

Y 掺杂 γ -TiAl 电子结构的第一性原理计算

夏金姣¹, 梁文萍¹, 缪强¹, 任蓓蕾¹, 韩培德²

(1. 南京航空航天大学, 江苏 南京 210016)

(2. 太原理工大学, 山西 太原 030024)

摘要:采用基于密度泛函理论的第一性原理平面波赝势方法, 计算过渡元素 Y 在 γ -TiAl 中占位情况, 并优化了 Ti_2Al_2 、 $TiAl_2Y$ 、 Ti_3Al_4Y 、 Ti_7Al_8Y 及 $Ti_{15}Al_{16}Y$ 的结构模型, 获得以上掺杂体系的几何结构、电子结构、形成能以及电荷布局值从而分析体系的稳定性、成键特性, 预测掺杂体系的宏观性质。结果表明: Y 元素优先占据 Ti 位; 随 Y 掺杂浓度增加, 晶格畸变逐渐增大, 晶体形成能力逐渐变强, Ti(d)-Al(p)中共价性比例先增加后减小, 其中 $Ti_{15}Al_{16}Y$ 的共价性最弱, 有利于 γ -TiAl 改善脆性。

关键词: 金属间化合物; 第一性原理; 占位; 电子结构

中图分类号: TG146.2³

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2017)02-0421-06

γ -TiAl 与传统高温结构材料相比, 具有熔点高、比强度和比模量高等优点, 有望替代镍基高温合金成为新一代航空结构材料。虽然 γ -TiAl 拥有诸多优异性能, 但是作为一种金属间化合物, Ti-Al 键合方式以共价性为主, 兼具金属性和离子性, Ti 和 Al 周围电荷分布不均匀, 呈现明显方向性, 且电荷密度差异大造成键强度差异大, 最终表现为 TiAl 金属间化合物的室温塑性和断裂韧性差, 严重阻碍了 γ -TiAl 的应用发展^[1-3]。添加微量合金化元素, 对 γ -TiAl 进行微合金化, 进而削弱 γ -TiAl 晶格中 Al(p)-Ti(d)的键强或提高 Ti(d)-Ti(d)的键强, 能够有效缓解 γ -TiAl 脆性^[4-7]。

Y 元素作为一种过渡金属, 具有熔点高, 化学性质稳定的优点, 成为研究掺杂元素的热点之一。王艳晶^[8]等人向高铌 TiAl 合金添加微量的 Y 元素, 发现 Y 有利于促进 Al 元素的选择性氧化, 促进生成保护性的 Al_2O_3 , 提高氧化膜与基体的粘附性, 有助于提高高铌 TiAl 的抗高温氧化性。陈玉勇^[9]等人对掺杂 Y 元素的 γ -TiAl 进行精密热成形处理, 研究 Y 对 γ -TiAl 的合金室温力学性能的影响。结果显示一定范围内的 Y 元素能有效提高 γ -TiAl 的塑性, 其原因在于 Y 元素的除氧作用以及对位错 1/2[110]的激活作用。Junqi He^[10]等人利用第一性原理计算 Y 在不同掺杂浓度对 NiAl 金属化合物力学性能的影响, 发现随着 Y 元素含量增加, NiAl 的延性先升后降, E 和 G 则先降后升。赵荣达^[11]

等人基于第一性原理对 FeAl(B2)进行 Y 微合金化的性能进行研究, 结果显示, 添加 Y 元素可以改善合金的塑性和室温脆性, 但对合金的硬度和高温性能有一定程度的损害。目前, 有关利用第一性原理研究掺杂 Y 元素对 γ -TiAl 合金的电子结构与力学性能的影响鲜有报道。本研究将从基于密度泛函的第一性原理角度出发, 优化掺杂 Y 后的 γ -TiAl 晶格, 计算形成能以分析 Y 元素在 γ -TiAl 晶格中的占位情况, 以及不同掺杂浓度的 Y 元素对 γ -TiAl 晶格结构、电子分布的影响, 从而对 γ -TiAl 的宏观性能进行预测。

1 模拟计算

本研究中第一性原理计算采用 Materials Studio 软件中的 Cambridge Serial Total Energy Package (CASTEP)模块^[12]。CASTEP 模块是基于密度泛函理论的第一性原理赝势平面波方法, 即利用赝势替代粒子势。交换关联能用广义梯度近似 (GGA)校正, 交换关联势选择 Perdew Burke Ernzerhof (PBE), 涉及的 Ti, Al 和 Y 原子的电子组态分别为 $3s^23p^6sd^24s^2$, $2s^23p^1$ 和 $4s^24p^64d^15s^2$, 其他轨道电子视为芯电子。平面波截断能为 310 eV, 布里渊区 k 矢量为 $5 \times 5 \times 5$ (Monkhorst Pack 形式)。迭代计算时每个原子的总能量收敛设为 2.0×10^{-5} eV/atom, 作用于每个原子的力不大于 0.5 eV/nm, 公差偏移不大于 0.002 nm, 应力偏差不大于

收稿日期: 2016-01-30

基金项目: 国家自然科学基金 (51474131, 51174119); 江苏省普通高校研究生科研创新计划项目 (KYLX15_0309); 南京航空航天大学博士学位论文创新与创优基金 (BCXJ14-11); 江苏高校优势学科建设工程资助项目

作者简介: 夏金姣, 女, 1992 年生, 博士生, 南京航空航天大学材料科学与技术学院, 江苏 南京 210016, 电话: 025-52112916, E-mail: jinjiao_xia@hotmail.com

0.1 GPa。理想 γ -TiAl 晶体结构为 $L1_0$ ，空间群为 $P4/mmm$ ，属于 AuCu 型结构，Ti 占据 2e 位置，Al 占据 1a 和 1c 位置，晶格参数为 $a=b=0.4001$ nm， $c=0.4071$ nm， $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ 。建立 γ -TiAl 的单体，如图 1 所示，共 4 个原子。优化后的晶格参数为 $a=b=0.400625$ nm， $c=0.408867$ nm，误差约为 0.4%，远小于在赝势平面波预期误差 1%~2%，说明选择的计算方法及参数适用于模拟体系。对 γ -TiAl 进行 Y 原子掺杂，掺杂原子含量为 0.03125。不同掺杂含量则根据周期性，改变超晶胞大小 ($1\times 1\times 1$ 、 $2\times 1\times 1$ 、 $2\times 2\times 1$ 、 $2\times 2\times 2$)，则掺杂浓度 (at%) 分别为 25，1.25，6.25 和 3.125。对以上超晶胞进行结构优化后，计算优化体系的形成能、能带结构、态密度、电子密度、布局数等参数预测 γ -TiAl 的宏观性能。

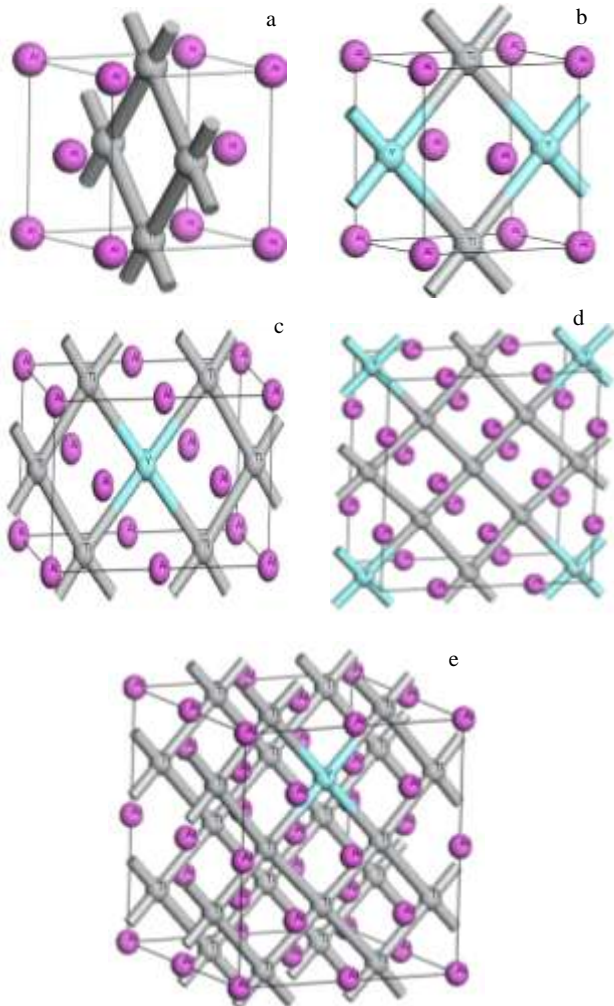


图 1 Ti_2Al_2 、 $TiAl_2Y$ 、 Ti_3Al_4Y 、 Ti_7Al_8Y 及 $Ti_{15}Al_{16}Y$ 的晶体结构

Fig.1 Crystal structure of Ti_2Al_2 (a), $TiAl_2Y$ (b), Ti_3Al_4Y (c), Ti_7Al_8Y (d) and $Ti_{15}Al_{16}Y$ (e)

2 结果与讨论

2.1 优先占位

判断掺杂元素在晶格中的具体位置常用方法是计算形成能，即表示不同类原子由单质状态生成化合物释放或吸收的能量，形成能^[13]计算方法如下：

$$E_f(TiAl_2Y) = \frac{1}{4}[E(TiAl_2Y) - E_{Ti}^{bulk} - 2E_{Al}^{bulk} - E_Y^{bulk}] \quad (1)$$

$$E_f(Ti_2AlY) = \frac{1}{4}[E(Ti_2AlY) - 2E_{Ti}^{bulk} - E_{Al}^{bulk} - E_Y^{bulk}] \quad (2)$$

式中， $E_f(TiAl_2Y)$ 、 $E_f(Ti_2AlY)$ 分别表示 $TiAl_2Y$ 、 Ti_2AlY 的形成能， $E(TiAl_2Y)$ 、 $E(Ti_2AlY)$ 分别表示 1 个 Y 原子取代 1 个 Ti、Al 原子后超晶胞的总能量， E_{Ti}^{bulk} 、 E_{Al}^{bulk} 、 E_Y^{bulk} 分别表示原子 Ti、Al 和 Y 在单质状态下的能量，依次为 -6412.0，-225.9 和 -772.2 eV。为了更直观、更简洁的确定 Y 原子在 γ -TiAl 中的占位情况，可以通过计算位置选择能 E_{site} ，即比较 $TiAl_2Y$ 、 Ti_2AlY 的形成能大小，表达式如下：

$$E_{site} = E_f(TiAl_2Y) - E_f(Ti_2AlY) \quad (3)$$

若 $E_{site} > 0$ ，表明 Y 原子占据 Al 位置的能量更低，则 Y 原子优先占据 Al 原子位；若 $E_{site} < 0$ ，表明 Y 原子占据 Ti 位置的能量更低，则 Y 原子优先占据 Ti 原子位。

表 1 为 1 个 Y 原子取代 Ti_2Al_2 中 1 个 Ti 或 Al 原子的总能量、形成能和位置选择能。 E_{site} 求得为 -1160.1eV，为负值，说明 $TiAl_2Y$ 的形成能较 Ti_2AlY 的形成能小，Y 原子优先取代 Ti 原子的位置。这是因为在 Ti、Al 和 Y 单质晶格结构均为 FM-3M 的基础上，Ti 原子半径(0.14 nm)较 Al 原子半径(0.125 nm)与 Y 原子半径(0.18 nm)更相近，根据原子半径相近更易取代的原则，Y 原子优先占据 Ti 原子位置。

2.2 晶格常数与形成能

分别建立单体以及 $2\times 1\times 1$ 、 $2\times 2\times 1$ 和 $2\times 2\times 2$ 3 种超晶胞，将 Y 原子取代 Ti 原子，对掺杂浓度(at%)为 25，12.5，6.25 和 3.125 的超晶胞进行结构优化，优化后的晶格参数如表 2 所示。

通过公式(4)计算各超晶胞的形成能，从而判断不同掺杂浓度的晶格形成难易程度。

表 1 Ti_2AlY 和 $TiAl_2Y$ 总能量(E)，形成能(E_f)，位置选择能(E_{site})
Table 1 Total energies (E), formation energy (E_f) of Ti_2AlY and $TiAl_2Y$, site occupation energy (E_{site}) (eV)

$TiAl_2Y$		Ti_2AlY		E_{site}
E	E_f	E	E_f	
-1910.0	1431.5	-6412.0	2591.6	-1160.1

$$E_f(\text{Ti}_{2n-1}\text{Al}_{2n}\text{Y}) = \frac{1}{4n} [E(\text{Ti}_{2n-1}\text{Al}_{2n}\text{Y}) - (2n-1)E_{\text{Ti}}^{\text{bulk}} - 2nE_{\text{Al}}^{\text{bulk}} - E_{\text{Y}}^{\text{bulk}}] \quad (4)$$

其中 $E_f(\text{Ti}_{2n-1}\text{Al}_{2n}\text{Y})$ 为 $\text{Ti}_{2n-1}\text{Al}_{2n}\text{Y}$ 的形成能, $E(\text{Ti}_{2n-1}\text{Al}_{2n}\text{Y})$ 为 $\text{Ti}_{2n-1}\text{Al}_{2n}\text{Y}$ 的总能量, $n(n=1, 2, 4, 8)$ 为超晶胞中所含单胞数量。计算所得的计算能如表 3 所示。所有掺杂晶格的形成能均为正值, 需要依靠外界提供能量(如磁控溅射、离子镀、高温熔炼^[14-16])。结合表 2 和表 3, 可以看出, 随着 Y 原子掺杂浓度降低, $\text{Ti}_{2n-1}\text{Al}_{2n}\text{Y}$ 晶格参数逐渐趋近于实验值。其原因是 Y 原子作为外来原子, 原子半径大于 Ti, 替代 Ti 原子后会排挤其周围原子, 造成晶格畸变, 且随着掺杂原子浓度增加, 晶格畸变越严重。比较所得的形成能, 结果显示 Y 原子在掺杂浓度为 25 at% 时, 形成能最小, 仅为 1431.4 eV, 说明 TiAl_2Y 更易形成。

2.3 电子态密度

图 2 是不同掺杂浓度下 Y 原子在优先取代 γ -TiAl 晶格中 Ti 原子位置前后各元素的分波态密度图(PDOS)和总态密度图(TDOS)。TDOS 中, 费米能级处的电子浓度不为零, 说明掺杂前后的体系均呈现明显的金属性。且掺杂前后, 成键电子的分布情况基本不变, 均处在能量为 -60~-55 eV、-35~-30 eV 和 -10~-10 eV 的范围内。-60~-55 eV 的电子主要来源于 Ti 的 4s 轨道, -35~-30 eV 的电子主要来源于 Ti 的 3p 轨道, -10~-10 eV 的电子来源较为复杂, 主要由 Ti 的 3d 轨道、Al 的 3p 轨道以及 Y 的 4d 轨道提供, 而这些原子轨道在费米能级存在发生重叠, 说明存在轨道杂化现象。而 Y 元素作为一种过渡元素, d 轨道存在一个很大的尖峰, 说明 Y 的 4d 轨道上电子相对比较局域, 且 4d 轨道中存在一个较宽的能隙, 反映了由 4d 轨道形成的键的共价性较强, 说明掺杂的 Y 原子可以代替 Ti 原子(Al 原子)与 Al 原子(Ti 原子)成键, 减少了 Al(p)和 Ti(d)的键合数量, 增强了 Ti-Ti 和 Al-Al, 有利于提高晶体

表 2 $\text{Ti}_{2n-1}\text{Al}_{2n}\text{Y}$ ($n=1, 2, 4, 8$)平衡时的晶格参数
Table 2 Equilibrium lattice parameters in $\text{Ti}_{2n-1}\text{Al}_{2n}\text{Y}$ ($n=1, 2, 4, 8$) ($\times 10^{-1}$ nm)

	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>
Ti_2Al_2	4.006	4.006	4.089
TiAl_2Y	4.411	4.411	4.173
Ti_4Al_4	4.006	4.006	4.088
$\text{Ti}_3\text{Al}_4\text{Y}$	4.165	4.165	4.203
Ti_8Al_8	4.002	4.002	4.099
$\text{Ti}_7\text{Al}_8\text{Y}$	4.08	4.086	4.159
$\text{Ti}_{16}\text{Al}_{16}$	3.998	3.998	4.104
$\text{Ti}_{15}\text{Al}_{16}\text{Y}$	4.043	4.043	4.126

表 3 $\text{Ti}_{2n-1}\text{Al}_{2n}\text{Y}$ ($n=1, 2, 4, 8$) 的总能量 *E* 与形成能 E_f
Table 3 Total energies (*E*) and formation energies (E_f) of $\text{Ti}_{2n-1}\text{Al}_{2n}\text{Y}$ ($n=1, 2, 4, 8$) (eV)

	TiAl_2Y	$\text{Ti}_3\text{Al}_4\text{Y}$	$\text{Ti}_7\text{Al}_8\text{Y}$	$\text{Ti}_{15}\text{Al}_{16}\text{Y}$
<i>E</i>	-1910.0	-5230.6	-11871.9	-25154.5
E_f	1431.4	1960.1	2224.4	2356.6

面间的可动性, 提高位错滑移能力, 从而改善 γ -TiAl 的脆性^[16]。

费米能级处的能带宽度反映了元素周围电子被局域的程度, 能带宽度越窄, 电子被局域, 参与成键的能力减弱; 反之, 电子呈现非局域化性质, 参与成键的能力强。由图 2 可知能带宽度随 Y 掺杂浓度的减少而变窄, 电子局域性增强, 成键能力下降, 降低了 Al(p)与 Ti(d)的相互作用, 说明 Y 的加入削弱了 Ti(d)-Al(p)的键合强度, 降低其共价性且削弱能力随浓度减小而增强, 有助于缓解 γ -TiAl 的脆性。而能带中的主峰位置反映了大部分成键电子所处的能量环境。主峰的位置越左, 成键电子所处能量环境越低, 形成的键的稳定性越高, 从而提高晶体的稳定性。对比图 2 中的 4 个图, 可以看出, 主峰的位置随 Y 的掺杂浓度减低而左移, 说明成键电子的能量降低, 形成的晶体稳定性提高。

2.4 差分电荷密度

通过计算不同掺杂浓度 Y 的化合物电子密度减去单个原子密度, 得到 Ti_2Al_2 晶体与不同掺杂浓度 Y 优先占位后所得体系的((1 $\bar{1}$ $\bar{1}$))晶面上的二次差分电荷图, 如图 3 所示。 γ -TiAl 晶格中加入 Y 原子后, 改变了体系的化学成分及几何构型。二次差分电荷图直观的表现出了体系变化后的电荷重新分布情况, 即用图 3 中的红白蓝表示。红色表示得电子, 蓝色表示失电子, 白色表示中间态。Ti 和 Y 原子周围电荷分布为花瓣形, 即 Ti 与 Y 的成键轨道为 d 轨道。Ti 和 Al 原子中心区域为失电子区域, 而 Ti 与 Al 原子之间的为电子区域, 说明 Ti 与 Al 原子通过公用电子形成共价键, 具有较强的方向性。当 Ti 原子被 Y 原子取代后, Ti 和 Al 原子之间存在电荷转移。随着 Y 原子掺杂数量的减小, 转移电荷数量逐渐增加, Ti 与 Al 原子之间的电子数量逐渐较小, 表现为 Ti 与 Al 原子间重叠电子云区域减小, Ti-Al 共价性减弱, 离子性增强, 宏观上可以展现出脆性下降, 与图 3 分析结果一致。而对比掺杂 Y 元素前后的二次差分电荷图, 可以看出 Ti 和 Al 原子周围的电子分布情况并未发生较大畸变, 说明 Ti-Al 具有共价性、离子性及金属性。

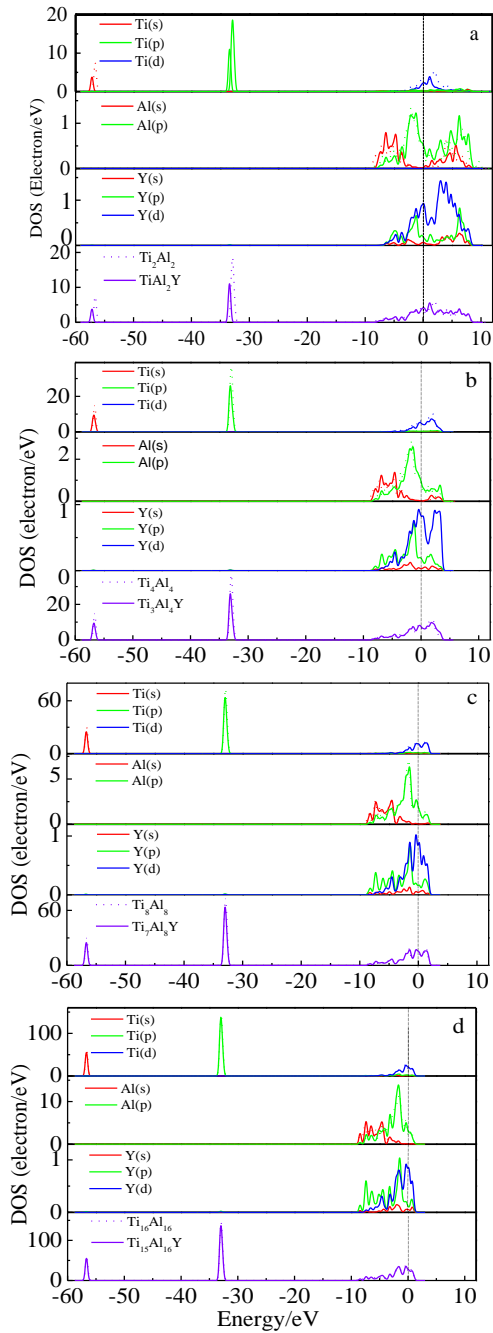


图 2 不同浓度掺杂 Y 前后各元素的分波态密度图(PDOS)、总态密度图(TDOS)

Fig.2 Partial and total density of states before and after doping: (a) Ti_2Al_2 , (b) Ti_3Al_4Y , (c) Ti_7Al_8Y , and (d) $Ti_{15}Al_{16}Y$

2.5 布局分析

常见的布局分布分为原子布局数和重叠布局（也称为键布局）。原子布局通过分析原子的电荷数判断原子的得失电子能力，从而分析成键原子之间的成键特性。重叠布局数是通过已知两个成键原子之间电子云的重叠程度，分析成键特性进而预测材料宏观性质。

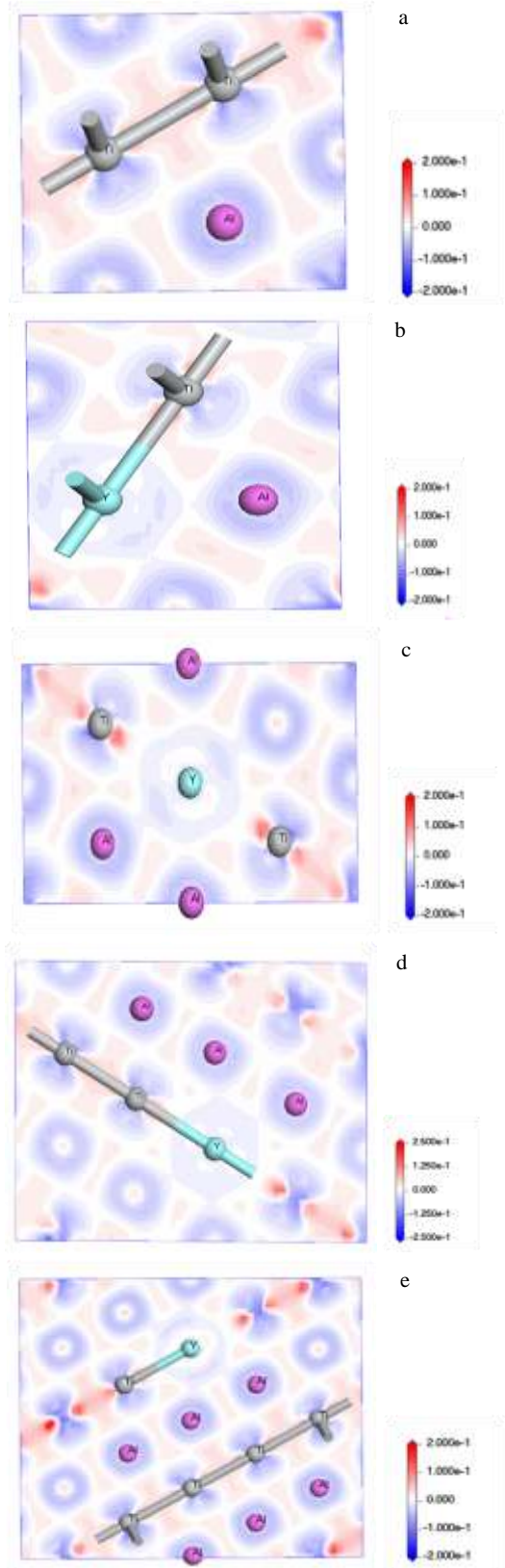


图 3 Ti_2Al_2 、 $TiAl_2Y$ 、 Ti_3Al_4Y 、 Ti_7Al_8Y 及 $Ti_{15}Al_{16}Y$ 的 $(1\bar{1}\bar{1})$ 面二次差分电荷图

Fig.3 Charge densities difference on $(1\bar{1}\bar{1})$ plane of Ti_2Al_2 (a), $TiAl_2Y$ (b), Ti_3Al_4Y (c), Ti_7Al_8Y (d), and $Ti_{15}Al_{16}Y$ (e)

计算完美 Ti_2Al_2 晶体与不同掺杂浓度 Y 优先占位后所得体系的 Mulliken 布局数, 结果如表 4 所示。掺杂 Y 后, Ti 和 Al 周围电子分布发生不同程度的变化, Ti 原子失电子数明显增加, Al 原子周围电子变化不大, 这与电子密度图得到的结果一致。比较 Ti 和 Al 失电子数大小, 可知 Y-Ti 较 Y-Al 离子键成分更大, 且离子键成分随 Y 掺杂浓度的增加而增加。对比掺杂 Y 前后, Ti 和 Al 周围电荷在各原子轨道分布情况, Ti(s)、Ti(p)、Ti(d)以及 Al(p)轨道上电荷数降低, 说明原子轨道得电子能力降低, 成键的共价性降低。而削弱 Al(p)-Ti(d)的方向性有助于缓解 TiAl 的脆性。

表 5 是 γ -TiAl 掺杂 Y 原子前后, Ti-Al 单位键长的布局。重叠布局数为正值, 说明原子间形成共价键, 且数值越大, 共价性越强。重叠布局数为负值, 说明原子之间形成反键, 相互排斥, 无法稳定构型。当掺杂浓度为 3.125 at% 时, 单位键长的布局数(p)大幅降低, 由 1.118 charge/nm 降至 0.167 charge/nm, 此时, Ti-Al 离子性最强而共价性最弱, 大幅改善 γ -TiAl 脆性。而掺杂浓度为 12.5 at% 时, 单位键长的布局数最大, 高达 1.381 charge/nm, 说明 $\text{Ti}_7\text{Al}_8\text{Y}$ 的 Ti-Al 中共价性比例最高, 方向性最强, 宏观表现为脆性大, 硬度高不利于材料性质的改善。而重叠布局数随着 Y 元素浓度增加先升高后减小, 则 Ti-Al 共价性比例先升高后减小, 宏观上表现为脆性先变大后降低, 硬度先增高后减小^[17-19]。

表 4 Ti_2Al_2 及 $\text{Ti}_{2n-1}\text{Al}_{2n}\text{Y}$ ($n=1, 2, 4, 8$) 的原子布局数

Table 4 Atomic populations in Ti_2Al_2 and $\text{Ti}_{2n-1}\text{Al}_{2n}\text{Y}$ ($n=1, 2, 4, 8$)

	Atomic	s	p	d	Total population	Charge number
Ti_2Al_2	Ti	2.33	6.73	2.83	11.89	0.11
	Al	0.99	2.12	0	3.11	-0.11
TiAl_2Y	Ti	2.29	5.77	2.72	10.77	1.23
	Al	1.12	1.86	0	2.98	0.02
	Y	0.32	1.59	2.36	4.27	-1.27
$\text{Ti}_3\text{Al}_4\text{Y}$	Ti	2.31	6.08	2.77	11.16	0.84
	Al	1.05	2.01	0	3.05	-0.05
	Y	0.34	2.01	2.37	4.27	-1.72
$\text{Ti}_7\text{Al}_8\text{Y}$	Ti	2.31	6.34	2.80	11.44	0.56
	Al	1.04	2.01	0	3.05	-0.05
	Y	0.35	2.18	2.35	4.88	-1.88
$\text{Ti}_{15}\text{Al}_{16}\text{Y}$	Ti	2.27	6.31	2.80	11.39	0.61
	Al	1.00	2.04	0	3.05	-0.05
	Y	0.35	2.73	2.41	5.49	-2.49

表 5 Ti_2Al_2 和 $\text{Ti}_{2n-1}\text{Al}_{2n}\text{Y}$ ($n=1, 2, 4, 8$) 的重叠布局数

Table 5 Charge population of unit bond length in Ti_2Al_2 and $\text{Ti}_{2n-1}\text{Al}_{2n}\text{Y}$ ($n=1, 2, 4, 8$)

	Population	Length/ $\times 10^{-1}$ nm	$P/\text{charge nm}^{-1}$
Ti_2Al_2	0.32	2.86214	1.118
TiAl_2Y	0.40	3.03614	1.317
$\text{Ti}_3\text{Al}_4\text{Y}$	0.41	2.96993	1.381
$\text{Ti}_7\text{Al}_8\text{Y}$	0.14	2.98814	0.469
$\text{Ti}_{15}\text{Al}_{16}\text{Y}$	0.05	2.98772	0.167

3 结论

1) 过渡元素 Y 掺杂在 γ -TiAl 中将优先取代 Ti 原子, 且随着 Y 浓度的增加, 掺杂后的晶格形成能力变强。

2) Ti(d)-Al(p)中共价成分居多, Y 的加入有助于削弱 Ti(d)-Al(p)的方向性, 增强 Ti-Ti 和 Al-Al 的键合强度, 从而在宏观性质上主要表现为 γ -TiAl 脆性缓解。Y 原子掺杂后, Ti 与 Al 原子之间存在电荷转移现象, 转移数量随 Y 掺杂浓度的增大而减小。而 Y 掺杂浓度为 3.125 at% 的 $\text{Ti}_{15}\text{Al}_{16}\text{Y}$, 重叠布局数最小, 说 Ti-Al 之间成键的共价键比例最弱, 离子性最强。

参考文献 References

- [1] Greenberg B F, Anisimov V I, Gornostirev Y N *et al. Scripta Metallurgica*[J], 1988, 22(6): 859
- [2] Morinaga M, Saito J, Yukawa N *et al. Acta Metallurgica et Materialia* [J], 1990, 38(1): 2
- [3] Hussian A, Hayat S S, CHoudhry M A. *Physica B* [J], 2011, 406: 1961
- [4] Liu Xiankun(刘显坤), Liu Ying(刘颖). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程) [J], 2012, 41(2): 479
- [5] Li Hong(李虹), Wang Shaoqing(王绍青), Ye Hengqiang(何恒强), *Acta Physica Sinica*(物理学报) [J], 2009, 58(S): 224
- [6] Wu Hongli(吴红丽), Zhang Wei(张伟), Gong Shengkai(宫声凯). *Acta Chimica Sinica*(化学学报)[J], 2008, 66: 1669
- [7] Emanuel Schwaighofer, Helmut Clemens, Svea Mayer *et al. Intermetallics*[J], 2014, 44: 128
- [8] Wang Yanjing(王艳晶), Song Meijin(宋玫锦), Wang Jijie(王继杰) *et al. Rare Metal Materials and Engineering* (稀有金属材料与工程) [J], 2014, 43(7): 1697
- [9] Chen Yuyong(陈玉勇), Han Jianchao(韩建超), Xiao Shulong(肖树龙) *et al. The Chinese Journal of Nonferrous Metals* (中国有色金属学报)[J], 2014, 24(5): 1241
- [10] He Junqi, Wang You, Yan Mufu, *Computational Materials Science*[J], 2010, 50: 545

- [11] Zhao Rongda(赵荣达), Zhu Jingchuan(朱景川), Liu Yong(刘勇) *et al.* *Acta Physica Sinica* (物理学报)[J], 2012, 61(13): 137-102
- [12] Lv Jianmin(吕建民), Hu Qingmiao(胡青苗), Xu Dongsheng(徐东生) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering* (稀有金属材料与工程) [J], 2008, 37(3): 959
- [13] Wu Gonghao(吴国浩), Zheng Shukai(郑树凯), Liu Lei(刘磊). *The Chinese Journal of Nonferrous Metals* (中国有色金属学报) [J], 2013, 23(3): 852
- [14] Chao Jiang. *Acta Materialia*[J], 2008, 56: 6224
- [15] Liu Teng(刘腾), Teng Xinying(滕新营), Zhou Guorong(周国荣) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程) [J], 2012, 41(11): 1940
- [16] Li Baohui(李宝辉), Chen Yuyong(陈玉勇), Kong Fantao(孔凡涛). *Special Casting & Nonferrous Alloys*(特种铸造及有色合金) [J], 2006, 26(12): 762
- [17] Chai Lihua(柴丽华), Chen Yuyong(陈玉勇), Liu Zhiguang(刘志光). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与材料工程)[J], 2011, 40(11): 1976
- [18] Zhong Xiaping(钟夏平), Deng Wen(邓文), Tang Yusheng(唐郁生) *et al.* *Acta Physica Sinica* (物理学报)[J], 1998, 47(10): 1734
- [19] Li Rong(李荣), Luo Xiaoling(罗小玲), Liang Guoming(梁国明). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程) [J], 2011, 40(11): 1916

First-principles Study on Electronic Structure of γ -TiAl Alloy Doped with Y

Xia Jinjiao¹, Liang Wenping¹, Miao Qiang¹, Ren Beilei¹, Han Peide²

(1. Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China)

(2. Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China)

Abstract: Site substitution of Y and the super-cell systems of γ -TiAl doped with Y were investigated by the first-principle plane-wave pseudopotential method based on density functional theory. The geometric and electronic structures, formation energy, Mulliken and bond population of Ti_2Al_2 , TiAl_2Y , $\text{Ti}_3\text{Al}_4\text{Y}$, $\text{Ti}_7\text{Al}_8\text{Y}$ and $\text{Ti}_{15}\text{Al}_{16}\text{Y}$ were obtained. The results show that Y prefers to be a substitute for Ti in γ -TiAl alloy. The addition of Y increases both lattice distortion of γ -TiAl and forming ability of the doped lattice. Moreover, the proportion of covalent properties increases first and then descends with increasing of Y doping content. $\text{Ti}_{15}\text{Al}_{16}\text{Y}$ has the weakest covalent properties, in favor of improving the brittleness of γ -TiAl.

Key words: intermetallic compound; first-principle; site substitution; electronic structure

Corresponding author: Liang Wenping, Ph. D., Professor, College of Materials Science and Engineering, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, P. R. China, Tel: 0086-25-52112916, E-mail: wpliang@nuaa.edu.cn