

FYSMENA 3110/4110 Prosjektoppgaver

Prosjektoppgaven har innleveringsfrist 14. november. Oppgavene legges i posthylla til Ole Martin Løvrvik på ekspedisjonskontoret til Fysisk institutt. Oppgavene skal fortrinnsvis gjøres to og to, og det skal leveres felles rapport.

Opgaven består i å bruke ADF-BAND til å gjøre DFT-beregninger på et selvvalgt materialsystem, samt å skrive en prosjektrapport om dette arbeidet. Det er foreslått materialsystemer i det som følger, men det er også mulig å velge et eget system til prosjektoppgaven. Diskuter i så fall dette med O. M. Løvrvik. Dere har kun tilgang til den serielle versjonen av ADF, slik at det er begrenset hvor store systemer som kan behandles i løpet av prosjektperioden. Det er viktig å begynne beregningene så tidlig som mulig, for noen av jobbene kan ta lang tid å kjøre.

Dere må selv vurdere hva som skal beregnes og hvilke resultater som skal presenteres i prosjektrapporten. Det følgende er en liste over egenskaper som det kan være naturlig å beregne:

- Konvergens av numeriske parametere.
- Relaksert krystallstruktur.
- Beregnede totalenergier.
- Tilstandstetthet (DOS og LDOS).
- Bandstruktur.
- Ladningsanalyse.
- Romlig elektronstruktur; 3D-plott av enkeltorbitaler.
- Dielektrisk funksjon.

Rapporten kan for eksempel bestå av følgende deler:

- Kort introduksjon om materialet.
- Kort om metoden; valg av parametere, basisfunksjoner osv.
- Presentasjon av de viktigste resultatene.
- Konklusjoner og oppsummering.

1 Karbon nanorør

Dette er kanskje det aller "hotteste" nanomaterialet for tiden. Det finnes en del forskjellige muligheter på nettet for å generere koordinatene til nanorør:

Wrapping – nanotube coordinate generator (free, downloadable program to Windows):

<http://www.photon.t.u-tokyo.ac.jp/~maruyama/wrapping3/wrapping.html>

TubeGen - nanotube coordinate generator (free, web interface):

<http://turin.nss.udel.edu/research/tubegenonline.html>

Nanotube Modeler – generator of nanostructures (downloadable program to Windows, registration needed to get out coordinates):

<http://jcrystal.com/>

Nanotubes made simple – explanation of nanotubes and small applet for visualization (free, web interface):

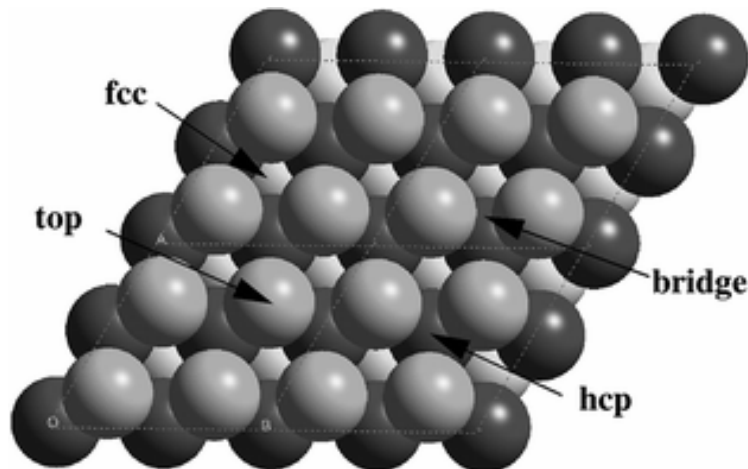
<https://www.ccs.uky.edu/~ernst/carbontubes/structure.html>

Indeksene n og m avgjør typen nanorør. $m=0$ gir en sikksakkavslutning (zigzag) på røret, mens $n=m$ gir en lenestol (armchair). Andre kombinasjoner gir chirale nanorør.

For denne oppgaven bør du i hvert fall regne på en sikksakk og en lenestol, for eksempel $(n,m) = (10,0)$ og $(6,6)$. Bruk kun én enhetscelle (se på "Nanotubes made simple" hvis du er i tvil om hvor stor en enhetscelle er.) Et mulig chiralt nanorør er $(n,m) = (8,4)$.

2 Hydrogen på en platinaoverflate

Platina er en svært viktig katalysator, blant annet i brenselceller. Du har allerede laget en Pt-overflate i oppgave 6 b), og i dette prosjektet skal du finne ut hva som skjer når et hydrogenatom vekselvirker med en Pt-overflate. Hydrogenatomet kan enten plasseres rett over et Pt-atom (topp-plassen, med én nærmeste nabo), midt på linjen mellom to Pt-atomer (bro-plassen, med to nærmeste naboer) eller i hulrommet mellom tre Pt-atomer (enten rett over et Pt-atom i lag nummer to (hcp-plassen) eller rett over et Pt-atom i lag nummer tre (fcc-plassen)). Høyden over overflaten kan varieres i små trinn, slik at du får ut en potensialkurve for hver plass. Eventuelt kan strukturen relakseres automatisk.



Pt(111)-overflaten sett ovenfra, med de fire plassene top, bridge, fcc og hcp markert med piler. Atomer i lag nummer to er mørke, resten er lyse.

3 Titandioksid til mange anvendelser

Titandioksid (TiO_2) er et svært vanlig og anvendelig stoff, brukt i alt fra maling og tannkrem til selvrensende vinduer og avanserte solceller. Det finnes tre naturlig forekommende krystallstrukturer for titandioksid. Koordinatene kan enklest puttes inn ved å kopiere det inn i .run-filen etter at alt annet er lagt til der, og dessuten legge til en linje i .run-filen:

```
Coordinates natural
```

En interessant problemstilling er her å sammenligne optiske egenskaper for bulk titandioksid med tunne filmer (overflater). De tre naturlig forekommende strukturene er anatase, rutil og brookitt. Den vanligste er rutil, og det er også den som har de fleste anvendelsene. Krystallstrukturene er som følger:

Anatase. Tetragonal (alle vinkler er 90°), $a=b=3.776 \text{ \AA}$, $c=9.486 \text{ \AA}$. Koordinater (i enheter av akselengdene):

Ti1	0.00000	0.50000	0.25000
Ti1	0.50000	0.50000	0.50000
Ti1	0.00000	0.00000	0.00000
Ti1	0.50000	0.00000	0.75000
O1	0.00000	0.50000	0.04200
O1	0.00000	0.00000	0.79200
O1	0.50000	0.00000	0.95800
O1	0.00000	0.50000	0.45800
O1	0.00000	0.00000	0.20800
O1	0.50000	0.50000	0.70800
O1	0.50000	0.50000	0.29200

O1	0.50000	0.00000	0.54200
Rutil. Tetragonal, $a=b=4.5929 \text{ \AA}$, $c=2.9591 \text{ \AA}$. Koordinater:			
Ti1	0.50000	0.50000	0.50000
Ti1	0.00000	0.00000	0.00000
O1	0.69440	0.69440	0.00000
O1	0.30560	0.30560	0.00000
O1	0.19440	0.80560	0.50000
O1	0.80560	0.19440	0.50000
Brookitt. Ortorombisk (alle vinkler er 90°), $a=9.1840 \text{ \AA}$ $b=5.4470 \text{ \AA}$ $c=5.1450$. Koordinater:			
Ti1	0.37299	0.61298	0.87300
Ti1	0.62701	0.11298	0.62700
Ti1	0.87299	0.88702	0.12700
Ti1	0.87299	0.61298	0.62700
Ti1	0.62701	0.38702	0.12700
Ti1	0.37299	0.88702	0.37300
Ti1	0.12701	0.11298	0.87300
Ti1	0.12701	0.38702	0.37300
O1	0.98999	0.84497	0.82000
O1	0.48999	0.65503	0.18000
O1	0.51001	0.15503	0.32000
O1	0.98999	0.65503	0.32000
O1	0.51001	0.34497	0.82000
O1	0.48999	0.84497	0.68000
O1	0.01001	0.15503	0.18000
O1	0.01001	0.34497	0.68000
O2	0.27002	0.89502	0.03500
O2	0.72998	0.39502	0.46500
O2	0.77002	0.60498	0.96500
O2	0.77002	0.89502	0.46500
O2	0.22998	0.39502	0.03500
O2	0.72998	0.10498	0.96500
O2	0.27002	0.60498	0.53500
O2	0.22998	0.10498	0.53500

4 Nanostrukturert silisium

Silisium er kanskje det viktigste materialet i vår teknologi. Det diskuteres heftig om det vil være mulig å fortsette å bruke Si etter hvert som størrelsen på komponentene i datamaskiner fortsetter å minke.

Bruk bandinput til å lage flater (slabs) og kjeder (chains) av silisium. Prøv også å lage et cluster, ved å bruke et kjede med vakuum mellom clusterne. Her kan du sammenligne resultater med det du fikk ut i oppgave 4 (bulk silisium).