

Bi, Sb 及稀土元素对 AZ91 镁合金高温性能影响机理研究*

张国英^{1)†} 张 辉¹⁾ 魏 丹¹⁾ 罗志成¹⁾ 李昱材²⁾

1) 沈阳师范大学物理科学与技术学院, 沈阳 110034)

2) 沈阳工程学院基础教学部, 沈阳 110136)

(2008 年 5 月 1 日收到, 2008 年 7 月 1 日收到修改稿)

利用大角重位点阵概念建立了 AZ91 镁合金基体(α 相)和镁 0001 对称倾斜晶界原子结构模型, 应用实空间的连分数方法计算了体系的结构能、环境敏感镶嵌能以及相互作用能. 结果发现, 在镁合金基体中, Al 和稀土形成团簇时比较稳定, Al, Bi 或 Sb 与稀土形成团簇时不稳定. Bi 或 Sb 和稀土元素同时存在于 AZ91 镁合金中时, 一方面 Bi 或 Sb 将可与 RE 结合形成 RE_2B (RE_2Sb 或 $RE-B$ ($RE-Sb$)) 化合物弥散分布于晶界, 另一方面镁合金基体中会形成 $Al_{11}RE_3$ 化合物, 消耗了镁合金中的 Al, 抑制粗大非连续析出相 $Mg_{17}Al_{12}$ 的形成. 稀土与 Al, Bi 或 Sb 形成的化合物熔点较高, 且晶界区 RE_2B (RE_2Sb) 或 $RE-B$ ($RE-Sb$) 化合物的析出细化 AZ91 合金基体中 $Al_{11}RE_3$ 相, 显著提高了合金的高温性能.

关键词: 电子理论, 晶界偏聚, 合金元素, 高温性能

PACC: 7000, 6170N, 8140C

1. 引 言

AZ91 镁合金中主要的强化相是 $Mg_{17}Al_{12}$, 此相热稳定性差, 温度超过 120°C 时就会软化和粗化, 且 $Mg_{17}Al_{12}$ 相具有立方结构, 与镁基体的六角密集结构不匹配, $Mg/Mg_{17}Al_{12}$ 为脆性界面, 这些导致镁合金在高于 150°C 时的高温性能很差^[1]. 袁广银^[2] 等研究发现, 在 AZ91 镁合金中, Bi 元素的加入形成新的连续析出相 $Mg_{17}(Al, Bi)_2$ 与基体存在复杂的半共格关系, 提高了强化相的热稳定性, 有助于合金高温性能的改善. Sb 的加入一方面固溶于 $Mg_{17}Al_{12}$ 相, 另一方面以 Mg_3Sb_2 形式析出, 室温下通过细化基体晶粒强化合金, 高温下通过 Mg_3Sb_2 相弥散沉淀强化镁合金^[2]. Bi 或 Sb 掺入 AZ91 镁合金时, Bi 或 Sb 比 Al 易于偏聚于晶界, 抑制 Al 在晶界偏聚, 促进基体中连续的 $Mg_{17}Al_{12}$ 相的析出, 提高 AZ91 镁合金室温性能^[3].

在 Mg-Al 合金中加入 1% 左右的 RE, RE 优先和

Al 结合生成具有体心正方晶体结构 Al_4RE 相 (RE 为 La, Nd, Ce 及 Pr) 和立方 Laves 晶型的 Al_2RE 相 (RE 为 Y 或 Nd)^[4,5], 同时由于稀土与 Al 形成化合物, 减少了 $Mg_{17}Al_{12}$ 相的析出量, 从而提高了合金高温性能. 王渠东等人^[1] 研究了稀土对 AZ91 镁合金组织和性能的影响, 发现稀土的加入, 镁合金中会析出高稳定性的 $Al_{11}RE_3$ 粒子, $Mg_{17}Al_{12}$ 相得到细化, 提高了 AZ91 镁合金的高温性能. Y 及 MM (含铈、镧的混合稀土) 加入 AZ91 镁合金中, 合金中分别出现 Al_2Y 及 $Al_4(Ce, La)$ 组织, 它们具有较高热稳定性和显微硬度, 导致合金强化^[5,6]. 刘子利等人^[7] 研究了 Sb 元素对 AE41 (Mg-4Al-RE) 镁合金组织和性能的影响, 结果表明加入 Sb 后基体中出现了弥散颗粒质点. 该颗粒质点主要为 RE_2Sb 相, 但当加入 Sb 量较高时, 该颗粒质点主要为 RE_2Sb 相和 $RESb$ 相的复合物. 随着 Sb 加入量的增加, 条状 $Al_{11}RE_3$ 相数量降低, 同时晶枝逐渐变短变细, 弥散 $RESb$ 颗粒质点数量和尺寸增大. 加入 Sb 改善了 Mg-Al-RE 合金的流动性. 合金的拉伸强度、塑性、硬度和冲击韧性随着 Sb 含

* 国家自然科学基金 (批准号: 50671069, 50571071), 辽宁省教育厅科学研究计划 (批准号: 2008511, 2007T165) 资助的课题.

† E-mail: Gyzhang1965@sina.com

量的增加而提高,但 Sb 含量过大时合金的综合力学性能下降。

以上是向 Mg-Al 合金中分别加入 Bi, Sb, RE 元素及向 AE 合金中加入 Sb 的研究成果。受向 AE 合金中加入 Sb 思路的启发,我们打算应用电子理论研究 Bi 或 Sb 和稀土同时加入对 AZ91 镁合金高温性能的影响机理。

2. 计算方法与模型建立

应用电子理论研究材料的微观机理的工作很多,如应用第一原理方法研究 Nb, Mo 在 TiAl 合金中的合金化效应^[8], ZnO 中 In-N 的共同掺杂效应^[9]等,但这些方法需要材料具有周期性。实空间的连分数方法在计算过程中不要求系统具有周期性,故此方法在处理不具备周期性的材料方面比较方便^[10-12]。本文计算过程中涉及晶界模型,晶界不具备周期性,其他方法如不做近似很难处理此类问题。根据连分数方法,体系的总结构能 E_s 为^[13]

$$E_s = \sum_l \sum_{\alpha} \int_{-\infty}^{E_f} E_{nl}(E) \lambda E, \quad (1)$$

式中 E_f 为体系的费米能级, α 是轨道(s, p, d), l 为所选区域内的格点, $n_{nl}(E)$ 为状态密度。计算过程中,哈密顿对角矩阵元-原子轨道自能取自 Fischer 用 Hartree-Fock 近似计算的结果^[14]。哈密顿非对角矩阵元-原子间的跃迁积分取为 Slater-Koster 积分^[13],普适参数取自固态表^[15],链长取为 30。各元素价电子组态取为 Mg: $3s^2 3p^0$; Al: $3s^2 3p^1$; Bi: $6s^2 6p^3$; Sb: $5s^2 5p^3$; La: $6s^2 5d^1$ (f 电子作为冻心); Sc: $4s^2 3d^1$; Y: $5s^2 4d^1$ 。

环境敏感镶嵌能 E_{ESE} 是合金元素在不同典型原子环境中的能量,利用它可以比较元素在不同环境中的相对稳定性。对于替位式合金元素,环境敏感镶嵌能可表示为^[16]

$$E_{\text{ESE}} = \frac{1}{n} (E^a - E^d - nE_f^a + nE_f), \quad (2)$$

式中, n 是处于某个典型环境中(本文为完整镁合金 α 相内,或晶界区)的合金原子数, E^a , E^d 分别是在此环境中包含和不包含合金元素时计算出的总结构能, E_f , E_f^a 分别是基体和合金元素孤立时的原子能。环境敏感镶嵌能越高,合金原子对周围环境影响越大,该原子越不稳定,它有向环境敏感镶嵌能低的位置扩散的趋势。利用环境敏感镶嵌能,可以讨论合金元素和稀土元素在晶界区的偏聚性质,揭示镁合金

高温强化机理。

原子间的相互作用能可以用来判断合金是否存在有序化或团簇化的趋势^[17]。若原子间相互排斥,则合金具有有序化倾向,原子间相互吸引则有团簇化倾向。合金原子间相互作用能(ΔE)可以表达为下面三个系统间的能量组合,即

$$\Delta E = [E(N, nX) + (n-1)E(N) - nE(N, X)], \quad (3)$$

其中, N 为某一特定环境所选范围内的总格点数, $E(N, nX)$ 为所选范围内含有 n 个近邻合金原子的总结构能, $E(N)$ 为所选范围内不含合金原子的总结构能, $E(N, X)$ 为仅含一个合金原子时所选范围的总结构能。(3)式表示合金体系中 n 个合金原子形成团簇时,它们之间的相互作用能。

由于在 AZ91 镁合金中加入稀土会形成 $\text{Al}_{11}\text{RE}_3$ 相, Al 和稀土原子比近似 4:1。当稀土和 Bi 或 Sb 同时加入时,考虑 Sb 或 Bi 是否会固溶于 $\text{Al}_{11}\text{RE}_3$ 相中,因此设计一个稀土原子、一个 Bi(或 Sb)和三个 Al 形成团簇的模型,计算 Bi(或 Sb)与稀土、Al 与稀土两种原子之间的相互作用能,计算 RE, Al 和 Bi(或 Sb)三种原子之间的相互作用能。

由(3)式可推出 RE 和 Si(或 Bi)相互作用能计算公式:

$$\begin{aligned} \Delta E_{(\text{RE-Bi})} = & [E((N-5)\text{Mg} + 3\text{Al}, \text{RE} + \text{Bi}) \\ & + E((N-3)\text{Mg} + 3\text{Al}) \\ & - [E((N-1)\text{Mg}, \text{RE}) \\ & + E((N-1)\text{Mg}, \text{Bi})]]. \end{aligned} \quad (4)$$

镁合金中 $\text{Al}_{11}\text{RE}_3$ 相(近似 4:1)中一个稀土原子被 Bi 取代,即 Bi 固溶于 $\text{Al}_{11}\text{RE}_3$ 相时, $E((N-5)\text{Mg} + 3\text{Al}, \text{RE} + \text{Bi})$ 表示基体镁和 $\text{Al}_{11}\text{RE}_3$ 相(共 N 个原子, $N-5$ 个镁原子)的总结构能, $E((N-3)\text{Mg} + 3\text{Al})$ 表示基体镁中存在三个形成团簇的 Al 时的总结构能, $E((N-1)\text{Mg}, \text{RE})$ 表示基体镁中仅含一个稀土原子, $E((N-1)\text{Mg}, \text{Bi})$ 表示基体镁中仅含一个 Bi 原子时的总结构能。(5)(6)式中各能量的解释与(4)式中的类似。

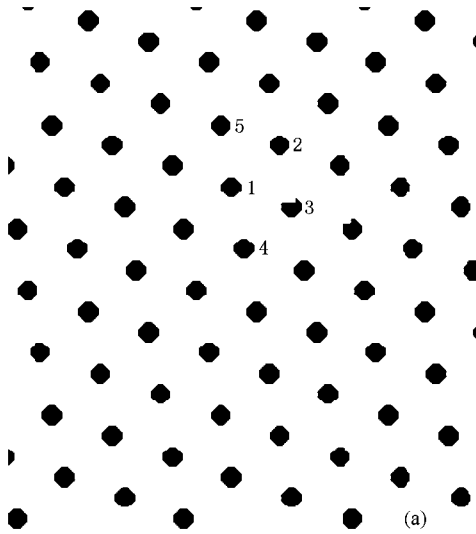
计算 $\Delta E_{\text{RE-Sb}}$ 时将(4)式子中 Bi 换成 Sb。

RE 和 Al 相互作用能公式:

$$\begin{aligned} \Delta E_{(\text{RE-Al})} = & [E((N-5)\text{Mg} + \text{Bi}, \text{RE} + 3\text{Al}) \\ & + 3E((N-1)\text{Mg} + \text{Bi}) \\ & - [E((N-1)\text{Mg}, \text{RE}) \\ & + 3E((N-1)\text{Mg}, \text{Al})]], \end{aligned} \quad (5)$$

RE, Al 和 Bi 或 Sb 三种原子间的相互作用能

$$\Delta E_{(RE-Al-Bi)} = [E((N - 5)Mg, 3Al + Bi + RE) + 4E(N)] - [3E((N - 1)Mg, Al) + E((N - 1)Mg, Bi) + E((N - 1), RE)]. \quad (6)$$



计算 $\Delta E_{RE-Al-Sb}$ 时将(6)式中 Bi 换成 Sb.

相互作用能为负,表示计算的原子间相互吸引;相反,表示相互排斥.

利用文献[3]的方法建立模型,如图1中为 α -

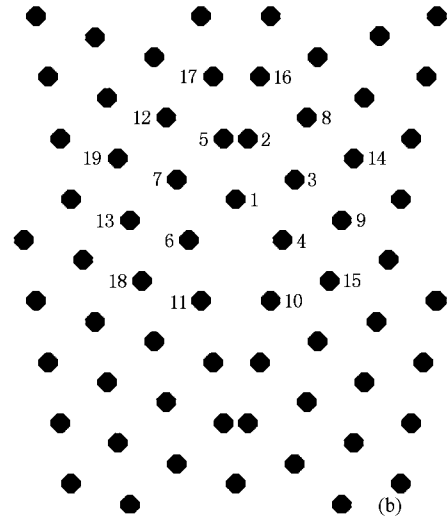


图1 镁 α 相(a)和镁0001]对称倾斜晶界(b)原子结构模型

Mg 原子团(a)和镁0001]对称倾斜晶界(b)原子结构模型.

由于 Mg-Al 合金中添加 RE 元素会形成 $Al_{11}RE_3$ 化合物,设计一个 Al,RE 在 α -Mg 和晶界区偏聚的模型.按 RE 和 Al 的比 1:4($Al_{11}RE_3$ 化合物中 RE 和 Al 的比接近 1:4)替换 α -Mg 和晶界区的 Mg 原子.图 1(a)中 1 号原子为 RE 原子,2,3,4,5 号原子为 Al 原子.图 1(b)中 1 号为 RE 原子,2,5,16,17 号为 Al 原子.在同时掺杂稀土和 Bi 或 Sb 时,将 2 号原子 Al 原子替换成 Bi 或 Sb 原子.计算系统的结构能,环境敏感镶嵌能,以及相互作用能.通过计算结果揭示 RE 和 Bi 或 Sb 共同掺入对 Mg 合金高温强化性能的影响机理.

能比晶界区的高,也就是 Bi,Sb 在晶界区比较稳定.比较表 1 和表 2 的第一列发现,由于稀土的存在,基体中 Al-RE 原子团的总结构能较低,说明在晶内形成的 RE-Al 化合物比在晶界处稳定,说明稀土元素抑制 Al 在晶界的偏聚,从而有效地抑制了时效组织中非连续析出相的形成,提高了析出相的热稳定性,从而有助于改善合金的高温力学性能.

表 1 镁 α 相内体系结构能(eV,体系共 19 个原子)

	Al(2,3,4,5)	Bi(2)Al(3,4,5)	Si(2)Al(3,4,5)
La(1)	-549.6165	-537.9672	-540.4345
Sc(1)	-557.1595	-544.8997	-547.2913
Y(1)	-549.8398	-538.2996	-540.7750

表 2 镁0001]对称倾斜晶界体系结构能(eV,体系共 19 个原子)

	Al(2,5,16,17)	Bi(2)Al(5,16,17)	Si(2)Al(5,16,17)
La(1)	-543.8037	-590.1315	-593.2315
Sc(1)	-549.8868	-566.4366	-569.4351
Y(1)	-543.9851	-590.2953	-593.3839

3. 计算结果与分析

3.1. 结构能

根据(1)式分别计算了稀土元素(La,Y,Sc)及 Al,Bi,Sb 固溶于镁基体内和晶界区的总结构能,结果见表 1 和表 2.比较表 1 和表 2 的 2,3 列发现,掺入相同元素(Bi 或 Sb)时(在晶界时,稀土位于重位位置,Al,Bi 或 Sb 在晶界近区),镁合金 α 相总结构

3.2. 环境敏感镶嵌能

环境敏感镶嵌能(E_{ESE})表征的是掺入的某原子对周围环境的影响, E_{ESE} 越小时,掺入的原子越稳

定. 在 Mg 的晶内和晶界中掺入 5 个原子, 表 3 和表 4 是以 5 个原子作为一个原子团的总环境敏感镶嵌能. 由表 3 可知, 只有 RE 和 Al 存在于 Mg 晶内时, 这两种原子对周围环境影响较小, 将其中一个 Al 换成 Bi 或 Sb 之后对环境影响较明显, 说明 Bi 或 Sb 很难固溶于 $Al_{11}RE_3$ 稀土化合物中. 表 4 中的数据说明在晶界处将 Al 换成 Bi 或 Sb 体系变得稳定了(表 4 第一与二、三列相比). 再比较表 3 和表 4 的相同列, RE, Bi, Sb 存在于 Mg -Al 合金中时, Bi 或 Sb 更容易在晶界处析出 RE-Sb 或 RE-Bi 有序相, 而 Al 将会在晶内形成 RE-Al, $Mg_{17}Al_{12}$ 化合物等弥散的有序相.

表 3 镁 α 相内环境敏感镶嵌能(eV)

	Al(2,3,4,5)	Bi(2)Al(3,4,5)	Si(2)Al(3,4,5)
La(1)	-2.4834	35.8059	36.0486
Sc(1)	-5.5764	-33.3234	-33.6418
Y(1)	-1.5667	36.6135	36.8481

表 4 镁 0001 对称倾斜晶界环境敏感镶嵌能(eV)

	Al(2,5,16,17)	Bi(2)Al(5,16,17)	Si(2)Al(5,16,17)
La(1)	-12.9889	-32.6767	-33.0667
Sc(1)	-14.6220	-4.5318	-4.8203
Y(1)	-12.0303	-31.7005	-32.0791

3.3. 相互作用能 ΔE

表 5, 表 6 分别计算了在 Mg 晶内和晶界中 RE 原子和合金元素的相互作用能. 由表 5 看出晶体内

表 5 镁 α 相内原子间相互作用能

ΔE	(RE-Bi)	(RE-Sb)	(RE-Al) _{Bi}	(RE-Al) _{Sb}	(RE-3Al-Bi)	(RE-3Al-Sb)
La \rightarrow 1	-9.11	-9.56	-130.70	-139.22	-14.85	-15.30
Sc \rightarrow 1	-6.53	-6.91	-128.13	-136.57	-12.28	-12.65
Y \rightarrow 1	-9.26	-9.72	-130.85	-139.38	-15.00	-15.46

表 6 镁 0001 对称倾斜晶界原子间相互作用能

ΔE	(RE-Bi)	(RE-Sb)	(RE-Al) _{Bi}	(RE-Al) _{Sb}	(RE-3Al-Bi)	(RE-3Al-Sb)
La \rightarrow 1	-94.66	-95.15	-228.35	-239.28	18.37	17.88
Sc \rightarrow 1	-65.27	-65.66	-198.96	-209.79	47.76	47.37
Y \rightarrow 1	-95.39	-95.87	-229.09	-240.01	17.63	17.15

4. 结 论

1. 总结构能计算表明在 AZ91 镁合金中, 稀土

部原子间相互作用能都为负, 说明稀土与合金元素在排列有序的晶体内部相互吸引(负值), 尤其是 RE-Al 之间(确切的是 RE 和 3 个 Al 之间, 周围还有一个 Bi 或 Sb 原子, 由于是研究稀土和 Bi 或 Sb 共同加入 AZ91 镁合金中的性质). $\Delta E_{(RE-Al-Bi)}$ 和 $\Delta E_{(RE-Al-Sb)}$ 计算结果说明在晶体内部有形成 RE-Al-Bi 和 RE-Al-Sb 团簇的倾向. 由表 6, 只有 3 种原子的相互作用为排斥, 说明 3 种原子都存在时, 它们将不会形成化合物共存于晶界, 由计算的结果来看 RE-Al 之间的吸引大于 RE-Bi 或 RE-Sb 之间, 所以 RE-Al 将会以化合物的形式首先析出如 $Al_{11}RE_3$ 相, Al_2RE 相或 Al_4RE 相^[1,5], 同时 RE 与 Bi 和 Sb 的吸引作用将会促其形成 RE-Bi(RE-Sb) 或 RE_2Bi (RE_2Sb) 化合物有序相分布于晶界. 晶界处形成大量上述硬化相使晶界得到了强化. Bi 和 Sb 与 RE 的结合必然导致 RE 元素的减少, 使得 RE-Al 化合物数量减少, 对基体的割裂作用减弱, Mg 合金性能得到提高. 刘子利等^[7] 研究发现 Sb 加入 AE 合金后, 出现了弥散颗粒 RE_2Sb 相, 加入 Sb 量较高时, 弥散颗粒主要为 RE_2Sb 相和 $RESb$ 相的复合物. 随着 Sb 加入量的增加, 条状 $Al_{11}RE_3$ 相数量降低, 同时晶枝逐渐变短变细. 合金的拉伸强度、塑性、硬度和冲击韧性随着含 Sb 量的增加而提高. 可见我们的研究结果与刘子利等的研究相符. 这就从理论上预示了在 AZ91 镁合金中如同时加入 RE 和 Bi 或 Sb 元素, 会提高镁合金的高温性能.

元素(La, Y, Sc) 与 Al 和 Bi(或 Sb) 形成团簇时固溶于晶界区时比较稳定, 在基体中稀土只与 Al 形成团簇时才比较稳定, 稀土与 Al 和 Bi 或 Sb 形成三元团簇时不稳定. 说明稀土元素抑制 Al 在晶界的偏聚,

从而有效地抑制了时效组织中非连续析出相的形成,有助于改善合金的高温力学性能.

2. 环境敏感镶嵌能计算和总结构能计算得出类似的结论.

3. 相互作用能计算表明 Bi 或 Sb 将与 RE 结合形成 RE_2Bi (RE_2Sb)或 $RE-Bi$ ($RE-Sb$)化合物弥散分布于晶界,Al 与 RE 形成 $A_{11}RE_3$ 化合物存在于 Mg

合金基体中. RE_2Bi (RE_2Sb)或 $RE-Bi$ ($RE-Sb$)化合物和 $A_{11}RE_3$ 化合物的形成,消耗了合金中的 Al,抑制粗大非连续析出相 $Mg_{17}Al_{12}$ 的形成,同时 RE_2Bi (RE_2Sb)或 $RE-Bi$ ($RE-Sb$)化合物形成消耗稀土也会使 $A_{11}RE_3$ 细化,这些稀土化合物的熔点都很高,因此显著提高了镁合金的高温性能.

- [1] Wang Q D ,Lu Y Z ,Zeng X Q ,Ding W J ,Zhu Y P 2000 *Trans. Nonferrous. Met. Soc. China* **10** 235
- [2] Yuan G Y ,Lu Y Z ,Zeng X Q ,Zhu Y P ,Ding W J 2001 *Acta. Metall. Sin.* **37** 23 (in Chinese) [袁广银、吕宜振、曾小勤、朱燕萍、丁文江 2001 金属学报 **37** 23]
- [3] Zhang G Y ,Zhang H ,Fang G L ,Li Y C 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5288 (in Chinese) [张国英、张 辉、方戈亮、李昱材 2005 物理学报 **54** 5288]
- [4] Zheng W C ,Li S S ,Tang S ,Zeng D B 2006 *Acta. Metall. Sin.* **42** 835 (in Chinese) [郑伟超、李双寿、汤 彬、曾大本 2006 金属学报 **42** 835]
- [5] Liu H W ,Luo C P ,Liu J W 2004 *Mater. Mech. Eng.* **28**(4) 29 (in Chinese) [刘宏伟、罗承萍、刘江文 2004 机械工程材料 **28** (4) 29]
- [6] Zhang S C ,Cai Q Z ,Wang L S ,Wei B K 2005 *Spec. Cast. & Nonferrous. Met.* **25** 287 (in Chinese) [张诗昌、蔡启舟、王立世、魏伯康 2005 特种铸造及有色金属 **25** 287]
- [7] Liu Z L ,Chen Z F ,Liu X ,Qin T J 2006 *Chin. J. Mater. Res.* **20** 186 (in Chinese) [刘子利、陈照峰、刘 希、琴陶杰 2006 材料研究学报 **20** 186]
- [8] Dang H L ,Wang C Y ,Yu T 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 2838 (in Chinese) [党宏丽、王崇愚、于 涛 2007 物理学报 **56** 2838]
- [9] Chen K ,Fan G H ,Zhang Y ,Ding S F 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3138 (in Chinese) [陈 琨、范广涵、章 勇、丁少峰 2008 物理学报 **57** 3138]
- [10] Liu G L ,Li R D 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 776 (in Chinese) [刘贵立、李荣德 2006 物理学报 **55** 776]
- [11] Zhang G Y ,Zhang H ,Wei D ,He J Q 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1581 (in Chinese) [张国英、张 辉、魏 丹、何君琦 2007 物理学报 **56** 1581]
- [12] Zhang H ,Zhang G Y ,Wang R D ,Zhong B 2006 *Chin. Phys.* **15** 641
- [13] Harrison W A 1980 *Electronic Structure and the Properties of Solids* (San Francisco : Freeman) p551
- [14] Haydock R 1980 *Solid State Physics* **35** (New York : Academic Press) p216
- [15] Slater J C ,Koster G F 1954 *Phys. Rev.* **94** 14986
- [16] Wang L G ,Wang C Y 1997 *Mater. Sci. Eng. A* **234-236** 521
- [17] Hu Q M ,Yang R ,Xu D S ,Hao Y L ,Li D ,Wu W T 2003 *Phys. Rev. B* **67** 224203-1

The mechanism of the influence of Bi (or Sb) and rare earth on high temperature performance of AZ91 magnesium alloy *

Zhang Guo-Ying^{1)†} Zhang Hui¹⁾ Wei Dan¹⁾ Luo Zhi-Cheng¹⁾ Li Yu-Cai²⁾
1) *College of Physics Science and Technology ,Shenyang Normal University ,Shenyang 110034 ,China)*
2) *Department of Preparatory Courses ,Shenyang Institute of Engineering ,Shenyang 110136 ,China)*
(Received 1 May 2008 ; revised manuscript received 1 July 2008)

Abstract

The atomic structure models of α matrix and the symmetric [0001] tilt boundary in AZ91 magnesium alloy were set up by using the concept of coincidence-site lattice (CSL). The total structure energy of α matrix and the grain boundary (GB), the environment sensitive embedding energies (E_{ESE}) of alloy elements and the interaction energies between the atom clusters were calculated by using recursion method. Calculation results show that the cluster formed by Al and RE in bulk AZ1 Magnesium alloy is rather stable ,but the cluster of Al ,Bi (or Sb) and RE atom is unstable . When Bi (or Sb) and RE atoms coexist in AZ91 magnesium alloy ,Bi or Sb will combine with RE to form dispersed particles which are mainly RE_2Bi (or RE_2Sb) and RE-Si (or RE-Bi) distributed at the grain boundary ,and $\text{Al}_{11}\text{RE}_3$ will form in the bulk in AZ91 magnesium alloy . The consumption of Al in magnesium alloy inhibits the formation of the discontinuous precipitate phase $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$. The melting points of compounds formed by RE and Al (or Bi ,Sb) are high ,thus the high temperature performance of AZ91 magnesium alloy would be obviously improved .

Keywords : electronic theory , grain boundary aggregation , alloy elements , high temperature performance

PACC : 7000 , 6170N , 8140C

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 50671069 ,50571071) ,and the Science Research Program of the Education Bureau of Liaoning Province of China (Grant Nos. 2008511 ,2007T165) .

† Corresponding author. E-mail :Gyzhang1965@sina.com