

**ANKARA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

DOKTORA TEZİ

DUVAR DÜZENSİZLİĞİNİN İLETKENLİĞE ETKİSİNİN İNCELENMESİ

Didem KETENOĞLU

FİZİK MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI

ANKARA

2011

Her hakkı saklıdır

TEZ ONAYI

Didem KETENOĐLU tarafından hazırlanan “**Duvar düzensizliğinin iletkenliğe etkisinin incelenmesi**” adlı tez çalışması 04 / 04 / 2011 tarihinde aşğıdaki jüri tarafından oybirliği ile Ankara Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı’nda **DOKTORA TEZİ** olarak kabul edilmiştir.

Danışman: Prof.Dr. Basri ÜNAL

Jüri Üyeleri:

Başkan:

Prof.Dr. Tacettin ALTANHAN
Ankara Üniversitesi, Fizik Anabilim Dalı

Üye:

Prof.Dr. Basri ÜNAL
Ankara Üniversitesi, Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı

Prof.Dr. Ali Ulvi YILMAZER
Ankara Üniversitesi, Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı

Prof.Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR
Ankara Üniversitesi, Fizik Anabilim Dalı

Prof.Dr. Aytunç ATEŞ
Atatürk Üniversitesi, Fizik Anabilim Dalı

Yukarıdaki sonucu onaylarım.

Prof.Dr. Özer KOLSARICI

Enstitü Müdürü

ÖZET

Doktora Tezi

DUVAR DÜZENSİZLİĞİNİN İLETKENLİĞE ETKİSİNİN İNCELENMESİ

Didem KETENOĞLU

Ankara Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı

Danışman: Prof.Dr. Basri ÜNAL

Bu çalışmada yüzey düzensizlikleri bulunan yarıiletken ince film için yarıklasik bir yaklaşım olan Boltzmann taşınım denkleminin Green fonksiyonu çözüm yöntemi ilk defa uygulanarak, bu düzensizliklerden kaynaklanan elektron saçılmalarının elektriksel iletkenlik üzerindeki etkileri incelenmiştir. Koordinat dönüşümleri yapılarak, yüzey düzensizlikleri hacmin içine katılmış ve her iki sınırın da düz olması sağlanmıştır. Dönüşmüş Hamiltonyende pertürbasyon olarak bulunan düzensiz potansiyel enerji terimi için farklı modeller ele alınarak elde edilen iletkenlik sonuçları, literatürde yaygın olarak kullanılan yöntemler ile elde edilen sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Boltzmann taşınım denklemi düzensiz duvarları olan sistem için sabit manyetik alan varlığında ve manyetik alanın olmadığı durumda gevşeme zamanı yaklaşımı altında çözülmüştür.

Nisan 2011, 90 sayfa

Anahtar Kelimeler: İletkenlik, Boltzmann taşınım denklemi, sınır düzensizliği, özenerji, iki boyutlu yarıiletken ince filmler, Boltzmann denkleminin Green fonksiyonu çözümü

ABSTRACT

Ph.D. Thesis

STUDY OF WALL ROUGHNESS EFFECT ON CONDUCTIVITY

Didem KETENOĞLU

Ankara University

Graduate School of Natural and Applied Sciences

Department of Engineering Physics

Supervisor: Prof.Dr. Basri ÜNAL

In this work electrical conductivity of semiconducting thin films having irregular walls has been studied through considering the effect of electron scatterings by applying, for the first time, the Green function solution method to the solution of semiclassical Boltzmann equation. By making coordinate transformations, the irregularities on the walls have been transferred into the volume and in this way the both surfaces have been brought into flat forms. By taking various models for random potential energy term contained in the transformed Hamiltonian as the perturbation, conductivity values have been calculated and compared with the ones obtained from the methods widely known in literature. The Boltzmann transport equation has been solved in relaxation time approximation for the irregular walled system in two cases, when there is a constant magnetic field and when there is no magnetic field.

April 2011, 90 pages

Key Words : Conductivity, Boltzmann transport equation, boundary roughness, self energy, two dimensional semiconducting thin films, Green function solution of Boltzmann equation

TEŞEKKÜR

Tez çalışmamın her aşamasında değerli bilgi ve görüşlerinden yararlandığım, çalışmalarımı ilgili her sorunu bana vakit ayırmaktan çekinmeyerek ve büyük bir sabırla çözümlendiren, çalışmalarımın yönlendirilmesi ve sonuçlandırılmasında büyük emeği geçen, danışmanım Sayın Prof.Dr. Basri Ünal'a (Ankara Üniversitesi, Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı)

Tez çalışmamda değerli katkılarından dolayı Sayın Prof.Dr. Mehmet Kabak'a (Ankara Üniversitesi, Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı)

Gösterdiği ilgi ve yapıcı tutumlarından dolayı her zaman desteğini ve bana güvenini hissettiğim, Sayın Prof.Dr. Ali Ulvi Yılmaz'ın (Ankara Üniversitesi, Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı)

Tez izleme komitemde bulunan Sayın Prof.Dr. Bekir Sıtkı Kandemir'e (Ankara Üniversitesi, Fizik Anabilim Dalı)

teşekkürlerimi sunarım.

Her koşulda bana verdikleri destekten dolayı değerli aileme de sonsuz teşekkürler.

Didem KETENOĞLU

Ankara, Nisan 2011

İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	i
ABSTRACT	ii
TEŞEKKÜR	iii
SİMGELER DİZİNİ	vi
ŞEKİLLER DİZİNİ	viii
ÇİZELGELER DİZİNİ	x
1. GİRİŞ	1
2. KURAMSAL TEMELLER.....	6
2.1 Gevşeme Zamanı Yöntemi	7
2.2 Fermi Altın Kuralı Yöntemi.....	8
2.3 Çarpışma İşlemcisi Yöntemi	13
2.4 Schrödinger Denkleminin Green Fonksiyonu Çözüm Yöntemi	15
3. MATERYAL VE YÖNTEM.....	20
3.1 Koordinat Dönüşümü	20
3.2 Momentum Dönüşümü	21
3.3 Hamiltonyen Dönüşümü	22
3.4 Rastgele Potansiyel Enerji.....	23
3.5 Korelasyon Fonksiyonu	24
3.5.1 Gaussyen korelasyon fonksiyonu.....	27
3.5.2 Üstel korelasyon fonksiyonu	28
3.5.3 H kuvvetinin korelasyon fonksiyonu.....	29
3.6 Genel durum için çözümler	29
3.6.1 Boltzmann denkleminin çözümü	30
3.6.2 İşlemciler	32
3.6.3 Pertürbe olmamış Green fonksiyonu	33
3.6.4 Özenerji.....	34
3.6.5 Pertürbe Green fonksiyonu	36
3.6.6 $g(r, \phi)$ fonksiyonu	37
3.6.7 Akım yoğunluğu	38
3.6.8 Elektriksel iletkenlik ve özdirenç katsayıları	39

3.7 $B = 0$ İçin Çözümler	41
3.7.1 Boltzmann denkleminin çözümü	41
3.7.2 İşlemciler	41
3.7.3 Pertürbe olmamış Green fonksiyonu	42
3.7.4 Özenerji.....	42
3.7.5 Pertürbe Green fonksiyonu.....	45
3.7.6 $g(r, \phi)$ fonksiyonu	45
3.7.7 Akım yoğunluğu	46
3.7.8 Elektriksel iletkenlik ve özdirenç katsayıları	47
3.8 $B = 0$ ve $\tau_0 = \infty$ İçin Çözümler	48
3.8.1 Özenerji.....	48
3.8.2 Elektriksel iletkenlik ve özdirenç katsayıları	50
3.9 $B \neq 0$ İçin Özel Bir Özfonksiyon Değerinde Çözümler	51
3.9.1 D_0 işlemcisine ait özdeğer ve özfonksiyonlar.....	51
3.9.2 Pertürbe olmamış Green fonksiyonu	52
3.9.3 Özenerji.....	53
3.9.4 Pertürbe Green fonksiyonu.....	58
3.9.5 $g(r, \phi)$ fonksiyonu	59
3.9.6 Akım yoğunluğu	59
3.9.7 Elektriksel iletkenlik ve özdirenç katsayıları	60
4. BULGULAR VE TARTIŞMA	61
4.1 $B = 0$ ve $\tau_0 = \infty$ Durumunda Sayısal Hesaplamalar	61
4.1.1 Gaussyen model.....	61
4.1.2 Üstel model.....	65
4.2 Özel Bir Özfonksiyon Değerinde Sayısal Hesaplamalar	69
4.2.1 Üstel model.....	69
4.2.2 Gaussyen model.....	73
5. SONUÇ.....	81
KAYNAKLAR	85
ÖZGEÇMİŞ.....	89

SİMGELER DİZİNİ

B	Magnetik Alan
c	Hacimsel Elektron Yoğunluğu
e	Elektronun Yüğü
E	Elektrik Alan
$f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$	Faz Uzayı Dağılım Fonksiyonu
f_0	Fermi-Dirac Dağılım Fonksiyonu
F	Dış Kuvvet
$g(\mathbf{r}, \phi)$	Fermi-Dirac Dağılım Fonksiyonundan Sapma
G	Pertürbe Green Fonksiyonu
G_0	Pertürbe Olmamış Green Fonksiyonu
h	Planck Sabiti
H	Kabartı Eksponenti
j	Akım Yoğunluğu
k	Dalga Sayısı
L	İnce Film Kalınlığı
l	Korelasyon Uzunluğu
l_τ	Ortalama Serbest Yol
m	Kütle
n	Birim Alan Başına Elektron Sayısı
n_i	Safsızlık Yoğunluğu
N_s	Dolu Alt Bantların Sayısı
P_F	Fermi Momentumu
\mathbf{R}_i	i 'inci Atomun Yer Vektörü
$V(\mathbf{r})$	Elektrik Potansiyel
$V(\mathbf{r})$	Potansiyel Enerji
\mathbf{v}	Hız
\mathbf{v}_F	Fermi Hızı

$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$	\mathbf{k} İlk Durumundan \mathbf{k}' Son Durumuna Geçiş Oranı
ω	Açısal Frekans
σ	Elektriksel İletkenlik
ρ	Özdirenç
τ	Gevşeme Zamanı
\hbar	$h / 2\pi$
ϕ_p	Dış Potansiyel
$\delta v(\mathbf{r})$	Fermi Hızındaki Değişim
Σ	Özenerji
$\Sigma_{\tau}^{\mathbf{B}}$	\mathbf{B} ve τ değeri için özenerji
ζ	Kristalit Büyüklüğü
ε	Enerji
ε_F	Fermi Enerjisi

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1 L kalınlıklı filmden geçen I_x akımı.....	10
Şekil 3.1 Düzensiz yüzeyleri bulunan ince film.....	20
Şekil 3.2 Green fonksiyonu G için pertürbasyon serileri.....	35
Şekil 3.3 Sadeleştirilemeyen özenerji Σ	35
Şekil 3.4 \mathbf{k}_1 vektörünün yönelimi	44
Şekil 3.5 \hat{n}' ve \hat{n}'_{\perp} vektörlerinin yönelimi	54
Şekil 4.1 Farklı korelasyon uzunlukları için boyuna iletkenliğin değişimi. $\mathbf{B} = 0$ ve $\tau_0 = \infty$ durumunda Gaussyen model için $H = 1$, $L = 5 \times 10^{-9}$ m , $\Delta = 0.3 \times 10^{-9}$ m , $n = 4 \times 10^{16}$ m ⁻²	63
Şekil 4.2 Farklı korelasyon uzunlukları için boyuna iletkenliğin değişimi. $\mathbf{B} = 0$ ve $\tau_0 = \infty$ durumunda üstel model I için $H = 0.5$, $L = 8 \times 10^{-9}$ m , $\Delta = 0.5 \times 10^{-9}$ m , $n = 4.8 \times 10^{16}$ m ⁻²	66
Şekil 4.3 Farklı korelasyon uzunlukları için boyuna iletkenliğin değişimi. $\mathbf{B} = 0$ ve $\tau_0 = \infty$ durumunda üstel model II için $H = 0.5$, $L = 5 \times 10^{-9}$ m , $\Delta = 0.3 \times 10^{-9}$ m , $n = 4 \times 10^{16}$ m ⁻²	68
Şekil 4.4 Sabit $l_{\tau} / l = 290$ değerinde farklı $\omega_0 \tau_0$ değerleri için $\rho_{xx}(\mathbf{B}) / \rho_{xx}(\mathbf{B} = 0)$ oranının değişimi. Üstel model için $n = 4 \times 10^{15}$ m ⁻² , $n_i = 10^{15}$ m ⁻² , $l \times l_{\tau} = 65.61 \times 10^{-12}$ m ²	72
Şekil 4.5 Sabit $l_{\tau} / l = 290$ değerinde farklı $\omega_0 \tau_0$ değerleri için $\rho_{xx}(\mathbf{B}) / \rho_{xx}(\mathbf{B} = 0)$ oranının değişimi (Mirlin vd. 1999).....	72
Şekil 4.6 Sabit $\omega_0 = 8.79 \times 10^9$ değerinde farklı l_{τ} / l değerleri için $\Delta \rho_{xx} / \rho_{xx}(\mathbf{B} = 0)$ oranının değişimi. Gaussyen model için $n = 4 \times 10^{15}$ m ⁻² , $n_i = 10^9$ m ⁻² , $l \times l_{\tau} = 65.61 \times 10^{-12}$ m ²	77

Şekil 4.7 Rastgele bir manyetik alandaki iki boyutlu elektron gazının farklı l_{τ} / l değerleri için $\Delta\rho_{xx} / \rho_{xx}(\mathbf{B} = 0)$ oranının değişimi (Hedegard ve Smith 1995).....	78
Şekil 4.8 $B_0 = 0, \delta B(\mathbf{r}) \neq 0$ için farklı l_{τ} / l değerlerinde $\Delta\rho_{xx} / \rho_{xx}(B_0 = 0)$ oranının değişimi.....	80

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 4.1 Üstel model I için farklı korelasyon uzunluklarında hesaplanan I , $\text{Im} \Sigma_{\infty}^0(1)$ ve σ_{xx} değerleri	66
Çizelge 4.2 Üstel model II için farklı korelasyon uzunluklarında hesaplanan I , $\text{Im} \Sigma_{\infty}^0(1)$ ve σ_{xx} değerleri	67
Çizelge 4.3 Üstel model için sabit $l_{\tau} / l = 290$ değerinde farklı $\omega_0 \tau_0$ değerleri için $\rho_{xx}(\mathbf{B}) / \rho_{xx}(\mathbf{B} = 0)$ oranının değişimi	71
Çizelge 4.4 Gaussyen model için sabit $\omega_0 = 8.79 \times 10^9$ değerinde farklı l_{τ} / l değerleri için $\Delta \rho_{xx} / \rho_{xx}(\mathbf{B} = 0)$ oranının değişimi	77
Çizelge 4.5 $B_0 = 0$, $\delta B(\mathbf{r}) \neq 0$ için farklı l_{τ} / l değerlerinde $\Delta \rho_{xx} / \rho_{xx}(B_0 = 0)$ oranının değişimi	79

1. GİRİŞ

Günümüzde yarıiletken teknolojisi oldukça gelişmiştir ve bütün devreler elektrikle çalışmaktadır. Her bir parça üzerine elektrik alan uygulanması esastır. Bu durumda elektriksel iletkenlikle ilgili katsayıların hesabı büyük öneme sahiptir. İletkenlik hesabı ile ilgili çok geniş bir literatürün olduğu görülmektedir. Hesaplama yöntemleri oldukça fazladır. Yarıiletken teknolojisi aygıt boyutlarını mikron altı (10000 Å'dan az) bölgelere ve mikron altının daha da altı (1000 Å'dan az) bölgelere kadar küçültmeye devam ettiğinden küçük boyutların fiziğini ilgilendiren bir çok yeni sorun ortaya çıkmıştır. Bu sorunlar özellikle katıhaldeki taşınımın kuantumlu incelenmesinin gerekliliğini ortaya koymuştur. Mikron altının daha da altı bölgede, yarıiletkenlerdeki taşınım kuantumlu taşınım olayına yaklaşır. Bu nedenle çözümlerde katıhal fiziğinin ilk gelişiminden bu yana yarıiletken fiziğinin esas dayanağı olan yarıklasik Boltzmann taşınım denkleminde faydalanılmıştır.

Manyetik alanın değişmesi sonucunda elektriksel direncin değişmesi olayına manyetodirenç denir. Manyetik alanın artması ile elektriksel direnç artabilir (pozitif manyetodirenç) ya da azalabilir (negatif manyetodirenç). Malzemenin manyetodirenci uygulanan manyetik alanın şiddetine ek olarak, manyetik alanın yönüne de (akıma göre) bağlıdır. Uygulanan manyetik alan akıma dik olduğu zaman enine manyetodirenç, paralel olduğu zaman boyuna manyetodirenç gözlenir. Uygulanan manyetik alana ek olarak değişik saçıcıların varlığında, sayısal ve analitik yöntemlerle manyetodirenç üzerine yapılan çalışmalar oldukça fazladır. Saçıcılar rastgele manyetik alanlar (RMF) ve rastgele elektrik potansiyelleri (RP) olmak üzere iki grupta toplanabilir. Rastgele manyetik alanlar uygulanan manyetik alanın rastgele konumlarda merkezlenmiş bileşenlerinden oluşur (Hedegard ve Smith 1995). Rastgele elektrik potansiyelleri de yapı içinde rastgele konumlarda merkezlenmiş, uzun veya kısa erişimli çok sayıda potansiyelin toplamından oluşur (Mirlin vd. 1999). Bu çalışmadaki saçıcılar sınır düzensizliklerinin hacim içine dahil edilmesiyle dönüşmüş Hamiltonyende pertürbasyon terimi olarak yer alan rastgele potansiyel enerjinin neden olduğu rastgele potansiyellerdir.

Çok tabakalı sistemler, kuantum kuyuları, dar kanallar ve ince filmler gibi kısıtlı geometrili sistemlerde taşınım işlemi üzerinde sınırdan saçılmaların etkisinin önemli olduğu, iletkenlik hesaplamalarından anlaşılmaktadır (Fishman ve Calecki 1989, 1991). Mikroüretim ve nanoüretim teknolojisindeki gelişmeler, iki boyutlu elektron sistemi içindeki bir sınırlayıcı potansiyel ile ortaya çıkan kuantum kuyularının incelenmesini olanaklı kılmıştır. Sınırdan saçılmaların etkileri kuantum tuzakları, kuyuları ve filmleri ile ilgili herhangi bir çalışmanın tamamlayıcı bir parçasıdır.

Malzeme teknolojisindeki gelişmeler, özellikle ultra ince film üretimi, ultra temiz ve yüksek vakum sistemlerindeki gelişmeler fiziksel olarak sınırdan saçılmaların etkisinin daha iyi anlaşılmasını gerektirir. Sınırdan saçılmaların etkisi özellikle parçacık ortalama serbest yolunun sistem boyutu ile karşılaştırılabilir olduğu ultra ince ve/ya da ultra temiz sistemlerdeki taşınımında önemlidir (Meyerovich ve Ponomarev 2002).

Yarıiletken ince filmlerin elektron yüzey/ara yüzey saçılmaları ile sınırlı elektriksel iletkenlikleri, mikroelektronik cihazlarda (Stern 1992) temel ve teknolojik bir öneme sahip olmasından dolayı son 15 yıldır büyük bir ilgi ile çalışılmıştır. Yüksek elektron yoğunluklu (10^{16} m^{-2}) silikon-metal-oksid yarıiletken tersinim (inversiyon) tabakaları içinde, iki boyutlu elektron gazının düşük sıcaklık mobilitesi ve iletkenliği ara yüzey saçılmaları ile oluşturulur. Diğer taraftan, tek heteroeklemlili sistemlerde (örn. AlGaAs/GaAs), ara yüzey kabartı saçılmasının taşıyıcı iletkenliği üzerinde, gevşek elektron hapsinden dolayı sadece küçük bir etkiye sahip olması beklenir. Küçük ara yüzey kabartılarının güçlü elektron saçılmalarına neden olabildiği ince kuantum tellerinde ise durum farklıdır. Gerçekte, bir AlGaAs/GaAs/AlGaAs kuantum teli içinde kabartı saçılması GaAs tel kalınlığı 10 nm'den daha az olduğunda önemli olur (Stern 1992). Elektronik taşınım üzerinde ara yüz kabartılarının benzer etkisi diğer sistemlerde de bulunmuştur.

Üç boyutlu (3D) sistemde duvar düzensizliğinin çok fazla önemi olmayabilir fakat, iki boyutlu (2D) sistem veya 2D sanki (quasi) sistemde serbest elektronlar her iki yüzeye yakın hareket ettiklerinden dolayı, bunun önemi vardır. Günümüz elektronik teknolojisinde bunlar çok ince filmler şeklinde ve Si/SiO₂, GaAs/Al_xGa_{1-x}As gibi

yapıların ara yüzlerinde tuzaklanmış elektron gazları olarak karşımıza çıkar (Economou ve Soukalis 2005). Yüzeyde/ara yüzeyde bulunan rastgele kabartı (roughness) şeklindeki düzensizlikler ince filmin elektriksel iletkenliğini kuvvetli bir biçimde etkiler, çünkü burada ek yük saçılması söz konusudur (Fishman ve Calecki 1989). Yarıiletken film için σ iletkenliğinin L film kalınlığı ile $\sigma \propto L^6$ şeklinde arttığı deneysel (Hedegard ve Smith 1995) ve kuramsal (Fishman ve Calecki 1989, 1991) olarak bulunmuştur. Fakat yüzey kabartıları sınırdaki saçılmalar nedeniyle iletkenliği azaltır ve hacim içinde hiç safsızlık (impurity), yapı kusuru (defect) ve tanecik sınırı (grain boundary) saçıcıları olmadığı zaman da, yani sistemin kendi gevşeme zamanı sonsuz olduğu durumda bile, bu azaltıcı etki geçerlidir. Bundan başka, değişik film hazırlama koşulları değişik yüzey kabartı şekillerine yol açar ve bu film hazırlama mekanizmasının bir sonucudur (Zhao vd. 2001). Modern deneysel teknikler yüzeyin şeklinin yüksek doğrulukla yeniden oluşturulmasına olanak verir (Reis vd. 1991). Tüm taşınım katsayılarının ve sistem büyüklüğüne ilişkin (mesoscopic) değişkenlerin, sadece yüzeyin ana belirtgenleri cinsinden yani yüzey kabartılarının korelasyon fonksiyonu aracılığı ile hesabı için tutarlı bir yaklaşım gereklidir.

En yaygın olarak kullanılan iki yaklaşımdan biri Meyerovich ve Stepaniants'ın (1995) koordinat dönüşümü yöntemi olup, burada ana düşünce sınır koşulunu uygulamadaki zorluğu hacim (bulk) hareket denklemine yükleyerek, ne kadar karmaşık olursa olsun sınır koşulu basit bir hacim problemini çözenin yerleşik yöntemlerle bir yolunun bulunacağıdır. Çoğu zaman basit sınır koşulları olan karmaşık bir hacim problemini çözmek, karmaşık sınır koşulları olan daha basit bir hacim problemini çözmekten çok daha kolaydır. Kullanılan bu düzenli (kanonik) dönüşüm çizgisel değildir ve bazı ek rastgele çizgisel olmayan terimler kazanan hacim Hamiltonyeninde önemli bir karışıklığa neden olur. Hacim Hamiltonyenindeki bu terimler başlangıç sınır pürüzleri üzerindeki tüm bilgiyi içerir. Bu Hamiltonyen rastgele terimli herhangi bir hacim Hamiltonyeni gibi işlem görür. Sınır pürüzlerinin genliği çok büyük değilse, hacim Hamiltonyenine gelen bu düzeltmeler pertürbe olarak işlem görebilir. Taşınım denkleminin sol tarafında (dinamik) içerilen pertürbe düzeltmeler, bazı ek dış alanlara eşdeğerdir ve çizgi kaymaları (line shifts) ya da filmin kalınlığına hareket için kuantumlu enerji seviyelerinin hesaplanmasında çok önemlidir. Boltzmann

denkleminde eşitliğin sağ tarafında bulunan çarpışma terimine gelen düzeltmeler, taşınım katsayılarındaki değişimi tanımlar.

Fishman ve Calecki'nin (1989) kullandığı diğer yaklaşımda ise, faz uzayında elektron dağılım fonksiyonu $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ 'nin sağladığı Boltzmann taşınım denkleminde bulunan $(\partial f / \partial t)_{\text{çarp}} \text{ çarpışma terimi, pertürbe olmamış } H_0 \text{ Hamiltonyenli sistemin durumları arasındaki geçiş olasılıklarına altın kuralın uygulanması ile açıklanır. Pertürbe olmamış sistem belirli bir saçıcı potansiyel uygulanmadan önceki durumdur. Bu yüzden sistemin (pertürbe olmamış) durumları bilinmiyorsa bu yöntem uygulanamaz. İnce film çalışmalarında sistem } z \text{ yönünde } L \text{ genişlikli sonsuz yükseklikte potansiyel kuyusu } V_0 = \infty \text{ olarak alınır. } V_0 \text{ sınırlayıcı (confining) potansiyel } z > L/2 \text{ ve } z < -L/2 \text{ için } V_0 \text{ değerini almak üzere sistem Hamiltonyeni } H_0 = (p^2 / 2m) + V_0 \theta(z - L/2) + V_0 \theta(-z - L/2) \text{ olarak tanımlanır. Yüzeylerden birindeki düzensizliği temsil etmek üzere } z = L/2 + \xi(\mathbf{r}) \text{ yazılır. Burada } \xi(\mathbf{r}) \text{ yüzey kabartı fonksiyonudur. } \theta(z - L/2) \text{ yerine artık } \theta[z - L/2 + \xi(\mathbf{r})] \text{ yazılır. } V = V_0 \{ \theta[z - L/2 + \xi(\mathbf{r})] - \theta[z - L/2] \} \text{ olmak üzere Hamiltonyen artık } H_0 + V \text{ olarak değişir. Pertürbasyon terimi basamak fonksiyonunun } z = L/2 \text{ de Taylor serisine açılmasıyla } V = V_0 \{ \theta[z - L/2 + \xi(\mathbf{r})] - \theta[z - L/2] \} \approx V_0 \xi(\mathbf{r}) \delta(z - L/2) \text{ olarak bulunur. Böylece } \xi(\mathbf{r}) \text{ yüzey düzensizliğinin Hamiltonyendeki } V \text{ pertürbasyon teriminde nasıl içerilebileceğinin iki farklı yolu belirtilmiştir.}$

Genellikle taşınım problemleri güçlü saçılmalardansa zayıf saçılmaların olduğu sistemler için daha ilgi çekicidir. Güçlü saçılmaların olduğu sistemlerde her bir duvar çarpışması sonucunda parçacık fazının bütünüyle değişmesi sonucu ortalama serbest yol, duvarlar arasındaki uzaklıktan daha büyük olamayabilir (Meyerovich ve Ponomarev 2002). Zayıf saçılmaların olduğu sistemde etkileşme terimi V zayıf kabul edildiği için, genelde kuvvetli saçılmalarda kullanılan ve tam bir kuantum mekaniksel yaklaşım olan Kubo formülü (Kubo 1956, Ballentine ve Hammerberg 1984, Caceres ve Grigera 2001) tercih edilmemektedir. Tercih edilen tek kuantum mekaniksel yöntem olarak Sheng vd.'nin (1995) geliştirdiği ve Schrödinger denkleminde ait Green fonksiyonunun özenerjisi

hesabına dayalı yöntem sayılabilir. Bu yöntemlerin yerine daha hızlı sonuç sağlayan klasik veya yarıklasik yöntemler ve bunların yaklaşık şekilleri kullanılır. Yarıklasik bir yöntem olan Boltzmann taşınım denklemi ele alındığında, doğrusal olmayan integro-diferansiyel bir denklemdir ve çözümü zordur. Zayıf saçılmalar altında bazı basitleştirmeler sonucu doğrusal bir diferansiyel denklem elde edilir. Bu basitleştirmeler gevşeme zamanı yaklaşımı (Hedegard ve Smith 1995), saçılmalar için altın kural yaklaşımı (Meyerovich ve Ponomarev 2003, Palasantzas 2005, Calecki 1986) ve çarpışma işlemcisi özfonksiyon açılımı (Mirlin ve Wölfle 1997, 1998, Mirlin vd. 1999) ile sağlanır.

Yüzey düzensizliklerinin neden olduğu iletkenlik birçok farklı yöntemle hesaplanabilir. Her bir yöntemin kendine özgü yaklaşımları vardır ve hesaplanan iletkenlik sonuçları arasında da farklar bulunmaktadır. Bu bilinen yöntemlerden birinin seçilmesi, sonuçları diğer yöntemlerin sonuçlarıyla karşılaştırma olanağı sağlar. Bu hesaplama yöntemlerinin hepsinde $\xi(\mathbf{r})$ 'nin yerine kabartı korelasyon fonksiyonu (roughness correlation) olarak adlandırılan $F(\rho) = \overline{\xi(\mathbf{r})\xi(\mathbf{r}')}$ veya Fourier dönüşümü $F(k)$ kullanılır ve sayısal hesaplamalar için $F(k)$ 'nin değişik modelleri ele alınır. En yaygın olarak kullanılan modeller, A ve B sabitler olmak üzere, $F(k) = Ae^{-k^2/l^2}$ Gaussyen model (Hedegard ve Smith 1995, Palasantzas 1998) ve $F(k) = Be^{-k/l}$ üstel modeldir (Mirlin vd. 1999, Palasantzas ve De Hosson 2003).

Bölüm 2'de V pertürbasyon teriminden dolayı sistem iletkenliğinde meydana gelen değişmeyi hesaplayan farklı yöntemlerin ayrıntılı açıklaması ele alınacaktır. Bölüm 3' de bu tezin konusu olan Boltzmann taşınım denkleminin Green fonksiyonu çözüm yöntemi ayrıntılı olarak açıklanacaktır. Bölüm 4'de farklı modeller için yapılan sayısal hesaplamalar anlatılacak ve elde edilen sonuçlar, diğer literatür bulgularıyla karşılaştırmalı olarak verilecektir. Bölüm 5'de ise, elde edilen sonuçlar tartışılarak, yorumlanacaktır.

2. KURAMSAL TEMELLER

Sistem Hamiltoniyenine gelen V pertürbasyon teriminin etkisiyle iletkenliğe gelen katkının hesaplanabilmesi için değişik yöntemlerden bazıları giriş bölümünde belirtilmiştir. Bu yöntemlerden üç tanesi yarıklasik olup, Boltzmann taşınım denkleminin dayanır, diğer bir yöntem ise kuantum mekaniksel ve Schrödinger denkleminin Green fonksiyonunu esas alır.

Faz uzayında $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ elektron dağılım fonksiyonunun sağladığı Denklem (2.1), ϕ_p uygulanan dış potansiyel, $V(\mathbf{r})$ sistem potansiyeli ve \mathbf{B} dış manyetik alan olmak üzere,

$$\mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{a}(\mathbf{r}) \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{çarp}} \quad (2.1)$$

Boltzmann taşınım denklemdir. Burada $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{çarp}}$ çarpışma integralidir ve kuvvet

$\mathbf{F} = -e[-\nabla \phi_p - \nabla V(\mathbf{r}) + \mathbf{v} \times \mathbf{B}]$ 'dir. Sistem potansiyelinin çeşitli bileşenleri olabilir, örneğin hacim içindeki saçıcılardan dolayı bir gevşeme zamanı varsa bu, τ_0 sistem gevşeme zamanı olarak adlandırılabilir ve duvar düzensizliğinden gelen gevşeme zamanı τ , τ_0 'a herhangi bir yolla (Mathiessen's kuralı) katılabilir. Bu durumda $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ 'nin açıkça zamana bağlı olmadığı kararlı hal için, ϕ açısı \mathbf{v} hız vektörünün açısı olmak üzere, $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \phi) = f_0(v) + g(\mathbf{r}, \phi)\delta(v - v_F)$ yazıldığında $g(\mathbf{r}, \phi)$ 'nin sağladığı doğrusallaştırılmış denklem,

$$\mathbf{v} \cdot \frac{\partial [f_0(v) + g(\mathbf{r}, \phi)\delta(v - v_F)]}{\partial \mathbf{r}} - \frac{e}{m} [-\nabla \phi_p - \nabla V(\mathbf{r}) + (v_F + \delta v)\hat{n} \times B_0 \hat{z}] \cdot \frac{\partial [f_0(v) + g(\mathbf{r}, \phi)\delta(v - v_F)]}{\partial \mathbf{v}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{çarp}} \quad (2.2)$$

olur (Hedegard ve Smith 1995, Mirlin vd. 1999). Bu denklemde v_F Fermi hızı ve $\hat{n} = (\cos \phi, \sin \phi)$ 'dir. Yarı klasik üç yöntem bu denkleme dayanarak açıklanabilir.

2.1 Gevşeme Zamanı Yöntemi

Bu yöntemde Denklem (2.1)'de eşitliğin sağ tarafındaki çarpışma integrali için $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{çarp}} \simeq -\frac{(f-f_0)}{\tau_0} = -\frac{1}{\tau_0} g(\mathbf{r}, \phi) \delta(v-v_F)$ gevşeme zamanı yaklaşımı yapılır ve sistemin kendi içindeki $\mathbf{E}_1 = -\nabla V(\mathbf{r})$ yönü sabit olmayan, rastgele elektrik alanının etkisi de şimdilik dahil edilerek,

$$\left\{ \underbrace{\left(v_F \hat{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \omega_0 \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{\tau_0} \right)}_{D_0} + \underbrace{\left(\frac{V(\mathbf{r})}{P_F} \hat{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \left(\frac{\nabla V(\mathbf{r})}{P_F} \cdot \hat{\phi} + \frac{\omega_0 V(\mathbf{r})}{v_F P_F} \right) \frac{\partial}{\partial \phi} \right)}_W \right\} g(\mathbf{r}, \phi) = \underbrace{-\frac{e}{m} \mathbf{E}_0 \cdot \hat{n} + \frac{\nabla V(\mathbf{r})}{m} \cdot \hat{n}}_{\chi} \quad (2.3)$$

denklemini elde edilir. Bu denklemde P_F Fermi momentumu, $\omega_0 = eB_0/m$ ve $\hat{\phi} = \hat{n}_\perp = (-\sin \phi, \cos \phi)$ 'dir. Düzenli terim işlemcisi D_0 , pertürbe terim işlemcisi W ve sürücü terim işlemcisi χ olmak üzere,

$$D_0 = i \left\{ v_F \hat{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \omega_0 \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{\tau_0} \right\} \quad (2.4)$$

$$W = i \left\{ \frac{V(\mathbf{r})}{P_F} \hat{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \left(\frac{\nabla V(\mathbf{r})}{P_F} \cdot \hat{\phi} + \frac{\omega_0 V(\mathbf{r})}{v_F P_F} \right) \frac{\partial}{\partial \phi} \right\} = i \left\{ \delta v(\mathbf{r}) \hat{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \left(\nabla \delta v(\mathbf{r}) \cdot \hat{\phi} + \frac{\omega_0 \delta v(\mathbf{r})}{v_F} \right) \frac{\partial}{\partial \phi} \right\} \quad (2.5)$$

$$\chi = i \left\{ -\frac{e}{m} \mathbf{E}_0 \cdot \hat{n} + \frac{\nabla V(\mathbf{r})}{m} \cdot \hat{n} \right\} \quad (2.6)$$

ifadeleri yazılır. Denklem (2.3) işlemci eşitliği olarak şu şekilde yazılabilir:

$$Dg \equiv (D_0 + W)g = \chi \quad (2.7)$$

Bunun çözümü ise, D 'nin Green fonksiyonu G cinsinden,

$$g(\mathbf{r}, \phi) = \int dr' d\phi' G(\mathbf{r}, \phi; \mathbf{r}', \phi') \chi(\phi') \quad (2.8)$$

olarak verilir. Özfonksiyon seri yöntemi kullanılarak

$$G(\mathbf{r}, \phi; \mathbf{r}', \phi') = \sum_{nk} \frac{U_{nk}(\mathbf{r}, \phi) V_{nk}(\mathbf{r}', \phi')}{\lambda_{nk} - \Sigma(n, \mathbf{k})}$$

elde edilir. D_0 ve $\text{Adj } D_0$ işlemcilerine ait

özfonksiyonlar sırasıyla $U_{nk}(\mathbf{r}, \phi)$ ve $V_{nk}(\mathbf{r}, \phi)$ olmak üzere, λ_{nk} , D_0 işlemcisine ait

özdeğerdir. Özenerji terimi ise $\Sigma(n, \mathbf{k}) = \langle n\mathbf{k} | W D_0^{-1} W | n\mathbf{k} \rangle$ olarak tanımlanır.

2.2 Fermi Altın Kuralı Yöntemi

Denklem (2.1)'de sağ taraftaki çarpışma integrali için,

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{çarp}} = \sum_{\mathbf{k}'} \{ W(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f(\mathbf{k}') [1 - f(\mathbf{k})] - W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f(\mathbf{k}) [1 - f(\mathbf{k}')] \} \quad (2.9)$$

yazılır (Calecki 1986). Bu denklem $f(\mathbf{k})$ dağılım fonksiyonu cinsinden doğrusal olmayan bir ifadedir. Burada $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ bir elektronun \mathbf{k} durumundan \mathbf{k}' durumuna birim zamanda geçiş olasılığı olup, kuantum mekaniksel bir kavramla yani Fermi altın kuralıyla hesaplanır ve yöntemle yarı klasik denmesi de buradan kaynaklanır. Çok sayıdaki alt bantlardan (subband) yalnızca en düşük enerjili tek bir bant içinde elektronların hareket ettiği basit halde ve elastik saçılmalar için ifade

$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = (2\pi/\hbar) \left| \langle \mathbf{k} | V(\mathbf{r}) | \mathbf{k}' \rangle \right|_{\text{ort}}^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'})$ 'dür. Bu ifade \mathbf{k} , \mathbf{k}' indisleri cinsinden

simetrik olduğundan Denklem (2.9) şu şekilde yazılabilir:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{çarp}} &= -\sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}', \mathbf{k}) [f(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k}')] \\ &= -\frac{2\pi}{\hbar} \frac{A}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{k}' \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) \left| \langle \mathbf{k} | V(\mathbf{r}) | \mathbf{k}' \rangle \right|_{\text{ort}}^2 [f(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k}')] \end{aligned} \quad (2.10)$$

Çarpışmaların etkisinin dağılım fonksiyonunu $\tau(\mathbf{k})$ kadarlık süre içinde denge durumuna gevşetmek olduğu varsayımı yapılırsa, Denklem (2.1)'in sağ tarafının ayrıca

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{çarp}} \simeq -[f(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k})]/\tau(\mathbf{k}) \quad \text{şeklinde yazılabiliyor olması, uzaysal bağımsız}$$

$\nabla_{\mathbf{r}} f = 0$ ve yalnızca sabit bir \mathbf{E} elektrik alanı tarafından sürülen sistem halinde, bu

denklem $\frac{e\mathbf{E}}{m} \nabla_{\mathbf{v}} f = -[f(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k})]/\tau(\mathbf{k})$ şeklinde yazılma olanağı sağlar. Yaklaşık

olarak $\nabla_{\mathbf{v}} f \simeq \nabla_{\mathbf{v}} \varepsilon \frac{\partial f}{\partial \varepsilon}$ yazılabilir ve $\nabla_{\mathbf{v}} \varepsilon = m\mathbf{v}$ enerji bandı içindeki elektronların grup

hızıyla ilgili olduğundan $f(\mathbf{k})$, $f(\mathbf{k}')$ dağılım fonksiyonları için ayrıca,

$$f(\mathbf{k}) \simeq f_0(\mathbf{k}) - e\tau(\mathbf{k}) \mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_F(-) \delta(\varepsilon - \varepsilon_F) \quad (2.11)$$

$$f(\mathbf{k}') \simeq f_0(\mathbf{k}') - e\tau(\mathbf{k}') \mathbf{E} \cdot \mathbf{v}'_F(-) \delta(\varepsilon - \varepsilon_F) \quad (2.12)$$

yazılabilir (Seeger 1989). Bu iki ifadenin farkı alınarak Denklem (2.10)'da hesaplama yapılabilir ve kolaylık için sabit alan \mathbf{E} ile \mathbf{k} x yönünde alındığında, \mathbf{k} ile \mathbf{k}' arasındaki açı α olmak üzere,

$$f(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k}') = -[f(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k})](1 - \cos \alpha) \quad (2.13)$$

elde edilir. Şimdi $\frac{e\mathbf{E}}{m} \nabla_{\mathbf{v}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{çarp}}$ haline gelen Denklem (2.1)'in sol ve sağ tarafı

yukarıdaki veriler doğrultusunda yeniden şu şekilde yazılabilir:

$$-[f(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k})]/\tau(\mathbf{k}) = -[f(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k})] \frac{A}{2\pi\hbar} \int d\mathbf{k}' \left| \langle \mathbf{k} | V(\mathbf{r}) | \mathbf{k}' \rangle \right|_{ort}^2 (1 - \cos \alpha) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) \quad (2.14)$$

Sol taraftaki $1/\tau(\mathbf{k})$ terimi sağ taraftaki ilgili ifadeyle eşleştirilirse,

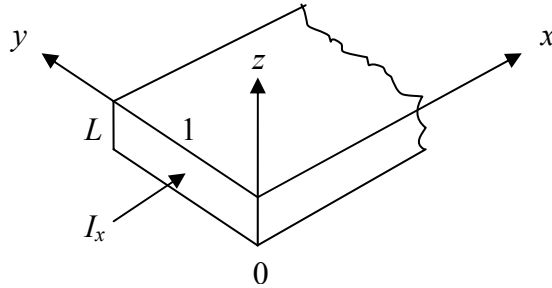
$$1/\tau(\mathbf{k}) = \frac{A}{2\pi\hbar} \int d\mathbf{k}' \left| \langle \mathbf{k} | V(\mathbf{r}) | \mathbf{k}' \rangle \right|_{ort}^2 (1 - \cos \alpha) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) \quad (2.15)$$

olarak bulunur. Böylece daha önce belirtildiği gibi $f(\mathbf{r}, v, \phi) = f_0(v) + g(\mathbf{r}, \phi) \delta(v - v_F)$ biçiminde yazılan dağılım fonksiyonunun düzeltme kısmı $g(\mathbf{r}, \phi) \delta(v - v_F) = e\tau(\mathbf{k}) E v_F \cos \phi (1/mv_F) \delta(v - v_F)$ olarak elde edilmiş olur. Burada Delta fonksiyonunun dönüşümü için

$$\delta(\varepsilon - \varepsilon_F) = \delta\left(\frac{mv^2}{2} - \frac{mv_F^2}{2}\right) = \frac{2}{m} \delta(v^2 - v_F^2) = \frac{2}{m} \delta[(v - v_F)(v + v_F)] = \frac{1}{mv_F} \delta(v - v_F)$$

işlemi uygulanmıştır. Şekil 2.1'deki modelden toplam akım hesaplanırsa,

$$I_x = -2e \int \frac{d\mathbf{P}}{h^2} v \cos \phi g(\mathbf{r}, \phi) \delta(v - v_F) \quad (2.16)$$



Şekil 2.1 L kalınlıklı filmde geçen I_x akımı

işleminin yapılması gerekir (Mirlin vd. 1999). Yukarıda bulunan $g(\mathbf{r}, \phi)$ yerine yazılarak,

$$I_x = -2e \int \frac{mv dv d\phi}{h^2} v \cos \phi (-) e \bar{\tau} E \cos \phi \delta(v - v_F) \quad (2.17)$$

$$I_x = E \frac{e^2 \bar{\tau} m v_F^2}{h^2} \int_0^{2\pi} \cos^2 \phi d\phi = 2\pi E \frac{e^2 \bar{\tau}}{m} \frac{m^2 v_F^2}{h^2} = E \frac{e^2 \bar{\tau}}{m} n \quad (2.18)$$

$$I_x = \frac{E e^2 \bar{\tau}}{m} n \quad (2.19)$$

Bu akım $L \times 1$ kesit alanından geçtiğinden akım yoğunluğu

$$J_x = \frac{n e^2 \bar{\tau}}{mL} E \quad (2.20)$$

ve iletkenlik, yüzeyel elektron yoğunluğu $n = cL$ olmak üzere,

$$\sigma = \frac{c e^2 \bar{\tau}}{m} \quad (2.21)$$

olarak elde edilir. İletkenlik ifadesinde m^{-3} birimiyle hacimsel derişimin kullanılması gereklidir. Bu kullanıldığı takdirde σ $(\Omega m)^{-1}$ birimiyle hesaplanabilir. Denklem (2.15)'den gevşeme zamanının hesaplanabilmesi için Hamiltonyendeki saçıcı potansiyelin bilinmesi gerekir. İnce film modelinde yüzeylerden biri düzgün, diğeri $h(\mathbf{r})$ ile tanımlanan girintilere sahipse ve her iki taraftan V_0 derinlikli basamak fonksiyonu şeklinde bir potansiyel kuyusundan ibaretse, basamak fonksiyonunun seri açılımı yardımıyla $V(\mathbf{r})$ pertürbasyon terimi,

$$V(\mathbf{r}) \approx -V_0 h(\mathbf{r}) \delta(z - L/2) \quad (2.22)$$

alınır. Denklem (2.15) için gerekli nicelik,

$$\left\langle \mathbf{k} | V(\mathbf{r}) | \mathbf{k}' \right\rangle_{ort}^2 = \left\langle \mathbf{k} | V(\mathbf{r}) | \mathbf{k}' \right\rangle \left\langle \mathbf{k}' | V(\mathbf{r}') | \mathbf{k} \right\rangle = \frac{1}{A^2} \iint \left\langle V(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}') \right\rangle_{ort} e^{-j(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \quad (2.23)$$

Açısal parantezli ifade şekillenim ortalaması demektir ve

$$\left\langle V(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}') \right\rangle = \frac{1}{A} \int V(\mathbf{r}) V(\boldsymbol{\rho} + \mathbf{r}) d^2\mathbf{r} = F(\boldsymbol{\rho}) \quad (2.24)$$

ile tanımlanan potansiyel-potansiyel korelasyon fonksiyonuna eşittir. Denklem (2.24)'deki integraller $\mathbf{r} - \mathbf{r}' = \boldsymbol{\rho}$, $\mathbf{r} = \mathbf{r}$ değişken dönüşümüyle yapılırsa, $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ olmak üzere $\left\langle \mathbf{k} | V(\mathbf{r}) | \mathbf{k}' \right\rangle_{ort}^2 = \frac{1}{A} F(q)$ sonucu bulunur, burada $F(q)$ k uzayındaki korelasyon fonksiyonu yani $F(\boldsymbol{\rho})$ 'nun Fourier dönüşümüdür. Sabit olan \mathbf{k} , x yönünde seçildiğinde ve Denklem (2.15)'deki $d\mathbf{k}'$ integrali yapılırsa,

$$\frac{1}{\tau(\mathbf{k})} = \frac{A}{2\pi\hbar} \int k' dk' \frac{1}{A} F(q) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) \int (1 - \cos \alpha) d\phi_{\mathbf{k}'} \quad (2.25)$$

Basit parabolik bant için $k dk' = m d\varepsilon' / \hbar^2$ alınabilir ve $k' = k$, $q = 2k \sin \frac{\alpha}{2}$ olmak üzere,

$$\frac{1}{\tau(\mathbf{k})} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_0^{2\pi} F(q) (1 - \cos \alpha) d\alpha \quad (2.26)$$

elde edilir. Daha fazla hesap yapılabilmesi ancak $F(q)$ fonksiyonunun tam şeklinin bilinmesi halinde olanaklıdır. Bu $F(q)$ için en çok kullanılan modeller Gaussyen ve üstel fonksiyonlardır. Bunlara ait uygulamalar Bulgular ve Tartışma bölümünde verilmiştir. Denklem (2.25)'den k 'ya, yani enerjiye bağlı gevşeme zamanının hesaplandığı görülür. $T = 0$ mutlak sıcaklığında yalnızca $k = k_F$ 'deki değer söz

konusudur, fakat diğer durumlarda gevşeme zamanının enerji ortalaması alınarak $\bar{\tau}(k)$ şeklinde kullanılabilir. Bu nedenle Denklem (2.21)'de $\bar{\tau}$ görülmektedir.

2.3 Çarpışma İşlemcisi Yöntemi

Mirlin ve Wölfle (1997) tarafından genel olarak zamana bağlı hal dikkate alınarak $\hbar = 1$ birimleriyle, \mathbf{k} momentum uzayında \mathbf{r} konumunda ve t anında fermiyonların $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ dağılım fonksiyonunun uygulanan $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}e^{(-i\omega t + i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})}$ dış elektrik alanı ve düzleme dik \mathbf{B}_0 sabit manyetik alanı varlığındaki $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ 'de oluşan doğrusal değişim $f_1(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ için şu kinetik denklem yazılmıştır (Mirlin ve Wölfle 1997):

$$i(\omega - \mathbf{v} \cdot \mathbf{q})f_1 + e(\mathbf{v} \times \mathbf{B}_0) \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f_1 + e\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f = C\{f_1\} \quad (2.27)$$

$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{çarp}} = C\{f\}$ olmak üzere, dış kuvvet, $\mathbf{E} \cdot \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon}$, yalnızca Fermi çemberi ($\varepsilon = \varepsilon_F$)

üzerindeki durumlara etki ettiği için f_1 sadece \mathbf{k} 'nin ϕ açısız konumuna, örneğin x eksenine göre açısına bağlıdır. Denklem (2.27)'nin her iki tarafı, biraz sonra

tanımlanacak olan τ ile çarpılırsa ve $\nabla_{\mathbf{k}} = \hat{n} \frac{\partial}{\partial k} + \hat{\phi} \frac{1}{k} \frac{\partial}{\partial \phi}$, $\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} = \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} = \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \varepsilon}$

kullanılırsa,

$$i\tau(\omega - vq \cos \phi)f_1 + \tau \frac{eB_0}{m} \frac{v}{(k/m)} \frac{\partial f_1}{\partial \phi} - eE v \tau \cos(\phi_E - \phi) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) = \tau C\{f_1\} \quad (2.28)$$

yazılabilir. Şimdi $\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) e l E g(\phi) = f_1(\phi)$ şeklinde boyutsuz yeni bir dağılım

fonksiyonu $g(\phi)$ tanımlansın. Bunun sağladığı denklem,

$$i\tau(\omega - vq \cos \phi)g(\phi) + \omega_c \tau \frac{\partial g(\phi)}{\partial \phi} - \cos(\phi_E - \phi) = \tau C\{g(\phi)\} \quad (2.29)$$

olur. Yukarıda tanımlanan τ sistem gevşeme zamanı olup, alışlageldik gevşeme zamanı yaklaşımı C çarpışma işlemcisinin tüm özdeğerleri için

$$C \chi_m(\phi) = \lambda_m \chi_m(\phi) \quad (2.30)$$

aynı değerin alındığı $\lambda_m = 1/\tau$ açıdan bağımsız (isotropic) hali temsil eder. Mirlin ve Wölfle (1998) tarafından bu, model I alınarak, yönden bağımsız safsızlık saçılmasının bununla incelenebileceği ve kısa erişimli ilişkilendirilmiş (correlated) rastgele potansiyele uygulanabilir olduğu belirtilmiştir (Mirlin ve Wölfle 1998). Aranılan $g(\phi)$

açısal momentum özfonksiyonları $\chi_m(\phi) = e^{im\phi}$ cinsinden $g(\phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} g_m e^{im\phi}$ şeklinde

seriye açılırsa g_m katsayıları $g_m = \int_0^{2\pi} g(\phi') e^{im\phi'} \frac{d\phi'}{2\pi}$ olarak verilir. Bu seri açılım

ifadesi Denklem (2.29)'da yerine koyularak, bilinmeyen g_m katsayıları için iç içe girmiş tekrarlı bağıntıları elde edilir.

$$\sum_m i\tau \left[\omega - \frac{1}{2} vq(e^{i\phi} + e^{-i\phi}) \right] g_m e^{im\phi} - i \sum_m m\omega_c \tau g_m e^{im\phi} - \frac{1}{2} (e^{i\phi_E} e^{-i\phi} + e^{-i\phi_E} e^{i\phi}) = \sum_m \lambda_m \tau g_m e^{im\phi} \quad (2.31)$$

$$\sum_m (i\omega\tau - im\omega_c\tau - \lambda_m\tau) g_m e^{im\phi} - i \sum_m \frac{vq\tau}{2} g_m e^{i(m+1)\phi} - i \sum_m \frac{vq\tau}{2} g_m e^{i(m-1)\phi} = \frac{1}{2} e^{-i\phi_E} e^{i\phi} + \frac{1}{2} e^{i\phi_E} e^{-i\phi} \quad (2.32)$$

$$(i\omega\tau - im\omega_c\tau - \lambda_m\tau) g_m - i \frac{vq\tau}{2} g_{m-1} - i \frac{vq\tau}{2} g_{m+1} = \frac{1}{2} e^{-i\phi_E} \quad (2.33)$$

$$a_m g_m - b(g_{m+1} + g_{m-1}) = S_m \quad (2.34)$$

Bu tekrarlarba bağıntılarında katsayılar; $a_m = -i\omega\tau - im\omega_c\tau + \lambda_m\tau$, $b = -i\frac{vq\tau}{2}$ ve

$S_m = -\frac{1}{2}e^{-im\phi_\varepsilon}\delta_{|m|,1}$ olarak tanımlanmıştır. Model I'de a_m katsayısı m 'nin doğrusal bir fonksiyonudur, çünkü $\lambda_m\tau = \frac{1}{\tau}\tau = 1$ 'dir. Tam çözüm Bessel fonksiyonları cinsinden elde edilen karmaşık bir ifadedir.

2.4 Schrödinger Denkleminin Green Fonksiyonu Çözüm Yöntemi

Model Hamiltonyen hacim içindeki safsızlıklardan ve ince filmin her iki yüzeyindeki kabartılardan gelen saçılmaları içerir. İnce filmin ideal hali L kalınlığında olup, yüzeyleri $z = 0$ ve $z = L$ 'dedir. Hamiltonyendeki pertürbasyon terimi yine Calecki (1986) yöntemindeki Denklem (2.22)'deki gibi $V(\mathbf{r}) \simeq -V_0h(\mathbf{r})\delta(z - L)$ şeklinde alınır ve V_0 hapisleyici (confining) potansiyel derinliğinin sonsuz limiti düşünülür. Üç boyutta sonsuz büyüklükte, yönden bağımsız rastgele bir sistem düşünülürse, şekillenim ortalaması alınmış Green fonksiyonunun λ ortalama serbest yoldan çok büyük $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ uzaklıkları için şekli genel olarak,

$$\langle G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \varepsilon_F) \rangle = G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}', k_F) = \frac{2m}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{ik_F|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{-\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{2\lambda}} \quad (2.35)$$

biçimindedir (Thouless 1974). Bunun Fourier dönüşümü de, $k_F^2 / 2m = \varepsilon_F$ olmak üzere, şu şekildedir:

$$\tilde{G}_0(k) = \frac{2m}{(k_F + i/2\lambda)^2 - k^2} \simeq \frac{2m}{k_F^2 - k^2 + ik_F/\lambda} \quad (2.36)$$

Fermi dalga vektörünün, $k_F \rightarrow k_F + i/2\lambda$ değişikliği ile $i/2\lambda$ gibi küçük bir sanal kısım kazandığı görülmektedir, bu da gerek $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}', k_F)$ 'nin $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty$ 'da sönüme

uğramasını ve gerekse $\psi(\mathbf{r})$ dalga fonksiyonunun kendisinin $r \rightarrow \infty$ 'da sifira gitmesini sağlar.

Orijinal Schrödinger denklemi pozitif potansiyel için,

$$(\nabla^2 + k_F^2)\psi = 2mV(\mathbf{r})\psi \quad (2.37)$$

biçiminde yazılabileceği için, ortalama Green fonksiyonunun sağladığı denklem,

$$(\nabla^2 + k_F^2 + ik_F / \lambda)G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}', \varepsilon_F) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.38)$$

'dir. Yani $\left(\frac{\nabla^2}{2m} + \varepsilon_F + ik_F / 2m\lambda \right) 2mG_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}', \varepsilon_F) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ 'den dolayı Denklem

(2.38)'in çözümü olan $G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}', \varepsilon_F)$ 'yi $2m$ ile çarparak, esas denklemin Green fonksiyonu elde edilebilir. Denklem (2.38)'e ait özfonksiyonlar ve özdeğerler,

$$(\nabla^2 + k_F^2 + ik_F / \lambda)U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \lambda_{\mathbf{k}}U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.39)$$

$$U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{AL}} e^{i\mathbf{k}_{||} \cdot \mathbf{r}_{||}} e^{ik_z z} \quad (2.40)$$

$$\lambda_{\mathbf{k}} = k_F^2 + i(k_F / \lambda) - (k_{||}^2 + k_z^2) \quad (2.41)$$

olup, daha sonraki ince film incelemesine uyarlamak için z bileşeni ayrı yazılmıştır. O halde Green fonksiyonu aynı zamanda,

$$G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}', \varepsilon_F) = \frac{2m}{AL} \sum_{k_{||}, k_z} \frac{e^{i\mathbf{k}_{||} \cdot (\mathbf{r}_{||} - \mathbf{r}'_{||})} e^{ik_z(z-z')}}{k_F^2 - (k_{||}^2 + k_z^2) + ik_F / \lambda} \quad (2.42)$$

Şeklinde yazılabilir. Şimdi bu son ifadede her iki tarafın Fourier dönüşümü alınırsa $G_0(\mathbf{k})$ için Denklem (2.36)'daki gibi bir sonuç elde edilebilir. İnce film haline geçilirken özfonksiyonların ve özdeğerlerin z bileşeninin değiştirilmesi gerekir ve bu durumda Denklem (2.40), (2.41) şu hale gelirler:

$$U_{kn}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i\mathbf{k}_{//} \cdot \mathbf{r}} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{d}} \sin q_n z \quad (2.43)$$

$$\lambda_{nk} = k_F^2 + i(k_F / \lambda) - (k_{//}^2 + q_n^2) \quad (2.44)$$

Burada $q_n = \frac{n\pi}{L}$, $n=1,2,\dots,\infty$, z yönündeki kuantumlu momentumdur. Denklem (2.42)'nin alacağı yeni şekil ise, ε_F iç indisini kolaylık için kaldırarak,

$$G_0(\mathbf{r}_{//} - \mathbf{r}'_{//}; z, z') = \frac{2m}{Ad} \sum_{k_{//}, n} \frac{e^{i\mathbf{k}_{//} \cdot (\mathbf{r}_{//} - \mathbf{r}'_{//})} \sin q_n z \sin q_n z'}{k_F^2 - (k_{//}^2 + q_n^2) + ik_F / \lambda} \quad (2.45)$$

Her iki tarafın $\mathbf{r}_{//} - \mathbf{r}'_{//} = \boldsymbol{\rho}$ koordinatları üzerinden integrali alındığında bir boyutlu Green fonksiyonu elde edilir ve sağdaki toplamdan $k_{//}$ düşer,

$$\int G_0(\boldsymbol{\rho}; z, z') d^2 \boldsymbol{\rho} = g_0(z, z') = \frac{2m}{d} \sum_n \frac{\sin q_n z \sin q_n z'}{k_F^2 - q_n^2 + ik_F / \lambda} \quad (2.46)$$

Aynı zamanda Denklem (2.38)'in her iki tarafının $\mathbf{r}_{//} - \mathbf{r}'_{//} = \boldsymbol{\rho}$ değişkenine göre integrali alınırsa $g_0(z, z')$ fonksiyonunun sağladığı diferansiyel denklem bulunabilir,

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r_{//}^2} + \frac{d^2}{dz^2} + k_F^2 + ik_F / \lambda \right) \int G_0(\boldsymbol{\rho}; z, z') d^2 \boldsymbol{\rho} = \delta(z - z') \int \delta(\mathbf{r}_{//} - \mathbf{r}'_{//}) d^2 \boldsymbol{\rho} \quad (2.47)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r_{//}^2} + \frac{d^2}{dz^2} + k_F^2 + ik_F / \lambda \right) g_0(z, z') = \delta(z - z') \quad (2.48)$$

Burada $g_0(z, z')$ fonksiyonu hiçbir şekilde $r_{//}$ 'ye bağlı olmadığından $\partial^2 / \partial r_{//}^2$ türevi etkisizdir ve düşer, o halde sağlanan denklem,

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + k_F^2 + ik_F / \lambda \right) g_0(z, z') = \delta(z - z') \quad (2.49)$$

'dür. Aslında buradan hareketle de $g_0(z, z')$ için Denklem (2.46) ile verilen sonuç elde edilebilirdi. Şimdi Denklem (2.46) hangi temsilde yazılmışsa aynı temsil kullanılarak pertürbe olmuş, tam Green fonksiyonunun yazıldığı varsayalım. Paydaya sadece ilave bir özenerji terimi geleceğinden,

$$g(z, z') = \frac{2m}{d} \sum_n \frac{\sin q_n z \sin q_n z'}{k_F^2 - q_n^2 + ik_F / \lambda + \Sigma_n} \quad (2.50)$$

olur. Burada özenerji Denklem (2.59)'da verilen Schrödinger denkleminin sağındaki $2mV(\mathbf{r})\psi$ sürücü terimi yardımıyla ve ψ için $(\nabla^2 + k_F^2)\psi_0 = 0$ 'daki $\psi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{AL}} e^{ik_{//} r_{//}} \sin q_n z$ sıfırıncı yaklaşımı kullanılarak şu şekilde yazılır:

$$\Sigma_n = \langle U_n(z) | 2mV(z)\psi_0(\mathbf{r})g_0(z, z')2mV(z')\psi_0(\mathbf{r}') | U_n(z') \rangle \quad (2.51)$$

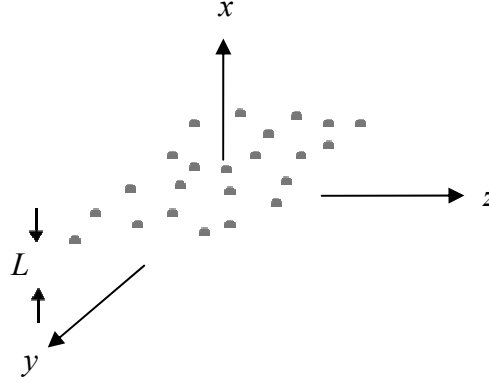
Ancak uzun ve ayrıntılı işlemlerin sonucunda ve bazı yaklaşımlar altında iletkenlik ifadesi elde edilebilir. İnce metalik filmler için geçerli olmak üzere ve n_c tane alt bantın elektronlarla dolu olduğu durum için iletkenlik ifadesi,

$$\sigma \approx \frac{e^2 d^5}{4\pi^5 \langle |f|^2 \rangle S(n_c)} \sum_{n=1}^{n_c} \frac{k_F^2 - q_n^2}{n^2} \quad (2.52)$$

ile verilir. Burada $S(n_c) = \sum_{n=1}^{n_c} n^2 = n_c(n_c + 1)(2n_c + 1)/6$ olup, $\langle |f|^2 \rangle$ ise, tüm yüzey düzensizlik şekillenimleri üzerinden ortalaması alınmış korelasyon fonksiyonunu gösterir ve basitlik için momentumdan bağımsız sabit bir değer olarak alınmıştır.

3. MATERYAL VE YÖNTEM

3.1 Koordinat Dönüşümü



Şekil 3.1 Düzensiz yüzeyleri bulunan ince film

Ortalama kalınlığı L ve mükemmel düz yüzeyleri olan ince filmin sınırları $x = \pm L/2$ denklemi ile tanımlanır. Şekil 3.1'deki gibi her iki yüzeyde (x eksenine dik) düzensizlikler mevcutsa sınırlar $x = (L/2) - \xi_1(y, z)$ ve $x = (-L/2) + \xi_2(y, z)$ olarak değişir. İnce filmin sınırlarının sonsuz potansiyel ile sınırlandırıldığı varsayılır ve düzensiz yüzeyler için bu sınırlarda $\psi[(L/2) - \xi_1(y, z)] = \psi[(-L/2) + \xi_2(y, z)] = 0$ sınır koşulları geçerlidir. Yüzey düzensizlikleri film kalınlığından oldukça küçüktür ($\xi_1, \xi_2 \ll L$) ve rastgeledir ($\langle \xi_1 \rangle = \langle \xi_2 \rangle = 0$). Genellikle farklı duvarlardaki düzensizliklerin birbirleriyle etkileşmedikleri varsayılır, $\xi_{12} = 0$. Yüzey düzensizlikleri bulunan bu sistemde,

$$X = \frac{L\{x - 1/2[\xi_2(y, z) - \xi_1(y, z)]\}}{L - [\xi_1(y, z) + \xi_2(y, z)]}, \quad Y = y, \quad Z = z \quad (3.1)$$

koordinat dönüşümleri ile her iki sınır da $X = L/2$ ve $X = -L/2$ olarak düzleştirilir ve sınır düzensizlikleri hacmin içine katılmış olur. Bu dönüşümlerin yapılmasındaki amaç, hesaplamaları kolaylaştırmaktır. Basitlik olması açısından geçirgen olmayan yansıtıcı

duvarlar ele alınır, böylece duvarlardaki sınır koşulu $\psi = 0$ olur. Bu durumda yeni koordinatlardaki sınır koşulları önemsiz hale gelir, $\psi(L/2) = \psi(-L/2) = 0$. Sonuç olarak düzensiz duvarları olan bir sistem içindeki taşınım problemi tamamen ideal, aynasal duvarlı bir sistem içindeki taşınım problemine eşdeğer olmuş olur. Artık Hamiltonyenin içinde pertürbe terim olacaktır.

3.2 Momentum Dönüşümü

İlk koordinatlardaki (x, y, z) momentum işlemcileri,

$$p_x = -i\hbar \partial / \partial x, \quad p_y = -i\hbar \partial / \partial y, \quad p_z = -i\hbar \partial / \partial z \quad (3.2)$$

ve dönüşmüş koordinatlardaki (X, Y, Z) momentum işlemcileri,

$$P_x = -i\hbar \partial / \partial X, \quad P_y = -i\hbar \partial / \partial Y, \quad P_z = -i\hbar \partial / \partial Z \quad (3.3)$$

olmak üzere,

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial X} \frac{\partial X}{\partial x} = P_x \left(\frac{L}{L - \xi} \right) = P_x \left(1 + \frac{\xi}{L} \right) \quad (3.4)$$

$$p_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial Y} \frac{\partial Y}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial X} \frac{\partial X}{\partial y} \right) = P_y + P_x \left[\frac{1}{2} (\xi'_{1y} - \xi'_{2y}) + \frac{X (\xi'_{1y} + \xi'_{2y})}{L} \right] \quad (3.5)$$

$$p_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial Z} \frac{\partial Z}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial X} \frac{\partial X}{\partial z} \right) = P_z + P_x \left[\frac{1}{2} (\xi'_{1z} - \xi'_{2z}) + X \frac{(\xi'_{1z} + \xi'_{2z})}{L} \right] \quad (3.6)$$

$$\xi = \xi_1 + \xi_2$$

ξ'_y : ξ fonksiyonunun y türevi

$\xi'_{1,2y}$: $\xi_{1,2}$ fonksiyonunun y türevi

eşitlikleri elde edilir. Dönüşüm işlemlerinde film kalınlığı L 'nin yüzey düzensizliklerinin genliğinden oldukça büyük olduğu ($\xi/L \ll 1$) kabul edilmiştir ve işlemlerde ξ/L seri açılımı yapılmıştır.

3.3 Hamiltonyen Dönüşümü

Hacim Hamiltonyeni de dönüşmüş koordinatlar cinsinden ifade edilmelidir. Homojen filmlerde, hacim Hamiltonyeni sadece momentuma bağlıdır, $\hat{H} = \hat{H}_0(\mathbf{p})$. Yeni değişkenler cinsinden hacim Hamiltonyeni ise küçük bir \hat{V} “pertürbasyon” terimi içerir.

İlk koordinatlardaki (x, y, z) Hamiltonyen işlemcisi, $\hat{H}_0(\mathbf{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ ve dönüşmüş

koordinatlardaki (X, Y, Z) Hamiltonyen işlemcisi (ξ/L seri açılımından sonra),

$\hat{H}(\mathbf{P}) = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}$ olmak üzere, $\hat{H}_0(\mathbf{p}) = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2)$ ifadesindeki momentum

değerleri dönüşmüş koordinatlar cinsinden yazılarak, dönüşmüş Hamiltonyen elde

edilir. $\langle \xi \rangle = 0$ olduğu için, “pertürbasyon” da rastgeledir, $\langle \hat{V} \rangle = 0$.

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{\xi}{mL} \hat{P}_x^2 + \frac{1}{2m} \left(X \hat{P}_x \frac{\xi'_y}{L} \hat{P}_y + X \hat{P}_x \frac{\xi'_z}{L} \hat{P}_z + \text{Hermitik eşlenikler} \right) \quad (3.7)$$

$$\hat{V} = \frac{\xi}{mL} \hat{P}_x^2 + \frac{1}{2m} \left(X \hat{P}_x \frac{\xi'_y}{L} \hat{P}_y + X \hat{P}_x \frac{\xi'_z}{L} \hat{P}_z + \text{Hermitik eşlenikler} \right) \quad (3.8)$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0(\mathbf{p}) = \hat{H}_0(\mathbf{P}) + \hat{V} \quad (3.9)$$

İşlemlerde duvarların göreceli olarak pürüzsüz ($\xi'_{1,2y}, \xi'_{1,2z} \ll 1$) olduğu kabul

edilmiştir. “Pertürbasyon” sadece \hat{V} teriminden oluşmaz,

$\hat{V}' = \frac{1}{2m} \left[\hat{P}_x (\xi'_{1y} - \xi'_{2y}) \hat{P}_y + \hat{P}_x (\xi'_{1z} - \xi'_{2z}) \hat{P}_z \right]$ ek terimini de içerir. Ancak hacimsel sönüm ihmal edildiğinde, dalga fonksiyonları basit düzlem dalgalar olduğunda, bu terimler çarpışma işlemcisinden ve sonuç olarak da taşınım denkleminde yok olurlar. İşlemlerde gereksiz karışıklığa yol açmamak için sadece \hat{V} “pertürbasyon” terimi kullanılacaktır.

Sonuç olarak, düzensiz duvarlara sahip bir sistem içindeki taşınım problemi, tamamen ideal aynasal duvarlı, $\psi(L/2) = \psi(-L/2) = 0$, ancak pertürbe hacim Hamiltonyenine sahip bir sistem içindeki taşınım problemine eşdeğer hale gelir.

3.4 Rastgele Potansiyel Enerji

İnce filmlerde, film kalınlığına (x yönünde) olan hareket $P_x = \frac{\pi \hbar j}{L}$ ($j = 1, 2, \dots$) olacak şekilde kuantumludur. Kalınlık çok küçük olduğunda, farklı j durumları arasındaki uzaklık çok büyük olabilir ki; bu durumlar arasındaki geçişler etkin bir biçimde durdurulur. Bu durumda parçacıkların film boyunca (y ve z yönünde) olan hareketi, $\hat{V}^{(j)}$ rastgele potansiyellerindeki j durumlarında bulunan parçacıkların iki boyutlu hareketine eşdeğer olur, yani parçacıkların hareketi tamamen film boyunca gerçekleşir. Bu durumda film kalınlığına olan momentum (P_x), film boyunca olan momentumdan (P_y, P_z) oldukça büyüktür. Film boyunca oluşan hareket için iki boyutlu etkin potansiyel,

$$V^{(j)}(y, z) \approx P_x^2 \frac{\xi(y, z)}{mL} \approx \left(\frac{\pi \hbar j}{L} \right)^2 \frac{\xi(y, z)}{mL} \quad (3.10)$$

olarak ifade edilir. $\xi(y, z)$ yüzey düzensizliklerinin korelasyon fonksiyonudur. $V^{(j)}(y, z)$ potansiyeli, farklı j durumları arasındaki geçişlerin ihmal edildiği durumlarda

kullanılabilir. Bu da farklı j durumları arasındaki uzaklık, film boyunca olan hareketin kinetik enerjisinden büyükse yapılabilir ($\pi\hbar/L \gg P_y, P_z$).

Dönüşmüş Hamiltonyende yer alan iki boyutlu düzensiz potansiyel enerji terimi en genel hali ile,

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = \left(\frac{\pi\hbar j}{L} \right)^2 \frac{1}{mL} \xi(\mathbf{r}) \quad (3.11)$$

olarak ifade edilir ve \mathbf{r} vektörü film boyunca olan iki boyutlu koordinatları ifade etmek üzere, bu düzensiz terim rastgele \mathbf{R}_i konumlarında bulunan $v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ potansiyellerinden oluşmaktadır. Rastgele potansiyel enerjide yer alan yüzey düzensizliklerinin fonksiyonu,

$$\xi(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N h(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \quad (3.12)$$

yüzeyde rastgele \mathbf{R}_i noktalarında konumlanmış $h(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ yükselti fonksiyonlarının toplamından oluşmaktadır (Fishman ve Calecki 1989, Palasantzas ve Barnas 1997, Meyerovich ve Ponomarev 2002).

3.5 Korelasyon Fonksiyonu

Her bir yükselti-yükselti korelasyon fonksiyonu $f(\rho)$ gerçek uzayda,

$$f(\rho) = \overline{h(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)h(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i)} = \frac{1}{A} \int h(\boldsymbol{\rho} + \mathbf{R})h(\mathbf{R})d^2\mathbf{R} \quad (3.13)$$

olmak üzere, yüzey düzensizliklerinin korelasyon fonksiyonu $F(\rho)$ rastgele yüzey düzensizlikleri ya da film kalınlığındaki dalgalanmaları karakterize etmek için kullanılır ve gerçek uzayda,

$$F(\rho) = \overline{\xi(\mathbf{r})\xi(\mathbf{r}')} = \frac{1}{A} \int \xi(\boldsymbol{\rho} + \mathbf{R})\xi(\mathbf{R})d^2\mathbf{R} \quad (3.14)$$

$$F(\rho) = \sum_i \overline{h(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)h(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i)} = Nf(\rho) \quad (3.15)$$

olarak tanımlanır. Rastgele potansiyel enerjilerin korelasyon fonksiyonu $s(\rho)$ ise, $\overline{V(\mathbf{r})V(\mathbf{r}')}$ rastgele potansiyel enerjilerin şekillenim ortalaması ile gerçek uzayda şu şekilde elde edilir:

$$\overline{V(\mathbf{r})V(\mathbf{r}')} = N \int v(\mathbf{r} - \mathbf{R})v(\mathbf{r}' - \mathbf{R}) \frac{d^2\mathbf{R}}{A} \quad (3.16)$$

Yüzeyde rastgele N kabartı varsa ve ortalama alan A ise, safsızlık yoğunluğu $n_i = N/A$ olmak üzere $\mathbf{R} = \mathbf{R}_1 + \mathbf{r}'$, $d^2\mathbf{R} = d^2\mathbf{R}_1$ değişken değiştirmeleri yapılarak,

$$\overline{V(\mathbf{r})V(\mathbf{r}')} = n_i \int v(\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \mathbf{R}_1)v(-\mathbf{R}_1)d^2\mathbf{R}_1 \quad (3.17)$$

$$\overline{V(\mathbf{r})V(\mathbf{r}')} = n_i \int v(\mathbf{r} - \mathbf{r}' + \mathbf{R}_1)v(\mathbf{R}_1)d^2\mathbf{R}_1, \quad -\mathbf{R}_1 = \mathbf{R}_1 \quad (3.18)$$

$$\overline{V(\mathbf{r})V(\mathbf{r}')} = n_i \int v(\boldsymbol{\rho} + \mathbf{R})v(\mathbf{R})d^2\mathbf{R}, \quad \mathbf{r} - \mathbf{r}' = \boldsymbol{\rho}, \mathbf{R}_1 = \mathbf{R} \quad (3.19)$$

$$s(\rho) = \overline{V(\mathbf{r})V(\mathbf{r}')} = \left(\frac{\pi\hbar j}{L}\right)^4 \frac{1}{m^2 L^2} \overline{\xi(\mathbf{r})\xi(\mathbf{r}')} = \left(\frac{\pi\hbar j}{L}\right)^4 \frac{1}{m^2 L^2} F(\rho) = \left(\frac{\pi\hbar j}{L}\right)^4 \frac{1}{m^2 L^2} Nf(\rho) \quad (3.20)$$

İntegralin sonucu $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ 'nün bir fonksiyonudur. Düzensizliklerin yönden bağımsız olduğu varsayılır ve böylece korelasyon fonksiyonları sadece $\rho = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ bağıl uzaklığına bağlıdır.

Örneğin Gaussyen dağılım gösteren $V(\mathbf{r}) = ve^{-r^2/l^2}$ rastgele potansiyel enerjisinin konum uzayındaki korelasyonu $s(\rho) = \overline{V(\mathbf{r})V(\mathbf{r}')}$ şu şekilde elde edilir:

Hesaplama basitlik olması açısından $\rho = \mathbf{r}$ yazılarak,

$$s(r) = N \frac{1}{A} \int v(\mathbf{r} + \mathbf{R})v(\mathbf{R})d^2\mathbf{R} = n_i \int ve^{-(\mathbf{r}+\mathbf{R})^2/l^2} ve^{-\mathbf{R}^2/l^2} d^2\mathbf{R} \quad (3.21)$$

$$s(r) = n_i v^2 \iint e^{-[(X+x)^2+(Y+y)^2]/l^2} e^{-(X^2+Y^2)/l^2} dXdY \quad (3.22)$$

$$s(r) = n_i v^2 \int dXe^{-[(X+x)^2+X^2]/l^2} \int dYe^{-[(Y+y)^2+Y^2]/l^2} \quad (\text{Gradshteyn vd. 1980}) \quad (3.23)$$

$$s(r) = n_i v^2 \left(\sqrt{\pi/2l} e^{-x^2/2l^2} \right) \left(\sqrt{\pi/2l} e^{-y^2/2l^2} \right) = n_i v^2 \frac{\pi l^2}{2} e^{-r^2/2l^2} \quad (3.24)$$

ve \mathbf{r} yerine tekrar ρ yazılarak,

$$s(\rho) = \overline{V(\mathbf{r})V(\mathbf{r}')} = n_i v^2 \frac{\pi l^2}{2} e^{-\rho^2/2l^2} \quad (3.25)$$

sonucu bulunur.

Yüzey düzensizliklerinin gösterdiği dağılımın şekli ile ilgili bilgiyi korelasyon fonksiyonu verir. Yüzey düzensizliklerinin korelasyon fonksiyonu $F(\rho) = \overline{\xi(\mathbf{r})\xi(\mathbf{r}')}$, taşınım katsayıları ve sistem büyüklüğüne ilişkin parametreleri içermektedir. Bu parametrelerden düzlem içi kabartı korelasyon uzunluğu l , yüzeyde bulunan kabartılar

arasındaki ortalama uzaklığın bir ölçüsüdür. ζ parametresi kristalit büyüklüğü, Δ parametresi ise kabartı yükseltmelerinin rms değeridir (rms kabartı genliği). Δ parametresinin iletkenlik üzerindeki önemi çok büyük değildir ($\sigma \sim \Delta^{-2}$). Kabartı eksponenti $0 \leq H \leq 1$ ise, yüzey düzensizliklerinin derecesinin bir ölçüsüdür. Kabartı eksponentinin değerinin azalması, kısa mesafede daha çok düzensiz yüzeyin olması anlamına gelir. Tanımlanan parametrelerden özellikle l 'nin ve H 'nin iletkenlik üzerindeki etkisi daha fazladır. H , özellikle büyük l değerleri için güçlü bir etkiye sahiptir. Bu yüzden yüzey düzensizliklerinin derecesini belirleyen H de yapılan hesaplamalarda yer almalıdır (Palasantzas ve Barnas 1997, Palasantzas 1998, Palasantzas ve De Hosson 2003). Büyük kabartı genliklerinde ve büyük korelasyon uzunluklarında, kesin iletkenlik sonuçlarından bazı sapmalar meydana gelebileceği göz önünde bulundurulmalıdır (Palasantzas ve Barnas 1997).

Yüzey düzensizliklerinin korelasyon fonksiyonu farklı yüzeyler için farklı şekillere sahiptir. Sık kullanılan modeller Gaussyen, üstel ve H parametresinin korelasyon fonksiyonudur.

3.5.1 Gaussyen korelasyon fonksiyonu

$F(\rho)$ için teorik hesaplamalarda sık kullanılan bir model Gaussyen dağılımdır ve konum uzayında,

$$F(\rho) = \overline{\xi(\mathbf{r})\xi(\mathbf{r}')^*} = Ae^{-\rho^2/l^2} \quad (3.26)$$

olarak ifade edilir. A sabit bir değer olmak üzere, e^{-r^2/l^2} ifadesinin Fourier dönüşümü alındığında,

$$\mathcal{F}(e^{-r^2/l^2}) = \int d^2\mathbf{r} e^{-r^2/l^2} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (3.27)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dy e^{-(x^2+y^2)/l^2} e^{-i(k_x x + k_y y)} \quad (3.28)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2/l^2} e^{-ik_x x} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2/l^2} e^{-ik_y y} \quad (\text{Gradshteyn vd. 1980}) \quad (3.29)$$

$$= \left(\sqrt{\pi l^2} e^{-k_x^2 l^2 / 4} \right) \left(\sqrt{\pi l^2} e^{-k_y^2 l^2 / 4} \right) = \pi l^2 e^{-k^2 l^2 / 4} \quad (3.30)$$

sonucu kullanılarak $F(k) = A\pi l^2 e^{-k^2 l^2 / 4}$ (Fishman ve Calecki 1991) değeri ve rastgele potansiyel enerjilerin k uzayındaki korelasyonu

$$\overline{V^*(k)V(k)} = \overline{|V(k)|^2} = \left(\frac{\pi \hbar j}{L} \right)^4 \frac{1}{m^2 L^2} A \pi l^2 e^{-k^2 l^2 / 4} \quad (3.31)$$

olarak elde edilir.

3.5.2 Üstel korelasyon fonksiyonu

$F(\rho)$ için sık kullanılan ve deneysel sonuçlarla iyi bir uyum gösteren diğer bir model ise, üstel dağılımdır ve konum uzayında,

$$F(\rho) = \overline{\xi(\mathbf{r})\xi(\mathbf{r}')} = A e^{-\rho/l} \quad (3.32)$$

olarak tanımlanır ve Fourier dönüşümü alındığında $F(k) = \frac{2\pi l^2 A}{(1+k^2 l^2)^{3/2}}$ olmak üzere,

rastgele potansiyel enerjilerin korelasyonu k uzayında,

$$\overline{V^*(k)V(k)} = \overline{|V(k)|^2} = \left(\frac{\pi \hbar j}{L} \right)^4 \frac{1}{m^2 L^2} \frac{2\pi l^2 A}{(1+k^2 l^2)^{3/2}} \quad (3.33)$$

olarak elde edilir.

3.5.3 H kuvvetinin korelasyon fonksiyonu

$F(k)$ için momentum uzayında kullanılan diğer bir model ise,

$$F(k) = \frac{2\pi l^2 A}{(1+k^2 l^2)^{H+1}} \quad (3.34)$$

olmak üzere, $H = 1/2$ için üstel modeli verir ve $0 \leq H \leq 1$ için $F(k)$ 'nin farklı değerleri alınabilir. Rastgele potansiyel enerjilerin korelasyonu k uzayında,

$$|\overline{V(k)}|^2 = \left[\left(\frac{\pi \hbar}{L} \right)^2 \frac{1}{mL} \right]^2 \frac{2\pi l^2 A}{(1+k^2 l^2)^{H+1}} \quad (3.35)$$

olarak ifade edilir.

Böylece $F(\rho)$ ya da Fourier dönüşümü olan $F(k)$ için farklı modeller ele alınabilir. Bu da Denklem (3.11) ile tanımlı rastgele saçıcı potansiyel için farklı modellerin incelenmesi demektir. Literatürde, farklı metodların kullanıldığı çalışmalarda benzer $F(\rho)$ 'lar ya da $F(k)$ 'lar ele alınarak, çalışmadaki sonuçlar karşılaştırılmıştır.

3.6 Genel durum için çözümler

Yarıiletken ince filmlerde elektron yoğunluğu oldukça düşük ($n \sim 10^{15} \text{ m}^{-2}$) olduğu için, dolu alt bantların sayısı da azdır, $N_s = 1$ ya da $N_s = 2$. Dolu alt bantların sayısı N_s olmak üzere, sabit taşıyıcı yoğunluğu n için L 'nin artışı dolu alt bantların sayısında da artışa neden olur. Hesaplamalarda yarıiletken film kalınlığı L , 10 nm'den küçük alınarak, sadece tek bir alt bantın dolu olduğu durum için hesaplamalar yapılmıştır ($N_s = 1$). $L = 10$ nm değerinde Fermi seviyesi ikinci alt bantın alt sınırını kesmektedir.

Sadece tek bir alt bantın elektronlar tarafından işgal edildiği $N_s = 1$ durumu elektriksel iletkenlik için yapılan analitik hesaplamalarda kolaylık getireceğinden tercih edilmiştir (Palasantzas ve Barnas 1997). $N_s = 1$ durumu, $j = 1$ 'e karşılık geldiğinden ince film kalınlığınca olan momentum sabit kabul edilebilir, $P_x = \frac{\pi\hbar}{L}$. Yarıiletken ince filmlerde elektronların sadece tek bir alt bantta olmasından dolayı tek bir Boltzmann denklemi çözülür. Birden fazla bantın dolu olması durumu, birden fazla Boltzmann denkleminin çözülmesini gerektirdiğinden, hesaplamalara da zorluk getirecektir. Bu yüzden metaller yerine, yarıiletken filmler için yapılan hesaplamalar tercih edilmiştir.

Yüzey düzensizliklerinden kaynaklanan elektron saçılmalarının elektriksel iletkenlik üzerindeki etkisinin incelendiği çalışmada hesaplamalar mutlak sıcaklıkta, $T = 0$ K, yapılmıştır. Zayıf ve düzgün bir biçimde değişim gösteren rastgele potansiyelin etkisi altında, iki boyutta etkileşimsiz olarak hareket eden elektronların yarıklasik yöntemle elektriksel iletkenliği hesaplanmıştır.

3.6.1 Boltzmann denkleminin çözümü

Hacim içindeki düzensiz potansiyel enerji, $V(\mathbf{r}) = \frac{V(\mathbf{r})}{e}$ rastgele elektrik potansiyeline,

bu da $\mathbf{E}_1 = -\nabla V(\mathbf{r})$ rastgele elektrik alanına ve Fermi hızında küçük bir değişime,

$\delta v(\mathbf{r}) = \frac{V(\mathbf{r})}{P_F} = \sum_i v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ (Mirlin vd. 1999) neden olur. Fermi hızındaki değişim

$\delta v(\mathbf{r})$, Fermi enerjisine gelen ek düzensiz potansiyel enerji terimi yoluyla hesaplanır,

$$\frac{1}{2} m [v_F + \delta v(\mathbf{r})]^2 = E_F + V(\mathbf{r}).$$

2DEG'nin sabit, oldukça zayıf dış elektrik alan $\mathbf{E}_0 = -\nabla\phi_p$ ve elektron gazının düzlemine dik olarak uygulanan sabit, dış manyetik alan $\mathbf{B} = B_0\hat{z}$ içinde olduğu varsayıldığında, f_0 Fermi-Dirac dağılım fonksiyonu, $g(\mathbf{r}, \phi)$ denge dağılımından

sapmayı gösteren fonksiyon olmak üzere $f(\mathbf{r}, v, \phi) = f_0(v) + g(\mathbf{r}, \phi)\delta(v - v_F)$ elektron dağılım fonksiyonunun sağladığı Boltzmann taşınım denklemi:

$$\mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{a}(\mathbf{r}) \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{çarp}} \quad (3.36)$$

Elektronların Fermi hızı $\mathbf{v}_F = v_F \hat{n}$ ve toplam hız $\mathbf{v} = (v_F + \delta v) \hat{n}$ 'dir. $V(\mathbf{r})$ pertürbasyonu olmadan önce, sistemin kendi doğasında bulunan saçıcılardan (hacimdeki safsızlık, yapı kusuru ve tanecik sınırı saçıcıları) kaynaklanan gevşeme zamanı τ_0 olarak tanımlanır. Lorentz kuvveti $\mathbf{F} = -e[\mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_1 + \mathbf{v} \times \mathbf{B}]$ olmak üzere, gerekli tanımlamalar Boltzmann denkleminde yerine yazılır ve denklem gevşeme zamanı yaklaşımı, $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{çarp}} = -\frac{f - f_0}{\tau_0} = -\frac{1}{\tau_0} g(\mathbf{r}, \phi) \delta(v - v_F)$, altında çözülür.

$$\mathbf{v} \cdot \frac{\partial \left[\overbrace{f_0(v) + g(\mathbf{r}, \phi) \delta(v - v_F)}^{f(\mathbf{r}, v, \phi)} \right]}{\partial \mathbf{r}} - \frac{e}{m} \left[\underbrace{-\nabla \phi_p}_{\mathbf{E}_0} \underbrace{-\nabla V(\mathbf{r})}_{\mathbf{E}_1} + \underbrace{\mathbf{v}}_{(v_F + \delta v) \hat{n}} \times \underbrace{\mathbf{B}}_{B_0 \hat{z}} \right] \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{çarp}} = -\frac{1}{\tau_0} g(\mathbf{r}, \phi) \delta(v - v_F) \quad (3.37)$$

Hıza ait silindirik koordinatlar $\hat{n} = \hat{v} = \cos \phi, \sin \phi$ ve $\hat{n}_\perp = \hat{\phi} = \hat{z} \times \hat{n} = (-\sin \phi, \cos \phi)$ olmak üzere, silindirik koordinatlarda hıza bağlı gradyen ifadesi

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} = \nabla_{\mathbf{v}} = \hat{v} \frac{\partial}{\partial v} + \hat{\phi} \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial \phi} = \hat{n} \frac{\partial}{\partial v} + \hat{n}_\perp \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

terimlerle hesaplama yapmak için $\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} = \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{v}}$, $\varepsilon = \frac{1}{2} m v^2$, $d\varepsilon = m v dv$, $\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} = m v \frac{\partial}{\partial \varepsilon}$

yer değiştirmesi yapılır ve $\frac{\partial f_0(v)}{\partial \varepsilon} = -\delta(\varepsilon - \varepsilon_F) = -(m v_F)^{-1} \delta(v - v_F)$,

$$\frac{\partial f_0(v)}{\partial \mathbf{v}} = m v [-(m v_F)^{-1} \delta(v - v_F)]$$

olmak üzere v , v_F 'e eşit olarak alınabilir. $\delta(v - v_F)$ terimi ve bu terimin \mathbf{v} 'ye göre türevi oldukça küçük olduğundan denklemdaki $\delta(v - v_F)$

terimlerinin hepsi sadeleşir. \mathbf{E}_0 dış alanı ve $g(\mathbf{r}, \phi)$ oldukça küçük değerler olduğundan çarpımları ikinci dereceden küçük bir terim çıkar ve ihmal edilir. Fermi momentumu

$$P_F = mv_F, \text{ Fermi hızındaki değişim } \delta v(\mathbf{r}) = \frac{V(\mathbf{r})}{P_F} \text{ ve sabit açısal frekans } \omega_0 = eB_0 / m$$

tanımları kullanılarak aşağıdaki denklemler elde edilir.

$$\begin{aligned} & v_F \hat{n} \cdot \frac{\partial g(\mathbf{r}, \phi)}{\partial \mathbf{r}} + \frac{V(\mathbf{r})}{P_F} \hat{n} \cdot \frac{\partial g(\mathbf{r}, \phi)}{\partial \mathbf{r}} + \frac{e}{m} \mathbf{E}_0 \cdot \hat{n} + \frac{e}{m} \mathbf{E}_0 \cdot \frac{V(\mathbf{r})}{v_F P_F} \hat{n} - \frac{\nabla V(\mathbf{r})}{m} \cdot \hat{n} - \frac{\nabla V(\mathbf{r})}{m} \cdot \frac{V(\mathbf{r})}{v_F P_F} \hat{n} + \\ & \frac{\nabla V(\mathbf{r})}{mv_F} \cdot \hat{\phi} \frac{\partial g(\mathbf{r}, \phi)}{\partial \phi} + \omega_0 \frac{\partial g(\mathbf{r}, \phi)}{\partial \phi} + \omega_0 \frac{V(\mathbf{r})}{v_F P_F} \frac{\partial g(\mathbf{r}, \phi)}{\partial \phi} = -\frac{1}{\tau_0} g(\mathbf{r}, \phi) \end{aligned} \quad (3.38)$$

$$\begin{aligned} & \left\{ \left(v_F \hat{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \omega_0 \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{\tau_0} \right) + \frac{V(\mathbf{r})}{P_F} \hat{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \left(\frac{\nabla V(\mathbf{r})}{P_F} \cdot \hat{\phi} + \frac{\omega_0 V(\mathbf{r})}{v_F P_F} \right) \frac{\partial}{\partial \phi} \right\} g(\mathbf{r}, \phi) = \\ & -\frac{e}{m} \mathbf{E}_0 \cdot \hat{n} - \frac{e}{m} \mathbf{E}_0 \cdot \frac{V(\mathbf{r})}{v_F P_F} \hat{n} + \frac{\nabla V(\mathbf{r})}{m} \cdot \hat{n} + \frac{\nabla V(\mathbf{r})}{m} \cdot \frac{V(\mathbf{r})}{v_F P_F} \hat{n} \end{aligned} \quad (3.39)$$

\mathbf{E}_0 , uygulanan oldukça küçük dış elektrik alan ve $\delta v(\mathbf{r})$, hızdaki oldukça küçük değişim olduğundan iki terimin çarpımı, ikinci dereceden küçük bir terim çıkar ve Denklem (3.39)'da eşitliğin sağ tarafındaki ikinci ve dördüncü terimlerin ihmal edilmesiyle Boltzmann taşınım denkleminin çözümü aşağıdaki gibi elde edilir.

$$\begin{aligned} & \left\{ \left(v_F \hat{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \omega_0 \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{\tau_0} \right) + \frac{V(\mathbf{r})}{P_F} \hat{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \left(\frac{\nabla V(\mathbf{r})}{mv_F} \cdot \hat{\phi} + \frac{\omega_0 V(\mathbf{r})}{v_F P_F} \right) \frac{\partial}{\partial \phi} \right\} g(\mathbf{r}, \phi) = \\ & -\frac{e}{m} \mathbf{E}_0 \cdot \hat{n} + \frac{\nabla V(\mathbf{r})}{m} \cdot \hat{n} \end{aligned} \quad (3.40)$$

3.6.2 İşlemciler

Boltzmann taşınım denkleminin çözümünden elde edilen Denklem (3.40), işlemci eşitliği olarak yazıldığında, dağılım fonksiyonunun bir parçası olan $g(\mathbf{r}, \phi)$ 'nin sağladığı denklem şu şekildedir:

$$Dg(\mathbf{r}, \phi) \equiv (D_0 + W)g(\mathbf{r}, \phi) = \chi(\mathbf{r}, \phi) \quad (3.41)$$

Burada düzenli, pertürbe ve sürücü terim kolaylık için i ön çarpanını ile birlikte:

$$D_0 = i \left\{ v_F \hat{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \omega_0 \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{\tau_0} \right\} \quad (3.42)$$

$$W = i \left\{ \frac{V(\mathbf{r})}{P_F} \hat{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \left(\frac{\nabla V(\mathbf{r})}{P_F} \cdot \hat{\phi} + \frac{\omega_0 V(\mathbf{r})}{v_F P_F} \right) \frac{\partial}{\partial \phi} \right\} = i \left\{ \delta v(\mathbf{r}) \hat{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \left(\nabla \delta v(\mathbf{r}) \cdot \hat{\phi} + \frac{\omega_0 \delta v(\mathbf{r})}{v_F} \right) \frac{\partial}{\partial \phi} \right\} \quad (3.43)$$

$$\chi = i \left\{ -\frac{e}{m} \mathbf{E}_0 \cdot \hat{n} + \frac{\nabla V(\mathbf{r})}{m} \cdot \hat{n} \right\} = i \left\{ -\frac{e}{m} \mathbf{E}_0 \cdot \hat{n} + \frac{\nabla V(\mathbf{r})}{m} \cdot \hat{n} \right\} \quad (3.44)$$

Düzenli terim D_0 , pertürbasyonun olmadığı durumdaki sistemin kendi gevşeme zamanını, Fermi hızını ve sabit açısal frekansı içermektedir. Pertürbe terim W , dönüşmüş Hamiltonyende yer alan $V(\mathbf{r})$ rastgele saçıcı potansiyel terimini içerirken, sürücü terim χ ise, uygulanan sabit dış elektrik alanı ve pertürbe terimin neden olduğu rastgele elektrik alanı içermektedir. Boltzmann taşınım denkleminin çözümü ile iletkenlik hesaplamalarının farklı aşamalarında kullanılacak olan bu terimler elde edilmiş olur.

3.6.3 Pertürbe olmamış Green fonksiyonu

D_0 işlemcisine ait özfonksiyon $U_{nk}(\mathbf{r}, \phi)$ ve $\text{Adj } D_0$ ek işlemcisine ait özfonksiyon $V_{nk}(\mathbf{r}, \phi)$ olmak üzere, düzenli işlemci D_0 aşağıdaki özdeğer denklemini sağlar:

$$D_0 U_{nk}(\mathbf{r}, \phi) = \lambda_{nk} U_{nk}(\mathbf{r}, \phi) \quad (3.45)$$

Düzenli işlemci D_0 ($D_0^{-1} = G_0$) için pertürbe olmamış Green fonksiyonu,

$$G_0(\mathbf{r}, \phi; \mathbf{r}', \phi') = \sum_{nk} \frac{U_{nk}(\mathbf{r}, \phi) V_{nk}(\mathbf{r}', \phi')}{\lambda_{nk}} \quad (3.46)$$

olup, D_0 'ın ötelemeye göre değişmezliğinden dolayı $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ ve dönmeye göre değişmezliğinden dolayı $n = n'$ 'dür. Bu nedenle G_0 da sadece $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ ile $\phi - \phi'$ 'nin bir fonksiyonudur, $G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; \phi - \phi')$. Pertürbe olmamış Green fonksiyonu özenerji hesabında kullanılacaktır.

3.6.4 Özenerji

Rastgele saçıcı potansiyeller üzerinden ortalama alınabilmesi, önemli bir fiziksel nicelik olan ve denge dağılımından sapmayı gösteren $g(\mathbf{r}, \phi)$ dağılım fonksiyonu üzerinden ortalama alınmasını gerektirmektedir. Denklem (3.41)'i sağlayan $g(\mathbf{r}, \phi)$, G Green fonksiyonu cinsinden $g(\mathbf{r}, \phi) = \int d\mathbf{r}' d\phi' G(\mathbf{r}, \phi; \mathbf{r}', \phi') \chi(\phi')$ denklemine göre hesaplanır. Bu denkleme göre ortalama g dağılım fonksiyonunun hesabı için, ortalama Green fonksiyonu $\overline{D^{-1}}$ ($D^{-1} = G$) hesaplanmalıdır. $D = D_0 + W$ denklemine göre, D^{-1} terimi seriye açıldığında,

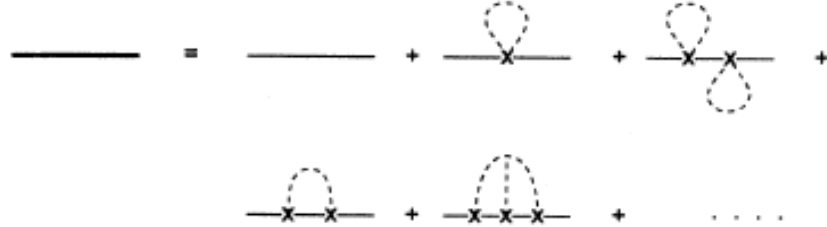
$$D^{-1} = \frac{1}{D_0 + W} = \frac{1}{D_0 \left(1 + \frac{W}{D_0}\right)} = \frac{1}{D_0} \frac{1}{1 + \frac{W}{D_0}} \quad (3.47)$$

$$D^{-1} = \frac{1}{D_0} \left(1 - \frac{W}{D_0} + \frac{W^2}{D_0^2} - \frac{W^3}{D_0^3} + \dots\right) = D_0^{-1} - D_0^{-2}W + D_0^{-3}W^2 - \dots \quad (3.48)$$

$$D^{-1} = D_0^{-1} - D_0^{-1}WD_0^{-1} + D_0^{-1}WD_0^{-1}WD_0^{-1} - \dots \quad (3.49)$$

ifadesi elde edilir. Şekil 3.2'de gösterildiği üzere terimler kuantum mekaniğindeki gibi diyagramlara uyarlanabilir. Denklem (3.49)'daki her bir terimin tek tek ortalaması alınır. Bu biçimsel olarak sıradan safsızlık saçılmasının kuantum mekaniksel

davranışına benzemektedir. Şekil 3.2’de pertürbe olmamış Green fonksiyonu G_0 ince çizgi ile gösterilmiştir. Çarpı işaretleri W ’yı ve kesikli çizgiler de safsızlık ortalamasını göstermektedir.

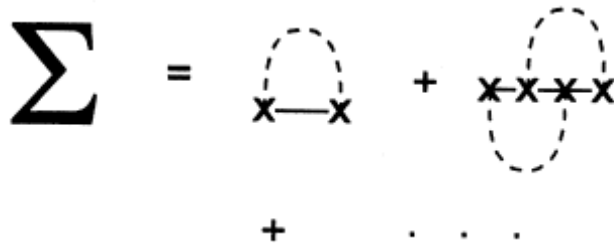


Şekil 3.2 Green fonksiyonu G için pertürbasyon serileri

Şekillenim ortalaması alındıktan sonra Denklem (3.49),

$$\overline{D^{-1}} = (D_0 - \Sigma)^{-1} \quad (3.50)$$

ile verilir. Özenerji Σ , tüm sadeleştirilemez (indirgenemez) diyagramların toplamıdır. Uygun geometrik seriler toplanarak, özenerji cinsinden ortalama Green fonksiyonu için eşitlik yazılabilir. Ortalama Green fonksiyonu bundan sonra özenerji cinsinden yazılacaktır (Hedegard ve Smith 1995).



Şekil 3.3 Sadeleştirilemeyen özenerji Σ

Hesaplamlarda Σ için serideki ilk diyagram kullanılmıştır. Bunun anlamı hesaplamalarda sadece ikinci dereceden W terimlerinin bulunacak olmasıdır (şekil 3.3' deki ilk diyagram). Daha yüksek dereceli diyagramlar da (daha fazla çarpı işareti içeren) alınabilir; hepsi sonludur ve bu diyagramların sonucu değiştirmeyeceği beklenmektedir. Örneğin şekil 3.3'deki ikinci diyagramın sonucu değiştirmedeği doğrulanmıştır (Hedegard ve Smith 1995). Özenerji ve buna bağlı olarak $\overline{D^{-1}}$,

$$\Sigma = \overline{WD_0^{-1}W} \quad (3.51)$$

$$\overline{D^{-1}} = (D_0 - \overline{WD_0^{-1}W})^{-1} \quad (3.52)$$

olarak ifade edilir. Özenerji $\overline{WD_0^{-1}W}$ hesaplanırken W 'nin Hermitik ($W^\dagger = W$) ve $D_0^{-1} = G_0$ olduğu kullanılır. D_0 düzenli işlemcisi için seçilen $U_{nk}(\mathbf{r}, \phi)$ özfonksiyonuna göre çözüme devam edilir.

$$\Sigma(n, \mathbf{k}; n', \mathbf{k}') = \left\langle nk \left| \overline{WD_0^{-1}W} \right| n'k' \right\rangle = \int d\mathbf{r} d\phi d\mathbf{r}' d\phi' V_{nk}(\mathbf{r}, \phi) \overline{WD_0^{-1}W} U_{n'k'}(\mathbf{r}', \phi') \quad (3.53)$$

$$= \int d\mathbf{r} d\phi d\mathbf{r}' d\phi' V_{nk}(\mathbf{r}, \phi) \overline{W^\dagger D_0^{-1}W} U_{n'k'}(\mathbf{r}', \phi') \quad (3.54)$$

$$= \int d\mathbf{r} d\phi d\mathbf{r}' d\phi' \overline{[WU_{nk}(\mathbf{r}, \phi)]^* G_0 [WU_{n'k'}(\mathbf{r}', \phi')]} \quad (3.55)$$

3.6.5 Pertürbe Green fonksiyonu

D_0 işlemcisine ait özdeğer, özfonksiyon ve özenerji için hesaplanan değerlerin yerine yazılması ve

$$\overline{D^{-1}} = \frac{1}{D_0 - \overline{WD_0^{-1}W}} \quad (3.56)$$

$$\langle nk | \overline{D^{-1}} | nk \rangle = \left\langle nk \left| \frac{1}{D_0 - \overline{WD_0^{-1}W}} \right| nk \right\rangle = \frac{1}{\langle nk | D_0 | nk \rangle - \langle nk | \overline{WD_0^{-1}W} | nk \rangle} \quad (3.57)$$

$\langle nk | D_0 | nk \rangle = \lambda_{nk}$ ve $\langle nk | \overline{WD_0^{-1}W} | nk \rangle = \Sigma(n, k)$ sonuçlarının kullanılması ile,

$$\langle nk | \overline{D^{-1}} | nk \rangle = \frac{1}{\lambda_{nk} - \Sigma(n, k)} \quad (3.58)$$

işlemleri sonucunda pertürbe Green fonksiyonu elde edilir:

$$G(\mathbf{r}, \phi, \mathbf{r}', \phi') = \sum_{nk} \frac{U_{nk}(\mathbf{r}, \phi) V_{nk}(\mathbf{r}', \phi')}{\lambda_{nk} - \Sigma(n, k)} \quad (3.59)$$

Şekillenim ortalaması alındıktan sonra ortalama G ($G_{ort} = \overline{D^{-1}}$) sadece $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ ile $\phi - \phi'$ 'nin bir fonksiyonudur, $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; \phi - \phi')$. Bu nedenle G köşegendir, $n = n'$ ve $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ 'dür. $\overline{D^{-1}} = \frac{1}{D_0 - \overline{WD_0^{-1}W}}$ eşitliğine göre G 'nin köşegen olması özenerjinin de köşegen

olmasını gerektirir. Bunun anlamı özenerjinin $n = n'$ ve $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ için hesaplanacak olmasıdır:

$$\Sigma(n, k) = \langle nk | \overline{WD_0^{-1}W} | nk \rangle \quad (3.60)$$

3.6.6 $g(\mathbf{r}, \phi)$ fonksiyonu

Ortalama Green fonksiyonu G 'nin hesaplanması ile önemli bir fiziksel nicelik olan $g(\mathbf{r}, \phi)$ 'nin ortalama değeri elde edilir. Bundan sonraki yazımlarda $g(\mathbf{r}, \phi)$ 'nin ortalama değeri kullanılmıştır. $Dg = \chi$, $g = D^{-1}\chi$, $g_{ort} = \overline{D^{-1}}\chi$ olmak üzere,

$$g(\mathbf{r}, \phi) = \int d\mathbf{r}' d\phi' G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; \phi - \phi') \chi(\phi') \quad (3.61)$$

olarak tanımlanır. Sürücü terimden oluşan işlemci ise,

$$\chi(\phi') = -i \frac{e}{m} \mathbf{E}_0 \cdot \hat{\mathbf{n}}' + \frac{i}{m} \nabla V(\mathbf{r}') \cdot \hat{\mathbf{n}}' \quad (3.62)$$

'dir. $\nabla V(\mathbf{r}')$ ile $\hat{\mathbf{n}}'$ arasındaki açı rastgele olduğu için, Denklem (3.62)'de eşitliğin sağ tarafındaki ikinci terimin ortalamaya katkısı küçüktür ve ihmal edilebilir. Bu terim literatürdeki çalışmalarda da hesaba katılmamıştır. $\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{\mathbf{x}}$ alınarak, $\hat{\mathbf{n}}' = \cos\phi' \hat{\mathbf{x}} + \sin\phi' \hat{\mathbf{y}}$ ve \mathbf{E}_0 ile $\hat{\mathbf{n}}'$ arasındaki açı ϕ' olmak üzere,

$$\chi(\phi') = -i \frac{e}{m} \mathbf{E}_0 \cdot \hat{\mathbf{n}}' = -i \frac{e}{m} E_0 \cos\phi' \quad (3.63)$$

sürücü terim işlemcisi, $g(\mathbf{r}, \phi)$ denkleminde yerine yazılır. Denklem (3.61)'den akım için sadece $\mathbf{k} = 0$ bileşeninin gerekli olduğu görülmektedir (Hedegard ve Smith 1995). Bu nedenle $g(\mathbf{r}, \phi)$ 'nin $\mathbf{k} = 0$ bileşeni alınarak,

$$g(\mathbf{r}, \phi) = \int d\mathbf{r}' d\phi' \sum_{nk} \frac{U_{nk}(\mathbf{r}, \phi) V_{nk}(\mathbf{r}', \phi')}{\lambda_{nk} - \Sigma(n, \mathbf{k})} \left(-i \frac{e}{m} E_0 \cos\phi' \right) \quad (3.64)$$

denklemini elde edilir.

3.6.7 Akım yoğunluğu

Akım yoğunluğu, her bir elektrondan gelen \mathbf{v} katkısının $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \phi) = f_0(\mathbf{v}) + g(\mathbf{r}, \phi) \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_F)$ dağılım fonksiyonu aracılığı ile ağırlıklandırılması ve \mathbf{v} üzerinden integral alınması ile elde edilir (Rossiter 1987).

$$j_x(\mathbf{r}) = -\frac{2em^2}{h^2} \iint v_x f(\mathbf{r}, v, \phi) d^2\mathbf{v} = -\frac{2em^2}{h^2} \iint v_x [f_0(v) + g(\mathbf{r}, \phi)\delta(v-v_F)] d^2\mathbf{v} \quad (3.65)$$

f_0 ; denge durumundaki yani sistem üzerinde herhangi bir dış kuvvetin olmadığı durumdaki dağılım fonksiyonudur. Elektronlar dengede ise

$$-\frac{2em^2}{h^2} \iint v_x f_0 d^2\mathbf{v} = 0 \quad (3.66)$$

olur yani akım geçişi yoktur. Bu durumda akım yoğunluğu,

$$j_x(\mathbf{r}) = -\frac{2em^2}{h^2} \iint v_x g(\mathbf{r}, \phi)\delta(v-v_F) d^2\mathbf{v} \quad (3.67)$$

olarak ifade edilir. $d^2\mathbf{v} = vdv d\phi$ olmak üzere, $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-a)dx = f(a)$ tanımından yararlanılarak, v 'ye bağlı integral, $\delta(v-v_F)$ teriminden dolayı $v=v_F$ olmasını gerektirir ve

$$j_x(\mathbf{r}) = -\frac{2em^2}{h^2} \int_0^{2\pi} v_F^2 \cos\phi g(\mathbf{r}, \phi) d\phi \quad (3.68)$$

olarak yazılan denklemde, hesaplanan $g(\mathbf{r}, \phi)$ 'nin yerine yazılıp, ϕ açısal integralinin çözümü ile iki boyutta x yönündeki akım yoğunluğu elde edilir.

3.6.8 Elektriksel iletkenlik ve özdirenç katsayıları

\mathbf{J} ve \mathbf{E} arasındaki ilişki Ohm yasası olarak,

$$\mathbf{J} = \sigma \cdot \mathbf{E} \quad (3.69)$$

ve matris denklemleri olarak,

$$\begin{pmatrix} j_x \\ j_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{xx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} \quad (3.70)$$

şeklinde ifade edilir. Elektrik alanın sadece x yönündeki bileşeni için $j_x = \sigma_{xx}E_x + \sigma_{xy}E_y$ denklemini $j_x = \sigma_{xx}E_x$ denklemine dönüştür. Boyuna iletkenlik katsayısı ise,

$$\sigma_{xx} = \frac{j_x(\mathbf{r})}{E_o} \quad (3.71)$$

olarak elde edilir. Bu ifade x yönünde bir \mathbf{E} uygulandığında aynı yönde oluşan akım yoğunluğunu ifade eder. σ_{xy} ise Hall olayı ile ilgili iletkenlik katsayısıdır. Fermi hızının karesi $v_F^2 = \hbar^2 k_F^2 / m^2 = \hbar^2 (2\pi n) / m^2$ 'dir. $L \times 1$ kesit alanından geçen akım yoğunluğunun elde edilebilmesi için hacimsel elektron yoğunluğu $c = n/L$ ifadesi kullanılır. Bu ifade yüzeyel elektron yoğunluğunun film kalınlığına bölünmesi ile elde edilir. Bu tanımlar Denklem (3.71)'de yerine yazılarak, boyuna iletkenlik ifadesi $(\Omega m)^{-1}$ birimi ile elde edilir (Meyerovich ve Ponomarev 2002). σ_{xx} ifadesi \mathbf{E} elektrik alanının x bileşeninin $g(\mathbf{r}, \phi)$ ifadesinde, v hızının x bileşeninin ise $j(\mathbf{r})$ ifadesinde yerine yazılması ile elde edilmiştir. İletkenlik katsayısının diğer bileşenleri de benzer yolla σ_{ij} ifadesi için \mathbf{E} elektrik alanının \hat{i} bileşeninin $g(\mathbf{r}, \phi)$ ifadesinde, v hızının \hat{j} bileşeninin ise $j(\mathbf{r})$ ifadesinde yerine yazılmasıyla elde edilir. İletkenlik katsayısına ait matrisde tüm bileşenlerin yerine yazılıp, matrisin tersinin alınması ile gerekli öz direnç ifadesi elde edilir:

$$(\sigma) = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{xx} \end{pmatrix} \quad (3.72)$$

$$(\rho) = (\sigma)^{-1} \quad (3.73)$$

3.7 B = 0 İçin Çözümler

3.7.1 Boltzmann denkleminin çözümü

$\mathbf{B} = 0$ ve sonlu bir τ_0 durumu için Lorentz kuvveti $\mathbf{F} = m\mathbf{a}(\mathbf{r}) = -e[\mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_1]$,

$\mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{a}(\mathbf{r}) \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{çarp}}$ Boltzmann taşınım denkleminde yerine yazılıp gevşeme

zamanı yaklaşımı altında çözüldüğünde elde edilen denklem şu şekildedir:

$$\left[\left(v_F \hat{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \frac{1}{\tau_0} \right) + \frac{V(\mathbf{r})}{P_F} \hat{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\nabla V(\mathbf{r})}{P_F} \cdot \hat{\phi} \frac{\partial}{\partial \phi} \right] g(\mathbf{r}, \phi) = -\frac{e}{m} \mathbf{E}_0 \cdot \hat{n} + \frac{\nabla V(\mathbf{r})}{m} \cdot \hat{n} \quad (3.74)$$

3.7.2 İşlemciler

Boltzmann taşınım denkleminin çözümünden elde edilen düzenli, pertürbe ve sürücü terim işlemcileri:

$$D_0 = i \left\{ v_F \hat{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \frac{1}{\tau_0} \right\} \quad (3.75)$$

$$W = i \left\{ \frac{V(\mathbf{r})}{P_F} \hat{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\nabla V(\mathbf{r})}{P_F} \cdot \hat{\phi} \frac{\partial}{\partial \phi} \right\} = \left\{ \delta v(\mathbf{r}) \hat{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \nabla \delta v(\mathbf{r}) \cdot \hat{\phi} \frac{\partial}{\partial \phi} \right\} \quad (\text{Mirlin vd. 1999}) \quad (3.76)$$

$$\chi = i \left\{ -\frac{e}{m} \mathbf{E}_0 \cdot \hat{n} \right\} \quad (3.77)$$

3.7.3 Pertürbe olmamış Green fonksiyonu

Düzenli işlemci D_0 aşağıdaki özfonksiyon ve özdeğerlere sahiptir:

$$D_0 U_{nk}(\mathbf{r}, \phi) = \lambda_{nk} U_{nk}(\mathbf{r}, \phi) \quad (3.78)$$

$$U_{nk}(\mathbf{r}, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi A}} e^{i\{\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-n\phi\}} \quad (3.79)$$

$$\lambda_{\mathbf{k}} = -v_F \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{k} + \frac{i}{\tau_0} \quad (3.80)$$

D_0 işlemcisine ait özfonksiyon $U_{nk}(\mathbf{r}, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi A}} e^{i\{\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-n\phi\}}$ ve

$\text{Adj } D_0 = i \left\{ -v_F \hat{\mathbf{n}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \frac{1}{\tau_0} \right\}$ (Dennery ve Krzywicki 1967) ek işlemcisine ait

özfonksiyon $V_{nk}(\mathbf{r}, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi A}} e^{-i\{\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-n\phi\}}$ olmak üzere, $\lambda_{\mathbf{k}} = -v_F \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{k} + (i/\tau_0)$ özdeğeri

ve $\sum_n e^{in(\phi' - \phi)} = 2\pi \delta(\phi' - \phi)$ tanımı kullanılarak, pertürbe olmamış Green fonksiyonu

elde edilir:

$$G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; \phi - \phi') = \sum_{n, \mathbf{k}} \frac{U_{nk}(\mathbf{r}, \phi) V_{nk}(\mathbf{r}', \phi')}{-v_F \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{k} + (i/\tau_0)} = \frac{\delta(\phi' - \phi)}{A} \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{-v_F \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{k} + (i/\tau_0)} \quad (3.81)$$

3.7.4 Özenerji

Özenerji n ve \mathbf{k} 'ya göre köşegendir ($n = n', \mathbf{k} = \mathbf{k}'$) ve $\mathbf{B} = 0$ için özenerji Σ^0 olarak tanımlanır. Denklem (3.76)'daki W ve Denklem (3.79)'daki $U_{nk}(\mathbf{r}, \phi)$ değerlerinin yerine yazılmasıyla özenerji için aşağıdaki denklemler elde edilir:

$$\Sigma^0(n, \mathbf{k}) = \left\langle n\mathbf{k} \left| \overline{WD_0^{-1}W} \right| n\mathbf{k} \right\rangle = \int d\mathbf{r} d\phi d\mathbf{r}' d\phi' \overline{[WU_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}, \phi)]^*} G_0 [WU_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}', \phi')] \quad (3.82)$$

$$= \frac{1}{2\pi A^2} \int d\mathbf{r} d\phi d\mathbf{r}' d\phi' \left\{ i \left[\sum_i \overline{v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)} \hat{n} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \sum_i \nabla_{\mathbf{r}} \overline{v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)} \cdot \hat{n}_{\perp} \frac{\partial}{\partial \phi} \right] e^{i\{\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - n\phi\}} \right\}^* \delta(\phi' - \phi) \sum_{\mathbf{k}_1} \frac{e^{i\mathbf{k}_1(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}}{-v_F \hat{n} \cdot \mathbf{k}_1 + (i/\tau_0)} \left\{ i \left[\sum_j \overline{v(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_j)} \hat{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} + \sum_j \nabla_{\mathbf{r}'} \overline{v(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_j)} \cdot \hat{n}'_{\perp} \frac{\partial}{\partial \phi'} \right] e^{i\{\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}' - n\phi'\}} \right\} \quad (3.83)$$

Şekillenim ortalamasından $i = j$ alınır. ϕ' açısıl integrali, $\delta(\phi' - \phi)$ teriminden dolayı $\phi = \phi'$, $\hat{n} = \hat{n}'$ ve $\hat{n}_{\perp} = \hat{n}'_{\perp}$ olmasını gerektirir. Akım için $\mathbf{k} = 0$ alınır ve $\Sigma^0(n, \mathbf{0})$ yerine $\Sigma^0(n)$ yazımı kullanılarak,

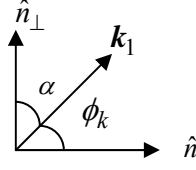
$$\Sigma^0(n) = \frac{n^2}{A^2} \sum_{i, \mathbf{k}_1} \frac{1}{-v_F \hat{n} \cdot \mathbf{k}_1 + (i/\tau_0)} \int d\mathbf{r} \nabla_{\mathbf{r}} \overline{v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)} \cdot \hat{n}_{\perp} e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}} \int d\mathbf{r}' \nabla_{\mathbf{r}'} \overline{v(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i)} \cdot \hat{n}_{\perp} e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}'} \quad (3.84)$$

elde edilen denklemde Fourier dönüşümlerinin de kullanılmasıyla,

$$\Sigma^0(n) = \frac{n^2}{A^2} \sum_{i, \mathbf{k}_1} \frac{1}{-v_F \hat{n} \cdot \mathbf{k}_1 + (i/\tau_0)} \overline{[i\mathbf{k}_1 \cdot \hat{n}_{\perp} v(\mathbf{k}_1)]} [i\mathbf{k}_1 \cdot \hat{n}_{\perp} v(\mathbf{k}_1)]^* \quad (3.85)$$

olarak bulunur. $\overline{v^*(\mathbf{k}_1)v(\mathbf{k}_1)} = \overline{|v(\mathbf{k}_1)|^2}$, $\sum_i = N = An_i$, $\sum_{\mathbf{k}_1} = \frac{A}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} k_1 dk_1 \int_0^{2\pi} d\phi_k$

tanımları ve şekil 3.4'deki \mathbf{k}_1 vektörünün yönelimi kullanılarak, gerekli ifadeler yerine yazılır:



Şekil 3.4 k_1 vektörünün yönelimi

$$\Sigma^0(n) = \frac{n^2 n_i \tau_0}{(2\pi)^2} \int_0^\infty |v(k_l)|^2 k_l^3 dk_l \int_0^{2\pi} d\phi_k \left[\frac{-i \sin^2 \phi_k}{v_F^2 \tau_0^2 k_l^2 \cos^2 \phi_k + 1} - v_F \tau k_l \frac{\sin^2 \phi_k \cos \phi_k}{v_F^2 \tau_0^2 k_l^2 \cos^2 \phi_k + 1} \right] \quad (3.86)$$

$$v_F^2 \tau_0^2 k_l^2 \cos^2 \phi_k + 1 = 1 + v_F^2 \tau_0^2 k_l^2 - v_F^2 \tau_0^2 k_l^2 \sin^2 \phi_k = (1 + v_F^2 \tau_0^2 k_l^2) \left(1 - \frac{v_F^2 \tau_0^2 k_l^2 \sin^2 \phi_k}{1 + v_F^2 \tau_0^2 k_l^2} \right) \quad (3.87)$$

$$a^2 = \frac{v_F^2 \tau_0^2 k_l^2}{1 + v_F^2 \tau_0^2 k_l^2} < 1 \quad (3.88)$$

$$\Sigma^0(n) = \frac{n^2 n_i \tau_0}{(2\pi)^2} \int_0^\infty |v(k_l)|^2 k_l^3 dk_l \left(\frac{-4i}{1 + v_F^2 \tau_0^2 k_l^2} \underbrace{\int_0^{\pi/2} \frac{\sin^2 \phi_k d\phi_k}{1 - a^2 \sin^2 \phi_k}}_{I(a)} - \frac{a^2}{v_F \tau_0 k_l} \int_0^{2\pi} \frac{\sin^2 \phi_k \cos \phi_k d\phi_k}{1 - a^2 \sin^2 \phi_k} \right) \quad (3.89)$$

Denklem (3.89)'da parantez içindeki ikinci integralin değeri sıfırdır.

$$I(a) = \frac{1}{2} \int_0^{\pi/2} \frac{d\phi_k}{1 - a^2 \sin^2 \phi_k} - \frac{1}{2} \int_0^{\pi/2} \frac{\cos 2\phi_k d\phi_k}{1 - a^2 \sin^2 \phi_k} \quad (3.90)$$

$$I(a) = \frac{1}{2} \frac{\pi}{2\sqrt{1-a^2}} - \frac{1}{2} \frac{(-\pi)}{2\sqrt{1-a^2}} \left(\frac{1 - \sqrt{1-a^2}}{a} \right)^2 = \frac{\pi}{2\sqrt{1-a^2}} \frac{1 - \sqrt{1-a^2}}{a^2} \quad (\text{Gradshteyn vd. 1980}) \quad (3.91)$$

$$\Sigma^0(n) = \frac{n^2 n_i \tau_0}{(2\pi)^2} \int_0^\infty |v(k_l)|^2 k_l^3 dk_l \left(-i \frac{4}{1 + v_F^2 \tau_0^2 k_l^2} I(a) \right) \quad (3.92)$$

$I(a)$ değerinin yerine yazılması ile $\mathbf{B} = 0$ için özenerji,

$$\Sigma^0(n) = -i \frac{n^2 n_i \tau_0}{2\pi} \int_0^\infty |v(k_l)|^2 k_l^3 dk_l \left(\frac{\sqrt{1 + v_F^2 \tau_0^2 k_l^2} - 1}{v_F^2 \tau_0^2 k_l^2} \right) \quad (3.93)$$

olarak elde edilir. Boyut analizi yapıldığında birimi $(\text{sn})^{-1}$ olarak bulunur.

3.7.5 Pertürbe Green fonksiyonu

Denklem (3.59)'da $U_{nk}(\mathbf{r}, \phi)$ ve $V_{nk}(\mathbf{r}, \phi)$ fonksiyonlarının yerine yazılması ile pertürbe Green fonksiyonu,

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; \phi - \phi') = \frac{1}{2\pi A} \sum_{n, \mathbf{k}} \frac{e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - n\phi)} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}' - n\phi')}}{-v_F \hat{n} \cdot \mathbf{k} + (i/\tau_0) - \Sigma^0(n)} \quad (3.94)$$

olarak yazılır.

3.7.6 $g(\mathbf{r}, \phi)$ fonksiyonu

Denklem (3.64)'de $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; \phi - \phi')$ için hesaplanan değerinin yerine yazılması ve \mathbf{E}_0 'ın x yönündeki bileşeninin seçilmesi ile,

$$g(\mathbf{r}, \phi) = -\frac{ieE_0}{2\pi mA} \int dr' d\phi' \left[\sum_{n, \mathbf{k}} \frac{e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - n\phi)} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}' - n\phi')}}{-v_F \hat{n} \cdot \mathbf{k} + (i/\tau_0) - \Sigma^0(n)} \right] \cos \phi' \quad (3.95)$$

fonksiyonu elde edilir. İletkenlik için $\mathbf{k} = 0$ alınır ve $\int dr' = A$ değeri yerine yazılarak aşağıdaki denklemler elde edilir:

$$g(\mathbf{r}, \phi) = -\frac{ieE_o}{2\pi mA} \int dr' d\phi' \left[\sum_n \frac{e^{-in\phi} e^{in\phi'}}{(i/\tau_0) - \Sigma^0(n)} \right] \cos \phi' \quad (3.96)$$

$$g(\mathbf{r}, \phi) = -\frac{ieE_o}{2\pi m} \sum_n \frac{e^{-in\phi}}{(i/\tau_0) - \Sigma^0(n)} \int_0^{2\pi} d\phi' e^{in\phi'} \cos \phi' \quad (3.97)$$

Açısal integral sadece $n = \pm 1$ için π sonucunu vereceğinden, \sum_n toplamının sadece $n = \pm 1$ bileşeninden katkı gelir ve

$$g(\mathbf{r}, \phi) = -\frac{ieE_o}{2m} \left[\frac{e^{-i\phi}}{(i/\tau_0) - \Sigma^0(1)} + \frac{e^{i\phi}}{(i/\tau_0) - \Sigma^0(-1)} \right] \quad (3.98)$$

olarak bulunur. Denklem (3.98)'den özenerjinin sadece $n = \pm 1$ değeri için hesaplanması gerektiği bulunur.

3.7.7 Akım yoğunluğu

Denklem (3.95), $j_x(\mathbf{r}) = -\frac{2em^2}{h^2} \int_0^{2\pi} v_F^2 \cos\phi g(\mathbf{r}, \phi) d\phi$ denklemine yerine yazılarak,

$$j_x(\mathbf{r}) = i \frac{\pi e^2 m E_0 v_F^2}{h^2} \left[\frac{1}{(i/\tau_0) - \Sigma^0(1)} + \frac{1}{(i/\tau_0) - \Sigma^0(-1)} \right] \quad (3.99)$$

ifadesi bulunur. $\mathbf{B} = 0$ durumu için hesaplanan özenerjinin sadece imajiner bileşeni olduğundan (Denklem 3.93) ve bu bileşenler için $\text{Im} \Sigma^0(1) = \text{Im} \Sigma^0(-1)$ özelliği geçerli olduğundan x yönünde iki boyutta akım yoğunluğu,

$$j_x(\mathbf{r}) = \frac{2\pi e^2 m E_0 v_F^2}{h^2} \left[\frac{1}{(1/\tau_0) - \text{Im} \Sigma^0(1)} \right] \quad (3.100)$$

olarak elde edilir.

3.7.8 Elektriksel iletkenlik ve özdirenç katsayıları

İletkenlik katsayıları ve buna bağlı olarak hesaplanan boyuna özdirenç ifadesi:

$$\sigma_{xx} = \frac{2\pi e^2 m v_F^2}{h^2} \left[\frac{1}{(1/\tau_0) - \text{Im} \Sigma^0(1)} \right] \quad (3.101)$$

$$\sigma_{yy} = \frac{2\pi e^2 m v_F^2}{h^2} \left[\frac{1}{(1/\tau_0) - \text{Im} \Sigma^0(1)} \right] \quad (3.102)$$

$$\sigma_{xy} = 0 \quad (3.103)$$

$$(\sigma) = \begin{pmatrix} \frac{2\pi e^2 m v_F^2}{h^2} \left[\frac{1}{(1/\tau_0) - \text{Im} \Sigma^0(1)} \right] & 0 \\ 0 & \frac{2\pi e^2 m v_F^2}{h^2} \left[\frac{1}{(1/\tau_0) - \text{Im} \Sigma^0(1)} \right] \end{pmatrix}_{2 \times 2} \quad (3.104)$$

$$\text{Adj} \sigma = \begin{pmatrix} \frac{2\pi e^2 m v_F^2}{h^2} \left[\frac{1}{(1/\tau_0) - \text{Im} \Sigma^0(1)} \right] & 0 \\ -\frac{2\pi e^2 m v_F^2}{h^2} \left[\frac{1}{(1/\tau_0) - \text{Im} \Sigma^0(1)} \right] & \frac{2\pi e^2 m v_F^2}{h^2} \left[\frac{1}{(1/\tau_0) - \text{Im} \Sigma^0(1)} \right] \end{pmatrix}_{2 \times 2} \quad (3.105)$$

$$\det \sigma = \left\{ \frac{2\pi e^2 m v_F^2}{h^2} \left[\frac{1}{(1/\tau_0) - \text{Im} \Sigma^0(1)} \right] \right\}^2 \quad (3.106)$$

$$(\rho) = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2\pi e^2 m v_F^2} [(1/\tau_0) - \text{Im} \Sigma^0(1)] & 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2\pi e^2 m v_F^2} [(1/\tau_0) - \text{Im} \Sigma^0(1)] & \frac{\hbar^2}{2\pi e^2 m v_F^2} [(1/\tau_0) - \text{Im} \Sigma^0(1)] \end{pmatrix}_{2 \times 2} \quad (3.107)$$

$$\rho_{xx} = \frac{\hbar^2}{2\pi e^2 m v_F^2} [(1/\tau_0) - \text{Im} \Sigma^0(1)] \quad (3.108)$$

$v_F^2 = \frac{\hbar^2 (2\pi n)}{m^2}$ tanımının yerine yazılması ile boyuna özdirenç ifadesi

$$\rho_{xx} = \frac{m}{ne^2} [(1/\tau_0) - \text{Im} \Sigma^0(1)] \quad (3.109)$$

olarak elde edilir. Denklemden yüzeysel elektron yoğunluğu n yerine hacimsel elektron yoğunluğu c ifadesinin kullanılması ile sonuç Ωm biriminde elde edilir.

3.8 $B = 0$ ve $\tau_0 = \infty$ İçin Çözümler

3.8.1 Özenerji

$B = 0$ durumu için yapılan hesaplamalarda yüzey düzensizliklerinden kaynaklanan saçıcı etkiler olmadan önceki sistemin doğal gevşeme zamanı $\tau_0 = \infty$ olduğunda, yani sistem başlangıçta mükemmel iletken olarak kabul edildiğinde, $1/\tau_0$ terimi D_0 işlemcisinde yer almaz,

$$D_0 = i \left\{ v_F \hat{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right\} \quad (3.110)$$

ve bu işlemciye ait özdeğer,

$$\lambda_k = -v_F \hat{n} \cdot \mathbf{k}_l + i0 \quad (3.111)$$

olarak bulunur. $\mathbf{B} = 0$ ve $\tau_0 = \infty$ durumu için özenerji Σ_∞^0 olmak üzere, Denklem (3.85)'den itibaren $\tau_0 = \infty$ için çözüme devam edildiğinde,

$$\Sigma_\infty^0(n) = \frac{n^2 N}{A^2} \sum_{\mathbf{k}_l} \frac{(\mathbf{k}_l \cdot \hat{n}_\perp)^2 \overline{|v(k_l)|^2}}{-v_F \hat{n} \cdot \mathbf{k}_l + i0} \quad (3.112)$$

ifadesi elde edilir. Şekil 3.4'den $\mathbf{k}_l \cdot \hat{n}_\perp = k_l \cos \alpha = k_l \sin \phi_k$ ve $\hat{n} \cdot \mathbf{k}_l = k_l \cos \phi_k$ eşitlikleri yerine yazılarak,

$$\Sigma_\infty^0(n) = \frac{n^2 N}{(2\pi)^2 A} \int_0^\infty k_l dk_l \int_0^{2\pi} d\phi_k \frac{(k_l \sin \phi_k)^2 \overline{|v(k_l)|^2}}{-v_F (k_l \cos \phi_k) + i0} \quad (3.113)$$

$$= \frac{n^2 n_i}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \overline{|v(k_l)|^2} k_l dk_l \int_0^{2\pi} d\phi_k \frac{(k_l \sin \phi_k)^2}{-v_F k_l \cos \phi_k + i0} \quad (3.114)$$

denklemleri elde edilir.

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x + i\varepsilon} = \frac{1}{x} - i\pi \delta(x) \quad (\text{Jones 1966}) \quad (3.115)$$

tanımından yararlanılarak,

$$\int_0^{2\pi} \frac{k_l^2 \sin^2 \phi_k}{-v_F k_l \cos \phi_k + i0} d\phi_k = \int_0^{2\pi} \frac{k_l^2 \sin^2 \phi_k}{-v_F k_l \cos \phi_k} d\phi_k - i\pi \int_0^{2\pi} k_l^2 \sin^2 \phi_k \delta(v_F k_l \cos \phi_k) d\phi_k \quad (3.116)$$

olmak üzere,

$$\Sigma_{\infty}^0(n) = \frac{n^2 n_i}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} k_I^3 \overline{|v(k_I)|^2} dk_I \left[\int_0^{2\pi} \frac{\sin^2 \phi_k}{-v_F k_I \cos \phi_k} d\phi_k - i\pi \int_0^{2\pi} \sin^2 \phi_k \delta(v_F k_I \cos \phi_k) d\phi_k \right] \quad (3.117)$$

yazılabilir. Denklem (3.117)'deki eşitliğin sağ tarafındaki ikinci integralin çözümü, $\cos \phi_k = 0$ eşitliğinden $\phi_k = \pi/2$ ve $3\pi/2$ olmasını gerektirir:

$$\Sigma_{\infty}^0(n) = \frac{n^2 n_i}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} k_I^3 \overline{|v(k_I)|^2} dk_I \left[\int_0^{2\pi} \frac{\sin^2 \phi_k}{-v_F k_I \cos \phi_k} d\phi_k - \frac{i\pi}{v_F k_I} \left(\int_0^{2\pi} \sin^2 \phi_k \delta(\phi_k - \frac{\pi}{2}) d\phi_k + \int_0^{2\pi} \sin^2 \phi_k \delta(\phi_k - \frac{3\pi}{2}) d\phi_k \right) \right] \quad (3.118)$$

$$= \frac{n^2 n_i}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} k_I^3 \overline{|v(k_I)|^2} dk_I \left[\int_0^{2\pi} \frac{\sin^2 \phi_k}{-v_F k_I \cos \phi_k} d\phi_k - \frac{2i\pi}{v_F k_I} \right] \quad (3.119)$$

Denklem (3.119)'daki açısal integralin değeri sıfır olacağından $\mathbf{B} = 0$ ve $\tau_0 = \infty$ durumu için özenerji değeri,

$$\Sigma_{\infty}^0(n) = -i \frac{n^2 n_i}{2\pi v_F} \int_0^{\infty} k_I^2 \overline{|v(k_I)|^2} dk_I \quad (3.120)$$

olarak elde edilir. Bu sonuç Mirlin vd. (1999) çalışmasındaki farklı bir yöntemle elde edilen $1/\tau$ denklemi ile aynıdır.

3.8.2 Elektriksel iletkenlik ve özdirenç katsayıları

İletkenlik katsayıları ve buna bağlı olarak hesaplanan boyuna özdirenç ifadesi Denklem (3.104) ve Denklem (3.107) yardımıyla $\tau_0 = \infty$ için aşağıdaki gibi elde edilir:

$$(\sigma) = \begin{pmatrix} \frac{2\pi e^2 m v_F^2}{h^2} \begin{bmatrix} 1 \\ -\text{Im} \Sigma_\infty^0(1) \end{bmatrix} & 0 \\ 0 & \frac{2\pi e^2 m v_F^2}{h^2} \begin{bmatrix} 1 \\ -\text{Im} \Sigma_\infty^0(1) \end{bmatrix} \end{pmatrix}_{2 \times 2} \quad (3.121)$$

$$(\rho) = \begin{pmatrix} \frac{h^2}{2\pi e^2 m v_F^2} \begin{bmatrix} -\text{Im} \Sigma_\infty^0(1) \end{bmatrix} & 0 \\ -\frac{h^2}{2\pi e^2 m v_F^2} \begin{bmatrix} -\text{Im} \Sigma_\infty^0(1) \end{bmatrix} & \frac{h^2}{2\pi e^2 m v_F^2} \begin{bmatrix} -\text{Im} \Sigma_\infty^0(1) \end{bmatrix} \end{pmatrix}_{2 \times 2} \quad (3.122)$$

$$\rho_{xx} = \frac{h^2}{2\pi e^2 m v_F^2} \begin{bmatrix} -\text{Im} \Sigma_\infty^0(1) \end{bmatrix} = \frac{m}{n e^2} \begin{bmatrix} -\text{Im} \Sigma_\infty^0(1) \end{bmatrix} \quad (3.123)$$

3.9 $B \neq 0$ için Özel Bir Özfonksiyon Değerinde Çözümler

Bu bölümde düzenli işlemci D_0 için Hedegard ve Smith'e (1995) ait çalışmadaki özfonksiyon değeri kullanılarak, Mirlin vd. (1999) ve Hedegard ve Smith (1995) sonuçlarıyla karşılaştırma yapılabilmesi amacıyla, yapılan çözümler anlatılmıştır. Hesaplamalarda genel durum için yapılan çözümlerden yararlanılmıştır.

3.9.1 D_0 işlemcisine ait özdeğer ve özfonksiyonlar

$B \neq 0$ ve sonlu bir τ_0 durumu için Boltzmann taşınım denkleminin çözümünden elde

edilen $D_0 = i \left\{ v_F \hat{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \omega_0 \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{\tau_0} \right\}$ düzenli işlemcisi için,

$$\psi_{nk}(\mathbf{r}, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi A}} e^{i\{k \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{R}(\phi)] - n\phi\}} \quad (\text{Hedegard ve Smith 1995}) \quad (3.124)$$

özfonksiyonu seçildiğinde $D_0\psi_{nk}(\mathbf{r}, \phi) = \lambda_n\psi_{nk}(\mathbf{r}, \phi)$ özdeğer denkleminde elde edilen özdeğer,

$$\lambda_n = n\omega_0 + (i/\tau_0) \quad (3.125)$$

olarak ifade edilir. A , ince filmin ortalama alanı, $\mathbf{R}(\phi) = r_c(\sin \phi, -\cos \phi)$ ve $r_c = v_F / \omega_0$ ortalama siklotron yarıçapıdır.

3.9.2 Pertürbe olmamış Green fonksiyonu

Düzenli işlemci D_0 için pertürbe olmamış Green fonksiyonu,

$$G_0(\mathbf{r}, \phi; \mathbf{r}', \phi') = \sum_{n,k} \frac{\psi_{nk}(\mathbf{r}, \phi)\psi_{nk}^*(\mathbf{r}', \phi')}{\lambda_n} \quad (3.126)$$

denkleminde özfonksiyon ve özdeğer ifadelerinin yerine yazılması ile,

$$G_0(\mathbf{r}, \phi; \mathbf{r}', \phi') = \frac{1}{2\pi} \sum_n \frac{e^{in(\phi' - \phi)}}{n\omega_0 + (i/\tau_0)} \frac{1}{A} \sum_k e^{ik \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \mathbf{R}(\phi) + \mathbf{R}(\phi')]} \quad (3.127)$$

olarak elde edilir. $\int d^2\mathbf{k} e^{ik \cdot \mathbf{r}} = (2\pi)^2 \delta(\mathbf{r})$ olmak üzere,

$$\sum_k e^{ik \cdot \mathbf{r}} = \frac{A}{(2\pi)^2} \int d^2\mathbf{k} e^{ik \cdot \mathbf{r}} = A\delta(\mathbf{r}) \text{ 'dir. } \mathbf{k} \text{ toplamının } 1/A \text{ ile çarpımı sadece bir } \delta(\mathbf{r})$$

fonksiyonu verir. n üzerinden toplam, $1/2\pi$ çarpanı ile birlikte $-\frac{i}{\omega_0} \frac{e^{[\phi' - \phi]/\omega_0\tau_0}}{e^{2\pi/\omega_0\tau_0} - 1}$

(Hedegard ve Smith 1995) sonucunu verir ve pertürbe olmamış Green fonksiyonu

$$G_0(\mathbf{r}, \phi; \mathbf{r}', \phi') = -\frac{i}{\omega_0} \frac{e^{[\phi' - \phi]/\omega_0\tau_0}}{e^{2\pi/\omega_0\tau_0} - 1} \delta[\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \mathbf{R}(\phi) + \mathbf{R}(\phi')] \quad (3.128)$$

olarak elde edilir. D_0 'ın ötelemeye göre değişmezliğinden dolayı, $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ ve dönmeye göre değişmezliğinden dolayı, $n = n'$ 'dür. Bu nedenle G_0 sadece $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ ile $\phi - \phi'$ 'nin bir fonksiyonudur, $G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; \phi - \phi')$.

3.9.3 Özenerji

Özenerji $\overline{WD_0^{-1}W}$ hesaplanırken W 'nin Hermitik ($W^\dagger = W$) olduğu ve $\mathbf{r}(\phi) = r_c(\cos\phi, \sin\phi)$, $\hat{n}' = (\cos\phi', \sin\phi')$, $D_0^{-1} = G_0$ tanımlamaları kullanılarak aşağıdaki sonuçlar elde edilir:

$$\Sigma(n, \mathbf{k}; n', \mathbf{k}') = \left\langle n\mathbf{k} \left| \overline{WD_0^{-1}W} \right| n'\mathbf{k}' \right\rangle = \int d\mathbf{r} d\phi d\mathbf{r}' d\phi' \psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}, \phi) \overline{WD_0^{-1}W} \psi_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}', \phi') \quad (3.129)$$

$$= \int d\mathbf{r} d\phi d\mathbf{r}' d\phi' \psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}, \phi) \overline{W^\dagger D_0^{-1}W} \psi_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}', \phi') \quad (3.130)$$

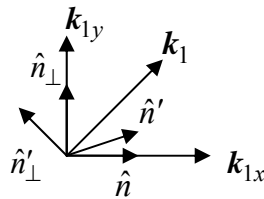
$$= \int d\mathbf{r} d\phi d\mathbf{r}' d\phi' \left[\overline{W\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}, \phi)} \right]^* G_0 \left[W\psi_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}', \phi') \right] \quad (3.131)$$

$$= \frac{1}{2\pi A} \int d\mathbf{r} d\phi d\mathbf{r}' d\phi' \left\{ i \left[\sum_i \overline{v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)} \hat{n} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \left(\sum_i \nabla_{\mathbf{r}} \overline{v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)} \cdot \hat{n}_\perp + \frac{\omega_0}{v_F} \sum_i \overline{v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)} \right) \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \right. \\ \left. e^{i\{\mathbf{k}[\mathbf{r} - \mathbf{R}(\phi)] - n\phi\}} \right\}^* G_0 \left\{ i \left[\sum_j \overline{v(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_j)} \hat{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} + \left(\sum_j \nabla_{\mathbf{r}'} \overline{v(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_j)} \cdot \hat{n}'_\perp + \frac{\omega_0}{v_F} \sum_j \overline{v(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_j)} \right) \frac{\partial}{\partial \phi'} \right] \right. \\ \left. e^{i\{\mathbf{k}'[\mathbf{r}' - \mathbf{R}(\phi')] - n'\phi'\}} \right\} \quad (3.132)$$

$$\Sigma(n, \mathbf{k}; n', \mathbf{k}') = \int d\mathbf{r} d\phi d\mathbf{r}' d\phi' \left\{ \left[\underbrace{\sum_i \nabla_{\mathbf{r}} \overline{v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)} \cdot \hat{n}_{\perp}}_1 (n + \mathbf{k} \cdot r_c \hat{n}) + \underbrace{\frac{1}{r_c} \sum_i \overline{v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)} n}_2 \right] \psi \right\}^* G_0 \quad (3.133)$$

$$\left\{ \left[\underbrace{\sum_j \nabla_{\mathbf{r}'} \overline{v(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_j)} \cdot \hat{n}'_{\perp}}_3 (n' + \mathbf{k}' \cdot r_c \hat{n}') + \underbrace{\frac{1}{r_c} \sum_j \overline{v(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_j)} n'}_4 \right] \psi \right\}$$

$\overline{D^{-1}} = \left(D_0 - \overline{W D_0^{-1} W} \right)^{-1}$ olmak üzere, şekillenim ortalaması alındıktan sonra G , sadece $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ ile $\phi - \phi'$ 'nin bir fonksiyonudur. Bundan dolayı G köşegendir, $n = n'$ ve $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$. G 'nin köşegen olması özenerjinin de köşegen olmasını gerektirir, bu nedenle $\Sigma(n, \mathbf{k}) = \left\langle n\mathbf{k} \left| \overline{W D_0^{-1} W} \right| n\mathbf{k} \right\rangle$ için çözümlere devam edilmiştir. Şekillenim ortalamasından dolayı $i = j$ alınarak yapılan özenerji hesaplamalarında, iletkenlik için $\mathbf{k} = 0$ alınmıştır ve $\Sigma(n, \mathbf{k} = 0)$ yerine $\Sigma(n)$ ifadesi kullanılmıştır. Fourier dönüşümleri için $\int d(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) e^{-i\mathbf{k}_i \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)} = v(k_1)$, $\int d(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \nabla_{(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)} v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) e^{-i\mathbf{k}_i \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)} = i\mathbf{k}_i v(k_1)$ denklemleri kullanılarak hesaplamalara k uzayında devam edilmiştir. Safsızlık yoğunluğu n_i olmak üzere, $\sum_i = N = A n_i$ ve $\sum_{k_i} = \frac{A}{(2\pi)^2} \int d^2 \mathbf{k}_i = \frac{A}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} k_1 dk_1 \int_0^{2\pi} d\phi_k$ toplamları yerine yazılmıştır.



Şekil 3.5 \hat{n}' ve \hat{n}'_{\perp} vektörlerinin yönelimi

Şekil 3.5’de k_1 ile \hat{n}' arasındaki açı ϕ'_k , k_1 ile \hat{n} arasındaki açı ϕ_k , \hat{n} ile \hat{n}' arasındaki açı $\phi' - \phi = \theta$ olmak üzere,

$$k_1 = k_1 \cos \phi_k \hat{x} + k_1 \sin \phi_k \hat{y} \quad (3.134)$$

$$\hat{n}_\perp = \hat{y} \quad (3.135)$$

$$\hat{n}'_\perp = -\sin \theta \hat{x} + \cos \theta \hat{y} \quad (3.136)$$

olarak tanımlanır. Elde edilen sonuçlarda boyutsuz değişken $k_1 l = x$ kullanılmıştır. Bu tanımlamalar kullanılarak, incelenecek modele göre farklılık gösterecek olan $v(k_1)$ değerlerini içeren integraller hesaplanmıştır.

1 ve 3 numaralı terimlerin çarpımından gelen katkı:

$${}^{1-3} \Sigma(n) = \frac{-in^2 n_i}{4\pi^2 \omega_0 (e^{2\pi/\omega_0 \tau_0} - 1)} \int_0^\infty k_1^3 |v(k_1)|^2 dk_1 \int_0^{2\pi} d\theta e^{-in\theta} e^{\theta/\omega_0 \tau_0} \left\{ -\sin \theta \int_0^\pi d\phi_k \sin 2\phi_k \cos [k_1 r_c ((1 - \cos \theta) \sin \phi_k + \sin \theta \cos \phi_k)] + \right. \quad (3.137)$$

$$\left. 2 \cos \theta \int_0^\pi d\phi_k \sin^2 \phi_k \cos [k_1 r_c ((1 - \cos \theta) \sin \phi_k + \sin \theta \cos \phi_k)] \right\}$$

1 ve 4 numaralı terimlerin çarpımından gelen katkı:

$${}^{1-4} \Sigma(n) = \frac{in^2 n_i}{2\pi^2 v_F (e^{2\pi/\omega_0 \tau_0} - 1)} \int_0^\infty k_1^2 |v(k_1)|^2 dk_1 \int_0^{2\pi} d\theta e^{-in\theta} e^{\theta/\omega_0 \tau_0} \left\{ \int_0^\pi d\phi_k \sin \phi_k \cdot \right. \quad (3.138)$$

$$\left. \sin [k_1 r_c ((1 - \cos \theta) \sin \phi_k + \sin \theta \cos \phi_k)] \right\}$$

2 ve 3 numaralı terimlerin çarpımından gelen katkı:

$$\begin{aligned}
{}^{2-3}\Sigma(n) &= \frac{in^2 n_i}{2\pi^2 v_F (e^{2\pi/\omega_0\tau_0} - 1)} \int_0^\infty k_1^2 \overline{|v(k_1)|^2} dk_1 \int_0^{2\pi} d\theta e^{-in\theta} e^{\theta/\omega_0\tau_0} \\
&\left\{ \sin\theta \int_0^\pi d\phi_k \cos\phi_k \sin\left[k_1 r_c ((1 - \cos\theta) \sin\phi_k + \sin\theta \cos\phi_k)\right] - \right. \\
&\left. \cos\theta \int_0^\pi d\phi_k \sin\phi_k \sin\left[k_1 r_c ((1 - \cos\theta) \sin\phi_k + \sin\theta \cos\phi_k)\right] \right\} \quad (3.139)
\end{aligned}$$

2 ve 4 numaralı terimlerin çarpımından gelen katkı:

$$\begin{aligned}
{}^{2-4}\Sigma(n) &= \frac{-in^2 n_i \omega_0}{2\pi^2 v_F^2 (e^{2\pi/\omega_0\tau_0} - 1)} \int_0^\infty k_1^2 \overline{|v(k_1)|^2} dk_1 \int_0^{2\pi} d\theta e^{-in\theta} e^{\theta/\omega_0\tau_0} \int_0^\pi d\phi_k \cdot \\
&\cos\left[k_1 r_c ((1 - \cos\theta) \sin\phi_k + \sin\theta \cos\phi_k)\right] \quad (3.140)
\end{aligned}$$

Konum uzayında hesaplanan özenerji ${}^{2-4}\Sigma(n, \mathbf{k}; n', \mathbf{k}')$:

Şekillenim ortalaması alındıktan sonra ortalama G^3 'nin köşegen olması özenerjinin de köşegen olmasını gerektirir. Ancak bu işlemlerde özenerjinin köşegen olduğunun ispatlanması amacı ile özenerji $\langle n\mathbf{k} | n'\mathbf{k}' \rangle$ için hesaplanarak, işlemler sırasında köşegenlik özelliğinin kendiliğinden geldiği gösterilecektir.

$${}^{2-4}\Sigma(n, \mathbf{k}; n', \mathbf{k}') = \int dr d\phi dr' d\phi' \frac{1}{P_F^2 r_c^2} \sum_{i,j} \overline{v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) v(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_j)} m' G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; \phi - \phi') \psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}, \phi) \psi_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}', \phi') \quad (3.141)$$

Şekillenim ortalaması için $i = j$ alındıktan sonra rastgele potansiyel enerjilerin korelasyon fonksiyonu s , sadece $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ 'ye bağlıdır ve $\sum_i \overline{v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)v(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i)} = s(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ olarak tanımlanır. Ortalama, ötelemeye göre değişmezliği getirir, bunun anlamı özenerji \mathbf{k} değişkenine göre köşegendir. Bu özellik, integraldeki değişkenlerin $\mathbf{r} - \mathbf{r}' = \mathbf{r}_1$, $\mathbf{r} + \mathbf{r}' = \mathbf{r}_2$ olarak tanımlanması ile buna bağlı olarak elde edilen yeni değişkenlerin $\mathbf{r} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$, $\mathbf{r}' = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)$ olarak alınması ile ispatlanabilir.

$$2^{-4} \Sigma(n, \mathbf{k}; n', \mathbf{k}') = \frac{1}{2\pi A P_F^2 r_c^2} \int d\mathbf{r} d\phi d\mathbf{r}' d\phi' s(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) n n' e^{-i\{\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'\}} e^{-i\{\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}(\phi') - \mathbf{k}\cdot\mathbf{R}(\phi)\}} e^{in\phi} e^{-in'\phi'} \left[-\frac{i}{\omega_0} \frac{1}{e^{2\pi/\omega_0\tau_0} - 1} e^{[\phi' - \phi]/\omega_0\tau_0} \delta[\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \mathbf{R}(\phi) + \mathbf{R}(\phi')] \right] \quad (3.142)$$

$$= \left(-\frac{i}{\omega_0} \frac{1}{e^{2\pi/\omega_0\tau_0} - 1} \right) \frac{n n'}{2\pi A P_F^2 r_c^2} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{2\pi} d\phi' e^{-i\{\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}(\phi') - \mathbf{k}\cdot\mathbf{R}(\phi)\}} e^{in\phi} e^{-in'\phi'} e^{[\phi' - \phi]/\omega_0\tau_0} \int d\mathbf{r}_1 \delta[\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}(\phi) + \mathbf{R}(\phi')] s(\mathbf{r}_1) e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{k}')\frac{\mathbf{r}_1}{2}} \int d\mathbf{r}_2 e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\frac{\mathbf{r}_2}{2}} \quad (3.143)$$

\mathbf{r}_1 'e bağlı integral $\mathbf{r}_1 = \mathbf{R}(\phi) - \mathbf{R}(\phi')$ olmasını, \mathbf{r}_2 'ye bağlı integral ise, $(2\pi)^2 \delta\left(\frac{\mathbf{k}' - \mathbf{k}}{2}\right)$ olmasını gerektirir.

$$2^{-4} \Sigma(n, \mathbf{k}; n', \mathbf{k}') = \left(-\frac{i}{\omega_0} \frac{1}{e^{2\pi/\omega_0\tau_0} - 1} \right) \frac{n n'}{2\pi P_F^2 r_c^2} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{2\pi} d\phi' e^{-i\{\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}(\phi') - \mathbf{k}\cdot\mathbf{R}(\phi)\}} e^{in\phi} e^{-in'\phi'} e^{[\phi' - \phi]/\omega_0\tau_0} s(\mathbf{R}(\phi) - \mathbf{R}(\phi')) e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{k}')\frac{[\mathbf{R}(\phi) - \mathbf{R}(\phi')]}{2}} \left(\frac{2(2\pi)^2 \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k})}{A} \right) \quad (3.144)$$

$\frac{2(2\pi)^2 \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k})}{A} = 2\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$, denkleminde $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ olmalıdır. Yapılan işlemler sonucunda \mathbf{k}

içeren terimler sadeleşir ve özenerji sadece n ve n' 'ye bağlı olarak kalır.

$\mathbf{R}(\phi) - \mathbf{R}(\phi') = 2r_c \left| \sin \frac{\phi' - \phi}{2} \right|$, eski koordinatlar ϕ ve ϕ' , yeni koordinatlar ϕ ve

$\theta = \phi' - \phi$ olmak üzere değişken değiştirmesi yapılır.

$${}^{2-4}\Sigma(n, n') = -\frac{i}{\omega_0 \pi P_{F_c}^2 r_c^2} \frac{m n'}{e^{2\pi/\omega_0 \tau_0} - 1} \int_0^{2\pi} d\theta s \left(2r_c \sin \frac{\theta}{2} \right) e^{\theta/\omega_0 \tau_0} e^{-in'\theta} \int_0^{2\pi} d\phi e^{i(n-n')\phi} \quad (3.145)$$

$\int_0^{2\pi} d\phi e^{i(n-n')\phi}$ integralinin sonucu $n - n' = 0$ ise 2π , $n - n' \neq 0$ ise 0 'dır. Bu durum

sonucun $n = n'$ olmasını gerektirir. Özenerjinin dönmelere göre de değişmez olduğu ispatlanmış olur ve özenerji aşağıdaki gibi elde edilir:

$${}^{2-4}\Sigma(n) = -i \frac{2n^2}{P_{F_c}^2 V_{F_c} r_c (e^{2\pi/\omega_0 \tau_0} - 1)} \int_0^{2\pi} d\theta s \left(2r_c \sin \frac{\theta}{2} \right) e^{\theta/\omega_0 \tau_0} e^{-in\theta} \quad (3.146)$$

3.9.4 Pertürbe Green fonksiyonu

Denklem (3.59)'da $\psi_{nk}(\mathbf{r}, \phi)$ ve $\psi_{nk}^*(\mathbf{r}', \phi')$ özfonksiyonlarının yerine yazılması ile pertürbe Green fonksiyonu,

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; \phi - \phi') = \frac{1}{2\pi A} \sum_{n, \mathbf{k}} \frac{e^{i\{\mathbf{k} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{R}(\phi)] - n\phi\}} e^{-i\{\mathbf{k} \cdot [\mathbf{r}' - \mathbf{R}(\phi')] - n\phi'\}}}{n\omega_0 + (i/\tau_0) - \Sigma(n)} \quad (3.147)$$

olarak bulunur.

3.9.5 $g(\mathbf{r}, \phi)$ fonksiyonu

Denklem (3.147), Denklem (3.64)'de yerine yazılarak $g(\mathbf{r}, \phi)$ fonksiyonu elde edilir.

$$g(\mathbf{r}, \phi) = -i \frac{eE_0}{2\pi Am} \int dr' d\phi' \sum_{n, \mathbf{k}} \frac{e^{i\{\mathbf{k} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{R}(\phi)] - n\phi\}} e^{-i\{\mathbf{k} \cdot [\mathbf{r}' - \mathbf{R}(\phi')] - n\phi'\}}}{n\omega_0 + (i/\tau_0) - \Sigma(n)} \cos \phi' \quad (3.148)$$

$$g(\mathbf{r}, \phi) = -i \frac{eE_0}{2m} \left\{ \frac{e^{-i\phi}}{\omega_0 + (i/\tau_0) - \Sigma(1)} + \frac{e^{i\phi}}{-\omega_0 + (i/\tau_0) - \Sigma(-1)} \right\} \quad (3.149)$$

Denklem (3.149)'a göre özenerji $n = \pm 1$ için hesaplanmalıdır.

3.9.6 Akım yoğunluğu

Denklem (3.149)'un Denklem (3.68)'de yerine yazılması ile iki boyutta x yönündeki akım yoğunluğu,

$$j_x(\mathbf{r}) = i \frac{e^2 m E_0 v_F^2 \pi}{h^2} \left\{ \frac{1}{\omega_0 + (i/\tau_0) - [\text{Re} \Sigma(1) + i \text{Im} \Sigma(1)]} + \frac{1}{-\omega_0 + (i/\tau_0) - [\text{Re} \Sigma(-1) + i \text{Im} \Sigma(-1)]} \right\} \quad (3.150)$$

olarak elde edilir. Denklem (3.137), (3.138), (3.139) ve (3.140) için $\text{Im} \Sigma(-1) = \text{Im} \Sigma(1)$ ve $\text{Re} \Sigma(1) = -\text{Re} \Sigma(-1)$ eşitlikleri geçerli olduğundan, Denklem (3.150) düzenlenerek,

$$j_x(\mathbf{r}) = \frac{2\pi m e^2 E_0 v_F^2}{h^2} \frac{(1/\tau_0) - \text{Im} \Sigma(1)}{[\omega_0 - \text{Re} \Sigma(1)]^2 + [(1/\tau_0) - \text{Im} \Sigma(1)]^2} \quad (3.151)$$

sonucu elde edilir.

3.9.7 Elektriksel iletkenlik ve özdirenç katsayıları

İletkenlik katsayısı ve boyuna özdirenç ifadeleri şu şekildedir:

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \frac{2\pi m e^2 v_F^2}{h^2} \frac{(1/\tau_0) - \text{Im}\Sigma(1)}{[\omega_0 - \text{Re}\Sigma(1)]^2 + [(1/\tau_0) - \text{Im}\Sigma(1)]^2} \quad (3.152)$$

$$\sigma_{xy} = \frac{2\pi m e^2 v_F^2}{h^2} \frac{(1/\tau_0) - \text{Im}\Sigma(1)}{[\omega_0 - \text{Re}\Sigma(1)]^2 + [(1/\tau_0) - \text{Im}\Sigma(1)]^2} \quad (3.153)$$

$$\rho_{xx} = \frac{h^2}{2\pi m e^2 v_F^2} [(1/\tau_0) - \text{Im}\Sigma(1)] = \frac{m}{ne^2} [(1/\tau_0) - \text{Im}\Sigma(1)] \quad (3.154)$$

ρ_{xx} değeri, c hacimsel derişim değerinin kullanılması sonucu Ωm birimi ile elde edilir.

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

4.1 $B = 0$ ve $\tau_0 = \infty$ Durumunda Sayısal Hesaplamalar

$B = 0$ ve $\tau_0 = \infty$ durumundaki sayısal hesaplamalarda ortalama kalınlığı L olan ve düzensiz yüzeyleri bulunan yarıiletken ince filmin sınırları $z = \pm L/2 \mp \xi(x, y)$ olarak alınmıştır. Film kalınlığınca (z yönünde) olan hareketin kuantumlu olduğu varsayılmıştır. Rastgele potansiyel enerjilerin korelasyonunu tanımlayan

$$\overline{V(\mathbf{r})V(\mathbf{r}')} = \left[\left(\frac{\pi\hbar}{L} \right)^2 \frac{1}{mL} \right]^2 F(\rho) \text{ ifadesinde } F(\rho) \text{ 'nun Fourier dönüşümü olan } F(k)$$

için üç farklı model ele alınmıştır. Hesaplamalarda ele alınan ilk model Gaussyen dağılım (Palasantzas 1998) diğeri ise üstel dağılımdır (Palasantzas ve Barnas 1997, Palasantzas ve De Hosson 2003). İletkenlik, farklı l kabartı korelasyon uzunlukları için hesaplanmıştır ve aynı modellerin farklı yöntemlerle hesaplandığı literatür sonuçları ile karşılaştırılmıştır.

4.1.1 Gaussyen model

Yüzey düzensizliklerinin korelasyon fonksiyonu $F(\rho) = \overline{\xi(\mathbf{r})\xi(\mathbf{r}')} = \Delta^2 e^{-(\rho/l)^{2H}}$ için Gaussyen dağılım ($H = 1$) ele alınmıştır (Palasantzas 1998). Yüzey düzensizliklerinden kaynaklanan rastgele potansiyel enerjilerin korelasyonu konum uzayında,

$$\overline{V(\mathbf{r})V(\mathbf{r}')} = \left[\left(\frac{\pi\hbar}{L} \right)^2 \frac{1}{mL} \right]^2 \overline{\xi(\mathbf{r})\xi(\mathbf{r}')} = \left[\left(\frac{\pi\hbar}{L} \right)^2 \frac{1}{mL} \right]^2 \Delta^2 e^{-\rho^2/l^2} \quad (4.1)$$

olmak üzere özenerji değerinin hesaplanması için gerekli k uzayındaki korelasyon değeri,

$$\overline{V^*(k)V(k)} = \overline{|V(k)|^2} = \left[\left(\frac{\pi\hbar}{L} \right)^2 \frac{1}{mL} \right]^2 \Delta^2 \pi l^2 e^{-k^2 l^2 / 4} \quad (4.2)$$

rastgele hızların korelasyonu $\overline{|v(k)|^2} = \overline{|V(k)|^2} / P_F^2$ olarak

$\Sigma_{\infty}^0(n) = -i \frac{n^2 n_i}{2\pi v_F} \int_0^{\infty} k^2 \overline{|v(k)|^2} dk$ denkleminde yerine yazıldığında,

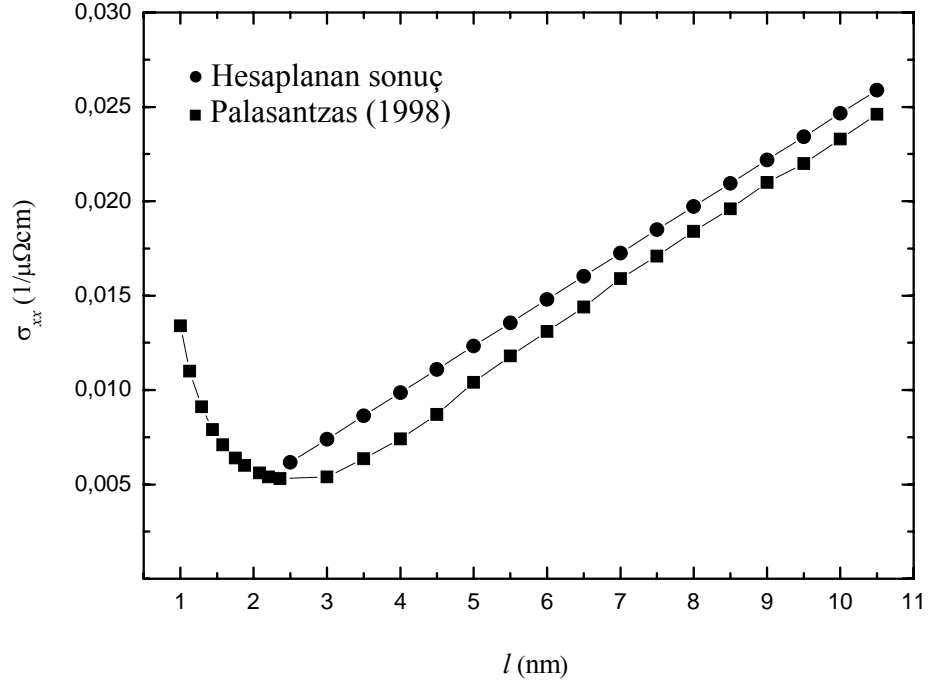
$$\Sigma_{\infty}^0(1) = -i \frac{h^4 \Delta^2}{32L^6 m^4 v_F^3 l} \int_0^{\infty} e^{-x^2/4} x^2 dx \quad (4.3)$$

ifadesi elde edilir. İntegralde boyutsuz değişken $kl = x$ kullanılmıştır ve $n_i \Delta^2 = \Delta^2$ olarak tanımlanmıştır. $\Delta = 0.3 \times 10^{-9}$ m, $L = 5 \times 10^{-9}$ m ve $k_F = \sqrt{2\pi n}$ olmak üzere, $v_F = (2\hbar^2 \pi n / m^2)^{1/2} = 5.81 \times 10^4$ m/sn sayısal değerlerinin yerine yazılması ile özenerji değerinin sonucu,

$$\Sigma_{\infty}^0(1) = -i913.155/l \text{ sn}^{-1} \quad (4.4)$$

olarak elde edilir. Üç boyutta boyuna iletkenlik katsayısı, birimi $(\Omega m)^{-1}$ olmak üzere, yüzeysel elektron yoğunluğu $n = 4 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$ ve hacimsel elektron yoğunluğu $c = n/L = 4 \times 10^{16} \text{ m}^{-2} / 5 \times 10^{-9} \text{ m} = 0.8 \times 10^{25} \text{ m}^{-3}$ alınarak Denklem (3.121)'den hesaplanır.

$$\sigma_{xx} = \frac{ce^2}{m} \left(-\frac{1}{\text{Im} \Sigma_{\infty}^0(1)} \right) = \frac{ce^2}{m} \left(\frac{1}{913.155/l} \right) = 2.465 \times 10^{14} l (\Omega m)^{-1} = 2.465 \times 10^6 l (\mu\Omega \text{cm})^{-1} \quad (4.5)$$



Şekil 4.1 Farklı korelasyon uzunlukları için boyuna iletkenliğin değişimi. $B = 0$ ve $\tau_0 = \infty$ durumunda Gaussyen model için $H = 1$, $L = 5 \times 10^{-9}$ m, $\Delta = 0.3 \times 10^{-9}$ m, $n = 4 \times 10^{16}$ m⁻²

Palasantzas (1998) tarafından yapılan çalışmada farklı kristalit büyüklükleri, $\zeta = 5, 20, 50, 100$ nm, ele alınmıştır. Şekil 4.1'deki kareli eğri en büyük kristalit büyüklüğüne, $\zeta = 100$ nm, sahip olan eğridir. Bu eğride yaklaşık 2 nm $\langle l \rangle$ 3 nm değerlerinde güçlü bir saçılma olduğundan dolayı bir minimum gözlenmektedir. Bunun nedeni $\overline{|V(k)|^2}$ 'nin $\sim l^2$ ile artması, bir maksimuma ulaşması ve l 'nin daha fazla artışında ise $\sim e^{-l^2}$ ile azalmasıdır. Büyük korelasyon uzunluklarında (sabit Δ genliği için) eğri normal bir davranış gösterir. Bunun nedeni azalan Δ/l (yüzey pürüzsüzlüğü) ile daha zayıf yüzey elektron saçılmalarının gerçekleşmesidir. Ayrıca ortalama kristalit büyüklüğü ζ , korelasyon uzunluğu l 'den çok büyükse, keskin bir minimum meydana gelir (Palasantzas 1998).

Şekil 4.1’de hesaplamalar sonucu elde edilen dairesel eğride boyuna iletkenlik artan kabartı korelasyon uzunlukları için doğrusal bir artış göstermektedir. Bu artışın nedeni $\sigma_{xx} \sim l$ sonucudur. Hesaplamalar belirli bir l_{min} değerinin altında geçerli değildir. Yaklaşık olarak $l > 3$ nm değerleri için yapılan karşılaştırma literatür ile uyum göstermektedir. Kareli eğride $l \rightarrow 0$ için, σ_{xx} sonsuza giderken dairesel eğride ise, σ_{xx} sıfıra gitmektedir. Bu farklılığın nedeni hesaplamalarda serbest elektron yaklaşımının, $kl_\tau \gg 1$, esas alınmış olmasıdır. Sıcaklık etkileri olmadığına ($T = 0$ K) tüm elektronlar için $k = k_F$ durumu geçerlidir. Bu durumda $k_F l_\tau \gg 1$ denkleminde $k_F l_\tau \approx 100$ alınarak korelasyon uzunluğu için minimum bir değer elde edilebilir:

$$k_F = \frac{mv_F}{\hbar} = \frac{9.1 \times 10^{-31} \cdot 5.81 \times 10^4 \cdot 2\pi}{6.62 \times 10^{-34}} = 5 \times 10^8 \text{ m}^{-1} \quad (4.6)$$

$$l_\tau = v_F \tau = v_F \frac{1}{-\text{Im} \Sigma_\infty^0(1)} = 5.81 \times 10^4 \frac{l}{913.155} = 63.58l \text{ m} \quad (4.7)$$

değerleri $k_F l_\tau \approx 100$ denkleminde yerine yazılarak,

$$5 \times 10^8 \cdot 63.58l \approx 100 \quad (4.8)$$

$$l_{min} \approx 3 \text{ nm} \quad (4.9)$$

yaklaşık sonucu elde edilir. $l_{min} \approx 3$ nm değerinde ve 3 nm’nin üstündeki değerlerde serbest elektron yaklaşımı geçerli iken, 3 nm’nin altındaki değerler için yaklaşım geçerliliğini yitirmektedir.

4.1.2 Üstel model

Yüzey düzensizliklerinin korelasyon fonksiyonu olarak üstel dağılım, $F(\rho) = \overline{\xi(\mathbf{r})\xi(\mathbf{r}')} = \Delta^2 e^{-\rho/l}$, ele alındığında buna karşılık gelen rastgele potansiyel enerjilerin k uzayındaki korelasyonu,

$$\overline{V^*(k)V(k)} = \overline{|V(k)|^2} = \left[\left(\frac{\pi\hbar}{L} \right)^2 \frac{1}{mL} \right]^2 \frac{2\pi\Delta^2 l^2}{(1+ak^2 l^2)^{1+H}} \quad (\text{Palasantzas ve De Hosson 2003}) \quad (4.10)$$

denkleminde $H = 0.5$ alınarak bulunur ve rastgele hızların korelasyonu $\overline{|v(k)|^2} = \overline{|V(k)|^2} / P_F^2$ olarak $\Sigma_\infty^0(n) = -i \frac{n^2 n_i}{2\pi v_F} \int_0^\infty k^2 \overline{|v(k)|^2} dk$ denkleminde yerine yazıldığında,

$$\Sigma_\infty^0(1) = -i \frac{\hbar^4 \Delta^2}{16L^6 m^4 v_F^3 l} \underbrace{\int_0^{x_c} \frac{x^2}{(1+ax^2)^{3/2}} dx}_I \quad (4.11)$$

özenerji değeri elde edilir. İntegralde boyutsuz değişken $kl = x$ kullanılmıştır ve $n_i \Delta^2 = \Delta^2$ olarak tanımlanmıştır. İntegral değeri, üst sınırın sonsuz olması durumunda ıraksak olacağından, üst sınırın maksimum değeri $x_c = k_c l = 2k_F l = (8\pi n)^{1/2} l$ olarak

alınmıştır. $\int_0^{k_c} \frac{2\pi\Delta^2 l^2}{(1+ak^2 l^2)^{3/2}} d^2 \mathbf{k} = (2\pi)^2 \Delta^2$ normalizasyon koşulunun kullanılması

ile elde edilen $a = 1 - (1 + ak_c^2 l^2)^{-1/2} = 1 - (1 + ax_c^2)^{-1/2}$ (Palasantzas ve De Hosson 2003)

değeri her bir l korelasyon uzunluğu için ayrı ayrı hesaplanmıştır. Özenerjideki

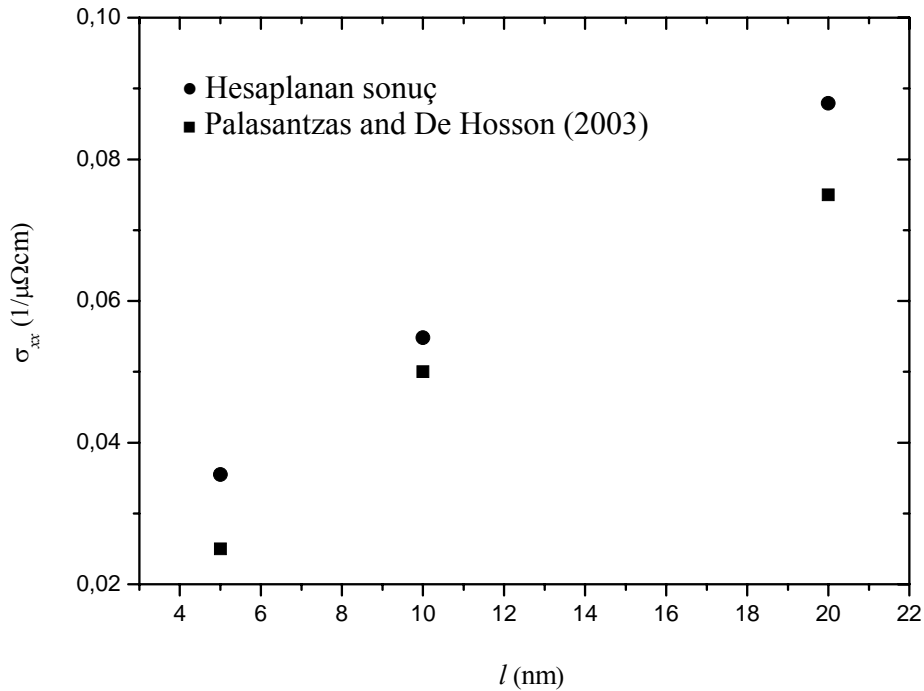
$I = \int_0^{x_c} \frac{x^2}{(1+ax^2)^{3/2}} dx$ integral değeri de farklı korelasyon uzunlukları için farklı

değerlere sahiptir. Üç boyutta boyuna iletkenlik katsayısı,

$\sigma_{xx} = (ce^2/m)[-1/\text{Im}\Sigma_{\infty}^0(l)]$, yüzeysel elektron yoğunluğu $n = 4.8 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$, hacimsel elektron yoğunluğu $c = n/L = 4.8 \times 10^{16} \text{ m}^{-2} / 8 \times 10^{-9} \text{ m} = 0.6 \times 10^{25} \text{ m}^{-3}$, $\Delta = 0.5 \times 10^{-9} \text{ m}$, $L = 8 \times 10^{-9} \text{ m}$ ve $v_F = 6.36 \times 10^4 \text{ m/sn}$ alınarak farklı korelasyon uzunlukları için hesaplanmıştır.

Çizelge 4.1 Üstel model I için farklı korelasyon uzunluklarında hesaplanan I , $\text{Im}\Sigma_{\infty}^0(l)$ ve σ_{xx} değerleri

l (nm)	I	$\text{Im}\Sigma_{\infty}^0(l)$ (sn^{-1})	σ_{xx} ($\mu\Omega\text{cm}$) ⁻¹
5	1.831	-2.376×10^{10}	0.0355
10	2.372	-1.539×10^{10}	0.0548
20	2.959	-9.599×10^9	0.0879



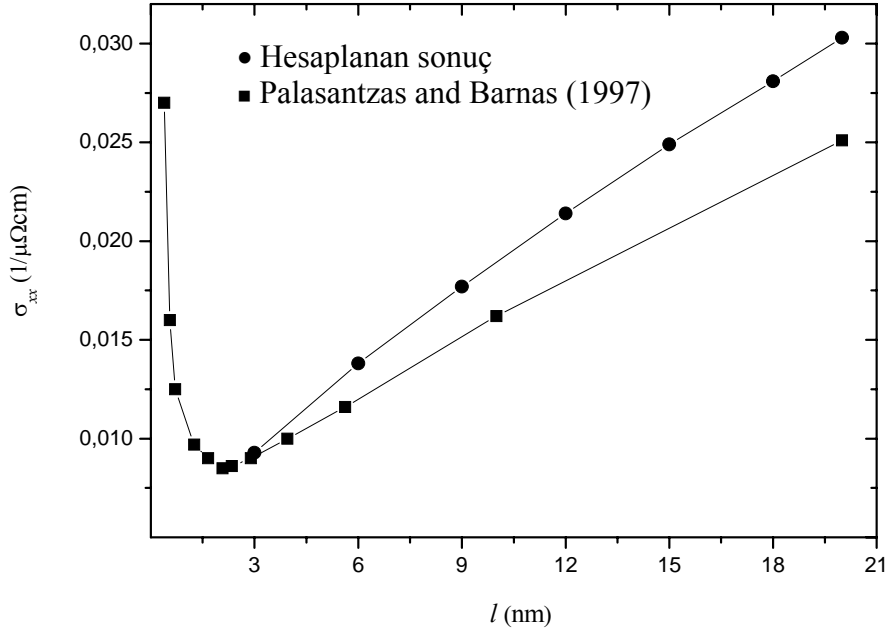
Şekil 4.2 Farklı korelasyon uzunlukları için boyuna iletkenliğin değişimi. $B = 0$ ve $\tau_0 = \infty$ durumunda üstel model I için $H = 0.5$, $L = 8 \times 10^{-9} \text{ m}$, $\Delta = 0.5 \times 10^{-9} \text{ m}$, $n = 4.8 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$

Palasantzas ve De Hosson (2003) tarafından yapılan çalışmada iki yüzey arasındaki çapraz korelasyon uzunluğu tanımlanmıştır ve boyuna iletkenlik katsayısının bu parametreye bağlı grafiği, $l = 5, 10, 20$ nm değerleri için çizilmiştir. Palasantzas ve De Hosson'a (2003) ait grafikte bahsedilen parametrenin sıfır değerinde üç eğrinin her biri düşey eksenini farklı noktalarda kesmektedir. Sonuç olarak yüzeyler arasındaki çapraz korelasyonun olmadığı durum için üç farklı $l = 5, 10, 20$ değerinde karşılaştırma yapılmıştır. Sonuçlar literatür ile uyum göstermektedir. Artan l değerleri için boyuna iletkenlik katsayısı da artış göstermektedir.

Karşılaştırmaya olanak sağlamak üzere Palasantzas ve Barnas (1997) çalışmasındaki sayısal veriler, yüzeyel elektron yoğunluğu $n = 4 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$, hacimsel elektron yoğunluğu $c = n/L = 4 \times 10^{16} \text{ m}^{-2} / 5 \times 10^{-9} \text{ m} = 0.8 \times 10^{25} \text{ m}^{-3}$, $\Delta = 0.3 \times 10^{-9} \text{ m}$, $L = 5 \times 10^{-9} \text{ m}$ ve $v_F = 5.81 \times 10^4 \text{ m/sn}$ alınarak üstel model hesapları yinelenmiştir.

Çizelge 4.2 Üstel model II için farklı korelasyon uzunluklarında hesaplanan I , $\text{Im} \Sigma_{\infty}^0(l)$ ve σ_{xx} değerleri

l (nm)	I	$\text{Im} \Sigma_{\infty}^0(l) (\text{sn}^{-1})$	$\sigma_{xx} (\mu\Omega\text{cm})^{-1}$
3	1.410	-2.422×10^{11}	0.00929
6	1.905	-1.635×10^{11}	0.0138
9	2.219	-1.270×10^{11}	0.0177
12	2.453	-1.053×10^{11}	0.0214
15	2.639	-9.064×10^{10}	0.0249
18	2.794	-7.998×10^{10}	0.0281
20	2.886	-7.433×10^{10}	0.0300



Şekil 4.3 Farklı korelasyon uzunlukları için boyuna iletkenliğin değişimi.

$\mathbf{B} = 0$ ve $\tau_0 = \infty$ durumunda üstel model II için $H = 0.5$, $L = 5 \times 10^{-9}$ m, $\Delta = 0.3 \times 10^{-9}$ m, $n = 4 \times 10^{16}$ m⁻²

Palasantzas ve Barnas (1997) tarafından yapılan çalışmada farklı kabartı eksponentleri, $H = 0, 0.5, 1$, ele alınmıştır. Şekil 4.3'deki kareli eğri $H = 0.5$ kabartı eksponentine sahip olan eğridir. Bu eğride yaklaşık olarak $l = 2$ nm'de film iletkenliğinde bir minimum görülmektedir. l 'nin daha büyük değerlerinde iletkenlik normal bir davranış göstermektedir, l değeri arttıkça, iletkenlikte artmaktadır. $l < 2$ nm değerleri için durum tam tersidir, l değeri azaldıkça Palasantzas ve Barnas'daki (1997) iletkenlik artmaktadır, bu çalışmada yapılan hesaplamalarda ise uyumsuzluk göstererek azalmaktadır. Bu uyumsuzluğun nedeni serbest elektron yaklaşımından açıklandığı üzere yine geçerlilik alt sınırı olan $l_{min} \approx 3$ nm değerinin altına inilmiş olmasıdır.

4.2 Özel Bir Özfonksiyon Değerinde Sayısal Hesaplamalar

4.2.1 Üstel model

Yüzey düzensizliklerinden kaynaklanan rastgele saçıcı potansiyel enerji için k uzayında $V(k) = (\pi\hbar^2 / m)e^{-kl}$ (Mirlin vd. 1999) değeri ele alınarak sabit bir l_r / l için, farklı $\omega_0\tau_0$ değerlerinde sabit manyetik alan varlığındaki boyuna özdirencin, manyetik alan olmadığı durumdaki boyuna özdirence oranının, $\rho_{xx}(B \neq 0) / \rho_{xx}(B = 0)$, değişim grafiği incelenmiş ve literatürdeki sonuçlar ile karşılaştırılmıştır.

Denklem (3.137), Denklem (3.138), Denklem(3.139), Denklem (3.140), $v(k) = (\pi\hbar^2 / mP_F)e^{-kl}$ hız ifadesinin yerine yazılması ve Fortran 90 programında yazılan Monte Carlo yöntemi ile sayısal olarak hesaplanmıştır.

$\cos\left[\frac{290x}{\omega_0\tau_0}((1-\cos\theta)\sin\phi_k + \sin\theta\cos\phi_k)\right]$ terimi x ile oldukça hızlı değişim göstermektedir ve bu nedenle x 'in küçük artış değerleri için daha iyi sonuç vermektedir. x aralıkları yeterince küçük seçilerek ve bu aralıklarda diğer integral değerleri hesaplanarak, toplamları alınmıştır. Atış sayısı da milyon mertebesinde alınarak, daha iyi sonuçlar elde edilmiştir. Sonlu bir τ_0 için $B \neq 0$ olduğu durumdaki $\Sigma(1)$ değerleri şu şekildedir:

$$\begin{aligned} {}^{1-3}\Sigma(1) &= \frac{1}{\tau_0} \left[\frac{-i0.147}{\omega_0\tau_0(e^{2\pi/\omega_0\tau_0} - 1)} \right] \int_0^\infty dx e^{-2x} x^3 \int_0^{2\pi} d\theta e^{-\theta(i-1/\omega_0\tau_0)} \\ &\left\{ -\sin\theta \int_0^\pi d\phi_k \sin 2\phi_k \cos\left[\frac{290x}{\omega_0\tau_0}((1-\cos\theta)\sin\phi_k + \sin\theta\cos\phi_k)\right] + \right. \\ &\left. 2\cos\theta \int_0^\pi d\phi_k \sin^2\phi_k \cos\left[\frac{290x}{\omega_0\tau_0}((1-\cos\theta)\sin\phi_k + \sin\theta\cos\phi_k)\right] \right\} \end{aligned} \quad (4.12)$$

$${}^{1-4} \Sigma(1) = \frac{1}{\tau_0} \left[\frac{i0.001}{e^{2\pi/\omega_0\tau_0} - 1} \right] \int_0^\infty dx e^{-2x} x^2 \int_0^{2\pi} d\theta e^{-\theta(i-1/\omega_0\tau_0)} . \quad (4.13)$$

$$\int_0^\pi d\phi_k \sin \phi_k \sin \left[\frac{290x}{\omega_0\tau_0} ((1 - \cos \theta) \sin \phi_k + \sin \theta \cos \phi_k) \right]$$

$${}^{2-3} \Sigma(1) = \frac{1}{\tau_0} \left[\frac{i0.001}{e^{2\pi/\omega_0\tau_0} - 1} \right] \int_0^\infty dx e^{-2x} x^2 \int_0^{2\pi} d\theta e^{-\theta(i-1/\omega_0\tau_0)}$$

$$\left\{ \sin \theta \int_0^\pi d\phi_k \cos \phi_k \sin \left[\frac{290x}{\omega_0\tau_0} ((1 - \cos \theta) \sin \phi_k + \sin \theta \cos \phi_k) \right] - \right. \quad (4.14)$$

$$\left. \cos \theta \int_0^\pi d\phi_k \sin \phi_k \sin \left[\frac{290x}{\omega_0\tau_0} ((1 - \cos \theta) \sin \phi_k + \sin \theta \cos \phi_k) \right] \right\}$$

$${}^{2-4} \Sigma(1) = \frac{1}{\tau_0} \left[\frac{-i0.35 \times 10^{-5} \omega_0 \tau_0}{e^{2\pi/\omega_0\tau_0} - 1} \right] \int_0^\infty dx e^{-2x} x \int_0^{2\pi} d\theta e^{-\theta(i-1/\omega_0\tau_0)} \quad (4.15)$$

$$\int_0^\pi d\phi_k \cos \left[\frac{290x}{\omega_0\tau_0} ((1 - \cos \theta) \sin \phi_k + \sin \theta \cos \phi_k) \right]$$

Sonlu bir τ_0 için $\mathbf{B} = 0$ olduğu durumdaki özenerji $\Sigma^0(1)$ (Denklem 3.93) ifadesinde de aynı $v(k)$ hız değeri kullanılarak,

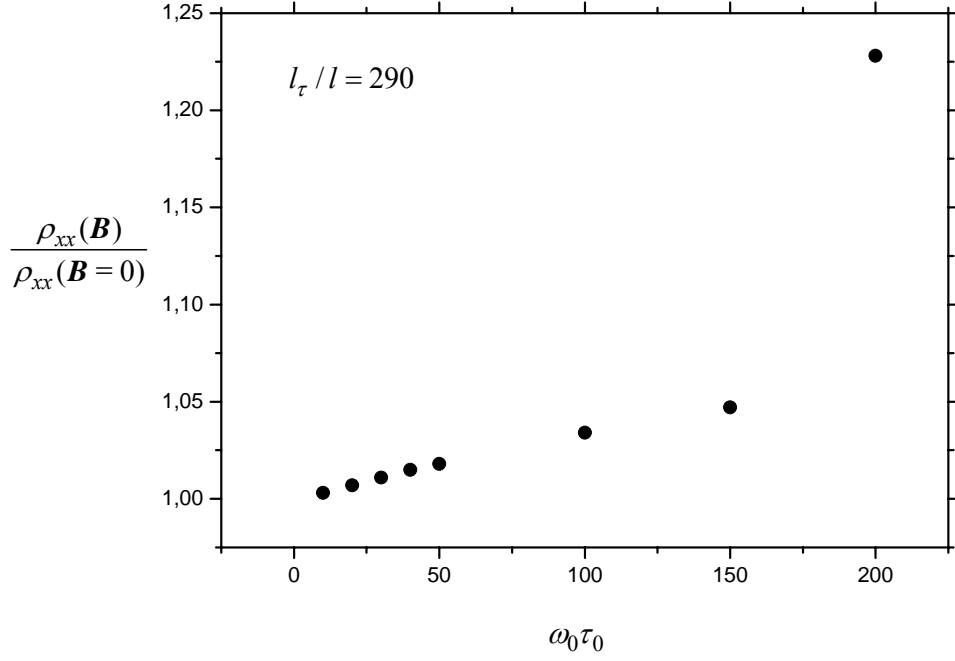
$$\Sigma^0(1) = -i \frac{n_i h^4}{32\pi^3 m^4 v_F^4 l^2 \tau_0} \int_0^\infty e^{-2x} x \left(\sqrt{1 + (l_\tau/l)^2 x^2} - 1 \right) dx \quad (4.16)$$

elde edilir. İntegrallerde boyutsuz değişken $kl = x$ kullanılmıştır. Yüzeysel elektron yoğunluğu $n = 4 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$, safsızlık yoğunluğu $n_i = 10^{15} \text{ m}^{-2}$ ve $v_F = 1.836 \times 10^4$

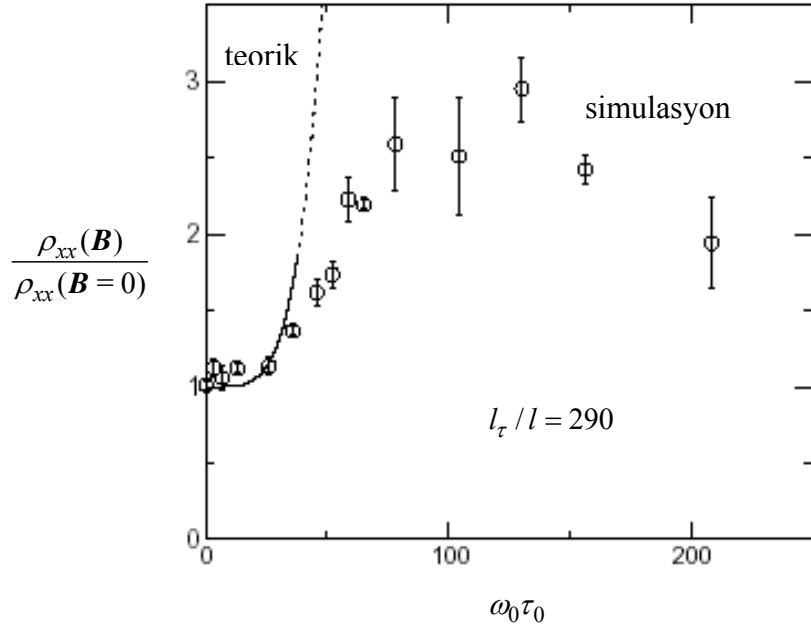
m/sn olarak alınmıştır. $l \times l_\tau = 65.61 \times 10^{-12} \text{ m}^2$ (Hedagard ve Smith 1995) ve $l_\tau / l = 290$ (Mirlin vd. 1999) denklemlerinin ortak çözümünden elde edilen düzlem içi kabartı korelasyon uzunluğu $l = 0.476 \times 10^{-6} \text{ m}$ ve ortalama serbest yol $l_\tau = v_F \tau = 137.9 \times 10^{-6} \text{ m}$ olarak hesaplanmıştır. $\mathbf{B} = 0$ ve $\mathbf{B} \neq 0$ durumundaki özenerji değerleri gerekli tanımlamalarla birlikte sayısal olarak hesaplanarak, $\frac{\rho_{xx}(\mathbf{B})}{\rho_{xx}(\mathbf{B} = 0)} = \frac{(1/\tau_0) - \text{Im} \Sigma(1)}{(1/\tau_0) - \text{Im} \Sigma^0(1)}$ ifadesinde yerine yazılmıştır ve çizelge 4.3 ile şekil 4.4'deki sonuçlar elde edilmiştir.

Çizelge 4.3 Üstel model için sabit $l_\tau / l = 290$ değerinde farklı $\omega_0 \tau_0$ değerleri için $\rho_{xx}(\mathbf{B}) / \rho_{xx}(\mathbf{B} = 0)$ oranının değişimi

$\omega_0 \tau_0$	10	20	30	40	50	100	150	200
$\frac{\rho_{xx}(\mathbf{B})}{\rho_{xx}(\mathbf{B} = 0)}$	1.003	1.007	1.011	1.015	1.018	1.034	1.047	1.228



Şekil 4.4 Sabit $l_\tau/l = 290$ değerinde farklı $\omega_0\tau_0$ değerleri için $\rho_{xx}(\mathbf{B})/\rho_{xx}(\mathbf{B} = 0)$ oranının değişimi.
 Üstel model için $n = 4 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$, $n_i = 10^{15} \text{ m}^{-2}$, $l \times l_\tau = 65.61 \times 10^{-12} \text{ m}^2$



Şekil 4.5 Sabit $l_\tau/l = 290$ değerinde farklı $\omega_0\tau_0$ değerleri için $\rho_{xx}(\mathbf{B})/\rho_{xx}(\mathbf{B} = 0)$ oranının değişimi (Mirlin vd. 1999)

Şekil 4.5 Mirlin vd.'ne (1999) ait olup, karşılaştırma yapılabilmesi amacıyla verilmiştir. Şekil 4.5'deki teorik manyetodirenç eğrisi $\omega_0\tau_0$ ile çok dik olarak arttığı halde bu çalışmada hesaplanan aynı eğri $\omega_0\tau_0$ ile ılımlı bir artış göstermektedir ve bu yüzden simülasyon hesaplamaları ile daha iyi uyum içindedir.

4.2.2 Gaussyen model

Sabit bir $\omega_0\tau_0$ değeri için farklı l_τ/l değerlerinde $\frac{\Delta\rho_{xx}}{\rho_{xx}(\mathbf{B}=0)} = \frac{\rho_{xx}(\mathbf{B}) - \rho_{xx}(\mathbf{B}=0)}{\rho_{xx}(\mathbf{B}=0)}$

oranının değişim grafiği incelenmiş ve literatürdeki sonuçlar ile karşılaştırılmıştır. Yüzey düzensizliklerinin hacim içine dahil edildiği sistemde $\mathbf{B} \neq 0$ olduğu durum ve sonlu bir τ_0 için Boltzmann denkleminin çözümünden elde edilen pertürbe işlemci,

$$W = i \left\{ \frac{V(\mathbf{r})}{P_F} \hat{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \left(\frac{\nabla V(\mathbf{r})}{P_F} \cdot \hat{\phi} + \frac{\omega_0}{v_F P_F} V(\mathbf{r}) \right) \frac{\partial}{\partial \phi} \right\} \quad (4.17)$$

ve düzenli duvarlara sahip bir sistemde $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ düzensiz manyetik alanının var olduğu durum için pertürbe işlemci (Hedegard ve Smith 1995),

$$W = i \left\{ \delta\omega(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial \phi} \right\} \quad (4.18)$$

şeklindedir. Pertürbe işlemciler karşılaştırıldığında, Denklem (4.17)'de rastgele saçıcı potansiyellerin etkisi, Denklem (4.18)'de ise rastgele saçıcı manyetik alanların etkisi görülmektedir. Sonuçların karşılaştırılabilmesi için her iki denklemde $\partial/\partial\phi$ ile çarpım halinde bulunan terimler birbirine eşitlenir:

$$\frac{\nabla V(\mathbf{r})}{P_F} \cdot \hat{\phi} + \frac{\omega_0}{v_F P_F} V(\mathbf{r}) = \delta\omega(\mathbf{r}) \quad (4.19)$$

Gaussyen dağılım gösteren düzensiz manyetik alan $B(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N b e^{-(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)^2/l^2}$ olarak

tanımlıdır ve safsızlıklar tarafından oluşturulan manyetik alan şiddetindeki değişim $db = 0.03$ T (Hedagard ve Smith 1995) alınarak, $\delta\omega(\mathbf{r})$ için sayısal bir değer bulunur:

$$\delta\omega(\mathbf{r}) = \frac{e\delta B(\mathbf{r})}{m} = \frac{e \cdot db}{m} \sum_{i=1}^N e^{-(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)^2/l^2} = 0.527 \times 10^{10} \sum_{i=1}^N e^{-(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)^2/l^2} \quad (4.20)$$

Gaussyen dağılım gösteren düzensiz potansiyel enerji ise,

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = \left(\frac{\pi\hbar}{L}\right)^2 \frac{1}{mL} \sum_{i=1}^N h(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = \left(\frac{\pi\hbar}{L}\right)^2 \frac{1}{mL} \sum_{i=1}^N \Delta e^{-(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)^2/l^2} \quad (4.21)$$

olarak tanımlıdır. Denklem (4.19)'da, Denklem (4.20) ve Denklem (4.21) ile tanımlı değerler yerine yazılarak,

$$\frac{1}{P_F} \left(\frac{\pi\hbar}{L}\right)^2 \frac{\Delta}{mL} \nabla \sum_{i=1}^N e^{-(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)^2/l^2} \cdot \hat{\phi} + \frac{\omega_0}{v_F P_F} \left(\frac{\pi\hbar}{L}\right)^2 \frac{\Delta}{mL} \sum_{i=1}^N e^{-(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)^2/l^2} = 0.527 \times 10^{10} \sum_{i=1}^N e^{-(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)^2/l^2} \quad (4.22)$$

denklemini edilir. Eşitliğin sol tarafındaki terimlerden birinci terime ait özenerji hesaplandığında, ikinci terim için hesaplanan özenerji değerinin yanında önemsiz kalır. Bu yüzden karşılaştırma eşitliğin sol tarafındaki ikinci terim ile eşitliğin diğer tarafındaki terim için yapılır,

$$\frac{\omega_0}{v_F P_F} \left(\frac{\pi\hbar}{L}\right)^2 \frac{\Delta}{mL} \sum_{i=1}^N e^{-(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)^2/l^2} = 0.527 \times 10^{10} \sum_{i=1}^N e^{-(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)^2/l^2} \quad (4.23)$$

ve rastgele manyetik alanlar cinsinden elde edilen katsayı,

$$\frac{\omega_0}{v_F P_F} \left(\frac{\pi \hbar}{L} \right)^2 \frac{\Delta}{mL} = 0.527 \times 10^{10} \quad (4.24)$$

rastgele potansiyel enerjide yerine yazılır:

$$V(\mathbf{r}) = \left(\frac{\pi \hbar}{L} \right)^2 \frac{\Delta}{mL} \sum_{i=1}^N e^{-(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)^2/l^2} = 0.527 \times 10^{10} \frac{v_F P_F}{\omega_0} \sum_{i=1}^N e^{-(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)^2/l^2} \quad (4.25)$$

Konum uzayında rastgele potansiyel enerjilerin korelasyonu $s(\rho) = \overline{V(\mathbf{r})V(\mathbf{r}')}$ için,

$$s(\rho) = n_i \left(0.527 \times 10^{10} \frac{v_F P_F}{\omega_0} \right)^2 \frac{\pi l^2}{2} e^{-\rho^2/2l^2} \quad (4.26)$$

sonucu Denklem (3.25) yardımı ile elde edilir. $\mathbf{B} \neq 0$ ve sonlu bir τ_0 durumu için Hedagard vd.'ne (1995) ait özel bir özfonksiyon değeri kullanılarak konum uzayında hesaplanan,

$${}^{2-4} \Sigma(1) = -i \frac{2}{P_F^2 v_F r_c (e^{2\pi/\omega_0 \tau_0} - 1)} \int_0^{2\pi} d\theta s \left(2r_c \sin \frac{\theta}{2} \right) e^{\theta/\omega_0 \tau_0} e^{-i\theta} \quad (4.27)$$

özenerji denkleminde Denklem (4.26)'daki korelasyon fonksiyonu yerine yazılır. $r_c = v_F / \omega_0$, $v_F \tau = l_\tau$ tanımları kullanılarak ve $\theta/2 = \theta_1$ değişken değiştirmesi yapılarak, öz direnç değişimi hesaplamalarında gerekli olan özenerji değeri elde edilir:

$${}^{2-4} \Sigma(1) = -i \frac{(0.527 \times 10^{10})^2 n_i \pi l^2}{\omega_0 (e^{2\pi/\omega_0 \tau_0} - 1)} \int_0^{2\pi} e^{-\frac{2l_\tau^2 \sin^2(\theta/2)}{\omega_0^2 \tau_0^2 l^2}} e^{\theta/\omega_0 \tau_0} e^{-i\theta} d\theta \quad (4.28)$$

$${}^{2-4}\Sigma(1) = -i \frac{2(0.527 \times 10^{10})^2 n_i \pi l^2}{\omega_0 (e^{2\pi/\omega_0 \tau_0} - 1)} \int_0^\pi e^{-\frac{2(l_\tau/l)^2 \sin^2 \theta_1}{\omega_0^2 \tau_0^2}} e^{2\theta_1/\omega_0 \tau_0} \cos 2\theta_1 d\theta_1 \quad (4.29)$$

$\mathbf{B} = 0$ ve sonlu bir τ_0 durumu için özel bir özfonksiyon değeri kullanılarak k uzayında hesaplanan,

$$\Sigma^0(1) = -i \frac{n_i \tau_0}{2\pi} \int_0^\infty \overline{|v(k)|^2} k^3 dk \left(\frac{\sqrt{1 + v_F^2 \tau_0^2 k^2} - 1}{v_F^2 \tau_0^2 k^2} \right) \quad (4.30)$$

özenerjisi için gerekli olan rastgele hız $v(k) = 0.527 \times 10^{10} \frac{v_F}{\omega_0} \pi l^2 e^{-k^2 l^2 / 4}$,

$v(r) = 0.527 \times 10^{10} \frac{v_F}{\omega_0} e^{-r^2 / l^2}$ ifadesinin Fourier dönüşümü alınarak elde edilir. $\Sigma^0(1)$,

boyutsuz değişken $kl = x$ kullanılarak aşağıdaki gibi elde edilir.

$$\Sigma^0(1) = -i \frac{(0.527 \times 10^{10})^2 n_i \pi l^2}{2\tau_0 \omega_0^2} \int_0^\infty x e^{x^2/2} \left(\sqrt{1 + (l_\tau/l)^2 x^2} - 1 \right) dx \quad (4.31)$$

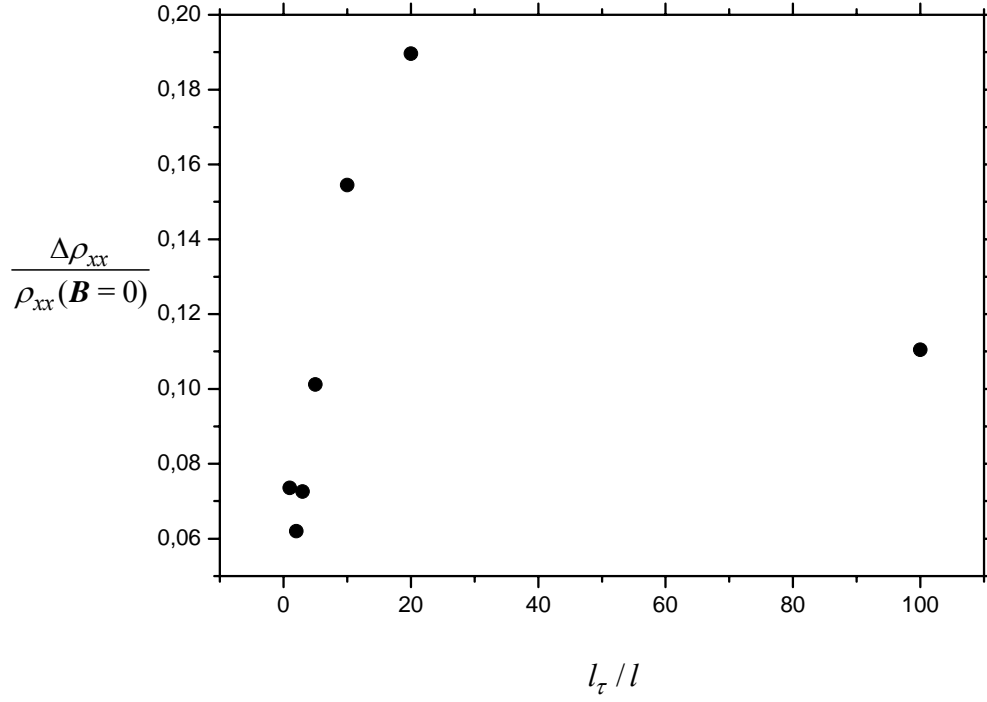
Boyuna öz dirençteki değişim,

$$\frac{\Delta \rho_{xx}}{\rho_{xx}(\mathbf{B} = 0)} = \frac{(1/\tau_0) - \text{Im} \Sigma(1)}{(1/\tau_0) - \text{Im} \Sigma^0(1)} - 1 \quad (4.32)$$

olmak üzere hesaplanan özenerji değerleri yerine yazılır. $\omega_0 = 8.79 \times 10^9$, $n = 4 \times 10^{15}$ m^{-2} , $n_i = 10^9$ m^{-2} , $v_F = 1.836 \times 10^4$ m/sn , $l \times l_\tau = 65.61 \times 10^{-12}$ m^2 alınarak sabit bir $\omega_0 \tau_0$ için farklı l_τ/l değerlerinde $\Delta \rho_{xx} / \rho_{xx}(\mathbf{B} = 0)$ oranından tablodaki sonuçlar elde edilmiştir. Her bir l_τ/l oranı için τ_0 değeri ayrı ayrı hesaplanmıştır.

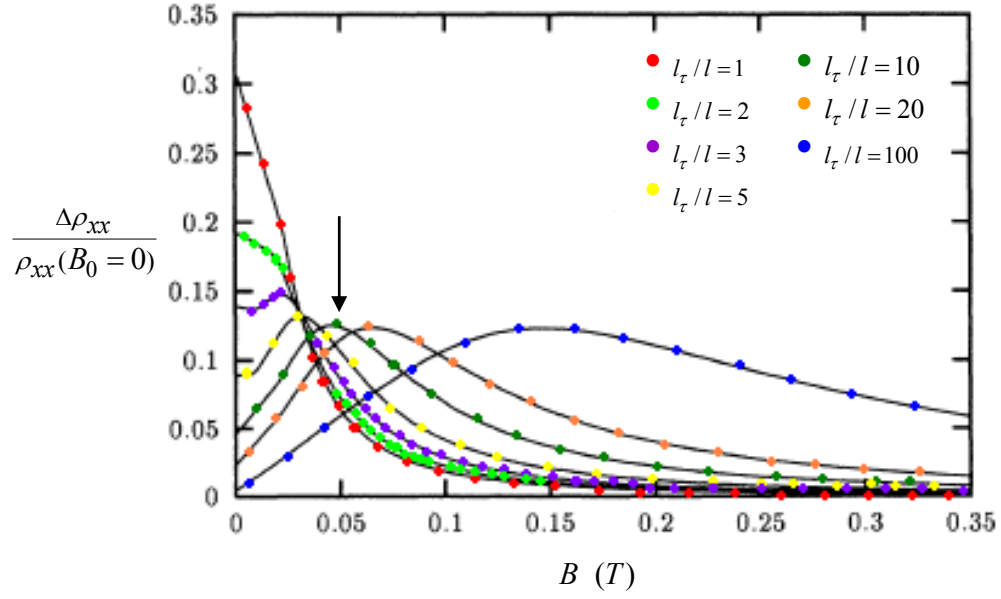
Çizelge 4.4 Gaussyen model için sabit $\omega_0 = 8.79 \times 10^9$ değerinde farklı l_τ / l değerleri için $\Delta\rho_{xx} / \rho_{xx}(\mathbf{B} = 0)$ oranının değişimi

l_τ / l	1	2	3	5	10	20	100
$\frac{\Delta\rho_{xx}}{\rho_{xx}(\mathbf{B} = 0)}$	0.0735	0.0620	0.0726	0.1011	0.1545	0.1896	0.1105



Şekil 4.6 Sabit $\omega_0 = 8.79 \times 10^9$ değerinde farklı l_τ / l değerleri için $\Delta\rho_{xx} / \rho_{xx}(\mathbf{B} = 0)$ oranının değişimi.

Gaussyen model için $n = 4 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$, $n_i = 10^9 \text{ m}^{-2}$, $l \times l_\tau = 65.61 \times 10^{-12} \text{ m}^2$



Şekil 4.7 Rastgele bir manyetik alandaki iki boyutlu elektron gazının farklı l_{τ}/l değerleri için $\Delta\rho_{xx}/\rho_{xx}(B_0 = 0)$ oranının değişimi (Hedegard ve Smith 1995)

Şekil 4.7 Hedegard vd.'ne (1995) ait olup, düzenli duvarları olan bir sistem için, iki boyutlu elektron gazının düzlemine dik uygulanan rastgele $B(\mathbf{r}) = B_0 + \delta B(\mathbf{r})$ manyetik alan varlığında Boltzmann taşınım denkleminin Green fonksiyonu çözümü ile elde edilmiştir ve hesaplamalarda korelasyon fonksiyonu için $\overline{\delta\omega(\mathbf{r})\delta\omega(\mathbf{r}')} = n_i\delta\omega^2 \frac{\pi l^2}{2} e^{-\rho^2/2l^2}$ değeri kullanılmıştır. $l \times l_{\tau}$ değeri sabit alınarak, eğrilerin aynı grafik içinde yer almaları sağlanmıştır. Şekil 4.7'de $B = 0.05$ T değerinden çizilen düşey eksen farklı l_{τ}/l değerine sahip eğriler tarafından kesilmektedir. Şekil 4.6'da $B = 0.05$ T manyetik alan değerine karşılık gelen $\omega_0 = eB/m = 8.79 \times 10^9$ için, farklı l_{τ}/l değerlerine sahip eğrilerin boyuna öz dirençlerindeki değişim çizilmiştir. Şekil 4.6'da en büyük $\Delta\rho_{xx}/\rho_{xx}(B = 0)$ değerlerinin $l_{\tau}/l = 10$ ve 20 için olduğu görülür. Hesaplanan değerler biraz daha büyük olmakla birlikte şekil 4.7'deki değerlerle aynı mertebededir ve sonuçların uyumlu olduğu görülmektedir.

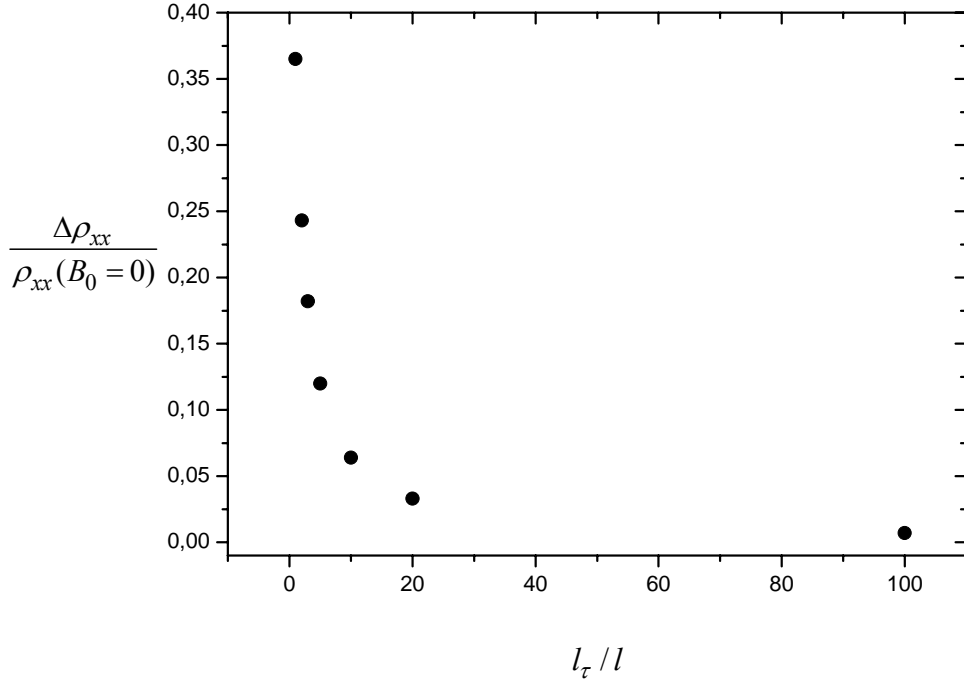
Şekil 4.7’de orijindeki $\Delta\rho_{xx}/\rho_{xx}(B_0=0)$ sonuçlarının tez çalışmasındaki çözüm yöntemi kullanılarak bulunması amacıyla ek bir sayısal hesaplama yapılmıştır. Hedegard ve Smith (1995) çalışmasında bu sonuçlar $\Delta\rho_{xx}/\rho_{xx}(B_0=0)$ için $B_0 \rightarrow 0$ limitinde hesaplanmıştır. Bu çalışmada ise başlangıçta Boltzmann taşınım denkleminin içerdiği Lorentz kuvvetinde $B_0=0$ alınarak çözümler yapılmıştır. Düzenli duvarları olan bir sistemde sabit, dış elektrik alan ve elektron gazının düzlemine dik olarak uygulanan $B(\mathbf{r})=B_0+\delta B(\mathbf{r})$ manyetik alanı etkisi altında $B_0=0$, $\delta B(\mathbf{r})\neq 0$ ve sonlu bir τ_0 için elde edilen boyuna öz dirençteki değişim,

$$\frac{\Delta\rho_{xx}}{\rho_{xx}(B_0=0)} = \frac{n_i\tau_0^2\delta\omega^2\pi l^2}{2} \int_0^\infty \frac{e^{-x^2/2x}}{\sqrt{1+(l_\tau/l)^2x^2}} dx \quad (4.33)$$

şeklindedir. Farklı l_τ/l değerleri için elde edilen $\Delta\rho_{xx}/\rho_{xx}(B_0=0)$ sonuçları çizelge 4.5 ve şekil 4.8 ile verilmiştir.

Çizelge 4.5 $B_0=0$, $\delta B(\mathbf{r})\neq 0$ için farklı l_τ/l değerlerinde $\Delta\rho_{xx}/\rho_{xx}(B_0=0)$ oranının değişimi

l_τ/l	1	2	3	5	10	20	100
$\frac{\Delta\rho_{xx}}{\rho_{xx}(B_0=0)}$	0.365	0.243	0.182	0.12	0.064	0.033	0.007



Şekil 4.8 $B_0 = 0$, $\delta B(\mathbf{r}) \neq 0$ için farklı l_τ / l değerlerinde $\Delta\rho_{xx} / \rho_{xx}(B_0 = 0)$ oranının değişimi

Şekil 4.8’de hesaplanan değerler sonucu elde edilen grafik, şekil 4.7’deki $B_0 = 0$ durumundaki değerlerle aynı mertebededir ve sonuçların uyumlu olduğu görülmektedir. Artan l_τ / l değerleri için her iki grafikte de $\Delta\rho_{xx} / \rho_{xx}(B_0 = 0)$ oranı azalmaktadır. $\Delta\rho_{xx} / \rho_{xx}(B_0 = 0)$ oranı en büyük değerini $l_\tau / l = 1$ için, en küçük değerini ise $l_\tau / l = 100$ için almıştır.

5. SONUÇ

Bu çalışmada Hedagard ve Smith'e (1995) ait Boltzmann taşınım denkleminin Green fonksiyonu çözüm yöntemi, yüzey düzensizlikleri bulunan yarıiletken ince film için ilk defa kullanılarak, bu düzensizliklerden kaynaklanan elektron saçılmalarının elektriksel iletkenlik üzerindeki etkileri yarıklasik bir yaklaşımla çözümlenerek doğrulanmıştır. Ortalama kalınlığı L olan ve yüzey düzensizlikleri bulunan yarıiletken ince filmde koordinat dönüşümleri yapılarak, her iki sınırdaki düzensizlikler düzleştirilmiştir ve sınır düzensizlikleri hacmin içine dahil edilmiştir. Bunun sonucunda düzensiz duvarlı bir sistem içindeki taşınım problemi tamamen ideal, aynasal duvarlı bir sistem içindeki taşınım problemine eşdeğer duruma getirilmiştir. Hacim Hamiltoniyeni dönüşmüş koordinatlar cinsinden ifade edildiğinde pertürbasyon olarak iki boyutlu rastgele potansiyel enerji terimini içermektedir.

İnce filmlerde film kalınlığınca olan hareket kuantumludur ve parçacıkların hareketi tamamen film boyunca gerçekleşir. Film kalınlığınca olan momentum film boyunca olan momentumdan oldukça büyüktür. Dönüşmüş Hamiltoniyende bulunan rastgele potansiyel enerji terimi boyuna koordinatlara bağlıdır ve yalnızca film kalınlığınca olan momentumu içerir. Düzensiz potansiyel enerji terimi, rastgele R_j konumlarındaki yükseltilerden oluşan yüzey düzensizliklerinin fonksiyonunu içermektedir. Bu düzensiz potansiyel enerji terimi için literatürde farklı yöntemlerle çözülmüş üstel ve Gaussyen dağılım ele alınarak, çalışmadaki sonuçlarla karşılaştırılmıştır.

Analitik hesaplamalara kolaylık getirmesi açısından düşük elektron yoğunluklu ($n \sim 10^{15} \text{ m}^{-2}$) ve 10 nm'den daha az kalınlığa sahip ince film tercih edilerek, tek bir alt bantın dolu olduğu durum $N_s = 1$ ele alınmıştır. Bu durumda $j = 1$ 'dir ve film kalınlığınca olan momentum sabit kabul edilir. Buna ek olarak tek bir alt bantın dolu olmasından dolayı tek bir Boltzmann denklemi çözülmüştür. Metallerde yüksek elektron yoğunluğundan dolayı çok sayıda alt bantın dolu olduğu bilinmektedir, bu nedenle metaller yerine yarıiletkenler tercih edilmiştir. Hesaplamalar $T = 0 \text{ K}$ 'de yapılmıştır.

Yüzey düzensizliklerinden kaynaklanan ve dönüşmüş Hamiltonyende yer alan pertürbe terim rastgele elektrik potansiyeline, dolayısı ile rastgele elektrik alanına ve Fermi hızında küçük bir değişime neden olur. Uygulanan dış alanlar ise sabit, zayıf dış elektrik alan ve elektron gazının düzlemine dik uygulanan sabit manyetik alandır. Uygulanan dış alanlar Boltzmann taşınım denkleminde yer alan Lorentz kuvvetinde içerilmiştir. Hedegard ve Smith (1995) yöntemine göre $f(\mathbf{r}, v, \phi)$ elektron dağılım fonksiyonun sağladığı doğrusallaştırılmış Boltzmann taşınım denklemi gevşeme zamanı yaklaşımı altında iki boyutlu elektron gazı için çözülmüştür. Bu denklemin çözümünden iletkenlik hesaplamalarının değişik aşamalarında kullanılacak olan düzenli, pertürbe ve sürücü terim elde edilmiştir. Düzenli terim D_0 saçıcı etkiler olmadan önceki sistemin doğal gevşeme zamanını içerir. Bu işlemciye ait özfonksiyon ve özdeğerlerin belirlenmesi ile pertürbe olmamış Green fonksiyonu $G_0 = D_0^{-1}$ elde edilmiştir. D_0 işlemcisi öteleme ve dönmelere göre değişmez olduğundan G_0 da sadece $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ ve $\phi - \phi'$ 'nin bir fonksiyonudur.

Rastgele saçıcı potansiyeller üzerinden ortalama alınması $f(\mathbf{r}, v, \phi)$ fonksiyonunun bir parçası olan ve denge dağılımından sapmayı gösteren $g(\mathbf{r}, \phi)$ dağılım fonksiyonu üzerinden ortalama alınmasını gerektirir. Ortalama g değeri için ortalama G yani $\overline{D^{-1}}$ hesaplanmalıdır. $D^{-1} = (D_0 + W)^{-1}$ terimi seriye açılarak, serideki tüm terimler diyagramlara uygulanır. Bu terimlerin şekillenim ortalaması alındıktan sonra özenerji Σ tüm sadeleştirilemez diyagramların toplamını temsil eder. Hesaplamalarda Σ için sadeleştirilemez terimlerin toplamındaki ilk terim kullanılmıştır. Sadece ikinci dereceden W terimini içeren bu ilk terim $\Sigma = \overline{WD_0^{-1}W}$ 'dir. Diğer terimler sonucu çok fazla etkilememektedir. Ortalama Green fonksiyonu G , bu aşamadan sonra $\overline{D^{-1}} = (D_0 - \overline{WD_0^{-1}W})^{-1}$ cinsinden yazılmıştır. Şekillenim ortalaması alındıktan sonra G ötelemelere ve dönmelere göre değişmez olduğundan, $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; \phi - \phi')$ olarak ifade edilmiştir. Bunun anlamı $\overline{D^{-1}}$ teriminde içerilen özenerjinin de köşegen olmasıdır. Pertürbe olmamış Green fonksiyonunun hesaplanan değeri, düzenli işlemciye ait

özfonksiyon değeri ve pertürbe terim kullanılarak özenerji $\langle nk | \overline{WD_0^{-1}W} | nk \rangle$ ve dolayısı ile $\overline{D^{-1}} = (D_0 - \overline{WD_0^{-1}W})^{-1}$ hesaplanmıştır. Ortalama G yardımıyla önemli bir fiziksel nicelik olan $g(\mathbf{r}, \phi)$ elde edilmiştir. Akım yoğunluğu her bir elektrondan gelen hız katkısının $g(\mathbf{r}, \phi)$ dağılım fonksiyonu aracılığı ile ağırlıklandırılması ve hız üzerinden integral alınması ile elde edilmiştir. Elde edilen akım yoğunluğu denkleminde elektriksel iletkenlik ve öz direnç katsayıları belirlenmiştir.

Çalışmada manyetik alan ve durulma zamanı için farklı durumlar ele alınmıştır ve Lorentz kuvvetinde yerine yazılmıştır. Sistemin sonlu bir gevşeme zamanı olduğu ve gevşeme zamanının sonsuz olduğu durumların her ikisi de incelenmiştir. Sistemin doğal gevşeme zamanına katkı duvar düzensizliklerinden kaynaklanan saçılmalardan gelmiştir. Sonlu bir τ_0 için $\mathbf{B} \neq 0$ ve $\mathbf{B} = 0$ olduğu durumlar ve $\tau_0 = \infty$ için $\mathbf{B} = 0$ olduğu durum incelenmiştir. Ayrıca Hedegard ve Smith'e (1995) ait bir özfonksiyon değeri kullanılarak sonlu bir τ_0 için $\mathbf{B} \neq 0$ olduğu durumdaki çözümler anlatılarak, mevcut sonuçlarla birebir kıyaslama yapılması amaçlanmıştır.

Mirlin vd.'ne (1999) ait, \mathbf{B} manyetik alan ve ω frekans değerlerinin her ikisinin de sıfır limitinde hesaplanan gevşeme zamanı denklemini $\frac{1}{\tau} = \frac{1}{2\pi m^2 v_F^3} \int_0^\infty k^2 S(k) dk$, ilk defa

Denklem (3.120) ile duvar düzensizlikleri bulunan yarıiletken ince filmin iletkenlik hesaplamaları için kullanılmıştır. Mirlin vd.'ne (1999) ait denkleminde $S(k)$ potansiyel enerjinin korelasyon fonksiyonunun momentum uzayındaki değeridir. Denklem (3.120) ise, $1/\tau$ denkleminin Hedegard ve Smith'e (1995) ait bir yöntemle $\mathbf{B} = 0$ ve $\tau_0 = \infty$ durumunda hesaplanması sonucu elde edilmiştir. Denklem (3.120) kullanılarak elde edilen iletkenlik sonuçları, literatürde yaygın olarak kullanılan metodlar ile elde edilen sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Tez çalışmasında kullanılan yaklaşımda Denklem (3.74)'deki eşitliğin sağ tarafında çarpışma terimi yoktur, yalnızca sürücü terim bulunmaktadır. Yüzey saçıcıları olmadan önce yarıiletken sistem mükemmel iletken, $\tau_0 = \infty$, kabul edilerek, $\mathbf{B} = 0$ 'da çözümler yapılmıştır. Saçıcı etkiler W pertürbe

teriminde içerilmiştir. W teriminin neden olduğu Green fonksiyonuna ait özenerji $\int F(k)k^2 dk$ integralini içermektedir. Bu özenerji değeri Gaussyen model için $\Sigma_{\infty}^0(1) \sim -i/l$ ile üstel model için $\Sigma_{\infty}^0(1) \sim (-i/l)I(l)$ ile sonuçlanmıştır. İki farklı kabartı korelasyon fonksiyonu $F(\rho)$ için sonuçlar, büyük l değerlerinde bilinen yöntemlerle hesaplanan sonuçlarla uyum içerisindedir ve sonuçların uyumluluğu şekil 4.1 - 4.3'de görülmektedir. İletkenlik artan l değerleri için artış göstermektedir. Bu artış Gaussyen korelasyon fonksiyonu için doğrusal, üstel korelasyon fonksiyonu için ise hemen hemen doğrusaldır. Küçük l değerlerinde ise $l_{\min} \approx 3$ nm değerinin altındaki sonuçlar literatür ile uyumsuzluk göstermiştir. Bu yüzden Denklem (3.120), $l_{\min} \approx 3$ nm değerinin altında geçerli değildir. Küçük l değerleri büyük $\Sigma_{\infty}^0(1)$ değerlerine ve buna bağlı olarak küçük iletkenlik değerlerine yol açmıştır. Küçük l değerleri için bu yöntemle iletkenlik hesaplanması yapılmadığından bu problem ile daha önceden karşılaşmamıştır. Serbest elektron yaklaşımı $k_F l_{\tau} \gg 1$ ile l değerleri için $l_{\min} \approx 3$ nm olma şartı kullanılarak bu probleme çözüm getirilmiştir. Palasantzas ve Barnas'a (1997) ait yöntemde saçılma terimi W 'nin etkileri Boltzmann denkleminde eşitliğin sağ tarafında çarpışma terimi olarak yer almıştır.

Hedegard ve Smith'e (1995) ait bir özfonksiyon değeri kullanılarak sonlu bir τ_0 için $B \neq 0$ olduğu durumda, rastgele potansiyel enerji için Mirlin vd.'ne (1999) ait üstel model ve Hedegard ve Smith'e (1995) ait Gaussyen model kullanılarak mevcut sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Sonuçların uyumluluğu şekil 4.4 ve şekil 4.7'de görülmektedir.

Şekil 4.8' de ise $B_0 = 0$ ve $\delta B(\mathbf{r}) \neq 0$ durumu için hesaplanan değerler de literatürdeki sonuçlar ile uyumludur.

Tez çalışmasında hesaplamalar sonucu elde edilen değerlerin literatürdeki sonuçlar ile aynı mertebede olması çözümlerin doğruluğunu göstermektedir.

KAYNAKLAR

- Ballentine, L.E. and Hammerberg, J.E. 1984. Computation of electrical conductivity and thermoelectric power in strong scattering disordered metals. *Canad. J. Phys.*, 62, 692-700.
- Caceres, M.O. and Grigera, S.A. 2001. Concerning the microscopic linear response theory. *Physica A*, 291, 317-326.
- Calecki, D. 1986. Electron distribution functions and inelastic scattering in one and two dimensional structures. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 19, 4315-4328.
- Dennery, P. and Krzywicki, A. 1967. *Mathematics for Physicists*. Harper ann Row, Newyork.
- Economou, E.N. and Soukalis, C.M. 2005. *Disorder and localization theory*. Elseiver Ltd., 445-452.
- Fishman, G. and Calecki, D. 1989. Surface induced resistivity of ultrathin metallic films: A limit law. *Phys. Rev. Lett.*, 62, 1302-1305.
- Fishman, G. and Calecki, D. 1991. Influence of surface roughness on the conductivity of metallic and semiconducting quasi-two-dimensional structures. *Phys. Rev. B*, 43, 11581-11585.
- Gradshteyn, I.S. and Ryzhik, I.M. 1980. *Table of Integrals, Series and Products* . Academic Press, New York.
- Hedegard, P. and Smith, A. 1995. Solution of the Boltzmann equation in a random magnetic field. *Phys. Rev. B*, 51, 10869-10874.

- Jones, D.S. 1966. Generalised Functions. McGraw-Hill, Newyork.
- Kubo, R. 1956. A general expression for the conductivity tensor. *Canad. J. Phys.*, 34, 1274-1277.
- Meyer, J. R., Arnold, D. J., Hoffman, C. A. and Bartoli, F. J. 1991. Interface roughness limited electron mobility in HgTe-CdTe superlattices. *Appl. Phys. Lett.*, 58, 2523-2525.
- Meyerovich, A.E. and Stepaniants, S. 1995. Transport in channels and films with rough surfaces. *Phys. Rev. B*, 51, 17116-17130.
- Meyerovich, A.E. and Ponomarev, I.V. 2002. Surface roughness and size effects in quantized films. *Phys. Rev. B*, 65, 155413-1 – 155413-15.
- Meyerovich, A.E and Ponomarev, V.I. 2003. Quantum size effect in conductivity of multilayer metal films. *Phys. Rev. B*, 67, 165411-1 - 165411-10.
- Mirlin, A.D. and Wölfle, P. 1997. Composite fermions in the fractional quantum Hall effect: Transport at finite wavevector. *Phys. Rev. Lett.*, 78, 3717-3720.
- Mirlin, A.D. and Wölfle, P. 1998. Weiss oscillations in the preseure of small-angle impurity scattering. *Phys.Rev. B*, 58, 12986-12992.
- Mirlin, A.D., Wilkie, J., Evers, F., Polyakov, D.G. and Wölfle, P. 1999. Strong magnetoresistance induced by long-range disorder. *Phys. Rev. Lett.* , 83, 2801-2804.
- Palasantzas, G. and Barnas, J. 1997. Surface-roughness fractality effects in electrical conductivity of single metallic and semiconducting films. *Phys. Rev. B*, 56, 7726-7731.

- Palasantzas, G. 1998. Surface roughness and grain boundary scattering effects on the electrical conductivity of thin films. *Phys. Rev. B*, 58, 9685-9688.
- Palasantzas, G. and De Hosson, J.Th.M. 2003. Effect of roughness on the conductivity of semiconducting thin films/quantum wells with double rough boundaries. *J. Appl. Phys.*, 93, 320-324.
- Palasantzas, G. 2005. Influence of anomalous roughness growth on the electrical conductivity of thin films. *Phys. Rev. B*, 71, 205320-1 - 205320-5.
- Reis, G., Hastreiter, E., Brückl, H. and Vancea, J. 1991. Thickness-dependent thin-film resistivity: Application of quantitative scanning-tunneling-microscopy imaging. *Phys. Rev. B*, 43, 5176-5179.
- Rossiter, P.L. 1987. *The Electrical Resistivity of Metals and Alloys*. Cambridge University Press, Newyork.
- Sasaki, H., Noda, T., Hirakawa, K., Tanaka, M. and Matsusue, T. 1987. Interface roughness scattering in GaAs/AlAs quantum wells. *Appl. Phys. Lett.*, 51, 1934-1936.
- Seeger, K. 1989. *Semiconductor physics*, Springer-Verlag, Berlin.
- Sheng, L., Xing, D.Y. and Wang, Z.D. 1995. Transport theory in metallic films: Crossover from the classical to the quantum regime. *Phys. Rev. B*, 51, 7325-7328.
- Stern, F. 1992. in *Physics of Nanostructures*, edited by J. H. Davies and A. R. Long (Proceedings of the 38th Scottish Universities Summer School in Physics 1991, NATO Advanced Study Institute), 31–52.
- Thouless, D.J. 1974. Electrons in disordered systems and the theory of localization. *Phys. Rep.*, 13, 93-142.

Zhao, Y.P., Wang G.C. and Lu, T.M. 2001. Characterization of Amorphous and Crystalline Rough Surfaces-Principles and Applications. Experimental Methods in The Physical Science 1, 37, Academic Press, New York.

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Didem (ÇAKMAK) KETENOĞLU
Doğum Yeri : ANKARA
Doğum Tarihi : 19.04.1980
Medeni Hali : Evli
Yabancı Dili : İngilizce

Eğitim Durumu (Kurum ve Yıl)

Lise : Ankara Ayrancı Süper Lisesi, 1994-1998.
Lisans : Ankara Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Fizik Mühendisliği Bölümü, 1998-2002.
Yüksek Lisans : Ankara Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı, 2002-2004.
Doktora : Ankara Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı, 2004-2011.

Çalıştığı Kurum ve Yıl

Ankara Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Fizik Mühendisliği Bölümü, 2002-

Yayınları (SCI ve diğer)

- **Cakmak, D.**, Elmali, A., Elerman, Y., Cakir, O. 2004. Influence of the Ni substitution for Co on $4f-3d$ interactions in $ErCo_{10-x}Ni_xSi_2$ ($0 \leq x \leq 10$). Solid State Communications, 131 (3-4), 241-243.

- *Unal, B., Ketenoglu, D. 2011. On the self energy of 2D electron gas under random magnetic field. Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures. (Yayına sunuldu).*
- *Unal, B., Ketenoglu, D. 2011. Wall roughness effect on the electronic conductivity of semiconducting thin films. Physica B: Condensed Matter. (Yayına sunuldu).*