



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 №2

Преподаватель:

К.К. Абгарян

А.А. Журавлев

Москва, 2022

Постановка задачи

В рамках данной лабораторной работы требуется для материала определить постоянную решетки, энергию когезии и провести идентификацию параметров уравнения состояния Берча-Мурнагана на не менее чем девяти точках.

Описание материала:

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

Решение и результаты

Перед тем как приступить непосредственно к решению требуется определить несколько параметров необходимых для последующих расчетов:

- Атомная масса кальция - 40.078
- Файл с псевдопотенциалами для кальция: Ca_pbe_v1.uspp.F.UPF

Решение данной лабораторной разделилось на четыре этапа:

1 - этап: Определение параметров решетки $ecutwfc$, $ecutrho$, k_points

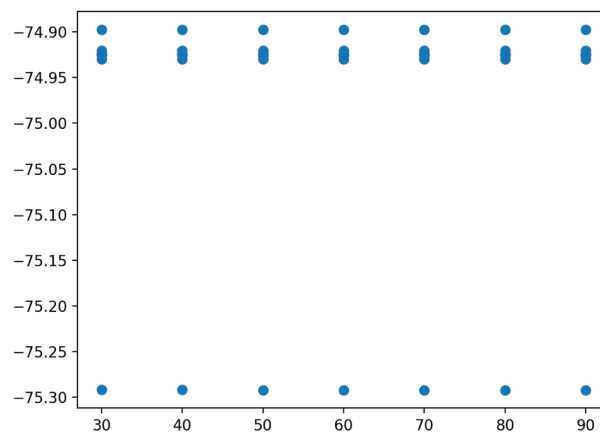
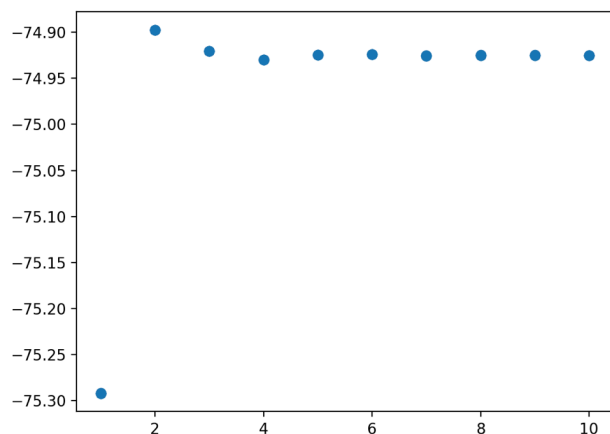
Задаем структуру входного файла для текущего этапа:

```
&control
  calculation = 'scf'
  prefix = 'base'
  pseudo_dir = 'sssp'
  outdir = 'out'
/
&system
  ibrav = 2
  A = 5.58
  nat = 1
  ntyp = 1
  ecutwfc = {ecutwfc}
  ecutrho = {ecutwfc * 8}
  occupations = 'smearing'
  smearing = 'cold'
  degauss = 0.02
/
&electrons
/
ATOMIC_SPECIES
  Ca 40.078 Ca_pbe_v1.uspp.F.UPF
ATOMIC_POSITIONS crystal
  Ca 0.0 0.0 0.0
K_POINTS automatic
  {k} {k} {k} 0 0 0
```

Для структуры перебором были подобраны параметры. Интервалы перебора:

- $ecutwfc$ от 30 до 90 с шагом 10
- $ecutrho = ecutwfc * 8$
- K points от 1 до 10 с шагом 1

Зависимость полученной энергии от параметров:



($K = 6$, $ecutwfc = 90$): -74.92408813

($K = 7$, $ecutwfc = 30$): -74.92533107

($K = 7$, $ecutwfc = 40$): -74.9254111

Начиная с $k = 7$ и $ecutwfc = 30$ изменения происходят в 4 знаке.

Но я на всякий случай взял $ecutwfc = 40$.

Результат: $k = 7$; $ecutwfc = 4$; $ecutrho = 320$;

2 - этап: Определение постоянной решетки

Задаем структуру входного файла для текущего этапа:

```
&control
  calculation = 'vc-relax'
  prefix = 'base'
  pseudo_dir = 'sssp'
  outdir = 'out'
/
&system
 ibrav = 2
  A = 5.58
  nat = 1
  ntyp = 1
  ecutwfc = 40
  ecutrho = 320
  occupations = 'smearing'
  smearing = 'cold'
  degauss = 0.02
/
&electrons
  conv_thr = 1.d-8
/
```

```

&ions
/
&cell
/
ATOMIC_SPECIES
Ca 40.078 Ca_pbe_v1.uspp.F.UPF
ATOMIC_POSITIONS crystal
Ca 0.0 0.0 0.0
K_POINTS automatic
7 7 0 0 0

```

На выходе получаем константу для изменения нашего изначального размера решетки 0.989671422.

Следовательно решетка уменьшается:

5.58 -> 5.52236653476

3 - этап: Определение когезионной энергии

Задаем структуру входного файла для текущего этапа, при этом увеличиваем размер решетки в 3 раза:

```

&control
calculation = 'scf'
prefix = 'single'
pseudo_dir = 'sssp'
outdir = 'out'
/
&system
ibrav = 1
A = 17
nat = 1
ntyp = 1
ecutwfc = 40
ecutrho = 320
occupations = 'fixed'
nspin = 2
tot_magnetization = 0
/
&electrons
/
ATOMIC_SPECIES
Ca 40.078 Ca_pbe_v1.uspp.F.UPF
ATOMIC_POSITIONS crystal
Ca 0.0 0.0 0.0
K_POINTS gamma

```

Параметр tot_magnetization берем равным нулю, т.к. на внешней орбитали нету неспаренных электронов.

Получаем когезионную энергию равную -1.915. Отличается от данных на сайте не более чем на 5%.

[Calcium](#)

178 kJ/mol



1.84 eV/atom



4 - этап: Идентификация параметров состояния Берча-Мурнагана

Идентифицируем параметры состояний Берча-Мурнагана:

$$E(V) = E(V_0) + \frac{9V_0B_0}{16} \left(\left(\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right)^3 B'_0 + \left(\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right)^2 \left(6 - 4 \left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} \right) \right) \quad (6)$$

Для того чтобы идентифицировать свободные параметры необходимо произвести несколько расчётов энергии с решётками различных размеров, а затем произвести параметрическую идентификацию заданной кривой. Для начала проведём один базовый расчёт энергии для системы с константой решётки, полученной в рамках предыдущих шагов.

Варьируем постоянную решетки на +1%, +2%, +3%, +4%, +5%.

Полученные параметры:

-537.46030798 15.76421203 1. 16.01740438

Результаты:

