**项目名称：**压强对新型金属间化合物位错性质及其力学性能的影响研究

**完成人（限11人）：**李绍蓉、吴小志、杨静、胡海、马保成、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。重点研究这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，得出压强对这类材料力学性能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，否则须出具知情同意书）**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| 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 |
| 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 |
| Energy investigations on the adhesive properties of Al/TiC interfaces | Phys. B | 吴小志、孙婷、王锐、刘利利、刘庆 | 2014年5月 | 重庆大学 |
| On the core width and Peierls stress of bubble rafts dislocations within the framework of modified Peierls-Nabarro model | [Central European Journal of Physics](https://link.springer.com/journal/11534%22%20%5Co%20%22Central%20European%20Journal%20of%20Physics) | 吴小志、刘利利、王锐、姬娜 | 2011年2月 | 重庆大学 |
| [Generalized-stacking-fault energy and surface properties for HCP metals: A first-principles study](http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433209017516%22%20%5Ct%20%22http%3A//xueshu.baidu.com/usercenter/paper/_blank) | [Applied Surface Science](https://www.sciencedirect.com/science/journal/01694332%22%20%5Co%20%22Go%20to%20Applied%20Surface%20Science%20on%20ScienceDirect) | 吴小志、王少峰、王锐 | 2010年3月 | 重庆大学 |
| [Generalized-stacking-fault energy surfaces for B2-MgRE (RE=Y, Dy, Pr, Tb) intermetallic compounds: Ab initio calculations](http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921452610012184%22%20%5Ct%20%22http%3A//xueshu.baidu.com/usercenter/paper/_blank) | [Physica B: Condensed Matter](https://www.sciencedirect.com/science/journal/09214526%22%20%5Co%20%22Go%20to%20Physica%20B%3A%20Condensed%20Matter%20on%20ScienceDirect) | 吴小志、王锐、王少峰、刘利利 | 2010年12月 | 重庆大学 |
| Peierls stress for <110>{001} mixed dislocation in SrTiO3 within framework of constrained path approximation | 力学学报（英文版） | 吴小志、王少峰、刘瑞萍 | 2010年10 | 重庆大学 |
| The ability of the Coincidence Doppler Broadening Spectroscopy to characterize polymers containing different chemical elements | Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy | 杨静、张涛、韩立安、曹兴忠、于润升、王宝义 | 2017年1月 | 西安科技大学、中国科学院高能物理研究所 |
| Phase stability, mechanical properties and electronic structure of TiAl alloying with W, Mo, Sc and Yb | J. Alloys Compd | 胡海、吴小志、王锐、李卫国、庆 | 2015年10月 | 重庆大学 |
| First principles study on the phase stability and mechanical properties of MoSi2 | Intermetallics | 胡海、吴小志、王锐、李卫国、刘庆 | 2015年7月 | 重庆大学 |
| The structural stability, mechanical properties and stacking fault energy of Al3Zr precipitates in Al-Cu-Zr alloys: HRTEM observations and first-principles calculations | J. Alloys Compd. | 胡海，赵明琪，贾志宏，王锐、李卫国，刘庆 | 2016年4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 |
| 一种用于交通自然灾害的监控预警装置 | 马保成、李绍蓉、叶万军 | 马保成 | CN204155457U |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |

1. **专著等**

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