

压力下金属化合物 $MgZn_2$ 和 Mg_2Y 力学性能的第一性原理研究

高岩^{1,2}, 毛萍莉¹, 刘正¹, 王峰¹

(1. 沈阳工业大学材料科学与工程学院, 辽宁沈阳 110870; 2. 沈阳师范大学实验教学中心, 辽宁沈阳 110034)

摘要: 为了研究压力对Mg-Zn-Y合金性能的影响, 利用基于密度泛函理论(DFT)的第一性原理方法, 研究了Mg-Zn-Y合金中金属化合物 $MgZn_2$ 和 Mg_2Y 在0~40 GPa的高压环境下的力学性能, 以及 $MgZn_2$ 和 Mg_2Y 的晶胞参数。结果表明, Mg_2Y 在高压环境下比 $MgZn_2$ 易于压缩。基于弹性常数 C_{ij} 的研究结果, 分析了 $MgZn_2$ 和 Mg_2Y 的体积模量(B)、剪切模量(G)、杨氏模量(E)、泊松比(ν)、各向异性指数(A)等力学参数。结果表明, $MgZn_2$ 和 Mg_2Y 在高压环境下均表现出塑性特征和延性特征以及良好的力学性能; 进一步分析表明 $MgZn_2$ 的抗剪切能力、抵抗外力变形能力、刚度等性能要优于 Mg_2Y 。随着压力的增加, $MgZn_2$ 的塑性和延性同时降低, 而 Mg_2Y 的塑性与延性呈现增强趋势。

关键词: Mg-Zn-Y合金; 第一性原理; 力学性能

作者简介:

高岩(1983-), 男, 博士生, 主要研究方向为镁合金的开发和应用。E-mail: gaoy@synu.edu.cn

通讯作者:

毛萍莉, 女, 教授, 博士, 博士生导师。电话: 024-25497131, E-mail: maopl@sut.edu.cn

中图分类号: TG146.2

文献标识码: A

文章编号: 1001-4977(2019)

07-0692-07

基金项目:

国家自然科学基金(51571145)。

收稿日期:

2019-01-03 收到初稿,

2019-02-21 收到修订稿。

镁是工业应用中最轻的金属材料, 密度仅为 1.74 g/cm^3 。一直以来镁合金凭借着其比强度高、刚性好、尺寸稳定性好、耐腐蚀及易于回收等众多优点, 广泛应用于国防、化工、电子等重要领域^[1-2]。尤其随着中国高铁运营的快速发展, 镁合金对高铁减重起到了关键作用。Zn与Y元素是重要的镁合金元素。价格低廉的Zn元素可以显著提高镁合金的抗蠕变性能及铸造性能^[3]。稀土元素Y可以起到细化晶粒的作用, 进而提高合金的综合力学性能^[4]。

研究表明, 三元合金Mg-Zn-Y具有独特的微观结构, 其力学性能也优于其他合金, 合金中主要含有 $MgZn_2$ 、 Mg_2Zn 、 Mg_2Y 、 MgY 等二元相, 以及W相 $Mg_3Zn_3Y_2$ 、I相 $Mg_3Zn_6Y_3$ 、X相(长周期6H、14H、18R、24R相)。Mg-Zn-Y合金的室温屈服强度高达610 MPa, 伸长率可达5%^[5]。如此高的室温屈服强度远高于商用钛合金和铝合金。针对高屈服强度的Mg-Zn-Y合金, 科研工作者已经进行了大量研究, 但是许多研究仅仅停留在0压力下的电子结构、结构稳定性、力学性能等, 很少有加压性能方面的试验研究。第一性原理加压试验是基于密度泛函理论(DFT)的一种研究方法, 可从微观角度分析化合物的各项性能随外界压力的变化情况。

由于外界压力对材料的结构参数和性能会产生重要影响。因此, 本研究选取Mg-Zn-Y合金中主要 AB_2 型化合物 $MgZn_2$ 和 Mg_2Y 作为研究对象。利用第一性原理方法, 研究压力对 $MgZn_2$ 和 Mg_2Y 结构稳定性和力学性能的影响。

1 试验材料与计算方法

$MgZn_2$ 和 Mg_2Y 合金化合物是Mg-Zn-Y合金中生成的主要二元化合物, 均为六方晶体结构, 结构如图1所示, 结构参数如表1所示。试验过程中在 $MgZn_2$ 和 Mg_2Y 晶胞的三个轴所在方向上同时施加压力, 在外界压力作用下 $MgZn_2$ 和 Mg_2Y 晶胞的结构发生了变化。

本研究的所有试验均采用密度泛函理论为基础的CASTEP软件包^[6]。交换关联选

用广义梯度近似GGA-PBE形式。计算过程中截断能设置为340 eV。采用 $6 \times 6 \times 4$ 和 $5 \times 5 \times 2$ 的K点网络分别对 MgZn_2 和 Mg_2Y 进行结构优化和拉伸后的能量计算。自洽场收敛精度为 1×10^{-6} eV/atom, 体系总能量为 1×10^{-5} eV/atom时达到收敛, 应力偏差为0.05 GPa。

2 结果及讨论

2.1 晶体结构和稳定性

MgZn_2 和 Mg_2Y 晶格参数(a/a_0 , c/c_0)、体积参数(V/V_0)随压力的变化曲线如图2所示, 其中 a_0 、 c_0 和 V_0 是0压力下的结构平衡参数。从图中可明显发现, MgZn_2 和 Mg_2Y 的 a/a_0 、 c/c_0 和 V/V_0 随着压力的增加而降低, 都呈现出先快速降低后趋于平缓的趋势。当外界压力很小时, 晶格长度与体积的变化很快, 说明材料的耐压缩性差。当外界压力逐渐增加时, 由于晶胞的原子排列更加致密, 此时材料变得难以压缩。从图中还可以发现, MgZn_2 和 Mg_2Y 的a轴的可压缩性均小于c轴, 表明沿着 $\{0001\}$ 面的成键强度弱于 $\{1000\}$ 面^[11]。当外界压力达到40 GPa时, MgZn_2 和 Mg_2Y 的a轴分别缩短了9.47%和12.24%, c轴分别缩短了11.60%和13.88%, 体积分别减小了29.50%和35.07%。由此可说明, 在0~40 GPa的压力下, Mg_2Y 对压力更加敏感,

Mg_2Y 比 MgZn_2 更加易于压缩。通过拟合图2中曲线可以得到各个参数与压力关系的二次方程, 见式(1)-(6), 进而可推算分析出任意压力下的各晶格参数。

$$a/a_0(\text{MgZn}_2)=0.997\ 96-0.003\ 73P+3.612\ 24 \times 10^{-5}P^2 \quad (1)$$

$$a/a_0(\text{Mg}_2\text{Y})=0.995\ 83-0.005\ 28P+5.376\ 67 \times 10^{-5}P^2 \quad (2)$$

$$c/c_0(\text{MgZn}_2)=0.997\ 55-0.004\ 17P+4.242\ 26 \times 10^{-5}P^2 \quad (3)$$

$$c/c_0(\text{Mg}_2\text{Y})=0.996\ 09-0.005\ 89P+6.460\ 91 \times 10^{-5}P^2 \quad (4)$$

$$V/V_0(\text{MgZn}_2)=0.992\ 71-0.011\ 09P+1.192\ 13 \times 10^{-4}P^2 \quad (5)$$

$$V/V_0(\text{Mg}_2\text{Y})=0.986\ 42-0.015\ 33P+1.778\ 19 \times 10^{-4}P^2 \quad (6)$$

2.2 力学性能

弹性常数是研究材料在外部应变下的力学性能的重要参数。基于弹性常数可以计算出材料的体积模量 B 、剪切模量 G 、杨氏模量 E 、泊松比 ν 和各向异性 A 等重要参数来深入研究材料的力学性能。 MgZn_2 和 Mg_2Y 属于六方晶体结构, 具有6个弹性常数 C_{11} 、 C_{12} 、 C_{13} 、 C_{33} 、 C_{44} 和 C_{66} , $C_{66}=(C_{11}-C_{12})/2$ 。计算求得的 MgZn_2 和 Mg_2Y 在0压力下的弹性常数值 C_{ij} 列于表2中, 均满足六方晶体结构的机械稳定标准: $C_{11} > 0$, $C_{11}-C_{12} > 0$, $C_{44} > 0$, $(C_{11}+C_{12})C_{33}-2C_{33}^2 > 0$ 。并且, 0压力下的计算结果与其他研究结果基本吻合, 表明本研究的计算可信。

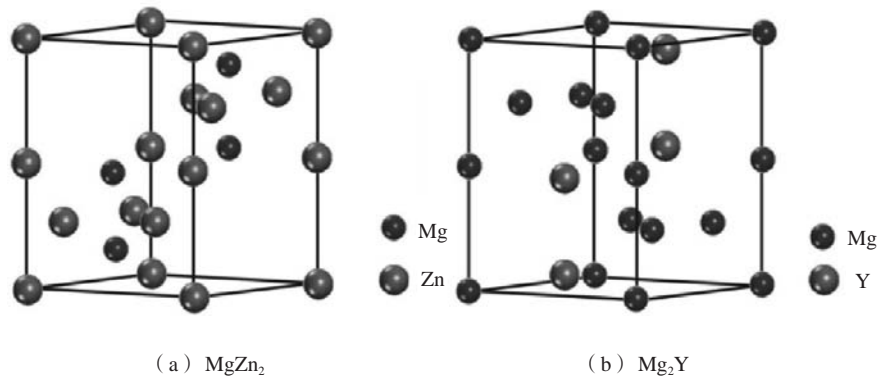


图1 晶体结构

Fig. 1 Crystal structures

表1 MgZn_2 和 Mg_2Y 的结构参数
Table 1 Structure parameters of MgZn_2 and Mg_2Y

金属化合物	空间群	原子数	原子坐标	$a_0/\text{\AA}$		$c_0/\text{\AA}$		$V_0/\text{\AA}^3$	$\rho / (\text{g} \cdot \text{cm}^{-3})$		
				本次计算	参考值	本次计算	参考值				
MgZn_2	$P6_3/mc$	12	Mg: (0.33, 0.67, 0.062)	5.19	5.16 ^[7]	8.62	8.56 ^[7]	201.17	5.120		
			Zn: (0, 0, 0)							5.23 ^[8]	8.47 ^[8]
			Zn: (0.34, 0.17, 0.25)								
Mg_2Y	$P6_3/mc$	12	Mg: (0, 0, 0) Mg: (0.84, 0.68, 0.25) Y: (0.33, 0.67, 0.62)	6.03	6.04 ^[9] 6.06 ^[10]	9.96	9.75 ^[9] 9.79 ^[10]	317.39	2.968		

弹性常数在高压下 (0~40 GPa) 的变化曲线如图3所示。从图3可以看出, MgZn₂和Mg₂Y的C₁₁、C₁₂、C₁₃和C₃₃均随压力的增加而迅速增加, 但C₄₄的增量相对平缓, 表明两种结构C₁₁、C₁₂、C₁₃和C₃₃对压力的敏感性明显高于C₄₄, 这可能是由于MgZn₂和Mg₂Y的各向异性所造成的。在0~40 GPa的压力范围内, MgZn₂和Mg₂Y的C₁₁和C₃₃的值总是大于其他弹性常数, 这意味着MgZn₂和Mg₂Y在a轴和c轴的单轴应力下是不可压缩的, 沿c轴的不可压缩性强于a轴的不可压缩性^[11]。

MgZn₂和Mg₂Y在高压环境下的柯西压力如图4所示。柯西压力C₁₂-C₄₄可以用来判断材料的延性与脆性, 当C₁₂-C₄₄为正值时, 材料为延性材料, 反之表现为脆性^[15]。从图4可以看出, MgZn₂和Mg₂Y在高压环境下均展现良好的延性, MgZn₂的延性要优于Mg₂Y。

另外柯西压力C₁₂-C₆₆和C₁₃-C₄₄可以用来判断合金材料的成键情况。当C₁₂-C₆₆和C₁₃-C₄₄的值为正时表明材料中表现为金属键结合, 反之表现为共价键结合^[11, 15]。从图4可以看出, MgZn₂和Mg₂Y的结合键随着压力的增加表现出更好的金属特性。

六方晶体结构MgZn₂和Mg₂Y的体模量B和剪切模量G通常利用Voigt-Reuss-Hill近似计算获得, 计算公式如下^[11-15]:

$$B_v = [2(C_{11} + C_{12}) + C_{33} + 4C_{13}] / 9 \quad (7)$$

$$G_r = (7C_{11} - 5C_{12} + 12C_{44} + 2C_{33} - 4C_{13}) / 30 \quad (8)$$

$$B_R = \frac{c^2}{C_{11} + C_{12} + 2C_{33} - 4C_{13}} \quad (9)$$

$$G_R = \frac{5}{2} \left[\frac{c^2 C_{44} C_{66}}{3B_v C_{44} C_{66} + c^2 (C_{44} + C_{66})} \right] \quad (10)$$

$$B = (B_v + B_R) / 2 \quad (11)$$

$$G = (G_v + G_R) / 2 \quad (12)$$

式中: 下角标V和R分别代表Voigt和Reuss, $c^2 = (C_{11} + C_{12}) C_{33} - 2C_{13}^2$ 。

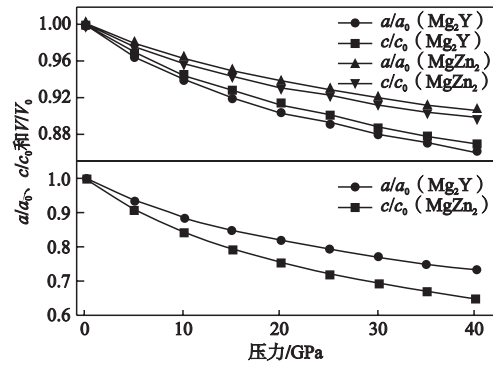


图2 MgZn₂和Mg₂Y的a/a₀、c/c₀和V/V₀随压力的变化
Fig. 2 Normalized lattice parameters a/a₀, c/c₀ and the normalized volume V/V₀ of MgZn₂ and Mg₂Y as a function of pressure

利用求得的体模量与剪切模量, 可进一步计算求出杨氏模量E和泊松比ν, 计算公式如下^[15-16]:

$$E = \frac{9BG}{3B+G} \quad (13)$$

$$\nu = \frac{1}{2} \left[\frac{B - \frac{2}{3}G}{B + \frac{1}{3}G} \right] \quad (14)$$

MgZn₂和Mg₂Y在0压力下各模量与泊松比的计算结果列于表3中, 计算结果与其他研究结果吻合, 进一步表明本研究的计算可信。应注意到MgZn₂和Mg₂Y的体模量B均大于剪切模量G, 表明六方晶体结构MgZn₂和Mg₂Y的稳定性主要是由剪切模量G所影响, 这与具有六方体晶体结构的其他金属化合物分析结果是一致的。

通过体模量B可判断材料抵抗外界应力作用下变形的能力, B值越大, 抵抗能力则越强^[16]。从表3可知, 在0压力环境下MgZn₂抵抗外力变形的能力要强于Mg₂Y。同样, 剪切模量G可判断材料抵抗外界应力作

表2 MgZn₂和Mg₂Y在0压力下的弹性常数
Table 2 Elastic constants of MgZn₂ and Mg₂Y under 0 pressure

金属化合物	项目	弹性常数/GPa				
		C ₁₁	C ₁₂	C ₁₃	C ₃₃	C ₄₄
MgZn ₂	本次计算	89.37	85.03	22.59	135.63	19.91
	文献值 ^[8]	91.25	87.27	28.62	147.59	20.21
	文献值 ^[12]	91.25	85.27	23.38	198.31	24.88
Mg ₂ Y	本次计算	79.18	25.44	27.84	81.84	19.11
	文献值 ^[13]	76.83	25.41	21.11	83.96	17.78
	文献值 ^[14]	62.86	39.91	27.16	77.07	17.42

用下剪切变形的能力， G 值越大，抵抗剪切变形能力越强^[17]。分析可得，在0压力环境下 Mg_2Y 抵抗剪切变形的能力要强于 $MgZn_2$ 。而杨氏模量 E 则是判断固体刚度的一个指标， E 值越大，材料刚度越大^[18]。分析可得，在0压力环境下 Mg_2Y 的刚度大于 $MgZn_2$ 。泊松比 ν 可以反映材料抵抗剪切的能力，其值一般在 $-1 \sim 0.5$ ， ν 值越大材料的塑性越好。在0压力环境下 $MgZn_2$ 塑性要强于 Mg_2Y 。此外，体模量 B 与剪切模量 G 的比值可以用来判断材料的延展性与脆性。当 B/G 值高于1.75，材料展现延性特征，反之表现出脆性特征^[19]。分析可知， $MgZn_2$ 和 Mg_2Y 在0压力环境下均展现延性特征，并且 $MgZn_2$ 的延性要强于 Mg_2Y ，这与柯西压力 $C_{12}-C_{44}$ 的分析结果是一致的。

$MgZn_2$ 和 Mg_2Y 在0~40 GPa压力下的体模量 B 、剪切模量 G 和杨氏模量 E 的变化曲线如图5所示。从图5可以看出， $MgZn_2$ 和 Mg_2Y 的体模量 B 、剪切模量 G 和杨氏模量 E 均随着压力的增加而增加，均为线性关系，说明二者在外界压力作用下，抵抗变形和剪切的能力以及刚度均有所提高。进一步分析可发现，在高压环境下 $MgZn_2$ 的抗变形能力始终强于 Mg_2Y ；在0~5 GPa

的低压环境下， Mg_2Y 的剪切模量 G 和杨氏模量 E 略高于 $MgZn_2$ ，表明此时 Mg_2Y 的抗剪切能力与刚度略高于 $MgZn_2$ 。在5~40 GPa的高压环境下， Mg_2Y 的剪切模量 G 和杨氏模量 E 呈缓慢增加的趋势，而 $MgZn_2$ 的 G 与 E 值则呈现快速增加趋势，此时 $MgZn_2$ 的抗剪切能力和刚度远高于 Mg_2Y ，说明在高压环境下 $MgZn_2$ 的力学性能要优于 Mg_2Y 。

$MgZn_2$ 和 Mg_2Y 的泊松比 ν 随压力变化曲线如图6所示。从图6可看出 $MgZn_2$ 的泊松比随压力增加而降低， Mg_2Y 的泊松比随压力增加而增加，说明高压环境使 $MgZn_2$ 的可塑性下降，反而压力可促使 Mg_2Y 的可塑性增强。进一步分析可发现在0~40 GPa的压力范围内， $MgZn_2$ 和 Mg_2Y 的 ν 值分别在0.314~0.407 2与0.272~0.410 6之间，这也表明 $MgZn_2$ 和 Mg_2Y 的原子间力在高压环境下仍保持中心原子间力。

$MgZn_2$ 和 Mg_2Y 的 B/G 值随压力变化曲线如图7所示。在0~40 GPa的压力范围内， $MgZn_2$ 和 Mg_2Y 的 B/G 值均高于1.75，表明两种结构在高压环境下依然保持良好的延展性。深入分析可发现， $MgZn_2$ 的 B/G 值随压力增加而降低， Mg_2Y 的 B/G 值随压力增加而增加，结果表

表3 $MgZn_2$ 和 Mg_2Y 的力学参数
Table 3 Mechanical parameters of $MgZn_2$ and Mg_2Y

金属化合物	项目	B/GPa	G/GPa	E/GPa	ν	A	B/G
$MgZn_2$	本次计算	63.78	12.74	35.84	0.41	9.17	5.01
	文献值 ^[8]	68.79	12.65	35.77	0.41	10.15	5.43
	文献值 ^[12]	70.71	16.12	45.57	0.39	8.32	4.39
Mg_2Y	本次计算	44.70	23.32	59.60	0.28	0.71	1.92
	文献值 ^[13]	41.43	23.59	59.48	0.27	0.69	1.76
	文献值 ^[20]	42.00	23.00	59.00	0.26	-	1.83

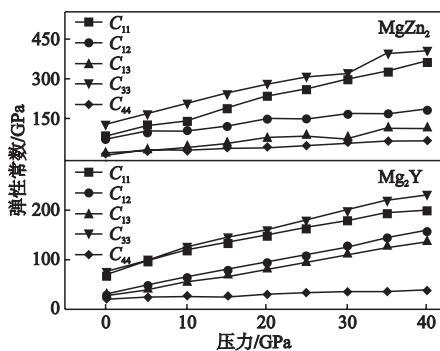


图3 $MgZn_2$ 和 Mg_2Y 在不同压力下的弹性常数

Fig. 3 Elastic constants C_{ij} as a function of $MgZn_2$ and Mg_2Y as a function of pressure

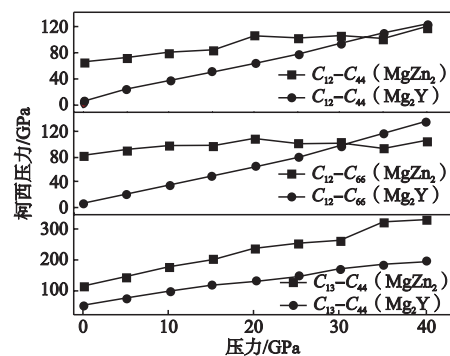


图4 $MgZn_2$ 和 Mg_2Y 在不同压力下的柯西压力

Fig. 4 Cauchy pressure as a function of pressure for $MgZn_2$ and Mg_2Y

明高压环境下 MgZn_2 的延展性下降, Mg_2Y 的延展性增强。其主要原因是 Mg_2Y 剪切模量 G 值在高压环境下没有 MgZn_2 敏感。

材料的微裂纹和各向异性塑性变形与弹性各项异性有关^[21]。通常可以通过弹性常数计算出材料的弹性各项异性值, 计算公式如下^[11, 15]:

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} \quad (15)$$

MgZn_2 和 Mg_2Y 在0~40 GPa压力下的弹性各向异性系数如图8所示。分析可发现0压力下, MgZn_2 的各向异性程度明显高于 Mg_2Y , 随着压力的增加 MgZn_2 的各向异性程度在明显下降, 而 Mg_2Y 的各向异性程度缓慢增加。

此外还可以采用压缩和剪切作用下晶体的各向异性百分比来描述晶体的各向异性程度。体模量 A_B 和剪切模量 A_G 的各向异性计算公式如下^[15, 22]:

$$A_B = \frac{B_V - B_R}{B_V + B_R} \quad (16)$$

$$A_G = \frac{G_V - G_R}{G_V + G_R} \quad (17)$$

当 A_B 和 A_G 值为0时为各向同性, 若数值为1则表现为各向异性。从图8中可以看出, MgZn_2 与 Mg_2Y 的 A_B 值趋于0, 且随压力增加变化不明显, 表明在压缩方向上晶体表现为各向同性。进一步分析, 可发现 MgZn_2 的 A_G 值随压力增加而降低, Mg_2Y 的 A_G 值随压力增加而增加; 表明在剪切方向上, MgZn_2 的各向异性程度随压力增加而降低, Mg_2Y 的各向异性程度随压力增加而增加。综合以上分析表明 MgZn_2 与 Mg_2Y 的弹性各向异性受外部压力影响。

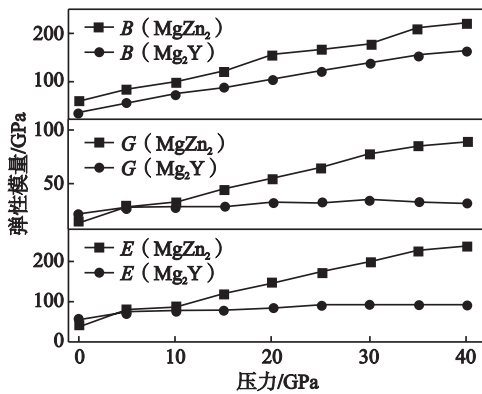


图5 MgZn_2 和 Mg_2Y 不同压力下的弹性模量

Fig. 5 Calculated bulk modulus B , shear modulus G and Young's modulus E as a function of pressure for MgZn_2 and Mg_2Y

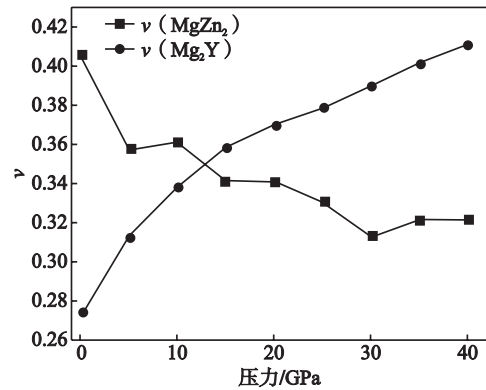


图6 MgZn_2 和 Mg_2Y 在不同压力下的泊松比 ν

Fig. 6 Calculated Poisson's ratio (ν) as a function of pressure for MgZn_2 and Mg_2Y

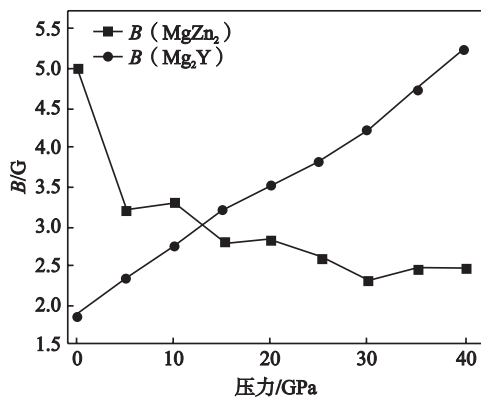


图7 MgZn_2 和 Mg_2Y 在不同压力下的 B/G

Fig. 7 Calculated B/G as a function of pressure for MgZn_2 and Mg_2Y

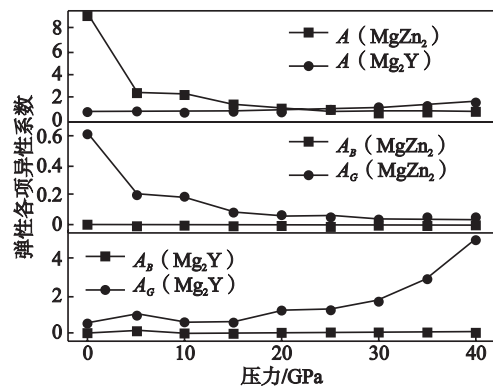


图8 MgZn_2 和 Mg_2Y 在不同压力下的弹性各向异性系数

Fig. 8 Calculated elastic anisotropy of MgZn_2 and Mg_2Y as a function of pressure

3 结论

(1) MgZn_2 和 Mg_2Y 的相对晶格常数(a/a_0 、 c/c_0)和晶胞体积常数 V/V_0 随压力的增加而降低,在0~40 GPa外部压力下 MgZn_2 和 Mg_2Y 均可以稳定存在, Mg_2Y 对压力更加敏感,可压缩性强于 MgZn_2 。

(2) MgZn_2 和 Mg_2Y 的弹性常数 C_{ij} 、体模量 B 、剪切模量 G 、杨氏模量 E 均随压力增大而增加,说明在高压环境下, MgZn_2 和 Mg_2Y 均表现出良好的力学性能;

且结果表明 MgZn_2 的抗剪切能力、抵抗外力变形能力、刚度在高压环境下的表现要优于 Mg_2Y 。

(3) 泊松比、柯西压力和 B/G 的计算结果表明,在高压环境下, MgZn_2 和 Mg_2Y 均为结合力都表现为中心原子力,均表现出塑性特征和延性特征,随着压力的增加, MgZn_2 的塑性和延性同时降低,而 Mg_2Y 的塑性与延性呈现增强趋势。

(4) 多角度的弹性各项异性值分析表明, MgZn_2 和 Mg_2Y 的弹性各向异性受外部压力影响。

参考文献:

- [1] GUAN D, RAINFORTH W M, GAO J, et al. Individual effect of recrystallisation nucleation sites on texture weakening in a magnesium alloy: Part 2-shear bands [J]. Acta Materialia, 2018, 145: 399-412.
- [2] 瞿祥落, 韩宝, 赵文博, 等. 热处理对Mg-7Sn-4Al-2Zn-xSr合金的组织演变和力学性能的影响 [J]. 铸造, 2014, 63 (3): 275-279.
- [3] 王娟, 侯华, 赵宇宏, 等. 第一性原理研究压力对Ni-Mo二元化合物力学性能和电子结构的影响 [J]. 稀有金属材料与工程, 2018, 47 (3): 846-852.
- [4] 高红选, 张晓燕, 樊磊, 等. 稀土元素La对铝镁合金组织和力学性能的影响 [J]. 铸造, 2014, 63 (3): 265-267.
- [5] ZHU Y M, MORTON A J, NIE J F. The 18R and 14H long-period stacking ordered structures in Mg-Y-Zn alloys [J]. Acta Materialia, 2010, 58 (8): 2936-2947.
- [6] WANG F, SUN S J, BO Y U, et al. First principles investigation of binary intermetallics in Mg-Al-Ca-Sn alloy: Stability, electronic structures, elastic properties and thermodynamic properties [J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2016, 26 (1): 203-212.
- [7] 周恬武, 徐少华, 张福全, 等. Sn合金化 MgZn_2 相及 Mg_2Sn 相结构稳定性的第一原理研究 [J]. 中国有色金属学报, 2010, 20 (5): 914-922.
- [8] 毛萍莉, 于波, 刘正, 等. Mg-Zn-Ca合金中 AB_2 型金属间化合物电子结构和弹性性质的第一性原理计算 [J]. 金属学报, 2013, 49 (10): 1227-1233.
- [9] ZANICCHI G, CONTARDI V, MARAZZA R, et al. On some lanthanide and pseudolanthanide magnesium alloys [J]. Journal of The Less-Common Metals, 1988, 142 (142): L31-L36.
- [10] CHEN G, ZHANG P. First-principles study of electronic structures, elastic properties and thermodynamics of the binary intermetallics in Mg-Zn-Re-Zr alloy [J]. Defence Technology, 2013, 9 (3): 131-139.
- [11] MAO P, YU B, LIU Z, et al. Mechanical, electronic and thermodynamic properties of Mg_2Ca laves phase under high pressure: a first-principles calculation [J]. Computational Materials Science, 2014, 88 (20): 61-70.
- [12] 周恬武, 徐少华, 张福全, 等. ZA62镁合金中 AB_2 型金属间化合物的结构稳定性与弹性性能的第一原理计算 [J]. 金属学报, 2010, 46 (1): 97-103.
- [13] CHEN Q, HUANG Z, ZHAO Z, et al. First principles study on elastic properties, thermodynamics and electronic structural of AB_2 type phases in magnesium alloy [J]. Solid State Communications, 2013, 162 (2): 1-7.
- [14] ZHANG J, MAO C, LONG C G, et al. Phase stability, elastic properties and electronic structures of Mg-Y intermetallics from first-principles calculations [J]. Journal of Magnesium & Alloys, 2015, 3 (2): 127-133.
- [15] YU C F, CHENG H C, CHEN W H. Structural, mechanical and thermodynamic properties of AuIn_2 crystal under pressure: a first-principles density functional theory calculation [J]. Journal of Alloys and Compounds, 2015, 619: 576-584.

- [16] LIU Y, HU W C, LI D J, et al. Mechanical, electronic and thermodynamic properties of C14-type AMg_2 (A=Ca, Sr and Ba) compounds from first principles calculations [J]. Computational Materials Science, 2015, 97: 75–85.
- [17] LIANG Z, WANG W, ZHANG M, et al. Structural, mechanical and thermodynamic properties of ZrO_2 , polymorphs by first-principles calculation [J]. Physica B: Condensed Matter, 2017, 511: 10–19.
- [18] LI C M, ZENG S M, CHEN Z Q, et al. First-principles calculations of elastic and thermodynamic properties of the four main intermetallic phases in Al-Zn-Mg-Cu alloys [J]. Computational Materials Science, 2014, 93: 210–220.
- [19] ZHOU D, LIU J, XU S, et al. First-principles investigation of the binary intermetallics in Mg-Al-Sr alloy: stability, elastic properties and electronic structure [J]. Computational Materials Science, 2014, 86 (2) : 24–29.
- [20] LI C, ZHANG K, RU J G. Pressure dependence of structural, elastic and electronic of Mg_2Y : a first principles study [J]. Journal of Alloys & Compounds, 2015, 647: 573–577.
- [21] ZHAO C, WANG X. First-principles study of the structural, electronic, elastic, and thermodynamic properties of Rh_3Sc compound under high pressure [J]. Journal of Alloys and Compounds, 2017, 704: 484–490.
- [22] GHEBOULI B, GHEBOULI M A, FATMI M, et al. First-principles study of the structural, elastic, electronic, optical and thermodynamic properties of the cubic perovskite $CsCdCl_3$ under high pressure [J]. Solid State Communications, 2010, 150 (39) : 1896–1901.

First-Principles Study on Mechanical Properties of Metal Compounds $MgZn_2$ and Mg_2Y under Pressure

GAO Yan^{1,2}, MAO Ping-li¹, LIU Zheng¹, WANG Feng¹

(1. School of Materials Science and Engineering, Shenyang University of Technology, Shenyang 110870, Liaoning, China; 2. Experimental Teaching Center, Shenyang Normal University, Shenyang 110034, Liaoning, China)

Abstract:

In order to investigate the effect of pressure on the properties of Mg-Zn-Y alloy, the mechanical properties of metal compounds $MgZn_2$ and Mg_2Y under high pressure of 0-40 GPa were studied by first-principles method based on density functional theory (DFT). The unit cell parameters of $MgZn_2$ and Mg_2Y were analyzed. The results show that Mg_2Y is easier to compress than $MgZn_2$ under high pressure. Based on the results of the elastic constant C_{ij} , the bulk modulus (B), shear modulus (G), Young's modulus (E), Poisson's ratio (ν), anisotropy index (A) of $MgZn_2$ and Mg_2Y were analyzed. The results show that both $MgZn_2$ and Mg_2Y exhibit plasticity and ductility in high pressure environment, and all show good mechanical properties. Further analysis shows that $MgZn_2$ has better performances than Mg_2Y in shear resistance, resistance to external force deformation and stiffness. With the increase of pressure, the plasticity and ductility of $MgZn_2$ decrease simultaneously, while the plasticity and ductility of Mg_2Y show an increasing trend.

Key words:

Mg-Zn-Y alloys; first principles; mechanical properties