文章编号：1000-5773(2008)03-0253-06

过渡金属锇在高压下的力学特性*

刘小妹[1]，梁拥成[2]，宋秋红[2]

（1. 上海工程技术大学基础教学学院，上海 201620；
2. 上海水产大学工程学院，上海 200090）

摘要：基于密度泛函理论平面波赝势法的第一性原理计算，研究了过渡金属锇在高压下的状态方程、弹性常数和其它力学性质。计算结果表明：过渡金属锇具有很高的体积模量 B_0（423.9 GPa）和弹性常数 C_{11}（771.3 GPa）与 C_{33}（852.0 GPa），与金刚石的（$B_0=452.8$ GPa，$C_{11}=C_{33}=1\,082.9$ GPa）比较，具有超低压缩特性；表征材料抵抗剪切变形能力的弹性常数 C_{44}（269.8 GPa）和切变模量（276.8 GPa）只有金刚石的（$C_{44}=586.9$ GPa，$G=537.5$ GPa）一半，而所成的又是纯金属键，因此锇不具有超硬性。最后，定性分析了它的高体积模量和低硬度的微观电子机制，这对于设计与合成新的超硬性材料具有启发意义。

关键词：过渡金属锇；力学特性；高压；第一性原理计算
中图分类号：O521.2；O369 **文献标识码**：A

1 引 言

在高压下，过渡金属锇（Os）不但具有超低压缩性，而且可能存在二级同构相变等新奇的物理力学特性，因而近年来引起了国际高压研究者的极大兴趣和关注[1-10]。锇属于贵重的 5*d* 铂系金属，有很高的价电子浓度，极强的抵抗弹性变形的能力，因而是非常好的不可压缩性材料。尽管它的纯金属材料本身硬度并不高，但在其中掺入硼、碳、氮或氧等轻小原子，就可能形成方向性的共价键，极大地增强其抵抗塑性变形的能力，从而提高它的硬度。这可能为设计和合成超硬材料提供一条新途径，因而过渡金属及其化合物最近受到重视[11-14]，值得深入研究。

因为粉末状或海绵状锇易在空气中缓慢地被氧化，并挥发出很高致毒性、强烈气味性的 OsO_4，所以人们对锇的研究、特别是实验研究一直很少。直到 2002 年，Cynn 等人[1]第一次从实验上测定了锇在高压下的状态方程到 60 GPa，惊奇地发现它是最难压缩的材料（体积模量为 462 GPa），甚至超过人们一直公认的最难压缩的金刚石（体积模量为 446 GPa）[3]。这个报道意味着非局域的金属键比局域的共价键更难压缩，这似乎很难从物理方面去理解。然而，这个结果很快受到质疑。Occelli 小组[2]和 Kenichi[3]紧接着对锇的高压状态方程重新进行了测定，分别获得的体积模量为 395 GPa 和 411 GPa，都略低于金刚石。对于锇体积模量的研究，除以上实验研究外，还有很多其它的理论计算结果[4-10]，分别从 392 GPa 到 476 GPa，非常分散，这可能是因为各自采用不同的计算方法与交换关联势所造成的。尽管大部分认为是低于金刚石的，但还是存在着争论：例如 Fast 等人[6]通过计算获得的理论值为 476.1 GPa，高于金刚石的数值；而 Hebbache 等[7]的计算结果更出乎意料，在低压时高于金刚石的，在高压时低于金刚石的，而且数值与拟合的状态方程形式有很大关系。这可能是由于计算没有完全收敛造成的。

* **收稿日期**：2007-10-10；**修回日期**：2008-01-09
基金项目：国家自然科学基金项目（10602023）；上海市教委科研创新项目（08YZ119）；上海市高校选拔培养优秀青年教师科研专项基金项目（2005xpyq32）；上海水产大学博士启动基金
作者简介：刘小妹（1976—），女，硕士，讲师，主要从事断裂力学研究. E-mail：liuxm76@163.com
通讯作者：梁拥成（1974—），男，博士，讲师，主要从事材料物性的第一性原理计算. E-mail：ycliang@shfu.edu.cn

除了国际上这些超低压缩性(体积模量的倒数)研究,在国内,对于锇在高压下全面力学性质(弹性常数、切变模量、杨氏模量和泊松比等)的研究目前还未见报道。为此,本工作运用基于密度泛函理论的平面波赝势法的第一性原理计算,详细研究过渡金属锇在高压下的状态方程、弹性常数以及相关力学量,并分析其微观机制,深入理解其宏观力学特性,有助于设计工业上广泛应用的超硬材料。

2 计算细节

对在高压下过渡金属锇的全部计算,是采用基于密度泛函理论的平面波赝势法的第一性原理程序包 BSTATE[15]完成的。基于价态构形 $5d^6 6s^2 6p^0$ 以及相对论芯核,产生 Vanderbilt 超软赝势[16]。局域密度近似 (LDA-PW91)[17]和广义梯度近似 (GGA-PBE)[18-19]两种格式都分别作为交换关联密度函数,以便比较它们对计算结果的影响。

对平面波展开截断能量和动量空间抽样点数目的选取进行了仔细检测,获得了很好的收敛性,在后面的计算中,动能和电荷密度的平面波展开截断能量分别取为 574.8 eV 和 5 442.3 eV;动量空间抽样积分采用 14×14×10 Monkhorst-Pack 的网格[20]。

对于过渡金属锇,在很宽的体积范围内进行了自洽的总能量计算。由于它是六角密堆结构,因而需要在每个固定体积点进行结构优化。在优化的过程中固定体积,改变晶格比 c/a,把系列 c/a 构形下的能量进行二次抛物线拟合,以获得最低能量下的晶格参数,此晶格参数的总能量作为该体积的能量。锇虽然是重元素,但以前的研究[4,21]发现,自旋-轨道耦合作用对其力学参数的影响很小,因此在本工作的整个计算中忽略其自旋-轨道耦合效应。

3 结果与讨论

3.1 超低压缩性

在一定范围内,对于每个固定体积点自洽地计算出优化结构的总能量 $E(V)$,使用最小二乘法拟合三阶 Birch-Murnaghan 状态方程[22]

$$E(V)=-\frac{9}{16}B_0\left[(4-B'_0)\frac{V_0^3}{V^2}-(14-3B'_0)\frac{V_0^{7/3}}{V^{4/3}}+(16-3B'_0)\frac{V_0^{5/3}}{V^{2/3}}\right]+E_0 \tag{1}$$

获得此材料在零压下的平衡体积 V_0、体积模量 B_0 和体积模量对压力的一阶导数 B'_0,再把(1)式对体积 V 求导数,从而可得

$$p(V)=-\frac{\partial E(V)}{\partial V}=\frac{3}{2}B_0\left[\left(\frac{V_0}{V}\right)^{7/3}-\left(\frac{V_0}{V}\right)^{5/3}\right]\left\{1+\frac{3}{4}(B'_0-4)\left[\left(\frac{V_0}{V}\right)^{2/3}-1\right]\right\} \tag{2}$$

(2)式就完全决定不同体积下所对应的计算静水压力 p。

图 1 给出了采用广义梯度近似计算所得到的过渡金属锇和金刚石的压力与体积的关系曲线(状态方程),并与文献[1-3]中锇的实验数据进行比较。从图 1 可以定性看出,计算的状态方程曲线非常好地吻合 Occelli 小组[2]和 Kenichi[3]的实验结果,但略微偏离 Cynn 等人[1]的实验结果。在 0～100 GPa 计算压力范围内,金刚石比过渡金属锇更难于压缩,没有支持 Cynn 等人[1]认为锇是最难压缩材料的实验报道。

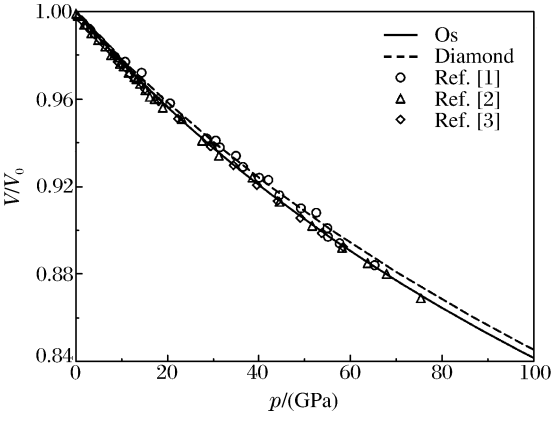


图 1 过渡金属锇和金刚石的压力与相对体积关系曲线

Fig. 1 The pressure-volume relations of transition-metal osmium and diamond

计算所得到的零压平衡态下的结构参数和拟合三阶状态方程(1)的定量结果列于表 1 中,同时列出其它文献结果作为比较。由于 LDA 低估晶格常数而高估弹性常数,而 GGA 正好相反,所以用两者的计算平均值来讨论。从表 1 可看出,金刚石的计算晶

格常数为 0.355 0 nm,与实验晶格常数 0.356 7 nm 非常一致;而计算体积模量 452.8 GPa 也重现了实验值 446 GPa。这说明我们的计算具有非常高的准确性。对于过渡金属锇,理论计算所得晶格常数为 0.273 9 nm、晶轴比为 1.575,在 1% 误差之内极好地吻合实验测量值;而计算所得的体积模量为 423.9 GPa,在 GGA 与 LDA 的误差范围之内,非常好地吻合 Occelli 小组[2] 和 Kenichi[3] 的实验结果 395 GPa 和 411 GPa,然而略小于 Cynn 等人[1] 的 462 GPa。体积模量对压力的导数的计算值为 4.68,很好地符合 Occelli 小组[2] 和 Kenichi[3] 的实验值 4.5 与 4.0,但明显偏离 Cynn 等人[1] 的结果(2.4)。因此,过渡金属锇确实具有很高的体积模量,是超低压缩性材料;但还是低于金刚石的体积模量,金刚石仍然是最难以压缩的材料。

表 1　零压下过渡金属锇与金刚石的晶格常数 a、轴间比 c/a、体积模量 B_0、弹性模量对压力导数 B'_0

Table 1　Lattice constants a, axial ratio c/a, bulk modulus B_0, and its pressure derivative B'_0 for transition-metal osmium and diamond under zero-pressure

Parameter	Os				Diamond			
	GGA	LDA	Ave.	Others	GGA	LDA	Ave.	Others
a/(nm)	0.274 6	0.273 2	0.273 9	0.273 4[1], 0.273 5[2], 0.273 3[3]	0.356 8	0.353 2	0.355 0	0.356 7[23], 0.353 7[25]
c/a	1.576	1.574	1.575	1.580[1], 1.579[2], 1.579[3]				
B_0/(GPa)	410.0	437.8	423.9	462[1], 395[2], 411[3]	436.8	468.8	452.8	446[23], 438[25]
B'_0	4.70	4.65	4.68	2.4[1], 4.5[2], 4.0[3]	3.30	3.59	3.45	3.0[23], 3.55[25]

为了深入理解六角密堆结构过渡金属锇在不同晶格方向上可压缩性质的各向异性,为此计算其 a 轴与 c 轴方向的可压缩性。一般地,沿具体 x 轴方向的可压缩性定义为 $k_x=-(1/x)(\partial x/\partial p)$[26]。先拟合计算晶格常数随压力的变化关系,得到解析表达式,再根据上面的定义式计算。图 2 给出了 a 轴与 c 轴的轴向压缩性的计算结果,可以看到,晶格在 a 方向比 c 方向更容易被压缩。并且,随着压力逐渐提高,a 轴与 c 轴方向都会变得更难压缩。

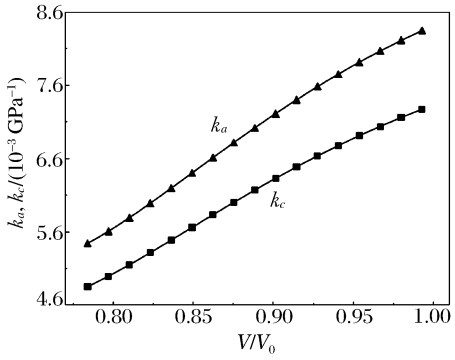


图 2　计算轴向压缩性(k_a 和 k_c)与相对体积的关系

Fig. 2　Calculated axis compressibility (k_a and k_c) as a function of relative volume

3.2　弹性常数和其它力学量

弹性常数描述晶体在外在应变下的响应,并提供最紧邻原子间成键强度的关键信息,获得准确的弹性常数等信息是理解固体宏观力学性质和设计超硬材料所必要的。第一性原理计算不仅能够提供与实验测量非常一致的弹性常数,而且可以极好地预测材料在高温高压等极端条件下的弹性常数,对于建立各种新型材料的本构关系提供了极大的方便。对于理想晶体,内能在某体积点附近展开为应变张量 ε 的二阶 Taylor 级数为[6]

$$E(V,\varepsilon)=E(V_0,\varepsilon_0)+V_0\left(\sum_i \sigma_i\varepsilon_i\xi_i+\sum_{ij}\frac{1}{2}C_{ij}\varepsilon_i\xi_i\varepsilon_j\xi_j\right) \tag{3}$$

式中:V_0 和 V 分别是初、末状态的晶体体积,$E(V_0,\varepsilon_0)$ 和 $E(V,\varepsilon)$ 是对应状态的体系内能;而一次项和二次项中的展开系数为 σ_i 和 C_{ij},物理意义分别为体系所对应的应力张量和绝热弹性常数。并且,在(3)式中引入参数因子 ξ_i,当 Voigt 指标为 1、2、3 时,$\xi_i=1$;当 Voigt 指标为 4、5、6 时,$\xi_i=2$。对于不同晶格结构,取相应的应变分量,自洽的计算出体系内能,通过最小二乘法就能拟合出弹性常数 C_{ij};再根据 Voigt-Reuss-Hill 边界法[27] 计算出材料的切变模量 G、杨氏模量 E 和泊松比 ν。详细计算过程不再给出,可参阅相关文献。

对于六角结构过渡金属锇,弹性常数只有 C_{11}、C_{12}、C_{13}、C_{33} 和 C_{44} 5 个是独立的。表 2 中给出了它在零压下的计算弹性常数、切变模量、杨氏模量和泊松比。为了检测计算结果并与过渡金属锇进行比较,

先计算了立方金刚石的 3 个独立弹性常数 C_{11}、C_{12}、C_{44} 和相关力学量，与获得的文献值吻合非常好，这再一次说明我们计算的准确性。从表 1 可以看到：(1) 度量锇 a 轴与 c 轴方向压缩难易程度的弹性常数 C_{11} 与 C_{33} 分别为 771.3 GPa 与 852.0 GPa，有很高的数值，具有超低不可压缩性，并且 c 轴比 a 轴略难于压缩。然而，它们都没有超过金刚石的弹性常数 C_{11} 的值(1 082.9 GPa)，但已经达到其 80%左右。锇的杨氏模量 E 大约是金刚石的 60%。(2) 锇的非对角弹性常数 $C_{12}=224.3$ GPa 与 $C_{13}=227.0$ GPa 基本相等，远大于金刚石的弹性常数 $C_{12}=139.7$ GPa；计算的泊松比为 0.228，也远大于金刚石的泊松比(0.076)。(3)弹性常数 C_{44} 和切变模量 G 是材料抵抗剪切变形能力的重要参数，也是衡量材料硬度的间接指标。锇的弹性常数为 269.8 GPa，还不到金刚石相应值 586.9 GPa 的一半，而切变模量 $G=276.8$ GPa，也低于金刚石的切变模量(537.5 GPa)，这表明过渡金属锇抵抗剪切变形的能力远小于金刚石，又因为它所成的是金属键，因此过渡金属锇虽是超低压缩性材料、但不是超硬材料。实际上，锇的维氏硬度约为 4 GPa，大大低于金刚石的硬度值(约 90 GPa[12])。另外，过渡金属锇在高压下的弹性常数的变化规律也是非常重要的，有利于建立高压下过渡金属锇的本构关系。图 3 显示了它在体积不断压缩时弹性常数的变化规律。可看出，随着压力的不断增加，弹性常数 C_{12}、C_{13} 和 C_{44} 缓慢增大，而弹性常数 C_{11} 和 C_{33} 则快速增大。

表 2 零压下过渡金属锇与金刚石的弹性常数 C_{ij}、切变模量 G、杨氏模量 E 和泊松比 ν

Table 2 Elastic constants C_{11}, shear modulus G, Young's modulus E and Poisson's ratio ν for transition-metal osmium and diamond under zero-pressure

Parameter	Os			Diamond			
	GGA	LDA	Ave.	GGA	LDA	Ave.	Others
C_{11}/(GPa)	734.9	807.6	771.3	1 059.3	1 106.4	1 082.9	1 020[24]
C_{12}/(GPa)	208.5	240.1	224.3	128.9	150.5	139.7	133[24]
C_{13}/(GPa)	210.8	243.1	227.0				
C_{33}/(GPa)	810.8	893.1	852.0				
C_{44}/(GPa)	260.0	279.5	269.8	569.1	603.9	586.9	553[24]
G/(GPa)	266.5	287.1	276.8	525.0	549.9	537.5	509[24]
E/(GPa)	652.1	707.4	679.8	1 126.1	1 186.2	1 156.2	
ν	0.223	0.232	0.228	0.072	0.079	0.076	

3.3 微观电子机制

为了定性理解和解释过渡金属锇的宏观力学性质，对其电子结构进行了分析。对纯金属锇，一方面，在所有过渡金属中，它具有最高的价电子浓度，达到 572 nm^{-3}，接近最高价电子浓度的金刚石(705 nm^{-3})；而且，它的成键态已经饱和，反键态没有占据[25]。计算态密度类似于文献[25]，因而没有显示。另一方面，与其它金属相比，它具有很强的方向键。图4显示了在原胞内计算的空间电荷密

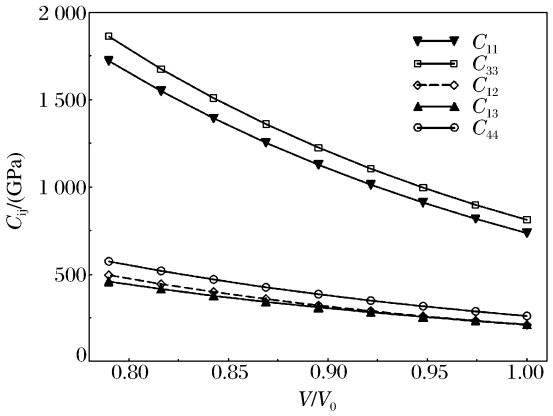


图 3 计算弹性常数(C_{ij})与相对体积的关系

Fig. 3 Calculated elastic constants(C_{ij}) as a function of relative volume

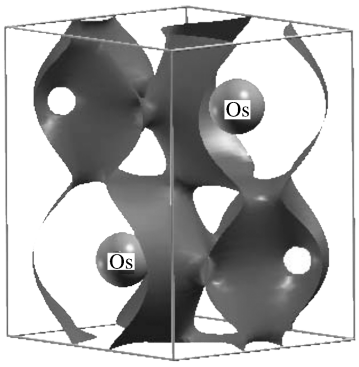


图 4 计算的电荷密度图

Fig. 4 Calculated charge density

度,可看到相邻的锇原子之间的电子云形成明显的方向性,这与 Grossman 等人[28]的研究结果是一致的。这两个方面决定它有非常高的体积模量和超低压缩性。然而,体积模量通常与材料的弹性变形(可逆的)相联系,而硬度是与材料的塑性变形(不可逆的)相联系的。对于过渡金属锇,尽管它具有很高的价电子浓度,然而形成的是金属键,不能有效地阻止原子间不可逆的位错的形成与运动,因而它呈现低的硬度值。从最硬材料金刚石可以看出,三维短与强的共价键形成空间高对称的网状结构是高硬度的关键所在。因此,可以利用过渡金属很高的价电子浓度,掺入硼、碳、氮或氧等小原子,使其形成方向性的共价键,增强其抵抗塑性变形的能力,从而大大提高其硬度值。例如 ReB_2[11]和 OsB_2[12-13]就是最典型的例子,最近受到极大关注。

4　结　论

基于密度泛函理论平面波赝势法的第一性原理计算,研究了在高压下过渡金属锇的状态方程、弹性常数和其它力学特性。计算结果表明:过渡金属锇具有很高的体积模量和弹性常数 C_{11} 与 C_{33},与金刚石的相当,是超低压缩性材料;但间接衡量材料硬度的弹性常数 C_{44} 和切变模量 G 只有金刚石的一半。由于其是纯金属键,因此它不是超硬性材料。

另外指出,过渡金属锇具有很高的价电子浓度是其超低压缩性的主要原因,但这些价电子大都形成的是金属键,不能有效地阻止原子间位错的形成与运动,因而它呈现低的硬度值。然而,可以利用过渡金属很高的价电子浓度,掺入硼、碳、氮或氧等小原子,使其形成方向性的共价键,大大提高它的硬度,这可能成为设计和合成超硬材料的新途径。

References:

[1] Cynn H, Klepeis J E, Yoo C S, et al. Osmium Has the Lowest Experimentally Determined Compressibility [J]. Phys Rev Lett, 2002, 88: 135701.

[2] Occelli F, Farber D L, Badro J, et al. Experimental Evidence for a High-Pressure Isostructural Phase Transition in Osmium [J]. Phys Rev Lett, 2004, 93: 095502.

[3] Kenichi T. Bulk Modulus of Osmium: High-Pressure Powder X-Ray Diffraction Experiments under Quasihydrostatic Conditions [J]. Phys Rev B, 2004, 70: 012101.

[4] Liang Y C, Fang Z. First-Principles Study of Osmium under High-Pressure [J]. J Phys: Condens Matter, 2006, 18: 8749-8759.

[5] Joshi K D, Jyoti G, Gupta S C. On Compressibility of Osmium Metal [J]. High Pressure Res, 2003, 23(4): 403-408.

[6] Fast L, Wills J M, Johansson B, et al. Elastic Constants of Hexagonal Transition Metals: Theory [J]. Phys Rev B, 1995, 51: 17431.

[7] Hebbache M, Zemzemi M. *Ab Initio* Study of High-Pressure Behavior of a Low Compressibility Metal and a Hard Material: Osmium and Diamond [J]. Phys Rev B, 2004, 70: 224107.

[8] Ma Y M, Cui T, Zhang L J, et al. Electronic and Crystal Structures of Osmium under High Pressure [J]. Phys Rev B, 2005, 72: 174103.

[9] Sahu B R, Kleinman L. Osmium Is Not Harder than Diamond [J]. Phys Rev B, 2005, 72: 113106.

[10] Koudela D, Richter M, Mobius A, et al. Lifshitz Transitions and Elastic Properties of Osmium under Pressure [J]. Phys Rev B, 2006, 74: 214103.

[11] Chung H Y, Weinberger M B, Levine J B, et al. Synthesis of Ultra-Incompressible Superhard Rhenium Diboride at Ambient Pressure [J]. Science, 2007, 316: 436-439.

[12] Cumberland R W, Weinberger M B, Gilman J J, et al. Osmium Diboride, an Ultra-Incompressible, Hard Material [J]. J Am Chem Soc, 2005, 127: 7264-7265.

[13] Gou H Y, Hou L, Zhang J W, et al. First-Principles Study of Low Compressibility Osmium Borides [J]. Appl Phys Lett, 2006, 88: 221904.

[14] Liang Y C, Guo W L, Fang Z. First-Principles Studies of Low-Compressibility of Transition-Metal Compounds OsB_2 and OsO_2 [J]. Acta Phys Sin, 2007, 56(8): 4847-4855. (in Chinese)
梁拥成,郭万林,方 忠. 过渡金属化合物 OsB_2 与 OsO_2 低压缩性的第一性原理计算研究 [J]. 物理学报, 2007,

56(8):4847-4855.
[15] Fang Z, Terakura K. Structural Distortion and Magnetism in Transition Metal Oxides: Crucial Roles of Orbital Degrees of Freedom [J]. J Phys: Condens Matter, 2002, 14: 3001-3014.
[16] Vanderbilt D. Soft Self-Consistent Pseudopotentials in a Generalized Eigenvalue Formalism [J]. Phys Rev B, 1990, 41: 7892.
[17] Perdew J P, Wang Y. Accurate and Simple Analytic Representation of the Electron-Gas Correlation Energy [J]. Phys Rev B, 1992, 45: 13244.
[18] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple [J]. Phys Rev Lett, 1996, 77: 3865.
[19] Perdew J P, Burke K, Wang Y. Generalized Gradient Approximation for the Exchange-Correlation Hole of a Many-Electron System [J]. Phys Rev B, 1996, 54: 16533.
[20] Monkhorst H J, Pack J D. Special Points for Brillouin-Zone Integrations [J]. Phys Rev B, 1976, 13: 5188.
[21] Chen Z Y, Xiang H J, Yang J L, et al. Structural and Electronic Properties of OsB_2: A Hard Metallic Material [J]. Phys Rev B, 2006, 74: 012102.
[22] Birch F. Finite Strain Isotherm and Velocities for Single-Crystal and Polycrystalline NaCl at High Pressures and 300 K [J]. J Geophys Res, 1978, 83: 1257-1268.
[23] Occelli F, Loubeyre P, Toullec R L. Properties of Diamond under Hydrostatic Pressures up to 140 GPa [J]. Nat Mater, 2003, 2: 151-154.
[24] Tse J S, Klug D D, Uehara K, et al. Elastic Properties of Potential Superhard Phases of RuO_2 [J]. Phys Rev B, 2000, 61: 10029.
[25] Zheng J C. Superhard Hexagonal Transition Metal and Its Carbide and Nitride: Os, OsC and OsN [J]. Phys Rev B, 2005, 72: 052105.
[26] Neumanm G S, Stixrude L, Cohen R E. Absence of Lattice Strain Anomalies at the Electronic Topological Transition in Zinc at High Pressure [J]. Phys Rev B, 2001, 63: 054103.
[27] Hill R. The Elastic Behavior of a Crystalline Aggregate [J]. Proc Phys Soc London, 1953, 65: 349-354.
[28] Grossman J C, Mizel A, Cote M, et al. Transition Metals and Their Carbides and Nitrides Trends in Electronic and Structural Properties [J]. Phys Rev B, 1999, 60: 6343.

Mechanical Properties of Transition-Metal Osmium under High Pressure

LIU Xiao-Mei[1], LIANG Yong-Cheng[2], SONG Qiu-Hong[2]

(1. *College of Fundamental Studies, Shanghai University of Engineering Science, Shanghai* 201620, *China*;
2. *College of Engineering Science and Technology, Shanghai Fisheries University, Shanghai* 200090, *China*)

Abstract: The equation of states, elastic constants and other mechanical properties of transition-metal osmium under high-pressure are studied by the first-principles plane-wave pseudopotential calculations based on the density functional theory (DFT). The calculated results indicate that osmium has high bulk modulus B_0 (423.9 GPa) and large elastic constants C_{11} (771.3 GPa) and C_{33} (852.0 GPa) comparable to diamond (B_0 = 452.8 GPa, C_{11} = C_{33} = 1 082.9 GPa), so it is an ultralow-compressible material. However, its elastic constant C_{44} (269.8 GPa) and shear modulus G (276.8 GPa), which indirectly measure hardness, are half of those of diamond (C_{44} = 586.9 GPa, G = 537.5 GPa). Because of its pure metallic bonds, it may not be superhard material. The microscopic mechanism of high bulk modulus and low hardness can be understood from the analysis for electronic structures, and it helps to design and synthesize new superhard material.

Key words: transition-metal osmium; mechanical properties; high-pressure; first-principles calculations