

应变时效过程中析出相界面 Al/ θ' 的能量响应

罗康¹, 江勇^{1,2}, 易丹青^{1,2}, 傅上¹, 臧冰¹

(1. 中南大学 材料科学与工程学院, 长沙 410083;

2. 中南大学 有色金属材料科学与工程教育部重点实验室, 长沙 410083)

摘要: 基于第一性原理密度泛函方法, 计算研究 Al/ θ' 共格界面对应变时效参数的能量响应, 综合讨论外加单向应变、时效温度以及 Cu 化学活度对界面形成能的影响作用。结果表明: θ' 相的界面能随温度的升高而增大, 当温度从 298 K 增加到 498 K 时, 大尺寸的 θ' 相界面能($\gamma_{\text{Al}/\theta'}$)增大约 2.3%, 而小尺寸的富铜 θ' 相界面能($\gamma_{\text{Al}/\theta'(\text{Cu-rich})}$)增大约 7.6%; 在相同温度和应变下, 小尺寸的富铜 θ' 相界面能总是比大尺寸 θ' 的相界面能低约 10%。在室温下, 当应变从 0 增加到 2% 时, 富铜 θ' 相界面能最大降低约 9.2%; 不同的应变方式(压缩或拉伸、垂直或平行界面方向)对各类型 θ' 相界面能的作用效果有所不同, 由此影响到其在基体中的析出方式, 这应该是应变时效的主要机制之一。

关键词: Al/ θ' 界面; 界面能; 应力-应变时效; 第一性原理

中图分类号: TG111.5

文献标志码: A

Energetics response to precipitates interface Al/ θ' under strain aging

LUO Kang¹, JIANG Yong^{1,2}, YI Dan-qing^{1,2}, FU Shang¹, ZANG Bing¹

(1. School of Materials Science and Engineering, Central South University, Changsha 410083, China;

2. Key Laboratory of Nonferrous Metal Materials, Ministry of Education, Central South University, Changsha 410083, China)

Abstract: Based on first-principles, the potential effects of coherent Al/ θ' interfaces under the response to external strains were calculated, and the effect of the uniaxial strain, aging temperature and Cu activity on the interfacial energies of both stoichiometric and Cu-rich Al/ θ' interfaces energies were investigated. The results show that the interfacial energies θ' phase always increase with temperature increasing, the larger size interface energy ($\gamma_{\text{Al}/\theta'}$) and smaller size interface energy ($\gamma_{\text{Al}/\theta'(\text{Cu-rich})}$) increase by about 2.3% and 7.6%, respectively, as the temperature increases from 298 to 498 K. Under the same temperature and strain states, $\gamma_{\text{Al}/\theta'(\text{Cu-rich})}$ is always lower than $\gamma_{\text{Al}/\theta'}$ by about 10%. For a parallel tensile strain of 2% at room temperature, $\gamma_{\text{Al}/\theta'(\text{Cu-rich})}$ decreases the most by up to about 9.2%. The different strain signs (compressive or tensile) and directions (parallel or vertical) have different influences on the interface energies, and can affect the orientation preference of θ' precipitates in the matrix. This may be one major mechanism for strain/stress aging.

Key words: Al/ θ' interface; interface energy; strain-stress aging; first-principles

时效强化(也称沉淀强化)作为一种最常见的热处理强化工艺, 在各类合金材料, 特别是航天航空用轻质结构合金材料中应用广泛。合金的时效强化效果,

在很大程度上取决于时效过程中合金基体内强化第二相的析出数量、尺寸、分布弥散程度以及不同析出相的析出顺序。而析出相的析出序列可以随时效工艺参

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51071177); 国家重点基础研究发展计划资助项目(2012CB619506)

收稿日期: 2012-12-11; **修订日期:** 2013-05-17

通信作者: 江勇, 教授, 博士; 电话: 0731-88830263; E-mail: yjiang@csu.edu.cn

数(包括时效温度、时效时间、合金过饱和度等)的变化而发生改变,从而为优化设计时效工艺提供了新的途径。Al-Cu合金是一类最典型的具有复杂析出序列的时效强化型二元合金。针对其强化相的时效析出行为,研究者们已做了大量的实验研究,并确定其在低温时效过程中的析出序列为(过饱和固溶体)→GP-I区→GP-II区(θ'' 相, Al_3Cu)→ θ' 相(Al_2Cu , I4/mmm)→ θ 相(Al_2Cu , I4/mcm)^[1-4]。研究者进一步发现,在合金时效过程中同时施加较大的应力/应变场(即应力或应变时效),有可能明显影响析出相的惯析面、分布密度和尺寸大小,从而在峰时效前大大提高析出强化效果^[5-9]。对于应力/应变时效的作用机制,目前主要有扩散蠕变^[10]、界面控制扩散^[11-13]以及应变能转化共格界面晶格畸变^[14]的几种推断。这些推断都基于一个共同的认识,即应力/应变时效机制与析出强化相界面存在重要联系。界面结构及其相关能量特性,不仅与析出相的形核与长大行为密切相关,也会直接影响析出序列的顺序以及与位错的相互作用等复杂行为。因此,界面结构与性质在应力/应变时效研究中日益受到重视。然而,由于界面研究的实验方法和手段极其有限,特别是对于外加应力/应变场下析出相的界面结构与性质,在时效温度下如何随外加应力/应变场响应变化,目前尚缺乏基本理解和认识。

近年来,第一性原理热力学计算作为一种重要的理论研究方法,开始逐步应用于界面材料体系的基础研究,包括若干典型的合金/氧化物的相界面^[15-18]。第一性原理计算研究方法的最大特点是从最基本的热力学原理出发,以计算量子力学为手段,对体系能量(焓、熵、自由能)、晶体结构、电子结构等进行无参数的精确计算,结合合理的物理和热力学模型,可对材料的宏观物理性能、化学性能和力学性能等进行直接的理论预测。其计算过程由于不需要引入任何经验性参数或实验数据,计算结果依靠能量准则(或原子间力准则)自我收敛,故可排除一切人为因素的影响,研究结论可以做到自我支持。本文作者采用基于第一性原理密度泛函理论的计算方法,以Al-Cu合金中常见 θ' (Al_2Cu)析出相为例,对析出相界面所受温度和应变(应力)场耦合作用的影响开展系统性的理论研究。具体而言,针对不同尺寸 θ' 析出相的两种典型共格界面,考察在应变(应力)时效过程中温度和外加应变方式(压缩或拉伸、垂直或平行界面方向)对其界面形成能的影响和作用。这种从原子及电子层面探究外场作用下界面结构和性质的研究方法及其应用,不仅有助于界面科学的发展,而且对于合金材料的强化作用机理及优化制备具有重要指导意义。

1 计算方法与界面模型

本研究主要开展以下几项内容的计算研究工作:

1) Al-Cu合金中Cu的化学活性,以及其受温度和外加应变的影响作用;

2) 基于他人的高分辨电子显微分析结果,针对不同尺寸的 θ' 析出相界面的两种典型共格关系,构建相应的共格界面原子结构,并通过第一性原理热力学计算评估平衡状态下对应的界面形成能;

3) Al/ θ' 界面能受时效温度、Cu活性、外加应变大小和施加方式的影响及其变化趋势。

所有计算均采用第一性原理电子密度泛函通用程序包VASP^[19],其中交换关联能采用广义梯度近似,电子与离子核之间的相互作用采用PBE赝势,平面波展开采用较高的能量截断(375 eV)。Cu化学活度的相关计算,采用包含单个Cu原子的 $2\times 2\times 2$ 面心Al超胞,布里渊区内能量积分在 $9\times 9\times 9$ Monkhorst-Pack (M-P) k-网格中进行。由此计算预测Al和 θ' 体相结构参数($a_{\text{Al}}=4.041$ Å, $a_{\theta'}=4.074$ Å, $c_{\theta'}=5.845$ Å),与实验值^[20]吻合很好,最大误差在0.6%以内。

最近对Al/ θ' 界面原子结构的高分辨电子显微分析发现^[21],不同尺寸的 θ' 相与Al基体均保持同一种界面取向关系,即 $(001)_{\theta'}/\{001\}_{\text{Al}}$ 。时效早期形成的细小尺寸 θ' 相($<1\sim 5$ nm),其界面为富铜结构(Cu-rich),富集的Cu原子占据着 θ' 相(001)面的面心位置。而较大尺寸的 θ' 相(>5 nm)界面结构,由符合化学计量比的 θ' 相(001)面与基体Al构成,且该界面上基体一侧Al原子位于 θ' 相表面上两个相邻Cu原子的桥键位置。根据高分辨电镜分析确定的界面原子结构,采用三明治超胞模型所构建的两种界面,即Al/ θ' (Cu-rich)和Al/ θ' ,分别如图1(a)和(b)所示。

为兼顾计算精度和计算效率,针对界面能展开原子层数的收敛计算,最终确定合理的界面超胞尺寸,即两种计算超胞均包含8层基体Al原子、3层 θ' 相的Cu原子、2层 θ' 相的Al原子和至少12 Å的真空层。布里渊区内的能量积分采用 $18\times 18\times 1$ M-P k-网格。为了获得平衡态结构,弛豫计算采用的Hellmann-Feynman原子净力收敛判据为小于 1.0×10^{-11} N。所有计算暂且忽略声子-电子的相互作用对能量的贡献。针对界面施加应力/应变场的方式,设计沿平行界面/[100]和垂直界面/[001]两个方向的单轴压缩与拉伸的4种典型组合方式。

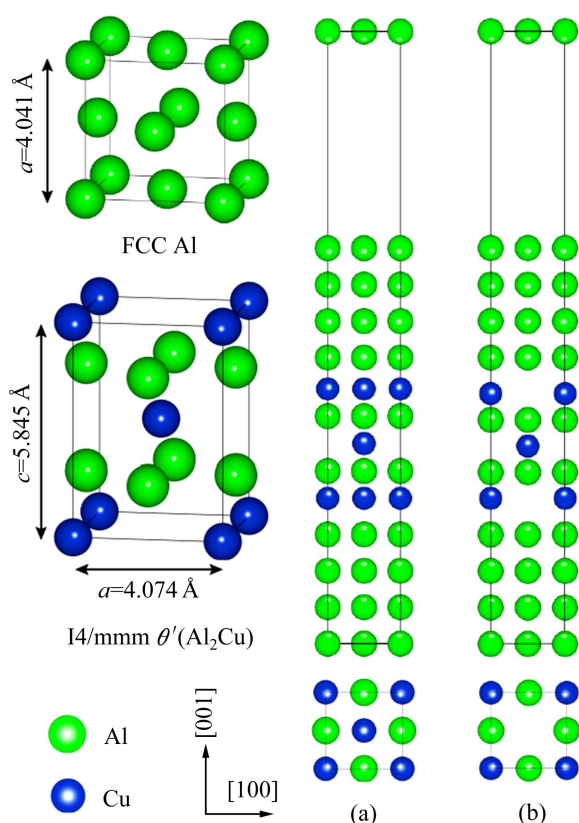


图1 Al和 θ' 的常用晶胞以及基于高分辨电镜分析结果^[21]所构建的三明治型 Al/ θ' 界面模型

Fig. 1 Conventional cells of FCC Al and tetragonal θ' and sandwich models of Al/ θ' interfaces characterized by HRTEM^[21]: (a) Al(001)/ θ' (001) (Cu-rich); (b) Al(001)/ θ' (001)

2 计算结果与讨论

基于已有的界面热力学模型^[15-17, 22], 可以进一步

拓展, 推导出应变条件下达到热力学平衡状态的 Al 基体与 θ' 的界面能 γ_1 , 如式(1)所示:

$$\gamma_1(\varepsilon) = \frac{1}{2A} \left\{ E_0(\varepsilon) - N_{\text{Al}} \mu_{\text{Al}}^0(\varepsilon) - \frac{1}{2} N_{\text{Al}} \mu_{\theta'}^0(\varepsilon) - \left(N_{\text{Cu}} - \frac{1}{2} N_{\text{Al}} \right) [\mu_{\text{Cu}}^0(\varepsilon) + KT \ln \alpha_{\text{Cu}}^0(\varepsilon)] \right\} - \sigma_{\text{Al}}(\varepsilon) \quad (1)$$

式中: A 为界面超胞中所包含的界面面积; E_0 为整个界面超胞的总能; μ_i 和 N_i 分别表示超胞内各组成元素的化学势(即单位自由能)和原子个数; N_{Al} 是 Al 块体中的 Al 原子数; N_{Al} 表示 θ' 相中 Al 原子数; 上标 '0' 表示各组元的纯净态; ε 为所受的弹性应变, 与应力保持线性关系; α_{Cu} 为 Al-Cu 合金基体中 Cu 的化学活度, 是建立 Al-Cu 合金基体和 θ' 界面之间热力学平衡条件的关键物理量; $\sigma_{\text{Al}}(\varepsilon)$ 表示界面模型中多出的 Al 基体的表面能。

Cu 化学活度与其活度因子 γ_{Cu} 、温度和成分有如下函数关系:

$$\alpha_{\text{Cu}}(T, x_{\text{Cu}}, \varepsilon) = x_{\text{Cu}} \gamma_{\text{Cu}}(T, x_{\text{Cu}}, \varepsilon) \quad (2)$$

在合金化程度较低的情况下 ($x_{\text{Cu}} < 10\%$, 摩尔分数), 一般可以认为 γ_{Cu} 与浓度无关, 故可近似推导:

$$\gamma_{\text{Cu}}(T, x_{\text{Cu}}, \varepsilon) \approx \gamma_{\text{Cu}}(T, \varepsilon) = \exp\{[\Delta H(T, \varepsilon) - T \Delta S_{n-c}(T, \varepsilon)] / (KT)\} \quad (3)$$

式中: $\Delta H(T, \varepsilon)$ 和 $\Delta S_{n-c}(T, \varepsilon)$ 分别对应于相同应变下纯净态单质中的单个 Cu 原子固溶到 Al 基体中所引起的焓变和非形熵变, 均可以通过密度泛函计算得到^[23]。

图2所示为不同应变条件下 Al-Cu 合金中 Cu 活度因子随温度的变化关系曲线。由于 $\Delta H(T, \varepsilon)$ 总是负值, 在同一应变下, γ_{Cu} 会随温度升高而增大。图2还清楚显示, γ_{Cu} 不仅受温度影响, 而且应变对 γ_{Cu} 也

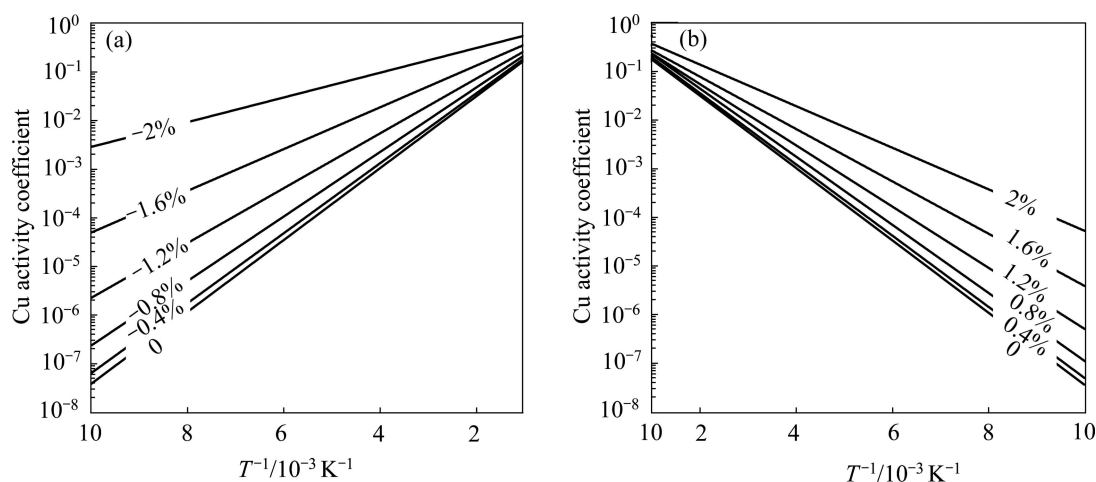


图2 不同应变(ε)下 Cu 活度因子随温度的变化关系曲线

Fig. 2 Cu activity coefficients varying with temperature under strains: (a) Compressive; (b) Tensile

有明显的影响:无论是压缩还是拉伸应变,在同一温度下, γ_{Cu} 总是随应变变量 ε 增加而增大。在室温附近,当压缩应变 ε 从 0 增加到 2%, γ_{Cu} 相应地从 10^{-3} 增大到 10^{-1} , 相当于无外加应变条件下温度约为 1 000 K 时的数值。拉伸应变下也有同样的效果。随着应变变量 ε 的增加,活度因子变化变得平缓,即 γ_{Cu} 对温度的敏感性下降。同样地,随着温度增加, γ_{Cu} 对应变量的敏感性也下降,增大的趋势都变得平缓。概括地讲,提高温度和应变变量,可提高合金中的 Cu 活度(或活度因子),两者对 Cu 活度的影响趋势相同。

计算界面能时,考虑了两种应变施加方向,即平行界面(沿 $[100]_{\theta}$)和垂直界面(沿 $[001]_{\theta}$),如图 1 所示。针对图 1 所构建的两种界面结构,利用方程(1)分别计算了不同温度(室温到 498 K)和应变条件($-2\% \leq \varepsilon \leq 2\%$)下界面能的变化关系。计算结果如图 3 所示。其中图 3(a)、(a')、(b)、(b')、(c)、(c')、(d)、(d') 分别表示平行界面压缩、平行界面拉伸、垂直界面压缩、垂直界面拉伸 4 种应变方式。

比较图 2~3 的计算结果可以发现,类似于温度对 Cu 活度的影响,界面能总是随着温度的升高而增大,这是因为公式(1)中合金的 Cu 活度(a_{Cu})的数值总是低于 1,即不可能等于或超过纯净单质 Cu 中的 Cu 活度值。应变对界面能的影响则相反,界面能随着 ε 的增加而普遍降低。这是由于在给定应变下,公式(1)中界面超胞总能(E_0)与参考态下各相单位能量(μ_i)都因偏离各自的基态结构而略有升高,但前者升高量相对较少。这表明,这种结合性良好的界面在受到外加力场弹性作用时,能够提供一种能量上的缓冲,从而协调界面两侧各相共同变形。而结合性越差的界面,界面能受应变的影响会越小,界面对变形协调性影响也越低。

具体而言,对于较大尺寸的 θ' 相界面(Al/θ'),从该界面相结构(见图 1(b))可见, Al/θ' 界面上沿平行界面方向的原子分布疏松,存在大量面心空位(Empty sites), Cu 层上最近邻原子间距很大(为 4.074 Å), Cu—Cu 相互作用极弱,因此,不论是沿平行或是垂直界面方向施加应变,主要是通过影响跨界面的 Cu—Al 间的相互作用而影响界面超胞总能。Cu—Al 键与界面形成一定夹角(约 40°),导致平行与垂直于界面方向施加的同等应变变量,对跨界面的 Cu—Al 键影响会不等效。而且,垂直方向的应变将影响到所有跨界面的 Cu—Al 键,而平行方向的应变只能影响到其中的一半。因此,垂直方向的应变对界面结构和界面超胞总能影响较大,进而反映到对界面能的影响较大。定量计算证实,沿平行界面方向施加压缩应变(见图

3(a))对该界面影响很小。垂直界面方向施加的应变(图 3(c)和 3(d))对该界面能影响稍大(在 $\varepsilon = \pm 2\%$ 时, $\gamma_{\text{Al}/\theta'}$ 降低在 2.0% 以内),且压缩和拉伸应变影响也稍有不同。但平行界面方向施加拉伸应变(图 3(b))对该界面能影响较大, $\varepsilon = 2\%$ 时, $\gamma_{\text{Al}/\theta'}$ 降低约 4.1%。结合式(1)中各项能量值的计算结果分析发现,主要是由于 Al 表面能和 Cu 活度(而非界面超胞总能)受该种应变方式影响较大,共同作用于界面能的结果。

对于小尺寸的富铜 θ' 相界面($\text{Al}/\theta'(\text{Cu-rich})$),由对应于该界面相结构(图 1(a))可知,界面上富余的 Cu 都填隙到 θ' 相(001)面的面心空位中,使得界面上的原子排布完全紧密,其结果是降低 Cu 层上最近邻原子间距至 2.88 Å,同时,跨界面的 Cu—Al 键增加一倍。因此,在受到外加应变作用时, Cu 层上的 Cu—Cu 和所有跨界面的 Cu—Al 键都同时发生相应变化,从更大程度上影响界面超胞总能,进而界面能。但无论是平行或是垂直界面,特别是压缩或拉伸应变,对界面结构(和能量)的影响接近等效。定量计算也证实(图 3),同等外加力场条件,富铜 θ' 相界面能比 θ' 相界面能下降明显更多;但不同应变方式对富铜 θ' 相界面能的影响差别不大,以垂直界面方向的压缩应变为例, $\varepsilon = 2\%$ 时, $\gamma_{\text{Al}/\theta'(\text{Cu-rich})}$ 降低约 9.2%。

为了更好地反映应变方式对界面能的影响,分别选取常用的应力时效温度($T = 433 \text{ K}$ 和 498 K),计算和比较在同样温度下 Al/θ' 和 $\text{Al}/\theta'(\text{Cu-rich})$ 两种界面的界面能随应变的变化趋势(图 4)。由图 4 能观察到的一个最明显趋势是,在这两个典型的时效温度下,无论采用何种不同的应变量和应变方式,始终有 $\gamma_{\text{Al}/\theta'(\text{Cu-rich})} < \gamma_{\text{Al}/\theta'}$ 。由于形成这两种 θ' 相界面所需的共格应变完全一样,界面能成为决定析出的最主要因素。依据体系总能趋于最小化的原则,基于本研究的计算结果可以预见,无论外加应变场是否存在,当 θ' 在 Al 基体中脱溶析出、形成新鲜 Al/θ' 界面时,富铜型共格界面因为所消耗的界面能较低,所以更容易出现。这完全符合已有 HRETM 观测到的实验现象^[21],即在常规时效(无外加应力应变场)早期阶段,或极为细小($< 2 \sim 5 \text{ nm}$)的 θ' 相, θ' 相界面均以富铜相结构为主。计算结果同样预测,这一现象也将在应变(应力)时效过程存在,这一点可待将来实验验证。

图 4 还显示,在时效过程中引入压缩应变时,如果应变方向垂直于界面,两种界面的界面能 $\gamma_{\text{Al}-\theta'(\text{Cu-rich})}$ 和 $\gamma_{\text{Al}/\theta'}$ 变化更明显,即相对于平行界面方向应变,应变垂直于界面方向会更多地降低界面能;而在时效过程中引入拉伸应变时,结果则恰恰相反,当应变方向

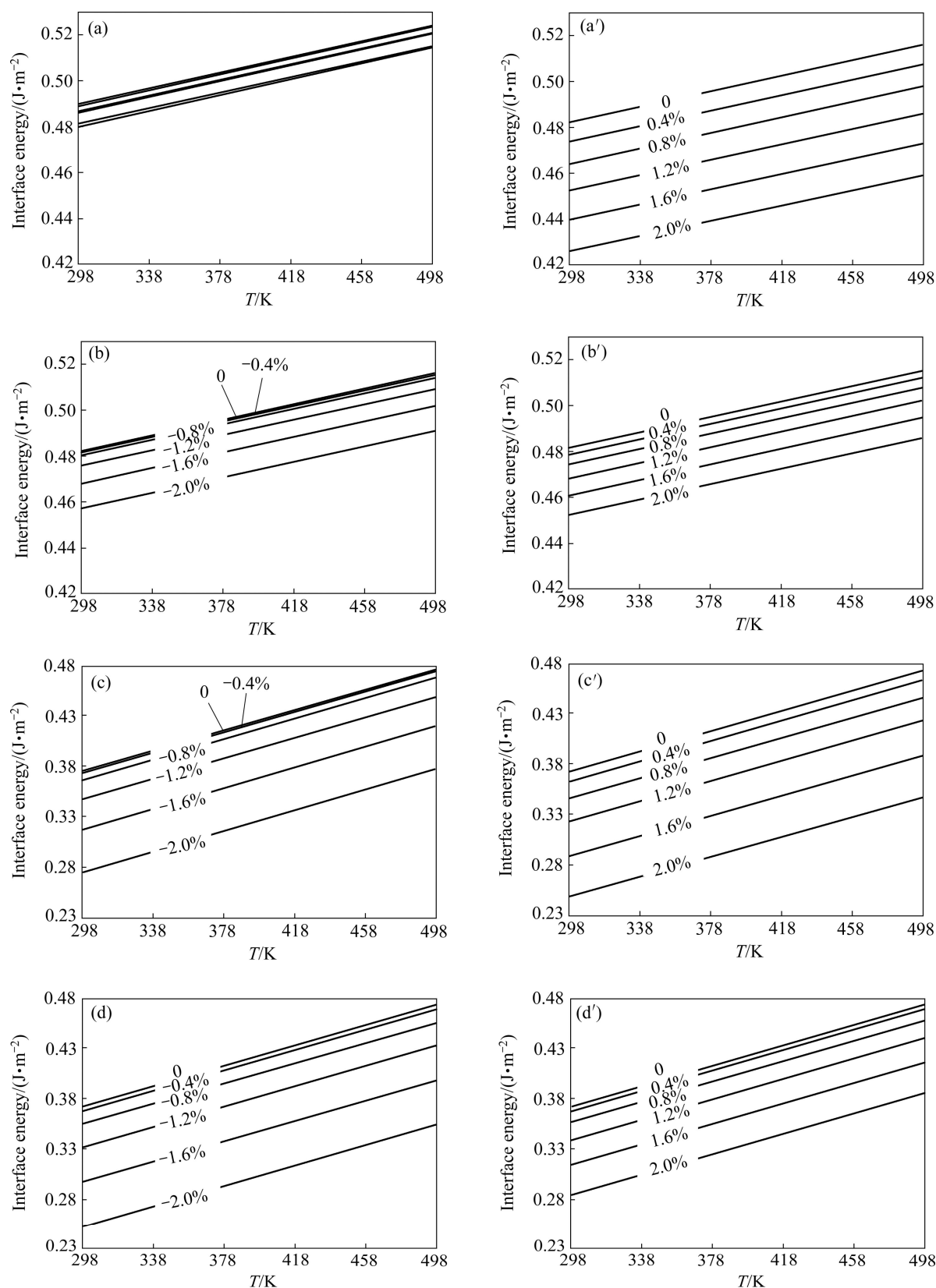


图 3 不同应变条件下 Al/ θ' 和 Al/ θ' (Cu-rich) 界面能随温度的变化关系

Fig. 3 Change of interface energies of Al/ θ' and Al/ θ' (Cu-rich) with temperature under strains: (a) Parallel compressive, interface Al/ θ' ; (a') Parallel tensile, interface Al/ θ' ; (b) Vertical compressive, interface Al/ θ' ; (b') Vertical tensile, interface Al/ θ' ; (c) Parallel compressive, interface Al/ θ' (Cu-rich); (c') Parallel tensile, interface Al/ θ' (Cu-rich); (d) Vertical compressive, interface Al/ θ' (Cu-rich); (d') Vertical tensile, interface Al/ θ' (Cu-rich)

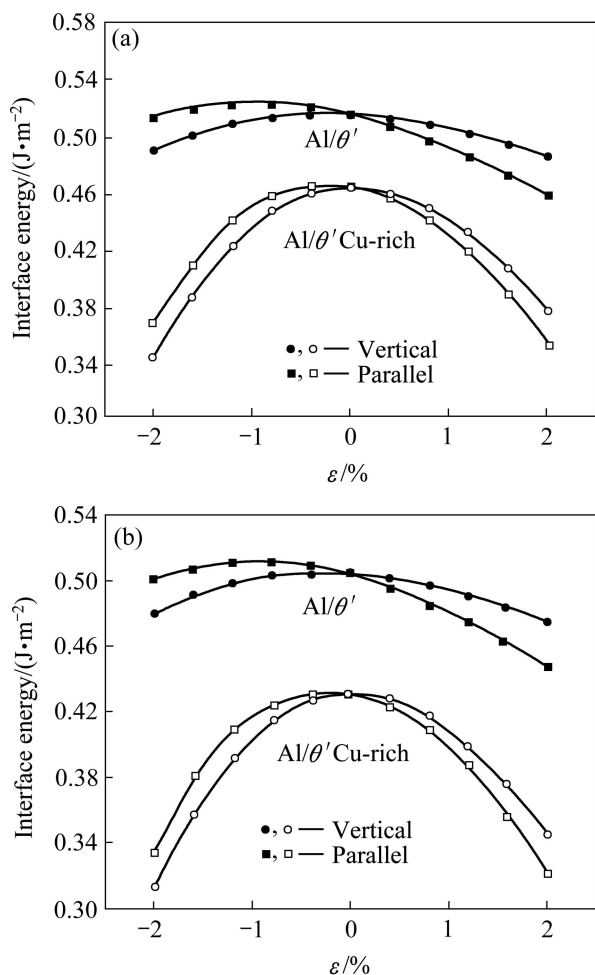


图4 不同时效温度下应变方式和方向对界面能的影响

Fig. 4 Effect of strain way and direction on interface energy at different temperatures: (a) 498 K; (b) 433 K

平行于界面时, 对 $\gamma_{\text{Al}/\theta'(\text{Cu-rich})}$ 和 $\gamma_{\text{Al}/\theta'}$ 的影响比较明显, 相比于垂直于界面方向的应变, 会更多地降低界面能。不同温度下都有同样的结果。在界面生长过程中新的界面不断产生, 但总界面能总是趋于最小, 因此, 界面能越低的界面越容易获得优先生长。据此, 根据计算的结果可以推断, 压缩(或拉伸)应变下, Al/θ'界面将更容易趋向于垂直(或平行)于外加应变方向。图5所示为不同应变条件下计算预测的 Al-Cu 合金中析出相 θ' 可能出现的择优生长现象: 即压缩应力时效时, 有利于析出垂直于应力轴方向的 θ' 相; 而拉伸应力时效时, 有利于析出平行于应力轴方向的 θ' 析出相。这一推断与大量的应力时效实验结果完全吻合, 特别是 ZHU 等^[7]针对 Al-Cu 合金单晶所开展的一系列应力时效实验。

至此, 借助以上计算结果和讨论, 对于应变(应力)时效机制以及时效过程中观察到的应力取向现象, 能够从界面角度给出一定程度的理论解释: 温度升高促使界面能增大, 导致 Al/θ'共格界面稳定性下降, 也不利于 Al/θ'共格界面形成。而外加应变场的作用, 与温度对界面的影响刚好相反, 即在应力应变(应力)时效过程中由于应变的作用, 可以降低 Al/θ'界面能, 从而促进 θ' 相的析出和稳定; 由于压缩和拉伸应变对 θ' 相界面能的影响程度不同, 即压缩应变条件下, 垂直于应变方向的界面能更容易减小, 而拉伸应变条件下, 平行应变方向的界面能更容易减小, 最终促使 θ' 相在压缩应变时效时趋于沿垂直应力轴方向析出, 在拉伸应变时效时趋于沿平行应力轴方向析出。

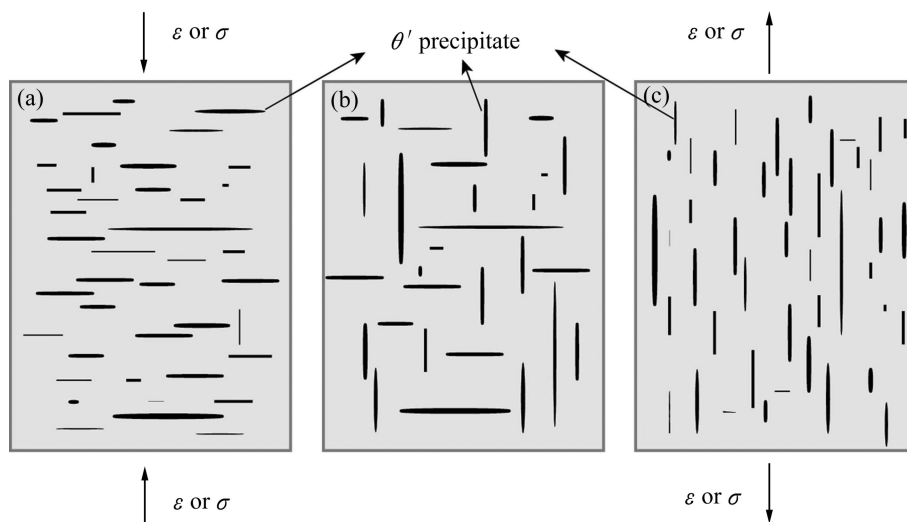


图5 不同应力、应变下析出相 θ' 的择优取向示意图

Fig. 5 Preferential orientation of precipitate θ' under different strain and stress: (a) Compressive; (b) Without strain and stress; (c) Tensile

3 结论

1) 应变(应力)时效条件下, Al-Cu 合金中 Cu 活度因子 γ_{Cu} 同时受到温度和应变的直接影响: γ_{Cu} 总是随温度的升高而增大, 而给定温度下, γ_{Cu} 随着应变的增加而增大; 随着应变 ε 增加, γ_{Cu} 对温度的敏感性下降。同样地, 随着温度增加, γ_{Cu} 对应变量的敏感性也下降; 提高温度和应变量均可提高 Cu 活度, 但两者对 Cu 活度的影响效果成竞争性抵消。

2) 温度和应变对 Al/ θ' 界面能的作用效果相反, $\gamma_{\text{Al}/\theta'}$ 随温度的升高而增大, 随应变的增加而减小。温度升高, Al/ θ' 共格界面稳定性降低, 不利于 Al/ θ' 共格界面形成, 而外加应变场的作用可以抵消温度效应, 降低 Al/ θ' 界面能, 从而促进 θ' 相析出。

3) 相同应变条件下, 始终有 $\gamma_{\text{Al}/\theta'(\text{Cu-rich})} < \gamma_{\text{Al}/\theta'}$, 即在时效析出过程中, 富铜 θ' 相界面更容易形成, 与常规时效的最新 HRTEM 观测分析结果吻合。由于这一结论不受应变条件影响, 由此可以预见, 应变(应力)时效过程中富铜 θ' 相也同样更容易析出。

4) Al-Cu 合金在应变(应力)时效过程中出现第二相择优析出和生长, 其主要机理在于不同应变方式对不同位向的界面的界面能影响作用不同。受压缩应变下, 由于垂直于应变方向的界面能降低较多, 故有利于 θ' 相沿垂直应力轴方向析出和长大; 而拉伸应变下, 平行应变方向的界面能降低较多, 故有利于 θ' 相沿平行应力轴方向析出和长大。

REFERENCES

- [1] HARDY H K, HEAL T J. Report on precipitation[J]. Progress in Metal Physics, 1954, 5: 143–278.
- [2] FRANK W G, MARTHA G. Precipitation hardening in the first aerospace aluminum alloy: The wright flyer crankcase[J]. Science, 1994, 266(5187): 1015–1017.
- [3] SON S K, TAKEDA M, MITOME M, BANDOB Y, ENDO T. Precipitation behavior of an Al-Cu alloy during isothermal aging at low temperatures[J]. Materials Letters, 2005, 59(6): 629–632.
- [4] TAKEDA M, MAEDA Y, YOSHIDA A, YABUTA K, KONUMA S, ENDO T. Discontinuity of G.P.(I) zone and θ' phase in an Al-Cu alloy[J]. Scripta Materialia, 1999, 41(6): 643–649.
- [5] HOSFORD W F, AGRAWAL, SUPHAL P. Effect of stress during aging on the precipitation of θ' in Al-wt Pct Cu[J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 1975, 6(3): 487–491.
- [6] ETO T, NACHI M, MORI T. Study of G. P. zones in Al-Cu alloys by stress aging[J]. Transactions of the Japan Institute of Metals, 1979, 20(8): 459–467.
- [7] ZHU A W, STARKE Jr E A, JR. Stress aging of Al-xCu alloy: Experiments[J]. Acta Materialia, 2001, 49(12): 2285–2295.
- [8] HARGARTER H, LYTTLE M T, STARKE E A. Effects of preferentially aligned precipitates on plastic anisotropy in Al-Cu-Mg-Ag and Al-Cu alloys[J]. Materials Science and Engineering A, 1998, 257(1): 87–99.
- [9] ZHU A W, STARKE Jr E A. Stress aging of Al-Cu alloys: Computer modeling[J]. Acta Materialia, 2001, 49(15): 3063–3069.
- [10] HOSFORD W F, AGRAWAL S P. Authors' reply[J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 1976, 7(5): 771–772.
- [11] SANKARAN R. Discussion of effect of stress during aging on the precipitation of theta prime phase in Al-4Cu wt Pct Cu[J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 1976, 7(5): 770–771.
- [12] LI D Y, CHEN L Q. Computer simulation of stress-oriented nucleation and growth of θ' precipitates in Al-Cu alloys[J]. Acta Materialia, 1998, 46(8): 2573–2585.
- [13] LI D Y, CHEN L Q. Selective variant growth of coherent precipitate under external constraints[J]. Journal of Phase Equilibria and Diffusion, 1998, 19(6): 523–528.
- [14] CHENG K Y, JO C Y, HU Z Q. Influence of applied stress on the γ' directional coarsening in a single crystal superalloy[J]. Materials and Design, 2010, 31(2): 968–971.
- [15] ZHANG W, SMITH J R, EVANS A G. The connection between ab initio calculations and interface adhesion measurements on metal/oxide systems: Ni/Al₂O₃ and Cu/Al₂O₃[J]. Acta Materialia, 2002, 50(15): 3803–3816.
- [16] JIANG Yong, SMITH J R, EVANS A G. First principles assessment of metal/oxide interface adhesion[J]. Applied Physics Letter, 2008, 92(14): 141918.
- [17] SMITH J R, JIANG Yong, EVANS A G. Adhesion of the gamma-Ni(Al)/alpha-Al₂O₃ interface[J]. International Journal of Materials Research, 2007, 98(12): 1214–1221.
- [18] LAN Gong-qiang, JIANG Yong, YI Dan-qing, LIU Shao-jun. Theoretical prediction of impurity effects on the internally oxidized metal/oxide interface: The case study of S on Cu/Al₂O₃[J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2012, 14(31): 11178–11184.
- [19] KRESSE G, FURTHMULLER J, <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/vasp/vasp.html>.
- [20] MURRAY J L. The aluminium-copper system[J]. International Metals Reviews, 1985, 30(5): 211–233.
- [21] BOURGEOIS L, DWYER C, WEYLAND M, NIE Jian-feng, MUDDLE B C. Structure and energetics of the coherent interface between the θ' precipitate phase and aluminium in Al-Cu[J]. Acta Materialia, 2011, 59(18): 7043–7050.
- [22] 江勇. 基于第一性原理揭示活性元素钬对热障涂层关键界面的强化机理[J]. 中国有色金属学报, 2011, 21(6): 1463–1472.
- [23] JIANG Yong. Strengthening mechanisms of reactive element Hf on key interface in thermal barrier coating systems based on first-principles[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2011, 21(6): 1463–1472.
- [23] JIANG Yong, SMITH J R, EVANS A G. Temperature dependence of the activity of Al in dilute Ni(Al) solid solutions[J]. Physical Review B, 2006, 74(22): 224110.

(编辑 李艳红)