**项目名称：**新型金属间化合物位错性质的高压效应

**完成人（限11人）：**李绍蓉、王少峰、朱华泽、张涛、炎正馨、吴小志、田玉仙

**完成单位（所有单位）：**西安科技大学、重庆大学

**项目简介：**本项目结合密度泛函理论和位错晶格理论研究不同压强下B2结构的稀土金属间化合物AlSc、MgSc 的位错性质，预测它们的高压稳定性，并寻找压强对材料位错性质影响的一般规律。研究内容主要包括：采用密度泛函理论计算 AlSc、MgSc 的相变压强；用密度泛函理论计算 AlSc、MgSc 等材料大气压到相变压强下的晶格常数、结合能和广义层错能等与位错相关的物理参数；基于位错晶格理论，预测AlSc、MgSc 的位错芯结构和Peierls 应力。重点研究几类材料在相变压强附近的位错性质，并找出位错芯结构和 Peierls 应力等性质随压强变化的规律；结合他人对其他材料的研究结果，分析压强效应对位错运动机制的影响，得出压强对材料位错性质影响的一般规律及相应的关系式，完善位错方程。预测AlSc、MgSc 在高压下的稳定性，为实际应用提供理论参考。项目依托国家自然科学基金青年基金项目《几种新型稀土金属间化合物中位错性质的高压效应》（批准号11404257，经费：25万），已顺利完成项目，并结题。

**主要知识产权目录：**

1. **文章（限15篇）（文章的第一作者、通讯作者必须为奖励申报完成人）**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| 文章题目 | 期刊名称 | 作者（所有人） | 发表时间 | 完成单位（所有） |
| Dislocation Core Structure and Peierls Stress of the B2-based AlSc in {110} Plane | Journal of Electronic Materials | 李绍蓉、吴小志、张涛、田玉仙、炎正馨、朱华泽 | 2016年6月 | 西安科技大学、重庆大学 |
| Dislocation Equation for <110>{1-10} Dissociated Superdislocations in Perovskite CaSiO3 |  Physics and Chemistry of Minerals | 李绍蓉、吴小志、张涛、田玉仙、炎正馨、朱华泽 | 2016年6月 | 西安科技大学、重庆大学 |
| A Langmuir and AFM study on interfacial behavior of binary monolayer of hexadecanol/DPPE at the air-water interface  | Chemistry and Physics of Lipids | 朱华泽、孙润广，郝长春，张鹏利 | 2016年10月 | 西安科技大学、陕西师范大学 |
| DFT study of methoxy adsorbed on Ni-doped Cu (100) surface | Emerging Materials Research | 炎正馨、龚安、刘伟、李绍蓉、廖谦、陈倩 | 2016年2月 | 西安科技大学 |
| Interfacial Interactions and Nanostructure Changes inDPPG/HD Monolayer at the Air/Water Interface | Journal of Nanomaterials | 朱华泽、孙润广，张涛、郝长春，张鹏利、王娟、李绍蓉 | 2015年10月 | 西安科技大学、陕西师范大学 |
| First principle study on generalized stacking fault energy surfaces of B2-AlRE intermetallic compounds | Physica B | 李绍蓉、王少峰、王锐 | 2011年9月 | 重庆大学 |
| Solving dislocation equation for the dislocation with complex core |  European Physical Journal B,  | 李绍蓉、王少峰、王锐 | 2011年2月 | 重庆大学 |

1. **专利&软著**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 专利（软著）名称 | 完成人 | 权人 | 专利（软著）号 |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |

1. **专著等**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 名称 | 作者 | 出版社 | 出版时间 |
|  |  |  |  |