

C、Si 单掺杂对 CuCr 基触头材料性能影响的第一性原理计算

丁 璨^{1,2}, 郭 旭¹, 顾家骏¹

(1. 三峡大学电气与新能源学院, 湖北 宜昌 443002; 2. 华中科技大学强电磁技术全国重点实验室, 武汉 430074)

摘要: 电触头作为断路器核心元件, 须具备优良的导电性、力学性能及抗熔焊性。CuCr 合金因高强高导被广泛应用, 但高温下存在脆性提升等缺陷。文中采用基于密度泛函理论的第一性原理计算, 研究 3% 原子分数的 C、Si 单掺杂对 CuCr 基合金性能的影响。通过构建不同 Cr 浓度的 CuCrX (X=C、Si) 置换固溶体模型, 利用 CASTEP 软件分析合金晶格参数、热力学稳定性、弹性常数及电子结构等。结果表明: C 掺杂显著影响晶格常数, 随 Cr 浓度升高晶格畸变加剧, 且显著提升热力学稳定性, 但降低弹性模量、增强脆性, 其弹性变化有利于提升抗熔焊性能; Si 掺杂对晶格影响较弱, 可提升弹性模量, CuCr_{0.16}Si_{0.03} 综合弹性强度最优, 同时增强脆性以改善抗熔焊性能。电子结构显示, C、Si 掺杂均增强导电性, CuCrC 理论导电能力更强, 在成键特性上, CuCrC 杂化作用显著, CuCrSi 中 Si-Cr 杂化提升键能与抗形变能力。本研究为 CuCr 基触头合金性能优化提供理论依据。

关键词: 第一性原理; C/Si 单掺杂; 热力学稳定性; 弹性性能; 电子结构

First-principles Calculations of the Effect of C and Si Single Doping on the Properties of CuCr-Based Contact Materials

DING Can^{1,2}, GUO Xu¹, GU Jiajun¹

(1. College of Electrical Engineering and New Energy, China Three Gorges University, Hubei Yichang 443002, China;

2. State Key Laboratory of Advanced Electromagnetic Technology, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China)

Abstract: As the core components of circuit breaker, electrical contacts shall possess have excellent electrical conductivity, mechanical properties and anti-melting properties. CuCr alloys are widely used because of high strength and high conductivity, but there are defects such as brittleness enhancement at high temperatures. By constructing a model of CuCrX (X=C, Si) replacement solid solution with different Cr concentrations, the lattice parameters, thermodynamic stability, elastic constants and electronic structure of the alloys were analyzed using CASTEP software. The results show that C doping significantly affects the lattice constant, the lattice distortion increases with the increase of Cr concentration, and significantly improves the thermodynamic stability, but reduces the modulus of elasticity, enhances the brittleness, and its elastic change is favorable to improve the resistance to fusion welding. Si doping has a weak effect on the lattice and enhances the elastic modulus, CuCr_{0.16}Si_{0.03} has the optimal integrated elastic strength, while enhancing brittleness to improve fusion welding resistance. The electronic structure shows that both C and Si doping enhance the electrical conductivity, and the theoretical electrical conductivity of CuCrC is stronger. In terms of bonding characteristics, CuCrC hybridization plays a significant role, and Si-Cr hybridization in CuCrSi enhances the bonding energy and deformation resistance. This study provides a theoretical basis for the optimization of the properties of CuCr-based contact alloys.

Key words: first-principles; C/Si single doping; thermodynamic stability; elastic properties; electronic structure

0 引言

在电气设备广泛应用和新兴产业快速发展的趋势下, 高压输配电网络中的断路器核心部件—电触头, 正经受着更为严苛的工作考验。它要求同时具备出色

的导电、导热能力, 良好的力学性能, 以及优异的抗熔焊特性^[1-3]。CuCr 合金凭借高强度与高导电性的突出优势, 在中压真空灭弧室领域获得大量应用。不过, 该合金存在高温脆性加剧、抗软化性能欠佳、易发生

基金项目: 强电磁技术全国重点实验室开放课题(2025KF022)。

Project Supported by Open Projects of the State Key Laboratory of Advanced Electromagnetic Technology(2025KF022).

过时效等固有缺陷，难以契合复杂工况的实际需求^[4-6]。传统实验手段研究合金性能存在成本高、耗时长

的局限，而分子模拟技术能够从微观电子层面系统探究性能变化规律，为新型合金的开发提供经济高效的理论依据。因此，将 C、Si 等微量元素引入 CuCr 合金体系，对其性能进行优化改良，已成为当前研究的重要着力点^[7]。

Cu 基合金触头在特高压场景下需平衡导电性与力学强度，复合强化法通过引入第 3 组元(如 Cr、Zr 等)成为主要改良手段。Cr、Zr 因对导电性影响小、强化效果显著成为理想掺杂元素^[8-9]。杨旗等^[10]研究发现，采用高温单相区固溶工艺可改善析出强化效果，与两相区固溶相比，单相区固溶后铸态 Cr 相更充分固溶，时效时可析出更多纳米 Cr 相弥散分布，合金力学性能显著提升，屈服强度和抗拉强度分别提升 29.3%、25.6%，且导电率未明显下降。于昊玮等^[11]对固溶态 Cu-0.7Cr-0.19Zr 合金进行冷轧处理，采用低温预时效、高温单级时效及二者结合的双级时效工艺制备样品，发现时效处理未导致明显再结晶，保留了超细晶结构和高密度位错，单级与双级时效均提升力学与电学性能，且双级时效效果更优。Kaushal 等^[12]研究 CuCrZr 合金时效硬化发现，Cu₄Zr 相圆柱形沉淀物体积分数小，位错切割作用形成较小硬化峰值，而 Cr₂Cu 沉淀物因位错作用呈环状，形成较大硬化峰值，且材料抗拉强度随温度升高而降低。

石墨铜基复合材料具有良好的耐磨性和导电性，广泛用于电接触材料，当有碳元素存在时，CuCr 合金内部微晶间湿润角会得到改善，同时铬与石墨形成的 Cr₃C₂ 相与其他碳化物相比具有较好的摩擦性能。

而 C 形成的高熔点碳化物还可抑制高温下 Cu 和 Cr 晶粒的异常长大，提升耐电弧侵蚀性和高温稳定性，且几乎不固溶于 Cu 基体，对导电率影响极小^[13]。Si 元素的添加则能细化体立方结构富 Cr 相的析出，同时 Si 的添加还能增强合金的固溶效果。Si 通过脱氧净化基体，减少氧化物夹杂，同时形成 CrSi₂过渡相降低 Cu-Cr 界面能，促进 Cr 相均匀弥散分布，在提升界面结合强度的同时细化晶粒，实现强度与塑性的平衡，导电率仍可保持在 80%IACS 以上^[14]。万霖等^[15]通过改变粉末锻造 FeCuCCr 合金中 C、Cr 质量分数研究发现，无 Cr 时合金组织以铁素体和渗碳体为主，硬度和抗拉强度随 C 质量分数小幅增加；添加 Cr 后，合金硬度随 Cr 质量分数增加而提升，最高达 HRA68.6。Qu J P 等^[16]研究发现添加 Si 能显著提高合金的耐高温软化性能，主要原因是添加 Si 后抑制了铬析出物的生长，其对边界的固定效果更好，从而抑制了再结晶的发生。

相较于 Zr、Ti 等高成本金属元素，C 和 Si 在成本与资源性上具有显著优势，可兼容现有粉末冶金及真空熔炼制备工艺，无需额外采用特殊专用保护气氛。此外，C 和 Si 的化合物(如 Cr₃C₂、CrSi₂)高温稳定性突出(熔点分别为 1 890 °C和 1 490 °C)，远高于 CuCr 合金工作温度^[17]。因此，文中基于密度泛函理论的第一性原理计算，通过构建不同掺杂比例的 CuCr 及 CuCrC/Si 固溶体模型，系统分析微量 C、Si 单掺杂对 CuCr 合金热力学稳定性(结合能、生成焓)、力学性能(体模量、剪切模量等)及电子结构(导电性、成键特性)的影响规律。通过计算弹性常数、态密度、能带结构及电荷布居，从微观尺度揭示掺杂元素作用机制，针

对当前 C、Si 掺杂 CuCr 合金研究较少的现状，为开发高导电、高强度、抗熔焊的新型铜基触头合金提供理论参考，推动电气设备关键元件技术升级。

1 计算模型及方法

模型的建立遵循第一性原理中“最小重复单元+浓度可控”原则，确保模型既能反映宏观性能，又能降低计算成本。模型中 Cu 选择面心立方晶系，每个本征 Cu 原胞中含有 4 个 Cu 原子，空间群为 FM/MMM，Cr 原子置换时采用“随机均匀分布”原则，避免 Cr 原子团聚，模拟实际合金中 Cr 的弥散分布，建立含有 32 个原子的 $2 \times 2 \times 2$ 的 CuCr_x ($x=0.03, 0.06, 0.09, 0.13, 0.16, 0.19, 0.22, 0.25$) 置换固溶体超晶胞模型，其中 CuCr_x 中 x 是原子分数，并将对应掺杂结构中的 Cu 原子用 3% 原子分数 C、Si 原子随机置换，以此得到 CuCrX ($X=\text{C}, \text{Si}$) 置换固溶体超晶胞模型，并对模型的相关性质进行分析。

采用 CASTEP 软件计算，经收敛性测试，平面波截断能设置为 450 eV，描述离子实与价电子间相互作用采用第一性原理计算平面波超软赝势 (OTFG ultrasoft)，采用周期性边界条件，计算过程中交换关联泛函选取广义梯度近似 (GGA) 下的 PBESOL，布里渊区 k 点积分网格大小取 $6 \times 6 \times 6$ ，自洽精度调整为 4.0×10^{-7} eV/atom，原子间相互作用力调整为 0.01 eV/Å，单原子能量设置为 5.0×10^{-6} eV/atom，原子最大位移为 5.0×10^{-4} Å，应力偏差为 0.01 GPa，对体系所有原子进行充分弛豫。研究所采用的固溶体计算模型见图 1。

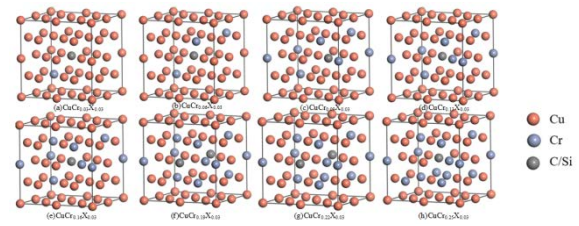


图 1 CuCrC/Si 合金固溶体计算模型

Fig. 1 Computational modeling of CuCrC/Si alloys in solid solution

2 计算结果与讨论

2.1 基本物理性能

文中以研究 CuCr 合金性能为基础，对各固溶合金模型中的 Cu 原子置换掺杂 3% 原子分数的 C、Si，进行充分弛豫后的晶格常数和晶胞体积见表 1-3。对比发现在置换掺杂 C 原子之后合金的晶格常数较未掺杂发生较大变化，且晶格常数的变化率随着晶格内 Cr 浓度的加大而不断升高。这是由于 C 原子半径为 77 pm，远小于 Cu 原子的半径 127 pm，晶格弛豫后晶胞的局部结构和电子结构会发生显著改变，且 C 原子与 Cu 原子之间键合特性差异较大，这也会对弛豫后的晶格常数产生影响。原子置换固溶体晶格变化率可以在一定程度上反映晶格畸变的剧烈程度。由表 2 可以看到随着 Cr 浓度的提升，晶格的畸变程度显著增加。相比之下表 3 所示 Si 原子的加入并没有对固溶体模型的晶格常数产生显著影响，晶格常数的变化率也基本保持原样。因为 Si 原子半径为 111 pm，相较于 C 原子在弛豫后对晶格局部的影响更小，且 Si 与 Cu 形成的共价键其键合特性与 Cu 的金属键差异较小，对晶格常数的影响也相对更弱^[18-19]。

表 1 CuCr 固溶体晶胞参数

Table 1 Cell parameters of CuCr solid solution

| 模型 | $a/\text{Å}$ | $\rho/(\text{g}\cdot\text{cm}^{-3})$ | $V/\text{Å}^3$ |
|----|--------------|--------------------------------------|----------------|
|----|--------------|--------------------------------------|----------------|

| | | | |
|----------------------|-------|-------|---------|
| CuCr _{0.03} | 7.133 | 9.252 | 362.902 |
| CuCr _{0.06} | 7.133 | 9.179 | 363.706 |
| CuCr _{0.09} | 7.137 | 9.147 | 362.852 |
| CuCr _{0.13} | 7.141 | 9.033 | 365.337 |
| CuCr _{0.16} | 7.198 | 9.006 | 364.269 |
| CuCr _{0.19} | 7.210 | 8.921 | 365.609 |
| CuCr _{0.22} | 7.264 | 8.856 | 366.124 |
| CuCr _{0.25} | 7.416 | 8.806 | 366.711 |

表 2 CuCrC 固溶体晶胞参数

Table 2 Cell parameters of CuCrC solid solution

| 模型 | $a/\text{\AA}$ | $\rho/(\text{g}\cdot\text{cm}^{-3})$ | $V/\text{\AA}^3$ |
|--|----------------|--------------------------------------|------------------|
| CuCr _{0.03} C _{0.03} | 7.071 | 9.026 | 362.513 |
| CuCr _{0.06} C _{0.03} | 7.099 | 9.019 | 360.664 |
| CuCr _{0.09} C _{0.03} | 7.173 | 8.827 | 366.328 |
| CuCr _{0.13} C _{0.03} | 7.294 | 8.749 | 367.385 |
| CuCr _{0.16} C _{0.03} | 7.305 | 8.770 | 364.331 |
| CuCr _{0.19} C _{0.03} | 7.377 | 8.660 | 366.742 |
| CuCr _{0.22} C _{0.03} | 7.445 | 8.638 | 365.449 |
| CuCr _{0.25} C _{0.03} | 7.704 | 8.621 | 363.938 |

表 3 CuCrSi 固溶体晶胞参数

Table 3 Cell parameters of CuCrSi solid solution

| 模型 | $a/\text{\AA}$ | $\rho/(\text{g}\cdot\text{cm}^{-3})$ | $V/\text{\AA}^3$ |
|---|----------------|--------------------------------------|------------------|
| CuCr _{0.03} Si _{0.03} | 7.002 | 9.071 | 363.634 |
| CuCr _{0.06} Si _{0.03} | 7.086 | 9.001 | 364.040 |
| CuCr _{0.09} Si _{0.03} | 7.100 | 8.956 | 364.333 |
| CuCr _{0.13} Si _{0.03} | 7.090 | 8.858 | 365.896 |
| CuCr _{0.16} Si _{0.03} | 7.129 | 8.823 | 365.171 |
| CuCr _{0.19} Si _{0.03} | 7.140 | 8.750 | 365.895 |
| CuCr _{0.22} Si _{0.03} | 7.215 | 8.682 | 366.039 |
| CuCr _{0.25} Si _{0.03} | 7.423 | 8.648 | 366.685 |

2.2 稳定性分析

为了对各掺杂模型的热力学稳定性进行分析,对所有模型的结合能及生成焓进行计算。计算式为:

$$E_{coh} = \frac{(E_{tot} - xE_{atom}^{Cu} - yE_{atom}^{Cr} - zE_{atom}^X)}{x + y + z} \quad (1)$$

$$\Delta H = \frac{(E_{tot} - xE_{solid}^{Cu} - yE_{solid}^{Cr} - zE_{solid}^X)}{x + y + z} \quad (2)$$

式(1)、(2)中: E_{coh} 为体系结合能; ΔH 为生成焓;

x 、 y 、 z 分别为固溶体模型中 Cu、Cr、X(C 或 Si)原子

的个数; E_{tot} 为固溶体模型体系总能量; E_{atom}^{Cu} 、 E_{atom}^{Cr} 、

E_{atom}^X 分别为单个 Cu、Cr、X(C 或 Si)原子的能量;

E_{solid}^{Cu} 、 E_{solid}^{Cr} 、 E_{solid}^X 分别表示基态单质 Cu、Cr、X(C 或 Si)原子能量。

合金结合能表示孤立原子结合为固溶体系所需能量,结合能为负值时体系可稳定存在,且负值绝对值越大,固溶体系越稳定^[20]。合金生成焓数值与其合金化能力相关,可表征合金形成的难易程度。生成焓为负值表明体系形成过程能自发放热,其负值绝对值越大,体系形成时放出能量越多,稳定时能量越低,越不易发生其他反应,此时合金具备较稳定的热力学结构^[21]。

不同 Cr 掺杂浓度的 CuCr、CuCrX(X=C、Si)合金结合能与生成焓见图 2、3。结果显示,掺入 3% 原子分数 C、Si 原子后,各固溶体合金结合能均为负,且随 Cr 浓度升高而结合能降低,说明热力学稳定性逐渐增强。C 掺杂体系结合能显著低于未掺杂体系,表明 C 可显著提升热力学稳定性,而 Si 掺杂对结合能无显著影响。CuCr_{0.25}C_{0.03} 的结合能因 Cr 浓度的升高导致晶格畸变加剧而略高于 CuCr_{0.22}C_{0.03},与前文对晶格常数的分析保持一致。生成焓方面,掺杂后各体系生成焓曲线与结合能曲线基本保持一致,说明各体系均具有自发固溶的趋势。CuCrC 生成焓显著低于 CuCr 合金,形成固溶体难度降低,而 CuCrSi 生成焓与 CuCr 合金无显著差异,与结合能分析一致。

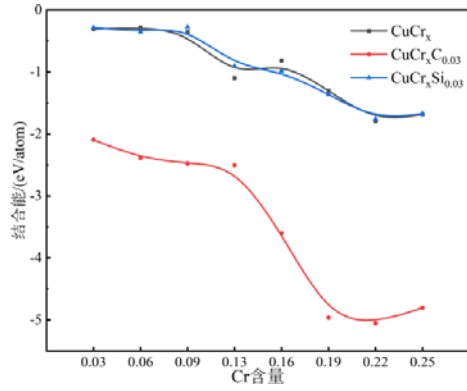


图 2 CuCr、CuCrC、CuCrSi 固溶体合金结合能

Fig. 2 The binding energy of CuCr, CuCrC, CuCrSi solid solution alloys

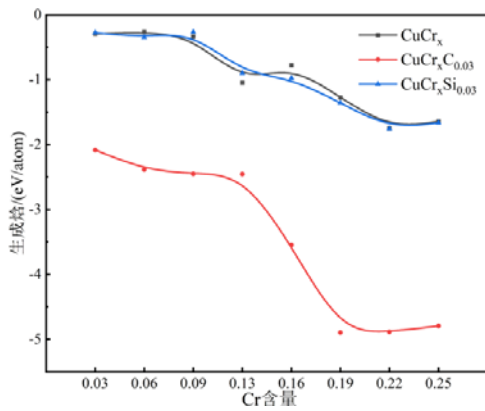


图 3 CuCr、CuCrC、CuCrSi 固溶体合金生成焓

Fig. 3 Enthalpy of formation of CuCr, CuCrC, CuCrSi solid solution alloys

表 4 不同成分 CuCrC 合金弹性常数及力学参数

Table 4 Elastic constants and mechanical parameters of CuCrC alloys with different compositions

| 模型 | C_{11}/GPa | C_{12}/GPa | C_{44}/GPa | B/GPa | G/GPa | E/GPa | γ |
|--|---------------------|---------------------|---------------------|----------------|----------------|----------------|----------|
| CuCr _{0.03} C _{0.03} | 161.463 | 149.105 | 25.312 | 153.226 | 17.659 | 51.029 | 0.375 |
| CuCr _{0.06} C _{0.03} | 174.704 | 144.704 | 35.533 | 154.074 | 27.320 | 63.570 | 0.364 |
| CuCr _{0.09} C _{0.03} | 174.884 | 146.773 | 40.239 | 156.143 | 29.766 | 84.205 | 0.349 |
| CuCr _{0.13} C _{0.03} | 185.942 | 141.449 | 35.856 | 156.280 | 30.412 | 85.679 | 0.330 |
| CuCr _{0.16} C _{0.0} | 185.204 | 148.805 | 46.738 | 160.939 | 35.323 | 98.407 | 0.333 |
| CuCr _{0.19} C _{0.03} | 190.613 | 147.599 | 51.090 | 161.973 | 39.257 | 108.968 | 0.328 |
| CuCr _{0.22} C _{0.03} | 198.832 | 146.632 | 51.700 | 164.032 | 41.460 | 114.266 | 0.318 |
| CuCr _{0.25} C _{0.03} | 219.538 | 138.995 | 53.786 | 165.843 | 48.380 | 132.948 | 0.314 |

表 5 不同成分 CuCrSi 合金弹性常数及力学参数

Table 5 Elastic constants and mechanical parameters of CuCrSi alloys with different compositions

| 模型 | C_{11}/GPa | C_{12}/GPa | C_{44}/GPa | B/GPa | G/GPa | E/GPa | γ |
|---|---------------------|---------------------|---------------------|----------------|----------------|----------------|----------|
| CuCr _{0.03} Si _{0.03} | 194.409 | 147.013 | 62.973 | 162.803 | 47.263 | 129.395 | 0.369 |
| CuCr _{0.06} Si _{0.03} | 194.489 | 147.907 | 79.646 | 163.434 | 57.104 | 153.444 | 0.344 |
| CuCr _{0.09} Si _{0.03} | 196.200 | 148.637 | 94.751 | 164.491 | 66.363 | 160.9632 | 0.326 |
| CuCr _{0.13} Si _{0.03} | 198.444 | 153.242 | 97.842 | 168.309 | 67.746 | 178.494 | 0.320 |

2.3 弹性性质

弹性性能表征了材料产生微小形变之后恢复原始结构的能力。晶体的弹性性质与许多其他性质都密切相关，比如状态方程、比热容、熔点等^[22]。文中采用广义胡克定律的应力—应变法对掺杂模型的弹性性质进行计算。晶体有 3 个独立的弹性常数 C_{11} 、 C_{12} 、 C_{44} 。弹性常数与总能量之间的关系满足

$$E(V_0, \varepsilon) = E(V_0, 0) + V_0 \sum_i \sigma_{iei} + \frac{V_0}{2} \sum_{ij} C_{ij\epsilon i \epsilon j} \quad (3)$$

式(3)中， V_0 和 $E(V_0, 0)$ 分别为未施加应变时体系的体积和体系的总能量。晶体的力学稳定性可由 Born-Huang 判据进行判断，弹性常数需要满足 $C_{11} > 0$ ， $C_{11} - C_{12} > 0$ ， $C_{44} > 0$ ， $C_{11} + 2C_{12} > 0$ ^[23]。不同成分 CuCrC、CuCrSi 合金弹性常数及力学参数见表 4、5，由表 4、5 可知，CuCrC 和 CuCrSi 合金体系各计算模型的弹性常数均满足上述判据，可进一步分析其弹性性质。

| | | | | | | | |
|---|---------|---------|---------|---------|--------|---------|-------|
| CuCr _{0.16} Si _{0.03} | 199.170 | 155.415 | 101.472 | 169.680 | 69.634 | 183.776 | 0.317 |
| CuCr _{0.19} Si _{0.03} | 197.833 | 153.843 | 99.950 | 168.214 | 68.768 | 179.504 | 0.322 |
| CuCr _{0.22} Si _{0.03} | 200.826 | 153.746 | 97.433 | 169.439 | 67.876 | 178.813 | 0.314 |
| CuCr _{0.25} Si _{0.03} | 205.775 | 154.637 | 95.485 | 171.963 | 67.519 | 182.047 | 0.314 |

基于 Hill 模型在 Reuss 近似下得到体模量 B_R 和剪切模量 G_R ，在 Voigt 近似下计算得到体模量 B_V 和剪切模量 G_V 。体模量 B 和剪切模量 G 可以根据独立弹性常数和 V-R-H 近似得到，表达式如下^[24]：

$$B_V = B_R = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (4)$$

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

$$G_R = \frac{5[(C_{11} - C_{12})C_{44}]}{4[C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})]} \quad (6)$$

$$B = \frac{B_V + B_R}{2} \quad (7)$$

$$G = \frac{G_V + G_R}{2} \quad (8)$$

杨氏模量 E 和泊松比 γ 的方程如下：

$$E = \frac{9GB}{3B + G} \quad (9)$$

$$\gamma = \frac{3B - 2G}{6B + 2G} \quad (10)$$

弹性模量是衡量材料抵抗弹性变形能力的物理量，表征其在弹性变形范围内应力与应变的比例关系，包括体模量 B 、剪切模量 G 和杨氏模量 E 。体模量值越大，抗压缩性、刚性及价键强度越高；剪切模量数值越大，材料硬度和抗塑性变形能力越高；杨氏模量值越大，材料刚度越大、越难发生弹性形变^[24]。

不同 Cr 掺杂浓度的 CuCr、CuCrC、CuCrSi 合金弹性模量见图 4-6。结果显示：C 的加入使 CuCrC 合金体模量、剪切模量及杨氏模量较未掺杂前显著下降；从宏观上来说 C 在固溶体系内部会起到润滑组元的作用从而降低体系的弹性强度；从微观上来说 C 易形成强共价键，而 Cu 和 Cr 主要以金属键结合，C 的引

入会在 Cu-Cr 金属基体中形成局部共价键区域，破坏金属键的连续性^[25]。CuCrC 合金体模量随 Cr 质量分数增加的变化率大于 CuCr 合金，其中 CuCr_{0.25}C_{0.03} 体模量最高为 165.843 GPa，较 CuCr_{0.25} 降低 3.659 GPa。其高 Cr 质量分数区间的剪切模量、杨氏模量变化率低于 CuCr 合金。而 Si 的加入使 CuCrSi 合金弹性模量较 CuCr 合金有所升高。从微观上讲 Si 倾向于形成共价键，且其共价键特性与 C 相比更接近金属键，所以 Si 的引入不会显著破坏 Cu-Cr 基体的金属键连续性；宏观上 Si 与 Cr 会形成较高硬度的硅化物并起到阻碍原子位错运动的作用从而提高体系的弹性强度。文[26]研究发现，CuCr 合金中添加 Si 可提高合金峰值硬度和抗软化性，且随着 Si 元素的添加而降低层错能、改变沉淀形态，验证了 Si 掺杂提升弹性模量、增强抗形变的能力。其中 CuCr_{0.25}Si_{0.03} 具有最高的体模量，而 CuCr_{0.16}Si_{0.03} 具有最高的剪切模量和杨氏模量。与 CuCr 合金不同的是，在此之后继续升高 Cr 的掺杂浓度 CuCrSi 合金的剪切模量和杨氏模量均出现下降。这是因为 Si 的掺杂浓度较低，对 CuCr 合金的强化作用达到极限，不能再与 Cr 形成第二相。对比分析发现，CuCr_{0.16}Si_{0.03} 的体模量较 CuCr_{0.25}Si_{0.03} 只降低了 2.283 GPa，且兼具最高剪切模量和杨氏模量，综合来看其弹性强度最优。由此可见，Si 的加入可减少高成本 Cr 用量并提高合金的弹性强度。不同成分 CuCr、CuCrC、CuCrSi 合金泊松比、 G/B 值、位错能 W 见图 7。

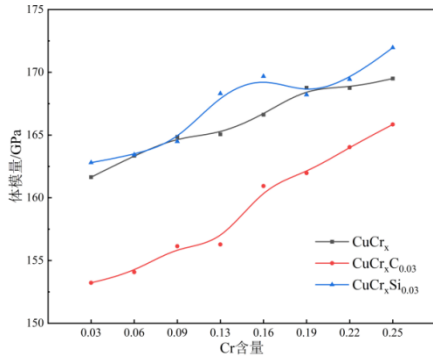


图 4 不同成分 CuCr、CuCrC、CuCrSi 合金体模量
Fig. 4 Bulk modulus of CuCr, CuCrC and CuCrSi alloys

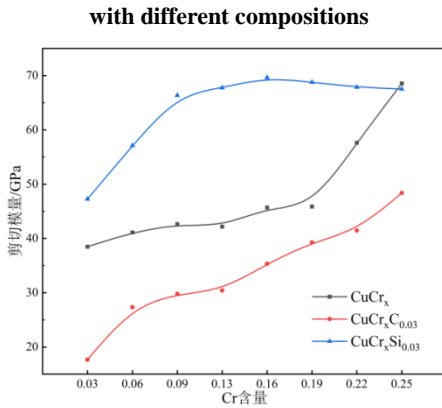


图 5 不同成分 CuCr、CuCrC、CuCrSi 合金剪切模量
Fig. 5 Shear modulus of CuCr, CuCrC and CuCrSi alloys

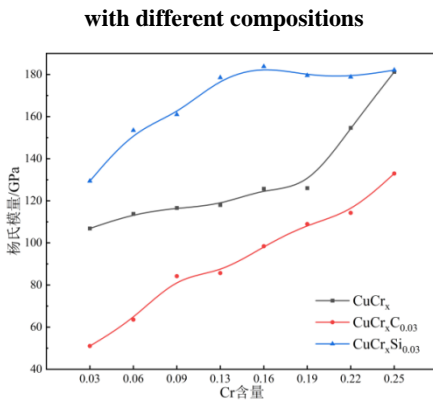


图 6 不同成分 CuCr、CuCrC、CuCrSi 合金杨氏模量
Fig. 6 Young's modulus of CuCr, CuCrC and CuCrSi alloys

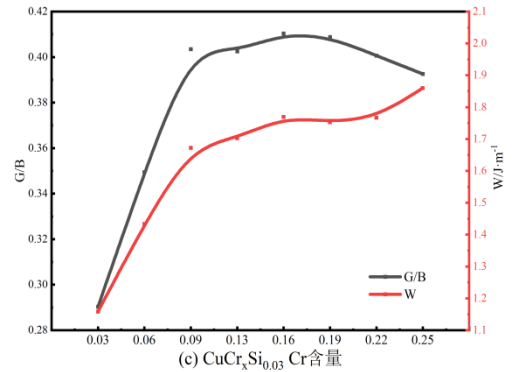
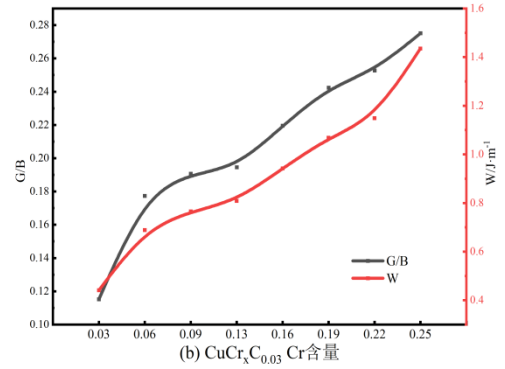
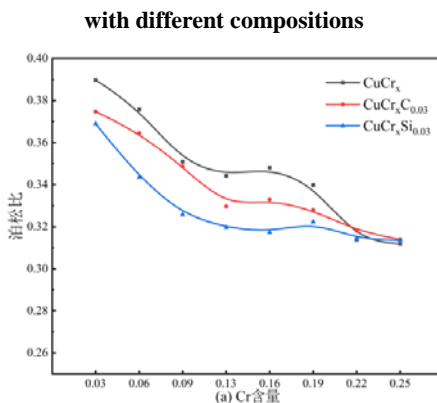


图 7 不同成分 CuCr、CuCrC、CuCrSi 合金泊松比、 G/B 值、位错能 W

Fig. 7 Poisson's ratio, G/B value and dislocation energy of CuCr, CuCrC and CuCrSi alloys with different compositions

材料的脆韧性可以用泊松比来进行判断。当材料呈脆性时 $\gamma < 0.26$ ，呈韧性时 $\gamma > 0.26$ ^[27]。不同 Cr 掺杂浓度的 CuCr、CuCrC、CuCrSi 合金泊松比见图 7(a)。结果显示，CuCrC、CuCrSi 合金泊松比均低于 CuCr 合金，其中 CuCrSi 合金整体泊松比最低，表明 C 和 Si 的加入会降低 CuCr 合金延展性、增强脆性，且 Si 的增脆作用更显著。3 种合金泊松比均随 Cr 浓度升高而降低，说明高浓度 Cr 掺杂仍会削弱合金整体延展性。

CuCr 合金作为真空断路器触头使用时存在熔焊现象，尤其在高电压分断大短路电流时更为显著。业界主要有两种应对措施：一是增大断路器分断机构弹簧弹力以减缓触头弹跳，但会增加机械结构重量和负担，降低断路器可靠性和寿命；二是改进触头材料本身性质^[28]。以上研究表明，向 CuCr 合金中加入脆性

相 C 后,合金的体模量、剪切模量均有不同程度的降低,抗拉伸强度下降,同时泊松比下降、脆性增强。同时依据文[29]对弹性模量的测试显示,C 添加使体模量从 120 GPa 降至 90 GPa,剪切模量从 45 GPa 降至 30 GPa,泊松比从 0.32 降至 0.28,与文中研究结果类似,脆性增强直接抑制了液态金属桥的形成,通过分形理论量化触头表面熔焊区域形貌,发现添加 C 后触头表面分形维数(D)从 2.8 降至 2.5 以下,对应熔焊面积减少 60% 以上。因此,此类弹性性质变化有助于减轻工况下触头合金的熔焊现象。

Pugh 判据也能反映材料的脆韧性。其指出:当剪切模量和体模量的比值 $G/B < 0.57$ 时,材料有良好的韧性且韧性随着比值的降低而增强^[30]。同时,文中还计算了各掺杂模型单个位错单位长度上的应变能。计算公式如下:

$$W \approx Gb^2 = 0.5Ga^2 \quad (11)$$

式(11)中: G 为剪切模量; b 为伯格矢量; a 为晶格常数。对于面心立方结构 $b^2 = 0.5a^2$ 。固溶体晶格畸变会导致位错应变能增加,单个位错单位长度应变能影响材料加工能耗:应变能越小,抗拉强度越低、塑性变形能力越强,加工能耗越低。CuCrC、CuCrSi 合金位错能及 G/B 值随 Cr 掺杂浓度的变化趋势见图 7(b)、(c)。结果显示,两种合金的位错能及 G/B 值均随 Cr 浓度增大而上升,与泊松比曲线走势相反,进一步验证了前文合金脆韧性分析的可靠性。CuCrC 合金曲线整体走势较 CuCrSi 合金缓和,与硅化物相阻碍位错运动、增加位错能有关,且 CuCrSi 合金位错能整体高于 CuCrC 合金。

2.4 硬度

3 种合金维氏硬度随 Cr 质量分数变化的关系曲

线见图 8。结果显示,CuCrC 合金硬度与 CuCr 合金无明显差异,且两者随 Cr 质量分数变化的曲线走势相近,均近似呈正相关趋势;CuCrSi 合金硬度较 CuCr 合金有一定提升。分析表明,虽然 CuCr_{0.25}Si_{0.03} 硬度最高,但较 CuCr_{0.16}Si_{0.03} 提升幅度有限,且 Cr 质量分数却增加 9%。结合前文对合金脆韧性分析,CuCr_{0.16}Si_{0.03} 还同时拥有比 CuCr_{0.25}Si_{0.03} 更良好的延展性和韧性。因此,CuCr_{0.16}Si_{0.03} 是兼顾弹性强度、硬度及力学性能的最优选择。

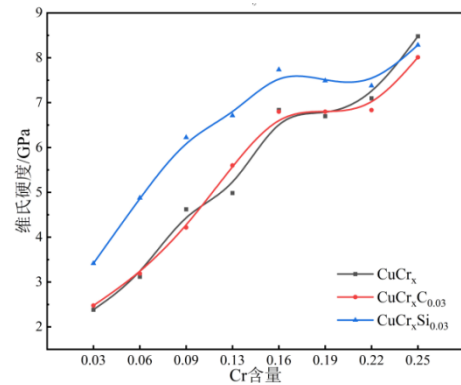


图 8 不同成分 CuCr、CuCrC、CuCrSi 合金维氏硬度
Fig. 8 Vickers hardness of CuCr, CuCrC and CuCrSi alloys with different compositions

2.5 电子态密度

材料的许多重要的宏观性质比如可加工性、脆韧性、导电性等都与其微观电子结构密切相关,所以对材料的电子结构进行研究有助于从微观角度更加深入地了解材料的外在性质^[31]。本章运用第一性原理计算对 8 种掺杂比例的 CuCr 合金的电子态密度和能带结构进行分析。为了篇幅简洁直观这里选取了 4 种比较有代表性的掺杂比例来对其变化进行分析。

为研究 C、Si 掺杂对 CuCr 合金电学性能的影响,从电子角度分析 CuCrX(X=C、Si)合金的态密度并与 CuCr 合金对比。图 9 显示,4 种代表性 Cr 掺杂浓度的 CuCr、CuCrX(X=C、Si)合金总态密度均连续穿越

费米能级，表明各固溶体均具有良好的导电性。掺入 C、Si 后，价带态密度峰值整体向费米能级移动，使价带电子跃迁趋势增强，电子更容易从价带激发到导带从而使合金整体的导电性提升^[32]。CuCrC 态密度峰值更靠近费米能级，理论上导电性更强。在分子轨道理论中，电子按能量高低填充在不同分子轨道上，其中，最高占据分子轨道(HOMO)：能量最高且被电子占据的轨道，电子易从这里被激发或失去；最低未占据分子轨道(LUMO)：能量最低且未被电子占据的轨道，电子易跃迁到这里或从这里接受电子。HOMO-LUMO 能隙(E_{H-L})：两者之间的能量差，是电子从 HOMO 跃迁至 LUMO 所需的最小能量。导电性的本质是“电子在材料中自由移动的能力”，而能隙决定了电子能否从“束缚态”(HOMO)进入“自由态”(LUMO 及以上轨道)，能隙 E_{H-L} 越小，则导电性越强^[33]。由表 6-8 可知，同等 Cr 质量分数情况下，能隙 $E_{H-L}(\text{CuCrC}) < E_{H-L}(\text{CuCrSi}) < E_{H-L}(\text{CuCr})$ ，对应其导电能力的强弱，且能隙 E_{H-L} 均随 Cr 质量分数的升高而升高，即合金导电性随 Cr 掺杂浓度的升高而稍有下降，与态密度的分析保持一致。

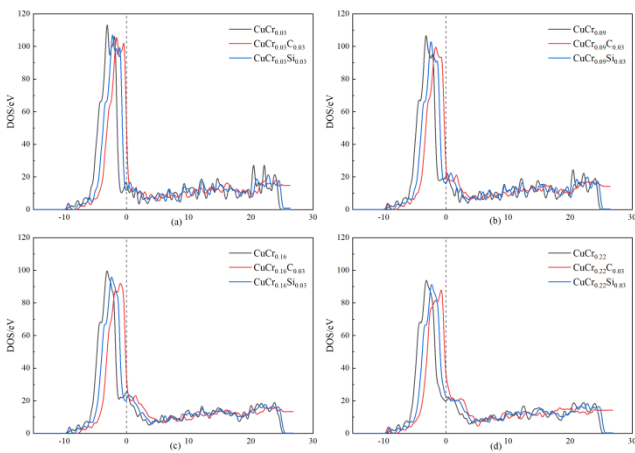


图 9 不同成分 CuCr、CuCrC、CuCrSi 合金总态密度
Fig. 9 The total density of states of CuCr, CuCrC and CuCrSi alloys with different compositions

表 6 CuCr 固溶体 HOMO、LUMO 能级及能隙

Table 6 HOMO, LUMO energy levels and energy gap of CuCr solid solution

| 模型 | HOMO/eV | LUMO/eV | 能隙 E_{H-L} /eV |
|----------------------|---------|---------|------------------|
| CuCr _{0.03} | -5.314 | -4.968 | 0.346 |
| CuCr _{0.09} | -5.207 | -4.620 | 0.587 |
| CuCr _{0.16} | -5.163 | -4.385 | 0.778 |
| CuCr _{0.22} | -4.810 | -3.536 | 1.274 |

表 7 CuCrC 固溶体 HOMO、LUMO 能级及能隙

Table 7 HOMO, LUMO energy levels and energy gap of CuCrC solid solution

| 模型 | HOMO/eV | LUMO/eV | 能隙 E_{H-L} /eV |
|--|---------|---------|------------------|
| CuCr _{0.03} C _{0.03} | -5.049 | -4.928 | 0.121 |
| CuCr _{0.09} C _{0.03} | -5.135 | -4.979 | 0.156 |
| CuCr _{0.16} C _{0.03} | -5.283 | -4.994 | 0.289 |
| CuCr _{0.22} C _{0.03} | -4.802 | -4.416 | 0.386 |

表 8 CuCrSi 固溶体 HOMO、LUMO 能级及能隙

Table 8 HOMO, LUMO energy levels and energy gap of CuCrSi solid solution

| 模型 | HOMO/eV | LUMO/eV | 能隙 E_{H-L} /eV |
|---|---------|---------|------------------|
| CuCr _{0.03} Si _{0.03} | -5.403 | -5.203 | 0.200 |
| CuCr _{0.09} Si _{0.03} | -5.051 | -4.783 | 0.268 |
| CuCr _{0.16} Si _{0.03} | -5.266 | -4.849 | 0.417 |
| CuCr _{0.22} Si _{0.03} | -4.948 | -4.137 | 0.811 |

此外，随 Cr 掺杂浓度升高，CuCrC、CuCrSi 合金键能均有所增强，与弹性性能分析中弹性强度与 Cr 浓度成正相关的结论一致。CuCrC 和 CuCrSi 合金的分态密度图见图 10、11，为图示直观，只选取部分轨道进行分析。CuCrC 中，Cu 与 Cr 的 d 轨道存在较大重叠、杂化现象明显，表明成键作用较强。C 原子的 p 轨道与 Cu、Cr 的 d 轨道均存在明显杂化，且随 Cr 浓度升高，C 与 Cr 杂化增强，并对费米能级处电子产生贡献，这是其导电性能强于 CuCr 合金的原因。CuCrSi 中，Si 原子的 p 轨道与 Cu、Cr 的 d 轨道杂化效果弱于 C，导致导电性能略逊；但随固溶体中 Cr 质量分数提升，Si 原子周围 Cr 原子增多，其价带远端 Si 的 s 轨道与 Cr 的 p 轨道杂化增强，提升合金键能与抗弹性形变能力。

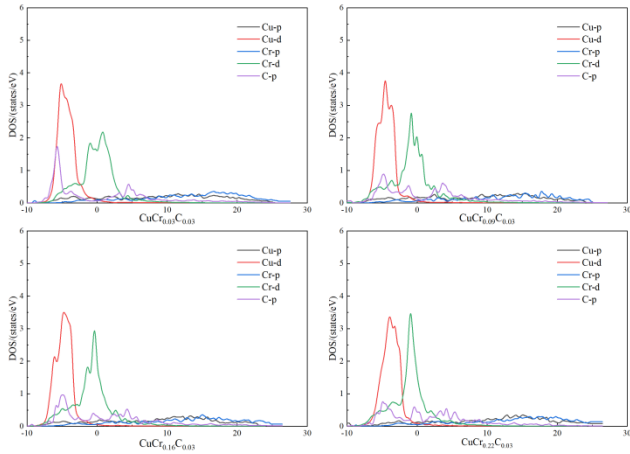


图 10 不同成分 CuCrC 合金分态密度

Fig. 10 The density of states of CuCrC alloys with different compositions

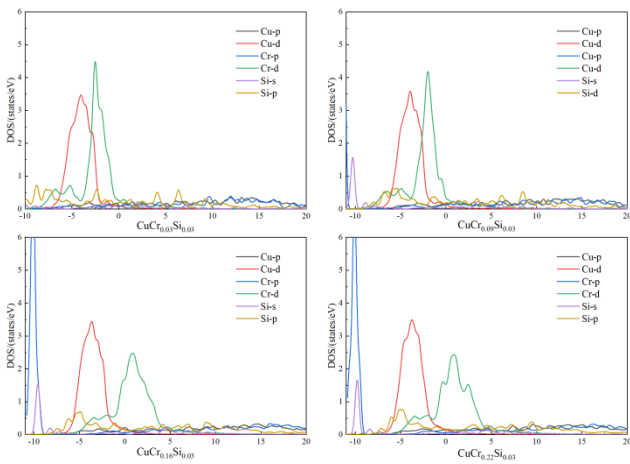


图 11 不同成分 CuCrSi 合金分态密度

Fig. 11 The density of states of CuCrSi alloys with different compositions

2.6 能带结构

4 种不同浓度的 CuCr、CuCrC、CuCrSi 合金的能带结构图见图 12-14。结果显示，各能带均穿越费米能级，表明各掺杂合金导电性良好，均未发生较大程度降低。能带结构密集程度为 CuCrC > CuCrSi > CuCr，对应 3 种合金导电能力顺序。文[13]的研究指出，在 Cu/石墨烯复合丝中，Cr 与 C 反应生成纳米 Cr₃C₂ 相，界面结合增强，导电率仍保持在 96.93% IACS。这一机制表明，C 的掺杂可通过形成稳定碳化物减少对 Cu 基体的电子散射，从而维持高

导电性；文[14]的研究显示，在 Cu-0.21Cr 合金中添加 0.02wt%Si 并进行固溶时效处理后，导电率保持在 92.5% IACS。以上实验结果与文中对 C、Si 单掺杂 CuCr 合金导电性结果保持一致，且与前文对态密度和 HOMO、LUMO 能级的分析结果相同。CuCrC、CuCrSi 合金随 Cr 掺杂浓度提升，0 eV 到 -2 eV 之间价带电子数量减少，合金导电能力下降；同时电子键能升高，电子发生跃迁的概率减小，材料韧性减弱，强度提高，这与前文态密度的分析结论一致。

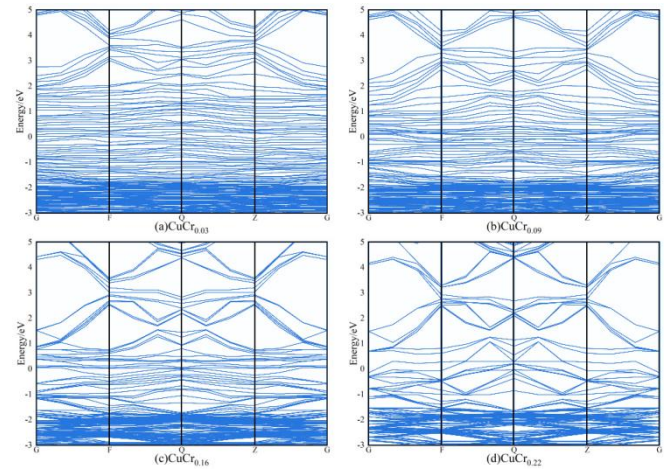


图 12 不同成分 CuCr 合金能带结构图

Fig. 12 The energy band structure diagram of CuCr alloy with different composition

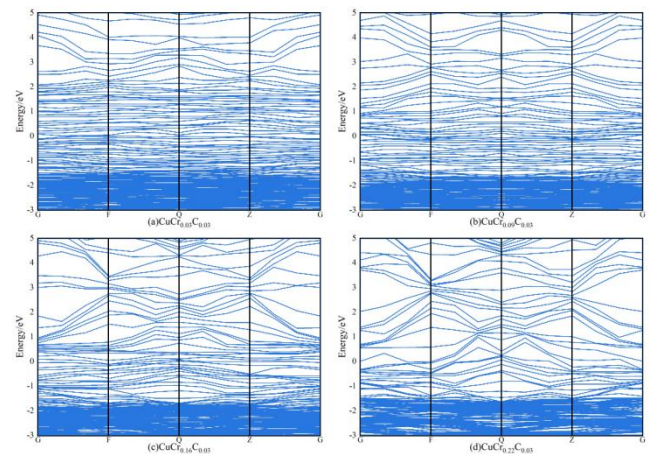


图 13 不同成分 CuCrC 合金能带结构

Fig. 13 The energy band structure diagram of CuCrC alloy with different composition

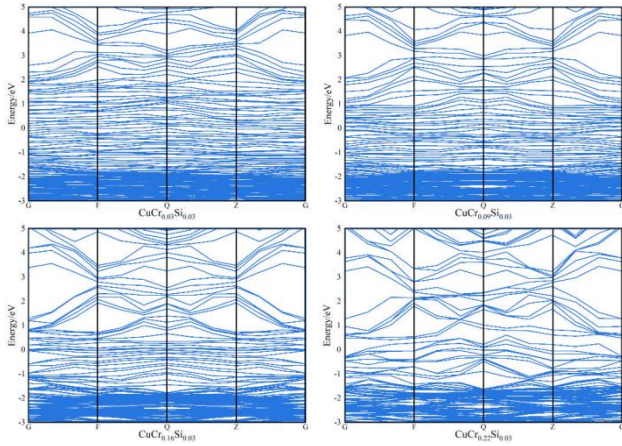


图 14 不同成分 CuCrSi 合金能带结构

Fig. 14 The energy band structure diagram of CuCrSi alloy with different composition

2.7 电荷布居

Milliken 电荷布居分析(population analysis)是对粒子轨道占据情况的定量分析,可用于揭示体系内粒子间成键及内部各轨道间电子转移情况^[34]。Milliken 指出, A 与 B 原子间布居数越大, 共用电子数越多、

共价键越强; 布居数越小, 离子键越强。

不同成分 CuCrC 合金电荷布居见表 9, 由表 9 显示, CuCrC 合金中 Cu、Cr 原子均为得电子, 电荷数分别从-0.06 e 降至-0.2 e、0.8 e 降至 0.54 e, 电荷变化分别由 p、p/d 轨道主导; C 原子电荷有增有减, 表明其在合金内部成键过程中起促进作用。不同成分 CuCrSi 合金电荷布居见表 10, 由表 10 可知, CuCrSi 合金中 Cu 原子表现为失电子, 电荷数从-0.05 e 升至-0.01 e, 电荷变化依然集中于 p 轨道; Cr 原子电荷得失情况与 CuCrC 合金中 Cr 原子相似; Si 原子失电子, 由 s 轨道贡献。从电荷转移情况来看 CuCrSi 合金内部原子间电荷转移更剧烈, 成键现象更明显, 进一步解释其抗弹性形变能力更强的原因。

表 9 不同成分 CuCrC 合金电荷布居

Table 9 The charge population of CuCrC alloys with different compositions

| 模型 | 元素 | s 轨道 | p 轨道 | d 轨道 | 总数 | 电荷/e |
|--|----|------|------|------|-------|-------|
| CuCr _{0.03} C _{0.03} | Cu | 0.86 | 0.53 | 9.67 | 11.06 | -0.06 |
| | Cr | 2.49 | 5.63 | 5.09 | 13.20 | 0.80 |
| | C | 1.52 | 2.91 | 0.00 | 4.43 | -0.43 |
| CuCr _{0.09} C _{0.03} | Cu | 0.86 | 0.55 | 9.68 | 11.09 | -0.09 |
| | Cr | 2.49 | 5.85 | 5.06 | 13.41 | 0.59 |
| | C | 1.48 | 3.04 | 0.00 | 4.52 | -0.52 |
| CuCr _{0.16} C _{0.03} | Cu | 0.86 | 0.58 | 9.67 | 11.10 | -0.10 |
| | Cr | 2.48 | 5.95 | 5.05 | 13.47 | 0.53 |
| | C | 1.47 | 2.96 | 0.00 | 4.43 | -0.43 |
| CuCr _{0.22} C _{0.03} | Cu | 0.86 | 0.66 | 9.67 | 11.20 | -0.20 |
| | Cr | 2.48 | 5.98 | 5.02 | 13.47 | 0.54 |
| | C | 1.37 | 3.13 | 0.00 | 4.50 | -0.50 |

表 10 不同成分 CuCrSi 合金电荷布居

Table 10 The charge population of CuCrSi alloys with different compositions

| 模型 | 元素 | s 轨道 | p 轨道 | d 轨道 | 总数 | 电荷/e |
|---|----|------|------|------|-------|-------|
| CuCr _{0.03} Si _{0.03} | Cu | 0.83 | 0.53 | 9.69 | 11.05 | -0.05 |
| | Cr | 2.59 | 5.69 | 5.07 | 13.35 | 0.65 |
| | Si | 1.30 | 2.63 | 0.00 | 3.94 | 0.06 |
| CuCr _{0.09} Si _{0.03} | Cu | 0.85 | 0.51 | 9.68 | 11.04 | -0.04 |
| | Cr | 2.59 | 5.81 | 5.09 | 13.48 | 0.52 |

| | | | | | | |
|---|----|------|------|------|-------|-------|
| CuCr _{0.16} Si _{0.03} | Si | 1.27 | 2.57 | 0.00 | 3.84 | 0.16 |
| | Cu | 0.82 | 0.51 | 9.70 | 11.03 | -0.03 |
| | Cr | 2.57 | 5.85 | 5.09 | 13.51 | 0.49 |
| | Si | 1.22 | 2.55 | 0.00 | 3.77 | 0.23 |
| CuCr _{0.22} Si _{0.03} | Cu | 0.83 | 0.48 | 9.71 | 11.01 | -0.01 |
| | Cr | 2.59 | 5.92 | 5.08 | 13.59 | 0.41 |
| | Si | 1.20 | 2.57 | 0.00 | 3.77 | 0.23 |

3 结论

基于密度泛函理论的第一性原理计算方法,运用CASTEP模块进行计算。通过原子替代法将3%原子分数的C、Si掺杂于CuCr固溶体中,构建不同Cr比例的8种CuCrC和八种CuCrSi合金模型,对几何优化后的晶胞参数、结合能、生成焓、弹性常数、电子态密度、能带结构及电荷布居进行分析,主要结论如下:

1)几何特性与热力学稳定性。C掺杂因原子半径和键合特性,对CuCr合金晶格常数影响比Si掺杂更显著,且晶格常数变化率随Cr浓度升高增大;C掺杂显著降低合金结合能与生成焓,提升热力学稳定性,而Si掺杂对二者无明显影响。

2)力学性质与抗熔焊性能。C掺杂显著降低弹性模量与泊松比,削弱抗压缩、抗剪切与抗拉伸性能,增强脆性,但有利于减轻真空断路器触头合金的熔焊现象。Si掺杂提升弹性模量,增强抗弹性形变能力,且随Cr浓度升高,剪切模量和杨氏模量先升后降,CuCr_{0.16}Si_{0.03}综合弹性强度最优,同时降低泊松比、增强脆性,改善抗熔焊性能,且CuCrSi合金硬度提升,CuCr_{0.16}Si_{0.03}是兼具高硬度、良好力学性能与经济性的优选成分。

3)电子结构特征。导电性:C、Si掺杂后合金态密度均穿越费米能级,价带峰值向费米能级移动,提

升价带电子跃迁趋势,增强导电性,其中CuCrC态密度峰值更靠近费米能级,理论导电能力更强;随Cr浓度升高,CuCrC、CuCrSi合金导电能力下降。

成键特性:CuCrC中Cu与Cr的d轨道杂化明显,成键作用强;C原子的p轨道与Cu、Cr的d轨道杂化显著,且随Cr浓度升高,C与Cr杂化增强,贡献费米能级处电子。CuCrSi中Si原子的p轨道与Cu、Cr的d轨道杂化弱于C,但随Cr质量分数提升,Si的s轨道与Cr的p轨道杂化增强,提升合金键能与抗弹性形变能力;原子间电荷转移更剧烈,成键现象更多,从电子层面解释其抗弹性形变能力更强的原因。

参考文献:

- [1]董博闻,吴振鹏,接金川,等.电触头用Cu-W合金的微观组织及抗烧蚀机理研究[J].铜业工程,2023(4):63-70.
DONG Bowen, WU Zhenpeng, JIE Jinchuan, et al. Microstructure and ablation resistance mechanism of Cu-W alloy used for electrical contacts[J]. Copper Engineering, 2023(4): 63-70.
- [2]崔得锋,黄岚霞,王景芹,等.2019-2023年电接触材料行业发展概况综述及趋势[J].电工材料,2024(6):1-5.
CUI Defeng, HUANG Lanxia, WANG Jingqin, et al. Overview and trend outlook of the development of electrical contact materials industry from 2019 to 2023[J]. Electrical Engineering Materials, 2024(6): 1-5.
- [3]韩宁,李鹏,王小军,等.高电压等级铜铬触头材料的制备[J].电工材料,2025(1):31-35.
HAN Ning, LI Peng, WANG Xiaojun, et al. Preparation of

- high voltage grade CuCr contact materials[J]. *Electrical Engineering Materials*, 2025(1): 31-35.
- [4] 郑阳升, 郑顺奇, 贺 勇, 等. 铜基电触头材料的研究现状与发展趋势[J]. *电子工业专用设备*, 2020, 49(6): 1-6.
ZHENG Yangsheng, ZHENG Shunqi, HE Yong, et al. Research and development of copper-based electric contact materials[J]. *Equipment for Electronic Products Manufacturing*, 2020, 49(6): 1-6.
- [5] 夏春勇, 杨长龙, 多俊龙, 等. 中高压开关用 Cu 基触头材料研究进展[J]. *特种铸造及有色合金*, 2024, 44(5): 598-605.
XIA Chunyong, YANG Changlong, DUO Junlong, et al. Research progress in cu-based contact materials for medium and high voltage switches[J]. *Special Casting & Nonferrous Alloys*, 2024, 44(5): 598-605.
- [6] 胡号旗, 许 赓, 杨丽景, 等. 高强高导铜铬锆合金的最新研究进展[J]. *材料导报*, 2018, 32(3): 453-460.
HU Haoqi, XU Cheng, YANG Lijing, et al. Recent advances in the research of high-strength and high-conductivity CuCrZr alloy[J]. *Materials Review*, 2018, 32(3): 453-460.
- [7] 贾远温, 彭 锋. 真空有载分接开关主触头烧蚀研究[J]. *自动化应用*, 2024, 65(18): 112-114.
JIA Yuanwen, PENG Feng. Research on erosion of main contact of vacuum On-Load tap changer[J]. *Automation Application*, 2024, 65(18): 112-114.
- [8] SALVAN C, BRIOTTET L, BAFFIE T, et al. CuCrZr alloy produced by laser powder bed fusion: Microstructure, nanoscale strengthening mechanisms, electrical and mechanical properties[J]. *Materials Science and Engineering A-Structural Materials Properties Microstructure and Processing*, 2021(826): 141915-141915.
- [9] PURCEK G, YANAR H, DEMIRTAS M, et al. Microstructural, mechanical and tribological properties of ultrafine-grained Cu-Cr-Zr alloy processed by high pressure torsion[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2020(816): 152675.
- [10] 杨 旗, 王志磊, 肖星宇, 等. 不同固溶处理对 Cu-Cr 系合金组织和性能的影响[J]. *中国有色金属学报*, 2024, 34(1): 89-99.
YANG Qi, WANG Zhilei, XIAO Xingyu, et al. Effect of different solid solution treatments on microstructure and properties of Cu-Cr alloy[J]. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*, 2024, 34(1): 89-99.
- [11] 于昊玮, 胡敬源, 张 梁, 等. 预时效工艺对 Cu-Cr-Zr 合金力学性能和电学性能的影响[J]. *铜业工程*, 2024(3): 163-170.
YU Haowei, HU Jingyuan, ZHANG Liang, et al. Effect of pre-aging treatment on mechanical and electrical properties of Cu-Cr-Zr alloys[J]. *Copper Engineering*, 2024(3): 163-170.
- [12] JHA K, NEOGY S, KUMAR S, et al. Correlation between microstructure and mechanical properties in the age-hardenable Cu-Cr-Zr alloy[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2021(546): 152775.
- [13] WANG Jiaxiao, ZUO Tingting, XUE Jiangli, et al. Investigation on the novel high-performance copper/graphene composite conductor for high power density motor[J]. *CES Transactions on Electrical Machines and Systems*, 2024, 8(1): 80-85.
- [14] 杜宜博, 周延军, 宋克兴, 等. Si 对 Cu-0.21 mass%Cr 合金富 Cr 析出相和性能的影响[J]. *材料热处理学报*, 2022, 43(5): 49-54.
DU Yibo, ZHOU Yanjun, SONG Kexing, et al. Effect of Si on Cr-rich precipitates and properties of Cu-0.21 mass%Cr alloy[J]. *Transactions of Materials and Heat Treatment*, 2022, 43(5): 49-54.
- [15] 万 霖, 张继峰, 孙 露, 等. C 与 Cr 含量对粉末锻造 Fe-Cu-C-Cr 合金组织和物理性能影响[J]. *粉末冶金技术*, 2023, 41(6): 508-515.
WAN Lin, ZHANG Jifeng, SUN Lu, et al. Effects of C and Cr contents on microstructure and physical properties of powder forged Fe-Cu-C-Cr alloys[J]. *Powder Metallurgy Technology*, 2023, 41(6): 508-515.
- [16] QU J P, ZHANG W S, YUE S P, et al. Strengthening and high-temperature softening resistance of low Si-added Cu-Cr-Zr alloy for fusion reactor application[J]. *Materials Science and Engineering a*, 2022(861): 144328.
- [17] 雷 前, 杨一海, 肖 柱, 等. 高强高导高耐热铜合金的研究进展与展望[J]. *材料导报*, 2021, 35(15): 15153-15161.
LEI Qian, YANG Yihai, XIAO Zhu, et al. Research progress and prospect on high strength, high conductivity, and high heat resistance Copper alloys[J]. *Materials Review*, 2021,

- 35(15): 15153-15161.
- [18]SUN Y Q, XU G L. Effect of Ag on properties, microstructure, and thermostability of Cu-Cr alloy[J]. *Materials*, 2020, 13(23): 5386.
- [19]SHAN Liyuan, WANG Xueliang, CHANG Yanli, et al. Improving the mechanical performance of CuCr alloy by dissolving Cu in the Cr second phase[J]. *Materials Characterization*, 2021(176): 111104.
- [20]周少兰, 李忠盛, 丛大龙, 等. Ta-W/Hf 合金的结构稳定性及力学性质的第一性原理计算[J]. *原子与分子物理学报*, 2025, 42(1): 135-144.
- ZHOU Shaolan, LI Zhongsheng, CONG Dalong, et al. First-principles study of structural stability and mechanical properties of Ta-W/Hf alloys[J]. *Journal of Atomic and Molecular Physics*, 2025, 42(1): 135-144.
- [21]ZHOU Jiamin, ZHU Degui, TANG Liuting, et al. Microstructure and properties of powder metallurgy Cu-1%Cr-0.65%Zr alloy prepared by hot pressing[J]. *Vacuum*, 2016(131): 156-163.
- [22]JUNFENG Wang, JINSHUI Chen, CHENGJUN Guo, et al. Effect of heat treatment on low cycle fatigue properties of Cu-Cr-Zr alloy[J]. *Materials Characterization*, 2019(158): 109940.
- [23]马志鹏, 张玉亭, 李岩, 等. 石墨烯增强 SiC 陶瓷界面结合的第一性原理计算[J]. *复合材料学报*, 2026, 43(1): 606-616.
- MA Zhipeng, ZHANG Yuting, LI Yan, et al. First-principles calculations of interfacial bonding in graphene-enhanced SiC ceramics[J]. *Acta Materialiae Compositae Sinica*, 2026, 43(1): 606-616.
- [24]鲁昊天, 杨鲲, 李文戈. 钎掺杂 La₂Ce₂O₇ 电子结构和性能的第一性原理计算[J]. *机械工程材料*, 2024, 48(7): 63-69.
- LU Haotian, YANG Kun, LI Wenge. First-principles calculation of electronic structure and properties of Gd doped la₂Ce₂O₇[J]. *Materials for Mechanical Engineering*, 2024, 48(7): 63-69.
- [25]ZHANG Pengchao, SHI Jiefu, YU Yingshui, et al. Effect of cryorolling on microstructure and property of high strength and high conductivity Cu-0.5wt.%Cr alloy[J]. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 2020, 30(9): 2472-2479.
- [26]PANG Yong, XIA Chengdong, WANG Mingpu, et al. Effects of Zr and (Ni, Si) additions on properties and microstructure of Cu-Cr alloy[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2014, (582): 786-792.
- [27]TOUQIR M, MURTAZA G, AYYAZ A, et al. First-principles calculations to investigate Electronic, half-metallicity, thermodynamics, thermoelectric and mechanical properties of new half-heusler alloys FeCoZ(Z=Si, Ge, and Pb)[J]. *Computational and Theoretical Chemistry*, 2025(1244): 115066.
- [28]王昊晴, 李向阳, 林金阳, 等. Weibull 分布在真空断路器容性关合预击穿特性研究中的应用[J]. *高压电器*, 2020, 56(4): 179-183.
- WANG Haoqing, LI Xiangyang, LIN Jinyang, et al. Application of weibull distribution in prebreakdown characteristics when capacitive closing of vacuum circuit breakers[J]. *High Voltage Apparatus*, 2020, 56(4): 179-183.
- [29]YU Li, WANG Jianhua, GENG Yingsan, et al. High-current vacuum arc phenomena of nanocrystalline CuCr₂₅ contact material[J]. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 2011, 39(6): 1418-1426.
- [30]LI Pan, HUANG Long, CHEN Jinmao, et al. First-principles study of Co₂₁W₁₈ with pressure effect: The structural, mechanical, electronic properties and Debye temperature[J]. *Materials Today Communications*, 2022(33): 104276.
- [31]洗爱平, 朱耀宵. Cu-Cr 触头合金制备技术的发展[J]. *金属学报*, 2003, 39(3): 225-233.
- XIAN Aiping, ZHU Yaoxiao. The development of manufacture processing for Cu-Cr Contact Alloy[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2003, 39(3): 225-233.
- [32]王福容, 张永梅, 柏国宁, 等. Al 掺杂 Mg/Mg₂Sn 合金界面的第一性原理计算[J]. *金属学报*, 2023, 59(6): 812-820.
- WANG Furong, ZHANG Yongmei, BAI Guoning, et al. First principles calculation of Al-doped Mg/Mg₂Sn alloy interface[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2023, 59(6): 812-820.
- [33]辛燕, 葛运年, 李泽中, 等. 储能电池有机电极材料改性策略研究进展[J]. *物理化学学报*, 2024, 40(2): 14-44.
- XIN Yan, GE Yunnian, LI Zezhong, et al. Research progress on modification strategies of organic electrode materials for energy storage batteries[J]. *Acta Physico-Chimica Sinica*, 2024, 40(2): 14-44.
- [34]皇甫颢, 王子龙, 刘永利, 等. W1-xIrx 固溶合金几何结

构、电子结构、力学和热力学性能的第一性原理计算[J]. 金属学报, 2022, 58(2): 231-240.

HUANG FU Hao, WANG ZI Long, LIU Yongli, et al. A first principles investigation of W1-xIrx alloys: Structural, electronic, mechanical, and thermal properties[J]. Acta Metallurgica Sinica, 2022, 58(2): 231-240.

丁 璨(1982—), 男, 博士, 讲师, 主要从事高压开关电器的实验、仿真及理论计算(E-mail: dingcan@ctgu.edu.cn)。

郭 旭(2000—), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为电气工程新型材料(通信作者)(E-mail: 15076984824@163.com)。