【电子与信息科学 / Electronics and Information Science】

压力对 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的力学及热力学性质的影响

唐大富¹, 田晋忠², 张永梅³

1) 山西省锅炉压力容器监督检验研究院, 山西太原 030012; 2) 中北大学材料科学与工程学院, 山西太原 030051;
3) 中北大学理学院, 山西太原 030051

摘要: 基于密度泛函理论的 VASP (Vienna ab-initio simulation package) 软件包进行第一性原理计算, 研究压力状态下 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的能带和各向异性变化情况. 结果表明, 在 0 ~ 50 GPa 的压力范围内 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相具有金属性, 且压力有助于提高能带中原子轨道的扩展性. $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的 (100) 和 (010) 晶面的弹性各向异性随着压力升高而增强, 而 (110) 晶面的弹性各向异性随着压力的升高呈波动上升趋势. 基于准谐德拜模型, 研究 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的体积模量、德拜温度、热容和热膨胀系数随温度和压力的变化情况. 结果表明, 外加压力和温度对 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相热力学性质的影响是相反的. 外加压力能有效提升 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的体积模量和德拜温度, 而温度升高会导致体积模量和德拜温度降低. $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的热容和热膨胀系数在温度和压力下的变化规律基本一致.

关键词: 金属材料; 第一性原理; $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$; 压力; 各向异性; 能带; 热力学性质; VASP

中图分类号: TG146.2; O469 **文献标志码:** A **doi:** 10.3724/SP.J.1249.2021.04427

Effect of pressure on mechanical and thermodynamic properties of $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ phase

TANG Dafu¹, TIAN Jinzhong², and ZHANG Yongmei³

1) Boiler and Pressure Vessel Inspection Institute of Shanxi Province, Taiyuan 030012, Shanxi Province, P. R. China
2) School of Materials Science and Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, Shanxi Province, P. R. China
3) School of Science, North University of China, Taiyuan 030051, Shanxi Province, P. R. China

Abstract: The band structures and elastic anisotropy of $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ phase under various pressures are studied by using the Vienna ab-initio simulation package (VASP) based on density functional theory. The results show that $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ phase is still metallic in the pressure range of 0 to 50 GPa and the pressure can improve the expansion of atomic orbital in the energy band. The elastic anisotropy in (100) and (010) planes of $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ phase enhances with the increase of pressure, while the elastic anisotropy in (110) planes shows a fluctuating upward trend from 0 GPa to 50 GPa. Based on the quasi-harmonic Debye model, the changes of bulk modulus (B), Debye temperature (Θ_D), heat capacity (C_v and C_p) and thermal expansion coefficient (α) of $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ phase with pressure and temperature are studied. The effects of applied pressure and temperature on thermodynamic properties of the $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ phase is opposite. The values of B and Θ_D decrease with temperature and increase with the pressure. In addition, the variation trends of C_v , C_p and α under pressure and temperature are basically the same.

Received: 2020-11-29; **Accepted:** 2021-01-04; **Online (CNKI):** 2021-03-29

Foundation: Scientific and Technological Innovation Programs of Higher Education Institutions of Shanxi Province (2020L0280); Science Foundation of North University of China (XJJ201909)

Corresponding author: Engineer TANG Dafu. E-mail: 1027432260@qq.com

Citation: TANG Dafu, TIAN Jinzhong, ZHANG Yongmei. Effect of pressure on mechanical and thermodynamic properties of $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ phase [J]. Journal of Shenzhen University Science and Engineering, 2021, 38(4): 427-432. (in Chinese)

Key words: metallic material; first-principles; $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$; pressure; anisotropy; energy band; thermodynamic properties; Vienna ab-initio simulation package

准晶具有硬度高、不黏性好和表面能低等性能,适合作为复合材料的增强相^[1]. Al-Cu-Fe 准晶是一种热力学稳定相,由于原材料价格低廉、制备工艺简单而被广泛用于颗粒增强铝基复合材料中. 在制备 Al-Cu-Fe 准晶增强铝基复合材料时,扩散作用会导致 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的生成^[2-3]. 虽然 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相和 Al-Cu-Fe 准晶的结构存在差异,但是 STADNIK 等^[4]发现, $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相和 $\text{Al}_{65}\text{Cu}_{20}\text{Fe}_{15}$ 准晶相的价带谱具有相似性, LAPLANCHE 等^[5]发现两者的机械性能和变形机理相近. $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的存在可能会降低复合材料的综合力学性能. ALI 等^[6]发现,与增强相 Al-Cu-Fe 准晶相比, $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的存在能有效提升材料的屈服强度,使其作为强化相来制备高屈服强度复合材料成为可能.

$\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的晶体结构最初由 WESTGREN 等确定,而后 BOWN 等^[7]对其晶格常数进行了重新优化. TRAMBLY 等^[8]发现,通过 sp-d 轨道杂化可提高 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相费米能隙的宽度. LAPLANCHE 等^[9]系统研究了 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 的力学性能,发现当温度较高时, $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相由脆性转变为塑性. 压力会影响金属间化合物的结构和物理性质. $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相在压力下是稳定的,无其他新相生成,且压力能有效提高 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的硬度^[10]. 但晶体的各向异性可能导致硬度值随晶格方向的变化而发生改变. 因此,研究 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的各向异性能进一步帮助研究人员了解该晶体的性质在不同方向上的变化情况. 此外,由于第一性原理主要研究晶体在 0 K 时的物理性质,很难直观反映材料在室温或更高温度下的物理性质. 然而,晶体常常是在常温或高温条件下使用,研究 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的热力学性质十分必要. 目前暂未检索到 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相在压力下的各向异性及热力学性质的相关报道.

本研究基于密度泛函理论探究压力状态下 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的能带和各向异性的变化情况,结合准谐德拜模型,分析温度和压力对 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的体积模量、德拜温度和热容等热力学性质的影响,为 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的实际应用提供数据支撑.

1 计算方法

采用基于密度泛函理论^[11]的 VASP (Vienna

ab-initio simulation package)^[12]软件包进行第一性原理计算. 相关计算均在静水压力下完成,压力范围 0 ~ 50 GPa. 采用投影缀加波 (projected augmented wave, PAW) 的赝势方法,选取的泛函为广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 的 RPBE 形式^[13],平面波截断能为 440.0 eV, k 空间布里渊区的网格为 $4 \times 4 \times 2$. 几何优化过程中, $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的自洽收敛条件设置为平均每个原子能量收敛到 1.0×10^{-5} eV.

$\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的晶体结构如图 1,其化学式为 $\text{Al}_{28}\text{Cu}_8\text{Fe}_4$. $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相几何优化后的平衡晶格常数 ($a = b = 0.6366$ nm, $c = 0.1488$ nm) 与实验值 ($a = b = 0.6336$ nm, $c = 0.1487$ nm)^[8]十分接近,且最大误差不超过 0.5%,说明优化后的结构是可信赖的.

图 1 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的晶体结构

Fig. 1 The structure model of $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ phase

2 结果与分析

2.1 电子性质

图 2 为不同压力 p 下 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相沿布里渊区高对称点方向的能带图. 其中, 0 eV 处为费米能级. 由图 2 可见, 不同压力下 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的能带图较为相似, 且导带和价带穿过费米能级, 说明在压力作用下 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相依然具有金属性^[14]. 能带图中能量的分布并不呈对称性, 说明其导电性呈各向异性^[15]. 当 $p = 50$ GPa 时, 能带变宽, 说明压力的存在有助于提高能带中原子轨道的扩展性, 从而提高原子之间的成键强度.

2.2 力学性质

利用弹性常数可反映材料力学性质的强

弱^[16-17]. 表1展示了 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的弹性常数 C_{ij} 及弹性模量随压力的变化情况. 由表1可见, C_{ij} 随着 p 的升高而增大, 且 C_{11} 远大于其余 C_{ij} , 表明 x 轴方向在压力下更难以压缩. $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的体积模量 B 、剪切模量 G 和杨氏模量 E 均随 p 的升高而增大,

表明压力能有效提升 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的抗体积变形、抗剪切变形和刚度. 当 p 从0升到50 GPa时, $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的 B 、 G 和 E 分别提升了167.3%、93.8%和104.3%, 说明 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的 B 对压力最敏感.

图2 不同压力下 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的能带图

Fig. 2 The band structures of $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ phase at 0 and 50 GPa

表1 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的弹性常数 C_{ij} 及弹性模量随压力的变化情况

p	C_{11}	C_{33}	C_{44}	C_{66}	C_{12}	C_{13}	B	G	E
0 ^[10]	206.0	194.0	80.9	71.1	50.6	65.7	107.8	74.5	181.7
10 ^[10]	265.9	242.1	103.6	82.5	79.5	94.1	145.4	91.0	225.8
20 ^[10]	327.7	309.7	123.5	101.0	110.0	128.5	188.8	108.7	273.6
30 ^[10]	381.4	338.2	141.6	117.7	136.4	158.1	222.8	122.0	309.4
40	426.6	381.6	157.7	132.9	160.1	184.8	254.8	134.9	344.0
50	469.3	419.9	172.4	141.9	188.4	214.9	288.2	144.4	371.2

各向异性在研究材料的相变、沉淀、弹性失稳、内摩擦和裂纹行为等方面有重要作用. $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的剪切各向异性因子 A_1 、 A_2 和 A_3 由式(1)至式(3)获得.

(100)或(010)晶面的剪切各向异性因子为

$$A_1 = \frac{C_{44}(C_{11} + 2C_{13} + C_{33})}{C_{11}C_{33} - C_{13}^2} \quad (1)$$

(110)晶面的剪切各向异性因子为

$$A_2 = \frac{C_{44}(C_L + 2C_{13} + C_{33})}{C_L C_{33} - C_{13}^2} \quad (2)$$

(001)晶面的剪切各向异性因子为

$$A_3 = \frac{2C_{66}}{C_{11} - C_{12}^2} \quad (3)$$

其中,

$$C_L = C_{66} + \frac{C_{11} + C_{12}}{2} \quad (4)$$

当 $A_1 = A_2 = A_3 = 1$ 时, 表明该晶面是各向同性的; 当 A_1 、 A_2 和 A_3 的值都不等于1时, 该晶面表现为各向异性. 表2列出了压力下 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的剪切各向异性因子和通用各向异性指数^[18] (universal anisotropy index) A^U 的值. 其中, A^U 的计算公式为

$$A^U = 5 \frac{G_V}{G_R} + \frac{B_V}{B_R} - 6 \quad (5)$$

其中, B_V 和 G_V 表示由 Voigt 近似给出的体积模量和剪切模量; B_R 和 G_R 表示由 Reuss 近似给出的体积模量和剪切模量.

由表 2 可见, A_1 、 A_2 和 A_3 均不等于 1, 说明 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的 (100)、(010)、(1 $\bar{1}$ 0) 和 (001) 晶面呈各向异性. 此外, A_1 的值随 p 的增大而增大, 说明压力能够提高 (100) 或 (010) 晶面的各向异性. 当 $p < 20$ GPa 时, A_2 和 A_3 的值没有一定的规律性; 但当压力继续升高 ($p < 50$ GPa) 时, A_2 和 A_3 的值也随之升高, 表明较高压力 ($p > 20$ GPa) 能起到增大 (1 $\bar{1}$ 0) 晶面或降低 (001) 晶面各向异性的效果.

表 2 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相在不同压力下的
剪切各向异性因子和各向异性指数

Table 2 The shear anisotropic factors and universal
elastic anisotropy index of $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ phase
under different pressure

p/GPa	A_1	A_2	A_3	A^U
0	1.206	1.236	0.916	0.043
10	1.299	1.341	0.885	0.080
20	1.300	1.326	0.928	0.072
30	1.411	1.426	0.961	0.119
40	1.444	1.444	0.998	0.131
50	1.507	1.503	1.010	0.161

不同压力下 A^U 的值均大于 0, 说明 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相表现为各向异性. 随着压力增大, $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的各向异性总体呈增大趋势. 然而, $p = 20$ GPa 时, $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的各向异性略有下降.

2.3 热力学性质

基于准谐德拜模型^[19-20], 研究温度和压力对 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的热力学性质 (体积模量、德拜温度、热容和热膨胀系数) 的影响. 图 3 为 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的体积模量 B 在不同温度 T 和压力 p 下的变化情况. 当 $T = 0$ 且 $p = 0$ 时, $B = 103.1$ GPa, 这与密度泛函理论的计算值 (107.8 GPa) 十分相近, 验证了准谐德拜模型的可靠性. 当 p 为常数时, B 随 T 的升高呈下降趋势, 但当 T 在 0 ~ 100 K 时 B 的变化很小; 当 T 从 0 升至 800 K 时, B 在 0、10、20、30、40 和 50 GPa 的外加压力下分别下降了 18.4%、10.5%、7.6%、5.9%、4.8% 和 4.0%. 当 T 一定时, B 随外部压力的增加而变大, 表明压力能有效改善 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相抵抗体积变形的能力. 当 $T = 0$ 时, 随着 p 的增加, $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的抵抗体积变形能力提高了 178%; 当 $T = 800$ K 时, 压力的存在使 B 提高了 228%. 这充分表明, 与温度相比, 压力对体积模量的影响更为显著.

$\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的德拜温度 Θ_D 随温度和压力的变化规律如图 4. 由图 4 可见, 当 $T = 0$, $p = 0$ GPa 时, $\Theta_D = 550.8$ K, 这与文献 [10] 的计算结果 (567 K) 较为接近. 对比图 3 和图 4 可见, Θ_D 及 B 随温度和压力的变化情况是一致的, 且压力和温度的作用是完全相反的.

图 3 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的体积模量随温度和压力的变化情况

Fig. 3 B for $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ phase at different
temperatures and pressures

图 4 压力和温度对 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相德拜温度的影响

Fig. 4 The variation trend of Θ_D of $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ phase
at different temperatures and pressures

图 5 为不同温度下等容热容 C_v 和等压热容 C_p 随压力的变化情况. 当压力恒定时, 低温 ($T < 300$ K) 下的 C_v 和 C_p 迅速增大, 且值十分接近; 当温度较高 ($T > 300$ K) 时, C_v 遵循 Dulong-Petit 定律, 渐渐变为一个常数^[21-22], 而 C_p 依然会随着温度的升高而增大. 当 T 一定时, C_v 和 C_p 随着压力的升高而减少.

图5 热容随温度和压力的变化情况

Fig. 5 C_p and C_v of $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ phase as a function of temperature and pressure

与压力相比, 热容对温度的变化更敏感. 图6为不同温度和压力下 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的热膨胀系数 α 的变化情况. 当 T 相同时, α 随着压力的升高而减少, 当 $p > 30$ GPa 时, α 的减幅变小. 当温度较低 ($T < 300$ K) 时, α 呈线性增长; 当温度较高 ($T > 300$ K) 时, α 的增长速度逐渐变缓. 因此, 高温 ($T > 300$ K) 时温度对热膨胀系数的影响较小.

图6 热膨胀系数 α 随温度和压力的变化情况Fig. 6 α of $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ phase as a function of temperature and pressure

3 结 论

基于第一性原理和准谐德拜模型, 研究了压力和温度对 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的能带、各向异性及热力学性质的影响, 结果表明:

1) 在 0 ~ 50 GPa 的压力范围内, $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相为金属性. 随着压力增加, 能带变宽, 说明压力有助于提高 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相能带中原子轨道的扩展性.

2) $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相呈各向异性, (100) 或 (010) 晶面的各向异性随着压力的升高而增强, 而 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 晶体、(110) 晶面的各向异性在压力下呈波动上升趋势.

3) 压力和温度对 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的体积模量、德拜温度和热容等的影响完全不同. 当其他条件一致时, 体积模量和德拜温度随温度升高而降低, 随外部压力升高而迅速增大. $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的热容和热膨胀系数在温度和压力下的变化规律基本一致, 并且当温度较高 ($T > 300$ K) 时, C_v 遵循 Dulong-Petit 定律, 缓慢趋于常数.

基金项目: 山西省高等学校科技创新计划资助项目 (2020L0280); 中北大学科学研究基金资助项目 (XJJ201909)

作者简介: 唐大富 (1990—), 山西省锅炉压力容器监督检验研究院工程师. 研究方向: 承压类特种设备检验检测.
E-mail: 1027432260@qq.com

引 文: 唐大富, 田晋忠, 张永梅. 压力对 $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ 相的力学及热力学性质的影响[J]. 深圳大学学报理工版, 2021, 38(4): 427-432.

参考文献 / References:

- [1] TANG Zhiyi, FAN Tianyou. Three-dimensional equations of generalized dynamics of 18-fold symmetry soft-matter quasicrystals [J]. Modern Physics Letters B, 2020, 34(4): 2050109.
- [2] ZUO Jinrong, HOU Longgang, SHU Xuedao, et al. Investigation of deformation induced precipitation and the related microstructure evolution of Al-Zn-Mg-Cu alloy [J]. Materials Research Express, 2020, 7(10): 106529.
- [3] SUN Yuanwei, PAN Qinglin, SUN Yuqiao, et al. Localized corrosion behavior associated with $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ intermetallic in Al-Zn-Mg-Cu-Zr alloy [J]. Journal of Alloys and Compounds, 2019, 783: 329-340.
- [4] STADNIK Z M, STROINK G. Electronic structure of icosahedral $\text{Al}_{65}\text{Cu}_{20}\text{Fe}_{15}$ and crystalline $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ studied by photoemission spectroscopy [J]. Physical Review B, 1993, 47(1): 100.

- [5] LAPLANCHE G, BONNEVILLE J, JOULAIN A, et al. Mechanical properties of Al-Cu-Fe quasicrystalline and crystalline phases: an analogy [J]. *Intermetallics*, 2014, 50: 54-58.
- [6] ALI F, ANWAR M S, SALDINO S. Al-based metal matrix composites reinforced with Al-Cu-Fe quasicrystalline particles: strengthening by interfacial reaction [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2014, 607: 274-279.
- [7] BOWN M G, BROWN P J. The structure of FeCu_2Al_7 and $T(\text{CoCuAl})$ [J]. *Acta Crystallographica*, 2010, 1956: 911-914.
- [8] TRAMBLY G, LAISSARDIERE D, NGUYEN MANH D, et al. Electronic structure and hybridization effects in Hume-Rothery alloys containing transition elements [J]. *Physical Review B*, 1995, 52(11): 7920-7933.
- [9] LAPLANCHE G, BONNEVILLE J, JOULAIN A, et al. Plasticity of the $\omega\text{-Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ phase [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2016, 665: 144-151.
- [10] TIAN Jinzhong, ZHAO Yuhong, WEN Zhiqin, et al. Physical properties and Debye temperature of $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ alloy under various pressures analyzed by first-principles [J]. *Solid State Communications*, 2017, 257: 6-10.
- [11] PERDEW J P. Density functional approximation for the correlation energy of the inhomogeneous electron gas [J]. *Physical Review B*, 1986, 33(12): 8822-8824.
- [12] KRESSE G, FURTHMULLER J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set [J]. *Physical Review B*, 1996, 54(16): 11169.
- [13] HAMMER B, HANSEN L B, NORSKOV J K. Improved adsorption energetics within density-functional theory using revised Perdew-Burke-Ernzerhof functionals [J]. *Physical Review B*, 1999, 59(11): 7413-7421.
- [14] LYONS J L, Van de WALLE C G. Computationally predicted energies and properties of defects in GaN [J]. *Npj Computational Materials*, 2017, 3(1): 12.
- [15] 胡洁琼, 谢明, 陈家林, 等. Ti_3AC_2 相 ($A = \text{Si}, \text{Sn}, \text{Al}, \text{Ge}$) 电子结构、弹性性质的第一性原理研究 [J]. *物理学报*, 2017, 66(5): 057102.
- HU Jieqiong, XIE Ming, CHEN Jialin, et al. First principles study of electronic and elastic properties of Ti_3AC_2 ($A = \text{Si}, \text{Sn}, \text{Al}, \text{Ge}$) phases [J]. *Acta Physica Sinica*, 2017, 66(5): 057102. (in Chinese)
- [16] PLATA J J, NATH P, USANMAZ D, et al. An efficient and accurate framework for calculating lattice thermal conductivity of solids: AFLOW—AAPL Automatic Anharmonic Phonon Library [J]. *Npj Computational Materials*, 2017, 3(1): 45.
- [17] MOHRI T, CHEN Y, KOHYAMA M, et al. Mechanical properties of Fe-rich Si alloy from Hamiltonian [J]. *Npj Computational Materials*, 2017, 3(1): 10.
- [18] RANGANATHAN S I, OSTOJA-STARZEWSKI M. Universal elastic anisotropy index [J]. *Physical Review Letters*, 2008, 101(5): 055504.
- [19] BLANCO M A, FRANCISCO E, LUANA V. GIBBS: isothermal-isobaric thermodynamics of solids from energy curves using a quasi-harmonic Debye model [J]. *Computer Physics Communications*, 2004, 158(1): 57-72.
- [20] OTERO-DE-LA-ROZA A, LUANA V. GIBBS2: a new version of the quasi-harmonic model code. I. Robust treatment of the static data [J]. *Computer Physics Communications*, 2011, 182(8): 1708-1720.
- [21] 吴若熙, 刘代俊, 于洋, 等. CaS 电子结构和热力学性质的第一性原理计算 [J]. *物理学报*, 2016, 65(2): 281-287.
- WU Ruoxi, LIU Daijun, YU Yang, et al. First-principles investigations on structure and thermodynamic properties of CaS under high pressures [J]. *Acta Physica Sinica*, 2016, 65(2): 027101. (in Chinese)
- [22] YANG Jinwen, AN Li. Lattice vibrational behavior and thermodynamic properties of uranium disilicide USi_2 [J]. *Solid State Communications*, 2016, 248: 47-52.

【中文责编: 英子; 英文责编: 木柯】