
稀土渗氮催渗机制获揭示

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/10502.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

稀土渗氮催渗机制获揭示。近日，安徽工业大学现代表面工程研究中心教授张世宏团队的一项最新研究，通过第一性原理研究稀土元素对氮原子在体心立方铁表面吸附和扩散的影响，揭示了稀土渗氮的催渗机制。相关论文发表在《材料学报》上。

稀土在渗碳、渗氮、喷涂等表面处理技术中有着广泛的应用。稀土辅助渗氮被证明有助于促进扩渗速率，提高渗层厚度，改善渗层性能。然而，其相应的机制至今尚不清晰。

该项研究计算了体心立方铁的体结构和表面结构性能，计算了氮的吸附性能；建模模拟了稀土元素在体心立方铁中的占位，计算了稀土元素掺杂的体心立方铁表面氮原子的吸附情况。通过bader电荷和弛豫后的结构变化，研究人员还发现了较强的La-N作用，解释了La元素掺杂后氮原子吸附能的提高。研究项目还对氮原子在体心立方铁次表面的吸附进行了计算，发现了稀土元素掺杂对扩散能垒的降低有帮助，总结了稀土La和Ce的催渗机制。

据介绍，这项研究将有助于深入了解稀土在表面处理技术中发挥的作用，为稀土表面处理技术的优化提供理论支撑，也为第一性原理揭示表面处理的微观机制提供了一个范例。（来源：中国科学报陈彬 汪盛颜）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1016/j.actamat.2020.06.020>

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：shouquan@stimes.cn。

作者：张世宏等 来源：《材料学报》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发