【2021 全國科學探究競賽-這樣教我就懂】

高中（職）組成果報告表單

題目名稱：理論計算氧化鎢氧化銅導電性質

一、摘要

為了理解氧化鎢與氧化銅的半導體性質，我們利用 Wien2k 模擬計算 CuO 和WO_3光觸媒的電子態密度，利用實驗數據來分析 CuO 和WO_3的光學性質。從費米能階觀察能隙長，判斷其半導體性質的優劣性及光觸媒的催化效果好壞，最後我們發現氧化銅並不具有半導體的性質，而氧化鎢具有半導體性質，且光觸媒催化效果較佳，並且透過計算，我們可以推測兩者的介電系數、反射率、折射率等皆不同。

二、探究題目與動機

近年來，半導體的發展日新月異，因此許多的研究和計算因此產生。而部分的人會使用 Wien2k 模擬以及計算化合物的電子態密度(Density of states)。高一物理我們也有學過相關的知識，由此，我們透過自然科探究與實作的課程，了解半導體的成因、性質、判斷半導體的方法，再利用課上學到的介電系數相關公式，推論其介電系數等等性質的差異。最後，我們觀察到同學之前有做過 CuO（Ｐ型）與 WO_3（Ｎ型）光觸媒的實驗，由此，我們想利用他的實驗數據來分析它們的光學性質，以驗證我們所學。

三、探究目的與假設

（一）、利用 Wien2k 模擬計算 CuO 和WO_3光觸媒的電子態密度，藉此觀察其費米面的電子分布，進而了解 CuO 與WO_3光觸媒性質。

（二）、此理論模型的計算可以與實際在實驗室所做出來的樣品交互比對。

（三）、在實驗之前可以確認是否有我們預期的實驗數據或是特性。

四、探究方法與驗證步驟

Wien2k 使用方法：

所需編譯器 ：

(1)、Intel compiler C/Fortran

(2)、GNU compiler 4 以上

(3)、openmpi 1.6 以上(編譯 mpi 版本時)

所需函式庫(需要對應編譯器編譯)

(1)、BLAS

(2)、BLACS

(3)、ScalAPACK

(4)、Intel MKL(使用 Intel compiler 時)

(5)、FFTW3(不論使用何種編譯器都需要自行編譯)

Wien2k 軟體之計算邏輯如下：

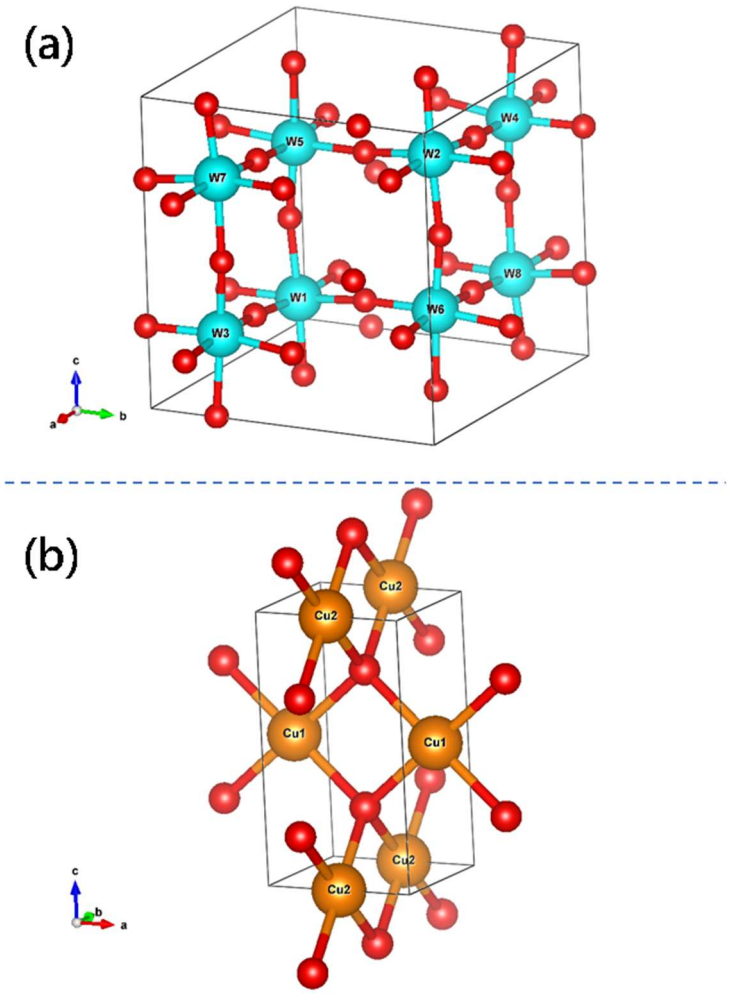
(1)、輸入原子種類、晶格大小等數據，判斷對稱群並初始化。

(2)、執行並且最佳化，利用自恰找尋能量最低的穩定之電子密度函數。

(3)、輸出最低能量電子密度函數相關檔案，完成自恰計算。

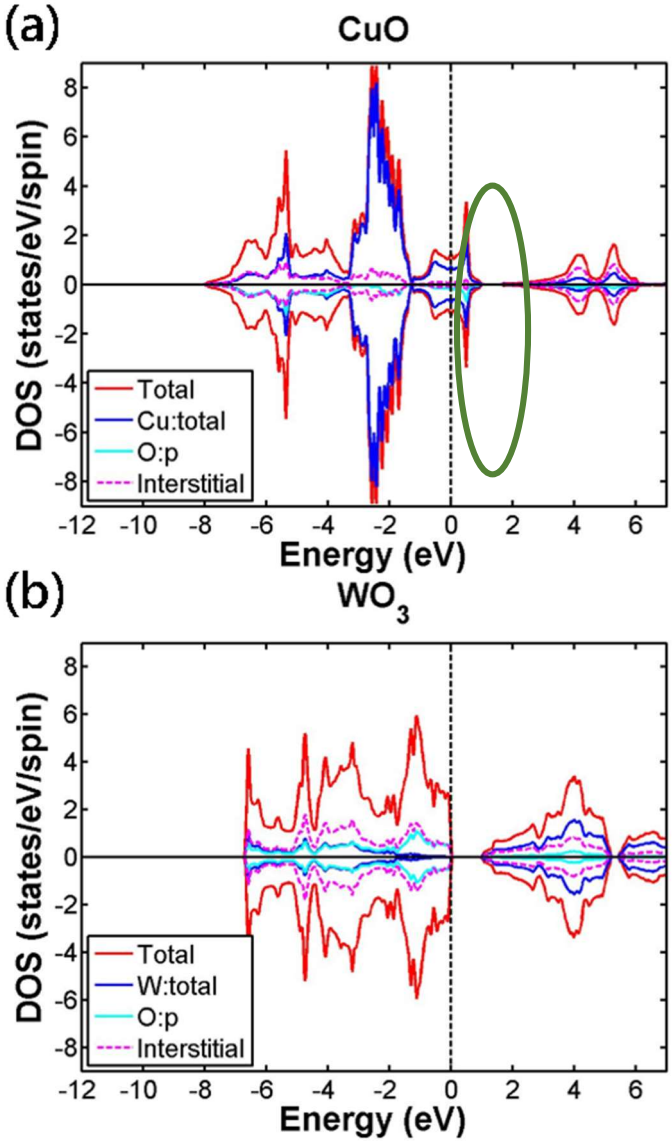
(4)、再計算電子態密度(DOS)。

計算結果：



(a) CuO 電子結構(ID: mp-704645/Crystal System: monoclinic/Space Group: C2/c/ a = 2.939 Å，b = 2.939 Å，c = 5.161 Å)

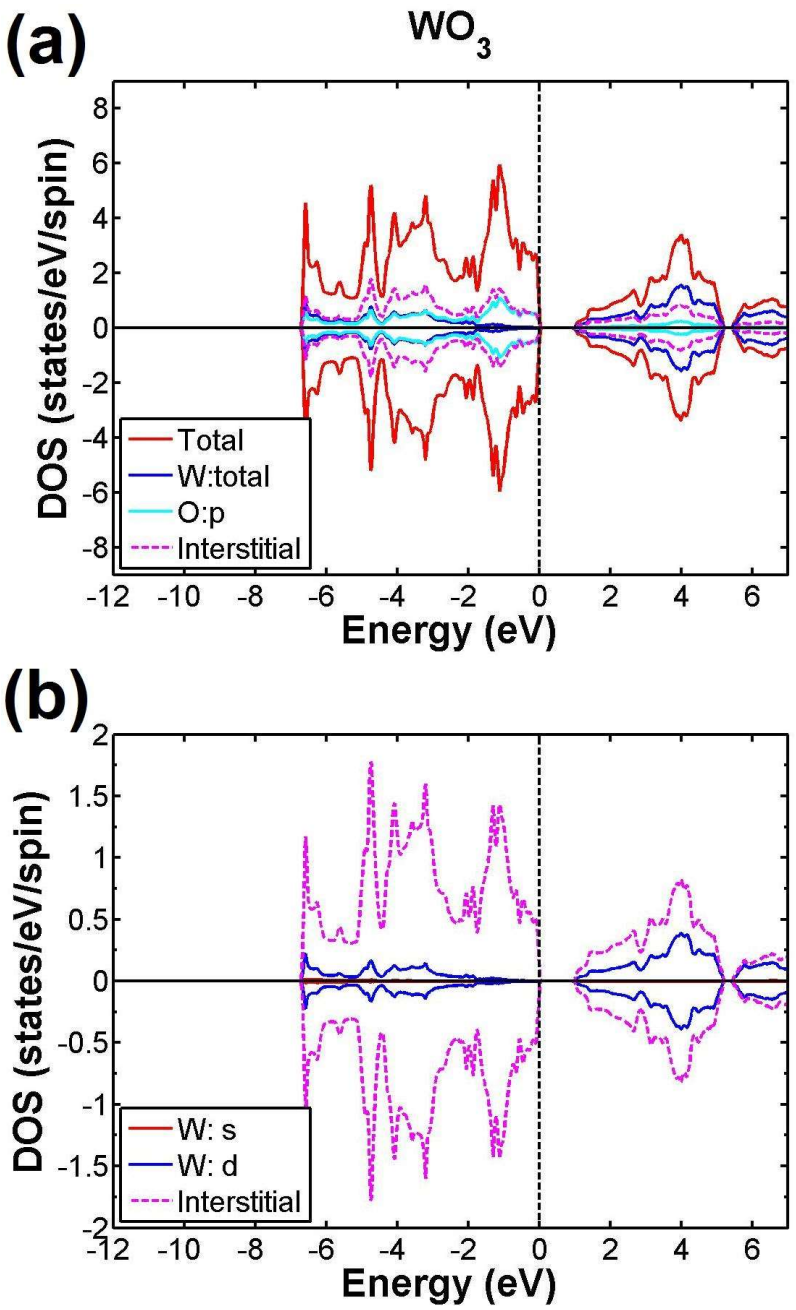
(b)WO_3 電子結構 (ID: mp-19033/Crystal System: monoclinic/Space Group: P21/c/ a = 5.422 Å，b = 5.443 Å，c = 7.755 Å) [6]



費米能階 E_F 上有電子分布，而且小能隙在高於 E_F 出現

(a)光觸媒 CuO 在 500 k points，9 × 5 × 9和 (b)WO_3 電子態密度(DOS)，500 k points，7 × 7 × 7 (Wien2k 程式計算)。

由(a)來看，CuO 電子態密度圖中，在費米能階 E_F 上有電子分佈，而且小能隙在高於 E_F 出現，產生類似金屬具有自由電子的性質，而 WO_3 雖仍可以觀察到半導體效果。(b)中則看的到明顯的能隙，正可以驗證光催化陣列圖中氧化鎢光催化效果較好之結論。



光觸媒 WO_3 (a)電子態密度(DOS)和 (b)分部電子態密度(Partial DOS)(Wien2k 程式)

進一步觀察 WO_3 之電子態密度分佈，由此圖來看，WO_3 帶隙約為 0.9 eV，半導體特性較為顯著，介電系數較小，相對電容率（該化合物電容率與真空電容率的比值）會接近真空電容率。

五、結論與生活應用

結論 ：

WO_3 相較於 CuO，半導體特性較為顯著，且光觸媒催化效果較佳，且CuO能展現出類似金屬具有自由電子的性質，

生活應用:

（一）、太陽能是地球上最豐沛的能量來源，而光觸媒主要是利用太陽光就能進行污染物降解和水解產氫等重要的反應

（二）、半導體可作為發光二極體和集成電路的材料。

（三）、幫助我們了解材料的光學性質，而更可以去應用它們。

參考資料

CuO 和 WO_3 說明書：

https://cdn.fbsbx.com/v/t59.2708-21/169174013_902333123865104_2282233159497367208_n.doc/%E4%B8%AD%E7%8D%8E-CuOWO3-%E8%AA%AA%E6%98%8E%E6%9B%B8_all.doc?_nc_cat=105&ccb=1-3&_nc_sid=0cab14&_nc_ohc=6D-YC7BQu-sAX_YrN0E&_nc_ht=cdn.fbsbx.com&oh=f5e7a4b24abe3af32e6eadb3a80af335&oe=606EA132&dl=1

第一原理計算軟體教學：

https://cdn.fbsbx.com/v/t59.2708-21/166231344_503843247665601_5746726730580536589_n.pptx/WIEN2K-%E7%AC%AC%E4%B8%80%E5%8E%9F%E7%90%86%E8%A8%88%E7%AE%97%E8%BB%9F%E9%AB%94%E6%95%99%E5%AD%B8_v6.pptx?_nc_cat=106&ccb=1-3&_nc_sid=0cab14&_nc_ohc=ofJh5IhcTEUAX8_b06V&_nc_ht=cdn.fbsbx.com&oh=ecd50aa62e90d4a1c84f98df2ef6189e&oe=606E5F6C&dl=1

相對電容率：

https://en.wikipedia.org/wiki/Permittivity