

# 镍基超导母体材料 $\text{EuNi}_2\text{Si}_2$ 的结构和 热力学性质研究\*

王宇杰<sup>1)†</sup> 周俊敏<sup>1)</sup> 钱 萍<sup>2)</sup> 申 江<sup>2)</sup>

1) (周口师范学院物理与电子工程系, 周口 466000)

2) (北京科技大学应用物理研究所, 北京 100083)

(2009 年 12 月 7 日收到; 2010 年 5 月 28 日收到修改稿)

应用 Chen-Möbius 晶格反演获得的原子间相互作用势, 对镍基超导母体材料  $\text{EuNi}_2\text{Si}_2$  不同空间群的结构进行结构弛豫、切变拉伸、随机扰动和 X 射线衍射谱的分析. 研究表明, 空间群号为 139 结构的  $\text{EuNi}_2\text{Si}_2$  母体材料能量最低, 结构最稳定. 另外, 还计算了空间群号为 139 稳定晶格结构的声子态密度和热力学性质. 计算结果表明: 对于声子态密度, 原子质量较大的稀土元素 Eu 在低频范围内贡献最大, 随着频率的升高, 原子质量较小的元素 Si 的贡献越来越突出; 对于比热容和振动熵, 在低温区元素 Eu 和 Ni 的贡献较大, 随着温度的升高, 元素 Si 的贡献越来越突出.

**关键词:** Chen-Möbius 晶格反演, 原子相互作用势, 热力学性质

**PACC:** 6155, 3420, 6550

## 1. 引 言

高温超导材料以其具有临界温度高、热导率低、损耗低和传输容量大等一些优点在电力、电缆<sup>[1-4]</sup>和滤波器制作<sup>[5, 6]</sup>等方面具广阔的应用前景. 而高温超导磁体<sup>[7]</sup>在高温超导体的基础上又以具有较强的磁场特性在磁悬浮列车<sup>[8-10]</sup>、磁分离技术<sup>[11]</sup>、超导磁储能<sup>[12-14]</sup>、超导核磁共振技术<sup>[15]</sup>和磁流体推动技术<sup>[16]</sup>等方面有着重要的应用价值. 2008 年, Kamihara 等<sup>[17]</sup>发现新型铁基超导材料  $\text{LaO}_{1-x}\text{F}_x\text{FeAs}$  的最高临界温度为 26 K, 若掺杂其他元素或替代铁基超导材料中的某些元素时, 这些层状的结构为  $\text{ZrCuSiAs}$  (1111) 类型的高温超导材料最高临界超导转变温度可达 56 K<sup>[18-23]</sup>. 此后不久, 发现  $\text{ThCr}_2\text{Si}_2$  (122) 类型的四方晶系铁基超导材料也具有超导电性, 并且由于过渡金属的存在, 这些结构呈现一定的磁性<sup>[24]</sup>. 由此形成这些不同类型的“1111”, “122”体系的高温超导材料再次引起了众多研究者的兴趣. 人们致力于研究这些材料的超导

机制和磁性来源, 但对其结构性性质却讨论较少. 因此, 本文从原子级层次模拟“122”体系的镍基超导母体材料  $\text{EuNi}_2\text{Si}_2$ <sup>[25]</sup>, 利用 Chen-Möbius 晶格反演理论<sup>[26-29]</sup>获得的原子间相互作用势, 研究了镍基超导母体材料  $\text{EuNi}_2\text{Si}_2$  不同空间群的结构稳定性, 并进一步计算了稳定晶体结构的热力学性质.

## 2. 理论方法

Chen-Möbius 晶格反演理论<sup>[26-29]</sup>是直接由第一原理计算结合能曲线出发, 反演获得原子间相互作用对势. 原子间相互作用对势在稀土化合物<sup>[30]</sup>、铁基化合物<sup>[31]</sup>和离子晶体<sup>[32]</sup>等很多复杂体系中得到广泛应用. Chen-Möbius 晶格反演理论开辟了利用原子间相互作用对势研究的一个新领域.

在 Chen-Möbius 晶格反演方法中, 晶体的结合能  $E(x)$  一般可表示为

$$\begin{aligned} E(x) &= \frac{1}{2} \sum_{R_i \neq 0} \Phi(R_i) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} r(n) \Phi[b(n)x], \end{aligned} \quad (1)$$

\* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2006CB605101) 和周口师范学院青年科研基金 (批准号: ZKNUQN 200913) 资助的课题.

† E-mail: scuwangyujie@126.com

式中  $x$  为原子间最近邻距离,  $r(n)$  为第  $n$  级近邻配位数,  $b(n)$  以最近邻距离为单位表征第  $n$  级近邻原子到参考原子的距离,  $\Phi(x)$  为对势函数. 运用 Chen-Möbius 变换便可得到原子间相互作用势的普遍公式

$$\Phi(x) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} I(n) E[b(n)x], \quad (2)$$

式中系数  $I(n)$  满足

$$\sum_{b(n) \mid b(k)} I(n) r b^{-1} \frac{b(k)}{b(n)} = \delta_{k1}. \quad (3)$$

这样我们可以由已知的结合能函数  $E(x)$  得到原子间的相互作用势. 通常用 Morse 函数来近似表达反演的势函数

$$\Phi(x) = D_0 (\exp[-\gamma(x/R_0 - 1)] - 2 \exp[-(\gamma/2)(x/R_0 - 1)]), \quad (4)$$

式中  $x$  为原子间距,  $D_0$  为对势极小值,  $R_0$  为对势极小时的原子间距,  $\gamma$  为无量纲参数. 本文计算所用到的势参数如表 1 所列, 其中同种原子的势参数是由实验参数通过 Morse 函数拟合得到的, 异种原子的势参数是由体心结构 ( $B2$ , 空间群为  $Pm\bar{3}m$ ) 通过 Morse 函数拟合得到的.

表 1 对势拟合参数

| 对势    | $R_0/\text{nm}$ | $D_0/\text{eV}$ | $\gamma$ |
|-------|-----------------|-----------------|----------|
| Eu-Eu | 0.47468         | 3.8052          | 7.3546   |
| Ni-Ni | 0.27930         | 10.0624         | 7.8084   |
| Si-Si | 0.39462         | 6.2481          | 6.2455   |
| Eu-Ni | 0.32355         | 10.6949         | 8.7249   |
| Eu-Si | 0.33671         | 11.5378         | 8.0883   |
| Ni-Si | 0.31035         | 8.9748          | 6.7146   |

### 3. 计算结果及分析

#### 3.1. $\text{EuNi}_2\text{Si}_2$ 的结构分析

对于同样组分比的超导母体材料  $\text{EuNi}_2\text{Si}_2$ , 理论上可能存在空间群号为 139, 129, 127, 51, 164 和

147 的六种结构. 为了探索何种空间群结构的  $\text{EuNi}_2\text{Si}_2$  材料最为可能, 我们利用原子间相互作用势对  $\text{EuNi}_2\text{Si}_2$  材料不同空间群的结构稳定性进行分析比较. 为此, 对每一种可能的结构作出最大范围的变形和扰动, 然后在路径不受任何空间群限制的条件下进行弛豫以考察其结构的稳定性. 为了减小涨落误差, 均采用  $3 \times 3 \times 3$  的超晶胞结构 (共 270 个原子). 首先, 我们对不同空间群的初始结构进行弛豫, 弛豫后的计算结果列于表 2.

表 2 不同空间群的初始结构弛豫后的结果

| 初始空间群号 | 终态空间群号 | 单个原子的终态能量/eV |
|--------|--------|--------------|
| 139    | 139    | -4.6950      |
| 129    | 129    | -4.6573      |
| 127    | 127    | -4.6578      |
| 51     | 51     | -4.5832      |
| 164    | 71     | -4.7011      |
| 147    | 12     | -4.6658      |

由表 2 可知, 初始空间群号为 164 和 147 的晶体结构在弛豫之后空间群发生变化, 说明它们的结构非常不稳定. 另外, 虽然空间群号为 164 的晶体结构在弛豫后单个原子的终态能量最低, 对于母体材料  $\text{EuNi}_2\text{Si}_2$ , 目前未曾从文献资料中查阅到这些弛豫后终态空间群号为 71 和 12 的晶体结构, 所以这里就不再加以讨论. 而初始空间群号为 139, 129, 127 和 51 的晶体结构在弛豫之后仍能恢复到原有的空间群结构, 说明它们都是可能存在的亚稳态结构, 其单胞结构如图 1 所示. 由弛豫后单个原子的终态能量可知, 空间群号为 139 结构的  $\text{EuNi}_2\text{Si}_2$  材料的结合能最高, 能量最低. 根据能量最低原理, 我们可推测空间群号为 139 的晶体结构最稳定. 另外, 在结构弛豫过程中, 我们计算了空间群号为 139 结构的晶格参数, 计算结果列于表 3. 由表 3 可知, 计算值与实验值非常接近, 最大误差仅为 1.87%. 由此可知理论值与实验值符合非常好, 从而也进一步验证了本文计算所用的模型和原子间相互作用势是可靠的.

表 3 空间群号为 139 结构的晶格参数

| 晶格常数 | 计算值/nm | 实验值/nm | 误差/% | 角度       | 计算值/(°) | 实验值/(°) |
|------|--------|--------|------|----------|---------|---------|
| $a$  | 0.399  | 0.395  | 1.03 | $\alpha$ | 90      | 90      |
| $b$  | 0.399  | 0.395  | 1.03 | $\beta$  | 90      | 90      |
| $c$  | 0.972  | 0.954  | 1.87 | $\gamma$ | 90      | 90      |

为进一步研究空间群号为 139 的晶体结构是否为最稳定结构,我们对能量相差较小的空间群号为 139,129 和 127 的晶体结构进行了同样的最大范围内的切变拉伸和随机扰动,研究结果分别列于表 4—表 7.

由表 4 可知,空间群号为 139 的晶体结构在经过不同的切变拉伸之后都能恢复到原来的空间群结构,

并且单个原子的能量均为  $-4.695 \text{ eV}$ . 由表 5 和表 6 可知,空间群号为 129 和 127 的晶体结构在经过与空间群号为 139 的晶体结构同样的切变拉伸之后变化较大,空间群大部分发生了改变. 对于母体材料  $\text{EuNi}_2\text{Si}_2$ , 目前未曾从文献资料中查阅到这些改变后的空间群结构. 而少部分没有改变的空间群结构,其单个原子的能量比空间群号为 139 结构的能量要高.

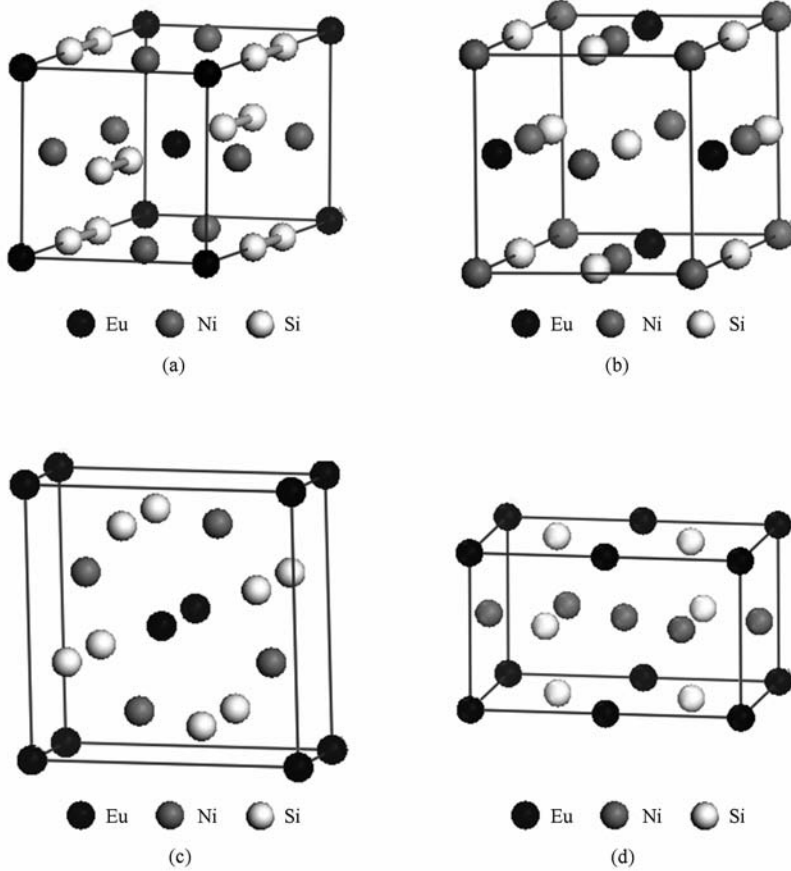


图 1  $\text{EuNi}_2\text{Si}_2$  不同空间群的单胞结构 (a)空间群号为 139, (b)空间群号为 129, (c)空间群号为 127, (d)空间群号为 51

表 4 空间群号为 139 的晶体结构在切变拉伸前后的初态与终态的数据比较

| 初 态  |               |               |               |                          |                         |                          |              | 终 态  |               |               |               |                          |                         |                          |              |
|------|---------------|---------------|---------------|--------------------------|-------------------------|--------------------------|--------------|------|---------------|---------------|---------------|--------------------------|-------------------------|--------------------------|--------------|
| 空间群号 | $a/\text{nm}$ | $b/\text{nm}$ | $c/\text{nm}$ | $\alpha/(\text{^\circ})$ | $\beta/(\text{^\circ})$ | $\gamma/(\text{^\circ})$ | 单个原子的终态能量/eV | 空间群号 | $a/\text{nm}$ | $b/\text{nm}$ | $c/\text{nm}$ | $\alpha/(\text{^\circ})$ | $\beta/(\text{^\circ})$ | $\gamma/(\text{^\circ})$ | 单个原子的终态能量/eV |
| 139  | 0.400         | 1.300         | 1.500         | 90                       | 85                      | 90                       | -0.9101      | 139  | 0.399         | 0.399         | 0.972         | 90                       | 90                      | 90                       | -4.6950      |
| 139  | 1.000         | 1.600         | 0.900         | 88                       | 90                      | 90                       | 0.0534       | 139  | 0.399         | 0.399         | 0.972         | 90                       | 90                      | 90                       | -4.6950      |
| 139  | 1.500         | 0.400         | 1.000         | 90                       | 85                      | 90                       | -0.8609      | 139  | 0.399         | 0.399         | 0.972         | 90                       | 90                      | 90                       | -4.6950      |
| 139  | 1.500         | 0.399         | 0.972         | 90                       | 90                      | 88                       | -0.8151      | 139  | 0.399         | 0.399         | 0.972         | 90                       | 90                      | 90                       | -4.6950      |
| 139  | 0.399         | 1.500         | 0.972         | 85                       | 90                      | 90                       | -0.8171      | 139  | 0.399         | 0.399         | 0.972         | 90                       | 90                      | 90                       | -4.6950      |
| 139  | 0.399         | 0.399         | 0.972         | 80                       | 90                      | 100                      | -4.3794      | 139  | 0.399         | 0.399         | 0.972         | 90                       | 90                      | 90                       | -4.6950      |

表 5 空间群号为 129 的晶体结构在切变拉伸前后的初态与终态的数据比较

| 初 态  |               |               |               |                  |                 |                  |                  | 终 态  |               |               |               |                  |                 |                  |                  |
|------|---------------|---------------|---------------|------------------|-----------------|------------------|------------------|------|---------------|---------------|---------------|------------------|-----------------|------------------|------------------|
| 空间群号 | $a/\text{nm}$ | $b/\text{nm}$ | $c/\text{nm}$ | $\alpha/(\circ)$ | $\beta/(\circ)$ | $\gamma/(\circ)$ | 单个原子的<br>终态能量/eV | 空间群号 | $a/\text{nm}$ | $b/\text{nm}$ | $c/\text{nm}$ | $\alpha/(\circ)$ | $\beta/(\circ)$ | $\gamma/(\circ)$ | 单个原子的<br>终态能量/eV |
| 129  | 0.400         | 1.300         | 1.500         | 90               | 85              | 90               | -0.9332          | 11   | 0.506         | 0.455         | 0.723         | 90.0             | 78.2            | 90.0             | -4.8020          |
| 129  | 1.000         | 1.600         | 0.900         | 88               | 90              | 90               | -0.3487          | 11   | 0.455         | 0.506         | 0.723         | 78.2             | 90.0            | 90.0             | -4.8020          |
| 129  | 1.500         | 0.400         | 1.000         | 90               | 85              | 90               | -1.0760          | 2    | 0.477         | 0.475         | 0.758         | 78.2             | 78.0            | 77.2             | -4.8276          |
| 129  | 1.500         | 0.399         | 0.972         | 90               | 90              | 88               | -1.0458          | 129  | 0.420         | 0.420         | 0.895         | 90.0             | 90.0            | 90.0             | -4.6573          |
| 129  | 0.399         | 1.500         | 0.972         | 85               | 90              | 90               | -1.0475          | 2    | 0.475         | 0.477         | 0.758         | 78.0             | 101.8           | 102.8            | -4.8276          |
| 129  | 0.399         | 0.399         | 0.972         | 80               | 90              | 100              | -4.2936          | 2    | 0.477         | 0.475         | 0.758         | 101.8            | 102.0           | 77.2             | -4.8276          |

表 6 空间群号为 127 的晶体结构在切变拉伸前后的初态与终态的数据比较

| 初 态  |               |               |               |                  |                 |                  |                  | 终 态  |               |               |               |                  |                 |                  |                  |
|------|---------------|---------------|---------------|------------------|-----------------|------------------|------------------|------|---------------|---------------|---------------|------------------|-----------------|------------------|------------------|
| 空间群号 | $a/\text{nm}$ | $b/\text{nm}$ | $c/\text{nm}$ | $\alpha/(\circ)$ | $\beta/(\circ)$ | $\gamma/(\circ)$ | 单个原子的<br>终态能量/eV | 空间群号 | $a/\text{nm}$ | $b/\text{nm}$ | $c/\text{nm}$ | $\alpha/(\circ)$ | $\beta/(\circ)$ | $\gamma/(\circ)$ | 单个原子的<br>终态能量/eV |
| 127  | 0.400         | 1.300         | 1.500         | 90               | 85              | 90               | 0.0248           | 71   | 0.528         | 1.186         | 0.433         | 90.0             | 34.8            | 90.0             | -4.7011          |
| 127  | 1.000         | 1.600         | 0.900         | 88               | 90              | 90               | -0.3593          | 71   | 0.433         | 1.224         | 0.301         | 104.3            | 90.0            | 90.0             | -4.7011          |
| 127  | 1.500         | 0.400         | 1.000         | 90               | 85              | 90               | -0.7578          | 166  | 0.940         | 0.459         | 0.517         | 90.0             | 47.1            | 90.0             | -4.8510          |
| 127  | 1.500         | 0.399         | 0.972         | 90               | 90              | 88               | -0.7795          | 47   | 1.184         | 0.520         | 0.279         | 90.0             | 90.0            | 116.1            | -4.2668          |
| 127  | 0.399         | 1.500         | 0.972         | 85               | 90              | 90               | -0.7920          | 166  | 0.459         | 0.938         | 0.520         | 46.9             | 90.0            | 90.0             | -4.8513          |
| 127  | 0.399         | 0.399         | 0.972         | 80               | 90              | 100              | 28.3359          | 127  | 0.730         | 0.730         | 0.285         | 90.0             | 90.0            | 90.0             | -4.6578          |

表 7 空间群号为 139, 129 和 127 的晶体经过随机扰动前后的结果 (晶格常数单位为 nm)

| 操作方式        | 空间群号 | $a$    | $b$   | $c$   | 空间群号 | $a$   | $b$   | $c$   | 空间群号 | $a$   | $b$   | $c$   |
|-------------|------|--------|-------|-------|------|-------|-------|-------|------|-------|-------|-------|
| 扰动前         | 139  | 0.3992 | 0.399 | 0.972 | 129  | 0.420 | 0.420 | 0.895 | 127  | 0.730 | 0.730 | 0.285 |
| 随机扰动 0.01nm | 139  | 0.3992 | 0.399 | 0.972 | 2    | 0.475 | 0.477 | 0.758 | 127  | 0.724 | 0.724 | 0.292 |
| 随机扰动 0.04nm | 139  | 0.3992 | 0.399 | 0.972 | 2    | 0.475 | 0.477 | 0.758 | 83   | 0.716 | 0.716 | 0.302 |
| 随机扰动 0.06nm | 139  | 0.3992 | 0.399 | 0.972 | 2    | 0.475 | 0.477 | 0.758 | 83   | 0.716 | 0.716 | 0.302 |

由表 7 可知:当晶格常数随机扰动 0.01 nm 时,空间群号为 139 和 127 的结构能恢复到原来的空间群结构,而空间群号为 129 的结构发生了改变;当晶格常数随机扰动增加到 0.04 或 0.06 nm 时,仅有空间群号为 139 的结构能恢复到原来的状态,其余的空间群结构都发生了改变,目前也未曾从文献资料中查阅到这些改变后的空间群结构.综合以上分析可知,通过切变拉伸和随机扰动,可判定空间群号为 139 的晶体结构是最稳定的.

最后,我们还研究分析了图 2 所示的若干能量相差较近的空间群结构的 X 射线衍射谱.由图 2 可知,空间群号为 129, 127 和 51 的晶体结构的 X 射线衍射谱与空间群号为 139 结构的 X 射线衍射谱相差甚远.由图 2(d)可知,空间群号为 139 的晶体结构是单相结构,不存在两相或多相的混合,进而也验证了超导

母体材料  $\text{EuNi}_2\text{Si}_2$  空间群号为 139 的晶体结构存在,并且是最稳定的,这与实验结果相一致.

### 3.2. 声子态密度和热力学性质

在晶格动力学的谐波近似中,晶格振动的表达式为

$$\det |D_{\alpha\beta, \mu\nu}(q) - \omega^2 \delta_{\alpha\beta} \delta_{\mu\nu}| = 0, \quad (5)$$

式中  $\omega$  为角频率,  $q$  为波矢量.通过(5)式我们可以求出声子色散  $\omega(q)$ , 进一步可求出声子态密度  $g(\omega)$ . 利用声子态密度可计算比热容  $c_V$  和振动熵  $S$ , 具体推导过程不再详述.  $c_V$  和  $S$  的表达式分别为

$$c_V(T) = 3Nk_B \int_0^\infty \frac{\left[\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right]^2 \exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)}{\left[\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1\right]^2} g(\omega) d\omega, \quad (6)$$

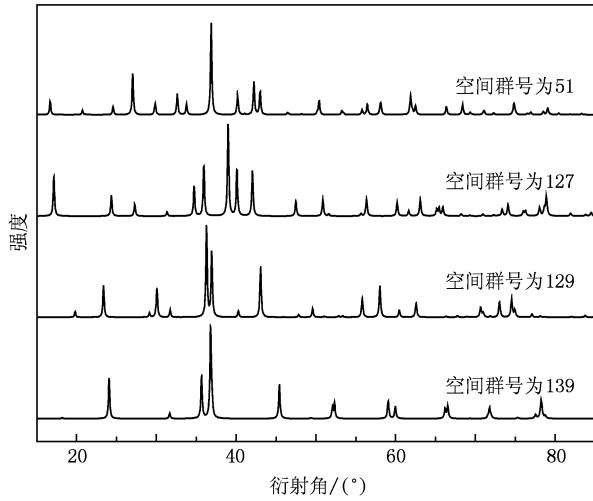


图2  $\text{EuNi}_2\text{Si}_2$  不同空间群结构的 X 射线衍射谱

$$S(T) = \int_0^T \frac{c_V(T)}{T} dT. \quad (7)$$

我们利用原子间的相互作用势计算了空间群号为 139 的稳定晶格结构的声子态密度和热力学性质,结果如图 3 和图 4 所示.

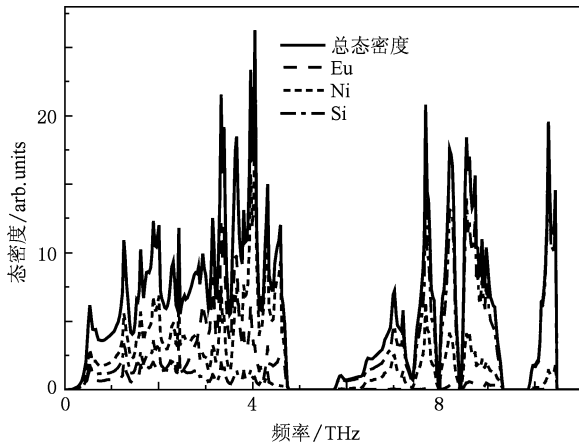


图3  $\text{EuNi}_2\text{Si}_2$  的声子态密度

图 3 为  $\text{EuNi}_2\text{Si}_2$  晶体结构的总声子态密度以及组成元素的声子态密度. 由图 3 可以看出, 总态密度按频率可分为 0—4.74 THz 的低频区和 5.73—10.44 THz 的高频区. 低频区中, 总态密度在 3.33, 4.05 THz 处出现峰值, 这主要是由原子质量较大的稀土元素 Eu 和过渡金属 Ni 贡献的; 而高频区中, 总态密度在 7.68, 8.55 和 10.29 THz 处出现峰值, 这主要是由原子质量较小的元素 Si 贡献的. 我们可以用原子之间的相互作用势来分析其原因. 声子态密度反映了晶格动力学性质, 比如元素 Eu 和元素 Si

相互作用时, 由于 Eu 的原子质量较大, 可以假定 Eu 相对于 Si 原子是不动的, 则会有部分 Si 原子被限制在 Eu-Si 的“势阱”中, 致使 Eu 只能受到 Eu-Si 形成的局域模影响, 从而只能对低频振动有贡献, 而由于 Si 原子质量较小, 因此其对高频振动贡献较大. 由以上分析可知, 在整个振动频率区域内, 原子质量较大的元素随着频率的升高对声子态密度的贡献越来越弱, 而原子质量较小的元素随着频率的升高对声子态密度的贡献越来越突出.

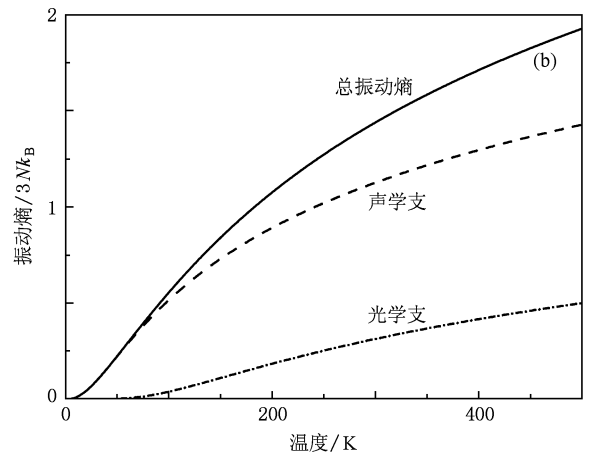
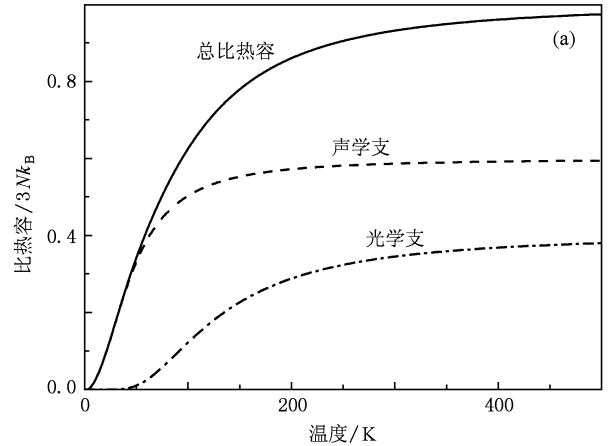


图4  $\text{EuNi}_2\text{Si}_2$  的比热容和振动熵随温度的变化 (a) 比热容随温度的变化, (b) 振动熵随温度的变化

图 4 为  $\text{EuNi}_2\text{Si}_2$  晶体结构的比热容和振动熵随温度的变化曲线. 由图 4 可知, 比热容和振动熵都随着温度的升高而逐渐升高, 并且在低温区声学支的贡献占据主要部分, 光学支的贡献几乎为零, 而随着温度的升高, 光学支的贡献越来越突出. 由于声学支和光学支分别由低频区和高频区的局域模构成, 所以结合声子态密度图可知, 在低温区元素 Eu 和 Ni 对比热容和振动熵的贡献较大, 随着温度的升

高, 元素 Si 的贡献越来越突出.

## 4. 结 论

本文从镍基超导母体材料的组成和结构出发, 应用 Chen-Möbius 晶格反演理论获得原子间相互作用对势, 对“122”体系的镍基超导母体材料  $\text{EuNi}_2\text{Si}_2$  不同空间群结构进行了原子级模拟. 通过研究晶体的结构弛豫、切变拉伸、随机扰动和 X 射线衍射谱, 判定空间群号为 139 的晶体结构是最稳定的, 这与实验结果相一致, 计算得到的晶格参数也与实验符合非常好. 另外, 对于空间群号为 139 的稳定晶体结

构, 我们还计算了它的声子态密度和热力学性质. 计算结果表明, 组成母体材料的各种元素在不同的频率区域对声子态密度的贡献是不一样的, 低频范围内原子质量较大的稀土元素 Eu 的贡献较大, 随着频率的升高, 原子质量较小的元素 Si 的贡献越来越突出. 对于比热容和振动熵, 在低温范围内元素 Eu 和 Ni 的贡献较大, 随着温度的升高, 元素 Si 的贡献越来越突出. 本文的研究结果对进一步分析新型镍基超导母体材料提供了参考, 然而, 当母体材料更为复杂或是在不同晶位替换实现第四组元掺杂时, 将有待于我们进一步利用原子之间的相互作用势对晶体结构及其性质做进一步的研究.

- [1] Dou S X, Liu H K, Guo Y C 1993 *Appl. Supercond.* **1** 1515
- [2] Hardono T, Cook C D, Jin J X 1998 *Supercond. Sci. Technol.* **11** 1087
- [3] Hardono T, Cook C D, Jin J X 1999 *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **9** 813
- [4] Maguire J F, Schmidt F, Hamber F, Welsh T E 2005 *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **15** 1787
- [5] Guo X B, Cao B S, Wei B, Zhu M H, He W J, Yin Z S, He S, Gao B X 2003 *Chin. J. Low Temp. Phys.* **25** 55 (in Chinese) [郭旭波、曹必松、魏 斌、朱美红、何文俊、尹哲胜、何 山、高葆新 2003 低温物理学报 **25** 55]
- [6] Yin Z S, Wei B, Cao B S, Guo X B, Zhang X P, He W J, He S, Gao L M, Zhu M H, Gao B X 2006 *Chin. J. Low Temp. Phys.* **28** 272 (in Chinese) [尹哲胜、魏 斌、曹必松、郭旭波、张晓平、何文俊、何 山、郜龙马、朱美红、高葆新 2006 低温物理学报 **28** 272]
- [7] Rango P D, Lees M, Lejay P, Sulpice A, Tourmier R, Ingold M, Gerni P, Pernet M 1991 *Nature* **349** 770
- [8] Wang J S, Wang S Y, Zeng Y W, Huang H Y, Luo F, Xu Z P 2002 *Physica C* **378—381** 809
- [9] Wang S Y, Wang J S, Ren Z Y, Jiang H, Zhu M, Wang X R, Tang Q X 2001 *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **11** 1808
- [10] Terai M, Igarashi M, Kusada S, Nemoto K, Kuriyama T, Hanai S, Yamashita T, Nakao H 2006 *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **16** 1124
- [11] Nishijima N, Saho N, Asano K, Hayashi H, Tsutsumi K, Murakami M 2003 *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **13** 1580
- [12] Steurer M, Hribernik W 2005 *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **15** 1887
- [13] Hanai S, Shimada M, Tsuchihashi T, Kurusu T, Ono M, Shimada K, Koso S, Tsutsumi K, Naqaya S 2003 *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **13** 1810
- [14] Nagaya S, Hirano N, Shikimachi K, Hanai S, Inaqaki J, Maruyama K, Ioka S, Ono M, Ohsemochi K, Kurusu T 2004 *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **14** 770
- [15] Fukushima K, Tanaka K, Wakuda T, Okada M, Ohata K, Sato J, Kiyoshi T, Wada H 2001 *Physica C* **357—360** 1297
- [16] Kang L, Inui Y, Matsuo T, Ishikawa M, Umoto J 2000 *Ener. Convers. Manage.* **41** 1453
- [17] Kamihara Y, Watanabe T, Hirano M, Hosono H 2008 *J. Am. Chem. Soc.* **130** 3296
- [18] Chen X H, Wu T, Wu G, Liu R H, Chen H, Fang D F 2008 *Nature* **453** 761
- [19] Chen G F, Li Z, Wu D, Li G, Hu W Z, Dong J, Zheng P, Luo J L, Wang N L 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 247002
- [20] Ren Z A, Yang J, Lu W, Yi W, Che G C, Dong X L, Sun L L, Zhao Z X 2008 *Mater. Res. Innovations* **12** 105
- [21] Ren Z A, Yang J, Lu W, Yi W, Shen X L, Li Z C, Che G C, Dong X L, Sun L L, Zhou F, Zhao Z X 2008 *Europhys. Lett.* **82** 57002
- [22] Ren Z A, Lu W, Yang J, Yi W, Shen X L, Li Z C, Che G C, Dong X L, Sun L L, Zhou F, Zhao Z X 2008 *Chin. Phys. Lett.* **25** 2215
- [23] Wang C, Li L J, Chi S, Zhu Z G, Ren Z, Li Y, Wang Y T, Lin X, Luo Y K, Jiang S, Xu X F, Cao G H, Xu Z A 2008 *Europhys. Lett.* **83** 67006
- [24] Chen Y Q, Luo J, Liang J K, Li J B, Rao G H 2009 *Chin. Phys. B* **18** 4944
- [25] Mayer I, Felner I 1977 *J. Phys. Chem. Solids* **38** 1031
- [26] Chen N X, Ren G B 1992 *Phys. Rev. B* **45** 8177
- [27] Chen N X, Chen Z D, Wei Y C 1997 *Phys. Rev. E* **55** R5
- [28] Chen N X, Ge X J, Zhang W Q, Zhu F W 1998 *Phys. Rev. B* **57** 14203
- [29] Zhang W Q, Xie Q, Ge X J, Chen N X 1997 *J. Appl. Phys.* **82** 578
- [30] Chen Y, Shen J 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** S146 (in Chinese) [陈 怡、申 江 2009 物理学报 **58** S146]
- [31] Chen Y, Shen J 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** S141 (in Chinese) [陈 怡、申 江 2009 物理学报 **58** S141]
- [32] Zhang S, Chen N X 2002 *Phys. Rev. B* **66** 064106

# Structure and thermodynamic properties of Ni based superconductive material $\text{EuNi}_2\text{Si}_2$ \*

Wang Yu-Jie<sup>1)†</sup> Zhou Jun-Min<sup>1)</sup> Qian Ping<sup>2)</sup> Shen Jiang<sup>2)</sup>

1) (*Department of Physics and Electronic Engineering, Zhoukou Normal University, Zhoukou 466000, China*)

2) (*Institute of Applied Physics, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China*)

(Received 7 December 2009; revised manuscript received 28 May 2010)

## Abstract

We investigate the structure stability, stretching, compressing, shearing, random shifting and X-ray diffraction of Ni based superconductive material  $\text{EuNi}_2\text{Si}_2$  with different space group numbers based on inversed interatomic potentials obtained with Chen-Möbius lattice-inversion technique. It is found that the space group number of 139 has the lowest binding energy and the structure is the most stable. Furthermore, the phonon density and the thermodynamic properties of the stable structure are calculated and discussed. The phonon density of states shows that the low frequency range is dominated by the rare-earth element Eu with larger atomic mass. While with frequency increasing, the Si atoms with smaller atomic mass become more and more prominent. For the specific heat and the vibrational entropy, Eu and Ni contribute more in the low temperature range, Si becomes more and more prominent with temperature increasing.

**Keywords:** Chen-Möbius lattice-inversion, interatomic potentials, thermodynamic properties

**PACC:** 6155, 3420, 6550

---

\* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 2006CB605101) and the Young Research Foundation of Zhoukou Normal University, China (Grant No. ZKNUQN200913).

† E-mail: scuwangyujie@126.com