

Al-Fe-Zr三元系中金属间化合物的形成焓计算*

EAM Calculation of Formation Enthalpies of Al, Fe and Zr Intermetallic Compounds

侯育花¹, 唐美¹, 王进¹, 王建川¹, 欧阳义芳¹, 钟夏平²

HOU Yu-hua¹, TANG Mei¹, WANG Jin¹, WANG Jian-chuan¹, OUYANG Yi-fang¹, ZHONG Xia-ping²

(1. 广西大学物理科学与工程技术学院, 广西南宁 530004; 2. 广西科学院, 广西南宁 530007)

(1. College of Physics Science and Technology, Guangxi University, Nanning, Guangxi, 530004, China; 2. Guangxi Academy of Science, Nanning, Guangxi, 530007, China)

摘要: 采用普适分析型的嵌入原子模型, 通过拟合纯元素的晶格常数、空位形成能、结合能和体积模量等, 确定出 Al-Fe 和 Zr 的嵌入原子模型参数, 并用该嵌入原子模型分别计算由 Al-Fe 和 Zr 元素构成的 3 个二元系以及三元系中的有序合金化合物的形成焓。计算结果与已有的实验结果和第一原理计算结果符合得比较好。从计算 Al-Fe-Zr 所组成的三元有序金属间化合物的形成焓得出的金属间化合物稳定性趋势与三元相图相符合。

关键词: 合金 形成焓 嵌入原子方法

中图分类号: TG111.3 文献标识码: A 文章编号: 1005-9164(2008)02-0156-05

Abstract The model parameters of the general analytic embedded-atom method for Al, Fe and Zr have been determined by fitting the lattice constants, the mono-vacancy formation energy, the cohesive energy and the bulk modulus of pure elements. The enthalpies of formation for intermetallic compounds for binary and ternary systems composed of Al, Fe and Zr have been calculated. The calculated results are in agreement with the experiments available and the ab initio results or other EAM results. The stability of ternary intermetallic compounds agrees well with that of phase diagram.

Key words intermetallic compound, enthalpy of formation, embedded-atom method

由于铝与过渡金属的金属间化合物具有良好的高温抗氧化及耐腐蚀性能, 同时具有低密度、高熔点等特点, 引起许多研究者的兴趣。Al-Fe 系金属间化合物是近年来研制发展而成的一类新型耐腐蚀材料, 具有低廉的成本、较低的密度、良好的耐磨性、优异的抗氧化性及在一些富氧腐蚀环境的抗蚀能力的同时, 又有可以用传统工艺手段容易进行加工等特点。使对铝铁合金的性能以及其热力学性质的研究越来越受到人们的重视。近几年来, 对于 Al-Fe 合金的稳定相和亚稳相作了较多的理论研究^[1-3], 主要集中在合金的结构稳定性和对合金性能的预测等方面。Zr 能够

有效提高铝合金的力学强度, 因此 Al-Zr 合金的研究具有重要的意义。近几年来, 用第一原理方法来研究结构稳定性和对性能的预测对 Al-Zr 合金的稳定相和亚稳相作了一系列的理论研究^[4-17]。第一原理方法的优点是在计算中无需输入实验数据, 就可以计算合金系统中相应的热力学性质等, 但是在研究合金析出相及其相界上存在的一些亚稳相时, 用第一原理计算需要采用较大的超原胞。计算量大, 而采用原子间相互作用势结合分子动力学方法就可研究较大的原子体系, 因此有必要建立相应的原子间相互作用势来研究相关性质。本文的目的就是要建立一种能有效地描述 Al-Fe 和 Zr 原子间相互作用势, 即嵌入原子方法 (EAM) 相互作用势。

嵌入原子方法理论是在 20 世纪 80 年代由美国物理学家 Daw 和 Baskes^[18,19] 基于密度泛函理论^[20], 运用有效介质和准原子近似^[21,22] 提出的一种半经验

收稿日期: 2007-11-12

作者简介: 侯育花 (1982-), 女, 硕士研究生, 主要从事嵌入原子方法理论方面的研究。

* 国家自然科学基金项目 (50761002) 和广西自然科学基金项目 (0728025) 资助。

理论 该理论既考虑了原子之间的对势相互作用,又包含了原子多体相互作用,且易于对金属及合金结构和性质等进行模拟计算。该理论已被应用于材料科学的诸多领域,在合金热力学的计算方面取得了很大的成功^[23-30]。以往的研究主要集中在二元合金系统。本文拟采用普适分析型的嵌入原子模型,对铝、铁和锆构成的二元、特别三元有序金属间化合物的形成焓进行计算。

1 嵌入原子理论及模型

1.1 嵌入原子理论

根据 EAM 理论,一个原子体系的总能量 E_{tot} 可表示为:

$$E_{tot} = \sum_i F_i(d_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} Q_{ij}(n_{ij}), \quad (1)$$

$$d_i(r) = \sum_{j \neq i} f_j(n_{ij}). \quad (2)$$

其中 $F(d)$ 是把一个原子嵌入到电子密度为 d 处的嵌入能量, $Q_{ij}(r)$ 是原子间的有效相互作用的两体势, $d_i(r)$ 是原子 i 处的电子密度,它是除原子 i 外所有其它原子的电子密度对原子 i 处的电子密度的贡献的线性迭加, $f_j(r)$ 是原子的电子密度分布函数, n_{ij} 是原子 i 与原子 j 间的距离。

1.2 嵌入原子模型及参数确定

根据普适的嵌入原子模型,其嵌入函数 $F(d)$ 两体势 $Q(r)$ 和原子电子密度 $f(r)$ 分布函数的形式分别为:

$$F(d) = -F_0 [1 - n \ln(\frac{d}{d_0})] (\frac{d}{d_0})^n, \quad (3)$$

$$Q(r) = -Q [1 + W(\frac{r}{r_1} - 1)] \exp[-\lambda(\frac{r}{r_1} - 1)], \quad (4)$$

$$f(r) = f_e \frac{r}{r_1} \exp[-U(\frac{r}{r_1} - 1)], \quad (5)$$

$$f_e = [\frac{E_c - E_f}{K}]^{\frac{3}{5}}. \quad (6)$$

其中下标 e 表示在平衡时的数值, K 为平衡时的体积, E_c 为纯元素的结合能, E_f 为纯元素的单空位形成能, F_0 , n , Q , W 和 λ 为模型参数。其值是通过拟合纯元素的

表 1 Al、Fe 和 Zr 的输入参数和嵌入原子参数

Table 1 The input physical parameters and the determined parameters of EAM for elements

相 Phase	a (nm) ^[31]	E_c (eV) ^[32]	E_f (V) ^[33]	B (10 ³ eV·nm ⁻³) ^[32]	c (nm) ^[31]	F_0 (eV)	n	λ	W	U	Q (eV)	f_e (10 ³ eV·nm) ⁻³
Al	0.405	3.390	0.653	0.451		2.737	0.807	5.477	6.479	6	0.091	1
Fe	0.287	4.280	1.451	1.050		2.829	0.884	5.696	7.424	6	0.218	1
Zr	0.323	6.250	1.762	0.520	0.515	4.488	0.742	4.765	6.058	6	0.236	1
Al-Fe								5.586	6.935		0.232	
Al-Zr								5.109	6.265		0.261	
Fe-Zr								5.210	6.706		0.304	

结合能、单空位形成能、晶格常数和体积模量来确定参数 f_e 是一个量度因子,对于纯元素来说可以取为 1,但是在合金中 f_e 将由 (6) 式确定。表 1 给出了 Al、Fe 和 Zr 的输入参数和确定的嵌入原子模型参数。

1.3 合金形成焓的计算方法

在计算合金时,对合金中异类原子间的相互作用势采用下面的公式:

$$\Phi(r) = -\Phi [1 + W(\frac{r}{r_{le}} - 1)] \exp[-\lambda(\frac{r}{r_{le}} - 1)], \quad (7)$$

$$W = \frac{\overline{W} \overline{W}}{\overline{W} \overline{W}}, \quad (8)$$

$$\lambda = \frac{\lambda^a \lambda^b}{\lambda^a \lambda^b}. \quad (9)$$

式中 a 和 b 分别代表合金中的两组元, r_{le} 表示合金平衡时最近邻原子间距离, Φ 是待定参数,由实验结果或第一原理计算结果确定。相互作用势函数和原子的电子密度分布函数分别用 4 次样条函数在第 2 近邻和第 3 近邻之间进行截尾。

计算合金形成焓的具体方法是:给定金属间化合物的初始晶格常数值,构造出该金属间化合物的晶体结构,使用分子静力学能量最低法对此晶体结构进行弛豫,使其达到平衡状态,对应的能量的绝对值即该金属间化合物的结合能。而合金以及有序金属间化合物的形成焓则由合金或金属间化合物的结合能减去相应的纯组元的结合能求得。用建立的嵌入原子模型分别计算了 Al-Fe 和 Zr 的二元、三元各有序金属间化合物的形成焓。

2 结果与分析

从表 2 结果可以看出,本文所计算的 B2 结构的 Al-Fe 金属间化合物的形成焓为 -0.260eV,与文献 [1] 的实验结果和舒小林^[2]用 M AEAM 所计算的结果是一致的,比 Vailhe 等^[3]用 EAM 原型理论计算结果的绝对值略大。这是因为我们在确定合金势表达式中的参数 Φ 时拟合了 B2 结构的 Al-Fe 金属间化合物形成焓的实验值。计算的 D0₃ 结构的 Al-Fe₃ 金属间化合物的形成焓为 -0.247eV,比文献 [1] 的实验值和舒

小林^[2]用 MAEAM 所计算的结果绝对值大。对于计算的 $L1_0$ B32 $L1_2$ 结构的金属间化合物的形成焓,在我们目前掌握的文献中还没有找到其他理论计算结果与其比较,因此,有待于进一步实验证实。

表 2 计算的 Al-Fe 二元各有序合金的形成焓的值

Table 2 The enthalpies of formation for Al-Fe binary intermetallic compounds

相 Phase	晶体结构 Crystal structure	ΔH (eV /atom)
Al ₃ Fe	L1 ₂	- 0.212
	D0 ₃	- 0.236
	B2	- 0.260
AlFe		- 0.260 ^[1]
		- 0.260 ^[2]
		- 0.325 ^[3]
	B32	- 0.375
	L1 ₀	- 0.260
AlFe ₃	L1 ₂	- 0.139
	D0 ₃	- 0.247
		- 0.132 ^[1]
		- 0.076 ^[2]

从表 3 中可以发现,本文所计算的 Al-Zr 合金的 $L1_2$ 结构的 AlZr₃ 金属间化合物的形成焓值为 - 0.280eV,与文献 [10~ 13] 的实验值一致,这主要是我们在确定合金势表达式中的参数时拟合了 $L1_2$ 结构的 AlZr₃ 金属间化合物形成焓的实验值。计算的 Al-Zr 合金的 $L1_2$ 结构的 Al₃Zr 金属间化合物的形成焓为 - 0.269 eV,比 Ghosh 等^[4,5]用第一原理计算的结果绝对值偏小。计算的 Al-Zr 合金的 B2 结构的 AlZr₂ 金属间化合物的形成焓值为 - 0.366eV,比 Ghosh 等^[4,5]用第一原理计算的值的绝对值略小,比 Alatalo 等^[6]用 FLASTO(LDA)方法计算的值的绝对值略大,跟用 FP-LMTO(LDA)方法计算的相近,比 Saunders 等^[7]用 CALPHAD 计算结果的绝对值略大,比 Wang 等^[8]用 CALPHAD 计算的结果绝对值小。计算的 Al-Zr 合金的 C14 结构的 Al₂Zr 金属间化合物的形成焓为 - 0.376 eV,比文献 [10~ 13] 的实验值和其他理论计算的结果^[5~ 9]绝对值都偏小。计算的 Al-Zr 合金的 Al₂Zr₃ 金属间化合物的形成焓为 - 0.401eV,与 Ghosh 等^[4,5]、Alatalo 等^[6]用第一原理计算和 Saunders 等^[7]用 CALPHAD 计算的相近,比文献 [10~ 13] 的实验值绝对值偏小。计算的 D0₂ 结构的 Al₃Zr 金属间化合物的形成焓为 - 0.308eV,比文献 [10~ 13] 的实验结果和其他理论计算结果^[5~ 9,15]绝对值偏小。计算的 Al₃Zr₄ 金属间化合物的形成焓为 - 0.471eV,比 Ghosh 等^[4,5]用第一原理计算绝对值略小,比 Alatalo 等^[6]用第一原理计算绝对值略大,但比 Wang T 等^[8]用 CALPHAD 计算结果偏小。计算 E94 结构的亚稳相 Al₃Zr₅ 金属间化合

物的形成焓为 - 0.299eV,比 Xu 等^[17]和 Alatalo 等^[6]用第一原理计算绝对值略小。计算的稳相 Al₃Zr₅ 金属间化合物的形成焓为 - 0.571eV,比 Ghosh^[4,5]、Alatalo 等^[6]用第一原理计算的结果绝对值偏大,比实验结果略大,比 Saunders 等^[7]用 CALPHAD 计算结果绝对值偏大,与 Wang 等^[8]用 CALPHAD 计算结果相近。计算的 D0₂ 结构的 AlZr₃ 金属间化合物的形成焓值为 - 0.161eV,比 Ghosh 和 Xu 等^[4,5,17]用第一原理计算的结果绝对值偏小。其他计算的金属间化合物的形成焓,在我们所能掌握的文献中还没有找到其他计算结果与其比较,因此,有待于进一步实验证实。

表 3 计算的 Al-Zr 二元各有序合金的形成焓的值

Table 3 The enthalpies of formation for Al-Zr binary intermetallic compounds

相 Phase	晶体结构 Crystal structure	ΔH (eV /atom)
Al ₃ Zr	L1 ₂	- 0.269
		- 0.481 ^[4]
	D0 ₃	- 0.321
	D0 ₂₂	- 0.265
AlZr ₂	B2	- 0.366
		- 0.381 ^[5]
		- 0.350 ^[6]
		- 0.370 ^[6]
		- 0.346 ^[7]
Al ₂ Zr	C14	- 0.501 ^[8]
		- 0.376
		- 0.553 ^[5]
		- 0.559 ^[6]
		- 0.569 ^[6]
		- 0.467 ^[9]
		- 0.581 ^[10,11]
		- 0.549 ^[12]
		- 0.554 ^[13]
		- 0.475 ^[7]
	- 0.545 ^[8]	
AlZr	B2	- 0.357
		- 0.311 ^[5]
		- 0.270 ^[6]
Al ₂ Zr ₃		- 0.290 ^[6]
	B32	- 0.440
	L1 ₀	- 0.404
		- 0.401
		- 0.407 ^[5]
		- 0.400 ^[6]
		- 0.530 ^[10,11]
Al ₃ Zr		- 0.398 ^[7]
		- 0.572 ^[8]
	D0 ₂	- 0.308
		- 0.509 ^[7]
		- 0.483 ^[5]
		- 0.529 ^[15]
		- 0.470 ^[6]
		- 0.500 ^[6]
	- 0.494 ^[13]	

相 Phase	晶体结构 Crystal structure	ΔH (eV/atom)
		-0.554 ^[14]
		-0.467 ^[9]
		-0.529 ^[10, 11]
		-0.508 ^[1, 2]
		-0.420 ^[7]
		-0.503 ^[8]
Al ₃ Zr ₁₄		-0.471
		-0.493 ^[7]
		-0.450 ^[6]
		-0.470 ^[6]
		-0.606 ^[8]
Al ₃ Zr ₁₅	E9 ₄	-0.299
		-0.371 ^[7]
		-0.350 ^[4]
Al ₃ Zr ₁₅		-0.571
		-0.390 ^[5]
		-0.350 ^[6]
		-0.370 ^[6]
		-0.518 ^[10, 11]
		-0.376 ^[7]
		-0.575 ^[8]
AlZr ₃	L1 ₂	-0.280
		-0.280 ^[7]
		-0.322 ^[5]
		-0.300 ^[6]
		-0.310 ^[6]
	D0 ₃	-0.209
	D0 ₂₂	-0.161
		-0.483 ^[5]
		-0.445 ^[17]

从表 4 结果可以看出,本文所计算的 C16 结构的 FeZr₂ 金属间化合物的形成焓值为 -0.185eV,与用第一原理计算的结果一致。这是因为我们在确定合金势表达式中的参数时 \mathcal{G} 拟合了用第一原理计算的 C16 结构的 FeZr₂ 金属间化合物形成焓的值。表 4 中 C15 结构的 Fe₂Zr 金属间化合物是最稳定的,其他计算的金属间化合物的形成焓,在我们所能掌握的文献中还没有找到其他计算结果与其比较,有待于进一步实验证实。

表 5 结果显示,本文计算的 D_{2h} 结构的 Al₈Fe₄Zr 金属间化合物的形成焓为 -0.655eV, C14 结构的 Al₈Fe₂Zr₃ 金属间化合物的形成焓为 -0.520eV, C15 结构的 Al₁₀Fe₅₇Zr₃₃ 金属间化合物的形成焓为 -0.221eV, B₆ 结构的 Al₂FeZr₆ 金属间化合物的形成焓为 -0.034eV;从这些计算结果可以看出, Al₈Fe₄Zr 金属间化合物是最稳定的, Al₈Fe₂Zr₃ 金属间化合物是次稳定的, Al₁₀Fe₅₇Zr₃₃ 金属间化合物是较稳定的, Al₂FeZr₆ 金属间化合物是最不稳定的。Ouyang 等^[31]对 Al₂FeZr₆ 非晶态晶化时发现,晶化产物为 AlZr₂ 和 FeZr₂。从本文计算的这 3 个化合物的形成焓来看,2

个二元化合物组成的体系其形成焓比 1 个三元化合物的形成焓要低,所以晶化产物为 2 个二元化合物。这与从 Miedema 理论预测的结果^[31]一致。

表 4 Fe-Zr 二元各有序合金的形成焓的值

Table 4 The enthalpies of formation for Fe-Zr intermetallic compounds

相 Phase	晶体结构 Crystal structure	ΔH (eV/atom)
Fe ₃ Zr	L1 ₂	-0.295
	D0 ₃	-0.251
	D0 ₂₂	-0.174
FeZr	B2	-0.333
	B32	-0.445
	L1 ₀	-0.333
FeZr ₂	C16	-0.185
		-0.185
Fe ₂ Zr	C15	-0.509
FeZr ₃	L1 ₂	-0.186
	D0 ₃	-0.260

表 5 Al-Fe-Zr 三元有序金属间化合物形成焓

Table 5 The formation enthalpies for Al-Fe-Zr ternary intermetallic compound

相 Phase	晶体结构 Crystal structure	ΔH (eV/atom)
Al ₂ FeZr ₆	B ₆	-0.034
Al ₈ Fe ₂ Zr ₃	C14	-0.520
Al ₈ Fe ₄ Zr	D _{2h}	-0.655
Al ₁₀ Fe ₅₇ Zr ₃₃	C15	-0.221

3 结论

(1) 运用普适分析型嵌入原子模型,通过拟合元素的晶格常数、空位形成能、结合能和体积模量等,确定出元素 Al、Fe 和 Zr 的嵌入原子模型参数。

(2) 计算出由 Al、Fe 和 Zr 元素构成的二元、三元有序金属间化合物的形成焓,计算的结果与已有的实验结果和第一原理理论计算的结果基本相符。

(3) 从计算的 Al-Fe-Zr 所组成的三元有序金属间化合物的形成焓的值得出的金属间化合物稳定性趋势与三元相图是符合的。计算的 Al₈Fe₄Zr 金属间化合物是最稳定的, Al₈Fe₂Zr₃ 金属间化合物是次稳定的, Al₁₀Fe₅₇Zr₃₃ 金属间化合物是较稳定的, Al₂FeZr₆ 金属间化合物是最不稳定的。

参考文献:

- [1] Mayer J, Meyer B, Oehrens J S, et al. Ordered intermetallic alloys: an assessment [J]. Intermetallics, 1997, 5: 579-600.
- [2] 舒小林. 金属间化合物物理性能: 点缺陷及扩散的改进分析型 EAM 模型研究 [D]. 湖南大学博士学位论文, 1998.
- [3] Valhe C, Farkas D. Shear faults and dislocation core stru-

- cture simulations in B2 FeAl [J]. *Acta Mater*, 1997, 45 4463–4473.
- [4] Ghosh G, Vaynman S, Asta M, et al. Stability and elastic properties of L12-(Al, Cu)₃ (Ti, Zr) phases: Ab initio calculations and experiments [J]. *Intermetallics*, 2007, 15 44–54.
- [5] Ghosh G, Asta M. First-principles calculation of structural energetics of Al-TM (Ti, Zr, Hf) intermetallics [J]. *Acta Mater*, 2005, 53 3225–3252.
- [6] Alatalo M, Weinert M, Watson R E. Stability of Zr-Al alloys [J]. *Phys Rev B*, 1998, 57 2009–2012.
- [7] Saunders N. Calculated stable and metastable phase equilibria in Al-Li-Zr alloys [J]. *Z Metallkunde*, 1989, 80 894.
- [8] Wang T, Jin Z, Zhao J C. Thermodynamic assessment of the Al-Zr binary system [J]. *J Phase Equilib*, 2001, 22 544.
- [9] Alcock C B, Jacobk T, Zador S. Zirconium physicochemical properties of its compounds [M] // Kubaschewski O. Atomic energy review, Vienna IAEA, 1976.
- [10] Murray J, Peruzzi A, Abiata J P. The Al-Zr (aluminum-Zirconium) system [J]. *J Phase Equilib*, 1992, 13 277.
- [11] Kematic R J, Franzen H F. Thermodynamic study of the zirconium-aluminum system [J]. *J Solid State Chem*, 1984, 54 226–234.
- [12] Meschel S V, Kleppa O J. Standard enthalpies of formation of 4d aluminides by direct synthesis calorimetry [J]. *J Alloy Compd*, 1993, 191 111–116.
- [13] Klein R, Jacob I O, Harep A G, et al. Solution-calorimetric determination of the standard molar enthalpies of formation of the pseudobinary compounds Zr(Al_{1-x}Fe_x)₂ at the temperature 298. 15 K [J]. *J Chem Thermodynamics*, 1994, 26 599–608.
- [14] Amador C, Hoyt J J, Chakoumakos B C, et al. Theoretical and experimental study of relaxations in Al₃Ti and Al₃Zr ordered phases [J]. *Phys Rev Lett*, 1995, 74 4955–4958.
- [15] Colinet, Pasturel A. Phase stability and electronic structure in ZrAl compound [J]. *J Alloy Compd*, 2001, 319 154–161.
- [16] Clouet E, Sanchez J M, Sigli C. First-principles study of the solubility of Zr in Al [J]. *Phys Rev B*, 2002, 65 094105(1–13).
- [17] Xu J H, Freeman A J. Phase stability and electronic structure of ScAl₃ and ZrAl₃ and of Sc-stabilized cubic ZrAl₃ precipitates [J]. *Phys Rev B*, 1990, 41: 12553–12561.
- [18] Daw M S, Baskes M I. Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in metals [J]. *Phys Rev Lett*, 1983, 50 1285–1288.
- [19] Daw M S, Baskes M I. Embedded-atom method derivation and application to impurities surfaces and other defects in metals [J]. *Phys Rev Lett*, 1984, 29 6443–6453.
- [20] Norskov J K. Covalent effects in the effective medium theory of chemical binding: Hydrogen heats of solution in the 3d metals [J]. *Phys Rev B*, 1982, 26 2875–2885.
- [21] Norskov J K, Lang N D. Effective-medium theory of chemical binding: Application to chemisorption [J]. *Phys Rev B*, 1980, 21: 2131–2136.
- [22] Stott M J, Zarembka E. Quasiatoms: An approach to atoms in nonuniform electronic system [J]. *Phys Rev B*, 1980, 22 1564–1583.
- [23] Johnson R A. Phase stability of fcc alloys with the embedded-atom method [J]. *Phys Rev B*, 1990, 41 9717–9720.
- [24] Ouyang Y F, Zhang B W, Liao S Z, et al. A simple analytical EAM model for bcc metals including Cr and its application [J]. *Phys Rev B*, 1996, 101: 161–168.
- [25] Zhang B W, Ouyang Y F. Theoretical calculation of thermodynamic data for bcc binary alloys with the embedded atom method [J]. *Phys Rev B*, 1993, 48 3022–3029.
- [26] Zhang B W, Ouyang Y F. Calculations of the thermodynamic properties for binary hcp alloys with simple embedded atom method model [J]. *Z Physik B*, 1993, 92 431–435.
- [27] Ouyang Y F, Zhang B W. Analytic embedded atom potentials for bcc metals: application to calculating the thermodynamic data of bcc alloys [J]. *Phys Lett A*, 1994, 192 79–83.
- [28] Ouyang Y F, Zhang B W, Liao S Z, et al. Formation enthalpies for fcc metal based binary alloys by embedded atom method [J]. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 1998, 8 60–63.
- [29] Hu W Y, Xu H D, Shu X L. Calculation of thermodynamic properties of Mg-RE (RE = Sc, Y, Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho or Er) alloys by an analytic modified embedded atom method [J]. *J Phys D: Appl Phys*, 2000, 33 711–718.
- [30] Ouyang Y F, Zhong X P, Tao X M. A general embedded atom method and application to prediction for thermodynamic properties of Fe-Eu system [J]. *Mater Sci Forum*, 2005, 52 57.
- [31] Ouyang Y F, Zhong X P, Shi H W, et al. Crystallization of Al₃FeZr₃ amorphous alloy prepared by mechanical alloying [J]. *Mater Trans*, 2006, 47 388–391.

(责任编辑: 邓大玉)