

# Analytic Equation of State and Thermodynamic Properties of $\text{Rb}_6\text{C}_{60}$ \*

Wei Yang

School of Electronic Information Engineering, Chengdu University, Chengdu  
Email: yangweicdu@163.com

Received: May 31<sup>st</sup>, 2013; revised: Jun. 14<sup>th</sup>, 2013; accepted: Jun. 29<sup>th</sup>, 2013

Copyright © 2013 Wei Yang. This is an open access article distributed under the Creative Commons Attribution License, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

**Abstract:** The analytic mean field potential (AMFP) approach is applied to the multiple-exponential potential solid, and the double-exponential (DE) potential is included in as a special case. The analytic equation of state and thermodynamic properties are derived and applied to  $\text{Rb}_6\text{C}_{60}$  solid. One set of potential parameters are determined by fitting the experimental compression data of  $\text{Rb}_6\text{C}_{60}$  up to 22 GPa at ambient temperature (296 K). Various physical quantities including the thermal expansion, bulk modulus, isochoric heat capacity, Helmholtz free energy are calculated and analyzed. The theoretical results are consistent with the available experimental data and those calculated by others. The AMFP method is a useful approach to consider the anharmonic effect of  $\text{Rb}_6\text{C}_{60}$  at high temperature.

**Keywords:** Equation of State; Thermodynamic Properties;  $\text{Rb}_6\text{C}_{60}$ ; AMFP

## $\text{Rb}_6\text{C}_{60}$ 的解析状态方程及热力学性质\*

杨 维

成都大学电子信息工程学院, 成都  
Email: yangweicdu@163.com

收稿日期: 2013 年 5 月 31 日; 修回日期: 2013 年 6 月 15 日; 录用日期: 2013 年 6 月 29 日

**摘 要:** 解析平均场(AMFP)方法用于多指数型固体, 双指数型固体作为一种特殊情况包含于其中。推导了状态方程和热物理量的解析表达式, 并把所得到的公式用于固体  $\text{Rb}_6\text{C}_{60}$  的热力学性质研究。通过拟合固态  $\text{Rb}_6\text{C}_{60}$  在室温 296 K 压强至 22 GPa 的压缩实验数据得到了一套势参数。在宽广温度和压强范围内对  $\text{Rb}_6\text{C}_{60}$  的各种物理量, 包括热膨胀、体积模量、等容热容量、亥姆霍兹自由能进行了计算和分析。我们的理论结果与其它的计算结果和有用的实验数据非常一致。AMFP 方法能很好的考虑  $\text{Rb}_6\text{C}_{60}$  在高温时的非谐性效应。

**关键词:** 状态方程; 热力学性质;  $\text{Rb}_6\text{C}_{60}$ ; 解析平均场方法

### 1. 引言

状态方程是描述处于热力学平衡态物质系统中各状态变量( $P, V, T, E$ )之间关系的一个函数表达式, 它是物理学研究的一个基础问题。对某种材料只要知

道状态方程, 就可以通过热力学关系求出相应的热力学性质。近年来, 人们对碱金属掺杂富勒烯的性质研究中, 主要集中于对其结构和电学性质的研究<sup>[1]</sup>。关于  $\text{Rb}_x\text{C}_{60}$  ( $x = 3, 4, 6$ ) 热力学性质的研究报道很少<sup>[2,3]</sup>。虽然一些研究小组测得了  $\text{Rb}_3\text{C}_{60}$  的实验状态方程, 并采用通用状态方程对热物性进行了研究, 但这些方程

\*基金项目: 四川省教育厅科研项目(11ZA298); 成都大学校重点基金(2011XJZ07)资助项目。

适用的温度压强范围有限,不能很好考虑温度效应。Poloni等<sup>[4]</sup>对Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub>和Cs<sub>6</sub>C<sub>60</sub>体系的热力学性质在实验和理论方面进行了研究。Sabouri-Dodaran等<sup>[5]</sup>利用高压x射线衍射实验得到了Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub>的实验状态方程,并用第一性原理对其状态方程进行计算。但这两个研究小组从实验和理论得到的结论有一定的差异。由于实验条件的限制,人们对Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub>在高温高压下的热力学性质研究较少。在理论方面人们大多基于在谐性或准谐性近似下进行计算,不能很好地考虑材料在高温下的非简谐效应。

众所周知,自由体积模型(亦称胞腔模型)是一种平均场近似,通常是考虑原子对晶相的焵姆赫兹自由能的热贡献。该模型认为每一个原子被限制在由它周围最近邻原子形成的Wigner-Seitz(WS)元胞中心。虽然这种元胞模型忽略了原子间的相互关联,但它包含了高温下重要的非简谐项。许多模拟结果表明元胞模型能很好地描述6指数幂型固体、氯化钠固体和面心立方Lennard-Jones晶体的性质。Wasserman等<sup>[6]</sup>进一步应用元胞模型于固态金属铁,其计算结果与静态压缩和冲击波压缩实验测量结果非常吻合。平均场理论的中心问题是如何计算平均场势。几年前王义等<sup>[7]</sup>提出了解析平均场(AMFP)方法并成功应用于14种典型金属,结果与实验结论非常符合。这种方法基于物理意义上的考虑,将平均场势能全部用冷能表示去计算固体的热力学性质。Bhatt等<sup>[8]</sup>进一步将AMFP方法应用于铅和碱金属认为与其它理论模型相比较AMFP方法计算简单、物理意义明显是研究材料在高温高压下热力学性质的一种可信的方法。孙久勋<sup>[9]</sup>等证明了AMFP的方法是自由体积理论的一种解析近似。在严格根据自由体积理论能导出解析状态方程时,直接采用它比AMFP方法更有价值。然而根据自由体积理论不能导出解析状态方程的表达式或者进行平均场积分太复杂的情况下,直接通过AMFP方法得到简单的状态方程就非常方便。本文基于AMFP方法对Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub>在宽广温度和压强下的热物理性质作进一步的研究。

## 2. 解析状态方程

许多作者<sup>[10-12]</sup>研究表明指数势能很好的描述固态富勒烯、金刚石、立方氮化硼等材料在宽广温度和压力下的热力学性质。因此,本文采用双指数(DE)势

描述Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub>分子间的相互作用。该势函数的表达式如下

$$\varepsilon(s) = \varepsilon_0 \cdot [C_1 e^{\lambda_1(1-s)} + C_2 e^{\lambda_2(1-s)}], \quad s = r/r_0 \quad (1)$$

$$\begin{cases} C_1 = \lambda_2 / (\lambda_1 - \lambda_2) \\ C_2 = -\lambda_1 / (\lambda_1 - \lambda_2) \end{cases} \quad (2)$$

式中 $r$ 是径向坐标, $r_0$ 是Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub>分子间平衡距离, $\varepsilon_0$ 是势阱深度,两个势参数 $\lambda_1, \lambda_2$ 描述势能随径向坐标 $r$ 的变化。

根据自由体积理论<sup>[13]</sup>,自由能可以表达为

$$\frac{F}{NkT} = -\frac{3}{2} \ln(2\pi\mu kT/h^2) + \frac{u(0)}{2kT} - \ln v_f \quad (3)$$

式中 $\mu$ 是Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub>分子的质量, $h$ 是普朗克常数。 $u(0)$ 是当晶格静止时,一个分子与所有其它分子相互作用的势能, $v_f$ 是自由体积。对整个晶格求和可得到 $u(0)$ 表达式如下

$$u(0) = \sum_{i \neq 0} z_i \varepsilon\left(\frac{R_i}{r_0}\right) = \sum_{i \neq 0} z_i \varepsilon\left(\delta_i \frac{a}{r_0}\right) = \sum_{i \neq 0} z_i \varepsilon(\delta_i y) \quad (4)$$

$$v_f = 4\pi \int_0^{r_m} \exp[-g(r,V)/kT] r^2 dr \quad (5)$$

式中 $R_i = \delta_i a$ 是第 $i$ 层分子距离中心分子( $i=0$ )之间的距离, $a$ 是最近邻的距离, $z_i$ 和 $\delta_i$ 是结构常数<sup>[14]</sup>。 $g(r,V)$ 表示某一分子漂移距中心分子为 $r$ 时的势能。根据AMFP方法<sup>[7]</sup>, $g(r,V)$ 可以用一个分子的冷能 $E_c(a)$ 表示为

$$g(r,V) = \frac{1}{2} \left[ \left(1 + \frac{r}{a}\right) E_c(a+r) + \left(1 - \frac{r}{a}\right) E_c(a-r) - 2E_c(a) \right] \quad (6)$$

$$E_c(a) = \frac{1}{2} u(0) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq 0} z_i \varepsilon(\delta_i y) \quad (7)$$

$r_m = (3a^3/4\pi\gamma)^{1/3} \approx a/2$ 是WS半径,它可以近似表示中心分子的最大位移。其中 $\gamma$ 是结构常数,对于bcc结构其值为 $3\sqrt{3}/4$ 。

固体的体积为 $V = Na^3/\gamma$ ( $N$ 是固态bcc Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub>的元胞数)。为了简便我们引入无量纲的约化自由体积 $\bar{v}_f$ ,约化体积 $y$ ,约化径向坐标 $x$ 如下

$$v_f = 4\pi a^3 \bar{v}_f = 4\pi\gamma V \bar{v}_f / N \quad (8)$$

$$y = a/r_0 = (V/V_0)^{1/3}, \quad V_0 = N(r_0)^3/\gamma \quad (9)$$

$$x = r/a, \quad x_m = \frac{r_m}{a} = (3/4\pi\gamma)^{1/3} \quad (10)$$

经过数学推导可以得到压缩因子  $Z$  和内能  $U$  的表达式如下

$$\begin{aligned} Z &= \frac{PV}{NkT} = -\frac{y}{3} \frac{\partial}{\partial y} \frac{F}{NkT} \\ &= 1 - \frac{y}{6kT} \frac{\partial}{\partial y} u(0) + \frac{y}{3\bar{v}_f} \frac{\partial}{\partial y} \bar{v}_f \end{aligned} \quad (11)$$

$$\frac{U}{NkT} = -T \frac{\partial}{\partial T} \frac{F}{NkT} = \frac{3}{2} + \frac{u(0)}{2kT} + \frac{T}{\bar{v}_f} \frac{\partial \bar{v}_f}{\partial T} \quad (12)$$

根据上面的方程, 可以方便地推出 Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub> 的相关热力学量的解析表达式。压缩因子  $Z$  可以视为变量  $y$  和  $T$  的函数, 即  $Z = Z(y, T)$ 。根据该函数热膨胀系数  $\alpha$  压缩系数  $\beta$  和等容热容量  $C_V$  可以简化为下面的形式

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_p = \frac{3}{y} \left( \frac{\partial y}{\partial T} \right)_p \\ &= \left[ \frac{Z}{T} + \left( \frac{\partial Z}{\partial T} \right)_y \right] \left[ Z - \left( \frac{y}{3} \right) \left( \frac{\partial Z}{\partial y} \right)_T \right]^{-1} \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \beta &= -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial P} \right)_T = -\frac{3}{y} \left( \frac{\partial y}{\partial P} \right)_T \\ &= \left( \frac{V_d y^3}{NkT} \right) \left[ Z - \left( \frac{y}{3} \right) \left( \frac{\partial Z}{\partial y} \right)_T \right]^{-1} \end{aligned} \quad (14)$$

$$\frac{C_V}{Nk} = \frac{1}{Nk} \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = \frac{U}{NkT} + T \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{U}{NkT} \right) \quad (15)$$

分析发现对方程(13)至(15)的具体计算中采用  $\Delta T = 0.00001 \times T$  和  $\Delta V = 0.00001 \times V$  这样的微分步长可以得到稳定的数值结果。

### 3. 计算结果分析

#### 3.1. 对 P-V 实验数据的拟合

根据上面推导的解析状态方程和热力学量的表达式, 我们对固态 Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub> 的热物理性质进行了计算和分析。美国学者 Girifalco<sup>[15]</sup>指出, 在 C<sub>60</sub> 分子中原子间是强烈的共价键相互作用构成高度对称的球笼状分子, 而 C<sub>60</sub> 分子间是较弱的范德瓦尔斯相互作用。因此固态 C<sub>60</sub> 的热物理性质可以视为分子内和分子间

的振动贡献之和, 而分子内振动对状态方程和热物理量(热容量除外)的贡献可以忽略, 所以没有把这部分贡献考虑在状态方程和热力学性质中, C<sub>60</sub> 分子的空间运动对状态方程起决定作用。因此, 正如 Girifalco<sup>[15]</sup>对 C<sub>60</sub> 热力学性质研究所做的近似一样, 在本文中我们也仅仅考虑 Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub> 分子之间相互作用对状态方程和热力学性质的贡献。法国学者 Sabouri-Dodaran 等<sup>[5]</sup>采用 x 射线衍射实验测得了 Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub> 在室温(296 K)的压缩数据, 并且指出在实验压强范围(0~22 GPa)内 Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub> 始终保持体心立方结构。基于 AMFP 和 DE 势对 Sabouri-Dodaran 的压缩实验数据拟合, 得到了方程(4)中的势参数如下

$$\lambda_1 = 9.03, \lambda_2 = 12, r_0 = 1.03 \text{ nm}, \varepsilon_0 = 36000 \text{ K} \quad (16)$$

将上面得到的势参数带入方程(1)便可得到具体的 DE 势函数的表达式。图 1 中给出了实验数据和拟合曲线, 从该图可以看出采用这种方法拟合的效果很好, 这说明 AMFP 方法对于研究 Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub> 的热物性是一种很适用的方法。

#### 3.2. 热力学性质随温度的变化

基于第一性原理, Sabouri-Dodaran 等<sup>[5]</sup>得到 Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub> 的状态方程与实验数据符合很好, 但他们根据实验数据分别利用不同的通用状态方程得到 Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub> 的体积模量  $B_0$  及对压强的变化率  $B'_0$  的结果间稍有差异。考虑到 Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub> 在室温下元胞参数, 采用 AMFP 方法计算得到的体积模量与 Sabouri-Dodaran 采用的线性拟合结果符合很好。晶体在室温下的体积模量  $B_0$  及其关于压强的一阶导数  $B'_0$  是通用状态方程的重要参数, 因此对它们的计算与研究具有重要意义。表 1 给出了采用 AMFP 方法结合 DE 势计算得到的  $B_0$  和  $B'_0$  与相关

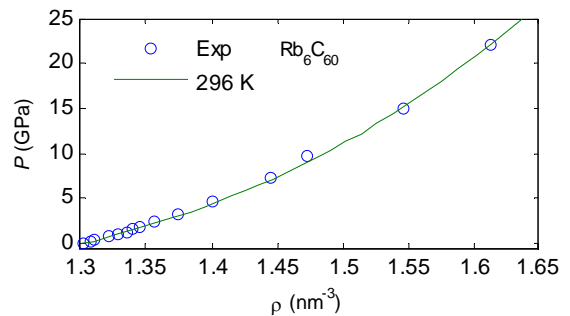


Figure 1. Compression curve at 296 K, "o" experimental data<sup>[4]</sup>  
图 1. 温度在 296 K 的压缩曲线, "o" 代表实验数据<sup>[4]</sup>

**Table 1. Calculated bulk modulus  $B_0$  and its pressure derivatives  $B'_0$  at zero pressure and 296 K, compared with the experimental data and other theoretical results**

**表 1. 在零压 296 K 计算得到 Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub> 的体积模量  $B_0$  及其关于压强的一阶导数  $B'_0$  与实验数据和其它理论计算结果的比较**

	Present AMFP	Ref.[5] Thoery	Ref.[16] Thoery	Ref.[4] Thoery	Ref.[4] Expt.	Ref.[5] Expt.
$B_0$ (GPa)	44.9	40.55	52.5	23	30	55.4
$B'_0$	7	3.3	-	6.6	8.5	5.13

文献中的实验值<sup>[4,5]</sup>和理论结果<sup>[4,5,16]</sup>的比较。从该表可以看出, AMFP 方法得到的体积模量  $B_0$  与实验结果的平均值接近, 同时与理论值也符合较好。我们经分析认为该表中的两组实验数据之间的差异主要可能与实验中样品所处的压强环境和化学环境有关。

相关文献<sup>[7-9]</sup>表明 AMFP 方法能成功地运用于对富勒烯和一些简单固体热力学性质的研究, 它能很好地考虑材料在高温下的非简谐效应。虽然在零压下没有关于 Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub> 热力学性质随温度变化的实验数据可以比较, 但根据 AMFP 的方法可以很方便地对 Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub> 热力学性质随温度变化趋势进行合理的预测。表 2 给出了在零压下的最近邻距离、线性热膨胀系数、体积模量以及等容热容量随温度的变化。最近邻距离和热膨胀系数都是温度的增函数, 而体积模量和等容热容量都随温度的升高而减小。

### 3.3. 热力学性质随压强的变化

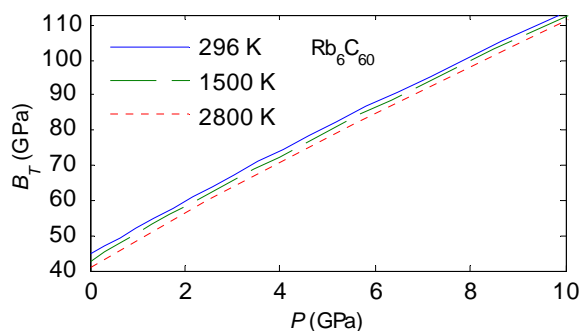
图 2 至图 5 中给出了 AMFP 方法并结合 DE 势计算得到 Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub> 的热力学性质随压强变化。图 2 表示温度分别为 296 K、1500 K 和 2800 K 时 Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub> 的等温体积模量  $B_T$  相对于压强  $P$  的变化, 两条曲线的变化趋势很一致。当温度一定时,  $B_T$  随压强的增大而增大; 当压强一定时  $B_T$  随温度的升高而减小, 这表明增大压强和降低温度对体积模量有着相同的效果。

图 3 和图 4 分别给出了 Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub> 在 296 K 时的热膨胀系数  $\alpha$  和等容热容量  $C_V$  相对于压强的变化关系。图 3 表示热膨胀系数  $\alpha$  是压强的减函数, 在低压下变化很快但在高压下变化减慢并表现出一定的饱和性。这是因为随着压强的增大, 原子间的相互作用增强, 热压对总压的贡献减弱, 冷压增强。因此, 热膨胀系数在高压下不明显。晶格振动的研究, 最早是从晶体热学性质开始的, 热运动宏观性质上最直接的表现就是热

**Table 2. The nearest-neighbor distance  $a$  in nm, linear thermal expansion coefficient  $\alpha$  in  $10^{-5} \text{ K}^{-1}$ , the bulk modulus  $B_T$  in GPa, the heat capacity  $C_V$  in  $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$**

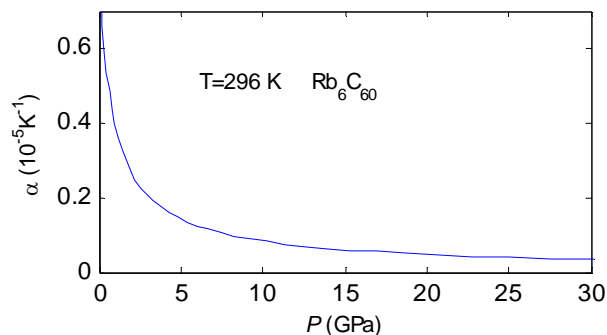
**表 2. 最近邻距离  $a$ (nm), 线性热膨胀系数  $\alpha(10^{-5} \text{ K}^{-1})$ , 体积模量  $B_T$  (GPa), 热容量  $C_V$  ( $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ )**

$T$	$a$	$\alpha$	$B_T$	$C_V$
200	1.2982	0.1272	44.630	24.883
400	1.2985	0.1278	44.337	24.854
600	1.2988	0.1284	44.044	24.845
800	1.2992	0.1290	43.752	24.829
1000	1.2995	0.1296	43.460	24.810
1200	1.2998	0.1302	43.168	24.790
1400	1.3002	0.1308	42.876	24.769
1600	1.3005	0.1315	42.585	24.747
1800	1.3009	0.1321	42.294	24.725
2000	1.3012	0.1328	42.044	24.703
2400	1.3019	0.1341	41.423	24.658
2800	1.3026	0.1355	40.844	24.612



**Figure 2. Variations of bulk modulus  $B_T$  versus pressure  $P$  at 296 K, 1500 K and 2800 K**

**图 2. 在 296 K、1500 K 和 2800 K 的体积模量随压强的变化**



**Figure 3. Variation of linear thermal expansion coefficient  $\alpha$  versus pressure  $P$  at 296 K**

**图 3. 在 296 K 时线性热膨胀系数  $\alpha$  随压强  $P$  的变化**

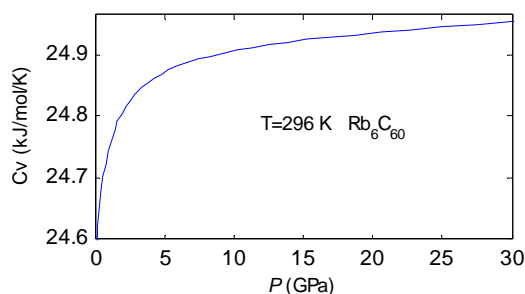


Figure 4. Variation of isochoric heat capacity  $C_V$  versus pressure  $P$  at 296 K

图 4. 在 296 K 时等容热容量  $C_V$  相对于压强  $P$  的变化

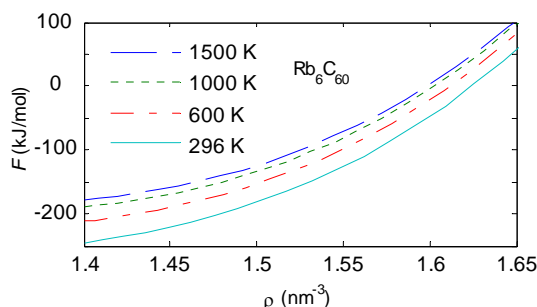


Figure 5. Variation of free energy  $F$  versus density  $\rho$  at 296 K, 600 K, 1400 K, 1500 K

图 5. 在 296 K, 600 K, 1400 K, 1500 K 自由能  $F$  相对于密度  $\rho$  的变化

容量。图 4 表明等容热容量  $C_V$  是压强的增函数，在低压时变化明显比在高压时变化更快。在温度为 296 K 压强高于 30 GPa 时  $C_V$  的值接近  $3R$  ( $R$  是理想气体常数)，这符合经典的杜隆 - 珀替定律。上一世纪大量的实验研究已经表明杜隆 - 珀替定律在室温和更高的温度对固体基本上是适合的。这就进一步证明了 AMFP 方法对 Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub> 的热容量  $C_V$  的预测是合理的。

由于自由能是重要的热力学量，基于它们的表达式很容易得到其它的热力学量。因此，在图 5 给出了在四个温度(296 K、600 K、1000 K、1500 K)下自由能相对于密度  $\rho$  的变化。该图表明在四个温度下 Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub> 的自由能是密度的增函数，具有相同的变化趋势，在低温时比在高温时变化更快。

#### 4. 结论

解析平均场方法是自由体积理论的一种解析近似，本文基于这种方法建立了 Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub> 的解析状态方程，并对 Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub> 热力学性质进行了研究。计算结果表

明采用该方法得到的结果与实验数据以及文献理论结果符合很好。同时该方法还能较方便地对 Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub> 在零压以及高温和高压下的热物性变化趋势进行预测。

#### 5. 致谢

本文工作得到四川省教育厅科研项目和成都大学学校重点基金资助(基金号 2011XJZ07; 11ZA298)。

#### 参考文献 (References)

- [1] M. G. Yao, B. Sundqvist and T. Wagberg. Reversible pressure-driven nanoscale phase separation in Rb<sub>4</sub>C<sub>60</sub>. *Physical Review B*, 2009, 79(8): 081403-081406.
- [2] W. H. Fietz, H. A. Ludwig, F. W. Hornung, et al. The compressibility of Rb<sub>3</sub>C<sub>60</sub> derived by X-ray experiments under high pressure. *Physica C*, 1994, 234(1-2): 45-48.
- [3] R. Kerkoud, P. Auban-Senzier, D. Jérôme, et al. Insulator-metal transition in Rb<sub>4</sub>C<sub>60</sub> under pressure from <sup>13</sup>C-NMR. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 1996, 57(2): 143-152.
- [4] R. Poloni, M. V. Fernandez-Serra, S. Le Floch, et al. Pressure-induced deformation of the C<sub>60</sub> fullerene in Rb<sub>6</sub>C<sub>60</sub> and Cs<sub>6</sub>C<sub>60</sub>. *Physical Review B*, 2008, 77(3): Article ID: 035429.
- [5] A. A. Sabouri-Dodaran, M. Marangolo, C. Bellin, et al. Equations of state of Rb<sub>x</sub>C<sub>60</sub> ( $x=3, 4$ , and 6). *Physical Review B*, 2004, 70(17): Article ID: 174114.
- [6] E. Wasserman, L. Stixrude. Thermal properties of iron at high pressures and temperatures. *Physical Review B*, 1996, 53(13): 8296-8309.
- [7] Y. Wang, D. Chen and X. Zhang. Calculated equation of state of Al, Cu, Ta, Mo, and W to 1000 GPa. *Physical Review Letter*, 2000, 84(15): 3220-3223.
- [8] N. K. Bhatt, P. R. Vyas, A. R. Jani, et al. Thermodynamic properties of the alkali metals at high temperatures and high pressures using mean-field potential model. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 2005, 66(5): 797-808.
- [9] J. X. Sun, L. C. Cai, Q. Wu, et al. Equivalence of the analytic mean-field potential approach with free-volume theory and verification of its applicability based on the Vinet equation of state. *Physical Review B*, 2005, 71(2): Article ID: 024107.
- [10] W. Yang, J. X. Sun and F. Yu. Thermodynamic properties of cubic boron nitride based on an analytic mean field approach. *European Physical Journal B*, 2009, 71(2): 211-217.
- [11] A. I. Karasevskii, V. V. Lubashenko. Binary distribution functions of atoms of simple crystals. *Physical Review B*, 2002, 66(5): 054302-054311.
- [12] W. Yang, J. X. Sun and R. G. Tian. Analytic equation of state and thermodynamic properties of diamond based on an analytic mean field approach. *Diamond & Related Materials*, 2009, 18(4): 632-636.
- [13] 金家骏. 分子热力学[M]. 北京: 科学出版社, 1990: 255-264.
- [14] N. X. Chen, Z. D. Chen and Y. C. Wei. Multidimensional inverse lattice problem and a uniformly sampled arithmetic Fourier transform. *Physical Review E*, 1997, 55(1): R5-R8.
- [15] L. A. Girifalco. Molecular properties of C<sub>60</sub> in the gas and solid phases. *Journal of Physical Chemistry*, 1992, 96(2): 858-861.
- [16] K. Ranjan, K. Dharamvir and V. K. Jindal. Bulk properties of alkali doped C<sub>60</sub> solids. *Indian Journal of Pure and Applied Physics*, 2005, 43(9): 654-659.