

# 高压下 $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$ 弹性性质、电子结构和热力学性质的第一性原理研究\*

颜小珍 邝小渝<sup>†</sup> 毛爱杰 匡芳光 王振华 盛晓伟

(四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

(2012年12月6日收到; 2012年12月26日收到修改稿)

采用密度泛函理论中的赝势平面波方法研究了高压下超导材料  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  的弹性性质、电子结构和热力学性质. 分析表明, 弹性常数、体弹模量、剪切模量、杨氏模量和弹性各向异性因子的外压力效应明显. 电子态密度 (DOS) 的计算结果显示, 在费米能级 ( $E_F$ ) 处的 DOS 峰随外界压强的增大显著降低, 由于  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  相对较高的超导温度 ( $T_c$ ) 起因于  $E_F$  处的 DOS 峰, 因此推测压强增大可能会降低  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  的  $T_c$ . 类似的现象在超导材料  $\text{MgB}_2$  和  $\text{SrAlSi}$  中已被发现. 此外, 基于准谐德拜模型, 对  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  在高温高压下的热力学性质的研究表明, 在一定范围内, 温度和压强将对其热膨胀系数和热容产生明显的影响.

**关键词:** 高压, 弹性性质, 电子结构, 热力学性质

**PACS:** 74.62.Fj, 62.20.D-, 74.20.Pq, 74.25.Bt

**DOI:** 10.7498/aps.62.107402

## 1 引言

材料的磁性和超导电性这两种不同的有序态通常会相互排斥. 然而在镍硼碳体系  $\text{RNi}_2\text{B}_2\text{C}$ <sup>[1,2]</sup> ( $R$  为稀土元素和  $Y$ ) 中, 人们却观察到磁性和超导电性共存的现象<sup>[1-3]</sup>, 这一发现引起了学者对这两种性质相互关联的兴趣. 目前认为  $\text{RNi}_2\text{B}_2\text{C}$  相对较高的超导温度是由费米能级处的态密度峰引起的<sup>[4-6]</sup>, 且与其晶格参数密切相关<sup>[7]</sup>.  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  是其中一种典型的材料, 其超导转变温度 ( $T_c$ ) 为 11 K, 当温度降低到 6 K 和 2.3 K 时, 除超导电性外还分别表现出反铁磁和弱铁磁特性<sup>[8-11]</sup>. 众所周知, 压强能有效地改变材料的晶体结构和电子结构, 因此也有可能改变其费米能级 ( $E_F$ ) 处的电子态密度 (DOS), 甚至影响材料的超导电性. 由于  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  在  $E_F$  处态密度峰的存在, 所以研究其高压下的性质尤其引人关注. 并且  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  有趣的超导行为已经被一些学者发现. Schmid 和 Braun<sup>[12]</sup>

通过高压 (1.5 GPa) 实验发现其  $T_c$  随压强的增加呈线性降低 (-0.082 K/GPa). 而 Alleno 等<sup>[13]</sup> 却发现  $T_c$  随压强增加而升高 (+0.17 K/GPa), 并且在 1 GPa 时达到最大. 然而在压强高于 2 GPa 时, 关于  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  的研究却非常有限, 尤其是它的弹性性质和电子结构. 本文采用第一性原理方法系统研究了  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  在高压下的弹性性质、电子结构和热力学性质. 目的是: 1) 探究高压对  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  晶体结构和电子结构的影响, 寻找高压导致的超导转变信号; 2) 预测该材料在不同压强下的弹性性质; 3) 研究其在高温高压下的热力学行为. 本文研究有助于深入理解  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  及  $\text{RNi}_2\text{B}_2\text{C}$  系列材料的各种物理性质.

## 2 理论模型和计算方法

常温常压下  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  属于四方晶系, 空间群为  $I4/mmm$ , 由 Er-C 平面 (磁性层) 和  $\text{Ni}_2\text{-B}_2$  层 (超导层) 交错堆叠而成, 其晶体结构如图 1 所示<sup>[2]</sup>. 本

\* 国家自然科学基金青年科学基金 (批准号: 11104190)、国家自然科学基金 (批准号: 11274235) 和高等学校博士学科点专项科研基金 (批准号: 20100181110086, 20110181120112) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯作者. E-mail: scu.kxy@163.com

文计算是在基于密度泛函理论的软件包 VASP<sup>[14,15]</sup> 中完成的, 其中赝势选择了 projected augmented wavefunction (PAW) 中的 GGA-PW91<sup>[16]</sup> 和 GGA-PBE<sup>[17]</sup>, 波函数动能截断能取 600 eV. 布里渊区  $k$  点取样利用 Monkhorst-Pack 方案, 并分别采用  $9 \times 9 \times 7$  和  $19 \times 19 \times 15$  的  $k$  点网格进行结构优化和电子结构的计算. 能量自洽精度设置为平均每个原子  $1 \times 10^{-6}$  eV. 在计算弹性常数时, 我们对晶格施加不同的微小应变, 优化应变后的结构并计算体系在应变前后的能量差. 在应变很小时, 这个能量差与应变成二次线性关系, 对其拟合可得到晶体的弹性常数. 这种通过应力-应变计算晶体弹性常数的方法在很多材料中被成功运用<sup>[18-21]</sup>. 另外, 在热力学性质的计算时, 我们采用的是准谐德拜模型<sup>[22]</sup>.

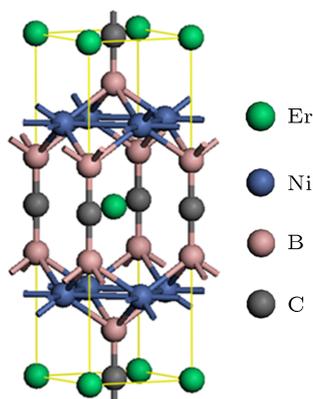


图1 ErNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C 晶体结构

### 3 结果与讨论

#### 3.1 晶体结构

基于实验测量得到的晶格参数和原子位置, 我们首先对 ErNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C 进行结构优化, 通过将体系的总能和对应的体积拟合到 Murnaghan 物态方程 (EOS) 中得到了 ErNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C 的平衡晶格常数  $a_0$ ,  $c_0$ , 平衡体积  $V_0$  和体弹模量  $B_0$ , 其值列于表 1, 同时列出了相应的实验值<sup>[23]</sup>. 从中可以看出, 使用 GGA-PW91 和 GGA-PBE 这两种赝势计算得到的平衡体积与实验值的误差都在 0.4% 以内, 且平衡晶格参数也与实验值符合得较好. 这说明我们选择的赝势和交换关联近似是合理的, 从而可以保证计算的可靠性.

在高压性质的计算中, 选择了 PW91 泛函, 因

为相对 PBE 来说, 其预测的平衡体积要更为精确 (见表 1). 在图 2(a) 中给出了  $a/a_0$ ,  $c/c_0$  和  $V/V_0$  随压强的变化关系 ( $a$ ,  $c$  和  $V$  分别表示加压后的晶格常数和平衡体积). 随着压强的增大, 它们的值连续减小, 并且  $c/c_0$  比  $a/a_0$  减小得更快, 这说明沿着  $c$  轴压缩要比沿着  $a$  轴更容易. ErNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C 这种明显的各向异性压缩行为将导致不同的压强对声子模式的影响, 并且会引起  $E_F$  附近的电子结构的改变. 另外, 图 2(b) 给出了键长之比  $d_{(\text{Er}-\text{C})}/d_{(\text{Er}-\text{C})0}$ ,  $d_{(\text{B}-\text{Er})}/d_{(\text{B}-\text{Er})0}$ ,  $d_{(\text{C}-\text{B})}/d_{(\text{C}-\text{B})0}$  和  $d_{(\text{Ni}-\text{B})}/d_{(\text{Ni}-\text{B})0}$  随压强的变化关系 ( $d$  为加压下的键长,  $d_0$  为零压下的键长). 从中容易看出 ErNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C 材料化学键的各向异性关系. 如图所示,  $d_{(\text{Ni}-\text{B})}/d_{(\text{Ni}-\text{B})0}$  的变化曲线要比其他的变化曲线更为陡峭, 说明 Ni—B 键对压强最为敏感. 这就意味着与超导有密切关系的 Ni<sub>2</sub>-B<sub>2</sub> 层容易受外界压强的影响. 由此, 我们可推测 ErNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C 的超导电性可能会受到外界压强的影响.

表 1 零压下的晶格常数  $a_0$ ,  $c_0$ , 平衡体积  $V_0$ , EOS 拟合得到的体弹模量  $B_0$ , 弹性常数  $C_{ij}$ , Voigt-Reuss-Hill 近似下的体弹模量  $B_V$ ,  $B_R$ ,  $B_H$  和剪切模量  $G_V$ ,  $G_R$ ,  $G_H$ , 杨氏模量  $E$ , 泊松比  $\nu$  和弹性各向异性因子  $A^U$ ,  $A_B$ ,  $A_G$

ErNi <sub>2</sub> B <sub>2</sub> C	Exp.[23]	GGA-PW91	GGA-PBE
$a_0/\text{\AA}$	3.502	3.521	3.520
$c_0/\text{\AA}$	10.558	10.441	10.440
$V_0/\text{\AA}^3$	129.480	129.440	129.430
$B_0/\text{GPa}$		191	188
$C_{11}/\text{GPa}$		281	282
$C_{12}/\text{GPa}$		142	143
$C_{13}/\text{GPa}$		140	140
$C_{33}/\text{GPa}$		273	274
$C_{44}/\text{GPa}$		57	57
$C_{66}/\text{GPa}$		128	130
$B_V/\text{GPa}$		186.6	187.1
$B_R/\text{GPa}$		186.5	187.0
$B_H/\text{GPa}$		186.6	187.1
$G_V/\text{GPa}$		75.9	76.5
$G_R/\text{GPa}$		69.5	69.7
$G_H/\text{GPa}$		72.7	73.1
$B_H/G_H$		2.567	2.560
$E/\text{GPa}$		193	194
$\nu$		0.328	0.327
$A^U$		0.4647	0.4831
$A_B$		0.00015	0.00017
$A_G$		0.04438	0.004605

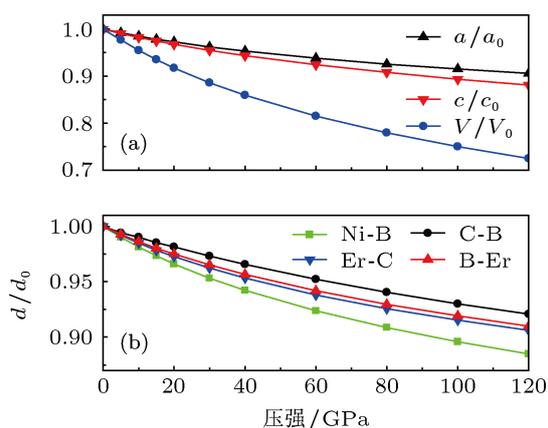


图2 晶格参数随压强的变化关系 (a)  $a/a_0$ ,  $c/c_0$  和  $V/V_0$ ; (b)  $d_{(Er-C)}/d_{(Er-C)0}$ ,  $d_{(B-Er)}/d_{(B-Er)0}$ ,  $d_{(C-B)}/d_{(C-B)0}$  和  $d_{(Ni-B)}/d_{(Ni-B)0}$

### 3.2 力学稳定性和弹性性质

为了研究  $ErNi_2B_2C$  的力学稳定性, 我们利用体系的内能和应变关系计算得到它的弹性常数  $C_{ij}$ . 在此基础上, 采用 Voigt-Reuss-Hill 近似, 得到体弹模量  $B_H$  和剪切模量  $G_H$ . 进一步利用公式  $E = 9B_H G_H / (3B_H + G_H)$  和  $\nu = (3B_H - 2G_H) / (6B_H + 2G_H)$  计算得到杨氏模量  $E$  和泊松比  $\nu$ . 此外, 还计算了  $ErNi_2B_2C$  的弹性各向异性因子  $A^U$  [24] 和  $A_B, A_G$  [25], 可分别表示为:  $A^U = 5G_V / G_R + B_V / B_R - 6$ ,  $A_B = (B_V - B_R) / (B_V + B_R)$  和  $A_G = (G_V - G_R) / (G_V + G_R)$ .

在零压下, 上述弹性参量列于表 1 中. 由计算结果可以得到以下结论.

1) 对于四方晶系, 其力学稳定性要求弹性常数需同时满足以下条件:  $C_{11} > 0, C_{33} > 0, C_{44} > 0, C_{66} > 0, (C_{11} - C_{12}) > 0, (C_{11} + C_{33} - 2C_{13}) > 0, [2(C_{11} + C_{12}) + C_{33} + 4C_{13}] > 0$ . 表 1 数据表明,  $ErNi_2B_2C$  是力学稳定的. 尽管目前还没有看到  $ErNi_2B_2C$  弹性常数实验值, 但是通过与  $RNi_2B_2C$  系列中相近材料  $YNi_2B_2C$  [26] 的实验结果比较发现, 计算得到的  $ErNi_2B_2C$  弹性常数与  $YNi_2B_2C$  的实验值非常接近.  $YNi_2B_2C$  的弹性常数实验值分别为:  $C_{11} = 295$  GPa,  $C_{12} = 158$  GPa,  $C_{13} = 126$  GPa,  $C_{33} = 262$  GPa,  $C_{44} = 64$  GPa 和  $C_{66} = 142$  GPa.

2) 体弹模量  $B_H$  可用于判断晶体中平均价键强度的大小, 其值越高, 相应的平均价键就越强. 计算表明, 由弹性常数计算得到的  $B_H$  与用 EOS 拟合得到的结果符合得很好, 同时也与其他相似物质如  $YNi_2B_2C$  (181 GPa [26], 200 GPa [27]) 和  $LuNi_2B_2C$  (210 GPa [28]) 的体弹模量非常接近. 此外, 剪切模量

$G_H$  用来衡量材料抵抗外部压力导致的剪切形变能力. 我们发现  $ErNi_2B_2C$  的  $G_H$  值要远大于  $B_H$ , 这说明限制其力学稳定性的参量主要是  $G_H$ .

3) 根据 Pugh [29] 提出的晶体力学行为的标准, 若  $B_H / G_H > 1.75$ , 则材料是易延展的, 反之, 若  $B_H / G_H < 1.75$  则是易碎的. 分析可知,  $ErNi_2B_2C$  的  $B_H / G_H$  值大于 1.75, 表现出延展性特征.

4)  $A^U$  和  $A_B, A_G$  是衡量材料弹性各向异性的指标. 其中,  $A^U$  的值偏离 0 的大小对应着材料弹性各向异性的强弱 [24],  $A_B$  和  $A_G$  的值越接近 1, 其弹性各项异性就越强 [25]. 如表 1 所示,  $A^U, A_B$  和  $A_G$  的值都接近 0, 表明  $ErNi_2B_2C$  的弹性各项异性较弱.

图 3—5 给出了上述弹性参量随压强的变化关系. 从中可以发现, 除  $C_{44}$  外, 所有参量都随着压强的增大而显著增大, 但增大的比率有所不同. 由于体弹模量  $B$  随压强单调增加, 而弹性常数  $C_{44}$  却基本保持不变, 因此随着压强的增大它们的比值将不断增大, 即在高压条件下  $ErNi_2B_2C$  容易发生切变, 这与上述剪切模量的分析是一致的.

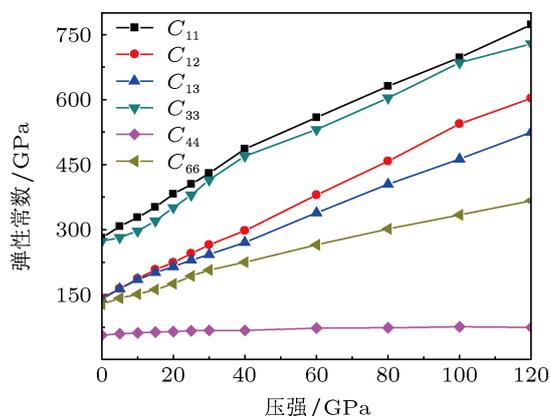


图3 弹性常数  $C_{ij}$  随压强的变化关系

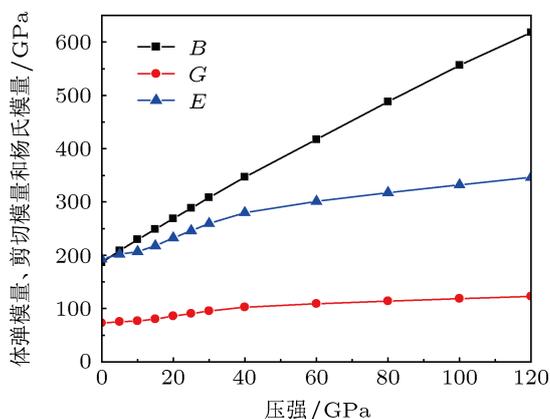
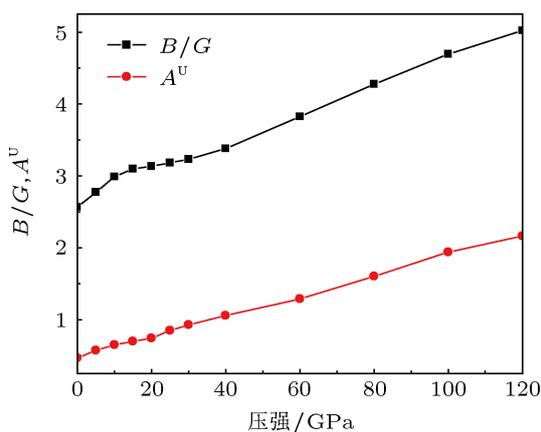


图4 体弹模量  $B$ , 剪切模量  $G$  和杨氏模量  $E$  随压强的变化关系

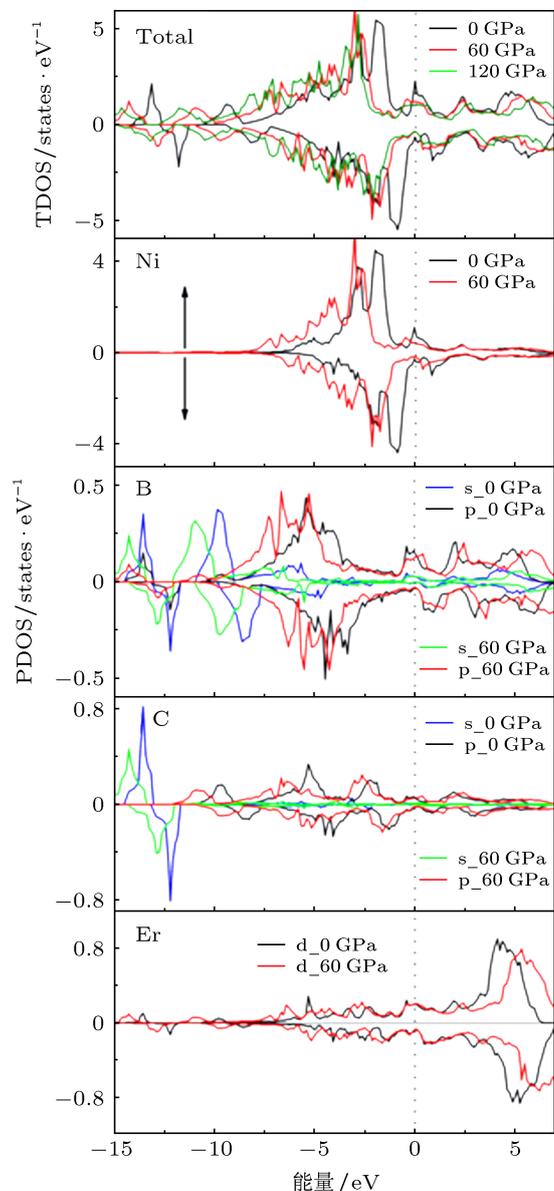

 图5  $B/G$  和弹性各向异性因子  $A^u$  随压强的变化关系

### 3.3 电子结构性质

电子结构性质对理解材料的超导性起着重要的作用, 因为超导性通常是由  $E_F$  附近电子结构的改变而引起的. 图 6 为  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  在外界压强为 0, 60 和 120 GPa 时的总态密度 (TDOS) 和各个原子的分波态密度 (PDOS) 分布图 (120 GPa 时只给出了 TDOS 图). 从中可以看出当压强为零时,  $E_F$  处没有出现带隙, 且自旋向上和自旋向下的子带都穿过费米面, 这说明  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  呈现金属性, 且其金属性由所有原子贡献. 同时, 在  $E_F$  处我们还发现一个较高的 DOS 峰, 其主要来自 Ni-3d 和 B-2p 态的贡献, 这个 DOS 峰的出现, 为  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  产生超导性提供了有利的条件. 另外, 我们发现在  $E_F$  附近的两个 DOS 峰之间, 有一明显的赝能隙, 这也在文献 [30] 中被报道过.  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  赝能隙的出现, 一方面可能与其  $E_F$  处强的 Ni-3d 和 B-2p 杂化有关, 因为它可以降低成键态而增加反键态的能量; 另一方面也可能与 Ni-3d 的电子“共振”和 B-2p 与 C-2p 的共价作用有关. 从图 6 还可以看出, 所有的原子轨道都发生了自旋能级劈裂, 且价带区自旋向上的电子数略多于自旋向下 (自旋正向劈裂), 从而引起体系自旋对称性破缺, 这是体系弱铁磁性的主要根源 (温度低于 2.3 K 时).

当外界压强为 60 和 120 GPa 时, 从 TDOS 图中, 我们发现所有的 DOS 峰都有偏离费米能级的趋势 (价带移向低能量区, 导带移向高能量区), 并且随着压强的增大,  $E_F$  处的 DOS 峰值明显降低. 由于  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  相对较高的超导温度 ( $T_c$ ) 是由  $E_F$  处突出的 DOS 峰引起的, 因此我们推测, 压强增大可能会降低  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  材料的  $T_c$ . 另外, Wang 等 [31] 和

Lorenz 等 [32] 也分别在超导体  $\text{MgB}_2$  和  $\text{SrAlSi}$  中发现了这个现象, 并认为其  $T_c$  随压强增大而降低主要是由  $E_F$  处的 DOS 随压强增大而降低引起的.


 图6 不同压强的 TDOS 和各个原子的 PDOS ( $\uparrow$  表示自旋向上,  $\downarrow$  表示自旋向下, 费米能级设为 0 eV)

### 3.4 热力学性质

对材料热力学性质的研究是凝聚态物理中的一个热门话题. 我们通过准谐德拜模型计算了  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  在高温高压下的热力学性质. 图 7 给出了  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  热膨胀系数  $\alpha$  在不同压强  $P$  下随温度  $T$  的变化关系. 如图所示, 当  $T < 300$  K 时,  $\alpha$  随温度的升高迅速增大. 当  $T > 300$  K 时,  $\alpha$  增加得较为缓慢, 并逐渐呈现一个微小斜率的线性增加. 另外还可以看出, 当温度一定时, 压强越大  $\alpha$  越小, 而且

在高温区,  $\alpha$  随压强的变化就更明显. 这说明压强对  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  的热膨胀性有一定的调节作用, 并且温度越高这种调节作用就越有效, 因为外加压力可以使晶体的结构更加紧致.

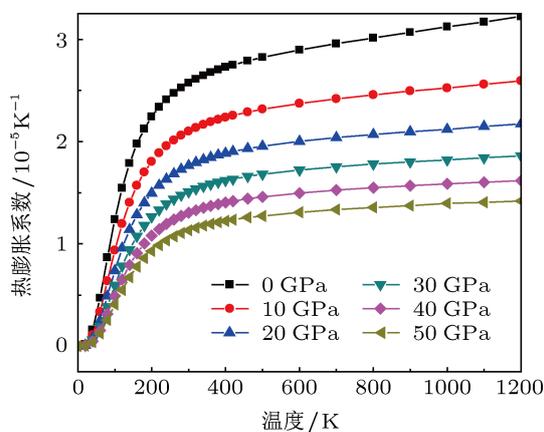


图7 不同压强下热膨胀系数  $\alpha$  随温度的变化关系

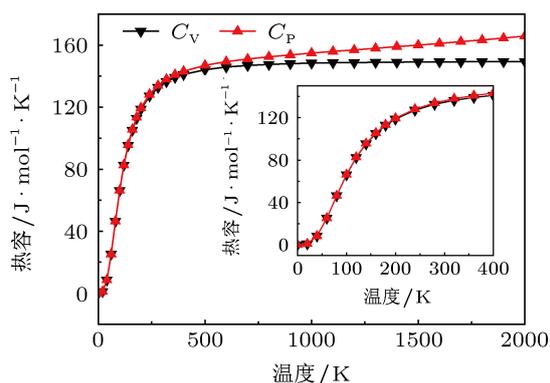


图8 零压下定压热容  $C_p$  和定容热容  $C_v$  随温度的变化关系, 插图为 0—400 K 的放大图

图8给出的是定压热容  $C_p$  和定容热容  $C_v$  在 0 压下随温度  $T$  的变化情况. 可以发现在温度低于 400 K 时,  $C_p$  和  $C_v$  随温度的变化曲线重合, 并且符合德拜三次方定律 (见插图). 然而当温度高于 400 K 时,  $C_p$  和  $C_v$  曲线逐渐分开,  $C_p$  随温度单调递增, 而  $C_v$  逐渐接近常数 Dulong-Petit 极限  $3nN_A k_B$  ( $n$  为分子中的原子个数,  $N_A$  为阿伏伽德罗常数,  $k_B$  为玻尔兹曼常数), 对于  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$ ,  $n = 6$ , 即极限值为  $149.4 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ .

## 4 结论

本文利用第一性原理平面波赝势密度泛函理论计算了超导材料  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  在高压下的弹性性质, 电子结构和热力学性质. 获得了不同压强下的弹性常数、体弹模量、剪切模量、杨氏模量、泊松比和弹性各向异性因子. 分析表明  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  是一种具有较弱弹性各向异性的延展性材料且易受外加压力的影响. DOS 的计算结果显示, 在零压下, TDOS 和 PDOS 在  $E_F$  处会出现一个峰, 随着压强的增大, Ni-3d 和 B-2p 态在  $E_F$  处的 DOS 明显降低, 并导致 TDOS 在  $E_F$  处的峰值降低. 由于  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  相对较高的超导温度  $T_c$  起因于  $E_F$  处的 DOS 峰, 所以我们推测压强增大可能会降低  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  的  $T_c$ . 基于准谐德拜模型, 对  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  在高温高压下的热力学性质的研究显示, 定压热容  $C_p$  和定容热容  $C_v$  都随温度的升高迅速增大, 且当温度高于一定值时,  $C_p$  成小幅度的线性增长,  $C_v$  趋于 Dulong-Petit 极限.

- [1] Cava R J, Takagi H, Zandbergen H W, Krajewski J J, Peck Jr W F, Siegrist T, Batlogg B, van Dover R B, Felder R J, Mizuhashi K, Lee J O, Eisaki H, Uchida S 1994 *Nature* **367** 252
- [2] Siegrist T, Zandbergen H W, Cava R J, Krajewski J J, Peck Jr W F 1994 *Nature* **367** 254
- [3] Cho B K, Canfield P C, Johnston D C 1995 *Phys. Rev. B* **52** 3844
- [4] Pickett W E, Singh D J 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 3702
- [5] Mattheiss L F 1994 *Phys. Rev. B* **49** 13279
- [6] Hoellwarth C C, Klavins P, Shelton R N 1996 *Phys. Rev. B* **53** 2579
- [7] Sánchez D R, Micklitz H, Baggio-Saitovitch E M 2005 *Phys. Rev. B* **71** 024509
- [8] Canfield P C, Gammel P L, Bishop D J 1998 *Phys. Today* **51** 40
- [9] Bud'ko S, Canfield P 2006 *C. R. Phys.* **7** 56
- [10] Choi S M, Lynn J W, Lopez J W, Gammel P L, Canfield P C, Bud'ko S L 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 107001
- [11] Kawano-Furukawa H, Takeshita H, Ochiai M, Nagata T, Yoshizawa H, Furukawa N, Takeya H, Kadowaki K 2002 *Phys. Rev. B* **65** 180508
- [12] Schmidt H, Braun H F 1994 *Physica C* **229** 315
- [13] Alleno E, Neumeier J J, Thompson J D, Canfield P C, Cho B K 1995 *Physica C* **242** 169
- [14] Kresse G, Hafner J 1993 *Phys. Rev. B* **47** 558
- [15] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [16] Perdew J P, Chevary J A, Vosko S H, Jackson K A, Pederson M R, Singh D J, Fiolhais C 1992 *Phys. Rev. B* **46** 6671
- [17] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [18] Jiao Z Y, Yang J F, Zhang X Z, Ma S H, Guo Y L 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 117103 (in Chinese) [焦照勇, 杨继飞, 张现周, 马淑红, 郭永亮 2011 物理学报 **60** 117103]
- [19] Li S N, Liu Y 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 6882 (in Chinese) [李世娜, 刘永 2010 物理学报 **59** 6882]
- [20] Zhang W, Chen W Z, Wang J F, Zhang X D, Jiang Z Y 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 246201 (in Chinese) [张炜, 陈文周, 王俊斐, 张小东, 姜振益 2012 物理学报 **61** 246201]
- [21] Chen H C, Yang L J 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 014207 (in Chinese) [陈

- 海川, 杨利君 2011 物理学报 **60** 014207]
- [22] Blanco M A, Francisco E, Luana V 2004 *Comp. Phys. Commun.* **158** 57
- [23] Lynn J W, Skanthakumar S, Huang Q, Sinha S K, Hossain Z, Gupta L C, Nagarajan R, Godart C 1997 *Phys. Rev. B* **55** 6584
- [24] Ranganathan S I, Ostoja-Starzewski M 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 055504
- [25] Chung D H, Buessem W R 1968 edited by Vahldiek F W, Mersol S A *Anisotropy in Single Crystal Refractory Compound* (Vol.2) (New York: Plenum) p217
- [26] Rourke P M C, Paglione J, Ronning F, Taillefer L, Kadowaki K 2003 *Physica C* **397** 1
- [27] Meenakshi S, Vijayakumar V, Rao R S, Sikka B K, Ravindran P, Hos-sain Z, Nagarajan R, Gupta L C, Vijayaraghavan R 1998 *Phys. Rev. B* **58** 3377
- [28] Weht R, Cappannini O M, Rodríguez C O, Christensen N E 1996 *Physica C* **260** 125
- [29] Ravindran P, Fast L, PKorzhavyi. A, Johansson B, Wills J, Eriksson O 1998 *J. Appl. Phys.* **84** 4891
- [30] Calegari E J, Magalhães S G, Chaves C M, Troper A 2011 *Supercond. Sci. Technol.* **24** 035004
- [31] Wang Y C, Lü J, Ma Y M, Cui T, Zou G T 2009 *Phys. Rev. B* **80** 092505
- [32] Lorenz B, Cmaidalka J, Meng R L, Chu C W 2003 *Phys. Rev. B* **68** 014512

# First-principles study on the elastic, electronic and thermodynamic properties of $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$ under high pressure\*

Yan Xiao-Zhen   Kuang Xiao-Yu<sup>†</sup>   Mao Ai-Jie   Kuang Fang-Guang  
Wang Zhen-Hua   Sheng Xiao-Wei

(Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610065, China)

(Received 6 December 2012; revised manuscript received 26 December 2012)

## Abstract

The elastic, electronic and thermodynamic properties of the superconducting  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  material at high pressure are investigated using the plane-wave pseudopotential density functional theory. The analysis shows the dependences of the elastic constants, bulk modulus, shear modulus, Young's modulus and elastic anisotropy factors on the applied pressure. The calculated electronic density of states (DOS) reveals that the DOS peak at the Fermi level ( $E_F$ ) will decrease noticeably with pressure. It can be concluded that the pressure may reduce the superconducting temperature ( $T_c$ ) of  $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$  since the relatively high  $T_c$  originates from the peak in the DOS. This phenomenon is also found in some other superconductors such as  $\text{MgB}_2$  and  $\text{SrAlSi}$ . Moreover, based on the quasi-harmonic Debye model, the results of the thermodynamic properties indicate that the pressure and temperature have significant influences on the thermal expansion coefficient and heat capacity.

**Keywords:** high pressure, elastic properties, electronic structure, thermodynamic properties

**PACS:** 74.62.Fj, 62.20.D-, 74.20.Pq, 74.25.Bt

**DOI:** 10.7498/aps.62.107402

\* Project supported by the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11104190), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11274235) and the Doctoral Education Fund of Education Ministry of China (Grant Nos. 20100181110086, 20110181120112).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: scu\_kxy@163.com