

基于第一性原理计算 V 元素对高熵合金 Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 的组织及性能影响

李远, 杨忠, 段洪波, 杨伟, 吴超, 李建平

(西安工业大学, 陕西 西安 710021)

摘要: 采用第一性密度泛函理论, 结合虚拟晶体近似 (VCA) 的方法建立晶体结构模型, 开展高熵合金 Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 的结构性能、弹性性能及基态能量计算。根据能量最低原理可确定, Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 高熵合金的最优 K-point 值为 12×12×12, 截断能为 1000 eV。计算结果表明: Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 系高熵合金均可生成 fcc+bcc 结构, fcc 的力学稳定性明显优于 bcc 的力学稳定性。V 元素含量由 0.2 增至 0.8 时, bcc 点阵常数降低约 4%, fcc 晶格常数降低约 6%。随着 V 元素的增加, Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 合金的体模量、剪切模量逐渐减小。V 元素含量为 0.8 时, bcc 结构的泊松比异常增加, 进一步说明了随着 V 元素含量的增加, 材料的塑性变形能力降低, 材料的脆性增加。经试验验证, Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 系高熵合金均由 fcc 和 bcc 组成, 组织形貌均为两相组织; V 元素含量由 0.2 升至 0.8 时, 延伸率降低约 85%, 该试验结果与第一性原理计算的结果较为吻合。

关键词: 第一性原理; 高熵合金; 稳定性; Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi

中图分类号: TG139

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2024)01-0095-07

传统的合金设计几乎都是以 1 种或 2 种金属元素为基础, 再根据特定的机械、物理或者化学特性添加少量的其他金属或非金属元素。经过多年的开发和研究, 传统合金的性能已经达到了瓶颈。直到 2004 年, 高熵合金(HEA)这一全新的设计理念被多位学者相继提出, 引发了材料领域的轰动。近年来, 高熵合金在结构、性能以及制备等方面都取得了重大的突破^[1-5]。

然而, 对于高熵合金的研究主要集中在试验室条件下组织及性能的测试, 关于理论研究较少。基于第一性原理中的密度泛函理论, 利用 MaterialsStudio 平台下的 CASTEP 软件包, 利用 VCA 虚拟晶格近似方式是研究材料某些宏观特性的有效手段。王兰馨^[6]等采用 VCA 法计算了 Al_xFeTiCrZnCu 合金的结构特征、弹性性能和热稳定性。密度随 Al 元素含量的增加而降低, 晶格常数减小, 系统的热力学稳定性有所下降。常超^[7]等采用第一性原理计算了 FeAlNiCrMn 高熵合金在不同压力下的晶格常数、结合能及态密度, 并解释了随压力的增加合金逐渐由各向异性向各向同性转变的过程。Liao 等^[8]采用第一性原理方法研究了高熵合金 NbTiVZr 的结构稳定性、弹性和热力学性质, 发现该合金相比传统 Ni 基合金具有更低的热膨胀系数。

CoCrFeNi 系高熵合金在制备过程中易形成成分均匀的单一固溶体结构, 受到众多学者的广泛关注和深入研究^[9-13]。与此同时, AlCoVFeNi 系高熵合金作为双相高熵合金, 发展前景广阔。Ye^[14]等开展轧制变形对 Al_{0.25}CoVFeNi 高熵合金组织及性能的影响规律研究, 探明了该合金实现强韧性的匹配研究。Li^[15]等研究 Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 高熵合金的铸态组织及力学性能, 提出该合金是典型的双相组织。

近年来, 为了进一步了解高熵合金中各组成元素对合金强化作用的规律和机制, 基于密度泛函理论的第一性原理计算成为一种重要的方法^[16-18]。尽管目前有大量学者在进行高熵合金的相关第一性原理计算, 但少有学者通过试验手段对第一性原理计算的相关结果进行验证。因此, 有必要深入开展高熵合金第一性原理计算及试验验证工作, 为高熵合金的设计开发提供新的思路及理论依据。本研究采用第一性原理计算 Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 高熵合金的相关结构及性质, 并结合试验进行验证。

1 计算及验证方法

第一性原理计算是基于密度泛函理论, 利用

收稿日期: 2023-05-29

基金项目: 国家自然科学基金 (51705391); 西安工业大学优秀学位论文培育基金 (YB202206)

作者简介: 李远, 男, 1992 年生, 博士, 西安工业大学, 陕西 西安 710021, E-mail: liyuan@st.xatu.edu.cn

Materialstudio 中的 CASTEP 程序包, 对 $\text{Al}_{10.4}\text{Co}_{0.5}\text{V}_x\text{FeNi}$ ($x=0.2, 0.4, 0.6, 0.8$, 合金简称 $\text{V}0.2, \text{V}0.4, \text{V}0.6, \text{V}0.8$) 系高熵合金进行第一性原理计算。为了避免在使用 VCA 方法建模过程中产生所谓的“虚拟原子”或长程结构中所累积的误差, 在单个晶胞的每个原子中采用虚拟晶体近似的方法建立模型, 并对其结构进行优化。分别构建 $\text{Al}_{10.4}\text{Co}_{0.5}\text{V}_x\text{FeNi}$ 系高熵合金的 bcc 和 fcc 结构模型 (见图 1), 电子间的交换相关函数通过 GGA-PBE 进行处理, 采用自洽迭代(SCF)方法进行计算, 电子弛豫用 Pulay 密度混合方案处理, 晶胞模型的几何优化采用 BFG 算法^[19-21]。

为保证计算的精确及准确性, 对 K-point 和截断能进行收敛性计算 (见图 2), 可以看出, K-point 为 $12 \times 12 \times 12$ 且截断能为 1000 eV 时, 基态总能量趋于稳定。基于以上设置, 对 bcc 的单质 Fe 和 fcc 的单质 Ni 的晶格参数进行计算, 分别为 0.2758 和 0.3513 nm, 与文献报道 0.267 和 0.353 nm 相差较小^[22]。由此可见, 所选取的计算设置较为合理。第一性原理计算完成后, 采用 Pandat 相图计算软件计算 $\text{Al}_{10.4}\text{Co}_{0.5}\text{V}_x\text{FeNi}$ 系高熵合金的相组成并采用电弧熔炼炉制备目标合金, 进一步表征合金的显微组织和力学性能, 验证第一性原理计算的结果。

2 结果与讨论

2.1 稳定性分析

基于以上设置条件, 本研究对 $\text{Al}_{10.4}\text{Co}_{0.5}\text{V}_x\text{FeNi}$ 系高熵合金的晶格结构进行优化, 优化后的晶格常数和基态总能量见图 3, 具体数值见表 1。可以看出, fcc 的晶格常数均大于 bcc 的晶格常数, fcc 和 bcc 的基态总能量均为负值。随着 V 元素的增加, 晶格常数和基态总能量均降低。V 元素含量由 0.2 增至 0.8 时, bcc 点阵常数降低约 4%, fcc 晶格常数降低约 6%。晶体结构的稳定性与其基态能量密切相关, 基态能量越低,

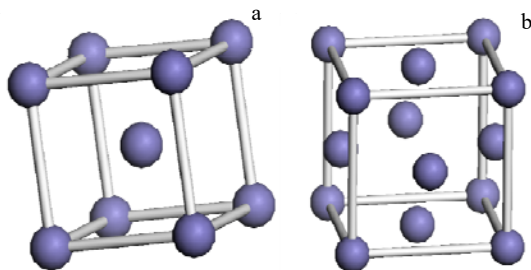


图 1 $\text{Al}_{10.4}\text{Co}_{0.5}\text{V}_x\text{FeNi}$ 系高熵合金的 bcc 和 fcc 结构模型
Fig.1 bcc (a) and fcc (b) structure models of $\text{Al}_{10.4}\text{Co}_{0.5}\text{V}_x\text{FeNi}$ high entropy alloys

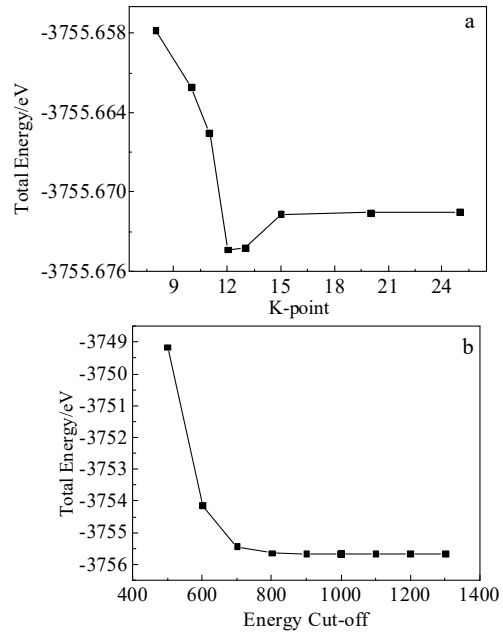


图 2 $\text{Al}_{10.4}\text{Co}_{0.5}\text{V}0.2\text{FeNi}$ 高熵合金基态总能量与 K-point 和截断能的关系

Fig.2 Relationship of total energy of $\text{Al}_{10.4}\text{Co}_{0.5}\text{V}0.2\text{FeNi}$ high entropy alloy with K-point (a), and energy cut-off (b)

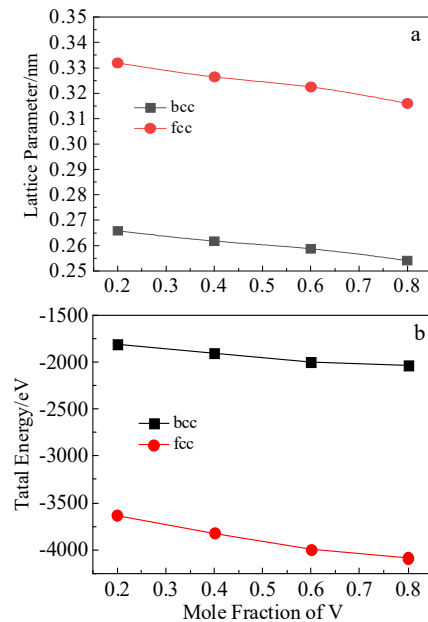


图 3 不同 V 元素含量的 $\text{Al}_{10.4}\text{Co}_{0.5}\text{V}_x\text{FeNi}$ 系高熵合金的晶格常数和基态总能量

Fig.3 Lattice parameters (a) and total energy (b) of $\text{Al}_{10.4}\text{Co}_{0.5}\text{V}_x\text{FeNi}$ high entropy alloys with different contents of element V

表 1 Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi(x=0.2,0.4,0.6,0.8)系高熵合金晶格常数和基态总能量

Table 1 Lattice constant and total ground state energy of Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi(x=0.2,0.4, 0.6, 0.8) high entropy alloys

Alloy	Lattice parameter/nm		Total energy/eV	
	bcc	fcc	bcc	fcc
V0.2	0.2658	0.3319	-1814.88	-3632.20
V0.4	0.2617	0.3264	-1910.14	-3824.14
V0.6	0.2587	0.3224	-1995.37	-3995.17
V0.8	0.2540	0.3159	-2040.79	-4086.46

晶体内部原子越稳定。随着 V 元素的增加，Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 系高熵合金原子处于最低能级时电子在离核最近的轨道上运动的定态，系统的稳定性越高，可以生成 fcc 和 bcc 立方结构。

2.2 力学性能分析

Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 高熵合金的晶格结构优化后，采用第一性原理密度泛函理论计算了其弹性常数 C_{ij} 、杨氏模量 E 、体积弹性模量 K 及泊松比 ν 。表 2 中列出不同 V 元素含量 Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 高熵合金的弹性常数 C_{ij} ，由于 Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 高熵合金的立方晶体结构，因此弹性常数只有 C_{11} 、 C_{12} 及 C_{44} 。弹性常数决定了材料的力学稳定性，根据立方晶体的力学稳定性判据： $C_{11}>0$ ， $C_{44}>0$ ， $C_{11}-C_{12}>0$ ， $C_{11}+2C_{12}>0$ 。可以看出，随着 V 元素的增加，合金力学稳定性均有所降低。bcc 均不符合力学稳定性条件，V 元素含量介于 0.2~0.6 力学稳定性条件；V 元素含量为 0.8 时， $C_{44}<0$ ，合金中 fcc 结构不符合力学稳定性。进一步说明，V 元素会影响 fcc 的力学稳定性，但对 bcc 结构的力学稳定性无关。

利用 Voigt-Reuss-Hill 近似的方法计算合金的体模量 B 、弹性模量 E 、泊松比 ν 和剪切模量 G 等。

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

$$E = \frac{9BG}{3B + G} \quad (2)$$

表 2 Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 高熵合金弹性常数 C_{ij}

Table 2 Elastic constants C_{ij} of Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi high entropy alloy

Alloy	C_{11}		C_{12}		C_{44}	
	bcc	fcc	bcc	fcc	bcc	fcc
V0.2	-67.26	270.09	164.67	55.57	108.95	163.78
V0.4	-105.36	238.52	150.03	27.82	82.29	134.56
V0.6	-137.29	215.31	136.36	6.95	55.09	96.19
V0.8	-179.86	154.21	108.49	-23.99	-3.20	34.93

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

剪切模量 G 取 Reuss 近似和 Voigt 近似平均值：

$$G_R = \frac{5(C_{11} - C_{12})C_{44}}{4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})} \quad (4)$$

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

$$G = \frac{G_V + G_R}{2} \quad (6)$$

金属材料的脆/韧性取决于泊松比。金属材料的泊松比小于 1/3 时可视其为韧性材料，其余为脆性材料。Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 系高熵合金的弹性模量 E 、体模量 B 、剪切模量 G 和泊松比 ν 见表 3。材料的模量表明了材料抵抗外界变形的能力，其值越大，说明抵抗变形的能力就越强，刚度也越大。随着 V 元素含量增加，Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 合金的体模量、剪切模量逐渐减小，材料抵抗变形的能力逐渐减小。同时，bcc 结构的泊松比异常增加，进一步说明了随着 V 元素含量的增加，材料的塑性变形能力降低，材料的脆性增加。

表 3 Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 系高熵合金的弹性模量 E 、体模量 B 、剪切模量 G 和泊松比 ν

Table 3 Elastic modulus E , bulk modulus B , shear modulus G and Poisson's ratio ν of Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi high entropy alloys

Alloy	E		B		G		ν	
	bcc	fcc	bcc	fcc	bcc	fcc	bcc	fcc
V0.2	385.7	304.3	87.3	127.0	252.4	138.2	-0.23	0.101
V0.4	222.0	258.7	64.9	98.0	119.3	122.0	-0.07	0.060
V0.6	112.6	207.8	45.1	76.4	51.9	99.3	0.08	0.047
V0.8	-769.7	103.8	12.3	35.4	-32.4	51.3	10.86	0.011

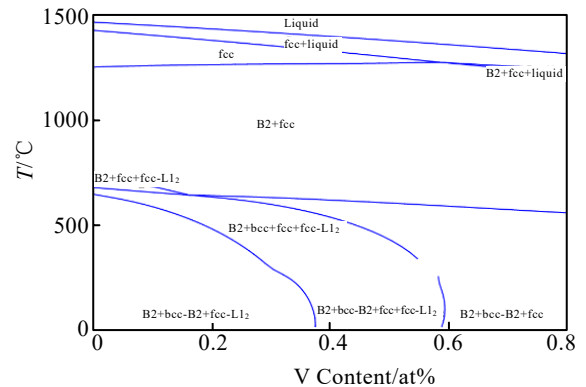


图 4 Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 高熵合金相图计算

Fig.4 Phase diagram calculation of Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi alloy

2.3 结果验证及分析

图 4 为 Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 高熵合金相图计算结果。经计算发现, 该合金体系是由 fcc(fcc-L₁₂)和 bcc(bcc-B₂)组成的双相组织。合金凝固过程中, 液相中先析出 fcc 相, 随后继续发生包晶反应。当 V 元素含量小于 0.6, 包晶反应产物仍为 fcc 相; 含量大于 0.6, 组织为 B₂ 结构。凝固温度接近 1000 °C, 合金为典型的 fcc+B₂ 相组织。室温下, 随着 V 含量的增加, 相组成由 B₂+bcc-B₂+fcc-L₁₂ 转变为 B₂+bcc-B₂+fcc+fcc-L₁₂。

采用真空电弧熔炼制备 Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 系高熵合金, 为确保合金均匀性, 每块合金锭熔炼 4~5 遍, 并结合 XRD(X 射线衍射仪)、SEM(扫描电子显微镜)、TEM(透射电子显微镜)和拉伸试验机进行表征及验证。

图 5 为铸态 Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 高熵合金的 XRD 图谱。由图可以看出, Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 合金均由 fcc 和 bcc 两相组成。结合 XRD 图谱和 PDF 卡进行对比分析, 发现 AlCo、AlNi、CoFe、FeNi 为 bcc 晶体结构, 晶格参数相似; Fe₂AlV 和 AlFe₃ 均为 fcc 晶体结构, 晶格参数相似, 可以相互固溶。XRD 谱图衍射峰的叠加主要是由调幅分解引起的, 这在高熵合金领域常有报道。因此, 很难确定 fcc 和 bcc 相的成分。此外, V 元素的加入量增加使材料中 fcc 峰衍射峰逐渐降低, bcc 衍射峰较为明显。以 fcc(111)为例, 随着 V 元素含量的增加, fcc(111)衍射峰变化较为明显。当 V 元素含量为 0~0.6 时, 随着 V 元素的增加, 合金中 fcc(111)均出现衍射峰; 当 V 元素为 0.8 时, 衍射峰消失, 该现象说明 V 元素会降低 fcc 的稳定性。初步分析, V 元素加入会导致材料 bcc 含量增加, fcc 含量降低。铸态合金具有明显的择优取向, V_{0.4} 合金中 fcc 在(111)面衍射峰较小, (200)面衍射峰强度较高。fcc 与 bcc 相均为晶体, 该结果与第一性原理计算结果较为吻合。

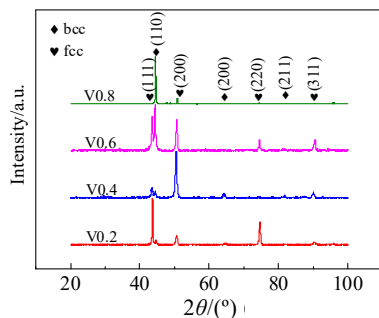


图 5 Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 系高熵合金 XRD 图谱

Fig. 5 XRD patterns of Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi high entropy alloys

图 6 为 Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 系高熵合金扫描显微组织, 可以看出, 随着 V 元素的增加, 微观组织均为两相组织, 形貌由枝晶状(枝晶+枝晶间)转变为均匀分布两相, 最终转变为 bcc 基体+fcc 第二相。Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.2}FeNi 和 Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.4}FeNi 合金先析出具有发达枝晶的 fcc 相, 随着凝固温度降低在枝晶间生成 bcc 相。EDS 成分分析结果见表 4, 可以看出, 枝晶相富含 V、Fe、Co 元素, 枝晶间富含 Al、Ni 元素。枝晶间 Al 含量明显高于枝晶内 Al 含量, 该现象可以解释为各元素熔点的差异促进了合金的非平衡凝固。在凝固过程中, 溶质(V, Fe, Co)含量较高的区域 A(由于成分波动)先凝固并形成枝晶, 而熔点较低的 Al 元素则从这些区域排斥形成枝晶间相。在 Fe₂Ni₂CrMox 高熵合金的研究中也报道了类似的现象^[23]。同时, 由于 Ni-Al 负混合焓较大, NiAl_x 相容易析出, Al 在 AlCoVFeNi 体系中与其他元素的负混合焓最大, 这意味着 Al 可以吸引 Fe、Co、V 和 Ni 元素形成 NiAl 型 bcc-B₂ 相。Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.6}FeNi 合金具有共晶组织的特征, 液相中析出少量 fcc 相, 随后发生共晶反应, 生成均匀分布的两相组织; Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.8}FeNi 为 bcc 相为主的合金, SEM 结果与 XRD 结果保持一致。结合 SEM、EDS 和 XRD 结果, fcc 相为富 FeV 相, bcc 相为富 NiAl 相。

图 7 为 Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.4}FeNi 和 Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.6}FeNi 高熵合金透射电镜微观形貌及衍射图谱。从合金基体和第二相的形貌和衍射图谱可以看出, Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.4}FeNi 和 Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.6}FeNi 均为

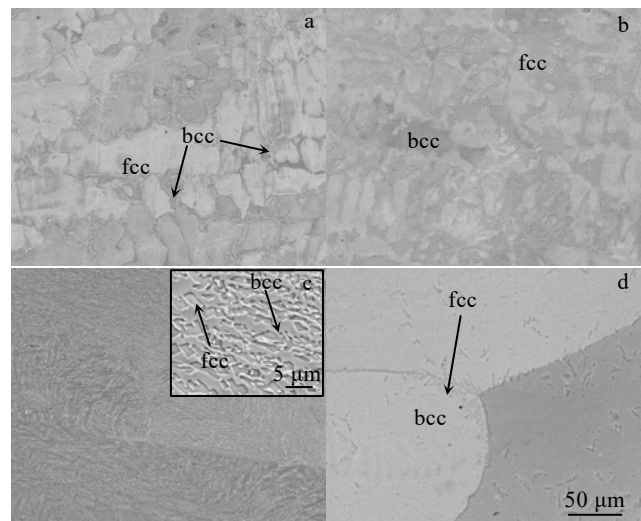


图 6 Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 系高熵合金微观组织

Fig.6 Microstructures of Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi high entropy alloys: (a) Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.2}FeNi, (b) Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.4}FeNi, (c) Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.6}FeNi, and (d) Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.8}FeNi

表 4 Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.2}FeNi 和 Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.4}FeNi 高熵合金 EDS 成分分析结果

Table 4 EDS results for the Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.2}FeNi and Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.4}FeNi alloys

Element	Al _{0.4} Co _{0.5} V _{0.2} FeNi		Al _{0.4} Co _{0.5} V _{0.4} FeNi	
	fcc	bcc	fcc	bcc
Al	7.83	18.27	6.94	13.99
V	6.84	5.77	14.34	12.20
Fe	36.22	24.27	31.81	26.40
Co	17.60	15.07	16.70	14.97
Ni	31.52	36.61	30.22	32.44

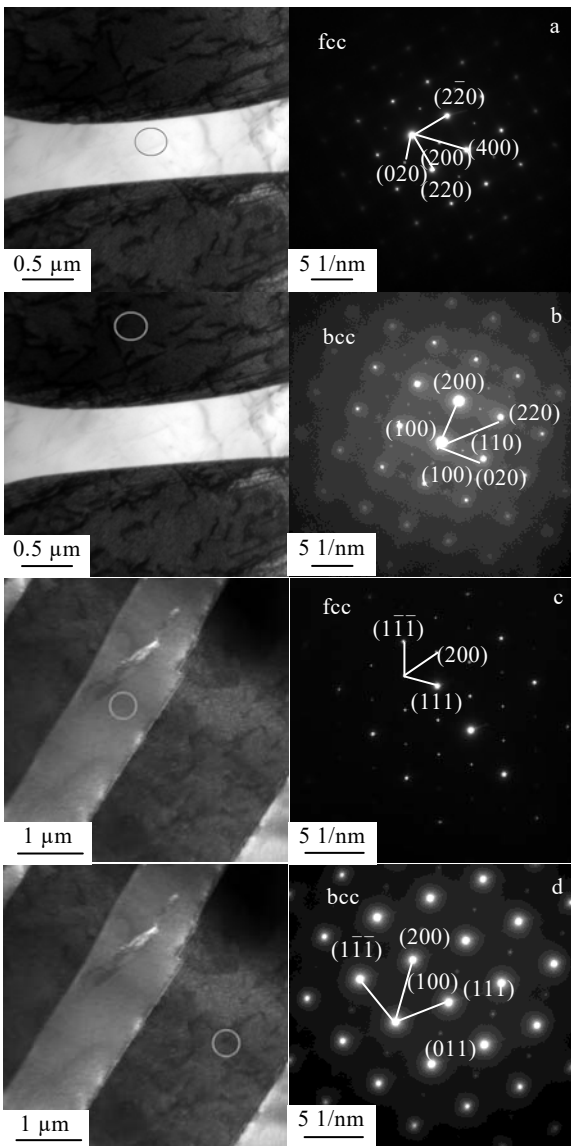


图 7 Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.4}FeNi 和 Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.6}FeNi 高熵合金透射电镜微观形貌及 SAED 图谱

Fig.7 TEM images and SAED patterns of the Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.4}FeNi (a, b) and Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.6}FeNi (c, d) high entropy alloys

fcc+bcc 两相组织。其中, Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.4}FeNi 合金中 fcc 和 bcc 均出现超点阵斑点, 为 fcc 和 bcc 的有序化结构, 两相之间的界面较为弯曲。Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.6}FeNi 合金符合共晶组织特征, bcc 仍为有序化结构, fcc 未出现超点阵斑。

图 8 为 Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 系高熵合金拉伸应力-应变曲线。可以看出, 随着 V 元素含量的增加, 其延伸率逐渐减小。V 元素含量由 0.2 升至 0.8 时, 抗拉强度先增加后降低; 延伸率降低约 85%。V_{0.2}、V_{0.4} 和 V_{0.6} 的抗拉强度约为 722、809 和 1128 MPa, 延伸率约为 34%、33% 和 28%; 材料的抗拉强度提高约 67%、88% 和 160%。可以看出, V 元素对材料强度的提高显著。V_{0.2} 和 V_{0.4} 以 fcc 相为基体, 且 fcc 相为典型的树枝晶, 因此对材料的强韧性有很大影响。然而, V_{0.6} 为典型的共晶组织, 较枝晶状组织的性能有所提高。V_{0.8} 材料抗拉强度和延伸率显著下降, 形成该结果的主要原因是组织以 bcc 相为主, 在变形过程中一旦出现裂纹会导致材料的塑性急剧下降。

图 9 为 Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 高熵合金拉伸断口。可以看出: 随着 V 元素含量的增加, 合金的断裂方式由韧性断裂转变为脆性断裂。V 元素含量为 0.2 和 0.4 时, 断口存在大量韧窝和少量解离台阶, 其断裂方式主要为韧性断裂。合金变形过程中, 材料的 fcc 的塑性较好形成韧窝, 由于 bcc-B2 相变形较小出现解离特征, 在 fcc 相边缘形成突起的边缘, 致使 Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.6}FeNi 断口出现典型的共晶组织断裂特征。Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.8}FeNi 的断口均为大尺寸的解理面, 为典型的河流状花样, 材料以脆性断裂为主。

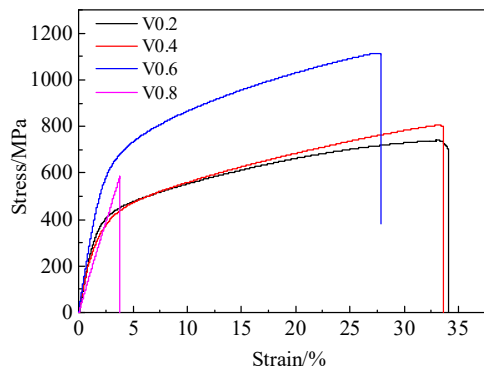


图 8 Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 系高熵合金拉伸应力-应变曲线
Fig.8 Tensile stress-strain curves of Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi high entropy alloys

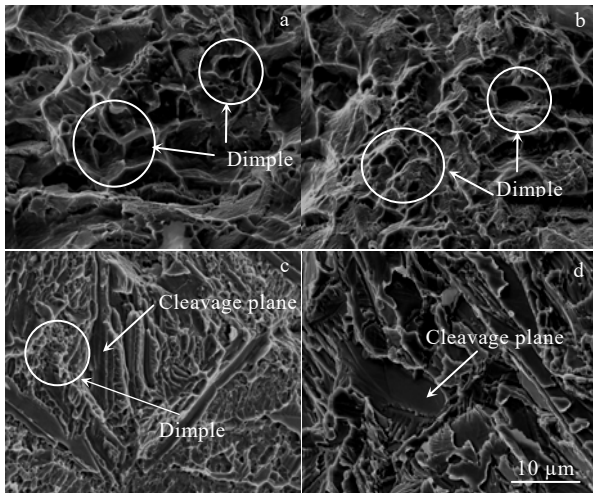


图 9 Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 系高熵合金拉伸断口

Fig.9 Fractured surfaces of the Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi high entropy alloys from tension tests: (a) Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.2}FeNi, (b) Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.4}FeNi, (c) Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.6}FeNi, and (d) Al_{0.4}Co_{0.5}V_{0.8}FeNi

3 结论

1) Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 高熵合金的最优 K-point 值为 12×12×12, 截断能为 1000 eV。Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 系高熵合金均可生成 fcc+bcc 结构, fcc 的力学稳定性明显优于 bcc 的力学稳定性。V 元素含量由 0.2 增至 0.8 时, bcc 点阵常数降低约 4%, fcc 晶格常数降低约 6%。

2) 随着 V 元素的增加, Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 合金的体模量、剪切模量逐渐减小。V 元素含量为 0.8 时, bcc 结构的泊松比异常增加, 进一步说明了随着 V 元素含量的增加, 材料的塑性变形能力降低, 材料的脆性增加。

3) Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi 系高熵合金均由 fcc 和 bcc 组成, 组织形貌由枝晶状(枝晶+枝晶间)转变为均匀分布的两相, 最终转变为基体+第二相组织; V 元素含量由 0.2 升至 0.8 时, 延伸率降低约 85%, 该试验结果与第一性原理计算的结果较为吻合。

参考文献 References

- [1] Yeh J W, Chen S K, Lin S J *et al. Adv Eng Mater*[J], 2004, 6: 299
 [2] Cantor B, Cha I, Knight P *et al. Mater Sci Eng A*[J], 2004, 375-377: 213
 [3] Chen X, Qi J Q, Sui Y W *et al. Mater Sci Eng A*[J], 2017, 681: 25

- [4] Wang G F, Liu Q, Yang J L *et al. Int J Refract Hard Met*[J], 2019, 84: 104988
 [5] Chang X J, Zeng M Q, Liu K L *et al. Advanced Materials*[J], 2020, 32(14): 1907226
 [6] Wang Lanxin(王兰馨), Yao Shan(姚山), Wen Bin(温斌) *et al. Materials Review(材料导报)*[J], 2019, 33: 356
 [7] Chang Chao(常超), Zhang Hui(张辉), Lai Yuan(来媛) *et al. Materials Review(材料导报)*[J], 2022, 36(14): 5
 [8] Liao M Q, Liu Y, Min L J *et al. Intermetallics*[J], 2018, 101: 152
 [9] Li Rongbin(李荣斌), Zou Chuanle(邹传乐), Zhang Zhixi(张志玺) *et al. Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程)*[J], 2023, 52(2): 667
 [10] Wang Huaikun(王怀坤), Wang Qiang(王强), Wang Zidi(王梓荻) *et al. Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程)*[J], 2023, 52(5): 1885
 [11] Zheng Wei(郑伟), Han Junzhao(韩俊昭), Duan Xing(段星) *et al. Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程)*[J], 2022, 51(9): 3230
 [12] Wang Yongxing(王永兴), Zhang Dongdong(张东东), Zhang Jinyu(张金钰) *et al. Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程)*[J], 2022, 51(2): 743
 [13] Wang Shi(王石), Wang Lin(王琳), Yin Xiaowei(尹晓伟) *et al. Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程)*[J], 2023, 52(4): 1483
 [14] Ye Z H, Li C W, Zheng M Y *et al. Mater Res Lett*[J], 2022, 10(11): 736
 [15] Li Y, Yang Z, Ma Z *et al. J Alloys Compd*[J], 2022, 911: 165043
 [16] Tsuru T, Lobzenko I, Wei D X *et al. Model Simul Mater Sc*[J], 2022, 30(2): 024003
 [17] Raghuraman V, Wang Y, Widom M *et al. Appl Phys Lett*[J], 2021, 119(12): 121903
 [18] Nong Z S, Wang H Y, Zhu J C *et al. Int J Miner*[J], 2020, 27(10): 1405
 [19] Bellaiche L, Vanderbilt D. *Am J Phys*[J], 2000, 61: 7877
 [20] Payne M C, Arias T A, Joannopoulos J D *et al. Rev Mod Phys*[J], 1992, 64: 1045
 [21] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M *et al. Phys Rev Lett*[J], 1998, 77(18): 3865
 [22] Leung T C, Chan C T, Harmon B N *et al. Phys Rev B Condens Matter*[J], 1991, 44(7): 2923
 [23] Jiao W, Jiang H, Qiao D *et al. Mater Chem Phys*[J], 2021, 260: 124175

Effects of V on Microstructure and Properties of Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi High-Entropy Alloys: First-Principles Study

Li Yuan, Yang Zhong, Duan Hongbo, Yang Wei, Wu Chao, Li Jianping

(Xi'an Technological University, Xi'an 710021, China)

Abstract: The first density functional theory and virtual crystal approximation (VCA) method were used to establish the crystal structure model in order to calculate the structural properties, elastic properties and heat of energy of high entropy alloy Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi. According to the minimum energy principle, the optimal K-point value of Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi high entropy alloy is 12×12×12, and the cutoff energy is 1000 eV. The results show that fcc+bcc structure can be formed by Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi alloy, and the mechanical stability of fcc is obviously better than that of bcc. When V content increases from 0.2 to 0.8, bcc lattice constant decreases by 4% and fcc lattice constant decreases by 6%. The bulk modulus and shear modulus of Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi alloy decrease with the increase in V content. When the content of element V is 0.8, the Poisson's ratio of bcc structure increases abnormally, which further indicates that with the increase in element V content, the plastic deformation capacity of materials decreases and the brittleness of materials increases. The experimental results show that Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi alloy is composed of fcc and bcc, and its microstructure is two-phase. When the content of element V increases from 0.2 to 0.8, the elongation decreases by ~85%. The experimental result is the same as that calculated by the first principles.

Key words: first principles; high entropy alloy; stability; Al_{0.4}Co_{0.5}V_xFeNi

Corresponding author: Li Jianping, Ph. D., Professor, Xi'an Technological University, Xi'an 710021, E-mail: lunwenljp123@163.com