

[补充信息]

纯 Fe 表面机械研磨处理对 Ti 原子扩散特性影响的第一性原理计算及实验验证

王泉¹, 于晓华^{1,2†}, 李晓宇^{1,3}, 刘成¹, 钟毅¹, 詹肇麟^{1,✉}, 邓久帅¹

1 昆明理工大学材料科学与工程学院, 云南 昆明 650093;

2 昆明理工大学固体废弃物国家废弃物资源化国家工程研究中心, 云南 昆明 650093;

3 大连理工大学材料科学与工程学院, 辽宁 大连 116024)

[Supplementary Information]

Effects of Mechanical Polishing of Pure Fe Surface on the Diffusion of Ti Atoms: a First Principles Study and the Experimental Verification

WANG Xiao¹, YU Xiaohua^{1, 2†}, LI Xiaoyu^{1, 3}, LIU Cheng¹, ZHONG Yi¹, ZHAN Zhaolin^{1,✉}, DENG Jiushuai¹

1 Faculty of Materials Science & Engineering, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650093;

2 Solid Waste Utilization National Engineering Center, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650093;

3 School of Materials Science and Engineering Dalian University of Technology, Dalian, 116024.

双辉等离子渗钛工艺

选用尺寸为 15 mm×15 mm×1 mm 的纯 Fe 作为基体材料, 使用直径为 8 mm 的 GCr15 钢球在真空条件下对基体材料表面机械研磨 1800 s。利用双辉等离子真空炉 (LDMC-1) 进行表面渗 Ti。工作气体为 Ar 气, 渗 Ti 工艺具体参数为: 工作压强 30~45 Pa, 源极电压 950~1050 V, 阴极电压 450 V, 保温温度 400℃, 时间 2 h。

试样检测

利用扫描电子显微镜 (QUANTA200) 观察渗层表面和截面的显微组织; 采用附带的能谱分析仪分析渗层的化学成分。运用 X 射线衍射仪 (D/MAX-2200) 分析渗层的相结构 (分析前应先用 4%硝酸酒精溶液腐蚀处理), X 射线源为 Cu 靶, K α 射线 ($\lambda=0.154056$ nm)。