

Ti_{1-x}V_xC (x=0~1) 材料弹性性质的第一性原理研究

庞立娟^{1,2}, 白晨光¹, 张雪峰², 吕学伟¹, 卢勇³

(1. 重庆大学, 重庆 400044)

(2. 攀枝花学院, 四川 攀枝花 617000)

(3. 昆明理工大学 真空冶金国家工程实验室, 云南 昆明 650093)

摘要: 采用基于密度泛函理论的第一性原理计算了 Ti_{1-x}V_xC (x=0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.75, 1) 8 种碳化钒钛的晶格常数、弹性常数、弹性模量和电子态密度, 计算结果与已报道试验结果很好符合。Ti_{1-x}V_xC (x=0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.75, 1) 的晶胞参数随钒含量的增大而减小, 在 x=0.5 时, 化合物具有最优的综合力学性能, 体模量 282.41 GPa、剪切模量 229.01 GPa 和剪切模量 *G*/体模量 *B* (*G/B*) 比值 0.68。分析电子态密度得知该系列化合物均具有良好的导电性, *pd* 轨道杂化作用明显 (除 VC 外), 从而导致了其力学性能的变化。

关键词: 第一性原理; 密度泛函理论; 碳化钒钛; 弹性性质

中图分类号: TG146.2*3

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2017)11-3272-05

TiC 是同时含有离子键、共价键及金属键的过渡族金属碳化物, 具有高硬度 (28~35 GPa)、高熔点 (~3100 °C)、良好的耐磨性、优异的导电性 (6.8×10⁻⁷ Ω m) 及价格低廉等诸多优点, 同时还具有一定的强度和韧性^[1-4]。因此, TiC 被公认是最有希望取代 WC 的硬质合金基体材料。

然而, 其断裂韧性 *K_{IC}* 值(6~9 MPa m^{1/2})^[5,6]远小于 WC-Co 系硬质合金(9~16 MPa m^{1/2}), 这导致了 TiC 实际应用受阻。因此, 改善 TiC 基硬质合金的断裂韧性成为急需解决的问题。

研究发现, TiC 基硬质合金的芯环相结构是造成其断裂韧性差的主要原因^[7-9]。芯-环相的形成与溶解-再析出机制密切相关。芯相一般为 TiC 相, 而环相则为(Ti, *M*)C 相, 其中 *M* 为液相熔化过程中溶入 TiC 晶胞中的 W、Mo、V 等过渡族原子^[10-13]。芯相与环相虽然具有相同的 NaCl 型晶体结构, 但两者的晶胞参数不同导致芯环相界面处产生残余应力, 进而促进裂纹产生并增殖, 此即恶化了材料的韧性^[8]。

解决 TiC 基硬质合金断裂韧性欠佳的重要措施之一是用(Ti, *M*)C 复式碳化物相取代 TiC 相, 该方法可以有效弱化芯环相两者之间的晶胞参数差异, 甚至可以形成无芯相, 从而改善 TiC 基硬质合金的断裂韧性, 其中, *M*=Mo、W、V、Ti 等^[14-18]。另一方面, TiC 相中因溶入了溶质原子形成(Ti, *M*)C 后, 起到固溶强化作

用, 可同时达到细化晶粒的目的。目前, TiC 基复合材料的热点已转为复式碳化物材料的研究, 其中 (Ti, V)C 又是一类非常重要的复式碳化物。

王静^[19]的研究结果表明, 当 V/Ti 原子比为 0.1、0.2 时, (V, Ti)C/Fe 复合材料的抗弯强度明显高于 V/Ti 原子比为 0 的复合材料; 当 V/Ti 原子比增加至 0.4~1.0 之间时, 复合材料的抗弯强度逐渐下降。文献[20]中使用 TiC、VC 及 Co 在不同温度下烧结后获得了 γ-(Ti, V)C_{1-x}/Co 复合材料, 当 VC 的含量 (质量分数) 从 18% 增加到 54% 时, HV30 从 16.5 GPa 增大至 18 GPa。

可见, (Ti, V)C 复式碳化物在复合材料中所起的作用与 Ti/V 原子比有很大关系。而强度及硬度又是 TiC 基复合材料应用时的重要评价指标, 它们与材料的弹性性质有着非常重要的联系。目前未见 V 含量与 Ti_{1-x}V_xC 的弹性性质与力学性能之间关系的全面实验及理论报道。本研究将采用第一性原理方法从理论上研究 V 含量与 Ti_{1-x}V_xC 弹性性质之间的关系, 得出(Ti, V)C 的力学性能随 V 含量不同的变化规律。

1 计算模型与方法

1.1 计算模型

TiC 和 VC 均为 NaCl 型面心立方晶体结构^[21,22], 空间群为 Fm-3m (如图 1 所示)。由于 V 和 Ti 原子半径非常接近, 根据 Hume-Rothery 定则可知, 在原母体

收稿日期: 2016-11-05

作者简介: 庞立娟, 女, 1982 年生, 博士生, 重庆大学材料科学与工程学院, 重庆 400044, 电话: 023-65127303, E-mail: panglijuan@163.com

材料中, V 和 Ti 相互取代, 其晶体结构不发生变化。

V 和 Ti 原子二者随机取代, 并呈无序固溶分布。在第一性原理计算中, 一般将此类晶体采用虚晶近似 (VCA) 建模, 即: 近似将 V 和 Ti 原子赝势根据含量比做线性近似混合处理, 如表达式 (1) 所示。

$$V_{VCA} = xV_{VC} + (1-x)V_{TiC} \quad (1)$$

现在已经有许多成功的研究工作表明 VCA 在碳化物方面的适用性^[23,24]。本工作研究对象为 $Ti_{1-x}V_xC$ ($x=0,1$), 混合元素种类仅 2 个, 较 (Ti, W, Mo, V) C 等研究对象简单, 理论上更具可行性。

$Ti_{1-x}V_xC$ 的结合能可反映出掺杂结构的稳定性和原子之间结合力强度, 其表达式如 (2) 所示:

$$E_f(Ti_{1-x}V_xC) = (E(Ti_{1-x}V_xC) - (1-x)E_{Ti} - xE_V) / 2 \quad (2)$$

对于立方晶体而言, 它们有 3 种不同的弹性系数 C_{ij} (C_{11} 、 C_{12} 和 C_{44}), 如果同时满足以下条件^[25]:

$$\begin{aligned} C_{11} + 2C_{12} > 0 \\ C_{11} - C_{12} > 0 \\ C_{44} > 0 \\ C_{12} < B < C_{11} \end{aligned} \quad (3)$$

则该立方晶体符合力学稳定性定则, 表明其在力学性能上是稳定的。

对于立方晶系的晶体而言, 其体积模量 (B)、剪切模量 (G)、弹性模量 (E) 与弹性常数 (C_{ij}) 之间的关系见下列公式^[26]:

$$\begin{aligned} B &= \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) \\ G &= \frac{1}{2}(G_V + G_R) \\ G_V &= \frac{1}{5}(3C_{44} + C_{11} - C_{12}) \\ G_R &= \frac{5C_{44}(C_{11} - C_{12})}{4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})} \\ E &= \frac{9BG}{3B + G} \end{aligned} \quad (4)$$

1.2 计算方法

模拟计算所采用的方法是基于密度泛函理论

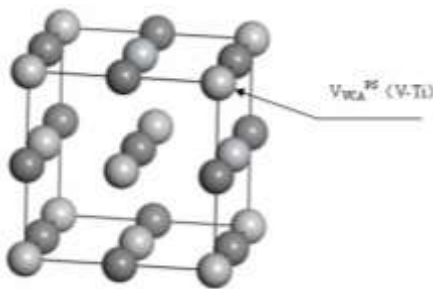


图 1 TiC 和 VC 的 NaCl 型晶体结构示意图

Fig.1 Crystal structure of TiC and VC (NaCl-type)

(DFT) 的第一性原理的 CASTEP 软件包^[27], 势函数采用平面波超软赝势方法计算, 电子交互关联作用采用了 Perdew-Burke-Ernzerhof 广义梯度近似 (PBE-GGA)^[28], 所使用的赝势为超软赝势, Ti、V 和 C 各元素的价电子分别为 $3s^23p^63d^24s^2$ 、 $3s^23p^63d^34s^2$ 、 $2s^22p^2$ 。经过收敛性测试后平面波截断能 E_{cut} 均设定为 350 eV, 布里渊区内以 Monkhorst-Pack^[29]方式 k 点取样 $10 \times 10 \times 10$ 。本研究中的几何结构优化采用 Brodyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS)^[30]最小优化方法进行, 具体的收敛参数如下: 自洽循环的能量收敛值为 1.0×10^{-5} eV·atom⁻¹, 原子之间相互作用力的收敛值为低于 0.03 eV·nm⁻¹, 最大距离的收敛值为低于 1.0×10^{-4} nm, 最大应力的收敛值为低于 0.05 GPa。

2 结果与讨论

2.1 $Ti_{1-x}V_xC$ 的晶体结构

通过对 $Ti_{1-x}V_xC$ ($x=0, 1$) 的晶体结构进行了优化, 得到的晶体结构参数见表 1。本研究中所得到的 TiC 和 VC 的晶胞参数与他人的实验数据及计算数据符合度很好, 误差 < 1%。可见, 所采用的 VCA 近似建模和计算方法可行。 $Ti_{1-x}V_xC$ ($x=0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.75, 1$) 晶胞参数随钒含量 x 的变化趋势如图 2 所示。由图可知, 随着 V 原子掺杂量的增多, 晶胞参数逐渐减小, 主要是由于 V 原子的原子半径略小于 Ti 所致。该结果与文献[31]对于 $Ti_{1-x}V_xC$ 的报道内容相一致。

2.2 $Ti_{1-x}V_xC$ 的弹性性质

本研究中 $Ti_{1-x}V_xC$ ($x=0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.75, 1$) 的弹性常数 C_{11} , C_{12} , C_{44} , 体模量 (B) 和剪切模量 (G) 的计算值见表 2。如前所述, 材料的稳定性可用公式 (3) 进行判断, $Ti_{1-x}V_xC$ 的所有成分均满足该式的判据。一般说来, 材料的硬度与体模量 (B)、剪切模量 (G) 之间存在一种近线性关系。因此, 材料的 B 、 G 高就意味着材料的硬度大。由图 3 可知, 随着 V 含量的增多, 体模量 (B) 略有增大, 但是在 $x=0.5$ 时, 材料具有最大

表 1 $Ti_{1-x}V_xC$ ($x=0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.75, 1$) 优化所得晶格参数理论计算值与他人工作数值

Table 1 Calculation equilibrium lattice constants a (nm) of $Ti_{1-x}V_xC$ ($x=0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.75, 1$) together with available previous experimental and theoretical date

Compounds	Present work/nm	Experiment/nm	Other theoretical works/nm
TiC	0.43304	0.433 ^[32] , 0.4332 ^[33]	0.4332 ^[34,35] , 0.43311 ^[36]
VC	0.41562	0.417 ^[37]	0.416 ^[38,39] , 0.410 ^[40]

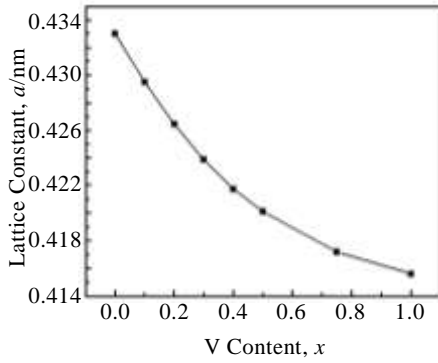


图 2 $Ti_{1-x}V_xC$ ($x=0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.75, 1$) 的晶胞参数变化

Fig.2 Variation of unit lattice parameters of $(Ti_{1-x}V_x)C$ ($x=0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.75, 1$)

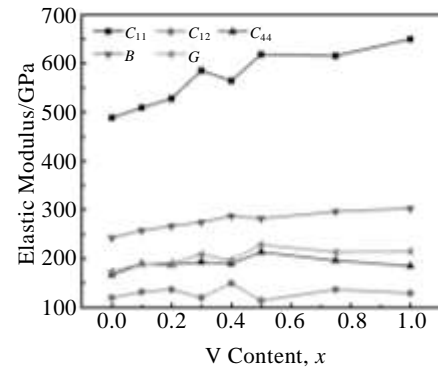


图 3 $Ti_{1-x}V_xC$ ($x=0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.75, 1$) 的弹性常数 C_{11} , C_{12} , C_{44} , 体模量 (B), 剪切模量 (G) 与 V 含量的关系

Fig.3 Elastic stiffness coefficients, bulk modulus and shear modulus of $Ti_{1-x}V_xC$ ($x=0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.75, 1$)

表 2 $Ti_{1-x}V_xC$ ($x=0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.75, 1$) 的弹性常数 C_{11} , C_{12} , C_{44} , 体模量 (B), 剪切模量 (G) 的计算值与他人工作数值比较

Table 2 Elastic properties (elastic constants, bulk modulus (B) and shear modulus (G)) of $Ti_{1-x}V_xC$ ($x=0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.75, 1$) together with available previous experimental and theoretical data for comparison

x	C_{11}	C_{12}	C_{44}	B/GPa	G/GPa
0	489.20	120.14	166.66	243.16	173.59
Expt. ^[44]	500	113	175	242	182
Calc. ^[45]	504.7	122.5	171.5	249.9	178.8
0.1	509.72	131.84	189.40	257.80	189.21
0.2	528.17	136.85	187.84	267.29	190.96
0.3	585.93	119.97	193.30	275.29	209.17
0.4	564.69	149.81	190.13	288.10	197.06
0.5	618.95	114.14	213.41	282.41	229.01
Calc. ^[42]	629.6	116.0	254.7	287.2	-
0.75	616.07	137.12	196.49	296.77	213.68
Calc. ^[42]	619.2	112.5	229.6	281.4	-
1	650.45	129.42	185.16	303.10 (304 ^[46])	215.30
Calc. ^[40]	578.2	147.2	176.3	290.9	215.5

的剪切模量 (G)。对于过渡金属化合物来说, 剪切模量 (G) 比体模量 (B) 可以更好地表征材料的硬度^[41]。因此, 计算所得 $Ti_{0.5}V_{0.5}C$ 具有最大的硬度值, 该结果与文献[42]的报道结果一致。从而可以推断, 所采用的计算方法适合于 Ti-V-C 体系各弹性模量的计算。文献[43]中提到可以通过剪切模量与体模量之比 G/B 来判断材料的脆脆性。如果 G/B 小于 0.57, 则材料表现为韧性; 反之, 材料则表现为脆性。 $Ti_{1-x}V_xC$ 的 G/B 之值均大于 0.57, 均表现出脆性, 但是 $Ti_{0.5}V_{0.5}C$ 的 G/B 之值最小为 0.68, 其脆性最小。这与文献[42]的结果一致。从而可以确定, 如果要获得具有优异的综合力学性能的碳化钒钛基硬质

合金, 应当选择 $Ti_{0.5}V_{0.5}C$ 作为硬质相。

2.3 $Ti_{1-x}V_xC$ 的态密度分析

弹性模量是材料的宏观特性, 微观上反映了原子离开自身平衡位置的难易程度, 即晶体中的原子之间结合力的强弱。因而, 从原子成键角度解释 $Ti_{1-x}V_xC$ ($x=0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.75, 1$) 中, 合金化取代比例与弹性性质之间的关系。

图 4 是 $Ti_{1-x}V_xC$ ($x=0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.75, 1$) 的态密度 (DOS) 图谱。由图可知, $Ti_{1-x}V_xC$ 系列化合物在费米能级上均具有有限的态密度值, 这说明它们都具有一定的导电性。且其费米能级能量随 V 含量由低到高的顺序依次对应为: $-1.200, -3.262, -3.877, -3.844, -3.845, -4.711, -6.963, -4.4621$ eV。从总体上分析, $Ti_{1-x}V_xC$ 的费米能级能量随 V 含量的增加基本呈现先下降后升高的变化规律。在钒含量 $x=0.75$ 时, $Ti_{0.25}V_{0.75}C$ 表现出最低费米能级。费米能级的意思就是电子占据的最高能级。从电荷转移角度而言, 费米能级越低, 化合物电子亲和能力越强, 其结构稳定性越好。 TiC 的费米能级能量低于 VC 的费米能级能量, 证明了 TiC 的电阻率 ($6.8 \times 10^{-7} \Omega \cdot m$) 高于 VC 的电阻率 ($6 \times 10^{-7} \Omega \cdot m$)。

$Ti_{1-x}V_xC$ 的费米能级两侧 2 个尖峰之间的 DOS 并不为零, 呈现“赝能隙” (pseudogap) 状态, 其中 $Ti_{0.5}V_{0.5}C$ 的赝能隙相对较宽, 可见其共价性更强。原子成键越强, 宏观表现为硬度较大。

$Ti_{1-x}V_xC$ (除 VC 外) 费米能级随 V 含量的增加逐渐远离赝隙, 说明化合物的稳定性随之减弱。通过分波态密度可知, 原子各层电子在费米能级附近有明显的 pd 轨道杂化, 其中以 $x=0.5$ 时, 轨道杂化最高, 有助于强化碳原子和金属原子之间的共价键, $Ti_{0.5}V_{0.5}C$ 表现最为

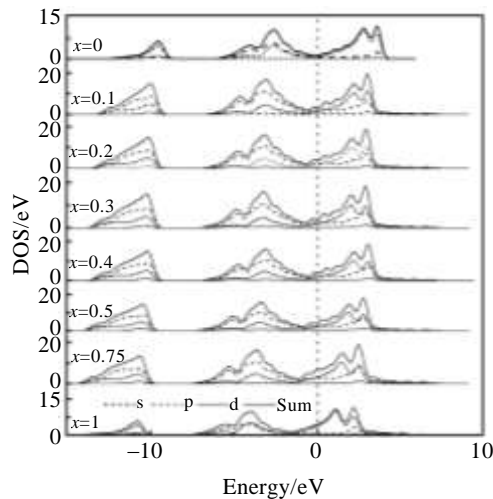


图 4 $Ti_{1-x}V_xC$ ($x=0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.75, 1$) 的 DOS 图
Fig.4 Density of states for $Ti_{1-x}V_xC$ ($x=0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.75, 1$)

明显, 因而其硬度最高。可见, pd 轨道杂化是 $Ti_{1-x}V_xC$ 硬度增强的关键点。

3 结 论

1) 随着 V 含量的增加, $Ti_{1-x}V_xC$ 的晶胞参数逐渐减小, 主要与 V 的原子半径小于 Ti 的原子半径有关。

2) $Ti_{0.5}V_{0.5}C$ 具有较好的体模量 282.41 GPa、剪切模量 229.01 GPa 和 G/B 比值 0.68, 综合力学性能最好。

3) $Ti_{1-x}V_xC$ 系列化合物在费米能级处均有一定的态密度值, 说明均可导电。随着 V 含量的升高, 各化合物的 pd 轨道杂化作用逐渐增强, 在 $x=0.5$ 时达到最大值。

参考文献 References

[1] Toth Louis E. *Transition Metal Carbides and Nitrides*[M]. New York: Academic Press, 1971: 145
[2] Liu Yang(刘 阳), Zeng Lingke(曾令可). *Titanium Carbides Based Cermets and Application*(碳化钛陶瓷及应用)[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2008: 10
[3] Didziulis S V, Butcher K D. *Coord Chem Rev*[J], 2013, 257(1): 93
[4] Rajabi A, Ghazali M J, Syarif J *et al. Chem Eng J*[J], 2014, 255: 445
[5] Mari D, Bolognini S, Feusier G *et al. Int J Refract Met Hard Mater*[J], 2003, 21(1-2): 37
[6] Liu N, Chao S, Yang H *et al. Int J Refract Met Hard Mater*[J], 2006, 24(6): 445
[7] Park S, Kang S. *Scripta Mater*[J], 2005, 52(2): 129
[8] Liu Y, Jin Y Z, Yu H *et al. Int J Refract Met Hard Mater*[J],

2011, 29(1): 104
[9] Chen X, Xiong W H, Qu J *et al. Int J Refract Met Hard Mater* [J], 2012, 31(1): 56
[10] Kim Y K, Shim J H, Cho Y W *et al. Int J Refract Met Hard Mater*[J], 2004, 22(4-5): 193
[11] Yu H J, Liu Y, Jin Y *et al. Int J Refract Met Hard Mater*[J], 2012, 34(8): 57
[12] Yu H J, Liu Y, Jin Y *et al. Int J Refract Met Hard Mater*[J], 2011, 29(5): 586
[13] Kim T, Kang S. *Int J Refract Met Hard Mater*[J], 2008, 26(5): 444
[14] Zhang Q K, Lin N, He Y *et al. Int J Refract Met Hard Mater* [J], 2013, 38: 15
[15] Cedat D, Libert M, Clavel M *et al. Int J Refract Met Hard Mater*[J], 2009, 27(2): 267
[16] Kwon H, Jung S A, Suh C Y *et al. Ceram Int*[J], 2014, 40(8): 12579
[17] Jin Y Z, Liu Y, Ye J *et al. Int J Refract Met Hard Mater*[J], 2011, 29: 268
[18] Lin Z H, Xiong J, Guo Z *et al. Ceram Int*[J], 2014, 40(10, Part B): 16421
[19] Wang Jing(王 静). *Study on the Mechanical Properties of (Ti, V)C/Fe((Ti, V)C/Fe 的原位合成及机械性能研究)*[D]. Chengdu: Sichuan University, 2007
[20] Sepúlveda R, Arenas F. *Int J Refract Met Hard Mater*[J], 2001, 19(4-6): 389
[21] Norton J. *J Met*[J], 1951, 10: 923
[22] Chihi T, Boucetta S, Maouche D *et al. Acta Phy Polonic A*[J], 2009, 116: 1085
[23] Gao Z, Kang S. *Comput Mater Sci*[J], 2014, 83: 51
[24] Ghosh G, Delsante S, Borzone G *et al. Acta Mater*[J], 2006, 54(19): 4977
[25] Wallace D C, Callen H. *Am J Phy*[J], 1972, 40: 1718
[26] Li Dehua(李德华), Zhu Xiaoling(朱晓玲), Su Wenjin(苏文晋) *et al. Acta Physica Sinca*(物理学报)[J], 2010(3): 2004
[27] Zou Aihua(邹爱华), Xu Jiang(徐 江), Huang Haojie(黄豪杰) *et al. Acta Physica Chemistry Sinca*(物理化学学报)[J], 2014(2): 289
[28] Monkhorst H J, Pack J D. *Phy Rev B*[J], 1976, 13(12): 5188
[29] Zhou Jingjing(周晶晶), Chen Yungui(陈云贵), Wu Chaoling(吴朝玲) *et al. Acta Physica Sinca*(物理学报)[J], 2009(10): 7044
[30] Zhukov V P, Gubanov V A, Jepsen O *et al. J Phys Chem Solids*[J], 1988, 49(7): 841
[31] Nartowski A M, Parkin I P, Mackenzie M *et al. J Mater*

- Chem*[J], 2001, 11(12): 3116
- [32] Xiao J S, Jiang B, Huang K *et al. Comput Mater Sci*[J], 2014, 88: 86
- [33] Yang Y, Lu H, Yu C *et al. J Alloy Compd*[J], 2009, 485(1-2): 542
- [34] Li H, Zhang L T, Li K *et al. Solid State Commun*[J], 2011, 151(8): 602
- [35] Lipatnikov V N, Lengauer W, Etmayer P *et al. J Alloys Compd*[J], 1997, 261(1-2): 192
- [36] Liu Y Z, Jiang Y H, Feng J *et al. J Alloy Compd*[J], 2014, 582: 500
- [37] Feng W X, Cui S X, Hu H *et al. Phys B*[J], 2011, 406(19): 3631
- [38] Zaoui A, Kacimi S, Boukortt A *et al. Phys B*[J], 2005, 358(1-4): 63
- [39] Wang X H, Zhang M, Ruan L Q *et al. T Nonferr Metal Soc*[J], 2011, 21(6): 1373
- [40] Zhao Likai(赵立凯), Zhao Erjun(赵二俊), Wu Zhijian(武志坚) *et al. Acta Physica Sinica*(物理学报)[J], 2013(4): 383
- [41] Fan Changzeng(范长增). *Electronic Structure and Mechanical Properties in Two Families of Transition Metal Nitrides and Carbides*(两类过渡金属氮(碳)化物的电子结构及力学性能)[D]. Harbin: Harbin Institute Technology, 2006
- [42] Pugh S F. *J Sci*[J], 2009, 45(367): 823
- [43] Gilman J J, Roberts R W. *J Appl Phys*[J], 1961, 32: 1405
- [44] Li H, Zhang L T, Ren H *et al. Solid State Commun*[J], 2011, 151(8): 602
- [45] Isaev E I, Abrikosov I A, Simak S I *et al. J Appl Phys*[J], 2007, 101(12): 123 519
- [46] Liu H L, Zhu J C, An J C *et al. Mater Lett*[J], 2008, 62(17-18): 3084

First-Principles Study on the Elasticity of $\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x\text{C}$ ($x=0\sim 1$) Materials

Pang Lijuan^{1,2}, Bai Chenguang¹, Zhang Xuefeng², Lv Xuewei¹, Lu Yong³

(1. Chongqing University, Chongqing 400044, China)

(2. Panzhihua University, Panzhihua 617000, China)

(3. National Engineering Laboratory for Vacuum Metallurgy, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650093, China)

Abstract: The lattice constants, elastic properties and electronic density of $\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x\text{C}$ ($x=0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.75, 1$) were calculated using the first-principles method based on the density functional theory, and the calculated results were in good agreement with other works. It is found that the lattice constant of $\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x\text{C}$ gets smaller with the content of vanadium decreasing. And $\text{Ti}_{0.5}\text{V}_{0.5}\text{C}$ shows the best mechanical properties with bulk modulus 282.41 GPa, shear modulus 229.01 GPa and the ratio of G/B 0.68. It could be found that all of the $\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x\text{C}$ is conductive, and there is hybridization effect for $\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x\text{C}$ except VC, which results in the change of mechanical properties of $\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x\text{C}$.

Key words: First-principles; density functional theory; titanium-vanadium carbides; elastic properties

Corresponding author: Bai Chenguang, Professor, School of Materials Science and Engineering, Chongqing University, Chongqing 400044, P. R. China, Tel: 0086-23-65127303, E-mail: baichenguangcd@163.com