

## 金属铑的反演势构建和应用

任县利, 陈松\*, 周建仁, 谢明, 王塞北, 陈静洪, 毕亚男  
(昆明贵金属研究所 稀贵金属综合利用新技术国家重点实验室, 昆明 650106)

**摘要:** 采用第一性原理方法, 计算得到铑的内聚能曲线; 基于陈氏晶格反演理论, 将内聚能进行反演得到其晶格反演对势曲线; 采用本文提出的双指数型势函数对反演对势曲线进行拟合, 获得该函数的精确解析式。为了验证该对势函数的有效性, 分别采用第一性原理方法、嵌入原子势方法以及反演对势方法, 计算铑的声子谱, 计算结果表明, 反演对势可以有效地反映原子间相互作用。结合玻尔兹曼分布函数及势函数的解析式, 利用自编程序计算得到在不同温度下铑的晶格振动平均位移的数值解, 同时得到在室温条件下铑的线膨胀系数, 体弹性模量和格林乃森常数等物理量, 计算结果与实验数据基本符合, 说明构建的铑的反演对势是准确有效的。

**关键词:** 计算材料学; 铑; 晶格反演; 第一性原理; 精确反演对势

**中图分类号:** TG146.3 **文献标识码:** A **文章编号:** 1004-0676(2021)03-0071-06

### The construction and applications of the lattice inversion potential for rhodium metal

REN Xian-li, CHEN Song\*, ZHOU Jian-ren, XIE Ming, WANG Sai-bei, CHEN Jing-hong, BI Ya-nan  
(State Key Laboratory of Advanced Technologies for Comprehensive Utilization of Platinum Metal,  
Kunming Institute of Precious Metals, Kunming 650106, China)

**Abstract:** The lattice cohesive curve of rhodium was obtained through first-principles calculations. The inversion pair potential curve was generated by inverting the cohesive energy based on Chen's lattice inversion theory. The double-exponential potential function proposed in this paper was used to fit the inversion potential curve, and the accurate pair potential function was obtained. The phonon spectra of rhodium was calculated through using the inversion potential data, the EAM (embedded atom method) potential theory and first principle method to verify the reliability of the inversion potential function. The calculation results showed that the inversion pair potential effectively reflect the interatomic interaction. The method combining Boltzmann statistics equation with accuracy fitting of lattice cohesive energy curve at different temperature was proposed to calculate the thermal expansion coefficient, the bulk modulus and Grüneisen constant at room temperature. The calculated results were consistent with the experiment results, indicating that the constructed inversion potential of rhodium was accurate and effective.

**Key words:** computational materials; rhodium; lattice inversion; first-principles; accurate inversion potential

原子间相互作用势是凝聚态物质在原子尺度上进行计算模拟的基础, 特别是使用分子动力学等方法对物质的结构和性质进行模拟研究时。获得精确

的原子间势函数一直是模拟计算的重点和前提, 并直接决定了模拟结果的准确性和有效性。陈氏晶格反演势理论, 作为一种对势理论, 已经被广泛的应

收稿日期: 2020-10-14

基金项目: 国家自然科学基金(51767011, U1602275, 51461023, 51267007); 云南省稀贵金属材料基因工程(202002AB080001-6, 2018ZE020, (202002AB080001-1); 国家重点研发计划(2017YFB0305700); 云南省自然科学基金(2019FA048, 2015FA042, 2010CD126, 2012FB195); 新金属材料国家重点实验室开放基金(2016-Z08); 云南省科技人才与平台计划(202105AE160027); 云南省技术创新人才项目(2015HB024)

第一作者: 任县利, 男, 博士, 研究方向: 贵金属计算材料。E-mail: renxianli\_1@163.com

\*通讯作者: 陈松, 博士, 研究员, 研究方向: 金属材料基因组工程。E-mail: cs@ipm.com.cn

用于各种材料的研究中,包括金属间化合物,金属陶瓷,离子晶体,半导体和金属氢化物<sup>[1-5]</sup>等材料领域。陈氏晶格理论以数论中的莫比乌斯理论为基础,可以获得中心原子与任意近邻下的原子之间的相互作用,从而得到精确的原子间相互作用势,反演过程以数论为基础,不含经验成分,得到的结果是准确有效的。而传统的多体势模型如 EAM 势(嵌入原子势),势函数中包含的参数往往通过拟合实验数据获得,含有较大经验性,并且在不同条件下,参数的值不同。同时,对于不同种材料,对应有不同的势函数形式。所以多体势模型往往普适性不强<sup>[6-8]</sup>。

本文以贵金属铑为研究对象,基于第一性原理和陈氏晶格反演理论,构建铑的精确反演对势。并利用对势的计算结果计算铑的声子谱以验证其有效性和可靠性。计算铑的线膨胀系数等物理量,为铑的研究尤其是在工程应用上的研究提供参考。

## 1 计算过程

### 1.1 反演势的构建

基于莫比乌斯理论,陈氏晶格反演方法<sup>[9]</sup>将得到的晶格内聚能反演,从而得到原子间的对势,可以总结为以下两个函数之间的转换。如果:

$$E(x) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} r(n) \varphi(b(n)x) \quad (1)$$

其中  $E(x)$  为原子内聚能,  $x$  为最近邻距离,  $r(n)$  为第  $n$  近邻原子的配位数,  $b(n)$  为第  $n$  近邻原子的相对距离,那么:

$$\varphi(x) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} I(n) E(b(n)x) \quad (2)$$

函数(2)中的  $I(n)$  为反演系数,可以通过式(3)计算:

$$\sum_{b(n)|b(m)} I(n) r \left( b^{-1} \left[ \frac{b(m)}{b(n)} \right] \right) = \delta_{m1} \quad (3)$$

集合  $\{b(m)\}$  满足乘法半群,并且通过计算机编程使得  $b(1), b(2) \cdots b(n)$  按从小到大排序,并且  $b(1)=1$ 。  $b^{-1}[b(m)/b(n)]$  是一种数学运算,表示当  $b(m)/b(n)$  的值属于集合  $\{b(m)\}$  并等于  $b(k)$  时,那么该运算得到的值即为  $k$ 。计算使用 Material Studio 软件中的 CASTEP 模块,采用基于局域密度近似(LDA)的赝势,计算了 fcc(面心立方)金属铑在不同原子距离下的孤立原子基态能。计算过程中布里渊区  $k$  空间网格划分为  $16 \times 16 \times 16$ ,截断能设置为 340 eV,迭代过

程收敛精度选择  $1 \times 10^{-5}$  eV。计算选取的价电子为  $4d^8 5s^1$ ,计算过程不考虑自旋极化<sup>[10-12]</sup>。孤立原子基态能计算结果如图 1 所示。采用式(4)函数:

$$\varphi(r) = E_0 + D \exp[-(r - R_0)/\varepsilon] \quad (4)$$

对图 1 所示曲线进行拟合,其中  $E_0$  表示孤立原子的基态能且有  $E_0^{\text{Rh}} = -601.483$  eV。

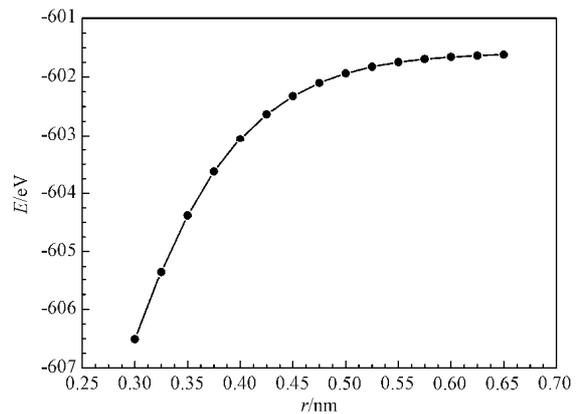


图 1 铑的孤立原子基态能曲线

Fig.1 The isolated atomic ground state energy curve of Rh

在相同的参数设置条件下,在铑的 fcc 晶格原胞中计算原子距离从 0.2~0.7 nm,步长为 0.01~0.05 nm 共计 40 个格点的内聚能。并减去基态能的值即得到晶格内聚能曲线。如图 2 所示。根据以上计算结果用自编程序计算得到原子距离从 0.2~1.2 nm,步长为 0.02 nm 的晶格反演势曲线,如图 3 所示。

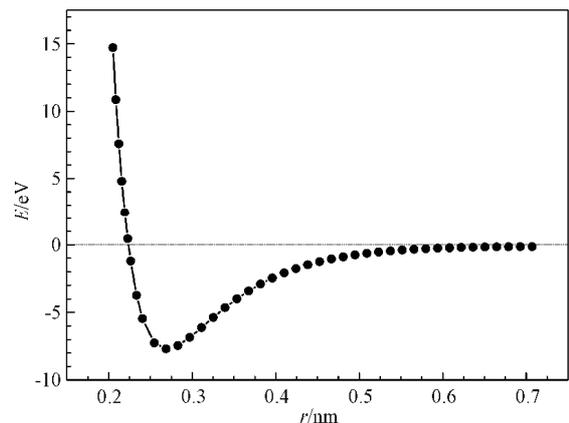


图 2 铑的晶格内聚能曲线

Fig.2 The lattice cohesive energy curve of Rh

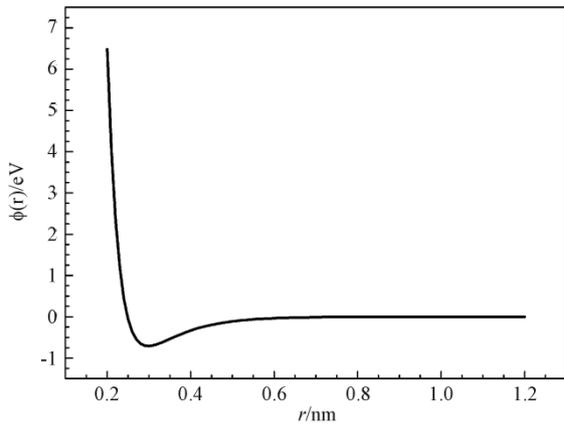


图 3 铑的晶格反演势曲线

Fig.3 The lattice inversion potential curve of Rh

### 1.2 反演势曲线的拟合

精确的拟合函数，尤其是全局性符合程度高的函数，是下一步精确计算的基础。采用 Origin 软件对图 3 所示曲线进行拟合，拟合质量通过软件给出的相关系数进行评估。相关系数的值在 0~1 之间，值越接近于 1，表明拟合的效果越好。本文分别采用 Rose 函数，Morse 函数及本文提出的新型的双指数型函数对反演势曲线进行拟合，并对拟合结果进行对比和分析。

#### 1.2.1 Rose 函数和 Morse 函数的拟合

Rose 函数常被用来做对势函数的拟合<sup>[13]</sup>，其函数形式如下：

$$\varphi(r) = -D[1 + \alpha(r - R_0)] \exp[-\alpha(r - R_0)] \quad (5)$$

其中  $D$ 、 $R_0$  和  $\alpha$  为拟合得到的参数， $\varphi(r)$  表示对势势能， $r$  为最近邻原子距离。拟合得到的相关系数值为 0.99781，可见拟合质量符合要求。

Morse 函数已被广泛运用于 fcc 金属的对势函数的拟合中，其函数形式如式(6)。

$$\varphi(r) = D[\exp(-2\alpha(r - R_0)) - 2\exp(-\alpha(r - R_0))] \quad (6)$$

拟合得到的参数值如表 1 所列，表 1 中同时将计算得到的数据与 Flahive 等<sup>[14]</sup>计算的数据对比。

对比发现： $R_0$  和  $\alpha$  的值相对差别较小，而  $D$  的值相差较大。这主要是两者选择的计算温度不同，本文计算选取 0 K 为基准态；而文献[14]的数据计

表 1 利用 Morse 函数拟合得到的铑参数对比

Tab.1 Fitting parameters in Morse potential function of Rh

$D/eV$	$\alpha/(1/nm)$	$R_0/nm$	相关系数( $r$ )	来源
0.75701	0.146151	0.296167	0.99911	本文
0.6674	0.15423	0.2875	—	[14]

算基准态为气态，并且文献[14]中  $R_0$  由平衡态最近邻原子距离决定， $\alpha$  与势函数的二阶求导有关，尽管随着温度的变化，原子间距离会以平衡态最近邻距离为中心做热振动，导致晶格常数发生改变，但根本上平衡态最近邻原子距离始终保持不变，所以当拟合选取的温度不同时，这两个参数的值差别较小。而  $D$  值与势函数对应的最低势能有关，由势函数选取的基准态决定，并且气态条件下，基准态能量要小于 0 K 时孤立原子的基态能，所以导致了  $D$  值有 0.0896 eV 的偏差，且文献[14]对应的值较小。所以本研究得到的势函数是准确有效的。

#### 1.2.2 双指数型势函数的拟合

为了进一步提高函数拟合精度，本文提出了包含有 5 个参数的双指数型势函数，其形式如下：

$$\varphi(r) = D_1 \exp[-\alpha(r - R_0)] - D_2 \exp[-\beta(r - R_0)] \quad (7)$$

拟合得到的相关系数为 1，表明拟合精度高，得到的参数如表 2 所列。

表 2 利用双指数型函数拟合得到铑的参数

Tab.2 Fitting parameters in double exponential potential function of rhodium

$D_1/eV$	$\alpha/(1/nm)$	$D_2/eV$	$\beta/(1/nm)$	$R_0/nm$
-1.25022	0.108703	-0.58873	0.344887	0.280592

为了对比和分析 3 种函数拟合对势曲线的效果，将其拟合结果进行放大观察和分析。如图 4 所示。结果表明，Rose 函数和 Morse 函数虽然在对势函数曲线的长程段和短程段拟合效果较好，但是在曲线的拐点附近与曲线的一致性符合较差。所以两个函

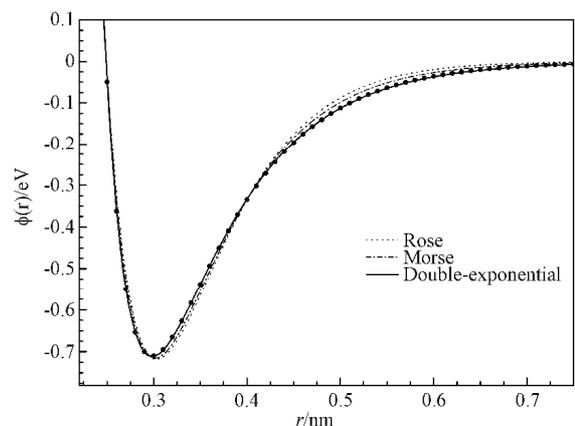


图 4 三种势函数拟合结果的比较

Fig.4 The comparison of the fitting results of these three potential functions

数的全局性精度相对不高。而本文提出的双指数型势函数,在拟合的全局上表现非常优异,且相关系数为 1,表明拟合精度很高,为下一步的精确计算,提供有力的基础。

## 2 应用和分析

### 2.1 铑的声子谱的计算

为了验证对势函数的有效性,通过 Material Studio 软件中的 GULP 模块分别采用反演对势方法和 EAM 势中的 Sutton-Chen 多体势方法以及通过软件中的 CASTEP 模块(采用有限位移法)计算了铑的声子谱,如图 5 所示。

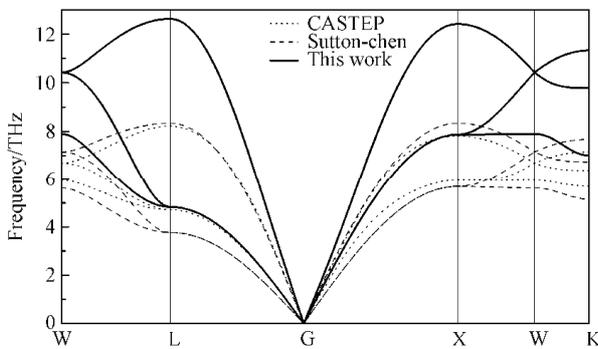


图 5 铑的声子谱

Fig.5 The phonon spectra of Rh

布里渊区对称点坐标为 G(0, 0, 0)、X(0.5, 0, 0.5)、W(0.5, 0.25, 0.75)、K(0.75, 0.375, 0.375)、L(0.5, 0.5, 0.5)。结果表明,三种方法对应的声子谱曲线的变化趋势是相似的,表明反演对势可以有效的反应原子间的相互作用。同时,采用 Sutton-Chen 方法计算声子谱时所需的时间比对势方法所需的时间要多 40 倍,说明对势函数在计算量上有明显的优势。

对于不同的材料体系,EAM 势的函数模型不同且均包含有经验成分<sup>[15]</sup>。并且其函数推导过程往往以 Rose 函数为基础,导致在后续的计算精度不够。而反演对势函数基于数学理论,通过严格的数学证明,不含有任何经验成分,是一种全局精确的势函数。对于声子谱的计算结果也是有效和可靠的。

### 2.2 势函数的应用和计算

采用式(8)双指数型函数对图 2 所示的铑的晶格内聚能曲线进行拟合,拟合得到的参数如表 3,拟合相关系数为 0.99996。

$$u(r) = D_1 \exp[-\alpha(r - R_0)] - D_2 \exp[-\beta(r - R_0)] \quad (8)$$

表 3 利用双指数型函数拟合内聚能曲线得到的铑参数

Tab.3 Fitting parameters of cohesive curve using double exponential potential function for rhodium

$D_1/\text{eV}$	$\alpha/(1/\text{nm})$	$D_2/\text{eV}$	$\beta/(1/\text{nm})$	$R_0/\text{nm}$
-7.39328	0.118509	-0.9365	0.374774	0.304313

对该函数求一阶导数,并令其值为 0,得到 0 K 下,平衡态原子最近邻距离  $r_0^{\text{Rh}} = 0.2686139 \text{ nm}$ 。在此基础上,分别计算了铑的线膨胀系数,体弹性模量以及格林乃森常数等物理量,并与实验数据进行对比和分析。

#### 2.2.1 线膨胀系数的计算

本方法基于计算得到的势函数的解析式以及玻尔兹曼分布函数<sup>[16]</sup>,计算在不同温度下,铑的热振动平均位移。

$$\bar{\delta} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \delta e^{-V/k_B T} d\delta}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-V/k_B T} d\delta} \quad (9)$$

其中  $\delta = r - r_0$ ,  $r_0$  为 0 K 下平衡态原子最近邻距离。考虑到原子距离不可能为负值,且从  $a$  到  $\infty$  变化,其中  $a$  为铑的离子半径。

$$\bar{\delta} = \frac{\int_a^{\infty} r e^{-V(r)/k_B T} dr}{\int_a^{\infty} e^{-V(r)/k_B T} dr} - r_0 \quad (10)$$

由于线膨胀系数是一维物理量,  $V(r)$  应为一维原子链上的势能,而公式(8)中的  $u(r)$  为原子间总能量,是三维的量。所以  $V(r)$  与  $u(r)$  之间的关系应为

$$V(r) = \frac{1}{3} u(r) \quad (11)$$

将式(8)及表 3 中的数据代入到式(10)中,用自编程序计算得到 273~373 K 范围内不同温度下的原子平均热振动位移的数值解。结果如图 6 所示。

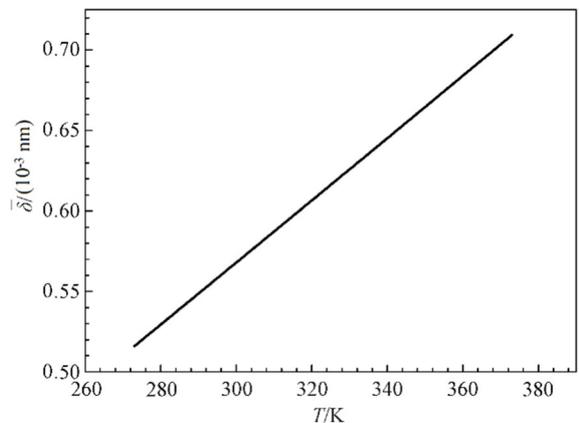


图 6 铑的原子热振动位移-温度曲线

Fig.6 Relationship between average atomic thermal vibration displacement and temperature curve of Rh

由式(12):

$$\alpha_L = \frac{1}{r_0} \frac{d\bar{\delta}}{dT} \quad (12)$$

计算得到 273~373 K 温度段的铑的线膨胀系数的平均值为  $\alpha_L^{\text{Rh}}=0.71978 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ 。与文献[17]实验数据对比  $\alpha_L^{\text{Rh}}=0.85 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ , 计算结果的相对误差为 15.3%, 说明计算数据与实验数据相比基本符合, 但值较小。这主要是因为忽略了金属自由电子气的影响。根据格林乃森方程:

$$\gamma = \frac{\kappa \alpha_V V}{C_V} \quad (13)$$

其中  $\kappa$  为体弹性模量,  $\alpha_V$  为体膨胀系数且与线膨胀系数之间的关系为  $\alpha_V=3\alpha_L$ ,  $\gamma$  为格林乃森常数,  $C_V$  为定容比热容。金属的比热容包括晶格比热容和电子比热容两部分[16], 其表达式如下:

$$C_V^{\text{total}} = C_V^{\text{lattice}} + C_V^{\text{electron}} \quad (14)$$

当温度高于德拜温度时, 晶格比热容起主导作用, 但是当温度较低时, 电子对金属的比热容会有显著贡献, 所以在 273~373K 范围内, 金属自由电子对比热容的影响不能忽略。所以导致计算结果值偏小。

但该计算方法是有效且十分有意义的, 传统的计算线膨胀系数的理论方法, 主要依靠近似原子间作用势和分子动力学方法等, 每种方法都有自己的假设, 许多假设只有在有限的温度范围内才有效[18], 且计算量大, 流程复杂。本方法结合原子间相互作用势和玻尔兹曼分布函数, 计算量小, 步骤简单, 具有一定精度, 适合实际使用。

### 2.2.2 体弹性模量的计算

体弹性模量和原子间相互作用势的关系[19]可以用下式表示:

$$\kappa = V \left( \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \right) \quad (15)$$

其中  $U$  为原子内聚能,  $V$  为单个原子在 fcc 晶格结构中所占的体积, 所以有:

$$\kappa = \frac{\sqrt{2}}{9r} \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} - \frac{2\sqrt{2}}{9r^2} \frac{\partial u}{\partial r} \quad (16)$$

将公式(8)带入到上式得:

$$\kappa = \frac{\sqrt{2}}{9r} \{ \alpha^2 D_1 \exp[-\alpha(r-R_0)] - \beta^2 D_2 \exp[-\beta(r-R_0)] \} - \frac{\sqrt{2}}{9r^2} \{ \alpha D_1 \exp[-\alpha(r-R_0)] - \beta D_2 \exp[-\beta(r-R_0)] \} \quad (17)$$

由公式(10)计算得到在室温 293 K 下原子的平均热振动位移为  $\bar{\delta}_{\text{Rh}}=5.51 \times 10^{-4} \text{ nm}$ , 所以室温下原子平衡态最近邻原子距离为  $r_0'=0.2719819 \text{ nm}$ ,  $r_0'$  由公式  $r_0'=r_0+\bar{\delta}$  计算得到。带入到公式(16)中, 得室温

(293K)下铑的体弹性模量为  $\kappa_{\text{Rh}}=3.132099 \times 10^{11} \text{ N} \cdot \text{m}^{-2}$ , 与实验数据[17]  $\kappa_{\text{Rh}}=2.76 \times 10^{11} \text{ N} \cdot \text{m}^{-2}$  对比, 误差为 13.5%, 说明计算结果是准确有效的。

### 2.2.3 格林乃森常数的计算

基于公式(13)及铑的线膨胀系数和体弹性模量的计算值, 其中体积  $V$  通过下式计算:

$$V = \frac{N_A}{4} (\sqrt{2}r_0)^3 \quad (18)$$

$N_A$  为阿伏伽德罗常数,  $r_0$  为平衡态最近邻原子距离。且  $C_V^{\text{Rh}}=24.98 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$ , 计算得到 293 K 下, 铑的格林乃森常数为  $\gamma_{\text{Rh}}=2.25$ , 与实验数据[17]对比  $\gamma_{\text{Rh}}=2.26$ , 相对误差为 0.8%, 说明得到的势函数势准确有效[20-23]。

## 3 结论

1) 以第一性原理计算为基础, 通过陈氏晶格反演方法, 得到了 fcc 金属铑的精确的晶格反演对势曲线, 并采用本研究提出的双指数型势函数对曲线进行拟合, 得到对势函数的精确解析式。

2) 分别采用反演对势函数, Sutton-Chen 函数及有限位移法计算了铑的声子谱, 对比发现本文得到的势函数是有效的。

3) 提出了基于反演势和玻尔兹曼分布函数计算线膨胀系数的方法, 计算了铑的线膨胀系数、体弹性模量和格林乃森常数, 与实验数据的对比相对误差分别为 15.3%、13.5%和 0.8%。表明本研究提出的计算方法是准确且有效的。

### 参考文献:

- [1] ZONG Y, CHEN N X. Theoretical study of (Ag, Au and Cu)/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> interfaces [J]. Journal of Physics Condensed Matter, 2009, 21(31): 315003.
- [2] SONG H Q, SHEN J, QIAN P, et al. Interfacial for Ag/GaN(0001) interfaces by inversion of adhesive energy [J]. Physica B, 2013, 431: 97-101.
- [3] ZHANG C H, HUANG S, LI R Z, et al. Effects on mechanical properties of refractory metal doped Ti3Al alloy [J]. International Journal of Modern Physics B, 2013, 27: 1350147.
- [4] ZHANG C H, HUANG S, SHEN J, et al. Chen's lattice inversion embedded-atom method for Ni-Al alloy [J]. Chinese Physics B, 2012, 21(11): 174-180.
- [5] LIU S J, SHI S Q, HUANG H, et al. Interatomic potentials and atomistic calculations of some metal hydride systems

- [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2002, 330/332: 64-69.
- [6] 万纾民. 固体中原子间相互作用势能函数与碱金属、碱土金属弹性的电子理论[J]. *中国科学(A 辑)*, 1987(2): 170-178.
- WANG S M. The interaction potential between atoms in solid materials and the electron theory of elasticity in alkalis metals and alkaline-earth metals [J]. *Scientia Sinica (Series A)*, 1987(2): 170-178.
- [7] 陈松, 陆建生, 谢明, 等. 铂铑金系基本力学性能的第一性原理研究[J]. *稀有金属*, 2015, 39(3): 276-282.
- CHEN S, LU J S, XIE M, et al. Principle investigation on mechanical performances of platinum-rhodium alloys [J]. *Chinese Journal of Rare Metals*, 2015, 39(3): 276-282.
- [8] WANG Y D, CHEN N X. Atomistic study of misfit dislocation in metal/SiC(111) interfaces [J]. *Journal of Physics Condensed Matter*, 2010, 22(13): 135009-135018.
- [9] CHEN N X. Möbius inversion in physics [M]. Singapore: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd, 2012: 155-260.
- [10] 夏璐, 陈松, 陆建生, 等. 分子动力学模拟用贵金属势函数的应用与发展[J]. *贵金属*, 2013, 34(4): 82-87.
- XIA L, CHEN S, LU J S, et al. The development and application of the interatomic potential of precious metals for molecular dynamics simulation [J]. *Precious Metals*, 2013, 34(4): 82-87.
- [11] 张建民, 吴喜军, 黄育红, 等. fcc 金属层错能的 EAM 法计算[J]. *物理学报*, 2006, 55(1): 393-397.
- ZHANG J M, WU X J, HUANG Y H, et al. Energy calculation of the stacking fault in FCC metals by embedded-atom method [J]. *Acta Physica Sinica*, 2006, 55(1): 393-397.
- [12] 夏璐. PtRh 合金系晶格反演势的构建及应用[D]. 昆明: 昆明理工大学, 2013.
- XIA L. The foundation and application of inversion potentials for the PtRh alloys [D]. Kunming: Kunming University of Science and Technology, 2013.
- [13] 谢谦, 黄美纯. 完整晶格的晶向族描述与晶格和[J]. *厦门大学学报(自然科学版)*, 1995, 34(1): 36-42.
- XIE Q, HUANG M C. Description of crystallographic direction families for perfect crystal and lattice sums [J]. *Journal of Xiamen University (Natural Science)*, 1995, 34(1): 36-42.
- [14] FLAHIWE P G, GRAHAM W R. Pair potential calculations of single atom self-diffusion activation energies [J]. *Surface Science*, 1980, 91(2): 449-462.
- [15] ZHANG C H, HUANG S, LI R Z, et al. Structural and mechanical properties of Fe-Al compounds: An atomistic study by EAM simulation [J]. *Intermetallics*, 2014, 52: 68-91.
- [16] 胡安, 章维益. 固体物理[M]. 北京: 高等教育出版社, 2008: 120.
- HU A, ZHANG W Y. *Solid-State Physics* [M]. Beijing: Higher Education Press, 2008: 120.
- [17] BRANDES E A, BROOK G B. *Smithells metals reference book (7th edition)* [M]. Oxford: Reed Educational and Publishing Ltd, 1992.
- [18] 张博. 金属元素热膨胀系数的评估与计算[D]. 湘潭: 湘潭大学, 2014.
- ZHANG B. Assessment and calculation of thermal expansion coefficient for metallic elements [D]. Xiangtan: Xiangtan University, 2014.
- [19] 刘超, 周铁, 郑瑞伦. 面心立方晶体的膨胀系数和弹性模量[J]. *西南师范大学学报(自然科学版)*, 2006, 31(5): 83-87.
- LIU C, ZHOU T, ZHENG R L. The expansion coefficient and elastic modulus of crystal with FCC structure [J]. *Journal of Southwest China Normal University (Natural Science)*, 2006, 31(5): 83-87.
- [20] 陈松, 刘泽光, 陈登权, 等. Au/Sn 界面互扩散特征[J]. *稀有金属*, 2005, 29(4): 413-417.
- CHEN S, LIU Z G, CHEN D Q, et al. Summary of Au/Sn interdiffusion features [J]. *Rare Metals*, 2005, 29(4): 413-417.
- [21] 陈松, 耿永红, 王传军, 等. 磁控溅射用 CoCrPt 系靶材制备技术研究进展[J]. *贵金属*, 2013, 34(1): 74-78.
- CHEN S, GENG Y H, WANG C J, et al. Research progress of CoCrPt system targets fabrication [J]. *Precious Metals*, 2013, 34(1): 74-78.
- [22] HU J Q, PAN Y, XIE M. First-principles study of phase stability and electronic properties of RhZr [J]. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 2011, 21: 2301-2305.
- [23] 任县利, 陈松, 谢明, 等. 金和银的晶格反演势的构建及应用[J]. *物理学报*, 2015, 64(14): 147101.
- REN X L, CHEN S, XIE M, et al. Application and foundation on inversion lattice potential of gold and silver [J]. *Acta Physica Sinica*, 2015, 64(14): 147101.