

# UTJECAJ MORFOLOGIJE SUPSTRATA NA STRUKTURU 2D MATERIJALA

---

Gemeri, Dejan

Master's thesis / Diplomski rad

2020

*Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj:* **Josip Juraj Strossmayer University of Osijek, Department of Physics / Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku, Odjel za fiziku**

*Permanent link / Trajna poveznica:* <https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:160:572857>

*Rights / Prava:* [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

*Download date / Datum preuzimanja:* **2024-12-04**



*Repository / Repozitorij:*

[Repository of Department of Physics in Osijek](#)



**SVEUČILIŠTE JOSIPA JURJA STROSSMAYERA U OSIJEKU**  
**ODJEL ZA FIZIKU**

**DEJAN GEMERI**

**UTJECAJ MORFOLOGIJE SUPSTRATA NA**  
**STRUKTURU 2D MATERIJALA**

**Diplomski rad**

**Osijek, 2020.**

**SVEUČILIŠTE JOSIPA JURJA STROSSMAYERA U OSIJEKU**

**ODJEL ZA FIZIKU**



**DEJAN GEMERI**

**UTJECAJ MORFOLOGIJE SUPSTRATA NA  
STRUKTURU 2D MATERIJALA**

**Diplomski rad**

predložen Odjelu za fiziku Sveučilišta J. J. Strossmayera u Osijeku radi stjecanja zvanja  
profesora fizike i informatike

**Osijek, 2020.**

**Ovaj rad izrađen je u Osijeku pod vodstvom izv.prof.dr.sc Igora Lukačevića u sklopu Sveučilišnog diplomskog studija fizike i informatike na Odjelu za fiziku Sveučilišta Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku.**

# Predgovor

Ovim putem izražavam veliku zahvalnost mentoru, izv.prof.dr.sc. Igoru Lukačeviću, uz čiju je neizmjernu pomoć izrađen ovaj rad. Njegove ideje, upute i savjeti kroz višesatne razgovore pomogli su mi da bih što kvalitetnije izradio rad.

Zahvaljujem se dr.sc Matku Muževiću uz čiju su brzu asistenciju otklonjeni svi problemi koji su se pojavili prilikom računa.

Hvala CRO-NGI računalnoj infrastrukturi (dostupnoj putem SRCE-a) koja je omogućila izvođenje potrebnih izračuna na klasterima, u suprotnom bi sve trajalo puno duže.

Hvala kolegi Vanji Dušiću na velikom prijateljstvu koje sam stekao tijekom zajedničkog studija.

Na samom kraju, želim se zahvaliti svojoj obitelji na potpori tijekom cijelog studija. Bez njih ništa ovo ne bi bilo moguće.

# Sadržaj

PREDGOVOR.....	II
SADRŽAJ.....	III
SAŽETAK .....	IV
UVOD .....	1
TEORIJSKI DIO.....	3
1.1.  SCHRÖDINGEROVA JEDNADŽBA .....	3
1.2.  TEORIJA FUNKCIONALNA GUSTOĆE .....	5
1.2.1.  Hohenberg-Kohn teorem.....	6
1.2.2.  Kohn-Shamove jednađbe.....	7
1.2.3.  Pseudopotencijali.....	8
1.3.  DVI-DIMENZIONALNE (2D) KRISTALNE STRUKTURE.....	9
1.3.1.  Ravninska saćasta .....	9
1.3.2.  Svijena saćasta .....	11
1.3.3.  Ravninska trokutasta.....	12
1.3.4.  Supstrati .....	14
REZULTATI.....	16
2.1.  RELAKSACIJA ALUMINENA NA Cu(111).....	16
2.2.  RELAKSACIJA ALUMINENA NA Ag(111) .....	19
2.3.  RELAKSACIJA ALUMINENA NA Au(111).....	21
2.4.  RELAKSACIJA ALUMINENA NA Pt(111) .....	23
2.5.  RELAKSACIJA ALUMINENA NA Ir(111).....	25
2.6.  RELAKSACIJA ALUMINENA NA Ge(111).....	27
2.7.  RELAKSACIJA ALUMINENA NA PdTe <sub>2</sub> (111) .....	33
2.8.  RELAKSACIJA ALUMINENA NA SUPSTRATU Cu(111) I Ag(111) SA SMANJENOM KONSTANTOM REŠETKE .....	40
RASPRAVA O REZULTATIMA .....	46
ZAKLJUČAK .....	47
LITERATURA .....	49
ŽIVOTOPIS .....	52

## **UTJECAJ MORFOLOGIJE SUPSTRATA NA STRUKTURU 2D MATERIJALA**

**DEJAN GEMERI**

### **Sažetak**

Cilj ovog rada bio je proširiti već postojeću bazu znanja o svojstvima 2D materijala. Struktura aluminena (dvodimenzionalni alotrop aluminijski) ispitana je na nekoliko određenih supstrata. Aluminen je pretpostavljen u tri različite alotropske modifikacije (ravninska saćasta, svijena saćasta i ravninska trokutasta) čije su jedinične ćelije relaksirane na supstratima: Cu, Ag, Au, Ge, PdTe<sub>2</sub>, Pt i Ir. Ideja rada je otkriti utjecaj supstrata na strukturu 2D aluminijski (aluminena). Za sve račune koristili smo softver Quantum ESPRESSO, programski paket namijenjen za izračune elektronskih struktura i modeliranje materijala. Na kraju, kroz ovaj rad pokušali smo utvrditi poveznicu između morfologije i konstante rešetke supstrata i postavljene 2D strukture. To znanje će biti od iznimnog značaja za buduće eksperimentalne pokušaje sinteze aluminena.

( 59 stranica, 25 slika, 9 tablica, 36 literaturnih navoda)

**Rad je pohranjen u knjižnici Odjela za fiziku**

**Ključne riječi:** teorija funkcionala gustoće, dvodimenzionalni materijali, supstrati, aluminij

**Mentor:** Igor Lukačević, izv.prof.dr.sc

**Ocjenjivači:**

**Rad prihvaćen:**

**INFLUENCE OF SUBSTRATE MORPHOLOGY ON 2D MATERIAL STRUCTURES****DEJAN GEMERI****Abstract**

The focal point of this thesis, which centres on the expansion of an existing knowledge about the properties of 2D materials, is the structure of aluminene (two-dimensional allotrope of aluminium) paired with specifically chosen substrates. Aluminene is proposed in three different allotropic modifications (planar honeycomb, buckled honeycomb and planar triangular) with its unit cell relaxed onto several different substrates: Cu, Ag, Au, Ge, PdTe<sub>2</sub>, Pt and Ir. The aim of this thesis is to determine which of these metallic surfaces can serve as a synthesis substrate as well as to examine their impact on the crystal structure of aluminene. In order to do this, software Quantum ESPRESSO, a suit for ab initio quantum chemistry methods of electronic-structure calculation and materials modelling, is used. Furthermore, another aim of this study is, to establish relations and find patterns between the morphology and lattice constant of the substrates and the proposed 2D structure. This knowledge will be of great importance for future experimental attempts of aluminene synthesis.

(59 pages, 25 figures, 9 tables, 36 references)

**Thesis deposited in Department of Physics library**

**Key words:** density functional theory, two-dimensional materials, substrates, aluminium

**Supervisor:** Igor Lukačević, Ph.D.

**Reviewers:**

**Thesis accepted:**



# Uvod

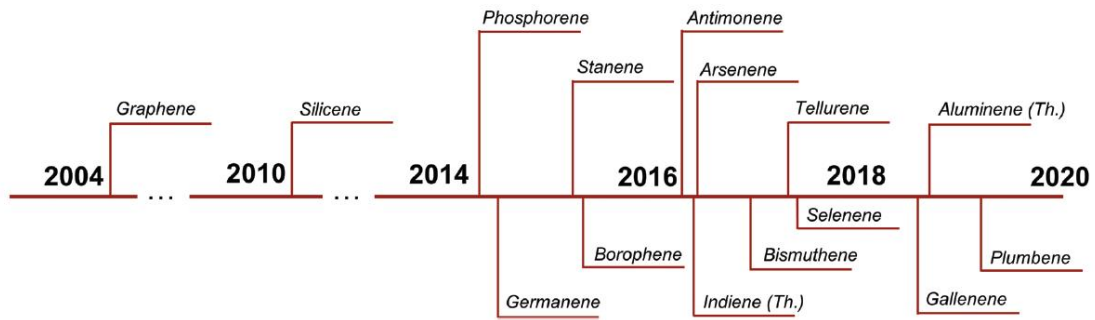
Nova era istraživanja 2D materijala počela je nakon otkrića grafena i od 2010. godine doživljava svoj procvat<sup>[1]</sup>. Mnogi dvodimenzionalni materijali imaju širok spektar korisnih svojstava, a na osnovu njih možemo dobiti informacije o mogućnostima njihove primjene i sinteze. Područja primjena obuhvaćaju kemijske, optičke, toplinske i elektromagnetske procese. Sinteza i eksperimentalna realizacija silicena i borofena dala je veliku motivaciju za pronalazak novih elemenata sa sličnim svojstvima<sup>[2]</sup>.

Međutim, svojstva ne ovise samo o kemijskim predispozicijama određenih elemenata, nego i o tome kako su njihovi atomi posloženi u kristalnoj rešetki. Mnogobrojnim pokusima je utvrđeno da pojedini jednoelementalni 2D materijali imaju više stabilnih alotropskih modifikacija<sup>[3]</sup>. Teorijsku pretpostavku pojedinih alotropskih modifikacija aluminena<sup>[4]</sup> i borofena<sup>[5]</sup> već imamo, a to je istraživačima dobra podloga za daljnja istraživanja.

Dvodimenzionalne jednoelementalne strukture mijenjaju tok istraživanja u području znanosti o materijalima, a njihova svojstva mogu doprinjeti razvoju moderne elektronike u kojoj su već svoju dominaciju pokazali silicij i germanij<sup>[6]</sup>. Njihovi jednosloji obećavaju kao moguća nova generacija materijala.

2D metali pokazali su da uz pojedine supstrate, kao što su Ir (111) i Si (111), tvore poznate strukture<sup>[7]</sup>. Isto tako, novija istraživanja pokazuju da osim čvrstih struktura, možemo predvidjeti moguće postojanje i 2D fluida kao što su Cu, Ag i Pt<sup>[8]</sup>. Kao jedan od važnijih faktora upotrebe tih materijala je mogući prijelaz od metalnih vodiča do poluvodiča uz smanjeni broj slojeva, a samim time optičkih i elektroničkih svojstava<sup>[9]</sup>.

Kada sa stajališta kvantne mehanike gledamo na materijale, oni nisu ništa drugo nego komplicirani sustav jezgri i elektrona. Koristeći fizikalne i matematičke metode uključene u računalne softvere želimo opisati i predvidjeti njihova svojstva.



Slika 1. Shematski prikaz vremenske crte eksperimentalnog ostvarenja 2D materijala nakon otkrića grafena. [2]

Ovaj rad temeljen je na teoriji funkcionala gustoće (DFT) koja nam opisuje strukturu i svojstva čestica na mikroskopskoj skali. Ako pogledamo samo 2002. godinu, možemo vidjeti kako je u prosjeku svaka dva sata izlazio po jedan članak u kojem je korištena teorija funkcionala gustoće<sup>[10]</sup>. Od tada, teorija se sve više koristi i dovodi do novih spoznaja u različitim područjima. Danas možemo reći kako se godišnje objavi oko 15,000 članaka čiji su rezultati utemeljeni kroz istraživanja putem teorije funkcionala gustoće<sup>[10]</sup>. Najveći napredak ostvaren je u proteklih 30ak godina. Teorija funkcionala gustoće (DFT) jedna je od najpopularnijih i najefikasnijih pristupa razumijevanju materije i kao takva je izuzetno uspješna u rješavanju problema sustava s više elektrona. Kako je rješavanje Schrödingerove jednadžbe za strukture s velikim stupnjevima slobode nepraktično, koristimo teoriju funkcionala gustoće (DFT) kao metodu pretpostavke.

U ovom radu napravljena je relaksacija tri strukture aluminena (ravninska saćasta, svijena saćasta i ravninska trokutasta) na odabranim supstratima (Cu, Ag, Au, Ge, PdTe<sub>2</sub>, Pt i Ir). Nakon relaksacije uočeno je da supstrati s plošno centriranom kubnom rešetkom, kao što su Cu, Ag, Pt, Ir i Au (uz izuzetak svijene saćaste strukture), mogu poslužiti kao supstrati u sve tri strukture, gdje aluminen nakon relaksacije postaje ravninski saćast. Kod Ge i PdTe<sub>2</sub> čija je kristalna struktura plošno centrirana dijamentna rešetka, događa se da nakon relaksacije aluminen u sve tri predložene strukture postane svijeni saćasti.

# Poglavlje 1

## Teorijski dio

### 1.1. Schrödingerova jednačba

Temeljna ideja prilikom rješavanja Schrödingerove jednačbe s više čestica, sastoji se u tome da valnu funkciju s više elektrona zamijenimo jednostavnijom, koja nam prikazuje osnovno stanje. Preciznije, svodimo sustav N-čestica na jednočestične probleme i tražimo prikladno približno rješenje. Materijale možemo predložiti kao sustave s velikim brojem jezgri i elektrona, s time da imamo na umu da između čestica djeluje Coulombova sila. Između elektrona djelovat će odbojna električna sila, to će se isto dogoditi i s parom jezgri, dok će privlačna električna sila djelovati između elektrona i jezgri.

Pripadne energije za elektrone iznose:

$$E_{ee} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ee}}. \quad (1.1.1)$$

Naboj elektrona prikazan je s  $q$ , permitivnost vakuuma je  $\epsilon_0 = 8,8452 \cdot 10^{-12} C^2/Nm^2$ , a s  $r_{ee}$  označili smo udaljenost između elektrona.

Slično možemo pisati za energije između dvije jezgre te između elektrona i jezgre, uzimajući u obzir protonski (atomski) broj  $Z$ :

$$E_{jj} = \frac{Z^2 q^2}{4\pi\epsilon_0 r_{jj}}, \quad (1.1.2)$$

$$E_{ej} = -\frac{Zq^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ej}}. \quad (1.1.3)$$

Zahvaljujući Louisu de Brogliu i njegovoj tezi da se česticama pridruže i valna svojstva, elektrone, pa i sve čestice, možemo opisati putem valne funkcije  $\psi(\mathbf{r})$ , gdje je  $\mathbf{r}$  vektor položaja čestice.

Ograničit ćemo se na promatranje stacionarnih stanja elektrona gdje nećemo uzeti u obzir vremensku komponentu Schrödingerove jednadžbe. Vremenski neovisna Schrödingerova jednadžba predstavljena je u obliku:

$$H\psi = E\psi. \quad (1.1.4)$$

gdje je hamiltonijan  $H$  jednak zbroju kinetičke i potencijalne energije, dok je  $E$  svojstvena vrijednost (energija) hamiltonijana za stanje opisano valnom funkcijom  $\psi$ .

Schrödingerova jednadžba za jedan elektron u potencijalu  $V(r)$  prikazana je kao:

$$\left[ \frac{p^2}{2m_e} + V(r) \right] \psi(r) = E\psi(r). \quad (1.1.5)$$

u gornjoj jednadžbi  $m_e$  predstavlja masu elektrona, a  $p$  je operator količine gibanja.

Poznato nam je da sustav u osnovnom stanju ima najnižu energijsku vrijednost, pa možemo jednadžbi (1.1.5) kao rješenje dodijeliti vrijednost valne funkcije  $\psi_0$ , tj. elektron se nalazi točno u stanju  $\psi_0$ . Kažemo da je to valna funkcija elektrona u osnovnom stanju.

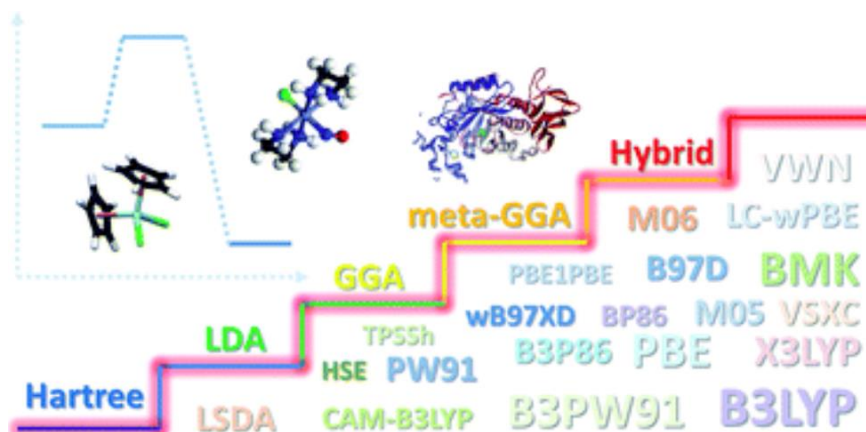
Krenut ćemo prema simulaciji sustava s više čestica, tako da u sustav koji smo do sada prikazivali dodamo još jedan elektron. Za to vrijeme, moramo uzeti u obzir da zbog Paulijevog principa isključenja pazimo da dodani elektron ima drugačiji spin od prvoga, odnosno da ta dva elektrona nemaju isto svojstveno stanje  $\psi_0$ . U prvom slučaju, sustavu s jednim elektronom, gustoća vjerojatnosti mogla je biti prikazana kao  $|\psi_0(\mathbf{r})|^2$ , dok ju sada u sustavu s dva elektrona bez njihovog međudjelovanja možemo pisati kao  $|\psi_0(\mathbf{r}_1)|^2 \cdot |\psi_0(\mathbf{r}_2)|^2$ . No u slučaju sustava dva elektrona koja međudjeluju, moramo uzeti u obzir i Coulombovu odbojnu električnu silu između dva elektrona, a ona će imati utjecaja na potencijal  $V$  i valnu funkciju elektrona u osnovnom stanju,  $\psi_0$ . Zbog nemogućnosti egzaktnog rješavanja takvog sustava jednadžbi i nepraktičnih približnih metoda rješavanja, moramo pronaći bolju teoriju s kojom možemo opisati sustav s više elektrona.

## 1.2. Teorija funkcionala gustoće

Teorija funkcionala gustoće trenutno je najpopularnija i najuspješnija metoda pomoću koje dolazimo do novih saznanja o svojstvima i ponašanjima atoma i molekula. Uspješna je iz nekoliko razloga, kao što su univerzalnost, jednostavnost i pouzdanost. Do sada smo se imali prilike upoznati sa Schrödingerovom jednačbom, a od sada preko teorije funkcionala gustoće prelazimo na njenu primjenu. Metodu specijalizira sve više fizičara i kemičara kako bi bili uspješni u istraživanju na polju materijala i kemijskog inženjeringa. Prilikom upoznavanja s teorijom funkcionala gustoće nije nam od posebne važnosti shvatiti svaki dio teorije ukoliko je želimo upotrebljavati za svoje izračune, međutim, ukoliko bismo ju željeli unaprijediti onda bismo morali potanko precizirati i razumijeti svaki njen dio.

Teorija se rodila 1964. godine kada su P. Hohenberg i W. Kohn objavili svoj rad u časopisu „Physical review“ pod nazivom „Nehomogeni elektronski plin“<sup>[10]</sup>. Od tada, pa sve do danas, bilo je mnogo znanstvenika koji su teoriju unaprijeđivali i učinili ju privlačnom i uspješnom u području istraživanja nanostrukture.

Kao aproksimacije funkcionala izmjene i gustoće najčešće su korištene LDA (eng. *Local Density Approximation*) i GGA (eng. *General Gradient Approximation*). Princip LDA je promatranje tvari kao homogenog plina elektrona uz poznavanje gustoće u pojedinoj točki, a kako je svaki sustav nehomogen, koristimo GGA koji će nam dati informaciju o brzini varijacije funkcionala. Danas uz LDA i GGA postoje mnogobrojni funkcionali koji poboljšavaju preciznost rezultata za različita svojstva (slika 2).



Slika 2. Shematski prikaz funkcionala izmjene i korelacije. [11]

Korištenjem teorije nećemo dobiti egzaktnih podataka i rezultate u svakom izabranom slučaju, ali ona i dalje predstavlja najsofisticiraniju metodu koja nam je dostupna.

### 1.2.1. Hohenberg-Kohn teorem

Hohenberg i Kohn su kroz dva teorema napravili poveznicu između energije osnovnog stanja iz Schrödingerove jednadžbe i gustoće elektrona te kako ju pronaći.

**Teorem I:** Energija osnovnog stanja iz Schrödingerove jednadžbe jedinstveni je funkcional gustoće elektrona.

**Teorem II:** Gustoća elektrona koja minimizira energiju cjelokupnog funkcionala je ona gustoća elektrona koja odgovara potpunom rješenju Schrödingerove jednadžbe.

Dokaz može biti prikazan kroz tri premise:

1. U svojem osnovnom stanju gustoća elektrona određuje vanjski potencijal jezgre,  $V_n$ , tj.  $n \rightarrow V_n$ .
2. U bilo kojem kvantnom stanju vanjski potencijal jedinstveno određuje valnu funkciju više elektrona,  $V_n \rightarrow \Psi$ .
3. U bilo kojem kvantnom stanju ukupna energija je funkcional valne funkcije više čestica,  $\Psi \rightarrow E$ .

Iz prikazanih premisa možemo zaključiti kako ukupna energija mora biti funkcional gustoće, što pišemo kao:

$$E = F[n]. \quad (1.2.1)$$

## 1.2.2. Kohn-Shamove jednađbe

Kohn-Shamove jednađbe<sup>[10]</sup> dolaze kao nadogradnja Hohenberg-Kohn teoremu. Kohn i Sham pojednostavnili su problem međusobnog djelovanja većeg broja elektrona tako da su ih promatrali kao čestice koje međusobno ne djeluju, ali se nalaze u efektivnom potencijalu. Na taj način, pružili su prikladne jednađbe sustava s jednom česticom koja se može riješiti. Dakle, dobili smo predstavu više-čestičnog susatava kao sustava s jednom česticom.

Funkcional dobiven u prethodnom teoremu možemo napisati kao:

$$F[n] = \int dr n(r) V_n(r) + \langle \Psi[n] | T + W | \Psi[n] \rangle. \quad (1.2.2)$$

gdje smo s  $T$  označili kinetičku, a s  $W$  Coulombovu energiju. Cilj je razjediniti kinetičku i Coulombovu energiju na energije koje posjeduju nezavisni elektroni i dobiti dio vezan uz razliku koji se naziva energija izmjene i korelacije:

$$E = \int dr n(r) V_n(r) - \sum_i \int dr \Phi_i^*(r) \frac{\nabla^2}{2} \Phi_i(r) + \frac{1}{2} \iint dr dr' \frac{n(r)n(r')}{|r - r'|} + E_{xc}[n]. \quad (1.2.3)$$

Gornja jednađba ima četiri člana. Prvi član, s lijeva na desno, predstavlja vanjski potencijal, drugi kinetičku energiju, treći Hartreejevu energiju, a zadnji član je energija izmjene i korelacije. Sve ono što ne znamo nalazi se u energiji izmjene i korelacije. U trenutku kada nam je ona poznata, onda možemo izračunati energiju sustava u njegovom osnovnom stanju koristeći se gustoćom elektrona (vidi 1.2.1).

Gustoću elektrona možemo odrediti pomoću Hohenberg-Kohnovog varijacijskog principa, nakon čega dobivamo izraz za potencijal izmjene i korelacije:

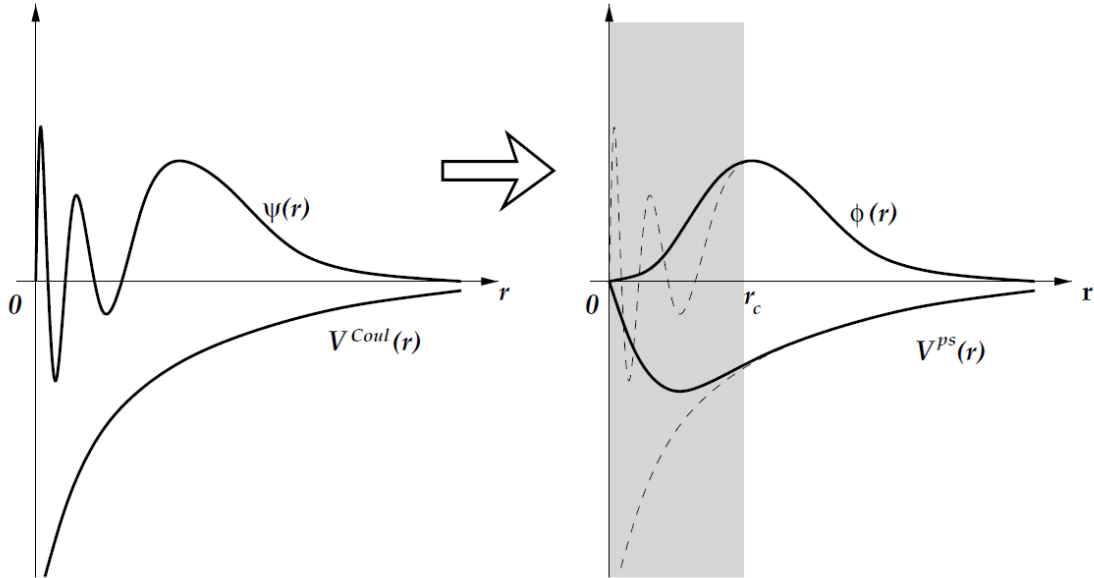
$$V_{xc}(r) = \left. \frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n} \right|_{n(r)}. \quad (1.2.4)$$

Kako bi smo pronašli egzaktnu vrijednost funkcionala i tako dobili informacije o energiji i gustoći u osnovnom stanju, koristimo se dalje aproksimacijama od koji je bitno spomenuti veliku praktičnu uspješnost koju postižu aproksimacija lokalne gustoće i aproksimacija poopćenih gradijenata.

### 1.2.3. Pseudopotencijali

Detaljnim proučavanjem elektrona u atomu zaključujemo da ih možemo podijeliti na dvije „vrste“. Jedni su oni koji se nalaze bliže jezgri, a drugi su na većim udaljenostima i slabije su vezani, koje zovemo valentnim elektronima. Ukoliko promatramo neku kemijsku reakciju (kao što je npr. stvaranje kemijskih veza), vidjet ćemo da glavnu ulogu preuzimaju valentni elektroni, dok oni bliže jezgri nisu fizikalno značajni tijekom procesa. Kako bismo dobili što točniju valnu funkciju moramo uzeti u obzir sve elektrone, što nam valnu funkciju čini iznimno kompleksnom. Upravo zbog toga, koristimo pseudopotencijale. U tom slučaju, u obzir uzimamo samo valentne elektrone, dok njihovu interakciju s jezgrom i elektronima bliže jezgri zamijenimo s efektivnim ionskim potencijalom (slika 3). Kao rezultat dobivamo pseudo valnu funkciju koja će zamijeniti valnu funkciju svih elektrona. Ona će dovoljno dobro opisati područje oko neke točke koja je udaljena od jezgre i time dati pouzdan prikaz fizikalnih svojstava i reakcija koje se odvijaju između atoma. Zbog intenzivnog osciliranja pseudopotencijala oko jezgre, koriste se mekani („soft“) pseudopotencijali s kojim je taj problem uklonjen, no zauzvrat dobivamo manje informacija o valnim funkcijama elektrona koji se nalaze bliže jezgi.





Slika 3. Grafički prikaz konstrukcije pseudo valne funkcije  $\phi(r)$  i pseudopotencijala  $V^{PS}(r)$ . Početna valna funkcija označena je s  $\psi(r)$  i Coulombov potencijal s  $V^{Coul}(r)$ . S  $r_c$  označen je radijus nakon kojeg se vrijednosti početne i pseudo-valne funkcije podudaraju („cut off“). [12]

Svi pseudopotencijali korišteni prilikom računa preuzeti su s PesudoDOJO servera<sup>[13]</sup>.

### 1.3. Dvodimenzionalne (2D) kristalne strukture

U ovom radu proučavali smo tri alotropske modifikacije aluminena (ravninski saćasti, svijeni saćasti i ravninski trokutasti), zajedno s određenim metalima kao supstratima za koje se pretpostavlja da bi se koristili prilikom sintetiziranja.

#### 1.3.1. Ravninska saćasta

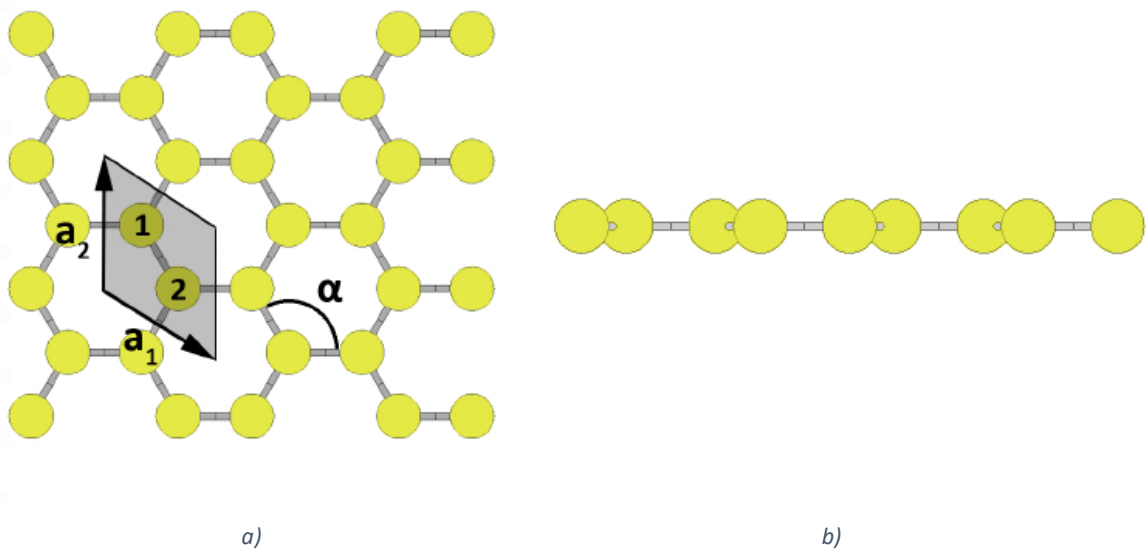
Grafen ima strukturu dvodimenzionalnog ugljika i njegova mreža je heksagonalne simetrije. Takvu strukturu zovemo još i ravninska saćasta (eng. *planar hexagonal*), a prostorna grupa joj je  $R\bar{3}m$ . Jedinične ćelije definiramo preko jediničnih vektora, a u našem slučaju imamo tri nekomplementarna vektora koji čine bridove ćelije:  $a_1$ ,  $a_2$  i  $a_3$ . Kako bismo dobili našu kristalnu strukturu, moramo jediničnu ćeliju beskonačno ponavljati u prostoru.

Kod ravninske sačaste strukture Bravaisova rešetka sastavljena je od dva atoma koji čine osnovu kristalne rešetke (slika 4). Bravaisova rešetka predstavlja raspored određenih točaka na takav način da je okolina bilo koje izabrane točke uvijek jednaka.

Jedinični vektori dani su s:

$$\begin{aligned} a_1 &= a (1, 0, 0), \\ a_2 &= a \left( -\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0 \right), \\ a_3 &= c (0, 0, 1). \end{aligned} \tag{1.3.1}$$

U jednakostima (1.3.1),  $a$  je konstanta rešetke, dok je  $c$  visina jedinične ćelije. Visinu  $c$  moramo zadati iako se radi o dvodimenzionalnoj rešetki (slika 4), jer želimo spriječiti međudjelovanje između periodičnih slika ćelije u  $z$ -smjeru. Iz iskustva je poznato da je visina vakuma od 20-ak angstrema dovoljna da tog međudjelovanja nema.



Slika 4. a) Ravninska sačasta struktura prikaza od gore. Jedinični vektori su  $a_1$  i  $a_2$ . Sivim je označena jedinična ćelija,  $\alpha$  je kut između veza. b) Ravninska sačasta struktura prikazana bočno. [14]

Na slici 4 su atomi unutar jedinične ćelije označeni brojevima 1 i 2. Njihove položaje možemo prikazati reduciranim koordinatama:

$$\begin{aligned} \text{atom 1} &: \left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0\right), \\ \text{atom 2} &: \left(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, 0\right). \end{aligned} \tag{1.3.2}$$

Kut između atoma veza (prikazane štapićima) iznosi  $120^\circ$ . Koordinate iz jednadžbi (1.3.2) inače se uzimaju kod trigonalnih ili heksagonalnih simetrija, gdje se točke nalaze u njihovom centru.

Svaki atom okružen je s tri jednako udaljena susjedna atoma čiju udaljenost možemo računati kao:

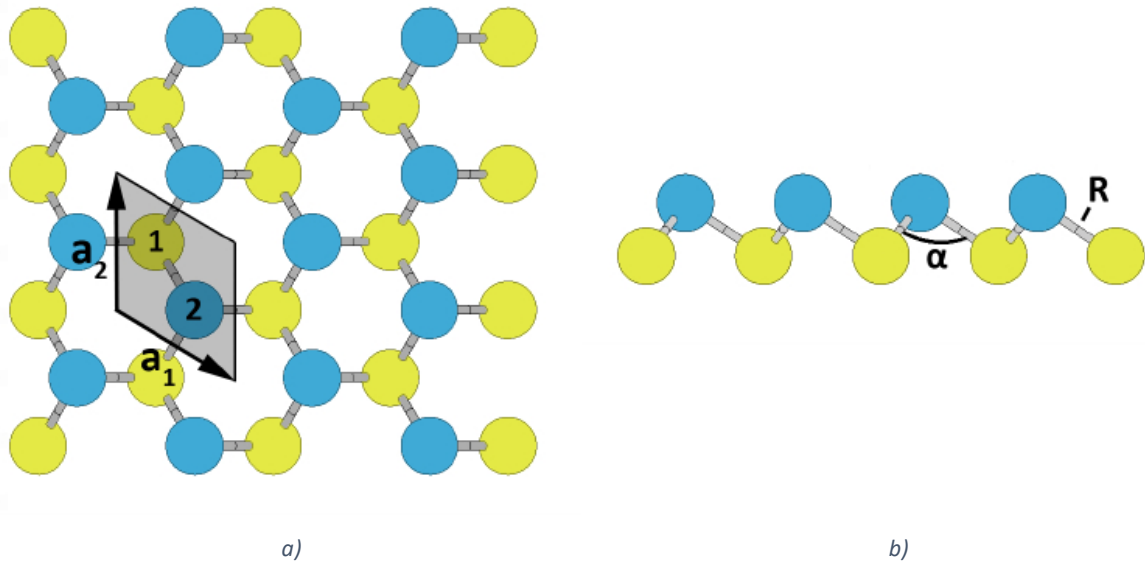
$$r = \frac{a}{\sqrt{3}}. \tag{1.3.3}$$

### 1.3.2. Svijena saćasta

Svijena saćasta struktura (eng. *buckled hexagonal*) slična je ravninskoj saćastoj uz dodatak da je jedan atom podignut na visinu  $h$  od ravnine rešetke. Dakle, radi se o heksagonalnoj strukturi prostorne grupe  $R\bar{3}m$  i s dva atoma Bravaisove rešetke.

Jedinični vektori isti su kao i kod planarne saćaste i prikazujemo ih kao:

$$\begin{aligned} a_1 &= a (1, 0, 0), \\ a_2 &= a \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0\right), \\ a_3 &= c (0, 0, 1). \end{aligned} \tag{1.3.4}$$



Slika 5. a) Svijena saćasta struktura prikazana od gore. Jedinični vektori su  $a_1$  i  $a_2$ . Plavim su označeni atomi koji se nalaze na nekoj visini  $h$  u odnosu na atome koji su iznačeni žutom bojom. Sivom bojom označena je jedinična ćelija. b) Svijena saćasta struktura prikazana bočno. Kut  $\alpha$  je kut između veza, a s  $R$  je označena udaljenost između atoma. [14]

Svaki atom okružen je još s tri atoma koji se nalaze na jednakoj udaljenosti, a reducirane koordinate izgledaju kao:

$$\begin{aligned} \text{atom 1} &: \left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0\right), \\ \text{atom 2} &: \left(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{h}{c}\right). \end{aligned} \tag{1.3.5}$$

Svijenu saćastu strukturu posjeduju na primjer još germanen<sup>[15]</sup> i silicen<sup>[16]</sup>.

### 1.3.3. Ravninska trokutasta

Ravninska trokutasta struktura (eng. *triangular*) heksagonalne je simetrije, a njena prostorna grupa je  $R\bar{3}m$ . Za razliku od ravninske saćaste i svijene saćaste, ima samo jedan atom Bravaisove rešetke. Svaki atom okružen je sa šest susjednih atoma, a svi se nalaze na udaljenosti koja je jednaka konstanti rešetke,  $r = a$ .

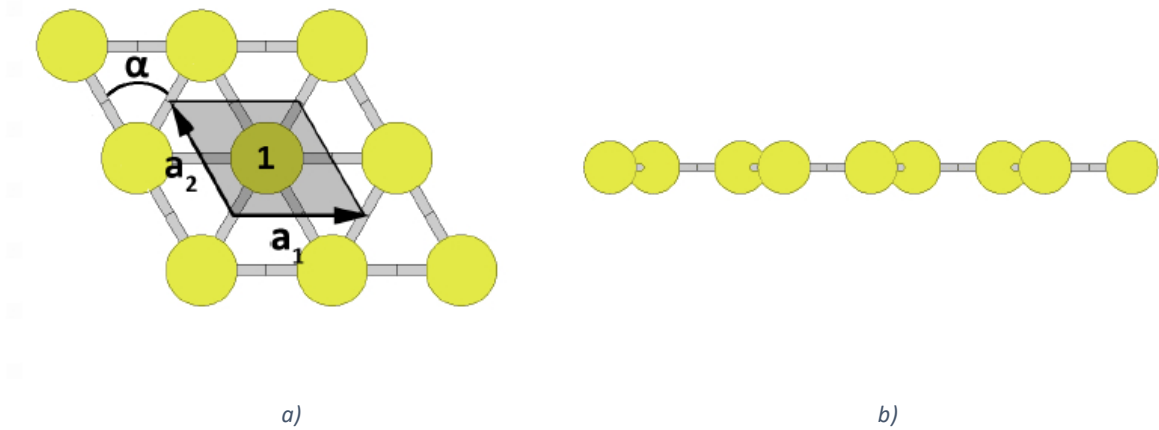
Jedinični vektori prikazani su na isti način kao i prethodne dvije strukture:

$$a_1 = a (1, 0, 0),$$

$$a_2 = a \left( -\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0 \right), \quad (1.3.6)$$

$$a_3 = c (0, 0, 1).$$

Kut između veza iznosi  $\alpha = 60^\circ$ .



Slika 6. a) Ravninska trokutasta struktura prikazana od gore. Jedinični vektori su  $a_1$  i  $a_2$ , dok je  $\alpha$  kut između veza. Sivim je označena jedinična ćelija. b) Ravninska trokutasta struktura prikazana bočno. [14]

Koordinate atoma u jediničnoj ćeliji prikazane su kao:

$$\text{atom 1} : \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0 \right). \quad (1.3.7)$$

Ravninsku trokutastu strukturu posjeduju već sintetizirani borofen<sup>[17]</sup>.

### 1.3.4. Supstrati

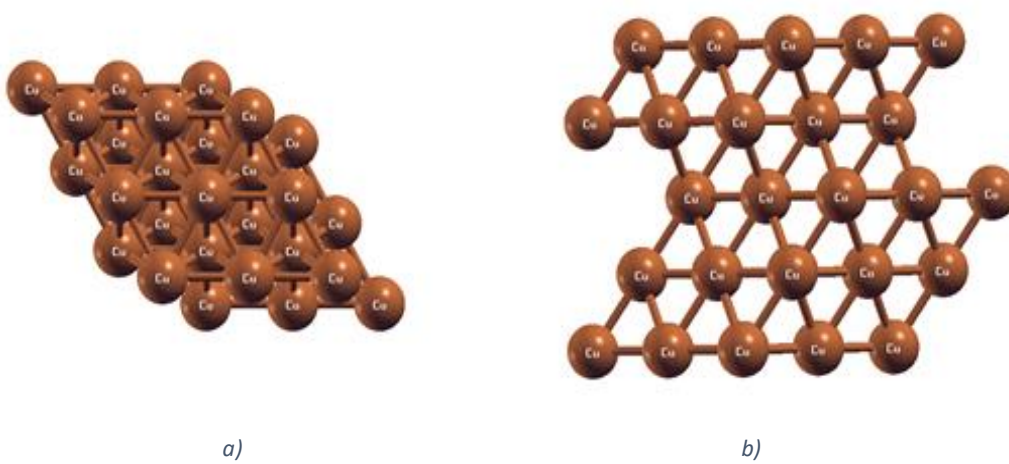
Obzirom da se jednosloj aluminijski (aluminen) ne može uspješno dobiti putem mehaničke eksfolijacije, kao što je to slučaj kod grafena (zbog toga što aluminen nema slojevitost strukturu, dok grafen ima), u ovom radu uzeli smo nekoliko pogodnih metalnih supstrata s istom kristalnom strukturom (plošno centrirana kubna rešetka) kao što su: Cu(111), Ag(111), Au(111), Ir(111), Pt(111) (slika 7), na kojima smo vršili relaksaciju sve tri alotropske modifikacije aluminena (ravninska sačasta, svijena sačasta i ravninska trokutasta). Pretpostavljamo da bi se neki od navedenih supstrata mogli koristiti pri sintezi aluminena.

Otkriveno je kako Cu(111) i grafen mogu poslužiti kao supstrati za sintezu aluminena jer su heksagonalne simetrije koje se lako mogu dobiti kao čiste površine bez nedostataka, što je dobar predložak za sintezu 2D materijala sa sačastom strukturom<sup>[11]</sup>. Interakcija između supstrata i jednosloja uzrokuje potrebno naprezanje u ravnini kako bi se stabilizirala dinamika kristalne rešetke. Namjera nam je pokazati kako morfologija supstrata utječe na konačnu strukturu aluminena te o kojim čimbenicima ovisi međudjelovanje supstrata i aluminena.

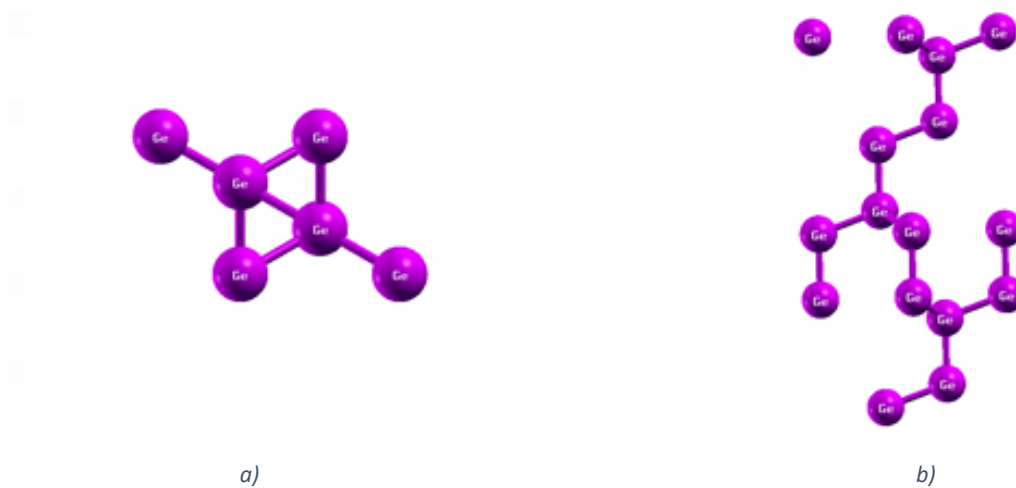
Metodom relaksacije sila (djeluju na atome) te tlaka (djeluje na stranice jednične ćelije) koja je uključena u programski paket Quantum ESPRESSO, dobivamo uvid kakva su strukturalna svojstva aluminena, kakva je konačna struktura aluminena u odnosu na supstrate i što nam to govori o fizikalno-kemijskim procesima između jednosloja i supstrata. Očekujemo i da će međudjelovanje supstrata i jednosloja uzrokovati male promjene na površini supstrata.

Zatim smo to isto napravili na površinama Ge(111) i PdTe<sub>2</sub>(111), čije su kristalne strukture drugačije. Ge(111) ima plošno centriranu dijamanatnu rešetku (slika 8), a PdTe<sub>2</sub>(111) ima prostornu grupu  $P\bar{3}m1$ , atom Pd u oktaedru je okružen sa šest atoma Te, odnosno imamo heksagonalnu prizmu. Na taj način i usporedbom željeli smo vidjeti kakav je utjecaj morfologije supstrata na strukturu aluminena. Za supstrat smo uzimali pet slojeva jer se to pokazalo dovoljnim za simulaciju površine, uz dva sloja na dnu čiji su atomi fiksirani.

Nakon toga, smanjivali smo konstantu rešetke Cu(111) i Ag(111) u koracima po 0.2 Å do vrijednosti približno jednake onoj koju ima svijeni sačasti aluminen. Takav postupak nije fizikalno ispravan, ali može poslužiti kao uvid u moguće ponašanje aluminena čija je konstanta rešetke jednaka ili slična supstratu.



Slika 7. a) Prikaz supstrata Cu(111) od gore. Atomi bakra su označeni na slici. b) Bočni prikaz supstrata Cu(111). Atomi bakra su označeni na slici.



Slika 8. a) Prikaz supstrata Ge(111) od gore. Atomi germanija su označeni na slici. b) Bočni prikaz supstrata Ge(111). Atomi germanija označeni su na slici.

# Poglavlje 2

## Rezultati

### 2.1. Relaksacija aluminena na Cu(111)

Iz tablice 1 vidimo kako ravninska saćasta struktura ( $\alpha$ ) nakon relaksacije ostaje gotovo ista kao i prije relaksacije, uz približavanje atoma aluminija i bakra (slika 9). Kod svijene saćaste strukture ( $\beta$ ) možemo primijetiti dvije udaljenosti atoma aluminija od atoma bakra, jedna je udaljenost bližeg atoma, a druga onoga koji je podignut za visinu  $h$  od ravnine (slika 9). Nakon relaksacije oba atoma dolaze na istu udaljenost od supstrata i struktura postaje ravninska saćasta ( $\alpha$ ). Kod ravninske trokutaste strukture ( $\gamma$ ) radili smo tri relaksacije za 1x1, 2x2 i 3x3 ćeliju (slika 9) gdje smo se željeli uvjeriti da će svaki oblik biti isti nakon relaksacije. Povećavanjem broja atoma po jediničnoj ćeliji ispitivali smo hoće li ono imati utjecaja na samu strukturu nakon relaksacije. Kao što možemo i vidjeti, struktura je postala identična u sva tri slučaja.

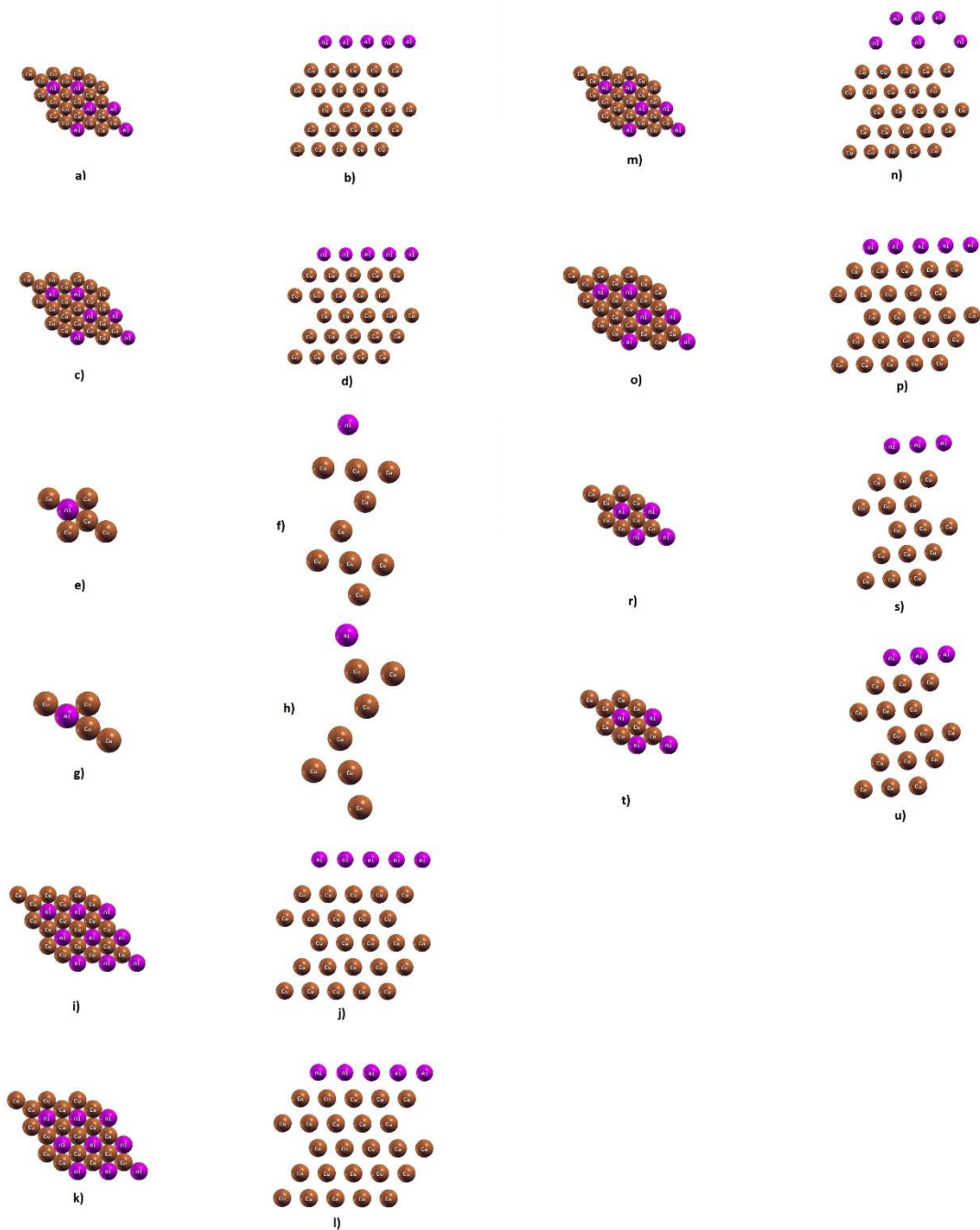
Energija kohezije ( $E_{coh}$ ) bitna je kako bismo ocijenili kakva je stabilnost određene strukture. Kako vidimo iz tablice, energija je negativna, što znači da je formiranje takve kristalne strukture dosta pogodno, za razliku od toga da atomi ostanu izolirani.

Konstanta rešetke bakra ( $a$ ) iznosi 4.42 Å.



Tablica 1. Prikazani su parametri aluminena i supstrata Cu(111) prije (p) i nakon (n) relaksacije. S  $E_{coh}(\frac{eV}{atom})$  označena je energija kohezije, konstanta rešetke označena je s  $a(\text{Å})$ ,  $d(\text{Å})$  je udaljenost između atoma koji su označeni u zagradi,  $h(\text{Å})$  je razmak između atoma slojeva,  $b(\text{Å})$  je udaljenost između slojeva atoma Al (eng. buckling height), a  $\theta(^{\circ})$  predstavlja kut između veza. Zbog jednostavnosti i ustaljene konvencije, ravninsku sačastu strukturu označili smo s  $\alpha$ , svijenu sačastu s  $\beta$ , a ravninsku trokutastu s  $\gamma$ .

Struktura	$E_{coh}$	a	b												
				$d(Al - Al)$		$d(Al - Cu)$		$d(Cu - Cu)$		$h(Cu - Cu)$		$\theta(Al)$		$\theta(Cu)$	
				p	n	p	n	p	n	p	n	p	n	p	n
$\alpha$	-0.14	4.46	0.00	2.56	2.56	3.34	2.57	2.56	2.57	2.56	2.56	120.00	120.64	120.00	120.04
$\beta$	-0.25	2.72	2.50	3.59	2.56	5.71	2.57	2.56	2.57	2.56	2.56	76.15	120.16	120.00	120.60
			0.00												
$\gamma(1x1)$	-0.16	2.56	0.00	2.56	2.56	3.34	2.62	2.56	2.56	2.56	2.56	60.00	60.00	120.00	120.00
$\gamma(2x2)$	-0.13	2.56	0.00	2.56	2.56	3.34	2.62	2.56	2.56	2.56	2.55	60.00	60.00	120.00	120.00
$\gamma(3x3)$	-0.21	2.56	0.00	2.56	2.56	3.34	2.62	2.56	2.56	2.56	2.56	60.00	60.00	120.00	120.00

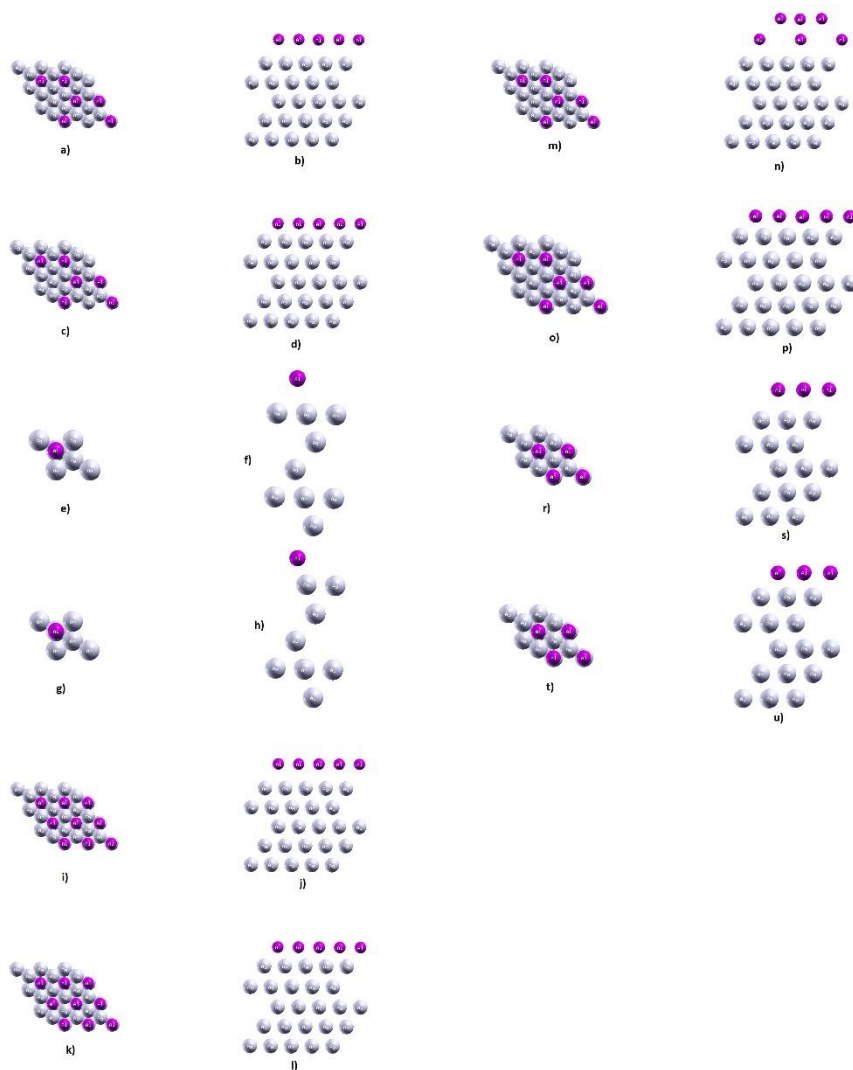


Slika 9. a) Prikaz ravninske sačaste strukture ( $\alpha$ ) od gore, prije relaksacije. b) Bočni prikaz ravninske sačaste strukture ( $\alpha$ ) prije relaksacije. c) Prikaz ravninske sačaste strukture ( $\alpha$ ) od gore, nakon relaksacije. d) Bočni prikaz ravninske sačaste strukture ( $\alpha$ ) nakon relaksacije. e) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1 \times 1)$  prije relaksacije, od gore. f) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1 \times 1)$  prije relaksacije. g) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1 \times 1)$  nakon relaksacije, od gore. h) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1 \times 1)$  nakon relaksacije. i) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3 \times 3)$  prije relaksacije, od gore. j) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3 \times 3)$  prije relaksacije. k) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3 \times 3)$  nakon relaksacije, od gore. l) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3 \times 3)$  nakon relaksacije. m) Prikaz svijene sačaste strukture ( $\beta$ ) prije relaksacije, od gore. n) Bočni prikaz svijene sačaste strukture ( $\beta$ ) prije relaksacije. o) Prikaz svijene sačaste strukture ( $\beta$ ) nakon relaksacije, od gore. p) Bočni prikaz svijene sačaste strukture ( $\beta$ ) nakon relaksacije. r) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2 \times 2)$  prije relaksacije, od gore. s) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2 \times 2)$  prije relaksacije. t) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2 \times 2)$  nakon relaksacije, od gore. u) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2 \times 2)$  nakon relaksacije.

## 2.2. Relaksacija aluminena na Ag(111)

Analogno relaksaciji aluminena na Cu(111), iz tablice 2 vidimo da sve strukture, nakon relaksacije na supstratu Ag(111), imaju parametre koji odgovaraju ravninskoj sačastoj strukturi ( $\alpha$ ).

Konstanta rešetke srebra ( $a$ ) iznosi 5.00 Å.



Slika 10. a) Prikaz ravninske sačaste strukture ( $\alpha$ ) od gore, prije relaksacije. b) Bočni prikaz ravninske sačaste strukture ( $\alpha$ ) prije relaksacije. c) Prikaz ravninske sačaste strukture ( $\alpha$ ) od gore, nakon relaksacije. d) Bočni prikaz ravninske sačaste strukture ( $\alpha$ ) nakon relaksacije. e) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1 \times 1)$  prije relaksacije, od gore. f) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1 \times 1)$  prije relaksacije. g) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1 \times 1)$  nakon relaksacije, od gore. h) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1 \times 1)$  nakon relaksacije. i) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3 \times 3)$  prije relaksacije, od gore. j) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3 \times 3)$  prije relaksacije, od gore. k) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3 \times 3)$  nakon relaksacije, od gore. l) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3 \times 3)$  nakon relaksacije. m) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2 \times 2)$  prije relaksacije, od gore. n) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2 \times 2)$  prije relaksacije, od gore. o) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2 \times 2)$  nakon relaksacije, od gore. p) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2 \times 2)$  nakon relaksacije, od gore. q) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2 \times 2)$  prije relaksacije. r) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2 \times 2)$  nakon relaksacije, od gore. s) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2 \times 2)$  prije relaksacije. t) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2 \times 2)$  nakon relaksacije, od gore. u) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2 \times 2)$  nakon relaksacije.

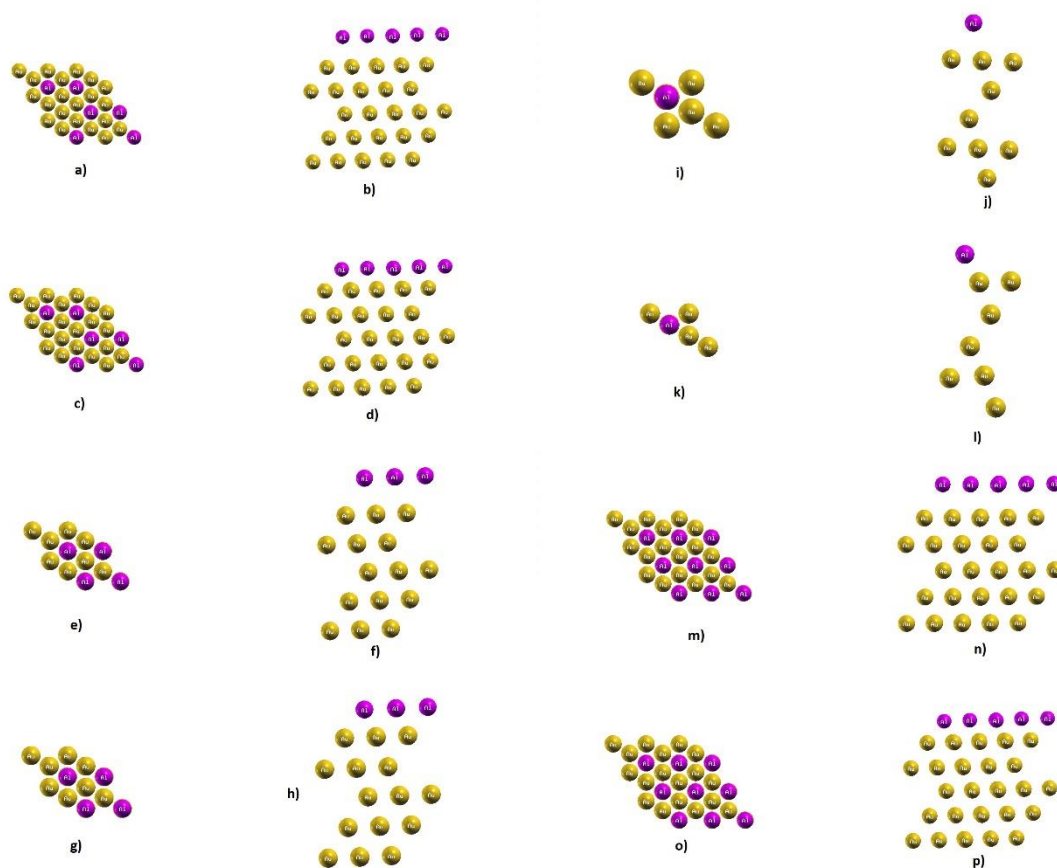
Tablica 2. Prikazani su parametri aluminena i supstrata Ag(111) prije (p) i nakon (n) relaksacije. S  $E_{coh}(\frac{eV}{atom})$  označena je energija kohezije, konstanta rešetke označena je s  $a(\text{Å})$ ,  $d(\text{Å})$  je udaljenost između atoma koji su označeni u zagradi,  $h(\text{Å})$  je razmak između atoma slojeva,  $b(\text{Å})$  je udaljenost između slojeva atoma Al (eng. buckling height), a  $\theta(^{\circ})$  predstavlja kut između veza. Zbog jednostavnosti i ustaljene konvencije, ravninsku sačastu strukturu označili smo s  $\alpha$ , svijenu sačastu s  $\beta$ , a ravninsku trokutastu s  $\gamma$ .

Struktura	$E_{coh}$	a	b												
				$d(Al - Al)$		$d(Al - Ag)$		$d(Ag - Ag)$		$h(Ag - Ag)$		$\theta(Al)$		$\theta(Ag)$	
				p	n	p	n	p	n	p	n	p	n	p	n
$\alpha$	-0.12	4.46	0.00	2.89	2.89	3.43	2.75	2.86	2.92	2.89	2.99	120.00	119.92	120.00	120.97
$\beta$	-0.23	2.72	2.52	3.83	2.89	5.77	2.76	2.89	2.92	2.89	2.99	81.49	119.83	120.00	120.93
			0.00												
$\gamma(1x1)$	-0.16	2.89	0.00	2.89	2.89	3.43	2.85	2.89	2.89	2.89	2.99	60.00	60.00	120.00	120.00
$\gamma(2x2)$	-0.14	2.89	0.00	2.89	2.89	3.43	2.85	2.89	2.89	2.89	3.00	60.00	60.00	120.00	120.00
$\gamma(3x3)$	-0.19	2.89	0.00	2.89	2.89	3.43	2.85	2.89	2.89	2.89	3.00	60.00	60.00	120.00	119.96

## 2.3. Relaksacija aluminena na Au(111)

Relaksacija svijenog saćastog aluminena ( $\beta$ ) nije konvergirala zbog velikih sila koje se javljaju između atoma, pa rezultati u tablici nisu dostupni. Ostale strukture pokazuju da nakon relaksacije postaju ravninske saćaste ( $\alpha$ ).

Konstanta rešetke ( $a$ ) zlata iznosi 4.99 Å.



Slika 11. a) Prikaz ravninske saćaste strukture ( $\alpha$ ) od gore, prije relaksacije. b) Bočni prikaz ravninske saćaste strukture ( $\alpha$ ) prije relaksacije. c) Prikaz ravninske saćaste strukture ( $\alpha$ ) od gore, nakon relaksacije. d) Bočni prikaz ravninske saćaste strukture ( $\alpha$ ) nakon relaksacije. e) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2 \times 2)$  prije relaksacije, od gore. f) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2 \times 2)$  prije relaksacije. g) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2 \times 2)$  nakon relaksacije, od gore. h) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2 \times 2)$  nakon relaksacije. i) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1 \times 1)$  prije relaksacije, od gore. j) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1 \times 1)$  prije relaksacije. k) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1 \times 1)$  nakon relaksacije, od gore. l) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1 \times 1)$  nakon relaksacije. m) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3 \times 3)$  prije relaksacije, od gore. n) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3 \times 3)$  prije relaksacije. o) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3 \times 3)$  nakon relaksacije, od gore. p) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3 \times 3)$  nakon relaksacije.

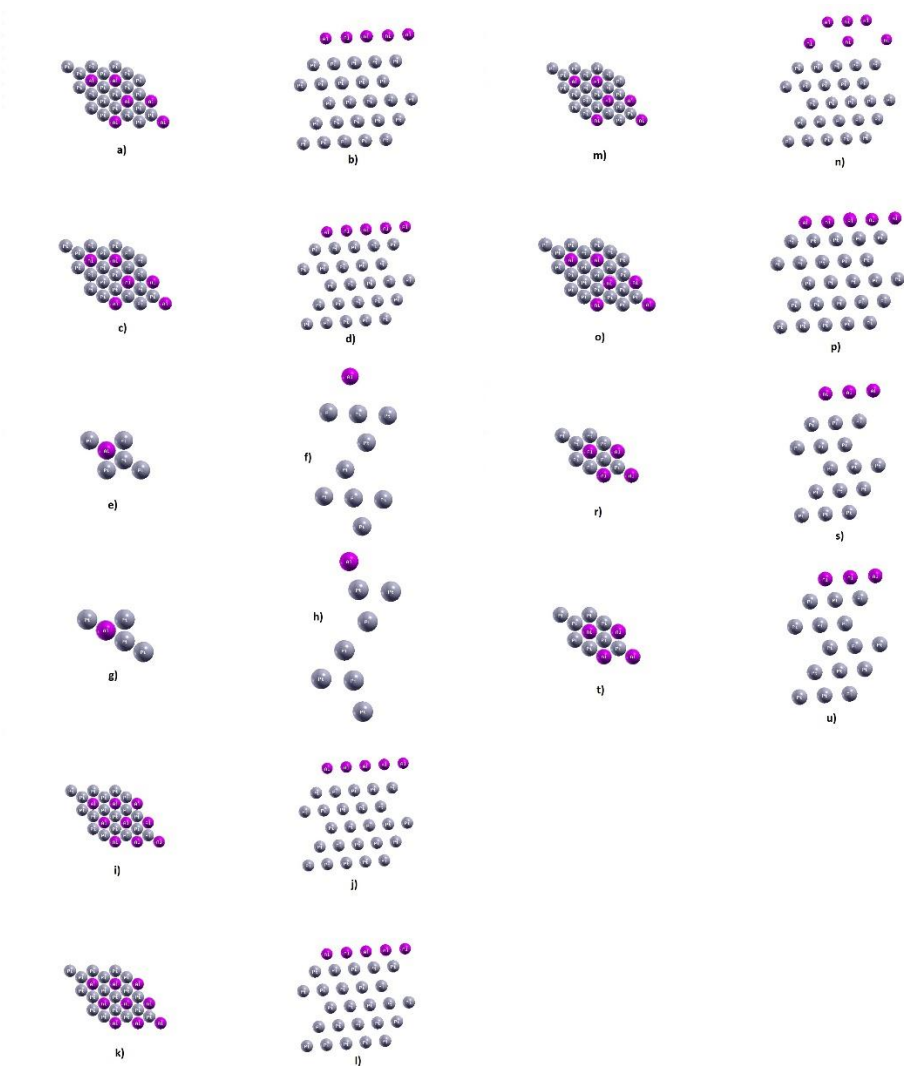
Tablica 3. Prikazani su parametri aluminena i supstrata Au(111) prije (p) i nakon (n) relaksacije. S  $E_{coh}(\frac{eV}{atom})$  označena je energija kohezije, konstanta rešetke označena je s  $a(\text{Å})$ ,  $d(\text{Å})$  je udaljenost između atoma koji su označeni u zagradi,  $h(\text{Å})$  je razmak između atoma slojeva,  $b(\text{Å})$  je udaljenost između slojeva atoma Al (eng. buckling height), a  $\theta(^{\circ})$  predstavlja kut između veza. Zbog jednostavnosti i ustaljene konvencije, ravninsku sačastu strukturu označili smo s  $\alpha$ , svijenu sačastu s  $\beta$ , a ravninsku trokutastu s  $\gamma$ .

Struktura	$E_{coh}$	a	b												
				$d(Al - Al)$		$d(Al - Au)$		$d(Au - Au)$		$h(Au - Au)$		$\theta(Al)$		$\theta(Au)$	
				p	n	p	n	p	n	p	n	p	n	p	n
$\alpha$	-0.15	4.46	0.00	2.88	2.88	3.43	2.65	2.88	2.92	2.89	2.90	120.00	119.94	120.00	121.37
$\beta$	/	/	/	/	/	/	/	/	/	/	/	/	/	/	/
$\gamma(1x1)$	-0.18	2.88	0.00	2.88	2.88	3.43	2.76	2.88	2.88	2.88	2.90	60.00	60.00	120.00	120.00
$\gamma(2x2)$	-0.18	2.88	0.00	2.88	2.88	3.43	2.76	2.88	2.88	2.89	2.92	60.00	60.00	120.00	120.00
$\gamma(3x3)$	-0.24	2.88	0.00	2.88	2.88	3.43	2.76	2.88	2.88	2.89	2.92	60.00	60.00	120.00	119.97

## 2.4. Relaksacija aluminena na Pt(111)

Iz tablice 4 vidimo da sve strukture nakon relaksacije postaju iste kao ravninska sačasta struktura ( $\alpha$ ).

Konstata rešetke ( $a$ ) platine iznosi 4.80 Å.



Slika 12. a) Prikaz ravninske sačaste strukture ( $\alpha$ ) od gore, prije relaksacije. b) Bočni prikaz ravninske sačaste strukture ( $\alpha$ ) prije relaksacije. c) Prikaz ravninske sačaste strukture ( $\alpha$ ) od gore, nakon relaksacije. d) Bočni prikaz ravninske sačaste strukture ( $\alpha$ ) nakon relaksacije. e) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1 \times 1)$  prije relaksacije, od gore. f) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1 \times 1)$  prije relaksacije. g) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1 \times 1)$  nakon relaksacije, od gore. h) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1 \times 1)$  nakon relaksacije. i) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3 \times 3)$  prije relaksacije, od gore. j) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3 \times 3)$  prije relaksacije. k) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3 \times 3)$  nakon relaksacije, od gore. l) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3 \times 3)$  nakon relaksacije. m) Prikaz svijene sačaste strukture ( $\beta$ ) prije relaksacije, od gore. n) Bočni prikaz svijene sačaste strukture ( $\beta$ ) prije relaksacije. o) Prikaz svijene sačaste strukture ( $\beta$ ) nakon relaksacije, od gore. p) Bočni prikaz svijene sačaste strukture ( $\beta$ ) nakon relaksacije. r) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2 \times 2)$  prije relaksacije, od gore. s) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2 \times 2)$  prije relaksacije. t) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2 \times 2)$  nakon relaksacije, od gore. u) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2 \times 2)$  nakon relaksacije.

Tablica 4. Prikazani su parametri aluminena i supstrata Pt(111) prije (p) i nakon (n) relaksacije. S  $E_{coh}(\frac{eV}{atom})$  označena je energija kohezije, konstanta rešetke označena je s  $a(\text{Å})$ ,  $d(\text{Å})$  je udaljenost između atoma koji su označeni u zagradi,  $h(\text{Å})$  je razmak između atoma slojeva,  $b(\text{Å})$  je udaljenost između slojeva atoma Al (eng. buckling height), a  $\theta(^{\circ})$  predstavlja kut između veza. Zbog jednostavnosti i ustaljene konvencije, ravninsku sačastu strukturu označili smo s  $\alpha$ , svijenu sačastu s  $\beta$ , a ravninsku trokutastu s  $\gamma$ .

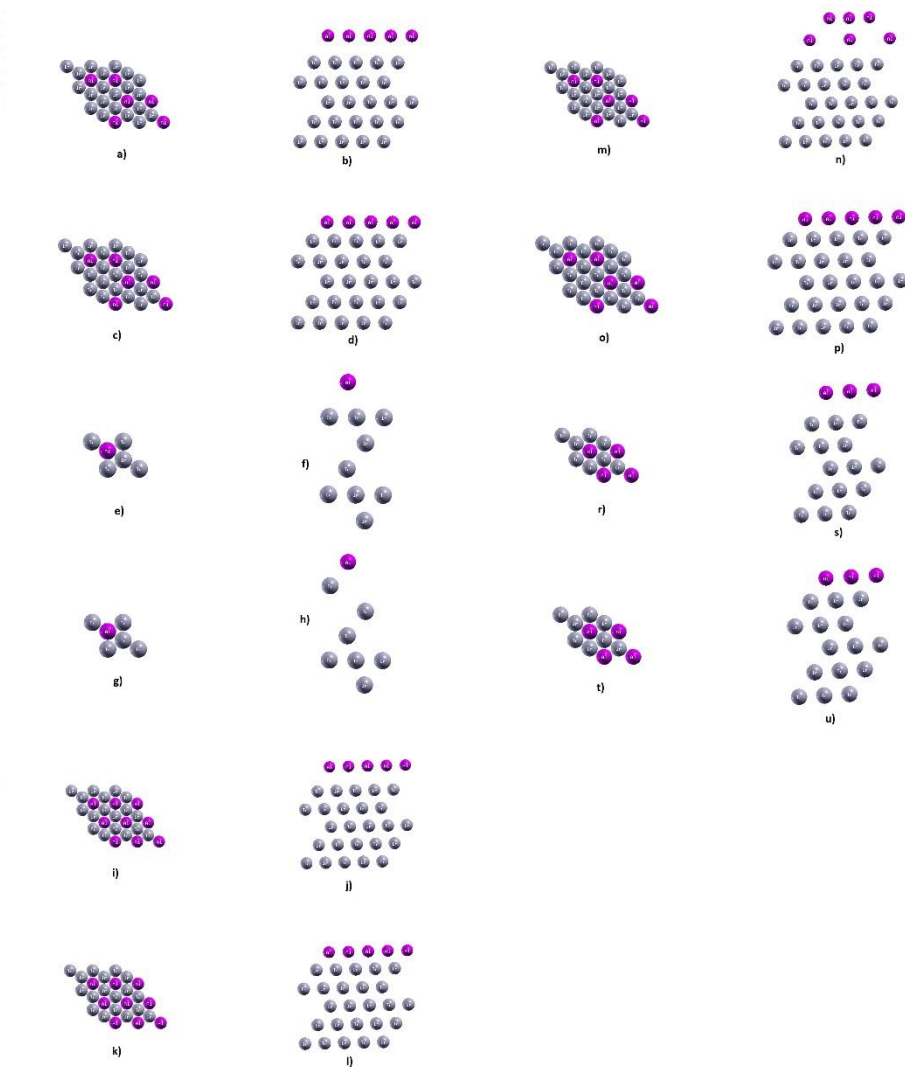
Struktura	$E_{coh}$	a	b												
				$d(Al - Al)$		$d(Al - Pt)$		$d(Pt - Pt)$		$h(Pt - Pt)$		$\theta(Al)$		$\theta(Pt)$	
				p	n	p	n	p	n	p	n	p	n	p	n
$\alpha$	-0.20	4.46	0.00	2.77	2.77	3.40	2.52	2.77	2.79	2.77	2.80	120.00	120.00	120.00	120.53
$\beta$	-0.31	2.72	2.52	3.75	2.77	5.75	2.52	2.77	2.79	2.78	2.81	79.74	119.39	120.00	120.83
			0.00												
$\gamma(1x1)$	-0.40	2.77	0.00	2.77	2.77	3.40	2.60	2.77	2.77	2.77	2.81	60.00	60.00	120.00	120.00
$\gamma(2x2)$	-0.39	2.77	0.00	2.77	2.77	3.40	2.60	2.77	2.77	2.77	2.82	60.00	60.00	120.00	120.00
$\gamma(3x3)$	-0.38	2.77	0.00	2.77	2.77	3.40	2.60	2.77	2.77	2.77	2.82	60.00	60.00	120.00	119.99



## 2.5. Relaksacija aluminena na Ir(111)

Iz tablice 5 vidimo da sve strukture nakon relaksacije postaju iste kao ravninska sačasta struktura ( $\alpha$ ).

Konstanta rešetke ( $a$ ) iridija iznosi 4.70 Å.



Slika 13. a) Prikaz ravninske sačaste strukture ( $\alpha$ ) od gore, prije relaksacije. b) Bočni prikaz ravninske sačaste strukture ( $\alpha$ ) prije relaksacije. c) Prikaz ravninske sačaste strukture ( $\alpha$ ) od gore, nakon relaksacije. d) Bočni prikaz ravninske sačaste strukture ( $\alpha$ ) nakon relaksacije. e) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1 \times 1)$  prije relaksacije, od gore. f) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1 \times 1)$  prije relaksacije. g) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1 \times 1)$  nakon relaksacije, od gore. h) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1 \times 1)$  nakon relaksacije. i) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3 \times 3)$  prije relaksacije, od gore. j) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3 \times 3)$  prije relaksacije. k) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3 \times 3)$  nakon relaksacije, od gore. l) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3 \times 3)$  nakon relaksacije. m) Prikaz svijene sačaste strukture ( $\beta$ ) prije relaksacije, od gore. n) Bočni prikaz svijene sačaste strukture ( $\beta$ ) prije relaksacije. o) Prikaz svijene sačaste strukture ( $\beta$ ) nakon relaksacije, od gore. p) Bočni prikaz svijene sačaste strukture ( $\beta$ ) nakon relaksacije. r) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2 \times 2)$  prije relaksacije, od gore. s) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2 \times 2)$  prije relaksacije. t) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2 \times 2)$  nakon relaksacije, od gore. u) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2 \times 2)$  nakon relaksacije.

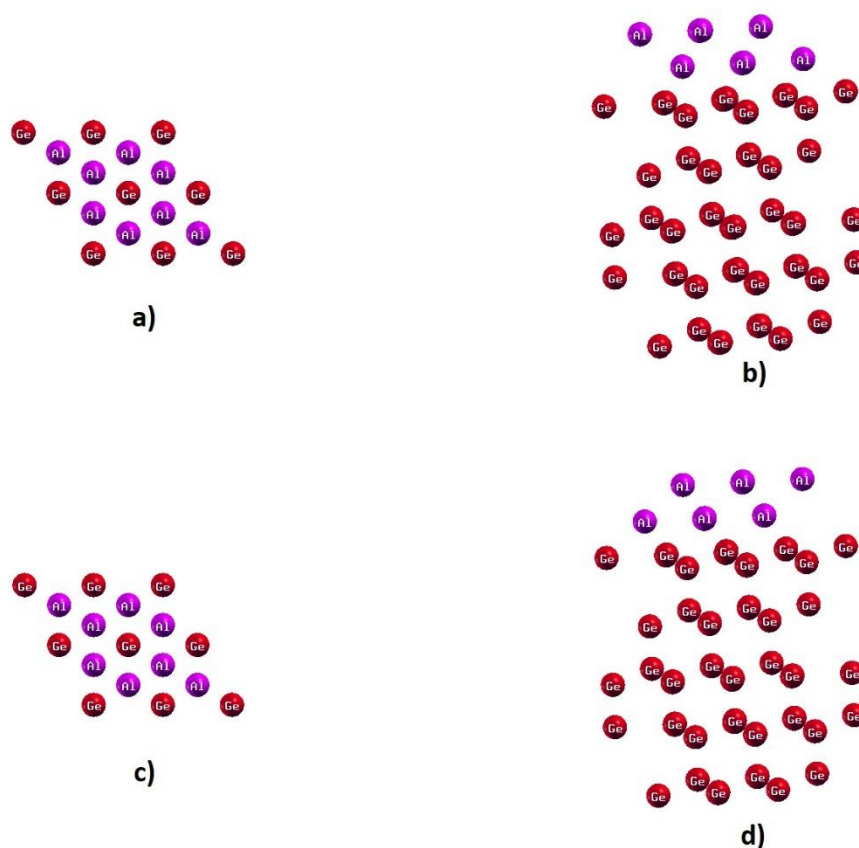
Tablica 5. Prikazani su parametri aluminena i supstrata Ir(111) prije (p) i nakon (n) relaksacije.  $S E_{coh}(\frac{eV}{atom})$  označena je energija kohezije, konstanta rešetke označena je s  $a(\text{Å})$ ,  $d(\text{Å})$  je udaljenost između atoma koji su označeni u zagradi,  $h(\text{Å})$  je razmak između atoma slojeva,  $b(\text{Å})$  je udaljenost između slojeva atoma Al (eng. buckling height), a  $\theta(^{\circ})$  predstavlja kut između veza. Zbog jednostavnosti i ustaljene konvencije, ravninsku sačastu strukturu označili smo s  $\alpha$ , svijenu sačastu s  $\beta$ , a ravninsku trokutastu s  $\gamma$ .

Struktura	$E_{coh}$	a	b												
				$d(Al - Al)$		$d(Al - Ir)$		$d(Ir - Ir)$		$h(Ir - Ir)$		$\theta(Al)$		$\theta(Ir)$	
				p	n	p	n	p	n	p	n	p	n	p	n
$\alpha$	-0.21	4.46	0.00	2.71	2.71	3.38	2.56	2.71	2.72	2.72	2.70	120.00	120.07	120.00	120.03
$\beta$	-0.32	2.72	2.52	3.70	2.72	5.74	2.56	2.71	2.72	2.72	2.70	78.79	119.98	120.00	120.04
			0.00												
$\gamma(1x1)$	-0.40	2.71	0.00	2.71	2.71	3.38	2.63	2.71	2.71	2.71	2.72	60.00	60.00	120.00	120.00
$\gamma(2x2)$	-0.39	2.71	0.00	2.71	2.71	3.38	2.63	2.71	2.71	2.71	2.72	60.00	60.00	120.00	120.00
$\gamma(3x3)$	-0.38	2.71	0.00	2.71	2.71	3.38	2.63	2.71	2.71	2.71	2.72	60.00	60.00	120.00	120.00

## 2.6. Relaksacija aluminena na Ge(111)

Iz tablice 6 možemo vidjeti kako smo svijenu sačastu strukturu razmatrali u dva slučaja, na  $\beta_1$  i  $\beta_2$ , odnosno imamo dvije svijene sačaste strukture gdje su različiti atomi aluminija podignuti na visinu  $h$  od ravnine aluminena. U prvom slučaju ( $\beta_1$ ), na visinu  $h$  podignuti su atomi aluminija koji se nalaze iznad atoma germanija, ali u drugom sloju. U drugom slučaju, ( $\beta_2$ ), situacija je obratna, odnosno na visinu  $h$  podignuti su atomi aluminija koji se nalaze iznad atoma germanija iz prvog sloja (slika 14).

Konstanta rešetke ( $a$ ) germanija iznosi  $4.06 \text{ \AA}$ .

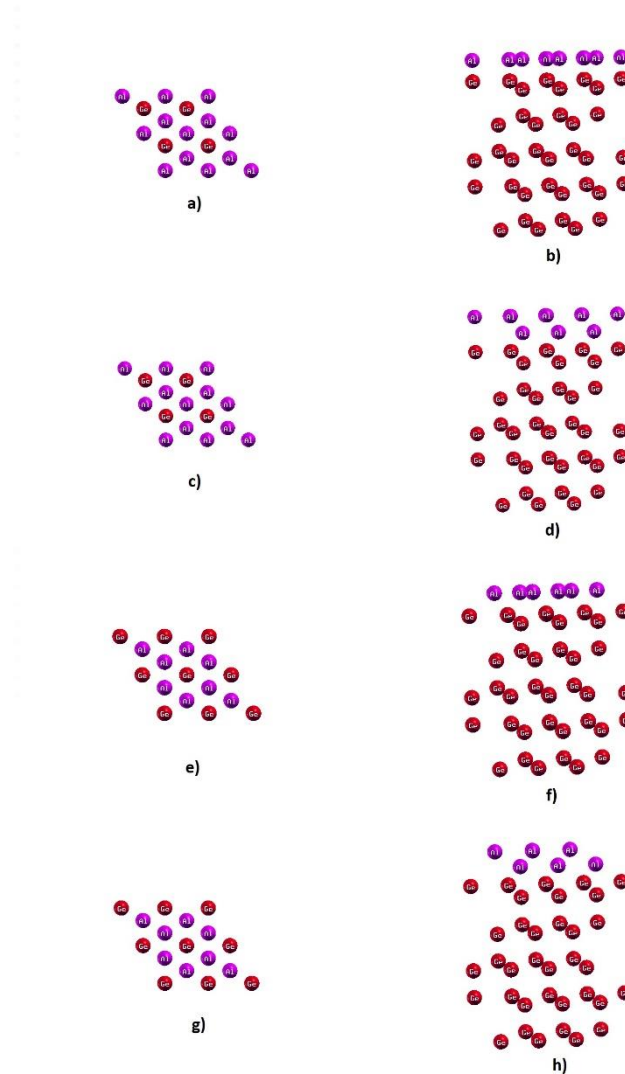


Slika 14. a) Prikaz svijene sačaste strukture  $\beta_1$  prije relaksacije, od gore. b) Bočni prikaz svijene sačaste strukture  $\beta_1$  prije relaksacije. c) Prikaz svijene sačaste strukture  $\beta_2$  prije relaksacije, od gore. d) Bočni prikaz svijene sačaste strukture  $\beta_2$  prije relaksacije.

Ravninska sačasta struktura ( $\alpha$ ) nakon relaksacije postaje svijena sačasta struktura ( $\beta$ ), koja odgovara parametrima u slučaju ( $\beta_1$ ). Svijene sačaste strukture ( $\beta_1$ ) i ( $\beta_2$ ) nakon relaksacije ostaju svijene.

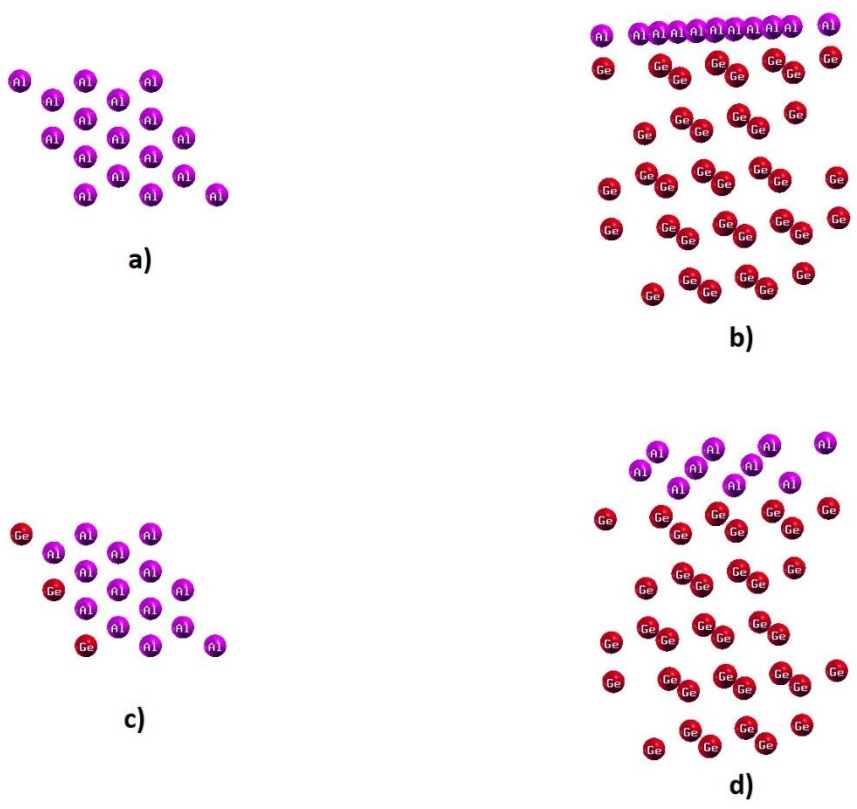
U slučaju ravninske trokutaste strukture s dva atoma aluminija, iz tablice 6 možemo vidjeti dvije situacije. U prvoj situaciji  $\gamma(1)$ , atomi aluminija postavljeni su direktno iznad atoma

germanija u prvom sloju (slika 15), dok su u drugoj situaciji  $\gamma(2)$ , atomi aluminija postavljeni iznad atoma germanija u drugom sloju (slika 15). Nakon relaksacije struktura  $\gamma(1)$  poprima parametre jednake svijenoj saćastoj strukturi ( $\beta_1$ ), a struktura  $\gamma(2)$  poprima parametre jednake svijenoj saćastoj strukturi ( $\beta_2$ ).



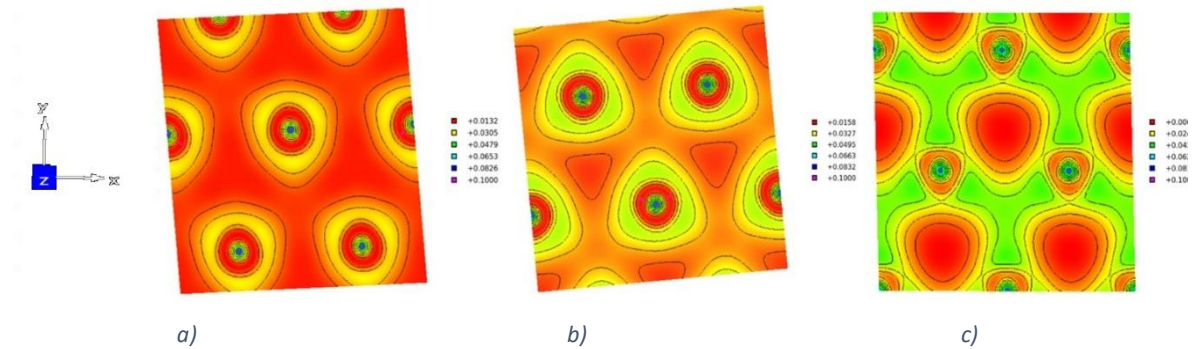
Slika 15. a) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1)$  prije relaksacije, od gore. b) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1)$  prije relaksacije. c) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1)$  nakon relaksacije, od gore. d) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1)$  nakon relaksacije. e) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2)$  prije relaksacije, od gore. f) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2)$  prije relaksacije. g) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2)$  nakon relaksacije, od gore. h) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2)$  nakon relaksacije.

Kod ravninske trokutaste strukture s tri atoma aluminija  $\gamma(3)$ , nakon relaksacije dobivamo strukturu kao što je prikazana na slici 16. Iz nje ne možemo jasno vidjeti radi li se o strukturi koja ima tri ravninska saćasta ( $\alpha$ ) ili dva svijena saćasta sloja ( $\beta$ ). Zbog toga smo morali izračunati gustoću naboja između atoma aluminija.



Slika 16. a) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3)$  prije relaksacije, od gore. b) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3)$  prije relaksacije. c) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3)$  nakon relaksacije, od gore. d) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3)$  nakon relaksacije.

Gustoću elektrona interpretiramo kao vjerojatnost da pronađemo elektrone u nekoj točki prostora, samim time možemo vidjeti postoje li veze između pojedinih atoma aluminija ili ne. Izračunali smo gustoću između atoma koji se nalaze u prvom sloju (prvi sloj do supstrata), zatim gustoću između atoma drugog (srednjeg) sloja i gustoću između atoma trećeg (gornjeg) sloja.



Slika 17. a) Prikaz gustoće naboja između atoma (Al) prvog sloja. b) Prikaz gustoće naboja između atoma (Al) drugog (srednjeg) sloja. c) Prikaz gustoće naboja između atoma (Al) trećeg sloja. Plavim točkama označeni su atomi (Al) na slikama.

Iz priloženih slika vidimo kako ne postoji veza između atoma koji se nalaze u prvom sloju, kao ni između atoma koji se nalaze u srednjem sloju. Situacija kod atoma trećeg sloja nešto je drugačija i možemo uočiti povezanost atoma. Na osnovu izračuna možemo reći kako ne postoje kemijske veze unutar donja dva sloja, odnosno, da nemamo ravninsku strukturu niti u prvom niti u drugom sloju.

Tablica 6. Prikazani su parametri aluminena i supstrata Ge(111) prije (p) i nakon (n) relaksacije. S  $E_{coh}(\frac{eV}{atom})$  označena je energija kohezije, konstanta rešetke označena je s  $a(\text{Å})$ ,  $d(\text{Å})$  je udaljenost između atoma koji su označeni u zagradi,  $h(\text{Å})$  je razmak između atoma slojeva, a  $\theta(^{\circ})$  predstavlja kut između veza. Zbog jednostavnosti i ustaljene konvencije, ravninsku sačastu strukturu označili smo s  $\alpha$ , svijenu sačastu s  $\beta$ , a ravninsku trokutastu s  $\gamma$ .

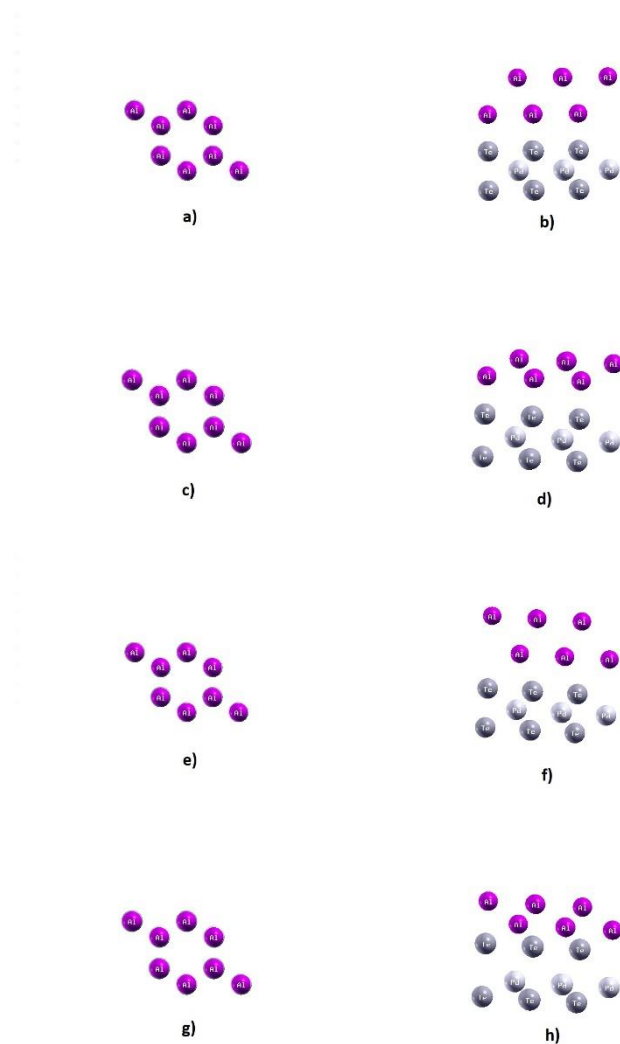
Struktura	$E_{coh}$	a												
			$d(Al - Al)$		$d(Al - Ge)$		$d(Ge - Ge)$		$h(Ge - Ge)$		$\theta(Al)$		$\theta(Ge)$	
			p	n	p	n	p	n	p	n	p	n	p	n
$\alpha$	-0.32	4.46	2.31	2.72	3.05	2.83	2.45	2.58	2.45	2.52	120.00	94.80	120.00	120.03
$\beta_1$	-0.32	2.72	3.05	2.72	4.62	2.83	2.45	2.58	2.45	2.52	81.79	94.80	120.00	120.04
$\beta_2$	-0.32	2.72	3.05	2.85	4.62	2.85	2.45	2.55	2.45	2.53	81.79	89.26	120.00	120.00
1 atom	-0.09	4.00	4.00	4.00	3.05	3.33	2.45	2.55	2.45	2.57	120.00	120.00	120.00	120.00
$\gamma(1)$	-0.32	2.31	2.31	2.72	3.05	2.85	2.45	2.58	2.45	2.52	60.00	94.80	120.00	120.00

$\gamma(2)$	-0.32	2.31	2.31	2.85	2.82	2.93	2.45	2.60	2.45	2.55	60.00	89.27	120.00	120.00
$\gamma(3)$	-0.44	2.30	2.30	2.60	2.82	2.82	2.45	2.57	2.45	2.47	60.00	100.26	120.00	120.00



## 2.7. Relaksacija aluminena na PdTe<sub>2</sub>(111)

Kao i kod površine Ge(111), tako smo i kod PdTe<sub>2</sub>(111) postavili svijene sačaste strukture ( $\beta_1$ ) i ( $\beta_2$ ) na dva različita početna položaja u odnosu na supstrat (tablica 7). U prvom slučaju ( $\beta_1$ ), na visini  $h$  postavljeni su atomi aluminija koji se nalaze iznad atoma (Pd), dok su u drugom slučaju ( $\beta_2$ ), na visini  $h$  postavljeni atomi aluminija koji se nalaze iznad atoma (Te) (slika 18). Konstanta rešetke ( $a$ ) PdTe<sub>2</sub> iznosi 4.10 Å.

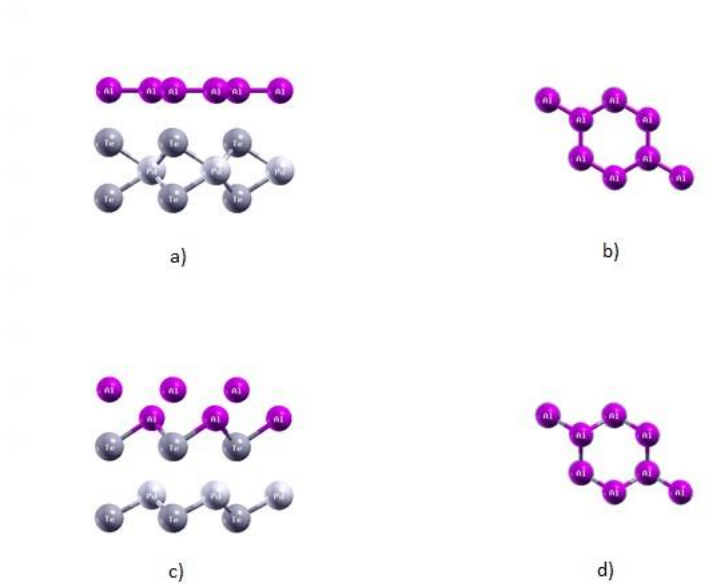


Slika 18. a) Prikaz svijene sačaste strukture  $\beta_1$  prije relaksacije, od gore. b) Bočni prikaz svijene sačaste strukture  $\beta_1$  prije relaksacije. c) Prikaz svijene sačaste strukture  $\beta_1$  nakon relaksacije, od gore. d) Bočni prikaz svijene sačaste strukture  $\beta_1$  nakon relaksacije. e) Prikaz svijene sačaste strukture  $\beta_2$  prije relaksacije, od gore. f) Bočni prikaz svijene sačaste strukture  $\beta_2$  prije relaksacije. g) Prikaz svijene sačaste strukture  $\beta_2$  nakon relaksacije, od gore. h) Bočni prikaz svijene sačaste strukture  $\beta_2$  nakon relaksacije.

Svijene saćaste strukture ( $\beta_1$ ) i ( $\beta_2$ ) nakon relaksacije ostaju svijene. Kod ( $\beta_1$ ) vidimo kako se atomi (Al) približavaju supstratu, dok se kod ( $\beta_2$ ) događa situacija analogna relaksaciji ravninske saćaste strukture. Primjećujemo približavanje atoma (Al) i (Te) (slika 18).

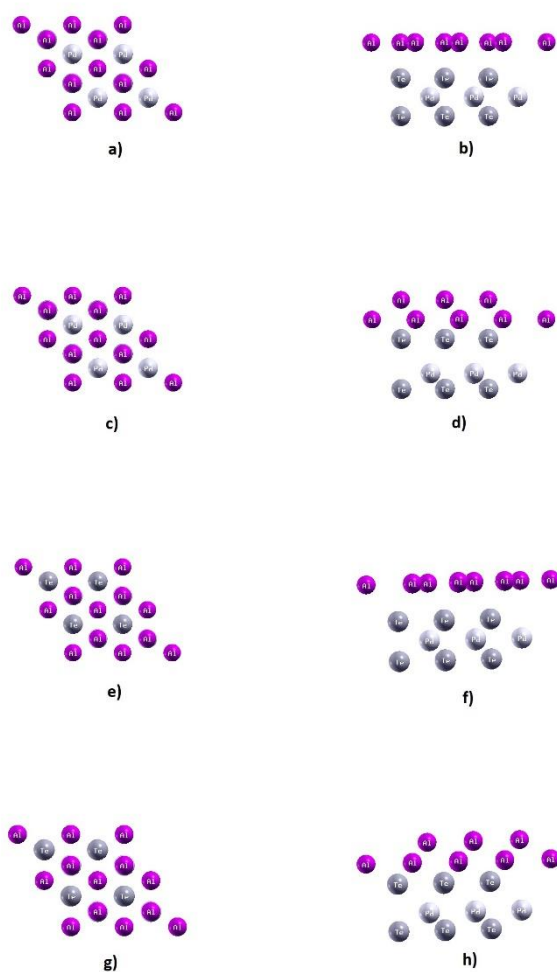
Kod postavljanja jednog atoma aluminija (iznad atoma (Te)) nakon relaksacije dobivamo da se atom (Al) udalji od supstrata i to za vrlo malu vrijednost što možemo i vidjeti iz tablice 7.

Ravninska saćasta struktura ( $\alpha$ ) nakon relaksacije postaje svijena saćasta struktura. Prema parametrima nakon relaksacije možemo primijetiti kako atom (Al), koji se nalazi iznad atoma (Te), odlazi na visinu 3.09 Å iznad ravnine uz primicanje atoma (Te), dok se atomi (Al) i (Pd) približavaju jedan drugome (slika 19).



Slika 19. a) Bočni prikaz ravninske saćaste strukture ( $\alpha$ ) prije relaksacije. b) Prikaz ravninske saćaste strukture ( $\alpha$ ) prije relaksacije, od gore. c) Bočni prikaz ravninske saćaste strukture ( $\alpha$ ) nakon relaksacije. d) Prikaz ravninske saćaste strukture ( $\alpha$ ) nakon relaksacije, od gore. Na slikama su označeni atomi aluminija (Al), paladija (Pd) i telura (Te).

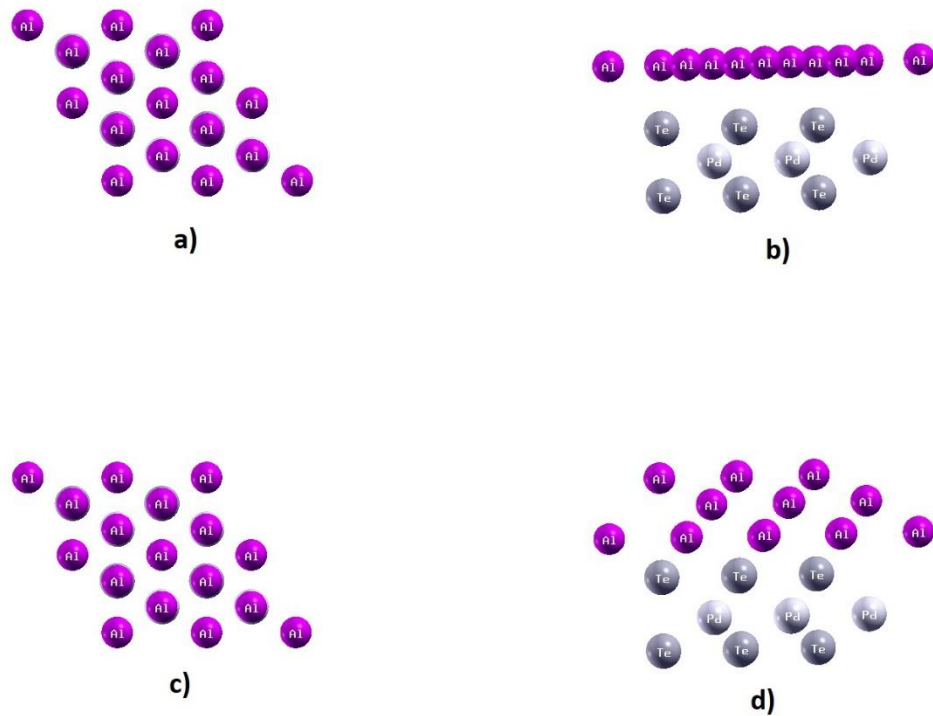
Iz tablice 7 možemo vidjeti kako smo postavljali dvije različite ravninske trokutaste strukture za dva atoma (Al). U prvoj situaciji  $\gamma(1)$ , jedan atom aluminija postavljen je iznad atoma (Te), dok se drugi nalazi u „šupljini“ u odnosu na supstrat. U drugoj situaciji  $\gamma(2)$ , jedan atom aluminija postavljen je iznad atoma (Pd), dok smo drugi postavili isto kao i u slučaju  $\gamma(1)$  (slika 20).



Slika 20. a) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1)$  prije relaksacije, od gore. b) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1)$  prije relaksacije. c) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1)$  nakon relaksacije, od gore. d) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(1)$  nakon relaksacije. e) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2)$  prije relaksacije, od gore. f) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2)$  prije relaksacije. g) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2)$  nakon relaksacije, od gore. h) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(2)$  nakon relaksacije.

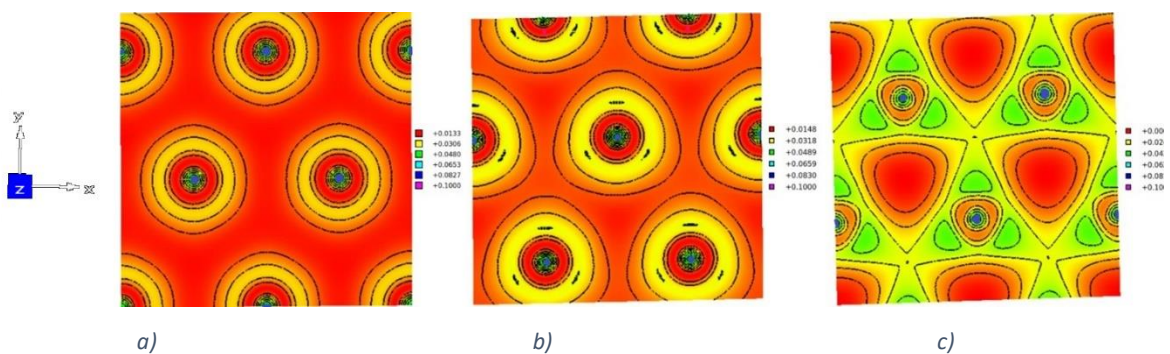
Nakon relaksacije prve strukture  $\gamma(1)$ , možemo primijetiti kako se atomi aluminija iznad atoma (Te) udaljavaju, dok se atomi aluminija koji se nalaze u „šupljinama“ i atomi (Te) međusobno približavaju. Nakon relaksacije druge strukture  $\gamma(1)$ , događa se slična situacija. Atomi aluminija iznad atoma (Pd) će se udaljavati, dok će se atomi aluminija koji se nalaze u „šupljinama“ i atomi (Te) međusobno približavati.

Ravninsku trokutastu strukturu s tri atoma aluminija,  $\gamma(3)$ , postavili smo na način da budu iznad atoma (Pd) i (Te) te u „šupljinama“ kao i u prethodnom slučaju (slika 21).



Slika 21. a) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3)$  prije relaksacije, od gore. b) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3)$  prije relaksacije. c) Prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3)$  nakon relaksacije, od gore. d) Bočni prikaz ravninske trokutaste strukture  $\gamma(3)$  nakon relaksacije.

Izračunali smo gustoću između atoma koji se nalaze u prvom sloju (prvi sloj do supstrata), zatim gustoću između atoma drugog (srednjeg) sloja i gustoću između atoma trećeg (gornjeg) sloja.



Slika 22. a) Prikaz gustoće naboja između atoma (Al) prvog sloja. b) Prikaz gustoće naboja između atoma (Al) drugog (srednjeg) sloja. c) Prikaz gustoće naboja atoma (Al) trećeg sloja. Plavim točkama označeni su atomi (Al) na slikama.

Iz priloženih slika možemo vidjeti kako ne postoje veze među atomima aluminija koji se nalaze u prvom sloju, kao ni veze među atomima drugog (srednjeg) sloja. Međutim, možemo reći kako postoje veze između atoma u trećem sloju.

Tablica 7. Prikazani su parametri aluminena i supstrata PdTe<sub>2</sub>(111) prije (p) i nakon (n) relaksacije. S  $E_{coh}(\frac{eV}{atom})$  označena je energija kohezije, konstanta rešetke označena je s  $a(\text{Å})$ ,  $d(\text{Å})$  je udaljenost između atoma koji su označeni u zagradi, a  $\theta(^{\circ})$  predstavlja kut između veza. Zbog jednostavnosti i ustaljene konvencije, ravninsku sačastu strukturu označili smo s  $\alpha$ , svijenu sačastu s  $\beta$ , a ravninsku trokutastu s  $\gamma$ .

Struktura	$E_{coh}$	a														
			$d(Al - Al)$		$d(Al - Pd)$		$d(Te - Te)$		$d(Pd - Te)$		$d(Al - Te)$		$\theta(Al)$		$\theta(PdTe_2)$	
			p	n	p	n	p	n	p	n	p	n	p	n	p	n
$\alpha$	-0.35	4.46	2.29	2.76	4.29	4.18	2.99	3.87	2.74	2.61	2.80	2.77	120.00	91.95	66.20	77.39
$\beta_1$	-0.35	2.72	3.59	2.67	7.06	5.69	2.99	3.09	2.74	2.77	2.80	2.78	66.98	96.09	66.20	68.13
$\beta_2$	-0.35	2.72	3.59	2.76	4.29	4.18	2.99	3.87	2.74	2.60	5.57	2.76	66.98	91.95	66.20	77.40
1 atom	-0.17	3.97	3.97	3.97	4.87	4.95	2.99	3.08	2.74	2.76	2.80	2.84	120.00	120.00	66.20	67.94
$\gamma(1)$	-0.35	2.29	2.29	2.77	4.87	4.85	2.99	3.09	2.74	2.59	2.80	2.76	60.00	91.66	66.20	78.07

$\gamma(2)$	-0.35	2.29	2.29	2.77	4.29	5.24	2.99	3.52	2.74	2.65	3.61	2.77	60.00	93.13	66.20	73.85
$\gamma(3)$	-0.50	2.29	2.29	2.60	4.29	5.02	2.99	3.27	2.74	2.93	2.80	2.89	60.00	99.68	66.20	70.70

## 2.8. Relaksacija aluminena na supstratu Cu(111) i Ag(111) sa smanjenom konstantom rešetke

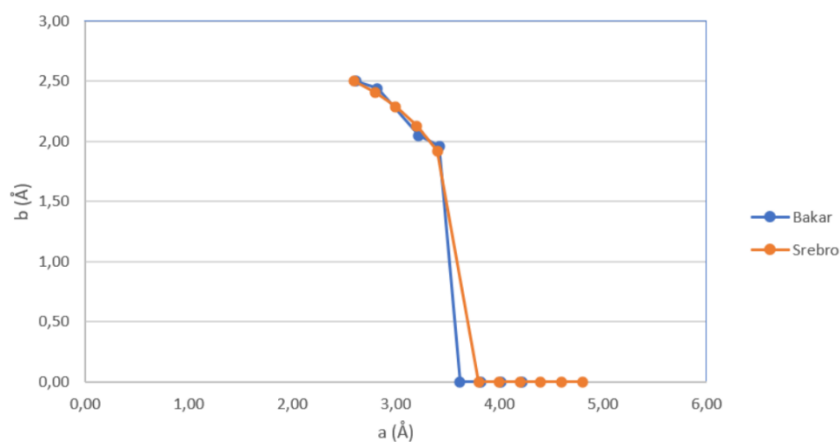
Zbog poteškoća pronalaska supstrata koji konstantom rešetke približno odgovara konstanti rešetke svijenog sačastog aluminena, smanjivali smo konstantu rešetke već korištenih supstrata, bakra i srebra. Iako to nije fizikalno korektno, poslužit će nam kao teorijska aproksimacija kako bismo mogli vidjeti što će se dogoditi sa strukturom na supstratu ravne morfologije, a konstante rešetke manje nego kod ravninske strukture aluminena. Očekujemo kako će svijeni sačasti aluminen ostati svijeni i nakon relaksacije, za konstantu rešetke supstrata koja će mu približno biti jednaka. Konstantu rešetke supstrata smanjivali smo u koracima po 0.2 Å.

Konstanta rešetke svijenog sačastog aluminena iznosi 2.72 Å. Smanjivali smo konstantu rešetke Cu(111) od 4.22 Å do 2.62 Å, dok smo u slučaju Ag(111) konstantu rešetke smanjivali od 4.80 Å do 2.60 Å.

Podaci dobiveni nakon relaksacije vidljivi su u tablici 8 i 9.

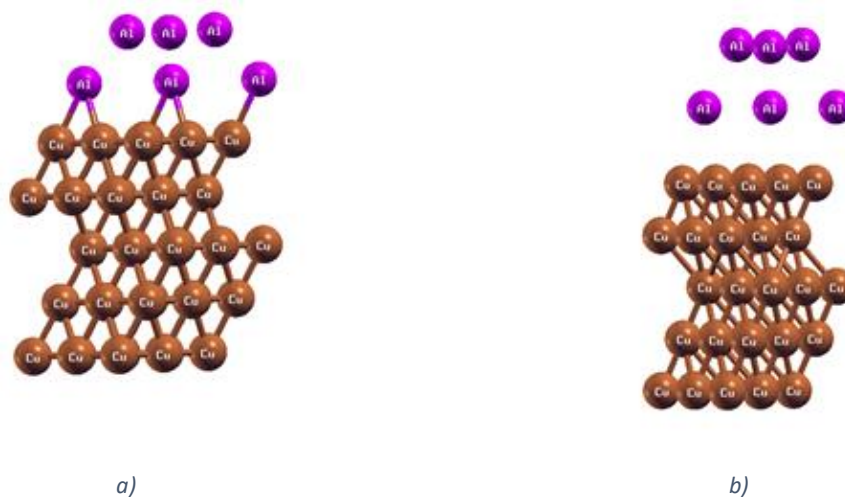
Iz tablice 8 možemo vidjeti kako struktura ostaje svijena sačasta na supstratima Cu(111) s konstantom rešetke 3.42 Å, 3.22 Å, 2.82 Å i 2.62 Å, dok račun za konstantu rešetke 3.02 Å nije konvergirao. Upravo zbog toga što smo išli po koracima od 0.2 Å možemo zamijetiti kako struktura od planarne sačaste polako postaje svijena sačasta.

Ovisnost visine svijanja (eng. *buckling height* ( $b$ )) o konstanti rešetke ( $a$ ) možemo vidjeti iz slike 23. Uočavamo kako se kod oba supstrata vrijednost ( $b$ ) povećava sa smanjivanjem konstante rešetke ( $a$ ).



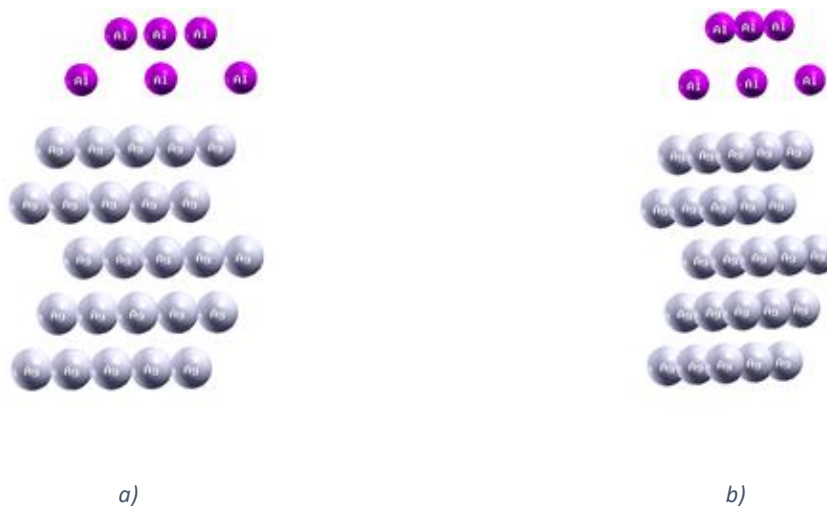
Slika 23. Grafički prikaz ovisnosti visine svijanja ( $b$ ) o konstanti rešetke ( $a$ ).





Slika 24. a) Bočni prikaz svijene sačaste strukture ( $\beta$ ) aluminena na Cu(111) kao supstratu s konstantom rešetke 3.42 Å, nakon relaksacije. b) Bočni prikaz svijene sačaste strukture ( $\beta$ ) aluminena na Cu(111) kao supstratu s konstantom rešetke 2.62 Å, nakon relaksacije. Na slikama su označeni atomi aluminija (Al) i atomi bakra (Cu).

Iz tablice 9 vidimo da kako struktura ostaje svijena sačasta pri konstanti rešetke 3.40 Å, 3.20 Å, 3.00 Å, 2.80 Å i 2.60 Å supstrata Ag(111). Isto tako, nedostupni su nam podaci za konstantu rešetke 3.60 Å, jer račun nije konvergirao.



Slika 25. a) Bočni prikaz svijene sačaste strukture ( $\beta$ ) aluminena na Ag(111) kao supstratu s konstantom rešetke 3.40 Å, nakon relaksacije. b) Bočni prikaz svijene sačaste strukture ( $\beta$ ) aluminena na Ag(111) kao supstratu s konstantom rešetke 2.60 Å, nakon relaksacije. Na slikama su označeni atomi aluminija (Al) i atomi srebra (Ag).

Tablica 8. Prikazani su parametri svijenog sačastog aluminena ( $\beta$ ) prije (p) i nakon (n) relaksacije na supstratu Cu(111). Konstanta rešetke označena je s  $a(\text{Å})$ ,  $d(\text{Å})$  je udaljenost između atoma koji su označeni u zagradi,  $h(\text{Å})$  je razmak između atoma slojeva,  $b(\text{Å})$  je udaljenost između slojeva atoma Al (eng. buckling height), a  $\theta(^{\circ})$  predstavlja kut između veza.

Supstrat	a	b													
		p		$d(\text{Al} - \text{Al})$		$d(\text{Al} - \text{Cu})$		$d(\text{Cu} - \text{Cu})$		$h(\text{Cu} - \text{Cu})$		$\theta(\text{Al})$		$\theta(\text{Cu})$	
		n	p	n	p	n	p	n	p	n	p	n	p	n	
Cu(111)	4.22	2.52	3.50	2.72	5.69	2.51	2.44	2.44	2.51	2.51	74.80	121.07	120.00	120.00	
		0.00													
	4.02	2.52	3.43	2.57	5.68	2.48	2.33	2.33	2.48	2.48	71.96	119.95	120.00	120.00	
		0.00													
	3.82	2.52	3.35	2.52	5.67	2.60	2.21	2.21	2.45	2.45	69.70	163.96	120.00	120.00	
		0.00													
	3.62	2.52	3.28	2.60	5.65	2.55	2.10	2.10	2.41	2.41	67.34	132.34	120.00	120.00	
		0.00													
	3.42	2.52	3.21	2.79	5.64	4.44	1.99	1.99	2.38	2.38	64.85	76.03	120.00	120.00	
		1.96													

	3.22	2.52	3.14	2.78	5.63	4.60	1.87	1.87	2.35	2.35	62.22	71.43	120.00	120.00	
		2.05													
	3.02	/	/	/	/	/	/	/	/	/	/	/	/	/	/
		/													
2.82	2.52	3.01	2.94	5.60	5.53	1.65	1.65	2.29	2.29	56.55	57.53	120.00	120.00		
	2.44														
2.62	2.52	2.95	2.93	5.59	5.64	1.53	1.53	2.27	2.27	53.51	53.58	120.00	120.00		
	2.50														

Tablica 9. Prikazani su parametri svijenog sačastog aluminena ( $\beta$ ) prije (p) i nakon (n) relaksacije na supstratu Ag(111). Konstanta rešetke označena je s  $a(\text{Å})$ ,  $d(\text{Å})$  je udaljenost između atoma koji su označeni u zagradi,  $h(\text{Å})$  je razmak između atoma slojeva,  $b(\text{Å})$  je udaljenost između slojeva atoma Al (eng. buckling height), a  $\theta(^{\circ})$  predstavlja kut između veza.

Supstrat	a	b												
Ag(111)		p	$d(\text{Al} - \text{Al})$		$d(\text{Al} - \text{Ag})$		$d(\text{Ag} - \text{Ag})$		$h(\text{Ag} - \text{Ag})$		$\theta(\text{Al})$		$\theta(\text{Ag})$	
		n	p	n	p	n	p	n	p	n	p	n	p	n
	4.80	2.52	3.75	2.78	5.75	2.80	2.78	2.78	2.86	2.86	79.77	119.85	120.00	120.00
		0.00												
	4.60	2.52	3.67	2.66	5.73	2.84	2.66	2.66	2.82	2.82	77.95	119.91	120.00	120.00
		0.00												
	4.40	2.52	3.58	2.83	5.71	2.63	2.55	2.55	2.79	2.79	76.03	119.81	120.00	120.00
		0.00												
	4.20	2.52	3.50	2.69	5.70	2.96	2.44	2.44	2.75	2.75	74.01	113.34	120.00	120.00
		0.00												
	4.00	2.52	3.43	2.57	5.68	2.74	2.32	2.32	2.72	2.72	71.88	119.81	120.00	120.00
		0.00												

	3.80	2.52	3.34	2.53	5.66	3.26	2.20	2.20	2.68	2.68	69.42	122.55	120.00	120.00	
		0.00													
	3.60	/	/	/	/	/	/	/	/	/	/	/	/	/	/
		/													
	3.40	2.52	3.20	2.75	5.64	4.95	1.97	1.97	2.62	2.62	64.38	76.45	120.00	120.00	
		1.92													
	3.20	2.52	3.13	2.83	5.62	5.33	1.85	1.85	2.60	2.60	61.72	69.13	120.00	120.00	
		2.13													
3.00	2.52	3.06	2.88	5.61	5.53	1.74	1.74	2.57	2.57	58.94	58.94	120.00	120.00		
	2.29														
2.80	2.52	2.99	2.92	5.60	5.65	1.63	1.63	2.54	2.54	56.00	57.79	120.00	120.00		
	2.41														
2.60	2.52	2.94	2.92	5.59	5.71	1.51	1.51	2.52	2.52	52.91	53.13	120.00	120.00		
	2.50														

## Poglavlje 3

### Rasprava o rezultatima

Zbog poznavanja činjenice da jednosloj aluminijska ne može samostalno egzistirati (eng. *free-standing*) jer ima nestabilnu dinamiku kristalne rešetke, bili smo primorani pronaći odgovarajuće supstrate koji bi služili pri sintezi stabilnih alotropskih modifikacija aluminena. Ukoliko postoji neslaganje u konstanti rešetke predložene strukture aluminena i odgovarajućih supstrata, doći će do naprezanja jednosloja aluminena prilikom relaksacije atoma aluminijska na površini supstrata. Slična svojstva pronalazimo kod borofena.

Proučavani supstrati imali su u prosjeku dva puta veću konstantu rešetke od svijenog saćastog aluminena ( $\beta$ ), gdje smo nakon relaksacije dobili da aluminen promijeni svoju strukturu i postane ravninski saćast ( $\alpha$ ). U slučaju da su supstrati imali sličnu konstantu rešetke s ravninskim saćastim aluminenom, ali drugačiju strukturu, kao što je to kod Ge(111) i PdTe<sub>2</sub>(111), ravninski saćasti aluminen nakon relaksacije postao je svijeni saćasti ( $\beta$ ). Kod istih supstrata, svijeni saćasti aluminen ( $\beta$ ) nakon relaksacije zadržao je svoju strukturu. Nakon napravljenih izračuna vidjeli smo kako na konačnu strukturu imaju utjecaja i konstanta rešetke ( $a$ ), ali i morfologija supstrata.

Daljnje istraživanje proveli smo smanjujući konstante rešetke Cu(111) i Ag(111) (supstrati s ravnom površinskom morfologijom) uz pretpostavku da će svijeni saćasti aluminen ( $\beta$ ) ostati iste strukture. Konstanta rešetke svijenog saćastog aluminena ( $\beta$ ) iznosi 2.72 Å, pa su supstrati s identičnim konstantama rešetke dali očekivane rezultate i struktura je za te vrijednosti ostala ista nakon relaksacije. Sa slike 23 možemo vidjeti naglo povećanje visine svijanjanja, nakon relaksacije, prilikom smanjivanja konstante rešetke supstrata. Kao rezultat dobivamo da svijeni saćasti aluminen ( $\beta$ ) zadržava svoju strukturu, a visina svijanjanja ima identičnu vrijednost kao i prije relaksacije.

Naše proučavanje mogli smo nastaviti postavljanjem ravninske saćaste strukture aluminena ( $\alpha$ ) na iste supstrate s prikazanim promijenama konstante rešetke.

# Poglavlje 4

## Zaključak

Ovaj rad predstavlja još jedno istraživanje na području nanomaterijala, korištenjem već poznate i ustaljene teorije funkcionala gustoće. Rezultati rada trebali bi pomoći u sintezi novih, još neotkrivenih, 2D materijala i na taj način obogatiti bazu već postojećeg znanja.

Nakon provedenih izračuna nad dvodimenzionalnim alotropom aluminija (aluminenu) u nekoliko različitih struktura (ravninski saćasti, svijeni saćasti i ravninski trokutasti) na izabranim supstratima Cu(111), Ag(111), Au(111), Ir(111), Pt(111), Ge(111) i PdTe<sub>2</sub>(111) dobili smo rezultate koji ukazuju da će na dobivenu strukturu nakon relaksacije utjecaj imati morfologija supstrata, ali isto tako i konstanta rešetke supstrata.

Sve tri strukturne modifikacije aluminena nad supstratima iste morfologije kao što su Cu(111), Ag(111), Au(111), Ir(111), Pt(111) nakon relaksacije postaju ravninske saćaste, dok je u slučaju supstrata s različitom morfologijom, kao što su Ge(111) i PdTe<sub>2</sub>(111), situacija drugačija i strukture nakon relaksacije postaju svijene saćaste. Jedini izuzetak predstavljaju strukture koje prilikom računa nisu konvergirale kao što je to relaksacija svijene saćaste strukture na Au(111) kao supstratu.

Provjeravanje utjecaja konstante rešetke supstrata na strukturu provedeno je pomoću aproksimacije supstrata sa smanjenom konstantom rešetke Cu(111) i Ag(111). Konstanta rešetke Cu(111) i Ag(111) smanjivala se po koracima od 0.2 Å, sve do konstante rešetke koju ima svijeni saćasti aluminen. Rezultati su nam pokazali da u slučaju Cu(111) s konstantom rešetke 3.42 Å dolazi do formiranja prve svijene saćaste strukture, odnosno struktura ostaje slična onoj koju smo inicijalno postavili. Ona ima isti oblik sve do konstante rešetke koja je identična konstanti rešetke svijenog saćastog aluminena i iznosi 2.62 Å. U slučaju Ag(111) događa nam se gotovo ista situacija, svijena saćasta struktura ostaje kod supstrata s konstantom rešetke 3.40 Å, a takva je sve do supstrata s konstantom rešetke 2.60 Å.

Kada bismo uspoređivali utjecaje morfologije supstrata i konstante rešetke supstrata na strukturu mogli bismo zaključiti kako konstanta rešetke supstrata ima veći utjecaj na formiranje struktura, upravo zbog toga što se promjene strukture očituju za konstantu rešetke koja je za otprilike 0.8 Å drugačija od one koju ima struktura postavljenog aluminena. To smo potvrdili na dva supstrata, dok bi rezultati bili puno vjerodostojniji na većem broju uzoraka i računa.

Ovaj rad mogli bismo još proširiti radeći izračune za fononske disperzije, deformacije i odgovarajuće temperature prilikom kojih bi se mogla vršiti sinteza.



# Literatura

- [1] Novoselov, K. S. et al. *Electric field effect in atomically thin carbon films*. Science 306, 666-669 (2004). Giustino F.; *Materials Modelling using Density Functional Theory*, University of Oxford (2014).
- [2] Glavin N. R., Rao R., Vashney V., Bianco E., Apte A., Roy A., Ringe E., Ajayan M. P.; *Emerging Applications of Elemental 2D Materials*, Advanced Materials (2020).
- [3] Kiraly B., Liu X., Wang L., Zhang Z., Mannix A. J., Fisher B. L., Yakobson B. I., Hersam M. C., Gusinger N. P.; *Borophene Synthesis on Au (111)*, ACS Nano (2019).
- [4] Lukačević I., Pajtler M. V., Mužević M., Gupta S. K.; *Prospect for experimental realization of two-dimensional aluminium allotropes*, Journal of Materials Chemistry C (2019).
- [5] Li W., Kong L., Chen C., Gou J., Sheng S., Zhang W., Li H., Chen L., Cheng P., Wu K.; *Experimental realization of honeycomb borophene*, Science Bulletin (2018).
- [6] *Basic Crystallographic Definitions and Properties of Si, SiGe, and Ge*, Virginia Semiconductor, Inc. (2002).
- [7] Gao N., Liu H., Zhou S., Bai Y., Zhao J.; *Interaction between Post-Graphene Group-IV Honeycomb Monolayers and Metal Substrates: Implication for Synthesis and Structure Control*, The Journal of Physical Chemistry (2017).
- [8] Nevalaita J., Koskinen P.; *Atlas for the properties of elemental two-dimensional metals*, Physical Review B 97, 035411 (2018).
- [9] Pumera M., Sofer Z.; *2D Monoelemental Arsenene, Antimonene, and Bismuthene: Beyond Black Phosphorus*, Advanced Materials (2017).
- [10] Giustino F.; *Materials Modelling using Density Functional Theory*, University of Oxford (2014).
- [11] Qi S., Hayashi J., Zhang L.; *Recent Application of calculations of metal complexes based on density functional theory*, RSC Advances, <https://doi.org/10.1039/C6RA16168E>
- [12] Kaxiras E.; *Atomic and Electronic Structure of Solids*, Cambridge University Press (2003).
- [13] URL: <http://www.pseudo-dojo.org/>

- [14] Mužević M.; *Prediction and characterisation of low-dimensional structures of antimony, indium and aluminium – PhD thesis*, University of Zagreb (2019).
- [15] H. Okamoto et al., *J. Am. Chem. Soc.* 2010, 132, 8, 2710-2718.
- [16] M. E. Dávila et al., *New J. Phys.*, 2014, 16, 095002.
- [17] Zhang Z., Evgeni S. Penev & Boris I. Yakobson, *Polyphony in B flat*, Nature Chemistry, volume 8, pages 525-527 (2016).
- [18] Li J., Madhekar N. V., Shenoy V. B.; *Bonding Charge Density and Ultimate Strength of Monolayer Transition Metal Dichalcogenides*, (2013),  
URL: <https://arxiv.org/pdf/1303.7259.pdf>
- [19] Šunjić M.; *Kvantna fizika mnoštva čestica*, Školska knjiga, Zagreb (2002).  
URL: <http://www.virginiasemi.com/pdf/BasicCrystallographicPropertiesofSi.pdf>
- [20] Batistić I.; *Kristalna struktura: fizika čvrstog stanja*, Sveučilište u Zagrebu (2014).
- [21] Senkić A.; *Primjena i nadogradnja eksperimentalnog postava za konfokalnu mikroskopiju 2-D materijala*, (2019),  
URL: [https://www.pmf.unizg.hr/\\_download/repository/sem2019/semSenkic.pdf](https://www.pmf.unizg.hr/_download/repository/sem2019/semSenkic.pdf)
- [22] Antunović A.; *Teorija grupa i kristalografija – Diplomski rad*, Sveučilište u Osijeku, Odjel za matematiku (2011).
- [23] Batistić I.; *Teorija funkcionala gustoće (DFT) kroz primjere uz programski paket QE*, Sveučilište u Zagrebu (2017).
- [24] *Basic Concepts of Crystallography*,  
URL: [https://www3.nd.edu/~amoukasi/CBE30361/Lecture\\_\\_crystallography\\_B.pdf](https://www3.nd.edu/~amoukasi/CBE30361/Lecture__crystallography_B.pdf)
- [25] *Osnove kristalne strukture*, Sveučilište u Zagrebu,  
URL: <http://www.phy.pmf.unizg.hr/~atonejc/2%20Osnove%20kristalne%20struktureNANO.pdf>
- [26] Posysaev S.; *Application of Density functional theory for modeling metal-semiconductor contacts, reaction pathways, and calculating oxidation states*, University of Oulu (2018).
- [27] Fernandez P. S., Bissett M., Ago H.; *Synthesis, structure and applications of graphene-based 2D heterostructures*, Chemical Society Reviews (2017).
- [28] Supek I.; *Teorijska fizika i struktura materije I dio*, Školska knjiga, Zagreb (1992).

- [29] Supek I.; *Teorijska fizika i struktura materije II dio*, Školska knjiga, Zagreb (1990).
- [30] Wu X., Shao Y., Liu H., Feng Z., Wang Y., Sun J., Liu C., Wang J., Liu Z., Zhu S., Wang Y., Du S., Shi Y., Ibrahim K., Gao H.; *Epitaxial Growth and Air-Stability of Monolayer Antimonene on PdTe<sub>2</sub>*, *Advanced Materials* (2017).
- [31] Koch W., Holthausen M. C.; *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*, WILEY-VCH (2001).
- [32] Sholl D. S., Steckel J. A.; *Density Functional Theory: A Practical Introduction*, WILEY (2009).
- [33] Feng B., Ding Z., Meng S., Yao Y., He X., Cheng P., Chen L., Wu K.; *Evidence of Silicene in Honeycomb Structures of Silicon on Ag (111)*, *Nano Letters* (2012).
- [34] Bernal R. V.; *Electrical Properties of Two-Dimensional Materials Used in Gas Sensors*, MDPI (2019).
- [35] Grosso B.; *Charge Density from scratch to visualization*, (2014),  
URL: [http://phycomp.technion.ac.il/~sbgrosso/QE\\_charge\\_density/QE\\_charge\\_density.pdf](http://phycomp.technion.ac.il/~sbgrosso/QE_charge_density/QE_charge_density.pdf)
- [36] Politzer P., Seminario J. M.; *Modern Density Functional Theory: A tool for Chemistry*, Department of Chemistry, University of New Orleans (1995).

# Životopis

Rođen sam 17. svibnja 1994. godine u Vukovaru. Osnovnu i srednju školu pohađam u Vukovaru, a nakon završene jezične gimnazije upisujem preddiplomski studij fizike na Odjelu za fiziku, Sveučilišta Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku, koji završavam 2018. godine s temom „Fizika ljudskog glasa“ kod mentorice prof. dr. sc. Maje Varge Pajtler. Iste godine upisujem diplomski studij fizike i informatike. Državni sam rekorder u pamćenju decimala broja  $\pi$  (1570 zapamćenih decimala) i 115. u svijetu.