

doi: 10.3969/j.issn.0490-6756.2019.06.014

# Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub>弹性模量和热力学性质模拟研究

李 迎<sup>1</sup>, 谭嘉进<sup>1,2</sup>, 姬广富<sup>2</sup>

(1. 东华理工大学理学院, 南昌 330013; 2. 中国工程物理研究院流体物理研究所 冲击波与爆炸物理实验室, 绵阳 621900)

**摘要:** 利用第一性原理结合赝势平面波方法研究了立方(空间群:P4232, No. 208)和四方(空间群:P42/nmcs, No. 137)Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub>的晶体结构、状态方程、弹性常数. 将晶胞能量-体积关系按 Birch - Murnaghan 状态方程拟合得到体弹模量及其对压强的一阶导数. 另外, 根据 Voigt - Reuss - Hill 关系预测了 Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub> 晶体的力学性质. 最后, 通过准谐德拜模型得到 Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub> 晶体在不同温度下的热膨胀系数、绝热体弹模量、晶胞体积和等体热容.

**关键词:** Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub>; 第一性原理; 弹性模量

**中图分类号:** O56 **文献标识码:** A **文章编号:** 0490-6756(2019)06-1081-06

## Theoretical study on elastic modulus and thermodynamic properties of Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub>

LI Ying<sup>1</sup>, TAN Jia-Jin<sup>1,2</sup>, JI Guang-Fu<sup>2</sup>

(1. School of Science, East China University of Technology, Nanchang 330013, China;

2. Laboratory for Shock Wave and Detonation Physics Research, Institute of Fluid Physics, Chinese Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China)

**Abstract:** We have performed theoretical investigations on the structure, equation of state (EOS), elasticity of the cubic (space group of P4232, No. 208) and tetragonal (space group of P42/nmcs, No. 137) Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub> crystals by using the first-principles pseudopotential plane-wave method. The bulk modulus and its pressure derivation are obtained by fitting the energy - volume points to Birch - Murnaghan equation of state. Moreover, according to the Voigt - Reuss - Hill approximation, the elastic moduli of Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub> are also successfully predicted. By employing the quasi-harmonic Debye model, the thermal expansion coefficient, bulk modulus, cell volume and heat capacity at different temperatures are also obtained.

**Keywords:** Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub>; First-principles method; Elastic modulus

## 1 引言

II-V 族半导体是由第二副族元素(Zn, Cd)与第五主族元素(N, P, As 等)形成, 如 Cd<sub>3</sub>P<sub>2</sub>, Zn<sub>3</sub>P<sub>2</sub>, Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub> 及 Zn<sub>3</sub>As<sub>2</sub> 等. 它们具有禁带窄、电子有效质量小、Bohr 半径大、能够实现宽波段发光、性质稳定等优点, 是应用于光电探测器、太阳能电池、激

光器、LED 的理想材料<sup>[1]</sup>. Bawendi 等用热注射方法合成高质量 Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub> 纳米晶, 通过调节尺寸(2~5 nm)便可实现从 530~2 000 nm 这一广阔的波段范围内发光, 原因是其 Bohr 半径大且载流子有效质量小<sup>[2]</sup>. Burian 等利用 AFM 结合 X-射线散射观察了 Cd<sub>26</sub>As<sub>74</sub> 纳米颗粒膜, 他们发现每个结构单元中的 Cd-As 都是四配位结构, 化学组成也是有

收稿日期: 2019-04-20

基金项目: 东华理工大学博士科研启动基金(DHBK201104); 国家自然科学基金(11664002); 江西省科技厅自然科学基金(20122BAB212011); 东华理工大学博士科研启动基金(DHBK1011)

作者简介: 李迎(1982-), 男, 博士, 主要从事原子与分子物理及其交叉学科的理论研究. E-mail: zbliscu@126.com

通讯作者: 谭嘉进. E-mail: tjjsu@126.com

序的<sup>[3]</sup>. 综合多个课题组对  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  磁输运性质的研究可得出如下结论: 单周期的 SdH 振荡表明  $E_F < E_L$ , 费米面近似于球形<sup>[4-7]</sup>.

Turner 等首次报道  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  有非常高的电子迁移速率  $1.5 \text{ m}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ , 同时还利用光吸收法测定  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  室温下带隙非常小, 仅为  $0.13 \text{ eV}$ <sup>[8]</sup>. 早期的研究将  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  视为类 Kane 半导体或者半金属, 虽然可以一定程度上解释迁移率大以及带隙小的问题, 但是会出现在较高能量情况下导带与价带的排序相矛盾的状况<sup>[9-10]</sup>. 后来, 人们意识到  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  是受晶体对称性保护的三维拓扑狄拉克半金属. Wang 等通过理论计算发现  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  是一种具有三维狄拉克费米子的拓扑半金属材料, 并预言其存在线性磁电阻<sup>[11]</sup>. 后来多个实验发现了  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  独特的能带结构并证明其存在三维的狄拉克点, 证实 Wang 等理论预测的正确性<sup>[12-14]</sup>.

多个实验研究了  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  的三维拓扑狄拉克半金属性质以及实验合成等<sup>[1-14]</sup>, 但对于它的晶格参数及弹性模量的理论研究较少. 本文通过第一性原理方法研究立方结构和四方结构  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  的晶格参数、弹性模量和热力学性质.

## 2 计算方法

晶体电子结构计算采用基于密度泛函理论的赝势平面波方法, 模守恒赝势平面波截断能设置为  $450 \text{ eV}$ . 交换关联能采用局域密度近似(local density approximation, LDA) 方法结合(ceperley - alder and perdew - zunger, CA-PZ)形式交换关联泛函获得<sup>[15]</sup>. 密度泛函自洽计算能量收敛精度为  $1 \times 10^{-6} \text{ eV/atom}$ . 立方结构  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  布里渊区积分采用  $6 \times 6 \times 6$  网格; 四方结构  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  布里渊区积分采用  $4 \times 4 \times 3$  网格. 布里渊区 K 点的积分网络采用 Monkhorst-Pack 形式进行处理<sup>[16]</sup>. 模拟体系价电子态分别为  $\text{Cd}4s^2 4p^3$  和  $\text{As}4d^{10} 5s^2$ . 立方结构(空间群: P4232, No. 208)和四方结构(空间群: P42/nmcs, No. 137)  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  原子坐标分别取自实验<sup>[17-18]</sup>. 本文电子结构模拟结果通过 CASTEP 程序包计算获得.

## 3 结果与讨论

### 3.1 晶格参数计算

晶体基态晶格参数对于研究材料的其他各项性质至关重要. 我们首先计算不同晶胞体积、晶格常数所对应的能量. 根据晶胞体积、晶格常数与能

量的变化曲线搜索最低能量结构, 该结构所对应的晶格常数即为零温零压下的平衡晶格参数, 如图 1 所示. 将计算所得到的体积-能量数据按三阶 Birch-Murnaghan 状态方程能量-体积关系拟合得到体弹模量  $B_0$  (GPa) 及其对压强的一阶导数  $B_0'$ <sup>[19]</sup>.

$$E(V) = E_0 + \frac{9V_0 B_0}{16} \left\{ \left[ \left( \frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right]^3 B_0' + \left[ \left( \frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right]^2 \left[ 6 - 4 \left( \frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} \right] \right\} \quad (1)$$

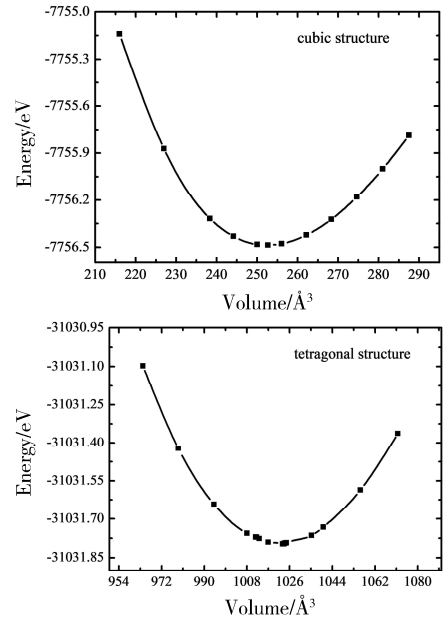


图 1  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  晶胞体积与能量的关系  
Fig. 1 The variation of energy versus volume of the unit cell for  $\text{Cd}_3\text{As}_2$

表 1 零温零压下  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  的晶格常数  $a_0$  (Å)、 $c_0$  (Å) 和体弹模量  $B_0$  (GPa) 及其对压强的一阶导数  $B_0'$

Tab. 1 Calculated equilibrium lattice parameters  $a_0$  (Å)、 $c_0$  (Å), bulk modulus  $B_0$  (GPa) and its first pressure derivative  $B_0'$  of  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  at  $T=0 \text{ K}$  and  $p=0 \text{ GPa}$  compared with experimental values

Crystal system	Lattice parameters	This work	Experiment	
Cubic	$a_0$	6.322	6.29 <sup>[17]</sup>	6.323 <sup>[20]</sup>
	$B_0$	60.88		
	$B_0'$	5.05		
Tetragonal	$a_0$	9.005	8.963 <sup>[18]</sup>	8.945 <sup>[21]</sup>
	$c_0$	12.628	12.68 <sup>[18]</sup>	12.65 <sup>[21]</sup>
	$B_0$	62.37		
	$B_0'$	3.91		

我们通过理论计算得到立方结构和四方结构

$\text{Cd}_3\text{As}_2$  晶体的晶格常数  $a_0$  (Å)、 $c_0$  (Å), 体弹模量  $B_0$  (GPa) 及其对压强的一阶导数  $B'_0$  以及其他实验结果列于表 1. 从表 1 可以看出, 我们通过密度泛函理论结合赝势平面波方法得到的平衡状态晶格参数与实验结果符合得很好. 这说明该方法能够有效地模拟  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  晶体的平衡状态晶格参数, 同时也间接证明预测  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  晶体其他性质的可靠性.

### 3.2 弹性模量计算

弹性模量不仅是衡量物体抵抗弹性变形能力大小的尺度, 更是原子、离子或分子之间键合强度的反映. 根据胡克定律, 应力与应变之间成线性关系, 表达公式如下:

$$\sigma_{ij} = \sum_{kl}^{1,3} C_{ijkl} \epsilon_{kl} \quad (2)$$

$\sigma_{ij}$  为应力,  $\epsilon_{kl}$  为应变,  $C_{ijkl}$  为弹性常数. 弹性常数通常有 21 个非零独立变量, 但是如果考虑晶体对称性因素, 非零独立变量将会减少. 例如立方晶系晶体有 3 个独立变量  $C_{11}$ 、 $C_{12}$  和  $C_{44}$ , 四方晶系晶体具有 6 个独立变量  $C_{11}$ 、 $C_{12}$ 、 $C_{13}$ 、 $C_{33}$ 、 $C_{44}$  和  $C_{66}$ .

Voigt<sup>[22]</sup> 和 Reuss<sup>[23]</sup> 分别提出不同的方法计算体弹模量和剪切模量, 在公式中分别用下标 V 和 R 表示.

对于立方晶系 ( $C_{11}$ ,  $C_{12}$  和  $C_{44}$ )

$$B_V = B_R = (C_{11} + 2C_{12})/3 \quad (3)$$

$$G_V = (C_{11} - C_{12} + 3C_{44})/5 \quad (4)$$

$$G_R = 5(C_{11} - C_{12})C_{44}/[4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})] \quad (5)$$

对于四方晶系 ( $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{13}$ ,  $C_{33}$ ,  $C_{44}$  和  $C_{66}$ )

$$B_V = (1/9)[2(C_{11} + C_{12}) + 4C_{13} + C_{33}], \quad (6)$$

$$G_V = (1/30)(M + 3C_{11} - 3C_{12} + 12C_{44} + 6C_{66}) \quad (7)$$

$$B_R = C^2/M, \quad (8)$$

$$G_R = 15\{ (18B_V/C^2) + [6/(C_{11} - C_{12}) + (6/C_{44}) + (3/C_{66})] \} - 1, \quad (9)$$

$$M = C_{11} + C_{12} + 2C_{33} - 4C_{13}, \quad (10)$$

$$C^2 = (C_{11} + C_{12})C_{33} - 2C_{13}^2, \quad (11)$$

在 Voigt - Reuss - Hill (VRH)<sup>[24]</sup> 近似下, 对 Voigt 和 Reuss 方法求得的体弹模量或剪切模量取代数平均值:

$$B_V + B_R = 2B_H, G_V + G_R = 2G_H \quad (12)$$

杨氏模量和泊松比可以通过体弹模量和剪切模量得到, 其计算公式分别为:

$$E = 9BG/(3B + G) \quad (13)$$

$$\sigma = \frac{3B - 2G}{2(3B + G)} \quad (14)$$

在表 2 中, 我们列出立方结构和四方结构  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  晶体在零温零压下的弹性模量. 由于没有关于  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  弹性常数的实验或者其他理论数据, 所以我们列出了 Kaur 等利用第一性原理的方法计算的与  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  相同晶相的  $\text{Zn}_3\text{As}_2$  的弹性模量 ( $C_{11} = 136.966$  GPa,  $C_{12} = 30.536$  GPa,  $C_{13} = 54.044$  GPa,  $C_{33} = 111.800$  GPa,  $C_{44} = 48.827$  GPa,  $C_{66} = 28.808$  GPa)<sup>[25]</sup>, 与他们的计算结果相类比, 我们预测的  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  弹性常数有较高可信度.

表 2 零温零压下  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  的弹性常数  $C_{ij}$  (GPa), 体弹模量  $B_H$  (GPa), 剪切模量  $G_H$  (GPa), 杨氏模量  $E$  (GPa) 和泊松比  $\sigma$

Tab. 2 The calculated elastic constants  $C_{ij}$  (GPa), Bulk elastic modulus  $B_H$  (GPa), shear modulus  $G_H$  (GPa), Young's modulus  $E$  (GPa) and Poisson's ratio  $\sigma$  of  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  at  $T=0$  K and  $p=0$  GPa

Elastic constants	This work	Elastic parameters	This work
Cubic			
$C_{11}$	80.45	$B_H$	59.26
$C_{12}$	48.67	$G_H$	28.23
$C_{44}$	41.46	$E$	73.08
		$\sigma$	0.28
Tetragonal			
$C_{11}$	89.71	$B_H$	58.61
$C_{12}$	34.45	$G_H$	21.23
$C_{13}$	49.47	$E$	56.83
$C_{33}$	81.82	$\sigma$	0.32
$C_{44}$	27.51		
$C_{66}$	13.96		

### 3.3 热力学性质计算

Blanco 等提出准谐德拜模型 (QHDM) 方法<sup>[26]</sup> 研究晶体的热力学性质. 准谐德拜模型方法已经被多次用于研究晶体的热力学性质<sup>[27-29]</sup>. 在此模型中, 晶体的非平衡 Gibbs 函数  $G^*(x_{\text{opt}}(V); p, T)$  表达形式如下:

$$G^*(x_{\text{opt}}(V); p, T) = E(x_{\text{opt}}(V)) + pV + A_{\text{vib}}(x_{\text{opt}}(V); T) \quad (15)$$

公式中  $E(x_{\text{opt}}(V))$  表示晶体原胞的总能量,  $p$  表示压强,  $V$  表示体积,  $A_{\text{vib}}$  表示振动的 Helmholtz 自由能. 准谐近似德拜模型中使用声子态密度  $A_{\text{vib}}$

表示形式如下:

$$A_{\text{vib}}(\Theta; T) = nkT \left[ \frac{9}{8} \frac{\Theta}{T} + 3 \ln(1 - e^{-\Theta/T}) - D(\Theta/T) \right] \quad (16)$$

公式中  $\Theta$  表示德拜温度,  $D(\Theta/T)$  表示德拜积分,  $n$  是每个原胞中包含的原子个数. 德拜温度  $\Theta$  可表达为:

$$\Theta = \frac{\hbar}{k} [6\pi^2 V^{1/2} n]^{1/3} f(\sigma) \sqrt{\frac{B_s}{M}} \quad (17)$$

公式中  $M$  表示原胞的分子的质量,  $v$  表示晶体材料的泊松比, 表 2 中已经计算给出.  $B_s$  表示晶体的绝热体弹模量.

非平衡 Gibbs 函数  $G^*(x_{\text{opt}}(V); p, T)$  对体积求最小值,

$$\left( \frac{\partial G^*(x_{\text{opt}}(V); p, T)}{\partial V} \right)_{p, T} = 0 \quad (18)$$

通过上式可得到等温体弹模量  $B_T$ , 等体热容  $C_V$ , 热膨胀系数  $\alpha$ .

根据准谐德拜模型得到立方结构和四方结构  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  等体热容与温度的关系, 如图 2 所示. 当温度小于 400 K 时, 两种结构的  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  等体热容均随温度升高而增大, 在 0~200 K 范围内变化尤为明显. 大于 400 K 时, 等体热容随温度增长趋势逐渐变缓, 当温度增大到较大数值后, 趋近于一个极限值.

如图 3 所示, 两种结构的  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  膨胀系数随温度升高而增大, 变化趋势与热容相似, 在 0~400 K 范围内, 膨胀系数随温度急剧增大, 大于 400 K 之后, 变化趋势逐渐变缓.

如图 4 和图 5 所示, 体弹模量  $B_0$  与绝热体弹模量  $B_s$  在低温(0~100 K)时随温度变化不明显,

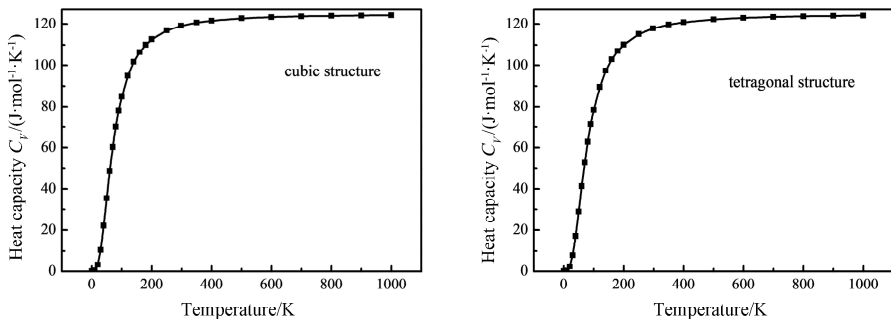


图 2  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  等体热容与温度关系  
Fig. 2 The variation of constant-volume heat capacity  $C_V$  versus temperature for  $\text{Cd}_3\text{As}_2$

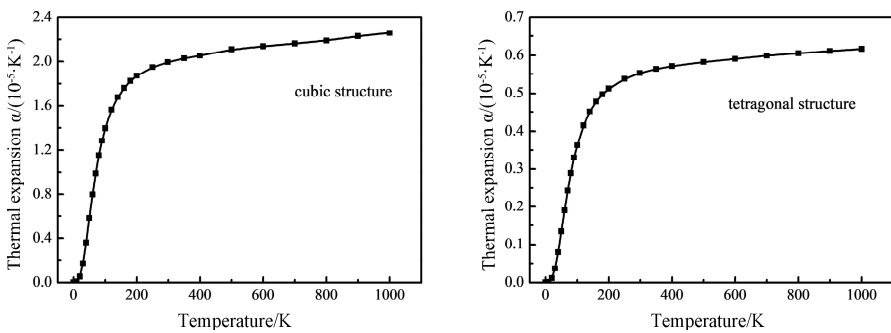


图 3  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  热膨胀系数  $\alpha$  与温度关系  
Fig. 3 The variation of thermal expansion  $\alpha$  of  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  versus temperature

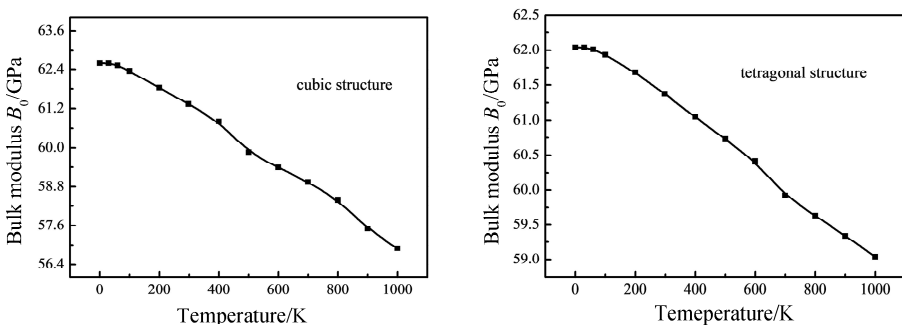


图 4  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  体弹模量  $B_0$  随温度变化的关系

Fig. 4 The variation of bulk modulus  $B_0$  of  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  versus temperature

大于 100 K 时, 两者随温度升高而减小, 并接近呈线性变化. 如图 6 所示, 在不同压强下, 两种结构

的  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  晶胞体积随温度的变化关系.

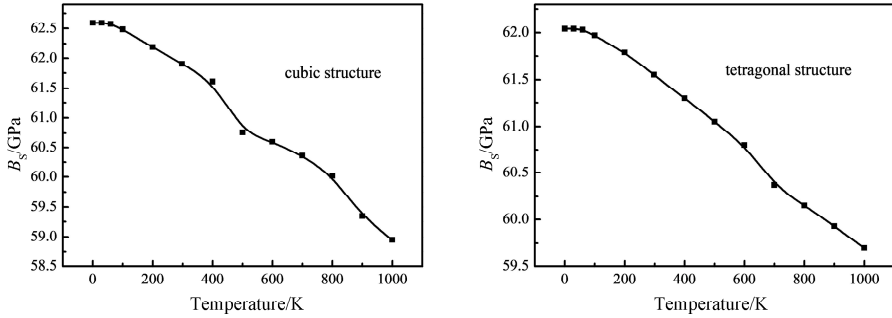


图 5  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  绝热体弹模量  $B_s$  与温度的关系

Fig. 5 The relationship of the adiabatic bulk modulus  $B_s$  and temperature for  $\text{Cd}_3\text{As}_2$

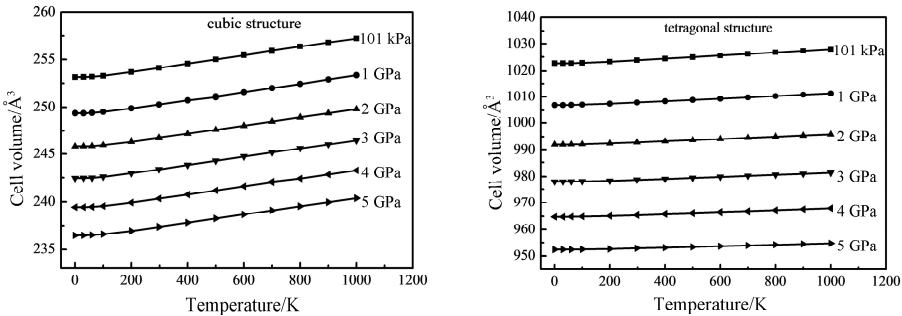


图 6 不同压强下  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  晶胞体积与温度的关系

Fig. 6 The relationships of cell volume and temperature for  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  at different pressures

## 4 结 论

(1) 利用第一性原理结合赝势平面波方法计算了立方结构和四方结构  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  晶体的晶格参数, 模拟结果与实验值吻合.

(2) 预测了  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  晶体的弹性常数. 立方结构  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  晶体的弹性常数值为  $C_{11}=80.45$  GPa,  $C_{12}=48.67$  GPa,  $C_{44}=41.46$  GPa; 四方结构  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  晶体的弹性常数值为  $C_{11}=89.71$  GPa,  $C_{12}=34.45$  GPa,  $C_{13}=49.47$  GPa,  $C_{33}=81.82$  GPa,  $C_{44}=27.51$  GPa,  $C_{66}=13.96$  GPa.

(3) 计算获得了  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  在不同温度下的热膨胀系数、绝热体弹模量、晶胞体积和等体热容.

### 参考文献:

[1] 苗世顶, 姚运金, 于少明. II-V 族半导体纳米晶的研究进展[J]. 中国科学: 技术科学, 2012(2): 123.  
 [2] Harris D K, Allen P M, Han H S, *et al.* Synthesis of cadmium arsenide quantum dots luminescent in the infrared [J]. J Am Chem Soc, 2011,

133: 4676.  
 [3] Burian A, Lecante P, Mosset A, *et al.* Differential anomalous X-ray scattering studies of amorphous  $\text{Cd}_{59}\text{As}_{41}$  and  $\text{Cd}_{26}\text{As}_{74}$  [J]. J Non-Cryst Solids, 1997, 212: 23.  
 [4] He L P, Hong X C, Dong J K, *et al.* Quantum transport evidence for the three-dimensional Dirac semimetal phase in  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  [J]. Phys Rev Lett, 2014, 113: 246402.  
 [5] Liang T, Gibson Q, Ali M N, *et al.* Ultrahigh mobility and giant magnetoresistance in the Dirac semimetal  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  [J]. Nature Mater, 2015, 14: 280.  
 [6] Zhao Y, Liu H, Zhang C, *et al.* Anisotropic Fermi surface and quantum limit transport in high mobility three-dimensional Dirac semimetal  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  [J]. Phys Rev X, 2015, 5: 031037.  
 [7] Narayanan A, Watson M D, Blake S F, *et al.* Linear magnetoresistance caused by mobility fluctuations in n-doped  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  [J]. Phys Rev Lett, 2015, 114: 117201.

- [8] Turner W J, Fischler A S, Reese W E. Electrical and optical properties of the II - V compounds [J]. J Appl Phys, 1961, 32: 2241.
- [9] Caron L G, Jay-Gerin J P, Aubin M J. Energy-band structure of  $Cd_3As_2$  at low temperatures and the dependence of the direct gap on temperature and pressure [J]. Phys Rev B, 1977, 15: 3879.
- [10] Zdanowicz W, Zdanowicz L. Semiconducting compounds of the AII BV group [J]. Annu Rev Mater Sci, 1975, 5: 301.
- [11] Wang Z, Weng H, Wu Q, *et al.* Three-dimensional Dirac semimetal and quantum transport in  $Cd_3As_2$  [J]. Phys Rev B, 2013, 88: 125427.
- [12] Liu Z K, Jiang J, Zhou B, *et al.* A stable three-dimensional topological Dirac semimetal  $Cd_3As_2$  [J]. Nature Mater, 2014, 13: 677.
- [13] Neupane M, Xu S Y, Sankar R, *et al.* Observation of a three-dimensional topological Dirac semimetal phase in high-mobility  $Cd_3As_2$  [J]. Nature Commun, 2014, 5: 3786.
- [14] Yi H, Wang Z, Chen C, *et al.* Evidence of topological surface state in three-dimensional Dirac semimetal  $Cd_3As_2$  [J]. Sci Rep: Uk, 2014, 4: 6106.
- [15] Ceperley D M, Alder B J. Ground state of the electron gas by a stochastic method [J]. Phys Rev Lett, 1980, 45: 566.
- [16] Monkhorst H J, Pack J D. Special points for Brillouin-zone integrations [J]. Phys Rev B, 1976, 13: 5188.
- [17] Pietraszko A, Łukaszewicz K. Thermal expansion and phase transitions of  $Cd_3As_2$  and  $Zn_3As_2$  [J]. Phys Status Solidi A, 1973, 18: 723.
- [18] Pietraszko A, Łukaszewicz K. A refinement of the crystal structure of  $\alpha$ - $Cd_3As_2$  [J]. Acta Crystallogr B, 1969, 25: 988.
- [19] Murnaghan F D. Finite deformations of an elastic solid [J]. Am J Math, 1937, 59: 235.
- [20] Passerini L. Struttura cristallina di alcuni fosfuri di metalli bivalenti e trivalenti [M]. [S. l.]: Associazione Italiana di Chimica, 1928, 58: 655.
- [21] Stackelberg M, Paulu R. Untersuchungen an den phosphiden und arseniden des zinks und cadmiums. Das  $Zn_3P_2$ -gitter [J]. Z Phys Chem, 1935, 28: 427.
- [22] Teubner, W. Voigt, Lehrburch der Kristallphysik [M]. Leipzig/Berlin: [s. n.], 1928.
- [23] Angew Z, Reuss A. Berechnung der fließgrenze von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle [J]. Math Mech, 1929, 9: 49.
- [24] Hill R. The elastic behaviour of a crystalline aggregate [J]. Proc Phys Soc Sec A, 1952, 65: 349.
- [25] Kaur M, Kabra K, Kumar R, *et al.* Structural, electronic and elastic properties of  $Zn_3As_2$  [J]. J Alloy Compd, 2017, 709: 179.
- [26] Blanco M A, Francisco E, Luana V. GIBBS: isothermal-isobaric thermodynamics of solids from energy curves using a quasi-harmonic Debye model [J]. Comp Phys Commun, 2004, 158: 57.
- [27] 仲成, 苑晓丽. 温度和压强对金属化合物  $Co_2Zr$  和  $Co_2Ti$  的结构和热力学性质影响的研究 [J]. 原子与分子物理学报, 2018, 35: 666.
- [28] 雷金桥, 黄莎, 刘科, 等. 块状  $NiSe_2$  的电学, 光学和热力学性质的理论研究 [J]. 原子与分子物理学报, 2017, 34: 1180.
- [29] 王海燕, 郭凯琪, 王彪, 等. GaP 相变及热力学性质的理论研究 [J]. 原子与分子物理学报, 2017, 34: 1093.

#### 引用本文格式:

中文: 李迎, 谭嘉进, 姬广富.  $Cd_3As_2$  弹性模量和热力学性质模拟研究 [J]. 四川大学学报: 自然科学版, 2019, 56: 1081.

英文: Li Y, Tan J J, Ji G F. Theoretical study on elastic modulus and thermodynamic properties of  $Cd_3As_2$  [J]. J Sichuan Univ: Nat Sci Ed, 2019, 56: 1081.