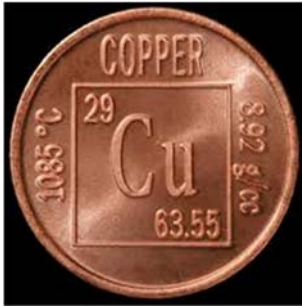


Εργαστηριακή άσκηση

Στατικοί υπολογισμοί σε μεταλλικά συστήματα
(Πλεγματική σταθερά, ενέργεια συνοχής, μέτρο ελαστικότητας όγκου)



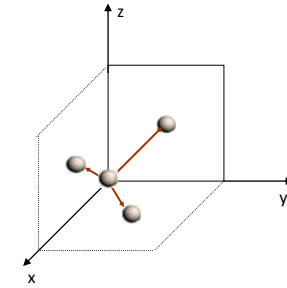
Δ.Γ. Παπαγεωργίου

Σύστημα που θα μελετήσουμε

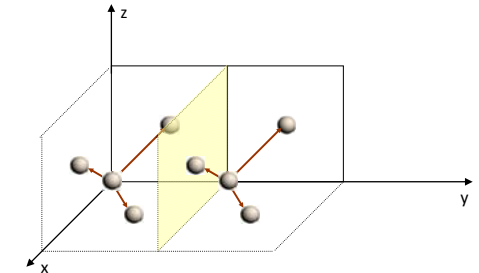
Κρυσταλλικός χαλκός fcc

- Η μοναδιαία κυψελίδα του κρυστάλλου fcc κατασκευάζεται τοποθετώντας άτομα σε τέσσερις θέσεις της μοναδιαίας κυψελίδας:

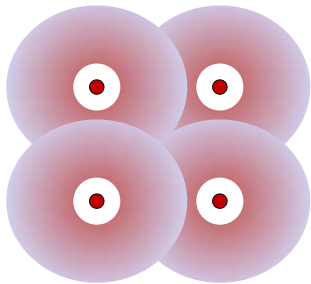
0	0	0
0	1/2	1/2
1/2	0	1/2
1/2	1/2	0



- Το συνολικό σύστημα κατασκευάζεται από επανάληψη της μοναδιαίας κυψελίδας στις τρεις διευθύνσεις.
- Παρατηρήστε ότι τα τελευταία άτομα απέχουν 1/2 από το τέλος της κυψελίδας.



Δυναμικό αλληλεπίδρασης: Μέθοδος ενσωματωμένου ατόμου - Embedded Atom Method (EAM)



Αν είναι παρόντα παραπάνω από ένα άτομα, τότε η συνολική πυκνότητα προκύπτει από υπέρθεση των ατομικών πυκνοτήτων.

$$\rho(r) = \sum_i \rho^{at}(r - r_i)$$

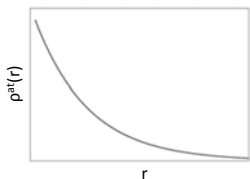
Η ενέργεια που απαιτείται για να ενσωματωθεί ένα άτομο σε ένα σημείο του χώρου δίνεται από τη συνάρτηση ενσωμάτωσης (embedding function):

$$F(\rho) = -F_0 \left[1 - \ln \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right)^n \right] \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right)^n$$

Για τις απωστικές αλληλεπιδράσεις προστίθεται ένα δυναμικό δύο σωμάτων:

$$U = \sum_i \sum_{j \neq i} \Phi(r_{ij}) + F(\rho(r_i))$$

Πυκνότητα ηλεκτρονίων εξαιτίας ενός ατόμου:



Λογισμικό

- LAMMPS: Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator
<http://lammps.sandia.gov/>
- VMD: Visual Molecular Dynamics
<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>
- GNUPLOT
<http://www.gnuplot.info/>

Απαραίτητα αρχεία

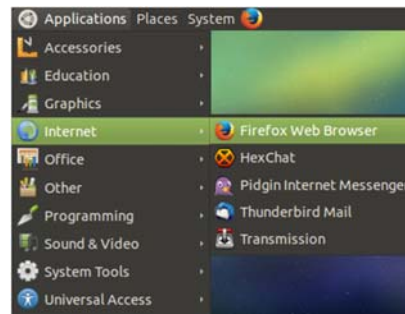
Απαραίτητα αρχεία:

- Αρχείο δυναμικού EAM για τον χαλκό (Cu.eam)
Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys, S.M. Foiles, M.I. Baskes and M.S. Daw, Phys. Rev. B **33**, 7983 (1986).
- Αρχεία εισόδου για το LAMMPS (static.in)

Διαθέσιμα από την ιστοσελίδα:

<http://pc164.materials.uoi.gr/dpapageo/courses/sim/>

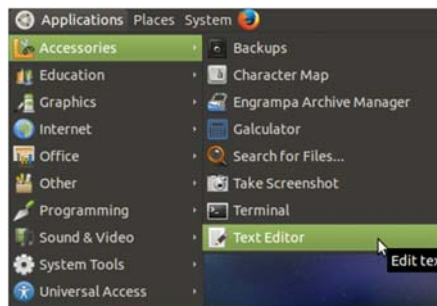
Κατέβασμα των αρχείων



Ιστοσελίδα

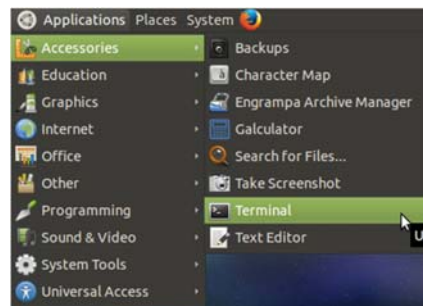
<http://pc164.materials.uoi.gr/dpapageo/courses/sim/>

Επιθεώρηση του αρχείου static.in



- Ενεργοποιούμε τον **Text Editor**
- Ανοίγουμε (**Open**) το αρχείο **static.in**

Άνοιγμα “Terminal” για εντολές



Προσομείωση με το LAMMPS

```
lmp < static.in
```

Αποτέλεσμα στην οθόνη:

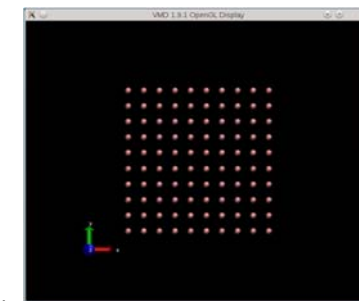
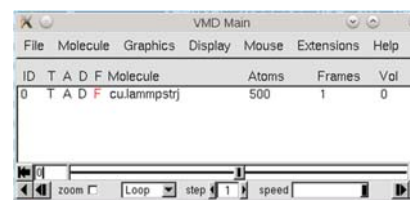
```
LAMMPS (17 Nov 2016)
Lattice spacing in x,y,z = 3.6 3.6 3.6
Created orthogonal box = (0 0 0) to (18 18 18)
  1 by 1 by 1 MPI processor grid
Created 500 atoms
Displacing atoms ...
WARNING: No fixes defined, atoms won't move (./verlet.cpp:55)
Neighbor list info ...
  1 neighbor list requests
  update every 1 steps, delay 10 steps, check yes
  max neighbors/atom: 2000, page size: 100000
  master list distance cutoff = 6.95
  ghost atom cutoff = 6.95
  binsize = 3.475, bins = 6 6 6
Memory usage per processor = 2.81209 Mbytes
Step Temp PotEng Press Lx Ly Lz
  0          0          0 -1769.599 17749.554      18      18      18
Loop time of 0 on 1 procs for 0 steps with 500 atoms
```

Αρχεία που δημιουργούνται:

- **log.lammps** αρχείο καταγραφής
- **cu.lammpstrj** αρχείο συντεταγμένων

Οπτικοποίηση συντεταγμένων με το vmd

vmd cu.lammpstrj ← Αρχείο συντεταγμένων



Ενέργειες:

Display → Orthographic

Graphics → Representations → Drawing Method → CPK

Στο τερματικό: pbc box

Μεταβολή της ενέργειας με την πλεγματική σταθερά

Επαναλαμβάνουμε τον υπολογισμό αλλάζοντας την πλεγματική σταθερά.

Αποθηκεύουμε τα αποτελέσματα στο αρχείο p1.

Πλεγματική σταθερά (Å)	Ενέργεια (eV)
2.5	
3.0	
3.5	
3.6	
4.0	
5.0	
6.0	
7.0	

Γραφική παράσταση με το Gnuplot

```
gnuplot
gnuplot> plot 'p1' u 1:2 w lp
```

'p1' Αρχείο με δεδομένα
u 1:2 Ποιές στήλες να χρησιμοποιηθούν για τους άξονες x και y
w lp Τα σημεία να ενωθούν με γραμμές

```
gnuplot> exit ← Εξοδος από το gnuplot
```

Που βρίσκεται το ελάχιστο της ενέργειας ;

Ποια είναι η πλεγματική σταθερά του χαλκού ;

Είναι αυτή για την οποία η ενέργεια έχει την ελάχιστη τιμή.

Μπορούμε να βρούμε το σημείο στο οποίο η ενέργεια έχει ελάχιστη τιμή ;

Επαναλαμβάνουμε τον υπολογισμό της ενέργειας για πλεγματικές σταθερές

3.2, 3.4, 3.8

Επαναλαμβάνουμε τη γραφική παράσταση με το gnuplot.

Που βρίσκεται το ελάχιστο της ενέργειας ;

Για να βρούμε με μεγαλύτερη ακρίβεια το ελάχιστο:

Επαναλαμβάνουμε τον υπολογισμό της ενέργειας για πλεγματικές σταθερές 3.56, 3.58, 3.6, 3.62, 3.64

Αποθηκεύουμε τα αποτελέσματα σε νέο αρχείο p2.

Πλεγματική σταθερά (Å)	Ενέργεια (eV)
3.56	
3.58	
3.60	
3.62	
3.64	

Γραφική παράσταση με το gnuplot:

```
gnuplot
```

```
plot 'p2' u 1:2 w lp
```

Παρατηρείστε ότι η γραφική παράσταση μοιάζει με παραβολή.

Προσαρμογή παραβολής με το gnuplot

```
gnuplot> f(x)=a*x**2+b*x+c
```

Ορισμός της παραβολής

```
gnuplot> fit f(x) 'p2' via a,b,c
```

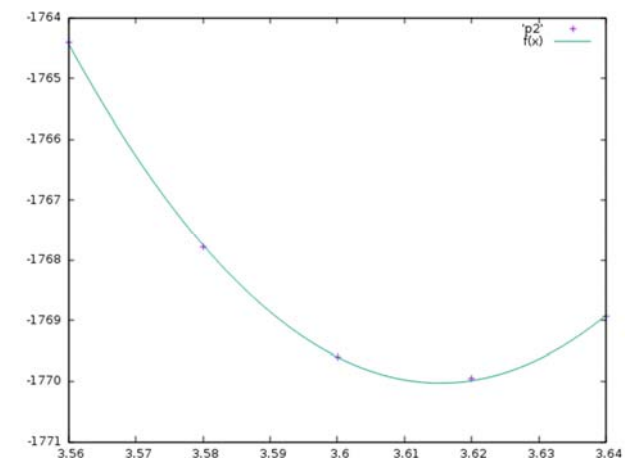
Προσαρμογή ελαχίστων τετραγώνων

Final set of parameters	Asymptotic Standard Error
a = 1833.21	+/- 23.86 (1.302%)
b = -13255.2	+/- 171.8 (1.296%)
c = 22190.8	+/- 309.2 (1.393%)

```
gnuplot> plot 'p2' w lp, f(x)
```

Γραφική παράσταση

Προσαρμογή παραβολής με το gnuplot



Πως βρίσκουμε την πλεγματική σταθερά

Αν η δυναμική ενέργεια έχει τη μορφή

$$f(x) = ax^2 + bx + c$$

τότε το σημείο του ελαχίστου είναι εκεί όπου

$$f'(x) = 0 \Rightarrow$$

$$2ax + b = 0 \Rightarrow$$

$$x = -\frac{b}{2a}$$

Πλεγματική σταθερά και ενέργεια συνοχής

```
gnuplot> m=-b/(2*a)
```

Ελάχιστο της παραβολής

```
gnuplot> print m
```

Εκτύπωση του ελαχίστου

```
3.61530
```

Πλεγματική σταθερά

Η πειραματική τιμή υπάρχει στο www.webelements.com στο Crystal Structure

```
gnuplot> print f(m)/500
```

Ενέργεια συνοχής

```
-3.5400
```

Η πειραματική τιμή υπάρχει στο www.webelements.com ως Enthalpy of atomization

```
gnuplot> exit
```

Έξοδος από το gnuplot

Μέτρο ελαστικότητας όγκου

Το μέτρο ελαστικότητας όγκου ορίζεται ως:

$$B = -V \frac{dP}{dV}$$

Από τη βασική θερμοδυναμική σχέση:

$$dU = TdS - pdV$$

για $T = 0$ παίρνουμε:

$$dU = -pdV$$

Τελικά:

$$B = V \frac{d^2U}{dV^2}$$

Θα κάνουμε τη γραφική παράσταση της δυναμικής ενέργειας σαν συνάρτηση του όγκου.

Αποθηκεύουμε τον όγκο και την ενέργεια σε νέο αρχείο p3.

Πλεγματική σταθερά (Å)	Όγκος (Å ³)	Ενέργεια (eV)
3.56		
3.58		
3.60		
3.62		
3.64		

Γραφική παράσταση με το gnuplot:

```
gnuplot
```

```
plot 'p3' u 1:2 w lp
```

Προσαρμογή παραβολής με το gnuplot

```
gnuplot> f(x)=a*x**2+b*x+c
```

Ορισμός της παραβολής

```
gnuplot> fit f(x) 'p3' via a,b,c
```

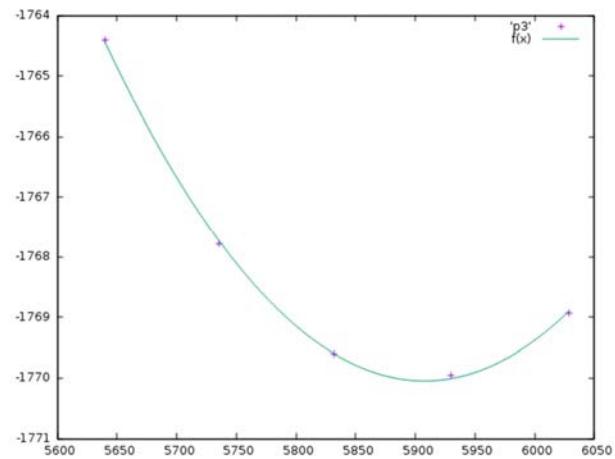
Προσαρμογή ελαχίστων τετραγώνων

Final set of parameters	Asymptotic Standard Error
a = 7.82465e-05	+/- 1.633e-06 (2.087%)
b = -0.924497	+/- 0.01905 (2.061%)
c = 960.733	+/- 55.56 (5.783%)

```
gnuplot> plot 'p3' w lp, f(x)
```

Γραφική παράσταση

Προσαρμογή παραβολής με το gnuplot



Μέτρο ελαστικότητας όγκου

Αν η δυναμική ενέργεια έχει τη μορφή

$$f(x) = ax^2 + bx + c$$

τότε το ελάχιστο είναι στο σημείο

$$x = -\frac{b}{2a}$$

Επίσης:

$$f''(x) = 2a$$

Συνεπώς:

$$B = V \frac{d^2U}{dV^2} \Rightarrow$$

$$B = -\frac{b}{2a} 2a \Rightarrow$$

$$B = -b$$

Μέτρο ελαστικότητας όγκου

```
gnuplot> print -b
```

0.924497

Μέτρο ελαστικότητας όγκου

Η πειραματική τιμή υπάρχει στο www.webelements.com στο Physical Properties

```
gnuplot> exit
```

Έξοδος από το gnuplot