

合金元素(Cr、Ni、Mn、Cu)增强 T91 钢耐蚀性机理的第一性原理计算研究

叶怀波¹, 孙琨¹, 李六六², 吴冰洁²

(1. 西安交通大学金属材料强度国家重点实验室, 710049, 西安;

2. 中国核动力设计研究院, 610005, 成都)

摘要: 为解决核反应堆结构材料 T91 钢在铅铋合金液中耐腐蚀性低的问题,采用热力学模拟和第一性原理计算相结合的方法,在原子尺度上探究了合金元素 Cr、Ni、Mn、Cu 增强 T91 钢的耐腐蚀性能的机理。通过热力学模拟计算研究,确定了 T91 钢室温下的主要相成分为马氏体结构,搭建了 4 种第一性原理计算模型马氏体-铬模型、马氏体-镍模型、马氏体-锰模型以及马氏体-铜模型,并计算比较了电子结构以及电荷密度分布,发现合金元素与 Fe 原子之间形成金属键。通过差分电荷研究分析,发现 Cr 与 Fe 原子之间的金属键具有较强的共价键特性且结合最强, Ni 与 Fe 原子之间的金属键也具有一定的共价键特性,但其结合弱于 Cr、Cu 和 Mn 原子次之。同时,计算了 4 种模型中合金元素与基底之间的结合能,发现马氏体-铬模型不仅能量最低,而且 Cr 与基底的结合很高,说明 Cr 原子能够提高 T91 钢的耐腐蚀性能。该研究可为合金元素 Cr、Ni、Mn、Cu 增强 T91 钢耐铅铋合金液腐蚀性能提供参考,同时也为新材料的开发以及性能预测提供一种新的研究方法。

关键词: T91 钢;耐腐蚀性能;第一性原理计算;合金元素

中图分类号: TB31 **文献标志码:** A

DOI: 10.7652/xjtuxb202409020 **文章编号:** 0253-987X(2024)09-0205-08

Research on the Mechanism of Enhancing the Corrosion Resistance of T91 Steel with Alloying Elements (Cr, Ni, Mn, Cu) Based on First-Principles Calculations

YE Huaibo¹, SUN Kun¹, LI Liuliu², WU Bingjie²

(1. State Key Laboratory for Mechanical Behavior of Materials, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China;

2. Nuclear Power Institute of China, Chengdu 610005, China)

Abstract: To address the problem of low corrosion resistance of T91 steel, a structural material used in nuclear reactors, in lead-bismuth alloy liquid, this paper employs a combination of thermodynamic simulation and first-principles calculations to investigate the mechanism of enhancing the corrosion resistance of T91 steel at the atomic scale with alloying elements Cr, Ni, Mn and Cu. Through thermodynamic simulation calculations research, the main phase composition of T91 steel at room temperature is determined to be martensite, and four first-principles calculation models, namely martensite-Cr, martensite-Ni, martensite-Mn, and martensite-Cu, are established and used to calculate and compare electronic structure and charge

收稿日期: 2024-02-02。 作者简介: 叶怀波(1999—),男,硕士生;孙琨(通信作者),男,教授,博士生导师。 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(52075417)

网络出版时间: 2024-05-17

网络出版地址: <https://link.cnki.net/urlid/61.1069.t.20240517.1015.002>

density distribution. It is found that a metallic bond is formed between the alloying elements and Fe atoms. Differential charge studies show that the metal bond between Cr and Fe atoms has strong covalent bond characteristics and the strongest bonding, while the metal bond between Ni and Fe atoms also has certain covalent bond characteristics, but its bonding is weaker than Cr, followed by Cu and Mn atoms. Additionally, the binding energy between the alloying elements and the substrate in the four models is calculated, with the martensite-Cr model exhibiting the lowest energy and a strong binding between Cr and the substrate. This effectively demonstrates that Cr atoms can improve the corrosion resistance of T91 steel. Overall, this study provides valuable insights for enhancing the corrosion resistance of T91 steel to lead-bismuth alloy using Cr, Ni, Mn and Cu, and also presents a novel research method for the development and performance prediction of new materials.

Keywords: T91 steel; corrosion resistance; first-principles calculations; alloying element

液态铅铋合金(LBE)因其具有较低的化学性、良好的中子学特性、良好的传热性以及固有的安全性,被认为是加速器驱动系统(ADS)和铅冷快堆等第4代核反应堆的主要候选材料之一^[1-3]。但是,在高温、高压的特殊工况下,流动的LBE会通过冲刷、溶解、腐蚀、冲蚀等一系列物理和化学过程对结构材料造成严重的腐蚀破坏,并且可能引起结构材料的脆化,从而对反应堆系统的安全运行造成严重影响。因此,ADS系统在商业化应用前必须解决高温LBE与结构材料相容性的关键科学和实际工程问题^[1]。

T91钢因具有较强的耐腐蚀性、抗蒸汽氧化性和良好的蠕变断裂强度^[4],被广泛认为是ADS系统首选的结构材料^[4-6]。在高温高压流动的LBE工况下,T91钢也受到一定的腐蚀。研究发现^[7-9],T91钢在铅铋合金液中主要的腐蚀机理为溶解腐蚀,而后产生更为严重的氧化腐蚀^[8],使T91钢组织和结构发生变化,耐腐蚀性能下降。

为了提高T91钢的耐蚀性,大量的研究人员通过实验^[10-13]和计算^[14-15]的方法,从材料的表面处理以及材料改性内部处理两个方面提高钢自身的耐腐蚀性能。廖庆等^[16]在T91钢表面制备 AlO_x 涂层防护, AlO_x 涂层可以有效防止铁、铬和氧元素的快速扩散,从而减小溶解腐蚀。李洪等^[17]通过提高T91钢的铜含量,使得表面氧化膜晶粒增大,且更为均匀、致密,改良型T91耐热钢的抗高温氧化性能得到提高,Mn元素的增加会细化T91钢中的晶粒,进而提高其耐腐蚀性能。此外,一些学者研究发现某些合金元素如Cr和Ni可以有效地提高T91钢的耐腐蚀性。刘捷等^[18]研究发现,加入Cr和Ni可以显著降低铁在LBE中的腐蚀,但没有从原子尺度上

解释这一现象。还有一些研究人员采用实验和计算相结合的方法开展研究。文献[19-20]研究了SIMP钢和T91钢在450℃、饱和氧LBE作用10 000 h时的氧化行为发现,因SIMP钢中Si含量较高致使耐蚀性优于同类钢,同时利用第一性原理计算了硅对降低氧化速率的影响。对T91钢作为核反应堆结构材料进行实验研究,由于实验条件严格,周期长,成本高,面临着巨大挑战。因此,本文提出了一种新的研究方法,将热力学模拟和计算相结合,在原子尺度上研究T91钢,从而降低研究成本,缩短实验周期。

本文针对T91钢耐铅铋腐蚀性能较差的问题,提出了将热力学模拟和第一性原理计算相结合的方法,在保障实验准确性的同时提高实验效率、减小实验成本。在原子尺度上研究了合金元素Cr、Ni、Mn、Cu增强T91钢的耐腐蚀性能的机理。基于第一性原理计算方法,计算了马氏体-铬模型、马氏体-镍模型、马氏体-锰模型以及马氏体-铜模型的电荷密度分布,分析了原子间的成键方式。同时,通过差分电荷,进一步研究原子之间的相互作用,分析耐铅铋腐蚀性能;此外,通过计算和分析结合能,讨论了结合能与耐蚀性的关系。本文的研究可为合金元素Cr、Ni、Mn、Cu提高T91钢的耐腐蚀性能提供参考,同时也为其他新材料的开发以及性能预测提供一种新的研究方法。

1 研究方法

本文第一性原理计算是基于密度泛函理论(DFT)和平面波方法,采用维也纳大学Hafner小组开发的模拟软件包(VASP)^[21]完成计算。使用投影增强波(PAW)势,描述电子-离子核心相互作用

用^[22],并选择 PBE(Perdew-Burke-Ernzerhof)泛函作为交换相关势^[23]。本研究中,选用 400 eV 的截止能量展开电子波函数,在进行计算时,布里渊区 k 点取值为 $13 \times 13 \times 13$;在进行单原子能量计算时,采用 Γ 点自动生成 k 点。为确保计算结果准确性和可信性,同时采用了金属体系常用的一阶 Methfessel-Paxton smearing 设置波函数的部分占有数,将 σ 设置为 $0.2^{[24]}$ 。在各项静态计算前,均采用共轭梯度法进行结构优化,收敛条件为:总能量变化小于 1.0×10^{-5} eV,每个原子上的力小于 0.01 eV/Å,以上所有参数均经过收敛。

2 计算模型

2.1 热力学模拟

采用材料性能模拟软件 Thermo-Calc 进行室温下相成份的计算,T91 钢元素成分如表 1 所示^[25]。室温下 T91 钢相成分计算是采用凝固模块下的相成分以及性能计算通道进行的。T91 钢以 0.0167 °C/min 的冷却速率从 1600 °C 冷却至室温,晶粒尺寸设置为 $500 \mu\text{m}$ 。由计算结果可知,T91 钢室温下的相是马氏体、奥氏体以及贝氏体,质量分数分别为 99.66% 、 0.24% 以及 0.1% ,主要的相成分为马氏体,这与实验结果相吻合。

表 1 T91 钢化学成分表^[25]

Table 1 Chemical composition of T91 steel^[25]

元素	质量分数/%
C	0.099
Mn	0.440
Si	0.200
Cr	9.250
Mo	0.850
V	0.190
Nb	0.067
N	0.050
Ni	0.250
Fe	88.604

2.2 计算模型建立

由 JMatPro 软件计算可知,T91 钢室温下相成分主要为马氏体。以此为基础,利用 AtomsK 软件建立了第一性原理计算原子模型。马氏体是碳在 $\alpha\text{-Fe}(bcc)$ 中的过饱和固溶体,具有体心正方晶格(晶格尺寸 $a = b \neq c$),轴比 c/a 称马氏体的正方度,正

方度越大,正方畸变越严重。当正方度小于 0.25% 时, $c/a \approx 1$,此时马氏体近似为体心立方晶格。随钢中碳含量升高,马氏体的点阵常数 c 增大, a 减小,正方度 c/a 增大,可用下列公式表示

$$c = a_0 + \alpha w \tag{1}$$

$$a = a_0 - \beta w \tag{2}$$

$$\frac{c}{a} = 1 + \gamma w \tag{3}$$

式中: a 的初始值 $a_0 = 2.861 \text{ Å}$ ($\alpha\text{-Fe}$ 点阵常数); $\alpha = 0.116$; $\beta = 0.013$; $\gamma = 0.046$; w 为马氏体碳的质量分数。 α 和 β 的数值表示碳在 $\alpha\text{-Fe}$ 点阵中引起局部畸变的程度。

根据前面分析可知,T91 钢中 $w(\text{C}) = 0.099\%$,计算获得 $c = 2.873 \text{ Å}$, $a = 2.860 \text{ Å}$, $c/a = 1.005$,其相对于 $\alpha\text{-Fe}$ 晶胞的形变量如下,其中 c_0 为晶格尺寸 c 的初始值。

Z 轴相对变化量

$$\frac{c - c_0}{c_0} = \frac{2.873 - 2.861}{2.861} = 0.004 \tag{4}$$

X 轴相对变化量

$$\frac{a_0 - a}{a_0} = \frac{2.861 - 2.860}{2.861} = 0.001 \tag{5}$$

根据上述理论计算结果,本文通过 AtomsK 平台软件构建了具有马氏体结构的铁原子超胞,如图 1 所示。同样地,分别用铬、镍、锰和铜等合金元素取代铁原子超胞中心的铁原子,构建了马氏体铬、镍、锰和铜的超胞,如图 2 所示。

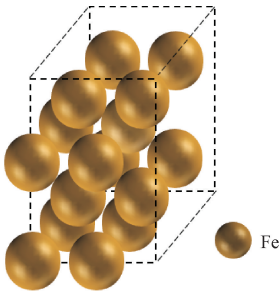
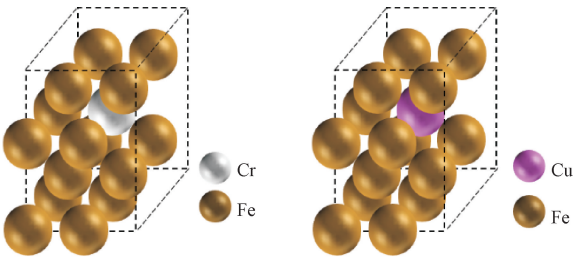


图 1 马氏体结构铁的超胞

Fig. 1 Fe supercell with martensitic structure



(a) 马氏体-铬模型 (b) 马氏体-铜模型

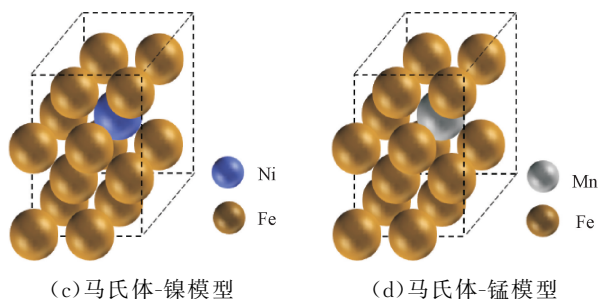


图 2 4 种模型超胞结构的超胞

Fig. 2 Four models of supercellular structures

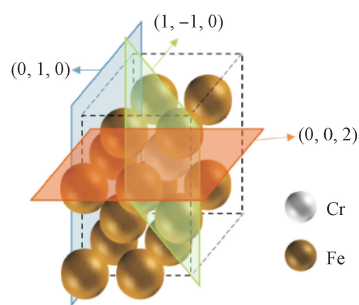


图 3 马氏体-铬模型的 3 个计算晶面

Fig. 3 Three calculated crystal faces of martensite-Cr

3 计算结果与讨论

3.1 电荷密度分布

原子间化学键的形成会引起电荷密度的变化。本文计算和分析电荷密度分布,得到材料的成键特性,可以初步判断材料结构中原子的成键情况。为了准确判断原子间的成键模式,分别从 3 个晶面(0, 1, 0)、(1, -1, 0)、(0, 0, 2)计算电荷密度分布,计算晶面如图 3 所示。

图 4 为马氏体-铬模型的电荷密度分布。在(0, 0, 2)晶面上,Cr 和 Fe 原子周围的电荷密度大于 Cr 和 Fe 原子之间的电荷密度,Fe 和 Cr 原子的电荷密度分布呈球形,原子之间的电荷密度均匀地接近于 0,所以,Cr 和 Fe 原子间形成金属键^[26]。在(0, 1, 0)晶面上,Fe 原子的电荷密度分布呈球形,除了 Fe 原子周围的电荷密度较高外,其余区域的电荷密度均为 0,这符合金属键的特征,说明 Fe 和 Fe 原子之间形成了金属键。

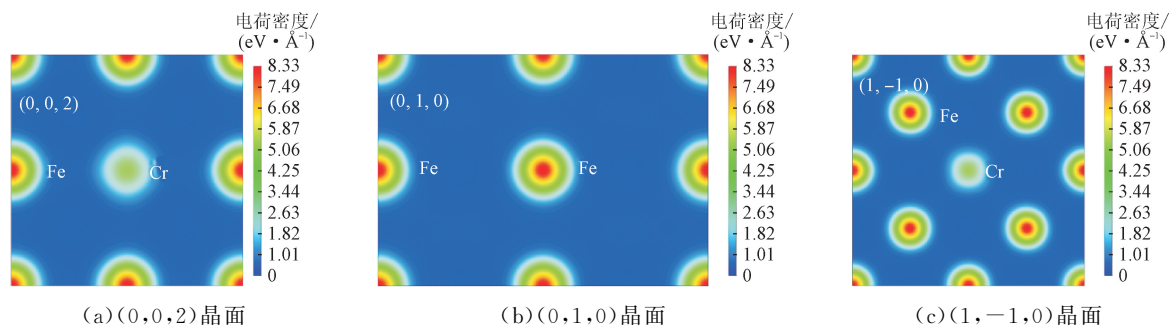


图 4 马氏体-铬模型 3 个计算晶面电荷密度分布

Fig. 4 Model calculates the charge density distribution of three crystal faces (0, 0, 1), (0, 1, 0) and (1, -1, 0)

同样计算了其余 3 种模型(1, -1, 0)晶面的电荷密度分布,如图 5 所示。由图 5(a)可知,Ni 原子和 Fe 原子周围的电荷密度大于 Ni 和 Fe 原子之间的电荷密度,Fe 和 Ni 原子的电荷密度分布呈球形,原子之间的电荷密度均匀地接近于 0,Fe 与 Ni 原子间形成金属键。

除了 Fe 原子周围的电荷密度较高外,Fe 和 Fe 原子之间其余区域的电荷密度均为 0,这符合金属键的特征,说明 Fe 和 Fe 原子之间也是以金属键结合。图 5(b)表明,Fe 原子与 Mn 原子之间也是以金属键结合。图 5(c)表明,Fe 原子与 Cu 原子之间依然是以金属键结合。

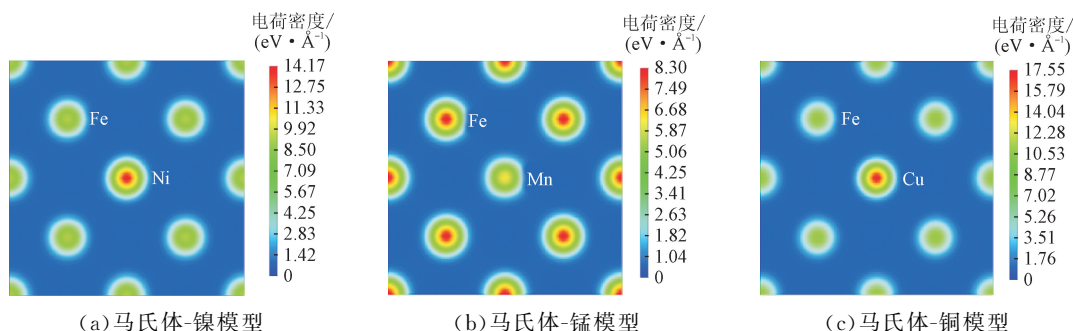


图 5 3 种计算模型在(1, -1, 0)晶面上的电荷密度分布

Fig. 5 Charge density distribution maps of three computational models on (1, -1, 0) crystal planes

从图 5 可以清楚地看到:Cr 原子的电荷密度小于 Fe 原子的,Fe 原子的电荷密度为 $8.23\text{ eV}/\text{\AA}^3$ 左右,Cr 原子电荷密度约为 $3.51\text{ eV}/\text{\AA}^3$;Ni 原子电荷密度大于 Fe 原子的,约为 $13.70\text{ eV}/\text{\AA}^3$;Mn 原子电荷密度小于 Fe 原子的,约为 $6.28\text{ eV}/\text{\AA}^3$;Cu 原子电荷密度大于 Fe 原子的,约为 $17.14\text{ eV}/\text{\AA}^3$ 。电荷密度由大到小依次为 Cu、Ni、Fe、Mn、Cr,这正符合其价电子排布,Cu 有 11 个价电子,其排布为 $3d^{10}4s^1$,Ni 有 10 个价电子,其排布为 $3d^84s^2$,Fe 有 8 个价电子,其排布为 $3d^64s^2$,Mn 有 6 个价电子,其排布为 $3d^54s^1$ 。价电子数越多,其结构稳定性越差。

3.2 差分电荷计算

为进一步讨论模型中合金元素与铁元素之间的电荷分布情况,本文分别对马氏体-铬模型、马氏体-镍模型、马氏体-锰模型和马氏体-铜模型进行了差分电荷计算分析。

图 6 为马氏体-铬模型、马氏体-镍模型、马氏体-锰模型和马氏体-铜模型的三维差分电荷图,其中黄色代表电子聚集,青色代表电荷缺失。为进一步定量分析合金元素与铁元素之间的电荷分布情况,对各个研究模型还计算了平面平均差分电荷,如下图 7 所示。从中可以清楚地看到:在马氏体-铬模型中,Cr 原子周围出现较多的电荷缺失,周围的 Fe 原子表现出电荷聚集,表现出较强的金属键特性,而 Cr 和 Fe 原子之间也表现出电荷聚集,且电荷聚集

明显偏向 Cr 原子。这表明,Cr 和 Fe 原子间虽然是金属键的成键方式,但是表现出一定的共价键的特性,且向 Cr 原子偏聚。平面平均差分电荷密度与三维差分电荷密度分布吻合,见图 7(a)、图 6(a),在 Cr 原子周围出现较多的电荷缺失,Fe 原子周围电荷聚集,且 Fe 和 Cr 原子间的电荷分布偏向 Cr 原子。

在马氏体-镍模型中也可以清楚的看见 Ni 原子周围出现电荷缺失,但是电荷缺失程度明显小于马氏体-铬模型。Ni 原子周围的 Fe 原子也出现了较多的电荷聚集,表现出弱于马氏体-铬模型的金属键特性,与马氏体-铬模型相似,Ni 和 Fe 原子之间的电荷聚集也发生向 Ni 原子偏向的现象,但是电荷偏向弱于马氏体-铬模型。平面平均差分电荷密度与三维差分电荷密度分布吻合,如图 7(b)、图 6(b)所示。在 Ni 原子周围出现较多的电荷缺失,Fe 原子周围电荷聚集,且 Fe 和 Ni 原子间的电荷分布偏向 Ni 原子。

在马氏体-锰模型中,可以观察到 Mn 原子周围的电荷缺失比较稀疏,说明 Mn 与 Fe 原子之间形成的金属键较弱;Fe 和 Mn 原子之间具有较多的电荷分布,这也与平面平均差分电荷密度分布相吻合,分布具有少量的偏向,说明 Mn 和 Fe 原子之间的金属键存在较小的共价键特性。最后,在马氏体-铜模型中也观察到 Cu 原子周围出现少量电荷缺失,缺失程度与马氏体-镍模型相似;在 Fe 原子周围出现电荷聚集,但是在 Fe 和 Cu 原子之间并未出现电荷聚集或缺失,更无电荷的偏向。所以,Fe 和 Cu 原子之间的金属键并未具有共价键的特性,这与图 7(d)平面平均差分电荷分布相吻合。

当 T91 钢受到液态铅铋合金液的腐蚀,Fe 原子要发生溶解扩散,就要挣脱周围合金原子的相互作用。Cr 和 Fe 之间的金属键最强,且具有较强的共价键的特性,这就使得 Cr 原子周围的 Fe 原子相对稳定,不发生扩散溶解,能够有效增强 T91 钢的耐腐蚀性能。同样,Ni 原子周围的 Fe 原子,因与 Ni 原子之间形成较强的金属键且具有共价键特性,也不易挣脱 Ni 原子束缚进而扩散溶解。Mn 原子周围的 Fe 原子,因其与 Mn 原子之间的金属键较弱,虽有较小的共价键特性,也易挣脱 Mn 原子的束缚发生扩散。Cu 原子与周围的 Fe 原子形成金属键,但金属键较弱,所以其在增加 T91 钢耐腐蚀性能方面是这几个合金元素最差。

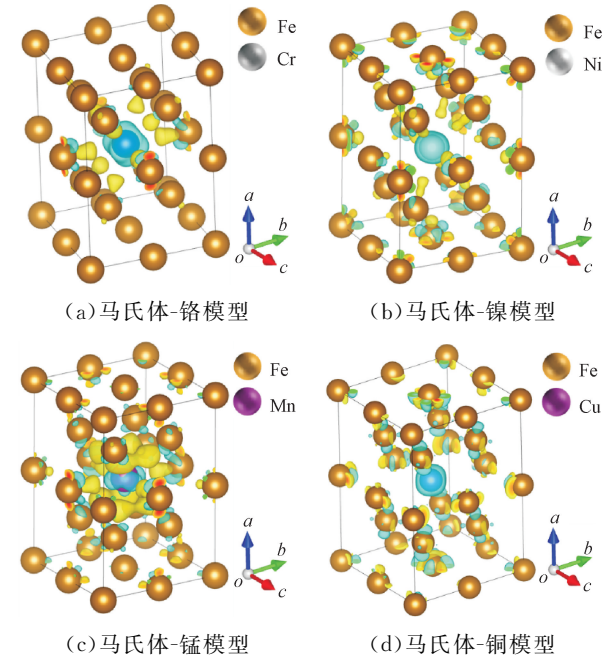


图 6 4 种模型的三维差分电荷

Fig. 6 Three dimensional differential charge maps of four models

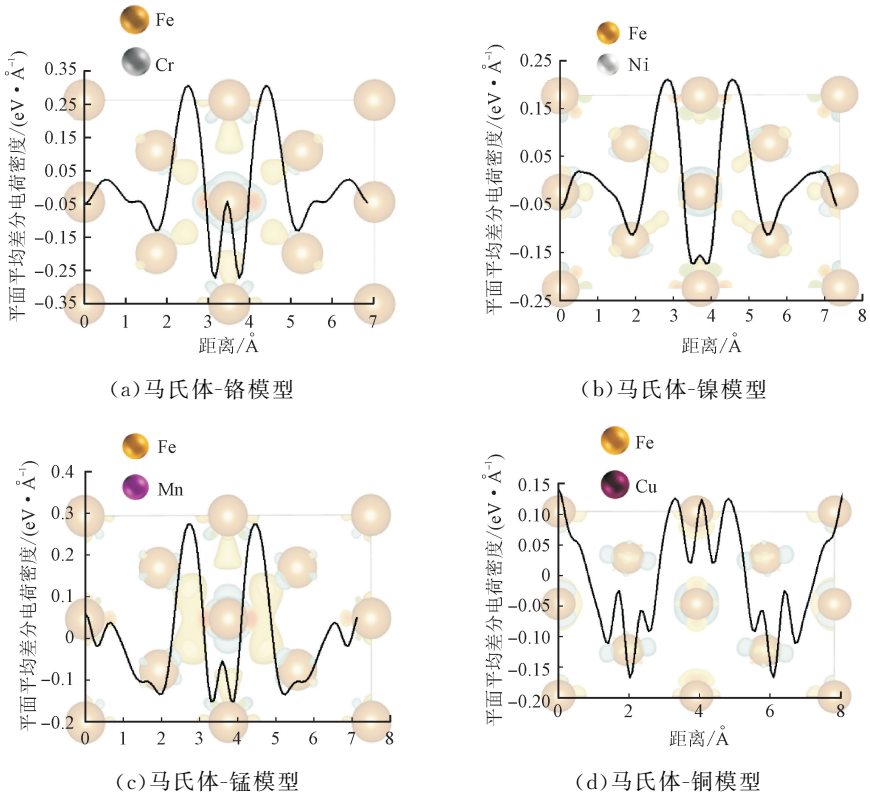


图 7 4 种模型的平面平均差分电荷情况
Fig. 7 Plane average differential charge maps of four models

3.3 结合能

人们普遍认为材料的耐腐蚀性能与材料结构稳定性密切相关,且材料结构越稳定,其耐腐蚀性能越好,结合能值越大。结合能被认为是表征材料结构稳定性的一种强有力的物理量,其计算示意图 8。

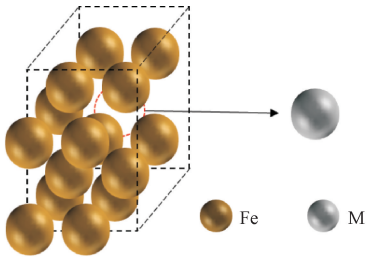


图 8 材料结合能计算示意
Fig. 8 Material binding energy calculation

4 种马氏体结构模型的总能量,各个金属原子的能量以及结合能如表 2 所示。结合能表示为^[27]

$$E_{\text{total}} = -E + E_M + E_{\text{base}} \tag{6}$$

式中: E_{total} 为体系的总能量; E 为本节需要的结合能; E_M 为单个金属原子的能量; E_{base} 为不含中心铁原子的含 15 个 Fe 原子的马氏体相的能量。

由表 2 可见,总能量最低的是马氏体-铬模型,

为 $-131.677\ 0\ \text{eV}$,根据吉布斯自由能可知,体系能量越低越稳定,所以马氏体-铬模型体系最稳定。马氏体-铜体系能量最高为 $-124.931\ 5\ \text{eV}$ 。结合能最高的是马氏体-镍模型体系,为 $4.684\ 4\ \text{eV}$,最低的是马氏体-铜模型体系,为 $2.516\ 7\ \text{eV}$ 。所以,Cr 原子、Ni 原子对 T91 钢的耐腐蚀性增强作用最大,其次是 Mn 原子和 Cu 原子。

表 2 4 种模型结合能计算结果

Table 2 Calculation result of binding energy of four models

模型	总能量/eV	结合能/eV
马氏体-铬	$-131.677\ 0$	$4.074\ 8$
马氏体-镍	$-127.551\ 7$	$4.684\ 4$
马氏体-铜	$-124.931\ 5$	$2.516\ 7$
马氏体-锰	$-131.212\ 0$	$3.887\ 0$

4 结 论

本文提出了热力学模拟和第一性原理计算相结合的方法,针对 T91 钢耐铅铋合金液腐蚀较差的问题,从原子尺度上对合金元素 Cr、Ni、Mn 以及 Cu 增强耐腐蚀性的机理进行了研究,主要结论如下。

(1)提出了热力学模拟和第一性原理计算相结合

的方法,即在热力学模拟的基础上,建立计算模型并进行了第一性原理计算,克服了实验过程中实验周期长和实验成本高等缺点,为新材料的研发提供了思路。

(2) T91 钢中的金属原子基本上是通过金属键相互作用的,并且通过差分电荷分析研究,Cr 原子与 Fe 原子之间虽然是金属键,但具有一定的共价键特性,且共价键特性较强,因此 Cr 与 Fe 原子之间的金属键最强;Ni 原子与 Fe 原子之间的金属键也有共价键的特性,但其弱于 Cr 和 Fe 原子之间的;Mn 和 Fe 原子之间的成键方式基本为金属键,有较小的共价键特性;Cu 和 Fe 原子之间的相互作用为金属键,并无共价键特性,故其金属键最弱。

(3) 在纯铁的马氏体结构相中,中心铁原子被 Cr、Ni、Cu 和 Mn 等合金元素取代,制备出 4 种马氏体结构相,结合能最高的是马氏体-镍模型,其次是马氏体-铬模型,说明 Cr、Ni 原子与铁原子结合紧密,马氏体中的 Cr 和 Fe 原子结合键和 Ni 和 Fe 原子间的结合键不易被破坏,因而不被腐蚀。

本文研究有助于 T91 钢在核工业中的应用,并可将其所采用的技术进一步推广到新材料的研发或一些实验操作难度较高的研究。基于热力学模拟建立计算模型,并通过第一性原理计算,将计算与并行实验研究相结合,它可以为新材料的设计或更低成本的材料开发提供更深入、更高效的途径。

参考文献:

- [1] SCHULENBERG T, CHENG Xu, STIEGLITZ R. Thermal-hydraulics of lead bismuth for accelerator driven systems [EB/OL]. (2005-07-01) [2024-01-22]. <https://www.osti.gov/etdeweb/biblio/20622077>.
- [2] SAR F, MHIAOUI S, GASSER J G. Thermal conductivity of liquid lead-bismuth alloys, possible coolants for fourth generation spallation nuclear reactors [J]. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2007, 353(32/40): 3622-3627.
- [3] SOBOLEV V. Thermophysical properties of lead and lead-bismuth eutectic [J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2007, 362(2/3): 235-247.
- [4] DOUBKOVÁ A, DI GABRIELE F, BRABEC P, et al. Corrosion behavior of steels in flowing lead-bismuth under abnormal conditions [J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2008, 376(3): 260-264.
- [5] AIELLO A, AZZATI M, BENAMATI G, et al. Corrosion behaviour of stainless steels in flowing LBE at low and high oxygen concentration [J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2004, 335(2): 169-173.
- [6] WEISENBURGER A, SCHROER C, JIANU A, et al. Long term corrosion on T91 and AISI 316L steel in flowing lead alloy and corrosion protection barrier development: experiments and models [J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2011, 415(3): 260-269.
- [7] MARTINELLI L, BALBAUD-CÉLÉRIER F, TERLAIN A, et al. Oxidation mechanism of a Fe-9Cr-1Mo steel by liquid Pb-Bi eutectic alloy: part I [J]. *Corrosion Science*, 2008, 50(9): 2523-2536.
- [8] MARTINELLI L, BALBAUD-CÉLÉRIER F, TERLAIN A, et al. Oxidation mechanism of an Fe-9Cr-1Mo steel by liquid Pb-Bi eutectic alloy at 470 °C: Part II [J]. *Corrosion Science*, 2008, 50(9): 2537-2548.
- [9] MARTINELLI L, BALBAUD-CÉLÉRIER F, PICARD G, et al. Oxidation mechanism of a Fe-9Cr-1Mo steel by liquid Pb-Bi eutectic alloy: part III [J]. *Corrosion Science*, 2008, 50(9): 2549-2559.
- [10] LIU Chao, SHEN Tielong, YAO Cunfeng, et al. Corrosion behavior of ferritic-martensitic steels SIMP and T91 in fast-flowing steam [J]. *Corrosion Science*, 2021, 187: 109474.
- [11] CHEN Lingzhi, XU Shuai, SCHROER C, et al. Comparison of corrosion behavior of T91, 9Cr and 9CrAl ODS steels in liquid Pb [J]. *Materials*, 2023, 16(6): 2295.
- [12] LIANG Zhiyuan, GUI Yong, WANG Yungang, et al. Corrosion performance of heat-resisting steels and alloys in supercritical carbon dioxide at 650 °C and 15 MPa [J]. *Energy*, 2019, 175: 345-352.
- [13] HALODOVÁ P, LORINČÍK J, HOJNÁ A. Microstructural investigation of LME crack initiated in ferritic/martensitic steel T91 loaded in liquid Lead-Bismuth eutectic at 300 °C [J]. *Materials*, 2018, 12(1): 38.
- [14] PENG Yuquan, CHEN Taicheng, CHUNG T J, et al. Creep rupture of the simulated HAZ of T92 steel compared to that of a T91 steel [J]. *Materials*, 2017, 10(2): 139.
- [15] 马韦刚, 邓平, 曹宇, 等. 316 和 T 91 钢在液态铅铋合金中的腐蚀行为研究 [J]. *科学技术创新*, 2023 (9): 49-53.
- [16] MA Weigang, DENG Ping, CAO Yu, et al. Corrosion behavior of 316 and T91 steel in liquid lead-bismuth eutectic alloy [J]. *Scientific and Technological Innovation*, 2023(9): 49-53.
- [16] 廖庆, 李炳生, 葛芳芳, 等. T91 钢和 SIMP 钢表面 AlO_x 涂层在 600 °C 静态液态铅铋共晶中的稳定性和腐蚀行为 [J]. *物理学报*, 2022, 71(15): 156103.

- LIAO Qing, LI Bingsheng, GE Fangfang, et al. Stability and corrosion behavior of AlO_x coating on T91 steel and SIMP steel in static liquid Pb-Bi eutectic at 600 °C [J]. *Acta Physica Sinica*, 2022, 71(15): 156103.
- [17] 李洪, 雷敬, 陈胜, 等. 铜含量对改良型 T91 钢高温氧化行为的影响 [J]. *钢铁*, 2021, 56(7): 123-128.
- LI Hong, LEI Jing, CHEN Sheng, et al. Effect of Cu content on high temperature oxidation behavior of modified T91 steel [J]. *Iron & Steel*, 2021, 56(7): 123-128.
- [18] 刘捷, 甄琦, 赵灿军, 等. 铁在液态铅铋合金中腐蚀的分子动力学研究 [J]. *工程热物理学报*, 2017, 38(3): 557-561.
- LIU Jie, ZHEN Qi, ZHAO Canjun, et al. Corrosion study of iron in liquid lead-bismuth eutectic in accelerator driven system by molecular dynamics method [J]. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2017, 38(3): 557-561.
- [19] KRESSE G, FURTHMÜLLER J. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set [J]. *Computational Materials Science*, 1996, 6(1): 15-50.
- [20] KRESSE G. Ab initio molecular dynamics for liquid metals [J]. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 1995, 192-193: 222-229.
- [21] KRESSE G, HAFNER J. Ab initio molecular dynamics for liquid metals [J]. *Physical Review: B*, 1993, 47(1): 558-561.
- [22] BLÖCHL P E. Projector augmented-wave method [J]. *Physical Review: B*, 1994, 50(24): 17953-17979.
- [23] PERDEW J P, BURKE K, ERNZERHOF M. Generalized gradient approximation made simple [J]. *Physical Review Letters*, 1996, 77(18): 3865-3868.
- [24] 李雪洁, 孙琨, 陈诚, 等. (Ti/Zr/Hf/Sn/W)NbMoTaV 高熵合金性能第一性原理计算分析方法 [J]. *西安交通大学学报*, 2022, 56(3): 180-186.
- LI Xuejie, SUN Kun, CHEN Cheng, et al. Investigation on properties of (Ti/Zr/Hf/Sn/W)NbMoTaV high-entropy alloys using first-principles calculation and analysis method [J]. *Journal of Xi'an Jiaotong University*, 2022, 56(3): 180-186.
- [25] 田书建. T91 和 15-15Ti 钢在 500 °C 液态铅铋合金氧化条件下腐蚀行为与机理研究 [D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2016.
- [26] 王坤, 乔英杰, 张晓红, 等. 理想拉伸/剪切应变对 U_3Si_2 化学键键长及电荷密度分布影响的第一性原理研究 [J]. *物理学报*, 2022, 71(22): 227102.
- WANG Kun, QIAO Yingjie, ZHANG Xiaohong, et al. First-principles study of effect of ideal tensile/shear strain on chemical bond length and charge density distribution of U_3Si_2 [J]. *Acta Physica Sinica*, 2022, 71(22): 227102.
- [27] 刘学杰, 张亮. 过渡金属氮化物的结合能第一原理计算 [J]. *金属世界*, 2009(S1): 11-14.
- LIU Xuejie, ZHANG Liang. Cohesive energies of the transition metal nitride calculated by first-principles method [J]. *Metal World*, 2009(S1): 11-14.

(编辑 杜秀杰)