# 微量硼元素对 Pt<sub>3</sub>AI 合金结构与力学性能的影响

潘 勇<sup>1</sup>,管伟明<sup>2</sup>,薛 屺<sup>1</sup>,郭俊梅<sup>2</sup>,闻 明<sup>2</sup>,谭志龙<sup>2</sup>
(1. 西南石油大学 材料科学与工程学院,成都 610500;

2. 昆明贵金属研究所 稀贵金属综合利用新技术国家重点实验室, 昆明 650106)

摘 要:采用第一性原理方法研究了微量 B 元素对 Pt<sub>3</sub>Al 合金的结构稳定性和力学性能的影响,详 细讨论了四面体间隙位置和八面体间隙位置两种添加方式。计算了它们的晶格参数、弹性常数、弹 性模量和电子结构等性质。计算结果表明,微量 B 元素引起 Pt<sub>3</sub>Al 合金的晶格膨胀。同时, B 在四 面体位置比八面体位置要稳定存在。弹性模量的计算表明, B 在四面体位置削弱了 Pt<sub>3</sub>Al 合金的抗 体积变形能力、抗剪切变形能力和弹性硬度。通过电子结构计算表明,微量 B 元素在 Pt<sub>3</sub>Al 合金中 形成了 Pt-B 键和 Al-B 键,削弱了 Pt-Al 金属键的键结合能力。

关键词: Pt<sub>3</sub>Al 合金; 弹性模量; 电子结构; 第一性原理

中图分类号: O521.2<sup>+</sup>1 文献标识码: A 文章编号: 1004-0676(2015)S1-0014-06

#### Effect of Boron on Structure and Mechanical Properties of Pt<sub>3</sub>Al Alloy from First-principles

PAN Yong<sup>1</sup>, GUAN Weiming<sup>2</sup>, XUE Qi<sup>1</sup>, GUO Junmei<sup>2</sup>, WEN Ming<sup>2</sup>, TAN Zhilong<sup>2</sup>

(1. School of Materials Science and Engineering, Southwest Petroleum University, Chengdu 610500, China;

2. State Key Laboratory of Advanced Technologies for Comprehensive Utilization of Platinum Metals, Kunming Institute of Precious Metals, Kunming 650106, China)

**Abstract:** The effect of B element on structural stability and mechanical properties of  $Pt_3Al$  alloy was investigated by using first-principles calculations. Two different B doping such as tetrahedral interstice (TI) and octahedral interstice (OI) were considered in detail. The lattice parameters, elastic constants, elastic modulus and electronic structure were calculated. The calculated results have shown that the doped B results in lattice expansion for  $Pt_3Al$  alloy, and the TI site is more stable than that of OI site. The calculated elastic modulus indicated that the doped B weakens the volume and shear deformation resistances and reduces the elastic stiffness. The calculated electronic structure has shown that Pt-B and Al-B bonds were formed in  $Pt_3Al$  alloy and weaken the bond strength of Pt-Al metallic bond.

Key words: Pt<sub>3</sub>Al alloy; Elastic modulus; Electronic structure; First-principles

铂族金属及合金因其高强度、高硬度、高温抗 蠕变性能、抗氧化性以及抗腐蚀性等优异的性能, 可作为替代镍基超合金的潜在高温结构材料应用于 航天航空发动机的热端部件<sup>[1-4]</sup>。在铂族合金当中, Pt-Al 合金由于其优异的抗氧化性能而受到广泛地 关注。研究表明,当 Pt-Al 合金置于高温环境时, Pt-Al 合金中的铝原子容易与空气中的氧发生氧化 反应,在 Pt-Al 合金的表面形成致密的 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 薄膜, 从而增强铂基合金的抗氧化行为<sup>[5,6]</sup>。并且这类合金 因其独特的共格  $\gamma/\gamma$  相结构具有较高的强度,计算 表明 Pt<sub>3</sub>Al 的体弹性模量和剪切模量分别达到了 217 和 89 GPa<sup>[7]</sup>,而 PtAl<sub>2</sub>的体弹性模量和剪切模量 分别为 193 和 54 GPa<sup>[8]</sup>。

过去关于 Pt-Al 合金的研究, 主要集中在它的

收稿日期: 2015-08-21

基金项目: 国家自然科学基金(No. 51274170), 云南省应用基础研究基金项目(2009CD134)。

第一作者:潘 勇,男,博士,副教授,研究方向:新型金属功能材料的设计与合成。E-mail: y\_pan@ipm.com.cn

显微组织结构和力学性能的研究。在微观结构方面, 早期Kim等人<sup>[9]</sup>采用第一性原理和CALPHAD相图 软件相结合的方法,研究了 Pt-Al 合金的相结构以 及热力学性能。研究表明,在 Pt-Al 二元合金中, 存在有 Pt<sub>2</sub>Al、Pt<sub>5</sub>Al<sub>3</sub>、PtAl、Pt<sub>2</sub>Al<sub>3</sub>和 PtAl<sub>2</sub>等物相 结构。在力学性能方面, Wenderoth 等人<sup>[10]</sup>研究了 铂基超合金中 γ 相在不同体积分数下的高温强度, 他们发现,随着温度的增高,铂基合金界面处的 γ/γ` 相逐渐减少,高温强度也相应地降低,显然,铂基 合金的强度与 γ/γ`相的浓度有关。2007 年, Wenderoth 等人<sup>[6]</sup>进一步研究了掺杂元素对 Pt-Al-Cr-Ni 四元合金的高温强度以及抗氧化行为的影响。 研究表明, Mo、Re 和W等元素可以增强这种铂基 四元合金的高温强度,但 Ru 元素对它的力学性能 并没有影响。注意的是,随着 Re 元素的增多,这 种四元合金的抗氧化能力逐渐增强。后来, Okamoto 等人<sup>[11]</sup>研究了面心结构 Pt<sub>3</sub>Al 的塑性变形,他们发 现 Pt<sub>3</sub>Al 在高温下主要是沿着(001)面和(111)面进行 滑移,表现出较好地延展性。综上所述,合金元素 对 Pt<sub>3</sub>Al 合金的力学性能影响极其显著,因此,探 索合金元素与 Pt<sub>3</sub>Al 合金力学性能之间的关系,对 于促进这种合金的发展具有非常重要的意义。

在本文中,采用第一性原理方法,研究了 B 元 素对于 Pt<sub>3</sub>Al 合金的结构稳定性以及力学性能的影 响。考虑到 B 在 Pt<sub>3</sub>Al 合金中的两种添加位置包括 四面体间隙位置和八面体间隙位置,计算了它们的 掺杂形成能、弹性常数、弹性模量以及电子结构等 相关性质。

种物相结构。研究表明,随着温度的降低,Pt<sub>3</sub>Al 结构由面心结构逐渐向四方结构转变[12]。考虑到 Pt<sub>3</sub>Al 合金的工作环境主要是集中在高温环境中,因 此,在本文中我们主要研究了 B 原子对面心结构 Pt<sub>4</sub>Al 的结构稳定性和力学性能的影响。该结构的空 间群为Pm-3m, 晶格参数为 a=3.876 Å<sup>[13]</sup>, Pt<sub>3</sub>Al 合 金的晶体结构如图 1(a)所示,图中,黑色原子为 Pt 原子, 深灰色原子为 Al 原子。从图中可以看出, Al 原子占据晶体的顶点位置, Pt 原子占据晶体的面 心位置。从结构特征考虑,在面心结构的 Pt<sub>3</sub>Al 合 金中,存在大量的晶体缺陷。而 B 原子的原子半径 远远小于 Pt 原子和 Al 原子的原子半径,根据添加 形式, B 原子的添加是以间隙添加为主。因此, 我 们分别考虑了 B 原子在八面体间隙位置 (如图 1(b) 所示)以及B原子在四面体间隙位置 (如图1(c)所示) 两种位置。两种模型分别标注为 B1 和 B2。

本文中所有的计算均是采用密度泛函理论的第 一性原理方法,在 Materials Studio 软件中的 CASTEP 模块中完成<sup>[14]</sup>。该软件是基于第一性原理 的平面波赝势方法,通过周期性边界条件,将晶体 的波函数由平面波基组展开,从而获得晶体的相关 物理性质。在基态的计算中,电子和离子实之间的 相互作用势是采用 Ultrasoft-Pseudopotentials 方法进 行描述[15]。电子之间的交互关联函数采用的是广义 梯度近似 GGA 中的 PW91 泛函<sup>[16]</sup>。在计算中,平 面波的截止能取为 400 eV, Brillouin 区的 K点选取 为10×10×10。在计算 Pt<sub>3</sub>Al 合金添加 B 元素的力学 性质和物理性质之前,首先对 Pt<sub>3</sub>Al 合金和 Pt<sub>3</sub>Al 合金添加 B 原子的晶体结构进行结构优化。结构优 化采用的是 Pulay 密度混合方案, SCF 误差为 2.0×10<sup>-6</sup> eV。在优化过程中, 晶胞的形状、晶格参 数乃至原子的坐标位置始终处于驰豫状态。

(c) B 在四面体间隙位置



# 1 理论计算部分

根据文献报道,对于 Pt<sub>3</sub>Al 合金而言,存在多

(a) Pt<sub>3</sub>Al 的晶体结构

(b) B 在八面体间隙位置

图 1 Pt<sub>3</sub>Al 及 B 在 Pt<sub>3</sub>Al 合金中分布的晶体结构图 Fig.1 Crystal structure of Pt<sub>3</sub>Al and Pt<sub>3</sub>Al with doping B atom

## 2 结果与讨论

#### 2.1 结构稳定性

在研究 B 元素对 Pt<sub>3</sub>Al 合金的力学性能影响之前,首先有必要研究 B 原子在 Pt<sub>3</sub>Al 合金中是否稳定存在。因此,有必要先讨论 B 原子在 Pt<sub>3</sub>Al 合金中的稳定性。一般而言,可通过掺杂形成能来判断合金元素在基体中是否稳定存在。掺杂形成能的计算公式如下所示:

 $E_{f}=E^{B}_{Pt_{3}Al} - E_{Pt_{3}Al} - E_{B}$  (1) 式中,  $E^{B}_{Pt_{3}Al}$ 、  $E_{Pt_{3}Al}$  和  $E_{B}$ 分别表示为采用第一性原 理计算得到  $Pt_{3}Al$  合金添加 B 原子,  $Pt_{3}Al$  合金以及 B 原子的晶胞总能。

表1为采用第一性原理计算得到Pt<sub>3</sub>Al 合金及B 原子在 Pt<sub>3</sub>Al 合金中两种间隙位置的晶格参数、晶 胞体积以及掺杂形成能。从表1中可以发现,理论 计算得到 Pt<sub>3</sub>Al 的晶格参数为 *a*=3.994 Å,略大于实 验测量值和之前的理论计算值<sup>[13,17]</sup>,说明计算结果 合理可信。

当在 Pt<sub>3</sub>Al 合金中添加 B 原子时,发现添加 B 原子之后 Pt<sub>3</sub>Al 合金的晶格参数要大于未添加 B 原 子的 Pt<sub>3</sub>Al 合金的晶格参数。很显然, 当在 Pt<sub>3</sub>Al 合金中添加 B 原子后, 会引起初始晶体结构的晶格 膨胀。值得注意的是, 当 B 原子加入到八面体间隙 位置时, Pt<sub>3</sub>Al 合金仍保留面心结构。从结构特征考 虑,位于八面体间隙位置的 B 原子,与周围的 Pt 原子和 AI 原子均是等同杂化,从而导致晶格参数沿 着 a-轴、b-轴和 c-轴同时膨胀。当 B 原子位于 Pt<sub>3</sub>Al 合金的四面体间隙时,如图 1(c)所示, B 原子将与 近邻的 Pt、Al 原子杂化,从而导致 Pt<sub>3</sub>Al 合金不均 匀的晶格膨胀。从表 1 中, 计算得到 Pt<sub>3</sub>Al 合金四 面体添加 B 原子的晶格参数分别为: a=4.276 Å、 b=4.278 Å和 c=4.275 Å。因此, B原子导致 Pt<sub>3</sub>Al 合金沿着 a-轴和 c-轴的局域杂化要强于沿着 b-轴的 局域杂化。进一步分析可以发现, B 原子在四面体 间隙位置的晶格参数要大于在八面体间隙位置的晶 格参数。

为了判断 B 原子在 Pt<sub>3</sub>Al 合金中是否稳定存在, 接下来我们计算了它的掺杂形成能。从表 1 中可以 发现, B 原子在八面体间隙位置和四面体间隙位置 的掺杂形成能分别为-1.074 eV/atom 和-1.243 eV/atom,说明 B 原子是可以在 Pt<sub>3</sub>Al 合金中稳定存 在的。特别是, B 原子在四面体间隙位置的掺杂形 成能比在八面体间隙位置的掺杂形成能小了 0.169 eV/atom,说明 B 原子在 Pt<sub>3</sub>Al 合金中的位于四面体间隙位置要比八面体间隙位置稳定。

## 表 1 Pt<sub>3</sub>Al 合金及 Pt<sub>3</sub>Al 合金添加 B 元素的晶格参数、晶 胞体积和掺杂形成能

Tab.1 The calculated lattice parameters, volume and doped formation energy ( $E_t$ ) of Pt<sub>3</sub>Al alloy and Pt<sub>3</sub>Al alloy with doping B

相	方法	a /Å	b/Å	c/Å	V/Å <sup>3</sup>	E <sub>f</sub> /(eV/atom)
Pt <sub>3</sub> Al	Cal	3.994	/	/	61.4	/
	Exp <sup>[13]</sup>	3.876	/	/	/	/
	Theo <sup>[17]</sup>	3.944	/	/	/	/
B1	Cal	4.208	/	/	74.5	-1.074
B2	Cal	4.276	4.278	4.275	73.8	-1.243

#### 2.2 力学性能

从掺杂形成能的计算结果可以判断, B 元素可 稳定存在于 Pt<sub>3</sub>Al 合金中。接下来,我们将分析 B 元素对 Pt<sub>3</sub>Al 合金力学性能的影响。一般而言,力 学性能可通过弹性常数(*C<sub>ij</sub>*)、体弹性模量(*B*)、剪切 模量(*G*)和杨氏模量(*E*)等来判断,而固体的弹性模 量又是通过其弹性常数获得。对于固体而言,弹性 常数通常被定义为应力对应变的比值,因此,固体 的弹性常数公式可以表达为:

$$C_{ijkl} = \frac{\partial^2 E}{\partial \delta_{ij} \partial \delta_{kl}}$$
(2)

考虑到微应变,固体的晶胞总能量可以通过泰勒公式展开:

$$E(V) = E(V_0, 0) + V_0 \sum_{i,j} \delta_{ij} \delta_{ij} + \frac{V_0}{2} \sum_{i,j,k,l} C_{ijkl} \delta_{ij} \delta_{kl} + \dots$$
(3)

式(3)中,E为第一性原理计算的晶胞总能量, $\delta$ 为 微应变。

在分析 B 元素对 Pt<sub>3</sub>Al 合金的力学性能影响之前,首先有必要考虑在 B 添加之后晶体的力学稳定性。对于面心结构而言,有三个独立的常数,C<sub>11</sub>、C<sub>12</sub>和 C<sub>44</sub>。如果面心结构要稳定存在,必须要满足以下条件<sup>[18]</sup>:

 $C_{11} > 0, C_{44} > 0, C_{11} > C_{12}, C_{11} + 2C_{12} > 0$  (4)

必须提及的是,当 B 原子位于 Pt<sub>3</sub>Al 合金的四 面体间隙位置时,晶体结构由面心结构向正交结构 转变。因此,对于正交结构,存在有六个独立的弹 性常数,它们分别为 C<sub>11</sub>、C<sub>12</sub>、C<sub>13</sub>、C<sub>33</sub>、C<sub>44</sub>和 C<sub>66</sub>。 如果正交结构要力学稳定存在,则弹性常数必须满 足以下条件:

 $[C_{11}>0, C_{33}>0, C_{44}>0, C_{66}>0,$ 

$$(C_{11}-C_{12})>0, (C_{11}+C_{33}-2, C_{13})>0,$$

2(C<sub>11</sub>+ C<sub>12</sub>)+C<sub>33</sub>+4C<sub>13</sub>>0] (5) 表 2 为第一性原理计算得到 Pt<sub>3</sub>Al 合金以及 B 原子在 Pt<sub>3</sub>Al 合金两种间隙位置处的弹性常数值。

# 表 2 Pt<sub>3</sub>Al 合金及 B 原子位于 Pt<sub>3</sub>Al 合金间隙处的弹性常数值(C<sub>ii</sub>)

Tab.2 The calculated elastic constants (GPa) of Pt<sub>3</sub>Al alloy and Pt<sub>3</sub>Al alloy with doping B

相	方法	$C_{11}$	<i>C</i> <sub>12</sub>	C 13	C 33	$C_{44}$	$C_{66}$
Pt <sub>3</sub> Al	Cal	306	183	/	/	105	/
	Theo <sup>[7]</sup>	332	193	/	/	72	/
B1	Cal	105	44	/	/	-31	/
B2	Cal	282	166	168	299	104	58

从表 2 中可以发现, 第一性原理计算得到 Pt<sub>3</sub>Al 合金的弹性常数与其它理论计算值比较吻合。进一 步发现, B 原子在 Pt<sub>3</sub>Al 合金中八面体间隙位置的 弹性常数不满足 Born 力学稳定性标准, 说明 B 原 子在 Pt<sub>3</sub>Al 合金八面体间隙位置是力学不稳定存在 的。但是 B 原子在 Pt<sub>3</sub>Al 合金四面体间隙位置的弹 性常数则满足 Born 力学稳定性标准, 因此, 可以得 出结论, 当在 Pt<sub>3</sub>Al 合金中添加 B 原子时, 主要是 在 Pt<sub>3</sub>Al 合金的四面体间隙位置稳定存在, 这一结 果与掺杂形成能的计算是一致的。

进一步分析发现,当在 Pt<sub>3</sub>Al 合金中添加 B 原 子时,弹性常数 C<sub>11</sub>和 C<sub>44</sub>均小于未添加 B 原子的 Pt<sub>3</sub>Al 合金,说明 B 原子的添加削弱了 Pt<sub>3</sub>Al 合金的 抗变形能力以及抗剪切变形能力。当 B 原子位于四 面体间隙位置,理论计算得到弹性常数 C<sub>11</sub>为 282 GPa,比弹性常数 C<sub>33</sub>(299 GPa) 小了 17 GPa,说 明当在 Pt<sub>3</sub>Al 合金中的四面体间隙位置添加 B 原子 时,沿着 *a*-轴的抗变形能力要弱于沿着 *c*-轴的抗变 形能力。

表 3 为第一性原理计算得到 Pt<sub>3</sub>Al 合金以及 Pt<sub>3</sub>Al 合金添加 B 元素的体弹性模量、剪切模量、

杨氏模量、泊松比和 B/G 比值。

#### 表 3 Pt<sub>3</sub>Al 合金及 Pt<sub>3</sub>Al 合金添加 B 元素的体弹性模量 B、 剪切模量 G、杨氏模量 E、泊松比 δ 和 B/G 比值

Tab.3 The calculated bulk modulus (B), shear modulus (G),

Young modulus (*E*), Poisson's ratio ( $\delta$ ) and *B*/*G* ratio

Pt<sub>3</sub>Al alloy and Pt<sub>3</sub>Al alloy with doping B

相	方法	<i>B</i> /GPa	G/GPa	E/GPa	δ	<i>B</i> /G
Pt <sub>3</sub> Al	Cal	224	85	226	0.332	2.63
	Theo <sup>[7]</sup>	239	71			
B2	Cal	207	71	191	0.346	2.92

从表 3 中可以看出,理论计算得到 Pt<sub>3</sub>Al 合金的体弹性模量和剪切模量分别为 224 GPa 和 85 GPa,与其它理论计算值比较吻合<sup>[7]</sup>。当 B 原子进入 Pt<sub>3</sub>Al 合金的四面体间隙位置时,计算得到它的体弹性模量和剪切模量分别为 207 GPa 和 71 GPa,均小于未添加 B 原子的 Pt<sub>3</sub>Al 合金的体弹性模量和剪切模量。结果说明,当在 Pt<sub>3</sub>Al 合金添加 B 原子时,削弱了它的抗体积变形和剪切变形能力。同时,计算得到添加 B 原子的杨氏模量为 191 GPa,小于 Pt<sub>3</sub>Al 合金的杨氏模量(226 GPa),显然, B 原子的添加同样降低了 Pt<sub>3</sub>Al 合金的弹性硬度。

另一方面,材料的脆韧性是材料能否进行塑性加工的一个重要衡量标准。根据 Pugh 准则<sup>[19]</sup>,材料的脆韧性可以通过 B/G 比值来评判。当 B/G 比值大于 1.75 时,材料表现为塑性,若 B/G 比值小于 1.75 时,材料则表现为脆性,并且,B/G 比值越小,说明材料越脆越难加工。从表 3 中可以看出,Pt<sub>3</sub>Al 合金的 B/G 比值为 2.63,大于 1.75,说明这种面心结构的 Pt<sub>3</sub>Al 合金表现为塑性行为。当在 Pt<sub>3</sub>Al 合金 中添加 B 原子时,其 B/G 比值为 2.92,很显然,添加 B 元素可以增强 Pt<sub>3</sub>Al 合金的塑性行为。

#### 2.3 电子结构

为了深层次的揭示 Pt<sub>3</sub>Al 合金在添加 B 元素之 后的结构稳定性以及力学性能变化,接下来计算了 Pt<sub>3</sub>Al 合金在添加 B 原子前后的电子结构。图 2 为 Pt<sub>3</sub>Al 合金中添加 B 原子前后的总态密度图和局域 态密度图,图中垂直的虚线代表费米面。



Fig.2 The density of states of Pt<sub>3</sub>Al,

[(a). Pt<sub>3</sub>Al, (b). B2]

从图 2(a)可以看出,在整个费米面区间的总态 密度图主要是由 Pt-5d 电子轨道上的电子和 Al 的 3s 和 3p 电子轨道上的电子贡献,生成 Pt-Al 金属键, 从而增强材料的抗变形能力。近一步分析,在费米 面以下的电荷密度图可以分为两部分:第一部分从 底带到-6.71 eV 的区间,主要是由 Pt-5d 电子轨道上 的电子和 Al-3s 电子轨道上的电子贡献;第二部分 从-6.71 eV 到费米面处,主要是由 Pt-5d 电子轨道上 的电子和 Al-3p 电子轨道上的电子贡献,这种电子 贡献的差异决定了化学键的强弱。

当在 Pt<sub>3</sub>Al 合金的四面体间隙位置添加 B 原子时,如图 2(b)所示,Pt<sub>3</sub>Al 合金在费米面以下的总态密度的峰数增多,同时主峰向费米面附近靠拢,意味着原子之间的局域杂化增强。计算得到 B 添加在费米面处的峰值为 1.66 eV,小于未添加 B 原子的Pt<sub>3</sub>Al 合金的费米面峰值(2.72 eV),这说明添加 B 原子的Pt<sub>3</sub>Al 合金比未添加 B 原子的体系要稳定。另一方面,添加 B 原子之后的 Pt 原子和 Al 原子的局域态密度的主峰峰值降低,而 Al-B 和 Pt-B 之间的电子转移增强,从而生成相应的 Pt-B 键和 Al-B 键,削弱了 Pt-Al 金属键的抗变形能力。

#### 3 结论

本文采用第一性原理方法研究了 B 元素对 Pt<sub>3</sub>Al 合金的结构稳定性和力学性能的影响,得到如 下结果:

(1) 理论计算得到 Pt<sub>3</sub>Al 合金的晶格参数、弹 性常数和弹性模量与其它理论计算值比较吻合,说 明计算结果合理可信。

(2) 当添加 B 元素之后, Pt<sub>3</sub>Al 合金的晶格参

数发生膨胀。B 元素位于 Pt<sub>3</sub>Al 合金的两种间隙位 置处的体系均能稳定存在,并且四面体间隙位置比 八面体间隙位置要稳定。

(3) 理论计算得到B原子位于八面体间隙位置的力学性能为非稳定存在,B原子位于四面体间隙位置的体系,其弹性常数和弹性模量均小于 Pt<sub>3</sub>Al 合金的弹性常数和弹性模量。

(4) 通过电子结构的计算,添加 B 原子之后在 费米面处的峰值要小于未添加 B 原子的费米面处的 峰值,证实了添加 B 原子的 Pt<sub>3</sub>Al 合金的结构稳定 性。同时,在 Pt<sub>3</sub>Al 合金中添加 B 原子之后,在体 系中形成了 Pt-B 键和 Al-B 键,削弱了 Pt-Al 金属 键的键强。

#### 参考文献:

- Grushko B, Kapush D, Samuha S, et al. A study of the Al-Pd-Pt alloy system[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2014, 600(7): 125-129.
- [2] Alam M Z, Kamat S V, Jayaram V, et al. Tensile behavior of a free-standing Pt-aluminide (PtAl) bond coat[J]. Acta Materialia, 2013, 61(11): 1093-1105.
- [3] Grushko B, Kapush D, Su J, et al. Al-rich region of Al-Pt[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2013, 580(8): 618-625.
- [4] Pan Y, Guan W, Wen M, et al. Hydrogen embrittlement of Pt3Zr compound from first-principles[J]. Journal Of Alloys and Compounds, 2014, 585(10): 549-554.
- [5] Douglas A, Neethling J H, Santamarta R, et al. Unexpected ordering behaviour of Pt<sub>3</sub>Al intermetallic precipitates[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2007, 432(7): 96-102.

- [6] Wenderoth M, Volkl R, Vorberg S, et al. Microstructure, oxidation resistance and high-temperature strength of *γ* hardened Pt-base alloys[J]. Intermetallics, 2007, 15(11): 539-549.
- [7] Feng J, Xiao B, Chen J, et al. Stability, thermal and mechanical properties of Pt<sub>x</sub>Al<sub>y</sub> compounds[J]. Materials & Design, 2011, 32(2): 3231-3239.
- [8] Pan Y, Guo J M, Lin Y H, et al. First-principles investigation on hydrogen doping of PtAl<sub>2</sub> alloy[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2015, 621(10): 201-205.
- [9] Kim D E, Manga V R, Prins S N, et al. First-principles calculations and thermodynamic modeling of the Al-Pt binary system[J]. Calphad-computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry, 2011, 35(11): 20-29.
- [10] Wenderoth M, Volkl R, Yokokawa T, et al. High temperature strength of Pt-base superalloys with different  $\gamma'$  volume fractions[J]. Scripta Materialia, 2006, 54(10): 275-279.
- [11] Okamoto N L, Hasegawa Y, Hashimoto W, et al. Plastic deformation of single crystals of Pt<sub>3</sub>Al with the L1<sub>2</sub> structure[J]. Philosophical Magazine, 2013, 93(1): 60-81.
- [12] Chauke H R, Minisini B, Drautz R, et al. Theoretical investigation of the Pt<sub>3</sub>Al ground state[J]. Intermetallics, 2010, 18(10): 417-421.

- [13] Zhang Q A, Akiba E. Phase relations and hybrogenation behavior of Sr(Al<sub>1-x</sub>)Mg<sub>x</sub>)<sub>2</sub>[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2003, 360(1): 143-150.
- [14] Segall M D, Lindan P J D, Probert M J, et al. First-principles simulation: ideas, llustrations and the CASTEP code[J]. Journal of Physics-condensed Matter, 2002, 14(3): 2717-2744.
- [15] Monkhorst H J, Pack J D. Special points for Brillouinzone integrations[J]. Physical Review B, 1976, 13(6): 5188-5192.
- [16] Ceperley D M, Alder B J. Ground state of the electron gas by a stochastic method[J]. Physical Review Letters, 1980, 45(8): 566-569.
- [17] Liu Y J, Huang H W, Pan Y, et al. First-principles study on the phase transition, elastic properties and electronic structure of Pt<sub>3</sub>Al alloys under high pressure[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2014, 597(2): 200-2004.
- [18] Beckstein O, Klepeis J E, Hart G L W, et al. Firstprinciples elastic constants and electronic structure of  $\alpha$ -Pt<sub>2</sub>Si and PtSi[J]. Physical Review B, 2001, 63(3): 134112.
- [19] Pugh S F. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals[J]. Philosophical Magazine, 1954, 45(6): 823-843.