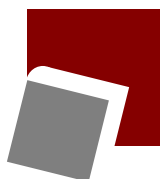


وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه
گاوزنگ - زنجان



تقابل جفت‌شدگی اسپین-مدار و برهمکنش الکترون-الکترون در سیستم‌های الکترونی

پایان‌نامه کارشناسی ارشد

سجاد احمدی

استاد راهنما: دکتر سعید عابدین‌پور

دی ۱۳۹۱

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

تقدیم بہ

ساحت مقدس چارہ معصوم (علیم السلام)

روح بزرگ پدرم کہ استادگی راز او آموختم

مادرم، دریای بی کران فداکاری

و ہمسر مہربانم

شکر و قدردانی

ذَلِكَ الْفَضْلُ مِنَ اللَّهِ وَكَفَى بِاللَّهِ عَلِيمًا (سوره نساء-آیه ۷۰)

این موهبتی از ناحیه خداست و کافی است که او، (از حال بندگان و نیات و اعمال آنها) آگاه است. سپاس خدای را که سخنوران، در ستودن او بمانند و شمارندگان، شمردن نعمت‌های او ندانند و کوشندگان، حق او را گزاردن نتوانند. آثار قدرت او بر چهره روز روشن، تابان است و انوار حکمت او در دل شب تار، درفشان. آفریدگاری که خویشتن را به ما شناساند و درهای علم را بر ما گشود و عمری و فرصتی عطا فرمود تا بدان، بنده ضعیف خویش را در طریق علم و معرفت بیازماید و سلام و درود بر محمّد و خاندان پاک او، طاهران معصوم، هم آنان که وجودمان و امدار وجودشان است؛ و نفرین پیوسته بر دشمنان ایشان تا روز رستاخیز...

تقدیم به روح پاک پدرم که عالمانه به من آموخت تا چگونه در عرصه زندگی، ایستادگی را تجربه نمایم و با تشکر از مادرم، دریای بی کران فداکاری و عشق که وجودم برایش همه رنج بود و وجودش برایم همه مهر و سپاس بسیار از همسر مهربانم، او که اسوه صبر و تحمل بوده و مشکلات مسیر را برایم تسهیل نمود.

با تقدیر و تشکر شایسته از استاد فرهیخته و فرزانه جناب آقای دکتر عابدین پور که با گفته‌های بلند، صحیفه‌های سخن را علم‌پرور نمود و همواره راهنما و راه‌گشای من در اتمام و اکمال پایان‌نامه بوده است.

و به تمام آزاد مردانی که نیک می‌اندیشند و عقل و منطق را پیشه خود نموده و جز رضای الهی و پیشرفت و سعادت جامعه، هدفی ندارند. دانشمندان، بزرگان، و جوانمردانی که جان و مال خود را در حفظ و اعتلای این مرز و بوم فدا نموده و می‌نمایند.

چکیده

پس از پیشنهاد مدل گاز الکترون آزاد توسط آرنولد زمرفیلد در سال ۱۹۲۸ میلادی، کارهای بسیاری بر روی این سیستم انجام گرفت. خواص بس ذره‌ای (مانند محاسبه تابع پاسخ، انرژی حالت پایه و...) چنین سیستمی در ابعاد مختلف و با استفاده از شیوه‌ها و تقریب‌های گوناگونی بررسی شد. در این پایان‌نامه با استفاده از روش تقریب فاز تصادفی، انرژی حالت پایه یک گاز الکترونی دوبعدی را در حضور جفت‌شدگی اسپین-مدار بایکوف - راشبا بررسی می‌کنیم. سپس با استفاده از مقادیر به‌دست آمده برای انرژی حالت پایه، خواص ترمودینامیکی این گاز مورد تحقیق قرار گرفته و اثرات تغییر پارامتر راشبا روی خواص ترمودینامیکی بررسی می‌شود. با استفاده از محاسبات تحلیلی و عددی انجام گرفته در این کار نشان می‌دهیم که انرژی حالت پایه، فشار و پتانسیل شیمیایی با افزایش پارامتر بدون بعد جفت‌شدگی اسپین-مدار راشبا کاهش و تراکم‌پذیری سیستم افزایش می‌یابد. انرژی و خواص ترمودینامیکی سیستم مورد بحث در چگالی‌های پایین یا رژیم تک نواری به‌شدت به جفت‌شدگی اسپین - مدار وابسته است.

واژه‌های کلیدی: جفت‌شدگی اسپین-مدار راشبا، تقریب فاز تصادفی، گاز الکترونی دوبعدی

فهرست

چکیده	پنج
پیش‌گفتار	۱
۱ اصول پایه‌ای		۳
۱.۱ مدل گاز الکترونی	۳
۱.۱.۱ مقدمه	۳
۲.۱.۱ پتانسیل دوره‌ای	۵
۳.۱.۱ تصحیحات گاز الکترونی	۷
۴.۱.۱ نمونه‌های واقعی گاز الکترونی	۱۱
۵.۱.۱ گاز الکترونی سه بعدی: فلزات و نیمرساناها	۱۱
۶.۱.۱ گاز الکترونی دو بعدی	۱۲
۷.۱.۱ گاز الکترونی یک بعدی	۱۴
۸.۱.۱ گاز الکترونی صفر بعدی	۱۵
۲.۱ جفت‌شدگی اسپین-مدار	۱۶
۱.۲.۱ منشأ جفت‌شدگی اسپین-مدار	۱۷
۲.۲.۱ جفت‌شدگی اسپین-مدار در نیمرساناها	۲۰

۲۲	جفت‌شدگی اسپین-مدار در ساختارهای نامتجانس نیم‌رسانا	۳.۲.۱
۲۵	جفت‌شدگی اسپین-مدار بایکوف-راشبا	۴.۲.۱
۳۲	جفت‌شدگی اسپین-مدار در ساختارهای متقارن	۵.۲.۱
۳۳	برهمکنش اسپین-مدار در سل‌های هاس	۶.۲.۱
۳۹	۲ بررسی خواص بس ذره‌ای گاز الکترونی	
۴۰	کوانتش دوم	۱.۲
۴۱	نمایش عدد اشغال	۱.۱.۲
۴۳	عملگرهای خلق و فنا ی فرمیونی	۲.۱.۲
۴۴	عملگرهای میدان کوانتومی	۳.۱.۲
۴۷	مروری بر نظریه پاسخ خطی	۲.۲
۴۸	تابع پاسخ خطی: شکل عمومی	۱.۲.۲
۵۳	تابع پاسخ چگالی - چگالی	۲.۲.۲
۵۵	عامل ساختار و قضیه‌ی افت و خیز - اتلاف	۳.۲.۲
۵۷	انرژی حالت پایه و تابع پاسخ چگالی	۴.۲.۲
۵۹	تابع پاسخ سیستم الکترونی بدون برهمکنش	۵.۲.۲
۶۰	تابع پاسخ چگالی - چگالی برای گاز الکترونی بدون برهمکنش	۶.۲.۲
۶۲	تقریب فاز تصادفی	۳.۲
۶۸	۳ خواص حالت پایه گاز الکترونی دو بعدی در حضور جفت‌شدگی اسپین-مدار	
۶۹	خواص تک ذره‌ای و بس ذره‌ای سیستم	۱.۳
۶۹	محاسبه خواص تک ذره‌ای	۱.۱.۳
۷۳	تابع پاسخ چگالی-چگالی	۲.۱.۳
۸۰	انرژی حالت پایه	۲.۳

۸۰	انرژی سیستم بدون برهمکنش	۱.۲.۳
۸۶	انرژی تبادلی	۲.۲.۳
۸۸	انرژی همبستگی-تبادلی و انرژی حالت پایه	۳.۲.۳
۹۲	خواص ترمودینامیکی	۳.۳
۹۲	فشار	۱.۳.۳
۹۵	پتانسیل شیمیایی	۲.۳.۳
۹۷	تراکم پذیری	۳.۳.۳
۱۰۱	آ محاسبه‌ی برخی کمیت‌ها در جفت‌شدگی اسپین-مدار	
۱۰۱	ساختار نواری نیم‌رساناها	۱.آ
۱۰۱	تقریب $k.p$	۱.۱.آ
۱۰۸	تقریب تابع پوش	۲.۱.آ
۱۲۱	محاسبه‌ی هامیلتونی \tilde{H}_c در سیستم‌های با عدم تقارن وارونه‌ی ساختاری	۲.آ
۱۲۳	محاسبه‌ی هامیلتونی \tilde{H}_c در ساختارهایی با عدم تقارن وارونه‌ی توده‌ای	۳.آ
۱۲۵	ب محاسبه‌ی انرژی تبادلی به‌شیوه‌ی اختلالی	
۱۳۶	ج تابع پاسخ چگالی-چگالی	
۱۴۱	د مشتقات انرژی	

پیش‌گفتار

جفت‌شدگی اسپین-مدار به علت استفاده‌های گوناگون در پدیده‌های نوین فیزیکی بسیار مورد توجه قرار گرفته است. یکی از مهم‌ترین این پدیده‌ها اسپینترونیک است، که شامل مطالعه کنترل فعال و دستکاری درجه آزادی اسپین در سیستم‌های حالت جامد است. به عبارت دیگر، اسپینترونیک اشاره به الکترونیک اسپینی، پدیده‌ی ترابرد اسپین‌های قطبیده در فلزات و نیمه هادی‌ها دارد. جفت‌شدگی اسپین-مدار برای تولید جریان اسپین قطبیده و کنترل آن نقشی بنیادی در اسپینترونیک دارد. بدین منظور علاقه‌مندیم حالتی را بررسی کنیم که در آن، آثار جفت‌شدگی اسپین-مدار نیز لحاظ شد باشد. ترکیبی از عمل تقارن وارونه‌ی زمانی و فضایی در مرکز تقارن نیمرساناها منجر به واکنی اسپینی دوگانه می‌گردد. برای شکست این واکنی دو روش می‌توان انتخاب کرد. شکست تقارن برگشت زمان که با اعمال یک میدان مغناطیسی است و دیگری شکست تقارن وارونه‌ی فضایی که وجود میدان الکتریکی را می‌توان عامل شکست این تقارن دانست. میدان الکتریکی به روش‌های مختلف در نیمرسانا ظاهر می‌شود از جمله اعمال یک میدان الکتریکی خارجی به سیستم یا عواملی مانند وضعیت‌های عدم تقارن ساختاری و توده‌ای که باعث می‌شود میدان الکتریکی در داخل ساختار بلور آشکار گردد. اگر جفت‌شدگی اسپین-مدار ناشی از یک میدان خارجی یا یک میدان الکتریکی داخلی باشد، آنرا اثر جفت‌شدگی اسپین-مدار راشبا و اگر جفت‌شدگی اسپین-مدار ناشی از عدم تقارن توده‌ای باشد آنرا اثر درسل‌هاس می‌نامند. اما زمانی که در سیستم‌های واقعی کار می‌کنیم، دیگر ذرات و الکترون‌های موجود در سیستم به چند ذره محدود نیست، بلکه وارد سیستمی می‌شویم که در آن تعداد ذرات از مرتبه‌ی عدد آووگادرو است که ممکن است باهم برهمکنش نیز داشته باشند. حال اگر بخواهیم رفتار این N الکترون را به‌عنوان مجموعه‌ای از الکترون‌های برهمکنش‌کننده (مثلاً در یک فلز واقعی یا گاز الکترون آزاد) بررسی کنیم، با یک مسئله‌ی بس‌ذره‌ای سروکار خواهیم داشت. برای بررسی خواص بررسی یک چنین سیستمی که

فیزیک بس ذره‌ای حاکم بر آن است، به زحمت خواهیم توانست سیستم را به‌طور دقیق حل نماییم لذا به روشهای تقریبی نیازمندیم. در مکانیک کوانتومی و به‌طور خاص در فیزیک ماده چگال و فیزیک بس ذره‌ای تقریب‌های مختلفی وجود دارد. از جمله این تقریب‌ها نظریه اختلال، مونت کارلوی کوانتومی و تقریب فاز تصادفی است. یکی از معروف‌ترین و موفق‌ترین تقریب‌ها، تقریب هارتری وابسته به زمان^۱ یا همان تقریب فاز تصادفی (RPA)^۲ است. اولین تقریب منطقی بعد از (RPA)، تقریب هارتری-فوک وابسته به زمان^۳ است.

^۱ The time-dependent Hartree approximation

^۲ The random phase approximation (RPA)

^۳ The time-dependent Hartree-Fock approximation (TDHFA)

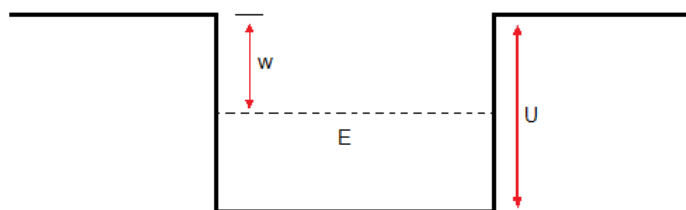
فصل اول

اصول پایه‌ای

۱.۱ مدل گاز الکترونی

۱.۱.۱ مقدمه

به تجربه می‌دانیم یک فلز به خوبی از قانون اهم پیروی می‌کند. اگر چه میدان الکتریکی مورد استفاده ضعیف باشد، باز هم این گفته صادق است. رسانندگی فلزی به انرژی فعال‌سازی نیاز ندارد. در صورتی که برای رسانندگی الکتریکی در نمک‌های یونی یا نیمرساناهایی مثل Si چنین نیست. بنابراین برخی از الکترون‌ها در فلزات نمی‌توانند همواره به اتم‌های خاصی مقید باشند بلکه باید آزاد بوده تا بتوانند در نمونه حرکت کنند. تصویری که از این الکترون‌های آزاد در ذهن می‌سازیم چنین است که گویی آن‌ها نظیر مولکول‌های یک گاز معمولی محبوس در یک ظرف شیشه‌ای، در فلز محبوس شده‌اند. ظرف محدودکننده برای الکترون سد پتانسیلی است که در سطح فلز ظاهر می‌شود (شکل ۱.۱). درون فلز الکترون‌های آزاد، گازی با چگالی یکنواخت تشکیل می‌دهند [۱].



شکل ۱.۱: چاه پتانسیل یک بعدی. U پتانسیلی است که همگی الکترون‌ها در آن حرکت می‌کنند و E انرژی جنبشی الکترون‌هاست که از ته جعبه اندازه‌گیری می‌شود [۱].

در مدل الکترون آزاد، از برهمکنش دافعه‌ی کولنی بین الکترون‌های رسانش^۱ و همچنین از برهمکنش الکترون‌ها با یون‌های زمینه چشم‌پوشی می‌کنیم. دلیل صرف‌نظر کردن از این برهمکنش‌ها آثار کوانتومی است که در سیستم پدیدار می‌شود. به‌عنوان نمونه از برهمکنش الکترون-الکترون به دو دلیل می‌توان چشم‌پوشید^۲. اول این‌که بر طبق اصل طرد پائولی الکترون‌های با اسپین موازی تمایل دارند دور از هم بمانند. دوم این‌که حتی اگر جهت اسپین‌ها نیز مخالف هم باشند، سیستم به‌منظور کمینه کردن انرژی حاصل از برهمکنش‌های کولنی، تمایل دارد الکترون‌ها را دور از هم دور نگه دارد. در مورد برهمکنش الکترون-یون نیز همین دور بودن الکترون از یون سبب کاهش قدرت برهمکنش خواهد شد. اما علت این دوری، حفاظت یون‌ها توسط الکترون‌های دیگر و ایجاد یک پتانسیل کولنی استتار شده‌ی کوتاه برد است [۲].

با همگی این اوصاف می‌توان گفت مدل الکترون آزاد، الکترون‌ها را به صورتی در نظر می‌گیرد که به‌طور کاملاً مستقل در یک چاه پتانسیل مربعی با عمق متناهی حرکت می‌کنند. لبه‌های چاه متناظر با مرزهای فلز است [۳].

با توجه به آنچه گفته شد، با حل معادله‌ی شرودینگر برای این گاز الکترون آزاد (همانند یک ذره در جعبه) می‌توان حالت‌های الکتریکی مختلف بلور، مانند چگالی حالت‌ها، ویژه مقدار انرژی و غیره را

^۱ روشن است که الکترون‌های آزاد باید ضعیف‌ترین بستگی را به اتم مادر داشته باشند که الکترون‌های واقع در نوار رسانش حاوی چنین شرطی هستند.

^۲ البته باید توجه داشت که ما در این‌جا در مورد یک سیستم گاز الکترونی ایده‌آل صحبت می‌کنیم، مسلماً در مواجهه با سیستم‌های واقعی (همانطور که در قسمت‌های بعد خواهیم دید) این فرض نادرست خواهد بود.

به دست آورد [۴].

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\psi(\mathbf{r}) \quad (1.1)$$

قابل ذکر است که مدل گاز الکترون آزاد توسط آرنولد زمرفیلد^۱ در سال ۱۹۲۸ میلادی پیشنهاد شد و توسط افرادی مانند لورنتس^۲، درود^۳ و دبای^۴ توسعه پیدا کرد [۴، ۵].

مدل شرح داده شده در فوق راجع به حرکت الکترون‌ها در جامدات بیش از حد ساده شده است به طوری که در آن پتانسیل بلور که پتانسیلی دوره‌ای است (شرح این پتانسیل در قسمت بعد ارائه خواهد شد) نادیده گرفته شده است. حال اگر بخواهیم با این مدل نتایج تجربی را توجیه کنیم، نمی‌توان از این پتانسیل کاملاً چشم‌پوشی کنیم. در قسمت‌های بعدی این فصل نیز خواهیم دید این پتانسیل عامل به وجود آمدن پدیده‌های مهمی چون جفت‌شدگی اسپین-مدار نیز است. لذا صرف‌نظر کردن از آن باعث می‌شود برخی پدیده‌های فیزیکی کاملاً نادیده گرفته شوند. بنابراین لازم است به معادله‌ی (۱.۱) یک پتانسیل $V(\mathbf{r})$ نیز افزوده شود. این پتانسیل بلور است که توسط الکترون دیده می‌شود [۲].

۲.۱.۱ پتانسیل دوره‌ای

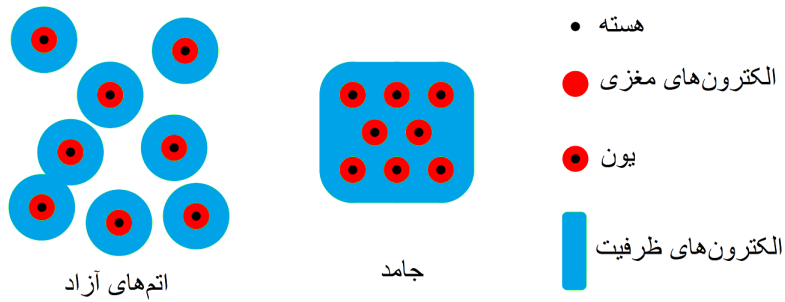
در فلز هر اتم شامل سه بخش است: هسته‌های مثبت سنگین باردار که در مرکز قرار دارند، ابر سبکی از هسته‌های الکترونی که به صورت منفی باردار شده‌اند و به شدت به هسته مقیدند و بالاخره تعدادی محدود از الکترون‌های ظرفیت در دورترین نقطه. هسته‌هایی با مرکز الکترونی، یون نامیده می‌شود. اگر اتم Z الکترون ظرفیت داشته باشد، بار یون $+Ze$ خواهد بود [۶].

^۱ Arnold Sommerfeld

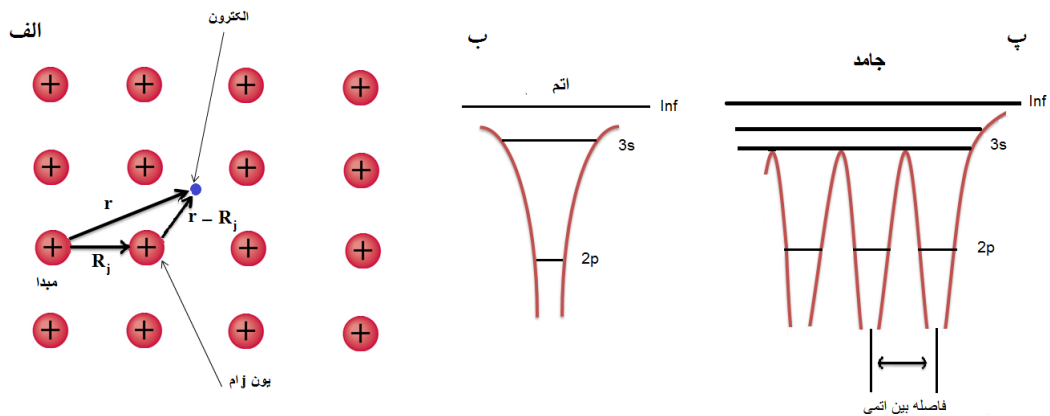
^۲ Lorentz

^۳ Drude

^۴ Debye



شکل ۲.۱: نمایی از بخش‌های مختلف یک اتم [۶]



شکل ۳.۱: (الف) برهمکنش یک الکترون با مغزهای یونی. (ب) طیف یک اتم سدیم و (پ) یک سدیم جامد [۲]

از آنجا که یون‌ها در یک بلور به‌طور مرتب قرار گرفته‌اند، لازم می‌شود که مسئله‌ی وجود یک الکترون در پتانسیل $V(\mathbf{r})$ با دوره‌ی تناوب شبکه‌ی براوه را مورد مطالعه قرار دهیم. این پتانسیل ترکیبی از دو جزء است. برهمکنش الکترون با مغزهای یونی که شبکه را می‌سازند و برهمکنش الکترون با الکترون‌های بلاخ که داخل شبکه حرکت می‌کنند. بنابراین می‌توانیم $V(\mathbf{r})$ را به‌صورت زیر بنویسیم [۲، ۷]

$$V(\mathbf{r}) = V_{ion}(\mathbf{r}) + V_{e-e}(\mathbf{r}) \quad (۲.۱)$$

که

$$V_{ion}(\mathbf{r}) = \sum_j v_{ion}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \quad (۳.۱)$$

(همان‌گونه که در شکل ۳.۱ نشان داده شده‌است)، پتانسیل یک یون است که در نقطه‌ای به بردار شبکه‌ی \mathbf{R}_j جایگزیده شده‌است. واضح است که پتانسیل V_{ion} همان خاصیت تناوبی

را دارد [۲]، چرا که هر یون منزوی یک پتانسیل کولنی تولید می‌کند (شکل ۳.۱ (ب)) و زمانی که آرایه‌ای از یونها لحاظ گردد، پتانسیل‌های منزوی هم‌پوشانی کرده و پتانسیلی مطابق شکل ۳.۱ (پ) به وجود می‌آورند [۱].

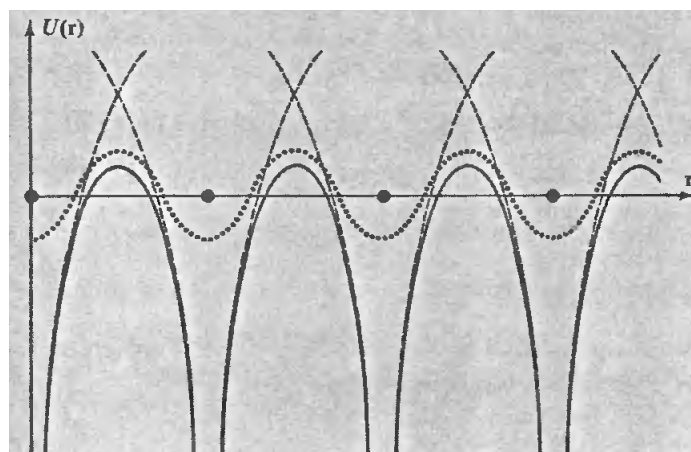
اما پتانسیل $V_{e-e}(\mathbf{r})$ برهمکنش الکترون-الکترون نامیده می‌شود، خصوصیتی دارد که بررسی آن را مشکل می‌کند. از جمله این که ما تنها در صورتی می‌توانیم این جمله را محاسبه کنیم که حالت‌های الکترون‌های دیگر را بدانیم. ولی این حالات از ابتدا معلوم نیستند. دوم این که $V_{e-e}(\mathbf{r})$ کاملاً تناوبی نیست. چرا که الکترون‌های داخل شبکه مدام در حرکتند. سوم این که باید دینامیک همه‌ی الکترون‌ها به‌طور همزمان در نظر گرفته شود. در مواجهه با این مشکلات خوشبختانه بنابر دلایلی که در قسمت قبل عنوان شد برهمکنش الکترون-الکترون کاملاً ضعیف است و نتیجه‌ی مهم این برهمکنش این است که الکترون‌ها به‌گونه‌ای توزیع می‌شوند که عمدتاً در اطراف یونها قرار گیرند و یونها را از الکترون‌های دیگر محافظت می‌کنند. این یک اثر اضافه‌ای دارد که برهمکنش الکترون-یون راحتی در بلند برد ضعیف می‌سازد که یک شرط مناسب دیگر است. بنابراین می‌توان یک عبارت تقریبی برای پتانسیل به‌صورت زیر نوشت

$$V(\mathbf{r}) = \sum_j v_s(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \quad (4.1)$$

که $v_s(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ پتانسیل یون استتار شده است که در مکان R_j قرار گرفته است. حاصل این حقیقت این است که پتانسیل $V(\mathbf{r})$ دوره‌ی تناوب $V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r})$ را دارد. بنابراین به‌علت این که پتانسیل تناوبی است، شرط بلاخ نیز برآورده می‌شود [۲].

۳.۱.۱ تصحیحات گاز الکترونی

مدل گاز الکترون آزاد به‌طور شگفت‌آوری در توصیف برخی از ویژگی‌های بنیادی رفتار فلزی موفق است، البته به شرطی که محدودیت‌های استفاده از زمان واهلش در فرآیندهای تراپردی را بپذیریم. گرچه با



شکل ۴.۱: پتانسیل دوره‌ای یک بلور نوعی که در راستای خطی از یون‌ها و در راستای خطی که از وسط صفحه‌ی یون‌ها می‌گذرد رسم شده است. (نقاط توپر مکان‌های یونی، منحنی‌های پر پتانسیل در راستای خط یون‌ها، منحنی‌های نقطه‌چین پتانسیل در راستای خط بین صفحاتی از یون‌ها و منحنی‌های خط‌چین پتانسیل یون‌های تنهای ایزوله را نشان می‌دهد.) [۷]

استفاده از مدل الکترون آزاد، برآورد کمیت‌هایی که فقط به انرژی الکترون‌ها یا چگالی حالت‌های الکترونی وابسته‌اند، امکان‌پذیر است، ولی نه می‌توان مقاومت ویژه یا رسانندگی گرمایی را از پیش برآورد کرد و نه به این سوال پاسخ داد که چرا برخی از عناصر فلز و برخی دیگر نیمرسانا هستند. علی‌رغم این محدودیت‌ها فرمول‌های ساده‌ای در مدل الکترون آزاد به دست می‌آیند که برخی از آن‌ها کاربردهای گسترده‌ای دارند. افزون بر آن، تجربه نشان می‌دهد که مایعات اغلب رسانا هستند و برخی از مواد (مثل Ge و Bi) در فاز مایع رسانندگی بهتری دارند. نتیجه این که بلوری بودن برای رفتار فلزی ضروری نیست و حداقل از نظر کیفی شاید بتوان پی برد که چرا مدل الکترون آزاد فلزات مایع را بهتر از رساناهای جامد توصیف می‌کند. یک مایع، نظم ساختاری بلند برد ندارد و همگنی آماری آن سازگاری‌اش با مدل گاز الکترون را بهبود می‌بخشد.

در مدل مقدماتی توصیف شده در ابتدای این فصل، فرض بر این بود که هر الکترون در میدان کولنی یون‌ها و همه‌ی الکترون‌های آزاد دیگر حرکت می‌کند. فرض شد که از ترکیب این دو میدان پتانسیل ثابتی شکل می‌گیرد که همه‌ی الکترون‌های آزاد در آن حرکت می‌کنند. در این صورت تابع موج هر الکترون فقط به مختصات خودش بستگی دارد نه به مختصات الکترون‌های دیگر. یعنی به جای حل

مسئله با $3N$ متغیر (N تعداد الکترون‌ها در گاز است)، N مسئله‌ی سه‌متغیره را حل می‌کنیم. در مدل گاز الکترون آزاد ساده، این N مسئله یکسانند، زیرا همه‌ی الکترون‌ها در پتانسیل یکسانی قرار دارند. این روال که در آن، مسئله بر حسب رفتار تک الکترون متحرک در میدان یون‌ها و پتانسیل میانگین (نه لزوماً ثابت) حاصل از همه‌ی الکترون‌های دیگر بررسی می‌شود، در همه‌ی محاسبات امروزی برای ترازهای انرژی الکترون در جامدات به کار برده می‌شود. این رهیافت به «تقریب تک‌الکترون» یا «تقریب ذره‌ی مستقل» معروف است، زیرا معادله‌ی شرودینگر همواره برای یک الکترون حل می‌شود نه مجموعه‌ای از N ذره‌ی برهمکنش‌کننده‌ی سیستم. این روش، شاید بهتر از آنچه انتظار می‌رفته است، کاراست ولی باید به یاد داشت که برای حل معادله‌ی شرودینگر برای یک الکترون معین در میدان میانگین $N-1$ الکترون دیگر، باید توزیع بار آن‌ها معلوم باشد و این تنها در صورتی امکان‌پذیر است که از توابع موج آن‌ها آگاه باشیم. لذا روش کار چنین است که نخست تابع موج این $N-1$ الکترون دیگر را به خوبی حدس زده و سپس معادله را برای تابع موج آن الکترون انتخابی حل کنیم. با استفاده از این جواب، می‌توان برآورد دیگر و شاید بهتری برای $N-1$ تابع موج دیگر به دست آورد. با تکرارهای پی‌درپی، تقریب‌های بهتر و بهتری برای توابع موج الکترونی به دست می‌آید. بالاخره به وضعیتی می‌رسیم که در آن توابع موج ψ سیستم الکترونی پس از تکرار محاسبات، تفاوت ناچیزی با توابع موج ψ به کار رفته برای توصیف پتانسیل در آغاز خواهد داشت. در این وضعیت N تابع موج حاصل سازگارند، یعنی پتانسیلی تولید می‌کنند که توابع موج به دست آمده پاسخ‌های معادله‌ی شرودینگر تک‌الکترونی (در حضور آن پتانسیل) هستند. گفته می‌شود که این توابع موج و پتانسیل‌ها خودسازگارند. گرچه می‌توان ویژه‌مقدار انرژی را بدون تعیین توابع موج به دست آورد، اما اگر توابع موج محاسبه نشوند هیچ تضمین صریحی وجود ندارد که خودسازگاری حاصل شده است. اگر بخواهیم رفتار N الکترون ظرفیت در یک فلز واقعی یا گاز الکترون آزاد ایده‌آل را به‌عنوان مجموعه‌ای از الکترون‌های برهمکنش‌کننده بررسی کنیم، با یک مسئله‌ی بس‌ذره‌ای (ذره 10^{23}) سروکار خواهیم داشت. به این مطلب به زودی بازمی‌گردیم ولی فعلاً بحث پیرامون گاز الکترون را در تقریب تک الکترون ادامه می‌دهیم. علی‌رغم چشم‌پوشی از

برجسته‌ترین مشخصه‌ی یک ماده‌ی بلورین، یعنی پتانسیل دوره‌ای، کوشش‌های فراوانی برای تعمیم مدل الکترون‌های آزاد به عمل آمده است. از آن‌جا که اصول زیربنایی این تعمیم از اهمیت فراوانی برخوردارند، لذا توصیف مختصری از آن‌ها ارائه می‌شود.

دو پدیده‌ی مهمی که قرار است در این‌جا به‌طور کیفی توصیف شوند عبارتند از تبادل^۱ و همبستگی^۲. انرژی تبدالی یا برهمکنش تبدالی مستقیماً از اصل طرد پائولی نتیجه می‌شود و تنها بین زوج الکترون‌های با اسپین موازی به وجود می‌آید. برهمکنش تبدالی موجب کاهش انرژی کل اتم می‌شود (چرا که دارای مقدار منفی است). کاهش انرژی کل بر اثر تبادل را می‌توان به این صورت درک کرد که بنا بر اصل طرد پائولی، الکترون‌های با اسپین موازی از یکدیگر دوری می‌کنند. یعنی این الکترون‌ها به اندازه‌ی الکترون‌های با اسپین پادموازی به هم نزدیک نمی‌شوند و لذا برهمکنش الکتروستاتیکی آن‌ها کاهش می‌یابد.

اکنون با ملاحظه‌ی برهمکنش تبدالی، به‌وضوح می‌توان مدل گاز الکترون را ارتقا داد. این عمل در قالب تقریب تک‌الکترونی که پیش از این معرفی شد به خوبی امکان‌پذیر است ولی اثر آن بد است. زیرا سازگاری مدل گاز الکترون با تجربه کاملاً از بین می‌رود. در این حالت شکل نوار دیگر سهموی نیست و علاوه بر آن، $N(E_F)$ و کمیت‌های وابسته به آن به‌طور کامل با تجربه اختلاف پیدا می‌کنند.

این نتیجه‌ی مایوس‌کننده از آن‌جا ناشی می‌شود که هرچند ملاحظه‌ی برهمکنش تبدالی کاری معتبر است، ولی این تنها تصحیحی نیست که می‌توان در یک مدل ساده وارد کرد. به‌علاوه واضح است که دافعه‌ی الکتروستاتیکی متقابل الکترون‌ها مانع از نزدیک شدن الکترون‌های با اسپین‌های پادموازی می‌شود. یعنی الکترون‌ها به دلیل داشتن بار مشابه نیز از یکدیگر دوری می‌جویند نه صرفاً به خاطر موازی بودن اسپین‌هایشان. با وجود این، دافعه‌ی کولنی بین اسپین‌های پادموازی ضعیف‌تر از اسپین‌های موازی است. دوری جستن الکترون‌ها از هم موجب حرکت همبسته‌ی آن‌ها می‌شود، که کاهش انرژی دافعه‌ی

^۱ Exchange

^۲ Correlation

کولنی حاصل از این دوری را «انرژی بستگی» می‌نامند. وقتی اثر تبادل همراه با اثر همبستگی در محاسبات لحاظ شوند، آن‌گاه مدل گاز الکترون آزاد دوباره سازگاری قابل قبولی با تجربه پیدا می‌کند. انرژی‌های تبدلی و بستگی، اجزای اصلی محاسبه‌ی نظری ترازهای انرژی الکترون‌ها در اتم‌ها و جامدات محسوب می‌شوند ولی برآورد صحیح این انرژی‌ها با مشکلات فراوانی روبروست [۱].

۴.۱.۱ نمونه‌های واقعی گاز الکترونی

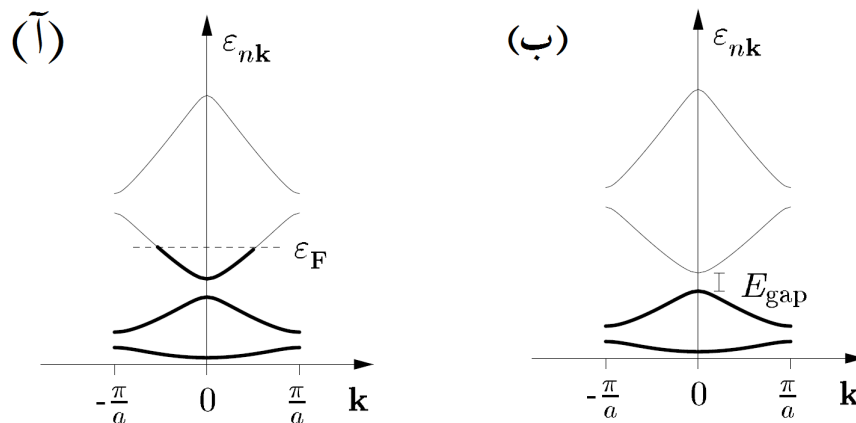
در این قسمت نمونه‌های واقعی از گازهای الکترونی در سه، دو، یک و صفر بعد را بررسی خواهیم کرد. کار کردن در ابعاد مختلف، فرصت مناسبی برای امتحان کردن درک اصول پایه‌ای در فیزیک گازهای الکترونی است.

۵.۱.۱ گاز الکترونی سه بعدی: فلزات و نیمرساناها

قبل از پرداختن به موضوع گاز الکترونی در جامدات سه بعدی، ابتدا کمی در مورد ساختار نواری و شکل ترازها توضیح خواهیم داد.

در فلزات انرژی فرمی ε_F درون نوار ظرفیت قرار دارد و هیچ گاف انرژی‌ای بین پایین‌ترین سطح اشغال شده و اولین سطح اشغال نشده وجود ندارد. در نارساها ε_F در لبه‌ی نوار ظرفیت است. نیمرساناها که سطح فرمی در آن‌ها بین نوار ظرفیت و رسانش قرار دارد، نارساهاهایی در $T = 0$ هستند، اما گاف نواری آن‌ها (E_{gap}) نسبتاً کوچک است (نوعاً کوچک‌تر از 2 eV) چنان‌که در دمای اتاق شماری از الکترون‌ها به صورت گرمایی به نوار رسانش تحریک می‌شوند.

در دمای اتاق، گاز الکترونی در فلزات وجود خواهد داشت که به علت $k_B T \ll \varepsilon_F$ ، یک گاز فرمی واگن خواهد بود. از طرف دیگر یک نیمرسانا به‌طور طبیعی به‌عنوان یک گاز کلاسیکی شرح داده می‌شود. چرا که برای انرژی‌های ε_k در نوار رسانش داریم $\frac{E_{gap}}{4} \gg k_B T$ در نتیجه $\varepsilon_k - \mu \gg \frac{E_{gap}}{4}$ در نتیجه



شکل ۵.۱: (آ) ساختار کلی نوار در رسانا. (ب) ساختار کلی نوار در نارسانا یا یک نیمرسانا [۶]

برای گازهای کلاسیکی مورد استفاده قرار می‌گیرد. از نمونه‌های گاز الکترونی سه بعدی می‌توان به n^+GaAs اشاره نمود. [۶، ۸]

۶.۱.۱ گاز الکترونی دو بعدی

در چهار دهه‌ی گذشته امکان ساخت گاز الکترونی دو بعدی در فصل مشترک نیمرساناها فراهم شده است. اولین تحقق این نمونه در لایه وارونی فن‌آوری اکسید-فلز-نیمرسانای (MOSFET) سیلیکونی به وجود آمد. همچنین از دیگر ابزارهایی که می‌توان در آن گاز الکترونی را مشاهده نمود، ساختارهای نامتجانس $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ است. در سیستم آخر می‌توان طول مسیر آزاد میانگین را به دست آورد که از نظر تکنولوژیکی برای الکترونیک با سرعت بالا مهم است. همچنین چنین کمیتی برای پژوهش پایه‌ای بسیاری از آثار کوانتومی در فیزیک ماده چگال ضروری به نظر می‌رسد.

گاز الکترونی در فصل مشترک ابزارهای نیمرسانا آشکار می‌گردد و به‌طور ذاتی در ابزارهای نیمرسانا