

การแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุในบริเวณรอบสิ่งเจือปนแบบคอนโด

ปริญญานิพนธ์

ของ

รังสรรค์ ศรีสาคร

12 ก.ค. 2525

สำนักหอสมุดกลาง มหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ

สุขุมวิท 23 พระโขนง กรุงเทพฯ 11 โทร. 3921575, 3915058

เสนอต่อมหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ ประสานมิตร

เพื่อเป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาคามหลักสูตร

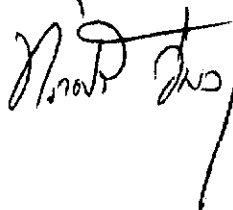
ปริญญาการศึกษามหาบัณฑิต

มีนาคม 2525

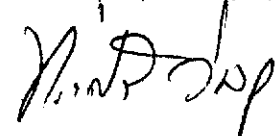

ลิขสิทธิ์เป็นของมหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ

คณะกรรมการที่ปรึกษาประจำตัวนิสิตและคณะกรรมการสอบไถ่พิจารณา
ปริญญาบัตรฉบับนี้แล้ว เห็นสมควรรับเป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตร
ปริญญาการศึกษามหาบัณฑิตของมหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒได้

คณะกรรมการที่ปรึกษา

สุกตน์ ขอดสั้น ✓
ประธาน
กรรมการ


คณะกรรมการสอบ

สุกตน์ ขอดสั้น
ประธาน
กรรมการ



ประกาศคุณูปการ

ปริญญานิพนธ์ฉบับนี้สำเร็จลงได้ด้วยความช่วยเหลือและให้คำแนะนำอย่างดียิ่ง
จากผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.สุทัศน์ ยุกสาน ประธานกรรมการที่ปรึกษา และ
ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ทรงศรี วิมลฉิม กรรมการที่ปรึกษา ผู้วิจัยขอขอบพระคุณ
เป็นอย่างสูง

รังสรรค์ ศรีสาคร

สารบัญ

บทที่	หน้า
1 บทนำ	1
ภูมิหลัง	1
ความมุ่งหมายของการวิจัย	3
ขอบเขตของการวิจัย	4
คำนิยามศัพท์เฉพาะ	4
2 ทฤษฎีและเอกสารการวิจัยที่เกี่ยวข้อง	5
สาเหตุการเกิดการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุ	5
กฎผลรวมของฟรีเคิล	9
ทฤษฎีการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุของฟรีเคิล	10
สมบัติของการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุ	13
สมบัติทั่วไป	13
การแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุที่ระยะใกล้กับสิ่งเจือปน	16
การแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุที่อุณหภูมิสูงกว่า	17
ศูนย์สัมบูรณ์	17
ศักย์ของสิ่งเจือปนที่ขึ้นกับอุณหภูมิ	18
3 วิธีดำเนินการวิจัย	19
4 ผลการวิจัย	23
การคำนวณโดยการประมาณแบบฟรีเคิล	23
การคำนวณโดยพิจารณาถึงผลของอันตรกิริยาระหว่างเอสและ	27
ซี-อี เลกตรอน	27
การคำนวณโดยการประมาณแบบเบทเท-ชอมเมอร์เฟิลด์	36

สารบัญ

บทที่	หน้า
5 บทย่อ สรุปผล อภิปราย และข้อเสนอแนะ	38
บทย่อ	38
ความมุ่งหมายของการวิจัย	38
วิธีดำเนินการวิจัย	38
การวิเคราะห์ผล	38
สรุปผลการวิจัย	38
อภิปรายผล	41
ข้อเสนอแนะในการวิจัย	42
บรรณานุกรม	43
ภาคผนวก	46

บัญชีภาพประกอบ

ภาพประกอบ	หน้า
1 (ก) แสดงการกระเจิงก่าธรในกรณีที่สิ่งเจือปนไม่เป็นแม่เหล็ก	6
(ข) แสดงการกระเจิงก่าธรในกรณีที่สิ่งเจือปนเป็นแม่เหล็ก ...	6
2 แสดงประจวบ ๆ สิ่งเจือปนที่ไม่เป็นแม่เหล็ก ความหนาแน่นของประจุไม่โคจรกระจายโดยทั่วอย่างสม่ำเสมอ แต่การกระจายของประจุอยู่ในลักษณะทรงกลมซ้อนกัน (halos of screening charge) โดยที่ความหนาแน่นของประจุจะเพิ่มและลดสลับกัน	7
3 (ก) แสดงการแปรเปลี่ยนแบบฟรีเคล ซึ่งเป็นผลมาจากการกระจายโมเมนตัมของอิเล็กตรอนอิสระที่โมเมนตัมสูงสุดมีค่าจำกัด	8
(ข) กราฟเส้น 1 ได้จากกรณีที่ค่าจำกัดของโมเมนตัมสิ้นสุดทันทีทันใด กราฟเส้น 2 ได้จากกรณีที่ค่าจำกัดของโมเมนตัมค่อย ๆ ลดหายไป กราฟเส้น 3 ได้จากกรณีที่ค่าจำกัดของโมเมนตัมค่อย ๆ ลดหายไปทีละน้อยกว่ากราฟเส้น 2	8
4 (ก) กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $f(\epsilon)$ และ ϵ	53
(ข) กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $f'(\epsilon)$ และ ϵ	53

ภูมิหลัง

ฟรีเดล (Friedel. 1952 : 153) ได้ศึกษาเกี่ยวกับการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุในบริเวณรอบ ๆ สิ่งเจือปนในโลหะเป็นครั้งแรกในปี ค.ศ. 1952 ต่อมาในปี ค.ศ. 1956 ฟรีเดล (Friedel. 1956 : 1190) ได้เสนอทฤษฎีการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุในบริเวณรอบสิ่งเจือปนในโลหะ ทฤษฎีของเขาใช้ได้ดีเฉพาะสิ่งเจือปนที่มีโซ่โลหะทรานซิชันในโลหะเจ้าบ้านแบบง่าย ๆ ต่อมาฟรีเดล (Friedel. 1958 : 287) ได้พัฒนาทฤษฎีของเขาให้ใช้โลกวางขวางขึ้น พบว่าที่ระยะทาง r วัดจากสิ่งเจือปน การแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุอยู่ในรูป

$$\Delta\rho(r) = Ar^{-3} \cos(2kr + \phi)$$

โดยที่ A และ ϕ ขึ้นอยู่กับศักย์ของสิ่งเจือปน (impurity potential) และชนิดของโลหะเจ้าบ้าน สูตรของฟรีเดลดังกล่าวได้รับการยืนยันว่าถูกต้องโดยโบลมเบอร์เกน และ โรว์แลนด์ (Bloembergen and Rowland. 1953 : 731) ซึ่งได้ทำการทดลองวัดโดยวิธีนิวเคลียร์แมกเนติกเรโซแนนซ์ (Nuclear Magnetic Resonance, NMR) คือได้ทำการวัดแอมพลิจูดของสัญญาณ NMR ของ ^{63}Cu ที่มี Zn เจือปนอยู่ควยที่ความเข้มข้นต่าง ๆ กัน พบว่าแอมพลิจูดของสัญญาณมีค่าลดลงเมื่อความเข้มข้นของสิ่งเจือปนเพิ่มขึ้น ต่อมาโรว์แลนด์ (Rowland. 1960 : 900) ได้ศึกษาหาความสัมพันธ์ระหว่างการทดลองและทฤษฎีโดยใช้สิ่งเจือปนชนิดต่าง ๆ และพบว่าแอมพลิจูดของสัญญาณที่ลดลง เป็นสัดส่วนโดยตรงกับประจุส่วนเกิน (excess charge) ของสิ่งเจือปน

ฟรีเดลได้สูตรข้างต้นโดยใช้แบบจำลองอิเล็กตรอนอิสระ (free electron model) ซึ่งไม่คำนึงถึงทั้งอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนและอิเล็กตรอน และโครง

สร้างของแถบพลังงาน (band structure) ของโลหะเจาบาน การแปรเปลี่ยนไปมาแบบฟรีเดล (Friedel oscillation) ดังในสูตรข้างบน ใช้ได้ก็เฉพาะที่ระยะไกลมาก ๆ จากสิ่งเจือปน แต่ที่ระยะใกล้ ๆ กับสิ่งเจือปน สูตรดังกล่าวจะใช้ไม่ได้ผลคีนัก (Alfred and Van Ostenberg. 1967 b : 569)

การแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุมีบทบาทสำคัญต่อสมบัติโดยทั่วไปของโลหะผสมอย่างเจือจางเป็นอย่างมาก เช่น สภาพต้านทานไฟฟ้า ความรอนจำเพาะ และความอ่อนไหวทางแม่เหล็ก (susceptibility) เป็นต้น จึงได้มีการศึกษาการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุรอบสิ่งเจือปนแบบต่าง ๆ ในโลหะเจาบานทั้งที่เป็นแม่เหล็กและไม่เป็นแม่เหล็ก ด้วยวิธีการต่าง ๆ กันทั้งทางทฤษฎีและการทดลอง รายงานการวิจัยเมื่อไม่นานมานี้ของซลาติก และ กรูเนอร์ (Zlatic and Gruner. 1977 : L 87) ได้ศึกษาการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุที่ระยะใกล้ ๆ กับสิ่งเจือปน 3d ในโลหะเจาบาน Al โดยใช่วิธีการประมาณฟลักซ์วอเอชันของสปินในขอบเขตจำกัดของแบบจำลองแอนเดอร์สัน (localized spin fluctuation (LSF) approximation of Anderson model) พบว่า $\Delta\rho$ ลดลงอย่างรวดเร็วมากกว่าค่าปกติที่ได้จากการคำนวณโดยใช้สูตรของฟรีเดล ผลการทดลองนี้ตรงกับที่กรูเนอร์ และ ฮาร์กิตไท (Gruner and Hargitai. 1971 : 772) กรูเนอร์ (Gruner. 1972 : 1039) เบร์เทียร์ และ มินเนียนีร์ (Berthier and Minier. 1973 : 1169) และอัลลูล (Alloul. 1975 : 1501) ที่ได้ทำการศึกษาโดยวิธี NMR และ NQR (Nuclear Quadrupole Resonance) กับโลหะผสม Al-3d ซลาติก และ กรูเนอร์ยังได้แสดงให้เห็นอีกว่า การประมาณ LSF ของแบบจำลองแอนเดอร์สันใช้อธิบายข้อมูล NQR ของ Al-Mn และ Al-Cr ได้ ซึ่งโลหะผสมทั้งสองนี้ต่างจากโลหะผสม Al-3d ตัวอื่น ๆ เพราะ $\Delta\rho$ ของ Al-Mn และ Al-Cr ที่ได้จากการทดลองมีค่าผิดไปจากที่คำนวณมาก (Berthier and Minier. 1973 : 1169) เบร์เทียร์ และ มินเนียนีร์ให้เหตุผลว่า การลดลงอย่างรวดเร็วย่างผิดปกติของ $\Delta\rho$ ที่ระยะใกล้ ๆ ใน Al-Mn และ Al-Cr นั้นเป็นผลมาจากฟลักซ์วอเอชันของแมกเนติกเซชัน (magnetization) ของอิเล็กตรอน

อิสระ แต่ค่า $\Delta\rho$ ของ Al-Mn และ Al-Cr ที่หาโดยการประมาณ LSF ของแบบจำลองแอนเดอร์สันก็สามารถอธิบายผลการทดลองในบริเวณวงอะตอมแรก ๆ รอบสิ่งเจือปนได้ นอกจากนี้ผลการวิจัยยังแสดงให้เห็นว่า $\Delta\rho$ ของ Al-Mn และ Al-Cr ขึ้นกับอุณหภูมิทั้งที่ระยะไกลและไกลจากสิ่งเจือปนและมีพฤติกรรมทั่ว ๆ ไปเป็นฟังก์ชันของ T/T_K เมื่อ T คือพลังงานของการก่อาชร และ T_K คืออุณหภูมิคอนโด ซึ่งผลอันนี้ตรงกับของกรูเนอร์ และ ฮาร์กิตไท (Gruner and Hargitai. 1971 : 772)

นอกจากนี้ยังมีนักฟิสิกส์อีกหลายท่านที่ได้ศึกษาเกี่ยวกับการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุ เช่น มีไซ และ ซาวาโดวสกี (Mezei and Zawadoxski. 1971 : 167) มีไซ และ กรูเนอร์ (Mezei and Gruner. 1972 : 1465) เจนา และ เกลดคาร์ท (Jena and Geldart. 1973 : 439) และซุโตะ และ วาสวาริ (Suto and Vasvari. 1973 : 1548) เป็นต้น

รายงานการวิจัยที่กล่าวมานี้ใช้โลหะทรานซิชัน 3d เป็นสิ่งเจือปน ในการวิจัยครั้งนี้ผู้วิจัยต้องการขยายงานวิจัยดังกล่าว โดยใช้สิ่งเจือปนแบบคอนโดในตัวนำธรรมดา เพื่อศึกษาการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุในบริเวณรอบสิ่งเจือปนแบบคอนโดว่าขึ้นกับระยะทางจากสิ่งเจือปนและอุณหภูมิอย่างไร

ความมุ่งหมายของการวิจัย

1. เพื่อศึกษาพฤติกรรมของการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุรอบสิ่งเจือปนแบบคอนโดที่ตำแหน่งต่าง ๆ

1.1 ที่ระยะไกลจากสิ่งเจือปน หรือ $k_F r \gg 10$

1.2 ที่ระยะใกล้กับสิ่งเจือปน หรือ $k_F r < 10$

โดยที่ r คือ ระยะทางที่วัดจากสิ่งเจือปน

k_F คือ โมเมนตัมเฟอร์มี (Fermi momentum)

2. เพื่อศึกษาว่า การแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุรอบสิ่งเจือปนแบบคอนโดขึ้นกับอุณหภูมิของโลหะเจือปนอย่างไร

ขอบเขตของการวิจัย

การวิจัยครั้งนี้จะศึกษาการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุในบริเวณรอบสิ่งเจือปนแบบคอนโดเพียงอะตอมเดียวเท่านั้น ที่อุณหภูมิต่ำ $T \ll T_K$ และอะตอมของสิ่งเจือปนมีอุณหภูมิคอนโด T_K สูง

คำนิยามศัพท์เฉพาะ

1. การแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุ (charge-density variation) หมายถึงความแปรปรวนของความหนาแน่นของอิเล็กตรอนอิสระรอบ ๆ สิ่งเจือปน ซึ่งเป็นการแปรเปลี่ยนเชิงระยะทางที่ไม่ขึ้นกับเวลา
2. สิ่งเจือปนแบบคอนโด (Kondo impurity) หมายถึงสิ่งเจือปนที่แสดงสมบัติคอนโด กล่าวคือ จะเป็นแม่เหล็กหรือไม่เป็นแม่เหล็กก็ได้ ทั้งนี้ขึ้นอยู่กับอุณหภูมิและชนิดของโลหะเจ้าบ้าน

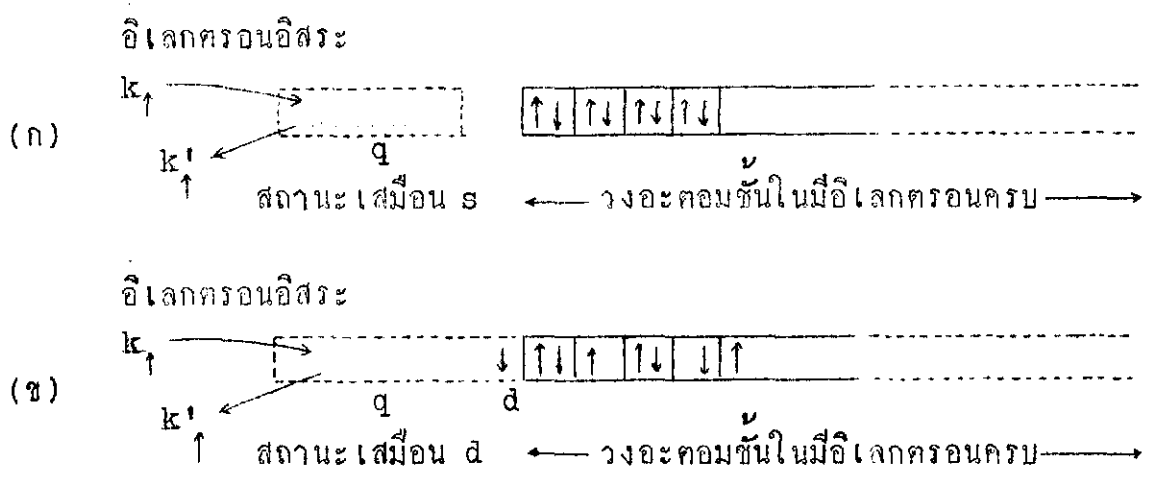
ทฤษฎีและ เอกสารการวิจัยที่เกี่ยวข้อง

สาเหตุการเกิดการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุ

พฤติกรรมของอิเล็กตรอนอิสระในโลหะเปลี่ยนแปลงได้ง่าย เมื่อได้รับการรบกวน (perturbation) เพียงเล็กน้อย เช่น เมื่อมีสิ่งเจือปนในโลหะเจือปนเป็นคณ เมื่ออิเล็กตรอนอิสระเข้ามาใกล้สิ่งเจือปน มันจะกระเจิงออกไป เพราะสิ่งเจือปนซึ่งมีสภาพเป็นลึออนจะทำให้เกิดแรงคูลอมบ์กับอิเล็กตรอนอิสระที่อยู่รอบ ๆ เมื่อเหล่าอิเล็กตรอนอิสระที่มีความเร็วต่ำเคลื่อนที่เข้าไปใกล้ลึออนของสิ่งเจือปน มันจะถูกผลักดันออกมาอย่างแรงโดยอิเล็กตรอนที่อยู่วงนอกของสิ่งเจือปน ส่วนอิเล็กตรอนความเร็วสูงจะผ่านไปอย่างรวดเร็ว อิเล็กตรอนทั้งสองพวกนี้จึงไม่มีความสำคัญในการกำบังอิทธิพลของลึออนของสิ่งเจือปน อิเล็กตรอนที่มีระดับพลังงานปานกลางพอ ๆ กับพลังงานของอิเล็กตรอนในวงโคจรนอกสุดของลึออนของสิ่งเจือปนเป็นอิเล็กตรอนที่มีความสำคัญในการกำบังอิทธิพลดังกล่าว พฤติกรรมเช่นนี้คือการกำทร (resonance) เมื่ออิเล็กตรอนอิสระเกิดการกำทร มันจะเปลี่ยนจากสถานะอิสระไปอยู่ในสถานะยึดเหนี่ยวเสมือน (virtual bound state) คือมันจะใช้เวลาชั่วคราวอยู่ภายในขอบเขตจำกัดรอบ ๆ ลึออนของสิ่งเจือปน แล้วกลับสู่สถานะอิสระซึ่งอาจจะต่างไปจากสถานะเดิมหรือเหมือนเดิมก็ได้ กระบวนการที่กล่าวมาเป็นการกระเจิงชนิดหนึ่งเรียกว่า การกระเจิงกำทร (resonance scattering)

การกำทรที่เกิดขึ้นแบ่งได้ 2 กรณี ทั้งนี้ขึ้นอยู่กับว่าสิ่งเจือปนเป็นแม่เหล็กหรือไม่เป็นแม่เหล็ก ในกรณีที่ไม่มีแม่เหล็ก สถานะเสมือน (แทนด้วย q) ทั้งภาพประกอบ 1 เกิดจากอิเล็กตรอนอิสระเข้ามาอยู่ในระดับ s ที่ว่างเปล่าของลึออนของสิ่งเจือปน ส่วนในกรณีที่ไม่มีแม่เหล็ก สถานะเสมือนเกิดจากการที่อิเล็กตรอนอิสระเข้ามาอยู่ในระดับ d หรือ f ที่มีอิเล็กตรอนอยู่แล้วในวงโคจรของอิเล็กตรอนวงนอก ๆ ของลึออน ในทั้ง 2 กรณี อิเล็กตรอนอิสระที่ตกกระทบบนอยู่ในสถานะที่มี

โมเมนตัมซึ่งแทนด้วย k เมื่อเข้าไปอยู่ในสถานะเสมือน q ชั่วคราวแล้วกลับสู่สถานะอิสระซึ่งแทนด้วย k'

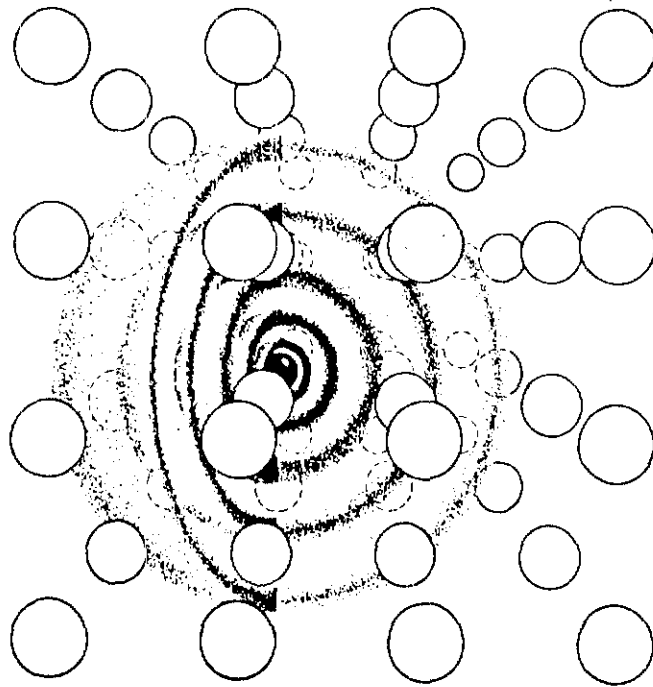


ภาพประกอบ 1 (ก) แสดงการกระเจิงกำจรในกรณีที่สิ่งเจือปนไม่เป็นแม่เหล็ก
 (ข) แสดงการกระเจิงกำจรในกรณีที่สิ่งเจือปนเป็นแม่เหล็ก

ข้อแตกต่างที่สำคัญอีกข้อหนึ่งของการกำจรทั้ง 2 กรณีคือ ในกรณีที่สิ่งเจือปนไม่เป็นแม่เหล็ก อิเล็กตรอนที่อยู่ครบในวงอะตอมใน ๆ ของอ็อนไม่มีความสำคัญในการกระเจิงเลยและอิเล็กตรอนสามารถเข้าไปอยู่ในสถานะยึดเหนี่ยวเสมือนโคโดยไม่ขึ้นกับสปินของตัวเองและของอิเล็กตรอนตัวอื่น ๆ ของอ็อนนั้น ๆ ส่วนกรณีที่สิ่งเจือปนเป็นแม่เหล็ก อิเล็กตรอนในวงอะตอมใน ๆ ของอ็อนมีความสำคัญมาก เพราะอ็อนมีสปินสุทธิ อิเล็กตรอนที่ตกกระทบก็มีสปินด้วย การกระเจิงในกรณีนี้จึงเป็นการกระเจิงที่ขึ้นกับสปิน (spin dependent scattering)

ผลการกระเจิงกำจรของอิเล็กตรอนอิสระนี้ทำให้ความหนาแน่นของประจุมีค่าต่าง ๆ กันที่ตำแหน่งต่าง ๆ ในบริเวณรอบ ๆ อ็อนของสิ่งเจือปน (ดังภาพประกอบ 2) โดยที่ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนอิสระอาจจะสม่ำเสมอคงที่หรือไม่ก็ได้ ทั้งนี้ขึ้นกับสิ่งเจือปนที่เชื่อว่า มีลักษณะสมมาตรแบบทรงกลมหรือไม่ โดยทั่วไปมักจะคิดว่าความหนาแน่นของประจุลดลงอย่างสม่ำเสมอเมื่อระยะทางจากสิ่งเจือปน

เพิ่ม แต่จริง ๆ ไม่เป็นเช่นนั้น ฟรีเทล (Friedel, 1952 : 153) เป็นคนแรกที่พบว่า ความหนาแน่นของประจุมีการแปรเปลี่ยน การแปรเปลี่ยนที่เกิดขึ้นดังกล่าวเป็นแบบคงที่ (Fixed oscillation) คือขึ้นกับระยะทางจากสิ่งเจือปนเท่านั้นและไม่ขึ้นกับเวลา ฟรีเทลยังพบว่า การแปรเปลี่ยนแบบฟรีเทลนี้มีความสำคัญในทฤษฎีโลหะผสม

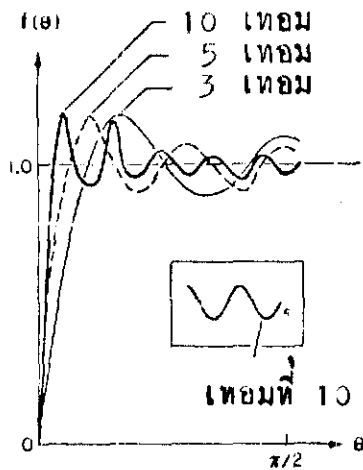


ภาพประกอบ 2 แสดงประจุรอบ ๆ สิ่งเจือปนที่ไม่เป็นแม่เหล็ก ความหนาแน่นของประจุไม่ไกลกระจายโดยทั่วอย่างสม่ำเสมอ แต่การกระจายของประจุอยู่ในลักษณะทรงกลมซ้อนกัน (halos of screening charge) โดยที่ความหนาแน่นของประจุจะเพิ่มและลดสลับกันไป

การแปรเปลี่ยนแบบฟรีเทลเกิดขึ้นได้เพราะ

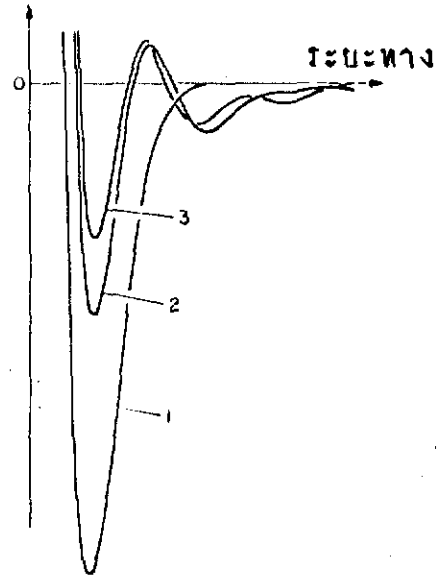
1. โมเมนตัมของอิเล็กตรอนอิสระซึ่งมีค่าต่าง ๆ กัน มีค่าสูงสุดจำกัดค่าหนึ่ง (sharp cut-off) จากค่าจำนวนใดการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุถึงภาพ

ประกอบ 3 (ก)



(ก)

ความหนาแน่นของอิเล็กตรอน



(ข)

ภาพประกอบ 3 (ก) แสดงการแปรเปลี่ยนแบบฟริเทอ ซึ่งเป็นการแปรเปลี่ยนแบบไม่ต่อเนื่องที่เกิดจากการกระจายโมเมนตัมของอิเล็กตรอนอิสระที่ไม่แน่นอนที่สุดที่มีค่าจำกัด

(ข) กราฟเส้น 1 ได้จากกรณีที่ค่าจำกัดของโมเมนตัมสิ้นสุดทันทีทันใด

กราฟเส้น 2 ได้จากกรณีที่ค่าจำกัดของโมเมนตัมค่อย ๆ ลดหายไป

กราฟเส้น 3 ได้จากกรณีที่ค่าจำกัดของโมเมนตัมค่อย ๆ ลดหายไป

ที่ละเอียดกว่ากราฟเส้น 2

ในทางคณิตศาสตร์ เมื่อเรามีสเค็พฟังก์ชัน (step function)

$$f(\theta) = \begin{cases} 1 & \text{เมื่อ } 0 < \theta < \pi \\ -1 & \text{เมื่อ } \pi < \theta < 2\pi \end{cases}$$

จากทฤษฎีฟูเรียร์ เราสามารถเขียนฟังก์ชันนี้ให้อยู่ในรูปต่อไปนี้ได้

$$f(\theta) = \frac{4}{\pi} \left(\sin \theta + \frac{1}{3} \sin 3\theta + \frac{1}{5} \sin 5\theta + \dots \right)$$

เราพิจารณาว่า แต่ละเทอมในที่นี่เกิดจากอิเล็กตรอนอิสระที่มีโมเมนตัมค่าหนึ่งหรือความยาวคลื่นค่าหนึ่ง การแปรเปลี่ยนจะเป็นถึงภาพประกอบ 3 (ก) จะเห็นว่าความหนาแน่นของประจุมีการแปรเปลี่ยนเพิ่มขึ้นและลดลงอย่างรวดเร็ว เมื่อระยะทางจากสิ่งเจือปนเพิ่ม เมื่อมีการกระจายโมเมนตัมของอิเล็กตรอนอิสระและโมเมนตัมของอิเล็กตรอนอิสระมีค่าสูงสุด ความหนาแน่นของประจุจะเปลี่ยน ถึงกราฟเส้น 2 และ 3 ของภาพประกอบ 3 (ข) ซึ่งเป็นการแปรเปลี่ยนแบบฟรีเคิล

2. เมื่อเกิดการกระเจิงของอิเล็กตรอนอิสระจากสถานะ $k \rightarrow k'$ จะมีการแทรกสอดระหว่างคลื่นอิเล็กตรอนที่เข้ามาใหม่และคลื่นอิเล็กตรอนที่ออกไป ผลของการแทรกสอดทำให้ความหนาแน่นของประจุเปลี่ยน กล่าวคือแอมพลิจูดของคลื่นอิเล็กตรอนและความหนาแน่นของอิเล็กตรอนเปลี่ยนแปลง การกระเจิงดังกล่าวอาจเขียนให้อยู่ในเทอมของการวิเคราะห์คลื่นย่อย (partial wave analysis) ได้ ซึ่งในทฤษฎีการกระเจิงโคออร์ดิเนตสูงกว่า คลื่นที่ออกไปสามารถแยกเป็นคลื่นย่อย เฟสของแต่ละคลื่นย่อยสัมพันธ์กับคลื่นตกกระทบ การเลื่อนเฟส (phase shifts) เหล่านี้จะขึ้นโดยตรงกับศักยการกระเจิง ความรู้เรื่องนี้มีควมสำคัญต่อทฤษฎีโลหะผสมอย่างเจือจางมาก

กฎผลรวมของฟรีเคิล (Friedel sum rule)

ลักษณะอันหนึ่งของการกระเจิงของอิเล็กตรอนอิสระในโลหะคือต้องเป็นไปตามกฎผลรวม (sum rule) กฎนี้เรียกว่า กฎผลรวมของฟรีเคิล (Friedel, 1952 : 153; 1958 : 287)

สมมติว่า เมื่อใส่อะตอมของสิ่งเจือปนลงในโลหะเจ้าบ้านนั้น นิวเคลียสของสิ่งเจือปนมีประจุมากกว่านิวเคลียสของโลหะเจ้าบ้านอยู่ Z ประจุส่วนเกิน Z นี้จะถูกกักขังโดยอิเล็กตรอนอิสระ ดังนั้นประจุจะมาอยู่ ณ บริเวณรอบ ๆ สิ่งเจือปนมากขึ้นในจำนวนที่พอเหมาะ เพื่อทำให้ประจุของสิ่งเจือปนที่มากเกินไบนั้นอยู่ในภาวะสมดุล

เพื่อจะได้เกิดความเป็นกลางทางไฟฟ้า

การที่จะทำให้เกิดความเป็นกลางทางไฟฟ้าได้คงใช้ประจุเท่ากับ

$$Z = \int \Delta p(r) d^3r \quad \text{หรือ} \quad Z = \int_0^{\epsilon_F} \Delta N(\epsilon) d\epsilon$$

เมื่อ $\Delta N(\epsilon)$ คือ การเปลี่ยนแปลงของความหนาแน่นของสถานะ

ϵ_F คือ พลังงานเฟอร์มี

ในกรณีที่สิ่งเจือปนมีความเข้มข้น ๆ เราสามารถเขียน $\Delta N(\epsilon)$ ให้อยู่ใน
เทอมของการเลื่อนเฟสของการกระเจิงได้ดังนี้

$$\Delta N(\epsilon) = 2\pi^{-1} \sum_l g_l d\delta_l / d\epsilon$$

เมื่อ δ_l และ g_l คือ การเลื่อนเฟสและดีเจเนอเรซี (degeneracy) ของ
เรพรีเซนเทชัน (representation) ที่มีเลขควอนตัมโมเมนตัมเชิงมุม l ตามลำดับ

เราหา Z ได้โดยการอินทิเกรต $\Delta N(\epsilon)$ จาก 0 ถึง ϵ_F ดังนี้

$$\int_0^{\epsilon_F} \Delta N(\epsilon) d\epsilon = 2\pi^{-1} \sum_l g_l \delta_l(\epsilon_F)$$

ถ้าศึกษาของสิ่งเจือปนมีลักษณะสมมาตรแบบทรงกลม ค่า $g_l = (2l+1)$

$$\text{ดังนั้น} \quad Z = 2\pi^{-1} \sum_l (2l+1) \delta_l(\epsilon_F)$$

สมการที่ได้นี้คือ กฎผลรวมของฟรีเกิล ซึ่งเป็นเงื่อนไขสำคัญ

ทฤษฎีการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุของฟรีเกิล

ในโลหะผสมที่มีสิ่งเจือปนผสมอย่างเจือจาง การแปรเปลี่ยนความหนาแน่น
ของประจุรอบ ๆ สิ่งเจือปนมีพิสัยไกล (Friedel, 1952 : 153; 1954 :
446; 1958 : 287; Kohn and Vosko, 1960 : 912) ดังนี้

$$\Delta p(\vec{r}) = \int d^3k \Delta p(\vec{k}, \vec{r}) \eta[\epsilon_F - \epsilon(\vec{k})] \quad \dots(1)$$

เมื่อ η คือ ยูนิค สเต็ป ฟังก์ชัน (unit step function) มีค่าดังนี้

$$\eta(x) = \begin{cases} 0 & \text{เมื่อ } x < 0 \\ 1 & \text{เมื่อ } x > 0 \end{cases}$$

$\Delta p(\vec{k}, \vec{r})$ คือ ความหนาแน่นของประจุที่เปลี่ยนไปเนื่องจากการกระเจิงของอิเล็กตรอนอิสระที่มีคลื่นเวกเตอร์ \vec{k} ที่ $T=0$ มีค่า

$$\Delta p(\vec{k}, \vec{r}) = |\psi^+(\vec{k}, \vec{r})|^2 + |\psi(\vec{k}, \vec{r})|^2 \quad \dots(2)$$

โดยที่ ψ^+ คือ ฟังก์ชันคลื่นที่กระเจิงไป (scattered wave function)

ψ คือ ฟังก์ชันบลอค (Bloch function) ของระบบที่ไม่ถูกรบกวน

เรากระจายฟังก์ชัน ψ^+ และ ψ ในเทอมของฟังก์ชันแวนเนียร์ (Wannier function) ได้ดังนี้

$$\psi^+(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_{\mu} B(\vec{k}, \vec{R}_{\mu}) a(\vec{r} - \vec{R}_{\mu}) \quad \dots(3)$$

$$\psi(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_{\mu} B^0(\vec{k}, \vec{R}_{\mu}) a(\vec{r} - \vec{R}_{\mu}) \quad \dots(4)$$

$$\text{ในเมื่อ } B^0(\vec{k}, \vec{R}_{\mu}) = \Omega^{\frac{1}{2}} (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_{\mu}) \quad \dots(5)$$

$$B(\vec{k}, \vec{R}_{\mu}) = \Omega^{\frac{1}{2}} (2\pi)^{-\frac{3}{2}} [\exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_{\mu}) + f(\theta) \vec{R}_{\mu}^{-1} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_{\mu})] \quad \dots(6)$$

โดยที่ $f(\theta)$ คือ แอมพลิจูดของการกระเจิง

เอาสมการ(3) ถึงสมการ(6) แทนในสมการ(2) แล้วแทนในสมการ(1)

จะได้

$$\begin{aligned} \Delta p(\vec{r}) &= \int d^3k \eta[\epsilon_F - \epsilon(\vec{k})] \sum_{\mu} [B^*(\vec{k}, \vec{R}_{\mu}) B(\vec{k}, \vec{R}_{\mu}) - B^{0*}(\vec{k}, \vec{R}_{\mu}) B^0(\vec{k}, \vec{R}_{\mu})] |a(\vec{r} - \vec{R}_{\mu})|^2 \\ &= \Omega (2\pi)^{-3} \sum_{\mu} |a(\vec{r} - \vec{R}_{\mu})|^2 \int d^3k \eta[\epsilon_F - \epsilon(\vec{k})] \\ &\quad \times [\exp(-i\vec{k} \cdot \vec{R}_{\mu}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_{\mu}) f(\theta) + \text{c.c.} + \vec{R}_{\mu}^{-2} |f(\theta)|^2] \quad \dots(7) \end{aligned}$$

เมื่อ c.c. คือ คอมเพลกซ์ คอนจูเกต (complex conjugate) ของ
เทอมทางซ้ายมือ

พิจารณาอินทิกรัลในสมการ(7) โดยใช้ระบบโคออดิเนตแบบทรงกลม
(spherical coordinate) ส่วนที่ขึ้นกับมุมคือ

$$\int \exp(-ik \cdot \underline{R}_\mu) f(\theta) d\Omega = 2\pi \int_0^\pi \exp(-ikR_\mu \cos\theta) f(\theta) \sin\theta d\theta$$

เมื่อ R_μ มีค่ามาก ๆ ผลการอินทิเกรตจะออกมาในรูปอนุกรม ในบริเวณ
ไกลจากสิ่งเจือปนจะใช้เฉพาะเทอมแรกของอนุกรมเท่านั้น คือ

$$(2\pi/ikR_\mu) [f(\pi) \exp(ikR_\mu) - f(0) \exp(-ikR_\mu)]$$

ทำนองเดียวกัน ค่าของส่วนที่ขึ้นกับมุมใน c.c. คือ

$$(-2\pi/ikR_\mu) [f(0) \exp(-ikR_\mu) - f(\pi) \exp(ikR_\mu)]$$

ส่วนอินทิกรัลสุดท้ายของสมการ(7) หาได้โดยใช้ทฤษฎีที่ศันศาสตร์ ได้ดังนี้

$$\int |f(\theta)|^2 d\Omega = 4\pi k^{-1} \text{Im } f(0)$$

เราสามารถเขียน $f(\theta)$ เสียใหม่เป็น $f(\theta) = |f(\theta)| e^{i\phi}$

โดยที่ ϕ คือ ปริมาณที่ได้จากการเลื่อนเฟส

ดังนั้นสมการ(7) เขียนได้เป็น

$$\Delta p(\vec{r}) = \Omega (2\pi)^{-3} \sum_\mu |a(\vec{r}-\underline{R}_\mu)|^2 R_\mu^{-2} \int_0^k dk k |f(k)| \sin(2kR_\mu + \phi) \dots (8)$$

ค่าอินทิกรัลใหม่นี้หาได้โดยวิธี integration by parts ซึ่งจะออกมาใน
รูปของการกระจายที่ระยะไกล (asymtotic expansion) จึงประมาณได้ว่าเทอม
แรกของการกระจาย คือค่าอินทิกรัล สมการ(8) จึงเขียนได้เป็น

$$\Delta p(\vec{r}) = \frac{1}{2} \Omega \pi^{-2} \sum_\mu |a(\vec{r}-\underline{R}_\mu)|^2 R_\mu^{-3} \cos(2k_F r + \phi) \dots (9)$$

เมื่อถึงขั้นแนวเบียร์ที่ขอบเขตที่แน่นอน จะมีเพียง เทอมเคียว เท่านั้นในผลรวมตามสมการ (9) ซึ่งอะไรใด ก็คือ เทอมที่ k มีค่าเข้าใกล้ k มากที่สุด ดังนั้นโดย การประมาณอีกครั้ง เราจะได

$$\Delta p(k) = A r^{-3} \cos(2kr + \delta)$$

ผลที่ได้ก็คือ ทฤษฎีของฟรีเกล ความหนาแน่นของประจุที่ถูกรบกวนจะแปรเปลี่ยนไปมา ขณะเดียวกันก็ลดลงอย่างช้า ๆ เมื่อระยะทางเพิ่มขึ้น การแปรเปลี่ยนเหล่านี้เป็นผลมาจากความไม่ต่อเนื่องของโมเมนตัมของอิเล็กตรอนอิสระ แคลาโมเมนตัมของอิเล็กตรอนอิสระมีความต่อเนื่องหรือเป็นฟังก์ชันที่เรียบ (smooth function) ของ k การแปรเปลี่ยนแบบพิสัยไกลก็จะไม่เกิดขึ้น

สมบัติของการแปร เปลี่ยนความหนาแน่นของประจุ

การศึกษสมบัติของการแปร เปลี่ยนความหนาแน่นของประจุกระทำไ้หลายวิธี เช่น ใช้ทฤษฎีการกระเจิงวิเคราะห์การเลื่อนเฟส (phase shift formalism) ทฤษฎีที-แมทริกซ์ (t-matrix) และทฤษฎีการตอบสนองไดอิเล็กตริก (dielectric response theory) ซึ่งทั้ง 3 วิธีนี้ให้ผลเดียวกัน

สมบัติทั่วไป

ในการใช้ทฤษฎีการกระเจิงนั้น ฟรีเกล (Friedel. 1954 : 446) เขียน Δp ในเทอมของการเลื่อนเฟสของคลื่นย่อยที่กระเจิงไปได้ โดยที่เฟสที่เปลี่ยนไปนี้หาได้จากผลสองหรือคำนวณโครงสร้างของแถบพลังงานของโลหะเจาบ้านเฮอรัค และ กอร์ดอน (Hurd and Gordon. 1968 : 2205) ได้คำนวณหาสมบัติทางไฟฟ้า ความร้อน และแม่เหล็กที่เปลี่ยนไปเนื่องจากการใส่สิ่งเจือปนลงในโลหะเจาบ้านในเทอมการเลื่อนเฟสได้ สมบัติเหล่านี้ได้แก่ ก่าตั้งไฟฟ้า-ความร้อน ความร้อนจำเพาะ และความอ่อนไหวทางแม่เหล็ก ซึ่งตรงกับผลการทดลองของ อัลเฟรด และ แวน ออสเตนเบิร์ก (Alfred and Van Ostenberg. 1967 a : 27)

การแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุอาจหาได้ใหม่จากทฤษฎีการตอบสนองไดอิเล็กตริก (Langer and Vosko. 1959 : 196) ตามทฤษฎีนี้ เมื่อใช้การประมาณแบบโทมัส-เฟอร์มี (Thomas-Fermi approximation) จะได้การแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุดังนี้

$$\Delta\rho(r) = -k_s^2 V_0(\mathbf{r}) \exp(-k_s r)$$

การแปรเปลี่ยนตั้งสมการข้างต้นได้มาโดยใช้โลหะเจือเบาที่มีความหนาแน่นประมาณเท่ากับโลหะปกติ ซึ่ง ρ ที่ระยะไกล ๆ กับสิ่งเจือปน การแปรเปลี่ยนจะเป็นแบบเอกซ์โพเนนเชียล (exponential) ส่วนที่ระยะไกลออกไปเกิน k_F^{-1} การแปรเปลี่ยนจะเป็นแบบอื่น ๆ ลง ๆ แต่เมื่อใช้การประมาณเฟสแบบสุ่ม (random phase approximation) จะได้การแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุที่ระยะไกล ๆ เป็น

$$\Delta\rho(r) \approx r^{-3} \cos 2k_F r$$

การที่การแปรเปลี่ยนขึ้นกับ r^{-3} เป็นเพราะการคิดแบบ 3 มิติ สำหรับใน 1 มิติ นั้น แชม และ แพตตัน (Sham and Patton. 1976 : 3157) พบว่าการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุอยู่ในรูป

$$\Delta\rho(r) \approx (k_F r)^{-1} \sin 2k_F r$$

ต่อมา มีไซ และ ซาวาโดวสกี (Mezei and Zawadowski. 1971 : 167) และ เบเรเรตัน (Berereton. 1972 : 681) ศึกษาการกระจายของประจุรอบสิ่งเจือปนโดยใช้ δ -แมทริกซ์ โดยวิธีนี้ ความหนาแน่นของประจุหาได้จากกรีนส์ฟังก์ชัน (Green's function) ต่อไปนี้

$$G(k, k', \omega) = G_0(k, k', \omega) + G_0(k, k', \omega) t(k, k', \omega) G_0(k, k', \omega)$$

เมื่อ $G_0(k, k', \omega)$ คือ กรีนส์ฟังก์ชันของอิเล็กตรอนอิสระในโลหะเจือเบา

$t(k, k', \omega)$ คือ δ -แมทริกซ์ของการกระเจิง

$\Delta\rho(r)$ หาได้จากแปลงแบบฟูเรียร์ (Fourier transform) ของ

$\langle c^\dagger(k) c(k) \rangle$ ซึ่งเขียนในเทอมของกรีนฟังก์ชันจะได้

$$\langle c^\dagger(k) c(k) \rangle = \pi^{-1} \int d\omega f(\omega) \text{Im} G(k, k, \omega)$$

เมื่อ $f(\omega)$ คือ ฟังก์ชันเฟอร์มี (Fermi function) โดยการอาศัยการประมาณอิเล็กตรอนอิสระ, $G_0(k, k, \omega) = \delta_{kk} (\omega - \epsilon_k)^{-1}$ และเมื่อเขียน $f(k, k, \omega)$ ให้อยู่ในรูปการเลื่อนเฟสก็จะได $\Delta p(\omega)$ ตรงกับสูตรของฟรีเคิล นอกจากนี้ลักษณะโครงสร้างช่องแถบพลังงานสามารถเขียนให้อยู่ในรูปกรีนฟังก์ชัน $G_0(k, k, \omega)$ ส่วนรายละเอียดเกี่ยวกับการกระเจิงสามารถเขียนให้อยู่ในรูป T -แมทริกซ์ วิธีนี้มีประโยชน์ในการพิจารณาโครงสร้างของแถบพลังงาน สมบัติการขึ้นกับทิศทาง (anisotropy) ของประจุ และลักษณะการที่ตักยของสิ่งเจือปนขึ้นกับคลื่นเวกเตอร์และพลังงานของอิเล็กตรอน ซึ่งในปี ค.ศ. 1973 ซุโตะ และ วาสวาริ (Suto and Vasvari, 1973 : 1548) ประสบความสำเร็จในการคำนวณหา $\Delta p(\omega)$ โดยใช้ทักยที่คำนวณได้จากโครงสร้างของแถบพลังงาน แต่ทักยของเขาใช้เฉพาะกรณีที่โลหะเจือปนและสิ่งเจือปนเป็นแบบง่าย ๆ เท่านั้น เช่นระบบ Cu-Zn เป็นต้น

เมื่อตักยของสิ่งเจือปน มีลักษณะไม่สมมาตรเชิงทรงกลมและโลหะเจือปนมีโครงสร้างของแถบพลังงานซับซ้อน สูตรการหา $\Delta p(\omega)$ ที่กล่าวมาจะเปลี่ยนแปลงไปอย่างมาก ลักษณะโครงสร้างของตักยจะเป็นตัวกำหนดตัวแปรของ $\Delta p(\omega)$ ที่ระยะใกล้กับสิ่งเจือปน แต่ที่ระยะไกล ๆ มีการเปลี่ยนแปลงน้อยมาก การคำนวณอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนและอิเล็กตรอน และโครงสร้างของแถบพลังงานทำให้การแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุขึ้นกับทิศทางและไม่เป็นคาบ

อันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนและอิเล็กตรอนทำให้ $\Delta p(\omega)$ ที่ระยะใกล้และไกลจากสิ่งเจือปนเปลี่ยนแปลง ในการคำนวณโดยที่ทฤษฎีการตอบสนองโคอีเลกทริกในขอบเขตคา-ประมาณเฟสแบบสุ่มโดยแลนเกอร์ และ วอสโค (Langer and Vosko, 1959 : 196) พบว่า $\Delta p(\omega)$ มีค่าเป็น $(1 + \xi/4)^{-2}$ เท่าของแบบฟรีเคิลสำหรับโลหะบริสุทธิ์ ξ มีค่า 0.75 - 1.50 ทั้งนี้อันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนและอิเล็กตรอนทำให้ $\Delta p(\omega)$ ลดลงถึงครึ่งหนึ่งของค่าที่ได้จากการประมาณโดยไม่

พิจารณาถึงอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนและอิเล็กตรอน แต่การเบี่ยงเบนอย่างมากนี้จะหาได้เมื่อ $k_F r < 5$ หรือภายในวงอะตอมชั้นแรก ต่อมา ซิงกวิ และคณะ (Singwi and others. 1970 : 1044) ศึกษาโดยใช้ค่าคงที่ไดอิเล็กตริกที่ถูกต้องขึ้น โดยพิจารณาทั้งอันตรกิริยาแบบคู่ออมบ์และสหสัมพันธ์แบบแลกเปลี่ยน พบว่าการแปรเปลี่ยนที่ระยะไกลมีค่าสูงขึ้นมา แต่ที่ระยะทาง $r > 5k_F^{-1}$ การแปรเปลี่ยนยังคงเดิม

ส่วนโครงสร้างของผิวเฟอร์มิ ที่ขึ้นกับทิศทางนั้น มีผลอย่างมากต่อสมบัติการเป็นคาบของการแปรเปลี่ยนของประจุ นอกจากนี้แล้วการสลายของ $\Delta\rho(r)$ ยังขึ้นอยู่กับจำนวนสถานะของการกระเจิงของอิเล็กตรอนจากภายในไปสู่ภายนอกผิวเฟอร์มิ เกี่ยวกับเรื่องนี้ โรท และคณะ (Roth and others. 1966 : 519) ได้ทำการศึกษาพบว่า เมื่อผิวเฟอร์มิเป็นแบบ 2 ระนาบ การสลายจะเป็นแบบ r^{-1} และผิวเฟอร์มิที่เป็นแบบทรงกระบอก การสลายจะเป็นแบบ r^{-2} ต่อมา โคลริดจ์ และคณะ (Coleridge and others. 1972 : 1999) พบว่าอิเล็กตรอนที่มีโมเมนตัมเชิงมุมต่าง ๆ กัน ทำให้การแปรเปลี่ยนเป็นแบบ s ในทิศทางหนึ่งและแบบ p ในอีกทิศทางหนึ่ง

การแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุที่ระยะไกลกับสิ่งเจือปน

สูตรของฟรีเคิลใช้ได้ดีที่ระยะไกล แต่ที่บริเวณใกล้ ๆ กับสิ่งเจือปน สักของสิ่งเจือปนที่ขึ้นกับพลังงานและเวกเตอร์ k และแถบพลังงานของอิเล็กตรอนอิสระในโลหะเจือปนทำให้สูตรของฟรีเคิลเปลี่ยนไป อัลเฟรด และ แวน ออสเตนเบิร์ก (Alfred and Van Ostenberg. 1967 b : 569) หา $\Delta\rho(r)$ ที่ระยะไกลโดยใช้วิธีการคำนวณคล้ายกับที่ฟรีเคิลเคยหาไว้ในกรณีระยะไกล โดยได้ว่า

$$\Delta\rho(r) = A r^{-3} \cos(2k_F r + \phi) + B r^{-4} \cos(2k_F r + \xi)$$

จากผลการคำนวณของเขาแสดงว่า การแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุที่ระยะไกลขึ้นอยู่กับ r^{-4} แต่เมื่อ r มีค่าน้อยมาก ๆ การแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุจะอยู่ในรูป r^{-3} ผลลัพธ์ที่ได้จึงอาจไม่ถูกต้อง ในปี ค.ศ. 1972 มีไซ และ

กรูเนอร์ (Mezei and Gruner. 1972 : 1465) หา $\Delta\rho(r)$ โดยวิธีอื่น เขาได้พิจารณาว่าแอมพลิจูดของการกระเจิงกำรเป็นแบบลอเรนซ์เซียน (Lorentzian resonance) และได้เสนอทฤษฎีสำหรับหาการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุดังนี้

$$\Delta\rho(r) = \int (2l+1)\pi^{-1} \text{Im} \left\{ t_l^{(0)}(r, \omega+ib) \right\} f(\omega) d\omega$$

และพบว่า ทั้งแอมพลิจูดและเฟสของ $\Delta\rho(r)$ อาจหาได้เป็นฟังก์ชันของระยะทาง และมีการเปลี่ยนแปลงเกิดขึ้นอย่างมากในบริเวณใกล้ ๆ สิ่งเจือปนและจะมากขึ้นถ้าความกว้างและตำแหน่งของการกำรมีค่าน้อย จากการทดลอง แอมพลิจูดของ $\Delta\rho(r)$ ที่ขึ้นกับระยะทางในกรณีที่มีการกำรเป็นแบบลอเรนซ์เซียนลดลงอย่างรวดเร็วกว่าการกำรแบบธรรมดา ต่อมา ซลาติก และ กรูเนอร์ (Zlatić and Gruner. 1977. : L87) คำนวณหา $\Delta\rho(r)$ โดยใช้การประมาณ LSF ของแบบจำลองแอนเดอร์สัน ปรากฏว่าได้ผลความหนาแน่นสถานะของอี-อิเล็กตรอนตรงกับผลการทดลองของกรูเนอร์ และ ซาวาโควสกี (Mezei and Zawadowski. 1974 : 1497) และ $\Delta\rho(r)$ ลดลงอย่างรวดเร็วที่ระยะใกล้กับสิ่งเจือปน

การแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุที่อุณหภูมิสูงกว่าศูนย์สัมบูรณ์

สูตรของฟรีเคิลใช้ได้เฉพาะที่ระยะไกลจากสิ่งเจือปนและอุณหภูมิต้องเป็นศูนย์สัมบูรณ์ควย เมื่ออุณหภูมิเป็นค่าอื่น นิวเฟอร์มีจะเลื่อนลงทำให้ $\Delta\rho(r)$ มีค่าลดลง ผลพหุนองนี้อาจเกิดจากการที่ระยะอิสระเฉลี่ยมีค่าจำกัด (finite mean free path, λ) ซึ่งกรณีนี้เกิดจากการที่มีสิ่งเจือปนมีความเข้มข้นสูงในโลหะเจาบางหรือไม้ก็เกิดจากการกระเจิงของอิเล็กตรอนโดยโฟนอน ผู้ที่ทำการวิจัยเกี่ยวกับเรื่องนี้ ไคแก เดอ เจนเนส (De Gennes. 1962 : 975) และ บีล โมนอค (Beal Monod. 1967 a : 1261) บีล โมนอคได้หา $\Delta\rho(r)$ ที่ลดลงได้โดยใช้ฟังก์ชันโคอีเลกตริก เมื่อ $T \neq 0$ ได้ผลดังนี้

$$\Delta\rho_T(r) = \Delta\rho_{T=0}(r) \frac{Y/R}{\text{sh}(Y/R)} \quad ; \quad R = k_F (2\pi k_B T)^{-1}$$

จากสูตรข้างกล่าว แสดงว่าที่ระยะไกล ๆ จากสิ่งเจือปน $\Delta\rho(r)$ ลดลงเป็นศูนย์ แต่ที่ระยะไกล ๆ $\Delta\rho(r)$ เปลี่ยนแปลงน้อยมาก ส่วนเคอ เจนเนสพบวาระยะอิสระเฉลี่ยเมื่ออุณหภูมิไม่เป็นศูนย์มีผลต่อค่าคงที่ไดอิเล็กตริก โดยศึกษาจากการเปลี่ยนแปลงของฟังก์ชันไดอิเล็กตริก ในกรณีที่สิ่งเจือปนมีความเข้มข้นจำกัด เขาหา $\Delta\rho(r)$ ได้ดังนี้

$$\Delta\rho_{\lambda}(r) = \Delta\rho_{\lambda=\infty}(r) \exp(-r/\lambda)$$

ซึ่งหมายความว่า $\Delta\rho(r)$ จะลดลงแบบเอ็กซ์โพเนนเชียล แต่สมการของเคอ เจนเนสได้มาโดยสมมติว่า ระยะอิสระเฉลี่ยได้จากการกระเจิงพหุคูณของอิเล็กตรอนโดยสิ่งเจือปนที่อยู่กระจัดกระจายแบบสุ่มและการคำนวณนี้พิจารณาถึงระยะอิสระเฉลี่ยที่เกิดจากการกระเจิงของอิเล็กตรอนโดยโฟนอนด้วย $\Delta\rho(r)$ จึงเปลี่ยนแปลงเพราะเหตุทั้งสองนี้ มากกว่าเหตุจากการเลือนลางของผิวเฟอร์มิ

ศักยของสิ่งเจือปนที่ขึ้นกับอุณหภูมิ

การที่วงอะตอม d หรือ f ของสิ่งเจือปนมีอิเล็กตรอนไม่ครบจะมีผลโดยตรงต่อการกระเจิงของอิเล็กตรอนโดยสิ่งเจือปน จากการศึกษาของฮีเกอร์ (Heeger. 1969 : 184) และคอนโด (Kondo. 1969 : 283) พบว่าทำให้เกิดผลของคอนโด (Kondo effect) และทำให้ศักยที่ขึ้นกับพลังงานลดลงอย่างรวดเร็วและทำให้ศักยที่ขึ้นกับอุณหภูมิมียค่าสูงขึ้น เมื่อเร็ว ๆ นี้ ซลาติก และ กรูเนอร์ (Zlatic and Gruner. 1977 : E87) ใช้วิธีการประมาณ LSF ของแบบจำลองแอนเคอร์สันศึกษาการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุที่ขึ้นกับอุณหภูมิที่ระยะต่าง ๆ ในโลหะผสม Al-3d โดยพิจารณาผลดังกล่าวด้วย พบว่ามีค่าดังนี้

$$\Delta\rho(r,T) = \Delta\rho(r,0) [1 - (T/\theta_r)^2]$$

เมื่อ θ_r คือ อุณหภูมิเชิงลักษณะ (characteristic temperature) มีค่าผกผันกับระยะทาง θ_r ที่ระยะอนันต์ θ_r มีค่า $(2/\pi^2)^{-1/2}$ ผลการศึกษาของเขาแสดงว่า $\Delta\rho(r,T)$ ลดลงแบบพาราโบลาจากค่า $T = 0$

บทที่ 3

วิธีดำเนินการ

ในการศึกษาการเปลี่ยนแปลงความหนาแน่นของอิเล็กตรอนอิสระในบริเวณรอบสิ่งเจือปนแบบต่าง ๆ นั้น มักถือว่าความหนาแน่นของอิเล็กตรอนอิสระของโลหะเจือปนที่บริเวณระดับพลังงานเฟอร์มีมีค่าคงที่คือ $N(0)$ และความหนาแน่นของอิเล็กตรอนอิสระใกล้สิ่งเจือปนขึ้นกับลักษณะการกระเจิงของอิเล็กตรอนอิสระว่าจะเป็นแบบ s หรือแบบ d การคำนวณในที่นี้จะใช้แบบทั่ว ๆ ไป คือการกระเจิงแบบ 1 (การกระเจิงที่เกิดขึ้นจริง ๆ นั้นเป็นแบบ d)

ถ้าเราพิจารณาระบบที่ประกอบด้วยโลหะเจือปนที่มีสิ่งเจือปนแบบคอนโดคสมอยู่ เราอาจบรรยายพฤติกรรมทางทฤษฎีของระบบโคควยแบบจำลองคอนโด (Kondo model) ซึ่งมีแฮมิลโทเนียนดังนี้

$$H = H_s + H_d + H_u + H_{sd}$$

H_s คือ แฮมิลโทเนียนของ s-อิเล็กตรอน (s-electron) หรืออิเล็กตรอนอิสระของโลหะเจือปน

$$H_s = \sum_{k\sigma} \epsilon_{k\sigma} a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma}$$

$\epsilon_{k\sigma}$ คือ พลังงานของ s-อิเล็กตรอนที่มีโมเมนตัม k

$a_{k\sigma}, a_{k\sigma}^+$ คือ ตัวปฏิบัติการทำลายและสร้าง (annihilation and

creation operators) อิเล็กตรอนอิสระที่มีโมเมนตัม k และสปิน σ ตามลำดับ

H_d คือ แฮมิลโทเนียนของ d-อิเล็กตรอน (d-electron) ของสิ่งเจือปน

$$H_d = E_d^0 \sum_{i\sigma} n_{di\sigma}$$

E_d^0 คือ พลังงานของ d-อิเล็กตรอน และ $n_{d\sigma} = d_{\sigma}^+ d_{\sigma}$

d_{i6}, d_{i6}^\dagger คือ ศัพท์ปฏิบัติการทำลายและสร้างดี-อิเล็กตรอนของสิ่งเจือปนที่มีสปิน 6 ตามลำดับ

H_U คือ แฮมิลโทเนียนที่เกิดจากอันตรกิริยาระหว่างดี-อิเล็กตรอนที่มีสปินตรงกันข้าม

$$H_U = U \sum_i n_{di\uparrow} n_{di\downarrow}$$

U คือ อันตรกิริยาลักษณะคูลอมบ์ระหว่างดี-อิเล็กตรอน

$n_{di\uparrow}, n_{di\downarrow}$ คือ จำนวนดี-อิเล็กตรอนที่มีสปินขึ้นและสปินลงตามลำดับ

H_{sd} คือ แฮมิลโทเนียนที่เกิดจากอันตรกิริยาระหว่างเอสและดี-อิเล็กตรอน

$$H_{sd} = \sum_{k6} V_{kd} (a_{k6}^\dagger d_{i6} + h.c.)$$

V_{kd} คือ อันตรกิริยาสมระหว่างเอสและดี-อิเล็กตรอน (s - d mixing interaction)

$h.c.$ คือ เฮอร์มิเทียน คอนจูเกต (Hermitian conjugate) ของ $a_{k6}^\dagger d_{i6}$ มีค่า $d_{i6}^\dagger a_{k6}$

การคำนวณหาการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุในบริเวณรอบสิ่งเจือปนแบบคอนโจะดำเนินการดังนี้

1. หากความหนาแน่นของอิเล็กตรอนอิสระที่ตำแหน่ง r' จากสิ่งเจือปนจาก

$$\rho(r', \omega) = -\bar{n}^{-1} \text{Im } \alpha(r, r', \omega)$$

เมื่อ $\alpha(r, r', \omega)$ คือ กรีนฟังก์ชันของอิเล็กตรอนอิสระที่สมนัยกับมวลยังผล (effective mass) m^*

2. หากกรีนฟังก์ชันของอิเล็กตรอนเดี่ยวที่เคลื่อนที่ผ่านอะตอมของสิ่งเจือปน

2.1 ในกรณีที่มีตำแหน่ง (coordinate space) เป็นตัวแปร

$$G_e(r, r', \omega) = G_{e_0}(r, r', \omega) + G_{e_0}(r, \omega) t_e(\omega) G_{e_0}(r', \omega)$$

เมื่อ G_{e_0} คือ กรีนส์ฟังก์ชันของอิเล็กตรอนอิสระในโลหะเจือบ้าน

$t_e(\omega)$ คือ ที-แมทริกซ์ของการกระเจิง $= v^2 G_d(\omega)$

$G_d(\omega)$ คือ กรีนส์ฟังก์ชันของดี-อิเล็กตรอน

v คือ อินตริกิริยาสมระหว่างเอสและดี-อิเล็กตรอน

2.2 ในกรณีที่มีโมเมนตัม (momentum space) เป็นตัวแปร

$$G(\vec{k}, \vec{k}', i\omega_n) = G^0(\vec{k}, \vec{k}', i\omega_n) \delta(\vec{k} - \vec{k}') + G^0(\vec{k}; i\omega_n) t_{kk'}(i\omega_n) G^0(\vec{k}'; i\omega_n)$$

เมื่อ $\delta(\vec{k} - \vec{k}')$ คือ ไดแรค เดลต้า ฟังก์ชัน (Dirac delta function)

$G^0(\vec{k}; i\omega_n)$ คือ กรีนส์ฟังก์ชันของอิเล็กตรอนอิสระในโลหะเจือบ้าน

$$G^0(\vec{k}; i\omega_n) = (i\omega_n - \tilde{\epsilon})^{-1}; \quad \tilde{\epsilon} = \epsilon_k - \epsilon_F$$

3. หากกรีนส์ฟังก์ชันของอิเล็กตรอนอิสระที่มีโมเมนตัมเชิงมุม l

$$G_l(r, \omega) = - (m^*/2\epsilon r) [ik_\omega r h_l^{(1)}(k_\omega r) - p_l(k_\omega r)^{-2}]$$

เมื่อ l คือ เลขควอนตัมโมเมนตัมเชิงมุม

p_l คือ ค่าคงที่

k_ω คือ $[2m^*(\omega + \epsilon_F)]^{1/2} = k_F \omega_0$ เมื่อ $\omega_0 = (1 + \omega/\epsilon_F)^{1/2}$

$h_l^{(1)}$ คือ ฟังก์ชันเบสเซลแบบทรงกลม (Spherical Bessel function)

ชนิดที่ 3 ซึ่งเมื่อ $x > 1$ เราจะได้ $x h_l^{(1)}(x) = -i \exp i[x - \frac{1}{2} l \pi + \phi(x)]$

4. หากกรีนส์ฟังก์ชันกัณฑ์แปลง (modified Green's function)

$$q_{\ell}^{\ell}(r; \omega + i\delta) = (2\pi)^{-3} \int d^3k j_{\ell}(\vec{k} \cdot \vec{r}) q_{\ell}^{\ell}(\vec{k}, i\omega_n) F(k)$$

เมื่อ j_{ℓ} คือ ฟังก์ชันเบสเซลแบบทรงกลม ชนิดที่ 2

$$F(k) \text{ คือ ฟังก์ชันคัทออฟ (cutoff function) } = \frac{\Gamma^2}{\Gamma^2 + \epsilon^2}$$

5. ใช้ที่-แมทริกซ์ของการกระเจิงของยามาดา และ โยซิดะ (Yamada and Yosida. 1975 : 970)

$$t_{\ell}(\omega) = \frac{\Gamma}{\pi N(\omega) [\omega + i\Gamma \operatorname{sgn} \omega - E_d - \Sigma(\omega)]}$$

$$\text{เมื่อ } N(\omega) = m^* k_F (2\pi)^{-1}$$

Γ คือ พลังงานของการก่กร

$\Sigma(\omega)$ คือ พลังงานในตนเอง (self-energy) ของอี-อิเล็กตรอน

$$\Sigma(\omega) = R(\omega) + iI(\omega)$$

$$R(\omega) = -(\tilde{x}_{\uparrow\uparrow} - 1)\omega \text{ และ } I(\omega) = -\frac{1}{2\Gamma} \operatorname{sgn} \omega \tilde{x}_{\uparrow\uparrow}^2 (\omega^2 + \tilde{x}_{\uparrow\uparrow}^2)$$

$\tilde{x}_{\uparrow\uparrow}$ คือ สหสัมพันธ์ระหว่างสปินของอี-อิเล็กตรอนที่มีสปินต่างกัน

$\tilde{x}_{\uparrow\uparrow}$ คือ สหสัมพันธ์ระหว่างสปินของอี-อิเล็กตรอนที่มีสปินเหมือนกัน

$\operatorname{sgn} \omega$ คือ สเต็มฟังก์ชัน มีสมบัติดังนี้

$$(d/d\omega) = 2 \delta_{\ell}(\omega)$$

$$\operatorname{sgn} \omega = \begin{cases} 1 & \text{เมื่อ } \omega > 0 \\ -1 & \text{เมื่อ } \omega < 0 \end{cases}$$

6. หากการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุจากผลต่างระหว่างความหนาแน่นของอี-อิเล็กตรอนอิสระ เมื่อโลหะจับกับบริสุทธ์และเมื่อถูกรบกวนโดยสิ่งเจือปน

7. พิจารณาผลการคำนวณที่ระยะไกลและไกลสิ่งเจือปน ทั้งที่อุณหภูมิศูนย์สัมบูรณ์และสูงกว่าศูนย์สัมบูรณ์

ผลการวิจัย

การคำนวณโดยการประมาณแบบฟรีเทิล

ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนอิสระที่ได้จากการคำนวณของมิไซ และ ซาวาโควสกี (Mezei and Zawadowski. 1971 : 167) มีค่าดังนี้

$$\rho(r, \omega) = -\pi^{-1} \lim_{r' \rightarrow r} \text{Im } G(r, r', \omega) \quad \dots(1)$$

ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนอิสระทั่วทุกสถานะหาได้โดยอินทิเกรตสมการ

(1) จาก $-\infty$ ถึง

$$\rho(r, T) = -\pi^{-1} \lim_{r' \rightarrow r} \text{Im} \int_{-\infty}^{\epsilon_F} d\omega f(\omega) G(r, r', \omega) \quad \dots(2)$$

เมื่อ $f(\omega)$ คือ ฟังก์ชันเฟอร์มี $= (\exp[(\omega - \epsilon_F)/k_B T] + 1)^{-1}$

$G(r, r', \omega)$ คือ กรีนฟังก์ชันของอิเล็กตรอนอิสระที่มีโมเมนตัมเชิงมุม l ขณะที่เคลื่อนที่ผ่านสิ่งเจือปน จะเขียนได้เป็น

$$G_l(r, r', \omega) = G_{l0}(r, r', \omega) + G_{l0}(r, \omega) t_l(\omega) G_{l0}(r', \omega) \quad \dots(3)$$

นำสมการ(3) แทนในสมการ(2) แล้วแยกเป็น 2 อินทิกรัล

$$\rho(r, T) = \rho_0(r, T) - \pi^{-1} (2l+1) \lim_{r' \rightarrow r} \int_{-\infty}^{\epsilon_F} d\omega f(\omega) G_{l0}(r, \omega) t_l(\omega) G_{l0}(r', \omega)$$

เมื่อ $\rho_0(r, T)$ คือ ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนอิสระเมื่อยังไม่ถูกรบกวนโดยสิ่งเจือปน

$$\rho_0(r, T) = -\pi^{-1} \lim_{r' \rightarrow r} \int_{-\infty}^{\epsilon_F} d\omega f(\omega) G_{l0}(r, r', \omega)$$

$t(\omega)$ คือ ที-แมทริกซ์ของการกระเจิง (ค่าและสมบัติของที-แมทริกซ์
ดังกล่าว ได้แสดงไว้ในภาคผนวก ก)

ผลต่างระหว่าง $p(r,r)$ และ $p_0(r,r)$ คือการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของ
ประจุ

$$\Delta p(r,r) = -(2l+1) \pi^{-1} \text{Im} \int_{-\infty}^{\epsilon_F} d\omega t(\omega) t_l(\omega) g_{l_0}^2(r,\omega) \quad \dots(4)$$

จากสมการ (4) ที่อนุกรมมีศูนย์กลางที่ $t(\omega)$ ของอินทิกรัลช่วง $-\infty$ ถึง 0
มีค่าเป็นศูนย์ ช่วง 0 ถึง ϵ_F มีค่าเป็น 1

$$\Delta p(r,0) = -(2l+1) \pi^{-1} \text{Im} \int_{-\epsilon_F}^0 d\omega t_l(\omega) g_{l_0}^2(r,\omega) \quad \dots(5)$$

$$g_{l_0}^2(r,\omega) = -\pi N(\omega) (k_F)^{-1} \left[\exp(i [k_F r - \frac{1}{2} l \pi + \phi(k_\omega r)]) - p_l(k_\omega r)^{-2} \right] \quad \dots(6)$$

ที่ระยะไกลจากสิ่งเจือปน ($k_F r \gg 1$) เทอม $(k_\omega r)^{-2}$ และ $\phi(k_\omega r) \approx 0$
ดังนั้นเมื่อแทนสมการ (6) ลงในสมการ (5) จะได้

$$\Delta p(r,0) = -(2l+1) \pi N^2(\omega) (k_F)^{-2} \text{Im} \int_{-\epsilon_F}^0 d\omega t_l(\omega) \exp(2ik_F r \omega_0 - i l \pi) \quad \dots(7)$$

ที่ระยะไกล ($r \gg \xi_F = v_F / \Gamma$) เทอม $\exp(2ik_F r \omega_0)$ ซึ่งเป็นฟังก์ชันของ ω
จะแปรเปลี่ยนไปมาอย่างรวดเร็วเมื่อเทียบกับอัตราการแปรเปลี่ยนของ $t_l(\omega)$ ดังนั้น
ตาม Riemann lemma อินทิกรัลดังกล่าวจะเป็นศูนย์ทุกแห่งยกเว้นที่ขีดจำกัดบนของ
อินทิกรัล ดังนั้นอินทิกรัลจึงมีค่าเฉพาะที่ $\omega = 0$

$$\begin{aligned} \Delta p(r,0) &= -(2l+1) \pi N^2(\omega) (k_F)^{-2} \text{Im} \left\{ \frac{t_l(\omega) \exp(2ik_F r \omega_0 - i l \pi)}{(d/d\omega) (2ik_F r \omega_0)} \right\}_{\omega=0} \\ &= -(2l+1) \pi N^2(\omega) (k_F)^{-2} \text{Im} \left\{ (v/2ir) t_l(0) \exp(2ik_F r - i l \pi) \right\} \end{aligned}$$

แทนค่า $t(\omega)$ ด้วยสมการ (ก4) ในภาคผนวก ก แล้วหาส่วนจินตภาพและจัด
สมการใหม่ จะได้

$$\Delta p(r,0) = - (2\ell+1) N(\omega) \epsilon_F (k_F) \frac{-3}{(E_d^2 + \Gamma^2)} \left[E_d \cos(2k_F r - \ell\pi) - \Gamma \sin(2k_F r - \ell\pi) \right]$$

$$= - (2\ell+1) N(\omega) \epsilon_F (k_F) \frac{-3}{(E_d^2 + \Gamma^2)} E_d^{\frac{1}{2}} \cos(2k_F r - \ell\pi + \phi)$$

เมื่อ $\sin \phi = \Gamma / (E_d^2 + \Gamma^2)^{\frac{1}{2}}$ และ $\cos \phi = E_d / (E_d^2 + \Gamma^2)^{\frac{1}{2}} \dots (8)$

แทนค่า $N(\omega)$ และ ϵ_F ด้วย $m^* k_F / 2\pi^2$ และ $k_F^2 / 2m^*$ ตามลำดับ เราจะได้

$$\Delta p(r,0) = - (2\ell+1) (2\pi)^{-1} \sin \phi r^{-3} \cos(2k_F r - \ell\pi + \phi) \dots (9)$$

จากสมการนี้แสดงให้เห็นว่า $\Delta p(r,0) \propto r^{-3} \cos 2k_F r$ ผลลัพธ์นี้สอดคล้องกับผลงานวิจัยของฟรีเดล (Friedel, 1958 : 287)

มีไซ และ กรูเนอร์ (Mezei and Gruner, 1972 : 1465) ได้แสดงที่แมทริกซ์ในรูปการเลื่อนเฟส $\delta_\ell(\omega)$ ไว้ดังนี้

$$\epsilon_N(\omega) \delta_\ell(\omega) = - \sin \delta_\ell(\omega) \exp[i\delta_\ell(\omega)] \dots (10)$$

จากสมการนี้ เราพิสูจน์ (ในภาคผนวก ข) ได้ว่า $\delta_\ell(\omega) = \phi$ ดังนั้น

$$\Delta p(r,0) = - (2\ell+1) (2\pi)^{-1} \sin \delta_\ell(\omega) r^{-3} \cos [2k_F r - \ell\pi + \delta_\ell(\omega)] \dots (11)$$

ผลลัพธ์ที่ได้นี้ตรงกับที่ฟรีเดล (Friedel, 1954 : 1446) เคยหาไว้โดยการใช้อนุกรมการกระเจิง

ค่า $\Delta p(r,0)$ ที่คำนวณได้ตามสมการ(9) นั้น เราประมาณว่าเทอม $\phi(k_\omega r)$ ของสมการ(6) มีค่าเป็นศูนย์ และอินทิกรัลในสมการ(7) หาโดยการใช่วิธี Riemann lemma แทนค่า $\phi(k_\omega r)$ ด้วยค่าคงที่ $\phi(k_F)$ และหาค่าอินทิกรัลโดยวิธี integration by parts ค่า $\Delta p(r,0)$ ที่คำนวณได้จะมีความแน่นอนยิ่งขึ้น ดังนั้นจากสมการ(7) เราจะได้

$$\Delta p(r,0) = - (2\ell+1) \epsilon_N^2(\omega) (k_F)^{-2} \text{Im} \int_{-\epsilon_F}^0 d\omega t_\ell(\omega) \exp(i[2k_\omega r - \ell\pi + 2\phi(k_F)]) \dots (12)$$

ให้ $I(r)$ คือ ส่วนจินตภาพของอินทิกรัลในสมการ (12)

$$\begin{aligned}
 y^2 &= 2m^*(\epsilon_F + \omega) \quad \rightarrow \quad d\omega = (y/m^*) dy \\
 I(r) &= \frac{1}{m^*} \operatorname{Im} \int_0^{k_F} dy y^2 t[(y^2/2m^*) - \epsilon_F] \exp(i[2ry - l\epsilon + 2\phi(k_F r)]) \\
 &= \frac{1}{m^*} \operatorname{Im} \left\{ t \left(\frac{y^2}{2m^*} - \epsilon_F \right) \left[\frac{y}{2ir} \exp(i[2ry - l\epsilon + 2\phi(k_F r)]) - \frac{1}{(2ir)^2} \exp(i[2ry - l\epsilon + 2\phi(k_F r)]) \right] \right\} \Bigg|_0^{k_F} \\
 &= -\frac{1}{2m^* ir} \left\{ t' \left(\frac{y^2}{2m^*} - \epsilon_F \right) \frac{y^2}{2ir} \exp(i[2ry - l\epsilon + 2\phi(k_F r)]) \right\} \Bigg|_0^{k_F} \\
 &= \operatorname{Im} \left\{ t(i0^+) \frac{k_F}{2im^* r} \exp(i[2k_F r - l\epsilon + 2\phi(k_F r)]) + t'(i0^+) \frac{1}{4m^{*2} r^2} \exp(i[2k_F r - l\epsilon + 2\phi(k_F r)]) \right. \\
 &\quad \left. + t'(i0^+) \frac{k_F^2}{4m^{*2} r^2} \exp(i[2k_F r - l\epsilon + 2\phi(k_F r)]) \right\} \\
 &= \operatorname{Im} \left\{ [t(i0^+) (-i) \frac{\epsilon_F}{k_F} + t(i0^+) \frac{\epsilon_F}{2(k_F)^2} - t'(i0^+) \frac{\epsilon_F^2}{(k_F)^2}] \exp(i[2k_F r - l\epsilon + 2\phi(k_F r)]) \right\}
 \end{aligned}$$

แทนค่า $t(i0^+)$ และ $t'(i0^+)$ ด้วยสมการ (ก4) และ (ก5) ในภาคผนวก ก ตามลำดับ แล้วหาส่วนจินตภาพและจัดสมการใหม่

$$I(r) = \frac{\epsilon_F \Gamma}{(k_F) \kappa N(\omega) (E_d^2 + \Gamma^2)} \left(A(r) \cos[2k_F r - l\epsilon + 2\phi(k_F r)] - B(r) \sin[2k_F r - l\epsilon + 2\phi(k_F r)] \right)$$

$$\text{เมื่อ} \quad A(r) = E_d - \left[\frac{1}{2} \Gamma + 2\epsilon_F \Gamma E_d \tilde{\chi}_{\uparrow\uparrow} / (E_d^2 + \Gamma^2) \right] (k_F r)^{-1}$$

$$B(r) = \Gamma + \left[\frac{1}{2} E_d + \epsilon_F \chi_{\uparrow\uparrow} (E_d^2 - \Gamma^2) / (E_d^2 + \Gamma^2) \right] (k_F r)^{-1}$$

$$I(r) = \frac{\epsilon_F \Gamma [A^2(r) + B^2(r)]^{\frac{1}{2}}}{(k_F) \kappa N(\omega) (E_d^2 + \Gamma^2)} \cos[2k_F r - l\epsilon + 2\phi(k_F r) + \alpha(r)]$$

$$= \frac{\epsilon_F \sin \phi_F(\omega) a(r)}{(k_F) N(\omega) \kappa} \cos[2k_F r - l\epsilon + 2\phi(k_F r) + \alpha(r)]$$

$$\text{เมื่อ} \quad \tan \alpha(r) = B(r)/A(r) \quad \text{และ} \quad a(r) = [A^2(r) + B^2(r)]^{\frac{1}{2}} / (E_d^2 + \Gamma^2)^{\frac{1}{2}}$$

แทน $I(r)$ ลงในสมการ (12) จะได้

$$\Delta p(r,0) = - (2l+1) (2l)^{-2} \sin^2(\theta_0) d(r) r^{-3} \cos[2k_F r - 2l\pi + 2\phi(k_F) + \alpha(r)] \dots (13)$$

สมการที่ได้นี้คือ corrected Friedel formula ซึ่งมีความถูกต้องกว่าสูตรของฟรีเกล เนื่องจากมีเฟสและแอมพลิจูดที่ขึ้นกับระยะทางคือ $2\phi(k_F) + \alpha(r)$ และ $\alpha(r)$ ตามลำดับ และผลลัพธ์นี้ตรงกับผลงานวิจัยของมีไซ และ กรูเนอร์ (Mezi and Gruner. 1972 : 1465)

การคำนวณโดยพิจารณาถึงผลของอันตรกิริยาระหว่างเอสและอี-อิเล็กตรอน

ในการคำนวณโดยการประมาณแบบฟรีเกล นั้น เราไม่ได้อันตรกิริยาระหว่างเอสและอี-อิเล็กตรอน, v_{kd} ซึ่งมีบทบาทสำคัญที่ระยะไกล ๆ สิ่งเจือปนทั้งนี้การแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุที่คำนวณได้จึงถูกต้องเฉพาะที่ระยะไกลจากสิ่งเจือปนและที่อุณหภูมิศูนย์สัมบูรณ์เท่านั้น ในการคำนวณต่อไปนี้เราจะพิจารณาอันตรกิริยาดังกล่าวด้วย ซึ่งจะช่วยให้เราสามารถหาการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุที่ตำแหน่งต่าง ๆ และอุณหภูมิต่าง ๆ กันได้

จากแฮมิลโทเนียนของระบบคอนโด แฮมิลโทเนียนส่วนที่เกิดจากอันตรกิริยาระหว่างเอสและอี-อิเล็กตรอนคือ

$$H_{sd} = \sum_{ikb} v_{kd} (a_{kb}^\dagger d_{ib} + h.c.)$$

$$\text{เมื่อ } v_{kd} = \sqrt{4\pi} v_{lm}(\vec{k}) F(k) \dots (14)$$

$$F(k) \text{ คือ ฟังก์ชันคัตออฟ } = \frac{2}{\Gamma(\Gamma + \frac{1}{2})}$$

y_{lm} คือ spherical harmonics

ขณะที่เกิดอันตรกิริยาระหว่างเอสและอี-อิเล็กตรอน กรีนส์ฟังก์ชันของอิเล็กตรอนเดี่ยวที่เคลื่อนที่ผ่านสิ่งเจือปนในเทอมแอมพลิจูดของการกระเจิง $t_{kk'}(i\omega)$ คือ

$$G(\vec{k}, \vec{k}'; i\omega_n) = G^0(\vec{k}, \vec{k}'; i\omega_n) \delta(\vec{k} - \vec{k}') + G^0(\vec{k}; i\omega_n) t_{kk'}(i\omega_n) G^0(\vec{k}'; i\omega_n) \dots (15)$$

โดยที่ $t_{kk'}(i\omega_n) = V_{kd} G_d(i\omega_n) V_{k'd}$

แทน V_{kd} ในสมการ(14) จะได้

$$t_{kk'}(i\omega_n) = 4\pi V_d^2 G_d(i\omega_n) \sum_{m=-l}^l (-1)^m y_{l-m}(\vec{k}) F(k) y_{lm}(\vec{k}') F(k') \dots (16)$$

นำสมการ(16) แทนในสมการ(15) แล้วคูณด้วย $(2\pi)^{-6} \int d\vec{k} d\vec{k}' e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \vec{k}'\cdot\vec{r}')$

เราจะได้

$$\begin{aligned} (2\pi)^{-6} \int d\vec{k} d\vec{k}' e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \vec{k}'\cdot\vec{r}')} G(\vec{k}, \vec{k}'; i\omega_n) \\ = (2\pi)^{-6} \int d\vec{k} d\vec{k}' e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \vec{k}'\cdot\vec{r}')} G^0(\vec{k}, \vec{k}'; i\omega_n) \delta(\vec{k} - \vec{k}') \\ + 4\pi V_d^2 G_d(i\omega_n) \sum_{m=-l}^l (-1)^m (2\pi)^{-3} \int d\vec{k} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} G^0(\vec{k}; i\omega_n) y_{l-m}(\vec{k}) F(k) \\ \times (2\pi)^{-3} \int d\vec{k}' e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} G^0(\vec{k}'; i\omega_n) y_{lm}(\vec{k}') F(k') \dots (17) \end{aligned}$$

โดยอาศัย

1. กรีนส์ฟังก์ชันเชิงอุณหภูมิตัว (thermodynamical Green's function)

$$G^0(\vec{r}, \vec{r}'; i\omega_n) = (2\pi)^{-3} \int d\vec{k} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r} - \vec{r}')} G^0(\vec{k}; i\omega_n)$$

2. การแปลงแบบฟูเรียร์ซ้อน (double Fourier transform)

$$G(\vec{r}, \vec{r}'; i\omega_n) = (2\pi)^{-6} \int d\vec{k} d\vec{k}' e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \vec{k}'\cdot\vec{r}')} G(\vec{k}, \vec{k}'; i\omega_n)$$

3. กรีนส์ฟังก์ชันตัดแปลง ซึ่งอยู่ในเทอม $F(k)$ และ y_{lm}

$$G_{cutoff}^{lm}(\vec{r}, i\omega_n) = (2\pi)^{-3} \int d\vec{k} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} G^0(\vec{k}; i\omega_n) y_{lm}(\vec{k}) F(k) \dots (18)$$

เราจะใส่สมการ(17) ในรูป

$$G(\vec{r}, \vec{r}'; i\omega_n) = G^0(\vec{r}, \vec{r}'; i\omega_n) + 4\pi v^2 G_d(i\omega_n) \sum_{m=-l}^l (-1)^m G_{\text{cutoff}}^{l-m}(\vec{r}, i\omega_n) G_{\text{cutoff}}^{lm}(-\vec{r}'; i\omega_n) \dots (19)$$

จากสมการ(18) เขียน $d\vec{k} \rightarrow dk k^2 d\Omega_k$ และอาศัยเอกลักษณ์

$$\int dk e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} y_{lm}(\vec{k}) = 4\pi i^l j_l(\vec{k} \cdot \vec{r}) y_{lm}(\vec{k})$$

เราจะใส่สมการ(18) ในรูป

$$\begin{aligned} G_{\text{cutoff}}^{lm}(\vec{r}; i\omega_n) &= y_{lm}(\vec{r}) i^l (2\pi^2)^{-1} \int dk k^2 j_l(\vec{k} \cdot \vec{r}) G^0(\vec{k}; i\omega_n) F(k) \\ &= y_{lm}(\vec{r}) i^l G^l(\vec{r}; i\omega_n) \dots (20) \end{aligned}$$

เมื่อ $G^l(\vec{r}; i\omega_n)$ เป็นกรีนฟังก์ชันที่เปลี่ยนแปลงที่ไม่ขึ้นกับทิศทาง r มีค่า

$$G^l(\vec{r}; i\omega_n) = (2\pi)^{-3} \int dk j_l(\vec{k} \cdot \vec{r}) G^0(\vec{k}; i\omega_n) F(k) \dots (21)$$

เนื่องจากความหนาแน่นของอิเล็กตรอนอิสระ (Mezei and Zawadowski, 1971 : 167) มีค่า

$$\rho(r, \omega) = -\pi^{-1} \text{Im} G(\vec{r}, \vec{r}'; \omega - i\delta)$$

ดังนั้นเมื่อหาส่วนจินตภาพของสมการ(19) และคูณตลอดด้วย $-\pi^{-1}$ แล้วแทนด้วยสมการ(20) เราจะได้อ

$$\rho(r, \omega) = \rho_0(r, \omega) - 4 \text{Im} \left\{ t(\omega - i\epsilon) \sum_{m=-l}^l (-1)^m y_{lm}(\vec{r}) i^l G^l(\vec{r}; i\omega_n) y_{lm}(-\vec{r}') i^l G^l(-\vec{r}'; i\omega_n) \right\} \dots (22)$$

โดยที่ $t(\omega - i\epsilon) = \sqrt{G_d(i\omega_n)}$

ใช้ความสัมพันธ์ต่อไปนี้กับสมการ(22)

$$1. y_{lm}(-\vec{r}') = (-1)^l y_{lm}(\vec{r})$$

$$2. \sum_{m=-l}^l (-1)^m y_{lm}(r) y_{l-m}(r) = (2l+1)/4\pi$$

เราจะโคสมการ(22) ในรูป

$$\begin{aligned} p(r, \omega) &= p_0(r, \omega) - (2l+1)\pi^{-1} \text{Im} \left\{ t(\omega - i\epsilon) G^l(-r; i\omega_n) G^l(r; i\omega_n) \right\} \\ &= p_0(r, \omega) - (2l+1)\pi^{-1} \text{Im} \left\{ t(\omega - i\epsilon) G^l(r; \omega - i\epsilon) \right\} \dots (23) \end{aligned}$$

$G^l(r; \omega - i\epsilon)$ เป็นกรีนส์ฟังก์ชันที่ปรากฏในสมการ(21) การหาค่ากรีนส์ฟังก์ชันดังกล่าวโดยสะดวกในภาคผนวก ค ซึ่งเมื่อนำมาแทนในสมการ(23) จะได้

$$\begin{aligned} p(r, \omega) &= p_0(r, \omega) - (2l+1)\pi N^2(\omega) \left[\frac{2}{\Gamma(\omega^2 + \Gamma^2)} \right]^2 \text{Im} \left\{ t(\omega) \left[i h_0^{(1)}(k_F r + \omega r/v_F) \right. \right. \\ &\quad + \left. \left. [(\omega + i\Gamma)/2\Gamma] h_0^{(1)}(k_F r + i\Gamma r/v_F) + [(\omega - i\Gamma)/2\Gamma] h_0^{(2)}(k_F r - i\Gamma r/v_F) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + [(\omega^2 + \Gamma^2)/\Gamma^2] |p_0(r, \omega)|^2 \right\} \dots (24) \end{aligned}$$

สมการ(24) จะเป็นสมการที่ใช้หาการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุที่ระยะต่าง ๆ จากสิ่งเจือปน

จะเห็นว่าฟังก์ชันเบสเซลในสมการ(24) จะเป็นอย่างไรขึ้นอยู่กับ l และปริมาณ 3 ปริมาณ คือ $k_F r$, r/ξ_ω และ r/ξ_F ในเมื่อ ξ_ω คือระยะอาพันธ์เชิงพลังงาน (energy coherence length) มีค่า v_F/ω และ ξ_F คือระยะอาพันธ์เชิงลักษณะ (characteristic coherence length) มีค่า v_F/Γ

ดังนั้นในการหาการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุที่ระยะต่าง ๆ จากสิ่งเจือปนต่อไปนี้ เราจะพิจารณาระยะทางไกลหรือไกลเทียบกับ ξ_ω และ ξ_F

กรณี $l = 0$

จากสมการ(ค6) ในภาคผนวก ค เมื่อ $l = 0$ จะได้

$$h_0^{(1)}(z) = -(i/z) e^{iz} ; h_0^{(2)}(z) = (i/z) e^{-iz} \dots (25)$$

นำสมการ(25) แทนในสมการ(24) จะได้

$$\Delta p(r, \omega) = -\kappa N^2(\omega) [\Gamma^2 / (\omega^2 + \Gamma^2)]^2 \text{Im} \left\{ t(\omega) \left[\frac{e^{i(k_F r + r/\xi_\omega)}}{(k_F r + r/\xi_\omega)} - \frac{i(k_F r + ir/\xi_\Gamma)}{2\Gamma(k_F r + ir/\xi_\Gamma)} \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{i(\omega - i\Gamma) e^{-i(k_F r - ir/\xi_\Gamma)}}{2\Gamma(k_F r - ir/\xi_\Gamma)} + \frac{(\omega + \Gamma)^2}{\Gamma^2} |p_\ell(r, \omega)|^2 \right] \right\}$$

ณ ตำแหน่งที่ $r \gg \xi_\omega$ และ $r \gg \xi_\Gamma$ เทอม e^{-r/ξ_ω} และ $e^{-r/\xi_\Gamma} \approx 0$

$$\Delta p(r, \omega) = -\kappa N^2(\omega) [\Gamma^2 / (\omega^2 + \Gamma^2)]^2 \text{Im} \left\{ t(\omega) \left[\frac{\cos(k_F r + r/\xi_\omega) + i \sin(k_F r + r/\xi_\omega)}{(k_F r + r/\xi_\omega)} \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{(\omega + \Gamma)^2}{\Gamma^2} |p_\ell(r, \omega)|^2 \right] \right\} \dots (26)$$

กรณี $\ell \neq 0$

1. ระยะใกล้ (short range) $r \ll \xi_\omega$, $r \ll \xi_\Gamma$, $\omega \ll \Gamma$

เทอม r/ξ_ω และ $r/\xi_\Gamma \approx 0$ เราจะใช้สมการ(24) ในรูป

$$\Delta p(r, \omega) = -(\ell+1) \kappa N^2(\omega) [\Gamma^2 / (\omega^2 + \Gamma^2)]^2 \text{Im} \left\{ t(\omega) \left[i h_\ell^{(1)}(k_F r) + [(\omega + i\Gamma)/2\Gamma] h_\ell^{(1)}(k_F r) \right. \right. \\ \left. \left. + [(\omega - i\Gamma)/2\Gamma] h_\ell^{(2)}(k_F r) + [(\omega + \Gamma)^2 / \Gamma^2] |p_\ell(r, \omega)|^2 \right] \right\} \dots (27)$$

1.1 Δp ที่บริเวณสิ่งเจือปน (impurity site) $r \rightarrow 0$

จากสมการ(27) แทนฟังก์ชันเบสเซลด้วยสมการ(ค4) ในภาคผนวก ค

และตัดเทอม $p_\ell(r, \omega)$ ออกเนื่องจากสัมประสิทธิ์มีค่าน้อย แล้วจัดสมการใหม่

$$\Delta p(r, \omega) = -(\ell+1) \kappa N^2(\omega) \text{Im} \left\{ t(\omega) [(1 + \omega/\Gamma) j_\ell(k_F r) - \eta_\ell(k_F r)]^2 \right\} \dots (28)$$

ฟังก์ชันเบสเซล $j_\ell(z)$ และ $\eta_\ell(z)$ ในรูปอนุกรมกำลังคือ

$$j_\ell(z) = \frac{z^\ell}{(2\ell+1)!} \left(1 - \frac{z^2}{2(2\ell+3)} + \dots \right)$$

$$\eta_\ell(z) = \frac{(2\ell+1)!}{(2\ell+1)} (1/z)^{\ell+1} \left(1 + \frac{z^2}{2(2\ell-1)} - \dots \right)$$

ที่บริเวณสิ่งเจือปนมี 2 กรณีที่เราจะพิจารณาคือ $\ell = 0$ และ $\ell \neq 0$
 เมื่อ $\ell = 0$, $j_0(z) = 1$, $\eta_0(z) = 1/z$ และให้ $\omega/r \approx 0$ ดังนั้นเรา
 จะได้สมการ(28) ในรูป

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow 0} \Delta p(r, \omega) &= -i\kappa N^2(0) \operatorname{Im} \left\{ t(\omega) \left[-1 + 4(k_F r)^{-2} - 4i(k_F r)^{-1} \right] \right\} \\ &= -4\kappa N^2(0) (k_F r)^{-2} \operatorname{Im} t(\omega) \end{aligned} \quad \dots(29)$$

เมื่อ $\ell \neq 0$, $j_\ell(z) \approx 0$ และ $\omega/r \approx 0$ เราจะได้สมการ(28) ในรูป

$$\lim_{r \rightarrow 0} \Delta p(r, \omega) = -4(2\ell+1) \kappa N^2(0) \eta_\ell^2(k_F r) \operatorname{Im} t(\omega) \quad \dots(30)$$

1.2 Δp เมื่อ $\ell(\ell+1) \ll k_F r \ll k_F \xi_r$

จากสมการ(24) แทนฟังก์ชันเบสเซลด้วยสมการ(ค6) ในภาคผนวก ค
 และพิจารณาเมื่อ $r \ll \xi_r$, $r \ll \xi_\omega$ (เทอม r/ξ_r และ $r/\xi_\omega \approx 0$) เราจะได้

$$\begin{aligned} \Delta p(r, \omega) &= -(2\ell+1) \kappa N^2(0) (k_F r)^{-2} \operatorname{Im} \left\{ t(\omega) \left[e^{i(k_F r - \frac{1}{2}\ell\pi)} + \frac{1}{2}(1-i\omega/r) e^{i(k_F r - \frac{1}{2}\ell\pi)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{1}{2}(1+i\omega/r) e^{-i(k_F r - \frac{1}{2}\ell\pi)} \right]^2 \right\} \\ &= -(2\ell+1) \kappa N^2(0) (k_F r)^{-2} \operatorname{Im} \left\{ t(\omega) \left[\cos(k_F r - \frac{1}{2}\ell\pi) + (i + \frac{\omega}{r}) \sin(k_F r - \frac{1}{2}\ell\pi) \right]^2 \right\} \dots(31) \end{aligned}$$

2. ระยะปานกลาง (medium range) $\ell(\ell+1) \ll k_F r \sim k_F \xi_r$

จากสมการ(24) แทนฟังก์ชันเบสเซลด้วยสมการ(ค6) ในภาคผนวก ค
 จะได้

$$\begin{aligned} \Delta p(r, \omega) &= -(\alpha\ell+1)\pi N^2(\omega) [\Gamma^2/(\omega^2+\Gamma^2)]^2 \text{Im} \left\{ t(\omega) \left[\frac{e^{i(k_F r + r/\xi_\omega - \frac{1}{2}\ell\pi)}}{(k_F r + r/\xi_\omega)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{(\omega+i\Gamma)(-i) e^{i(k_F r + r/\xi_\omega - \frac{1}{2}\ell\pi)}}{2\Gamma (k_F r + r/\xi_\omega)} + \frac{(\omega-i\Gamma)(i) e^{-i(k_F r - r/\xi_\omega - \frac{1}{2}\ell\pi)}}{2\Gamma (k_F r - r/\xi_\omega)} \right]^2 \right\} \\ &= -(\alpha\ell+1)\pi N^2(\omega) [\Gamma^2/(\omega^2+\Gamma^2)]^2 \text{Im} \left\{ t(\omega) \left[\frac{e^{i(k_F r + r/\xi_\omega - \frac{1}{2}\ell\pi)}}{(1 + 1/k_F \xi_\omega)} + \frac{-r/\xi_\omega}{2} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \times \left(\frac{(1-i\omega/\Gamma) e^{i(k_F r - \frac{1}{2}\ell\pi)}}{(1 + i/k_F \xi_\omega)} + \frac{(1+i\omega/\Gamma) e^{-i(k_F r - \frac{1}{2}\ell\pi)}}{(1 - i/k_F \xi_\omega)} \right) \right]^2 \right\} (k_F r)^{-2} \dots (32) \end{aligned}$$

3. ระยะไกล (long range) $r \gg \xi_\omega, r \gg \xi_\Gamma$

จากสมการ(32) เมื่อ $r \gg \xi_\Gamma$ เทอม $e^{-r/\xi_\Gamma} = 0$

$$\begin{aligned} \Delta p(r, \omega) &= -\frac{(\alpha\ell+1)\pi N^2(\omega) [\Gamma^2/(\omega^2+\Gamma^2)]^2 (k_F r)^{-2}}{(1 + 1/k_F \xi_\omega)^2} \text{Im} \left\{ t(\omega) e^{2i(k_F r + r/\xi_\omega - \frac{1}{2}\ell\pi)} \right\} \\ &= -(\alpha\ell+1)\pi N^2(\omega) (k_F r)^{-2} [\Gamma^2/(\omega^2+\Gamma^2)]^2 \text{Im} \left\{ t(\omega) e^{2i(k_F r + r/\xi_\omega - \frac{1}{2}\ell\pi)} \right\} \dots (33) \end{aligned}$$

เราสามารถแสดงที่-แมทริกซ์ของการกระเจิงในสมการต่าง ๆ ข้างต้น
 ในรูปของการเลื่อนเฟส $\delta_\ell(\omega)$ ได้ดังนี้ (การหาค่าที่-แมทริกซ์ของการกระเจิงใน
 รูปการเลื่อนเฟส แสดงไว้ในภาคผนวก ง)

$$\begin{aligned} t(\omega) &= \frac{\sin \delta_\ell(\omega) \cos \delta_\ell(\omega)}{\pi N(\omega)} - \frac{\sin 2\delta_\ell(\omega) \text{sgn} \omega \tilde{x}_{\uparrow\downarrow}^2(\omega^2 + \kappa T^2)}{2\Gamma^2 \pi N(\omega)} \\ &= -i \left\{ \frac{\sin 2\delta_\ell(\omega)}{\pi N(\omega)} + \frac{\cos 2\delta_\ell(\omega) \text{sgn} \omega \tilde{x}_{\uparrow\downarrow}^2(\omega^2 + \kappa T^2)}{2\Gamma^2 \pi N(\omega)} \right\} \dots (34) \end{aligned}$$

เมื่อแทน $t(\omega)$ ด้วยสมการ(34) เราจะได้ Δp ที่ระยะต่าง ๆ กันดังนี้

1. ที่ระยะใกล้ ($r \rightarrow 0; r \ll \xi_\Gamma$)

จากสมการ(29) Δp ที่มีบริเวณสิ่งเจือปน ($r \rightarrow 0$) เมื่อ $\ell = 0$

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow 0} \Delta p(r, \omega) &= -4\kappa N(\omega) (k_F r)^{-2} \left\{ \frac{\sin^2 \delta_0(\omega)}{\kappa N(\omega)} - \frac{\cos 2\delta_0(\omega) \operatorname{sgn} \omega \tilde{\chi}_{11}^2(\omega^2 + \kappa^2 T^2)}{2\Gamma^2 \kappa N(\omega)} \right\} \\ &= 4\kappa N(\omega) (k_F r)^{-2} \left\{ \sin^2 \delta_0(\omega) + \frac{1}{2\Gamma^2} \cos 2\delta_0(\omega) \operatorname{sgn} \omega \tilde{\chi}_{11}^2 \frac{\omega^2 + \kappa^2 T^2}{\kappa T} \right\} \dots (35) \end{aligned}$$

จากสมการ(30) Δp ที่บริเวณสิ่งเจือปน ($r \rightarrow 0$) เมื่อ $l \neq 0$

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow 0} \Delta p(r, \omega) &= -4(2l+1)\kappa N(\omega) \eta_l^2 (k_F r)^{-2} \left\{ \frac{\sin^2 \delta_l(\omega)}{\kappa N(\omega)} - \frac{\cos 2\delta_l(\omega) \operatorname{sgn} \omega \tilde{\chi}_{11}^2(\omega^2 + \kappa^2 T^2)}{2\Gamma^2 \kappa N(\omega)} \right\} \\ &= 4(2l+1)\kappa N(\omega) \eta_l^2 (k_F r)^{-2} \left\{ \sin^2 \delta_l(\omega) + \frac{1}{2\Gamma^2} \cos 2\delta_l(\omega) \operatorname{sgn} \omega \tilde{\chi}_{11}^2 \frac{\omega^2 + \kappa^2 T^2}{\kappa T} \right\} \\ &\dots (36) \end{aligned}$$

จากสมการ(31) Δp เมื่อ $r \ll \xi_r$

$$\begin{aligned} \Delta p(r, \omega) &= -(2l+1)\kappa N(\omega) (k_F r)^{-2} \operatorname{Im} \left\{ [R \operatorname{Re} t(\omega) + i \operatorname{Im} t(\omega)] \left[2 \cos(k_F r - \frac{1}{2} l \pi) + (i + \frac{\omega}{\Gamma}) \sin(k_F r - \frac{1}{2} l \pi) \right]^2 \right\} \\ &= -(2l+1)\kappa N(\omega) (k_F r)^{-2} \left\{ \operatorname{Re} t(\omega) \left[\frac{2\omega}{\Gamma} \sin 2(k_F r - \frac{1}{2} l \pi) + \frac{2\omega}{\Gamma} \sin^2(k_F r - \frac{1}{2} l \pi) \right] \right. \\ &\quad \left. + \operatorname{Im} t(\omega) \left[\frac{2\omega}{\Gamma} \sin 2(k_F r - \frac{1}{2} l \pi) - 5 \sin^2(k_F r - \frac{1}{2} l \pi) + 4 \right] \right\} \dots (37) \end{aligned}$$

2. ที่ระยะปานกลาง ($r \sim \xi_r$, $\omega \ll r$)

จากสมการ(32) เทอม $1/k_F \xi_r$ และ $1/k_F \xi_\omega \ll 1$ จึงตัดทิ้ง แล้วจัดเทอมใหม่

$$\begin{aligned} \Delta p(r, \omega) &= -(2l+1)\kappa N(\omega) (k_F r)^{-2} \operatorname{Im} \left\{ [R \operatorname{Re} t(\omega) + i \operatorname{Im} t(\omega)] \left[e^{i(k_F r + r/\xi_\omega - \frac{1}{2} l \pi)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + e^{-r/\xi_r} \left[\cos(k_F r - \frac{1}{2} l \pi) + \frac{\omega}{\Gamma} \sin(k_F r - \frac{1}{2} l \pi) \right]^2 \right] \right\} \\ &= -(2l+1)\kappa N(\omega) (k_F r)^{-2} \left\{ \operatorname{Re} t(\omega) \left[\sin 2(k_F r + r/\xi_\omega - \frac{1}{2} l \pi) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + 2e^{-r/\xi_r} \left[\cos(k_F r - \frac{1}{2} l \pi) + \frac{\omega}{\Gamma} \sin(k_F r - \frac{1}{2} l \pi) \right] \sin(k_F r + r/\xi_\omega - \frac{1}{2} l \pi) \right] \right. \\ &\quad \left. + \operatorname{Im} t(\omega) \left[\cos 2(k_F r + r/\xi_\omega - \frac{1}{2} l \pi) + e^{-2r/\xi_r} \left[\cos^2(k_F r - \frac{1}{2} l \pi) + \frac{\omega}{\Gamma} \sin 2(k_F r - \frac{1}{2} l \pi) \right] \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + 2e^{-r/\xi_r} \left[\cos(k_F r - \frac{1}{2} l \pi) + \frac{\omega}{\Gamma} \sin(k_F r - \frac{1}{2} l \pi) \right] \cos(k_F r + r/\xi_\omega - \frac{1}{2} l \pi) \right] \right\} \dots (38) \end{aligned}$$

3. ที่ระยะไกล ($r \gg \xi_r$, $r \gg \xi_\omega$, $\omega \ll r$)

จากสมการ(33)

$$\begin{aligned} \Delta p(r, \omega) &= -(2l+1) \kappa N(\omega) (k_F r)^{-2} \operatorname{Im} \left\{ \operatorname{Ret} t(\omega) + i \operatorname{Im} t(\omega) e^{2i(k_F r + r/\xi_\omega - \frac{1}{2}\pi)} \right\} \\ &= -(2l+1) \kappa N(\omega) (k_F r)^{-2} \left\{ \operatorname{Ret} t(\omega) \sin 2(k_F r + r/\xi_\omega - \frac{1}{2}\pi) + \operatorname{Im} t(\omega) \cos 2(k_F r + r/\xi_\omega - \frac{1}{2}\pi) \right\} \\ &= -(2l+1) \kappa N(\omega) (k_F r)^{-2} a(\omega) \sin [2(k_F r + r/\xi_\omega - \frac{1}{2}\pi) + \theta(\omega)] \quad \dots (39) \end{aligned}$$

เมื่อ $\tan \theta(\omega) = \operatorname{Im} t(\omega) / \operatorname{Re} t(\omega)$ และ $a(\omega) = \left\{ [\operatorname{Re} t(\omega)]^2 + [\operatorname{Im} t(\omega)]^2 \right\}^{\frac{1}{2}}$

โดยการประมาณว่าเทอม $\frac{1}{2r^2} \tilde{\chi}_{11}^2 (\omega^2 + \kappa^2 T^2)$ ของ $t(\omega)$ มีค่า ≈ 0 เราจะได้

$$\theta(\omega) = \delta_p(\omega) \quad \text{และ} \quad a(\omega) = \frac{\sin \delta_p(\omega)}{\kappa N(\omega)} \quad \dots (40)$$

นำสมการ(40) แทนในสมการ(39) เราจะได้

$$\Delta p(r, \omega) = -(2l+1) \kappa N(\omega) (k_F r)^{-2} \sin \delta_p(\omega) \sin [2(k_F r + r/\xi_\omega - \frac{1}{2}\pi) + \delta_p(\omega)] \quad \dots (41)$$

ผลการคำนวณที่ได้ในสมการ(41) ตรงกับผลการวิจัยของมีไซ และ

ชาวาโควสกี (Mezei and Zawadowski, 1972 : 167)

เราอาจหา $a(\omega)$ ได้ละเอียดขึ้นโดยให้เทอม $\left[\frac{1}{2r^2} \tilde{\chi}_{11}^2 (\omega^2 + \kappa^2 T^2) \right]^2$ ของ $[\operatorname{Re} t(\omega)]^2$ และ $[\operatorname{Im} t(\omega)]^2$ มีค่า ≈ 0 แล้วเราจะได้

$$\begin{aligned} a(\omega) &\approx \left\{ \frac{\sin^2 \delta_p(\omega)}{\kappa^2 N(\omega)} - \frac{\sin^2 \delta_p(\omega)}{\Gamma \kappa N(\omega)} \operatorname{sgn} \omega \tilde{\chi}_{11}^2 (\omega^2 + \kappa^2 T^2) \right\}^{\frac{1}{2}} \\ &\approx \frac{\sin \delta_p(\omega)}{\kappa N(\omega)} \left\{ 1 - \frac{1}{2r^2} \operatorname{sgn} \omega \tilde{\chi}_{11}^2 (\omega^2 + \kappa^2 T^2) + \dots \right\} \quad \dots (42) \end{aligned}$$

นำสมการ(42) แทนในสมการ(39) เราจะได้

$$\Delta p(r, \omega) = -(2l+1) \kappa N(\omega) (k_F r)^{-2} \sin \delta_p(\omega) \left[1 - \frac{1}{2r^2} \operatorname{sgn} \omega \tilde{\chi}_{11}^2 (\omega^2 + \kappa^2 T^2) \right] \sin [2(k_F r + r/\xi_\omega - \frac{1}{2}\pi) + \theta(\omega)] \quad \dots (43)$$

การคำนวณโดยการประมาณแบบเบทา-ซอมเมอร์เฟลด์

ผลการคำนวณ Δp โดยพิจารณาอันตรกิริยาระหว่างไอส์และที-อีเลกตรอน เราได้แสดง Δp เป็นฟังก์ชันของระยะทาง r และพลังงาน ω เพราะการคำนวณหา $\Delta p(r, T)$ ต้องใช้ฟังก์ชันเฟอริ, $f(\omega)$ ซึ่งจะทำให้การคำนวณซับซ้อนมาก ส่วนการคำนวณโดยการประมาณแบบฟรีเทิลนั้น เราหาได้แค่ Δp ที่ระยะไกลและอุณหภูมิเป็นศูนย์สัมบูรณ์ อย่างไรก็ตาม เราอาจหา $\Delta p(r, T)$ ที่ระยะไกลและอุณหภูมิสูงกว่าศูนย์สัมบูรณ์ได้โดยใช้การประมาณแบบเบทา-ซอมเมอร์เฟลด์

จากสมการ (4) เราสามารถเขียน $\Delta p(r, T)$ ในรูป

$$\Delta p(r, T) = \Delta p(r, 0) + (2l+1)\pi^{-1} \text{Im} \int_0^{\infty} d\omega f(\omega) t_l(\omega) G_{l_0}^2(r, \omega) \quad \dots (44)$$

อินทิกรัลในสมการ (44) อยู่ในรูป $\int_0^{\infty} d\epsilon f(\epsilon) \phi(\epsilon)$ ซึ่งมีค่าตามสมการ (จ 11) ของภาคผนวก จ ดังนั้น

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} d\omega f(\omega) t_l(\omega) G_{l_0}^2(r, \omega) &= \left\{ \int_0^{\omega} d\omega t_l(\omega) G_{l_0}^2(r, \omega) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{d}{d\omega} [t_l(\omega) G_{l_0}^2(r, \omega)] \right\}_{\omega=0} \\ &= \left\{ \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{d}{d\omega} [t_l(\omega) G_{l_0}^2(r, \omega)] \right\}_{\omega=0} \quad \dots (45) \end{aligned}$$

นำสมการ (45) แทนในสมการ (44)

$$\begin{aligned} \Delta p(r, T) &= \Delta p(r, 0) + (2l+1) \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \\ &\quad \times \text{Im} \left\{ G_{l_0}^2(r, \omega) \frac{d}{d\omega} t_l(\omega) + t_l(\omega) \frac{d}{d\omega} G_{l_0}^2(r, \omega) \right\}_{\omega=0} \quad \dots (46) \end{aligned}$$

จากสมการ (6) พิจารณาที่ระยะไกลจากสิ่งเจือปน

$$G_{l_0}^2(r, \omega) = -\pi^2 N^2(\omega) (k_F r)^{-2} \exp(2ik_F r \omega_0 - \frac{1}{2} \ell R) \quad \dots (47)$$

นำสมการ (47) แทนในสมการ (46) แล้วพิจารณาเมื่อ $\omega = 0$

$$\Delta p(r,T) = \Delta p(r,0) - \frac{1}{6} (2l+1) (k_B T)^2 \kappa^2 (v_F)^{-2} \text{Im} \left\{ [t(\omega) + \frac{2ir}{v_F}] \exp(2ik_F r - i\kappa r) \right\}$$

แทนค่า $t(\omega)$ และ $t'(\omega)$ ด้วยสมการ (ก6) และ (ก7) ในภาคผนวก ก ตามลำดับ แล้วหาส่วนจินตภาพและจัดสมการใหม่ จะได้

$$\Delta p(r,T) = \Delta p(r,0) - \frac{(2l+1)\Gamma(k_B T)^2}{12v_F r^2} [C(r,T) \cos(2k_F r - \kappa r) + D(r,T) \sin(2k_F r - \kappa r)] \dots (48)$$

ในเมื่อ

$$C(r,T) = \frac{-2\tilde{\chi}_{\uparrow\uparrow}^2 E_d (\Gamma + \frac{1}{2\Gamma} \tilde{\chi}_{\uparrow\uparrow}^2 \kappa T^2) - (2rE_d/v_F) [E_d^2 + (\Gamma + \frac{1}{2\Gamma} \tilde{\chi}_{\uparrow\uparrow}^2 \kappa T^2)^2]}{[E_d^2 + (\Gamma + \frac{1}{2\Gamma} \tilde{\chi}_{\uparrow\uparrow}^2 \kappa T^2)^2]^2}$$

$$D(r,T) = \frac{-\tilde{\chi}_{\uparrow\uparrow}^2 [E_d^2 - (\Gamma + \frac{1}{2\Gamma} \tilde{\chi}_{\uparrow\uparrow}^2 \kappa T^2)^2] + (2r\Gamma/v_F) (\Gamma + \frac{1}{2\Gamma} \tilde{\chi}_{\uparrow\uparrow}^2 \kappa T^2) [E_d^2 + (\Gamma + \frac{1}{2\Gamma} \tilde{\chi}_{\uparrow\uparrow}^2 \kappa T^2)^2]}{[E_d^2 + (\Gamma + \frac{1}{2\Gamma} \tilde{\chi}_{\uparrow\uparrow}^2 \kappa T^2)^2]^2}$$

แต่เนื่องจากเทอม $\frac{1}{2\Gamma} \tilde{\chi}_{\uparrow\uparrow}^2 \kappa T^2$ มีค่าน้อยจึงตัดทิ้ง ดังนั้น

$$C(r) = [-2E_d \Gamma \tilde{\chi}_{\uparrow\uparrow}^2 - (2rE_d/v_F) (E_d^2 + \Gamma^2)] / (E_d^2 + \Gamma^2)$$

$$D(r) = [-\tilde{\chi}_{\uparrow\uparrow}^2 (E_d^2 - \Gamma^2) + (2r\Gamma/v_F) (E_d^2 + \Gamma^2)] / (E_d^2 + \Gamma^2)$$

จากสมการ (48) เราจะได้

$$\Delta p(r,T) = \Delta p(r,0) - \frac{(2l+1)\Gamma(k_B T)^2}{12v_F r^2} [C^2(r) + D^2(r)]^{\frac{1}{2}} \cos[2k_F r - \kappa r - \beta(r)]$$

$$= \Delta p(r,0) - (2l+1)(k_B T)^2 a(r) r^{-2} \cos[2k_F r - \kappa r - \beta(r)] \dots (49)$$

เมื่อ $\tan \beta(r) = D(r)/C(r)$

และ $a(r) = (\Gamma/12v_F) [C^2(r) + D^2(r)]^{\frac{1}{2}}$

บทย่อ สรุปผล อภิปราย และข้อเสนอแนะ

บทย่อ

ความมุ่งหมายของการวิจัย

การศึกษาค้นคว้าครั้งนี้มีความมุ่งหมายเพื่อศึกษาการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุในบริเวณรอบ ๆ อะตอมของสิ่งเจือปนแบบคอนโคที่ระยะทางต่าง ๆ จากสิ่งเจือปนและที่อุณหภูมิต่ำกว่าอุณหภูมิกอนโคมาก ๆ

วิธีดำเนินการวิจัย

การคำนวณหาการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุ เริ่มต้นโดยการหาความหนาแน่นของอิเล็กตรอนอิสระที่เปลี่ยนไปเมื่อมีการกระเจิงกำรโดยใช้สมการความหนาแน่นของอิเล็กตรอนอิสระที่ได้จากการคำนวณของมีไซ และ ซาวาโควสกี จากนั้นใช้กรีนฟังก์ชันของอิเล็กตรอนอิสระที่มีโมเมนตัมเชิงมุม l และที่-แมทริกซ์ของการกระเจิงของยามาดา และ โยซิดะ โดยแยกการคำนวณเป็น 3 ตอน คือ การคำนวณโดยการประมาณแบบฟรีเคล การคำนวณโดยพิจารณาอันตรกิริยาระหว่างเอสและที่-อิเล็กตรอน และการคำนวณโดยการประมาณแบบเบทเท-ซอมเมอร์เฟิลด์

การวิเคราะห์ผล

นำสมการที่ได้จากการคำนวณมาวิเคราะห์หาการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุทั้งที่ระยะไกลและใกล้สิ่งเจือปน และที่อุณหภูมิต่าง ๆ

สรุปผลการวิจัย

ในการคำนวณหาการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุ ณ ตำแหน่งต่าง ๆ ในบริเวณรอบสิ่งเจือปนแบบคอนโคโดยใช้ที่-แมทริกซ์ของการกระเจิงของยามาดา และ โยซิดะ (Yamada and Yosida. 1975 : 970) ได้ผลดังนี้

1. ที่จุดศูนย์กลางขั้วสมบูรณ

เมื่อกำหนดโดยการประมาณแบบฟรีเคล ได้ผลว่า

ที่ระยะไกล

$$\Delta p(r, 0) = -(2l+1)(2\pi)^{-2} \sin^2 \delta_p(0) r^{-3} \cos[2k_F r - l\pi + \delta_p(\omega)]$$

แต่เมื่อกำหนดโดยการประมาณที่ละเอียดขึ้น ได้ผลว่า

$$\Delta p(r, \omega) = -(2l+1)(2\pi)^{-2} \sin^2 \delta_p(\omega) a(r) r^{-3} \cos[2k_F r - l\pi + 2\phi(k_F) + \alpha(r)]$$

$$\text{ในเมื่อ } a(r) = [A^2(r) + B^2(r)]^{1/2} / (E_d^2 + \Gamma^2)^{1/2}$$

$$\alpha(r) = \tan^{-1} B(r)/A(r)$$

$$A(r) = E_d - \left[\frac{1}{2}\Gamma + 2\epsilon_F \frac{\chi_{ll}}{\pi} E_d / (E_d^2 + \Gamma^2) \right] (k_F r)^{-1}$$

$$B(r) = \Gamma + \left[\frac{1}{2}E_d + \epsilon_F \frac{\chi_{ll}}{\pi} (E_d^2 - \Gamma^2) / (E_d^2 + \Gamma^2) \right] (k_F r)^{-1}$$

2. ที่จุดศูนย์กลางสูงกว่าขั้วสมบูรณ

เมื่อกำหนดโดยพิจารณาอันตรกิริยาระหว่างเฮลและอีเล็กตรอน ได้ผลว่า

ที่ระยะใกล้ ($r \rightarrow 0$, $r \ll \xi_r$)

$$\Delta p(r, \omega) = 4N(0) (k_F)^{-2} \left\{ \sin^2 \delta_p(\omega) + \frac{1}{2} \cos^2 \delta_p(\omega) \operatorname{sgn} \omega \frac{\chi_{ll}^2 \pi^2}{\Gamma^2} \right\} \quad \text{เมื่อ } r \rightarrow 0, l = 0$$

$$\Delta p(r, \omega) = 4(2l+1)N(0) \frac{2}{\pi} (k_F)^2 \left\{ \sin^2 \delta_p(\omega) + \frac{1}{2} \cos^2 \delta_p(\omega) \operatorname{sgn} \omega \frac{\chi_{ll}^2 \pi^2}{\Gamma^2} \right\} \quad \text{เมื่อ } r \rightarrow 0, l \neq 0$$

$$\Delta p(r, \omega) = -(2l+1)N(0)^2 (k_F)^{-2} \left\{ \frac{2\omega}{\Gamma} \operatorname{Re} t(\omega) [\sin 2(k_F r - l\pi) + \sin^2(k_F r - l\pi)] \right. \\ \left. + \operatorname{Im} t(\omega) \left[\frac{2\omega}{\Gamma} \sin 2(k_F r - \frac{1}{2}l\pi) - 5 \sin^2(k_F r - \frac{1}{2}l\pi) + 4 \right] \right\} \quad \text{เมื่อ } r \ll \xi_r$$

ที่ระยะปานกลาง ($r \sim \xi_F$)

$$\begin{aligned} \Delta p(r, \omega) = & -(2l+1) \kappa N^2 (k_F r)^{-2} \left\{ \operatorname{Re} t(\omega) \left[\sin 2(k_F r + r/\xi_\omega - \frac{1}{2}l\pi) \right. \right. \\ & + 2e^{-r/\xi_F} \left. \left[\cos(k_F r - \frac{1}{2}l\pi) + \frac{\omega}{r} \sin(k_F r - \frac{1}{2}l\pi) \right] \sin(k_F r + r/\xi_\omega - \frac{1}{2}l\pi) \right] \\ & + \operatorname{Im} t(\omega) \left[\cos 2(k_F r + r/\xi_\omega - \frac{1}{2}l\pi) + e^{-2r/\xi_F} \left[\cos^2(k_F r - \frac{1}{2}l\pi) + \frac{\omega}{r} \sin 2(k_F r - \frac{1}{2}l\pi) \right] \right. \\ & \left. \left. + 2e^{-r/\xi_F} \left[\cos(k_F r - \frac{1}{2}l\pi) + \frac{\omega}{r} \sin(k_F r - \frac{1}{2}l\pi) \right] \cos(k_F r + r/\xi_\omega - \frac{1}{2}l\pi) \right] \right\} \end{aligned}$$

ที่ระยะไกล ($r \gg \xi_F$)

$$\begin{aligned} \Delta p(r, \omega) = & -(2l+1) \kappa N^2 (k_F r)^{-2} \sin \delta_l(\omega) \sin \left[2(k_F r + r/\xi_\omega - \frac{1}{2}l\pi) + \theta(\omega) \right] \\ & \times \left[1 - \frac{1}{2r^2} \operatorname{sgn} \omega \frac{\tilde{\chi}_{11}^2}{\kappa T} \right] \end{aligned}$$

เมื่อคำนวณโดยการประมาณแบบเมทเท-ซอมเมอร์เฟิลด์

ที่ระยะไกล

$$\Delta p(r, T) = \Delta p(r, 0) = -(2l+1) (k_B T)^2 a(r) r^{-2} \cos [2k_F r - l\pi - \beta(r)]$$

$$\text{ในเมื่อ} \quad a(r) = (r/12v_F) [c^2(r) + D^2(r)]^{\frac{1}{2}}$$

$$\beta(r) = \tan^{-1} D(r)/c(r)$$

$$c(r) = \left[-2rE_d \frac{\tilde{\chi}_{11}}{\kappa} - (2rE_d/v_F) (E_d^2 + \Gamma^2) \right] / (E_d^2 + \Gamma^2)$$

$$D(r) = \left[-\frac{\tilde{\chi}_{11}}{\kappa} (E_d^2 - \Gamma^2) + (2r\Gamma/v_F) (E_d^2 + \Gamma^2) \right] / (E_d^2 + \Gamma^2)$$

อภิปรายผล

ในการหาการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุรอบสิ่งเจือปนแบบคอนโค โดยวิธี-แมทริกซ์ของการกระเจิงของขามาคา และ โยชิโกะ ถ้าใช้การประมาณแบบฟรีเกลจะหา $\Delta\rho$ โดยเฉพาะที่ระยะไกลและอุณหภูมิศูนย์สัมบูรณ์เท่านั้น เมื่อเทียบกับ การวิจัยของมีโซ และ กรูเนอร์ (Mezei and Gruner. 1972 : 1465) ซึ่งใช้ โลหะทรานซิชันเป็นสิ่งเจือปนในโลหะเจาขาม Al และ Cu โดยวิธี-แมทริกซ์ของการกระเจิงแบบลอเรนทซ์เขียน, $t(\omega) = \frac{\Gamma}{\pi N(\omega)} (\omega - \omega_0 + i\Gamma)^{-1}$ ปรากฏว่าในผลตรงกันคือ $\Delta\rho(r,0) \propto r^{-3} \cos 2k_F r$ และผลการวิจัยในกรณีนี้เมื่อใช้การประมาณที่ละเอียดขึ้น ใ้ผลว่า $\Delta\rho(r,0) \propto a(r) r^{-2} \cos[k_F r + \alpha(r)]$ โดยที่ $a(r) \propto r^{-1}$ และ $\alpha(r) \propto r$ แต่ของมีโซ และกรูเนอร์นั้น $a(r) \propto r$ ส่วนการหา $\Delta\rho$ ที่ระยะไกลและอุณหภูมิสูงกว่า ศูนย์สัมบูรณ์โดยการประมาณแบบเบทเท-ซอมเมอร์เฟลด์ ใ้ผลคล้ายกับการวิจัยของ มีโซ และ กรูเนอร์ คือ $\Delta\rho(r,T) - \Delta\rho(r,0) \propto a(r) r^{-2} \cos[2k_F r - \beta(r)]$ โดยที่ $a(r)$ และ $\beta(r) \propto r$ แตกต่างจากค่า $a(r)$ และ $\alpha(r)$ ของมีโซ และ กรูเนอร์

งานวิจัยนี้ยังใ้ค่านวณหา $\Delta\rho$ โดยพิจารณาอันตรกิริยาระหว่างเอสและ คี-อีเลกตรอนในการหา $\Delta\rho$ ที่ระยะไกล เราใ้หา $\Delta\rho$ เป็นฟังก์ชันของระยะทาง r และพลังงาน ω ซึ่งสามารถหา $\Delta\rho$ ใ้ทุกระยะทางและทุกอุณหภูมิที่ต่ำกว่าอุณหภูมิ คอนโคมาก ๆ เมื่อเทียบกับงานวิจัยของมีโซ และ ซาวาโรวสกี (Mezei and Zawadowski. 1971 : 167) ซึ่งใช้สิ่งเจือปนแบบพาราแมกเนติก ปรากฏว่าใ้ ผลสอดคล้องกันใ้บางกรณี กรณีที่สอดคล้องกันคือที่ระยะไกล ใ้ผลตรงกันว่า $\Delta\rho(r,\omega) \propto r^{-2} \sin 2(k_F r + r/\xi_\omega)$ แต่ที่ระยะปานกลางและระยะไกลใ้ผลต่างกัน กล่าวคือที่ระยะปานกลาง เราใ้

$$\Delta\rho(r,\omega) = -\alpha(1) \pi N^2(\omega) (k_F)^{-2} \text{Im} \left\{ t(i\omega) \left[e^{i(k_F r + r/\xi_\omega - \frac{1}{2}\pi)} + e^{-r/\xi_T} \left[\cos(k_F r - \frac{1}{2}\pi) + \frac{\omega}{\Gamma} \sin(k_F r - \frac{1}{2}\pi) \right] \right]^2 \right\}$$

ขณะที่ของมีโซ และ ซาวาโควส์กี ได้กล่าวว่า

$$\Delta p(r, \omega) = (2l+1) \kappa N^2(r) (k_F r)^{-2} \text{Im} \left\{ t(\omega) \left[-e^{-i(k_F r + r/\epsilon_\omega - \frac{1}{2}l\pi)} + e^{-r/\epsilon_F} \left[\cos(k_F r - \frac{1}{2}l\pi) + \frac{\omega}{r} \sin(k_F r - \frac{1}{2}l\pi) \right] \right]^2 \right\}$$

และที่ระยะไกลที่เราจะได้

$$\Delta p(r, \omega) = -(2l+1) \kappa N^2(r) (k_F r)^{-2} \text{Im} \left\{ t(\omega) \left[2\cos(k_F r - \frac{1}{2}l\pi) + (i + \frac{\omega}{r}) \sin(k_F r - \frac{1}{2}l\pi) \right]^2 \right\}$$

ขณะที่ของมีโซ และ ซาวาโควส์กี ได้กล่าวว่า

$$\Delta p(r, \omega) = (2l+1) \kappa N^2(r) (k_F r)^{-2} \cos^2(k_F r - \frac{1}{2}l\pi) \text{Im} t(\omega)$$

อย่างไรก็ดี ผลการวิจัยทั้ง 3 กรณีดังกล่าว ทั้งของการวิจัยฉบับนี้และของมีโซ และ ซาวาโควส์กี แสดงผลเหมือนกันส่วนหนึ่งคือ $\Delta p(r, \omega)$ จะมีค่าลดลงเป็นฟังก์ชันของ r^{-2} แต่ที่บริเวณสิ่งเจือปน ($r \rightarrow 0$) ให้ผลต่างกันอย่างสิ้นเชิง กล่าวคือของมีโซ และ ซาวาโควส์กี $\Delta p(r, \omega)$ ไม่ได้เป็นฟังก์ชันของระยะทาง r เลย แต่ของการวิจัยฉบับนี้ $\Delta p(r, \omega)$ เป็นฟังก์ชันของ $r^{-2(l+1)}$:

ข้อเสนอแนะในการวิจัย

ในการวิจัยครั้งนี้

1. เราคิดว่าศักยภาพของสิ่งเจือปนเป็นแบบทรงกลม แท้จริง ๆ แล้วศักยภาพของสิ่งเจือปนมีสมบัติที่ขึ้นกับทิศทาง งานวิจัยต่อไปควรจะคำนึงถึงสมบัตินี้
 2. เราไม่ได้พิจารณาโครงสร้างของแถบพลังงานของโลหะเจือปน ถ้านำมาพิจารณากว้าง อันตรกิริยาระหว่างเฮลและที-อี เลกตรอนจะเปลี่ยนรูปเป็นอย่างอื่น
 3. สูตรที่คำนวณได้ในรูป $\Delta p(r, \omega)$ เราอาจหาให้อยู่ในรูป $\Delta p(r, T)$ ได้โดยใช้การประมาณแบบเบทเท-ซอมเมอร์เฟิลด์ ถ้าต้องการจะให้สูตรที่ถูกต้องขึ้นอีก เราต้องคิดหากระบวนการอินทิเกรตที่ละเอียดถูกต้องกว่านี้
- ฉะนั้นจึงควรมีการวิจัยเพิ่มเติมเกี่ยวกับเรื่องดังกล่าวข้างต้น

मन्त्रालय

บรรณานุกรม

- Alfred, L.C.R. and D.O. Van Ostenberg. Physics Lett. A :
26 : 27, 1967 a.
_____. Phys. Rev. 161 : 569, 1967 b.
- Beal Monod, M.T. J. Phys. Chem. Sol. 28 : 1261, 1967 a.
- Berthier, C. and M. Minier. J. Phys. F : 3 : 1169, 1973 b.
- Bloembergen, N. and T.G. Rowland. Acta Metal. 1 : 731, 1953.
- Brereton, M.G. Phys. Stat. Sol. 57 : 681, 1972.
- Coleridge, P.T., G.B. Scott and I.M. Templeton. Can. J. Phys.
50 : 1999, 1972.
- De Gennes, P.G. Journal de Physique. 23 : 975, 1962.
- Friedel, J. Phil. Mag. 43 : 153, 1952.
_____. Advan. Phys. 3 : 446, 1954.
_____. Can. J. Phys. 34 : 1190, 1956.
_____. Nuovo Cim. (Suppl.) 2 : 287, 1958.
- Gradshteyn, I. Tables of Series, Products and Integrals.
Academic Press, 1965.
- Gruner, G. Solid St. Commun. 10 : 1039, 1972.
- Gruner, G. and C. Hargitai. Phys. Rev. Lett. 26 : 772, 1971.
- Gruner, G. and A. Zawadowski. Rept. Progr. Phys. 37 : 1497,
1974.
- Heeger, A.J. "Localized Moments and Nonmoments in Metals" in
Solid State Physics v. 23, p. 184, ed. by F. Seitz,
D. Turnbull and E. Ehrenrich. New York, Academic Press,
1969.
- Hard, C.M. Electron in Metals. New York, John Wiley & sons,
1975, 331 p.

- Hurd, C.M. and E.M. Gordon. J. Phys. Chem. Sol. 29 : 2205, 1968.
- Jena, P. and D.J.W. Goldart. Phys. Rev. B : 7 : 439, 1973.
- Kohn, W. and S.H. Vosko. Phys. Rev. 119 : 912, 1960.
- Kondo, J. "Theory of Dilute Magnetic Alloys" in Solid State Physics v. 23, p. 283, ed. by T. Scitz, D. Turnbull and E. Ehrenrich. New York, Academic Press, 1969.
- Langer, J.S. and S.H. Vosko. J. Phys. Chem. Sol. 12 : 196, 1959.
- Mezei, F. and A. Zawadowski. Phys. Rev. B : 3 : 167, 1971.
- Mezei, F. and G. Gruner. Phys. Rev. Lett. 29 : 1465, 1971.
- Roth, L.M., H.J. Zeiger and T.A. Kaplan. Phys. Rev. 149 : 519, 1966.
- Rowland, T.J. Phys. Rev. 119 : 900, 1960.
- Sham, L.J. and B.R. Patton. Phys. Rev. B : 13 : 3157, 1976.
- Singwi, K.S. and others. Phys. Rev. B : 1 : 1044, 1970.
- Suto, A. and B. Vasvari. J. Phys. F : 3 : 1548, 1973.
- Yamada, K. and K. Yosida. Prog. Theor. Phys. 55 : 970, 1975.
- Zlatic, V. and G. Gruner. Journal de Physique. 38 : L87, 1977.

ภาคผนวก

ภาคผนวก ก สมบัติของที-แมทริกซ์ของการกระเจิงของยามาดา และ โยซิดะ

ยามาดา และ โยซิดะ (Yamada and Yosida, 1975 : 970) ได้
คำนวณหาที-แมทริกซ์ของการกระเจิงไว้ดังนี้

$$t(\omega) = \frac{\Gamma}{\kappa_N(\omega) [\omega - i\Gamma \operatorname{sgn} \omega - E_d + (\tilde{\chi}_{11}^{-1})\omega + \frac{1}{2\Gamma} \operatorname{sgn} \omega \tilde{\chi}_{11}^2 (\omega^2 + R^2 T^2)]} \dots (n1)$$

$$= \frac{\Gamma}{\kappa_N(\omega)} \frac{(\tilde{\chi}_{11}^{-1} \omega - E_d) - i [\Gamma \operatorname{sgn} \omega + \frac{1}{2\Gamma} \operatorname{sgn} \omega \tilde{\chi}_{11}^2 (\omega^2 + R^2 T^2)]}{[(\tilde{\chi}_{11}^{-1} \omega - E_d)^2 + [\Gamma + \frac{1}{2\Gamma} \tilde{\chi}_{11}^2 (\omega^2 + R^2 T^2)]^2]} \dots (n2)$$

อนุพันธ์ของ $t(\omega)$ เทียบกับ ω หาจากสมการ (n1)

$$t'(\omega) = -\frac{\kappa_N(\omega)}{\Gamma} t^2(\omega) \left\{ \tilde{\chi}_{11}^{-1} + \frac{\omega}{\Gamma} \operatorname{sgn} \omega \tilde{\chi}_{11}^2 \right\} \dots (n3)$$

ที่จุดหลุมศูนย์กลางสมบูรณ์ ($T = 0$ และ $\omega = 0$)

จากสมการ (n2) และ (n3) เราจะได้

$$t(0) = -\frac{\Gamma}{\kappa_N(0)} \frac{(E_d + i\Gamma)}{(E_d^2 + \Gamma^2)} \dots (n4)$$

$$= -\frac{\kappa_N(0)}{\Gamma} t^2(0) \tilde{\chi}_{11}^{-1} = -\frac{\Gamma}{\kappa_N(0)} \frac{\tilde{\chi}_{11}^{-1} [(E_d^2 - \Gamma^2) + 2iE_d\Gamma]}{[(E_d^2 - \Gamma^2)^2 + 4E_d^2\Gamma^2]} \dots (n5)$$

ที่จุดหลุมสูงกว่าศูนย์กลางสมบูรณ์ ($0 < T \ll T_{kw}$ และ $\omega = 0$)

จากสมการ (n2) และ (n3) เราจะได้

$$t(0) = -\frac{\Gamma}{\kappa_N(0)} \frac{E_d + i(\Gamma + \frac{1}{2\Gamma} \tilde{\chi}_{11}^2 R^2 T^2)}{[E_d^2 + (\Gamma + \frac{1}{2\Gamma} \tilde{\chi}_{11}^2 R^2 T^2)^2]} \dots (n6)$$

$$t'(0) = -\frac{\kappa_N(0)}{\Gamma} t^2(0) \tilde{\chi}_{11}^{-1} \\ = -\frac{\Gamma}{\kappa_N(0)} \frac{\tilde{\chi}_{11}^{-1} [E_d^2 - (\Gamma + \frac{1}{2\Gamma} \tilde{\chi}_{11}^2 R^2 T^2) + i2E_d(\Gamma + \frac{1}{2\Gamma} \tilde{\chi}_{11}^2 R^2 T^2)]}{[E_d^2 + (\Gamma + \frac{1}{2\Gamma} \tilde{\chi}_{11}^2 R^2 T^2)^2]} \dots (n7)$$

ภาคผนวก ข การพิสูจน์ว่า $\int_{\Gamma} \psi(\omega) = \phi$

$$\text{จากสมการ (10)} \quad \kappa N(\omega) \psi_{\Gamma}(\omega) = -\sin \psi_{\Gamma}(\omega) \exp[i\psi_{\Gamma}(\omega)]$$

$$\text{L.H.S.} = -\kappa N(\omega) \frac{\Gamma (E_d + i\Gamma)}{\kappa N(\omega) (E_d^2 + \Gamma^2)} = -\frac{\Gamma E_d}{(E_d^2 + \Gamma^2)} - \frac{i\Gamma^2}{(E_d^2 + \Gamma^2)} \quad \dots (ข1)$$

$$\text{R.H.S.} = -\sin \psi_{\Gamma}(\omega) \cos \psi_{\Gamma}(\omega) - i \sin^2 \psi_{\Gamma}(\omega) \quad \dots (ข2)$$

เทียบส่วนจริงและส่วนจินตภาพในสมการ (ข1) และ (ข2) จะได้

$$\sin \psi_{\Gamma}(\omega) \cos \psi_{\Gamma}(\omega) = \Gamma E_d / (E_d^2 + \Gamma^2)$$

$$\text{และ} \quad \sin^2 \psi_{\Gamma}(\omega) = \Gamma^2 / (E_d^2 + \Gamma^2)$$

$$\text{ดังนั้น} \quad \tan \psi_{\Gamma}(\omega) = \Gamma / E_d$$

$$\text{แต่จากสมการ (8)} \quad \tan \phi = \Gamma / E_d$$

$$\text{นั่นคือ} \quad \psi_{\Gamma}(\omega) = \phi$$

ภาคผนวก ค การหาค่าของ $G^{\Gamma}(r, \omega \pm i\delta)$

จากสมการ (21) เราสามารถเขียน $G^{\Gamma}(r, i\omega_n) \rightarrow G^{\Gamma}(r, \omega \pm i\delta)$ ดังนั้น

$$\begin{aligned} G^{\Gamma}(r, \omega \pm i\delta) &= (2\pi)^{-3} \int d^3k j_{\Gamma}(\vec{k}, \vec{r}) G^{\Gamma}(\vec{k}; i\omega_n) F(k) \\ &= N(\omega) \int d\tilde{\epsilon} j_{\Gamma}(\vec{k}, \vec{r} + \tilde{\epsilon}r/v_F) (i\omega_n - \tilde{\epsilon})^{-1} \frac{\Gamma}{\Gamma + \tilde{\epsilon}^2} \quad \dots (ค1) \end{aligned}$$

ในเมื่อ $(2\pi)^{-3} \rightarrow N(\omega) d\tilde{\epsilon}$ และ $k = k_F + \tilde{\epsilon}/v_F$ ซึ่งหาได้ดังนี้

$$\tilde{\epsilon} = \epsilon_k - \epsilon_F \quad \dots (ค2)$$

$$= \frac{1}{2m^*} (k - k_F)(k + k_F) = (k_F/m^*)(k - k_F) = v_F (k - k_F)$$

$$k = k_F + \tilde{\epsilon}/v_F \quad \dots (ค3)$$

เมื่อ k คือ โมเมนตัมของอิเล็กตรอนอิสระที่บริเวณใกล้กับพลังงานเฟอร์มี v_F และ k_F คือ ความเร็วและโมเมนตัมของอิเล็กตรอนอิสระที่พลังงานเฟอร์มี ($\epsilon_k \approx \epsilon_F$) ตามลำดับ

$$\begin{aligned} (2\pi)^{-3} d^3k &= (2\pi)^{-3} dk k^2 4\pi \\ &= (k/m^*) dk (m^* k / 2\pi \hbar^2) \end{aligned}$$

จากสมการ (ค2) อนุพันธ์ของ $\tilde{\epsilon}$ เทียบกับ k คือ $d\tilde{\epsilon} = (k/m^*) dk$ และ จากสมการ (ค3) ที่ผิวเฟอร์มีอิเล็กตรอนอิสระมีโมเมนตัม $k_F = k$ ดังนั้น

$$(2\pi)^{-3} d^3k = N(0) d\tilde{\epsilon}$$

อาศัยความสัมพันธ์ระหว่างฟังก์ชันเบสเซล ชนิดที่ 2 $j_\ell(z), \eta_\ell(z)$ และ ชนิดที่ 3 $h_\ell^{(1)}(z), h_\ell^{(2)}(z)$

$$h_\ell^{(1)}(z) = j_\ell(z) + i\eta_\ell(z) \quad ; \quad h_\ell^{(2)}(z) = j_\ell(z) - i\eta_\ell(z) \dots (ค4)$$

$$j_\ell(z) = \frac{1}{2} [h_\ell^{(1)}(z) + h_\ell^{(2)}(z)] \dots (ค5)$$

และสมบัติระยะไกลของ $h_\ell^{(1)}(z)$ และ $h_\ell^{(2)}(z)$ เมื่อ $z \gg \ell(\ell+1)$

$$h_\ell^{(1)}(z) \approx - (i/z) e^{i(z - \frac{1}{2}\ell\pi)} \quad ; \quad h_\ell^{(2)}(z) \approx (i/z) e^{-i(z - \frac{1}{2}\ell\pi)} \dots (ค6)$$

นำสมการ (ค5) แทนในสมการ (ค1) :

$$\begin{aligned} G_\ell^{(n)}(r, \omega \pm i\delta) &= \frac{N(0)}{2} \int d\tilde{\epsilon} \frac{[h_\ell^{(1)}(k_F r + \tilde{\epsilon}r/v_F) + h_\ell^{(2)}(k_F r + \tilde{\epsilon}r/v_F)] \Gamma^2}{(i\omega_n - \tilde{\epsilon})(\Gamma^2 + \tilde{\epsilon}^2)} \\ &= G_\ell^{(1)}(r, \omega \pm i\delta) + G_\ell^{(2)}(r, \omega \pm i\delta) \dots (ค7) \end{aligned}$$

ในเมื่อ

$$G_\ell^{(n)}(r, \omega \pm i\delta) = \frac{N(0)}{2} \int d\tilde{\epsilon} \frac{h_\ell^{(n)}(k_F r + \tilde{\epsilon}r/v_F) \Gamma^2}{(i\omega_n - \tilde{\epsilon})(\Gamma^2 + \tilde{\epsilon}^2)} \quad ; \quad n = 1, 2 \dots (ค8)$$

คิดเชิงปริพันธ์ในสมการ (ค) ทำได้โดยวิธี contour integration

$$\text{พิจารณา } q^{(1)}(r, \omega - i\delta) = \frac{N(\omega)}{2} \int d\tilde{\epsilon} \frac{h_p^{(1)}(k_F r + \tilde{\epsilon} r/v_F) \Gamma^2}{(i\omega_n - \tilde{\epsilon})(\tilde{\epsilon} + i\Gamma)(\tilde{\epsilon} - i\Gamma)}$$

มีโพล (pole) ที่ $\tilde{\epsilon} = i\omega_n$ และ $\tilde{\epsilon} = i\Gamma$

เมื่อโพลอยู่ที่ $\tilde{\epsilon} = i\omega_n$ ค่าของ $q^{(1)}(r, \omega \pm i\delta)$ คือ

$$\frac{N(\omega)}{2} 2\pi i \left\{ \frac{h_p^{(1)}(k_F r + i\omega_n r/v_F) \Gamma^2}{(i\omega_n + i\Gamma)(i\omega_n - i\Gamma)} \right\} + \frac{N(\omega)}{2} \int \frac{v_F}{r} \frac{dy h_p^{(1)}(y) \Gamma^2}{[i\omega_n - (\frac{y}{r} - k_F)] [v_F^2 (\frac{y}{r} - k_F)^2 + \Gamma^2]}$$

เมื่อ $y = 0$ จะได้

$$\begin{aligned} & i\pi N(\omega) \left\{ \frac{h_p^{(1)}(k_F r + \omega r/v_F) \Gamma^2}{(\omega^2 + \Gamma^2)} \right\} + \frac{N(\omega)}{2} 2\pi i \left\{ \frac{v_F}{r} \frac{\Gamma^2}{(\Gamma^2 + 4\epsilon_F^2)} \frac{1}{(\omega + 2\epsilon_F - i\delta)} \right\} \\ &= i\pi N(\omega) \left\{ \frac{h_p^{(1)}(k_F r + \omega r/v_F) \Gamma^2}{(\omega^2 + \Gamma^2)} + \frac{v_F}{r} \frac{\Gamma^2}{(\Gamma^2 + 4\epsilon_F^2)} \frac{1}{(\omega + 2\epsilon_F - i\delta)} \right\} \\ &= \pi N(\omega) \left\{ \frac{i h_p^{(1)}(k_F r + \omega r/v_F) \Gamma^2}{(\omega^2 + \Gamma^2)} + i p_0(r, \omega) \right\} \end{aligned}$$

เมื่อโพลอยู่ที่ $\tilde{\epsilon} = i\Gamma$ ค่าของ $q^{(1)}(r, \omega \pm i\delta)$ คือ

$$\frac{N(\omega)}{2} 2\pi i \frac{h_p^{(1)}(k_F r + i\Gamma r/v_F) \Gamma^2}{(\omega - i\Gamma)(2i\Gamma)} = \pi N(\omega) \frac{h_p^{(1)}(k_F r + i\Gamma r/v_F) \Gamma^2 (\omega + i\Gamma)}{2\Gamma(\omega^2 + \Gamma^2)}$$

เพราะฉะนั้น เราจะได้

$$\begin{aligned} q^{(1)}(r, \omega \pm i\delta) &= \pi N(\omega) \left[\frac{\Gamma^2}{(\omega^2 + \Gamma^2)^2} \left\{ i h_p^{(1)}(k_F r + \omega r/v_F) + [(\omega^2 + \Gamma^2)/\Gamma^2] i p_0(r, \omega) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + h_p^{(1)}(k_F r + i\Gamma r/v_F) (\omega + i\Gamma)/2\Gamma \right\} \right] \dots (ค9) \end{aligned}$$

$$\text{พิจารณา } q^{(2)}(r, \omega \pm i\delta) = \frac{N(\omega)}{2} \int d\tilde{\epsilon} \frac{h_p^{(2)}(k_F r + \tilde{\epsilon} r/v_F) \Gamma^2}{(i\omega_n - \tilde{\epsilon})(\tilde{\epsilon} + i\Gamma)(\tilde{\epsilon} - i\Gamma)}$$

มีโพลที่ $\tilde{\epsilon} = -i\gamma$ ดังนั้น

$$\begin{aligned} q^{(2)}(r, \omega \pm i\delta) &= \frac{N(0)}{2} 2\pi i \frac{h_{\ell}^{(2)}(k_F r - i\gamma r/v_F) \Gamma^2}{(i\omega + i\gamma)(-2i\gamma)} \\ &= KN(0) \frac{h_{\ell}^{(2)}(k_F r - i\gamma r/v_F) \Gamma^2 (\omega - i\gamma)}{2\gamma(\omega^2 + \gamma^2)} \quad \dots (A10) \end{aligned}$$

เมื่อรวมสมการ (A9) และ (A10) เราจะได้

$$\begin{aligned} q_{\ell}^{(1)}(r, \omega \pm i\delta) &= KN(0) \left[\frac{\Gamma^2}{(\omega^2 + \gamma^2)} \right] \left\{ i h_{\ell}^{(1)}(k_F r + \omega r/v_F) - h_{\ell}^{(1)}(k_F r + i\gamma r/v_F) (\omega + i\gamma)/\gamma \right. \\ &\quad \left. + h_{\ell}^{(2)}(k_F r - i\gamma r/v_F) (\omega - i\gamma)/2\gamma + [(\omega^2 + \gamma^2)/\Gamma^2] i p_{\ell}(r, \omega) \right\} \dots (A11) \end{aligned}$$

ในเมื่อ

$$\begin{aligned} p_0(r, \omega) &= \frac{v_F}{r} \frac{\Gamma^2}{(\Gamma^2 + 4\epsilon_F^2)} \frac{1}{(\omega + 2\epsilon_F - i\delta)} \\ p_2(r, \omega) &= -\frac{v_F}{r} \frac{\Gamma^2}{(\Gamma^2 + 4\epsilon_F^2)} \frac{1}{(\omega + 2\epsilon_F - i\delta)} - 3 \left(\frac{v_F}{r} \right)^2 \left\{ \frac{1}{(\omega + 2\epsilon_F - i\delta)^3} \frac{\Gamma^2}{(\Gamma^2 + 4\epsilon_F^2)} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{(\omega + 2\epsilon_F - i\delta)} \frac{4\Gamma^2 \epsilon_F^2}{(\Gamma^2 + 4\epsilon_F^2)^2} \frac{1}{(\omega + 2\epsilon_F - i\delta)} \left[-\frac{\Gamma^2}{(\Gamma^2 + 4\epsilon_F^2)} + \frac{16\Gamma^2 \epsilon_F^2}{(\Gamma^2 + 4\epsilon_F^2)^3} \right] \right\} \end{aligned}$$

ภาคผนวก ง การหาค่าที่-แมทริกซ์ของการกระเจิงในรูปของการเลื่อนเฟส

ที่-แมทริกซ์ของการกระเจิงคือ

$$t(\omega) = \frac{v_{kd}^2}{kd} q_d(\omega) = \frac{\Gamma}{KN(0) [\omega - R(\omega) + i(\Gamma - I(\omega))]} \quad \dots (ง1)$$

เมื่อ $R(\omega)$ และ $I(\omega)$ คือส่วนจริงและส่วนจินตภาพของพลังงานในตนเอง, $\Sigma(\omega)$ ตามลำดับ เราอาจหา $t(\omega)$ ในรูปการเลื่อนเฟส ดังนี้

พิจารณา $1 - 2\pi i N(0) t(\omega)$ เมื่อแทน $t(\omega)$ ด้วยสมการ (ง) จะได้

$$\begin{aligned}
1 - 2\kappa \sin(\omega) t(\omega) &= 1 - \frac{2i\Gamma}{(\omega - R) + i(\Gamma - \omega)} \\
&= \frac{(\omega - R) - i(\Gamma + \omega)}{(\omega - R) + i(\Gamma + \omega)} \\
&= \frac{[(\omega - R)^2 + (\Gamma + I)^2]^{\frac{1}{2}} e^{-i\omega_1}}{[(\omega - R)^2 + (\Gamma - I)^2]^{\frac{1}{2}} e^{-i\omega_2}} \\
&= \left\{ \frac{(1 + I/\Gamma)^2 + [(\omega - R)/\Gamma]^2}{(1 - I/\Gamma)^2 + [(\omega - R)/\Gamma]^2} \right\} e^{-2i\delta_\ell(\omega)} \quad \dots (2)
\end{aligned}$$

ในเมื่อ $\tan \omega_1 = (\Gamma + I)/(\omega - R)$; $\tan \omega_2 = -(\Gamma - I)/(\omega - R)$

และ $2\delta_\ell(\omega) = \omega_1 - \omega_2$ ซึ่งหาค่าได้ดังนี้

$$\begin{aligned}
\tan(\omega_1 - \omega_2) &= \frac{[(\Gamma + I)/(\omega - R)] + [(\Gamma - I)/(\omega - R)]}{1 + (\Gamma + I)(\Gamma - I)/(\omega - R)^2} \\
&= \frac{2\Gamma(\omega - R)}{I^2 + (\omega - R)^2 - \Gamma^2} \\
&= -2(\omega - R)/\Gamma \quad \text{ในเมื่อ } \Gamma \gg (\omega - R), I
\end{aligned}$$

$$\omega_1 - \omega_2 = \pi - 2(\omega - R)/\Gamma$$

$$\text{หรือ } \delta_\ell(\omega) = \frac{\pi}{2} - (\omega - R)/\Gamma$$

จากสมการ (2) $\Gamma \gg (\omega - R)$ เมื่อ $[(\omega - R)/\Gamma]^2 \approx 0$

$$1 - 2\kappa \sin(\omega) t(\omega) \doteq \left\{ \frac{(1 + 2I/\Gamma)}{(1 - 2I/\Gamma)} \right\}^{\frac{1}{2}} e^{-2i\delta_\ell(\omega)}$$

$$t(\omega) = \frac{1}{2\kappa \sin(\omega)} \left\{ 1 - (1 + 4I/\Gamma)^{\frac{1}{2}} e^{-2i\delta_\ell(\omega)} \right\}$$

แทนค่า $I(\omega) = -\frac{1}{2\Gamma} \text{sgn } \omega \chi_{11}^2(\omega + \kappa T)$ แล้วจัดสมการใหม่

$$\begin{aligned}
 f(\omega) &= \frac{1}{2k_B N(\omega)} \left\{ (1 - e^{-2i\delta_f(\omega)}) + e^{-2i\delta_f(\omega)} \frac{1}{\Gamma^2} \operatorname{sgn} \omega \tilde{\chi}_{ff}^2(\omega^2 + \kappa T^2) \right\} \\
 &= \frac{1}{2k_B N(\omega)} \left\{ 2i \sin \delta_f(\omega) [\cos 2\delta_f(\omega) - i \sin 2\delta_f(\omega)] \right. \\
 &\quad \left. + [\cos 2\delta_f(\omega) - i \sin 2\delta_f(\omega)] \frac{1}{\Gamma^2} \operatorname{sgn} \omega \tilde{\chi}_{ff}^2(\omega^2 + \kappa T^2) \right\} \\
 &= \frac{\sin 2\delta_f(\omega)}{2k_B N(\omega)} - \frac{\sin 2\delta_f(\omega)}{2\Gamma^2 k_B N(\omega)} \operatorname{sgn} \omega \tilde{\chi}_{ff}^2(\omega^2 + \kappa T^2) \\
 &\quad - i \left\{ \frac{\cos 2\delta_f(\omega)}{k_B N(\omega)} + \frac{\cos 2\delta_f(\omega)}{2\Gamma^2 k_B N(\omega)} \operatorname{sgn} \omega \tilde{\chi}_{ff}^2(\omega^2 + \kappa T^2) \right\} \dots (33)
 \end{aligned}$$

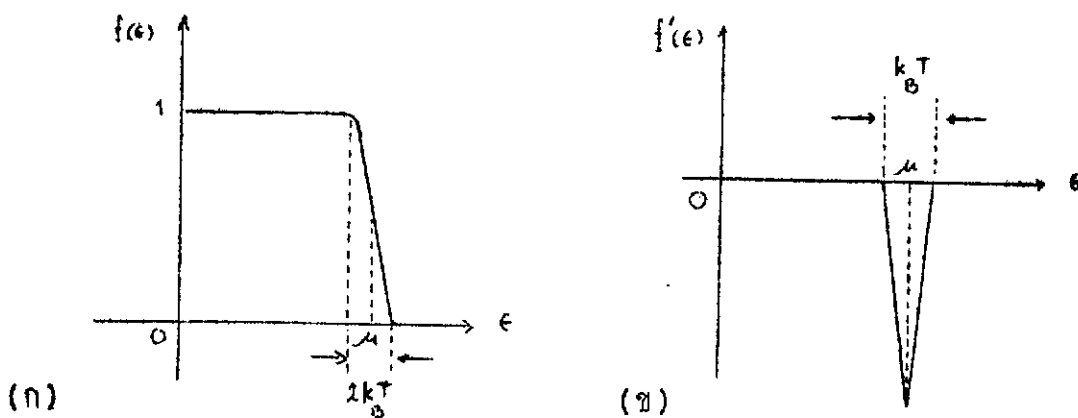
ภาคผนวก จ การหาค่าอินทิกรัล $\int_0^\infty d\epsilon f(\epsilon) \phi(\epsilon)$

ให้ $I = \int_0^\infty d\epsilon f(\epsilon) \phi(\epsilon)$

เมื่อ $\phi(\epsilon)$ คือ ฟังก์ชันใด ๆ ที่แปรตาม ϵ

$f(\epsilon)$ คือ ฟังก์ชันเฟอร์มี มีค่า $(1 + \exp[(\omega - \epsilon_f)/k_B T])^{-1}$

เมื่อเขียนกราฟระหว่าง $f(\epsilon)$ และ ϵ กับ $f'(\epsilon)$ และ ϵ จะได้ดังนี้



ภาพประกอบ 4 (ก) กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $f(\epsilon)$ และ ϵ
 (ข) กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $f'(\epsilon)$ และ ϵ

ตามภาพประกอบ 4 (ก) $f(\epsilon)$ ลดลงอย่างรวดเร็วจาก 1 ถึง 0 ภายในช่วงแคบ ๆ ขนาด $k_B T$ ณ ตำแหน่งที่ $\epsilon = \mu$ แต่ที่ ϵ ค่าอื่น ๆ $f(\epsilon)$ มีค่าเกือบคงที่ตามภาพประกอบ 4 (ข) $f'(\epsilon) = 0$ ทุก ๆ แห่งยกเว้นในช่วงแคบ ๆ $k_B T$ ที่ $\epsilon = \mu$ ซึ่งเป็นช่วงที่ $f'(\epsilon)$ มีค่ามากและเป็นลบ

เมื่อกระจายอินทิกรัล I โดยวิธี integration by parts เราจะได้

$$I = f(\epsilon) \psi(\epsilon) \Big|_0^\infty - \int_0^\infty d\epsilon f'(\epsilon) \psi(\epsilon) \quad \dots (91)$$

$$\text{ในเมื่อ } \psi(\epsilon) = \int_0^\epsilon d\epsilon' \phi(\epsilon') \quad \dots (92)$$

เนื่องจากเมื่อ $\epsilon = \infty$ และ $\epsilon = 0$ นั้น $f(\infty)$ และ $f(0)$ มีค่าเป็นศูนย์ ดังนั้นสมการ(91) จึงลดรูปเป็น

$$I = - \int_0^\infty d\epsilon f'(\epsilon) \psi(\epsilon) \quad \dots (93)$$

เฉพาะช่วงแคบ ๆ $k_B T$ รอบจุด $\epsilon = \mu$ เท่านั้นที่มีผลต่ออินทิกรัล I ในช่วงเล็ก ๆ นี้ พังก์ชัน $\psi(\epsilon)$ แปรเปลี่ยนอย่างช้า ๆ จึงเขียนให้อยู่ในรูปอนุกรมกำลังได้ว่า

$$\begin{aligned} \psi(\epsilon) &= \psi(\mu) + (\epsilon - \mu) \frac{d\psi}{d\epsilon} \Big|_\mu + \frac{1}{2!} (\epsilon - \mu)^2 \frac{d^2\psi}{d\epsilon^2} \Big|_\mu + \dots \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} (\epsilon - \mu)^m \frac{d^m \psi}{d\epsilon^m} \Big|_\mu \end{aligned}$$

แทนค่า $\psi(\epsilon)$ และ $f'(\epsilon)$ ลงในสมการ(93) จะได้

$$I = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \frac{d^m \psi}{d\epsilon^m} \Big|_\mu \int_0^\infty d\epsilon \frac{(\epsilon - \mu)^m \exp[(\epsilon - \mu)/k_B T]}{(1 + \exp[(\epsilon - \mu)/k_B T])^2} \cdot \frac{1}{k_B T} \quad \dots (94)$$

ให้ $x = (\epsilon - \mu)/k_B T \rightarrow dx = d\epsilon \cdot \frac{1}{k_B T}$ ดังนั้น จะได้สมการ(94) เป็น

$$I = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \frac{d^m \psi}{d\epsilon^m} \Big|_\mu (k_B T)^m \int_{-\mu/k_B T}^{\infty} dx \frac{x^m e^x}{(e^x + 1)^2} \quad \dots (95)$$

เนื่องจากที่อุณหภูมิมีค่า $\mu/k_B \gg 1$ จึงเห็นชัดจากกำลังของอินทิกรัลด้วย $-\infty$

ให้ $I_m = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x^m e^x}{(e^x + 1)^2}$ ดังนั้นสมการ (๖๕) จะอยู่ในรูป

$$I = \sum_{m=0}^{\infty} I_m \frac{1}{m!} (k_B T)^m \left. \frac{d^m \psi}{d\epsilon^m} \right|_{\mu} \quad \dots (๖๖)$$

จากตารางอินทิเกรต $I_m = 0$ เมื่อ $m = 1, 3, 5, \dots$ และ $I_m \neq 0$ เมื่อ $m = 0, 2, 4, \dots$ ดังนั้นเราสามารถเขียนสมการ (๖๖) ในรูปอนุกรมกำลังได้ว่า

$$I = \psi(\mu) + I_2 \frac{(k_B T)^2}{2!} \left. \frac{d^2 \psi}{d\epsilon^2} \right|_{\mu} + I_4 \frac{(k_B T)^4}{4!} \left. \frac{d^4 \psi}{d\epsilon^4} \right|_{\mu} + \dots \quad \dots (๖๗)$$

แต่ $k_B T \ll 1$ พจน์ที่ 3, 4... ของสมการ (๖๗) จึงมีค่าน้อยตัดทิ้งได้ ดังนั้น

$$I = \psi(\mu) + I_2 \frac{(k_B T)^2}{2!} \left. \frac{d^2 \psi}{d\epsilon^2} \right|_{\mu} \quad \dots (๖๘)$$

จากตารางอินทิเกรต เราทราบว่า

$$I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x^2 e^x}{(e^x + 1)^2} \quad \dots (๖๙)$$

และจากความสัมพันธ์ในสมการ (๖๒) เราจะได้

$$\phi(\epsilon) = \frac{d\psi}{d\epsilon} \quad \text{และ} \quad \psi = \int_0^{\mu} d\epsilon \phi(\epsilon) \quad \dots (๖๑๐)$$

นำสมการ (๖๙) และ (๖๑๐) แทนในสมการ (๖๘) เราจะได้

$$\int_0^{\mu} d\epsilon f(\epsilon) \phi(\epsilon) = \int_0^{\mu} d\epsilon \phi(\epsilon) + \frac{I_2}{2} (k_B T)^2 \left. \frac{d\phi(\epsilon)}{d\epsilon} \right|_{\mu} \quad \dots (๖๑๑)$$

การแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุในบริเวณรอบสิ่งเจือปนแบบคอนโกล

บทคัดย่อ

ของ

รังสรรค์ ศรีสาคร

เสนอต่อมหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ ประสานมิตร

เพื่อเป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาค้นคว้าหลักสูตร

ปริญญาการศึกษามหาบัณฑิต

มีนาคม 2525

การวิจัยครั้งนี้ได้คำนวณหาการแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุรอบ
สิ่งเจือปนแบบคอนโทตามแบบจำลองแอนเดอร์สัน และใช้ที่-แมทริกซ์ของการกระเจิง
ของยามาคา และ โยชิเคะ ผลการคำนวณแสดงให้เห็นว่าที่ระยะไกลจากสิ่งเจือปน
มาก ๆ และที่อุณหภูมิศูนย์สัมบูรณ์ การแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุแปรผัน
กับกำลังสามของระยะทางจากสิ่งเจือปน ซึ่งผลอันนี้ตรงกับสูตรของฟรีเคิล ส่วนที่
อุณหภูมิสูงกว่าศูนย์สัมบูรณ์ การแปรเปลี่ยนความหนาแน่นของประจุอยู่ในรูป $a(x)x^{-2}$
ผลอันนี้แสดงให้เห็นว่า อันตรกิริยาระหว่างเอสและอี-อิเล็กตรอน ทำให้ผลคำนวณ
ที่ไคแตกต่างไปจากสูตรของฟรีเคิล โดยที่ $a(x)$ เป็นสัดส่วนกับระยะทาง x จาก
สิ่งเจือปนและฟังก์ชันที่แปรเปลี่ยนไปมาของ $k_F x$ ที่ระยะทางต่าง ๆ จากสิ่งเจือปน

CHARGE - DENSITY VARIATIONS AROUND A KONDO IMPURITY

AN ABSTRACT

BY

RUNGSAN SRISAKORN

Presented in partial fulfillment of the requirements
for the Master of Education degree
at Srinakharinwirot University
March 1982

The charge-density variations around a Kondo impurity are calculated for the case of the Anderson model on the basis of the Yamada and Yosida's scattering t-matrix. It is found that at very long distance from the impurity and near the absolute zero ($T = 0$) the density variation varies as r^{-3} as expected from the Friedel formula, whereas at finite temperature ($T \neq 0$) the density variation is of the form $a(r)r^{-2}$. It is shown that the s-d mixing term gives a correction to the Friedel formula. This correction is proportional to r times an oscillatory function of $k_F r$ at various distances from the impurity.