

EXAM assignment

Lecture: Atomistic Computer Modeling of Materials (ÚFV/APMM/19)

Student: Dominik Volavka

Date: May 18, 2022

Submission Deadline: June 26, 2022 via email: *martin.gmitra@upjs.sk*

Assignment:

Using density functional theory as implemented in Quantum Espresso code suite calculate ground state properties of monolayer NbSe₂ in 1H and 1T polymorphs. To model quasi two-dimensionality of the monolayers consider separation by a vacuum at least of 12 Å in perpendicular direction. For pseudopotentials use the following provides with the assignment.

1. Find equilibrium configurations by finding the equilibrium lattice constant and atomic positions within the unit cell.
2. Calculate density of states and band structures along the high symmetry lines in first Brillouin zone.
3. Calculate scanning tunneling microscopy image in Tersoff & Hamann approximation for bias voltage of 1 eV below the Fermi level and tip distance of 2 Å from the surface.

Evaluation:

- 20% construction of the input files for self-consistent field calculations
- 40% finding equilibrium structures
- 20% calculations of density of states and electronic band structures
- 20% calculations of STM pictures
- +20% bonus, online oral exam covering theory topics given on lectures, please submit the requested files 2 days before oral exam.

Submit:

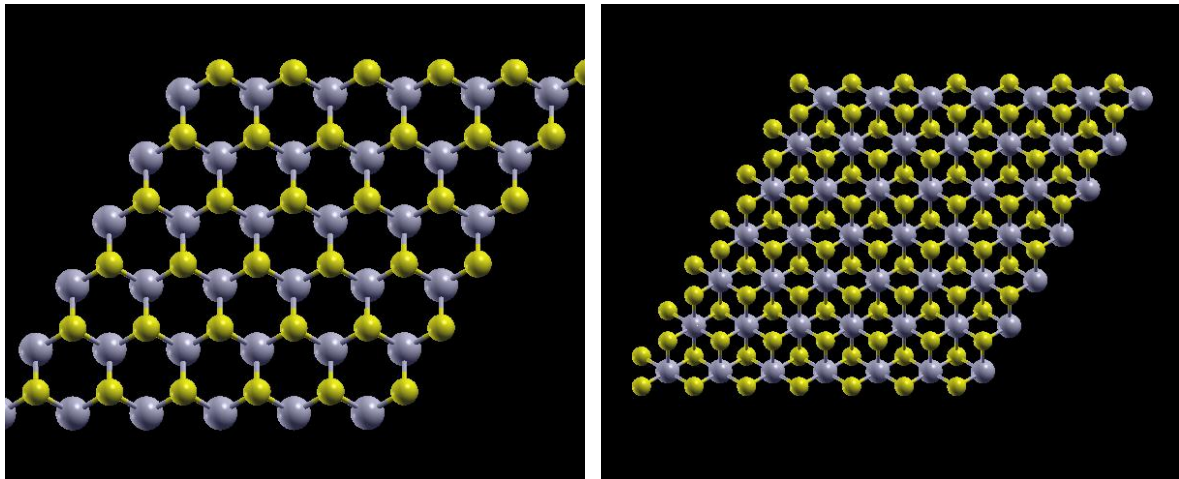
- input files, output files of self-consistent field calculations
- a short text report (pdf/odt/doc) with results figures/tables demonstrating obtained results, please include as a first page this assignment.

Exam evaluation scale:

A: 100% - 90% B: 89% - 75% C: 74% - 60% D: 59% - 40% E: 39% - 20% FX: 19% - 0

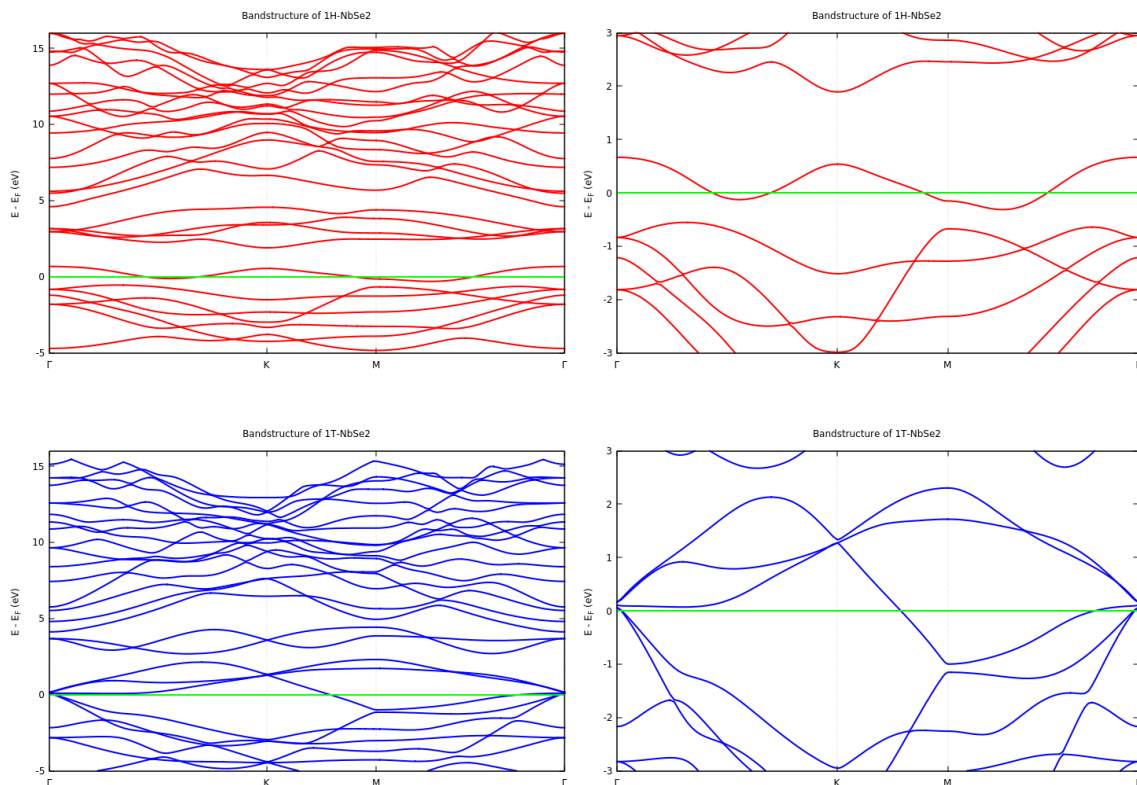
V tomto zadaní sa venujeme 1H a 1T polymorfom monovrstvy NbSe₂ oddelenej od okolia na vzdialenosť 12 Å. V prvom kroku sme sa snažili nájsť pomocou relaxačných výpočtov energeticky najvýhodnejšie rozloženie atómov, pričom nás zaujímala z-ová súradnica selénových atómov voči rovine tvorenej atómami nióbu.

Počiatkové hodnoty mriežkovej konštanty ($a = 3,49$ Å) a vertikálnej vzdialenosti selénových atómov ($z = \pm 1,67$ Å) sme získali z publikácie [1]. Zrelaxovaním štruktúry sme získali novú energeticky výhodnejšiu konfiguráciu systému (obrázok č.1). V prípade 1H vrstvy má vertikálna vzdialenosť selénových atómov hodnotu $\pm 1,6755$ Å, s celkovou energiou **-152,1283 Ry** a Fermiho energiou **0,33 eV**. V prípade 1T vrstvy má výhodnejšia vertikálna vzdialenosť Se atómov hodnotu $\pm 1,668$ Å, s celkovou energiou **-152,1236 Ry** a Fermiho energiou **1,015 eV**.

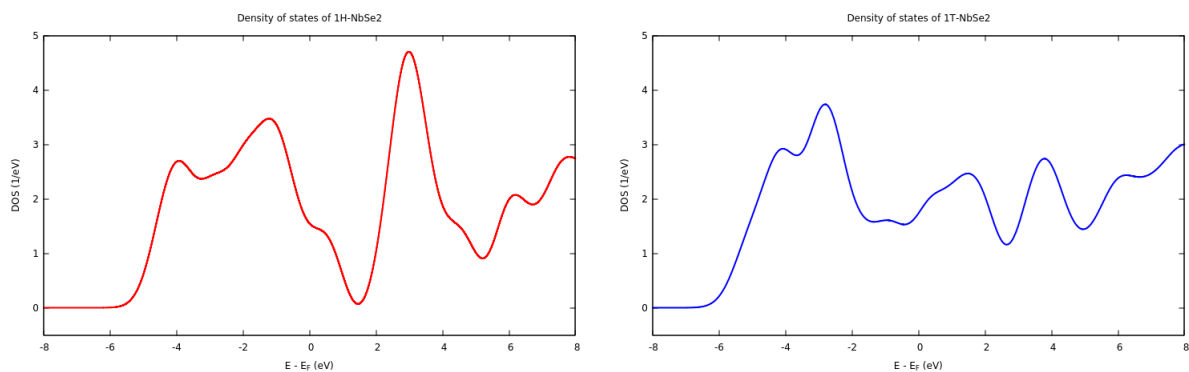


Obr. č. 1: Štruktúra skúmanej monovrstvy 1H-NbSe₂ (vľavo) a 1T-NbSe₂ (vpravo)

Na obrázku č. 2 si môžeme všimnúť pásové štruktúry oboch polymorfov. V prípade 1H-NbSe₂ vidíme širokú energetickú medzeru nad Fermiho hladinou, v ktorej sa nenachádzajú žiadne elektróny, čo pozorujeme aj v hustote stavov, ktorej hodnota klesne na nulu pri energii približne 1,8 eV nad Fermiho hladinou (obrázok č. 3). V pásovej štruktúre 1T-NbSe₂ pozorujeme lineárnu disperziu na Fermiho hladine medzi bodmi K a M. V pásových štruktúrach oboch polymorfov ďalej pozorujeme menšie energetické medzery (1H- pod Fermiho hladinou a 1T – nad Fermiho hladinou), ktorých prejav by sme mali pozorovať v hustote stavov. Neprítomnosť poklesu hustoty stavov môže byť dôsledok nedostatočného delenia energie. Ďalej vidíme, že pri energii 3 eV nad Fermiho hladinou pozorujeme v prípade 1H vrstvy výrazne väčšie množstvo stavov ako pri 1T vrstve.

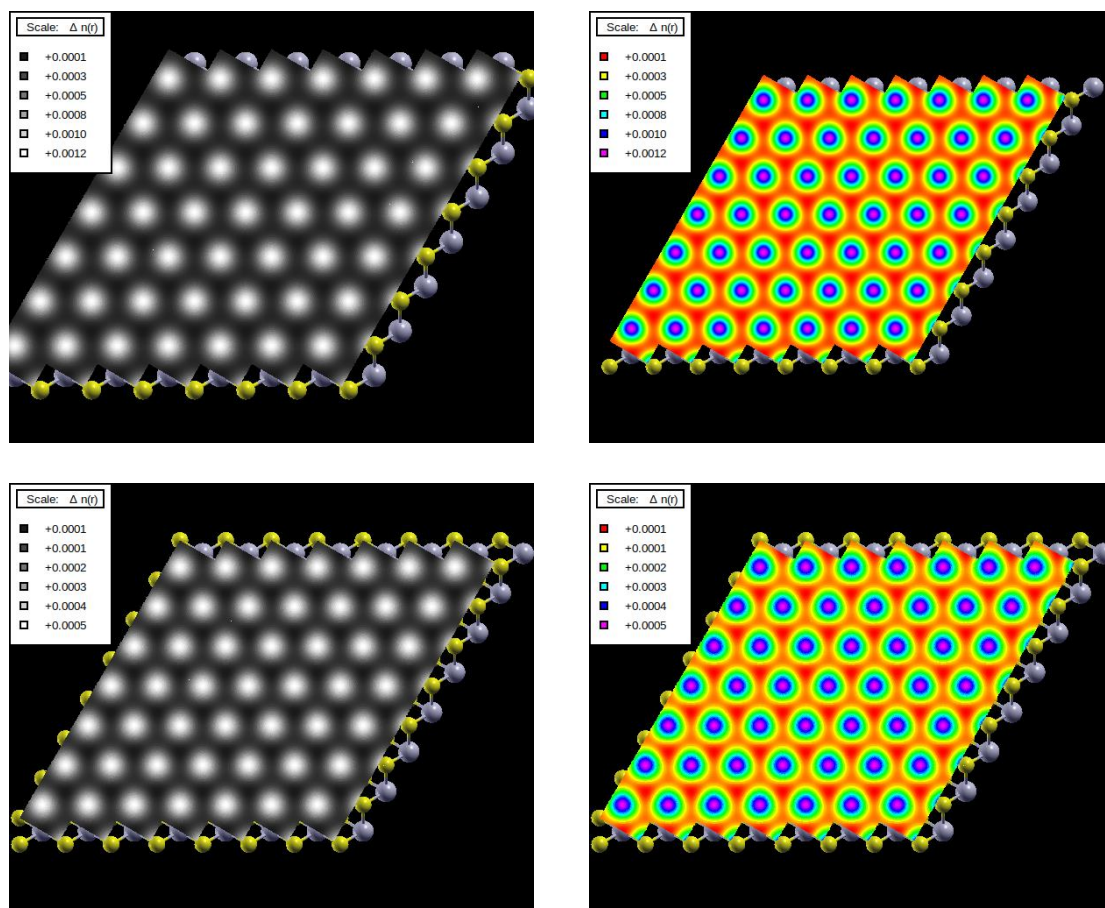


Obr. č. 2: Pásová štruktúra monovrstvy 1H-NbSe₂ s detailnejším pohľadom na okolie Fermiho hladiny (obrázky s červenou farbou) a pásová štruktúra monovrstvy 1T-NbSe₂ s detailnejším pohľadom na okolie Fermiho hladiny (obrázky s modrou farbou)



Obr. č. 3: Hustota stavov monovrstvy 1H a 1T-NbSe₂

Na obrázku č. 4 sa nachádzajú STM obrázky polymorfu 1H-NbSe₂ a 1T-NbSe₂ s hrotom vo výške 2 Å a pri biase -1 eV. Ako si môžeme zo škálovania všimnúť 1H vrstva vykazuje vyššie hodnoty signálu ako 1T vrstva.



Obr. č. 4: STM obrázky monovrstvy 1H-NbSe₂ (horné obrázky) a 1T-NbSe₂ (dolné obrázky) s rôznymi farebnými škálami

[1] Kamil, E., Berges, J., Schönhoff, G., Rösner, M., Schüler, M., Sangiovanni, G., & Wehling, T. O. (2018). Electronic structure of single layer 1T-NbSe₂: interplay of lattice distortions, non-local exchange, and Mott–Hubbard correlations. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 30(32), 325601. <https://doi.org/10.1088/1361-648x/aad215>