

SiC 颗粒促进球墨铸铁珠光体中 Fe_3C 异质形核机理及其力学性能研究

张 腾, 游志勇, 韩培德, 宋振洋, 韩嘉敏

(太原理工大学材料科学与工程学院, 吕梁市高端特种铁碳合金重点实验室, 山西太原 030024)

摘要: 系统研究了碳化硅 (SiC) 预处理对球墨铸铁组织和性能的调控机制。通过第一性原理计算与试验验证相结合, 揭示了SiC作为异质核心促进珠光体中渗碳体 (Fe_3C) 形核的作用机理。理论计算表明, $SiC_{(110)}$ 与 $Fe_3C_{(100)}$ 界面晶格失配率仅为5.77%, 界面粘附功达 $1.842 J/m^2$, 证实SiC可作为 Fe_3C 的高效形核基底。试验设计添加0~0.15 wt.% SiC, 结果表明: 添加 (0.1 wt.%) 显著优化球墨铸铁组织, 球化率达93%, 珠光体片间距最小化, 抗拉强度提升至846 MPa。SiC通过异质形核和碳扩散促进协同作用, 有效细化珠光体片间距并增强界面结合, 为铸态球墨铸铁的高强韧化提供了理论依据与工艺优化方案, 具有较大应用价值。

关键词: 球墨铸铁; SiC颗粒; Fe_3C ; 异质形核; 第一性原理

在球墨铸铁强韧化研究中, 控制珠光体含量并细化其片间距是关键途径^[1]。渗碳体 (Fe_3C) 作为珠光体的主要组成相, 其形核与生长机制直接影响珠光体微观结构^[2]。朱先勇等^[3]发现, Cu和Sb在 Fe_3C 界面富集可降低界面能, 使珠光体含量提升至94%以上, 片间距细化, 抗拉强度达800 MPa, 证实降低 Fe_3C 界面能是强韧化的有效策略。

碳化硅 (SiC) 作为球墨铸铁预处理材料, 自20世纪80年代起广泛应用于熔炼工艺^[4-5]。Cheng等^[6]通过计算发现ZrC/SiC界面中C终止面具有更高附着功 ($5.56 J/m^2$), 显示出更强的异质成核潜力; Zhang等^[7]对Al/SiC界面的研究表明, C终止面与Al终止面的界面能相当, 说明两者在复合材料中可以共存。以上研究均表明, SiC界面在异质形核中存在优势。此外, 张馥显等^[8]研究表明, 添加SiC使石墨球形核率提升了16.6%、抗拉强度提升了16%和伸长率提升了65.4%, 并且珠光体层片间距减小。然而, 目前关于SiC细化珠光体片层间距的作用机制尚未阐明, 特别是其作为异质形核核心促进 Fe_3C 碳化物形成的具体机理仍存在研究空白。

故本文结合第一性原理计算与试验验证, 系统探究SiC预处理对球墨铸铁组织性能的调控机制: 首先构建SiC/ Fe_3C 界面模型, 计算晶格失配度、界面粘附功及界面能, 从原子尺度揭示SiC作为异质核心促进 Fe_3C 形核的作用机制; 继而设计添加0~0.15wt.% SiC试验, 通过金相观察、SEM、XRD及拉伸测试, 分析SiC含量对石墨球化率、珠光体片间距及强韧性的影响规律, 最终确定SiC预处理的优化工艺方案, 为铸态球墨铸铁的高强韧化提供理论与工艺支撑。研究聚焦SiC与 Fe_3C 的界面协同效应, 突破传统研究局限, 为高性能球墨铸铁的制备开辟新路径。

1 试验设计

1.1 计算方法

采用VASP软件结合PBE-GGA泛函与PAW方法, 对 Fe_3C 和SiC的体相、表面及界面性质进行密度泛函理论计算^[9]。通过收敛性检验确定参数: 能量变化率小于

作者简介:

张 腾 (1998-), 男, 硕士生, 主要研究方向为高强韧球墨铸铁。E-mail: zhangtengSY998@163.com
通信作者:
游志勇, 男, 副教授, 博士, 硕士生导师。电话: 13603511486, E-mail: 13603511486@163.com

中图分类号: TG143.5

文献标识码: A

文章编号: 1001-4977 (2025) 10-1321-08

基金项目:

山西省吕梁市校地合作重点研发专项 (2023XDHZ15)。收稿日期: 2025-05-07 收到初稿, 2025-07-16 收到修订稿。

1×10^{-5} eV/atom、原子受力小于0.3 eV/nm、位移小于 1×10^{-4} nm。体相结构优化时，两者Ecut均设为360 eV，Kmesh为 $8 \times 8 \times 8$ ；表面性能计算时，Ecut为360 eV，Kmesh为 $8 \times 8 \times 1$ ；界面性质计算参数与表面一致（Ecut为360 eV，Kmesh为 $8 \times 8 \times 1$ ）。

1.2 试验设计

含3.8C-2.2Si-0.4Mn（质量分数，%）的铁液，在50 kg中频感应炉中熔炼，孕育剂使用FeSi75（75 wt.% Si），加入量为1.3wt.%，球化剂使用FeSiMg6RE1.8（6%Mg+1.8%RE+43% Si），加入量为1.4 wt.%。在冶炼末期（铁液即将出炉之前1 min），将直径50 nm的SiC颗粒掺入铁液中并进行10 s的60 r/min的机械搅拌，控制熔融温度（ ≥ 1450 °C）防止SiC粒子在熔融过程中发生氧化裂解，并使用铁型覆砂工艺进行浇注得到球墨铸铁“Y”形试块。如表1所示，本文拟采用4个不同的试验组（加入SiC含量：0，0.05%，0.1%，0.15%）进行试验，根据GB/T 1348—2009球墨铸铁件拉伸试样尺寸规定，并加工成相应的拉伸试样，具体尺寸如图1所示，并采用万能材料试验机进行力学性能检测。

表1 不同试验组的SiC含量

Tab. 1 The SiC content in different experimental groups w_B /%

组别	SiC添加量
对照组	0
1	0.05
2	0.1
3	0.15

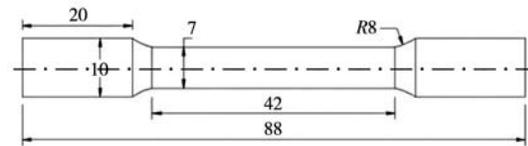


图1 拉伸试样示意图

Fig. 1 Schematic diagram of the tensile specimen

2 第一性原理计算

2.1 计算模型

晶体模型如图2所示。图2（a）为具有正交晶格的 Fe_3C 晶体单元胞（空间群：PNMA）作为 Fe_3C 模型，优化后的晶格常数为 $a=0.504$ nm， $b=0.67$ nm， $c=0.448$ nm。图2（b）为面心立方结构的SiC模型（空间群：fm-3m），优化后的晶格常数为 $a=b=c=0.437$ nm。

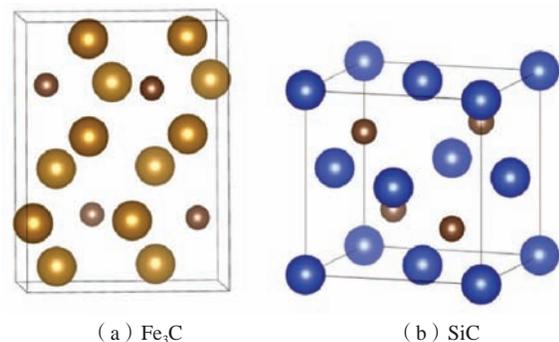
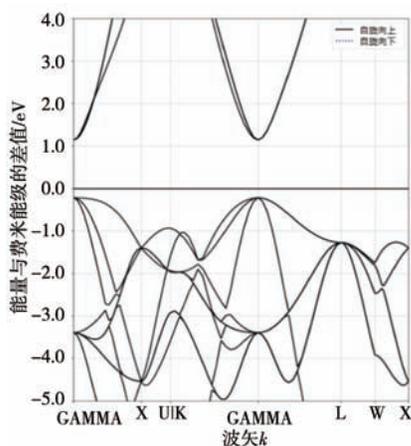


图2 晶体结构

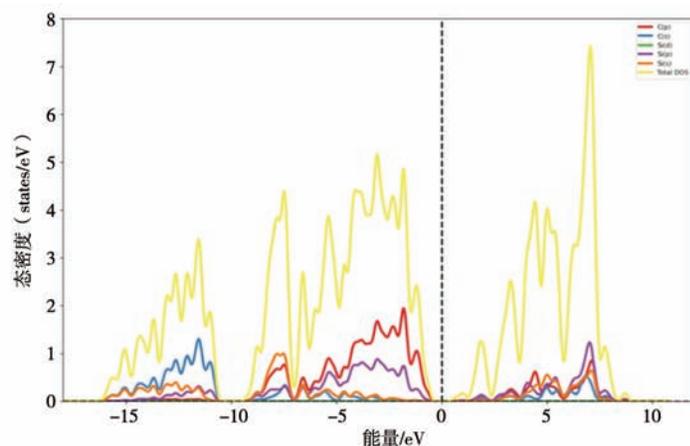
Fig. 2 Crystal structures

2.2 SiC和 Fe_3C 的体积特性

图3展示了SiC的电子结构特性。能带分析如图3（a）所示，SiC在费米能级（图中实线）附近呈现



（a）键结构



（b）态密度

图3 SiC电子结构特性

Fig. 3 Characterization of the electronic structure of the SiC

低态密度，且在-0.2~1.2 eV范围内具有显著带隙，费米能级位于带隙中央，证实其宽禁带半导体特性。态密度分析，图3 (b) 进一步表明，费米能级处总态密度 (TDOS) 趋近于零，与材料低导电性一致；在-7~12 eV能量区间内，Si-4p和C-2p轨道贡献的偏态密度 (PDOS) 存在显著共振峰，揭示了p-p轨道杂化主导的强共价键形成机制。表明SiC相结构中存在共价键。

图4展示了Fe₃C的电子结构特性，其中实线表示费

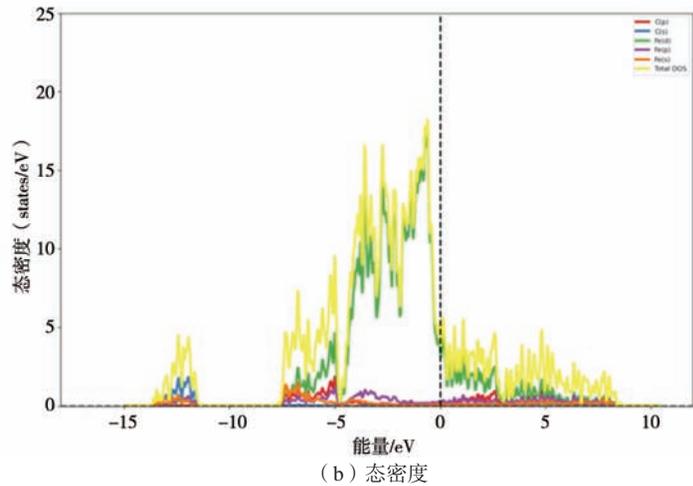
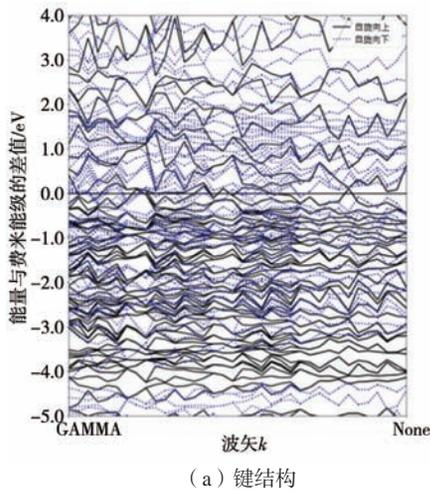


图4 Fe₃C电子结构特性

Fig. 4 Characterization of the electronic structure of the Fe₃C

2.3 二维晶格失配

Bramfitt的二维晶格失配理论，如Bramfitt所阐述的，适用于材料非匀相成核机制的研究^[9]。计算公式如式 (1) 所示：

$$\delta_{(hkl)_n}^{(hkl)_s} = \sum_{i=1}^3 \left[\frac{(|d_{[uvw]_s}^i \cos\theta - d_{[uvw]_n}^i| |d_{[uvw]_n}^i|)}{3} \right] \times 100\% \quad (1)$$

式中：(hkl)_s 为成核基底的晶面；(hkl)_n 为成核相的晶面；d_{[uvw]_s} 和 d_{[uvw]_n} 分别为沿[uvw]_s 与 [uvw]_n 方向的原子间距；θ 为 [uvw]_s 和 [uvw]_n 之间的夹角。

根据Bramfitt的二维晶格失配理论^[10]，基底相之间的晶格失配小于6%，衬底就可以作为成核相的高效非均相核。用公式 (1) 计算了Fe₃C与SiC的晶格失配度，结果见表2。Fe₃C₍₁₀₀₎/SiC₍₁₁₀₎ 界面的晶格失配度仅为5.77%。表明SiC可以作为Fe₃C的有效非均相成核基底。因此，本文选取Fe₃C₍₁₀₀₎ 面和SiC₍₁₁₀₎ 面建立表面模型，选取Fe₃C₍₁₀₀₎/SiC₍₁₁₀₎ 构建界面模型。

2.4 表面收敛检验

测量1.5 nm的真空层被纳入Fe₃C₍₁₀₀₎ 和SiC₍₁₁₀₎ 表面，如图5所示。SiC₍₁₁₀₎ 表面呈现出如图5 (a) - (b)

米能级。其中，图4 (a) 是Fe₃C型碳化物的能带结构。能带穿过费米能级，这表明Fe₃C具有金属性质。图4 (b) 则呈现了Fe₃C的TDOS和PDOS。在费米能级上电子的存在与能带结构一致，反映了Fe₃C的金属性质，Fe₃C内部有金属键。态密度分析表明，-7.5~-4 eV区间Fe-d/Cr-d与C-p轨道共价耦合，-4~0 eV范围内Fe-d与Cr-d轨道波峰反向分布，显示离子键特征。综上，Fe₃C相结构中存在金属键、共价键和离子键。

表2 Fe₃C和SiC之间的晶格失配

Tab. 2 Lattice mismatches between Fe₃C and SiC

匹配界面	(100) Fe ₃ C // (110) SiC		
[uvw] _{SiC}	[1 -1 0]	[1 -1 -1]	[0 0 1]
[uvw] _{Fe₃C}	[0 1 0]	[1 1 0]	[0 0 1]
θ	0	1.50	0
d _{SiC}	6.18	7.57	4.37
d _{Fe₃C}	6.70	8.06	4.48
δ	5.77%		

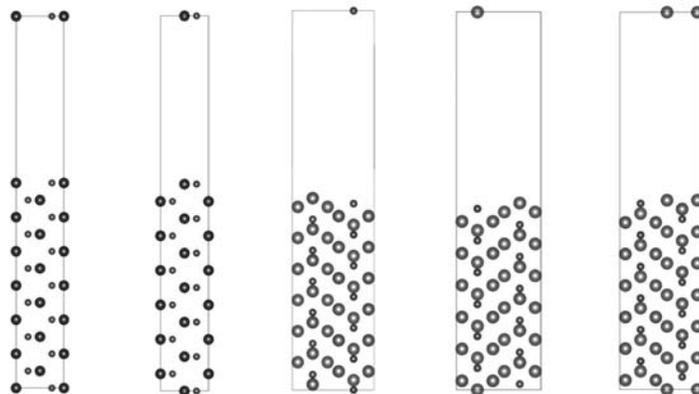
所示的两种不同的堆叠构型，分别为情形1 (b) 和情形2 (a)，而Fe₃C₍₁₀₀₎ 表面则呈现出三种堆叠构型。图5 (c) - (e) 显示了不同终止条件下Fe₃C₍₁₀₀₎ 表面的模型，具体为Fe端面 (c)、C端面 (d) 和Fe-Fe端面 (e)。

2.4.1 SiC₍₁₀₀₎ 的表面能

为了阐明SiC₍₁₀₀₎ 表面模型的收敛性，利用Botteger方程^[9]对该模型的表面能进行了计算：

$$\sigma_{\text{SiC}(110)} = \frac{1}{2A} (E_{\text{slab}}^N - N\Delta E) \quad (2)$$

$$\Delta E = (E_{\text{slab}}^N - E_{\text{slab}}^{N-2}) / 2 \quad (3)$$



(a) $\text{SiC}_{(110)}$ 情形1 (b) $\text{SiC}_{(110)}$ 情形2 (c) $\text{Fe}_3\text{C}_{(100)}$ C端 (d) $\text{Fe}_3\text{C}_{(110)}$ Fe端 (e) $\text{Fe}_3\text{C}_{(100)}$ Fe-Fe端

图5 不同的表面模型

Fig. 5 Surface models

式中： $\sigma_{\text{SiC}(110)}$ 为 $\text{SiC}_{(110)}$ 模型相关的表面能。 E_{slab}^N 和 E_{slab}^{N-2} 分别为 N 和 $N-2$ 原子层表面模型的总能量， A 为表面积。利用 Botteger 方程确定了 $\text{SiC}_{(110)}$ 情形1和情形2表面模型的表面能，计算结果如表3所示。

表3 $\text{SiC}_{(110)}$ 模型的表面能
Tab. 3 Surface energy of the $\text{SiC}_{(110)}$ model

层数		5	7	9	11	13
$\sigma_{\text{SiC}(110)}$	情形1	3.24	2.98	3.09	2.97	2.98
	情形2	3.24	3.04	2.98	2.97	2.97
		/($\text{J}\cdot\text{m}^{-2}$)				

在对 $\text{SiC}_{(110)}$ 情形1表面模型的分析中，观察到层数为11层时，表面能达到了 2.97 J/m^2 ，从而证实了11层 $\text{SiC}_{(110)}$ 情形1表面模型的收敛性。同样地，对于 $\text{SiC}_{(110)}$ 情形2表面模型，表明了11层的情况下，表面能也稳定在 2.97 J/m^2 ，这表明11层 $\text{SiC}_{(110)}$ 情形2表面模型同样具有收敛性。

2.4.2 $\text{Fe}_3\text{C}_{(100)}$ 的表面能

$\text{Fe}_3\text{C}_{(100)}$ 表面模型表面能的计算公式如式(4)：

$$\sigma_{\text{Fe}_3\text{C}(100)} = \frac{1}{2A} (E_{\text{slab}} - N_{\text{Fe}}\mu_{\text{Fe}} - N_{\text{C}}\mu_{\text{C}}) \quad (4)$$

式中： $\sigma_{\text{Fe}_3\text{C}(100)}$ 为 $\text{Fe}_3\text{C}_{(100)}$ 曲面模型的表面能； A 为表面积； E_{slab} 为 $\text{Fe}_3\text{C}_{(100)}$ 表面模型的总能量； N_{Fe} 和 N_{C} 分别为模型中 Fe 和 C 原子的数量； μ_{Fe} 和 μ_{C} 分别为 Fe 和 C 原子的化学势。

在0常压下， Fe_3C 中 Fe、C 原子化学势分别为 8.3 eV 和 9.09 eV ，据此结合体积单位能通过式(4)计算 $\text{Fe}_3\text{C}_{(100)}$ 模型表面能。

表4显示，6-30层 $\text{Fe}_3\text{C}_{(100)}$ Fe 端面模型在12层时表面能收敛至 0.165 J/m^2 ；表5中8-32层 $\text{Fe}_3\text{C}_{(100)}$ C 端面模型14层收敛至 0.172 J/m^2 ；表6中7-31层 $\text{M}_3\text{C}_{(100)}$ Fe-Fe 端接表面模型13层收敛至 0.176 J/m^2 。

表4 $\text{Fe}_3\text{C}_{(100)}$ 表面能的Fe-末端模型
Tab. 4 Fe-terminal model of the surface energy of the $\text{Fe}_3\text{C}_{(100)}$

层数	6	12	18	24	30
$\sigma_{\text{Fe}_3\text{C}(100)}$ / ($\text{J}\cdot\text{m}^{-2}$)	0.153	0.165	0.166	0.167	0.168

表5 $\text{Fe}_3\text{C}_{(100)}$ 表面能的C-末端模型
Tab. 5 C-terminal model of the surface energy of the $\text{Fe}_3\text{C}_{(100)}$

层数	8	14	20	26	32
$\sigma_{\text{Fe}_3\text{C}(100)}$ / ($\text{J}\cdot\text{m}^{-2}$)	0.163	0.172	0.174	0.174	0.175

表6 $\text{Fe}_3\text{C}_{(100)}$ 表面能的Fe-Fe-末端模型
Tab. 6 Fe-Fe-terminal model of the surface energy of the $\text{Fe}_3\text{C}_{(100)}$

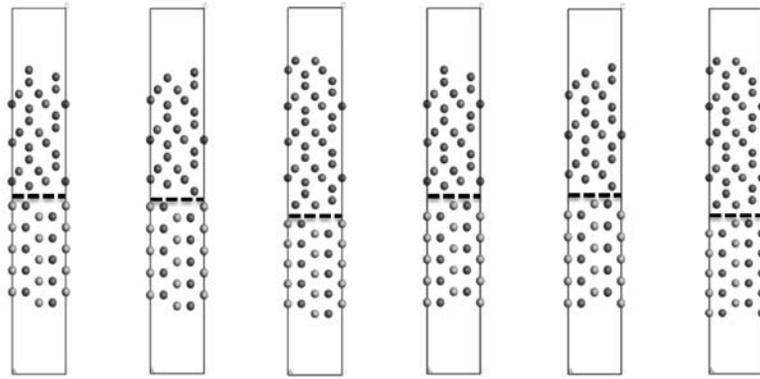
层数	7	13	19	25	31
$\sigma_{\text{Fe}_3\text{C}(100)}$ / ($\text{J}\cdot\text{m}^{-2}$)	0.169	0.176	0.178	0.179	0.180

收敛性测试结果表明，11层 $\text{SiC}_{(110)}$ 情形1表面模型、11层 $\text{SiC}_{(110)}$ 情形2表面模型、12层 $\text{Fe}_3\text{C}_{(110)}$ Fe 端面模型、14层 $\text{Fe}_3\text{C}_{(110)}$ C 端面模型和13层 $\text{Fe}_3\text{C}_{(100)}$ Fe-Fe 端面模型均能达到收敛性和类块体性能。因此，本文利用这些模型构建接口模型。

2.5 界面属性

根据原子在 $\text{SiC}_{(110)}$ 和 $\text{Fe}_3\text{C}_{(100)}$ 表面的不同堆叠模式，建立了6种界面模型，图6。用界面粘附功和界面能来评价界面的粘接强度和稳定性。其中，界面粘接工作是将界面划分为两个自由表面所需的可逆工作，可通过方程(5)^[12]计算。

$$W_{\text{ad}} = \frac{E_{\text{Fe}_3\text{C}} + E_{\text{SiC}} - E_{\text{Fe}_3\text{C}/\text{SiC}}}{S} \quad (5)$$



(a) 情形1/Fe (b) 情形2/Fe (c) 情形1/C (d) 情形2/C (e) 情形1/Fe-Fe (f) 情形2/Fe-Fe

图6 不同界面模型示意图

Fig. 6 Schematic diagrams of different interface models

式中： E_{Fe_3C} 和 E_{SiC} 分别为 $Fe_3C_{(100)}$ 面模型和 $SiC_{(110)}$ 面模型的总能量； $E_{Fe_3C/SiC}$ 为 $Fe_3C_{(100)}/SiC_{(110)}$ 界面模型的总能量； S 为 $Fe_3C_{(100)}/SiC_{(110)}$ 的界面面积。界面能可以评价界面的稳定性，通常界面能量越小，界面越稳定。界面能可由式(6)^[13]计算：

$$\gamma = \sigma_{Fe_3C} + \sigma_{SiC} - W_{ad} \quad (6)$$

式中： $\sigma_{Fe_3C_{(100)}}$ 和 $\sigma_{SiC_{(110)}}$ 分别为 $Fe_3C_{(100)}$ 和 $SiC_{(110)}$ 的表面能； W_{ad} 是 $Fe_3C_{(100)}/SiC_{(110)}$ 接口的粘附功。表7和表8分别列出了 $Fe_3C_{(100)}/SiC_{(110)}$ 模型的界面粘附功和界面能。

表7 $Fe_3C_{(100)}/SiC_{(110)}$ 模型的界面粘附功

Tab. 7 Interface bonding functions of the $Fe_3C_{(100)}/SiC_{(110)}$ model

界面	情形1/C	情形1/Fe	情形1/Fe-Fe	情形2/C	情形2/Fe	情形2/Fe-Fe
$W_{ad}/(J \cdot m^{-2})$	1.808	1.842	0.510	0.513	0.507	0.520

表8 $Fe_3C_{(100)}/SiC_{(110)}$ 模型的界面能

Tab. 8 Interface energies of the $Fe_3C_{(100)}/SiC_{(110)}$ model

界面	情形1/C	情形1/Fe	情形1/Fe-Fe	情形2/C	情形2/Fe	情形2/Fe-Fe
$\sigma/(J \cdot m^{-2})$	1.338	1.304	2.632	2.629	2.628	2.615

界面能在评估界面稳定性方面也起着重要作用。根据表7和8可知，情形1/Fe（11层 $SiC_{(110)}$ 情形1与12层 $Fe_3C_{(100)}$ Fe端）界面粘附功最大，界面的结合力最强，为 $1.842 J/m^2$ ，界面的稳定性也最好，为 $1.304 J/m^2$ 。

3 试验验证

3.1 碳化硅预处理对基体组织的影响

3.1.1 碳化硅预处理对球墨铸铁石墨形态的影响

根据GB/T 9441—2009球墨铸铁金相试样检验标准，采用相图分析软件IPP（Image-Pro Plus）分析了SiC预处理后球墨铸铁的球化率、球墨分布密度和球化等级结果如表9所示。根据图7看出，SiC加入量为0时，少量蠕虫状或片状石墨分布不均，且由表9可知，球化率为84%，球墨分布密度为328个/ mm^2 。加入SiC $\leq 0.1\%$ 时，石墨球形态改善，且球墨分布密度

变大，这是因为SiC分解生成的 SiO_2 可与SiC结合成为石墨形核衬底，共同形成有效形核核心，有助于降低石墨形核能垒，进而提升球化率^[14]；自由碳局部提高碳浓度，增强碳扩散驱动力，利于维持球状石墨^[15]。SiC=0.15%时，球墨分布密度最大为512个/ mm^2 ，球化率降至88%，部分石墨呈开花状、椭球形畸形，且尺寸分布变宽。

表9 预处理后球墨铸铁石墨球特征

Tab. 9 Characteristics of the graphite spheres of the nodular cast iron after pretreatment

编号	a	b	c	d
SiC加入量/wt.%	0	0.05	0.1	0.15
球化率/%	84	91	93	88
球墨分布密度/(个· mm^{-2})	328	434	472	512
球化等级	三级	二级	二级	三级

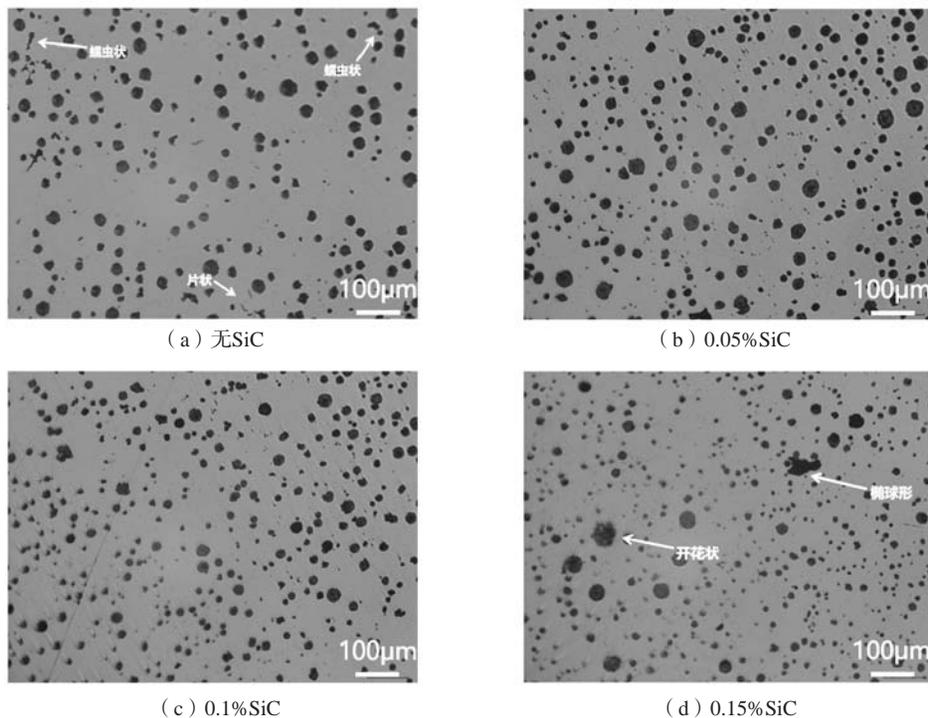


图7 不同SiC含量的球墨铸铁石墨形态图

Fig. 7 Graphite morphology diagrams of the ductile irons with different SiC contents

3.1.2 碳化硅预处理对球墨铸铁基体组织的影响

为研究不同SiC颗粒含量对球墨铸铁微观组织的影响，经4%酒精腐蚀后利用扫描电镜表征珠光体片间距（图8）。结果显示，随SiC加入，珠光体片间距均有所降低。0.1%SiC添加量时珠光体片间距最小；相比之下，0.15%时珠光体片间距有所增加，但仍优于未加SiC试样。因为SiC分解释放出Si元素，Si是强石墨化元

素，促进铁素体形成并抑制珠光体的生成。同时为了验证SiC是否成功加入，本文设置了三个试验组（加入SiC含量：0.1%，0.5%，1%）。如图9所示，XRD结果表明，在0.5%和1%添加组中均检测到了未分解的SiC特征衍射峰，证明SiC被成功引入且未完全分解。综上所述，未分解SiC颗粒作为 Fe_3C 异质核心增加形核密度，细化片层。

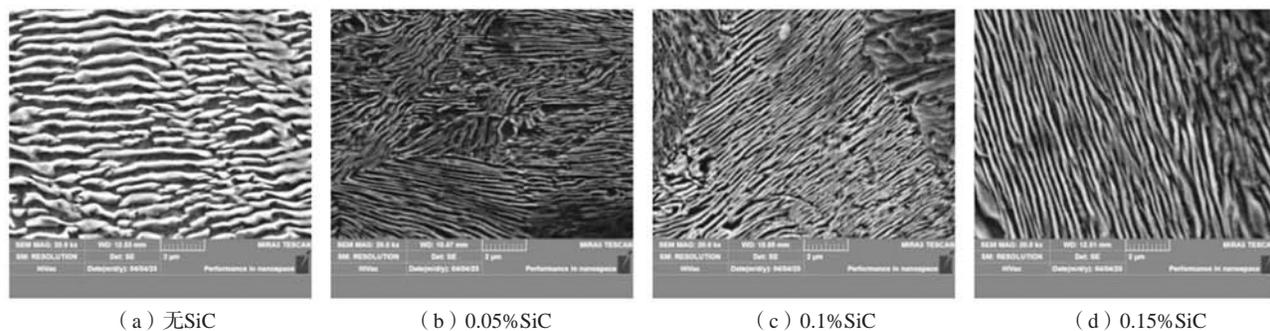


图8 不同SiC含量对珠光体的影响

Fig. 8 The influence of different SiC contents on the pearlite

3.1.3 SiC颗粒细化球墨铸铁珠光体中 Fe_3C 的机理分析

为分析SiC颗粒对球墨铸铁珠光体中 Fe_3C 的细化机理，采用扫描电子显微镜（SEM）结合X射线能谱（SEM-EDS）对预处理试样进行表征（图10）。SEM-EDS图谱显示，点1和点2的Si含量显著高于点3，表明 Fe_3C 区域存在Si元素富集，推测该处可能存在SiC颗粒。

通过X射线衍射仪（XRD）分析SiC加入量为

0.1%的球墨铸铁（图11），球墨铸铁基体在 44.36° 、 44.88° 、 65.1° 、 82.43° 处的衍射峰对应其基体相，而 35.8° 、 60.23° 、 71.96° 处的峰归属于SiC颗粒。预处理试样在 35.8° 处出现疑似SiC的微弱特征峰，为证实SiC颗粒的成功加入，通过不同SiC加入量试验，采用XRD表征证明存在未分解的SiC（图9），峰强度减弱与SiC添加量少有关。结合上述分析，点1和点2处的SiC颗粒

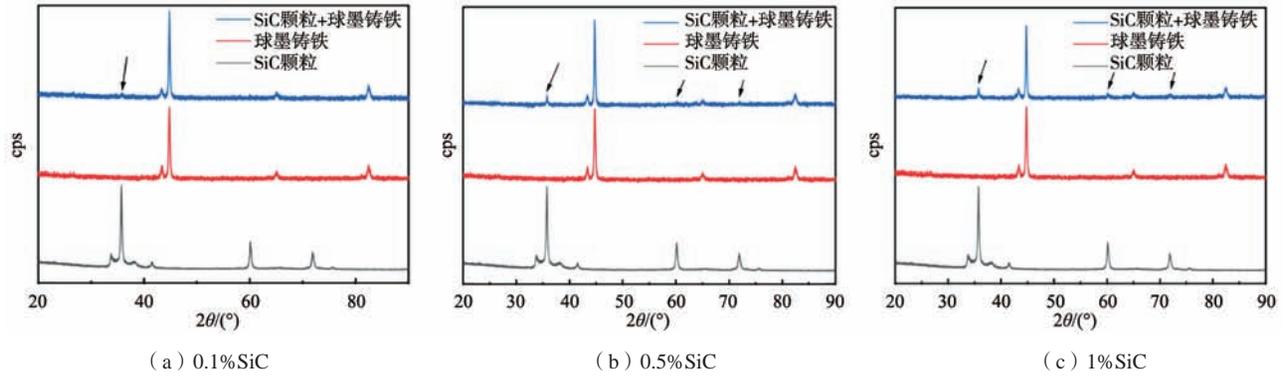


图9 SiC颗粒、未处理球墨铸铁及经不同含量SiC预处理的球墨铸铁的XRD谱图
Fig. 9 XRD patterns of SiC particles, untreated ductile iron, and ductile iron pretreated with SiC of varying contents

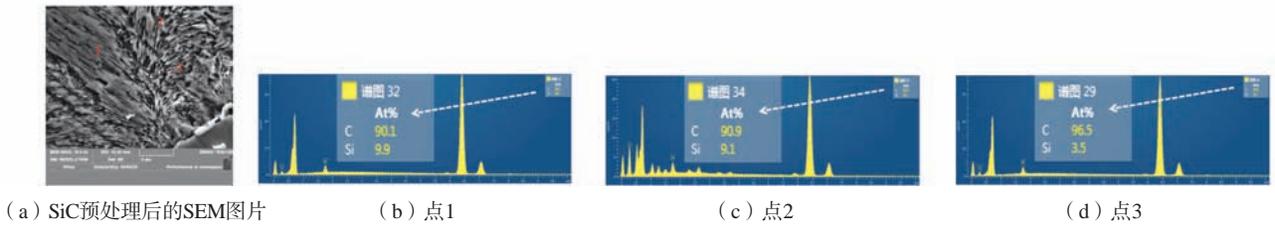


图10 SiC预处理后的SEM和SEM-EDS图像

Fig. 10 SEM and SEM-EDS images after SiC preprocessing

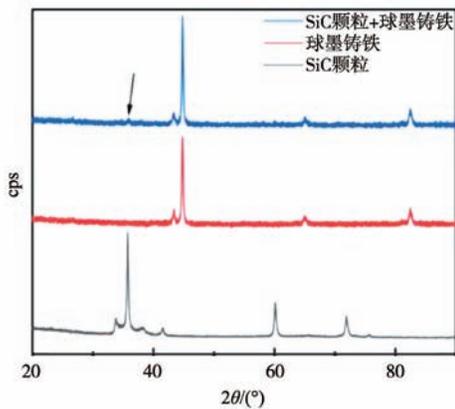


图11 SiC颗粒、未处理球墨铸铁及经SiC颗粒预处理的球墨铸铁的XRD谱图

Fig. 11 XRD patterns of SiC particles, untreated ductile iron, and ductile iron pretreated with SiC particles

可作为 Fe_3C 的异质形核核心，其高密度核心迫使 Fe_3C 与铁素体交替生长时更密集，导致珠光体团间距减小和片层结构细化。

3.2 SiC 预处理对球墨铸铁力学性能的影响

通过测试SiC预处理球墨铸铁的抗拉强度与伸长率(图12)，发现随SiC含量增加，抗拉强度与伸长率均是先升后降。SiC添加量为0.1%时，力学性能最好，抗拉强度达846 MPa、伸长率4.7%。这是因为，随着SiC的加入，铁素体含量增多，珠光体含量减少，所以会提升球墨铸铁的伸长率，同时，SiC分解释放的Si元素

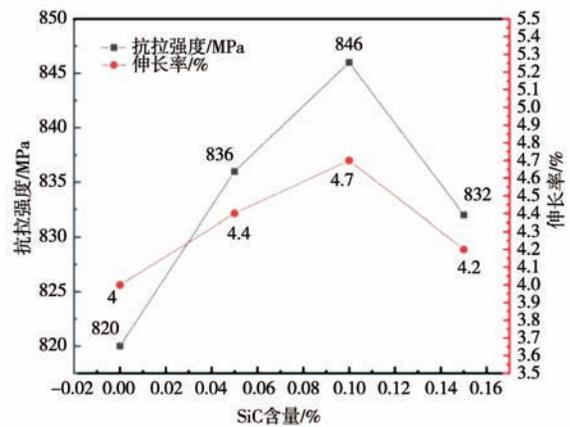


图12 SiC预处理对力学性能的影响

Fig. 12 Effect of SiC pretreatment on the mechanical properties

会固溶强化铁素体，未分解的SiC颗粒作为异质核心降低 Fe_3C 形核势垒，细化珠光体片间距提升球墨铸铁强度。当SiC含量为0.15%时，力学性能降低。因为石墨球形态恶化以及珠光体片间距增大，最终导致力学性能下降。综上，SiC含量为0.1%时球墨铸铁力学性能达到最佳。

4 结论

(1) 计算构建了 $Fe_3C_{(100)}/SiC_{(110)}$ 界面模型，发现二者界面晶格失配度为5.77%，满足 $\delta \leq 6\%$ 的高效形核条件，证实SiC是 Fe_3C 理想异质核心；情形1/Fe界面粘附功 $1.842 J/m^2$ 、界面能 $1.304 J/m^2$ ，强界面结合促使

珠光体片间距细化,从原子尺度解释了试验现象。

(2) 向球墨铸铁中添加SiC颗粒时,球墨铸铁的

力学性能得到提升。其中SiC颗粒加入量为0.1%时,力学性能最好,抗拉强度为846 MPa、伸长率为4.7%。

参考文献:

- [1] 周建强. 高强韧球墨铸铁制备工艺优化及应用研究 [D]. 芜湖: 安徽工程大学, 2022.
- [2] ZHANG M X, KELLY P M. The morphology and formation mechanism of pearlite in steels [J]. *Materials Characterization*, 2009, 60 (6): 545-554.
- [3] 朱先勇, 刘耀辉, 张英波, 等. 新型铸态高强度珠光体球墨铸铁的研究 [J]. *材料热处理学报*, 2007 (2): 85-88.
- [4] 刘美多, 李聪, 朱兴洋, 等. 复合纳米碳化硅包芯线球墨铸铁孕育及其效果分析 [J]. *铸造*, 2018, 67 (2): 167-170.
- [5] 张文和, 丁俊, 聂富荣. 铸铁的SiC孕育预处理 [J]. *铸造*, 2009, 58 (3): 279-281.
- [6] CHENG G, XIONG Y, ZHOU H, et al. Revealing the adhesion, stability and electronic structure of $ZrC_{(111)}/SiC_{(111)}$ interface: A first-principles study [J]. *Vacuum*, 2020, 180: 109591.
- [7] ZHANG F, LI Q, GLAZOFF M V, et al. First-principles study of interfaces in Al/SiC metal-matrix composite system [J]. *Computational Materials Science*, 2023, 229: 112444.
- [8] 张馥显. SiC粉体制备及其对球墨铸铁组织性能影响的研究 [D]. 大连: 大连交通大学, 2023.
- [9] SHI Z, LIU S, ZHOU Y, et al. Structure and properties of $YAlO_3/NbC$ heterogeneous nucleation interface: First principles calculation and experimental research [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2019, 773: 264-276.
- [10] BRAMFITT B L. The effect of carbide and nitride additions on the heterogeneous nucleation behavior of liquid iron [J]. *Metallurgical Transactions*, 1970, 1 (7): 1987-1995.
- [11] BOETTGER J C. Nonconvergence of surface energies obtained from thin-film calculations [J]. *Physical review B, Condensed matter*, 1994, 49 (23): 16798-16800.
- [12] XIAN Y, QIU R, WANG X, et al. Interfacial properties and electron structure of Al/B₄C interface: A first-principles study [J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2016, 478: 227-235.
- [13] HE Q, WANG J, SONG W, et al. Novel insights into heterogeneous nucleation interface properties between La_2O_3 and γ -TiAl: First-principles calculations [J]. *Materials Today Communications*, 2024, 41: 110292.
- [14] 申志清. 球墨铸铁石墨球核心组成及形核机制的研究 [J]. *铸造*, 2012 (4): 357-361.
- [15] 闫世兴, 董世运, 徐滨士, 等. 灰铸铁表面激光熔覆NiCuFeBSi合金层中碳扩散形式研究 [J]. *稀有金属材料与工程*, 2014, 43 (9): 2182-2186.

Research on the Heterogeneous Nucleation Mechanism and Mechanical Properties of Fe_3C in Ductile Iron Pearlite Promoted by SiC Particles

ZHANG Teng, YOU Zhi-yong, HAN Pei-de, SONG Zhen-yang, HAN Jia-min

(School of Materials Science and Engineering, Taiyuan University of Technology, Lvliang City Key Laboratory of Advanced Specialized Iron-Carbon Alloys, Taiyuan 030024, Shanxi, China)

Abstract:

This paper systematically studied the regulation mechanism of silicon carbide (SiC) pretreatment on the microstructure and properties of ductile iron. By combining first-principles calculations with experimental verifications, the mechanism by which SiC, as a heterogeneous nucleation site, promoting the nucleation of cementite (Fe_3C) in pearlite was revealed. Theoretical calculations showed that the lattice mismatch rate at the interface between $SiC_{(110)}$ and $Fe_3C_{(100)}$ was only 5.77%, and the interfacial bonding work reached $1.842 J/m^2$, confirming that the SiC can serve as an efficient nucleation substrate for the Fe_3C . The experimental design included the addition of the SiC with additions ranging from 0 to 0.15 wt.%. The results showed that an appropriate addition (0.1 wt.%) significantly optimized the microstructure of the ductile iron, with a spheroidization rate of 93%, resulting in minimized pearlite lamellae spacing, and increased the tensile strength to 846 MPa. Through the synergistic effects of heterogeneous nucleation and promotion of carbon diffusion, the SiC effectively refined the spacing of pearlite sheets and enhanced the interfacial bonding, providing a theoretical basis and process optimization scheme for the high strength and toughening of as-cast ductile iron, and had significant application value.

Key words:

ductile iron; SiC particles; Fe_3C ; heterogeneous nucleation; first-principles