

W 对 Co-Al-W 合金相界强度影响的理论研究

陈 律^{1,2} 刘逸众^{1,2} 任延岫^{1,2}

(1.长沙航空职业技术学院航空机电设备维修学院; 2.湖南省飞机维修工程技术研究中心)

摘 要 基于第一性原理赝势平面波方法,研究了 W 掺杂 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界前后其对电子分布与能态结构的变化。相界断裂功计算结果表明,W 原子取代界面内 γ' -Co₃Al 相区中的 Al 原子可提高 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界的断裂强度,而取代其他位置的 Al 原子或 Co 原子时,对其相界区域断裂强度的影响则不明显。进一步通过分析电子态密度与电子密度分布图发现,W 的掺杂使其与最近邻 Co 原子间所产生的强烈电子相互作用,将引起相界区域层间原子成键相互作用增强,这是 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界断裂强度得到提高的直接原因。

关键词 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界;相界断裂功;W 合金化

中图分类号 TG132.33⁺3 **文献标志码** A

DOI:10.15980/j.tzzz.2021.10.005

开放科学(资源服务)标识码(OSID): 

Theoretical Analysis on the Effect of W on the Phase Boundary Strength of Co-Al-W Alloy

Chen Lü^{1,2}, Liu Yizhong^{1,2}, Ren Yanxiu^{1,2}

(1.Aviation Electromechanical Equipment Maintenance Department, Changsha Aeronautical Vocational and Technical College; 2.Hunan Aircraft Maintenance Engineering Technology Research Center)

Abstract: The energetics and electronic structures of W doped γ -Co/ γ' -Co₃Al interface region model were calculated by the first principles method based on plane-wave pseudopotential theory. The results demonstrate that the substitution of W atom for Al atom sited in γ -Co/ γ' -Co₃Al interfaces can improve the rupture strength of the γ -Co/ γ' -Co₃Al interface. However, the substitution of W atom for Al or Co atom in other place has little effect on the rupture strength of the phase boundary region. The analysis of electron densities of states (DOS) and the distributions of valence electron densities of γ -Co/ γ' -Co₃Al interface indicate that the doping of W leads to the strong electron interaction between W and its nearest neighbor Co atoms, resulting in the enhancement of the interlayer atomic bonding interaction in the phase boundary region, which is the direct reason for the enhancement of the rupture strength of γ -Co/ γ' -Co₃Al phase boundary.

Key Words: γ -Co/ γ' -Co₃Al Interface, Interface Griffith Rupture Work, W Alloying

收稿日期:2021-03-03;修改稿收到日期:2021-03-23
基金项目:湖南省自然科学基金科教联合基金资助项目(2020JJ7076)
第一作者简介:陈律,男,1978 年出生,教授,长沙(410000),E-mail:6994980@qq.com
引用格式:陈律,刘逸众,任延岫. W 对 Co-Al-W 合金相界强度影响的理论研究[J]. 特种铸造及有色合金,2021,41(10):1 209-1 214.
CHEN L, LIU Y Z, REN Y X. Theoretical analysis on the effect of w on the phase boundary strength of Co-Al-W alloy[J]. Special Casting & Nonferrous Alloys, 2021, 41(10):1 209-1 214.

[5] CAO Y. Multi-stage electrostatic separation for recovering of aluminum from fine granules of black dross[J].Journal of Wuhan University of Technology-Mater. Sci. Ed., 2019, 34(4): 925-931.

[6] 贺永东,李颜凌,马斌,等.湿法工艺对二次铝灰无害化脱氮影响的研究[J].特种铸造及有色合金, 2020, 40(6): 679-683.

[7] 周扬民,谢刚.碱烧结法处理铝灰制备氢氧化铝[J].轻金属, 2015 (9): 12-14.

[8] 李玲玲,宋明,靳强.铝灰回收利用的研究进展[J].无机盐工业, 2018, 50(8): 6-10.

[9] YOLDI M. Efficient recovery of aluminum from saline slag wastes [J].Minerals Engineering, 2019, 140: 105 884.

[10] 吕帅帅,倪威,倪红军,等.铝灰渣中 AlN 水解行为及其多元非线性回归分析[J].中国有色金属学报, 2020, 30(4): 920-926.

[11] 郭学益,李菲,田庆华,等.二次铝灰低温碱性熔炼研究[J].中南大学学报, 2012, 43(3): 809-814.

[12] 张宁燕.碱法焙烧脱除二次铝灰中的氟、氯元素及铝的回收[J].新疆有色金属, 2019(2): 47-49.

[13] 戴翔,焦少俊,郑洋,等.利用含氟盐熔剂产生的二次铝灰的危险特性分析[J].无机盐工业, 2018, 50(11): 42-44.

[14] 鲍善词,李素芹.二次铝灰中氟、氯的浸出与回收分析[J].中国冶金, 2018, 28(10): 24-28.

[15] 杜凯峰,汪兴兴,倪红军,等.以含铝资源制备聚合氯化铝及其工艺研究进展[J].现代化工, 2018, 38(8): 48-51.

(编辑:栗万仲)

21 世纪初,研究者在 Co-Al-W 钴基合金中发现了 γ' -Co₃(Al,W) 强化相,并成功制备出该新型钴基高温合金^[1]。与传统镍基合金相比,该新型钴基高温合金具有类似镍基高温合金 γ 、 γ' 两相组织,同时兼有较高的熔点、良好的高温力学性能、更好的抗热腐蚀和耐磨损性能,有望成为下一代航空高温结构材料^[2]。然而由于 γ' -Co₃(Al,W) 析出相为部分短程无序的亚稳定结构相,在高温状态下容易分解成 Co₃W 等杂相而降低其高温性能^[3]。常通过增加 γ' 相组成元素 W 的含量^[4,5],或者添加 Ta、Ti、Nb 和 V^[6~16] 等 γ' 相强稳定合金化元素,提高 γ' -Co₃(Al,W) 强化相固溶温度与体积分数,从而提高 Co-Al-W 钴基合金的高温力学性能,并通过蠕变试验进一步得出包括 W 在内的合金化元素对合金蠕变性能和界面强度提高的积极作用^[13]。为了探究合金元素在 Co-Al-W 钴基合金中的作用机制,研究者开展了合金元素在 γ 与 γ' 相中分配情况的研究,发现 W^[4]、Ta、Ti、Mo、Nb、V^[6,9,17] 和 Ru^[18] 被强烈分配在 γ' 相,而 Cr、Fe 和 Mn 则优先分配至 γ 相^[6,9,17]。由于在 γ/γ' 两相合金中正错配度相对于负错配度的合金具有更好的高温力学性能^[19],进一步研究了合金化元素对 Co-Al-W 钴基合金中 γ/γ' 错配度的影响^[16,20,21]。最近,还相继报道了钴基合金中关键二元相 L1₂-Co₃X (X=Ti、Ta、Al、W、V) 的基础平衡态物理属性、合金化原子占位、弹性性质、热力学数据以及晶体结构参数在内的研究成果^[22~28]。

由于 Co-Al-W 钴基高温合金中有类似镍基高温合金的 γ/γ' 相界面,而其相界强度将直接影响 Co-Al-W 钴基高温合金的使用性能。鉴于相界的力学特性主要由相界区域层间电子相互作用的强弱所决定,而目前在试验研究上又无法深入准确探知微观区域层间电子价键结构特性。结合第一性原理理论计算能从电子-原子尺度探索合金微观成分-结构-性能的内在关系,揭示其宏观力学性能的物理本质影响及其结构和主导力学性能的物理本质,因此,本课题采用第一性原理计算方法研究 W 掺杂对 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界结构特性的影响,为开发新型钴基高温合金的成分设计提供参考。

1 计算模型与方法

1.1 计算方法

采用 CASTEP 总能量计算程序包。晶体波函数由平面波基组展开,经前期测试,交换-关联能函数采用广义梯度近似 (GGA-PBE),赝势采用倒空间表述的 Cepeley-Alder 超软赝势。模型能量计算运用基集修正,采用 Pulay 密度混合法,动能截断点设置为 300.0

eV,在各项计算任务之前,先用 BFGS(Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno)方法对 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界计算模型进行原子位置及超胞尺寸结构优化。能量 SCF (self-consistent calculation) 自洽计算时,相界模型总能量收敛值选取 1.0×10^{-5} eV/atom,每个原子上的力低于 0.003 eV/nm,公差偏移小于 0.01 nm,应力偏差小于 0.05 GPa。

1.2 表面模型测试

SATO J 等^[1]发现 γ' -Co₃(Al,W) 相是以 fcc 形态从 γ -Co 相基体中析出,并得出 γ 和 γ' 两相的晶格常数分别为 0.358 0 nm 和 0.359 9 nm,其晶格错配度为 0.53%,与 Ni 基高温合金中 γ/γ' 相界错配度很接近。参照 γ -Ni/ γ' -Ni₃Al 相界模型构建方法^[29],Co 基单晶超合金以 {002} 原子层为中心形成共格 γ/γ' 相界,本课题构造了 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界计算模型。在构造该模型前,以 γ -Co 相 (002) 表面与 γ' -Co₃Al 相 (001) 表面为研究对象,分别运用 $\delta E = (E_s^N - E_s^{N-1})$ 和 $\delta E = (E_s^N - E_s^{N-2})$ 计算了不同原子层数 Co(002) 与 Co₃Al(001) 表面模型总能的变化量 δE ,对 γ 相 (002) 表面以及 γ' 相 (001) 表面模型进行测试,以此确定两种表面模型稳定状态的有效原子层数^[29],其计算结果见图 1。从图 1 可见,对于 γ 相 (002) 及 γ' 相 (001) 表面模型,当原子层数达到 $N \geq 9$ 时,两个表面模型总能的变化量 δE 都基本趋于稳定,表明 γ 相 (002) 表面及 γ' 相 (001) 表面其有效表面模型的最低原子层数为 $N=9$ 。

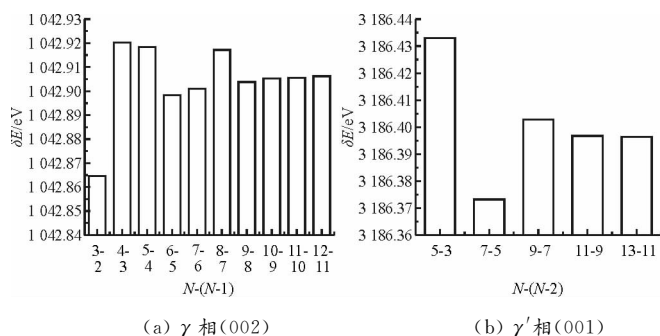


图 1 γ 相 (002) 表面与 γ' 相 (001) 表面模型总能变化量 δE 随原子层数 N 的变化

Fig.1 The variation of total energies δE of γ phase (002) and γ' phase (001) surface models with atomic layer N

1.3 相界计算模型

基于 SATO J 等^[1]X 射线分析结果,可认为基体 γ 与析出相 γ' 完全共格,以公共原子层 {002} 为界面构造 γ -Co/ γ' -Co₃Al 超胞模型,见图 2。依据表面模型测试结果,构建了由 9 个 Co 原子层与 9 个 Co₃Al 原子层组成的 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界计算模型,其中包含 72 个原子和两个对称相界,见图 2a。该模型中所标注的 (001)

γ 、(001) γ' 和(002) γ/γ' 分别表示 γ -Co 相区(001)原子层、 γ' -Co₃Al 相区(001)原子层和 γ/γ' 相界共格(002)原子层。由于共格的(002) γ/γ' 原子层既可认为是 γ -Co 相(002)表面,也可看作 γ' -Co₃Al 相(002)表面,故 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界模型存在如下两种界面区域取向关系,即:(001) $\gamma'//(002)\gamma$ (定义为区域 1)和(001) $\gamma'//(002)\gamma'$ (定义为区域 2)。对应有如下 4 个表面模型: γ' -Co₃Al 相(001)与 γ -Co 相(002)表面模型(见图 2b)和 γ -Co 相(001)与 γ' -Co₃Al 相(002)表面模型(见图

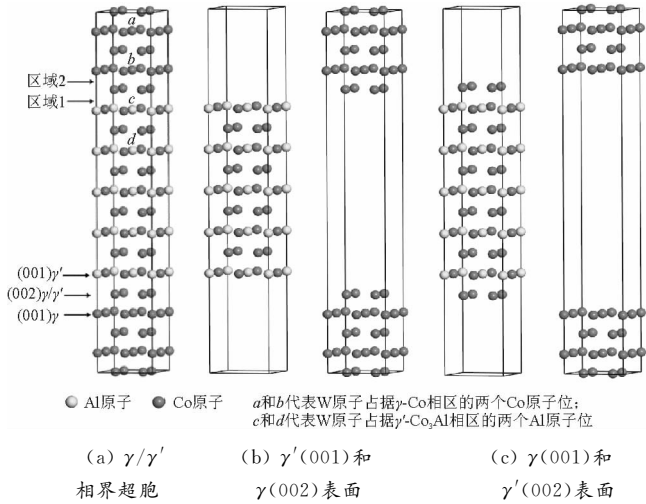


Fig.2 Models for calculation

表 1 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界模型与相应表面模型总能量 E_i 、 E_s 和相界截面积 S_i 及其相界 Griffith 断裂功 W_i

Tab.1 The total energies of γ -Co/ γ' -Co₃Al interfacial models(E_i) and surface models(E_s), the interfacial areas S_i and Griffith rupture works (W_i)

模型	区域	E_i/eV	E_s^{γ}/eV	$E_s^{\gamma'}/\text{eV}$	S_i/nm^2	$W_i/(\text{J} \cdot \text{m}^{-2})$
模型 1 (无掺杂)	1	-65 234.473 8	-37 533.939 8	-27 684.733 9	24.80	5.103 1
	2	-65 234.473 8	-29 190.912 1	-36 025.109 2	24.80	5.959 9
模型 2 (W→a)	1	-67 017.913 4	-39 317.271 7	-27 684.689 9	25.14	5.082 5
	2	-67 017.913 4	-30 974.157 7	-36 024.995 1	25.14	5.977 4
模型 3 (W→b)	1	-67 018.072 7	-39 317.381 7	-27 684.672 1	25.18	5.095 8
	2	-67 018.072 7	-30 973.100 4	-36 024.963 2	25.18	6.365 1
模型 4 (W→c)	1	-68 988.854 3	-37 533.701 4	-31 436.885 8	24.99	5.855 1
	2	-68 988.854 3	-29 190.794 3	-39 779.580 4	24.99	5.923 2
模型 5 (W→d)	1	-68 989.510 6	-37 533.747 3	-31 439.809 6	25.03	5.105 4
	2	-68 989.510 6	-29 190.748 0	-39 780.052 0	25.03	5.987 7

2.2 Griffith 断裂功的分析

区域 1 和区域 2 分别表示相界区域间可能断裂的两个位置(见图 2a)。比较这两个区域的 Griffith 断裂功大小,可以判断相间断裂将发生在 Griffith 断裂功较小的位置。从表 1 看出, γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界未合金化时,区域 1 断裂功为 5.103 1 J/m²,比区域 2 断裂功值小,表明区域 2 中(001) γ 原子层与共格(002) γ/γ' 原子层之间的键合强度要比区域 1 两侧(001) γ' 原子层与共格(002) γ/γ' 原子层之间的键合强度要强。由于相界的断裂强度是由界面原子层之间结合最弱的区域所决

定,故未合金化时,区域 1 的 Griffith 断裂功可以理解

2 计算结果与讨论

2.1 Griffith 断裂功的计算

γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界 W 掺杂前后其断裂功^[29,30]的变化可采用下式计算:

$$W = (-S_i/2) \cdot [E_i(n, m, l) - E_s^{\gamma}(n_{\gamma}, m_{\gamma}, l_{\gamma}) - E_s^{\gamma'}(n_{\gamma'}, m_{\gamma'}, l_{\gamma'})]$$
 (1)

式中, S_i 为共格 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界的面积; $E_i(n, m, l)$ 为 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界包含 18 层原子层相界模型总能量; $E_s^{\gamma}(n_{\gamma}, m_{\gamma}, l_{\gamma})$ 为 γ -Co 相表面模型的总能量; $E_s^{\gamma'}(n_{\gamma'}, m_{\gamma'}, l_{\gamma'})$ 为 γ' -Co₃Al 相表面模型的总能量; n, m, l 分别表示各计算模型中 Co、Al 以及 W 的原子个数,并且满足 $n = n_{\gamma} + n_{\gamma'}$ 、 $m = m_{\gamma} + m_{\gamma'}$ 以及 $l = l_{\gamma} + l_{\gamma'}$ 。

合金化前和 W 原子占据 $a \sim d$ 位的 γ -Co/ γ' -Co₃Al相界模型及其对应表面模型能量计算值及 Griffith 断裂功见表 1。

定,故未合金化时,区域 1 的 Griffith 断裂功可以理解

依据上述分析方法,比较表 1 中 W 原子占据 a, b, c 和 d 位所对应相界区域 1 和区域 2 的 Griffith 断裂功值大小,得到 W 掺杂对相界断裂强度的影响见图 3。可以看出,无论 W 原子是占据 a, b, c 位还是 d 位,区域 2 的 Griffith 断裂功都要比区域 1 的 Griffith 断裂功大,因此 W 掺杂后相界断裂强度就完全取决于区域 1

的 Griffith 断裂功,其断裂位置也基本发生在区域 1。从区域 1 来看,当 W 原子替换 γ' -Co₃Al 相 c 位的 Al 原子时,其 Griffith 断裂功显著增强,达到 5.855 J/m²,较未掺杂时纯净 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界的断裂强度(5.103 J/m²)提高了 0.752 J/m²,增幅为 14.7%,而占据其他 3 个位置时对其断裂强度的影响则不明显。由此可见,结合 W 原子主要分配在 γ' 相^[4] 的 Al 原子位^[26] 的试验结果,本课题则进一步发现当 W 原子占据 γ/γ' 相界面的 Al 原子位时,能显著增强其相界强度,而占据其他位置时对其断裂强度的影响则不明显,和 BAUER A 等^[13] 的结论一致。

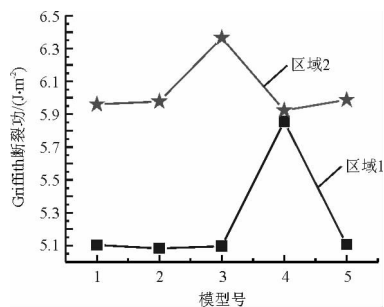


图 3 W 掺杂 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界对其断裂功的影响

Fig.3 Effect of W doped γ -Co/ γ' -Co₃Al phase boundary on Griffith rupture work

2.3 电子态密度分析

图 4 为掺杂 W 前后 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界区域 1 两侧(002) γ/γ' 与(001) γ' 原子层以及区域 2(002) γ/γ' 与(001) γ 原子层的投射电子态密度(DOS)的变化。图 4 中模型 1~5 分别对应未掺杂,以及 W 原子占据 a、b、c 和 d 位 5 个计算模型。由图 4a 可以看出,模型 4(W 原子占据 c 位)相较于模型 1(未掺杂)而言,(001) γ' 原子层电子态密度存在两个明显的改变:①在-5~-3 eV 能级区间内,明显增加了 2 个成键峰;②在-5~-3 eV 能级区间内成键电子数明显增多,其他能级区间基本保持成键电子数不变。而(002) γ/γ' 原子层电子态密度的主要变化体现在-3.5 eV 能级处比较明显增加了一个成键峰。成键电子数的增多以及成键峰的增加都说明在模型 4 中,W 原子占据 c 位明显增强了(002) γ/γ' 与(001) γ' 原子层间原子的键合强度,使得区域 1 的断裂强度得到提升,从而印证了图 3 中区域 1 的 Griffith 断裂功在模型 4 中得到增强。其余模型 2、3 和 5 相较于模型 1 则没有明显的变化。而由图 4b 可见,模型 3(W 原子占据 b 位)对照模型 1 模型(未掺杂),其(001) γ 原子层电子态密度在-5~-4 eV 能级区间内,也增加了 1 个成键峰,同时在此低能级区间内成键电子数也明显增多,这两个变化表明在模型 3 中,W 原子占据 b 位也增强了(002) γ/γ' 与(001) γ 原子层间原子

的键合强度,从而提升区域 2 的断裂强度,故在图 3 中出现模型 3 中区域 2 的 Griffith 断裂功增强,只不过此时相界的断裂强度由较低的区域 1 的断裂功决定。综上所述,掺杂前后 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界区域 1 和区域 2 原子层间电子态密度的分析揭示了其断裂功变化的原因源于 W 掺杂所引起的 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界区域层间原子电子相互作用的增强。

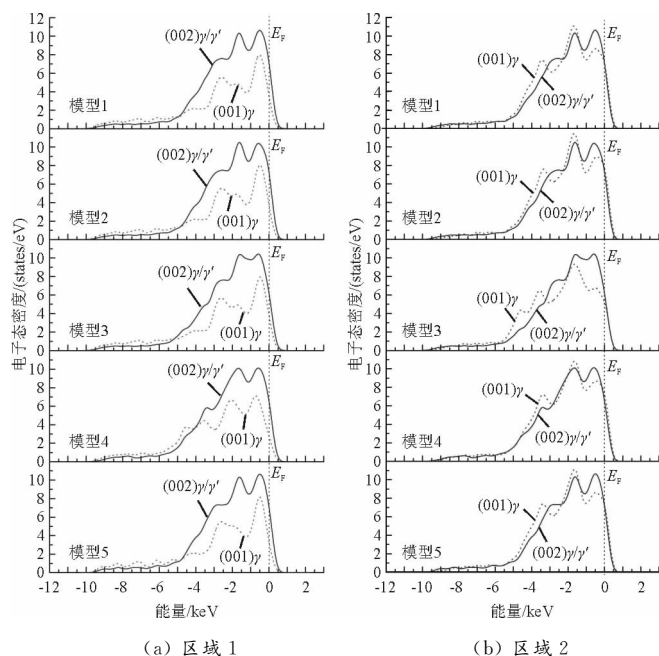
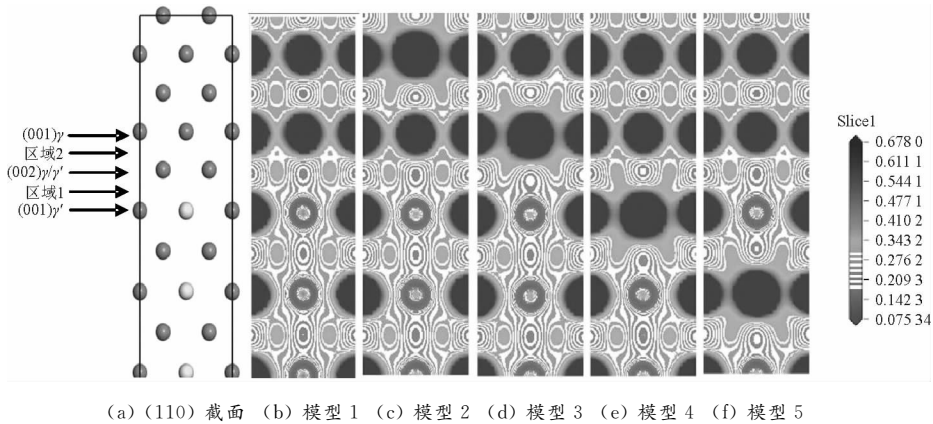


图 4 W 合金化前后 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界区域相邻原子层间的电子态密度

Fig.4 The density of electronic states between adjacent atomic layers of γ -Co/ γ' -Co₃Al phase boundary before and after W alloying

2.4 电子密度分布图

为了考察 W 掺杂对 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界区域 1 与区域 2 价电子相互作用的方向性,本课题进一步计算了相界模型(110)截面的电子密度分布图,见图 5(此处只截取了图 2 模型的上半部分,包含其中的 1 个相界)。图 5a 为所取电子密度分布图所对应到计算模型中的(110)截面,图 5b~图 5f 分别为未掺杂以及 W 原子占据 a、b、c、d 位 4 个模型(110)截面的电子密度分布图。从图 5b 可见,在纯净相界区域,(002) γ/γ' 层内 Co 原子与(001) γ' 层内 Al 原子之间所发生的 p-d 电子杂化效应,导致(002) γ/γ' 原子层内 Co 原子 3d 电子云呈现出各向异性的特征;而对于 γ 相中的 Co 原子,尤其是(001) γ 原子层内 Co 原子,由于已经远离 γ' 相中的 Al 原子,而与其第一近邻的 Co 原子间的电子相互作用则呈现出各向同性的状态。比较其区域 1 与区域 2 电子密度分布,可见区域 2 价电子比区域 1 多,表明区域 2 电子相互作用比区域 1 强。故图 5b 展示了一个理解图

图 5 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界模型(110)截面价电子密度分布图Fig.5 The valence electron density contour plots of the (110) planes in the γ -Co/ γ' -Co₃Al interface models

3 中纯净 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界相间断裂位置发生在区域 1 的直观图景。

从图 5c~图 5f 可见,对于 W 掺杂相界区域 $a \sim d$ 位,均能使其局域电子密度明显富集,可见 W 与第一近邻 Co 原子之间成键价电子密度要比未掺杂时 Co 与 Co 原子之间成键价电子密度要大,表明 W 与第一近邻 Co 原子之间电子相互作用相对于 Co 与 Co 原子要明显增强。当 W 占据 b 位置的 Co 原子时(模型 3),由图 5d 可以看出,W 掺杂后,(001) γ 原子层与共格(002) γ/γ' 原子层之间的电子密度明显增大,说明区域 2 两层原子结合更加牢固,从而在图 3 中出现了区域 2 断裂功的显著增强。而由于在区域 1 的电子密度基本没有变化,故使其断裂位置依然在区域 1。当 W 占据 c 位置的 Al 原子时(模型 4),见图 5d。W 掺杂后,W 原子与共格(002) γ/γ' 原子层最近邻 Co 原子间发生强烈的电子相互作用,致使沿 γ' -Co₃Al 相(001) γ' 原子层将 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界撕开将需要施加一个更大的外力,揭示了图 3 中区域 1 断裂功明显增加源于 W 原子与 Co 原子间的强烈的相互作用,虽然没有使相间断裂位置发生改变,但极大地提高了 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相间断裂强度。综上所述,从相界电子密度分布的维度很好地解释了图 3 中断裂功变化的原因。

3 结 论

(1)通过对 γ -Co 相(002)表面以及 γ' -Co₃Al 相(001)表面模型测试,确定两种表面模型稳定状态的有效原子层数都为 9 层,构造了 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界计算模型。

(2)W 原子占据 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界面内 Al 原子位时,能显著增强其相界强度,而占据其他位置时对相界强度的影响则不明显。结合 W 原子在 Co-Al-W 合金中的占位研究结果,从理论计算上验证了 W 元素对

其合金界面强度提高的试验结果。

(3)电子态密度与电子密度分布图的分析显示,W 掺杂对 γ -Co/ γ' -Co₃Al 相界断裂强度的提高源于 W 与第一近邻 Co 原子间强烈的电子相互作用,促使相界区域层间原子成键的作用显著增强。

参 考 文 献

- [1] SATO J, OMORI T, OIKAWA K, et al. Cobalt-base high-temperature alloys[J]. Science, 2006, 312(5 770): 90-91.
- [2] 刘兴军,陈悦超,卢勇,等. 新型钴基高温合金多尺度设计的研究现状与展望[J].金属学报, 2020, 56(1): 1-20.
- [3] LASS E A, GRIST R D, WILLIAMS M E. Phase equilibria and microstructural evolution in ternary Co-Al-W between 750 and 1 100 °C[J]. J. Phase Equilib. Diffus., 2016, 37(4): 387-401.
- [4] MEHER S, YAN H Y, NAG S, et al. Solute partitioning and site preference in γ/γ' cobalt-base alloys[J]. Scripta Materialia, 2012, 67(10): 850-853.
- [5] PYCZAK F, BAUER A, GÖKEN M, et al. The effect of tungsten content on the properties of L1₂-hardened Co-Al-W alloys[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2015, 632: 110-115.
- [6] MEHER S, BANERJEE R. Partitioning and site occupancy of Ta and Mo in Co-base γ/γ' alloys studied by atom probe tomography [J]. Intermetallics, 2014, 49(2): 138-142.
- [7] ZHOU H J, XUE F, CHANG H, et al. Effect of Mo on microstructural characteristics and coarsening kinetics of γ' precipitates in Co-Al-W-Ta-Ti alloys[J]. Journal of Materials Science & Technology, 2018, 34(5): 799-805.
- [8] BAUER A, NEUMEIER S, PYCZAK F, et al. Creep properties of different γ' -strengthened Co-base superalloys[J]. Materials Science and Engineering, 2012, A550(12): 333-341.
- [9] POVSTUGAR I, CHOI P P, NEUMEIER S, et al. Elemental partitioning and mechanical properties of Ti- and Ta-containing Co-Al-W-base superalloys studied by atom probe tomography and nanoin-dentation[J]. Acta Materialia, 2014, 78(4): 78-85.
- [10] SHI L, YU J J, CUI C Y, et al. Effect of Ta additions on microstructure and mechanical properties of a single-crystal Co-Al-W-base alloy[J]. Materials Letters, 2015, 149: 58-61.
- [11] SUZUKI A, POLLOCK T M. High-temperature strength and de-

- formation of γ/γ' two-phase Co-Al-W-base alloys[J]. Acta Materialia, 2008, 56(6): 1 288-1 297.
- [12] OOSHIMA M, TANANKA K, OKAMOTO N L, et al. Effects of quaternary alloying elements on the γ' solvus temperature of Co-Al-W based alloys with fcc/L1₂ two-phase microstructures[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2010, 508(1): 71-78.
- [13] BAUER A, NEUMEIER S, PYCZAK F, et al. Microstructure and creep strength of different γ/γ' -strengthened Co-base superalloy variants[J]. Scripta Materialia, 2010, 63(12): 1 197-1 200.
- [14] XUE F, ZHOU H J, DING X F, et al. Improved high temperature γ' stability of Co-Al-W-base alloys containing Ti and Ta[J]. Materials Letters, 2013, 112: 215-218.
- [15] XUE F, ZHOU H J, FENG Q. Improved high-temperature microstructural stability and creep property of novel Co-base single-crystal alloys containing Ta and Ti[J]. The Mineral, Metals & Materials Society, 2014, 66(12): 2 486-2 494.
- [16] YAN H Y, VOTONTSOV V A, DYE D. Alloying effects in polycrystalline γ' strengthened Co-Al-W base alloys[J]. Intermetallics, 2014, 48: 44-53.
- [17] OMORI T, OIKAWA K, SATO J, et al. Partition behavior of alloying elements and phase transformation temperatures in Co-Al-W-base quaternary systems[J]. Intermetallics, 2013, 32(2): 274-283.
- [18] SAUZA D J, BOCCHINI P J, DUNAND D C, et al. Influence of ruthenium on microstructural evolution in a model Co-Al-W superalloy[J]. Acta Materialia, 2016, 117: 135-145.
- [19] MUGHRABI H. The importance of sign and magnitude of γ/γ' lattice misfit in superalloys-with special reference to the new γ' -hardened cobalt-base superalloys[J]. Acta Materialia, 2014, 81: 21-29.
- [20] VORONTSOV V A, BARNARD J S, RAHMAN K M, et al. Coarsening behaviour and interfacial structure of γ' precipitates in Co-Al-W based superalloys[J]. Acta Materialia, 2016, 120: 14-23.
- [21] KAZANTSEVA N V, DEMAOKOV S L, YUROVSKIKH A S, et al. Phase diagram of the Co-Al-W system. structure and phase transformations near the Co₃ (Al, W) intermetallic composition range[J]. The Physics of Metals and Metallography, 2016, 117(7): 701-709.
- [22] XU W W, HAN J J, WANG Z W, et al. Thermodynamic, structural and elastic properties of Co₃X (X = Ti, Ta, W, V, Al) compounds from first-principles calculations[J]. Intermetallics, 2013, 32: 303-311.
- [23] JIN M, MIAO N H, ZHAO W Y, et al. Structural stability and mechanical properties of Co₃(Al, M) (M = Ti, V, Cr, Zr, Nb, Mo, Hf, Ta, W) compounds [J]. Computational Materials Science, 2018, 148: 27-37.
- [24] WANG C P, YAN L H, HAN J J, et al. Effects of alloying elements on the structural, elastic and thermodynamic properties of Co₃Ta compounds from first-principles calculations[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2017, 726: 490-497.
- [25] WANG W Y, XUE F, ZHANG Y, et al. Atomic and electronic basis for solutes strengthened (010) anti-phase boundary of L1₂ Co₃(Al, TM): A comprehensive first-principles study[J]. Acta Materialia, 2018, 145: 30-40.
- [26] XU W W, SHANG S L, WANG C P, et al. Accelerating exploitation of Co-Al-based superalloys from theoretical study[J]. Materials and Design, 2018, 142: 139-148.
- [27] WANG C P, DENG B, XU W W, et al. Effects of alloying elements on relative phase stability and elastic properties of L1₂Co₃V from first-principles calculations[J]. Journal of Materials Science, 2018, 53: 1 204-1 217.
- [28] 陈律,刘逸众. L1₂-Co₃X(X = Ti, Ta, Al, W, V)点缺陷结构的理论计算[J]. 特种铸造及有色合金, 2020, 40(9): 929-934.
- [29] 彭平,陈律,周焄武,等. Re 与 Ru 合金化对 Ni/Ni₃Al 相界电子结构影响的第一原理研究[J].金属学报, 2007, 43(2): 137-143.
- [30] 陈律,李敏. W 元素对 γ -Ni/ γ' -Ni₃Al 相界断裂功影响的理论计算[J]. 兵器材料科学与工程, 2020, 43(4): 99-103.

(编辑:刘晨辉)

突破高性能金属材料发展瓶颈有了新路径

从中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家研究中心获悉,该中心纳米金属科学家工作室博士后徐伟、张波研究员、李秀艳研究员和卢柯院士等研究发现,受限晶体结构可显著降低铝镁合金中的高温原子扩散速率。在铝镁合金平衡熔化温度附近,受限晶体结构的表观晶间扩散速率比同成分材料的晶界扩散降低约 7 个数量级。

该发现不但揭示了受限晶体结构的一种全新原子扩散行为,而且表明金属材料的高温原子扩散速率可以利用这种新型亚稳结构得到大幅度降低,这为发展高性能高热稳定性金属材料开辟了一条全新的途径。

原子扩散是材料制备加工过程中调控材料结构性能的一个基本过程。利用金属的高扩散速率可以在较低温度下大幅度调控金属材料结构和性能,从而获得良好的综合性能,但高扩散速率亦会导致金属材料在高温下结构失稳,很多金属会出现优异性能丧失、强度下降等现象。

2020 年,该团队发现了一种新型亚稳结构即受限晶体结构。此后,研究团队利用自主研发的低温塑性变形技术,将过饱和 Al-15Mg 合金薄片的晶粒尺寸细化至 10 nm 以下,并成功获得受限晶体结构。利用该结构,系统研究了该合金在升温过程中的 3 种原子扩散控制的结构演化过程。

研究表明,在接近合金熔点的高温下,受限晶体结构可以有效抑制这 3 种结构演化过程,甚至使合金的熔化温度比平衡熔点提升了 69 K,表现出超低的原子扩散速率。

(摘自中国有色网)