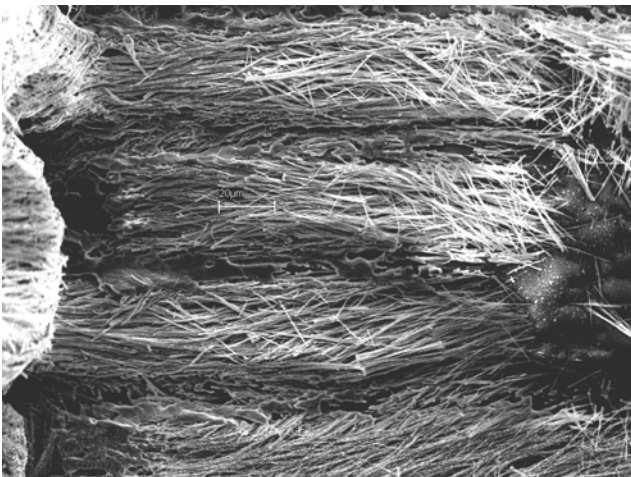
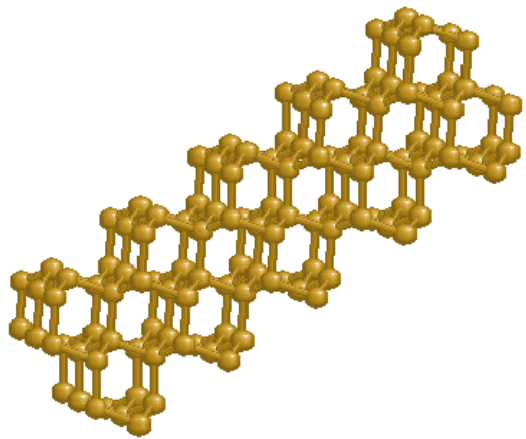


DFT modellering af metal-nanowirer

Ide: Tæthedsfunktional-teori (DFT) er et fantastisk værktøj til modellering af fast stoffer og nanostrukturer. I princippet kan man nøjes med at beregne elektron-tætheden (der kun afhænger af x , y og z) istedet for hele bølgefunktionen (der afhænger af $3N$ variable, hvis systemet indeholder N elektroner). I praksis er der dog mange små og store "tricks", man må kende, for at benytte metoden. Ideen i projektet er at modellere metalliske nanowirer vha. DFT. Vi vil benytte en såkaldt "jellium" model af kernerne, hvilket gør problemet meget nemmere. Med metoden vil vi undersøge, hvordan størrelser som overfladeenergi og evt. magnetisering afhænger af diameter og materiale. For små wires kan vi også sammenligne med beregninger uden "jellium" modellen, som kan udføres vha. frit tilgængelige koder som Abinit (www.abinit.org). Dette vil give en naturlig indføring i "rigtig" DFT. Hvis det ønskes, er det endelig muligt at fremstille og undersøge Ni eller Ag nanowirer vha. elektrodeponering i Al_2O_3 porøse membraner.

Teori: Den store opgave i projektet bliver at skrive et computer-program, som automatisk løser de kvantemekaniske ligninger og beregner elektron-tæthed osv. for nanowirer med forskellig diameter og materiale. Vi skal her kigge på matrix-metoder og smarte metoder til at opnå konvergens i "selv-konsistens"-problemer. Desuden vil projektet indeholde opstilling af "scripts" til Abinit-pakken, som kan bruges til at modellere nanowirer med fuld DFT.



Eksperimentelt: Den eksperimentelle del er frivillig, og kan udelades hvis det ønskes at fokusere 100% på modellering. Vi har tidligere fremstillet Ni (vist til venstre) og Ag nanowirer i Al_2O_3 membraner. Vi har membraner med porer fra 14nm til 80 nm liggende. Opstillingen er også nogenlunde intakt.

Kurser: Projektet vil i høj grad involvere kurserne "Kvantemekanik II" og "Nanostrukturer og -materialer". En glimrende introduktion til DFT er Walter Kohn's Nobel pris artikel her <http://homes.nano.aau.dk/tgp/kohn-lecture-nobel.pdf>

Forslagsstiller: TGP