

Project A20
FYS-MENA4111

Erlend Tiberg North & Alexandra Jahr Kolstad

5. november 2020
Week 44-

Abstract

Innhold

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

- ☒ lage en mappe på saga for begge
- ☒ skaffe POSCAR, jobfile og INCAR (de andre følger fra disse)
- ☐ sjekke at den konvergerer (decent ENCUT og KPOINTS)

Ting å gjøre:

- lage en mappe på saga for begge
- skaffe POSCAR, jobfile og INCAR (de andre følger fra disse)
- sjekke at den konvergerer (decent ENCUT og KPOINTS)
- relaxe POSCAR og static etter relax POSCAR
- total og relativ energi (fra static etter relax)
- DOS og LDOS
- bytte ut hydrogen i alkoholgruppen med lantanoidatomer (bestemme hvilket, Yb, Nd eller Tm (eller Y (obs, ikke lantanoid, er det mulig da?)))
- båndgap
- båndstruktur
- romlig elektronstruktur; 3D-plot av ladningstetthet (VESTA)

Ting å ha i L^AT_EX:

- 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