

doi:10.11835/j.issn.1000-582X.2019.258

Fe-Al-Cr 合金的晶粒控制对合金抗高温氧化性的影响

韩校宇¹, 王锦涛², 刘奇^{1,3}, 王小宇¹, 刘守平², 姚志远¹, 薄新维¹, 王焱辉¹

(1. 重庆材料研究院, 重庆 400707; 2. 重庆大学 材料科学与工程学院, 重庆 400044;
3. 国家仪表功能材料工程技术研究中心, 重庆 400707)

摘要: Fe-Al-Cr 合金具有良好的高温抗氧化性, 有广泛的应用前景, 具有晶粒粗大的特点。通过在 Fe-Al-Cr 合金中添加镍、碳、铜等奥氏体化元素, 使合金在冷却过程中生成 FeCr 相, 以阻碍晶粒长大的方式使合金晶粒尺寸可以控制在 100 μm 以内。探讨了 Fe-Al-Cr 合金氧化物薄膜形成的机制以及晶粒控制对 Fe-Al-Cr 合金抗高温氧化性的影响。通过金相显微镜观察高温下经不同氧化时间氧化后的 Fe-Al-Cr 合金, 发现 Al₂O₃ 薄膜优先形成于晶界, 晶界数量增多有利于 Al₂O₃ 的形成和生长。通过扫描电镜观察和能谱分析, 发现在 Fe-Al-Cr 合金中, (Al_{0.9}Cr_{0.1})₂O₃ 和 Al₂O₃ 组成了多层氧化物。结合第一性原理计算, 得出该多层氧化物是由于 Cr 的扩散而在合金表面形成的, 有助于提高 Fe-Al-Cr 合金的抗高温氧化性。最后, 证实晶粒直径较小的 Fe-Al-Cr 合金具有更好的抗高温氧化性。

关键词: 高铝钢; 拓扑密排相; 晶粒细化; 抗高温氧化性

中图分类号: TC13

文献标志码: A

文章编号: 1000-582X(2020)08-064-10

Effect of grain control of Fe-Al-Cr alloy on its resistance to high temperature oxidation

HAN Xiaoyu¹, WANG Jintao², LIU Qi^{1,3}, WANG Xiaoyu¹, LIU Shouping²,
YAO Zhiyuan¹, BO Xinwei¹, WANG Yanhui¹

(1. Chongqing Materials Research Institute, Chongqing 400707, P. R. China; 2. School of Materials Science and Engineering, Chongqing University, Chongqing 400044, P. R. China; 3. National Instrument Functional Materials Engineering Technology Research Center, Chongqing 400707, P. R. China)

Abstract: Fe-Al-Cr alloy has wide application prospects with its good resistance to high temperature oxidation, but it usually has the problem of coarse grains. In this research, by adding austenitizing elements such as nickel, carbon and copper to the Fe-Al-Cr alloy, the FeCr phase was formed during the cooling process, which hindered grain growth and the grain size could be controlled within 100 μm. The formation mechanism of oxide film and the effect of grain control on the high temperature oxidation resistance of Fe-Al-Cr alloy were discussed. The Fe-Al-Cr alloy oxidized for different oxidation time at high temperature was observed by metallography and it was found that the alumina film preferentially formed at

收稿日期: 2019-09-05 网络出版时间: 2019-11-22

基金项目: 增材制造技术与系统高价值专利培育项目(CQHVP2018)。

Supported by Additive Manufacturing Technology and System High Value Patent Cultivation Project (CQHVP2018).

作者简介: 韩校宇(1992—), 女, 重庆材料研究院助理工程师, 主要从事难熔合金制备。

通讯作者: 王锦涛, 男, 重庆大学硕士研究生, (E-mail)1324968548@qq.com。

the grain boundary, and the increase in the number of grain boundaries was favorable for the formation and growth of Al_2O_3 . Electron microscopy scan and energy spectrum analysis revealed that $(\text{Al}_{0.9}\text{Cr}_{0.1})_2\text{O}_3$ and Al_2O_3 formed a multilayer oxide. Combined with the first principle calculation, it is concluded that the multilayer oxide is formed on the surface of the alloy due to the diffusion of Cr, which is helpful to improving the high temperature oxidation resistance of the Fe-Al-Cr alloy. It is confirmed that the Fe-Al-Cr alloy with a smaller grain size has better resistance to high temperature oxidation.

Keywords: high alumina steel; topological dense phase; grain refinement; high temperature oxidation resistance

耐热钢因其合金种类多、适用性强,在重型机械高温工况中得到广泛应用。其中,Fe-Al-Cr合金由于其铝含量高、高温下能形成致密连续的氧化铝膜,可以在350~950 °C的环境中长时间工作。 Al_2O_3 是一种保护性热生长氧化物(TGO)^[1],抗高温分解与挥发。Fe-Al-Cr合金也因其比重小、电阻率高、寿命长、价格低廉等优点,具有极高的商业价值和研究价值^[2-4]。

Fe-Al-Cr合金中的Cr元素通过竞争氧化效应降低 Al_2O_3 薄膜形成的自由能,这称为Cr元素的第三组元效应,从而降低形成氧化铝薄膜所需的铝含量^[1]。然而,Al和Cr元素同时存在会导致合金出现粗晶现象。Fe-Al-Cr合金的晶粒尺寸通常大于500 μm,且力学性能较差,造成该系列合金无法大规模应用^[5-7],笔者之前的工作^[8]已经讨论了在Fe-Al-Cr合金中如何利用第二相的钉扎作用控制晶粒的长大,因此对更小的合金晶粒是否会破坏合金高温抗氧化性的研究具有重要意义。

近年来,许多学者对Fe-Al-Cr高铝耐热钢的抗氧化机理进行了研究^[9-11]。但是,关于合金晶粒尺寸对其抗高温氧化性能的影响研究较少。一些研究从合金晶粒形核与合金成分扩散两个方面对Fe-Al-Cr合金表面氧化行为的影响进行了探讨^[12-13]。然而,关于耐热钢的晶粒尺寸与其高温抗氧化性能之间的关系并无一致看法。笔者使用了7种Fe-Al-Cr合金,借助第二相的钉扎作用以控制晶粒大小,研究了这一问题。

1 实验材料与实验方法

1.1 实验材料

实验材料在真空感应炉中熔化,所用原料包括DT4C纯铁、纯铝($w(\text{Al})>99.9\%$)、纯镍($w(\text{Ni})>99.9\%$)和GCR15钢($w(\text{C})=0.08\%$)。用X射线荧光光谱(XRF)(20 (°)/min)测试,其化学成分如表1所示。1#、2#、4#、6#被用于文献[8]中的研究。

表1 实验材料的化学成分(以质量分数表示)

Table 1 Composition of experimental steel %

试样编号	$w(\text{Fe})$	$w(\text{Al})$	$w(\text{Cr})$	$w(\text{Ni})$	$w(\text{C})$	$w(\text{Cu})$	$w(\text{Si})$
1#	Bal	7.91	13.17	6.65			
2#	Bal	12.25	10.29	2.11	0.20		
3#	Bal	8.68	10.62	2.61	0.12	2.33	
4#	Bal	8.46	8.76		0.81		
5#	Bal	9.72	8.68				
6#	Bal	5.37	9.06				0.47
7#	Bal	4.71	8.38				

1.2 实验方法

合金熔炼后, 使用金相显微镜观察合金的微观形貌, 用 X 射线衍射(XRD, D/mAX 2500, $5^\circ \sim 90^\circ$, $10 (\text{ }^\circ)/\text{min}$)分析合金相组成, 用场发射扫描电子显微镜(FESEM, JOEL JSM-7800F)观察合金的表面形貌。

合金经线切割切成一个 $15 \text{ mm} \times 15 \text{ mm} \times 5 \text{ mm}$ ($\pm 1 \text{ mm}$)的试样, 置于马弗炉中, 空气气氛, 炉内温度为 $950 \text{ }^\circ\text{C}$, 炉内压力为标准大气压。保温 10 h 后, 关闭阀门, 将炉子冷却至室温进行称重。然后, 用砂纸去除氧化膜表面直至光滑, 再次放入相同条件的马弗炉中, 保温 10 h , 然后冷却至室温称重, 通过 X 射线衍射和金相显微镜形貌观察对氧化产物进行分析。

为验证高温氧化试验的结果, 用耐驰 STA 449C 热分析仪对样品进行热重分析(TG)。将样品以 $20 \text{ K}/\text{min}$ 的速度加热至 $950 \text{ }^\circ\text{C}$, 保温 5 h , 空气流速为 $50 \text{ mL}/\text{min}$ 。

2 实验结果和分析

2.1 晶粒控制

图 1 为 7 种 Fe-Al-Cr 合金的金相组织, 1#、2#、3#、4# 合金晶粒远小于 5#、6#、7# 合金, 通过 Image-Pro 金相分析软件, 对 7 种合金晶粒的直径进行了统计, 如表 2 所示。对于 1#、2# 和 4# 合金, 晶粒粒径通常小于 $100 \mu\text{m}$, 而 3# 合金晶粒的粒径略大于 $100 \mu\text{m}$, 5#、6# 和 7# 合金晶粒的粒径甚至达到毫米级。

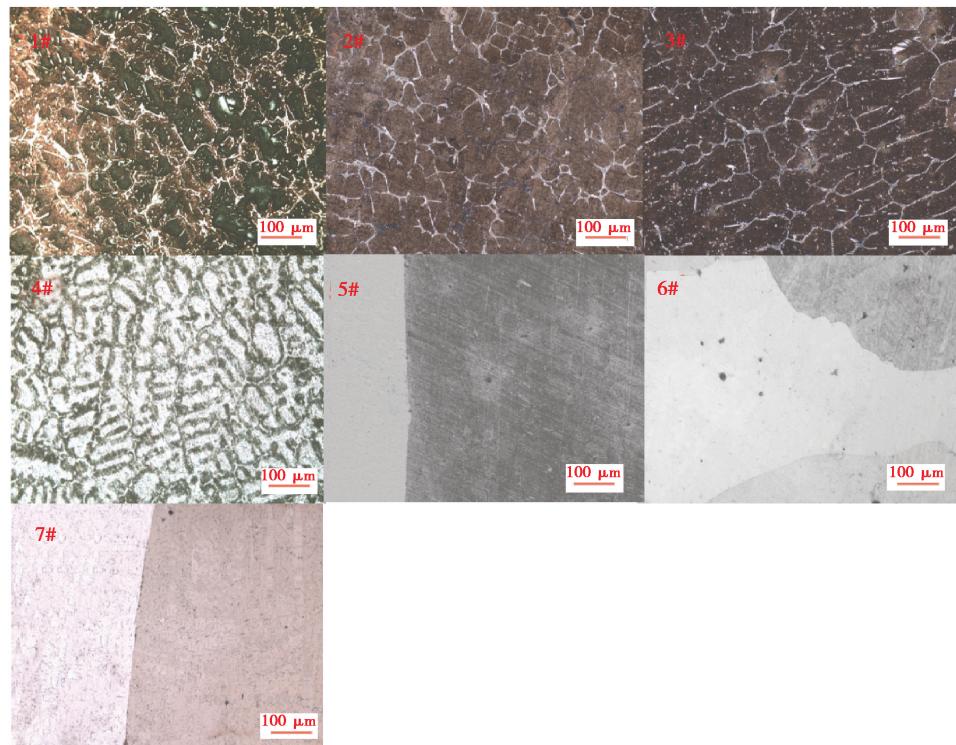


图 1 合金金相组织

Fig. 1 Metallography of Fe-Al-Cr

表 2 第一次合金高温抗氧化性实验结果

Table 2 First-alloy high-temperature oxidation resistance test results

试样编号	氧化前质量/g	氧化后质量/g	氧化速率/($\text{g} \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{m}^{-2}$)	平均晶粒尺寸/ μm
1#	6.720 8	6.721 0	0.026 7	86.732 6
2#	7.739 3	7.739 7	0.048 0	93.501 3
3#	7.493 3	7.496 4	0.413 3	102.873 9

续表 2

试样编号	氧化前质量/g	氧化后质量/g	氧化速率/(g·h ⁻¹ ·m ⁻²)	平均晶粒尺寸/μm
4#	6.886 2	6.878 6	-1.013 3	93.233 1
5#	7.654 9	7.760 1	14.026 7	5 208.626 0
6#	7.642 8	7.644 0	0.160 0	3 180.890 0
7#	8.281 2	8.339 0	7.706 7	4 369.755 2

图 2 为 XRD 分析结果, 合金的基体组织为 Fe_2AlCr 的 α -Fe 固溶体。合金晶粒大小的控制是通过合金化使高温合金在晶界生成一种拓扑密排相(TGP)- $\text{FeCr}(\sigma)$ 相, 来阻碍晶粒生长(图 3), 其生成规律受合金中 Cr/Ni 元素当量比的影响^[1]。Cr/Ni 元素当量比控制合金的奥氏体化(见舍弗勒图, 图 4), 而合金奥氏体化有利于 $\text{FeCr}(\sigma)$ 相的析出^[8]。在图 3 中, 可以明显看到 σ 相对合金晶粒长大的阻碍。

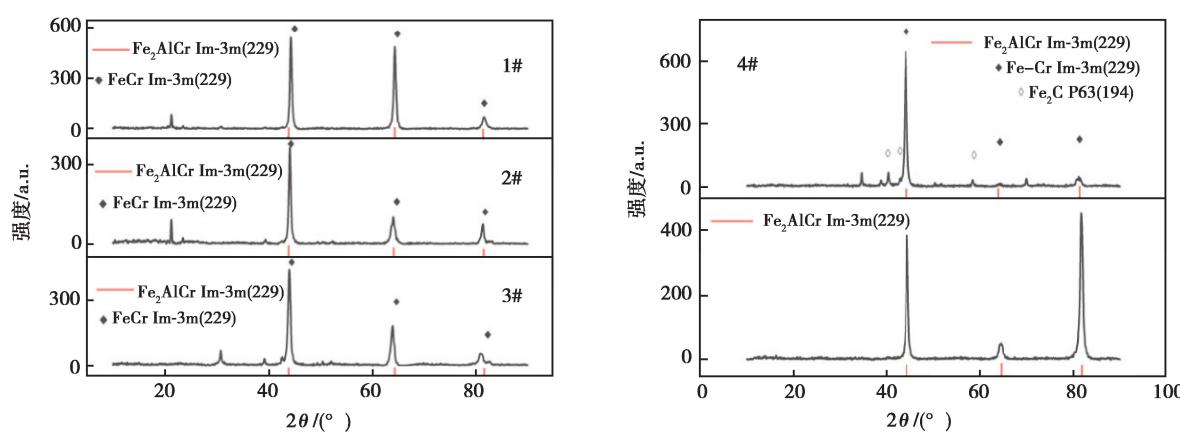


图 2 X 射线衍射结果

Fig. 2 XRD of Fe-Al-Cr

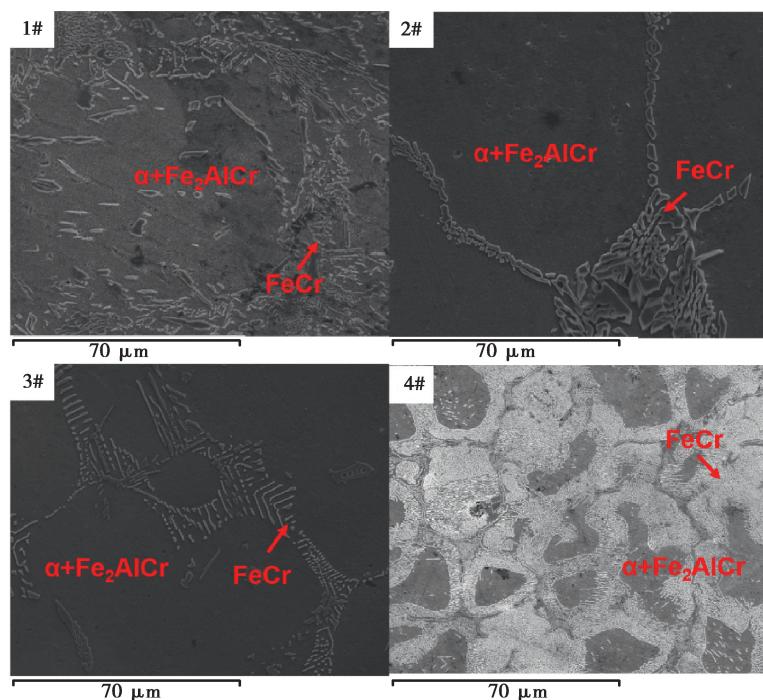
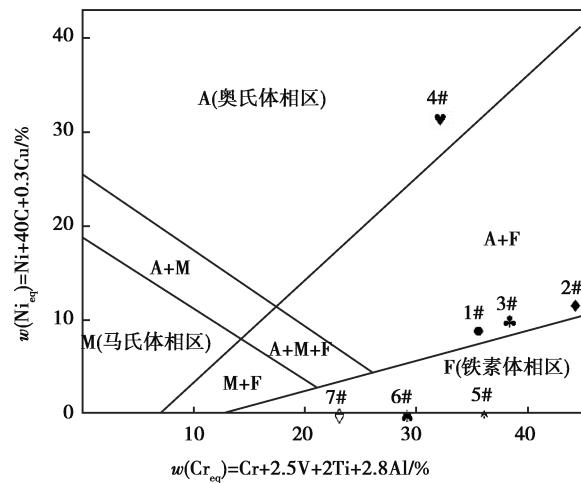


图 3 合金电子显微镜扫描图

Fig. 3 SEM of Fe-Al-Cr

图 4 合金奥氏体化与 Cr/Ni 元素当量比的关系^[1,8]Fig. 4 The relationship between alloying austenitization and Cr/Ni element equivalent ratio^[1,8]

2.2 晶粒大小对合金抗高温氧化性的影响

合金抗氧化性实验结果如表 2 和表 3 所示。氧化速率的计算方法如式(1)所示。

$$K = \frac{m_1 - m_0}{S_0 \cdot t}, \quad (1)$$

式中: K 为氧化速率, $\text{g}/(\text{m}^2 \cdot \text{h})$; m_0 为氧化前质量, g ; m_1 为氧化后质量, g ; S_0 为样品表面积, m^2 ; t 为氧化时间, h 。

表 3 第二次合金高温抗氧化性实验结果

Table 3 Second-alloy high-temperature oxidation resistance test results

试样编号	氧化前质量/g	氧化后质量/g	氧化速率/(g · h ⁻¹ · m ⁻²)	平均晶粒尺寸/μm
1#	6.685 0	6.685 5	0.066 7	86.732 6
2#	7.699 3	7.700 0	0.072 0	93.501 3
3#	7.461 2	7.461 9	0.093 3	102.873 9
4#	6.808 7	6.814 5	0.773 3	93.233 1
5#	7.569 1	7.691 1	16.266 7	5208.626 0
6#	7.549 9	7.551 4	0.200 0	3180.890 0
7#	8.244 0	8.285 4	5.520 0	4369.755 2

根据 GB/T 13303—1991, 1# 合金在 950 °C 时具有完全抗氧化性, 2#、3# 合金和 6# 合金具有抗氧化性, 7# 合金具有弱抗氧化性, 5# 合金没有抗氧化性。4# 合金为高碳钢, 由于高温下出现脱碳行为导致氧化后质量下降, 脱碳行为会破坏合金的抗氧化性。氧化速率与晶粒尺寸的关系如图 5 所示, 从实验结果来看, 晶粒细小的合金在高温下具有更好的抗氧化性。

热重实验结果(图 6)与 950 °C 高温抗氧化实验结果完全吻合, 根据合金质量增长速率(质量与时间的导数, dm/dt)的变化来看(图 6(b)), 晶粒最小的 1# 合金导数最大, 质量增长速率最快, 但是当氧化物薄膜形成后, 质量趋于稳定, 增长速率变趋于零。

由于合金晶粒越小, 晶界越多, 合金表面能量丰区更多, 这促进了氧化铝薄膜的形核与长大。5# 合金与 7# 合金没有形成致密的氧化铝薄膜, 质量持续增高; 而 4# 合金在热重实验过程中出现了质量降低的反常现

象,这是由于脱碳行为导致部分碳随流通的气体排出。同样晶粒粗大的6#合金快速形成了稳定的氧化铝薄膜(图6(d)),这是由于Si原子对氧化铝薄膜与合金基体结合能的降低导致的,文献[14]已经就此问题予以了说明。

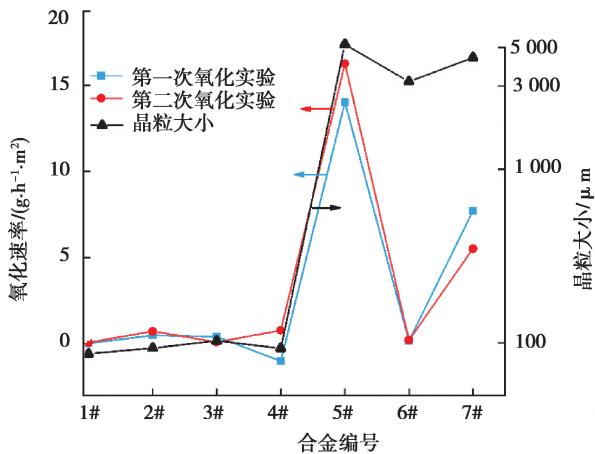


图5 Fe-Al-Cr合金高温下氧化速率与晶粒尺寸的关系

Fig. 5 Relationship between oxidation rate and grain size of Fe-Al-Cr alloy at high temperature

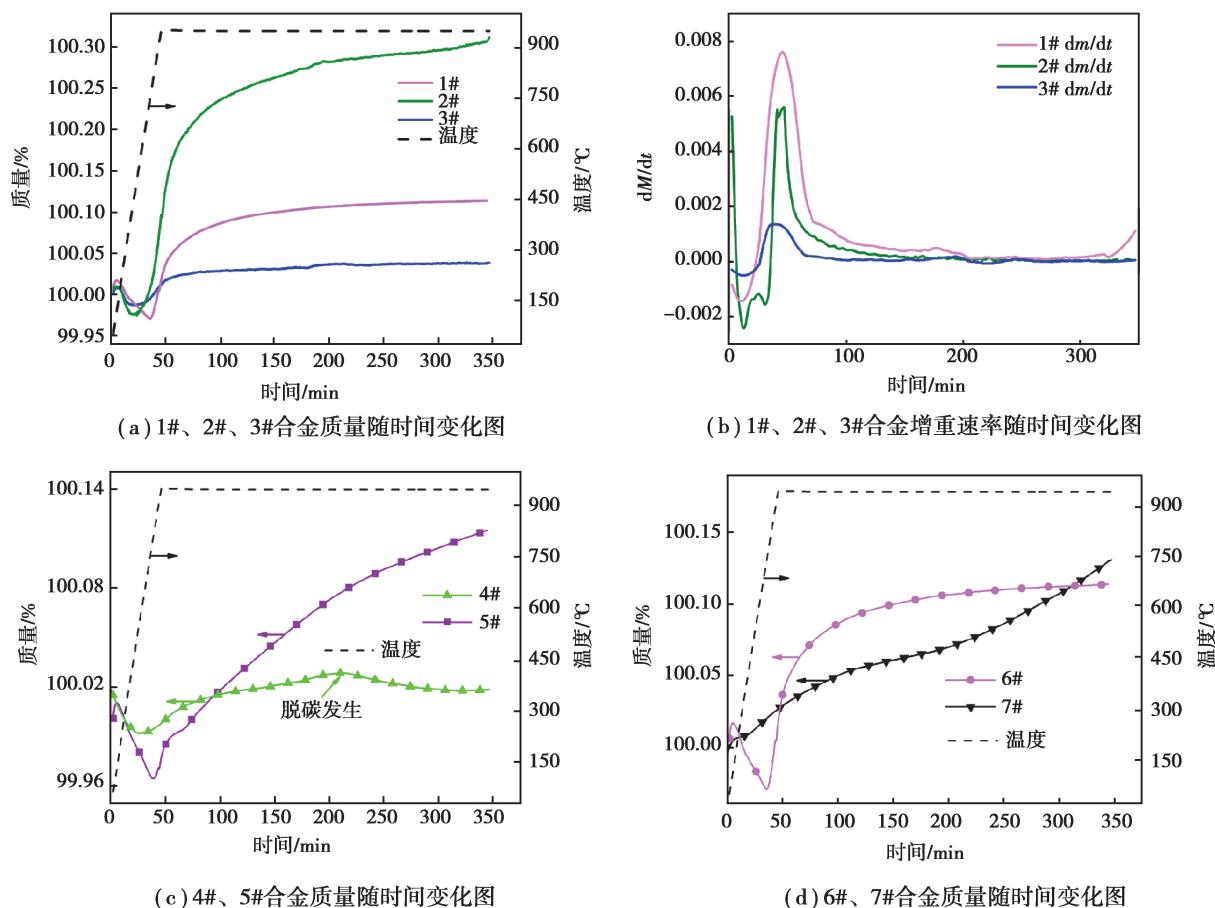


图6 合金热重分析

Fig. 6 Alloy thermogravimetric analysis

图7为合金氧化前后形貌比较,图8为合金氧化产物的XRD衍射结果。对于Fe-Al-Cr合金而言,均匀致密的氧化铝薄膜的形成有助于抗高温氧化性的提高,根据XRD光谱,可以看出1#、2#、3#、4#合金和

6#合金的表面形成了 Al_2O_3 薄膜,而5#合金和7#合金的表面没有形成连续的、致密的 Al_2O_3 ,无法阻止进一步的氧化,基体中的铁被氧化成了 Fe_2O_3 。实验结果表明,几种小晶粒合金试样的抗高温氧化性能优于大晶粒合金试样,这是因为晶界的活化能有利于铝的快速氧化。一般认为,合金中铝含量越高,在高温下抗氧化性越好,但从氧化实验(图5)和热重分析(图6)的结果来看,1#合金的抗高温氧化性最好,反而铝含量最少,说明晶粒大小在Fe-Al-Cr合金抗高温氧化性上扮演着重要角色。图6(b)中,合金晶粒越大(1# $86.47 \mu\text{m} < 2# 95.50 \mu\text{m} < 3# 102.87 \mu\text{m}$),氧化前期质量增重速率越小($1# \frac{dm}{dt} > 2# \frac{dm}{dt} > 3# \frac{dm}{dt}$ (mass/min)),说明了晶粒越小,氧化前期与氧的结合能力越强,有利于快速形成连续的、致密的 Al_2O_3 ,而铝含量并未影响合金氧化前期的增重速率。观察了1#合金在抗氧化实验中900 °C氧化1 h与3 h的表面照片(图9)。可以看出,氧化物薄膜优先在晶界处生成(颜色较基体更深),Fe-Al-Cr合金的晶界处富集了FeCr第二相,因此也是Cr元素的富集区,由于Cr的第三组元作用^[8]能显著减少 Al_2O_3 形成所需的自由能。因此由于 σ 相显著的聚集在晶界处阻碍晶粒长大,使合金晶界增多,并且由于Cr元素的富集使自由能的降低导致高温氧环境中合金在晶界周围迅速生成 Al_2O_3 ,促进了合金的高温抗氧化性。

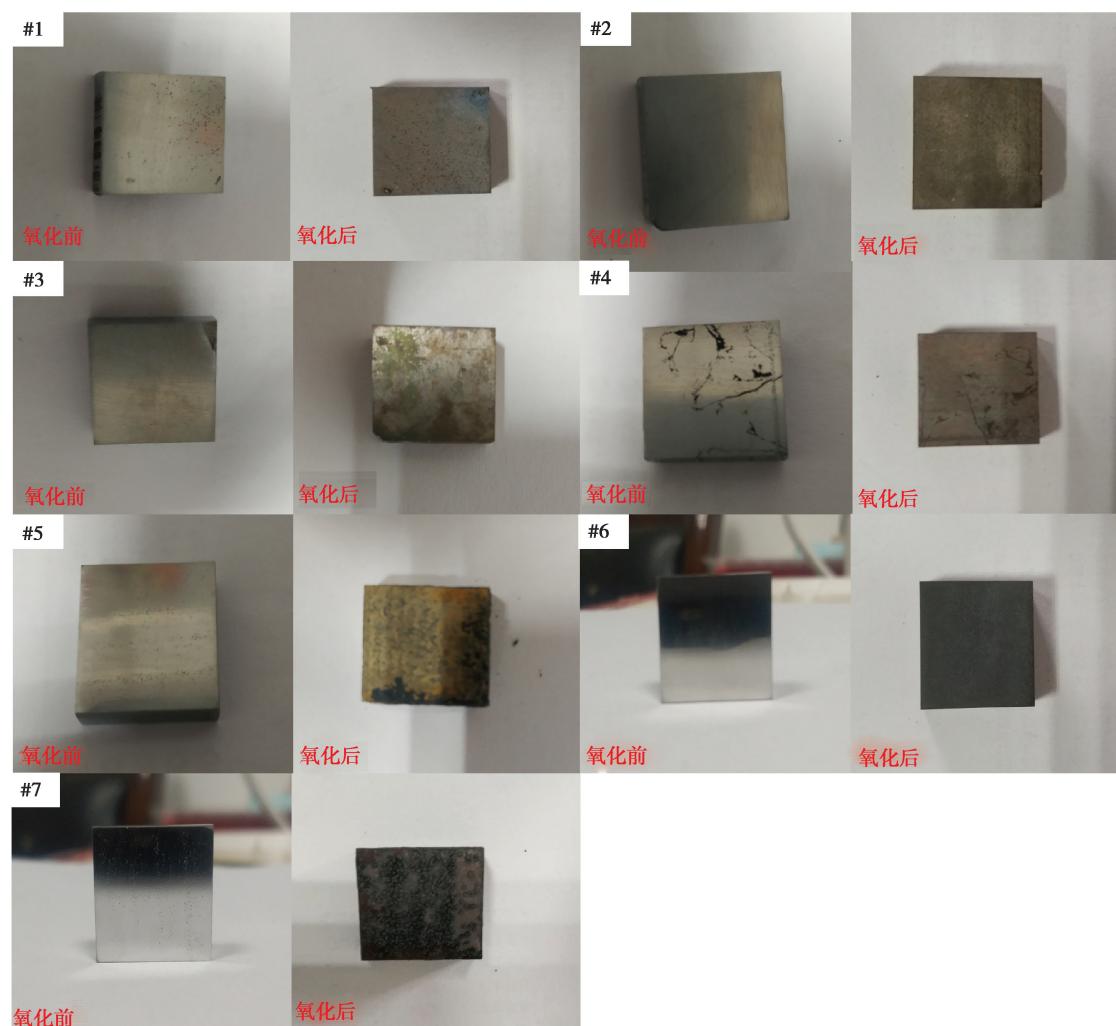


图 7 Fe-Al-Cr 合金氧化前后形貌

Fig. 7 Morphology of Fe-Al-Cr alloy before and after oxidation

氧化物的XRD分析证实 Al_2O_3 优先形成于表面,但对1#合金氧化物的进一步分析表明(图7): Al_2O_3 和 $(\text{Al}_{0.9}\text{Cr}_{0.12}\text{O}_3)$ 都存在于表面上。文献[15-17]证实了Al原子在 $\text{Ni}(110)/\text{Cr}_2\text{O}_3(0001)$ 界面的扩散可以形成多层氧化物,推测Cr原子以同样的方式在Fe-Al-Cr合金的铁/氧化铝界面扩散,形成了多层氧化物。为了验证这一判断,采用基于密度泛函理论的Materials Studio 6.0软件CASTEP模块进行计算,验证了Cr原子在界面的扩散导致界面系统总能的降低(表4),证实了Cr在基体与 Al_2O_3 的界面扩散这一猜想。

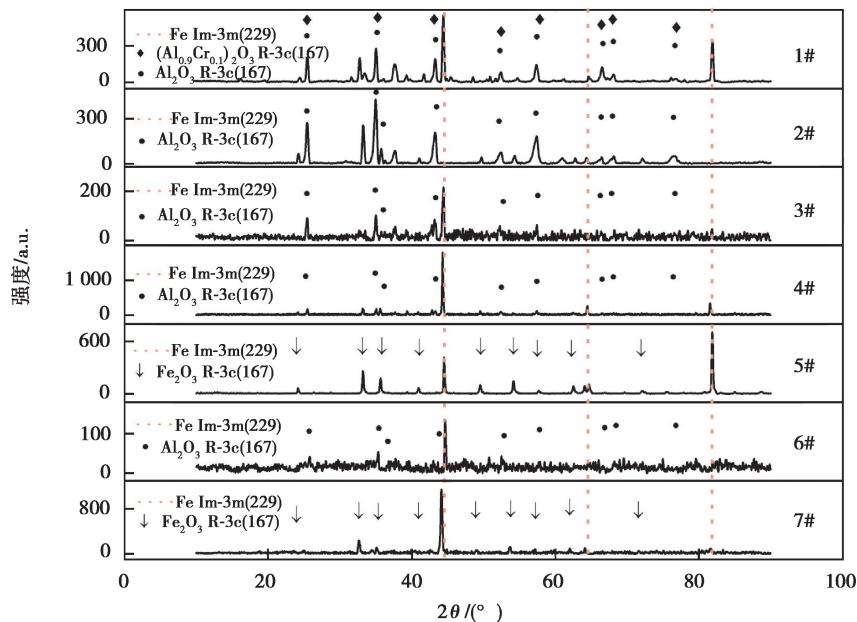


图 8 Fe-Al-Cr 合金表面氧化产物 XRD 分析

Fig. 8 XRD analysis of oxidation products of Fe-Al-Cr alloy surfaces

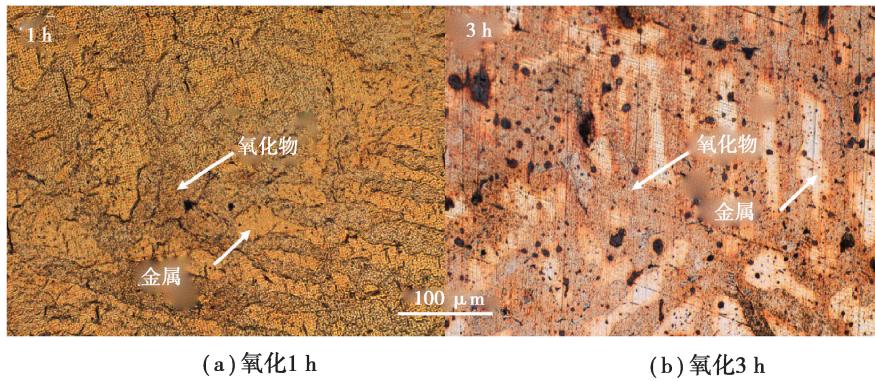


图 9 1# 合金 900 °C 氧化外观图

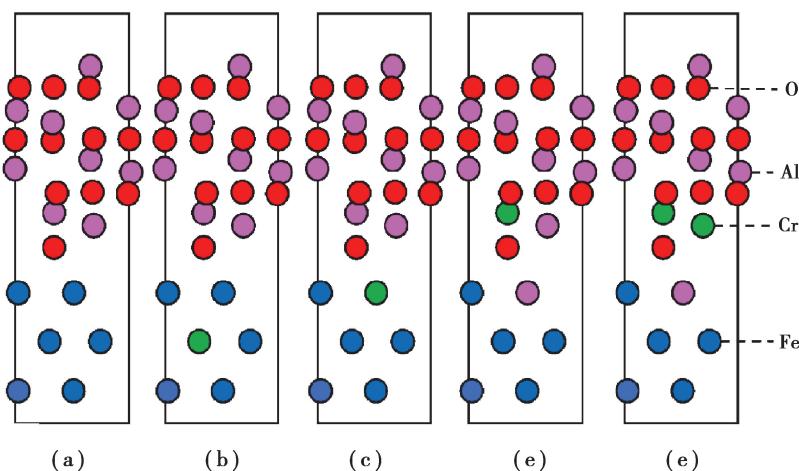
Fig. 9 1# Alloy oxidation appearance at 900 °C

表 4 界面总能量 E_{tot} 随 Cr 在 Fe(110)/Al₂O₃(0001) 界面扩散的变化Table 4 Changes in the total energy of the interface with the diffusion of Cr at the Fe(110)/Al₂O₃(0001) interface

模型	E_{tot}/eV
a	15 537.906 6
b	17 075.889 2
c	17 075.921 2
d	17 076.682 5
e	19 362.119 6

计算在基于密度泛函理论的 Materials Studio 6.0 软件中 CASTEP 模块完成, 交换关联能泛函使用广义梯度近似(GGA)中 PBE 形式描述, 使用超软赝势对价态电子进行描述, 平面波截断能取 340 eV, 布里渊区 K 点取样 $5 \times 5 \times 1$, 体系中每个原子总能量收敛值取 2.0×10^{-5} eV, 每个原子上的力低于 0.05 eV/nm, 公差偏移小于 0.02 nm, 应力偏差小于 1 GPa。计算过程中, 首先优化晶胞结构, 允许表层弛豫, 不考虑自旋极化

与原子磁性,模型如图 10 所示。通过计算结果证实了 Cr 原子在合金金属/氧化物界面的自发扩散,随着 Cr 的扩散系统总能不断降低,1#合金生成 $(\text{Al}_{0.9}\text{Cr}_{0.1})_2\text{O}_3$ 的动态过程如下:Fe、Al、Cr 三种元素在合金表面发生竞争氧化,由于氧化铝的活化能最低,Al 元素会不断还原生成的氧化铬与氧化铁,同时由于 Cr 元素的第三组元作用,氧化铝薄膜快速形成,晶粒更小, Al_2O_3 生成速率更快。在氧化铝覆盖金属表面后,Cr 原子仍会活跃在金属/氧化物界面,并且自发地扩散,取代了界面一侧氧化铝中某些铝原子,游离的铝仍会与氧结合,可以解释本文中所涉及的实验现象。



注:绿色球体代表 Cr 原子,蓝色球体代表 Fe 原子,紫色球体代表 Al 原子,红色球体代表 O 原子。

(a)—Fe(110)/ Al_2O_3 (0001)纯净界面;(b)—以 Cr 原子取代铁素体中 Fe 原子的界面结构;(c)—以 Cr 原子取代界面上 Fe 原子的界面结构;(d)—以 Cr 原子取代靠近界面的 Al 原子的界面结构;(e)—两个 Cr 原子取代 Al 原子的界面结构。

图 10 计算用 Cr 在 Fe(110)/ Al_2O_3 (0001)界面的扩散模型

Fig. 10 Diffusion path of Cr in the Fe(110)/ Al_2O_3 (0001) interface

3 结 论

Fe-Al-Cr 合金中拓扑密排相 FeCr(6)相在晶界的富集可以有效限制晶粒的长大,通过一系列大小晶粒的合金高温抗氧化实验证实了通过第二相钉扎作用细化晶粒不会破坏合金的高温抗氧化性:1)晶粒更小,合金表面晶界增多,表面具有更高的自由能使合金表面氧化铝生长速率更快,提高了合金的抗高温氧化性。2)钉扎在晶界处的第二相使 Cr 原子在晶界处富集,通过竞争氧化降低了 Al_2O_3 形成所需的自由能,使氧化物薄膜可以迅速生成。

在高温氧环境中,Fe-Al-Cr 合金表面会生成多层氧化物 $(\text{Al}_{0.9}\text{Cr}_{0.1})_2\text{O}_3$,通过第一性原理计算证实了 Cr 原子会在合金 Fe(110)/ Al_2O_3 (0001)界面发生自发扩散形成多层氧化物的动态氧化过程。

参考文献:

- [1] Deodeshmukh V P, Matthews S J, Klarstrom D L. High-temperature oxidation performance of a new alumina-forming Ni-Fe-Cr-Al alloy in flowing air[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2011, 36(7): 4580-4587.
- [2] Brüx U, Frommeyer G, Jimenez J. Light-weight steels based on iron-aluminium-influence of micro alloying elements (B, Ti, Nb) on microstructures, textures and mechanical properties[J]. Steel Research, 2002, 73(12): 543-548.
- [3] Wang H D, La P Q, Liu X M, et al. Effect of annealing on microstructure and mechanical properties of large dimensional bulk nanocrystalline Fe-Al-Cr alloy prepared by aluminothermic reaction[J]. Materials Science and Engineering: A, 2013, 582: 1-7.
- [4] Frommeyer G, Drewes E J, Engl B. Physical and mechanical properties of iron-aluminium-(Mn, Si) lightweight steels[J]. Revue

- De Métallurgie, 2000, 97(10): 1245-1253.
- [5] Messaoudi K, Huntz A, Lesage B. Diffusion and growth mechanism of Al_2O_3 scales on ferritic Fe-Cr-Al alloys[J]. Materials Science and Engineering: A, 1998, 247(1/2): 248-262.
- [6] Tolpygo V K. The morphology of thermally grown α - Al_2O_3 scales on Fe-Cr-Al alloys[J]. Oxidation of Metals, 1999, 51(5/6): 449-477.
- [7] Baik S I, Rawlings M J S, Dunand D C. Effect of hafnium micro-addition on precipitate microstructure and creep properties of a Fe-Ni-Al-Cr-Ti ferritic superalloy[J]. Acta Materialia, 2018, 153: 126-135.
- [8] Wang J T, Liu S P, Han X Y. Study on σ phase in Fe-Al-Cr alloys[J]. Metals, 2019, 9(10): 1092.
- [9] La P Q, Zhang D, Ma D L, et al. Aluminothermic preparation of bulk nanocrystalline Fe-Al-Cr alloy: computer simulation of melt cooling[J]. International Journal of Self-Propagating High-Temperature Synthesis, 2012, 21(2): 89-97.
- [10] Luo X X, Yao Z J, Zhang P Z, et al. Tribological properties of the Fe-Al-Cr alloyed layer by double glow plasma surface metallurgy[J]. Journal of Materials Engineering and Performance, 2016, 25(9): 3938-3947.
- [11] Teng Z K, Zhang F, Miller M K, et al. Thermodynamic modeling and experimental validation of the Fe-Al-Ni-Cr-Mo alloy system[J]. Materials Letters, 2012, 71: 36-40.
- [12] Baik S I, Rawlings M J S, Dunand D C. Atom probe tomography study of Fe-Ni-Al-Cr-Ti ferritic steels with hierarchically-structured precipitates[J]. Acta Materialia, 2018, 144: 707-715.
- [13] Chauhan A, Bergner F, Etienne A, et al. Microstructure characterization and strengthening mechanisms of oxide dispersion strengthened (ODS) Fe-9%Cr and Fe-14%Cr extruded bars[J]. Journal of Nuclear Materials, 2017, 495: 6-19.
- [14] 王锦涛, 韩校宇, 刘守平, 等. Si、V对Fe-Al-Cr合金高温氧化性的影响[J]. 重庆大学学报, 2019, 42(2): 82-93.
WANG Jintao, HAN Xiaoyu, LIU Shouping, et al. Effect of Si and V on high-temperature oxidation resistance of Fe-Al-Cr alloys[J]. Journal of Chongqing University, 2019, 42(2): 82-93. (in Chinese)
- [15] Liu H, Li Y P, Zhang C L, et al. Effects of aluminum diffusion on the adhesive behavior of the Ni(111)/ Cr_2O_3 (0001) interface: first principle study[J]. Computational Materials Science, 2013, 78: 116-122.
- [16] Dong N, Zhang C L, Liu H, et al. Effects of different alloying additives X ($X = \text{Si}, \text{Al}, \text{V}, \text{Ti}, \text{Mo}, \text{W}, \text{Nb}, \text{Y}$) on the adhesive behavior of Fe/ Cr_2O_3 interfaces: a first-principles study[J]. Computational Materials Science, 2015, 109: 293-299.
- [17] Niu Y, Wang S, Gao F, et al. The nature of the third-element effect in the oxidation of Fe- x Cr-3 at.% Al alloys in 1 atm O_2 at 1000 °C[J]. Corrosion Science, 2008, 50(2): 345-356.

(编辑 郑洁)