

# MoSi<sub>2</sub> 和 WSi<sub>2</sub> 的价电子结构及性能分析 \*

彭可 易茂中 冉丽萍

(中南大学粉末冶金国家重点实验室, 长沙 410083)

**摘要** 根据固体与分子经验电子理论, 对 MoSi<sub>2</sub> 和 WSi<sub>2</sub> 的价电子结构进行了定量的分析, 通过键距差方法计算了 MoSi<sub>2</sub> 和 WSi<sub>2</sub> 晶体中各键上的共价电子数. 结果表明: 在 MoSi<sub>2</sub> 和 WSi<sub>2</sub> 晶体中, 沿 <331> 位向分布的 Mo-Si 和 W-Si 原子键最强, 这些键上的共价电子数和键能分别影响化合物的硬度和熔点. 晶体中晶格电子数影响其导电性和塑性, MoSi<sub>2</sub> 晶体中含有高密度的晶格电子, 因此 MoSi<sub>2</sub> 的导电性和塑性比 WSi<sub>2</sub> 好. 并从键络分布的不均匀性解释了 MoSi<sub>2</sub> 和 WSi<sub>2</sub> 脆性产生的原因.

**关键词** MoSi<sub>2</sub>, WSi<sub>2</sub>, 价电子, 硬度, 导电率

**中图法分类号** TG148

**文献标识码** A

**文章编号** 0412-1961(2006)11-1125-05

## ANALYSIS OF VALENCE ELECTRONIC STRUCTURES AND PROPERTIES OF MoSi<sub>2</sub> AND WSi<sub>2</sub>

PENG Ke, YI Maozhong, RAN Liping

State Key Laboratory for Powder Metallurgy, Central South University, Changsha, 410083

Correspondent: YI Maozhong, professor, Tel: (0731)8830894, E-mail: yimaozhong@126.com

Supported by National Natural Science Foundation of China (No.50472078) and PhD Foundation of Ministry of Education of China (No.20040533006)

Manuscript received 2006-04-12, in revised form 2006-06-19

**ABSTRACT** According to the empirical electron theory of solids and molecules, the valence electron structures of MoSi<sub>2</sub> and WSi<sub>2</sub> were quantitatively studied, and the numbers of valence electrons on every bond in MoSi<sub>2</sub> and WSi<sub>2</sub> crystals were calculated by the method of bond length difference. The results showed that the strongest bonds in the unit cells of MoSi<sub>2</sub> and WSi<sub>2</sub> were Mo-Si and W-Si bond along <331> direction, respectively, whose valence electron numbers and the bond energy have great impact on the hardnesses and melting points of the two crystals. Since the numbers of lattice electrons in a crystal influence its conductivity and plasticity, the conductivity and plasticity of MoSi<sub>2</sub> with higher density of lattice electron are better than WSi<sub>2</sub>. Also, it is inferred that the brittlenesses of MoSi<sub>2</sub> and WSi<sub>2</sub> could be explained primarily by a heterogeneity of bond distribution.

**KEY WORDS** MoSi<sub>2</sub>, WSi<sub>2</sub>, valence electron, hardness, conductivity

金属间化合物 MoSi<sub>2</sub> 以其高熔点 (2030 °C)、较低密度 (6.24 g/cm<sup>3</sup>)、优异的高温抗氧化性和耐蚀性以及良好的导电导热性而成为新型高温结构材料的研究热点之一 [1-4]。然而 MoSi<sub>2</sub> 的室温脆性和低的高温强度限制了其作为高温结构材料的应用。合金化是增强增韧 MoSi<sub>2</sub> 的一种有效方法, 其中以 WSi<sub>2</sub> 合金化效果为最佳。WSi<sub>2</sub> 的熔点 (2160 °C) 比 MoSi<sub>2</sub> 更高, 具有与 MoSi<sub>2</sub> 相同

的晶体结构, 可与 MoSi<sub>2</sub> 形成固溶体, 其 1500 °C 的屈服应力为纯 MoSi<sub>2</sub> 的 8—10 倍 [5], 添加 50% (摩尔分数) WSi<sub>2</sub> 的 MoSi<sub>2</sub> 基复合材料的室温韧性提高 86% [6]。

Bhattacharyya 等 [7] 利用自洽赝势电子理论计算了 MoSi<sub>2</sub> 和 WSi<sub>2</sub> 电荷密度分布, 并计算了它们的理论结合能, 但没有确切给出它们的金属键与共价键的含量。而应用固体与分子经验电子理论 (EET), 可直接讨论金属间化合物中原子所处价态并半定量给出原子键中共价键的相对贡献。本文利用固体与分子经验电子理论, 对 MoSi<sub>2</sub> 和 WSi<sub>2</sub> 进行价电子结构分析, 并计算了 MoSi<sub>2</sub> 和 WSi<sub>2</sub> 的理论结合能, 为今后开发更优异性能的高温结构材料提供理论依据。

\* 国家自然科学基金项目 50472078 和教育部博士点基金项目 20040533006 资助

收到初稿日期: 2006-04-12, 收到修改稿日期: 2006-06-19

作者简介: 彭可, 男, 1979 年生, 博士生

## 1 MoSi<sub>2</sub> 和 WSi<sub>2</sub> 晶体结构、实验键距和等同键数

### 1.1 晶体结构

MoSi<sub>2</sub> 和 WSi<sub>2</sub> 均属于 C11<sub>b</sub> 型体心正方结构, 空间群为 I4/mmm, 金属原子 Me 占据 2a(0, 0, 0) 位, Si 原子占据 4e(0, 0, u) 位, 晶体结构如图 1 所示. 沿 (001) 方向的堆垛顺序为: Me, Si, Si, Me, Si, Si, Me. 尽管 Me 和 Si 原子层并非交替堆垛, 但有研究 [7] 认为, (001) 面的面间距可分为 3 个相等的部分, 即  $c' = c/3$ . 通过 MoSi<sub>2</sub> 和 WSi<sub>2</sub> 电子结构的计算 [8,9]、X 射线粉末衍射的 Rietveld 精修 [10] 以及单晶体衍射测定晶体结构 [11], 发现 Si 原子偏离 c/3 位置. 从实验和理论计算获得的 MoSi<sub>2</sub> 和 WSi<sub>2</sub> 晶胞结构参数列于表 1.

### 1.2 实验键距

进行键距差法 (bond length difference, BLD) 计算的前提条件是必须知道其晶体结构类型、晶格常数和原子坐标参数的具体数值. 本文采用文献 [11] 的晶胞结构参数来计算实验键距. 从图 1 可以看出, 位于中心结点的 Me 原子和八个顶角的 Me 原子为同类原子, 位于体心的 Si 原子和其它结点位置的 Si 原子也为同类原子. 因此, 在 C11<sub>b</sub> 型晶体结构具有六种不可忽略的键. 利用下式可计算原子间键距 [12]

$$D_{(n\alpha)} = \{(x_u - x_v)^2 a^2 + (y_u - y_v)^2 b^2 + (z_u - z_v)^2 c^2\}^{1/2} \quad (1)$$

式中  $u$  和  $v$  表示成键的两个原子, 其坐标参数分别为  $(x_u, y_u, z_u)$  和  $(x_v, y_v, z_v)$ ;  $a, b, c$  为晶格常数.

### 1.3 等同键数

根据公式  $I_\alpha = I_M \cdot I_S \cdot I_K$  [12], 求得对应各键的等同键数  $I_\alpha$  分别为

$$I_A = 2 \times 8 \times 2 = 32, \quad I_B = 4 \times 4 \times 1 = 16,$$

$$I_C = 2 \times 2 \times 2 = 8, \quad I_D = 4 \times 1 \times 1 = 4,$$

$$I_E = 4 \times 4 \times 1 = 16, \quad I_F = 2 \times 4 \times 1 = 8.$$

其中,  $I_M$  为一个分子或一个晶体结构单元内包含的参考原子数目;  $I_S$  为一个参考原子所形成的  $\alpha$  键的数目;  $I_K$  为参数, 当成键的原子数目为同类原子时其值为 1, 当成键的两个原子为不同原子时其值取为 2.

各式中的下标 A, B, C, D, E, F 分别表示图 1 中的各个键.

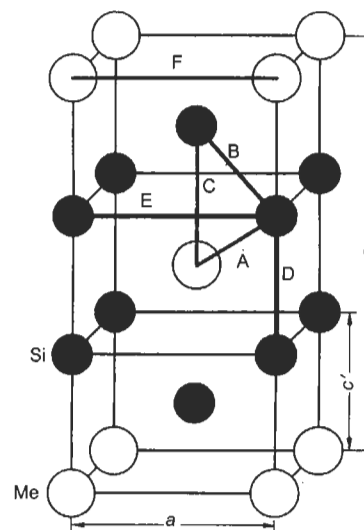


图 1 C11<sub>b</sub> 型 MeSi<sub>2</sub> 的晶体结构

Fig.1 Atom positions in unit cell of MeSi<sub>2</sub> with C11<sub>b</sub> structure

## 2 MoSi<sub>2</sub> 和 WSi<sub>2</sub> 价电子结构计算结果

根据各元素的杂化表, 将有关数据代入经验键距公式和文献 [12, 13] 提出的过渡金属化合物晶体结合能计算公式, 计算出各键距理论值和理论结合能, 再结合实验键距及结合能实验值确定最佳组合杂阶态 [12,14,15], 即可确定各元素所在杂阶. MoSi<sub>2</sub> 和 WSi<sub>2</sub> 结合能的实验值分别为 1681.2 和 1844.6 kJ/mol [7].

表 1 从实验和理论计算获得的 MoSi<sub>2</sub> 和 WSi<sub>2</sub> 晶胞结构参数  
Table 1 Structure parameters of MoSi<sub>2</sub> and WSi<sub>2</sub> obtained from experiments and calculations

Research method	Phase	Lattice parameter, nm			Si atomic position
		$a$	$c$	$c/a$	$u$
Powder method <sup>[7]</sup>	MoSi <sub>2</sub>	0.3200	0.7861	2.457	0.333c
	WSi <sub>2</sub>	0.3212	0.7880	2.453	0.333c
LAPW <sup>[9]</sup>	MoSi <sub>2</sub>	0.3222	0.7883	2.447	0.3355c
	WSi <sub>2</sub>	0.3230	0.7867	2.436	0.3351c
Pseudo-potential <sup>[8]</sup>	MoSi <sub>2</sub>	0.3202	0.7852	2.452	0.3374c
	WSi <sub>2</sub>	0.3211	0.7868	2.450	0.3366c
Rietveld refinement <sup>[10]</sup>	MoSi <sub>2</sub>	0.32064	0.78478	2.448	0.3353c
Single-crystal XRD <sup>[11]</sup>	MoSi <sub>2</sub>	0.32056	0.78450	2.447	0.3353c
	WSi <sub>2</sub>	0.32138	0.78299	2.436	0.3347c

通过计算机编程计算, MoSi<sub>2</sub> 和 WSi<sub>2</sub> 晶体的 Mo 和 W 分别处于丙种杂化第 3 阶和丙种杂化第 7 阶, 而 Si 分别处于第 1 阶和第 3 阶状态. MoSi<sub>2</sub> 和 WSi<sub>2</sub> 晶体理论结合能分别为 1677.1 和 1859.5 kJ/mol, 与实验值间的偏离分别为 0.24% 和 0.81%, 这比用自洽赝势电子理论计算的结果 ( $E_{\text{MoSi}_2}=1847.8$  kJ/mol,  $E_{\text{WSi}_2}=2058.1$  kJ/mol<sup>[7]</sup>) 要好得多.

利用共价键键能公式计算各键键能<sup>[12,16]</sup>, 计算过程中所需的 Mo, W 和 Si 原子的杂化状态参数如表 2 所

示. 计算得到的 MoSi<sub>2</sub> 和 WSi<sub>2</sub> 的价电子结构和键能分别列于表 3 和表 4.

### 3 讨论

#### 3.1 熔点与价电子结构的关系

MoSi<sub>2</sub> 和 WSi<sub>2</sub> 的熔点分别为 2030 和 2160 °C, 其高熔点的成因可以从其价电子结构特点去加以分析. 根据 EET 理论<sup>[12]</sup>, 晶体熔化只需使晶体中维持原子呈三维周期排列的主干键络破坏. 随着温度升高, 固态晶体的原子热振动振幅增加. 当温度升至熔化温度时, 原子热振动振

表 2 Mo, W 和 Si 原子杂化状态参数  
Table 2 Hybridization state parameters of Mo, W and Si atoms

Atom	$\sigma$	$R(l)$ , nm	$l$	$m$	$n$	$\tau$	$l'$	$m'$	$n'$	$\tau'$	$C_{h\sigma}$	$C_{t\sigma}$	$n_{T\sigma}$	$n_{l\sigma}$	$n_{c\sigma}$
Mo	C3	0.10801	1	0	5	0	0	0	4	1	0.9492	0.0508	5.8984	0.9492	4.9492
W	C7	0.11699	1	0	5	0	0	0	4	1	0.8021	0.1979	5.6042	0.8021	4.8021
Si	1	0.11700	2	2	0	0	1	3	0	1	1	0	4	2	2
Si	3	0.11700	2	2	0	0	1	3	0	1	0.8320	0.1681	4	1.664	2.336

Note:  $\sigma$ —name of hybridization level;  $R(l)$ —half bond length;  $l, m, n$  and  $l', m', n'$ —covalence and electron numbers of s, p, d in  $h$  and  $t$  states, respectively;  $\tau, \tau'$ —parameters, when s electron is covalence one,  $\tau = \tau' = 1$ , when s electron is lattice one,  $\tau = \tau' = 0$ ;  $C_{h\sigma}$  and  $C_{t\sigma}$ —compositions of  $h$  and  $t$  states in  $\sigma$  level, respectively;  $n_{T\sigma}, n_{l\sigma}, n_{c\sigma}$ —total valence electron number, lattice and covalence electron numbers in  $\sigma$  level respectively

表 3 MoSi<sub>2</sub> 价电子结构  
Table 3 Valence electron structure of MoSi<sub>2</sub>

Bond	Bonded atom	$I_\alpha$	$n_\alpha$	$D_{n\alpha}$ , nm	$\vec{D}_{n\alpha}$ , nm	$E_\alpha$ , kJ/mol
A	Mo-Si	32	0.25888	0.26092	0.26022	26.420
B	Si-Si	16	0.33466	0.26322	0.26252	21.488
C	Mo-Si	8	0.23874	0.26303	0.26233	24.169
D	Si-Si	4	0.40204	0.25844	0.25774	26.293
E	Si-Si	16	0.03706	0.32056	0.31986	1.953
F	Mo-Mo	8	0.01859	0.32056	0.31986	2.278

$$\beta=0.060 \text{ nm}, \Delta D = |D_\alpha - \vec{D}_\alpha| = 6.96 \times 10^{-4} \text{ nm}.$$

$$E_c=1681.2 \text{ kJ/mol}, \vec{E}_c=1677.1 \text{ kJ/mol}, \Delta E_c/E_c=0.24\%$$

Note:  $D_\alpha$  and  $\vec{D}_\alpha$ —measured and calculated bond lengths, respectively;  $n_\alpha$ —number of covalence electron pair;  $E_\alpha$ —bond energy;  $E_c$  and  $\vec{E}_c$ —measured and calculated binding energies, respectively

表 4 WSi<sub>2</sub> 价电子结构  
Table 4 Valence electron structure of WSi<sub>2</sub>

Bond	Bonded atom	$I_\alpha$	$n_\alpha$	$D_{(n_\alpha)}$ , nm	$\vec{D}_{(n_\alpha)}$ , nm	$E_\alpha$ /kJ, mol
A	W-Si	32	0.30697	0.26152	0.26476	33.397
B	Si-Si	16	0.28869	0.26313	0.26637	22.078
C	W-Si	8	0.30056	0.26207	0.26531	32.631
D	Si-Si	4	0.34022	0.25885	0.26209	26.445
E	Si-Si	16	0.03087	0.32138	0.32462	1.938
F	W-W	8	0.03085	0.32138	0.32462	3.764

$$\beta=0.060 \text{ nm}, \Delta D = |D_\alpha - \vec{D}_\alpha| = 3.24 \times 10^{-3} \text{ nm}$$

$$E_c=1844.6 \text{ kJ/mol}, \vec{E}_c=1859.5 \text{ kJ/mol}, \Delta E_c/E_c=0.81\%$$

幅大到足以破坏近邻原子之间的结合键,即原子振动动能达到主干键的键能,主干键结合被破坏,晶体发生熔化.因此,化合物主干键的键能越高,则需输入更高能量才能破坏主干键,同时熔点就越高.

根据键能计算结果,在  $\text{MoSi}_2$  和  $\text{WSi}_2$  晶体中,沿  $\langle 331 \rangle$  位向分布的 A 键的键能最大,都有 32 个等同键数,是晶体中维持原子呈三维周期排列的主干键.由表 3 和表 4 可知,  $\text{WSi}_2$  晶体中的最强键 A 键能比  $\text{MoSi}_2$  晶体中的最强键 A 键能高 26.4%.按照 EET 理论<sup>[12]</sup>,主干键键能值的这种差异造成两种化合物晶体中维持原子呈三维周期排列的主干键被破坏所需原子热振动能量出现差异,因此  $\text{WSi}_2$  熔点高于  $\text{MoSi}_2$  熔点.

### 3.2 硬度与价电子结构的关系

共价电子对晶体硬度的影响,最终是对晶体内原子之间结合键的影响.晶体在外力的作用下,只能出现两种情况:一种是产生变形,另一种是破断.晶体的硬度高,是指在外力作用下,不易发生变形.从微观角度讲,就是某一晶面上的原子与其相邻晶面上的原子之间或同一晶面之间的结合键不易断裂.在晶体内原子之间的结合键断开之前,键上的共价电子起着结合晶体内原子的作用.原子间的共价电子数越多,硬度越高<sup>[17-19]</sup>.

通过理论计算,  $\text{MoSi}_2$  和  $\text{WSi}_2$  中最强键 A 键的键能分别为 26.420 和 33.397 kJ/mol,共价电子数分别为 0.25888 和 0.30697.由此可以推断出,  $\text{WSi}_2$  的硬度高于  $\text{MoSi}_2$ .实验证明,在 9.8 N 的载荷下,  $\text{MoSi}_2$  和  $\text{WSi}_2$  单晶的 Vickers 硬度 HV 分别为 800 和 1120<sup>[20]</sup>.

### 3.3 晶格电子与电阻率和塑性的关系

晶格电子是余瑞璜引入的一个新概念,指的是在多个原子组成的固体体系内,由 3 个或更多的原子所围绕的空间内的价电子. EET 认为,晶格电子数越多,金属性越强,塑性越好;在外场作用下,晶体中的晶格电子沿着晶体中的“通道”运动形成电流,晶格电子数目的增加意味着晶体导电性的增加.

由文献<sup>[12]</sup>,纯 Mo 和纯 W 晶体中的 Mo、W 原子均处于甲种杂化第 3 阶, Si 处于第 4 阶状态.在 Mo 与 Si 反应前, Mo 和 W 原子均有 1.2386 个晶格电子,具有较好的导电性; Si 原子在 4 阶形成  $\text{sp}^3$  共价键,由于较强的共价键,其电子不易脱离晶格的束缚而参与导电,仅有 0.336 个晶格电子.由表 2 可知, Mo 与 Si 反应形成  $\text{MoSi}_2$  后, Mo 原子处于丙种杂化第 3 阶,有 0.9492 个晶格电子;而 Si 原子处于第 1 阶,有 2 个晶格电子. W 与 Si 反应形成  $\text{WSi}_2$  后, W 原子处于丙种杂化第 7 阶,有 0.8021 个晶格电子;而 Si 原子处于第 3 阶,有 1.664 个晶格电子.虽然 Mo 和 W 原子的晶格电子数有所减少,但 Si 原子的晶格电子数大幅增加,  $\text{MoSi}_2$  相和  $\text{WSi}_2$  相的平均晶格电子数分别为 1.6576 和

1.3767,其晶格电子数均大于反应前参与导电的晶格电子数,且  $\text{MoSi}_2$  相的平均晶格电子数大于  $\text{WSi}_2$  相的平均晶格电子数.

由此可以推断,  $\text{MoSi}_2$  和  $\text{WSi}_2$  晶体均具有较好的导电性,且  $\text{MoSi}_2$  的电阻率小于  $\text{WSi}_2$  的电阻率;与  $\text{MoSi}_2$  相比,  $\text{WSi}_2$  的塑性较差.实验结果表明,  $\text{MoSi}_2$  和  $\text{WSi}_2$  室温电阻率分别为 21.5 和  $33.4 \mu\Omega \cdot \text{cm}$ <sup>[21]</sup>.  $\text{MoSi}_2$  单晶可以在室温产生塑性变形,而  $\text{WSi}_2$  单晶只有在 1100 °C 以上才能产生塑性变形<sup>[22]</sup>. EET 理论计算与实验结果吻合.

### 3.4 脆性与价电子结构的关系

$\text{MoSi}_2$  晶胞空间键在 (100) 面上的投影如图 2 所示.由计算结果可知,  $\text{MoSi}_2$  的 (100) 面之间分布着最强键 A 键和较强键 B 键,分别有 32 和 16 个等同键数;而 (100) 面上各键共价电子数相对较少,虽然次强键 D 键和较强键 C 键分布其上,但等同键数分别为 4 和 8,且分布不对称,而其它键的键能又很小.  $\text{WSi}_2$  晶胞空间键与  $\text{MoSi}_2$  类似.因此,  $\text{C11}_b$  型晶体对称性差,  $\text{MoSi}_2$  和  $\text{WSi}_2$  晶体中价电子结构的分布不均匀,晶体中强弱键交错是导致晶体脆性的主要原因.在应力作用下容易因弱键断开而产生微裂纹,故造成  $\text{MoSi}_2$  和  $\text{WSi}_2$  具有较高的脆性.

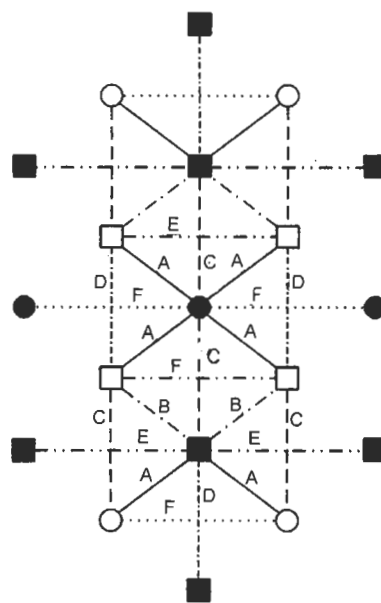


图 2  $\text{MoSi}_2$  晶胞各键在 (100) 面上的投影

Fig. 2 Projection of the bonds in  $\text{MoSi}_2$  unit cell on (100) plane ○ - Mo (at 0a); ● - Ni (at 0.5a); □ - Si (at 0a); ■ - Si (at 0.5a)

## 4 结论

(1)  $\text{MoSi}_2$  和  $\text{WSi}_2$  晶体的 Mo 和 W 分别处于丙种杂化第 3 阶和第 7 阶,而 Si 分别处于第 1 阶和第 3 阶状态.

(2) MoSi<sub>2</sub> 和 WSi<sub>2</sub> 晶体中, 沿  $\langle 331 \rangle$  位向分布的 Mo-Si 和 W-Si 原子键最强, 键能分别为 26.420 和 33.397 kJ/mol, 共价电子数分别为 0.25888 和 0.30697, 故两者之中 WSi<sub>2</sub> 的熔点高、硬度高。

(3) 通过对 MoSi<sub>2</sub> 和 WSi<sub>2</sub> 晶体中晶格电子数的比较, MoSi<sub>2</sub> 的导电性和塑性要好于 WSi<sub>2</sub>。

(4) MoSi<sub>2</sub> 和 WSi<sub>2</sub> 晶体中的价电子结构分布不均匀, 晶体中强弱键交错是导致晶体脆性的主要原因。

### 参考文献

- [1] Sharif A A, Misra A, Petrovic J J, Mitchell T E. *Intermetallics*, 2001; 9: 869
- [2] Petrovic J J. *Intermetallics*, 2000; 8: 1175
- [3] Sharif A A, Misra A, Petrovic J J, Mitchell T E. *Ser Mater*, 2001; 44: 879
- [4] Petrovic J J, Vasudevan A K. *Mater Sci Eng*, 1999; A261: 1
- [5] Petrovic J J, Honnell R E. *Ceram Eng Sci Proc*, 1990; 11: 734
- [6] Zhang H A, Chen P, Wang M J, Liu X Y. *Rare Met*, 2002; (4): 304
- [7] Bhattacharyya B K, Bylander D M, Kleinman L. *Phys Rev*, 1985; 32B: 7973
- [8] Zachariasen W. *Physik Chem*, 1927; 128: 39
- [9] Mattheiss L F. *Phys Rev*, 1992; B45: 3252
- [10] Harada Y, Morinaga M, Saso D, Takata M, Sakata M. *Intermetallics*, 1998; 6: 523
- [11] Tanaka K, Nawata K, Inui H, Yamaguchi M, Koiwa M. *Mater Res Soc Symp Proc*, 2001; 646: 4
- [12] Zhang R L. *Empirical Electron Theory of Solid and Molecules*. Changchun: Jilin Science and Technology Publishing House, 1993: 231  
(张瑞林, 固体与分子经验电子理论. 长春: 吉林科学技术出版社. 1993: 231)
- [13] Xu W D, Zhang R L, Yu R H. *Sci Chin*, 1988; 3A: 323  
(徐万东, 张瑞林, 余瑞璜. 中国科学, 1988; 3A: 323)
- [14] Chen S L, Gu Q, Wang Y M. *Acta Phys Sin*, 1995; 44: 940  
(陈舜麟, 顾 强, 王天民. 物理学报, 1995; 44: 940)
- [15] Jia D, Dong Z Z, Yu S J, Liu W X. *Rare Met Mater Eng*, 1998; 27: 152  
(贾 堤, 董治中, 于申军, 刘文西. 稀有金属材料与工程, 1998; 27: 152)
- [16] Liu L. *Rare Met Mater Eng*, 1997; 26: 9  
(刘 宁. 稀有金属材料与工程, 1997; 26: 9)
- [17] Wang H R, Ye Y F, Ming G H, Qin J Y, Wang W M. *Sci Bull*, 2001; 46: 215  
(王焕荣, 叶以富, 闵光辉, 秦敬玉, 王伟民. 科学通报, 2001; 46: 215)
- [18] Zheng Y, Xiong W H, Zong X J. *Rare Met Mater Eng*, 2002; 31: 13  
(郑 勇, 熊惟皓, 宗校军. 稀有金属材料与工程, 2002; 31: 13)
- [19] Liu N, Tian C Y, Shu S M, Xu G Y, Zhang R L. *J Chin Ceram Soc*, 1998; 26: 210  
(刘 宁, 田春艳, 舒士明, 徐根应, 张瑞林. 硅酸盐学报, 1998; 26: 210)
- [20] Inui H, Nakamoto T, Ishikawa K, Yamaguchi M. *Mater Sci Eng*, 1999; A261: 131
- [21] James F, Shackelford W A. *CRC Materials Science and Engineering Handbook*. Boca Raton: CRC Press LLC, 2001: 567
- [22] Ito K, Yano T, Nakamoto T, Inui H, Yamaguchi M. *Acta Mater*, 1999; 47: 937