

## 本期封面



2001年8期

栏目:

DOI:

论文题目: Ti在bcc Fe晶界中的作用

作者姓名: 尚家香 赵栋梁 王崇愚

工作单位: 钢铁研究总院功能材料所, 北京100081

通信作者: 王崇愚

通信作者Email: [cywang@public.bta.net.cn](mailto:cywang@public.bta.net.cn)

文章摘要: 在密度泛函理论框架下, 用第一原理DMol团簇方法, 基于Rice-Wang热力学模型研究了合金化元素Ti对bcc Fe $\Sigma$ 3[1 0](111)晶界结合的影响. 结果表明: 合金化元素Ti在晶界和自由表面的偏聚能之差为-0.372 eV, Ti增强晶界结合, 为韧性掺杂元素. Ti的化学效应起主要作用, 贡献为-0.713 eV, 表现为较强的增强晶界结合作用. 力学效应即掺杂引起的局域畸变贡献为+0.341 eV, 表现为减弱晶界结合的作用. 同时分析了Ti对晶界键合的影响, 当Ti原子占据晶界时, Ti使得距它较近的跨越晶界的键合加强, 反映了Ti强化晶界的作用.

关键词: Ti, bcc Fe晶界, 第一原理, 强化

分类号: TG146.2, 0763

关闭