

Введение

Ванадийсодержащие стали широко используются в промышленности и история их экспериментального изучения насчитывает десятки лет, но теория процессов легирования сталей ванадием весьма далека от завершения. Для понимания физических особенностей системы Fe-V, требуется проведение не только более точных, но и более широких по концентрации первопринципных расчётов. В системе Fe-V магнитный момент одиночной примеси ванадия в железе при 0 К антипараллелен магнитному моменту матрицы железа, а отталкивающее взаимодействие пары близкорасположенных атомов ванадия сильнее, чем у пары атомов хрома в Fe [1]. В данной работе было проведено исследование магнитных и структурных свойств системы Fe-V в зависимости от окружения ванадия.

Модель

В качестве модельной системы была выбрана ферромагнитная суперячейки ОЦК-железа содержащая 54 атома, которые частично замещались атомами ванадия. При интегрировании в обратном пространстве и вычислении электронной плотности использовалась схема Монхорста-Пака с сеткой 4*4*4 k-точек зоны Бриллюэна. Для всех систем была выбрана энергия обрезания 400 эВ. При оптимизации атомной структуры предполагается сходимость, когда изменение энергии между двумя электронными самосогласованными ступенями составляет менее 10⁻⁶ эВ, а силы на каждом из атомов не превышали значения 0.01 эВ/Å.

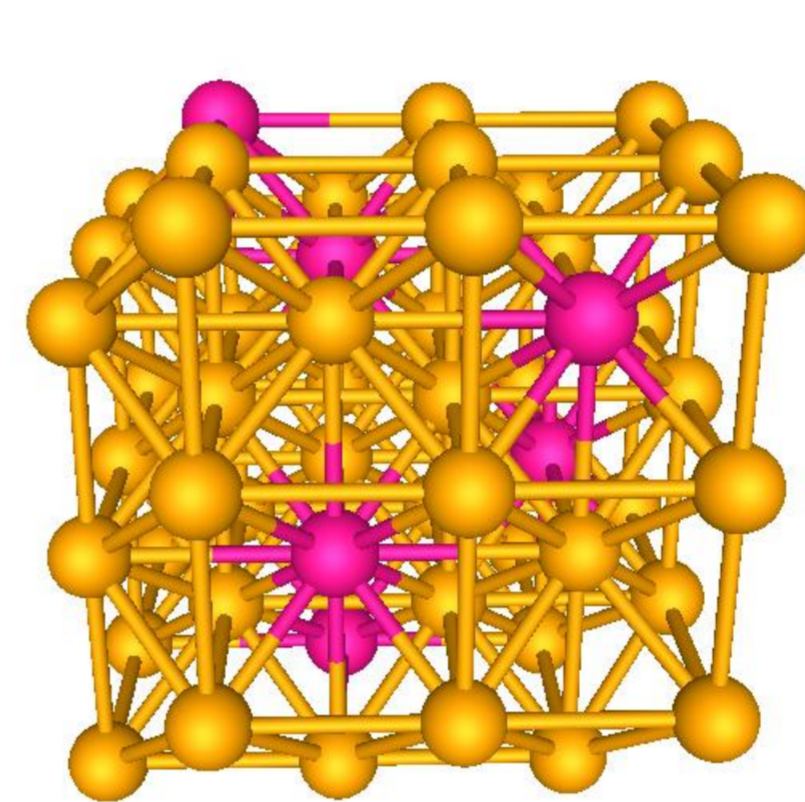
Методы



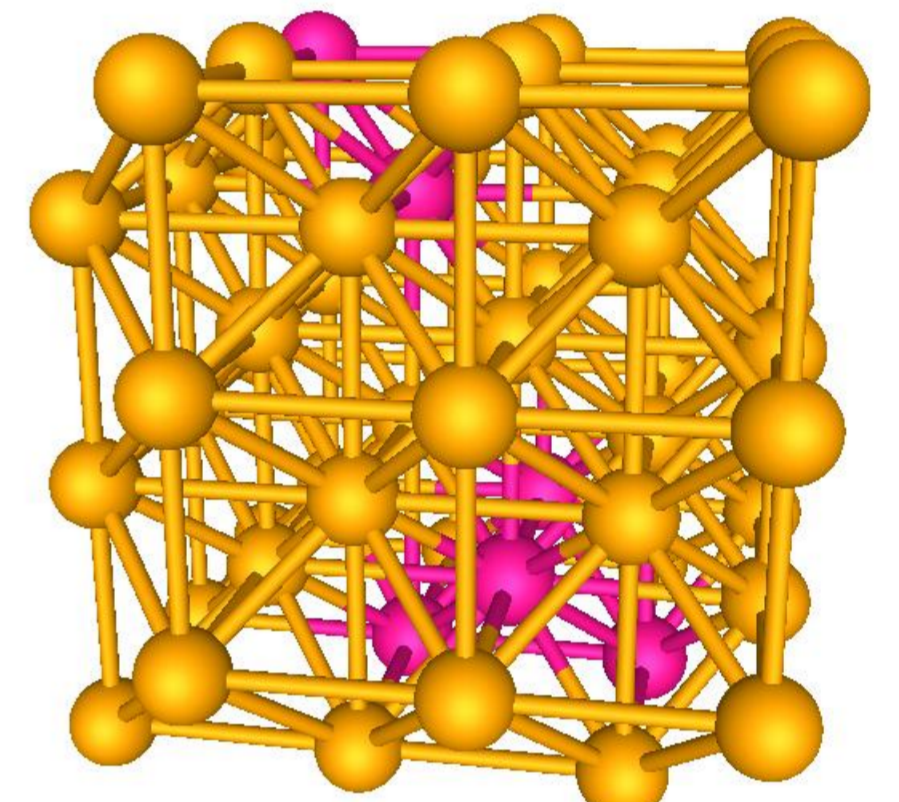
Метод проекционных присоединенных волн

Обобщенное градиентное приближение

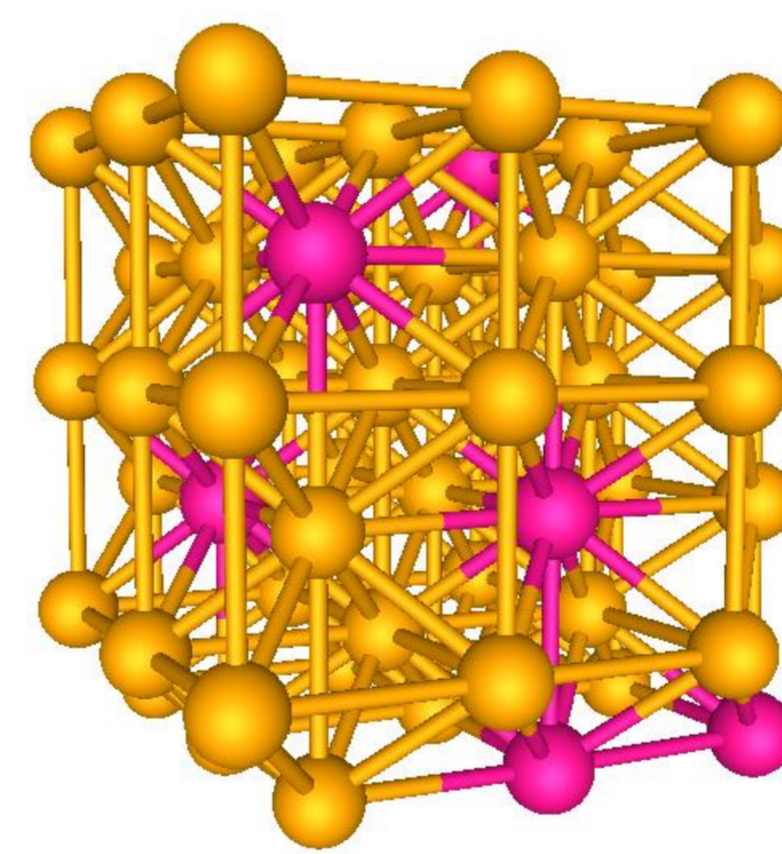
Программный пакет



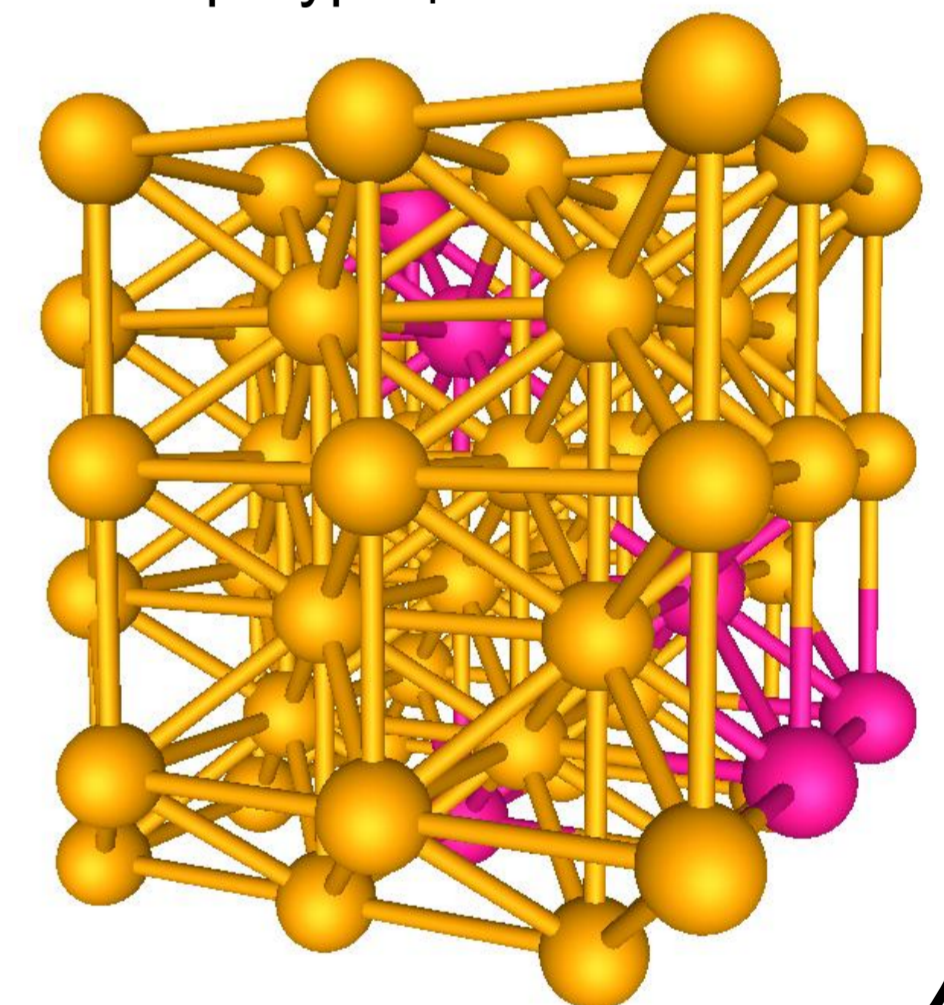
Конфигурация №1



Конфигурация №2



Конфигурация №3



Конфигурация №4

Результаты

$$\Delta E_{mix} = E_{FeV} - (1-c) \cdot E_{Fe} - c \cdot E_V$$

№	a, Å	M, μ _B	M(Fe), μ _B	M(V), μ _B	B, ГПа	ΔE, эВ	ΔE _{mix} , эВ
1	2.8516	98.192	2.189	-1.149	183.6	0.22	-0.070
2	2.8514	98.774	2.174	-0.928	181.1	1.31	-0.050
3	2.8522	98.174	2.196	-1.202	183.8	0.00	-0.074
4	2.8522	98.388	2.182	-1.061	181.7	0.90	-0.057

Из таблицы видно, что наименьшей энергией обладает система, в которой атомы ванадия наиболее удалены друг от друга, но при этом наблюдается наибольший объемный модуль и наименьший магнитный момент на атоме ванадия.

Конфигурация №1 - 3 атома ванадия находятся в первом окружении друг у друга, а 3 оставшихся атома ванадия не имеют в первом окружении других атомов ванадия.

Конфигурация №2 - шесть атомов ванадия находятся в первом окружении друг для друга.

Конфигурация №3 - 3 атома ванадия не имеют в первом окружении других атомов ванадия, 1 атом ванадия имеет в первом окружении 2 атома ванадия, но они расположены друг другу во втором окружении.

Конфигурация №4 - две тройки атомов ванадия, которые находятся в первом окружении друг другу.

References

- O. I. Gorbatov, S. V. Okatov, Y. N. Gornostyrev, et al. *The Physics of Metals and Metallography*, 2013, 114(8), 642–653.