

Ni-Al-Re/Ru合金的层错能*

于兴福^{1,2} 田素贵¹ 王明罡¹ 尚丽娟¹ 崔树森²

1. 沈阳工业大学材料科学与工程学院 沈阳 110023

2. 中航一集团沈阳黎明航空发动机(股份)有限公司 沈阳 110043

摘要 使用置换原子计算层错能的热力学模型计算了 Ni-Al-Re(Ru) 合金的层错能, 研究了合金元素和温度对层错能的影响. 结果表明: 随着温度的提高, Ni-Al-Re(Ru) 合金的层错能增加. Ni-6%Al-4%Re 合金的层错能随着温度的提高线性增加. Ni-6%Al-4%Ru 合金的层错能, 在温度低于 500 °C 时随着温度的提高呈抛物线规律增加, 高于 500 °C 时随着温度的提高呈线性规律增加. Al 原子可明显降低 Ni-6%Al-4%Re(Ru) 合金的层错能. 随着 Al 含量的提高, 原子偏聚自由能 ($\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$) 降低, 使 Al 原子自发偏聚, 并促进 γ' 有序相的形成和数量的增加, 是合金层错能降低的主要原因. 而 Ru 原子降低合金的偏聚自由能, 可提高 γ' 有序相的稳定性. 随着温度的升高, 原子偏聚引起的自由能 ($\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$) 增加可抑制原子偏聚; 当温度高于 500 °C 时, 含 Ru 合金有比 Ni-Al-Re 合金高的原子偏聚自由能 ($\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$), 故元素 Ru 能抑制原子的偏聚和 TCP 相的析出.

关键词 材料科学基础学科, Ni 基合金, 热力学计算, 偏聚自由能, 层错能

分类号 TG111, TG113

文章编号 1005-3093(2008)05-0515-06

Stacking fault energy of Ni-Al-Re/Ru alloys

YU Xingfu^{1,2} TIAN Sugui^{1**} WANG Minggang¹ SHANG Lijuan¹ CUI Shusen²

1. School of Materials Science and Engineering, Shenyang University of Technology, Shenyang 110023

2. Shenyang Liming Aeroengine (Group) Limited Liability Corporation AVIC, Shenyang 110043

* Supported by National Natural Science Foundation of China No.50571070 and Liaoning Province Education Foundation No.2004C004.

Manuscript received October 15, 2007; in revised form April 30, 2008.

** To whom correspondence should be addressed, Tel:(024)25494089, E-mail: tiansugui2003@163.com

ABSTRACT Using the thermodynamic model of the substituting atoms, the stacking fault energy (SFE) of Ni-Al-Re(Ru) alloys have been calculated, and the influences of the elements and temperatures on SFE of Ni-Al-Re (Ru) alloys have been analyzed. Results show that the SFE of Ni-6%Al-4%Re alloy increases with the temperature in the linear feature. The fact that the SFE of Ni-6%Al-4%Ru alloy increases with the temperature obeys the parabola regularity when is above 500 °C, and obeys the linear regularity when above 500 °C. The accumulated Gibbs free energy ($\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$) of Ni-6%Al-4%Re (Ru) alloys decreases with the increase of the Al content, so that promotes the formation of the γ' -Ni₃Al order phase, this is a main reason of decreasing the SFE of the alloys. The atom Ru may decrease the accumulated Gibbs free energy ($\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$) of the alloy to enhance the stability of γ' -Ni₃Al order phase. Compared to Ni-Al-Re alloy, Ni-Al-Ru alloy displays a higher free energy of the atom accumulated ($\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$) when temperature is enhanced to more than 500 °C, which inhibits the accumulation of the atoms and precipitation of TCP phase.

KEY WORDS foundational discipline in materials science, nickel-base alloy, thermodynamic calculation, accumulation free energy, stacking fault energy

层错能是金属材料的一个重要物理性质^[1]. 在

材料变形期间, 层错能的高低与位错的运动方式密切相关^[2-6], 并直接影响材料的力学性能. 如果材料在高温能够保持较低的层错能, 则扩展位错不易束集, 增大位错运动的阻力, 可提高材料的高温蠕变抗力. 用 TEM 节点法^[7] 直接测量合金的层错能, 误差较大; 用间接法只能定性测量合金的层错能^[8,9], 不能

* 国家自然科学基金 50571070 和辽宁省教育厅基金 2004C004 资助项目.

2007 年 10 月 15 日收到初稿; 2008 年 4 月 30 日收到修改稿.

本文联系人: 田素贵, 教授

定量评价元素对合金层错能的影响. 如果能用热力学方法定量计算合金中元素对层错能的影响, 则对镍基高温合金的成分设计有重要的指导作用^[10].

Ni-Al 是镍基高温合金中的基本元素, 而 Re、Ru 又是该合金系中先进单晶合金的重要强化元素. 加入 3% 和 6% 元素 Re, 分别是第二代和第三代单晶合金的主要成分特征, 比第一代合金的承温能力分别提高了 30 °C 和 60 °C. 在加入 Re 的基础上分别添加 3% 和 6% 的 Ru, 是第四代和第五代单晶合金的主要成分特征, 而后者在 1100 °C 施加 137 MPa 条件下的持久寿命高于 1000 h^[11]. 由此可见, 元素 Re 和 Ru 对于提高合金的高温持久性能有重要的作用. 元素 Re 溶解在 Ni 基合金的 γ 基体中, 并在基体中形成原子团簇^[12-13], 阻碍蠕变期间位错的运动, 能有效地强化合金中的 γ 基体相; 并可降低合金中其它元素的扩散速率, 延缓 γ' 相的粗化速率. Re 的过量加入导致 TCP 相的析出, 降低合金的蠕变性能, 在合金中加入元素 Ru 可降低其它元素在 γ'/γ 两相中的分配比, 抑制 TCP 相的析出, 从而提高合金中难溶元素的合金化程度, 并进一步改善合金的高温蠕变性能^[11]. 但是 Ru 抑制合金中 TCP 相析出的原因, 以及 Re、Ru 含量对合金中元素偏聚倾向及层错能的影响至今尚不清楚. 为此, 本文用热力学方法计算 Ni-Al-Re 和 Ni-Al-Ru 三元合金系的层错能, 研究元素 Re、Ru 浓度的变化对 Ni-Al-Re (Ru) 合金层错能的影响规律、元素 Re、Ru 浓度对合金中元素偏聚倾向的影响规律以及元素 Ru 可抑制 TCP 相析出的原因.

1 Ni-Al-Re和Ni-Al-Ru三元合金层错能的计算

Ni-Al-Re(Ru) 三元合金具有面心立方结构, 其层错能可表示为^[14]:

$$\gamma_{\text{SF}} = \frac{1}{8.4V^{2/3}} \Delta G_{\text{b}}^{\gamma \rightarrow \epsilon} + \Delta G_{\text{s}}^{\gamma \rightarrow \epsilon} + \Delta G_{\text{m}} \quad (1)$$

其中 $\Delta G_{\text{b}}^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 和 $\Delta G_{\text{s}}^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 分别为由置换原子组成的体系自由能和因原子偏聚形成的自由能, ΔG_{m} 为磁性自由能, 由于 Re、Ru 不发生磁性转变, 故 ΔG_{m} 值为 0.

根据上式计算出 Ni-Al-Re 合金 25 °C 和 1040 °C 的层错能与 Al、Re 质量分数之间的关系, 如图 1 和图 2 所示. 可以看出, 在室温和 1040 °C, Ni-Al-Re 合金的层错能随着 Al、Re 含量的变化趋势相同. 随着 Al 含量的提高, 合金的层错能降低, 室温下的层错能较低, 且随着 Al 含量的提高合金层错能的降低幅度较大. 随着 Re 含量的提高, 合金的层错能增大, 1040 °C 层错能的增加幅度较大. 在室温, Al 能有效降低合金的层错能, 且随其含量的提高, 层错能降低

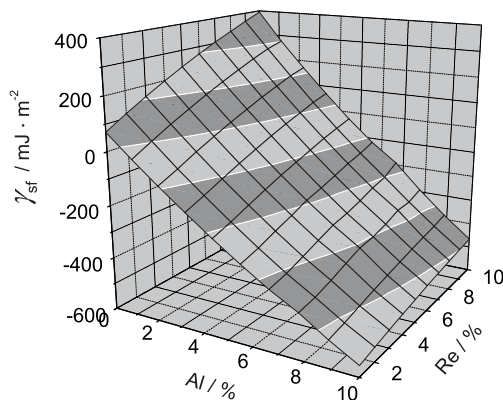


图 1 室温条件下 Ni-Al-Re 合金层错能与 Al、Re 之间关系

Fig.1 Relationship between the stacking fault energy of Ni-Al-Re alloy and Al, Re content at RT

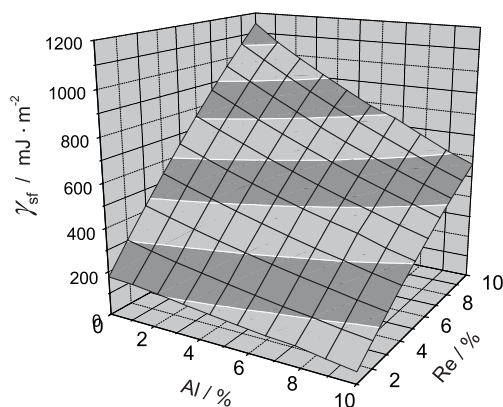


图 2 1040 °C 条件下 Ni-Al-Re 合金层错能与 Al、Re 含量之间关系

Fig.2 Relationship between the stacking fault energy of Ni-Al-Re alloy and Al, Re content at 1040 °C

幅度较大; 而 Re 提高合金层错能的作用较弱. 在 1040 °C, Al 降低合金层错能的作用较弱, 但 Re 提高合金层错能的作用较强.

在室温下计算出 Ni-Al-Ru 合金的层错能与 Al、Ru 含量之间的关系, 如图 3 所示. 可以看出, 随着 Al 含量的提高, 合金的层错能降低. 随着 Ru 含量的提高, 合金的层错能有两种变化趋势, 当 Al 含量低于 3% (质量分数) 时, 随着 Ru 含量的提高, 合金的层错能增大. 当 Al 含量高于 3% 时, 随着 Ru 含量的提高, 合金的层错能降低; 而在高 Al 含量范围内, 随着 Ru 含量的提高, 合金的层错能降低, 且其最低点出现在 Al、Ru 含量均为 10% 处.

在 1040 °C, Ni-Al-Ru 合金的层错能与 Al、Ru 含量之间的关系如图 4 所示. 可以看出, 随着 Al 含量的提高, 合金的层错能降低, 随着 Ru 含量的提高

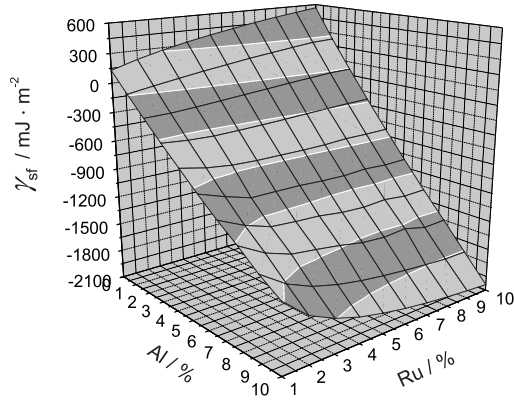


图3 室温条件下 Ni-Al-Ru 合金层错能与 Al, Ru 含量之间关系

Fig.3 Relationship between the stacking fault energy of Ni-Al-Ru alloy and Al, Ru content at RT

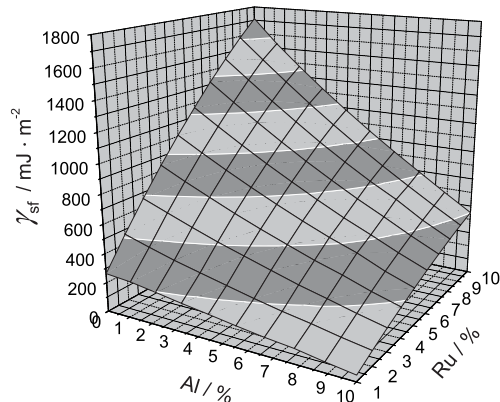


图4 1040 °C 条件下 Ni-Al-Ru 合金层错能与 Al, Ru 含量之间的关系

Fig.4 Relationship between the stacking fault energy of Ni-Al-Ru alloy and Al, Ru content at 1040 °C

合金的层错能增大,但是在 Al 含量较低时,随着 Ru 含量的提高,合金层错能增大的幅度较大;而当 Al 含量高时,随着 Ru 含量的提高,层错能提高的幅度较小。

从图 5 可以看出,与 Ni-6%Al-4%Re 合金比较,在低温条件下 Ni-6%Al-4%Ru 合金有较低的层错能,随着温度的提高,两合金的层错能值均增大。Ni-6%Al-4%Ru 合金的层错能增大的趋势服从抛物线规律,而 Ni-6%Al-4%Re 合金层错能增加的趋势服从线性规律,且含 Ru 合金层错能增加的幅度大于含 Re 合金层错能增加的幅度。当温度低于 500 °C 时, Ni-6%Al-4%Ru 合金具有较低的层错能;而高于 500 °C 后, Ni-6%Al-4%Ru 合金具有较高的层错能,两合金的层错能随着温度的变化均表现出线性增大的规律,且增大的幅度相当。

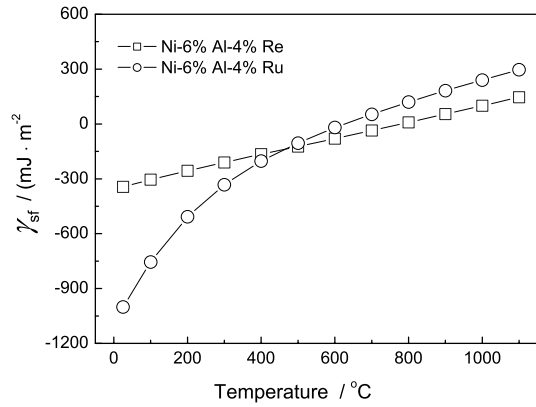


图5 温度对 Ni-6%Al-4%Re/Ru 合金层错能的影响

Fig.5 Influence of temperatures on the stacking fault energy of Ni-6%Al-4%Re/Ru alloys

2 Ni-Al-Re 和 Ni-Al-Ru 三元合金层错能的影响因素

2.1 Al, Re, Ru 含量对 $\Delta G_b^{\gamma \rightarrow \varepsilon}$ 、 $\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \varepsilon}$ 的影响

以上计算结果表明, Al, Re 和 Ru 原子以及温度对 Ni 基合金的层错能都有明显的影响。根据公式 (1), 层错能与 $\Delta G_b^{\gamma \rightarrow \varepsilon}$ (由置换原子引起的自由能变化) 和 $\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \varepsilon}$ (由原子偏聚引起的自由能变化) 有关, 因此, 探讨 $\Delta G_b^{\gamma \rightarrow \varepsilon}$ 和 $\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \varepsilon}$ 的变化规律, 可进一步分析合金层错能的主要影响因素。

$\Delta G_b^{\gamma \rightarrow \varepsilon}$ 为由置换原子组成的体系自由能。对于三元合金, 有

$$\Delta G_b^{\gamma \rightarrow \varepsilon} = x_i \Delta^0 G_i^{\gamma \rightarrow \varepsilon} + x_j \Delta^0 G_j^{\gamma \rightarrow \varepsilon} + x_k \Delta^0 G_k^{\gamma \rightarrow \varepsilon} + \Delta G_b^{E(\gamma \rightarrow \varepsilon)} \quad (2)$$

其中 x_i , x_j , x_k 为 i , j , k 各原子的摩尔分数, $\Delta^0 G_i^{\gamma \rightarrow \varepsilon}$ 、 $\Delta^0 G_j^{\gamma \rightarrow \varepsilon}$ 、 $\Delta^0 G_k^{\gamma \rightarrow \varepsilon}$ 为非磁性状态下各组元发生 $\gamma \rightarrow \varepsilon$ 转变的自由能, $\Delta G_b^{E(\gamma \rightarrow \varepsilon)}$ 为混合超额自由能, 根据 Chou 模型 [15] 可计算出三元合金混合超额 Gibbs 自由能 ($\Delta G_b^{E(\gamma \rightarrow \varepsilon)}$), 其中晶格稳定化参数取自文献 [16]。采用文献 [17,18] 中的方法, 计算出过渡族金属、非过渡族金属、惰性金属之间形成固溶体、化合物时的混合生成焓 ΔH_{mix} , 由于 Re, Ru, Ni 都是过渡族元素, 故计算混合生成焓时用到的参数 $P=14.1 \text{ V}^{-1} \text{ cm}^{-2} (\text{d.u.})^{-1/3}$, $R=0$, $\alpha=0.04$ 。

$\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \varepsilon}$ 为偏聚自由能, 其中原子在层错区偏聚引起的自由能变化 $\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \varepsilon}$ 分成三部分 [19]:

$$\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \varepsilon} = \Delta G_{\text{chm}} + \Delta G_{\text{sur}} + \Delta G_{\text{els}} \quad (3)$$

其中 ΔG_{chm} 为铃木偏聚引起的自由能变化, ΔG_{sur} 为由于基体和层错区原子浓度不同产生的表面自由能, ΔG_{els} 为由于原子尺寸不同所引起的弹性自由能。

由于不全位错的运动属于一种切变运动, 偏聚原子与不全位错的相互作用能量较小, 因此, 由原子偏聚引起的表面自由能 (ΔG_{sur}) 和弹性自由能 (ΔG_{els}) 可以忽略.

Ni- $x\%$ Al-4%Ru 和 Ni- $x\%$ Al-4%Re 合金的 $\Delta G_b^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 、 $\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 值与 Al 含量的关系如图 6 所示, 可以看出, 随着 Al 含量的提高, 两合金的 $\Delta G_b^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 值均提高, 而 $\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 值降低, 但是含 Ru 合金的 $\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 值降低的幅度较大. Ni-6%Al- $x\%$ Re 和 Ni-6%Al- $x\%$ Ru 合金的 $\Delta G_b^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 、 $\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 值与 Re(Ru) 含量的关系如图 7 所示. 由图 7 可见, 随着 Re 含量的提高, 合金的 $\Delta G_b^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 、 $\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 值降低, 但是降低的幅度较小; 而随着 Ru 含量的提高, 合金的 $\Delta G_b^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 、 $\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 降低的幅度较大, 特别是 $\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 值呈双曲线规律降低, 表明 Ru 原子对合金 $\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 值的影响较为复杂.

2.2 温度对 $\Delta G_b^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 、 $\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 的影响

图 8 表明, 随着温度的升高, Ni-6%Al-4%Re 与 Ni-6%Al-4%Ru 合金中因置换原子引起的自由能变化 ($\Delta G_b^{\gamma \rightarrow \epsilon}$) 和由原子偏聚引起的自由能变化 ($\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$) 均增大, 其中两种合金的 $\Delta G_b^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 值随着温度变化的趋势和幅度相同, 但是 $\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 变化的趋势不同, 含 Re 合金的 $\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 值随着温度的升高线性地增大, 而含 Ru 合金的 $\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 随着温度的提高呈抛物线规律增大. 在低于 500 °C 的温度区间, 含 Ru 合金的 $\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 较低, 当温度高于 500 °C 时, 含 Ru 合金的 $\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 值较高. 由此可见, 由原子偏聚引起的自由能变化 ($\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$) 对合金层错能的变化趋势起主要的作用, 随着温度的升高含 Ru 合金不易发生原子偏聚, 故可抑制 TCP 相的析出.

3 讨论

由图 6 可知, 随着 Al 含量的提高, 由置换原子引起的合金自由能 ($\Delta G_b^{\gamma \rightarrow \epsilon}$) 增大, 表明合金中形成置换原子需要外部供给能量. 但是由于 Al 原子是 γ' 相形成元素, 随着 Al 含量的提高, 由原子偏聚引起的自由能 ($\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$) 降低, 且降低的幅度较大. 这表明, Al 原子易于偏聚形成 L1₂ 结构的 γ' -Ni₃Al 有序相, 即合金中相的有序化是自由能降低的过程, 随着 Al 含量的提高, γ' -Ni₃Al 有序相的数量增加. 由此可见: 随着 Al 含量的提高, 合金层错能降低的主要原因是合金中形成了 γ' -Ni₃Al 有序相. 形成 γ' -Ni₃Al 有序相的异类原子间结合力较强, 可有效降低合金的层错能. 当 Al 含量达到 6%(质量分数) 时, 合金中 γ' 相有较高的体积分数, 且为 γ' 和 γ 两相组织. 如果随着 Al 含量的提高, 原子偏聚自由能 ($\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$) 的降低可促使 γ' -Ni₃Al 有序相的形成, 则含 Ru 合金的 $\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 值降低幅度增大, 表明元素 Ru 可提高 γ' -Ni₃Al 有

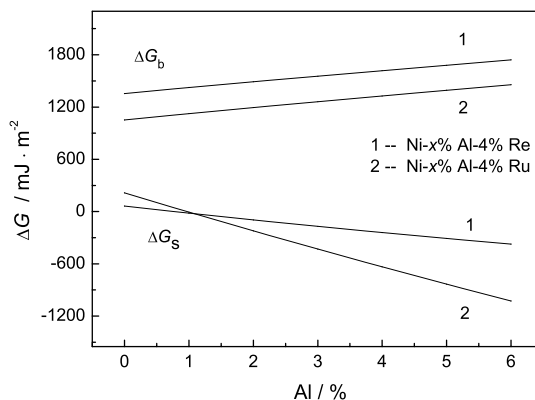


图 6 $\Delta G_b^{\gamma \rightarrow \epsilon} / \Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 与 Al 含量的关系

Fig.6 Relationship between Al content and $\Delta G_b^{\gamma \rightarrow \epsilon} / \Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$

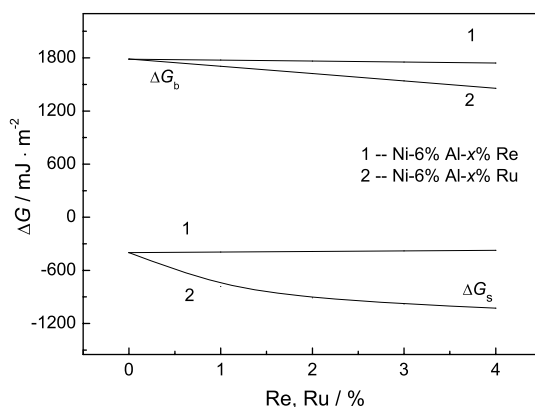


图 7 Re/Ru 含量与 $\Delta G_b^{\gamma \rightarrow \epsilon} / \Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 的关系

Fig.7 Relationship between Re/Ru content and $\Delta G_b^{\gamma \rightarrow \epsilon} / \Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$

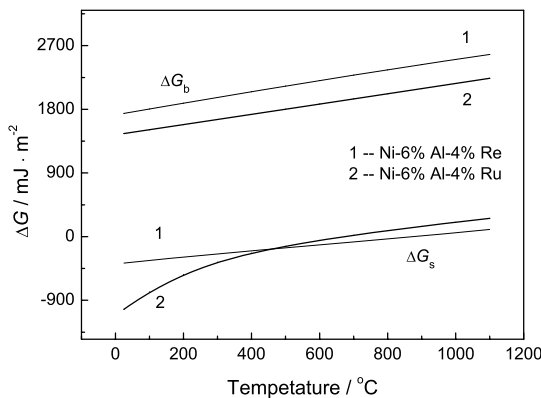


图 8 温度变化对 $\Delta G_b^{\gamma \rightarrow \epsilon} / \Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 值的影响

Fig.8 Influence of temperature on $\Delta G_b^{\gamma \rightarrow \epsilon} / \Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$

序相的稳定性.

由图 7 可知, 在含 Re 合金中, 随着 Re 含量提高, 合金的 $\Delta G_b^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 和 $\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 值没有明显变化, 但是在含 Ru 合金中, 随着 Ru 含量的提高 $\Delta G_b^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 值降低的幅度较小, 而 $\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$ 降低幅度较大. 这表明: 原子

易于在层错区偏聚, 并使合金的层错能降低. 元素在 γ' 、 γ 两相中存在分配比, 且 Re 主要富集在 γ 基体相中并以原子团簇的形式存在. 这可有效阻碍位错的运动和其它元素的扩散, 提高 Ni 基合金的高温蠕变抗力. 但是 Re 的含量过高, 在高温 Re 原子易于偏聚形成 TCP 相而降低合金的高温蠕变性能. 加入元素 Ru 可降低难溶元素在 Ni- 基合金 γ'/γ 两相中的分配比值, 提高难溶元素在 γ'/γ 两相中的合金化程度, 并抑制 TCP 相的析出, 因而可较大幅度地提高合金的高温蠕变性能.

根据对图 8 的分析, 随着温度的升高, Ni-6%Al-4%Re 和 Ni-6%Al-4%Ru 合金中由置换原子引起的自由能 ($\Delta G_b^{\gamma \rightarrow \epsilon}$) 线性增加, 其增加的幅度和速率相同. 这表明, 两合金不易形成置换式固溶体. 随着温度的提高, Ni-6%Al-4%Re 合金中由原子偏聚引起的自由能 ($\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$) 线性增加. 当温度低于 500 °C 时, 含 Ru 合金的原子偏聚自由能较小, 且为负值; 但是随着温度的升高偏聚自由能 ($\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$) 呈抛物线规律增加, 且增加的幅度较大, 特别是当温度高于 500 °C 后含 Ru 合金有比含 Re 合金更高的原子偏聚自由能 ($\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$). 这表明随着温度的升高, 含 Ru 合金中原子的偏聚使合金的自由能增加. 由此可见, 随着温度的升高, 元素 Ru 可抑制合金中的原子偏聚以及 TCP 相的析出 [20].

4 结 论

1. Ni-Al-Re 合金的层错能随着温度的提高线性增加. 温度低于 500 °C 时, 随着温度的提高 Ni-Al-Ru 合金的层错能呈抛物线规律增加; 当高于 500 °C 时, 随着温度的提高层错能线性增加. 在高温下 Ni-Al-Ru 合金的层错能比 Ni-Al-Re 合金的层错能高.

2. 元素 Al 可显著降低 Ni-Al-Re/Ru 合金的层错能, Al 浓度的提高使合金中原子偏聚自由能 ($\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$) 降低, 促进 γ' 有序相的形成和数量的增加, 是合金层错能降低的主要原因; 而 Ru 原子降低合金的偏聚自由能, 可提高 γ' 有序相的稳定性.

3. 随着温度的升高含 Ru 合金中原子的偏聚使自由能 ($\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$) 增大. 当温度高于 500 °C 时, 与 Ni-Al-Re 合金比较, 含 Ru 合金有更高的原子偏聚自由能 ($\Delta G_s^{\gamma \rightarrow \epsilon}$), 不易发生原子偏聚, 表明 Ru 可抑制 TCP 相的析出.

参 考 文 献

- 1 RONG Yonghua, MENG Qingping, HE Gang, XU Zuyao, Calculation of the stacking fault energies of Fe-Mn alloys by embedded atom method, Journal of Shanghai Jiao Tong University, **37**(2), 171(2003)
(戎咏华, 孟庆平, 何 刚, 徐祖耀, Fe-Mn 合金层错能的嵌入原子法计算, 上海交通大学学报, **37**(2), 171(2003))

- 2 D.M.Knowles, Q.Z.Chen, Superlattice stacking fault formation and twinning during creep in γ/γ' single crystal superalloy CMSX-4, Materials Science and Engineering, **A340**, 88(2003)
- 3 M.Legros, N.Cle'ment, P.Caron, In-situ observation of deformation micromechanisms in a rafted γ/γ' superalloy at 850 °C, Materials Science and Engineering, **A337**, 160(2002)
- 4 S.Gourdet, F.Montheillet, Effects of dynamic grain boundary migration during the hotcompression of high stacking fault energy metals, Acta Materialia, **50**, 2801(2002)
- 5 H.P.Karntaler, E.Muehlbacher, C.Rentenberger, The influence of the fault energies on the anomalous mechanical behaviour of Ni3Al alloys, Acta Materialia, **44**, 547(1996)
- 6 ZHANG Jianmin, WU Xijun, HUANG Yuhong, Energy calculation of the stacking fault in fcc metals by embedded-atom method, Acta Physica Sinica, **55**(1), 387(2006)
(张建民, 吴喜军, 黄育红, fcc 金属层错能的 EAM 法计算. 物理学报, **55**(1), 387(2006))
- 7 LIU Xiangjun, LIN Xinyuan, CHEN Shiyin, Stacking fault energy calculation of two kinds of stacking iron based shape memory alloys, Acta Metallurgica Sinica, **34**(9), 903(1998)
(刘向军, 林信远, 陈士银, 两种不锈钢基形状记忆合金层错能的计算, 金属学报, **34**(9), 903(1998))
- 8 HE Gang, XU Erdong, RONG Yonghua, On the determination of the stacking-fault probability by X-ray diffraction in Fe-Mn-Si shape memory alloy, Functional Materials, **30**(2), 155(1999)
(何 刚, 许二冬, 戎咏华, X 射线衍射法测定 Fe₂Mn₂Si 形状记忆合金层错几率的研究, 功能材料, **30**(2), 155(1999))
- 9 HE Gang, ZHAO Hengbei, RONG Yonghua, Peak-shift method on stacking fault probability determination and its application on Fe-Mn-Si alloys, Journal of Shanghai Jiaotong University, **33**(7), 765(1999)
(何 刚, 赵恒北, 戎咏华, 层错几率峰位移测定法及在 Fe₂Mn₂Si 合金中的应用, 上海交通大学学报, **33**(7), 765 (1999))
- 10 WAN Jianfeng, CHEN Shipu, XU Zuyao, Thermodynamical calculation of the stacking fault energy in Fe-30Mn-6Si-xN shape memory alloys, Acta Metallurgica Sinica, **36**, 679(2000)
(万见峰, 陈世朴, 徐祖耀, Fe-30Mn-6Si-xN 形状记忆合金层错能的热力学计算, 金属学报, **36**, 679(2000))
- 11 K.Yutaka, K.Toshiharu, Y.Tadaharu, Development of next-generation Ni-base single crystal superalloys, In: K.A.Green, T.M.Pollock, H.Harada, Superalloy 2004 (Champion, TMS, 2004) p.35
- 12 K.Wander, U.Glatzel, Chemical composition measurements of nickel-base superalloy by atom probe field microscopy, Mater. Sci. Eng., **A203**, 69(1995)
- 13 R.Darolia, D.F.Lahrman, R.D.Field, Formation of topologically closed packed phases in nickel base single crystal superalloys, In: S.Reichman, D.N.Duhl, G.Maurer, S.Antolovich, C.Lund, Superalloy 1988 (Champion, TMS, 1988) p.255
- 14 T.Ericsson, On the Suzuki effect and spinodal decomposition, Acta Metall., **14**, 1073(1966)

- 15 A.T.Dinsdale, SGTE data for pure elements, *Calphad*, **15**, 317(1991)
- 16 K.C.Chou, W.C.Li, F.S.Li, Formalism of new ternary model expressed in terms of binary regular-solution type parameters, *Calphad*, **20**, 395(1996)
- 17 LU Guimin, LE Qizhi, CUI Jianzhong, Thermodynamic Properties of Binary alloys of Zn-Mn and Zn-Ti¹¹, *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*, **11**, 95(2001)
(路贵民, 乐启炽, 崔建忠, Zn-Mn 和 Zn-Ti 二元合金热力学性质, *中国有色金属学报*, **11**, 95(2001))
- 18 A.R.Miedema, P.F.Chatel, F.R.Boer, Cohesion in alloy-fundamentals of a semi-empirical model, *Physica*, **100b**, 1(1980)
- 19 XU Zuyao, LI Lin, *The Thermodynamics of Material* (Beijing, Science Publish Corporation, 2001) p.44
(徐祖耀, 李麟, *材料热力学* (北京, 科学出版社, 2001) p.44)
- 20 R.Burgel, J.Grossmann, Development of a new alloy for directional solidification of large industrial gas turbine blades, in: K.A.Green, T.M.Pollock, H.Harada, *Superalloys 2004* (Champion, TMS, 2004) p.25