**实验目的**

1. 了解固体力学性质和原子键合关系

2. 掌握弹性常数等力学量的计算方式

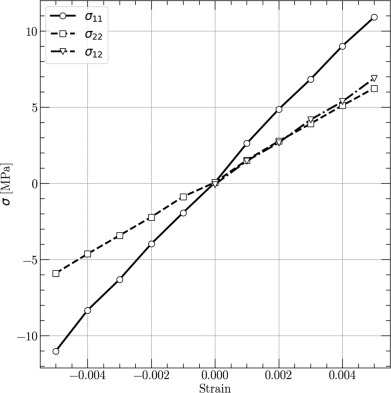
3. 理解弹性波在晶体中的传播

4. 认识温度对力学性能的影响

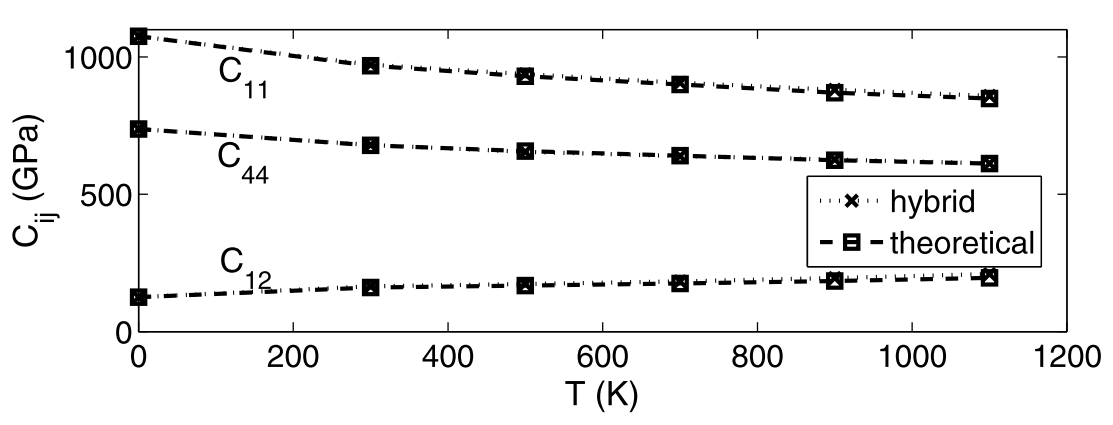
**实验内容**

**计算金属Al和绝缘体金刚石的零温和有限温下的弹性常数，模拟弹性波的传播。**

* 1. 独自编写程序，结合经验势计算Al和Diamond零温下的弹性常数。思考不同化学键对弹性常数以及物理性质的影响，分析计算误差来源与如何降低误差。探索不同晶系的独立矩阵元是否有不同。
  2. 基于弹性常数计算各种力学量和固体性质，模拟不同晶体中弹性波在[100]、[110]、[111]方向的传播，观察横波和纵波的区别。
  3. 模拟不同的Strain大小对应的Stress， 得到Strain-Stress relation，思考在多大的范围内胡克定律成立？



* 1. 模拟金刚石不同温度下的弹性常数，观察不同弹性常数随温度变化的趋势。



**模拟步骤：**

**零温下弹性常数计算流程**

**Step 1. 确定平衡的晶格构型**

我们可以通过EOS方程或者Stress tenor 优化得到稳定的晶格，以及原子位置。此时晶胞的Stress tensor 应该为0。

**Step 2. Deform晶胞**

接下来我们来Deform晶胞，我们可以定义一个 deformation gradient 矩阵 F,

通过将F与原始晶胞相乘得到deform以后的新晶胞，

以fcc为例，

**Step 3. 计算Deformed晶胞的Stress tensor**

在得到Deform后的晶胞后，我们需要对原子位置进行优化（固定晶格参数）。

优化完成以后，我们需要通过DFT或者经验势来得到体系的Stress tensor, 这里需要特别注意Stress tensor的符号，对应stress的方向。

之后我们需要将Stress tensor，转换成 Voigt 形式。

**Step 4. 确定Deformed晶胞的Strain tensor**

通过Green-Lagrange strain tensor的推导，我们可以得到，

同样的，我们将其转成Voigt形式，

注意Strain tensor最后三个分量与Stress tensor不同，都需要乘以2

**Step 5. Stress-Strain relation**

Stiffness张量通过弹性常数 Cij​将Stress分量与Strain分量关联起来

Strain分量 " ε" 和Stress分量 " σ" 由上述表达式通过一组方程联系起来,这些方程中的未知数是弹性常数 。在下一步中,我们将收集更多这样的方程,直到我们拥有足够多的方程组来找到所有的 。

**Step 6. 重复 Step2-Step5 (6次)**

从第二步开始，重复前述程序，注意使用彼此独立的Deformation，直到完成6种Deformation。任何6种Deformation的组合都是可以的，只要它们是独立的。然而，以下六种不同的Deformation的通常是最方便的

F­1-F­3 代表 tensile deformations，F­4-F­6 代表 shear deformation.

**Step 7. 求解弹性常数**

为了求解弹性常数，为这6种deformation各自写出Stress-Strain relation，并将它们以矩阵形式表示。

在这个方程中要特别注意指标。在stress tensor 和 strain tensor σij 或 εij​ 中，这里ij作为index的含义，与我们至之前使用的ij含义不同。列指标 j 指的是Deformation的编号（第一次Deformation，第二次Deformation，...），而行指标 i 指的是在 Voigt表示法中的位置,如σ24​ 是第四次变形的σyy分量。

如果使用Step6中推荐的Deformation.则我们得到上式右边的矩阵E,

这时我们只需要求解矩阵E的逆。在上式左右两边同时乘以E-1，我们就可以得到Stiffness tensor:

原则上这个结果必须是一个对称的6x6矩阵。事实上我们计算得到的它并不完全对称，这是由于计算误差造成的。为了减小计算误差，我们选择多种 δ1​ 和 δ​ 2，特别是可以选择相反符号，比如δ1=±0.01，δ2=±0.03，之后进行平均得到Stiffness tensor。

该计算方法原则上适用于任何晶体，无论它的对称性如何。在我们课程研究的体系中，如果考虑到对称性，原则上可以使用少于6种deformation。同样的，弹性常数也可以通过总能量法计算得到，这里我们可以对比通过总能量方法得到的弹性常数与通过Stress得到的弹性常数。

**有限温下弹性常数计算流程**

参考文献： **Mol Sim, 43, 1413 (2017)**

 J Chem Phys, 80, 4423 (1984)

Computer Physics Communications 183， 261-265 (2012)

**Step 1. 确定平衡的晶格构型**

通过分子动力学模拟得到有限温度下的平衡结构

**Step 2. Deform晶胞和实现有限温下Deformed晶胞的平衡**

Deform晶胞的方式与零温相同，但由于有限温度下弹性常数的计算需要通过分子动力学模拟进行系综平均得到，因此我们构造的deformation模式要远远多于零温。我们可以在6种deformations的基础上选取不同δ。对每一个deformed晶胞，我们需要通过分子动力学(100 ps)对原子进行弛豫。

**Step 3. 计算Deformed晶胞的Stress tensor**

弛豫完成后，我们可以进行10 ns的NVT系综分子动力学模拟，然后计算每一时刻的Stress tensor。需要注意的是，这里的Stress tensor 需要考虑动能的贡献。

最后我们对Stress tensor进行平均得到每一种Deformation在有限温下对应的Stress tensor.

**Step 4. 计算Strain tensor, Stress-Strain relation,以及 Stiffness tensor。**

同零温。

**力学量及弹性波的计算**

**模量计算：**

根据Voigt-Reuss-Hill [1-3]近似模型，

可以得到剪切模量(G)和体模量(B)。以立方晶系为例，

**由G和B，可以得到杨氏模量(E)和泊松比(v),**

**计算晶格稳定性的Bohn Criterion：**

**Bohn Criterion指出，无应变晶体的稳定性要求自由能必须可以由正定的Stiffness tensor来表示。对于立方晶体，这相当于对弹性常数的以下三个条件：**

**弹性波的传播：**

弹性波沿着x的传播方程为

对于Cubic体系，结合我们刚才计算的Stress-Strain relaition，可以得到

同理可得，沿y方向和z方向的传播方程

对于沿[100]方向传播的波，首先考虑longitudinal wave，，波矢和原子振动都沿着x方向。带入以上方程可得，

最终波速，

同理可得[100]方向的transverse wave, .

