

ANKARA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

DOKTORA TEZİ

**DÜZENSİZ İKİ VE ÜÇ BOYUTLU METALİK SİSTEMLERDE MANYETİK
ALANLA İLETKENLİK DEĞİŞİMİNİN (MAGNETORESİSTANÇ) SAYISAL
HESABI**

KEZİBAN USTA

FİZİK MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI

ANKARA

2009

Her hakkı saklıdır

TEZ ONAYI

Keziban USTA tarafından hazırlanan “Düzensiz iki ve üç boyutlu metalik sistemlerde manyetik alanla iletkenlik deęişiminin (magnetoresistance) sayısal hesabı” adlı tez çalışması 19/01/2009 tarihinde aşığıdaki jüri tarafından oy çokluğu 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

Üye : Doç. Dr. Mehmet KABAK

Ankara Üniversitesi Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı

Üye : Doç. Dr. Tuğrul HAKİOĞLU

Bilkent Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı

Üye : Prof. Dr. Mesude SAĞLAM

Ankara Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı

Yukarıdaki sonucu onaylarım.

Prof. Dr. Orhan ATAKOL

Enstitü Müdürü

ÖZET

Doktora Tezi

DÜZENSİZ İKİ VE ÜÇ BOYUTLU METALİK SİSTEMLERDE MANYETİK ALANLA İLETKENLİK DEĞİŞİMİNİN (MAGNETORESISTANCE) SAYISAL HESABI

Keziban USTA

Ankara Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Basri ÜNAL

Bu çalışmada düzensiz iki ve üç boyutlu metalik sistemlerde manyetik alanla iletkenliğin (manyetodirencin) değişimi incelenmiştir. Çalışmada Anderson Hamiltoniyeni ve Kubo formülü kullanılmıştır. Öncelikle iletkenlik için difüzyon ve yerel durumlar yoğunluğu hesaplanmıştır. Yerel durumlar yoğunluğunun hesaplanabilmesi için özyineleme(recursion) yöntemi kullanılmıştır. Yayılım(difüzyon) hesabı için özvektörün mümkün olduğu kadar doğru olarak hesaplanabilmesi için filtreleme(filtering) tekniği kullanılmıştır. $W = 4.0$, $W = 2.0$ düzensizlik parametreleri için 2500, 3600, 5184, 6400, 8100, 10000 ve 12100 atomlu iki boyutlu sistemlerde, $W = 0.66$ ve $W = 0.2$ düzensizlik parametreleri için 2500 ve 5184 atomlu iki boyutlu sistemlerde, $W = 8.0$ düzensizlik parametresi için 75 atomlu üç boyutlu basit kübik sistemde manyetik alanla iletkenliğin değişimi incelenmiştir. $W = 4.0$ ve $W = 2.0$ büyük düzensizlik parametrelerinde $B = 0 T$ da iletkenlik sistemin boyutu N ile önce artış sonra azalış göstermektedir. $W = 0.66$ ve $W = 0.2$ küçük düzensizlik parametrelerinde ise $B = 0 T$ da iletkenlik, sistemin boyutu N ile azalış göstermektedir. Bu iki davranışın sebebi çalışmada açıklanmıştır. İki boyutlu sistemlerde büyük ve küçük düzensizliklerde ($W = 4.0$, $W = 2.0$, $W = 0.66$ ve $W = 0.2$), manyetik alanla iletkenlik dalgalanmaktadır. Üç boyutlu sistemlerde ise manyetik alanla iletkenlik değişmemiştir.

Ocak 2009, 77 sayfa

Anahtar Kelimeler: İletkenlik, difüzyon, yerel durumlar yoğunluğu, manyetik alan, düzensizlik

ABSTRACT

Ph.D. Thesis

NUMERIC MAGNETORESISTANCE CALCULATIONS IN DISORDERED TWO AND THREE DIMENSIONAL METALLIC SYSTEMS

Keziban USTA

Ankara University
Graduate school of Natural and Applied Science
Department of Engineering Physics

Supervisor: Prof.Dr. Basri ÜNAL

In this work the change of conductivity with magnetic field in two and three dimensional metallic systems was examined. The Anderson Hamiltonian and Kubo formula was employed. Firstly diffusivity and density of states were calculated for conductivity. The Recursion technique was used for density of states calculations. The filtering technique was used for diffusivity calculation because of the necessity that the eigenvector ought to be as true as possible. Change of conductivity with magnetic field was investigated for three cases; first one was two dimensional systems of 2500, 3600, 5184, 6400, 8100, 10000, 12100 atoms with disorder parameters of $W = 4.0$ and $W = 2.0$, the second condition was two dimensional systems of 2500 and 5184 atoms with disorder parameters of $W = 0.66$ and $W = 0.2$ and the third one was three-dimensional simple cubic system of 75 atoms with $W = 8.0$. The conductivity firstly increased and then decreased with system size N at $B = 0T$ in $W = 4.0$ and $W = 2.0$ large disorder condition, but it decreased with system size N at $B = 0T$ when disorder parameters were small, $W = 0.66$ and $W = 0.2$. The reason of these two behaviors were explained in the work. In two dimensional system with large and small disorder ($W = 4.0$, $W = 2.0$, $W = 0.66$ and $W = 0.2$), conductivity fluctuated with magnetic field whereas in three dimensional systems, almost no change of conductivity with the magnetic field was seen.

January 2009, 77 pages

Key Words : Conductivity, diffusivity, localized density of states, magnetic field, disorder

TEŐEKKÜR

Çalıőmalarımı yönlendiren, araőtırmalarımın her aőamasında bilgi, öneri ve yardımlarını esirgemeyerek akademik ortamda olduđu kadar beőeri iliőkilerde de engin fikirleriyle yetiőme ve geliőmeme katkıda bulunan danıőman hocam sayın Prof. Dr. Basri ÜNAL'a, çalıőmalarım sırasında önemli katkılarda bulunan ve yönlendiren Doç. Dr. Mehmet KABAK'a, çalıőmalarım süresince maddi manevi desteklerini esirgemeyen deđerli bölüm başkanımız sayın Prof. Dr. Ali Ulvi YILMAZER'e, ve Prof. Dr. Çelik TARIMCI'ya, çalıőmalarım süresince birçok fedakarlıklar göstererek beni destekleyen eőim, ođlum ve aileme en derin duygularla teőekkür ederim.

Bu tez çalıőması, 'Paralel hesaplama (PARCOMP) yoluyla elektriksel iletkenliđin hesaplanması ve büyük sistemlerin modellenmesi'' konulu BİYEP projesi tarafından desteklenmiőtir.

Keziban USTA
Ankara, Ocak 2009

İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	i
ABSTRACT	ii
TEŞEKKÜR	iii
İÇİNDEKİLER	iv
SİMGELER DİZİNİ	v
ŞEKİLLER DİZİNİ	vii
ÇİZELGELER DİZİNİ	viii
1 GİRİŞ	1
2 KURAMSAL TEMELLER.....	7
2.1 Klasik Yaklaşım	7
2.1.1 Boltzmann taşınım denklemleri.....	7
2.1.2 Elektriksel iletkenlik	10
2.1.3 Hall olayı ve magnetodirenç	12
2.2 Kuantum Mekaniksel Yaklaşım	15
2.2.1 Çizgisel yanıt teorisi	15
3 MATERYAL VE YÖNTEM.....	23
3.1 Kubo Formülü	23
3.2 Yerel Durumlar Yoğunluğu	26
3.3 Özyineleme(Recursion) Yöntemi	30
3.4 Filtreleme(Filtering) Tekniği.....	33
3.5 Yayınımın(Difüzyonun) Hesaplanması	33
3.6 Manyetik Alanda Hamiltoniyen	36
4 BULGULAR	41
5. TARTIŞMA VE SONUÇ.....	64
KAYNAKLAR	71
ÖZGEÇMİŞ.....	76

SİMGELER DİZİNİ

A	Vektör Potansiyeli
a_m^+	Site Yaratma İşlemcisi
a_m	Site Yoketme İşlemcisi
a	Komşular Arasındaki Mesafe
B	Magnetik Alan
$D(E)$	Yayınım(Difüzyon)
$\bar{D}(E)$	Ortalama Yayınım
e	Elektronun Yüğü
E	Elektronun Enerjisi
E_F	Fermi Enerjisi
E	Elektrik Alan
ϵ_0	Boşluğun Elektrik Geçirgenliğı
ϵ	Rastgele Sayılar
$f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$	Faz Uzayı Dağılım Fonksiyonu
f_0	Fermi-Dirac Dağılım Fonksiyonu
$F(t)$	Dış Kuvvet
J	Akım Yoğunluğu
$G(E)$	Green Fonksiyonu
$g(E)$	Atom Başına Durumlar Yoğunluğu
\hat{H}	Hamiltoniyen İşlemcisi
$I_{m'm}$	Magnetik Alan Yokkenki m' ve m Arasındaki Rezonans İntegrali
k	Dalga Sayısı
k_B	Boltzmann Sabiti
k_F	Fermi Yarıçapı
l	Ortalama Serbest Yol
L	Sistemin Uzunluğu
m	Kütle
m^*	Etkin Kütle
N	Atom Sayısı
n	Birim Hacim Başına Elektron Sayısı
$n(E)$	Yerel Durumlar Yoğunluğu
P	Momentum
\mathbf{r}	Elektronun Konumu
\mathbf{R}_i	i 'inci Atomun Yer Vektörü
S_F	Fermi Yüzeyinin Alanı
T	Sıcaklık
$V(\mathbf{r})$	Potansiyel
V_{nm}	İki Komşu Arasındaki Aktarım Enerjisi
W	Düzensizlik Parametresi
$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$	k İlk Durumdan k' Son Durumuna Geçiş Oranı

\mathbf{v}	Hız
v_F	Fermi Hızı
ω	Açısal Frekans
σ	Elektriksel İletkenlik
ρ	Özdirenç
τ	Gevşeme Zamanı
h	Planck Sabiti
\hbar	$h/2\pi$
π	Pi sayısı
χ_i	Magnetik Alınganlık
Ω	Sistemin Hacmi
ϕ	Akı Yoğunluğu
$\phi(\mathbf{r}, \mathbf{k})$	Fermi Dirac Dağılım Fonksiyonundan Sapma
ξ	Yerelleşme(Localization) Uzunluğu

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 3.1 Hamiltoniyen matrisi için kullanılan $N = 4$ atomlu kare yapı.....	26
Şekil 3.2 İdeal basit kübik yapı kristal için enerji ile durumlar yoğunluğunun değişimi	30
Şekil 4.1 $V=0.5$ için manyetik alanla durumlar yoğunluğunun değişimi	45
Şekil 4.2 Kare yapıda $V=0.25$ için durumlar yoğunluğu	56
Şekil 4.3 Kare yapıda $V=0.5$ için durumlar yoğunluğu	56
Şekil 4.4 Kare yapıda $V=1.5$ için durumlar yoğunluğu	57
Şekil 4.5 Kare yapıda $V=5.0$ için durumlar yoğunluğu	57
Şekil 4.6 Basit kübik yapıda $V=0.125$ için durumlar yoğunluğu.....	58
Şekil 4.7 Kare yapıda $V=0.25$ için manyetik alanla iletkenliğin değişimi	58
Şekil 4.8 Kare yapıda $V=0.5$ için manyetik alanla iletkenliğin değişimi	59
Şekil 4.9 Kare yapıda $V=1.5$ için manyetik alanla iletkenliğin değişimi	59
Şekil 4.10 Kare yapıda $V=5.0$ için manyetik alanla iletkenliğin değişimi	60
Şekil 4.11 Basit kübik yapıda $V=0.125$ için manyetik alanla iletkenliğin değişimi	60
Şekil 4.12 Kare yapıda $V=0.5$ için sistem büyüklüğüne karşı yayılım değişimi	62
Şekil 4.13 Kare yapıda $V=0.25$ için sistem büyüklüğüne karşı yayılım değişimi	62
Şekil 4.14 $V=0.5$ için tek şekillenim alındığında manyetik alanla iletkenlik değişimi...	63
Şekil 4.15 $V=0.25$ için tek şekillenim alındığında manyetik alanla iletkenlik değişimi	63

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 4.1 50x50 ve 72x72 kare yapı için E_F civarındaki üç farklı enerji de $D(E)$..	42
Çizelge 4.2 Fortran programındaki A ve B2 katsayıları	44
Çizelge 4.3 $B(T)$ 'nın farklı değerleri için $H = \frac{e}{2\hbar} Ba^2$ parametresi.....	45
Çizelge 4.4 $V = 0.25$ de, $N = 2500$ için değişik manyetik alanlarda yayılım, durumlar yoğunluğu ve iletkenlik değerleri (20 farklı şekillenim alındığında).....	46
Çizelge 4.5 $V = 0.25$ de, $N = 5184$ için değişik manyetik alanlarda yayılım, durumlar yoğunluğu ve iletkenlik değerleri (20 farklı şekillenim alındığında).....	46
Çizelge 4.6 $V = 0.5$ de, $N = 2500$ için değişik manyetik alanlarda yayılım, durumlar yoğunluğu ve iletkenlik değerleri (20 farklı şekillenim alındığında).....	47
Çizelge 4.7 $V = 0.5$ de, $N = 5184$ için değişik manyetik alanlarda yayılım, durumlar yoğunluğu ve iletkenlik değerleri (20 farklı şekillenim alındığında).....	47
Çizelge 4.8 $V = 1.5$ de, $N = 2500$ için değişik manyetik alanlarda yayılım, durumlar yoğunluğu ve iletkenlik değerleri (20 farklı şekillenim alındığında).....	47
Çizelge 4.9 $V = 1.5$ de, $N = 5184$ için değişik manyetik alanlarda yayılım, durumlar yoğunluğu ve iletkenlik değerleri (20 farklı şekillenim alındığında).....	48
Çizelge 4.10 $V = 5.0$ de, $N = 2500$ için değişik manyetik alanlarda yayılım, durumlar yoğunluğu ve iletkenlik değerleri (20 farklı şekillenim alındığında).....	48
Çizelge 4.11 $V = 5.0$ de, $N = 5184$ için değişik manyetik alanlarda yayılım, durumlar yoğunluğu ve iletkenlik değerleri (20 farklı şekillenim alındığında).....	48
Çizelge 4.12 $V = 0.125$ de, $N = 125$ için değişik manyetik alanlarda yayılım, durumlar yoğunluğu ve iletkenlik değerleri (20 farklı şekillenim alındığında).....	49
Çizelge 4.13 $V = 0.5$ de, $N = 2500$ için değişik manyetik alanlarda yayılım ve iletkenlik değerleri (tek şekillenim alındığında)	50
Çizelge 4.14 $V = 0.5$ de, $N = 5184$ için değişik manyetik alanlarda yayılım ve iletkenlik değerleri (tek şekillenim alındığında)	51
Çizelge 4.15 $V = 0.5$ de, $N = 6400$ için değişik manyetik alanlarda yayılım ve iletkenlik değerleri (tek şekillenim alındığında)	52
Çizelge 4.16 $V = 0.25$ de, $N = 2500$ için değişik manyetik alanlarda yayılım ve iletkenlik değerleri (tek şekillenim alındığında)	53
Çizelge 4.17 $V = 0.25$ de, $N = 5184$ için değişik manyetik alanlarda yayılım ve iletkenlik değerleri (tek şekillenim alındığında)	54
Çizelge 4.18 $V = 0.25$ de, $N = 6400$ için değişik manyetik alanlarda yayılım ve iletkenlik değerleri (tek şekillenim alındığında)	55

1 GİRİŞ

Metallerin uçları arasına gerilim uygulandığında akım oluşur ve bu akımı oluşturan elektronlar, numune içindeki kristal kusurları gibi kristalin mükemmelliğini bozan sebeplerden dolayı %100 serbestlikle metalin içinde serbestçe hareket edemez. Buna elektriksel direnç denir ve tüm metallerde gözlenir. Bunun yanı sıra metallerdeki elektriksel direnç manyetik alanın değişmesiyle de değişim göstermektedir. Bir metalin herhangi bir manyetik alana girmesi sonucunda elektriksel direncinin değişmesi olayına manyetodirenç (magnetoresistance MR) denir. Direnç artan manyetik alanla birlikte artabilir (pozitif MR) yada azalabilir (negatif MR). Herhangi bir metal için ölçülen MR sadece uygulanan manyetik alanın şiddetine bağlı değil, aynı zamanda metalden geçen akıma göre uygulanan manyetik alanın yönüne de bağlıdır. Ferromanyetik malzemelerde ve bunların alaşımlarında yöne bağımlı (anizotropik manyetodirenç) AMR gözlenir. AMR de manyetik alan akıma dik olduğu zaman enine manyetodirenç (EMR), paralel olduğu zaman boyuna manyetodirenç (BMR) ölçülür. Cu ve Ag gibi ferromanyetik olmayan metallerde hem enine hem de boyuna olan MR uygulanan manyetik alanın artmasıyla çok az bir artış gösterir (Alper 1995). Ferromanyetik metallerde (Fe, Ni, Co) ve bunların alaşımlarında elektriksel direnç, manyetik alan akıma paralel olduğu zaman manyetik alan artarken artar, dik olduğu zaman manyetik alan artarken direnç azalır. Her iki durumda da belli bir manyetik alan değerinin üstünde dirençteki azalma veya artma doyuma ulaşır (Şahin 2006).

Her ne kadar MR yapısal olarak üstün iletkenlik veya üstün akışkanlık gibi düşük sıcaklık olayı değilse de, düşük sıcaklıktaki oldukça saf metaller dışında pratikte laboratuvarlarda bulunan manyetik alanlarla gözlenmesi oldukça zordur. Yarıiletkenlerde ve yarı metal olan bizmutta (10^{-5} iletim elektronu atom başına) oda sıcaklığında bile orta şiddetteki manyetik alana duyarlılık vardır ve bu duyarlılık 1886'dan beri manyetik alanı ölçmeye yarayan toplu cihaz yapımına yol açmıştır (Leduc 1886, Donovan and Conn 1949, Pippard 1989). $B= 0.6$ T'luk enine bir manyetik alan altında dirençte yaklaşık % 18'lik bir değişim gözlenmiştir. Kapitza (1928) tarafından oda sıcaklığında bizmutla yapılan deneyde manyetik alan 24 T yapılmış dirençte 40 kat artma gözlenmiştir ve bu artış B ile doğrusaldır. Oda koşulları altında bakırın direnç değişimi

ancak %2 kadardır (Kapitza 1929), fakat sıcaklık 4⁰K'e kadar indirildiğinde 10 T'lık manyetik alanın bakırın direncini 14 kat arttırdığı deneysel olarak gözlenmiştir (Launay 1959). 10 T'lık manyetik alan uygulayarak saf bizmutun direncinin birkaç milyon değerinde bir çarpan kadar değiştiği görülebilir (Alers and Weber 1953).

1945'ten sonra yarıiletken fiziğindeki gelişmeler taşınım özelliklerine karşı ilgi uyandırdı (Blatt 1957). Hall etkisi taşıyıcı yoğunluğunun yorumlanmasında daha dikkat çekti fakat diğer taşınım özellikleri de unutulmadı. Seitz (1950)'nin gösterdiğine göre klasik yaklaşımda iletkenlik tensörü σ_{ij} B cinsinden kuvvet serisine açıldığında kübik kristaller için kareli terime kadarki kısmın en genel ifadesi

$$\mathbf{J} = \sigma_0 \boldsymbol{\varepsilon} + \alpha \boldsymbol{\varepsilon} \times \mathbf{B} + \beta B^2 \boldsymbol{\varepsilon} + \gamma (\boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{B}) \mathbf{B} + \delta T^0 \boldsymbol{\varepsilon} \quad (1.1)$$

şeklinde yazılabilir. Burada σ_0 ve $\alpha - \delta$ katsayıları B 'den bağımsız olup doğal olarak T sıcaklığına bağlıdır. T^0 3x3 tipinde bir matristir, küp eksenlerine göre yazıldığında köşegendir ve $T_{ij}^0 = \delta_{ij} B_i B_j$ şeklindedir. Sağdaki ilk üç terim B 'nin yönelimine göre yönden bağımsız özellikte bir iletkenlik tensörünü tanımlar, dördüncü terim enine MR ile ilgisi olmayan tamamen boyuna MR ile ilgili bir terimdir ve beşinci son terim ise enine etkinin yöne bağlılığını gösterir. Yukarıdaki denkleme göre $\boldsymbol{\varepsilon}$ yönündeki akım \mathbf{B} 'ye değil B^2 'ye bağlıdır, $\boldsymbol{\varepsilon} \times \mathbf{B}$ 'yi içeren terim ise $\boldsymbol{\varepsilon}$ 'ye dik yöndeki akımı yani Hall akımını gösterir. Deneyleri uygun şekilde yaparak buradaki katsayıların hepsi belirlenebilir, fakat bunların elektronik yapıya ve saçılma olaylarına bağlanarak açıklanması kolay değildir. Seitz germanyum için enerji yüzeylerinin küresel kabul edildiği, gevşeme zamanı τ 'nun enerjiye ve doğrultuya bağlı olduğu basitleştirilmiş bir model seçti. Bu yolla elde edilen hesaplamalar deneyle az çok uyum göstermiştir.

Daha önce B ile doğrusal değişen etki olarak Kapitza (1928)'in yaptığı deneylerden bahsedilmişti. B ile doğrusal olarak değişen bu etkiyi klasik yaklaşımda açıklama olanağı olmadığından bu olayın kuantum mekaniksel olarak açıklanması gerekir. Abrikosov (1969) kuvvetli manyetik alan içinde elektron hareketinin Landau kuantizasyonunu dikkate alarak, Landau bantları arasındaki uzaklığın B ile orantılılığı

nedeniyle, çok büyük olmasından dolayı, bunlardan ancak en dipteki bandın elektronları bulundurduğunu öne süren bir model geliştirdi. Bu model için direncin B ile doğrusal olarak değiştiğini gösterdi. Son yıllarda B ile doğrusal değişen MR ölçümleri yapılmaya devam edilmektedir (Xu et.al 1997) ve Ag_2Te gibi sıcaklıkla yasak enerji aralığı kaybolarak yarıiletkeneye dönüşen maddeler üzerinde çalışılmıştır. Abrikosov (2003)'ün çalışmasında alışlagelmişin dışında, doğrusal band yapısına sahip metal modeli ele alınmış ve bu modelde öz direncin B ile doğrusal olarak değiştiği gösterilmiştir.

Uygulanan dış manyetik alanın etkisi ile iletkenlikte oluşan değişme katıhal fiziğinin gerek deneysel gerekse kuramsal olarak ilgilendiği ana konulardan birisidir. Bu konunun önemi, çok değişik kullanım alanlarının, örneğin manyetik yolla yapılan kayıtlar veya okumaların yanı sıra duyarlılık manyetik alan ölçme cihazlarının yapısını ilgilendirmesinden ileri gelmektedir.

Bugünlerde en güncel konulardan biri dev manyetodirenç'tir (giant magnetoresistance GMR). GMR elektriksel dirençteki oldukça büyük değişmedir. GMR 1988 yılında Albert Fert tarafından keşfedilmiştir. Birbirini izleyen ferromanyetik tabakalarda manyetik momentlerin gerçek yöneliminin, uygulanan alanın bir fonksiyonu olarak değiştiği ferromanyetik / paramanyetik çoklu yapılarda gözlenir. Temelde GMR manyetik metaldeki elektronların elektriksel direncine bağlıdır. Bu manyetik metaldeki elektron spin doğrultusu filmlerin manyetik momentine paralel ya da antiparaleldir. Paralel spine sahip elektronlar daha az saçılırlar ve bu yüzden bu sistemler düşük bir dirence sahiptirler. Manyetik tabakaların momentleri düşük alanda antiparalel olduğunda her iki manyetik tabakanın da düşük saçılma oranlarına sahip elektronları yoktur, bu direnci artırır. Manyetik alan uygulandığında manyetik tabakaların momentleri aynı yöne yönelirler, spini paralel olan elektronlar tabaka içinden özgürce geçerler ve elektriksel direnç düşer. Yapının direnci bu yüzden komşu manyetik tabakalarda manyetik momentler arasındaki açının cosinüsü ile orantılıdır (Chaiken et al. 1990, Chaiken 1997, <http://www.osti.gov/bridge/servlets/purl/16377-4X7wHX/native/16377.pdf>, 2008).

GMR'nin teknolojik uygulamaları veri toplama endüstrisinde. IBM ilk olarak GMR teknolojisine dayalı ürettiği sabit diskleri piyasaya sürmüştür ve bu günlerde bütün disk sürücülerinde kullanılmaktadır. Sabit disklerde GMR okuma duyucusu bir spin-value tekniği kullanılarak oluşturulur. Spin value direnci $H=0$ yakınlarında küçük alan bölgelerindeki periyodik değişiklikleri tanımlar. Sabit disk sürücünde manyetik bit'ler okuyucu başın altından geçerken, spin valuedeki duyma tabakasının manyetik yönelimi direnç değişikliği sonucunda değişir. GMR'nin diğer uygulama alanları otomotiv sektörü ile ilgili algılayıcılar, katıhal alanı ve kalıcı manyetik belleklerdir.

Sisteme uygulanan manyetik alanın çok şiddetli olması halinde durumlar yoğunluğunda değişmeler meydana gelir ve sonuçta öz direnç B 'ye karşı titreşimli bir değişme gösterir (Shubnikov-de Haas oscillations) (Pippard 1989). Landau modeli ile işe başlayarak, ek bir periyodik potansiyelin varlığını pertürbasyon gibi işleme sokarsak Landau enerji düzeylerinin sonsuz katlı dejenereliliğinin kaldırıldığını ve her bir düzeyin birer Landau enerji bandına dönüştüğünü görürüz (Wannier 1962, Rauh et.al 1974, Wannier 1975, Obermier and Wannier 1976, Wannier et.al 1979). Ayrıca dönüşen ve genişleyen bu Landau bantları birkaç ayrık bant halinde de yarılabılır yani her bir Landau bandı içinde ek yasak enerji aralıkları oluşabilir (Czycholl and Ponischoviki 1988). Biz daha basit hal olan zayıf B hali ile ilgileneceğiz ve durumlar yoğunluğunda bir değişme olmadığını varsayacağız.

B ile doğrusal artan MR'nin kuantum mekaniksel açıklaması 1990'lı yıllarda yapıldıktan sonra, MR üzerindeki çalışmalar akıma dik uygulanan sabit B 'a ek olarak bulunan değişik saçıcı potansiyeller kullanılarak gerek sayısal gerekse analitik yöntemlerle günümüze kadar devam etmiştir. Bunları gelişigüzel elektrik potansiyel (RP) ve gelişigüzel manyetik alan (RMF) modellemesi diye ikiye ayırabiliriz. Birincisinde $V(r)$ yapı içinde rastgele noktalarda merkezlenmiş, $v(r - r_i)$ gibi uzun veya kısa erişimli çok sayıda potansiyelin toplamından oluşur. İkincisinde ise elektron akımına dik yönde uygulanan $B(r)$ 'nin yerden yere değişen $b(r - r_i)$ gibi bileşenlerden oluştuğu kabul edilir (Hedegard and Smith 1995). RP çalışmalarında sık kullanılan bir potansiyel Gaussiyen bağdaştırıcılı (korrelator) potansiyeldir ve doğrudan uzayda

$$\overline{V(r)V(r')} = n_i \frac{V_G^2}{2\pi r_c^2} e^{-(r-r')^2/2r_c^2} \quad (1.2)$$

şeklinde yazılabilir. Fourier dönüşümü alındığında ise, \mathbf{k} dalga vektörü uzayında, $\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \mathbf{q}$ olmak üzere,

$$\overline{|V_q|^2} = n_i \frac{V_G^2}{S} e^{-q^2 r_c^2/2} \quad (1.3)$$

şeklinde yazılabilir (Akerms and Wolf 1988, Baranger and Stone 1989). Burada S sistemin alanı (hacmi), r_c bağdaşıklık(korelasyon) uzunluğu, V_G potansiyelin şiddeti ve n_i de safsızlık derişimidir. Uzun erişimli bu potansiyel için yapılan analitik çalışma Boltzmann taşınım denkleminin çözümünde Fermi yüzeyindeki elektronların açisal difüzyona uğradığını kabul ederek yapıldığında pozitif MR özelliği göstereceğini bulmuştur (Mirlin 1999). Öte yandan kısa erişimli potansiyeller için $H = H_0 + \delta V(r)$, $\hat{H}_0 = (\hat{p} + \mathbf{A})^2 / 2m$ model Hamiltoniyenin saçıcı potansiyelinin \mathbf{r} 'ye bağılılığı,

$$\delta V(r) = \sum_i \varepsilon_m \delta(r - r_i) \quad (1.4)$$

biçiminde yazılarak analitik hesaplamaya konu olmuştur (Joynt 1984). Aynı modelin orbital (site) temsilindeki yazımı Anderson Hamiltoniyeni olarak bilinir ve

$$\hat{H} = \sum_n \varepsilon_n a_n^+ a_n + \sum_{n,m} V_{nm} a_n^+ a_m \quad (1.5)$$

şeklinde yazılır ve burada ε_n 'ler $-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}$ aralığındaki gelişigüzel sayılardır, V_{nm} ise düzenli yapı oluşturan atomların (komşu) ikisi arasındaki aktarım (transfer) enerjisidir ve manyetik alanın etkisiyle üstel şekilde sanal bir evre çarpanı kazanmıştır (Fışchuk and Rudko 1978, 1980). Doğrudan doğruya Kubo ifadesinden σ iletkenliğini (Stein and Krey 1980, Ballentine and Hammerberg 1984) veya Landauer formülünden L_x, L_y

boyutlu dikdörtgen (veya 3 boyutta $L_x.L_y.L_z$ boyutlu) yapı için g konduktansını (Lee and Fisher 1981, Stone 1985) hesaplayan sayısal çalışmalarda genellikle denklem (1.5) ile verilen Anderson modeli kullanılmıştır.

Bu tezdeki çalışmada, biz de bu modeli kullanacağız, kullanacağımız modele ilişkin ayrıntılı açıklama bölüm 3 de verilecektir. İlk önce doğrudan doğruya Kubo ifadesinden B 'ye bağlı DC iletkenlik hesaplanacak ve çeşitli W saçılma şiddetleri için $\sigma - B$ eğrileri elde edilecektir. Anılan model Hamiltoniyen için literatürde böyle bir çalışma yapılmadığından, bulunan $\sigma - B$ eğrileri ya $g - B$ sayısal eğrileriyle veya deneysel eğrilerle karşılaştırılacaktır. Ayrıca sonuçların sistem büyüklüğüne bağlılığından lokalizasyon (yerelleşme) özellikleri yorumlanacaktır.

2 KURAMSAL TEMELLER

2.1 Klasik Yaklaşım

2.1.1 Boltzmann taşınım denklemi

Uygulanan manyetik alanın akımda ne gibi bir değişikliğe yol açtığını klasik yoldan anlamaya çalışırsak, bunu yapmanın en açık yolu Boltzmann taşınım denklemini kullanmaktır (Rossiter 1987, Mizutani 2003). Kararlı durumda, uygulanan dış alan, saçılma olayı, bozukluklar ve bunlardan başka kristaldeki periyodik potansiyel sayesinde elektron hızlandırılır. Boltzmann taşınım denklemi, dalga paketi dalga vektörü \mathbf{k} 'da merkezlenmiş olan \mathbf{r} konumundaki elektron ve boşluklar için saçılma olayının varlığında, dış alan uygulandığında kararlı durumda dağılımın dengesi olarak formüllendirilir.

İlk olarak sadece sıcaklık gradyentine ve \mathbf{v}_k hızına sahip elektronların taşınmasına sebep olan bir sistem düşünülür. Elektronlar Δt zamanında $\mathbf{v}_k \Delta t$ uzaklığı kadar yer değiştirirler. t zamanında (\mathbf{r}, \mathbf{k}) konumunda dağılım fonksiyonu $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$, $t - \Delta t$ zamanında $(\mathbf{r} - \mathbf{v}_k \Delta t, \mathbf{k})$ konumundaki dağılım fonksiyonuna eşittir. Diğer bir deyişle $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = f(\mathbf{r} - \mathbf{v}_k \Delta t, \mathbf{k}, t - \Delta t)$ dir. Diffüzyon yüzünden elektron dağılımındaki değişim

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} \right)_{\text{diffüzyon}} &= \frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t - \Delta t)}{\Delta t} = \frac{f(\mathbf{r} - \mathbf{v}_k \Delta t, \mathbf{k}, t - \Delta t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t - \Delta t)}{\Delta t} \\ &= -\mathbf{v}_k \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k})}{\partial \mathbf{r}} = -\mathbf{v}_k \nabla f(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \end{aligned} \quad (2.1)$$

şeklinde yazılır. Burada $\mathbf{v}_k \nabla f(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = v_{k_x} \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) + v_{k_y} \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) + v_{k_z} \left(\frac{\partial f}{\partial z} \right)$ dir. Aynı zamanda t zamanında (\mathbf{r}, \mathbf{k}) konumunda elektron dağılımı $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$, $t - \Delta t$ zamanında $(\mathbf{r}, \mathbf{k} - \left(\frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t} \right) \Delta t, t - \Delta t)$ konumundaki elektron dağılımına eşittir. Yani $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = f(\mathbf{r}, \mathbf{k} - \left(\frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t} \right) \Delta t, t - \Delta t)$ dir. Alan etkisi altında elektron dağılımındaki değişim oranı

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} \right)_{alan} &= \frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t - \Delta t)}{\Delta t} = \frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{k} - \frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t} \Delta t, t - \Delta t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t - \Delta t)}{\Delta t} \\ &= - \left(\frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t} \right)_{alan} \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} = - \frac{(-e)}{\hbar} (\mathbf{E} + \mathbf{v}_k \times \mathbf{B}) \frac{\partial f_k}{\partial \mathbf{k}} \end{aligned} \quad (2.2)$$

olarak yazılır. Kurulan kararlı durumda sıcaklık gradyenti ve uygulanan dış alan tarafından neden olunan elektron dağılımındaki değişiklik saçılma olayındaki değişiklik $(\partial f / \partial t)$ ile dengelenir. Çünkü elektron dağılımındaki (df / dt) net değişiklik üç bileşenin toplamıdır.

$$\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{diffüzyon} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{alan} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{sacilma} \quad (2.3)$$

Kararlı durumda $df / dt = 0$ dir. (2.3) denklemini içine (2.1) ve (2.2) denklemlerini koyarsak Boltzmann taşınım denklemini

$$- \mathbf{v}_k \nabla f(\mathbf{r}, \mathbf{k}) - \frac{(-e)}{\hbar} (\mathbf{E} + \mathbf{v}_k \times \mathbf{B}) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = - \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{sacilma} \quad (2.4)$$

şeklinde yazılabilir. Kararlı durumda dış alan veya sıcaklık gradyenti varlığında elektron dağılım fonksiyonu, ısısal dengede uygulanan Fermi Dirac dağılım fonksiyon $f_0(\varepsilon_k, T)$ 'den sapabilir. Bu sapma,

$$\phi(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = f(\mathbf{r}, \mathbf{k}) - f_0(\varepsilon_k, T) \quad (2.5)$$

şeklinde yazılabilir ve $\phi(r, k)$ 'nın küçük olduğu kabul edilir. Denklem (2.4) yeniden yazılırsa

$$-\mathbf{v}_k \frac{\partial f_0}{\partial T} \nabla T - \frac{(-e)}{\hbar} (\mathbf{E} + \mathbf{v}_k \times \mathbf{B}) \frac{\partial f_0}{\partial k} = - \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{sacilma} + \mathbf{v}_k \frac{\partial \phi}{\partial r} + \frac{(-e)}{\hbar} (\mathbf{E} + \mathbf{v}_k \times \mathbf{B}) \frac{\partial \phi}{\partial k} \quad (2.6)$$

olur. Sol taraftaki manyetik alan içeren terim daima kaybolur. Çünkü

$$\mathbf{v}_k \times \mathbf{B} \frac{\partial f_0}{\partial k} = \mathbf{v}_k \times \mathbf{B} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_k} \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k} = (\mathbf{v}_k \times \mathbf{B} \cdot \mathbf{v}_k) \hbar \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_k} = 0 \quad (2.7)$$

dır. Burada $\mathbf{A} \times \mathbf{B} \cdot \mathbf{C}$ özdeşliği kullanılır. Sağ taraftaki $\mathbf{E} \left(\frac{\partial \phi}{\partial k} \right)$ teriminin E^2 derecesinde olduğu gösterilebilir ve ohm yasasından sapması yüzünden gözardı edilebilir. Fermi Dirac dağılım fonksiyonunun enerji ve sıcaklıktaki sapmalarla değişimi ele alınırsa

$$\frac{\partial f_0}{\partial T} = - \left(\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \left[\left(\frac{\varepsilon - \xi}{T} \right) + \frac{\partial \xi}{\partial T} \right] \quad (2.8)$$

yazılır. Burada $f_0(\varepsilon_k, T) = \frac{1}{e^{(\varepsilon_k - \xi)/k_B T} + 1}$ ve ξ kimyasal potansiyeldir. (2.6) denklemi indirgenerek yeniden yazılabilir.

$$\left(- \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \mathbf{v}_k \left[- \left(\frac{\varepsilon(k) - \xi}{T} \right) \nabla T + (-e) \left(E - \frac{\nabla \xi}{(-e)} \right) \right] = - \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{sacilma} + \mathbf{v}_k \frac{\partial \phi}{\partial r} + \frac{(-e)}{\hbar} (\mathbf{v}_k \times \mathbf{B}) \frac{\partial \phi}{\partial k} \quad (2.9)$$

Bu doğrusal Boltzmann taşınım denklemdir. $\nabla\zeta$ terimi extra elektrik alan içeriyor, çünkü o sıcaklık gradyenti tarafından indüklenen kimyasal potansiyeldeki değişme ile birleşen etkili bir alanı gösterir. (2.9) denkleminde eşitliğin sağ tarafındaki saçılma terimi düşünülürse saçılma yüzünden elektron dağılımındaki değişme genelde

$$\left(\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t}\right)_{\text{saçılma}} = \sum_{\mathbf{k}'} \{\theta(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f(\mathbf{k}') [1 - f(\mathbf{k})] - \theta(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f(\mathbf{k}) [1 - f(\mathbf{k}')]\} \quad (2.10)$$

şeklinde yazılır. Burada $\theta(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ saçılmada geçiş olasılığını gösterir. Kıvrık parantez $\{..\}$ içindeki $f(\mathbf{k}') [1 - f(\mathbf{k})]$ teriminde \mathbf{k}' durumundaki elektronlar, boş durumdaki \mathbf{k} içine atlar ve $\left(\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t}\right)_{\text{saçılma}}$ da artar ve aksine ikinci terim $f(\mathbf{k}) [1 - f(\mathbf{k}')]$ azalır.

$\left(\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t}\right)_{\text{saçılma}}$ nın hesaplanması oldukça zordur. Çünkü (2.10) karmaşık bir toplam içermektedir. Bu zorluktan sakınmak için gevşeme zamanı yaklaşımı kullanılır. O zaman saçılma terimi

$$-\left(\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t}\right) = \frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{k}) - f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}}, T)}{\tau} = \frac{\phi(\mathbf{r}, \mathbf{k})}{\tau} \quad (2.11)$$

olarak basitleşir. Burada τ gevşeme zamanı, $\phi(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ (2.5) denkleminde tanımlanan dağılım fonksiyonunun denge durumundan sapmasıdır.

2.1.2 Elektriksel iletkenlik

Sabit sıcaklık altındaki bir metale sadece düzgün bir elektrik alan uygulanırsa doğrusal Boltzmann taşınım denklemini, (2.9),

$$-\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{saçılma}} = \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) \mathbf{v}_k (-e) \mathbf{E} \quad (2.12)$$

şeklini alır. Gevşeme zamanı yaklaşımını kullanırsak (2.12) denklemi

$$\frac{\phi(k)}{\tau} = \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \mathbf{v}_k (-e)\mathbf{E} \quad (2.13)$$

şeklinde yazılabilir. $n = \left(\frac{1}{4\pi^3} \right) \iiint f(k) dk$ alınır, n birim hacim başına elektron sayısı veya elektron derişimi, olmak üzere akım yoğunluğu

$$\mathbf{J} = \frac{(-e)}{4\pi^3} \iiint \mathbf{v}_k f(k) dk \quad (2.14)$$

şeklinde yazabiliriz. (2.13)'nolu denklem (2.14)'nolu denklem de yerine konulursa denklemimiz

$$\mathbf{J} = \frac{e^2}{4\pi^3 \hbar} \int \frac{\mathbf{v}_k \mathbf{v}_k dS_F}{\mathbf{v}_{k_\perp}} \mathbf{E} \quad (2.15)$$

şeklini alır. Burada \mathbf{v}_{k_\perp} elektronun Fermi yüzeyine dik hız bileşenidir. Paydaki hız vektörlerinden biri \mathbf{J} akım yoğunluğuna paraleldir. Elektriksel iletkenlik tensörü $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$ olarak tanımlanırsa

$$\sigma = \frac{e^2}{4\pi^3 \hbar} \int \frac{\tau \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k dS_F}{\mathbf{v}_{k_\perp}} \quad (2.16)$$

olarak yazılır. Fermi yüzeyinde $\mathbf{v}_{k_\perp} = v_F$ olarak alınır, yönden bağımsız (izotropik) metal için elektriksel iletkenlik

$$\sigma = \frac{e^2}{4\pi^3} \int \frac{\tau v^2 dS_F}{\hbar v_{k_\perp}} = \frac{e^2 \tau}{4\pi^3 \hbar v_F} \frac{v_F^2}{3} \int dS_F = \frac{e^2 \tau v_F S_F}{12\pi^3 \hbar} = \frac{e^2 l S_F}{12\pi^3 \hbar} \quad (2.17)$$

olarak yazılabilir. Burada S_F Fermi yüzeyinin alanı, $l = \tau v_F$ ortalama serbest yoldur ve $v_F^2 = \sum_{i=x,y,z} v_i^2 = 3v_i^2$ kullanılır. S_F Fermi yüzeyinin alanı iki boyutlu (2D) sistemler için $2\pi k_F$, üç boyutlu (3D) sistemler için ise $4\pi k_F^2$ olarak alınır.

2.1.3 Hall olayı ve magnetodirenc

Hall olayı elektrik ve manyetik alanın her ikisinin de varlığında gerçekleşen bir olaydır. Elektrik alan dikdörtgen biçimindeki malzemede x yönü boyuncadır ve z yönü boyunca manyetik alan uygulanır. Bu yüzden y ve z yönleri boyunca akım akmaz, bu durumda $J_y = J_z = 0$ olur. y yönü boyunca çapraz elektrik alan E_y oluşur. Bu Hall etkisi olarak isimlendirilir.

Hall etkisi doğrusal Boltzmann taşınım denklemi içindeki $(-e)\mathbf{E}$ ve $(-e)\mathbf{v}_k \times \mathbf{B}$ gibi iki dış kuvvetin birleştirilmesi ile oluşturulabilir. Dış alanların yönü $\mathbf{E} = (E, 0, 0)$ ve $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ alınarak (2.9) nolu denklem yeniden yazılabilir:

$$(-e)\mathbf{E}\mathbf{v}_x \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) = \frac{\phi}{\tau} - \frac{(-e)}{\hbar} \mathbf{B} \left(\mathbf{v}_x \frac{\partial \phi}{\partial k_y} - \mathbf{v}_y \frac{\partial \phi}{\partial k_x} \right) \quad (2.18)$$

Burada basitlik için gevşeme zaman yaklaşımı kullanılır. Manyetik alan etkisi sadece dalga vektörünün x ve y bileşenlerindedir. (2.11) nolu denklemdeki ϕ fonksiyonu (Smith and Hojgaard 1989)

$$\phi = ak_x + bk_y \quad (2.19)$$

biçiminde kabul edilebilir ve bu bağıntı serbest elektron yaklaşımı ifadeleri $v_x = \hbar k_x / m$, $v_y = \hbar k_y / m$ ile birlikte (2.18) nolu denklemin içine sokulabilir. Böylece a ve b katsayıları σ_{xx} ve σ_{xy} iletkenlik tensörlerinde yer alırlar. σ_{yy} ve σ_{zz} gibi diğer

bileşenler de aynı şekilde y ve z yönlerinde dış elektrik alan uygulanıyormuş gibi hesaplanır.

$\mathbf{B} = (0,0,B)$ koşulu altında, bir bant modelindeki elektronlar için $\mathbf{J} = \sigma\mathbf{E}$ olarak iletkenlik tensörü açıkça yazılabilir.

$$\sigma_{ij} = \frac{n(-e)^2 \tau}{m} \begin{pmatrix} \frac{1}{1+\alpha^2} & \frac{-\alpha}{1+\alpha^2} & 0 \\ \frac{\alpha}{1+\alpha^2} & \frac{1}{1+\alpha^2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

Burada $\alpha = \omega_c \tau$ ve $\omega_c = eB/m$ dir. $\mathbf{B} = (0,0,B)$ koşulu altında elektronlar için $\mathbf{E} = \rho\mathbf{J}$ olarak tanımlanan öz direnç tensörü (2.20) nolu denklemin tersi olarak gösterilir.

$$\rho_{ij} = \frac{m}{n(-e)^2 \tau} \begin{pmatrix} 1 & \alpha & 0 \\ -\alpha & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

ve (2.20)' nolu denklemin yerine (2.21)' nolu denklem kullanılabilir.

Newton hareket denklemi iki bant modelindeki taşıyıcılar için dikkate alınırsa

$$m^* \left(\frac{dv_D}{dt} + \frac{v_D}{\tau} \right) = (\mp e)(\mathbf{E} + \mathbf{v}_D \times \mathbf{B}), \quad m^* \left(\frac{dv_D}{dt} + \frac{v_D}{\tau} \right) = (\mp e) \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v}_D \times \mathbf{B} \right) \text{ (CGS)} \quad (2.22)$$

denklemini yazılabilir. Burada \mathbf{v}_D ortalama sürüklenme hızı, τ ortalama çarpışma zamanı ve sağ taraf ise ortalama kuvvettir. Burada \mp sırasıyla taşıyıcıların yükünün işaretidir. Denge durumunda $\frac{dv_D}{dt} = 0$ dir, o zaman

$$\mathbf{v}_D = \left(\frac{(\mp e)\tau}{m^*} \right) (\mathbf{E} + \mathbf{v}_D \times \mathbf{B}) \quad (2.23)$$

olarak bulunur. Manyetik alanın yönü z eksenini seçilir ve $\omega_c = eB_z / m^*$, $\mathbf{J} = n(\mp e)\mathbf{v}_D$ kullanılırsa (2.23) nolu denklemden yararlanılarak

$$J_x = \frac{n(\mp e)\tau}{m^* (1 + \omega_c^2 \tau^2)} (E_x \mp \omega_c \tau E_y)$$

$$J_y = \frac{n(\mp e)\tau}{m^* (1 + \omega_c^2 \tau^2)} (\omega_c \tau E_x \mp E_y)$$

$$J_z = \frac{n(\mp e)\tau}{m^*} E_z \quad (2.24)$$

sonuçları elde edilir.

$\mathbf{J} \perp \mathbf{B}$ ve $\mathbf{E} \perp \mathbf{B}$ olduğundan iki banttaki taşıyıcıların her biri için akım yoğunluğu

$$\mathbf{J}_i = \frac{\sigma_i}{1 + \beta_i^2 B^2} \mathbf{E} - \frac{\sigma_i \beta_i}{1 + \beta_i^2 B^2} \mathbf{B} \times \mathbf{E} \quad (2.25)$$

olarak yazılır. Burada σ_i i .inci taşıyıcının iletkenliği, β_i ise $q_i \tau_i / m_i$ dir. Toplam akım yoğunluğu

$$\mathbf{J} = J_1 + J_2 = \left(\frac{\sigma_1}{1 + \beta_1^2 B^2} + \frac{\sigma_2}{1 + \beta_2^2 B^2} \right) \mathbf{E} - \left(\frac{\sigma_1 \beta_1}{1 + \beta_1^2 B^2} + \frac{\sigma_2 \beta_2}{1 + \beta_2^2 B^2} \right) \mathbf{B} \times \mathbf{E} \quad (2.26)$$

olarak yazılır.

Manyetodirenç $\Delta\rho_{xx}$, $[\rho_{xx}(B) - \rho_{xx}(0)]$ olarak tanımlanabilir. Gerçek metallerde $\Delta\rho_{xx}$ sınırlıdır ve artan manyetik alanla artar. Bu manyetodirenç etkisidir ve iki bant

modeliyle açıklanabilir (Ziman 1964). Enine MR, E ve J 'nin her ikisine dik olarak bulunan manyetik alan varlığında J boyunca uzanan E 'nin bileşeni dikkate alınarak tanımlanan direnci ifade eder. Manyetodirenc,

$$\frac{\Delta\rho_{xx}}{\rho_{xx}(0)} \equiv \frac{\rho_{xx}(B) - \rho_{xx}(0)}{\rho_{xx}(0)} = \frac{\sigma_1\sigma_2(\beta_1 - \beta_2)^2 B^2}{(\sigma_1 + \sigma_2)^2 + B^2(\beta_1\sigma_2 + \beta_2\sigma_1)^2} \quad (2.27)$$

olarak yazılır (Mizutani 2003). (2.27)'nolu denklem $\beta_1 > \beta_2$ için $\Delta\rho_{xx}$ 'in pozitif olduğunu gösterir fakat $\beta_1 = \beta_2$ olduğunda etki gözden kaybolur ve manyetik alan düşük olduğu sürece B^2 ile orantılıdır, diyebiliriz (Mizutani 2003).

2.2 Kuantum Mekaniksel Yaklaşım

2.2.1 Çizgisel yanıt teorisi

Kuantum mekaniksel olarak, uygulanan B 'nin sistemde nasıl bir akım doğuracağını bulmanın kestirme yöntemlerinden biri çizgisel yanıt teorisidir. Katıhal fiziğindeki deneyler genellikle maddenin bir dış etkiye karşı gösterdiği çizgisel yanıtı ölçerler. Madde bir dış elektrik alan içine konmuşsa maddenin buna karşı tepkisi bir elektrik akımının geçirilmesi şeklinde karşımıza çıkar. Çizgisel yanıt, ortaya çıkan işaretin dış etkinin genliği ile doğrudan orantılı olan kısmı demektir. Genellikle alçak düzeydeki dış etkilerde yalnızca bu kısım önemlidir (Karabulut 1998). Bu yöntemin düşünce şeklini ve ana basamaklarını kısaca özetleyeceğiz.

2.2.1.1 Dış kuvvete karşı gelen çizgisel fonksiyon

H_0 Hamiltoniyeni tarafından yönetilen S gibi bir sistem düşünülür. Sistem ısısal dengedeyken sisteme $t = -\infty$ 'dan itibaren bir dış kuvvet $F(t)$ uygulanır. $F(t)$ dış

kuvveti altında kabul edilen, S sisteminin toplam Hamiltoniyenindeki pertürbasyon terimi

$$\hat{V}(t) = -\hat{A}F(t) \quad (2.28)$$

şeklinde yazılabilir. Burada \hat{A} uygulanan $F(t)$ kuvveti ile ilintili(conjugate) dinamik bir niceliktir. Kullanılan Kubo (Kubo 1956, 1966, 1985) gösteriminde, \hat{A} işlemcisinin etkisi altında dikkate alınan \hat{B} gözlenebilir niceliğinin yanıt fonksiyonu $\phi_{BA}(t)$ şöyle tanımlanır (Caceres 2001),

$$\delta\langle\hat{B}(t)\rangle \equiv \langle\hat{B}(t)\rangle - \langle\hat{B}_{eq}\rangle = \int_0^{\infty} d\tau \phi_{BA}(\tau) F(t-\tau) \quad (2.29)$$

Bu eşitlik $\delta\langle\hat{B}(t)\rangle$ yanıtını sisteme uygulanan $F(t)$ dış kuvvetinin çizgisel bir fonksiyonu olarak ifade eder, yani yanıt geçikmeli etkilerin bir üst üste binmesi şeklindedir ve bu yüzden $\tau < 0$ için $\phi_{BA}(\tau) = 0$ dir. Yanıt fonksiyonu $\phi_{BA}(t)$ sisteme $t=0$ da uygulanan darbeli (impulsive) bir $F(t) \propto \delta(t)$ kuvvetine karşılık sistemin t anındaki yanıtını temsil eder.

2.2.1.2 Kubo formülü

Başlangıçta Hamiltoniyen

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t) \quad (2.30)$$

şeklinde iki tane terimden oluşur. Birinci terim \hat{H}_0 zamandan bağımsız Hamiltoniyen, diğeri $\hat{V}(t)$ ise pertürbasyon terimidir. Zamana bağlı pertürbasyon teorisi kullanıldığında \hat{H} toplam Hamiltoniyenin özvektörü $|\Psi_{\alpha}(t)\rangle$

$$|\Psi_\alpha(t)\rangle = |\alpha\rangle e^{-(i/\hbar)\varepsilon_\alpha t} + \sum_\beta |\beta\rangle a_{\alpha\beta} e^{-(i/\hbar)\varepsilon_\beta t} + \mathcal{G}(\hat{V}^2) \quad (2.31)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $|\alpha\rangle$ pertürbe olmayan kısmın özvektörüdür.

$\hat{H}_0|\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha|\alpha\rangle$ ve $\{|\alpha\rangle\}$ Hilbert uzayının basit bir gösterimidir. Zamana bağlı katsayı $a_{\alpha\beta}$

$$a_{\alpha\beta} = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{-(i/\hbar)(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta)t'} \langle \beta | \hat{V}(t') | \alpha \rangle \quad (2.32)$$

ile verilir. Schrödinger resminde göz önüne alınan herhangi \hat{B} 'nin ısısal istatistik ortalama değeri

$$\langle \hat{B}(t) \rangle = \sum_\alpha p_\alpha \langle \Psi_\alpha(t) | \hat{B} | \Psi_\alpha(t) \rangle \quad (2.33)$$

ile verilir. Burada p_α pertürbe özvektör $|\Psi_\alpha(t)\rangle$ tarafından tanımlanan durumda sistemin olasılık ağırlığıdır. Kritik nokta her bir pertürbe özvektörler için p_α 'nın nasıl alınacağıdır. Bu yüzden $p_\alpha \approx p_\alpha^{eq}$ ısısal varsayımı kullanılır. $\hat{V}(t)$ pertürbasyonunun öz durumların ısısal kararlı dağılımını değiştirmeyecek kadar küçük olduğu varsayılır. Bu durumda (2.31), (2.33) nolu eşitlikleri kullanarak

$$\begin{aligned} \langle \hat{B}(t) \rangle &= \sum_\alpha p_\alpha^{eq} \langle \Psi_\alpha(t) | \hat{B} | \Psi_\alpha(t) \rangle \\ &= \sum_\alpha p_\alpha^{eq} \langle \alpha | \hat{B} | \alpha \rangle + \sum_\alpha \sum_\beta p_\alpha^{eq} [\langle \beta | \hat{B} | \alpha \rangle a_{\alpha\beta}^* e^{(i/\hbar)\varepsilon_\beta t} e^{-(i/\hbar)\varepsilon_\alpha t} + \langle \alpha | \hat{B} | \beta \rangle a_{\alpha\beta} e^{(i/\hbar)\varepsilon_\alpha t} e^{-(i/\hbar)\varepsilon_\beta t}] \\ &\quad + \mathcal{G}(V^2) \end{aligned} \quad (2.34)$$

yazılır. (2.34) nolu denklemin ilk terimi $\langle \hat{B}_{eq} \rangle$ pertürbe olmamış durumların ortalama değeridir ve kendimizi çizgisel yanıtla sınırlandırarak,

$$\delta\langle\hat{B}(t)\rangle = \sum_{\alpha\beta} p_{\alpha}^{eq} [\langle\beta|\hat{B}|\alpha\rangle a_{\alpha\beta}^* e^{(i/\hbar)\varepsilon_{\beta}t} e^{-(i/\hbar)\varepsilon_{\alpha}t} + \langle\alpha|\hat{B}|\beta\rangle a_{\alpha\beta} e^{(i/\hbar)\varepsilon_{\alpha}t} e^{-(i/\hbar)\varepsilon_{\beta}t}] \quad (2.35)$$

ifadesi yazılabilir. (2.32) nolu denklemde tanımlanan $a_{\alpha\beta}$ yerine yazılıp üstel terimler toplanırsa (2.35) nolu denklem

$$\begin{aligned} \delta\langle\hat{B}(t)\rangle = \sum_{\alpha\beta} p_{\alpha}^{eq} & \left[-\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' [\langle\alpha|\hat{V}(t')|\beta\rangle e^{(i/\hbar)(t-t')\varepsilon_{\beta}} \langle\beta|\hat{B}|\alpha\rangle e^{-(i/\hbar)(t-t')\varepsilon_{\alpha}} \right. \\ & \left. - \langle\beta|\hat{V}(t')|\alpha\rangle e^{(i/\hbar)(t-t')\varepsilon_{\alpha}} \langle\alpha|\hat{B}|\beta\rangle e^{-(i/\hbar)(t-t')\varepsilon_{\beta}}] \right] \end{aligned} \quad (2.36)$$

haline gelir. Üstel terimler kuantum ketleri $\langle\alpha|\dots|\beta\rangle$ içine alınır ve β altındaki toplam atılırsa, sonuçta

$$\begin{aligned} \delta\langle\hat{B}(t)\rangle = \sum_{\alpha} & \left[-\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' p_{\alpha}^{eq} [\langle\alpha|\hat{V}(t') e^{(i/\hbar)(t-t')\hat{H}_0} \hat{B} e^{-(i/\hbar)(t-t')\hat{H}_0} |\alpha\rangle \right. \\ & \left. - \langle\alpha| e^{(i/\hbar)(t-t')\hat{H}_0} \hat{B} e^{-(i/\hbar)(t-t')\hat{H}_0} \hat{V}(t') |\alpha\rangle] \right] \end{aligned} \quad (2.37)$$

yazılır. Burada $e^{-(i/\hbar)(t-t')\hat{H}_0}$ denge çözüm işlemcisi olarak tanımlanabilir ve bunun \hat{B} ile ilintili olduğu kabul edilir. Bu yüzden Heisenberg resminde \hat{B}

$$\hat{B}(t-t') \equiv e^{(i/\hbar)(t-t')\hat{H}_0} \hat{B} e^{-(i/\hbar)(t-t')\hat{H}_0} \quad (2.38)$$

alınır. Sonuçta (2.37) nolu denklem

$$\begin{aligned} \delta\langle\hat{B}(t)\rangle & = \sum_{\alpha} \left[-\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' p_{\alpha}^{eq} \langle\alpha|\hat{V}(t')\hat{B}(t-t') - \hat{B}(t-t')\hat{V}(t')|\alpha\rangle \right] \\ & = \int_{-\infty}^t dt' \text{Tr}[\hat{\rho}^{eq} \{-\hat{V}(t'), \hat{B}(t-t')\}]_0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{-\infty}^t dt' Tr[\hat{\rho}^{eq}\{\hat{A}, \hat{B}(t-t')\}]_0 F(t') \\
&= \int_0^{\infty} d\tau Tr[\hat{\rho}^{eq}\{\hat{A}, \hat{B}(\tau)\}]_0 F(t-\tau)
\end{aligned} \tag{2.39}$$

şeklinde yazılır. Burada $\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}, \hat{B}]$ gösterimi kullanılır ve $\hat{V}(t')$ yerine konulur.

Sistemin E_α enerjili $|\alpha\rangle$ durumunda bulunma olasılığı anlamına gelen p_α^{eq} katsayılı aracılığıyla yoğunluk işlemcisi, $\hat{\rho}^{eq} \equiv \sum_\alpha |\alpha\rangle p_\alpha^{eq} \langle\alpha|$ olarak alınır. (2.29) ve (2.39) nolu

denklemler eşitlenirse

$$\phi_{BA}(\tau) = Tr[\hat{\rho}^{eq}\{\hat{A}, \hat{B}(\tau)\}]_0 \tag{2.40}$$

elde edilir. Bu Kubo teoremidir.

2.2.1.3 DC iletkenlik

(2.28) nolu denklemdeki $V(t)$ pertürbasyon terimi e yüküne sahip elektronlar için çok küçük değişen elektrik alan uygulandığında yeniden

$$\hat{V}(t) = -eE\hat{r}e^{\eta t} \tag{2.41}$$

şeklinde yazılabilir. Burada η kaybolacak kadar küçük pozitif bir niceliktir. (2.32) nolu denklemde pertürbasyon terimi $V(t)$ yerine konulur ve t' üzerinden integral alınırsa $a_{\alpha\beta}$ katsayısı

$$a_{\alpha\beta} = -\frac{e}{i\hbar} E \langle\beta|\hat{r}|\alpha\rangle \frac{e^{(\eta-i\omega_{\alpha\beta})t}}{\eta-i\omega_{\alpha\beta}} \tag{2.42}$$

şeklinde yazılır. Burada $\omega_{\alpha\beta} \equiv (E_\alpha - E_\beta)/\hbar$ gösterimi kullanılır.

Toplam akım yoğunluğu $J = \frac{e}{\Omega} \frac{d}{dt} \langle r(t) \rangle$ olarak yazılırsa (2.35) ve (2.42) nolu denklemlerden $\langle \hat{B}(t) \rangle$ nin ortalama değerinin türevi hesaplanabilir. Burada Ω sistemin hacmidir. \hat{B} işlemcisinin kendisi, \hat{r} ile orantılı olarak alınır, ayrıca $\frac{d}{dt} \langle \hat{B}_{eq} \rangle = 0$ dır.

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{B}(t) \rangle = \frac{e}{i\hbar} E \frac{d}{dt} \left[\sum_{\alpha\beta} p_\alpha^{eq} \left[\langle \beta | \hat{B} | \alpha \rangle \langle \alpha | \hat{r} | \beta \rangle \frac{e^{\eta t}}{\eta + i\omega_{\alpha\beta}} \right] - \sum_{\alpha\beta} p_\beta^{eq} \left[\langle \alpha | \hat{B} | \beta \rangle \langle \beta | \hat{r} | \alpha \rangle \frac{e^{\eta t}}{\eta - i\omega_{\alpha\beta}} \right] \right] \quad (2.43)$$

İkinci terimde toplamın içi yer değiştirirse yani $\alpha = \beta$, $\beta = \alpha$ alınır ve zamana göre türev alınır

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{B}(t) \rangle = \frac{e}{i\hbar} E \sum_{\alpha\beta} (p_\alpha^{eq} - p_\beta^{eq}) \langle \beta | \hat{B} | \alpha \rangle \langle \alpha | \hat{r} | \beta \rangle \frac{\eta e^{\eta t}}{\eta + i\omega_{\alpha\beta}} \quad (2.44)$$

şeklinde yazılır. Çizgisel yanıt teorisinde

$$\hat{B} = \frac{e}{\Omega} \hat{r} \quad (2.45)$$

olarak düşünülebilir. $t=0$ durumunda sabit elektrik alan yüzünden kararlı durumda sistemin akım yoğunluğu (2.44) ve (2.45) nolu denklemlerden yararlanarak

$$J = \frac{e^2}{i\hbar\Omega} E \sum_{\alpha\beta} (p_\alpha^{eq} - p_\beta^{eq}) \langle \beta | \hat{r} | \alpha \rangle \langle \alpha | \hat{r} | \beta \rangle \frac{\eta}{\eta + i\omega_{\alpha\beta}} \quad (2.46)$$

şeklinde yazılır. Bu ifadedeki α , β nın birer görev indisi (dummy indice) olduğu dikkate alınarak, ifade değişik sırada iki kez yazılıp ortalaması alınarak simetrik hale

getirilebilir. Böylece, $J = \frac{1}{2}(J + J)$ alınır ve α ve β yer değiştirilse (2.46) nolu denklem

$$J = \frac{e^2}{2i\hbar\Omega} E \left[\sum_{\alpha\beta} (p_\alpha^{eq} - p_\beta^{eq}) \langle \beta | \hat{r} | \alpha \rangle \langle \alpha | \hat{r} | \beta \rangle \frac{\eta}{\eta + i\omega_{\alpha\beta}} + \sum_{\beta\alpha} (p_\beta^{eq} - p_\alpha^{eq}) \langle \alpha | \hat{r} | \beta \rangle \langle \beta | \hat{r} | \alpha \rangle \frac{\eta}{\eta - i\omega_{\alpha\beta}} \right] \quad (2.47)$$

şeklini alır. Bu denklem de

$$J = \frac{e^2}{\hbar\Omega} E \left[\sum_{\alpha\beta} \frac{(p_\alpha^{eq} - p_\beta^{eq})}{\omega_{\alpha\beta}} \langle \beta | \hat{r} | \alpha \rangle \langle \alpha | \hat{r} | \beta \rangle \omega_{\alpha\beta}^2 \text{Im}[[\omega_{\alpha\beta} + i\eta]^{-1}] \right] \quad (2.48)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $\text{Im}[[\omega_{\alpha\beta} + i\eta]^{-1}]$, $[\omega_{\alpha\beta} + i\eta]^{-1}$ 'nin sanal kısmıdır. Şimdi $\eta \rightarrow 0$ limiti alınırsa $\omega_{\alpha\beta} \rightarrow 0$ için terimler gözden kaybolmaz. Sonuçta bu limitler altında

$$\frac{(p_\alpha^{eq} - p_\beta^{eq})}{\hbar\omega_{\alpha\beta}} = \left. \frac{df}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=\varepsilon_\alpha} \quad (2.49)$$

yazılabilir. Burada $f(\varepsilon)$ elektron olasılık dağılımıdır. Özgür parçacık Hamiltoniyenini H_0 olarak alırsak o zaman

$$[\hat{H}_0, \hat{r}] = -\frac{i\hbar}{m} \hat{p} \quad (2.50)$$

dir. Burada \hat{p} momentum işlemcisi ve m elektronun kütlesidir.

$$\hbar\omega_{\alpha\beta} \langle \alpha | \hat{r} | \beta \rangle = \langle \alpha | \hat{H}_0 \hat{r} | \beta \rangle - \langle \alpha | \hat{r} \hat{H}_0 | \beta \rangle = \langle \alpha | [\hat{H}_0, \hat{r}] | \beta \rangle \quad (2.51)$$

eşitliği göz önüne alınırsa (2.48) nolu denklem yeniden yazılabilir.

$$J = \frac{e^2}{m^2\Omega} E \left[\sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | \hat{p} | \beta \rangle \langle \beta | \hat{p} | \alpha \rangle \text{Im}[(\omega_{\alpha\beta} + i\eta)^{-1}] \frac{df}{d\varepsilon} \Big|_{\varepsilon=\varepsilon'_\alpha} \right] \quad \eta \rightarrow 0 \quad (2.52)$$

Toplam akım yoğunluğu $J = E\sigma$ dır. Özgür elektron saçılması $\text{Im}[(\omega_{\alpha\beta} + i\eta)^{-1}]$ terimi sayesinde hesaplanır. Saçılma potansiyelinin varlığında elektronun Green fonksiyonu bu terimle orantılıdır. Akım yoğunluğundan yararlanarak iletkenlik

$$\sigma = \frac{e^2}{m^2\Omega} \left[\sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | \hat{p} | \beta \rangle \langle \beta | \hat{p} | \alpha \rangle \text{Im}[(\omega_{\alpha\beta} + i\eta)^{-1}] \frac{df}{d\varepsilon} \Big|_{\varepsilon=\varepsilon'_\alpha} \right] \quad \eta \rightarrow 0 \quad (2.53)$$

şeklinde yazılır. Burada sanal kısım $-2\pi\delta(E_\alpha - E_\beta)$ şeklinde ve

$\frac{df}{d\varepsilon} \Big|_{\varepsilon=\varepsilon_\alpha} = -\delta(E - E_F)$ olarak yazılabilir ve E_F Fermi enerjisidir. O zaman (2.53) nolu

denkleminiz

$$\sigma = \frac{2\pi e^2}{m^2\Omega} \left[\sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | \hat{p} | \beta \rangle \langle \beta | \hat{p} | \alpha \rangle \delta(E_\alpha - E_\beta) \delta(E_\alpha - E_F) \right] \quad (2.54)$$

şeklini alır ve bu denklem Kubo formülü olarak bilinir.

3 MATERYAL VE YÖNTEM

Çalışmada Fortran 90 programlama dili kullanılarak N atomlu bir sistemin bazı düzensizlik parametrelerinde, uygulanan manyetik alanla iletkenliğinin değişimi (manyetodirenç) incelenmiştir. Öncelikle sistemin elektriksel iletkenliğini hesaplayabilmek için gerekli olan yayılım(difüzyon) ifadesinde yer alan doğru özvektörü bulmak amaçlanmıştır. Zaten zor olan da bu özvektörün hesaplanmasıdır. Özvektörü mümkün olduğu kadar doğru hesaplayabilmek için filtreleme(filtering) tekniği kullanılmıştır. İlk başlangıç vektörünü, sisteme ait \hat{H}_0 kullanılarak hazırlanan $F(E)$ filtreleme matrisi ile arka arkaya N_{run} defa çarpmanın program yazma ve çalıştırma açısından daha az zaman aldığı görülmüştür. Bunun için RAM belleğinin yeterince büyük olması gerekmektedir. Filtreleme tekniği ile oluşturulan matris (veya $N_{run} \sim 1000$ defa filtreleme matrisinin kendi kendisiyle çarpılmasıyla elde edilen matris) başlangıçta rastgele sayılardan oluşturulan vektörle çarpılır. Böylece en doğru özvektör bulunur ve yayılım hesaplanır. Sonra yeni bir program yardımıyla yerel durumlar yoğunluğu hesaplanır. Hesaplanan durumlar yoğunluğu ve yayılım Kubo formülünde yerine konularak elektriksel iletkenlik hesaplanır. Bu hesaplamalar yapılırken özyineleme(recursion) yöntemi kullanılır. Daha sonra z yönünde uygulanan zayıf manyetik alanda Anderson Hamiltoniyeni \hat{H} oluşturulmuş ve bu Hamiltoniyen yardımıyla yayılım ve yerel durumlar yoğunluğu hesaplanmış ve elektriksel iletkenliğin manyetik alanla değişimi incelenmiştir.

Bu bölümde belli düzensizlik parametrelerinde elektriksel iletkenliğin uygulanan manyetik alanla değişimini incelemek için kullandığımız yöntemler ve formüller incelenecektir.

3.1 Kubo Formülü

Denklem (2.54) de yazılan Kubo formülü \hbar cinsinden yazılmak istenirse (Stein 1980) iletkenlik

$$\sigma = \frac{2\pi\hbar e^2}{m^2\Omega} \left[\sum_{\nu\nu'} |\langle \nu | p_j | \nu' \rangle|^2 \delta(E_\nu - E_F) \delta(E_{\nu'} - E_F) \right] \quad (3.1)$$

şeklinde yazılabilir. İletkenlik tensörünün σ_{jk} ($j, k = x, y, z$) sadece köşegen (diagonal) elemanları ele alınır. $|\nu\rangle$ ve $|\nu'\rangle$ sırasıyla E_ν ve $E_{\nu'}$ enerji özdeğerlerine sahip H Hamiltoniyeni için özvektörlerdir.

Denklem (3.1) deki p momentum işlemcisinin j .inci bileşeni

$$(p_j)_{l,n} = \frac{i}{\hbar} m V_{ln} [x_j(l) - x_j(n)] \quad (3.2)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $x_j(l)$ ve $x_j(n)$ l ve n atomlarının yer vektörlerinin j .inci bileşenleridir, V_{ln} H Hamiltoniyenin de komşular arasındaki etkileşmeden kaynaklanan matris elemanıdır.

(3.1) nolu denklemdeki bazı terimler

$$\sum_{\nu} |\langle \nu | p_j | \nu' \rangle|^2 \delta(E_\nu - E_F) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \{ \langle p_j \nu | G(E_F + i\varepsilon) | p_j \nu \rangle \} \quad (3.3)$$

şeklinde yazılabilir (Stein 1980). Burada $G(E_F + i\varepsilon) = (E_F + i\varepsilon - \hat{H})^{-1}$ Green işlemcisi, ε çok küçük pozitif bir sayı ve Im ise sanal kısımdır.

(3.1) nolu denklemde

$$\sum_{\nu} \delta(E_\nu - E_F) = N(E) \quad (3.4)$$

olarak yazılabilir. Atom başına durumlar yoğunluğu $g(E) = \frac{1}{N} N(E)$ dir ve yaklaşık 100 atom üzerinde toplam alınırsa $g(E) = \frac{1}{N} \sum_a g_a(E)$ olur. Fermi enerjisindeki yerel durumlar yoğunluğu

$$g_a(E_F) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{\langle a|G(E_F + i\varepsilon)|a\rangle\} \quad (3.5)$$

şeklinde yazılır. $|a\rangle$ farklı atomlara yerleşmiş orbital fonksiyonudur. Bizim modelimiz de her bir atomun 1s orbitaline sahip olduğu kabul edilir. (3.3) ve (3.4) nolu denklemlerden yararlanılarak (3.1) nolu denklem

$$\sigma = \frac{\pi e^2}{\hbar} g(E_F) V^2 \left[-\frac{1}{\pi} \text{Im}[\langle \tilde{p}_j \nu | G(E_F + i\varepsilon) | \tilde{p}_j \nu \rangle] \right] \quad (3.6)$$

şeklinde yazılabilir. Burada \tilde{p}_j

$$\tilde{p}_j = \frac{\hbar}{aVm} p_j = \frac{\hbar}{aVm} \frac{i}{\hbar} mV[x_j(l) - x_j(n)]$$

$$\tilde{p}_j = \frac{i}{a} [x_j(l) - x_j(n)] \quad (3.7)$$

şeklinde boyutsuz bir işlemcidir. Kare yapılar için $\frac{N}{\Omega} = \frac{1}{a^2}$, basit kübik yapı için

$\frac{N}{\Omega} = \frac{1}{a^3}$ ve elmas yapılar için $\frac{N}{\Omega} = \frac{3\sqrt{3}}{8a^3}$ (a yakın komşular arasındaki uzaklık) olarak

alınır (Stein *et al.* 1980).

3.2 Yerel Durumlar Yoğunluğu

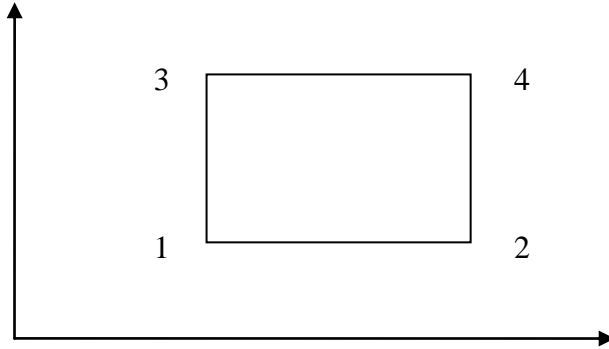
Herhangi bir sistemin en genel Hamiltoniyeni

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \sum_{i=1}^N v(r - R_i) \quad (3.8)$$

şeklinde yazılır. Schrödinger denklemi de

$$H\Psi_E = E\Psi_E \quad (3.9)$$

şeklindedir.



Şekil 3.1 Hamiltoniyen matrisi için kullanılan $N = 4$ atomlu kare yapı

Şekil 3.1'deki sisteme göre Hamiltoniyen, bütün atomlar özdeşdir(aynıdır)

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & V_{12} & V_{13} & 0 \\ V_{21} & \varepsilon_2 & 0 & V_{24} \\ V_{31} & 0 & \varepsilon_3 & V_{34} \\ 0 & V_{42} & V_{43} & \varepsilon_4 \end{bmatrix}$$

şeklinde yazılır ve model Hamiltoniyen,

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & V & V & 0 \\ V & \varepsilon_2 & 0 & V \\ V & 0 & \varepsilon_3 & V \\ 0 & V & V & \varepsilon_4 \end{bmatrix} \quad (3.10)$$

şeklinde yazılır. Burada ε 'lar(özdeğerler) rastgele sayıdır, çünkü her atomun cinsi veya çevresel ortamı farklı olabilir. V'ler ise atomlar arası potansiyel etkileşimdir. Böyle bir sistem için durumlar yoğunluğu

$$\begin{aligned} N(E) &= \sum_{n=1}^N \langle E_n | \mathcal{D}(E - \hat{H}) | E_n \rangle \\ &= \sum_{n=1}^N \langle E_n | \mathcal{D}(E - E_n) | E_n \rangle \\ &= \sum_{n=1}^N \langle E_n | E_n \rangle \mathcal{D}(E - E_n) \\ &= \sum_{n=1}^N \mathcal{D}(E - E_n) \end{aligned} \quad (3.11)$$

şeklinde yazılabilir. Atom başına ortalama durumlar yoğunluğu $n(E) = \frac{N(E)}{N}$ şeklindedir.

$$\frac{1}{z - \hat{H}} = G(E) = \frac{1}{E - \hat{H} + i\varepsilon} \equiv \frac{1}{E - \hat{H}} - i\pi\mathcal{D}(E - \hat{H}) \quad (3.12)$$

matematiksel özdeşliği $\lim \varepsilon \rightarrow 0$ için geçerlidir ve bu özdeşlik yardımıyla $N(E)$

$$N(E) = -\frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^N (-)\pi \langle E_n | \mathcal{D}(E - \hat{H}) | E_n \rangle$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^N \langle E_n | \text{Im } G(E + i\varepsilon) | E_n \rangle \\
&= -\frac{1}{\pi} \text{Tr}\{ \text{Im } G(E + i\varepsilon) \} \\
&= -\frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^N \text{Im } G_{nn}
\end{aligned} \tag{3.13}$$

şeklinde yazılabilir. Burada G_{nn} Green matrisinin(fonksiyonun) sanal kısmının köşegen elemanları toplamıdır yani matrisin izidir. Matrisin izi temsilden temsile değişmez.

$\langle \varphi_i | E_n \rangle = a_i^n$ olmak üzere,

$$\begin{aligned}
\langle E_n | E_n \rangle &= \langle a_1^{E_n} \varphi(1) + a_2^{E_n} \varphi(2) + \dots + a_N^{E_n} \varphi(N) | a_1^{E_n} \varphi(1) + a_2^{E_n} \varphi(2) + \dots + a_N^{E_n} \varphi(N) \rangle \\
&= |a_1^{E_n}|^2 + |a_2^{E_n}|^2 + \dots + |a_N^{E_n}|^2
\end{aligned} \tag{3.14}$$

şeklinde yazılabilir. (3.14) denkleminde yararlanarak

$$\begin{aligned}
N(E) &= \sum_{n=1}^N (|a_1^{E_n}|^2 + |a_2^{E_n}|^2 + \dots + |a_N^{E_n}|^2) \delta(E - E_n) \\
&= \sum_{n=1}^N |a_1^{E_n}|^2 \delta(E - E_n) + \sum_{n=1}^N |a_2^{E_n}|^2 \delta(E - E_n) + \dots + \sum_{n=1}^N |a_N^{E_n}|^2 \delta(E - E_n)
\end{aligned}$$

$$N(E) = n_1(E) + n_2(E) + \dots + n_N(E) \cong N n_a(E) \tag{3.15}$$

şeklinde yazılır. Burada $n_1(E)$ toplam durumlar yoğunluğuna 1 nolu atomdan gelen katkıdır. Ortalama olarak bu katkı terimlerinin hepsi aynı mertebededir veya eşittir. Bu yüzden a numaralı atomdan gelen katkı N ile çarpılır. a 'yı birçok defa sistemin her yerinde seçip ortalama alınır.

Green matrisinin yer temsilinde köşegen elemanları toplamı (bu köşegen elemanların hepsi ortalama olarak yaklaşık aynı değerdedir) yerine bir tane köşegen elemanı, örneğin $\langle a|G(E+i\varepsilon)|a\rangle$ 'yı, bulup bunun N katını alabiliriz. O halde esas problem $(E - \hat{H})$ verilince $G(E) = (E + i\varepsilon - \hat{H})^{-1}$ ters matrisi bulmak, fakat hepsini değil, yalnızca bir tane köşegen elemanını bulmaktır. Bu işlem C.Nex (Nex 1984)'in özyineleme yönteminin kullanıldığı Fortran programlarıyla yapılmıştır. Green fonksiyonunun sanal kısmının $-\frac{1}{\pi}$ ile çarpımı yerel durumlar yoğunluğunu verir.

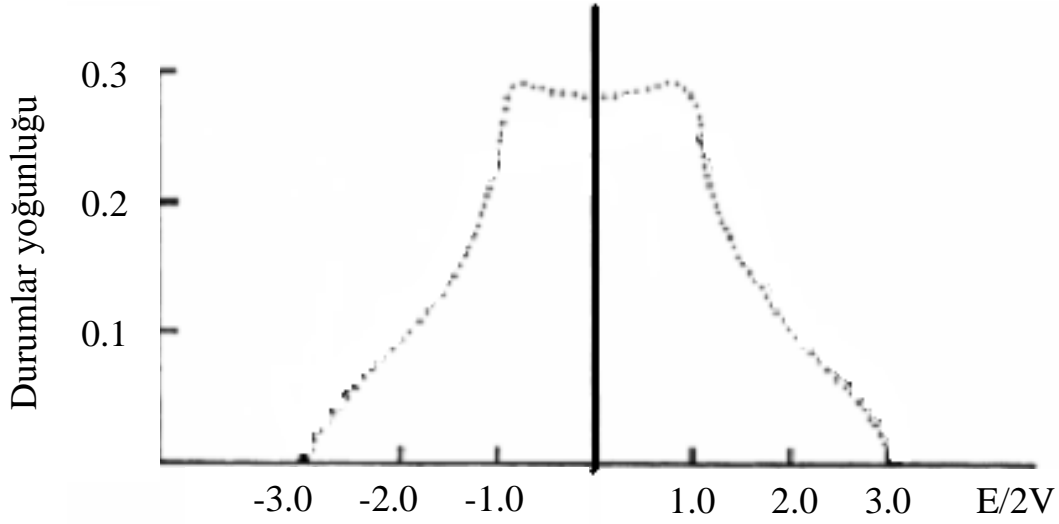
Durumlar yoğunluğu $N(E)$ düzensizlik parametresi W ile $N(E) \sim \frac{1}{W} N\left(\frac{E}{W}\right)$ şeklinde değişir. Bütün Hamiltoniyen matris elemanları W birimiyle ölçülür. Herhangi bir E enerjisine karşılık gelen durumların sayısı(yoğunluğu), W arttıkça azalır, yani enerji bandında genişleme olur. Durumlar yoğunluğu eğrisinin alanı daima 1 olduğu için, durumlar yani sistemin öz enerjileri, enerji ekseninde daha geniş bir bölgeye yayılırlar, bant genişliği artar.

İdeal bir kristal (düzensizlik parametresi sıfır) için enerji iki boyutta (Czychołł and Ponischowski 1988) ve üç boyutta (Soven 1969) sırasıyla

$$E(k) = 2V(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) \quad (3.16)$$

$$E(k) = 2V(\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)) \quad (3.17)$$

şeklindedir. Burada a örgü sabiti ve V yakın komşular arasındaki etkileşmedir. İdeal basit kübik yapı kristal için enerji ile durumlar yoğunluğunun değişimi Şekil 3.2 de gösterilmiştir (Soven 1969).



Şekil 3.2 İdeal basit kübik yapı kristali için enerji ile durumlar yoğunluğunun değişimi

3.3 Özyineleme(Recursion) Yöntemi

Orijinal özyineleme yöntemini Lanczos (1950) ele almıştır fakat modern versiyonunu ve katıhal fiziği problemleri ile bağlantısını Haydock (1980) kurmuştur. Özyineleme yöntemi Green fonksiyonunun köşegen elemanlarını hesaplamak için gerçek uzayda kullanılan bir yöntemdir.

Özyineleme yöntemi, bölgesel baskın etkileşmelere sahip sistemler için çözülmüş olan Schrödinger denklemi vasıtasıyla kurulur. Bu yöntem katıhal fiziğinin birçok alanında uygulanabilir. Örneğin düzensiz arsenikteki fonon kiplerinin yoğunluklarının, çeşitli hallerde yerel elektron yoğunluğunun ve manyetik özelliklerin hesaplanması gibi. Tüm bu uygulamalarda ortak olan, Hamiltoniyenin üçlü köşegen (tridiagonal) temsilinden çıkarılan yoğunluk fonksiyonunun değerlendirilmesi gerektiğidir. Yoğunluk fonksiyonu hesabının matematik işlemleri fiziksel çevreye az bağımlı olduğu halde orijinal sistem Hamiltoniyenini üçlü köşegen hale getiren algoritma modellenen fiziksel sisteme oldukça fazla bağlıdır (Nex 1984).

$EH = E - \hat{H}$ olmak üzere, model sistem için başlangıç matrisi

$$EH = \begin{bmatrix} E - \varepsilon_1 & -V & -V & 0 \\ -V & E - \varepsilon_2 & 0 & -V \\ -V & 0 & E - \varepsilon_3 & -V \\ 0 & -V & -V & E - \varepsilon_4 \end{bmatrix} \quad (3.18)$$

şeklinde ve Lanczos ketinde EH köşegen bir şekil alır.

$$EH = \begin{bmatrix} E - a_0 & -b_1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ -b_1 & E - a_1 & -b_2 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & -b_2 & E - a_2 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & E - a_{n-3} & -b_{n-2} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & -b_{n-2} & E - a_{n-2} \end{bmatrix} \quad (3.19)$$

Özyineleme yönteminde \hat{H} sistemin Hamiltoniyeni, U_0 da başlangıç durum vektörüdür ve normalize değildir. Programdaki katsayılar recursif olarak, $i = 0,1,2,\dots$ için,

$$b_0^2 = \langle U_0, U_0 \rangle \quad (3.20)$$

$$a_i = \langle U_i, HU_i \rangle / \langle U_i, U_i \rangle \quad (3.21)$$

$$U_{i+1} = (H - a_i)U_i - b_i^2 U_{i-1} \quad (3.22)$$

$$b_{i+1}^2 = \langle U_{i+1}, U_{i+1} \rangle / \langle U_i, U_i \rangle \quad (3.23)$$

bağıntılarıyla hesap edilir ve Green fonksiyonu bunlar cinsinden devam eden bir kesirdir (a continued fraction). Devam eden kesrin bir yerde sonlandırılması için değişik tipte sonlandırıcı (terminatör) ifadeleri, $t(E)$, kullanılır. $G(E)$ 'nin yeni ifadesi,

$$G(E) = \frac{b_0^2}{E - a_0 - \frac{b_1^2}{E - a_1 - \frac{b_2^2}{\dots \frac{b_{n-2}^2}{E - a_{n-2} - b_{n-1}^2 t(E)}}}} \quad (3.24)$$

şeklinde yazılabilir. Burada durumlar yoğunluğu tek bir enerji bandından oluştuğu için

$$t(E) = \frac{1}{E - a_{n-2} - b_{n-1}^2 t(E)} \quad (3.25)$$

şeklinde tanımlanan kare-kök sonlandırıcı uygundur. Bu kesme işlemi a_n ve b_n^2 katsayılarının artık değişmemeye başladığı noktada olur (Program dilinde bu katsayılar A(I) ve B2(I) diye adlandırılmıştır). $G(E)$ 'nin kesirsel ifadesinin ardaşık yaklaşımlarının hesabı $q(E)$ ve $P(E)$ gibi polinomların oranı, $G_n(E) \cong \frac{q_n(E)}{P_{n+1}(E)}$, aracılığıyla hesaplanabilir (Nex 1984). Bu polinomların tanımı, $i = 1, 2, \dots$ için şu şekildedir:

$$P_{-1} = 0 = q_{-1}, \quad P_0 = 1, \quad q_0 = b_0^2$$

$$P_{i+1}(E) = (E - a_i)P_i(E) - b_i^2 P_{i-1}(E) \quad (3.26)$$

$$q_i(E) = (E - a_i)q_{i-1}(E) - b_i^2 q_{i-2}(E) \quad (3.27)$$

$G(E + i\varepsilon) = G(E) + jG_i(E)$ 'nin sanal kısmından hesaplanan $|a\rangle$ başlangıç site noktası için yerel durumlar yoğunluğu (LDOS), $\varepsilon \rightarrow 0$ limitinde şöyledir:

$$n_a(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}G(E) = -\frac{1}{\pi} \frac{b_{n-1}^2 t_i [-q_{n-3} P_{n-1} + q_{n-2} P_{n-2}]}{[P_{n-1} - b_{n-1}^2 t_r P_{n-2}]^2 + [b_{n-1}^2 t_i P_{n-2}]^2} \quad (3.28)$$

3.4 Filtreleme(Filtering) Tekniđi

Filtreleme tekniđi Kramer and Weaire (1978) tarafından ortaya konulmuřur. Filtreleme tekniđindeki ama özvektörü yaklaşık olarak dođru olarak bulmaktır. Filtreleme matrisi,

$$F(E) = (H - a)(b - H)4/(b - a)^2 \quad (3.29)$$

řeklinde tanımlanır. $E = (a + b)/2$ dir. a ve b bant kenarları olup, a negatif, b ise pozitifdir. Filtreleme tekniđi, bařlangı olarak geliřigüzel sayılarından oluřturulan $|\Phi\rangle$ vektörüne Filtreleme iřlemcisinin N_{run} defa ($N_{run} \sim 1000$) uygulanması ile gerekleřir. Böylece yaklaşık özvektör bulunabilir.

$$|\Phi^n\rangle \equiv [F(E)]^n |\Phi\rangle \quad (3.30)$$

3.5 Yayınımın(Difüsvitenin) Hesaplanması

E_F 'ye yakın bir E_n özdeđerine karřılılık gelen $|\Psi(E_n)\rangle$ bařlangı özketi için yayılım,

$$\begin{aligned} \langle n | D(E) | n \rangle &= \sum_m \left| \langle n | \hat{p}_x | m \rangle \right|^2 \delta(E - E_n) \\ &= \sum_m \langle n | \hat{p}_x | m \rangle \langle m | \delta(E - E_n) | m \rangle \langle m | \hat{p}_x | n \rangle \end{aligned} \quad (3.31)$$

řeklinde yazılabilir. Diđer taraftan bir bařlangı $|\Psi_a\rangle = |a\rangle$ site orbital keti için yerel durumlar yođunluđu ise,

$$\langle a | n(E) | a \rangle = \sum_m \left| \langle a | m \rangle \right|^2 \delta(E - E_m)$$

$$= \sum_m \langle a|m \rangle \langle m|\delta(E - E_m)|m \rangle \langle m|a \rangle \quad (3.32)$$

şeklindedir. Denklem (3.31) ile denklem (3.32) birbirine benzemektedir. O zaman $n(E)$ yerel durumlar yoğunluğu hesabındaki $|a\rangle$ yerine yayılım hesabında $\hat{p}_x|n\rangle$ ifadesi kullanılabilir ve Lanczos programları kullanılabilir. Burada \hat{p}_x momentum işlemcisi, $|n\rangle$ E_F enerjisine yakın E_n enerjili bir $|\Psi_n\rangle$ özketidir. Bütün E_n 'ler seçilen E_F 'ye yakın olmak zorundadır. Dolayısıyla E_F 'ye bağlı yayılımı hesaplariken seçilen E_F 'nin yakın komşuluğundaki, altında ve üstünde ince bir dilim içindeki, $|n\rangle$ özfonksiyonları üzerinden $D(E)$ yayılımının ortalaması alınır.

EH site temsilinde oluşturulduğu için \hat{p}_x momentum matrisi de site temsilinde oluşturulur. Momentum matrisinin köşegen elemanları $\langle i|\hat{p}_x|i\rangle=0$, köşegen dışı elemanları,

$$\begin{aligned} \langle j|\hat{p}_x|i\rangle &= \frac{im}{\hbar} (R_i - R_j) \langle j|V|i\rangle \\ \langle i|\hat{p}_x|j\rangle &= -\frac{im}{\hbar} (R_i - R_j) \langle i|V|j\rangle = (\langle j|\hat{p}_x|i\rangle)^* \end{aligned} \quad (3.33)$$

şeklindedir. Burada R_i i 'inci atomun x yönündeki konumudur. Momentum matrisi,

$$\hat{p}_x = \begin{bmatrix} 0 & \langle 2|\hat{p}_x|1\rangle & \langle 3|\hat{p}_x|1\rangle & \cdot & \cdot \\ \langle 1|\hat{p}_x|2\rangle & 0 & \langle 3|\hat{p}_x|2\rangle & \cdot & \cdot \\ \langle 1|\hat{p}_x|3\rangle & \langle 2|\hat{p}_x|3\rangle & 0 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix} \quad (3.34)$$

şeklinde yazılır. E_n enerjisine sahip $|n\rangle$ özketinide,

$$|n\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ a_N \end{pmatrix} \quad \text{sütun vektörü ile gösterirsek, (3.31) denklemindeki } \hat{P}_x|n\rangle,$$

$$\hat{p}_x|n\rangle = \begin{bmatrix} 0 & p_{21} & \cdot & \cdot \\ p_{12} & 0 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdot \\ a_N \end{pmatrix} \quad (3.35)$$

şeklinde bir matris çarpımıyla bulunur. Yayınımı bulmak için bu sonuç vektörünü Lanczos özyineleme yönteminin başlangıç keti olarak almak gerekir.

Sistemin E_f enerji parametresine yakın düşen E_n , $|n\rangle$ öz durumlarından birkaçı kesin duyarlıkları bir şekilde 1000 iterasyonla filtreleme tekniği ile bulunur. Bu $|n\rangle$ özket

$\hat{P}_x|n\rangle$ şeklinde momentum işlemcisiyle (momentum matrisiyle) çarpılır ve $\frac{1}{E - \hat{H}}$

işlemcisinin (matrisinin) matris elemanı $\langle n|\hat{P}_x, \hat{P}_x|n\rangle$ ketlerini kullanarak hesaplanır.

Bu aynen $\frac{1}{E - \hat{H}}$ işlemcisinin, $|a\rangle$ başlangıç ketine ait yerel durumlar yoğunluğunu

hesaplarken alınan $\langle a|, |a\rangle$ matris elemana benzer bir hesaplama gerektirir.

Dolayısıyla durumlar yoğunluğunu hesaplayan program parçası, yayınımı $D(E)$ hesaplarırken de kullanılabilir.

Yayınım,

$$D(E) = \langle n|\hat{p}_x \delta(E - \hat{H}) \hat{p}_x|n\rangle$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{1}{\pi} \langle n | \hat{p}_x \operatorname{Im} \left\{ \frac{1}{E - \hat{H}} \right\} \hat{p}_x | n \rangle \\
&= -\frac{1}{\pi} \langle n | \hat{p}_x \operatorname{Im} \{ G(E + i\eta) \} \hat{p}_x | n \rangle
\end{aligned} \tag{3.36}$$

denkleminde hesaplanır.

3.6 Manyetik Alanda Hamiltoniyen

Site temsilinde zayıf manyetik alan varlığında Anderson Hamiltoniyeni,

$$\hat{H} = \sum_m \varepsilon_m a_m^+ a_m + \sum_{\substack{m' \neq m \\ m'm}} I_{m'm}^H a_m^+ a_m \tag{3.37}$$

şeklinde yazılır. Burada

$$I_{m'm}^H = I_{m'm} \exp \{ -(ie/2\hbar c) \mathbf{H} \cdot [\mathbf{R}_{m'} \times \mathbf{R}_m] \} \tag{3.38}$$

şeklinde verilir. (3.37) nolu denklemde a_m^+ site yaratma işlemcisi, a_m site yok etme işlemcisi, $I_{m'm}$ manyetik alan yokluğunda m ve m' atomları arasındaki rezonans integrali, \mathbf{R}_m ise m 'inci atomun yer vektörüdür.

Elektromanyetik alanda yüklü spinsiz bir parçacığın genel Hamiltoniyeni (Köksal 1989)

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\mathbf{P} + e\mathbf{A})^2 - e\phi \tag{3.39}$$

ile verilir. Burada \mathbf{A} vektör potansiyeli olup, sabit ve düzgün bir dış manyetik alanın uygulanması halinde,

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \mathbf{r}) \quad (3.40)$$

ile verilir ve $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ bağıntısını sağlayan \mathbf{A} bileşenleri (A_x, A_y, A_z) $\Rightarrow \left(-y \frac{B_z}{2}, x \frac{B_z}{2}, 0\right)$ olur. Dışarıdan uygulanan elektrik alan yoksa $\phi = 0$ alınır. \mathbf{R}_i

sabit noktasına $-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|}$ potansiyel enerjisiyle bağlı ve \mathbf{A} vektör potansiyeli aracılığıyla, B_z sabit manyetik alanın etkisi ile bir elektronun hareket denklemini,

$$\left\{ \frac{1}{2m} (\mathbf{P} + e\mathbf{A})^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|} \right\} \phi_i(\mathbf{r}) = E_d \phi_i(\mathbf{r}) \quad (3.41)$$

ile verilir. (3.41) nolu denklemin ikinci kısmı $|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|$ 'ye bağlıdır. Birinci kısım ise $|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|$ 'ye bağlı değil, sadece \mathbf{r} 'ye bağlıdır. O halde ϕ_i 'nin de $|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|$ 'ye bağlı olması beklenmez.

$$\phi_i(\mathbf{r}) = U_i(\mathbf{r}) e^{-i\chi_i(\mathbf{r})} \quad (3.42)$$

şeklinde bir çözüm aranır. Burada

$$\begin{aligned} \chi_i(\mathbf{r}) &= e\mathbf{A}(\mathbf{R}_i) \frac{\mathbf{r}}{\hbar} = \frac{e}{2\hbar} (\mathbf{B} \times \mathbf{R}_i) \mathbf{r} \\ &= \frac{e}{2\hbar} (\mathbf{B} \times \mathbf{R}_i) (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \\ &= \frac{e}{2\hbar} [\mathbf{R}_i \times (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)] \mathbf{B} \end{aligned} \quad (3.43)$$

şeklinde alınır ve $U_i(\mathbf{r})$ sadece \mathbf{r} 'ye bağlı bir fonksiyon olduğu kabul edilir. Vektör potansiyelini

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B}\times\mathbf{r} - \frac{1}{2}\mathbf{B}\times\mathbf{R}_i \quad (3.44)$$

şeklinde yazmak $\mathbf{B} = \nabla\times\mathbf{A}$ yı bozmaz, B yine aynı kalır. Bu sonuçlar denklem (3.41) de yerine konulursa

$$\left\{ \frac{1}{2m} \left(\mathbf{P} + \frac{e}{2}\mathbf{B}\times(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \right)^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|} \right\} U_i(\mathbf{r}) = E_d U_i(\mathbf{r}) \quad (3.45)$$

şeklini alır. Şimdi her iki terim de $|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|$ ye bağlı olduğu için çözüm $U_i(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ gibi $\mathbf{r} - \mathbf{R}_i$ 'nin yeni bir fonksiyonu olmalıdır.

$$\begin{aligned} \mathbf{P} = -i\hbar\nabla, \quad \nabla \cdot \vec{\mathbf{A}} = \mathbf{0} \quad \text{ve} \quad \nabla \cdot (\mathbf{A}\phi_i(r)) &= \mathbf{A}(\nabla\phi_i(\mathbf{r})) + (\nabla \cdot \mathbf{A})\phi_i(\mathbf{r}) \\ &= \mathbf{A}(\nabla\phi_i(\mathbf{r})) \end{aligned} \quad (3.46)$$

denklemini de hesaba katılırsa denklem (3.45)

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|} - \frac{i\hbar e}{2m}[\mathbf{B}\times(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)]\nabla + \frac{e^2}{8m}[\mathbf{B}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)]^2 \right\} U_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = E_d U_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \quad (3.47)$$

olarak yazılabilir. (3.47) nolu denklemdeki dördüncü terim zayıf manyetik alanda gözardı edilir. İlk yaklaşımda $U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ dalga fonksiyonu \mathbf{B} 'ye bağlı değildir. Tüm \mathbf{B} 'ye bağlılık ayar çarpanı $e^{-i\chi_i(\mathbf{r})}$ de içerilmiştir. Sonuçta i'inci site'da bulunan dalga fonksiyonu

$$\phi_i(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \exp \left\{ -i \frac{e}{2\hbar} (\mathbf{B} \times \mathbf{R}_i) (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \right\} \quad (3.48)$$

ile verilir. Hamiltoniyenin site temsilinde bu dalga fonksiyonları baz olarak kullanılır, tam bir set oluşturdukları ve birbirine dik oldukları kabul edilir.

(3.47) nolu denklemdeki Hamiltoniyen tek bir \mathbf{R}_i noktasındaki bir atomun (iyonun) varlığı halindeki Hamiltoniyendir. Birçok atomun varlığı halindeki yani bir iyon tarlası içinde hareket eden bir tek elektronun Hamiltoniyeni,

$$v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|} - i \frac{\hbar e}{2m} [\mathbf{B} \times (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)] \nabla \quad (3.49)$$

olmak üzere

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \sum_{i=1}^N v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \quad (3.50)$$

olur. Hamiltoniyenin köşegen matris elemanı

$$H_{11} = \int \phi_1(\mathbf{r}) \hat{H} \phi_1(\mathbf{r}) d^3 r = \epsilon_1 = \epsilon_d \quad (3.51)$$

şeklindedir ve bu da 1 nolu elektronun yaklaşık bağ enerjisidir, genelde $H_{ii} = \epsilon_i$ dir ve bunlar dağılma aralığı $-\frac{W}{2} \leq \epsilon_i \leq \frac{W}{2}$ olan rastgele sayılarıdır. Hamiltoniyenin köşegen dışı matris elemanı

$$H_{12} = \int \phi_1(\mathbf{r}) \hat{H} \phi_2(\mathbf{r}) d^3 r$$

$$\begin{aligned}
&= \int U^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_1) e^{i\frac{e}{2\hbar}(\mathbf{B} \times \mathbf{R}_1)(\mathbf{r} - \mathbf{R}_1)} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_1) + v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_2) \right\} U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_2) e^{-i\frac{e}{2\hbar}(\mathbf{B} \times \mathbf{R}_2)\mathbf{r}} d^3 r \\
&\quad + \int \phi_1(\mathbf{r} - \mathbf{R}_2) \left\{ \sum_{i \neq 1,2}^N v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \right\} \phi_2(\mathbf{r} - \mathbf{R}_2) d^3 r \tag{3.52}
\end{aligned}$$

şeklinde yazılır. $\rho = \mathbf{r} - \mathbf{R}_1$ alınır ve $(\mathbf{B} \times \mathbf{R}_2)\mathbf{r} = (\mathbf{R}_2 \times \mathbf{r})\mathbf{B}$ göz önünde bulundurulursa (3.52) nolu denklem

$$\begin{aligned}
H_{12} &= \int U^*(\rho) e^{i\frac{e}{2\hbar}(\mathbf{R}_1 \times \rho)\mathbf{B}} v(\rho) U(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2 + \rho) e^{-i\frac{e}{2\hbar}[\mathbf{R}_2 \times (\mathbf{R}_1 + \rho)]\mathbf{B}} d^3 \rho \\
H_{12} &= e^{-i\frac{e}{2\hbar}\mathbf{B}(\mathbf{R}_2 \times \mathbf{R}_1)} \int U^*(\rho) v(\rho) U(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2 + \rho) e^{-i\frac{e}{2\hbar}\mathbf{B}[(\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1) \times \rho]} d^3 \rho \tag{3.53}
\end{aligned}$$

şeklinde yazılabilir.

$|x| = \frac{e}{2\hbar} \mathbf{B} |\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1| \rho \cong \frac{e}{2\hbar} \mathbf{B} |\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1|^2 \ll 1$ ise $e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!}$ şeklinde seriye açılımından 1 alınabilir. İntegral içindeki terimi I_{12} , yani magnetik alan yokkenki iki atom arasındaki rezonans integrali olarak tanımlarsak Hamiltoniyeenin köşegen dışı matris elemanı

$$H_{12} = \langle \phi_1 | \hat{H} | \phi_2 \rangle = e^{-i\frac{e}{2\hbar}\mathbf{B}(\mathbf{R}_2 \times \mathbf{R}_1)} I_{12} \tag{3.54}$$

ve genel olarak

$$H_{ij} = \langle \phi_i | \hat{H} | \phi_j \rangle = e^{-i\frac{e}{2\hbar}\mathbf{B}(\mathbf{R}_j \times \mathbf{R}_i)} I_{ij} \tag{3.55}$$

şeklinde yazılır.

4 BULGULAR

İki boyutta $N = 50 \times 50$, $N = 60 \times 60$, $N = 72 \times 72$, $N = 80 \times 80$, $N = 90 \times 90$, $N = 100 \times 100$, $N = 110 \times 110$ atomdan oluşan kare yapı ve 3 boyutta $N = 5 \times 5 \times 5$ atomdan oluşan basit kübik yapı için hesaplamalar yapıldı. Enerji birimi (W) olarak alındığı için V yerine V/W konuldu ve ε_n rastgele sayıları -0.5 , 0.5 arasında değişti.

Örnek olarak $N = 2500$, $V = 1.5 \left(\frac{W}{V} = 0.66 \right)$ alınrsa enerji spektrumu

$$-\frac{W}{2} - ZV \leq E \leq ZV + \frac{W}{2} \quad (\text{iki boyutta kare yapı için } Z = 4, \text{ üç boyutta basit kübik yapı}$$

için $Z = 6$, Z en yakın komşu sayısı) arasında değişir. Bant genişliği $2B = 2(4 \times 1.5 + 0.5) = 13$, ortalama olarak öz enerjilerin birbirinden ayrılması

$$\Delta E = \frac{2B}{N} = \frac{13}{2.5 \times 10^3} \cong 5 \times 10^{-3} = 0.005 \text{ kadardır. } E_F = 0 \text{ Fermi enerjisi merkez olarak}$$

alınrsa bunun 0.005 aşağısındaki ve yukarısındaki durumları almamız yayılım hesabı için yeterlidir. Merkezde $g(E)$ durumlar yoğunluğu maksimumdur, dolayısıyla spektrum daha sıkışıktır bu yüzden hesaplamalarda $\Delta E'$ yi yukarıda hesaplanandan daha küçük almak gereklidir.

Fermi enerjisi $E_F = 0$ merkezi alınarak her düzensizlik parametresi için hesaplanan $\Delta E'$ lik bir uzaklık kadar altta ve üstte olmak üzere, üç tane durum için yayılım hesaplanmıştır. $E_F = 0'$ daki, üstündeki veya altındaki durumlarda hesaplanan yayınımlar arasında 0.0005 veya daha az bir fark vardır. E_F civarındaki üç farklı enerji için yayılım değerleri Çizelge 4.1 de gösterilmiştir.

Çizelge 4.1 50x50 ve 72x72 kare yapı için E_F civarındaki üç farklı enerji de $D(E)$

V=0.5	50x50		72x72	
$e_r = 0.001$	$D(E)$	$ \Delta D(E) /\bar{D}(E_F)$	$D(E)$	$ \Delta D(E) /\bar{D}(E_F)$
E=+0.001	2.7333		2.975	
E=0.000	2.731		2.976	
E=-0.001	2.729		2.977	
$\bar{D}(E_F) = 2.731(1 \pm 0.0005)$		0.0005	$2.976(1 \pm 0.0002)$	0.0002

Farklı atomlardan başlayarak oluşturulan Hamiltoniyen yardımıyla 20 farklı atom için yayılım hesaplanır ve ortalaması alınır. Toplam 60 tane yayılımın ortalaması alınır. Şekillenim (configuration) ortalaması alındığında hata artar. Örneğin 72x72 sistem için E_F etrafında dolaşırken oluşan hata $|\Delta D(E)|/\bar{D}(E_F) = 0.0002$ iken 20 farklı şekillenim ortalaması alındığında hata $\left\langle \frac{\Delta D(E)}{D(E_F)} \right\rangle \approx 0.02$ olur.

Yayımları hesaplamak için kullanılan özvektörü bulabilmek için filtreleme tekniği kullanılır. Filtreleme matris tekniği kullanılarak bulunan E enerjisine sahip $|\nu\rangle$ özvektörünün doğruluğu

$$e_r = \langle \delta | \delta \rangle = \{-\langle \nu | E + \langle \nu | \hat{H} | \hat{H} | \nu \rangle - E | \nu \rangle\} \quad (4.1)$$

denklemleri ile yoklandı (Unal vd. 2009). N_{run} filtreleme matrisinin kendisiyle çarpılma sayısı olmak üzere $N_{run} = 200$ için 0.007, $N_{run} = 400$ için 0.003, $N_{run} = 1000$ için 0.0015 hata payı bulunmuştur. Bu bize N_{run} sayısının mümkün olduğu kadar fazla alınması gerektiğini göstermektedir. Hesaplamalarda N_{run} 1000 veya daha fazla alınmıştır.

Bütün programlarda çift duyarlıklı sayı değişkenleri kullanılarak hesaplama yapıldı ve Fermi enerjisi civarında durumlar yoğunluğu $g(E_F)$ veya yayılım $D(E_F)$ yaklaşık olarak 0.001 hata ile hesaplandı.

Hesaplamalarda özyineleme yöntemi kullanılırken elde edilen değerler belli bir döngüden sonrası sabitleştiği için işlemlerin kesilmesi gerekiyordu. Bu değerler Fortran programında A(I) ve B2(I) katsayıları olarak verilir. A(I) ve B2(I) katsayıları Çizelge 4.1 de örnek olarak verilmiştir. A(I) ve B2(I) katsayıların bölüm 3.3 de a_n ve b_n^2 katsayıları olarak değinilmiştir.

Çizelge 4.2 Fortran programındaki A ve B2 katsayıları

<u>A</u>	<u>B2</u>
0.384	1.0000
-0.085	1.0000
-0.074	1.3048
-0.012	0.9808
0.025	1.1927
0.103	0.9444
-0.055	1.1735
-0.093	1.1119
0.073	1.0101
0.054	1.1535
0.091	1.0881
-0.023	1.0331
-0.024	1.2405
0.047	1.0166
0.001	1.2364
-0.006	1.0684
0.029	1.1832
0.001	1.0967
0.013	1.2231
0.007	1.1045
0.007	1.2451
0.019	1.1135
0.018	1.1771
0.003	1.1518
0.016	1.1663
0.000	1.1484
0.018	1.1661
0.026	1.1536
-0.018	1.1658
0.037	1.1503
-0.012	1.1457

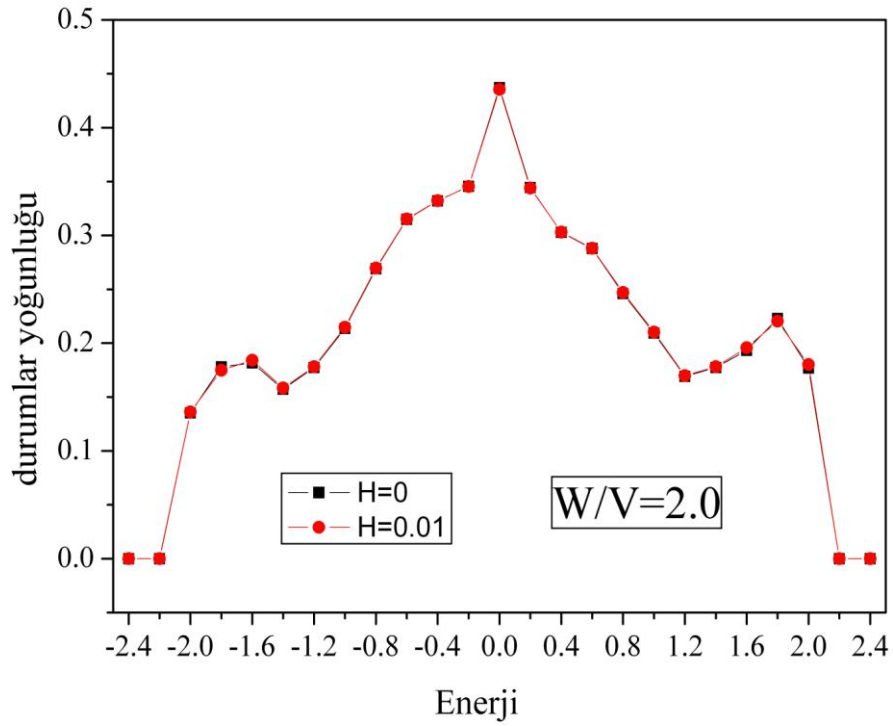
Sisteme manyetik alan (B) uygulandığında Hamiltoniyen manyetik alan içerir, yani Hamiltoniyende sanal kısım oluşur. Denklem (3.36) daki üstel terim a komşu atomlar arasındaki mesafe ($a = 3.5 \text{ \AA}$) olmak üzere, $\frac{e}{2\hbar} Ba^2$ şeklinde yazılabilir.

Programlarımızda $H = \frac{e}{2\hbar} Ba^2$ olmak üzere, H parametresinin değerlerini doğrudan kullandık. B ile H parametresi arasındaki geçiş Çizelge 4.3’de verilmiştir.

Çizelge 4.3 $B(T)$ 'nın farklı değerleri için $H = \frac{e}{2\hbar} Ba^2$ parametresi

$B(T)$	H
10	0.001
50	0.005
100	0.010

Manyetik alan uygulandığında durumlar yoğunluğunda herhangi bir değişme gözlenmemiştir ve Şekil 4.1 de bu görülmektedir.



Şekil 4.1 $V=0.5$ için manyetik alanla durumlar yoğunluğunun değişimi

Durumlar yoğunluğu hesaplanırken en az 100 atom üzerinden ortalama alınarak hesaplama yapılmıştır. Durumlar yoğunluğu grafiğinin altında kalan alan daima 1 dir,

hesaplamalarımızda yaklaşık olarak bu sağlanmıştır ve Şekil 3.2'ye benzer grafikler çizilmiştir. Şekillerde görüldüğü gibi durumlar yoğunluğu atom sayısına göre fazla bir değişme göstermemiştir. İki ve üç boyutta 20 farklı şekillenim alındığında farklı düzensizlik parametreleri için durumlar yoğunluğu, yayılım ve uygulanan manyetik alana karşı iletkenlik değerleri aşağıdaki çizelgelerde verilmiştir. İletkenliğin boyutu, iki boyutta $\frac{e^2}{\hbar}$, üç boyutta ise $\frac{e^2}{\hbar a}$ dır.

Çizelge 4.4 $V = 0.25$ de, $N = 2500$ için değişik manyetik alanlarda yayılım, durumlar yoğunluğu ve iletkenlik değerleri (20 farklı şekillenim alındığında)

$V = 0.25(W/V = 4.0)$			
$N = 2500$			
B	$\bar{D}(E)$	$g(E)$	$\sigma(e^2 / \hbar)$
0	0.5168		0.3948(∓ 0.018)
10	0.5160	0.7638	0.3941(∓ 0.017)
50	0.5100		0.3896(∓ 0.015)
100	0.5271		0.4026(∓ 0.01)

Çizelge 4.5 $V = 0.25$ de, $N = 5184$ için değişik manyetik alanlarda yayılım, durumlar yoğunluğu ve iletkenlik değerleri (20 farklı şekillenim alındığında)

$V = 0.25(W/V = 4.0)$			
$N = 5184$			
B	$\bar{D}(E)$	$g(E)$	$\sigma(e^2 / \hbar)$
0	0.5619		0.4577(∓ 0.01)
10	0.5597	0.81449	0.4559(∓ 0.01)
50	0.5790		0.4716(∓ 0.008)
100	0.5407		0.4404(∓ 0.006)

Çizelge 4.6 $V = 0.5$ de, $N = 2500$ için değişik manyetik alanlarda yayılım, durumlar yoğunluğu ve iletkenlik değerleri (20 farklı şekillenim alındığında)

$V = 0.5(W/V = 2.0)$			
$N = 2500$			
B	$\bar{D}(E)$	$g(E)$	$\sigma(e^2 / \hbar)$
0	2.7810		1.215(∓ 0.025)
10	2.7466	0.4369	1.200(∓ 0.017)
50	2.9070		1.270(∓ 0.021)
100	3.2767		1.4316(∓ 0.16)

Çizelge 4.7 $V = 0.5$ de, $N = 5184$ için değişik manyetik alanlarda yayılım, durumlar yoğunluğu ve iletkenlik değerleri (20 farklı şekillenim alındığında)

$V = 0.5(W/V = 2.0)$			
$N = 5184$			
B	$\bar{D}(E)$	$g(E)$	$\sigma(e^2 / \hbar)$
0	3.073		1.393(∓ 0.007)
10	3.049	0.45328	1.3825(∓ 0.005)
50	3.039		1.3774(∓ 0.01)
100	3.029		1.3729(∓ 0.01)

Çizelge 4.8 $V = 1.5$ de, $N = 2500$ için değişik manyetik alanlarda yayılım, durumlar yoğunluğu ve iletkenlik değerleri (20 farklı şekillenim alındığında)

$V = 1.5(W/V = 0.66)$			
$N = 2500$			
B	$\bar{D}(E)$	$g(E)$	$\sigma(e^2 / \hbar)$
0	67.5465		13.077(∓ 0.17)
10	64.0238	0.1936	12.395(∓ 0.1)
50	58.7810		11.33(∓ 0.24)
100	59.1674		11.4548(∓ 0.19)

Çizelge 4.9 $V = 1.5$ de, $N = 5184$ için değişik manyetik alanlarda yayınım, durumlar yoğunluğu ve iletkenlik değerleri (20 farklı şekillenim alındığında)

$V = 1.5(W/V = 0.66)$			
$N = 5184$			
B	$\bar{D}(E)$	$g(E)$	$\sigma(e^2 / \hbar)$
0	53.1276		9.8642(∓ 0.16)
10	55.9132	0.18567	10.3814(∓ 0.1)
50	59.5357		11.054(∓ 0.06)
100	58.6147		10.883(∓ 0.09)

Çizelge 4.10 $V = 5.0$ de, $N = 2500$ için değişik manyetik alanlarda yayınım, durumlar yoğunluğu ve iletkenlik değerleri (20 farklı şekillenim alındığında)

$V = 5.0(W/V = 0.2)$			
$N = 2500$			
B	$\bar{D}(E)$	$g(E)$	$\sigma(e^2 / \hbar)$
0	1797		96.076(∓ 2.97)
10	1672	0.05346	89.65(∓ 1.99)
50	1305		69.7987(∓ 1.6)
100	1094		58.49(∓ 1.61)

Çizelge 4.11 $V = 5.0$ de, $N = 5184$ için değişik manyetik alanlarda yayınım, durumlar yoğunluğu ve iletkenlik değerleri (20 farklı şekillenim alındığında)

$V = 5.0(W/V = 0.2)$			
$N = 5184$			
B	$\bar{D}(E)$	$g(E)$	$\sigma(e^2 / \hbar)$
0	1267		64.088(∓ 1.46)
10	1303	0.05055	65.87(∓ 1.44)
50	1543		78.017(∓ 0.76)
100	1146		57.946(∓ 1.045)

Çizelge 4.12 $V = 0.125$ de, $N = 125$ için değişik manyetik alanlarda yayılım, durumlar yoğunluğu ve iletkenlik değerleri (20 farklı şekillenim alındığında)

$V = 0.125(W/V = 8.0)$			
$N = 125$			
B	$\bar{D}(E)$	$g(E)$	$\sigma(e^2 / \hbar)$
0	0.02637		0.0369158(∓ 0.00168)
10	0.026368	1.4	0.0369156(∓ 0.00168)
50	0.026366		0.0369129(∓ 0.00168)
100	0.02635		0.0369027(∓ 0.00168)

İki boyutlu 50×50 , 72×72 ve 80×80 atomdan oluşan kare yapıda tek şekillenim alındığında $W = 2.0$ ve $W = 4.0$ düzensizlik parametreleri için uygulanan manyetik alana karşı yayılım ve iletkenliğin şekillenim ortalaması alınmamış değerleri aşağıdaki çizelgelerde verilmiştir.

Çizelge 4.13 $V = 0.5$ de, $N = 2500$ için değişik manyetik alanlarda yayılım ve iletkenlik değerleri (tek şekillenim alındığında)

$V = 0.5(W/V = 2.0)$		
$N = 2500$		
B	$D(E)$	$\sigma(e^2 / \hbar)$
0	2.7310	1.1934
5	2.7216	1.1893
10	2.6961	1.1782
15	2.6613	1.1630
20	2.6251	1.1471
25	2.5950	1.1340
30	2.5791	1.127
35	2.5857	1.1299
40	2.6196	1.1447
45	2.6768	1.1697
50	2.7465	1.2002
55	2.8188	1.2317
60	2.8903	1.2630
65	2.9605	1.2936
70	3.023	1.3214
75	3.0713	1.3421
80	3.0967	1.3532
85	3.1039	1.3563
90	3.1036	1.3562
95	3.1051	1.3568
100	3.1119	1.3598

Çizelge 4.14 $V = 0.5$ de, $N = 5184$ için değişik manyetik alanlarda yayılım ve iletkenlik değerleri (tek şekillenim alındığında)

$V = 0.5(W/V = 2.0)$		
$N = 5184$		
B	$D(E)$	$\sigma(e^2 / \hbar)$
0	3.1805	1.4416
5	3.1497	1.4276
10	3.0820	1.3969
15	3.0043	1.3618
20	2.9312	1.3286
25	2.8967	1.3130
30	2.9078	1.3180
35	2.9256	1.3261
40	2.9436	1.3342
45	2.9870	1.3539
50	3.0459	1.3806
55	3.1023	1.4062
60	3.1575	1.4312
65	3.2086	1.4544
70	3.2488	1.4726
75	3.2739	1.4839
80	3.2661	1.4804
85	3.2126	1.4562
90	3.1442	1.4252
95	3.1128	1.4109
100	3.1377	1.4222

Çizelge 4.15 $V = 0.5$ de, $N = 6400$ için değişik manyetik alanlarda yayılım ve iletkenlik değerleri (tek şekillenim alındığında)

$V = 0.5(W/V = 2.0)$		
$N = 6400$		
B	$D(E)$	$\sigma(e^2 / \hbar)$
0	3.6067	1.6865
5	3.5907	1.6790
10	3.5699	1.6693
15	3.4976	1.6356
20	3.4056	1.5925
25	3.3177	1.5515
30	3.2569	1.5230
35	3.2364	1.5134
40	3.2711	1.5297
45	3.3498	1.5664
50	3.4166	1.5977
55	3.4298	1.6039
60	3.3805	1.5808
65	3.3073	1.5466
70	3.3046	1.5433
75	3.4142	1.5966
80	3.5455	1.6579
85	3.5460	1.6580
90	3.5641	1.6667
95	3.5679	1.6684
100	3.5722	1.6704

Çizelge 4.16 $V = 0.25$ de, $N = 2500$ için değişik manyetik alanlarda yayılım ve iletkenlik değerleri (tek şekillenim alındığında)

$V = 0.25(W/V = 4.0)$		
$N = 2500$		
B	$D(E)$	$\sigma(e^2 / \hbar)$
0	0.5340	0.4349
5	0.5336	0.4346
10	0.5321	0.4334
15	0.5299	0.4316
20	0.5281	0.4301
25	0.5279	0.4300
30	0.5301	0.4318
35	0.5347	0.4356
40	0.5411	0.4408
45	0.5473	0.4458
50	0.5519	0.4495
55	0.5537	0.4510
60	0.5529	0.4503
65	0.5504	0.4483
70	0.5481	0.4464
75	0.5472	0.4457
80	0.5480	0.4464
85	0.5499	0.4479
90	0.5519	0.4495
95	0.5535	0.4509
100	0.5548	0.4519

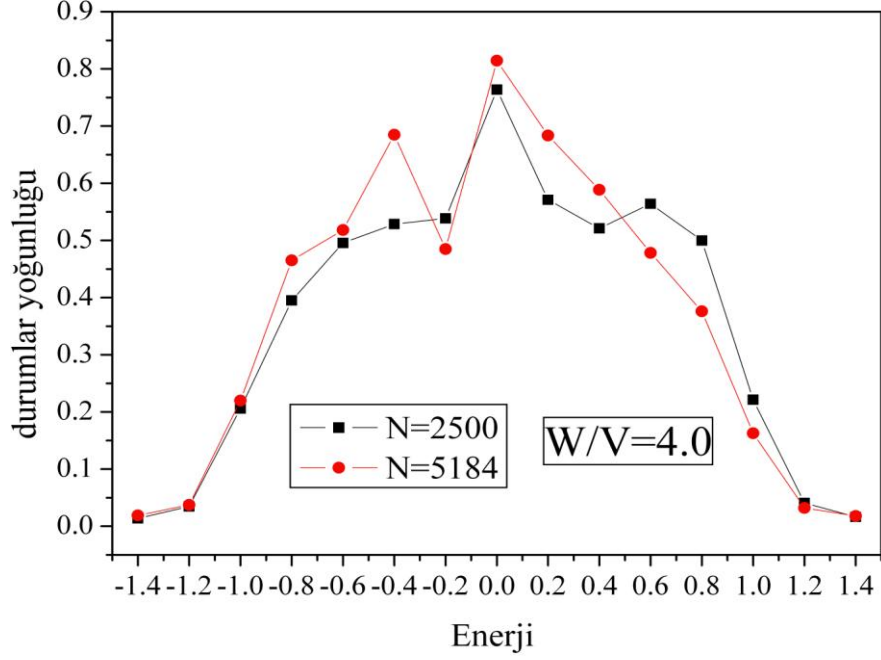
Çizelge 4.17 $V = 0.25$ de, $N = 5184$ için değişik manyetik alanlarda yayılım ve iletkenlik değerleri (tek şekillenim alındığında)

$V = 0.25(W/V = 4.0)$		
$N = 5184$		
B	$D(E)$	$\sigma(e^2 / \hbar)$
0	0.5720	0.4369
5	0.5729	0.4376
10	0.5752	0.4393
15	0.5784	0.4418
20	0.5818	0.4444
25	0.5850	0.4469
30	0.5875	0.4487
35	0.5888	0.4498
40	0.5889	0.4498
45	0.5879	0.4490
50	0.586	0.4476
55	0.5842	0.4462
60	0.5830	0.4453
65	0.5831	0.4454
70	0.5844	0.4464
75	0.5865	0.4480
80	0.5886	0.4496
85	0.5900	0.4507
90	0.5902	0.4510
95	0.5896	0.4504
100	0.5881	0.4492

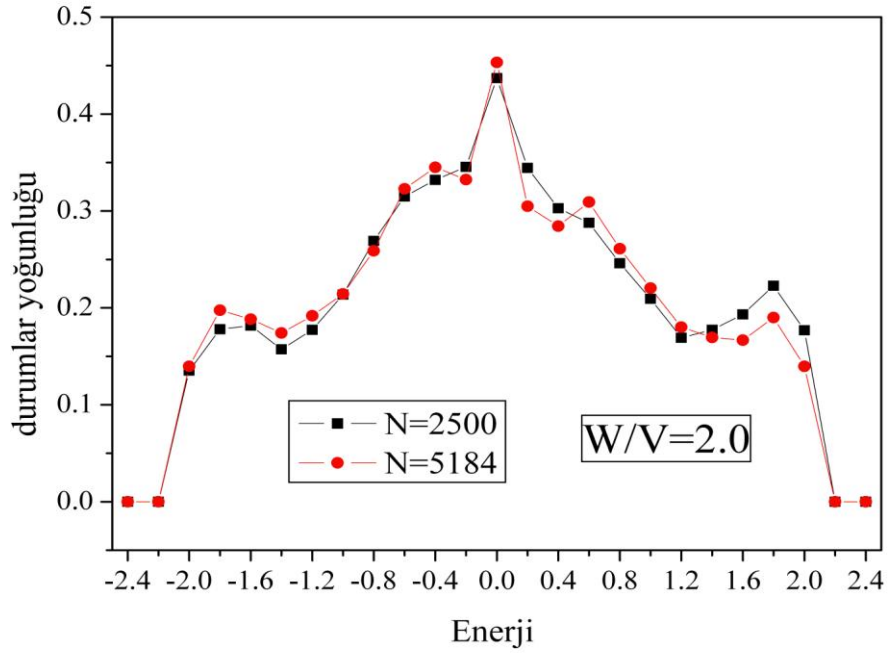
Çizelge 4.18 $V = 0.25$ de, $N = 6400$ için değişik manyetik alanlarda yayılım ve iletkenlik değerleri (tek şekillenim alındığında)

$V = 0.25(W/V = 4.0)$		
$N = 6400$		
B	$D(E)$	$\sigma(e^2 / \hbar)$
0	0.6056	0.4776
5	0.6049	0.4770
10	0.6015	0.4743
15	0.5933	0.4679
20	0.5790	0.4568
25	0.5608	0.4422
30	0.5422	0.4276
35	0.5284	0.4168
40	0.5120	0.4116
45	0.5225	0.4120
50	0.5279	0.4163
55	0.5352	0.4221
60	0.5419	0.4274
65	0.5445	0.4294
70	0.5431	0.4283
75	0.5427	0.4279
80	0.5430	0.4283
85	0.5420	0.4274
90	0.5376	0.4260
95	0.5303	0.4183
100	0.5221	0.4117

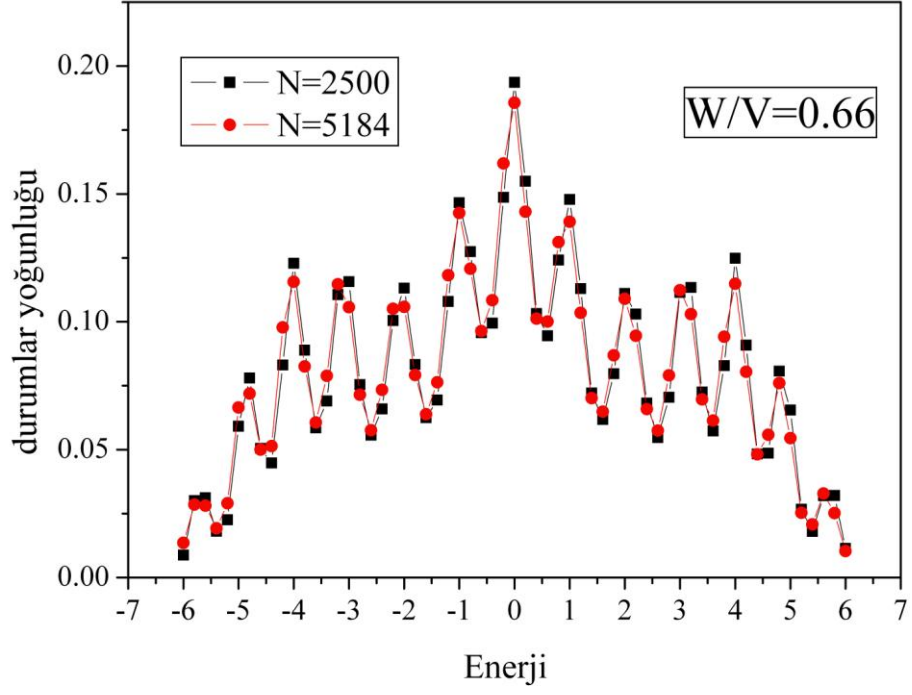
İki ve üç boyutta farklı düzensizlik parametreleri için durumlar yoğunluğu ve uygulanan manyetik alana karşı iletkenlik değerleri aşağıdaki şekillerde verilmiştir.



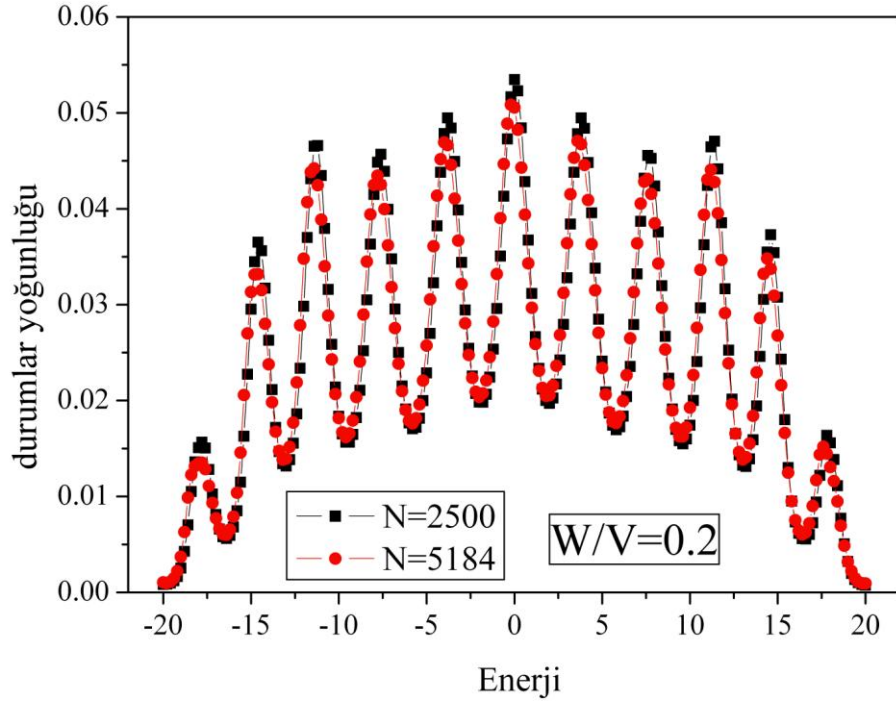
Şekil 4.2 Kare yapıda $V=0.25$ için durumlar yoğunluğu



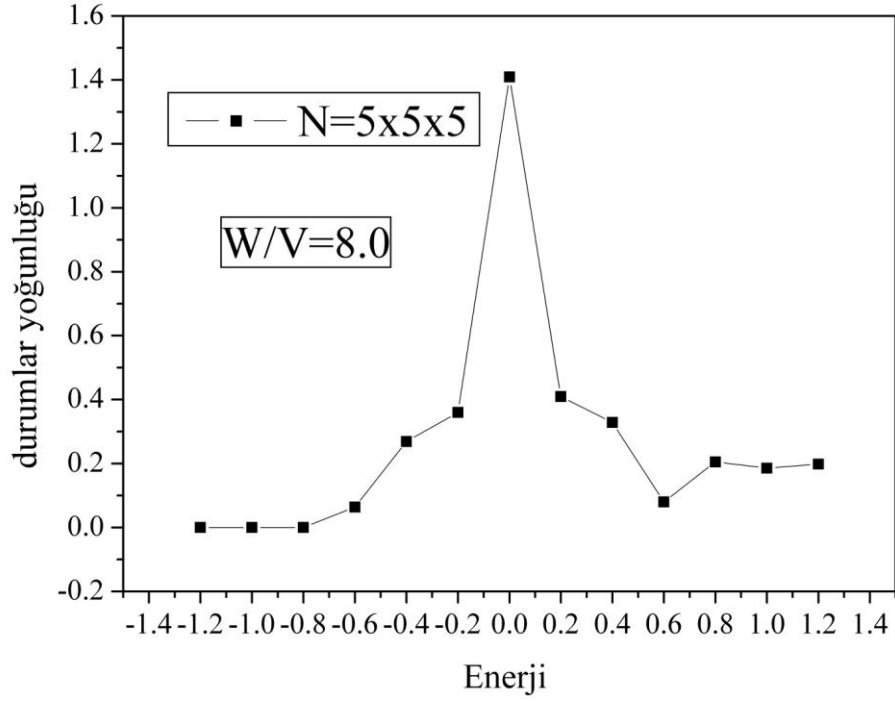
Şekil 4.3 Kare yapıda $V=0.5$ için durumlar yoğunluğu



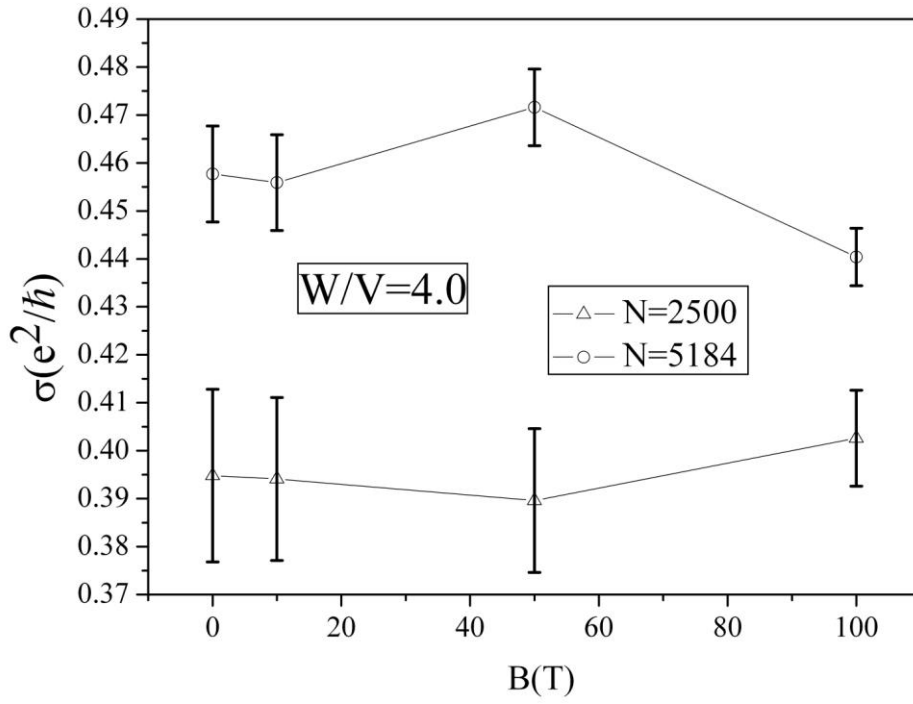
Şekil 4.4 Kare yapıda $V=1.5$ için durumlar yoğunluğu



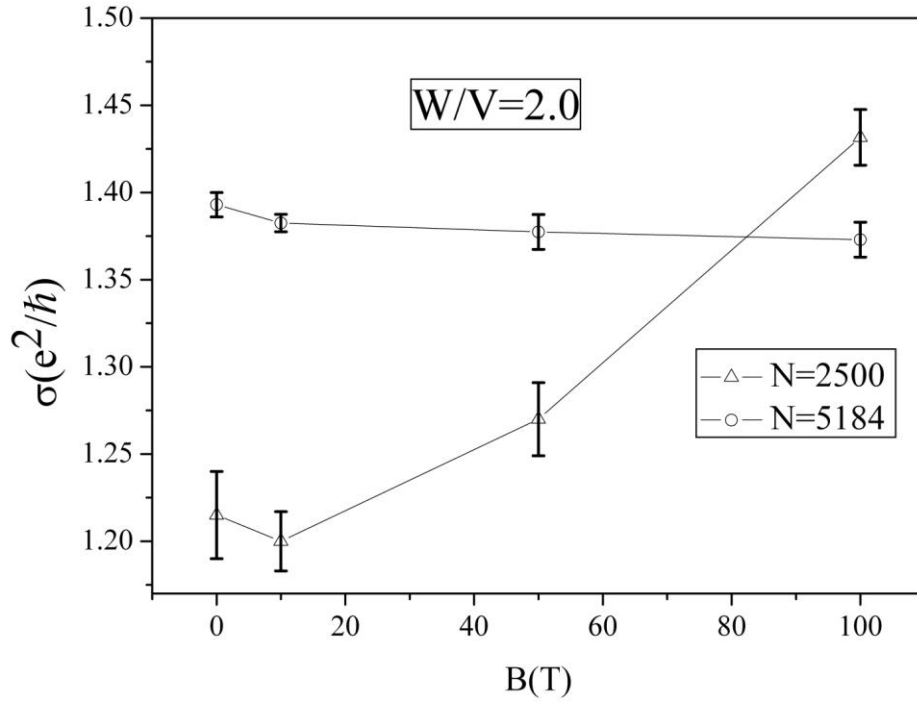
Şekil 4.5 Kare yapıda $V=5.0$ için durumlar yoğunluğu



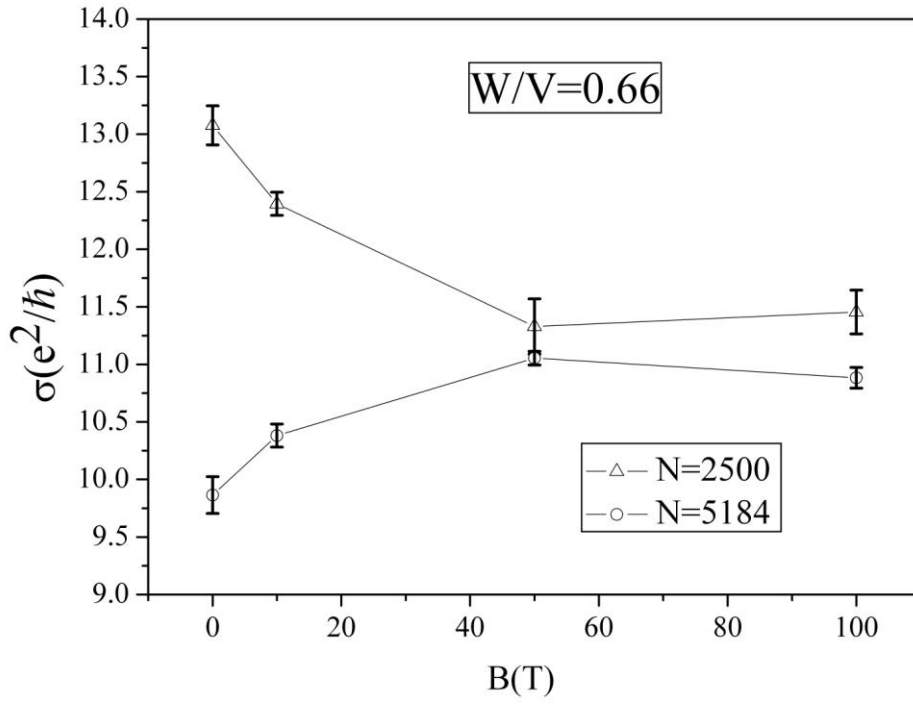
Şekil 4.6 Basit kübik yapıda $V=0.125$ için durumlar yoğunluğu



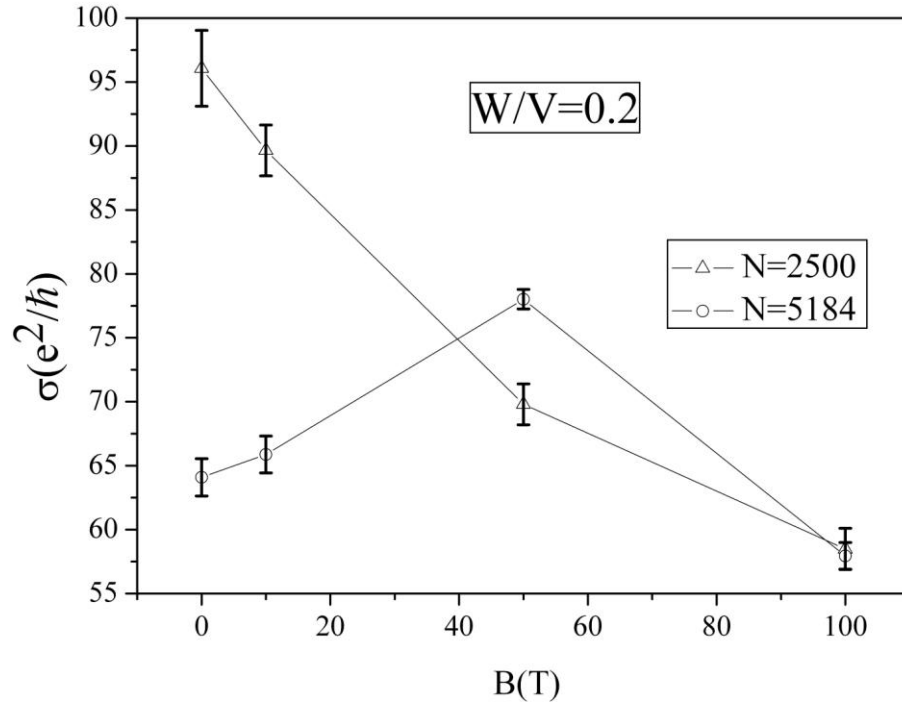
Şekil 4.7 Kare yapıda $V=0.25$ için manyetik alanla iletkenliğin değişimi



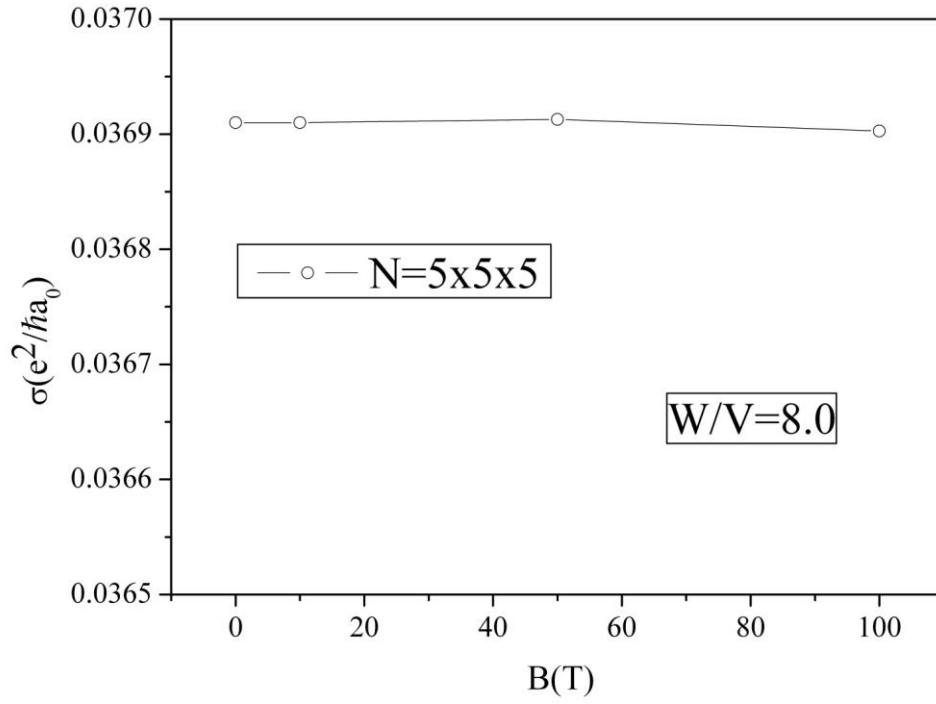
Şekil 4.8 Kare yapıda $V=0.5$ için manyetik alanla iletkenliğin değişimi



Şekil 4.9 Kare yapıda $V=1.5$ için manyetik alanla iletkenliğin değişimi



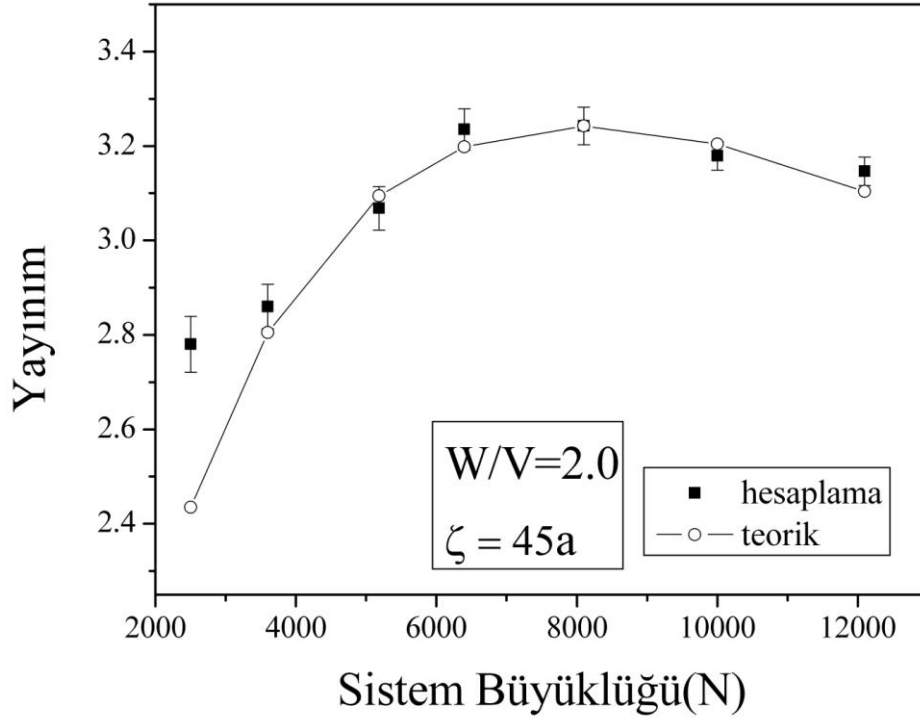
Şekil 4.10 Kare yapıda $V=5.0$ için manyetik alanla iletkenliğin değişimi



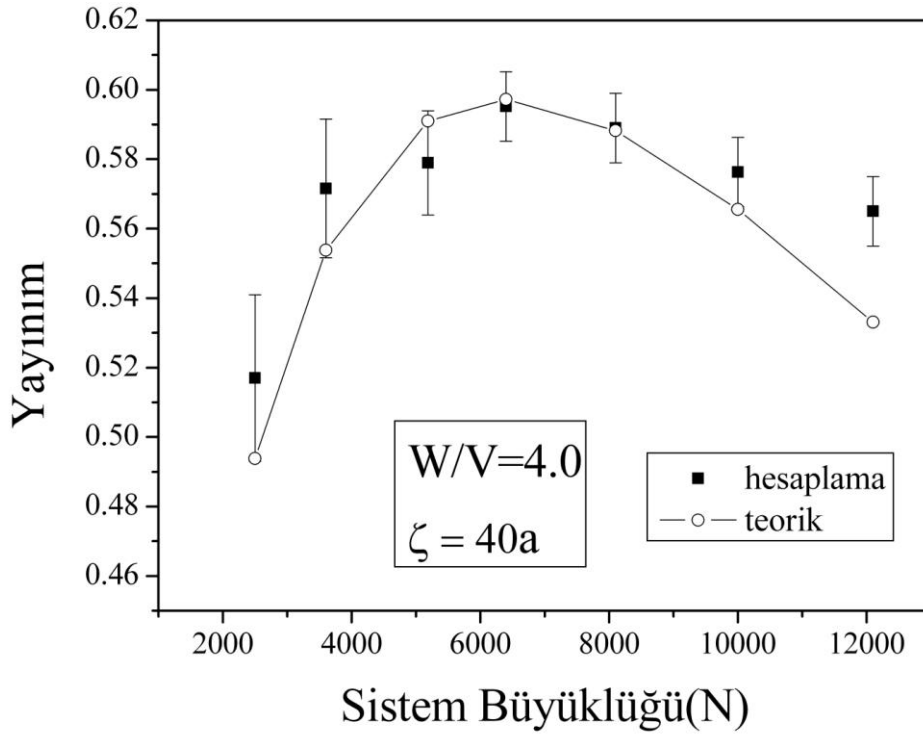
Şekil 4.11 Basit kübik yapıda $V=0.125$ için manyetik alanla iletkenliğin değişimi

Şekil 4.4 ve Şekil 4.5 zayıf saçılmaya karşılık gelmektedir, ve ortalama serbest yol yaklaşık sistem boyutu mertebesinde ($l \sim L$) veya daha büyük olduğundan durumlar yoğunluğu hesabında kullanılan A(I) ve B2(I) özyineleme katsayılarının yakınsaklığı iyi değildir. Ya katsayıların sayısını arttırmak yada sistem boyutunu büyütmek yoluna gidilmelidir, fakat her iki durumda da bilgisayar belleği bir sorun olarak karşımıza çıkar. Onun için katsayıların yakınsamasının iyi olduğu kuvvetli saçılma bölgesinde kalmayı tercih ettik. Zayıf saçılma eğrileri ve üç boyut için çizilen eğriler yalnızca bir fikir vermek amacıyla çizilmiştir. Sayısal karşılaştırmalar ve yorumlar için $l \ll L$ koşulunu sağlayan kuvvetli saçılma eğrileri üzerinde yapılacaktır.

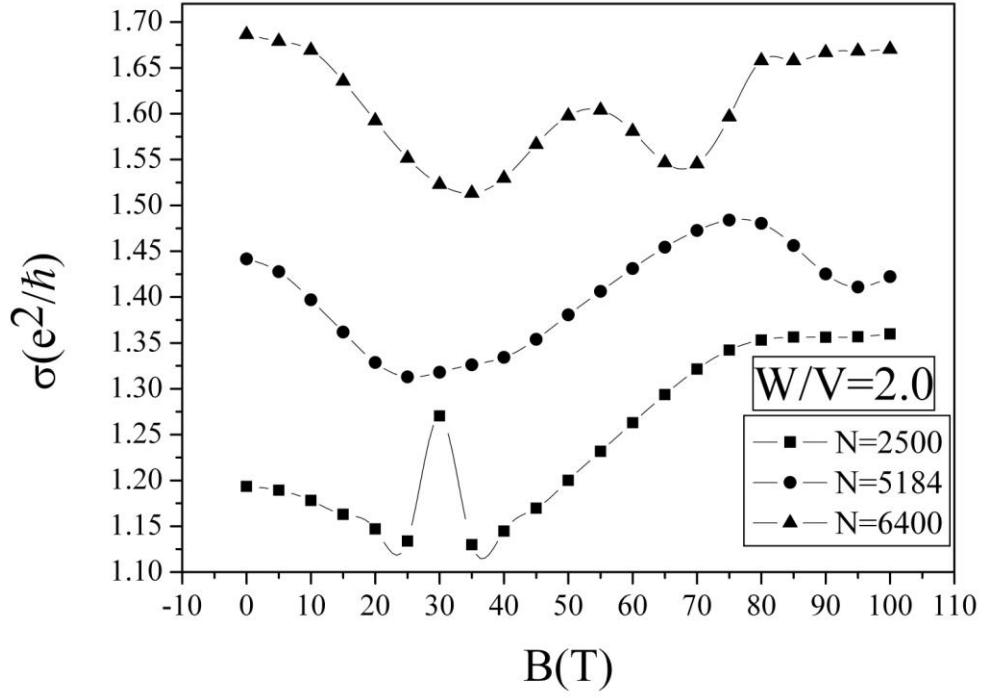
İki boyutta büyük düzensizlik parametresi $\frac{W}{V} = 4$ ve $\frac{W}{V} = 2$ için sistemdeki atom sayısı büyüdükçe iletkenlik önce artmakta ve belli bir değerden sonra azalmaktadır, teorik ve hesaplanan yayınım değerleri Şekil 4.12 ve Şekil 4.13 de gösterilmiştir, fakat küçük düzensizlik parametreleri için bu söylenemez. $\frac{W}{V} = 4$ ve $\frac{W}{V} = 2$ için 20 farklı şekillenim alındığında uygulanan manyetik alanla iletkenliğin değişmediği veya çok az değişim gösterdiği bulunmuştur. Tek şekillenim alındığında ise Şekil 4.14 ve Şekil 4.15 de görüldüğü gibi B ile dalgalanma gözlenmektedir. Zayıf saçılmaya karşılık karşılık gelen $\frac{W}{V} = 0.66$ ve $\frac{W}{V} = 0.2$ düzensizlik parametrelerinde ise durumlar yoğunluğunda bir dalgalanma gözlemlenmektedir, iletkenliğin de B 'ye göre düzenli bir artış veya azalış göstermediği söylenebilir. Fakat σ 'nın N sistem büyüklüğü arttıkça büyük N 'lerde azaldığı açıkça görülmektedir (Şekil 4.9, 4.10). Bu ise açıklanabilir ve beklenen bir davranıştır. σ 'nın N ile azalması zayıf lokalizasyon (WL) kuramı ile açıklanmıştır (Lee and Ramakrihnan 1985). Üç boyutta ise uygulanan manyetik alanla iletkenlik değişim göstermemiştir.



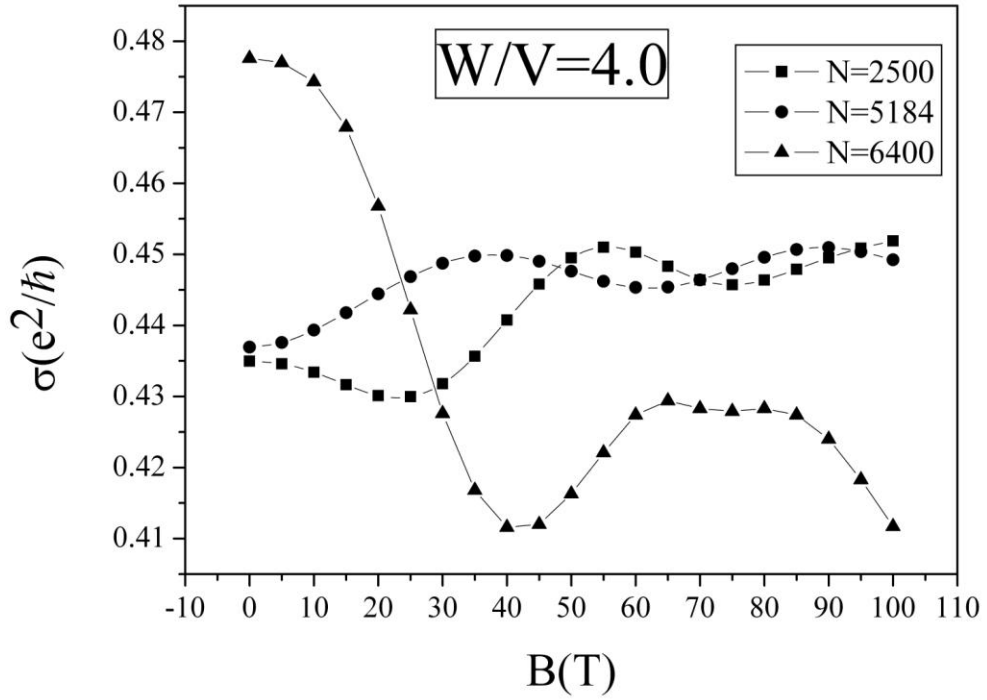
Şekil 4.12 Kare yapıda $V=0.5$ için sistem büyüklüğüne karşı yayınım değişimi



Şekil 4.13 Kare yapıda $V=0.25$ için sistem büyüklüğüne karşı yayınım değişimi



Şekil 4.14 $V=0.5$ için tek şekillenim alındığında manyetik alanla iletkenlik değişimi



Şekil 4.15 $V=0.25$ için tek şekillenim alındığında manyetik alanla iletkenlik değişimi

5. TARTIŞMA VE SONUÇ

(3.37) ve (3.38) denklemlerindeki Anderson Hamiltoniyeni ile iki ve üç boyutlu elektron sistemlerinin çeşitli özellikleri hesaplanabilir. Bizim çalışmamızda uygulanan manyetik alanın iletkenlik σ 'ya veya konduktans (conductance) g 'ye etkisi hesaplanmıştır. $L \times L$ kare örnek için g ve σ aynıdır, literatürde $g = \sigma L^{d-2}$ diye anılır ve burada d boyuttur. L_1 uzunluğuna ve L_2 genişliğine sahip uzun örnek için g ile σ arasındaki ilişki aynı değildir ve bu ilişki $g = \sigma / (L_1 / L_2)$ şeklindedir. Literatürde görülen σ değerleri gibi g değerleri de bizim bulduğumuz sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Literatürde birçok çalışma da Landauer formülünü kullanarak g 'yi hesaplamışlardır. Bizim çalışmamızda (3.6) nolu denklemdeki Kubo formülü kullanılmıştır. Literatürde Czycholl ve Ponischowski (1988) ve Ballentine ve Hammerberg (1984) Hamiltoniyedeki B 'ye bağlılığı farklı olarak ve Stein ve Krey (1980) de farklı özvektör hesaplama yöntemi kullanarak Kubo formülü ile iletkenliği hesaplamışlardır.

İletkenliğin hesabı için öncelikle yerel durumlar yoğunluğu ve yayınının hesaplanması gereklidir. Çalışmada yayınının hesaplanırken kullanılan özvektör hatası mümkün olduğu kadar küçültüldü ve $e_r \sim 0.001$ civarındadır. Fermi enerjisi etrafında $E = E_F \pm \Delta E$ birkaç durumda birçok şekillenim için $D(E)$ yayınının hesaplandı. Çizelge 4.1'nin 2. sütununda $D(E)$ değerleri verilmiştir ve değerler arasında çok küçük farklılıklar bulunmaktadır. Bu yüzden yayınının hesabındaki ana hata şekillenim ortalaması alınmasından kaynaklanmaktadır. Bu hata kaçınılmazdır ve onunla ilgili herhangi bir şey yapılamaz. (3.6) nolu denklemdeki iletkenlik $\sigma = g(E_F)(\pi(V/W))^2 D(E_F)e^2 / \hbar$ şeklinde yazılabilir ve iletkenlik değerleri bu formülden hesaplanmıştır. Burada V^2 , $(V/W)^2$ olarak görünüyor, çünkü enerji W 'nın biriminde ölçülmüştür, iletkenliğin birimi iki boyutta e^2 / \hbar , üç boyutta $e^2 / \hbar a$ alınmıştır ve hesaplanan değerlerin içinde yoktur. 50×50 kare yapı için $W/V = 2.0$ ' da manyetik alan uygulanmadan hesaplanan iletkenlik değeri $\sigma = 1.215 \pm 0.025$ olarak hesaplanmıştır. Stein ve Krey (1980) bu değeri $\sigma = 1.400 \pm 0.200$ olarak bulmuşlardır. Bizim değerlerimiz bağıl olarak Stein ve Krey'in değerinden 8 kat daha doğrudur.

Ayrıca iki farklı bölgede iletkenliğin örneğin büyüklüğüne bağlılığını açıklamayı başardık. Birincisi, metalik bölgedeki N sistemin büyüklüğü ile iletkenlikteki düşüş denklem (5.6) deki WL düzeltme terimi ile açıklanabilir. İkincisi ise, lokalize bölgenin yakınındaki sistem büyüklüğü ile iletkenlikteki önce artış sonra da azalış denklem (5.4)'e dayanarak açıklanabilir. Her iki durum da literatüre uygun olarak açıklanmaya çalışılmıştır. Bu konu üzerine çalışanlar iletkenlikte artış bulmuşlardır, fakat hesaplamalarında büyük hatalar olduğundan dolayı, bunu açıklamaya yönelmemişlerdir.

Uygulanan manyetik alanla iletkenliğin değişimi incelenirken Lee ve Fisher (1981) B eksenini boyunca seyrek aralıklar da, yani birkaç B değerinde ortalama iletkenlik için hesaplama yapmıştır, Stone (1985) ise sık aralıklarda tek şekillenimde hesaplama yapmıştır. Bizim çalışmada yirmi farklı şekillenim alındığından sadece dört noktada (4 tane B değerinde) manyetik alana karşı iletkenlik hesaplanmıştır. Belki bu yüzden Stone (1985)'in gözlediği sık dalgalanmaları gözden kaçırmış olabiliriz. Tek şekillenim alındığında yirmibir noktada (21 tane B değerinde) manyetik alana karşı iletkenlik hesaplamasını biz de Şekil 4.14 ve Şekil 4.15 te verdik ve dalgalanan eğrileri gözlemledik. Stone'nun çalışmasına göre uygulanan manyetik alana karşı iletkenlik büyük dalgalanmalar göstermiştir. Stone'nin çalışmasında elektron enerjisi belli bir miktar yerdeğiştirdiğinde oluşan yeni iletkenlik diğerinden %40 kadar daha büyüktür. Bizim çalışmada da E_F Fermi enerjisi değişmektedir. Bu yüzden E_F de, ΔE kadar kesin değildir. Gerçekte E_F 'nin yeri de bilinmiyor, biz Fermi enerjisini $E_F = 0$ da kabul ediyoruz. Bu modelde bundan sonraki çalışmalarda dalgalanmanın sebebi Fermi enerjisinin yerinin tam olarak bilinmemesi olarak alınabilir.

Büyük düzensizliklerde ($W = 4.0$ ve $W = 2.0$) manyetik alanla iletkenlik değişimi, 20 farklı şekillenim üzerinden ortalama alındığında sabit kalır veya az değişir, tek şekillenim için ise dalgalanma gösterir. Böylece büyük düzensizliklerde iki noktaya dikkat edilir, birincisi sistemin büyümesi ile iletkenliğin önce artması, sonra da azalmasıdır. İkincisi ise tek şekillenim için iletkenliğin manyetik alanla dalgalanmasıdır. $W/V = 4.0$ için sistem, L 'den daha küçük ξ yerleşme uzunluğuna sahip bazı lokalize özdurumların oluşumu yüzünden yalıtkanlığa doğru gider ve sistem lokalize bölgeye doğru gider. İletkenlik için birbirine çok yakın yerel yada genişletilmiş

durumlar gereklidir. Artan sistem büyüklüklerinde yerel durumlar elde etmek için daha çok şansımız vardır. Çünkü sistemin farklı bölgeleri ek durumlar sağlayabilir. Fakat bu mekanizmanın gelecekteki N artışları için devam edeceği söylenemez ve bu gerçeği açıklamak için formül yoktur.

Thouless(1974)'e göre enerji seviyelerindeki ortalama değişme $\overline{\Delta E_\alpha}$, $L > \xi$ olan sistem için antiperiyodik'ten periyodiğe geçiş sınır koşullarının değişmesinde genişletilmiş ve yerelleşmiş durumlar için farklı davranışlar gösterir.

Metalik bölge de, C sabit bir sayı olmak üzere,

$$\overline{\Delta E_\alpha} \sim \frac{C}{L^2} \quad (5.1)$$

şeklinde yazılabilir. Aynı nicelikler, E_α enerjisinde sistem yayınımları ile ilişkilendirilirse

$$\overline{\Delta E_\alpha} \sim \frac{\hbar D(E_\alpha)}{L^2} \quad (5.2)$$

şeklinde yazılır. (5.1) ve (5.2) denklemleri birbiriyle karşılaştırılırsa yayılım $D(E_\alpha) \sim \frac{C}{\hbar}$ dır ve L ile bağlantısı yoktur. Zayıf yerelleşmede iletkenlik başka etkiler nedeniyle aşağıdaki denklem (5.6) de görüldüğü gibi L 'ye bağlıdır.

Yerelleşmiş bölge durumları için $\overline{\Delta E_\alpha}$,

$$\overline{\Delta E_\alpha} \sim e^{-L/\xi} \quad (5.3)$$

şeklinde üstel olarak yazılabilir (Thouless 1974, Zvygain http://media.wiley.com/product_data/excerpt/40/04700950/0470095040.pdf, 2008).

$L > \xi$ kabul edilir, fakat L ve ξ büyüklükçe aynı mertebededirler. (5.2) ve (5.3) nolu denklemler kullanılırsa $D(E_\alpha)$,

$$D(E_\alpha) \sim \frac{L^2}{\hbar} e^{-L/\xi} \quad (5.4)$$

olur. Bu son yaklaşım literatürde daha önce kullanılmadı ve Şekil 4.12 ve Şekil 4.13 deki N ile yayınının önce artış sonra azalış davranışını (5.4) nolu denklemle açıklayabiliriz. Sistem düzensizlik değeri W geçiş noktasına yakın, $W_c \sim 6.0$, ve elektron yerelleşme uzunluğu da $\xi \sim L$ olsun. Difüzyon teorisinden gelen uzaklık ve belirsizlik zamanı ile $\tau_\alpha \sim L^2 / D(E_\alpha)$, $\tau_\alpha \sim \hbar / \Delta E_\alpha$ şeklinde bağıntılar yazılabilir. $\xi \ll L$ durumu için denklem (5.2) kullanılamaz, çünkü sınırlara ulaşmadan önce yerleşmiş durumların etkisi azalır. Gerçekte (5.4) nolu denklemdeki yayınım daha önce tanımlanan $\langle \bar{D}(E_F) \rangle$ yayınının şekillenim ortalamasıdır. Bu denkleme göre ilk önce iletkenlik $L = 2\xi$ noktasına kadar L ile artar ve daha sonra artan L ile üstel olarak düşmeye başlar.

Şekil 4.7 ve Şekil 4.8'de $L \sim \xi$ dir ve bu yüzden L ile artan bir davranış gösteriyor. Stein ve Krey (1980)' in düzensizlik parametreleri $W = 4.0$ ve $W = 5.0$ olan çalışmasında da bu yönelimler vardır fakat hesaplamalarındaki hataların büyük olmasından dolayı artan davranışı savunamamışlardır. Bizim hatalarımız oldukça küçüktür. $g(L) = G(L)/(e^2 / \hbar)$ ile tanımlanan boyutsuz iletkenliğin asimtotik davranışı (Zvyagin http://media.wiley.com/product_data/excerpt/40/04700950/0470095040.pdf, 2008), $L \rightarrow \infty$ da

$$g = g_c e^{-L/\xi} \quad (5.5)$$

şeklinde yazılabilir, ve bu denklem (5.4) ile uyumludur.

Şimdiye kadar 2500 ve 5184 atomlu yapılar için fikir yürütülmüştür. Şekil 4.12 ve Şekil 4.13 de ise 2500, 3600, 5184, 6400, 8100, 10000, 12100 için yapılan hesaplamalar

görülmektedir. Şekil 4.12 ve Şekil 4.13'e bakıldığında $B = 0$ da sistemin büyüklüğü ile yayınım değeri önce artmakta daha sonra ise azalış göstermektedir ve dolayısıyla iletkenlikte aynı özelliği göstermektedir. Hesaplanan değerler ile teorik değerler Şekil 4.12 ve Şekil 4.13'de görüldüğü gibi uyum göstermektedir. $W = 2.0$ için $\xi = 45a$, $W = 4.0$ için ise $\xi = 40a$ 'dır. Şekil 4.12 de 8100 atomlu yapıya kadar yayınım değeri artmakta daha sonra azalmaktadır. Şekil 4.13 de ise 6400 atomlu yapıya kadar artmakta daha sonra azalmaktadır. Bu davranışlar denklem (5.4)'e göre açıklanabilir. Belli bir L değerine kadar L^2 'li terim etkili, daha sonra L büyüdükçe üstel terim daha etkili hale geliyor ve yayınım değeri düşmeye başlıyor.

Şimdi daha önce bahsettiğimiz büyük düzensizlik eğrilerinden tamamıyla farklı bir davranış sergileyen küçük düzensizlik eğrilerinin belirgin özelliğini inceleyeceğiz. Burada zayıf bir şekilde lokalize olmuş durumlar vardır. Daha önce (bölüm 4) Şekil 4.4 ve Şekil 4.5'e ilişkin yapılan açıklamada bulguların her yönüyle tam olmadığı ve dolayısıyla bütün bakımlardan yorum yapılamayacağı üzerinde durulmuştu. Yalnızca çok belirgin olan bir özelliği üzerinde yani σ 'nın L 'ye bağlılığı üzerinde yorum yapacağız. $\xi > L$ ve $\xi \gg L$ için sistem balistik bölgeye girer. Elektron dalgalarının elastik saçılımı, geriye doğru (ters doğrultuda) yapıcı girişime sebep olur. Bunun sonucu olarak da iletkenlikte düzeltme gereksinimi doğar. Bu tekil geri saçılımı veya WL düzeltmesi olarak bilinir ve $B = 0$ durumu için

$$\sigma(L) = \frac{ne^2\tau}{m} - \frac{2e^2}{\hbar\pi} \frac{1}{L^2} \sum_q \frac{1}{q^2}$$

$$\sigma(L) = \sigma_0 - \frac{e^2}{\hbar\pi^2} \ln\left(\frac{L}{l}\right) \quad (5.6)$$

formülü verilebilir (Lee and Ramakrishnan 1985). Uzunluğa bağlılık, q üzerinden alınan tekil integral sırasında, alçak ($q_{lower} \sim \frac{1}{L}$) ve yüksek ($q_{upper} \sim \frac{1}{l}$), q değeri kesilmelerinden meydana gelmektedir. Denklem (5.6)'ye göre sistem büyüklüğü artarken iletkenlik düşer ve Şekil 4.9 ve Şekil 4.10 da $N = 2500$ 'den $N = 5184$ 'e

iletkenliğin düşmesi bu etkiyi göstermektedir. $L \gg \xi$ gibi çok büyük sistemler için iletkenlikteki düşüşü görmek üzere sayısal hesaplamalar yapmak zordur çünkü bu kadar büyük L değerlerini elde etmek metalik durumda ξ nin de büyük olması nedeniyle zordur. WL düzeltilmesinin gerçekleşmesi için l , L' den daha küçük olmalıdır. Bunun için belirli bir saçılma derecesi ve l için örneklerin yeterli büyüklükte (L) olması gerekir.

Stone (1985) iletkenlik için Landauer formülünü kullanarak N_1 site uzunluğu ve N_2 site genişliği olan iki boyutlu sistemler için hesaplamalar yaptı ve onun sonuçlarını bizim sonuçlarla karşılaştırabiliriz. Stone'nin çalışmasında $0T$ ile $8T$ arasındaki değerlerde manyetik alana karşı direncin grafiği çizilmiştir ve rastgele dalgalanmalar gözlenmiştir. Örnek olarak $W = 0.6$ için $400 \times 40 = 16000$ atomlu bir malzemede $E_F = 0.2$ dir. $B = 0$ 'da $R_0 = 4900 \Omega$ 'dur. Uzun bir örnek için σ ile g ilişkilendirilir, $g = \sigma / (N_1 / N_2) = \sigma / 10$ dur. Şekil 4.9'daki $72 \times 72 = 5184$ atom sayısı için σ iletkenlik değerlerinden yararlanarak direnç hesaplanabilir. $\sigma = 10e^2 / \hbar = 10 \times 2.56 \times 10^{-4} = 2.56 \times 10^{-3} \Omega^{-1}$, $R = 10 / \sigma = (10 / 2.56) \times 10^{-3} = 4000 \Omega$ bizim sonuçlarımız Stone (1985)'in sonuçlarından %20 daha küçüktür. Stone (1985)'in Şekil 2'sinde $E_F = 0.200, 0.201, 0.210$ Fermi enerjilerinde $W = 6.0$ için $200 \times 20 = 4000$ atomlu örnek için ($0T, 1.6T$) arasında manyetik alana karşı R direnç değerleri çizilmiştir. $B = 0$ da sırasıyla direnç değerleri $R_0 = 14000 \Omega, 13000 \Omega$ ve 19000Ω 'dur. Bu sayılar gösteriyorki Stone'nin çalışması WL etkileşim formülüne, (5.6) nolu denkleme, uymamıştır. Çünkü büyük N 'ler için iletkenlik büyüktür (yani R_0 küçüktür). E_F 'nin 0.01 kadar değişmesi R_0 da 14000Ω 'dan 19000Ω değişme göstermiştir, dirençteki değişme yaklaşık 0.4 kadardır. Bütün B 'ler için R değerlerine bakıldığında Stone'nin çalışmasında manyetodirencin işaretinde bir tanımlama yoktur. Şekil 4.9 da $W/V = 0.66$ da öz enerji spektrumunda enerji aralıkları ortalama olarak $\Delta E \sim 0.003$ kadardır, ve Fermi enerjisinde bu ΔE değeri kadar bir belirsizlik söz konusudur.

Şekil 4.11'e bakıldığında üç boyut için uygulanan manyetik alanla iletkenliğin değişmediği gözlenmektedir, bu sonucun aldığımız sistemin yeterince büyük olmamasından kaynaklandığı düşünülmektedir. Bilgisayar belleğinin yeterince büyük olmamasından dolayı bununla ilgili daha fazla çalışma yapılmamıştır.

KAYNAKLAR

- Abrikosov, AA. 1969. Galvanomagnetic phenomena in metals in quantum limit. Sov. Phys. JETP 29, 746-753
- Abrikosov, AA. 2003. Quantum linear magnetoresistance; solution of an old mystery. J. Phys. A: Math. Gen. 36, 9119-9131.
- Alers P.B. and Webber R.T. 1953. The magnetoresistance of bismuth crystals at low temperatures. Physical Review, 91(5), 1060-1065.
- Alper, M. 1995. Elektrodeposited magnetic superlattices. Ph. D Thesis (basılmamış), University of Bristol, p.1-62
- Akkermans E., Wolf P.E., Maynard R and Maret G. 1988. Theoretical study of the coherent backscattering of light by disorderd media. Journal De Physique, 49, 77-98
- Altshuler, B. L., Khmel'nitzkii, D., Larkin, A.I. and Lee, P.A. 1980. Magnetoresistance and hall effect in a disordered 2-dimensional electron-gas. Phys. Rev. B 22, 5142-5153.
- Ballentine , L.E. and Hammerberg, J.E.1984. Computation of electral conductivity and thermoelectric power in strong-scattering disordered metals. Can. J. Phys., 62, 692
- Baranger H.U. and Stone A.D. 1989. Electrical lineer-response theory in an arbitrary magnetic-field-A nem Fermi surface formation. Physical Rev. B, 40(12), 8169-9193.
- Blatt, F.J. 1957. Solid State Physics . Academic Press, Vol:4, 199, New York.
- Caceres, M.O. and Grigera, S.A. 2001. Concerning the microscopic linear response theory. Physica A 291, 317-326
- Chaiken, A., Prinz, G.A. and Krebs, J.J. 1990. Magnetotransport study of Fe-Cr-Fe sandwiches grown ZnSe(100). J.Appl. Phys. 67, 4892-4894
- Chaiken, A. 1997. Unexploded ordnance dedection using imaging Giant Magnetoresistive(GMR) sensor Arrays.
<http://www.osti.gov/bridge/servlets/purl/16377-4X7wHX/native/16377.pdf> erişim tarihi:24.03.2008

- Czycholl, G. and Ponischowski, W. 1988. The recursion method for a two-dimensional electron system in a strong magnetic field. *Z.Phys. B.-Condensed Matter*, 73, 343-356.
- De Launay J., Dolecek R.L. and Webber R.T. 1959. Magnetoresistance of copper. *Physics and Chemistry of Solids*, 11 (1-2), 37-42.
- Donovan B. and Conn G.K.T. 1949. The electrical conductivity of bismuth fibres. 1. Magneto resistance and the crystalline structure. *Philosophical Magazine*, 40(302), 283-296.
- Fishchuk, I.I. and Rudko, V. N. 1978. Theory of the phononless high hall effect in disordered systems. *Phys.stat.sol.(b)*, 89, 61
- Fishchuk, I.I. and Rudko, V. N. 1980. Theoretical investigation of the frequency dependence of the conductivity tensor in disordered systems in the presence of a magnetic field. *J.Phys. C:Solid St. Phys.*,13, 2703-2713
- Haydock, R. 1980. *Solid state physics* 35 129(Eds. Ehrenreich, H., Seitz, F. and Turnbull, D.) Springer Verlag.
- Hedegard, P. And Smith, A. 1995. Solution of the Boltzmann equation in a random magnetic field. *Physical Review B*, 51(16), 10869-10874
- http://en.wikipedia.org/wiki/Giant_magnetoresistive_effect , erişim tarihi: 27.06.2007
- http://physics.unl.edu/~tsymbal/tsymbal_files/GMR/gmr.html , erişim tarihi: 27.06.2007
- http://physics.unl.edu/~tsymbal/tsymbal_files/GMR/gmr_files/page0001.html, erişim tarihi: 27.06.2007
- http://physics.unl.edu/~tsymbal/tsymbal_files/GMR/gmr_files/page0002.html, erişim tarihi: 27.06.2007
- http://physics.unl.edu/~tsymbal/tsymbal_files/GMR/gmr_files/page0003.html, erişim tarihi: 27.06.2007
- Jones, W. and March, N. H.. 1985. *Theoretical solid state physics volume 2: Non-equilibrium and disorder*. Newyork
- Joynt, R. and Prange R.E. 1984. Conditions for the quantum hall effect. *Phys. Rev. B* 29, 3303-3317.
- Kapitza P. 1928. The study of the specific resistance of bismuth crystals and its change in strong magnetic fields and some allied problems. *Proc. Roy.Soc.A*, 119, 358-443.

- Kapitza P. 1929. The change of electrical conductivity in strong magnetic fields. Part I. experimental results. Proc. Roy. Soc A, 123, 292-341.
- Karabulut, R. 1998. İletkenlik hesaplamalarında kullanılan değişik yöntemlerin incelenmesi. Yüksek lisans tezi (basılmamış). Ankara Üniversitesi. 51 s. Ankara.
- Köksal, F. Gümüş H. 1989. Atom ve molekül fiziği, no:43, 19 Mayıs Üniversite yayınları. 678 s. Samsun
- Kramer, B. and Weaire, D. 1978. New numerical-method for calculation of conductivity of a disordered system. J. Phys. C: Solid State. Phys 11, L5-L7.
- Kubo, R. 1956. A general expression for the conductivity tensor. Canad. J. Phys. 34, 1274-1277
- Kubo, R. 1966. The fluctuation-dissipation theorem. Rep. Prog. Phys. 29, 255-&.
- Kubo, R., Toda, M., Hashitsume, N., in: Cardona, M., Hulde, P., Queisser H.J.(Eds). 1985. Statistical physics I and II, nonequilibrium statistical mechanics. Springer series in SSS, sayfa ?, Springer, Berlin.
- Lanczos, C. 1950. An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of lineer differential and integral operators. J. Res. Natl. Bur. Stand Sec:B 45, 255-282
- Leduc, A. 1886. Compt. Rend. 102,358.
- Lee, P. A. and Fisher, D.S. 1981. Anderson localization in two dimensions. Physical Review Letters, 47(12), 882-885.
- Lee, P. A. and Ramakrishnan, T.V. 1985. Disordered electronic systems. Rev. Mod. Phys. 57, 287-337.
- Mirlin, A.D., Wilke, J., Evers, F., Polyakov, D.G. and Wölfle, P. 1999. Strong magnetoresistance induced by long-range disorder. Physical Review Letters, 83(14), 2801-2804.
- Mizutani, U. 2003. Introduction to the electron theory of metals. Cambridge University Pres, 579, Newyork
- Nex, C.M.M. 1984. The recursion method:Processing the continued fraction. Computer Physics Communications 34, 101-122
- Obermair, G.M. and Wannier, G.H. 1976. Bloch electrons in magnetic-fields-rationality, irrationality, degenerocy. Physc. Status Solidi B, 76, 217-222.

- Pippard, A.B. 1989 *Magnetoresistance in metals*. Cambridge University Press, 249, New York.
- Rauh A., Wannier, G.H., Obermair, G. 1974. Bloch electrons in irrational magnetic fields. *Physica Status Solidi B*, 63, 215-229.
- Rossiter, P.L. 1987. *The electrical resistivity of metals and alloys*. Cambridge University Press, sayfa ?, Newyork (London)
- Seitz F. 1950. Note on the theory of resistance of a cubic semiconductor in a magnetic field. *Physical Review*, 79(2), 372-375
- Smith, H. and Hojgaard Jensen, H. 1989. *Transport phenomena*. Clarendon press, Oxford.
- Soven, P. 1969. Contribution to the theory of disordered alloys. *Phys. Rev.* 178, 1136-1144
- Stein, J. and Krey, U. 1980. Numerical studies on the Anderson localization problem *Z.Physik B* 37, 13-22
- Stone, A.D. 1985. Magnetoresistance fluctuations in mesoscopic wires and rings. *Physical Review Letters*, 54(25), 2692-2695.
- Şahin, T. 2006. Elektrodepozisyon tekniğiyle üretilen Co ve CoFe filmlerinin yapısal ve manyetodirenç özelliklerinin incelenmesi. Yüksek lisans tezi (basılmamış). Balıkesir Üniversitesi. 94 s. Balıkesir.
- Thouless, D. J. 1974. Electrons in disorderd systems and the theory of localization. *Phys. Rep.* 13, 93-142.
- Unal B., Kabak M., Usta K., 2009, On Kramer-Weaire filtering method for eigenvectors, *International Journal of Computer Mathematics*, baskıda.
- Weaire, D. and Reilly, E .P. O. 1985. A Comparison of the recursion method and the equation-of-motion method for the calculation of densities of states. *J. Phys. C: solid State Phys.* 18, 1401-1413.
- Wannier, G.H. 1962. Dynamics of band electrons in electric and magnetic fields. *Reviews of Modern Physics*, 34, 645-655.
- Wannier G.H., 1975. Invariance properties of a proposed hamiltanien for bloch electrons in a magnetic-field. *Phys.Status Solid: B*, 70, 727-735.
- Wannier, G.H.,Obermair, G.M. Ray, R. 1979. Magneto-electronic density of states for a model crystal. *Phys. Status Solidi B*, 93, 337-342.

Xu, R., Husmann, A., Rosenbaum, TF., Saboungi, ML., Enderby, JE and Littlewood, PB. 1997. Large magnetoresistance in non-magnetic silver chalcogenides. Nature 390, 57-60.

Ziman, J.M. 1964. Principles of the theory of solids. Cambridge University pres.

Zvyagin, I. Charge transport via delocalized states in disordered marerials. http://media.wiley.com/product_data/excerpt/40/04700950/0470095040.pdf, 2008

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Keziban (SADE) USTA
Doğum Yeri : KARACASU
Doğum Tarihi : 03.10.1979
Medeni Hali : Evli
Yabancı Dili : İngilizce

Eğitim Durumu (Kurum ve Yıl)

Lise : Nazilli Lisesi, 1995

Lisans : Pamukkale Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü,
1999

Yüksek Lisans: Pamukkale Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim
Dalı, 2002

Çalıştığı Kurum/Kurumlar ve Yıl

Pamukkale Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, 2000-2003

Ankara Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Fizik Mühendisliği Bölümü, 2003-

Yayımları (SCI ve diğer)

- 1) On Kramer-Weaire filtering method for eigenvectors, Unal B., Kabak M., Usta K., International Journal of Computer Mathematics, baskıda. 2009
- 2) Calculation of M x-ray production cross sections from 1-1500 keV in the atomic region $70 \leq Z \leq 92$, Ertuğrul, M; Sade, K; Erdoğan, H, X-Ray Spectrometry, 33, 136-145, 2004

- 3) Calculation of L shell production cross sections for the elements with $40 \leq Z \leq 92$, Erdoğan, H; Sade, K; Ertuğrul, M, Journal of Quantitative Spectroscopy&Radiative Transfer, 84, 239-246, 2004
- 4) Magnetoresistance of two-dimensional tight-binding electrons in a weak magnetic field, K. Usta, B. Ünal, M. Kabak, 25. Uluslararası Fizik Kongresi, 25-29 Ağustos 2008, Bodrum- Muğla
- 5) 1-1500 keV enerjide atom numarası $70 \leq Z \leq 92$ olan elementlerin M x-ışını floresans tesir kesitinin hesaplanması, K. Usta, H.Erdoğan, M.Ertuğrul, 23. Uluslararası Fizik Kongresi, 13-16 Eylül 2005, Muğla
- 6) Ba, La ve Ce bileşiklerinde Coster-Kronig şiddetlendirme faktörlerinin değişimi, P. Tunay, H. Erdoğan, Ö. Söğüt, A. Küçükönder, K.Sade, 22. Uluslararası Fizik Kongresi, 14-19 Eylül 2004, Bodrum- Muğla
- 7) Atom numarası $40 \leq Z \leq 92$ olan elementlerin L x-ışını üretim tesir kesitinin hesaplanması, K. Sade, P.Tunay, M.Ertuğrul, H.Erdoğan, 21. Uluslararası Fizik Kongresi, 11-14 Eylül 2002, Isparta