

# W-Y 二元合金力学性质的第一性原理计算

姜迪友<sup>1,2</sup>, 刘三秋<sup>1</sup>

(1. 南昌大学, 江西 南昌 330047)

(2. 江西科技学院, 江西 南昌 330098)

**摘要:** 采用基于密度泛函理论的第一性原理方法研究了钇的含量对 W-Y 二元合金力学性质的影响, 精确计算了  $W_{1-x}Y_x$  ( $x = 0.0625, 0.125, 0.25, 0.5$ ) 合金的力学常数, 并对其力学特性进行分析。结果表明, W-Y 合金的弹性常数、体模量、杨氏模量以及剪切模量随 Y 含量 (原子分数) 的增加而成非单调性减小, 表明 Y 对 W 材料的合金化降低了材料的机械强度。然而, 基于力学特性  $B/G$ 、泊松比  $\nu$  和柯西压力  $C'$  等分析, Y 的合金化对 W 的延展性和韧性有明显的提高。当 Y 含量  $x$  为 0.25 时, 可有效改善 W-Y 合金的延展性和抗变形能力。通过态密度分析, W-Y 合金的金属性随 Y 含量的增加先减弱而后增强。

**关键词:** 第一壁材料; W-Y 合金; 力学性质; 第一性原理; 密度泛函理论

中图分类号: TG146.4<sup>+</sup>11

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2016)11-2895-07

钨具有高熔点、高热导率、高温高强度、低热膨胀系数、低溅射产额和高自溅射阈值、低蒸气压和低氚滞留性能, 成为核聚变反应堆中偏滤器和第一壁材料, 是最具有前途的面向等离子体材料<sup>[1-5]</sup>。另外, 钨同时可以作为聚变反应堆和其它涉及核反应系统的护甲材料<sup>[6]</sup>。然而, 纯钨表现出低延展性和低断裂韧性与高的脆性转变温度(DBTT)以及中子辐照条件下将引发钨晶体结构的变化并产生一系列嬗变产物, 同时还将引发钨的韧性降低和 (DBTT) 转变温度的提高, 但是热导率的下降不是很明显。这些都强烈的依赖于化学成分和微观结构状态<sup>[7]</sup>。固溶强化是一种常用的合金强化方法, 其性能同未合金化材料相比明显提高。W-Y 合金是当前最新研究的固溶强化钨合金。纯钇具有非常高的氧化亲和力, 能在球磨时与氧反应, 改变 W-Y 合金中氧的含量。氧化物弥散增强钨基材料能够有效改善抗辐射能力, 且钇的氧化物在高温下非常稳定, 同时 W-Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 合金材料具有良好的耐蚀性<sup>[8]</sup>。M. N. Avettand-Fenoel 等<sup>[9]</sup>用机械合金化方法制备 W-Y 粉末, 在 SEM 下观察混合 W-Y 粉末平均尺寸为 4.5  $\mu\text{m}$ , 且钇均匀地分布在钨晶格中, 钇的加入增强了钨韧性和蠕变性能。Lyubomira Veleva 等用粉末冶金技术方法制备 W-Y 合金材料, 致密度最高达 97%, 并伴有 Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 产生, 且烧结标本的致密度随 Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 和 Y 量的增加而增大。脆性转变温度(DBTT)在 1100~1200  $^{\circ}\text{C}$  之间<sup>[10,11]</sup>。纵观所有实验都没有对 W-Y 合金的力学性质做详细的阐述, 但力学性质中的弹性常数和弹性模量是

非常重要的力学参数, 能够提供理解材料特性的许多有益的信息<sup>[12,13]</sup>。特别是对第一壁材料钨合金而言, 材料的强度、延展性以及韧性对钨合金的成型以及结构的稳定及其重要。同时, 基于密度泛函理论的第一性原理计算可以从原子层面上研究材料的结构及性质<sup>[14-18]</sup>, 是非常有利的研究手段。但是, 到目前为止还没有关于 W-Y 合金的理论计算研究的报道, 因此从理论计算角度对 W-Y 合金力学性质的研究十分必要, 通过在原子层面上对材料结构的分析与计算得到材料的力学性质, 分析 Y 掺杂对 W 材料力学性能的影响, 与实验得到的部分结果对比, 并进一步指导实验。

因此, 本研究利用第一性原理计算方法研究了 W-Y 合金的力学性质。研究了 Y 的含量 (原子分数, 下同) 对 W-Y 合金的晶格常数和晶胞体积的影响。计算了 W-Y 合金的弹性常数、体模量、杨氏模量以及剪切模量, 并分析了这些参数随 Y 含量的变化情况以及对 W-Y 合金材料强度和抗变形能力的影响。基于力学特性  $B/G$ 、泊松比  $\nu$  和柯西压力  $C'$ , 讨论了 W-Y 合金的延展性随 Y 含量的变化情况。通过态密度分析了 W-Y 合金的金属性。

## 1 计算模型和方法

本研究所有计算工作都是采用 VASP<sup>[19,20]</sup> (Vienna ab-initio simulation package) 软件包完成的, 子交换关联函数的处理采用 J. P. Perdew 和 Y. Wang 提出的 PW91 广义梯度近似(GGA)<sup>[21]</sup>, 原子实和价电子之间的相互作用

收稿日期: 2015-11-15

基金项目: 国家自然科学基金项目 (11178002); 国际合作项目 (2015DFA61800); 江西省创新团队项目 (20133BCB2403); 江西省科技创新项目 (20114ACB00900)

作者简介: 姜迪友, 男, 1974 年生, 博士生, 讲师, 南昌大学材料科学与工程学院, 江西 南昌 330047, E-mail: jiangdiyout2005@163.com

采用投影缀加平面波(PAW)赝势来描述<sup>[22]</sup>。对简约布里渊区积分计算采用 Monkhost-Pack<sup>[23]</sup>方法时选取  $K$  网格点为  $11 \times 11 \times 11$ 。经测试平面波截断能选取 350 eV, 进一步提高截断能对能量的计算结果几乎没有影响。计算过程中对原子结构进行完全弛豫, 弛豫收敛于每原子受力不超过 0.1 eV/nm。

模型采用  $2 \times 2 \times 2$  的体心立方  $W$  结构超元胞, 共 16 个  $W$  原子。然后, 挑选超元胞中的  $W$  原子将其替换为  $Y$  原子从而得到一系列不同组分、不同取代结构的  $W$ - $Y$  二元合金的结构模型。本工作中涉及到的不同组分有:  $W_{16}$ 、 $W_{15}Y_1$ 、 $W_{14}Y_2$ 、 $W_{12}Y_4$  和  $W_8Y_8$ 。对这些初始构型在相同的计算条件下进行几何优化, 并计算形成能约为 0.12~0.16 eV/atom, 说明在实验中  $W$ - $Y$  合金合成是一种吸热反应。

晶体的弹性性质可以采用弹性常数  $C_{ij}$  来表征。弹性常数的计算通常采用连续弹性理论<sup>[24,25]</sup>, 在体系平衡结构基础上连续施加一定的应变, 计算应力-应变相互关系, 进而得到相应的弹性常数。对于体心立方结构, 其弹性性质可由 3 个独立的弹性常数表征, 即  $C_{11}$ 、 $C_{12}$  和  $C_{44}$ 。如果是六方晶体, 独立的弹性常数增大到 5 个( $C_{11}$ 、 $C_{12}$ 、 $C_{13}$ 、 $C_{33}$  和  $C_{44}$ )。这些常数可通过表 1 和表 2 中方程分别拟合得到。

从表 1 和表 2 中可以看出, 能量变化  $\Delta E$  和应变  $\delta$  的关系都为平方关系, 因此可以通过二次函数来拟合计

算点。结果发现, 二次函数可以很好的拟合计算数据并计算出合金的弹性常数。以体心立方结构模型的  $W_{12}Y_4$  为代例, 优化了  $Y$  原子的占位情况, 在最优占位情况下 (见图 1 插入结构图), 优化了该结构的平衡晶格常数, 对平衡晶格施加了从 -5%~5% 的应变, 给出了相应的拟合曲线, 如图 1 所示。从数据中得到拟合曲线和计算点之间的相关系数达到 0.99 以上, 这表明计算精度和计算方法能够获得比较精确的力学常数。

对于立方晶系, 采用计算得到的  $C_{11}$ 、 $C_{12}$  和  $C_{44}$  3 个弹性常数, 可以进一步通过 Voigt-Reuss-Hill 平均方案<sup>[26-29]</sup>计算得到体模量 ( $B$ )、剪切模量 ( $G$ )、各项同性杨氏模量 ( $E$ )、泊松比 ( $\nu$ ) 以及柯西压力 ( $C'$ ) 等力学参量。相关公式如下:

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

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

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

$$\nu = -1 + \frac{E}{2G} \quad (4)$$

$$C' = \frac{C_{12} - C_{44}}{2} \quad (5)$$

对于六角晶系, 采用计算得到的  $C_{11}$ 、 $C_{12}$ 、 $C_{13}$ 、 $C_{33}$  和  $C_{44}$  5 个弹性常数, 也可以计算得到  $B$ 、 $G$ 、 $E$  和  $\nu$  等力学参量, 具体可参阅文献[26-29]。

## 2 结果与讨论

### 2.1 立方晶系钨 (W) 与六角晶系钇 (Y) 的力学特性

首先, 计算了立方晶系钨与六角晶系钇的力学特性,

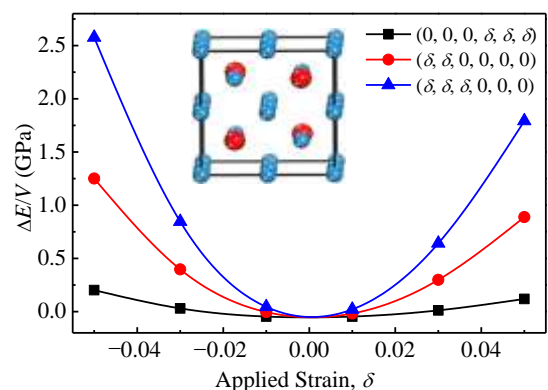


图 1  $W_{12}Y_4$  的能量变化与施加应变的二次项拟合曲线 (原子结构如其中插入图, 蓝色小球和红色大球分别为  $W$  和  $Y$  原子)

Fig.1 Fitting quadratic curves of energy change and strain of  $W_{12}Y_4$  (atomic structure is shown in the insert figure with blue as  $W$  atoms and red as  $Y$  atom)

表 1 立方晶系应变及其与总能变化关系

Table 1 Change relationship between strain and total energy of Cubic crystal system

Strain	Change of total energy
$e = (0, 0, 0, \delta, \delta, \delta)$	$\frac{\Delta E}{V} = \frac{3}{2}C_{44}\delta^2$
$e = (\delta, \delta, 0, 0, 0, 0)$	$\frac{\Delta E}{V} = (C_{11} + C_{12})\delta^2$
$e = (\delta, \delta, \delta, 0, 0, 0)$	$\frac{\Delta E}{V} = \frac{3}{2}(C_{11} + 2C_{12})\delta^2$

表 2 六角晶系应变及其与总能变化关系

Table 2 Change relationship between strain and total energy of Hexagonal system

Strain	Change of total energy
$e = (\delta, \delta, 0, 0, 0, 0)$	$\frac{\Delta E}{V} = (C_{11} + C_{12})\delta^2$
$e = (0, 0, 0, 0, 0, \delta)$	$\frac{\Delta E}{V} = \frac{1}{4}(C_{11} - C_{12})\delta^2$
$e = (0, 0, \delta, 0, 0, 0)$	$\frac{\Delta E}{V} = \frac{1}{2}C_{33}\delta^2$
$e = (0, 0, 0, \delta, \delta, 0)$	$\frac{\Delta E}{V} = C_{44}\delta^2$
$e = (\delta, \delta, \delta, 0, 0, 0)$	$\frac{\Delta E}{V} = \left( C_{11} + C_{12} + 2C_{13} + \frac{C_{33}}{2} \right) \delta^2$

并他人的理论和实验数据进行比较, 进而验证计算数据方法和参数的合理性。钨的弹性常数与力学参量分别列在表 3 和表 4 中<sup>[30,31]</sup>, 钇的弹性常数与力学参量分别列于表 5 和表 6 中<sup>[32,33]</sup>, 同时也列有实验值和理论值, 并与现有理论计算值进行对比。发现现有理论计算钨的弹性常数和力学参量与实验值符合的很好。表明利用密度泛函理论方法计算 W 和 Y 的力学性能具有很好的可靠性。文献[33]中利用了紧束缚近似方法(TB)计算 Y 的弹性常数与力学参量, 其结果与实验数据及密度泛函理论结构有一定的差距, 表明文献[33]中紧束缚势场没有密度泛函理论赝势法精确。由于对 W 和 Y 的结构都和实验结果比较接近, 因此, 有理由相信下面对 W-Y 二元合金的计算也能得到合理的结果。

2.2 钨钇(W-Y)二元合金的力学性能参数

图 2 给出了计算得到的 W-Y 二元合金的晶格常数随 Y 元素含量的变化情况。发现晶格常数随 Y 元素含量的

表 3 体心立方钨(W)的弹性常数与实验值和理论值对比

Table 3 Comparison of bcc W. Previous experimental and theoretical values elastic constants ( $C_{ij}$ ) (GPa)

Method	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{44}$
Present	529.94	211.19	139.44
Exp. <sup>[30]</sup>	533	205	163
Theor. <sup>[30, 31]</sup>	553	207	163

表 4 体心立方钨(W)的体模量(B)、剪切模量(G)、杨氏模量(E)、泊松比( $\nu$ )以及(B/G)与实验值和理论值对比

Table 4 Comparison of bcc W. Previous experimental and theoretical values for bulk modulus (B), shear modulus (G), Young's modulus (E), Poisson's ratio ( $\nu$ ) and B/G ratio

Method	B/GPa	G/GPa	E/GPa	B/G	$\nu$
Present	317.44	147.42	382.96	2.15	0.30
Exp. <sup>[30]</sup>	314.33	163.40	417.80	1.92	0.28
Theor. <sup>[30, 31]</sup>	322.33	173.00	440.24	1.86	0.27

表 5 六角钇(Y)的弹性常数与实验值和理论值(TB)对比

Table 5 Comparison of hcp Y. Previous experimental and theoretical values (TB) for elastic constant (GPa)

Method	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{13}$	$C_{33}$	$C_{44}$
Present	75.21	22.30	24.44	80.77	23.80
Exp. <sup>[32]</sup>	78	29	20	77	24
(TB) <sup>[33]</sup>	45	15	13	48	17

表 6 体心六角钇(Y)的体模量(B)、剪切模量(G)、杨氏模量(E)、泊松比( $\nu$ )以及(B/G)与实验值和理论值对比

Table 6 Comparison of hcp Y. Previous experimental and theoretical values for bulk modulus (B), shear modulus (G), Young's modulus (E), Poisson's ratio ( $\nu$ ) and B/G ratio

Method	B/GPa	G/GPa	E/GPa	B/G	$\nu$
Present	41.46	25.44	63.35	1.63	0.245
Exp. <sup>[32]</sup>	41.16	25.33	63.05	1.63	0.245
(TB) <sup>[33]</sup>	24.44	16.23	39.87	1.51	0.228

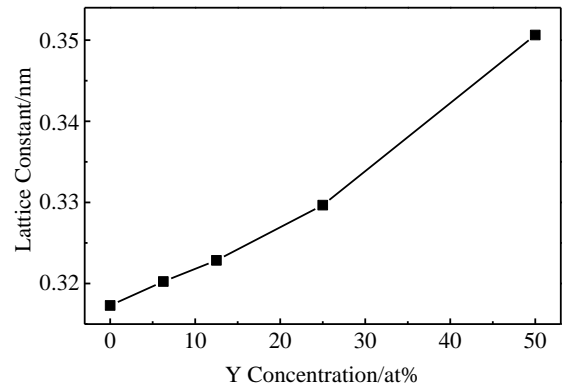


图 2 W-Y 二元合金晶格常数随 Y 含量变化趋势

Fig.2 Equilibrium lattice constant of W-Y binary alloys as a function of Y concentration

增加而增加, 这个结果是 Y 原子半径大于 W 原子半径的直接结果。当 Y 的含量小于 25% 时, 晶格常数几乎是成线性增加的, 表明 Y 原子的大小直接影响了晶格常数的变化, 说明 W-Y 二元合金在 Y 含量小于 25% 时在原子级别上固溶性能很好。当 Y 含量达到 50% 时, 晶格常数变化率增大, 此时 Y 在 W 晶格(体心立方)中的固溶性变差, 对应体系的自由能也增加, 稳定性变差, 形成固溶体也越来越难。

对于不同 Y 元素含量的 W-Y 二元合金, 还分别计算了其单晶弹性常数和力学性能。首先对不同含量 Y 情况下 Y 的占位进行了优化, 选择了能量最低的占位情况并优化其晶格常数, 其结果列于表 7。从表 7 中可以看出, Y 原子在体心立方晶格中, Y 和 W 的占位满足在对称性最高的结构中能量最低, 表明 W-Y 二元合金的固溶性很好, 可以在原子层面形成固溶体。图 3 给出了 W-Y 二元合金的 3 个单晶弹性常数随 Y 元素含量的变化趋势。从图 3 中可以看到, 弹性常数随钇元素含量的增加而成非单调性减弱。同时,  $C_{11}$  的变化最明显, 从 W 的 530.0 GPa 变化到  $W_8Y_8$  的 101.1 GPa, 这是描述立方晶体强度的重要弹性系数, 说明 W-Y 合金材料的强度随 Y 元素含量的增加将会明显减弱。

表 7 W-Y 二元合金的晶格常数(a)、晶胞体积(V)与优化后 Y 原子的占位情况

Table 7 Lattice constants (a), cell volumes (V) and placeholder of optimized Y atoms of W-Y binary alloys

Composition	a/nm	V/nm <sup>3</sup>	Optimized yttrium atom placeholder
$W_{16}$	0.31729	0.03194	-
$W_{15}Y_1$	0.32025	0.03284	Arbitrarily
$W_{14}Y_2$	0.32286	0.03365	(000), (0.5, 0.5, 0.5)
$W_{12}Y_4$	0.32966	0.03583	Fig.1
$W_8Y_8$	0.35063	0.04311	Evenly dispersed placeholder

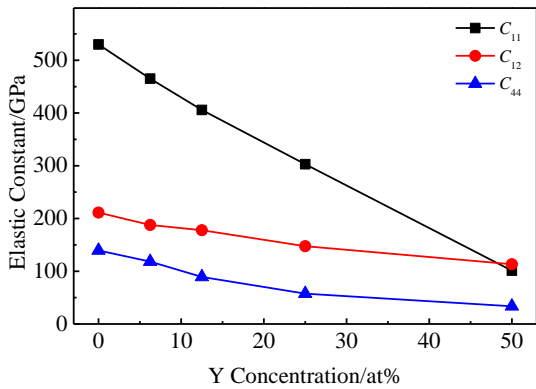


图 3 W-Y 二元合金的 3 个弹性常数随 Y 含量变化趋势

Fig.3 Three elastic constants of W-Y binary alloys as functions of Y concentration

根据上述的弹性常数,计算了 W-Y 二元合金在不同 Y 含量下的力学性能参量。固体材料的弹性模量包括体弹性模量 ( $B$ )、剪切模量 ( $G$ ) 以及杨氏模量 ( $E$ ), 反映了材料抵抗形变的难易程度<sup>[34]</sup>。图 4 给出了  $B$ 、 $G$  和  $E$  随 Y 含量增加的变化趋势图。计算出 W 的体弹性模量为 317.44 GPa, 这与实验值 314.33 GPa 吻合的非常好<sup>[30]</sup>。当 W 中加入 Y 时, 体弹性模量慢慢减小, 当 Y 的含量达到 25% 时, W-Y 合金的体弹性模量降低到 199.4 GPa。杨氏模量和剪切模量的变化更明显: 杨氏模量从纯 W 的 383.0 GPa 降低到含 25%Y 的 W-Y 合金的 177.4 GPa, 杨氏模量仅仅不到纯 W 的 1/2; 而剪切模量从纯 W 的 147.4 GPa 降低到含 25%Y 的 W-Y 合金的 65.6 GPa, 降低幅度也超过了 1/2。这些数据表明, W-Y 合金的机械强度相比纯 W 而言差了很多。

不过, W-Y 合金的延展性却能够获得明显提高。

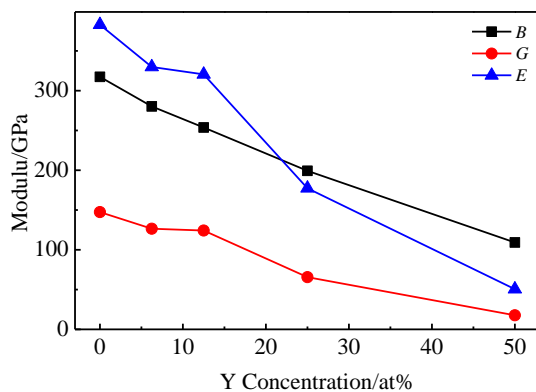


图 4 W-Y 二元合金的体弹性模量、剪切模量、杨氏模量随 Y 含量的变化

Fig.4 Bulk modulus ( $B$ ), shear modulus ( $G$ ) and Young's modulus ( $E$ ) of W-Y binary alloys as functions of Y concentration

Pugh 通过大量实验数据总结提出了一个判断材料延展性/脆性的经验判据: 通过体模量和剪切模量的比值 ( $B/G$ ) 可经验性地判断一个材料的延展性或脆性, 当材料体模量和剪切模量的比值大于 1.75, 材料具有延展性行为, 体现为韧性, 且数值越大, 材料的延展性越好; 反之, 当材料体模量和剪切模量的比值小于 1.75, 材料具有脆性特性, 且偏离 1.75 的数值越大, 材料的脆性程度越严重<sup>[35]</sup>。从图 5 可以看到, 不同 Y 元素含量的 W-Y 二元合金的体模量与剪切模量的比值 ( $B/G$ ) 均大于 1.75, W-Y 二元合金均表现为一定的延展性, 与实验符合的很好<sup>[9]</sup>。随着 Y 元素含量的增加 W-Y 二元合金体模量与剪切模量的比值 ( $B/G$ ) 整体上表现为增加的趋势。当 Y 元素含量大于 12.5% 时,  $B/G$  比值出现明显增大。另外, 通过材料的泊松比  $\nu$  也可以判断材料的韧性。图 5 同时给出了 W-Y 二元合金的泊松比随 Y 含量的变化趋势。同样可以看出, W-Y 二元合金材料的泊松比 ( $\nu$ ) 在 Y 元素含量大于 12.5% 时开始明显增加, 表明 Y 含量大于 12.5% 时, 可以明显提高合金材料的韧性。

柯西压力 ( $C'$ ) 是判断材料金属键和共价键的一个经验判据: 当柯西压力大于 0 时, 材料具有金属键结合方式, 具有较好的延展性。对于强金属键的材料, 柯西压力为正, 且数值越大, 表示金属键越强, 材料的延展性越好; 反之, 当柯西压力小于 0 时, 材料具有共价键结合方式, 力学上表现为脆性<sup>[36]</sup>。图 6 给出了 W-Y 二元合金的柯西压力随 Y 含量的变化。从图中可以看出, 不同 Y 含量的 W-Y 二元合金的柯西压力均大于 0, 表明 W-Y 二元合金中的成键为金属键。随着 Y 元素含量的增加, W-Y 二元合金柯西压力表现为先下降而后上升的趋势, 表示合金的金属性先减弱而后增强。当 Y 元素含量为 25% 时, W-Y 二元合金的柯西压力达到最大值 45.0 GPa, 此时材料的延展性也表现的非常好。当 Y 元素含量进一步增加时, 金属键强度反而减弱, 其柯西压

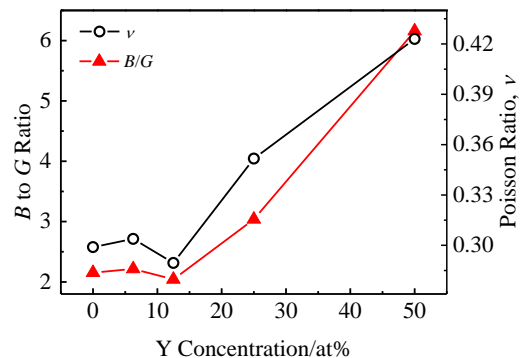


图 5 W-Y 二元合金的 B/G 比和泊松比随 Y 含量的变化

Fig.5  $B/G$  ratio and Poisson's ratio ( $\nu$ ) of W-Y binary alloys as functions of Y concentration

力相应降为 39.8 GPa, 这与上述讨论合金在 50% 时固溶性变弱表现一致。当材料中的 Y 含量达到 50% 时, W-Y 键的强度开始减弱, 结合能减小, 晶格常数呈现出非线性增加。

为了揭示  $W_{1-x}Y_x$  合金具有不同弹性性质的物理本质, 计算了  $W_{1-x}Y_x$  合金的电子结构并作出了其投影到不同金属原子分态密度分布(PDOS), 如图 7 所示。W-Y 合金的态密度主要由 W 原子的 5d 态和 Y 原子的 4d 态杂化而成, 并且在 DOS 靠近 Fermi 面的低能区域, W 原子的 5d 态的贡献占主导地位。所有合金均表现为金属性。同时, 随 Y 含量的增加, 费米能级由右向左移动, 开始由波峰走向波谷, 后由波谷走向波峰, 表示合金的金属性先减弱而后增强, 这正好与图 6 柯西压力 ( $C'$ ) 结果一致。这种电子结构性质的变化完全是由  $W_{1-x}Y_x$  合金价电子总数的变化所决定的。由于上述电子结构的差异, 决定

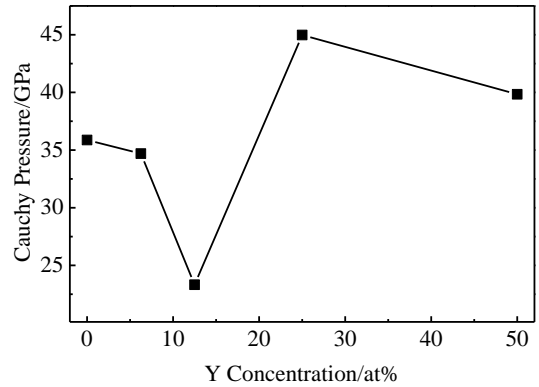


图 6 W-Y 二元合金的柯西压力随 Y 含量的变化

Fig.6 Cauchy pressure ( $C'$ ) of W-Y binary alloys as a function of Y concentration

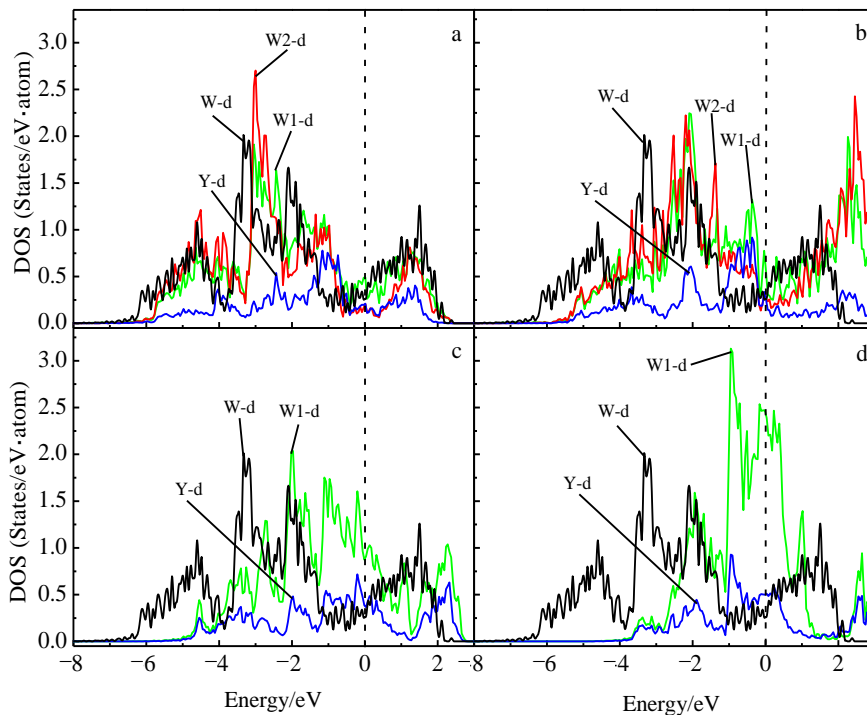


图 7  $W_{1-x}Y_x$  合金中金属原子的分态密度

Fig.7 Density of states (DOS) of bcc-based  $W_{1-x}Y_x$ : (a)  $W_{15}Y_1$ , (b)  $W_{14}Y_2$ , (c)  $W_{12}Y_4$ , and (d)  $W_8Y_8$  (The energy is with respect to the Fermi level.

In the figure, W1-d, W2-d, Y-d and W-d represent Y nearest neighbor a W atom, Y farthest a W atom, a Y atom in the alloys and a pure W atom, respectively)

了 W-Y 合金的弹性模量随 Y 含量的增加而下降。

### 3 结 论

1) 采用第一性原理方法主要研究了钇的含量对 W-Y 二元合金力学性质的影响。W-Y 合金的晶格常数和晶胞体积随 Y 的含量的增加而增大, 在 Y 含量小于 25%

时, 由于原子的固溶度高, 晶格常数变化主要由于 Y 的原子半径增大引起, 因而晶格常数基本上是线性增加的。W-Y 合金的体弹性模量、杨氏模量以及剪切模量都表现为随 Y 的含量的增加而减小, 表明 Y 的合金化明显减弱了 W 的机械强度。但是, Y 合金材料的延展性和韧性随钇元素含量的增加而得到加强。

2) 基于力学特性  $B/G$ 、泊松比  $\nu$  和柯西压力  $C'$  等数据的分析表明, 25% 的 Y 可有效改善 W-Y 合金的延展性。通过态密度分析, W-Y 合金的金属性随 Y 含量的增加先减弱而后增强。

3) 本研究计算的结果对研究钨基合金的力学性质有着深刻的指导意义, 为合成具有应用价值的 W-Y 合金提供了理论依据。

#### 参考文献 References

- [1] Tanabe T, Noda N, Nakamura H. *Journal of Nuclear Materials*[J], 1992, 196-198: 11
- [2] Roedig M, Kuehnlein W, Linke J. *Fusion Engineering and Design* [J], 2002, 61-62: 135
- [3] Davis J W, Slattery K T, Driemeyer D E et al. *Journal of Nuclear Materials*[J], 1996, 233-237(1): 604
- [4] Smid I, Akiba M, Vieider G et al. *Journal of Nuclear Materials*[J], 1998, 258-263(1): 160
- [5] Davis J W, Barabash V R, Makhankov A et al. *Journal of Nuclear Materials*[J], 1998, 258-263(1): 308
- [6] Ekman M, Persson K, Grimvall G. *Journal of Nuclear Materials*[J], 2000, 278(2-3): 273
- [7] Barabash V, Federici G, Linke J et al. *Journal of Nuclear Materials*[J], 2003, 313-316: 42
- [8] Rieth M, Dafferner B. *Journal of Nuclear Materials*[J], 2005, 342(1-3): 20
- [9] Avettand-Fenoel M N, Taillard R, Dhers J et al. *International Journal of Refractory Metals & Hard Materials*[J], 2003, 21(3-4): 205
- [10] Veleva L, Oksiuta Z, Vogt U et al. *Fusion Engineering and Design*[J], 2009, 84(7-11): 1920
- [11] Veleva L, Schäublin R, Plocinski T et al. *Fusion Engineering and Design*[J], 2011, 86(9-11): 2450
- [12] Shi S Q, Tanaka S, Kohyama M. *Phys Rev B*[J], 2007, 76(7): 075 431
- [13] Shang S L, Hector Louis G J, Shi S Q et al. *Acta Mater*[J], 2012, 60(13-14): 5204
- [14] Ouyang C Y, Du Y L, Shi S Q et al. *Phys Lett A*[J], 2009, 373(31): 2796
- [15] Tang Y H, Zhang H, Cui L X et al. *Phys Rev B*[J], 2010, 82: 125 104
- [16] Zhang H, Tang Y H, Shen J Q et al. *Appl Phys A-Mater Sci & Process*[J], 2011, 104(2): 529
- [17] Shi S Q, Lu P, Liu Z Y et al. *J Am Chem Soc*[J], 2012, 134(37): 15 476
- [18] Shi S Q, Qi Y, Li H et al. *J Phys Chem C*[J], 2013, 117(17): 8579
- [19] Kresse G, Furthmüller J. *Physical Review B*[J], 1996, 54(16): 11 169
- [20] Shi S Q, Zhang H, Ke X Z et al. *Phys Lett A*[J], 2009, 373(44): 4096
- [21] Perdew J P, Wang Y. *Physical Review B*[J], 1986, 33(12): 8800
- [22] Xu Bo(徐波), Pan Bicaï(潘必才). *Acta Physica Sinica(物理学报)*[J], 2008, 57(10): 6526
- [23] Rao Jianping(饶建平), Ouyang Chuying(欧阳楚英), Lei Minsheng(雷敏生) et al. *Acta Physica Sinica(物理学报)*[J], 2012, 61(4): 47 105
- [24] Wallace D C. *Solid State Physics*[J], 1970, 25: 301
- [25] Zhao J, Winey J, Gupta Y. *Physical Review B*[J], 2007, 75(9): 094 105
- [26] Voigt W. *Annalen der Physik(Leipzig)*[J], 1889, 38: 573
- [27] Reuss A. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* [J], 1929, 9: 49
- [28] Hill R. *Proceedings of the Physical Society Section A*[J], 1952, 65: 349
- [29] Hill R. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*[J], 1963, 11: 357
- [30] Söderlind P, Eriksson O, Wills J M et al. *Physical Review B*[J], 1993, 48(9): 5844
- [31] Einarsdotter K, Sadigh B, Grimvall G et al. *Physics Review Letters*[J], 1997, 79: 2073
- [32] Grosshans W A, Holzapfel W B. *Physical Review B*[J], 1992, 45(10): 5171
- [33] Mehl M J, Papaconstantopoulos D A. *Physical Review B*[J], 1996, 54(7): 4519
- [34] Meradji H, Drablia S, Ghemid S et al. *Physica Status Solidi (b)* [J], 2004, 241(13): 2881
- [35] Pugh S F. *Philosophical Magazine A*[J], 1954, 45: 823
- [36] Pettifor D G. *Materials Science and Technology*[J], 1992, 8: 345

## Mechanical Properties of W-Y Alloys by First-Principles Calculations

Jiang Diyou<sup>1,2</sup>, Liu Sanqiu<sup>1</sup>

(1. Nanchang University, Nanchang 330047, China)

(2. Jiangxi University of Technology, Nanchang 330098, China)

**Abstract:** The effect of yttrium contents on the fundamental mechanical properties of W-Y alloys was studied by the first-principles method based on the density functional theory. The mechanical constants of  $W_{1-x}Y_x$  ( $x=0.0625, 0.125, 0.25, 0.5$ ) alloys were calculated in solid solution model. According to the calculated mechanical constants, the mechanical properties were analyzed. Results show that the elastic constants, bulk modulus, Young's modulus and shear modulus of W-Y alloys decrease non-monotonically with the increase of Y concentration, indicating that the doped Y decreases the mechanical strength of W materials. Based on the mechanical characteristics, such as  $B/G$ , Poisson's ratio  $\nu$  and Cauchy pressure  $C'$ , the ductility and toughness of the W-Y alloys are significantly improved with the increase of Y concentration. When the Y contents reaches 0.25, the ductility and the deformation resistance of W-Y alloys are largely enhanced. Through the analysis of the density of states, W-Y alloy metallic properties decrease and then increase as the concentration of Y increases.

**Key words:** first wall material; W-Y alloy; mechanical properties; first-principles; density function theory

---

Corresponding author: Liu Sanqiu, Ph. D., Professor, Department of Materials Science and Engineering & Department of Physics, Nanchang University, Nanchang 330047, P. R. China, E-mail: sqlgroup@ncu.edu.cn