

H 对  $Mg_2Si$  力学性能影响的第一性原理研究\*

付正鸿 李婷 单美乐 郭糠 苟国庆†

(西南交通大学, 先进材料教育部重点实验室, 成都 610031)

(2019 年 3 月 4 日收到; 2019 年 6 月 15 日收到修改稿)

Al-Mg-Si 系铝合金在氢环境服役时, 因遭受氢损伤而导致力学性能退化.  $Mg_2Si$  是 Al-Mg-Si 系铝合金主要的热处理强化相, 其力学性能直接决定着 Al-Mg-Si 系铝合金的强度. 本文采用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法, 研究了间隙 H 原子对  $Mg_2Si$  力学性能的影响. 首先计算了  $Mg_2Si$  的单晶体弹性常数  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  和  $C_{44}$ , 在通过 Hill 模型计算了多晶体的弹性模量、泊松比及硬度, 并进一步计算了 H 对  $Mg_2Si$  晶粒拉伸性能的影响, 最后对 H 原子掺杂引起的  $Mg_2Si$  晶体态密度变化进行了分析. 结果表明: H 原子的引入显著降低  $Mg_2Si$  晶体的剪切模量和弹性模量, 从而使得体系强度、硬度降低, 韧性提高. 拉伸性能计算也表明 H 原子引起  $Mg_2Si$  晶体断裂强度降低、断裂延伸率提高. 态密度分析表明,  $Mg_2Si$  晶体中引入氢原子, 将引起  $Mg_2Si$  晶体由半导体性质向金属性质的转变, 从而造成体系强度、硬度的降低, 韧性增加. 本文计算结果可以为揭示以  $Mg_2Si$  为增强相的材料在氢环境中强度降低机理提供参考依据.

**关键词:** 第一性原理,  $Mg_2Si$ , 弹性性质, 态密度

**PACS:** 71.20.-b, 71.22.+i, 43.35.Cg, 31.15.E-

**DOI:** 10.7498/aps.68.20190368

## 1 引言

$Mg_2Si$  金属间化合物是 Al-Mg-Si 系铝合金主要的热处理强化相, 高弹性模量、高硬度的  $Mg_2Si$  颗粒弥散分布于铝合金基体中, 通过阻碍位错运动在 Al-Mg-Si 系铝合金形成弥散强化作用, 使铝合金强度硬度大幅度提高<sup>[1,2]</sup>. 由于  $Mg_2Si$  的高熔点 (1085 °C)<sup>[3]</sup>, 被用于替代 SiC 陶瓷制备铝基复合材料, 且具有良好的切削加工性和成形性. 因此,  $Mg_2Si$  金属间化合物的研究备受关注<sup>[4]</sup>.

对于  $Mg_2Si$  金属间化合物的理论研究, 主要采用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法. 任玉艳等<sup>[5]</sup>对  $Mg_2Si$  金属间化合物的结构稳定性、热力学和力学性能进行了系统的第一性原理计算研究, 理论计算值与实验值十分接近. 余本海等<sup>[6]</sup>

采用第一性原理的方法对  $Mg_2Si$  的同质异相体的晶体结构、电子结构及弹性性质进行了全面研究.

氢由于其原子半径极小, 容易在材料中扩散, 并引起材料性能的变化. 氢原子对晶体结构和力学性质影响的第一性原理计算已经成为目前研究的热点. 韩秀丽等<sup>[7]</sup>采用第一性原理的方法对 Ti-H 体系的晶体结构和能量进行了研究, 氢原子的加入引起 Ti 晶体的晶格畸变, 降低了晶体的结合能. 氢在  $\alpha$ -Fe 和  $\gamma$ -Fe 中掺杂均使晶体结构产生不同程度的畸变, 并降低了材料的塑性<sup>[8,9]</sup>. 姚宝殿等<sup>[10]</sup>的研究显示氢对  $Ti_3SiC_2$  的力学性质影响不大. 对  $\alpha$ -Ti—H 键重叠集居数的研究发现<sup>[11]</sup>, 氢减弱了近邻原子间的成键强度, 存在弱键效应; 而在  $\beta$ -Ti—H 中, 氢增加了近邻钛原子间的键重叠集居数, 存在强键效应. 氢的加入也会使 Nb 晶体发生类似的电子结构变化<sup>[12]</sup>.  $\alpha$ - $Fe_2O_3$ —H 中, H 和

\* 西南交通大学博士创新基金 (批准号: D-CX201831) 和国家重点研发计划 (批准号: 2016YFB1200602-16) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: [gouguoqing1001@163.com](mailto:gouguoqing1001@163.com)

O 之间成键, 费米面附近出现了新的杂化能级, 价带顶变宽, 同时带隙由于导带底下移而减小, 表明氢可以用来调节能带结构<sup>[13]</sup>.

本文采用基于密度泛函理论的第一性原理方法, 构建  $\text{Mg}_2\text{Si}$ -H 体系, 研究了氢原子浓度变化对  $\text{Mg}_2\text{Si}$  金属间化合物弹性性质的影响, 并对其力学性能的变化进行了深入分析.

## 2 计算方法

$\text{Mg}_2\text{Si}$  金属间化合物具有反萤石结构, 空间群号为  $Fm\bar{3}m$  (No. 255), 为面心立方 (FCC) 结构, 晶格常数  $a = b = c = 0.676 \text{ nm}$ ,  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ <sup>[14]</sup>. Si 原子占据顶角和面心位置, Mg 原子位于 Si 原子组成的四面体间隙中形成边长为  $0.5a$  的简单立方结构, 余留体心位置的八面体间隙, 成为 H 等小半径原子优先固溶位置.

本文采用基于密度泛函理论 (DFT) 和平面波赝势的 CASTEP (Cambridge sequential total energy package) 模块, 对不同 H 原子浓度的  $\text{Mg}_2\text{Si}$ -H 体系进行模拟计算. 首先构建  $\text{Mg}_2\text{Si}$  晶

胞, 几何优化后构建  $1 \times 1 \times 1$ ,  $1 \times 1 \times 2$ ,  $1 \times 2 \times 2$  的  $\text{Mg}_2\text{Si}$  超晶胞, 在体心八面体间隙中掺杂 H 原子, 形成 H 原子掺杂浓度分别为 7.69 at.%, 4 at.% 和 2.05 at.% 的  $\text{Mg}_2\text{Si}$ -H 体系, 如图 1 所示. 对掺杂 H 原子后的超晶胞再进行几何优化, 得到稳定的  $\text{Mg}_2\text{Si}$ -H 体系, 然后对  $\text{Mg}_2\text{Si}$ -H 体系进行弹性性质计算. 为更直观地反映 H 原子掺杂对  $\text{Mg}_2\text{Si}$  力学性的影响, 分别计算了  $1 \times 1 \times 2$  的  $\text{Mg}_2\text{Si}$  超晶胞和  $1 \times 1 \times 2$  的  $\text{Mg}_2\text{Si}$ -H (4 at.%) 超晶胞沿 [001] 方向进行拉伸的应力-应变曲线. 拉伸应变通过改变晶胞 [001] 方向的尺寸进行施加, 几何优化后获得对应的应力值.

计算过程采用周期性边界条件, 结构优化和弹性性质计算过程中, 采用广义梯度近似 (general gradient approximation, GGA) 中的质子平衡方程 (proton balance equation, PEB) 来处理电子间的交互关联能, 势函数选用倒异空间中表述的超软赝势 (ultrasoft pseudopotential). 计算中平面波截断能量 (cut off energy) 取 400 eV, 最大内应力为  $1 \times 10^{-3} \text{ GPa}$ , 原子最大位移为  $2 \times 10^{-4} \text{ nm}$ , 能量收敛标准为  $1 \times 10^{-6} \text{ eV/atom}$ . 第一布里渊区  $k$ -point

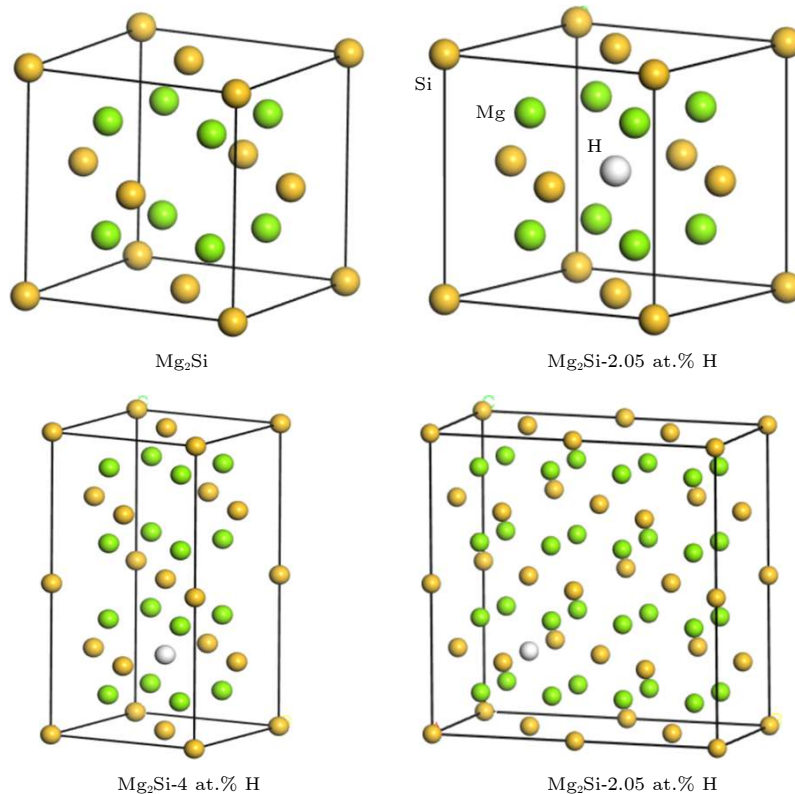


图 1 H 原子位于八面体间隙的  $\text{Mg}_2\text{Si}$ -H 体系超晶胞结构模型

Fig. 1. Super-cell structural model of  $\text{Mg}_2\text{Si}$ -H system.

矢量分别取  $9 \times 9 \times 9$ ,  $9 \times 9 \times 4$  和  $9 \times 4 \times 4$ .

在三向应力下, 材料共有 36 个弹性常数  $C_{ij}$  ( $i = 1-6, j = 1-6$ ).  $\text{Mg}_2\text{Si}$  晶体为立方结构, 因此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  $[011]$  三个方向的抗变形能力. 当  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  和  $C_{44}$  同时满足  $C_{11}-C_{12} > 0$ ,  $C_{11} > 0$ ,  $C_{44} > 0$  和  $C_{11}+2C_{12} > 0$  四个条件时, 合金体系才可以稳定存在, 满足力学性能稳定性条件<sup>[15]</sup>. 立方晶系剪切模量  $C'$  可由  $C_{11}$  和  $C_{12}$  计算:

$$C' = \frac{C_{11} - C_{12}}{2}. \quad (1)$$

材料的力学性质在微观上可以通过弹性常数、体模量、杨氏模量、剪切模量、泊松比和体模量/剪切模量之比等体现. 多晶弹性模量通常可由单晶弹性常数计算获得, 计算方法可用 Voigt 模型和 Reuss 模型描述. 经验证, Voigt 模型和 Reuss 模型所得模量通常为多晶模量的上限和下限, 因此 Hill<sup>[16,17]</sup> 对两者进行数学平均, 发现所得值与实测值一致性更好. 因此, 实际应用中 Hill 模型更为常用. 因此本文中  $\text{Mg}_2\text{Si}$  体模量  $B_H$ , 剪切模量  $G_H$  和杨氏模量  $E$  的计算如下:

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

$$G_V = \frac{1}{5}(C_{11} - C_{12} + C_{44}), \quad (3)$$

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

其中  $B_V$  和  $G_V$  分别为 Voigt 模型的体积模量和剪切模量,  $B_R$  和  $G_R$  分别为 Reuss 模型的体积模量和剪切模量. Hill 模型中体积模量  $B$  和剪切模量  $G$  分别为:

$$B_H = \frac{B_V + B_R}{2}, \quad (5)$$

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

杨氏模量  $E$  和泊松比  $\nu$  可由  $B$  和  $G$  计算得到<sup>[18,19]</sup>:

$$E = \frac{9B_H G_H}{3B_H + G_H}, \quad (7)$$

$$\nu = \frac{3B_H - 2G_H}{2(3B_H + G_H)}. \quad (8)$$

通常情况下,  $B$  反映材料抗体积压缩能力;  $G$  反映材料抗剪切应变的能力, 且与硬度相关<sup>[19]</sup>;  $E$  反映材料抗正应变的能力, 也反映材料的硬度,  $E$  越大, 材料的硬度越高<sup>[20]</sup>. 剪切应力下,  $\nu$  越小则稳定性越好.  $B$  与  $G$  的比值是材料工程应用中必须考虑的重要参数, 能反映材料的脆韧性, 以 1.75 作为临界值. 当  $B/G > 1.75$  时材料呈韧性, 否则呈脆性<sup>[20,21]</sup>.

材料的硬度与剪切模量、体模量之间存在直接的对应关系<sup>[22,23]</sup>. Miao 等<sup>[24]</sup> 在通过第一性原理研究材料的力学性质中, 提出了硬度  $H$  与杨氏模量  $E$  和泊松比  $\nu$  之间计算的经验公式:

$$H = \frac{(1 - 2\nu)E}{6(1 + \nu)}. \quad (9)$$

### 3 计算结果与分析

#### 3.1 晶体弹性常数

$\text{Mg}_2\text{Si}$ -H 体系晶体弹性常数  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$  和  $C'$  计算结果如表 1 所列. 从表 1 中可以看出, 所有体系中  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  和  $C_{44}$  均同时满足  $C_{11}-C_{12} > 0$ ,  $C_{11} > 0$ ,  $C_{44} > 0$  和  $C_{11}+2C_{12} > 0$  四个条件, 说明本文所建立的  $\text{Mg}_2\text{Si}$ -H 体系可以稳定存在, 满

表 1  $\text{Mg}_2\text{Si}$ -H 体系晶体弹性常数计算结果  
Table 1. Elastic constant of  $\text{Mg}_2\text{Si}$ -H system.

Phase	Source	Elastic constants/GPa				
		$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{44}$	$C'$	$C_{12}-C_{44}$
$\text{Mg}_2\text{Si}$	This work	113.2	22.2	45.2	45.5	-23.0
	Calculated <sup>[20]</sup>	113.7	22.8	43.5		
	Calculated <sup>[6]</sup>	114.5	21.5	45.6		
	Experimental <sup>[21]</sup>	126.0	26.0	48.5		
$\text{Mg}_2\text{Si}$ -2.05 at.%H	This work	110.3	25.1	38.8	42.6	-13.7
$\text{Mg}_2\text{Si}$ -4 at.%H	This work	109.0	26.1	37.8	41.4	-11.7
$\text{Mg}_2\text{Si}$ -7.69 at.%H	This work	90.6	35.5	34.9	27.5	0.6

足力学性能稳定性条件<sup>[15]</sup>. 本工作中的  $\text{Mg}_2\text{Si}$  的弹性常数  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  和  $C_{44}$  计算值分别为 113.2, 22.2 和 45.2 GPa, 与其他学者的理论计算结果<sup>[6,20]</sup> 相比, 最大计算误差分别为 1.15%, 2.70% 和 0.88%, 计算精度较高; 与其他学者的试验结果<sup>[21]</sup> 相比, 本工作中的,  $C_{12}$  和  $C_{44}$  的最大计算误差分别为 10.16%, 14.61 和 6.80%, 说明本文计算方法具有较高的可靠性.

图 2 给出了弹性常数  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$  和  $C'$  随氢原子浓度增加的变化趋势.  $C_{11}$  值反映了体系在 [100] 方向的抗变形能力. 从图 2 中可以看出, 随氢原子浓度从 0 增加到 7.69 at.% 过程中,  $C_{11}$  从 113.2 GPa 逐步减小到 90.6 GPa, 降低了 20%, 说明 H 原子的引入显著降低了  $\text{Mg}_2\text{Si}$  在 [100] 方向抵抗变形的能力.  $C_{12}$  反映了体系 [111] 方向的抗变形能力. 从图 2 中可看出, H 原子浓度从 0 增加到 7.69 at.% 过程中,  $\text{Mg}_2\text{Si}$  的  $C_{12}$  值从 22.2 GPa 增加到 35.5 GPa, 增加了 59.9%, 说明氢原子的引入使得  $\text{Mg}_2\text{Si}$  抵抗 [111] 方向的抗变形能力明显提高.  $C_{44}$  反映了体系 [011] 方向的抗变形能力, 随 H 原子浓度从 0 增加到 7.69 at.%,  $\text{Mg}_2\text{Si}$  的  $C_{44}$  从 45.2 MPa 降低到 34.9 GPa, 降低了 22.8%, 说明  $\text{Mg}_2\text{Si}$  在 [011] 方向抗变形能力随氢原子浓度的增加而有所降低. 经 (1) 式计算得到的单晶体剪切模量  $C'$  则随着氢浓度从 0 增加到 7.69 at.%, 从 45.5 GPa 降低到 27.5 GPa, 降低了 39.5%, 说明 H 原子具有显著降低  $\text{Mg}_2\text{Si}$  单晶体的抗剪切变形能力. 此外,  $C_{12}-C_{44}$  值还可表征晶体的脆性, 当  $C_{12}-C_{44} > 0$  时晶体为塑性, 当  $C_{12}-C_{44} < 0$  晶体

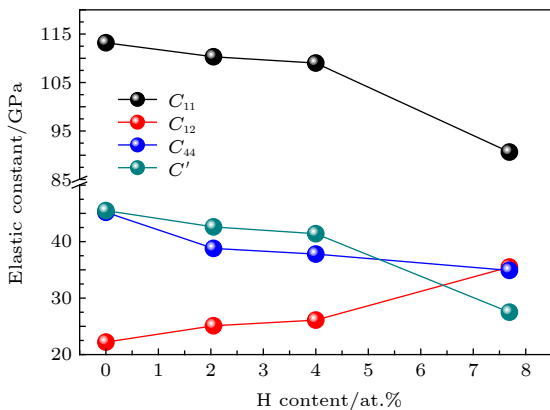


图 2 弹性常数  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$  和  $C'$  随氢原子浓度增加的变化趋势

Fig. 2. Relationships between  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$  and  $C'$  as a function of H atoms content.

为脆性<sup>[17]</sup>. 从表 1 可以看出, 当 H 原子浓度达到 7.69 at.% 时,  $C_{12}-C_{44}$  值从由负值增加到正值,  $\text{Mg}_2\text{Si}$  晶体发生了由脆性向塑性的转变.

### 3.2 多晶体弹性模量

经 (5)—(9) 式计算的剪切模量 ( $G_H$ )、体模量 ( $B_H$ )、弹性模量 ( $E$ )、泊松比 ( $\nu$ )、脆性 ( $B_H/G_H$ ) 及硬度 ( $H$ ) 如表 2 所列. 本工作中的  $G_H$ ,  $B_H$ ,  $E$  和  $\nu$  值分别为 45.3, 52.5, 105.6 GPa 和 0.16, 与其他学者的理论计算结果<sup>[6,20]</sup> 相比, 本工作的最大计算误差分别为 2.21%, 1.73%, 1.42% 和 4.29%, 计算精度较高; 与其他学者试验结果<sup>[21]</sup> 相比, 本工作中的  $B_H$  和  $E$  的最大计算误差分别为 12.38% 和 13.63%, 与试验结果同样十分接近, 说明本文计算方法具有较高的可靠性.

图 3 给出了剪切模量 ( $G_H$ )、体模量 ( $B_H$ )、弹性模量 ( $E$ )、泊松比 ( $\nu$ )、脆性 ( $B_H/G_H$ ) 及硬度 ( $H$ ) 随氢原子含量增加的变化趋势. 弹性模量  $E$  是表征材料刚度的重要参数,  $E$  值越高, 材料刚度越大. 本工作计算结果表明, 未引入氢原子时,  $\text{Mg}_2\text{Si}$  的弹性模量  $E$  为 105.6 GPa, 随着体系内 H 原子浓度从 0 增加到 7.69 at.%, 弹性模量  $E$  逐步降低到 79.5 GPa, 降低了 24.7%. 切变模量  $G$  与弹性模量  $E$  类似, 随着体系氢原子浓度从 0 增加到 7.69 at.%, 切变模量  $G$  从 45.3 GPa 降低到 31.7 GPa, 降低了 30%. 体模量  $B$  则随体系氢浓度的改变未表现出明显的变化. 弹性模量  $E$  和切变模量  $G$  的大幅度降低, 表明  $\text{Mg}_2\text{Si}$ -H 体系内氢原子浓度的增加, 显著降低了材料的强度、硬度. 与  $\alpha$ -Ti 相似<sup>[25]</sup>,  $\text{Mg}_2\text{Si}$  也表现出 H 致软化现象. 硬度计算结果显示, 体系的硬度从不含 H 原子时的 10.31 GPa 逐步降低到 7.69 at.% H 浓度时的 4.55 GPa, 降低了 55.8%, 印证了弹性模量  $E$  和切变模量  $G$  的计算结果. 随着 H 原子浓度增加, 体系硬度降低,  $B/G$  值逐步增加, 泊松比  $\nu$  也逐步增大. 当 H 原子浓度达到 7.69 at.% 时, 体系的泊松  $\nu$  为 0.28, 与普通低合金钢基本相当<sup>[26]</sup>. 说明当大量 H 原子溶于  $\text{Mg}_2\text{Si}$  时,  $\text{Mg}_2\text{Si}$  将逐步失去其本身具有的高强度、高硬度和高脆性, 可能严重降低以  $\text{Mg}_2\text{Si}$  为增强相材料的强度.

### 3.3 拉伸性能

图 4 给出了  $1 \times 1 \times 2$  的  $\text{Mg}_2\text{Si}$  超晶胞和



表 2 Mg<sub>2</sub>Si-H 体系模量  
Table 2. Modulus of Mg<sub>2</sub>Si-H system.

Phase	Source	Modulus					
		G <sub>H</sub> /GPa	B <sub>H</sub> /GPa	E/GPa	ν	B <sub>H</sub> /G <sub>H</sub>	H/GPa
Mg <sub>2</sub> Si	This work	45.3	52.5	105.6	0.16	1.16	10.31
	Calculated [20]	46.2	52.5	107.1	0.16	—	—
	Calculated [6]	44.3	53.4	104.1	0.17	—	—
	Experimental [21]	—	59.0	120.0	—	—	—
Mg <sub>2</sub> Si-2.05 at.%H	This work	40.2	53.4	96.5	0.17	1.32	9.07
Mg <sub>2</sub> Si-4 at.%H	This work	39.2	53.7	94.7	0.18	1.37	8.56
Mg <sub>2</sub> Si-7.69 at.%H	This work	31.7	53.8	79.5	0.28	1.69	4.55

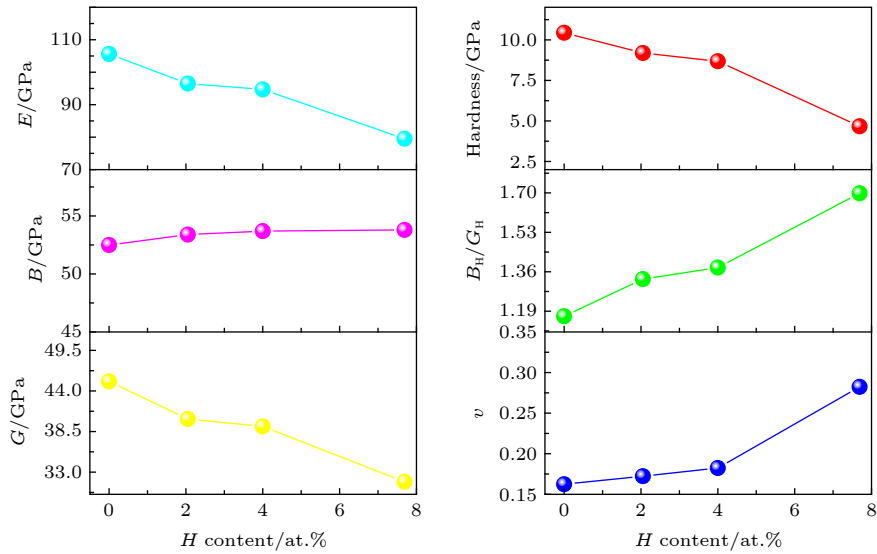


图 3 剪切模量 ( $G_H$ )、体模量 ( $B_H$ )、弹性模量 ( $E$ )、泊松比 ( $\nu$ )、脆性 ( $B_H/G_H$ ) 及硬度 ( $H$ ) 与体系 H 原子浓度的变化关系

Fig. 3. Shear moduli  $G$ , bulk moduli  $B$ , Young's moduli  $E$ , Poisson ratios  $\nu$ , brittleness  $B_H/G_H$  and Hardness  $H$  as a function of H atoms content.

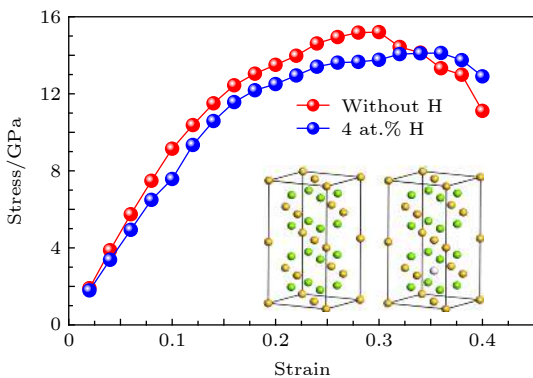


图 4 Mg<sub>2</sub>Si  $1 \times 1 \times 2$  超晶胞和 4 at.% Mg<sub>2</sub>Si-H 超晶胞沿 [001] 方向进行拉伸的应力-应变曲线

Fig. 4. Stress vs. strain curves of  $1 \times 1 \times 2$  super cell with 4 at.% and without H during stretching along [001] direction.

$1 \times 1 \times 2$  的 Mg<sub>2</sub>Si-H(4 at.%) 超晶胞沿 [001] 方向进行拉伸的应力-应变曲线. 从图中可以看出,

当 Mg<sub>2</sub>Si 中掺杂 4 at.% 的 H 原子时, 其抗拉强度从 15.21 GPa 降低到 14.12 GPa, 延伸率则从 0.3 增加到 0.36, 说明 H 原子的掺杂使 Mg<sub>2</sub>Si 的强度降低, 塑性增大. 此外, 掺杂 4 at.% H 原子的 Mg<sub>2</sub>Si 在弹性阶段的曲线斜率明显比不掺杂时要小, 说明 H 原子的掺杂使 Mg<sub>2</sub>Si 的弹性模量降低. 拉伸过程的应力-应变曲线结果与弹性模量计算结果得到很好地相互印证.

### 3.4 态密度分析

为探索 H 原子对 Mg<sub>2</sub>Si 力学性能影响微观机制, 对体系的态密度和分波态密度进行了分析, 如图 5 所示. 图 5(a) 为 Mg<sub>2</sub>Si 晶体的电子态密度和分波态密度. 由图可见, Mg<sub>2</sub>Si 晶体的能带主要密集分布于费米能级两侧, 具有典型的半导体特性.

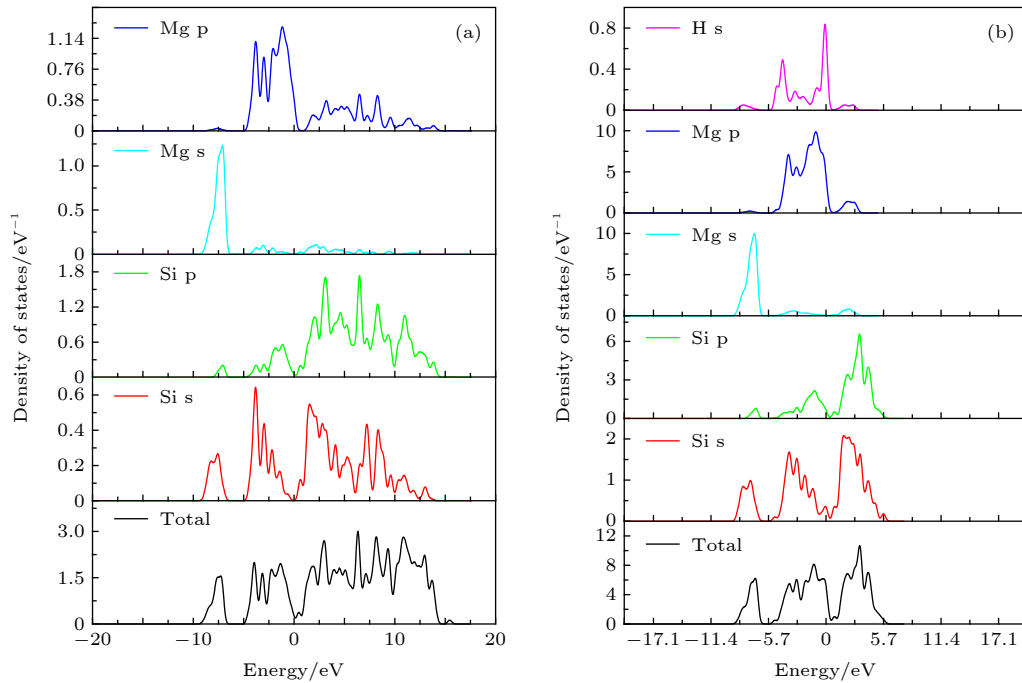


图 5 (a)  $Mg_2Si$  和 (b)  $Mg_2Si-7.69 \text{ at.}\%H$  总态密度和分波态密度

Fig. 5. DOS and PDOS of (a)  $Mg_2Si$  and (b)  $Mg_2Si-7.69 \text{ at.}\% H$ .

分波态密度显示, 在  $-9 \sim -6 \text{ eV}$  能量范围内,  $Mg_2Si$  的态密度主要由 Mg 的 3s 和 Si 的 3s 态电子贡献, Si 的 3p 态电子有少量贡献. 在  $-5 \sim 0 \text{ eV}$  能量范围内,  $Mg_2Si$  的态密度主要由 Mg 的 3p 和 Si 的 3s 态电子贡献, Si 的 3p 态电子有少量贡献. 在  $0 \sim 20 \text{ eV}$  能量范围内,  $Mg_2Si$  的态密度主要由 Si 的 3p 和 3s 态电子贡献, Mg 的 3p 态电子有少量贡献. 当体系中引入 7.79 at.% 的 H 原子时, H 原子显著增加了 Mg 和 Si 原子 S 和 P 态电子的贡献率, 总态密度明显提高; 同时, 体系在  $0 \sim 20 \text{ eV}$  能量范围内的态密度峰缩减到  $0 \sim 6 \text{ eV}$  范围内, 变现为体系的禁带变窄, 如图 5(b) 所示. 于此同时, H 原子的引入, 还引起了费米能级处态密度的增加, 态密度跨过费米能级区域. 因此, H 原子的引入使体系具有了一定的金属性质, 从而引起材料强度、硬度的降低, 韧性增加.

## 4 结 论

1)  $Mg_2Si-H$  体系内 H 原子浓度从 0 增加到 7.69 at.%, 剪切模量和弹性模量分别下降 24.7% 和 31.7%, 从而造成体系强度硬度降低, 韧性提高.

2) 态密度分析表明,  $Mg_2Si$  晶体中引入氢原

子, 将引起  $Mg_2Si$  晶体由半导体性质向金属性质的转变, 从而造成体系强度、硬度的降低, 韧性增加.

## 参考文献

- [1] Li J G, Tan H Y, Shi Z M, He Q 2008 *Chin. J. Nonferrous Met.* **18** 1819 (in Chinese) [李建国, 谭红艳, 史子木, 何迁 2008 中国有色金属学报 **18** 1819]
- [2] Zeng F L, Wei Z L, Li J F, Li C X, Tan X, Zhang Z, Zheng Z Q 2011 *T. Nonferr. Metal. Soc.* **21** 2559
- [3] Qin Q D, Li W X, Zhao K W, Qiu S L, Zhao Y G 2010 *Mat. Sci. Eng. A* **527** 2253
- [4] Tong X, Zhang D, Wang K, Lin J, Liu Y, Shi Z, Li Y, Lin J, Wen C 2018 *Mat. Sci. Eng. A* **733** 9
- [5] Ren Y Y, Liu T Y, Li Y M 2016 *Sci. Sin.: Phys. Mech. Astron.* **46** 084611 (in Chinese) [任玉艳, 刘桐宇, 李英民 2016 中国科学: 物理学 力学 天文学 **46** 084611]
- [6] Yu B H, Liu M L, Chen D 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 087105 (in Chinese) [余本海, 刘墨林, 陈东 2011 物理学报 **60** 087105]
- [7] Han S L, Wang Q, Sun L D, Zhang H X 2008 *Chin. J. Nonferrous Met.* **18** 523 (in Chinese) [韩秀丽, 王清, 孙东立, 张红星 2008 中国有色金属学报 **18** 523]
- [8] Zhang F C, Li C F, Wen P, Rang Z L 2014 *Acta Phys. Sin.* **66** 227101 (in Chinese) [张凤春, 李春福, 文平, 罗强, 冉曾令 2014 物理学报 **66** 227101]
- [9] Ma G M, Kang S J, Zhang H L, Xu H B 2015 *Hot Working Technology* **44** 96 (in Chinese) [马明光, 亢世江, 张红玲, 徐红彬 2015 热加工工艺 **44** 96]
- [10] Yao B D, Hu G Q, Yu Z S 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 026202 (in Chinese) [姚宝殿, 胡桂青, 于治水 2016 物理学报 **65** 026202]
- [11] Han X L 2010 *Ph. D. Dissertation* (Harbin: Harbin Institute of Technology) (in Chinese) [韩秀丽 2010 博士学位论文 (哈尔滨: 哈尔滨工业大学)]

- [12] Rao J P, Ouyang C Y, Lei M S 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 047105 (in Chinese) [饶建平, 欧阳楚英, 雷敏生 2012 物理学报 **61** 047105]
- [13] Shi Y, Bai Y, Mo L B, Xiang Q Y, Huang Y L, Cao J L 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 116301 (in Chinese) [石瑜, 白洋, 莫丽珍, 向青云, 黄亚丽, 曹江利 2015 物理学报 **64** 116301]
- [14] Liu N N, Sun H Y, Liu H S 2009 *Mat. Rev.* **23** 278 (in Chinese) [刘娜娜, 孙翰英, 刘洪生 2009 材料导报: 纳米与新材料专辑 **23** 278]
- [15] Li L Y, Yu W, Jin C Q 2005 *J. Phys.: Condens. Mat.* **17** 5965
- [16] Hill R 2002 *Proc. Phys. Soc.* **65** 349
- [17] Jang S H, Chichibu S F 2012 *J. Appl. Phys.* **112** 073503
- [18] Yu W Y, Wang N, Xiao X B 2009 *Solid State Sci.* **11** 1400
- [19] Li Y, Gao Y, Xiao B 2010 *J. Alloy Compd.* **502** 28
- [20] Bystricky J, LaFrance P, Lehar F, Perrot F, Winternitz P 1985 *Phys. Rev. D* **32** 575
- [21] Parks G S 1973 *J. Chem. Educ.* **30** 82A
- [22] Sung C M, Sung M 1996 *Mater. Chem. Phys.* **43** 1
- [23] Leger J M, Djemia P, Ganot F 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 2169
- [24] Miao N, Sa B, Zhou J 2011 *Comp. Mater. Sci.* **50** 1559
- [25] Senkov O N, Dubois M, Jonas J J 1996 *Metall. Mater. Trans. A* **27** 3963
- [26] Maziyar A, Ahad M, Herbert D, Christian G M 2015 *Metall. Mater. Trans. B* **46** 1471

## Effect of H on elastic properties of Mg<sub>2</sub>Si by the first principles calculation\*

Fu Zheng-Hong   Li Ting   Shan Mei-Le   Guo Kang   Gou Guo-Qing<sup>†</sup>

(Key Laboratory of Advanced Technologies of Materials, Ministry of Education, Southwest Jiaotong University, Chengdu 610031, China)

( Received 4 March 2019; revised manuscript received 15 June 2019 )

### Abstract

The mechanical properties of Al-Mg-Si-type aluminum alloys may degenerate due to the hydrogen damage during servicing in hydrogen environment. The Mg<sub>2</sub>Si is the main strengthening phases in Al-Mg-Si-type aluminum alloys. Therefore, the mechanical properties of Mg<sub>2</sub>Si directly determine the strengths of Al-Mg-Si-type aluminum alloys. In this work, the effects of hydrogen atoms on the mechanical properties of Mg<sub>2</sub>Si are investigated by first principle calculation, which is based on the density function theory. First of all, we calculate the single crystal elasticity constants of  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  and  $C_{44}$ . Then the elasticity modulus, Poisson's ratio and hardness of polycrystalline are calculated by using the crystal elasticity constants. Furthermore, we also calculate the tensile properties of Mg<sub>2</sub>Si with and without H atoms. The difference between the densities of states with and without H atoms is used to investigate the change of Mg<sub>2</sub>Si induced by H atoms. The results show that hydrogen atoms significantly reduce the shear modulus and elastic modulus of Mg<sub>2</sub>Si, resulting in the strength and hardness decreasing, but the toughness increasing. The calculations of tensile properties indicate that H atoms reduce the fracture strength but enhance the fracture elongation of Mg<sub>2</sub>Si. The analysis of density of states indicates that hydrogen atoms will induce the properties of Mg<sub>2</sub>Si to transform from semiconductor to metal properties. The calculated results in this paper can provide a reference basis for revealing the mechanism of strength reduction of Mg<sub>2</sub>Si materials in a hydrogen environment.

**Keywords:** the first principles, Mg<sub>2</sub>Si, elastic properties, density of states

**PACS:** 71.20.-b, 71.22.+i, 43.35.Cg, 31.15.E-

**DOI:** 10.7498/aps.68.20190368

\* Project supported by the Doctoral Innovation Fund Program of Southwest Jiaotong University, China (Grant No. D-CX201831) and the National Key Research and Development Program of China (Grant No. 2016YFB1200602-16).

† Corresponding author. E-mail: [gouguoqing1001@163.com](mailto:gouguoqing1001@163.com)