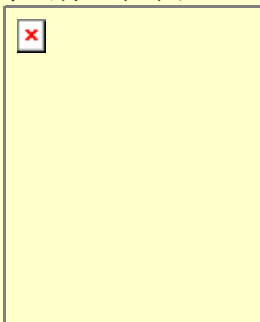


本期封面



2007年3

栏目：3

DOI:

论文题目： 基于递归法钛合金应力腐蚀机理研究

作者姓名： 刘贵立

工作单位： 沈阳工业大学

通信作者： 刘贵立

通信作者Email: guili@online.ln.cn

文章摘要：

采用计算机模拟技术创建钛 α 相和 β 相晶粒、 α 相中刃位错及位错塞积形成的微裂纹原子集团模型。利用递归法（Recursion）计算了位错、裂纹及 α 相晶粒的电子结构（费米能级、结构能、环境敏感镶嵌能等），计算并分析了合金元素Mo、V对 β 相原子结合能的影响。结果表明：氢在位错处的环境敏感镶嵌能较低，易于在位错处聚积，形成氢原子气团。位错对氢原子气团的“钉扎”作用使钛合金局部硬化，使位错运动受阻塞积形成微裂纹。裂纹尖端费米能级高于裂纹其他区域，电子从裂纹尖端流向裂纹其他区域造成电位差，在电解质作用下裂纹尖端阳极分解腐蚀。拉应力与裂纹处的氢气压使裂纹解理或沿晶延伸，促进应力腐蚀的发展。合金元素Mo、V有利于 α 钛合金中 β 相的形成，阻止裂纹在 α 相中扩展，提高合金应力腐蚀抗力。

关键词： 递归法，电子结构，钛合金

分类号： TG142

关闭