

高压下 InMgI_3 的机械、电子和光学性质的第一性原理研究

张慧梅, 王 静, 钟启巧

长江大学物理与光电工程学院, 湖北 荆州

收稿日期: 2026年2月9日; 录用日期: 2026年3月10日; 发布日期: 2026年3月17日

摘 要

基于第一性原理方法, 本文系统研究了无铅钙钛矿 InMgI_3 在0~60 GPa下的几何结构、机械、电子和光学性质。相关的机械性质研究表明, InMgI_3 的弹性力学失稳点约为74 GPa。随着压强的增加, 该晶体的弹性常数(C_{ij})、体弹模量(B)、剪切模量(G)、杨氏模量(E)、 B/G 、泊松比(ν)和各向异性因子(A)均增大。电子性质研究表明, 零压下 InMgI_3 表现出间接带隙半导体特性(带隙值为1.24 eV), 其带隙在10 GPa时达到最大值(1.782 eV)。光学性质研究表明, 该晶体在真空红外探测与能量转换器件等领域具有一定的应用潜力。通过施加外部压强可有效调控 InMgI_3 材料的光学和电子性质。

关键词

InMgI_3 , 第一性原理, 机械性质, 电子性质, 光学性质

First-Principles Study of Mechanical, Electronic and Optical Properties of InMgI_3 under High Pressure

Huimei Zhang, Jing Wang, Qiqiao Zhong

School of Physics and Optoelectronic Engineering, Yangtze University, Jingzhou Hubei

Received: February 9, 2026; accepted: March 10, 2026; published: March 17, 2026

Abstract

Based on first-principles methods, this study systematically investigates the geometric structure, mechanical, electronic, and optical properties of lead-free perovskite InMgI_3 under pressures ranging

from 0 to 60 GPa. Mechanical property studies reveal that the instability point of elasticity mechanics of InMgI_3 is approximately 74 GPa. With increasing pressure, the crystal exhibits enhanced elastic constants (C_{ij}), bulk elastic modulus (B), shear modulus (G), Young's modulus (E), B/G ratio, Poisson's ratio (ν), and anisotropy factor (A). Electronic property analysis demonstrates that InMgI_3 exhibits indirect bandgap semiconductor characteristics with bandgap value of 1.24 eV at zero pressure, with the bandgap reaching its maximum value of 1.782 eV at 10 GPa. Optical property studies indicate that this crystal holds potential applications in vacuum infrared detection and energy conversion devices. External pressure can effectively modulate the optical and electronic properties of InMgI_3 materials.

Keywords

InMgI₃, First-Principles, Mechanical Properties, Electronic Properties, Optical Properties

Copyright © 2025 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

三元卤化物钙钛矿具有低成本、载流子迁移率高和带隙较宽等特性，其在窗口材料、闪烁体、激光器及太阳能电池等领域具有广泛的应用前景[1]-[6]。

镧基钙钛矿晶体是一类环境友好型的卤化物钙钛矿晶体，由于其带隙可调、激子结合能低和光吸收系数高等特性，使其成为能源转换材料、光学晶体材料等候选材料。因此，镧基钙钛矿晶体得到了研究者的广泛关注。Kang 等通过计算研究了多种镧基 AInX_3 ($A =$ 碱金属, $X = \text{F}$ 或 Cl) 卤化物钙钛矿[7]，表明它们是热力学稳定性的间接带隙绝缘体。Khan 等[8]通过密度泛函理论研究发现立方相 InCaF_3 和 InCdF_3 是直接带隙半导体，而 InHgF_3 则是间接带隙材料。Rahman 等[9]通过 DFT 计算研究了 InMgF_3 的光电性质，研究表明其为间接带隙的半导体($E_g = 2.49$ eV)，在光电材料领域具有良好前景。Zhang 等[10]基于第一性原理研究了 InBeF_3 在静水压力下的物理性质，研究表明其为间接带隙材料。Zhang 等[11]研究了 InXY_3 ($X = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}; Y = \text{Cl}, \text{Br}$) 的结构和物理性质，研究表明 InXY_3 晶体具有热力学和机械稳定性，表现出良好的光电性质。Edgar 等[12]采用垂直提拉法制备了正交结构的 TlMgCl_3 和 TlMgBr_3 晶体。Takayuki 等[13]采用同样的方法制备出了 TlMgCl_3 、 TlCdCl_3 、 TlSrCl_3 和 TlBaCl_3 闪烁体，并在 γ 射线照射下对其光谱特性进行了评估。张等[14]研究了高压下 YMgF_3 ($Y = \text{Al}, \text{Ga}, \text{In}, \text{Tl}$) 晶体的光电性质，研究表明 XMgF_3 晶体在紫外光学器件具有广泛的应用前景。Apon 等[15]系统研究了零压下 AMgX_3 ($A = \text{Ga}, \text{In}, \text{Tl}; X = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) 晶体的电子、光学及力学性质。研究表明，立方晶体 AMgX_3 具有良好的稳定性，在光电领域具有一定应用前景。

综上，目前关于 InMgI_3 晶体在高压下的机械、电子及光学性质研究还未见相关的报道。高压能改变晶体的结构，甚至引发结构相变，从而引起晶体的物理性质的变化。因此，本文采用密度泛函理论(DFT)[16]-[21]，对立方型钙钛矿 InMgI_3 晶体不同压强下的机械、电子与光学性质进行研究，为 InMgI_3 晶体极端条件下的物理性质和实际应用的研究提供重要参考。

2. 计算方法

本文利用 CASTEP 软件[22]计算和分析 InMgI_3 晶体的物理性质。在进行结构优化和性质计算时，采

用 PBE 泛函[23]描述交换关联能, 利用超软赝势(OTFG ultrasoft pseudopotential) [24]处理离子与价电子间的相互作用。经过收敛性测试后, 确定平面波的截断能为 650 eV, k 点为 $12 \times 12 \times 12$, 能量自洽收敛条件为 5.0×10^{-6} eV/atom, 最大力收敛标准为 5×10^{-7} eV/atom, 最大位移收敛标准为 5×10^{-4} Å。InMgI₃ 的弹性性质计算采用应力-应变方法[25], 并采用 HSE06 杂化泛函计算其光电性质。

3. 结果与讨论

3.1. 晶体结构与机械性质

图 1 为立方 InMgI₃ 晶体的结构, 其空间群为 Pm-3m, 其中 Mg 原子位于(0.5, 0.5, 0.5), In 原子位于(0.0, 0.0, 0.0), I 原子位于(0.5, 0.5, 0.0)。如表 1 所示, 本文计算的 InMgI₃ 的晶格常数为 5.795 Å, 与文献值(5.777 Å)高度吻合[15], 证明了本文计算方法的可靠性。

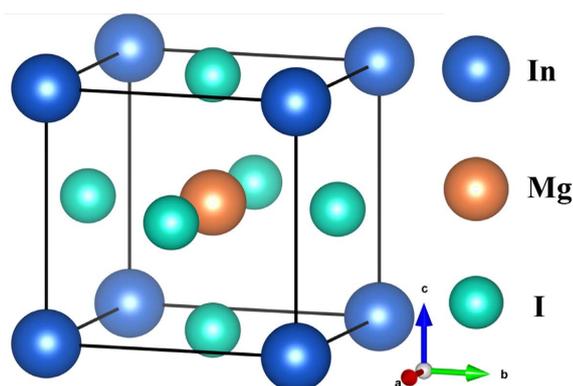


Figure 1. Crystal structure of cubic InMgI₃ compound
图 1. 立方 InMgI₃ 的晶体结构

Table 1. Mechanical properties of InMgI₃ at 0 GPa

表 1. InMgI₃ 在 0 GPa 下的机械性质

Compound	a (Å)	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)	B (GPa)	G (GPa)	E (GPa)	ν
This work	5.795	36.213	11.780	9.574	19.924	10.556	26.914	0.275
Ref. [15]	5.777	36.171	11.077	11.039	19.442	11.619	29.068	0.251

表 1 为 InMgI₃ 在 0 GPa 下的机械性质。从表中可以看出, InMgI₃ 的相关计算结果与文献值[15]符合得非常好, 进一步验证了本文计算方法的可靠性。

立方晶体 InMgI₃ 的机械性质是由三个独立的弹性常数(C_{11} 、 C_{12} 与 C_{44})决定。根据 Voigt、Reuss 和 Hill 近似[26] [27], 其剪切模量为:

$$G_V = \frac{C_{11} + 3C_{44} - C_{12}}{5} \quad (1)$$

$$G_R = \frac{5C_{44}(C_{11} - C_{12})}{3(C_{11} - C_{12}) + 4C_{44}} \quad (2)$$

$$G = \frac{G_R + G_V}{2} \quad (3)$$

其体弹模量 B [28]、杨氏模量 E [29]、各向异性因子 A [30]和泊松比 ν [31]为:

$$B = \frac{2C_{12} + C_{11}}{3} \quad (4)$$

$$E = \frac{9GB}{G + 3B} \quad (5)$$

$$\nu = \frac{3B - 2G}{2(G + 3B)} \quad (6)$$

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} \quad (7)$$

Table 2. Mechanical properties of InMgI₃ under different pressures

表 2. 不同压强下 InMgI₃ 的机械性质

<i>P</i> (GPa)	0	10	20	30	40	50	60	74
<i>a</i> (Å)	5.795	5.296	5.069	4.920	4.808	4.719	4.645	4.558
<i>C</i> ₁₁ (GPa)	36.213	111.319	177.632	239.952	299.970	356.761	413.914	491.691
<i>C</i> ₁₂ (GPa)	11.780	33.887	54.178	73.826	93.504	112.018	132.336	161.051
<i>C</i> ₄₄ (GPa)	9.574	20.264	29.657	38.485	46.958	55.131	63.148	74.048
<i>B</i> (GPa)	19.924	59.697	95.329	129.202	162.326	193.599	226.195	271.264
<i>G</i> (GPa)	10.556	26.341	39.961	52.660	64.760	76.345	87.613	110.556
<i>E</i> (GPa)	26.914	68.890	105.185	139.085	171.477	202.425	232.783	292.000
<i>B/G</i>	1.888	2.266	2.386	2.453	2.507	2.536	2.582	2.453
ν	0.275	0.308	0.316	0.321	0.324	0.326	0.328	0.321
<i>A</i>	0.784	0.523	0.480	0.463	0.455	0.451	0.449	0.448

表 2 汇总了 InMgI₃ 晶体在不同压强下的晶格常数(*a*)、弹性常数(*C_{ij}*)、体弹模量(*B*)、剪切模量(*G*)、杨氏模量(*E*)、*B/G*、泊松比(ν)和各向异性因子(*A*)。根据在不同压强下的立方晶体力学稳定性要求[32]: $C_{44} - P > 0$ 、 $C_{11} - C_{12} - 2P > 0$ 、 $C_{11} + 2C_{12} + P > 0$, 可知 InMgI₃ 晶体弹性力学失稳点约为 74 GPa。与 *C*₁₂ 和 *C*₄₄ 相比, *C*₁₁ 随着压强增加得比较快, 这表明 InMgI₃ 晶体在 *x* 轴方向的拉伸和压缩的程度比较大。

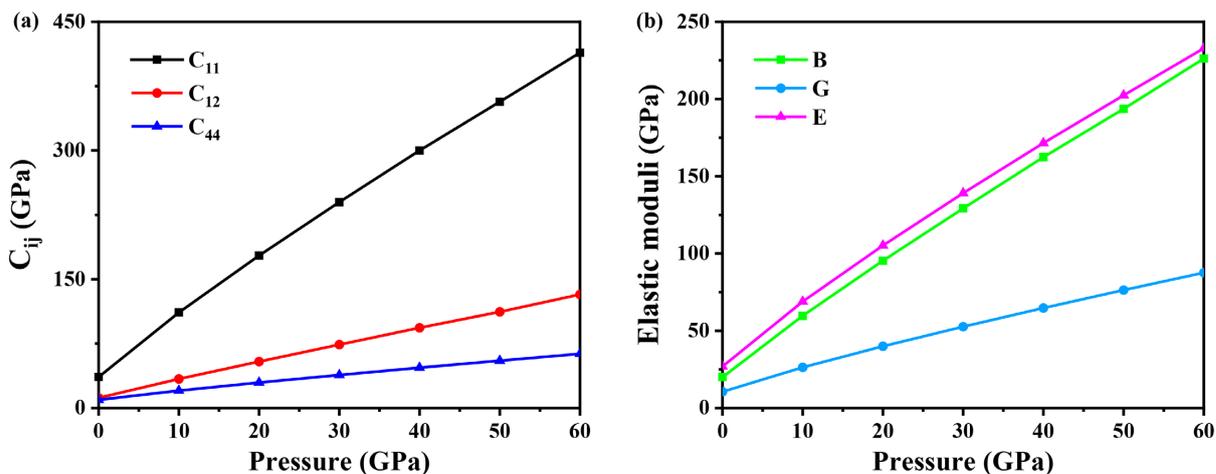


Figure 2. (a) The elastic constant *C_{ij}*, (b) elastic modulus (*B*, *G* and *E*) of InMgI₃ at various pressures.

图 2. (a) 不同压强下 InMgI₃ 的弹性常数 *C_{ij}*, (b) 弹性模量(*B*、*G* 和 *E*)

如图 2(a)所示, InMgI_3 的弹性常数 C_{ij} 均随压强增大而增大, 其中 C_{11} 变化最为显著, 说明其对压强最为敏感。体弹模量 B 、剪切模量 G 和杨氏模量 E 分别可以反映了材料的硬度、抗变形能力和刚度。由图 2(b)知, 这些值均随压强的增大而增大, 表明该材料在高压下表现出更好的力学性能。

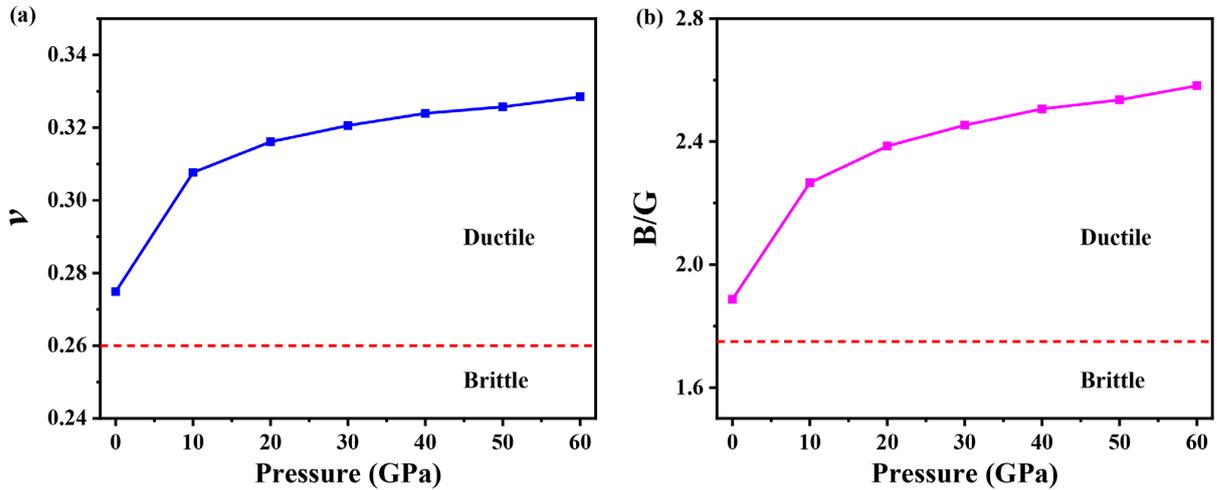
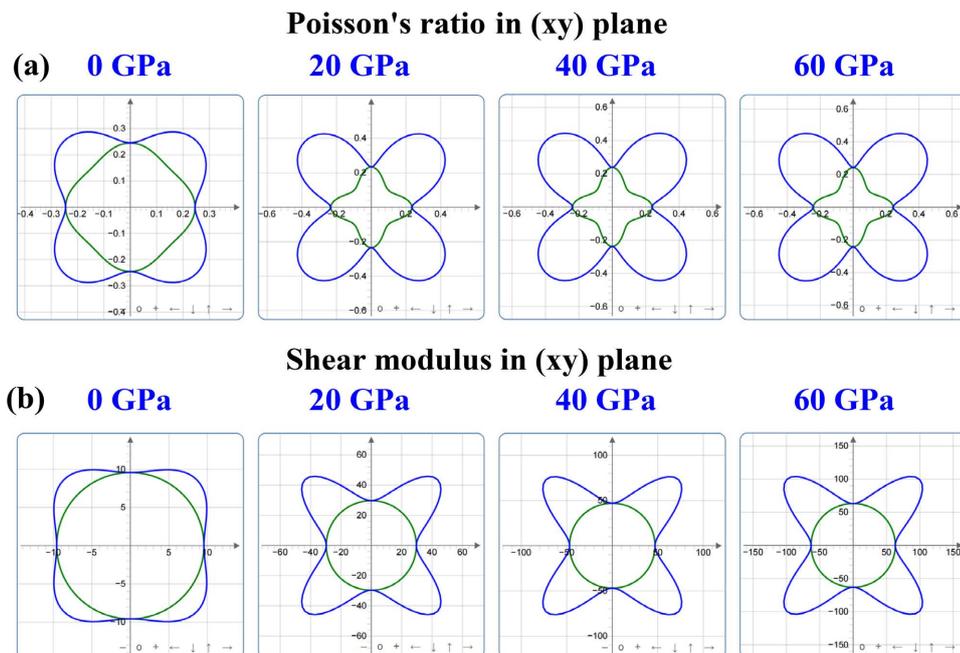


Figure 3. The (a) ν and (b) B/G of InMgI_3 at different pressures

图 3. (a) 不同压强下 InMgI_3 的 ν 及 (b) B/G 比值

泊松比(ν) [31]和 B/G 比值[33]是判断材料延展性或脆性的指标, 其临界值分别为 0.26 和 1.75。当 ν 和 B/G 值分别超过相应的临界值时, 材料呈现为延展性; 反之, 则表现为脆性。由图 3 可知, InMgI_3 表现出延展性, 其延展性在 0~10 GPa 范围内显著增强, 超过 10 GPa 后则缓慢增强。各向异性因子 A 可以判断材料是否具有各项异性, 当各向异性因子 A 等于 1 时, 晶体为各向同性材料; 当各向异性因子不等于 1 时, 晶体为各向异性材料; 由表 2 可知, InMgI_3 在 0 GPa 时的各向异性因子为 0.78, 说明其具有各向异性特性, 且随着压强增大, A 值逐渐减小, 显示出更大的各向异性程度。



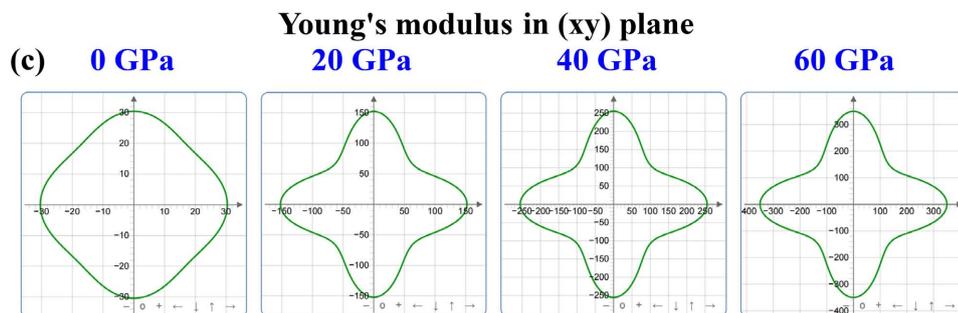


Figure 4. Two-dimensional anisotropic diagrams of Poisson's ratio (a), shear modulus (b) and Young's modulus (c) of InMgI₃ at different pressures

图 4. 不同压强下 InMgI₃ 的泊松比(a)、剪切模量(b)及杨氏模量(c)的二维各项异性图

为了直观地分析 InMgI₃ 的各向异性特征, 图 4 显示了使用 ELATE 软件[34]绘制的 InMgI₃ 在 0~60 GPa 范围内的剪切模量、杨氏模量和泊松比的二维图形。形状是圆形则对应为各向同性, 形状偏离圆形则对应为各向异性。在 0 GPa 下, 泊松比、剪切模量及杨氏模量的二维各项异性分布图均偏离圆形, 表明它们均具有各向异性特征, 且随着压强增大, 各向异性程度也越大。

3.2. 电子特性

InMgI₃ 晶体的电子性质可通过其能带结构与态密度反映。图 5 显示了 InMgI₃ 在 0~60 GPa 范围内的能带结构。费米能级位于 0 eV 处, 能量大于费米能级的区域被称为导带, 能量小于费米能级的区域被称为价带。

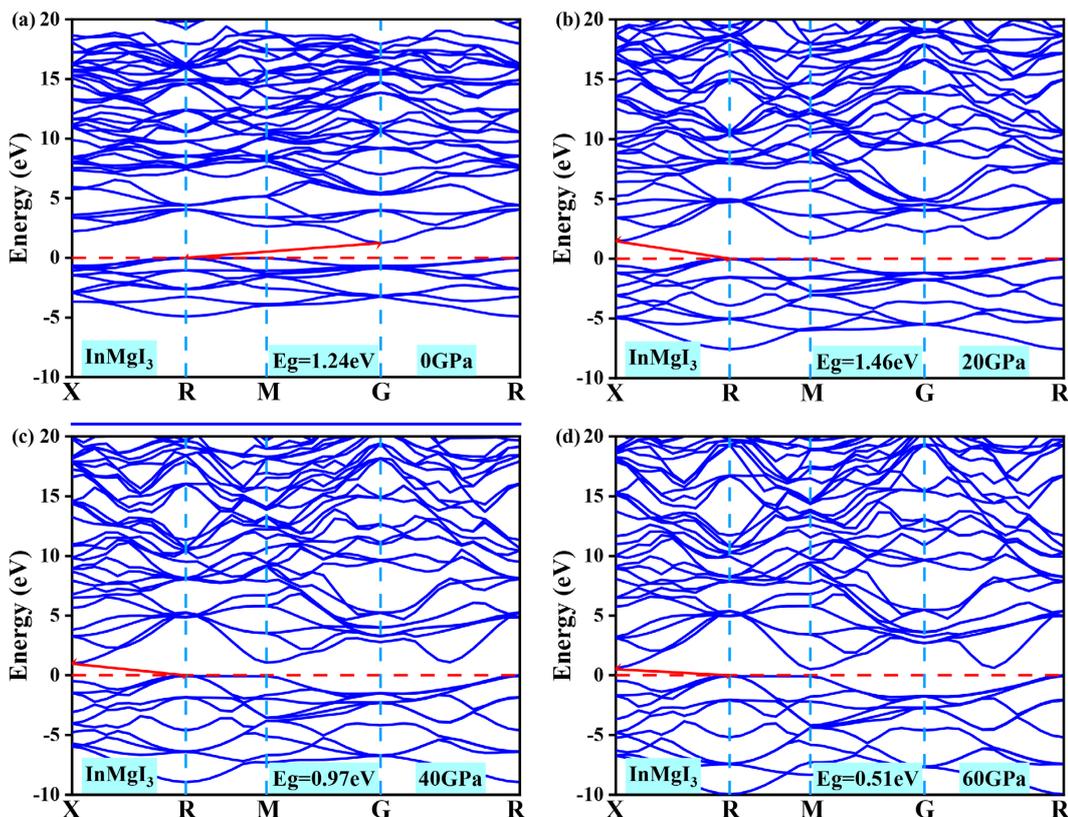


Figure 5. Energy band structure of InMgI₃ under different pressures

图 5. 不同压强下 InMgI₃ 的能带结构

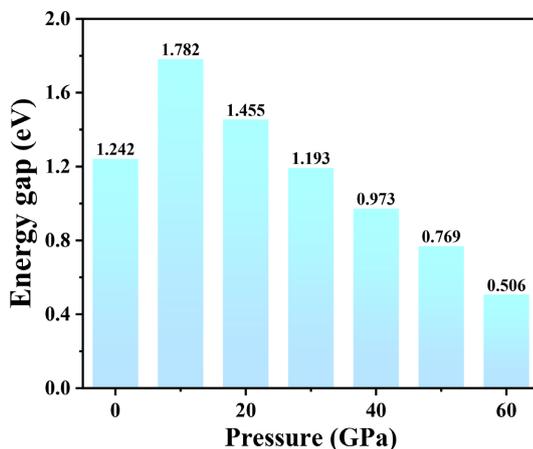


Figure 6. The relationship between band gap and pressure of InMgI₃
图 6. InMgI₃ 带隙与压强的关系

由图 5 可知, 0 GPa 下, InMgI₃ 晶体是一种间接带隙半导体材料, 带隙值为 1.27 eV [15] 相吻合。在 20 GPa、40 GPa 和 60 GPa 下, 其带隙值分别为 1.46 eV、0.97 eV 和 0.51 eV。图 6 显示了 InMgI₃ 的带隙与压强的关系。随着压强的增大, 其带隙值在 10 GPa 处达到峰值, 随后随压强的增大而逐渐减小。这是因为当压强增至 10 GPa 时, 原子间距逐渐减小, 导致导带最大值(CBM)向高能区偏移, 从而使带隙增大; 当压强从 10 GPa 增至 60 GPa 时, 导带的带顶从 G 点变为 X 点, 其带隙值变窄。

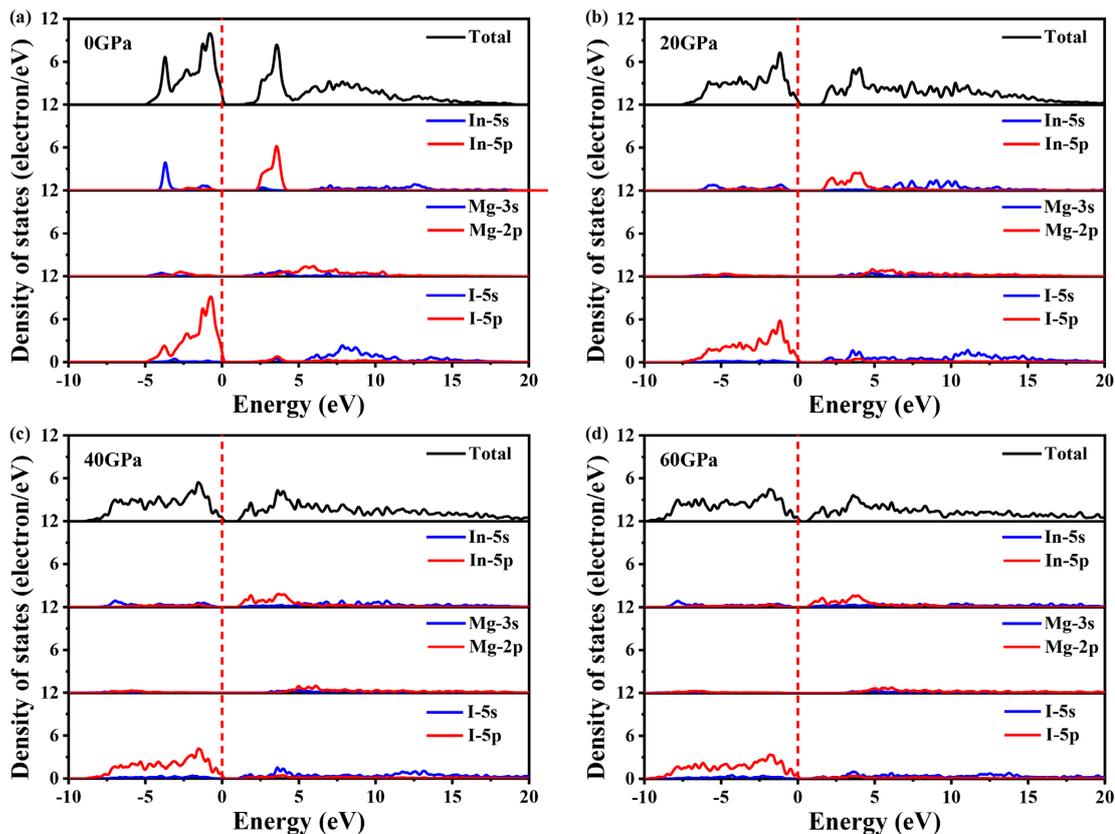


Figure 7. Total and partial state densities of InMgI₃ at different pressures
图 7. 不同压强下 InMgI₃ 的总态密度与部分态密度图

图 7 为 InMgI₃ 晶体在 0~60 GPa 范围内的总态密度(DOS)与部分态密度(PDOS)图。由图 7 可知, 各原子的价带、导带能级对总态密度的贡献, InMgI₃ 的导带主要由 Mg 原子的 2p 轨道电子、I 原子的 5s 轨道电子和 In 原子的 5p 轨道电子贡献, 而价带主要由 I 原子的 5p 轨道电子和 In 原子的 5s 轨道电子贡献。

3.3. 光学性质

材料的光学性质反映了其对电磁辐射的响应特性。本文系统研究了 InMgI₃ 在 0~60 GPa 范围内的复介电函数 $\epsilon(\omega)$ 、吸收系数 $\alpha(\omega)$ 、消光系数 $k(\omega)$ 、反射率 $R(\omega)$ 和折射率 $n(\omega)$ 。

图 8 显示了 InMgI₃ 在不同压强下的介电函数 $\epsilon(\omega)$ 。在光电器件中, 具有较高介电常数的材料能减少载流子复合损耗, 从而提升器件效率。由图 8(a)可知, 在 0 GPa、20 GPa、40 GPa 和 60 GPa 下, InMgI₃ 的静态介电函数实部 $\epsilon_1(0)$ 分别为 5.8、8.89、11.8 和 4.9; 在 3.13 eV、2.61 eV、2.08 eV、1.91 eV 处达到峰值, 分别为 8.97、13.3、16.5 和 19.6, 即介电常数 $\epsilon_1(\omega)$ 随入射光能量增大而逐渐增大, 峰值向低能区域移动。这表明 InMgI₃ 晶体在不同压强下均表现出优异的光电转换效率, 是优秀的光电器件候选材料。由图 8(b)可知, 随着压强的增大, 其介电常数 $\epsilon_2(\omega)$ 峰值也增大, 峰值位置向高能区域移动。

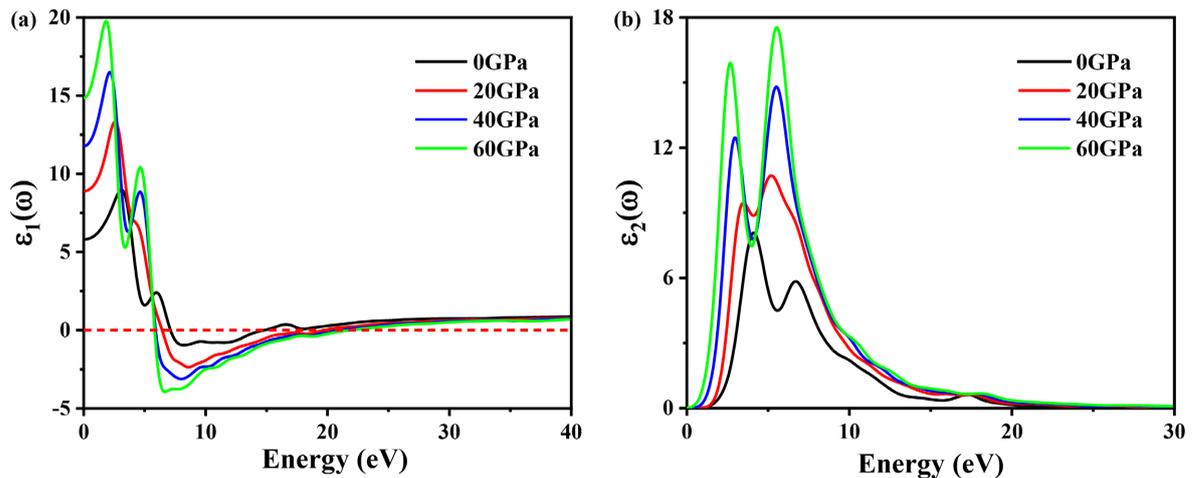


Figure 8. Dielectric function $\epsilon(\omega)$ of InMgI₃ at different pressures: (a) real part $\epsilon_1(\omega)$, (b) imaginary part $\epsilon_2(\omega)$.

图 8. 不同压强下 InMgI₃ 介电函数 $\epsilon(\omega)$: (a) 实部 $\epsilon_1(\omega)$, (b) 虚部 $\epsilon_2(\omega)$

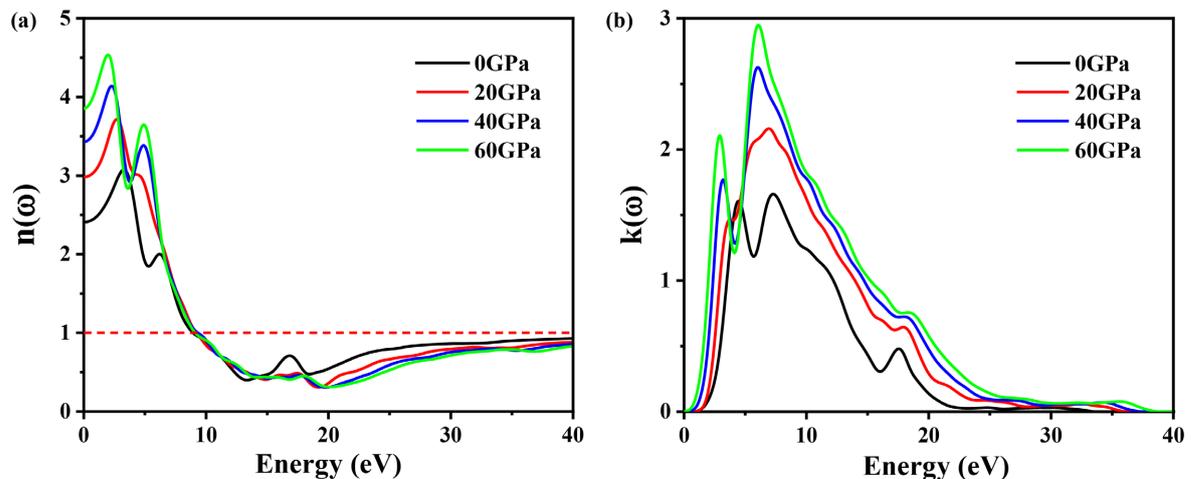


Figure 9. (a) refractive index $n(\omega)$ and (b) extinction coefficient $k(\omega)$ of InMgI₃ at different pressures

图 9. (a) 不同压强下 InMgI₃ 的折射率 $n(\omega)$ 与 (b) 消光系数 $k(\omega)$

图 9 显示了 InMgI_3 在不同压强下的折射率 $n(\omega)$ 和消光系数 $k(\omega)$ 。由图 9(a) 可知, 在 0 GPa、20 GPa、40 GPa 和 60 GPa 下, InMgI_3 的静态折射率 $n(0)$ 分别为 2.41、2.98、3.43 和 3.85, 且分别在 3.07 eV、2.71 eV、2.33 eV 和 2.01 eV 处达到峰值, 其值分别为 3.27、3.27、4.14 和 4.53。表明, 随着压强的增大, 其折射率随之升高, 折射光谱呈现红移现象。由图 9(b) 可知, 在 0 GPa、20 GPa、40 GPa 和 60 GPa 下, InMgI_3 的消光系数 $k(\omega)$ 分别在 1.66 eV、2.16 eV、2.63 eV 和 2.95 eV 处达到峰值, 且随着压强的增大, 消光系数向低能区域移动。

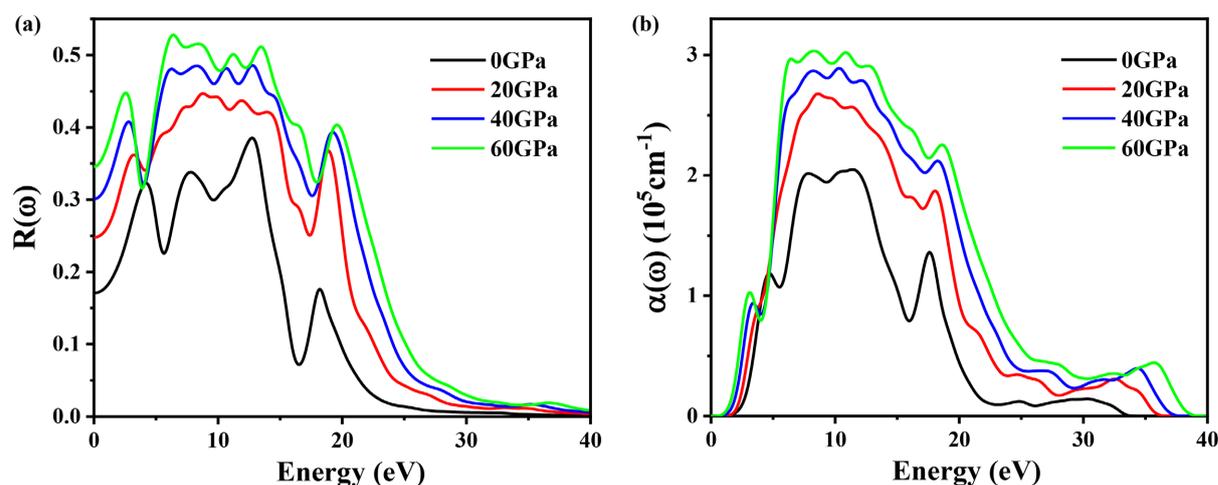


Figure 10. (a) $R(\omega)$ and (b) $\alpha(\omega)$ of InMgI_3 at different pressures
图 10. (a) 不同压强下 InMgI_3 的反射率 $R(\omega)$ 和 (b) 吸收系数 $\alpha(\omega)$

图 10 显示了 InMgI_3 在不同压强下的反射率 $R(\omega)$ 和吸收系数 $\alpha(\omega)$ 。随着压强增大, 其光反射和吸收本领均显著增强。值得注意的是, InMgI_3 在可见光和紫外光区域具有宽吸收峰和高吸收系数, 其在太阳能电池等光电领域具有潜在的应用价值。

4. 结论

本文采用第一性原理方法系统研究了 InMgI_3 晶体在不同压强下的力学、电子及光学性质。在 0 GPa 下, InMgI_3 的晶格常数为 5.795 Å。力学性质研究表明, 该晶体在高压下展现出优异的延展性和各向异性。电子结构研究表明, InMgI_3 是间接半导体材料, 随压强增加, 其带隙值呈现先增大后减小的趋势。光学性质研究表明, InMgI_3 在高压下表现出更优异的光学性质。

基金项目

湖北省大学生创新创业训练项目(项目编号: S202510489049)。

参考文献

- [1] Yin, W., Yang, J., Kang, J., Yan, Y. and Wei, S. (2015) Halide Perovskite Materials for Solar Cells: A Theoretical Review. *Journal of Materials Chemistry A*, **3**, 8926-8942. <https://doi.org/10.1039/c4ta05033a>
- [2] Leijtens, T., Eperon, G.E., Noel, N.K., Habisreutinger, S.N., Petrozza, A. and Snaith, H.J. (2015) Stability of Metal Halide Perovskite Solar Cells. *Advanced Energy Materials*, **5**, Article ID: 1500963. <https://doi.org/10.1002/aenm.201500963>
- [3] Kutnjak, Z., Petzelt, J. and Blinc, R. (2006) The Giant Electromechanical Response in Ferroelectric Relaxors as a Critical Phenomenon. *Nature*, **441**, 956-959. <https://doi.org/10.1038/nature04854>
- [4] Kim, C.H., Qi, G., Dahlberg, K. and Li, W. (2010) Strontium-Doped Perovskites Rival Platinum Catalysts for Treating

- NO_x in Simulated Diesel Exhaust. *Science*, **327**, 1624-1627. <https://doi.org/10.1126/science.1184087>
- [5] Jena, A.K., Kulkarni, A. and Miyasaka, T. (2019) Halide Perovskite Photovoltaics: Background, Status, and Future Prospects. *Chemical Reviews*, **119**, 3036-3103. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.8b00539>
- [6] Nishimatsu, T., Terakubo, N., Mizuseki, H., Kawazoe, Y., Pawlak, D.A., Shimamura, K., *et al.* (2002) Band Structures of Perovskite-Like Fluorides for Vacuum-Ultraviolet-Transparent Lens Materials. *Japanese Journal of Applied Physics*, **41**, L365-L367. <https://doi.org/10.1143/jjap.41.l365>
- [7] Kang, C. and Kotliar, G. (2019) Material Design of Indium-Based Compounds: Possible Candidates for Charge, Valence, and Bond Disproportionation and Superconductivity. *Physical Review Materials*, **3**, Article ID: 015001. <https://doi.org/10.1103/physrevmaterials.3.015001>
- [8] Khan, S., Ahmad, R., Mehmood, N., Hina, F., Rehman, A.U., Zaman, S.U., *et al.* (2021) First-Principles Investigation of the Physical Properties of Indium Based Fluoroperovskites InAF_3 ($A = \text{Ca, Cd}$ and Hg). *Materials Science in Semiconductor Processing*, **121**, Article ID: 105385. <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2020.105385>
- [9] Ahmad, M.S., Habib, A., Rauf, A., Haq, M.U. and Saddique, J. (2020) Theoretical Investigation of the Structural, Electronic, and Mechanical Properties of the Magnesium-Based Fluoroperovskite Compounds XMgF_3 ($X = \text{Ga, Al, In}$). *Fluoride*, **53**, 542-553.
- [10] Zhang, J., Chen, Y., Chen, S., Hou, J., Song, R. and Shi, Z. (2023) Electronic Structure, Mechanical, Optical and Thermodynamic Properties of Cubic Perovskite InbF_3 with Pressure Effects: First-Principles Calculations. *Results in Physics*, **50**, Article ID: 106590. <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2023.106590>
- [11] Zhang, S., Chen, S., Chen, Y., Hou, J., Zhang, J., Liu, J., *et al.* (2025) A DFT Approach to Explore the Structural, Mechanical, and Optoelectronic of Indium-Based InXY_3 ($X = \text{Ca, Sr, Ba}$; $Y = \text{Cl, Br}$) Halide Perovskites for Photoelectric Applications. *Physics Letters A*, **533**, Article ID: 130243. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2025.130243>
- [12] van Loef, E., Soundara Pandian, L., Ciampi, G., Stand, L., Du, M., Rutstrom, D., *et al.* (2022) Crystal Growth, Density Functional Theory, and Scintillation Properties of TlMgX_3 ($X = \text{Cl, Br, I}$). *Chemical Physics*, **558**, Article ID: 111535. <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2022.111535>
- [13] Yanagida, T., Fujimoto, Y., Arai, M., Koshimizu, M., Kato, T., Nakauchi, D., *et al.* (2020) Comparative Studies of Scintillation Properties of Tl-Based Crystals. *Sensors and Materials*, **32**, 1351-1356. <https://doi.org/10.18494/sam.2020.2711>
- [14] Zhang, J., Chen, Y., Chen, S., Hou, J., Song, R. and Shi, Z. (2024) First-Principles Study of Mechanical, Electronic Structure, and Optical Properties for Cubic Fluoroperovskite XMgF_3 ($X = \text{Al, Ga, In, Tl}$) under High Pressure. *Materials Science in Semiconductor Processing*, **174**, Article ID: 108158. <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2024.108158>
- [15] Apon, I.A., Hasan, Md, R. and Islam, M. (2024) First-Principles Investigation of Structural, Mechanical, and Electronic Properties of AMgX_3 ($A = \text{Ga, In, Tl}$, and $X = \text{Cl, Br, I}$) Perovskites for Optoelectronic Applications. *Physica Scripta*, **100**, Article ID: 015931. <https://doi.org/10.1088/1402-4896/ad966f>
- [16] Xu, N., Chen, Y., Chen, S., Zhang, W., Li, S., Song, R., *et al.* (2023) First-Principles Investigations for the Hydrogen Storage Properties of XVH_3 ($X = \text{Na, K, Rb, Cs}$) Perovskite Type Hydrides. *Journal of Materials Research and Technology*, **26**, 4825-4834. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2023.08.218>
- [17] Sun, W., Chen, B., Li, X., Peng, F., Hermann, A. and Lu, C. (2023) Ternary Na-P-H Superconductor under High Pressure. *Physical Review B*, **107**, Article ID: 214511. <https://doi.org/10.1103/physrevb.107.214511>
- [18] Dai, W., He, S., Ding, K. and Lu, C. (2022) Polymeric Hydronitrogen N_4H : A Promising High-Energy-Density Material and High-Temperature Superconductor. *ACS Applied Materials & Interfaces*, **14**, 49986-49994. <https://doi.org/10.1021/acsami.2c16293>
- [19] Luo, W., Song, R., Xu, S., Chen, Y., Chen, S., Zhang, W., *et al.* (2024) First Principles Study of the Electronic Structure, Mechanical and Optical Properties of Cubic Perovskite NaCaCl_3 under Pressure. *Physica B: Condensed Matter*, **677**, Article ID: 415712. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2024.415712>
- [20] 李梓宁, 许楠林, 肖循, 陈艳, 陈善俊, 张伟斌. 高压下立方型 AgMgF_3 钙钛矿的力学、热力学和电子性质研究[J]. 昆明理工大学学报, 2023, 48(5): 28-37.
- [21] 陈善俊, 金振航, 张伟斌, 李松, 卢崇远, 赵杰. 立方型钙钛矿 KMgF_3 晶体的弹性及热力学性质[J]. 长江大学学报, 2020, 17(5): 90-96.
- [22] Clark, S.J., Segall, M.D., Pickard, C.J., Hasnip, P.J., Probert, M.I.J., Refson, K., *et al.* (2005) First Principles Methods Using Castep. *Zeitschrift für Kristallographie—Crystalline Materials*, **220**, 567-570. <https://doi.org/10.1524/zkri.220.5.567.65075>
- [23] Langreth, D.C. and Perdew, J.P. (1980) Theory of Nonuniform Electronic Systems. I. Analysis of the Gradient Approximation and a Generalization That Works. *Physical Review B*, **21**, 5469-5493. <https://doi.org/10.1103/physrevb.21.5469>
- [24] Meier, R.J. (1999) On the Effectiveness of Ultra-Soft Pseudopotentials in Plane-Wave Based Molecular Electronic

- Structure Calculations. *Journal of Molecular Structure: Theochem*, **467**, 79-83. [https://doi.org/10.1016/s0166-1280\(98\)00478-3](https://doi.org/10.1016/s0166-1280(98)00478-3)
- [25] Fan, C., Zeng, S., Li, L., Zhan, Z., Liu, R., Wang, W., *et al.* (2006) Potential Superhard Osmium Dinitride with Fluorite and Pyrite Structure: First-Principles Calculations. *Physical Review B*, **74**, Article ID: 125118. <https://doi.org/10.1103/physrevb.74.125118>
- [26] K. D. Verma, J. and D. Nag, B. (1965) On the Elastic Moduli of a Crystal and Voigt and Reuss Relations. *Journal of the Physical Society of Japan*, **20**, 635-636. <https://doi.org/10.1143/jpsj.20.635>
- [27] Hill, R. (1952) The Elastic Behaviour of a Crystalline Aggregate. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, **65**, 349-354. <https://doi.org/10.1088/0370-1298/65/5/307>
- [28] Chung, D.H. and Buessem, W.R. (1967) The Voigt-Reuss-Hill Approximation and Elastic Moduli of Polycrystalline MgO, CaF₂, β -ZnS, ZnSe, and CdTe. *Journal of Applied Physics*, **38**, 2535-2540. <https://doi.org/10.1063/1.1709944>
- [29] Fisher, E.S., Manghnani, M.H. and Kikuta, R. (1973) Hydrostatic Pressure Derivatives of the Single Crystal Elastic Moduli of Gd, Dy and Er. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **34**, 687-703. [https://doi.org/10.1016/s0022-3697\(73\)80176-3](https://doi.org/10.1016/s0022-3697(73)80176-3)
- [30] Song, R., Chen, Y., Chen, S., Xu, N. and Zhang, W. (2024) First-Principles to Explore the Hydrogen Storage Properties of XPtH₃ (X = Li, Na, K, Rb) Perovskite Type Hydrides. *International Journal of Hydrogen Energy*, **57**, 949-957. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.01.116>
- [31] Song, R., Xu, N., Chen, Y., Chen, S., Zhang, J., Dai, W., *et al.* (2024) Insight into the Mechanical, Electronic, Kinetic, Thermodynamic, and Hydrogen Storage Properties of XFeH₃ (X = Ca, Sr, Ba) Perovskites for Hydrogen Storage Applications: First-Principle Calculations. *Chinese Journal of Physics*, **89**, 1152-1163. <https://doi.org/10.1016/j.cjph.2023.12.040>
- [32] Born, M. (1940) On the Stability of Crystal Lattices. I. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, **36**, 160-172. <https://doi.org/10.1017/s0305004100017138>
- [33] Ezugwu, E.O. and Wang, Z.M. (1997) Titanium Alloys and Their Machinability—A Review. *Journal of Materials Processing Technology*, **68**, 262-274. [https://doi.org/10.1016/s0924-0136\(96\)00030-1](https://doi.org/10.1016/s0924-0136(96)00030-1)
- [34] Gaillac, R., Pullumbi, P. and Coudert, F. (2016) ELATE: An Open-Source Online Application for Analysis and Visualization of Elastic Tensors. *Journal of Physics: Condensed Matter*, **28**, Article ID: 275201. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/28/27/275201>