

第一性原理计算 α -ScD_x ($D = \text{H}, \text{He}$) 的弹性常数*范开敏¹⁾²⁾ 杨莉^{1)†} 彭述明³⁾ 龙兴贵³⁾ 吴仲成³⁾ 祖小涛¹⁾

1) (电子科技大学应用物理系, 成都 610054)

2) (四川文理学院物理与工程技术系, 达州 635000)

3) (中国工程物理研究院核物理与化学研究所, 绵阳 621900)

(2010 年 7 月 31 日收到; 2010 年 10 月 19 日收到修改稿)

本文采用第一性原理方法研究了 α 相钪氢化合物 (α -ScH_x) 和 α 相钪氦化合物 (α -ScHe_x) 的弹性常数, 其中 $x = 0, 1/4, 1/8, 1/32$ 表示 H 原子和 He 原子在 α -ScD_x ($D = \text{H}, \text{He}$) 中的浓度. 研究表明, 对于钪, 氢和氦对晶体的弹性性质的影响截然不同. 钪氢化合物晶体的弹性常数基本上随着晶体中氢的浓度增加而增加, 这跟实验测量得出的结论一致; 然而, 钪氦化合物体系的弹性常数几乎随着氦浓度的增加而降低.

关键词: 第一性原理, 弹性常数, α -ScH_x, α -ScHe_x

PACS: 62.20.de, 62.20.dq, 71.15.Mb

1. 引言

氚是氢的同位素, 它不仅是未来清洁能源聚变的重要燃料, 也是中子发生器 (氘-氚反应) 的关键材料 (氚靶材料). 随着中子发生器里用氚、核聚变燃料用氚、国防用氚和逐渐开展的空间堆计划用氚的需求出现, 要获得高性能储氚已迫在眉睫^[1].

稀土金属储氢 (及其同位素) 能力很强. 稀土金属中的氚会通过 β 衰变 $T \rightarrow {}^3\text{He} + \beta^- + \bar{\nu}$ 产生氦^[2]. 氦在材料中的溶解度很低, 随着时间的推移会逐渐增多, 积累的氦将聚集、沉淀, 形成氦-空位团, 乃至氦泡, 这不仅阻碍氚气扩散到储氚材料表面, 而且会引起金属氚化物体积膨胀、平衡压降低以及力学性能变化等^[3-5]. 因此, 氦在金属氚化物中的行为受到越来越多的关注^[6-8]. 作为一种典型的储氢材料, 钪氢化合物的相关材料性能引起理论和实验的广泛研究^[9-12]. 实验研究表明, 当氢的浓度高达 0.35 时, 钪氢化合物还能保持稳定的 α 相的固溶状态^[13].

弹性常数和体弹模量是表征材料性能的重要参数, 反映了材料的稳定性和硬度. 通过弹性常数可以得到与晶体的力学和动力学性质相关的信息.

因此, 获得准确的材料的弹性常数是必要的. 在理论和实验方面, 有很多关于材料弹性性质的研究^[9,14-21]. Leisure 等人^[9], 曾详细对室温下 ScH_x ($x = 0, 0.18, 0.25$) 的弹性常数进行了测量, 发现钪氢化合物的弹性常数随氢浓度的增加而增加, 然而未见其对变化原因进行分析. 对于钪氦化合物系统的弹性性质, 未见理论和实验方面的研究. 因此在本工作中, 我们采用基于密度泛函理论的从头算方法计算了 α -ScH_x ($x = 0, 1/4, 1/8, 1/32$) 和 α -ScHe_x ($x = 0, 1/4, 1/8, 1/32$) 两种化合物体系的弹性常数, 并从理论方面进行了详细分析.

2. 理论方法

本工作使用 Vienna ab initio simulation package (VASP) 程序包计算了 α -ScH_x 和 α -ScHe_x 体系的弹性常数. 计算中采用的钪的赝势来自于 VASP 软件包的赝势库, 并且对各种赝势进行了测试. 最后采用缀加投影波方法描述离子和电子间的相互作用^[22,23], 交换关联函数采用广义梯度近似的 Perdew-Wang (PW91)^[24].

hcp 结构晶体的弹性常数可以通过对平衡晶格结构施加微小应变来计算其能量的改变量^[18].

* 国家自然科学基金-中国工程物理研究院联合基金 (批准号: 10976007), 中央高校基本科研业务费专项资金 (批准号: ZYGX2009J040) 和四川文理学院院级基金 (批准号: 2010A03Z) 资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: yanglilkd@yahoo.com.cn, yanglilkd@uestc.edu.cn

$$\frac{\Delta E}{V} = (C_{11} + C_{12})\delta^2, \quad (1)$$

$$\frac{\Delta E}{V} = \frac{1}{4}(C_{11} - C_{12})\delta^2, \quad (2)$$

$$\frac{\Delta E}{V} = \frac{1}{2}C_{33}\delta^2, \quad (3)$$

$$\frac{\Delta E}{V} = C_{44}\delta^2, \quad (4)$$

$$\frac{\Delta E}{V} = (C_{11} + C_{12} + 2C_{13} + C_{33}/2)\delta^2. \quad (5)$$

通过平面波基矢法 (the plane-wave basis sets) 对晶胞原子位置进行弛豫, 并对晶胞大小和形状进行优化. 计算过程中对截断能进行了测试, 对于 α -ScH_x 体系, 截断能取为 400 eV, α -ScHe_x 体系的截断能取为 550 eV. K 点是以 Gamma 点为中心, 根据 M-P 方法产生. 一旦晶胞弛豫完成, 利用布洛赫修正四面体方法 (the tetrahedron method with Blöchl corrections) 计算得到体系的总能.

针对 α -ScH_x 和 α -ScHe_x 体系, 分别选取了三种不同的超晶胞, 具体的选取方法和超晶胞中各原子数见表 1.

表 1 α -ScD_x 超晶胞的选取及晶胞中的原子数, 其中 D 表示元素 H 或 He

		ScD _{1/4}	ScD _{1/8}	ScD _{1/32}
超晶胞		2 × 1 × 1	2 × 2 × 1	4 × 2 × 2
原子数	Sc	4	8	32
	D	1	1	1

实验研究发现, 对于 α -ScH_x 体系, H 原子处在四面体间隙时最稳定^[9]. 计算同样发现, 对于钪氢和钪氦化合物体系, H 和 He 原子处在晶体的四面体间隙位置比处在八面体间隙位置更稳定的^[19]. 因此, 在 α -ScD_x ($D = \text{H, He}$) 体系中, H 和 He 原子分别放在 α 相钪晶体的四面体间隙位置. 为了系统研究不同浓度的 H 和 He 对 α -Sc 的弹性性质的影响,

计算了 ScH_{1/4}, ScH_{1/8}, ScH_{1/32}, ScHe_{1/4}, ScHe_{1/8} 和 ScHe_{1/32} 的弹性常数.

3. 结果及讨论

为了判断选取的赝势和采用的晶格弛豫和粒子坐标优化方法的可行性, 我们首先计算了纯钪晶体的弹性常数, 计算结果见表 2. 从表 2 中我们可以看出纯钪晶体弹性常数计算结果和实验结果的误差大部分在 6% 以内, 误差最小的 C_{33} , 误差仅为 1.0%. 误差较大一点的是 C_{44} , 其误差为 12.5%. 这可能是由于在理论计算时没有考虑温度的影响. 总体来讲, 纯钪晶体弹性常数的理论计算值和实验测量值符合得比较好. 因此我们的计算方法是可靠的. 所以我们采用这种方法详细计算研究了 α -ScH_x 和 α -ScHe_x 体系的弹性常数.

表 2 给出了 α -ScH_x ($x = 0, 1/4, 1/8, 1/32$) 的弹性常数计算值和部分实验值. 施加在晶胞的应变 δ 从 -0.018 到 0.018 以间隔 0.003 变化, 共 13 个值. 同时, 我们对 K 点也进行了详细的测试, 并且发现 K 点的选取对计算结果有一定程度的影响, 因此为了得到精确的结果, 尽量提高 K 点数目. 本文对 ScH_{1/4}, ScH_{1/8} 和 ScH_{1/32}, 分别选取的 K 点网格为 6 × 8 × 8, 8 × 8 × 8 和 4 × 6 × 6. 从表 2 中, 发现 ScH_x ($x = 1/4, 1/8, 1/32$) 体系的弹性常数 ($C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{44}$) 非常明显的大于纯钪晶体的相应的弹性常数, 并且随着 H 浓度的增加而增加, 这一点与文献[9]给出的结论一致. 分析其原因, 可能是因为当氢原子注入到钪晶体中后, 氢原子与钪原子的外层电子相互作用成键, 从而钪氢化合物中钪原子和氢原子紧密结合使得材料的这四个弹性常数值增加. 然而, C_{33} 却随着 H 浓度的增加而降低. C_{33} 是描述 Z 轴方向的一个常数, 前面我们讨论过氢原子在钪晶体中四面体间隙位置是最稳定的结构, 也就是说在

表 2 α -Sc 和 α -ScH_x 的弹性常数的实验值和计算值 (单位: 10⁹ Pa)

	C_{11}		C_{12}		C_{44}		C_{33}		C_{13}	
	计算值	实验值	计算值	实验值	计算值	实验值	计算值	实验值	计算值	实验值
ScH _{1/4}	114.7		46.3		34.5		92.1		38.5	
ScH _{1/8}	110.0		44.2		33.2		99.9		34.3	
ScH _{1/32}	105.4		41.4		30.2		103.1		34.1	
Sc	105.6	(99.3)	40.8	(39.7)	30.6	(27.2)	105.9	(107)	31.4	(29.4)

注: 括号里的数值为文献[25]的值.

α -ScH_x ($x = 1/4, 1/8, 1/32$) 中注入的氢原子是位于 Z 轴方向上两个钪原子之间, 这可能就导致表征 Z 轴方向弹性性质的 C_{33} 随着 H 浓度的增加而减小. 从表 2 中我们很容易看出, 当 x 的值足够小的时候, 例如 ScH_{1/32}, α -ScH_x 体系的五个弹性常数值逐渐趋向于纯钪晶体相应的弹性常数值, 这也从另一方面

证明了我们计算方法和计算结果的可靠性. 为了测试计算结果, 对 α -ScH_{1/32} 体系, 我们选取了应变幅度 δ 以间隔 0.01 从 -0.06 增加到 0.06, 同样取十三个不同的微小应变. 结果发现, 对于这种情况, 取的微小应变稍微增加对计算结果影响很小.

表 3 α -Sc 和 α -ScHe_x 的弹性常数的实验值和计算值 (单位: 10^9 Pa)

	C_{11}		C_{12}		C_{44}		C_{33}		C_{13}	
	计算值	实验值	计算值	实验值	计算值	实验值	计算值	实验值	计算值	实验值
ScHe _{1/4}	84.7		40.0		21.0		95.7		32.3	
ScHe _{1/8}	93.3		38.0		27.2		91.4		36.5	
ScHe _{1/32}	103.2		41.5		29.7		105.8		31.7	
Sc	105.6	(99.3)	40.8	(39.7)	30.6	(27.2)	105.9	(107)	31.4	(29.4)

注: 括号里的数值为文献[25]的值, 便于比较 Sc 的弹性常数的实验值与计算值也列入表中.

表 3 给出了 α -ScHe_x 体系弹性常数的计算值. 对于 α -ScHe_x 体系, 截断能增加到 550 eV, 施加的应变 δ 从 -0.018 到 0.018 以间隔 0.003 变化. 便于比较, 纯钪晶体弹性常数的理论值和实验值也列在表 3 中. 从表 3 我们可以发现, 与 α -ScH_x 体系相反, ScHe_{1/8} 和 ScHe_{1/32} 的四个弹性常数 (C_{11} , C_{12} , C_{33} , C_{44}) 都随氢浓度的增加而减小. 这可能主要是由于氢和氦的电子结构的差异导致的. 第一性原理计算研究体系结构通常从电子态密度和电荷分布方面分析^[26,27]. 下面我们从电子态密度和电荷转移方面分别分析 α -ScH_x 和 α -ScHe_x 体系中间隙 H 原子和 He 原子与近邻 Sc 原子之间的相互作用.

由于曲线太多, 为了清晰分析, 图 1(a) 和 (c) 中只给出了体系费米能级附近 Sc-d 电子态密度图局部放大图. 图 1(b) 和 (d), 同时给出费米能级附近的电子态密度图局部放大图. 从图 1(a) 可以看出, 加氢后, Sc-d 电子态密度峰值在费米能级附近明显比纯钪晶体的低, 并且随着 H 浓度的增加, Sc-d 电子态密度与纯 Sc 的差别越大. 这说明 α -ScH_x 体系中, H 与它的最近邻 Sc 原子之间相互作用比较强, 并且随着 H 原子浓度增加, α -ScH_x 体系中 Sc 和 H 之间的作用增强. 图 1(b) 给出了 α -ScH_x 体系中间隙原子 H-s 电子态密度图. 从图 1(b) 中可以发现, 随着 H 浓度的增加, H-s 电子态密度峰值向着低能端移动, 并且峰值降低. 这也说明 α -ScH_x 体系中, 间隙 H 原子和近邻 Sc 原子之间的相互作用比较强, 而且该相互作用随着 H 浓度增加而增加.

图 1(c) 给出了 α -ScHe_x 体系中 He 间隙原子的最近邻 Sc 的 d 电子态密度, 图 1(d) 给出了相应

的 He 的 p 电子态密度. 从图 1(c) 中明显可以看出, 加 He 后的 Sc-d 电子态密度曲线与纯钪的 Sc-d 电子态密度曲线比较, 偏离最大的是 ScHe_{1/4}, 偏离最小的是 ScHe_{1/32}, 这说明 α -ScHe_x 体系中, 尽管 Sc 和 He 的相互作用比较弱, 随着氢浓度增加, Sc 和 He 相互作用也是增加的. 比较图 1(d) 中 ScHe_{1/32} 与 ScHe_{1/8} 的 He-p 电子态密度, 可以看出 He 浓度的增加导致其 p 电子态密度峰值升高, 图 1(d) 中放大的费米能级附近的电子态密度图明显显示了其变化趋势. 从以上分析不难得出 α -ScD_x ($D = H, He$) 体系中随着 H 和 He 的浓度增加, H, He 与其近邻 Sc 原子的相互作用增强, 但是 He 和 Sc 之间与 H 和 Sc 之间的作用机理有着明显的差别.

从图 2(a) 和 (b) 可以看出, α -ScH_x 体系中随着 H 原子浓度增加, Sc 和 H 之间电荷转移稍有增强, 这说明随着 H 浓度增加, 体系中 Sc 和 H 之间的相互作用越强. 同样, 从图 2(c) 和 (d) 发现, α -ScHe_x 体系随 He 浓度增加, Sc 和 He 之间电荷转移也稍有增强, 即两种原子之间的相互作用也加强. 这和图 1 给出的结论是一致的. 值得注意的是, 比较 α -ScH_x (图 2(a) 和 (b)) 和 α -ScHe_x (图 2(c) 和 (d)) 体系, 很容易发现, 对于这两种体系, 电荷转移的方向是恰好相反的. 图 2(a) 和 (b) 表明, α -ScH_x 体系中 H 在相互作用过程中得到电荷, 而从图 2(c) 和 (d) 可以看出 α -ScHe_x 体系中 He 在相互作用过程中失去电荷.

结合图 1 和图 2, 不难发现, α -ScH_x 和 α -ScHe_x 体系中, 四面体间隙原子 (H 与 He) 和 Sc 原子的相互作用都是随间隙原子的浓度增加而加强, 但是由

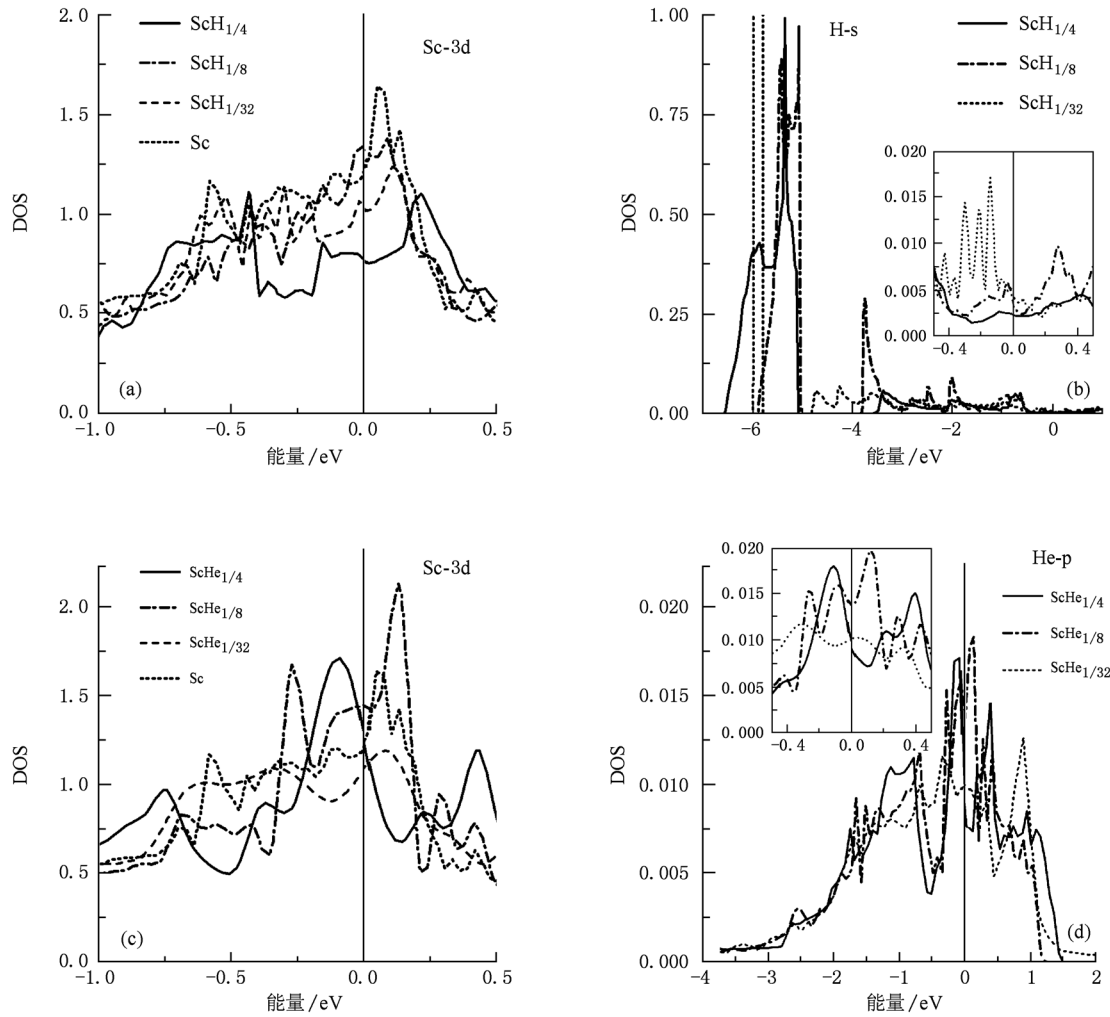


图1 α - ScD_x ($D = \text{H}, \text{He}$) 体系中四面体间隙原子 D 的最近邻 Sc 原子的 d 电子态密度和间隙原子 D ($\text{H-s}, \text{He-p}$) 的电子态密度图. 图1(a), (c) 中实线为 $\text{ScD}_{1/4}$ 结构中四面体间隙 D 原子近邻原子 Sc-d 电子态密度, 点划线和虚线分别为 $\text{ScD}_{1/8}$ 和 $\text{ScD}_{1/32}$ 结构中四面体间隙 D 原子的近邻 Sc-d 电子态密度, 点线为纯钪晶体中 Sc-d 电子态密度; (b), (d) 中实线为 $\text{ScD}_{1/4}$ 结构中四面体间隙原子 D ($\text{H-s}, \text{He-p}$) 电子态密度, 点划线和点线分别为 $\text{ScH}_{1/8}$ 和 $\text{ScH}_{1/32}$ 结构中四面体间隙原子 D ($\text{H-s}, \text{He-p}$) 电子态密度

于 H 原子和 He 原子电子结构的差异, 从而导致相互作用过程中电荷转移相反, 这可能就是 H 原子和 He 原子注入到纯钪晶体中后, 对晶体弹性常数的影响相反的原因.

表3中需要说明的一点是, ScHe_x ($x = 1/4, 1/8, 1/32$) 的弹性常数 C_{13} 的数值大于纯钪晶体的 C_{13} 的值. 这与文献[18]中误差产生原因类似, 可能是由于 C_{13} 的理论计算是通过方程(7)的联合求解, 从方程(7)明显可以看出 C_{13} 的解与弹性常数 C_{11} , C_{12} 和 C_{33} 有直接关系, 我们分析认为是由于联合求解放大了 C_{13} 误差, 理论与实验研究中此种联合求解出现类似的误差是不可避免的, 但其他的计算结果仍然具有一定的参考价值. 另外, 从表3中我们还可以看

出, $\text{ScHe}_{1/4}$ 的弹性常数 C_{12} 和 C_{33} 分别大于 $\text{ScHe}_{1/8}$ 的 C_{12} 和 C_{33} . 其原因可能是当钪氢体系中的氢原子浓度增大到一定浓度的时候 (大于 25%), ScHe_x 晶体不再是典型的 hcp 结构. 图3(a) 给出了 ScHe_x 体系原子坐标优化之前的一个晶胞的结构图, 图3中(b)和(c)分别给出了原子坐标优化后 $\text{ScHe}_{1/8}$ 和 $\text{ScHe}_{1/4}$ 的结构图.

比较图3(a), (b) 和 (c), 可以看出, 氢原子浓度较低的 $\text{ScHe}_{1/8}$ 晶体结构 (见图3(b)) 与原子坐标优化之前晶体结构 (见图3(a)) 相比变化不大, 依然是比较典型的 hcp 结构, 氢原子浓度较高的 $\text{ScHe}_{1/4}$ 晶体结构 (见图3(c)) 与原子坐标之前晶体结构 (见图3(a)) 相比发生了比较明显的晶格畸

变,不再是标准的 hcp 结构. 对这种情况,我们改变施加应变的方式,对晶体施加应变使 δ 从 -0.030 到 0.030 变化,间隔为 0.003 ,也就是计算的 $\Delta E/V - \delta$ 数据每组增加至 21 个. 计算发现依然得到和上面同样的结论. 与加氢的 $\alpha\text{-ScH}_x$ 体系一样,对于 $\alpha\text{-ScHe}_x$ 体系来说,当氦的浓度足够低的时候,所有的五个弹性常数分别趋近于纯钪晶体的相应的弹性常数值.

4. 结 论

本文用 VASP 软件包计算了不同 H 原子浓度的钪氢化合物和不同 He 原子浓度的钪氦化合物的弹

性常数,讨论了 H 和 He 这两种元素在钪晶体中的浓度与化合物弹性常数之间的关系. 结果发现 H 原子和 He 原子注入到钪晶体中,对晶体的弹性性质影响不同. 对 $\alpha\text{-ScH}_x$,其弹性常数基本上随氢浓度增加而增大,这和实验测量结果一致^[9],对 $\alpha\text{-ScHe}_x$ 来说,其弹性常数随氦浓度增加几乎都是变小的趋势,并且,我们从电子态密度和电荷密度转移方面详细分析了其原因,对于 $\alpha\text{-ScD}$ ($D = \text{H}, \text{He}$)_x 体系来说,由于 H 原子和 He 原子电子结构的差异导致了相应体系中其与 Sc 原子的相互作用不同,从而导致晶体弹性性质方面的差异. 同时还发现当氦的浓度超过 25% 的时候,由于氦浓度过高致使 ScHe_x 晶体发生晶格畸变,不再是典型的 hcp 结构.

-
- [1] Zhou J J, Chen Y G, Wu C L, Zheng X, Fang Y C, Gao T 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4853 (in Chinese) [周晶晶、陈云贵、吴朝玲、郑欣、房玉超、高涛 2009 物理学报 **58** 4853]
 - [2] Mitchell D J, Provo J L 1985 *J. Appl. Phys.* **57** 1855
 - [3] Wang Y, Chou M Y 1994 *Phys. Rev. B* **49** 13357
 - [4] Blaschko O, Pleschitschnig J 1989 *Phys. Rev. B* **40** 5344
 - [5] Yang L, Peng S M, Long X G, Gao F, Heinisch H L, Kurtz R J, Zu X T 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 054903
 - [6] Prem M, Krexner G, Pleschitschnig J 2003 *Journal of Alloys and Compounds* **356-357** 683
 - [7] Blaschko O, Pleschitschnig J, Glas R, Weinzierl P 1991 *Phys. Rev. B* **44** 9164
 - [8] Wixom R R, Browning J F, Snow C S, Schultz P A, Jennison D R 2008 *J. Appl. Phys.* **103** 123708
 - [9] Leisure R G, Schwarz R B, Migliori A, Lei M 1993 *Phys. Rev. B* **48** 1276
 - [10] Skripov A V, Soloninin A V, Sibirtsev D S, Buzlukov A L, Stepanov A P, Balbach John J, Conradi Mark S, Barnes R G, Hempelmann R 2002 *Phys. Rev.* **66** 054306
 - [11] Gygax F N, Solt G, Amato A, Anderson I S, Pinkpank M, Schenck A, Udovic T J 2009 *Phys. Rev. B* **61** 168
 - [12] Garcés J, González R, Vajda P 2009 *Phys. Rev. B* **79** 054113
 - [13] Burger J P, Daou J N, Lucasson A, Lucasson P, Vajda P, 1985 *Z. Phys. Chem. N. F.* **143** 111
 - [14] Kwiseon K, Walter R L L, Benjamin S 1996 *Phys. Rev. B* **53** 16310
 - [15] Mehl M J, Osburn J E, Papaconstantopoulos D A, Klein B M 1990 *Phys. Rev. B* **41** 10311
 - [16] Mehl M J 1993 *Phys. Rev. B* **47** 2493
 - [17] Wang S Q, Ye H Q 2002 *Phys. Rev. B* **66** 235111
 - [18] Wang S Q, Ye H Q 2003 *J. Phys. : Condens. Matter* **15** 5307
 - [19] Yang L, Peng S M, Long X G, Gao F, Heinisch H L, Kurtz R J, Zu X T, submitted to *J. Phys-Condens Mat.*
 - [20] Li D H, Zhu X L, Su W J, Cheng X L 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 2004 (in Chinese) [李德华、朱晓玲、苏文晋、程新路 2010 物理学报 **59** 2004]
 - [21] Wang H Y, Zhu W J, Song Z F, Liu S J, Chen X R, He H L 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3703 (in Chinese) [王海燕、祝文军、宋振飞、刘绍军、陈向荣、贺红亮 2008 物理学报 **57** 3703]
 - [22] Kresse G, Joubert D 1999 *Phys. Rev. B* **59** 1758
 - [23] Blöchl P E 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17953
 - [24] Perdew J P, Chevary J A, Vosko S H, Fiolhais C 1992 *Phys. Rev. B* **46** 6671
 - [25] Brandes E A, Brook G B 1992 *Smithells Metal Reference Book* 7th edn (Oxford: Butterworths) p15
 - [26] Liu X K, Liu Y, Qian D Z, Zheng Z 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 6450 (in Chinese) [刘显坤、刘颖、钱达志、郑洲 2010 物理学报 **59** 6450]
 - [27] Li C B, Li M K, Yin D, Liu F Q, Fan X J 2005 *Chin. Phys.* **14** 2287

First-principles calculation for elastic constants of $\alpha\text{-ScD}_x$ ($D = \text{H}, \text{He}$) *

Fan Kai-Min¹⁾²⁾ Yang Li^{1)†} Peng Shu-Ming³⁾ Long Xing-Gui³⁾ Wu Zhong-Cheng³⁾ Zu Xiao-Tao¹⁾

1) (Department of Applied Physics, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 610054, China)

2) (Department of Physics and Engineering Technology, Sichuan University of Arts and Science, Dazhou 635000, China)

3) (Institute of Nuclear Physics and Chemistry, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China)

(Received 31 July 2010; revised manuscript received 19 October 2010)

Abstract

The elastic constants of $\alpha\text{-ScH}_x$ ($x = 0, 1/4, 1/8, 1/32$) and $\alpha\text{-ScHe}_x$ ($x = 0, 1/4, 1/8, 1/32$) are studied by the first-principles method. It is found that the addition of hydrogen to the scandium has an effect greatly different from the addition of helium to this rare-earth metal. The elastic constants of the $\alpha\text{-ScH}_x$ system almost increase with hydrogen concentration increasing, which is in agreement with the experimental observation. Whereas, in the case of $\alpha\text{-ScHe}_x$ system, the elastic constants almost decrease with the increase of helium concentration.

Keywords: first-principles, elastic constant, $\alpha\text{-ScH}_x$, $\alpha\text{-ScHe}_x$

PACS: 62.20.de, 62.20.dq, 71.15.Mb

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10976007), the Fundamental Research Funds for the Central Universities (Grant No. ZYGX2009J040), and the Funds of Sichuan University of Arts and Science (Grant No. 2010A03Z).

† Corresponding author. E-mail: yanglilkd@yahoo.com.cn, yanglilkd@uestc.edu.cn