

西南大学材料与能源学院

本科课程实验报告



课程名称： 计算材料学

授课专业： 材料物理

班级年级： 2023 级材料物理 3 班

学生姓名： 黄德勇

课程成绩：

教师姓名： 刘华可

20 25 - 20 26 学年第 二 学期



实验报告

姓名:黄德勇 学号:222023319210132 专业班级:材料物理3班 成绩:

实验课程	计算材料学		
实验名称	基于 DFT 的计算晶体 X 轴的应力应变曲线实验		
实验时间	2026 年 4 月 22 日	实验地点	25-0006-02

一、实验预习

1. 实验目的

- (1) 同样以立方晶从 g0 为计算对象, 学习在 Materials studio (CASTEP 模块) 中, 通过对 X 轴沿 [100] 方向的拉伸应变, 计算体系的应力张量, 获得完整的应力应变曲线。
- (2) 从线性弹性阶段提取从 g0 的杨氏模量 E, 并验证由经验约束对 y, z 轴进行的泊松比是否有效, 学会用数学方法在拟合时识别弹性-非线性转折点。
- (3) 理解几何估计与 Hellmann-Feynman 定理和应力定理。

2. 实验原理

应力的 DFT 计算

在 DFT 框架下应力张量由总能对应变的变分导出, 即 Nielsen-Martin 应力定理:

$$\sigma_{\alpha\beta} = -\frac{1}{\Omega} \frac{\partial E_{\text{total}}}{\partial \epsilon_{\alpha\beta}}$$

其中, Ω 为晶胞体积, $\epsilon_{\alpha\beta}$ 为应变张量分量. CASTEP 在每次自洽计算后自动输出应力张量的笛卡尔分量 (单位 GPa):

$$\vec{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix}$$

单轴拉伸应变的施力方式

对平衡于结构沿 X 轴施力 e 单轴拉伸工程应变, 即 $\epsilon_{xx} = \epsilon$, 晶阵应变变为:

$$\vec{h} = \vec{h}_0 \cdot (\vec{I} + \vec{\epsilon}), \quad \vec{\epsilon} = \begin{bmatrix} \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

即将晶格长度 a 拉伸为 $a(1+\epsilon)$ ，对 b, c 方向，利用经验泊松比：

$$b_i = c_i = a_i \times [1 - \nu \cdot \epsilon], \quad \epsilon \text{ 为拉伸率, } \nu \text{ 为泊松比, 取为 } 0.18 \text{ 的经验值}$$

得出，并施加各向同性约束。

线弹性本构关系

在线弹性范围内，单轴应力满足广义胡克定律：

$$\sigma_{xx} = E \cdot \epsilon_{xx}$$

实验中通过线性拟合应力-应变数据提取杨氏模量 E ，其中 b 截距来源于平衡结构的残余应力，理想情况下 $b \approx 0$ 。

$$\sigma = E\epsilon + b$$

对于立方晶体， $[100]$ 方向的杨氏模量与线弹性系数的关系：

$$\frac{1}{E_{[100]}} = S_{11} = \frac{C_{11} + C_{12}}{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}$$

应力-应变曲线的物理分区

完整的应力应变曲线分以下阶段，见讨论中的附图：

阶段	特征	DFT 计算范围
线弹性区域	$\sigma \propto \epsilon$, 可逆	$\epsilon \lesssim \epsilon_y$
弹性极限点	线性偏离起点 (ϵ_y, σ_y)	识别拐点
非线性弹性区	仍可逆但非线性	$\epsilon_y < \epsilon < \epsilon_{\text{fracture}}$
塑性/断裂区	不可逆, 宏观实验才能观测	DFT 理想晶体直接断裂 (通常)

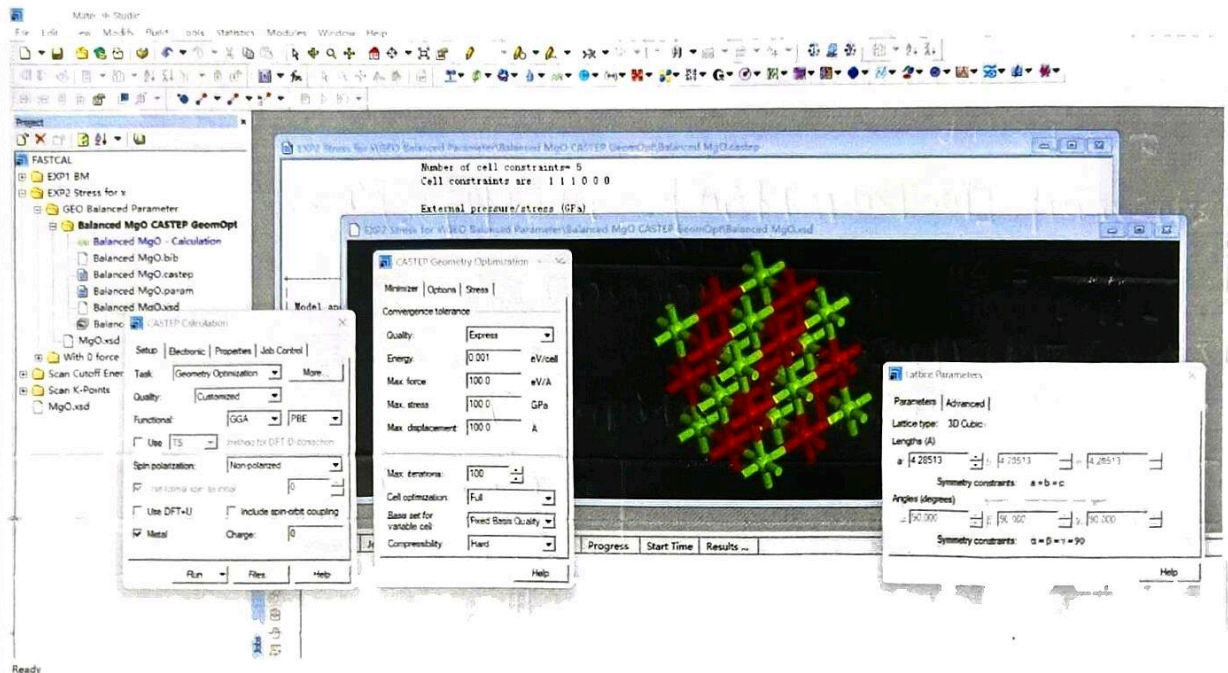
DFT 计算的是理想完整晶体的应力-应变响应，不包括位错、晶界等缺陷效应，因此得到的是理论强度通常远超实验值

二、实验过程

1. 实验过程记录

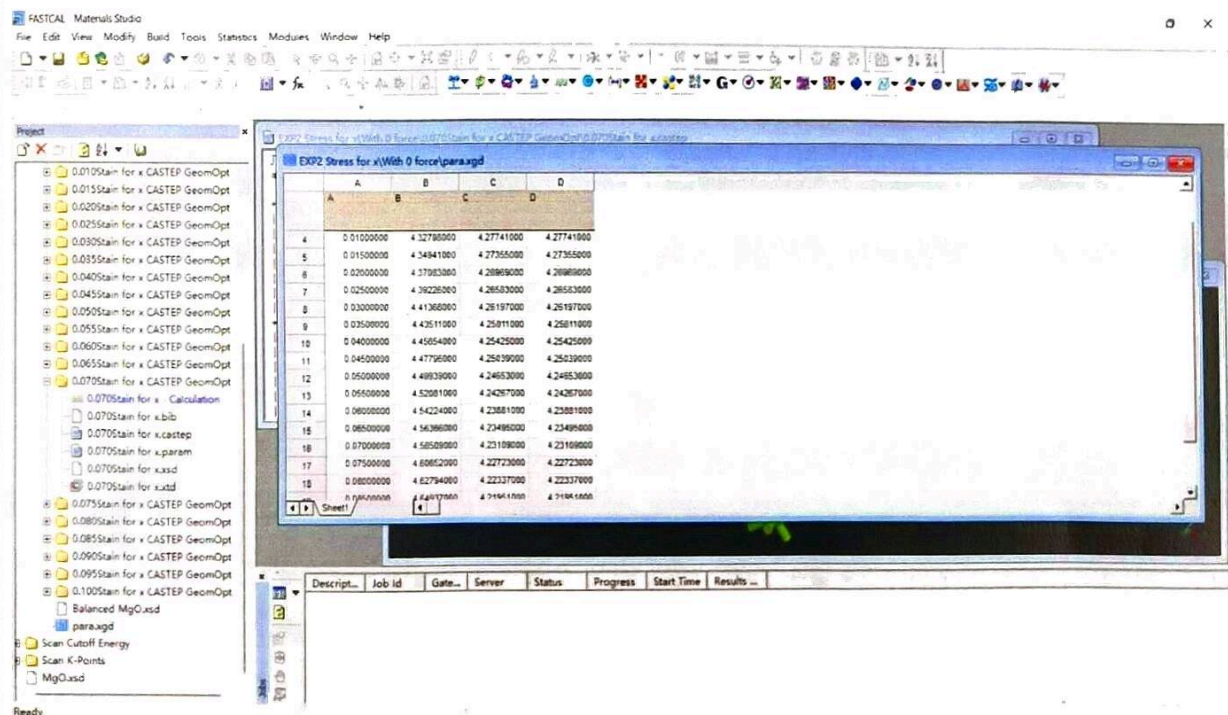
平衡于结构准备

以 Bm 方程拟合实验中的 $a_0 = 4.285 \text{ \AA}$ 为初始参数, 在 CASTEP 中对 MgO 进行几何优化, 使应力收敛至 $< 0.1 \text{ GPa}$, 得到图中的充分子晶格平衡于结构。



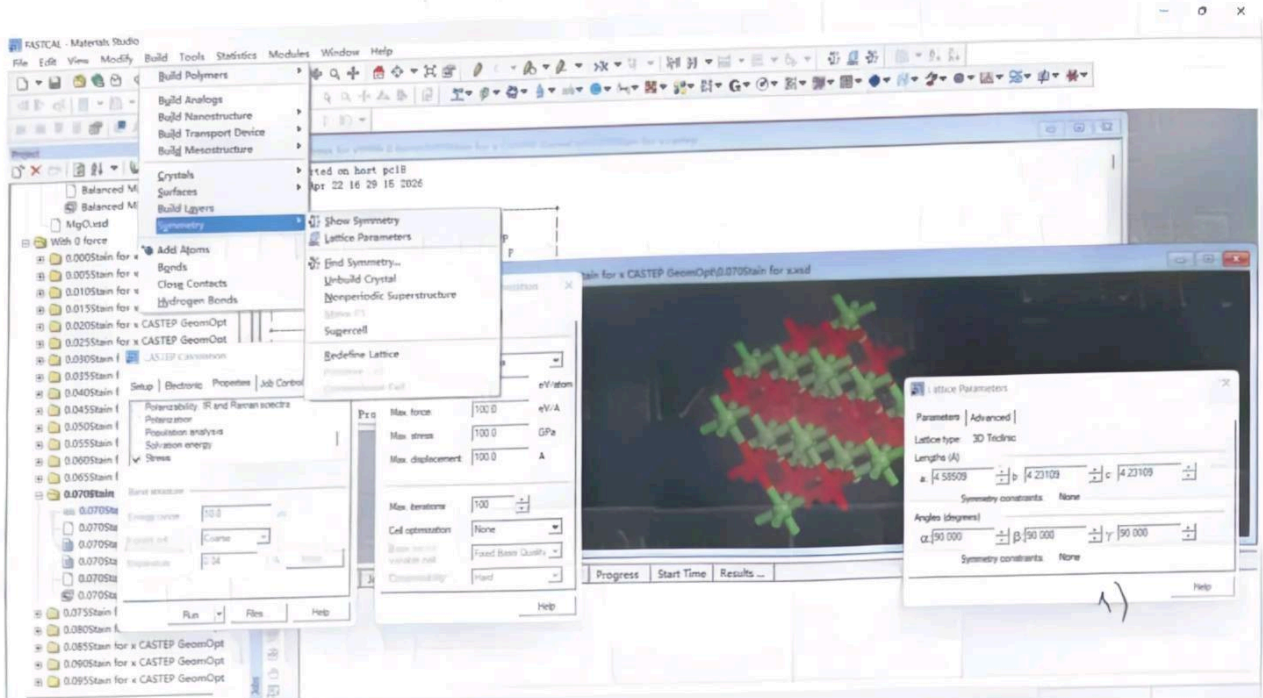
单轴应变序列生成

令 b, c 轴满足一个经验公式的泊松收缩: $b = c = a \times (1 - 0.18\varepsilon)$, $a = a_0(1 + \varepsilon)$. 在 Materials Studio 中生成对平衡于结构沿 a 方向的拉伸应变, 自 ε 从 0.0005 到 1.000, 步长 0.015.



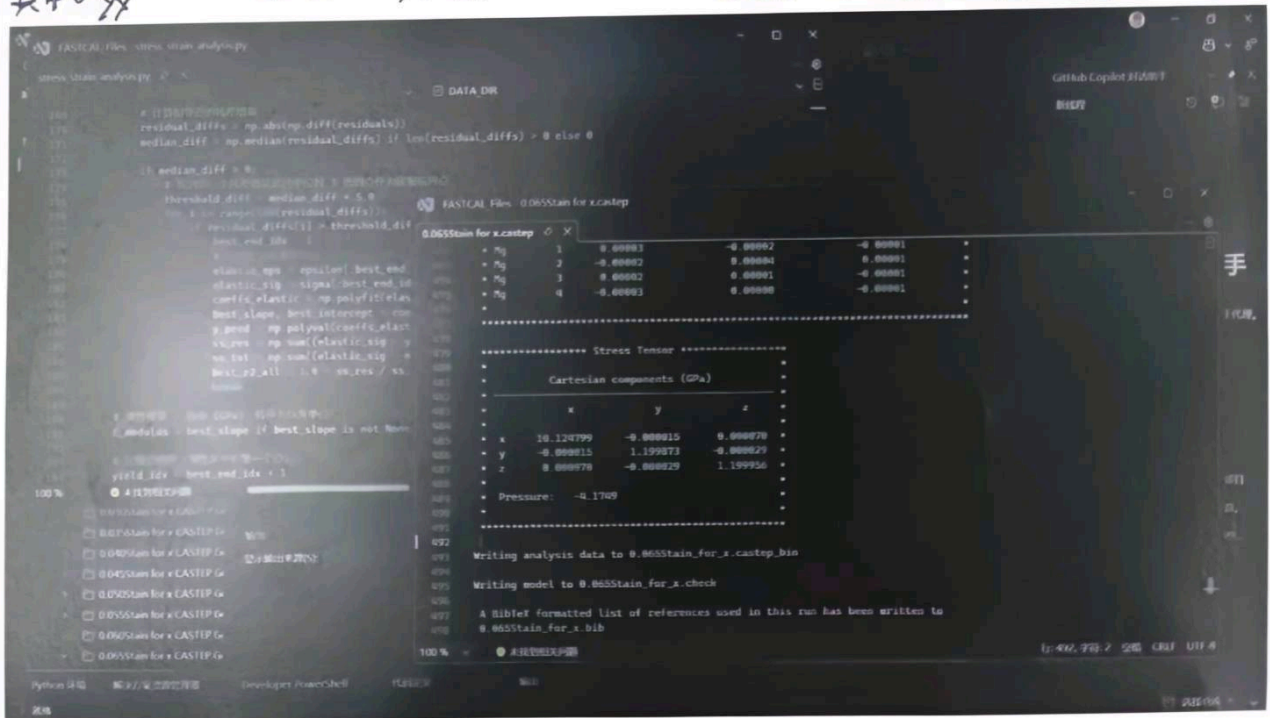
应力计算

将完全(各)弛豫的从go晶体移到根项目中,取消对称性群,回到P1,并开启对应力的计算,关闭Geo的晶胞参数调整,且只修改a,b,c,不改变角度.



应力数据提取

对每个castep输出文件中提取应力张量的笛卡尔分量,如图是 $\epsilon = 0.065$ 的结果,其中 $\sigma_{yx} = 1.1995736 \text{ GPa}$, $\sigma_{22} = 1.19956 \text{ GPa}$,说明b,c刚性约束下,有应力作用(张应力).



三、分析讨论

1. 实验结果与分析

从G0的x (a) 轴的单轴应力-应变曲线如图所示, 其中, 弹性拟合结果 (弹性范围 $\epsilon \in [0, 0.025]$):

$$\sigma = 202.11\epsilon + 0.0727, R^2 = 0.99805196$$

由此提取出杨氏模量:

$$E = 202.11 \text{ GPa}$$

截距 $b = 0.0727 \text{ GPa}$ 接近零, 说明与实验符合, 平衡结构的残余应力极小.

弹性极限点为:

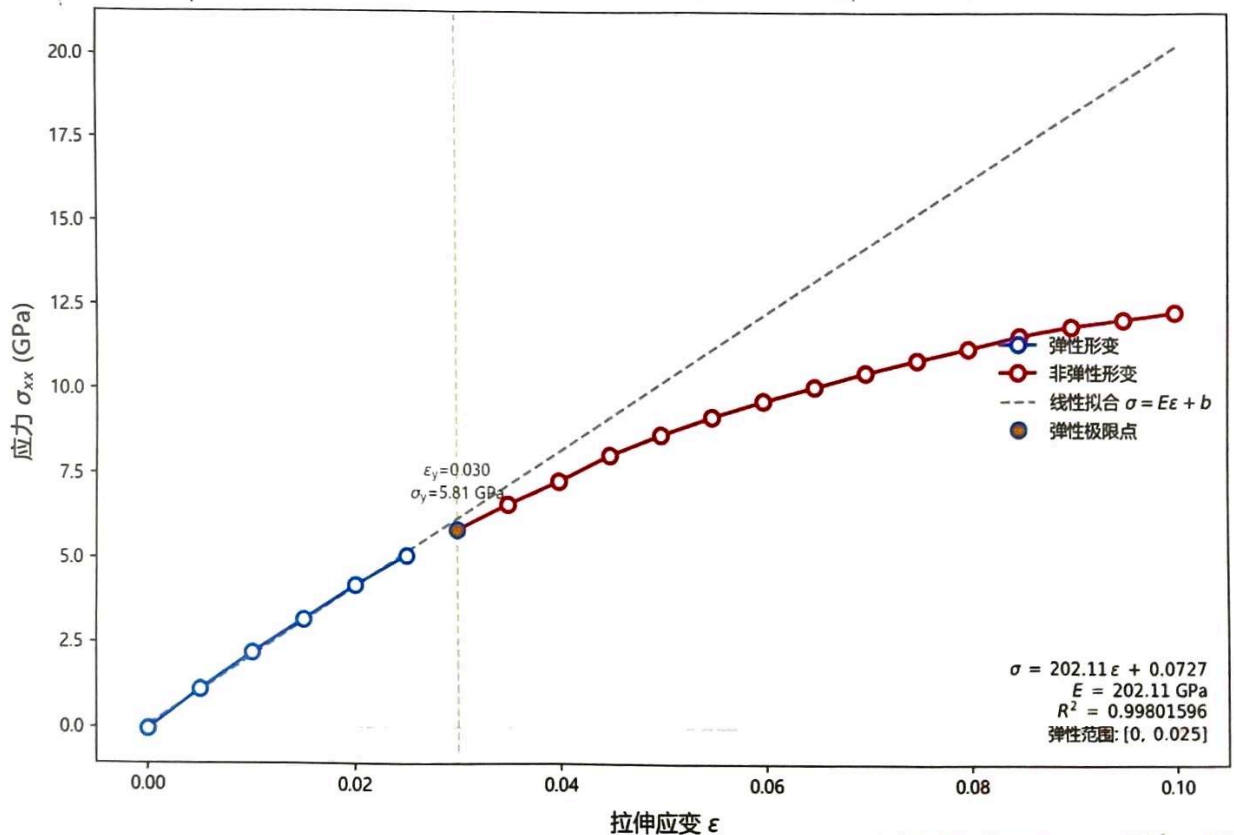
$$\epsilon_y = 0.030, \sigma_y = 5.81 \text{ GPa}$$

当 $\epsilon > 0.030$ 时, 应力偏离线性, 进入非线性弹性区, 曲线斜率不断降低, 应力变大且增长速度变缓

参数	DFT	实验值 (多晶)
E (GPa)	202.11	248 - 310
ϵ_y 理论弹性极限	0.030	~ 0.001

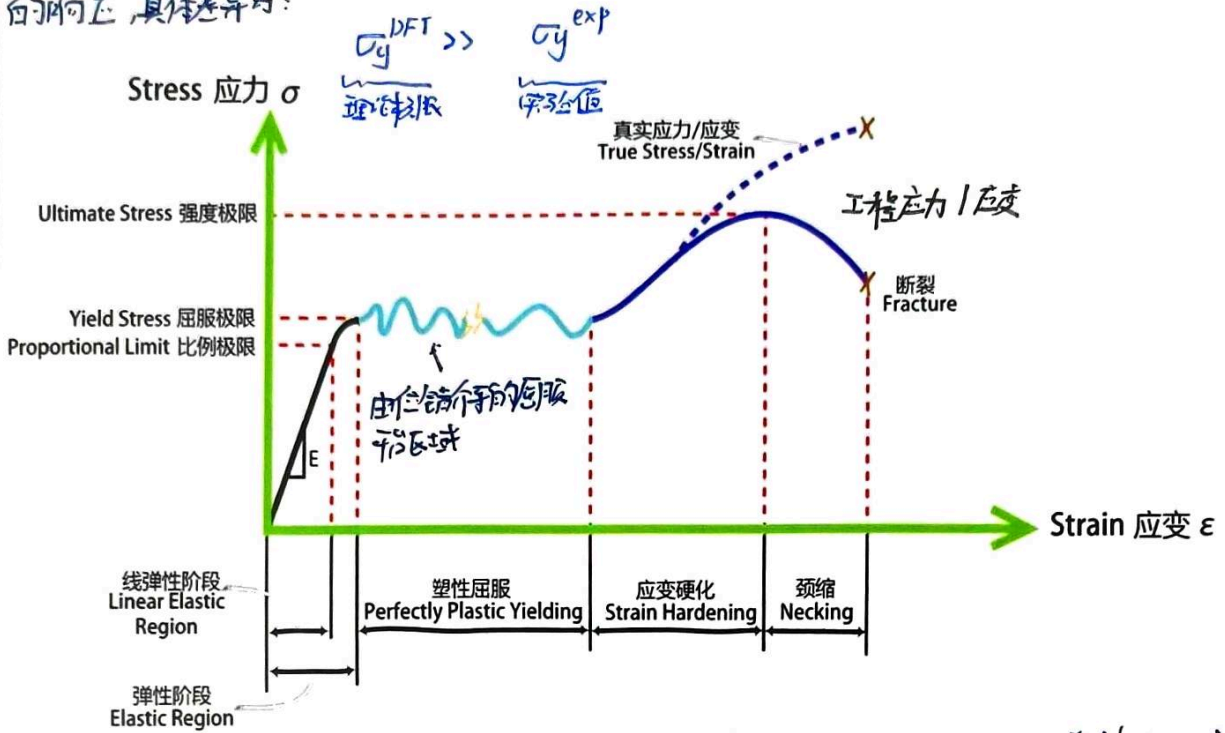
杨氏模量低于实验值近35%, 原因在于, GGA-PBE系统低估了结合能, 使得能量曲线曲率 (即弹性常数) 偏低.

MgO 单轴拉伸应力-应变曲线 ($\nu = 0.18, a_0 = 4.285 \text{ \AA}$)



2. 问题提出与讨论

DFT给出的应力应变曲线与宏观实验曲线相比有什么本质差异? 弹性极限又该如何界定?
 DFT计算的理想晶体的应力-应变曲线在物理上对应的是完整单晶、零温(0K)、无缺陷条件下
 的响应, 具体差异为:



DFT曲线不存在位错介导的屈服和应力硬化, 其在超过弹性极限后直接进入非线性响应直至键断裂. 因此本质上只有弹性区和断裂前的非弹性区两个阶段. DFT的弹性极限界定方式是以线性拟合中的残差为判断, 当残差超过阈值 (实验中取中值数残差的3.0倍) 认为线性关系不再成立. 对应最后一个线性点即为弹性极限 (ϵ_y, σ_y).

此外, 即使我们使用经验值模拟, b, c 方向上的应力仅有 σ_{yy} 和 σ_{zz} 的应力. 这体现了柏松效应没有被中和的体现. 由晶胞在 y, z 方向上被约束而转化的横向应力.

四、其它

备注：

1. 第四部分（其它）由教师自行规定填写内容，可为课程大纲设置但本实验报告前三部分未包含在内的学习任务。
2. 若本课程不涉及其它内容，教师不需要在第四部分后的“指导教师签名”处签名。

A large empty rectangular box with a thin black border, occupying most of the page. It is intended for the student to write their report or answer questions.

指导教师签名:

日期: