



2002年9期

栏目:

DOI:

论文题目: Co, Cr和Ni对Fe<sub>3</sub>Al金属间化合物相平衡的影响

作者姓名: 马钢 夏源明

工作单位: 中国科学院中国科学技术大学材料力学行为和设计重点实验室, 合肥230027

通信作者: 马钢

通信作者Email: [magang@ustc.edu.cn](mailto:magang@ustc.edu.cn)

文章摘要:

中国科学院中国科学技术大学材料力学行为和设计重点实验室, 合肥230027  
利用集团变分法, 计算了Fe-Al-Co, Fe-Al-Cr, Fe-Al-Ni三元合金700 K等温截面的Fe<sub>3</sub>Al相区. 三个三元合金等温截面的计算结果显示, Fe-Al-Ni相图中的Fe<sub>3</sub>Al相区最小, Fe-Al-Cr相图中的Fe<sub>3</sub>Al相区最大; 根据等温截面的几何性质, 可以将Co和Ni看成是一类原子, 而Cr原子属于另一类. 利用Monte Carlo方法分析了Co, Cr和Ni对Fe<sub>3</sub>Al金属间化合物原子组态的影响. 从不同原子在不同亚点阵上的占位情况和原子组态图都可以看出, Cr原子倾向于占据β亚点阵; Co和Ni原子倾向于占据α亚点阵, 也有一部分Co和Ni原子倾向于与Al原子形成B2结构晶粒, 分布于D0<sub>3</sub>晶粒中, 这将加剧晶体中缺陷的形成. 从Monte Carlo法得到的这些结果, 也可以看出Co和Ni属于一类原子, 而Cr属于另一类.

关键词: Fe-Al-Co(Cr, Ni)相图, 集团变分法

分类号: TG113.14

关闭