

Ru 合金化 Ni/Ni₃Al 相界断裂功的第一原理计算

陈 律^{1,2}, 彭 平¹, 湛建平², 田泽安¹, 韩绍昌¹

(1. 湖南大学 材料科学与工程学院, 长沙 410082;

2. 长沙航空职业技术学院 航空装备工程系, 长沙 410124)

摘 要: 采用第一原理赝势平面波方法计算了 Ru 合金化前后 γ -Ni/ γ' -Ni₃Al 相界的电子与能态结构, 并比较强化元素 Ru 分别占据不同亚点阵位时对相界断裂强度的影响。结果表明: Ru 置换 Ni/Ni₃Al 相界区域中的 Ni 或 Al 原子, 都可明显提高 Ni/Ni₃Al 相界的断裂强度; 尤其以 Ru 置换 γ -Ni/ γ' -Ni₃Al 相界面层的 Al 原子时, 对相界的强化效果最好。电子态密度与电子密度分布图的分析结果显示: Ru 合金化对 γ -Ni/ γ' -Ni₃Al 相界的强化可归因于 Ru 与其最近邻 Ni 原子间强烈的电子相互作用引起的相界区域层间原子价键强度的增强。

关键词: γ -Ni/ γ' -Ni₃Al 相界; 合金化效应; 第一原理计算; 断裂功

中图分类号: TG 132.33

文献标识码: A

First-principles calculation on rupture work of Ni/Ni₃Al interface with Ru addition

CHEN Lü^{1,2}, PENG Ping¹, ZHAN Jian-ping², TIAN Ze-an¹, HAN Shao-chang¹

(1. School of Materials Science and Engineering, Hunan University, Changsha 410082, China;

2. Department of Aeronautical Equipment Engineering, Changsha Aeronautical Vocational and Technical College, Changsha 410124, China)

Abstract: Using the first principles plane-wave pseudopotential method, the energetic and electronic structure of Ni/Ni₃Al interface with Ru addition were calculated. The Griffith rupture works W of Ni/Ni₃Al interface with Ru addition demonstrate that the substitution of Ru atom for either Ni atom or Al atom is profitable to improve the rupture strength of the interface. Among which the replacement of Ru for Al at the Ni/Ni₃Al interfacial layer is the best. The analysis of electron densities of states (DOS) and the distributions of valence electron densities of Ni/Ni₃Al interface reveal that the electronic interaction between the first nearest neighbor (FNN) Ru-Ni atoms is stronger than that between FNN Ni-Al atoms, and the overlapping electron numbers within the interlayer on the Ni/Ni₃Al interface with Ru addition increase, compared with the interface without Ru addition. The strengthening effect of Ru on the rupture strength of γ -Ni/ γ' -Ni₃Al interface can be attributed to the enhancement of the interlayer bonding, which is induced by the strong interaction between the Ru-Ni atoms.

Key words: γ -Ni/ γ' -Ni₃Al interface; alloying effect; first-principle calculation; rupture work

Ni 基单晶超合金是目前发现的服役温度最高的一类高温合金, 是发展先进航空发动机涡轮盘与涡轮叶片的首选材料。其结构主要是由具有 L1₂-Ni₃Al 有序金属间化合物结构的 γ' 析出相共格沉淀在具有

Fcc-Ni 固溶体结构的 γ 基体上构成, 而合金化则一直是此类合金得以发展的一个主要方法。随着人们对其结构性能间关系认识的深入, Ni 基单晶超合金研发已取得很大的进展, 以 Ru 部分取代 Re 为标志, 已经开

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(50771044); 湖南省科技计划资助项目(06FJ4117); 湖南省教育厅科学研究资助项目(06D002)

收稿日期: 2007-07-27; 修订日期: 2008-01-15

通讯作者: 彭 平, 教授, 博士; 电话: 0731-8821610; E-mail: ppeng@hnu.cn

发出第四代单晶超合金^[1]。

实验上, ALCHEMI 的分析结果^[1]表明: 60% 以上的 Ru 富聚在 γ' -Ni₃Al 相区占据 Al 点阵位, 余下的不足 40% 的 Ru 分散在 γ' -Ni₃Al 相或 γ -Ni 相区占据 Ni 点阵位。虽然 Ru 合金化的强韧效果已得到证实^[1], 但其作用机理却不是很清楚。由于第一原理计算能从原子与电子结构层次上揭示材料微结构区域的强韧化特性, 所以, 近年来很多作者^[2-6]针对 γ -Ni 与 γ' -Ni₃Al 相及 γ -Ni/ γ' -Ni₃Al 相界的合金化效应进行了研究, 如 LIU 等^[2]采用分子轨道理论 DV-X α 方法考察了 B, P, C, O 和 N 等痕量元素对 Ni/Ni₃Al 团簇模型相界结合强度的影响, CHEN 等^[3-6]则进一步采用基于密度泛函理论的 DMol 程序, 计算了 Mo, W, Nb 等单独合金化、Re 和 Ru 及 Re 和 S 复合合金化时 Ni/Ni₃Al 团簇模型的电子结构和价键特性, 并通过层内与层间原子的重叠聚居数分析, 表征和考察了掺杂与合金化前后 Ni/Ni₃Al 相界的剪切强度与区域韧性。本课题组采用超胞模型, 运用赝势平面波方法 CASTEP 程序, 对 γ -Ni/ γ' -Ni₃Al 界面结构特性进行过研究^[7-10], 计算了 P 和 B 掺杂^[8]、Re 单独合金化^[9]、Re 与 Ru 复合合金化^[10]对 Ni/Ni₃Al 界面断裂强度与脆化特性的影响, 并从电子与价键结构上对其强韧化机制进行了分析。考虑到现有研究在考察 Ni/Ni₃Al 相界合金化时缺乏对 Ru 合金化的系统研究, 即仅仅考察和分析了 Ru 在 γ' -Ni₃Al 相区占 Al 点阵位这种主要位置时对 Ni/Ni₃Al 相界性能的影响及其机制, 而没有考察其 40% 的原子占 γ' -Ni₃Al 相或 γ -Ni 相中 Ni 点阵位时的情形, 为此, 本文作者分别考察 Ru 占 γ -Ni 相或 γ' -Ni₃Al 相中不同亚点阵位时对 Ni/Ni₃Al 相界强化特性的影响, 并从电子结构层次上对 Ru 强韧化作用机制进行初步分析。

1 计算模型与方法

1.1 计算方法

计算采用 CASTEP 总能计算软件包。CASTEP 是基于密度泛函理论的第一原理赝势平面波方法^[11]。采用周期性边界条件, 晶体波函数由平面波基组展开。在这里, 交换-关联能采用局域密度近似(LDA), 赝势采用倒空间表述的 Cepeley-Alder 超软(ultrasoft)赝势^[12]。计算之前, 简单测试了 Ni₃Al 中 Ni 和 Al 的赝势, 测试结果见表 1。与平衡晶格常数、形成热与体模量的计算值与实验值符合较好。动能截断点取 330.0 eV, 使用基集修正^[13], 应用 Pulay 密度混合法^[14]。计

算之前, 先用 Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno(BFGS)方法^[15]进行几何优化。自洽计算(SCF)时, 体系总能量收敛值取 1.0×10^{-3} eV/atom, 每个原子上的力低于 1 eV/nm, 公差偏移小于 5.0×10^{-3} nm, 应力偏差小于 0.2 GPa。

表 1 Ni₃Al 中 Ni 和 Al 赝势测试结果

Table 1 Test results of ultrasoft pseudopotentials of Ni and Al in Ni₃Al

Research	Lattice constant/nm	Heat of formation/(eV·atom ⁻¹)	Bulk modulus/Mbar
This work	0.357	2.27	2.20
TB-LMTO ^[16]	0.351	2.20	1.46
AE-LMTO ^[17]	0.355	1.94	2.10
Expt. ^[16-17]	0.357	1.59-1.62	2.40

1.2 相界计算模型

假定基体 γ 与析出相 γ' 完全共格, 基于 HARADA 等^[18]的 AP/FIM 分析结果, 依据本课题组对 Ni 与 Ni₃Al 单晶表面模型的测试结果^[10], 以 γ -Ni 与 γ' -Ni₃Al 公共原子层 {002} 为界面构造 Ni/Ni₃Al 超胞模型(如图 1(a)所示)。超胞晶格常数 $a = (a_{\text{Ni}} + a_{\text{Ni}_3\text{Al}})/2$ 。模型由 9 个 Ni 原子层与 7 个 Ni₃Al 原子层组成^[10], 包含 64 个原子和 2 个对称相界, 如图 1(a)所示, 其中 (001) γ , (001) γ' 和 (002) γ/γ' 分别表示 γ -Ni 相区与 γ' -Ni₃Al 相区中 (001) 原子层和 γ -Ni/ γ' -Ni₃Al 相界共格 (002) 原子层。忽略 2 个相邻相界之间的相互作用。由于 (002) 原子层既可看成 fcc-Ni 相的表面, 也可看作 L1₂-Ni₃Al 相的表面, 因此, 上述模型存在如下 2 种取向关系, 即: (002) γ //(001) γ' 和 (001) γ //(002) γ' 。相应地, 存在如下 4 个表面模型, 即: γ -Ni 相 (002) 与 γ' -Ni₃Al 相 (001) 表面模型和 γ -Ni 相 (001) 与 γ' -Ni₃Al 相 (002) 表面模型(见图 1(b)和图 1(c))。考虑到先前的实验研究结果^[1], 60% 以上的 Ru 占据 γ' -Ni₃Al 相区的 Al 原子位, 由此推断, 余下 40% 左右的 Ru 势必分散在 γ' -Ni₃Al 相或 γ -Ni 相中的 Ni 点阵位, 为此本文进一步构造了 7 个 Ru 单独合金化的相界模型(如图 1(a)所示), 即 Ru 占 a 位(Ru \rightarrow a)的 Model-2, Ru 占 b 位(Ru \rightarrow b)的 Model-3, Ru 占 c 位(Ru \rightarrow c)的 Model-4, Ru 占 d 位(Ru \rightarrow d)的 Model-5, Ru 占 e 位的(Ru \rightarrow e)的 Model-6, Ru 占 f 位的(Ru \rightarrow f)的 Model-7 和 Ru 占 g 位的(Ru \rightarrow g)的 Model-8, 并且基于对称性的考虑, 在所有的合金化模型中, 合金化原子均对称分布在 2 个相界区域内。

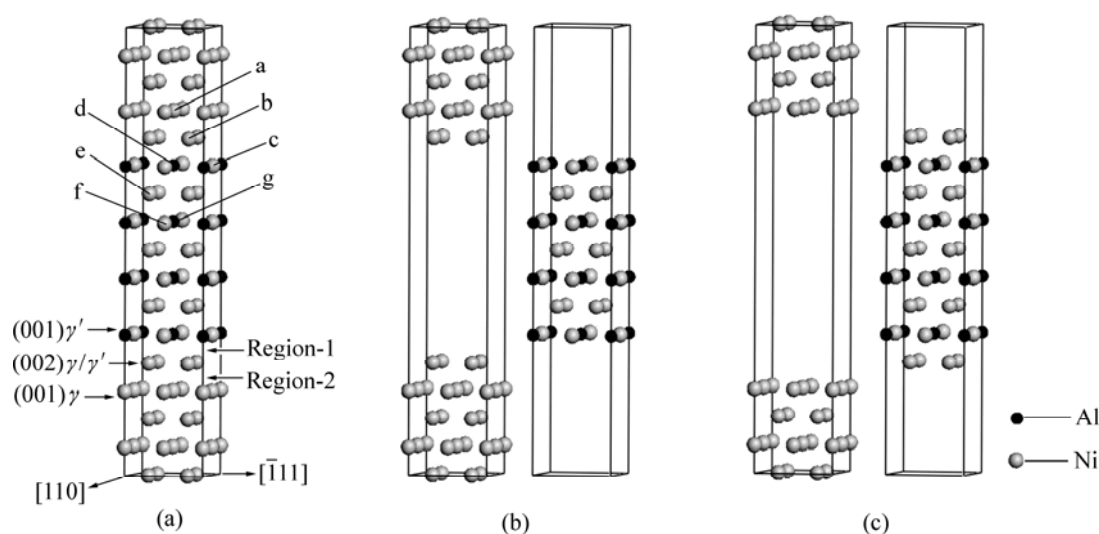


图1 计算模型示意图

Fig.1 Schematic diagram of calculation models: (a) Ni/Ni₃Al interface models, a, b, c, f denote Ni atom and d, g denote Al atom; (b) Ni(002) and Ni₃Al(001) surfaces; (c) Ni(001) and Ni₃Al(002) surfaces

2 结果与讨论

2.1 Ni/Ni₃Al 相界的 Griffith 断裂功

为了考查 Ru 合金化对 Ni/Ni₃Al 相界结合强度的影响, 本模拟采用下式计算了 Ni/Ni₃Al 相界合金化前后相界断裂功^[19]:

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

式中 S_i 为共格相界面积; $E_i(n, m, l)$ 为 γ/γ' 相界模型的总能量; $E_s^\gamma(n_\gamma, m_\gamma, l_\gamma)$ 与 $E_s^{\gamma'}(n_{\gamma'}, m_{\gamma'}, l_{\gamma'})$ 分别为 γ 相和 γ' 相表面模型的总能量; n , m 和 l 分别表示 Ni, Al 和 Ru 原子的个数, 且 $n = n_\gamma + n_{\gamma'}$, $m = m_\gamma + m_{\gamma'}$, $l = l_\gamma + l_{\gamma'}$ 。

表 2 所示为 Ru 合金化前后 Ni/Ni₃Al 相界模型及其相关表面模型的总能量和基于式(1)计算的 Ni/Ni₃Al 相界 Griffith 断裂功。考虑到 Ni/Ni₃Al 相界模型存在两种取向关系, 因此, 有 2 个相间断裂位置, 如图 1(a)所示: 其一发生在共格(002)原子层与 (001) γ' 原子层之间的相界区域(region-1), 其二为(001) γ 原子层与共格(002)原子层之间的相界区域 (region-2)。从表 2 可看出, 合金化前, Ni/Ni₃Al 相界 region-1 的断裂功比 region-2 的小, 表明 region-1 的键合强度比 region-2 的弱。由于断裂通常发生在材料键合最弱的区域, 因

此, region-1 的 Griffith 断裂功(4.862 J/m²)即为纯净 Ni/Ni₃Al 相界的断裂强度^[10]。

类似地, 对 Ru 合金化后 Ni/Ni₃Al 相界的结合强度进行分析。比较可见, Ru 占 a 位(Ru→a), Ru 占 b 位(Ru→b), Ru 占 e 位(Ru→e), Ru 占 f 位(Ru→f)和 Ru 占 g 位(Ru→g)的 Ni/Ni₃Al 相界键合比较弱的区域仍为 region-1(见表 2), 但断裂强度发生了改变。与 Ru 合金化前相比, Ru→a, Ru→b, Ru→e, Ru→f 和 Ru→g 模式的断裂强度(分别为 5.349, 5.275, 5.438, 5.232 和 5.523 J/m²)分别增加 0.487, 0.413, 0.576, 0.37 和 0.661 J/m², 其中合金强化效果最好的模式为 Ru→g(Ru 代 g 位的 Al 原子, 见图 1)。其余 2 种 Ru 合金化模式(Ru→c 和 Ru→d)的 Ni/Ni₃Al 相界键合比较弱的区域转变为 region-2(见表 2), Ru→c 与 Ru→d 的合金化模式较合金化前断裂强度也分别增加了 0.354 和 0.785 J/m², 其中合金化效果最好的模式为 Ru→d(Ru 代 d 位的 Al 原子, 见图 1)。由以上分析可见, Ru 置换 Ni/Ni₃Al 相界区域附近的 Ni 或 Al 原子位置, 都可提高 Ni/Ni₃Al 相界的断裂强度, 其中 Ru 置换 γ' -Ni₃Al 相的 Al 原子位置时, 对 Ni/Ni₃Al 相界合金强化效果很好, 其中尤以占据相界界面层 d 位时最有利。考虑到先前的实验研究结果: 60%以上的 Ru 占据 γ' -Ni₃Al 相区的 Al 原子位^[1], 可见, Ru 合金化 Ni/Ni₃Al 相界有利于提高 Ni/Ni₃Al 相界的断裂强度, 是一类可显著提高 Ni 基单晶合金高温强度的强化元素^[1, 10]。

表 2 Ni/Ni₃Al 相界超胞与相应表面模型的总能量 E_i , E_s 和相界截面积 S_i 及 Ni/Ni₃Al 相界的 Griffith 断裂功 W_i

Table 2 Total energies E_i and E_s of Ni/Ni₃Al interfacial supercells and their corresponding surface models, interfacial areas S_i and Griffith rupture works, W

Model	Site	E_i/eV	E_s^γ/eV	$E_s^{\gamma'}/\text{eV}$	S_i/nm^2	$W/(\text{J}\cdot\text{m}^{-2})$
No. 1 (No-addition)	Region-1	-75 964.719 7	-48 520.283 4	-274 29.570 4	0.244 9	4.862
	Region-2	-75 964.719 7	-37 736.135 3	-382 12.461 5	0.244 9	5.273
No. 2 (Ru→a)	Region-1	-78 470.812 7	-51 027.744 7	-274 26.159 9	0.253 2	5.349
	Region-2	-78 470.812 7	-40 243.014 7	-382 08.725 3	0.253 2	6.034
No. 3 (Ru→b)	Region-1	-78 470.872 1	-51 027.315 5	-274 26.848 3	0.253 7	5.275
	Region-2	-78 470.872 1	-37 733.545 1	-407 18.677 7	0.253 7	5.888
No. 4 (Ru→c)	Region-1	-78 470.626 0	-48 517.731 5	-299 35.880 3	0.252 8	5.391
	Region-2	-78 470.626 0	-37 733.773 5	-407 20.391 8	0.252 8	5.216
No. 5 (Ru→d)	Region-1	-81 047.834 0	-48 516.499 5	-325 12.197 1	0.242 4	6.073
	Region-2	-81 047.834 0	-37 733.055 0	-432 96.984 2	0.242 4	5.647
No. 6 (Ru→e)	Region-1	-78 469.158 3	-48 516.503 9	-299 35.443 1	0.253 5	5.438
	Region-2	-78 469.158 3	-37 733.001 8	-407 18.381 0	0.253 5	5.617
No. 7 (Ru→f)	Region-1	-78 470.484 3	-48 517.542 5	-299 36.376 9	0.253 6	5.232
	Region-2	-78 470.484 3	-37 733.727 4	-407 19.917 5	0.253 6	5.319
No. 8 (Ru→g)	Region-1	-81 047.476 4	-48 516.532 8	-325 13.582 1	0.251 8	5.523
	Region-2	-81 047.476 4	-37 733.143 2	-432 96.607 8	0.251 8	5.639

2.2 相界原子层的投射电子态密度

图 2 进一步示出 Ni/Ni₃Al 相界 Ru 合金化前后相界 region-1 与 region-2 附近(002) γ/γ' 、(001) γ 与(001) γ' 原子层的投射电子态密度(PDOS)。通过比较可见, Fermi 能级 E_F 附近的电子态密度 region-2 均比 region-1 的高, 同时, 还明显可见 Ru 合金化元素对 (001) γ 与(001) γ' 原子层投射电子态密度的影响。从图 2(a)不难看出, 对于 Ru→b 模式, 表 2 所列的 Ni/Ni₃Al 相界的强化可归因于 Ru 合金化诱导的 region-1 层间原子的电子相互作用在-5.5~-3.5 eV 低能区的显著增强, 而对于 Ru→d 合金化模式, region-2 层间成为断裂区, 是因为 region-1 层间原子的电子相互作用在-5~-3 eV 低能区显著增强, 使得表 2 中 Ru→d 合金化模式 region-1 层间断裂强度从 4.862 J/m² 提高到 6.073 J/m², 并超过 region-2 层间断裂强度(5.647 J/m²)。图 2(b)中, 对于 Ru→a 模式的 region-2 区域, 层间原子的电子相互作用在-5~-3 eV 低能区同样显著增强, 从而使得该层间断裂强度从合金化前的 5.273 J/m² 提高

到合金化后的 6.034 J/m², 超过 region-1 层间断裂强度 (5.349 J/m²), 成为非断裂区。但对其他合金化模式, Ru 对相界区域层间原子电子相互作用的影响则不太明显。为了比较 Ru 合金化前后相界区域层间原子键合强度的变化, 本文进一步计算了 region-1 与 Region-2 Fermi 能级 E_F 以下的重叠电子数, 结果如图 3 所示。图 3 显示: 合金化模型 No.2, No.3, No.6, No.7 与 No.7 region-1 层间原子的重叠电子数分别为 25.12, 25.02, 24.94, 24.95 与 25.62, 均比合金化前模型 No.1 相应层间原子的重叠电子数 24.76 大, 说明表 2 所示相应 Ru 合金化 Ni/Ni₃Al 相界的强化可归因于 Ru 合金化诱导的 region-1 层间原子的电子相互作用加强。合金化模型 Model-5 region-2 层间原子的重叠电子数为 45.98, 比合金化前 Model-1 相应层间原子的重叠电子数 40.08 大。由此可见, 出现表 2 所示相间断裂位置与断裂强度的结果很大程度上源于 Ru 合金化引起的 Ni/Ni₃Al 相界区域层间原子电子相互作用强度的改变。

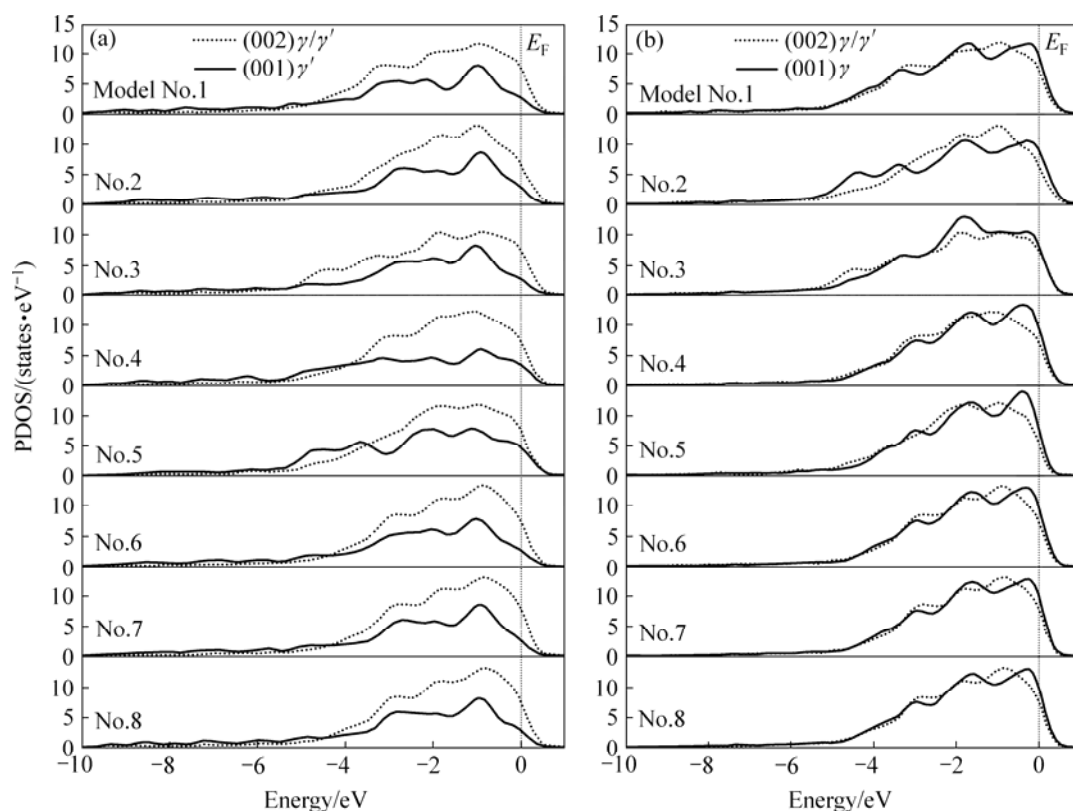


图 2 相界区域原子层的投射电子态密度

Fig.2 Projective densities of states (PDOS) of atomic layers in Ni/Ni₃Al interfacial models: (a) Region-1; (b) Region-2

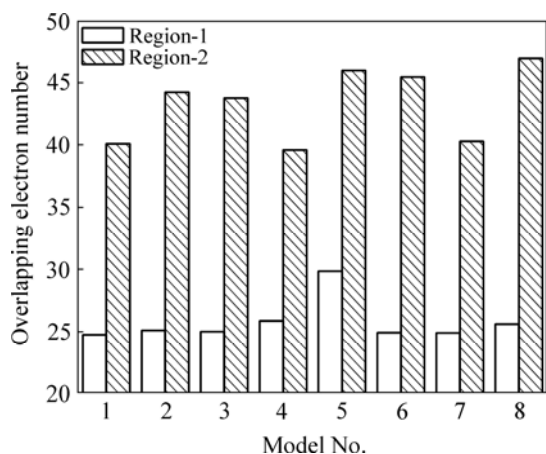


图 3 相界区域原子层间的重叠电子数

Fig.3 Overlapping electron numbers within first nearest neighbor atomic layers in Ni/Ni₃Al interface models

2.3 相界(010)截面的电子密度分布

为了进一步考察 Ni/Ni₃Al 相界区域价电子相互作用的方向性, 本文作者计算了合金化前 Model-1, Ru 合金化后 Model-3, Model-5 与 Model-8 模型(010)面的电子密度分布, 如图 4 所示。从图 4 可见: 合金化前 γ' -Ni₃Al 相中最近邻(FNN) Ni-Al 原子间的电子相互作用

用强于 γ -Ni 相中 FNN Ni-Ni 原子间的电子相互作用^[20], 并且明显可见因 FNN Ni-Al 原子间 p-d 电子杂化^[5]而导致(002) γ/γ' 原子层上 Ni-3d 电子的各向异性, 而对于 γ -Ni 相中的 Ni, 则由于其远离 γ' -Ni₃Al 相中的 Al, 因而其 FNN Ni-Ni 原子间的电子相互作用呈现出各向同性的特点。比较其 region-1 与 region-2 的电子密度分布, 图 4(a)清楚显示: region-2 价电子较多, region-1 价电子相对较少, 表明 region-2 的局域电子相互作用比 region-1 的强, 因此, 图 4(a)所示为表 2 所列的 Ni/Ni₃Al 相间断裂位置的直观图。

对于 Ru 合金化的情况, 从图 4 可见, Ru 合金化均使其局域电子密度富集, 与合金化前比较, 明显可见 FNN Ni-Ru 原子间价电子密度增加, 这表明: 其原子间的电子相互作用相对于 FNN Ni-Ni 与 Ni-Al 有所增强。对于 Ru→b 的合金化模式, 图 4(b)显示: FNN Ni-Ru 原子间连成一个“整体”, 价电子密度明显增强, 使 region-2 层间断裂功显著增强(5.273 J/m²→5.888 J/m²), 同时也强化了 region-1 断裂功(从 4.862 J/m²→5.275 J/m²)。相比之下, 相间断裂仍然为合金化前的 region-1。对于 Ru→d 的 Model-5 模式, 图 4(c)显示: Ru 合金化可使共格(002) γ/γ' 原子层与 (001) γ' 原子层

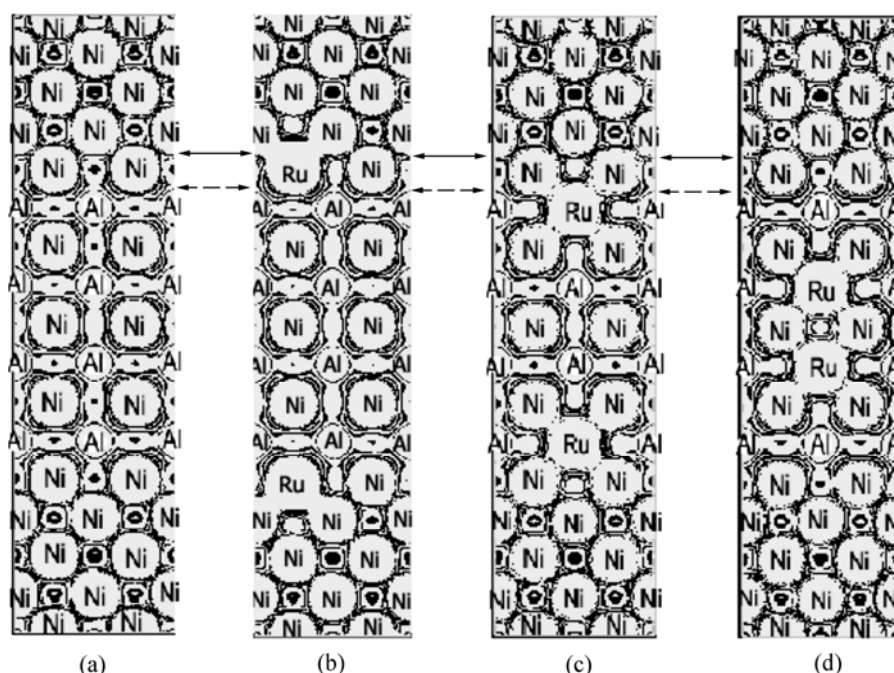


图 4 Ni/Ni₃Al 超胞模型(010)截面价电子密度分布图(注: 虚线箭头为 region-1, 实线箭头为 region-2)

Fig.4 Total valence charge density contour plots of (010) planes of Ni/Ni₃Al interfacial models with or without addition (Region indicated by dashed arrows is region-1; and that by solid arrows is region-2): (a) Model-1; (b) Model-3; (c) Model-5; (d) Model-8

结合得更加牢固, 因此, 需要施加更大的外力才能使其沿 γ' -Ni₃Al 相(001) γ' 原子层将 γ -Ni/ γ' -Ni₃Al 相界撕开, 从而导致表 2 所列的断裂功明显增加(4.862 \rightarrow 5.647 J/m²), 甚至这种强烈的相互作用还导致相间断裂从 region-1 变到 region-2。而对于 Ru \rightarrow g 的 Model-8 模式, 从图 4(d)可见, FNN Ru-Ni 原子间强烈的电子相互作用则主要是强化了 γ' -Ni₃Al 相区的结合, 因而, 相间断裂位置没有发生改变, 仍然为合金化前的 region-1, 只是因合金化而断裂强度有所提高。

3 结论

1) Ru 置换 Ni/Ni₃Al 相界区域附近的 Ni 或 Al 原子, 均可提高 Ni/Ni₃Al 相界的断裂强度, 证实 Ru 确实是一类可显著提高 Ni 基单晶合金高温强度的强化元素。当 Ru 置换 γ' -Ni₃Al 相界的 Al 原子时, 对相界的强化效应显著, 并以置换 γ -Ni/ γ' -Ni₃Al 相界面层的 Al 原子时, 对相界的强化效果最好。

2) 电子态密度与电子密度分布图的分析结果表明: Ru 合金化对 γ -Ni/ γ' -Ni₃Al 相界的强化可归因于 Ru 与其最近邻 Ni 原子间强烈的电子相互作用引起的相界区域层间原子价键相互作用的增强。

REFERENCES

- [1] OFORI A P, ROSSOUW C J, HUMPHREYS C J. Determining the site occupancy of Ru in the L1₂ phase of a Ni-base superalloy using ALCHEMI[J]. *Acta Mater*, 2005, 53(1): 97–110.
- [2] LIU Y, CHEN K Y, LU G, et al. Impurity effects on the Ni/Ni₃Al interface cohesion[J]. *Acta Mater*, 1997, 45(5): 1837–1849.
- [3] CHEN K Y, ZHAO L R, TSE J S. A first-principles survey of γ/γ' interface strengthening by alloying elements in single crystal Ni-base superalloys[J]. *Mater Sci Eng A*, 2004, 365(1/2): 80–84.
- [4] CHEN K Y, ZHAO L R, TSE J S. Synergetic effect of Re and Ru on γ/γ' interface strengthening of Ni-base single crystal superalloys[J]. *Mater Sci Eng A*, 2003, 360(1/2): 197–201.
- [5] TSE J S, ZHAO L R, CHEN K. Atomic mechanism of the Re and Ru strengthening effect on the gamma-gamma' interface of Ni-based single-crystal superalloys: a first-principles study[J]. *Pilots Mag*, 2003, 83: 1685–1698.
- [6] CHEN K Y, ZHAO L R, TSE J S. Sulfur embrittlement on γ/γ' interface of Ni-base single crystal superalloys[J]. *Acta Mater*, 2003, 51(4): 1079–1086.
- [7] PENG P, JIN Z H, YANG R, HU Z Q. First-principles study of effect of lattice misfit on the bonding strength of Ni/Ni₃Al interface[J]. *J Mater Sci*, 2004, 39(12): 3957–3963.
- [8] PENG P, ZHOU D W, LIU J S, YANG R, HU Z Q. First-principles study of the properties of Ni/Ni₃Al interface

- doped with B or P[J]. *Mater Sci Eng A*, 2006, 416(1/2): 169–175.
- [9] PENG P, SOH A K, YANG R, HU Z Q. First-principles study of effect of Re addition on the strength and toughness of γ/γ' interface in Ni-based superalloy[J]. *Comput Mater Sci*, 2006, 38(2): 354–361.
- [10] 彭 平, 陈 律, 周惦武, 田泽安, 韩绍昌, 金 涛, 胡壮麒. 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.
- PENG Ping, CHEN Lü, ZHOU Dian-wu, TIAN Ze-an, HAN Shao-chang, JIN Tao, HU Zhuang-qi. A first-principles study on electron structures of Ni/Ni₃Al interfaces with Re and Ru addition[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2007, 43(2): 137–143.
- [11] SEGALL M D, LINDAN PHILIP J D, PROBERT M J, PICKARD C J, HASHIP P J, CLARK S J, PAYNE M C. First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code[J]. *J Phys: Condens Matter*, 2002, 14(11): 2717–2744.
- [12] VANDERBILT D. Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigen value formalism[J]. *Phys Rev B*, 1990, 41(11): 7892–7895.
- [13] FRANCIS G P, PAYNE M C. Finite basis set corrections to total energy pseudopotential calculations[J]. *J Phys: Condens Matter*, 1990, 2(19): 4395–4404.
- [14] PULAY P. Ab initio calculation of force constants and equilibrium geometries in polyatomic molecules(I)—Theory[J]. *Mol Phys*, 1969, 17(2): 197–204.
- [15] FISCHER T H, ALMLOF J. General methods for geometry and wave function optimization[J]. *J Phys Chem*, 1992, 96(24): 9768–9774.
- [16] RAVINDRAN P, SUBRAMONIAM G, ASOKAMANI R. Ground-state properties and relative stability between the L1₂ and DO₁₉ phases of Ni₃Al by Nb substitution[J]. *Phys Rev B*, 1996, 53(3): 1129–1137.
- [17] XU Jian-hua, MIN B I, FREEMAN A J, OGUCHI T. Phase stability and magnetism of Ni₃Al[J]. *Phys Rev B*, 1990, 41(8): 5010–5016.
- [18] HARADA H, ISHIDA A, BHADESHIA H K D H, YAMAZAKI M. Atom-probe microanalysis of a nickel-base single crystal superalloy[J]. *Appl Surf Sci*, 1993, 67(1/4): 299–304.
- [19] HU Q M, YANG R, XU D S, HAO Y L, LI D. Energetics and electronic structure of grain boundaries and surfaces of B- and H-doped Ni₃Al[J]. *Phys Rev B*, 2003, 67(22): 224203–224212.
- [20] FU C L, YOO M H. Electronic structure and mechanical behavior of transition-metal aluminides: A first-principles total-energy investigation[J]. *Mater Chem Phys*, 1992, 32(1): 25–36.

(编辑 龙怀中)