

学校编码: 10384
学号: 20720111150105

密级_____

厦 门 大 学

硕 士 学 位 论 文

部分(Nb, Pt)-基合金系的扩散动力学研究
Kinetic Investigations of Some (Nb, Pt)-based Alloys Systems

张炎财

指导教师姓名: 王翠萍教授

专业名称: 材 料 学

论文提交日期: 2014 年 6 月

论文答辩日期: 2014 年 6 月

答辩委员会主席: _____

评 阅 人: _____

2014 年 6 月

厦门大学学位论文原创性声明

本人呈交的学位论文是本人在导师指导下,独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考其他个人或集体已经发表的研究成果,均在文中以适当方式明确标明,并符合法律规范和《厦门大学研究生学术活动规范(试行)》。

另外,该学位论文为()课题(组)的研究成果,获得()课题(组)经费或实验室的资助,在()实验室完成。(请在以上括号内填写课题或课题组负责人或实验室名称,未有此项声明内容的,可以不作特别声明。)

声明人(签名):

年 月 日

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人同意厦门大学根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》等规定保留和使用此学位论文，并向主管部门或其指定机构送交学位论文（包括纸质版和电子版），允许学位论文进入厦门大学图书馆及其数据库被查阅、借阅。本人同意厦门大学将学位论文加入全国博士、硕士学位论文共建单位数据库进行检索，将学位论文的标题和摘要汇编出版，采用影印、缩印或者其它方式合理复制学位论文。

本学位论文属于：

1. 经厦门大学保密委员会审查核定的保密学位论文，
于 年 月 日解密，解密后适用上述授权。

2. 不保密，适用上述授权。

（请在以上相应括号内打“√”或填上相应内容。保密学位论文应是已经厦门大学保密委员会审定过的学位论文，未经厦门大学保密委员会审定的学位论文均为公开学位论文。此声明栏不填写的，默认为公开学位论文，均适用上述授权。）

声明人（签名）：

年 月

摘要

铌基合金具有高温强度高、抗氧化性好、耐蚀性好等特点，广泛应用于航空航天、医疗及核工业等领域。铂基合金具有良好的导电性、耐腐蚀性和催化性等特点，广泛应用于电子行业、玻璃工业和汽车工业等领域。因此，迫切需要开展对铌基合金和铂基合金材料设计的研究工作，促进其优化生产工艺及提高研发效率。扩散动力学计算是材料设计的重要理论基础，也是研究扩散型相变和模拟材料工艺过程的有力工具。本研究利用 DICTRA 软件对铌基合金和铂基合金的扩散动力学参数进行了优化与计算，取得的主要研究成果如下：

(1) 基于文献报道的实验数据，利用 DICTRA 软件对纯 Fe、Nb、Cu、Th、Al、Ti、W、U 中的部分杂质扩散系数进行了优化与计算，计算结果和实验结果取得了良好的一致性。

(2) 根据文献报道的扩散实验信息，利用 DICTRA 软件对 Nb-X (X: Al, Mo, Ti, Zr, Pd) 和 Pt-X (X: Au, Cu, Fe, Pd) 各二元合金系以及其它相关体系的扩散系数进行了优化与计算，计算结果和实验结果符合良好。

(3) 在文献报道的扩散实验数据基础上，利用 DICTRA 软件对 Cu-Al-Si、Ni-Al-Re 三元系的扩散系数进行了优化与计算，计算结果和实验数据取得了良好的一致性。同时，基于本研究所建立的铌基多元合金的动力学数据库，对铌基多元合金的扩散偶浓度曲线和扩散路径进行了计算预测。

本研究将作为铌基和铂基合金动力学数据库的重要组成部分，可为铌基合金与铂基合金的材料设计与扩散行为的解析提供重要的理论指导。

关键词：铌基合金；铂基合金；DICTRA；扩散动力学

Abstract

Niobium-based alloys have high strength at high temperature, good oxidation resistance, good corrosion resistance, etc. Niobium-based alloys are widely used in the fields of transportation, aerospace, medical care and nuclear industry, etc. As to platinum-based alloys, they also have many properties, such as good conductivity, remarkable corrosion resistance and catalytic properties. They are widely used in electronic industry, glass industry, and automobile industry, etc. Therefore, an urgent need to carry out of the niobium-based alloys and platinum-based alloys material design research work, promote the optimization of production technology and improve research and development efficiency. Diffusion kinetic calculation is seen as important theoretical foundation for the material design, and it is a powerful tool to research the diffusion phase transformation and simulate the processing technology of the materials. In the present work, the software, namely DICTRA, is used to optimize and calculate the diffusion kinetic parameters of the niobium-based alloys and platinum-based alloys and the main research results are listed as follows:

(1) Based on the experimental data reported in literatures, the impurity-diffusion coefficients in pure Fe, Nb, Cu, Th, Al, Ti, W, U are optimized and calculated by using DICTRA. The calculated results are good agreement with the experimental data.

(2) Based on the experimental data reported in literatures, the diffusion coefficients of Nb-X (X: Al, Mo, Ti, Zr, Pd), Pt-X (X: Au, Cu, Fe, Pd) and other related alloys are optimized and calculated in the frame of DICTRA. The calculated results are good agreement with the experimental data.

(3) According to the experimental data reported in literatures, the diffusion coefficients of Cu-Al-Si, Ni-Al-Re ternary alloys are optimized and calculated in the frame of DICTRA. The calculated results are good agreement with the experimental data. Based on the established kinetic database of niobium-based alloys, diffusion

couples and diffusion paths of niobium-based alloys are simulated.

This study is an important part of the kinetic database of platinum-based and platinum-based alloys, for platinum-based and platinum-based alloys material design and the diffusion behavior analysis provide important theoretical guidance.

Keywords: Niobium-based alloys; Platinum-based alloys; DICTRA; Diffusion kinetic

厦门大学博硕士学位论文摘要库

目 录

摘 要.....	I
Abstract.....	III
第一章 绪论	1
1.1 引言.....	1
1.2 (Nb, Pt)-基合金应用概况	1
1.2.1 铌基合金应用概况.....	1
1.2.2 铂基合金应用概况.....	2
1.3 扩散动力学的应用与研究现状	3
1.3.1 扩散动力学的应用.....	3
1.3.2 扩散动力学的研究现状.....	3
1.4 选题意义及主要内容	4
参考文献.....	5
第二章 动力学模型与计算过程	8
2.1 动力学模型	8
2.1.1 扩散通量的计算.....	8
2.1.2 纯组元在稳定结构中的自扩散与杂质扩散系数的优化模型.....	10
2.1.3 纯组元在亚稳定结构中的自扩散的优化模型.....	10
2.1.4 二元系固溶体相动力学参数的优化模型.....	11
2.1.5 三元系固溶体相动力学参数的优化模型.....	12
2.2 DICTRA 计算方法介绍和动力学计算过程	12
2.2.1 DICTRA 计算方法介绍.....	12
2.2.2 动力学计算过程.....	13
参考文献.....	15

第三章 部分纯金属中的杂质扩散系数的动力学优化与计算	17
3.1 引言	17
3.2 纯 Fe 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	17
3.2.1 Be 在纯 Fe 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	17
3.2.2 Mo 在纯 Fe 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	17
3.2.3 Nb 在纯 Fe 中杂质扩散系数的动力学优化与计算.....	18
3.2.4 Si 在纯 Fe 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	18
3.2.5 Sn 在纯 Fe 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	18
3.2.6 V 在纯 Fe 中杂质扩散系数的动力学优化与计算.....	19
3.2.7 Zn 在纯 Fe 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	19
3.3 纯 Nb 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	24
3.3.1 Al 在纯 Nb 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	24
3.3.2 Mo 在纯 Nb 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	24
3.3.3 P 在纯 Nb 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	24
3.3.4 Pd 在纯 Nb 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	25
3.3.5 Ru 在纯 Nb 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	25
3.3.6 Sn 在纯 Nb 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	25
3.4 纯 Cu 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	29
3.4.1 Be 在纯 Cu 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	29
3.4.2 Bi 在纯 Cu 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	29
3.4.3 Cd 在纯 Cu 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	29
3.4.4 Cr 在纯 Cu 中杂质扩散系数的动力学优化与计算.....	30
3.4.5 Ga 在纯 Cu 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	30
3.4.6 Ge 在纯 Cu 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	30
3.4.7 In 在纯 Cu 中杂质扩散系数的动力学优化与计算.....	31
3.4.8 Ir 在纯 Cu 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	31
3.4.9 Pb 在纯 Cu 中杂质扩散系数的动力学优化与计算.....	31
3.4.10 Rh 在纯 Cu 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	31

3.4.11 Ru 在纯 Cu 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	32
3.4.12 Tl 在纯 Cu 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	32
3.5 纯 Th 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	39
3.5.1 纯 fcc-Th 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	39
3.5.2 纯 bcc-Th 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	40
3.6 纯 Al 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	50
3.6.1 Au 在纯 Al 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	50
3.6.2 Cd 在纯 Al 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	50
3.6.3 Ga 在纯 Al 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	50
3.6.4 Ge 在纯 Al 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	51
3.6.5 Hf 在纯 Al 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	51
3.6.6 In 在纯 Al 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	51
3.6.7 Ir 在纯 Al 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	51
3.6.8 Mo 在纯 Al 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	52
3.6.9 Pd 在纯 Al 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	52
3.6.10 Ti 在纯 Al 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	52
3.7 纯 Ti 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	58
3.7.1 Ge 在纯 Ti 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	58
3.7.2 Mn 在纯 Ti 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	58
3.7.3 P 在纯 Ti 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	58
3.7.4 Sc 在纯 Ti 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	58
3.7.5 Sn 在纯 Ti 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	59
3.7.6 W 在纯 Ti 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	59
3.8 纯 W 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	63
3.8.1 Cr 在纯 W 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	63
3.8.2 Hf 在纯 W 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	63
3.8.3 Ir 在纯 W 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	63
3.8.4 Os 在纯 W 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	63

3.8.5 Re 在纯 W 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	64
3.8.6 Sc 在纯 W 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	64
3.9 纯 U 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	68
3.9.1 Au 在纯 U 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	68
3.9.2 Co 在纯 U 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	68
3.9.3 Cr 在纯 U 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	68
3.9.4 Cu 在纯 U 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	68
3.9.5 Fe 在纯 U 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	69
3.9.6 Mn 在纯 U 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	69
3.9.7 Ni 在纯 U 中杂质扩散系数的动力学优化与计算	69
3.10 小结	74
参考文献	75
第四章 (Nb, Pt)-基二元合金系扩散动力学参数的优化与计算	81
4.1 引言	81
4.2 Nb-基二元合金系扩散动力学参数的优化与计算	81
4.2.1 Nb-Al 二元合金系	81
4.2.2 Nb-Mo 二元合金系	86
4.2.3 Nb-Ti 二元合金系	89
4.2.4 Nb-Zr 二元合金系	93
4.2.5 Nb-Pd 二元合金系	96
4.3 Pt-基二元合金系扩散动力学参数的优化与计算	98
4.3.1 Pt-Au 二元合金系	98
4.3.2 Pt-Cu 二元合金系	103
4.3.3 Pt-Fe 二元合金系	108
4.3.4 Pt-Pd 二元合金系	111
4.4 其他二元合金系扩散动力学参数的优化与计算	116
4.4.1 Fe-Sn 二元合金系	116

4.4.1 Fe-Sb 二元合金系	118
4.5 小结.....	120
参考文献.....	121
第五章 动力学数据库的建立及其应用探索.....	124
5.1 引言.....	124
5.2 部分三元合金扩散动力学的优化与计算.....	124
5.2.1 Cu-Al-Si 三元系	124
5.2.2 Ni-Al-Re 三元系	125
5.3 Nb-基动力学数据库的建立及应用.....	134
5.3.1 Nb-Al-Zr-Ti-V (bcc 相) 动力学数据库的建立	134
5.3.2 Nb-Al-Zr-Ti-V (bcc 相)动力学数据库的应用	134
5.4 小结.....	141
参考文献.....	142
第六章 总结	144
致 谢.....	145
攻读硕士学位期间的科研成果	146

厦门大学博硕士学位论文摘要库

Degree papers are in the "[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)". Full texts are available in the following ways:

1. If your library is a CALIS member libraries, please log on <http://etd.calis.edu.cn/> and submit requests online, or consult the interlibrary loan department in your library.
2. For users of non-CALIS member libraries, please mail to etd@xmu.edu.cn for delivery details.

厦门大学博硕士论文摘要库