

专题: 原子分子和材料物性数据

# 合金元素对钯基合金热力学和弹性性能的影响规律研究以及数据库构建\*

朱晗毓<sup>1)</sup> 种晓宇<sup>1)†</sup> 高兴誉<sup>2)‡</sup> 武海军<sup>3)</sup>  
李祖来<sup>1)</sup> 冯晶<sup>1)</sup> 宋海峰<sup>2)</sup>

1) (昆明理工大学材料科学与工程学院, 昆明 650093)

2) (北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100098)

3) (贵金属功能材料全国重点实验室, 昆明 650106)

(2025年8月6日收到; 2025年10月19日收到修改稿)

钯 (Pd) 合金较低的摩擦系数和较好的力学性能使得其在用于长时间稳定工作的高精度仪器仪表中具备潜在优势, 但是因为高昂的原料和实验成本导致基础数据缺乏, 无法进行高性能 Pd 合金的设计. 因此, 本研究利用第一性原理计算了 Pd 的晶格常数和弹性模量, 并建立 Pd 与 Al, Si, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni 等 33 种合金元素形成的稀固溶体模型, 计算了混合焓、弹性常数和弹性模量. 研究表明, 除 Mn, Fe, Co, Ni, Ru, Rh, Os 和 Ir 外, 其他合金元素都可以固溶到 Pd 中, 元素周期表两侧的合金元素能提高 Pd 固溶体的延展性, 其中 La, Ag 和 Zn 的作用最明显. 通过差分电荷密度分析, Ag 掺杂后形成的电子云呈球形分布, 造成延展性提高, Hf 掺杂后周围的离域程度最大, 表明 Hf 与 Pd 的键合存在较强的离子性, 导致 Pd<sub>31</sub>Hf 硬度较高. 本文数据集可在 <https://www.doi.org/10.57760/sciedb.j00213.00186> 中访问获取.

**关键词:** 第一性原理, Pd 基合金, 混合焓, 弹性模量**PACS:** 62.20.-x, 05.70.Ce, 71.20.-b, 81.30.-t**DOI:** 10.7498/aps.74.20251058**CSTR:** 32037.14.aps.74.20251058

## 1 引言

钯及其合金因兼具高催化活性、优异氢渗透性与耐腐蚀性, 在新能源转换、氢能存储及高温器件等领域展现出不可替代的应用价值<sup>[1]</sup>. 短程有序对合金中位错的运动产生了阻碍, 因此在含有短程有序的合金中, 这些局部有序区域常常能够有效地限制晶粒的增长, 从而通过细晶强化进一步提高了合金的强度和硬度. 钯合金具有较低的摩擦系数和优异的力学稳定性, 这使得其在需要长时间稳定工作

的精密仪器仪表中具备潜在优势<sup>[2-4]</sup>.

钯作为贵金属材料, 资源有限, 利用传统“经验+实验试错”的模式进行成分设计和性能优化具有研发经验少、研发周期长和研发成本高等问题<sup>[5,6]</sup>, 不满足装备升级换代对新材料性能提升的迫切需求, 因此亟需探索新的研究方法来提高研发效率. 通过将材料科学与高性能计算相结合, 可以有效缩短研发周期. 为此, 美国政府在 2011 年推出了“材料基因组计划”, 其内涵为结合材料高通量计算、高效实验、数据库和机器学习等技术, 建立数据驱动的新材料研发新范式<sup>[7,8]</sup>. 通过构建材料数据库,

\* 云南省重点研发计划 (批准号: 202403AA080016) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: [xiaoyuchong@kust.edu.cn](mailto:xiaoyuchong@kust.edu.cn)‡ 通信作者. E-mail: [gao\\_xingyu@iapcm.ac.cn](mailto:gao_xingyu@iapcm.ac.cn)

能够系统化地管理和应用数据,为材料智能设计提供坚实的基础.它不仅提高了材料研发的效率,减少了资源浪费,还为新材料的预测和发现提供了更多的可能性.数据库的构建和利用为材料设计带来了巨大的推动作用,具有加速创新、优化设计和降低成本的深远意义.作为高通量计算的主要方法之一,基于密度泛函理论的第一性原理计算不依赖任何经验参数,能够快速产生大量数据,为新材料的设计提供指导<sup>[9-15]</sup>.

目前,针对 Pd 合金的研究较少,为了降低 Pd 合金的研发成本、缩短研发周期,有必要系统深入了解多种合金元素对 Pd 合金基础物性的影响.因此本工作采用第一性原理计算,从电子-原子层面探究 33 种合金元素对 Pd 合金结构、热力学、力学等性质的影响,为未来设计更低成本、更高性能的新型 Pd 基合金材料提供理论基础.

## 2 计算方法

### 2.1 理论模型

#### 2.1.1 固体状态方程

状态方程 (简称 EOS) 提供了描述在特定条件下,压力 ( $P$ )、体积 ( $V$ ) 与能量 ( $E$ ) 三者间函数相互关系的方法.已知,在固定体积的情况下,能量与体积的变化是成二次方比例.在本工作中,首先运用第一性原理对变体积后的晶体结构进行弛豫处理,获得与之相对应的能量数值.之后,引入四参数 Birch-Murnaghan 状态方程对上述计算获得的能量与体积数据 ( $E-V$ ) 进行拟合,采用所得方程可绘制  $E-V$  曲线.基于  $E-V$  曲线还可计算出材料的体积模量 ( $B$ )、平衡晶胞体积 ( $V_0$ )、偏压系数 ( $B'_0$ ) 以及静态能量 ( $E_0$ ).具体的计算过程如下<sup>[16-21]</sup>:

$$E(V) = E_0 + \frac{9V_0B}{16} \left\{ \left[ \left( \frac{V_0}{V} \right)^{2/3} - 1 \right]^3 B'_0 + \left[ \left( \frac{V_0}{V} \right)^{2/3} - 1 \right]^2 \left[ 6 - 4 \left( \frac{V_0}{V} \right)^{2/3} \right] \right\}. \quad (1)$$

#### 2.1.2 力学性质

本文利用应力-应变法计算不同晶体结构的弹性常数,并利用广义胡克定律得到弹性系数的二阶张量.应力-应变法展开式如下<sup>[22]</sup>:

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

其中,金是立方晶系,其具有高对称性,只包含 3 个独立的弹性常数  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$ .根据 Voigt-Reuss-Hill 近似计算材料的体模量和剪切模量,具体公式如下:

$$B_V = B_R = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3}, \quad (3)$$

$$G_V = \frac{C_{11} - C_{12} + 3C_{44}}{5}, \quad (4)$$

$$G_R = \frac{5(C_{11} - C_{12})C_{44}}{4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})}, \quad (5)$$

其中  $B_V$  ( $B_R$ ) 和  $G_V$  ( $G_R$ ) 分别为来自 Voigt(Reuss) 近似的体模量和剪切模量.根据 Hill 近似来计算体模量和剪切模量,利用获得的  $B$  和  $G$  的结果,可以进一步计算得到杨氏模量  $E$ 、泊松比  $\nu$  和硬度  $H_V$ ,其计算公式如下<sup>[23-25]</sup>:

$$B = \frac{B_V + B_R}{2}, \quad (6)$$

$$G = \frac{G_V + G_R}{2}, \quad (7)$$

$$E = \frac{9BG}{3B + G}, \quad (8)$$

$$\nu = \frac{3B - 2G}{6B + 2G}, \quad (9)$$

$$H_V = 0.92k^{-1.137}G^{0.708}. \quad (10)$$

在定压下, Gibbs 自由能是温度和成分的函数.任一多组元溶体相的摩尔 Gibbs 自由能可表示为

$$G_m = G_m^{\text{ref}} + \Delta_{\text{mix}}G_{\text{mix}}^{\text{id}} + G^e, \quad (11)$$

其中,  $G_m^{\text{ref}}$  为构成溶体相的纯组元对 Gibbs 自由能的贡献;  $\Delta_{\text{mix}}G_{\text{mix}}^{\text{id}}$  来自理想混合熵对 Gibbs 自由能的贡献;  $G^e$  是超额 Gibbs 自由能,表示溶液偏离理想溶液的程度.

根据 Redlich-Kister (R-K) 多项式和正则解模型<sup>[26-28]</sup>,按正规溶体模型计算 Pd-X 超额 Gibbs 能量项,可表示为

$$E_{G_m} = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n x_i x_j L_{ij}, \quad (12)$$

$$L_{ij} = \sum_{v=0}^k (x_i - x_j)^v L_{ij}^v \quad (13)$$

$$L_{ij} = a_{ij} + b_{ij}, \quad (14)$$

其中  $L_{ij}$  为与温度无关的参数,  $x_i$  为组分的摩尔分数. 二元体系中相互作用参数的过量焓的组分依赖性用  $a_{ij}$  来描述, 过量熵用  $b_{ij}$  来描述. 在本工作中, 只考虑了 0 K 时的混合焓, 所以多余的吉布斯能等于混合焓. 然后用方程得到了 Pd-X 二元合金混合焓的零级相互作用参数 ( $^0L$ ).

## 2.2 计算方法和参数细节

本工作中所有的高通量计算是基于极端材料专家平台 (ProME) 进行的, 基态计算引擎为 VASP. 此外, 原子核与价电子之间的相互作用通过投影缀加平面波 (PAW) 赝势来描述. 交换关联能由广义梯度近似 (GGA) 下 Perdew-Burke-Ernzerhoff (PBE) 泛函<sup>[29-31]</sup> 描述. 建立  $2 \times 2 \times 2$  超胞包含 32 个原子, 用于模拟基于钯的稀有合金 (Pd<sub>31</sub>X), 其中包含 31 个溶剂原子 (Pd) 和一个溶质原子 ( $X = \text{Al, Si, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Ga, Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd, Ag, Cd, La, Ce, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt, Th}$ ). 此外, 本研究中采用全弛豫策略处理基于 Pd 的稀固溶体合金, 截止能取为 400 eV, Monkhorst-Pack  $k$  点网格为  $6 \times 6 \times 6$ , 基于钯的稀固溶体的电荷差密度. 此外, 电子自洽的能量收敛标准为每原子  $10^{-6}$  eV, 收敛精度小于 0.02 eV/Å.

## 3 结果与讨论

### 3.1 纯 Pd 计算

纯 Pd 是面心立方结构, 属于空间群  $Fm\bar{3}m$ , 根据文献<sup>[32]</sup> Pd 实验的晶格常数为  $a = 3.917 \text{ \AA}$ , 采用合金理论自动化工具包 (ATAT) 建立 Pd 的晶胞模型. 图 1 为纯 Pd 的  $2 \times 2 \times 2$  超胞模型.

通过对 Pd 的晶体结构几何优化, 确定其处于最低能级时的体积, 即所谓的平衡体积. 利用计算所得的体积以及静态总能量的数据点, 并用 Birch-Murnaghan 固态方程拟合能量与体积 ( $E-V$ ), 构建出  $E-V$  图, 如图 1(b) 所示. 图中计算能量值由黑色点标示, 整体趋势在平衡体积的附近分布, 而拟合出的曲线则以红色实线表示, 所有的数据点均准确分布在拟合曲线之上. 这表明使用 Birch-Murnaghan 状态方程拟合是准确的, 因此确认了所得到的  $E-V$  数据的合理性.

每个晶体系统都具有一些独特的独立弹性常数. 钯属于立方晶系, 有 3 个独立的弹性常数, 包括  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  和  $C_{44}$ <sup>[31]</sup>. 用 PBE 赝势优化的纯钯晶格参数为  $3.936 \text{ \AA}$ , 比未优化的高出 0.49%. 实验值为  $3.917 \text{ \AA}$ <sup>[32]</sup>, 相较其他赝势误差较小. 因此, 本工作中选择 PBE 赝势. 纯钯的优化晶格参数大于实验值, 这可能是由于使用 GGA 的交换关联能会高估晶格常数, 因此计算出的弹性模量较小. 基于钯的稀有合金在平衡体积下的弹性常数是通过应力-应变方法计算的, 并采用 Voigt-Reuss-Hill (VRH)<sup>[33,34]</sup> 法来获得多晶材料的弹性性质, 纯 Pd 的体积模量为 170 GPa, 杨氏模量为 130 GPa, 剪切模量为 47 GPa.

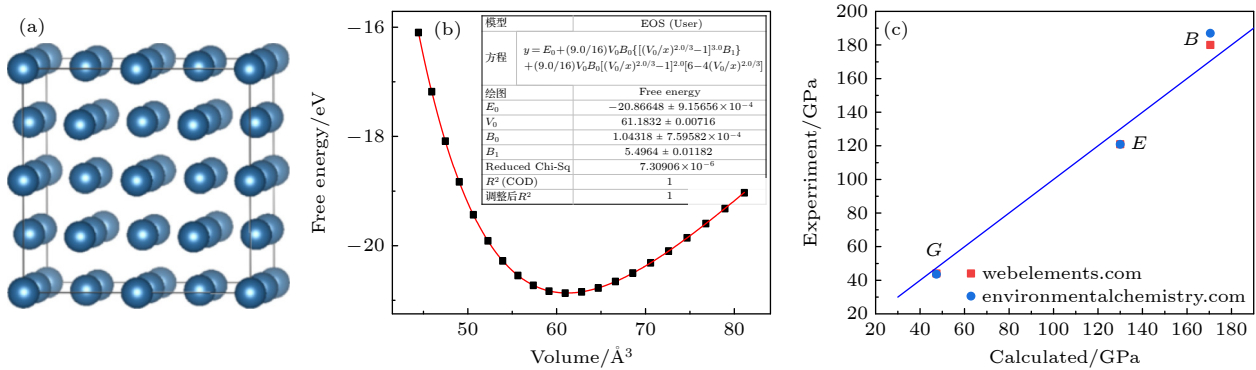


图 1 (a) Pd 超胞模型; (b) Pd 的能量-体积曲线; (c) Pd 的弹性模量与实验值对比

Fig. 1. (a) Supercell models of Pd; (b) the energy-volume curves for Pd; (c) comparison of the elastic modulus of Pd with experimental values.

纯钯的弹性性质计算值与实验值<sup>[35-37]</sup>对比如图1(c)所示. 图中细实线表示计算值等于实验值, 即当点接近细实线时, 计算值与实验值吻合良好. 可以明显看出, 所有点都非常接近虚线, 这表明计算结果与实验结果高度一致.

### 3.2 Pd<sub>31</sub>X 稀固溶体建模

引入了稀固溶体模型, 首先建立 2×2×2 超胞模型, 替换 Pd 超胞中的一个原子, 从而得到 Pd<sub>31</sub>X (X = Al, Si, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Ga, Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd, Ag, Cd, La, Ce, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt, Th) 模型. 在这个模型中, 蓝色小球表示 Pd 原子, 黄色小球表示 X 原子, 模型示意图见图 2<sup>[38]</sup>.

由于合金元素 X 与 Pd 的原子尺寸不一致, 这可能会导致建模的时候产生晶格参数的变化, 进而晶格畸变. 为了解决这个问题, 本研究对构建的 Pd<sub>31</sub>X 晶体模型进行了弛豫处理, 目的是寻找达到最低能量状态时的体积, 即平衡体积. 对弛豫后的原子进行计算, 依据 Birch-Murnaghan(BM) 固态方程拟合所获得的体积与静态总能量的数据点, 绘

制 E-V 曲线. 通过这一步骤, 不仅可以确定平衡体积, 也可以得到最低的静态总能量值, 这为之后对其进行力学和热学性质计算提供了重要基础.

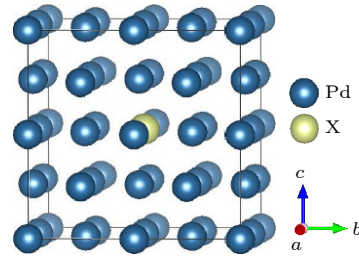
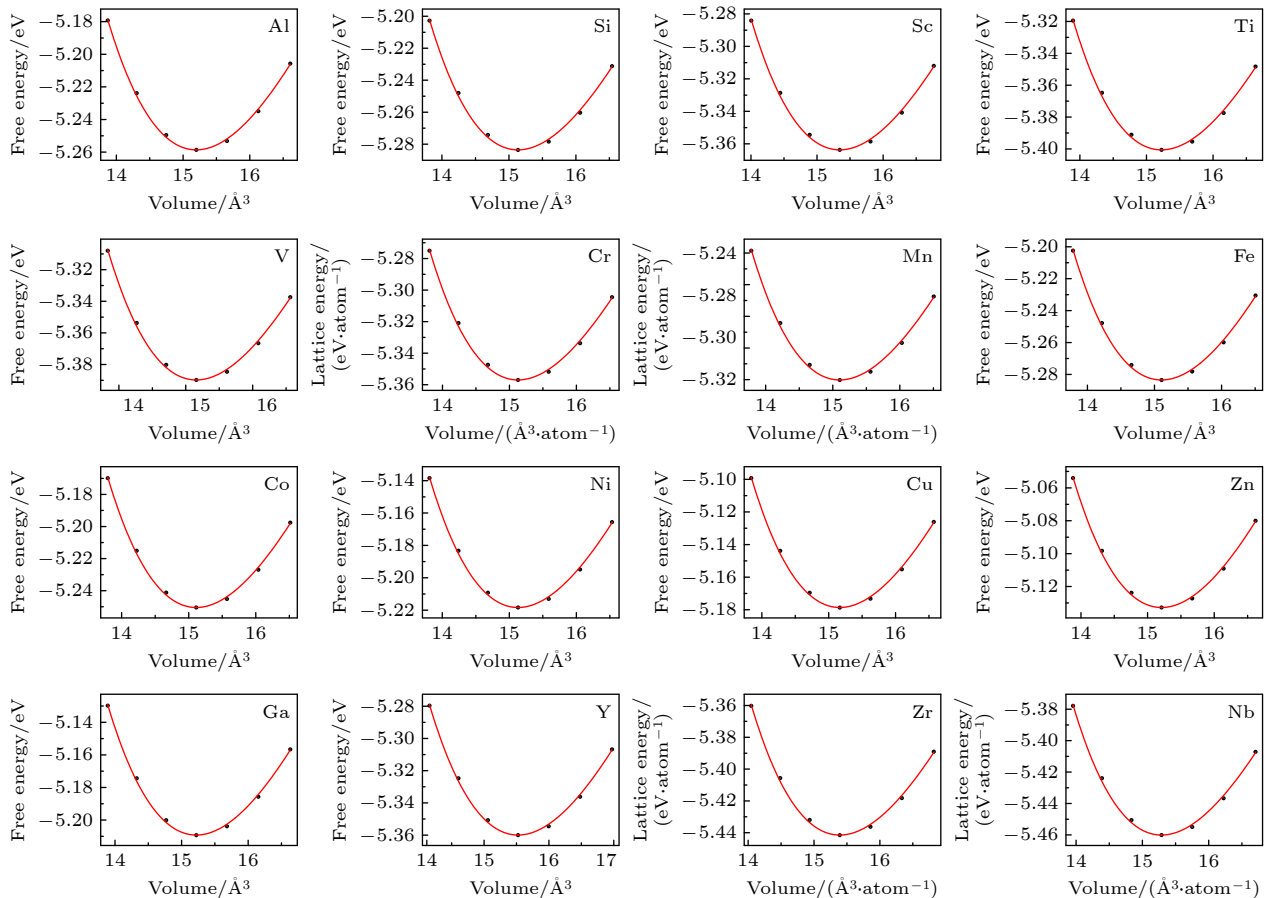


图 2 Pd<sub>31</sub>X 晶体结构示意图  
Fig. 2. Crystal structure of Pd<sub>31</sub>X.

如图 3 所示, 黑色实心点表示平衡体积下对应的能量数值, 红色实线表示采用 BM 状态方程拟合的曲线. 发现所有的点都在线上, 说明采用 BM 状态方程拟合是比较准确的, 计算的能量-体积点是合理的.

### 3.3 Pd<sub>31</sub>X 稀固溶体热力学稳定性计算

本研究采用混合焓来判断稀 Pd 基合金的热力学稳定性. 从图 4 和表 1 可以看出除 8 种合金



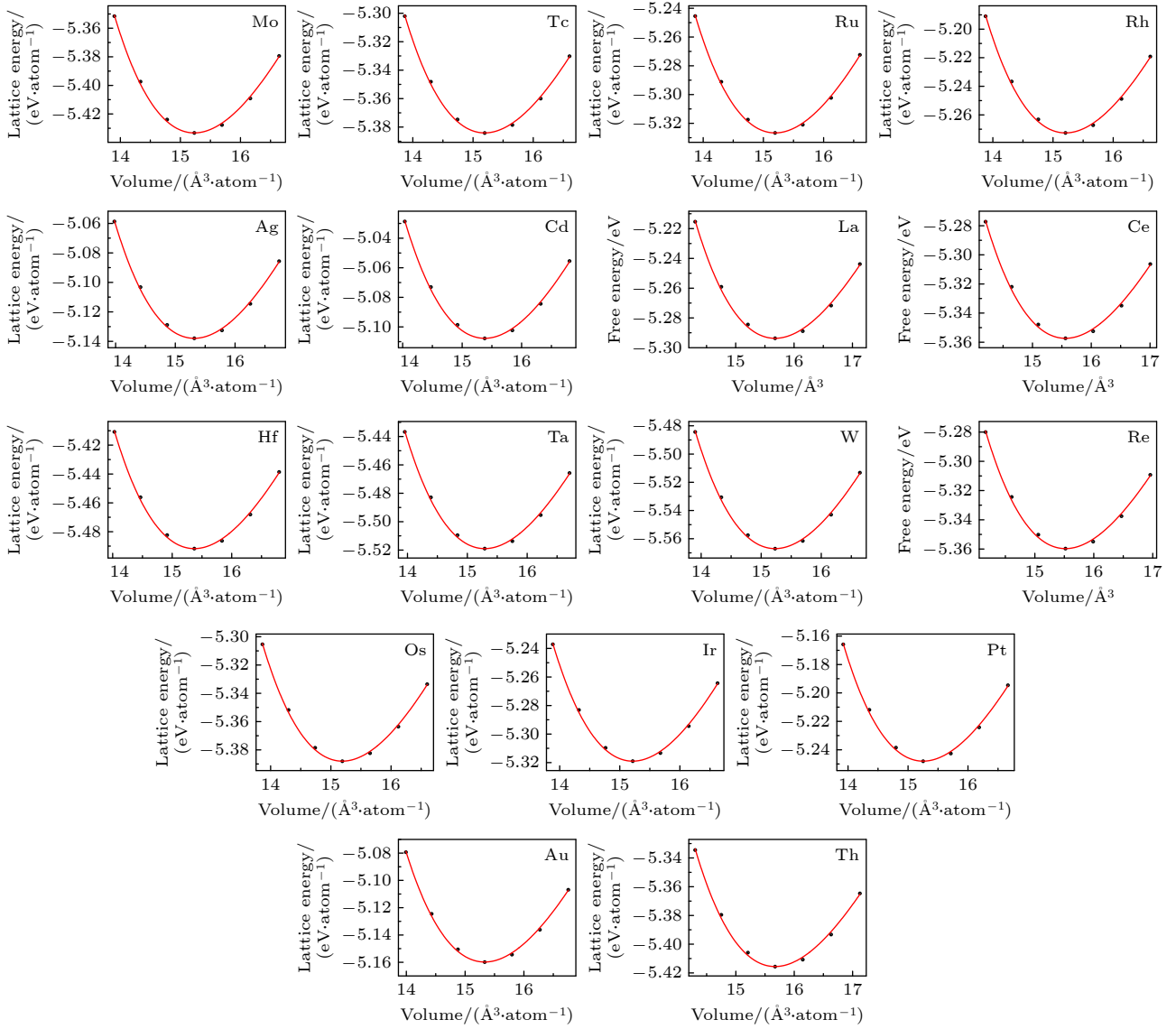


图3 Pd<sub>31</sub>X (X = Al, Si, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Ga, Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd, Ag, Cd, La, Ce, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt, Th) 的能量-体积曲线

Fig. 3. Energy-volume curves for Pd<sub>31</sub>X (X = Al, Si, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Ga, Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd, Ag, Cd, La, Ce, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt, Th).

元素 (Mn, Fe, Co, Ni, Ru, Rh, Os, Ir) 外, Pd 基稀固溶体热力学稳定, 因为其混合焓为负, 即剩余的合金元素可以溶解在 Pd 基体中. 与同时期的合金元素相比, 掺杂 IIIB 及 IVB 族合金元素 (Sc, Ti,

Y, Zr, Ce, Hf, Th) 后的混合焓较负, 这可能与最外层电子结构有关. 另外, 混合焓最大的 Pd<sub>31</sub>Fe 最不稳定, 这与电负性、原子半径和晶体结构有关. Fe 在基态为体心立方 (BCC) 结构, 溶质与 Pd 在

表1 Pd 稀固溶体原子及完全松弛下的体积 (V)、混合焓 ( $\Delta H$ ) 与零阶相互作用参数 ( ${}^0L$ )

Table 1. Volume (V), mixing enthalpy ( $\Delta H$ ), and zero-order interaction parameter ( ${}^0L$ ) for atomic and complete relaxation strategies of Pd dilute solid solution.

| Pd <sub>31</sub> X | Atom relaxing strategy                       |                                    |            | Full relaxing strategy                       |                                    |            | Solid solubility |
|--------------------|--|------------------------------------|------------|--|------------------------------------|------------|------------------|
|                    | V/(Å <sup>3</sup> ·unit cell <sup>-1</sup> ) | $\Delta H$ /(J·mol <sup>-1</sup> ) | ${}^0L$    | V/(Å <sup>3</sup> ·unit cell <sup>-1</sup> ) | $\Delta H$ /(J·mol <sup>-1</sup> ) | ${}^0L$    |                  |
| Al                 | 487.87                                       | -8564.71                           | -282911.59 | 486.32                                       | -8681.80                           | -286779.56 | 5%               |
| Si                 | 487.87                                       | -7619.23                           | -251680.33 | 484.34                                       | -7644.04                           | -252499.95 | 6.00%            |
| Sc                 | 487.87                                       | -11153.07                          | -368411.25 | 491.01                                       | -11418.30                          | -377172.35 | 10%              |
| Ti                 | 487.87                                       | -10113.64                          | -334076.21 | 487.22                                       | -10255.70                          | -338768.78 | 6%               |

表 1 (续) Pd 稀固溶体原子及完全松弛豫略下的体积 ( $V$ )、混合焓 ( $\Delta H$ ) 与零阶相互作用参数 ( ${}^0L$ )  
 Table 1 (continued). Volume ( $V$ ), mixing enthalpy ( $\Delta H$ ), and zero-order interaction parameter ( ${}^0L$ ) for atomic and complete relaxation strategies of Pd dilute solid solution.

| $\text{Pd}_{31}\text{X}$ | Atom relaxing strategy                       |   |            | Full relaxing strategy                       |   |            | Solid solubility |
|--------------------------|--|---|------------|--|---|------------|------------------|
|                          | $V/(\text{\AA}^3\cdot\text{unit cell}^{-1})$ | $\Delta H/(\text{J}\cdot\text{mol}^{-1})$ | ${}^0L$    | $V/(\text{\AA}^3\cdot\text{unit cell}^{-1})$ | $\Delta H/(\text{J}\cdot\text{mol}^{-1})$ | ${}^0L$    |                  |
| V                        | 487.87                                       | -6175.68                                  | -203996.75 | 485.01                                       | -6249.44                                  | -206433.24 | 10%              |
| Cr                       | 487.87                                       | -1968.7                                   | -65030.61  | 485.57                                       | -1897.47                                  | -62677.72  | 12%              |
| Mn                       | 487.87                                       | 1093.49                                   | 36120.32   | 483.34                                       | 962.92                                    | 31807.49   | 15%              |
| Fe                       | 487.87                                       | 2205.78                                   | 72862.04   | 483.35                                       | 2006.79                                   | 66288.66   | 10%              |
| Co                       | 487.87                                       | 1678.78                                   | 55453.81   | 483.60                                       | 1427.42                                   | 47151.00   | 3%               |
| Ni                       | 487.87                                       | 524.51                                    | 17325.86   | 484.15                                       | 270.46                                    | 8933.84    | 完全互溶             |
| Cu                       | 487.87                                       | -766.65                                   | -25324.15  | 485.30                                       | -997.37                                   | -32945.41  | 20%              |
| Zn                       | 487.87                                       | -4513.42                                  | -149088.54 | 486.68                                       | -4589.15                                  | -151590.11 | 7%               |
| Ga                       | 487.87                                       | -6361.88                                  | -210147.41 | 487.05                                       | -6472.09                                  | -213787.63 |                  |
| Y                        | 487.87                                       | -10057.30                                 | -332215.41 | 496.61                                       | -10411.01                                 | -343899.13 | 8%               |
| Zr                       | 487.87                                       | -11826.39                                 | -390652.51 | 492.53                                       | -12047.20                                 | -397946.22 | 8%               |
| Nb                       | 487.87                                       | -9494.62                                  | -313628.61 | 489.21                                       | -9616.53                                  | -317655.76 | 15%              |
| Mo                       | 487.87                                       | -5023.61                                  | -165941.15 | 487.39                                       | -5089.07                                  | -168103.51 | 23%              |
| Tc                       | 487.87                                       | -973.48                                   | -32156.31  | 486.18                                       | -1072.43                                  | -35424.78  | 25%—86%          |
| Ru                       | 487.87                                       | 1059.92                                   | 35011.71   | 486.21                                       | 995.81                                    | 32893.73   | 4%               |
| Rh                       | 487.87                                       | 814.70                                    | 26911.42   | 486.61                                       | 531.91                                    | 17570.24   | 8%               |
| Ag                       | 487.87                                       | -18.04                                    | -595.92    | 490.16                                       | -128.24                                   | -4236.11   | 完全互溶             |
| Cd                       | 487.87                                       | -3068.11                                  | -101346.48 | 492.11                                       | -3208.36                                  | -105979.25 |                  |
| La                       | 487.87                                       | -8248.78                                  | -272475.91 | 501.57                                       | -8649.21                                  | -285703.03 |                  |
| Ce                       | 487.87                                       | -11290.17                                 | -372939.69 | 497.96                                       | -11613.00                                 | -383603.62 | 17%              |
| Hf                       | 487.87                                       | -12565.04                                 | -415051.67 | 491.86                                       | -12765.53                                 | -421674.24 | 12%              |
| Ta                       | 487.87                                       | -10076.76                                 | -332858.26 | 489.28                                       | -10186.26                                 | -336475.27 | 4%               |
| W                        | 487.87                                       | -5839.20                                  | -192881.85 | 487.40                                       | -5887.76                                  | -194485.85 | 28%              |
| Re                       | 487.87                                       | -1398.74                                  | -46203.54  | 487.82                                       | -1356.74                                  | -44816.19  | 18%              |
| Os                       | 487.87                                       | 1196.45                                   | 39521.60   | 486.10                                       | 1091.13                                   | 36042.65   | 9%               |
| Ir                       | 487.87                                       | 1114.98                                   | 36830.25   | 486.88                                       | 910.96                                    | 30091.00   | 3%               |
| Pt                       | 487.87                                       | -229.64                                   | -7585.51   | 488.04                                       | -509.93                                   | -16844.30  | 完全互溶             |
| Au                       | 487.87                                       | -458.08                                   | -15131.47  | 490.65                                       | -733.56                                   | -24231.25  | 完全互溶             |
| Th                       | 487.87                                       | -12313.59                                 | -406745.80 | 501.50                                       | -12676.97                                 | -418748.79 |                  |

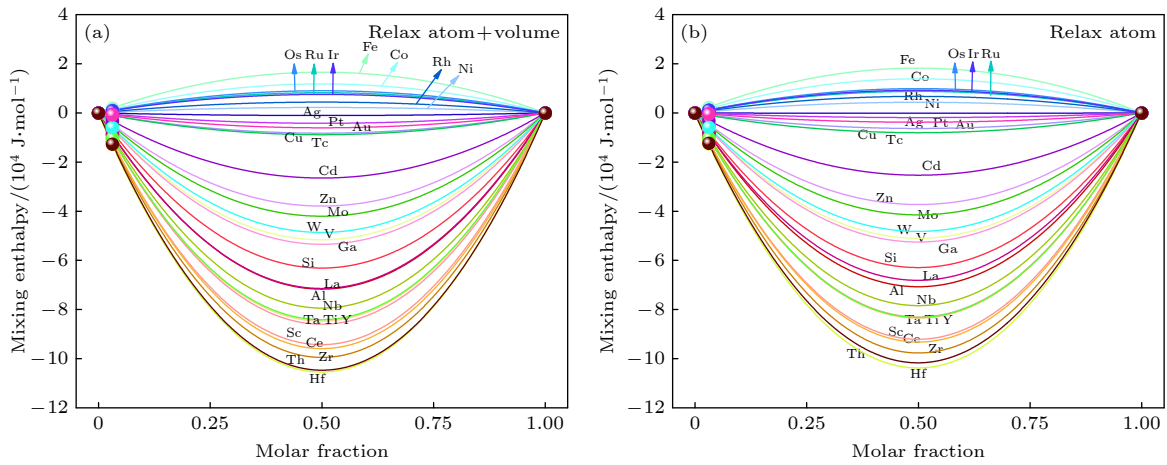


图 4 原子弛豫 (a) 和完全弛豫 (b) 策略下 Ir-X 二元合金的混合焓的三点拟合

Fig. 4. Three-point fitting of the mixing enthalpy of Ir-X binary alloys under atomic relaxation (a) and complete relaxation (b) strategies.

电负性和原子半径上的差异表明, Fe 与 Pd 的电负性和原子半径差异均较大 (电负性差异为 0.37; 原子半径之差为 11 Å). 因此, Fe 与 Pd 之间更容易形成化合物而不是固溶体. 且 Fe 和 Pd 的电子结构存在差异, Fe 是一个过渡金属, 其 3d 轨道与 Pd 的 4d 轨道不同. 这些差异可能导致它们在合金中的电子态不兼容, 从而使得合金的形成不稳定.

此外, Cu 与 Pd 的电负性和原子半径差异均较大 (电负性差异为 0.3; 原子半径差为 11 Å). 然而, Pd<sub>31</sub>Cu 是热力学稳定的, 这是因为 Cu 是面心立方结构, 以及 Pd 在基态.

### 3.4 Pd<sub>31</sub>X 稀固溶体力学性质计算

图 5 和表 2 所示为基于钯的稀固溶体的弹性性能. 根据 Born 机械稳定性准则 [39,40], 即对于立方弹性对称系统,  $C_{11} > 0$ ,  $C_{44} > 0$ ,  $C_{11} - C_{12} > 0$

以及  $C_{11} + 2C_{12} > 0$ , 通过计算得到的弹性常数证明了本研究中所有基于钯的稀固溶体均具有机械稳定性. 此外, 发现弹性模量随原子序数的增加而周期性变化, 即弹性模量先增大后减小. 由此可以发现当周期表两端的合金元素溶解到钯基体中时, Pd<sub>31</sub>X 的弹性模量低于基体. 而根据 Brańka 和 Wojciechowski [31] 的研究可知, 随着周期性变化原子半径先减小后增大的规律, 即体积先减后增, 变化规律与弹性模量随平衡体积变化趋势相反. 综上所述, 可得出平衡体积越大弹性模量越小的结论.

已知延展性/脆性行为是材料的重要机械性能, 在工程应用和其他工作条件下必须加以考虑.  $B/G$  ( $\nu$ ) 通常被用作经验指标来估计材料系统中延展性的倾向 [41].  $B/G$  值是判断材料脆性和韧性的常用指标, 即  $B/G$  高于 1.75 表示材料具有延展

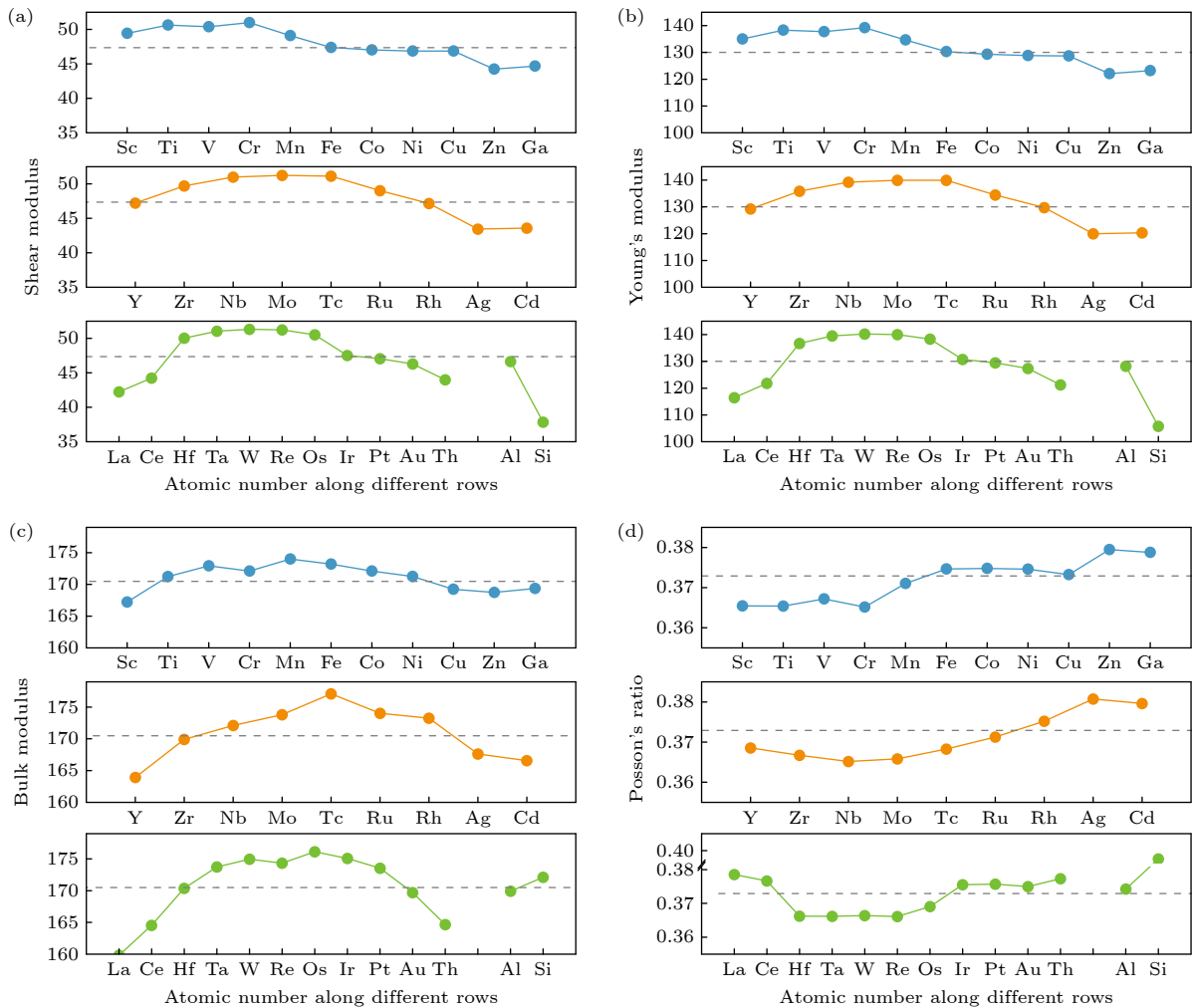


图 5 钯基稀固溶体合金的弹性特性 (a) 体模量; (b) 剪切模量; (c) 杨氏模量; (d) 泊松比

Fig. 5. Elastic properties of Pd-based dilute alloys: (a) Bulk modulus; (b) shear modulus; (c) Young's modulus; (d) Poisson's ratio.

性, 否则则为脆性. 脆性/延展性的判断也可以通过泊松比来确认, 其中临界值为 0.26(如图 5(d) 所示). 从图 5 曲线趋势可以发现周期表两侧的合金元素能提高基于钯的基稀固溶体的延展性. 此外, 其也可用于评估金属材料的加工性能<sup>[42-44]</sup>, 即比

例越大, 可加工性越好. 显然, 大多数掺杂合金的延展性优于纯钯, 而一小部分合金的延展性较差. 研究发现, 合金元素 La, Ag 和 Zn 显著提高了纯钯的延展性, 而 Cu, Hf 等合金元素则降低了纯钯的延展性.

表 2 完全弛豫下的钯基稀固溶体合金的计算弹性性能 (GPa), 包括弹性常数  $C_{ij}$ 、体模量、剪切模量、杨氏模量、 $B/G$  和泊松比

Table 2. Calculated elastic properties (GPa) of Pd-based dilute alloys in full relaxing strategy, including Elastic constants  $C_{ij}$ , bulk modulus, shear modulus, Young's modulus,  $B/G$  and Poisson's ratio.

| Pd <sub>31</sub> X | $C_{11}$ | $C_{12}$ | $C_{44}$ | $G$ | $B$ | $E$ | $B/G$ | $\nu$ | Pd <sub>31</sub> X | $C_{11}$ | $C_{12}$ | $C_{44}$ | $G$ | $B$ | $E$ | $B/G$ | $\nu$ |
|--------------------|----------|----------|----------|-----|-----|-----|-------|-------|--------------------|----------|----------|----------|-----|-----|-----|-------|-------|
| Al                 | 207      | 151      | 65       | 47  | 170 | 128 | 3.643 | 0.374 | Tc                 | 215      | 158      | 75       | 51  | 177 | 140 | 3.463 | 0.368 |
| Si                 | 197      | 160      | 61       | 38  | 172 | 106 | 4.548 | 0.398 | Ru                 | 213      | 155      | 69       | 49  | 174 | 134 | 3.550 | 0.371 |
| Sc                 | 208      | 147      | 68       | 49  | 167 | 135 | 3.383 | 0.365 | Rh                 | 213      | 153      | 64       | 47  | 173 | 130 | 3.674 | 0.375 |
| Ti                 | 212      | 151      | 71       | 51  | 171 | 138 | 3.381 | 0.365 | Ag                 | 200      | 151      | 64       | 43  | 168 | 120 | 3.859 | 0.381 |
| V                  | 212      | 153      | 73       | 50  | 173 | 138 | 3.432 | 0.367 | Cd                 | 199      | 150      | 64       | 44  | 167 | 120 | 3.820 | 0.380 |
| Cr                 | 211      | 153      | 74       | 51  | 172 | 139 | 3.375 | 0.365 | La                 | 193      | 143      | 61       | 42  | 160 | 116 | 3.784 | 0.379 |
| Mn                 | 213      | 155      | 70       | 49  | 174 | 135 | 3.544 | 0.371 | Ce                 | 199      | 147      | 64       | 44  | 165 | 122 | 3.720 | 0.377 |
| Fe                 | 212      | 154      | 66       | 47  | 173 | 130 | 3.655 | 0.375 | Hf                 | 210      | 150      | 70       | 50  | 170 | 137 | 3.405 | 0.366 |
| Co                 | 212      | 152      | 64       | 47  | 172 | 129 | 3.659 | 0.375 | Ta                 | 213      | 154      | 74       | 51  | 174 | 140 | 3.403 | 0.366 |
| Ni                 | 211      | 151      | 63       | 47  | 171 | 129 | 3.654 | 0.375 | W                  | 212      | 156      | 77       | 51  | 175 | 140 | 3.409 | 0.366 |
| Cu                 | 207      | 151      | 66       | 47  | 169 | 129 | 3.611 | 0.373 | Re                 | 213      | 155      | 75       | 50  | 174 | 140 | 3.402 | 0.366 |
| Zn                 | 203      | 152      | 64       | 44  | 169 | 122 | 3.814 | 0.379 | Os                 | 214      | 157      | 74       | 51  | 176 | 138 | 3.486 | 0.369 |
| Ga                 | 205      | 152      | 63       | 45  | 169 | 123 | 3.791 | 0.379 | Ir                 | 213      | 156      | 67       | 48  | 175 | 131 | 3.684 | 0.376 |
| Y                  | 202      | 145      | 66       | 47  | 164 | 129 | 3.471 | 0.369 | Pt                 | 214      | 153      | 63       | 47  | 174 | 129 | 3.689 | 0.376 |
| Zr                 | 210      | 150      | 70       | 50  | 170 | 136 | 3.418 | 0.367 | Au                 | 207      | 151      | 65       | 46  | 170 | 127 | 3.666 | 0.375 |
| Nb                 | 211      | 153      | 74       | 51  | 172 | 139 | 3.375 | 0.365 | Th                 | 198      | 148      | 64       | 44  | 165 | 121 | 3.742 | 0.377 |
| Mo                 | 212      | 155      | 76       | 51  | 174 | 140 | 3.393 | 0.366 |                    |          |          |          |     |     |     |       |       |

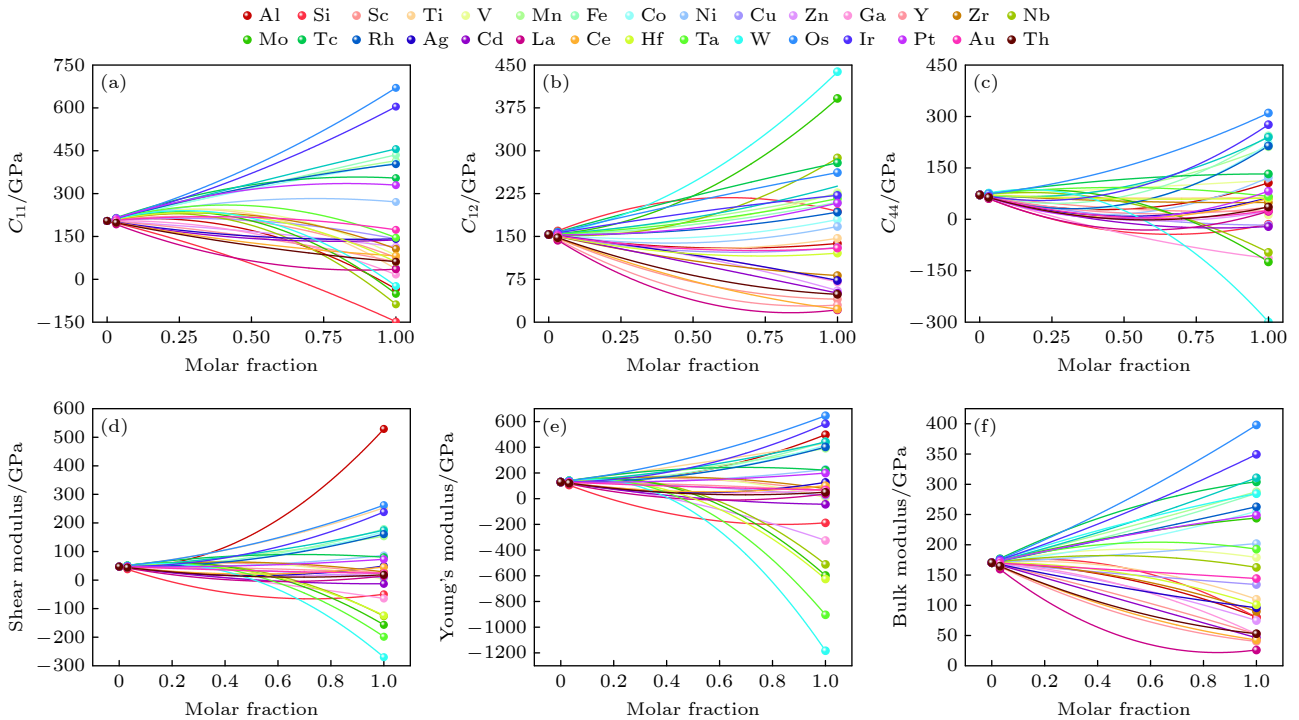


图 6 通过 R-K 多项式得到的 Pd-X 二元合金的弹性常数和弹性模量

Fig. 6. Elastic constants and elastic modulus of Pd-X binary alloys obtained through R-K polynomials.

最后, 图 6 给出了 R-K 多项式计算所得 Pd-X 二元合金的弹性常数和弹性模量, 可在今后的研究中应用于 Ir 基多组分体系. 本文所有数据集 (包括 mixing enthalpy, input\_zero.m 输入文件、C11\_C12\_C44\_B\_G\_E) 均可在科学数据银行 <https://www.doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00186> 中访问获取.

一般来说,  $B/G$  值越大, 材料的体积刚度 (即抗压能力) 越强, 而剪切刚度较弱. 这个比值对于理解材料的塑性、弹性行为和应力传导特性很有帮助. 从图 7 可以看出, Ag 的延展性和体积刚度最优. 又按性质顺序从图 7 上筛选了 6 种典型的合金元素 (Zn, Cu, Ag, La, Ce, Hf), 并采用 Mulliken 布居分析、总电荷密度和差分电荷密度分析了 6 种典型的钯固溶体的化学键合特性.

差分电荷密度即成键前后的原子电荷密度之差. 通过计算和分析差分电荷密度, 可以得到成键过程中电荷移动的趋势以及成键极化方向等性质<sup>[45,46]</sup>. 从图 8 可以看出, 合金元素的掺入改变了原电荷分布. 从 (111) 平面截面图可以看出, 基底掺杂原子附近呈现红色, Pd 原子附近呈现蓝色, 表明电子由 Pd 转移向掺杂的合金元素. 电子在

Pd 周围离域, 溶质与 Pd 之间的电子云呈现不对称分布, 表明了金属键的相互作用. 铜、金、银、硅理论模型都是面心立方结构, 但铜、金是公认的塑性材料, 而银与硅是脆性材料. 比较它们的能带结构和态密度发现, Ir, Si 的能带比 Au 和 Cu 宽, 键能强, 塑性变形困难, 而且 Ir 和 Si 的电子云存在极化现象, 较电子云分布均匀的 Au 和 Cu 位错运动

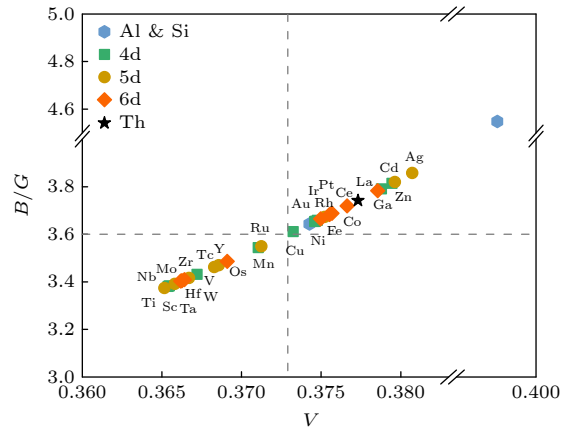


图 7 钯基稀固溶体合金在完全弛豫策略下的泊松比与  $B/G$  的关系

Fig. 7. Poisson's ratio and  $B/G$  relationship of dilute Pd-based alloys under the complete relaxation strategy in terms of computational materials science.

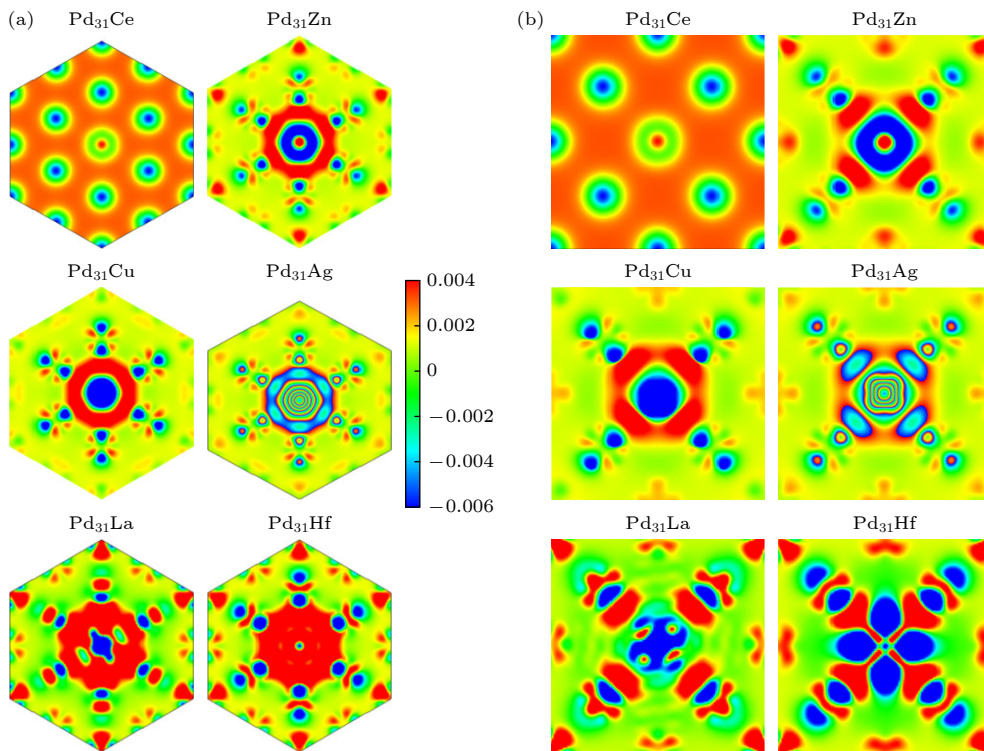


图 8 差分电荷密度 (a) (111) 面; (b) (100) 面

Fig. 8. Differential charge density: (a) (111) plane; (b) (100) plane.

更为困难. 因此认为在材料的塑性变形过程中, 若电子成非球形分布将造成变形困难<sup>[44,47]</sup>. 而电子球形分布的均匀性促使金属原子间的键合更加稳定和均匀, 有助于平衡应力集中. 这样, 在外力作用下, 原子能够相对滑移, 并且不会容易发生裂纹的形成. 而 Ag 掺杂后, Pd<sub>31</sub>Ag 的电子云呈球形分布, 因此其具有最好的延展性. 再看 (100) 平面截面图, 可以发现电子云存在明显的方向性, 证明钯固溶体存在混合键.

## 4 结 论

本文以 Pd 基稀固溶体为研究对象, 基于第一性原理计算的方法, 系统地研究了 33 种合金元素对 Pd 基稀固溶体合金性能的影响, 并筛选出具有潜力的元素. 主要结论如下:

1) 通过对比计算的混合焓发现, Mn, Fe, Co, Ni, Ru, Rh, Os 和 Ir 不容易固溶到 Pd 固溶体.

2) 通过计算 Pd 固溶体弹性模量并按元素周期表顺序作图, 对比可以发现周期表两端的合金元素固溶到 Pd 基体中时, Pd<sub>31</sub>X 的弹性模量低于基体.

3) 元素周期表两侧的合金元素能提高 Pd 固溶体的延展性, 其中合金元素 La, Ag 和 Zn 能显著提高 Pd 固溶体的延展性, 而 Cu, Hf 等合金元素则降低了 Pd 固溶体的延展性.

4) Ag 掺杂后, Pd<sub>31</sub>Ag 的电子云呈球形分布, 促使金属原子间的键合更加稳定和均匀, 具有好的延展性. Hf 掺杂后, Pd<sub>31</sub>Hf 电子云的离域程度最大, Hf 与 Pd 之间化学键方向性更强, 导致 Pd<sub>31</sub>Hf 硬度较高.

## 数据可用性声明

支撑本研究成果的数据集可在科学数据银行 <https://www.doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00186> 中访问获取.

## 参考文献

- [1] Gao S L, Fan S S, Yuan C, Cao J W 2023 *Aero Weapon*. **30** 11 (in Chinese) [高书亮, 樊思思, 袁成, 曹军伟 2023 *航空兵器* **30** 11]
- [2] Xu X, Lv J X, Wang Y, Li M, Wang Z, Wang H 2025 *Mater. Genome Eng. Adv.* **3** e69
- [3] Jiao L 2018 *M. S. Thesis* ( Beijing: Beijing University of Technology) (in Chinese) [焦磊 2018 硕士学位论文 (北京: 北京工业大学)]
- [4] Ma X D, Yu J J, Zhao T 2016 *Shandong Ind. Technol.* **19** 2 (in Chinese) [马晓东 余建军 赵涛 2016 *山东工业技术* **19** 2]
- [5] Su Y J, Fu H D, Bai Y, Jiang X, Xie J X 2020 *Acta Metall. Sin.* **56** 1313 (in Chinese) [宿彦京, 付华栋, 白洋, 姜雪, 谢建新 2020 *金属学报* **56** 1313]
- [6] Wang Z R, Qin M Y, Zhang P, Xu Y G, Que S T, Yan F, Xiang X D 2025 *Mater. Genome Eng. Adv.* **3** e70010
- [7] Wang H, Xiang Y, Xiang X D, Chen L Q 2015 *Sci. Technol. Rev.* **33** 13 (in Chinese) [汪洪, 向勇, 项晓东, 陈立泉 2015 *科技导报* **33** 13]
- [8] Guo Z K, Li R, He X F, Guo J, Ju S H 2024 *Mater. Genome Eng. Adv.* **2** e73
- [9] Meng H Y, Huang J, Zhao T H, Zhang X Y, Tong Y, Qu J L, Li W D, Jiang L, Meng F C, Chen S Y 2025 *Mater. Genome Eng. Adv.* **9** e70002
- [10] Wang W Y, Tang B, Shang S L, Wang J, Li S, Wang Y, Zhu J, Wei S, Wang J, Darling K A, Mathaudhu S N, Wang Y, Ren Y, Hui X D, Kecskes L J, Li J, Liu Z K 2019 *Acta Mater.* **170** 231
- [11] Xia Y X, He J G, Chen N F, Chen J K 2024 *Rare Metals* **43** 3460
- [12] Chong X Y, Paz Soldan Palma J, Wang Y, Shang S L, Drymiotis F, Ravi V A, Star K E, Fleurial J P, Liu Z K 2021 *Acta Mater.* **217** 117169
- [13] Hu Y C, Tian J 2023 *J. Mater. Informat.* **3** 1
- [14] Wang W Y, Gan B, Lin D, Wang J, Wang Y, Tang B, Kou H C, Shang S L, Wang Y, Gao X Y, Song H F, Hui X D, Kecskes L J, Xia Z H, Dahmen K A, Liaw P K, Li J S, Liu Z K 2020 *J. Mater. Sci. Technol.* **53** 192
- [15] Zou C, Li J, Wang W Y, Zhang Y, Lin D, Yuan R, Wang X, Tang B, Wang J, Gao X Y, Kou H, Hui X D, Zeng X Q, Ma Q, Song H F, Liu Z K, Xu D S 2021 *Acta Mater.* **202** 211
- [16] Liao M Q, Liu Y, Min L, Lai Z H, Han T Y, Yang D, Zhu J C 2018 *Intermetallics*. **101** 152
- [17] Birch F 1947 *Phys. Rev.* **71** 809
- [18] Shang S L, Wang Y, Kim D, Liu Z K 2010 *Comput. Mater. Sci.* **47** 1040
- [19] Zhou Y X 2021 *Ph. D. Dissertation* ( Kunming: Kunming University of Science and Technology) (in Chinese) [周云轩 2021 博士学位论文 (昆明: 昆明理工大学)]
- [20] Chong X Y, Wei Y, Liang Y X, Shang S L, Li C, Zhang A M, Wei Y, Gao X Y, Wang Y, Feng J, Chen L, Song H F, Liu Z K 2023 *J. Mater. Inf.* **3** 21
- [21] Teter D M, Gibbs G V, Boisen M B Jr, Allan D C, Teter M P 1995 *Phys. Rev. B* **52** 8064
- [22] Huang Z H, Liu G T, Zhang B F, Yan M F, Fu Y D 2020 *Phys. Lett. A* **384** 126797
- [23] Su Y, Liang C X, Wang D 2023 *J. Mater. Inf.* **3** 14
- [24] Duan Y H, Sun Y, Peng M J, Zhou S G 2014 *J. Alloys Compd.* **595** 14
- [25] Tang B Y, Chen P, Li D L, Yi J X, Wen L, Peng L M, Ding W J 2010 *J. Alloys Compd.* **492** 416
- [26] Wang Y, Liao M Q, Bocklund B J, Gao P, Shang S L, Kim H J, Beese A M, Chen L Q, Liu Z K 2021 *Calphad* **75** 102355
- [27] Liu Y, Lu Y H, Wang W, Li J, Zhang Y, Yin J, Pan X Q, Chen Y, Li J S, Song H F 2023 *J. Mater. Inf.* **3** 17
- [28] Chen R T, Li E, Zou Y 2024 *J. Mater. Inf.* **4** 26
- [29] Perdew J P, Ruzsinszky A, Csonka G I, Vydrov O A, Scuseria G E, Constantin L A, Zhou X, Burke K 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 136406

- [30] Vega L, Vines F 2020 *J. Comput. Chem.* **41** 2598
- [31] Tretiakov K V, Wojciechowski K W 2008 *J. Non-Cryst. Solids* **354** 35
- [32] Ji H, Yin J, Wei G, Lai W S, Liu B X, Liu J B 2023 *Rare Metals* **42** 1663
- [33] Li R Y, Duan Y H 2016 *Philos. Mag.* **96** 972
- [34] Ozisik H B, Deligoz E, Ozisik H, Ateser E 2020 *Mater. Res. Express* **7** 025004
- [35] Kenneth Barbalace <https://EnvironmentalChemistry.com/yogi/periodic/Pd.html> [2025-10-12]
- [36] Samsonov G V 1968 *Handbook of the Physicochemical Properties of the Elements* (New York: Springer New)
- [37] Peng H J, Xie Y Q, Tao H J 2006 *Trans. Nonferrous Met. Soc. China* **16** 100 (in Chinese) [彭红建, 谢佑卿, 陶辉锦 2006 中国有色金属学报 **16** 100]
- [38] Duan Y J, Qiao J C 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 086101 (in Chinese) [段亚娟, 乔吉超 2022 物理学报 **71** 086101]
- [39] Zhang X Z, Wang D T, Nagaumi H, Wang R, Wu Z B, Zhang M H, Gao D S, Chen H, Wang P F, Zhou P F, Zhou Y X, Wang Z X, Li T L 2025 *Mater. Genome Eng. Adv.* **3** e70008
- [40] Born M 1939 *J. Chem. Phys.* **7** 591
- [41] Wang G C, Jiang Y H, Li Z L, Chong X Y, Feng J 2021 *Ceram. Int.* **47** 4758
- [42] Xu X W, Fu K, Li L L, Lu Z M, Zhang X H, Fan Y, Lin J, Liu G D, Luo H Z, Tang C C 2013 *Physica B* **419** 105
- [43] Tan F Q, Bai Q G, Yu B, Wang J F, Zhang Z H 2024 *Rare Metals* **43** 5305
- [44] Yan Z, Chen J C, Lv L U 2015 *Mater. Rev.* **29** 150 (in Chinese) [庄严, 陈敬超, 吕连灏 2015 材料导报 **29** 150]
- [45] Li W, Zhang Y L, Cheng X, Wang J Q, Yang B, Guo H G 2022 *Sep. Purif. Technol.* **282** 119967
- [46] Chen F Q, Ding J Q, Guo K Q, Yang L, Zhang Z G, Yang Q W, Yang Y W, Bao Z B, He Y, Ren Q L 2021 *Angew. Chem. Int. Ed.* **60** 2341
- [47] Ma W, Huang H, Ding W, Guo S, Liu H X, Cheng X N 2023 *Rare Metals* **42** 1670

SPECIAL TOPIC—Atomic, molecular and materials properties data

# Influence of alloying elements on the thermodynamic and elastic properties of palladium based alloys and database construction\*

ZHU Hanyu<sup>1)</sup> CHONG Xiaoyu<sup>1)†</sup> GAO Xingyu<sup>2)‡</sup> WU Haijun<sup>3)</sup>  
LI Zulai<sup>1)</sup> FENG Jing<sup>1)</sup> SONG Haifeng<sup>2)</sup>

1) (*Faculty of Materials Science and Engineering, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650093, China*)

2) (*Beijing Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100098, China*)

3) (*State Key Laboratory of Precious Metal Functional Materials, Kunming 650106, China*)

( Received 6 August 2025; revised manuscript received 19 October 2025 )

## Abstract

The lower friction coefficient and superior mechanical properties of palladium (Pd) alloys make them potentially advantageous for use in high-precision instruments and devices that require long-term stable performance. However, the high cost of raw materials and experimental expenses result in a lack of fundamental data, which hinders the design of high-performance Pd alloys. Therefore, in this study, first-principles calculations are used to determine the lattice constant and elastic modulus of Pd. A model of dilute solid solutions formed by Pd with 33 alloying elements including Al, Si, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, and others, is established. The mixing enthalpy, elastic constant, and elastic modulus are calculated. The results show that, all other alloying elements except for Mn, Fe, Co, Ni, Ru, Rh, Os, and Ir can form solid solutions with Pd. Alloying elements from both sides of the periodic table enhance the ductility of Pd solid solutions, with La, Ag, and Zn having the most significant effects, while Cu and Hf reduce the ductility of Pd. Differential charge density analysis indicates that the electron cloud formed after doping with Ag is spherically distributed, thereby improving ductility. After doping with Hf, the degree of delocalization around the atoms is maximized, indicating a strong ionic bond between Hf and Pd, which results in a higher hardness of Pd<sub>31</sub>Hf. The datasets presented in this paper are openly available at <https://www.doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00186>.

**Keywords:** first-principles, Pd-base alloy, mixing enthalpy, elastic modulus

**PACS:** 62.20.-x, 05.70.Ce, 71.20.-b, 81.30.-t

**DOI:** [10.7498/aps.74.20251058](https://doi.org/10.7498/aps.74.20251058)

**CSTR:** [32037.14.aps.74.20251058](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20251058)

\* Project supported by the Key Research and Development Program of Yunnan Province, China (Grant No. 202403AA080016).

† Corresponding author. E-mail: [xiaoyuchong@kust.edu.cn](mailto:xiaoyuchong@kust.edu.cn)

‡ Corresponding author. E-mail: [gao\\_xingyu@iapcm.ac.cn](mailto:gao_xingyu@iapcm.ac.cn)

合金元素对钯基合金热力学和弹性性能的影响规律研究以及数据库构建

朱晗毓 种晓宇 高兴誉 武海军 李祖来 冯晶 宋海峰

**Influence of alloying elements on the thermodynamic and elastic properties of palladium based alloys and database construction**

ZHU Hanyu CHONG Xiaoyu GAO Xingyu WU Haijun LI Zulai FENG Jing SONG Haifeng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 246201 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20251058

CSTR: 32037.14.aps.74.20251058

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20251058>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

合金元素Sn, Nb对锆合金腐蚀氧化膜相稳定性影响的第一性原理研究

First-principles study on effects of alloying elements Sn and Nb on phase stability of corrosion oxide films of zirconium alloys

物理学报. 2024, 73(15): 157101 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240602>

胶体聚合物弹性模量的微观理论: 键长的效应

Microscopic theory for elastic modulus of colloidal polymers: Effect of bond length

物理学报. 2021, 70(12): 126401 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210128>

第一性原理计算研究Cr掺杂CuZr<sub>2</sub>的电子结构、弹性性质和硬度

First-principles study of electronic structure, elastic properties and hardness of Cr-doped CuZr<sub>2</sub>

物理学报. 2025, 74(13): 137101 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250264>

第一性原理研究合金元素对逆变奥氏体在Cu沉淀上异质形核的影响

First-principles study on effect of alloying elements on heterogeneous nucleation of reverse austenite on Cu precipitation

物理学报. 2022, 71(8): 086301 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212144>

卷积神经网络辅助无机晶体弹性性质预测

Machine learning-driven elasticity prediction in advanced inorganic materials via convolutional neural networks

物理学报. 2025, 74(12): 120702 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250127>

元素掺杂对储氢容器用高强钢性能影响的第一性原理和分子动力学模拟

First principles and molecular dynamics simulations of effect of dopants on properties of high strength steel for hydrogen storage vessels

物理学报. 2024, 73(6): 067101 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231735>