

La 和 Ce 掺杂对 α -Al 结构和弹性性质影响的第一性原理研究

许 乾¹, 傅高升^{1, 2}, 宋莉莉¹, 陈鸿玲¹, 王火生³

(1. 福州大学, 福建福州 350116; 2. 闽江学院, 福建福州 350108; 3. 福建工程学院, 福建福州 350118)

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, 从原子尺度对La和Ce掺杂 α -Al 的几何结构、弹性性质和态密度进行计算分析, 为铸造Al-RE系合金的开发提供理论依据。几何结构分析表明, La和Ce掺杂改变了 α -Al 的结构参数, Al-Ce固溶体的结合能比Al-La固溶体低, 即Al-Ce固溶体的结构稳定性较高; 弹性性质分析表明, La和Ce掺杂降低了 α -Al 的弹性模量, 削弱了 α -Al 的抗变形能力, 使体系的对称性下降, 从而表现出一定的各向异性, 这种变化以La掺杂 α -Al 较为明显; 态密度分析表明, La和Ce掺杂所形成的固溶体在费米能级处的态密度不为0, 掺杂会引发费米能级附近区域态密度增加, 使体系表现出一定的金属性质, 从而引起体系强度、硬度降低, 塑性、韧性提高。

关键词: 第一性原理; La和Ce; α -Al; 几何性质; 弹性性质; 态密度

作者简介:

许 乾 (1995-), 男, 硕士研究生, 研究方向为有色合金熔体处理及其强韧化。E-mail: 287018433@qq.com

通讯作者:

傅高升, 男, 教授, 博士, 博士生导师。E-mail: fugaosheng@fzu.edu.cn

中图分类号: TG146.21

文献标识码: A

文章编号: 1001-4977(2021)

08-0939-06

基金项目:

福建省自然科学基金资助项目(2017J01156)。

收稿日期:

2021-03-24 收到初稿,

2021-06-22 收到修订稿。

随着市场需求的增加以及铝加工技术的提高, 铝合金在新能源汽车、高铁、船舶、航空航天等高端领域的应用越来越广^[1]。稀土元素具有很强的化学活性和亲和力, 添加到铝及其合金中, 可起到变质、净化和微合金化等作用, 有利于提高铝合金的综合性能和开发高性能的铸造Al-RE系合金^[2]。研究表明^[3-4], 在铝合金中添加少量稀土可增强其塑韧性、耐磨性、耐蚀性等, 有效提高材料的力学性能和加工性能。但由于稀土理化性质的特殊性, 易受到铝合金中杂质元素等的干扰, 在稀土对铝合金组织和性能影响规律的研究中, 难以从更深层次解释稀土原子与铝基体相互作用的微观机理。

基于密度泛函理论(DFT)^[5]的第一性原理因其计算尺度小、精度大的特点及以材料建模结合理论科学的形式, 可从原子尺度分析解决实际问题, 同时可避免试验仪器误差和试验材料缺陷而导致偶然的试验结果, 被广泛应用于合金材料的研究中^[6-8]。在合金成分的设计中, 应用第一性原理模拟材料在不同环境下的性能变化规律和失效机理, 能够在不依赖试验数据的条件下准确预测合金的电子结构与热力学信息。因此, 本文采用第一性原理的计算方法探讨La和Ce掺杂对 α -Al 结构性质和弹性性能的影响, 有望为高性能铸造Al-RE系合金的开发提供理论依据。

1 模型建立与计算方法

为模拟La和Ce在 α -Al 中的作用机理, 同时考虑计算能力和计算资源的限制, 构建 $3 \times 3 \times 3$ 含108个Al原子的 α -Al 超胞, 并将单个La和Ce原子掺杂在 α -Al 超胞的体心间隙位置, 形成Al-RE固溶体 (RE在固溶体中的浓度约为0.92%), 体系的结构模型如图1所示。

本文模拟采用Materials Studio软件进行, 在进行第一性原理计算时, 除了在CASTEP模块中通过设置命令参数确定进行何种计算, 还有两个参数对计算的准确性和效率有很大影响, 分别是截断能和 k 点的设定。为了使计算的系统总能量

达到设定的精度，截断能应选取得足够高，而过高的截断能会降低计算效率。 k 点通常要满足关系 $k_1 \times a_1 = k_2 \times a_2 = k_3 \times a_3$ ，其中 a_1 、 a_2 、 a_3 分别是在 x 、 y 、 z 方向上的晶格常数，准确性会随着 k 点数量的增大而提高，但大量的 k 点也会降低计算效率。因此，要将截断能和 k 点视为变量，对体系进行收敛性测试。通常，当系统总能变化稳定在 5×10^{-6} eV 以内，并使得优化后作用在晶胞中每个原子上的力小于 0.01 eV/Å，晶胞残余应力低于 0.02 GPa，公差偏移小于 5×10^{-4} Å 时，则认为计算达到收敛^[9]，即确定了截断能和 k 点。

计算过程采用投影追加平面波方法 (PAW)，交换关联函数选用 GGA-PBE 方法，自洽场运算采用 Pulay 密度混合法，自洽场 SCF 收敛标准设置为 5.0×10^{-7} eV/atom，体系结构的几何优化采用 BFGS 算法。在整个过程中，体系能量的收敛标准设置为 5×10^{-6} eV/atom，原子间相互作用力收敛标准设置为 0.01 eV/Å，晶胞残余应力收敛标准设置为 0.02 GPa，公差偏移收敛标准设置为 5×10^{-4} Å，CASTEP 模块对上述四个参数同时进行优化且均达到收敛标准。通过收敛性测试， α -Al 超胞体系的截断能设置为 $1\ 000$ eV， k 点设置为 $25 \times 25 \times 25$ ；掺杂体系的截断能设置为 380 eV， k 点设置为 $2 \times 2 \times 2$ 。

2 计算结果与讨论

2.1 几何结构

体系结构经几何优化后，所得到的晶格常数等结构信息如表 1 所示。其中 a 、 b 、 c (nm) 为晶格常数， ΔH_{sol} (eV·atom⁻¹) 为固溶焓， E_{coh} (eV·atom⁻¹) 为结合能。

可以看到， α -Al 晶格常数的计算值与试验值误差很小，由此可见第一性原理计算结果的准确性，同时也表明在合金成分的设计中，应用第一性原理从原子尺度进行计算是合理的。此外，由于 La 和 Ce 的原子半径 ($r_{\text{La}}=0.187\ 7$ nm， $r_{\text{Ce}}=0.182\ 5$ nm)^[11] 比 Al 的原子半径 ($r_{\text{Al}}=0.143$ nm)^[12] 大，当 La 和 Ce 掺杂在 α -Al 中时，固溶体的平衡晶格常数均有所增大，这表明 La 和 Ce 掺杂可以改变 α -Al 的结构参数。

晶体的固溶焓 (ΔH_{sol}) 是反映固溶体形成难易程度的物理量，用来表征一种元素固溶于另一种基体中形成固溶体的固溶能力。固溶焓可用于评估 La 和 Ce 原

子在 α -Al 中固溶的难易程度，若计算所得的固溶焓为负值，则说明其可自发地固溶于 α -Al 中，且固溶焓的绝对值越大，化合物越容易形成；反之，若固溶焓为正值，则说明其在 α -Al 中的固溶过程不能自发进行，需要在某些外力条件下才能固溶于 α -Al 中。固溶焓用公式可以表示为：

$$\Delta H_{\text{sol}} = \frac{E_{\text{tot}} - (N-1)E_{\text{solid}}^{\text{Al}} - E_{\text{solid}}^{\text{RE}}}{N} \quad (1)$$

式中： E_{tot} 是 Al-RE 固溶体体系的总能量， $E_{\text{solid}}^{\text{Al}}$ 和 $E_{\text{solid}}^{\text{RE}}$ 分别是 Al 和 RE (La、Ce) 基态单质下单原子能量， N 为 Al-RE 固溶体体系的原子总数。

计算所得两种固溶体的固溶焓如表 1 所示。可以看到，两者的固溶焓均为正值，表明 La 和 Ce 在 α -Al 中的固溶过程不能自发进行，需要在某些外力条件下才能固溶于 α -Al 中，这是由于 La 和 Ce 的原子半径比 Al 的原子半径大所致。此外，Al-Ce 固溶体的固溶焓比 Al-La 固溶体低，表明 La 和 Ce 掺杂 α -Al 较易优先形成 Al-Ce 固溶体。

结合能 (E_{coh}) 是衡量合金化能力的重要物理量，用来表征晶体的结构稳定性以及合金化元素在晶体中的稳定程度。晶体的结合强度、结构稳定性与结合能大小有直接的关系。当结合能为负时，结构才可以稳定存在，而且结合能越负，即结合能的绝对值越大，晶体分解为自由粒子的难度就越大，晶体结构就越稳定。根据公式 (2) 计算了 La 和 Ce 固溶于 α -Al 基体后固溶体的结合能：

$$E_{\text{coh}} = \frac{E_{\text{tot}} - (N-1)E_{\text{atom}}^{\text{Al}} - E_{\text{atom}}^{\text{RE}}}{N} \quad (2)$$

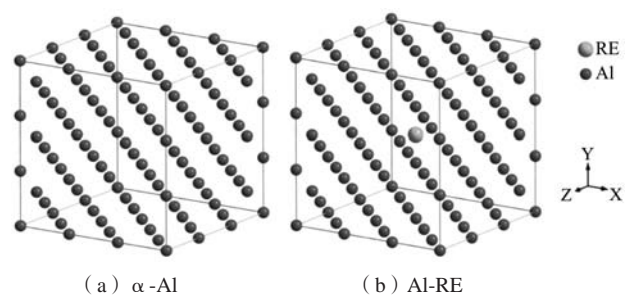


图1 α -Al和Al-RE固溶体的结构模型

Fig. 1 Structural model of α -Al and Al-RE solid solution

表1 计算所得的体系结构信息
Table 1 Calculated architecture information

结构	方法	a /nm	b /nm	c /nm	$\Delta H_{\text{sol}} / (\text{eV} \cdot \text{atom}^{-1})$	$E_{\text{coh}} / (\text{eV} \cdot \text{atom}^{-1})$
α -Al	计算值	0.404 0	0.404 0	0.404 0	-	-
	试验值 ^[10]	0.404 7	0.404 7	0.404 7	-	-
Al-Ce固溶体	计算值	0.408 6	0.408 6	0.408 6	0.030 3	-3.664 0
Al-La固溶体	计算值	0.409 4	0.409 4	0.409 4	0.034 8	-3.655 2

式中： $E_{\text{atom}}^{\text{Al}}$ 和 $E_{\text{atom}}^{\text{RE}}$ 分别是Al和RE（La、Ce）在孤立自由状态下的单原子能量。

从结合能的计算公式可知，晶体的结合能是自由原子结合为晶体所释放的能量，也可以理解为晶体分解成单个原子时对外界所做的功^[3]。由表1可以看到，两种固溶体的结合能均为负值，说明掺杂体系在结构上是稳定的，且Al-Ce固溶体的结合能比Al-La固溶体低，表明Al-Ce固溶体具有较高的结构稳定性。

2.2 弹性性质

弹性性质是固体材料重要的力学性质之一。当固体材料发生形变时，晶体内任意两点间的距离都会发生改变，这种变化可以用应变来描述，作用在固体材料单位面积上的力即为应力。在弹性范围内，应变与应力的关系可用胡克定律来表示。在应用第一性原理计算弹性常数时，采用应力-应变法只需计算较少的应变模式即可计算出全部弹性常数，大大降低计算量^[13]。因此，本文采用应力-应变法对其独立弹性常数进行计算。

弹性常数是表征材料弹性的量，对于不同的单晶体而言，弹性常数的数量不相同，而且体系的对称性也在一定程度上决定了弹性常数的数量^[14]。在三向应力状态下，材料共有36个弹性常数 C_{ij} （ $i=1-6, j=1-6$ ）。本文所构建的体系模型均属于立方晶系，具有高度对称性，因此只存在三个独立的弹性常数，即 C_{11} ， C_{12} 和 C_{44} ，分别体现体系在[100]，[111]和[011]三个方向上的抗变形能力。对几何优化后的体系进行弹性常数的计算，得到的独立弹性常数结果如表2所示。

由Born^[16]力学稳定性条件可知，弹性常数可作为判断合金固溶体稳定性的依据。对于高度对称的立方晶系，若同时满足 $C_{11}>0$ ， $C_{44}>0$ ， $C_{11}-C_{12}>0$ 和 $C_{11}+2C_{12}>0$ 四个条件，则认为合金体系能够稳定存在。可以看到，掺杂体系均满足Born力学稳定性条件，说明可以稳定存在，且本文所构建的掺杂体系是由La和Ce原子掺杂在 α -Al超胞的体心间隙位置形成，根据晶体学理论，晶体体心处的间隙最大，相对其余间隙位置较易形成间隙固溶体^[14]，因此可以认为计算结果是合理的。由表2可以发现，与 α -Al基体相比，La和Ce掺杂会引起弹性常数发生变化，主要表现在 C_{11} 有较大幅度

的降低， C_{12} 和 C_{44} 出现升高的趋势，但并不明显，这种变化以La原子掺杂 α -Al较为明显，表明La和Ce掺杂 α -Al后，主要影响[100]晶向上的变形能力，对[111]和[011]晶向上的变形能力影响较小。

材料的力学性质在微观上可以用体模量 B 、剪切模量 H 、杨氏模量 E 、泊松比 ν 、体模量与剪切模量的比值 B/G 来体现。由VRH近似法^[17]可知相关的计算公式为：

$$B_V=B_R=\frac{C_{11}+2C_{12}}{3} \quad (3)$$

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

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

式中： B_V 和 G_V 分别为Voigt模型的体模量和剪切模量， B_R 和 G_R 分别为Reuss模型的体模量和剪切模量。Hill近似是对Voigt近似和Reuss近似的计算结果取均值，故Hill模型中体模量和剪切模量分别为：

$$B_H=\frac{B_V+B_R}{2} \quad (6)$$

$$G_H=\frac{G_V+G_R}{2} \quad (7)$$

材料的杨氏模量（ E ）、泊松比（ ν ）可根据 B 、 G 推算得到：

$$E=\frac{9BG}{3B+G} \quad (8)$$

$$\nu=\frac{E-2G}{2G} \quad (9)$$

在计算得到独立弹性常数的基础上，进一步对体系的弹性模量进行计算，结果如表3所示。

材料的体模量 B 表征在外加应力的作用下抵抗变形的能力，其值越大抗变形的能力越强；剪切模量 G 用来表征材料在受外界剪切应力作用下的切变抗力，其值越大越不容易发生剪切变形；杨氏模量 E 表征材料的刚度，即材料发生弹性变形的难易程度，其值越大，刚度越大，材料塑性越差。表3的计算结果表明，La和Ce掺杂会降低 α -Al的弹性模量，削弱其抗变形能力，即对强度有一定程度降低，使体系较易发生变形，这种

表2 计算所得的独立弹性常数
Table 2 Calculated independent elastic constants

结构	方法	C_{11}	C_{12}	C_{44}	$C_{11}-C_{12}$	$C_{11}+2C_{12}$
α -Al	计算值	108.61	63.36	34.57	45.25	235.33
	试验值 ^[15]	108.2~112.6	61.3~66.0	27.9~28.5	-	-
Al-Ce固溶体	计算值	91.32	67.41	37.63	23.91	226.14
Al-La固溶体	计算值	85.85	68.86	40.48	16.99	223.57

变化以La掺杂 α -Al较为明显。

泊松比 ν 是材料横应变与纵应变的比值,晶体的韧性可以用泊松比 ν 进行大致判定,当 ν 值越大,材料韧性越好,韧性转变的临界值为0.26。此外,材料体模量与剪切模量的比值 B/G 也可用于判断材料的韧性^[18]:即当 B/G 的值大于1.75时,材料表现为韧性,比值越大,韧性越好,反之材料就呈脆性。综合以上两项指标可以发现,三者均表现出延展性,且延展性大小顺序为: α -Al<Al-Ce固溶体<Al-La固溶体。可见,La和Ce掺杂能够在一定程度上提高 α -Al的塑韧性。

材料的弹性各向异性系数 A 表明材料出现微裂纹的可能性^[19], A 的值表示材料各向异性的程度,当 $A=1$ 时,材料表现为各向同性,相关的计算公式为:

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} \quad (10)$$

表3所示 α -Al的 A 值与1较为接近,表明其偏离各向同性的程度较小,但La和Ce掺杂会降低 α -Al的各向同性,所形成的固溶体表现出一定的各向异性。

杨氏模量的三维表示是描述杨氏模量各向异性的一种有效方法,它可直观地展示弹性模量沿不同晶向的变化特征^[20]。图2为三种结构杨氏模量各向异性的三维示意图。可以看到,三种结构的各向异性相差较大,掺杂体系的各向异性程度相比 α -Al要明显增加,且三者各向异性大小顺序为: α -Al<Al-Ce固溶体<Al-La固溶体。这是由于La和Ce掺杂 α -Al后会降低体系的对称性,从而使各向异性的程度不可避免增加。

2.3 态密度

材料的许多宏观性质,如强度、硬度、塑韧性、稳定性等与其电子结构紧密相关,为探索La和Ce掺杂对 α -Al结构性质和弹性性质影响的微观机制,对掺杂体系的态密度进行计算分析,从电子层面研究La和Ce

在 α -Al中的固溶行为,结果如图3所示。

图3a、b分别为Al-La固溶体和Al-Ce固溶体的态密度图,虚线代表费米能级,对应的能量值为0。本研究所涉及的各元素价态的电子分别为:Al $3s^2 3p^1$, La $5d^1 6s^2$, Ce $4f^1 5d^1 6s^2$ 。由图3可知,两种固溶体在费米能级处的态密度不为0,说明两者均呈金属性。Al-La固溶体的电子主要分布在-35~15 eV区域,在-35~-30 eV范围内,体系的成键电子主要由La的s轨道贡献,在-20~-15 eV范围内,成键电子主要由La的p轨道贡献,由于这两部分距离费米能级较远,故对体系的性能基本没有影响。费米能级附近区域的成键电子主要由Al的p轨道贡献,并且该区域La的d轨道与Al的s、p轨道存在微弱的杂化,说明Al和La之间存在成键,但Al的s、p轨道对价带的贡献要远大于La原子。同样地,Al-Ce固溶体的电子态也主要分布在费米能级附近的区域,成键电子主要由Al的p轨道贡献,但与Al-La固溶体不同的是,在费米能级右侧1~2 eV区域,Ce的f轨道与Al的s、p轨道产生激烈的杂化现象,使得体系的稳定性增强,说明Al和Ce之间存在稳定的成键,这很好地解释了本文通过计算结合能得出Al-Ce固溶体的稳定性比Al-La固溶体高的结果。此外,通过对比掺杂体系的总态密度和分态密度可知,在费米能级附近的区域,掺杂体系的总态密度较Al的态密度高,表明La和Ce掺杂会引发费米能级附近区域态密度增加,使体系表现出一定金属性质,从而引起体系强度、硬度降低,塑性、韧性提

表3 计算所得的弹性模量
Table 3 Calculated elastic modulus

结构	B/GPa	G/GPa	E/GPa	ν	B/G	A
α -Al	78.44	29.17	77.86	0.335	2.689	1.528
Al-Ce固溶体	75.38	23.80	64.60	0.357	3.167	3.148
Al-La固溶体	74.52	21.92	59.89	0.366	3.399	4.765

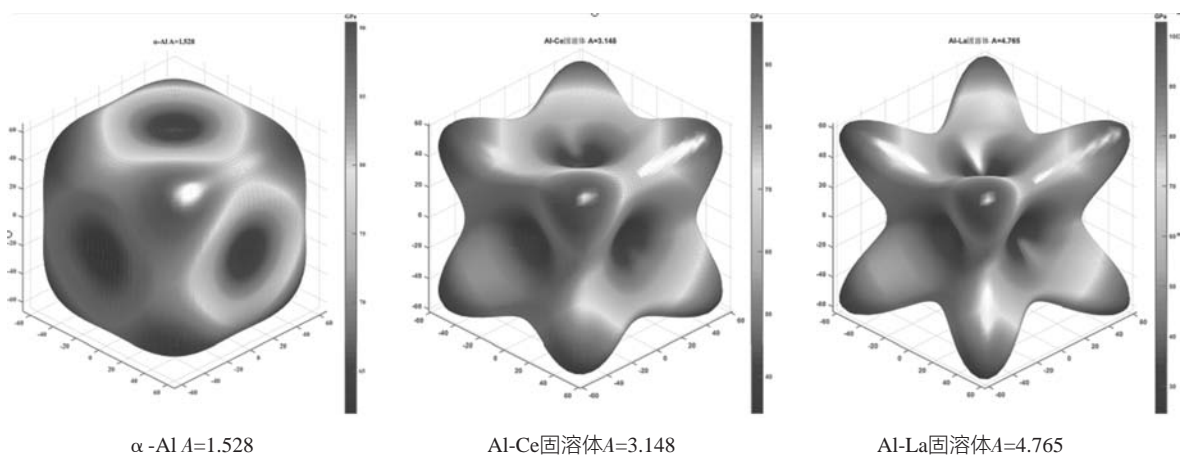


图2 杨氏模量各向异性的三维示意图 (GPa)

Fig. 2 Three-dimensional diagram of Young's modulus anisotropy (GPa)

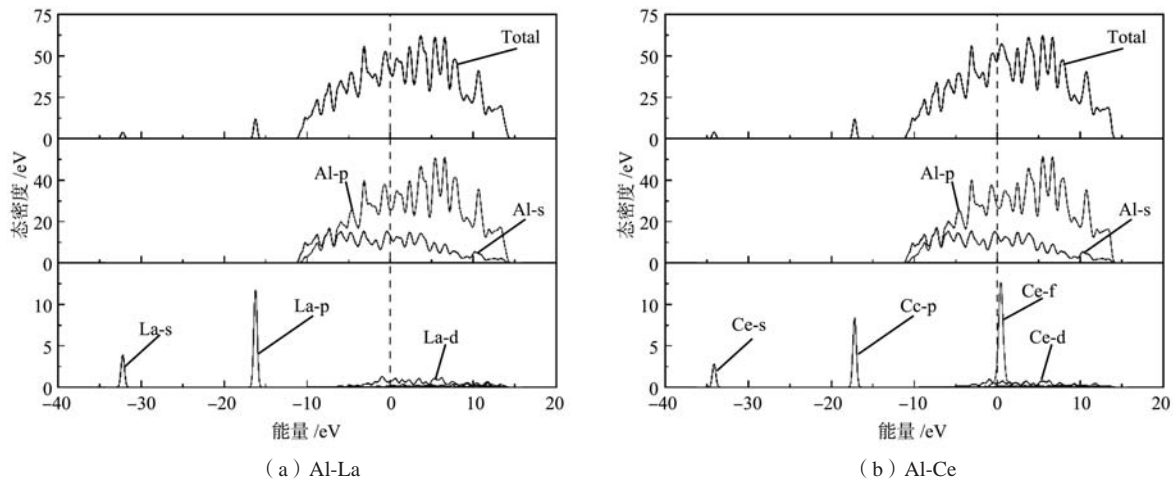


图3 Al-RE固溶体的态密度图

Fig. 3 Density of states of Al-RE solid solution

高,这对开发高韧性的铸造Al-RE系合金具有重要的理论意义,同时也很好地解释了本文弹性性质部分所得出的计算结果。

3 结论

(1) La和Ce掺杂改变了 α -Al的结构参数,Al-Ce固溶体的结合能比Al-La固溶体低,即Al-Ce固溶体的结构稳定性较高。

(2) La和Ce掺杂降低了 α -Al的弹性模量,削弱了 α -Al的抗变形能力,使体系的对称性下降,从而表现出一定的各向异性,这种变化以La掺杂 α -Al较为明显。

(3) La和Ce掺杂所形成的固溶体在费米能级处的态密度不为0,掺杂会引发费米能级附近区域态密度增加,使体系表现出一定的金属性质,从而引起体系强度、硬度降低,塑性、韧性提高。

参考文献:

- [1] 田梅娟, 坚增运, 海瑞. Al-Si合金凝固收缩率的研究进展 [J]. 铸造, 2020, 69 (10): 1060-1064.
- [2] 田伟, 胡梦楠, 孙玥, 等. 稀土元素对铝铜合金性能影响的研究进展 [J]. 材料热处理学报, 2019, 40 (3): 12-19.
- [3] 李浩, 林冲, 费卓铭, 等. La变质对Al-8.5Si-3.5Cu-1.2Fe合金组织和性能的影响 [J]. 特种铸造及有色合金, 2020, 40 (6): 684-689.
- [4] 于小健, 宁萌, 周文军, 等. 稀土Y变质对Al-7Si-0.35Mg合金中富铁相的影响机制 [J]. 兵器材料科学与工程, 2018, 41 (1): 38-42.
- [5] NITYANANDA Rajaram, HOHENBERG P, KOHN W. Inhomogeneous electron gas [J]. Resonance, 2017, 22 (8): 809-811.
- [6] CHEN B, ZHANG C H, JIN Y. First-principles calculation of interface binding strength and fracture performance of β '/Al interface in Al-Mg-Si-Cu alloy [J]. Journal of Alloys and Compounds, 2020, 830: 154515.
- [7] 杨阳, 毛萍莉, 刘正. 金属化合物MgAg和MgY在压力下力学性能的第一性原理计算 [J]. 铸造, 2017, 66 (4): 343-347.
- [8] 高岩, 毛萍莉, 刘正, 等. 压力下金属化合物MgZn₂和Mg₂Y力学性能的第一性原理研究 [J]. 铸造, 2019, 68 (7): 692-698.
- [9] 陈志谦, 李春梅, 李冠男, 等. 材料的设计、模拟与计算—CASTEP的原理及其应用 [M]. 北京: 科学出版社, 2019: 62.
- [10] 景力军. Al-Si系合金的微观组织调控及 α -Al相细化机理的研究 [D]. 南京: 东南大学, 2019.
- [11] 姜婉婷, 罗永春, 赵磊, 等. 稀土元素对R-Y-Ni系A₂B₇型无镁储氢合金微观结构和电化学性能的影响 [J]. 无机化学学报, 2018, 34 (10): 1817-1825.
- [12] 宁远涛, 周新铭, 戴红. 稀土元素在Al中固溶度亚稳扩展研究 [J]. 金属学报, 1992 (3): 49-54.
- [13] 刘晨, 米国发, 王有超, 等. 稀土元素Sc、Y掺杂对 α -Fe力学性能影响的第一性原理计算 [J]. 热加工工艺, 2019, 48 (22): 56-59, 75.
- [14] 李英民, 马鸣檀, 任玉艳, 等. 稀土La掺杂Mg₂Si的几何结构、弹性性能和电子结构的第一性原理研究 [J]. 材料工程, 2020, 48 (4): 100-107.

- [15] 章雅平, 唐荣奇, 赵伊君. 金属铝弹性常数从头计算的一种新方法 [J]. 国防科技大学学报, 1992, (4): 82-85.
- [16] BORN M, HUANG K, LAX M. Dynamical theory of crystal lattices [J]. American Journal of Physics, 1954, 39 (2): 113-127.
- [17] HILL R. On discontinuous plastic states, with special reference to localized necking in thin sheets [J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 1952, 1 (1): 19-30.
- [18] PUGH S, XCII F. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals [J]. Philosophical Magazine, 2009, 45 (367): 823-843.
- [19] FU C L, WANG X, YE Y Y, et al. Phase stability, bonding mechanism, and elastic constants of Mo_5Si_3 by first-principles calculation [J]. Intermetallics, 1999, 7 (2): 179-184.
- [20] ZHOU W, LIU L, LI B, et al. Structural, elastic, and electronic properties of Al-Cu intermetallics from first-principles calculations [J]. Journal of Electronic Materials, 2009, 38 (2): 356-364.

First-Principle Study on Effect of La and Ce Doping on Structure and Elastic Properties of α -Al

XU Qian^{1,2}, FU Gao-sheng^{1,2}, SONG Li-li¹, CHEN Hong-ling¹, WANG Huo-sheng³

(1. Fuzhou University, Fuzhou 350116, Fujian, China; 2. Minjiang University, Fuzhou 350108, Fujian, China; 3. Fujian College of Engineering, Fuzhou 350118, Fujian, China)

Abstract:

The geometric structure and elastic properties of La and Ce doped α -Al were calculated from atomic scale by the first-principles plane-wave pseudo-potential method based on the density functional theory. The work will provide theoretical basis for the development of cast Al-RE alloys. The results show that La and Ce doping can change the structural parameters of α -Al, the binding energy of Al-Ce solid solution is lower than that of Al-La solid solution, the structural stability of Al-Ce solid solution is relatively high; the elastic properties analysis shows that La and Ce doping reduces the modulus of elasticity of α -Al, weakens the deformation resistance and reduces the symmetry of α -Al, and the doping system of Al-La/Ce solid solution is anisotropy, especially La doping α -Al. The analysis results of density of states show that the doping of La and Ce will increase the density of states near the Fermi level which is not zero and makes the system show certain metal properties, resulting in the decrease of strength and hardness, and the improvement of plasticity and toughness.

Key words:

first-principle; La and Ce; α -Al; geometric properties; elastic properties; density of states