

DOI:10.16356/j.1005-2615.2021.01.014

## Re 对 Ni<sub>3</sub>Al 屈服强度及断裂强度影响的第一原理研究

胡雪兰, 卢睿智, 王智隆, 王梦媛, 王亚如

(中国民航大学中欧航空工程师学院, 天津 300300)

**摘要:** 为了满足航空发动机热端部件材料力学性能的不不断提高, 应用基于密度泛函理论的第一原理方法, 研究了 Re 对 Ni<sub>3</sub>Al 金属间化合物力学强度的影响。通过建立掺杂 Re 前后 Ni<sub>3</sub>Al 的滑移模型和断裂模型, 计算了晶胞的不稳定堆垛层错能  $\gamma_{US}$  和断裂能  $\gamma_C$ , 进而判断 Re 对 Ni<sub>3</sub>Al 屈服强度和断裂强度的影响。另外根据经验判据,  $\gamma_C/\gamma_{US}$  值可表征材料的韧性。计算结果表明, Re 的掺杂增大了 Ni<sub>3</sub>Al [11 $\bar{2}$ ](111) 和 [1 $\bar{1}0$ ](111) 两个滑移系下的  $\gamma_{US}$ , 使得滑移系不易开动, 不易使 Ni<sub>3</sub>Al 发生塑性变形, 增大了 Ni<sub>3</sub>Al 的屈服强度。Re 增大了 Ni<sub>3</sub>Al 在密排面处的断裂能, 使得其不易在密排面发生断裂, 增大了断裂强度。关于改善 Ni<sub>3</sub>Al 的韧性, Re 的掺杂对于密排面上不同滑移方向的影响具有一定的差别。此研究工作可为改善航空发动机单晶叶片的力学性能提供理论基础。

**关键词:** 材料物理与化学; 第一原理计算; Ni<sub>3</sub>Al 金属间化合物; 合金化元素 Re; 力学强度

**中图分类号:** V250.3      **文献标志码:** A      **文章编号:** 1005-2615(2021)01-0125-05

## Effect of Re on Yield Strength and Fracture Strength of Ni<sub>3</sub>Al Based on First-Principles Study

HU Xuelan, LU Ruizhi, WANG Zhilong, WANG Mengyuan, WANG Yaru

(Sino-European Institute of Aviation Engineering, Civil Aviation University of China, Tianjin 300300, China)

**Abstract:** In order to meet the continuous progress of the mechanical properties of aeroengine hot-end components, the effects of Re on the mechanical strength of Ni<sub>3</sub>Al intermetallics are investigated by the first-principles calculation based on density functional theory. By establishing the slip model and fracture model of Ni<sub>3</sub>Al before and after doping Re, unstable stacking fault energy  $\gamma_{US}$  and fracture energy  $\gamma_C$  are calculated, and then the effects of Re on the yield strength and fracture strength of Ni<sub>3</sub>Al are determined. In addition, according to empirical criteria, the  $\gamma_C/\gamma_{US}$  value can characterize the toughness or brittleness of materials. The results show that Re augments  $\gamma_{US}$  in the two slip systems [11 $\bar{2}$ ](111) and [1 $\bar{1}0$ ](111) of Ni<sub>3</sub>Al, indicating Re makes them difficult to move. Thus Re makes Ni<sub>3</sub>Al difficult to perform the plastic deformation and enhances its yield strength. Furthermore, Re augments  $\gamma_C$  at the close-packed surface of Ni<sub>3</sub>Al, making it difficult to fracture at the surface and enhancing its fracture strength. Regarding to improving the toughness of Ni<sub>3</sub>Al, Re has different effects in the different slip directions at the close-packed surface. The research can provide the theoretical basis for improving the mechanical properties of single crystal blades of aeroengines.

**Key words:** materials physics and chemistry; first-principles calculation; Ni<sub>3</sub>Al intermetallics; alloying element Re; mechanical strength

**基金项目:** 中央高校基本业务经费(3122018Z004)资助项目。

**收稿日期:** 2020-05-23; **修订日期:** 2021-01-03

**通信作者:** 胡雪兰, 博士, 教授, E-mail: huxlemma@163.com。

**引用格式:** 胡雪兰, 卢睿智, 王智隆, 等. Re 对 Ni<sub>3</sub>Al 屈服强度及断裂强度影响的第一原理研究[J]. 南京航空航天大学学报, 2021, 53(1): 125-129. HU Xuelan, LU Ruizhi, WANG Zhilong, et al. Effect of Re on yield strength and fracture strength of Ni<sub>3</sub>Al based on first-principles study[J]. Journal of Nanjing University of Aeronautics & Astronautics, 2021, 53(1): 125-129.

随着航空涡轮发动机的不断发展,推重比和涡轮前温度不断提高<sup>[1]</sup>,使得进一步开发发动机热端部件材料成为重点研究工作。 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 金属间化合物具有熔点高、密度小、高温性能好等特点,使其具备成为热端部件材料的潜质。但是其屈服强度较低、室温下韧性不足的缺点,限制了它进一步的发展,目前科研人员主要通过掺杂合金化元素的方法来提 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 的力学性能。在合金化元素中,Re的掺杂可使高温合金的强度和耐高温能力进一步提高,单晶合金的组织性能得到极大改善<sup>[2]</sup>。Gong等基于密度泛函理论和Debye-Grüneisen模型发现Re能够增强 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 的热力学性质,其归因于Re原子与相邻主体原子间增强的化学键合<sup>[3]</sup>。Zhao等使用第一原理计算,发现Mo-Re原子对优先选择Al-Al位点,并使得 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 的杨氏模量增加<sup>[4]</sup>。Liu等基于分子动力学和离散变分法,研究了Re对 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 沿3种裂纹方向裂纹脆性断裂的影响,得出Re使得 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 合金的强度增加,提高了合金的抗变形能力<sup>[5]</sup>。胡雪兰等通过第一原理计算,发现当Re的掺杂浓度为0.93%和1.85%时,均能提高 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 的刚性和硬度,1.85%时改善效果更为明显<sup>[6]</sup>。在实验方面,Zhao等设计了含Re单晶 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 基合金IC21,IC21表现出优异的蠕变性能和良好的高温抗氧化性<sup>[7]</sup>。Tian等探究高温下含Re的镍基高温合金蠕变过程的变形机理,得出Re和合金中其他元素的相互作用可能会降低原子的扩散速率,从而改善微观结构的稳定性<sup>[8]</sup>。

目前关于Re掺杂 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 方面的研究,很少涉及Re对 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 滑移系、屈服强度以及韧性的影响。屈服强度较低和韧性不足是 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 材料的主要缺点,而Re对于 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 滑移系开动的难易程度的影响可以判断出Re是否能够改善 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 的屈服强度。论文中的滑移面同样是 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 的密排面,密排面的正常堆垛可能出现破坏的情况<sup>[9]</sup>,通过建立密排面之间的断裂层,可以研究Re对于 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 断裂强度的影响。本文中计算的不稳定堆垛层错能与断裂能的比值,可用来表征材料的韧脆性,进而判断Re的掺杂是否对 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 的韧性有所改善。

## 1 计算模型与方法

所有计算运用基于密度泛函理论的第一原理方法,交换关联泛函采用广义梯度近似(Generalized gradient approximation, GGA)。建立滑移和断裂模型时使用可视化电子及结构分析软件(Vi-

simulation for electronic and structural analysis, VESTA),计算晶胞能量时使用维也纳从头计算模拟的计算机程序包(也称原子尺度材料模拟的计算机程序包,Vienna ab-initio simulation package, VASP)。离子和电子间的相互作用采用超软赝势。晶体波函数用平面波基展开,平面波动能的截止能为500 eV。计算广义堆垛层错能时,建立的滑移模型如图1(b)所示,模型体积为 $10.10 \text{ \AA} \times 8.78 \text{ \AA} \times 18.60 \text{ \AA}$ ,对布里渊区的积分采用 $3 \times 3 \times 1$ 的Monkhorst-Pack均匀 $k$ 点网格,设置相邻层错面之间的距离为 $9.30 \text{ \AA}$ (大于 $8 \text{ \AA}$ ),消除了它们之间的相互作用。计算断裂能时,建立的断裂模型如图1(c)所示,模型体积为 $10.10 \text{ \AA} \times 8.78 \text{ \AA} \times 27.85 \text{ \AA}$ ,对布里渊区的积分采用 $3 \times 3 \times 1$ 的Monkhorst-Pack均匀 $k$ 点网格。设置中间真空层厚度为 $11.1 \text{ \AA}$ (大于 $10 \text{ \AA}$ ),可消除两个断裂表面间的相互作用<sup>[10]</sup>。两个模型中的原子层数均为9层,每层包含16个原子,在滑移模型中,上面4层原子设置有滑移矢量。掺杂原子Re的位置靠近滑移面和真空层,当发生滑移和断裂时,Re与近邻原子所成的化学键断裂,容易比较Re掺杂前后对于 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 力学强度的影响。结构弛豫计算的收敛判据为原子间作用力小于 $10^{-3} \text{ eV/\AA}$ ,弛豫时固定滑移原子的 $b$ 方向位移以及断裂表面原子的 $c$ 方向位移。考虑到模型计算的耗时问题,模型中掺杂了1个Re原子,Re的掺杂浓度为0.70%,与之前相关研究中的掺

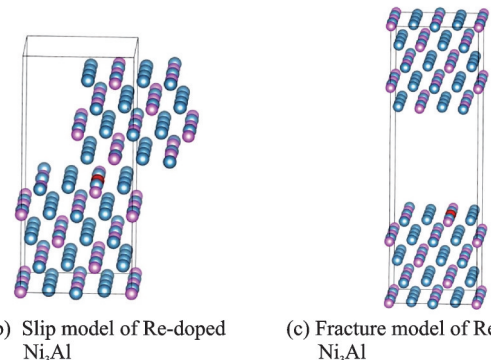
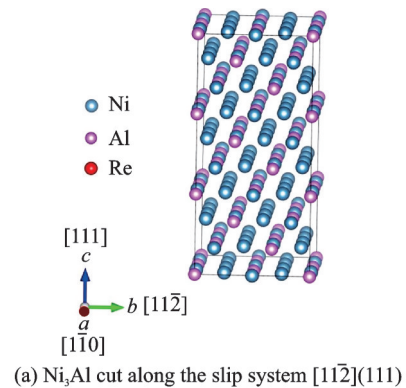


图1 沿 $[11\bar{2}](111)$ 滑移系截取的 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 晶胞以及掺杂Re的 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 滑移模型和断裂模型示意图

Fig.1 Schematic of  $\text{Ni}_3\text{Al}$  cut along the slip system  $[11\bar{2}](111)$ , and slip model and fracture model of Re-doped  $\text{Ni}_3\text{Al}$

杂浓度 0.85% 相差不大。

## 2 结果分析

低温和常温下,单晶体的塑性变形主要通过滑移方式进行,因此可通过分析晶胞产生滑移的难易程度判断材料屈服强度的大小。在实际晶体中,由于密排面的正常堆垛可能出现破坏的情况,因此可以通过密排面发生断裂的难易程度判断断裂强度的大小。已有研究表明,Re原子在Ni<sub>3</sub>Al中易于替代Al位<sup>[6]</sup>,Ni<sub>3</sub>Al体系中(111)面上的滑移系优先启动<sup>[11]</sup>。基于此结论,本文通过计算 $[11\bar{2}](111)$ 和 $[1\bar{1}0](111)$ 两个滑移系断裂能和不稳定堆垛层错能,探究Re的掺杂对Ni<sub>3</sub>Al力学强度的影响。这里研究的力学强度主要是屈服强度和断裂强度,它们分别用来描述材料抵抗塑性变形和断裂的能力。

### 2.1 Re的掺杂对 $[11\bar{2}](111)$ 滑移系的影响

在单位滑移面积上,原子沿滑移方向刚性滑移所需要的能量为广义堆垛层错能 $\gamma_{GSF}$ ,其最大值为不稳定堆垛层错能 $\gamma_{US}$ 。 $\gamma_{US}$ 可表征滑移系开动所需的能量。 $\gamma_{GSF}$ 可通过如下公式定义<sup>[12]</sup>

$$\gamma_{GSF}(u) = \frac{E(u) - E(0)}{A} \quad (1)$$

式中: $E(u)$ 代表滑移矢量为 $u$ 时晶胞的能量; $E(0)$ 代表无滑移时晶胞的能量; $A$ 为滑移面的面积。该公式通过计算发生滑移时晶胞能量与无滑移时晶胞能量的差值,确定 $\gamma_{GSF}$ 。

图2中 $u/b$ 的值可表征晶胞畸变的程度,此处表征晶胞滑移变形的程度。 $u/b$ 为晶胞的上半部4个原子层沿 $[11\bar{2}]$ 的滑移量,晶胞内下半部5个原子层固定不动。晶胞弛豫时,有滑移矢量的原子沿 $[11\bar{2}]$ 方向的坐标设为固定,以保证晶胞始终处于滑移变形的情况下进行弛豫。由图2可得,两种体系 $\gamma_{GSF}$ 在 $u=0.25b$ ( $b$ 为柏式矢量)处均出现最大值,即不稳定堆垛层错能 $\gamma_{US}$ 。无论是否掺杂Re,体系在滑移过程中, $\gamma_{GSF}$ 值的大小与部分原子滑移至原晶胞(这里的原晶胞指未产生滑移时的晶胞)的间隙位或原子位有关。图3中虚线圆圈代表滑移前各原子所处的位置,实线圆圈代表第1列原子经过滑移后所处的位置。由Ni<sub>3</sub>Al的晶体结构特征可知,当滑移量为25%时,滑移的Al、Ni原子占据了原晶胞内原子之间的空隙处,如图3(a)所示,而它们滑移前所在的位置被空出,因此晶胞内部产生了大量的空位,使得晶胞能量增大<sup>[13]</sup>,进而得到的 $\gamma_{GSF}$ 值较大;当滑移量为50%时,滑移的Al原子占据了原晶胞Ni原子的位置,滑移的Ni原子占据

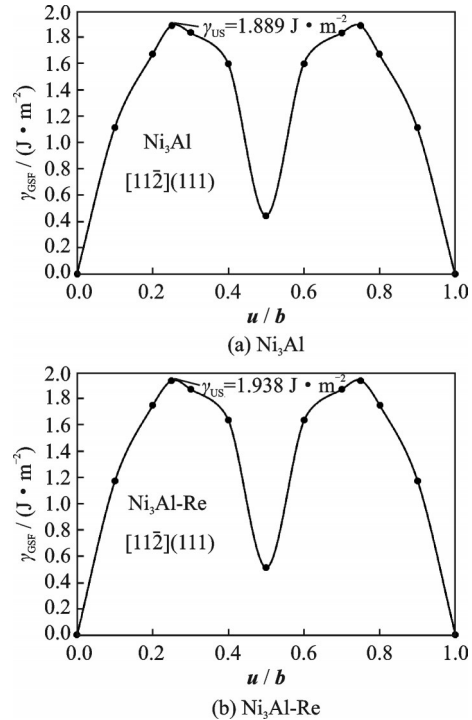


图2 Ni<sub>3</sub>Al和Ni<sub>3</sub>Al-Re在 $[11\bar{2}](111)$ 滑移系下 $\gamma_{GSF}$ 随滑移量变化的关系曲线

Fig.2 Variation curves of  $\gamma_{GSF}$  of Ni<sub>3</sub>Al and Ni<sub>3</sub>Al-Re versus slip change for the slip system $[11\bar{2}](111)$

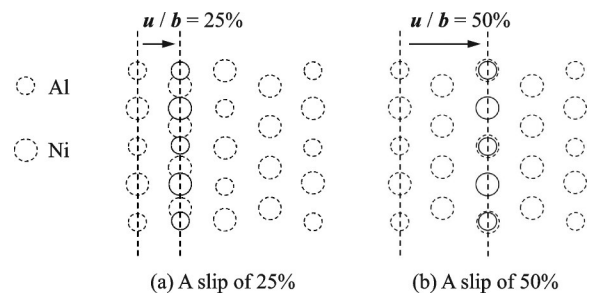


图3 滑移25%和滑移50%时Ni<sub>3</sub>Al中部分原子的移动情况(以沿 $[11\bar{2}](111)$ 滑移系截取的Ni<sub>3</sub>Al晶胞中第7层第1列原子为例)

Fig.3 Movement of some atoms in Ni<sub>3</sub>Al when it occurs a slip of 25% and 50%(e.g. the first column of atoms in the seventh layer of Ni<sub>3</sub>Al cut along the slip system $[11\bar{2}](111)$ )

了原晶胞Al原子的位置,如图3(b)所示,大量的空位被填补使得晶胞的能量减小,因此得到的 $\gamma_{GSF}$ 值较小。Re掺杂前后, $\gamma_{US}$ 值由1.889 J/m<sup>2</sup>增加至1.938 J/m<sup>2</sup>,说明Re增大了 $[11\bar{2}](111)$ 滑移系开动所需要的能量,使得 $[11\bar{2}](111)$ 不易开动,进而增大了Ni<sub>3</sub>Al在该滑移方向上的屈服强度。

断裂能 $\gamma_C$ 同样是判断固体力学性能的一个重要物理量。断裂能表示将单位面积的固体断裂分开成两个自由表面所需要的能量。计算公式如下

$$\gamma_c = \frac{E_s - E_0}{\Delta S} \quad (2)$$

式中： $E_s$ 代表断裂后体系能量； $E_0$ 代表断裂前体系的能量； $\Delta S$ 表示断裂产生的表面面积。为了消除两个表面间的相互作用，计算过程中两个表面之间的距离为11.1 Å。通过计算， $\text{Ni}_3\text{Al}$ 在(111)面处的断裂能为3.657 J/m<sup>2</sup>， $\text{Ni}_3\text{Al-Re}$ 在(111)面处的断裂能为3.827 J/m<sup>2</sup>。说明对于(111)面，Re提高了裂纹扩展所需要的能量，使得 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 不易在此面发生断裂，增大了 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 的断裂强度。断裂能 $\gamma_c$ 与不稳定堆垛层错能 $\gamma_{US}$ 的比值可以表征材料的韧脆性<sup>[14-15]</sup>。材料的断裂总是伴随裂纹的形成与扩展，裂纹尖端存在应力集中，若裂纹尖端的应力水平超过了结合键的强度，结合键将不稳定导致裂纹扩展，则引起脆性断裂；若裂纹尖端的应力水平引起滑动变形，裂纹将钝化，材料发生塑性变形。因此，应力集中造成位错的滑移或是裂纹的扩展决定了材料的断裂模式，故材料中位错滑移所需的能量与裂纹扩展所需的能量是决定材料韧脆性的重要参数。 $\gamma_c/\gamma_{US}$ 值越大说明材料韧性越好，反之材料越脆。Re掺杂 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 之后， $\gamma_c/\gamma_{US}$ 值由1.936增加至1.975，表明对于 $[\bar{1}\bar{1}\bar{2}](111)$ 滑移系，Re的掺杂改善了 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 的韧性。

## 2.2 Re的掺杂对 $[\bar{1}\bar{1}\bar{0}](111)$ 滑移系的影响

由图4可知，对于此滑移系 $\gamma_{US}$ 出现在 $u=$

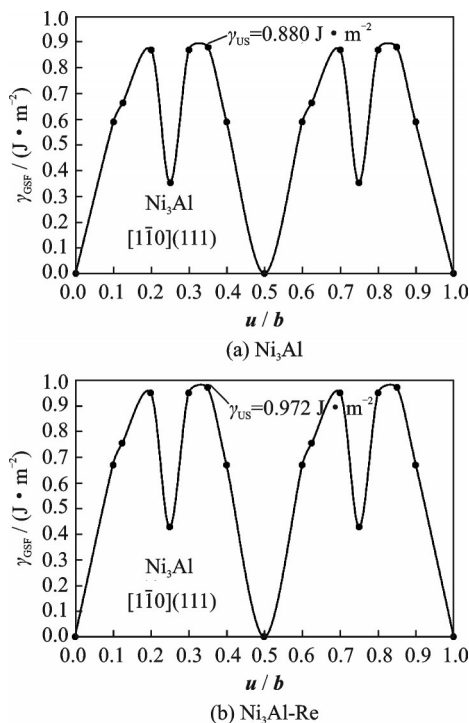


图4  $\text{Ni}_3\text{Al}$ 和 $\text{Ni}_3\text{Al-Re}$ 在 $[\bar{1}\bar{1}\bar{0}](111)$ 滑移系下 $\gamma_{GSF}$ 随滑移量变化的关系曲线

Fig.4 Variation curves of  $\gamma_{GSF}$  of  $\text{Ni}_3\text{Al}$  and  $\text{Ni}_3\text{Al-Re}$  versus slip change for the slip system  $[\bar{1}\bar{1}\bar{0}](111)$

0.35 $b$ 处。由于晶胞在 $[\bar{1}\bar{1}\bar{0}](111)$ 滑移系下滑移50%与未产生滑移时的晶胞结构一致，因此 $\gamma_{US}$ 值同样出现在 $u=0.85b$ 处。通过对比图2(a)和图3(a)发现， $[\bar{1}\bar{1}\bar{0}](111)$ 滑移系的 $\gamma_{US}$ 值明显小于 $[\bar{1}\bar{1}\bar{2}](111)$ 的 $\gamma_{US}$ 值，说明 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 中 $[\bar{1}\bar{1}\bar{0}](111)$ 比 $[\bar{1}\bar{1}\bar{2}](111)$ 更容易开动。Re掺杂 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 晶胞后， $\gamma_{US}$ 值由0.880 J/m<sup>2</sup>增加至0.972 J/m<sup>2</sup>，说明Re增大了 $[\bar{1}\bar{1}\bar{0}](111)$ 滑移系开动所需的能量，使 $[\bar{1}\bar{1}\bar{0}](111)$ 不易开动，进而增大了 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 在该滑移方向上的屈服强度。

在断裂能方面，由于滑移方向 $[\bar{1}\bar{1}\bar{0}]$ 和 $[\bar{1}\bar{1}\bar{2}]$ 相互垂直且均平行于(111)面，所以在 $[\bar{1}\bar{1}\bar{0}](111)$ 和 $[\bar{1}\bar{1}\bar{2}](111)$ 两个滑移系下计算的断裂能是一致的。因此对于 $[\bar{1}\bar{1}\bar{0}](111)$ 滑移系，Re同样提高了裂纹扩展所需要的能量，使得 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 在(111)面处不易发生断裂，增大了 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 的断裂强度。这与其他实验研究中含Re的 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 基合金能够表现出良好的高温强度的结论相符合<sup>[16]</sup>。Re掺杂后， $\gamma_c/\gamma_{US}$ 值由4.156降低至3.937，说明对于 $[\bar{1}\bar{1}\bar{0}](111)$ 滑移系，Re使得 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 的韧性降低，进而说明Re的掺杂对于(111)面上不同滑移方向的影响具有一定的差别。对于 $[\bar{1}\bar{1}\bar{2}](111)$ ，Re对 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 断裂强度的增强作用优于对屈服强度的增强作用；对于 $[\bar{1}\bar{1}\bar{0}](111)$ ，Re对 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 屈服强度的增强作用优于对断裂强度的增强作用。由于两个滑移系的断裂能一致，说明在 $[\bar{1}\bar{1}\bar{0}]$ 滑移方向上，Re对 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 屈服强度的增强效果好于在 $[\bar{1}\bar{1}\bar{2}]$ 滑移方向上，Re使得 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 在 $[\bar{1}\bar{1}\bar{0}]$ 方向更难发生塑性变形。

## 3 结 论

本文基于第一原理计算了 $\text{Ni}_3\text{Al}$  $[\bar{1}\bar{1}\bar{2}](111)$ 和 $[\bar{1}\bar{1}\bar{0}](111)$ 两个滑移系的不稳定堆垛层错能和断裂能。得出如下结论：

(1) Re提高了 $[\bar{1}\bar{1}\bar{2}](111)$ 、 $[\bar{1}\bar{1}\bar{0}](111)$ 两个滑移系开动所需要的能量，不易使 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 发生塑性变形，增大了 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 的屈服强度。

(2) Re提高了 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 在(111)面处断裂需要的能量，不易使 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 发生断裂，增大了 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 的断裂强度。

(3)通过比较Re掺杂前后的 $\gamma_c/\gamma_{US}$ 值发现，在 $[\bar{1}\bar{1}\bar{2}](111)$ 滑移系下，Re改善了 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 的韧性；在 $[\bar{1}\bar{1}\bar{0}](111)$ 滑移系下，Re使得 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 韧性降低。说明在改善 $\text{Ni}_3\text{Al}$ 韧性方面，Re的掺杂对于密排面上不同滑移方向的影响具有一定的差别。

## 参考文献:

- [1] 焦华宾,莫松.航空涡轮发动机现状及未来发展综述[J].航空制造技术,2015(12):62-65.  
JIAO Huabin, MO Song. Present status and development trend of aircraft turbine engine[J]. Aeronautical Manufacturing Technology, 2015(12): 62-65.
- [2] 刘争光.Ni基单晶模型高温合金中重元素Re对裂纹扩展作用的原子学模拟[D].北京:钢铁研究总院,2014.  
LIU Zhengguang. Atomistic simulation of the effect of heavy element Re on the crack propagation in the Ni-based single crystal model superalloys[D]. Beijing: Central Iron and Steel Research Institute, 2014.
- [3] GONG Wei, ZHAO Wenyue, MIAO Naihua, et al. Strengthening effects of alloying elements W and Re on Ni<sub>3</sub>Al: A first-principles study[J]. Computational Materials Science, 2018, 144: 23-31.
- [4] ZHAO Wenyue, SUN Zhimei, GONG Shengkai. Synergistic effect of co-alloying elements on site preferences and elastic properties of Ni<sub>3</sub>Al: A first-principles study[J]. Intermetallics, 2015, 65: 75-80.
- [5] LIU Shulan, WANG Chongyu, YU Tao. Effect of Re and W upon brittle fracture in Ni<sub>3</sub>Al cracks by atomic simulation[J]. Computational Materials Science, 2015, 110: 261-269.
- [6] 胡雪兰,卢睿智,王智隆,等.Re对Ni<sub>3</sub>Al微观结构及力学性质影响的第一原理研究[J].物理学报,2020,69(10):212-220.  
HU Xuelan, LU Ruizhi, WANG Zhilong, et al. First-principles study on effect of Re on micro structure and mechanical properties of Ni<sub>3</sub>Al intermetallics[J]. Acta Physica Sinica, 2020, 69(10): 212-220.
- [7] ZHAO Haigen, LI Shusuo, PEI Yanling, et al. Microstructure and mechanical properties of Ni<sub>3</sub>Al-based single crystal alloy IC21[J]. Acta Metallurgica Sinica, 2015, 51(10): 1279-1287.
- [8] TIAN Sugui, ZHU Xinjie, WU Jing, et al. Influence of temperature on stacking fault energy and creep mechanism of a single crystal nickel-based superalloy[J]. Journal of Materials Science and Technology, 2016, 32(8): 790-798.
- [9] 王亚男,陈树江,董希淳.位错理论及其应用[M].北京:冶金工业出版社,2007:78-80.  
WANG Yanan, CHEN Shujiang, DONG Xichun. Dislocation theory and application[M]. Beijing: Metallurgical Industry Press, 2007: 78-80.
- [10] ZHAO Wenyue, SUN Zhimei, GONG Shengkai. Vacancy mediated alloying strengthening effects on  $\gamma/\gamma'$  interface of Ni-based single crystal superalloys: A first-principles study[J]. Acta Materialia, 2017, 135: 25-34.
- [11] 单智伟,杨继红,刘路,等.单晶Ni<sub>3</sub>Al裂纹扩展的TEM原位观察[J].金属学报,2000,36(3):262-267.  
SHAN Zhiwei, YANG Jihong, LIU Lu, et al. In-situ TEM investigation of crack propagation in single crystal Ni<sub>3</sub>Al[J]. Acta Metallurgica Sinica, 2000, 36(3): 262-267.
- [12] 胡雪兰.NiAl金属间化合物O杂质效应的第一原理研究[D].北京:北京航空航天大学,2009.  
HU Xuelan. First-principles calculation of effects of oxygen impurity on NiAl intermetallics[D]. Beijing: Beihang University, 2009.
- [13] 黄昆.固体物理学[M].2版.北京:北京大学出版社,2014:69-73.  
HUANG Kun. Solid state physics[M]. 2nd ed. Beijing: Peking University Press, 2014: 69-73.
- [14] RICE J R. Dislocation nucleation from a crack tip: An analysis based on the Peierls concept[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1992, 40(2): 239-271.
- [15] RICE J R, BELTZ G E, SUN Y. Topics in fracture and fatigue[M]. Berlin: Springer, 1992.
- [16] LI Peng, LI Qinqin, JIN Tao. Effect of Re on low-cycle fatigue behaviors of Ni-based single-crystal superalloys at 900 °C[J]. Materials Science and Engineering A, 2014, 603: 84-92.

(编辑:胥橙庭)