

๕๒ ก.ม. ๒๕๓๕

ความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุรอบสิ่งเจือปนแบบแม่เหล็กพารา

ปริญาพนธ์

ของ

ชัยณรงค์ ควงสีแก้ว

เสนอต่อมหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ ประสานมิตร เพื่อเป็นส่วนหนึ่งของการศึกษา

ตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต วิชาเอกฟิสิกส์

กันยายน ๒๕๓๔

ลิขสิทธิ์ เป็นของมหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ

180415

คณะกรรมการควบคุมและคณะกรรมการสอบได้พิจารณาปริญญานิพนธ์ฉบับนี้แล้ว เห็นสมควรรับ เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต สาขาฟิสิกส์ ของมหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒได้

คณะกรรมการควบคุม

.....ประธาน

(ศ. ดร. สุทัศน์ ยกส้าน)

.....กรรมการ

(ผศ. ดร. เพ็ญลดา วีระสัย)

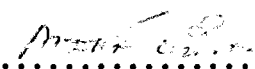
คณะกรรมการสอบ

.....ประธาน

(ศ. ดร. สุทัศน์ ยกส้าน)

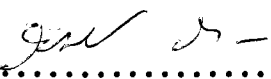
.....กรรมการ

(ผศ. ดร. เพ็ญลดา วีระสัย)

.....กรรมการที่แต่งตั้งเพิ่มเติม

(ผศ. ดร. ฉสรวรค์ ผลโภค)

บัณฑิตวิทยาลัยอนุมัติให้รับวิทยานิพนธ์ฉบับนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตร วิทยาศาสตรมหาบัณฑิต วิชาเอกฟิสิกส์ ของมหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ

.....คณบดีบัณฑิตวิทยาลัย

(ศ. ดร. สมพร บัวทอง)

วันที่...1...เดือน...พฤษภาคม...พ.ศ. ๒๕๖๔

ประกาศคุณพระการ

ปริญญานิพนธ์ฉบับนี้สำเร็จได้ด้วยความช่วยเหลือจาก ศาสตราจารย์ ดร. สุกฤษณ์
ยกส์าน ที่ให้คำปรึกษาชี้แนะแนวทาง รวมทั้งการตรวจแก้ไขตลอดระยะเวลาที่ทำการวิจัยด้วย
วิญญาณของความเป็นครูอย่างแท้จริง ผู้วิจัยรู้สึกซาบซึ้งในพระคุณเป็นอย่างยิ่ง

ขอขอบคุณ ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. เพ็ญลดา วีระสัย และ
ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ฉสรวรค์ ผลโกศ ที่ได้ให้คำปรึกษาแนะนำด้านวิชาการที่เป็น
ประโยชน์ต่อการวิจัย

ท้ายที่สุดนี้ขอกราบขอบพระคุณ คุณพ่อ คุณแม่ ที่เป็นกำลังใจในการทำงานวิจัยนี้
และขอขอบคุณครูบาอาจารย์ที่เคยอบรมสั่งสอนแก่ผู้วิจัยทุกท่าน

ชัยณรงค์ ดวงสีแก้ว

สารบัญ

บทที่	หน้า
1 บทนำ	1
ภูมิหลัง	1
2 เอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	9
คุณสมบัติของความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุ	9
3 วิธีการวิจัย	22
4 ผลการวิจัย	32
4.1 การคำนวณหาความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุที่ระยะไกล และอุณหภูมิศูนย์องศาสัมบูรณ์	33
4.2 การคำนวณหาความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุที่ระยะไกล จากอะตอมของสิ่งเจือปนและอุณหภูมิสูงกว่าศูนย์องศาสัมบูรณ์โดยใช้ ใช้การประมาณแบบ เบทเท-ซัมเมอร์เฟลด์	36
4.3 การคำนวณหาค่าความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุที่ระยะ ใกล้และอุณหภูมิศูนย์องศาสัมบูรณ์	37
4.4 การคำนวณหาความแปรปรวนของความหนาแน่นที่ระยะใกล้จาก อะตอมของสิ่งเจือปนและอุณหภูมิสูงกว่าศูนย์องศาสัมบูรณ์โดยใช้ การประมาณแบบ เบทเท-ซัมเมอร์เฟลด์	38
5 สรุป อภิปราย และเสนอแนะ	39
สรุปผลการวิจัย	39
อภิปรายผล	40
ข้อเสนอแนะ	41

บทที่	หน้า
บรรณานุกรม	42
ภาคผนวก	45
ประวัติย่อผู้วิจัย	56
บทคัดย่อ	57

บัญชีภาพประกอบ

ภาพประกอบ		หน้า
1	แสดงการกระเจิงกำทอนของอิเล็กตรอนในการตีสิ่งเจือปนไม่เป็นแม่เหล็ก โดยที่สปีนของอิเล็กตรอนก่อนและหลังการกระเจิงไม่เปลี่ยนแปลงทิศทาง	2
2	แสดงการกระเจิงกำทอนในการตีสิ่งเจือปนเป็นแม่เหล็ก โดยที่สปีนของอิเล็กตรอนก่อนและหลังการกระเจิงกลับทิศทางหรือไม่ก็ได้	2
3	แสดงความหนาแน่นประจุว่าไม่ได้กระจายโดยทั่วอย่างสม่ำเสมอในโลหะแต่จะเป็นไปในลักษณะไม่สม่ำเสมอที่มีสมมาตรเชิงทรงกลม โดยที่ความหนาแน่นของประจุรอบอะตอมสิ่งเจือปนมีมากบ้างน้อยบ้างสลับกันไป	3
4	แสดงความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุรอบอะตอมของสิ่งเจือปนตามแบบจำลองของฟรีเคิล	7
5	แสดงการขึ้นกับระยะทางของการถูกรบกวนโดยให้ค่าโคอีเล็คทริกคงที่ของความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุรอบอะตอมสิ่งเจือปน ..	16
6	ความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุรอบอะตอมของสิ่งเจือปนในโลหะเจ้าย่านชนิดทองแดง	18
7	กราฟแสดงสมบัติของส่วนกลับของสภาพรับไว้ได้เชิงแม่เหล็กกับอุณหภูมิสำหรับสารที่แสดง	
	ก) พฤติกรรมแสดงสภาวะแม่เหล็กพารา	23
	ข) พฤติกรรมแสดงสภาวะแม่เหล็กเฟอร์โร	23
	ค) พฤติกรรมแสดงสภาวะแม่เหล็กแอนติเฟอร์โร	23
	ง) พฤติกรรมแสดงสภาวะแม่เหล็กเฟอร์โร	23

บัญชีภาพประกอบ

ภาพประกอบ	หน้า
8 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $f(\epsilon)$ และ ϵ ที่จุดทศนิยมต่าง ๆ	50
9 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $f'(\epsilon)$ และ ϵ	51

บทที่ 1

บทนำ

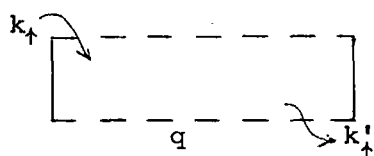
ภูมิหลัง

สาเหตุการเกิดความแปรปรวนของความหนาแน่นของประจุในบริเวณรอบอะตอมของสิ่งเจือปนในโลหะ

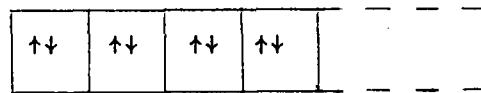
ตามปกติแล้วอิเล็กตรอนอิสระในโลหะเจ้าบ้านจะเปลี่ยนแปลงพฤติกรรมได้อย่างง่ายดายเมื่อถูกรบกวนโดยอิทธิพลของสนามภายนอก อาทิเช่น โดยสนามแม่เหล็ก สนามไฟฟ้า หรืออะตอมของสิ่งเจือปน (impurity) ในกรณีเช่นนี้เราจะพบว่าเมื่ออิเล็กตรอนอิสระของโลหะเจ้าบ้าน (host) จะถูกรบกวนเมื่อมันเคลื่อนที่เข้าใกล้อะตอมของสิ่งเจือปน ถ้าอิเล็กตรอนนั้นความเร็วต่ำมันก็จะถูกแรงผลักออกมาอย่างรุนแรง และแรง ๆ นี้เป็นแรงคูลอมบ์ (coulomb force) ที่เกิดขึ้นระหว่างอิเล็กตรอนในวงโคจรวงนอกของอะตอมของสิ่งเจือปนกับอิเล็กตรอนของโลหะเจ้าบ้าน ถ้าอิเล็กตรอนอิสระนั้นมีความเร็วสูงมันจะเคลื่อนที่ผ่านอะตอมของสิ่งเจือปนไปอย่างรวดเร็ว อิเล็กตรอนทั้งสองประเภทนี้ไม่มีความสำคัญเท่าใดนักต่อความแปรปรวนของความหนาแน่นของอิเล็กตรอนรอบ ๆ อะตอมของสิ่งเจือปน แต่สำหรับอิเล็กตรอนอิสระที่มีพลังงานประมาณพอ ๆ กับอิเล็กตรอนในวงโคจรนอกสุดของอะตอมของสิ่งเจือปน อิเล็กตรอนอิสระเหล่านี้จะมีอิทธิพลมากต่อความหนาแน่นของประจุรอบอะตอมของสิ่งเจือปน กล่าวคืออิเล็กตรอนอิสระเหล่านี้จะเปลี่ยนจากสถานะอิสระ (free state) ไปสู่สถานะถูกยึดเหนี่ยว (bound state) โดยมันเคลื่อนที่เข้าจะไปใช้เวลาชั่วคราวอยู่ในวงโคจรรอบ ๆ อะตอมของสิ่งเจือปนแล้วกลับคืนไปสู่สถานะอิสระอีกครั้งหนึ่ง ในเวลาต่อมาอิเล็กตรอนในสถานะใหม่อาจจะมีสถานะเหมือนหรือต่างไปจากสถานะเดิมก็ได้ เราเรียกกระบวนการนี้ว่า การกระเจิงกำทอน (resonance scattering) และโดยทั่วไปแล้วการกระเจิงกำทอนนี้อาจแบ่งได้เป็นสองประเภทคือ

1. ในกรณีที่จะดอมของสิ่งเจือปนมีสภาพไม่เป็นแม่เหล็ก (nonmagnetic) ในกรณีเช่นนี้เราแทนสถานะเสมือน (virtual state) ด้วย q ดังภาพประกอบ 1

อิเล็กตรอนอิสระ



สถานะเสมือน S



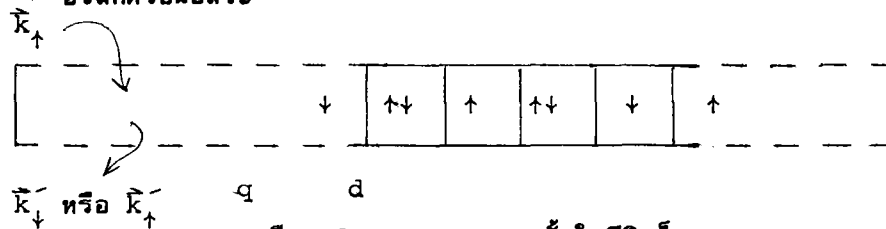
วงอะตอมชั้นในมีอิเล็กตรอนครบ

ภาพประกอบ 1 แสดงการกระเจิงกำทอนของอิเล็กตรอนในกรณีสิ่งเจือปนไม่เป็นแม่เหล็ก โดยที่สปินของอิเล็กตรอนก่อนและหลังการกระเจิงไม่เปลี่ยนแปลงทิศทาง

สถานะ q นี้เกิดจากการที่อิเล็กตรอนอิสระ สถานะ k_+ เข้ามาอยู่ในชั้น s รอบอะตอมสิ่งเจือปนเป็นการชั่วคราว แล้วคืนออกสู่สถานะอิสระในสถานะ k'_+

2. ในกรณีที่จะดอมสิ่งเจือปนมีสภาพเป็นแม่เหล็ก (magnetic) สถานะเสมือนรอบอะตอมสิ่งเจือปนจะเกิดจากการที่อิเล็กตรอนอิสระสถานะ k_+ เข้ามาอยู่ในชั้น d หรือ f ที่มีอิเล็กตรอนอยู่แล้วในวงโคจรนอกของอะตอมสิ่งเจือปน แล้วเคลื่อนที่ออกสู่สถานะอิสระในสถานะ k'_+ หรือ k'_- ดังภาพประกอบ 2

อิเล็กตรอนอิสระ



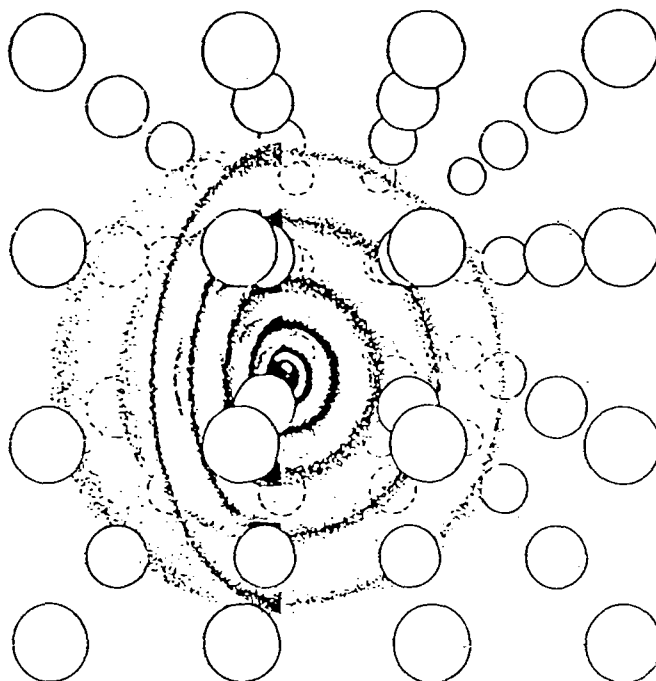
สถานะเสมือน d

วงอะตอมชั้นในมีอิเล็กตรอนครบ

ภาพประกอบ 2 แสดงการกระเจิงกำทอนในกรณีสิ่งเจือปนเป็นแม่เหล็กโดยที่สปินของอิเล็กตรอนก่อนและหลังการกระเจิงกลับทิศทางหรือไม่ก็ได้

โดยสรุป จะเห็นได้ว่าความแตกต่างที่สำคัญในการกระเจิงกำหนดของอิเล็กตรอน ในทั้งสองกรณีนี้คือ ในกรณีที่อะตอมของสิ่งเจือปนไม่เป็นแม่เหล็ก อิเล็กตรอนที่อยู่เต็มวงโคจร ภายในจะไม่มีผลใด ๆ ต่อการกระเจิง เนื่องจากอิเล็กตรอนที่เข้ามาจะปรากฏอยู่ในสถานะ เสมือนและจากไป โดยที่อิเล็กตรอนอิสระไม่มีอิทธิพลต่อสปินของอิเล็กตรอนตัวอื่น ๆ ของ อะตอมสิ่งเจือปน แต่ในกรณีของสิ่งเจือปนเป็นแม่เหล็กจะมีการกระเจิงของอิเล็กตรอนโดย อาศัยอันตรกิริยาระหว่างสปินของอิเล็กตรอนอิสระกับสปินสุทธิของอะตอมสิ่งเจือปน

ปรากฏการณ์การกระเจิงกำหนดของอิเล็กตรอนอิสระนี้เองที่ทำให้เกิดความแปรปรวน ของความหนาแน่นอิเล็กตรอนอิสระในบริเวณอะตอมของสิ่งเจือปน ดังภาพประกอบ 3



ภาพประกอบ 3 แสดงความหนาแน่นประจุว่าไม่ได้กระจายโดยทั่วอย่างสม่ำเสมอในโลหะ แต่จะเป็นไปในลักษณะไม่สม่ำเสมอที่มีสมมาตรเชิงทรงกลม โดยที่ความหนาแน่นของประจุ รอบอะตอมสิ่งเจือปนมีมากม้างน้อยบ้างสลับกันไป

ในปี ค.ศ. 1952 ฟรีเดิล⁽¹⁻²⁾ (Friedel) ได้คำนวณความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุในบริเวณรอบอะตอมของสิ่งเจือปนในโลหะโดยใช้ทฤษฎีกระเจิง (scattering theory) เขาศึกษาโลหะที่มีสิ่งเจือปนผสมอย่างเจือจางโดยคำนวณหาความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุรอบ ๆ อะตอมสิ่งเจือปนได้ดังนี้

$$\delta\rho(\vec{r}) = \int d^3k \delta\rho(\vec{k}, \vec{r}) \eta(\epsilon_F - \epsilon_k). \quad (1.1)$$

เมื่อ η คือฟังก์ชันขั้นบันไดหนึ่งหน่วย (unit step function) ซึ่งมีค่าดังนี้

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

ถ้ากำหนดให้ $\delta\rho(\vec{k}, \vec{r})$ คือความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุเนื่องจากการกระเจิงของอิเล็กตรอนอิสระที่มีคลื่นเวกเตอร์ (wave-vector) $\vec{k}$ ที่ตำแหน่ง $\vec{r}$ และที่อุณหภูมิศูนย์องศาสัมบูรณ์ $\delta\rho(\vec{k}, \vec{r})$ จะมีค่า

$$\delta\rho(\vec{k}, \vec{r}) = |\psi^+(\vec{k}, \vec{r})|^2 + |\psi(\vec{k}, \vec{r})|^2 \quad (1.2)$$

เมื่อ ψ^+ คือฟังก์ชันคลื่นของการกระเจิง (scattering wave function)

เมื่อระบบถูกรบกวน

และ ψ คือฟังก์ชันบล็อก (block function) ของระบบที่ไม่ถูกรบกวน เมื่อเรากระจายฟังก์ชัน ψ^+ และ ψ ในเทอมของฟังก์ชันแวนเนียร์ (Wannier function) เราจะได้ว่า

$$\psi^+(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_{\mu} B(\vec{k}, \vec{R}_{\mu}) a^+(\vec{r} - \vec{R}_{\mu}) \quad (1.3)$$

$$\psi(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_{\mu} B^0(\vec{k}, \vec{R}_{\mu}) a(\vec{r} - \vec{R}_{\mu}) \quad (1.4)$$

$$\text{ในเมื่อ } B(\vec{k}, \vec{R}_{\mu}) = \Omega^{1/2} (2\pi)^{-3/2} [e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_{\mu}} + \frac{f(\theta) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_{\mu}}}{R_{\mu}}] \quad (1.5)$$

$$B^0(k, R_\mu) = \Omega^{1/2} (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_\mu} \quad (1.6)$$

โดยที่ $f(\theta)$ คือแอมพลิจูดของการกระเจิง (scattering amplitude)

Ω คือปริมาตร

และ R_μ คือตำแหน่งของแลตทิซ

เมื่อนำสมการ (1.3) ถึงสมการ (1.6) แทนในสมการ (1.2) และสมการ (1.1) จะได้

$$\begin{aligned} \delta\rho(\vec{r}) = & \int d^3k \eta(\epsilon_F - \epsilon_k) \sum_{\mu} \{ B^*(\vec{k}, \vec{R}_\mu) B(\vec{k}, \vec{R}_\mu) \\ & - B^{0*}(\vec{k}, \vec{R}_\mu) B^0(\vec{k}, \vec{R}_\mu) \} |a(\vec{r} - \vec{R}_\mu)|^2 \end{aligned} \quad (1.7)$$

หากเราพิจารณาอินทิกรัลในสมการ (1.7) โดยใช้พิกัดแบบทรงกลม (spherical coordinate) ส่วนที่ขึ้นกับมุมจะเขียนได้เป็น

$$\int e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_\mu} f(\theta) d\Omega = 2 \int_0^\pi e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_\mu \cos \theta} f(\theta) \sin \theta d\theta$$

เมื่อ R_μ มีค่ามาก ๆ ผลการอินทิเกรตจะออกมาในรูปอนุกรม ในบริเวณที่ไกลจากสิ่งเจือปนมาก ๆ และเมื่อเราพิจารณาจะใช้เฉพาะเทอมแรกของอนุกรมเท่านั้น จะได้ค่าอินทิกรัลของสมการ (1.7) ตามทฤษฎีทัศนศาสตร์ (optical theory) ว่า

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

ถ้าเราเขียน $f(\theta)$ เสียใหม่ได้เป็น $f(\theta) = |f(\theta)| e^{i\vartheta}$

โดยที่ ϑ คือปริมาณที่ได้จากการเลื่อนเฟส (phase shift) สมการ (1.7) จึงเขียนได้เป็น

$$\delta\rho(r) = \frac{\Omega}{(2\pi)^2} \sum_{\mu} |a(\vec{r} - \vec{R}_\mu)|^2 R_\mu^2 \int_0^{k_F} dk k |f(\pi)| \sin(2k_F R_\mu + \vartheta) \quad (1.8)$$

ค่าอินทิกรัลใหม่นี้ทำได้โดยการอินทิเกรตแบบแยกส่วน (integration by parts) ในรูปการกระจายที่ระยะไกล (asymptotic expansion) จะประมาณได้ว่า เทอมแรกของการกระจายคือผลลัพธ์ของการอินทิเกรตสมการ (1.8) จึงเขียนได้เป็น

$$\delta\rho(\vec{r}) = \frac{\Omega}{2\pi} \sum_{\mu} |a(\vec{r}-\vec{R}_{\mu})|^2 R_{\mu}^{-3} \cos(2k_F r + \vartheta) \quad (1.9)$$

เมื่อฟังก์ชันแวนเนียร์มีขอบเขตที่แน่นอนจะมีเพียงเทอมเดียวเท่านั้นในสมการ (1.9) ซึ่งจะใช้ในเทอมที่ R_{μ} มีค่าเข้าใกล้ r มากที่สุด ดังนั้นโดยการประมาณอีกครั้งจะได้

$$\delta\rho(\vec{r}) = \frac{A}{r^3} \cos(2k_F r + \vartheta) \quad (1.10)$$

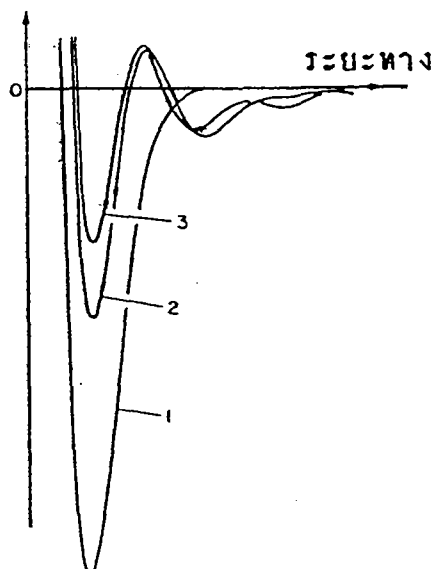
เมื่อ A คือแอมพลิจูดของการกระเจิง

k_F คือโมเมนตัมเฟอร์มี (Fermi momentum)

และ r คือระยะทางจากอะตอมของสิ่งเจือปน

ผลที่ได้คือทฤษฎีของฟรีเคิล ตามทฤษฎีนี้ความหนาแน่นของประจุที่ถูกรบกวนจะแปรเปลี่ยนตามระยะทางจากอะตอมของสิ่งเจือปน ขณะที่แอมพลิจูดของการแปรปรวนก็จะลดลงอย่างช้า ๆ เมื่อระยะทางเพิ่มขึ้น สาเหตุสำคัญของการแปรเปลี่ยนของความหนาแน่นประจุเป็นผลมาจากความไม่ต่อเนื่องของโมเมนตัมของอิเล็กตรอนอิสระ ดังภาพประกอบ 4

ความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุ $[\delta\rho(x)]$



ภาพประกอบ 4 แสดงความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุรอบอะตอมของสิ่งเจือปนตามแบบจำลองของฟรีเคิล

กราฟเส้น 1 ได้จากการคำนวณกรณีที่โมเมนต์สูงสุดของอิเล็กตรอนมีการสิ้นสุดทันทีทันใด

กราฟเส้น 2 ได้จากการคำนวณกรณีที่โมเมนต์สูงสุดของอิเล็กตรอนค่อย ๆ ลดหายไป

กราฟเส้น 3 ได้จากการคำนวณที่ค่าโมเมนต์สูงสุดค่อย ๆ ลดหายไปทีละน้อย ๆ ซึ่งช้ากว่ากรณีที่ 2

แต่ถ้าโมเมนต์สูงสุดของอิเล็กตรอนอิสระแปรปรวนต่อเนื่องหรือเป็นฟังก์ชันของ k ที่เรียบ (smooth function) การแปรปรวนของประจุที่ระยะไกลเท่านั้นก็จะไม่เกิดขึ้น

โบลมเบอร์เกนและโรแลนด์⁽³⁾ (Bloembergen and Rowland) ได้ทดสอบความสัมพันธ์ดังสมการที่ (1.10) ในปี ค.ศ. 1953 ได้ทำการวัดแอมพลิจูดของสัญญาณ NMR (Nuclear Magnetic Resonance) ใน ^{63}Cu ที่มี Zn เจือปนอยู่ด้วยความเข้มข้นต่าง ๆ กัน เขาพบว่าแอมพลิจูดของสัญญาณมีค่าลดลงเมื่อความเข้มข้นของอะตอมสิ่งเจือปนเพิ่มขึ้นตาม

สมการ (1.10) ทุกประการ

ความพยายามที่จะเข้าใจปรากฏการณ์ความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุรอบ
สิ่งเจือปนแบบต่าง ๆ ทั้งที่เป็นแม่เหล็กและไม่เป็นแม่เหล็กในโลหะ เจ้าบ้านนี้ได้มีผู้วิจัยทั้งทาง
ทฤษฎีและการทดลองมากมาย)

เอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

คุณสมบัติของความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุ

ทฤษฎีของฟรีเคลนั้นสามารถใช้อธิบายกรณีที่จะคอมของสิ่งเจือปนมิได้เป็นโลหะทรานสิชัน ทฤษฎีนี้ใช้ได้ดีและถูกต้องเฉพาะที่ระยะไกลจากอะตอมสิ่งเจือปนและที่อุณหภูมิศูนย์องศาสัมบูรณ์เท่านั้น ทั้งนี้เพราะเวกเตอร์คลื่นและการขึ้นกับพลังงานศักย์ของสิ่งเจือปนไม่มีอิทธิพลมากมายนักต่อความหนาแน่นประจุที่ระยะไกลกว่าระยะ k_F^{-1}

หลังจากที่ฟรีเคลได้คำนวณความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุโดยใช้ทฤษฎีการกระเจิงแล้ว ก็ได้มีผู้คำนวณความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุมากมาย บ้างก็ใช้ทฤษฎีที-เมตริกซ์ (t-matrix) บ้างก็ใช้ทฤษฎีการตอบสนองไดอิเล็กตริกซ์ (Dielectric response theory) จะอย่างไรก็ตาม ทฤษฎีหลัก ๆ ที่ใช้อธิบายความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุมี 3 ทฤษฎี⁽⁴⁾ คือ

1. ทฤษฎีการกระเจิง

ทฤษฎีนี้พิจารณาการกระเจิงของอิเล็กตรอนโดยศักย์ของสิ่งเจือปนที่มีลักษณะสมมาตรเชิงทรงกลม เราอธิบายได้โดยเขียนเป็นฟังก์ชันคลื่นในรูป

$$\begin{aligned}\phi_k(r) &= e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \frac{f_k(\theta) e^{ikr}}{r} \\ &= e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + q_k(\vec{r})\end{aligned}\quad (2.1)$$

เมื่อ $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ คือคลื่นระนาบที่ตกกระทบ

และ $f_k(\theta)$ คือแอมพลิจูดของการกระเจิงซึ่งถูกกำหนดโดยศักย์ของการกระเจิง

ความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุคือ

$$\delta\rho_k(\vec{r}) = q_k(\vec{r})e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} + c.c + \left| \frac{f_k(\theta)e^{ikr}}{r} \right|^2 \quad (2.2)$$

ที่ระยะไกลจากอะตอมสิ่งเจือปนมากคือ $r \gg k_F^{-1}$ เราตัดเทอมสุดท้ายของสมการ (2.2)ทิ้ง เราจะได้

$$\langle \delta\rho_k(\vec{r}) \rangle = \frac{f_k(\pi) \sin(2kr + \emptyset)}{kr^2} \quad (2.3)$$

หากเราต้องการความแปรปรวนของอิเล็กตรอนที่ทุก ๆ ค่าพลังงาน เราคำนวณได้ โดยการอินทิเกรตที่ระดับพลังงานจากศูนย์จนกระทั่งถึงระดับเฟอร์มี

$$\delta\rho(\vec{r}) = \frac{\alpha}{2\pi^2} \int_0^{k_F} d^3k \langle \delta\rho_k(\vec{r}) \rangle = \frac{\alpha \cos(2k_F r + \emptyset)}{2\pi^2 r^3} \quad (2.4)$$

เมื่อ k_F คือโมเมนตัมของเฟอร์มี
 α คือแอมพลิจูดของความแปรปรวน
 $\emptyset$ คือเฟสของความแปรปรวน

จะเห็นว่าพฤติกรรมของความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุนี้ขึ้นกับผิวเฟอร์มี (Fermi surface) สมการ (2.4) แสดงว่าความแปรปรวนนี้ขึ้นกับระยะทางโดยที่สมการนี้จะใช้อธิบายผลการทดลองได้ดีที่ $r < \zeta$

เมื่อ ζ คือความยาวอาพันธ์ (coherence length) ซึ่ง

$$\zeta = v_F / \Gamma$$

เมื่อ v_F คือความเร็วเฟอร์มี

และ Γ คือค่าของศักย์ยังผลการกระเจิงที่ขึ้นกับพลังงานและเวกเตอร์คลื่น

ในการวิเคราะห์การเลื่อนเฟส (phase shift) ของทฤษฎีการกระเจิง $\emptyset$ คือ พารามิเตอร์ที่ประกอบด้วย การเลื่อนเฟส $\eta_\ell(e_F)$ ของคลื่นย่อย (partial wave) ที่ผิวเฟอร์มี เมื่อคลื่นย่อยมีเลขโมเมนตัมเชิงมุม ℓ ค่าพารามิเตอร์เหล่านี้คือ

$$A \sin \vartheta = \frac{1}{2\pi} \sum_{\ell} (-1)^{\ell} (2\ell+1) \sin^2 \eta_{\ell}(\epsilon_F) \quad (2.5)$$

$$A \cos \vartheta = \frac{1}{2\pi} \sum_{\ell} (-1)^{\ell} (2\ell+1) \sin \eta_{\ell}(k_F) \cos \eta_{\ell}(k_F) \quad (2.6)$$

ทฤษฎีการเลี้ยวเบนนี้ให้ค่าพารามิเตอร์ที่สามารถตรวจสอบได้จากการทดลองค่า η_{ℓ} สามารถคำนวณได้จากแถบโครงสร้างพลังงาน (band structure) โดยใช้การเลี้ยวเบน เราจะทราบสมบัติเชิงไฟฟ้าของสารเจือปนที่มีการเติมอะตอมของสิ่งเจือปน

คุณสมบัติอีกประการหนึ่งในการกระเจิงของอิเล็กตรอนอิสระในโลหะคือ การกระเจิงต้องเป็นไปตามกฎผลรวม (Sum rule) เช่น เมื่อเราใส่อะตอมของสิ่งเจือปนในโลหะเจ้าบ้านและนิวเคลียสของสิ่งเจือปนมีประจุมากกว่านิวเคลียสของโลหะเจ้าบ้านอยู่ Z ประจุส่วนเกิน Z นี้จะถูกกำบังโดยอิเล็กตรอนอิสระ ดังนั้นอิเล็กตรอนจะมาอยู่ ณ บริเวณรอบ ๆ อะตอมสิ่งเจือปนมากในปริมาณที่เหมาะสม เพื่อให้ประจุของอะตอมสิ่งเจือปนที่มีมากเกินไบนั้นอยู่ในภาวะสมดุลจนในที่สุดทำให้เกิดความเป็นกลางทางไฟฟ้า

การที่จะทำให้สิ่งเจือปนเกิดความเป็นกลางทางไฟฟ้าเราต้องใช้ประจุเท่ากับ

$$Z = \int \delta \rho(\vec{r}) d^3 r \quad \text{หรือ} \quad Z = \int_0^{\epsilon_F} \Delta N(E) dE$$

เมื่อ $\Delta N(E)$ คือการเปลี่ยนแปลงของความหนาแน่นของสถานะ

และ ϵ_F คือพลังงานเฟอร์มิ

ในกรณีที่สิ่งเจือปนมีความเข้มข้นน้อย ๆ เราสามารถเขียน $\Delta N(E)$ ให้อยู่ในพจน์ของการเลี้ยวเบนของการกระเจิงได้ดังนี้

$$\Delta N(E) = \frac{2}{\pi} \sum_{\ell} g_{\ell} \frac{d\eta_{\ell}}{dE} \quad (2.7)$$

เมื่อ η_ℓ และ g_ℓ คือการเลื่อนเฟสและดีเจนเนอเรซี (degeneracy) ของสถานะที่มีเลขควอนตัมโมเมนตัมเชิงมุมเป็น ℓ ตามลำดับ

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

$$\int_0^{\epsilon_F} \Delta N(E) dE = \frac{2}{\pi} \sum_\ell g_\ell \eta_\ell(\epsilon_F) \quad (2.8)$$

ถ้าศักย์ของสิ่งเจือปนมีลักษณะสมมาตรแบบทรงกลม ค่า $g_\ell = (2\ell + 1)$ ดังนั้น

$$Z = \frac{2}{\pi} \sum_\ell (2\ell + 1) \eta_\ell(\epsilon_F) \quad (2.9)$$

ผลที่ได้นี้คือกฎผลรวมของฟรีเดล (Friedel's sum rule) ซึ่งเป็นเงื่อนไขที่สำคัญ

2. ทฤษฎีการตอบสนองไดอิเล็กตริก

ในทฤษฎีการตอบสนองนี้ ศักย์ยังผล (effective potential) ของสิ่งเจือปนมีค่า

$$V(r, \omega) = \frac{V_0}{(2\pi)^3} \int \frac{4\pi}{q^2 \epsilon(\omega, q)} e^{iqr} d^3q \quad (2.10)$$

เมื่อ $\epsilon(\omega, q)$ คือฟังก์ชันไดอิเล็กตริก (dielectric function)

ความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุสามารถคำนวณได้จากสมการของพัวซองส์ (Poisson equation) ซึ่งมีค่าเท่ากับ

$$\delta\rho(\vec{r}) = \frac{V_0}{(2\pi)^3} \int \left[\frac{1}{\epsilon(0, q)} - 1 \right] e^{iqr} d^3q \quad (2.11)$$

ดังจะเห็นได้ว่ารูปแบบของความแปรปรวนจะขึ้นกับการเลือกไดอิเล็กตริกซ์ฟังก์ชันเมื่อใช้การประมาณแบบเฟสสุ่ม (random phase approximation) จะได้

$$\epsilon(0, q) = 1 - \frac{4\pi F(q)}{q^2}$$

เมื่อ

$$F(q) = \frac{k_F^2}{8\pi^2} \left\{ 1 + \frac{4k_F^2 - q^2}{4k_F q} \ln \frac{(2k_F + q)}{(2k_F - q)} \right\}$$

เมื่อแทนค่า $\epsilon(0, q)$ ลงในสมการ (2.11) เราจะได้ความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุที่ระยะไกล ๆ เป็น

$$\delta\rho(\vec{r}) \sim \frac{\cos(2k_F r)}{r^3} \quad (2.12)$$

สมการ (2.12) เป็นผลคำนวณโดยแลงเกอร์และวอสโก⁽⁵⁾ (Langer and Vosko) ได้พบว่าจะมีความแปรปรวนของประจุเป็นแบบมากบ้างน้อยบ้างที่ระยะไกลออกไปเกิน k_F^{-1} แต่เมื่อใช้

$$\epsilon(0, q) = 1 - \frac{k_s^2}{q^2}$$

เมื่อ

$$k_s = \frac{6\pi n e^2}{\epsilon_F}$$

และ n คือความหนาแน่นของอิเล็กตรอนต่อปริมาตร

ซึ่งได้จากการประมาณแบบโทมัส-เฟอร์มี (Thomas-Fermi approximation) แล้วนำ $\epsilon(0, q)$ ไปแทนในสมการ (2.11) คำนวณหาความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุได้เป็น

$$\delta\rho(\vec{r}) = \frac{-k_s^2 V_0 e^{-k_s r}}{4\pi r} \quad (2.13)$$

ในที่นี้ V_0 คือค่าคงที่ของอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนของโลหะ เจ้าบ้านกับอิเล็กตรอนของอะตอมสิ่งเจือปน ความแปรปรวนจะเป็นแบบเอกซ์โพเนนเชียล (exponential)

ตามธรรมชาติเมื่ออุณหภูมิสูงขึ้นผิวเฟอร์มิของโลหะจะเลื่อนลงขึ้น มีผลทำให้ความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุมีค่าลดลง ในปี ค.ศ. 1967 บีล โมนอด⁽⁶⁾ (Beal Monod) ได้คำนวณหาความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุโดยใช้ฟังก์ชันไดอิเล็กตริกของโลหะจำบ้านแบบลินฮาร์ด ฟังก์ชัน (Linhard function) เมื่ออุณหภูมิไม่เท่ากับศูนย์องศาสัมบูรณ์ที่ $q = 2k_F$ จะได้

$$\left. \frac{d\varepsilon}{dq} (0, q) \right|_{q=2k_F} \approx \frac{1}{4\pi^2 k_F^2} \ln \left| \frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right| \quad (2.14)$$

ที่อุณหภูมิ $k_B T \ll \varepsilon_F$ เมื่อแทนในสมการ (2.11) และอินทิเกรตจะได้

$$\delta\rho(\vec{r}, T) = \delta\rho(\vec{r}, 0) \frac{r/R}{\sinh(r/R)} \quad (2.15)$$

โดยในที่นี้ $R = k_F (2\pi k_B T)^{-1}$

สมการนี้แสดงว่าที่ระยะไกลจากอะตอมสิ่งเจือปน $\delta\rho(\vec{r}, T)$ จะลดลงเป็นศูนย์ แต่ที่ระยะใกล้ ๆ $\delta\rho(\vec{r}, T)$ จะเปลี่ยนแปลงไปน้อยมาก ซึ่งจากการทดลองโดยใช้ NMR พบว่าระยะทางที่กล่าวถึงนี้มีค่าประมาณ 50 อังสตรอม ที่อุณหภูมิห้อง R มีค่าประมาณ 100 อังสตรอม

3. ทฤษฎี-เมตริกซ์

การประมาณแบบที-เมตริกซ์ (t-matrix approximation) สามารถใช้ในการคำนวณหาความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุได้ วิธีนี้อาศัยกรีนฟังก์ชัน (Green's function) ดังนี้คือ

$$G(k, k', \omega) = G_0(k, k', \omega) + G_0(k, k', \omega) T(k, k', \omega) G_0(k, k', \omega) \quad (2.16)$$

เมื่อ $G_0(k, k', \omega)$ คือกรีนฟังก์ชันของอิเล็กตรอนอิสระในโลหะจำบ้านบริสุทธิ์

และ $T(k, k', \omega)$ คือที-เมตริกซ์ของการกระเจิง

เรากำนวหาความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุโดยใช้การแปลงแบบฟูรีเออร์
ของ $\langle C(k^+) C(k^-) \rangle$ ให้อยู่ในรูปเทอมของกรีนฟังก์ชันคือ

$$\langle C(k^+) C(k^-) \rangle = \frac{1}{\pi} \int f(\omega) d\omega \text{Im} G(k, k', \omega) \quad (2.17)$$

เมื่อ $f(\omega)$ คือฟังก์ชันเฟอร์มี (Fermi function)

และสำหรับการแกว่งเล็กน้อย

และเขียน $T(k, k'; \omega)$ ในเทอมของการเลื่อนเฟส

โดยวิธีนี้ข้อมูลด้านแถบโครงสร้างของโลหะเจือปนและข้อมูลของอะตอมสิ่งเจือปน
จะปรากฏอยู่ในที-เมตริกซ์ วิธีนี้ใช้มากในการศึกษาผลกระทบของแถบโครงสร้าง (band
structure effects) และการขึ้นกับทิศทาง (anisotropy) ของผิวเฟอร์มี รวมทั้งใช้
ในการศึกษาผลของเวกเตอร์คลื่นต่อพลังงานศักย์ของสิ่งเจือปน โดยสรุปความแปรปรวนของ
ความหนาแน่นประจุจะขึ้นกับการเลือกกรีนฟังก์ชันและที-เมตริกซ์เป็นอย่างมาก ซึ่งการคำนวณ
โดยวิธีนี้เหมาะสำหรับระบบที่เจือปนและสิ่งเจือปนมีศักย์ของอันตรกิริยาต่อกันอย่างง่าย ๆ
เช่น ระบบ CuZn เป็นต้น

เมื่อศักย์ของสิ่งเจือปนมีลักษณะที่ไม่สมมาตรเชิงทรงกลมและโลหะเจือปนมี
โครงสร้างของแถบพลังงานซับซ้อน สูตรของความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุจะซับซ้อน
มาก ความปกติแล้วลักษณะโครงสร้างของศักย์จะเป็นตัวกำหนด $\delta\rho(\vec{r})$ ณ ที่ระยะใกล้กับสิ่ง
เจือปน แต่ที่ระยะไกล ๆ $\delta\rho(\vec{r})$ จะมีการเปลี่ยนแปลงน้อยมาก หากมีการพิจารณาอันตรกิริยา
แบบคูลอมบ์ ระหว่างอิเล็กตรอนกับอิเล็กตรอน ทำให้ $\delta\rho(\vec{r})$ ที่ระยะใกล้และไกลจากสิ่ง
เจือปนเปลี่ยนแปลงในการคำนวณโดยใช้ทฤษฎีการตอบสนองไดอิเล็กตริกแบบเฟสคู่
แลงเกอร์และวอสโกพพบว่า $\delta\rho(\vec{r})$ มีค่าเป็น $(1 + \zeta/4)^{-2}$ เท่าของแบบฟรีเดิล ในกรณี
โลหะบริสุทธิ์ ζ มีค่าอยู่ในช่วง 0.75-1.50

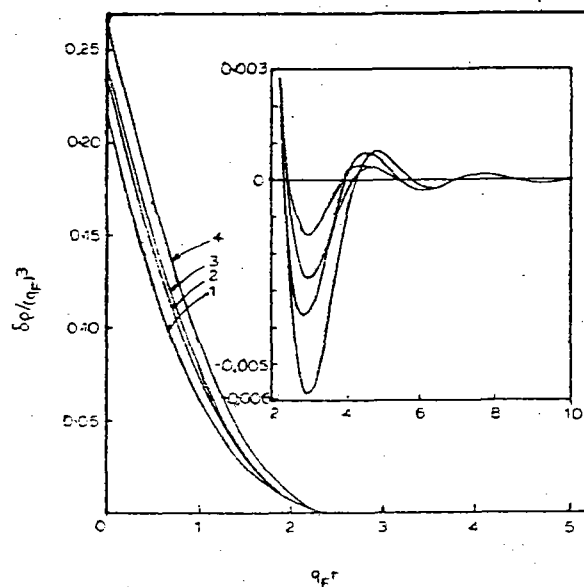
$$\text{เมื่อ } \zeta = 0.33r_s^3$$

$$\text{และ } r_s^3 = \left[\frac{4\pi}{3} a_0^3 n_0 \right]^{-1}$$

ในเมื่อ n_0 = ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนต่อปริมาตร

a_0 = รัศมีของบอร์

ดังนั้นอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนกับอิเล็กตรอนจะทำให้ $\delta\rho(\vec{r})$ ลดลงถึงครึ่งหนึ่งของค่าที่ได้จากการประมาณ โดยไม่พิจารณาอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนกับอิเล็กตรอน แต่การเบี่ยงเบนอย่างนี้จะเกิดขึ้นเมื่อ $k_F r < 5$ หรือกล่าวได้ว่าเฉพาะภายในบริเวณวงอะตอมที่ใกล้กันมากที่สุดรอบอะตอมสิ่งเจือปนเท่านั้น ซึ่งต่อมาซิงกิวิและคณะ⁽⁷⁾ (Singwi and others) ได้ศึกษาปัญหานี้โดยใช้ค่าไดอิเล็กตริกที่ถูกต้องขึ้นเขาได้พิจารณาทั้งอันตรกิริยาแบบคูลอมบ์ และสหสัมพันธ์แบบแลกเปลี่ยน (exchange correlation) ระหว่างอิเล็กตรอนและพบว่า การแปรปรวนที่ระยะใกล้มีค่าเพิ่มขึ้น แต่ที่ระยะทาง $k_F r > 5$ การแปรปรวนจะยังคงมีสภาพเดิม ดังภาพประกอบ 5



ภาพประกอบ 5 แสดงการขึ้นกับระยะทางของการถูกรบกวนโดยให้ค่าไดอิเล็กตริกคงที่
ความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุรอบอะตอมสิ่งเจือปน เมื่อ

- 1 คือการประมาณแบบ R.P.A. (Random Phase Approximation)
- 2 คือการประมาณแบบฮับบาร์ด (Hubbard approximation)
- 3 โดยซิงกวิและโตชิ (Singwi and Tosi)
- 4 โดยซิงกวิและคนอื่น ๆ (Singwi and others)

สำหรับการนิโคโครงสร้างของฟิวเฟอร์มีที่ขึ้นกับทิศทาง กรณีนี้จะมีผลกระทบต่อสมบัติการเป็นคาบของความแปรปรวนของประจุเป็นอย่างมาก นอกจากนี้การแปรปรวนของ $\delta\rho(r)$ ยังขึ้นกับจำนวนสถานะที่เหลืว่างอยู่ในการกระเจิงของอิเล็กตรอน จากภายในไปสู่ภายนอกฟิวเฟอร์มี ซึ่งไรท์⁽⁸⁾ (Roth) ได้ทำการศึกษาและพบว่า เมื่อฟิวเฟอร์มีเป็นแบบทอกรระบอบ การลดลงของความแปรปรวนจะเป็นแบบ r^2 ต่อมา โคลริดจ์และคนอื่น ๆ⁽⁹⁾ (Coleridge and others) พบว่าอิเล็กตรอนที่มีโมเมนตัมเชิงมุมต่างกันจะทำให้ความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุต่างกัน

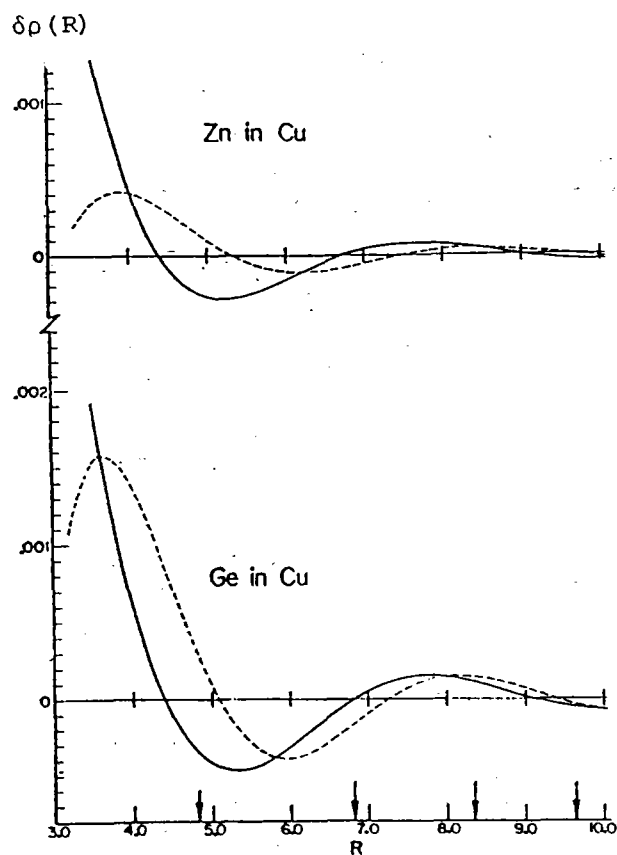
การคำนวณหาความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุที่ระยะไกลกับสิ่งเจือปน

ในปี ค.ศ. 1967 อัลเฟรดและออสเทนเบิร์ก⁽¹⁰⁾ (Alfred and Ostenberg) ได้พบว่าสูตรของฟรีเคิลนั้นใช้ได้เฉพาะที่ไกลจากอะตอมสิ่งเจือปนมาก ๆ คือที่ระยะไกลกว่า k_F แต่ที่ระยะใกล้ ๆ กับอะตอมสิ่งเจือปนสูตรของฟรีเคิลจะใช้ไม่ได้ผลคั่นก ทั้งนี้เพราะนอกจากศักย์ของสิ่งเจือปนจะขึ้นกับพลังงานและเวกเตอร์ k ของอิเล็กตรอนแล้ว ศักย์ยังขึ้นกับโครงสร้างแถบพลังงานของอิเล็กตรอนอีกด้วย เมื่ออัลเฟรดและออสเทนเบิร์กคำนวณหาความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุที่ระยะไกลโดยใช้วิธีการคำนวณที่คล้ายกับที่ฟรีเคิลเคยหาไว้ที่ระยะไกล เขาได้ผลว่า

$$\delta\rho(\vec{r}) = \frac{A\cos(2k_F r + \emptyset)}{r^3} + \frac{B\cos(2k_F r + \zeta)}{r^4} \quad (2.18)$$

ซึ่งแสดงว่าความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุที่ระยะไกลจะขึ้นอยู่กับ r^{-4} เมื่อ r มีค่าน้อย แต่ที่ระยะใกล้ ๆ ความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุจะอยู่ในรูป r^{-3}

ดังภาพประกอบ 6



ภาพประกอบ 6 ความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุรอบอะตอมของสิ่งเจือปนในโลหะ

เจ้าบ้านชนิดทองแดง ----- แสดง $\delta\rho(R)$ จริง ๆ ที่ระยะไกล และ ———— แสดง $\delta\rho(R)$ ที่ได้จากการคำนวณ

ฮีเกอร์⁽¹¹⁾ (Heeger) และ คอนโด⁽¹²⁾ (Kondo) พบว่าการที่วงโคจร (orbital) d หรือ f ของอิเล็กตรอนรอบอะตอมสิ่งเจือปนมีอิเล็กตรอนไม่เต็มวงนั้น จะมีอิทธิพลโดยตรงต่อการกระเจิงของอิเล็กตรอน โดยจะทำให้เกิดปรากฏการณ์คอนโด (Kondo effect) นอกจากนั้นเหตุการณ์นี้ ทำให้ศักย์การกระเจิงขึ้นกับอุณหภูมิอีกด้วย ทำให้ศักย์ที่ขึ้นกับพลังงานมีค่าลดลงอย่างรวดเร็ว

จากการศึกษาความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุ โดยซลาติคและกรูเนอร์⁽¹³⁾ (Zlatić and Grüner) ที่กระทำในปี ค.ศ. 1977 เขาพบว่าที่ระยะใกล้ ๆ รอบอะตอม สิ่งเจือปนแบบ 3d ในโลหะเจ้าบ้านเช่น Al เมื่อใช้วิธีการประมาณแบบความแปรปรวนของสปินในบริเวณเฉพาะตามแบบจำลองของแอนเดอร์สัน (Localized spin Fluctuation (LSF) approximation of Anderson model) เขาพบว่าความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุขึ้นกับอุณหภูมิและระยะต่าง ๆ ดังนี้

$$\delta\rho(\vec{r},T) = \delta\rho(\vec{r},0) \left[1 - \left(\frac{T}{\theta_r}\right)^2\right] \quad (2.19)$$

เมื่อ θ_r คืออุณหภูมิเอกลักษณ์ (characteristic temperature) ซึ่งมีค่าพหุคูณกับระยะทางที่ระยะอนันต์ θ_r มีค่าเท่ากับ $\pi/\sqrt{2}$ ผลการศึกษาของเขาแสดงว่า $\delta\rho(r,T)$ ลดลงแบบพาราโบลาจากค่าที่อุณหภูมิเท่ากับศูนย์อย่างสมบูรณ์ และลดลงอย่างรวดเร็วมากกว่าค่าที่ได้จากสูตรของฟรีเคิล ซึ่งผลคำนวณนี้ตรงกับที่ของกรูเนอร์และชาร์กิท⁽¹⁴⁾ (Grüner and Hargitai) กรูเนอร์⁽¹⁵⁾ (Grüner) เบร์เทียร์และมินเนียร์⁽¹⁶⁾ (Berthier and Minier) และอัลลูล⁽¹⁷⁾ (Alloul) ได้ศึกษาความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุไว้โดยวิธี NMR (Nuclear Magnetic Resonance) และ NQR (Nuclear Quadrupolar Resonance) สำหรับกรณีโลหะผสม Al-3d ซลาติคและกรูเนอร์ยังได้แสดงให้เห็นอีกว่าวิธีการประมาณชนิด LSF ตามแบบจำลองแอนเดอร์สันนั้นสามารถใช้อธิบายข้อมูล NQR ในโลหะผสม Al-3d ได้เพราะ $\delta\rho(\vec{r})$ ของ Al-Mn และ Al-Cr ที่ได้จากการทดลองมีค่าผิดไปจากค่าที่ได้จากการคำนวณของเบร์เทียร์และมินเนียร์มาก ทั้งนี้เขาได้ให้เหตุผลว่าการที่แอมพลิจูดของความแปรปรวนลดลงอย่างรวดเร็วผิดปกติที่ระยะใกล้ ๆ ในระบบ Al-Mn และ Al-Cr นั้นเป็นผลมาจากการเปลี่ยนแปลงของแมกนีไทเซชัน (Magnetization) ของอิเล็กตรอนอิสระ นอกจากนี้ค่า $\delta\rho(\vec{r})$ ของ Al-Mn และ Al-Cr ยังขึ้นกับอุณหภูมิ ทั้งที่ระยะใกล้และไกลจากสิ่งเจือปน และมีพฤติกรรมทั่วไปเป็นฟังก์ชันของ Γ/T_K เมื่อ Γ คือพลังงานของการก้ำทอน และ T_K คือ

อุณหภูมิคอนโด ซึ่งผลอันนี้ตรงกับการคำนวณของกรูเนอร์และชาร์กิต

จากการแปรผลจากการทดลองซึ่งใช้ cw NMR⁽¹⁸⁻²⁰⁾ (continuous-wave Nuclear Magnetic Resonance) NQR⁽²¹⁻²⁷⁾ และวิธีอื่น ๆ ก็ได้มีการพบว่าความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุรอบโลหะทรานสิชันหรือแรเอิร์ท (transition-metal or rare-earth) ในโลหะเจ้าบ้านมีคุณสมบัติทั่วไปที่สำคัญสองประการคือ

1. แอมพลิจูดของความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุรอบสิ่งเจือปนบริเวณใกล้สิ่งเจือปนมีค่าน้อย

2. ในโลหะเจือแบบคอนโด (หรือสารเจือแม่เหล็ก) ความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุแสดงพฤติกรรมว่าขึ้นกับอุณหภูมิมาก และเป็นไปในทำนองเดียวกับสภาพต้านทานไฟฟ้า

เมื่อเร็ว ๆ นี้ ซอคซีวิก, ซลาติก และฮอวาทิก⁽²⁸⁾ (Sokcevic, Zlatic and Horvatic) ได้ศึกษาความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุรอบสิ่งเจือปน 3d หรือ 4f ในโลหะปกติโดยใช้แบบจำลองแอนเดอร์สัน เขาพบว่าอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนเจ้าบ้านมีผลต่อความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุในแถบนำ (conduction band) และเมื่ออุณหภูมิสูงขึ้นแอมพลิจูดของความแปรปรวนจะลดลง และผลกระทบนี้จะมีมากที่ระยะไกลระยะหนึ่งจากสิ่งเจือปนที่ระยะหนึ่ง และที่ไกลกว่าระยะนี้แอมพลิจูดก็จะลดลงอย่างช้า ๆ ซึ่งสันนิษฐานได้ว่าแอมพลิจูดจะหายไปที่ระยะไกลมาก ซึ่งชี้ให้เห็นได้โดยข้อมูลจากการวิเคราะห์ที่อุณหภูมิต่ำ ๆ

จากที่กล่าวมาทั้งหมดจะเห็นว่า ในการศึกษาความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุรอบบริเวณรอบสิ่งเจือปนประเภทต่าง ๆ ฟรีเคลให้สูตรความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุโดยใช้ทฤษฎีการกระเจิงเป็นพื้นฐานของการคำนวณเป็นคนแรก สูตรนี้ใช้ได้กับการอธิบายผลการทดลองที่ระยะไกลจากสิ่งเจือปน และเมื่อได้มีการประยุกต์ทฤษฎีของ

ที-เมตริกซ์ และการตอบสนองไดโพลีกริกปรากฏว่าได้ผลการคำนวณใกล้เคียงกับที่ฟรีเคลดคำนวณไว้ งานวิจัยต่าง ๆ เท่าที่กล่าวมานี้ได้คำนวณหาความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุรอบสิ่งเจือปนประเภทต่าง ๆ เช่น

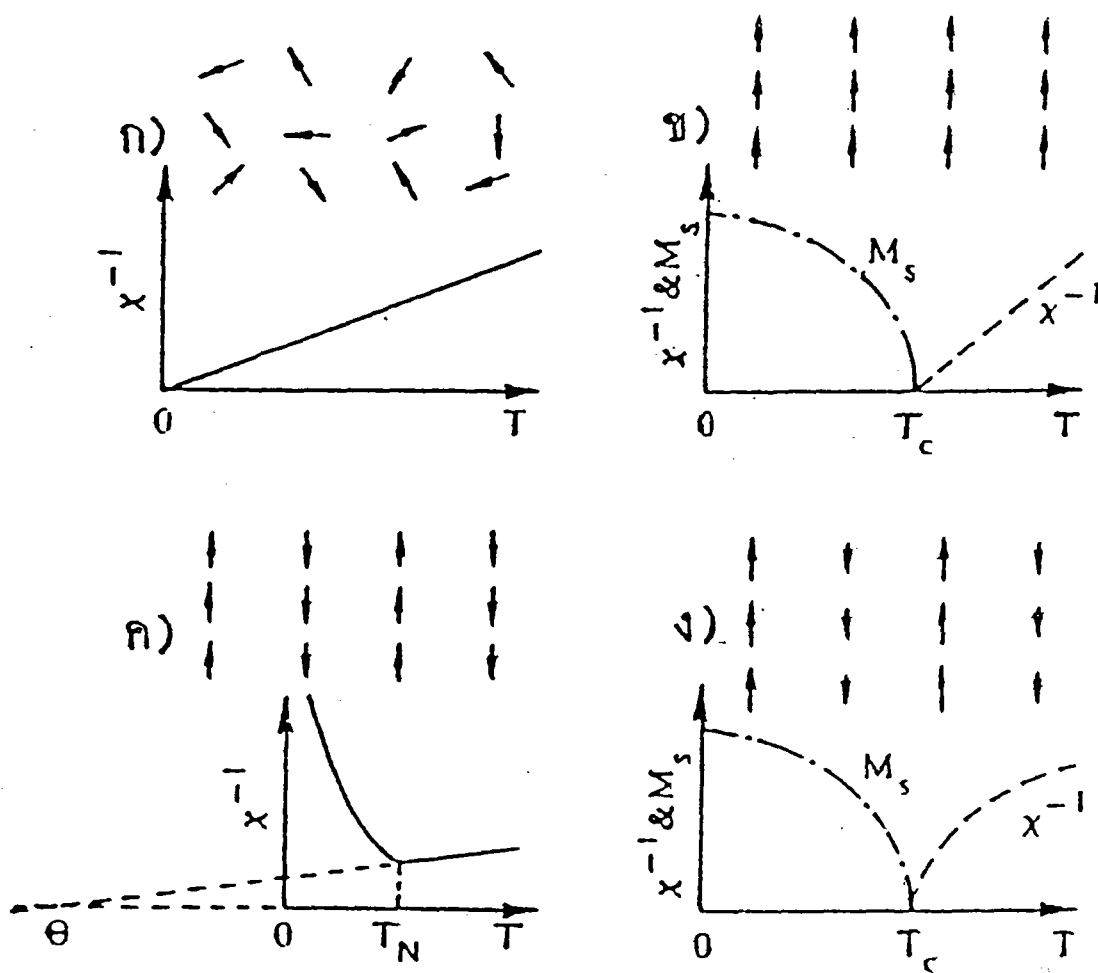
- สิ่งเจือปนแบบคอนโค
- สิ่งเจือปนแบบแอนเคอร์สัน
- และ - สิ่งเจือปนประเภทโลหะทรานสิชัน 3d หรือ 4f เป็นต้น

แต่การคำนวณหาความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุรอบสิ่งเจือปนแบบแม่เหล็กพาราโดยใช้ทฤษฎี-เมตริกซ์ยังไม่มีผู้ใดกระทำ

บทที่ 3

วิธีการวิจัย

สารแม่เหล็กในธรรมชาติมีหลายชนิด ได้แก่ แม่เหล็กเฟอร์ไรต์ (ferromagnet) แม่เหล็กแอนติเฟอร์ไรต์ (antiferromagnet) แม่เหล็กเฟอร์ไรต์ (ferrimagnet) และ แม่เหล็กพารา (paramagnet) เป็นต้น สภาวะแม่เหล็กเฟอร์ไรต์นั้นมีสภาพทางแม่เหล็กสูงสุด เนื่องด้วยโมเมนต์แม่เหล็กทุกชั่วคู่เรียงตัวชี้ไปในทิศทางเดียวกัน แต่ถ้าสารใดมีโมเมนต์แม่เหล็กทุกชั่วคู่ซึ่งมีขนาดเท่ากัน แต่ชั่วคู่ที่อยู่ใกล้กันชี้ในทิศทางตรงกันข้าม อิทธิพลของโมเมนต์จะหักล้างกันและกันหมดทำให้ค่าของการทำให้เป็นแม่เหล็ก (magnetization) สุทธิเท่ากับศูนย์ การเรียงตัวของโมเมนต์แม่เหล็กลักษณะนี้ทำให้เกิดสภาวะแม่เหล็กแอนติเฟอร์ไรต์ และสภาวะแม่เหล็กแอนติเฟอร์ไรต์นี้จะหายไปเมื่ออุณหภูมิของสารแม่เหล็กสูงขึ้นถึงค่าหนึ่ง เราเรียกอุณหภูมิของการเปลี่ยนแปลงสภาวะนี้ว่า "อุณหภูมิเนล" (Neel temperature) T_N เมื่ออุณหภูมิของสารสูงกว่าอุณหภูมิเนล ($T > T_N$) สารจะกลายสภาพเป็นแม่เหล็กพารา สภาพรับไว้ได้เชิงแม่เหล็ก (magnetic susceptibility) จะเป็นไปตามกฎคูรี (Curie's law) คือ $\chi \propto 1/T$ ส่วนสภาวะแม่เหล็กเฟอร์ไรต์นั้นการเรียงตัวของโมเมนต์เป็นแบบคล้ายสภาวะแม่เหล็กแอนติเฟอร์ไรต์ แต่โมเมนต์มีขนาดไม่เท่ากัน ดังภาพประกอบ 7



ภาพประกอบ 7 กราฟแสดงสมบัติของส่วนกลับของสภาพรีไวต์เชิงแม่เหล็กกับอุณหภูมิ
สำหรับสารที่แสดง

- ก) พฤติกรรมแสดงสถานะแม่เหล็กพารา
- ข) พฤติกรรมแสดงสถานะแม่เหล็กเฟอร์โร
- ค) พฤติกรรมแสดงสถานะแม่เหล็กแอนติเฟอร์โร
- ง) พฤติกรรมแสดงสถานะแม่เหล็กเฟอร์โร

ตามธรรมชาติแล้วสารแม่เหล็กพารานั้นจะมีค่าสภาพรับไว้ได้เชิงแม่เหล็กเป็นบวก
ปรากฏการณ์นี้มีพบใน

1) อะตอม หรือโมเลกุลของผลึกที่มีโครงสร้างไม่สมบูรณ์ (lattice defect) โดยมีจำนวนอิเล็กตรอนเป็นเลขคี่ ซึ่งทำให้สปินรวมทั้งหมดไม่เป็นศูนย์ เช่น อะตอมไฮโดรเจนอิสระ ก๊าซไนตริกออกไซด์ (NO) รวมทั้งสารอินทรีย์พวก triphenylmethyl $C(C_6H_5)_3$ และ F-center ใน alkali halides เป็นต้น

2) อะตอมอิสระหรือไอออน (ion) ที่มีอิเล็กตรอนภายในชั้น (shell) เต็มบางส่วน เช่น ธาตุพวกแอรเอิร์ท และธาตุแอกทิไนด์ (actinide) เช่น Mn^{2+} , Gd^{2+} , U^{4+}

3) สารประกอบบางอย่างที่มีจำนวนอิเล็กตรอนเป็นเลขคู่ ซึ่งรวมทั้งโมเลกุลของออกซิเจน และ organic biradicals

ในสารแม่เหล็กพารา อันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนนำ (conduction electron) ที่มีสปินเป็น σ กับอะตอมของสิ่งเจือปนแบบแม่เหล็กพาราที่มีสปินเป็น S ถูกกำหนดโดย (29)

$$U_{\mu\mu'} = V\delta_{\mu\mu'} - \frac{J}{2} S \cdot \sigma_{\mu\mu'} \quad (3.1)$$

เมื่อ V คือความแรงของอันตรกิริยาศักย์ (strength of the potential interaction)

J คือค่าคงที่ของอันตรกิริยาแลกเปลี่ยน (exchange interaction)

ดังนั้นเราสามารถเขียนฮามิลโทเนียนของระบบที่โลหะเจียบ้านถูกเจือปนโดยอะตอมของสิ่งเจือปนแบบแม่เหล็กพาราได้ดังนี้คือ

$$H = H_o + H_{sd} \quad (3.2)$$

เมื่อ H_0 คือฮามิลโทเนียนของอิเล็กตรอนอิสระในโลหะปกติ ซึ่งเขียนได้เป็น

$$H_0 = \sum_{k\sigma} \epsilon_k a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma}$$

เมื่อ ϵ_k คือพลังงานที่วัดมาจากระดับเฟอร์มิของอิเล็กตรอนเดี่ยวซึ่งมี
โมเมนตัม k

$a_{k\sigma}^+$ และ $a_{k\sigma}$ คือตัวปฏิบัติการสร้างและทำลาย (creation and annihilation operator) สำหรับอิเล็กตรอนของโลหะเจ้าบ้าน
ที่มีโมเมนตัม k และสปิน σ

และ H_{sd} คือฮามิลโทเนียนที่เกิดจากอันตรกิริยาระหว่างเอส-อิเล็กตรอนของ
โลหะเจ้าบ้าน กับดี-อิเล็กตรอนที่เคลื่อนที่ไปมารอบอะตอมของสิ่ง
เจือปน ซึ่ง H_{sd} จะเขียนได้เป็น

$$H_{sd} = \frac{1}{N} \sum_{k''k'\mu\mu'} a_{k''\mu}^+ a_{k'\mu'} (V_{\mu\mu'} - \frac{J_s}{2} \vec{S} \cdot \vec{\sigma})$$

เมื่อ N คือจำนวนอิเล็กตรอนต่อหนึ่งหน่วยปริมาตร

การคำนวณหาความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุรอบอะตอมของสิ่งเจือปนแบบ
แม่เหล็กพารามิชั่นตอนดังนี้

1. ในกรณีโลหะเจ้าบ้านบริสุทธ์

จากฮามิลโทเนียน H_0 ในสมการที่ (3.2) คำนวณหาสมการของการเคลื่อนที่
ของตัวปฏิบัติการ $a_{k\uparrow}^+$, $a_{-k\downarrow}^+$, $a_{k\uparrow}$ และ $a_{-k\downarrow}$

$$-i \frac{d}{dt} a_{k\uparrow}^+ = [H_0, a_{k\uparrow}^+] = \epsilon_k a_{k\uparrow}^+ \quad (3.3)$$

$$-i \frac{d}{dt} a_{-k\downarrow}^+ = [H_0, a_{-k\downarrow}^+] = \epsilon_{-k} a_{-k\downarrow}^+ \quad (3.4)$$

$$-i\frac{d}{dt}a_{k\uparrow} = [H_0, a_{k\uparrow}] = -\epsilon_k a_{k\uparrow} \quad (3.5)$$

$$-i\frac{d}{dt}a_{k\downarrow} = [H_0, a_{k\downarrow}] = -\epsilon_k a_{k\downarrow} \quad (3.6)$$

เมื่อกำหนดให้

$$A_k = \begin{bmatrix} a_{k\uparrow} \\ a_{k\downarrow} \\ + \\ a_{k\uparrow} \\ + \\ a_{k\downarrow} \end{bmatrix} \quad (3.7)$$

$$\text{ดังนั้น } A_k^+ = [a_{k\uparrow}^+ \ a_{k\downarrow}^+ \ a_{k\uparrow} \ a_{k\downarrow}]$$

เมื่อใช้สมการ (3.7) และเพาลีเมตริกซ์ เราสามารถเขียนสมการ (3.3), (3.4), (3.5) และสมการ (3.6) ได้เป็น

$$[H_0, A_k^+] = A_k^+ \epsilon_k \rho_3 \quad (3.8)$$

2. ในกรณีโลหะเจ้าบ้านมีสิ่งเจือปนแบบแม่เหล็กพารา จากฮาร์มิลโทเนียน

รบกวน H_{sd} ในสมการ (3.2) ที่แสดงอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนของโลหะเจ้าบ้านกับอะตอมของสิ่งเจือปนแบบแม่เหล็กพารา เราคำนวณหาสมการการเคลื่อนที่ของตัวปฏิบัติการ $a_{k\uparrow}^+, a_{k\downarrow}^+, a_{k\uparrow}$ และ $a_{k\downarrow}$ ได้ดังนี้

$$-i\frac{d}{dt}a_{k\uparrow}^+ = [H_{sd}, a_{k\uparrow}^+] = \frac{1}{N} \sum_{k'} a_{k'\uparrow}^+ V - \frac{J}{2N} \sum_{k'} (a_{k'\uparrow}^+ S_Z + a_{k'\downarrow}^+ S^+) \quad (3.9)$$

$$-i\frac{d}{dt}a_{k\downarrow}^+ = [H_{sd}, a_{k\downarrow}^+] = \frac{1}{N} \sum_{k'} a_{k'\downarrow}^+ V - \frac{J}{2N} \sum_{k'} (-a_{k'\downarrow}^+ S_Z + a_{k'\uparrow}^+ S^-) \quad (3.10)$$

$$-i\frac{d}{dt}a_{k\uparrow} = [H_{sd}, a_{k\uparrow}] = -\frac{1}{N}\sum_{k'} a_{k'\uparrow} V - \frac{J}{2N}\sum_{k'} (a_{k'\uparrow} S_Z + a_{k'\downarrow} S^-) \quad (3.11)$$

$$-i\frac{d}{dt}a_{k\downarrow} = [H_{sd}, a_{k\downarrow}] = -\frac{1}{N}\sum_{k'} a_{k'\downarrow} V - \frac{J}{2N}\sum_{k'} (a_{k'\uparrow} S^+ - a_{k'\downarrow} S_Z) \quad (3.12)$$

เมื่อเรียบเรียงสมการ (3.9), (3.10), (3.11) และสมการ (3.12) ใหม่ เราสามารถเขียนสมการทั้ง 4 ได้ดังนี้คือ

$$[H_{sd}, A_k^+] = \frac{V}{N}\sum_{k'} A_{k'}^+ \rho_3 - \frac{J}{2N}\sum_{k'} A_{k'}^+ (\vec{S} \cdot \vec{\alpha}) \quad (3.13)$$

เมื่อ

$$\vec{S} \cdot \vec{\alpha} = \begin{bmatrix} S_Z & S^- & 0 & 0 \\ S^+ & -S_Z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -S_Z & -S^+ \\ 0 & 0 & -S^- & S_Z \end{bmatrix}$$

$$\text{และ} \quad \vec{\alpha} = \frac{1}{2}(1 + \rho_3)\vec{\sigma} - \frac{1}{2}(1 - \rho_3)\sigma_2\vec{\sigma}\sigma_2$$

3. กำหนดให้กรีนฟังก์ชัน

$$G_{kk'} = \langle\langle A_k; A_{k'}^+ \rangle\rangle \quad \text{และ} \quad X_{kk'} = \langle\langle A_k; A_{k'}^+ (\vec{S} \cdot \vec{\alpha}) \rangle\rangle \quad (3.14)$$

ใช้ความสัมพันธ์ที่ว่า

$$\omega \langle\langle A_k; A_{k'}^+ \rangle\rangle = \langle\{A_k; A_{k'}^+\}\rangle + \langle\langle A_k; [H; A_{k'}^+] \rangle\rangle \quad (3.15)$$

ในเมื่อ $H = H_O + H_{sd}$ และความถี่มิตซุบารา (Mutsubara's frequency)
 $\omega = \pi T(2n + 1)$ เมื่อ $n = 0, 1, 2, 3, \dots$, และ $\omega = i\omega_n$

แทนค่าสมการ (3.8) และสมการ (3.13) ลงในสมการ (3.15) จะได้

$$(\omega - \epsilon_{k, \rho_3}) G_{kk'} = \delta_{kk'} + \frac{V}{N} \sum_{k'} G_{kk'} \rho_3 - \frac{J}{2N} \sum_{\ell} X_{k\ell} \quad (3.16)$$

และใช้ความสัมพันธ์

$$\omega X_{kk'} = \langle \{A_k; A_{k'}^+, (\vec{S} \cdot \vec{\alpha})\} \rangle + \langle \langle [A_k; H]; A_{k'}^+, (\vec{S} \cdot \vec{\alpha}) \rangle \rangle$$

กับ $X_{kk'}$ ในสมการ (3.14) จะได้

$$\begin{aligned} \omega X_{kk'} = & \langle \{A_k; A_{k'}^+, (\vec{S} \cdot \vec{\alpha})\} \rangle + \langle \langle [A_k; H_O]; A_{k'}^+, (\vec{S} \cdot \vec{\alpha}) \rangle \rangle \\ & + \langle \langle [A_k; H_{sd}]; A_{k'}^+, (\vec{S} \cdot \vec{\alpha}) \rangle \rangle \end{aligned} \quad (3.17)$$

เรากำนวหาสมการการเคลื่อนที่ดังข้อที่ (1) และ (2) จะได้

$$[A_k; H_O] = A_k \epsilon_{k, \rho_3} \quad (3.18)$$

และ

$$[A_k; H_{sd}] = \frac{V}{N} \sum_{k'} \rho_3 A_{k'} - \frac{J}{2N} \sum_{k'} (\vec{S} \cdot \vec{\alpha}) A_{k'} \quad (3.19)$$

เมื่อเราแทนค่าสมการ (3.18) และสมการ (3.19) ลงในสมการ (3.17) จะได้

$$X_{kk'} = \frac{V}{N} G_{ok} \sum_{\ell} X_{\ell k'} \rho_3 - \frac{J}{2N} G_{ok} \sum_{\ell} T_{\ell k'} \quad (3.20)$$

$$\text{เมื่อ } T_{\ell k'} = \langle \langle (\vec{S} \cdot \vec{\alpha}) A_{\ell}; A_{k'}^+, (\vec{S} \cdot \vec{\alpha}) \rangle \rangle \quad (3.21)$$

$$\text{และ } G_{ok} = (\omega - \epsilon_{k, \rho_3})^{-1}$$

หาผลรวมของ $X_{kk'}$ ในสมการ (3.20) ทุก ๆ ค่าของ k จะได้

$$\sum_k X_{kk'} = -\frac{1}{2}(1 - F_V \rho_3)^{-1} F_J \sum_{\ell} T_{\ell k'} \quad (3.22)$$

$$\text{เมื่อกำหนดให้ } F_V = \frac{V}{N} \sum_{\ell} G_{O\ell} \text{ และ } F_J = \frac{J}{N} \sum_{\ell} G_{O\ell} \quad (3.23)$$

ให้ค่า k ในสมการ (3.22) เท่ากับ ℓ แล้วแทนค่าในสมการ (3.20) จะได้

$$X_{kk'} = -\frac{J}{2N} G_{Ok} (1 - F_V \rho_3)^{-1} \sum_{\ell} T_{\ell k'} \quad (3.24)$$

หาค่า $\sum_k X_{kk'}$ ในสมการ (3.24) แล้วแทนค่าในสมการ (3.16) จะได้

$$G_{kk'} = \delta_{kk'} G_{Ok'} + \frac{V}{N} G_{Ok'} \sum_{\ell} G_{k\ell} \rho_3 + \left(\frac{J}{2N}\right)^2 G_{Ok'} G_{Ok} (1 - F_V \rho_3)^{-1} \sum_{\ell, \ell'} T_{\ell, \ell'} \quad (3.25)$$

และหาค่า $\sum_{\ell} G_{k\ell}$ ในสมการ (3.25) แล้วแทนค่าลงในสมการ (3.16) อีกครั้ง จะได้

$$\begin{aligned} G_{kk'} &= G_{Ok'} \delta_{kk'} + G_{Ok'} \left\{ \frac{V}{N} \rho_3 (1 - F_V \rho_3)^{-1} \right. \\ &\quad + \frac{V}{N} (1 - F_V \rho_3)^{-1} F_J (1 - F_V \rho_3)^{-1} \hat{t} \\ &\quad \left. + \frac{J}{4N} (1 - F_V \rho_3)^{-1} \hat{t} \right\} G_{Ok'} \end{aligned} \quad (3.26)$$

$$\text{เมื่อ } \hat{t} = \frac{J}{4N} \sum_{\ell, \ell'} T_{\ell, \ell'} \quad (3.27)$$

$$\text{จากการกำหนดให้ } T_{kk'} = \langle\langle (\vec{S} \cdot \vec{\alpha}) A_K; A_K^+ (\vec{S} \cdot \vec{\alpha}) \rangle\rangle$$

เราสามารถหาที่-เมตริกซ์โดยเมตริกซ์ยูนิตารี (unitary matrix) ได้ดังนี้

$$M = \frac{(1 + \rho_3)}{2} - \frac{(1 - \rho_3) i \sigma_2}{2} \quad (3.28)$$

ทำให้ได้

$$\begin{aligned} T_{kk'} &= (\vec{S} \cdot \vec{\alpha}) G_{kk'} (\vec{S} \cdot \vec{\alpha}) \\ &= M(\vec{S} \cdot \vec{\sigma}) M^\dagger G_{kk'} M(\vec{S} \cdot \vec{\sigma}) M^\dagger \\ &= M(\vec{S} \cdot \vec{\sigma})^2 G_{kk'} \\ &= S^2 G_{kk'} \end{aligned} \quad (3.29)$$

เมื่อแทนค่าสมการ (3.29) และสมการ (3.27) ลงในสมการ (3.26) โดยที่

$T_{kk'}$ คือเทอมที่อยู่ระหว่าง G_{ok} และ $G_{ok'}$ ในสมการ (3.26) คือ

$$T_{kk'} = \frac{V}{N} \rho_3 (1 - F_V \rho_3)^{-1} + \frac{J}{4N} (1 - F_V \rho_3)^{-1} \hat{t} (1 - F_V \rho_3)^{-1} \quad (3.30)$$

จะได้ค่า $\hat{t}$ ที่สอดคล้องกับสมการ (3.30) คือ

$$\hat{t} = S^2 F_J (1 - \rho_3 F_V)^{-1} \left\{ 1 + \frac{\hat{t}}{4} (1 - F_V)^{-1} F_J \right\} \quad (3.31)$$

กำหนดให้ $\hat{t} = A + B \rho_3$ แล้วแทนค่าในสมการ (3.31) จะได้

$$A + B \rho_3 = -JN(0) \pi S^2 i \frac{(1 - v i \rho_3)}{(1 + v^2)} \left\{ 1 + \frac{(A + B \rho_3) (1 - v i \rho_3) (-JN(0) \pi i)}{4(1 + v^2)} \right\} \quad (3.32)$$

ในเมื่อ $F_V = -vi$

$$v = VN(0) \pi$$

และ $F_J = -JN(0) \pi i$

เมื่อเทียบสัมประสิทธิ์สมการ (3.32) เพื่อหาค่า A และ B คือ

$$A = -2jSi(1 + v^2 + j^2)/D$$

$$\text{และ } B = -2jSV(1 + v^2 - j^2)/D$$

$$\text{ในเมื่อ } D = (1 + v^2)^2 + 2j^2(1 - v^2) + j^4 ; \quad j = \frac{JSN(0)\pi}{2}$$

ดังนั้น

$$\hat{t} = \frac{-2jSi(1 + v^2 + j^4)}{D} - \frac{2jSV(1 + v^2 - j^2)}{D} \rho_3 \quad (3.33)$$

นำสมการ (3.33) นี้แทนในสมการ (3.30) ในที่สุดจะได้

$$T_L(\omega) = \frac{1}{NN(0)\pi D}(-t_1 + t_3\rho_3) \quad (3.34)$$

$$\text{เมื่อ } t_1 = \{(1 + v^2)v^2 + j^2(1 - 2v^2) + j^4\}$$

$$\text{และ } t_3 = v(1 + v^2 - j^2)^2$$

บทที่ 4

ผลการวิจัย

จากกรีนฟังก์ชันที่ถูกรบกวนโดยสิ่งเจือปน เราสามารถคำนวณหาความหนาแน่นของอิเล็กตรอน $[\rho(\vec{r}, \omega)]$ ที่ตำแหน่ง $\vec{r}$ และพลังงาน ω ได้จากสมการ (30)

$$\rho(\vec{r}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\vec{r}' \rightarrow \vec{r}} \text{Im } G_{\ell}(\vec{r}, \vec{r}', \omega) \quad (4.1)$$

ดังนั้นความหนาแน่นของอิเล็กตรอนที่ตำแหน่ง $\vec{r}$ และอุณหภูมิ T หาได้โดยการอินทิเกรตสมการ (4.1) จาก $-\infty$ ถึง ϵ_F

$$\rho(\vec{r}, T) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\vec{r}' \rightarrow \vec{r}} \text{Im} \int_{-\infty}^{\epsilon_F} d\omega f(\omega) G_{\ell}(\vec{r}, \vec{r}', \omega) \quad (4.2)$$

เมื่อ $f(\omega)$ คือฟังก์ชันเฟอร์มีซึ่งมีค่าเท่ากับ $(e^{[(\omega - \epsilon_F)/k_B T]} + 1)^{-1}$

และ $G_{\ell}(\vec{r}, \vec{r}', \omega)$ คือกรีนฟังก์ชันของอิเล็กตรอนที่มีโมเมนตัมเชิงมุม ℓ ขณะมีสิ่งเจือปนรบกวน ซึ่งเขียนได้เป็น

$$G_{\ell}(\vec{r}, \vec{r}', \omega) = G_{\ell}^{(0)}(\vec{r}, \vec{r}', \omega) + G_{\ell}^{(0)}(\vec{r}, \vec{r}', \omega) T_{\ell}(\omega) G_{\ell}^{(0)}(\vec{r}, \vec{r}', \omega) \quad (4.3)$$

ในที่นี้ $T_{\ell}(\omega)$ คือเมตริกซ์การกระเจิง (scattering matrix)

เมื่อแทนสมการ (4.3) ลงในสมการ (4.2) จะได้

$$\rho(\vec{r}, T) = \rho_0(\vec{r}, T) - \frac{(2\ell+1)}{\pi} \lim_{\vec{r}' \rightarrow \vec{r}} \int_{-\infty}^{\epsilon_F} d\omega f(\omega) G_{\ell}^{(0)}(\vec{r}, \vec{r}', \omega) T_{\ell}(\omega) G_{\ell}^{(0)}(\vec{r}, \vec{r}', \omega)$$

ในที่นี้ $\rho_0(\vec{r}, T)$ คือความหนาแน่นของอิเล็กตรอนที่ยังไม่ถูกรบกวนโดยสิ่งเจือปน

$$\rho_0(\vec{r}, T) = \frac{1}{\pi} \lim_{\vec{r}' \rightarrow \vec{r}} \int_{-\infty}^{\epsilon_F} d\omega f(\omega) G_{\ell}^{(0)}(\vec{r}, \vec{r}', \omega)$$

และผลต่างระหว่าง $\rho(\vec{r}, T)$ และ $\rho_0(\vec{r}, T)$ คือความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุ ซึ่งมีค่าเท่ากับ $\delta\rho(\vec{r}, T)$

$$\delta\rho(\vec{r}, T) = \frac{-(2\ell + 1)}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^{\epsilon_F} d\omega f(\omega) T_\ell(\omega) G_\ell^{(0)}(\vec{r}, \omega)^2 \quad (4.4)$$

4.1 การคำนวณหาความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุที่ระยะไกลและอุณหภูมิศูนย์องศาสัมบูรณ์

ในสมการ (4.4) ที่อุณหภูมิศูนย์องศาสัมบูรณ์ $f(\omega)$ ในช่วง $-\infty$ ถึง 0 มีค่าเป็น 0 และในช่วง 0 ถึง ϵ_F $f(\omega)$ มีค่าเป็น 1 ดังนั้น

$$\delta\rho(\vec{r}, 0) = -\frac{(2\ell + 1)}{\pi} \text{Im} \int_{-\epsilon_F}^0 d\omega T_\ell(\omega) G_\ell^{(0)}(\vec{r}, \omega)^2 \quad (4.5)$$

และ

$$G_\ell^{(0)}(\vec{r}, \omega) = \frac{-m^*}{2\pi r} [ik_\omega r h^{(1)}(k_\omega r) - P_\ell/k_\omega^2 r^2]$$

ในที่นี้ $k_\omega = [2m^*(\epsilon_F + \omega)]^{1/2}$

$P_\ell =$ ค่าคงที่ เช่น $P_2 = 3$

และ $h^{(1)}(x)$ คือฟังก์ชันเบสเซลเชิงทรงกลมชนิดแรกซึ่งหาก $x \gg 1$ จะได้

$$x h^{(1)}(x) = -ie^{i(x - \ell\pi/2 + \phi(x))}$$

ดังนั้น

$$G_\ell^{(0)}(r, \omega) = -\frac{m^*}{2\pi r} \{e^{i(k_\omega r - \ell\pi/2 + \phi(k_\omega r))} - P_\ell/k_\omega^2 r^2\}$$

ที่ระยะไกลคือ $k_\omega r \gg 1$ จะได้ว่าเทอม $(k_\omega r)^{-2}$ และ $\phi(k_\omega r)$ มีค่าเป็นศูนย์

ดังนั้น

$$G_{\ell}^{(0)2}(\vec{r}, \omega) = \left(\frac{m^*}{2\pi r}\right)^2 e^{2i(k_{\omega} r - \ell\pi/2)} \quad (4.6)$$

เมื่อแทนค่าสมการ (4.6) ลงในสมการ (4.5)

$$\begin{aligned} \delta\rho(\vec{r}, 0) &= -\frac{(2\ell + 1)}{\pi} \operatorname{Im} \int_{-\epsilon_F}^0 d\omega T_{\ell}(\omega) \left(\frac{m^*}{2\pi r}\right)^2 e^{2i(k_{\omega} r - \ell\pi/2)} \\ &= -\frac{(2\ell + 1)}{\pi} \operatorname{Im} \int_{-\epsilon_F}^0 d\omega T_{\ell}(\omega) \left(\frac{m^*}{2r}\right)^2 e^{2i[\{2m^*(\omega + \epsilon_F)\}^{1/2} r - \ell\pi/2]} \end{aligned} \quad (4.7)$$

ซึ่งที่ระยะไกล เทอม $e^{2i[\{2m^*(\omega + \epsilon_F)\}^{1/2} r - \ell\pi/2]}$ ซึ่งเป็นฟังก์ชันของ ω จะแปรเปลี่ยนไปอย่างรวดเร็วเมื่อเทียบกับอัตราการแปรเปลี่ยนของ $T_{\ell}(\omega)$ ดังนั้นในการอินทิเกรตแบบรีมาน เลมมา (Riemann lemma integral) อินทิกรัลดังกล่าวจะเป็นศูนย์ทุกแห่ง ยกเว้นที่ขีดจำกัดบนของอินทิกรัลคือที่ $\omega = 0$

ดังนั้นจากสมการ (4.7) กำหนดให้

$$X = [2m^*(\omega + \epsilon_F)]^{1/2}$$

$$\text{จะได้ } d\omega = \frac{X}{m^*} dX \quad \text{ดังนั้น}$$

$$\begin{aligned} \delta\rho(\vec{r}, 0) &= -\frac{(2\ell + 1)}{\pi} \left(\frac{m^*}{2\pi r}\right)^2 \operatorname{Im} \int_{\frac{X^2}{2m^*}}^0 \frac{X}{m^*} dX T_{\ell}(\omega) e^{2i(rX - \ell\pi/2)} \\ &= -\frac{(2\ell + 1)}{\pi} \left(\frac{m^*}{2\pi r}\right)^2 \operatorname{Im} \int_{\frac{X^2}{2m^*}}^0 \frac{X}{m^*} T_{\ell} \left[\frac{X^2}{2m^*} - \epsilon_F\right] e^{2i(rX - \ell\pi/2)} \end{aligned}$$

$$\text{ให้ } t_{\ell}(0) = T_{\ell} \left[\frac{X^2}{2m^*} - \epsilon_F \right]$$

$$\text{และที่ } \omega = 0 \text{ จะได้ } X = (2m^*\epsilon_F)^{1/2} = k_F \quad \text{ดังนั้น}$$

$$\delta\rho(\vec{r},0) = -\frac{(2\ell+1)}{\pi}\left(\frac{m^*}{2\pi r}\right)^2 \text{Im} \frac{t_\ell(0)}{m^*} \int x dx e^{2i(rX - \ell\pi/2)}$$

เมื่อใช้อินทิกรัลแบบแยกส่วนจะได้

$$\begin{aligned} \delta\rho(\vec{r},0) &= -\frac{(2\ell+1)}{\pi}\left(\frac{m^*}{2\pi r}\right)^2 \text{Im} \frac{t_\ell(0)}{m^*} \left\{ \frac{x e^{2i(rX - \ell\pi/2)}}{2ir} \right\} \Big|_{X=k_F} \\ &\quad - \frac{1}{2ir} \{ e^{2i(rX - \ell\pi/2)} dx \} \end{aligned}$$

ซึ่งเทอมสุดท้ายจะแปรผันโดยตรงกับ r^{-2} ดังนั้นจะมีค่าน้อยมากเมื่อเทียบกับ เทอมแรกจนไม่ต้องนำมาพิจารณา ในที่สุดเราจะได้

$$\delta\rho(\vec{r},0) = -\frac{(2\ell+1)}{\pi}\left(\frac{m^*}{2\pi r}\right)^2 \text{Im} \frac{k_F}{2irm^*} t_\ell(0) e^{2i(rk_F - \ell\pi/2)}$$

เนื่องจาก $v_F = k_F/m^*$ ดังนั้น

$$\begin{aligned} \delta\rho(\vec{r},0) &= -\frac{(2\ell+1)}{\pi}\left(\frac{m^*}{2\pi r}\right)^2 \text{Im} \left\{ \frac{v_F}{2ir} t_\ell(0) e^{2i(k_F r - \ell\pi/2)} \right\} \\ &= \frac{(2\ell+1)}{\pi}\left(\frac{m^*}{2\pi r}\right)^2 \text{Im} \left\{ -\frac{v_F}{2r} t_\ell(0) [\cos(2k_F r - \ell\pi) \right. \\ &\quad \left. + i \sin(2k_F r - \ell\pi)] \right\} \end{aligned} \quad (4.8)$$

เมื่อแทนค่า $T_\ell(0) = -t_1/NN(0)\pi D = t_\ell(0)$ ลงในสมการ (4.8) จะได้ว่าความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุที่ระยะไกลและอุณหภูมิศูนย์องศาสัมบูรณ์ ในกรณี $\ell = 0$ เป็น

$$\delta\rho(\vec{r},0) = \frac{v_F m^{*2}}{8\pi^4 NN(0) D r^3} t_1 \cos(2k_F r) \quad (4.9)$$

4.2 การคำนวณหาความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุที่ระยะไกลจากอะตอมของสิ่งเจือปนและอุณหภูมิสูงกว่าศูนย์องศาสัมบูรณ์โดยใช้การประมาณแบบ เบทเท-ซัมเมอร์เฟลด์ (Bethe-Sommerfeld)

จากสมการ (4.4) เราสามารถเขียน $\delta\rho(\vec{r}, T)$ ได้ในรูป

$$\delta\rho(\vec{r}, T) = \delta\rho(\vec{r}, 0) + \frac{(2\ell + 1)}{\pi} \text{Im} \int_0^\infty d\omega f(\omega) T_\ell(\omega) G_\ell^{(0)^2}(\vec{r}, \omega) \quad (4.10)$$

อินทิกรัลในสมการ (4.10) อยู่ในรูป $\int_0^\infty d\omega f(\omega) \vartheta(\omega)$ ซึ่งมีค่าตามสมการ (ผ-16) ในภาคผนวก ข

$$\begin{aligned} \int_0^\infty d\omega f(\omega) T_\ell(\omega) G_\ell^{(0)^2}(\vec{r}, 0) &= \int_0^\infty d\omega T_\ell(\omega) G_\ell^{(0)^2}(\vec{r}, \omega) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \\ &+ \frac{\pi^2}{6} (k_B T) \frac{2d}{d\omega} T_\ell(\omega) G_\ell^{(0)^2}(\vec{r}, \omega) \Big|_{\omega=0} \quad (4.11) \end{aligned}$$

เมื่อแทนค่า $G_\ell^{(0)^2}(\vec{r}, \omega)$ จากสมการ (4.6) ลงในสมการ (4.11) แล้วหาค่าอินทิกรัลจะได้

$$\begin{aligned} \delta\rho(\vec{r}, T) &= \delta\rho(\vec{r}, 0) + \frac{(2\ell + 1)}{\pi} \text{Im} \left[\frac{m^{*2} t_\ell(0) V_\ell e^{2i(k_F r - \ell\pi/2)}}{8\pi^2 r^3 i} \right. \\ &\quad \left. + \frac{(k_B T m^*)^2}{12V_F r} t_\ell(0) i e^{2i(k_F r - \ell\pi/2)} \right] \quad (4.12) \end{aligned}$$

เมื่อแทนค่า $T_\ell(0)$ ลงในสมการ (4.12) แล้วหาค่าจินตภาพจะได้

$$\delta\rho(\vec{r}, T) - \delta\rho(\vec{r}, 0) = \frac{m^{*2} t_1 V_F \cos(2k_F r)}{8\pi^3 r^3 N N(0) D} - \frac{(k_B T m^*)^2 t_1 \cos(2k_F r)}{12\pi r V_F N N(0) D} \quad (4.13)$$

4.3 การคำนวณหาค่าความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุที่ระยะใกล้และ อุณหภูมิต่ำของสสารควบแน่น

ในกรณีที่ $k_{\omega} r \rightarrow 0$ เราประมาณได้ว่า

$$j_{\ell}(k_{\omega} r) \sim \frac{(k_{\omega} r)^{\ell}}{(2\ell + 1)!} \left\{ 1 - \frac{(k_{\omega} r)^2}{2(2\ell + 3)} + \dots \right\}$$

ดังนั้นเมื่อ $\ell = 0$

$$j_0(k_{\omega} r) \sim 1$$

และ

$$\eta_{\ell}(k_{\omega} r) \sim \frac{(2\ell + 1)!!}{(2\ell + 1)!} \left(\frac{1}{k_{\omega} r}\right)^{\ell+1} \left\{ 1 + \frac{(k_{\omega} r)^2}{2(2\ell - 1)} + \dots \right\}$$

ดังนั้นเมื่อ $\ell = 0$

$$\eta_0(k_{\omega} r) \sim \frac{1}{k_{\omega} r}$$

จะได้ว่า

$$h^{(1)}(k_{\omega} r) = 1 + i/k_{\omega} r$$

เมื่อนำค่า $h^{(1)}(k_{\omega} r)$ แทนลงในค่า $G_{\ell}^{(0)}(\vec{r}, \omega)$ แล้วคำนวณหาค่าความ

แปรปรวนของความหนาแน่นประจุที่ระยะใกล้และอุณหภูมิต่ำของสสารควบแน่นได้เป็น

$$\delta\rho(\vec{r}, 0) = \frac{m^* t_{\ell}(0) k_R^3}{6\pi^3 r} = \frac{m^* t_1 k_F^3}{6\pi^4 N N(0) D r} \quad (4.14)$$

4.4 การคำนวณหาความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุที่ระยะไกลจากอะตอม
ของสิ่งเจือปนและอุณหภูมิสูงกว่าศูนย์องศาสัมบูรณ์โดยใช้การประมาณแบบเบทเท-
ซัมเมอร์เฟลด์ จะได้ว่า

$$\delta\rho(\vec{r}, T) - \delta\rho(\vec{r}, 0) = \frac{-(k_B T)^2 t_\ell(0) m^*{}^2}{12\pi V_F r} = \frac{(k_B T)^2 m^* t_1}{12\pi^2 V_F r N N(0) D} \quad (4.15)$$

บทที่ 5

สรุป อภิปราย และเสนอแนะ

การวิจัยครั้งนี้มีจุดมุ่งหมายเพื่อคำนวณหาความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุที่ระยะไกลและใกล้สิ่งเจือปนแบบแม่เหล็กพารา ทั้งที่อุณหภูมิศูนย์องศาและที่อุณหภูมิใด ๆ โดยมีขั้นตอนการคำนวณดังนี้

1. คำนวณหาที่-เมตริกซ์ของการกระเจิงเมื่อมีอะตอมของสิ่งเจือปนแบบแม่เหล็กพาราในโลหะเจ้าบ้าน

2. คำนวณหาความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุโดยการคำนวณหากรีนฟังก์ชัน ทั้งนี้โดยใช้กรีนฟังก์ชันของอิเล็กตรอนอิสระที่มีโมเมนต์เชิงมุม e และที่-เมตริกซ์ที่ได้จากการคำนวณในข้อ 1

สรุปผลการวิจัย

ผลการคำนวณหาความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุที่มีสิ่งเจือปนแบบแม่เหล็กพาราพบว่า

1. ที่ระยะไกลและศูนย์องศาสัมบูรณ์ พบว่า

$$\delta\rho(\vec{r}, 0) = - \frac{V_F m^*{}^2 t_1}{NN(0) \pi D r^3} \cos(2k_F r)$$

2. ที่ระดับไกลและอุณหภูมิสูงกว่าศูนย์องศาสัมบูรณ์ พบว่า

$$\delta\rho(\vec{r}, T) - \delta\rho(\vec{r}, 0) = \frac{m^*{}^2 t_1 V_F \cos(2k_F r)}{8\pi r^3 NN(0) D} - \frac{(k_B T m^*)^2 t_1 \cos(2k_F r)}{12\pi r V_F NN(0) D}$$

3. ที่ระยะใกล้และอุณหภูมิศูนย์องศาสัมบูรณ์ พบว่า

$$\delta\rho(\vec{r}, 0) = -\frac{m^*t_1 k_F^3}{6\pi^4 r_{NN}(0) D}$$

4. ที่ระยะใกล้และอุณหภูมิสูงกว่าศูนย์องศาสัมบูรณ์ พบว่า

$$\delta\rho(\vec{r}, T) - \delta\rho(\vec{r}, 0) = \frac{(k_B T m^*)^2 t_1}{12\pi^2 V_F r_{NN}(0) D}$$

อภิปรายผล

ในการคำนวณหาที่-เมตริกซ์ของการกระเจิงที่มีสิ่งเจือปนแบบแม่เหล็กพาราแมกเนติก พบว่าไม่มีส่วนที่ขึ้นกับพลังงาน และเมื่อนำมาคำนวณหาความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุที่ระยะใกล้คือที่ $k_F r \gg 1$ และที่ศูนย์องศาสัมบูรณ์พบว่า ให้ผลคล้ายกับที่ฟรีเคลเคยหาไว้คือ

$$\delta\rho(\vec{r}, 0) \propto \frac{\cos(2k_F r)}{r^3} \text{ แต่เมื่อคำนวณที่อุณหภูมิสูงกว่าศูนย์องศาสัมบูรณ์โดยการประมาณแบบเบทเท-ซัมเมอร์เฟลด์ปรากฏว่า } \delta\rho(\vec{r}, T) - \delta\rho(\vec{r}, 0) \propto \frac{\cos(2k_F r)}{r^3} \text{ และ } \frac{\cos(2k_F r)}{r}$$

โดยเทอมที่ 2 เนื่องมาจากการขึ้นกับอุณหภูมิของฟังก์ชันเฟอร์มิ ซึ่งให้ผลแตกต่างจากที่ มีโซและชาวาโคว์สกีซึ่งใช้สิ่งเจือปนแบบแม่เหล็กพาราแมกเนติกให้ $\delta\rho(r, \omega) \propto \sin 2(k_F r + r/\zeta_\omega)$ เมื่อ ζ_ω คือระยะอาพันธ์เชิงพลังงาน (energy coherence length) ซึ่งมีค่าเท่ากับ V_F/ω และผลที่เราคำนวณได้นี้จะขึ้นกับอุณหภูมิเป็นอย่างมากเมื่ออุณหภูมิสูงกว่าศูนย์องศาสัมบูรณ์ แต่เมื่อเราคำนวณหาความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุที่ระยะใกล้พบว่า ผลการคำนวณแตกต่างไปจากของอัลเฟรดและออสเทน เบิร์กคำนวณไว้คือ ของเขาที่ระยะใกล้และอุณหภูมิศูนย์องศาสัมบูรณ์จะขึ้นอยู่กับ r^{-4} แต่ของเรานั้นจะขึ้นกับ r^{-1} ทั้งที่อุณหภูมิศูนย์องศาสัมบูรณ์และที่อุณหภูมิใด ๆ นอกจากนี้ยังขึ้นกับ T^2 อีกด้วย

ข้อเสนอแนะ

1. การวิจัยนี้ให้อะตอมของสิ่งเจือปนเพียงหนึ่งอะตอม เท่านั้น ควรมีการขยายงานวิจัยในกรณีมีอะตอมของสิ่งเจือปนหลายอะตอมซึ่งต้องพิจารณาอันตรกิริยาระหว่างอะตอมด้วย

2. พิจารณากรณี $\ell \neq 0$ และกรณีอะตอมไม่มีสมมาตรแบบทรงกลมคำนวณหาในกรณีเช่นนี้บ้าง เพื่อเปรียบเทียบผล

גדנא פארברעכענע

บรรณานุกรม

1. Friedel, J. Philosophical Magazine. 43 : 153, 1952.
2. Friedel, J. Nouvo Cimento (Supplement). 2 : 287, 1958.
3. Bloembergen, N. and T. J. Rowand. Acta Metallurgica. 1 : 713, 1953.
4. Grüner, G. and Minier M. Advances in Physics. 26 : 231, 1977.
5. Langer, J. S. and S. H. Vosko. Journal of Physical Chemistry. American Chemical Society. 12 : 196, 1969.
6. Beal Monod, M. T. Journal of Physical Chemistry. American Chemical Society. 28 : 1261, 1967a.
7. Singwi, K. S. et al. Physical Reviews. B : 1 : 1044, 1970.
8. Roth, L. M. Physical Reviews. 149 : 519, 1966.
9. Coleridge, P. T. et al. Canadian Journal of Physics. 34 : 1190, 1956.
10. Alfred, L. C. R. and D. O. Van Ostenberg. Physical Reviews Letters. A. 26 : 27, 1967a.
11. Heeger, A. J. "Localized Moment and Nonmoment in Metals," in Solid State Physics. V. 23, p. 184, ed. by F. Stitz, D. Turnbull and E. Ehrenrich, New York, Academic Press, 1959.
12. Kondo, J. "Theory of Dilute Magnetic Alloys," in Solid State Physics. V. 23, p. 283, ed. by F. Seitz, D. Turnbull and E. Ehrenrich, New York, Academic Press, 1969.
13. Zlatic, V. and G. Grüner. Journal de Physique. 38 : L 87, 1977.
14. Grüner, G. and C. Hargitai. Physical Review Letters. 26 : 772, 1971.
15. Grüner, G. Solid State Communication. 10 : 1039, 1972.
16. Berthier, C. and Minier. Journal of Physics. F 3 : 1169, 1973.
17. Alloul, H. Journal of Physics. F 4 : 1501, 1974.

18. Rowland, T. J. Acta Metallurgica. 3 : 74, 1955.
19. Rowland, T. J. Physical Reviews. 119 : 900, 1960.
20. Berthier, C. and M. Minier. Solid State Communication.
10 : 257, 1972.
21. Redfield, D. Physical Reviews. 130 : 589, 1963.
22. Minier, M. Physical Reviews. 182 : 437, 1965.
23. Berthier, C. and M. Minier. Physical Reviews. B 7 : 1854,
1973.
24. Berthier, C. and M. Minier. Journal of Physics. F 3 : 1268,
1973.
25. Berthier, C. and M. Minier. Journal of Physics. F 3 : 1169,
1973.
26. Berthier, C. and M. Minier. Journal of Physics. F 7 : 515,
1977.
27. Minier, M. and S. Ho Dun. Journal of Physics. F 7 : 503,
1977.
28. Sokcevic, D. V. Zlatic and B. Horvatic. Physical Reviews.
B 39 : 603, 1989.
29. Yutaka, Okabe and A. D. S. Nagi. Physical Reviews.
B 28 : 1320, 1989.
30. Mezei, F. and A. Zawadowski. Physical Reviews. B 3 : 167,
1971.

ภาคผนวก ก

ที-เมตริกซ์

จากฮามิลโทเนียนของระบบที่ถูกรบกวน

$$H = H_0 + V \quad (M-1)$$

โดยที่ H_0 คือฮามิลโทเนียนของระบบที่ไม่ถูกรบกวน

V คือฮามิลโทเนียนของอันตรกิริยาของการรบกวน

เราหาตัวปฏิบัติการกรีนฟังก์ชันได้จากสมการของชโรดิงเงอร์ (Schrodinger's equation)

1. สำหรับระบบที่ยังไม่ถูกรบกวน จะได้ว่า

$$H_0 \psi = E \psi$$

$$H_0 \psi = \frac{i d\psi}{dt}$$

$$(i\omega_n - H_0) \psi = 0$$

$$\text{กรีนฟังก์ชันของสมการนี้คือ } G_0(Z) = (Z - H_0)^{-1} \text{ เมื่อ } Z = i\omega_n \quad (M-2)$$

2. เมื่อระบบถูกรบกวนจะได้ว่า

$$H \psi = E \psi$$

$$H \psi = \frac{i d\psi}{dt}$$

$$(i\omega_n - H) \psi = 0$$

ในทำนองเดียวกัน กรีนฟังก์ชันของระบบที่ถูกรบกวนคือ

$$G(Z) = (Z - H)^{-1} \quad (M-3)$$

เรากำหนดตัวปฏิบัติการ $T(Z)$ โดยความสัมพันธ์

$$G(Z) = G_0(Z) + G_0(Z)T(Z)G_0(Z) \quad (M-4)$$

และเราเรียก $T(Z)$ ว่า ที-เมตริกซ์ ซึ่งขึ้นกับคุณสมบัติการกระเจิงดังนี้คือ

จากสมการ (M-4)

$$\begin{aligned} G_0(Z)T(Z)G_0(Z) &= G(Z) - G_0(Z) \\ T(Z) &= G_0^{-1}(Z)G(Z)G_0^{-1}(Z) - G_0^{-1}(Z) \\ &= (Z - H_0)[G(Z)G_0^{-1}(Z) - 1] \\ &= (Z - H_0)G(Z)G_0^{-1}(Z) - G(Z)G^{-1}(Z) \\ &= (Z - H_0)G(Z)V \end{aligned} \quad (M-5)$$

เมื่อ $V = [G_0^{-1}(Z) - G^{-1}(Z)]$

เนื่องจากในสมการ (M-5) เราคำนวณจากขวาไปซ้าย เมื่อเราคำนวณจากซ้ายไปขวาเราจะได้

$$T(Z) = VG(Z)[Z - H_0]$$

จากคุณสมบัติของการสมมาตรดังกล่าวเราจึงได้

$$G_0(Z)T(Z) = G(Z)V \quad (M-6)$$

$$\text{และ } T(Z)G_0(Z) = VG(Z) \quad (M-7)$$

ดังนั้นสมการ (M-4) เราสามารถเขียนสมการใหม่ได้ความสัมพันธ์จากสมการ (M-6) และ (M-7) คือ

$$G(Z) = G_0(Z) + G(Z)VG_0(Z) = G_0(Z) + G_0(Z)VG(Z) \quad (M-8)$$

และจากสมการ (M-6) และ (M-7) จะได้

$$\begin{aligned}
 T(Z) - V &= G_O^{-1}(Z)G(Z)V - V \\
 &= [G_O^{-1}(Z)G(Z) - 1]V \\
 &= VG(Z)V
 \end{aligned}$$

$$\text{ดังนั้น } T(Z) = V + VG(Z)V \quad (\text{ผ-9})$$

จากสมการ (ผ-8) เราสามารถคำนวณหาอนุกรมของการรบกวนโดยการแทนค่าซ้ำ ๆ ดังนี้

$$G(Z) = G_O(Z) + G_O(Z)VG_O(Z) + G_O(Z)VG_O(Z)VG_O(Z) + \dots \quad (\text{ผ-10})$$

และเมื่อแทนสมการ (ผ-10) ลงในสมการ (ผ-9) จะได้

$$T(Z) = V + VG_O(Z)V + VG_O(Z)VG_O(Z)V + \dots \quad (\text{ผ-11})$$

ซึ่งอนุกรมของการรบกวนตามสมการ (ผ-10) และ (ผ-11) นี้สามารถใช้เป็น
พื้นฐานสำหรับการคำนวณอย่างประมาณได้

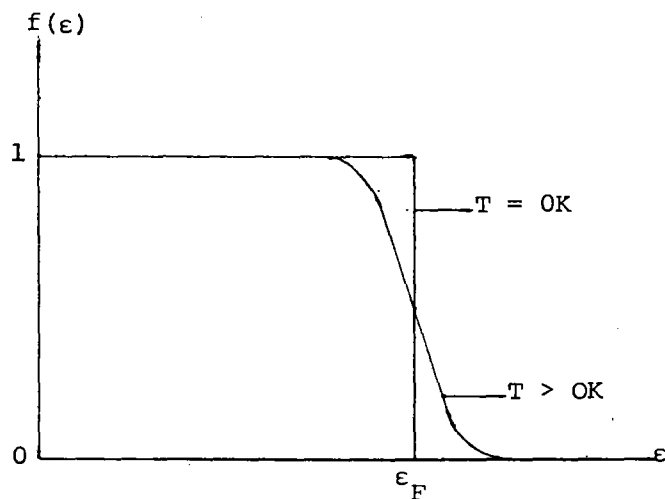
ภาคผนวก ข

การหาค่าอินทิกรัล $\int_0^{\infty} f(\epsilon)\delta(\epsilon) d\epsilon$

การหาค่าอินทิกรัล $\int_0^{\infty} f(\epsilon) \phi(\epsilon) d\epsilon$

โดยที่ $f(\epsilon)$ คือฟังก์ชันเฟอร์มิ

และ $\phi(\epsilon)$ คือฟังก์ชันธรรมชาติของ ϵ



ภาพประกอบ 8 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $f(\epsilon)$ และ ϵ ที่อุณหภูมิต่าง ๆ

เนื่องจากฟังก์ชันเฟอร์มิมีค่าสูงสุดเป็น 1 และลดลงอย่างรวดเร็วจนจะเป็น 0 ในช่วงแคบ ขนาด $k_B T$ ณ ที่พลังงาน $\epsilon = \epsilon_F$ แต่ที่พลังงานอื่น ๆ $f(\epsilon)$ มีค่าคงที่โดยตลอด เมื่อเป็นดังนี้เราอาจใช้วิธีประมาณหาค่าการอินทิเกรตและยึดสมบัติของฟังก์ชันเฟอร์มิที่ว่าความชันของฟังก์ชันเป็นศูนย์ทุกหนทุกแห่งนอกจากในช่วง $k_B T$ ที่ใกล้กับค่า $\epsilon = \epsilon_F$ ซึ่งมีความชันสูงและเป็นลบ

โดยวิธีการอินทิเกรตแบบแยกส่วนจะได้ว่า

$$\int_0^{\infty} f(\epsilon) \phi(\epsilon) d\epsilon = f(\epsilon) \psi(\epsilon) \Big|_0^{\infty} - \int_0^{\infty} f'(\epsilon) \psi(\epsilon) d\epsilon \quad (\text{ผ-12})$$

$$\text{โดยที่ } f'(\epsilon) = \frac{df(\epsilon)}{d\epsilon}$$

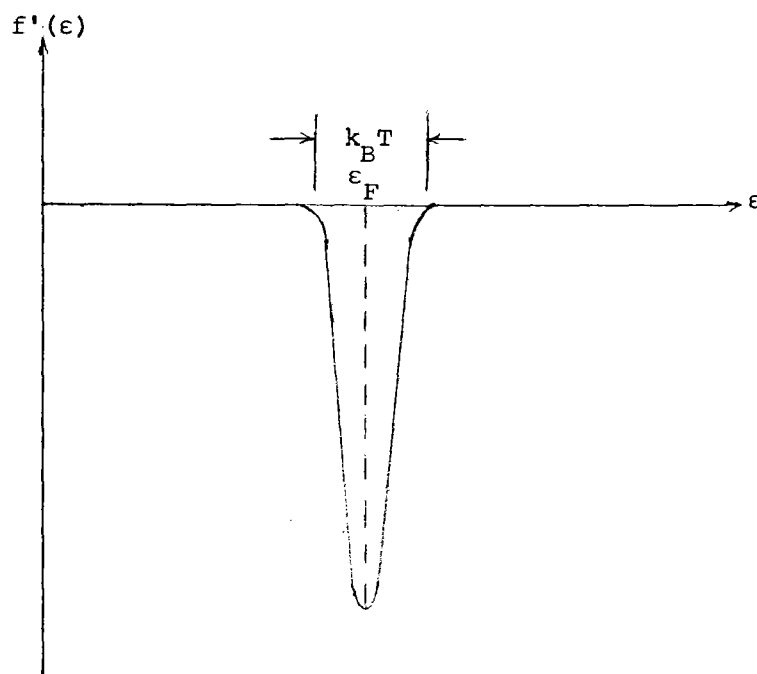
$$\text{และ } \psi(\epsilon) = \int_0^\infty \phi(\epsilon) d\epsilon$$

สำหรับเทอมแรกข้างขวาของสมการ (M-12) ตามวิธีอินทิเกรชันแบบแยกส่วนจะมีค่าเป็น 0 เนื่องจากว่า $f(\infty) = 0$ และ $\psi(0) = 0$

ดังนั้นจึงได้ว่า

$$\int_0^\infty f(\epsilon) \phi(\epsilon) d\epsilon = - \int_0^\infty f'(\epsilon) \psi(\epsilon) d\epsilon \quad (\text{M-13})$$

ในที่นี้จะเห็นได้ว่าการที่ทราบสมบัติของ $f'(\epsilon)$ จะช่วยให้การหาอินทิกรัลในสมการ (M-13) ง่ายขึ้นเพราะ $f'(\epsilon)$ จะมีความสำคัญเฉพาะเพียงในช่วง $k_B T$ รอบบริเวณที่ $\epsilon = \epsilon_F$ เท่านั้น



ภาพประกอบ 9 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $f'(\epsilon)$ และ ϵ

สำหรับค่าของ $\psi(\epsilon)$ ในช่วงพลังงานเดียวกันนี้เราอาจจะกระจาย $\psi(\epsilon)$ ตาม
แบบอนุกรมได้เป็น

$$\begin{aligned}\psi(\epsilon) &= \psi(\epsilon_F) + (\epsilon - \epsilon_F) \left[\frac{d\psi}{d\epsilon} \right]_{\epsilon_F} + \frac{1}{2} (\epsilon - \epsilon_F)^2 \left[\frac{d^2\psi}{d\epsilon^2} \right]_{\epsilon_F} + \dots \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left[\frac{d^m\psi}{d\epsilon^m} \right]_{\epsilon_F} (\epsilon - \epsilon_F)^m\end{aligned}$$

เมื่อแทนค่า $\psi(\epsilon)$ ลงในสมการ (ท-13) จะได้

$$\int_0^{\infty} f(\epsilon) \phi(\epsilon) d\epsilon = - \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left[\frac{d^m\psi}{d\epsilon^m} \right]_{\epsilon_F} \int_0^{\infty} f'(\epsilon) (\epsilon - \epsilon_F)^m d\epsilon \quad (\text{ท-14})$$

พิจารณาเฉพาะเทอมอินทิกรัลเราจะเขียนเสียใหม่ได้ดังนี้

$$-(k_B T)^m \int_{-\epsilon_F}^{\infty} \frac{e^X}{(e^X + 1)^2} X^m dX$$

$$\text{โดยที่ } X \equiv \frac{(\epsilon - \epsilon_F)}{k_B T}$$

แต่เนื่องจากเครื่องหมายในเทอมอินทิกรัลจะมีค่ามากที่สุดที่ $\epsilon = \epsilon_F$ หรือเมื่อ
 $X = 0$ และเนื่องจาก $\epsilon_F/k_B T \gg 1$ เราจึงอาจใช้ขีดจำกัดล่างเป็น $-\infty$ แทน $-\epsilon_F/k_B T$
เสีย ซึ่งจะไม่ทำให้การอินทิเกรตผิดพลาดไปมากแต่อย่างใด

$$\int_0^{\infty} f'(\epsilon) (\epsilon - \epsilon_F)^m d\epsilon = -(k_B T)^m \text{Im}$$

$$\text{โดยที่ } \text{Im} \approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^X}{(e^X + 1)^2} X^m dX$$

$$\text{แต่ } \frac{e^X}{(e^X + 1)^2} = \frac{1}{(e^X + 1)(e^{-X} + 1)}$$

และ $\text{Im} = 0$ เมื่อ m เป็น เลขคี่ เพราะว่า

$$\begin{aligned} I_0 &= -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^X}{(e^X + 1)^2} dX \\ &= \frac{-1}{(e^X + 1)} \Big|_{-\infty}^{\infty} = 1 \end{aligned}$$

ฉะนั้นในที่สุดจะได้ว่า

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} f(\epsilon) \phi(\epsilon) d\epsilon &= \sum_{m=0}^{\infty} \text{Im} \frac{(k_B T)^m}{m!} \left[\frac{d^m \psi}{d\epsilon^m} \right]_{\epsilon_F} \\ &= \psi(\epsilon_F) + \frac{I_2 (k_B T)^2}{2!} \left[\frac{d^2 \psi}{d\epsilon^2} \right]_{\epsilon_F} + \dots \end{aligned} \quad (\text{M-15})$$

สำหรับค่าของ I_2 จะหาได้ว่า $I_2 = \frac{\pi^2}{3}$ ดังนั้น

$$\int_0^{\infty} f(\epsilon) \phi(\epsilon) d\epsilon = \int_0^{\epsilon_F} \phi(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left[\frac{d^2 \psi}{d\epsilon^2} \right]_{\epsilon_F} + \dots \quad (\text{M-16})$$

จะเห็นว่าเทอมแรกทางข้างขวาของผลลัพธ์ก็คือค่าที่ได้เมื่อ $T \rightarrow 0$ ส่วนเทอมที่สองและเทอมต่อ ๆ ไปก็คือค่าที่ได้เมื่ออุณหภูมิของระบบไม่เป็นศูนย์ อันมีผลกระทบมากในช่วง $k_B T$ ที่ $f(\epsilon)$ ลดลงจาก 1 จนเป็น 0

ภาคผนวก ค

การหาค่าอินทิกรัล $F_V = \frac{V}{N} \sum_l G_{ol}$

การหาค่าอินทิกรัล $F_V = \frac{V}{N} \sum_l G_{ol}$

$$F_V = -\frac{V}{N} N(0) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(i\omega_n - \epsilon_k^2)}{\epsilon_k^2 + \omega_n^2} d\epsilon_k$$

$$= -\frac{V}{N} N(0) i\omega_n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon_k}{\epsilon_k^2 + \omega_n^2}$$

$$= -\frac{V}{N} N(0) \frac{i\omega_n}{\omega_n} \tan^{-1} \frac{\epsilon_k}{\omega_n} \Big|_{-\infty}^{\infty}$$

$$F_V = -\frac{V}{N} N(0) \pi i$$

ถ้าให้ $N = 1$ จะได้ว่า $F_V = -VN(0)\pi i$

และเมื่อใช้วิธีการแบบเดียวกันกับ F_J จะได้ว่า

$$F_J = -JN(0)\pi i$$

ประวัติย่อผู้วิจัย

ชื่อ นายชัยณรงค์ ดวงสีแก้ว

เกิดวันที่ 1 เดือน กุมภาพันธ์ พุทธศักราช 2509

สถานที่เกิด จังหวัดลพบุรี

สถานที่อยู่ปัจจุบัน บ้านเลขที่ 105/1 ถนนพระราม 4 เขตปทุมวัน

กรุงเทพมหานคร 10330

สถานที่ทำงานปัจจุบัน -

ประวัติการศึกษา

พ.ศ. 2527 มัธยมศึกษาตอนปลาย จากโรงเรียนวัดบวรเม่งคล

พ.ศ. 2530 กศ.บ.(ฟิลิกส์) จากมหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ ประสานมิตร

พ.ศ. 2534 วท.ม.(ฟิลิกส์) จากมหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ ประสานมิตร

ความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุรอบสิ่งเจือปนแบบแม่เหล็กพารา

บทคัดย่อ

ของ

ชัยณรงค์ ดวงสีแก้ว

เสนอต่อมหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ ประสานมิตร

เพื่อเป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตร

ปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต

กันยายน 2534

บทคัดย่อ

การวิจัยครั้งนี้ได้คำนวณหาความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุรอบสิ่งเจือปนแบบแม่เหล็กพาราโดยวิธี ที-เมตริกซ์ ที่ระยะไกลและใกล้อะตอมของสิ่งเจือปนทั้งที่อุณหภูมิศูนย์องศาสัมบูรณ์และอุณหภูมิสูงกว่าศูนย์องศาสัมบูรณ์ ซึ่งผลการคำนวณพบว่า

1. ที่ระยะไกลและอุณหภูมิต่ำกว่าศูนย์องศาสัมบูรณ์ ความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุจะอยู่ในรูป $\frac{A}{r^3} \cos(2k_F r)$ เมื่อ r คือระยะทางจากอะตอมของสิ่งเจือปน และ k_F คือโมเมนตัมเฟอร์มิ

2. ที่ระยะไกลและอุณหภูมิสูงกว่าศูนย์องศาสัมบูรณ์ ความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุจะอยู่ในรูป $\frac{B \cos(2k_F r)}{r^3} + \frac{CT^2 \cos(2k_F r)}{r}$ เมื่อ T คืออุณหภูมิ

3. ที่ระยะใกล้และอุณหภูมิต่ำกว่าศูนย์องศาสัมบูรณ์ ความแปรปรวนของความหนาแน่นประจุจะอยู่ในรูป $\frac{E}{r}$

4. ที่ระยะใกล้และอุณหภูมิสูงกว่าศูนย์องศาสัมบูรณ์ ความแปรปรวนจะอยู่ในรูป $\frac{(E + GT^2)}{r}$

เมื่อ A, B, C, E และ G คือค่าคงที่ที่ได้จากแบบจำลอง

CHARGE-DENSITY VARIATIONS AROUND A PARAMAGNETIC IMPURITY

AN ABSTRACT

BY

CHAINARONG DOUNGSAEKLAU

Presented in partial fulfillment of the requirement for the

Master of Science degree in Physics

at Srinakharinwirot University

September 1991

The charge-density variations around a paramagnetic impurity are calculated by the method of t-matrix at asymptotic and preasymptotic distances; at the absolute zero and finite temperatures. From the calculation it is found that:

1. The charge-density variation at asymptotic distances and absolute zero temperature is of the form $\frac{A \cos(2k_F r)}{r^3}$; where r is the distance from the impurity atom and k_F is the Fermi momentum.

2. The charge-density variation at large distances and finite temperature is of the form $\frac{B \cos(2k_F r)}{r^3} + \frac{CT^2 \cos(2k_F r)}{r}$; where T is the temperature.

3. The charge-density variation at preasymptotic distances and absolute zero temperature is of the form $\frac{E}{r}$.

4. The charge-density variation at near distances and finite temperature is of the form $\frac{(E + FT^2)}{r}$.

Where A , B , C , E and F are constants the model.