

铝-稀土金属间化合物形成焓的计算

王 为, 汤振雷, 占春耀, 聂祚仁

(北京工业大学, 北京 100022)

摘 要: 详细分析了二元铝-稀土金属间化合物的形成焓的 Miedema 计算值和文献报道数据的误差分布。结果表明, 计算值相比于文献中实验数据普遍呈现负偏差。为此, 计算研究中需要针对铝-稀土元素重要的影响因子——稀土原子与铝原子的半径比来修正热力学计算模型。对铝-稀土金属间化合物的系列计算结果及其误差分析说明, 修正的 Miedema 模型计算值更加接近实验值, 误差由原来的 36% 缩小到目前的 5%。并利用 MTDATA 热力学计算软件部分验算计算结果, 证明依据新模型的热力学计算预测更加准确可靠。用新模型计算了常见的铝-稀土金属间化合物的形成焓, 同时也计算了 Al-Er, Al-Tb, Al-Gd 等研究数据缺乏的铝-稀土金属间化合物的形成焓。

关键词: 热力学计算; 形成焓; 铝-稀土金属间化合物; Miedema 模型; MTDATA

中图分类号: TG111.3

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2009)12-2100-06

铝合金以其优异的导热性、导电性、塑性、比强度、低密度等性能而被广泛应用。但是, 与此同时, 人们也在不断研究提高铝合金的强度和综合性能的方法^[1-3], 常用的方法有细晶强化^[4], 析出强化等^[5], 而利用稀土微合金化的方法改变合金的相结构来提高合金的性能是目前主要方法之一^[6,7]。设计合金相和讨论改性机制等都需要热力学方面的理论分析和预测, 但是, 有关铝-稀土金属间化合物方面的热力学资料缺乏, 全面系统分析有困难, 因此, 开展有关铝-稀土合金, 特别是部分铝-稀土金属间化合物的热力学基础数据的理论计算方法和模型研究, 以及相关数据的收集评估有重要意义。关于铝-稀土合金的热力学计算研究一直是研究的热点。路贵民计算过 Al-Sc 的热力学性质^[8]; 余胜文计算分析了 Al-Mg-Sc 合金中热力学平衡相及其相变规律^[9]; 讨论过 Al-Mg-Er 系统中主强化相 Al₃Er 相的析出机制和基本热力学数据^[10]。但有文献^[11]指出, 采用 Miedema 模型计算的热力学数据, 对于过渡族元素-非过渡族元素, 一般误差值可能高达 50 kJ/mol 或者相对误差达到 30% 以上。对于镧系 Laves 相, 计算值和实验值误差在 20~80 kJ/mol, 有些情况误差甚至达到 90 kJ/mol, 即相对误差可达 60%。本工作即以此问题展开, 研究采用 Miedema 计算 Al-RE 金属间化合物的形成焓及误差, 通过修正 Miedema 计算模型和参数, 并计算所涉及的相关铝-稀土合金化合物

相的形成焓, 再利用 MTDATA 热力学和相平衡计算分析平台(英国国家物理实验室研发)验算比对, 讨论所提出的计算模型的准确性和计算结果的精确性。

1 计算模型和条件

对简单合金系统的热力学计算, 讨论最多的是 Miedema 模型。此计算模型的特点是以元素的基本物理参数(元素的摩尔体积, 电负性, 电子密度等)来计算合金的形成焓, 比较简单快捷。通过多年的发展, 现在一般计算所采用的模型表述式如下^[12]:

$$\Delta H = f(x_i, V)g(x_i, n_{ws})p\left[\frac{q}{p}(\Delta n_{ws}^{1/3})^2 - (\Delta\phi)^2 - \alpha\frac{r}{p}\right] \quad (1)$$

式中,

$$g(x_i, n_{ws}) = \frac{2x_iV_i^{2/3} + 2x_jV_j^{2/3}}{(n_{ws}^{1/3})_j^{-1} + (n_{ws}^{1/3})_i^{-1}} \quad (2)$$

$$f(x_i, V) = x_i^s \cdot x_j^s \cdot [1 + \lambda(x_i^s \cdot x_j^s)^2] \quad (3)$$

$$\text{式中, } x_i^s = \frac{x_iV_i^{2/3}}{x_iV_i^{2/3} + x_jV_j^{2/3}} \quad (4)$$

$$x_j^s = \frac{x_jV_j^{2/3}}{x_iV_i^{2/3} + x_jV_j^{2/3}} \quad (5)$$

$$\text{式中, } V_i^{2/3} = V_{i0}^{2/3} \cdot [1 + \mu f_j^i \cdot (\phi_j - \phi_i)] \quad (6)$$

$$V_j^{2/3} = V_{j0}^{2/3} \cdot [1 + \mu f_i^j \cdot (\phi_j - \phi_i)] \quad (7)$$

$$\text{式中, } f_j^i = x_j^s (1 + \lambda x_i^s x_j^s) \quad (8)$$

$$f_i^j = x_i^s (1 + \lambda x_i^s x_j^s) \quad (9)$$

收稿日期: 2008-11-27

基金项目: 国家重点基础研究发展规划项目(01009790200601); 国家杰出青年科学基金(50525413)

作者简介: 王 为, 男, 1964 年生, 教授, 北京工业大学材料科学与工程学院, 北京 100022, 电话: 010-67396439, E-mail: wangwei@bjut.edu.cn

公式中有系列参数, λ 表示合金的有序度; μ 为常数, 随元素的原子价不同而异; ϕ_i 和 ϕ_j 分布表示 i 和 j 原子的电负性; $n_{(ws)i}$ 和 $n_{(ws)j}$ 分布表示 i 和 j 的电子密度参数; V_i 和 V_j 分布为 i 和 j 原子的摩尔体积; p, q, r 分别为经验参数, Miedema 在讨论模型时总结出经验参数的取值规律^[13]。表 1 所示为计算中相关的铝和稀土元素的参数。

考虑到元素的结构和性能参数, 稀土元素除 Eu 和 Yb 以外, 一般稀土元素的电负性、原子半径等物性参数都较相近, 所以可以推测 Miedema 模型计算后相似的金属间化合物的形成焓会比较相近。但由于这些原子物性参数有差别以及内层电子的分布不同, 相似的铝-稀土金属间化合物热力学性质还是有所差别。在铝-稀土二元合金系统形成的金属间化合物中, 轻稀土-铝合金中的金属间化合物就与重稀土-铝合金中形成的键的结构不同, 形成焓大小也不同。另外, 在上述的计算模型中, 对于 r/p 的比值一般仅仅考虑了过渡族金属的 3d 电子和非过渡族金属的 P 电子接触后, 轨道互相杂化能量降低所造成的影响, 还没考虑到 4f 或 5d 电子的作用。由于稀土原子内层电子轨道的电子并没填满, 从成键的角度看, 会对铝-稀土元素间形成化合物有一定的影响。由此看来, 用上述模型计算出的值与实验值会有一定的误差。此外还需说明, Miedema 经典计算模型在确定常数参数时, 一般都是根据实验数据的研究经验取值, 并假定某一类合金系统取同样的值, 这种假定并未经严格证明, 对于具有特殊性的稀土-铝合金显然也会引起误差。

表 1 铝和稀土元素的参数值

Table 1 Parameters of aluminum and rare earth^[12]

Element	$n_{(ws)i}^{-1/3}$	ϕ	$V^{2/3}$	μ
Al	1.39	4.20	4.60	0.07
Sc	1.27	3.25	6.1	0.07
Y	1.21	3.20	7.3	0.07
La	1.09	3.05	8.0	0.07
Ce	1.19	3.18	7.77	0.07
Pr	1.20	3.19	7.56	0.07
Nd	1.20	3.19	7.51	0.07
Pm	1.21	3.19	7.43	0.07
Sm	1.21	3.20	7.37	0.07
Eu	2.50	0.88	9.43	0.04
Gd	1.21	3.20	7.34	0.07
Tb	1.22	3.21	7.20	0.07
Dy	1.22	3.21	7.12	0.07
Ho	1.22	3.22	7.06	0.07
Er	1.23	3.22	6.98	0.07
Tm	1.23	3.22	6.90	0.07
Yb	0.92	2.58	8.52	0.04
Lu	1.24	3.22	6.81	0.07

2 计算结果和讨论

稀土和 Al 能形成多种金属间化合物, 在 RE-Al 二元系热力学计算的研究中, 一般认为轻稀土 (Pr、Nd 等) 与 Al 组成的二元体系都存在 RE₃Al、RE₂Al、REAl、REAl₂、REAl₃、RE₃Al₁₁ 等金属间化合物, 其中 REAl₂ 是一致熔化合物, 其它化合物都是由包晶反应或共晶反应生成。重稀土 (Gd、Dy、Er、Ho) 与 Al 组成的二元体系都存在 RE₂Al、RE₃Al₂、REAl、REAl₂、REAl₃ 等金属间化合物^[14]。表 2 和表 3 列出了稀土-铝合金化合物形成焓及相应文献报道的形成焓相关数据 (ΔH_1 是通过文献查到的铝-稀土金属间化合

表 2 铝-轻稀土金属间化合物的形成焓

Table 2 Enthalpies of intermetallics in aluminum and light rare earth (kJ/mol-atom)

Alloy	ΔH_1	Ref.	Code No.	ΔH_2	ΔH_3
Al ₁₁ La ₃	-38.5	[15]	1	-48.9	-37.2
AlLa ₃	-25.0	[15]	2	-37	-26.1
Al ₂ La	-50.0	[17]	3		
	-51.4	[21]	4	-64	-50.2
	-54.2	[18]	5		
AlLa	-46.0	[20]	6	-66	-49.3
AlLa ₂	-50.5	[20]	7	-56	-34.8
Al ₃ La	-44.2	[20]	8	-52	-42.7
	-43.4	[20]	9		
AlCe	-46	[26]	10	-68	-51.3
Al ₂ Ce	-52.2	[18]	11		
	-48.9	[21]	12	-65	-51.7
	-50	[26]	13		
Al ₃ Ce	-39.5	[21]	14	-55	-43.7
	-27	[26]	15		
Al ₁₁ Ce ₃	-39	[20]	16	-48	-38.0
	-41	[26]	17		
Al ₁₁ Pr ₃	-43.6	[19]	18	-47.9	-37.4
Al ₃ Pr	-	-	-	-55.2	-43.1
AlPr ₂	-	-	-	-47	-36.7
AlPr	-	-	-	-65.7	-51.3
Al ₂ Pr	-54.2	[16]	19	-65.7	-51.3
AlPr ₃	-	-	-	-35.2	-27.5
AlNd ₃	-27.5	[24]	20	-39	-27.7
AlNd ₂	-36.5	[24]	21	-51	-36.9
AlNd	-50	[24]	22	-69	-51.5
Al ₂ Nd	-53.6	[18]	23	-64	-51.4
	-53	[24]	24		
Al ₃ Nd	-45	[24]	25	-52	-43.1
Al ₁₁ Nd ₃	-41	[24]	26	-48	-37.3
Al ₁₁ Sm ₃	-	-	-	-47.2	-37.3
AlSm ₂	-38	[27]	27	-51	-37.5
Al ₃ Sm	-47.5	[27]	28	-52	-43.2
Al ₂ Sm	-54.3	[18]	29		
	-55.0	[27]	30	-64	-51.7
	-55	[19]	31		
AlSm ₃	-	-	-	-35.7	-28.2

表 3 铝-重稀土金属间化合物的形成焓

Table 3 Enthalpies of intermetallics in aluminum and heavy rare earth (kJ/mol·atom)

Alloy	ΔH_1	Ref.	Code No.	ΔH_2	ΔH_3
Al ₃ Gd					-42.6
AlGd ₂	-34.7	[21]	32		
	-29	[22]	33	-51	-37.2
AlGd	-39.4	[24]	34		
	-42.9	[18]	35	-69	-51.6
Al ₂ Gd	-	-			-29.0
Al ₂ Gd ₃	-33.3	[18]	36	-60	-44
Al ₃ Tb	-	-		-54.3	-43.1
Al ₂ Tb	-	-		-65.1	-51.7
AlTb	-	-		-66.5	-52.8
Al ₂ Tb ₃	-	-		-56.8	-45.1
AlTb ₂	-	-		-48.0	-38.1
AlTb ₃	-	-		-36.1	-28.7
Al ₃ Dy	-	-		-53.1	-42.2
Al ₂ Dy	-52.7	[18]	37	-64.1	-50.9
AlDy	-	-		-65.6	-52.1
Al ₂ Dy ₃	-	-		-56.1	-44.6
AlDy ₂	-	-		-47.6	-37.8
AlDy ₃	-	-		-35.8	-28.4
Al ₃ Ho	-	-		-52.8	-42.2
Al ₂ Ho	-52.5	[18]	38	-62.6	-50.0
AlHo	-	-		-65.5	-52.3
Al ₂ Ho ₃	-	-		-56.2	-44.9
AlHo ₂	-	-		-47.6	-38.0
AlHo ₃	-	-		-35.7	-28.5
Al ₃ Er	-	-		-53.3	-42.8
Al ₂ Er	-50.5	[18]	39	-64.5	-51.8
	-49.1	[24]	40		
AlEr	-	-		-66.6	-53.5
Al ₂ Er ₃	-	-		-57.3	-46.0
AlEr ₂	-	-		-48.4	-38.9
AlEr ₃	-	-		-36.5	-29.3
Al ₃ Tm	-	-		-51.7	-41.8
Al ₂ Tm	-	-		-62.8	-50.7
AlTm	-	-		-65.1	-52.6
Al ₂ Tm ₃	-	-		-56.1	-45.3
AlTm ₂	-	-		-47.5	-38.4
AlTm ₃	-	-		-35.8	-28.9
Al ₃ Lu	-	-		-54.2	-44.3
Al ₂ Lu	-	-		-65.8	-53.8
AlLu	-	-		-68.7	-56.1
Al ₂ Lu ₃	-	-		-59.2	-48.4
AlLu ₂	-	-		-50.7	-41.4
AlLu ₃	-	-		37.8	30.9
AlY ₂	-	-		-47.5	-38.2
AlY ₃	-47	[25]	41	-52	-28.7
Al ₂ Y	-40.5	[25]	42		
	-50.4	[23]	43	-64	-52.2
	-50.5	[19]	44		
AlY	-44	[25]	45	-69	-53.0
Al ₂ Y ₃	-40.0	[24]	46	-60	-45.2
AlSc	-62.0	[28]	47		
	-41.1	[24]	48	-68	-57.6
AlSc ₂	-28.2	[28]	49	-54	-43.5
Al ₂ Sc	-31.3	[28]	50		
	-37	[22]	51	-59	-52.9
Al ₃ Sc	-59.8	[28]	52		
	-43.5	[29]	53	-49	-42.7
Al ₂ Sc ₃	-	-		-58.5	-50.7

物形成焓的实验值, ΔH_2 是用 Miedma 模型式 (1) 计算出的形成焓, ΔH_3 是模型修正后的计算结果)。由表 2 和表 3 的数据比较可以看出, 用式 (1) 计算的结果比文献中实验结果要更负。经计算可知, 有些金属间化合物形成焓的计算值和文献实验值偏差很大 (此处取偏差 = (计算值 - 实验值) / 实验值), 如 Al₂Gd₃ 和 AlSc₂ 的形成焓, 偏差分别达到 80% 和 90%, 偏差大于 30% 的有 18 个, 占了表中所有数据的 1/3 还多, 表中数据总体平均偏差 (= 所有偏差之和 / 数据个数) 为 36%。

原子半径比是影响化合物类型及热力学参数的重要因素。而在 Miedema 模型中并没有考虑到半径比这个元素间相互关联的因素。因此在充分考虑结构影响因子的基础上, 修正模型重新计算表 2 中的所列相后, 发现引入铝原子半径与稀土原子半径的比值 R_{Al}/R_{RE} 时计算结果更为准确, 计算所依据的 Miedema 模型如下:

$$\Delta H_{re} = \frac{R_{Al}}{R_{RE}} \times \Delta H \quad (10)$$

式中, ΔH_{re} 表示修正后的形成焓, R_{Al} 和 R_{RE} 分别表示铝和稀土的原子半径(表 4), ΔH 的值由式 (1) 计算得出。根据式 (10) 重新计算铝-稀土的形成焓后, 计算结果列在表 2 和表 3。从表 2 和表 3 的数据可以对比看出, 对模型进行上述的修改后, 计算值和实验值更加吻合, 比原来用传统 Miedema 模型计算的结果更接近文献中实验值。对比修正后的计算结果与文献实验数据知, 计算值与文献实验值比较偏差最大的是 Al₂Sc 的 69% (相对 -31.3 的计算结果), 偏差大于 30% 的只有 6 个金属间化合物, 平均偏差仅为 5%。计算值和文献实验值的误差在图 1 中表现出来。修正模型后计算值与文献实验数据更吻合。此外需指出, 图 1 说明, 在合金的富稀土元素端, 修正模型后的计算结果

表 4 铝-稀土原子半径比

Table 4 Radius ratio of aluminum to rare earth

Element	R_{Al}/R_{RE}
La	0.7606
Ce	0.7857
Pr	0.7814
Nd	0.7857
Pm	0.7857
Sm	0.7901
Gd	0.7901
Tb	0.7944
Dy	0.7944
Ho	0.7989
Er	0.8034
Tm	0.8079
Lu	0.8171
Sc	0.8667
Y	0.8034

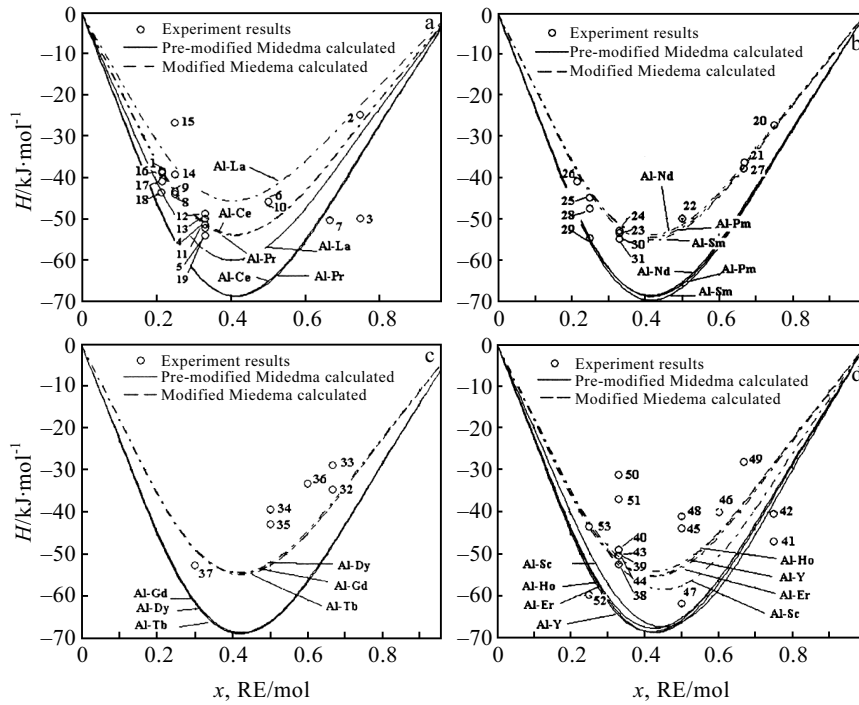


图 1 Miedema 模型修改前铝-稀土形成焓和修改后铝-稀土形成焓以及文献实验数据的比较
(小圈和数字对应表 2 和表 3 中的文献实验数据标号)

Fig.1 Enthalpy comparison for intermetallics in aluminum and rare-earth from pre-modified Miedema, modified Miedema and experiment results (the small circles and numerals mean code No. of the experiment data in Table.2 and Table.3 from Reference): (a) Al-La, Ce, Pr, (b) Al-Nd, Pm, Sm, (c) Al-Gd, Tb, Dy, and (d) Al-Ho, Er, Y, Sc

还是比文献实验值要负，但是比传统的 Miedema 模型计算出的结果更接近文献实验值，这也在一定程度上说明合金中存在较强的相互作用。

从化学价键原理来看，稀土元素的金属性较强，而铝元素可表现出一定的非金属性。Al 元素的 3p 轨道并未填满，3p 轨道的能量又低于稀土元素的 5s 轨道的能量，这样 Al 原子提供轨道，稀土原子提供电子，因此形成化合物时，轨道会发生兼并，使原子结合能比其他金属间化合物高。

稀土原子最内层是惰性气体氙结构的饱和层，最外层是两个电子，4f 层是未饱和的电子层，从镧原子到镱原子 4f 电子个数依次增加，即从轻稀土到重稀土 4f 电子有所不同。内层电子在成键中也会起到一定的作用。稀土原子和铝成键时情况复杂，成键时不是纯粹的金属键，会发生电子轨道的分裂和杂化，这就造成了金属间化合物结构的复杂性。因此对于同一种稀土元素和铝合金系统，根据合金元素含量的不同，会出现 Al₃RE, Al₂RE, AlRE, AlRE₂, AlRE₃ 等多种金属间化合物。同时，从表 2, 表 3 中可以得出这样的规律，富铝端和富稀土端的金属间化合物的形成焓差别比较大，Al₃RE 的形成焓比 AlRE₃ 的形成焓更负，

在 AlRE, Al₂RE 和 AlRE₃ 类型金属间化合物的形成焓中，重稀土的形成焓比轻稀土的更负。

在铝合金中添加微量的混合稀土或单一稀土能起到有益作用。轻稀土与铝一般生成 Al₁₁RE₃，重稀土与铝生成 Al₃RE 金属间化合物^[30]。这些金属间化合物相在铝熔液中会随着凝固的进程而首先析出，作为形核核心，促进形核，从而减小显微结构中晶粒的尺寸。或在变形过程中作为弥散细小的第二相分布在基体中阻碍位错运动，从而增强铝合金强度。但不同的人实验测定的结果相差比较大。原来的 Miedema 计算也未对这些相的形成焓做准确的预测，经过修正的 Miedema 模型可以准确预测出这些常见的金属间化合物的形成焓(表 2 和表 3)，同时对实验数据缺乏的 Er, Dy, Tb 等重稀土元素和铝的金属间化合物的形成焓做了补充(表 2 和表 3)。

3 MTDATA 的计算分析比较

本研究采用英国国家物理实验所(NPL)开发的 MTDATA 热力学和相平衡计算分析平台(version 5.01 April 2003)，计算分析了一些相关稀土的金属间化合物的形成焓。作为上述模型法计算值的对比，结果列

在表 5 中。对照表 5 和表 2 表 3 所列的数据可以看出，两个计算结果很接近，这也在一定程度上说明，本研究所提出的修正计算模型的正确性。

表 5 MTDATA 计算的铝-稀土金属间化合物的形成焓
Table 5 Calculated enthalpies of intermetallics in aluminum and rare earth by MTDATA

	Al ₁₁ RE ₃	Al ₃ RE	Al ₂ RE	AIRE	AIRE ₂	AIRE ₃
La	-	-43.75	-	-43.25	-50.3	-21.5
Ce	-37.3	-	-54.3	-46.5	-	-
Nd	-37.8	-	-60.3	-49.1	-36.2	-26.5
Sc	-	-41.3	-48.1	-47.0	-37.0	-

4 结 论

1) 用新提出的模型计算主要铝-稀土金属间化合物的形成焓和 Al-Er, Al-Tb, Al-Dy 等研究数据缺乏的铝-稀土金属间化合物的形成焓，可以作为铝合金热力学计算分析的依据。

2) 修正模型的计算结果更接近文献实验值，平均误差由 36% 缩小到 5%，新模型计算结果更准确可靠。

3) 随着稀土合金元素含量的增加，在可以形成的一系列金属间化合物中，富铝端和富稀土端的金属间化合物的形成焓差别比较大，Al₃RE 形成焓比 AIRE₃ 的形成焓更负，这与铝，稀土轨道杂化方式不同有关。从电子构型来看，由轻稀土到重稀土元素由于 4f 电子排列不同和 4f 电子增多，相应的 AIRE, Al₂RE 和 AIRE₃ 系列铝-稀土金属间化合物中，铝-重稀土的形成焓比铝-轻稀土的形成焓更负。

参考文献 References

[1] Keith E, Knipling David C Dunand, David N Seidman. *Z Metallkd*[J], 2006, 97: 246

[2] Fu Jingbo(付静波), Nie Zuoren(聂祚仁), Yang Junjun(杨军军). *Chinese Journal of Rare Metals*(稀有金属)[J], 2005, 29(4): 558

[3] Vijaya Singh, Satya Prasad K. *Scripta Materialia*[J], 2004, 50: 903

[4] Zhang Zuogui(张作贵), Liu Xiangfa(刘相法), Bian Xiufang(边秀房). *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*(中国有色金属学报)[J], 1999, 9(4): 736

[5] Esmaeili S, Lloyd D J. *Acta Materialia*[J], 2005, 53: 5257

[6] Li Shaolu(李绍禄), Pan Qinlin(潘清林), Chen Xianming(陈显明). *Ordnance Material Science and Engineering*(兵器材料科学与工程)[J], 2003, 26(1): 11

[7] Yang Junjun(杨军军), Xu Guofu(徐国富), Nie Zuoren(聂祚仁). *Special Casting & Nonferrous Alloys*(特种铸造及有色合

金)[J], 2006, 26(7): 393

[8] Lu Guimin(路贵民). *Chinese Journal of Nonferrous Metals* (有色金属)[J], 1999, 51(2): 76

[9] Yu Shengwen(余胜文), Wang Wei(王为), Xu He(徐赫). *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*(中国有色金属学报)[J], 2006, 16(3): 505

[10] Yu Shengwen(余胜文), Wang Wei(王为). *Journal of the Chinese Rare Earth Society*(中国稀土学报)[J], 2006, 24: 470

[11] Xing Qiu Chen, Wolf W, Podliucky R. *Intermetallic*[J], 2004, 12: 59

[12] Niessen A K, deBoer F R, Boon B *et al. Caphad*[J], 1983, 17: 51

[13] de Boer F R, Boom R, Mattens W C M *et al. Cohesion in Metals, Transition Metal Alloys*[M]. Amsterdam: North-Holland, 1988: 42

[14] Villars P, Calvert L D. *Pearson's Handbook of Crystallographic Data for Intermetallic Phases. 2nd Edition*[M]. Materials Park, OH: ASM International, 1991

[15] Sommer F, Keita M, Krull H G *et al. Less-Common Met*[J], 1988, 137: 267

[16] Colinet C, Pasturel A, Buschow K H J. *Chem. Thermodyn*[J], 1985, 17: 1133

[17] Jung W G, Kleppa O J, Topor L. *Alloys Comp*[J], 1991, 171: 309

[18] Saccone A, Cacciamani G *et al. Intermetallics*[J], 1998, 6: 201

[19] Colinet C. *Journal of Alloys and Compounds*[J], 1995, 225: 409

[20] Gabriella Borzone, Mnna Maria Cardinale, Nadia Parodi. *Journal of Alloys and Compounds*[J], 1997, 247: 141

[21] Colinet C, Pasturel A, Hicter P. *Physical B*[J], 1985, 128 ; 5

[22] Sommer F, Keit M. *Less-Common Met*[J], 1987, 136: 95

[23] Borzone G, Cacciamani G, Ferro R. *Metall Trans A*[J], 1991, 22: 2119

[24] Meschel S V, Kleppa O J. In: Faulkner J S, Jordan R G eds. *Experimental and Theoretical Perspectives*[C]. Kluwer: Dordrecht, 1994: 103

[25] Borzone G, Cacciamani G, Ferro R. *Z Metallkd*[J]. 1993, 84: 635

[26] Pyagai I N, Vakhodov A V. *Metall*[J], 1990, 5: 50

[27] Borzone G, Cardinale A M, SAccone A *et al. Journal of Alloys and Compounds*[J], 1995, 220: 122

[28] Pyagai I N, Vakhodov A V. *Russian Metallurgy*[J], 1990(5): 50

- [29] Caccianani G, Riani P, Borzone G. *Intermetallics*[J], 1999, 7: 101
- [30] Ning Yuantao(宁远涛), Zhou Xinming(周新铭). *Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 1992, 28(3): 96

Calculations of Formation Enthalpies of Al-RE Intermetallics

Wang Wei, Tang Zhenlei, Zhan Chunyao, Nie Zuoren
(Beijing University of Technology, Beijing 100022, China)

Abstract: The error distribution between Miedema-calculated values and reference-reported values for formation enthalpies of binary Al-RE intermetallics was analyzed and it is known that the calculated results are commonly negative compared with those in references. Therefore, an important influencing factor, radius ratio of RE atom to aluminum atom should be considered to modify the thermodynamic calculation model in the study. The calculation results of the modified model are more closed to the reported experiment results and the error was found to be reduced from 33.6% to 5%. The enthalpies of some common intermetallics of aluminum and rare earth were also checked by MTDATA for comparison. All that proved the modified calculating model are much more accurate and reliable. The common formation enthalpies of intermetallics of aluminum and rare earth as well as Al-Er, Al-Tb, Al-Gd, which are studied less, are calculated by the modified Miedema model.

Key words: thermodynamic calculation; formation enthalpy; intermetallics of aluminum and rare earth; Miedema model; MTDATA

Biography: Wang Wei, Professor, College of Material Science and Engineering, Beijing University of Technology, Beijing 100124, P. R. China, Tel: 0086-10-67396439, E-mail: wangwei@bjut.edu.cn