镍基高温合金设计的研究进展*

倪　莉，张　军，王　博，刘　林，傅恒志

（西北工业大学凝固技术国家重点实验室，西安 710072）

摘要　简述了近年来高温合金设计的研究进展，分析和讨论了蠕变性能、微观组织稳定性、铸造性能、密度和成本等方面因素在合金设计中的影响。并具体论述了相计算方法、d 电子理论、多元回归法、相图计算方法等高温合金设计方法的设计思路、理论基础及应用。最后，结合高温合金的使用要求，对未来高温合金设计的研究方向和发展趋势进行了探讨和展望。

关键词　镍基高温合金　蠕变性能　合金设计方法

中图分类号：TG132.3　　**文献标识码**：A

Progress in Alloy Design of Nickel-based Superalloys

NI Li, ZHANG Jun, WANG Bo, LIU Lin, FU Hengzhi

(State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072)

Abstract　Research status of the design of nickel-based superalloys is reviewed. The influences of creep resistance, microstructural stability, castability, density and cost on the design of superalloys are analyzed. The guidelines, theoretical basis and application of the superalloy design methods, such as phase computation, d-electrons concept, regression analysis, phase diagram calculation, are presented respectively. Finally, based on the operating requirements of the superalloys, the tendency and prospect of superalloy design methods are pointed out.

Key words　nickel-based superalloy, creep resistance, alloy design method

镍基高温合金作为一种重要的结构材料，具有优良的高温力学性能和抗热腐蚀性能，是目前先进航空发动机和工业燃气轮机叶片的主要材料[1]。可满足长期服役的先进航空发动机及能胜任高峰负荷发电的工业燃气轮机的出现，要求材料具有抗蠕变、抗疲劳、低热膨胀系数、高弹性模量以及低密度等综合性能。为了满足使用要求，必须从材料设计及制备技术方面进行深入研究并取得突破。

目前单晶高温合金已经发展到第五代，材料的承温能力提高了 100 ℃以上。在高温合金发展过程中，先进的合金设计理念和方法起到了至关重要的作用。过去的几十年里，材料设计者提出了多种高温合金设计方法。20 世纪 80 年代末 Morinaga 等[2-4]基于分子轨道能级提出的 d 电子理论是目前较为成熟的方法之一。近年来随着计算机技术和材料科学等基础学科的发展，涌现出很多新的合金设计方法。归纳现有的合金设计思想可知，无论采用何种设计方法，最终都回归到研究高温合金成分-工艺-组织结构-力学性能的关系，因此有必要对这种制约关系进行研究，为高温合金的优化设计打下理论基础。

本文对目前主要合金设计方法的设计思想、应用性和存在的问题进行讨论，从高温合金的蠕变性能、微观组织稳定性、铸造性能、密度和成本等角度出发，考虑其与合金成分之间的内在关系，探讨如何在合金设计中保证这些性能，为高代次镍基高温合金的设计提供参考。

1　高温合金设计考虑因素

由于高温合金成分复杂，所以在合金设计时需要考虑的因素较多，有必要对其影响因素进行讨论。Reed 等[5]综合考虑蠕变抗力、微观结构稳定性、铸造性能、密度和成本等因素建立模型，系统研究了一系列单晶高温合金，提出了合金的设计准则。

1.1　蠕变性能

蠕变断裂寿命是反映高温合金力学性能的一个重要参数，无论是合金设计还是实验及应用，其指标都是衡量合金高温力学性能的重要依据。由于镍基单晶合金特别是近 10 多年发展起来的一些高性能的单晶合金中所含合金元素较多，合金成分对其蠕变断裂寿命的影响十分复杂。

Reed[5]通过总结现有的一些研究结果，提出了用来描述蠕变抗力的价值指标，记为 M_{creep}：

$$M_{\mathrm{creep}} = \sum_i x_i / \widetilde{D}_i \tag{1}$$

式中：x_i 是合金中溶质元素 i 的原子分数，$\widetilde{D}_i$ 是互扩散系数的近似值。在实际涡轮燃气轮机工程应用中认为 1%蠕变

*国家高技术研究发展计划(2012AA03A511)

倪莉：女，1989 年生，硕士生，主要从事高代次单晶高温合金成分设计的研究　E-mail：nili89nwpu@163.com　张军：通讯作者，男，1967 年生，教授，主要从事高温合金的研究　Tel：029-88494825　E-mail：zhjscott@nwpu.edu.cn

所需要的时间是一个很重要的量,而且越大越好。Reed 证实了实验用高温合金发生 1%蠕变所需要的时间与上述的价值指标成线性关系(图 1)。因此,M_{creep}值越大的高温合金蠕变性能越好。

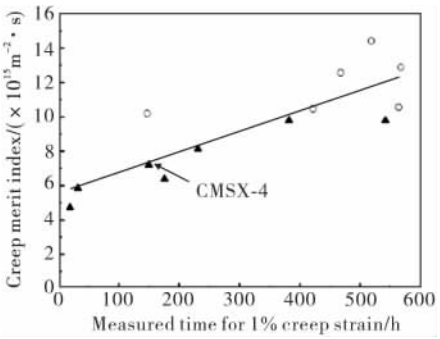

图 1 M_{creep}计算值与 1%蠕变所需时间的测量值的比较(900 ℃,390 MPa)[5]

Fig. 1 Comparison of computed values of merit index M_{creep} with measured values of time to 1% strain (900 ℃, 390 MPa)[5]

Yoo 等[6]认为镍基单晶高温合金的蠕变断裂寿命可以看成是合金成分、蠕变应力和蠕变温度的函数,并且用贝叶斯神经网络法建立了蠕变断裂寿命的模型,通过对复杂体系结构的计算证实神经网络法可以很精确地预测蠕变断裂寿命。该研究结果表明,Re 元素和 Cr 元素对蠕变断裂寿命的影响最大。

Janotti 等[7]用第一性原理阐明了在镍的晶格常数范围内过渡族金属元素对溶质-空位交换过程的影响,并着重研究了溶质的原子序数对溶质-空位的交换能的影响,进而研究其对高温性能尤其是蠕变性能的影响。来自 d 区中心的溶质元素具有大的溶质-空位交换能,如 Re 的溶质-空位交换能约为 170 kJ/mol。具有大的交换能的元素一般都被添加到高温合金中从而保证合金的强度。

1.2 微观组织稳定性

微观组织的设计是获得最佳蠕变抗力的一个必不可少的因素,因此在高温合金设计中,对微观组织的考虑至关重要。众所周知,有 3 个主要的微观组织特征参数影响着单晶高温合金的蠕变性能:γ′相体积分数、γ/γ′相错配度以及 TCP 相(拓扑密堆相)的析出倾向。

1.2.1 γ′相体积分数

γ′相是镍基高温合金中最重要的强化相。研究发现[8],在一定的温度和加载应力范围内,蠕变变形主要受 γ 通道的限制,且蠕变位错不穿透 γ′相。因此 γ′析出强化相含量需足够大才能限制住位错通道(即 γ 基体相)的扩展。

Dyson[9]提出镍基高温合金中蠕变变形速率的基本模型:

$$\dot{\varepsilon}=\frac{1.6}{\overline{M}}\rho\phi_p(1-\phi_p)[(\pi/4\phi)^{1/2}-1]c_jD_s\sinh\left[\frac{(\sigma-\sigma_i-\hat{\sigma_{net}})b^2\lambda_p}{\overline{M}kT}\right] \quad (2)$$

式中:ρ 是蠕变位错的柏氏矢量 b 的密度,λ_p 是 γ′粒子的间距,c_j 是凹凸部分的密度,$\overline{M}$ 是泰勒因数,D_s 是体积扩散系数,ϕ_p 是 γ′相体积分数。从式(2)可以看出,蠕变变形速率与 γ′相体积分数有关。

但高温合金中并不是 γ′相体积分数越大越好。Murakumo 等[10]分别在 900 ℃、392 MPa 和 1100 ℃、137 MPa 下对第三代单晶高温合金 TMS-75 进行蠕变实验,考察 γ′相体积分数对合金蠕变性能的影响。从图 2 可以看出,蠕变性能随着 γ′相体积分数的增加呈先增强后减弱的趋势,在两种条件下当 γ′相体积分数分别为 70%和 55%时,合金的蠕变断裂寿命最长。

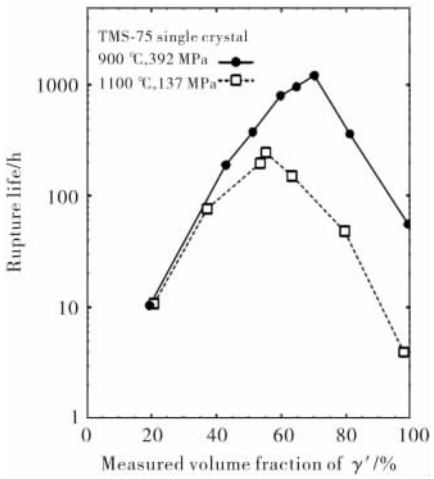

图 2 γ′相体积分数与蠕变断裂寿命的关系[10]

Fig. 2 Relationship between measured volume fraction of γ′ and creep rupture life[10]

1.2.2 γ/γ′错配度

Pyczak 等[11]指出 γ/γ′界面错配的共格应力是微观组织改变的驱动力,提高 γ/γ′错配度可在一定程度上提高合金的强度。研究表明[12,13],当使用温度低于 $0.6T_m$ 时,晶格错配度较大的合金具有较高的共格应变强化作用,可延长合金的持久寿命;而当温度高于 $0.6T_m$ 时,由于元素的扩散过程加剧,γ′相易于长大,使组织不稳定性增加,从而缩短合金的持久寿命。一般认为,具有较低晶格错配度的合金,γ/γ′两相的共格界面应变较小,在高温蠕变期间,合金的组织稳定性增加,并具有较高的持久性能。

高温合金的 γ/γ′错配度主要受合金成分的影响。Florian Pyczak 等[14]利用 X 射线衍射研究在 25~1100 ℃温度范围内不同合金元素对镍基高温合金点阵常数和点阵错配度的影响。由图 3($k=c_\gamma/c_\gamma$)可看出,合金元素 Re、Cr、Ru 以及偏析程度较小的元素如 Co、Mo 富集于 γ 基体相中,从而改变 γ 相的点阵常数。而合金元素 Ti、Ta、Al 富集于 γ′相中,从而改变 γ′相的点阵常数。其他元素如 W、Ir 在 γ 相和 γ′相中的含量近似平衡,同时增大两相的点阵常数。

另外,随着温度的升高,γ 相和 γ′相的点阵常数都增大,但是在高温下 γ 相的点阵常数比 γ′相的点阵常数增大更快。因此,在高温下高温合金的点阵错配度是负值,而且随着温度的升高会变得越来越负[14]。由以上分析可知,在设

计高温合金时，要结合合金的工作条件和性能要求，调整部分合金元素如 Re、Cr、Ta 等，以使高温合金的错配度最低，且最好是负值。

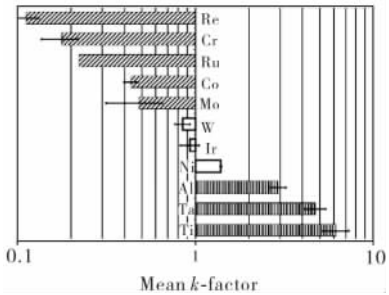

图 3　合金中不同元素的 k 值[14]

Fig. 3　Mean k-factor of different alloying elements in the series of investigated alloys[14]

1.2.3　TCP 相

随着高温合金中难熔元素含量的增加，TCP 相的析出倾向增大。TCP 相是由过渡族元素（主要包括 Ni、Cr、Mo、Co、W、Re）形成的具有高原子配位数和复杂晶体结构的一类金属间化合物，主要有 σ 相、p 相、μ 相和 R 相。大部分 TCP 相对高温合金的高温性能有害，主要是因为 TCP 相是脆性相，往往会成为裂纹产生和迅速扩展的通道。另外，TCP 相的形成消耗了基体中大量的难熔元素，从而削弱了基体的固溶强化效果[15]。因此，在高温合金的设计中，抑制 TCP 相的析出对保持微观组织的稳定性和高温合金的高温性能至关重要。

国内外在研究镍基高温合金设计时，为避免 TCP 相的形成，采用了很多方法，如相计算方法（N_v）、d 电子理论（Md）、P 值法等，其中 d 电子理论是应用最广的方法。在 d 电子理论中[2-4]，用 Md 值表示 TCP 相的析出倾向。Md 值越大，TCP 相越容易形成。进行合金设计时，要确保 Md 值小于某个临界值从而避免 TCP 相的析出。有研究表明[15]，TCP 相的形成是由于加入了固溶强化元素，如 Re、W、Ta 等。为了抑制 TCP 相的析出，需控制这些元素的含量。

1.3　合金铸造性能

镍基单晶高温合金的铸造性能主要考虑两个方面：合金的热处理窗口（HTW）和糊状区区间（ΔT）。热处理窗口是指合金的初熔温度与 γ' 相完全固溶的温度之差。热处理窗口越大，合金的热处理工艺越容易实施，一般要求热处理窗口不小于 20 ℃。糊状区区间是指液相开始凝固温度与液相完全凝固温度之差，其大小会影响单晶生长的难易及枝晶偏析程度。Reed[5] 认为，合金的铸造性能可以看成抵制雀斑形成的一种控制能力。雀斑主要在糊状区由于密度反转形成，显然糊状区越小越有利于单晶生长，一般要求糊状区区间不大于 50 ℃。

Hobbs 等[16] 通过研究定向凝固过程中合金元素对雀斑形成倾向的影响进而研究元素对合金铸造性能的影响，发现高密度难熔元素 Ta、W、Re 在凝固过程中偏析最严重，因此可以认为密度的改变仅仅是由这 3 种元素的再分配而引起的。由于 Re 和 W 偏析到固相，Ta 偏析到液相，故而铸造性能可以表示为：

$$M_{\text{castability}} = w_{\text{Ta}}/(1.2w_{\text{Re}} + w_{\text{W}}) \tag{3}$$

式中：w_{Ta}、w_{Re} 和 w_{W} 分别表示合金中 Ta、Re 和 W 的质量分数。$M_{\text{castability}}$ 值越大，则合金的铸造性能越好。因此设计合金时，在保证合金性能和相稳定性的前提下，可以适当提高 Ta 元素的含量，降低 Re 和 W 元素的含量。

1.4　密度和成本

随着单晶合金中难熔元素含量的增加，合金的初熔温度逐渐升高，但合金的密度也增加，这显然有悖于发动机叶片的设计要求。纯镍的密度为 8.907 g/cm^3，但是单晶镍基高温合金由于含有 10 余种合金元素，合金化程度很高，其密度显然与这个值不同（图 4）。

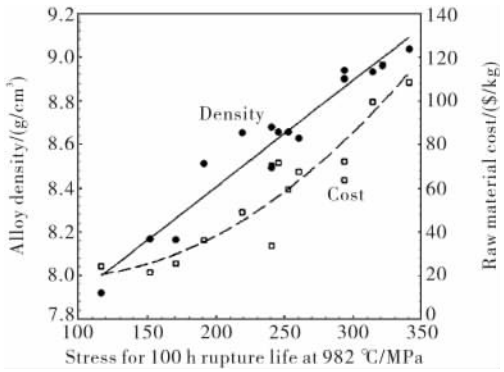

图 4　单晶高温合金中密度、成本与蠕变性能之间的关系[8]

Fig. 4　Data for the density, cost and associated creep performance of a number of single-crystal superalloys[8]

从图 4 可以看出蠕变抗力与合金的密度、成本相互联系，即合金的蠕变抗力越高其密度和成本也越大，其中高代次单晶高温合金的密度甚至超过 9 g/cm^3，成本几乎是第一代单晶高温合金的 5 倍[8]。这主要是由于高代次单晶高温合金中加入了大量的稀贵难熔元素，如 Re 和 Ru。因此，在设计合金时有必要适当降低难熔元素的含量，从而降低合金的密度和成本。

2　高温合金的设计方法

2.1　相计算方法

Boesch 等[17] 根据电子空穴预测 σ 脆性相的形成，并首创 PHACOMP（Phase computation 的略语）方法设计高温合金。其基本思想是用合金中平均电子空位数 $\overline{N_V}$（即金属 d 能带中电子空位数）的大小来预测和控制镍基高温合金基体（γ 相）中析出的有害相，计算公式为：

$$\overline{N_V} = \sum_{i=1}^{n} m_i (N_V)_i \tag{4}$$

式中：$\overline{N_V}$ 为平均电子空穴数；m 为各元素的原子分数；N_V 为各元素的电子空穴数。当合金的平均电子空穴数高于某一数值（临界值）时，合金倾向于形成 TCP 相；相反，当平均电子空穴数低于该值时，合金不形成 TCP 相。

Boesch 等只扣除了 γ′相所消耗的合金元素含量,对剩余基体按式(4)计算平均电子空穴数,得出临界值为 2.32。Woodyatt 等[18]同时扣除 γ′相、硼化物和碳化物所消耗的各种合金元素含量,对剩余基体成分按式(4)计算平均电子空穴数。通过 500 多种商业和实验合金的计算与实验结果对比,得出形成 σ 相的$\overline{N_V}$临界值为 2.45～2.52,形成 Laves 相的$\overline{N_V}$临界值为 2.30。

应用相计算方法可以很方便地判断某种合金是否会形成 TCP 相,进而可以探索出新的合金。但是此方法也有很大的局限性,主要是应用范围过窄,只能对镍基高温合金给出较好的结果,对其他系统的合金如钴基和铁基高温合金效果欠佳甚至无效;个别元素的电子空穴数随成分而变化;不能考虑铸造高温合金存在的成分偏析等因素;仅对现有合金是否出现脆性相进行估计,不能对合金的性能进行预测。

2.2 d 电子理论

Yukawa 等[2-4]利用($DV-X_\alpha$)方法计算合金的电子结构参数,提出了 d 电子合金设计理论。其基本思想是应用分子轨道理论计算合金元素的 d 电子能级 Md。再根据 Md 值和合金成分,求出合金的平均 d 分子轨道能级 $\overline{Mdt}$:

$$\overline{Mdt}=\sum x_i\cdot(Md)_i \tag{5}$$

另外,在 d 电子理论中还提出了另一个参数 Bo,用以度量元素之间共价键的结合强度,合金中平均 Bo 值用 $\overline{Bo}$ 表示,计算公式如下:

$$\overline{Bo}=\sum x_i\cdot(Bo)_i \tag{6}$$

式中:x_i 为 i 组元在合金中的原子分数(或原子比);$(Md)_i$ 和$(Bo)_i$ 分别为合金中 i 组元的 Md 值和 Bo 值。

如图 5 所示,参数 Bo 表示原子之间电子云的重叠,是原子间共价键强度的度量。对于 Fe、Ni 和 Ti 等具有未成对 d 轨道电子的过渡族元素,由 d 电子云重叠确定的共价键能(即 Bo)占整个亲合能的大部分。因此 Bo 值愈高,原子之间的键合就愈强。

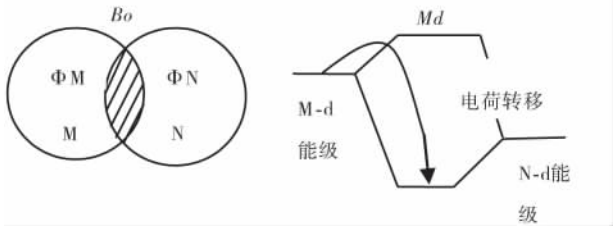

图 5 d 电子合金设计的电子结构参量 *Bo* 和 *Md* 示意图[19]

Fig. 5 Electronic structure parameter *Bo* and *Md* for d-electron alloy design[19]

张济山等[19]指出参数 Md 作为过渡族元素 M 的 d 轨道能级与电荷的转移有关。如图 5 所示,当 M 和 N 两个原子结合成分子时,出现结合与反结合两个能级,这样就会发生由高能级向低能级的电荷转移。能级较高的原子 M 将给出电子而表现出较小的电负性,而能级较低的原子 N 获得电子表现出较大的电负性,因此 Md 和原子的电负性有密切关系。此外,Md 还与原子半径有关。Morinaga 等[2]认为 Md 可更好地预测过渡族元素的溶解度规律和相的稳定性规律,并在相图上进行拟合加以证实。综上所述,Md 值可以作为相稳定性的表征参量。

张济山等[20]通过实验证明相稳定性临界条件可以用 $\overline{Mdt}=0.991$ 表示,当 $\overline{Mdt}$ 值超过 0.991 时,开始析出 σ 相,而且 σ 相的体积分数随 $\overline{Mdt}$ 值的增大而增加。因此,在合金设计中可采用 $\overline{Mdt}$ 判据表征相稳定性。这就找到了一种较为简便的合金设计方法,即直接根据合金成分计算 $\overline{Mdt}$ 值来判断合金成分是否位于相稳定的区域。

Yukawa 等[3]用 d 电子理论成功地设计出性能与第二代单晶合金 PWA1484 和 CMSX-4 相当的 TUT 系列单晶合金。20 世纪 90 年代初,中国科学院金属研究所张济山等[20-22]在与日本丰桥大学合作研究中,应用 d 电子设计法研制出高性能的抗腐蚀单晶合金。Moniruzzaman 等[4]根据 d 电子理论设计出了一系列含 Re 的第三代单晶高温合金,与商用第二代单晶高温合金相比,设计出的含 5.8%Re 和 3.8%Cr 的高温合金具有优异的高温蠕变强度和热腐蚀抵抗力。

d 电子理论不仅适用于镍基高温合金系统,而且还适用于钴基和铁基高温合金。由于此方法以理论计算为前提,所以与控制平均电子空位数的相计算方法相比,有以下几个明显的优点:(1)理论更严密;(2)设计更准确;(3)应用更广泛;(4)可以预测性能。特别地,在用此方法设计出成本低、密度小、性能相当于或超过第二代单晶合金的合金后,其越来越受到研制者的青睐。

2.3 多元回归法

多元回归法以回归公式为主,理论公式只作为参考,面向现实应用。多元回归法的设计思想是在实验规律和实验参数的基础上建立回归方程,设计合金成分,并计算相关力学性能,最后选出最优合金。目前此方法在应用方面取得很大进展,相对来说也比较成熟。

Harada 等[23]发展了高温合金相平衡和性能预测的线性回归方法,即在对已知实验数据进行统计处理的基础上,对合金的性能进行预测。他们通过该方法设计了大约 100 种合金,并通过蠕变断裂实验、拉伸实验和热腐蚀实验对合金性能进行评估。结果发现,在抗热腐蚀性能相当的情况下,许多合金比商用合金(如 IN738LC、Mar-M247 等)有更高的蠕变断裂强度,其中一些合金也具有较好的拉伸性能。

日本金属材料技术研究所 Yamazaki 等[24]先选定 γ′相中除 Al 和 Ni 之外的成分,再根据由大量实验得出的经验回归方程确定 γ′相的成分,然后以实验规律和实验参数为基础,通过一系列回归公式确定合金成分,计算合金的力学性能及相关数据,最后选择出最理想的单晶合金。Yamazaki 等用此方法成功设计出了性能优异的 TMS 系列单晶高温合金。

多元线性回归方法的优点是,当变量之间没有明显的关系时,通过线性回归分析可以很容易找到待预测性能与预设变量之间的关系。但是,在考察实际数据时,假设性能

与成分之间呈线性关系显得过于简单。同时不同元素之间可能相互作用，一种元素含量的改变也许会影响到待预测性能与其他元素之间的关系。因此，这种方法准确性和可靠性不高。

2.4　相图计算方法

相图被誉为材料设计的指导书。随着多元多相平衡计算方法、数据库和计算软件的完善，相图计算方法（即CALPHAD方法）成为材料设计、冶金和化工等过程模拟的重要工具，相平衡研究真正成为材料设计的一部分[25]。相图计算方法主要是根据已知的热力学和相平衡数据确定低组元（二元和三元）系统中各相的吉布斯能，获得热力学模型参数，然后从低组元系统通过外推方法获得多组元合金相的吉布斯能表达式，最后利用平衡条件计算相图[26]。

高温合金在高温条件下或中温长时间服役条件下可以逐渐达到相平衡状态，所以在使用温度下的平衡态组织的研究对高温合金的设计具有重要意义。对于镍基高温合金这种多组元系统，通过实验的方法很难得到平衡相的可靠实验结果。因此，利用相图计算方法[27,28]来分析多组元合金中的析出相，并在此基础上预测合金的物理性能成为了目前研究的重点。

研究结果表明[29,30]，通过热力学计算软件JMatPro可以比较准确地计算出不同成分的镍基高温合金的平衡相含量和物理性能。图6是笔者利用JMatPro软件经过热力学计算得到的Rene N6合金的各主要析出相与析出温度的关系图。由图6可知，通过JMatPro软件能够得出表征合金性能的参数，从而为新合金的设计提供参考。王静等[31]利用相图计算软件JMatPro，以GE公司的低Re合金成分为参考，设计并筛选出了几组低Re含量且承温能力达到第二代单晶水平的合金成分。王衣等[32]利用JMatPro软件研究了Ni-Co基高温合金的化学成分对平衡相的析出行为、加工性能和γ/γ'晶格错配度的影响，总结了Co、Al、Ti元素含量的变化对促进合金第二相强化和提高高温组织稳定性的作用，为Ni-Co基变形高温合金的成分优化设计提供参考。

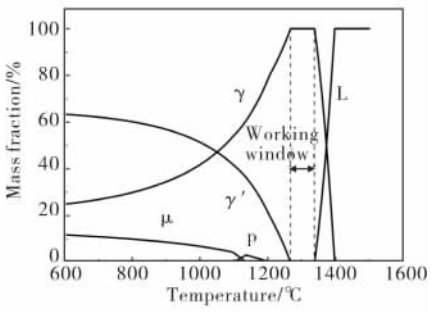

图6　利用JMatPro计算的Rene N6合金各析出相与析出温度的关系曲线

Fig. 6　Temperature dependence of precipitation phases in Rene N6 alloy calculated by JMatPro

传统的材料设计在很大程度上依赖于“试错法”、“炒菜法”，不仅设计周期长，而且耗费巨大。相图计算为材料的设计提供了理论上的依据，节约了计算的成本，缩短了新材料开发的周期。尤其是计算机的快速发展及相应软件的开发，给相图计算乃至材料设计提供了极大的便利，其在日后的研究中必将得到更为广泛的应用。

2.5　合金设计新进展

近几年，随着计算机技术的快速发展，高温合金的发展也非常迅速，目前单晶高温合金已经发展到第五代，研究发现新合金的发展与计算机技术息息相关。Koizumi等[33]利用NIMS-ADP合金设计计算程序成功研制了第五代单晶高温合金TMS-162，经实验验证其蠕变断裂寿命在目前报道的合金中是最高的。Sato等[34]也利用计算机程序成功设计了第五代单晶高温合金TMS-196，该合金在1100 ℃经过1000 h的蠕变，微观组织仍然稳定。

近年来，建立在数据库基础上的合金设计计算工具发展迅速。Zhou等[35]在第一性原理的基础上，结合热力学、动力学和晶格参数数据库，利用相场模型模拟了三元Ni-Al-Mo高温合金的γ'相微观组织的演化过程。Cottura等[36]通过建立相场模型，研究了材料的微观组织演化与材料粘塑性行为的关系。Tancret[37]结合计算工具和人工遗传算法提出了一种新的合金设计过程，即利用基于已有合金数据的高斯分布回归分析预测合金的力学性能，借助热力学计算预测相的形成，通过人工智能遗传算法选择最优合金成分，使得力学性能、微观组织和成本达到预定目标。

汤山道也等[38]为镍基高温合金构建了一个数据库，数据库中包含着高温合金发展各方面（如合金的化学成分、铸造过程、热处理过程、蠕变实验等）的数据。使用这个数据库可以通过大量与高温合金发展有关的数据对所设计的合金进行评价和分析，从而为新合金的设计节约了时间和成本。

综上所述，计算机技术已经广泛应用于镍基高温合金的设计中，计算工具的成熟应用也给研究人员带来了极大的方便。在实验的基础上，通过建立热力学、动力学及各种性能的数据库，发展综合的、多范围的计算工具，可以缩短研究新合金的时间，降低成本。在今后的研究中，利用计算工具研究和评价合金必将获得更大的发展。

3　结语

综上所述，经过几十年的发展，高温合金设计理论水平得到了很大的提高，设计得到的高温合金性能也有了长足的进步。但是合金设计中所需考虑的因素非常繁杂，虽然对于高温合金成分-工艺-组织结构-力学性能之间的关系已经有了深入的研究，但是目前还没有成熟的理论可以表述它们的相互作用关系，而且也没有完整的理论可以解释元素对高温合金的物理冶金性能方面的影响。

随着航空事业的发展，特别是对先进航空发动机推力和推重比要求的不断提高，迫使涡轮入口温度不断升高，这对高温合金的承温能力提出了更高的要求。人们急切需要研究出新的合金设计方法，设计出性能更加优异的高温合金。为此，今后研究的重心是在实验的基础上加强对合金

微观结构的理论研究,借助先进的计算机技术研究各类合金元素间相互作用的物理与化学行为及其对合金高温力学性能的影响。

参考文献

1 胡壮麒,刘丽荣,金涛,等. 镍基单晶高温合金的发展[J]. 航空发动机,2005,31(3):1

2 Yukawa N, Morinaga M, Ezaki H, et al. Alloy design of superalloys by d-electrons concept [M]//High temperature alloys for gas turbine and other applications. Berlin: Springer, 1986:35

3 Murata Y, Miyazaki S, Morinaga M, et al. Hot corrosion and high strength nickel-based single crystal and directionally-solidified superalloys developed by the d-electrons concept [M]//Superalloys 1996. Warrendale: TMS, 1996: 61

4 Moniruzzaman M, Murata Y, Morinaga M, et al. Alloy design of Ni-based single crystal superalloys for the combination of strength and surface stability at elevated temperatures [J]. ISIJ Int, 2003, 43(8): 1244

5 Reed R C, Tao T, Warnken N. Alloys-by-design: Application to nickel-based single crystal superalloys[J]. Acta Mater, 2009, 57(19): 5898

6 Yoo Y S, Jo C Y, Jones C N. Compositional prediction of creep rupture life of single crystal Ni base superalloy by Bayesian neural network[J]. Mater Sci Eng A, 2002, 336 (1): 22

7 Janotti A, Krčmar M, Fu C L, et al. Solute diffusion in metals: Larger atoms can move faster[J]. Phys Rev Lett, 2004, 92(8): 085901

8 Reed R C. The superalloys: Fundamentals and applications [M]. UK: Cambridge University Press, 2006

9 Dyson B F. Microstructure based creep constitutive model for precipitation strengthened alloys: Theory and application[J]. Mater Sci Techn, 2009, 25(2): 213

10 Murakumo T, Kobayashi T, Koizumi Y, et al. Creep behaviour of Ni-base single crystal superalloys with various γ' volume fraction [J]. Acta Mater, 2004, 52(12): 3737

11 Pyczak F, Neumeier S, Göken M. Influence of lattice misfit on the internal stress and strain states before and after creep investigated in nickel-base superalloys containing rhenium and ruthenium [J]. Mater Sci Eng A, 2009, 510: 295

12 Gilles R, Mukherji D, Többens D M, et al. Neutron X-ray and electron-diffraction measurements for the determination of γ/γ' lattice misfit in Ni-base superalloys [J]. Appl Phys A, 2002, 74(1): s1446

13 Diologent F, Caron P, d'Almeida T, et al. The γ'/γ mismatch in Ni based superalloys: In situ measurements during a creep test [J]. Nucl Instrum Methods Phys Res B: Beam Interact Mater Atoms, 2003, 200: 346

14 Pyczak F, Devrient B, Mughrabi H. The effects of different alloying elements on the thermal expansion coefficients, lattice constants and misfit of nickel-based superalloys investigated by X-ray diffraction [M]. Superalloys 2004. Warrendale: TMS, 2004: 827

15 Rae C M F, Reed R C. The precipitation of topologically close-packed phases in rhenium-containing superalloys[J]. Acta Mater, 2001, 49(19): 4113

16 Tin S, Rae C M F. A castability model based on elemental solid-liquid partitioning in advanced nickel-base single-crystal superalloys[J]. Metall Mater Trans A, 2005, 36(10): 2761

17 Boesch W J, Slaney J S. Preventing sigma phase embrittlement in nickel-base superalloy [J]. Metal Prog, 1964, 86 (1): 109

18 Woodyatt L R, Sims C T, Beattie H J. Prediction of sigma-type phase occurrence from compositions in austenitic superalloys [J]. Trans TMS-AIME, 1966, 236: 519

19 张济山,崔华,胡壮麒. d 电子合金理论及其在合金设计中的应用[J]. 材料科学与工程,1993,11(3):1

20 张济山,崔华,村田纯教,等. 应用 d 电子理论发展新型抗热腐蚀单晶镍基高温合金:Ⅰ.相稳定性临界条件的确定[J]. 金属学报,1993,29(7):A289

21 张济山,崔华,村田纯教,等. 应用 d 电子理论发展新型抗热腐蚀单晶镍基高温合金:Ⅱ.合金元素对显微组织和性能的影响[J]. 金属学报,1993,29(7):A297

22 张济山,崔华,村田纯教,等. 应用 d 电子理论发展新型抗热腐蚀单晶镍基高温合金:Ⅲ.性能评价[J]. 金属学报,1994,30(2):A70

23 Harada H, Yamazaki M, Koizumi Y, et al. Alloy design for nickel-base superalloys [C]// High Temperature Alloys for Gas Turbines 1982. Liege, 1982: 721

24 Yamazaki M. Development of nickel-base superalloys for a national project in Japan [M]//High Temperature Alloys for Gas Turbine and Other Applications. Berlin: Springer, 1986: 945

25 Saunders N, Miodownik A P. CALPHAD-Calculation of phase diagrams: A comprehensive guide [M]. Oxford: Pergamon, 1998

26 戴占海,卢锦堂,孔纲. 相图计算的研究进展[J]. 材料导报,2006,20(4):94

27 Kattner U R, Campbell C E. Modelling of thermodynamics and diffusion in multicomponent systems [J]. Mater Sci Techn, 2009, 25(4): 443

28 Rettig R, Singer R F. Numerical modelling of precipitation of topologically close-packed phases in nickel-base superalloys [J]. Acta Mater, 2011, 59(1): 317

29 Saunders N, Guo U K Z, Li X, et al. Using JMatPro to model materials properties and behavior[J]. JOM, 2003, 55 (12): 60

(下转第 16 页)

and critical current density in Mg_xB_2[J]. Physica C,2006,434:67

14 **李飞,等.** Mg/B **化学计量比对** MgB_2 **超导电性和磁通钉扎性能的影响**[J]. **稀有金属材料与工程**,2011,40(5):863

15 Fujii H, Togano K, Kumakura H. Enhancement of critical current densities of powder in tube processed MgB_2 tapes by using MgH_2 as a precursor powder[J]. Supercond Sci Techn,2002,15:1571

16 Iijima Y, Kikuchi A, Yoshida Y, et al. MgB_2 Superconducting wire fabrication by using Mg_4Ag as starting material [J]. Physica C,2004,407: 44

17 Hishinuma Y, Kikuchi A, et al. Annealing effect on microstructure and superconducting properties of the v-based laves phase superconducting wire synthesized by a RHQ process [J]. Supercond Sci Techn,2006,19:1269

18 Akiyasu Yamamoto, et al. Improved critical current properties observed in MgB_2 bulks synthesized by low-temperature solid-state reaction[J]. Supercond Sci Techn,2005,18:116

19 Yan S C, Yan G, Lu Y F,et al. The upper critical field in micro-SiC doped MgB_2 fabricated by a two-step reaction method[J]. Supercond Sci Techn,2007,20:549

20 Chen S K, Tan K S, Glowacki B A,et al. Effect of heating rates on superconducting properties of pure MgB_2, carbon nanotube- and nano-SiC-doped in situ MgB_2/Fe wires[J]. Appl Phys Lett,2005,87:182504

21 Shcherbakova O V, Pan A V, et al. Superconducting properties of MgB_2: Polycarbosilane versus conventional nano-SiC doping[J]. Supercond Sci Techn,2007,20:5

22 John M Rowell. The widely variable resistivity of MgB_2 samples[J]. Supercond Sci Techn,2003,16:R17

23 Klie R F, Idrobo J C, Browning N D,et al. Direct observation of nanometer-scale Mg- and B-oxide phases at grain boundaries in MgB_2[J]. Appl Phys Lett,2001,79:1873

24 Olaf Perner, et al. Effects of oxide particle addition on superconductivity in nanocrystalline MgB_2 bulk samples[J]. Physica C,2005,432:15

25 Pan X F,Cheng C H, Zhao Y. Effect of rare-earth oxides doping on the superconductivity and flux pinning of MgB_2 superconductor[J]. J Supercond Nov Magn,2011,24(5):1611

26 Dou S X, Shcherbakova O, Yeoh W K, et al. Mechanism of enhancement in electromagnetic properties of MgB_2 by nano SiC doping[J]. Phys Rev Lett,2007,98:097002

27 Cheng C H, Yang Y, Munroe P,et al. Comparison between nano-diamond and carbon nanotube doping effects on critical current density and flux pinning in MgB_2[J]. Supercond Sci Techn,2007,20:296

28 Cheng C H, Zhang H, Zhao Y,et al. Doping effect of nano-diamond on superconductivity and flux pinning in MgB_2[J]. Supercond Sci Techn,2003,16:1182

29 Ye S J, Matsumoto A, Togano K, et al. The critical current properties of 37-filament internal Mg diffusion-processed MgB_2 wires[J]. Supercond Sci Techn,2013,26:105027

(责任编辑 房 威)

(上接第 6 页)

30 Saunders N, Guo Z, Li X, et al. Modelling the material properties and behaviour of Ni-based superalloys [M]// Superalloys 2004. Warrendale:TMS, 2004:849

31 **王静,孙锋,单爱党,等. 几种典型镍基单晶高温合金成分设计的热力学分析**[J]. **上海有色金属**,2011,32(2):49

32 **王衣,孙锋,董显平,等. 新型** Ni-Co **基高温合金中平衡析出相的热力学研究**[J]. **金属学报**,2010,46(3):334

33 Koizumi Y, Kobayashi T, Yokokawa T, et al. Development of next-generation Ni-base single crystal superalloys [M]// Superalloys 2004. Warrendale:TMS, 2004:35

34 Sato A, Harada H, Kawagishi K, et al. A 5th generation SC superalloy with balanced high temperature properties and processability [M]// Superalloys 2008. Warrendale: TMS, 2008:131

35 Zhou S H, Wang Y, Zhu J Z, et al. Computational tools for designing Ni-base superalloys [M]// Superalloys 2004. Warrendale:TMS, 2004:969

36 Cottura M, Le Bouar Y, Finel A, et al. A phase field model incorporating strain gradient viscoplasticity: Application to rafting in Ni-base superalloys [J]. J Mech Phys Solids, 2012, 60(7):1243

37 Tancret F. Computational thermodynamics,Gaussian processes and genetic algorithms: Combined tools to design new alloys [J]. Modelling Simul Mater Sci Eng,2013, 21(4):045013

38 **汤山道也,横川忠晴,小泉裕,等.** Ni **基超合金開発のためのデータベース構築**[J]. **日本金属学会誌**,2009,73(6):469

(责任编辑 房 威)