

Mg 和 Sc 掺杂 AlLi 相的弹性性质和德拜温度的第一性原理研究

田晋忠 马圣洁 陈瀚 鲁若鹏 赵宇宏 侯华
(中北大学材料科学与工程学院)

摘 要 基于第一性原理研究了 Mg 和 Sc 对 AlLi 相的弹性模量、各向异性和德拜温度的影响。结果表明, AlLi、Al₆₃Li₆₄X 和 Al₆₄Li₆₃X (X=Mg 和 Sc) 相在 0 K 均能形成稳定结构且满足力学稳定性判据。Mg 和 Sc 能提高 AlLi 相的剪切模量和杨氏模量, 但对改善 AlLi 相的体积模量起消极作用。AlLi、Al₆₃Li₆₄X 和 Al₆₄Li₆₃X 相的力学性能呈各向异性, 其中 Al₆₄Li₆₃Mg 的各向异性程度最高。AlLi 相的脆性随着 Mg 或 Sc 的掺杂而增大。AlLi、Al₆₃Li₆₄X 和 Al₆₄Li₆₃X 相的硬度和德拜温度具有相同的变化趋势。

关键词 第一性原理; AlLi 相; 弹性性质; 德拜温度

中图分类号 TG146.21 **文献标志码** A

DOI: 10.15980/j.tzzz.2022.08.004

开放科学(资源服务)标识码(OSID):



First-principle Method of Elastic Properties and Debye Temperature of Mg and Sc Doped AlLi Phase

Tian Jinzhong, Ma Shengjie, Chen Han, Lu Ruopeng, Zhao Yuhong, Hou Hua
(School of Materials Science and Engineering, North University of China)

Abstract: The effects of Mg and Sc elements on the elastic moduli, anisotropy, and Debye temperature of AlLi phase were investigated by first-principles method. The results indicate that AlLi, Al₆₃Li₆₄X and Al₆₄Li₆₃X (X=Mg and Sc) phases can form a stable structure at 0 K and meet the mechanical stability criterion. The shear modulus and Young's modulus of AlLi phase are increased by Mg and Sc elements, which play a negative role in improving the bulk modulus of AlLi phase. AlLi, Al₆₃Li₆₄X and Al₆₄Li₆₃X phases show anisotropy, among which Al₆₄Li₆₃Mg has the highest degree. The brittleness of AlLi phase is increased with the doping of Mg or Sc. The hardness and Debye temperature of AlLi, Al₆₃Li₆₄X and Al₆₄Li₆₃X phases have the similar changing trend.

Key Words: First-principle, AlLi Phase, Elastic Properties, Debye Temperature

Al-Li 合金具有密度低、弹性模量高和断裂韧度好等特点, 成为航空航天领域中最具发展前景的结构材料之一^[1]。在二元和三元 Al-Li 合金中亚稳相 δ' -Al₃Li 相是一种主要强化相^[2], 但随着时效时间延长, δ' 相的含量会降低并形成平衡相 δ -AlLi。 δ 相的弹性模量比 δ' 相的弹性模量低, 且其对 Al-Li 合金的力学性能起负面作用^[3~5]。因而, 系统研究 δ 相的结构和性质有利于揭示其对合金性能的影响机理。

第一性原理是一种预测相结构及性质的有效方法^[6,7]。UESUGI T 等^[8] 基于广义梯度近似泛函预测了 AlLi 晶体的弹性常数、弹性模量和各向异性, 发现在

$\langle 111 \rangle$ 晶向簇方向 AlLi 晶体具有最大的杨氏模量。陈丽娟等^[9] 发现与 Li 空位相比, AlLi 相中的 Al 空位不仅形成难度高, 而且对能带和电子态密度有较大的影响。GUO X Q 等^[10] 分析了不同结构(如 B32、B2 和 L1₀) 对 AlLi 相电子性质的影响, 发现 B32 结构的 AlLi 相具有较高的稳定性。CHEN D 等^[11] 发现在 0~20 GPa 的压力范围内 AlLi 相呈现脆性和各向异性; 当温度为 300 K 时, AlLi 相的热膨胀系数为 3.65×10^{-5} /K。GUO Y 等^[12] 建立了 AlLi 相中 Zn 原子替代 Al 位的掺杂模型, 发现 Zn 掺杂能降低 AlLi 相的各向异性, 并提高晶体的刚度。在 Al-Li 合金中加入其他不同种类的

收稿日期: 2022-01-24; 修改稿收到日期: 2022-04-06
基金项目: 山西省科技重大专项基金资助项目(20191102008, 20191102007); 国家自然科学基金资助项目(52074246, 22008224, 51774253); 山西省基础研究计划资助项目(20210302124632); 山西省高等学校科技创新计划资助项目(2020L0280); 中北大学科学研究基金资助项目(XJJ201909); 中北大学青年学术带头人资助项目(11045505)
第一作者简介: 田晋忠, 男, 1990 年出生, 讲师, 太原(030051), E-mail: tianjinzhong@nuc.edu.cn
通信作者: 赵宇宏, 女, 1974 年出生, 教授, 太原(030051), E-mail: zhaoyuhong@nuc.edu.cn
引用格式: 田晋忠, 马圣洁, 陈瀚, 等. Mg 和 Sc 掺杂 AlLi 相的弹性性质和德拜温度的第一性原理研究[J]. 特种铸造及有色合金, 2022, 42(8): 940-943.
TIAN J Z, MA S J, CHEN H, et al. First-principle method of elastic properties and debye temperature of Mg and Sc doped AlLi phase[J]. Special Casting & Nonferrous Alloys, 2022, 42(8): 940-943.

微合金化元素(如 Mg 和 Sc),也能起到调控结构及性质的积极作用^[13,14]。但是,Mg 和 Sc 对 AlLi 相结构和性质的影响尚不明确。

因此,在本课题中构建含微合金化元素 $X(X=\text{Mg}$ 和 $\text{Sc})$ 的掺杂模型,并基于第一性原理,系统探究 Mg 和 Sc 对 AlLi 相的形成焓、弹性常数、弹性模量、延展性和德拜温度等的影响。

1 计算模型与方法

AlLi 相的化学式为 Al_8Li_8 , 晶格常数 $a=b=c=0.637\text{ nm}$ 。为探究微合金化元素 $X(X=\text{Mg}$ 和 $\text{Sc})$ 对 AlLi 相结构和性质的影响,构建了含 128 个原子的 $2\times$

2×2 超胞模型,见图 1。图 1 超胞中一个 Al 或 Li 原子被一个微合金化元素取代,进而形成了两种不同的掺杂模型: $\text{Al}_{63}\text{Li}_{64}X$ 和 $\text{Al}_{64}\text{Li}_{63}X$ 。

采用基于密度泛函理论的 CASTEP 软件包(Cambridge Sequential Total Energy Package)^[15]来预测 AlLi 相及其掺杂模型的结构和性质。交换关联泛函采用广义梯度近似 GGA(Generalized Gradient Approximation)的 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE)泛函^[16]。AlLi 相及掺杂模型的平面波截断能均设置为 500 eV;AlLi、 $\text{Al}_{63}\text{Li}_{64}X$ 和 $\text{Al}_{64}\text{Li}_{63}X$ 的 k 点网格分别设置为: $18\times 18\times 18$ 、 $8\times 8\times 8$ 和 $8\times 8\times 8$ 。几何优化过程中最大压力的收敛阈值设定为 0.02 GPa。

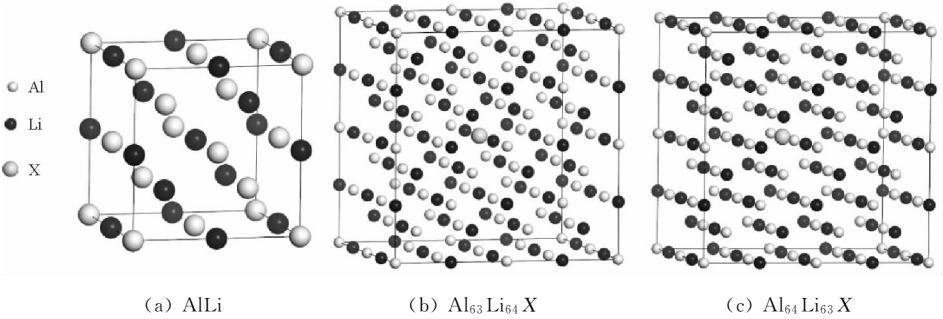


图 1 AlLi、 $\text{Al}_{63}\text{Li}_{64}X$ 、 $\text{Al}_{64}\text{Li}_{63}X(X=\text{Mg}$ 和 $\text{Sc})$ 的晶体模型

Fig.1 Crystal model of AlLi, $\text{Al}_{63}\text{Li}_{64}X$ and $\text{Al}_{64}\text{Li}_{63}X(X=\text{Mg}$ and $\text{Sc})$

2 计算结果与分析

2.1 结构性质

基于第一性原理计算了 AlLi、 $\text{Al}_{63}\text{Li}_{64}X$ 和 $\text{Al}_{64}\text{Li}_{63}X(X=\text{Mg}$ 和 $\text{Sc})$ 相的晶格常数和形成焓,见表 1。预测的 AlLi 相的晶格常数($a=0.637\text{ 1 nm}$)与理论计算值($a=0.636\text{ 5 nm}$)^[5]相一致,验证模拟方法的准确性。形成焓(ΔH_f)反映了 AlLi 及掺杂结构形成的难易程度,计算公式如下:

$$\Delta H_f = \frac{1}{a+b+c} \times (E_{\text{tot}} - aE_{\text{solid}}^{\text{Al}} - bE_{\text{solid}}^{\text{Li}} - cE_{\text{solid}}^X) \tag{1}$$

式中, a 、 b 和 c 分别为 AlLi 相或 Al-Li-X 相中 Al、Li 和掺杂元素 X 的原子个数; E_{tot} 为晶体的总能量; $E_{\text{solid}}^{\text{Al}}$ 、 $E_{\text{solid}}^{\text{Li}}$ 和 E_{solid}^X 分别为固态 Al、Li 和掺杂元素中单个原子的能量。从表 1 可知,AlLi、 $\text{Al}_{63}\text{Li}_{64}X$ 和 $\text{Al}_{64}\text{Li}_{63}X(X=\text{Mg}$ 和 $\text{Sc})$ 相的形成焓均为负值,意味着这 5 种相均能形成稳定结构。AlLi 相及其掺杂结构的形成焓从大到小依次为: $\text{Al}_{63}\text{Li}_{64}\text{Sc}$ 、 $\text{Al}_{64}\text{Li}_{63}\text{Mg}$ 、 $\text{Al}_{63}\text{Li}_{64}\text{Mg}$ 、Al-Li、 $\text{Al}_{64}\text{Li}_{63}\text{Sc}$,这说明掺杂 Mg 会增加 AlLi 相的形成难度,只有 $\text{Al}_{64}\text{Li}_{63}\text{Sc}$ 相的形成能力略高于 AlLi 相。对于掺杂 Mg 的 AlLi 相, $\text{Al}_{63}\text{Li}_{64}\text{Mg}$ 相更容易形成;而

在掺杂 Sc 的 AlLi 相中, $\text{Al}_{63}\text{Li}_{64}\text{Sc}$ 较难形成。

表 1 AlLi、 $\text{Al}_{63}\text{Li}_{64}X$ 、 $\text{Al}_{64}\text{Li}_{63}X(X=\text{Mg}$ 和 $\text{Sc})$ 的晶格常数和形成焓

Tab.1 The lattice parameters and formation enthalpy of AlLi, $\text{Al}_{63}\text{Li}_{64}X$ and $\text{Al}_{64}\text{Li}_{63}X(X=\text{Mg}$ and $\text{Sc})$		
合金相	晶格常数 a/nm	形成焓 $\Delta H_f/(\text{eV} \cdot \text{atom}^{-1})$
AlLi	0.637 1	-0.180 7
$\text{Al}_{64}\text{Li}_{63}\text{Mg}$	1.276 1	-0.174 0
$\text{Al}_{63}\text{Li}_{64}\text{Mg}$	1.275 7	-0.180 0
$\text{Al}_{64}\text{Li}_{63}\text{Sc}$	1.275 8	-0.180 8
$\text{Al}_{63}\text{Li}_{64}\text{Sc}$	1.277 3	-0.173 1

2.2 弹性性质

立方结构的 AlLi、 $\text{Al}_{63}\text{Li}_{64}X$ 和 $\text{Al}_{64}\text{Li}_{63}X(X=\text{Mg}$ 和 $\text{Sc})$ 相有 3 个独立的弹性常数(C_{ij}),即: C_{11} 、 C_{12} 和 C_{44} 。AlLi 相及其掺杂结构的 C_{ij} 见表 2。预测的 AlLi 相的 C_{ij} 与 UESUGI T 等^[8] 计算的理论值($C_{11}=66.9\text{ GPa}$ 、 $C_{12}=38.2\text{ GPa}$ 和 $C_{44}=51.7\text{ GPa}$)接近,证明了计算结果的可靠性。

AlLi、 $\text{Al}_{63}\text{Li}_{64}X$ 和 $\text{Al}_{64}\text{Li}_{63}X(X=\text{Mg}$ 和 $\text{Sc})$ 相的 C_{ij} 均满足立方晶体的弹性稳定性判据($C_{11}-C_{12}>0$, $C_{11}>0$, $C_{44}>0$, $C_{11}+2C_{12}>0$)^[17],说明这 5 个合金相在 0 GPa 时表现出力学稳定性。AlLi 相及其掺杂结构的 C_{11} 大于 C_{12} 和 C_{44} ,说明这些相在 x 轴方向较难压缩。

表 2 AlLi、Al₆₃Li₆₄X、Al₆₄Li₆₃X(X=Mg 和 Sc)的弹性常数 C_{ij} 、
体积模量 B 、剪切模量 G 、杨氏模量 E 、 B/G 比和硬度 H_v 、

Tab.2 The elastic constants C_{ij} , bulk modulus B , shear modulus G , Young's modulus E , B/G ratio and Vickers hardness

H_v of AlLi, Al ₆₃ Li ₆₄ X and Al ₆₄ Li ₆₃ X(X=Mg and Sc)								
合金相	$C_{11}/$ GPa	$C_{12}/$ GPa	$C_{44}/$ GPa	$B/$ GPa	$G/$ GPa	$E/$ GPa	B/G	$H_v/$ GPa
AlLi	66.2	38.1	50.3	47.5	30.3	75.0	1.57	5.7
Al ₆₄ Li ₆₃ Mg	66.6	37.9	52.5	47.5	31.3	77.0	1.52	6.2
Al ₆₃ Li ₆₄ Mg	68.5	36.4	55.0	47.1	33.7	81.6	1.40	7.6
Al ₆₄ Li ₆₃ Sc	67.5	37.3	52.0	47.4	31.8	77.9	1.49	6.5
Al ₆₃ Li ₆₄ Sc	67.4	36.8	53.3	47.0	32.4	79.1	1.45	6.9

AlLi、Al₆₃Li₆₄X 和 Al₆₄Li₆₃X(X=Mg 和 Sc)相的
体积模量 B 、剪切模量 G 和杨氏模量 E 可通过 Voigt-
Reuss-Hill 近似方法^[18] 计算。由表 2 可见,Mg 和 Sc
的掺杂不能提高 AlLi 相的体积模量 B ,表明 Mg 和 Sc
元素不具备改善 AlLi 相抵抗体积变形的能力。
Al₆₄Li₆₃X(X=Mg 和 Sc)的 B 大于 Al₆₃Li₆₄X,说明
Mg 和 Sc 元素占据 Li 位时能表现出相对较高的抵抗体
积变形的能力。掺杂 Mg 和 Sc 能增大 AlLi 相的 E 和
 G ,且这些合金相的 E 和 G 有着相同的变化趋势,即 E
或 G 的值从小到大的排序为 AlLi、Al₆₄Li₆₃Mg、
Al₆₄Li₆₃Sc、Al₆₃Li₆₄Sc、Al₆₃Li₆₄Mg。因而,Mg 和 Sc 的
添加能改善 AlLi 相的抗剪切变形能力和刚度。当 Mg
或 Sc 元素占据 AlLi 相的 Al 位时,掺杂结构具有相对
较高的 E 和 G ,表明 Al₆₃Li₆₄X 的抗剪切变形能力和刚
度优于 Al₆₄Li₆₃X,这个结果与合金元素 X 对 B 的影响
完全不同。与 AlLi 化合物相比,Al₆₄Li₆₃Mg、
Al₆₃Li₆₄Mg、Al₆₄Li₆₃Sc 和 Al₆₃Li₆₄Sc 的 G 值分别提高
了 3.3%、11.2%、5.0% 和 6.9%;而 E 值分别增加了
2.7%、8.8%、3.9% 和 5.5%,表明 Mg 或 Sc 元素在改善
AlLi 相的抗剪切变形能力方面具有较大的优势。

AlLi 相及掺杂结构的延展性可通过 Pugh 给出的
经验公式(B/G)来预测^[19]。当 $B/G>1.75$ 时,材料趋
于体现延展性;反之,材料则表现为脆性。由表 2 可见,
AlLi、Al₆₃Li₆₄X 和 Al₆₄Li₆₃X(X=Mg 和 Sc)相的 B/G
值均小于 1.75,说明这几种相都表现为脆性^[20]。
Al₆₃Li₆₄X 和 Al₆₄Li₆₃X 的 B/G 值比 AlLi 小,表明 AlLi
相的脆性会随着 Mg 或 Sc 的掺杂而增大。尤其是当
Mg 或者 Sc 元素占据 Al 位时,会显著增大 AlLi 相的
脆性。

硬度也是一种反映 AlLi 相力学性质的重要参数。
CHEN X Q 等^[21] 基于硬度与弹性之间的内在关联性提
出了预测多晶体硬度的理论模型,计算公式如下:

$$H_v=2\left(\frac{G^3}{B^2}\right)^{0.585}-3$$

(2)

由表 2 可知,AlLi、Al₆₃Li₆₄X 和 Al₆₄Li₆₃X(X=

Mg 和 Sc)相的 H_v 值从大到小顺序为:Al₆₃Li₆₄Mg>
Al₆₃Li₆₄Sc>Al₆₄Li₆₃Sc>Al₆₄Li₆₃Mg>AlLi。
Al₆₄Li₆₃Mg、Al₆₃Li₆₄Mg、Al₆₄Li₆₃Sc 和 Al₆₃Li₆₄Sc 维氏
硬度比 AlLi 相分别增大了 9.2%、33.0%、13.5% 和
21.6%。因而,Mg 和 Sc 元素能起到改善 AlLi 相维氏
硬度的作用,尤其是 Al₆₃Li₆₄Mg 具有最高的硬度。

各向异性反映了晶体沿不同方向力学性质的差异
性。采用通用各向异性因子 A^U ^[22]、压缩各向异性系数
 A_B 和剪切各向异性系数 A_G 来评估晶体的各向异性程
度,计算公式为:

$$A^U=5\frac{G_V}{G_R}+\frac{B_V}{B_R}-6$$

(3)

$$A_B=\frac{B_V-B_R}{B_V+B_R}$$

(4)

$$A_G=\frac{G_V-G_R}{G_V+G_R}$$

(5)

式中, $G_V(B_V)$ 和 $G_R(B_R)$ 分别为 Voigt 和 Reuss 剪切
(体积)模量。如果 $A^U=A_B=A_G=0$,则晶体为各向同
性;反之,偏离 0 的程度越大,晶体的各向异性程度越
高。根据表 3 可知,AlLi、Al₆₃Li₆₄X 和 Al₆₄Li₆₃X(X=
Mg 和 Sc)相的 A^U 值均大于 0,且偏离 0 的程度由大到
小的顺序为 Al₆₄Li₆₃Mg、AlLi、Al₆₃Li₆₄Sc、Al₆₄Li₆₃Sc、
Al₆₃Li₆₄Mg。因此,AlLi 及掺杂结构总体呈现各向异
性,且 Sc 能降低 AlLi 相各向异性。AlLi、Al₆₃Li₆₄X 和
Al₆₄Li₆₃X(X=Mg 和 Sc)相的 $A_G>0$,说明这些相呈
现剪切各向异性。

表 3 AlLi、Al₆₃Li₆₄X、Al₆₄Li₆₃X(X=Mg 和 Sc)的通用各向异性
因子 A^U 、压缩各向异性 A_B 、剪切各向异性 A_G 和德拜温度 Θ_D

Tab.3 The universal anisotropy index A^U , compressible
anisotropy A_B , shear anisotropy A_G and Debye temperature
 Θ_D of AlLi, Al₆₃Li₆₄X and Al₆₄Li₆₃X(X=Mg and Sc)

合金相	A^U	A_B	A_G	Θ_D/K'
AlLi	2.226	0	0.182	544
Al ₆₄ Li ₆₃ Mg	2.320	0	0.188	551
Al ₆₃ Li ₆₄ Mg	2.066	0	0.171	573
Al ₆₄ Li ₆₃ Sc	2.077	0	0.172	552
Al ₆₃ Li ₆₄ Sc	2.119	0	0.175	561

2.3 德拜温度

德拜温度 Θ_D 与原子间的结合力有关,其反映了晶
体的多种物理性质。基于已获得的弹性常数,能计算
AlLi、Al-Li-X(X=Mg 和 Sc)相的德拜温度^[23],具体
计算公式如下:

$$\Theta_D=\frac{h}{k_B}\left[\frac{3n}{4\pi}\left(\frac{N_A\rho}{M}\right)\right]^{\frac{1}{3}}v_m$$

(6)

$$v_m=\left[\frac{1}{3}\left(\frac{2}{v_s^3}+\frac{1}{v_l^3}\right)\right]^{-1/3}$$

(7)

$$v_t = \sqrt{G/\rho} \quad (8)$$

$$v_l = \sqrt{(3B + 4G)/3\rho} \quad (9)$$

式中, h 、 k_B 、 N_A 分别为普朗克常数、玻尔兹曼常数和阿伏伽德罗常数; n 、 ρ 和 M 分别为 AlLi 或 Al-Li-X 相的原子个数、密度和相对分子质量。AlLi、Al₆₃Li₆₄X 和 Al₆₄Li₆₃X 相的 Θ_D 见表 3。 Θ_D 值由小到大的顺序为: AlLi、Al₆₄Li₆₃Mg、Al₆₄Li₆₃Sc、Al₆₃Li₆₄Sc、Al₆₃Li₆₄Mg, 说明掺杂 Mg 或 Sc 元素能提高 AlLi 相的 Θ_D 。因而, AlLi 相 Θ_D 值(544 K)最小, 而 Al₆₃Li₆₄Mg 具有最大的 Θ_D 值(573 K)。Al₆₄Li₆₃Mg、Al₆₃Li₆₄Mg、Al₆₄Li₆₃Sc 和 Al₆₃Li₆₄Sc 比 AlLi 相的 Θ_D 分别提高了 1.3%、5.3%、1.5% 和 3.1%, 表明掺杂元素 Mg 或 Sc 占据 Al 位时能有效改善 AlLi 相的 Θ_D 。这 5 种相的 Θ_D 值的变化趋势与硬度一致, 可能是因为 Mg 或者 Sc 的掺杂增大了原子间的结合力。

3 结 论

(1) AlLi、Al₆₃Li₆₄X 和 Al₆₄Li₆₃X ($X = \text{Mg}$ 和 Sc) 相均能形成稳定结构, 其中 Al₆₃Li₆₄Sc 相较难形成。

(2) AlLi、Al₆₃Li₆₄X 和 Al₆₄Li₆₃X ($X = \text{Mg}$ 和 Sc) 相在 0 K 时呈现力学稳定。Mg 和 Sc 难以有效提高 AlLi 相的抵抗体积变形的能力, 但能增加 AlLi 相抗剪切变形能力和刚度。

(3) AlLi 及掺杂结构均呈现脆性和各向异性, 且各向异性程度从高到低依次为: Al₆₄Li₆₃Mg、AlLi、Al₆₃Li₆₄Sc、Al₆₄Li₆₃Sc、Al₆₃Li₆₄Mg; Mg 或 Sc 元素能提高 AlLi 相的德拜温度, 其中 Al₆₃Li₆₄Mg 相具有最高的 Θ_D 值。

参 考 文 献

- [1] EL-ATY A A, XU Y, GUO X, et al. Strengthening mechanisms, deformation behavior, and anisotropic mechanical properties of Al-Li alloys: A review[J]. Journal of Advanced Research, 2018, 10: 49-67.
- [2] PLETCHER B A, WANG K G, GLICKSMAN M E. Experimental, computational and theoretical studies of δ' phase coarsening in Al-Li alloys[J]. Acta Materialia, 2012, 60(16): 5 803-5 817.
- [3] LIU D, YÜREKLI B, ULLSPERGER T, et al. Microstructural aspects of additive manufacturing of Al-Li alloys with high Li content[J]. Materials & Design, 2021, 198: 109 323.
- [4] TIAN J Z, ZHAO Y H, HOU H, et al. The effect of alloying elements on the structural stability, mechanical properties, and debye temperature of Al₃Li: A first-principles study[J]. Materials, 2018, 11(8): 1 471.
- [5] MOGULKOC Y, CIFTCI Y O, SURUCU G. Structural phase transition, electronic, elastic, and vibrational properties of LiAl intermetallic compound: Insights from first-principles calculations[J]. Canadian Journal of Physics, 2017, 95(8): 691-698.
- [6] 李越鑫, 田晓林, 杨文奎, 等. Zr 合金 ZrH₂ 相中 H 原子扩散行为的

- 第一性原理研究[J]. 特种铸造及有色合金, 2021, 41(5): 562-566.
- [7] 赵宇宏, 景舰辉, 陈利文, 等. 装甲防护陶瓷-金属叠层复合材料界面研究进展[J]. 金属学报, 2021, 57(9): 1 107-1 125.
- [8] UESUGI T, TAKIGAWA Y, HIGASHI K. Elastic constants of AlLi from first principles[J]. Materials Transactions, 2005, 46 (6): 1 117-1 121.
- [9] 陈丽娟, 侯柱锋, 朱梓忠, 等. LiAl 中空位形成能的第一原理计算[J]. 物理学报, 2003, 52(9): 2 229-2 234.
- [10] GUO X Q, PODLOUCKY R, FREEMAN A J. Structural and electronic structural properties of ordered LiAl compounds[J]. Physical Review, 1989, B40(5): 2 793-2 800.
- [11] CHEN D, CANG Y P, LUO Y S, et al. Temperature and pressure effects on the elasticity behavior, electronic and vibrational properties of Al, Li, LiAl and Li₂Al: A density functional theory study[J]. Computational Materials Science, 2015, 106: 50-58.
- [12] GUO Y, WANG W, HUANG H, et al. Effect of doping Zn atom on the structural stability, mechanical and thermodynamic properties of AlLi phase in Mg-Li alloys from first-principles calculations[J]. Philosophical Magazine, 2020, 100(14): 1 849-1 867.
- [13] IVANOV R, DESCHAMPS A, DE GEUSER F. High throughput evaluation of the effect of Mg concentration on natural ageing of Al-Cu-Li-(Mg) alloys[J]. Scripta Materialia, 2018, 150: 156-159.
- [14] SHI C, ZHANG L, WU G, et al. Effects of Sc addition on the microstructure and mechanical properties of cast Al-3Li-1.5Cu-0.15Zr alloy[J]. Materials Science and Engineering, 2017, A680: 232-238.
- [15] SEGALL M D, LINDAN P J D, PROBERT M J, et al. First-principles simulation: Ideas, illustrations and the CASTEP code[J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2002, 14 (11): 2 717-2 744.
- [16] PERDEW J P, BURKE K, ERNZERHOF M. Generalized gradient approximation made simple[J]. Physical Review Letters, 1996, 77(18): 3 865-3 868.
- [17] MOUHAT F, COUDERT F X. Necessary and sufficient elastic stability conditions in various crystal systems[J]. Physical Review, 2014, B90(22): 224 104.
- [18] HILL R. The elastic behaviour of a crystalline aggregate[J]. Proceedings of the Physical Society, 1952, A65(5): 349-354.
- [19] PUGH S F. XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals[J]. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 1954, 45(367): 823-843.
- [20] ZHAO Y, DENG S, LIU H, et al. First-principle investigation of pressure and temperature influence on structural, mechanical and thermodynamic properties of Ti₃AC₂ ($A = \text{Al}$ and Si) [J]. Computational Materials Science, 2018, 154: 365-370.
- [21] CHEN X Q, NIU H, LI D, et al. Modeling hardness of polycrystalline materials and bulk metallic glasses [J]. Intermetallics, 2011, 19(9): 1 275-1 281.
- [22] RANGANATHAN S I, OSTOJA-STARZEWSKI M. Universal elastic anisotropy index[J]. Physical Review Letters, 2008, 101 (5): 055 504.
- [23] ANDERSON O L. A simplified method for calculating the Debye temperature from elastic constants[J]. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 1963, 24(7): 909-917.

(编辑: 栗万仲)