

[文章编号] 1004- 0609(2002)02- 0205- 08

无序 hcp $\text{Ti}_x\text{Al}_{(1-x)}$ 合金的单原子操纵设计^①

谢佑卿, 彭 坤, 刘心笔, 杨昕昕, 邓永平

(中南大学 材料科学与工程系, 粉末冶金国家重点实验室, 长沙 410083)

[摘 要] 依据 hcp Ti-Al 系的特征原子和特征晶体序列的结构参数和性质, 应用计算机技术进行无序 hcp $\text{Ti}_x\text{Al}_{(1-x)}$ 合金单原子操纵设计, 求得它们的电子结构参数、晶体结构参数、物理性质和热力学性质, 并存入信息库中, 为复杂合金的设计、制备和应用提供基础资料。

[关键词] Ti-Al 系; 电子结构; 晶体结构; 物理性质; 热力学性质

[中图分类号] TG 111

[文献标识码] A

合金是具有组织、相和原子 3 个结构层次的复杂系统。“能”和“形”是合金的基本属性。从能量观点出发, 与 3 个结构层次相对应的理论分别是宏观热力学、统计热力学和能带理论; 从形态出发, 相对应的理论分别是金相学、晶体学和价键理论。在思维方式上从局部分析思维向整体系统式思维转变, 在方法学上分析和综合相结合, 实现原子结构、相结构、组织结构和性质的理论大综合, 发展材料信息科学、材料计算机设计科学、材料制备和应用科学, 是 21 世纪材料科学发展的最大任务。

1 金属材料系统科学(SSMM)框架

经过近 20 年的研究, 作者建立了一个适用的 SSMM 框架(如图 1 所示), 它包含了系统的创新内容。

1.1 纯金属系统科学(SSPM)框架

SSPM 框架的创新点是:

- 1) 由基于第一原理的纯金属单电子(OE)理论(采用 $DV-X_\alpha$ 法^[1])和新建立的纯金属单原子(OA)理论相互参照确定纯金属的电子结构;
- 2) 新建描述原子电子结构与晶体结构几何关系的“晶格常数方程”^[2], 原子间能量关系的“固体中多原子相互作用(MAI)势能函数”^[3];
- 3) 由 MAI 势导出了体弹性模量、弹性模量、切变模量、热膨胀系数与微观量的关系式^[2];
- 4) 纯金属系统科学是多种理论的有机综合, 它能给出合金相初始单质自然态和非自然态的电子结构参数、晶体结构参数、物理性质和热力学性质^[4~6]。

1.2 合金物理化学(PCA)框架

合金具有如下特点: 1) 合金是组元成分连续可变的系统; 2) 合金中原子的排布可以是无序、偏聚、部分有序和完全有序。因此在微观上, 除完全有序合金以外, 其它合金不具有晶体的基本属性——对称性和周期性, 只是平均意义上的晶体。为此构建了以纯金属系统科学的基础、4 个相互关联的新模型为主要内容的 PCA 框架(如图 2 所示)。

1.3 合金统计热力学(SAT)框架

纯金属系统科学, 合金物理与化学新框架与传统的热力学原理相结合构建了合金统计热力学的新框架, 如图 5 所示。

① [基金项目] 湖南省自然科学基金资助项目(99JZY 1005); 高等学校博士学科点专项科研基金资助课题(1998053309)

[收稿日期] 2001- 02- 26; [修订日期] 2001- 06- 30

[作者简介] 谢佑卿(1937-), 男, 教授。

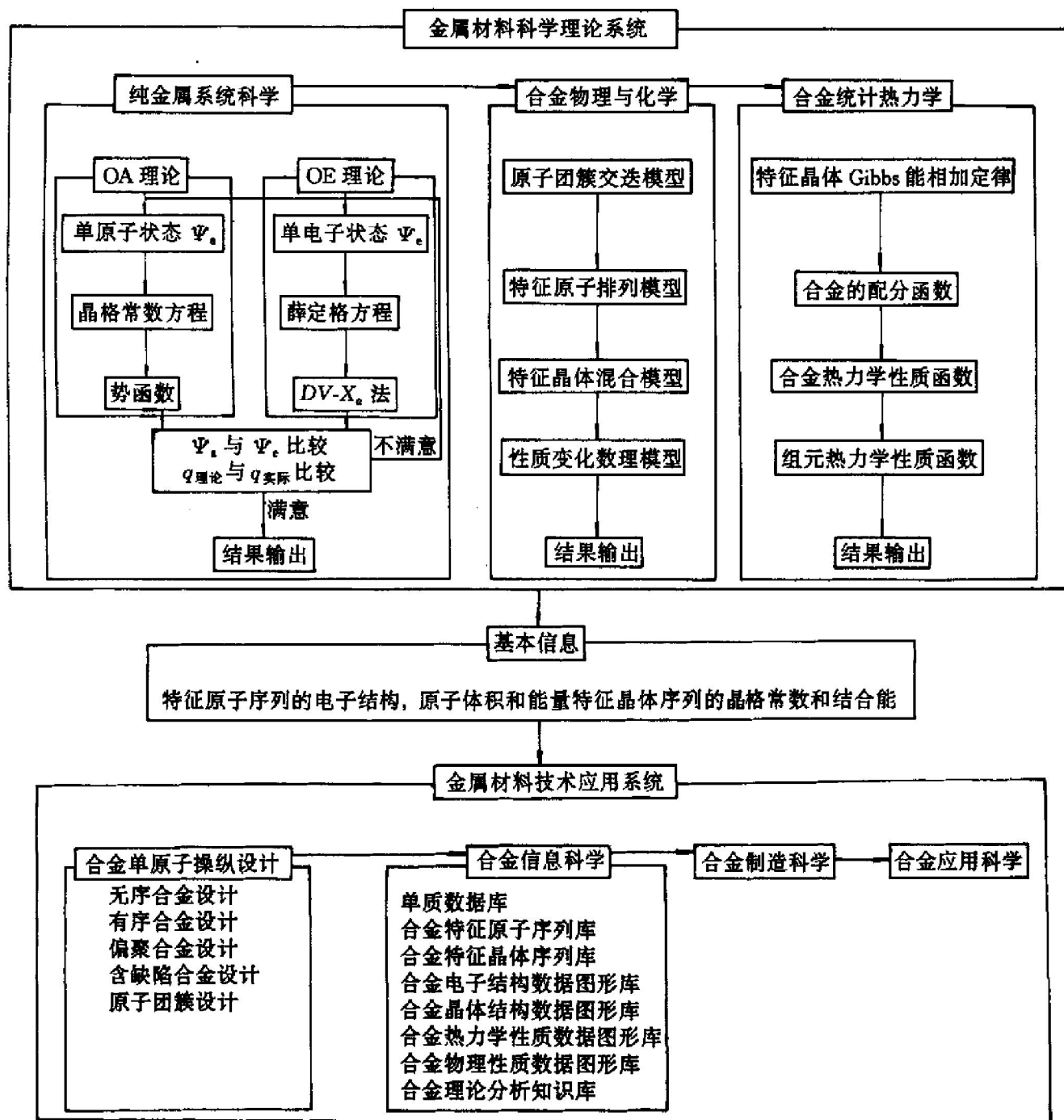


图 1 金属材料系统科学框架

Fig. 1 SSMM framework

2 hcp Ti-Al 系中的特征原子和特征晶体序列

与生物体中基因序列相类似, 基本原子团序列和相应的特征原子序列决定合金的结构和性质。由金属材料科学理论系统已求得 hcp Ti-Al 系的基本信息: 特征原子序列 $\Psi_0^{Ti} \dots \Psi_i^{Ti} \dots \Psi_{12}^{Ti}$, $\Psi_0^{Al} \dots \Psi_i^{Al} \dots \Psi_{12}^{Al}$ 和相应特征晶体序列的电子结构参数、原子体积 V 、结合能 E_c 、体弹性模量 B 、单键半径 R 和室温热膨胀系数 α (见表 1 和表 2)。(i 为特征原子序数, s_f , s_c , d_f , d_c , d_n 分别为 s , d 轨道的近自由电子, 共价电子和非键电子)。

3 无序 hcp $Ti_xAl_{(1-x)}$ 合金的单原子操纵设计

合金单原子操纵(SAM)计算机设计的步骤是: 1) 按照设计要求在 Bravais 格点上排列原子; 2) 按照基

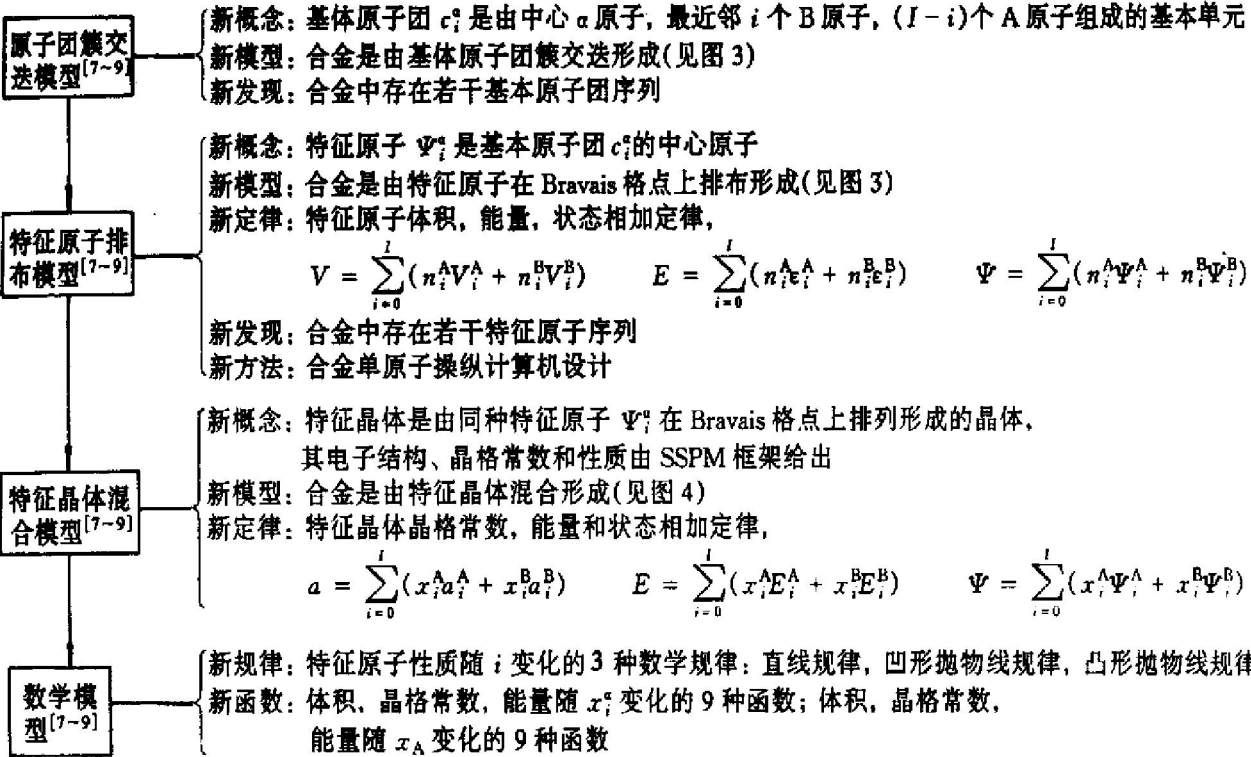


图 2 合金物理与化学框架

Fig. 2 Physical and chemical framework of alloys

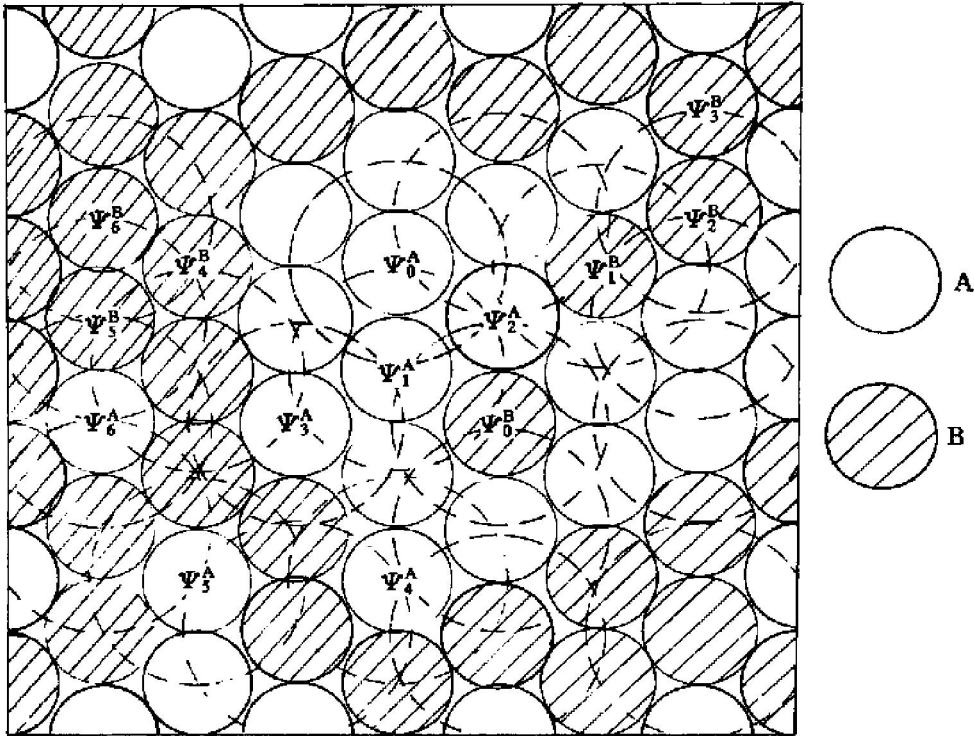


图 3 合金的原子团簇交迭模型和特征原子排布模型

Fig. 3 Atomic cluster overlapping pattern and characteristic atomic arrangement pattern of alloy

本原子团簇和特征原子的定义, 用 Ψ_i^A 和 Ψ_i^B 标记每个原子; 3) 依据设计体中特征原子含量(x_i^A 和 x_i^B) 或特征原子数(n_i^A 和 n_i^B), 特征原子序列和特征晶体序列的结构参数、性质和金属材料的科学理论系统求得设计体的结构参数和性质。

应用 SAM 法可进行无序合金^[10]、有序合金^[11]、化合物^[12]、偏聚合金, 含缺陷合金以及原子团簇设计, 结果存储于金属材料信息科学的各库之中。本文只介绍无序 hcp $\text{Ti}_x\text{Al}_{(1-x)}$ 合金设计的结果。

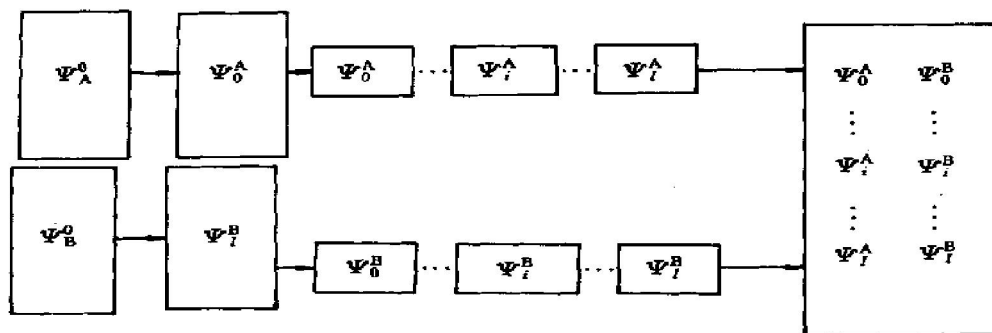


图 4 合金的特征晶体混合模型

Fig. 4 Characteristic crystal mixed pattern of alloys

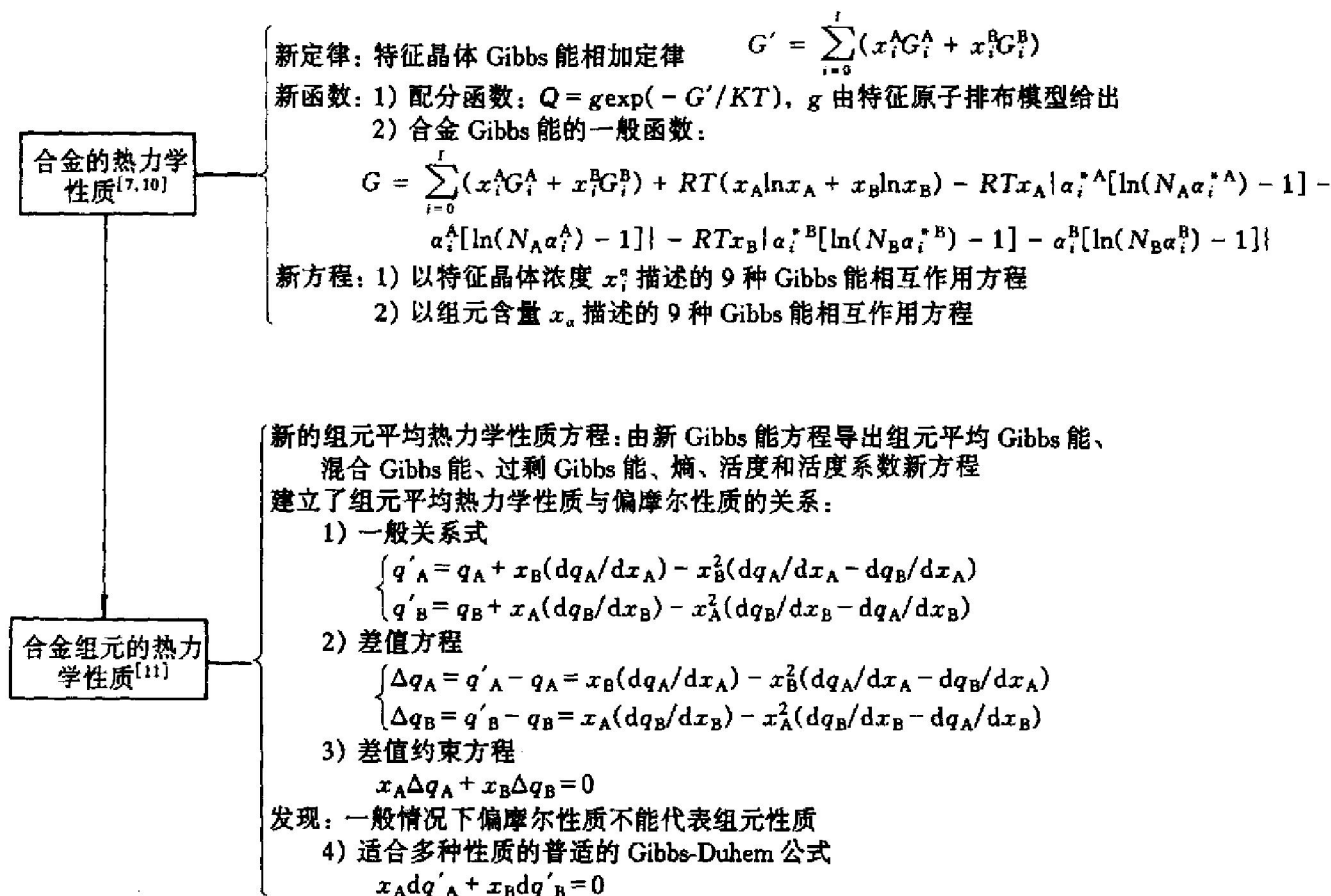


图 5 合金统计热力学的新框架

Fig. 5 New framework of statistical thermodynamics of alloy

以 Ti 和 Al 的含量 x_{Ti} 和 x_{Al} 为占据格点的几率, 在 hcp 格子中排列原子便可得到无序 hcp $Ti_x Al_{(1-x)}$ 合金。合金中 Ti 和 Al 的特征原子含量为:

$$\begin{cases} x_i^{Ti} = C_{12}^i x_{Ti}^{(13-i)} x_{Al}^i \\ x_i^{Al} = C_{12}^i x_{Ti}^{(12-i)} x_{Al}^{i+1} \end{cases}$$

式中 $C_{12}^i = 12! / (12-i)! i!$ 。图 6 描绘了 x_i^{Ti} 和 x_i^{Al} 的变化。

4 合金信息科学

4.1 单质数据库(DBSS)

在 Ti-Al 系中存在 hcp, bcc 和 fcc 3 种晶体结构的相, 它们的初始特征晶体中 hcp-Ti, bcc-Ti 和 fcc-Al 是自然态单质, fcc-Ti, hcp-Al 和 bcc-Al 为非自然态单质。表 1 和表 2 包含有 hcp-Ti 和 hcp-Al 的初始特征晶体的结构参数和性质, 如它们的电子结构为: $\Psi_0^{Ti} = [Ar](3d_n)^{0.6290}(3d_c)^{2.1245}(4s_c)^{0.9320}(4s_f)^{0.3145}$, $\Psi_0^{Al} =$

$[\text{Ne}](3s_e)^{1.4540}(3p_e)^{0.6530}(3s_f+3p_f)^{0.8930}$ 。

DBSS 库中存储各种晶体结构单质的电子结构参数, 晶体结构参数, 物理性质和热力学性质。

4.2 特征原子和特征晶体序列数据库(DBCC)

在 Ti-Al 系中存在 hcp, bcc 和 fcc 3 种相的 Ti 和 Al 的特征原子和特征晶体序列。表 1 和表 2 分别为 hcp Ti-Al 相的 Ti 和 Al 的特征原子序列和特征晶体序列的结构参数和性质。DBCC 库中存储二元合金系各相的特征原子序列和特征晶体序列的结构参数和性质。

4.3 合金系电子结构数据-图形库(DGBE)

表 3 列出了无序 hcp $\text{Ti}_x\text{Al}_{(1-x)}$ 的电子结构参数。如: 无序 hcp $\text{Ti}_{0.75}\text{Al}_{0.25}$ 合金的电子结构为 $0.75[\text{Ar}](3d_n)^{0.5899}(3d_e)^{2.1560}(4s_e)^{0.9624}(4s_f)^{0.2950}+0.25[\text{Ne}](3s_e)^{1.3224}(3p_e)^{1.0086}(3s_f+3p_f)^{0.6689}$, 它还可写成 $(d_n)^{0.4424}(d_e)^{1.6170}(p_e)^{0.2522}(s_e)^{1.0524}(s_f+s_p)^{0.3885}$ 。合金的电子结构参数随组元含量的变化还可以用图形描述。DGBE 库中存储二元合金系各相的电子结构参数随组元浓度变化的数据库和图。

4.4 合金系晶体结构参数的数据和图形库(DGBC)

在 DGBC 库中存储了 Ti-Al 系无序和有序 hcp, bcc 和 fcc $\text{Ti}_x\text{Al}_{(1-x)}$ 合金的晶格常数和原子体积随浓度

表 1 hcp Ti-Al 系中 Ti 的特征原子和特征晶体序列

Table 1 Characteristic atoms of Ti and characteristic crystal sequence in hcp Ti-Al series alloys									
i	s_f	s_e	d_e	d_n	R/nm	$V/10^{-3}\text{nm}^3$	$E_c/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	$B/10^{11}\text{Pa}$	$\alpha/(10^{-6}\text{K}^{-1})$
0	0.314 5	0.932 0	2.124 4	0.629 0	0.127 49	17.653	467.09	1.066	8.81
1	0.312 5	0.936 0	2.126 5	0.625 0	0.127 50	17.629	468.19	1.069	8.79
2	0.307 5	0.942 0	2.135 5	0.615 0	0.127 45	17.557	471.41	1.076	8.72
3	0.298 5	0.956 0	2.148 5	0.597 0	0.127 42	17.437	476.77	1.089	8.61
4	0.286 5	0.972 0	2.168 5	0.573 0	0.127 33	17.268	484.54	1.106	8.46
5	0.271 5	0.989 0	2.196 5	0.543 0	0.127 18	17.052	493.92	1.128	8.28
6	0.253 5	1.090 0	2.230 5	0.507 0	0.126 99	16.787	505.68	1.155	8.06
7	0.233 5	1.025 0	2.274 5	0.467 0	0.126 67	16.474	519.57	1.186	7.82
8	0.210 5	1.042 0	2.326 5	0.421 0	0.126 30	16.113	535.67	1.223	7.55
9	0.186 5	1.045 0	2.395 5	0.373 0	0.125 67	15.705	553.92	1.265	7.27
10	0.162 0	0.107 0	2.497 0	0.324 0	0.124 54	15.248	574.28	1.311	6.98
11	0.135 5	0.981 0	2.612 5	0.271 0	0.123 26	14.742	596.78	1.363	6.68
12	0.108 5	0.932 0	2.742 5	0.217 0	0.121 80	14.189	621.42	1.419	6.37

表 2 hcp Ti-Al 系中 Al 的特征原子和特征晶体序列

Table 2 Characteristic atoms of Al and characteristic crystal sequence in hcp Ti-Al series alloys								
<i>i</i>	s _f + p _f	s _c	p _c	<i>R</i> /nm	<i>V</i> /10 ^{−3} nm ³	<i>E_c</i> /(kJ•mol ^{−1})	<i>B</i> /10 ¹¹ Pa	α/(10 ^{−6} K ^{−1})
0	0.490 0	1.320 0	1.190 0	0.118 00	15.800	403.04	0.649	11.69
1	0.560 0	0.300 0	0.140 0	0.118 00	15.944	390.00	0.628	12.14
2	0.620 0	1.311 0	1.069 0	0.118 00	16.073	378.08	0.609	12.58
3	0.678 0	1.310 0	1.012 0	0.118 00	16.200	367.29	0.592	13.00
4	0.725 0	1.332 0	0.943 0	0.118 00	16.307	357.69	0.576	13.40
5	0.766 0	1.355 0	0.879 0	0.118 00	16.402	349.20	0.563	13.77
6	0.800 0	1.382 0	0.818 0	0.118 00	16.483	341.78	0.551	14.12
7	0.830 0	1.400 0	0.770 0	0.118 00	16.555	335.56	0.541	14.41
8	0.854 0	1.416 0	0.730 0	0.118 00	16.614	330.49	0.533	14.66
9	0.870 0	1.436 0	0.694 0	0.118 00	16.654	326.52	0.526	14.87
10	0.885 0	1.441 0	0.674 0	0.118 00	16.690	323.67	0.522	15.02
11	0.891 0	1.451 0	0.658 0	0.118 00	16.706	322.10	0.519	15.11
12	0.893 0	1.454 0	0.653 0	0.118 00	16.711	321.42	0.518	15.14

变化的数据表和图。表 4 列出了无序 hcp $Ti_xAl_{(1-x)}$ 合金组元的原子体积。

4.5 合金系的热力学性质数据和图形库(DGBT)

图 7 示出了无序 hcp $Ti_xAl_{(1-x)}$, fcc $TiAl$ 型, hcp Ti_3Al 型和 fcc $TiAl_3$ 型合金的 Gibbs 能随组元浓度变化图。在 DGBT 库中存储了二元合金及其组元热力学性质随组元含量变化的数据表和图(包括相图)。

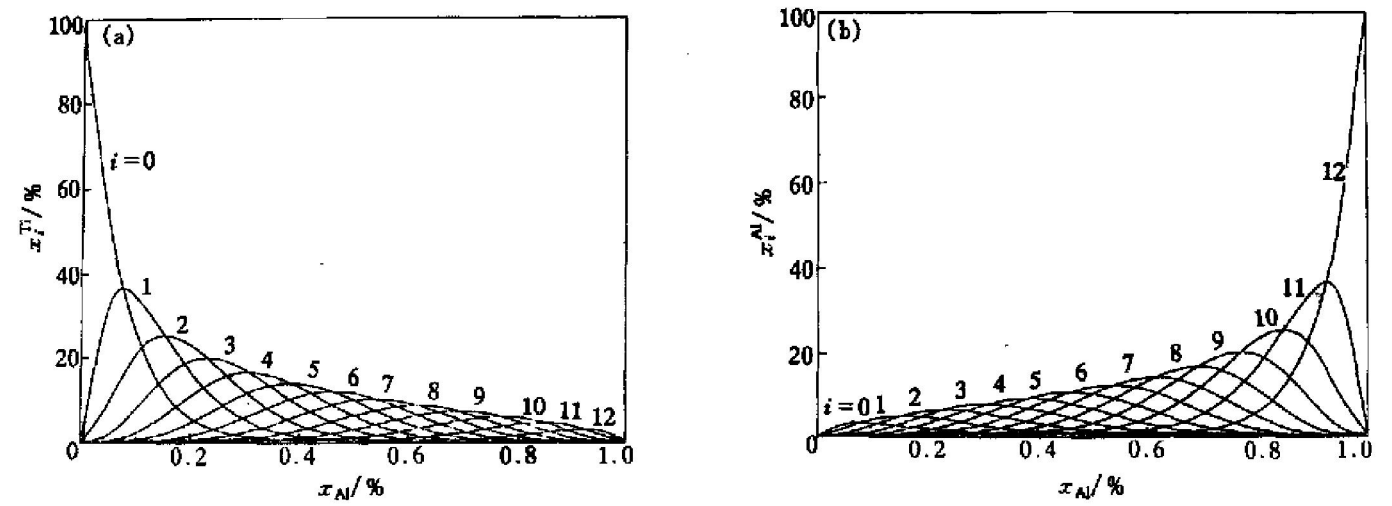


图 6 无序 hcp $Ti_xAl_{(1-x)}$ 合金中的 Ti 和 Al 特征原子浓度 x_i^{Ti} 和 x_i^{Al}

Fig. 6 Characteristic atomic content of Ti and Al in disordered hcp $Ti_xAl_{(1-x)}$ alloys

(a) $-x_i^{Ti}$; (b) $-x_i^{Al}$

表 3 无序 hcp $Ti_xAl_{(1-x)}$ 合金及组元的电子结构

Table 3 Electronic structure of disordered hcp $Ti_xAl_{(1-x)}$ alloy and its components

x_{Al}	$Ti_xAl_{(1-x)}$ alloy					Ti component				Al component		
	s _f + p _f	s _c	p _c	d _c	d _n	s _f	s _c	d _c	d _n	s _f + p _f	s _c	p _c
0.10	0.335 8	0.976 1	0.112 2	1.918 0	0.558 0	0.310 0	0.939 0	2.131 1	0.620 0	0.568 5	1.310 0	1.121 5
0.25	0.388 5	1.052 4	0.252 2	1.617 0	0.442 4	0.295 0	0.962 4	2.156 0	0.589 9	0.668 9	1.322 4	1.008 6
0.30	0.410 8	1.081 3	0.291 3	1.518 1	0.403 0	0.287 8	0.974 3	2.168 6	0.575 7	0.697 9	1.331 2	0.971 0
0.40	0.462 0	1.141 9	0.359 2	1.320 7	0.324 8	0.270 7	1.001 1	2.201 2	0.541 4	0.749 1	1.353 0	0.897 9
0.50	0.520 9	1.200 5	0.415 5	1.122 3	0.249 9	0.249 9	1.023 8	2.244 7	0.499 9	0.791 9	1.377 1	0.831 0
0.60	0.586 5	1.253 9	0.463 8	0.920 7	0.180 8	0.226 0	1.034 5	2.301 8	0.452 0	0.826 8	1.400 2	0.773 0
0.75	0.695 2	1.327 8	0.529 6	0.605 5	0.092 7	0.185 3	1.025 1	2.422 2	0.370 6	0.865 2	1.428 6	0.706 1
0.80	0.733 7	1.351 8	0.551 7	0.494 8	0.068 3	0.170 7	1.015 1	2.473 9	0.341 5	0.874 4	1.436 0	0.689 6
0.90	0.812 6	1.400 8	0.598 8	0.259 7	0.028 1	0.140 4	0.982 4	2.596 6	0.280 7	0.887 3	1.447 3	0.665 4

表 4 无序 hcp $Ti_xAl_{(1-x)}$ 合金及组元的物理性质

Table 4 Physical properties of disordered hcp $Ti_xAl_{(1-x)}$ alloy and its components

x_{Al}	$Ti_xAl_{(1-x)}$ alloy				$Ti_xAl_{(1-x)}$ alloy				$Ti_xAl_{(1-x)}$ alloy			
	E_c $/(kJ \cdot mol^{-1})$	$V/10^{-3} \cdot$ nm^3	B $/(10^{11} Pa)$	α_{298} $/(10^{-6})$	E_c $/(kJ \cdot mol^{-1})$	$V/10^{-3} \cdot$ nm^3	B $/(10^{11} Pa)$	α_{298} $/(10^{-6})$	E_c $/(kJ \cdot mol^{-1})$	$V/10^{-3} \cdot$ nm^3	B $/(10^{11} Pa)$	α_{298} $/(10^{-6})$
0.10	461.93	17.429	1.036	8.96	470.10	17.592	1.509	8.77	388.36	15.967	0.723	10.66
0.25	453.80	17.083	0.981	9.40	479.46	17.383	1.532	8.65	368.83	16.186	0.669	11.68
0.30	447.71	16.972	0.960	9.61	483.99	17.281	1.543	8.59	363.07	16.250	0.653	12.01
0.40	438.18	16.764	0.915	10.12	495.19	17.029	1.570	8.44	352.66	16.366	0.625	12.64
0.50	426.48	16.590	0.865	10.71	509.21	16.715	1.604	8.27	343.75	16.466	0.600	13.25
0.60	412.22	16.464	0.718	11.48	526.06	16.337	1.645	8.07	336.33	16.549	0.580	13.75
0.75	385.17	16.394	0.685	12.71	556.65	15.650	1.720	7.72	328.01	16.420	0.557	14.38
0.80	374.44	16.410	0.614	13.15	568.25	15.390	1.748	7.60	325.99	16.665	0.551	14.54
0.90	350.12	16.510	0.518	14.03	593.59	14.821	1.810	7.33	323.07	16.697	0.543	14.77

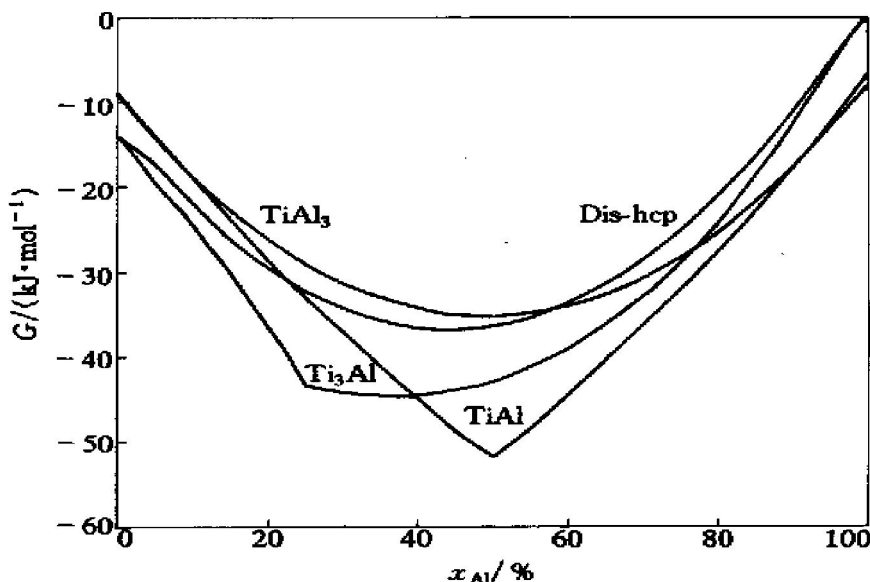


图 7 无序 hcp $\text{Ti}_x\text{Al}_{(1-x)}$, fcc TiAl , hcp Ti_3Al 和 fcc TiAl_3 型及有序 $\text{Ti}_x\text{Al}_{(1-x)}$ 合金的 Gibbs 能随组元含量变化曲线(298 K)

Fig. 7 Change of Gibbs energy of disordered fcc $\text{Ti}_x\text{Al}_{(1-x)}$, ordered TiAl , Ti_3Al and TiAl_3 alloy with content of Al(298 K)

4.6 合金系的物理性质数据-图形库(DGBP)

表 4 中还列出了无序 hcp $\text{Ti}_x\text{Al}_{(1-x)}$ 合金的结合能 E_c , 体弹性模量 B 和 298 K 时的热膨胀系数 α 。DGBP 库中存储了二元合金系的物理性质随组元含量变化的数据表和图。

4.7 合金系的知识库(KBAS)

在 KBAS 数据库中除存储金属材料系统学框架的知识内容以外, 还存储各合金系的结构参数和性质的计算公式。例如:

1) 无序 hcp $\text{Ti}_x\text{Al}_{(1-x)}$ 合金的平均体积方程:

$$V = x_{\text{Ti}} V_0^{\text{Ti}} + x_{\text{Al}} V_2^{\text{Al}} + \frac{(I-1)x_{\text{Ti}}x_{\text{Al}}^2 + x_{\text{Ti}}x_{\text{Al}}}{I} (V_I^{\text{Ti}} - V_0^{\text{Ti}}) + \frac{(I-1)x_{\text{Ti}}^2x_{\text{Al}} + x_{\text{Ti}}x_{\text{Al}}}{I} (V_0^{\text{Al}} - V_I^{\text{Al}})$$

式中 $I = 12$, $V_0^{\text{Ti}} = 17.653 \times 10^{-3} \text{ nm}^3$, $V_I^{\text{Al}} = 16.713 \times 10^{-3} \text{ nm}^3$, $V_I^{\text{Ti}} = 14.189 \times 10^{-3} \text{ nm}^3$, $V_0^{\text{Al}} = 15.801 \times 10^{-3} \text{ nm}^3$ 。

2) 无序 hcp $\text{Ti}_x\text{Al}_{(1-x)}$ 合金的结合能方程:

$$E = x_{\text{Ti}} E_0^{\text{Ti}} + x_{\text{Al}} E_I^{\text{Al}} + \frac{(I-1)x_{\text{Ti}}x_{\text{Al}}^2 + x_{\text{Ti}}x_{\text{Al}}}{I} (E_I^{\text{Ti}} - E_0^{\text{Ti}}) + \frac{(I-1)x_{\text{Ti}}^2x_{\text{Al}} + x_{\text{Ti}}x_{\text{Al}}}{I} (E_0^{\text{Al}} - E_I^{\text{Al}})$$

式中 $I = 12$, $E_0^{\text{Ti}} = 467.1 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$, $E_I^{\text{Al}} = 321.43 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$, $E_I^{\text{Ti}} = 621.35 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$, $E_0^{\text{Al}} = 402.98 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。

3) 无序 hcp $\text{Ti}_x\text{Al}_{(1-x)}$ 合金的 Gibbs 能方程:

$$G = x_{\text{Ti}} G_0^{\text{Ti}} + x_{\text{Al}} G_I^{\text{Al}} + \frac{(I-1)x_{\text{Ti}}x_{\text{Al}}^2 + x_{\text{Ti}}x_{\text{Al}}}{I} (G_I^{\text{Ti}} - G_0^{\text{Ti}}) + \frac{(I-1)x_{\text{Ti}}^2x_{\text{Al}} + x_{\text{Ti}}x_{\text{Al}}}{I} (G_0^{\text{Al}} - G_I^{\text{Al}}) - TS$$

式中 $G_0^{\text{Ti}}/(\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}) = -467.1 \times 10^3 + 10.898T$, $G_I^{\text{Al}}/(\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}) = -321.43 + 9.618T$, $G_I^{\text{Ti}}/(\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}) = -621.35 \times 10^3 + 34.257T$, $G_0^{\text{Al}}/(\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}) = -402.98 \times 10^3 + 42.149T$ 。

5 结论

- 1) 建立了一个金属材料的科学理论系统的 SSMM 框架。
- 2) 应用金属材料的科学理论系统求得 hcp Ti-Al 系的基本信息: 特征原子序列和特征晶体序列的电子结构参数、晶格常数、原子体积、物理性质和热力学性质。
- 3) 运用计算机技术, 以 x_{Ti} 和 x_{Al} 为占据 hcp 格点的几率排列 Ti 和 Al 原子便可得到无序 hcp

$Ti_xAl_{(1-x)}$ 合金, 并可求得合金的电子结构参数、晶格常数、原子体积、物理性质和热力学性质随组元含量变化的数据库和图形库。

4) 知识库中存有无序 hcp $Ti_xAl_{(1-x)}$ 合金的结构参数和性质的计算公式。

应当指出, SSMM 框架是初步的, 其科学理论内容、合金系及其结构参数和性质的数据表和图形处在不断丰富和完善之中。

[REFERENCES]

- [1] Ellis D E, Painter G S. One discrete variational method to solve the Kohn-Sham equation [J]. Phys Rev, 1973, B2: 2887–2899.
- [2] 谢佑卿, 马柳莺. 晶体价电子结构的理论晶格参量 [J]. 中南矿冶学院学报, 1985, 43(1): 1–10.
XIE You-qing, MA Liu-ying. The theoretical lattice parameter of the valence electron structure of crystal [J]. Journal of Central South Mining Institute, 1985, 43(1): 1–10.
- [3] XIE You-qing. A new potential function with many-atom interactions in solid [J]. Science in China(series A), 1993, 36(1): 90–99.
- [4] XIE You-qing, ZHANG Xiao-dong. Electronic structure and properties of pure nickel [J]. Science in China(series A), 1993, 36(4): 495–503.
- [5] Xie Y Q. Electronic structure and properties of pure iron [J]. Acta Metall Mater, 1994, 4(11): 3705.
- [6] 彭 坤, 谢佑卿. 金属 Zr 的电子结构和物理性能 [J]. 中国有色金属学报, 1999, 9(4): 700–704.
PENG Kun, XIE You-qing. Electronic structures and physical properties of Zr metal [J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 1999, 9(4): 700–704.
- [7] XIE You-qing, MA Liu-ying. Microstructure and properties of Cu-Ni alloys [J]. Science in China(series A), 1993, 36(5): 612–623.
- [8] XIE You-qing. Atomic energies and Gibbs energy functions of Ag-Cu alloys [J]. Science in China(series A), 1998, 41(2): 146–156.
- [9] XIE You-qing, ZHANG Xiao-dong. Atomic volumes and volume functions of Ag-Cu alloys [J]. Science in China(series A), 1998, 41(2): 157–168.
- [10] XIE You-qing, ZHANG Xiao-dong. Phase diagram and thermodynamic properties of Ag-Cu alloys [J]. Science in China(series A), 1998, 41(2): 348–356.
- [11] 谢佑卿. Cu-Ni 合金组元的偏原子体积与平均原子体积的关系 [J]. 金属学报(A), 1998, 34(12): 1243–1248.
XIE You-qing. Relationship between partial and average atomic volume of components in Cu-Ni alloys [J]. Acta Metallurgica Sinica (Series A), 1998, 34(12): 1243–1248.
- [12] XIE You-qing, ZHANG Xiao-dong. Electronic structure of Ag-Cu alloys [J]. Science in China(series A), 1998, 41(3): 225–236.

Monoatom control designing of disordered hcp $Ti_xAl_{(1-x)}$ alloy

XIE You-qing, PENG Kun, LIU Xin-bi, YANG Xin-xin

(National Key Laboratory for Powder Metallurgy, Department of Materials Science and Engineering,
Central South University, Changsha 410083, China)

[Abstract] Based on the structure parameters and properties of characteristic atoms and characteristic crystal sequence, the monoatom control designing of hcp $Ti_xAl_{(1-x)}$ serials alloy can be done through computation technique. Electronic structure and crystal structure parameters, physical and thermodynamic properties can be calculated. These information can be put into the computer to supply the basic data for designing, preparation and application of complex alloys.

[Key words] Ti-Al serials alloy; electronic structure; crystal structure; physical property; thermodynamic property

(编辑 杨 兵)