



近快速凝固条件下 Ni-50%Sc 金属间化合物韧脆性

原志鹏, 崔红保, 陈 昊, 常亚涛, 郭学锋

(河南理工大学 材料科学与工程学院, 焦作 454000)

摘 要: 通过真空电弧熔炼水冷铜模吸铸法制备 Ni-50%Sc 合金, 用 XRD 和 EDS 分析合金的相组成, 研究其金属间化合物的韧脆性。结果表明: 凝固组织为 B2-NiSc_p+(NiSc+Ni₂Sc)_e, 其中共晶组织分布在晶界与枝晶臂之间。在外力作用下的受力链“B2_p-晶界₁-Ni₂Sc_e-晶界₂-B2_e-晶界₂-Ni₂Sc_p-晶界₃-B2_e”中, Ni₂Sc_e和与其相连的晶界是裂纹产生的区域, 而 B2-NiSc 是塑性较好、在外力作用下可以发生较大变形的金属间化合物。

关键词: 金属间化合物; 第一性原理; B2-NiSc_p; (NiSc+Ni₂Sc)_e; 裂纹萌生

文章编号: 1004-0609(2017)-03-0525-07

中图分类号: TG146.1

文献标志码: A

金属间化合物具有长程有序超点阵的结构特点, 原子间同时存在金属、共价和离子 3 种价键, 强度高, 多数具有优异的高温性能, 可用于航空航天、石油化工和能源动力等工业领域。但是, 金属间化合物的致命弱点是室温塑性低, 严重限制了其应用。2003 年, 美国 Iowa 州立大学和 Ames 实验室 GSCHNEIDNER 等^[1]报道, 具有 B2 结构的金属间化合物 RM(R 为稀土金属, M 为主族金属和过渡族金属)如 YAg、DyCu、CeAg 和 YRh 等都具有明显有别于传统概念的金属间化合物的性能, 尤其具有较好的本征延展性和韧性, 从而引起了材料科学工作者对金属间化合物新一轮的认识与探索, 尤其对具有 B2 结构金属间化合物的呈现高塑性和韧性的机理给予了更高的关注。

B2 结构金属间化合物中很多是具有准确化学计量比的化合物, 通常摩尔比 50:50, 因此, 仅就制备工艺而言, 对其性能影响很大, 因为化学成分微量偏移, 便可以产生第二相, 从而改变 B2 金属间化合物的本征塑性。MULAY 等^[2]研究表明, RM(CuY、AgY、CuDy、AgEr、MgCe 和 MgY)金属间化合物中第二相在很大程度上影响 B2 金属间化合物的韧塑性。CAO 等^[3]在 Ames 实验室和上海大学从事研究期间, 用 TEM 对变形过程中产生第二相问题进行了深入的研究, 揭示了第二相形成机理。由此可见, 从理论上讲为了表征金属间化合物本征塑韧性, 首先要制备出具有准确化学计量比的单相合金, 避免第二相等其他

因素的影响。但是, 大量的实验发现, 即使严格配料, 也无法经普通凝固和近快速凝固获得均质单相 B2 金属间化合物, 而总会伴生第二相生成, 困扰揭示单相 B2 金属间化合物的本征塑性过程。因此, 通过实验组织分析, 在找出主要第二相的基础上, 采用密度泛函理论的平面波赝势方法^[4], 从第一性原理出发, 通过优化晶体结构, 计算其形成焓、弹性常数和态密度, 从理论上分析其硬度和韧塑性。本文作者选择熔点接近的 Ni 元素与 Sc 元素形成 B2 结构的 NiSc 金属间化合物, 并力求探索第二相 Ni₂Sc 对 B2 能性影响的可能性, 为后续研究提供理论参考。

1 实验

1.1 实验方法

纯度 99.99%的 Sc 块用砂纸打磨成银白色, 经超声波清洗后, 用酒精清洗吹干。99.99%Ni 粒用浓硝酸清洗后用酒精清洗吹干。按照 Ni-50%Sc(摩尔分数)成分, 用 FA2004 天平(精度 0.0001 g)称量, 配成预熔合金料。处理好的原材料用真空电弧熔炼水冷铜模吸铸成 d 8 mm 试样。为了避免污染, 在将原料放入电弧炉前, 用体积分数 10%的硝酸酒精溶液清洗铜模和电弧炉膛, 经吹干后, 将称量好的原料放入电弧炉膛中。为了避免熔炼过程中 Sc 与残余氧气发生反应,

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51271073, 51301063); 河南理工大学引进人才基金资助项目(Y-2009)

收稿日期: 2016-03-28; 修订日期: 2016-08-20

通信作者: 崔红保, 副教授, 博士; 电话: 15893001510; E-mail: cuihongbao@hpu.edu.cn

导致 Sc 原料的损失, 将电弧炉抽真空至 2.0×10^{-3} Pa, 反充高纯氩气至 0.05 MPa, 并反复 4 次。在氩气氛围下, 首先预熔 Ti 块消除电弧炉内残余空气, 然后熔炼合金。为了获取成分均匀的 B2-NiSc 金属间化合物, 合金经“熔化-冷却-翻转”7次循环后, 将均匀的合金熔体吸铸成 $d 8$ mm 的柱状试样。试样经打磨抛光后, 用 $V(\text{HF}):V(\text{HNO}_3):V(\text{H}_2\text{O})=1:4:5$ 的溶液腐蚀, 用 MA 系列金相显微镜观察其组织形态。采用日本 SmartLab 高分辨 X 射线衍射仪(XRD)分析合金的相组成, 扫描速度为 4 ($^\circ$)/min, 扫描范围为 $20^\circ \sim 120^\circ$ 。采用德国 Merlin Compact 场发射扫描电子显微镜(SEM)配备 X 射线能谱仪(EDS)分析合金相的微细组织和成分。在凝固试样上截取出 $2.21 \text{ mm} \times 2.89 \text{ mm} \times 10.28 \text{ mm}$ 抗压试样用于在 Instron 力学性能试验机上进行抗压断裂实验。

1.2 实验结果

$d 8$ mm 急冷试样横截面中心区域的组织如图 1 所示。其中基体组织以枝晶方式生长, 根据相图可以判断为初生相金属间化合物 B2-NiSc, 如图 1(a)所示。枝晶臂和枝晶间为片状共晶组织, 如图 1(b)所示。根

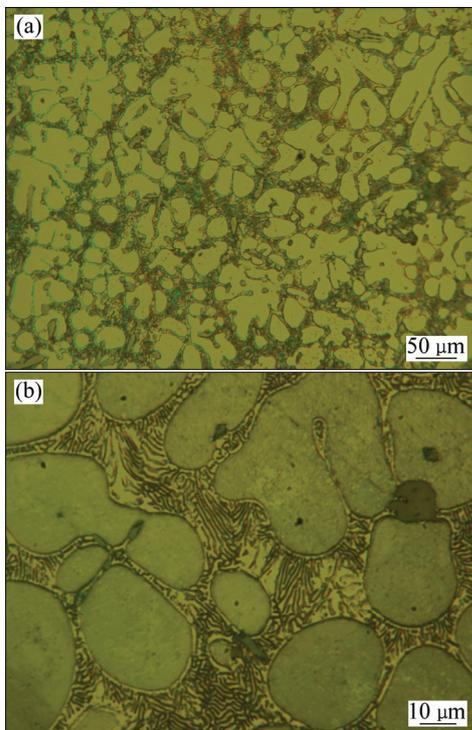


图 1 真空吸铸 $d 8$ mm-Ni-50%Sc 合金横截面中心区域组织
Fig. 1 Central region microstructures of Ni-50%Sc alloy by rapidly solidified in water cooled copper mold with $d 8$ mm diameter: (a) Dendrites microstructure; (b) Eutectic microstructure between dendrites

据相图可知, 枝晶间存在共晶组织, 可能的原因有两个方面, 一是熔炼过程中成分偏离了 Ni-50%Sc 成分; 二是凝固过程中存在结构缺陷, 形成的 B2-NiSc 枝晶成分不是严格意义上的 Ni-50%Sc, 或存在某种元素的点或线缺陷导致另外一种元素相对富裕, 从而在后续凝固过程中形成了共晶组织。

XRD 分析结果如图 2 所示, 合金组织由 B2-NiSc 和 Ni_2Sc 两相组成。EDS 分析表明, 枝晶成分为 Ni-49.94%Sc, 是 B2-NiSc 金属间化合物。共晶成分为 Ni-40.88%Sc, 是(NiSc+ Ni_2Sc)共晶混合物, 如图 3 所示。结合以上组织观察结果可知, 熔炼和凝固过程中

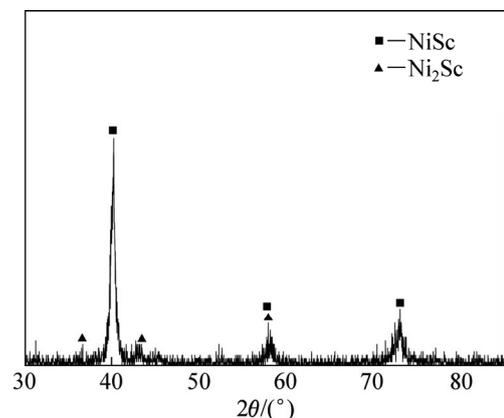


图 2 真空吸铸 Ni-50%Sc 合金 XRD 谱

Fig. 2 XRD pattern of Ni-50%Sc alloy by rapidly solidified in water cooled copper mold

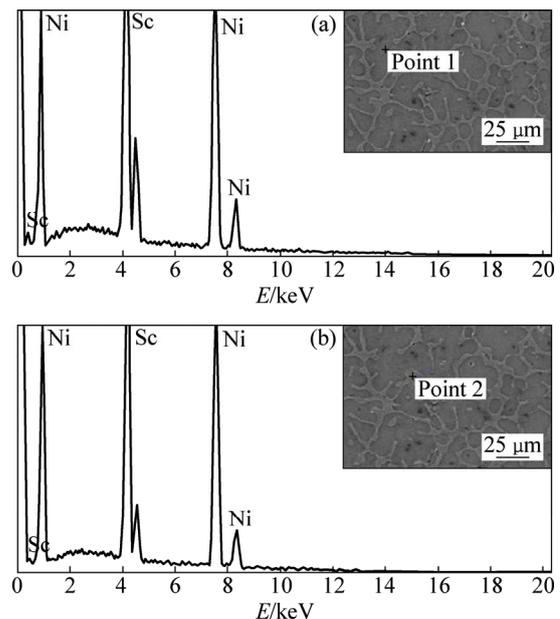


图 3 真空吸铸 Ni-50%Sc 合金 EDS 谱

Fig. 3 EDS patterns of Ni-50%Sc alloy by rapidly solidified in water cooled copper mold: (a) EDS results of primary phase; (b) EDS results of eutectic microstructure

因 Sc 的损失导致 Ni 含量大于 50%, 或者 B2-NiSc 化合物中存在 Ni 的空位。

抗压试验后试样断裂前形成的裂纹如图 4 所示。从裂纹可以看出, 断裂裂纹形核首先发生在晶界上, 然后沿着晶界或枝晶间扩展。晶界上首先形成裂纹, 可能有不同原因, 但是, 如果晶界上存在第二相, 而第二相相对较脆, 也是形成裂纹的一个重要原因。晶粒内部存在有大量滑移带, 如图 4 中箭头所示。晶粒内部滑移带, 肯定了 B2 晶粒有一定的变形滑移能力, 也就是具有较好的塑性。

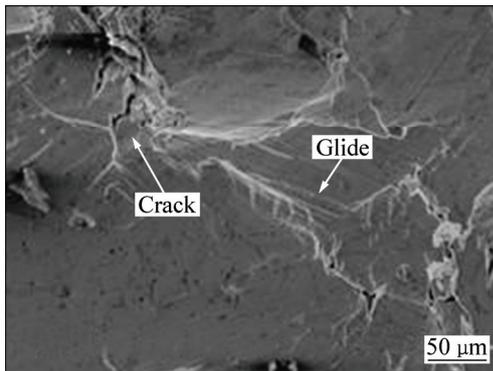


图 4 抗压试验后形成的裂纹

Fig. 4 Crack formation after compression test

2 计算

2.1 计算方法

B2-NiSc 为 CsCl 型体心立方结构, 空间群 $Pm\bar{3}m$, 晶格常数 $a=b=c=3.171 \text{ \AA}$, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ 。Ni 原子的坐标为(0, 0, 0), Sc 原子的坐标为(0.5, 0.5, 0.5)。Ni₂Sc 为 Ti₂Ni 结构, 空间群为 $Fd\bar{3}m$, 晶格常数 $a=b=c=6.926 \text{ \AA}$, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$, 其中, Ni 原子的坐标是(0.625, 0.625, 0.625), Sc 原子的坐标是(0, 0, 0)。NiSc 和 Ni₂Sc 的晶胞模型如图 5 所示。

采用密度泛函理论的平面波赝势方法, 选择广义梯度近似(GGA)的 PBE 泛函进行计算^[4]。计算中, NiSc 和 Ni₂Sc 平面波截断能(Cut-off)分别为 400 eV 和 330 eV。Brillouin 区 K 点为分别为 $9 \times 9 \times 9$ 和 $5 \times 5 \times 5$,

迭代过程中, 收敛精度为 $1 \times 10^{-6} \text{ eV/atom}$, 计算在 CASTEP 模块^[5]上完成。为了能够得到精确值, 首先对晶胞进行几何优化, 然后计算金属间化合物的能量状态、弹性常数和态密度, 用以从理论上评价金属间化合物的稳定性和基本性能, 从而分析实验结果与理论结果的偏差原因。

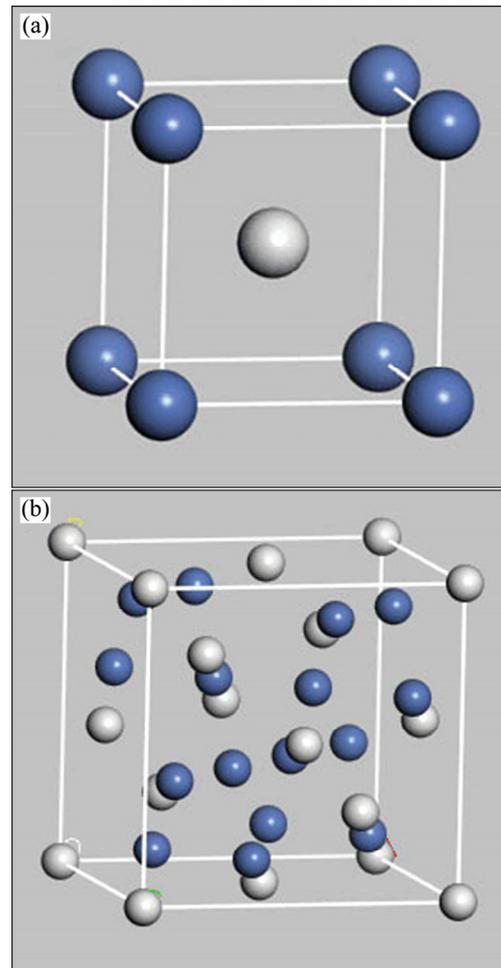


图 5 金属间化合物 NiSc 和 Ni₂Sc 的晶胞模型

Fig. 5 Cell models of NiSc (a) and Ni₂Sc (b) intermetallics

2.2 计算结果

优化后 NiSc 和 Ni₂Sc 晶胞的晶格常数和实验值如表 1 所列。计算值与理论值偏差均小于 5%, 表明几何优化的结构可靠。

表 1 NiSc 和 Ni₂Sc 的晶格常数和晶胞总能量

Table 1 Equilibrium lattice constants and total energy of NiSc and Ni₂Sc

Compound	Calculate value			Reference value			E_{tot}/eV
	$a/\text{\AA}$	$b/\text{\AA}$	$c/\text{\AA}$	$a/\text{\AA}$	$b/\text{\AA}$	$c/\text{\AA}$	
NiSc	3.171	3.171	3.171	3.176	3.176	3.176	-2632.754
Ni ₂ Sc	6.926	6.926	6.926	7.041	7.041	7.041	-7975.661

金属间化合物 B2-NiSc 的形成热可以通过式(1)求得^[6]:

$$H = \frac{1}{x+y}(E_{\text{tot}} - xE_{\text{solid}}^{\text{Ni}} - yE_{\text{solid}}^{\text{Sc}}) \quad (1)$$

式中: x 和 y 分别代表 B2-NiSc 晶胞中 Ni 和 Sc 原子的个数; E_{tot} 表示晶胞结构总能量; $E_{\text{solid}}^{\text{Ni}}$ 和 $E_{\text{solid}}^{\text{Sc}}$ 分别表示单个 Ni 原子和 Sc 原子固态时的能量。

采用与计算金属间化合物能量类似的方法计算了固态单原子能量 $E_{\text{tot}}^{\text{Ni}}$ 和 $E_{\text{solid}}^{\text{Sc}}$, 首先计算 Ni 和 Sc 原子对应单质的能量, 然后将计算结果除以单质中包含的原子数目, 得到单个 Ni 原子和 Sc 原子固态时的能量, 计算结果如表 2 所示。

表 2 单个固态原子的能量

Table 2 Atomic energy of a single atom in solid state

Element	K-point	E_{cut}/eV	$E_{\text{solid}}/\text{eV}$
Ni	$6 \times 6 \times 6$	330	-1354.452
Sc	$4 \times 4 \times 4$	270	-1276.975

将表 2 中的计算结果和优化后晶体结构参数以及热物性参数(见表 1)代入式(1), 得到金属间化合物 B2-NiSc 和 Ni_2Sc 的形成热分别为 -0.6637 eV 和 -452.1347 eV。

金属间化合物 B2-NiSc 和 Ni_2Sc 的总态密度和局部态密度计算结果如图 6 所示。

计算结果表明, NiSc 和 Ni_2Sc 这两种化合物电子分布区间基本一致, 集中分布在 4 个能量区域: -50~-48 eV, -30~-28 eV, -10~0 eV 和 0~20 eV, 如图 6 所示。其中 -50~-48 eV 和 -30~-28 eV 价带区的电子主要由 Sc 原子的 s 轨道和 p 轨道所贡献; -10~0 eV 价带区的电子主要由 Ni 的 d 轨道贡献; 而 0~20 eV 导带区的电子主要由 Sc 和 Ni 的 d 轨道杂化而成。从计算结果表明, 费米能级的态密度主要由 Ni 和 Sc 的 d 轨道杂化而成, B2-NiSc 和 Ni_2Sc 对应的费米能级的态密度峰值分别为 11 eV 和 20.5 eV。

体心立方晶体结构的 B2-NiSc 和 Ni_2Sc 弹性常数计算结果如表 3 所示。根据不同晶体结构稳定性的检测标准^[7-9], 从计算结果得知两种化合物都具有力学稳定性。

金属间化合物 B2-NiSc 和 Ni_2Sc 的体积模量、剪切模量、弹性模量和泊松比可以通过式(2)~(5)获得, 计算结果如表 4 所示。

$$G = \frac{1}{5}(C_{11} - C_{12} + 3C_{44}) \quad (2)$$

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

$$E = \frac{9BG}{3B+G} \quad (4)$$

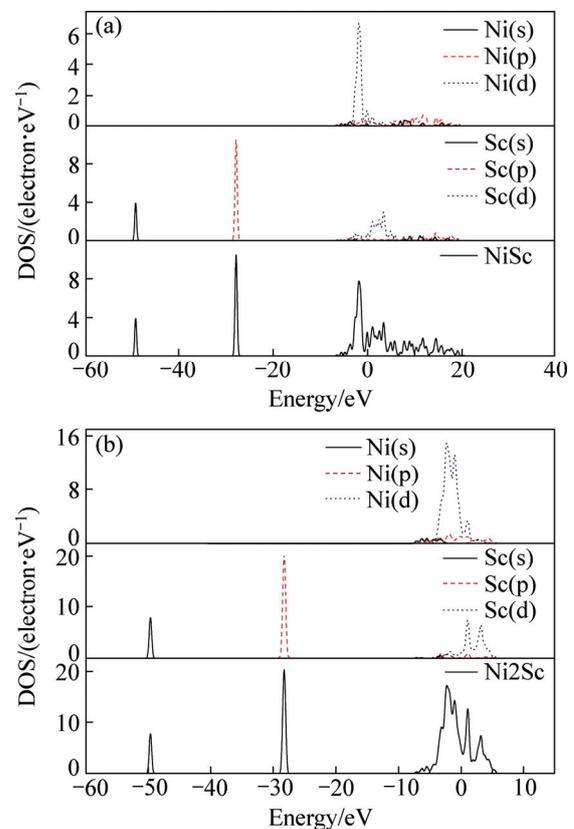


图 6 金属间化合物 B2-NiSc 和 Ni_2Sc 总态密度和分波态密度

Fig. 6 Total and partial DOS of B2-NiSc and Ni_2Sc : (a) B2-NiSc; (b) Ni_2Sc

表 3 B2-NiSc 和 Ni_2Sc 金属间化合物的弹性常数

Table 3 Calculated elastic constants of B2-NiSc and Ni_2Sc intermetallics

Compound	C_{11}	C_{12}	C_{44}
NiSc	153.88	73.22	45.35
Ni_2Sc	87.91	24.05	37.61

表 4 NiSc 和 Ni_2Sc 金属间化合物的剪切模量、体积模量、弹性模量与泊松比

Table 4 Shear modulus, bulk modulus, elastic modulus and Poisson's ratios of NiSc and Ni_2Sc intermetallics

Compound	G	B	E	ν
NiSc	43.27	100.11	113.46	0.31
Ni_2Sc	35.22	45.33	83.92	0.19

$$v = \frac{3B - 2G}{2(3B + G)} \quad (5)$$

3 分析和讨论

Ni-50%Sc 经过急冷快速凝固后, 凝固组织为 $B2-NiSc_p+(NiSc+Ni_2Sc)_e$ 。其中共晶组织分布在晶界或枝晶臂之间, 为最后凝固的区域。对于设计成分为严格线性金属间化合物情况而言, 形成这种组织的可能性只有 3 种情况: 一种是凝固过程中因某种元素的损失, 成分偏离了设计成分。从本凝固组织来看, 应该是 Sc 有损失, 从而成分落在了 Ni_2Sc 和 $NiSc$ 两相共晶的过共晶区域; 二是高温熔体中大量空位被保留下来, 形成了某种元素为主大量空位的 $B2-NiSc$ 金属间化合物和枝晶间的共晶组织。从本研究来看, 应该是形成 Ni 空位; 第三情况是第一种情况和第二种情况的组合。从含有较多共晶分数的凝固组织来看, 第三种情况最为可能。也就是不仅快速凝固保留了空位, 而且熔化和凝固过程中有 Sc 的损失, 形成这种非单相 $B2-NiSc$ 的凝固组织, 其在外力作用下的力学行为将会发生显著变化。首先, 力的传导会发生结构性变化。对于单相线性金属间化合物多晶组织, 其力的传导为“ $B2$ -晶界- $B2$ ”形式。如果不考虑缺陷的影响, 获得的力学行为是单相多晶 $B2$ 的本征性能。然而, 对于本研究的组织而言, 力的传导应该为“ $B2_p$ -晶界₁- Ni_2Sc_e -晶界₂- $B2_e$ -晶界₂- Ni_2Sc_e -晶界₃- $B2_p$ ”, 这里, 晶界₁是初生的 $B2-NiSc$ 与共晶 Ni_2Sc_e 之间的界面, 晶界₂是共晶 $NiSc$ 和共晶 Ni_2Sc 的界面, 晶界₃是共晶 Ni_2Sc 与初生的 $B2-NiSc$ 之间的界面。很显然, 由于力的传导链增长, 环节多, 断裂裂纹的形核会发生在最为薄弱的脆性区域, 材料的韧塑性的控制环节恰好是这种脆性区域。如果 Ni_2Sc_e 塑性较差, 断裂裂纹有可能萌生在 Ni_2Sc_e 相, 也可能发生在晶界₁、晶界₂或晶界₃。外力作用下材料的力学行为不再是单相多晶 $B2$ 的本征性能。

过渡金属都有较小的原子半径, 较大的相对原子质量, 其 s 轨道参与成键并在成键中起主导作用, 因此金属键强, 硬度大, 熔沸点高。

晶内通过滑移和孪生等方式破坏, 有以下 3 种形式: $B2_p$ 、 $B2_e$ 和 Ni_2Sc_e 。而通过第一性原理计算, 得出 $NiSc$ 是韧性的而 Ni_2Sc 是脆性的, 由此推断出断裂发生在 Ni_2Sc_e , 通过图 4 也验证了这一结果。由图 4 可以看出, 断裂先发生在晶界处 Ni_2Sc_e , 然后扩展到 $B2_e$ 和 Ni_2Sc_e 晶界。

体积模量是晶体抗体积变化能力的量度, 可以反映材料抵抗断裂的能力。从表 4 可以看出, Ni_2Sc 有很强的抗体积变化的特性。剪切模量是晶体抗形状变化能力的量度, 可以反映抵抗塑性变形的能力, 一般来说, 很高的剪切模量意味着原子间具有明显的方向价键特性。计算结果表明, $NiSc$ 中的原子价键是最强的。弹性模量是表征在弹性限度内物质材料抗拉或抗压的物理量, 它是沿纵向的弹性模量一种最重要、最具特征的力学性质^[10]。一般来说, 弹性模量是衡量弹性变形难易程度的指标, 弹性模量越大, 其强度也越大^[11]。由表 4 可知, $NiSc$ 的强度比 Ni_2Sc 的要大。通过 Pugh 模量比, 材料的硬度不仅与剪切模量有关而且和弹性模量有关^[12]。尽管不同材料之间有差别, 但是总体上弹性模量和剪切模量越大, 其硬度也越大。因此在这些金属间化合物中, $NiSc$ 的硬度比 Ni_2Sc 的硬度大。被 Pugh 引入的 G/B 比值能很好地反映材料的塑性和脆性, 当 G/B 小于 0.57 时, 材料是韧性的; 当 G/B 大于 0.57 时, 材料是脆性的^[13]。经计算得到的 $NiSc$ 和 Ni_2Sc 的 G/B 值分别为 0.43 和 0.78。由此推断 $NiSc$ 是韧性的而 Ni_2Sc 是脆性的。这种计算结果与实验结果完全吻合。泊松比能反映材料抗剪切的稳定性, 泊松比越大, 材料塑性越好^[14]。经计算得到的 $NiSc$ 和 Ni_2Sc 的泊松比分别为 0.31 和 0.19, 因此, $NiSc$ 的塑性比 Ni_2Sc 的塑性好。除此之外, 弹性模量和 $C_{12}-C_{44}$ 值也能反映材料的力学性能。弹性模量和 $C_{12}-C_{44}$ 值越大, 材料的塑性也越高^[15]。由计算结果可知, $NiSc$ 的弹性模量和 $C_{12}-C_{44}$ 值最大, $NiSc$ 塑性比 Ni_2Sc 塑性好。

通过实验和计算可以发现, 在外力作用下的受力链“ $B2_p$ -晶界₁- Ni_2Sc_e -晶界₂- $B2_e$ -晶界₂- Ni_2Sc_e -晶界₃- $B2_p$ ”中, Ni_2Sc_e 和与其相连的晶界是裂纹产生的区域, 而 $B2-NiSc$ 是塑性较好的, 在外力作用下可以发生较大变形的金属间化合物。

4 结论

1) Ni-50%Sc 经过急冷快速凝固后, 凝固组织为 $B2-NiSc_p+(NiSc+Ni_2Sc)_e$ 。其中共晶组织分布在晶界或枝晶臂之间, 为最后凝固的区域。

2) 通过第一性原理计算可知 $NiSc$ 塑性比 Ni_2Sc 塑性好。

3) 通过实验和计算可以发现, 在外力作用下的受力链“ $B2_p$ -晶界₁- Ni_2Sc_e -晶界₂- $B2_e$ -晶界₂- Ni_2Sc_e -晶界₃- $B2_p$ ”中, Ni_2Sc_e 和与其相连的晶界是裂纹产生的区域, 而 $B2-NiSc$ 是塑性较好的, 在外力作用下可

以发生较大变形的金属间化合物。

致谢

感谢天津大学刘永长教授在计算方面的帮助。

REFERENCES

- [1] GSCHNEIDNER K, RUSSELL A, PECHARSKY A, MORRIS J, ZHANG Z H, LOGRASSO T, HSU D, CHESTER C H, YE Y Y, SLAGER A, KESSE D. A family of ductile intermetallic compounds[J]. *Nature Materials*, 2003, 2(9): 587–591.
- [2] MULAY R P, WOLLMERSHAUSER J A, HEISEL M A, BEI H, RUSSELL A M. X-ray diffraction study of the phase purity, order and texture, of ductile B2 intermetallics[J]. *Acta Materialia*, 2010, 58: 2788–2796.
- [3] CAO G H, BECKER A T, WU D, CHUMBLEY L S, LOGRASSO T A. Mechanical properties and determination of slip systems of the B2 YZn intermetallic compound[J]. *Acta Materialia*, 2010, 58: 4298–4304.
- [4] 王文静, 刘子利, 刘希琴, 张志东, 王渠东. Mg-Er 金属间化合物稳定性与电子结构的第一性原理研究[J]. *中国有色金属学报*, 2014, 24(2): 343–350.
WANG Wen-jing, LIU Zi-li, LIU Xi-qin, ZHANG Zhi-dong, WANG Qu-dong. First principles study on the stability and electronic structure of Mg-Er intermetallic compounds[J]. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*, 2014, 24(2): 343–350.
- [5] 傅利, 赵宇宏, 杨晓敏, 王楠, 王志勤. Mg-Al-Si-Ca 合金系金属间化合物的电子结构和力学性能的第一性原理计算[J]. *稀有金属材料与工程*, 2014(11): 2733–2738.
FU Li, ZHAO Yu-hong, YANG Xiao-min, WANG Nan, WEN Zhi-qin. First principles calculation of electronic structure and mechanical properties of Mg-Al-Si-Ca intermetallic compounds[J]. *Rare Metal Materials and Engineering*, 2014(11): 2733–2738.
- [6] WU M M, WEN L, TANG B Y, PENG L M, DING W J. First-principles study of elastic and electronic properties of MgZn₂ and ScZn₂ phases in Mg-Sc-Zn alloy[J]. *Journal of Alloys & Compounds*, 2010, 506: 412–417.
- [7] 胡洁琼, 谢明, 张吉明, 刘满门, 杨有才, 陈永泰. Au-Sn 金属间化合物的第一性原理研究[J]. *物理学报*, 2013, 62(24): 272–279.
HU Jie-qiong, XIE Ming, ZHANG Ji-ming, LIU Man-men, YANG You-cai, CHEN Yong-tai. First principles study of Au-Sn intermetallic compounds[J]. *Acta Physica Sinica*, 2013, 62(24): 272–279.
- [8] DUAN Y H, HUANG B, SUN Y, PENG M J, ZHOU S G. Stability, elastic properties and electronic structures of the stable Zr-Al intermetallic compounds: A first-principles investigation[J]. *Journal of Alloys & Compounds*, 2014, 590(5): 50–60.
- [9] BORN M, HUANG K, LAX M. Dynamical theory of crystal lattices[J]. *American Journal of Physics*, 1955, 23(7): 474–474.
- [10] PRODAN I D, SCUSERIA G E, MARTIN R L. Assessment of metageneralized gradient approximation and screened Coulomb hybrid density functionals on bulk actinide oxides[J]. *Physical Review B Condensed Matter*, 2006, 73(4): 045104.
- [11] 赵慧, 赵宇宏, 杨晓敏, 眭怀明, 侯华, 韩培德. Ca、Sr 和 Ba 掺杂 Mg₂Si 弹性性能和电子结构的第一性原理研究[J]. *稀有金属材料与工程*, 2015(3): 638–643.
ZHAO Hui, ZHAO Yu-hong, YANG Xiao-min, SUI Huai-ming, HOU Hua, HAN Pei-de. First principles study on the elastic properties and electronic structure of Ca, Sr and Ba doped Mg₂Si[J]. *Rare Metal Materials and Engineering*, 2015(3): 638–643.
- [12] GAO L, ZHOU J, SUN Z M, CHEN R S, HAN E H. First-principles calculations of the beta'-Mg(7)Gd precipitate in Mg-Gd binary alloys[J]. *Chinese Science Bulletin*, 2011, 56(11): 1142–1146.
- [13] LIU Y, WANG J, GAO Q N, DU Y. Structural, elastic and electronic properties of Cu-X compounds from first-principles calculations[J]. *Journal of Central South University*, 2015, 22(5): 1585–1594.
- [14] PRIYANGA G S, RAJESEARAPALANICHAMY R, IYAKUTTI K. First principles study of structural, electronic, elastic and magnetic properties of cerium and praseodymium hydrogen system REH-x (RE: Ce, Pr and x=2, 3)[J]. *Journal of Rare Earths*, 2015, 33(3): 289–303.
- [15] CHEN H L, LIN L, MAO P L, LIU Z. Phase stability, electronic, elastic and thermodynamic properties of Al-RE intermetallics in Mg-Al-RE alloy: A first principles study[J]. *Journal of Magnesium & Alloys*, 2015, 3(3): 197–202.

Ductility of near rapidly solidified Ni-50%Sc intermetallics

YUAN Zhi-peng, CUI Hong-bao, CHEN Hao, CHANG Ya-tao, GUO Xue-feng

(School of Materials Science and Engineering, Henan Polytechnic University, Jiaozuo 454000, China)

Abstract: Ni-50%Sc alloy was prepared with a vacuum arc smelting and water cooled copper mold suction-casting machine. XRD was used to identify phase microstructural components, and the composition of each phase was analyzed with EDS. The ductility of intermetallics was studied. The results show that the solidification structure is $B2\text{-NiSc}_{\text{primary}}$ and $(\text{Ni}_2\text{Sc}+\text{NiSc})_{\text{eutectic}}$, and the eutectic is distributed between the grain boundaries and dendrite arms. The $\text{Ni}_2\text{Sc}_{\text{eutectic}}$ and grain boundary connected with $\text{Ni}_2\text{Sc}_{\text{eutectic}}$ are the nucleation region of the crack among force chain of $B2_{\text{primary}}$ -grain boundary₁- $\text{Ni}_2\text{Sc}_{\text{eutectic}}$ -grain boundary₂- $B2_{\text{eutectic}}$ - $\text{Ni}_2\text{Sc}_{\text{eutectic}}$ -grain boundary₃- $B2_{\text{primary}}$. NiSc plasticity is better than Ni_2Sc by using the first-principles plane-wave pseudo-potential method based on density functional theory. Intermetallic NiSc with B2-structure is a ductile phase, which experiences large deformation under external force.

Key words: intermetallic compound; first-principles; $B2\text{-NiSc}_{\text{primary}}$; $(\text{Ni}_2\text{Sc}+\text{NiSc})_{\text{eutectic}}$; crack nucleation

Foundation item: Projects (51301063, 51571086) supported by the National Natural Science Foundation of China; Project (Y-2009) supported by the Talent Introduction Foundation of Henan Polytechnic University, China

Received date: 2016-03-28; **Accepted date:** 2016-08-20

Corresponding author: CUI Hong-bao; Tel: 15893001510; E-mail: cuihongbao@hpu.edu.cn

(编辑 何学锋)