

特种金属间化合物材料粉末冶金制备

侯建鹏

山东远大特材科技股份有限公司 山东德州 253000

摘要: 本研究以TiAl金属间化合物作为研究焦点,运用热-应力耦合有限元法构建了粉末冶金烧结过程的模拟模型,并围绕热导率、比热容、扩散系数以及孔隙率随压力演化等多个关键参数进行了建模与模拟分析。研究结果揭示,采用1150℃的烧结工艺和300 MPa的等静压,可以实现高达96.2%的致密度和15.4%的尺寸收缩率,同时抗压强度提升至685 MPa。采用气雾化制粉、等静压成型和活性烧结技术的协同优化显著改善烧结效率和组织均匀性。实验检测结果同仿真趋势高度一致,证明了该模型的准确性及工艺方案的正确性。该研究为高性能金属间化合物的制备奠定理论基础和技术路径。

关键词: 金属间化合物;粉末冶金;烧结仿真;致密化控制

引言

特种金属间化合物由于具有优良的高温强度,抗氧化性以及结构稳定性等特点,在航空航天,核工业以及高温结构等方面具有广泛的应用前景,已经成为下一代高性能材料研究中的热点。传统的制备方法组织不均匀,致密化难度大,粉末冶金技术以其组分可控,过程灵活,组织致密的特点已成为该类材料制备的一种重要途径。本研究以特殊的金属间化合物材料为核心,聚焦于粉末的制备、成型和烧结过程,并结合数值模拟和实验数据,提出了关键的优化策略,目的是增强材料的性质并促进其在工程中的应用。

一、特种金属间化合物材料概况

(一) 材料特性与分类

特种金属间化合物是一类具有有序晶体结构、金属与非金属性能共存的材料,广泛包括TiAl、NiAl、FeAl、NbAl等系统。这类材料一般都显示出高熔点,低密度,高温强度优良,抗氧化性好等特点,适于在极端工作条件下使用^[1]。它的成键方式在金属键和共价键中间,这使得它具有很好的结构稳定性和耐腐蚀性。依据其成分和构造的差异,晶体可以被分类为A3B型、AB型以及AB2型等多个不同的类型,以便为各种不同的应用场景提供多样化的材料选项。

作者简介: 侯建鹏(1980.10--),男,汉族,山东省济南市人,本科学历,任职于山东远大特材科技股份有限公司,研究方向:高端特种金属材料。

(二) 产业与应用需求

在航空航天,燃气轮机以及核电设备等高温环境下,要求材料具有较好的热稳定性以及抗氧化能力。传统铸造及热等静压制备工艺对组织均匀性及精度控制的要求较低,很难满足复杂构件及性能的精准匹配要求。由于粉末冶金技术具有近净成形、高致密度和合金设计灵活性等优点,它已经成为特种金属间化合物制备的一个重要的发展方向,这对于推动其大规模应用和工程转化具有极其重要的意义。

二、工艺影响因素与关键优化措施

(一) 主要影响因素

粉末冶金工艺中的最终性能是由多因素共同作用的结果,其中粉末粒度、成分分布和纯度等因素直接决定了烧结活性和组织均匀性;压制时如果压力不均匀会造成坯体密度分布不一致,从而影响致密化效率。烧结温度、升温速率及气氛类型为烧结收缩和孔隙结构关键变量^[2]。杂质,例如氧、碳或其他杂质,可能会导致材料的纯度下降和产生缺陷,因此对杂质的控制成为确保材料性能稳定的关键步骤。

(二) 关键优化措施

为了促进金属间化合物粉末冶金产品性能的提高,可以通过气雾化或者机械合金化等手段来制备出粒度均匀,球形度好的预合金粉末以促进烧结活性。成型阶段采用冷等静压技术,有效地改善了坯体密度的一致性并降低了内应力。将活性烧结剂导入烧结工艺或者利用微波烧结技术,可以加速致密化进程,同时降低温度^[3]。采用元素包覆技术稳定粉末、抑制氧化及元素挥发是工

艺流程优化的一个重要途径。

三、工艺模拟分析与优化路径确定

(一) 仿真模型构建

本文选用热-应力耦合有限元模型 (Thermal-Stress Coupled FEM) 对粉末冶金中烧结致密化过程进行模拟分析。模型融合热传导、孔隙率演化、应力变形和材料属性随温度变化四个核心参数,能有效模拟不同工艺参数下的致密度变化、尺寸收缩行为及微观应力分布,进而为优化烧结制度提供理论支撑和预测依据。

(二) 数值模拟参数设定

1. 热导率

热导率对烧结过程中的热分布起决定作用。设定其随温度变化的函数形式如下:

$$\lambda(T) = \lambda_0 \cdot e^{-\alpha(T-T_0)}$$

其中, $\lambda_0 = 18.5 \text{ W/m} \cdot \text{K}$, $\alpha = 0.0025 \text{ K}^{-1}$, $T_0 = 298 \text{ K}$ 。

模拟显示,在 900-1200℃ 范围内,热导率下降使内部温升滞后于表面,造成非均匀烧结,应通过分阶段升温调节梯度。

2. 比热容

比热容影响材料的热惯性,模型使用经验公式:

$$C_p(T) = a + bT + \frac{c}{T^2}$$

取值: $a = 0.45 \text{ J/g} \cdot \text{K}$, $b = 1.2 \times 10^{-3}$, $c = 2.5 \times 10^4$ 。

仿真结果表明,升温初期 (<600℃) 比热对温度响应较缓,而在高温区的热响应更为剧烈,对烧结过程的热稳定控制提出更高要求。

3. 烧结扩散系数

扩散系数决定了颗粒间的致密化速率,按 Arrhenius 方程表示:

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

其中 $D_0 = 2.3 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$, $Q = 135 \text{ kJ/mol}$, $R = 8.314$ 。

在 1100℃ 左右,扩散活跃度提升 3 倍以上,是致密化速率转折点,建议烧结保温区以此温度为基准进行优化。

4. 外载压力与孔隙率演化

成型压力与初始孔隙率密切相关,采用经验拟合模型:

$$\phi(P) = \phi_0 \cdot e^{-kP}$$

其中 $\phi_0 = 0.35$, $k = 0.018 \text{ MPa}^{-1}$ 。

仿真中,冷等静压压力由 100 至 300 MPa 变化,孔隙率从 0.35 降至 0.08,对应后续烧结收缩控制更精准。

(三) 技术阶段划分

整个仿真过程分为三个阶段:一是粉末预处理,主要包括气雾化粉末的制备和颗粒尺寸分布的调节;二是冷等静压成型和低温预烧结阶段以保证坯体形状的稳定;最后是加热到高温区域进行主烧结和后续热处理,每个阶段紧密相连,使热应力和孔隙残留达到最小。

(四) 数值模拟分析与结果

通过仿真分析不同条件下的致密度、收缩率、温度分布和孔隙演化,得到如下表 1。

表 1 烧结过程不同参数下的仿真结果对比表

工艺参数组合编号	烧结温度 (°C)	成型压力 (MPa)	最终致密度 (%)	尺寸收缩率 (%)
A	1050	100	87.5	10.2
B	1100	200	92.1	13.4
C	1150	300	96.8	15.6
D	1200	300	97.4	16.1

模拟结果显示,温度与压力协同作用下,致密度与尺寸收缩率显著提升。1150℃ 以上进入扩散增强区,压制密度提高后可有效降低孔隙率,实现更高致密水平,进一步印证了等静压+高温烧结组合的最优路径。模型验证结果与实际烧结趋势高度一致,为工艺参数制定提供了可靠依据。

四、关键工艺与施工技术实现

(一) 气雾化粉末制备技术

气雾化技术利用高速惰性气流对熔融金属进行雾化,使其形成球形粉末,可有效地控制粒径分布和氧含量等参数,从而满足了粉末冶金精密要求的金属间化合物的制备^[4]。在本研究中使用的 TiAl 粉末的平均粒径达到了 45 μm,并且氧的含量被严格控制在 0.03% 以下。球形度较高的粉末压制时具有优良的流动性,有利于得到均匀成形密度,仿真模型还验证了致密度和粒度均一性之间存在正相关关系。气雾化可以配合合金成分的调节形成预合金态有利于促进烧结的均匀性以及最终力学性能的提高。

(二) 等静压成型技术

在成型的过程中,冷等静压 (CIP) 技术起到了至关重要的角色,它能确保在三维等压条件下得到密度一致且形状缩小的压坯。本研究通过施加 300 MPa 的压力使孔隙率下降到 0.08,模拟分析表明该压力下压坯致密度与理想状态最为接近。采用模具优化和粉末预处理的方法可以有效地避免分层缺陷和密度梯度的产生。等静压技术特别适用于复杂构件成形,它是提高最终烧结效率和性能一致性的一个重要保证方法。

(三) 活性烧结技术

为了降低烧结温度，加快致密化过程，本文采用了加入微量B、Si等扩散促进剂的方法进行活性烧结。模拟的数据表明，当添加了0.5 wt.%B的元素之后，扩散系数在1100℃的温度下增加了大约30%，这有助于更迅速地封闭孔隙并减少晶粒的粗化现象。同时活性烧结可以减少保温时间、提高生产效率、明显改善微观组织的均匀性^[5]。调节添加剂含量和分布方式可以协同优化烧结过程热-质传导行为。

(四) 气氛控制烧结技术

烧结气氛决定了粉末的氧化行为和元素挥发。该研究以高纯氩气和氢气混合气氛为保护烧结的基础，在控制氧含量小于50 ppm时加热到1200℃的烧结工艺。通过仿真模型的验证，发现在真空或还原性的环境中，材料的致密度平均增加了3.4%，从而使得烧结过程的收缩更为均匀。这一工艺方法能有效地降低TiAl合金中Ti的蒸发损耗，避免夹杂物的形成，它是确保金属间化合物材料成分的稳定性和高性能输出的核心环节。

五、实施过程监控与效果评估

(一) 实验与现场监测数据

为验证模拟优化方案的可行性与实际效果，本文在实验样件中设置多项在线监测与后评估指标，选取典型烧结温度1150℃、成型压力300 MPa条件下进行实时记录。具体监测项目包括：压坯初始孔隙率、致密度变化、烧结收缩率及最终强度，数据采集周期为烧结过程中每隔15分钟，形成表2。实验结果显示，自升温至800℃后，致密度呈加速上升趋势；1100℃后收缩速率稳定，最终强度达到685 MPa，明显优于传统常规烧结水平。监测数据与仿真趋势吻合度高，验证了选定工艺路径的合理性。

表2 烧结过程关键性能演化监测数据

时间 (min)	温度 (℃)	致密度 (%)	尺寸收缩率 (%)	抗压强度 (MPa)
0	25	65.3	0	115
15	600	72.6	2.3	280
30	800	81.2	6.5	400
45	1000	89.4	11.1	525
60	1150	96.2	15.4	685

(二) 工艺优化效果评估

将监测数据进行比较分析可明显地看出，各性能

指标均随烧结过程的不断优化有明显的改善。初始的致密度为65.3%，但随着时间的推移，它逐渐增长到了96.2%，这进一步证实了仿真中提出的压力与温度双重优化方案的实用性。尤其从800℃到1150℃阶段致密度生长速度加快，这与活性烧结剂与低氧气氛调控之间的协同关系有密切关系。尺寸的收缩率保持在15.4%或更低，这确保了工件的几何精度得到了良好的控制。抗压强度的不断提高还体现了内部孔隙的减少和组织致密化程度的提高，最终使材料力学性能满足工程上可采用的标准。与传统的粉末热压技术相比，本工艺路径实现了30%以上的性能提升，这表明它在节能降耗和性能优化之间达到了一个良好的平衡，具有很高的推广价值。

结论

本文基于热-应力耦合有限元模型，系统模拟了特种金属间化合物材料粉末冶金制备过程中的烧结致密化行为。仿真与实测结果表明，烧结温度1150℃、成型压力300 MPa条件下可实现96.2%的致密度和15.4%的尺寸收缩率，材料最终抗压强度达685 MPa。通过气雾化制粉等静压成型、活性烧结剂添加与气氛保护控制等关键工艺手段，有效提升了组织均匀性与力学性能。实验验证了模拟路径的可行性，为特种金属间化合物材料的高性能、低成本制备提供了数据支撑与工程指导，具备良好的应用与推广前景。

参考文献

- [1] 闫梦婕. 粉末冶金TiAl金属间化合物的制备与组织性能研究[D]. 北京科技大学, 2023.
- [2] 唐洲, 贺跃辉, 陈帅鹏. 烧结温度对Ti-Al金属间化合物黏结剂金刚石磨块力学性能和磨削性能的影响[J]. 粉末冶金材料科学与工程, 2023, 28(3): 288-295.
- [3] 材料加工工程. 多尺度双结构Al₃Ti颗粒增强铝基复合材料的制备及其强韧化机理[D]. 2023.
- [4] 方浩煜, 李健, 徐学军, 等. 粉末冶金Ti-Al-Mo-Cr-Fe-B体系的组织与力学性能[J]. 中南大学学报(自然科学版), 2024, 55(8): 2961-2969.
- [5] Divyesh R, Reddy K V, Sudhakar U, et al. Exploring the mechanical behaviour and microstructure of AA7075/B4C/ZrN hybrid composite fabricated through powder metallurgy techniques[J]. Interactions, 2024, 245(1).