论文

基于第一原理研究含活性元素 Y 的 Ni/Al₂O₃ 界面拉伸强度和断裂特性包泽赢^{①②}, 郭显聪^{①②}, 尚福林^{①②*}^① 西安交通大学航天航空学院工程力学系, 西安 710049;^② 机械结构强度与振动国家重点实验室, 西安 710049

*联系人, E-mail: shangfl@mail.xjtu.edu.cn

收稿日期: 2013-10-23; 接受日期: 2014-09-01

教育部博士点基金(编号: 20110201110019)、国家自然科学基金(批准号: 11272243)和 NSAF 联合基金(批准号: U1330116)资助项目

摘要 采用基于密度泛函的量子力学第一原理计算方法, 系统研究了热障涂层中含活性元素钇(Y)的 Ni/Al₂O₃ 界面拉伸强度和断裂特性. 首先, 考察了 Al 截断 O 位置 Ni(111)/Al₂O₃(0001)界面模型中活性元素 Y 可能占据的位置, 包括间隙位置、Al 替代位置和 Ni 替代位置. 通过计算界面结合能, 并与纯净界面的结合能相比较, 确定了含活性元素 Y 的 Ni(111)/Al₂O₃(0001)界面稳定模型, 并分析了稳定界面模型的原子键以及晶格常数等基本参数. 随后, 对获得的稳定界面模型开展第一原理拉伸模拟计算, 获取了含活性元素 Y 的 Ni(111)/Al₂O₃(0001)界面的理论拉伸强度和分离功等参数. 进而, 通过分析界面原子键长和电荷密度的变化, 对该界面的失效和断裂特性作了详细分析, 并证实了元素 Y 对 Ni(111)/Al₂O₃(0001)界面的强化效应.

关键词 活性元素钇, Ni/Al₂O₃ 界面, 拉伸强度, 断裂特性, 第一原理计算

PACS: 71.20.Be, 71.15.Mb, 71.15.Dx

doi: 10.1360/SSPMA2013-00090

1 引言

为满足严酷的服役条件并保证涡轮叶片材料性能和使用可靠性, 热障涂层(Thermal Barrier Coating, TBC)技术自 20 世纪 60 年代以来得到了广泛应用, 成为未来涡轮发动机热端部件高温防护涂层技术的发展方向^[1,2]. 然而 TBC 系统在长期高温服役环境下, 会产生失配应变, 最终导致 TBC 界面的失效破坏.

延缓 TBC 系统失效的两个关键策略是抑制热生长氧化物(TGO)的生长来阻碍应变的产生、增加 TGO 层与粘结层(BC 层)之间的界面结合强度. 已有研究表明^[3], 在 BC 层中添加如 Hf, Y(钇)和 Zr 等活性元素可以降低氧化物晶界的比重, 阻碍孔洞的形成, 降低有害元素硫在界面的扩散速率等, 从而提高 BC/TGO 界面的结合强度. 对于热障涂层 YSZ 材料系统而言, Y 是重要、作用独特的一类稀土元素. Y 能够吸

引用格式: 包泽赢, 郭显聪, 尚福林. 基于第一原理研究含活性元素 Y 的 Ni/Al₂O₃ 界面拉伸强度和断裂特性. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2015, 45: 024601
Bao Z Y, Guo X C, Shang F L. Tensile strength and fracture property of Ni(111)/ α -Al₂O₃(0001) interface with Yttrium doping based on first-principles (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2015, 45: 024601, doi: 10.1360/SSPMA2013-00090

收镍基高温合金中的氧并改善氧化膜与金属基体的附着强度, 来自 BC 层(如 NiCrAlY)的 Y 会影响到界面的组织与特性. 然而, 现有文献大都从分离功的变化来预测或判定 Y 元素对 Ni(Al)/Al₂O₃ 界面结合强度的强化作用. Jarvis 等人^[4]通过计算发现, 在 Ni/Al₂O₃ 界面添加 Y 元素能够提高其界面结合能约 70%–80%, 达到 3242 mJ/m². Ozfidan 等人^[5]的第一原理计算表明, 活性元素 Y 对 NiAl(110)/Al₂O₃(0001)界面结合强度的影响类似于 Hf 或 Zr, 在界面处会形成混合的 O—Y—Ni 键, 从而增强其界面结合强度. 然而由于 Y 的存在, 减少了 Ni—Al_{Al2O3} 键和 Al_{NiAl}—O 键的电荷数量, 使得 Y 对界面结合强度的增强作用没有 Hf 和 Zr 那么显著. 目前, 关于含有 Y 的 Ni/Al₂O₃ 界面在外载荷下的力学响应和断裂特性还未见报道. 从材料设计和涂层制备角度来看, 十分有必要对含有 Y 的 Ni/Al₂O₃ 界面进行深入研究, 探究其受外载荷时的机械强度、变形行为以及断裂特性.

Zhang 等人^[6–9]通过第一原理拉伸模拟计算, 先后研究了几种杂质元素对 Al 晶界的影响. 结果表明, Na 和 Ca 分别降低了 Al 晶界理论拉伸强度约 83%和 50%, 偏析界面的 Na—Al 和 Ca—Al 键相比于纯净界面的 Al—Al 键要弱一些, 偏析 Ga 元素对 Al 晶界具有增强作用, 添加 Si 元素对偏析 Na 晶界具有增强作用、以及 S 元素会弱化晶界. 借助于这种第一原理加载模拟计算, 可以分析晶界附近原子结合键和电子结构的变化、进而考察杂质元素对晶界的基础力学特性的影响. 本文针对 Ni/Al₂O₃ 理想界面的计算表明^[10–12], 单轴拉伸第一原理模拟计算能够获取界面强度特性与断裂特征, 可以用于定量评估界面的基础力学参数, 例如拉伸强度、断裂应变以及界面分离功; 这些参数通常与界面原子构型(例如原子层截断位置、晶格失配)等因素密切相关. 因此, 运用第一原理计算方法, 可以探讨 Y 元素对 Ni/Al₂O₃ 界面的基础力学强度与断裂特性的影响, 并通过分析界面原子键和电子结构在变形过程中的演化等信息来理解其微观断裂的过程及规律.

下文将要介绍的是计算方法和计算模型, 重点对含掺杂 Y 元素的 Ni/Al₂O₃ 界面稳定模型的确定过程加以说明(2.1 和 2.2 小节), 并对如何开展界面第一原理拉伸模拟计算进行简要叙述, 然后对得到的计算结果进行分析与讨论, 重点对界面的理论拉伸强

度、分离功参数和界面断裂方式等进行阐述, 最后是对本文的研究作了总结.

2 计算方法与模型

2.1 Y 的块体性质

考察含 Y 元素的 Ni/α-Al₂O₃ 界面在外载荷下的力学响应之前, 一个重要的起点是确定 Y 元素在 Ni/α-Al₂O₃ 界面中所可能占据的位置. 另一个关键问题是, 需要对第一原理模拟方法用于该类界面计算的正确性和精度进行考证和确认. 本小节将结合块体 Y 的第一原理计算对这两个问题进行说明.

本课题组前期对 Ni(111)/α-Al₂O₃(0001)界面开展了大量的第一原理模拟计算, 详见文献[10–12]. 研究证实, 使用基于密度泛函理论的第一原理计算软件包 VASP 时, 较为合理的求解策略是: 基于投影缀加波(PAW)来描述系统的电子-离子相互作用以及基于广义梯度近似(GGA)来近似计算交换-关联能. 基于这一 PAW+GGA 框架, 本文首先考察含 Y 元素的 Ni/α-Al₂O₃ 界面, 并对其求解精度进行分析.

Y 元素晶体原胞结构如图 1 所示, 是一种密排六方结构, 每个原胞结构含有 2 个原子, 图中的小球代表 Y 原子, a_0 和 c_0 代表晶格常数.

首先, 在维也纳第一原理计算软件包 VASP 中, 设置不同的截断能和 k 点网格密度来对块体 Y 进行弛豫计算. 原子弛豫过程采用的 Hellmann-Feynman

图 1 (网络版彩图)块体 Y 的晶体原胞结构
Figure 1 (Color online) Crystalline structure of unit cell of bulk Yttrium.

原子净力收敛条件取为 10^{-3} eV/Å, 能量收敛条件为 10^{-5} eV. 然后, 根据总能量的收敛情况来确定截断能和 k 点密度, 计算结果如图 2(a)和(b)所示. 可以确定, 截断能取为 490 eV、布里渊区 k 点采样尺寸取为 $15 \times 15 \times 15$ 能够满足较高的计算精度. 之后, 按此设定计算出不同晶格常数下 Y 的总能量并拟合 Murnaghan 状态方程^[13]. 该方程由 Murnaghan 于 1944 年提出, 它给出了描述总能量 $E(V)$ 和体积 V 的函数关系, 即

$$E(V) = \frac{B_0 V}{B'_0(B'_0 - 1)} \left[B'_0 \left(1 - \frac{V_0}{V} \right) + \left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'_0} - 1 \right] + E_0(V_0), \quad (1)$$

其中 B_0 是体模量, V_0 是平衡态体积, B'_0 是体模量对压强的偏导, $E_0(V_0)$ 是晶体的结合能. 图 2(c)给出了计

算得到的 Y 的晶格常数和体模量, 晶格常数 a_0 , c_0 和体模量 B_0 分别为 3.635 Å, 5.714 Å 和 40.50 GPa. 文献 [14,15] 给出的晶格常数 a_0 和 c_0 分别为 3.647 Å 和 5.731 Å, 体模量为 41 GPa. 可以看出, 二者之间的误差很小, 这说明本文所采用的基于 PAW+GGA 框架的计算方法是合适的.

2.2 掺杂 Y 的 Ni/ α -Al₂O₃ 界面模型

确定了基本计算方法和块体 Y 的基础物理性质之后, 本文继续研究掺杂 Y 元素的 Ni(111)/ α -Al₂O₃ (0001) 界面模型问题. 基于前期工作^[110-12], 本文重点考虑在最稳定的 Ni(111)/ α -Al₂O₃ (0001) 界面模型即 Al 截断 O 位置的三明治共格界面模型中, 添加 Y 元素. 图 3 为该界面模型的示意图, 其中 Ni 原子为蓝

图 2 PAW+GGA 框架下块体 Y 的总能量

(a) 截断能; (b) k 点密度; (c) 晶格常数; (d) 图(c)的局部放大图

Figure 2 Total energy of bulk Yttrium using the computational framework of PAW+GGA. (a) Cut-off energy; (b) k -point sampling; (c) lattice constant; (d) enlarged view of box area in (c).

色, Al 原子为粉色, O 原子为红色, Y 原子为绿色. 为了更好地说明界面结构特征, 图 3 显示了界面横向三个周期的结构. 图 3(a)和(b)的三个坐标轴方向 a , b 和 c 分别代表 $[\bar{1}2\bar{1}0]$, $[\bar{1}\bar{1}0] \parallel [\bar{1}010]$ 和 $[111] \parallel [0001]$ 结晶学方向. Y 元素在该界面的可能位置包括替换 Al 位置, 替换 Ni 位置和间隙位置. 从计算精度和计算量的可控性要求出发, 本文的第一原理计算中考虑了替换 Ni 第一层或第二层原子位置, 其他层内的替换位置未予计及.

文献中通常采用结合能参数来表征界面结构的稳定性, 结合能越大, 界面结构越稳定^[16]. 这里, 我

们定义含元素 Y 的 Ni/ α -Al₂O₃ 界面结合能为

$$W_{\text{ad}} = \frac{E_{\text{Ni/Y}} + E_{\text{Al}_2\text{O}_3} - E_{\text{Ni/Y/Al}_2\text{O}_3}}{A} \quad (2)$$

其中 E_i 是计算模型中相应薄片层的总能量, A 是平衡态界面横截面积, 每个薄片层的横截面积等于平衡态界面面积. 每个薄片层的总能量计算使用相同的计算方法, 即采用 PAW+GGA 框架, 具体为: 布里渊区 k 点采样尺寸取为 $5 \times 5 \times 1$; 本文通过大量试算确定, 较为合理的 Y 的截断能为 490 eV; 加上前期计算中^[10-12]已经确定的纯净 Ni/Al₂O₃ 界面中 Ni 和 Al₂O₃ 的截断能分别为 410 eV 和 500 eV, 将界面截断能设置为 500 eV. 首先, 采用共轭梯度法(CG 算法)沿垂直于界面方向进行弛豫, 直到 Hellman-Feynman 净力小于 1 eV/Å. 然后, 弛豫所有的原子直到 Hellman-Feynman 净力小于 0.08 eV/Å, 最后采用准牛顿算法弛豫所有原子直到 Hellman-Feynman 净力小于 0.05 eV/Å、能量小于 10^{-5} eV. 最终确定的包含 Y 元素的 Al 截断 O 位置 Ni(111)/ α -Al₂O₃(0001)界面的界面结合能如表 1 所示. 可以看出, Y 元素处于界面间隙位置时的界面结构最稳定, 其界面结合能最大, 达到 3.87 J/m², 约为对应的纯净界面结合能的 2.65 倍. 基于这一结果, 下文中选择 Y 元素处在间隙位置的界面模型作为拉伸模拟计算的对象.

2.3 单轴拉伸模拟计算

对于上述 Y 元素在间隙位置的 Ni(111)/ α -Al₂O₃(0001)稳定界面模型, 采用第一原理方法开展单向拉伸模拟计算. 图 4 为该计算模型(下文中称为超胞)的示意图, 模型沿拉伸方向的初始长度为 l_0 . 具体拉伸过程如下: (1) 在垂直于界面的方向上(轴向)施加一定的微小应变, 使超胞伸长 $l-l_0$ 长度; (2) 超胞中原子的位置首先按比例作线性伸长, 然后进行晶格的充分

图 3 掺杂 Y 元素的 Ni(111)/ α -Al₂O₃(0001)界面模型示意图 (a) 正视图; (b) 俯视图; (c) 替换 Al; (d) 间隙位置; (e) 替换 Ni1; (f) 替换 Ni2

Figure 3 The schematic diagrams of Ni(111)/ α -Al₂O₃(0001) interface with Yttrium doping. (a) Front view; (b) top view; (c) Al-substitution site; (d) interstitial site; (e) Ni1-substitution site; (f) Ni2-substitution site.

图 4 间隙位置掺杂 Y 的 Ni/ α -Al₂O₃ 界面的单轴延伸模拟计算示意图

Figure 4 Schematic diagram of the uniaxial extension simulation of Ni(111)/ α -Al₂O₃(0001) interfaces with Yttrium doping in an interstitial site.

表 1 不同位置掺杂 Y 元素的 Al 截断 O 位置 Ni(111)/ α - Al_2O_3 (0001)界面结合能Table 1 The bonding energy of the Al-terminated O-site Ni(111)/ α - Al_2O_3 (0001) interfaces with Yttrium doping in different sites

	Y 原子位置				
	纯净界面	替换 Al	替换 Ni1	替换 Ni2	间隙位置
界面结合能 (J/m^2)	1.46	1.13	1.49	1.09	3.87

弛豫并保持平行于界面的晶胞尺寸不变, 弛豫方法同前; (3) 重复上述过程, 直至界面完全断开. 为了保证应变步的连续性, 每个载荷步的初始结构采用前一载荷步弛豫之后的结构.

关于第一原理拉伸模拟的详细计算策略和方法, 请参见文献[10–12]. 根据文献中的分类, 本文所采用的方法属于单轴延伸方法, 它与真实模拟实验条件下的单轴拉伸有细微的区别. 但是, 从已有的第一原理研究结果来看, Ni(111)/ α - Al_2O_3 (0001)界面模型在两种情况下的应力-应变响应曲线等结果差别很小. 因此, 本文使用了计算量略小的单轴延伸模拟计算.

3 结果与讨论

3.1 强度参数

图 5 为计算得到的在单轴延伸条件下间隙位置掺杂 Y 元素以及纯净的 Al 截断 O 位置 Ni(111)/ α - Al_2O_3 (0001)界面模型的应力-应变曲线. 当拉伸应变达到 10% 时, 掺杂界面的应力值达到最大, 约为 18.75 GPa; 而纯净界面在 8% 应变处达到最大应力值 11.10 GPa. 这表明, 间隙位置处的 Y 元素显著提高了 Al-O 界面的拉伸强度, 增幅达 69%. 这就证实了, Y 元素对 Ni/ α - Al_2O_3 界面具有增强作用. 同时, Y 元素也提高了临界拉伸应变约 25%, 即同时有效的增强了 Ni/ α - Al_2O_3 界面韧性.

应力-应变曲线所围成的面积可以近似的表征分离界面所做的功, 即界面分离功. 根据本文的研究, 单轴延伸下掺杂 Y 的界面应力-应变曲线所围成的面积约为 $3.82 \text{ J}/\text{m}^2$; 而纯净界面应力-应变曲线所围成的面积则为 $1.44 \text{ J}/\text{m}^2$. 即间隙位置处的 Y 元素提高了其界面分离功约 1.65 倍. 另外, 从该应力-应变曲线的形状可以看出, 掺杂 Y 界面的应力-应变曲线较为

图 5 掺杂 Y 和纯净 Ni/ α - Al_2O_3 界面的拉伸应力-应变曲线
Figure 5 Stress-strain curves of clean Ni/ α - Al_2O_3 interface and Ni/ α - Al_2O_3 interface with Yttrium doping.

接近连续体力学中的指数型内聚力模型. 在一定程度上, 最大拉伸应力和应力-应变曲线围成的面积可以代表相应的内聚拉伸强度 $\sigma_{\max}$ 和分离功 ϕ_n [17]. 值得一提的是, Jarvis 等人 [2] 计算得出的 Ni/ α - Al_2O_3 界面添加 Y 元素时的界面结合能约为 $3.24 \text{ J}/\text{m}^2$, 略小于本文的计算结果. 这可能是由于 Y 元素在界面的位置不同而导致的, 在他们的计算模型中 Y 元素替换了 Ni 的位置, 不同于本文的间隙位置. 根据前述计算结果 (2.2 小节), Y 元素占据这一间隙位置属于更为可能的稳定界面模型, 因此可以相信这种模型更为接近于物理实际.

3.2 断裂特性

为了更好地理解掺杂 Y 的 Ni/ α - Al_2O_3 界面的断裂过程, 我们考察了单轴延伸过程中界面附近各个原子结合键的变化情况. 图 6 给出了界面原子键及其随变形而变化的示意图, 图中将 Ni 原子标识为蓝色, Al 原子为粉色, O 原子为红色, Y 原子为绿色. 可以看到若干有意思的结果: (1) 在单轴延伸过程中, Ni1—Y1 键长变化并不明显; 在应变达到临界应变 10% 之前, Ni1—Y1 键长缓慢增加, 幅度不超过 6%; 且在超过临界应变之后, 其键长缓慢降低至初始平衡状态水平, 变化不大. (2) Y1—Al1 键和 Y1—O1 键的键长随着拉伸应变的增加而逐渐增加, 并且在超过临界应变之后, 二者继续迅速伸长. 这清楚地表明, 该界面在 Y1—Al1 键和 Y1—O1 键处发生了破

图 6 掺杂 Y 的 $\text{Ni}/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 界面拉伸过程中的键长变化
 Figure 6 Variations of the atomic bonds of $\text{Ni}/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ interface with Yttrium doping during the stretching process.

坏. 再结合图 5 所示的掺杂界面的应力-应变曲线结果, 即拉应力在达到临界应变之后是逐渐降低的. 可以判断, 在外加单轴载荷时, 该掺杂 Y 的 $\text{Ni}/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 界面更为倾向于发生类似韧性方式的断裂.

价电子电荷密度分布同样能够反映出界面原子键的相关特性. 下面我们观察分析该界面在拉伸过程中的价电子电荷密度分布的变化情况. 图 7 给出了单轴延伸下掺杂 Y 的 $\text{Ni}/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 界面在不同应变处电荷密度分布的变化过程, 图 7(a)是电荷密度分布分析切面(虚线所示)的俯视图, 电荷密度以等高线方式来绘出. 为了便于与纯净 $\text{Ni}/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 界面相比较, 图 7(b)展示了纯净界面在无外加载荷条件下的电荷密度分布(引自文献[10]). 对比图 7(b)和(c)可以看出,

图 7 掺杂 Y 的 $\text{Ni}/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 界面拉伸过程中的电荷密度变化($\text{e}/\text{\AA}^3$)
 (a) 切面俯视图; (b) 纯净界面; (c) 应变等于 0%; (d) 4%; (e) 8%; (f) 9.5%; (g) 10% (临界应变); (h) 10.5%; (i) 12%

Figure 7 Variations of the valence charge densities of $\text{Ni}/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ interface with Yttrium doping during the stretching process. (a) Top view; (b) clean interface; (c) tensile strain=0%; (d) 4%; (e) 8%; (f) 9.5%; (g) 10% (critical strain); (h) 10.5%; (i) 12%.

纯净界面模型中 Ni 和 O 原子之间形成了一个 Ni—O 离子键; 而掺杂界面中 Y 和 O 原子之间则形成了两个 Y—O 离子键, 并且 Y 和 Al 原子之间形成了 Y—Al 金属间化合键, 这些均使得界面结合强度高于纯净界面. 随着拉伸应变的增加, 掺杂界面 Y 和 O 原子之间的电荷密度逐渐减少, 并且这种电荷密度的减少也发生在 Y—Al 键之间, 直至界面完全断开. 这表明, 掺杂 Ni/ α -Al₂O₃ 界面先后沿 Y—Al 键和 Y—O 键断开, 并发生断裂.

4 结论

本文采用基于密度泛函理论的第一原理计算方法, 研究了掺杂 Y 元素的 Ni(111)/ α -Al₂O₃(0001) 界面的理论强度和断裂特性. 首先分析了 VASP 软件包中 PAW+GGA 理论框架下计算 Y 元素的正确性和精度, 并且从界面结合能角度考虑, 确定了可能的含 Y 元素的 Ni/ α -Al₂O₃ 稳定界面模型. 进而, 重点考察了单轴延伸条件下该稳定界面模型的力学响应, 侧重研究其理论拉伸强度、界面分离功和断裂特征等, 得到的主要研究结果为:

(1) 采用 PAW+GGA 方法, 确定了 Y 原胞晶格常数 a_0 , c_0 和体模量 B_0 , 分别为 3.635 Å, 5.714 Å 和 40.50 GPa. 这一计算结果与现有文献结果十分接近. 同时, 从界面结合能角度判定, 在 4 种可能的掺杂界面模型中, Y 元素处于 Ni/ α -Al₂O₃ 界面间隙位置时的界面结合能最大(3.87 J/m²), 结构最为稳定.

(2) 在单轴延伸条件下, 间隙位置处掺杂 Y 元素的 Ni/ α -Al₂O₃ 界面模型的临界应变约为 10%, 此时拉伸应力达到峰值, 约为 18.75 GPa, 即该掺杂界面的理论拉伸强度为 18.75 GPa 左右; 对应的界面分离功约为 3.82 J/m², 约高出纯净界面的分离功 1.65 倍. 这些结果表明, 掺杂 Y 元素能够有效提高 Ni/ α -Al₂O₃ 界面结合强度.

(3) 综合分析该界面的拉伸应力-应变响应曲线、界面附近原子键和价电子电荷密度分布随应变的变化等结果, 可以确定, 在外加拉伸载荷的变形过程中, 间隙位置处掺杂 Y 的 Ni/ α -Al₂O₃ 界面将会沿着 Y—Al 键和 Y—O 键逐渐断开, 并使该界面 Ni 一侧(包含 Y 元素)和 Al₂O₃ 一侧完全断开, 其破坏方式接近于韧性断裂.

参考文献

- 1 周瑞发, 韩雅芳, 李树索. 高温结构材料. 北京: 国防工业出版社, 2006
- 2 曹学强. 热障涂层材料. 北京: 科学出版社, 2007
- 3 Padture N P, Gell M, Jordan E H. Materials science-Thermal barrier coatings for gas-turbine engine applications. *Science*, 2002, 296(5566): 280–284
- 4 Jarvis E A, Carter E A. The role of reactive elements in thermal barrier coatings. *Comput Sci Eng*, 2002, 4: 33–41
- 5 Ozfidan I, Chen K Y, Fu M. Effects of additives and impurity on the adhesive behavior of the NiAl(110)/Al₂O₃(0001) Interface: An *ab initio* study. *Metall Mater Trans A*, 2011, 42A: 4126–4136
- 6 Zhang Y, Lu G H, Wang T M, et al. First-principles study of the effects of segregated Ga on an Al grain boundary. *J Phys Condens Matter*, 2006, 18: 5121–5128
- 7 Zhang Y, Lu G H, Hu X L, et al. First-principles computational tensile test on a Na-segregated Al grain boundary with an Si additive and an intergranular embrittlement suppression mechanism. *J Phys Condens Matter*, 2007, 19: 456225
- 8 Zhang Y, Lu G H, Deng S, et al. Weakening of an aluminum grain boundary induced by sulfur segregation: A first-principles computational tensile test. *Phys Rev B*, 2007, 75: 174101
- 9 Lu G H, Zhang Y, Deng S, et al. Origin of intergranular embrittlement of Al alloys induced by Na and Ca segregation: Grain boundary weakening. *Phys Rev B*, 2006, 73: 224115
- 10 Guo X C, Shang F L. Reinvestigation of the tensile strength and fracture property of Ni(111)/ α -Al₂O₃(0001) interfaces by first-principle calculations. *Comput Mater Sci*, 2011, 50: 1711–1716
- 11 Guo X C, Shang F L. Shear strength and sliding behavior of Ni/Al₂O₃ interfaces: A first-principle study. *J Mater Res*, 2012, 27: 1237–1244
- 12 Guo X C, Bao Z Y, Shang F L. Mixed-mode mechanical responses of Ni(111)/ α -Al₂O₃(0001) interface by first-principle calculations. *J Mater Res*, 2013, 28: 3018–3028, doi:10.1557/jmr.2013.294
- 13 Murnaghan F D. The compressibility of media under extreme pressures. *Proc Natl Acad Sci USA*, 1944, 30: 244–247
- 14 Spedding F H, Daane A H, Herrmann K W. The crystal structures and lattice parameters of high-purity scandium, yttrium and the rare earth

- metals. *Acta Crystallogr*, 1956, 9: 559–563
- 15 Guo F, Poon S J, Shiflet G J. Metallic glass ingots based on yttrium. *Appl Phys Lett*, 2003, 83: 2575–2577
- 16 Zhang W, Smith J R, Evans A G. The connection between *ab initio* calculations and interface adhesion measurements on metal/oxide systems: Ni/Al₂O₃ and Cu/Al₂O₃. *Acta Mater*, 2002, 50: 3803–3816
- 17 闫亚宾, 尚福林. PZT 薄膜界面分层破坏的内聚力模拟. *中国科学 G 辑: 物理学 力学 天文学*, 2009, 39: 1007–1017

Tensile strength and fracture property of Ni(111)/ α -Al₂O₃(0001) interface with Yttrium doping based on first-principles

BAO ZeYing^{1,2}, GUO XianCong^{1,2} & SHANG FuLin^{1,2*}

¹ Xi'an Jiaotong University, School of Aerospace, Department of Engineering Mechanics, Xi'an 710049, China;

² State Key Laboratory for Strength and Vibration of Mechanical Structures, Xi'an 710049, China

The first principle calculations based on density functional theory are carried out to assess the tensile strength and fracture characteristics of Ni(111)/ α -Al₂O₃(0001) interface with Yttrium doping in thermal barrier coating. At first, careful investigations are made to determine the computational models of the Al-terminated O-site Ni(111)/ α -Al₂O₃(0001) interfaces, i.e., the physically possible occupied positions of reactive element Y among interstitial site, Al-substitution site and Ni-substitution site. By calculating the bonding energy of interfaces and comparing with that for clean Ni/Al₂O₃ interface, the stable Ni(111)/ α -Al₂O₃(0001) interface model with reactive element Y is obtained. A detailed analysis of this interface is made on its atomic bonds and the lattice constants. Then, uniaxial tensile simulations by first-principle method are done to extract the fundamental mechanical properties of this interface, including theoretical tensile strength and work of separation. Furthermore, the failure and fracture characteristics of the interface are elucidated by observing the variations of the atomic bonds near interface and valence charge densities. Our study confirms that reactive element Y substantially strengthens the adhesion of Ni(111)/ α -Al₂O₃(0001) interface.

reactive-element Y, Ni/Al₂O₃ interface, tensile strength, fracture characteristic, first-principle calculation

PACS: 71.20.Be, 71.15.Mb, 71.15.Dx

doi: 10.1360/SSPMA2013-00090