

第一性原理研究 Re 和 Ru 掺杂含量对 Ni-Al 二元模型镍基单晶高温合金稳定性的影响

彭知非, 吴文平

(武汉大学土木建筑工程学院工程力学系, 430072 武汉)

摘要:采用第一性原理计算,研究了掺杂元素(Re, Ru)含量对 Ni-Al 二元模型单晶高温合金稳定性和占位倾向的影响。结果表明,随着 Re 和 Ru 元素含量的增加,体系的总能量逐渐降低,说明体系的稳定性得到了提高。同时,使用 Ru 替换 Ni 的体系的稳定性最低,Re 替换 Al 的体系的稳定性最好,Re 和 Ru 均更倾向于替换 Al,这与之前的实验结果一致。并且当 Re 和 Ru 元素含量占比约为 1.4% 替换 Al 时,替换形成能相较于其他含量的 Re 和 Ru 是最低的。此外,通过去除 Ni-Al 二元模型中的一层原子,获得了 2 种不同的层错模式。对于这 2 种层错模式的研究表明,用 Re 和 Ru 替换 Al 可以使体系的稳定性得到提高,且含 Re 的体系更稳定,替换形成能也比 Ru 替换 Al 更低。然而,对于不同的层错模式,使用 Re 和 Ru 替换 Al,当体系稳定性最好,替换形成能以及层错能最低时,所需 Re 和 Ru 的含量不相同。使用 Re 替换 Al,层错体系具有更好的稳定性,但稳定性最好的体系中 Re 的含量取决于所选择的层错模式。

关键词: Ni-Al 二元模型;第一性原理计算;Re 和 Ru 元素;稳定性;层错模式

中图分类号:O346.3

文献标志码:A

文章编号:1000-4939(2025)06-1301-08

First-principles study on the effects of Re and Ru doping content on the stability of a Ni-Al binary model nickel-based single-crystal superalloy

PENG Zhifei, WU Wenping

(Department of Engineering Mechanics, School of Civil Engineering, Wuhan University, 430072 Wuhan, China)

Abstract: In this paper, the effects of doping elements (Re and Ru) content on the stability and occupancy orientation of a Ni-Al binary model nickel-based single-crystal superalloy are studied by using first-principles calculations. The results show that the total energy of the system decreases gradually with the increase of the content of Re and Ru elements, which suggests that the stability of the system is improved. The system using Ru to replace Ni has the lowest stability, while the stability of system is the best by using Re to replace Al. Therefore, Re and Ru are more inclined to replace Al, which is consistent with the

收稿日期:2023-07-04

基金项目:国家自然科学基金资助项目(No. 12172259)

通信作者:吴文平,教授。E-mail:wpwu@whu.edu.cn

引用格式:彭知非,吴文平. 第一性原理研究 Re 和 Ru 掺杂含量对 Ni-Al 二元模型镍基单晶高温合金稳定性的影响[J]. 应用力学学报,2025,42(6):1301-1308.

PENG Zhifei, WU Wenping. First-principles study on the effects of Re and Ru doping content on the stability of a Ni-Al binary model nickel-based single-crystal superalloy[J]. Chinese journal of applied mechanics,2025,42(6):1301-1308.

previous experimental results. Meanwhile, compared to other contents of Re and Ru, when Re and Ru with the content of about 1.4% are used to replace Al, the substitution formation energy is the lowest. Furthermore, two different stacking fault modes are obtained by deleting a layer of atoms in the Ni-Al binary model. Research on these two stacking fault modes indicates that replacing Al with Re and Ru can improve the stability of the systems, and systems containing Re are more stable, which have lower substitution formation energy compared to replacing Al with Ru. However, for different stacking fault modes, when replacing Al with Re and Ru, the content of Re and Ru is different for the best of a stable system and the lowest of substitution formation energy and stacking fault energy. Replacing Al with Re results in a better stability in stacking fault systems, but the content of Re in the most stable system depends on the selected stacking fault mode.

Key words: Ni-Al binary model; first-principles calculation; Re and Ru elements; stability; stacking fault mode

镍基单晶高温合金因其优异的高温力学性能而广泛应用于工业燃气轮机和航空发动机叶片的高温热端部件材料^[1-2]。镍基单晶高温合金的微观结构由 γ 基体相Ni(FCC结构)和 γ' 沉淀相 Ni_3Al (L12结构)组成。为了进一步提高镍基单晶高温合金的高温力学性能,通常将诸如Re、Ru、Co、Hf、Ti、Ta、W、Mo、Nb、Cr等难熔元素掺杂到高温合金中^[3-4]。在这些元素中,Re元素对高温合金的力学性能具有显著影响,在镍基单晶高温合金中添加Re可以形成大的晶格畸变,从而产生长程应力场,进而阻碍位错的滑移和攀升,提高基体相的机械强度^[5]。此外,Re元素可以通过增加 γ/γ' 相的错配度来提高 γ' 相强化效果,并有效降低 γ' 相的粗化程度,延缓 γ 基体通道厚度的增加^[6-8]。除了合金元素Re,难熔元素Mo和W可以提高镍基单晶高温合金的蠕变断裂强度^[9-10]。然而,添加Re、Mo、W和Co等难熔元素会使高温合金易于生成拓扑密排相(topologically close packed, TCP),但合金元素Ru可以有效抑制TCP相在合金中的沉淀,提高高温合金的结构稳定性,进而改善高温合金的整体力学性能^[11-12]。上述研究表明,研究掺杂元素Re和Ru的含量对探索镍基单晶高温合金的晶格畸变, γ/γ' 相的错配度,TCP相的析出机制以及稳定性等方面具有重要意义。

基于实验的掺杂元素研究不仅需要严格的实验条件和高昂的材料成本,而且要精确控制一系列掺杂元素的含量,也会存在一些困难^[13]。与实验方法相比,理论模拟具有成本低、速度快、效率高等优点,可以在更微观的尺度上有效地研究难熔元素掺杂行为背后的物理机制^[14]。近年来,第一性原理计算已成为研究掺杂元素对高温合金物理力学性能影响的

有力工具。例如,JIANG等^[15-16]通过第一性原理计算对合金元素的占位倾向进行了一系列研究,并给出了判断 Ni_3Al 中合金元素占位倾向的标准,发现Pt、Pd和Au元素具有很强的占据Ni位点的倾向。ZHOU等^[17]发现Re倾向于占据 Ni_3Al 中Al元素的位置,YU等^[18]通过实验进一步证实了这一结果。MITROKHIN等^[19]研究了 Ni_3Al 中Co和Nb元素的占位倾向,通过第一性原理计算,发现Nb倾向于占据Al元素的位置,这与X射线电子光谱的实验结果一致。RUAN等^[20]通过第一原理计算,发现Nb和Ti倾向于占据Al元素的位置。上述研究主要通过第一性原理计算了镍基单晶高温合金中掺杂元素的占位倾向。此外,掺杂元素对镍基单晶高温合金层错的影响也非常显著。LI等^[21]发现,当Co和Ru元素掺杂到断层面时, γ' 相 Ni_3Al 的层错能会降低,而Cr、Mo、Ta和W则会增加体系的层错能。SHANG等^[22]研究了26种合金元素,并通过第一原理计算证明这些掺杂元素全部降低了镍基单晶高温合金中 γ 相的稳定层错能。YU等^[23]研究了掺杂元素Re、Ta、W、Ru和Ti对 Ni_3Al 广义层错能的影响,发现Re元素可以更有效地增加(111)平面上的广义层错能。这些关于掺杂元素对镍基单晶高温合金占位倾向和层错能影响的研究侧重于分析替换单个原子对高温合金稳定性的影响。然而,掺杂元素如Re和Ru含量的变化对镍基单晶高温合金的稳定性的影响很大程度上是推测性的,缺乏定量的计算分析,并且掺杂多少含量的Re和Ru元素可以获得镍基单晶高温合金的最佳稳定性和力学性能尚不清楚。

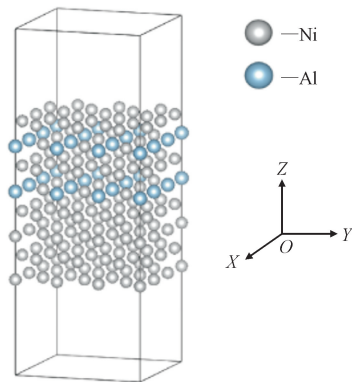
本研究建立了Ni-Al二元模型镍基单晶高温合金和基于此模型的两种不同层错模式,并通过第一

性原理计算了 Ni-Al 二元模型镍基单晶高温合金在替换不同原子个数的 Re 和 Ru 时,体系能量的变化趋势,以研究不同含量的 Re 和 Ru 元素对镍基单晶高温合金稳定性和占位倾向及层错模式的影响,并探讨 Ni-Al 二元模型镍基单晶高温合金有最佳稳定性时 Re 和 Ru 元素的含量。

1 计算模型与公式

1.1 Ni-Al 二元模型镍基单晶高温合金

Ni-Al 二元模型镍基单晶高温合金由 144 个原子组成,包括 γ 相 Ni 以及 γ' 相 Ni_3Al ,其中 Ni 和 Ni_3Al 的晶格常数分别为 3.508 \AA 和 3.563 \AA ,这是通过体系的自洽计算获得的,数据与文献[24-25]的结果相似。该模型的上层是 γ' 相 Ni_3Al ,下层是 γ 相 Ni,每层由 72 个原子组成,这些原子是对 L12 结构的 Ni_3Al 和 FCC 结构的 Ni 进行单胞扩展而获得的。真空层被添加到上层和下层,以抵消模型在 Z 轴方向上的周期性影响,如图 1 所示。



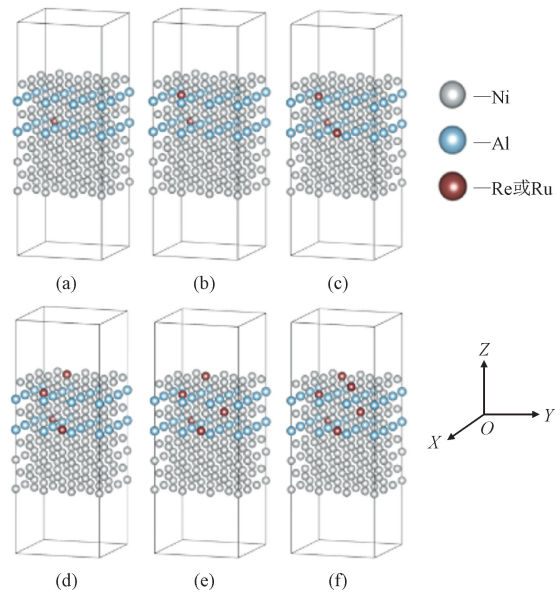
注:蓝色原子是 Al,灰色原子是 Ni。

图 1 Ni-Al 二元模型镍基单晶高温合金

模型总能量的计算基于密度泛函理论(DFT),计算软件采用 VASP (Vienna Ab initio Simulation Package) [26-27]。在广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 的条件下,选用 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 交换关联势与投影增强波法 (PAW) 研究原子与电子的优化 [28-29]。计算中,平面波截断能选取 400 eV ,电子自洽迭代收敛精度取 10^{-5} eV ,原子弛豫至赫尔曼-费曼力小于 0.01 eV/\AA [30-31]。布里渊区的 K 点是通过使用 Gamma 参数自动生成的,在自洽计算中,取值为 $5 \times 5 \times 2$ 。

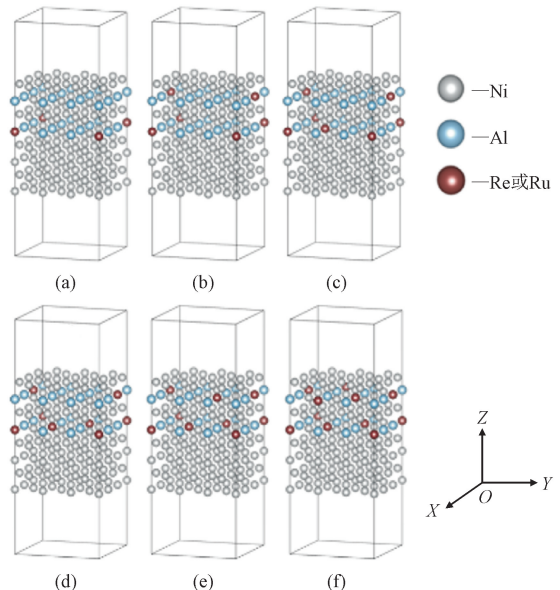
在保持 Ni-Al 二元模型原子总数不变的条件

下,将不同原子个数的 Re 与 Ru 原子分别替换上层 Ni_3Al 中 Ni 的位置和 Al 的位置,得到含有不同掺杂元素 Re 或 Ru 含量的 Ni-Al-Re/Ru 掺杂模型,其模型分别如图 2 和图 3 所示。



注:(a)~(f) 分别表示 Re 或 Ru 替换 Ni 原子的个数从 1 个到 6 个。
图 2 Re 或 Ru 替换 Ni-Al 二元模型中 Ni 原子的个数

Fig. 2 The number of Ni atoms replaced by Re or Ru in the Ni-Al binary model



注:(a)~(f) 分别表示 Re 或 Ru 替换 Al 原子的个数从 1 个到 6 个。
图 3 Re 或 Ru 替换 Ni-Al 二元模型中 Al 原子的个数

Fig. 3 The number of Al atoms replaced by Re or Ru in the Ni-Al binary model

1.2 层错模式的构建

在以上 Ni-Al 二元模型的基础上,通过去除一

层原子来构建相应的层错模式。层错模式分为 A 与 B 两种;层错模式 A 通过在 Ni-Al 二元模型的 XZ 平面方向上去除一层 Ni 原子而获得,去除的这一层 Ni 原子用红色框 a 标记,层错贯穿了 γ' 和 γ 相,如图 4 (a) 所示。层错模式 B 通过在 Ni-Al 二元模型的 XY 平面方向上去除一层 Ni 原子而获得,去除的这一层 Ni 原子用红色框 b 标记,层错仅在 γ' 相产生,如图 4 (b) 所示。

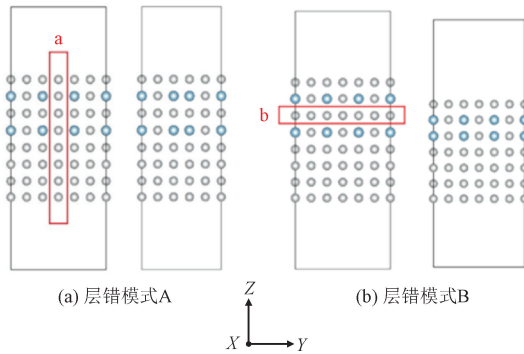


图 4 两种层错模式

Fig. 4 Two stacking fault modes

1.3 能量计算公式

为了研究掺杂元素含量对 Ni-Al 二元模型镍基单晶高温合金稳定性的影响,将模型中 γ' 相的 Ni 和 Al 替换为不同数量的 Re 或 Ru,以获得不同含量的掺杂元素模型。此外,为了分析不同掺杂元素含量的占位倾向以及体系的稳定性,计算了体系的总能量和替换形成能。替换形成能 (γ_{SFE}) 的定义如下^[32-33]。

$$\gamma_{SFE}^X = \frac{1}{n} [(E_X + n\mu_M) - (E_0 + n\mu_X)] \quad (1)$$

式中: X 代表掺杂元素 (Re, Ru); M 代表被替换的元素 (Ni, Al); n 表示被替换的原子个数; E_X 表示替换掺杂原子个数为 n 后体系的总能量; μ_M 代表单个被替换原子的化学势 (μ_{Ni} 取自 FCC-Ni, $\mu_{Al} = \mu_{Ni_3Al} - 3\mu_{Ni}$); E_0 代表尚未替换难熔元素体系的总能量; μ_X 代表单个掺杂原子的化学势 (分别取自 HCP-Re 与 HCP-Ru)。

如第 1.2 节所示,构建了 2 个层错模式 (A 和 B),层错能 (γ_{SF}) 的定义为^[34-35]

$$\gamma_{SF} = (E_{SF} - E_0) / \Delta S \quad (2)$$

式中: E_{SF} 是有层错的体系的总能量; E_0 是未发生层错的体系的总能量; ΔS 是层错区域的面积。

考虑到掺杂元素仅对层错区域及其相邻区域有很大影响,对远离层错的区域影响很小^[36],因此,在

本研究的模型中,掺杂元素分布在层错区域和其相邻的区域。

2 计算结果与讨论

2.1 掺杂元素含量对 Ni-Al 二元模型稳定性的影响

Ni-Al 二元模型镍基单晶高温合金体系总能量和替换形成能的计算结果分别如图 5 和图 6 所示。

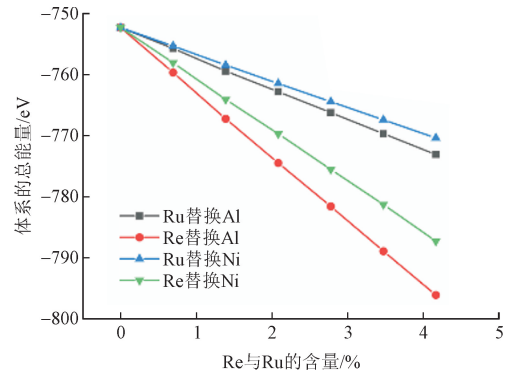


图 5 Re 和 Ru 元素含量与体系总能量的关系

Fig. 5 The relationship between the content of Re and Ru and the total energy of the system

从图 5 可以看出,体系的总能量随着掺杂元素含量的增加而降低,这意味着随着 Re 元素和 Ru 元素含量的增加,体系的稳定性逐渐提高。此外,Re 替换 Al 的体系总能量最低,这表明该体系的稳定性最好;而 Ru 替换 Ni 的体系总能量最高,因此该体系的稳定性最差。

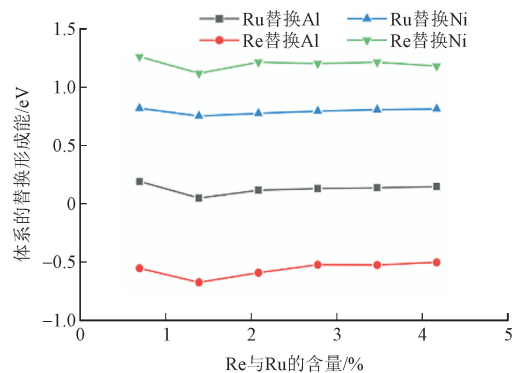


图 6 Re 和 Ru 元素含量与体系替换形成能的关系

Fig. 6 The relationship between the content of Re and Ru and the substitution formation energy of the system

如图 6 所示,不同体系的替换形成能从高到低的顺序为:Re 替换 Ni 的体系 > Ru 替换 Ni 的体系 > Ru 替换 Al 的体系 > Re 替换 Al 的体系。无论掺杂元素 (Re、Ru) 的类型和含量如何,当掺杂元素替换

Al 时,体系的替换形成能低于这些元素替换 Ni 的替换形成能,这意味着 Re 元素与 Ru 元素更容易替换 γ' 沉淀相 Ni_3Al 中的 Al 的位置。该结论与 ZHOU 等^[17]采用原子探针层析成像 (APT) 的实验结果以及 ZHU 等^[37]的第一性原理计算结果一致。另一方面,从图 6 可以看出,当 Re 含量约为 1.4% 时,体系的替换形成能最低,也就是说,当 Re 的含量约为 1.4% 时,Re 的替换作用最强,最容易替换 Al 位点。

2.2 掺杂元素含量对层错模式稳定性的影响

根据第 2.1 节中的替换形成能的分析可以看出,Re 和 Ru 元素倾向于替换 Al 原子的位置,因此层错模式仅考虑掺杂元素 Re 和 Ru 替换 Al 的情况,计算了不同层错模式的层错能,以揭示掺杂元素含量对不同层错模式稳定性的影响。

2.2.1 层错模式 A 的稳定性研究

层错模式 A 是通过在 Ni-Al 二元模型的 XZ 平面方向上去除一层 Ni 原子而获得的,如图 4(a) 所示。图 7 ~ 图 9 分别显示了层错模式 A 的总能量、替换形成能和层错能随 Re 元素和 Ru 元素含量变化而变化的趋势。

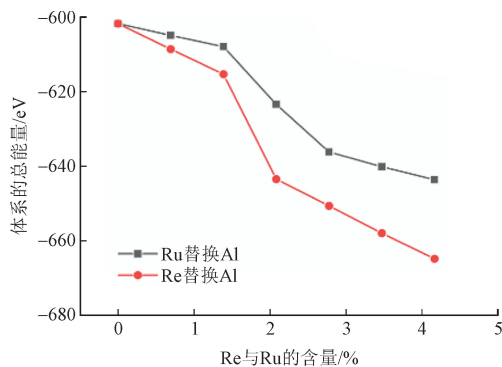


图 7 Re 和 Ru 元素含量与层错模式 A 总能量的关系

Fig. 7 The relationship between the content of Re and Ru and the total energy of the stacking fault mode A

由图 7 可知,总能量的变化趋势与 Ni-Al 二元模型相似,随着掺杂元素含量的增加,体系的总能量逐渐降低,这意味着体系的稳定性随着 Re 元素与 Ru 元素含量的增加而提高。不论掺杂元素的含量是多少,含 Re 体系的稳定性都优于含 Ru 体系。

图 8 显示了层错模式 A 替换形成能的变化趋势,当掺杂元素的含量为 0 ~ 1.4% 时,体系的替换形成能基本保持稳定。当 Re 或 Ru 的含量大于 1.4% 时,体系的替换形成能迅速降低。当 Re 含量约为 2.1% 时,Re 替换 Al 的体系的替换形成能最低;当 Ru 含量约为 2.8% 时,Ru 替换 Al 的体系的替

换形成能最低。随着掺杂元素含量的继续增加,含 Re 和含 Ru 体系的替换形成能再次逐渐增加。这表明,当 Re 的含量约为 2.1% 而 Ru 的含量约 2.8% 时,体系更容易实现掺杂行为,如果 Re、Ru 的含量大于这些值时,掺杂行为逐渐变得困难。

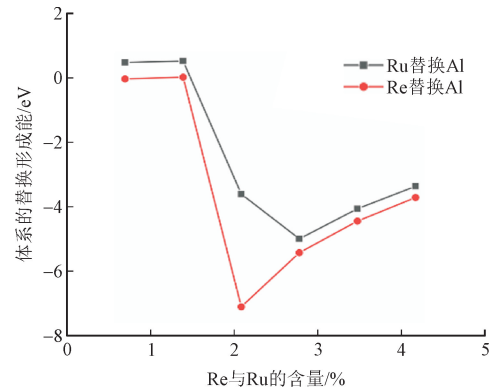


图 8 Re 和 Ru 元素含量与层错模式 A 替换形成能的关系

Fig. 8 The relationship between the content of Re and Ru and the substitution formation energy of the stacking fault mode A

图 9 显示了掺杂元素含量的变化对层错模式 A 的层错能的影响。

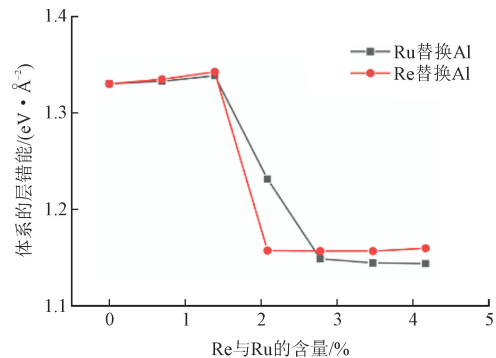


图 9 Re 和 Ru 元素含量与层错模式 A 层错能的关系

Fig. 9 The relationship between the content of Re and Ru and the stacking fault energy of the stacking fault mode A

由图 9 可知,当掺杂元素含量低于 1.4% 时,掺杂元素含量的增加可以略微提高体系的层错能,这一点能够从以往的研究结果中得到验证^[38]。对于含 Re 的体系,当 Re 含量大于 2.1% 时,体系的层错能降低;而对于含 Ru 的体系,当 Ru 含量大于 2.8% 时,体系的层错能降低。这表明,当掺杂元素 Ru 的含量达到一定值时,可以降低体系的层错能,这与 LI 等^[21]的研究结论一致。此外,如果 Re 的含量继续增加,含 Re 体系的层错能基本没有变化,当 Ru 的含量继续升高时,含 Ru 体系的层错能也基本保持不变。因此,结合掺杂元素含量的变化对总能量、替换形成能和层错能的影响,可以得出,当 Re 含量约为

2.1%, Ru 含量约为 2.8% 时,各自体系易于发生掺杂现象,体系的层错能也将基本达到最低值。

2.2.2 层错模式 B 的稳定性研究

层错模式 B 是在 Ni-Al 二元模型的 XY 平面方向上去除一层 Ni 原子而获得的,如图 4(b) 所示。图 10~图 12 分别显示了层错模式 B 的总能量、替换形成能和层错能随 Re 元素和 Ru 元素含量变化而变化的趋势。

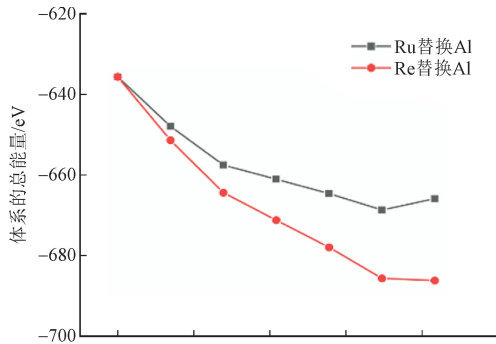


图 10 Re 和 Ru 元素含量与层错模式 B 总能量的关系

Fig. 10 The relationship between the content of Re and Ru and the total energy of the stacking fault mode B

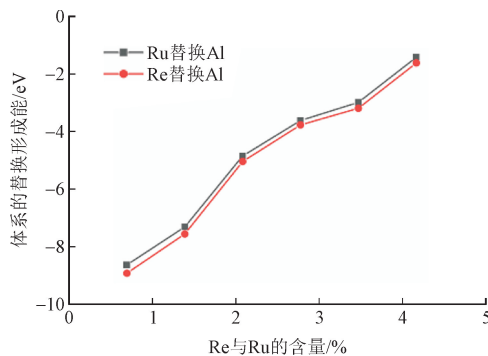


图 11 Re 和 Ru 元素含量与层错模式 B 替换形成能的关系

Fig. 11 The relationship between the content of Re and Ru and the substitution formation energy of the stacking fault mode B

由图 10 可知,对于层错模式 B,难熔元素的掺杂降低了体系的总能量,从而提高了体系的稳定性。对于 Re 替换 Al 的体系,随着掺杂元素含量的增加,体系的总能量逐渐降低,当 Re 含量约为 3.5% 时,体系的总能量接近最低值。类似地,对于 Ru 替换 Al 的体系,当 Ru 的含量约为 3.5% 时,体系的总能量达到最低值,然后总能量随着 Ru 含量的继续增加而略微增加,也就是说,当 Ru 含量约为 3.5% 时,Ru 替换 Al 的体系是最稳定的。将 Re 替换 Al 的体系与用 Ru 替换 Al 的体系相比较,可知当 Re 或 Ru 的含量约为 3.5% 时,用 Re 替换 Al 的体系总能量低于用 Ru 替换 Al 的体系,此时体系也是最稳定的。

至于掺杂元素含量的变化导致的掺杂难易程度

的影响,由图 11 可知,随着体系中掺杂元素 (Re、Ru) 含量的增加,体系的替换形成能也逐渐增加。因此,对于层错模式 B,虽然掺杂元素含量的增加可以提高体系的稳定性,但难熔元素的掺杂难度也变得越来越高。

此外,由图 12 可知,掺杂元素 Re 和 Ru 都可以降低体系的层错能。对于用 Re 替换 Al 的体系,当 Re 含量从 0 上升至 1.4% 左右时,层错能迅速降低。当 Re 含量约为 1.4% ~ 3.5% 时,层错能基本上保持不变。而当 Re 含量大于 3.5% 后,继续增加 Re 的含量将会使体系的层错能重新升高。对于层错能的变化,Ru 替换 Al 的体系的变化趋势与 Re 替换 Al 的体系相似。在一定的掺杂元素含量的范围内将 Ru 掺杂到体系中可以降低体系的层错能,这一结论同以往研究者的结论^[21,39]一致。值得说明的是,我们还进一步研究发现,当 Ru 元素含量约为 3.5% 时,体系的层错能最低,但当掺杂元素的含量大于 3.5% 时,体系的层错能会再次升高。这表明掺杂元素 (Re 和 Ru) 可以降低层错能,并且当掺杂元素的含量约为 3.5% 时,存在最低的层错能。此外,从图 12 可以看出,当掺杂元素含量小于 3% 时,Re 替换 Al 的体系的层错能总是低于 Ru 替换 Al 的体系。结合图 10 和图 11 中体系的总能量和替换形成能的分析,可以更加确定 Re 替换 Al 的体系是最稳定的。

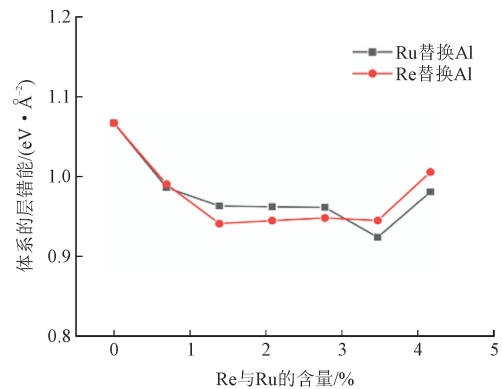


图 12 Re 和 Ru 元素含量与层错模式 B 层错能的关系

Fig. 12 The relationship between the content of Re and Ru and the stacking fault energy of the stacking fault mode B

3 结论

本研究采用第一性原理计算,研究了 Ni-Al 二元模型镍基单晶高温合金的稳定性和掺杂元素的占位倾向。建立了 Ni-Al 二元模型和基于此模型两种不同的层错模式。计算了不同 Re 和 Ru 元素含

量对 Ni-Al 二元模型镍基单晶高温合金的稳定性、占位倾向以及层错的影响。主要结论如下。

1) 基于对 Ni-Al 二元模型镍基单晶高温合金的第一性原理计算,发现掺杂 Re 和 Ru 元素可以提高体系的稳定性。掺杂元素 Re 和 Ru 替换 Ni-Al 二元模型中 Al 原子比替换 Ni 原子的体系更稳定,而且使用 Re 替换 Al 的体系稳定性最好。当 Re 和 Ru 元素的含量约为 1.4% 时,体系的替换形成能相对较低,且更容易替换 Al 原子。

2) 基于去除 Ni-Al 二元模型中一层原子获得两种不同层错模式的分析,发现随着 Re 和 Ru 元素含量的增加,体系的总能量逐渐降低,稳定性得到提高。同时,相较于用 Ru 替换 Al 原子,使用 Re 替换 Al 原子可以使体系的稳定性更好,替换形成能更低。但体系稳定性最好、替换形成能和层错能最低时所对应的 Re 含量取决于所选择的层错模式。

参考文献:

- [1] 孙万超, 陆山. 考虑应力集中的镍基单晶合金低周疲劳公式[J]. 应用力学学报, 2013, 30(2):273-277.
SUN Wanchao, LU Shan. Fatigue life prediction of single crystal nickel-based superalloys by considering stress concentration[J]. Chinese journal of applied mechanics, 2013, 30(2):273-277 (in Chinese).
- [2] 郭建亭. 高温合金在能源工业领域中的应用现状与发展[J]. 金属学报, 2010, 46(5):513-527.
GUO Jianting. The current situation of application and development of superalloys in the fields of energy industry[J]. Acta metallurgica Sinica, 2010, 46(5):513-527 (in Chinese).
- [3] POLLOCK T M, TIN S. Nickel-based superalloys for advanced turbine engines; chemistry, microstructure and properties [J]. Journal of propulsion and power, 2006, 22(2):361-374.
- [4] KAWAGISHI K, YEH A C, YOKOKAWA T, et al. Development of an oxidation-resistant high-strength sixth-generation single-crystal superalloy TMS-238[M]//HURON E S, REED R C, HARDY M C, et al. Superalloys 2012. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, Inc., 2012:189-195.
- [5] 于松, 王崇愚, 于涛. 嵌入原子法研究 Ni₃Al 中点缺陷以及 Re 择优占位和集团化[J]. 物理学报, 2007, 56(6):3212-3218.
YU Song, WANG Chongyu, YU Tao. Study of the point defect, Re site, and Re cluster in Re embedded Ni₃Al using the embedded atom method[J]. Acta physica Sinica, 2007, 56(6):3212-3218 (in Chinese).
- [6] MOTTURA A, FINNIS M W, REED R C. On the possibility of Rhenium clustering in nickel-based superalloys[J]. Acta materialia, 2012, 60(6/7):2866-2872.
- [7] TIAN S G, SU Y, QIAN B J, et al. Creep behavior of a single crystal nickel-based superalloy containing 4.2% Re[J]. Materials & design, 2012, 37:236-242.
- [8] HUANG M, CHENG Z Y, XIONG J C, et al. Coupling between Re segregation and γ/γ' interfacial dislocations during high-temperature, low-stress creep of a nickel-based single-crystal superalloy[J]. Acta materialia, 2014, 76:294-305.
- [9] FLEISCHMANN E, MILLER M K, AFFELDT E, et al. Quantitative experimental determination of the solid solution hardening potential of rhenium, tungsten and molybdenum in single-crystal nickel-based superalloys [J]. Acta materialia, 2015, 87:350-356.
- [10] RETTIG R, MATUSZEWSKI K, M 8 1BDBR3A, et al. Development of a low-density rhenium-free single crystal nickel-based superalloy by application of numerical multi-criteria optimization using thermodynamic calculations[C]//Proceedings of the 13th International Symposium of Superalloys. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, Inc., 2016:35-44.
- [11] MATUSZEWSKI K, RETTIG R, MATYSIAK H, et al. Effect of ruthenium on the precipitation of topologically close packed phases in Ni-based superalloys of 3rd and 4th generation[J]. Acta materialia, 2015, 95:274-283.
- [12] GAO S, ZHOU Y Z, LI C F, et al. Effects of platinum group metals addition on the precipitation of topologically close-packed phase in Ni-base single crystal superalloys [J]. Journal of alloys and compounds, 2016, 671:458-464.
- [13] REED R C, YEH A C, TIN S, et al. Identification of the partitioning characteristics of ruthenium in single crystal superalloys using atom probe tomography [J]. Scripta materialia, 2004, 51(4):327-331.
- [14] 文敏儒. 过渡族金属元素对镍基合金力学性能影响的第一原理研究[D]. 北京:清华大学, 2017.
- [15] JIANG C, GLEESON B. Site preference of transition metal elements in Ni₃Al[J]. Scripta materialia, 2006, 55(5):433-436.
- [16] JIANG C, SORDELET D J, GLEESON B. Site preference of ternary alloying elements in Ni₃Al: a first-principles study[J]. Acta materialia, 2006, 54(4):1147-1154.
- [17] ZHOU Y, MAO Z G, BOOTH-MORRISON C, et al. The partitioning and site preference of rhenium or ruthenium in model nickel-based superalloys: an atom-probe tomographic and first-principles study[J]. Applied physics letters, 2008, 93(17):171905.
- [18] YU X X, WANG C Y, ZHANG X N, et al. Synergistic effect of Rhenium and ruthenium in nickel-based single-crystal superalloys [J]. Journal of alloys and compounds, 2014, 582:299-304.
- [19] MITROKHIN Y S, BELASH V P, KLIMOVA I N, et al. Site preference of ternary alloying elements in Ni₃Al-X (X = Co, Nb): a first-principles calculations in combination with XPS study[J]. Materials research express, 2017, 4(2):025016.
- [20] RUAN H G, HUANG F X, ZHANG Z C, et al. Ti and Nb addition to Ni₃Al: site preferences and alloying efficiency from first principles calculations[J]. Materials science-medziagotyra, 2017, 23(4):307-312.
- [21] LI W J, WANG C Y. Doping effects on the stacking fault energies

- of the γ' phase in Ni-based superalloys[J]. Chinese physics b, 2020, 29(2):026401.
- [22] SHANG S L, ZACHERL C L, FANG H Z, et al. Effects of alloying element and temperature on the stacking fault energies of dilute Ni-base superalloys[J]. Journal of physics: condensed matter, 2012, 24(50):505403.
- [23] YU X X, WANG C Y. The effects of alloying elements on generalized stacking fault energies, strength and ductility of γ' -Ni₃Al[J]. Materials science and engineering: a, 2012, 539:38-41.
- [24] KUMAR A, CHERNATYNSKIY A, HONG M, et al. An Ab initio investigation of the effect of alloying elements on the elastic properties and magnetic behavior of Ni₃Al[J]. Computational materials science, 2015, 101:39-46.
- [25] KUMAR A, CHERNATYNSKIY A, LIANG T, et al. Charge optimized many-body (COMB) potential for dynamical simulation of Ni-Al phases[J]. Journal of physics: condensed matter, 2015, 27(33):336302.
- [26] KRESSE G, HAFNER J. Ab initio Hellmann-Feynman molecular dynamics for liquid metals[J]. Journal of non-crystalline solids, 1993, 156-158, Part 2:956-960.
- [27] KRESSE G, FURTHMÜLLER J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set[J]. Physical review b, 1996, 54(16):11169-11186.
- [28] BLÖCHL P E. Projector augmented-wave method[J]. Physical review b, 1994, 50(24):17953-17979.
- [29] BURKE K, PERDEW J P, LEVY M. Improving energies by using exact electron densities[J]. Physical review a, 1996, 53(5):R2915-R2917.
- [30] LI C, SHANG J, KOU L, et al. Synergistic effect of alloying elements doping and external pressure on the elastic property of Ni₃Al: a first-principles study[J]. AIP advances, 2015, 5(7):077136.
- [31] WEN M R, WANG C Y. Lattice stability and the effect of Co and Re on the ideal strength of Ni: first-principles study of uniaxial tensile deformation[J]. Chinese physics b, 2017, 26(9):093106.
- [32] KOHAN A F, CEDER G, MORGAN D, et al. First-principles study of native point defects in ZnO[J]. Physical review b, 2000, 61(22):15019-15027.
- [33] ZHU C X, YU T, WANG C Y, et al. First-principles study of Ni/Ni₃Al interface doped with Re, Ta and W[J]. Computational materials science, 2020, 175:109586.
- [34] YAN J A, WANG C Y, WANG S Y. Generalized-stacking-fault energy and dislocation properties in bcc Fe: a first-principles study[J]. Physical review b, 2004, 70(17):174105.
- [35] YANG W C, QU P F, SUN J C, et al. Effect of alloying elements on stacking fault energies of γ and γ' phases in Ni-based superalloy calculated by first principles[J]. Vacuum, 2020, 181:109682.
- [36] EURICH N C, BRISTOWE P D. Segregation of alloying elements to intrinsic and extrinsic stacking faults in γ' -Ni₃Al via first principles calculations[J]. Scripta materialia, 2015, 102:87-90.
- [37] ZHU C X, YU T. Effects of Re, Ta, and W in [110] (001) dislocation core of γ/γ' interface to Ni-based superalloys: First-principles study[J]. Chinese physics b, 2020, 29(9):096101.
- [38] 胡雪兰, 孙小清, 王梦媛, 等. Ta 和 Re 对 Ni/Ni₃Al 相界面断裂强度和蠕变强度的影响[J]. 物理学报, 2023, 72(6):72-80.
- HU Xuelan, SUN Xiaoqing, WANG Mengyuan, et al. Effect of Ta and Re on the fracture strength and creep strength of Ni/Ni₃Al interface[J]. Acta physica Sinica, 2023, 72(6):72-80 (in Chinese).
- [39] WANG C, WANG C Y. Density functional theory study of Ni/Ni₃Al interface alloying with Re and Ru[J]. Surface science, 2008, 602(14):2604-2609.

(编辑 张璐)