

# Ce 与 Cr 协同作用 B<sub>2</sub>-NiAl 合金力学性能的理论研究

陈 律, 刘逸众, 李 敏

(长沙航空职业技术学院, 湖南 长沙 410124)

**摘 要:** 采用第一性原理赝势平面波方法, 基于虚拟晶体势函数近似(VCA), 研究了不同浓度  $x$  ( $x=0 \text{ at}\% \sim 2.2 \text{ at}\%$ ) 的 Ce 和 Cr 单独及协同合金化对 B<sub>2</sub>-NiAl 晶体弹性模量  $E$ 、剪切模量  $G$ 、Cauchy 压力参数及  $G/B_0$  比值的影响。结果表明: Cr 占据 Ni 原子位能显著提高 B<sub>2</sub>-NiAl 合金的剪切模量  $G$  和弹性模量  $E$ , 而 Ce 占据 Al 原子位则能降低其合金的  $G$  和  $E$ ; 随着合金化浓度提高到 2.1 at%, Cr 占据 Al 原子位能改善 B<sub>2</sub>-NiAl 合金的延性, 而当 Ce 取代 Al 原子位协同 Cr 取代 Al 原子位时, 对其延性的改善效果比各自单独合金化的效果更显著, 且以合金化浓度为 2.0 at% 时为最佳效果。这一理论计算很好的重现了实验中 Ce 与 Cr 协同合金化明显提升 B<sub>2</sub>-NiAl 合金室温延性的现象。电子态密度分析显示, Cr 原子或者 Cr 协同 Ce 原子能够削弱 B<sub>2</sub>-NiAl 晶体当中的 Ni(d)-Ni(d) 主要成键峰的杂化效应, 降低主要成键峰的方向性。

**关键词:** B<sub>2</sub>-NiAl; Ce 和 Cr 合金化; VCA 近似; 力学性质

中图分类号: TG146.2

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2020)09-3065-06

稀土元素在金属间化合物中可以通过细化组织和晶粒来改善合金的力学性能<sup>[1]</sup>。通过 Ce 元素微合金化, 改善合金力学性能的探索一直是材料研究领域的热点。例如, Ce 加入 Cu-Cr-Zr 合金, 能细化合金晶粒, 达到优化其热加工性能的作用<sup>[2]</sup>。向 AZ91D 镁合金中加入 0.7 at% 的 Ce, 可以使合金的抗拉强度和伸长率由 117.4 MPa 和 4.0% 分别提高至 138.87 MPa 和 6.5%<sup>[3]</sup>。在 AZ80 合金中分别添加 1 at% 的 Ce 和 Y, 均可显著细化合金的晶界第二相<sup>[4]</sup>。在 T91 钢中加入 Ce 能有效改善其强度与韧性, 并进一步发现 Ce 的含量在 0.002% 时, 可以得到最佳室温冲击性能<sup>[5]</sup>。含量为 0.035% 的 Ce 可以细化 2304 双相不锈钢组织及抑制  $\sigma$  相的析出, 提高其时效后的冲击韧性<sup>[6]</sup>。当 Ce 添加量为 0.04% 时, A356 铝合金的抗拉强度、屈服强度及延伸率比未添加 Ce 时分别提高 7.89%、24.48% 和 108.09%<sup>[7]</sup>。1.0% 的 Ce 可明显细化 Al-Mn-Mg 合金组织, 与未添加 Ce 时比较, 其抗拉强度提高 13.59%, 达到 175.49 MPa, 伸长率提高 26%, 达到 17.66%<sup>[8]</sup>。通过添加 Ce, 能改善双相不锈钢 S32550 的力学性能, 并以含量为 0.03% 时获得较好的冲击韧性<sup>[9]</sup>。Ce 添加显著地提高 Al-7Si-0.7Mg-0.2Fe 合金的拉伸性能, 尤其当 Ce 添加量 0.1% 时, 合金抗拉强度、屈服强度和伸长率较未添加时能分别提高 11.8%、10.8%、39.1%<sup>[10]</sup>。在理论研

究方面, 采用第一性原理赝势平面波方法计算了 Ce 对 NiAl<sup>[11,12]</sup> 及 TiAl<sup>[13]</sup> 合金力学性能的影响, 发现 Ce 的添加均能提高其合金的延性。科研人员进一步研究发现, 适量的稀土元素可以明显改善 NiAl 合金的室温和高温拉伸塑性和强度, 并提高其抗氧化性能, 而过量的稀土元素则降低其力学性能和抗氧化性能<sup>[1]</sup>。早期的实验研究报道了在 NiAl 中同时添加 2.39 at%Cr 和 0.025 at%Ce 后, 压缩屈服强度高于纯 NiAl 的同时, 其压缩塑性还达到 10% 以上<sup>[14]</sup>, 为解决 NiAl 合金室温塑性低和高温强度不足提供了新的合金化方向。

受实验材料的限制以及实验方法、设备、环境等因素的影响, 合金化元素 Cr 和 Ce 及其浓度对 NiAl 合金作用机制的本征效应还有待从理论层面开展研究。基于理论研究能从电子-原子尺度探索金属间化合物成分-结构-性能的内在关系, 为揭示力学性能的形成机制及其结构和主导力学性能的物理本质<sup>[15-18]</sup>, 本研究采用第一性原理赝势平面波方法计算不同浓度 ( $x=0 \text{ at}\% \sim 2.2 \text{ at}\%$ ) 的 Cr 和 Ce 单独及协同合金化 NiAl 合金的力学本征属性, 以期能从晶体结构与电子成键状态等微观层面探索合金化元素 Cr 和 Ce 及其浓度对 NiAl 金属间化合物的作用机制。

## 1 计算模型与方法

收稿日期: 2019-01-09

基金项目: 湖南省自然科学基金科教联合基金(2017JJ5057)

作者简介: 陈 律, 男, 1978 年生, 硕士, 副教授, 长沙航空职业技术学院航空机电设备维修学院, 湖南 长沙 410124, 电话: 0731-85473638, E-mail: 6994980@qq.com

B<sub>2</sub>-NiAl 晶体结构(见图 1a)的空间群为 pm $\bar{3}$ m, 属立方晶系, Ni 原子占据立方晶格 8 个顶角位置, Al 占据体心位置。图 1b 是 16 个原子组成的 2×2×2 无缺陷 NiAl 超胞晶体模型。Ce 原子在 NiAl 晶体中强烈占据 Al 原子位<sup>[12]</sup>, 而 Cr 原子在 NiAl 晶体中的占位情况依赖于其化学计量比成分的偏离和环境温度的改变, 无占据 Al 原子位或者占据 Ni 原子位的明显优先选择<sup>[19]</sup>。不过持不同意见的研究人员依据 Cr 原子占据 Al 原子位的固溶度大于占据 Ni 原子位的固溶度这一结论, 推测出 Cr 原子倾向于占据 Al 原子位<sup>[20]</sup>。基于 Cr 原子在 NiAl 晶体中占位的不确定性以及 Ce 原子占据 Al 原子位的结论, 本工作对 Cr 占据 2 种亚点阵位以及 Ce 占据 Al 原子位分别进行了不同浓度(x=0 at%~2.2 at%)的单独以及协同合金化模型的计算。

本工作使用的计算程序为 CASTEP 总能计算软件包。CASTEP 软件包基于密度泛函理论, 势函数采用超软(Ultrasoft)赝势, 交换关联能函数采用 GGA-PBE, 所有超胞模型的动能截断点均取 330.0 eV, K 点网格数取 4×4×4, 用 BFGS 方法对超胞结构进行几何优化。计算时体系总能量收敛值取 1.0×10<sup>-3</sup> eV/atom, 每个原子上的力低于 0.01 eV/nm, 应力偏差小于 0.2 GPa, 公差偏移小于 5×10<sup>-4</sup> nm。本课题组对上述计算参数选择进行了验证, 其比较结果显示所选参数合适<sup>[18]</sup>。合金化时势函数采用 VCA 虚拟晶体近似<sup>[21]</sup>。该近似方法在计算 W<sub>0.5</sub>Re<sub>0.5</sub> 合金超胞模型弹性模量<sup>[21]</sup>以及 Pb(Zr<sub>1-x</sub>Ti<sub>x</sub>)O<sub>3</sub> 晶格常数<sup>[22]</sup>的研究中得到有效验证。

## 2 计算结果的分析与讨论

### 2.1 计算结果

立方晶系有 C<sub>11</sub>、C<sub>12</sub>与 C<sub>44</sub>3 个独立的弹性常数。本研究就图 1b 超胞模型, 对 Ce 占据 Al 原子位及 Cr 占据 2 种亚点阵位不同浓度(x=0 at%~2.2 at%)单独及协同合金化计算模型弹性常数计算结果列于表 1 和表 2。

### 2.2 合金化对弹性常数 E 与剪切模量 G 的影响

立方晶体模型的体模量 B<sub>0</sub>、剪切模量 G 以及弹性模量 E 采用式 (1)~(3) 分别计算<sup>[23]</sup>。

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

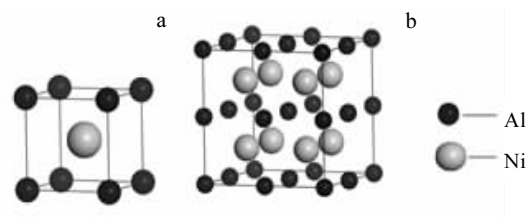


图 1 计算模型

Fig.1 Models of calculation: (a) NiAl and (b) Ni<sub>8</sub>Al<sub>8</sub>

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

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

把表 1 和表 2 中计算所得合金化模型的 C<sub>11</sub>、C<sub>12</sub>与 C<sub>44</sub> 值代入式(1)、式(2)与式(3), 可得不同合金化方式与浓度 x 对 NiAl 合金弹性模量 E(见图 2a)与剪切模量 G(见图 2b)的影响。显而易见, Cr 单独合金化时, 其浓度 x 从 0 at%增加到 2.2 at%, 当 Cr 原子取代 Ni 原子位时, E 和 G 值急剧上升, 当合金化浓度达到 0.4 at%时, 才基本趋于稳定; 而当 Cr 原子取代 Al 原子位时, 其剪切模量 G 和弹性模量 E 相比未合金化时下降, 但影响的幅度似乎与浓度的变化没有关系; Ce 原子取代 Al 原子位单独合金化时, 随着合金化浓度的提高, NiAl 合金弹性模量 E 和剪切模量 G 均较未合金化时有所提高, 不过其影响的幅度似乎也与浓度的变化没有关系, 这种效应与 Ce 原子取代 Al 原子位协同 Cr 原子取代 Ni 原子位复合合金化时 G 和 E 的变化基本保持一致; 然而, 却与 Ce 原子取代 Al 原子位协同 Cr 原子取代 Al 原子位复合合金化时明显不一样, 区别在于当浓度大于 1.6 at%时, Ce 与 Cr 同时取代 Al 原子位能降低其合金的剪切模量 G 和弹性模量 E。Cr 取代 Ni 原子位的微合金化方式能显著提升 NiAl 合金材料的剪切模量 G 和弹性模量 E, 这种效应来自 Cr 原子的固溶强化作用<sup>[24]</sup>。

### 2.3 合金化对合金材料延性的影响

金属键的 Cauchy 压力 C<sub>12</sub>-C<sub>44</sub> 值的正和负, 可以定性的表征其合金材料的韧脆性。Cauchy 压力数值为正, 且越大表明材料的延展性也就越好; 相反, Cauchy 压力数值为负, 且越小说明材料的延展性也就越不好<sup>[25,26]</sup>。依据这一评判依据, 本研究考察了 Cr 和 Ce 作用于 B<sub>2</sub>-NiAl 的合金化方式及其浓度 x 的变化对计算模型 Cauchy 压力(C<sub>12</sub>-C<sub>44</sub>)值的影响, 并绘制在图 3a 中。由图 3a 可见, Ce 原子取代 Al 原子位单独合金化时, 降低了 B<sub>2</sub>-NiAl 超胞的 Cauchy 压力值, 且随着合金化浓度的提高, 其 Cauchy 压力值逐步提高并接近未合金化时 C<sub>12</sub>-C<sub>44</sub> 值的, 然而直到合金化浓度达到 2.2 at%也没有超过未合金化时其 Cauchy 压力值(50.1 GPa), 表明 Ce 的微合金化不能改善理想无缺陷 B<sub>2</sub>-NiAl 单晶体的延性, 与实验研究中得出 0.025 at% Ce 的添加可以提高 B<sub>2</sub>-NiAl 合金抗压延性达到 4%<sup>[14]</sup> 不一致。分析其原因有两点: 第 1 是本研究的合金化浓度是从 0.1 at%开始, 忽视了 0.1 at%以下的合金化效应; 第 2 是实验中 B<sub>2</sub>-NiAl 合金存在的点缺陷可能与 Ce 原子协同作用以致改善其抗压延性<sup>[16]</sup>。在 0 at%~2.2 at%的合金化浓度范围内, 当 Cr 占据 Ni 原子位, 随着合金化浓度的提高, 其 Cauchy 压力值的波动没有反映出 Cr 能改善 B<sub>2</sub>-NiAl 合金的延性; 然而当 Cr 占

表 1 Ce 和 Cr 单独合金化 B<sub>2</sub>-NiAl 晶体的弹性常数 C<sub>ij</sub>

Table 1 Elastic constant C<sub>ij</sub> of B<sub>2</sub>-NiAl crystal alloyed by Ce or Cr, separately (GPa)

x/at%	Ce→Al site			Cr→Al site			Cr→Ni site		
	C <sub>11</sub>	C <sub>12</sub>	C <sub>44</sub>	C <sub>11</sub>	C <sub>12</sub>	C <sub>44</sub>	C <sub>11</sub>	C <sub>12</sub>	C <sub>44</sub>
0	161.4	148.0	97.9	161.4	148.0	97.9	161.4	148	97.9
0.1	193.0	134.6	117.1	997.8	131.7	92.5	1015.6	131.9	91.2
0.2	195.6	136.7	117.1	28.4	109.3	93.8	1020.8	132.7	90.1
0.3	198.0	138.0	116.6	34.2	112.5	94.8	1017.9	131.4	91.0
0.4	203.1	142.1	115.6	36.5	113.1	95.1	1346.9	138.9	90.4
0.5	201.3	140.0	114.3	39.7	115.1	95	1345.3	137.7	90.4
0.6	202.7	141.0	113.2	42.5	116.6	93.7	1358.3	138.3	89.8
0.7	204.7	143.4	112.5	46.3	118.8	92.4	1347.4	134.7	90.1
0.8	204.0	142.9	112.5	48.5	118.9	91.6	1353.1	136.8	89.9
0.9	208.3	146.9	113.1	49.8	117.6	91.8	1341.1	127.6	96.7
1.0	209.1	146.5	114.2	54.7	120.5	92.7	1348.6	135.6	90.1
1.1	210.6	145.4	115.4	57.1	122.6	94.5	1347.3	134.1	90.0
1.2	207.6	139.6	116.1	58.5	126.1	95.7	1347.5	136.4	90.0
1.3	213.7	143.4	116.0	57.6	128.7	95.6	1334.8	127.7	96.3
1.4	212.5	141.3	115.5	56.5	130.8	94.6	1339.8	136.3	90.0
1.5	213.1	143.6	114.4	56.8	132.5	93.5	1338.5	137.8	89.9
1.6	211.8	146.5	113.5	58.9	134.0	92.5	1337.7	134.9	89.5
1.7	209.4	149.3	112.8	61.5	134.4	92.1	1328.1	134	89.5
1.8	206.6	151.3	112.4	63.8	134.6	91.3	1337.4	124.2	94.1
1.9	204.5	152.5	111.9	65.8	135.3	89.8	1317.2	125	94.3
2.0	203.9	153.1	111.3	67.6	137.2	87.6	1317.0	126.3	93.8
2.1	204.7	153.6	110.2	69.1	138.7	84.6	1314.4	125.5	93.0
2.2	206.3	154.0	108.9	71.8	138.4	83.0	1320.8	133.9	86.9

表 2 Ce 和 Cr 协同合金化 B<sub>2</sub>-NiAl 晶体的弹性常数 C<sub>ij</sub>

Table 2 Elastic constant C<sub>ij</sub> of B<sub>2</sub>-NiAl crystal alloyed by Ce cooperation with Cr (GPa)

x/at%	Ce→Al site+Cr→Al site			Cr→Al site+Cr→Ni site		
	C <sub>11</sub>	C <sub>12</sub>	C <sub>44</sub>	C <sub>11</sub>	C <sub>12</sub>	C <sub>44</sub>
0	161.4	148	97.9	161.4	148	97.9
0.1	196.6	137.5	117.1	194.9	136.6	116.6
0.2	201.5	140.1	115.2	196	136.1	116.4
0.3	200.7	139.3	112.7	196.9	135.3	115.1
0.4	203.3	142	113	197.2	135.2	113.1
0.5	209	143.7	115.4	198.9	137.8	111.4
0.6	214.8	144.3	116.1	199.2	138.6	110.6
0.7	216.3	148.5	114.2	200	137.7	111
0.8	205.3	149.5	112.3	203.5	137	112.4
0.9	205.8	155.5	111.1	207.1	135.4	113.8
1.0	209.7	157.3	108.1	210.4	136	114.3
1.1	210.1	157.2	105.7	204.6	136.4	113
1.2	212.1	160.9	106.2	197.9	139.7	111.5
1.3	217	158	102.1	194.2	142.6	110.8
1.4	220.7	157.5	96.4	193.9	143.6	110.7
1.5	213.8	162.2	95.1	194.1	142.3	110.9
1.6	191.8	162.4	81.5	193.8	141.3	110.1
1.7	191.3	163.8	70.1	195.3	143.7	108.5
1.8	188.9	163.2	69.2	194.5	144.3	106.8
1.9	185.9	159.5	65.7	193	141.9	106.1
2.0	193.2	159.4	50.6	197.3	140.5	105.2
2.1	191.6	145.8	55.9	203	138.6	103.1
2.2	189.9	137.7	53	205.8	135.8	101.5

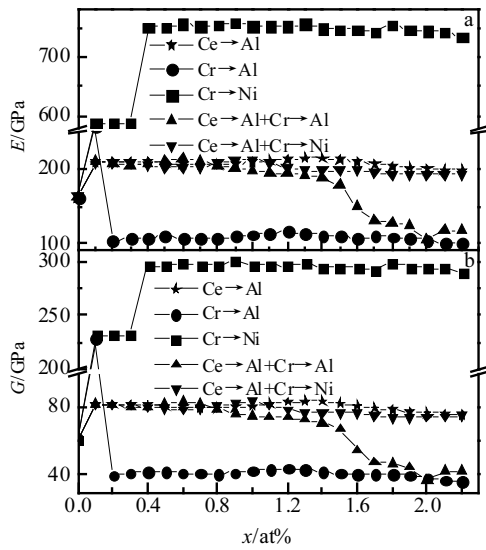


图 2 合金化浓度  $x$  与合金化方式对完整  $\text{Ni}_8\text{Al}_8$  晶体  $E$  和  $G$  的影响

Fig.2 Effect of alloying concentration  $x$  and mode on the Young modulus  $E$  (a) and shear modulus  $G$  (b) for  $\text{Ni}_8\text{Al}_8$  perfect crystals

据 Al 原子位时, 当合金化浓度提高到 2.1at%时, 其 Cauchy 压力值为 54.1 GPa, 超过了未合金化时的 Cauchy 压力值 50.1 GPa, 说明 Cr 的合金化效应开始改善  $\text{B}_2\text{-NiAl}$  合金的延性, 这与实验研究中得出 2.19 at% Cr 的添加可以提高  $\text{B}_2\text{-NiAl}$  合金抗压延性达到 2.5 at%<sup>[14]</sup> 保持一致。进一步分析复合合金化的效应, 当 Ce 原子取代 Al 原子位协同 Cr 原子取代 Ni 原子位时, 随着合金化浓度的提高, 其 Cauchy 压力值的波动依然没有反映出此种合金化方式能改善  $\text{B}_2\text{-NiAl}$  合金的延性; 然而, 当 Ce 原子取代 Al 原子位协同 Cr 原子取代 Al 原子位时, 合金化浓度从 0.1 at% 逐步提高到 2.0 at%, 其 Cauchy 压力值从 20.4 GPa 稳步提升到 108.8 GPa, 说明改善  $\text{B}_2\text{-NiAl}$  合金延性效应十分显著, 并且这种复合合金化对  $\text{B}_2\text{-NiAl}$  合金延性改善的积极效应比各自单独合金化时还要显著, 呈现出 1+1>2 的效果。而当超过 2.0 at% 时, 其 Cauchy 压力值又开始下降。这一计算分析结果与在  $\text{B}_2\text{-NiAl}$  中同时添加 2.39 at%Cr 和 0.025 at%Ce 后, 其压缩塑性达到 10% 以上的实验研究结果基本保持一致, 考虑到 Cr 原子有取代 Al 原子位的倾向<sup>[20]</sup>, 本研究从理论研究层面证实了 Ce 协同 Cr 能改善  $\text{B}_2\text{-NiAl}$  合金延性的客观事实。

由于  $G/B_0$  值也可以衡量金属合金材料的延性或脆性<sup>[27]</sup>, 并指出  $G/B_0$  值为 0.57 是合金材料的韧脆分界值,

其值越大于 0.57, 材料呈现出越脆; 反之, 材料的延性则越好<sup>[28]</sup>。基于这个评判依据, Cr 和 Ce 作用于  $\text{B}_2\text{-NiAl}$  的合金化方式及其浓度  $x$  的变化对计算模型  $G/B_0$  比值的影响呈现在图 3b 中。从图 3b  $G/B_0$  比值的变化趋势可以明显看出, 能降低计算模型  $G/B_0$  比值的合金化方式只有 Cr 占据 Al 原子位的单独合金化以及 Ce 原子取代 Al 原子位协同 Cr 原子取代 Al 原子位的复合合金化两种方式。尤其是 Ce 和 Cr 同时取代 Al 原子位且浓度均为 2.0 at% 时, 其计算模型  $G/B_0$  比值降到 0.22, 达到所有合金化方式及浓度计算模型中的最低值, 远比未合金化时的 0.40 小。 $G/B_0$  值变化的趋势与 Cauchy 压力  $C_{12}\text{-}C_{44}$  值的分析结果保持完全一致。

### 2.4 合金化前后电子态密度结构的变化

合金材料宏观层面呈现出来的力学属性必然与其晶体内部的电荷分布和原子之间的成键特性等因素密切相关<sup>[29]</sup>。为了探究 Ce 和 Cr 不同合金化方式和浓度对  $\text{B}_2\text{-NiAl}$  晶体内部的电荷分布和原子之间的成键特性的影响, 进一步计算了合金化超胞模型总电子态密度(见图 4), 虚线为费米能级。图 4 中, 从上到下分别是纯净  $\text{B}_2\text{-NiAl}$  超胞、Ce 占据 Al 原子位、Cr 占据 Al 原子位、Cr 占据 Ni 原子位、Ce 占据 Al 原子位协同 Cr 占据 Al 原子位以及 Ce 占据 Al 原子位协同 Cr 占据 Ni 原子位 6 种计算模型的总电子态密度, 统一取其合金化浓度为 2.0 at% 时的模型。纯净  $\text{B}_2\text{-NiAl}$  晶体中, 位于 -1.7 eV 附近的主要成键峰为 Ni(d)-Ni(d) 键, 其态

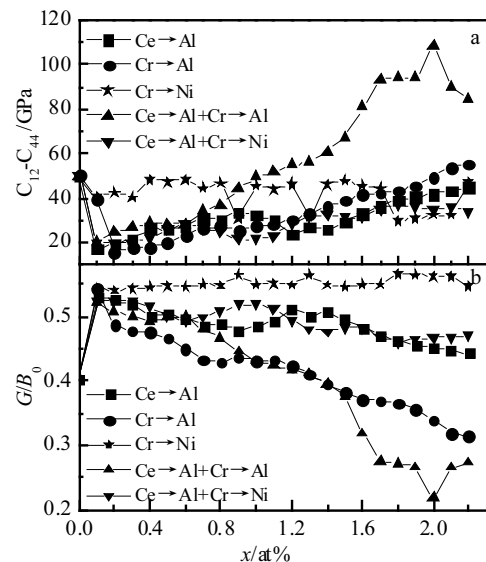
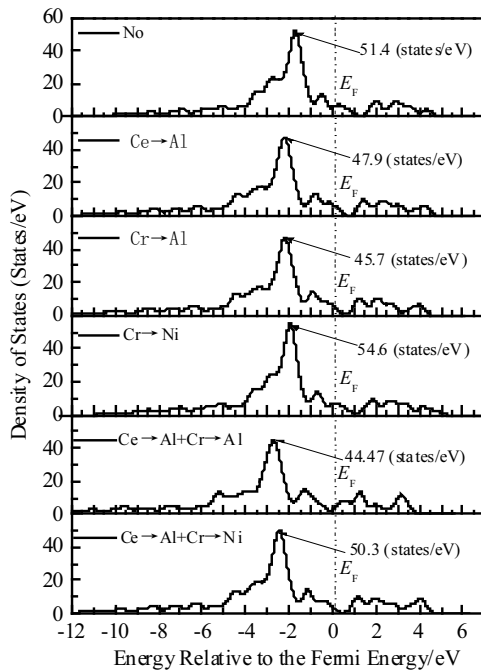


图 3 合金化浓度  $x$  与合金化方式对  $\text{Ni}_8\text{Al}_8$  单晶 Cauchy 压力与  $G/B_0$  值的影响

Fig.3 Effect of alloying concentration  $x$  and mode on the  $C_{12}\text{-}C_{44}$  (a) and the  $G/B_0$  (b) value for  $\text{Ni}_8\text{Al}_8$  crystals

图4 B<sub>2</sub>-NiAl 超胞模型的电子态密度Fig.4 Density of states of B<sub>2</sub>-NiAl supercell models

密度为 51.4 (state/eV)。对比 5 种合金化方式, Cr 占据 Ni 原子位模型主要成键峰的态密度为 54.6 (state/eV), 说明增强了 Ni(d)-Ni(d)键的杂化效应, 提升了主要成键峰的方向性<sup>[30]</sup>, 从成键电子分布状态层面说明 Cr 占据 Ni 原子位降低了其晶体的延性, 与前面弹性常数数据分析一致。其余 4 种合金化方式中, 都有削弱 B<sub>2</sub>-NiAl 晶体原子中 Ni(d)-Ni(d)主要成键峰的杂化效应, 降低主要成键峰方向性的趋势, 尤其是当 Cr 占据 Al 原子位和 Ce 取代 Al 原子位协同 Cr 取代 Al 原子位 2 种合金化方式, 其主要成键峰的态密度分别降到了 45.7 和 44.47 (state/eV), 故从成键电子分布状态层面进一步说明了 Cr 占据 Al 原子位和 Ce 取代 Al 原子位协同 Cr 取代 Al 原子位 2 种合金化能提升其晶体的延性。综上所述, 电子总态密度结构图的分析进一步印证了弹性常数计算与分析所得结果。

### 3 结论

1) 在合金化浓度为 0 at%~2.2 at%范围内, Ce 占据 Al 原子位、Cr 占据 Ni 原子位以及 Ce 占据 Al 原子位协同 Cr 占据 Ni 原子位 3 种合金化方式均能提高 B<sub>2</sub>-NiAl 合金的剪切模量  $G$  和弹性模量  $E$ , 尤其是 Cr 占据 Ni 原子位的效果最显著; 而 Ce 占据 Al 原子位则能降低其合金的  $G$  和  $E$ ; 与前两者都不一样的 Cr

占据 Al 原子位协同 Ce 占据 Al 原子位的复合合金化方式, 其浓度小于 1.6 at%区间内增强其  $G$  和  $E$ , 而对于 1.6 at%时则降低其  $G$  和  $E$ 。

2) 随着合金化浓度提高到 2.1 at%, Cr 占据 Al 原子位能改善 B<sub>2</sub>-NiAl 合金的延性, 而当 Ce 取代 Al 原子位协同 Cr 取代 Al 原子位时, 对其延性的改善效果比各自单独合金化的效果更显著, 且以合金化浓度为 2.0 at%时为最佳效果。理论计算很好的重现了实验中 Ce 与 Cr 协同合金化明显提升 B<sub>2</sub>-NiAl 合金室温延性的现象。

3) 电子态密度分析显示, Cr 占据 Al 原子位和 Ce 取代 Al 原子位协同 Cr 取代 Al 原子位 2 种合金化方式能明显削弱 B<sub>2</sub>-NiAl 晶体中 Ni(d)-Ni(d)主要成键峰的杂化效应, 降低主要成键峰的方向性。

### 参考文献 References

- [1] Guo Jianting(郭建亭), Yuan Chao(袁超), Hou Jieshan(侯介山). *Acta Metallurgica Sinica* (金属学报)[J], 2008, 44(5): 513
- [2] Zhang Yi(张毅), Xu Qianqian(许倩倩), Li Ruiqing(李瑞卿) *et al. Transactions of Materials and Heat Treatment*(材料热处理学报) [J], 2014, 35(8): 1
- [3] Hu Yong(胡勇), Rao Li(饶丽), Li Qiuping(黎秋萍). *Transactions of Materials and Heat Treatment*(材料热处理学报)[J], 2014, 35(4): 121
- [4] Wang Jun(王军), Zhu Xiurong(朱秀荣), Xu Yongdong(徐永东) *et al. The Chinese Journal of Nonferrous Metals*(中国有色金属学报)[J], 2014, 24(1): 25
- [5] Fu Xiaoyang(富晓阳), Yang Jichun(杨吉春), Zhao Xuelin(赵学林) *et al. Hot Working Technology*(热加工工艺)[J], 2015, 44(12): 68
- [6] Liu Xiao(刘晓), Ma Lifei(马利飞), Li Hongbing(李红斌) *et al. Hot Working Technology*(热加工工艺)[J], 2017, 46(12): 110
- [7] Liu Chunhai(刘春海), Tan Qing(谭青), Liu Hua(刘华) *et al. Rare Metals and Cemented Carbides*(稀有金属与硬质合金)[J], 2017, 45(3): 45
- [8] Wang Wuxiao(王武孝), Luo Jingzhao(罗京兆), Liu Xueyong(刘雪雍). *Foundry*(铸造)[J], 2018, 67(12): 1105
- [9] Zhang Jiangtao(张江涛). *Foundry Technology*(铸造技术)[J], 2018, 39(12): 2690
- [10] Liu Chunhai(刘春海), Li Tian(李天), Wu Dayong(吴大勇) *et al. Foundry*(铸造)[J], 2019, 68(2): 152
- [11] Wang Y, He J Q, Yan M F *et al. J Mater Sci Technol*[J], 2011, 27(8): 719
- [12] He Junqi(何君琦). *Thesis for Doctorate*(博士论文)[D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2013

- [13] Qin Yonghe(秦永和). *Thesis for Doctorate*(博士论文)[D]. Harbin: Harbin Engineering University, 2015
- [14] Chen W X, Hines J R, Wang Y. *Advanced Engineering Materials* [J], 2004, 6(11): 876
- [15] Chen Yu(陈煜), Yao Zhengjun(姚正军), Zhang Pingze(张平则) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2017, 46(10): 2863
- [16] Chen Lü(陈律), Peng Ping(彭平), Zhan Jianping(湛建平) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程) [J], 2010, 39(2): 229
- [17] Chen Lü(陈律), Peng Ping(彭平), Han Shaochang(韩绍昌). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2007, 36(12): 2089
- [18] Chen Lü(陈律), Wen Tao(文韬). *Journal of Aeronautical Materials* (航空材料学报)[J], 2011, 31(2): 1
- [19] Wang Lei(王雷). *Thesis for Doctorate*(博士论文)[D]. Xi'an: Northwestern Polytechnical University, 2014
- [20] Guo Jianting(郭建亭), Ren Weili(任维丽), Zhou Jian(周健). *Acta Metallurgica Sinica* (金属学报)[J], 2002, 38(6): 667
- [21] Souvatzia P, Katsnelson M I, Simak S. *Phys Rev B*[J], 2004, 70: 012 201
- [22] Ramer N J, Rappe A M. *Phys Rev B*[J], 2000, 62: R743
- [23] Xu W W, Han J J, Wang Z W *et al. Intermetallics*[J], 2013, 32: 303
- [24] Li Hutian(李虎田), Guo Jianting(郭建亭), Ye Hengqiang(叶恒强). *Rare Metal Materials and Engineering* (稀有金属材料与工程) [J], 2006, 35(7): 1162
- [25] Pettifor D G. *Mater Sci Technol* [J], 1992, 8(4): 345
- [26] Ponomareva A V, Isaev E I, Vekilov Y K *et al. Physical Review B* [J], 2012, 85(14): 144 117
- [27] Wang J Y, Zhou Y C. *Phys Rev B*[J], 2004, 69: 144 108
- [28] Wen Zhiqing(文志勤). *Thesis for Doctorate*(博士论文)[D]. Taiyuan: North University of China, 2019
- [29] Zhang Chunhong(张春红), Zhang Zhongzheng(张忠政), Yan Wangjun(闫万珺) *et al. Journal of Atomic and Molecular Physics*(原子与分子物理学报)[J], 2017, 34(4): 756
- [30] Zhang Chaoyan(张超彦), Zhang Lixia(张丽霞), Hou Hua(侯华). *Journal of Atomic and Molecular Physics*(原子与分子物理学报)[J], 2019, 36(6): 1025

## First-Principles Study on Mechanical Properties of B<sub>2</sub>-NiAl Intermetallic Compound Alloyed by Ce Cooperation with Cr

Chen Lü, Liu Yizhong, Li Min

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

**Abstract:** The effect of alloying concentration  $x$  ( $x=0\sim 2.2$  at%) on Cauchy pressure, elastic modulus  $E$ , the shear modulus  $G$  and their ratio  $G/B_0$  of B<sub>2</sub>-NiAl supercells alloyed by Cr and Ce, alone or together, was calculated in the framework of Virtual Crystal Approximation (VCA) by the first-principles pseudopotential plane-wave method. Results show that the shear modulus  $G$  and elastic modulus  $E$  of B<sub>2</sub>-NiAl alloy are significantly increased when Cr occupies the Ni atom site in B<sub>2</sub>-NiAl crystals, while the  $G$  and  $E$  will be reduced when Ce occupies the Al atom site. With the alloying concentration increasing to 2.1 at%, the ductility of B<sub>2</sub>-NiAl crystals can be improved with Cr occupying the Al atom site. It is worth emphasizing that the ductility of B<sub>2</sub>-NiAl crystals is improved more significantly when Ce and Cr replace Al atom site simultaneously than that alloyed by Ce or Cr alone, especially when the alloying concentration  $x$  is 2.0 at%. The calculation result herein explains the phenomenon that the room temperature ductility of B<sub>2</sub>-NiAl alloy is enhanced obviously by Cr cooperation with Ce. The electronic density of states shows that Cr atoms or Cr cooperation with Ce atoms all can weaken the hybridization effect of the main bonding peaks of Ni(d)-Ni(d) and decrease the directivity of the main bonding peaks in B<sub>2</sub>-NiAl crystal.

**Key words:** B<sub>2</sub>-NiAl; Ce and Cr alloying; virtual crystal approximation; mechanical property

Corresponding author: Chen Lü, Master, Associate Professor, Aviation Electromechanical Equipment Maintenance Department, Changsha Aeronautical Vocational and Technical College, Changsha 410124, P. R. China, Tel: 0086-731-85473638, E-mail: 6994980@qq.com