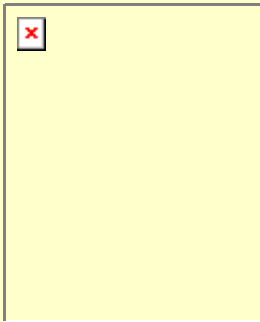


本期封面



1999年9期

栏目:

DOI:

论文题目: Co₃Ti化合物中合金元素有序行为的第一原理预测

作者姓名: 徐东生 李东 胡壮麒

工作单位: 中国科学院金属研究所, 沈阳 110015

通信作者: 徐东生

通信作者Email: dsxu@imr.ac.cn

文章摘要: 基于离散变分X₀₆₃₃原子簇(DV-X α cluster)方法的电子结构计算, 研究了合金元素在L₁₂结构Co₃Ti中的有序行为在电子结构计算中考虑了合金原子周围的晶格弛豫, 以原子簇的结合能为参数绘图, 用两条平行直线将合金元素在亚晶格中的占位行为分为三类, 在两线外侧的元素分别只占Co位(如Ni)或Ti位(如Sc, Y, Zr, Hf等), 不受成分影响, 两线之间元素(如V, Cr, Mn, Cu, Pd等)的占位行为.

关键词: Co₃Ti 有序行为 原子占位 占位竞争

分类号: TG111.1 TG146

关闭