

C, N, O原子在金属V中扩散行为的第一性原理计算

杨彪 王丽阁 易勇 王思泽 彭丽霞

First-principles calculations of the diffusion behaviors of C, N and O atoms in V metal

Yang Biao Wang Li-Ge Yi Yong Wang En-Ze Peng Li-Xia

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 026602 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.026602

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.026602>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I2>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

三维集成电路堆叠硅通孔动态功耗优化

Stack-through silicon via dynamic power consumption optimization in three-dimensional integrated circuit

物理学报.2015, 64(2): 026601 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.026601>

V高掺杂量对ZnO(GGA+U)导电性能和吸收光谱影响的研究

Effects of V-heavy-doped ZnO on electric conductivity performance and absorption spectrum

物理学报.2014, 63(19): 197102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.197102>

Cr,Mo,Ni在 α -Fe(C)中占位、键合性质及合金化效应的第一性原理研究

First principles calculation of occupancy, bonding characteristics and alloying effect of Cr, Mo, Ni in bulk α -Fe?

物理学报.2014, 63(19): 197101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.197101>

考虑自热效应的互连线功耗优化模型

A novel interconnect-optimal power model considering self-heating effect

物理学报.2013, 62(1): 016601 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.016601>

一般边界条件下球形压力容器钢壁中氚和氦-3的浓度变化规律研究

Research on tritium and helium-3 content distributions in steel wall of spherical pressure vessel under general boundary condition

物理学报.2012, 61(15): 156601 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.156601>

C, N, O原子在金属V中扩散行为的第一性原理计算*

杨彪¹⁾ 王丽阁¹⁾ 易勇^{1)2)†} 王恩泽¹⁾ 彭丽霞³⁾

1)(西南科技大学材料科学与工程学院, 绵阳 621010)

2)(四川省非金属复合与功能材料重点实验室-省部共建国家重点实验室培育基地, 绵阳 621010)

3)(表面物理与化学重点实验室, 绵阳 621907)

(2014年5月28日收到; 2014年11月3日收到修改稿)

基于密度泛函理论, 采用第一性原理计算方法研究了C, N, O原子在金属V中的扩散行为. 首先, 讨论了C, N, O原子在V体心立方晶格中的间隙占位情况, 分析了其在间隙位置与V晶格的相互作用, 并探究了这种相互作用对金属V电子结构的影响. 研究表明: C, N, O原子在V的八面体间隙位置更为稳定, 并且C, N, O原子的2p电子与V的3d电子之间有比较强的成键作用; C, N, O原子的扩散势垒分别为0.89, 1.26, 0.98 eV, 并得出了其扩散系数表达式; 最后, 通过阿仑尼乌斯关系图对比了三者V中扩散系数的大小, 并计算出体系温度在500—1100 K之间时其在V中的扩散系数, 计算结果与实验值基本符合.

关键词: 金属V, 第一性原理, 电子结构, 扩散系数

PACS: 66.30.-h, 71.15.-m, 81.05.Bx

DOI: 10.7498/aps.64.026602

1 引言

在国际热核聚变实验堆(ITER)项目中, 面向等离子体的第一壁材料以及包层结构材料要经受强中子(14 MeV)、高能量等恶劣条件的考验, 要求所采用的材料必须具有优良的低中子活性及良好的高温力学性能^[1]. 钒及其合金是典型的低活化金属, 因其具有中子辐照活性低、抗辐照肿胀、低热膨胀性、抗氢脆性以及良好的可加工性能等而成为未来聚变反应堆的主要候选结构材料之一.

自20世纪60年代, 国内外就开始了钒及V-Cr-Ti合金的微观组织、力学性能、抗辐照性能、高温性能等的研究工作^[2-5]. 研究发现^[6-8], 在较高温度下, V, Cr, Ti元素极易与C, N, O等杂质元素发生反应, 从而影响钒及V-Cr-Ti合金的使用性能和寿命. Tyumentsev等^[6,7]认为, V-4Cr-4Ti

合金中析出的第二相组织主要是富含Ti的高碳型碳-氮-氧化物(记为Ti(CON)), 且合金中杂质含量越高, Ti(CON)相的数量和尺寸越大, 对合金塑性等性能的影响也越大. 黄姝珂等^[8]研究发现, V-5Cr-5Ti合金中的第二相Ti(CON)在1000 °C以下可以稳定存在, 当温度超过1100 °C时部分Ti(CON)会溶入合金基体, 使基体中间隙原子(C, N, O)的含量增加, 形成固溶强化, 使合金的硬度大幅提高, 塑性下降.

目前, 虽有文献对V-Cr-Ti合金的第二相Ti(CON)进行了相关报道, 但缺少对Ti(CON)进行具体系统的研究. 同时, 对C, N, O原子对钒基合金拉伸性能、蠕变和断裂等性能的影响规律和机理研究还比较匮乏, 制约了钒基合金的广泛应用. 国内外研究表明^[9-13], 金属与间隙原子的相互作用是由扩散控制的一个过程. 因此, 从理论上计

* 国防基础科研项目(批准号: B1520133006)和四川省非金属复合与功能材料重点实验室-省部共建国家重点实验室培育基地开放基金(批准号: 14zxkf04)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yiyong@swust.edu.cn

算研究间隙原子在金属晶格中的扩散行为, 有利于更好地解释间隙原子对金属性能的影响规律和影响机理. 本文通过第一性原理计算的方法对 C, N, O 原子在金属 V 中的扩散行为进行了研究, 探究了 C, N, O 原子与 V 晶格相互作用的电子结构及其扩散路径和迁移势垒, 并估算了体系温度在 500—1100 K 之间时 C, N, O 原子的扩散系数, 为深入了解 C, N, O 原子对金属 V 以及钒基合金性能的影响机理提供了理论基础.

2 计算模型和参数设置

本文计算采用基于密度泛函理论^[14,15]下的平面波赝势方法的 VASP (Vienna *ab initio* simulation package)^[16,17] 软件包来完成. 计算中电子之间的交换关联能选用广义梯度近似中的 PW91 方法^[18], 原子实和价电子之间的相互作用选用缀加平面波赝势来描述^[19]. 为了尽量减少平面波基个数, 赝势采用超软赝势 (ultra-soft)^[20], 布里渊区内以 Monkhorst-Pack^[21] 方法对 k 点进行取样, 计算前对原子结构和晶格进行完全弛豫, 使得每个原子平均能量的收敛值小于 1×10^{-5} eV; 每个原子上的受力小于 $0.03 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^{-1}$; 原子的最大位移标准为 0.001 \AA ; 晶体内应力的最大值为 0.03 GPa .

金属 V 属于体心立方 (bcc) 结构, 空间群为 $Im\bar{3}m$ ^[22], 其晶格常数的实验值为 3.03 \AA , 由于 C, N, O 的原子半径较小, 应首先占据 V 晶格的间隙位置. 为了保证计算结果的准确性, 首先对截断能和 k 点网格对晶格常数的影响进行了测试^[23]. 测试结果显示, 当截断能为 310 eV 和 k 点网格为 $4 \times 4 \times 4$ 时, 能量收敛于 $5 \times 10^{-6} \text{ eV} \cdot \text{atom}^{-1}$. 对金属 V 的单晶胞进行晶格常数优化, 优化后的晶格常数为 3.05 \AA , 与实验结果 (3.03 \AA) 差别在 1% 以内,

表明该计算方法准确可靠. 在计算 C, N, O 原子与金属 V 的结合能和扩散势垒时, 为了保证计算的准确性, 同时尽可能减少计算量、节约计算时间, 采用含有 16 个 V 原子的 $2 \times 2 \times 2$ 超胞模型 (如图 1 所示), 截断能选取 380 eV , k 点网格选取 $4 \times 4 \times 4$, 从而保证了在计算过程中能量收敛小于 $1 \times 10^{-5} \text{ eV} \cdot \text{atom}^{-1}$.

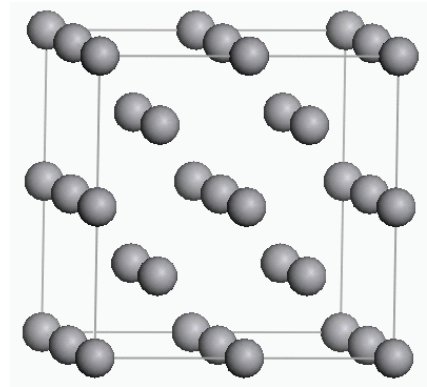


图1 含有 16 个 V 原子的 $2 \times 2 \times 2$ 超胞模型

3 计算结果与讨论

3.1 C, N, O 原子占位情况分析

在体心立方结构中, 存在的间隙位置有八面体 O (octahedral) 间隙位和四面体 T (tetrahedral) 间隙位两种, 不同的间隙位置有着不同的结合能. 首先, 分别对单个 C, N, O 原子 (interstitial atoms, IAs) 在 $2 \times 2 \times 2$ 的 V 超胞中 O 位和 T 位的局域晶格结构和结合能进行了计算. C, N, O 原子占据两种间隙位置所引起的晶格畸变值如表 1 所示. 而 C, N, O 原子与金属 V 的结合能可通过 (1) 式计算:

$$E_{\text{bind}} = E_{\text{IAs/V}} - E_{\text{V}} - E_{\text{IAs}}, \quad (1)$$

表1 C, N, O 原子在两种间隙位置引起的晶格畸变

体系	$a/\text{\AA}$	$b/\text{\AA}$	$c/\text{\AA}$	V	ΔV	晶格畸变率 $\delta/\%$
金属 V	6.056	6.056	6.056	222.105	—	—
V-C (O)	5.832	6.199	6.219	224.833	2.728	1.23
V-C (T)	5.799	5.799	6.879	231.330	9.225	4.15
V-N (O)	5.914	6.170	6.170	225.139	3.034	1.37
V-N (T)	5.821	5.821	6.779	229.700	7.595	3.42
V-O (O)	5.963	6.151	6.151	225.609	3.504	1.58
V-O (T)	5.830	5.830	6.742	229.153	7.084	3.17

式中 E_{bind} 为结合能, $E_{\text{IAS}/V}$ 为包含一个 C (N/O) 原子的体系总能量, E_V 和 E_{IAS} 分别为纯 V 超胞体系的能量和单个 C (N/O) 原子的能量.

对 C, N, O 原子两种间隙位置结合能的计算结果见表 2. 从表 1 和表 2 的计算结果可以看出: 1) C, N, O 原子占据八面体间隙位置所引起的晶格畸变小于占据四面体间隙引起的晶格畸变; 2) 结合能为负值, 说明 C, N, O 原子都易进入 V 晶格中, 而 C, N, O 原子在八面体间隙位置的结合能要低于四面体间隙位置的结合能. 以上都表明了 C, N, O 原子更倾向于占据 V 的八面体间隙位置, 在此间隙位置结构更加稳定. 因此, C, N, O 原子在金属 V 中的聚集或扩散应该首先发生在八面体间隙位置, 与先前研究发现的 C, N, O 原子在体心立方晶体中优先占据的间隙位置一致 [24,25]. 为了减少计算量, 后面只研究八面体间隙位置.

表 2 C, N, O 原子与金属 V 的结合能

体系	$E_{\text{IAS}/V}/\text{eV}$	E_V/eV	E_{IAS}/eV	$E_{\text{bind}}/\text{eV}$
V-C (O)	-31778.373		-145.418	-9.133
V-C (T)	-31777.047			-7.807
V-N (O)	-31896.182		-270.625	-1.735
V-N (T)	-31895.293			-0.846
V-O (O)	-32061.664		-433.745	-4.097
V-O (T)	-32060.336			-2.769

3.2 态密度

为了分析 C, N, O 原子进入晶格中对金属 V 电子结构的影响, 我们计算了纯 V 以及分别在其八面体间隙位置放置一个 C, N, O 原子后 V 的电子结构, 并把电子态密度投影到各个原子轨道上, 结果如图 2 所示. 图中红色点划线分别表示 C, N, O 原子的 2p 电子态密度, 黑色实线 (Pure Vd) 和蓝色虚线 (Vd) 分别表示晶胞中没有加入 C, N, O 原子时以及加入 C, N, O 原子后其周围最近邻的 V 原子的 3d 电子态密度. 从图中可以看出, V 的 3d 电子与 C, N, O 的 2p 电子之间产生了强烈的相互作用, 其电子态密度分别在费米能级下方 -5.10, -6.65 和 -7.75 eV 附近形成了一个较强共振峰, 说明在该处形成了新的能态, 即成键态. 同时, 比较了加入 C, N, O 原子后 V 和纯 V 的 3d 电子态密度, 发现 V 的

3d 电子在 -0.5 eV 左右的强度要低于纯 V 的电子强度, 表明加入 C, N, O 原子后 V 的 3d 电子在该处有一部分电子的能级分别下移到了 -5.10, -6.65 和 -7.75 eV 附近, 并分别与 C, N, O 的 2p 电子形成了新键.

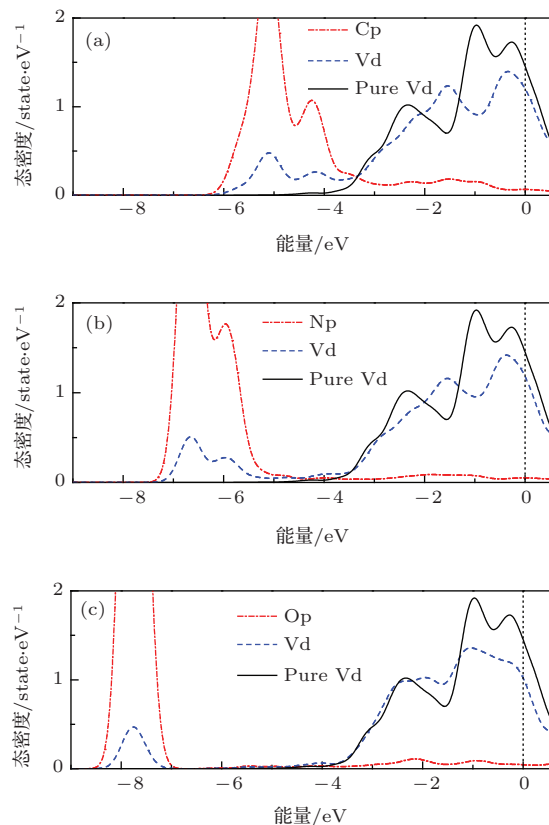


图 2 (网刊色彩) C, N, O 原子及其第一近邻 V 原子的态密度 (a) C; (b) N; (c) O

3.3 过渡态和扩散系数

3.3.1 扩散过渡态

为了分析 C, N, O 原子在金属 V 晶格中的扩散情况, 通过弹性能带 (nudged elastic band) 方法 [26], 优化了 C, N, O 原子在 V 晶格中从一个八面体间隙位置迁移到最近邻的另一个八面体间隙位置的最佳迁移路径, 如图 3 (a) 所示. 采用“TS search”中“Complete LST/QST”的方法搜索了 C, N, O 原子在 V 晶格中扩散时的过渡态, 此方法将传统的 LST/QST 算法与共轭梯度方法相结合, 能比较快速而准确地搜索到所需的过渡态 [27]. 由过渡态搜索结果可知, C, N, O 原子在扩散过程中所需要克服的最高能垒 (扩散势垒) 分别为 0.89, 1.26, 0.98 eV, 结果如图 4 所示, 过渡态位置在 V 晶格的密排面上, 如图 3 (b) 所示.

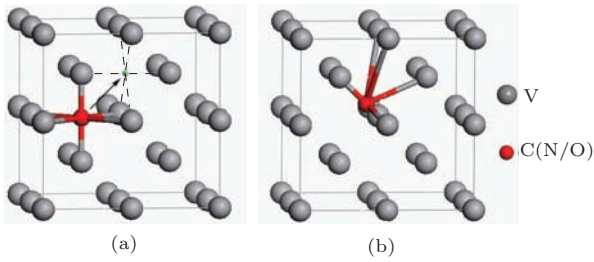


图3 C(N/O)原子扩散体系示意 (a)扩散初态和终态; (b)过渡态

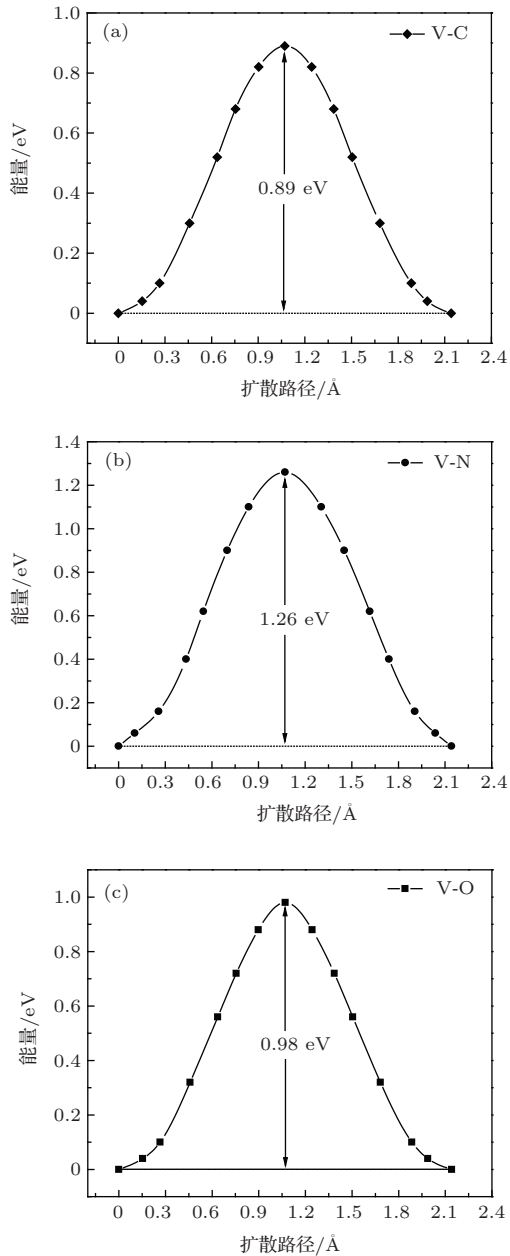


图4 C, N, O原子在金属V中的扩散势垒曲线 (a) C; (b) N; (c) O

3.3.2 扩散系数

1889年,阿仑尼乌斯提出了著名的阿仑尼乌斯公式(Arrhenius equation),该公式不但揭示了化学反应的速率常数与温度之间的关系,同时也适用于

表示扩散系数与温度间的关系^[28].扩散系数的阿仑尼乌斯表达形式为

$$D = D_0 \exp(-E_a/k_B T), \quad (2)$$

式中 D_0 为扩散常数, E_a 为扩散势垒, k_B 和 T 分别为玻尔兹曼常数和绝对温度, $k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}$.

根据过渡态理论^[29],原子在固体中的跃迁率表达式为

$$\nu = \nu \exp(-E_a/k_B T), \quad (3)$$

式中 ν 为C, N, O原子的振动频率.由原子跃迁率,可以把扩散系数表示为^[30]

$$D = l^2 \nu \exp(-E_a/k_B T), \quad (4)$$

式中 l 为原子每次跃迁的距离,通过对C, N, O原子在跃迁过程中始末位置进行测量,得到 $l = 2.141 \text{ \AA}$.根据温特-齐纳理论^[31,32],振动频率 ν 可以近似地表示为

$$\nu = (2E_a/ml^2)^{1/2}, \quad (5)$$

式中 m 为单一原子的质量,C, N, O原子的质量分别为 1.993×10^{-26} , 2.325×10^{-26} , $2.657 \times 10^{-26} \text{ kg}$.计算得到C, N, O原子在V晶格中的振动频率分别为 1.77×10^{13} , 1.95×10^{13} , $1.60 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$.

将以上求得的 l, ν, E_a 值代入(4)式,可以得到C, N, O原子在V晶格中的扩散系数为

$$D(\text{C}) = 8.11 \times 10^{-7} \times \exp(-0.89 \text{ eV}/k_B T) \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}, \quad (6)$$

$$D(\text{N}) = 8.94 \times 10^{-7} \times \exp(-1.26 \text{ eV}/k_B T) \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}, \quad (7)$$

$$D(\text{O}) = 7.33 \times 10^{-7} \times \exp(-0.98 \text{ eV}/k_B T) \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}. \quad (8)$$

将上述理论计算结果与前人的实验数据进行对比,如表3所示.从表3中可以看出理论计算结

表3 C, N, O原子在金属V中扩散势垒和扩散常数的理论计算与实验值的比较

间隙原子	扩散势垒/eV		扩散常数/ $\times 10^{-7} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	
	理论计算	实验值	理论计算	实验值
C	0.89	1.21	8.11	8.80
N	1.26	1.57	8.94	5.02
O	0.98	1.29	7.33	2.66

表4 体系温度在500—1100 K时C, N, O原子在金属V中的扩散系数 ($\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$)

T/K	500	600	700	800	900	1000	1100
C	8.83×10^{-16}	2.75×10^{-14}	3.21×10^{-13}	2.03×10^{-12}	8.50×10^{-12}	2.68×10^{-11}	6.84×10^{-11}
N	1.83×10^{-19}	2.38×10^{-17}	7.72×10^{-16}	1.05×10^{-14}	7.98×10^{-14}	4.04×10^{-13}	1.53×10^{-12}
O	9.91×10^{-17}	4.37×10^{-15}	6.54×10^{-14}	4.98×10^{-13}	2.41×10^{-12}	8.52×10^{-12}	2.39×10^{-11}

果与实验值^[33,34]的规律基本相符合. 但是由于实验所使用材料具有一定的晶体结构缺陷以及在实验过程中外界环境因素(如温度、压力等)对实验结果的影响, 而理论计算不存在这些方面的影响, 这使得理论计算与实验值之间存在一定量的误差.

根据C, N, O原子在金属V中的扩散系数(6)—(8)式, 计算了体系温度在500—1100 K之间时C, N, O原子的扩散系数, 如表4所示.

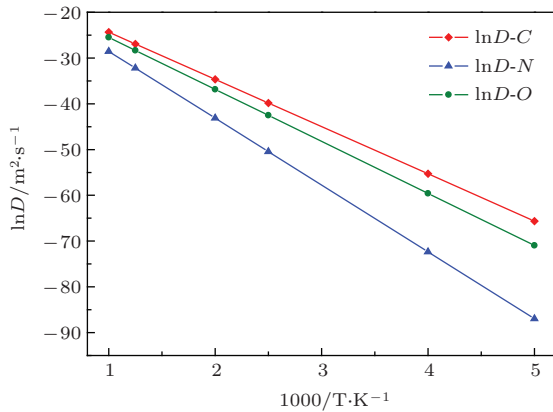


图5 (网刊彩色) C, N, O原子在金属V中扩散系数对数与温度倒数关系的阿伦尼乌斯图

由(6)—(8)式计算得到体系温度在200—1000 K之间时, C, N, O原子在金属V中扩散系数的对数与温度倒数关系的阿伦尼乌斯图, 如图5所示. 从图5中可以看出, C原子在金属V中的扩散系数最高, 而N的扩散系数比C和O的都要低, 这是因为在扩散过程中C原子需要克服的能量势垒最低, 而N原子需要克服的能量势垒最高.

4 结 论

本文采用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法, 对C, N, O原子在金属V中的扩散行为进行了研究. 优化后金属V的晶格常数为3.05 Å, 与实验值3.03 Å相符合. C, N, O原子占据两种间隙位置时的晶格优化和结合能的计算结果, 说明其在金属V晶格中的八面体间隙位置比在四面体间隙

位置更为稳定. 电子结构的计算结果表明, C, N, O的p电子与V的d电子之间有很强的成键作用, 形成的成键态能级分别在费米能级下方-5.10, -6.65和-7.75 eV附近. 最后, 计算了C, N, O原子在金属V中的扩散势垒分别为0.89, 1.26, 0.98 eV, 其过渡态位置在V晶格的密排面上. 并根据过渡态理论得到了C, N, O原子在金属V中的扩散系数表达式, 计算结果与实验值基本相符合. 为以后深入了解C, N, O原子对金属V以及钒基合金性能的影响机理提供了理论基础.

参考文献

- [1] Smith D L, Chung H M, Loomis B A 1995 *Fusion Eng. Des.* **29** 399
- [2] Kohyama A 2005 *Mater. Trans. JIM* **46** 384
- [3] Wang C, Zhang Y M, Zhang Y M 2007 *Chin. Phys. B* **16** 2455
- [4] Muroga T, Nagasaka T, Abe K, Chernov V M, Matsui H, Smith D L, Xu Z Y 2002 *J. Nucl. Mater.* **307–311** 547
- [5] Yang B, Wang L G, Wang E Z 2014 *Mater. Rev.* **28** 143 (in Chinese) [杨彪, 王丽阁, 王恩泽 2014 材料导报 **28** 143]
- [6] Tyumentsev A N, Korotaev A D, Pinzhin Y P, Ditenberg I A, Litovchenko S V, Shuba Y V, Shevchenko N V, Drobishev V A, Potapenko M M, Chernov V M 2004 *J. Nucl. Mater.* **329–333** 429
- [7] Skai K, Satou M, Fujiwara M, Takanashi K, Hasgawaa, Abe K 2004 *J. Nucl. Mater.* **329–333** 457
- [8] Huang S K, Zhou D C, Li C A, Li J M, Liu B 2011 *Mater. Eng.* **3** 34 (in Chinese) [黄姝珂, 周丹晨, 李昌安, 李敬民, 刘宝 2011 材料工程 **3** 34]
- [9] Rao J P, Ouyang C Y, Lei M S, Jiang F Y 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 047105 (in Chinese) [饶建平, 欧阳楚英, 雷敏生, 江风益 2012 物理学报 **61** 047105]
- [10] Liu Y L, Jin S, Zhang Y 2012 *Chin. Phys. B* **21** 016105
- [11] Fujiwara M, Takanashi K, Satou M 2002 *J. Nucl. Mater.* **307–308** 601
- [12] Zhang P B, Zhao J J, Qin Y, Wen B 2011 *J. Nucl. Mater.* **413** 90
- [13] Lü B, Linghu R F, Song X S, Wang X L, Yang X D, He D W 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 076802 (in Chinese) [吕兵, 令狐荣锋, 宋晓书, 王晓璐, 杨向东, 贺端威 2012 物理学报 **61** 076802]

- [14] Hohenberg P, Kohn W 1964 *Phys. Rev. B* **136** 864
 [15] Kohn W, Sham L J 1965 *Phys. Rev. A* **140** 1133
 [16] Kresse G, Hafner J 1993 *Phys. Rev. B* **47** 558
 [17] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
 [18] Perdew J P, Wang Y 1992 *Phys. Rev. B* **45** 13244
 [19] Kresse G, Joubert D 1999 *Phys. Rev. B* **59** 1758
 [20] Vanderbilt D 1990 *Phys. Rev. B* **41** 7892
 [21] Monkhorst H J, Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188
 [22] Zhou J J, Chen Y G, Wu C L, Pang L J, Zheng X, Gao T 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 7044 (in Chinese) [周晶晶, 陈云贵, 吴朝玲, 庞立娟, 郑欣, 高涛 2009 物理学报 **58** 7044]
 [23] Wu Q, Li S S, Ma Y 2012 *Chin. Phys. B* **21** 109102
 [24] Zhu J S, Wang B Z 1992 *Theoretical Foundation of Metal* (Beijing: China Astronautic Publishing House) p32 (in Chinese) [祝菊生, 王炳洲 1992 金属理论基础 (北京: 中国宇航出版社) 第 32 页]
 [25] Yang Z J 1966 *Acta Phys. Sin.* **22** 281 (in Chinese) [杨正举 1966 物理学报 **22** 281]
 [26] Sheppard D, Terrell R, Henkelman G 2008 *J. Chem. Phys.* **128** 134106
 [27] Govind N, Petersen M, Fitzgerald G 2003 *Comput. Mater. Sci.* **28** 250
 [28] Arrhenius S 1889 *Z. Phys. Chem.* **4** 226
 [29] Vineyard G H 1957 *J. Phys. Chem. Solids* **3** 121
 [30] Kutner R 1981 *Phys. Rev. Lett. A* **81** 239
 [31] Wert C, Zener C 1949 *Phys. Rev. B* **76** 1169
 [32] Wert C 1950 *Phys. Rev. B* **79** 601
 [33] Shewmon P 1989 *Diffusion in Solids* (New York: John Wiley & Sons) p84
 [34] Boratto F J M, Reed-Hill R E 1977 *Scripta Metall.* **11** 1107

First-principles calculations of the diffusion behaviors of C, N and O atoms in V metal*

Yang Biao¹⁾ Wang Li-Ge¹⁾ Yi Yong^{1)2)†} Wang En-Ze¹⁾ Peng Li-Xia³⁾

1) (School of Materials Science and Engineering, Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621010, China)

2) (State Key Laboratory Cultivation Base for Nonmetal Composites and Functional Materials, Mianyang 621010, China)

3) (Science and Technology on Surface Physics and Chemistry Laboratory, CAEP, P. O. Box 718-35, Mianyang 621907, China)

(Received 28 May 2014; revised manuscript received 3 November 2014)

Abstract

Based on the density functional theory, the diffusion behaviors of C, N and O atoms in V metal are studied by using the first-principles calculation method. Firstly, the site occupations of C, N and O atoms in the interstitials of the bcc V lattice are discussed. The interactions of interstitial C, N and O atoms with V lattice are analyzed, and the influence of the electronic structure on the interaction is explored. The study results show that C, N and O atoms are more stable in octahedral interstice of V metal, and a relatively strong bonding interaction is formed between their 2p-electron and the 3d-electron of V metal. The diffusion barriers of C, N and O atoms are 0.89 eV, 1.26 eV and 0.98 eV, respectively. Thus, the expressions of their diffusion coefficients are obtained. Finally, the diffusion coefficients of C, N and O atoms are compared by the Arrhenius plot. Their diffusion coefficients are calculated at 500–1100 K, and the calculation results are consistent with experimental values.

Keywords: V metal, first-principles, electronic structure, diffusion coefficient

PACS: 66.30.-h, 71.15.-m, 81.05.Bx

DOI: 10.7498/aps.64.026602

* Project supported by the National Defense Basic Scientific Research Program of China (Grant No. B1520133006) and the Foundation of State Key Laboratory Cultivation Base for Nonmetal Composites and Functional Materials, China (Grant No. 14zxk04).

† Corresponding author. E-mail: liyong@swust.edu.cn