

文章编号: 1004-0609(2006)01-0047-07

NiAl 力学性质合金化效应的第一原理计算^①

胡艳军^{1, 2}, 彭平¹, 李贵发¹, 周惦武¹, 韩绍昌¹

(1. 湖南大学 材料科学与工程学院, 长沙 410082;

2. 广东医学院 第二临床学院, 东莞 523808)

摘 要: 采用第一原理赝势平面波方法, 计算几种合金化元素 X (X= Cr、Mn、Fe、Co 和 Cu) 与不同 Fe 含量(0, 3.125%, 4.167%, 6.25%, 摩尔分数) (NiFe) Al 超胞的几何与电子结构, 并采用如下几个力学参数: 弹性常数 C_{44} 、Cauchy 压力参数($C_{12}-C_{44}$)、弹性模量 E 和剪切模量 G 及比值 G/B_0 等, 表征和评判了合金化元素 X 与不同 Fe 含量对 NiAl 金属间化合物延性与硬度的影响。结果表明: 高浓度(6.25%)合金化虽可提高 NiAl 晶体的硬度, 但却导致 NiAl 延展性降低, 合金化后 NiAl 硬度增加的次序为: (NiMn) Al₈ > (NiCo) Al₈ > (NiFe) Al₈ > (NiCr) Al₈ > (NiCu) Al₈ > NiAl, 其延展性降低次序则与硬度增加次序相反; 随着 Fe 含量的升高, NiAl 晶体的硬度增加, 但其使硬度增加的上限约为 4%, 而随着 Fe 含量的降低, NiAl 晶体的延展性逐步增大, 当 Fe 含量低到一定程度时, 可改善 NiAl 晶体的本征脆性。

关键词: B2-NiAl; 赝势平面波方法; 合金化; 弹性模量

中图分类号: TG 146.2

文献标识码: A

Alloying effects of mechanical properties of B2-NiAl intermetallic compound calculated by first-principles method

HU Yan-jun^{1, 2}, PENG Ping¹, LI Gui-fa¹, ZHOU Dian-wu¹, HAN Shao-chang¹

(1. School of Materials Science and Engineering, Hunan University, Changsha 410082, China;

2. The Second Clinic School of Guangdong Medical College, Dongguan 523808, China)

Abstract: Using the first-principles pseudopotential plane-wave methods based on the density functional theory, the geometric and electronic structures of (NiX) Al supercells with different alloying elements X (X= Cr, Mn, Fe, Co and Cu) or different Fe contents, e. g. 0, 3.125%, 4.167% and 6.25% (mole fraction) are calculated. Several mechanical properties parameters such as elastic constant C_{44} , Cauchy pressure parameter ($C_{12}-C_{44}$), elastic modulus E , the shear modulus G and their ratio G/B_0 are used to characterize and assess the effect of alloying element and Fe content on the ductility and hardness of NiAl intermetallic compounds, respectively. The result shows that high addition of alloying element X (6.25%) can not enhance the ductility of NiAl intermetallic compound although it makes the hardness of NiAl improve as following order: NiAl < (NiCu) Al₈ < (NiCr) Al₈ < (NiFe) Al₈ < (NiCo) Al₈ < (NiMn) Al₈. And the decreasing order of ductility of NiAl induced by alloying element X is opposite to their hardness increasing order. With the increase of Fe content, the hardness of NiAl is elevated. And the upper limit making the hardness of NiAl increase is about 4%. Meanwhile a gradual improvement of the ductility of NiAl is also observed as Fe addition content decreases. From this variation tendency of the ductility of NiAl versus Fe content, a deduction is made. The intrinsic embrittlement of NiAl can be restrained if Fe content is enough low.

Key words: B2-NiAl; pseudopotential plane-wave method; alloying; elastic modulus

① 基金项目: 国家重点基础研究发展规划资助项目(TG2000067105); 教育部科技重点资助项目(104139)

收稿日期: 2005-05-31; 修订日期: 2005-09-12

作者简介: 胡艳军(1979-), 男, 硕士研究生

通讯作者: 彭平, 副教授; 电话: 0731-8821610; E-mail: ppeng@hnu.cn

B2 结构的 NiAl 金属间化合物作为一种宇航用高温结构材料有着广阔的应用前景^[1], 但 NiAl 作为结构材料的应用却受到其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、结合键的类型与强度、以及长程有序化的程度等, 被证明是一类可有效改善其力学性质的方法^[1]。这些合金化元素中的一类过渡金属^[2] (如 Mn、Fe、Co、Ni 和 Cu 等) 在 B2-NiAl 中有很大的固溶度, 有望改善 NiAl 力学性能。1992 年 Darolia 等^[1] 率先在 NiAl 单晶中加入 0.25% 的 Fe, 发现 NiAl<110>方向的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。Guo 等^[2] 采用机械合金化制备并考察了 $\text{Ni}_{50}\text{Al}_{50-x}\text{Fe}_x$ ($x = 5, 10, 15, 20, 25, 30$) 的力学性质, 发现 NiAl 硬度随 Fe 含量的增加而不断减小; Pike 等^[3] 系统研究了 Fe 含量对富 Ni、富 Al 或化学计量比 NiAl 力学性质的影响, 结果表明, 富 Ni 的 NiAl 晶体加入 Fe 可使其软化, 而富 Al 和化学计量比的 NiAl 晶体加 Fe 则使其硬度提高。Munroe 等^[4] 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 的屈服强度和硬度却不断提高。最近, Kovalev 等^[5] 对含 2% Fe 的 NiAl 进行拉伸和压缩实验, 发现这种情况下的 Fe 可以提高 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。以上这些实验结果显示, Fe 合金化对 NiAl 力学性质有很大影响, 并且因含量不同而呈现出不同的变化趋势。

对于上述的实验结果, 目前对 NiAl 大部分的理论研究仅局限于合金化元素在 NiAl 中的占

位^[6]。考虑到材料的弹性常数能够被用来估算材料的一些力学性质^[7], 本文作者已对这些元素中的典型代表 Cr 在 NiAl 中优先占据 Ni 位进行了计算^[8], 为此本文作者在此基础上进一步计算了几个化学计量比 $\text{Ni}_7\text{Al}_8\text{X}$ ($\text{X} = \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}$) 和 $(\text{NiFe})\text{Al}$ 超胞模型的弹性常数, 分析并考察了这些合金化元素及不同 Fe 含量对 NiAl 力学性质的影响。

1 计算模型与方法

B2-NiAl 晶体结构如图 1(a) 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 $\text{pm}3\text{m}$, 可看成是由两个简单立方子晶格相互交错穿插而成。图 1(b) 所示为 16 个原子组成的 X 元素占 Ni 位后 $(\text{Ni}_7\text{X})\text{Al}_8$ 超胞模型。当 X 为 Ni 时, 为一个不含缺陷的纯 B2-NiAl 晶体; 当 X 为其它元素时, 此时含量为 6.25%, 且假定合金化后 $(\text{Ni}_7\text{X})\text{Al}_8$ 超胞晶体结构的空间群不变。图 1(c) 和图 1(d) 分别为 Fe 原子置换 B2-NiAl 中心 Ni 原子后构成的 $(\text{Ni}_{11}\text{Fe})\text{Al}_{12}$ 和 $(\text{Ni}_{15}\text{Fe})\text{Al}_{16}$ 超胞, 此时对应 Fe 含量分别为 4.167% 和 3.125%, 这 2 个超胞均为四方晶系, 空间群为 $\text{p}4/\text{mmm}$ 。

采用的计算程序是 Castep 软件包。Castep 为基于密度泛函理论的第一原理赝势平面波方法^[9], 晶体波函数由平面波基组展开, 交换关联能函数采用 GGA 中的 PBE 关系式。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动能截断点均取 330.0 eV, 计算所涉及的元

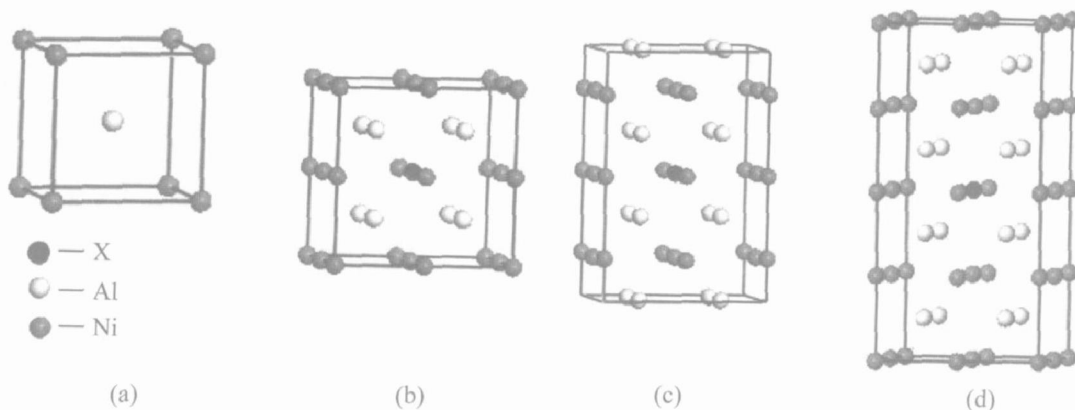


图 1 计算模型

Fig. 1 Models used in calculation

(a) —Crystal structure of B2-NiAl; (b) — $\text{Ni}_7\text{Al}_8\text{X}$ ($\text{X} = \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}$ and Cu) supercell;

(c) — $(\text{Ni}_{11}\text{Fe})\text{Al}_{12}$ supercell; (d) — $(\text{Ni}_{15}\text{Fe})\text{Al}_{16}$ supercell

素, 均使用倒易空间表述的超软赝势, 这些原子的赝势由 Castep 软件包提供, 并被很好地测试过。根据对称性, (Ni₁₁Fe)Al₁₂和(Ni₁₅Fe)Al₁₆超胞模型的计算, *K* 点网格数取 4×4×2, 其它超胞结构模型, *K* 点网格数取 4×4×4。各项计算之前, 都用 BFGS 方法^[9]对超胞结构进行了几何优化, 以求得它们的局域最稳定结构。自洽场计算(SCF)时应用了 Pulay 密度混合法^[9], 体系总能量收敛值取 5.0×10⁻⁶ eV/atom, 每个原子上的力要求低于 0.1 eV/nm, 公差偏移小于 5×10⁻³ nm, 应力偏差小于 0.02 GPa。

2 结果与讨论

2.1 合金化元素对 NiAl 力学性的影响

在立方晶体中, 晶体的弹性常数只有 3 个独立变量, 即 *C*₁₁、*C*₁₂和*C*₁₄, 由这些弹性常数可以得到晶体的弹性模量, 如体模量 *B*₀、剪切模量 *G*、弹性模量 *E* 和泊松比 *ν*等^[10]。

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

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

$$E = \frac{9B_0G}{3B_0 + G} \tag{3}$$

$$\nu = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{E}{3B_0} \right] \tag{4}$$

表 1 列出了 Ni₇Al₈X 超胞的弹性常数 *C*₁₁、*C*₁₂、*C*₁₄与体模量 *B*₀, 以及相应的实验值和其它理论计算结果。由表 1 可见, 本文计算的 B2-NiAl 超胞体模量 *B*₀ 与实验值^[11, 12] 相差很小, 和采用 LMTO^[14]方法计算的结果也很接近, *C*₁₂ 则比实验值略大, 而 *C*₄₄ 与 *C*₁₁ 值则比实验值略小, 但都基本与实验结果接近。通过式 (1)~(4), 进一步计算了 Ni₇Al₈X 超胞的剪切模量 *G*、弹性模量 *E*、剪切模量 *G* 与体模量 *B*₀ 的比值 *G/B*₀、Cauchy 压力值 (*C*₁₂−*C*₄₄) 和泊松比 *ν*等。作为检验, 比较了 NiAl 晶体的两种不同方法的计算结果。结果发现: 本文计算的值 (*E* = 161.6 GPa, *G* = 60.87 GPa, *ν* = 0.328) 与 Hsieh 等^[15] 采用分子动力学方法计算的 NiAl 值 (*E* = 186 GPa, *G* = 71 GPa, *ν* = 0.31) 十分接近, 说明本文所选计算参数合适。

为了考察合金化元素对 NiAl 弹性常数的影响, 图 2(a) 所示为 NiAl 合金化后弹性常数 *C*₄₄、弹性模量 *E*、剪切模量 *G* 随合金化元素原子序数 *Z*

表 1 (Ni₇X)Al₈ 的弹性常数与体模量
及其与实验和其它计算结果的比较

Table 1 Comparison of data of
elastic constants and bulk moduli of
(Ni₇X)Al₈ supercells with experimental values
and other calculated values

Model	(Ni ₇ X)Al ₈	<i>C</i> ₁₁ / GPa	<i>C</i> ₁₂ / GPa	<i>C</i> ₄₄ / GPa	<i>B</i> ₀ / GPa
Exp. ^[11]		199	137	116	158.7
Exp. ^[12]		204.6	135.4	116.8	158.5
Cal. by EAM ^[13]	NiAl	185.8	123.4	123.4	144.2
				146	156.0
Cal.	Ni ₈ Al ₈	164.06	152.17	97.48	156.13
	(Ni ₇ Cr)Al ₈	218.01	120.59	117.82	153.06
	(Ni ₇ Mn)Al ₈	249.62	120.32	128.32	163.42
	(Ni ₇ Fe)Al ₈	223.97	126.37	128.32	158.90
	(Ni ₇ Co)Al ₈	242.36	121.61	127.11	161.86
	(Ni ₇ Cu)Al ₈	159.30	150.84	108.69	153.66

(或外层价电子数 *n*) 的变化。从图 2(a) 可见, *E* 和 *G* 随 *Z* 变化的趋势相同, Mn 和 Co 合金化时 *E* 和 *G* 最大, 纯 NiAl 时最小。由于材料硬度与其弹性模量 *E* 和剪切模量 *G* 密切相关^[10], 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, 材料的硬度越高。这样, 由图 2(a) 可见, 合金化可使 NiAl 晶体的硬度较大幅度提高。按照 Jhi 等^[7] 的观点, 材料的硬度与弹性常数 *C*₄₄ 存在单调对应关系, 即 *C*₄₄ 越大, 材料硬度越高。因此图 2(a) 中 *C*₄₄ 随 *Z* 变化的曲线表明上述合金化有增强 NiAl 晶体硬度的变化趋势, 而其硬度大小次序则为: (Ni₇Mn)Al₈ > (Ni₇Co)Al₈ > (Ni₇Fe)Al₈ > (Ni₇Cr)Al₈ > (Ni₇Cu)Al₈ > NiAl。

图 2(b) 所示为合金化后 (Ni₇X)Al₈ 体系的 *G/B*₀ 比值和负 Cauchy 压力 −(*C*₁₂−*C*₄₄) 随合金化元素原子序数 *Z* 的变化。基于 Pugh 等^[16] 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的应用可靠性^[17], 本文对图 2(b) 中 *G/B*₀ 随 *Z* 变化的曲线进行了分析。由图 2(b) 可见, 合金化后 (Ni₇X)Al₈ (*X* = Cr、Mn、Fe、Co 和 Cu) 的 *G/B*₀ 都比纯 NiAl 的值有所增大, 表明高浓度合金化使 B2-Ni(X)Al 变得更加脆了, 其脆性增加的次序为: (Ni₇Mn)Al₈ < (Ni₇Co)Al₈ < (Ni₇Fe)Al₈ <

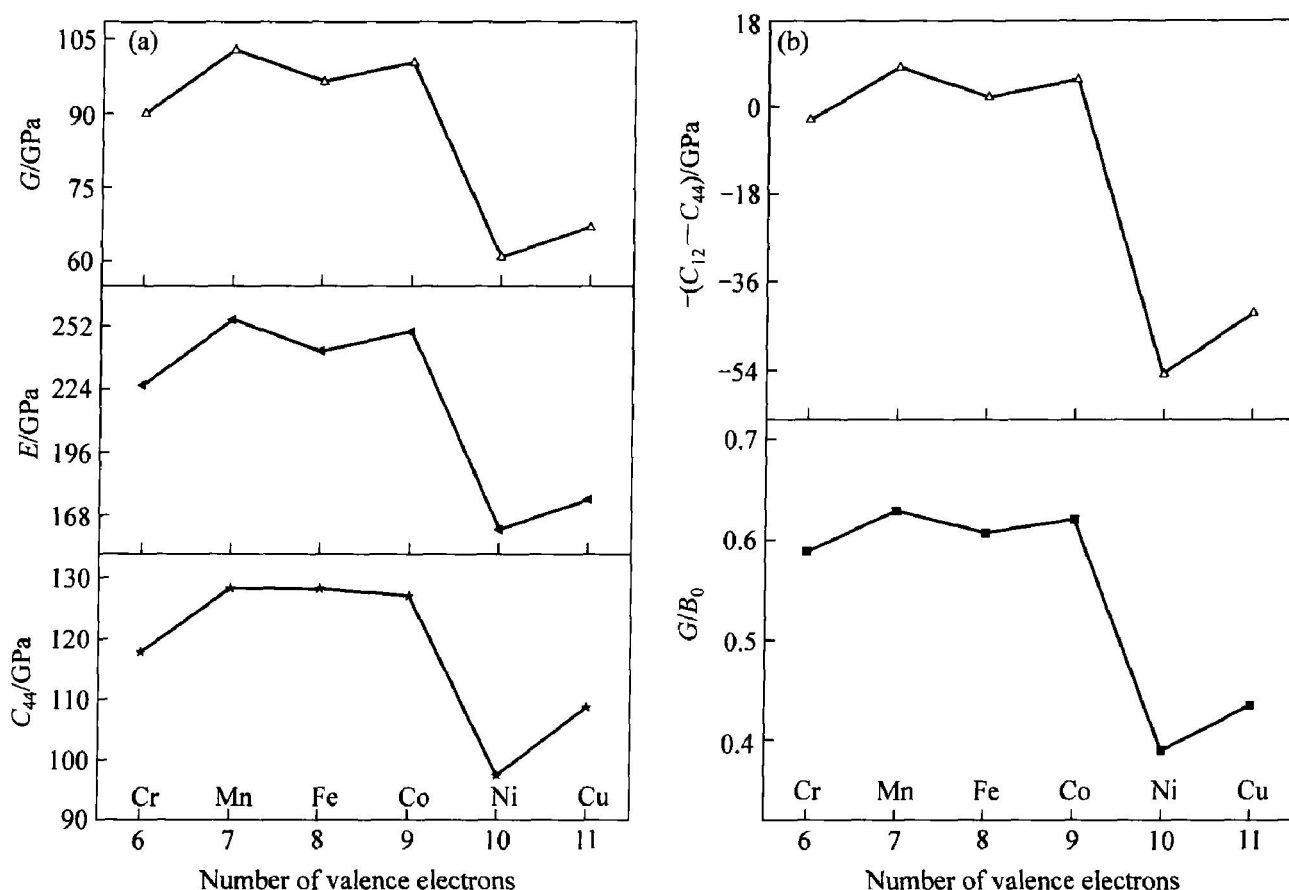


图 2 (Ni₇X)Al₈ 超胞 C_{44} 、 E 、 G (a) 和 G/B_0 与 $-(C_{12}-C_{44})$ (b) 随合金化元素价电子数的变化

Fig. 2 Variations of elastic constants, elastic modulus, shear modulus(a), and ratios of shear modulus to bulk modulus, negative Cauchy pressure parameters(b) with number of valence electrons of alloying elements

(Ni₇Cr)Al₈ < (Ni₇Cu)Al₈ < NiAl。此外考虑到 Cauchy 压力值判据已被很好地应用于表征和评判纯 Ni 和 Al 晶体的延展性以及半导体 Si 晶体的脆性^[18], 即: 对于金属键, 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。这样由图 2(b) 可见, 纯 NiAl 的 Cauchy 压力值为正, 表明其具有本征延展性, 其室温脆性很可能源于其结构缺陷与环境的影响^[2], Cu、Cr 合金化后 Cauchy 压力值也为正, 并且 Cu 合金化后 Cauchy 压力值与纯 NiAl 的相差不大, 表明 Cu 合金化(即使是高的含量 6.25%)对纯 NiAl 的本征延展性改变也很小; 而其它元素, 如 Mn、Fe 和 Co, 合金化后其 Cauchy 压力值都为负, 表明这些元素合金化后使 NiAl 延展性变差。综合这两个方面的考虑, 可以得到合金化后(Ni₇X)Al₈ 体系延展性大小的次序为: NiAl > (Ni₇Cu)Al₈ > (Ni₇Cr)Al₈ >

(Ni₇Fe)Al₈ > (Ni₇Co)Al₈ > (Ni₇Mn)Al₈。这与前面的硬度大小次序刚好相反, 这一现象表明, 合金化虽然提高了 NiAl 的硬度, 但同时也降低了它的延展性。郭等^[2]曾经指出, 合金化可以提高 NiAl 某一方面的性能, 但各种性能很难同时得到改善; 而 Darolia 等^[1]的研究发现, 对 NiAl 单晶, 加入 0.25% 的 Fe 能将 [110] 取向 NiAl 单晶的室温塑性提高到 6%, 但当加入的合金化元素含量超过 0.5% 时, 塑化作用消失。在本文的超胞模型中, X 元素的摩尔分数高达 6.25%, 很可能是在这里观察不到 B2-NiAl 合金化塑性改善的原因。

2.2 Fe 含量对 NiAl 力学性的影响

在四方晶系中, 有 6 个独立的弹性模量, 分别为 C_{11} 、 C_{33} 、 C_{12} 、 C_{13} 、 C_{44} 和 C_{66} , 体模量 B_0 和剪切模量 G 可用式(5)和(6)计算^[19], 其弹性模量 E 则与立方晶系相同, 可由式(3)计算:

$$B_0 = \frac{2C_{11} + C_{33} + 2C_{12} + 4C_{13}}{9} \tag{5}$$

$$G = \frac{2C_{11} + C_{33} - C_{12} - 2C_{13} + 6C_{44} + 3C_{66}}{15} \tag{6}$$

表 2 列出了不同 Fe 含量(NiX) Al 各超胞弹性模量的计算结果。从表 2 可见, 相对于不含 Fe 的纯 NiAl 晶体, Fe 合金化后, 弹性常数 C_{11} 、 C_{33} 、 C_{44} 和 C_{66} 明显增大, 并且随 Fe 含量升高而增加, 而弹性常数 C_{12} 和 C_{13} 则随 Fe 含量升高而减小。至于 Fe 含量对 Ni(Fe) Al 超胞体模量 B_0 的影响, 当 Fe 含量为 3.125% 时, 其体模量值比合金化前略小, 含量进一步升高时体模量则比合金化前大。Fe 合金化使 Ni(Fe) Al 超胞剪切模量 G 和弹性模量 E 显著增大, 并且存在随含量升高而增加的变化趋势, 但当 Fe 含量达约 4% 以后, G 和 E 值则趋于稳定。根据材料的硬度与材料弹性模量 E 和剪切模量 G 之间的对应关系^[10], 表明随着 Fe 含量升高 NiAl 晶体的硬度增加, 并且其硬度增加的 Fe 含量上限约为 4%。计算结果与 Pike 等^[3] 和 Munroe 等^[4] 的实验结论基本一致。表 2 还给出了 Fe 含量对这些超胞 G/B_0 值的影响, 由表 2 可见, 合金化之前 G/B_0 值为 0.39, Fe 合金化后, G/B_0 值增大, 并且存在随着 Fe 含量增加而增大的变化趋势。这表明 Fe 合金化虽然不能改善 NiAl 晶体的延性, 但当 Fe 含量低时, NiAl 晶体的延性却比高 Fe 含量时较好。这与 Darolia 等^[1] 和 Munroe 等^[4] 发现高含量 Fe 不能改善 NiAl 延性的实验结果是一致的。但是, Darolia 等和 Munroe 等分别对 Fe 含量为 0.25% 和 2% 的 NiAl 进行拉伸实验, 却发现低含量 Fe 能提高 NiAl 晶体的延性。由此可预测会出现图 3 虚线所示的计算结果, 即: 随着 Fe 含量的增加, G/B_0 先减小, 然后增加, 从而显示低含量 Fe 能改善 NiAl 的延性。但由于受第一原理计算原子

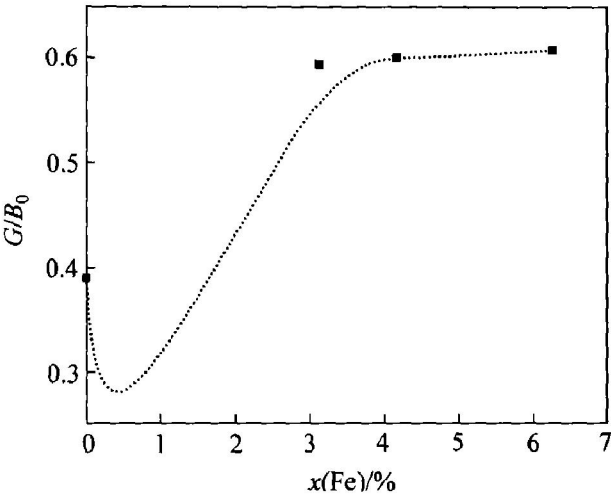


图 3 G/B_0 随合金化 Fe 原子浓度的变化
Fig. 3 Curve of G/B_0 versus Fe content in Ni(Fe) Al supercell

数的限制, 要得到如此低含量 Fe 的 NiAl 超胞的弹性常数十分困难。

2.3 电子密度

图 4 所示为各超胞模型原子密排 (110) 面的电子密度图。可以看出, 合金化前 Ni_8Al_8 超胞的 (110) 面, Ni、Al 原子周围电子排布基本呈球形(图 4(a)), 也就是说其周围电子成键方向性不是很强, 这也可能是 NiAl 本身具有一定的塑性的原因^[2, 3]。而 Fe 合金化后, Fe 原子周围电子排布成方形, 且它的加入强烈影响着 Ni 和 Al 原子周围的电子排布, 使得它们的电子排布大致变成了方形, 表明 Fe 合金化后, Ni 与 Al 周围电子成键方向性变强了, 这也可能就是本文中 Fe 高浓度合金化后不能改善 NiAl 的延性反而使其变脆的原因。

表 2 不同 Fe 含量(NiFe) Al 超胞弹性常数、体模量、剪切模量及其比值 G/B_0

Table 2 Calculation data of elastic constants, bulk modulus, shear modulus and elastic modulus of (NiFe) Al supercells with different Fe contents and ratio of G/B_0

$x(Fe)/\%$	$C_{11}/$ GPa	$C_{33}/$ GPa	$C_{44}/$ GPa	$C_{66}/$ GPa	$C_{12}/$ GPa	$C_{13}/$ GPa	$B_0/$ GPa	$G/$ GPa	$E/$ GPa	G/B_0
0	164.06	164.06	97.48	97.48	152.17	152.17	156.13	60.87	161.61	0.390
3.125	224.82	194.64	124.31	126.47	126.73	126.73	156.07	92.62	231.97	0.590
4.167	234.95	228.13	127.00	126.99	136.52	122.06	162.15	97.36	243.37	0.600
6.250	223.97	223.97	128.32	128.32	126.37	126.37	158.90	96.51	240.78	0.607

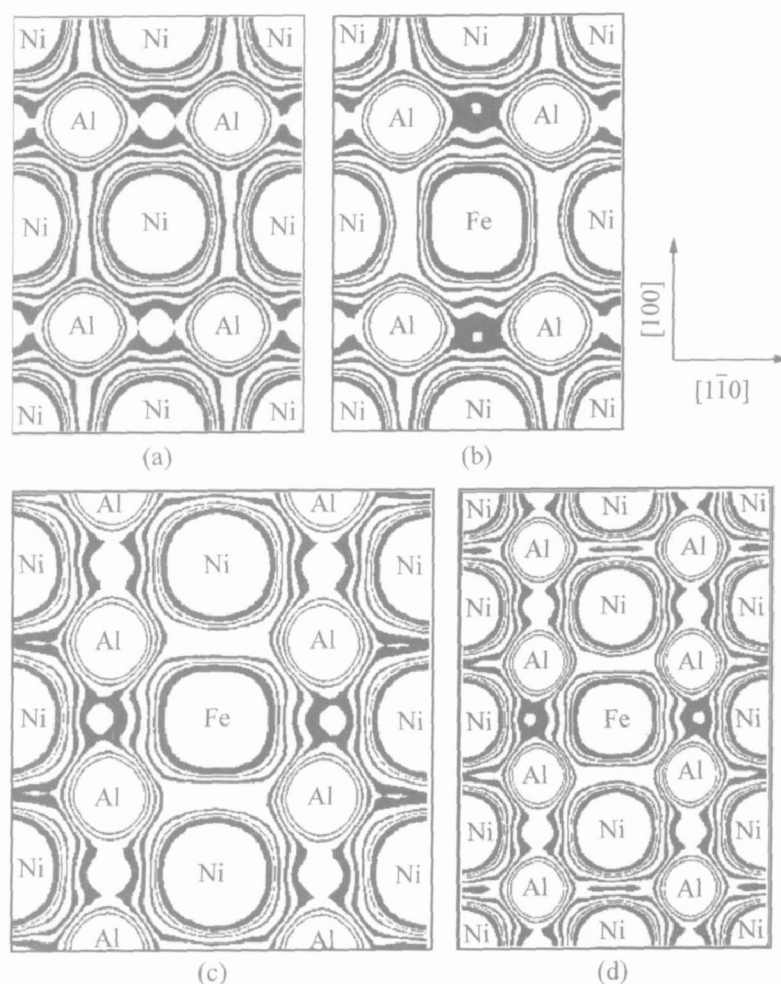


图4 Ni_8Al_8 、 $(\text{Ni}_7\text{Fe})\text{Al}_8$ 、 $(\text{Ni}_{11}\text{Fe})\text{Al}_{12}$ 和 $(\text{Ni}_{15}\text{Fe})\text{Al}_{16}$ 超胞(110)面电子密度图

Fig. 4 Contour plots of valence electron densities of (110) plane in Ni_8Al_8 (a), $(\text{Ni}_7\text{Fe})\text{Al}_8$ (b), $(\text{Ni}_{11}\text{Fe})\text{Al}_{12}$ (c) and $(\text{Ni}_{15}\text{Fe})\text{Al}_{16}$ (d) supercells

性脆性。

3 结论

1) 合金化元素对NiAl晶体的硬度与延性有明显影响,高浓度合金化可使NiAl晶体的硬度大幅度提高,合金化元素影响的次序为: $(\text{Ni}_7\text{Mn})\text{Al}_8 > (\text{Ni}_7\text{Co})\text{Al}_8 > (\text{Ni}_7\text{Fe})\text{Al}_8 > (\text{Ni}_7\text{Cr})\text{Al}_8 > (\text{Ni}_7\text{Cu})\text{Al}_8 > \text{NiAl}$ 。

2) 高浓度合金化同时降低了NiAl晶体的延性,且延性降低的次序与硬度升高的次序相反,即: $(\text{Ni}_7\text{Mn})\text{Al}_8 < (\text{Ni}_7\text{Co})\text{Al}_8 < (\text{Ni}_7\text{Fe})\text{Al}_8 < (\text{Ni}_7\text{Cr})\text{Al}_8 < (\text{Ni}_7\text{Cu})\text{Al}_8 < \text{NiAl}$ 。

3) 随着Fe含量的升高,NiAl晶体的硬度大幅度提高,其导致硬度增加的含量上限约为4%;而随着Fe含量的降低,NiAl晶体的延性逐步增强,当含量低到一定程度时,有望改善NiAl晶体的本

REFERENCES

- [1] Darolia R, Lahrman D, Field R. The effect of iron, gallium and molybdenum on the room temperature tensile ductility of nickel aluminide (NiAl) [J]. Scripta Metall Mater, 1992, 26(7): 1007 - 1012.
- [2] Guo J T, Zhou L Z, Liu Z G, et al. Effect of iron on formation of mechanically alloyed NiAl alloy and its mechanical properties [J]. Acta Metall Sin 1996, 9(6): 515 - 518.
- [3] Pike L M, Chang Y A, Liu C T. Solid solution hardening and softening by Fe additions to NiAl [J]. Intermetallics, 1997, 5(8): 601 - 608.
- [4] Munroe P R, George M, Baker I, et al. Microstructure, mechanical properties and wear of NiAl-Fe alloys [J]. Mater Sci Eng A, 2002, 325(1): 1 - 8.
- [5] Kovalev A I, Barskaya R A, Wainstein D L. Effect of

- alloying on electronic structure, strength and ductility characteristics of nickel aluminide[J]. *Surf Sci*, 2003, 532 - 535(10): 35 - 40.
- [6] Song Y, Guo Z X, Yang R, et al. First principles study of site substitution of ternary elements in NiAl [J]. *Acta Mater*, 2001, 49(9): 1647 - 1654.
- [7] Jhi S H, Ihm J, Louie G S, et al. Electronic mechanism of hardness enhancement in transition-metal carbonitrides[J]. *Nature*, 1999, 399(6726): 132 - 134.
- [8] 胡艳军, 彭平, 周惦武, 等. 3d 过渡金属在 NiAl 中占位的第一原理研究[J]. *中国有色金属学报*, 2004, 14(12): 2102 - 2107.
- HU Yan-jun, PENG Ping, ZHOU Dian-wu, et al. First-principle calculation for site substitution of 3d transition metal elements in NiAl intermetallic compound[J]. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*, 2004, 14(12): 2102 - 2107.
- [9] Payne M C, Teter M P, Allan D C, et al. Iterative minimization techniques for ab initio total energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients [J]. *Rev Mod Phys*, 1992, 64(4): 1045 - 1097.
- [10] Chen K Y, Zhao L R, John R, et al. Alloying effects on elastic properties of TiN-based nitrides[J]. *J Phys D: Appl Phys*, 2003, 36: 2725 - 2729.
- [11] Rusovic N, Warlimont H. Elastic Behaviour of B2-NiAl alloys[J]. *Phys Status Solidi A*, 1977, 44(2): 609 - 619.
- [12] Davenport T, Zhou L, Trivisono. Ultrasonic and atomic force studies of the martensitic transformation induced by temperature and uniaxial stress in NiAl alloys[J]. *Phys Rev B*, 1999, 59(5): 3421 - 3426.
- [13] Farkas D, Mutasa B, Vailhe C, et al. Interatomic potentials for B2 NiAl and martensitic phases [J]. *Modelling Simul Mater Sci Eng*, 1995, 3(2): 201 - 214.
- [14] Cerny M, Pokluda J, Sandera P. Ab initio analysis of theoretical isotropic strength and elasticity of nickel aluminide compound[J]. *Mater Sci A*. 2004, 387 - 389(1 - 2): 923 - 925.
- [15] Hsieh C L, Tuan W H, Wu T T. Elastic behaviour of model two phase material[J]. *J Europ Ceramic society*. 2004, 24(15 - 16): 3789 - 3793.
- [16] Pugh S F. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals [J]. *Philos Mag*, 1954, 45(0): 823 - 843.
- [17] Wang J Y, Zhou Y C. Polymorphism of Ti₃SiC₂ ceramic: First-principles investigations [J]. *Phys Rev B*, 2004, 69: 144108 - 144121.
- [18] Pettifor D G. Theoretical predictions of structure and related properties of intermetallics [J]. *Mater Sci Technol*, 1992, 8(4): 345 - 349.
- [19] Mehl M J, Klein B M, Papaconstantopoulos D A. *Intermetallic Compounds: Principles and Practice* [M]. London: John Wiley and Sons, 1995. 195 - 210.

(编辑 陈爱华)