

EXAM assignment

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

Student: Juraj Mních

Date: April 6, 2022

Submission Deadline: April 29, 2022 via email: *martin.gmitra@upjs.sk*

Assignment:

Using density functional theory as implemented in Quantum Espresso code suite calculate ground state properties of bilayer graphene. For lattice constant consider 2.46 \AA as it is for a bare graphene, for interlayer distance use 3.35 \AA , and to model two-dimensional system consider a vacuum of about 15 \AA in direction perpendicular to the graphene planes.

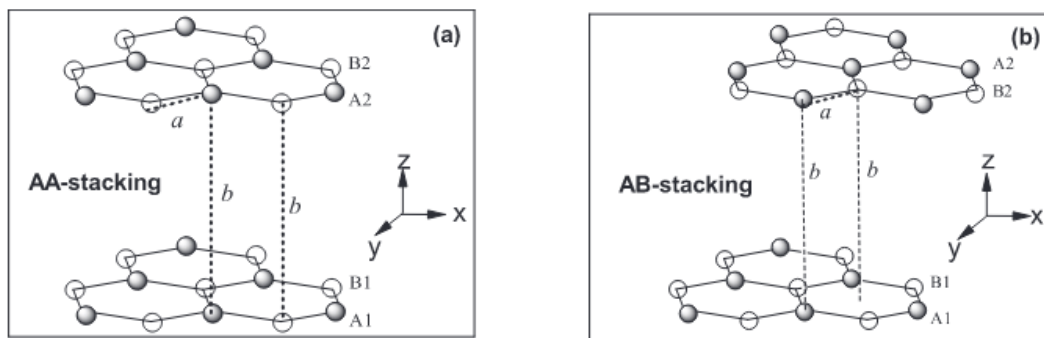


Figure: Schematic structure of AA and AB bilayer graphene stacking, reproduced from Y. Xu et al., Nanotechnology 21, 065711 (2010).

1. Calculate electronic band structure and density of states for AA and AB stackings. Compare and discuss electronic bands along high symmetry points in Brillouin zone $\Gamma - K - M - \Gamma$ close to the Fermi level. Use cutoff at least of 45 Ry.

2. Construct a twisted bilayer graphene with a twist angle of $21,787^\circ$ and calculate electronic band structure along $\Gamma - K - M - \Gamma$ in reduced Brillouin zone close to the Fermi level and density of states. Compare and discuss the results with the AA and AB stacked bilayer graphene.

Evaluation:

- 30% construction of the input files for task 1
- 20% self-consistent field calculations and density of states for task 1
- 30% construction of the input files for task 2
- 20% self-consistent field calculations and density of states for task 2
- +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.

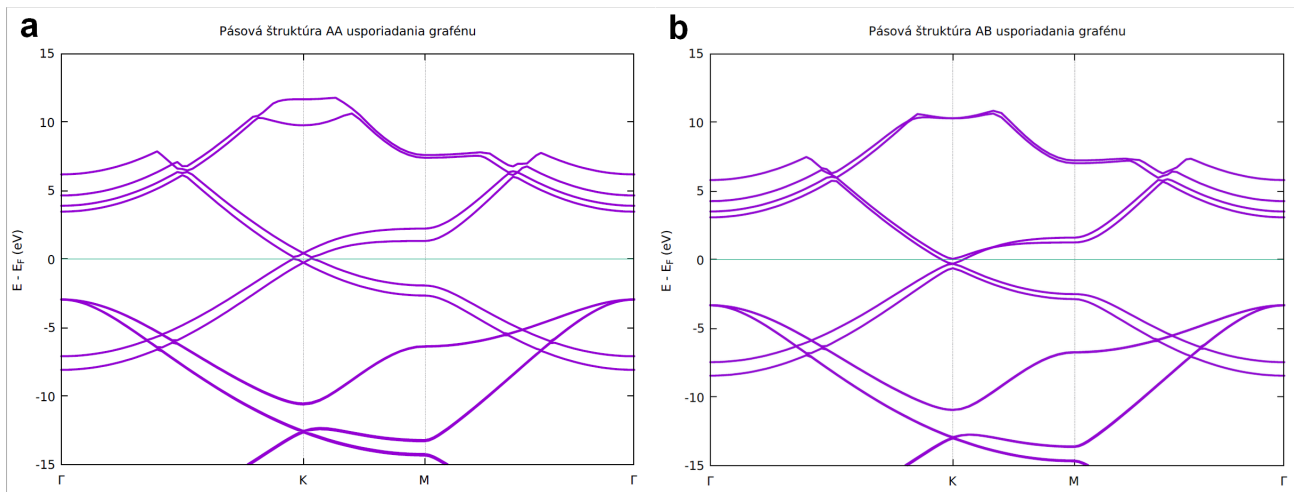
Exam evaluation scale:

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

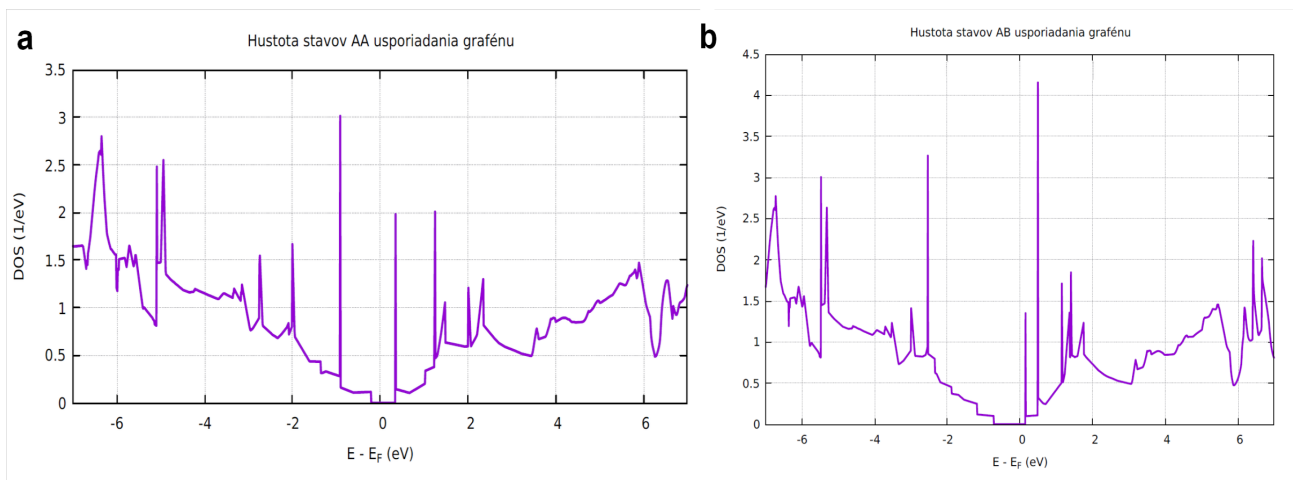
Pásová štruktúra a hustota stavov dvojvrstvy grafénu závisia na vzájomnej polohe obidvoch vrstiev. Jednotlivé vrstvy môžeme voči sebe posúvať, takto môže vzniknúť známe AA alebo AB usporiadanie. Zároveň môžeme vrstvy voči sebe otáčať. Elementárna bunka štruktúry, ktorá vznikne netriviálnym pootočením vrstiev (rôznym od celočíselného násobku 60°), obsahuje minimálne 28 atómov. Je to presne prípad pre uhol pootočenia $\Theta = 21,787^\circ$.

Úloha 1

AA usporiadanie dvojvrstvy grafénu dostaneme, ak obe vrstvy budú uložené presne na sebe. Elementárna bunka dvojvrstvy bude mať zhodné rozmery v rovine (xy) s klasickým jednovrstvovým grafénom. Rozdiel je len v tom, že elementárna bunka obsahuje 4 atómy namiesto dvoch. Z každej vrstvy prispievajú práve 2 atómy. Pri AA usporiadaní majú dvojice atómov v elementárnej bunke rovnaké x -ové a y -ové súradnice, líšia sa len z -ovými súradnicami. Pri AB usporiadaní taktiež elementárnu bunku tvoria 4 atómy, ale už len jedna dvojica atómov sa nachádza presne pod sebou, zvyšné dve sú voči sebe posunuté. V celom zadaní máme predpokladať, že dvojvrstva grafénu je od ďalšej dvojvrstvy oddelená vákuom okolo 15\AA . Keďže obe vrstvy sú vzdialené medzi sebou $3,36\text{\AA}$, vzdialenosť medzi prvou vrstvou grafénu a prvou vrstvou druhej dvojvrstvy bude $d = 3,36 + 15\text{\AA}$.



Obr. 1: **Pásové štruktúry AA a AB usporiadania grafénu.** **a** Pásová štruktúra AA usporiadania grafénu. **b** Pásová štruktúra AB usporiadania grafénu. V oboch prípadoch pozorujeme v okolí Fermiho energie charakteristický priebeh disperzie pre grafén.



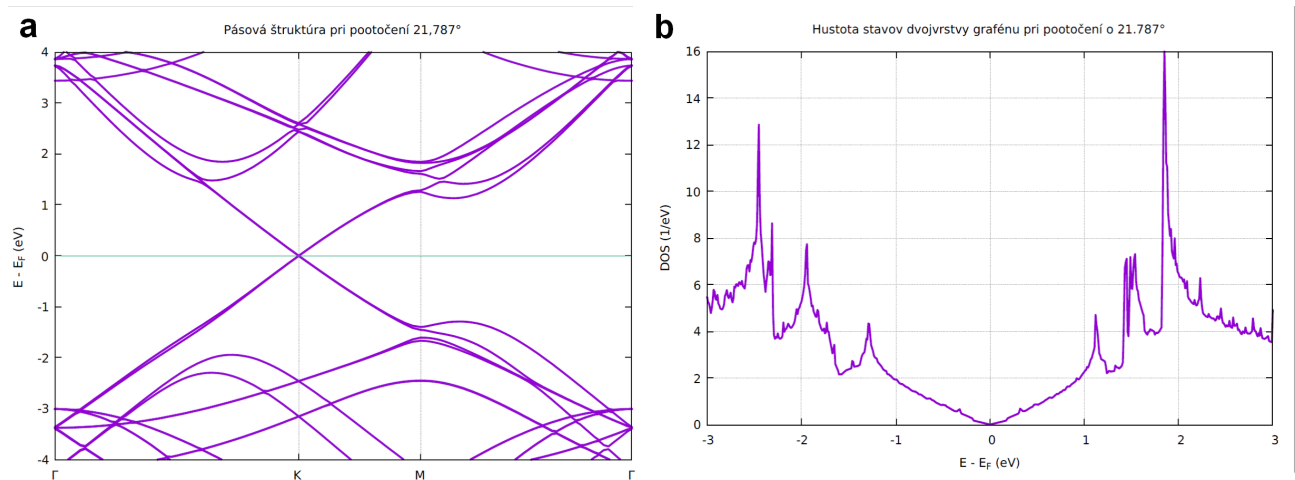
Obr. 2: **Hustoty stavov.** **a** Hustota stavov AA usporiadania grafénu. **b** Hustota stavov AB usporiadania grafénu. Pozorujeme charakteristický nárast hustoty stavov pri vzdľavovaní sa od Fermiho energie.

Na obrázkoch 1 a 2 sú zobrazené pásové štruktúry a hustoty stavov. V oboch prípadoch môžeme pozorovať

veľmi podobný priebeh. Diracov bod, ako v prípade klasického grafénu, sa nachádza v K bode a okolo neho pozorujeme lineárnu disperziu v okolí Fermiho hladiny. Na iných miestach nedochádza k prelínaniu pásov s Fermiho hladinou. Taktiež je veľmi výrazná degenerácia jednotlivých pásov. V oboch prípadoch je nulová hustota stavov na Fermiho hladine, ktorá potom s narastajúcou/klesajúcou energiou narastá podobne, ako pri obyčajnom graféne.

Úloha 2

Uhol $21,787^\circ$ je vhodným uhlom na rýchle a jednoduché skúmanie vlastností dvojvrstiev grafénu, lebo má najmenšiu elementárnu bunku, ktorú môžeme rotáciou vrstiev dostať. V takejto bunke sa nachádza 28 atómov, po 14 z každej vrstvy. Na generovanie elementárnej bunky sme použili program Cellmatch, ktorý našiel vektory elementárnej bunky a zároveň aj relatívne pozície jednotlivých atómov vzhľadom na tieto vektory. Na obrázku 3 je taktiež pekne viditeľný Diracov bod s peknou lineárnou disperziou. Pozorujeme zvýšený počet pásov, ktorý je zapríčinený väčším počtom atómov (atómových orbitálov) v elementárnej bunke. V okolí Fermiho energie je disperzia porovnateľná s disperziou AA a AB usporiadania. Pri hustote stavov taktiež pozorujeme klasický priebeh pre grafén okolo Fermiho hladiny s tým rozdielom, že máme väčší počet van Hoveových singularít, ktoré sú taktiež spôsobené väčším počtom pásov relatívne blízko Fermiho hladiny



Obr. 3: **Pásová štruktúra a hustota stavov dvojvrstvy grafénu pootočenej o $21,787^\circ$.** **a** Pásová štruktúra v okolí Fermiho energie je taktiež podobná disperzii jednovrstvového grafénu. Počet pásov pri vzd'áľovaní sa od Fermiho energie prudko narastá. **b** Hustota stavov kopíruje priebeh hustoty stavov pre obyčajný grafén v okolí Fermiho energie. Pozorujeme viacero van Hoveových singularít.