文章编号:1673-5196(2021)02-0007-06

Cu 含量对 γ-Ni 相影响的第一性原理

李亚敏*,江 璐,刘洪军

(兰州理工大学部共建有色金属先进加工与再利用国家重点实验室,甘肃兰州 730050)

摘要:基于第一性原理赝势平面波方法,从原子尺度上分析了 Cu 元素含量的变化对镍基合金基体相 γ-Ni 相的影响.计算了掺杂前后不同体系的晶胞总能量、形成热、结合能、态密度以及电荷密度,分析了掺杂前后不同体系的稳 定性.结果表明:Cu 原子的掺杂使 γ-Ni 相的形成热和结合能的绝对值降低,并且随着掺杂浓度的增大,形成热和结 合能的绝对值也相应降低,表明 Cu 的掺杂降低了体系的稳定性,Cu 含量越高体系的稳定性越差; Cu 的掺杂降低 了体系的硬度、抗变形能力以及原子间的定向键和结合能力,使体系的延性降低.引起这些变化的本质原因是 Cu 原子的掺杂改变了体系中 Ni 原子周围的电荷分布以及电荷间的相互作用.计算结果与实验结果的趋势相一致. 关键词: Cu 含量;第一性原理;γ相;电子结构 中图分类号: TG146.1 文献标志码;A

Effect of Cu content on the γ -Niphase: First-principles studies

LI Ya-min, JIANG Lu, LIU Hong-jun

(State Key Laboratory of Advanced Processing and Recycling of Nonferrous Metals, Lanzhou Univ. of Tech., Lanzhou 730050, China)

Abstract: In this work, first-principles density functional theory was applied to investigate the effect of variation of Cu Content on the γ -Ni Phase of nickel base alloy from the atomic scale. The total energy, formation enthalpy, cohesive energy, the density of the states and elect on density difference were calculated and used to study the stability of different system including before and after doping. The results show that the doping of Cu atoms reduces the absolute values of formation enthalpy and cohesive energy of the γ -Ni system, and with the increase of the doping concentration, the absolute values of the formation enthalpy reduced when introducing Cu, which is worse with the increasement of Cu. The doping of Cu reduces the hardness and deformation resistance of the system, as well as the oriented bond and bonding ability between atoms, resulting in the reduction of system's ductility. The essential reason for these changes is that the incorporation of Cu changed the charge distribution and interaction around Ni atoms in the system. The trend for experimental results are consistent with that for the first-principles calculation results.

Key words: Cu content; first-principles; γ phase; electronic structure

镍基高温合金具有的优点与镍自身的优异性能 有关^[1].镍为面心立方结构,组织非常稳定,从室温 到高温不发生同素异型转变;镍具有高的化学稳定 性,在 500℃以下几乎不氧化,常温下也不受湿气、 水及某些盐类水溶液的作用.镍在硫酸及盐酸中溶 解很慢,而在硝酸中溶解很快;纯镍的硬度虽然不 高,但塑性却极好,尤其在低温下塑性变化不大;Ni

收稿日期:2020-09-03

原子的电子排布式为 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^8 4s^2$,第三 电子层基本达到饱和,因此镍具有比较大的合金化 能力,甚至添加十几种合金元素也不出现有害相,这 就为改善镍的各种性能提供了可能.因此,研究人员 经常采用合金化的方法来提高镍基合金的性能^[2-4]. 近年来,随着计算材料的不断发展,从固体物理的角 度研究合金元素的掺杂问题成为了热点^[5].王云 江^[6]采用基于密度泛函理论(DFT)的第一性原理贋 势平面波方法研究了合金元素 Ta、Mo、W、Cr、Re、 Ru、Co 以及 Ir 对 γ -Ni 相弹性性质的影响,并对各

通讯作者: 李亚敏(1973-),女,河北蠡县人,副教授,博士. Email:leeyamin@163.com

计算模型的晶格常数、弹性模量以及韧脆性进行了 分析.结果表明,除Co和Cr外,其余合金元素均使 γ 相的晶格常数增大,并且所有合金元素的加入都 降低了 γ 相和 γ' 相之间的晶格错配度;除了 Co 以 外,其余的合金元素均使 γ 相的脆性变大.

Cu 作为镍矿的伴生元素,对镍基合金组织和性 能具有重要的影响^[7].因此,研究 Cu 对镍基合金基 体 γ 相的影响具有现实意义.本文采用第一性原理 计算的方法从微观电子结构入手,研究四种不同浓 度 Cu 的掺杂对 γ -Ni 相结构稳定性、弹性力学性质 以及电子结构的影响;并结合实验分析 Cu 的含量 对铸态 Inconel 718 合金 γ 相力学性能的影响.

模型建立与试验方法 1

1.1 计算方法与晶体模型建立

 γ -Ni 相属面心立方结构,空间群为 FM-3M,晶 格常数 $a=b=3.571 8\times 10^{-4} \mu m$, $\alpha=\beta=\gamma=90^{\circ[8]}$. 分别构造由 8 个、16 个和 32 个原子组成的 Ni (1× 2×1)、 $(2\times2\times1)$ 和 $(2\times2\times2)$ 超晶胞,将一个 Cu 原子掺杂进超晶胞体系中,得到的超晶胞计算模型 如图 1 所示.由于 Cu 在镍原材料中的含量有限,因 此只考虑一个 Cu 原子掺杂的情况.当超晶胞模型为 Ni₈、Ni₃₁Cu、Ni₁₅Cu 和 Ni₇Cu 时,所对应 Cu 原子的 掺杂原子分数分别为 0%、3.125%、6.25%和12.5%.

计算采用基于密度泛函理论(DFT)的贋势平 面波 CASTEP(cambridge serial total energy package)程序,平面波截断能取 400 eV,Ni₈和 Ni₇Cu 的 K 点网格数取 $12 \times 6 \times 12$, Ni₃₁ Cu 的取 $6 \times 6 \times 6$, $Ni_{15}Cu$ 的取 $6 \times 6 \times 12$.采用广义梯度近似(GGA)处 理交换关联能部分,交换关联势取 Perdew-Wang91 (PW91)形式.Ni 原子的 3d⁸4s²和 Cu 原子的 3d¹⁰4s¹ 作为价电子,其他轨道电子视为芯电子.计算之前采 用 BFGS 方法对计算模型进行结构优化.自洽计算 参数为:总能量收敛设为 2.0×10^{-6} eV/atom,每个 原子上的力低于 $5 \times 10^6 \text{ eV}/\mu m$, 公差偏移小于 $2 \times$ 10^{-7} µm,应力偏差小于 0.1 Pa.

1.2 实验方法

以铸态 Inconel 718 合金为研究对象,分析 Cu 元素的含量对合金基体相 γ -Ni 相的影响.铸态 Inconel 718 合金基体相以 γ 相为主.实验原材料的化 学配比见表 1.试样制备过程为配料-混料-压块-熔 炼-切割.采用 HBRVU-187.5 型布洛维氏光学硬度 计测试实验合金的布氏硬度,测试前试样表面经 $240^{\#} \sim 800^{\#}$ 水砂纸逐级打磨,每个试样测试 5 个 点,取平均值.屈服强度测试采用的设备为 WDW-100D型电子万能材料试验机,试样尺寸为 $\phi5 \text{ mm} \times$ 8 mm,压缩实验前试样表面经 600 ♯ 砂纸机械磨光. 采用 JEM-6700F 场发射扫描电子显微镜观察合金 晶界析出相的大小、形貌及分布,化学腐蚀剂成 分为:

 $1 g CuSO_4 + 20 mL HCl + 10 mL C_2 H_5 OH$



(a) Ni_s

(b) Ni₇Cu

(c) Ni1₅Cu

(d) Ni₃₁Cu

图 1 γ-Ni体系的超晶胞计算模型 Fig.1 Supercell model of γ-Ni

表 1	实验合金的化学成分(质量分数)	
12 1	<u> </u>	

		Tab.1	Chemical composition of experimental alloys						%
合金	Ni	Cr	Nb	Mo	Ti	Al	С	Cu	Fe
No.0	52.00	18.40	5.40	3.05	1.05	0.55	≪0.05	0	Bal.
No.1	52.00	18.40	5.40	3.05	1.05	0.55	≪0.05	0.1	Bal.
No.2	52.00	18.40	5.40	3.05	1.05	0.55	≪0.05	0.3	Bal.
No.3	52.00	18.40	5.40	3.05	1.05	0.55	≪0.05	0.5	Bal.

(C)1994-2021 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

2 结果与讨论

2.1 形成热与结合能

为了判断 Cu 原子掺杂 γ-Ni 体系后对其稳定性 的影响,分别计算了各掺杂模型的形成热与结合能. 计算结果见表 2.

表 2 掺杂前后 γ-Ni体系的形成热和结合能

Tab.2 Formation enthalpy and cohesive energy of the supercells

_				
	Cu	$E_{ m tot}$	$H_{ m form}$	$E_{ m coh}$
	/ %	/eV	$/(eV \cdot atom^{-1})$	$/(eV \cdot atom^{-1})$
	0	$-10\ 835.131$	-0.045 6	-7.229
	3.125	$-43\ 462.640$	-0.044 1	-7.130
	6.25	$-21 \ 792.372$	-0.043 8	-7.030
	12.5	$-10\ 957.262$	-0.0390	-6.833

形成热用来衡量相结构的稳定性.Cu 掺杂进 γ-Ni 体系后,形成热的计算公式如式(1)所示:

$$H = \frac{1}{x + y + z} (E_{\text{tot}} - xE_{\text{solid}}^{\text{Ni}} - yE_{\text{solid}}^{\text{Cu}}) \qquad (1)$$

式中: E_{tot} 为晶胞总能; E_{solid}^{Ni} 、 E_{solid}^{Cu} 分别表示固态 Ni 和 Cu 每个原子的能量;x、y分别表示 Ni 和 Cu 原 子在晶胞结构模型中的原子个数,计算固态单原子 能量时采用与金属间化合物晶胞总能量相同的计算 条件,单个原子 Ni 和 Cu 的能量分别取-1 354.437 0、 -1 476.518 0 eV.

晶体的强度、结构稳定性与其结合能密切相关, 结合能的绝对值越大,则形成的晶体越稳定.Cu原 子掺杂进 Ni 体系后,结合能的计算公式如式(2)所示:

$$E = \frac{1}{x + y + z} (E_{\text{tot}} - xE_{\text{atom}}^{\text{Ni}} - yE_{\text{atom}}^{\text{Cu}}) \qquad (2)$$

式中: E_{tot} 为晶胞总能; E_{atom}^{Cu} 、 E_{atom}^{Cu} 分别表示 Ni 和 Cu自由原子的能量;x、y分别表示 Ni 和 Cu 原子 在晶胞结构模型中的原子个数,在计算自由原子能 量时采用与金属间化合物晶胞总能量相同的计算条 件,自由原子 Ni 和 Cu 的能量分别为-1 347.162 0、 -1 472.464 0 eV.

由表 2 可知,各计算模型的形成热和结合能均 为负值,表明各晶胞结构均能够形成,并且形成的结 构相对稳定.各计算模型形成热的绝对值随着 Cu 掺 杂浓度的升高而降低,表明未掺杂 Cu 原子的晶胞 结构最易形成,当掺杂原子分数为 12.5%时,其晶胞 相对于其他晶胞结构而言较难形成.各计算模型结 合能的绝对值均随着掺杂浓度的升高而降低,表明 未掺杂 Cu 原子的晶胞最稳定,随着掺杂浓度的增 加,晶胞结构的稳定性依次降低.综合分析形成热和 结合能可知,Cu 原子的掺杂降低了 γ -Ni 体系的结构稳定性.体系稳定性的降低促使铸态 Inconel 718 合金的组织形貌发生了显著的变化,合金中析出了 大量的 Laves 相^[9],如图 2 所示.







2.2 弹性性质

弹性常数 *C_{ii}* 可以描述晶体的弹性性质.在线弹 性近似下,当应变分量趋近于 0 时,由胡克定律可 知,每一个应力分量都可以表示成 6 个应变分量的 线性函数,如式(3)所示:

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} e_{kl} \tag{3}$$

式中: C_{ijkl} 为弹性常数,是一个 9×9 的四阶张量,可 以简化为 C_{ij} ,用 6×6 的矩阵表示 9×9 的矩阵^[10].

对于立方晶系而言,只有三个独立的弹性常数, 分别为:*C*₁₁、*C*₁₂以及 *C*₄₄,其力学稳定性判断条件 为^[11-14]

$$C_{11} > 0, C_{44} > 0, C_{11} - C_{44} > 0, C_{11} + 2C_{12} > 0$$

$$(4)$$

对于四方晶系而言,有六个独立的弹性常数,分 别为 *C*₁₁、*C*₁₂、*C*₁₃、*C*₃₃、*C*₄₄和 *C*₆₆,其力学稳定性判 断条件为

$$\begin{cases} C_{11} + C_{33} - 2C_{13} > 0, \quad C_{11} > 0, \quad C_{33} > 0 \\ C_{44} > 0, \quad C_{66} > 0, \quad C_{11} - C_{22} > 0 \\ 2C_{11} + C_{33} + 2C_{12} + 4C_{12} > 0 \end{cases}$$

(5)

分别计算不同 Cu 掺杂浓度体系 Ni₈、Ni₃₁Cu、 Ni₁₅Cu 和 Ni₇Cu 的弹性常数,结果见表 3.从表 3 可 以看出,计算获得的弹性常数值与实验值和其他理

(C)1994-2021 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

表 3 掺杂前后 γ-Ni 体系的弹性常数 C_{ij}

Tab.3 Elastic constant C_{ij} of γ -Ni system before and after doping

γ−Ni	C_{11}/GPa	C_{12}/GPa	C_{13}/GPa	C_{33}/GPa	C_{44}/GPa	C_{66}/GPa
0(Ni) ^[17]	246.5	147.3			124.7	
0(Ni) ^[18]	260.6	177.0			109.3	
0	228.937	171.482	174.281	229.743	107.982	108.161
3.125	210.278	132.964			108.409	
6.25	204.059	163.408	147.646	197.526	101.737	105.258
12.5	198.571	152.073	152.112	205.838	101.219	99.361

论计算值比较接近,说明所构建的计算模型和计算 方法合理.立方结构的 $Ni_{31}Cu$ 计算模型满足力学稳 定性(4)的条件,四方结构的 Ni_8 、 $Ni_{15}Cu$ 和 Ni_7Cu 的计算模型均满足式(5)的力学稳定性条件,表明掺 杂前后各体系都是力学稳定的.比较均为四方体系 的 Ni_8 、 $Ni_{15}Cu$ 和 Ni_7Cu 的计算结果可知,掺杂体系 的弹性常数随着 Cu 原子掺杂浓度的增大而减小.

为了进一步讨论 Cu 的掺杂对 Ni 体系弹性力 学性质的影响,对各掺杂体系体模量 B、剪切模量 G、G/B 以及杨氏模量 E 的值进行了分析.晶体的体 模量 B 和剪切模量 G 都可以由晶体的弹性常数通 过 Voigt-Reuss-Hill 近似推算出来,其中 Voigt、Reuss 和 Hill 分别表示弹性系数的最大值、最小值和 平均值.

对于立方晶系而言,体模量和剪切模量可以简 化成如下计算公式^[14]:

$$B = \frac{1}{3} (C_{11} + 2 C_{12}) \tag{6}$$

$$G_{\rm V} = \frac{1}{5} (C_{11} - C_{12} + 3 C_{44}) \tag{7}$$

$$G_{R} = \frac{5(C_{11} - C_{12}) C_{44}}{3(C_{11} - C_{12}) + 4 C_{44}}$$
(8)

$$G = \frac{1}{2}(G_V + G_R) \tag{9}$$

对于四方晶系而言,体模量和剪切模量可以简 化成如下计算公式:

$$B = \frac{1}{9} (2 C_{11} + C_{33} + 2 C_{12} + 4 C_{13})$$
(10)

$$G = \frac{1}{15} (2 C_{11} + C_{33} - C_{12} - 2 C_{13} + 6 C_{44} + 3 C_{66})$$
(11)

对于所有晶系,杨氏模量 E 的计算公式如下:

$$E = \frac{9GB}{3B+G} \tag{12}$$

体模量与剪切模量都是弹性模量的一种表征, 体模量是材料对于表面四周压强产生形变的度量, 与材料中原子间的综合性质有关.通常用来描述材 料在外力作用下的抗体积变形能力,其值越大说明 晶体的抗变形能力越强.剪切模量可以判断材料在 剪切应力作用下的抗变形能力.剪切模量越大,说明 材料原子间的定向键越明显.杨氏模量是用来衡量 固体材料硬度的弹性模量.杨氏模量越大,说明固体 材料的硬度就越大^[15].

由公式(6~12)计算各掺杂体系体模量 B、剪切 模量 G、G/B 以及杨氏模量 E,结果见表 4.从表 4 可以看出,当 Cu 原子的掺杂质量分数为 0%时,所 对应的掺杂体系 Ni₈的弹性模量值最大;Cu 原子掺 杂进 γ -Ni 体系后,使得各掺杂模型的体模量 B、剪 切模量 G 以及杨氏模量 E 均有不同程度的降低,其 中剪切模量 G 随着 Cu 掺杂质量分数的增大而依次 降低.对 Cu 掺杂前后体系弹性模量的分析可知,Cu 的掺入降低了体系的硬度和抗体积变形能力,使原 子间的定向键与结合能力减弱.

表 4 掺杂前后 γ-Ni 体系的体模量 B、剪切模量 G、B/G 以 及杨氏模量 E

Tab.4 Bulk modulus B, shear modulus G, B/G and Young's

modulus E	of	γ−Ni	system	before	and	after	doping
-----------	----	------	--------	--------	-----	-------	--------

Cu/%	B/GPa	G/GPa	G/B	E/GPa
0	191.967	75.997	0.396	201.412
3.125	158.735	71.736	0.452	187.033
6.25	169.227	71.543	0.423	188.119
12.5	168.397	70.139	0.416	184.765

为了分析 Cu 的掺杂对 γ -Ni 体系延性的影响, 通过 Pugh 判据进行了计算^[16].Pugh 判据的基本标 准为:材料的延性可以用剪切模量 G 与体模量 B 的 比值来表征,材料延性和脆性的临界值为 0.57,当 G/B < 0.57 时,材料具有延性;当G/B > 0.57 时,材 料为脆性.并且 G/B 的值越小,材料的延性越好.反 之,材料的脆性越大.各掺杂模型 G/B 的值见表 4, 从表 4 可以看出,掺杂前后各计算模型 G/B 的值均 小于 0.57,表明 Cu 掺杂前后各体系均具有延性,并 且随着 Cu 的掺杂,G/B 的值有不同程度的升高,表 明 Cu 的掺杂降低了体系的延性.综合考虑 Cu 的掺 杂对体系弹性模量的影响可知,Cu 降低了体系的弹 性力学性能.计算结果在实验中也获得了证实.图 3 为不同 Cu 含量铸态 Inconel 718 合金的硬度和屈服 强度图.从图 3 可以看出,0 号合金的硬度最高,随着 Cu 的加入铸态合金的硬度依次降低;未加入 Cu 的 合金屈服强度值最高,随着 Cu 的加入铸态合金的 屈服强度依次降低,变化趋势与硬度相同.实验结果 进一步证实了计算模型和计算方法的合理性.



2.3 态密度

从计算和实验结果可以发现,Cu原子掺杂进 γ Ni 体系后使其结构稳定性与弹性力学性能均降低, 为了进一步从电子结构上分析造成这一变化的本质 原因,选取Cu原子掺杂前后掺杂质量分数分别为 0%和 12.5%的 Ni₈与 Ni₇Cu 掺杂体系进行总态密 度(DOS)和分波态密度(PDOS)计算分析.计算中所 涉及到的原子外层电子结构包括 Ni 3d⁸4s²和 Cu 3d¹⁰4s¹, 计算结果如图4 所示. 从各掺杂模型的 DOS 图中可以看出,掺杂前后计算模型费米能级处 的电子浓度均不为零,说明掺杂前后体系均呈现明 显的金属性.并且掺杂前后,成键电子的分布情况基 本不变,均处在为 $-10 \sim -12$ eV.从图 4a 可以看 出,Ni₈模型的成键电子主要是由 Ni d 轨道和少量 的 Nip 轨道贡献,并且在费米能级处有个很大的尖 峰;从图 4b 可以看出, Ni₇Cu 模型的成键电子主要 是由 Ni d 轨道和 Cu d 轨道贡献,这些电子轨道在 费米能级处发生重叠,说明存在轨道杂化现象.并且

Cu 原子的电子基本分布在成键态,且在较低能级处 与 Ni 的 d 轨道杂化.Cu 原子掺杂后,使得 Ni 原子 d 轨道电子的 PDOS 尖峰变宽,也致使 Ni₇Cu 模型的 DOS 在费米能级处的尖峰变宽.这说明 Cu 原子掺 杂后,Cu 原子的 d 轨道与邻近 Ni 原子的 d 轨道间 发生 d-d 电子相互作用致使峰变宽,离域性变强.总 之 Cu 原子掺杂进 γ -Ni 体系后,增加了 Cu-Ni 之间 的相互作用,影响了原体系中电子的相互作用,导致 各原子之间的键合强度也发生了变化.



图 4 Ni₈ 与 Ni₇Cu 掺杂体系的总态密度和分波态密度图 Fig.4 Partial and total electronic density of states of the systems with doping Cu in Ni₈ 与 Ni₇Cu

2.4 差分电荷密度

为了更深层次地剖析 Cu 原子的掺杂使 γ-Ni 体 系稳定性降低的原因,进一步研究 Cu 原子与周围 Ni 原子的键合作用,更直观地了解 Cu 原子掺杂前 后体系中原子间的成键情况,选取 Ni₈ 与 Ni₇ Cu 掺 杂晶胞的(001)面绘制差分电荷密度图,如图 5 所 示.图 5 中蓝色表示电子缺失(减少),红色表示电子 富集(增加).由图 5 可以看出掺杂导致原子的电子 排布发生了明显的变化,从而引起差分电荷密度发 生了变化.由图 5a 可以看出,未掺杂时,Ni 原子与最 近的 Ni 原子之间靠运动于它们之间的公有化的自 由电子结合起来,表明 Ni 与 Ni 原子间的键合作用 为金属键.Ni 原子周围有电荷缺失,并且电荷缺失 沿 Ni-Ni(处在四个角上的 Ni 与处在中心的 Ni 原 子)方向;从图 5b 可以看出,Ni₈Cu 掺杂晶胞(001) 面中心的 Ni 原子被 Cu 原子取代后,Ni 原子周围有 电荷富集,并且电荷沿 Ni-Cu 方向富集,表明 Ni-Ni、Ni-Cu 之间共价键性增强.结合图 4b 可知 Ni-Cu 之间的化学键由 Cu 3d 和 Ni 3d 轨道的价电子杂化 形成.



图 5 Ni_s及 Ni₇Cu 掺杂晶胞(001)面差分电荷密度图 Fig.5 Distribution of charge density difference of the systems in Ni₈ and Ni₇Cu along (001) plane

3 结论

 第一性原理计算表明,Cu原子的掺杂使 γ-Ni体系的形成热、结合能的绝对值均降低,并且随 着掺杂浓度的增大,形成热和结合能的绝对值依次 降低,表明体系稳定性依次降低;Cu原子的掺杂使 γ-Ni体系的弹性常数、体模量 B、剪切模量 G 以及 杨氏模量 E 均不同程度的降低,G/B 的值稍有升 高,表明 Cu 的掺入降低了体系的硬度、抗变形能力 以及原子间的定向键和结合能力,使体系的延性降 低.

2) 态密度以及(001)面的差分电荷密度表明当 Ni₇Cu 掺杂晶胞(001)面中心的 Ni 原子被 Cu 原子 取代后,Ni 原子周围有电荷富集,Ni 原子与 Cu 原 子之间有键合作用,是由 Cu 原子 d 轨道和 Ni 原子 d 轨道的价电子杂化形成的.

3) Cu 的加入促进了铸态 Inconel 718 合金中 Laves 相的析出,并且 Cu 的加入使合金的硬度和屈 服强度均降低.实验结果与第一性原理计算结果的 趋势相一致.

致谢:本文得到省部共建有色金属先进加工与再 利用国家重点实验室开放基金(SKLAB02019014) 项目的资助,在此表示感谢.

参考文献:

- [1] 陈国良.高温合金学 [M].北京:冶金工业出版社,1988.
- [2] 张义文,胡本芙.镍基粉末高温合金中微量元素 H_f的作用 [J].
 金属学报,2015,51(8):967-975.
- [3] 刘 杰,李亚敏,刘洪军.Al对 K4169 合金铸态组织和力学性 能的影响 [J].热加工工艺,2010,39(11):37-39.
- [4] LIU X G, WANG L, LOU L H, et al. Effect of Mo addition on microstructural characteristics in a Re-containing single crystal superalloy [J]. Journal of Materials Science & Technology, 2015,31(2):143-147.
- [5] IMAYEV R M, IMAYEV V M, OEHRING M, et al. Alloy design concepts for refined gamma titanium aluminide based alloys [J].Intermetallics, 2007, 15(4):451-460.
- [6] 王云江.镍基合金力学性能与元素分配行为的第一原理研究 [D].北京:清华大学,2010.
- [7] 冶 军.美国镍基高温合金 [M].北京:科学出版社,1978.
- [8] YOO M H. Stability of superdislocations and shear faults in L12 ordered alloys [J]. Acta Metallurgica, 1987, 35(7): 1559-1569.
- [9] 季根顺,杨彦莉,寇生中.镍基高温合金 K4169 的高温相变研究 [J].兰州理工大学学报,2016,42(3):14-17.
- [10] 徐婉棠,喀兴林.群论及其在固体物理中的应用 [M].北京:高 等教育出版社,1999.
- [11] CONNÉTABLE D, THOMAS O.CFirst-principles study of nickel-silicides ordered phases [J].Journal of Alloys & Compounds, 2011, 509(6): 2639-2644.
- [12] HUANG W, YANG L.First-principles investigation of the electronic, mechanical, and thermodynamic properties of europium carbide [J]. Canadian Journal of Physics, 2015, 93(4); 409-412.
- [13] PRIKHODKO S V, MA Y, ARDELL A J, et al. Elastic constants of face-centered cubic and L12 Ni-Si alloys; Composition and temperature dependence [J].Metallurgical and Materials Transactions A, 2003, 34(9): 1863-1868.
- [14] BECKSTEIN O, KLEPEIS J E, HART G L W, et al. First principles elastic constants and electronic structure of α-Pt₂Si and PtSi [J].Physical Review B,2001,63(13):1-12.
- [15] CHEN Q, HUANG Z, ZHAO Z, et al. Thermal stabilities, elastic properties and electronic structures of B2-MgRE (RE= Sc, Y, La) by first-principles calculations [J]. Computational Materials Science, 2013, 67, 196-202.
- [16] PUGH S F.XCII.Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals [J]. Philosophical Magazine, 1954, 45(367):823-843.
- [17] MATHON M, CONNÉTABLE D, SUNDMAN B, et al. Calphad-type assessment of the Fe-Nb-Ni ternary system [J]. Calphad-Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry, 2009, 33(1): 136-161.
- [18] 文志勤.Inconel 718 合金的相及界面性质的第一性原理研究 [D].太原:中北大学,2014.