

Fe 对 NiAl 力学性能影响的第一原理计算

陈 律^{1,2}, 彭 平¹, 湛建平², 韩绍昌¹

(1. 湖南大学, 湖南 长沙 410082)

(2. 长沙航空职业技术学院, 湖南 长沙 410124)

摘 要: 采用第一原理赝势平面波方法, 基于虚拟晶体势函数近似(VCA), 计算 Fe 合金化(浓度 $x < 3.0\%$, 原子分数, 下同)时完整与缺陷 B_2 -NiAl 晶体的弹性性质, 并采用弹性常数 C_{44} 、Cauchy 压力参数($C_{12}-C_{44}$)、杨氏模量 E 、剪切模量 G 及其与体模量 B_0 的比值 G/B_0 等, 表征和评判 Fe 合金化浓度 x 对 NiAl 金属间化合物延性与硬度的影响。结果表明: 无论是无缺陷的理想 NiAl 晶体, 还是含 Ni 空位或 Ni 反位的 NiAl 缺陷晶体, $x < 0.6\%$ 的 Fe 合金化均可使其硬度大幅提高。Fe 合金化浓度低于 0.5% 时, 虽然完整 NiAl 晶体的延性变差, 但含 Ni 空位的缺陷 NiAl 晶体的延性却可明显改善, 并以 $x = 0.2\% \sim 0.4\%$ 时韧化效果最好。Ni 空位或 Ni 反位降低 B_2 -NiAl 晶体的本征延性。实验中 $0.20\% \sim 0.25\%$ 的 Fe 合金化对 NiAl 晶体延性的改善很可能源于 Fe 原子与 NiAl 晶体中 Ni 空位间的关联与协同作用。

关键词: B_2 -NiAl; Fe 合金化; 第一原理计算; VCA 近似; 弹性性质

中图分类号: TG146.1⁺5

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2010)02-0229-05

B_2 结构的 NiAl 金属间化合物具有熔点高、密度低、强度高、热导率大、抗氧化性好等优异的物理和力学性能, 作为高温结构材料, 其应用却受到较差室温塑性的限制。合金化可以改变这种金属间化合物的电子结构、结合键类型与强度以及长程有序化的程度等^[1], 被证明是一类可有效改善其力学性能的方法^[2,3]。Fe 在 NiAl 中有很大固溶度, 且能保持其 B_2 型结构不变, 在改善 NiAl 力学性能方面被寄予厚望^[4]。1992 年 Darolia 等人^[5]率先发现在 NiAl 单晶中加入 0.25% 的 Fe 可使 NiAl<110>方向延展性从合金化前的 1% 提高到 6% , 此后 Fe 对 NiAl 的韧化效应就一直受到人们的重视。Pike 等人^[6]对 Fe 掺杂的富 Ni、富 Al 与化学计量比 NiAl 力学性质的研究发现: 富 Ni 的 NiAl 晶体加入 Fe 可使其软化, 而富 Al 和化学计量的 NiAl 晶体加 Fe 则使其硬度提高; Guo 等人^[7]采用机械合金化制备了 $Ni_{50}Al_{50-x}Fe_x$ ($x=5, 10, 15, 20, 25, 30$) 合金并考查了其力学性质, 发现 NiAl 基合金的硬度随 Fe 含量增加不断增加; Munroe 等人^[8]进一步指出高浓度 Fe 合金化对 NiAl 延性没有改善作用, 但随着 Fe 含量的增加, NiAl 屈服强度和硬度可不断提高; 最近 Kovalev 等人^[9]通过对 2% Fe 合金化 NiAl 的拉伸和压缩试验, 发现这种浓度的 Fe 合金化能提高 NiAl 的延性, 并推测其延性改善可能源于合金化后晶体费米能级处电子数 $N(E_F)$ 的增加。以

上实验结果显示: Fe 合金化对 NiAl 力学性质有很大影响, 并且因合金化浓度不同呈现出不同的变化趋势。

针对上述实验结果, 本课题组曾通过理论计算初步考察了 Fe 合金化浓度对 NiAl 基晶体力学性质的影响^[10], 但由于合金化浓度偏高, 仅分析了高浓度 Fe 合金化不能改善 NiAl 合金延性的实验结果, 而实际上低浓度 Fe 合金化对 NiAl 基合金延性呈明显的改善作用。有鉴于此, 本研究进一步采用虚拟晶体势函数近似(VCA)方法对低浓度 Fe 合金化 NiAl 晶体的力学性质进行了计算与分析。

1 计算模型与方法

B_2 -NiAl 晶体结构如图 1a 所示。Ni 原子占据 8 个顶角位置, Al 占据体心位置, 它的空间群为 $pm\bar{3}m$, 可看成是由两个简单立方子晶格相互交错穿插而成。图 1b 是 16 个原子组成的 $2 \times 2 \times 2$ 无缺陷 NiAl 晶体超胞模型。图 1c 和 1d 分别是 NiAl 晶体 Ni 空位和 Ni 反位超胞模型。由于 Fe 在 NiAl 晶体中优先占据 Ni 原子位^[11], 因此本研究针对 Ni 原子位进行不同浓度的 Fe 合金化。

计算程序为 Castep(cambridge serial total energy package)总能计算软件包。Castep 是基于密度泛函理论的第一原理赝势平面波方法^[12], 晶体波函数由平面波基

收稿日期: 2009-02-15

基金项目: 国家自然科学基金项目(50771044); 湖南省教育厅科学研究项目(06D002)资助

作者简介: 陈 律, 男, 1978 年生, 硕士, 讲师, 湖南大学材料科学与工程学院, 湖南 长沙 410082; 通讯作者: 彭 平, 教授, 电话: 0731-8821610, E-mail: ppeng@hnu.cn

组展开, 势函数采用倒易空间表述的超软(Ultrasoft)赝势^[13], 交换关联能函数采用 GGA 中的 PBE 关系式^[14]。采用周期性边界条件, 平面波数目由动能截断点决定, 本计算中所有超胞模型的动能截断点均取 330.0 eV。根据对称性, 超胞模型计算的 K 点网格数取 $4 \times 4 \times 4$ 。各项计算之前, 都用 BFGS 方法^[15] 对超胞结构进行几何优化, 以求得它们的局域最稳定结构。使用基集修正^[16], 自洽场计算(SCF)时应用 Pulay 密度混合法^[17], 体系总能量收敛值取 1.0×10^{-3} eV/atom, 每个原子上的力要求低于 1 eV/nm, 公差偏移小于 5×10^{-4} nm, 应力偏差小于 0.2 GPa。

合金化时势函数采用 VCA(virtual crystal approximation)虚拟晶体近似^[18]。VCA 近似的主要假设是混合原子的虚拟势可由单原子势与其权重乘积的代数和来表示。该近似已被广泛地应用于无序体系和固溶体结构性质的计算, 并被证实可有效地计算晶体的某些结构性质, 如 Ramer 等人^[19]对 $\text{Pb}(\text{Zr}_{1-x}\text{Ti}_x)\text{O}_3$ 晶格常数的计算, 计算结果与实验数据一致, Souvatzis 等人^[18]分别用 VCA 方法和超胞模型计算了 $\text{W}_{0.5}\text{Re}_{0.5}$ 合金的弹性模量, 相对误差 < 5% 等。

2 计算结果与讨论

2.1 B_2 -NiAl 晶体的基本物性

首先计算 B_2 -NiAl 晶体的晶格常数 a 、合金形成热 ΔH 与弹性模量 C_{ij} , 结果列于表 1, 并与先前的实验数据^[20-22]、以及 Farkas 等人^[23]、Voter 等人^[24]和 Rao 等人^[25]的计算结果进行了比较。从表 1 可见, 本研究计算结果与实验数据十分接近, 与其他计算结果也符合较好。表明本研究所选计算条件与参数基本合适。

2.2 Fe 合金化 NiAl 晶体的弹性性质

基于图 1b 的超胞模型, 计算了低浓度 Fe 合金化 NiAl 单晶的弹性常数 C_{11} 、 C_{12} 和 C_{44} 。考虑到单晶弹性常数能被用来估算多晶材料的一些力学性质^[26], 进一步采用下式计算 B_2 -NiAl 多晶材料的体模量 B_0 、剪切模量 G 、杨氏模量 E ^[27]。

$$B_0 = (C_{11} + 2C_{12}) / 3 \quad (1)$$

$$G = (3C_{44} + C_{11} - C_{12}) / 5 \quad (2)$$

$$E = 9B_0G / (3B_0 + G) \quad (3)$$

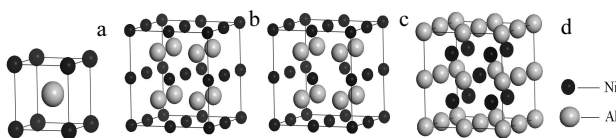


图 1 计算模型

Fig.1 Models of calculation: (a) crystal structure of B_2 -NiAl, (b) Ni_8Al_8 supercell, (c) NiAl supercell with Ni vacancy defect, and (d) NiAl supercell with Ni anti-site defect

表 1 B_2 -NiAl 的晶格常数 a 、形成热 ΔH 和弹性模量 C_{ij}

Table 1 Lattice constant a , heat of formation ΔH and elastic constant C_{ij} of B_2 -NiAl crystal

	This work	Exp. ^[20-22]	Farkas ^[23]	Voter ^[24]	Rao ^[25]
a/nm	0.287	0.2886 ^[20]	0.288	0.287	0.288
$\Delta H/\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$	-71.3	-72.0 ^[21]	-55.4	-	-
C_{11}/GPa	161.4	211.5 ^[22]	185.8	278.8	189.1
C_{12}/GPa	148.0	143.2 ^[22]	123.4	184.3	126.6
C_{44}/GPa	97.9	112.1 ^[22]	123.4	177.8	128.2

由于材料硬度与杨氏模量 E 和剪切模量 G 密切相关^[27], 虽然不同材料的硬度与其弹性模量的关系不尽相同, 但一般来说, E 与 G 的值越大, 则材料硬度越高。按照 Jhi 等人^[26]最近的观点, 材料的硬度还与弹性常数 C_{44} 存在单调对应关系, 即 C_{44} 越大, 材料硬度越高。这样, 通过式(2)与式(3)以及独立变量 C_{44} 的计算值, 得出 Fe 合金化浓度 x 对 NiAl 多晶材料硬度的影响(见图 2)。由图 2 可知, 随着 Fe 合金化浓度从 0 增加到 3%, B_2 -NiAl 晶体的 C_{44} 、 E 、 G 大幅提高, 仅在 0.6% 处上升幅度有所下降。可见, Fe 合金化可显著提高 NiAl 晶体的硬度。

图 3 为 B_2 -($\text{Ni}_{1-x}\text{Fe}_x$)Al 单晶 Cauchy 压力 C_{12} - C_{44} 与多晶 G/B_0 比值随 Fe 合金化浓度 x 变化的曲线。基于 Pugh 等人^[28]的经验判据, 即: G/B_0 值越大, 材料越脆, 反之, 延性越好, 特别是考虑到这一判据在分析金属间化合物延性或脆性方面的应用可靠性^[29], 对图 3 中 G/B_0 随 Fe 合金化浓度变化的曲线进行分析。由图 3 可见, 无缺陷 NiAl 晶体未合金化时, G/B_0 最小, 随着 Fe 合金化浓度从 0 增加到 3%, G/B_0 值逐步增大, 说明 Fe 合金化浓度增加使 NiAl 晶体材料变得越来越脆。

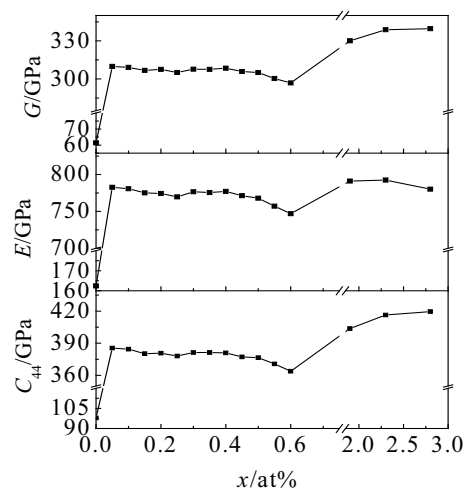


图 2 B_2 -NiAl 晶体 C_{44} 、 E 、 G 随 Fe 合金化浓度 x 的变化
Fig.2 Elastic constant C_{44} , Young modulus E and shear modulus G of B_2 -NiAl crystals as a function of Fe alloying concentration x

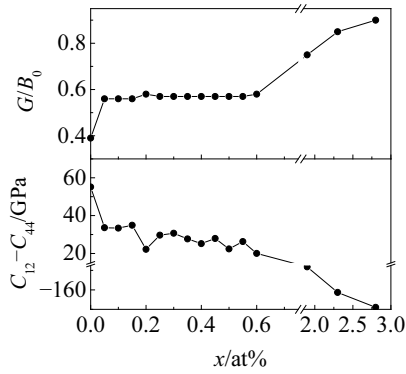


图 3 B_2 -NiAl 单晶 Cauchy 压力 $C_{12}-C_{44}$ 和多晶 G/B_0 比值随 Fe 合金化浓度 x 的变化

Fig.3 Cauchy pressure parameter ($C_{12}-C_{44}$) of B_2 -NiAl single crystals and the G/B_0 of polycrystals as a function of Fe alloying concentration x

考虑到 Cauchy 压力已被很好地应用来表征和评判纯 Ni 和纯 Al 晶体的延展性以及半导体 Si 晶体的脆性^[30], 即: 金属键的 Cauchy 压力值为正, 并且数值越大表示金属键越强、材料的延展性越好; 而对于具有强方向性的共价键, Cauchy 压力值为负, 材料表现为脆性。据此进一步对图 3 中 Cauchy 压力 $C_{12}-C_{44}$ 随 Fe 合金化浓度变化的曲线进行分析。由图 3 可见, 未合金化时, Cauchy 压力值为正, 说明理想 B_2 -NiAl 晶体本征上是延性的金属间化合物, 这一点已被 Levit 等人^[31]对[123]取向 NiAl 单晶的实验研究所证实, 即: 当很好地控制 NiAl 单晶中杂质原子、热空位、组分缺陷、晶体取向、表面处理、预变形时, 可得到 NiAl 单晶高达 28% 的室温延伸率。Fe 合金化时, 随着合金化浓度从 0 增加到 3%, 图 3 显示 Cauchy 压力 $C_{12}-C_{44}$ 值持续下降, 直至为负, 表明随着 Fe 合金化浓度增加, NiAl 单晶越来越脆。计算预测结果似乎与 Darolia 等人^[5]实验结果不符, 即没有看到 0.25% 的 Fe 合金化使 NiAl 单晶室温塑性提高到 6%, 而超过 0.5% 时初化作用消失的变化趋势。

考虑到晶体缺陷对金属间化合物的物理与力学性质起着非常重要的作用, 如单晶点缺陷结构对塑性的降低程度 RuAl 却没有 NiAl 大, 从而导致含有点缺陷结构的实际合金室温塑性 RuAl 反而比 NiAl 好^[32], 而 B_2 -YX ($X= Cu, Rh, Ag, In$) 金属间化合物之所以表现出良好的室温延性, 除了它们呈本征延性外, 多晶材料中存在的点缺陷对其延性的积极影响也是重要原因之一^[33]。由此猜想: NiAl 基合金比较差的室温塑性可能源于其对结构缺陷与环境的高敏感性^[34], 因此, 下面

进一步对 Fe 合金化时缺陷 NiAl 晶体的力学性质进行计算。

2.3 缺陷 NiAl 晶体 Fe 合金化时的弹性性质

NiAl 金属间化合物中的点缺陷结构主要为 Ni 空位和 Ni 反位^[35,36]。进一步计算 Fe 合金化时 Ni 空位(见图 1c)与 Ni 反位(见图 1d)缺陷 NiAl 单晶的弹性常数 C_{11} 、 C_{12} 和 C_{44} 。相应的 Cauchy 压力 $C_{12}-C_{44}$ 值与多晶杨氏模量 E 、剪切模量 G 和 G/B_0 比值随 Fe 合金化浓度 x 变化的曲线, 如图 4~7 所示。

当 Fe 合金化浓度 $x=0$ 时, 比较图 2、图 4 与图 6 可见, 相对于无缺陷的理想 NiAl 晶体, Ni 空位与 Ni 反位的存在使 NiAl 晶体的杨氏模量 E 分别提高 75.4 GPa 和 54.2 GPa、剪切模量 G 分别提高 35.4 GPa 和 23.1 GPa; 比较图 3、图 5 与图 7 可见, Ni 空位与 Ni 反位的存在分别使 NiAl 晶体 G/B_0 值增大 0.27 和 0.12, Cauchy 压力 $C_{12}-C_{44}$ 值分别从 55.1 GPa 减小至 -15.3 GPa 和 24.5 GPa, 表明 NiAl 晶体中点缺陷的存在使其硬度增加的同时也使材料延性大幅降低^[32,33]。

进一步分析图 4 与图 6 可见, 与无缺陷理想 NiAl 晶体情形不同(见图 2), 随着 Fe 合金化浓度的增加, 缺陷 NiAl 晶体的杨氏模量 E 和剪切模量 G 不是逐步增加, 而是越来越小, 但在 Fe 合金化浓度 $x<0.6\%$ 时, 不论是相对于未合金化完整晶体还是较之于未合金化的缺陷晶体, 都明显可见 Fe 合金化时($Ni_{1-x}Fe_x$)Al 多晶 E 和 G 值的提高, 虽然 Fe 合金化对缺陷晶体的强化程度不及对完整晶体的显著, 但仍然可见 Fe 合金化对缺陷 NiAl 晶体硬度的大幅提高。

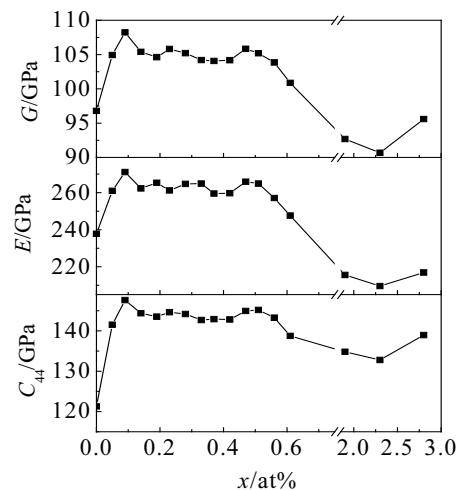


图 4 Ni 空位 B_2 -NiAl 单晶 C_{44} 、 E 和 G 随 Fe 合金化浓度 x 的变化

Fig.4 Elastic constant C_{44} , Young modulus E and shear modulus G of of B_2 - $(Ni_{1-x}Fe_x)$ Al single crystals with Ni vacancy defect as a function of Fe alloying concentration x

而由图 5 可见：当 Fe 合金化浓度 $x < 0.5\%$ 时，随着 Fe 合金化浓度增大，单晶 Cauchy 压力参数 $C_{12}-C_{44}$ 不断升高，多晶 G/B_0 值不断降低，表明 Fe 合金化对含 Ni 空位的 NiAl 多晶材料延性有明显的改善作用，并以 $x=0.2\% \sim 0.4\%$ 时，缺陷 NiAl 多晶延性的提升幅度尤为明显。而当 Fe 合金化浓度 $x > 0.5\%$ 时，Fe 对缺陷 NiAl 晶体的韧化作用则消失。对于 Ni 反位的情况，由图 7 可见：虽然总体上 Fe 合金化对 NiAl 晶体的韧化没有效果，但在 $x < 0.6\%$ 的低 Fe 合金化浓度区间，

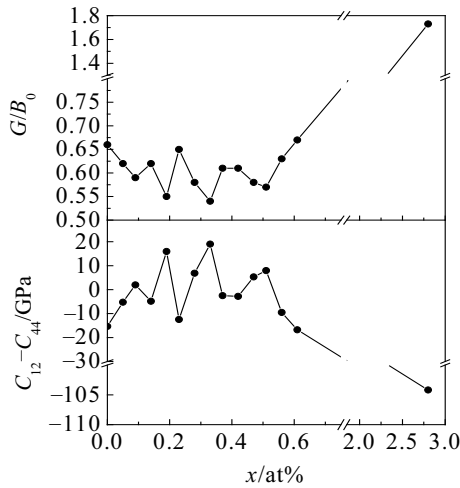


图 5 Ni 空位 B_2 -NiAl 单晶 Cauchy 压力 $C_{12}-C_{44}$ 与 G/B_0 比值随 Fe 合金化浓度 x 的变化

Fig.5 Cauchy pressure ($C_{12}-C_{44}$) and the ratio G/B_0 of $B_2-(Ni_{1-x}Fe_x)Al$ single crystals with Ni vacancy defect as a function of Fe alloying concentration x

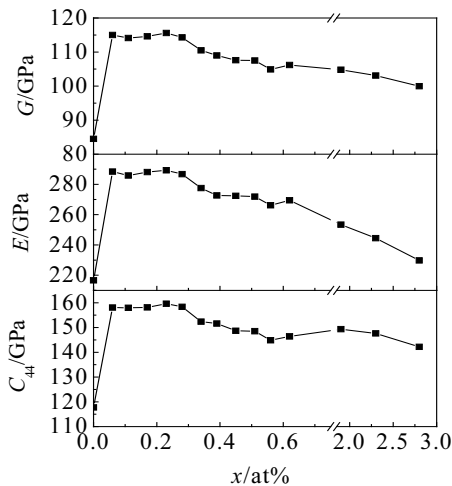


图 6 Ni 反位 B_2 -NiAl 的晶体 C_{44} 、 E 、 G 随 Fe 合金化浓度 x 变化

Fig.6 Elastic constant C_{44} , Young modulus E and shear modulus G of $B_2-(Ni_{1-x}Fe_x)Al$ single crystals with Ni anti-site as a function of Fe alloying concentration x

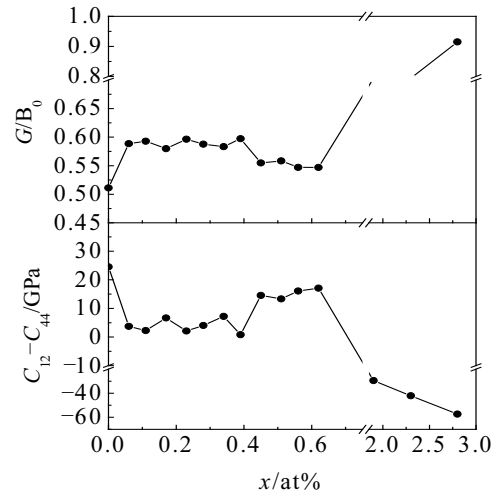


图 7 Ni 反位 B_2 -NiAl 的晶体 G/B_0 比值和 Cauchy 压力 $C_{12}-C_{44}$ 值随 Fe 合金化浓度 x 变化

Fig.7 Cauchy pressure parameter ($C_{12}-C_{44}$) and the ratio G/B_0 of $B_2-(Ni_{1-x}Fe_x)Al$ single crystals with Ni anti-site as a function of Fe alloying concentration x

随着 Fe 合金化浓度的增加，也大致可见 Cauchy 压力 $C_{12}-C_{44}$ 缓慢升高与 G/B_0 比值轻微下降的变化趋势，并在 $x=0.45\% \sim 0.65\%$ 区间呈现相对较好的韧化效果。

考虑到空位缺陷的热平衡特征，即在一定温度的热平衡条件下，再纯净的晶体也存在一定量的热平衡空位浓度。由此分析，实验中发现的 0.25% 的 Fe 合金化浓度使 NiAl 单晶的室温塑性从 1% 提高到 6%^[5]，一个主要的原因很可能源于 NiAl 晶体中的 Ni 空位与 Fe 原子间的关联与协同作用。

3 结 论

1) Fe 合金化浓度对 NiAl 晶体的硬度有明显影响，当 $x \leq 0.6\%$ 时，无论点缺陷存在与否，Fe 合金化均可使 B_2 -NiAl 晶体的硬度大幅提高。

2) Ni 空位或 Ni 反位降低 B_2 -NiAl 晶体的本征延性。当 $x \leq 0.5\%$ 时，Fe 合金化虽然不能改善完整 B_2 -NiAl 晶体的延性，但却可明显提高缺陷 B_2 -NiAl 晶体的延展性，尤其是对含 Ni 空位的缺陷 NiAl 单晶与多晶体，其最佳 Fe 合金化浓度约为 0.2%~0.4%。

3) 实验中发现的 0.20%~0.25% 的 Fe 合金化对 NiAl 单晶延性的改善很可能源于 Fe 原子与 NiAl 晶体中 Ni 空位间的关联与协同作用。

参考文献 References

[1] Darolia R. *J Mater Sci Technol*[J], 1994, 10: 157
 [2] Morinaga M *et al. Acta Mater*[J], 1990, 38: 25
 [3] Liu Zhenyun(刘震云) *et al. Materials for Mechanical*

- Engineering* (机械工程材料)[J], 1998, 22: 1
- [4] Guo Jingting(郭建亭) *et al. Acta Metallurgica Sinica* (金属学报)[J], 2002, 38: 667
- [5] Darolia R *et al. Scripta Metall Mater*[J], 1992, 26(7): 1007
- [6] Pike L M *et al. Intermetallics*[J], 1997, 5(8): 601
- [7] Guo J T *et al. Acta Metallurgica Sinica*[J], 1996, 9(6): 515
- [8] Munroe P R *et al. Mater Sci Eng A*[J], 2002, 325(1):1
- [9] Kovalev A I *et al. Surf Sci*[J], 2003, 532-535(10): 35
- [10] Hu Yanjun(胡艳军) *et al. The Chinese Journal of Nonferrous Metals* (中国有色金属学报)[J], 2006, 16(1): 47
- [11] Hu Yanjun(胡艳军) *et al. The Chinese Journal of Nonferrous Metals* (中国有色金属学报)[J], 2004, 14(12): 2102
- [12] Segall M D *et al. J Phys: Condens Matter*[J], 2002, 14(11): 2717
- [13] Vanderbilt D. *Phys Rev B*[J], 1990, 41(11): 7892
- [14] Perdew J P *et al. Phys Rev Lett*[J], 1996, 77(18-28): 3865
- [15] Fischer T H *et al. J Phys Chem*[J], 1992, 96(24): 9768
- [16] Francis G P *et al. J Phys: Condens Matter*[J], 1990, 2(19): 4395
- [17] Pulay P. *Mol Phys*[J], 1969, 17(2): 197
- [18] Souvatzis P *et al. Phys Rev B*[J], 2004, 70: 011 201
- [19] Ramer N J *et al. Phys Rev B*[J], 2000, 62: 743
- [20] Villas P *et al. Pearson's Handbook of Crystallographic Data for Intermetallic Phases*[M]. 2nd Edt. OH: ASM International, 1991: 865
- [21] Zhang Yonggang(张永刚) *et al. Structural Intermetallics*(金属间化合物结构材料)[M]. BeiJing: National Defense Industry Press, 2001: 120
- [22] Wasilewski R J. *Trans TMS AIME*[J], 1966, 236: 455
- [23] Farkas D *et al. Modelling Simul Mater Sci Eng*[J], 1995, 3: 201
- [24] Voter A F *et al. Proc Symp Mater Res Soc*[J], 1987, 82: 175
- [25] Rao A I *et al. Proc Symp Mater Res Soc*[J], 1991, 213: 125
- [26] Jhi S H *et al. Nature*[J], 1999, 399(6726): 132
- [27] Chen K Y *et al. J Phys D: Appl Phys*[J], 2003, 36: 2725
- [28] Pugh S F. *Philos Mag* [J], 1954, 45: 823
- [29] Wang J Y *et al. Phys Rev B*[J], 2004, 69: 144 108
- [30] Pettifor D G. *Mater Sci Technol*[J], 1992, 8(4): 345
- [31] Levit V I *et al. Scripta Mater* [J], 1996, 34: 1925
- [32] Chen Lü(陈律) *et al. Rare Metal Materials and Engineering* (稀有金属材料与工程)[J], 2006, 35(7):1065
- [33] Chen Lü(陈律) *et al. Rare Metal Materials and Engineering* (稀有金属材料与工程)[J], 2007, 36(12): 2089
- [34] Darolia R *et al. Intermetallics*[J], 1999, 7: 1195
- [35] Würschum R *et al. Phys Rev B*[J], 1996, 54(2): 849
- [36] Pike L M *et al. Acta Mater* [J], 1997, 45(9): 3

First-Principles Calculation on Mechanical Properties of B_2 -NiAl Intermetallic Compound with Fe Addition

Chen Lü^{1,2}, Peng Ping¹, Zhan Jianping², Han Shaochang¹

(1. Hunan University, Changsha 410082, China)

(2. Changsha Aeronautical Vocational and Technical College, Changsha 410124, China)

Abstract: Using the first-principles pseudopotential plane-wave methods based on the density functional theory, the elastic constants of B_2 -(Ni_{1-x}Fe_x)Al ($x=0-3.0$ at%) supercells with or without Ni vacancy or Ni anti-site defect were calculated in the framework of Virtual Crystal Approximation. Several parameters, such as elastic constant C_{44} , Cauchy pressure ($C_{12}-C_{44}$), Young modulus E , the shear modulus G and their ratio G/B_0 , have been adopted to characterize and assess the effect of Fe alloying concentration on the ductility and hardness of NiAl intermetallic compounds. It is found that Fe addition with $x < 0.6$ at% is proved to be efficient to enforce the strength or hardness of NiAl intermetallic compounds either for perfect crystals or for defect crystals. No improvement of the ductility of perfect B_2 -NiAl crystals can be demonstrated as Fe is added in the range from 0 to 3.0 at%. The Ni vacancy or Ni anti-site defects make the intrinsic ductility of perfect B_2 -NiAl crystals without Fe addition to be weakened. However, an obvious decrease in the degree of the embrittlement of B_2 -(Ni_{1-x}Fe_x)Al crystals with Ni vacancies can be seen as Fe alloying concentration x is lower than 0.5 at%, and the optimum additions locate in the range from 0.2 at% to 0.4 at%. From these calculations, a deduction therefore is conducted. That is for the distinct increase in the elongation rate of a B_2 -NiAl single crystal with Fe addition of 0.20-0.25 at% in the experiments could originate from the correlative and cooperative effects between vacancies and Fe addition in the B_2 -NiAl crystal.

Key words: B_2 -NiAl; Fe alloying; pseudopotential plane-wave method; elastic modulus