

## 第一性原理研究 Sc 元素掺杂在 Ni/Ni<sub>3</sub>Al 合金低指数相界的强化作用

贾亚鹏<sup>1</sup> 蔡军<sup>1\*</sup> 江河<sup>2</sup> 董建新<sup>2</sup>

1. 华北电力大学核科学与工程学院, 北京 102206

2. 北京科技大学材料科学与工程学院, 北京 100083

**[摘要]** 用第一性原理系统地研究了合金化元素 Sc 在 Ni/Ni<sub>3</sub>Al ( $\gamma/\gamma'$ ) 合金低指数面的替代占位对其相界面断裂功的影响。溶解能计算表明单个 Sc 原子在  $\gamma/\gamma'$  (01) 和 (111) 相界的能量最低占位为  $\gamma$  相中的 Ni 原子, 而在 (110) 界面中占位为  $\gamma'$  相中的 Al 原子。在  $\gamma/\gamma'$  (01)、(110) 及 (111) 相界中, Sc 掺杂原子数目由 1 个逐步提高至 3 个时, 增加的 Sc 均替代  $\gamma'$  相中的原子。格里菲斯断裂功计算表明在  $\gamma/\gamma'$  相界中掺杂 Sc 原子显著提高了相界面的结合强度。态密度分析发现掺杂的 Sc 原子会与其最邻近的 Ni 或 Al 原子发生轨道相互作用而获得电子。这种相互作用导致相界面处的电荷密度增加, 增强了 Sc 原子与最邻近 Ni 或 Al 原子结合的键能, 从而提高  $\gamma/\gamma'$  镍基高温合金相界面的结合强度。

**[关键词]** 镍基合金; Sc 替代; Ni/Ni<sub>3</sub>Al ( $\gamma/\gamma'$ ) 相界; 第一性原理

DOI: 10.33142/ect.v2i9.13457

中图分类号: TG132.33

文献标识码: A

### First Principles Study on the Strengthening Effect of Sc Element Doping on the Low Index Phase Boundary of Ni/Ni<sub>3</sub>Al Alloy

JIA Yapeng<sup>1</sup>, CAI Jun<sup>1\*</sup>, JIANG He<sup>2</sup>, DONG Jianxin<sup>2</sup>

1. School of Nuclear Science and Engineering, North China Electric Power University, Beijing, 102206, China

2. School of Materials Science and Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing, 100083, China

**Abstract:** The effect of substitution of alloying element Sc on the interfacial fracture toughness of Ni/Ni<sub>3</sub>Al ( $\gamma/\gamma'$ ) alloy with low index surface was systematically studied using first principles. The calculation of dissolution energy shows that the lowest energy occupied by a single Sc atom at the interface between the  $\gamma/\gamma'$  (01) and (111) phases is the Ni atom in the  $\gamma$  phase, while at the (110) interface it occupies the Al atom in the  $\gamma'$  phase. When the number of Sc doped atoms gradually increases from 1 to 3 in the  $\gamma/\gamma'$  (01), (110), and (111) phase boundaries, the increased Sc replaces the atoms in the  $\gamma'$  phase. Griffith fracture energy calculation shows that doping Sc atoms in the  $\gamma/\gamma'$  phase interface significantly improves the bonding strength of the phase interface. Density of states analysis revealed that doped Sc atoms undergo orbital interactions with their nearest Ni or Al atoms to obtain electrons. This interaction leads to an increase in charge density at the phase interface, enhancing the bond energy between Sc atoms and the nearest Ni or Al atoms, thereby improving the bonding strength at the phase interface of  $\gamma/\gamma'$  nickel based superalloys.

**Keywords:** nickel based alloys; Sc substitution; Ni/Ni<sub>3</sub>Al ( $\gamma/\gamma'$ ) phase boundary; first principles

#### 1 简介

镍基单晶高温合金同时具有耐高温高压和良好的工业焊接性能, 被广泛应用于现代航空航天工业中, 用来制造发电涡轮叶片和航空发动机的热端部件<sup>[1-2]</sup>。镍基高温合金主要由面心立方结构的  $\gamma$ -Ni 单晶相和面心正方晶系 L12 结构的  $\gamma'$ -Ni<sub>3</sub>Al 相组成<sup>[3]</sup>。Ni/Ni<sub>3</sub>Al 相界面在镍基高温合金中广泛存在, 这种  $\gamma/\gamma'$  相界面被视为镍基高温合金中的主要结构缺陷。目前多使用合金元素掺杂方法来强化 Ni/Ni<sub>3</sub>Al 相界面, 常用的掺杂元素有 W、Mo、Co、Re 等, 在理论和实验上都已经进行了大量研究<sup>[4-7]</sup>。例如: 在实验方面, Westbrooke 等人研究了 Re、W、Mo 等元素的含量对镍基合金中拓扑密堆相的影响。发现掺杂 Re 原子浓度的降低可以降低合金密度, 提高合金的高温断裂强度<sup>[8]</sup>。而在理论方面, Gong 等人通过电子结构理论计算了掺杂 Re、Cr、Ru、Co 等金属元素的镍基合金在  $\gamma/\gamma'$  (01)

处的格里菲斯断裂功。发现这些合金元素掺杂提高了镍基高温合金在  $\gamma/\gamma'$  处的格里菲斯断裂功, 对  $\gamma/\gamma'$  (01) 相界面有很好的强化作用<sup>[9]</sup>。Sc 作为一种稀土元素, 目前被广泛应用于铝合金的掺杂。在铝合金中加入 Sc 极易生成 Al<sub>3</sub>Sc 新相, 从而提高合金的耐热性能、结构稳定性、焊接性能和抗腐蚀性能<sup>[10-11]</sup>。由于 Al<sub>3</sub>Sc 相和镍基高温合金中的  $\gamma'$ -Ni<sub>3</sub>Al 相具有相似的 L12 结构, 这为 Sc 掺杂在镍基高温合金并起到强化作用提供了一定的理论支持。实验方面, Deng 等人通过在镍基高温合金中添加 0~0.098wt% 的 Sc, 发现 Sc 的掺杂改变了晶界处的形状, 提高了室温下镍基高温合金的强度和延展性<sup>[12]</sup>。

尽管如此, 但还没有用第一性原理研究 Sc 原子在  $\gamma/\gamma'$  (110)、(110) 及 (111) 相界面的掺杂作用。为此, 本文用第一性原理方法系统地研究合金化元素 Sc 的掺杂对于  $\gamma/\gamma'$  (01)、(110)、(111) 低指数相界面结构的

影响,以期进一步揭示 Sc 原子掺杂对镍基高温合金断裂的作用机制。

## 2 模型与计算方法

Ni 和 Ni<sub>3</sub>Al 均为 FCC 结构,晶格常数分别为 3.524 Å 与 3.573Å<sup>[13]</sup>。两相晶格常数之间的失配度为 1.4%。基于 Ni 和 Ni<sub>3</sub>Al 的公共 Ni 原子层为界面分别建立  $\gamma/\gamma'$ (01)、(110) 和 (111) 相界面的超胞模型。(01) 和 (110) 相界面的两种超胞模型均由 5 个 Ni 原子层、5 层 Ni<sub>3</sub>Al 原子层以及 1 层共格晶面构成。由于  $\gamma/\gamma'$ (111) 面超胞模型不含有公共 Ni 原子层,我们构建了由 6 个 Ni 原子层和 5 个 Ni<sub>3</sub>Al 原子层组成的 (111) 相界面超胞模型。图 1 中显示了 3 种相界面的超胞模型,图中大原子代表 Al 原子,小原子代表 Ni 原子。图中 Ni 或 Al 原子上的数字表示 Sc 原子的可能替代占位。在三种超胞界面上方添加 15Å 的真空层,以尽量减少相邻两个界面间的相互影响。三种超胞模型均含有 88 个原子,分别用于研究 Sc 原子掺杂在  $\gamma/\gamma'$ (01)、(110) 和 (111) 相界面的溶解能最低替代占位。

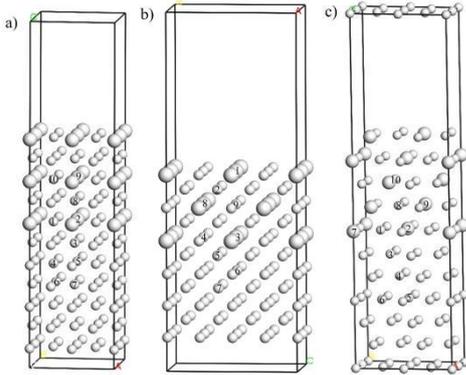


图 1  $\gamma/\gamma'$  相界面超胞模型, (a)  $\gamma/\gamma'$ (01) 相界超胞, (b)  $\gamma/\gamma'$ (110) 相面, (c)  $\gamma/\gamma'$ (111) 相界, 大原子为 Al 原子, 小原子为 Ni 原子, 原子上面的标号表明 Sc 原子的可能替代占位

本文使用 Material Studio 软件中基于密度泛函理论开发的 CASTEP 模块<sup>[14-15]</sup>计算模型的溶解能。几何优化使用 BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno) 算法弛豫。这种算法对多粒子微观系统进行总能量优化,进而得到最低能量状态下的稳定结构。计算中交换关联函数选用广义梯度近似下的 PBE (GGA-PBE)<sup>[16]</sup>。使用超软赝势 (ultrasoft pseudopotentials) 来描述原子核与电子间的相互作用。采用自洽 (SCF) 求解多粒子系统的 Kohn-Sham 方程。截断能设为 480eV, 布里渊区的 K 点<sup>[17]</sup>设定为  $6 \times 6 \times 1$ 。弛豫优化的收敛参数为每个原子的能量变化控制在小于  $1.0 \times 10^{-5}$  eV, 最大应力和最大原子位移小于 0.05GPa 和  $1.0 \times 10^{-3}$  Å, 并且残余应力控制在 0.03eV/Å 以下。

## 3 结果与讨论

### 3.1 Sc 原子在 $\gamma/\gamma'$ (01)、(110)、(111) 相界面的溶解能与替代占位

为了研究 Sc 原子的掺杂对  $\gamma/\gamma'$ (01)、(110)、(111)

低指数相界面力学性能的强化作用,需要优先确定 Sc 原子在掺杂数不同时,其在  $\gamma/\gamma'$ (01)、(110)、(111) 相界面中的稳定替代占位。计算 Sc 原子在  $\gamma/\gamma'$  相界不同替代占位处的模型溶解能,溶解能最低的替代占位即为 Sc 原子在界面中的最稳定替代占位。在确定单个 Sc 原子替代占位的基础上,我们进一步研究掺杂原子的数量对其替代占位变化的影响。

首先计算单个 Sc 原子在  $\gamma/\gamma'$ (01) 界面的优先替代占位。其中 Sc 原子替换相界面中 1-10 占位的 Ni 或 Al 原子,见图 1-(a)。图 1-(a) 中 1-2 和 8-10 为  $\gamma'$ -Ni<sub>3</sub>Al 相中的 Ni 或 Al 原子位,3 为  $\gamma/\gamma'$  公共 Ni 原子层中的 Ni 原子位,4-7 为  $\gamma$ -Ni 相中的 Ni 原子位。计算 Sc 原子替换在  $\gamma/\gamma'$ (01) 界面 10 种占位处模型的溶解能。溶解能  $E_d$  计算公式如下:

$$E_d = \frac{1}{n+m+x} [E(\text{Ni}_n\text{Al}_m\text{Sc}_x) - n \cdot E(\text{Ni}) - m \cdot E(\text{Al}) - x \cdot E(\text{Sc})]$$

其中  $E(\text{Ni}_n\text{Al}_m\text{Sc}_x)$  表示掺杂  $x$  个 Sc 原子后的 Ni/Ni<sub>3</sub>Al-Sc<sub>x</sub> 界面体系总能量,  $E(\text{Ni})$ 、 $E(\text{Al})$ 、 $E(\text{Sc})$  表示单个 Ni 原子、Al 原子、Sc 原子的能量,  $n$  和  $m$  表示界面体系中 Ni 原子和 Al 原子个数。对于  $\gamma/\gamma'$ (110) 和 (111) 面,其溶解能计算同上。

计算的单个 Sc 原子掺杂溶解能随其替代占位变化显示在图 2 中,对应的原子浓度为 1.14%。

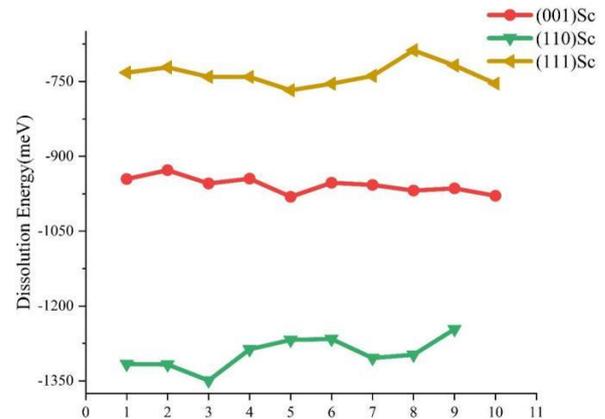


图 2 单个 Sc 原子在  $\gamma/\gamma'$ (01)、(110)、(111) 相界面掺杂溶解能随替代占位的变化

溶解能计算结果表明:单个 Sc 原子在 (01) 相界面替代  $\gamma$  相中 (标号 5 处) Ni 原子,其占位的溶解能最低,为 -981.1meV。因此 Sc 原子在 (01) 相界替代  $\gamma$  相中图 1 标号为 5 的 Ni 原子。在 (110) 相界面,单个 Sc 原子替代  $\gamma'$  相中的 (标号 3 处) Al 原子时的溶解能最低,为 -1349.3meV。而在 (111) 相界面,单个 Sc 原子替代  $\gamma$  相中的 (标号 5 处) Ni 原子时的溶解能最低,为 -767.6meV。

确定了单个 Sc 原子在  $\gamma/\gamma'$ (01)、(110)、(111) 相界面溶解能最低的替代占位。在此基础上,再添加第 2

和第3个Sc原子,一共掺杂x个Sc原子,记为 $\gamma/\gamma'-Sc_x$ ,得到x个Sc原子掺杂在 $\gamma/\gamma'$ 相界中的优先替代占位。其溶解能和替代占位结果皆列于表1中。

由表1可见在 $\gamma/\gamma'$ (01)、(110)、(111)相界面,随着掺杂Sc原子数增加,Sc掺杂在三个相界面的溶解能也增加。与(01)和(111)比较,1-3个Sc掺杂在(110)相界面的相应的溶解能更低,尤其是掺杂1个Sc在(110)相界面上的溶解能最低,为-1349.3meV。这表明在 $\gamma/\gamma'$ 相界面掺杂1-3个Sc时最易在 $\gamma/\gamma'-Sc$ (110)相界面掺杂。在 $\gamma/\gamma'$ (01)和(111)相界面,第1个Sc原子替代 $\gamma$ 相中的Ni原子,而第2、3个Sc原子替代 $\gamma'$ 相中的原子。而在(110)面中,第1-3个Sc原子均替代 $\gamma'$ 相中Al原子。详见图3,其中(a)表示第1-3个Sc原子掺杂在 $\gamma/\gamma'$ (01)、(b)(110)和(c)(111)的优先替代占位,原子上方的数字表示Sc原子的替代顺序。

表1 Ni/Ni<sub>3</sub>Al( $\gamma/\gamma'$ )相界面体系掺杂1-3个Sc原子的优先占位及溶解能

模型体系	相界面	优先替代占位	被替代原子	溶解能 (meV/atom)
$\gamma/\gamma'-Sc$	(01)	$\gamma-Ni$	Ni	-981.1
$\gamma/\gamma'-Sc_2$	(01)	$\gamma'-Ni_3Al$	Al	-993.7
$\gamma/\gamma'-Sc_3$	(01)	$\gamma'-Ni_3Al$	Al	-983.2
$\gamma/\gamma'-Sc$	(110)	$\gamma'-Ni_3Al$	Al	-1349.3
$\gamma/\gamma'-Sc_2$	(110)	$\gamma'-Ni_3Al$	Al	-1296.4
$\gamma/\gamma'-Sc_3$	(110)	$\gamma'-Ni_3Al$	Al	-1285.1
$\gamma/\gamma'-Sc$	(111)	$\gamma-Ni$	Ni	-767.6
$\gamma/\gamma'-Sc_2$	(111)	$\gamma'-Ni_3Al$	Al	-766.0
$\gamma/\gamma'-Sc_3$	(111)	$\gamma'-Ni_3Al$	Ni	-699.9

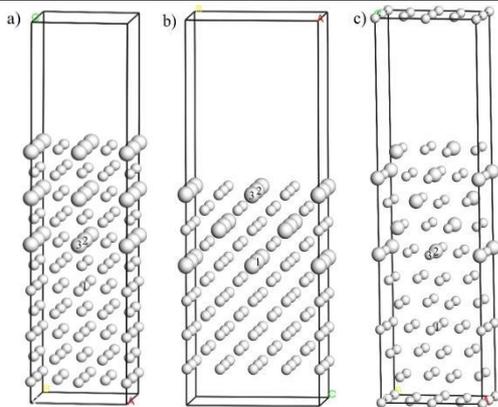


图3  $\gamma/\gamma'$ (01)、(110)、(111)面中第1-3个Sc原子的最低能量占位,(a)(01)面,(b)(110)面,(c)(111)面。原子上方的数字代表Sc原子的掺杂顺序。大原子为Al原子,小原子为Ni原子

### 3.2 Sc原子的掺杂对 $\gamma/\gamma'$ (01)、(110)、(111)相界面断裂强度的影响

合金模型中某一界面的断裂性能往往由格里菲斯断裂功(Griffith work)<sup>[18]</sup>来衡量。格里菲斯断裂功被定

义为沿着界面劈裂晶体所需的能量。在镍基高温合金中,格里菲斯断裂功可以用于评估 $\gamma/\gamma'$ 界面的结合强度和沿晶断裂的难易程度。

格里菲斯断裂功计算公式<sup>[19]</sup>为:

$$G = (E_{\gamma surface} + E_{\gamma' surface} - E_{\gamma/\gamma' surface})/A$$

式中 $E_{\gamma surface}$ 为 $\gamma-Ni$ 相晶体的总能量, $E_{\gamma' surface}$ 为 $\gamma'-Ni_3Al$ 相晶体的总能量。 $E_{\gamma/\gamma' surface}$ 为 $\gamma/\gamma'-Ni/Ni_3Al$ 晶体的总能量,A为相界面面积。由断裂功定义可知断裂功越大,沿相界面发生断裂需要的能量越多,相界面越稳定。

计算格里菲斯断裂功界面模型见图3。在 $\gamma/\gamma'$ (01)和 $\gamma/\gamma'$ (110)超胞相界处存在一个公共Ni原子层,它既可以划分到 $\gamma'$ 相也可以属于 $\gamma$ 相见图3(a),(b)。我们称公共Ni原子层属于 $\gamma$ 相的断裂为断裂功I,属于 $\gamma'$ 相的断裂为断裂功II。而 $\gamma/\gamma'$ (111)相界中因为不存在公共Ni原子层见图3(c),故仅有一种断裂功。 $\gamma/\gamma'$ (01)、(110)、(111)相界面的断裂功随掺杂Sc原子数的变化显示在图4中。

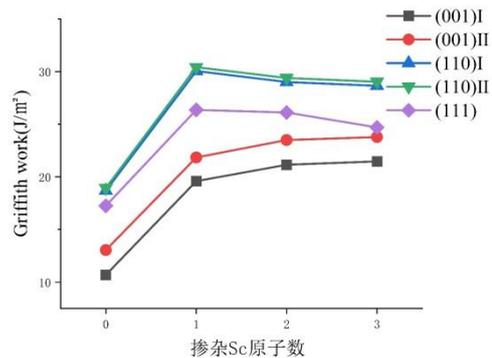


图4  $\gamma/\gamma'$ (01)、(110)、(111)相界面的断裂功随掺杂Sc原子数的变化

由图可见 $\gamma/\gamma'$ (01)、(110)和(111)相界在掺杂1-3个Sc原子后,与未掺杂比较,Sc原子掺杂都提高了相界的格里菲斯断裂功。表明Sc在这三种相界掺杂都使相界的结合增强。仔细比较发现随着掺杂Sc原子数的增加,断裂功的提高减弱,即掺杂对相界结合的增强效应减弱。Eris等人在研究Re掺杂 $\gamma/\gamma'$ (01)相界时也发现过量的Re原子掺杂会削弱单个Re原子替换对镍基高温合金的相界结合强化作用<sup>[20]</sup>。目前Sc掺杂在 $\gamma/\gamma'$ 相界面时也有相同的强化趋势。此外由图可见,在 $\gamma/\gamma'$ (01)与(110)相界掺杂Sc原子时其相应的断裂功I小于断裂功II。即Ni原子层属于 $\gamma$ 相时断裂需要的能量更低,断裂更容易发生在公共Ni原子层属于 $\gamma$ 的相界面处。

### 3.3 态密度

态密度将原子的电子轨道各自独立出来,统计了不同轨道的电子能量分布情况。我们研究了 $\gamma/\gamma'$ (01)、(110)和(111)相界面掺杂Sc原子前后的态密度分布。它可以

显示出电子在原子上的得失。

图5显示了单个晶格Sc原子和 $\gamma/\gamma'$ -Sc<sub>x</sub>(01)相界中Sc原子的分波态密度(PDOS)图,图6显示了与Sc原子最近邻Ni原子的分波态密度图。图中的虚线表示费米面的所在位置。相界(110)和(111)的分波态密度图与此类似,这里不被显示。

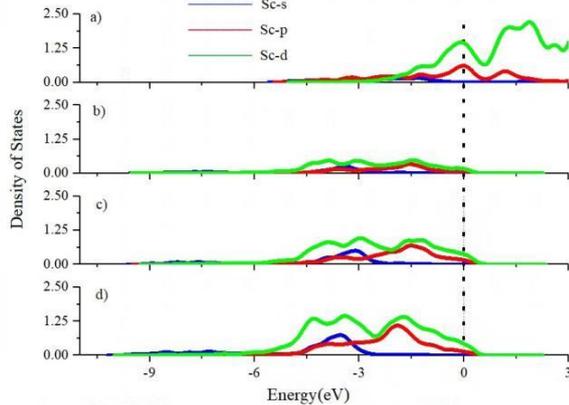


图5 单个晶格Sc原子与 $\gamma/\gamma'$ -Sc<sub>x</sub>(01)相界面中Sc原子的PDOS。(a)单个晶格Sc原子,(b) $\gamma/\gamma'$ -Sc(01)相界面中的Sc原子,(c) $\gamma/\gamma'$ -Sc<sub>2</sub>(01)相界面,(d) $\gamma/\gamma'$ -Sc<sub>3</sub>(01)相界面

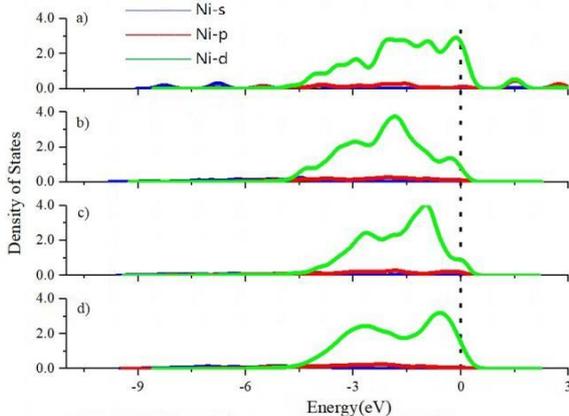


图6  $\gamma/\gamma'$ -Sc<sub>x</sub>(01)相界面基体Ni原子和掺杂Sc原子最近邻Ni原子的PDOS。(a) $\gamma/\gamma'$ -Sc(01)相界面单个基体Ni原子,(b) $\gamma/\gamma'$ -Sc(01)相界面掺杂Sc原子最近邻Ni原子,(c) $\gamma/\gamma'$ -Sc<sub>2</sub>(01)相界面,(d) $\gamma/\gamma'$ -Sc<sub>3</sub>(01)相界面

由图可见在 $\gamma/\gamma'$ (01)相界面中,随着Sc原子掺杂量的增加,掺杂Sc原子3d轨道电荷密度明显增加,而其最近邻Ni原子的3d轨道电荷密度明显降低。这表明掺杂Sc原子与其最近邻Ni原子发生了相互作用,Sc原子得到电子而Ni原子失去电子。Zhu等人计算了Re原子在 $\gamma/\gamma'$ (01)相界的掺杂作用,也发现Re原子与其近邻的Ni原子存在这样的杂化作用<sup>[21]</sup>。这种杂化作用提高了掺杂Sc原子与最近邻Ni或Al原子之间的结合键能,从而提高了 $\gamma/\gamma'$ 相界面的结合强度。

#### 4 结论

用第一性原理研究了Sc原子掺杂在 $\gamma/\gamma'$ (01)、

(110)、(111)相界面对其断裂性能的影响,结论如下:

(1)溶解能计算表明:在 $\gamma/\gamma'$ 相界中仅掺杂1~3个Sc原子时,掺杂的首个Sc原子在 $\gamma/\gamma'$ (01)或(111)相界中替代 $\gamma$ 相中的Ni原子,第2、3个Sc原子替代 $\gamma'$ 相中的Ni或Al原子。而在 $\gamma/\gamma'$ (110)相界,掺杂的Sc原子均替代 $\gamma'$ 相中的Al原子。

(2)格里菲斯断裂功计算表明:掺杂Sc原子显著地增强了 $\gamma/\gamma'$ (01)、(110)和(111)相界面的结合强度。在 $\gamma/\gamma'$ (01)相界面,掺杂3个Sc原子时的增强效果最好。而在 $\gamma/\gamma'$ (110)和(111)相界面,掺杂1个Sc原子时的增强效果最好。相界面强度顺序为: $\gamma/\gamma'$ -Sc(110) >  $\gamma/\gamma'$ -Sc(111) >  $\gamma/\gamma'$ -Sc(01)。

(3)态密度分析表明:在 $\gamma/\gamma'$ 相界中掺杂Sc原子会使掺杂原子与最近邻的Ni或Al原子发生轨道杂化作用并获得电子。这增强了Sc原子与最近邻Ni或Al原子之间的结合键能,从而强化了 $\gamma/\gamma'$ 相界面的断裂性能。

#### [参考文献]

- [1]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.
- [2]Xuan H-J, Wu R-R. Aeroengine turbine blade containment tests using high-speed rotor spin testing facility [J]. Aerospace Science and Technology, 2006(8): 501-508.
- [3]Cetel A D, Duhl D N. Second-Generation Nickel-Base Single Crystal Superalloy [J]. Superalloys, 1988(8): 235-244.
- [4]Wu X-X, Wang C-Y. Influence of alloying elements upon the theoretical tensile strength of Ni-based model superalloy:  $\gamma$ -Ni/ $\gamma'$ -Ni<sub>3</sub>Al multilayer [J]. Computational Materials Science, 2016, 119(9): 120.
- [5]Liu S-L, Wang C-Y, Yu T. Influence of the alloying elements Re, Co and W on the propagation of the Ni/Ni<sub>3</sub>Al interface crack [J]. Computational Materials Science, 2015(7): 52.
- [6]Blavette D, Caron P, Khan T. An atom probe investigation of the role of rhenium additions in improving creep resistance of Ni-base superalloys [J]. Scripta Metallurgica, 1986(6): 1395-400.
- [7]濮晟, 谢光, 王莉. Re和W对铸态镍基单晶高温合金再结晶的影响 [J]. 金属学报, 2016, 52(5): 538-48.
- [8]Westbrooke E F, Forero L E, Ebrahimi F. Slip analysis in a Ni-base superalloy [J]. Acta Materialia, 2005, 53(7): 2137-47.

- [9]Xiao-Nan G, Yang G, Fu Y, et al. First-principles study of Ni/Ni<sub>3</sub>Al interface strengthening by alloying elements [J]. Computational Materials Science, 2009(4): 89.
- [10]Dorin T, Jiang L, Langan T. Formation of Al<sub>3</sub>Sc Dispersoids and Associated Strengthening [M]. The Minerals: Metals & Materials Series, Light Metals, 2023.
- [11]Gao Y H, Cao L F, Yang C, et al. Co-stabilization of  $\theta'$ -Al<sub>2</sub>Cu and Al<sub>3</sub>Sc precipitates in Sc-microalloyed Al-Cu alloy with enhanced creep resistance [J]. Materials Today Nano, 2019, 6(9): 100035.
- [12]Rui Deng, Feng Liu, Liming Tan, et al. Effects of scandium on microstructure and mechanical properties of RR1000 [J]. Alloys and Compounds, 2019, 785(9): 634-641.
- [13]Wang Y-J, Wang C-Y. The alloying mechanisms of Re, Ru in the quaternary Ni-based superalloys interface: A first principles calculation [J]. Materials Science and Engineering: A, 2008, 490(2): 242-9.
- [14]Huang J, Tea E, Li G, et al. Hydrogen release at metal-oxide interfaces: A first principle study of hydrogenated Al/SiO<sub>2</sub> interfaces [J]. Applied Surface Science, 2017, 406(8): 128-135.
- [15]Segall M D, Lindan P J D, Probert M J, et al. First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code [J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2002(9): 2717-2744.
- [16]Perdew J P, Burke K, Wang Y. Generalized gradient approximation for the exchange-correlation hole of a many-electron system [J]. Physical review, 2002, 54(23): 16533-9.
- [17]Monkhorst H J, Pack J D. Special points for Brillouin-zone integrations [J]. Physical review, 2002(9): 5188-92.
- [18]Hu Q M, Yang R, Xu D S, et al. Energetics and electronic structure of grain boundaries and surfaces of B- and H-doped Ni<sub>3</sub>Al [J]. Physical review, 2003, 67(22): 78.
- [19]Rice J R, Wang J-S. Embrittlement of interfaces by solute segregation [J]. Materials Science and Engineering A-structural Materials Properties Microstructure and Processing, 1989, 107(4): 23-40.
- [20]Eris R, Akdeniz M V, Mekhrabov A O. The Site Preferences of Transition Elements and Their Synergistic Effects on the Bonding Strengthening and Structural Stability of  $\gamma'$ -Ni<sub>3</sub>Al Precipitates in Ni-Based Superalloys: A First-Principles Investigation [J]. Metallurgical and Materials Transactions, 2021, 52(6): 2298-313.
- [21]Zhu C, Yu T, Wang C, et al. First-principles study of Ni/Ni<sub>3</sub>Al interface doped with Re, Ta and W [J]. Computational Materials Science, 2020(7): 109586.

作者简介: 贾亚鹏 (2000—), 男, 汉族, 河南安阳人, 硕士在读, 华北电力大学核科学与工程学院, 研究方向, 金属与合金材料。