

Elektronens dans med sig själv

I dagens moderna samhälle spelar exempelvis elektroniken en allt större roll, och med detta växer konstant behovet av nya och bättre material. Halvledare är ett exempel på en av de mest fundamentala delarna som den här utvecklingen har byggts på, och en grundlig förståelse av deras, och andra materials, egenskaper är därmed en nödvändighet. En möjlighet för att uppnå detta är genom experiment, varigenom deras svar på yttre stimulans ger viktiga insikter. Men för att förstå varför ett material beter sig på ett visst vis, och kunna dra slutsatser om hur förändringar påverkar beteendet, krävs även en djup teoretisk förståelse. Problem uppstår dock när antalet elektroner blir många och förenklingar behövs: hur ska dessa approximationer skapas för att på ett korrekt sätt beskriva verkligheten – och hur kan de förbättras?

Interaktionen mellan elektronerna som rör sig i materialet är det som ger upphov till de fascinerande egenskaper som uppvisas. Med hjälp av teorier som beskriver dessa kan man, under en del antaganden, beräkna egenskaper för olika material. Detta är väldigt användbart då man kan modifiera ett material med hjälp av några knapptryck, istället för att behöva framställa dem på nytt var gång; väldigt exotiska eller rent av hälsovådliga ämnen kan på så sätt undersökas utan kostnad eller risk. Givetvis måste materialen i slutändan testas experimentellt för att säkerställa att de beräknade resultaten stämmer, men det ultimata målet vore att efterlikna experimenten korrekt endast med de grundläggande byggstenarna av materialet som utgångspunkt.

Trots att ekvationen som beskriver elektronernas beteende är välkänd, den så kallade Schrödingers ekvationen, så är det i många fall otroligt komplicerat att lösa den. Problemet ligger i att alla av de ofattbara mängderna elektroner interagerar med varandra, varpå förenklingar och approximationer behövs för att möjliggöra de numeriska beräkningarna. Dessa approximationer medför att den förenklade bilden har tappat delar av sin förmåga att beskriva verkligheten. En av dessa är den så kallade *GW* approximationen, som används för att förenkla det så kallade *mångkroppsproblem* som interaktionen ger upphov till. *GW* har använts med stor framgång på breda klasser av material, men det finns flera områden där approximationen brister och det uppstår problem. I detta arbete har en typ av självinteraktion (d.v.s. att elektronen ofysikaliskt interagerar med sig själv) kallad *självsärmning* undersökts.

Självsärmning innebär att styrkan av interaktionen med övriga elektroner som en viss elektron känner av minskas (skärmas av) på grund av sin egen närvaro. För att undvika detta problem, som förekommer på grund av hur *GW* approximationen är skapad, har en metod utvecklats för några år sedan där självskärmningen elimineras. Målet med detta arbete har varit tvåfalt; att undersöka denna förändrade version av *GW* med hjälp av förenklade modeller av verkligheten, samt att genom numeriska beräkningar för halvledare undersöka dess effekt på riktiga material. Resultatet av arbetet visar på att metoden för att avlägsna problemet med självskärmning förbättrade beskrivningen som ges av *GW* i flera fall för modellerna, till och med så långt som att nästan ge en fullt korrekt bild av de undersökta egenskaperna i vissa regimer, och gav en genomgående förbättrad bild av de undersökta halvledarna. Emellertid behövs fortfarande vidare forskning för att nå det övergripande målet om att kunna beskriva ett material exakt, enbart från dess mest fundamentala delar.