

Greenfunktion: En grön beskrivning av material

Elektroner, fast de inte kan ses med blotta ögat, har en grundläggande betydelse i vår vardag. Inom vår natur finns många exempel på system av elektroner som interagerar med varandra, så kallade *flerelektronsystem*: från materialet i elektronikkomponenter ner till några av de minsta beståndsdelarna i vår natur, atomer. Vi har utvecklat en *Greenfunktion*-teori för att beskriva material och flerelektronsystem med, så kallade, *degenererade grundtillstånd*.

Hur elektroner rör sig inom material och hur de interagerar med varandra styr materials elektroniska egenskaper. Medan interaktionen mellan två elektroner är av en enkel och välkänd form, bidrar de stora antalet elektroner i material till materials komplicerade elektroniska egenskaper. Dessa egenskaper, som kan vara av intresse i skapandet av elektronikkomponenter, är i praktiken svåra att beskriva från endast de välkända naturlagar som styr interaktionen. Det enorma antalet elektroner i verkliga material gör att det krävs olika approximationer och metoder för att simulera dessa system. Däremot så kan elektroniska egenskaper faktiskt beräknas med imponerande precision med dagens toppmoderna metoder. Simulationer bidrar till en djupare förståelse av hur elektroner uppför sig inom material och utgör ett starkt verktyg för att finna material med önskade materialegenskaper för framtida konstruktion av nya material.

Ett flerelektronsystem kan befinna sig i olika tillstånd. Tillståndet system föredrar att befinna sig i är det med lägsta energi, det så kallade grundtillståndet. Situationen kan ses som en rund boll på en kullig terräng, där bollen föredrar att rulla ned i dalarna: grundtillståndet. Vissa system har flertal grundtillstånd, där alla har samma lägsta energi, ett så kallat degenerat grundtillstånd. Likt en boll som till samma grad föredrar att rulla ner i flertal olika dalar. I vår natur är flerelektronsystem med degenererade grundtillstånd vanliga. Exempel på sådana system är majoriteten av atomerna i det periodiska systemet och syremolekylerna vi andas. Utöver mångfalden av dessa system i vår natur, härstammar många unika och fascinerande fenomen från degenerationen. För att beskriva dessa system korrekt krävs att en metod används som tar hänsyn till grundtillståndsdegeneration.

Det finns en mångfald av metoder för att simulera flerelektronsystem. En populär metod för beräkning av materialegenskaper är den så kallade *Greenfunktion-teorin*. Teorin beskriver väl en stor samling av material med icke-degenererade grundtillstånd. Däremot finns ingen allmän Greenfunktion-teori för att beskriva flerelektronsystem med degenererade grundtillstånd. För tillfället ignoreras degenerationen eller behandlas endast i specialfall. Syftet med detta masterprojekt var att utveckla en Greenfunktion-teori för beskrivning av flerelektronsystem med degenererade grundtillstånd. Med den konstruerade teorin kan material och flerelektronsystem med degenererade grundtillstånd beskrivas med en Greenfunktion-teori. Med teorin kan vi fortsätta att se mer av den grundläggande betydelsen elektroner har i vår vardag, även fast de inte kan ses med blotta ögat.

Handledare: Ferdi Aryasetiawan, Tor Sjöstrand

Examensarbete: 60 hp i fysik 2019

Fysiska institutionen, Lunds universitet