

稀土元素在 α -Fe 和 Fe_3C 中分配行为的第一性原理研究

熊辉辉 张慧宁

First-principles investigation on partitioning behavior of rare earth elements between α -Fe and Fe_3C

Xiong Hui-Hui Zhang Hui-Ning

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 248101 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.248101

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.248101>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I24>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

三元 $(\text{Co}_{0.5}\text{Cu}_{0.5})_{100-x}\text{Sn}_x$ 合金的热物理性质与液固相变机理

Thermophysical properties and liquid-solid transition mechanisms of ternary $(\text{Co}_{0.5}\text{Cu}_{0.5})_{100-x}\text{Sn}_x$ alloys

物理学报.2016, 65(22): 228101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.228101>

稀土 La 对 bcc-Fe 中 Cu 扩散行为影响的第一性原理研究

First-principles study of the effect of lanthanum on the Cu diffusion mechanism in bcc-Fe

物理学报.2014, 63(24): 248101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.248101>

拉伸试验测试金属韧性的不确定性: 中温脆性和应变速率脆性

Measurement uncertainty of metallic ductility in tensile tests: intermediate temperature embrittlement and strain rate embrittlement

物理学报.2014, 63(22): 228101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.228101>

不同加载条件下位错和溶质原子交互作用的数值模拟

Simulations of the interactions between dislocations and solute atoms in different loading conditions

物理学报.2014, 63(22): 228102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.228102>

忆阻元件与 RLC 以及二极管串并联电路的特性研究

Properties of memristor in RLC circuit and diode circuit

物理学报.2014, 63(17): 178101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.178101>

稀土元素在 α -Fe和 Fe_3C 中分配行为的第一性原理研究*

熊辉辉[†] 张慧宁

(江西理工大学冶金与化学工程学院, 赣州 341000)

(2016年7月14日收到; 2016年8月16日收到修改稿)

基于密度泛函理论的第一性原理, 采用分配焓研究了 Sc, Y, Ce 和 La 四种稀土元素在 α -Fe 和 Fe_3C 之间的分配行为, 并讨论了稀土合金渗碳体的平均重叠布居数和态密度. 研究表明: α -Fe 和 Fe_3C 中的稀土元素均呈现一定的反铁磁性. 在铁磁态和无磁态时这些稀土的分配焓均为负, 说明了它们更容易分配并固溶于渗碳体, 且使渗碳体中 Fe—C 共价键和 Fe—Fe 金属键增强, 从而提高了渗碳体的稳定性; 此外, Sc 更容易占据渗碳体中 Fe 的 4c 位置, 而 Y, Ce 和 La 更容易置换渗碳体中的 8d 位置, 与平均重叠布居数和态密度分析的结果一致.

关键词: 稀土, 分配, Fe_3C , 第一性原理

PACS: 81.05.Bx, 81.40.-z, 81.40.Cd

DOI: 10.7498/aps.65.248101

1 引言

稀土元素在钢中的溶解度较低, 加入微量的稀土合金, 不仅可以明显改善钢的微观结构, 而且还可提高钢的深冲性能、抗腐蚀性、耐磨性、拉拔性等机械性能^[1,2] 但是, 由于稀土元素特殊的物理化学性质, 极易受到钢中氧和其他杂质元素的干扰, 导致稀土元素在钢中存在状态的精确表征、分布稳定性的控制、以及稀土元素对材料的组织结构影响规律等相关研究较为困难. 因此, 在很长时间内, 稀土元素在钢中的存在形式和作用机理仍存在较多争议. 王海燕等^[3,4] 利用第一性原理研究了稀土元素 Ce 和 La 在 α -Fe 中占位倾向与作用机理, 认为它们均倾向于偏聚在 α -Fe 晶界区. Zhao 等^[1] 研究稀土元素对 TWIP 钢组织和机械的影响时发现渗碳体里面存在一定含量的稀土元素; 周雪峰等^[5] 发现钢在凝固过程时稀土元素能促进“鱼骨状”的 M_6C 碳

化物的形成; Yan 和 Liu^[6] 也在马氏体不锈钢中的 θ - Fe_3C 里发现稀土元素, 然而 Wang 等^[7] 则认为稀土元素与铁素体发生作用并促进了铁素体的形核. 因此, 钢铁中稀土元素的偏聚和固溶行为有待于进一步的研究.

采用密度泛函理论 (DFT) 可以研究钢铁中微量元素分配和偏聚行为^[8], Ande 和 Sluiter^[9,10] 系统地计算了钢铁中微量元素 V, Cr, Mn, Mo, Al, Si, P, Co, Ni 和 Cu 在铁素体和三种渗碳体 (Fe_3C , Fe_5C_2 和 η - Fe_2C) 之间的偏聚倾向; Sawada 等^[11] 也利用第一性原理分析了 Cr 和 Si 在铁素体和渗碳体之间的分区倾向. 然而, 钢铁中稀土元素的分配和偏聚行为至今尚未见报道. 因此, 本文利用 DFT 讨论稀土元素 Sc, Y, Ce 和 La 在 α -Fe 和渗碳体 (Fe_3C) 中的占位倾向, 并且从电子角度解释其分配行为, 从而为稀土元素在钢铁中的应用提供一定的理论基础.

* 国家自然科学基金 (批准号: 51304053) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: xionghui8888@126.com

2 计算方法

本文采用基于DFT结合平面波赝势方法的CASTEP [12,13] 软件进行计算, 为了得到最合理的计算方法, 我们首先选取三种不同的泛函(GGA-PBE, GGA-PW91, LDA-CAPZ)对 α -Fe(体心立方, 空间群 $IM-3M$, No. 229)和 Fe_3C (正交晶系, 空间群 $Pnma$, No.62)的基态性质进行计算, 结果如表1所列. 可以看出GGA-PBE泛函计算出来的晶格常数和磁矩都比其他两个泛函的误差小, 更接近于实验值, 因此接下来的计算皆采用GGA-PBE泛函 [14]. 本文所有计算在倒易空间上进行, 对于渗碳体(Fe_3C)和合金渗碳体(由16个原子构成, $Fe_{11}MC_4$, $M = Sc, Y, La, Ce$), k 点的网格划分均为 $8 \times 6 \times 9$. 对于 α -Fe的晶胞(由54个Fe原子构成, Fe_{54}), k 点的网格划分为 $6 \times 6 \times 6$. 原子采用超软赝势, 最大平面波截断能量为410 eV, 收敛条件是自洽计算的最后两个循环能量之差小于 5×10^{-6} eV/atom, 作用在每个原子上的力不大于0.01 eV/Å, 内应力不大于0.02 GPa.

表1 在铁磁(FM)或无磁(NM)态时, α -Fe和 Fe_3C 的晶格常数、磁矩的计算结果和实验值的比较

Table 1. Comparison of calculated and experimental lattice constants and magnetic moment for α -Fe and Fe_3C under FM or NM state.

对象	泛函	$a/\text{\AA}$	$b/\text{\AA}$	$c/\text{\AA}$	μ_M/μ_B
α -Fe(FM)	GGA-PW91	2.81	2.81	2.81	2.11
	GGA-PBE	2.82	2.82	2.82	2.15
	LDA-CAPZ	2.73	2.73	2.73	1.82
α -Fe(NM)	GGA-PW91	2.75	2.75	2.75	
	GGA-PBE	2.75	2.75	2.75	
	LDA-CAPZ	2.69	2.69	2.69	
Exp [15]		2.86	2.86	2.86	2.12
Fe_3C (FM)	GGA-PW91	5.00	6.70	4.45	22.21
	GGA-PBE	4.98	6.71	4.43	21.26
	LDA-CAPZ	4.81	6.46	4.27	0.04
Exp [16]		5.09	6.74	4.52	21.36

当钢处于长时间回火, 且 Fe_3C 和 α -Fe两相都存在时, 钢中的合金元素则倾向于偏聚到此两相之一. 当合金原子偏聚于渗碳体并置换其铁原子时

就形成了合金渗碳体. Anda和Sluiter [9]提出了一个合理的方法来判断合金元素的分配行为, 即利用(1)式进行计算:

$$Fe_{n-1}M + Fe_{3q}C_q \rightleftharpoons Fe_{3q-1}MC_q + Fe_n, \quad (1)$$

式中 $Fe_{n-1}M$ 和 Fe_n 分别指的是合金元素溶解于 α -Fe以及纯 α -Fe. $Fe_{3q}C_q$ 和 $Fe_{3q-1}MC_q$ 分别代表渗碳体和合金渗碳体. 因此每种合金元素的分配焓(ΔH_p)可以表示为

$$\Delta H_p = H[Fe_{3q-1}MC_q] + H[Fe_n] - H[Fe_{n-1}M] - H[Fe_{3q}C_q]. \quad (2)$$

稳定性指的是合金元素从 α -Fe到渗碳体相的转变, 不稳定性指的是合金元素仍然保留在 α -Fe中. 因此, 渗碳体是否稳定可以用合金元素在渗碳体和 α -Fe之间的竞争来衡量. 一个负的 ΔH_p 数值说明合金元素能稳定渗碳体并向其偏聚和固溶. 一个正的 ΔH_p 数值说明了合金元素不会提高渗碳体的稳定性, 反而更容易偏聚于 α -Fe. 由于第一性原理计算出来的焓都是0 K时的值, 在此温度下 α -Fe

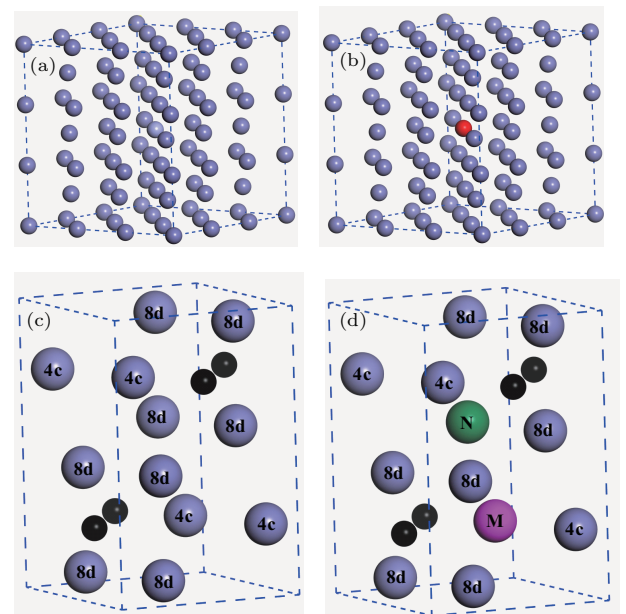


图1 (网刊彩色) α -Fe和 Fe_3C 及其稀土元素(Sc, Y, La, Ce)固溶后的晶体结构示意图 (a) α -Fe; (b) 稀土元素固溶于 α -Fe; (c) Fe_3C ; (d) 稀土元素占据 Fe_3C 的4c (M)或8d (N)位置(浅蓝色球代表铁, 红球、粉色球和绿球代表稀土元素)

Fig. 1. (color online) Crystal structure diagram of α -Fe, Fe_3C and after introduced rare earth element (Sc, Y, La, Ce): (a) α -Fe; (b) rare earth solution in α -Fe; (c) Fe_3C ; (d) rare earths occupy 4c or 8d position of Fe_3C (light blue ball represents Fe, the red, blue, and pink balls are all rare earth elements).

和渗碳体的焓值都是铁磁态,而在生产中,回火温度一般控制在600—950 K,此时 α -Fe仍然是铁磁态,但是渗碳体不再是铁磁态,所以,本研究考虑了渗碳体的铁磁态和非铁磁态两种情况下的分配行为,此外,由于渗碳体中的Fe原子存在两个等效位置,即“general”位置(8d)和“special”位置(4c),因此,本文考察了稀土元素取代此两种位置时的分配焓,如图1所示.

3 结果与讨论

表2为 α -Fe和稀土元素(Re)置换 α -Fe中的一个Fe原子形成的 Fe_{53}M 在0 K时的总焓(即 $H[\text{Fe}_{54}]$ 和 $H[\text{Fe}_{53}\text{M}]$)及它们的差值($\Delta H(\text{Fe}_{53})$), α -Fe中稀土元素的磁矩也列于表中.由表2可以看出, α -Fe中的稀土合金元素的磁矩均为负值,说明它们呈现一定的反铁磁性,此外渗碳体里面的稀土也呈反铁磁性(如表3),且Yethiraj等^[17]通过实验测定Re-Fe-C中的稀土元素Re的磁矩也为负值,两者研究的结果相一致.

表2 在0 K时 α -Fe超胞的焓 $H[\text{Fe}_{54}]$, $\Delta H(\text{Fe}_{53}) = H[\text{Fe}_{53}\text{M}] - H[\text{Fe}_{54}]$ 以及稀土元素的磁矩 μ_M
Table 2. Enthalpies at 0 K of α -Fe, $\Delta H(\text{Fe}_{53}) = H[\text{Fe}_{53}\text{M}] - H[\text{Fe}_{54}]$ and the magnetic moment on Re, μ_M .

M	$H[\text{Fe}_{54}]/\text{eV}$	$\Delta H[\text{Fe}_{53}\text{M}]/\text{eV}$	μ_M/μ_B
Fe	-46727.51	0.00	2.21
Sc	-47138.94	-411.43	-0.75
Y	-46051.60	675.91	-0.63
Ce	-46922.26	-194.75	-1.72
La	-46720.51	7.00	-0.68

为了讨论稀土元素在 α -Fe和 Fe_3C 之间的分配和占位行为,我们将计算得到的 α -Fe, Fe_3C 和合金渗碳体的焓值代入分配焓(2)式,可以得出稀土元素在铁磁态和无磁态渗碳体两种情况下的分配焓,同时也计算了渗碳体中各稀土元素的磁矩,结果如表3和图2所示.可以看出,无论是铁磁态、无磁态还是稀土元素取代渗碳体中哪个位置的Fe,所有轻重稀土元素的分配焓均为负,表明了它们更容易偏聚于渗碳体并提高渗碳体的稳定性,和文献^[1]的分析结果一致.

对于所有的3d和4d过渡金属来说,它们更容易占据渗碳体的8d位置而非4c位置^[18,19].本文研

究的Y,Ce和La稀土元素,无论是铁磁态还是无磁态的渗碳体,它们取代渗碳体8d位置的分配焓比4c位置时要低,表明了它们易于分配并占据渗碳体中的8d位置.这种现象可以用稀土元素(Re)和渗碳体中C原子的相互作用来解释,当 M -C键比Fe-C键的强度大时,说明金属 M 可以降低合金渗碳体的能量^[19],而Re-C键能比Fe-C大,且渗碳体中8d位置和4c位置的Fe分别有3个和2个Fe-C键,因此,稀土元素更容易替代8d位置上的Fe以获得更多的Re-C键,从而降低体系的能量.然而,在轻稀土元素中,在铁磁态和无磁态时,Sc占据渗碳体中Fe的4c位置比8d位置所形成的合金渗碳体的分配焓数值低,说明Sc更容易占据到渗碳体中的4c位置,这可能是由于Sc本身容易占据无磁态渗碳体的4c位置(见表3),增强了其磁无序化程度,从而削弱了Sc占据8d位置的倾向.

表3 在0 K时稀土元素的分配焓 ΔH_p 以及渗碳体里面稀土元素的磁矩 μ_M

Table 3. Partitioning enthalpies of the rare earth elements, ΔH_p , at 0 K and magnetic moments, μ_M , on Re in cementite.

M	$\Delta H_p/\text{eV}\cdot\text{atom}^{-1}$				μ_M/μ_B	
	FM		NM			
	4c	8d	4c	8d	4c	8d
Sc	-0.56	-0.51	-0.84	-0.69	-0.24	-0.24
Y	-1.11	-1.65	-0.34	-1.02	-0.23	-0.23
Ce	-0.03	-0.73	-0.10	-1.85	-0.66	-0.70
La	-0.29	-1.63	-0.26	-1.84	-0.27	-0.18

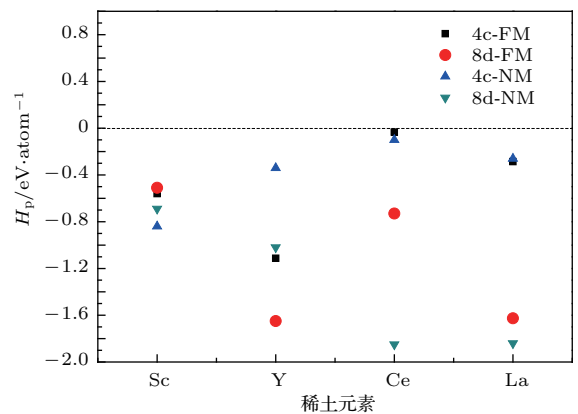


图2 稀土合金元素的分配焓, ΔH_p

Fig. 2. Partitioning enthalpies of rare earth alloy elements, ΔH_p .

根据Mulliken布居数分析,可通过计算原子间的重叠布居数来评价原子间成键情况.平均重叠

布居数 ($\overline{n_{AB}}$) 可通过 (3) 式求出 [20], 共价键重叠布居数越大, 晶胞中原子之间的交互作用就越强, 键合力就越大.

$$\overline{n_{AB}} = \frac{\sum_i n_i^{AB} N_i}{\sum_i N_i}, \quad (3)$$

式中 $\overline{n_{AB}}$ 表示平均重叠布居数, N_i 代表晶胞中两个原子间化学键的总数, n_i^{AB} 表示两个原子间的布居数.

表 4 为稀土合金渗碳体的平均重叠布居数, 且列出了渗碳体的数值加以比较, 可以发现 Sc, La,

Ce 稀土合金渗碳体 Fe—C 共价键和 Fe—Fe 金属键的平均重叠布居数均比渗碳体大, 说明这些元素能使渗碳体中原子间交互作用增强, 原子间结合力增大, 变形能力减弱. 此外, 钇合金渗碳体的 Fe—C 共价键和 Fe—Fe 金属键的平均布居数虽然小于渗碳体, 但是它占据 8d 和 4c 位置时均形成较强的 Y—C 共价键 (分别为 1.22 和 0.60), 因此也能提高渗碳体的稳定性. 此外, Y, La 和 Ce 置换渗碳体 Fe 中的 8d 位置所具有的平均键集居数均比 4c 位置时要大, 而 Sc 取代 4c 位置时更大, 即稳定性更强, 和上述分配焓所分析的结果一致.

表 4 铁磁态时渗碳体和稀土合金渗碳体的平均重叠布居数

Table 4. The average overlap population of rare earth alloyed cementite and pure cementite under FM state.

键型	Fe ₃ C	(Fe, Sc) C		(Fe, Y) C		(Fe, La) C		(Fe, Ce) C	
		4c	8d	4c	8d	4c	8d	4c	8d
Fe—C	0.27	0.31	0.30	0.26	0.27	0.38	0.41	0.36	0.37
Fe—Fe	0.11	0.15	0.14	0.11	0.16	0.26	0.44	0.25	0.27
Y—C				1.22	0.60				

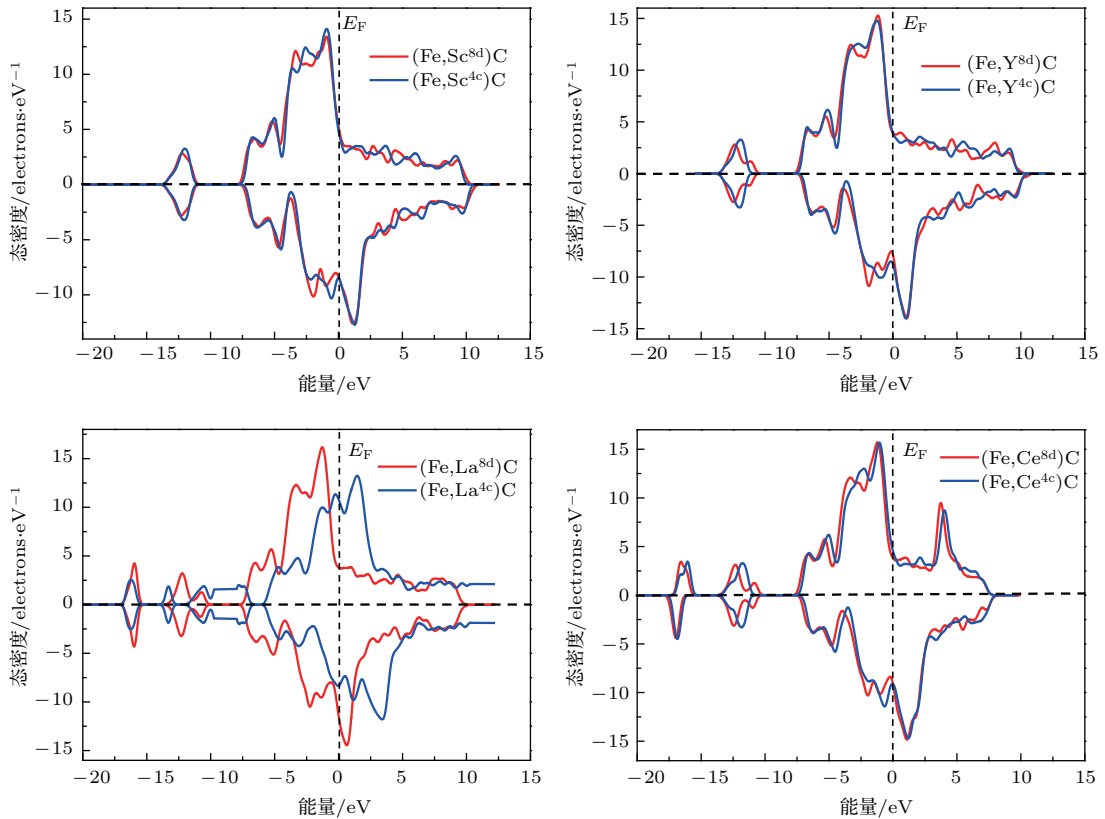


图 3 (网刊彩色) 稀土合金元素取代渗碳体 4c 和 8d 位置时的总态密度

Fig. 3. (color online) Total density of states of the rare earth substituting 4c and 8d Fe position of cementite.

稀土元素占据渗碳体不同位置Fe时的总态密度如图3所示. 由图3可知, Sc和Y稀土合金渗碳体的态密度和渗碳体的态密度较为相似, 主要分为3个区域, 即最低共价带、中间较高共价带和非占有导电态, 而La和Ce渗碳体在 -15 eV到 -16 eV多了一个共价带, 这是它们4f轨道价电子作用的反映. 另外, 上述合金渗碳体的态密度上下不对称反映了它们均具有一定的磁性. 在费米面处的态密度值不为0, 说明合金渗碳体具有金属性.

费米能级(E_F)处态密度的大小可以用来反映化合物的稳定性, 态密度越小, 化合物越稳定. 对比可以发现, Y, La和Ce取代渗碳体Fe中的8d位置时的态密度均比4c位置时要小, 而Sc反之, 说明了Y, La和Ce更容易偏聚到渗碳体中Fe的8d位置, 而Sc则倾向于4c位置, 与上述分析的结果一致, 从而进一步说明计算的准确性.

4 结 论

1) 稀土合金元素Sc, Y, La和Ce占据 α -Fe和渗碳体里面Fe后, 化合物里面的稀土元素均呈现一定的反铁磁性;

2) 无论渗碳体是铁磁态还是无磁态, 所有稀土元素的分配焓均为负, 表明了它们更容易分配到渗碳体, 且使渗碳体中原子间交互作用增强, 提高了渗碳体的稳定性;

3) 在铁磁态和无磁态时, Sc更容易取代在渗碳体中Fe的4c位置, 而Y, Ce和La更容易置换渗碳体中的8d位置, 和稀土合金渗碳体的平均重叠集居数和态密度分析和分配焓的结果一致.

参考文献

[1] Zhao Y Y, Wang J F, Zhou S, Wang X D 2014 *Mater. Sci. Eng. A* **608** 106

[2] Wang L M, Lin Q, Yue L J, Liu L, Guo F, Wang F M 2008 *J. Alloys Compd.* **451** 534

[3] Wang H Y, Gao X Y, Ren H P 2014 *Rare Metal Mat.* **43** 2739 (in Chinese) [王海燕, 高雪云, 任慧平 2014 稀有金属材料与工程 **43** 2739]

[4] Wang H Y, Gao X Y, Ren H P, Zhang H W, Tan H J 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 148101 (in Chinese) [王海燕, 高雪云, 任慧平, 张红伟, 谭会杰 2014 物理学报 **63** 148101]

[5] Zhou X F, Yin X Y, Fang F, Jiang J Q, Zhu W L 2012 *J. Rare Earths* **30** 1075

[6] Yan M F, Liu R L 2010 *Surf. Coat. Technol.* **205** 345

[7] Wang M J, Mu S M, Sun F F, Wang Y 2007 *J. Rare Earths* **25** 490

[8] Wang B W, Xie Y P, Zhao S J, Li J, Hu L J 2014 *Phys. Status Solidi* **251** 950

[9] Ande C K, Sluiter M H F 2010 *Acta Mater.* **58** 6276

[10] Ande C K, Sluiter M H F 2012 *Metall. Mater. Trans. A* **43** 4436

[11] Sawada H, Kawakami K, Körmann F, Grabowski B, Hickel T, Neugebauer J 2016 *Acta Mater.* **102** 241

[12] Segall M, Lindan P J, Probert M A, Pickard C, Hasnip P, Clark S, Payne M 2002 *J. Phys.: Condens. Matter* **14** 2717

[13] Zhao B Q, Zhang Y, Qiu X Y, Wang X W 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 014212 (in Chinese) [赵伯强, 张耘, 邱晓燕, 王学维 2016 物理学报 **65** 014212]

[14] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865

[15] Gao X Y, Wang H Y, Li C L, Ren H P, Li D C, Liu Z C 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 248101 (in Chinese) [高雪云, 王海燕, 李春龙, 任慧平, 李德超, 刘宗昌 2014 物理学报 **63** 248101]

[16] Fasiska E, Jeffrey G 1965 *Acta Cryst.* **19** 463

[17] Yethiraj M, Yelon W B, Buschow K H J 1991 *J. Magn. Magn. Mater.* **97** 45

[18] Jang J H, Kim I G, Bhadeshia H K D H 2009 *Comput. Mater. Sci.* **44** 1319

[19] Shein I R, Medvedeva N I, Ivanovskii A L 2007 *Phys. Status Solidi* **244** 1971

[20] Liu Y Z, Jiang Y H, Zhou R, Feng J 2014 *J. Alloys Compd.* **582** 500

First-principles investigation on partitioning behavior of rare earth elements between α -Fe and Fe_3C *

Xiong Hui-Hui[†] Zhang Hui-Ning

(School of Metallurgy and Chemical Engineering, Jiangxi University of Science and Technology, Ganzhou 341000, China)

(Received 14 July 2016; revised manuscript received 16 August 2016)

Abstract

With the active physical and chemical properties of rare earth (RE), the segregation and solution behaviors of RE elements in steel have still not been very clear to date. Thus, the first-principles method based on the density functional theory is employed to address this problem. The partitioning behaviors of RE elements, including Sc, Y, Ce and La, between α -Fe and Fe_3C are studied by partitioning enthalpy, and the average overlap population, density of states (DOS) of rare earth alloyed cementite are also discussed. Moreover, the ferromagnetic (FM) and non-magnetic (NM) cementite with RE element substitutions are both considered in this work. The results show that all the RE elements in the α -Fe and Fe_3C align anti-ferromagnetic, which is in good agreement with the experimental result. The partitioned enthalpies of these rare earth elements are all negative for the FM and NM cementite, indicating that they tend to partition and solubilize in the cementite phase. Furthermore, the partitioned enthalpies of Y, Ce and La substituting the general position (8d) Fe atom for FM or NM cementite are lower than those of the special position (4c), which indicates that Y, Ce and La prefer to substitute the 8d Fe site. However, Sc partitioning 4c site of FM and NM cementite is energetically favorable compared with the 8d site. The calculated average overlap populations of Fe—C covalent bond and Fe—Fe metallic bond in Y-, La- and Ce-substituted cementite are all larger than that of cementite, showing that the binding strength and the stability of RE-introduced cementite increase. In addition, compared with the 4c Fe site of cementite, Y, La, and Ce substituting the 8d Fe site exhibits larger average overlap population, suggesting that the stability of cementite is enhanced after the introduction of Y, La and Ce, proving again that these elements tend to replace the 8d Fe site of cementite. By comparing the DOSs of the alloyed cementite, we find that the density of states at Fermi level of alloyed cementite with Y, La, and Ce substitutions at 8d Fe site are smaller than those of alloyed cementite with Y, La, and Ce substitutions at 4c Fe site, this further suggests that Y, La, and Ce partitioning at 8d Fe site result in more stable structures, which agrees well with the analysis results of the partitioned enthalpy.

Keywords: rare earth, partitioning, Fe_3C , first-principles

PACS: 81.05.Bx, 81.40.-z, 81.40.Cd

DOI: [10.7498/aps.65.248101](https://doi.org/10.7498/aps.65.248101)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51304053).

[†] Corresponding author. E-mail: xionghui8888@126.com