



Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

Факультет вычислительной математики и кибернетики

Кафедра информационной безопасности

Мирпулатов Исломбек Пулат-угли

Многомасштабное моделирование физических явлений и процессов

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №3

Преподаватель:

К. К. Абгарян

А. А. Журавлев

Москва, 2022

1 Постановка задачи

Для вашего материала вычислите модуль объёмной упругости и константы упругости $c_{11}, c_{22}, c_{33}, c_{44}, c_{55}, c_{66}, c_{12}, c_{13}$ и c_{23} .

Описание материала:

- Химический элемент - Ca (Кальций)
- Тип решетки - Гранецентрическая
- Электронная структура - Металлическая
- Отношение $ecutrho/ecutwfc$ - 8

Для более точных расчетов повысил значения переменных:

$ecutrho = 80$

$ecutwfc = 640$

$k_points = 9$

Значение постоянной решетки было взято из предыдущей лабораторной работы:

$A = 5.52236653476$

2 Решение и результаты

Зададим некоторые переменные, которые нам в последствии понадобятся:

$\alpha = 0.01$ - изменение решетки на 1%

$\Omega = A^3/4$ - объем решетки

Далее генерируем входные файлы по примеру структуры:

```
&control
  calculation = 'scf'
  prefix = 'base'
  pseudo_dir = 'sssp'
  outdir = 'out'
/
&system
  ibrav = 0
  A = 5.52236653476
  nat = 1
  ntyp = 1
  ecutwfc = 80
  ecutrho = 640
  occupations = 'smearing'
  smearing = 'cold'
  degauss = 0.02
/
&electrons
  conv_thr = 1.d-8
/
ATOMIC_SPECIES
  Ca 40.078 Ca_pbe_v1.uspp.F.UPF
ATOMIC_POSITIONS crystal
  Ca 0.0 0.0 0.0
K_POINTS automatic
  9 9 9 0 0 0
CELL_PARAMETERS alat
  {m[0,0]} {m[0,1]} {m[0,2]}
  {m[1,0]} {m[1,1]} {m[1,2]}
  {m[2,0]} {m[2,1]} {m[2,2]}
```

Где в качестве матрицы m выступает произведение базисной матрицы на матрицу деформации (Представлены в таблице ниже). После произведения расчетов энергии на основе сгенерированных структур получаем все необходимые энергии для подсчета констант упругости по формулам из столбца Зависимость.

Матрицы деформации и константы упругости

Свойство	Матрица деформации	Зависимость
B	$D_B(\alpha) = \begin{pmatrix} 1+\alpha & 0 & 0 \\ 0 & 1+\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1+\alpha \end{pmatrix}$	$\frac{1}{9\Omega} \frac{d^2 E(D_B(\alpha))}{d\alpha^2}$
c_{11}	$D_{c_{11}}(\alpha) = \begin{pmatrix} 1+\alpha & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\frac{1}{\Omega} \frac{d^2 E(D_{c_{11}}(\alpha))}{d\alpha^2}$
c_{22}	$D_{c_{22}}(\alpha) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1+\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\frac{1}{\Omega} \frac{d^2 E(D_{c_{22}}(\alpha))}{d\alpha^2}$
c_{33}	$D_{c_{33}}(\alpha) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1+\alpha \end{pmatrix}$	$\frac{1}{\Omega} \frac{d^2 E(D_{c_{33}}(\alpha))}{d\alpha^2}$
c_{44}	$D_{c_{44}}(\alpha) = \begin{pmatrix} \frac{1}{(1-\alpha^2)^{1/3}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{(1-\alpha^2)^{1/3}} & \frac{\alpha}{(1-\alpha^2)^{1/3}} \\ 0 & \frac{\alpha}{(1-\alpha^2)^{1/3}} & \frac{1}{(1-\alpha^2)^{1/3}} \end{pmatrix}$	$\frac{1}{4\Omega} \frac{d^2 E(D_{c_{44}}(\alpha))}{d\alpha^2}$
c_{55}	$D_{c_{55}}(\alpha) = \begin{pmatrix} \frac{1}{(1-\alpha^2)^{1/3}} & 0 & \frac{\alpha}{(1-\alpha^2)^{1/3}} \\ 0 & \frac{1}{(1-\alpha^2)^{1/3}} & 0 \\ \frac{\alpha}{(1-\alpha^2)^{1/3}} & 0 & \frac{1}{(1-\alpha^2)^{1/3}} \end{pmatrix}$	$\frac{1}{4\Omega} \frac{d^2 E(D_{c_{55}}(\alpha))}{d\alpha^2}$
c_{66}	$D_{c_{66}}(\alpha) = \begin{pmatrix} \frac{1}{(1-\alpha^2)^{1/3}} & \frac{\alpha}{(1-\alpha^2)^{1/3}} & 0 \\ \frac{\alpha}{(1-\alpha^2)^{1/3}} & \frac{1}{(1-\alpha^2)^{1/3}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{(1-\alpha^2)^{1/3}} \end{pmatrix}$	$\frac{1}{4\Omega} \frac{d^2 E(D_{c_{66}}(\alpha))}{d\alpha^2}$
c_{12}	$D_{c_{12}}(\alpha) = \begin{pmatrix} \frac{1+\alpha}{(1-\alpha^2)^{1/3}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1-\alpha}{(1-\alpha^2)^{1/3}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{(1-\alpha^2)^{1/3}} \end{pmatrix}$	$\frac{1}{2\Omega} \frac{d^2 (E(D_{c_{11}}(\alpha)) + E(D_{c_{22}}(\alpha)) - E(D_{c_{12}}(\alpha)))}{d\alpha^2}$
c_{13}	$D_{c_{13}}(\alpha) = \begin{pmatrix} \frac{1+\alpha}{(1-\alpha^2)^{1/3}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{(1-\alpha^2)^{1/3}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-\alpha}{(1-\alpha^2)^{1/3}} \end{pmatrix}$	$\frac{1}{2\Omega} \frac{d^2 (E(D_{c_{11}}(\alpha)) + E(D_{c_{33}}(\alpha)) - E(D_{c_{13}}(\alpha)))}{d\alpha^2}$
c_{23}	$D_{c_{13}}(\alpha) = \begin{pmatrix} \frac{1}{(1-\alpha^2)^{1/3}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1+\alpha}{(1-\alpha^2)^{1/3}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-\alpha}{(1-\alpha^2)^{1/3}} \end{pmatrix}$	$\frac{1}{2\Omega} \frac{d^2 (E(D_{c_{22}}(\alpha)) + E(D_{c_{33}}(\alpha)) - E(D_{c_{23}}(\alpha)))}{d\alpha^2}$

В результате подсчетов получили следующие значения:

B: 17.4409

C11: 21.6031

C22: 21.6031

C33: 21.6031

C44: 14.0707

C55: 14.0707

C66: 14.0707

C12: 15.3701

C13: 15.3701

C23: 15.3701

Можно сверить с реальными значениями взятыми по ссылке:

MaterialsProject Ca

Ниже в матрице представлены значения с сайта

21	15	15	0	0	0
15	21	15	0	0	0
15	15	21	0	0	0
0	0	0	14	0	0
0	0	0	0	14	0
0	0	0	0	0	14