

# Ni<sub>3</sub>Al 中 Re 诱导缺陷对螺位错交滑移的影响

易洲<sup>1,2</sup>, 胡佳<sup>1</sup>, 邓永和<sup>1</sup>, 陈义<sup>3</sup>, 文大东<sup>1</sup>, 高明<sup>1</sup>, 彭平<sup>2</sup>

(1. 湖南工程学院 计算科学与电子学院, 湖南 湘潭 411104)

(2. 湖南大学 材料科学与工程学院, 湖南 长沙 410082)

(3. 湖南工程学院 机械工程学院, 湖南 湘潭 411104)

**摘要:** Ni<sub>3</sub>Al 的高温异常流变行为与 1/2[ $\bar{1}$ 10](111) 超级部分位错的交滑移密切相关, 本工作利用第一性原理计算探究 Re 在 Ni<sub>3</sub>Al 晶体中的占位倾向及 Re 效应对 Ni<sub>3</sub>Al 中位错形核与运动的影响。由 Re 占据 Ni<sub>3</sub>Al 不同晶格点位所对应的点缺陷形成焓及能量因子  $E_{\text{Re-Re}}^{\text{initial} \rightarrow \text{final}}$ , 可知单个 Re 原子在 Ni<sub>3</sub>Al 中优先占据 Al 位, 2 个 Re 原子优先占据 Al-Al 位。通过对 Ni<sub>3</sub>Al 晶体 [ $\bar{1}$ 10](111) 和 [11 $\bar{2}$ ](111) 滑移系广义堆垛层错能的计算, 发现 Re 原子占据 Al 位能促进 1/2[ $\bar{1}$ 10](111) 超级部分位错的交滑移。2 个 Re 原子垂直滑移方向排列比沿着滑移方向排列能有效阻碍位错形核与运动; 2 个 Re 原子分布在相邻 (111) 原子面上比排列在同一个 (111) 原子面上时会进一步促进螺位错的交滑移。分析缺陷 Re<sub>A</sub> 和 Re<sub>B</sub> 间的关联能  $\Delta E^{\text{Re}_A + \text{Re}_B}(d)$  对 Ni<sub>3</sub>Al 晶体 1/2[ $\bar{1}$ 10](111) 超级部分位错交滑移的影响, 结果表明缺陷 Re<sub>A</sub> 和 Re<sub>B</sub> 间较弱的交互作用有利于改善高温时 Ni<sub>3</sub>Al 的异常流变行为。Re 原子优先占据 Al 位置提高 Ni<sub>3</sub>Al 的屈服强度能够归功于 Re<sub>Al</sub>-Re<sub>Al</sub> 间的弱交互作用。

**关键词:** Ni<sub>3</sub>Al; 广义堆垛层错能; 交滑移; 关联能

**中图分类号:** TG146.1+5

**文献标识码:** A

**文章编号:** 1002-185X(2022)10-3689-10

镍基单晶高温合金主要由 L1<sub>2</sub> 结构的  $\gamma'$ -Ni<sub>3</sub>Al 强化相嵌入到 fcc 结构的  $\gamma$ -Ni 基体所组成, 由于合金在严苛的服役环境(超高温、超高压、超高应力)下拥有优异的高温机械性能, 故而在航空发动机燃烧室得到广泛应用<sup>[1-4]</sup>。镍基单晶高温合金的强度主要来自  $\gamma$  基体的固溶强化、 $\gamma'$  强化相的异常屈服强度及  $\gamma/\gamma'$  的界面强化<sup>[5]</sup>。这类强化与难熔金属元素的掺杂密切相关, 例如对应 Re 的含量(质量分数)约为 3% 和 6% 的第 2 代和第 3 代镍基单晶高温合金, 它们的承温能力在第 1 代基础上能提高 30 和 60 °C<sup>[6]</sup>, 通常 Re 掺杂导致合金机械强度增强的作用叫作合金的 Re 效应<sup>[7]</sup>。Re 掺杂不仅降低  $\gamma$  基体的内禀堆垛层错能<sup>[8]</sup>, 还增大  $\gamma'$  强化相的反相畴界层错能<sup>[9]</sup>, 且能促进  $\gamma'$  强化相螺型位错的交滑移, 进而提高镍基单晶高温合金的综合蠕变强度, 尤其是在高温下的屈服强度。

镍基单晶高温合金在高温蠕变时,  $\langle 110 \rangle \{111\}$  超级位错剪切进入  $\gamma'$  强化相中,  $\langle 110 \rangle \{111\}$  超级位错分解成 2 个 1/2  $\langle 110 \rangle \{111\}$  超级部分位错并在 2 个位错间产生反相畴界 (APB) 结构。其分解过程如下:

$\langle 110 \rangle \{111\} \rightarrow 1/2 \langle 110 \rangle \{111\} + \text{APB} + 1/2 \langle 110 \rangle \{111\}$ 。在  $\gamma'$  强化相中, 1/2  $\langle 110 \rangle \{111\}$  超级部分位错滑移时在  $\langle 112 \rangle \{111\}$  方向存在一个低的堆垛层错组态, 表明位错在  $\langle 110 \rangle$  方向形核和运动相对于  $\langle 112 \rangle$  方向会更困难<sup>[10]</sup>。所以超级部分位错会分解成 2 个 1/6[ $\bar{1}$ 1 $\bar{2}$ ](111) Shockley 部分位错并产生一个复合堆垛层错 (CSF), 过程为:  $1/2 \langle 110 \rangle \{111\} \rightarrow 1/6 \langle 112 \rangle \{111\} + \text{CSF} + 1/6 \langle 112 \rangle \{111\}$ 。镍基单晶高温合金中 Ni<sub>3</sub>Al 晶体很大程度决定了合金的高温形变抗力, 高温时 Ni<sub>3</sub>Al 晶体有屈服应力的反常温度依赖性<sup>[11]</sup>。 $\gamma'$  强化相在高温时的反常流变行为是由于螺型位错从 (111) 主滑移面到 (001) 面上的热激活交滑移引起的, 螺型位错交滑移会形成 Kear-Wiltsdorf (KW) 位错锁, 导致后续位错的滑移受到限制<sup>[12]</sup>。Ni<sub>3</sub>Al 晶体 (111) 面的全位错由 4 个 Shockley 部分位错组成, 分别包围 1 个 APB 和 2 个 CSF<sup>[13,14]</sup>, 如图 1 所示。如果能在  $\gamma'$  强化相中促进螺型位错交滑移形成位错锁, 就能导致更高的流变应力, 从而对镍基单晶高温合金的强度提供保证。

为了获得 Ni<sub>3</sub>Al 晶体位错滑移调制蠕变的信息, 大

收稿日期: 2021-09-23

基金项目: 国家自然科学基金 (51871096, 52071136)

作者简介: 易洲, 男, 1989 年生, 博士, 讲师, 湖南工程学院计算科学与电子学院, 湖南 湘潭 411104, 电话: 0731-58683584, E-mail: yizhou@hnu.edu.cn

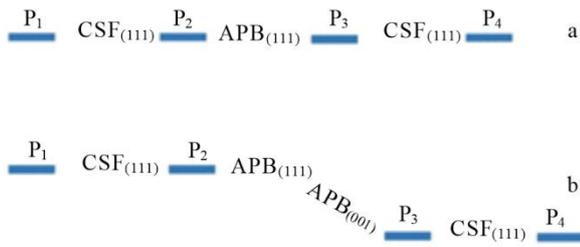


图 1 Ni<sub>3</sub>Al 螺型错交滑移示意图

Fig.1 Schematic diagrams of a cross-slip of screw dislocations in Ni<sub>3</sub>Al crystals: (a) before cross-slip and (b) after cross-slip

量工作研究了 Ni<sub>3</sub>Al 晶体中  $1/2\langle 110 \rangle\{111\}$  超级部分位错的交滑移机制<sup>[11,15-17]</sup>。例如, Wang 等人<sup>[18]</sup>探究了 Re 和 W 对 Ni<sub>3</sub>Al 晶体  $\langle 110 \rangle\{111\}$  和  $\langle 112 \rangle\{111\}$  滑移系中的广义堆垛层错能量的影响。结果表明 Re 和 W 的掺杂不仅显著提高  $\{111\}$  面上的 APB 能量和 CSF 能量, 而且还能增加它们的不稳定层错能, 且 Re 和 W 能有效阻止  $1/2\langle 110 \rangle\{111\}$  超级部分位错和  $1/6\langle 112 \rangle\{111\}$  Shockley 部分位错的发射、繁殖和运动。此外, Re 和 W 的掺杂还可以降低  $1/2\langle 110 \rangle\{111\}$  超级部分位错的交滑移激活焓<sup>[15]</sup>, 表明 Re 和 W 的加入会促进螺型位错的交滑移。有关实验结果显示在不含 Re 的镍基单晶高温合金中,  $\gamma'$ -Ni<sub>3</sub>Al 强化相在 980 °C 的蠕变条件下会出现明显的筏排化<sup>[19]</sup>, 当镍基单晶高温合金中掺杂 2% 的 Re (质量分数, 下同), Ni<sub>3</sub>Al 中会观察到 K-W 位错锁, 此时镍基单晶高温合金有低的应变速率和更好的蠕变抗力。若镍基单晶高温合金中 Re 的含量达到 4.2%, 在 1040~1100 °C 的高温条件下会有更为优异的蠕变抗力。

本工作采用第一性原理方法, 首先探究  $\gamma'$ -Ni<sub>3</sub>Al 强化相中掺杂不同浓度的合金 Re 元素时, Re 在 Ni<sub>3</sub>Al 晶

体中的占位模式, 然后考察 Re 元素对广义堆垛层错能及螺型错交滑移的影响, 最后进一步研究掺杂高浓度 Re 元素时, Re 原子之间的交互效应对  $\gamma'$ -Ni<sub>3</sub>Al 强化相位错滑移调制蠕变的影响。

## 1 计算方法与模型

本工作计算均采用基于密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 的第一性原理方法 (Vienna abinitio simulation package, VASP) 计算程序<sup>[20]</sup>。使用投影缀加平面波 (PAW)<sup>[21]</sup>和广义梯度近似 (GGA-PBE)<sup>[22]</sup>来描述离子与电子及电子与电子间的相互作用。在 Ni<sub>3</sub>Al 晶体计算中, 截断能量定为 350 eV。构建  $3 \times 3 \times 3$  共计 108 个原子的 Ni<sub>3</sub>Al 超胞模型来探究 Re 元素在 Ni<sub>3</sub>Al 晶体中的占位倾向, 而计算 Ni<sub>3</sub>Al 晶体的广义堆垛层错能曲线则是采用沿  $[11\bar{2}]$ 、 $[\bar{1}10]$ 、 $[111]$  这 3 个晶向重定义晶格而构建的共计 96 个原子的超胞模型, 对应于上述 2 类超胞模型的布里渊区  $k$  点分别取为  $4 \times 4 \times 4$  和  $5 \times 7 \times 1$ 。计算过程中超胞原子均需全面优化弛豫, 即力的收敛判据为每个原子的受力均小于 0.09 eV/nm, 电子自洽的能量收敛判据为  $10^{-5}$  eV。

如图 2a、2b 所示, 构建沿  $[11\bar{2}]$ 、 $[\bar{1}10]$ 、 $[111]$  这 3 个晶向重定义晶格的超胞模型来计算 Ni<sub>3</sub>Al 晶体的广义堆垛层错能。这 96 个原子的超胞模型包含 Ni<sub>3</sub>Al 晶体沿  $(111)$  密排面构成的堆垛顺序为 ABCABCABCABC 的结构, 2 个相邻超胞的表面加入一个 1.2 nm 的真空层来消除超胞间的相互影响。为防止表面重构, Ni<sub>3</sub>Al 超胞模型上下表面的一层原子固定不动, 其余位置的原子也只能沿垂直于滑移面的方向优化弛豫。计算 Ni<sub>3</sub>Al 广义堆垛层错能的方法是在 12 层的 Ni<sub>3</sub>Al 超胞模型中, 固定 Ni<sub>3</sub>Al 超胞下半部分的 6 层原子不动, 而使其上部分 6

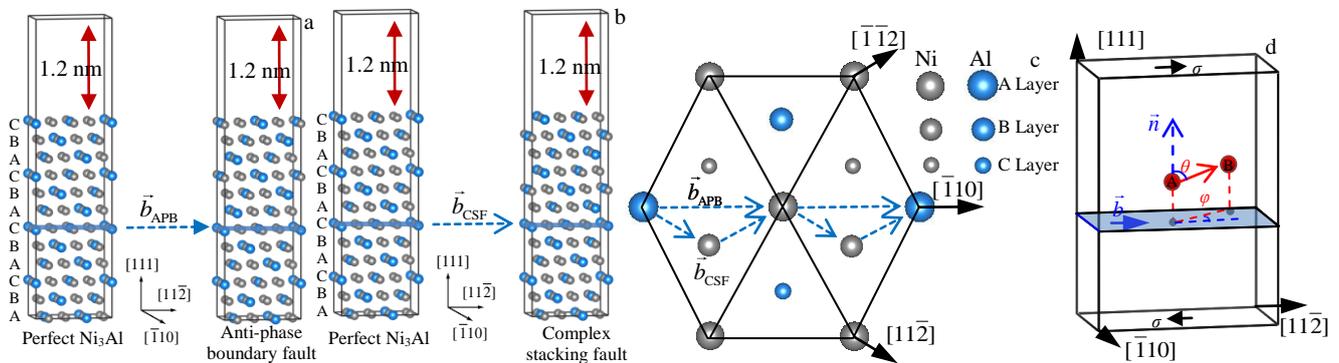


图 2 Ni<sub>3</sub>Al 晶体在  $[\bar{1}10]\{111\}$  滑移系反相畴界层错模型图, 在  $[11\bar{2}]\{111\}$  滑移系复合堆垛层错模型图, 在  $(111)$  面上形成 2 种层错的 Burger 矢量, 以及 Ni<sub>3</sub>Al 超胞中 Re<sub>A</sub> 和 Re<sub>B</sub> 缺陷的距离与方向

Fig.2 Model diagrams of Ni<sub>3</sub>Al crystal in  $[\bar{1}10]\{111\}$  slip system APB fault (a) and  $[11\bar{2}]\{111\}$  slip system CSF (b); Burger's vectors of two kinds of stacking faults formed on  $(111)$  plane of Ni<sub>3</sub>Al crystal (c); distance and direction of Re<sub>A</sub> and Re<sub>B</sub> defects in Ni<sub>3</sub>Al supercell (d)

层原子沿指定方向滑移一个伯格斯矢量, 伯格斯矢量示意图见图 2c 所示。沿着  $[\bar{1}10](111)$  滑移方向移动  $b_{\text{APB}} = a_0 / 2[\bar{1}10]$  距离, 可得到反相畴界层错结构, 见图 2a 所示。在图 2b 中, 沿  $[11\bar{2}](111)$  滑移方向移动  $b_{\text{CSF}} = a_0 / 6[11\bar{2}]$  距离, 即可得到复合堆垛层错结构。

Ni<sub>3</sub>Al 超胞中掺杂 1 个 Re 原子时, Re 原子替换 Ni<sub>3</sub>Al 晶体中的 Al 原子表示为模型 Re<sub>Al</sub>, 同理, 模型 Re<sub>Ni</sub> 表示 Re 原子替换 Ni<sub>3</sub>Al 晶体中的 Ni 原子。在 Ni<sub>3</sub>Al 晶体中掺杂 2 个 Re 原子时, 则表示为模型 M<sub>Re<sub>A</sub>Re<sub>B</sub></sub><sup>Re<sub>A</sub></sup>( $d_0$ ), 此模型中 A、B 表示的是 Al 位置或 Ni 位置, 其中 Ni 位置还可被区分为 Ni1、Ni2 及 Ni3 3 个非等效位,  $d_0$  表示 A、B 原子间的初始间距, 被记作 1<sup>st</sup>、2<sup>nd</sup>、3<sup>rd</sup>、4<sup>th</sup>、5<sup>th</sup> 和 6<sup>th</sup>, 对应的距离为  $\sqrt{2}a_0/2$ 、 $a_0$ 、 $\sqrt{6}a_0/2$ 、 $\sqrt{2}a_0$ 、 $\sqrt{10}a_0/2$  和  $\sqrt{3}a_0$ ,  $a_0$  是 Ni<sub>3</sub>Al 的最优晶格参数。例如 M<sub>Re<sub>Al</sub>Re<sub>Ni</sub></sub><sup>Re<sub>Al</sub></sup>(5<sup>th</sup>) 表示 Ni<sub>3</sub>Al 晶体中一个 Al 原子被 Re 替换, 另外一个 Re 替换 Ni 原子, 被替换的 Al 和 Ni 是第 5 近邻的距离关系。在模型 M<sub>Re<sub>A</sub>Re<sub>B</sub></sub><sup>Re<sub>A</sub></sup>( $d_0$ ) 中, 除了要考虑 2 个 Re 原子间的距离外, Re 原子的位置取向 ( $\theta$  和  $\varphi$ ) 也不能忽略。如图 2d 所示, 本工作只考虑 2 种典型的 Re 原子掺杂模式, 第 1 种掺杂模式是 2 个 Re 原子掺杂在同一个 (111) 原子层上, 即  $h_1=h_2=0$ ; 另 1 种掺杂模式是 2 个 Re 原子掺杂在相邻的 (111) 原子层上, 即  $h_1=0$ , 但是即  $h_2=h_0 \neq 0$ ,  $h_0 = a_0 / \sqrt{3}$  是重定义晶格超胞模型的层间距。2 个掺杂 Re 原子在同一个 (111) 原子层排布时, 模型被标记为 H<sub>Re<sub>A</sub>Re<sub>B</sub></sub><sup>Re<sub>A</sub></sup>( $\vec{d}_0$ )。  $\vec{d}_0$  等于  $d_0[hkl]$ , 表示 A 和 B 位置的排列取向是沿  $[hkl]$  方向, 且 A 和 B 间的距离是  $d_0$ 。当 2 个掺杂 Re 原子在相邻原子层排布时, 模型标记为 V<sub>Re<sub>A</sub>Re<sub>B</sub></sub><sup>Re<sub>A</sub></sup>( $\vec{d}_0$ ), 表示第 2 个 Re 原子掺杂是位于第 1 个掺杂 Re 原子相邻的 (111) 原子层上。

## 2 结果分析与讨论

### 2.1 Re 原子在 Ni<sub>3</sub>Al 晶体中的占位倾向

本工作计算 Ni<sub>3</sub>Al 晶体的平衡晶格常数是 0.3566 nm, 此晶格常数与实验测得值 0.3571 nm 及计算所得值 0.3567 nm 基本吻合<sup>[23-25]</sup>。在 Ni<sub>3</sub>Al 超胞中, Re 原子掺杂的点缺陷形成焓  $H$  通过式 (1) 计算<sup>[26,27]</sup>:

$$H = E(\text{Ni}_{3x-n}\text{Al}_{x-m}\text{Re}_{n+m}) - E(\text{Ni}_{3x}\text{Al}_x) - (n+m)E(\text{Re}) + nE(\text{Ni}) + mE(\text{Al}) \quad (1)$$

式中,  $E(\text{Ni}_{3x-n}\text{Al}_{x-m}\text{Re}_{n+m})$  是包含掺杂 ( $n+m$ ) 个 Re 原子的 Ni<sub>3</sub>Al-Re 超胞总能量,  $E(\text{Ni}_{3x}\text{Al}_x)$  是完美 L1<sub>2</sub> 结构的 Ni<sub>3</sub>Al 总能量。  $E(\text{Ni})$ ,  $E(\text{Al})$ ,  $E(\text{Re})$  分别是 fcc-Ni, fcc-Al, hcp-Re 的单位原子能量。  $x=3 \times 3 \times 3$  是计算超胞大小, 计算结果列于表 1 中。由表 1 可知,  $H_{\text{ReNi}}$  为 0.996 eV,  $H_{\text{ReAl}}$  为 0.910 eV, 它们的点缺陷形

表 1 Ni<sub>3</sub>Al(Re) 结构优化后 Re 原子间距  $d$ 、点缺陷形成焓  $H_i$  和关联能  $\Delta E^{\text{Re}_A+\text{Re}_B}(d)$

Table 1 Distances  $d$  between Re atoms, point defect formation enthalpies  $H_i$  and correlative energies  $\Delta E^{\text{Re}_A+\text{Re}_B}(d)$  in  $\gamma'$ -Ni<sub>3</sub>Al phases with and without Re-addition after optimization

Model	$d/\times 10^{-1}$ nm	$H_i/\text{eV}$	$\Delta E^{\text{Re}_A+\text{Re}_B}(d)/\text{eV}$
Ni <sub>Al</sub>	-	2.008	-
Al <sub>Ni</sub>	-	-0.968	-
Re <sub>Al</sub>	-	0.910	-
Re <sub>Ni</sub>	-	0.996	-
M <sub>Re<sub>Al</sub>Re<sub>Al</sub></sub> <sup>Re<sub>Al</sub></sup> (2 <sup>nd</sup> )	3.635	1.940	0.120
M <sub>Re<sub>Al</sub>Re<sub>Al</sub></sub> <sup>Re<sub>Al</sub></sup> (4 <sup>th</sup> )	5.075	1.905	0.085
M <sub>Re<sub>Al</sub>Re<sub>Al</sub></sub> <sup>Re<sub>Al</sub></sup> (6 <sup>th</sup> )	6.182	1.834	0.014
M <sub>Re<sub>Al</sub>Re<sub>Ni</sub></sub> <sup>Re<sub>Al</sub></sup> (1 <sup>st</sup> )	2.541	1.827	-0.079
M <sub>Re<sub>Al</sub>Re<sub>Ni</sub></sub> <sup>Re<sub>Al</sub></sup> (3 <sup>rd</sup> )	4.390	1.950	0.044
M <sub>Re<sub>Al</sub>Re<sub>Ni</sub></sub> <sup>Re<sub>Al</sub></sup> (5 <sup>th</sup> )	5.649	1.959	0.053
M <sub>Re<sub>Ni</sub>Re<sub>Ni</sub></sub> <sup>Re<sub>Ni</sub></sup> (1 <sup>st</sup> )	2.431	1.780	-0.212
M <sub>Re<sub>Ni</sub>Re<sub>Ni</sub></sub> <sup>Re<sub>Ni</sub></sup> (2 <sup>nd</sup> )	3.647	2.163	0.171
M <sub>Re<sub>Ni</sub>Re<sub>Ni</sub></sub> <sup>Re<sub>Ni</sub></sup> (3 <sup>rd</sup> )	4.450	2.105	0.113
M <sub>Re<sub>Ni</sub>Re<sub>Ni</sub></sub> <sup>Re<sub>Ni</sub></sup> (4 <sup>th</sup> )	5.132	2.131	0.139
M <sub>Re<sub>Ni</sub>Re<sub>Ni</sub></sub> <sup>Re<sub>Ni</sub></sup> (5 <sup>th</sup> )	5.653	2.051	0.059
M <sub>Re<sub>Ni</sub>Re<sub>Ni</sub></sub> <sup>Re<sub>Ni</sub></sup> (6 <sup>th</sup> )	6.198	1.991	-0.001

成焓都为正值, 表明在 Ni<sub>3</sub>Al 晶体中掺杂 Re 原子, 无论 Re 原子是占据 Al 位置还是 Ni 位置都是一个吸热反应。进一步比较 Re<sub>Al</sub> 与 Re<sub>Ni</sub> 模型的点缺陷形成焓, 可知  $H_{\text{ReAl}} = 0.910 \text{ eV} < H_{\text{ReNi}} = 0.996 \text{ eV}$  表明 Ni<sub>3</sub>Al 晶体中 Re 原子替换 Al 原子的形成能力是高于 Re 原子替换 Ni 原子的, 即在 Ni<sub>3</sub>Al 晶体中掺杂一个 Re 原子时, Re 原子倾向替换 Al 原子。

为了更加准确评估 Ni<sub>3</sub>Al 晶体中 Re 原子的占位模式倾向, 进一步计算 Ni<sub>3</sub>Al 晶体中单个 Re 原子从占据 Ni 原子位置到占据 Al 原子位置时的能量变化, 过程表示为  $E_{\text{Re}}^{\text{Ni} \rightarrow \text{Al}}$ , 如式 (2) 所示<sup>[28,29]</sup>:



式 (2) 表示 Re 原子在 Ni<sub>3</sub>Al 晶体中的转移过程: Re 原子最初占据 Ni 原子位置, 随化学反应使 Re 原子转移到 Al 原子位置, 原来在 Al 位置上的 Al 原子被替换到最初 Re 原子占据的 Ni 原子位置上。  $E_{\text{Re}}^{\text{Ni} \rightarrow \text{Al}}$  表示 Re 原子从 Ni 原子位置转移到 Al 原子位置时, 2 个 Ni<sub>3</sub>Al-Re 系统的能量差, 计算公式如下所示:

$$E_{\text{Re}}^{\text{Ni} \rightarrow \text{Al}} = E(\text{Ni}_{3x}\text{Al}_{x-1}\text{Re}) + E(\text{Ni}_{3x-1}\text{Al}_{x+1}) - E(\text{Ni}_{3x-1}\text{Al}_x\text{Re}) - E(\text{Ni}_{3x}\text{Al}_x) \quad (3)$$

式中,  $E(\text{Ni}_{3x}\text{Al}_{x-1}\text{Re})$  是 Re 原子占据 Al 原子位置时系

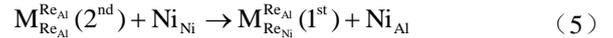
统的总能量,  $E(\text{Ni}_{3x-1}\text{Al}_{x+1})$  是 Al 原子反位占据 Ni 原子位置的总能量,  $E(\text{Ni}_{3x-1}\text{Al}_x\text{Re})$  是 Re 原子占据 Ni 原子位置的总能量,  $E(\text{Ni}_{3x}\text{Al}_x)$  是  $\text{Ni}_3\text{Al}$  的总能量。由式 (1) 中 Re 原子掺杂的点缺陷形成焓  $H$ , 式 (3) 进一步能够表示为:

$$E_{\text{Re}}^{\text{Ni} \rightarrow \text{Al}} = H_{\text{ReAl}} + H_{\text{AlNi}} - H_{\text{ReNi}} \quad (4)$$

$\text{Ni}_3\text{Al}$  晶体中 Re 原子占位倾向可通过如下判据确定<sup>[28,29]</sup>: 若  $E_{\text{Re}}^{\text{Ni} \rightarrow \text{Al}} < 0$ , 可确定 Re 原子在  $\text{Ni}_3\text{Al}$  晶体中倾向占据 Al 原子位置。若  $E_{\text{Re}}^{\text{Ni} \rightarrow \text{Al}} > (H_{\text{AlNi}} + H_{\text{NiAl}})$ , 可确定 Re 原子在  $\text{Ni}_3\text{Al}$  晶体中倾向占据 Ni 原子位置。若  $0 < E_{\text{Re}}^{\text{Ni} \rightarrow \text{Al}} < (H_{\text{AlNi}} + H_{\text{NiAl}})$ ,  $\text{Ni}_3\text{Al}$  晶体中 Re 原子的占据位置模式与  $\text{Ni}_3\text{Al}$  的成分密切相关, 例如,  $\text{Ni}_3\text{Al}$  晶体中 Al 原子富集, 则合金 Re 原子占据 Ni 原子位置; 如果  $\text{Ni}_3\text{Al}$  晶体中 Ni 原子更为富集, 合金 Re 原子会占据 Al 原子位置。在  $3 \times 3 \times 3$  的  $\text{Ni}_3\text{Al}$  超胞模型中掺杂 1 个 Re 原子, 通过计算得到  $E_{\text{Re}}^{\text{Ni} \rightarrow \text{Al}}$  为  $-1.05 \text{ eV}$ , 负的  $E_{\text{Re}}^{\text{Ni} \rightarrow \text{Al}}$  表明  $\text{Ni}_3\text{Al}$  晶体中 Re 原子是优先替换 Al 原子, 这一结论与理论计算<sup>[28,29]</sup>及实验结果<sup>[30]</sup>是吻合的。若在  $3 \times 3 \times 3$  的  $\text{Ni}_3\text{Al}$  超胞模型中掺杂 2 个 Re 原子, 合金 Re 原子在  $\text{Ni}_3\text{Al}$  晶体中的占位更为复杂, 这 2 个 Re 原子既可全部占据 Al 原子位置, 也可全部占据 Ni 原子位置, 还能既占据 Al 原子位置又占据 Ni 原子位置。

进一步探讨在单个 Re 原子掺杂基础上额外掺杂 1 个 Re 原子进入  $\text{Ni}_3\text{Al}$  晶体,  $\text{Ni}_3\text{Al}$  晶体掺杂 2 个 Re

原子的点缺陷形成焓也列于表 1 中。由表 1 可得, 与单个 Re 原子掺杂的点缺陷形成焓比较,  $\text{Ni}_3\text{Al}$  晶体中掺杂 2 个 Re 原子的点缺陷形成焓明显高于单个 Re 原子的点缺陷形成焓, 且点缺陷形成焓的值与 Re 原子占据位置间的距离  $d$  有关。采用单个 Re 原子占位的方法来探究 2 个 Re 原子掺杂在  $\text{Ni}_3\text{Al}$  中的占位情况。依然定义  $E_{\text{Re-Re}}^{\text{initial} \rightarrow \text{final}}$ , 式中上标表示掺杂 2 个 Re 原子在  $\text{Ni}_3\text{Al}$  中的最初和最终状态。例如, 把  $M_{\text{ReAl}}^{\text{ReAl}}(2^{\text{nd}})$  和  $M_{\text{ReNi}}^{\text{ReAl}}(1^{\text{st}})$  当作 2 个 Re 原子在超胞中的最初和最终状态表示为式 (5):



同理,  $E_{\text{Re-Re}}^{\text{initial} \rightarrow \text{final}}$  能够由对应的点缺陷形成焓表示:

$$E_{\text{Re-Re}}^{\text{initial} \rightarrow \text{final}} = H_{\text{ReAl} + \text{ReNi}}(1^{\text{st}}) + H_{\text{NiAl}} - H_{\text{ReAl} + \text{ReAl}}(2^{\text{nd}}) \quad (6)$$

式 (6) 中, 最初和最终状态的转换过程是不可逆的。例如,  $M_{\text{ReAl}}^{\text{ReAl}}(2^{\text{nd}})$  占位转换到  $M_{\text{ReNi}}^{\text{ReAl}}(1^{\text{st}})$  占位的  $E_{\text{Re-Re}}^{\text{initial} \rightarrow \text{final}}$  结果是  $1.90 \text{ eV}$ , 前后过程转换,  $M_{\text{ReNi}}^{\text{ReAl}}(1^{\text{st}})$  占位到  $M_{\text{ReAl}}^{\text{ReAl}}(2^{\text{nd}})$  占位的  $E_{\text{Re-Re}}^{\text{initial} \rightarrow \text{final}}$  是  $-0.86 \text{ eV}$ 。这是由于在最初和最终状态的逆转过程中, 它们分别对应形成的点缺陷是  $\text{Al}_{\text{Ni}}$  反位点缺陷和  $\text{Ni}_{\text{Al}}$  反位点缺陷。表 2 是  $E_{\text{Re-Re}}^{\text{initial} \rightarrow \text{final}}$  的计算结果, 由表 2 可知在  $\text{Ni}_3\text{Al}$  晶体中 2 个 Re 原子间的距离对  $E_{\text{Re-Re}}^{\text{initial} \rightarrow \text{final}}$  是有影响的, 比如从最初  $M_{\text{ReNi}}^{\text{ReAl}}(1^{\text{st}})$  占位到最终  $M_{\text{ReAl}}^{\text{ReAl}}(2^{\text{nd}})$  占位的  $E_{\text{Re-Re}}^{\text{initial} \rightarrow \text{final}}$  是  $-0.86 \text{ eV}$ , 而从最初  $M_{\text{ReNi}}^{\text{ReAl}}(3^{\text{rd}})$  占位到最终  $M_{\text{ReAl}}^{\text{ReAl}}(2^{\text{nd}})$  占位的  $E_{\text{Re-Re}}^{\text{initial} \rightarrow \text{final}}$  是  $-0.98 \text{ eV}$ 。尽管  $E_{\text{Re-Re}}^{\text{initial} \rightarrow \text{final}}$  不能表示由最初转变为最终的具体情况, 但是负的  $E_{\text{Re-Re}}^{\text{initial} \rightarrow \text{final}}$  表明

表 2 Re-Re 原子掺杂在  $\text{Ni}_3\text{Al}$  超胞模型中的能量因子  $E_{\text{Re-Re}}^{\text{initial} \rightarrow \text{final}}$

Table 2 Energy factors  $E_{\text{Re-Re}}^{\text{initial} \rightarrow \text{final}}$  of Re-Re doping in  $\text{Ni}_3\text{Al}$  supercell model

Final	Initial												
	Al-Al			Al-Ni			Ni-Ni						
	2 <sup>nd</sup>	4 <sup>th</sup>	6 <sup>th</sup>	1 <sup>st</sup>	3 <sup>rd</sup>	5 <sup>th</sup>	1 <sup>st</sup>	2 <sup>nd</sup>	3 <sup>rd</sup>	4 <sup>th</sup>	5 <sup>th</sup>	6 <sup>th</sup>	
Al-Al	2 <sup>nd</sup>	0	0.03	0.10	-0.86	-0.98	-0.99	-1.78	-2.16	-2.10	-2.13	-2.05	-1.99
	4 <sup>th</sup>	-0.03	0	0.07	-0.89	-1.01	-1.02	-1.81	-2.19	-2.14	-2.08	-2.08	-2.02
	6 <sup>th</sup>	-0.10	-0.07	0	-0.96	-1.08	-1.09	-1.88	-2.26	-2.21	-2.23	-2.15	-2.09
Al-Ni	1 <sup>st</sup>	1.90	1.93	0.44	0	-0.12	-0.13	-0.92	-1.30	-1.25	-1.27	-1.19	-1.13
	3 <sup>rd</sup>	2.02	2.05	2.12	0.12	0	-0.01	-0.80	-1.18	-1.12	-1.15	-1.07	-1.01
	5 <sup>th</sup>	2.03	2.06	2.13	0.13	0.01	0	-0.79	-1.17	-1.11	-1.14	-1.06	-1.00
Ni-Ni	1 <sup>st</sup>	3.86	3.89	3.96	1.96	1.84	1.83	0	-0.38	-0.32	-0.35	-0.27	-0.21
	2 <sup>nd</sup>	4.24	4.27	4.34	2.34	2.22	2.21	0.38	0	0.06	0.03	0.11	0.17
	3 <sup>rd</sup>	4.18	4.22	4.29	2.29	2.16	2.15	0.32	-0.06	0	-0.03	0.05	0.11
	4 <sup>th</sup>	4.21	4.24	4.31	2.31	2.19	2.18	0.35	-0.03	0.03	0	0.08	0.14
	5 <sup>th</sup>	4.13	4.16	4.23	2.23	2.11	2.10	0.27	-0.11	-0.05	-0.08	0	0.06
	6 <sup>th</sup>	4.07	4.10	4.17	2.17	2.05	2.04	0.21	-0.17	-0.11	-0.14	-0.06	0

掺杂 2 个 Re 原子在 Ni<sub>3</sub>Al 中是最终占位比最初占位更为稳定。由表 2 中  $E_{\text{Re-Re}}^{\text{initial} \rightarrow \text{final}}$  大小可以判断, 在 Ni<sub>3</sub>Al 中掺杂 2 个 Re 原子时, 相对于 2 个 Re 原子同时占据 Ni 原子位置, 2 个 Re 原子分别占据 Al 原子位置和 Ni 原子位置较为稳定, 但是它的稳定程度是低于 2 个 Re 原子同时占据 Al 原子位置。

2.2 Re 对 Ni<sub>3</sub>Al 中位错形核与运动的影响

在 Ni<sub>3</sub>Al 晶体(111)滑移面上, 沿着  $[\bar{1}10]$  和  $[11\bar{2}]$  滑移方向滑移一个伯格斯矢量距离, 分别能够产生反向畴界层错 (APB) 和复合堆垛层错 (CSF)。图 3 描述单个 Re 原子掺杂在 Ni<sub>3</sub>Al 晶体滑移面上的 Al 位或不等效的 3 个 Ni 位时在  $[\bar{1}10]$ (111)和  $[11\bar{2}]$ (111)滑移系中的广义堆垛层错能曲线。从图 3a 可知, 对比 Re 原子占据 Ni 位, Re 原子占据 Al 位的不稳定层错能  $\gamma_{\text{usf}}$  更大,  $\gamma_{\text{usf}}$  越高, Ni<sub>3</sub>Al 晶体内位错越难发射, 晶体的塑性变形越难发生<sup>[31]</sup>, 所以在  $[\bar{1}10]$ (111)滑移方向, Re 原子占据 Al 位能够更加有效地阻碍 Ni<sub>3</sub>Al 晶体内部  $1/2[\bar{1}10]$ (111) 超级部分位错的形核。同时从表 3 可知, 在  $[\bar{1}10]$ (111)滑移系中纯 Ni<sub>3</sub>Al 晶体的  $\gamma_{\text{usf}}$  为 811 mJ/m<sup>2</sup>, Re<sub>Al</sub> 模型的  $\gamma_{\text{usf}}$  增大 156 mJ/m<sup>2</sup>, Re<sub>Ni1</sub>、Re<sub>Ni2</sub> 和 Re<sub>Ni3</sub> 模型的  $\gamma_{\text{usf}}$  分别减小 104、123 和增大 16 mJ/m<sup>2</sup>。图 3b 中对应的复合堆垛层错在 Ni<sub>3</sub>Al、Re<sub>Al</sub>、Re<sub>Ni1</sub>、Re<sub>Ni2</sub>、Re<sub>Ni3</sub> 模型的  $\gamma_{\text{usf}}$  分别为 233、366、157、211、211 mJ/m<sup>2</sup>。上述结果表明当 Re 原子占据 Ni 位, Ni<sub>3</sub>Al 内部  $1/2[\bar{1}10]$ (111) 超级部分位错和  $1/6[11\bar{2}]$ (111) Shockley 部分位错形核所需克服的形核能垒是最低的, 也就是 Ni<sub>3</sub>Al 晶体中 Re 原子占据 Ni 位时晶体内部的位错更容易形核。而当 Re 原子占据 Al 位,  $[\bar{1}10]$ (111)和  $[11\bar{2}]$ (111)滑移系中对应的  $\gamma_{\text{usf}}$  均增大, 表明在  $\gamma'$ -Ni<sub>3</sub>Al 晶体内部中位错很难发射, 进而阻碍位错的形核。

图 3 进一步得到 Ni<sub>3</sub>Al 晶体的反向畴界层错能量 ( $\gamma_{\text{APB}}$ ) 和复合堆垛层错能量 ( $\gamma_{\text{CSF}}$ ) 的值分别为 203

和 173 mJ/m<sup>2</sup>。  $\gamma_{\text{APB}}$  能够影响  $1/2[\bar{1}10]$ (111) 超级部分位错的交滑移运动,  $\gamma_{\text{APB}}$  值较大时, 由  $1/2[\bar{1}10]$ (111) 超级部分位错相互作用产生的切向力可显著增大超位错的交滑移速率<sup>[17]</sup>, 图 3a 显示当 Re 原子占据 Al 位, 能够增大  $\gamma_{\text{APB}}$ 。同时  $\gamma_{\text{CSF}}$  不仅在很大程度上决定交滑移的驱动力, 还会影响 2 个  $1/6[11\bar{2}]$ (111) Shockley 部分位错之间的宽度及复合堆垛层错 (CSF) 的稳定程度。要把 2 个  $1/6[11\bar{2}]$ (111) Shockley 部分位错束集为 1 个  $1/2[\bar{1}10]$ (111) 超级部分位错就与它们间的宽度及 CSF 的稳定程度直接相关, Re 原子占据 Al 位能增大  $\gamma_{\text{CSF}}$ , 导致 CSF 区域的宽度变小, 以及使 CSF 结构倾向不稳定, 进而使 2 个  $1/6[11\bar{2}]$ (111) Shockley 部分位错的束集能量降低<sup>[15]</sup>。

从表 3 和图 3 还能得到 Re 占据 Ni 的 3 个非等效位时, 即 Re<sub>Ni1</sub>、Re<sub>Ni2</sub> 和 Re<sub>Ni3</sub> 模型在  $[\bar{1}10]$ (111)和  $[11\bar{2}]$ (111)滑移系中的层错能都是不同的。因此可以推论 Ni<sub>3</sub>Al 的层错能与 Re 占位密切相关, 图 4 详细展示单个 Re 分别占据不同 Ni 位时局部区域的原子结构<sup>[10]</sup>。从图 4 可知, (111)滑移面上原子的排布在  $[\bar{1}10]$  和  $[11\bar{2}]$  方向上基本不同, 图 4h 中原子在 (111) 滑移面上沿特定滑移方向都会有一个位移  $\Delta x$ , 但 Re 原子和最近邻 Ni 原子或 Al 原子的距离从  $l_0$  到  $l$  的变化是截然不同的。

$$l = [l_0^2 + (\Delta x)^2 - 2l_0\Delta x \cos\delta]^{1/2} \quad (7)$$

这个余弦公式中<sup>[10]</sup>, Re 占据位置的  $l_0$  和  $\Delta x$  是相同的, 而在滑移后  $l$  会产生不同的分布角  $\delta$ 。基于上述分析, Re 原子和最近邻原子的成键会有很大改变。比如在  $[\bar{1}10]$  方向上, Re 分别占据 3 个非等效 Ni 位, 会有 3 个不同的分布角  $\delta$ , 因此 Re<sub>Ni1</sub>、Re<sub>Ni2</sub> 和 Re<sub>Ni3</sub> 模型有 3 个不同的  $\gamma_{\text{usf}}$ 。但在  $[11\bar{2}]$  方向上, 只有 2 个分布角  $\delta$ , Re<sub>Ni2</sub> 和 Re<sub>Ni3</sub> 模型的分布角  $\delta$  是一样的, 这样模型 Re<sub>Ni2</sub> 中键长变化  $\Delta l = l - l_0$  和 Re<sub>Ni3</sub> 模型中键长变化相同, 所以 Re<sub>Ni2</sub> 模型和 Re<sub>Ni3</sub> 模型在  $[11\bar{2}]$  方向上有

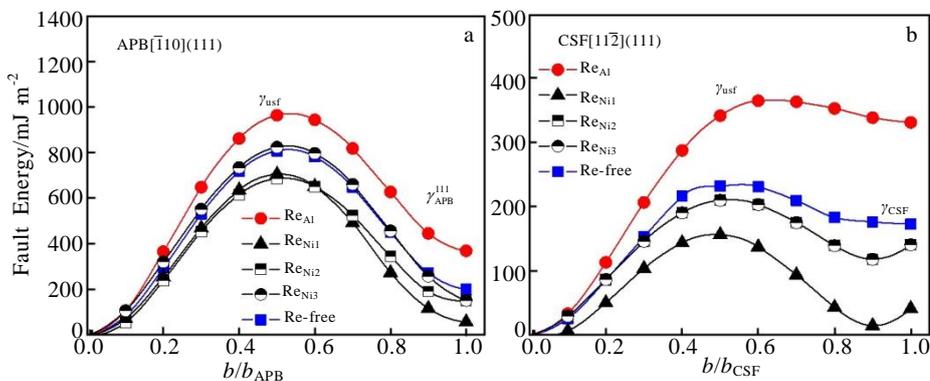


图 3 Ni<sub>3</sub>Al(Re)体系的广义堆垛层错能曲线

Fig.3 Curves of generalized stacking fault energies in Ni<sub>3</sub>Al(Re) models: (a)  $[\bar{1}10]$ (111) direction and (b)  $[11\bar{2}]$ (111) direction

表 3 Ni<sub>3</sub>Al(Re)体系的反相畴层错能  $\gamma_{APB}$ , 复合堆垛层错能  $\gamma_{CSF}$ , 不稳定堆垛层错能  $\gamma_{usf}$  及  $\gamma_{APB}^{111} / \gamma_{APB}^{001}$

**Table 3 Anti-phase boundary energies  $\gamma_{APB}$ , complex stacking fault energies  $\gamma_{CSF}$ , unstable stacking fault energies  $\gamma_{usf}$  and  $\gamma_{APB}^{111} / \gamma_{APB}^{001}$  in  $\gamma'$ -Ni<sub>3</sub>Al(Re) phases ( $[hkl]$  and  $[\theta, \varphi]$  are the orientation from A to B sites as well as corresponding orientation angle related to  $[\bar{1}10](111)$  and  $[11\bar{2}](111)$  slip)**

Model	$[hkl]$	A-B	$[\bar{1}10](111)$			$[11\bar{2}](111)$			$[110](001)$	$\gamma_{APB}^{111} / \gamma_{APB}^{001}$
			$[\theta, \varphi]/(^{\circ})$	$\gamma_{usf}/\text{mJ m}^{-2}$	$\gamma_{APB}^{111}/\text{mJ m}^{-2}$	$[\theta, \varphi]/(^{\circ})$	$\gamma_{usf}/\text{mJ m}^{-2}$	$\gamma_{CSF}/\text{mJ m}^{-2}$	$\gamma_{APB}^{001}/\text{mJ m}^{-2}$	
Re-free	-	-	-	811	203	-	233	173	110	1.84
Re <sub>Al</sub>	-	Al	-	967	302	-	366	332	149	2.02
Re <sub>Ni</sub>	-	Ni1	-	707	59	-	157	42	52	1.13
-	-	Ni2	-	688	154	-	211	141	86	1.79
-	-	Ni3	-	827	154	-	211	141	86	1.79
V <sub>ReAl</sub> <sup>ReAl</sup> (2 <sup>nd</sup> )	[001]	Al-Al	[90, 60]	1023	351	[90, 150]	428	406	162	2.16
H <sub>ReAl</sub> <sup>ReAl</sup> (4 <sup>th</sup> )	$[10\bar{1}]$	Al-Al	[54.8, 90]	1097	481	[54.8, 0]	449	396	198	2.43
H <sub>ReNi</sub> <sup>ReAl</sup> (1 <sup>st</sup> )	$[1\bar{1}0]$	Al-Ni1	[90, 0]	826	87	[90, 90]	241	192	63	1.39
-	$[10\bar{1}]$	Al-Ni2	[90, 60]	973	279	[90, 150]	285	241	157	1.78
-	$[01\bar{1}]$	Al-Ni3	[90, 120]	973	279	[90, 150]	285	241	157	1.78
V <sub>ReNi</sub> <sup>ReAl</sup> (1 <sup>st</sup> )	[110]	Al-Ni1	[35.3, 90]	944	301	[35.3, 180]	345	288	138	2.19
-	[011]	Al-Ni2	[35.3, 30]	899	293	[35.3, 60]	279	293	157	1.87
-	[101]	Al-Ni3	[35.3, 150]	896	293	[35.3, 60]	279	293	156	1.87
H <sub>ReNi</sub> <sup>ReAl</sup> (3 <sup>rd</sup> )	$[11\bar{2}]$	Al-Ni1	[90, 90]	950	265	[90, 180]	258	195	148	1.79
V <sub>ReNi</sub> <sup>ReAl</sup> (3 <sup>rd</sup> )	$[\bar{1}12]$	Al-Ni1	[62, 49]	985	339	[62, 41]	286	208	187	1.82
H <sub>ReNi</sub> <sup>ReNi</sup> (1 <sup>st</sup> )	$[0\bar{1}1]$	Ni1-Ni2	[90, 60]	634	45	[90, 150]	173	39	80	0.56
-	$[\bar{1}01]$	Ni1-Ni3	[90, 120]	714	45	[90, 150]	173	39	80	0.56
-	$[\bar{1}10]$	Ni2-Ni3	[90, 180]	698	60	[90, 90]	131	22	108	0.56
V <sub>ReNi</sub> <sup>ReNi</sup> (1 <sup>st</sup> )	[110]	Ni3-Ni3	[35.3, 90]	698	135	[35.3, 180]	246	151	128	1.06
-	[101]	Ni1-Ni3	[35.3, 30]	749	36	[35.3, 60]	166	42	80	0.45
V <sub>ReNi</sub> <sup>ReNi</sup> (2 <sup>nd</sup> )	[100]	Ni3-Ni3	[54.8, 90]	794	63	[54.8, 0]	186	35	49	1.29
-	[010]	Ni3-Ni2	[54.8, 30]	802	115	[54.8, 120]	193	79	66	1.74
H <sub>ReNi</sub> <sup>ReNi</sup> (3 <sup>rd</sup> )	$[11\bar{2}]$	Ni3-Ni3	[90, 90]	672	56	[90, 180]	179	40	38	1.47
-	$[11\bar{2}]$	Ni2-Ni2	[90, 90]	672	56	[90, 180]	179	40	38	1.47
V <sub>ReNi</sub> <sup>ReNi</sup> (3 <sup>rd</sup> )	$[1\bar{1}2]$	Ni2-Ni3	[62, 131]	685	117	[62, 41]	187	62	73	1.60
H <sub>ReNi</sub> <sup>ReNi</sup> (4 <sup>th</sup> )	$[01\bar{1}]$	Ni2-Ni3	[90, 120]	810	81	[90, 150]	186	38	46	1.76
-	$[10\bar{1}]$	Ni3-Ni2	[90, 60]	810	81	[90, 150]	186	38	46	1.76

相同的  $\gamma_{usf}$ 。

Ni<sub>3</sub>Al 晶体随温度升高具有异常的屈服应力行为, 此屈服应力行为在很大程度上决定了镍基单晶高温合金的强度和高温形变抗力。普遍认为 Ni<sub>3</sub>Al 的异常流变行为是由于螺位错从 (111) 主滑移面到 (001) 交滑移面上的热激活交滑移引起的, 交滑移后的螺位错形成 KW 位错锁, 导致后续位错的滑移受到限制<sup>[12]</sup>。位错的结构和运动对理解晶体的塑性变形和力学性能有着关键作用, Paidar、Pope 和 Vitek<sup>[13]</sup>提出位错钉扎机制的 PPV 模型。在 Ni<sub>3</sub>Al 中 (111) 面上的全位错

由 4 个 Shockley 部分位错 (P1=P3 和 P2=P4) 组成<sup>[15]</sup>, 如图 1a 所示它们包围 1 个 APB 和 2 个 CSF 部分, 交滑移后形成的位错锁如图 1b 所示。基于 PPV 模型, 交滑移后单位长度螺位错对的能量变化是:

$$\Delta E = \left( \gamma_{APB}^{001} - \frac{\gamma_{APB}^{111}}{\sqrt{3}} \right) \cdot w \quad (8)$$

式中,  $\gamma_{APB}^{111}$  和  $\gamma_{APB}^{001}$  分别是 (111) 和 (001) 面上的 APB 能量,  $w$  是从 (111) 面到 (001) 面的交滑移距离。当  $\gamma_{APB}^{111} / \gamma_{APB}^{001} > \sqrt{3}$ , 负的  $\Delta E$  表示螺位错交滑移在能量上是允许的, 减小的  $\gamma_{APB}^{111} / \gamma_{APB}^{001}$  表明从 (111) 面到 (001)

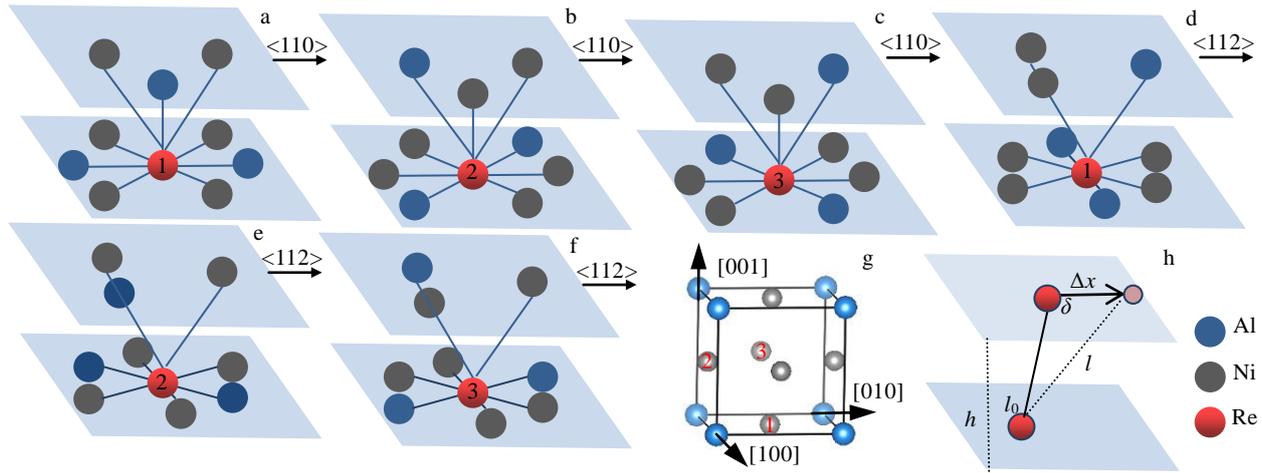


图 4 Re 原子在 (111) 滑移面 3 个非等效 Ni 位置的局域原子环境

Fig. 4 Schematic diagrams of local atom configurations of Re atoms doped at three non-equivalent sites of Ni: (a~c)  $[\bar{1}10](111)$  directions, (d~f)  $[11\bar{2}](111)$  directions; (g) Ni<sub>3</sub>Al unit cell (the Arabic numerals 1, 2 and 3 represent three non-equivalent sites of Ni); (h)  $l_0$  and  $l$  represent the distance between Re and its nearest neighboring host atoms before and after deformations

面的螺位错交滑移更加困难。假定图 1b 中的 Shockley 部分位错 P3 和 P4 是领先部分位错对, P1 和 P2 是后续部分位错对, 当后续部分位错对仍在 (111) 面上时, 领先部分位错对首先遭遇合金元素的阻碍而向 (001) 面交滑移。因此可采用  $\gamma_{APB}^{111} / \gamma_{APB}^{001}$  的值评估 Re 原子的掺杂对  $\gamma'$  相高温屈服强度的影响,  $\gamma_{APB}^{111} / \gamma_{APB}^{001}$  的值列在表 3 中, Re 原子占据 Al 位能增大  $\gamma_{APB}^{111} / \gamma_{APB}^{001}$ ,  $\gamma_{APB}^{111} / \gamma_{APB}^{001}$  的增大使螺位错更容易发生交滑移形成位错锁, 从而导致 Ni<sub>3</sub>Al 晶体高温屈服强度的增加。目前, 在 Ni<sub>3</sub>Al 晶体中掺杂 Re 原子使其蠕变强度提高的作用机理还需进一步研究, 接下来掺杂 2 个 Re 原子到 Ni<sub>3</sub>Al 晶体中, 由 Re 原子间交互作用对  $[\bar{1}10](111)$  和  $[11\bar{2}](111)$  滑移系堆垛层错能量的影响来评估双 Re 掺杂对  $\gamma'$  相的强化机制。

### 2.3 Re 原子间的交互效应对 Ni<sub>3</sub>Al 螺位错交滑移的影响

表 3 数据可得掺杂 2 个 Re 原子对 Ni<sub>3</sub>Al 晶体广义堆垛层错能的影响, 模型  $H_{Re_B}^{Re_A}(\vec{d})$  和  $V_{Re_B}^{Re_A}(\vec{d})$  中的  $\vec{d}$  由  $d$  和  $[hkl]$  表示,  $d$  对应 Re 原子间的距离,  $[hkl]$  是从  $Re_A$  晶格点到  $Re_B$  晶格点的方向。对 Ni<sub>3</sub>Al 晶体在  $[\bar{1}10](111)$  和  $[11\bar{2}](111)$  滑移方向的层错能结果比较, Re 原子在 2 个滑移系中对 Ni<sub>3</sub>Al 晶体位错形核与运动的影响基本相同, 即本工作后续只重点分析双 Re 掺杂对 Ni<sub>3</sub>Al 晶体  $[\bar{1}10](111)$  滑移系的影响。从表 3 能够得出, 模型  $V_{Re_{Al}}^{Re_{Al}}(2^{nd})$  在  $[\bar{1}10](111)$  滑移方向上的  $\gamma_{usf} = 1023 \text{ mJ/m}^2$  和  $\gamma_{APB}^{111} / \gamma_{APB}^{001} = 2.16$  大于模型  $Re_{Al}$  的  $\gamma_{usf} = 967 \text{ mJ/m}^2$  和  $\gamma_{APB}^{111} / \gamma_{APB}^{001} = 2.02$ , 表明在 Ni<sub>3</sub>Al 晶体

中 2 个 Re 原子最优占据 Al-Al 位比单个 Re 原子掺杂进一步增大  $\gamma_{usf}$  和  $\gamma_{APB}^{111} / \gamma_{APB}^{001}$ 。但是, 若在 Ni<sub>3</sub>Al 晶体中掺杂大量 Re 元素, 会出现部分 Re 原子占据 Ni 位, 即 2 个 Re 原子是占据在 Al-Ni 位, 形成  $Re_{Al} + Re_{Ni}$  复合缺陷, 甚至 2 个 Re 原子都占据 Ni 位, 形成  $Re_{Ni} + Re_{Ni}$  复合缺陷。上述 2 种复合缺陷对 Ni<sub>3</sub>Al 的  $\gamma_{usf}$  和  $\gamma_{APB}^{111} / \gamma_{APB}^{001}$  提高极其有限, 甚至有些复合缺陷还会降低 Ni<sub>3</sub>Al 的  $\gamma_{usf}$  和  $\gamma_{APB}^{111} / \gamma_{APB}^{001}$ 。例如  $Re_{Al} + Re_{Ni}$  复合缺陷, 模型  $H_{Re_{Ni}}^{Re_{Al}}(1^{st})$  的  $\gamma_{usf} = 826 \sim 973 \text{ mJ/m}^2$ 、 $\gamma_{APB}^{111} / \gamma_{APB}^{001} = 1.39 \sim 1.78$ , 模型  $V_{Re_{Ni}}^{Re_{Al}}(1^{st})$  的  $\gamma_{usf} = 896 \sim 944 \text{ mJ/m}^2$ 、 $\gamma_{APB}^{111} / \gamma_{APB}^{001} = 1.87 \sim 2.19$ , 模型  $V_{Re_{Ni}}^{Re_{Al}}(3^{rd})$  的  $\gamma_{usf} = 985 \text{ mJ/m}^2$ 、 $\gamma_{APB}^{111} / \gamma_{APB}^{001} = 1.82$ , 模型  $H_{Re_{Ni}}^{Re_{Al}}(3^{rd})$  的  $\gamma_{usf} = 950 \text{ mJ/m}^2$ 、 $\gamma_{APB}^{111} / \gamma_{APB}^{001} = 1.79$ , 部分模型的  $\gamma_{usf}$  和  $\gamma_{APB}^{111} / \gamma_{APB}^{001}$  是低于模型  $Re_{Al}$  的  $\gamma_{usf} = 967 \text{ mJ/m}^2$  和  $\gamma_{APB}^{111} / \gamma_{APB}^{001} = 2.02$ 。对于  $Re_{Ni} + Re_{Ni}$  复合缺陷, 所有模型的  $\gamma_{usf}$  和  $\gamma_{APB}^{111} / \gamma_{APB}^{001}$  都小于模型  $Re_{Al}$ 。例如模型  $H_{Re_{Ni}}^{Re_{Ni}}(1^{st})$  的  $\gamma_{usf} = 634 \sim 714 \text{ mJ/m}^2$ 、 $\gamma_{APB}^{111} / \gamma_{APB}^{001} = 0.56$ , 模型  $V_{Re_{Ni}}^{Re_{Ni}}(1^{st})$  的  $\gamma_{usf} = 698 \sim 749 \text{ mJ/m}^2$ 、 $\gamma_{APB}^{111} / \gamma_{APB}^{001} = 0.45 \sim 1.06$ , 模型  $V_{Re_{Ni}}^{Re_{Ni}}(2^{nd})$  的  $\gamma_{usf} = 794 \sim 802 \text{ mJ/m}^2$ 、 $\gamma_{APB}^{111} / \gamma_{APB}^{001} = 1.29 \sim 1.74$  等等。上述结果表明 Ni<sub>3</sub>Al 晶体中 Re 原子只有占据 Al 位置, 才能有效阻碍 Ni<sub>3</sub>Al 晶体中位错的形核和运动, 若在 Ni<sub>3</sub>Al 晶体中加入过多的 Re 元素, 晶体中会出现部分的 Re 占据 Ni 位置, 这种 Re 原子占位模式是很可能不利于镍基单晶高温合金的强化。

模型  $V_{Re_B}^{Re_A}(\vec{d})$  和模型  $H_{Re_B}^{Re_A}(\vec{d})$  的层错能量不仅与 Re 原子间的距离  $d$  有关, Re 原子间的方向  $[hkl]$  也会对层错能量产生影响。  $[hkl]$  的 2 个方向参数是  $[\theta, \varphi]$ ,

其中  $\theta$  是 2 个 Re 原子与 (111) 面法线的夹角,  $\varphi$  是 2 个 Re 原子与滑移方向的夹角。若 Re 原子间距  $d$  相同,  $\text{Re}_A$  和  $\text{Re}_B$  的排布方向垂直滑移方向, 2 个 Re 原子同时对位错的运动产生阻碍, 从而促使螺位错发生交滑移形成位错锁; 而当 Re 原子排布沿滑移方向, Re 原子可能是逐步地阻碍位错的运动, 导致位错在同一 (111) 面滑移<sup>[10]</sup>。相比 2 个 Re 原子沿着滑移方向排列时, 2 个 Re 原子垂直滑移方向排列会有一个更大的  $\gamma_{\text{usf}}$  和  $\gamma_{\text{APB}}^{111} / \gamma_{\text{APB}}^{001}$ 。例如, 模型  $\text{H}_{\text{Re}_{\text{Ni}}}^{\text{Re}_{\text{Al}}}(1^{\text{st}})$  中,  $\varphi=120^\circ$  时的  $\gamma_{\text{usf}}=973 \text{ mJ/m}^2$  和  $\gamma_{\text{APB}}^{111} / \gamma_{\text{APB}}^{001}=1.78$  大于  $\varphi=0^\circ$  时的  $\gamma_{\text{usf}}=826 \text{ mJ/m}^2$  和  $\gamma_{\text{APB}}^{111} / \gamma_{\text{APB}}^{001}=1.39$ , 模型  $\text{V}_{\text{Re}_{\text{Ni}}}^{\text{Re}_{\text{Al}}}(1^{\text{st}})$  中,  $\varphi=90^\circ$  时的  $\gamma_{\text{usf}}=944 \text{ mJ/m}^2$  和  $\gamma_{\text{APB}}^{111} / \gamma_{\text{APB}}^{001}=2.19$  也是大于  $\varphi=30^\circ$  时的  $\gamma_{\text{usf}}=899 \text{ mJ/m}^2$  和  $\gamma_{\text{APB}}^{111} / \gamma_{\text{APB}}^{001}=1.87$ 。

评估 2 个 Re 原子掺杂在  $\text{Ni}_3\text{Al}$  晶体中的排布方式对层错能的影响, 即 2 个 Re 原子排布在同一 (111) 原子层上及排布在相邻的 (111) 原子层上。当 Re 原子间的距离  $d$  相同时, 大部分模型  $\text{V}_{\text{Re}_{\text{Ni}}}^{\text{Re}_{\text{Al}}}(\vec{d})$  和模型  $\text{V}_{\text{Re}_{\text{Ni}}}^{\text{Re}_{\text{Al}}}(\vec{d})$  的  $\gamma_{\text{usf}}$  与  $\gamma_{\text{APB}}^{111} / \gamma_{\text{APB}}^{001}$  是大于模型  $\text{H}_{\text{Re}_{\text{Ni}}}^{\text{Re}_{\text{Al}}}(\vec{d})$  和模型  $\text{H}_{\text{Re}_{\text{Ni}}}^{\text{Re}_{\text{Al}}}(\vec{d})$ 。例如, 模型  $\text{V}_{\text{Re}_{\text{Ni}}}^{\text{Re}_{\text{Al}}}(3^{\text{rd}})$  的  $\gamma_{\text{usf}}=985 \text{ mJ/m}^2$  和  $\gamma_{\text{APB}}^{111} / \gamma_{\text{APB}}^{001}=1.82 >$  模型  $\text{H}_{\text{Re}_{\text{Ni}}}^{\text{Re}_{\text{Al}}}(3^{\text{rd}})$  的  $\gamma_{\text{usf}}=950 \text{ mJ/m}^2$  和  $\gamma_{\text{APB}}^{111} / \gamma_{\text{APB}}^{001}=1.79$ , 模型  $\text{V}_{\text{Re}_{\text{Ni}}}^{\text{Re}_{\text{Al}}}(1^{\text{st}})$  的  $\gamma_{\text{usf}}=698\sim 749 \text{ mJ/m}^2$  和  $\gamma_{\text{APB}}^{111} / \gamma_{\text{APB}}^{001}=0.45\sim 1.06 >$  模型  $\text{H}_{\text{Re}_{\text{Ni}}}^{\text{Re}_{\text{Al}}}(1^{\text{st}})$  的  $\gamma_{\text{usf}}=634\sim 714 \text{ mJ/m}^2$  和  $\gamma_{\text{APB}}^{111} / \gamma_{\text{APB}}^{001}=0.56$ 。这表明 2 个 Re 原子排布在相邻 (111) 原子层比同一 (111) 原子层能有效阻碍  $1/6[1\bar{1}\bar{2}](111)$  Shockley 部分位错和  $1/2[\bar{1}10](111)$  超级部分位错的形核, 以及更能促进  $1/2[\bar{1}10](111)$  超级部分位错的交滑移<sup>[32]</sup>。

从表 3 结果可知模型  $\text{V}_{\text{Re}_{\text{Ni}}}^{\text{Re}_{\text{Al}}}(\vec{d})$  和模型  $\text{H}_{\text{Re}_{\text{Ni}}}^{\text{Re}_{\text{Al}}}(\vec{d})$  的  $\gamma_{\text{usf}}$  和  $\gamma_{\text{APB}}^{111} / \gamma_{\text{APB}}^{001}$  随距离  $d$  的增加而增大, 模型  $\text{V}_{\text{Re}_{\text{Ni}}}^{\text{Re}_{\text{Al}}}(3^{\text{rd}})$  和模型  $\text{H}_{\text{Re}_{\text{Ni}}}^{\text{Re}_{\text{Al}}}(3^{\text{rd}})$  的  $\gamma_{\text{usf}}$  和  $\gamma_{\text{APB}}^{111} / \gamma_{\text{APB}}^{001}$  是大于模型  $\text{V}_{\text{Re}_{\text{Ni}}}^{\text{Re}_{\text{Al}}}(1^{\text{st}})$  和模型  $\text{H}_{\text{Re}_{\text{Ni}}}^{\text{Re}_{\text{Al}}}(1^{\text{st}})$  的, 即 Re 原子间距离  $d$  越大, 对应的  $\gamma_{\text{usf}}$  和  $\gamma_{\text{APB}}^{111} / \gamma_{\text{APB}}^{001}$  越高。但是, Re 原子间的距离  $d=1^{\text{st}}$ ,  $\text{Re}_{\text{Al}} + \text{Re}_{\text{Ni}}$  复合缺陷的  $\gamma_{\text{usf}}$  和  $\gamma_{\text{APB}}^{111} / \gamma_{\text{APB}}^{001}$  比  $\text{Re}_{\text{Ni}} + \text{Re}_{\text{Ni}}$  复

合缺陷的  $\gamma_{\text{usf}}$  和  $\gamma_{\text{APB}}^{111} / \gamma_{\text{APB}}^{001}$  要大。这说明 Re 原子间的距离  $d$  对位错形核和运动的影响只是一个重要因素, 还不是一个主导性因素。进一步探究 Re 原子间的交互作用对位错形核与运动的影响, 关联能方程  $\Delta E^{\text{Re}_A + \text{Re}_B}(d)$  表示  $\text{Ni}_3\text{Al}$  中掺杂 2 个 Re 原子导致的点缺陷之间的相互作用能, 同时关联能  $\Delta E^{\text{Re}_A + \text{Re}_B}(d)$  能够通过对应的点缺陷形成焓计算得到<sup>[26]</sup>:

$$\Delta E^{\text{Re}_A + \text{Re}_B}(d) = H_{\text{Re}_A + \text{Re}_B}(d) - H_{\text{Re}_A} - H_{\text{Re}_B} \quad (9)$$

由式 (9) 能够计算得出关联能  $\Delta E^{\text{Re}_A + \text{Re}_B}(d)$  的值, 计算结果列在表 1 中, 从表 1 数据可知, 当  $\text{Re}_A$  与  $\text{Re}_B$  距离  $d$  是最近邻关系时, 关联能  $\Delta E^{\text{Re}_A + \text{Re}_B}(d)$  是一负值, 负值表明 2 个 Re 原子占据在 Al-Ni 原子位置以及占据在 Ni-Ni 原子位置时, 这 2 个掺杂 Re 原子间的相互作用是吸引的<sup>[33]</sup>。随 2 个 Re 原子间距离不断增大, 对应  $\Delta E^{\text{Re}_A + \text{Re}_B}(d)$  成正值, 且随 2 个 Re 原子间距  $d$  从第 2 近邻逐渐到第 6 近邻时, 它们的关联能是不断降低直到趋于零。

图 5 描述了  $\gamma_{\text{usf}}$  及  $\gamma_{\text{APB}}^{111} / \gamma_{\text{APB}}^{001}$  与  $\text{Re}_A$  与  $\text{Re}_B$  缺陷间的关联能  $\Delta E^{\text{Re}_A + \text{Re}_B}(d)$  的关系。从图 5a 可知, 随关联能  $\Delta E^{\text{Re}_A + \text{Re}_B}(d)$  从  $-0.212 \text{ eV}$  逐步增加到  $0.171 \text{ eV}$ ,  $\gamma_{\text{usf}}$  开始是缓慢上升, 接着随关联能不断增大而逐渐下降, 图 5c 的  $\gamma_{\text{APB}}^{111} / \gamma_{\text{APB}}^{001}$  随关联能  $\Delta E^{\text{Re}_A + \text{Re}_B}(d)$  的变化趋势也与之类似。当关联能  $\Delta E^{\text{Re}_A + \text{Re}_B}(d) = 0.120 \text{ eV}$  时, 模型  $\text{V}_{\text{Re}_{\text{Ni}}}^{\text{Re}_{\text{Al}}}(2^{\text{nd}})$  的  $\gamma_{\text{usf}}$  和  $\gamma_{\text{APB}}^{111} / \gamma_{\text{APB}}^{001}$  是远大于  $\Delta E^{\text{Re}_A + \text{Re}_B}(d) = -0.212 \text{ eV}$  的模型  $\text{V}_{\text{Re}_{\text{Ni}}}^{\text{Re}_{\text{Al}}}(1^{\text{st}})$  和模型  $\text{H}_{\text{Re}_{\text{Ni}}}^{\text{Re}_{\text{Al}}}(1^{\text{st}})$  及  $\Delta E^{\text{Re}_A + \text{Re}_B}(d) = -0.079 \text{ eV}$  的模型  $\text{V}_{\text{Re}_{\text{Ni}}}^{\text{Re}_{\text{Al}}}(1^{\text{st}})$  和模型  $\text{H}_{\text{Re}_{\text{Ni}}}^{\text{Re}_{\text{Al}}}(1^{\text{st}})$ 。分析缺陷  $\text{Re}_A$  和  $\text{Re}_B$  间的关联能  $\Delta E^{\text{Re}_A + \text{Re}_B}(d)$  对  $\text{Ni}_3\text{Al}$  晶体  $\gamma_{\text{usf}}$  和  $\gamma_{\text{APB}}^{111} / \gamma_{\text{APB}}^{001}$  的影响, 结果表明缺陷  $\text{Re}_A$  和  $\text{Re}_B$  间较弱的相互作用是更有利于改善高温时  $\text{Ni}_3\text{Al}$  晶体的异常流变行为。同时还能推论一个较弱的正相关作用会比一个较弱的负相关作用更能提高  $\text{Ni}_3\text{Al}$  的蠕变抗力及屈服强度。进一步还可知 Re 原子优先占据 Al 位置提高  $\gamma'$ - $\text{Ni}_3\text{Al}$  相的屈服强度能够归功于  $\text{Re}_{\text{Al}}-\text{Re}_{\text{Al}}$  间的弱交互作用。

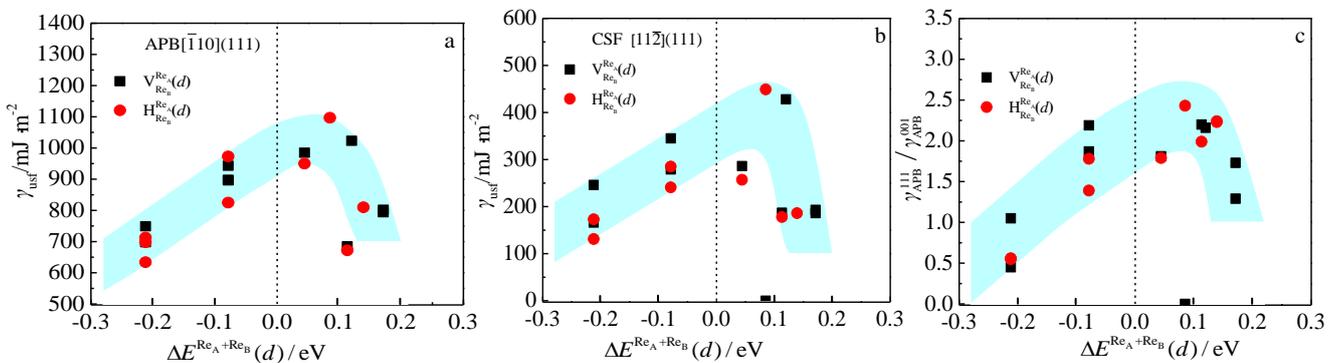


图 5  $[\bar{1}10](111)$  滑移系和  $[11\bar{2}](111)$  滑移系的  $\gamma_{\text{usf}}$  及  $\gamma_{\text{APB}}^{111} / \gamma_{\text{APB}}^{001}$  与关联能  $\Delta E^{\text{Re}_A + \text{Re}_B}(d)$  的关系

Fig.5 Relationship between  $\gamma_{\text{usf}}$  in  $[\bar{1}10](111)$  (a),  $[11\bar{2}](111)$  (b) slip directions,  $\gamma_{\text{APB}}^{111} / \gamma_{\text{APB}}^{001}$  and  $\Delta E^{\text{Re}_A + \text{Re}_B}(d)$  (c)

### 3 结 论

1) 单个 Re 原子在 Ni<sub>3</sub>Al 晶体中优先占据 Al 位置, 双 Re 掺杂时, 优先占据 Al-Al 位置。

2) Re 原子占据 Al 位能增大 Ni<sub>3</sub>Al 晶体在  $[\bar{1}10](111)$  和  $[11\bar{2}](111)$  滑移方向的不稳定层错能  $\gamma_{\text{usf}}$ , 即阻碍  $1/2[11\bar{0}](111)$  超级部分位错和  $1/6[11\bar{2}](111)$  Shockley 部分位错的形核; 同时增大的  $\gamma_{\text{APB}}^{111} / \gamma_{\text{APB}}^{001}$  表明 Re 原子能促进 Ni<sub>3</sub>Al 晶体中  $1/2[11\bar{0}](111)$  超级部分位错的交滑移。

3) Re 原子间的排布方式影响 Ni<sub>3</sub>Al 晶体的  $\gamma_{\text{usf}}$  与  $\gamma_{\text{APB}}^{111} / \gamma_{\text{APB}}^{001}$ , Re 原子垂直滑移方向排列比沿着滑移方向排列时, 会有更大的  $\gamma_{\text{usf}}$  和  $\gamma_{\text{APB}}^{111} / \gamma_{\text{APB}}^{001}$ ; 同时 Re 原子排布在相邻 (111) 原子面上, 对应的  $\gamma_{\text{usf}}$  与  $\gamma_{\text{APB}}^{111} / \gamma_{\text{APB}}^{001}$  可能比排列在同一个 (111) 原子面上要大。

4) 关联能函数  $\Delta E^{\text{Re}_A + \text{Re}_B}(d)$  表征 Re 原子间的交互作用, 证明较弱的正关联交互作用比负关联有利于改善高温时 Ni<sub>3</sub>Al 晶体的异常流变行为。因此, Re 原子优先占据 Al 位置提高 Ni<sub>3</sub>Al 晶体的屈服强度能够归功于 Re<sub>Al</sub>-Re<sub>Al</sub> 间的弱交互作用。

#### 参考文献 References

- [1] Long Haibo, Mao Shengcheng, Liu Yinong *et al.* *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2018, 743: 203
- [2] Niu Xiaofeng(牛晓峰), Huang Zhiwei(黄志伟), Yan Peiwen(阎佩雯) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2018, 47(12): 3651
- [3] Zhao Yuhong, Wen Zhiqin, Hou Hua *et al.* *Applied Surface Science*[J], 2014, 303: 205
- [4] Zhao Yuhong, Qi Lei, Jin Yuchun *et al.* *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2015, 647: 1104
- [5] Huang Yanyan, Mao Zugang, Noebe Ronald D *et al.* *Acta Materialia*[J], 2016, 121: 288
- [6] Caron Pierre, Khan Tasadduq. *Aerospace Science and Technology*[J], 1999, 3(8): 513
- [7] Erickson G L. *Superalloys*[J], 1996, 1: 35
- [8] Shang S L, Zacherl C L, Fang H Z *et al.* *Journal of Physics: Condensed Matter*[J], 2012, 24: 505 403
- [9] Yu Xiaoxiang, Wang Chongyu. *Materials Science and Engineering A*[J], 2012, 539: 38
- [10] Chen Yi, He Shuang, Yi Zhou *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2018, 152: 408
- [11] Wang-Koh Y M. *Materials Science and Technology*[J], 2016, 33: 934
- [12] Yoo M H. *Scripta Metallurgica*[J], 1986, 20(6): 915
- [13] Paidar V, Pope D P, Vitek V. *Acta Metallurgica*[J], 1984, 32(3): 435
- [14] Ngan A H W, Wen M, Woo C H. *Computational Materials Science*[J], 2004, 29(3): 259
- [15] Yu Xiaoxiang, Wang Chongyu. *Philosophical Magazine*[J], 2012, 92: 4028
- [16] Shang Shunli, Shimanek John, Qin Shipin *et al.* *Physical Review B*[J], 2020, 101: 24 102
- [17] Dodaran M, Etefagh A H, Guo S M *et al.* *Intermetallics*[J], 2020, 117: 106 670
- [18] Wu Xiaoxia, Wang Chongyu. *RSC Advances*[J], 2016, 6(25): 20 551
- [19] Tian S G, Zeng Z, Fushun L *et al.* *Materials Science and Engineering A*[J], 2012, 543: 104
- [20] Kresse G, Hafner J. *Physical Review B*[J], 1993, 47: 558
- [21] Kresse G, Joubert D. *Physical Review B*[J], 1999, 59: 1758
- [22] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M. *Physical Review Letter*[J], 1996, 77: 3865
- [23] Kulo Nada, He Shuang, Ecker Werner *et al.* *Intermetallics*[J], 2019, 114: 106 604
- [24] Hou Hua, Wen Zhiqin, Zhao Yuhong *et al.* *Intermetallics*[J], 2014, 44: 110
- [25] Wen Zhiqin, Zhao Yuhong, Hou Hua *et al.* *Superlattices and Microstructures*[J], 2017, 103: 9
- [26] Li Yujuan, Hu Qingmiao, Xu Dongsheng *et al.* *Intermetallics*[J], 2011, 19(6): 793
- [27] Li Yamin(李亚敏), Chen Yinping(陈银萍), Liu Hongjun(刘洪军). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2020, 49(8): 2746
- [28] Ruban A V, Skriver H L. *Physical Review B*[J], 1997, 55: 856
- [29] Jiang Chao, Gleeson Brian. *Scripta Materialia*[J], 2006, 55(5): 433
- [30] Yu X X, Wang C Y, Zhang X N *et al.* *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2014, 582: 299
- [31] Yi Zhou, Peng Ping. *Computational Materials Science*[J], 2020, 172: 109 314
- [32] Chen Yi, He Shuang, Yi Zhou *et al.* *Journal of Physics and Chemistry of Solids*[J], 2019, 131: 34
- [33] Mottura Alessandro, Finnis M W, Reed R C. *Acta Materialia*[J], 2012, 60(6-7): 2866

## Impact of Defects Induced by Re on Screw Dislocation Cross-Slip in Ni<sub>3</sub>Al

Yi Zhou<sup>1,2</sup>, Hu Jia<sup>1</sup>, Deng Yonghe<sup>1</sup>, Chen Yi<sup>3</sup>, Wen Dadong<sup>1</sup>, Gao Ming<sup>1</sup>, Peng Ping<sup>2</sup>

(1. School of Computational Science & Electronics, Hunan Institute of Engineering, Xiangtan 411104, China)

(2. School of Materials Science and Engineering, Hunan University, Changsha 410082, China)

(3. School of Mechanical Engineering, Hunan Institute of Engineering, Xiangtan 411104, China)

**Abstract:** The anomalous flow behavior of Ni<sub>3</sub>Al at high temperature is closely related to the cross-slip of  $1/2[\bar{1}10](111)$  super-partial dislocations. In this work, using a first-principles calculation, the impact of the occupation tendency of Re in Ni<sub>3</sub>Al crystal and Re-effect on the nucleation and movement of dislocations in Ni<sub>3</sub>Al was investigated. The analysis of energy factors  $E_{\text{Re-Re}}^{\text{initial} \rightarrow \text{final}}$  associated with the formation enthalpy of point defects reveals Re prefers to occupy Al sites, and the Re-Re pair prefers to occupy Al-Al sites in  $\gamma'$ -Ni<sub>3</sub>Al phase. By calculating the generalized stacking fault energies for  $[\bar{1}10](111)$  and  $[11\bar{2}](111)$  systems in Ni<sub>3</sub>Al, it is found that the Re atoms occupying Al sites can promote the  $1/2[\bar{1}10](111)$  cross-slip of screw dislocations. A longitudinal arrangement of Re<sub>A</sub> and Re<sub>B</sub> defects should be able to effectively impede the nucleation and movement of dislocations compared with their horizontal layout. Two Re atoms arranged on adjacent (111) atomic planes will further promote the cross-slip of screw dislocations than when they are arranged on the same (111) atomic plane. As their interaction is characterized and assessed by a correlation energy function  $\Delta E^{\text{Re}_A + \text{Re}_B}(d)$  between Re<sub>A</sub> and Re<sub>B</sub> point defects, a weak correlation is demonstrated to be favorable for the improvement of the anomalous flow of Ni<sub>3</sub>Al at high temperature. The preferential occupation of Al sites by Re atoms for the improvement of yield strength of Ni<sub>3</sub>Al can be attributed to a weak repulsive interaction between Re<sub>Al</sub> and Re<sub>Al</sub> defects.

**Key words:** Ni<sub>3</sub>Al; generalized stacking fault energies; cross-slip; correlation energy

---

Corresponding author: Yi Zhou, Ph. D., Lecturer, School of Computational Science & Electronics, Hunan Institute of Engineering, Xiangtan 411104, P. R. China, Tel: 0086-731-58683584, E-mail: yizhou@hnu.edu.cn