

DOI: 10.7512/j.issn.1001-2303.2025.10.14

Al/Ag/Al钎料钎焊TA1的原子扩散机制研究与界面调控

郭琛骏, 孙逸翔*, 裴黄崙*

中国机械总院集团郑州机械研究所有限公司 高性能新型焊接材料全国重点实验室, 河南 郑州 450001

摘要: 针对钛合金传统钎焊易氧化、高温损伤母材的问题, 提出采用原位合成 Ag-Al 基钎料 (Al/Ag/Al 三明治结构) 对 TA1 纯钛进行低温钎焊。通过分子动力学模拟与真空钎焊试验相结合, 系统揭示了 Ag-Al-Ti 体系的原子扩散机制与界面反应规律。分子动力学模拟表明: Al 原子因较小原子半径 (1.43 Å) 和低扩散激活能 ($Q=36.227$ kJ/mol), 通过间隙扩散主导 α -Ti 渗入过程, 优先形成 TiAl_3 金属间化合物; 而 Ag 原子扩散激活能较高 ($Q=87.42$ kJ/mol), 扩散系数显著低于 Al 原子。模拟轨迹显示 Al 原子扩散轨迹在 Ti 晶格中呈规则折线, 同时 Al-Ag 互扩散在高温下形成无序非晶态, 径向分布函数 (RDF) 证实 Al-Ag 成键作用随温度增强。试验验证在 1 073 K/30 min 工艺下可获得无缺陷接头, 其典型组织为 $\text{TA1/TiAl}_3+\text{Ag(ss, Al)}/\text{TA1}$, 其中 TiAl_3 相通过弥散强化提升力学性能, Ag(ss, Al) 固溶体填充间隙。力学测试表明 Ag-Al 基钎料钎焊接头抗剪切强度优于纯 Ag 或 Al 中间层扩散连接接头, 断裂模式为韧性混合断裂。证实该钎料设计可在降低钎焊温度 (低于 β 转变点) 的同时提升接头可靠性, 为钛合金钎料设计和钎焊工艺制订提供原子尺度依据。

关键词: Ag/Al/Ti 体系; 扩散行为; 钎焊; 分子动力学

中图分类号: TG425 文献标识码: A 文章编号: 1001-2303(2025)10-0122-09

Interfacial Regulation and Atomic Diffusion in TA1 Brazed with Al/Ag/Al solder

GUO Chenjun, PEI YinYin*, SUN Yixiang*

China Academy of Machinery Zhengzhou Research Institute of Mechanical Engineering Co., Ltd., State Key Laboratory of High Performance & Advanced Welding Materials, Zhengzhou 450001, China

Abstract: This study addresses the issues of easy oxidation and base metal damage in conventional brazing of titanium alloys by proposing an in-situ synthesized Ag-Al-based filler (Al/Ag/Al sandwich structure) for low-temperature brazing of TA1 pure titanium. Combining molecular dynamics simulations and vacuum brazing experiments, the atomic diffusion mechanisms and interfacial reaction behaviors in the Ag-Al-Ti system were systematically investigated. Molecular dynamics simulations using the EAM potential revealed that Al atoms, due to their smaller atomic radius (1.43 Å) and lower diffusion activation energy ($Q=36.227$ kJ/mol), dominate the penetration into α -Ti via interstitial diffusion, preferentially forming TiAl_3 intermetallic compounds. In contrast, Ag atoms exhibit a higher diffusion activation energy ($Q=87.42$ kJ/mol) and a significantly lower diffusion coefficient than Al atoms. Simulation trajectories showed that the diffusion paths of Al atoms follow a regular zigzag pattern within the Ti lattice, while mutual Al-Ag diffusion at elevated temperatures leads to the formation of a disordered amorphous phase. Radial distribution function (RDF) analysis confirmed enhanced Al-Ag bonding interactions with increasing temperature. Experimental validation under the optimized brazing condition (1 073 K/30 min) produced defect-free joints with a typical microstructure of $\text{TA1/TiAl}_3 + \text{Ag(ss, Al)}/\text{TA1}$. The TiAl_3 phase contributes to strength improvement through dispersion strengthening, and the Ag(ss, Al) solid solution fills interfacial gaps. Mechanical tests demon-

收稿日期: 2025-08-28

基金项目: 国家重点研发计划(2022YFB3402203)

作者简介: 郭琛骏(2000—), 男, 硕士研究生, 主要从事钛合金钎料开发及设备研究。

通讯作者: 孙逸翔, E-mail: sunyixiang@163.com; 裴黄崙, E-mail: balloy@163.com。

strated that the brazed joints using the Ag-Al filler exhibit higher shear strength than those using pure Ag or Al interlayers via diffusion bonding. Fracture analysis indicated a mixed failure mode of ductile and intergranular fracture. This filler design effectively reduces the brazing temperature (below the β -transus point) while improving joint reliability, providing atomic-scale insights for low-temperature and high-efficiency joining of titanium alloys.

Keywords: Ag/Al/Ti system; diffusion kinetics; braze; molecular dynamics

引用格式:郭琛骏,孙逸翔,裴黄崙. Al/Ag/Al钎料钎焊TA1的原子扩散机制研究与界面调控[J].电焊机,2025,55(10):122-130.

Citation: GUO Chenjun, PEI YinYin, SUN Yixiang. Interfacial Regulation and Atomic Diffusion in TA1 Brazed with Al/Ag/Al solder[J]. Electric Welding Machine, 2025, 55(10): 122-130.

0 引言

钛及其合金因其高比强度、优异的耐腐蚀性和生物相容性,广泛应用于航空航天、生物医学及化工等领域。然而,钛合金在高温下易与O/N/H反应生成脆性氧化,传统熔焊需要惰性气体多层防护,防止接头脆化;相比之下,在真空/惰性气氛中进行的钎焊能有效抑制界面氧化^[1],已成为钛合金常用的加工方式^[2]。钛合金的钎焊连接技术是当前材料科学与工程领域的热点问题。研究表明,在低于 β 转变温度下钎焊纯钛,对于避免其原始组织发生不良变化具有重要意义。相比于Ti基钎料较高的钎焊温度带来的母材热损伤以及钎焊时间长等问题,Ag基钎料及Al基钎料可以在较低的钎焊温度下实现钛合金的有效连接^[2-3]。因此其在不需要保证高温强度的场景下,无疑是一种更优的选择,被广泛应用于生物及医学领域。

Yu等^[4]采用Ag箔作为钎料对TC4进行1 000 °C下真空钎焊,发现接头典型微观组织呈现 α + β 片层结构,并分布着Ti-Ag金属间化合物。接头中的金属间化合物包括TiAg及附着在Ti₂Ag上的针状和微米级颗粒相,以及一些颗粒状结构的Ti₂Ag;但其钎焊温度较高,对母材性能影响较大。Al元素可以有效降低Ag的熔化温度,且Ag与Al可接触反应形成低熔点液相,从而在降低钎焊温度的同时,提升钎料铺展性^[5]。ZHANG^[6]等通过XRD、EBSD分析揭示Ag的添加可降低Al₃Ti与Al之间的界面能,从而减少裂纹萌生倾向。因此有必要对Ag-Al协同钎焊钛合金展开深入研究。

目前对于钎料的设计往往基于经验,缺乏对微观作用机理的深入研究与规律总结。分子动力学通过原子尺度模拟扩散动力学、界面反应及相变行

为,成为钎料成分设计、工艺优化及机理研究的核心工具。Wang等^[7]对Ag/Ti体系进行模拟,结果显示Ag原子扩散系数($5.0 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$)显著高于Ti($2.5 \times 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$),且活化能为131.2 kJ/mol与56.4 kJ/mol,这解释了Ti侧优先形成TiAg相的现象。Zhang等^[8]通过分子动力学研究揭示TiAl₃的扩散呈各向异性,原子主要在Ti/Al交替晶面迁移,直接影响连接强度。LING等^[9]通过MD发现 β -Zr相比 α -Zr扩散系数更高,指导添加Ti中间层降低Zr连接温度,并通过EBSD与模拟结果互证 β 相在晶界优先形核的再结晶机理。可见将钎焊试验与分子动力学模拟相结合,可在原子层面优化钎料设计理论且论证IMC控制机理。

本文通过制备TA1/Al/Ag/Al/TA1差异化三明治结构钎焊接头,首先采用分子动力学模拟研究了Ag、Al、Ti原子在不同温度下的扩散行为,然后通过原位合成理论生成Ag-Al基钎料对纯钛进行焊接试验,结合分子动力学计算结果及钎焊接头对接头界面的微观组织与元素分布进行分析与扩散机理研究。此外,对钎焊接头的力学性能进行了评估,以确定结合界面的强度和可靠性。

1 试验材料与方法

1.1 分子动力学模拟

本研究根据钎焊接头实际组装方式,建立了共计28 800个原子的Ti-Al-Ag三元扩散模型。如图1a所示,白色为Ti原子,粉红色为Al原子,蓝色为Ag原子。分子动力学计算采用lammmps程序包^[10]。模拟中采用了1 fs的时间步长,三个坐标轴方向均采用周期性边界条件。采用NPT系综在多个试验温度(900~1 100 K)下进行模拟2 000 ps并对所获得

结果进行分析。在模拟过程中,记录了Ag、Al和Ti原子从界面处沿Z轴的运动。选用计算原子均方位移(MSD)以获得扩散系数。并在OVITO中对扩散轨迹进行可视化^[11]。

1.1.1 势函数

采用嵌入原子法(Embedded Atom Method, EAM)势函数描述金属原子的多体相互作用。其物理基础是将金属原子视为嵌入局域电子云背景的实体,从而突破传统对势模型的局限性。体系总能量由两项构成:

$$E_{tot} = \sum_i F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi_{ij}(r_{ij}) \quad (1)$$

式中 ρ_i 表征原子 i 处的电子密度; $F_i(\rho)$ 为嵌入能函数; $\phi_{ij}(r)$ 描述双体势作用。本研究中Ti-Al-Ag间EAM势函数由Zhou^[12]等开发的力场程序所拟合。该势函数已在多项工作中证明了其适用性^[7,13-14]。

1.2 真空钎焊试验方案

试验采用厚度为0.02 mm的Al箔与0.06 mm的Ag箔制成Al/Ag/Al三明治钎料,通过如图1c所示装配方式钎焊TA1纯钛。工艺参数如图1b所示。并对获得的钎焊接头进行抛光后使用SEM扫描电镜对微观界面进行分析。如图1d的方式使用万能力学试验机对接头力学性能进行测试。并对剪切断口通过SEM进行观察,对断裂机制进行分析。

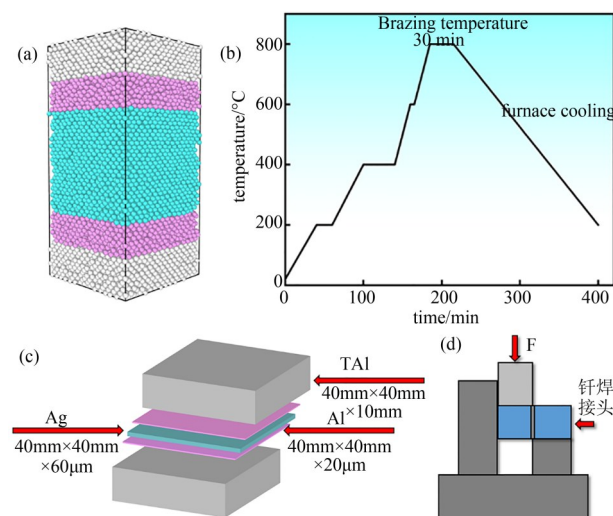


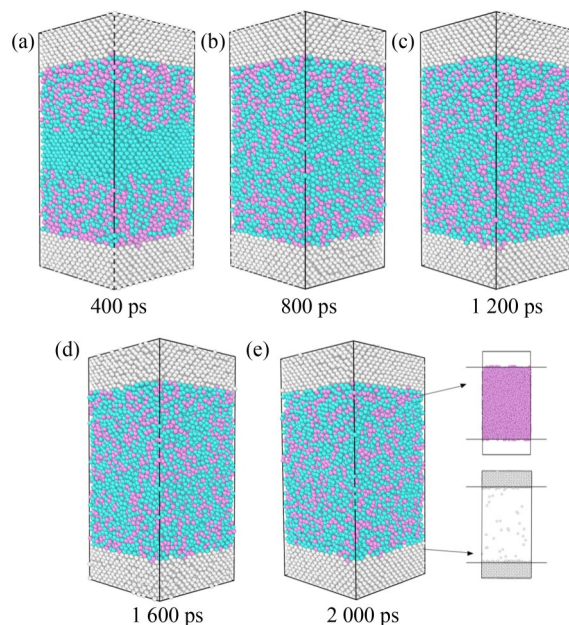
图1 (a)分子动力学计算模型,(b)钎焊工艺参数,(c)钎焊接头装配示意图,(d)剪切示意图

Fig. 1 (a) Molecular dynamics computational model; (b) Brazing process parameters; (c) Schematic of brazed joint assembly; (d) Schematic diagram of specimen shear test

2 结果与讨论

2.1 分子动力学结果

图2为Ti-Al-Ag扩散模型在1 100 K下不同时间段所形成的轨迹图。可以看出,随着时间的增加,Al原子与Ag原子之间的扩散作用大于Al原子与Ti原子之间的扩散作用。在2 000 ps时,Al原子与Ag原子之间已完全混合。其中可以明显看出,钎缝部分Al与Ag原子大多处于无序(非晶态)结构。且可以看出Al原子向 α -Ti中扩散比Ag原子向 α -Ti中扩散得更多。这一现象可归因于Ag的原子半径(1.44 Å)大于Al的原子半径(1.43 Å),较小的原子更易渗透入较大原子结构中。其中Chen^[15]在Cu-Al扩散中也发现了类似的现象,即Cu原子更易扩散进入Al原子中。相比于Al原子向Ti原子中扩散,Ti原子则更易进入Al原子,且Ti原子扩散距离更长。该结果与Zhang^[8]及Luo^[16]研究结果相同,这一现象主要归因于扩散温度接近Al原子的熔点。在此期间,Al原子的运动明显加快且不稳定,增加了Ti原子克服扩散势垒进入Al晶格的几率。模拟温度接近Al的熔点,因此Al原子更易离开平衡晶格位置从而形成空位,使得Ti原子更深的扩散进入



(a) 400 ps (b) 800 ps (c) 1 200 ps (d) 1 600 ps (e) 2 000 ps

图2 1 100 K下获得原子运动轨迹图

Fig. 2 Atomic trajectory at 1 100 K

Al 中。Šimon Svoboda^[17] 在其试验模拟中证实, Ti 在 Ag 中通过空位机制扩散, 而 Ag 在 Ti 中由于晶格畸变受阻。同时在模拟温度下, Ag 原子具有较弱的键, 这使得 Ag 容易形成空位, 使 Ti 原子扩散得更深。这进一步解释了为何 Ti 原子向钎料层中扩散了更远的距离。

钎焊的本质是母材与钎料原子之间的相互扩散, 最终形成冶金结合。分子动力学可以确定性计算系统粒子的运动轨迹, 因此可以通过式(2)来计算, 获得不同原子类型的原子均方位移(MSD), 其定义为:

$$MSD = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [r_i(t) - r_i(0)]^2 \quad (2)$$

式中 N 为原子个数, t 为时间, $r_i(t) - r_i(0)$ 表示粒子在 0 到 t 的时间区间内所经过的矢量距离。扩散系数与 MSD 之间的关系由 Einstein-Smoluchowski 方程建立:

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\partial MSD}{2N \partial t} \quad (3)$$

式中 N 表示维度数($N=3$)。

在所研究的五个温度下, 测得的 MSD- t 关系如图 3 所示。由于 MSD 是在系统加热开始时测量的, 因此模拟的前 50~60 ps 包含了这种加热, 并且在这个区域内, MSD- t 关系不是线性的。这部分曲线被称为弹道区域, 对应于原子围绕其平衡格点的振动, 而不是跃迁到新格点^[18]。可以看出三种原子的 MSD 值都随着温度的升高而增大。在相同温度下钎料原子较母材具有更大的均方位移, 母材原子处于固体扩散系数范围, 而钎料部分已完全熔化, 具有液相扩散特点, 此种状态符合预先设计的固/液扩散特征, 能够实现较好的界面钎焊效果。符合固液模型扩散特点^[19]。

图 4a 为根据式(3)对 1 000 ps 后的 MSD 曲线进行线性拟合所得的 Al 与 Ag 原子的扩散系数。可以看出, Al 的扩散系数明显大于 Ag 的扩散系数, 这是由于模拟温度更接近 Al 的熔点, 因此 Al 原子的运动更加活跃。而随着温度的增加, Ag 原子的扩散作用加剧, 这是由于模拟温度逐渐升高, 接近 Ag 的熔点, 从而促使了 Ag 原子的运动加剧。根据阿伦尼乌斯方程可以计算出 Al 原子向 Ag 原子中扩散和 Ag 原子向 Al 原子中扩散的扩散激活能。阿伦尼乌

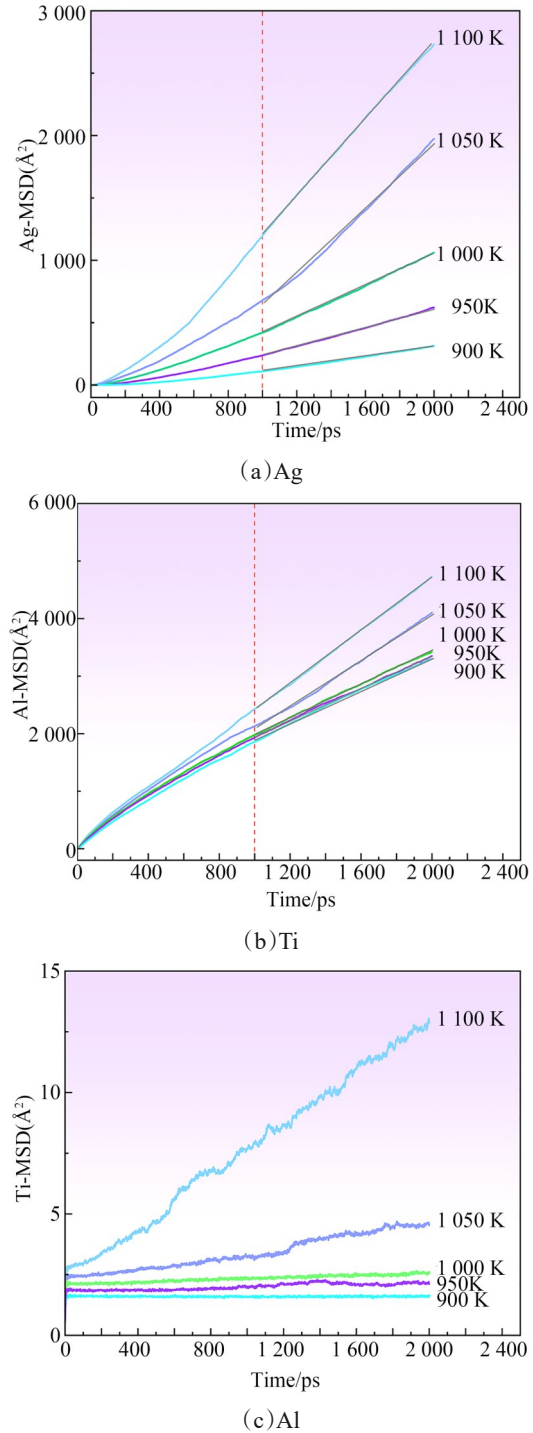


图 3 不同原子的 MSD 随时间变化曲线

Fig. 3 The curve of MSD of different atoms over time

斯方程其定义为:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \quad (4)$$

式中 D 为扩散系数; D_0 指前因子, 表示温度趋近于无穷大时的扩散系数; Q 为扩散激活能(单位: J/mol)

或 kJ/mol), 表示原子克服势垒所需的最小能量; R 为气体常数, $R=8.314 \text{ J}/(\text{mol}\cdot\text{K})$ 。为计算扩散激活能 Q , 通常对阿伦尼乌斯方程取自然对数, 将其线性化, 其运算结果见图 4b, 计算得到 Al 原子的 Q 值为 36.227 kJ/mol 。Ag 原子的 Q 值为 87.42 kJ/mol , 且该值小于 Wang 等^[7]在 Ag/Ti 体系中获得 Ag 原子的扩散激活能 ($Q=131.2 \text{ kJ/mol}$), 这表明 Al 原子的加入有效降低了 Ag 原子的扩散激活能。此外, 计算得到的 Q 值介于典型固/固扩散激活能与液/液激活能之间, 能够在保证母材损伤较小的状态下得到较好的钎焊效果。Al 的低扩散激活能接近液相扩散能垒, 表明其在接近熔点时呈现准液态行为。结合 Ag 的高激活能及相关文献推测其扩散机制为晶界扩散^[20]。与 Ag 相比, Al 表现出更高的扩散系数, 表明 Al 原子以更快的速度扩散到 Ag 晶格中。

径向分布函数(RDF)是分子和原子系统最重要的结构特征之一, 其定义为从某个选定的粒子中找到距离为 r 的粒子的概率^[21]。图 5a 为 $1\,100 \text{ K}$ 所形成的各原子对之间的 RDF 曲线, 其中 Al-Al、Al-Ag 和 Ag-Ag 曲线证明其界面区域是无序的, 只有第一个峰。说明在 $1\,100 \text{ K}$ 时, Al 与 Ag 之间已完全形成无序的非晶态。同时发现 Al-Ag 之间成键作用较强, 其峰值相对于 Al-Ti 与 Ag-Ti 之间要大很多。对 5 个温度下 Al-Ag 原子对之间的径向分布函数进行分析(见图 5b), 可以看出随着温度的增加, 第一近邻的 Al-Ag 峰随温度升高而增大, 900 K 、 950 K 、 $1\,000 \text{ K}$ 、 $1\,050 \text{ K}$ 和 $1\,100 \text{ K}$ 时分别为 1.857 、 2.63 、

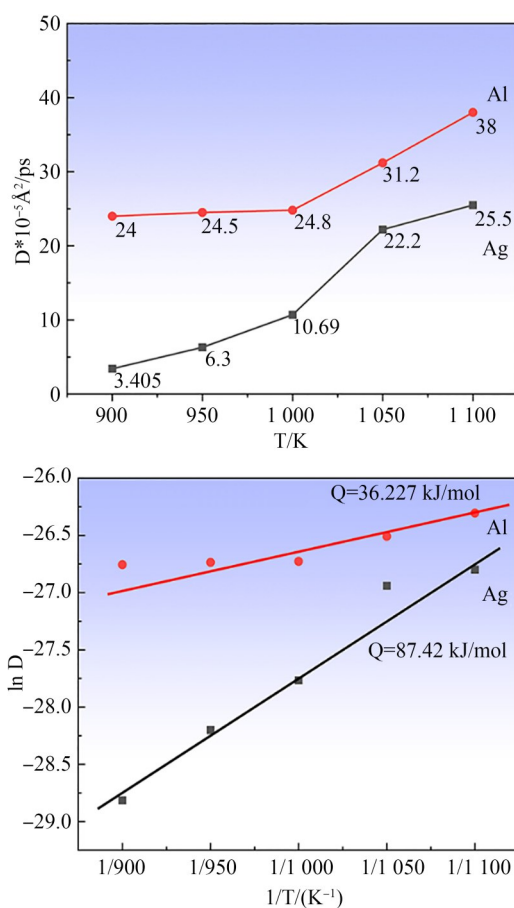


图4 (a)扩散系数随温度变化图;(b)Al与Ag的Arrhenius曲线

Fig. 4 (a) Diffusion coefficients vs. temperature; (b) Arrhenius plots for Al and Ag

3.17 、 3.60 和 3.56 , 这表明随着温度的增加, Al-Ag 原子对之间的成键作用逐渐增强。

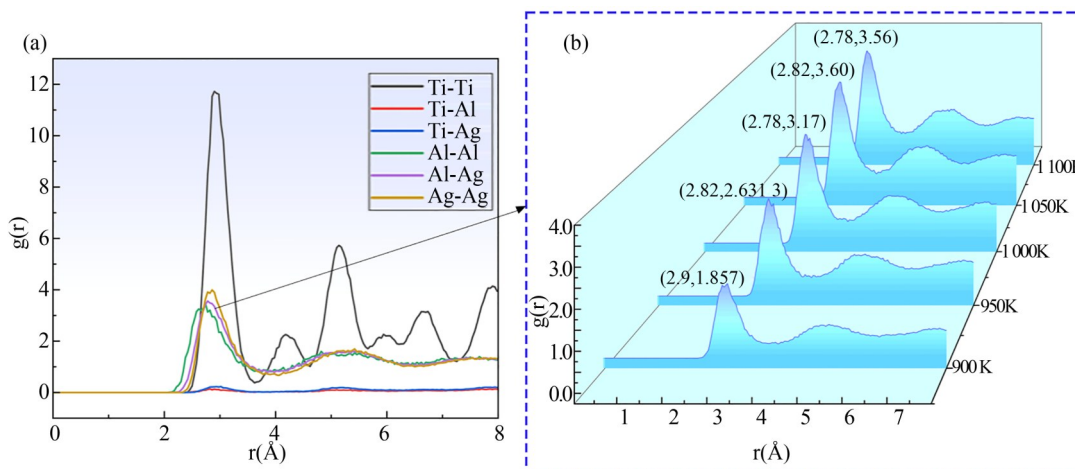
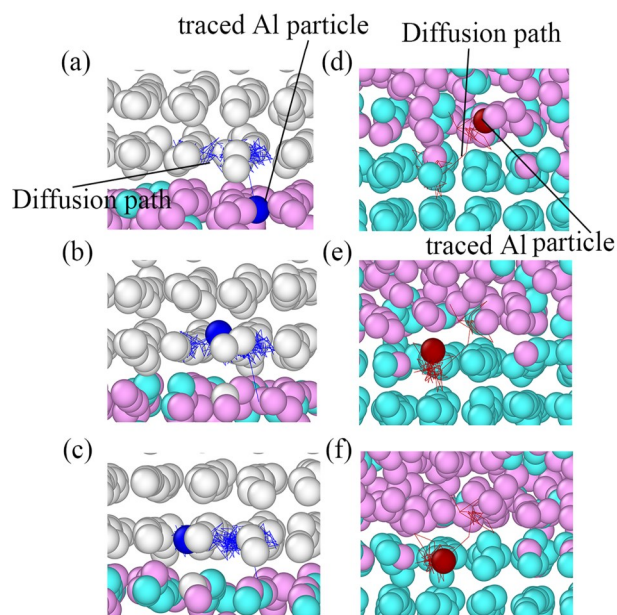


图5 (a)各扩散对之间的RDF曲线($1\,100 \text{ K}$); (b)不同温度下的Al-Ag扩散RDF曲线

Fig. 5 (a) RDF curves for atomic pairs ($1\,100 \text{ K}$); (b) Temperature-dependent Al-Ag RDF curves

上述分析表明, Al 原子凭借其较小的原子半径、较高的扩散系数及较低的扩散激活能, 在界面反应中起主导地位, 因此有必要对 Al 原子的扩散机制进行研究。通过在 ovito 中对特定 Al 原子的轨迹进行追踪, 可以绘制其扩散路径, 绘制的路径图如图 6a、6b 所示。在 Al/Ti 界面区域 (见图 6a), 运动轨迹中的 Ti 原子基本呈现有序状态, Al 原子向 Ti 原子中的扩散路径呈现规则的折线 (蓝色标记), 符合间隙扩散轨迹特点。相比之下, Al 原子向 Ag 原子中的扩散由于 Al-Ag 在试验温度下呈现无序状态, 因此无法通过示踪原子来对扩散机制进行判断。但先前的众多研究已经表明, 在高温下 FCC 金属之间的扩散通常表现为空位扩散^[17]。



(a)-(c) Al 原子 (蓝色) 在 Ti 原子中的扩散轨迹;

(d)-(f) Al 原子 (红色) 在 Ag 原子中的扩散轨迹

图 6 标记 Al 原子的扩散运动路径图

Fig. 6 tracking the diffusion pathways of Al atoms

分子动力学方法的局限性。目前的分子动力学 (MD) 模拟仍然受到一些公认的限制。例如, MD 模拟从根本上受到空间和时间的限制, 这限制了其对长期或大规模物理过程建模的能力; 这导致通常在分子动力学模拟这种高度理想化状态下获得的结果与实际测得值存在误差。但其定性判断的结果是可信的。此外, 模拟结果对原子间势函数的选择具有较高的敏感性, 边界条件或温压控制 (温度和压力) 的变化会显著影响模拟结果。因此, MD 模

拟结果需要通过辅助真空钎焊试验进行观察验证。

2.2 真空钎焊试验结果

为验证分子动力学模拟结果并探究实际钎焊接头的界面特征, 对在钎焊温度 1 073 K, 保温时间 30 min 条件下的钎焊接头进行 SEM 观察。如图 7a 所示, 钎料与母材之间形成了良好的冶金结合, 界面间无空洞、未焊合等缺陷。由界面 EDS 面扫描 (见图 7b~7d) 可以看出, 元素扩散状况与模拟结果基本一致, 即 Al 与 Ag 原子扩散作用比较剧烈, 扩散效果好; 而 Ti 更易进入 Al 中, Al 与 Ag 则几乎没有扩散进入 Ti 中。Ag 原子的扩散呈现典型的晶界扩散现象^[20,22-23]。

对部分相进行点扫描分析 (见图 7e、7h), 其扫描结果如表 1 所示。可以看出界面间化合物的物相组成比较简单, 主要包括大量暗色相与白色相。对暗色相的分析表明, 其 Ti 与 Al 的原子比约为 1:3, 推测其为 TiAl_3 。其中前人的研究已证实 TiAl_3 在该试验条件下稳定存在^[16,24-26]。白色相主要为 Ag 基固溶体。进一步地, 钎焊温度对界面物相的分布与形貌具有显著的影响。对比图 7g (1 103 K) 与图 7h (1 043 K) 可知, 随着钎焊温度的升高, Ti 原子的扩散活性增强, 导致 TiAl_3 金属间化合物的数量急剧增加。相反, 在较低温度下, 界面反应层中的 TiAl_3 相明显减少, 接头主要由 Ag 基固溶体构成。

试验结果清晰地表明, 钎焊接头中金属间化合物的形成主要依赖 Ti-Al 金属扩散体系。Ti 和 Al 原子之间强烈的负混合焓, 使得 Ti-Al 金属间化合物的生成在扩散过程中不可避免。在众多可能的 Ti-Al 相中, TiAl_3 相因其优越的热力学稳定性、较低的界面能以及显著更低的吉布斯自由能, 在较高温度下成为优先形成的稳定相, 倾向于形成连续致密的反应层^[8,27-28]。相比之下, 尽管 Ti-Ag 体系可能生成 TiAg 或 Ti_2Ag 等化合物, 但其生成焓远高于 Ti-Al 系, 因此在本次试验条件下未能形成^[29]。值得注意的是, TiAl_3 相在靠近钎缝中心区域的晶粒尺寸较大, 呈规则多面体; 而邻近母材的区域则表现为细小密集分布。这可能是由于 Ag 原子在 Ti/Al 界面处富集, 其较大的原子半径 (1.44 Å) 产生空间位阻效应, 阻碍了 Ti 原子向 Al 原子侧的扩散, 导致边缘区域 TiAl_3 形核率降低。从而使得中心区域 TiAl_3 相

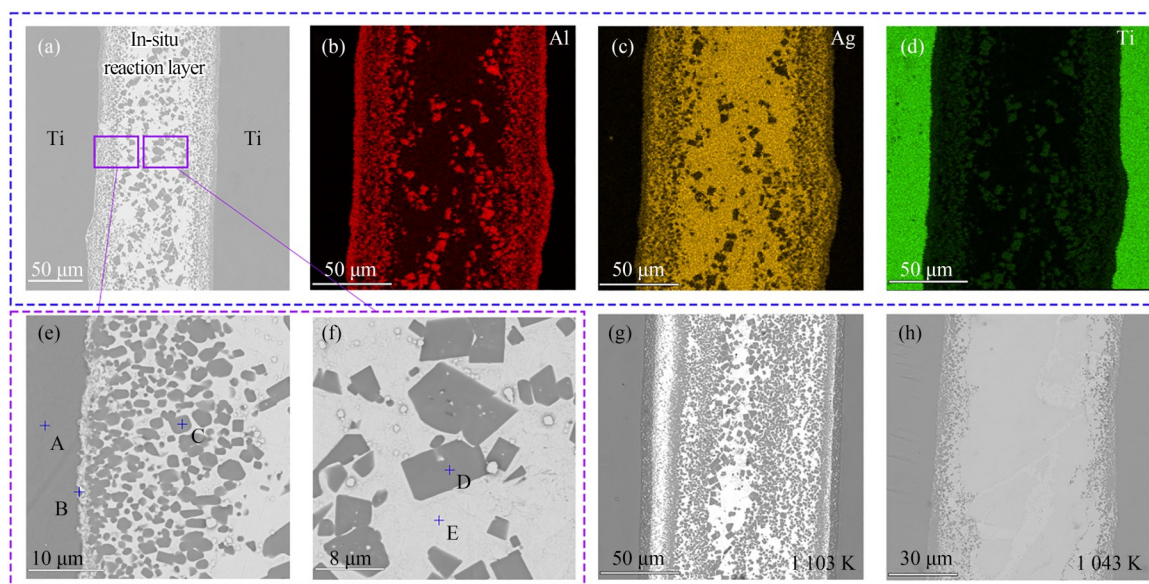


图7 (a)1 073 K,30 min 获得的钎焊接头典型界面图;不同元素的EDS面扫图:(b)Al,(c)Ag,(d)Ti;(e)-(f)钎焊接头微观界面图;不同钎焊温度下获得钎焊接头的界面图,(g)1 103 K,(h)1 043 K

Fig. 7 (a) Typical interfacial microstructure of the brazed joint obtained at 1 073 K for 30 min; EDS elemental mapping of (b) Al, (c) Ag, and (d) Ti; (e)-(f) High-magnification interfacial microstructure of the joint; Interfacial morphology of joints brazed at different temperatures: (g) 1 103 K, (h) 1 043 K

表1 标记点的元素组成

Table 1 Element composition of marked points

Point	Ag(at.%)	Al(at.%)	Ti(at.%)	可能相
A	—	—	100	Ti
B	6.75	54.11	39.14	TiAl ₂
C	9.88	66.47	23.65	TiAl ₃
D	9.17	67.45	23.38	TiAl ₃
E	71.06	28.94	—	Ag(ss,Al)

充分长大,呈现规则多面体形状。

钎焊接头剪切力学性能数据如图8所示,结果表明,相对于单纯的Al箔^[30]与Ag箔^[7]对TA1进行

扩散连接,Al/Ag/Al三明治钎料钎焊TA1能在更短的保温时间内获得更好的抗剪切力学性能(见图8a)。1 073 K下试样的断口形貌和相组成如图8b所示。观察发现,断裂主要发生在钎焊接头的钎焊界面处,既有韧性韧窝,又有明显的晶粒形貌,说明断裂面包含韧性断裂和沿晶断裂。

综合来看,Ag-Al钎料相对于Al钎料有效地提高了钎焊接头力学性能与高温应用,相对于Ag钎料则有效降低了钎焊温度,保持在 β 相转变线之下,防止母材热损伤的同时也获得了更高的接头强度。

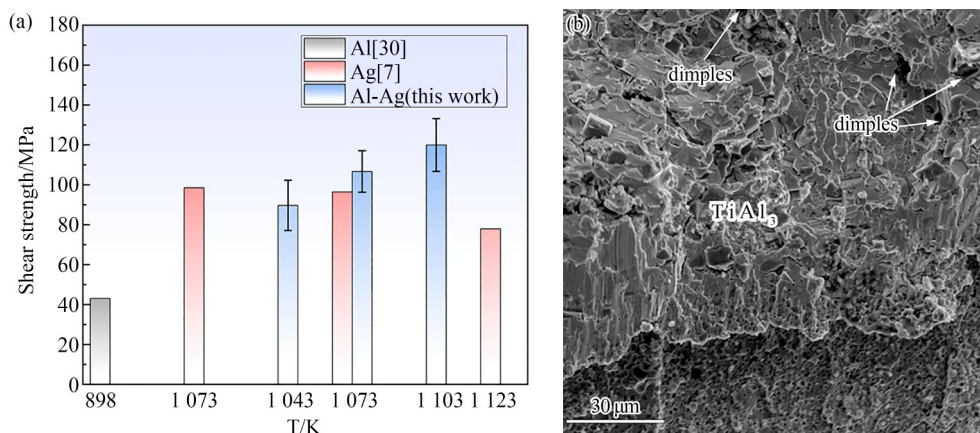


图8 (a)获得钎焊接头的力学性能对比,(b)钎焊接头剪切断口微观形貌(1 073 K,30 min)

Fig. 8 (a) Mechanical property comparison of the brazed joints; (b) Microstructure of the shear fracture surface of the joint brazed at 1 073 K, 30 min

如图9所示,在钎焊接头原位形成过程中,Al原子通过间隙扩散形成 TiAl_3 相,同时无序态的Ag原子与Al原子互相固溶形成Ag基固溶体填充间隙。 TiAl_3

相的弥散强化作用有效地提高了接头的力学性能。因此本研究对于设计一种新的Ag-Al基钎料从而应用于工程实践具有重要意义。

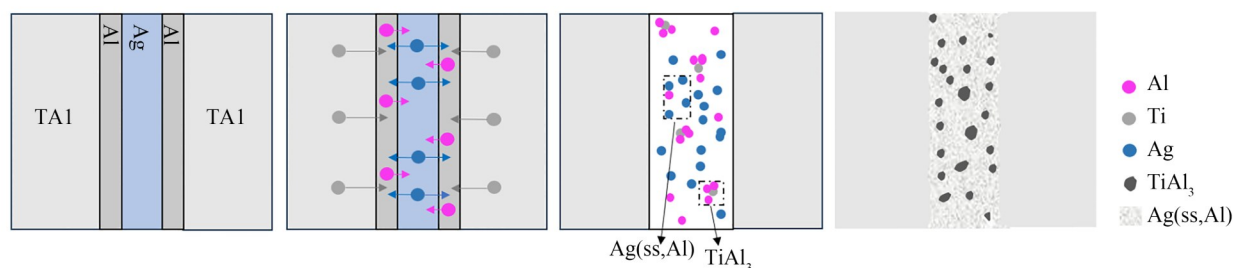


图9 扩散机制示意

Fig. 9 Schematic of the diffusion mechanism

3 结论

本研究通过分子动力学与真空钎焊试验相结合,对Ag-Al-Ti三元体系的扩散行为进行了研究,并设计Al/Ag/Al三明治钎料获得了良好的无缺陷的TA1钎焊接头。主要结论如下:

(1)MD模拟表明Al-Ag之间具有良好的互扩散。Al的扩散系数大于Ag的扩散系数,表明了Al原子对扩散过程的主导特性。Al原子因较小原子半径(1.43 Å)及低扩散激活能(36.227 kJ/mol),较Ag($Q=87.42$ kJ/mol)更易渗入 α -Ti晶格。MD模拟表明其扩散机制为间隙扩散。Al原子与Ti原子促进 TiAl_3 形成;在钎焊温度下,Ag-Al钎料层呈无序状态,钎缝区形成Ag(ss,Al)固溶体。可见模拟计算可以为后续钎料设计提供原子尺度依据。

(2)试验证实1 073 K钎焊时,界面组织以 TiAl_3 (暗色相)和Ag(ss,Al)(白色相)为主;温度升高至1 103 K时Ti扩散加剧, TiAl_3 层增厚,而1 043 K时 TiAl_3 相减少,优化温度可平衡 TiAl_3 相生成与母材热损伤。力学性能测试表明,Al-Ag基钎料可在较低温度下实现更高的抗剪切强度(与纯Al、纯Ag中间层对比)。接头断裂模式表现为韧性断裂和沿晶断裂。

参考文献:

- [1] Long W M, Zhao Y, ZHONG S J, et al. Research Progress on Intermetallic Compounds in Copper-Aluminum Brazed Joints [J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2021, 50(1): 7-13.
- [2] Long W M, Li S N, Du D, et al. Morphological Evolution and Development Trend of Brazing Materials [J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2019, 48(12): 3781-3790.
- [3] 龙伟民. 钎焊材料成分设计准则及典型组织演变机制 [J]. 稀有金属材料与工程, 2025, 54(4): 837-853.
- [4] LONG W M. Design Guidelines for Composition of Brazing Filler Metals and Evolution Mechanisms of Typical Microstructures [J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2025, 54(4): 837-853.
- [5] PENG Y, LI J, DU Y, et al. Microstructure and mechanical properties of joints prepared by vacuum brazing on TC4 titanium alloy with Ag as filler metal [J]. Vacuum, 2021, 187: 110134.
- [6] MISHIN Y, HERZIG Chr. Diffusion in the Ti-Al system [J]. Acta Materialia, 2000, 48(3): 589-623.
- [7] ZHANG Z, HUANG J, YAO C, et al. Effect of Ag alloying on the microstructure and mechanical properties of laser welded-brazed Ti/Al dissimilar joints [J]. Materials Science and Engineering: A, 2022, 848: 143359.
- [8] WANG L, WANG H, ZOU Q, et al. Experimental study and molecular dynamics simulation of Ag/Ti diffusion bonding [J]. Surfaces and Interfaces, 2024, 55: 105296.
- [9] ZHANG J, ZHAO Q, ZHANG L, et al. Molecular dynamics simulations based on the diffusion interface of solid-phase Ti-Al system [J]. Chemical Physics, 2025, 597: 112797.
- [10] LING X, YOU G, LU Z, et al. Diffusion bonding mechanisms of pure Zr with a Ti interlayer: Microstructural characterization and polycrystalline molecular dynamics simulations [J]. Journal of Manufacturing Processes, 2021, 50(1): 7-13.

- 2024, 127:397–408.
- [10] THOMPSON A P, AKTULGA H M, BERGER R, et al. LAMMPS—a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales [J]. *Computer Physics Communications*, 2022, 271:108171.
- [11] STUKOWSKI A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2009, 18(1):015012.
- [12] Zhou X W, Johnson R A, Wadley H N. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers [J]. *Physical Review B*, 2004, 69(14):144113.
- [13] LI Y, WENG L, WANG H, et al. Wetting and spreading behavior of AgCuTi on Ti substrate: A molecular dynamics study [J]. *Journal of Materials Research and Technology*, 2023, 27:1808–1818.
- [14] LI Y, WANG H, WENG L, et al. Wetting and spreading of AgCuTi on Fe substrate at high temperatures: A molecular dynamics study [J]. *Journal of Materials Research and Technology*, 2023, 27:5783–5790.
- [15] CHEN S, KE F, ZHOU M, et al. Atomistic investigation of the effects of temperature and surface roughness on diffusion bonding between Cu and Al [J]. *Acta Materialia*, 2007, 55(9):3169–3175.
- [16] LUO J G, ACOFF V L. Using cold roll bonding and annealing to process Ti/Al multi-layered composites from elemental foils [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2004, 379(1–2):164–172.
- [17] SVOBODA Š, LEBEDA M, VLČÁK P, et al. Molecular dynamics simulation of the diffusion behaviour in Ti–Ag using diffusion couple method [J]. *Results in Physics*, 2024, 64:107943.
- [18] HE X, ZHU Y, EPSTEIN A, et al. Statistical variances of diffusional properties from ab initio molecular dynamics simulations [J/OL]. *NPJ Computational Materials*, 2018, 4(1)[2025–07–10].
- [19] ZHANG T T, WANG W X, ZHOU J, et al. Molecular Dynamics Simulations and Experimental Investigations of Atomic Diffusion Behavior at Bonding Interface in an Explosively Welded Al/Mg Alloy Composite Plate [J]. *Acta Metallurgica Sinica (English Letters)*, 2017, 30(10):983–991.
- [20] BOKSTEIN B, RODIN A. Grain Boundary Diffusion and Grain Boundary Segregation in Metals and Alloys [J]. *Diffusion Foundations*, 2014, 1:99–122.
- [21] Chandler D. Introduction to modern statistical mechanics [EB/OL]. Oxford University Press, 1987. [2025–07–10].
- [22] BOKSTEIN B S, GULEVSKY S A, PETELIN A L, et al. Diffusion Controlled Grain Triple Junctions Wetting in Metals [J]. *Defect and Diffusion Forum*, 2011, 309–310:231–238.
- [23] BOKSTEIN B S, RODIN A O, SMIRNOV A N. Thermodynamics of grain boundary adsorption in binary systems with limited solubility [J]. *International Journal of Materials Research*, 2005, 96(10):1094–1098.
- [24] LIN C, WU W, HAN Y, et al. Orderly nucleation and competitive growth behaviors of Ti–Al intermetallic compounds in Ti/TiAl₃ diffusion couple under high temperature [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2023, 939:168815.
- [25] MIRJALILI M, SOLTANIEH M, MATSUURA K, et al. On the kinetics of TiAl₃ intermetallic layer formation in the titanium and aluminum diffusion couple [J]. *Intermetallics*, 2013, 32:297–302.
- [26] Xu L, Cui Y Y, Hao Y L, et al. Growth of intermetallic layer in multi-laminated Ti/Al diffusion couples [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2006, 435:638–647.
- [27] WANG J, SHANG S L, WANG Y, et al. First principles calculations of binary Al compounds: Enthalpies of formation and elastic properties [J]. *Calphad*, 2011, 35(4):562–573.
- [28] LIU M, ZHANG C, ZHAO H, et al. Micro-/nano-scale structure and elemental diffusion in the Al/Ti/Al sandwich structure [J]. *Journal of Materials Research and Technology*, 2023, 24:9537–9552.
- [29] GIERLOTKA W, DĘBSKI A, GAŚSIOR W, et al. Computational approach to the Ag–Ti system [J]. *Computational Materials Science*, 2023, 230:112519.
- [30] WEI Y, AIPING W, GUISHENG Z, et al. Formation process of the bonding joint in Ti/Al diffusion bonding [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2008, 480(1–2):456–463.