

Физика твердого тела. Задание 1

Касапенко Наталья, Б02-927

04.03.2022

Задание.

Определить силовые постоянные между плоскостями вдоль направления [100] для алюминия, меди, железа, свинца и т.д., и построить спектр фононов вдоль этого направления.

При распространении волны вдоль направления [100] все атомные плоскости в кристалле будут смещаться синфазно. Пусть смещение плоскости s в кристалле равно u_s . Предполагаем, что сила, действующая на плоскость s и обусловленная смещением плоскости $s+p$, пропорциональна разности их смещений $u_{s+p} - u_s$. Тогда для результирующей силы, действующей на плоскость s выполняется:

$$F_s = \sum C_p * (u_{s+p} - u_s)$$

Для моделирования такого смещения используем код LAMMPS. Рассмотрим сначала случай с Al. Создадим структуру с fcc решеткой $a = 4.04$ ангстрема, содержащую 500 атомов в 10 вертикальных слоях по оси x . Создаем искусственное смещение пятого слоя решетки на $\delta u = 0.05 * 4.04 * 5 = 1.01$ ангстрема по оси x . Выводим силы, которые действуют на каждый атом. Используется потенциал eam/fs . Для расчета Рассматриваем C_p как силовую постоянную, определенную для одного атома. Тогда сила F_s - это сила, действующая на один атом в плоскости s . Вычисляем силовые постоянные между плоскостями s и p по формуле (тут N - количество атомов в слое) :

$$C_p = \frac{F_{sp}}{(u_{s+p} - u_s)N}$$

При этом индекс p принимает положительное значение, если рассматриваемая плоскость правее по оси x относительно плоскости s , и отрицательные в противном случае. Тут F_{sp} - суммарная сила, действующая на плоскость p в результате смещения плоскости s .

При расчетах для других металлов используются следующие потенциалы:

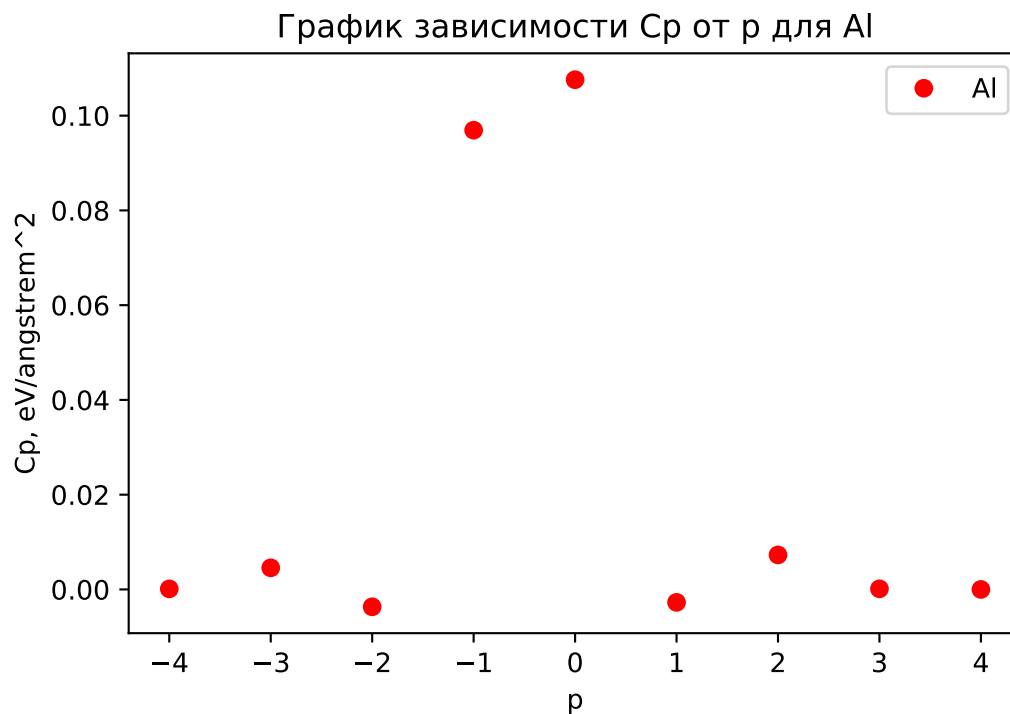
Almm.eam.fs

Femm.eam.fs

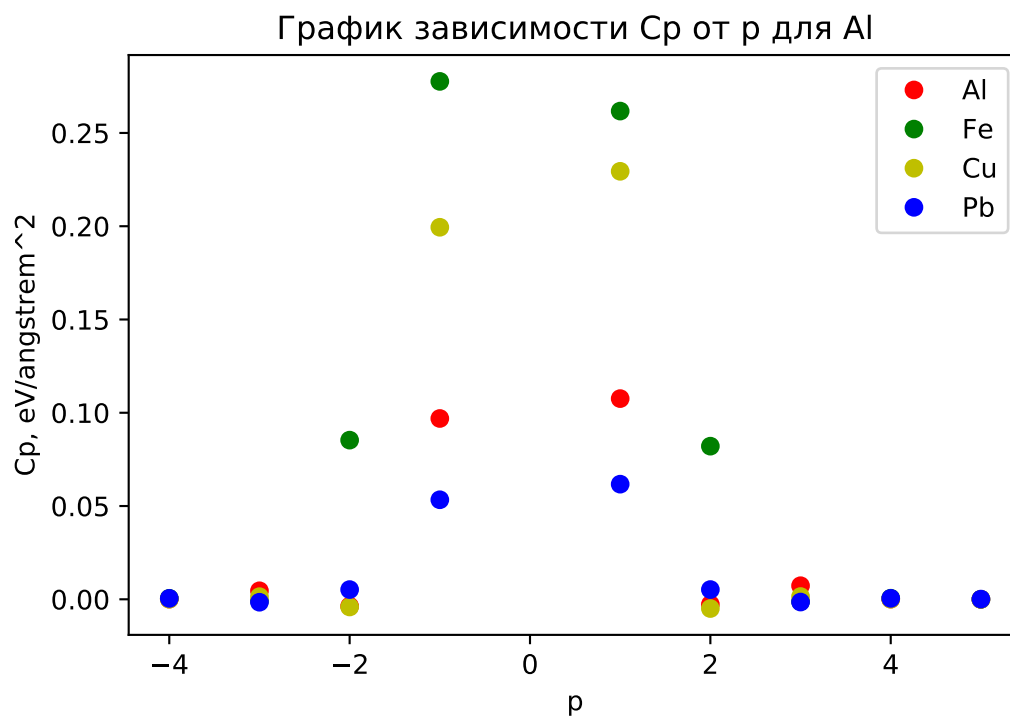
Cuu6.eam

PbWang02.eam.fs

В результате чего получаем такую зависимость:



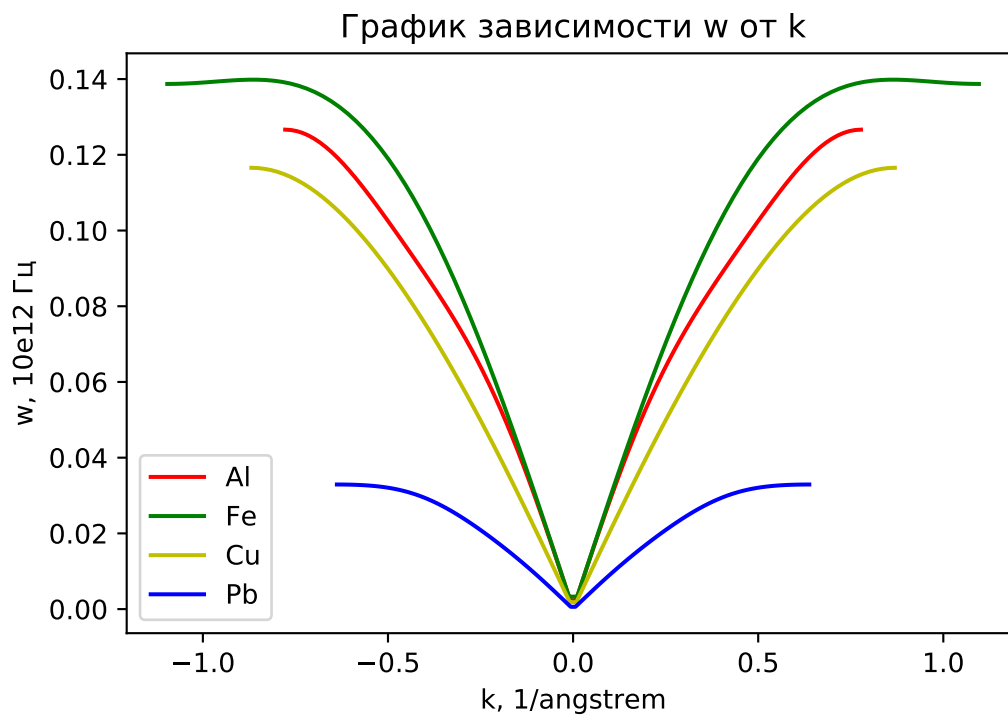
Аналогичные зависимости построим для металлов Cu, Fe, Pb.



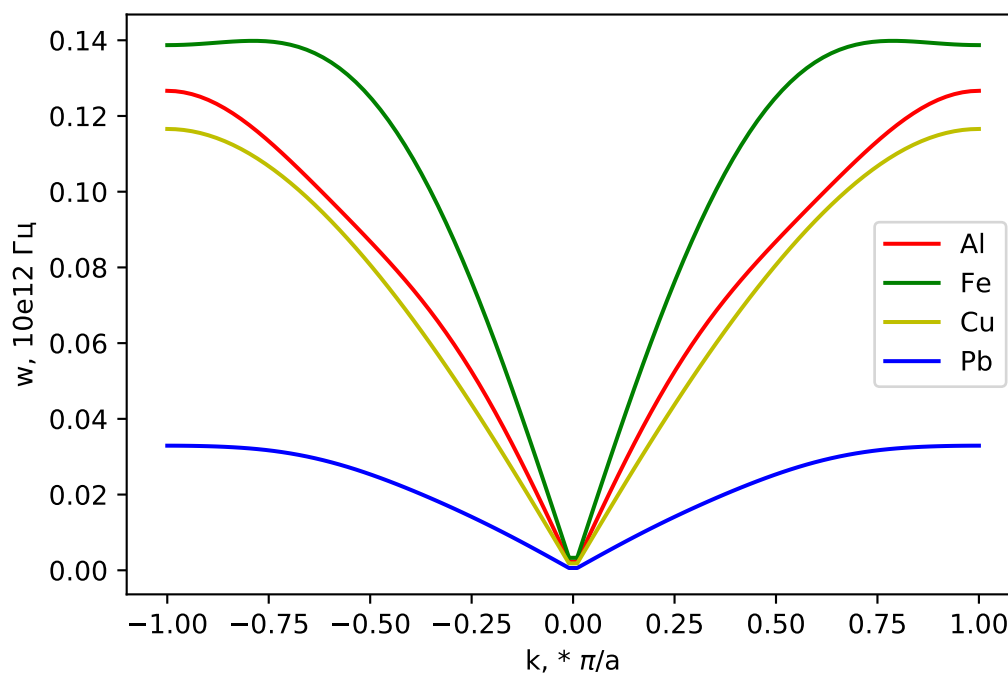
Далее рассчитаем спектр фононов вдоль этого направления по формуле:

$$w = \sqrt{\frac{2}{M} \sum C_p (1 - \cos(pKa))}$$

Здесь усреднили коэффициенты C_p и C_{-p} .



Также отскалируем ось k , используя множитель π/a .



Для проверки кристаллической структуры, построим два соседних среза по оси x для различных металлов (в единицах постоянной решетки).

