

Naturvetenskaplig undersökning

Analys av visualiseringar gjorda med visualiseringsverktyget
ENVISIoN

Redaktör: Marian Brännvall

Version 1.0

Status

Granskad	PL	2018-05-28
Godkänd	Rickard Armiento	2018-05-28

PROJEKTIDENTITET

2018/VT, Grupp 2

Linköpings Tekniska Högskola, IFM

Gruppdeltagare

Namn	Ansvar	Telefon	E-post
Anders Rehult	Projektledare (PL)	076-3161206	andre449@student.liu.se
Marian Brännvall	Dokumentansvarig (DOK)	070-7280044	marbr639@student.liu.se
Andreas Kempe	Sekreterare (SE)	073-9796689	andke133@student.liu.se
Viktor Bernholtz	Viktor Bernholtz (VB)	073-0386030	vikbe253@student.liu.se

Kund: IFM, Linköpings universitet, 581 83 Linköping**Kontaktperson hos kund:** Rickard Armiento, 013-281249, rickard.armiento@liu.se**Kursansvarig:** Per Sandström, 013-282902, persa@ifm.liu.se**Handledare:** Johan Jönsson, 013-281176, johan.jonsson@liu.se

Innehåll

Dokumenthistorik	iv
1 Inledning	1
1.1 Syfte	1
1.2 Bakgrund	1
1.3 Definitioner	1
2 Utförande	1
3 Resultat och slutsatser	1
3.1 Kristallstrukturer	2
3.2 Elektrontäthet	2
3.3 Tillståndstäthet	4
3.4 Elektronlokaliseringsfunktion, ELF	5
4 Diskussion	6
Referenser	7

Dokumenthistorik

Version	Datum	Utförda förändringar	Utförda av	Granskad
0.1	2018-05-24	Första utkast.	PG	PL
0.2	2018-05-25	Andra utkast.	PG	PL
1.0	2018-05-28	Godkänd.	PG	PL

1 Inledning

Dokumentet är en naturvetenskaplig undersökning för kandidatprojektet i visualisering av elektronstrukturer. Här undersöks fysiken kring de egenskaper som har visualiserats i projektet för att få en bättre förståelse för dessa fenomen.

1.1 Syfte

Syftet med den naturvetenskapliga undersökningen är att ge en beskrivning av fysiken tillhörande de framtagna visualiseringarna.

1.2 Bakgrund

Kandidatprojektet i visualisering av elektronstrukturer har innefattat visualisering av ett antal fysikaliska fenomen: kristallstruktur, elektrontäthet, tillståndstäthet samt elektronlokaliseringsfunktionen. Se kapitel 1.3 nedan för information om dessa. För att få en bättre förståelse för fysiken kring dessa görs denna naturvetenskapliga undersökning som utifrån de framtagna visualiseringarna beskriver dessa fenomen.

1.3 Definitioner

- **Kristall** är en fast fas i vissa ämnen som byggs upp genom periodisk upprepning i tre dimensioner av ett arrangemang av atomer [1].
- **Elektrontäthet** är en funktion som beskriver elektroners fördelning i rummet, t.ex. kring atomkärnorna i atomer eller molekyler [2].
- **Elektronlokaliseringsfunktion** (eng. electron localization function, ELF) är ett mått på sannolikheten att finna en elektron i närheten av en referenselektron med samma spinn [3].
- **Tillståndstäthet** (eng. density of states, DOS) är en storhet som anger antalet enligt kvantfysikens lagar tillåtna tillståndsvärden per energienhet hos ett fysikaliskt system [4].

2 Utförande

Det framtagna visualiseringsverkyget, ENVISIoN, har använts för att visualisera de olika fenomenen. Visualiseringar har gjorts för olika ämnen och genom att analysera dessa har slutsatser kunnat dras, dessa presenteras nedan i kap. 3.

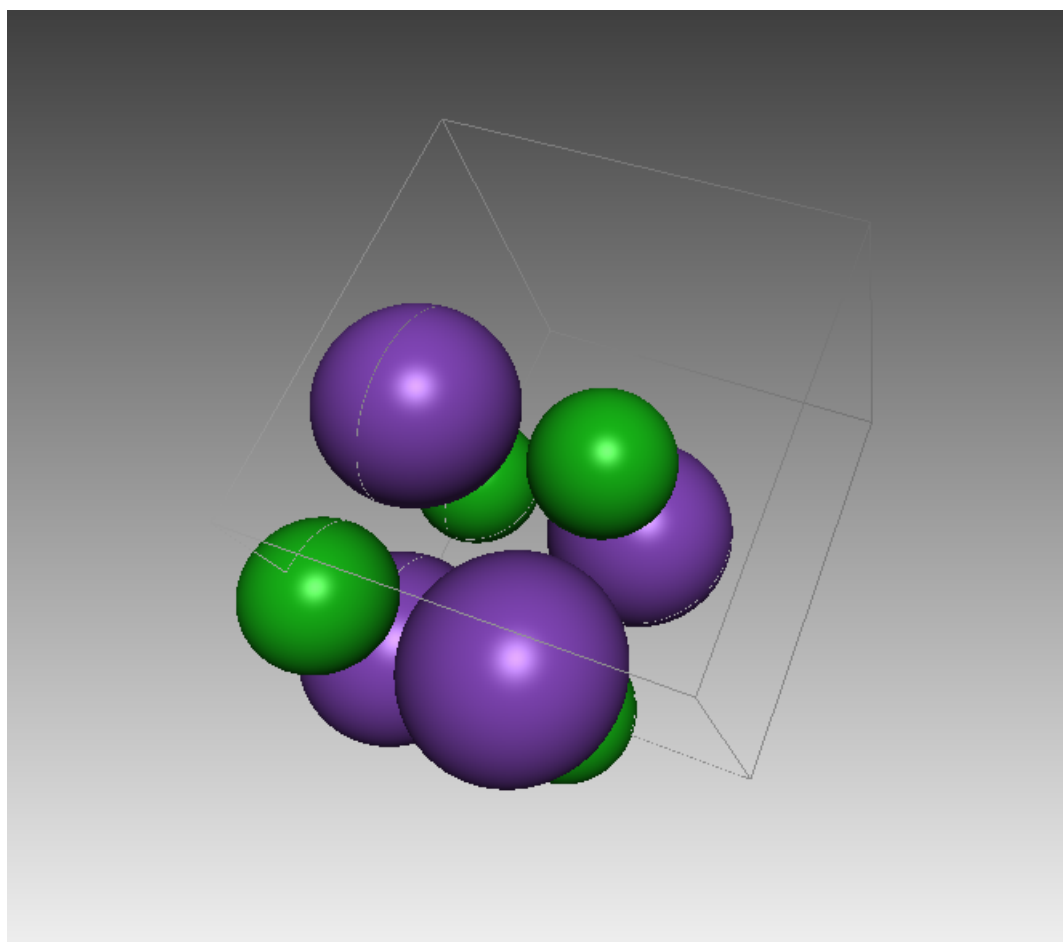
3 Resultat och slutsatser

Här beskrivs resultaten av visualiseringarna av de olika egenskaperna samt slutsatserna som drogs utifrån dem.

3.1 Kristallstrukturer

En av egenskaperna som kan visualiseras med det framtagna visualiseringsverktyget är kristallstrukturen för ett givet ämne. Kristallstrukturen beskriver atomernas positioner i enhetscellen där atomerna representeras av sfärer med olika radie för de olika atomtyperna.

I figur 1 ses kristallstrukturen för natriumklorid, NaCl. NaCl är av ytcentrerad-kubisk struktur vilket syns i figuren där (de lila) Na-atomerna sitter i hörnen samt på ytorna till den kubiska enhetscellen.

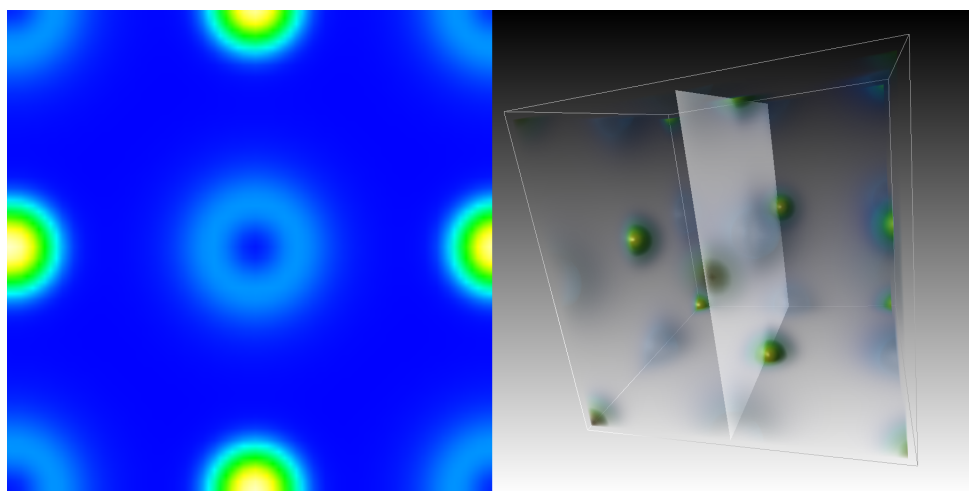


Figur 1: Visualisering av enhetscell för natriumklorid, NaCl.

3.2 Elektrontäthet

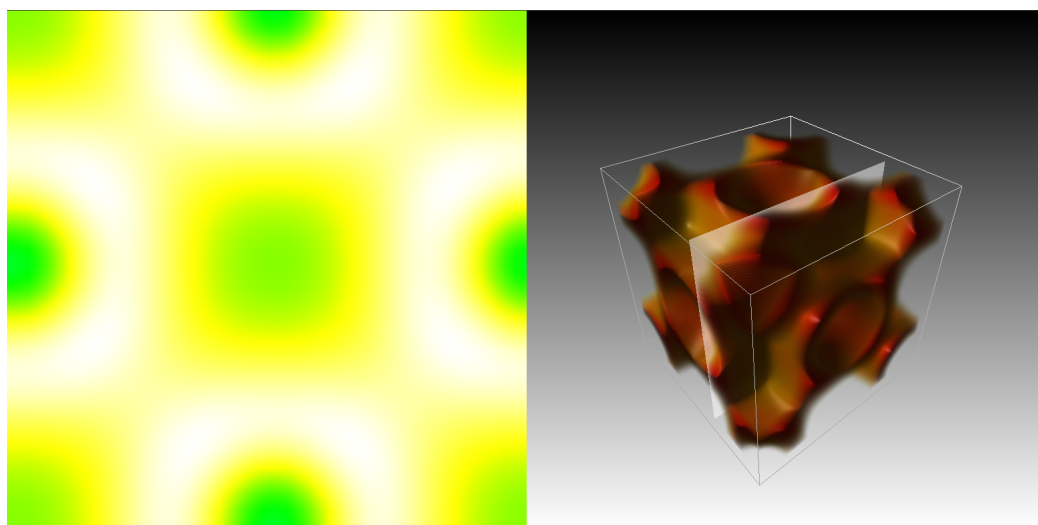
En av egenskaperna som kan visualiseras med det framtagna visualiseringsverktyget är elektrontäthet. Elektrontätheten beskriver sannolikheten att hitta en elektron på en given plats.

I figur 2 ses en skärmbild av en visualisering av elektrontätheten hos natriumklorid, NaCl. I detta fall är slice-funktionen påslagen vilken gör att ett plan fås som kan flyttas i den tre-dimensionella bilden för att få en två-dimensionell bild till vänster. Vad som kan ses här är en betydligt högre sannolikhet att hitta elektroner kring Cl-atomerna än kring Na-atomerna. Detta faller sig naturligt eftersom NaCl är en jonbindning där en elektron har överförts från Na-atomen till Cl-atomen.



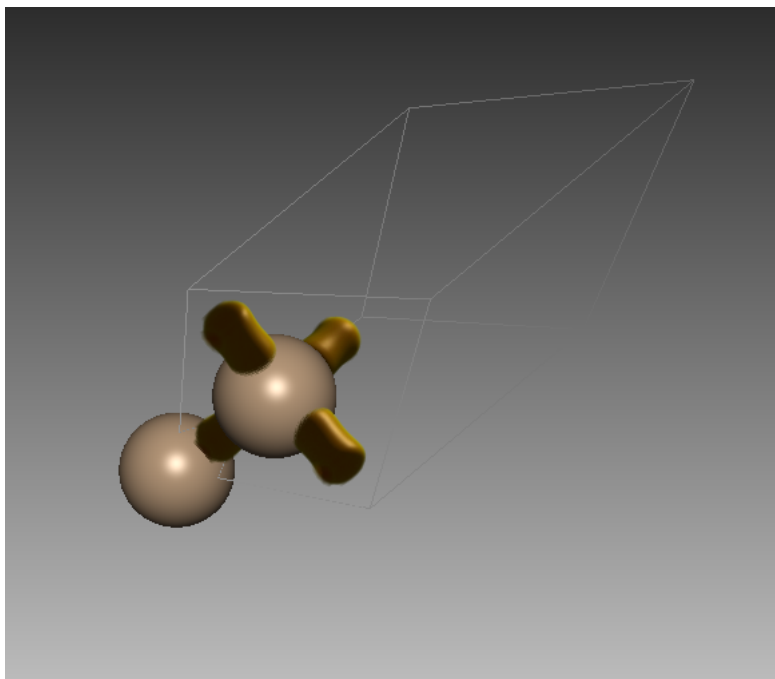
Figur 2: Visualisering av elektrontäthet för natriumklorid, NaCl.

Figur 3 är en skärmbild från visualiseringen av elektrontäthet för aluminium, Al, med slice-funktion påslagen. Här syns att det är hög elektrontäthet kring och mellan Al-atomerna. Al är en metall och har alltså fria valenselektroner som delas av alla atomer. Vissa antydningar till bindningar kan urskiljas men är i jämförelse med de kovalenta bindningarna i figur 4 diffusa. Det relevanta är att elektrontätheten är hög mellan atomerna och inte koncentrerat till bindningarna.



Figur 3: Visualisering av elektrontäthet för aluminium, Al.

Figur 4 är en skärmbild från visualisering av elektrontäthet för kisel, Si. Si-atomerna har kovalenta bindningar mellan sig, dvs. de delar elektronpar mellan sig. Bindningarna syns tydligt i visualiseringen eftersom elektrontätheten är hög just kring dessa bindningar.

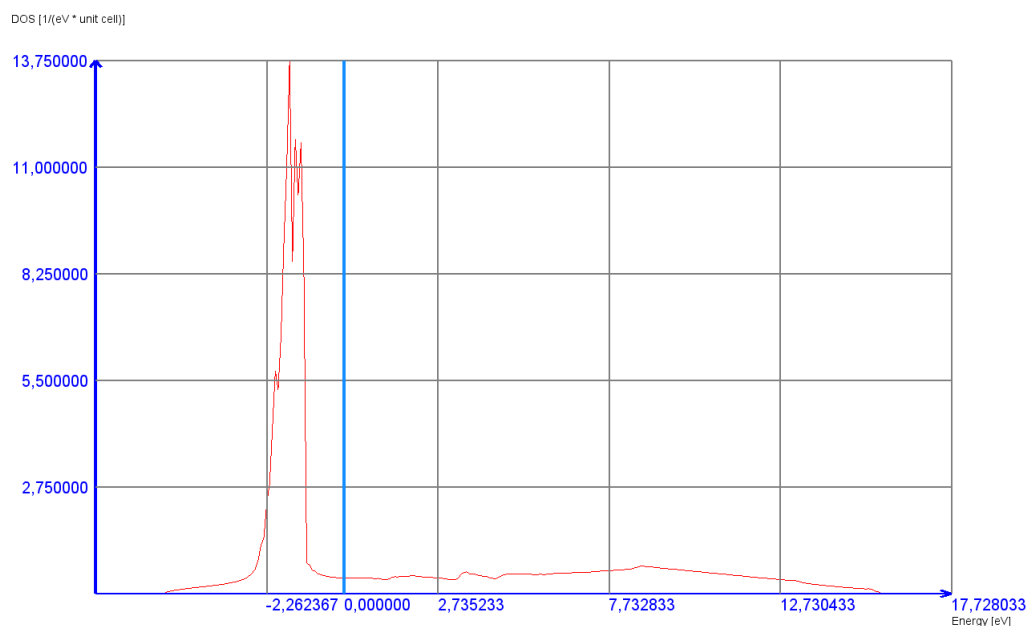


Figur 4: Visualisering av elektrontäthet för kisel, Si.

3.3 Tillståndstäthet

Två av egenskaperna som kan visualiseras med det framtagna verktyget är total och partiell tillståndstäthet. Tillståndstäthet beskriver antalet tillåtna tillstånd för olika energier.

I figur 5 ses en skärmbild av en visualisering av den totala tillståndstätheten för koppar, Cu. Noll på x-axeln ligger vid Fermi-energin och är markerad med en blå linje. För en ledare är tillståndstätheten skild från noll vid Fermi-energin men hos en isolator och halvledare ligger Fermi-energin mitt i bandgapet mellan ledningsband och valensband vilket gör att tillståndstätheten är noll kring Fermi-energin. Cu är en metall och borde alltså ha en nollskild tillståndstäthet vid Fermi-energin och utifrån figur 5 ses att detta stämmer; även om tillståndstätheten är låg så går den aldrig ner till noll.

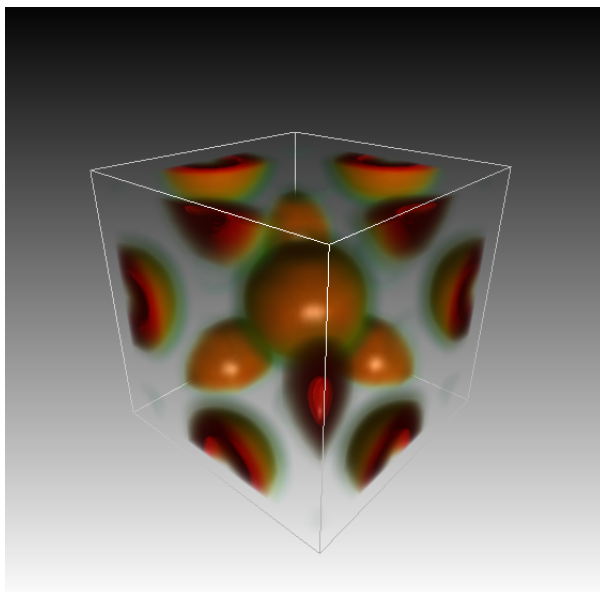


Figur 5: Visualisering av total tillståndstäthet för koppar, Cu.

3.4 Elektronlokaliseringsfunktion, ELF

En av egenskaperna som kan visualiseras med det framtagna verktyget är ELF. ELF beskriver sannolikheten att hitta en elektron kring en referenselektron. Det kan också beskrivas som ett mått på hur svårt det är att få in ytterligare en elektron på en viss plats. ELF ger i många sammanhang en tydligare bild av bindningarna i kristallen.

Figur 6 är en skärmbild av en visualisering av ELF för NaCl. Denna kan jämföras med elektrontätheten för NaCl som sågs i figur 2 i kap. 3.2. Elektrontätheten var hög kring Cl-atomerna men ELF är istället hög kring Na-atomerna.



Figur 6: Visualisering av ELF för natriumklorid, NaCl.

4 Diskussion

Att använda visualiseringar av olika ämnen kan bidra till ökad förståelse för olika materials egenskaper. Som har visats i denna naturvetenskapliga undersökning så kan visualiseringarna ge en förklaring till de olika ämnernas ledningsförmågor t.ex. kan dessa visualiseringar förklara varför ett ämne är en halvledare och ett annat en isolator.

Referenser

- [1] *Nationalencyklopedin*. URL: <https://www.ne.se/uppslagsverk/encyklopedi/l%C3%A5ng/kristall> (hämtad 2018-05-25).
- [2] *Nationalencyklopedin*. URL: <https://www.ne.se/uppslagsverk/encyklopedi/l%C3%A5ng/elektront%C3%A4tthet> (hämtad 2018-05-25).
- [3] *Electron Localizability: Chemical Bonding Analysis in Direct and Momentum Space*. URL: <http://www2.cpfs.mpg.de/ELF/index.php?content=01quant/01def.txt> (hämtad 2018-05-25).
- [4] *Nationalencyklopedin*. URL: <https://www.ne.se/uppslagsverk/encyklopedi/l%C3%A5ng/tillst%C3%A5ndst%C3%A4tthet> (hämtad 2018-05-25).