

Abstrakti

Studimi i strukturës elektronike të metaleve dhe gjysmëpërçuesve përbën një nga sfidat themelore të fizikës së gjendjes së ngurtë. Për të kuptuar sjelljen mikroskopike të elektroneve në kristale, është e domosdoshme të përshkruhet ndërveprimi i tyre me potencialin që lind nga rregullsia periodike e joneve pozitive në rrjetin kristalin. Ky potencial, i quajtur **potencial periodik**, është themeli mbi të cilin ndërtohet teoria e brezave energjetikë, që shpjegon pse disa materiale janë përcjellës të mirë, disa janë izolatorë dhe të tjerë janë gjysmëpërçues.

Ky punim trajton përshkrimin teorik të strukturës elektronike të sistemeve periodike, me fokus në sjelljen e elektroneve në trupat e ngurtë kristalorë. Në fillim prezantohet koncepti i potencialit periodik dhe roli themelor i teoremës së Blochut në përshkrimin e gjendjeve një-elektronike në kristale. Më pas analizohet modeli Kronig–Penney si një model i thjeshtuar, por shumë domethënës, për kuptimin e formimit të brezave energjetikë dhe hendekëve energjetikë të ndaluar, duke ilustruar lidhjen ndërmjet potencialit periodik dhe strukturës së brezave.

Megjithatë, përshkrimi i plotë i sistemeve me shumë elektrone kërkon marrjen parasysh të **ndërveprimeve elektron–elektron**, të cilat nuk mund të injorohen në një trajtim realist të materialeve. Pikërisht këtu hyn në lojë **përafrimi Hartree–Fock**, një metodë e fuqishme variacionale që lejon përshkrimin e një sistemi me shumë elektrone në mënyrë të përafruar, duke ruajtur në të njëjtën kohë parimet bazë të mekanikës kuantike dhe simetrinë antisimetike të funksionit valor. Në këtë formalizëm, funksioni total i valës për sistemin ndërtohet në formën e një **determinante Slater**, që siguron respektimin e parimit të përjashtimit të Paulit dhe përcakton mënyrën sesi energjia totale e sistemit mund të minimizohet për të gjetur gjendjen më të qëndrueshme. Një vëmendje e veçantë i kushtohet konceptit të vrimës së Fermi dhe rolit të saj në përshkrimin e vetive elektronike të metaleve.

Më tej, metoda Hartree–Fock aplikohet në modelin e gazit të elektroneve të lirë, me theks të veçantë në metalet monovalente, si një rast referues për analizën e sistemeve metalike. Diskutohet gjithashtu rasti i dy elektroneve të lirë për të ilustruar në mënyrë të qartë natyrën kuantike të ndërveprimit të shkëmbimit. Në fund, paraqitet procesi vetë-konsistent i Hartree–Fock, i cili siguron koherencën ndërmjet orbitaleve një-elektronike dhe potencialit efektiv. Edhe pse metoda Hartree–Fock nuk përfshin plotësisht efektet e korrelacionit elektronik, ajo ofron një bazë teorike të fortë për kuptimin e strukturës energjetike dhe vetive themelore të materialeve kristalore.

Abstract

The study of the electronic structure of metals and semiconductors is one of the fundamental challenges of solid-state physics. To understand the microscopic behavior of electrons in crystals, it is necessary to describe their interaction with the potential that arises from the periodic arrangement of positive ions in the crystal lattice. This potential, called the periodic potential, is the foundation on which the band theory is built, which explains why some materials are good conductors, some are insulators, and others are semiconductors.

This paper deals with the theoretical description of the electronic structure of periodic systems, with a focus on the behavior of electrons in crystalline solids. First, the concept of the periodic potential and the fundamental role of Bloch's theorem in describing one-electron states in crystals are introduced. Then, the Kronig–Penney model is analyzed as a simplified, but very significant, model for understanding the formation of energy bands and forbidden energy gaps, illustrating the connection between the periodic potential and the band structure.

However, the complete description of many-electron systems requires the consideration of electron–electron interactions, which cannot be ignored in a realistic treatment of materials. This is where the Hartree–Fock approximation comes into play, a powerful variational method that allows the description of a many-electron system in an approximate manner, while preserving at the same time the basic principles of quantum mechanics and the antisymmetric symmetry of the wave function. In this formalism, the total wave function for the system is constructed in the form of a Slater determinant, which ensures the respect of the Pauli exclusion principle and determines how the total energy of the system can be minimized to find the most stable state. Special attention is paid to the concept of the Fermi hole and its role in describing the electronic properties of metals.

Next, the Hartree–Fock method is applied to the free electron gas model, with special emphasis on monovalent metals, as a reference case for the analysis of metallic systems. The case of two free electrons is also discussed to clearly illustrate the quantum nature of the exchange interaction. Finally, the self-consistent Hartree–Fock process is presented, which ensures the coherence between one-electron orbitals and the effective potential. Although the Hartree–Fock method does not fully include the effects of electronic correlation, it provides a strong theoretical basis for understanding the energy structure and fundamental properties of crystalline materials.