

01,07

## Упругие свойства B2-NiAl с добавлением W: исследование из первых принципов

© А.В. Пономарева

Лаборатория моделирования и разработки новых материалов,  
Национальный исследовательский технологический университет „МИСиС“,  
Москва, Россия

Email: alena.ponomareva@misis.ru

Поступила в Редакцию 15 сентября 2022 г.

В окончательной редакции 15 сентября 2022 г.

Принята к публикации 16 сентября 2022 г.

Изучен эффект влияния легирования вольфрама на упругие свойства B2-NiAl при низкотемпературном и высокотемпературном способах размещении W по подрешеткам. С помощью метода точных МТ-орбиталей в сочетании с методом когерентного потенциала рассчитаны константы  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$ , модуль Юнга  $E$ , модуль сдвига  $G$ , значения давления Коши, соотношения  $G/B$ . С использованием феноменологических критериев корреляции между пластичностью и упругими константами показано, что добавление вольфрама может улучшить пластические характеристики B2-NiAl в обоих типах сплавов. Установлено, что при высокотемпературном способе размещения вольфрама на Al подрешетке наблюдается потеря механической стабильности и уменьшение механических свойств при увеличении концентрации W. В сплавах с низкотемпературным распределением атомов вольфрама на обеих подрешетках возникает уникальное сочетание свойств — при увеличении содержания W помимо увеличения пластичности наблюдается одновременное увеличение упругих постоянных  $C_{44}$  и  $C_{11}$ , модулей сдвига  $G$  и Юнга  $E$ . С помощью расчета плотности электронных состояний проанализированы различия в поведении упругих постоянных в сплавах с разным типом размещения вольфрама.

**Ключевые слова:** NiAl, легирующие элементы, вольфрам, упругие свойства, пластичность, первопринципные расчеты.

DOI: 10.21883/FTT.2023.01.53917.477

### 1. Введение

Сплавы на основе NiAl с кубической структурой B2 находят широкое применение в различных отраслях промышленности благодаря ряду выдающихся свойств. Высокая температура плавления, широкая область гомогенности, высокая теплопроводность, низкая плотность позволяют использовать материалы на основе B2-NiAl в авиа- и ракетостроении, электронике. За счет высоких антикоррозионных свойств и отличных эксплуатационных характеристик в условиях высоких температур и давлений сплавы на основе никеля используются в современных ядерно-энергетических системах [1]. Одним из сдерживающих факторов в использовании B2-NiAl является низкая пластичность в крупнокристаллическом состоянии, отсутствие трещиностойкости при комнатной и низких температурах, а также недостаточная прочность при температурах выше 1100° К. Охрупчивание этих сплавов можно уменьшить несколькими путями, в том числе микро- и макролегированием. Так, в работе [2] сообщается, что измельчение зерна до нанометрических размеров в сплавах на основе NiAl улучшает их пластические характеристики. В ряде работ удалось достичь повышения пластичности за счет формирования специфической микроструктуры, например образованием волокон и армированием второй фазы с помощью

добавления Mo, Fe, Cr, Co, W, Hf, Ti [3–5], а также включений боридов и карбидов молибдена и вольфрама [6,7] или углеродных нанотрубок [8]. Авторам работы [9] удалось увеличить пластичность никелида алюминия в результате сплавления с лантаном из-за частичного разупорядочения атомной структуры. Теоретические исследования [10–13] структурных, электронных и упругих свойств NiAl с легирующими элементами показали, что Cr, Mo, Tc, Ru, Rh и Pd являются многообещающими кандидатами для улучшения механических свойств никелида алюминия.

Ранее мы исследовали влияние легирования Sc, Ti, Cr, Co, V, W, Re на упругие свойства сплавов B2-NiAl при условии энергетически выгодного расположения третьего элемента по подрешеткам при  $T = 0$  К [14–16]. Основным результатом работы [14] является расчет упругих характеристик изучаемых материалов — упругих констант  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$ , объемного модуля  $B$ , модулей Юнга  $E$  и сдвига  $G$ , коэффициентов анизотропии. Упругие постоянные являются важными характеристиками конструкционных сплавов и используются для оценки механической стабильности и прочностных характеристик материалов. Расчеты показали, что добавки W, V, Re и Ti могут улучшить пластичность B2-NiAl без существенного изменения макроскопических модулей упругости. В [15] выполнено подробное исследование

эффектов сплавления NiAl с Re, исследовано концентрационное поведение упругих характеристик и их связь с межатомным взаимодействием. В работе [16] с помощью синтеза горения осуществлено экспериментальное подтверждение результатов моделирования эффектов допирования Ti на свойства В2-NiAl. Показано, что экспериментальное значение модуля Юнга синтезированного (Ti<sub>50</sub>Al<sub>50</sub>)Ni сплава, полученное методом микроиндентирования, очень хорошо согласуется с теоретическим расчетом, подтверждая надежность теоретических методов исследования.

В настоящей работе мы детально исследуем влияние W на упругие характеристики В2-NiAl. Несмотря на то, что растворимость вольфрама в NiAl металлургическим способом очень низкая, получение сплавов другими способами, например методами осаждения, механического сплавления, самораспространяющегося высокотемпературного синтеза, алюминотермического восстановления оксидов металлов может позволить достичь значительно большей растворимости. Как было показано нами в работе [14] при исследовании так называемой энергии переноса, которая позволяет учесть возможность образования антиструктурного дефекта, при  $T = 0$  К атомы W занимают позиции как на Al, так и на Ni подрешетках. Это совпадает с результатами работы [17], в которой показано, что при низких температурах атомы W располагаются на обеих подрешетках одновременно, однако при более высоких температурах проявляют предпочтение подрешетке Al. Поэтому мы рассмотрели эффект влияния легирования вольфрама на упругие свойства В2-NiAl при низкотемпературном и высокотемпературном способах размещения W по подрешеткам.

## 2. Детали вычислений

Упругие постоянные Ni–Al–W сплавов были определены на основе расчета полных энергий деформированных решеток, при этом деформация сохраняла объем исходной, недеформированной решетки в области действия закона Гука [18]. Для кубических кристаллов существует три независимых элемента тензора упругих постоянных:  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$ .

Константы  $C_{11}$  и  $C_{12}$  определяются из соотношений

$$C_{11} = 3B + 4C'/3, \quad (1)$$

$$C_{12} = 3B - 2C'/3, \quad (2)$$

где  $B$  — объемный модуль,  $C'$  — модуль тетрагонального сдвига. Объемный модуль  $B$  был получен из расчета уравнения состояния.

Упругая константа  $C'$  была получена, используя орто ромбическую деформацию вида

$$I + D_0 = \begin{pmatrix} 1 + \delta & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \delta & 0 \\ 0 & 0 & 1/1 - \delta^2 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

как коэффициент соответствующего изменения энергии от квадрата деформации:

$$\Delta E/V = 2C'\delta^2 + O(\delta^4). \quad (4)$$

Константа  $C_{44}$  рассчитывалась, используя моноклинное искажение

$$I + D_M = \begin{pmatrix} 1 & \delta & 0 \\ \delta & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1/1 - \delta^2 \end{pmatrix} \quad (5)$$

и изменение в полной энергии

$$\Delta E/V = 2C_{44}\delta^2 + O(\delta^4). \quad (6)$$

Полная энергия рассчитывалась для шести различных деформаций ( $\delta = 0.00-0.05$ ), затем при помощи линейной аппроксимации  $\Delta E$  как функции квадрата деформации определялись упругие постоянные  $C'$  и  $C_{44}$ . Далее, с использованием значений объемного модуля определялись упругие постоянные  $C_{11}$  и  $C_{12}$  из уравнений (1) и (2).

Критерий устойчивости кристаллической решетки получается из условия, что плотность энергии может быть представлена положительно определенной квадратичной формой таким образом, что энергия возрастает при любой малой деформации. Поэтому все диагональные компоненты тензора упругих констант должны иметь положительные значения. Следовательно, для кубических кристаллов критерий стабильности определяется выражениями

$$C_{44} > 0, \quad C_{11} - C_{12} > 0, \quad C_{11} + 2C_{12} > 0. \quad (7)$$

Для получения упругих характеристик поликристаллов использовалось усреднение по Хиллу (H) [19,20]. Значения характеристик в приближении Хилла являются средним арифметическим значений, полученных в приближениях Реуса (R) и Фойгта (V) [19].

Первый метод соответствует предположению об однородности деформаций в поликристалле, второй — однородности напряжений, причем получаемые значения упругих характеристик дают верхнюю и нижнюю границы изменения соответствующих свойств [19].

Для кубических кристаллов имеем

$$B_R = B_V = (C_{11} + 2C_{12})/3, \quad (8)$$

$$G_V = (C_{11} - C_{12} + 3C_{44})/5, \quad (9)$$

$$G_R = (5C_{44}(C_{11} - C_{12})) / (4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})), \quad (10)$$

$$E = 9BG/(3B + G). \quad (11)$$

Для анализа изменения феноменологических соотношений в результате легирования использовались такие параметры, как давление Коши  $P_C = (C_{12} - C_{44})$  [21] и соотношение  $(G/B)$  [22], которые можно рассматривать как показатели хрупкости материалов. Для ковалентных

материалов с направленным характером атомных связей давление Коши отрицательно ( $C_{12} < C_{44}$ ), так как в этом случае сопротивление материала сдвиговой деформации ( $C_{44}$ ) значительно больше, чем для изменения объема ( $C_{12}$ ). С другой стороны, для металлических связей, где электроны почти делокализованы, давление Коши должно быть положительным ( $C_{12} > C_{44}$ ). Отношение  $G/B$  можно также рассматривать как меру пластичности [22]. Объемный модуль  $B$  связан с сопротивлением изменению длины связи, а модуль сдвига  $G$  соответствует изменению угла связи. Поэтому, если  $G/B < 0.5$ , то материал ведет себя пластично, если  $G/B > 0.5$ , то материал должен быть хрупким.

Расчеты проводились с использованием метода точных МТ-орбиталей (ЕМТО) [18] и приближения когерентного потенциала (СПА) [23]. Комбинация метода ЕМТО с приближением когерентного потенциала позволила проводить исследования неупорядоченных и частично неупорядоченных W-NiAl сплавов. В методе ЕМТО полная несферическая зарядовая плотность, а затем и кинетическая энергия, получается путем точного самосогласованного решения одноэлектронного уравнения Кона–Шема для пересекающихся МТ-потенциалов. Это дает возможность достичь точности, сравнимой с полнопотенциальными методами, при этом сохраняется эффективность методов, основанных на использовании МТ-потенциалов [24–28].

Обменно-корреляционные эффекты в электронном газе были учтены в рамках обобщенного градиентного приближения (GGA) [29]. Базисный набор волновых функций ЕМТО включал  $s$ -,  $p$ -,  $d$ -,  $f$ -орбитали. Полная зарядовая плотность (FCD) [30] была представлена одноцентровым разложением электронных волновых функций в терминах сферических гармоник с орбитальными моментами  $I_{FCD}^{\max} = 8$ . Интегрирование по энергии проведено по 24 точкам на полукруглом контуре. Для расчета упругих свойств интегрирование по неприводимой части зоны Бриллюэна проводилось с использованием сетки  $31 \times 31 \times 31$   $k$ -точек в обратном пространстве. Сходимость энергии по отношению к параметрам расчета составляла  $10^{-7}$  Ry.

### 3. Результаты и обсуждение

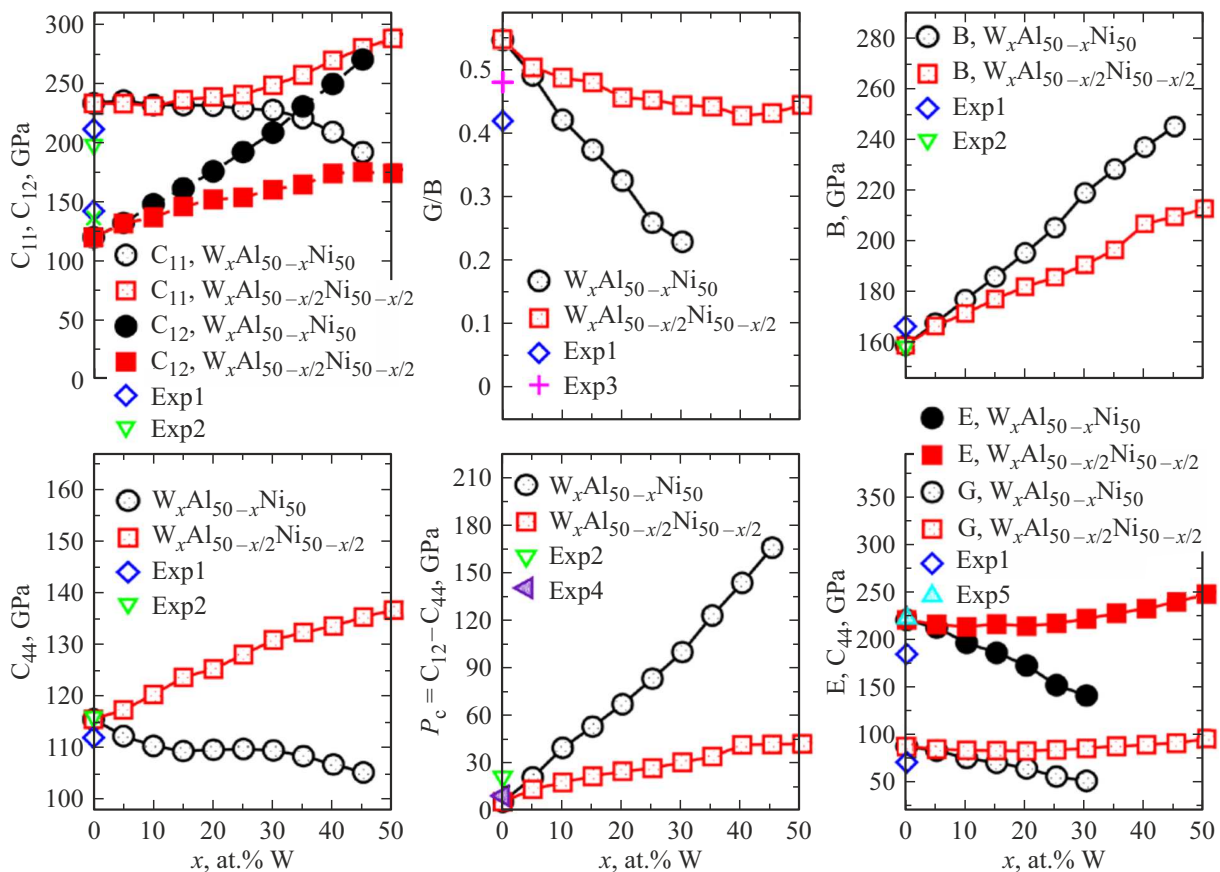
Для исследования эффекта легирования W на упругие свойства B2-NiAl были определены упругие константы  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$ , модуль Юнга  $E$  и модуль сдвига  $G$  тройных NiAl-W сплавов. Отметим, что для B2-NiAl найдено хорошее согласие между теоретическим и экспериментальным параметром решетки, объемным модулем, упругими константами (рис. 1 и Ref [14]). На рис. 1 представлены упругие свойства  $W_xAl_{50-x/2}Ni_{50-x/2}$  сплавов при низкотемпературном распределении атомов вольфрама по подрешеткам Al и Ni, так и  $W_xAl_{50-x}Ni_{50}$  сплавов при высокотемпературном размещении атомов W на алюминиевой подрешетке (отметим, что в случае с высокотем-

пературного размещения  $x$  обозначает концентрацию на подрешетке, т.е. полная концентрация W в сплаве равна  $x/2$ ). Из рис. 1 видно, что  $W_xAl_{50-x/2}Ni_{50-x/2}$  сплавы, в которых атомы вольфрама размещены на обеих подрешетках, устойчивы во всем диапазоне концентраций, так как выполняются все критерии механической стабильности кубических кристаллов, представленные уравнениями (7). В то же время для  $W_xAl_{50-x}Ni_{50}$  сплавов, в которых атомы W размещены только на подрешетке Al, кривые  $C_{11}$  и  $C_{12}$  пересекаются в точке  $x \sim 30$ , поэтому критерий механической устойчивости ( $C_{11} - C_{12}$ )  $> 0$  выполняется только при  $x < 30$ .

При малых концентрациях вольфрама поведение упругих констант  $C_{11}$  и  $C_{12}$  для обоих типов сплавов практически одинаковое:  $C_{11}$  до  $x \sim 10$  почти не меняется, а  $C_{12}$  начинает увеличиваться. При дальнейшем увеличении содержания вольфрама  $C_{11}$  и  $C_{12}$  для неупорядоченных  $W_xAl_{50-x/2}Ni_{50-x/2}$  сплавов увеличиваются, для частично неупорядоченных  $W_xAl_{50-x}Ni_{50}$  сплавов  $C_{12}$  также увеличивается, а  $C_{11}$  — уменьшается с W концентрацией. Вместе с тем наблюдаются различия в поведении значений сдвиговой константы  $C_{44}$ , модуля Юнга  $E$  и модуля сдвига  $G$  при различном распределении вольфрама по подрешеткам: в  $W_xAl_{50-x}Ni_{50}$  сплавах  $C_{44}$ ,  $G$  и  $E$  уменьшаются, в то время как в  $W_xAl_{50-x/2}Ni_{50-x/2}$  сплавах все эти параметры увеличиваются, с максимальным изменением в упругой постоянной  $C_{44}$ . Объемный модуль  $B$  увеличивается с концентрацией вольфрама для обоих типов сплавов, максимальное увеличение наблюдается для  $W_xAl_{50-x}Ni_{50}$  сплавов.

Феноменологические корреляции между пластичностью и упругими константами были проанализированы с помощью значений давления Коши ( $P_C = C_{12} - C_{44}$ ) и соотношения  $G/B$ . Как было показано в [14], B2-NiAl имеет смешанный ковалентно-металлический тип связи с присутствием ионной составляющей и находится достаточно близко к границе  $G/B$  хрупких материалов, что подтверждается экспериментальными данными (рис. 1). Изменение  $P_C$  и  $G/B$  в зависимости от концентрации W указывает на возможность улучшения пластических свойств, т.к. величина соотношения  $G/B$  уменьшается, а значения  $P_C$  — увеличивается. При этом в  $W_xAl_{50-x}Ni_{50}$  сплавах изменения параметров хрупкости более значительны, чем в  $W_xAl_{50-x/2}Ni_{50-x/2}$  сплавах. В  $W_xAl_{50-x}Ni_{50}$  сплавах мы ограничили зависимость упругих характеристик  $E$ ,  $G$ ,  $G/B$  концентрацией вольфрама  $x = 30$ , поскольку при достижении области механической нестабильности приближение Реусса, которое дает вклад в используемое приближение Хилла, становится неприемлемым, так как использует режим однородной деформации [19]. Как видно из формул (10) и (11) в приближении Реусса модули  $G$  и  $E$  пропорциональны ( $C_{11} - C_{12}$ ), поэтому при  $x > 30$  показывают нелинейное поведение с уходом в отрицательную область.

Таким образом, различное размещение вольфрама по подрешеткам приводит к значительным отличиям в свойствах легированного никелида алюминия: с потерей



**Рис. 1.** Упругие константы  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$ , соотношение  $G/B$ , давление Коши  $P_C = (C_{12} - C_{44})$ , объемные модули  $B$ , модули сдвига  $G$  и модули Юнга  $E$   $W_xAl_{50-x}Ni_{50}$  и  $W_xAl_{50-x/2}Ni_{50-x/2}$  сплавов. На рисунке использованы обозначения для экспериментальных данных: Exp1 — [31], Exp2 — [32], Exp3 — [33], Exp4 — [34], Exp5 — [15].

механической стабильности по  $C' = (C_{11} - C_{12})/2$  при высокотемпературном расположении и с увеличением упругих характеристик и пластичности при низкотемпературном размещении.

Чтобы понять причину различного поведения упругих характеристик в исследуемых системах, было детально проанализировано изменение плотности электронных состояний (DOS) при легировании (рис. 2). При низких концентрациях вольфрама полная плотность состояний почти сохраняет форму DOS чистого NiAl (рис. 2, a1–a3), в которой основной вклад в DOS в районе энергии Ферми вносит узкая  $d$ -зона Ni. Она состоит из так называемых несвязывающих (основной вклад от  $t_{2g}$  электронов с небольшим вкладом  $e_g$  электронов) и антисвязывающих ( $e_g$ ) состояний, разделенных псевдощелью. Подробное описание DOS чистого В2-NiAl приведено в статье [14]. Различия в полной плотности состояний в  $W_xAl_{50-x}Ni_{50}$  и  $W_xAl_{50-x/2}Ni_{50-x/2}$  сплавах при  $x = 10$  (рис. 2, a1) минимальны: небольшое размытие пиков и небольшой сдвиг вправо полной DOS из-за уменьшения концентрации Ni в  $W_xAl_{50-x/2}Ni_{50-x/2}$  сплавах по сравнению с  $W_xAl_{50-x}Ni_{50}$  сплавами. Однако парциальная плотность показывает основное различие между сплавами: в  $W_xAl_{50-x/2}Ni_{50-x/2}$  появляется

пик  $t_{2g}$  состояний W(Ni) (вольфрам, расположенный на подрешетке никеля) (рис. 2, e1, зеленая линия), который смещен в сторону энергии Ферми относительно  $t_{2g}$  состояний W(Al) (вольфрам, расположенный на алюминиевой подрешетке) (рис. 2, e1, черная линия). Так как  $t_{2g}$  орбитали в структурах ОЦК-типа обеспечивают межатомную связь между первыми соседями, то этот эффект обеспечивает усиление  $sp-d$ -гибридизации между электронами W и Al (рис. 2, e1–e3), что приводит к увеличению сдвиговых констант  $C_{44}$  в  $W_xAl_{50-x/2}Ni_{50-x/2}$  сплавах (рис. 1).

В сплавах  $W_xAl_{50-x}Ni_{50}$  состояния W(Ni) отсутствуют, так как атомы вольфрама расположены только на подрешетке алюминия, более того,  $t_{2g}$  состояния W(Al) имеют низкую DOS, а  $e_g$  нулевую плотность состояний в интервале энергий  $-0.2 - -0.05$  Ry (рис. 2, d1–d3), поэтому при размещении вольфрама на подрешетке алюминия уменьшается связь и с атомами Ni, и с атомами Al. Это приводит к одновременному уменьшению упругих констант  $C_{11}$  и  $C_{44}$ , а также модулей  $G$  и  $E$  в  $W_xAl_{50-x}Ni_{50}$  сплавах (рис. 1).

При увеличении концентрации вольфрама на никелевой подрешетке появляется и растет доля  $e_g$  состояний W(Ni) с ненулевой плотностью состояний в интервале

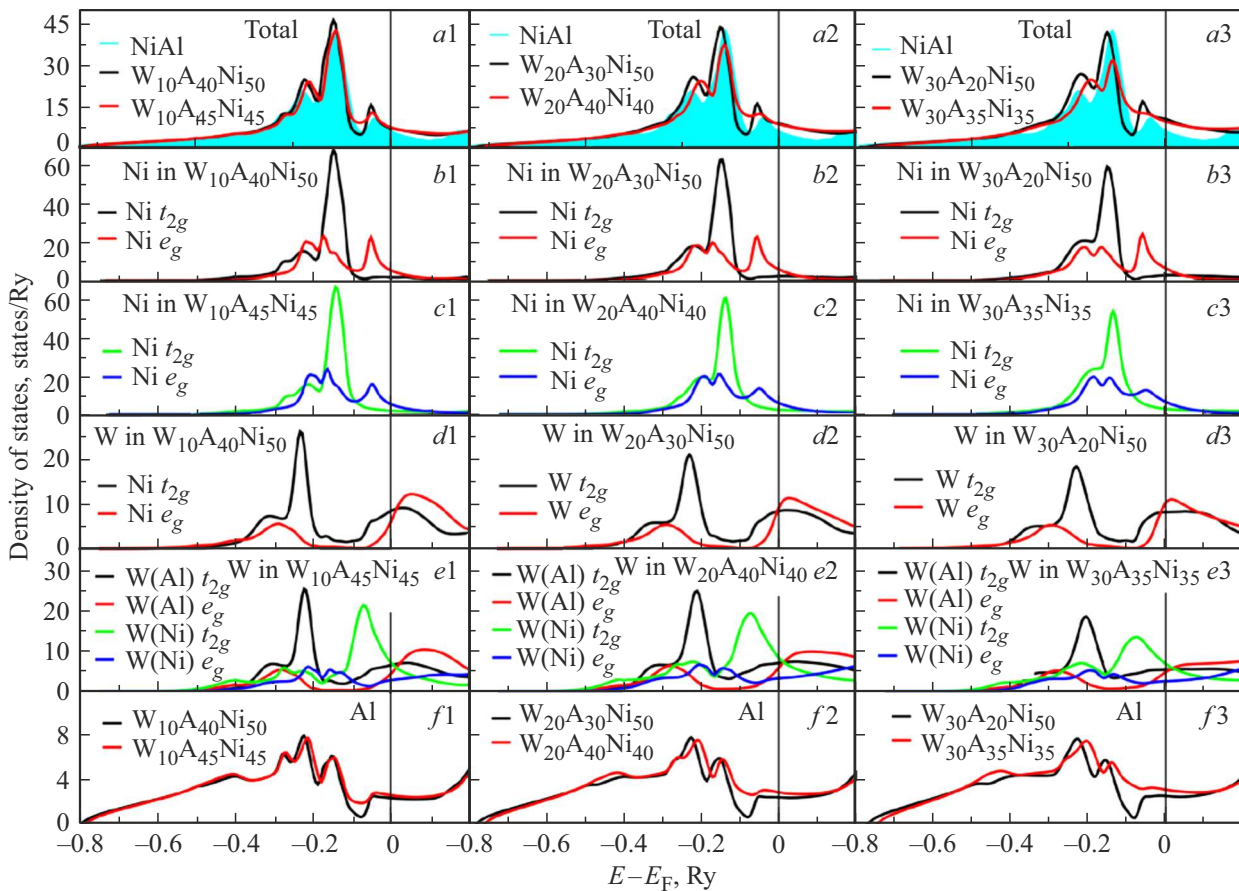


Рис. 2. Полная и парциальная плотность электронных состояний (DOS)  $W_xAl_{50-x/2}Ni_{50-x/2}$  и  $W_xAl_{50-x}Ni_{50}$  сплавов.

$-0.2 - 0.1$  eV (рис. 2,  $e1-e3$ ), что приводит к увеличению упругой постоянной  $C_{11}$  и небольшому росту модуля сдвига  $G$  и модуля Юнга  $E$  в  $W_xAl_{50-x/2}Ni_{50-x/2}$  сплавах при  $x > 20$ . Увеличению упругой постоянной  $C_{11}$  в  $W_xAl_{50-x/2}Ni_{50-x/2}$  сплавах также происходит из-за дозаполнения зоны алюминия  $5d$  электронами  $W$ , имеющих большую пространственную протяженность. При этом благодаря хвостам  $5d$  электронов  $W$  уменьшается размер псевдощели, полная плотность состояний  $W_xAl_{50-x/2}Ni_{50-x/2}$  сплавов становится более гладкой в районе энергии Ферми (рис. 2,  $f1-f3$ ).

Как следует из рис. 1 в сплавах с обоими способами размещения вольфрама отношение  $G/B$  уменьшается, а  $P_C$  становится более положительным при увеличении концентрации вольфрама, что свидетельствует об увеличении металлической доли в атомной связи. Это, во-первых, вызвано размытием пиков как  $Ni$ , так и  $W$  (рис. 2,  $c1-c3$ ,  $d1-d3$ ) из-за беспорядка на одной или обеих подрешетках. Во-вторых, происходит перераспределение электронов никеля между  $t_{2g}$ - и  $e_g$ -орбиталями: пики  $t_{2g}$  уменьшаются и размываются, в то время как  $e_g$  пики заполняются и смещаются в сторону более низких энергий. Этот эффект сильнее проявляется в  $W_xAl_{50-x}Ni_{50}$  сплавах, так как в них концентрация никеля выше, чем в  $W_xAl_{50-x/2}Ni_{50-x/2}$

сплавах. Таким образом, увеличение однородности электронной плотности ( $t_{2g} + e_g$ ) дополнительно усиливает металлическую связь в  $W_xAl_{50-x}Ni_{50}$  сплавах. С другой стороны, потеря направленности связи приводит к увеличению сопротивления изменению объема по сравнению с сопротивлением сдвигу, а следовательно, увеличению объемного модуля  $B$  и константы  $C_{12}$  в сплавах с высокотемпературным распределением вольфрама. Действительно, как мы видели из рис. 1,  $C_{12}$  и объемный модуль  $B$  в  $W_xAl_{50-x}Ni_{50}$  сплавах меняются сильнее, чем в  $W_xAl_{50-x/2}Ni_{50-x/2}$  сплавах. Значение константы  $C_{11}$   $W_xAl_{50-x}Ni_{50}$  сплавов в концентрационном интервале стабильности меняется слабо (рис. 1), так как  $Ni e_g$  состояния практически полностью сохраняют свою форму (рис. 2,  $b1-b3$ ). Одновременно с этим быстрый рост  $C_{12}$  с увеличением концентрации  $W$  на  $Al$  подрешетке приводит к тому, что константа  $C'$  становится отрицательной при  $x > 30$  и  $W_xAl_{50-x}Ni_{50}$  сплавы становятся механически нестабильными.

Таким образом, появление  $t_{2g}$  электронов вольфрама на  $Ni$  подрешетке приводит к увеличению  $C_{44}$ , а  $e_g$  электронов  $W(Ni)$  — к увеличению  $C_{11}$  в сплавах с низкотемпературным размещением, т.е. размещение вольфрама на  $Ni$  подрешетке увеличивает, главным образом, ковалентную составляющую атомной связи

в  $W_xAl_{50-x/2}Ni_{50-x/2}$  сплавах. При размещении вольфрама на алюминиевой подрешетке взаимодействие W и Ni увеличивает однородность электронной плотности и усиливает металлическую компоненту атомной связи в сплавах обоих типов, но этот эффект сильнее проявляется в  $W_xAl_{50-x}Ni_{50}$  сплавах, так как никель не замещается вольфрамом.

#### 4. Заключение

С помощью метода точных МТ-орбиталей в комбинации с приближением когерентного потенциала (EMTO-CRPA) изучен эффект легирования вольфрамом на упругие свойства В2-NiAl при низкотемпературном размещении W на обеих подрешетках и высокотемпературном способе размещения W на подрешетке Al. Показано, что в  $W_xAl_{50-x}Ni_{50}$  сплавах с вольфрамом на Al подрешетке наблюдается потеря механической стабильности и деградация механических свойств — уменьшение упругой константы  $C_{44}$ , модуля сдвига  $G$  и модуля Юнга  $E$ . Однако при малых концентрациях вольфрама в области механической стабильности ожидается резкое увеличение пластичности. В то же время в  $W_xAl_{50-x/2}Ni_{50-x/2}$  сплавах с низкотемпературным распределением атомов вольфрама возникает редкое сочетание свойств — при увеличении содержания W увеличивается пластичность и одновременно с этим увеличиваются упругие константы  $C_{11}$  и  $C_{44}$ , модуль сдвига  $G$  и модуль Юнга. Анализ плотности электронных состояний показал, одновременное увеличение пластичности и механических свойств в  $W_xAl_{50-x/2}Ni_{50-x/2}$  сплавах напрямую связан с изменением электронной структуры при легировании.

#### Финансирование работы

Работа поддержана Российским научным фондом (проект № 22–12–00193). Вычисления выполнены на вычислительном кластере НИТУ „МИСиС“.

#### Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

#### Список литературы

- [1] N. Trung, H. Phuong, M.D. Starostenkov. *Lett. Mater.* **9**, 168 (2019).
- [2] E.M. Schulson, D.R. Barker. *Scripta Met.* **17**, 519 (1983).
- [3] H. Li, J. Guo, H. Ye, Q. Wang, J.C. He. *Mater. Lett.* **62**, 61 (2008).
- [4] G. Frommeyer, R. Rablbauer, H.J. Schafer. *Intermetallics* **18**, 299 (2010).
- [5] K. Ishida, R. Kainuma, N. Ueno, T. Nishizawa. *Met. Mater. Trans. A* **22**, 441 (1991).
- [6] V.V. Gostishchev, I.A. Astapov, S.N. Khimukhin. *Inorganic Mater.: Appl. Res.* **8**, 546 (2017).
- [7] E. Liu, Y. Gao, J. Jia, Y. Bai, W. Wang. *Mater. Sci. Eng. A* **592**, 201 (2014).
- [8] S. Ameri, Z. Sadeghian, I. Kazeminezhad. *Intermetallics* **76**, 41 (2016).
- [9] A.I. Kovalev, D.L. Wainstein, A.Y. Rashkovskiy. *Appl. Surf. Sci.* **354**, 323 (2015).
- [10] C. Zhang, P. Han, J. Li, M. Chi, L. Yan, Y. Liu, X. Liu, B. Xu, J. Phys. D **41**, 095410 (2008).
- [11] C. Jiang, J. Sordet, B. Gleeson. *Acta Mater.* **54**, 2361 (2006).
- [12] C. Zhang, F. Tian, X. Ni. *Chin. Phys. B* **29**, 036201 (2020).
- [13] P. Lazar, R. Podloucky. *Phys. Rev. B* **73**, 104114 (2006).
- [14] A.V. Ponomareva, E.I. Isaev, Yu.Kh. Vekilov, I.A. Abrikosov, *Phys. Rev. B* **85**, 144117 (2012).
- [15] A.V. Ponomareva, Y.K. Vekilov, I.A. Abrikosov. *J. Alloys Compd* **586**, S274 (2014).
- [16] K.P. Sidnov, D.S. Belov, A.V. Ponomareva, I.A. Abrikosov, A.M. Zharmukhambetova, N.V. Skripnyak, S.A. Barannikova, A.S. Rogachev, S. Rouvimov, A.S. Mukasyan. *J. Alloys Compd.* **688**, 534 (2016).
- [17] C. Jiang. *Acta Mater.* **55**, 4799 (2007).
- [18] L. Vitos. *Computational Quantum Mechanics for Materials Engineers: The EMTO Method and Applications*. Springer-Verlag, London (2007).
- [19] G. Grimvall. *Thermophysical Properties of Materials*, 1st ed., Elsevier, N.Y. (1999).
- [20] C. Asker, L. Vitos, I.A. Abrikosov. *Phys. Rev. B* **79**, 214112 (2009).
- [21] D. Pettifor. *Mater. Sci. Technol.* **8**, 345 (1992).
- [22] S.F. Pugh. *Phil. Mag.* **45**, 823 (1954).
- [23] L. Vitos, I.A. Abrikosov, B. Johansson. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 156401 (2001).
- [24] L. Vitos, P.A. Korzhavyi, B. Johansson. *Phys. Rev. Lett.* **88**, 155501 (2002).
- [25] J. Zhang, C. Cai, G. Kim, Y. Wang, W. Chen. *npj Comput. Mater.* **8**, 89 (2022).
- [26] D. Music, T. Takahashi, L. Vitos, C. Asker, I.A. Abrikosov, J.M. Schneider. *Appl. Phys. Lett.* **91**, 191904 (2007).
- [27] T. Gebhardt, D. Music, D. Kossmann, M. Ekholm, I.A. Abrikosov, L. Vitos, J.M. Schneider. *Acta Mater.* **59**, 3145 (2011).
- [28] J. Zhang, P.A. Korzhavyi, J. He, *Materials Today Commun.* **28**, 102551 (2021).
- [29] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
- [30] J. Kollar, L. Vitos, H.L. Skriver. In: *Electronic Structure and Physical Properties of Solids: The Uses of the LMTO Method*, Lecture Notes in Physics / Ed. H. Dreysse. Springer-Verlag, Berlin (2000). C. 85.
- [31] G. Simmons, H. Wang. *Single Crystal Elastic Constants and Calculated Aggregate Properties: A Handbook*. MIT Press, Cambridge, MA (1971).
- [32] N. Rusovicand, H. Warlimont. *Phys. Status Solidi A* **44**, 609 (1977).
- [33] T. Davenport, L. Zhou, J. Trivisonno. *Phys. Rev. B* **59**, 3421 (1999)
- [34] M. Mostoller, R. M. Nicklow, D. M. Zehner, S.-C. Lui, J.M. Mundenar, E.W. Plummer. *Phys. Rev. B* **40**, 2856 (1989).

Редактор Ю.Э. Кумаев