

# B<sub>2</sub>-NiAl 弹性性质 Ag 合金化效应的理论研究

陈律, 文韬

(空军航空维修技术学院, 长沙 410124)

**摘要:** 采用第一原理赝势平面波方法和基于虚拟晶体势函数近似(VCA), 计算了 Ag 合金化(浓度  $x < 1.0\%$ , 原子分数, 下同) 时完整与缺陷 B<sub>2</sub>-NiAl 晶体的弹性性质, 并采用弹性常数  $C_{44}$ , Cauchy 压力参数( $C_{12} - C_{44}$ )、弹性模量  $E$ 、剪切模量  $G$  及其与体模量  $B_0$  的比值  $G/B_0$  等, 表征和评判了 Ag 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,  $x < 1\%$  的 Ag 合金化均可使其硬度大幅提高; 在  $0\% \sim 0.6\%$  以及  $0.7\% \sim 1\%$  区间, Ag 将提高 NiAl 完整晶体材料的延性, 并且以  $0.6\%$  附近为最好; 当  $x \leq 0.5\%$  时, Ag 合金化能改善 Ni 空位的 NiAl 多晶材料延性, 并以  $x = 0.32\% \sim 0.48\%$  时, Ni 空位的 NiAl 多晶延性的提升幅度尤为明显; 而当  $1\% > x > 0.5\%$  时, 却可明显提高 Ni 反位 B<sub>2</sub>-NiAl 晶体的延展性, 并在  $x = 0.73\% \sim 1\%$  区间呈现相对较好的韧化效果。上述结论归于低浓度 Ag 的固溶强化与高浓度 Ag 的富 Ag 相软化作用。

**关键词:** B<sub>2</sub>-NiAl; Ag 合金化; 第一原理计算; 弹性性质

**DOI:** 10.3969/j.issn.1005-5053.2011.2.001

**中图分类号:** TG146.2

**文献标识码:** A

**文章编号:** 1005-5053(2011)02-0001-07

B<sub>2</sub> 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, 其应用却受到室温塑性较差的限制。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<sup>[1]</sup>, 被证明是一种可有效改善其力学性能的方法<sup>[2,3]</sup>。研究人员根据合金元素在 NiAl 化合物中的作用行为, 将其分成三类<sup>[4]</sup>: A 类元素 Ti, Zr, Hf, Nb 和 Ta 在 NiAl 中的固溶度很低, 常以 Heusler 相(Ni<sub>2</sub>AlX) 和 Laves 相(NiAlX) 三元金属间化合物形式存在, 显著提高 NiAl 合金的蠕变强度; B 类元素 V, Cr, Mo, W 与 NiAl 形成伪二元共晶系, 共晶组织改善 NiAl 合金的室温韧性; C 类元素 Fe, Co, Cu 在 NiAl 中有很高的固溶度, 大量加入 NiAl 合金中, 形成塑性第二相而提高其室温塑性。最近周健等人<sup>[4]</sup>研究了 Ag 对 NiAl 合金显微组织和压缩性能的影响, 其结果表明 Ag 合金化能显著提高 NiAl 合金的室温压缩塑性, 而合金元素 Ag 在 NiAl 中的作用行为还不清楚。1992 年 Darolia 等人<sup>[5]</sup>率先发现

在 NiAl 单晶中加入 0.25% 的 Fe 可使 NiAl 在  $\langle 110 \rangle$  方向延展性从 1% 提高到 6%, 而 Fe 的加入量超过 0.5% 时韧化作用呈消失的变化趋势。Munroe 等人<sup>[6]</sup>进一步指出高浓度 Fe 合金化不能改善 NiAl 合金的延性。由此可见, 合金元素的浓度对合金化效应有很大的影响。

由于实验条件的复杂性和实验手段的限制, 研究者一直没有研究清楚合金化元素 Ag 对 NiAl 合金的作用机制。第一性原理计算由于能从丰富的原子尺度信息解释许多实验现象而广泛地应用于金属间化合物的各种物理、力学性质与合金化效应的研究<sup>[7-11]</sup>。为了更好地理解元素 Ag 及其浓度对 NiAl 合金的作用机制, 本工作采用第一性原理计算方法系统地研究不同浓度 Ag 合金化 NiAl 合金的弹性性质, 以期从原子尺度解释合金化元素 Ag 对 NiAl 合金的作用机制。

## 1 计算模型与方法

B<sub>2</sub>-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, d 分别是 NiAl 晶体 Ni 空位和

收稿日期: 2008-12-29; 修订日期: 2010-08-27

基金项目: 湖南省教育厅科学研究资助项目(06D002)

作者简介: 陈律(1978—), 男, 硕士, 讲师, 主要从事材料计算与设计研究, (E-mail) chencastep@126.com。

Ni 反位超胞模型。由于 Ag 在 NiAl 晶体中优先占据 Ni 原子位<sup>[12]</sup>, 并且 Ag 在 NiAl 中的固溶度小于 1%<sup>[13]</sup>。因此本工作针对 Ni 原子位进行了不同浓度(0~1%)的 Ag 合金化的模型计算。

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<sup>[14]</sup>, 晶体波函数由平面波基组展开, 势函数采用倒易空间表述的超软( Ultrasoft) 赝势<sup>[15]</sup>, 交换关联能函数采用 GGA 中的 PBE 关系式<sup>[16,17]</sup>。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 330.0eV。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<sup>[18]</sup>对超胞结构进行几何优化, 以求得其局域最稳定结构。使用基集修正<sup>[19]</sup>, 自洽场计

算(SCF)时应用 Pulay 密度混合法<sup>[20]</sup>, 体系总能量收敛值取  $1.0 \times 10^{-3}$  eV/atom, 每个原子上的力要求低于 0.01eV/nm, 公差偏移小于  $5 \times 10^{-4}$  nm, 应力偏差小于 0.2GPa。

合金化时势函数采用 VCA( Virtual crystal approximation) 虚拟晶体近似<sup>[21]</sup>。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<sup>[22]</sup>对 Pb ( $Zr_{1-x}Ti_x$ ) O<sub>3</sub> 晶格常数的计算, 计算结果与实验数据一致, Souvatzis 等人<sup>[21]</sup>分别用 VCA 方法和超胞模型计算了 W<sub>0.5</sub>Re<sub>0.5</sub>合金的弹性模量, 相对误差 <5%。

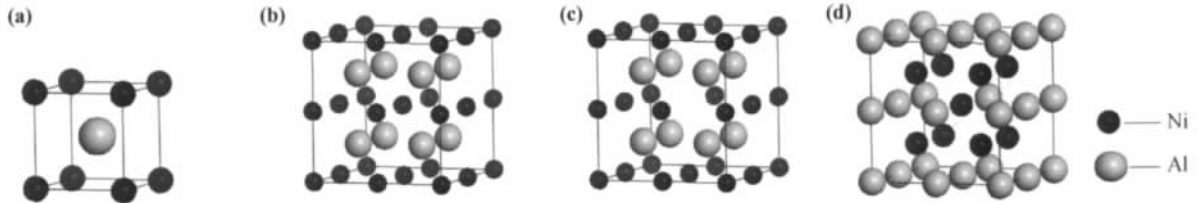


图1 计算模型 (a) NiAl 晶体结构; (b) Ni<sub>8</sub>Al<sub>8</sub> 超胞; (c) Ni 空位超胞; (d) Ni 反位超胞

Fig.1 Models of calculation (a) crystal structure of B<sub>2</sub>-NiAl; (b) Ni<sub>8</sub>Al<sub>8</sub> supercell; (c) NiAl supercell with Ni vacancy defect; (d) NiAl supercell with Ni anti-site defect

## 2 计算结果与讨论

### 2.1 B<sub>2</sub>-NiAl 晶体的基本物性

首先计算了 B<sub>2</sub>-NiAl 晶体的晶格常数  $a$ 、合金形成热  $\Delta H$  与弹性模量  $C_{ij}$ , 结果列于表 1, 并与先前的实验数据<sup>[23~25]</sup>, 以及 Farkas 等人<sup>[26]</sup>、Voter 等人<sup>[27]</sup>

和 Rao 等人<sup>[28]</sup>的计算结果进行比较。从表 1 可见, 计算结果与实验数据比较接近, 之所以存在一定的差距, 初步确定其原因在于实验条件下 NiAl 单晶中杂质原子、热空位、组分缺陷、晶体取向、表面处理、预变形等因素对 NiAl 单晶本征物理性质的影响较大。计算结果与其他研究中的计算结果接近, 表明本工作所选计算条件与参数基本合适。

表1 B<sub>2</sub>-NiAl 的晶格常数  $a$ 、形成热  $\Delta H$  和弹性常数  $C_{ij}$

Table 1 The lattice constant  $a$ , the heat of formation  $\Delta H$  and elastic constant  $C_{ij}$  of B<sub>2</sub>-NiAl crystal

Parameter	This work	Exp. <sup>[23~25]</sup>	Farkas <sup>[26]</sup>	Voter <sup>[27]</sup>	Rao <sup>[28]</sup>
$a$ /nm	0.287	0.2886 <sup>[23]</sup>	0.288	0.287	0.288
$\Delta H$ /(kJ/mol)	-71.3	-72.0 <sup>[24]</sup>	-55.4		
$C_{11}$ /GPa	161.4	211.5 <sup>[25]</sup>	185.8	278.8	189.1
$C_{12}$ /GPa	148.0	143.2 <sup>[25]</sup>	123.4	184.3	126.6
$C_{44}$ /GPa	97.9	112.1 <sup>[25]</sup>	123.4	177.8	128.2

### 2.2 Ag 合金化 NiAl 晶体的弹性性质

基于图 1b 的超胞模型, 本工作计算了低浓度 Ag 合金化 NiAl 单晶的弹性常数。考虑到单晶弹性

常数能被用来估算多晶材料的一些弹性性质<sup>[29]</sup>, 进一步采用式(1)~(3)计算了 B<sub>2</sub>-NiAl 多晶材料的体模量  $B_0$ 、剪切模量  $G$ 、弹性模量  $E$ <sup>[30]</sup>。

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

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

$$E = \frac{9B_0G}{3B_0 + G} \quad (3)$$

由于材料硬度与弹性模量  $E$  和剪切模量  $G$  密切相关<sup>[30]</sup>, 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<sup>[29]</sup> 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, 图2示出了 Ag 合金化浓度  $x$  对 NiAl 多晶材料硬度的影响。由图2可知, 随着 Ag 合金化浓度从 0 增加到 1%,  $B_2$ -NiAl 晶体的  $C_{44}, E, G$  大幅提高。可见, Ag 合金化可显著提高 NiAl 晶体的硬度, 这种效应归因于低浓度 Ag 的固溶强化<sup>[4]</sup>。

图3为  $B_2$ -(Ni<sub>1-x</sub>Ag<sub>x</sub>)Al 单晶 Cauchy 压力  $C_{12} - C_{44}$  与多晶  $G/B_0$  比值随 Ag 合金化浓度  $x$  变化曲线。基于 Pugh 等人<sup>[31]</sup> 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<sup>[32]</sup>, 本工作对图3中  $G/B_0$  随 Ag 合金化浓度变化的曲线进行了分析。由图3可见, Ag 合金化浓度在 0~0.6% 以及 0.7%~1% 区间,  $G/B_0$  值相对于未合金化时都要小, 说明在上述两个合金化浓度区间 Ag 有利于 NiAl 晶体材料延性的提高, 浓度在 0.6% 左右时效果最好。

考虑到 Cauchy 压力已被很好地用来表征和评判纯 Ni 和纯 Al 晶体的延展性以及半导体 Si 晶体的脆性<sup>[33]</sup>, 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 Ag 合金化浓度变化曲线进行了分析。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<sup>[34]</sup> 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% 的室温伸长率。Ag 合金化时, 随着合金化浓度从 0 增加到 1%, 图3显示 Cauchy 压力  $C_{12} - C_{44}$  值在 0~0.6% 以及 0.7%~1% 区间, 相对于合金化前都有所增加, 表明在上

述两个合金化浓度区间 Ag 将提高 NiAl 晶体材料的延性, 同样也反映出合金化浓度在 0.6% 左右最好。

考虑到晶体缺陷对金属间化合物的物理与弹性性质起着非常重要的作用, 比如 RuAl 单晶室温塑性虽然比 NiAl 单晶差, 但其点缺陷结构对塑性降低程度的影响却没有 NiAl 大, 从而导致含有点缺陷结构的 RuAl 合金实际室温塑性比 NiAl 好<sup>[9]</sup>, 而  $B_2$ -YX ( $X = \text{Cu}, \text{Rh}, \text{Ag}, \text{In}$ ) 金属间化合物之所以表现出良好的室温延性, 除了他们呈本征延性外, 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<sup>[8]</sup>。由此推测: NiAl 基合金室温塑性比较差可能源于其对结构缺陷与环境的高敏感性<sup>[35]</sup>, 因此, 本工作进一步对 Ag 合金化时缺陷 NiAl 晶体的弹性性质进行了计算。

### 2.3 缺陷 NiAl 晶体 Ag 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<sup>[36,37]</sup>, 因此本工作另计算了 Ni 空位(见图1c)与 Ni 反位(见图1d)缺陷 NiAl 单晶低浓度 Ag 合金化时的弹性常数。相应的单晶  $C_{44}$  和 Cauchy 压力  $C_{12} - C_{44}$  值与多晶弹性模量  $E$ 、剪切模量  $G$  和  $G/B_0$  比值随 Ag 合金化浓度  $x$  变化的曲线如图4与图5所示。

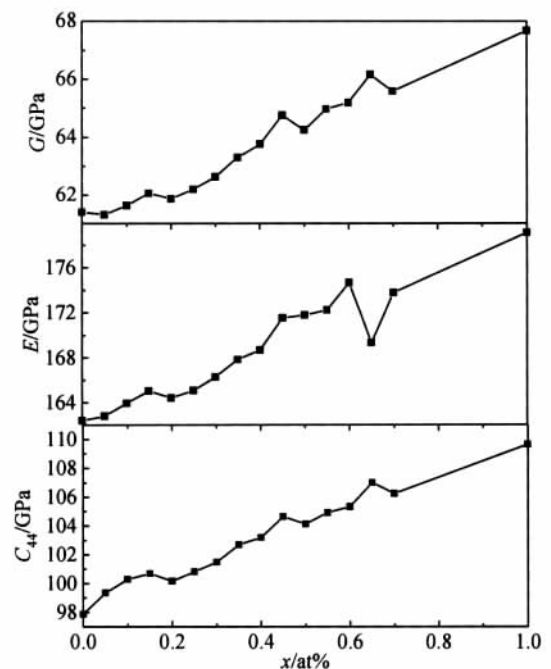


图2  $B_2$ -NiAl 晶体  $C_{44}, E, G$  随 Ag 合金化浓度  $x$  的变化

Fig. 2 The elastic constant  $C_{44}$ , the elastic modulus  $E$  and the shear modulus  $G$  of  $B_2$ -NiAl crystals as a function of Ag alloying concentration  $x$

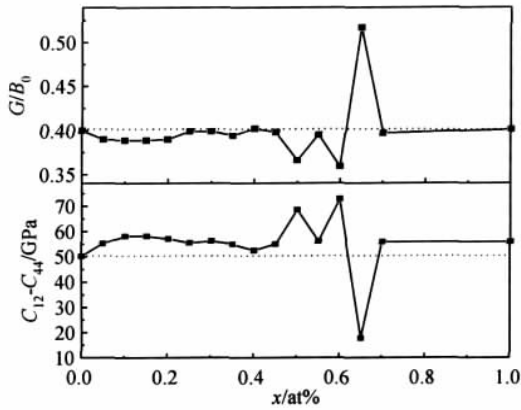


图3  $B_2$ -NiAl 单晶 Cauchy 压力  $C_{12}-C_{44}$  和多晶  $G/B_0$  比值随 Ag 合金化浓度  $x$  的变化

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

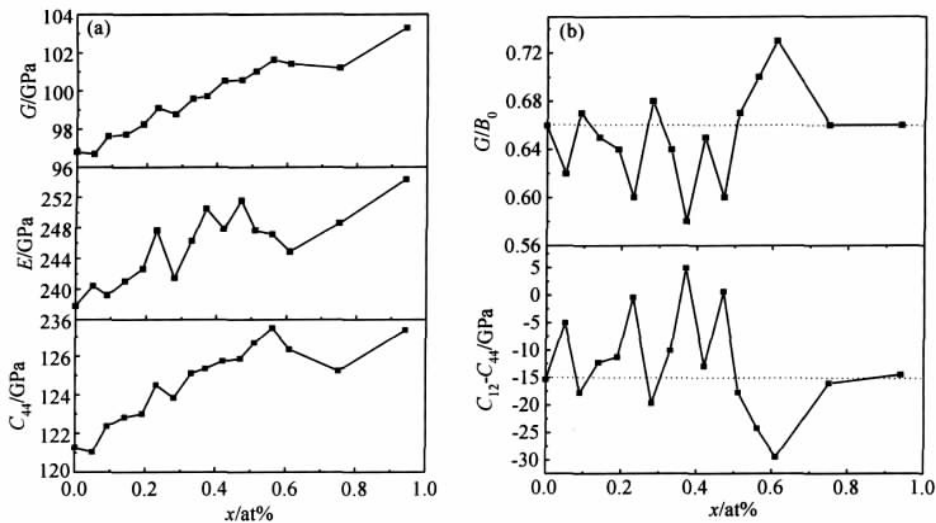


图4 Ni 空位  $B_2$ -NiAl 单晶  $C_{44}$  和 Cauchy 压力  $C_{12}-C_{44}$  与多晶  $E, G$  和  $G/B_0$  比值随 Ag 合金化浓度  $x$  的变化

Fig. 4 The elastic constant  $C_{44}$ , Cauchy pressure ( $C_{12}-C_{44}$ ) of  $B_2-(Ni_{1-x}Ag_x)$  Al single crystals with Ni vacancy defect and the elastic modulus  $E$ , the shear modulus  $G$  and the ratio  $G/B_0$  of corresponding polycrystals as a function of Ag alloying concentration  $x$

时( $Ni_{1-x}Ag_x$ ) Al 多晶  $E$  和  $G$  值的提高,并且 Ag 合金化对缺陷晶体的强化程度比完整晶体的更显著。可见 Ag 的固溶强化同样使缺陷 NiAl 晶体的硬度也大幅提高。

而由图 4b 可见: 当 Ag 合金化浓度  $x < 0.5\%$  时,单晶 Cauchy 压力参数  $C_{12}-C_{44}$  值震荡不定,但基本上较未合金化时的有所提升,多晶  $G/B_0$  值也较未合金化时的有所降低,表明在这一合金化浓度范围 Ag 对含 Ni 空位的 NiAl 多晶材料延性有改善作用,并以  $x = 0.32\% \sim 0.48\%$  时, Ni 空位的 NiAl 多

晶延性的提升幅度尤为明显。而当 Ag 合金化浓度  $1\% > x > 0.5\%$  时, Ag 对 Ni 空位的 NiAl 晶体的强化作用则消失。

由图 5b 可知 Ni 反位的情况: 当 Ag 合金化浓度  $x < 0.5\%$  时,虽然对 NiAl 晶体的强化没有效果,但在  $1\% > x > 0.5\%$  高 Ag 合金化浓度区间,随着 Ag 合金化浓度的增加,可见 Cauchy 压力  $C_{12}-C_{44}$  的显著升高与  $G/B_0$  比值明显下降,并在  $x = 0.73\% \sim 1\%$  区间呈现相对较好的强化效果。一个主要的原因很可能源于富 Ag 相的软化作用<sup>[4]</sup>。

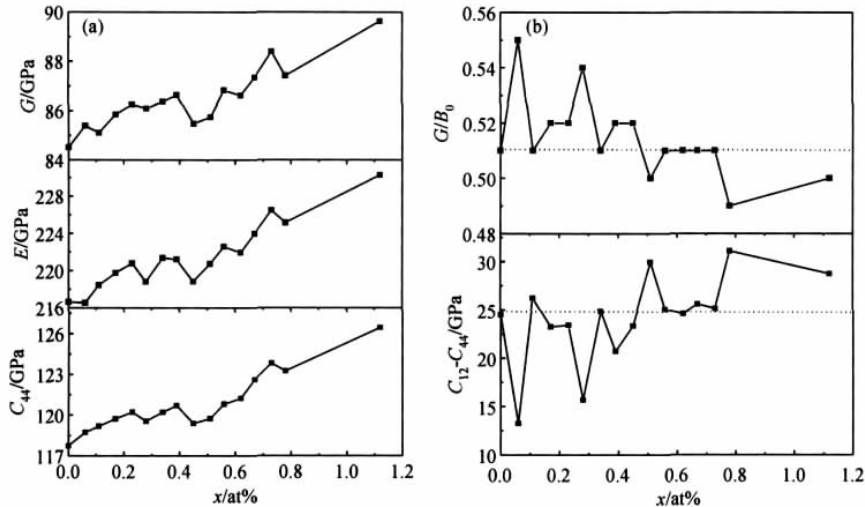


图5 Ni 反位 B<sub>2</sub>-NiAl 的晶体  $C_{44}$ ,  $E$ ,  $G$  以及  $G/B_0$  比值和 Cauchy 压力  $C_{12}-C_{44}$  值随 Ag 合金化浓度  $x$  变化

Fig 5 The elastic constant  $C_{44}$  and Cauchy pressure parameter ( $C_{12}-C_{44}$ ) of B<sub>2</sub>-(Ni<sub>1-x</sub>Ag)<sub>x</sub> Al single crystals with Ni anti-site and the elastic modulus  $E$ , the shear modulus  $G$  as well as the ratio  $G/B_0$  of corresponding polycrystals as a function of Ag alloying concentration  $x$

### 3 结论

(1) Ag 合金化浓度在 0 ~ 1% 范围内均对 NiAl 晶体的硬度有明显影响, 无论点缺陷存在与否, Ag 合金化均可使 B<sub>2</sub>-NiAl 晶体的硬度大幅提高。在 0 ~ 0.6% 以及 0.7% ~ 1% 区间, Ag 将提高 NiAl 完整晶体材料的延性, 并且以 0.6% 左右为最好。

(2) Ni 空位或 Ni 反位降低 B<sub>2</sub>-NiAl 晶体的本征延性。当  $x \leq 0.5\%$  时, Ag 合金化能改善 Ni 空位的 NiAl 多晶材料延性, 尤其  $x = 0.32\% \sim 0.48\%$  时, Ni 空位的 NiAl 多晶延性的提升幅度尤为明显; 当  $1\% > x > 0.5\%$  时, 可明显提高 Ni 反位 B<sub>2</sub>-NiAl 晶体的延展性, 在  $x$  为 0.73% ~ 1% 时呈现相对较好的韧化效果。

志谢: 湖南大学材料科学与工程学院彭平教授课题组提供 CASTEP 软件与技术支持。

#### 参考文献:

[1] DAROLIA R. Structural applications of NiAl [J]. J Mater Sci Technol, 1994, 10(3): 157-169.  
 [2] MORINAGA M, SAITO J, YUKAWA N, *et al.* Electronic effect on the ductility of alloyed TiAl compound [J]. Acta Mater, 1990, 38(1): 25-29.  
 [3] 刘震云, 林栋梁, 黄伯云, 等. NiAl 金属间化合物研究

现状 [J]. 机械工程材料, 1998, 22(2): 1-5.

[4] 周健, 郭建亭, 李谷松. Ag 对 NiAl 合金组织和性能的影响 [J]. 材料工程, 2002, 3: 7-10.  
 [5] DAROLIA R, LAHRMAN D, FIELD R. The effect of iron, gallium and molybdenum on the room temperature tensile ductility of NiAl [J]. Scripta Metall Mater, 1992, 26(7): 1007-1012.  
 [6] MUNROE P R, GEORGE M, BAKER I, *et al.* Microstructure, mechanical properties and wear of Ni-Al-Fe alloys [J]. Mater Sci Eng A, 2002, 325(1): 1-8.  
 [7] 陈律, 彭平, 李贵发, 等. Li<sub>0</sub>-TiAl 金属间化合物 Mn、Nb 合金化电子结构的计算 [J]. 航空材料学报, 2005, 25(5): 15-19.  
 [8] 陈律, 彭平, 韩绍昌. B<sub>2</sub>-YX (X = Cu, Rh, Ag, In) 点缺陷结构及其基本物性的理论计算 [J]. 稀有金属材料与工程. 2007, 36(12): 2089-2093.  
 [9] 陈律, 彭平, 李贵发, 等. B<sub>2</sub>-RuAl 点缺陷结构的第一原理计算 [J]. 稀有金属材料与工程. 2006, 35(7): 1065-1070.  
 [10] 陈律, 彭平, 韩亚利. Li<sub>0</sub>-TiAl 基本物性的计算与比较研究 [J]. 材料科学与工艺, 2007(1): 47-51.  
 [11] 陈律, 彭平, 湛建平, 等. Ru 合金化 Ni/Ni<sub>3</sub>Al 相界断裂功的第一原理计算 [J]. 中国有色金属学报, 2008, 18(5): 890-896.  
 [12] XU D S, LI D, HU Z Q. Substitution Behavior in NiAl-a First Principle Prediction Considering Lattice Relaxation [J]. Mater Res Soc Symp Proc, 1999, 538: 377-382.  
 [13] 郭建亭. 有序金属间化合物镍铝合金 [M], 北京: 科学出版社, 2003: 66-69.

- [14] SEGALL M D, LINDAN PHILIP J D, PROBERT M J, *et al.* First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code [J]. *J Phys: Condens Matter*, 2002, 14 (11): 2717 – 2744.
- [15] VANDERBILT D. Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism [J]. *Phys Rev B*, 1990, 41(11): 7892 – 7895.
- [16] MARLO M, MILMAN V. Density-functional study of bulk and surface properties of titanium nitride using different exchange-correlation functionals [J]. *Phys Rev B*, 2000, 62(4): 2899 – 2907.
- [17] WHITE J A, BIRD D M. Implementation of gradient-corrected exchange-correlation potentials in car-parrinello total-energy calculations [J]. *Phys Rev B*, 1994, 50(7): 4954 – 4957.
- [18] FISCHER T H, ALMLÖF J. General methods for geometry and wave function optimization [J]. *J Phys Chem*, 1992, 96(24): 9768 – 9774.
- [19] FRANCIS G P, PAYNE M C. Finite basis set corrections to total energy pseudopotential calculations [J]. *J Phys: Condens Matter*, 1990, 19(2): 4395 – 4404.
- [20] PULAY P. Ab initio calculation of force constants and equilibrium geometries in polyatomic molecules I: Theory [J]. *Mol Phys*, 1969, 17(2): 197 – 204.
- [21] SOUVATZIA P, KATSNELSON M I, SIMAK S. First-principles prediction of superplastic transition-metal alloys [J]. *Phys Rev B*, 2004; 70: 012201 – 012203.
- [22] RAMER N J, RAPPE A M. Virtual-crystal approximation that works: Locating a compositional phase boundary in  $\text{Pb}(\text{Zr}_{1-x}\text{Ti}_x)\text{O}_3$  [J]. *Phys Rev B*, 2000, 62: R743 – R746.
- [23] VILLAS P, CALVERT L. Pearson's Handbook of Crystallographic data for Intermetallic Phases: 2nd Edt [M]. OH USA: ASM International (OH), 1991.
- [24] 张永刚, 韩雅芳, 陈国良, 等. 金属间化合物结构材料 [M]. 北京: 国防工业出版社, 2001: 120.
- [25] WASILEWSKI R J. Elastic Constants and Young's Modulus of NiAl [J]. *Trans TMS AIME*, 1966, 236: 455 – 457.
- [26] FARKAS D, MUTASA B, VAILHE C, *et al.* Interatomic potentials for  $\text{B}_2$  NiAl and martensitic phases [J]. *Modeling Simul Mater Sci Eng*, 1995, 3(2): 201 – 214.
- [27] VOTER A F, CHEN S P. Accurate interatomic potentials for Ni, Al and  $\text{Ni}_3\text{Al}$  [J]. *Proc Symp Mater Res Soc*, 1987, 82: 175 – 180.
- [28] RAO A I, WOODWARD C, PARTHASARATHY T A. Empirical interatomic potentials for  $\text{Ll}_0$  TiAl and  $\text{B}_2$  NiAl [J]. *Proc Symp Mater Res Soc*, 1991, 213: 125 – 130.
- [29] JHI S H, IHM J, LOUIE G S, *et al.* Electronic mechanism of hardness enhancement in transition-metal carbonitride [J]. *Nature*, 1999, 6726(399): 132 – 134.
- [30] CHEN K Y, ZHAO L R, JOHN R, *et al.* Alloying effects on elastic properties of TiN-based nitride [J]. *J Phys D: Appl Phys*, 2003, 36: 2725 – 2729.
- [31] PUGH S F. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals [J]. *Philos Mag*, 1954, 45: 823 – 843.
- [32] WANG J Y, ZHOU Y C. Polymorphism of  $\text{Ti}_3\text{SiC}_2$  ceramic: First-principles investigation [J]. *Phys Rev B*, 2004, 69: 144108 – 144121.
- [33] PETTIFOR D G. Theoretical predictions of structure and related properties of intermetallics [J]. *Mater Sci Technol*, 1992, 8(4): 345 – 349.
- [34] LEVIT V I, BUL I A, HU J, *et al.* High tensile elongation of  $\beta$ -NiAl single crystals at 293 K [J]. *Scripta Mater*, 1996, 34(12): 1925 – 1930.
- [35] DAROLIA R, WALSTON W S, NOEBE R, *et al.* Mechanical properties of high purity single crystal NiAl [J]. *Intermetallics*, 1999, 7(10): 1195 – 1202.
- [36] WÜRSCHUM R, BADURA-GERGEN K, KÜMMERLE E A, *et al.* Characterization of radiation-induced lattice vacancies in intermetallic compounds by means of positron-lifetime studies [J]. *Phys Rev B*, 1996, 54(2): 849 – 856.
- [37] PIKE L M, CHANG Y A, LIU C T. Point defect concentrations and hardening in binary  $\text{B}_2$  intermetallics [J]. *Acta Mater*, 1997, 45(9): 3709 – 3719.

# First-Principles Study on Elastic Properties of B<sub>2</sub>-NiAl Intermetallic Compound with Ag Addition

CHEN Lü, WEN Tao

( Air Force Aeronautical Service 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<sub>2</sub>-(Ni<sub>1-x</sub>Ag<sub>x</sub>)Al ( $x = 0 \sim 1\%$ , atom fraction,) 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 ( $C_{12}-C_{44}$ ), Elastic modulus  $E$ , the shear modulus  $G$  and their ratio  $G/B_0$  were adopted to characterize and assess the effect of Ag alloying concentration on the ductility and hardness of NiAl intermetallic compounds. Ag addition with  $x < 1\%$  is proved to be efficient to enforce the strength or hardness of NiAl intermetallic compounds either for perfect crystals or for defect crystals. Adding Ag in the range of 0 to 0.6% and 0.7% to 1%, especially about 0.6%, help to improve the ductility of perfect B<sub>2</sub>-NiAl. Ni vacancy or Ni anti-site defects make the intrinsic ductility of perfect B<sub>2</sub>-NiAl crystals without Ag addition to be weakened. Moreover, the ductility of B<sub>2</sub>-(Ni<sub>1-x</sub>Ag<sub>x</sub>)Al crystals with Ni vacancies or Ni anti-site is obviously improved as Ag alloying concentration  $x$  is lower than 0.5% (0.32% to 0.48%, especially) or is in the range of 0.5% to 1% (0.73% to 1%, especially) respectively. The alloying effect attribute to solid solution hardening of Ag atom in low concentration and intergeneration of Ag-rich phase in high concentration.

**Key words:** B<sub>2</sub>-NiAl; Ag alloying; pseudopotential plane-wave method; elastic properties

\*\*\*\*\*

## 欢迎订阅《航空材料学报》

非常感谢各位订户这些年来对《航空材料学报》的支持! 2011 年的征订工作已开始, 非常欢迎新老订户踊跃订阅本刊。

2011 年,《航空材料学报》采用铜版纸印刷, 双月刊。

本刊主要刊登与航空工业有关的材料、材料制备工艺、数值模拟、材料计算和材料性能等方面的最新学术论文。同时也刊登在航空工业有应用前景的材料及工艺的相关文章。

《航空材料学报》为《中文核心期刊要目总览》收录期刊, 中国科技论文统计源期刊, 被美国工程索引 ( Ei)、美国化学文摘 ( CA)、英国科学文摘 ( INSPEC)、美国金属文摘 ( MA)、美国剑桥科学文摘等多家检索机构收录。

订刊请与编辑部联系。