

Project A20  
FYS-MENA4111

Erlend Tiberg North & Alexandra Jahr Kolstad

19. november 2020  
Week 44-

**Abstract**

# Innhold

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Method</b>	<b>3</b>
2.1	Energy convergence . . . . .	3
2.2	K-points convergence . . . . .	3
<b>3</b>	<b>Results</b>	<b>3</b>
3.1	Energy convergence . . . . .	3
3.2	K-points convergence . . . . .	4
<b>4</b>	<b>Discussion</b>	<b>4</b>
<b>5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>4</b>
<b>6</b>	<b>References</b>	<b>4</b>
<b>A</b>	<b>Appendix 1</b>	<b>4</b>

## Ting å gjøre:

- lage en mappe på saga for begge

**done**

- skaffe POSCAR, jobfile og INCAR (de andre følger fra disse)

**done**

- sjekke at den konvergerer (decent ENCUT og KPOINTS)

**done**

The data shows that we should use 450eV for ENCUT as that is the 1st job with a difference less than 3meV.

For k-density we see that even the lowest value, 1.0, is within 3 meV (1.0 gives around 1.75 meV), so this can be used. However, the data shows that 3.0 is below 1 meV, with 4.0 being identical in energy to 5.0. This can possibly be discussed in group, but 1.0 should technically be enough for k-density.

- relaxe POSCAR og static etter relax POSCAR

**done**

- total og relativ energi (fra static etter relax)

**done**

- DOS (båndgap) og LDOS (båndstruktur)

- romlig elektronstruktur; 3D-plot av ladningstetthet (VESTA)

- bytte ut hydrogen i alkoholgruppen med lantanoidatomer (Yb, Nd, Tm og Y)

- relaxe POSCAR og static etter relax POSCAR

- total og relativ energi (fra static etter relax)

- DOS (båndgap) og LDOS (båndstruktur)

- romlig elektronstruktur; 3D-plot av ladningstetthet (VESTA)

**Ting å ha i L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X:**

- abstrakt
- kort introduksjon av materialet
- kort om metode, valg av paramtere (CUTOFF, etc)
- presentasjon av de viktigste resultatene
- diskusjon av hvordan resultatene kan tolkes, f.eks. sammenligne til eksperimenter eller tidligere beregninger i litteraturen
- konklusjon/oppsummering
- kilder
- appendix ?

**OBS: husk å lagre bilder for rapporten og presentasjonen mens man gjør beregningene**

## **1 Introduction**

## **2 Method**

### **2.1 Energy convergence**

ENCUT: 300 to 900

### **2.2 K-points convergence**

K-point density: 1.0 to 6.0

## **3 Results**

### **3.1 Energy convergence**

Started to convergence around 450 eV for ENCUT.

### **3.2 K-points convergence**

## **4 Discussion**

## **5 Conclusion**

## **6 References**

- [1] Ben G. Streetman & Sanjay Kumar Banerjee, 2016, *Solid State Electronic Devices seventh edition*, Pearson Education

## **A Appendix 1**