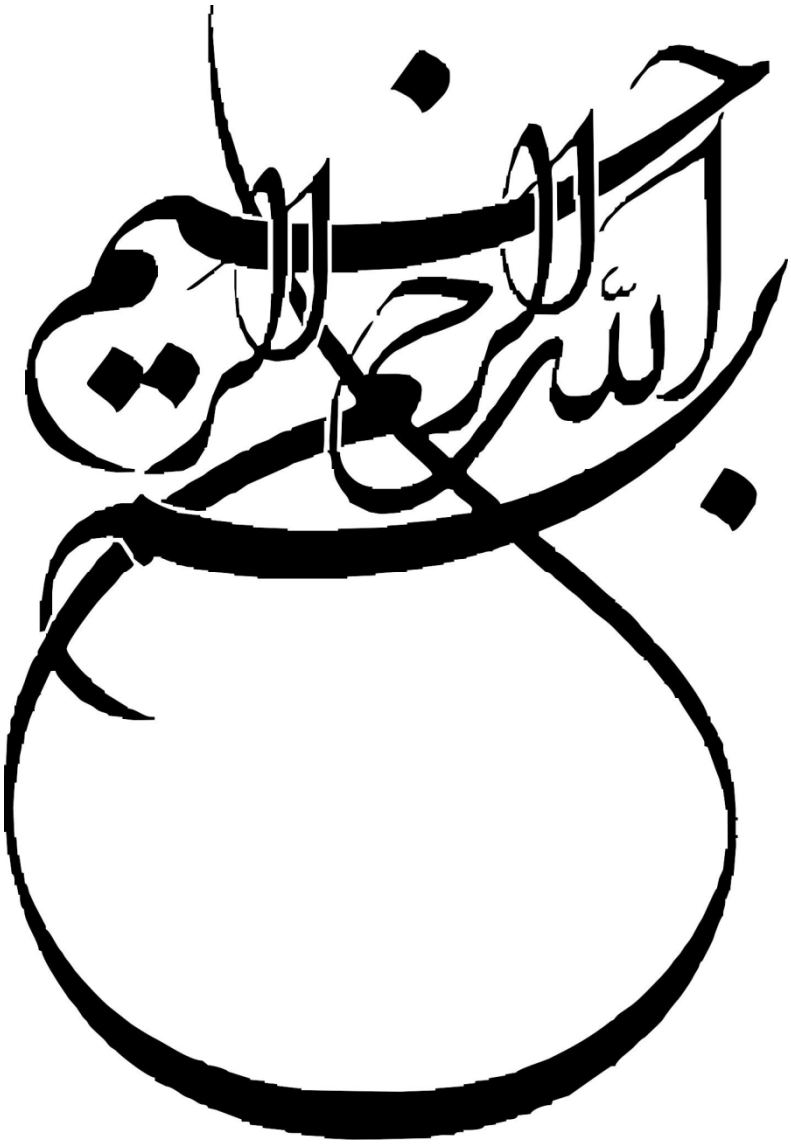

بسم الله الرحمن الرحيم

همه امتیازهای این پایان نامه به دانشگاه بوعلی سینا تعلق دارد. در صورت استفاده از تمام یا بخشی از مطالب پایان نامه در مجلات، کنفرانس‌ها و یا سخنرانی ها، باید نام دانشگاه بوعلی (یا استاد یا اساتید راهنمای پایان‌نامه) و نام دانشجو با ذکر ماخذ و ضمن کسب مجوز کتبی از دفتر تحصیلات تکمیلی دانشگاه ثبت شود. در غیر این صورت مورد پیگرد قانونی قرار خواهد گرفت.

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه:

برای دریافت درجه کارشناسی ارشد در رشته فیزیک حالت جامد

عنوان:

مطالعه ساختار بلوری $Rutile\ TiO_2$ و سطح استوکیومتری و کاهش یافته $Rutile\ TiO_2\ (\bar{1}10)$

با استفاده از نظریه تابعیت چگالی

استاد راهنما:

دکتر منوچهر بابایی پور

استاد مشاور:

دکتر صفدر حبیبی

پژوهشگر:

خدیجه خادمی ریزی

آبان ماه ۱۳۹۰

تقدیم به

مادرم

خدایا از تو مدد می‌گیرم تا سپاسم را بر تمامی آنانی که گام‌های استوارشان و دستان پر از لطفشان تکیه گاه خستگی راهم بودند، پیشکش کنم.

از پدر و مادر مهربانم که سال ها با تلاش بی شائبه و بدون هیچ گونه چشم داشت، امکان تحصیل با فراغ بال را برایم فراهم نمودند صمیمانه سپاسگزارم.

وظیفه خود می‌دانم صمیمانه‌ترین سپاس‌ها و تشکرهایم را تقدیم کنم به استاد راهنمای ارجمند و گرامی‌ام جناب آقای دکتر منوچهر بابائی پور، چرا که بدون صبر و حوصله ودلسوزی‌های بی دریغ و راهنمایی‌های سودمند ایشان انجام این تحقیق غیر ممکن بود.

از استاد گرانقدر آقای دکتر صفدر حبیبی که مشاور اینجانب بودند نیز سپاسگزارم.

از خواهران و برادران عزیزم که همیشه همراه و باعث دلگرمی من بودند متشکرم.

از همکلاسی‌ها و دوستان خوبم به خاطر همراهی همیشگی‌شان سپاسگزارم .

در نهایت سپاس از هر یاری دهنده‌ای که وسعت همراهی‌اش حتی به قدر لحظه‌ای مرا به سپاسی ابدی موظف نمود.

دانشگاه بوعلی سینا

مشخصات رساله/پایان نامه تحصیلی

عنوان:

مطالعه ساختار بلوری Rutile TiO_2 و سطح استوکیومتری و کاهش یافته Rutile TiO_2 $(\bar{1}10)$ با استفاده از نظریه تابعیت چگالی

نام نویسنده: خدیجه خادمی ریزی

نام استاد راهنما: دکتر منوچهر بابایی پور

نام استاد مشاور: دکتر صفدر حبیبی

دانشکده: علوم	**گروه آموزشی: فیزیک**	
رشته تحصیلی: فیزیک	**گرایش تحصیلی: حالت جامد**	**مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد**
تاریخ تصویب: ۸۹/۷/۱۸	**تاریخ دفاع: ۹۰/۸/۲۹**	**تعداد صفحات: ۵۷**

چکیده:

دی اکسید تیتانیم (TiO_2) یک اکسید فلز واسطه با گسترهٔ وسیعی از کاربردهاست، که مورد توجه بسیاری از محققین قرار گرفته است. این ماده هم‌چنین به عنوان یک سیستم مدل در علوم سطح به کار برده می‌شود. محاسبات در چارچوب نظریه تابعیت چگالی به روش شبه پتانسیل و به کارگیری تقریب‌های LDA و GGA روی انبوهه Rutile TiO_2 و سطح استوکیومتری و کاهش یافته Rutile TiO_2 $(\bar{1}10)$ انجام می‌شود. مطالعات ساختار الکترونی نشان می‌دهد که انبوهه Rutile TiO_2 یک نیمه رسانا با گاف نواری عریض است. باندهای هیبرید شده به طورعمده در پایین باند ظرفیت واقع شده‌اند در حالی که در بالای باند ظرفیت به طور عمده اوربیتال‌های O 2p فاقد همپوشانی قرار دارند. باند رسانش توسط توزیع اوربیتال‌های 3d تعیین می‌شود. گاف نواری و سطوح پایینی باند رسانش در ابریاخته سطح استوکیومتری شبیه انبوهه است در حالی که در ابریاخته سطح کاهش یافته حالت‌های اشغال شده در لبه پایینی باند رسانش وجود دارد که اصولاً حول اتم‌های Ti سطح متمرکز شده‌اند.

واژه‌های کلیدی: Rutile TiO_2، نظریه تابعیت چگالی، شبه پتانسیل، تقریب LDA, تقریب GGA

فهرست مطالب صفحه

مقدمه..... ا

فصل اول: ساختار بلوری $Rutile\ TiO_2$ و ساخت ابر یاخته سطح $(\bar{1}10)$ آن..... ۱

مقدمه..... ۲

۱-۱- ساختار بلوری..... ۲

۱-۲- دستگاه شاخص گذاری صفحات بلور..... ۳

۱-۳- مطالعه ساختار سطح..... ۵

۱-۴- چگونگی ساخت ابر سلول لایه‌های نازک..... ۶

۱- ۵- محاسبه ساختار سطح $Rutile\ TiO_2\ (\bar{1}10)$..... ۷

فصل دوم: نظریه تابعیت چگالی..... ۱۰

مقدمه..... ۱۱

۲-۱- مطالعه کوانتومی بلور..... ۱۱

۲-۲- تقریب بورن-اوپنهایمر(آدیاباتیک)..... ۱۲

۲-۳- تقریب الکترون مستقل..... ۱۳

۲-۴- تقریب هارتری..... ۱۴

۲-۵- تقریب هارتری فوک..... ۱۴

۲-۶- نظریهٔ توماس ـ فرمی..... ۱۴

۲-۷- نظریه تابعی چگالی..... ۱۵

۲-۷-۱- قضایای هوهنبرگ-کوهن..... ۱۵

۲-۷-۲- رهیافت کوهن-شم..... ۱۶

۲-۷-۳- تقریب چگالی موضعی (LDA)..... ۱۹

۲-۷-۴- تقریب شیب تعمیم یافته (GGA)..... ۲۰

۲-۷-۵- حل معادلات کوهن- شم با در نظر گرفتن امواج تخت (PW)..... ۲۲

۲-۷-۶- نظریه شبه پتانسیل..... ۲۵

۲-۷-۶-۱- انواع شبه پتانسیل..... ۲۶

فصل سوم: بررسی خواص الکترونی ساختار Rutile TiO_2 و سطح استو کیومتری وکاهش یافته $(\bar{1}10)$ آن.....۲۸

مقدمه.....۲۹

۳-۱- انتخاب شبه پتانسیل.....۲۹

۳-۲- محاسبات مربوط به انبوهه Rutile TiO_2.....۲۹

۳-۲-۱- بهینه سازی پارامترهای محاسباتی.....۳۰

۳-۲-۲- ساختار الکترونی انبوهه.....۳۱

۳-۳- محاسبات مربوط به سطح استوکیومتری $(\bar{1}10)$ Rutile TiO_2.....۳۷

۳-۳-۱- واهلش ساختار ابریاخته و بدست آوردن انرژی سطح.....۳۸

۳-۳-۲- ساختار الکترونی سطح استوکیومتری $(\bar{1}10)$ Rutile TiO_2.....۳۹

۳-۴- محاسبات مربوط به سطح کاهش یافته $(\bar{1}10)$ Rutile TiO_2.....۴۴

۳-۴-۱- واهلش ساختار ابریاخته و بدست آوردن انرژی سطح.....۴۵

۳-۴-۲- ساختار الکترونی سطح کاهش یافته $(\bar{1}10)$ Rutile TiO_2.....۴۷

فصل چهارم: نتایج.....۵۱

منابع.....۵۶

جدول ۳-۱: پارامتر های شبکه Rutile TiO_2 ..... ۳۱

جدول ۳-۲: گاف انرژی انبوهه ۳۵

جدول ۳- ۳: جابه‌جایی اتم‌ها در راستای z در سطح ابریاخته استوکیومتری Rutile TiO_2 $(\bar{1}10)$ ۳۸

جدول ۳-۴: انرژی سطح استوکیومتری Rutile TiO_2 $(\bar{1}10)$ ۳۹

جدول ۳-۵: گاف انرژی ابریاخته سطح استوکیومتری Rutile TiO_2 $(\bar{1}10)$ ۴۴

جدول ۳-۶: جابه‌جایی اتم‌ها در راستای z در سطح ابریاخته کاهش یافته Rutile TiO_2 $(\bar{1}10)$ ۴۵

جدول ۳-۷: انرژی سطح کاهش یافته Rutile TiO_2 $(\bar{1}10)$ ۴۶

جدول ۳-۸: گاف انرژی ابریاخته سطح کاهش یافته Rutile TiO_2 $(\bar{1}10)$ ۵۰

شکل ۱-۱: ساختار $Rutile\ Tio_2$ ۳

شکل ۱-۲: صفحات میلر (۰۰۱) و (۱۱۰) در ساختار FCC ۴

شکل ۱-۳: صفحه میلر (۱۱۱) در ساختار FCC ۴

شکل ۱-۴: ساختار ابر یاخته سطح یک جامد بادر نظر گرفتن شرایط مرزی دوره‌ای در سه بعد ۶

شکل ۲-۱: نمودار تغییرات ضریب $F(s)$ برای تقریب‌های مختلف GGA ۲۱

شکل ۲-۲: فلوچارتی از چگونگی حل خودسازگار معادلات کوهن-شم ۲۳

شکل ۲-۳: مقایسه‌ای است شماتیک از پتانسیل واقعی($v(r)$) و شبه پتانسیل($v_p(r)$) و همچنین تابع موج واقعی الکترون ($u(r)$) و شبه تابع موج ۲۶

شکل ۳-۱: سیستم مختصات استفاده شده در توصیف پیوندها ۳۰

شکل ۳-۲: چگالی الکترونی در صفحه (110) تقریب GGA (PBE) ۳۱

شکل ۳-۳: چگالی الکترونی در صفحه (110) تقریب LDA ۳۲

شکل ۳-۴: نمودار ساختار نواری $Rutile\ TiO_2$ تقریب GGA ۳۳

شکل ۳-۵: نمودار ساختار نواری $Rutile\ TiO_2$ تقریب LDA ۳۳

شکل ۳-۶: نمودار چگالی حالت کلی بر حسب انرژی (ev) برای تقریب GGA (PBE) ۳۴

شکل ۳-۷: نمودار چگالی حالت کلی بر حسب انرژی (ev) برای تقریب LDA ۳۴

شکل ۳-۸: ساختار ابر یاخته سطح $Rutile\ TiO2\ (\bar{1}10)$ ۳۸

شکل ۳-۹: چگالی الکترونی سطح استوکیومتری $Rutile\ TiO_2\ (\bar{1}10)$ در صفحه (۱۰۱) در تقریب LDA ۴۰

شکل ۳-۱۰: چگالی الکترونی سطح استوکیومتری $Rutile\ TiO_2\ (\bar{1}10)$ در صفحه (۰۱۱) در تقریب LDA ۴۰

شکل ۳-۱۲: چگالی الکترونی سطح استوکیومتری $Rutile\ TiO_2\ (\bar{1}10)$ در صفحه (۰۱۱) در تقریب GGA ۴۱

شکل ۳-۱۳: چگالی الکترونی سطح استوکیومتری $Rutile\ TiO_2\ (\bar{1}10)$ در سه بعد در تقریب GGA ۴۲

شکل ۳-۱۴: چگالی الکترونی سطح استوکیومتری $Rutile\ TiO_2\ (\bar{1}10)$ در سه بعد در تقریب GGA ۴۲

شکل۳-۱۵: نمودارچگالی حالتها ی ابر یاخته سطح استوکیومتری $Rutile\ TiO2\ (\bar{1}10)$ در تقریب LDA ۴۳

شکل۳-۱۶: نمودار چگالی حالتهای ابر یاخته سطح استوکیومتری $Rutile\ TiO_2\ (\bar{1}10)$ در تقریب GGA ۴۳

شکل ۳-۱۷: ساختار ابر یاخته سطح کاهش یافته $Rutile\ TiO_2\ (\bar{1}10)$ ۴۵

شکل ۳-۱۸: چگالی الکترونی سطح کاهش یافته $Rutile\ TiO_2\ (\bar{1}10)$ در صفحه (۱۱۰) در تقریب LDA ۴۷

شکل ۳-۱۹ : چگالی الکترونی سطح کاهش یافته Rutile TiO_2 $(\bar{1}10)$ در صفحه (۱۱۰) در تقریب GGA..... ۴۷

شکل ۳-۲۰: چگالی الکترونی سطح کاهش یافته Rutile TiO_2 $(\bar{1}10)$ در سه بعد در تقریب GGA..... ۴۸

شکل ۳-۲۱: چگالی الکترونی سطح کاهش یافته Rutile TiO_2 $(\bar{1}10)$ در سه بعد در تقریب GGA..... ۴۸

شکل ۳-۲۲: نمودار چگالی حالتها ی ابر یاخته سطح کاهش یافته Rutile TiO_2 $(\bar{1}10)$ در تقریب LDA..... ۴۹

شکل ۳-۲۳: نمودار چگالی حالتهای ابر یاخته سطح کاهش یافته Rutile TiO_2 $(\bar{1}10)$ در تقریب GGA..... ۴۹

مقدمه:

دی اکسید تیتانیوم (TiO_2) در چهل سال اخیر به دلیل کاربردهای زیاد صنعتی کانون توجه بسیاری از محققین حوزه تجربی و نظری بوده است [۱]. برای مثال این ماده به طور گسترده در کاتالیزورهای ناهمگن و نوری، حسگرهای گازی، لایه‌های محافظ، سلول‌های خورشیدی . . . . استفاده می‌شود [۲]. همچنین این ماده به عنوان جاذب نور فرابنفش در کرم‌های ضد آفتاب به کار می‌رود. دو خاصیت مهم دیگر این ماده که آن را در زندگی امروز بسیار کارا و مفید می‌سازد، خواص فتوکاتالیستی و خود تمیز کنی آن است. از این دو خاصیت برای تصفیه آب و فاضلاب‌ها، حذف آلودگی هوا در ساختمان‌ها، تسریع واکنش‌های فتوشیمیایی مانند تولید هیدروژن، ساخت سطوح و لایه‌های ضد مه، مسواک‌هایی که ما را از استفاده از خمیر دندان بی‌نیاز می‌کند و شیشه‌های خود تمیز کن استفاده می‌شود.

دی اکسید تیتانیم یک نیمرسانا با گاف انرژی بزرگ، حدود ۳ ev است. ۵ پلیمر از TiO_2 در شکل بلوری وجود دارد. Anatase و Brookite در دما و فشار پایین پایدار هستند. TiO_2-II و TiO_2- III از Anatase و Brookite تحت فشار در شرایط آزمایشگاهی ساخته می‌شوند. فاز Rutile از لحاظ ترمودینامیکی پایدارتر است و ساختار بهم‌پکیده‌تر و چگال‌تری نسبت به بقیه ساختارهای TiO_2 دارد.

دی اکسید تیتانیم یک سیستم مدل برای علم سطح روی اکسید فلزات شده است. این مسئله ناشی از دو دلیل است:

۱. سطح TiO_2 برای بسیاری از تکنیک‌های آزمایشگاهی علم سطح مناسب است.

۲. گسترده‌ی وسیعی از کاربردها که شامل کاتالیزها می‌شود را داراست.

سطح $(\bar{1}10)$ این ماده از لحاظ ترمودینامیکی پایدار است. این سطح با جایگاه‌های خالی اکسیژن، به خاطر اهمیت عامل انفعالی، برای بسیاری از جذب ها مورد توجه واقع شده است [۳، ۴].

در این پایان نامه به بررسی یکی از روش‌های شبیه سازی که اخیراً مورد توجه ویژه‌ای قرار گرفته است، پرداخته می‌شود. سعی شده است خواص الکترونی بلور Rutile TiO_2 و سطح استوکیومتری و کاهش یافته $(\bar{1}10)$ آن را با استفاده از نرم افزار PWscf (تعبیه شده در بسته نرم افزاری Espresso) که برنامه‌ای در چارچوب نظریه تابعی چگالی و بر مبنای روش محاسباتی شبه پتانسیل است و به صورت مجانی از طریق اینترنت در اختیار علاقمندان قرار دارد، بررسی شود.

فصل اول

ساختار بلوري Rutile TiO_2

وچگونگي ساخت ابر ياخته سطح $(\bar{1}10)$ آن

مقدمه:

در این فصل به مروری بر ساختار مواد و نظم بلوری آن‌ها و تعاریف پایه‌ای مورد نیاز می‌پردازیم. در ادامه ساختار تتراگونال $Rutile\ Tio_2$ و چگونگی ساخت ابر یاخته سطح $(\bar{1}10)$ $Rutile\ Tio_2$ را مورد بررسی قرار می-دهیم.

۱-۱- ساختار بلوری

تعریف بلور: بلورها از تکرار یک ساختار منظم در کل فضا به وجود می‌آیند. این ساختار از دو قسمت شبکه و پایه تشکیل شده است.

شبکه: بلورهای ایده‌آل از آرایش اتم‌ها بر روی نقاطی فرضی در سه بعد به نام شبکه تشکیل می‌شوند. شبکه به وسیله‌ی سه بردار انتقال a_1 و a_2 و a_3 تعریف می‌شود. بطور کلی قسمت ریاضی بلور که نظم قرار گرفتن اتم‌ها را نشان می‌دهد به وسیله تعریف شبکه بلور نشان داده می‌شود. به وسیله بردار انتقال رابطه (۱-۱) تمام شبکه ساخته می‌شود:

$$R = \sum_{i=1}^{3} n_i a_i \qquad (۱-۱)$$

که n_i ها اعداد صحیح هستند.

پایه: به هر نقطه شبکه یک، دو و یا چند اتم متصل است، که از تکرار پایه ها ساختار بلور شکل می‌گیرد.

یاخته بسیط: متوازی السطوحی است که به وسیله‌ی محورهای a_i تولید می‌شود، که با اعمال انتقال مناسب تمام فضا را پر می‌کنند. یاخته بسیط را می‌توان به طرق مختلف برگزید که در همه‌ی این گزینش‌ها تعداد اتم‌های پایه‌ی بسیط یکسان است و چگالی نقاط شبکه در هر یاخته‌ی بسیط برابر یک است.

با توجه به تقارن‌های مختلف موجود در بلور اعم از انتقال و دوران و اینکه هیچ محدودیتی در مورد طول-های a,b,c و نیز زوایای بین آن‌ها وجود ندارد، می‌توان شبکه‌های خاصی را که در آن اعمال مشترک تقارنی و محدودیت‌های خاصی وجود دارد تعریف کرد، به این شبکه، شبکه‌ی براوه می‌گویند [۵، ۶].

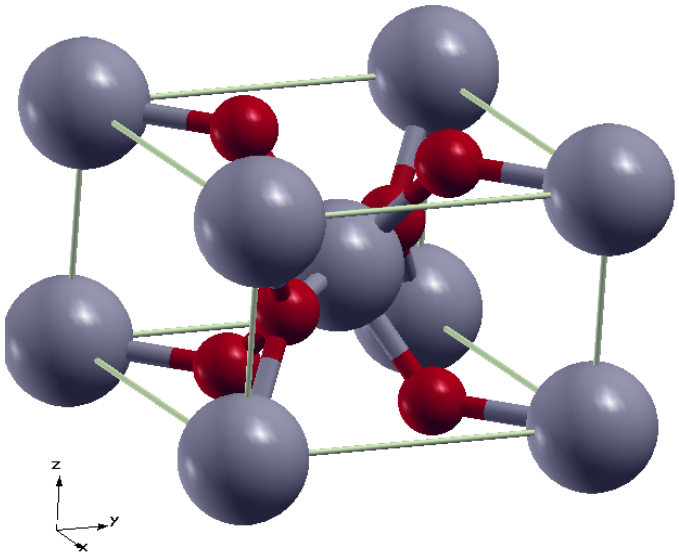
در فضای ۳ بعدی، ۱۴ نوع شبکه‌ی براوه وجود دارد که در اینجا با توجه به ساختار ترکیب TiO_2 Rutile فقط به معرفی ساختار تتراگونال (چهار گوشی) می‌پردازیم.

ساختار چهار گوشی

شبکه براوه چهار گوشی یک شبکه براوه تولید شده از سه بردار متعامد است، که فقط دو تا از بردارها طول برابر دارند و محور سوم محور c نامیده می‌شود. سه بردار بسیط در روابط (۱-۲) نشان داده شده است :

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^{\circ} \qquad (۱-۲)$$



شکل ۱-۱: ساختار TiO_2 Rutile.

شکل ۱-۱ ساختار تتراگونال، TiO_2 Rutile را نشان می‌دهد که با استفاده از نرم افزار PWscf و xcrysden رسم شده است.

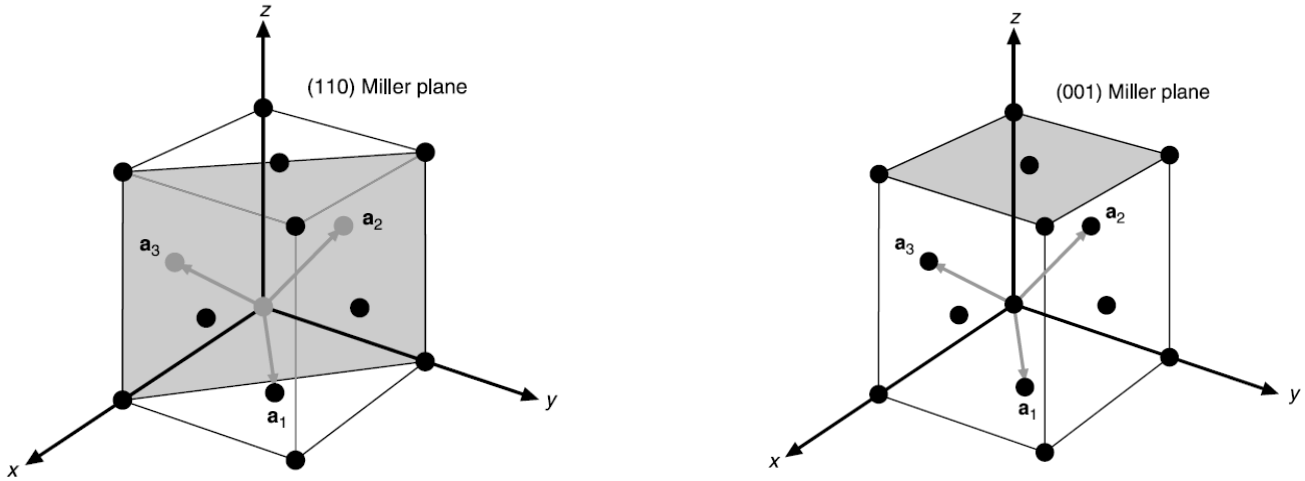
۱-۲- دستگاه شاخص گذاری صفحات بلور

مکان و جهت یک صفحه بلور به کمک هر سه نقطه‌ای از صفحه که بر روی یک خط واقع نباشد مشخص می‌شود. اگر هر نقطه روی یکی از محورهای بلور واقع باشد، صفحه را می‌توان با دادن مکان نقاط در امتداد محور-ها برحسب ثابت‌های شبکه مشخص کرد.

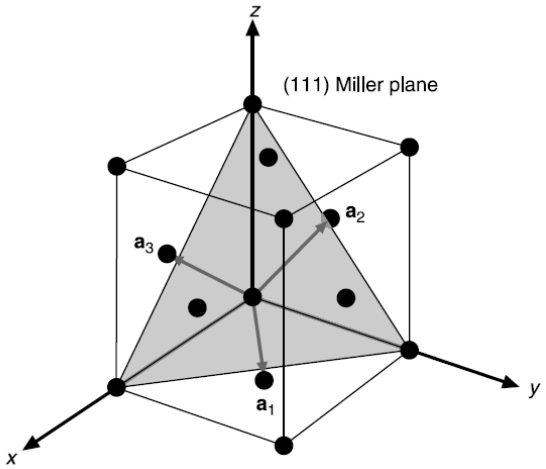
در تحلیل ساختارها سمت‌گیری صفحه را با استفاده از شاخص‌هایی که با قواعد زیر تعیین می‌شوند، مشخص می‌کنیم:

۱. محل تقاطع صفحه را با محورهای a, b, c بر حسب ثابت‌های شبکه پیدا می‌کنیم. این محورها می‌توانند بسیط یا غیر بسیط باشند.

۲. اعداد حاصل را وارونه می‌کنیم، آنگاه آن‌ها را به سه عدد درستی که دارای همان نسبت‌ها باشند تقلیل می‌دهیم، معمولا کوچکترین سه عدد درست را اختیار می‌کنیم. نتیجه را به صورت (hkl) در پرانتز قرار می‌دهیم. [۵]



شکل ۱-۲: صفحات میلر (۰۰۱) و (۱۱۰) در ساختار FCC.



شکل ۱-۳: صفحه میلر (۱۱۱) در ساختار FCC.

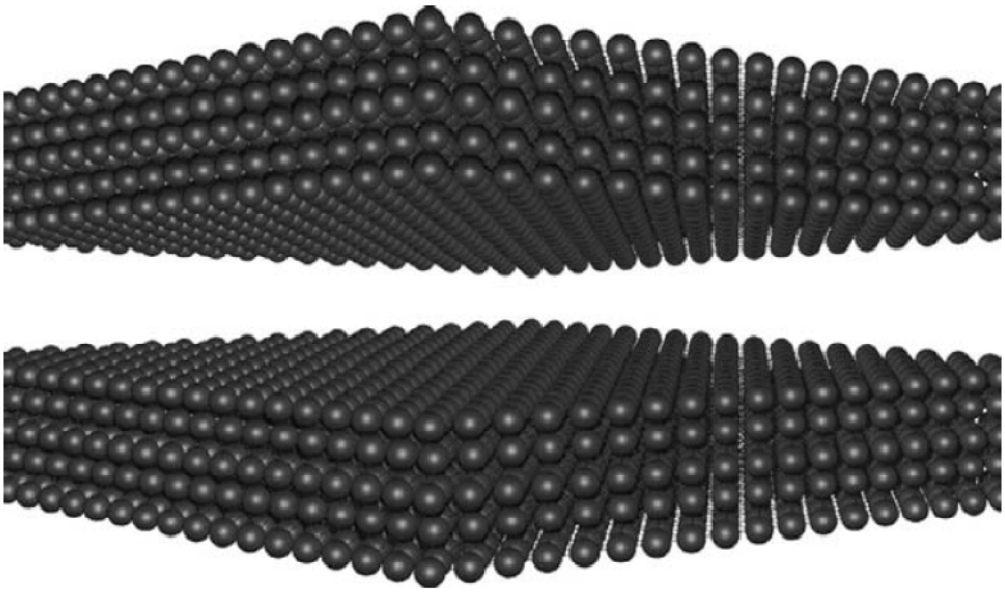
۱-۳- مطالعه ساختار سطح

نرم افزار PWscf از جمله نرم افزارهایی است که بر اساس محاسبه خواص بلورهای کامل بلاخ تهیه شده است، این بدان معناست که بایستی کل سیستم مورد مطالعه از تکرار یاخته‌های اولیه در سه بعد به صورت یکنواخت حاصل شود، به گونه‌ای که برای محاسبه خواص سیستم بتوان از شرط مرزی دوره‌ای استفاده کرد.

اولین نکته در محاسبه ساختار یک سیستم کم بعد (یک بعدی یا دو بعدی)، چگونگی انتخاب یک یاخته اولیه است، به گونه‌ای که از تکرار آن در فضا بتوانیم سیستم مورد مطالعه را تا حد قابل قبولی شبیه سازی کنیم،

چرا که در این ساختارها در بعد کاهش یافته دیگر تقارن انتقالی وجود ندارد و باید ضمن حفظ ویژگی‌های سیستم اصلی، آن تقارن‌ها را به طور دستی در ساختار بگنجانیم. برای این هدف ابتدا بایستی ویژگی‌های بنیادی سیستم مورد نظر که انتظار می‌رود حتی‌المقدور در سیستم شبیه سازی شده وجود داشته باشد را تعیین کنیم، سپس ابر یاخته را طوری طراحی کنیم که آن ویژگی‌ها را تأمین کند. در اینجا می‌خواهیم چگونگی محاسبه ساختار سطح را بررسی کنیم.

در مورد سطح یک جسم واقعی، مهم‌ترین ویژگی‌های ساختاری که باید برآورده شوند، این است که با عبور از یک مقطع دو بعدی، از درون ماده به فضای خلاٍ برویم، به طوری که در راستای عمود بر سطح، از یک سو به فضای آزاد و از سوی دیگر به درون ماده برسیم. هم‌چنین باید در نظر داشته باشیم که وقتی از سطح یک جسم سخن می‌گوئیم، انتظار داریم ضخامت آن جسم به اندازه کافی بزرگ باشد که در نقاط وسط، اتم‌ها رفتاری شبیه به انبوهه داشته باشند، در غیر این‌صورت به جای داشتن سطح یک جسم واقعی، یک لایه نازک (thin film) از جسم مورد نظر را خواهیم داشت. لذا با کمی ساده سازی می‌توان سطح یک جسم را به صورت یک لایه نازک در نظر گرفت. که ضخامت آن به اندازه کافی بزرگ باشد که لایه‌های مرکزی همانند حالت انبوهه رفتار کنند.



شکل ۱-۴: ساختار ابر یاخته سطح یک جامد بادر نظر گرفتن شرایط مرزی دوره‌ای در سه بعد.

۱-۴- چگونگی ساخت ابر سلول لایه‌های نازک

لایه نازک، معمولا به دسته صفحات اتمی که روی هم چیده شده‌اند و یا به عبارت دیگر در راستای عمود بر خود تا ضخامت چند اتم رشد داده شده‌اند، گفته می‌شود. در شبیه سازی لایه‌های نازک این صفحات اتمی را نامتناهی فرض می‌کنیم. برای تشکیل ساختار کامل یک لایه نازک (hkl) نیاز به یک یاخته قراردادی مناسب از حالت انبوهه داریم که بتوان از روی هم چیدن آن ابرسلول لایه نازک را تشکیل داد. تکرار این یاخته قراردادی در دو بعد، صفحات اتمی نامتناهی را نتیجه می‌دهد، از تکرار این آرایه اتمی دوبعدی در راستای عمودی تا ضخامت چند اتم یک لایه نازک شکل می‌گیرد.

برای این‌که بتوانیم این تکرار را تا بینهایت ادامه دهیم و در عین حال لایه نازک به انبوهه تبدیل نشود، بایستی پس از تکرار صفحات تا ضخامت مناسب، یک لایه خلإ ایجاد کنیم و سپس مجدداً همان لایه نازک و به این ترتیب این لایه‌ها را تا بینهایت تکرار می‌کنیم. پس باید ابرسلولی بسازیم که شامل یک ضخامت کامل از لایه نازک همراه با یک لایه خلإ باشد. یادآوری می‌شود که در دو بعد موازی با صفحات اتمی ابر سلول همانند یاخته قراردادی انبوهه خواهد بود. به این ترتیب با تکرار ابرسلول در سه بعد، یک توالی نامتناهی از صفحات اتمی داریم که با ضخامتی از خلإ از هم فاصله گرفته‌اند. اگر ضخامت خلإ به قدر کافی زیاد باشد که از برهمکنش لایه‌های مجاور جلوگیری کند، هر لایه همانند یک لایه منزوی رفتار می‌کند.

همانطور که قبلا گفته شد، برای تشکیل ابرسلول لایه نازک (hkl) نیاز به یک یاخته قراردادی مناسب مربوط به ساختار انبوهه داریم. این یاخته قراردادی باید دارای شرایط زیر باشد:

۱. راستای c این یاخته باید موازی با بردار عمود بر سطح لایه باشد:

$$c \parallel [hkl] \qquad (۱-۱)$$

۲. دو بردار پایه دیگر، a و b، بر این راستا، [hkl]، متعامد باشد:

$$a, b \perp c (\parallel [hkl]) \qquad (۱-۲)$$

۳. هر سه بردار پایه حتما ترکیب صحیحی از بردارهای پایه بسیط باشند وگرنه ممکن است انتهای بردارها روی نقاط شبکه قرار نگیرد و شبکه به هم بخورد.

در حالت کلی این یاخته قراردادی ممکن است یاخته متداول حالت پایه انبوهه نباشد. پس از انتخاب یاخته جدید باید با کمک روابط تبدیلی بین دو مجموعه بردار پایه، مکان‌های اتمی در یاخته جدید را استخراج می‌کنیم. واضح است که مختصات اتم‌هایی که درون یاخته قرار می‌گیرند و حتی تعداد اتم‌های درون یاخته احتمالا تغییر می‌کند و باید با جستجو در یاخته‌های همسایه، اتم‌هایی که احتمالا به پایه شبکه اضافه می‌شوند را بیابیم.

تعداد اتم‌های پایه در یاخته قراردادی را می‌توان با محاسبه نسبت حجم یاخته قراردادی به حجم یاخته بسیط محاسبه کرد. پس از تعیین پارامترهای شبکه و مکان‌های اتمی مربوط به یاخته جدید، می‌توان ساخت ابرسلول لایه نازک را آغاز کرد [۷].

۱- ۵- محاسبه ساختار سطح $(\bar{1}10)$ Rutile TiO_2

همانطور که گفته شد Rutile Tio_2 دارای شبکه بلوری تتراگونال است و سه پایه اتمی که دوتای آن اکسیژن و دیگری تیتانیوم است سلول واحد را تشکیل می‌دهند. مکان‌های اتمی در این ساختار عبارتند از :

Ti	0.0000	0.0000	0.0000
Ti	0.5000	0.5000	0.5000
O	0.3053	0.3053	0.0000
O	-0.3053	-0.3053	0.0000
O	0.8053	0.1947	0.5000
O	0.1947	0.8053	0.5000

بردارهای شبکه یاخته بسیط آن نیز به صورت زیر است:

$$\text{primitive}: \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}$$

که a و c طول یاخته است و جهت‌های $\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$ روی یال‌های این یاخته فرض شده‌اند. همان‌طور که گفتیم برای مطالعه سطح $(\bar{1}10)$ باید بتوانیم لایه نازک در همین مقطع ایجاد کنیم و برای این کار نیاز به یک یاخته قراردادی مناسب جدید داریم که باید دارای سه شرط زیر باشد:

۱- بردار 'c آن در جهت $[\bar{1}10]$ باشد.

۲- بردارهای 'a و 'b هر دو بر 'c عمود باشند.

۳- همه این بردارها ترکیب‌هایی از بردارهای شبکه یاخته بسیط باشند.

بردار 'c را می‌توان به صورت زیر فرض کرد:

$$\vec{c}' = a\,(\hat{j} - \hat{i}) \qquad (۱-۵-۱)$$

برای اعمال شرط دوم دو بردار زیر را اختیار می‌کنیم:

$$\vec{a}' = c\hat{k} \qquad \text{و} \qquad \vec{b}' = a(\vec{j} + \vec{i}) \qquad (۲-۵-۱)$$

روابط تبدیلی این دو دستگاه پایه (بسیط و قرار دادی جدید) به صورت زیر است:

$$\begin{aligned} \vec{a}' &= \vec{c} & \vec{a} &= \frac{1}{2}(\vec{b}' - \vec{c}') \\ \vec{b}' &= \vec{b} + \vec{a} \quad \Rightarrow & \vec{b} &= \frac{1}{2}(\vec{c}' + \vec{b}') \\ \vec{c}' &= \vec{b} - \vec{a} & \vec{c} &= \vec{a}' \end{aligned} \qquad (۳-۵-۱)$$

اکنون باید مکان‌های اتمی را در این یاخته جدید بیابیم. برای این کار ابتدا باید بدانیم درون این یاخته قراردادی چند اتم وجود دارد. این تعداد را می‌توان از نسبت حجمی این یاخته به یاخته بسیط به دست آورد؛ حجم یاخته قراردادی برابر است با:

$$\vec{a}'.(\vec{b}' \times \vec{c}') = 2V_{\text{Primitive}} \qquad (۴-۵-۱)$$