

**T.C.**  
**GEBZE YÜKSEK TEKNOLOJİ ENSTİTÜSÜ**  
**MÜHENDİSLİK VE FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**DÜZENSİZ SİSTEMLERDE**  
**BRAGG YANSIMALARININ**  
**MEZOSKOPIK DALGALANMALARA ETKİSİ**  
**VE ELEKTRONİK KORELASYONLAR**

**Ersoy ŞAŞIOĞLU**  
**DOKTORA TEZİ**  
**FİZİK ANABİLİM DALI**

**GEBZE**  
**2003**

T.C.  
GEBZE YÜKSEK TEKNOLOJİ ENSTİTÜSÜ  
MÜHENDİSLİK VE FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**DÜZENSİZ SİSTEMLERDE  
BRAGG YANSIMALARININ MEZOSKOPIK  
DALGALANMALARA ETKİSİ VE ELEKTRONİK  
KORELASYONLAR**

Ersoy ŞAŞIOĞLU  
DOKTORA TEZİ  
FİZİK ANABİLİM DALI

Tez Danışmanı  
Prof. Dr. Bekir AKTAŞ

GEBZE  
2003

## KABUL VE ONAY

## ÖZET

Bu çalışmamızda, yarı-dolu bant yapısına sahip az katkılı iki- ve üç-boyutlu örgüler için elektron-elektron korelasyonlarından kaynaklanan kuantum katkıların rolünü açıklamaya çalıştık.

Random olarak dağılmış substitutional impüritilere sahip iki- ve üç-boyutlu örgülerin iletkenliğindeki ve elektronik durum yoğunluğundaki mezoskopik dalgalanmalar üzerinde çalışıldı. Fermi yüzeyinin karşı tarafında yer alan seviyelerin korelasyonlarına ek olarak Fermi yüzeyinin aynı tarafında (altında veya üstünde) bulunan seviyelerin korelasyonları da nestinge bağlı olarak yarı dolumda ortaya çıkarlar. Bragg yansımaları yarı-dolumdaki iletkenliğin dağılım fonksiyonunu değiştirir ve statik iletkenlik dalgalanmalarının artışına yardımcı olur.

Etkileşmeyen elektronların kuantum girişim etkisi yanında, bant merkezindeki elektron-elektron etkileşimi de sistemin fiziksel özelliklerini belirgin bir şekilde değiştirir. Substitutional impüritilere sahip üç-boyutlu kübik bir örgünün elektronik durum yoğunluğuna ( $DY$ ) yüksek dereceden kuantum etkileşim katkıları kısa-menzilli elektron-elektron etkileşimleri durumunda hesaplandı. Bant merkezinde  $DY$ 'ye nihai kuantum katkısı pozitifdir; yani, Fermi enerjisine yaklaştıkça  $DY$  artar. Bununla birlikte Bragg yansımalarının bastırıldığı commensurate noktalardan uzakta,  $DY$ 'ye negatif katkılar halen var olmaya devam eder.  $DY$  için bulunan sonuçlardan hareket ederek tünelleme iletkenliği hesaplandı ve tünelleme iletkenliğinin anti sıfır-bias anomali sergilediği gösterildi.

Bragg yansımaları aynı zamanda bir elektronun inelastik ömrünü de önemli ölçüde etkiler. Elektron-elektron saçılma oranları bandın ortasında Umklapp süreçleri ile azalır. 2-boyutlu düzensiz örgülerde yarı-dolumda bu, elektron-elektron saçılma zamanlarının artması ve elektronların bir faz uyum hareketi göstermeleri anlamına gelir.

## ABSTRACT

In the present work we have attempted to describe the role of quantum corrections originating from noninteracting electrons and electron-electron correlations in the middle of the band for weakly disordered lattices.

The mesoscopic fluctuations of the density of electronic states and of the conductivity of two- and three-dimensional lattices with randomly distributed substitutional impurities are studied. Correlations of the levels lying above (or below) the Fermi surface, in addition to the correlations of the levels lying on opposite sides of the Fermi surface, take place at half filling due to nesting. The Bragg reflections mediate to increase static fluctuations of the conductivity in the middle of the band which change the distribution function of the conductivity at half- filling.

In addition to quantum interference effect of noninteracting electrons, electron-electron interaction in the middle of the band significantly changes the physical properties of the system. The high order quantum interaction corrections to the density of electronic states ( $DOS$ ) of a three-dimensional cubic lattice with substitutional impurities are calculated in the presence of short-range electron-electron interactions. The resulting quantum correction to the  $DOS$  at half-filling is positive; i.e., the  $DOS$  increases as the Fermi energy is approached. However, far from the commensurate points where the Bragg reflections are suppressed, the negative corrections to the  $DOS$  survive. For the sake of completeness the tunnelling conductivity is calculated. It is shown that tunnelling conductivity manifests anti zero-bias anomaly.

Bragg reflections also significantly affects the inelastic lifetime of an electron. Electron-electron collision rates are reduced by the Umklapp processes in the middle of the band. This means the enhancement of electron-electron collision times and indicating a phase coherent motion of electrons at half-filling in 2-dimensional disordered lattices.

## TEŞEKKÜR

Bu çalışma süresince her türlü engin bilgi, destek ve tecrübelerini hiç bir şekilde esirgemeyen değerli hocam Prof. Dr. Enver Nakhmedov'a, tez danışmanım Prof. Dr. Bekir Aktaş'a ve Fatih Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölüm Başkanı Prof. Dr. Mustafa Kumru'ya en içten teşekkürlerimi sunarım.

Max-Planck Enstitüsü Kompleks Sistemler Araştırma Merkezi'nde çalışma imkanı sağlayan Prof Dr. Peter Fulde'ye de ayrıca teşekkür ederim.

Çalışmam sırasında fikirleriyle sürekli destek olan çalışma arkadaşım Serkan Çalışkan'a teşekkürlerimi ifade ederim.

# İÇİNDEKİLER

|                                                                    |     |
|--------------------------------------------------------------------|-----|
| ÖZET .....                                                         | iv  |
| ABSTRACT .....                                                     | v   |
| TEŞEKKÜR.....                                                      | vi  |
| İÇİNDEKİLER .....                                                  | vii |
| SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ.....                                | x   |
| ŞEKİLLER DİZİNİ .....                                              | xii |
| 1. GİRİŞ.....                                                      | 1   |
| 2. MEZOSKOPIK SİSTEMLERİN KARAKTERİSTİK ÖLÇEKLERİ.....             | 3   |
| 2.1. Fermi Dalgaboyu .....                                         | 3   |
| 2.2. Ortalama Serbest Yol .....                                    | 3   |
| 2.3. Sistemin Büyüklüğü .....                                      | 4   |
| 2.4. Termal Difüzyon Uzaklığı ve Thouless Enerjisi.....            | 6   |
| 2.5. Faz Uyum Uzaklığı .....                                       | 7   |
| 2.6. Difüzyon Rejimi ve Balistik Rejim .....                       | 8   |
| 2.7. Mezoskopik Zaman Ölçekleri.....                               | 9   |
| 3. DÜZENSİZ SİSTEMLERİN DİYAGRAMATİK PERTÜRBASYON<br>TEORİSİ ..... | 10  |
| 3.1. Green Fonksiyonları .....                                     | 10  |

|                                                                                                 |        |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------|--------|
| 3.2. Random Potansiyel Modeli .....                                                             | 11     |
| 3.3. Random Potansiyelde Propagasyon .....                                                      | 14     |
| 3.3.1. Self-enerji.....                                                                         | 25     |
| 3.3.2. İskelet Diyagramları .....                                                               | 29     |
| 3.3.3. İmpüriti-Ortalımalı Propagatör.....                                                      | 32     |
| 3.4. İki-parçacık Korelasyon Fonksiyonları .....                                                | 35     |
| 3.4.1. Difüzyon (Merdiven Diyagramları) .....                                                   | 37     |
| 3.4.2. Cooperon (Fan Diyagramları) .....                                                        | 39     |
| <br>4. YARI DOLU BANTTA İMPÜRİTİ PROBLEMLERİNE<br>DİYAGRAMATİK YAKLAŞIM .....                   | <br>40 |
| 4.1. Hamiltoniyen.....                                                                          | 41     |
| 4.2. Enerji Spektrumu ve Fermi Yüzeyi .....                                                     | 41     |
| 4.3. Serbest Parçacık Green Fonksiyonları .....                                                 | 42     |
| 4.4. İmpüriti Saçılması ve Relaksasyon Zamanları.....                                           | 44     |
| 4.5. Difüzyon ve Cooperon Diyagramları.....                                                     | 47     |
| 4.6. Momentum Relaksasyon Zamanının Renormalizasyonu .....                                      | 50     |
| <br>5. DÜZENSİZ SİSTEMLERDE BRAGG YANSIMALARINDAN<br>KAYNAKLANAN KUANTUM GİRİŞİM ETKİLERİ ..... | <br>54 |
| 5.1. Düzensiz İletkenlerde Kuantum Girişim Etkileri (Genel Bir<br>Değerlendirme).....           | 54     |
| 5.2. Çevreyle Etkileşmeden Kaynaklanan Elektron Faz<br>Uyumsuzluğu .....                        | 57     |
| 5.3. Elektronik Durumlara Bragg Yansımalarından Kaynaklanan<br>Girişim Katkıları .....          | 58     |
| 5.4. Zayıf Lokalizasyon.....                                                                    | 66     |
| 5.5. Mezoskopik Dalgalanmalar .....                                                             | 75     |

|                                                                                                                      |     |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 5.5.1. Enerji Seviyesi İtme ve Çekmesi.....                                                                          | 75  |
| 5.5.2. İletkenlik Dalgalanmaları.....                                                                                | 84  |
| 5.5.3. Simetri Özellikleri .....                                                                                     | 89  |
| 6. DÜZENSİZ SİSTEMLERDE YARI-DOLU BANTTA ELEKTRONİK<br>KORELASYONLAR .....                                           | 92  |
| 6.1. Kısa Menzilli Elektronik Korelasyonlar .....                                                                    | 93  |
| 6.1.1. Elektronik Durumlara İki-boyutta Korelasyon Katkıları .....                                                   | 95  |
| 6.1.2. Elektronik Durumlara Üç-boyutta Korelasyon Katkıları .....                                                    | 100 |
| 6.1.3. Tünelleme İletkenliğindeki Anti Sıfır-Bias Anomali.....                                                       | 107 |
| 6.2. İnelastik Elektron-Elektron Saçılma Zamanı: Yarı-dolu Bantta<br>Bragg Yansımasından Kaynaklanan Faz Uyumu ..... | 111 |
| 7. SONUÇLAR.....                                                                                                     | 116 |
| KAYNAKLAR .....                                                                                                      | 118 |
| ÖZGEÇMİŞ.....                                                                                                        | 124 |

## SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

|                               |                                                |
|-------------------------------|------------------------------------------------|
| $A$                           | Vektör potansiyeli                             |
| $AA$                          | Advanced-advanced                              |
| $AR$                          | Advanced-retarded                              |
| $BY$                          | Bragg yansıması                                |
| $C(\mathbf{q}, \omega)$       | Normal Cooperon                                |
| $C_{\pi}(\mathbf{q}, \omega)$ | $\pi$ – Cooperon                               |
| $C_{imp}$                     | Impurity yoğunluğu                             |
| $D(\mathbf{q}, \omega)$       | Normal Difüzyon                                |
| $D_{\pi}(\mathbf{q}, \omega)$ | $\pi$ – Difüzyon                               |
| $D$                           | Difüzyon sabiti                                |
| $DY$                          | Durum yoğunluğu                                |
| $d$                           | Boyut                                          |
| $E$                           | Elektrik alan                                  |
| $e$                           | Elektronik yük                                 |
| $e - e$                       | Elektron-elektron                              |
| $g_N$                         | Normal saçılma için boyutsuz etkileşim sabiti  |
| $g_{\pi}$                     | Umklapp saçılma için boyutsuz etkileşim sabiti |
| $\mathbf{G}$                  | Ters örgü vektörü                              |
| $G$                           | Green fonksiyonu                               |
| $G^{(A)}$                     | Advanced Green fonksiyonu                      |
| $G^{(R)}$                     | Retarded Green fonksiyonu                      |
| $\hbar$                       | Planck sabiti                                  |
| $H$                           | Manyetik alan                                  |
| $L_T$                         | Thouless uzunluğu                              |
| $L$                           | Sistem boyutu                                  |

|                                |                                                        |
|--------------------------------|--------------------------------------------------------|
| $l$                            | Ortalama serbest yol                                   |
| $MIT$                          | Metal yalıtkan faz geçişi (Metal-insulator-transition) |
| $MYM$                          | Metal-yalıtkan-metal                                   |
| $m$                            | Elektron kütlesi                                       |
| $m^*$                          | Efektif elektronik kütle                               |
| $n$                            | Elektron yoğunluğu                                     |
| $p_F$                          | Fermi momentumu                                        |
| $R(\varepsilon, \varepsilon')$ | İki parçacık korelatörü                                |
| $RR$                           | Retarded-retarded                                      |
| $SR$                           | Spin rotasyonel                                        |
| $T$                            | Sıcaklık                                               |
| $T_c$                          | Kritik sıcaklık                                        |
| $TR$                           | Time reversal                                          |
| $U$                            | Impurity potansiyeli                                   |
| $V$                            | Sistemin hacmi                                         |
| $v_F$                          | Fermi hızı                                             |
| $\rho_{0d}$                    | Etkileşmeyen elektronlar için $DY$                     |
| $\delta\rho$                   | $DY$ 'ye katkı                                         |
| $\varepsilon_F$                | Fermi enerjisi                                         |
| $\xi$                          | Lokalizasyon uzunluğu                                  |
| $\sigma$                       | İletkenlik                                             |
| $\sigma_0$                     | Drude iletkenliği                                      |
| $\delta\sigma$                 | İletkenliğe katkı                                      |
| $\tau$                         | Yaşam süresi                                           |
| $\tau_N$                       | Normal impüriti saçılmasına bağlı yaşam süresi         |
| $\tau_\pi$                     | Umklapp saçılmasına bağlı yaşam süresi                 |
| $\tau_{e-e}$                   | Inelastik saçılma zamanı (normal saçılma)              |
| $\tau_{\pi(e-e)}$              | Inelastik $\pi$ – saçılma zamanı                       |
| $\sum(\mathbf{q}, \omega)$     | Self-enerji                                            |
| $\Omega$                       | Dış frekans                                            |

## ŞEKİLLER DİZİNİ

- Şekil 2.1:**  $L_x, L_y$ , ve  $L_z$  büyüklüğünde bir kutuya kapatılmış bir sistem. Sistem ebatlarının ve Fermi dalgaboylarının göreceli büyüklüklerine bağlı olarak  $3D$ ,  $2D$ ,  $1D$  ve  $0D$  arasında değişiklik göstermektedir. .... 5
- Şekil 3.1:** Makroskopik bir örneğin alt örneklerinin bireysel impüriti yapılanmaları. .... 13
- Şekil 3.2:** Üç korelasyon fonksiyonunun şematik resmi: a) yoğunluk yoğunluk, b) difüzyon ve c) Cooperon. Dalgalı çizgiler sırasıyla merdiven ( $D$ ) ve fan ( $C$ ) diyagramlarının toplamını temsil etmektedir. .... 36
- Şekil 3.3:** Merdiven ve fan diyagramları. .... 38
- Şekil 3.4:** Fan ve merdiven diyagramları arasındaki bağlantı. .... 39
- Şekil 4.1:** Bant merkezinde sıkı-bağlı model için kare bir örgünün Fermi yüzeyi.  $\mathbf{Q}_0 = \pm \mathbf{Q}_{01}; \pm \mathbf{Q}_{02}$  nesting vektörleri ile tam nesting ortaya çıkar, burada  $\mathbf{Q}_{01} = \left\{ \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \right\}$  ve  $\mathbf{Q}_{02} = \left\{ -\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \right\}$  şekilde görülmektedir. .... 42
- Şekil 4.2:** Merdiven serileri: a)  $C_N$  normal cooperon, b)  $D_\pi$   $\pi$ -difüzyonu ve c)  $C_\pi$   $\pi$ -cooperonu. d)  $\tilde{C}_\pi$  ve  $\tilde{D}_\pi$ ,  $\tilde{C}_\pi = J_\pi C_\pi$  ve  $\tilde{D}_\pi = J_\pi D_\pi$  ile gösterilir, burada  $J_\pi$  (4.10) ifadesinde verilmiştir. .... 46
- Şekil 4.3:** a)  $\tau_N$  normal relaksasyon zamanı için, b)  $\tau_\pi$   $\pi$ -saçılması relaksasyon zamanı için; katkı sağlayan impüriti verteksleri ..... 46

- Şekil 4.4:** Normal saçılma ve  $\pi$ - saçılması için cooperonun gerçek uzay temsili a)  $i$ 'nci saçılma hareketinde, küçük  $\alpha_i$  açısı ile impüritiler üzerinden çoklu saçılmaya bağlı time-reversal yörünge. b) a)'da çizilen yörünge'nin aynısı, ancak bir farkla ki her bir saçılmaya Bragg yansıması da katılmıştır, ve  $\alpha_i + \pi$  açıları sonucunu vermektedir. Her iki şekilde de hız vektörlerinin büyüklükleri aynı olacak şekilde seçilmiştir. .... 47
- Şekil 4.5:** a), b) Born yaklaşımında normal impüriti saçılması için self-enerji, c) en düşük dereceden  $\pi$ - saçılması için self-enerji, d), e), f)  $\pi$ - saçılması için self-enerjiye yüksek dereceden katkılar..... 52
- Şekil 4.6:** a) Renormalize edilmiş Green fonksiyonu için Dyson denklemi, b)  $\pi$ - saçılması için self-enerji. .... 52
- Şekil 5.1:** Çift-yarık deneyi çerçevesinde elektron girişiminin dört belirgin gösterimi. Girişen yol çiftleri gerçek yolları (a ve c) içerebileceği gibi time-reversal yollarını (b ve d) da sırasıyla  $\hbar/e$  veya  $\hbar/2e$ 'nin karakteristik dalgalanma ölçeğine bağlı olarak kapsayabilir. Şemalar şu girişim etkilerini temsil etmektedir: (a) Aharonov-Bohm etkisi, (b) persistent akım, (c) iletkenlik dalgalanmaları ve (d) zayıf lokalizasyon. .... 55
- Şekil 5.2:** a) Cooperon'da ve b,c) difüzyon kanallarında umklapp saçılmaya bağlı olarak Green fonksiyonuna önemli bir katkı yapan self-enerji kısımları..... 60
- Şekil 5.3:** Self-enerjiye cooperon ve difüzyon bloklarındaki ikinci dereceden katkılar. Hesaplamalar bu diyagramlar arasında tam bir iptal etmenin olduğunu gösteriyor. .... 62
- Şekil 5.4:** İmpüriti potansiyelinin örnek değerleri için  $\rho^{(2)}$  ve  $\rho^{(3)}$  üzerine impüriti etkisi. Karşılaştırma için aynı zamanda yalın  $DY$   $\rho_0^{(2)}$  ve  $\rho_0^{(3)}$  de,  $\tau = \infty$ 'e uygun olarak, verilmiştir. .... 64

- Şekil 5.5:** Bir parçacığın  $A$  noktasından  $B$  noktasına gidebileceği çeşitli yollar.  $O$  noktası ise kendisini-kesen yolun kesişme noktasıdır. .... 68
- Şekil 5.6:** İletkenliğe ilk kuantum katkısı veren diyagramlar. a) ve b) sırasıyla normal ve umklapp saçılma kanallarından  $\sigma(\omega)$ 'ye olan difüzyon katsayısı katkılarını karakterize etmektedir.  $\sigma(\omega)$ 'ye  $DY$ 'den gelen katkıları gösteren c)-d) diyagramlarındaki  $\Sigma$ , Şekil 5.2'de gösterilen tüm self-enerji katkılarının toplamıdır. Diğer iki diyagram c') ve d'), c) ve d)'den elektron çizgilerinin yönü itibarı ile ayrılmaktadır. .... 71
- Şekil 5.7:** a)  $i$ 'nci saçılma hareketinde, küçük  $\alpha_i$  açısı ile impüritiler üzerinden çoklu saçılmaya bağlı time-reversal yörünge. b) a)'da çizilen yörüngenin aynısı, ancak bir farkla ki her bir saçılmaya Bragg yansıması da katılmıştır, ve  $\alpha_i + \pi$  açıları sonucunu vermektedir. Her iki şekilde de hız vektörlerinin büyüklükleri aynı olacak şekilde seçilmiştir. .... 77
- Şekil 5.8:** Düzensiz transportaki ilgili zaman ve enerji ölçeklerini gösteren şematik diyagram. .... 80
- Şekil 5.9:** (a)  $\pi$ -difüzyon ve (b)  $\pi$ -Cooperon bloklarından  $BY$ 'lere bağlı olarak metalik rejimdeki  $R(\varepsilon, \varepsilon')$   $DY$  korelatörüne birinci-dereceden ek katkılar. .... 81
- Şekil 5.10:** (a) difüzyon ve (b) Cooperon bloklarından normal saçılmaya bağlı olarak metalik rejimdeki  $R(\varepsilon, \varepsilon')$   $DY$  korelatörüne birinci-dereceden katkılar. .... 81
- Şekil 5.11:** Üç farklı sistemde aperiyojik manyeto iletkenlik dalgalanmalarının karşılaştırılması [Lee et. al. 1987], (a) gold ringde  $g(B)$ , (b) quasi-1D silikon *MOSFET*, (c) Anderson modeli için  $g(B)$ 'nin nümerik hesaplaması. .... 84

**Şekil 5.12:** Normal saçılmaya bağlı olarak iletkenlik varyansına katkı sağlayan diyagramlar..... 86

**Şekil 5.13:** BR'lere bağlı olarak iletkenlik varyansına katkı yapan diyagramlar. Prime'larla işaret edilen diyagramlar elektron çizgilerinin yönü ile verilenlerden farklıdır. Tekli impüriti çizgisine uygun olarak  $(\tilde{e})$ ,  $(\tilde{f})$  ile  $(e)$ ,  $(f)$  simetriktir ve  $(\tilde{g})$ ,  $(\tilde{h})$  ise tekli impüriti çizgisi altındaki düz ve kesikli çizgilerin yer değiştirmesi ile  $(g)$ ,  $(h)$ 'den elde edilir.  $(e) - (\tilde{h}')$ 'ye benzer diyagramlar  $(d, d')$ 'den üretilen Cooper kanalında da mevcuttur. .... 87

**Şekil 6.1:** Bragg yansımaları sebebiyle bant merkezindeki  $DY$  'ye, (a), (a') ve (c), (c') exchange etkileşimlerinden; (b), (b') ve (d), (d') ise doğrudan etkileşimlerden gelen katkılar. (e) ve (f) sırasıyla  $D_\pi(\mathbf{q}, i\omega_m)$   $\pi$ -difüzyonu ve  $C_\pi(\mathbf{q}, i\omega_m)$   $\pi$ -Cooperonu için impüriti merdiven serileri. (g)  $\tilde{D}_\pi$  (veya  $\tilde{C}_\pi$ ) bloku için,  $\pi$ -difüzyonuna (veya  $\pi$ -Cooperonuna) bir impüriti çizgisi ekleyerek elde edilen diyagram eşitliği. Kalın dalgalı çizgi ve üzerinde çarpı bulunan noktalı çizgi sırasıyla Coulomb potansiyeli ve impüriti saçılmasını göstermektedir. .... 97

**Şekil 6.2:** Sırasıyla (a) parçacık-boşluk ve (b) parçacık-parçacık kanallarındaki  $2D$  bant merkezinde kare bir örgü üzerindeki elektronlar için Coulomb etkileşimlerinin gösterilmesi..... 98

**Şekil 6.3:**  $d = 3$  için  $DY$  'nin enerji bağımlılığı. Eğriler impüriti konsantrasyonunun veya elektron-elektron etkileşimi sabitinin artmasıyla  $DY$  'un değişimini göstermektedir..... 107

**Şekil 6.4:** McMillan ve Mochel [Millan and Mochel, 1981]'in ardından,  $x = 0,08$ ,  $x = 0,12$ ,  $0,16$  ve  $0,20$  örnekleri için  $V$  bias voltajına karşı  $Ge_{1-x}Au_x$  elektrotları ile bir  $MYM$  kontağının tünelleme iletkenliği  $G = dI/dV$  ..... 108

**Şekil 6.5:** Self-enerjiler a) Difüzyon kanalında exchange etkileşimi, b)  $D_N$  bloku için diagram denklemi, c) ve d)  $\pi$ -saçılması için

difüzyon kanalında exchange etkileşimi. Kalın dalgalı çizgiler ve çarpı bulunan noktalı çizgi sırasıyla Coulomb potansiyeli ve impüriti saçılmasını göstermektedir. .... 113

# 1. GİRİŞ

*Mezoskopik fizik* [Imry, 1997] için araştırma alanı, random bir ortamda gezinen elektronların kuantum girişim etkileridir. Bu konunun çekici özelliği, kuantum etkilerini makroskopik nesneler üzerinde de gözlemleyebilme imkanıdır. Bu nedenle, temel bir önşart uzun zaman ölçeklerinde veya uzun mesafeler boyunca faz uyumudur. Bunu elde etmek için, düşük sıcaklıklar ve makul temizlikte örnekler ihtiyacı vardır. Son yirmi yıl içinde, mezoskopik fizik çok aktif bir alan olmuştur ve hızlı teknolojik ilerleme bir çok yeni fenomenin gözlemlenmesi olanağını sundu.

Girişim etkileri, mezoskopik sistemlerin hem termodinamik hem de transport özelliklerinde güçlü dalgalanmalar biçiminde kendini gösterir. Örneğin, ‘mezoskopik’ rejimde, bir metalin iletkenliği bahsedilen kuantum dalgalanmalarını gösterir. Sistemin büyüklüğünün artması üzerine, Anderson-lokalize rejimine bir geçiş ortaya çıkar ve iletkenlik dalgalanmaları daha güçlü hale bile gelir. Benzer şekilde, mezoskopik sistemin çeşitli termodinamik katsayıları, örneğin, spektral durum yoğunluğu, termal ve manyetik duyarlılıklar, vs. de kuantum stochastic davranış sergilerler.

Abrahams et. al.’ın öncülük eden çalışmasının [Abrahams et. al. 1979] ardından düzensiz metaller teorisinde büyük ilerleme kaydedildi. Bir- ve iki-boyutlu ( $1D$  ve  $2D$ ) düzensiz sistemlerdeki tüm elektronik durumlar randomness derecesine bakmaksızın lokalize olurlar [Mott and Twose, 1961 Berezinskii, 1974]. Düzensiz metallerdeki elektron-elektron korelasyonlarının, sistemin transport ve termodinamik özelliklerine gözardı edilemeyecek katkılarla sonuçlandığı görülür [Altshuler and Aronov, 1985]. İletkenliğe olan katkılar, etkileşmeyen bir elektron gazı için elde edilen lokalizasyon katkılarına benzerdirler, ve elektronik durumlara kuantum katkılarının bunu Fermi düzeyi yakınında azaltacağı görülür. Yukarıda sözü geçen tüm çalışmalarda yer alan düzensiz metaller random impüritiler alanında dolaşan bir serbest elektron gazı şeklinde modellenmişlerdir. Bununla birlikte, düşük

impüriti konsantrasyonlarında kristal genellikle periyodik bir yapıya sahip olur ve impüriti atomları çoğu durumda örgünün yerli atomlarının yerini alır. Bu yüzden,  $\lambda$  elektron dalga boyunun ve  $a$  örgü sabitinin oranlanabilirlik etkileri saçılma süreçlerinde önemli hale gelirler. Oranlanabilirliğin elektron bandının tüm ‘rasyonel’ noktalarında bulunduğu bilinir, fakat bununla beraber, yarı-dolu bir bant için daha önemli olarak ortaya çıkar.

İmpüriti saçılması sürecinde Brillouin bölgesi sınırındaki elektronik dalganın Bragg yansıması bant merkezine yaklaşıldıkça daha önemli hale gelir. Bu süreç, Bragg yansıması için oranlanabilirlik şartına bağlı olarak yeni bir relaksasyon zamanı sağlar. Sözkonusu örgüler,  $2D$  için kare yapıya ve  $3D$  kristaller için basit kübik yapıya sahiptirler. Periyodiklik, pertürbasyon teorisinde sistemin fiziksel özelliklerine belirgin bir katkı yapan yeni diyagramlar sınıfının ortaya çıkmasına sebep olur.  $2D$  kare örgü için, yalın sistemin durum yoğunluğu ( $DY$ ) bandın ortasında logaritmik van Hove tekilliğine sahip olur. Ve bu tekilliğin substitutional impüritilere sahip örgü için de korunduğu görülmektedir. Bununla birlikte, enerji bağımlılığı önemli ölçüde değişir ve tepe noktası daralır [Nakhmedov et. al. 2000a,b]. Yarı-dolu bir enerji bandı için substitutional impüritilere sahip  $2D$  kare bir örgünün tek-parçacık  $DY$ ’si üzerindeki etkileşim etkileri, bant merkezine yaklaştıkça işaretini değiştirir [Nakhmedov and Prigodin, 2002].

Bu çalışmada ele alınan konular şu şekilde düzenlenmiştir: Mezoskopik sistemlerin karakteristik ölçeklerine Bölüm 2’de bir giriş yapılmakta, Bölüm 3 ise geleneksel impüriti diyagram tekniğine ayrılmaktadır. Bölüm 4’te nesting vektörüne uygun bir şekilde parçacık-boşluk simetrisini kullanarak düzensiz kristal yapıya sahip metallerde oranlanabilirlik etkilerini incelemek için yeni diyagramatik metoda giriş yapılmaktadır. Bölüm 5, yarı-dolu bantta etkileşmeyen elektronların girişim etkileri ile ilgilidir. Son bölümde ise çoğunlukla iki ve üç boyutlu örgülerin elektronik durumlarına etkileşimden kaynaklanan katkılar ve inelastik saçılma zamanı üzerinde durulmaktadır.

## 2. MEZOSKOPIK SİSTEMLERİN KARAKTERİSTİK ÖLÇEKLERİ

### 2.1. Fermi Dalgaboyu

Mezoskopik sistemlerinin karakterini açıklayan bir önemli ölçek seviyesi Fermi dalga boyudur,  $\lambda_F = 2\pi/k_F$ , burada  $k_F$  Fermi dalga sayısıdır. Sıfır sıcaklıkta, elektronlar  $|\mathbf{k}| \leq k_F$  olan  $\mathbf{k}$  dalga vektörü tarafından belirlenen yerde bulunurlar. Fermi dalga vektörü

$$n = \begin{cases} \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} k_F^3 & (d=3), \\ \frac{2}{(2\pi)^2} \pi k_F^2 & (d=2), \\ \frac{2}{2\pi} k_F & (d=1), \end{cases} \quad (2.1)$$

yoluyla hesaplanan  $n$  elektron yoğunluğuna bağlıdır. Burada  $d$  sistem boyutu ( $d=0$  için  $0D$ ,  $d=1$  için  $1D$ ,  $d=2$  için  $2D$  ve  $d=3$  için  $3D$ ) ve faktör 2 elektron spininden gelmektedir. **Cu** ve **Ag** gibi tipik metallerde, Fermi dalga boyu birkaç angström düzeyindedir ve **GaAs / AlGaAs** karışık yapılarında tecrübe edilen  $2D$  sistemleri gibi yarıiletkenlerde  $n \approx 3 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$  elektron yoğunluğu için  $\lambda_F \approx 400 \text{Å}$  değerini elde ederiz.

### 2.2. Ortalama Serbest Yol

Uygulanan bir dış alanda elektron sisteminin zaman gelişimi,  $l$  ortalama serbest yol adlı önemli boy seviyesini açıklayan Boltzmann transport denklemi ile yönetilmektedir. Ortalama serbest yol, farklı bir dalga vektörü

yönüne saçılmadan önce bir elektron tarafından kat edilen ortalama yörünge uzunluğudur. Yeterince düşük sıcaklıklarda, transport  $\varepsilon_F$  Fermi enerji alanı içindeki elektronlar tarafından belirlenir ve böylece  $v_F$  'nin Fermi hızını ve  $\tau$  'nin relaksasyon zamanını gösterdiği  $l = v_F \tau$  formülünü elde ederiz. İletkenlik genellikle  $m$  elektron kütlesi olmak üzere

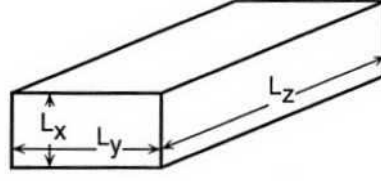
$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}, \quad (2.2)$$

şeklinde yazılır.

Relaksasyon zamanı, değişik yerlere saçılacak bir elektron için saçılma olasılığının tersi olarak tanımlanan geleneksel saçılma zamanından farklıdır. Aslında, elektron hareketinin yönünü değiştirmeyen saçılma akımda bir azalmaya neden olmaz. Yavaş değişen bir potansiyele sahip bir saçıcı için, küçük-açılı saçılma olasılığı transport relaksasyon zamanı  $\tau_{tr}$  ile  $\tau$  arasında büyük bir farka yol açarak geniş açılı saçılmaninkinden daha büyük hale gelmektedir. Yukarıdaki denklemde görülen relaksasyon zamanı gerçekte  $\tau$  yerine  $\tau_{tr}$  dir.

## 2.3. Sistemin Büyüklüğü

Şekil 2.1'de görüldüğü gibi  $L_x \times L_y \times L_z$  ( $L_x < L_y < L_z$ ) büyüklüğünde bir kutu içine kapatılmış bir sistem düşünün.



Şekil 2.1:  $L_x, L_y$ , ve  $L_z$  büyüklüğünde bir kutuya kapatılmış bir sistem. Sistem ebatlarının ve Fermi dalgaboylarının göreceli büyüklüklerine bağlı olarak  $3D$ ,  $2D$ ,  $1D$  ve  $0D$  arasında değişiklik göstermektedir.

Bu sistemin enerjisini  $n_x$ ,  $n_y$  ve  $n_z$  tamsayı olmak üzere

$$\varepsilon(n_x, n_y, n_z) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \left( \frac{\pi n_x}{L_x} \right)^2 + \left( \frac{\pi n_y}{L_y} \right)^2 + \left( \frac{\pi n_z}{L_z} \right)^2 \right], \quad (2.3)$$

formülü vermektedir. Sistem  $L_x, L_y, L_z$  ve  $\lambda_F$  'nin göreceli büyüklüklerine bağlı olarak kabaca aşağıdaki gibi sınıflandırılabilir:

- $\lambda_F \square L_x < L_y < L_z$  :  $3D$  (bulk)
- $\lambda_F \square L_x < L_y < L_z$  :  $quasi\ 2D$  (ince filmler)
- $L_x < \lambda_F \square L_y < L_z$  :  $2D$  (MOSFETs, hetero yapılar)
- $L_x < L_y \square \lambda_F \square L_z$  :  $quasi\ 1D$  (kuantum wire)
- $L_x < L_y < \lambda_F \square L_z$  :  $1D$
- $L_x < L_y < L_z < \lambda_F$  :  $0D$  (kuantum dot)

$L \square L_x \square L_y \square L_z$  ebadındaki bir kutuya birçok elektron konulduğunda, yukarıda sözü geçen kuantum mekanik kuantizasyon enerjisine ek olarak elektronlar arasındaki Coulomb etkileşimine bağlı yükleme enerjisi (charging energy)  $E_c$  'yi de göz önünde bulundurmak zorundayız. Bir elektron eklemek

yada çıkarmak için gerekli tipik yükleme enerjisini  $E_c = e^2/L$  verir. Bu yükleme enerjisi büyük ölçekli sistemler için kuantizasyon enerjisinden daha önemlidir ve büyüklükteki azalmayla birlikte daha önemsiz hale gelmektedir. Crossover  $L \propto \sqrt{\lambda_F a_B}$  civarında ortaya çıkmaktadır, burada  $a_B$  Bohr yarıçapıdır. Yükleme enerjisi yalıtılmış bir metal veya bir kuantum dot içindeki tek-elektron tünellemede önemli bir rol oynar.

## 2.4. Termal Difüzyon Uzaklığı ve Thouless Enerjisi

Bir elektron  $l$  ortalama serbest yoldan daha küçük bir ölçekte saçılmadıkça balistik bir hareket yapar, fakat  $l$ 'den daha büyük bir ölçekte ise gelişigüzel bir yayılma hareketi (random walk) yapar. Bu yayılma hareketinin karakterini

$$D \propto v_F^2 \tau = \frac{l^2}{\tau} = l v_F \quad (2.4)$$

formülüyle elde edilen  $D$  difüzyon katsayısı belirler. Saçılma nedeniyle dalga vektörü  $\mathbf{k}$  ile belirlenen bir elektron  $\mathbf{k}$  uzayında enerji  $\hbar/\tau$  ile uyumlu bir genişlemeye sahiptir. Bu genişlemeyi  $(\partial \epsilon(\mathbf{k})/\partial k) \Delta k \propto \hbar/\tau$ 'deki  $\Delta k \propto 1/l$  verir. Yine de öz durumdaki bir elektronun belirli bir enerjiye ve dalga fonksiyonuna sahip olduğuna dikkat edilmelidir. Bu dalga fonksiyon artık düz bir dalgadan gelmemektedir fakat  $\mathbf{k}$  uzayındaki genişlemeyle uyumlu karmaşık bir uzaysal değişimi göstermektedir. Her bir elektronun faz uyumuna impüritiden saçılma ile zarar gelmez.

Sıfır sıcaklık dışında transport nicelikleri,  $T$  sıcaklık ve  $k_B$  Boltzmann sabiti olmak üzere, Fermi enerjisi etrafındaki  $k_B T$  aralığında yer alan bir enerjiye sahip olan durumların sıcaklık ortalaması ile belirlenir. Bu,  $\hbar/k_B T$  düzenindeki belli bir zaman aşımından sonra elektronun faz belleğini kaybetmesi anlamına gelir. Elektron,  $D$  difüzyon katsayısı ile karakteri

belirlenen gelişigüzel bir hareket yaptığında bu zaman aşımına bağlı büyüklüğü  $L_T = \sqrt{D\hbar/k_B T}$  verir. Bu uzunluğa termal difüzyon uzaklığı denir.

$L$  sonlu büyüklükte bir sistem için, Thouless enerjisi dediğimiz  $E_T = D\hbar/L^2$  'den elde edilen bir enerji düzeyi belirleyebiliriz [Devoret and Grabert, 1992]. Birbirine yakın enerjiye sahip iki durum birbiriyle ilişkilendirilir, fakat  $E_T$  'den daha fazla birbirinden ayrı enerjiye sahip olanlar neredeyse birbirinden bağımsız olarak kabul edilebilirler. Thouless enerjisi Anderson lokalizasyonunda da önemli bir rol oynar.

## 2.5. Faz Uyum Uzaklığı

Buraya kadar elektron hareketi tek Schrödinger denklemi ile açıklanan elektron sistemini ele aldık. Bununla birlikte, gerçek sistemlerde, elektronlar diğer birçok serbestlik dereceleri ile etkileşim içindedirler ve enerji alışverişinde bulunurlar. Örneğin, elektron diğer elektronlardan saçılmaya veya örgü titreşimlerine bağlı olarak bir öz durumdan diğerine hareket eder. Elektronun fazı böyle dinamik etkileşimler tarafından sona erdirilir ve bir elektronun, içinde faz belleğini koruduğu mesafeye faz uyum uzaklığı denir. Esnek olmayan saçılmayla belirlenen  $\tau_\phi$  faz relaksasyon zamanı için, faz uyum uzaklığı difüzyon rejiminde  $L_\phi = \sqrt{D\tau_\phi} = l\sqrt{\tau_\phi/\tau}$  ile verilir.

Düşük sıcaklıklarda elektron-elektron ve elektron-fonon saçılması azalır. Genellikle Fermi liquid teorisine göre elektron-elektron saçılması durumunda  $p=2$  olmak üzere  $\tau_\phi \propto T^{-p}$  'dir [Josephson, 1962]. Kuvvetli düzensizlik durumunda,  $p$  daha küçük değere sahip olur. Fononlardan saçılma için,  $p$  daha büyüktür. Faz uyumu  $L_\phi \propto T^{-p/2}$  ile orantılı olarak azalan sıcaklıkla artar. Balistik rejimde ise  $L_\phi \propto v_F \tau_\phi$  elde edilir.

## 2.6. Difüzyon Rejimi ve Balistik Rejim

Mezoskopik sistemlerde, boyutlar faz uyum uzaklığından küçük veya kıyaslanabilir büyüklükte olabilir. Genellikle makroskopik sistemlerde gözlenen nicelikler çeşitli sistem kümelerindeki ortalamalardır, çünkü her bir sistem bağımsız Schrödinger denklemleri ile açıklanan birçok alt sistemden oluşur. Faz uyumu sistemin büyüklüğü ile kıyaslanabilir hale geldiğinde, yine de bütün sistem tek bir Schrödinger denklemi ile idare edilir ve gözlenen nicelikler alınan ortalamalar değildir ve sistemden sisteme değişebilirler.

Mezoskopik bir sistem  $L$  sistem büyüklüğü ve  $l$  ortalama serbest yolun göreceli büyüklüğüne bağlı olarak difüziv ve balistik rejimlere ayrılmıştır.  $L \gg l$  olduğu difüzyon rejimlerinde transport difüziv bir süreç olarak anlaşılabilir ve temelde sistemin şeklinden bağımsızdır.  $L \ll l$  olduğu balistik rejimlerde ise elektron sistem içinde balistik bir hareket yapar ve sistem sınırları impüriti yerine saçılma rolü oynar.

Metal teller ve kuantum dotlar ortalama serbest yol  $\approx 100 \text{ \AA}$  düzeninde ve sistem büyüklüğü daha geniş oldukça difüzyon rejiminde olurlar. Ayrıca, Fermi dalga boyu ( $\approx 2 \text{ \AA}$ ) sistemin büyüklüğünden çok daha küçüktür ve dolayısıyla en yakın komşu enerji düzeyleri arasındaki ayrımın sıcaklıkla kıyaslanabilir hale geldiği çok düşük sıcaklıklar dışında enerji düzeylerinin kuantizasyonu önemli değildir. Metal kuantum dotlarda, bu nedenle, en önemli enerji ölçütü Coulomb etkileşimine bağlı yükleme enerjisidir.

Yüksek kalitedeki yarıiletken hetero yapılarda , ortalama serbest yol  $50 \mu m$  kadar genişlikte olabilir ve balistik transport ortaya çıkar. Ayrıca, Fermi dalga boyu büyüktür ( $300 \approx 500 \text{ \AA}$ ) ve sistem büyüklüğü ile kıyaslanabilir. Bu nedenle sistem sınırlamasına bağlı kuantizasyon genellikle önemli bir rol oynar.

## 2.7. Mezoskopik Zaman Ölçekleri

Mezoskopik fizikte zaman ölçekleri uzunluk ölçeklerinden daha temel öneme sahiptir. Difüzyon durumunda,  $L = \sqrt{D\tau}$  difüzyon formülüyle ilişkilidirler. Aşağıda bunların sembolleri ve ilgili uzunluk ölçekleriyle ilişkileri verilmiştir:

- Decoherence Zamanı;  $\tau_\phi$ :  $\tau_\phi = \frac{L_\phi^2}{D}$
- Manyetik Zaman;  $\tau_H$ :  $\tau_H = \frac{L_H^2}{D}$
- Thouless Difüzyon Zamanı;  $\tau_D$ :  $\tau_D = \frac{L^2}{D}$
- Termal Difüzyon Zamanı;  $\tau_\beta$ :  $\tau_\beta = \frac{L_T^2}{D} = \frac{\hbar}{k_B T}$
- Ortalama Serbest Zaman;  $\tau$ :  $\tau = \frac{l}{v_F}$

### 3. DÜZENSİZ SİSTEMLERİN DİYAGRAMATİK PERTÜRBASYON TEORİSİ

Bu bölümde az katkılı düzensiz sistemlerin fiziksel özelliklerini incelerken temel aracımız olacak olan diyagramatik impüriti-ortalama tekniğine [Abrikosov et al., 1963, Rickayzen, 1980, Rammer, 1998] giriş yapacağız. Random potansiyel kavramını açıkladıktan sonra, ilk olarak pertürbasyon teorisindeki ortalama propagatörü derece derece ele alacağız. Bu yolla diyagramların topolojik yapılarına dayanan pertürbasyon ifadelerinin kısmi olarak nasıl toplanacağını göstereceğiz ve self-enerji ve iskelet diyagramları gibi önemli kavramları göreceğiz.

Metal bir iletken düşük sıcaklıklarda sıcaklıktan bağımsız bir direnç gösterir ve bu direncin değerine artık direnç denir. Artık direnç ideal bir kristalinkinden alınan örneğin sapmasına bağlıdır. Bir iletkenin her zaman kusurları vardır: kristal atomlarının yerine geçen yabancı atomlar, eksik atomlardan kaynaklanan boşluklar, kristalde yerinden kopmalar, vs.. Aşağıda sadece statik impüritiler göz önüne alınacaktır.

#### 3.1. Green Fonksiyonları

Bir parçacığın retarded Green fonksiyonu

$$[E + i0 - H(r)]G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (3.1)$$

denklemlerle tanımlanır ve advanced karşılığı  $G^A(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = (G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E))^*$  ile verilir. Denklem(1)'in

$$G^{R,A}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \sum_{\alpha} \frac{\psi_{\alpha}(\mathbf{r})\psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}')}{E - E_{\alpha} \pm i0} \quad (3.2)$$

şeklinde bir çözümü vardır, burada  $\psi_\alpha(\mathbf{r})$  ile gösterilen  $H = -\nabla^2/2m + V(\mathbf{r})$  Hamiltoniye öz durumlarıdır ve  $V(\mathbf{r})$  de potansiyeli göstermektedir. Analitik özellikler retarded ve advanced Green fonksiyonlarının  $t < 0$  ve  $t > 0$  için sırasıyla ortadan kaybolmalarını sağlar.

Serbest bir tanecik için ( $V = 0$ ) dalga fonksiyonları düzlem dalgaları ( $\alpha = \mathbf{p}$ ) ve Denklem(1)

$$G^{R,A}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) = \left( \frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{d/2} e^{im(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2/2\hbar t} \theta(\pm t) \quad (3.3)$$

ile tamamlanır. Fiziksel olarak,  $G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t)$  bir taneciğin  $t$  zaman içinde  $\mathbf{r}$  konumundan  $\mathbf{r}'$  konumuna yayılmasını temsil eder. Propagatör denklemsel olarak Feynman yol integraliyle gösterilebilir:

$$G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) = \int_{\mathbf{r}(0)=\mathbf{r}}^{\mathbf{r}(t)=\mathbf{r}'} D\mathbf{r}(t) \exp \left[ i \int_0^t \left( \frac{\dot{\mathbf{r}}^2}{2m} - V(\mathbf{r}) \right) dt' \right] \quad (3.4)$$

### 3.2. Random Potansiyel Modeli

Verilen bir örnekte  $\mathbf{r}_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, N'$  gibi bazı belirli konumlarda yer alan impürtilerimiz olduğunu düşünelim. Bir taneciğin algılayacağı impüriti potansiyeli bireysel impüriti potansiyellerinin toplamıdır, ve biz kolaylık olsun diye impürtilerin hemen hemen aynı olduğunu kabul edeceğiz:

$$V(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N'} V_{imp}(\mathbf{x} - \mathbf{r}_i) = \int d\mathbf{x}' V_{imp}(\mathbf{x}') \rho_{imp}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (3.5)$$

burada

$$\rho_{imp}(x) = \rho_{imp}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{N'}) = \sum_{i=1}^{N'} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_i) \quad (3.6)$$

impüriti yoğunluk dağılımıdır, ve bu yoğunluk dağılımı

$$\rho_{imp}(\mathbf{k}) = \rho_{imp}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{N'}) = \int d\mathbf{x} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \rho_{imp}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N'} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} \quad (3.7)$$

Fourier transformuna sahiptir. Potansiyelin Fourier transformu

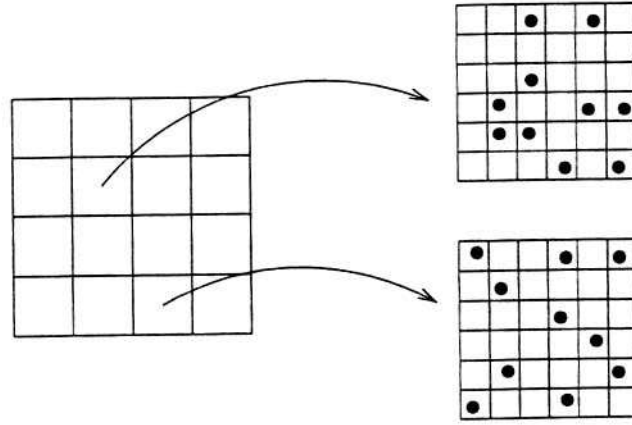
$$V(\mathbf{q}) = V_{imp}(\mathbf{q}) \sum_{i=1}^{N'} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} \quad (3.8)$$

şeklindedir ki biz burada bireysel impüriti potansiyelinin Fourier transformunu

$$V_{imp}(\mathbf{q}) = \int_V d\mathbf{x} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} V_{imp}(\mathbf{x}) \quad (3.9)$$

verdik.  $V$  burada sistemin hacmini göstermektedir.

İmpüritisi  $N$  olan ve  $V$  hacmindeki düzensiz bir iletkenin her bir alt sisteminde,  $\square \mathbf{r}_m$  hacimli  $M$  hücreden oluşan bir ağ tasarlayalım ve bu ağ o kadar ince olsun ki impüritiler arasındaki ortalama mesafe,  $n_i^{-1/d} = (V/N)^{1/d}$ , hücre büyüklüğünden daha geniş olsun. Bir hücrede birden fazla impüritiye sahip olma olasılığı böylece önemsiz hale gelir.



Şekil 3.1: Makroskopik bir örneğin alt örneklerinin bireysel impüriti yapılanmaları.

Herhangi bir alt örneğin tek bir impüriti yapılanması bu yüzden impüritilerin hangi hücrelerde yer aldığını belirlemede eşdeğerdir: bir tane  $\square \mathbf{r}_i$ 'de, ..., bir tane  $\square \mathbf{r}_{i_N}$ 'de. Küçük hücrelerin sınırları dahilinde impüritilerin bu yapılanması için olasılık,  $P(\square \mathbf{r}_i, \dots, \square \mathbf{r}_{i_N})$ , bir olasılık yoğunluğu çerçevesinde belirlenir:

$$P(\square \mathbf{r}_i, \dots, \square \mathbf{r}_{i_N}) = P(\mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_{i_N}) \square \mathbf{r}_i \dots \square \mathbf{r}_{i_N} \quad (3.10)$$

Burada  $\mathbf{r}_{i_k}$ ,  $k$  hücresindeki bir noktadır. İmpüritilerin konumlarının bağımsız bir şekilde dağıldığını varsayarak,  $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$  noktalarında yer alan impüritileri veren olasılık yoğunluğu için

$$P(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = P(\mathbf{r}_1) \dots P(\mathbf{r}_N) = \prod_{i=1}^N P(\mathbf{r}_i) \quad (3.11)$$

formülünü elde ederiz ki burada  $P(\mathbf{r}_i)$ ,  $\mathbf{r}_i$  noktasının etrafındaki hücre içindeki bir impüritiyi veren olasılık yoğunluğudur.

Herhangi bir hücrede yer alacak bir impüriti için eşit olasılık varsaydığımız her bir random durumda, normalizasyonla

$$P(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \quad (3.12)$$

random potansiyel durumuna ulaşırız.

Kendiliğinden-ortalama (self-averaging) durumunda, bir  $F$  fiziksel miktar değeri makroskopik olarak birbirinin aynı alt sistemler kümesi üzerinden bir ortalama değer ile temsil edilir. Bu ortalama değer impüriti konumlarının farklılık gösterdiği sistemler üzerinden ortalama alınarak elde edilir, fakat bunlar aynı impüriti konsantrasyonuna sahiptirler. Bu her biri  $N$  impüritili kümeden alınan herhangi bir sistemde,  $F$  miktarı impüritilerin gerçek konumlarına bağlı olacaktır,  $F = F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ , ve  $F$  'nin impüriti ortalaması için son eşitliğin random durum için geçerli olduğu

$$\begin{aligned} \langle F \rangle &\equiv \int \prod_{i=1}^N d\mathbf{r}_i F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) P(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \\ &= \int \prod_{i=1}^N \frac{d\mathbf{r}_i}{V} F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \end{aligned} \quad (3.13)$$

elde edilir.

### 3.3. Random Potansiyelde Propagasyon

Bundan sonraki incelemede en önemli kısmı impüriti-ortalama propagatörü (impurity-averaged propagator) oluşturmaktadır. Bu, random potansiyeldeki bir taneciğin hareketini tartışırken ihtiyaç duyulacak temel yapıtaşlarıdır. Verilen bir örnek veya alt sistemde propagatör (burada momentum temsiline gösterilen)

$$G^R(\mathbf{p}, t; \mathbf{p}', t') \equiv G^R(\mathbf{p}, t; \mathbf{p}', t'; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (3.14)$$

parametrik olarak impüriti konumlarına bağlıdır.

İmpüriti-ortalamalı propagatör impüriti potansiyeli çerçevesinde propagatörün pertürbatif açılımındaki her bir terimin ortalaması alınarak elde edilebilir. Bireysel impüriti potansiyelleri çerçevesinde impüriti potansiyelini göstererek

$$V(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \equiv V(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = V_{imp}(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \sum_{i=1}^N e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}_i} \quad (3.15)$$

her bir potansiyel terim impüriti faz faktörü ile birleştirilir.

$$\rho_{imp}(\mathbf{p}-\mathbf{p}'; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{i=1}^N \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}_i\right\} \quad (3.16)$$

Birinci dereceden terimlerinin ortalamasını alarak momentum gösteriminde

$$\langle G_1^R(\mathbf{p}, \mathbf{p}', E) \rangle = G_0^R(\mathbf{p}, E) V_{imp}(\mathbf{p}-\mathbf{p}') G_0^R(\mathbf{p}', E) \frac{1}{V} \langle \sum_{i=1}^N e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}_i} \rangle \quad (3.17)$$

elde ederiz ve impüriti yoğunluğunun Fourier transformunun impüriti ortalamasını almak zorundayız. Exponentler,  $\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'$  olduğunda sıfır verir, ve  $\mathbf{p}=\mathbf{p}'$  için impüritilerin sayısını elde ederiz; yani,

$$\langle \sum_{i=1}^N e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}_i} \rangle = N \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \quad (3.18)$$

çünkü özdeş katkıyı sağlayan toplamda  $N$  sayıda terim vardır. Bu nedenle (3.17) ifadesindeki bütün faktör ortalama impüriti yoğunluğudur. Tahmin edileceği gibi birinci dereceden impüriti-ortalamalı propagatör için translasyon invaryansını tekrar yerine koyduk

$$\langle G_1^R(\mathbf{p}, \mathbf{p}', E) \rangle = n_i V_{imp}(\mathbf{p}=0) \left[ G_0^R(\mathbf{p}, E) \right]^2 \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \quad (3.19)$$

Kronecker fonksiyonunun önündeki faktörü

$$G_1^R(\mathbf{p}, \mathbf{p}', E) = n_i V_{imp}(\mathbf{p} = 0) [G_0^R(\mathbf{p}, E)]^2 \quad (3.20)$$

diyagramatik olarak gösterebiliriz

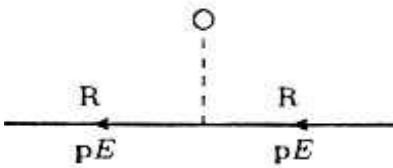
$$G_1^R(\mathbf{p}, \mathbf{p}', E) = \begin{array}{c} \text{X} \\ | \\ \text{R} \quad \text{R} \\ | \quad | \\ \text{p}E \quad \text{p}E \end{array} \quad (3.21)$$

aşağıda gösterildiği gibi

$$\begin{array}{c} \text{X} \\ | \\ \text{p} \quad \text{p}' \end{array} = n_i V_{imp}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad (3.22)$$

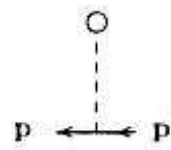
burada çarpı  $n_i$  impüriti konsantrasyonunu belirtmekte, kesikli çizgi ise impüriti potansiyelinin Fourier transformu  $V_{imp}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$ 'yi göstermektedir ki burada argüman giden ve gelen momentumların farkıdır.

Birinci dereceden terim impüriti potansiyelinin değeri keyfi olan uzaysal ortalaması,  $V_{imp}(\mathbf{p} = 0)$ , ile orantılıdır ve yalnızca Hamiltoniye'ye eklenen bir sabit,  $n_i V_{imp}(\mathbf{p} = 0)$ , gibi davranır. Bu terim bu nedenle herhangi bir gözlenebilir sonuca sahip değildir, ve sıfır kabul edebiliriz, veya enerjiyi ölçmek için referansı tekrar tanımlayabiliriz. Sonraki durum terimi renormalize etmenin basit bir örneğidir; yani, Hamiltoniye'ye  $-n_i V_{imp}(\mathbf{0})$  sabitini ekleriz ve bu terim bir önceki terimin yerini alarak ilk-sıra terimini



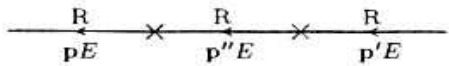
$$= G_0^R(\mathbf{p}, E) (-n_i V_{imp}(\mathbf{0})) G_0^R(\mathbf{p}, E) \quad (3.23)$$

oluşturur. Hamiltoniyen'e eklenen terim tarafından üretilen ekstra diyagramlar impüriti-saçılması diyagramlarını tamamen şu şekilde değiştirecektir:



$$= - \text{[Diagram with a cross instead of a circle]} \quad (3.24)$$

İkinci-dereceden terim için



$$G_2^R(\mathbf{p}, \mathbf{p}', E) = \quad (3.25)$$

impüriti ortalaması üzerinden,

$$\begin{aligned} \langle G_2^R(\mathbf{p}, \mathbf{p}', E) \rangle &= G_0^R(\mathbf{p}, E) \sum_{\mathbf{p}''} V_{imp}(\mathbf{p} - \mathbf{p}'') G_0^R(\mathbf{p}'', E) V_{imp}(\mathbf{p}'' - \mathbf{p}') \\ &G_0^R(\mathbf{p}', E) \frac{1}{V^2} \langle \sum_{i,j=1}^N e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}'') \cdot \mathbf{r}_i} e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}''-\mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}_j} \rangle \end{aligned} \quad (3.26)$$

elde ederiz ve impüriti konumları üzerinden toplamın ortalamasını almak zorundayız. Özdeş katkıyı veren toplamda  $N(N-1)$  sayıda terim bulunurken farklı impüritilere saçılmasını karşılayan toplamdaki terimler,  $i \neq j$ ,

$$\frac{1}{V^2} \langle \sum_{i,j=1}^N e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}'') \cdot \mathbf{r}_i} e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}''-\mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}_j} \rangle = \frac{N(N-1)}{V^2} \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}''} \delta_{\mathbf{p}', \mathbf{p}''} \quad (3.27)$$

faktörünü verir.  $n_i = N/V$  oranının korunduğu bir şekilde  $V$  ve  $N$ 'i sonsuza yaklaştırdığımız termodinamik limiti ele alırız, ve

$$\frac{1}{V^2} \left\langle \sum_{i \neq j}^N e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}_i} e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}'-\mathbf{p}) \cdot \mathbf{r}_j} \right\rangle = n_i^2 \delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} \delta_{\mathbf{p}',\mathbf{p}'} = n_i^2 \delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} \delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} \quad (3.28)$$

ifadesine ulaşırız, buradan da farklı impüritilerden saçılmanın katkısını

$$\langle G_2^R(\mathbf{p}, \mathbf{p}', E) \rangle^{i \neq j} = \delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} n_i^2 [V_{imp}(\mathbf{p}=0)]^2 [G_0^R(\mathbf{p}, E)]^3 \equiv G_2^R(\mathbf{p}, E)^{i \neq j} \delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} \quad (3.29)$$

elde ederiz. Bu terimdeki önfaktörün iki impüriti çizgili bir

$$G_2^R(\mathbf{p}, \mathbf{p}', E)^{i \neq j} = \begin{array}{c} \text{---} \xleftarrow{\mathbf{R}} \text{---} \times \text{---} \xleftarrow{\mathbf{R}} \text{---} \times \text{---} \xleftarrow{\mathbf{R}} \text{---} \\ \text{---} \xrightarrow{\mathbf{p}E} \text{---} \quad \text{---} \xrightarrow{\mathbf{p}E} \text{---} \quad \text{---} \xrightarrow{\mathbf{p}E} \text{---} \end{array}$$

$$= [G_0^R(\mathbf{p}, E)]^3 n_i^2 [V_{imp}(\mathbf{p}=0)]^2 \quad (3.30)$$

diyagramatik gösterimi vardır. Terim korunabilir veya yukarıda açıklanan yolla renormalize edilebilir.

Aynı impüritiden saçılmaya karşılık gelen terim  $i = j$

$$\left\langle \sum_{i=1}^N e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}_i} \right\rangle = N \delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} \quad (3.31)$$

faktörünü verirken özdeş katkısı veren toplamda  $N$  sayıda terim vardır, ve impüriti-ortalama propagatöre olan katkısı

$$\begin{aligned}
\langle G_2^R(\mathbf{p}, \mathbf{p}', E) \rangle^{i=j} &= n_i \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \left[ G_0^R(\mathbf{p}, E) \right]^2 \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}''} |V_{imp}(\mathbf{p} - \mathbf{p}'')|^2 G_0^R(\mathbf{p}'', E) \\
&\equiv G_2^R(\mathbf{p}, E)^{i=j} \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'}
\end{aligned}
\tag{3.32}$$

elde ederiz. Bu terimdeki önfaktörün diyagramatik temsili

$$G_2^R(\mathbf{p}, E)^{i=j} = \text{Diagram: A horizontal line with three vertices labeled } \mathbf{p}E, \mathbf{p}''E, \text{ and } \mathbf{p}E. \text{ Above the middle vertex is a dashed triangle with an 'X' at its top.} \tag{3.33}$$

impüriti korelatörünü momentum gösteriminde

$$\begin{aligned}
&\text{Diagram: A vertical dashed line with an 'X' in the middle. On the left, two horizontal arrows point towards the line, labeled } \mathbf{p}_1 \text{ and } \mathbf{p}'_2. \text{ On the right, two horizontal arrows point away from the line, labeled } \mathbf{p}'_1 \text{ and } \mathbf{p}_2. \\
&\equiv n_i \delta_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \mathbf{p}'_1 + \mathbf{p}'_2} V_{imp}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}'_1) V_{imp}(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}'_2) \\
&= n_i \delta_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \mathbf{p}'_1 + \mathbf{p}'_2} |V_{imp}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}'_1)|^2
\end{aligned}
\tag{3.34}$$

açıkladık. Kronecker fonksiyonu translasyon invaryansının impüriti ortalama üzerinden düzeltilmesini gösterir ve impüriti korelatöründeki gelen momentumların toplamının giden momentumların toplamına eşit olduğunu ifade eder. Yukarıdaki ikinci-dereceden durumda momentum korunumu trivial bir şekilde  $1 = \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}} = \delta_{\mathbf{p} + \mathbf{p}^*, \mathbf{p} + \mathbf{p}^*}$  olarak gösterilmiştir.

İmpüriti potansiyelindeki ikinci derece impüriti-ortalamalı propagatör için continuum limitinde şunu elde ederiz:

$$G_2^R(\mathbf{p}, E) = [G_0^R(\mathbf{p}, E)]^2 n_i \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} |V_{imp}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_1')|^2 G_0^R(\mathbf{p}', E) \quad (3.35)$$

Üçüncü-derece diyagram için

$$G_3^R(\mathbf{p}, \mathbf{p}', E) = \begin{array}{c} \text{R} \quad \text{R} \quad \text{R} \quad \text{R} \\ \text{p}E \quad \text{p}_2E \quad \text{p}_1E \quad \text{p}'E \end{array} \quad (3.36)$$

konum-bağımlı impüriti faz faktörünün toplamını alırız

$$\left\langle \sum_{i,j,k=1}^N e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}_2) \cdot \mathbf{r}_i - \frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_2-\mathbf{p}_1) \cdot \mathbf{r}_j - \frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_1-\mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}_k} \right\rangle \quad (3.37)$$

ki bu aynı impüritinin,  $i = j = k$ , üçlü saçılması içindir ve  $N\delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}$  önfaktörünü ve dolayısıyla

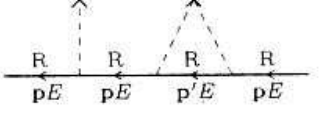
$$\begin{array}{c} \text{R} \quad \text{R} \quad \text{R} \quad \text{R} \\ \text{p}E \quad \text{p}_2E \quad \text{p}_1E \quad \text{p}E \end{array} = n_i [G_0^R(\mathbf{p}, E)]^2 \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} V_{imp}(\mathbf{p}-\mathbf{p}_2) G_0^R(\mathbf{p}_2, E) \\ V_{imp}(\mathbf{p}_2-\mathbf{p}_1) G_0^R(\mathbf{p}_1, E) V_{imp}(\mathbf{p}_1-\mathbf{p}) \quad (3.38)$$

diyagramını verir, burada üç-ayak üç impüriti potansiyel faktörünü, çarpı ise daha önceki gibi impüriti konsantrasyonunu temsil etmektedir. Aynı impüritiden üç veya daha fazla saçılması olan terimleri çoklu saçılma olarak adlandıracaktır.

Aynı impüritiden ikili saçılması olan terimler,  $i \neq j = k, i = j \neq k$  terimleri, sarkan bir impüriti çizgisi içerirler, ortalamanın verdiği gibi

$$\frac{N(N-1)}{V^2} \delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}_2} \delta_{\mathbf{p}_2,\mathbf{p}'} \square \frac{N^2}{V^2} \delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}_2} \delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} \quad (3.39)$$

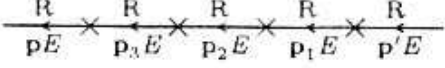
burada son ifade geniş hacim sınırları dahilinde bir özdeşliktir. Örneğin korunabilecek veya sıfıra renormalize edilebilecek olan



$$= n_l V_{imp}(0) \left[ G_0^R(\mathbf{p}, E) \right]^3$$

$$n_i \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}'} |V_{imp}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')|^2 G_0^R(\mathbf{p}', E) \quad (3.40)$$

katkısını alalım. Dördüncü-derece diyagram



$$\quad (3.41)$$

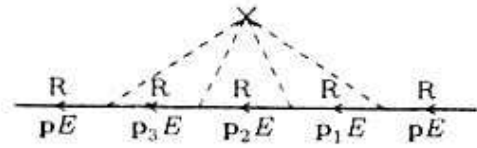
şu impüriti faz faktörüne sahiptir:

$$\left\langle \sum_{i,j,k,l=1}^N e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}_3) \cdot \mathbf{r}_i - \frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_3-\mathbf{p}_2) \cdot \mathbf{r}_j - \frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_2-\mathbf{p}_1) \cdot \mathbf{r}_k - \frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_1-\mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}_l} \right\rangle \quad (3.42)$$

Aynı impüritiden dörtlü saçılmayı karşılayan terim,  $i = j = k = l$ ,

$$\left\langle \sum_{i=j=k=l}^N e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}_3) \cdot \mathbf{r}_i - \frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_3-\mathbf{p}_2) \cdot \mathbf{r}_j - \frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_2-\mathbf{p}_1) \cdot \mathbf{r}_k - \frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_1-\mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}_l} \right\rangle = N \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \quad (3.43)$$

faktörünü içerir ki bu faktör çoklu saçılma terimini vermekte ve aşağıdaki diyagrama karşılık gelmektedir:



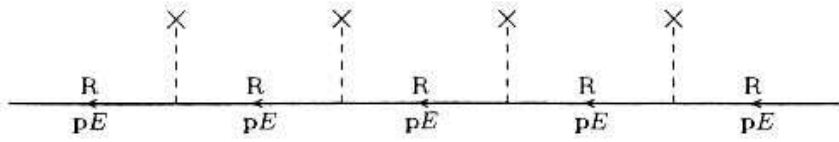
$$G_4^R(\mathbf{p}, E)^{i=j=k=l} =$$

$$= n_i \int \frac{d\mathbf{p}_3}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d\mathbf{p}_2}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d\mathbf{p}_1}{(2\pi\hbar)^3} V_{imp}(\mathbf{p} - \mathbf{p}_3)$$

$$V_{imp}(\mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_2) V_{imp}(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1) V_{imp}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p})$$

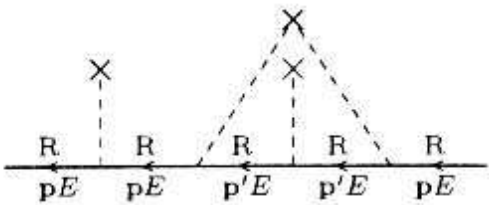
$$G_0^R(\mathbf{p}_3, E) G_0^R(\mathbf{p}_2, E) G_0^R(\mathbf{p}_1, E) \left[ G_0^R(\mathbf{p}, E) \right]^2 \quad (3.44)$$

Aynı zamanda sarkan impüriti çizgilerine sahip diyagramlara karşılık gelen dördüncü-dereceden terimleri de elde ederiz. Örneğin saçılmanın  $i \neq j \neq k \neq l$  farklı impüritilerinden olduğu  $N(N-1)(N-2)(N-3)$  terimleri,



$$(3.45)$$

veya iki sarkan çizgili terimler, örneğin  $i \neq j = l \neq k$  olduğu terim,



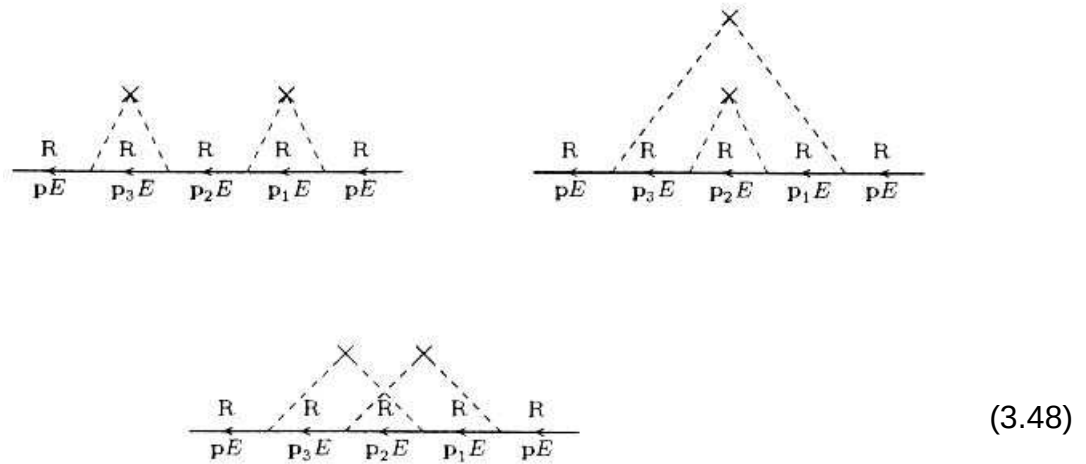
$$(3.46)$$

Bunun gibi bütün sarkan impüriti çizgi diyagramları korunabilir veya sıfıra renormalize edilebilir.

İki farklı impüritiden çiftli saçılmayı aldığımız zaman, örneğin toplamda  $i = j \neq k = l$  olan terimi düşündüğümüz durumda, ilginç terimler ortaya çıkar. O zaman impüriti faz faktörü

$$\begin{aligned} \langle e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}_2) \cdot \mathbf{r}_i} e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_2-\mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}_k} \rangle &= \delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}_2} \delta_{\mathbf{p}_2,\mathbf{p}'} = \delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}_2} \delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} \\ &= \delta_{\mathbf{p}_3+\mathbf{p}_2,\mathbf{p}_3+\mathbf{p}} \delta_{\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2,\mathbf{p}'+\mathbf{p}_1} \end{aligned} \quad (3.47)$$

olur. İki farklı impüritiden çiftli saçılma üç değişik şekilde ortaya çıkabilir; biri yukarıda düşünülen  $i = j \neq k = l$ , diğer iki ihtimal ise  $i = k \neq j = l$  ve  $i = l \neq j = k$  şeklindedir, ve bu üç katkıya karşılık gelen diyagramlar ise şu şekildedir:



İmpüriti korelatörleri her bir terimde farklı momentum-korunum kısıtlamasına götürür.

Yüksek dereceden terimlerin impüriti ortalamasına devam edilmesi durumunda impüriti-ortalama propagatör, impüriti konsantrasyonunda veya impüriti potansiyelinde ve yalın propagatör,  $G_0^R$ , yani impüriti potansiyelinin olmaması durumundaki propagatörde pertürbatif bir açılım olarak ifade edilir.

Çoklu saçılmanın ihmal edilebileceği yaklaşım Born yaklaşımı olarak adlandırılacaktır. Born yaklaşımında  $n$ 'inci sıra impüriti-ortalamalı propagatör için bütün diyagramları elde etmenin kolay bir yolu vardır: Bütün impüriti çarpıları mümkün olan tüm şekillerde çiftler halinde birbirine bağlanır.

Pertürbasyon teorisindeki her bir derece için impüriti-ortalamalı propagatörün translasyon invaryansını alırız ve analitik olarak impüriti-ortalamalı propagatör için

$$\langle G^R(\mathbf{p}, \mathbf{p}', E) \rangle = G^R(\mathbf{p}, E) \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \quad (3.49)$$

elde ederiz. İmpüriti-ortalamalı propagatörün translasyon invaryansı fiziksel bir bakış açısı ile aşıkardır çünkü ortalama prosedürü herhangi bir noktayı ayırt etmez. İmpüriti korelatöründeki momentum korunumu, (3.34)'teki ifade, bir diyagramın toplam momentumunun korunmasını sağlarken pertürbasyon teorisindeki her bir derece için bu özelliği teyit ettik.

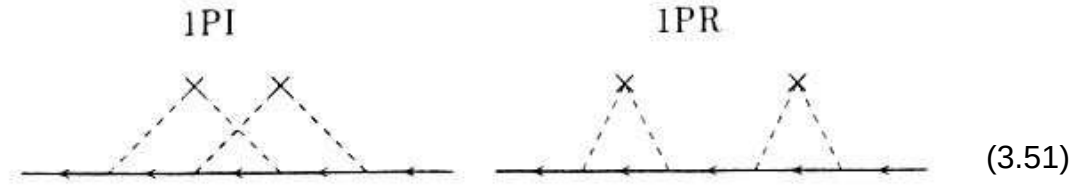
Born yaklaşımında üçüncü dereceden diyagramlar aşağıdaki gibidir:

$$\begin{aligned}
& \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} \\
& + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} \\
& + \text{Diagram 5} + \text{Diagram 6} \\
& + \text{Diagram 7} \\
& + \text{Diagram 8} + \dots
\end{aligned} \tag{3.50}$$

### 3.3.1. Self-enerji

Daha önce uygun ifadelerden diyagramatik formüller türettik. Şimdi ise öncekilerden, yeni diyagramatik ifadeler üretmek ve dolayısıyla diyagramatik olarak yeni denklemler türetmek için doğrudan doğruya diyagramatik dille tartışacağız.

İmpüriti-ortalımalı propagatör diyagramlarının tamamını kavrayabilmek için bunların sınıflandırma topolojilerini kullanacağız. Bir içsel parçacık çizgisini keserek ikiye bölünemeyen bütün diyagramları karşılayan tek parçacıklı indirgenemez ( $1PI$ ) propagatörü ele alalım. Örnekte



ilk diyagram tek-parçacıklı indirgenemez (one-particle irreducible -  $1PI$ ), iken ikincisi tek-parçacıklı indirgenebilir (one-particle reducible -  $1PR$ )'dir.

Tek-parçacıklı indirgenemez impüriti-ortalımalı diyagramların dış çizgilerini keserek self-enerji diyeceğimiz bir nesne elde ederiz.

Bütün impüriti-ortalımalı propagatör diyagramlarını içsel bir parçacık çizgisini sadece bir yerden keserek ikiye, veya iki yerden, üç, vs. yerden, bölünüp bölünemeyeceklerine göre tek tek sınıflandırabiliriz. Yapı olarak mümkün olan tüm propagatör diyagramlarını tek tek çıkarabiliriz:

$$\begin{aligned}
\Sigma^R(E, \mathbf{p}) &\equiv \text{p}E \leftarrow \text{circle}(\Sigma^R(E, \mathbf{p})) \leftarrow \text{p}E \\
&= \left( \text{p} \xleftarrow{\quad} \text{p} \right) + \text{triangle}(\text{X}) + \text{triangle}(\text{X}, \text{X}) \\
&\quad + \text{triangle}(\text{X}, \text{X}, \text{X}) + \text{triangle}(\text{X}, \text{X}, \text{X}, \text{X}) + \dots
\end{aligned} \tag{3.52}$$

The diagrams represent various self-energy corrections. The first term is a horizontal line with arrows pointing left, labeled 'p' at both ends. The subsequent terms are triangles formed by dashed lines, with 'X' marks at the vertices. The first triangle has one 'X' at the top vertex. The second triangle has two 'X' marks at the top and bottom vertices. The third triangle has three 'X' marks at the top, bottom-left, and bottom-right vertices. The fourth triangle has four 'X' marks at all four vertices. The sequence continues with an ellipsis.

$$\begin{aligned}
G^R(\mathbf{p}, E) &= \frac{\text{R}}{\text{p}E} \\
&= \frac{\text{R}}{\text{p}E} + \frac{\text{R}}{\text{p}E} \text{circle}(\Sigma^R(E, \mathbf{p})) \frac{\text{R}}{\text{p}E} + \frac{\text{R}}{\text{p}E} \text{circle}(\Sigma^R(E, \mathbf{p})) \frac{\text{R}}{\text{p}E} \text{circle}(\Sigma^R(E, \mathbf{p})) \frac{\text{R}}{\text{p}E} \\
&\quad + \frac{\text{R}}{\text{p}E} \text{circle}(\Sigma^R(E, \mathbf{p})) \frac{\text{R}}{\text{p}E} \text{circle}(\Sigma^R(E, \mathbf{p})) \frac{\text{R}}{\text{p}E} \text{circle}(\Sigma^R(E, \mathbf{p})) \frac{\text{R}}{\text{p}E} + \dots
\end{aligned} \tag{3.53}$$

The diagrams represent a series of self-energy corrections to the Green's function. The first term is a horizontal line with arrows pointing left, labeled 'R' at the top and 'pE' at the bottom. The subsequent terms are circles containing the self-energy  $\Sigma^R(E, \mathbf{p})$ , connected by horizontal lines with arrows pointing left, labeled 'R' at the top and 'pE' at the bottom. The sequence continues with an ellipsis.

İterasyon ile bu denklem

$$\frac{R}{pE} = \frac{R}{pE} + \frac{R}{pE} \circlearrowleft \Sigma^R(E, \mathbf{p}) \frac{R}{pE} \quad (3.54)$$

denkleminde eşit olur. Self-enerji çerçevesinde böylece impüriti-ortalama propagatör için

$$G^R(\mathbf{p}, E) = G_0^R(\mathbf{p}, E) + G_0^R(\mathbf{p}, E) \Sigma^R(E, \mathbf{p}) G^R(\mathbf{p}, E) \quad (3.55)$$

denklemini buluruz ve bunu çözerek şuna ulaşırız:

$$G^R(\mathbf{p}, E) = \frac{1}{G_0^{-1}(\mathbf{p}, E) - \Sigma^R(E, \mathbf{p})} = \frac{1}{E - \varepsilon_{\mathbf{p}} - \Sigma^R(E, \mathbf{p})} \quad (3.56)$$

Self-enerji propagatörün analitik yapısını, analitik olarak incelenen propagatörün kutuplarının yerini ve dolayısıyla momentum durumlarının hayat sürelerini belirler.

Denklem (3.56)'nın Fourier transformu ile izotropik modelimizde

$$G_E^R(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \langle G_E^R(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \rangle = \frac{-m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{\frac{i}{\hbar}|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \sqrt{2m(E - \Sigma^R(E, p_E \hat{\mathbf{p}}))}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \quad (3.57)$$

denklemini elde ederiz, burada  $p_E$

$$p_E = \sqrt{2m(E - \Sigma^R(E, p_E \hat{\mathbf{p}}))} \quad (3.58)$$

denkleminin çözümüdür.

### 3.3.2. İskelet Diyagramları

Buraya kadar self-enerjinin sadece pertürbatif tanımlamasını ele aldık. Fiziksel sistemin gerçekçi bir tanımlamasında ise, kontrollü bir yaklaşım uygulayabilmek için her zaman problemin spesifik yönlerini ortaya çıkarmamız gerekmektedir. Bu sonuç için sistemdeki gerçek korelasyonlarla çalışmak zorundayız ve self-enerjinin impüriti-ortalamalı propagatör çerçevesinde gösterilmesi gerekmektedir. Ful-propagatör çerçevesinde self-enerjinin bir tanımını yapabilmek için, self-enerjinin pertürbatif açılımını göz önünde bulunduralım.

Pertürbatif açılımda verilen herhangi bir self-enerji için, içsel çizgilerde bütün olası self-enerji dekorasyonlarını taşıyan self-enerji diyagramlarıyla karşılaşırız

$$\begin{aligned}
& \text{Diagram 1} \rightarrow \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} + \dots \\
& = \text{Diagram 2} + \text{Diagram 5} \\
& \rightarrow \text{Diagram 2} + \text{Diagram 5} \\
& + \text{Diagram 6} + \dots \\
& = \text{Diagram 7}
\end{aligned}
\tag{3.59}$$

The diagrams represent Feynman diagrams for a particle propagator. Diagram 1 is a bare propagator with a self-energy insertion (X). Diagram 2 is a propagator with a self-energy insertion (X) and a loop (R). Diagram 3 is a propagator with a self-energy insertion (X) and a loop (R) and a loop (R). Diagram 4 is a propagator with a self-energy insertion (X) and a loop (R) and a loop (R) and a loop (R). Diagram 5 is a propagator with a self-energy insertion (X) and a loop (R) and a loop (R). Diagram 6 is a propagator with a self-energy insertion (X) and a loop (R) and a loop (R) and a loop (R). Diagram 7 is a propagator with a self-energy insertion (X) and a loop (R) and a loop (R) and a loop (R) and a loop (R).

Pertürbatif açılımdaki bütün self-enerji diyagramlarını içsel parçacık çizgisinin, iki, üç ya da daha fazla parçaya bölünüp bölünemeyeceğine göre tek tek sınıflandırabiliriz. Böylece tek yöntemle self-enerji diyagramlarını kısmen toplamayı geliştiririz: verilen bir self-enerji diyagramı için tüm içsel self-enerji eklemeleri kaldırılır, ve kalan yalın parçacık propagatör çizgilerinin yerine tam impüriti-ortalamalı propagatör çizgileri kullanılır. Self-enerjinin orijinal pertürbatif açılımının bu kısmî toplanması yoluyla yalnızca iskelet diyagramları denen ve ful-propagatörü içeren diyagramlar ortaya çıkacaktır.

Yapım yoluyla sadece, yalnız iki ful-propagatör çizgisini kesmekle ikiye bölünemeyen iskelet diyagramları ortaya çıkar, ve self-enerji için kısmen toplanmış diyagramatik açılımı elde ederiz

$$\begin{aligned}
 \sum^R(E, \mathbf{p}) = & \left( \text{Diagram 1} \right) + \text{Diagram 2} \\
 & + \text{Diagram 3} \\
 & + \text{Diagram 4} \\
 & + \text{Diagram 5} + \dots
 \end{aligned} \tag{3.60}$$

The diagrams represent Feynman diagrams for the self-energy expansion. Diagram 1 is a horizontal line with two vertices labeled  $\mathbf{p}$  and  $\mathbf{p}$ , and a vertical dashed line with an 'X' at the top. Diagram 2 is a horizontal line with two vertices labeled  $\mathbf{p}E$  and  $\mathbf{p}E$ , and a dashed line forming a triangle with an 'X' at the top. Diagram 3 is a horizontal line with two vertices labeled  $\mathbf{p}E$  and  $\mathbf{p}E$ , and two dashed lines forming two triangles with 'X' marks at the top. Diagram 4 is a horizontal line with two vertices labeled  $\mathbf{p}E$  and  $\mathbf{p}E$ , and three dashed lines forming three triangles with 'X' marks at the top. Diagram 5 is a horizontal line with two vertices labeled  $\mathbf{p}E$  and  $\mathbf{p}E$ , and four dashed lines forming four triangles with 'X' marks at the top.

Her bir diyagramın pertürbasyon teorisindeki terimlerin sonsuz bir toplamına karşılık geldiği kısmi toplama ile ulaşılan şey, self-enerjinin tam impüriti-ortalama propagatörün bir fonksiyoneli olarak ifade edilmesidir.

$$\sum^R(E, \mathbf{p}) = \sum_{\mathbf{p}, E}^R [G^R] \tag{3.61}$$

Bu topolojik sınıflandırma ile devam edebilir ve yüksek dereceden verteks fonksiyonlarını gösterebiliriz.

### 3.3.3. İmpüriti-Ortalamalı Propagatör

Bu bölümde göreceğiz ki yeterince yüksek enerji ve momentumlarda, impüriti çizgilerinin kesiştiği iskelet diyagramlarını self-enerji için ihmal edebiliriz. Bu sayede Born yaklaşımıyla tek bir self-enerji diyagramımız

$$\sum_{NCA}^R(E, \mathbf{p}) \equiv \begin{array}{c} \text{X} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{R} \\ \text{p}E \leftarrow \text{p}'E \rightarrow \text{p}E \end{array} \quad (3.62)$$

kalır. Analitik olarak self-enerji için Born yaklaşımında, propagatörün self-enerji çerçevesinde belirlendiği gibi devreye girdiğinden beri dolaylı bir ifade olan

$$\sum_{NCA}^R(E, \mathbf{p}) \equiv n_i \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} |V_{imp}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')|^2 G^R(\mathbf{p}', E) \quad (3.63)$$

ifadesini elde ederiz.

İmpüriti saçılmasının etkisini daha iyi anlamak için, denklem (3.63)'e serbest propagatörü sokarız ve momentum relaksasyon zamanını (Born yaklaşımında) gösterdiğimiziz

$$\sum_0^{\sim R}(\mathbf{p}, E) \equiv \begin{array}{c} \text{X} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{p}E \leftarrow \text{p}E \end{array} = -i \frac{\hbar}{2\tau(E, \mathbf{p})} + \text{Re} \sum_0^{\sim R}(\mathbf{p}, E) \quad (3.64)$$

denklemini ve

$$\frac{\hbar}{\tau(E, \mathbf{p})} = 2\pi n_i N_0(E) \int \frac{d\hat{\mathbf{p}}'}{4\pi} |V_{imp}(\mathbf{p} - p_E \hat{\mathbf{p}}')|^2 \quad (3.65)$$

denklemini elde ederiz ki burada  $p_E = \sqrt{2mE}$ , ve self-enerjinin reel kısmı, temel değer (principle value) integralidir:

$$\text{Re} \sum_0^{\sim R}(\mathbf{p}, E) = n_i P \int_0^\infty d\varepsilon_{p'} N(\varepsilon_{p'}) \frac{1}{E - \varepsilon_{p'}} \int \frac{d\hat{\mathbf{p}}'}{4\pi} \left| V_{imp}(\mathbf{p} - \sqrt{2m\varepsilon_{p'}} \hat{\mathbf{p}}') \right|^2 \quad (3.66)$$

burada  $P$  integralin temel değerinin alınması gerektiğini belirtir. Bu ilk iterasyonda böylece impüriti-ortalamalı propagatör [Abrikosov et al., 1963] için şu formüle ulaşırız:

$$\tilde{G}_0^R(E, \mathbf{p}) = \frac{1}{E - \varepsilon_{p'} - \text{Re} \sum_0^{\sim R}(\mathbf{p}, E) + i\hbar/2\tau(E, \mathbf{p})} \quad (3.67)$$

Aşağıda sadece  $\tau \equiv \tau(E_F, \mathbf{p}_F)$  olduğu yüksek enerji  $E \approx E_F \approx \hbar/\tau$  bölgeleri ve yüksek momentum  $p \approx p_F \approx \sqrt{2mE_F} \approx \hbar/l$  bölgeleri ile ilgileneceğiz, ve  $l = v_v \tau$  impüriti ortalama serbest yolunu ve  $v_v = p_F/m$  hızını göstereceğiz. Daha sonra impüriti potansiyelinin bir aralığa,  $a$ , sahip olduğunu ve bunun ortalama serbest yoldan çok daha küçük,  $a \ll l$ , olduğunu varsayarız, yani

$$V_{imp}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} e^{-r/a} \quad (3.68)$$

veya Fourier transformu için

$$V_{imp}(\mathbf{k}) \propto \frac{4\pi}{\mathbf{k}^2 + a^{-2}} \quad (3.69)$$

Self-enerjinin hesaplanması için diğer uygun nicelikler olan  $|p - p_F| \approx p_F$  momentum ve  $|E - E_F| \approx E_F$  enerjileri bölgesinde, durum yoğunluğu ve impüriti potansiyeli esas olarak sabittir, çünkü yalnızca  $E_F$  ve  $p_F$  gibi büyük ölçeklerde değişiklik gösterirler, yani  $a \approx \hbar/p_F$ . Bu nedenle ilgi alanımızı oluşturan bölgede self-enerjinin gerçek kısmı temelde sabittir ve enerjiyi ölçmedeki referansımızda yalnızca önemsiz bir değişikliğin ortaya çıkmasına

sebepler olur. İlk iterasyonla ulaşılan propagatör ifadesi olan denklem (3.67), bu nedenle keskin bir şekilde  $p_F$  değerinde zirveye ulaşan ve  $\hbar/l$  gibi dar bir genişliğe sahip bir momentum fonksiyonudur. Self-enerjinin imajineri kısmı için sonuç, (3.65)'teki ifade,  $\hbar/E_F\tau$ 'yi bulmak için, serbest propagatörün yerine advanced propagatörün,  $\tilde{G}_0^R$ , konulması ile böylece değişmeden kalır. Bu nedenle  $\hbar/E_F\tau$ 'yi bulmak için, Born yaklaşımındaki self-enerji  $|E - E_F| \ll E_F$ ,  $|p - p_F| \ll p_F$  için,

$$\begin{aligned} \Sigma^R(E, \mathbf{p}) &\equiv \text{Diagram: A triangle with a dashed line on top and two solid lines on the sides. The left solid line is labeled } \mathbf{p}E \text{ and the right solid line is labeled } \mathbf{p}E. \text{ The bottom solid line is labeled } \mathbf{p}'E. \text{ The top dashed line is labeled } R. \end{aligned}$$

$$= -\frac{i\hbar}{2\tau} \quad (3.70)$$

buluruz, burada

$$\frac{\hbar}{\tau} = 2\pi n_i N_0(E_F) \int \frac{d\mathbf{p}'}{4\pi} |V_{imp}(\sqrt{2mE_F}(\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}'))|^2 \quad (3.71)$$

İmpüriti-ortalamalalı propagatör için böylece,  $|E - E_F| \ll E_F$ ,  $|p - p_F| \ll p_F$

$$\langle G^R(E, \mathbf{p}) \rangle = G^R(E, \mathbf{p}) \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \quad (3.72)$$

elde ederiz, burada

$$G^R(E, \mathbf{p}) = \frac{1}{E - \varepsilon_{\mathbf{p}} + i\hbar/2\tau} \quad (3.73)$$

Dikkat etmeliyiz ki bu tarz propagatör  $E$  ve  $\mathbf{p}$ 'nin tüm değerleri için kullanılabilir.

İlgi alanımız olan bölgede,  $E \approx E_F$ , (3.57) ifadesine göre impüriti-ortalama propagatörün ortalama serbest yol ölçeğinde eksponansiyel olarak azalır:

$$G_E^{R(A)}(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \equiv \langle G_E^{R(A)}(\mathbf{x},\mathbf{x}') \rangle = \frac{-m}{2\pi\hbar^2} \frac{\exp\{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|(\pm ik_E - 1/2l_E)\}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \quad (3.74)$$

$$= G_0^{R(A)}(\mathbf{x}-\mathbf{x}', E) e^{-|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|/2l}$$

burada  $k_E = \sqrt{2mE}/\hbar$  elektronik dalga vektörü ve  $l_E = \hbar k_E \tau_E / m$  de impüriti ortalama serbest yoludur.

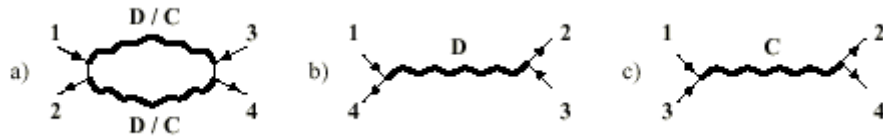
### 3.4. İki-parçacık Korelasyon Fonksiyonları

Ortalama Green fonksiyonunu bulursak bir sonraki adım korelasyon fonksiyonlarını hesaplamak olacaktır. Daha önce de gördüğümüz gibi, uzaysal ve enerjisel olarak hızlı bir şekilde dalgalanan bir nesne olan Green fonksiyonu, herhangi bir kontrol parametresi üzerinden ortalama alındığındaki bazı mikroskobik  $l$  ölçeklerinde, kolayca gözden kaybolur ve böylece doğrudan doğruya erişilemez hale gelir. Bu yüzden, dalgalanma kavramını tanımlarken, genellikle 'mikroskobik' yapıtaşları olarak  $F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4; \omega) \equiv \langle G^A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; E) G^R(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4; E + \omega) \rangle$  tipi korelasyon fonksiyonları kullanılır. Kuantum dalga girişimine bağlı olarak,  $F$  korelasyon fonksiyonu her ne zaman koordinatlarının ikisi birbirine ( $l$ 'nin ölçeği üzerinde) bir çift haline gelecek şekilde yaklaşırsa uzun-menzilli hale gelir. Koordinatları eşleştirmenin (pairing) üç olasılığı ve dolayısıyla üç korelasyon fonksiyonu vardır. Açıkça belirtirsek,

- $\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_1 \approx \mathbf{r}_2$  ve  $\mathbf{r}' \equiv \mathbf{r}_3 \approx \mathbf{r}_4$  için,  $F^{[d]}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = F(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \mathbf{r}', \mathbf{r}')$  lokal durum yoğunluğunun dalgalanmalarını, ve dolayısıyla termodinamik dalgalanmaları ve parametrik korelasyonları tanımlar.

- $F^{[D]}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = F(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mathbf{r}', \mathbf{r})$  ise  $\mathbf{r}$ 'den  $\mathbf{r}'$ 'ye toplam propagasyon olasılığını tanımlar. Bu, mezoskopik transport çerçevesinde genelleştirilmiş 'difüzyon'dur.

- Son olarak, time-reversal ( $T$ ) simetrisine sahip bir sistemde, Cooperon denilen  $F^{[C]}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = F(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mathbf{r}, \mathbf{r}')$  korelatörü de uzun-menzilli hale gelir.



Şekil 3.2: Üç korelasyon fonksiyonunun şematik resmi: a) yoğunluk yoğunluk, b) difüzyon ve c) Cooperon. Dalgalı çizgiler sırasıyla merdiven (D) ve fan (C) diyagramlarının toplamını temsil etmektedir.

Momentum temsilinde, yukarıda tanımlanan korelasyon fonksiyonu şu şekilde verilir:

$$F(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}'_1; \mathbf{p}_2, \mathbf{p}'_2; \omega) \equiv \langle G^A(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}'_1; E) G^R(\mathbf{p}_2, \mathbf{p}'_2; E + \omega) \rangle \quad (3.75)$$

Yine –ortalama Green fonksiyonu için olmak üzere– diyagramatik pertürbasyon serileri çiftli impüriti çizgili diyagramların toplanmasını da kapsar. En büyük katkı *merdiven diyagramları* ve *fan diyagramları* serileridir, (bkz. Şekil 3.3).  $\langle AB \rangle_c = \langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$  denklemi şu şekilde yazılabilir:

$$\begin{aligned}
\langle G^A(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}'_1; E) G^R(\mathbf{p}_2, \mathbf{p}'_2; E + \omega) \rangle_c &= G^A(\mathbf{p}_1, E) G^A(\mathbf{p}'_1, E) \times \\
&\times G^R(\mathbf{p}_2, E + \omega) G^R(\mathbf{p}'_2, E + \omega) \times \\
&\times \Gamma(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2; \omega) \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}'_1 + \mathbf{p}'_2)
\end{aligned} \tag{3.76}$$

dolayısıyla indirgenebilir verteks fonksiyonunun tanımlaması  $\Gamma(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2; \omega)$  şeklinde olur.

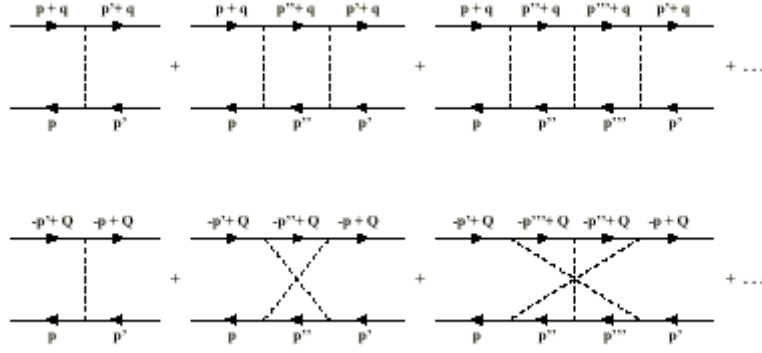
### 3.4.1. Difüzyon (Merdiven Diyagramları)

İlk olarak Şekil 3.3'ün üst kısmında canlandırılan merdiven diyagramlarının toplamını ele alalım. Her bir verteksdeki momentum korunumuna bağlı olarak,  $\mathbf{q} \equiv \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2 (= \mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}'_2)$  momentum farkı sabittir, ve  $\Gamma$  yalnızca bu farka bağlıdır. Öyleyse  $\Gamma(\mathbf{q}, \omega)$ 'yi Dyson denkleminin iki-parçalı bir benzeri olan Bethe-Salpeter denklemi verir:

$$\begin{aligned}
\Gamma(\mathbf{q}, \omega) &= \gamma_V + \gamma_V \left[ \int d\mathbf{p}'' G^A(\mathbf{p}'' + \mathbf{q}, E) G^R(\mathbf{p}'', E + \omega) \right] \Gamma(\mathbf{q}, \omega) \\
&= \gamma_V + \gamma_V \Pi(\mathbf{q}, \omega) \Gamma(\mathbf{q}, \omega)
\end{aligned}$$

burada

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = \int d\mathbf{p}'' G^A(\mathbf{p}'' + \mathbf{q}, E) G^R(\mathbf{p}'', E + \omega)$$



Şekil 3.3: Merdiven ve fan diyagramları.

$\mathbf{q}, \omega \rightarrow 0$  için  $\Gamma$ 'nin ıraksayacağı sonucunu öngörebilirsek, küçük  $|\mathbf{q}|, \omega$  için  $\Pi$  indirgenemez verteks fonksiyonunu yaklaşık olarak bulabiliriz:

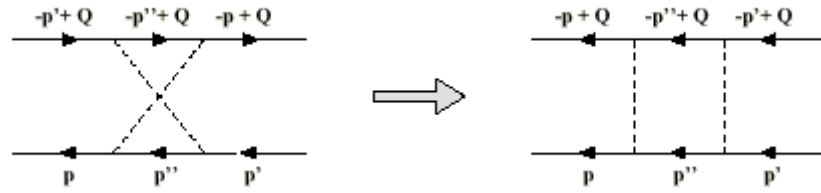
$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) \approx 2\pi N\tau(1 + i\omega\tau - D\mathbf{q}^2\tau) \quad (3.77)$$

$D = v_F^2\tau/d$  difüzyon sabitidir ( $d$  ise sistemin boyutudur).  $\gamma_V = (2\pi N\tau)^{-1}$  olduğunu hatırlarsak, merdiven diyagramlarının toplamı son olarak şu sonucu verir:

$$\Gamma(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\gamma_V}{1 - \gamma_V \Pi(\mathbf{q}, \omega)} = \frac{1}{2\pi N\tau^2} \frac{1}{D\mathbf{q}^2 - i\omega} \equiv D(\mathbf{q}, \omega) \quad (3.78)$$

Buna difüzyon kutbu (pole) veya difüzyon denir. Kolayca görülebilir ki difüzyon zayıf manyetik alanlardan etkilenmez: Minimum eşleştirme (coupling) manyetik alanın tüm momentumları uygun vektör potansiyeli ile değiştirmesi anlamına gelir,  $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \mathbf{A}$ ; bununla birlikte,  $(\mathbf{p}_1 - \mathbf{A}) - (\mathbf{p}_2 - \mathbf{A}) = \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2 = \mathbf{q}$ .

### 3.4.2. Cooperon (Fan Diyagramları)



Şekil 3.4: Fan ve merdiven diyagramları arasındaki bağlantı.

Bir fan diyagramı [Langer and Neal, 1966] (ayrıntılı bir açıklama için bkz. Ör. [Bergmann, 1984]) bir  $G$ -çizgisini ters çevirerek merdiven diyagramına dönüştürülebilir (Şekil 3.4). Şimdi bütün oklar aynı yönü gösterdiği için, vertekslerde momentum korunumu, sabit olacak olan  $\mathbf{Q} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}'_2$  momentum toplamını gerektirmektedir. Bundan başka, bütün denklemlerin yapısı merdiven diyagramları için olanlarla aynıdır. Sonuç olarak,

$$\Gamma(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{1}{2\pi N \tau^2} \frac{1}{D\mathbf{Q}^2 - i\omega} \equiv C(\mathbf{Q}, \omega) \quad (3.79)$$

Buna parçacık-parçacık kanalındaki bir korelatörün yerini tuttuğu için süperiletkenliğe bir analogi ile Cooperon denir. Şimdi manyetik bir alanın varlığı, Cooperon'un bozulması sonucuna götüren  $\mathbf{Q} \rightarrow \mathbf{Q} - 2\mathbf{A}$ 'nın değiştirilmesini gerektirmektedir.  $\langle G^R G^R \rangle$  veya  $\langle G^A G^A \rangle$  formunun ortalamasının bağlı kısmı kaybolur, yani, uzun-menzilli korelasyonlar kalmaz. Yoğunluk-yoğunluk korelatörü,  $F^{[d]}$ , difüzyonlar ve Cooperonlar çerçevesinde gösterilebilir (aynı zamanda bkz. Şekil 3.2) ve bu nedenle burada ayrıca tartışılmayacaktır.

## 4. YARI DOLU BANTTA İMPÜRİTİ PROBLEMLERİNE DİYAGRAMATİK YAKLAŞIM

Lokalizasyon problemleri üzerine yapılan bir çok çalışmada düzensiz metaller impüritilerin random alanı içinde hareket eden bir serbest elektron gazı olarak modellenmişlerdir. Yine de, düşük impüriti konsantrasyonuna sahip katkılı kristaller genellikle periyodik yapılarını korumaktadırlar ve impüriti atomları çoğu durumda örgünün asıl atomlarının yerini alırlar. Substitutional impüritilerin  $a$  örgü sabitine sahip  $\lambda$  elektron dalga boylarının orantılı değerine yakın düşük-boyutlu örgülerin fiziksel özellikleri üzerinde önemli etkiye sahip oldukları gösterilmiştir [Nakhmedov et al, 2000a]. Bu bölümde Nakhmedov et al, 2000a tarafından ileri sürülen diyagramatik yaklaşımı kullanarak yarı dolu bantta random potansiyelde bir parçacığın propagasyonunu ele alacağız.

İmpüriti saçılması süreci içinde Brillouin bölgesi sınırındaki elektronik dalganın Bragg yansımaları bandın ortasına yaklaşıldıkça önemli hale gelir. Bu süreç probleme umklapp saçılması için Bragg yansımasının uygunluk şartlarının değişmesine bağlı olarak bant merkezinden bir sapma için artan yeni bir relaksasyon zamanı sağlar. Tasarladığımız bu örgülerin 2D kristaller için kare ve 3D kristaller için basit kübik bir yapısı vardır. Periyodiklik, pertürbasyon teorisinde düzensiz sistemlerin transport ve termodinamik özelliklerine ek bir katkı yapan yeni bir diyagram sınıfının ortaya çıkmasına sebep olur.

## Hamiltoniyen

Substitutional impüritilere sahip  $d$  – boyutlu basit kare (veya kübik) bir örgünün Hamiltoniyen'i aşağıdaki gibi verilir:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V(\mathbf{r}) \quad (4.1)$$

Burada;  $\hat{H}_0$  ile gösterilen,  $a$  örgü sabitine sahip düzgün bir örgüdeki etkileşmeyen elektronların sıkı-bağlı (tight-binding) Hamiltoniyen'idir.  $V(\mathbf{r}) = \sum_i U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$  ise,  $i$ 'nci örgü noktasında rastgele bir şekilde yer alan bir impüritinin konumsal vektörü olan  $\mathbf{R}_i$ 'ye sahip impüriti potansiyelini göstermektedir.

İkinci kuantizasyon operatörleri  $c_{\mathbf{p},\sigma}^+$  ve  $c_{\mathbf{p},\sigma}$ 'yi ortaya koyarak,  $\mathbf{p}$  momentumuna ve  $\sigma$  spinine sahip bir elektron için, (4.1) ifadesi şu şekilde yeniden yazılabilir:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p},\sigma} \varepsilon(\mathbf{p}) c_{\mathbf{p},\sigma}^+ c_{\mathbf{p},\sigma} + \sum_{\mathbf{p},\mathbf{q},\mathbf{G},\sigma} \rho_{imp}(\mathbf{q}) U(\mathbf{q}) c_{\mathbf{p},\sigma}^+ c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}+\mathbf{G},\sigma} \quad (4.2)$$

Burada,  $\rho_{imp}(\mathbf{q}) = L^{-d} \sum_i \exp(i\mathbf{q}\mathbf{R}_i)$  ve  $U(\mathbf{q})$  tek bir impüriti potansiyelinin Fourier transformudur. Bu çalışma boyunca,  $\hbar = 1$  birimlerini kullanıyoruz.  $\mathbf{p}$  ve  $\mathbf{q}$  momentumları birinci Brillouin bölgesinde değişiklik gösterirler ve  $\mathbf{G}$  de ters (reciprocal) örgü vektörüdür.

## Enerji Spektrumu ve Fermi Yüzeyi

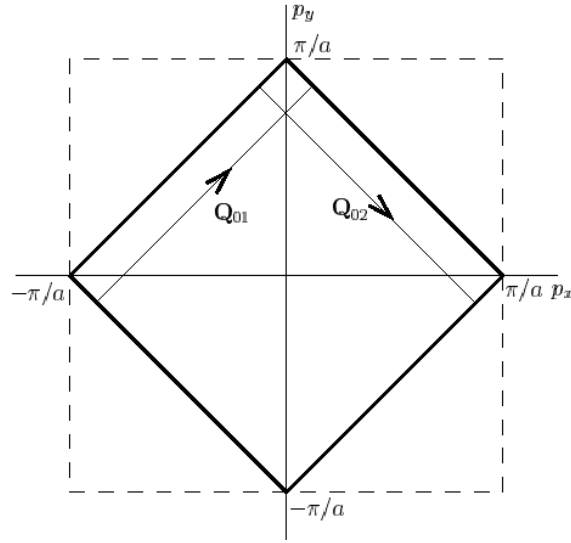
Denklem(4.2)'deki  $\varepsilon(\mathbf{p})$ ,  $d$  – boyutlu kare (kübik) bir örgü üzerindeki bir elektronun enerji spektrumudur,

$$d = 2 \text{ için; } \quad \varepsilon(\mathbf{p}) = t \left[ 2 - \cos(p_x a) - \cos(p_y a) \right] \quad (4.3)$$

$$d = 3 \text{ için; } \varepsilon(\mathbf{p}) = t \left[ 3 - \cos(p_x a) - \cos(p_y a) - \cos(p_z a) \right] \quad (4.4)$$

burada  $\frac{-N_{x,y,z}}{2} < n_{x,y,z} < \frac{N_{x,y,z}}{2}$  ile  $p_{x,y,z} = \frac{2\pi}{aN_{x,y,z}} n_{x,y,z}$  ve  $t$  en-yakın-komşu noktaları için tünelleme integralidir.

Elektronik bant genişliği  $d = 2$  için  $W = 4t$  ve  $3D$  sistemler için  $W = 6t$  'dir.  $2D$  sistemler için  $\varepsilon_F = 2t$  'ye ve  $3D$  için  $\varepsilon_F = 3t$  'ye karşılık gelen bant merkezine yaklaşıldıkça Fermi yüzeyi nested hale gelir, yani nesting vektörü map edilebilen yüzey elementlerini ortaya koyar. Bizim örneğimizde, nesting şartları yüzeyin her kısmı için yerine getirilir, ve  $2D$  kare örgüler için, bant merkezindeki Fermi yüzeyi düzdür (bkz. Şekil 4.1).



Şekil 4.1: Bant merkezinde sıkı-bağlı model için kare bir örgünün Fermi yüzeyi.  $\mathbf{Q}_0 = \pm \mathbf{Q}_{01}; \pm \mathbf{Q}_{02}$  nesting vektörleri ile tam nesting ortaya çıkar,

burada  $\mathbf{Q}_{01} = \left\{ \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \right\}$  ve  $\mathbf{Q}_{02} = \left\{ -\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \right\}$  şekilde görülmektedir.

## Serbest Parçacık Green Fonksiyonları

Hamiltoniye'nin ikinci kısmı olan ve random olarak dağılmış impürtiler üzerinde saçılmayı açıklayan denklem (4.2)'deki  $\hat{H}$ , hem normal ( $\mathbf{G} = 0$  için)

süreçleri hem de umklapp ( $G \neq 0$  için) süreçlerini kapsar. İmpüriti konsantrasyonunun küçük olduğu varsayılır ki böylece Born yaklaşımı [Abrikosov et al., 1963] impüritiler üzerindeki saçılma sürecini tahmin etmek için uygun olsun. Bu durumda impüriti potansiyeli sıfır ortalama değerine sahip bir  $\delta$ -korelasyonlu Gaussian potansiyel olacak şekilde seçilir.

Sıfır sıcaklıktaki serbest parçacık Green fonksiyonları  $G_0^{R,A}(\varepsilon, \mathbf{p})$ ,  $G_0^R$  retarded ve  $G_0^A$  advanced Green fonksiyonlarına uygun olmak için sırasıyla  $\varepsilon > 0$  ve  $\varepsilon < 0$  olmak üzere

$$G_0^{R,A}(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{1}{\varepsilon - (\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon_F) + \frac{i}{2\tau} \text{sign}(\varepsilon)} \quad (4.5)$$

şeklinde gösterilir. Denklem (4.5)'teki  $\varepsilon(\mathbf{p})$  enerji spektrumu 2D ve 3D durumları için sırasıyla (4.3) ve (4.4) ifadeleri ile gösterilmiştir. Fermi yüzeyine yakın yerde (birinci Brillouin bölgesinde) bulunan momentumlar için enerji spektrumu Fermi yüzeyi civarında lineerize edilebilir ve  $\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon_F \approx v_F (\mathbf{p} - \mathbf{p}_F) = v_F (|\mathbf{p}| - p_F) \cos \alpha$ , ve  $\mathbf{v}(\mathbf{p}) = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}} = at \{ \sin p_x a, \sin p_y a \}$

burada elektron dalga paketinin grup hızıdır. Küçük bant dolulukları için, Fermi yüzeyi bir kürenin şekline çok yakındır, bant merkezine yani yarı doluluğa yaklaşıldıkça  $\cos \alpha$  zayıf bir şekilde değişir hale gelir; örneğin,  $\cos \alpha$ 'nın varyasyon aralığının maksimum olduğu bant merkezindeki 2D bir sistem için

$\frac{1}{\sqrt{2}} < \cos \alpha < 1$ 'dir. Yaklaşık olarak her zaman  $\cos \alpha = 1$  olarak alabiliriz.

Commensurate noktalar bölgesinde, özellikle bant merkezinde impüritiler üzerinde elektron saçılması Umklapp süreçlerini de içerir. Fermi yüzeyi etrafındaki enerji spektrumunun lineerizasyon prosedürü bu durumda  $\mathbf{Q}_0$  büyük momentum transferinin ayrılmasından sonra gerçekleştirilir.

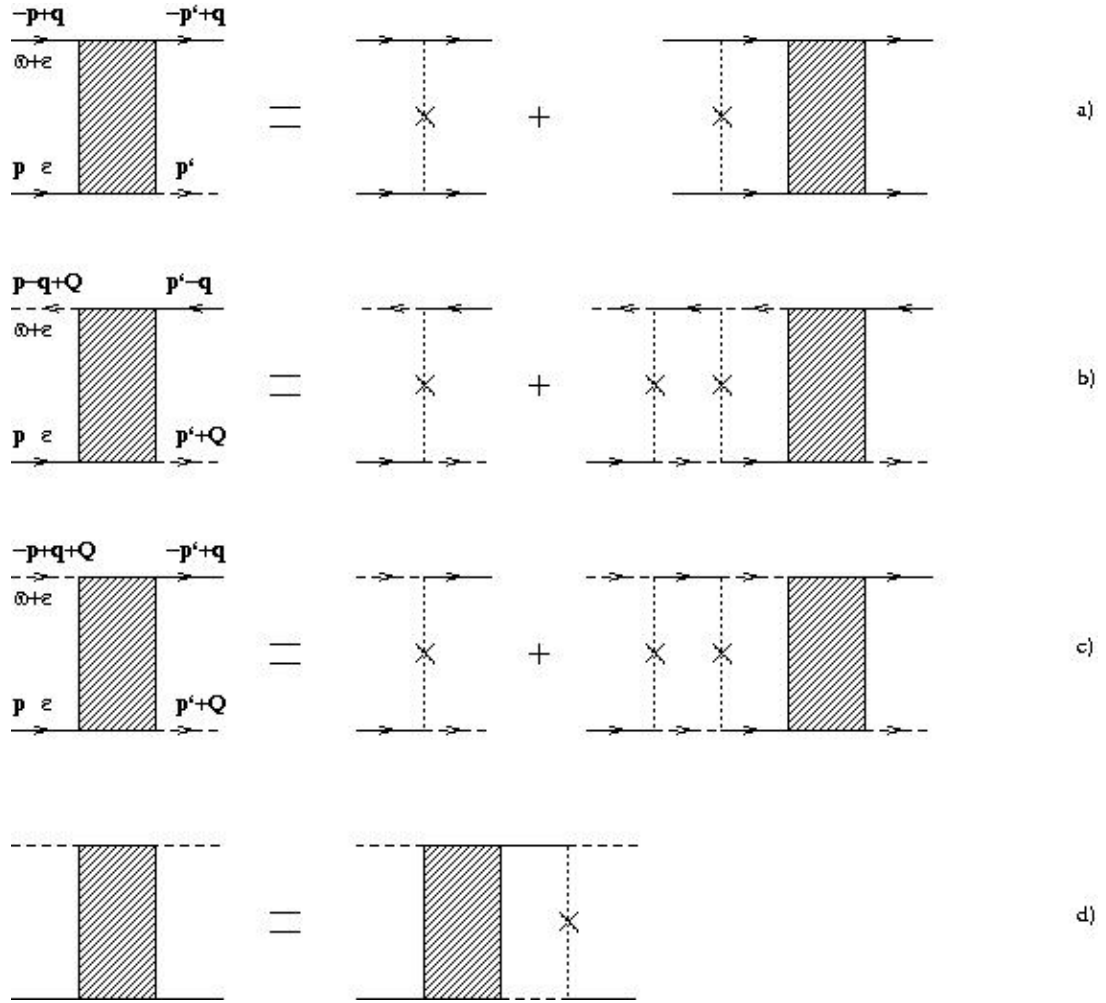
## İmpüriti Saçılması ve Relaksasyon Zamanları

Zayıf lokalizasyon teorisinde random olarak dağılmış impüritiler alanında hareket eden elektron gazı olarak modellenen düşük-boyutlu düzensiz sistemlerin kinetik özelliklerine düşük sıcaklık kuantum katkılar fan diyagramlarının alanına girmektedir [Gorkov et al., 1979]. Bu diyagramlar momentum uzayında bir parçacık-parçacık kanalında (Şekil 4.2a) merdiven diyagramları olarak yeniden çizilebilirler (Cooperon'un uzaysal temsili için bkz. Şekil 4.4a). Cooperon bloku parçacıkların küçük toplam momentumları,  $|\mathbf{q}|l \ll 1$ , için ve küçük enerji farkları,  $|\omega|\tau \ll 1$ , için bir kutba sahiptir. Cooperon bloku sahip olacağı bir difüzyon kutbu daha üretir ki bu, parçacıkların toplam momentumları  $|\mathbf{q}|l \ll 1$  olmak üzere  $(\mathbf{Q}_0 + \mathbf{q})$  olduğunda ve toplam enerji küçük olduğunda büyük momentum transferi içindir. Bu durumda impüriti üzerinde her bir saçılma hareketi  $\mathbf{Q}_0$ 'a yakın büyük bir momentum transferini içerir. Tabii ki bu süreç temel olarak  $\mathbf{Q}_0 = 2\mathbf{p}_F$  olduğu zaman bant merkezi civarında yer alır ve  $\tau_\pi$  relaksasyon zamanına sahip impüriti üzerinde saçılma sürecindeki elektronun eşzamanlı Bragg yansımasından oluşur. Bu saçılma süreci bundan böyle  $\pi$ -saçılması olarak adlandırılacaktır.

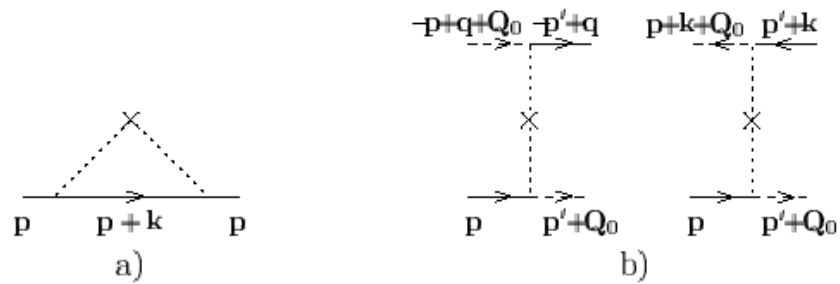
İki değişik saçılma süreci ve birbirini karşılayan relaksasyon zamanı oluşturulabilir: Bir impüriti üzerinden saçılmanın birinci Brillouin bölgesinin içindeki elektronun momentumunu saçılmadan sonra devam ettirdiği  $\tau_N$ 'ye sahip normal saçılma (bkz. Şekil 4.3a), ve  $\tau_\pi$  relaksasyon zamanına sahip  $\pi$ -saçılması (Şekil 4.3b). Burada, momentum korunumu ihlal edilmiştir ve bu saçılma süreci bir umklapp sürecine karşılık gelmektedir. Toplam relaksasyon zamanı  $\tau$  böylece  $\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_N} + \frac{1}{\tau_\pi}$  olarak ifade edilebilir. Dikkat edilmelidir ki burada normal relaksasyon zamanı  $\tau_N$ 'in gösterimi 2D durumu için Şekil 4.3a'ya göre

$$\frac{1}{\tau_N} = \frac{C_{imp}}{(2\pi)^2} \int_S \frac{d\mathbf{S}}{|\mathbf{v}_k|} |U(\mathbf{p}_F, \mathbf{S})|^2 \quad (4.6)$$

şeklinde verilebilir.  $\tau_N$  'in sabit ve bant doluluğundan bağımsız olacağını varsayabiliriz. Bu, eyer noktalarında kaybolan hıza bağlı olarak integrandın tekilliklerinin impüriti potansiyelinin uygun sıfırları ile giderilmesi anlamına gelir. Umklapp süreçlerini de içine alan impüriti saçılmasını diyagramatik olarak canlandırmak için büyük momentumlu bir elektronun Green fonksiyonunu kesikli bir çizgi ile gösteririz. Büyük momentum transferine sahip Cooperon bloku,  $C_\pi(\mathbf{q}, \varepsilon)$ , için merdiven serileri diyagramatik olarak Şekil 4.2b'de gösterilmiştir. Aslında çizgilerin kesikli olmasının tek başına fiziksel bir anlamı yoktur; sadece büyük momentum transferiyle bir elektron saçılması için anlamı vardır.



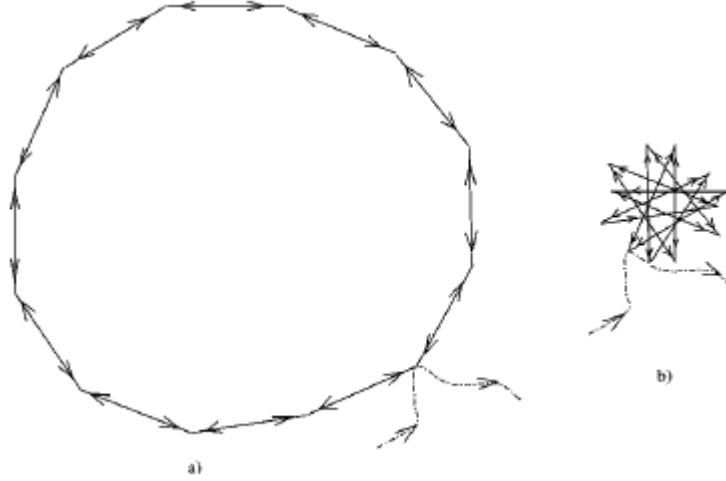
Şekil 4.2: Merdiven serileri: a)  $C_N$  normal cooperon, b)  $D_\pi$   $\pi$ - difüzyonu ve c)  $C_\pi$   $\pi$ - cooperonu. d)  $\tilde{C}_\pi$  ve  $\tilde{D}_\pi$ ,  $\tilde{C}_\pi = J_\pi C_\pi$  ve  $\tilde{D}_\pi = J_\pi D_\pi$  ile gösterilir, burada  $J_\pi$  (4.10) ifadesinde verilmiştir.



Şekil 4.3: a)  $\tau_N$  normal relaksasyon zamanı için, b)  $\tau_\pi$   $\pi$ - saçılması relaksasyon zamanı için; katkı sağlayan impüriti verteksleri

## Difüzyon ve Cooperon Diyagramları

Parçacık-parçacık kanalındaki propagasyon sürecinde normal Cooperon bloku  $C_N(\mathbf{q}, \varepsilon)$  için parçacıkların momentumları difüzyon sırasında Fermi yüzeyinde zıt yerlerde bulunur. Bunun aksine Umklapp süreci ile iki-parçacıklı propagatör  $C_\pi(\mathbf{q}, \varepsilon)$  için momentumlar ise Fermi yüzeyinde aynı bölümde bulunur ve her bir impüriti saçılma hareketi Bragg yansımasına bağlı olarak Fermi yüzeyinin karşı bölümüne parçacıkları uygun ve tutarlı bir şekilde yeniden yerleştirir. Bu iki-parçacıklı propagatör,  $C_\pi(\mathbf{q}, \varepsilon)$ ,  $\pi$ -cooperon olarak adlandırılacaktır.



Şekil 4.4: Normal saçılma ve  $\pi$ -saçılması için cooperonun gerçek uzay temsili a)  $i$ 'nci saçılma hareketinde, küçük  $\alpha_i$  açısı ile impüritiler üzerinden çoklu saçılmaya bağlı time-reversal yörünge. b) a)'da çizilen yörüngenin aynısı, ancak bir farkla ki her bir saçılmaya Bragg yansıması da katılmıştır, ve  $\alpha_i + \pi$  açıları sonucunu vermektedir. Her iki şekilde de hız vektörlerinin büyüklükleri aynı olacak şekilde seçilmiştir.

Aynı durum büyük bir elektron ve boşluk momentumu,  $|\mathbf{k}| \approx 1$ , farkı ile,  $(\mathbf{Q}_0 + \mathbf{k})$ ,  $\pi$ -difüzyon bloku  $D_\pi(\mathbf{k}, \varepsilon, \omega)$  için de ortaya çıkar (Şekil 4.2). Normal difüzyon bloku  $D_N(\mathbf{k}, \varepsilon, \omega)$  ile  $\pi$ -difüzyonu  $D_\pi(\mathbf{k}, \varepsilon, \omega)$ 'nın karşılaştırması da yine bu iki süreç arasındaki büyük farkları göz önüne

serer.  $N$  –difüzyon kanalındaki propagasyon sürecinde  $\mathbf{p}$  ve  $\mathbf{p}+\mathbf{k}$ , ve  $|\mathbf{k}|l \ll 1$  momentumları ile elektron ve boşluk Fermi yüzeyinde birbirlerine yakın dururlar. Bunlar Fermi yüzeyinde difüzyona uğrarlar ve her bir saçılma hareketinden sonra momentumların yakınlığını korurlar. Bunun tersine  $\pi$ - difüzyonu  $D_\pi$  için elektron ve boşluk momentumları Fermi yüzeyinin karşı tarafında yer almaktadır. İmpüritiler üzerinde her bir saçılma Fermi yüzeyi üzerindeki elektron ve boşluk konumlarının birbiriyle yer değiştirmesine sebep olur. Şimdi  $C_N$ ,  $C_\pi$  ve  $D_\pi$  için Şekil 4.2'de gösterilen serileri toplayalım. Şekil 4.2a'daki merdiven serileri toplanırsa,  $C_N(\mathbf{q},\omega)$  için aşağıdaki ifade elde edilir:

$$C_N(\mathbf{q},\omega) = C_{imp} |U(0)|^2 \left\{ \frac{\sqrt{(1-i\tau|\omega|)^2 + (ql)^2}}{\sqrt{(1-i\tau|\omega|)^2 + (ql)^2} - \frac{\tau}{\tau_N}} \Theta(-\varepsilon(\varepsilon+\omega)) + \Theta(\varepsilon(\varepsilon+\omega)) \right\} \quad (4.7)$$

Elektronik bandın merkezinden uzakta,  $\tau_\pi \ll \tau_N$  ve  $\tau \approx \tau_N$ . Dolayısıyla,  $C_N(\mathbf{q},\omega)$ ,  $|\omega|\tau \ll 1$  ve  $|\mathbf{q}|l \ll 1$  için bir difüzyon kutbuna sahiptir. Bant merkezine yaklaştıkça, umklapp saçılması yoğunlaşır ve  $\tau_\pi \ll \tau_N$  ve  $\tau \approx \tau_\pi$  olur. Sonuç olarak,  $C_N(\mathbf{q},\omega)$ 'nin difüzyon kutbu bant merkezinde kaybolur. Bu rejimde kare veya basit kübik kristalin Fermi yüzeyi,  $2D$  örgü için  $\mathbf{Q}_0 = \left\{ \pm \frac{\pi}{a}, \pm \frac{\pi}{a} \right\}$  ve  $3D$  örgü için  $\mathbf{Q}_0 = \left\{ \pm \frac{\pi}{a}, \pm \frac{\pi}{a}, \pm \frac{\pi}{a} \right\}$  şeklinde bir nesting vektörü ile nested hale gelir ( $2D$  durumu için bkz. Şekil 4.1). Bu durumda yarı dolu bant için aşağıdaki  $\mathbf{Q}_0$  vektörüne bağlı elektron saçılmasının parçacık-boşluk simetrisi oluşur:

$$\varepsilon(\mathbf{p} + \mathbf{Q}_0) - \varepsilon_F = -[\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon_F] \quad (4.8)$$

Düşük sıcaklık özelliklerine asıl katkırı şimdi Şekil 4.2b'deki  $\pi$ -cooperon  $C_\pi(\mathbf{q}, \varepsilon, \omega)$  vermektedir. Şekil 4.2'deki merdiven serilerini toplayarak  $C_\pi(\mathbf{q}, \varepsilon, \omega)$  için aşağıdaki ifadeye ulaşılır:

$$C_\pi(\mathbf{q}, \varepsilon, \omega) = C_{imp} |U|^2 \frac{J_\pi^2}{1 - J_\pi^2} \quad (4.9)$$

burada  $J_\pi$  merdiven serilerindeki temel bir "bubble"ın ifadesidir, ve

$$J_\pi = C_{imp} \int \frac{d^d p}{(2\pi)^d} |U|^2 G(\mathbf{p}, \varepsilon) G(-\mathbf{p} + \mathbf{q} + \mathbf{Q}_0, \varepsilon + \omega) \quad (4.10)$$

$J_\pi$ 'yi hesaplamak için, elektron-boşluk simetri ilişkisi (4.8) ifadesi kullanılarak  $\mathbf{Q}_0$  büyük momentumu kaldırılır ve bundan sonra enerji spektrumu Fermi yüzeyi civarında lineerize edilir. Sonuç olarak  $C_\pi(\mathbf{q}, \varepsilon, \omega)$  için aşağıdaki ifadeyi elde ederiz:

$$C_\pi(\mathbf{q}, \varepsilon, \omega) = C_{imp} |U(2p_F)|^2 \left\{ \frac{(\tau/\tau_\pi)^2}{(1 - i\tau|2\varepsilon + \omega|)^2 + (ql)^2 - (\tau/\tau_\pi)^2} \Theta(\varepsilon(\varepsilon + \omega)) \right. \\ \left. + \Theta(-\varepsilon(\varepsilon + \omega)) \right\} \quad (4.11)$$

Böylece  $\pi$ -cooperon parçacıkların  $\mathbf{Q}_0$ 'a yakın toplam momentumları ( $|\mathbf{k}|l \ll 1$ ) ve küçük toplam enerjileri  $|2\varepsilon + \omega|\tau \ll 1$  için bir difüzyon kutbuna sahip olur. Bir elektron çizgisinin time reversali ile  $C_\pi(\mathbf{q}, \varepsilon, \omega)$ 'den farklılık gösteren  $D_\pi(\mathbf{k}, \varepsilon, \omega)$  difüzyon bloku,  $|\mathbf{k}|l \ll 1$  olmak üzere büyük ( $\mathbf{Q}_0 + \mathbf{k}$ ) momentumların farkı ve elektron ve boşluğun küçük toplam enerjisi için bir kutba sahiptir (bkz. Şekil 4.2c).  $D_\pi(\mathbf{k}, \varepsilon, \omega)$ 'nin hesaplanması  $C_\pi(\mathbf{q}, \varepsilon, \omega)$ 'ninkine benzer ve şunu elde ederiz:

$$D_{\pi}(\mathbf{k}, \varepsilon, \omega) = C_{imp} |U(2p_F)|^2 \left\{ \frac{(\tau/\tau_{\pi})^2}{(1-i\tau|2\varepsilon+\omega|)^2 + (ql)^2 - (\tau/\tau_{\pi})^2} \Theta(\varepsilon(\varepsilon+\omega)) \right. \\ \left. + \Theta(-\varepsilon(\varepsilon+\omega)) \right\} \quad (4.12)$$

Bunun ardından, Umklapp süreçlerine bağlı olarak fiziksel niceliklere kuantum katkıları hesaplayabiliriz.

## Momentum Relaksasyon Zamanının Renormalizasyonu

Bölüm 4.4'te işaret edildiği gibi saçılma süreçleri ve bunlara uygun relaksasyon zamanları iki farklı sınıfa ayrılabilir:  $\tau_N$  relaksasyon zamanına sahip normal saçılma ve  $\tau_{\pi}$  relaksasyon zamanı ile  $\pi$ -saçılması. Birinci dereceden pertürbasyon teorisinde bunların birbirlerine eşit olduğunu varsayabiliriz ( $\tau_N = \tau_{\pi} = \tau_0$ ). Fakat yüksek dereceden pertürbasyon teorisini ele alırsak  $\pi$ -saçılması için durum büyük değişiklik gösterir. Bu bölümde Bragg yansımalarından kaynaklanan self-enerjiye yüksek dereceden kuantum katkıları hesaplayacağız.

Normal saçılma zamanı  $\tau_N$  ve  $\pi$ -saçılma zamanı  $\tau_{\pi}$ 'yi Şekil 4.5'teki self-enerjilerin imajineri kısımlarıyla gösterebiliriz.

$$\frac{1}{\tau_N} = i \left[ \sum_N^R(\mathbf{p}, \varepsilon) - \sum_N^A(\mathbf{p}, \varepsilon) \right] = -2 \text{Im} \sum_N^R(\mathbf{p}, \varepsilon) \quad (4.13)$$

$\sum_N^R(\mathbf{p}, \varepsilon)$  diyagramatik olarak Şekil 4.5a'da gösterilmiştir.

$$\frac{1}{\tau_N} = \frac{C_{imp}}{(2\pi)^2} \int_S \frac{d\mathbf{S}}{|\mathbf{v}_k|} |U(\mathbf{p}_F, \mathbf{S})|^2 = (2\pi) \rho_0^{(2d)} C_{imp} |U|^2 \quad (4.14)$$

Normal impüriti saçılması için self-enerjideki yüksek dereceden diyagramların dahil edilmesi elastik saçılma zamanı  $\tau_N$ 'e önemli bir katkı sağlamaz. Bir karşılaştırma yaparsak,  $k_F l \ll 1$  olmak üzere bir  $\frac{1}{k_F l}$  faktörü ile Şekil 4.5b'deki diyagramın katkısı Şekil 4.5a'dakininkinden daha küçüktür.

$\pi$ - saçılmasında, normal saçılmanın tersine,  $RR$  veya  $AA$  kanallar korelasyon fonksiyonlarına katkı sağladığı için, self-enerji yüksek dereceden katkıları içerir.  $\pi$ - saçılması için Şekil 4.5d'deki diyagrama bakalım:

$$\frac{1}{\tau_\pi} = i \left[ \sum_\pi^R(\mathbf{p}, \varepsilon) - \sum_\pi^A(\mathbf{p}, \varepsilon) \right] = -2 \text{Im} \sum_\pi^R(\mathbf{p}, \varepsilon) \quad (4.15)$$

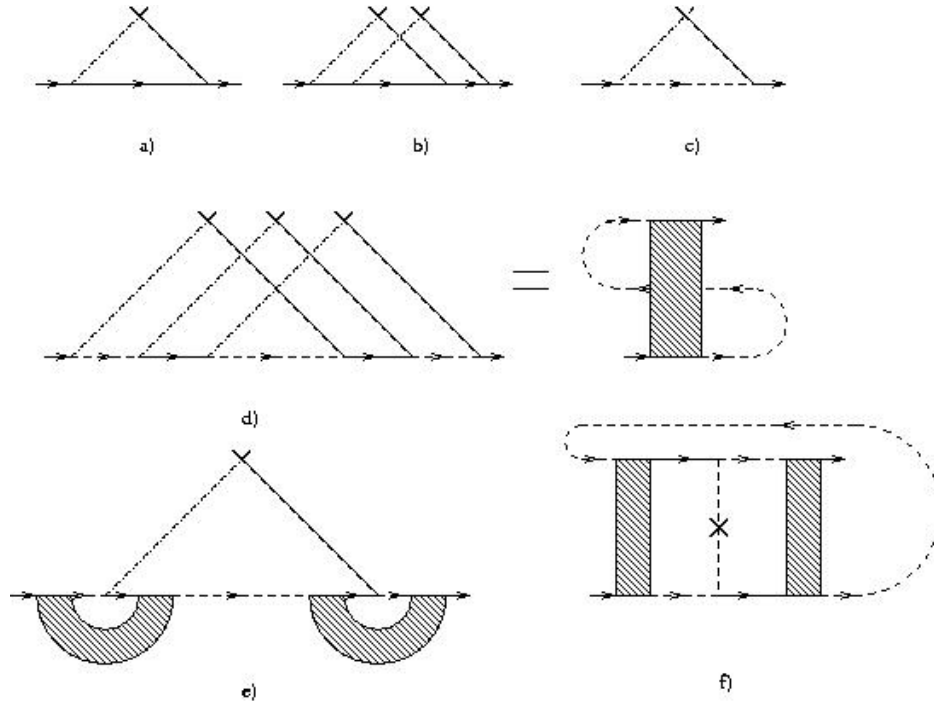
burada self-enerji 4.5d'de verilmiştir

$$\frac{1}{\tau_\pi} = -2 \text{Im} \left\{ \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} C_\pi(\mathbf{q}, \varepsilon) G_0^R(-\mathbf{p} + \mathbf{q} + \mathbf{Q}, \varepsilon) \right\} \quad (4.16)$$

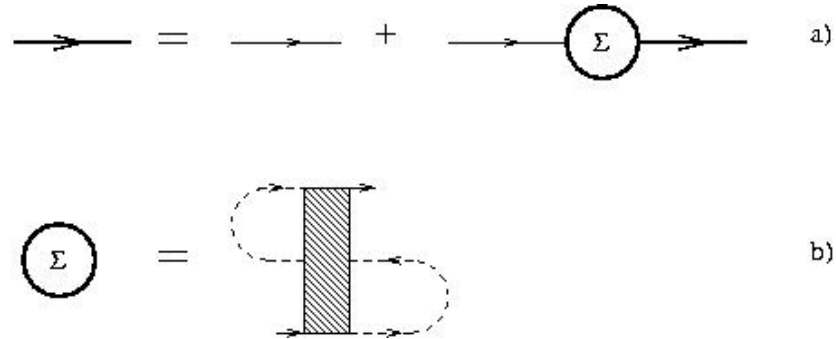
$\mathbf{q}$  üzerinden integral alırsak,

$$\frac{1}{\tau_\pi} = \frac{1}{\tau_0} \left[ \frac{1}{2\pi \varepsilon_F \tau_0} \ln \left( \frac{1}{4|\varepsilon| \tau_0} \right) \right] \quad (4.17)$$

Şekil 4.5e,f'deki geriye kalan diyagramlar self-enerjinin imajineri kısmına herhangi bir katkıda bulunmazlar.



Şekil 4.5: a), b) Born yaklaşımında normal impüriti saçılması için self-enerji, c) en düşük dereceden  $\pi$ -saçılması için self-enerji, d), e), f)  $\pi$ -saçılması için self-enerjiye yüksek dereceden katkılar.



Şekil 4.6: a) Renormalize edilmiş Green fonksiyonu için Dyson denklemi, b)  $\pi$ -saçılması için self-enerji.

Buraya kadar toplam Green fonksiyonunun yeni Cooperon blokları tarafından renormalize edilmediğini farzettik. Toplam Green fonksiyonunu Şekil 4.6'daki diyagramatik temsile göre renormalize etmekle

$$G_0^R(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{1}{\varepsilon - (\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon_F) + \frac{i}{2\tau_0}} \rightarrow \tilde{G}_0^R(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{1}{\varepsilon - (\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon_F) + \frac{i}{2\tau_\pi}} \quad (4.18)$$

elde ederiz. Bir sonraki adım ise Cooperon ve Difüzyon bloklarını renormalize etmektir. Renormalize edilmiş Green fonksiyonlarını kullanarak bu blokları hesaplarsak;

$$\tilde{C}_\pi(\mathbf{q}, \varepsilon, \omega) = \frac{1}{2\pi\tau_\pi\rho_0^{(2d)}} \left\{ \frac{\Theta(\varepsilon(\varepsilon + \omega))}{-2i\tau_\pi|2\varepsilon + \omega| + (ql)^2} + \Theta(-\varepsilon(\varepsilon + \omega)) \right\} \quad (4.19)$$

elde ederiz. Denklem (4.16)'daki renormalize edilmiş Cooperon blokunu yerine koyarak yeniden-renormalize edilmiş  $\pi$ -saçılma zamanı  $\tau'_\pi$ 'yi elde ederiz.

$$\frac{1}{\tau'_\pi} = \frac{1}{\tau_0} \left[ \frac{1}{2\pi\varepsilon_F\tau_0} \ln \left( \frac{1}{4|\varepsilon|\tau_0} \right) \right]^3 \quad (4.20)$$

$\varepsilon \rightarrow 0$  ( $\varepsilon = (\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon_F)$ ) olduğunda  $\tau_\pi$  ve  $\tau'_\pi \rightarrow 0$ . Difüzyon limiti için şart  $l \ll \lambda_F$  'dir ve bu şart Cooperon bloklarının türetilmesinde kullanılır.  $\varepsilon \rightarrow 0$ ,  $l = v_F\tau_\pi \rightarrow 0$  olduğunda, pertürbasyon teorisinin geçerli olabilmesi için ortalama serbest yol  $l$ 'nin Fermi dalga boyu  $\lambda_F$ 'den daha büyük olması gerektiğinden bu durum mümkün olamaz. Sonuç olarak  $\tau_\pi$  için daha düşük bir sınırimız olmalı, bu da  $l \ll \lambda_F$  ve  $\tau_\pi \geq \frac{\lambda_F}{v_F}$  'dir. Sonlu sıcaklık veya tam

olmayan nesting  $\tau_\pi$ 'deki logaritmik tekilliği engelleyebilir. Umklapp saçılmanın, 1D ve 2D elektronik yapılarda gözlemlenen olağan dışı decoherence'i açıklamak için olası bir mekanizma olabileceği düşünülebilir [Mohanty et. al. 1997].

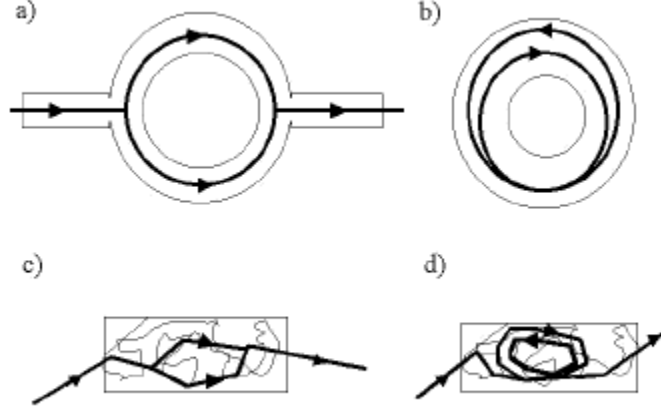
## **5. DÜZENSİZ SİSTEMLERDE BRAGG YANSIMALARINDAN KAYNAKLANAN KUANTUM GİRİŞİM ETKİLERİ**

Bir kuantum mekanik sistemi klasik sistemden ayıran iki temel özellik uyum (coherence) ve spindir. Spinin etkileri gürültü ve dalgalanma gibi istatistiksel özelliklerde ortaya çıkarken uyum girişim kavramında örneklendirilir. Yoğun madde fiziğinde, girişim etkileri genellikle elektronla incelenir. Bu elektronlar uyumun kaybolması veya dış dünya ile etkileşmelerinden kaynaklanan uyumsuzluk nedeniyle yalnızca belirli sonlu bir süre için kuantum mekaniksel olarak kalırlar. Uyumsuzluk düşük sıcaklıklarda daha az zararlı hale gelir, çünkü bu durumda serbestliğin çevresel dereceleri ihmal edilebilir ya da uyumsuzluk için gerekli olan termal dalgalanmalar bastırılır. Düşük sıcaklıklarda, milikelvin düzeyinde elektron uyumu için tipik zaman ölçeği nanosaniye düzeyidir. Elektronların kat ettiği mesafe, hala uyumlu kaldığı sürece, faz uyum uzaklığını belirler. Deneylerde bu mesafe ölçeği birkaç mikrondan birkaç nanometreye kadar değişiklik göstermektedir. Bu yüzden kuantum-mekanik aygıtı –içinde elektronun kuantum mekanik olarak davrandığı bir katı-hal aygıtı– genellikle ebat olarak nanometre ölçeğindedir.

### **5.1. Düzensiz İletkenlerde Kuantum Girişim Etkileri (Genel Bir Değerlendirme)**

Kuantum mekaniğin ayırdedici yanı her zaman girişim olayları olmuştur. Eğer bir olayın ortaya çıkması için bir çok alternatif varsa net olasılığın genliği (amplitude) bireysel alternatifler için genliğin toplamıdır ve bunun karesi de net olasılıktır. Örneğin iki muhtemel alternatifi bulunan bir olay düşünelim: Şekil 5.1a'da şematik olarak gösterilen bir iletken içinde propagasyon yapan

bir elektronu ele alalım. Elektron üst yoldan veya alt yoldan gidebilir. Bu kurgu, aslında çift-yarık deneyinin yoğun-madde versiyonudur [Mohanty, 2001].



Şekil 5.1: Çift-yarık deneyi çerçevesinde elektron girişiminin dört belirgin gösterimi. Girişen yol çiftleri gerçek yolları (a ve c) içerebileceği gibi time-reversal yollarını (b ve d) da sırasıyla  $\hbar/e$  veya  $\hbar/2e$ 'nin karakteristik dalgalanma ölçeğine bağlı olarak kapsayabilir. Şemalar şu girişim etkilerini temsil etmektedir: (a) Aharonov-Bohm etkisi, (b) persistent akım, (c) iletkenlik dalgalanmaları ve (d) zayıf lokalizasyon.

Elektronun kuantum konumu  $|\Psi\rangle$  iki halin süperpozisyonudur; kompleks genlikleri sırasıyla  $\psi_{upper}$  ve  $\psi_{lower}$  olan üst konum  $|u\rangle$  ve alt konum  $|l\rangle$ :

$$|\Psi\rangle = \psi_{upper} |u\rangle + \psi_{lower} |l\rangle \quad (5.1)$$

Elektronu yüzüğün sağ tarafındaki bir  $x$  noktası konumunda bulma olasılığı elektron konumu  $|\Psi\rangle$ 'nin yer konumu  $|x\rangle$  üzerine projeksiyon büyüklüğünün karesidir:

$$|\langle x|\Psi\rangle|^2 = |\psi_{upper}|^2 |\langle x|u\rangle|^2 + |\psi_{lower}|^2 |\langle x|l\rangle|^2 + 2 \text{Re}[\psi_{upper}^* \psi_{lower} \langle x|u\rangle \langle x|l\rangle] \quad (5.2)$$

Son terim kuantum uyumlu elektronun sol taraftan sağ tarafa gitmek için iki alternatif yolu arasındaki girişimi temsil etmektedir. Bu terim geleneksel çift-yarık deneyinde aydınlık ve karanlık kenarlar olarak ortaya çıkar. Düşük-boyutlu iletkenlerde, değişik elektronik yollar arasındaki girişim iletim ve manyetizasyon gibi klasik transport ve termodinamik özelliklere kuantum katkılar olarak incelenir. Kenar modelleri çift-yarık deneyindeki yapıcı ve yıkıcı girişimleri örneklendirirken yörüngeleri boyunca biriken faza bağlı olarak bir katı içinden elektronların geçişi de girişimi gösterir. Dışsal bir  $B$  manyetik alanı iki girişen yol arasındaki faz farkını  $\mathbf{A}$  vektör potansiyeli olmak üzere

$$2\pi \frac{e}{\hbar} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = 2\pi \frac{e}{\hbar} \oint \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = 2\pi \frac{\Phi}{\hbar/e}, \quad (5.3)$$

miktarında değiştirir. Elde edilen faz temel dalgalanma kuantumu  $\hbar/e$ 'ye ve  $\Phi$  yollarının içerdigi dalgalanmaya bağlıdır. Aharonov-Bohm denen, elektronun yolları arasındaki fazın ayarlanması bir iletken içinde bir dizi girişim deneyimini etkinleştirir. Örneğin, fazın 0'dan  $2\pi$ 'nin tam katlarına doğru değiştirilmesi elektron iletimi katsayısında periyodik bir salınımın gözlenmesine imkan verir ve yüzük yapısındaki düzensiz bir iletkenin  $G$  iletkenliğinde dile getirilir:

$$G^{AB}(\Phi) = G^{AB} \left( \Phi + n \frac{\hbar}{e} \right) \quad (5.4)$$

Bu Aharonov-Bohm katkısıdır. İletkenin içindeki karmaşık yollar setinin girişimi iletkenlik dalgalanmalarına yol açar, ve elektron yörüngelerinin time-reversal çiftlerinin girişimi iletken içindeki gerçek uzayda elektronun zayıf lokalizasyonu ile sonuçlanır. İletkenliğe çeşitli girişim katkılarına benzer olarak, termodinamik nicelikler de girişimden etkilenir, belirgin örnek bir normal-metal faz-uyumlu yüzükteki persistent akımdır.

## 5.2. Çevreyle Etkileşmeden Kaynaklanan Elektron Faz Uyumsuzluğu

Eğer kuantum sistem bir çevreyle etkileşirse, o zaman sistemin toplam dalga fonksiyonu  $|\Psi\rangle$ , hem sistemin dalga fonksiyonu  $|u\rangle$  ve  $|l\rangle$ , hem de çevrenin dalga fonksiyonundan oluşur. Örneğin çevrenin temel seviyede olduğunu varsayalım. Toplam dalga fonksiyonu:

$$(\psi_{upper}|u\rangle + \psi_{lower}|l\rangle) \otimes |\chi_0\rangle \quad (5.5)$$

Bu bir sonuç halidir. Elektron ve bath arasındaki etkileşimden sonra toplam kuantum hali yine de bir “entanglement” haline dönüşür. Bireysel kuantum halleri etkileşimden sonra değişen bath halleri ile entangled hale gelir:

$$\psi_{upper}|u\rangle \otimes |\chi_1\rangle + \psi_{lower}|l\rangle \otimes |\chi_2\rangle \quad (5.6)$$

Bath şimdi sistemin haline bağlı olarak değişmiştir, dolayısıyla sistem hakkındaki bilgileri taşımaktadır. Bu, bilgi kaybına ve uyumsuzluğa götürür. Girişimi temsil eden olasılık yoğunluğu, (5.2) ifadesindeki üçüncü terim, şimdi

$$2 \operatorname{Re} [\psi_{upper}^* \psi_{lower} \langle x|u\rangle \langle x|l\rangle] \rightarrow 2 \operatorname{Re} [\psi_{upper}^* \psi_{lower} \langle x|u\rangle \langle x|l\rangle \langle \chi_1|\chi_2\rangle] \quad (5.7)$$

haline gelir. Bu ifadeden anlaşılıyor ki eğer bath halleri etkileşimden sonra birbirine ortogonal hale gelirse girişim terimi tamamen bastırılacaktır. Girişimin ölçümü sadece sistem hallerini içerdiği için, uyumsuzluk çevreden gelen ek faktör olarak kuantize edilebilir. Bu, serbestliğin çevresel derecelerinin entegrasyonudur ki birçok durumda eksponansiyel faktör  $e^{-t/\tau_\phi}$  olarak gösterilebilir. Girişimin bastırıldığı oran uyumsuzluk oranıdır, ve zaman ölçeği de uyumsuzluk zamanı  $\tau_\phi$ 'dir. Bu, aynı zamanda, iki çevresel halin iki sistem haline bağlı olarak diyagonal duruma geldiği zaman ölçeğini de temsil eder.

### 5.3. Elektronik Durumlara Bragg Yansımalarından Kaynaklanan Girişim Katkıları

Kuantum girişim etkileri izotropik sistemler için elektronik durumları etkilemese de bu bölümde elektronik durumlara ve sistemin diğer fiziksel özelliklerine belirli bir etkisinin olduğu bant merkezini ele alacağız.

Düzgün  $d$  – boyutlu örgünün tek-parçacık durum yoğunluğu (density of states -  $DY$ );  $dS$ ,  $d$  – boyutlu uzayda izoenerjik bir yüzeyin bir elementi olmak üzere

$$\rho_0^{(d)} = \frac{2}{(2\pi)^{(d)}} \int_S \frac{dS}{|\nabla \epsilon(\mathbf{k})|} \quad (5.8)$$

şeklinde gösterilir. Elektron dalga paketi  $\mathbf{v}_k = \nabla \epsilon(\mathbf{k})$ 'nin grup hızının kaybolduğu noktalarda  $\rho_0^{(d)}$  bir van Hove tekilliğine sahiptir [Ziman, 1964].  $a$

sabit aralığına sahip temiz bir 1D örgünün  $DY$ 'si  $\rho_0^{(1)} = \frac{1}{\pi a \sqrt{\epsilon(2t - \epsilon)}}$  olacak

şekilde kolayca hesaplanabilir. Bu ifade gösteriyor ki  $\rho_0^{(1)}$ ,  $\epsilon \rightarrow \epsilon_F = t$  olduğu durumda bant merkezi yakınındaki enerjinin düzgün bir fonksiyonudur ve  $\epsilon$  bant kenarlarına yaklaştıkça,  $\epsilon \rightarrow 0, 2t$ , üstsel bir tekilliğe sahip olur. (4.3) ifadesinde verildiği gibi bir enerji spektrumuna sahip bir 2D kristalin yalın  $DY$ 'si bandın ortasında logaritmik bir van Hove tekilliğine sahiptir:

$$\rho_0^{(2)} = \frac{1}{\pi^2 a^2 t} K \left( \sqrt{1 - \left( \frac{\epsilon}{2t} \right)^2} \right) = \begin{cases} \frac{2}{\pi a^2 \sqrt{4t^2 - \epsilon^2}} \ln \frac{4t^2 - \epsilon^2}{\epsilon^2}, & |\epsilon| \ll 2t \\ \frac{1}{\pi a^2 |\epsilon|}, & |\epsilon| \approx 2t \end{cases} \quad (5.9)$$

Burada ve aşağıda, elektron enerjisi  $\epsilon$ 'nin ölçüsü bandın ortasından alınır, yani  $\epsilon = 0$  bant merkezine karşılık gelir. Sıkı-bağlı modelde basit 3D kristalin van Hove tekilliği  $|\epsilon| = t$  yakınında cusps verir:

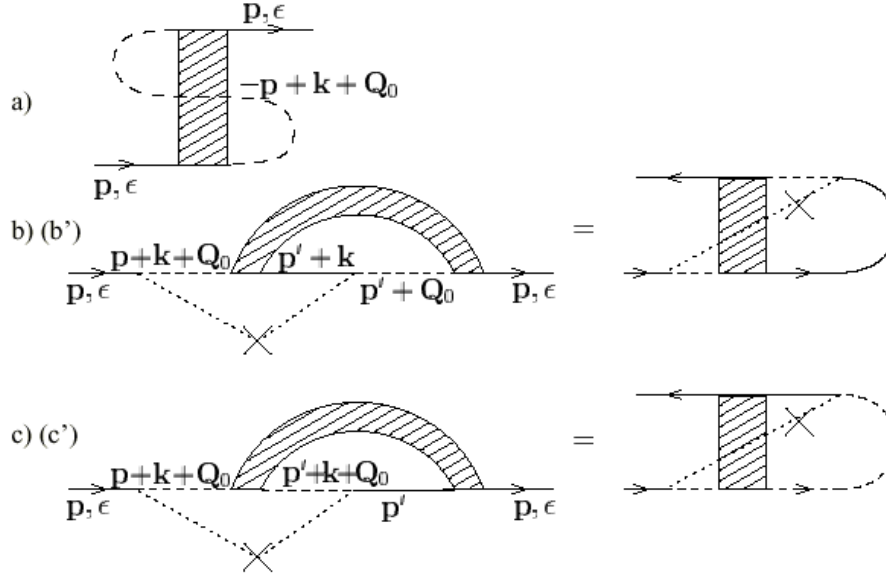
$$\rho_0^{(3)} = \frac{1}{\pi^2 t^{3/2} a^3} \sqrt{\varepsilon - t} \quad (5.10)$$

Bu bölümde substitutional impüritilerin 2D ve 3D kristallerin  $DY$ 'sine etkilerini inceleyeceğiz.  $d$  – boyutlu elektron gazları içinde random olarak dağılmış impüritilerin  $DY$ 'ye herhangi bir etkisi yoktur. Substitutional impüritilere sahip 2D ve 3D basit kare (kübik) kristallerin  $DY$ 'si, bant merkezi civarında, hatta etkileşmeyen elektronlar için bile, sahip olacağı quantum katkılar üretir. Commensurability'nin bandın ortasına yakın yerlerde 1D düzensiz kristallerin kinetiğine ve  $DY$  üzerine etkisi birçok yazar tarafından hesaplanmıştır [Dyson, 1953, Hirsch and Eggarter, 1976, Eggarter and Riedinger, 1978, Inui et al., 1994]. İlk olarak Dyson bant merkezi civarında düzensiz bir 1D sistemin fonon  $DY$ 'sinin  $\rho^{(1)} \propto -|\varepsilon|^{-1} \ln^{-3} |\varepsilon|$  şeklinde bir tekilliğe sahip olduğuna işaret etmiştir. Dikkat edilmelidir ki bant merkezindeki 1D bir sistemde  $DY$ 'nin tekil artışının van Hove tekilliği ile bir ilgisi yoktur, çünkü ikincisi (van Hove) 1D sistemler için bant kenarında yer alır. Onun yerine bant merkezindeki Bragg yansımaları ve impüriti saçılmasının girişi ile azaltılır. Daha sonra birçok 1D modelin elektronik  $DY$ 'sinde analog bir tekillik bulundu [Hirsch and Eggarter, 1976, Eggarter and Riedinger, 1978, Inui et al., 1994]. 1D saçılma problemi ileriye ve geriye saçılma süreçleriyle karakterize edildiği için diyagonal-dışı düzensizliğe sahip 1D modeller yalnızca ileriye saçılma genliği sıfır olursa bandın merkezinde bir tekillik gösterirler. Bragg yansıması ile küçük ileriye saçılma lokalizasyonu artırır gibi görünmektedir ve sonuç olarak bant merkezindeki  $DY$ 'nin ıraksaması netliğini kaybeder. Substitutional impüritilerin 2D (kare) ve 3D (basit kübik) örgülerin  $DY$ 'si üzerindeki etkisi diyagonal ve diyagonal-dışı düzensiz sistemler için nümerik olarak [Hu et al., 1984, Eilmes et al., 1998, Kramer and Kinnon, 1993] incelendi.

$DY$  için  $\rho(\varepsilon)$ 'yi retarded Green fonksiyonu  $G_R(\mathbf{p}, \varepsilon)$  yoluyla gösteren

$$\rho^{(d)}(\varepsilon) = -\frac{2}{\pi} \text{Im} \int \frac{d^d p}{(2\pi)^d} G_R(\mathbf{p}, \varepsilon) \quad (5.11)$$

ifadesiyle başlayalım.  $G_R(\mathbf{p}, \epsilon)$  nin self-enerjisine önemli bir katkı sağlayan yeni diyagramlar sınıfı Şekil 5.2'de çizilmiştir.



Şekil 5.2: a) Cooperon'da ve b,c) difüzyon kanallarında umklapp saçılmaya bağlı olarak Green fonksiyonuna önemli bir katkı yapan self-enerji kısımları.

Bu diyagramlar cooperon ve difüzyon bloklarında ( $C_\pi(\mathbf{q}, \epsilon)$  ve  $D_\pi(\mathbf{k}, \epsilon)$ ) birinci-dereceden self-enerjiye katkıları temsil etmektedir.  $C_\pi(\mathbf{q}, \epsilon)$  ve  $D_\pi(\mathbf{k}, \epsilon)$  bir dış frekans ( $\omega=0$ ) taşımadıkları için, bunların gösterimleri  $\omega=0$  olan (4.11) ve (12) ifadelerinden çıkarılır:

$$C_\pi(\mathbf{q}, \epsilon) = C_{imp} |U(2p_F)|^2 \left( \frac{\tau}{\tau_\pi} \right)^2 \frac{1}{(1 - 2i\tau|\epsilon|)^2 + (ql)^2 - (\tau/\tau_\pi)^2} \quad (5.12)$$

$$D_\pi(\mathbf{k}, \epsilon) = C_{imp} |U(2p_F)|^2 \left( \frac{\tau}{\tau_\pi} \right)^2 \frac{1}{(1 - 2i\tau|\epsilon|)^2 + (kl)^2 - (\tau/\tau_\pi)^2} \quad (5.13)$$

$\tau_\pi \rightarrow \tau$ 'ye giderken, her iki blok da  $|\epsilon|\tau \ll 1$  ve  $ql, kl \ll 1$  için bir difüzyon kutbuna sahip olurlar. Cooperon ve difüzyon blokları  $d=2$  için fiziksel

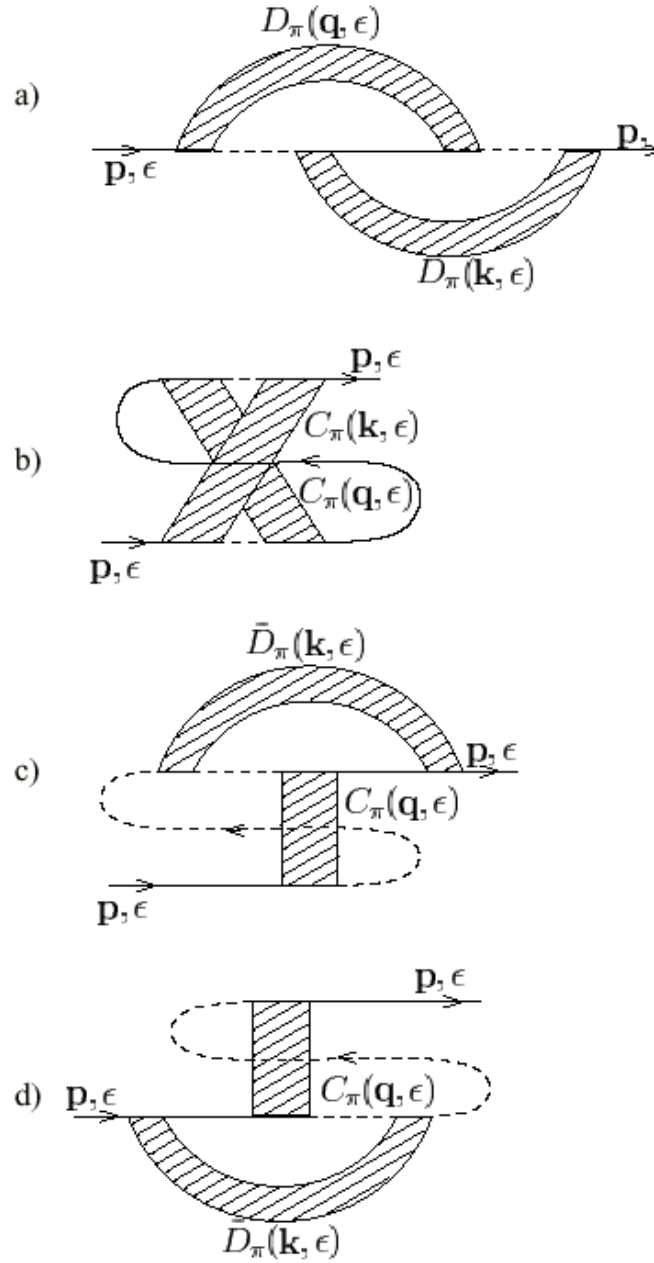
parametrelere loharitmik katıklar ve  $d=3$  için  $\sqrt{|\epsilon|\tau}$  katıkları doğurur. Böylece self-enerji kısımları için cooperon ve difüzyon bloklarındaki daha üst-sıra diyagramları,  $|\epsilon|\tau \ll 1$  için  $3D$  sistemlerde gerekli değildir. Ama yine de  $2D$  sistemlerde self-enerjiye birinci-dereceden katkı içinde var olan logaritmik sapma daha yüksek dereceden logaritmik katıkların gözden geçirilmesini gerektirmektedir. Difüzyon ve cooperon bloklarının tüm olası kombinasyonlarını içeren diyagramların yapısı dahil edilen blokların artan sayısıyla daha karmaşık hale gelir. Fakat, çeşitli teorik yöntemlerle gösterildiği gibi, iletkenliğe daha yüksek logaritmik katıklar birbirini iptal eder [Gorkov et al., 1979, Oppermann and Wegner, 1979, Altshuler et al., 1986] ve iletkenliğe en önemli katkı yalnızca birinci dereceden logaritmik terimdir. Self-enerjiye yüksek dereceden katıklar bizim örneğimizde de birbirini iptal edecektir. Self-enerjiye logaritma-kareli katıkları veren ikinci sıra diyagramlar Şekil 5.3'te gösterilmiştir. Basit hesaplamalar bu diyagramların toplamının sıfır sonucunu verdiğini gösteriyor.

Retarded Green fonksiyonu  $G_R(\mathbf{p}, \epsilon)$ ,

$$G_R(\mathbf{p}, \epsilon) = \frac{1}{\left(G_R^0(\mathbf{p}, \epsilon)\right)^{-1} - \sum(\epsilon, \mathbf{p})} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(G_R^0(\mathbf{p}, \epsilon)\right)^{n+1} \left(\sum(\epsilon, \mathbf{p})\right)^n \quad (5.14)$$

şeklindeki Dyson eşitliğine göre Şekil 5.2'deki birinci-dereceden self-enerji kısımlarının toplamı  $\sum(\epsilon, \mathbf{p})$  ile gösteriliyor. Şekil 5.2'deki diyagramların toplamını alarak şu ifadeye ulaşılır:

$$\sum(\epsilon, \mathbf{p}) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \left\{ C_{\pi}(\epsilon, \mathbf{k}) - \frac{2\tau}{\tau_{\pi}} \left( 1 - \frac{\tau}{\tau_{\pi}} \right) D_{\pi}(\epsilon, \mathbf{k}) \right\} G_R^0(-\mathbf{p} + \mathbf{k} + \mathbf{Q}_0, \epsilon) \quad (5.15)$$



Şekil 5.3: Self-enerjiye cooperon ve difüzyon bloklarındaki ikinci dereceden katkılar. Hesaplamalar bu diyagramlar arasında tam bir iptal etmenin olduğunu gösteriyor.

Denklem (5.14) ve (15)'i denklem (5.11)'de yerine koyarak  $\rho(\epsilon)$  için aşağıdaki ifade çıkarılabilir:

$$\rho(\epsilon) = \rho_0^{(d)} - \frac{2}{\pi} \text{Im} \sum_{n=1}^{\infty} A_n \alpha_d^n(\epsilon) \quad (5.16)$$

$$\alpha_d(\varepsilon) = 4\tau^2 \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \left\{ C_\pi(\varepsilon, \mathbf{k}) - \frac{2\tau}{\tau_\pi} \left( 1 - \frac{\tau}{\tau_\pi} \right) D_\pi(\varepsilon, \mathbf{k}) \right\} \quad (5.17)$$

$$A_n = \frac{1}{(2\tau)^{2n}} \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} G_0^{n+1}(\mathbf{p}, \varepsilon) G_0^n(-\mathbf{p} + \mathbf{Q}_0, \varepsilon) = (-1)^{n+1} 2\pi i \rho_0^{(d)} \frac{n(2n-1)!}{2^{2n} (n!)^2} \quad (5.18)$$

Burada  $\rho_0^{(d)}$ ,  $d$  – boyutlu temiz bir kristal için  $DY$ ’dir ve bu, denklem (5.9) ve (10)’da  $d=2$  ve  $d=3$  için sırasıyla verilmiştir. Denklem (5.17)’deki  $n$  üzerinden toplama denklem (5.18)’i kullanarak kolayca gerçekleştirilebilir:

$$\rho(\varepsilon) = \rho_0^{(d)} \left\{ 1 - \text{Re} \frac{\alpha_d(\varepsilon)}{\sqrt{1+\alpha_d(\varepsilon)} (1+\sqrt{1+\alpha_d(\varepsilon)})} \right\} = \rho_0^{(d)} \text{Re} \frac{1}{\sqrt{1+\alpha_d(\varepsilon)}} \quad (5.19)$$

burada  $\alpha_d(\varepsilon)$  enerji bağıntısı (5.17), (12) ve (13) ifadelerinden çıkarılabilir:

$$\alpha_d(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi\varepsilon_F\tau} \left( 1 - \frac{2\tau}{\tau_\pi} + \frac{2\tau^2}{\tau_\pi^2} \right) \ln \left[ \frac{2 - \frac{\tau^2}{\tau_\pi^2}}{1 - \frac{\tau^2}{\tau_\pi^2} - 4i|\varepsilon|\tau} \right], & d=2 \\ \frac{3 \left( 1 - \frac{2\tau}{\tau_\pi} + \frac{2\tau^2}{\tau_\pi^2} \right)}{4\pi\tau_\pi\varepsilon_F^2} \left\{ 1 - \frac{\pi\sqrt{3}}{4} \left[ \sqrt{\sqrt{\left( 1 - \frac{\tau^2}{\tau_\pi^2} \right)^2 + (4|\varepsilon|\tau)^2} - 1 + \frac{\tau^2}{\tau_\pi^2}} \right. \right. \\ \left. \left. - i \sqrt{\sqrt{\left( 1 - \frac{\tau^2}{\tau_\pi^2} \right)^2 + (4|\varepsilon|\tau)^2} + 1 - \frac{\tau^2}{\tau_\pi^2}} \right] \right\}, & d=3 \end{cases} \quad (5.20)$$

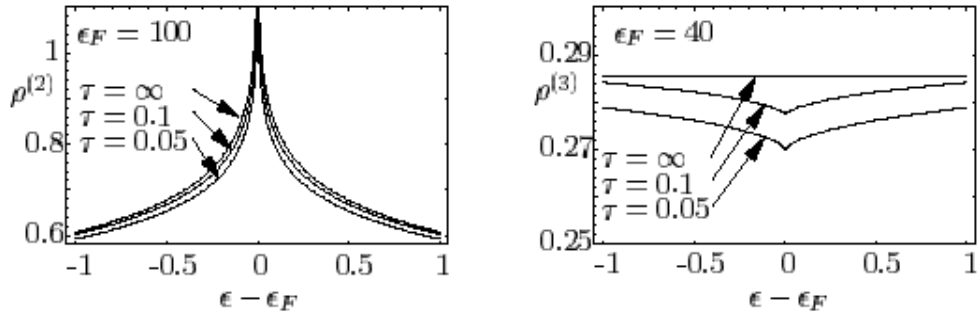
(5.19) ve (20) ifadelerinden görülebileceği gibi bant merkezinden uzakta, Umklapp saçılmasının etkileri  $DY$ ’ye olan kuantum katkıların kaybolmasının bir sonucu olarak azalmakta ve  $\tau_\pi \square \tau_N \approx \tau$  olmaktadır. Bant merkezi civarında,  $\tau \approx \tau_\pi < \tau_N$  ve impüriti etkileri önem kazanır.

Yarı dolu bir enerji bandına sahip 2D bir sistem için  $DY$  şu şekilde gösterilebilir:

$$\rho^{(2)}(\varepsilon) = \rho_0^{(2)}(\varepsilon) \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{2\pi\varepsilon_F\tau} \ln \frac{1}{4|\varepsilon|\tau_\pi}}} \quad (5.21)$$

burada (5.9) ifadesinde verilen  $\rho_0^{(2)}(\varepsilon)$ , bandın ortasında logaritmik bir tekillik içerir. (5.21) ifadesi, 2D kare yalın bir kristalin  $DY$ 'sindeki van Hove tekilliğinin substitutional impüritilerin varlığı durumunda korunduğunu gösteriyor. Fakat, merkezi tepe noktası impüriti saçılmasına bağlı olarak temiz sistemlerdeki van Hove tepe noktasınınkinden daha dar hale gelmektedir. Bandın ortası civarında  $\rho^{(2)}(\varepsilon)$  enerji bağıntısı logaritmik bağıntıdan logaritmanın kareköküne dönüşür [Nakhmedov et al., 2000a],

$$|\varepsilon \rightarrow 0| \quad \text{iken} \quad \rho^{(2)}(\varepsilon) = \frac{2}{(\pi a)^2 \varepsilon_F} (2\pi\varepsilon_F\tau_\pi)^{1/2} \ln^{1/2} \left[ \frac{1}{4|\varepsilon|\tau_\pi} \right] \quad (5.22)$$



Şekil 5.4: İmpüriti potansiyelinin örnek değerleri için  $\rho^{(2)}$  ve  $\rho^{(3)}$  üzerine impüriti etkisi. Karşılaştırma için aynı zamanda yalın  $DY$   $\rho_0^{(2)}$  ve  $\rho_0^{(3)}$  de,  $\tau = \infty$ 'e uygun olarak, verilmiştir.

Şekil 5.4a'da  $\rho^{(2)}(\varepsilon)$ 'un impüriti potansiyel şiddetiyle değişimi çizilmiştir, ki bu, azalan  $\tau_\pi$  veya artan düzensizlik şiddeti ile merkezi tepe noktasının bir daralmasını göstermektedir. İçinde diyagonal-dışı bir düzensizliğin gözlemlendiği

kare bir örgünün  $DY$ 'si [Hu et al., 1984, Eilmes et al. 1998] de aynı etkiyi gösterir. Dikkat edilmelidir ki örneğimizde ele aldığımız impüriti potansiyeli diyagonal-dışı düzensizliğe uymaktadır, çünkü Hamiltoniyen denklemi (4.2)'nin impüriti potansiyeline karşılık gelen kısmı diyagonal ( $U(0)$ ) ve diyagonal-dışı ( $\mathbf{q} \neq 0$  değeri ile  $U(\mathbf{q})$ ) bölümler olarak ikiye ayrılabilir. Diyagonal bölüm, ortalama alma sürecinde white-noise potansiyeli [Abrikosov et al., 1963] için sıfıra eşit olacak şekilde seçilmiştir.

2D sistemlerin tersine, substitutional impüritiler basit kübik 3D kristallerin  $DY$ 'si üzerinde küçük bir etkiye sahiptir. Bant merkezine çok yakın bölgede,  $\alpha_3(\varepsilon)$  için (5.17) ifadesi basitleştirilmiştir:

$$\alpha_3(\varepsilon) = \frac{3}{4\pi\tau_\pi^2\varepsilon_F^2} \left\{ 1 - \frac{\pi\sqrt{3}}{2} \sqrt{|\varepsilon|\tau} (1-i) \right\} \equiv \alpha_R + i\alpha_I \quad (5.23)$$

(5.23) ifadesini kullanarak,  $\rho^{(3)}(\varepsilon)$  şu şekilde gösterilebilir:

$$\rho^{(3)}(\varepsilon) = \frac{\rho_0^{(3)}}{\sqrt{2}} \frac{\sqrt{1 + \alpha_R + \sqrt{(1 + \alpha_R)^2 + \alpha_I^2}}}{\sqrt{(1 + \alpha_R)^2 + \alpha_I^2}} \approx \frac{\rho_0^{(3)}}{\sqrt{1 + \frac{3}{4\pi\varepsilon_F^2\tau_\pi^2} \left( 1 - \frac{\pi\sqrt{3}|\varepsilon|\tau}{2} \right)}} \quad (5.24)$$

burada  $\alpha_R(\varepsilon)$  ve  $\alpha_I(\varepsilon)$  sırasıyla  $\alpha_3(\varepsilon)$ 'nin reel ve imajineri kısımlarıdır. Denklem (5.24)  $DY$ 'nin küçük bir inişinin substitutional impüritilere bağlı olarak basit kübik 3D bir örgünün yarı-dolu bandının ortasında oluştuğunu gösteriyor (bkz. Şekil 5.4b). Bu inişin derinliği düzensizlik şiddetiyle şu şekilde artar:

$$\rho^{(3)}(\varepsilon = 0) = \frac{\rho_0^{(3)}}{\sqrt{1 + \frac{3}{4\pi\varepsilon_F^2\tau_\pi^2}}} \quad (5.25)$$

2D sistemlerin  $DY$  'si için elde edilen sonuçlar, denklem (5.19)-(22), ve 3D sistemlerin  $DY$  'si için elde edilen sonuçlar, denklem(23)-(25), 1D sistemlerin aksine substitutional impüritilerin bant merkezindeki 2D ve 3D kristallerin Fermi yüzeyi üzerindeki  $DY$  'yi azaltma eğiliminde olduklarını göstermektedir.

(5.21) ifadesindeki 2D ve (5.24) ifadesindeki 3D sistemlerde  $DY$  'nin göreceli azalma mekanizması Umklapp saçılmasıdır, aynı şey 1D  $DY$  'yi arttırmaktadır. Bununla birlikte, sıkı-bağlı modelde 2D kare bir kristalin nested Fermi yüzeyi,  $DY$  'de van Hove tekilliğine yol açan  $\left\{\pm\frac{\pi}{a},0\right\}$  ve

$\left\{0,\pm\frac{\pi}{a}\right\}$  'deki eyer noktalarını da içerir. Bu örnekteki Umklapp saçılması

$DY$  'deki merkezi van Hove tepe noktasını zayıflatır, ama yine de tepeyi indiremez veya işaretini ters çeviremez. Aşağıdaki yolla, 1D ve daha yüksek boyutlu sistemlerin  $DY$  'si üzerinde substitutional impüritilerin değişik etkileri olduğunu anlıyoruz: 1D bir düzensiz sistemde lokalizasyonun temel mekanizması impüritiler üzerinde geriye doğru saçılmadır [Lifshitz et al., 1988, Berezinskii, 1974]. Bir impüriti üzerindeki saçılma sürecinde, bant merkezindeki eşzamanlı Bragg yansıması geriye saçılmayı ileriye saçılmaya dönüştürür, ve ileriye olanı da geriye. Böylece yok denecek kadar küçük ileriye saçılma genliği için [Gorkov and Dorokhov, 1976, Gogolin and Melnikov, 1977] Bragg yansıması impüriti saçılmasına bağlı lokalizasyonu önler.

## 5.4. Zayıf Lokalizasyon

İletkenlerdeki artık direnç, elektronların impüritilerden ve statik örgü hatalarından esnek saçılması ile belirlenir. “İyi” iletkenlerde, elektronun dalga boyu  $\lambda = 2\pi\hbar/p$  ( $p$  elektron momentumudur),  $l$  ortalama serbest yolundan çok daha küçüktür. Çarpışmalar arasında elektron serbest bir parçacık gibi hareket eder ve quasi-klasik bir şekilde tanımlanabilir. Elektronik davranışın bu tanımlaması iletkenlik için meşhur Drude ifadesini üretir:

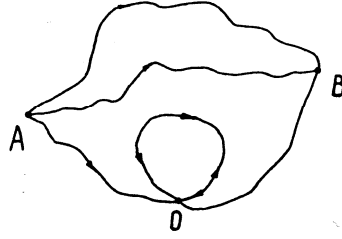
$$\sigma = \frac{e^2 \tau}{m} N \quad (5.26)$$

burada  $N$  elektron konsantrasyonu,  $m$  efektif kütle,  $\tau$  saçılmalar arasındaki zaman,  $e$  ise elektronik yüküdür. Anderson tarafından gösterildiği gibi [Anderson, 1958]  $\lambda > 1$  olduğunda yeterince yüksek bir impüriti konsantrasyonunda elektron durumları lokalize hale gelir ve artık iletme katkıda bulunmazlar. Düzensizliğin artan derecesiyle ortaya çıktığı gözlemlenen, delokalizeden lokalize durumlara geçiş Anderson faz geçişi olarak adlandırılır. Bununla birlikte,  $\lambda \ll 1$  olduğundaki yüksek metalik iletkenlik alanlarında bile, kuantum katkılar klasik Drude ifadesine eklenebilir. Bu bölümde bu katkıların fiziksel anlamlarını, büyüklüklerini ve bunlarla ilgili bazı kavramları tartışacağız.

İyi bir iletken düşünelim ( $\lambda \ll 1$ ).  $A$  noktasından  $B$  noktasına ulaşmak için (Şekil 5.5) bir parçacık, değişik yollar üzerinden gidebilir.  $A$  noktasından  $B$  noktasına bir transfer için toplam olasılık  $W$ , bir parçacığın tüm olası yollardan geçmesi olasılığının genliklerinin tümünün toplam modülünün karesini alarak bulunabilir, yani

$$W = \left| \sum_i A_i \right|^2 = \sum_i |A_i|^2 + \sum_{i \neq j} A_i A_j^* \quad (5.27)$$

Denklem (5.27)'deki ilk terim parçacığın herhangi bir yoldan geçmesi için olasılıkların toplamını, ikincisi ise çeşitli genliklerin girişimini temsil eder. Çoğu yollar için girişim önem taşımaz çünkü uzunlukları büyük bir şekilde farklılık göstermektedir ve dolayısıyla dalga fonksiyonlarının fazları da bu yollar üzerinde önemli şekilde değişiklik göstermelidir. Bu nedenle tüm yollar üzerinden toplam alırken, girişim teriminin ortalama değeri salınım yapan doğası gereği kaybolacaktır. Yine de belirli türde yollar, örneğin kendisini-kesen yollar, vardır (Şekil 5.5).



Şekil 5.5: Bir parçacığın  $A$  noktasından  $B$  noktasına gidebileceği çeşitli yollar.  $O$  noktası ise kendisini-kesen yolun kesişme noktasıdır.

Bu türden her bir yola iki adet genlik tahsis edilebilir, ilmi geçidin saat yönü ve tersi yönünü karşılamak üzere  $A_1$  ve  $A_2$ . Bu iki genlik birbiriyle uyumludur ve bu nedenle bu dalgaların girişimi ihmal edilemez. Sonuç olarak, bir parçacığı  $O$  noktasında bulma olasılığı

$$|A_1|^2 + |A_2|^2 + 2 \operatorname{Re} A_1 A_2^* = 4|A_1|^2$$

haline gelir, yani, girişimi ihmal ederek olasılıkların toplamını aldığımızda elde edeceğimiz sonucun iki katıdır. Diğer yandan, 'bir parçacığı terkettiği noktada bulma olasılığı'ndaki bir artma, 'onu  $B$  (gözlem noktası) noktasında bulma olasılığı'nda bir azalma anlamına gelir; yani, girişimden kaynaklanan, azalan bir iletkenlik veya artan bir direnç. Girişimin ihmal, elektronların klasik bir tanımı (Boltzman denklemi) anlamına gelir ve kapsamı iletkenliğe yapılan kuantum katkıları karşılar. Şimdi iletkenliğe yapılan katkıların büyüklüğünü tahmin edelim. İmpüritilerden saçılma nedeniyle elektron yolları gelişigüzel bir ilerleme kalıbı izler. Girişim genlikleri,  $\lambda^2$  tesir kesitli bir tüp içinde bulunan yollara uygundur. İletkenliğe olan kuantum katkıların göreceli büyüklüğü,  $\delta\sigma/\sigma$ , az önce gördüğümüz gibi negatiftir ve klasik bir difüzyon hareketiyle kendisiyle kesişecek şekilde bir tüp için olasılıkla orantılıdır

$$\frac{\delta\sigma}{\sigma} \approx -\int_{\tau}^{\tau_{\phi}} \frac{v\lambda^2 dt}{(Dt)^{3/2}} \quad (5.28)$$

burada  $v$  parçacık hızı ve  $D$  difüzyon katsayısıdır. Denklem (5.28)'deki integralin hesaplanması  $\tau < t < \tau_\phi$  limitleri içinde gerçekleştirilir, ki burada  $\tau_\phi$  esnek-olmayan veya spin-flip saçılma ile ilgili faz relaksasyon zamanıdır. Böylece üç boyutlu sistem için iletkenliğe kuantum katkılar,  $L_\phi = \sqrt{D\tau_\phi}$  olmak üzere

$$\delta\sigma \approx \frac{e^2}{\hbar L_\phi} + \text{const.} \quad (5.29)$$

şeklini alırlar [Anderson et al. 1979, Gor'kov et al 1979]. Denklem (5.29)'dan anlaşılacağı gibi,  $\hbar/pl \ll 1$  parametresi ile iletkenliğe kuantum katkılar küçük olmasına rağmen yine de gözardı edilmeyecek bir sıcaklık ( $\tau_\phi \approx T^{-p}$  olduğu için) veya frekans ilişkisi (denklem (5.28)'deki integralin üst limiti  $\Omega\tau_\phi \gg 1$ 'de  $\frac{1}{\Omega}$  ile ve dolayısıyla, denklem (5.29)'daki  $L_\phi$  de  $L_\Omega = \sqrt{D/\Omega}$  ile değiştirilmek zorundadır) doğurur. Şunu vurgulamak gerekir ki girişim etkileri sıcaklık azaldıkça bir direnç artışı doğururlar.

Bir tel veya filmin enlemesine büyüklüğü  $a \ll L_\phi$  olursa, parçacık  $\tau_\phi$  zamanı boyunca bir duvardan diğerine kadar olan aralıkta birçok defa difüzyon yapabilecektir, ki böylece onu enine boyutun herhangi bir noktasında bulma olasılığımız aynı olur. Sonuç olarak iletkenliğe kuantum katkıları için, örneğimizde  $d$  efektif boyutsallık (film için  $d=2$  ve tel için  $d=1$ ) olmak üzere

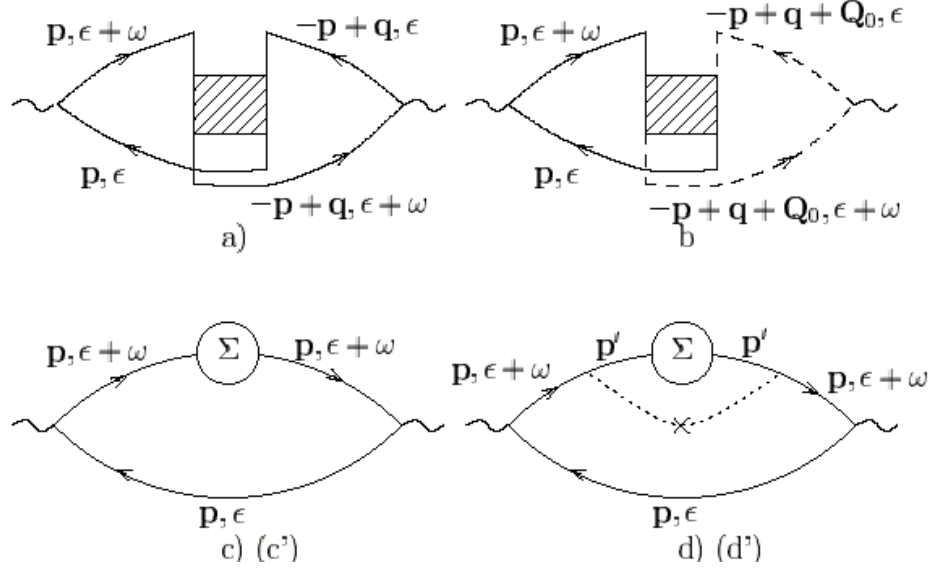
$$\frac{\delta\sigma}{\sigma} \approx - \int_{\tau}^{\tau_\phi} \frac{v\lambda^2 dt}{(Dt)^{3/2}} \frac{1}{a^{3-d}} \quad (5.30)$$

sonucuna ulaşırız. İntegral alarak şuraya geliriz:

$$\delta\sigma \propto \begin{cases} -\frac{e^2}{\hbar} \ln\left(\frac{L_\phi}{l}\right), & d = 2 \\ -\frac{e^2}{\hbar} L_\phi, & d = 1 \end{cases} \quad (5.31)$$

İzotropik sistemler için kalitatif sonuçları gözden geçirdikten sonra, yarı dolu bantta substitutional impüritilere sahip iki-boyutlu bir örgü için diyagramatik yöntemle iletkenliğe zayıf lokalizasyon katkılarını inceleyeceğiz.

Sıfır sıcaklıkta 2D Anderson modeli için DC-iletkenlik [Stein and Krey, 1980]'de hesaplanmıştır ve  $\sigma$ 'nin davranışı Fermi enerjisinin bir fonksiyonu ve düzensizlik olarak ele alınmıştır. Bununla birlikte, bu nümerik sonuçlar iletkenliğe katkı yapan süreçlerin fiziksel kaynağına sınırlı bir kavrayış olanağı sağlamaktadır. Bu bölümde, tasarladığımız model için iletkenliğe düşük sıcaklık kuantum katkılarını inceleyeceğiz. "Fan" diyagramlarının görev alanı zayıf lokalizasyon teorisinde [Gorkov et al 1979] iletkenliğe kuantum girişim katkılarıdır. Random olarak dağılmış impüritiler üzerinde çoklu saçılma sürecinin elektronik dalga fonksiyonları arasındaki girişim elektronik bir sistemin mobilitesini değiştirir ve "fan" diyagramları difüzyon katsayısına bir katkıda bulunur. Substitutional impüritileri olan basit kristal sistemin iletkenliği, elektronik bir bandın yarı-doluma yaklaşması için gerekli hale gelen impüritiler üzerindeki saçılma süreci içindeki Bragg yansımasına bağlı olan  $DY$  'deki değişimler yoluyla da etkilenebilir. İletkenliğe birinci-dereceden zayıf lokalizasyon katkısını açıklayan ve hem difüzyon katsayısını hem de  $DY$  katkılarını temsil eden diyagramlar Şekil 5.6'da gösterilmiştir.



Şekil 5.6: İletkenliğe ilk kuantum katkısı veren diyagramlar. a) ve b) sırasıyla normal ve umklapp saçılma kanallarından  $\sigma(\omega)$ 'ye olan difüzyon katsayısı katkılarını karakterize etmektedir.  $\sigma(\omega)$ 'ye DY'den gelen katkılarını gösteren c)-d) diyagramlarındaki  $\Sigma$ , Şekil 5.2'de gösterilen tüm self-enerji katkılarının toplamıdır. Diğer iki diyagram c) ve d'), c) ve d)'den elektron çizgilerinin yönü itibarı ile ayrılmaktadır.

Girişim etkilerinin düşük-boyutlu sistemler için önemli olmasından dolayı, burada yalnızca substitutional impüritileri olan 2D kare bir örgü için iletkenliğe kuantum katkılarını hesaplayacağız.

İletkenliğe kuantum katkılar Kubo ifadesine göre hesaplanır

$$\sigma_{\alpha,\beta}(\omega) = i \frac{Ne^2}{m\omega} \delta_{\alpha\beta} + \frac{2e^2}{\omega} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} v_\alpha(\mathbf{p}) v_\beta(\mathbf{p}) \langle G(\mathbf{p}, \epsilon + \omega) G(\mathbf{p}, \epsilon) \rangle \quad (5.32)$$

burada,  $G(\mathbf{p}, \epsilon)$  Green fonksiyonu ve  $\alpha = (x, y)$  elektron hızının bir bileşeni olmak üzere  $v_\alpha(\mathbf{p}) = \frac{\partial \epsilon}{\partial p_\alpha}$ ,  $\langle \dots \rangle$  parantezi ise impüritiler üzerinden ortalama

almaya işaret etmektedir. Enerji bandının merkezinden uzakta, normal saçılmaya sahip fan diyagramlarının alanı, zayıf düzensizlikte 2D etkileşmeyen elektron gazının [Gorkov et al 1979] iletkenliğe logaritmik katkılarınıdır. Bu diyagramlar Şekil 5.6'a da görüldüğü gibi merdiven serileri

şeklinde yeniden çizilebilir. Bant merkezine yaklaşıldıkça Bragg yansıması yoğunlaşır. Bu durumda bir impüriti üzerinde bir elektron saçılması hareketine Brillouin bölgesi sınırındaki Bragg yansıması eşlik edebilir. Bant merkezine yaklaşıldığındaki iletkenliğe ek katkı veren yeni diyagramlar Şekil 5.6b-d' ile gösterilmiştir.

Şekil 5.6a'daki diyagramların iletkenliğe katkısı  $\sigma_a(\omega)$ , denklem (5.32)'deki Kubo ifadesine göre aşağıdaki şekilde gösterilebilir:

$$\sigma_a(\omega) = \frac{2e^2}{\omega} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} C_N(\mathbf{q}, \varepsilon, \omega) A_\alpha^N(\mathbf{q}, \varepsilon, \omega) \quad (5.33)$$

$C_N$  burada, normal saçılma için cooperon blokudur.

$$\begin{aligned} A_\alpha^N(\mathbf{q}, \varepsilon, \omega) = & \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} v_\alpha(\mathbf{p}) v_\alpha(-\mathbf{p} + \mathbf{q}) G(\mathbf{p}, \varepsilon + \omega) \times \\ & \times G(-\mathbf{p} + \mathbf{q}, \varepsilon + \omega) G(\mathbf{p}, \varepsilon) G(-\mathbf{p} + \mathbf{q}, \varepsilon) \end{aligned} \quad (5.34)$$

Sıkı-bağlı model  $\alpha = (x, y)$  için,  $v_\alpha(\mathbf{p})$  hız bileşeni,  $v_\alpha(\mathbf{p}) = ta \sin(p_\alpha a)$  şeklinde verilir.  $\mathbf{p}$  üzerinden alınan integral  $\int \frac{dS}{(2\pi)^2 |\mathbf{v}_p|} \int d\xi$  şeklinde yazılabilir, bundan sonra  $\xi$  enerji değişkeni üzerinden integral kolayca hesaplanabilir.  $|\mathbf{v}_p| = ta \sqrt{\sin^2 p_x a + \sin^2 p_y a}$  ortadan kaybolduğu zaman yarı-dolu bant için Fermi yüzeyinin eyer noktalarında ortaya çıkan van Hove tekilliği,  $dS$  Fermi yüzeyi üzerinden alınan integralin altındaki  $v_\alpha^2(\mathbf{p})$  terimine bağlı olarak ortadan kalkar. Bu nedenle  $A_\alpha(\mathbf{q}, \varepsilon, \omega)$  değeri serbest-elektron gazı modelininkinden büyük bir farklılık göstermez ve şunu elde ederiz:

$$A_\alpha(\mathbf{q}, \varepsilon, \omega) = -p_F \tau_0^2 l \Theta(-\varepsilon(\varepsilon + \omega)) \quad (5.35)$$

(5.12) ve (5.35) ifadelerini kullanarak iletkenlik için

$$\delta\sigma^{(N)}(\omega) = \delta\sigma_a(\omega) = -\frac{e^2}{2\pi^2} \ln\left(\frac{1}{|\omega|\tau_0}\right) \quad (5.36)$$

elde edilir ki,  $\delta\sigma_a(\omega)$  iletkenliğe geleneksel zayıf lokalizasyon katkısını [Gorkov et al 1979] temsil eder. Burada  $\tau_\pi = \tau_N = \tau_0$  olarak kabul edildi.

Bant merkezinde iletkenliğe önemli bir ek katkı yapan diğer diyagramlar Şekil 5.6b-d'nde gösterilmiştir. Bu yeni diyagramların ortaya çıkışı büyük momentum transferli  $\pi$ -kanalındaki saçılmaya bağlıdır. Bant merkezindeki difüzyon katsayısına en önemli kuantum katkısı  $\pi$ -cooperon blokları ile Şekil 5.6ab'deki fan diyagramlarından gelir. Bu diyagramı karşılayan ifade şu şekilde olur

$$\sigma_b(\omega) = \frac{2e^2}{\omega} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} C_\pi(\mathbf{q}, \varepsilon, \omega) A_\pi(\mathbf{q}, \varepsilon, \omega) \quad (5.37)$$

$C_\pi(\mathbf{q}, \varepsilon, \omega)$  burada, (5.12) ifadesinde verilen  $\pi$ -cooperonudur ve

$$\begin{aligned} A_\pi(\mathbf{q}, \varepsilon, \omega) = & \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} v_\alpha(\mathbf{p}) v_\alpha(-\mathbf{p} + \mathbf{q} + \mathbf{Q}_0) G(\mathbf{p}, \varepsilon + \omega) \times \\ & \times G(\mathbf{p}, \varepsilon) G(-\mathbf{p} + \mathbf{q} + \mathbf{Q}_0, \varepsilon + \omega) G(-\mathbf{p} + \mathbf{q} + \mathbf{Q}_0, \varepsilon) \end{aligned} \quad (5.38)$$

(5.38) ifadesinin hesaplanması,  $A_\pi^N(\mathbf{q}, \varepsilon, \omega)$ 'nin hesaplanışına benzerdir.  $v_\alpha(\mathbf{k} + \mathbf{Q}_0) = -v_\alpha(\mathbf{k})$  şartını hesaba katarak  $A_\pi(\mathbf{q}, \varepsilon, \omega)$  için şu sonucu buluruz:

$$\begin{aligned} A_\pi(\mathbf{q}, \varepsilon, \omega) = & \frac{p_F l \tau_0^2}{(1 - 2i\tau_0|\varepsilon|)(1 - 2i\tau_0|\varepsilon + \omega|)} \times \\ & \times \left\{ \frac{1}{1 - i\tau_0|2\varepsilon + \omega|} \Theta(\varepsilon(\varepsilon + \omega)) + \Theta(-\varepsilon(\varepsilon + \omega)) \right\} \end{aligned} \quad (5.39)$$

Şekil 5.6c-d' ile gösterilen diyagramlar  $DY$ 'deki değişimlere bağlı olarak iletkenliğe kuantum katkıları temsil eder. Bu diyagramların toplamına karşılık gelen ifade şu şekilde verilebilir:

$$2(\sigma_c(\omega) + \sigma_d(\omega)) = \frac{2e^2}{\omega} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} C_\pi(\mathbf{q}, \varepsilon) B(\mathbf{q}, \varepsilon, \omega) \quad (5.40)$$

ve

$$B(\mathbf{q}, \varepsilon, \omega) = \frac{p_F l \tau_0^2}{(1 - 2i\tau_0|\varepsilon + \omega|)^2} \left\{ -\Theta(-\varepsilon(\varepsilon + \omega)) + \right. \\ \left. + \frac{1}{1 - i\tau_0|\varepsilon + \omega| - i\tau_0|\varepsilon|} \Theta(\varepsilon(\varepsilon + \omega)) \right\} \quad (5.41)$$

Bazı rutin hesaplamaların ardından, iletkenliğe umklapp sürecinden kaynaklanan toplam katkı için aşağıdaki ifadeyi elde ederiz:

$$\sigma_\pi(\omega) = \sigma_b(\omega) + 2(\sigma_c(\omega) + \sigma_d(\omega)) = -\frac{5e^2}{2\pi^2} \ln\left(\frac{1}{|\omega|\tau_0}\right) \quad (5.42)$$

Bant merkezinde, iletkenliğe toplam kuantum katkı geleneksel zayıf lokalizasyon katkısı ve umklapp süreçlerinden gelen katkıların toplamı olarak yazılabilir. Sonuç olarak şu ifadelerle ulaşırız:

$$\sigma_{total}(\omega) = \sigma_N(\omega) + \sigma_\pi(\omega) = -\frac{e^2}{2\pi^2} \ln\left(\frac{1}{|\omega|\tau_0}\right) - \frac{5e^2}{2\pi^2} \ln\left(\frac{1}{|\omega|\tau_0}\right) \quad (5.43)$$

$$\sigma_{total}(\omega) = -\frac{6e^2}{2\pi^2} \ln\left(\frac{1}{|\omega|\tau_0}\right) \quad (5.44)$$

Yeni diyagramatik yaklaşım yeni tekil blokların, yani  $\pi$ -cooperon  $C_\pi(\mathbf{q}, \varepsilon, \omega)$  ve  $\pi$ -difüzyon  $D_\pi(\mathbf{q}, \varepsilon)$ , bant merkezinde iletkenliğe büyük bir katkı yaptığını gösteriyor. Bant merkezinden uzakta yeni kuantum katkıları

gözden kaybolmakta ve geriye geleneksel zayıf lokalizasyonun iletkenliğe katkıları kalmaktadır.

## 5.5. Mezoskopik Dalgalanmalar

### 5.5.1. Enerji Seviyesi İtme ve Çekmesi

Son zamanlarda yapılan düzensiz sistemlerdeki elektronik seviye istatistik çalışmaları göstermiştir ki [Efetov, 1983, Altshuler and Shklovskii, 1986, Altshuler et al. 1991, Prigodin, 1993, Altland and Gefen, 1993, Kravtsov and Lerner, 1995, Mirlin, 2000] metalik fazdaki seviyeler arasındaki itmenin varlığı Wigner-Dyson istatistiğinin [Mehta, 1991] gerçekleşmesi sonucunu verir. Yeterince impüriti içeren  $d > 2$  boyutlu elektron gazı içindeki enerji seviyeleri yalıtkan bir faz içinde birbiriyle bağlantısız hale gelir ve seviye dağılımı Poisson istatistiğine [Shklovski et al. 1993] uyar. Bununla birlikte, farklı enerjilere sahip tek-parçacık durumunun overlap'i bunların dağılımını değiştiren seviye korelasyonlarına götürür. Random olarak dağılmış nokta-gibi impüritiler alanında hareket eden serbest elektronlar modeli önemli ölçüde daha önceki çalışmalarda incelenmiştir. Bir örgü için yapılan küçük bir katkı genellikle Bravais örgüsünün periyodikliğine zarar vermez. Son zamanlardaki, substitutional impüritilere sahip iki-boyutlu (2D) kare örgüler ve üç-boyutlu (3D) kübik örgülerdeki zayıf lokalizasyon etkileri çalışmaları,  $\lambda$  elektron dalga boyunun  $a$  örgü aralığı ile oranlanabilirliğine bağlı Bragg yansımaları lokalizasyon bağıntılarını önemli şekilde değiştirir [Nakhmedov et al. 2000a,b, Nakhmedov and Prigodin 2002]. 2D bir örgüde etkileşmeyen elektronlar için Fermi yüzeyinde durum yoğunluğu sıfıra gider ve 3D basit kübik bir örgünün Fermi yüzeyinde küçük bir iniş kazanır [Nakhmedov et al. 2000a,b]. Bu nedenle, nested Fermi yüzeylere sahip düzensiz 2D örgülerin fiziksel parametrelerinin statik dalgalanmasının, bant merkezine yaklaşıldıkça BR'ler tarafından nasıl değiştirildiğini incelemek ilginçtir.

Bu bölümde, BR'lerin bant merkezindeki 2D ve 3D düzensiz örgülerin seviye istatistikleri üzerindeki etkisini dikkate alıyoruz [Nakhmedov et al. 2002]. Seviye spektrumlarının önemli bir karakteristiği iki-seviyeli korelasyon fonksiyonudur

$$R(\varepsilon, \varepsilon') = \frac{1}{\rho_{0d}^2} \{ \langle \rho(\varepsilon) \rho(\varepsilon') \rangle - \langle \rho(\varepsilon) \rangle \langle \rho(\varepsilon') \rangle \}, \quad (5.45)$$

burada  $\langle \dots \rangle$  parantezleri impüriti yapılanmaları üzerinden ortalama alınması anlamına gelmektedir.  $\rho_{0d}$  ise Born yaklaşımı ile hesaplanan  $d$  – boyutlu ( $d = 2, 3$ ) örgünün  $DY$ 'sidir: sırasıyla en-yakın-komşu bölgeleri için tünelleme integrali ve esnek impüriti saçılması için relaksasyon zamanı olan  $t$  ve  $\tau_0$  ile

$$(|\varepsilon| \approx t \text{ 'de}); \quad \rho_{02} = \frac{2}{(\pi a)^2 t} \ln \left[ \varepsilon_F \min \{ \tau_0, 1/|\varepsilon| \} \right], \quad \text{ve} \quad \rho_{03} = \text{const} - \frac{2}{\pi^2 a^3 t^{3/2}} \sqrt{|\varepsilon| - t}.$$

$DY$  için,  $\rho(\varepsilon)$ 'yi retarded ( $G_R$ ) ve advanced ( $G_A$ ) Green fonksiyonları ile bağdaştıran formülü,

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi i} \int \frac{d\mathbf{r}}{v} \{ G_A(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon) - G_R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon) \}$$

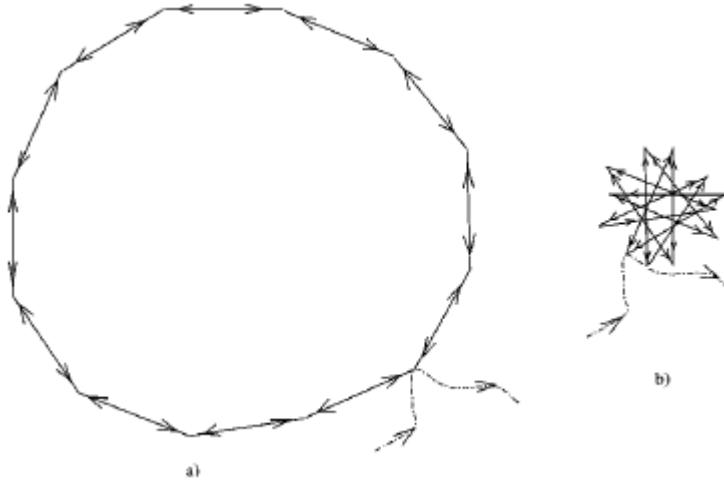
kullanarak,  $v$  “hacim” ve  $s$  de spin dejenerasyonu olmak üzere,  $R(\varepsilon, \varepsilon')$ ;

$$\begin{aligned} R(\varepsilon, \varepsilon') = & - \left( \frac{s}{2\pi \rho_{0d}} \right)^2 \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \{ \langle G_A(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \varepsilon) G_A(\mathbf{r}', \mathbf{r}'; \varepsilon') \rangle + \langle G_R(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \varepsilon) \times \\ & \times G_R(\mathbf{r}', \mathbf{r}'; \varepsilon') \rangle - \langle G_R(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \varepsilon) G_A(\mathbf{r}', \mathbf{r}'; \varepsilon') \rangle - \langle G_A(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \varepsilon) \times \\ & \times G_R(\mathbf{r}', \mathbf{r}'; \varepsilon') \rangle - 4 \text{Re} \langle G_R(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \varepsilon) \rangle \text{Re} \langle G_R(\mathbf{r}', \mathbf{r}'; \varepsilon') \rangle \} \end{aligned} \quad (5.46)$$

şeklinde ifade edilebilir. Bant merkezinden uzakta, denklem (5.46)'daki  $RA$  ve  $AR$  korelatörleri yalnızca iki-dereceli korelasyon fonksiyonuna [Altshuler and Shklovskii, 1986] katkıda bulunurlar. Bununla birlikte, nested Fermi

yüzeyleri için elektron-boşluk simetrisinin varlığı denklem (5.46)'daki  $R(\varepsilon, \varepsilon')$ 'ye  $RR$  ve  $AA$  korelatörlerinin kayda değer katkılarını doğurur.

Bilindiği gibi, time-reversal yörüngeler arasındaki girişim elektronik dalga fonksiyonunun zayıf lokalizasyonuna götürür (bkz. Ref. [Altshuler and Aronov, 1985]). Küçük açılar ile impüritiler üzerinde çoklu saçılmaya bağlı yörünge üzerinde oluşan ilmkten (Şekil 5.7a) saat yönü ve tersi yönde geçen elektron, iletim olasılığını azaltır. Bununla birlikte, nested bir Fermi yüzeyi için herbir saçılma hareketine, serbest bir elektron gazının zayıf lokalizasyon haritasını önemli bir şekilde değiştiren büyük ( $\approx \pi$ ) saçılma açısıyla BR'ler eşlik eder (Şekil 5.7b).



Şekil 5.7: a)  $i$ 'nci saçılma hareketinde, küçük  $\alpha_i$  açısı ile impüritiler üzerinden çoklu saçılmaya bağlı time-reversal yörünge. b) a)'da çizilen yörünge'nin aynısı, ancak bir farkla ki her bir saçılmaya Bragg yansıması da katılmıştır, ve  $\alpha_i + \pi$  açıları sonucunu vermektedir. Her iki şekilde de hız vektörlerinin büyüklükleri aynı olacak şekilde seçilmiştir.

$\varepsilon$  ve  $\varepsilon'$  parçacık enerjileriyle Umklapp ve normal saçılmalara bağlı parçacık-parçacık ve parçacık-boşluk kanallarındaki iki-parçacıklı impüriti blokları  $C_\pi(\mathbf{q}, \varepsilon + \varepsilon')$  ve  $C_N(\mathbf{q}, \varepsilon - \varepsilon')$ ,

$$C_{\pi}(\mathbf{q}, \varepsilon + \varepsilon') = \frac{1}{2\pi\rho_{0d}\tau_0} \left\{ \Theta(-\varepsilon\varepsilon') + \frac{\Theta(\varepsilon\varepsilon')}{(1 - i\tau_0|\varepsilon + \varepsilon'| + \gamma\tau_0)^2 + \frac{2}{d}(ql)^2 - 1} \right\} \quad (5.47)$$

$$C_N(\mathbf{q}, \varepsilon - \varepsilon') = \frac{1}{2\pi\rho_{0d}\tau_0^2} \left\{ \Theta(\varepsilon\varepsilon') + \frac{\Theta(-\varepsilon\varepsilon')}{(-i|\varepsilon - \varepsilon'| + Dq^2 + \gamma)} \right\} \quad (5.48)$$

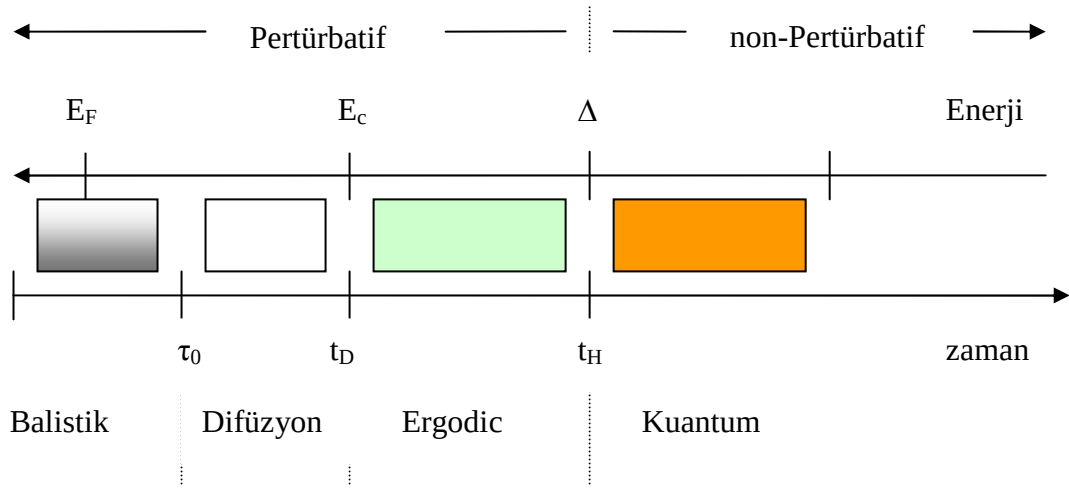
şeklinde ifade edilir [Nakhmedov et al. 2000a,b, Nakhmedov and Prigodin 2002], ki burada  $\gamma$  parametresi inelastik elektron-elektron saçılma oranına işaret etmek için konulmuştur. Aynı zamanda  $\pi$ -difüzyonu  $D_{\pi}(\mathbf{q}, \varepsilon + \varepsilon')$  de, denklem (5.47) ile gösterilir, ancak burada  $\mathbf{q}$  bir parçacığın ve tam bir  $\mathbf{Q}$  nesting vektörüne sahip bir boşluğun momentum farkı olacaktır. Dikkat edilmelidir ki “normal” Cooperon ve difüzyon blokları denklem (5.47)’deki toplam yerine  $\varepsilon$  ve  $\varepsilon'$  enerjilerinin farkına bağlıdır. Difüziv bir sistemdeki normal saçılmadan (Şekil 5.10) gelenlere ek olarak  $R(\varepsilon, \varepsilon')$ ’ye katkı sağlayan BR’lere bağlı olarak bant merkezinde yeni diyagramlar (Şekil 5.9) ortaya çıkar. Difüzyon rejiminin incelenmesinde sistemin  $L$  lineer uzunluğunun  $l$  esnek ortalama serbest yoldan daha büyük ve lokalizasyon uzunluğundan daha küçük olduğu varsayılır, ki bunlardan ikincisi exponansiyel olarak büyüktür. Enerji ölçeklerini,  $d$  – boyutlu bir sistemin  $D = v_F^2 \tau_0 / d$  difüzyon katsayısı ve  $\Delta = 1/\rho_{0d} L^d$  ortalama enerji seviye aralığı ile  $E_c = \hbar D / L^2$  Thouless enerjisi olarak kabul ederek,  $E_c / \Delta = \hbar \rho_{0d} D L^{d-2} = \left[ \sigma / (e^2 / \hbar) \right] L^{d-2} = g$ ’nin boyutsuz iletkenlik olduğunu anlamak mümkündür. Metal örneğinde  $g > 1$  olduğu için, difüziv sistem (bkz. Şekil 5.8)  $\Delta \ll E_c \ll \hbar / \tau_0$  şartı ile karakterize edilebilir. Bölüm 2’de mezoskopik fiziğin karakteristik ölçeklerini açıklamıştık. Anderson lokalizasyon etkisinin yokluğunda, difüzyon yapan parçacığın karşılaştığı farklı rejimlere kısaca bir göz atalım.

- **Balistik Rejim:** burada,  $t < \tau$  zaman ölçeklerinde bir dalga paketi Fermi hızında balistik bir şekilde yayılır. Bu rejimde parçacık dinamiği impüriti altyapısına büyük bir şekilde duyarsızlık gösterir.

- **Difüzyon Rejimi:** bir  $\tau < t < t_D \equiv L^2/D$  zaman ölçeği, arka plandaki impüriti potansiyelinden saçılmaya bağlı kuantum girişimi dalga paketinin difüziv dinamiğini doğurur. Difüzyon rejimi içinde, kuantum zayıf lokalizasyon katkıları yalın değerin altındaki difüzyon sabitini renormalize eder.  $d \leq 2$  boyutunda, bu kuantum katkılar birikir, ve en sonunda dalga paketinin tam lokalizasyonuna sebep olur.

- **Ergodic Rejim:** eğer parçacık lokalize olmazsa, eğer lokalizasyon uzunluğu sistemin ebatlarını çok fazla aşarsa,  $\xi \ll L$ ;  $t > t_D \equiv L^2/D$  zaman ölçeklerinde dalga paketi tüm sistem üzerine yayılır. Bu durumda, parçacık dinamiği “ergodic” olarak adlandırılacaktır. Burada dinamik, sistemin geometrik ve maddesel özelliklerinden bağımsız, evrensel hale geliyor. Sistemin spektrum özellikleri de random matris kümelerinkinden ayırdedilemez hale gelir.

- **Kuantum Rejimi:** son olarak  $t > t_H \equiv \hbar/\Delta$  zaman ölçeklerinde, parçacıklar, içinde, özelliklerinin bireysel enerji düzeylerinin çözümlemesi ile ilgili evrensel özellikler tarafından dikte edildiği bir rejime girerler.



Şekil 5.8: Düzensiz transporttaki ilgili zaman ve enerji ölçeklerini gösteren şematik diyagram.

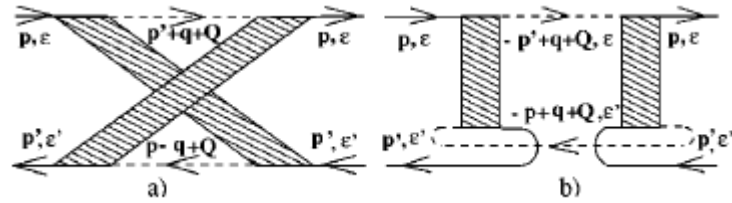
Şekil 5.9 ve 5.10'daki diyagramların katkılarını toplayarak  $R(\varepsilon, \varepsilon')$  korelatörü şu şekilde gösterilir:

$$R(\varepsilon, \varepsilon') = \frac{(s\Delta\tau_0)^2}{\beta\pi^2} \text{Re} \sum_{\mathbf{q}} \left\{ \frac{\Theta(-\varepsilon\varepsilon')}{\tau_0^2 \left( -i|\varepsilon - \varepsilon'| + Dq^2 + \gamma \right)^2} - \frac{\Theta(\varepsilon\varepsilon')}{\left[ \left( 1 - i\tau_0|\varepsilon + \varepsilon'| + \gamma\tau_0 \right)^2 + \frac{2}{d}(ql)^2 - 1 \right]^2} \right\} \quad (5.49)$$

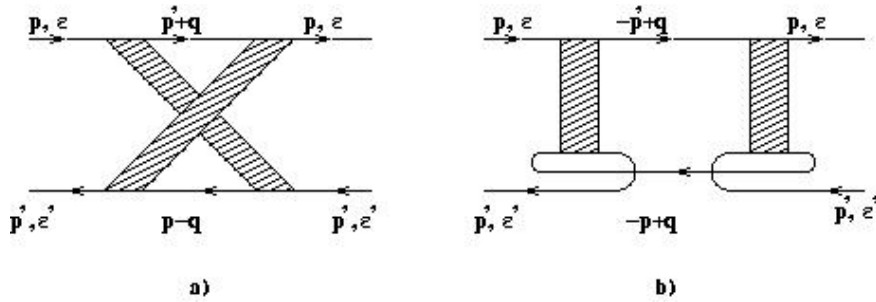
burada  $\beta$ ,  $\beta=1, 2$  ve  $4$  ile, sırasıyla, orthogonal, unitary ve symplectic kümeleri sınıflandıran Dyson indeksidir [Mehta, 1991].  $BY$  'lerin bastırıldığı bant merkezinden uzak yerlerde, yalnızca denklem (5.49)'un parantez içindeki ilk teriminin  $R$  'ye katkısı vardır. Ergodic rejimde,  $|\varepsilon \pm \varepsilon'| \ll E_c$ , sadece  $\mathbf{q}=0$  teriminin denklem (5.49)'daki  $\mathbf{q}$  üzerinden toplama içinde tutulması gereklidir. Bu nedenle

$$R(\varepsilon, \varepsilon') = -\frac{(s\Delta)^2}{\beta\pi^2} \text{Re} \left\{ \frac{\Theta(-\varepsilon\varepsilon')}{(\varepsilon - \varepsilon' + i\gamma)^2} - \frac{\Theta(\varepsilon\varepsilon')}{4(\varepsilon + \varepsilon' + i\gamma)^2} \right\} \quad (5.50)$$

gösteriyor ki Fermi yüzeyinin iki zıt tarafındaki iki seviye,  $|\varepsilon - \varepsilon'| > \gamma$  enerji farkıyla birbirini iter ve  $|\varepsilon - \varepsilon'| < \gamma$  enerji farkında ise birbirini çeker. Diğer yandan,  $|\varepsilon + \varepsilon'| > \gamma$  enerjilerine sahip iki seviye Fermi yüzeyinin aynı tarafında birbirini çekerken  $|\varepsilon + \varepsilon'| < \gamma$  enerjilerinde birbirlerini iterler. Ayrıca, Fermi yüzeyindeki iki seviyenin çekimi ( $\varepsilon = \varepsilon' = 0$ ) bant merkezine yaklaşılmakla zayıflar ve  $R(0,0)$  korelatörü bant merkezinde  $3/4$  değerine ulaşır. Dikkat edilmelidir ki bant merkezinden uzakta Fermi yüzeyinin yalnızca zıt taraflarında bulunan seviyeler birbiriyle etkileşirler. Fermi yüzeyinin aynı tarafındaki seviyelerin bir başka etkileşimi de, bant merkezinde  $BY$  'lere bağlı olarak ortaya çıkar.



Şekil 5.9: (a)  $\pi$ -difüzyon ve (b)  $\pi$ -Cooperon bloklarından  $BY$  'lere bağlı olarak metalik rejimdeki  $R(\varepsilon, \varepsilon')$   $DY$  korelatörüne birinci-dereceden ek katkılar.



Şekil 5.10: (a) difüzyon ve (b) Cooperon bloklarından normal saçılmaya bağlı olarak metalik rejimdeki  $R(\varepsilon, \varepsilon')$   $DY$  korelatörüne birinci-dereceden katkılar.

İki seviyenin,  $\varepsilon_0$  ve  $\varepsilon'_0$ 'nde merkezlenmiş ve,  $W = 2dt$  bant genişliği olmak üzere,  $E \leq W$  gibi bir enerji aralığında korelatörü, (5.49) ifadesinde verilen  $R(\varepsilon, \varepsilon')$ 'nin  $E$  enerji aralığı üzerinden integrali alınarak elde edilebilir:

$$\begin{aligned}
 \langle \delta\rho_{\varepsilon_0}(E) \delta\rho_{\varepsilon'_0}(E) \rangle &= \int_{\varepsilon_0-E/2}^{\varepsilon_0+E/2} d\varepsilon \int_{\varepsilon'_0-E/2}^{\varepsilon'_0+E/2} d\varepsilon' R(\varepsilon, \varepsilon') \\
 &= \frac{s^2}{\beta\pi^2\rho_{0d}^2} \text{Re} \left\{ \ln \frac{\gamma^2 \left[ (\varepsilon_0 - \varepsilon'_0)^2 - (E + i\gamma)^2 \right]}{\left[ \varepsilon_0^2 - (E/2 + i\gamma)^2 \right] \left[ \varepsilon'^2_0 - (E/2 + i\gamma)^2 \right]} - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{4} \ln \frac{\gamma^2 \left[ (\varepsilon_0 + \varepsilon'_0)^2 - (E + i\gamma)^2 \right]}{\left[ \varepsilon_0^2 - (E/2 + i\gamma)^2 \right] \left[ \varepsilon'^2_0 - (E/2 + i\gamma)^2 \right]} \right\} \times \\
 &\quad \times \left\{ \theta(-\varepsilon_0 \varepsilon'_0) - \frac{1}{4} \theta(\varepsilon_0 \varepsilon'_0) \right\} \left( |\varepsilon_0|, |\varepsilon'_0| \leq E/2 \right)
 \end{aligned} \tag{5.51}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \delta\rho_{\varepsilon_0}(E) \delta\rho_{\varepsilon'_0}(E) \rangle &= \int_{\varepsilon_0-E/2}^{\varepsilon_0+E/2} d\varepsilon \int_{\varepsilon'_0-E/2}^{\varepsilon'_0+E/2} d\varepsilon' R(\varepsilon, \varepsilon') \\
 &= \frac{s^2}{\beta\pi^2\rho_{0d}^2} \text{Re} \ln \left[ 1 - \frac{E^2}{(|\varepsilon_0| + |\varepsilon'_0| + i\gamma)^2} \right] \times \\
 &\quad \times \left\{ \theta(-\varepsilon_0 \varepsilon'_0) - \frac{1}{4} \theta(\varepsilon_0 \varepsilon'_0) \right\} \left( |\varepsilon_0|, |\varepsilon'_0| \geq E/2 \right)
 \end{aligned} \tag{5.52}$$

Bant merkezinden uzakta (5.51) ve (5.52) ifadelerinin parantezleri içindeki ikinci katkı, ortadan kaybolur. Bu durum continuum modeline karşılık gelir. Bununla birlikte, Fermi yüzeyinin iki zıt tarafında bulunan seviyelerin etkileşiminin  $\langle \delta\rho_{\varepsilon_0}(E) \delta\rho_{\varepsilon'_0}(E) \rangle$ 'e katkıda bulunması gerçeği, Ref. [Altshuler and Shklovskii, 1986] içinde hesaba katılmamıştır. Denklem(5.51) ve (5.52)'den anlaşıldığı gibi iki-seviyeli korelasyon fonksiyonu  $\varepsilon_0 = \varepsilon'_0$  olduğunda bile büyük ölçüde  $E$  enerji-şeridinin-ortasına bağlıdır. Ortası

Fermi düzeyi civarında olan bir enerji varyansının  $\langle [\delta\rho_{\varepsilon_0}(E)]^2 \rangle$ , enerjiye logaritmik bağlı olduğu görülür:

$$\begin{aligned} \langle [\delta\rho_{\varepsilon_0=0}(E)]^2 \rangle &= \frac{2s^2(1-f)}{\beta\pi^2\rho_{0d}^2} \ln\left[\frac{E}{\gamma}\right] \quad (E/2 < \gamma < E) \\ &= -\frac{2s^2(1-f)}{\beta\pi^2\rho_{0d}^2} \ln\left[\frac{E}{4\gamma}\right] \quad (\gamma < E/2) \end{aligned} \quad (5.53)$$

burada  $f$  BY 'leri karakterize eden parametredir:  $f = 1/4$  bant merkezinde ve  $f = 0$  bant merkezinden uzakta. Denklem(8)'e göre  $E/2 < \gamma < E$  enerjileri için seviyelerdeki Dyson itmesi  $E > 2\gamma$  gibi büyük enerji uzaklıkları için bir çekime dönüşür.

Difüzyon limiti için,  $E \ll E_c$  olduğunda, (5.49) ifadesindeki  $\mathbf{q}$  üzerinden alınan toplam integral ile değiştirilebilir. Sonuç olarak DY varyansı  $\langle [\delta\rho_{\varepsilon_0=0}(E)]^2 \rangle$  için aşağıdaki ifadeleri elde ederiz:

$$\langle [\delta\rho_{\varepsilon_0=0}(E)]^2 \rangle = \frac{(\sqrt{2}-1)(1-f)s^2}{6\pi^3\beta\rho_{03}^2} \left(\frac{E}{E_c}\right)^{3/2} \quad (d=3) \quad (5.54)$$

$$\langle [\delta\rho_{\varepsilon_0=0}(E)]^2 \rangle = \frac{(1-f)s^2}{4\pi^3\beta\rho_{02}^2} (E\tau_0) \left(\frac{E}{E_c}\right) \quad (d=2)$$

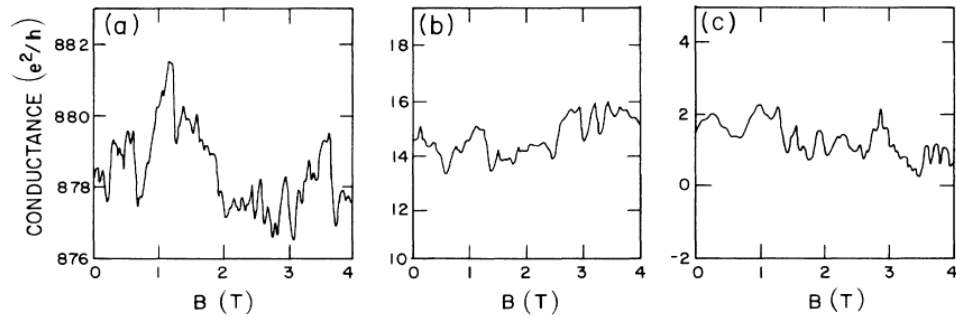
$d=2$  örneğinde, denklem (5.54)'teki  $\langle [\delta\rho_{\varepsilon_0=0}(E)]^2 \rangle$ 'e  $E$ 'deki lineer katkılar tamamen iptal edilir ve dalgalanmalar 3D sistemlerdeki kadar güçlü olmaz. Bu, 2D sistemlerdeki seviyelerin lokalize karakteriyle ilgili gibi görünmektedir.

DY 'deki dalgalanmalar üzerine çalışmamız random bir potansiyelde etkileşmeyen elektronlar örneğiyle sınırlı kaldı. Şunu kolayca söyleyebiliriz ki  $T=0$ 'da etkileşimler difüzyon rejiminde evrensel DY dalgalanmalarının nümerik değerini etkilemezler. Bu gerçek, periyodikliğin etkisinin elektron

efektif kütlesine dahil edilebileceği bant merkezinden uzaktaki modelimizle tanımlanan 2D elektron gaz modeli için açık bir şekilde Lee et. al. [Lee et al. 1987] tarafından gösterilmiştir. Sonlu bir sıcaklıkta, etkileşimler sonlu bir inelastik saçılma oranı ortaya koyarlar ki bu oran impüriti merdiven bloklarının difüzyon kutuplarını sona erdirir.

### 5.5.2. İletkenlik Dalgalanmaları

İletkenlik dalgalanmaları iletkenin içindeki elektronun izlediği çeşitli karmaşık yollar arasındaki girişimden doğmaktadır [Lee et al. 1987];  $L_\phi$  ile kıyaslanabilir veya daha küçük ebatta bir iletken için bu katkının ortalaması ortadan kalkmaz. Tüm olası girişim terimleri random olarak iletkenliğe katkı yaptıkları için, mikroskobik düzensizliği karakterize eden özdeş parametrelere, örneğin difüzyon sabiti gibi, sahip sistemler, belirli impüriti yapılanmalarından kaynaklanan belirli girişim yolları kümesine bağlı olarak çok farklı iletkenliğe sahiptirler. İletkenliğin dış bir manyetik alan fonksiyonu olarak ölçülmesi (bkz. Şekil 5.11) impüriti yapılanmalarının mikroskobik istatistiksel haritasının çıkarılmasına izin verir çünkü karmaşık yollar kümesinin ürettiği girişim kalıpları, farklı manyetik akı değerleri için değişmektedir.



Şekil 5.11: Üç farklı sistemde aperiodyk manyeto iletkenlik dalgalanmalarının karşılaştırılması [Lee et. al. 1987], (a) gold ringde  $g(B)$ , (b) quasi-1D silikon MOSFET, (c) Anderson modeli için  $g(B)$ 'nin nümerik hesaplaması.

Bu bölümde iletkenliğin mezoskopik dalgalanmaları üzerindeki umklapp saçılmasının etkilerini ele alıyoruz. Bant merkezinden uzakta Fermi yüzeyi yaklaşık olarak bir küre gibi olduğunda statik iletkenlikteki dalgalanmaların varyansı [Altshuler, 1985] Şekil 5.12’de verilen diyagramlar ile düzenlenmiştir. Bu diyagramlar continuum ve izotropik sistemler için birçok yazar tarafından da [Altshuler et. al. 1991, Altshuler, 1985, Lee and Stone, 1985] hesaplanmıştır. Şekil 5.13’de verilen diyagramlardan gelen  $BY$  ’lere bağlı iletkenlik varyansına diğer katkılar olabilir. İmpüritiler üzerindeki normal ve umklapp saçılmalara bağlı iletkenlik dalgalanmalarına toplam katkı

$$\langle \delta G_{\alpha\beta} \delta G_{\gamma\mu} \rangle = G_D^2 \{ \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\mu} + \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\gamma} \} + G_\rho^2 \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\mu} \quad (5.55)$$

ifadesi ile verilir, burada Altshuler ve Shklovskii notasyonunu [Altshuler and Shklovskii, 1986] izledik. Bu notasyonda difüzyon katsayısından ve  $DY$  dalgalanmalarından  $\langle \delta G_{\alpha\beta} \delta G_{\gamma\mu} \rangle$  iletkenlik varyansına gelen katkılar sırasıyla sıcaklığa bağımlı  $G_D^2$  ve  $G_\rho^2$  katsayıları ile gösterilmiştir.

$G_D^2$  ve  $G_\rho^2$  nin gösterimleri  $f(x) = (x \cot x - 1) / \sinh^2 x$  olmak üzere;

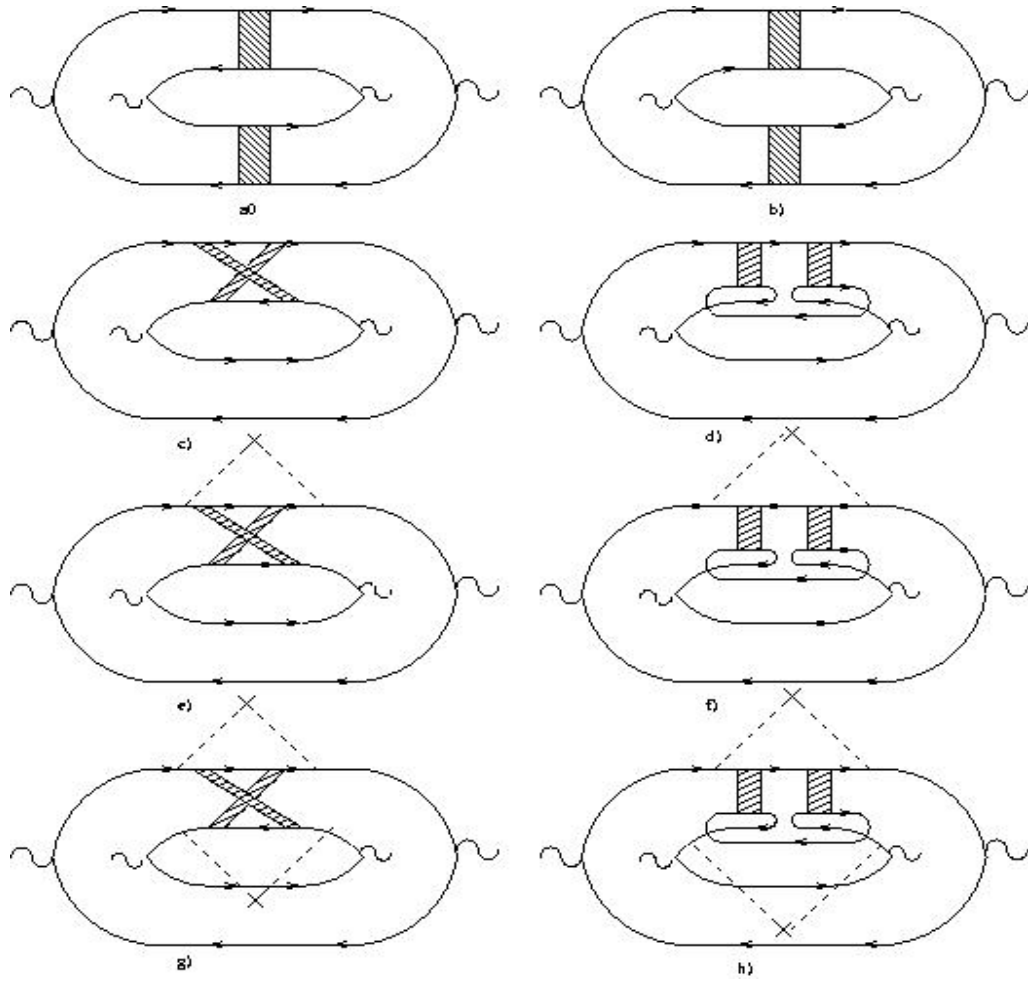
$$G_D^2 = \frac{s^2}{\beta} \left( \frac{e^2}{\hbar} \frac{E_c}{\pi} \right)^2 \int \frac{d\varepsilon}{2T} f\left(\frac{\varepsilon}{2T}\right) \times \quad (5.56)$$

$$\times \sum_q \left\{ \frac{1}{|Dq^2 - i\varepsilon|^2} + \frac{\tau_0^2}{\left| (1 - i\varepsilon\tau_0)^2 + \frac{2}{d}(ql)^2 - 1 \right|^2} \right\}$$

ve

$$G_\rho^2 = \frac{s^2}{\beta} \left( \frac{e^2}{\hbar} \frac{E_c}{\pi} \right)^2 \int \frac{d\varepsilon}{2T} f\left(\frac{\varepsilon}{2T}\right) \text{Re} \sum_q \frac{1}{(Dq^2 - i\varepsilon)^2} \quad (5.57)$$

şekilde verilebilir. Denklem(5.56)'da parantez içindeki ikinci terim  $\pi$ -saçılmalarına bağlı olarak Şekil 5.13'de verilen diyagramlardan gelir. Bununla birlikte,  $BY$  'lerin  $G_p^2$ 'ye herhangi bir katkısı yoktur. Thouless ifadesine göre [Thouless, 1977] yalnızca, ortası Fermi düzeyinde olan  $E_c$  aralığında bulunan tek-elektron seviyeleri iletkenliğe katkıda bulunurlar. Fermi yüzeyinin aynı tarafında korelasyonlanmış seviyelerin  $G_p^2$ 'ye katkıları birbirini iptal eder.



Şekil 5.12: Normal saçılmaya bağlı olarak iletkenlik varyansına katkı sağlayan diyagramlar.



$T \ll E_c$  olduğu durumda  $G_D^2$  ve  $G_\rho^2$ 'nin değerleri birbirinden büyük ölçüde farklılık gösterirler ve sıcaklığa bağlı olurlar:

$$G_\rho^2 = \frac{s^2}{\beta} \left( \frac{e^2}{2\pi\hbar} \right)^2 a_d \left( \frac{E_c}{T} \right)^{(4-d)/2} \quad (5.59)$$

ve

$$G_D^2 = \begin{cases} \frac{1}{2}(1+f)G_\rho & (d=3) \\ (1+f)\frac{s^2}{\beta} \left( \frac{e^2}{2\pi\hbar} \right)^2 \frac{E_c}{T} \ln \frac{T}{\max\{E_c, \gamma\}} & (d=2) \end{cases} \quad (5.60)$$

burada  $a_d$  bir katsayıdır [Altshuler, 1985]. (5.59) ve (5.60) ifadelerinden görülebileceği gibi iletkenlik varyansına temel katkı difüzyon katsayısının bant merkezinde yoğunlaşan dalgalanmasından gelmektedir. Ekstra önfaktör  $(1+f)$  ile varyansın artması, elektronların impüritiler üzerindeki umklapp saçılmasının,  $G$  dağılım fonksiyonunu değiştirmesi anlamına gelir. Random matris teorisi dilinde, düzensiz bir sistemin yalıtkan bir fazı, random elemanları olan bir  $N \times N$  diyagonal matris kümesi ile çözümlenebilir.  $N \times N$  matrisi içinde, difüziv sistemler içindeki farklı enerjilerin overlap durumlarına bağlı olarak diyagonal-dışı terimlerin mevcudiyeti dağılım fonksiyonunu bir Poisson fonksiyonundan bir Wigner-Dyson fonksiyonuna dönüştürür. Büyük momentum transferi ile impüritiler üzerinde saçılma da diyagonal-dışı matris elemanlarına ek katkılar sağlar. Bu nedenle, umklapp saçılmasına bağlı olarak dağılım fonksiyonunda ortaya çıkan değişme makuldür. İki-seviyeli korelasyonlar, seviyelerin birbirlerini çekip çekmedikleri veya itip itmediklerine ve bu seviyelerin Fermi yüzeyinin aynı ya da zıt tarafındaki göreceli konumlarına duyarlıdır. Bununla birlikte, iletkenlik dalgalanmaları, seviye etkileşimlerinin ve seviye konumlarının karakterine duyarlı değil gibi görünmektedir; hem çekim hem de itme  $\langle \delta G_{\alpha\beta} \delta G_{\mu\nu} \rangle$ 'e benzer katkılar yaparlar. Bu gerçek, neden  $\langle [\delta \rho_{\varepsilon_0}(E)]^2 \rangle$  için denklem (5.53) ve (5.54) ile

denklem (5.58)-(60)'ın  $BY$  'lerden gelen  $f$  faktörünü farklı şekilde içerdiklerinin sebebi gibi görünmektedir.

İletkenlik dalgalanmaları random bir potansiyelde etkileşmeyen elektronlar örneğiyle sınırlı tutuldu. Şunu kolayca gösterebiliriz ki  $T = 0$  'da etkileşimler difüzyon rejiminde evrensel iletkenlik dalgalanmalarının nümerik değerini etkilemezler. Bu gerçek, periyodikliğin etkisinin elektron efektif kütesine dahil edilebileceği bant merkezinden uzaktaki modelimizle tanımlanan  $2D$  elektron gaz modeli için Lee et. al. [Lee et al. 1987] tarafından da açık bir şekilde doğrulanmıştır. Sonlu sıcaklıkta etkileşimler, impüriti merdiven bloklarının difüzyon kutuplarını sona erdiren, sonlu, inelastik bir saçılma oranı ortaya koyarlar.

Son zamanlarda üretilen  $C_{60}$  –tabanlı novel (field-effect transistor - *FET*) aygıtları [Schön et. al. 2001] gate potansiyelini değiştirerek bant doluluğunu kontrol etme olanağı sunmaktadır. Tek bir  $C_{60}$  kristali bir yalıtıcıdır ve yaklaşık  $2\text{ eV}$  'lik bir bant gapine sahiptir. Bant doluluğu, yine de, ya bir kimyasal katkı ile [Dresselhaus et. al. 1994] ya da bir *FET* yapısında bir gate potansiyeli uygulayarak [Schön et. al. 2001] değiştirilebilir. Üç elektronun  $C_{60}$  molekülüne katılması ile bant merkezine ulaşılır. Dikkat edilmelidir ki,  $C_{60}$  –tabanlı *FET* yapısı üzerine son araştırmalar bu maddenin süperiletkenlik özelliklerine odaklanmıştır ve bu nedenle, tek  $C_{60}$  kristali Schön et. al. tarafından aşırı temiz olduğu için seçilmiştir. Bravais örgüsünün periyodikliğini korurken, substitutional impüritilerle fullerites'e katkı imkanı, bu aygıtlarda bant merkezindeki mezoskopik dalgalanmalar üzerindeki oranlanabilirlik etkilerinin gözlemlenmesine olanak sağlayacaktır.

### 5.5.3. Simetri Özellikleri

Düzensiz sistemlerdeki enerji seviyelerinin istatistiksel özellikleri Hamiltoniye'nin simetrisi ile belirlenir, Cartan'ın simetrik uzaylar ailesine göre random matris kümelerinin tüm olası evrensellik sınıflarını yakın

zamanda Zirnbauer sınıflandırmıştır [Zirnbauer, 1996]. Kendisi, mevcut üç Wigner-Dyson random matris sınıfından ayrı, üç chiral simetrik sınıf ve dört Bogolyubov–de Gennes sınıfının da var olduğunu gösterdi. Time-reversal ( $TR$ ) veya spin-rotasyonel ( $SR$ ) invaryansa bağlı olarak farklı sınıflar içinde de alt-bölümler ortaya çıkmaktadır. Bizim modelimizin, evrensel random matris kümelerinin hangi sınıfına ait olduğunu netleştirmek için, ikinci kuantizasyon operatörleri  $\psi_\sigma(\mathbf{r})$  aracılığıyla yazılan impüriti Hamiltoniyen’inden başlamalıyız

$$H_{imp} = \sum_\sigma \int d\mathbf{r} \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) U_{imp}(\mathbf{r}) \psi_\sigma(\mathbf{r}) \quad (5.61)$$

burada

$$U_{imp}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{I}} V_{eff}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_I) = \sum_{\mathbf{I}} [V_{imp}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_I) - V_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_I)] \quad (5.62)$$

yani,  $\mathbf{I}$  bölgesinde yer alan impüriti civarındaki bir elektron, impüriti potansiyeli  $V_{imp}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_I)$  ile asıl atom potansiyeli  $V_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_I)$ ’nin farkı olan  $V_{eff}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_I)$  potansiyelini “hisseder”. Katkı atomları, yerli atomlardan birine komşu bir kimyasal element grubuna ait olduğunda,  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_I$ ’de  $V_{eff}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_I)$  sıfıra gider, ve tail’de sıfırdan farklı olur, çünkü bir katı içindeki bir pertürbasyon alanının tipik örneği, yüklü bir impüriti civarındaki elektrostatik alandır.  $H_{imp}$  içindeki  $\psi$  operatörlerini orthogonal Wannier fonksiyonları  $w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_I)$  üzerinden şu şekilde açarsak

$$\psi_\sigma(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{n}} c_{\mathbf{n},\sigma} w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_I) \quad (5.63)$$

impüriti Hamiltoniyeni, “site” gösteriminde yazılabilir,

$$H_{imp} = \sum_{\sigma, \langle \mathbf{n}, \mathbf{m} \rangle} t_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} c_{\mathbf{n}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{m}, \sigma} \quad (5.64)$$

ki bu en-yakın-komşu bölgeleri arasındaki hoppinge katkı yapmaktadır. Hamiltoniye'nin son şekli diyagonal-dışı düzensizliği karşılayan problemde ele alınan düzensizliği gösterir. Kimyasal potansiyelin değişen değerleri ile binary düzensiz bir  $d$  – boyutlu substitutional alaşımın idealize edilmiş durumunu tanımlayan, randomnessun diğer bir modeline –yani, diyagonal düzensizliğe– işaret etmekte fayda vardır. Diyagonal düzensizlik, lokalizasyon uzunluğunun  $l$  ortalama serbest yol ile kıyaslanabilir büyüklükte olduğu ve difüzyon rejiminin yokluğuna bağlı olarak kimyasal potansiyelin bölgeden bölgeye değişen bir varyasyonuna yol açtığı 1D düzensiz sistemlerde de gerçekleştirilebilir. Lokalizasyon uzunluğunun eksponansiyel olarak büyük değeri  $\xi_{loc}$ ,  $\xi_{loc} \propto l \exp(\varepsilon_F \tau_0)$ , yine de, 2D zayıf düzensiz sistemlerde  $L \propto \xi_{loc}$  için metalik rejimin gerçekleşmesine imkan verir. Fan-diyagram tekniğini uygulayarak, kimyasal potansiyelin belirli bir değeri ile 2D metalik bir sistemdeki randomness üzerinden ortalama almak için, atom bölgelerindeki enerji dalgalanmalarını ihmal ederiz, çünkü impüritilerden esnek bir saçılma hesaba katılır ve hesaplamalarda  $\langle V_{eff} \rangle = 0$  ile  $\delta$ –korelasyonlu white-noise potansiyeli kullanılır. Oppermann ve Wegner'i izlersek, [Oppermann and Wegner, 1979, Gade, 1993] örgü iki alt-örgüye bölünebilir, ki böylece Hamiltoniye yalnızca farklı alt-örgüleri birleştiren matris elemanlarını içerir ve saf bir şekilde diyagonal-dışı hale gelir. Blok diyagonal-dışı Hamiltoniye, Pauli matrisi  $\sigma_3$  ile anticommute eder. Bu tür bir simetri genellikle chiral simetri olarak anılır [Zirnbauer, 1996, Altland and Simons, 1999]. Modelin tek-parçacık Green fonksiyonu bant merkezinde chiral simetriyi içerir, ki bu, bantın ortasına yaklaşıldıkça  $DY$  ve iletkenliğin alışılmadık bir davranışına yol açar. Bu nedenle, çalışmamızda incelenen model hem  $TR$  hem de  $SR$  invaryansının varlığındaki chiral simetriye uyar.

## 6. DÜZENSİZ SİSTEMLERDE YARI-DOLU BANTTA ELEKTRONİK KORELASYONLAR

Bir-boyutlu  $1D$  ve iki-boyutlu  $2D$  elektronik sistemlerdeki etkileşim ve randomness etkilerinin rekabeti düşük-sıcaklık fiziğindeki en ilgi çekici konulardan biridir. Bant merkezinden uzaktaki bir  $1D$  metalin gelişigüzel dağılmış impüritilerinin etkileşmeyen bir elektron gazının [Berezinskii, 1974] bütün elektronik durumlarını lokalize ettiği görülmüştür. Bununla birlikte, bant merkezinde ortaya çıkan Bragg yansımaları, durumların delokalize olmasına ve bandın ortasında durum yoğunluğunun ( $DOS$ ) artmasına yol açar ki bu etki “Dyson tekiliği” [Lifshits et al. 1988, Dyson, 1953] olarak bilinir. Düzensizliği olmayan  $1D$  korelasyonlu bir elektron gazı Luttinger liquid teorisi [Voit, 1994] ile tanımlanır.

$2D$  Sistemlerdeki düzensizlik ve etkileşim ilişkisi problemi  $1D$  sistemlerde olduğu kadar karmaşıktır. Gerçekten de,  $2D$  elektron gazının tüm durumları, impüriti konsantrasyonunun ne kadar küçük olduğuna bağlı olmaksızın lokalize olacağı gösterildi [Abrahams et. al. 1979]. Bant merkezinden uzaktaki  $2D$  düzensiz bir metal içinde difüzyon yaparak hareket eden elektronlar arasındaki zayıf Coulomb etkileşimlerinin lokalizasyon etkisini arttıracak gösterildi [Altshuler et. al. 1980, Altshuler and Aronov, 1985, Fukuyama, 1985]. Nested bir Fermi yüzeyine sahip  $2D$  temiz bir örgünün temel seviyesi, belirli bir küçüklükteki Coulomb etkileşimi altında antiferromanyetik bir spin gap'ine uygun olarak kararsız hale gelir [Hirsch, 1985] ve güçlü etkileşimlerde bir Mott gap'i oluşturur. Substitutional impüritilere [Nakhmedov et. al. 2000a,b] sahip bir örgü üzerindeki bir  $2D$  elektron gazının iletkenliği ve  $DY$  üzerine son çalışmalar etkileşmeyen sistemler için bant merkezindeki oranlanabilirlik etkileri  $1D$  sistemler için elde edilenlere [Weissman and Cohan, 1975] zıttır, ki bu nedenle uygun Bragg yansımasının eşlik ettiği bir impüriti saçılmasının Fermi düzeyinde elektronik durum

yoğunluklarını azalttıkları gösterilmiştir. Makul zayıflıkta düzensiz 2D elektronik sistemlerdeki etkileşim etkileri henüz tam olarak incelenmemiştir. Dikkat edilmesi gereken nokta şudur ki, yakın zamanlarda incelenen, 2D elektronik sistemlerdeki düşük sıcaklıklarda ( $T \leq 2 \text{ K}$ ) ortaya çıkan metal-yalıtkan faz geçişi (metal-insulator transition - *MIT*) [Abrahams et. al. 2001, Kravchenko et. al. 2001] “geleneksel” lokalizasyon teorisi çerçevesinde açıklanamaz ve halen düzensiz sistemler fiziğindeki temel öneme sahip, yanıt bulmaya çalışılan konulardan biridir. Yüksek mobiliteye sahip metal-oksit-yarıiletken field-effect transistörlerdeki (*MOSFET*'s) direncin ölçümleri gösterdi ki düşük elektron yoğunluklarındaki,  $n < n_c$ , yalıtkan davranışı,  $n$  elektron yoğunluğu  $n_c = 9.02 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  kritik değerine ( $n > n_c$  için) ulaştığında metalik duruma geçmektedirler.  $e-e$  etkileşimlerinin zayıf olacağı tahmin edilen *GaAs/AlGaAs*'da [Ribeiro et. al. 1999] *MIT*'in gözlemlenmesi korelasyonların etkisinin, hayati öneme sahip olmasına rağmen, *MIT*'e götüren tek etken olmadığını gösteriyor.

## Kısa Menzilli Elektronik Korelasyonlar

Bu bölümde kısa-menzilli coulomb etkileşimlerinin yarı-dolu enerji bandı için substitutional impüritilere sahip 2D kare ve 3D kübik örgüler üzerindeki etkilerini inceleyeceğiz. Bant merkezinden uzaktaki bir  $DY$ 'ye kuantum katkı sınıfının bant merkezine yaklaştıkça işaretini değiştirdiğini göstereceğiz [Nakhmedov and Prigodin 2002].  $DY$ 'nin bu şekildeki bir davranışı  $\sigma(T)$  iletkenliği için gözlenene benzer [Abrahams et. al. 2001, Kravchenko et. al. 2001]. Düzensizliğe sahip yarı-dolu Hubbard modelindeki iletkenliğin yakın zamanlarda yapılan bir hesaplaması da yine system parçacık-boşluk simetrisi kazandıkça  $d\sigma/dT$ 'nin işaretinde bir değişme olduğunu göstermektedir [Denteneer et. al. 2001].

Substitutional impüritilerin random alanında etkileşen elektronların Hamiltoniyen'i Bloch-state gösteriminde aşağıdaki şekilde yazılabilir:

$$\begin{aligned}
\hat{H} = & \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{p}) c_{\mathbf{p}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{p}, \sigma} + \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{G}, \sigma} \rho_{imp}(\mathbf{q}) V_{imp}(\mathbf{G} + \mathbf{q}) c_{\mathbf{p}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{p} + \mathbf{q} + \mathbf{G}, \sigma} + \\
& + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \mathbf{G}, \sigma, \sigma'} U(\mathbf{G} + \mathbf{q}) c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}', \sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}' - \mathbf{q}, \sigma'} c_{\mathbf{k} + \mathbf{q} + \mathbf{G}, \sigma}
\end{aligned} \tag{6.1}$$

burada;  $t$  ve  $a$  sırasıyla en-yakın-komşu bölgeleri için tünelleme integrali ve örgü aralığı olmak üzere

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \begin{cases} t[2 - \cos(p_x a) - \cos(p_y a)], & (d = 2) \\ t[3 - \cos(p_x a) - \cos(p_y a) - \cos(p_z a)], & (d = 3) \end{cases} \tag{6.2}$$

(6.1) ifadesindeki  $V_{imp}(\mathbf{q})$  ve  $U(\mathbf{q})$  sırasıyla, tek-impüriti potansiyeli ve kısa-menzilli e-e etkileşim potansiyelinin Fourier transformudur;  $\mathbf{G}$  ise ters örgü vektörüdür.  $L$  sistemin lineer bir boyutu ve  $\mathbf{R}_{\alpha}$  de bir örgü bölgesinde random olarak yer alan bir impüritinin koordinatı olmak üzere  $\rho_{imp}(\mathbf{q}) = L^{-2} \sum_{\alpha} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{R}_{\alpha})$ .

Bant dolumunu değiştirerek, Brillouin bölgesi sınırındaki elektronik dalganın Bragg yansımaları  $\lambda$  elektron dalga boyunun makul değeri ve  $a$  örgü sabiti için yoğunlaşır. Bandın ortasına yaklaştıkça önem kazandıkları için bant merkezindeki Bragg yansımalarının etkilerini inceleyeceğiz. Denklem (6.2)'de verilen enerji dağılımı için Fermi yüzeyi bant merkezinde düzdür ve  $\mathbf{Q} = \{\pm\pi/a, \pm\pi/a\}$  vektörleri ile tüm bölümleri nested olmuştur. Fermi yüzeyinin tam nesting'i  $\mathbf{Q}$ 'ya uygun olarak elektron spektrumu için aşağıdaki elektron-boşluk simetri ilişkisinin doğmasına sebep olur:

$$\varepsilon(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) - \varepsilon_F = -[\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon_F] \tag{6.3}$$

burada  $\varepsilon_F$  Fermi enerjisidir ve yarı-doluluk durumu için  $\varepsilon_F = 2t$  ( $d = 2$ ) ve  $\varepsilon_F = 3t$  ( $d = 3$ )'tür. Dikkat edilmesi gereken nokta; sıkı-bağlı modelde  $t'$  yani ikinci yakın komşulara hopping terimi Fermi yüzeyinin tam nestingini

bozmaktadır. Bununla birlikte,  $t'/t=0.165$  için  $Q^*=0,91Q$  ile en uygun nesting ortaya çıkmaktadır [Ruvalds et. al. 1995].

### 6.1.1. Elektronik Durumlara İki-boyutta Korelasyon Katkıları

Küçük bir bant doluluğu ve rasyonel noktalardan uzak yerler için ele almakta olduğumuz modelin Fermi yüzeyi bir küre gibi görünür, bu nedenle periyodikliğin etkisi elektronik efektif kütleye dahil edilebilir. Bu durum impürtilerin random alanında gezinen bir elektron gazınıninkinden farklı değildir. Bu model için  $DY$ 'ye quantum katkılar [Altshuler et. al. 1980, Altshuler and Aronov, 1985, Fukuyama, 1985] referanslarında hesaplanmıştır. Difüzyon kanalındaki etkileşimlerden doğan  $DY$ 'ye birinci-derece quantum katkı aşağıdaki şekilde gösterilebilir [Altshuler et. al. 1980, Altshuler and Aronov, 1985]:

$$\delta\rho_N^{(D)}(\epsilon, T) = -\rho_0^{(2d)} \left[ \frac{U(0,0) - 2U(\mathbf{p}-\mathbf{p}',0)}{4\pi^2\hbar D} \right] \ln \left[ \frac{1}{\tau_0 \max\{\epsilon, T\}} \right] \quad (6.4)$$

burada  $D$  difüzyon katsayısıdır; ki  $v_F$  ve  $\tau_0$  sırasıyla Fermi hızı ve normal saçılmalar için impüriti relaksasyon zamanı olmak üzere  $D = v_F^2 \tau_0 / 2$  ve

$\rho_0^{(2d)} = \frac{m}{2\pi\hbar^2}$ 'dir.  $U$  etkileşim potansiyelinin üzerindeki çizgi Fermi yüzeyi

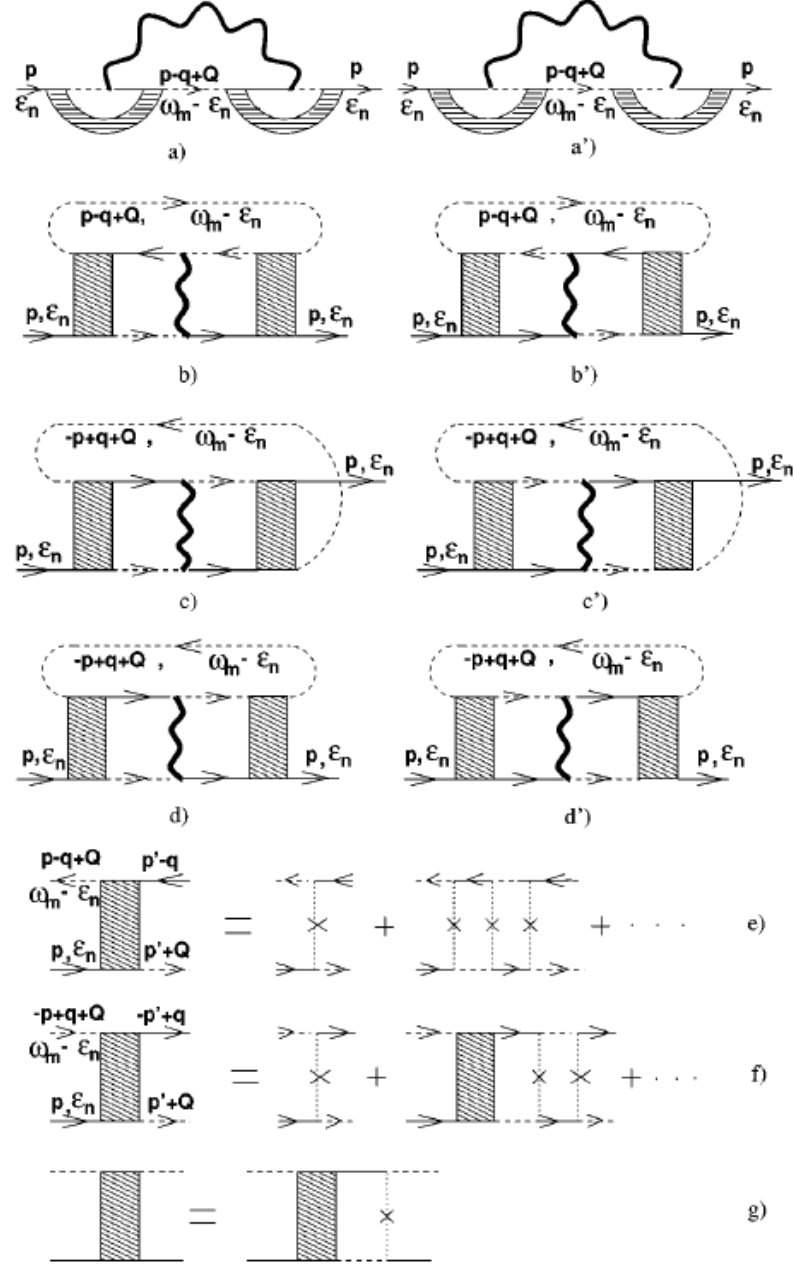
üzerinden ortalamayı göstermektedir ve Hartree katkı terimindeki 2 ilave önfaktörü ise spin dejenerasyonundan gelmektedir. Cooper kanalındaki etkileşimler bant merkezinden uzaktaki  $DY$ 'ye aşağıdaki katkıyı yapmaktadır:

$$\delta\rho_N^{(C)}(\epsilon, T) = -\frac{1}{2\pi^2\hbar D} \ln \frac{\ln T_c \tau_0 / \hbar}{\ln T_c / \max\{\epsilon, T\}} \quad (6.5)$$

burada  $T_c = \epsilon_F \exp(1/\lambda)$  ve  $\lambda = \rho_0^{(2d)} U$  boyutsuz etkileşim sabitidir. Bant merkezinden uzakta difüzyon kanalındaki kısa-menzilli etkileşimin dinamik

olarak perdelenmesi yalın etkileşim potansiyelini kayda değer şekilde değiştirmezken, Cooper kanalında önemli ölçüde renormalize edilir [Larkin, 1980].

Bant merkezinde Bragg yansımaları ve elektron-elektron korelasyonlarından kaynaklanan  $DY$ 'ye yeni kuantum katkılar ortaya çıkar. Herkesin bildiği gibi, termodinamik ve kinetik katsayılara kuantum girişim katkıları *difüzyon* ve *Cooperon* blokları olarak tabir edilen tekli impüriti merdiven serilerinden gelir [Altshuler and Aronov, 1985].



Şekil 6.1: Bragg yansımaları sebebiyle bant merkezindeki  $DY$  'ye, (a), (a') ve (c), (c') exchange etkileşimlerinden; (b), (b') ve (d), (d') ise doğrudan etkileşimlerden gelen katkılar. (e) ve (f) sırasıyla  $D_\pi(\mathbf{q}, i\omega_m)$   $\pi$ -difüzyonu ve  $C_\pi(\mathbf{q}, i\omega_m)$   $\pi$ -Cooperonu için impüriti merdiven serileri. (g)  $\tilde{D}_\pi$  (veya  $\tilde{C}_\pi$ ) bloku için,  $\pi$ -difüzyonuna (veya  $\pi$ -Cooperonuna) bir impüriti çizgisi ekleyerek elde edilen diyagram eşitliği. Kalın dalgalı çizgi ve üzerinde çarpı bulunan noktalı çizgi sırasıyla Coulomb potansiyeli ve impüriti saçılmasını göstermektedir.

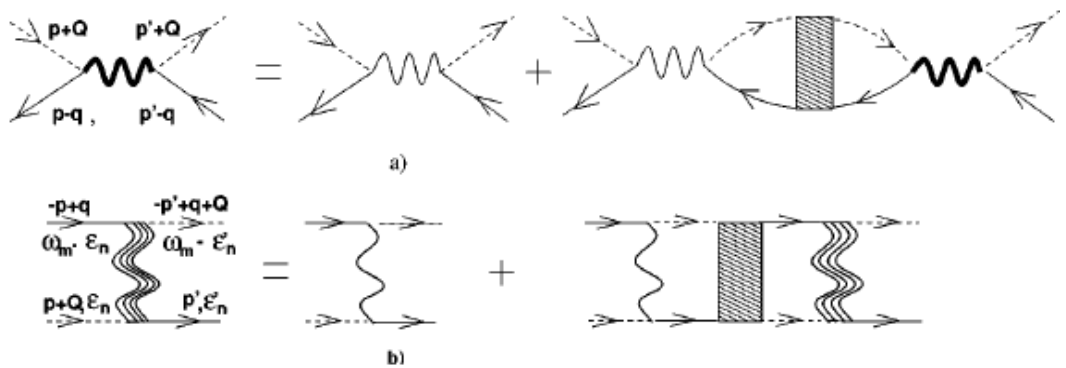
Bandın ortasındaki  $DY$  'ye diğer ek katkılar Şekil 6.1(a)–(d')'den gelir. e-e etkileşimlerine bağlı  $DY$  'ye katkı,  $\delta\rho(\epsilon, T)$ , aşağıdaki ifadede verilmiştir,

$$\delta\rho(\varepsilon, T) = -\frac{2}{\pi} \left\{ \text{Im} \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} G_0^2(\mathbf{p}, i\varepsilon_n) \sum_{ee}(\mathbf{p}, i\varepsilon_n) \right\}_{i\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon} \quad (6.7)$$

burada  $\sum_{ee}$  Şekil 6.1(a)–(d') ile verilen  $DY$  'ye birinci-dereceden kuantum katkılar için self-enerjidir. Şekil 6.1(a)'daki diyagrama uygun ifade bazı küçük hesaplamalardan sonra aşağıdaki şekle indirgenebilir:

$$\delta\rho_a(\varepsilon, T) = 2\tau_0^2 \rho_0^{2d} \text{Im} \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} U(\mathbf{q} - 2\mathbf{Q}, 2\varepsilon - \omega) \frac{\tan \frac{\omega + \varepsilon}{2T} + \tan \frac{\omega - \varepsilon}{2T}}{\left[ (1 - i\omega\tau_0)^2 + (ql)^2 - 1 \right]^2} \quad (6.8)$$

Bant merkezindeki yeni katkıda (6.8) kapsama dahil edilen yalın  $DY$ ,  $\rho_0^{(2d)}$ 'deki van Hove tekilliği, yalın Green fonksiyonundaki  $i/2\tau_0$  terimi tarafından ortadan kaldırılır [Gruzberg et. al. 2001]. Şekil 6.1'deki diğer diyagramların hesaplamaları  $\delta\rho_a(\varepsilon, T)$ 'nin hesaplanmasına benzerdir. Yine Şekil 6.1'deki (a'), (b'), (c'), ve (d') den gelen katkılar sırasıyla (a), (b), (c), ve (d)'den gelenlere eşittir. Difüzyon ve Cooperon kanallarındaki  $U$  potansiyelinin gösterilmesi Şekil 6.2'de verilen diyagramatik eşitliklere göre gerçekleştirilir.



Şekil 6.2: Sırasıyla (a) parçacık-boşluk ve (b) parçacık-parçacık kanallarındaki  $2D$  bant merkezinde kare bir örgü üzerindeki elektronlar için Coulomb etkileşimlerinin gösterilmesi.

Bandın ortasında, elektron gaz modelinde [Larkin, 1980] ortaya çıkan Cooper kanalındaki potansiyelin perdelenmesinin yerine difüzyon kanalında kısa-menzilli bir etkileşimin perdelenmesinin ortaya çıktığı gösterilebilir. Takiben, Şekil 6.1'deki (c)-(d') diyagramlarındaki etkileşimin dinamik bir şekilde perdelenmesi yalın potansiyelin değerini temelden değiştirmez ve bu diyagramların  $DY$  'ye katkısı (6.8) ifadesine göre hesaplanır,

$$\delta\rho_{\pi}^{(c)}(\varepsilon, T) = \rho_0^{(2d)} \frac{\left[ U(2\mathbf{Q}, 0) - 2U(\mathbf{p} - \mathbf{p}' + 2\mathbf{Q}, 0) \right]}{4\pi^2 \hbar D} \ln \left( \frac{1}{\tau_0 \max\{\varepsilon, T\}} \right) \quad (6.9)$$

Difüzyon kanalındaki etkileşimin perdelenmesi Şekil 6.2'deki diyagramatik eşitliğe göre gerçekleştirilir,

$$U(\mathbf{q} - 2\mathbf{Q}, \omega_m) = \frac{2}{\rho_0^{(2d)} \left[ \ln \frac{T_c}{T} - \psi \left( \frac{|\omega_m| + Dq^2}{4\pi T} + \frac{1}{2} \right) + \psi \left( \frac{1}{2} \right) \right]} \quad (6.10)$$

Şekil 6.1(a) ve (a')'deki diyagramlardan  $DY$  'ye gelen katkı denklem (6.10)'un denklem (6.8)'e yerleştirilmesi ile hesaplanır. Bu diyagramlardan gelen katkı denklem (6.5)'te gösterilen  $\delta\rho_N^{(c)}(\varepsilon, T)$  için uygun ifade ile verilmiştir. Şekil 6.1(b) ve (b') ile verilen difüzyon kanalındaki diğer diyagramların potansiyeli sıfır enerji ve  $\mathbf{p}' - \mathbf{p}'' + 2\mathbf{Q}$  büyük momentumunu taşırlar. Bu nedenle perdelenme efektif değildir ve bu diyagramlar  $DY$  'ye logaritmik katkı yaparlar. Sonuçta, difüzyon ve Cooper kanallarındaki  $DY$  'ye toplam kuantum katkı şu şekilde gösterilebilir:

$$\begin{aligned} \delta\rho_{\pi}^{(D)}(\varepsilon, T) = & \frac{1}{2\pi^2 \hbar D} \ln \frac{\ln T_c \tau_0 / \hbar}{\ln T_c / \max\{\varepsilon, T\}} + \\ & + \rho_0^{(2d)} \frac{U(\mathbf{p} - \mathbf{p}' + 2\mathbf{Q}, 0)}{2\pi^2 \hbar D} \ln \left( \frac{1}{\tau_0 \max\{\varepsilon, T\}} \right) \end{aligned} \quad (6.11)$$

$$\delta\rho_{\pi}^{(C)}(\varepsilon, T) = \rho_0^{(2d)} \left[ \frac{U(2\mathbf{Q}, 0) - 2\overline{U(\mathbf{p} - \mathbf{p}' + 2\mathbf{Q}, 0)}}{4\pi^2 \hbar D} \right] \ln \left( \frac{1}{\tau_0 \max\{\varepsilon, T\}} \right) \quad (6.12)$$

$$\delta\rho_{\pi}(\varepsilon, T) = \delta\rho_{\pi}^{(D)}(\varepsilon, T) + \delta\rho_{\pi}^{(C)}(\varepsilon, T) \quad (6.13)$$

(6.11) ve (6.12) ifadelerinden görülmektedir ki  $DY$  'ye Bragg yansımaları katkısı,  $\delta\rho_{\pi} = \delta\rho_{\pi}^{(D)} + \delta\rho_{\pi}^{(C)}$ ,  $\varepsilon$  'nin Fermi düzeyine yaklaşmasıyla artmaktadır.

$DY$  'ye toplam kuantum katkısı,  $\delta\rho(\varepsilon, T)$ , bandın ortasında  $\delta\rho(\varepsilon, T) = \delta\rho_N(\varepsilon, T) + \delta\rho_{\pi}(\varepsilon, T)$  olarak gösterilebilir.  $DY$  'ye olan her iki katkı da aynı enerji veya sıcaklık bağımlılıklarına sahiptir. Bununla birlikte, işaret olarak ve etkileşim potansiyelinin  $U(0,0)$  ve  $U(2\mathbf{Q},0)$  değerleri bakımından farklılık gösterirler. Kısa-menzilli etkileşim perdelenen bir Coulomb etkileşimi olduğu için, eğer Thomas-Fermi perdeleme sayısı ters örgü vektörü  $2\mathbf{Q}$  düzeyinde olursa, sırasıyla denklem (6.4) ve denklem (6.9)'a dahil edilen  $U(0,0)$  ve  $U(2\mathbf{Q},0)$  potansiyelleri birbirinden önemli ölçüde farklılık gösteremezler. Sonuç olarak,  $DY$  'ye toplam kuantum katkılar bant merkezinde pozitif hale gelirler. Bant merkezinden uzakta Bragg yansımaları yok olur ve  $DY$  'ye en önemli katkı (6.4) ifadesindeki logaritmik olarak azalan Altshuler-Aronov katkısıdır [Altshuler and Aronov, 1985].

### 6.1.2. Elektronik Durumlara Üç-boyutta Korelasyon Katkıları

Bu bölümde substitutional impüritilere sahip üç boyutlu kübik örgü için bandın ortasındaki elektronik durumlara yüksek dereceden etkileşim katkılarını ele alacağız. Bir önceki bölümden öğrenildiği gibi, bant merkezindeki  $DY$  'ye toplam kuantum katkı,  $\delta\rho(\varepsilon, T)$ ,  $\delta\rho(\varepsilon, T) = \delta\rho_N(\varepsilon, T) + \delta\rho_{\pi}(\varepsilon, T)$  şeklinde gösterilebilir. Continuum modeli için üç-boyutlu iletkenin elektronik durumlarına yüksek dereceden etkileşim

katkısı Şaşioğlu tarafından hesaplanmıştır [Şaşioğlu, 1999]. Üç-boyutlu iletkendeki elektronik durumlara etkileşim katkısı

$$\delta\rho_N^{(3d)}(\varepsilon) = -\rho_0^{(3d)} \left\{ \frac{\beta_N}{\sqrt{1+\beta_N} [1+\sqrt{1+\beta_N}]} \right\} \quad (6.14)$$

burada

$$\beta_N = \frac{3g_N}{2\pi\varepsilon_F^2\tau_0^2} - \frac{3g_N}{4\sqrt{2}\varepsilon_F^2\tau_0^2} \sqrt{3|\varepsilon|\tau_0} \quad \text{ve} \quad g_N = g_1 + g_2 - 2(g_3 + g_4) \text{ 'dir.}$$

Burada, umklapp süreçleri için bu referansta kullanılan notasyonu izleyeceğiz.

DY , “retarded” Green fonksiyonu  $G^R(\mathbf{p},\varepsilon)$ ’yi kullanarak şu şekilde hesaplanır:

$$\rho^{(3d)}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} G^R(\mathbf{p},\varepsilon) \quad (6.15)$$

Toplam Green fonksiyonu Dyson eşitliğine [Abrikosov et. al. 1963] göre hesaplanacaktır:

$$G^R(\mathbf{p},\varepsilon) = \frac{1}{G_0^{-1}(\mathbf{p},\varepsilon) - \sum_{ee}(\mathbf{p},\varepsilon)} \quad (6.16)$$

burada  $G_0^{R(A)}(\mathbf{p},\varepsilon)$  “yalın” retarded (advanced) Green fonksiyonudur ( $GF$ ), ve  $T=0$  için aşağıdaki biçimde verilir:

$$G_0^{R(A)}(\mathbf{p},\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - [\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon_F] \pm \frac{i}{2\tau_0}} \quad (6.17)$$

burada  $+(-)$  işaretleri, retarded (advanced)  $GF$  'ye uygun olarak kullanılmaktadır.  $\sum_{ee}(\mathbf{p}, \varepsilon)$  ise elektron-elektron korelasyonuna bağlı self-enerji bölümüdür. Denklem (3)'e göre "retarded"  $GF$ ,

$$G^R(\mathbf{p}, \varepsilon) = \sum_{n=0}^{\infty} \left( G_0^R(\mathbf{p}, \varepsilon) \right)^{n+1} \left( \sum(\mathbf{p}, \varepsilon) \right)^n \quad (6.18)$$

şeklinde yazılabilir. Self-enerji  $\sum(\mathbf{p}, \varepsilon)$ 'ye katkı yapan diyagramlar bir önceki bölümde Şekil 6.1'de verilmiştir.

Daha önceki çalışmalardan öğrenileceği gibi [Altshuler and Aronov, 1985],  $DY$  'ye en büyük katkı exchange self-enerjiye bağlıdır (Şekil 6.1'deki (a) ve (a') diyagramları). Bu nedenle burada yalnızca bu self-enerjiyi ele alarak hesaplama metodunu ortaya koyuyoruz. Diğer diyagramların katkısının hesaplanması zor değildir. Şekil 6.1'in diğer diyagramlarının katkısını nihai sonuçlarda hesaba katacağız. Exchange diyagramına uygun gelen self-enerji için gösterim aşağıdaki şekilde olur:

$$\sum_{ee}(\varepsilon, \mathbf{p}) = i \sum_{\mathbf{q}} \int_{\varepsilon}^{1/\tau} \frac{d\omega}{2\pi} G_0^R(\mathbf{p} + \mathbf{q} + \mathbf{Q}, \omega - \varepsilon) U(\mathbf{q} - 2\mathbf{Q}, 2\varepsilon - \omega) \gamma^2(\mathbf{q}, \omega) \quad (6.19)$$

Burada  $\gamma(\mathbf{q}, \omega)$ , büyük ( $|\mathbf{q}| \approx 1$ ) toplam momentuma,  $|\mathbf{q}| \ll 1$ , ve küçük enerji transferine,  $|\omega| \tau_0 \ll 1$ , sahip elektron-boşluk propagasyonuna ait Şekil 6.1'deki merdiven diyagramlarının toplamıdır. Üç-boyutta, bu diyagramların toplanması 2D'deki diyagramlarınkinden farklılık gösterirler ve  $\gamma(\mathbf{q}, \omega)$  için:

$$\gamma(\mathbf{q}, \omega) = \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} G_0^R(\mathbf{p}' + \mathbf{Q}, \varepsilon) G_0^R(\mathbf{p}' + \mathbf{q}, \omega - \varepsilon) D_{\pi}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\tau_0(-i\omega + Dq^2)} \quad (6.20)$$

elde ederiz ki bu,  $|\mathbf{q}| \ll 1$  ve  $|\omega| \tau_0 \ll 1$  şartları altında bir difüzyon kutbuna sahiptir. Burada  $D = v_F^2 \tau_0 / d$ ,  $d$  boyutlu sistemler için difüzyon katsayısıdır.

Self-enerjiye temel katkı küçük  $\mathbf{q}$  ile ilgili olduğu için bu durumda denklem (6.19)'u,

$$\sum_{ee}(\mathbf{p}, i\varepsilon_n) \cong G_0^R(\mathbf{p} + \mathbf{Q}, \omega - \varepsilon) \alpha(\varepsilon) \quad (6.21)$$

şeklinde değiştirebiliriz ki burada,

$$\alpha(\varepsilon) = i \sum_{\mathbf{q}} \int_{\varepsilon}^{1/\tau} \frac{d\omega}{2\pi} U(\mathbf{q} - 2\mathbf{Q}, 2\varepsilon - \omega) \gamma^2(\mathbf{q}, \omega) \quad (6.22)$$

(6.18) ve (6.22) ifadelerini (6.14)'de yerine koyarsak;

$$\begin{aligned} \rho^{(3d)}(\varepsilon) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \sum_{n=0}^{\infty} \alpha^n(\varepsilon) \left(G_0^R(\mathbf{p}, \varepsilon)\right)^{n+1} \left(G_0^R(\mathbf{p} + \mathbf{Q}, \omega - \varepsilon)\right)^n \\ &= \rho_0^{(d)} - \frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{n=1}^{\infty} A_n [\alpha(\varepsilon)]^n \end{aligned} \quad (6.23)$$

elde ederiz ki burada,

$$A_n = \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \left(G_0^R(\mathbf{p}, \varepsilon)\right)^{n+1} \left(G_0^R(\mathbf{p} + \mathbf{Q}, \omega - \varepsilon)\right)^n \quad (6.24)$$

DY için (6.23) ifadesinin toplamındaki  $n=0$  teriminin  $\rho_0^{(3d)}$ 'ye eşit olduğunu kolayca görmek mümkündür. Bu nedenle “yalın” DY (6.23) ifadesinde ayırılmıştır. Basit hesaplamaların ardından  $A_k$  için (6.24) ifadesi

$$\begin{aligned} A_k &= (-1)^{n+1} \rho_0^{(3d)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{\left(\xi - \varepsilon - \frac{i}{2\tau}\right)^{n+1} \left(\xi + \omega - \varepsilon + \frac{i}{2\tau}\right)^n} \\ &= (-1)^{n+1} \rho_0^{(3d)} (2\pi i) \tau_0^{2n} \frac{n(2n-1)!}{(n!)^2} \end{aligned} \quad (6.25)$$

biçimine indirgenebilir.

$$\alpha = \frac{i}{\tau_0^2} \alpha_0(\varepsilon) \quad \text{ve} \quad \alpha_0(\varepsilon) = \sum_q \int_{\varepsilon}^{\frac{1}{\tau}} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{U(\mathbf{q} - 2\mathbf{Q}, 2\varepsilon - \omega)}{(-i\omega + Dq^2)} \quad (6.26)$$

olduğunu göstererek  $DY$  için (6.23) ifadesini,

$$\rho^{(3d)}(\varepsilon) = \rho_0^{(3d)} + \rho_0^{(3d)} \operatorname{Im} \left\{ \frac{4\alpha_0(\varepsilon)}{\sqrt{1+4i\alpha_0}(1+\sqrt{1+4i\alpha_0})} \right\} \quad (6.27)$$

şeklinde yazabiliriz.  $A_n$  için (6.25) ifadesinin hesaplanması sırasında  $n$  üzerinden toplam almak için

$$\ln(1 + \sqrt{1+x^2}) = \ln 2 - \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n-1)!}{(n!)^2 2^{2n}} x^{2n}$$

formülünü kullandık.

$DY$  için, sonsuz sayıda logaritmik ıraksayan diyagramların toplanması (6.26) ve (27) ifadeleri ile verilmiştir. Kısa-menzilli perdelenmiş bir Coulomb etkileşimi için bu ifadeler çok basit bir şekilde hesaplanabilir. Bu durumda Coulomb potansiyeli ne  $\mathbf{q}$ 'ya ne de  $\omega$ 'ya bağlı olur, ve  $U(\mathbf{q} - 2\mathbf{Q}, 2\varepsilon - \omega) = V_0$  biçiminde seçebiliriz. Öyleyse, (6.26) ifadesi

$$\alpha_0(\varepsilon) = -V_0 \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{1}{\varepsilon + iDq^2} \quad (6.28)$$

biçimine indirgenebilir. Üç boyut için yapılan hesaplama bize;

$$\alpha_0(\varepsilon) = i \frac{3V_0\rho_0^{3d}}{8\pi\varepsilon_F^2\tau_0^2} - i \frac{3V_0\rho_0^{3d}}{16\sqrt{2}\varepsilon_F^2\tau_0^2} \sqrt{3\tau_0|\varepsilon|} \quad (6.29)$$

verir. Denklem (6.29)'u denklem (6.27)'de yerine koyarak  $DY$  'ye kuantum katkılar için aşağıdaki ifadeyi elde ederiz:

$$\delta\rho_{\pi}^{(3d)}(\varepsilon) = \rho_0^{(3d)} \left\{ \frac{2\beta_{\pi}}{\sqrt{1-\beta_{\pi}}[1+\sqrt{1-\beta_{\pi}}]} \right\} \quad (6.30)$$

burada,  $g_1 = V_0 \rho_0^{(3d)}$ , boyutsuz etkileşimin sabiti, ve  $\varepsilon$  enerjisi de Fermi enerjisinden ölçülmek üzere;

$$\beta_{\pi} = \frac{3g_1}{2\pi\varepsilon_F^2\tau_0^2} - \frac{3g_1}{4\sqrt{2}\varepsilon_F^2\tau_0^2} \sqrt{3|\varepsilon|\tau_0}$$

Bu hesaplamalarda yalnızca Şekil 6.1'deki (a), (a') diyagramları ile karakterize edilen self-enerjiye exchange katkısı ele aldık. Şekil 6.1'deki diğer diyagramlar (b), (b'), (c), (c') ve (d), (d') de aynı yolla hesaplanabilir. Bu ek self-enerji bölümlerinin yalnızca boyutsuz etkileşim sabitini renormalize ettiği gösterilebilir, ki böylece  $g_2$ ,  $g_3$  ve  $g_4$  sırasıyla Şekil 6.1'deki (b), (b'), (c), (c') ve (d), (d') self-enerjilerini göstermek üzere

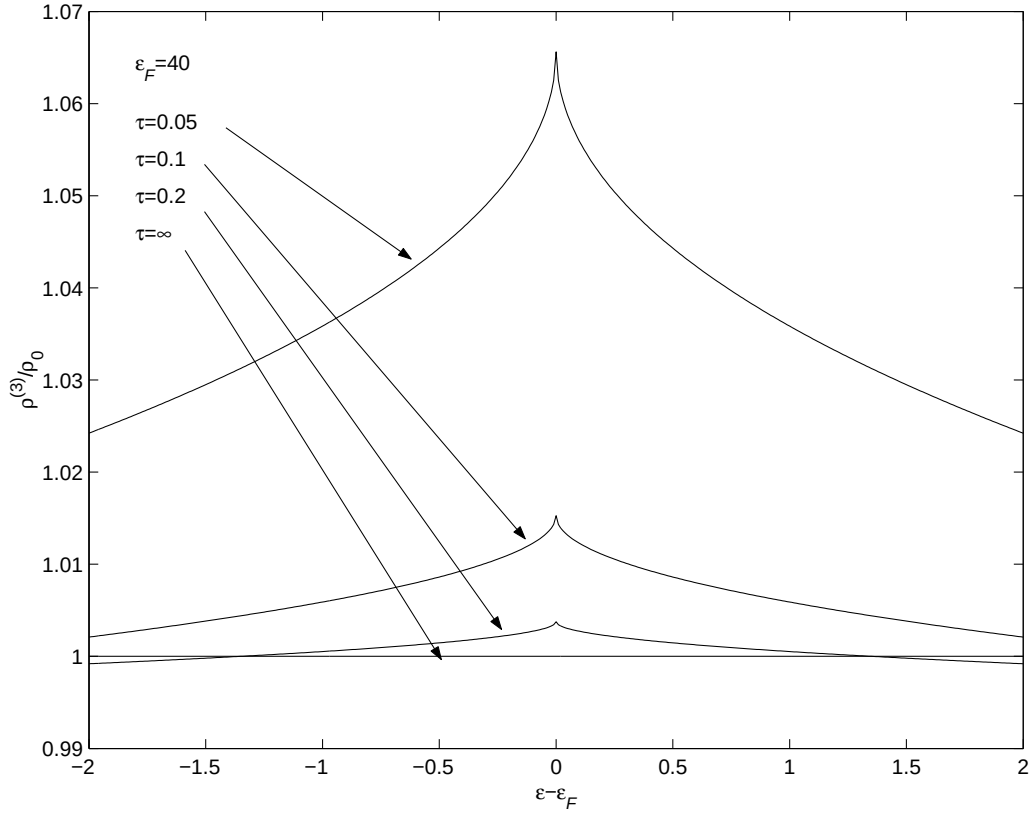
$$g_1 \Rightarrow g_{\pi} = g_1 + g_2 + 2(g_3 + g_4)$$

elde edilir.

Bandın ortasında  $DY$  'ye toplam kuantum katkı,  $\delta\rho(\varepsilon)$ ,  $\delta\rho(\varepsilon) = \delta\rho_N(\varepsilon) + \delta\rho_{\pi}(\varepsilon)$  şeklinde gösterilebilir.  $DY$  'ye olan her iki katkı da aynı enerji veya sıcaklık bağımlılığına sahiptir. Bununla birlikte, işaret olarak ve  $g_N$  ve  $g_{\pi}$  boyutsuz etkileşim katsayı değerleri bakımından farklılık gösterirler. Kısa-menzilli etkileşim perdelenen bir Coulomb etkileşimi olduğu için, eğer Thomas-Fermi perdelenme sayısı ters örgü vektörü  $2\mathbf{Q}$  düzeyinde olursa,  $U(0,0)$  ve  $U(2\mathbf{Q},0)$  potansiyelleri birbirinden önemli ölçüde farklılık gösteremezler. Sonuç olarak,  $DY$  'ye olan toplam kuantum katkılar bant

merkezinde pozitif hale gelirler. Bant merkezinden uzakta Bragg yansımaları yok olur, ve  $DY$  'ye en önemli katkı (6.14) ifadesi ile verilir. Dikkat edilmelidir ki, bias voltajının bir fonksiyonu olarak bir metal-yalıtkan-metal kontaktaki tünelleme iletkenliğini ölçerek tek-parçacık  $DY$  'de bir anomali deneysel olarak gözlemlenebilir. Bu bağımlılık tamamen  $DY$  'nin bir enerji bağımlılığını yansıtır.

$d = 3$  için  $\rho(\varepsilon)$  'nin enerji bağımlılığı Şekil 6.3'te gösterilmektedir. Bu bağımlılık üstsel bir bağılıktır. Fermi seviyesinde  $\rho(\varepsilon)$  sonlu bir değer alır. Boyutsuz  $g$  Coulomb sabiti veya impüriti konsantrasyonunun artmasıyla (ki bu  $\tau_0$  'ın azalmasına eşittir)  $\rho^{(3d)}(\varepsilon_F)$  'nin arttığı görülebilir. Bu gerçek gösteriyor ki, zayıf düzensizlik limiti çerçevesinde elektronlar arasında artan impüriti konsantrasyonu ya da Coulomb etkileşimi kuvveti ile  $3d$  düzensiz sistemler için metal-yalıtkan faz geçişi yoktur.



Şekil 6.3:  $d = 3$  için  $DY$ 'nin enerji bağımlılığı. Eğriler impüriti konsantrasyonunun veya elektron-elektron etkileşimi sabitinin artmasıyla  $DY$ 'un değişimini göstermektedir.

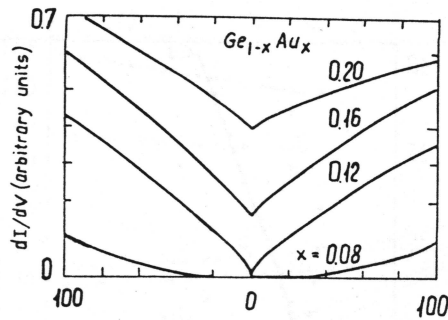
### 6.1.3. Tünelleme İletkenliğindeki Anti Sıfır-Bias Anomali

Uygulanan bias voltajının bir fonksiyonu olarak bir metal-yalıtkan-metal ( $MYM$ ) kontağındaki tünelleme iletkenliğini ölçerek tek-parçacık  $DY$ 'de bir anomali deneysel olarak gözlemlenebilir. Bu bağımlılık tamamen  $DY$ 'nin bir enerji bağımlılığını yansıtır. Bu bölümde teorik olarak bant merkezindeki üç-boyutlu zayıf düzensizliğe sahip örgülerdeki tünelleme iletkenliğini araştıracağız.

$MYM$  kontaklarında, tünelleme direncindeki sıfır-bias anomalileri bir çok deneyde incelenmiştir (bkz. ör. [Rowel, 1969]). Bu anomaliler iki çeşit olabilirler, yani voltaj ilişkisine karşı tünelleme iletkenliği maksimum veya minimum olabilir. Tünelleme iletkenliğinde tepe noktası genellikle manyetik impüritilerden saçılmaya atfedilir [Appelbaum, 1966]. Tünelleme

iletkenliğindeki iniş-çıkışa gelince, bu uzun bir süre açıklanamamıştır. Durum yoğunluğu üzerindeki elektron-elektron etkileşimleri teorisi bu konu için bir yorum getirmektedir.

Altshuler ve Aronov  $Al - I(O_2) - Au$  MYM kontaklarında tünelleme direnci çalışmalarında elde edilen deneysel verileri analiz etmişlerdir ve bunun  $eV > T$ 'de  $|V|^{1/2}$  ile orantılı olduğunu göstermişlerdir. Mc Millan ve Mochel [Millan and Mochel, 1981]  $Al - Al_2O_3 - Ge_{1-x}Au_x$  amorph kontakları üzerindeki tünelleme iletkenliğinin bir araştırmasını yapmışlardır. Şekil 6.4 değişik  $x$  değerleri için bias voltajına bağlı olarak tünelleme iletkenliğinin bağımlılığını temsil etmektedir.  $x = 0,12$  örneği metal-yalıtkan faz geçişine çok yakın olurken  $x = 0,08$  örneğinde hakikaten bir yalıtkandır.



Şekil 6.4: McMillan ve Mochel [Millan and Mochel, 1981]'in ardından,  $x = 0,08$ ,  $x = 0,12$ ,  $0,16$  ve  $0,20$  örnekleri için  $V$  bias voltajına karşı  $Ge_{1-x}Au_x$  elektrotları ile bir MYM kontağının tünelleme iletkenliği  $G = dI/dV$ .

Fermi seviyesi civarında iletkenliğin azalma eğilimi Altshuler-Aronov'un teorisi [Altshuler and Aronov 1979] ile açıklanabilir. Fakat, bu teori büyük enerji veya sıcaklık aralıkları için tünelleme iletkenliğindeki değişmeyi gösteremez.

Tünel kavşağı (junction) iki farklı maddeden hazırlanmaktadır ve tünel akımının değeri aşağıdaki biçimde verilir:

$$J(V) = \frac{1}{eR} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon [n(\varepsilon - eV) - n(\varepsilon)] \rho_1(\varepsilon) \rho_2(\varepsilon - eV) \quad (6.31)$$

Burada  $n(\varepsilon)$ , sıcaklık ( $T$ ) ve potansiyele ( $V$ ) bağlı olan Fermi dağılım fonksiyonudur.  $\varepsilon$  enerjisi, Fermi seviyesinden ölçülür ve bundan sonraki tüm gösterimlerde kullanılacaktır.  $R$  ise elektron korelasyonlarını hesaba katmaksızın kavşağın direncidir. Kolaylık olması için, ikinci maddenin  $DY$ 'sini sabit kabul edeceğiz, ve diğeri korelasyon ve düzensizlik sebebiyle anomali gösterecek. (6.31) ifadesinden ek iletkenlik için aşağıdaki ifadeyi yazabiliriz:

$$\frac{\delta\sigma(V,T)}{\sigma_0} = \frac{1}{4T} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{\rho^{(3d)}(\varepsilon,T)}{\rho_0^{(3d)}} \left[ \frac{1}{\cosh^2 \frac{\varepsilon - eV}{2T}} + \frac{1}{\cosh^2 \frac{\varepsilon + eV}{2T}} \right] \quad (6.32)$$

$\sigma_0$  burada, Drude ifadesi olarak bilinen klasik iletkenliktir.

Bir önceki bölümden, bant merkezinde, continuum modelinin tersine tünelleme iletkenliğinin anti sıfır-bias anomalisini ortaya koyması beklenir çünkü elektronik duurlara toplam quantum katkılar pozitiftir.  $T = 0$ 'da (6.31) ve (32) ifadelerinde, parantez içindeki nicelikler  $\delta$  – fonksiyonu verirler ve

$$\frac{\sigma^{(3d)}(V)}{\sigma_0} = \frac{\rho^{(3d)}(eV)}{\rho_0^{(d)}} \quad (6.33)$$

Bir önceki bölümde,  $T = 0$ 'da bant merkezindeki üç-boyutlu sistemlerin  $DY$ 'si için tam analitik ifadeleri bulmuştuk. Bunun sonlu sıcaklıklar için genelleştirilmesi aşağıdaki şekilde verilir.

$$\delta\rho_N^{(3d)}(\varepsilon,T) = -\rho_0^{(3d)} \left\{ \frac{\beta_N}{\sqrt{1+\beta_N} [1+\sqrt{1+\beta_N}]} \right\} \quad (6.34)$$

$$\delta\rho_{\pi}^{(3d)}(\varepsilon) = \rho_0^{(3d)} \left\{ \frac{2\beta_{\pi}}{\sqrt{1-\beta_{\pi}} [1+\sqrt{1-\beta_{\pi}}]} \right\} \quad (6.35)$$

burada

$$\beta_N = \frac{3g_N}{2\pi\varepsilon_F^2\tau_0^2} - \frac{3g_N}{4\sqrt{2\varepsilon_F^2\tau_0^2}} \sqrt{3\tau_0 \max\{|\varepsilon|, T\}} \quad (6.36)$$

ve

$$\beta_{\pi} = \frac{3g_{\pi}}{2\pi\varepsilon_F^2\tau_0^2} - \frac{3g_{\pi}}{4\sqrt{2\varepsilon_F^2\tau_0^2}} \sqrt{3\tau_0 \max\{|\varepsilon|, T\}} \quad (6.37)$$

(6.34) ve (6.35) ifadelerini (6.32) ifadesinde yerine koyarak ve integralleri hesaplayarak sıcaklık ve potansiyele uygun tünelleme iletkenliği için genel ifadeyi yazabiliriz.

$$\frac{\delta\sigma^{(3d)}(T)}{\sigma_0} = 2 \frac{\delta\rho^{(3d)}(T)}{\rho_0^{(3d)}} \int_0^1 \frac{dx}{\cosh^2 x} + 2 \int_1^{\infty} \frac{dx}{\cosh^2 x} \frac{\delta\rho^{(3d)}(2Tx)}{\rho_0^{(3d)}} \quad (6.38)$$

(6.38)'deki gösterimde, en büyük katkı ilk integralden gelmektedir. Hesaplamaların ardından ek tünelleme iletkenliği için aşağıdaki ifadeyi yazabiliriz.

$$\frac{\delta\sigma^{(3d)}(T)}{\sigma_0} = \frac{\delta\sigma_{\pi}^{(3d)}(T)}{\sigma_0} + \frac{\delta\sigma_N^{(3d)}(T)}{\sigma_0} \quad (6.39)$$

$$\frac{\delta\sigma^{(3d)}(T)}{\sigma_0} = 2C_0 \left\{ \frac{2\beta_{\pi}}{\sqrt{1-\beta_{\pi}} [1+\sqrt{1-\beta_{\pi}}]} - \frac{\beta_N}{\sqrt{1+\beta_N} [1+\sqrt{1+\beta_N}]} \right\} \quad (6.40)$$

$C_0 \approx 1$  burada bir katsayıdır. (6.33)'teki ifade  $T=0$ 'da kontak potansiyeline uygun tünelleme iletkenliğinin değişimini göstermektedir. (6.40) ifadesi ise, potansiyelin küçük değerindeki ( $V=0$ ) sıcaklığa uygun iletkenliğin değişimini

göstermektedir. Bant merkezinde, ek tünelleme iletkenliğine toplam kuantum katkı pozitifdir. Bu nedenle iletkenlik anti sıfır-bias anomalisi ortaya koymaktadır.

## **İnelastik Elektron-Elektron Saçılma Zamanı: Yarı-dolu Bantta Bragg Yansımasından Kaynaklanan Faz Uyumu**

İnelastik elektron-elektron saçılması düzensiz metalik sistemlerdeki çeşitli fenomenlerde önemli bir rol oynar [Altshuler and Aronov, 1985]. İletkenliğe zayıf lokalizasyon katkılarından sorumludur. Bu sistemlerdeki mezoskopik fenomenlerde de önemli rol oynadığı kanıtlanmıştır. Özellikle inelastik saçılma, evrensel iletkenlik dalgalanmaları (universal conductance fluctuations -  $UCF$ 's) [Altshuler and Khmelnitskii, 1985, Lee et. al. 1987] için farklı boyutlar arasındaki cross-over'ları ve sıcaklık bağımlılıklarını ve persistent akımlar [Schmid, 1991] gibi benzer problemleri yönetir.

Elektron-elektron etkileşimi bu problemlere inelastik saçılma zamanı yoluyla girer. Yaklaşık on yıl önce yapılan kapsamlı araştırmalar gösterdi ki en az iki ilgili elektron-elektron saçılma zamanı mevcuttur: (I) kinetik teori formalizminde ortaya çıkan out-saçılma zamanı  $\tau_{out}$  [Schmid, 1974, Altshuler and Aronov, 1979]; bu inelastik saçılmanın ters frekansı anlamına sahiptir; (II) faz kırılma zamanı  $\tau_{\phi}$  [Altshuler et. al. 1982], ki bunun alanı, özellikle, zayıf lokalizasyon katkısı ve Fermi liquid teorisindeki quasi-parçacık bozulmasıdır. Bu iki zamanın üç-boyutlu sistemlerde aynı değerlere sahip oldukları gösterilmiştir. Faz-kırılma zamanı sonsuz  $2D$  ve quasi- $1D$  sistemlerde de çok iyi ele alınmıştır [Altshuler et. al. 1982]. Bununla birlikte, düşük-boyutlu sistemlerdeki out-saçılma oranı  $\gamma(\epsilon, T) = \tau_{out}^{-1}$ , bazı çelişkilere sebep olmuştur. Bunu sıfır sıcaklıkta ele alan Altshuler ve Aronov [Altshuler and Aronov, 1985],  $d=1$  (Q1D) veya  $d=2$  (2D) için  $\gamma(\epsilon, T=0) = \epsilon^{d/2}$  sonucunu elde etmişlerdir. Bu, özellikle, Fermi liquid teorisinin Fermi

seviyesine yeterince yakın quasi-1D sistemlerde bozulduğu anlamına gelir. Sonlu sıcaklığı da kapsayan çalışmalar out-saçılma oranı yeterince düşük enerjilerde,  $\varepsilon \propto T$ , ıraksadığını göstermiştir. İki-boyutlu sistemlerde bu tekilliği gidermek için, yine farklı sonuçlara götüren, girişimlerde bulunulmuştur [Fukuyama and Abrahams, 1983, Lopes, 1983, Castellani et. al. 1986].

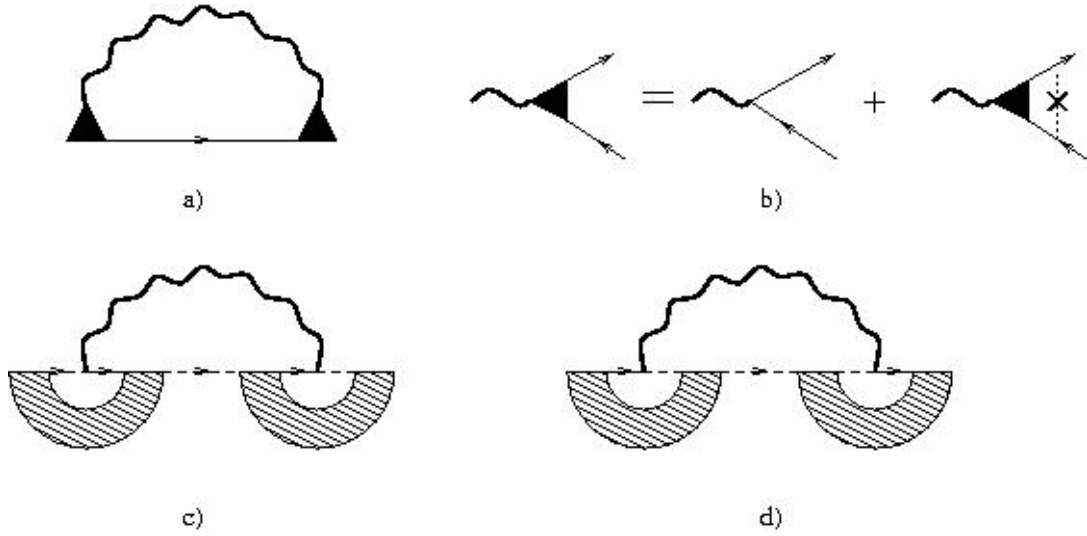
Random olarak dağılmış nokta gibi impüritiler alanında gezinen serbest elektron modeli bundan önceki çalışmalarda başlıca ele alındı. Bir örgüye yapılan küçük bir katkı genellikle Bravias örgüsünün periyodikliğine zarar vermez. Substitutional impüritilere sahip üç-boyutlu (3D) kübik örgüler ve iki-boyutlu (2D) kare örgülerdeki zayıf lokalizasyon etkileri üzerine son zamanlarda yapılan çalışmalar  $\lambda$  elektronik dalga boyu ve  $a$  örgü aralığının oranlanabilirliğine bağlı Bragg yansımalarının lokalizasyonu önemli ölçüde değiştirdiğini ortaya çıkardı [Nakhmedov et al. 2000a,b, Nakhmedov and Prigodin 2002]. Bu nedenle, bant merkezine yaklaştıkça inelastik elektron saçılma zamanının  $BY$  'ler tarafından ne kadar değiştirildiğini netleştirmek ilgi çekicidir.

Geleneksel impüriti diyagram tekniğini kullanarak inelastik saçılma oranı  $\gamma(\varepsilon, T) = \tau_{out}^{-1} = \tau_{e-e}^{-1}$ , self enerjilerin imajineri kısmı şeklinde ifade edilebilir:

$$\frac{1}{\tau_{N(e-e)}} = i \left[ \sum_N^R(\mathbf{p}, \varepsilon) - \sum_N^A(\mathbf{p}, \varepsilon) \right] = -2 \text{Im} \sum_N^R(\mathbf{p}, \varepsilon) \quad (6.41)$$

$$\frac{1}{\tau_{\pi(e-e)}} = i \left[ \sum_{\pi}^R(\mathbf{p}, \varepsilon) - \sum_{\pi}^A(\mathbf{p}, \varepsilon) \right] = -2 \text{Im} \sum_{\pi}^R(\mathbf{p}, \varepsilon) \quad (6.42)$$

burada  $N$  ve  $\pi$  sırasıyla normal ve  $\pi$ -saçılmasını temsil etmektedir. Normal ve Umklapp elektron-elektron saçılmaları için self-enerjiler Şekil 6.5'te verilmiştir.



Şekil 6.5: Self-enerjiler a) Difüzyon kanalında exchange etkileşimi, b)  $D_N$  bloku için diagram denklemi, c) ve d)  $\pi$ -saçılması için difüzyon kanalında exchange etkileşimi. Kalın dalgalı çizgiler ve çarpı bulunan noktalı çizgi sırasıyla Coulomb potansiyeli ve impüriti saçılmasını göstermektedir.

$$\frac{1}{\tau_{N(ee)}} = -2 \operatorname{Im} \sum_N^R(\mathbf{p}, \varepsilon) \quad (6.43)$$

$$= -2 \operatorname{Im} \left\{ i \sum_q \int_{\varepsilon}^{1/\tau} \frac{d\omega}{2\pi} G_0^A(\mathbf{p}-\mathbf{q}, \varepsilon-\omega) U(\mathbf{q}, \omega) [D(\mathbf{q}, \omega)]^2 \right\}$$

$D(\mathbf{q}, \omega)$  burada, normal impüriti saçılmasını gösteren Şekil 6.5b'deki merdiven serilerinin toplamasıdır ve advanced Green function  $G_0^A$ ,  $\varepsilon_F$  ( $\varepsilon \rightarrow 0$ ) civarına  $G_0^A(\mathbf{p}-\mathbf{q}, \varepsilon-\omega) = [\varepsilon-\omega-(\varepsilon(\mathbf{p})-\varepsilon_F)-i/2\tau_0]^{-1} \approx 2i\tau_0$  şeklinde yaklaşık olarak ifade edilebilir. Etkileşim potansiyelinin,  $U(\mathbf{q}, \omega) = V_0$ , kısa-menozilli olduğunu kabul edersek bu durumda Coulomb potansiyeli ne  $\mathbf{q}$  ne de  $\omega$ 'ya bağlı olur ve momentum ( $\mathbf{q}$ ) ve frekans ( $\omega$ ) üzerinden integral alırsak

$$\frac{1}{\tau_{N(ee)}} = \frac{1}{\tau_0} \left[ \frac{g_N}{\pi \varepsilon_F \tau_0} \ln \left( \frac{1}{\varepsilon \tau_0} \right) \right] \quad (6.44)$$

elde ederiz. Burada  $g_N = \rho_0^{(2d)} V_0$ , difüzyon kanalı için boyutsuz exchange etkileşim sabitidir.

Umklapp saçılması için, self-enerji Şekil 6.5c, ve d'de verilmiştir

$$\frac{1}{\tau_{\pi(ee)}} = -2 \operatorname{Im} \left\{ i \sum_{\mathbf{q}} \int_{\varepsilon}^{1/\tau} \frac{d\omega}{2\pi} G_0^R(\mathbf{p} + \mathbf{q} + \mathbf{Q}, \omega - \varepsilon) U(\mathbf{q} - 2\mathbf{Q}, 2\varepsilon - \omega) A(\mathbf{q}, \omega) \right\} \quad (6.45)$$

burada,

$$A(\mathbf{q}, \omega) = \left\{ \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} G_0^R(\mathbf{p}' + \mathbf{Q}, \varepsilon) G_0^R(\mathbf{p}' + \mathbf{q}, \omega - \varepsilon) D_{\pi}(\mathbf{q}, \omega) \right\}^2$$

$$= \left[ \frac{1}{-2i\omega\tau_0 + (ql)^2} \right]^2 \quad (6.46)$$

benzer hesaplamaları uygulayarak, büyük momentum transferi ( $\mathbf{Q}$ ) ile Umklapp süreçlerinden gelen, inelastik saçılma oranı için şu ifadeyi elde ederiz:

$$\frac{1}{\tau_{\pi(ee)}} = -\frac{1}{\tau_0} \left[ \frac{g_{\pi}}{2\pi\varepsilon_F\tau_0} \ln \left( \frac{1}{\varepsilon\tau_0} \right) \right] \quad (6.47)$$

Esnek-olmayan saçılma oranı için yukarıdaki ifadeler aynı enerji bağılılıklarına sahiptirler. Bununla birlikte, işaret olarak ve  $g_N$  ve  $g_{\pi}$  boyutsuz etkileşim sabitlerinin değerleri bakımından farklılık gösterirler. Kısa-menzilli etkileşim perdelenen bir Coulomb etkileşimi olduğu için,  $U(0,0)$  ve  $U(2\mathbf{Q},0)$  potansiyelleri, eğer Thomas-Fermi perdelenme sayısı ters örgü vektörü  $2\mathbf{Q}$  ile aynı seviyede olursa, birbirinden çok fazla farklı olamazlar.  $g_N$  ve  $g_{\pi}$ 'yi eşit olarak alırsak ( $g_N = g_{\pi} = g$ ), toplam inelastik saçılma oranını, bant merkezinde  $f = 1/2$  ve bant merkezinden uzakta  $f = 0$  olmak üzere, şu şekilde gösterebiliriz:

$$\frac{1}{\tau_{(e-e)}} = \frac{1}{\tau_{N(ee)}} + \frac{1}{\tau_{\pi(ee)}} \quad (6.48)$$

$$\frac{1}{\tau_{(e-e)}} = \frac{(1-f)}{\tau_0} \left[ \frac{g}{\pi \mathcal{E}_F \tau_0} \ln \left( \frac{1}{\mathcal{E} \tau_0} \right) \right] \quad (6.49)$$

(6.49) ifadesini sonlu sıcaklıklara genelleştirmek kolaydır, ve

$$\frac{1}{\tau_{(e-e)}} = \frac{(1-f)}{\tau_0} \left[ \frac{g}{\pi \mathcal{E}_F \tau_0} \ln \left( \frac{1}{T \tau_0} \right) \right] \quad (6.50)$$

ifadesine ulaşırız. (6.49) ve (50) ifadelerinden anlaşılacağı gibi elektron-elektron saçılma oranları yarı-dolu bantta umklapp süreçleri ile azalmaktadır. Bu nedenle elektron-elektron saçılma zamanları büyük ölçüde artmıştır. Bu, iki-boyutlu düzensiz örgülerde bant merkezindeki elektronların faz uyumlu bir hareketini göstermektedir.

## 7. SONUÇLAR

Bu çalışmamızda, zayıf düzensizliğe sahip örgüler için bant merkezindeki etkileşmeyen elektron ve elektron-elektron etkileşimlerinden kaynaklanan kuantum katkıların rolünü açıklamaya çalıştık.

Durum yoğunluğuna ve iletkenliğe düşük sıcaklık kuantum girişim katkıları, substitutional impüritilere sahip iki-boyutlu ( $2D$ ) kare kristal için incelendi.  $DY$ 'ye önemli logaritmik katkıları toplayarak, bant merkezi yakınındaki enerji bağımlılığı bulundu. Substitutional impüritilerin van Hove tekilliğini bantın orta kısmında bastırmadıkları; bununla birlikte, onun enerji bağımlılığını önemli ölçüde değiştirdikleri gösterildi. Üç-boyutlu basit kübik örgülerdeki substitutional impüritilere bağlı zayıf düzensizlik, bantın ortasında sık bir inişle sonuçlanır.  $2D$  bir örgünün iletkenliğine olan kuantum katkıların hesaplanması gösteriyor ki meşhur logaritmik lokalizasyon katkısı bütün bant dolum seviyeleri için mevcuttur. Bunun yanında, katkının büyüklüğü bant merkezine yaklaştıkça artmaktadır.

Random olarak dağılmış substitutional impüritilere sahip iki- ve üç-boyutlu örgülerin elektronik durum yoğunluğunun ve iletkenliklerinin mezoskopik dalgalanmaları incelendi. Fermi yüzeyinden aşağıda veya yukarıda bulunan seviyelerin korelasyonları, bunun yanında Fermi yüzeyinin zıt tarafında bulunan seviyelerin korelasyonları, nestinge bağlı olarak bant merkezinde yer alırlar. Bantın ortasında iletkenliğin statik dalgalanmalarını Bragg yansımaları artırır, ve bunlar bant merkezinde iletkenliğin dağılım fonksiyonunu değiştirir.

Etkileşmeyen elektronların kuantum girişim etkisinin yanında, yarı-dolu bantta elektron-elektron etkileşimi de sistemin fiziksel özelliklerini belirgin olarak değiştirir. Substitutional impüritilere sahip iki-boyutlu kare bir örgünün elektronik durum yoğunluğuna birinci dereceden kuantum etkileşim katkıları

kısa-menzilli elektron-elektron etkileşimlerinin varlığında hesaplandı. Enerji bandının ortasında Brillouin bölgesi sınırındaki Bragg yansımaları; işareti, Altshuler-Aronov logaritmik katkısının işaretine ters olan  $DY$ 'ye ek katkılar sağlamak için gösterilmiştir. Bant merkezindeki  $DY$ 'ye kuantum katkısı pozitifdir, yani  $DY$ , Fermi enerjisine yaklaşıldıkça logaritmik olarak artar. Bununla birlikte, Bragg yansımalarının bastırıldığı oranlı noktalardan uzakta,  $DY$ 'ye negatif logaritmik katkılar var olmaya devam eder. Tamamlamak için, üç-boyutta, yüksek dereceden etkileşim katkıları ele alındı, Fermi enerjisinde  $DY$ 'nin tam değeri hesaplandı. Tünelleme iletkenliğinin anti sıfır-bias anomalisi ortaya koyduğu gösterildi.

Bragg yansımaları aynı zamanda bir elektronun inelastik saçılma zamanını da belirgin olarak etkiler. Elektron-elektron saçılma oranları bant merkezindeki umklapp süreçleri ile azalır. Bu, elektron-elektron saçılma zamanlarının artması anlamına gelir ve iki-boyutlu düzensiz örgülerde bant merkezindeki elektronların faz uyumlu bir hareketini göstermektedir.

## KAYNAKLAR

Abrahams E. *et al.*, Rev. Mod. Phys. **73**, 251 (2001)

Abrahams E., Anderson P. W., P. A. Lee, and Ramakrishnan T. V., Phys. Rev. B **24**, 6783 (1981)

Abrahams E., Anderson P. W., Licciardello P. C., and Ramakrishnan T. V., Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979)

Abrikosov A. A., Gork'ov L. P., and Dzyaloshinskii I. E., "*Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics*" (Prentice-Hall, Inc., 1963)

Altland A. and Gefen Y., Phys. Rev. Lett. **71**, 3339 (1993)

Altland A. and Simons B. D., Nucl. Phys. B **562**, 445 (1999)

Altshuler B. L. and Aronov A. G., in book, "*Electron-Electron Interactions in Disordered Systems*", edited by A. L. Efros and M. Pollak (Elsevier, North-Holland, 1985), Chap 1.

Altshuler B. L. and Khmelnitskii D. E., Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **42**, 291 (1985) [JETP Lett. **42**, 359 (1985)]

Altshuler B. L. and Shklovskii B. I., Sov. Phys. JETP **64**, 127 (1986)

Altshuler B. L., Aronov A. G., and Khmelnitskii D. E., J. Phys. C **15**, 7367 (1982)

Altshuler B. L., Aronov A. G., and Lee P.A., Phys. Rev. Lett. **44**, 1288 (1980)

Altshuler B. L., JETP Lett. **41**, 648 (1985)

Altshuler B. L., Kravtsov V. E., and Lerner I. V., in “*Mesoscopic Phenomena in Solids*”, edited by B. L. Altshuler, P. A. Lee, and R. A. Webb (Elsevier, New York, 1991), Chap. 10.

Altshuler B. L., Kravtsov V. E., and Lerner I. V., Zh. Eksp. Teor. Fiz. **91**, 2276 (1986), [Sov. Phys. JETP **64**, 1352 (1986)]

Altshuler, B. L., and A. G. Aronov, *Solid State Commun.* **30**, 115 (1979)

Anderson, P. W., Abrahams, E. and Ramakrishnan T. V., Phys. Rev. Lett., **43**, 718, (1979)

Anderson, P. W., Phys. Rev., **109**, 1492, (1958)

Appelbaum J. Phys. Rev. Lett. **17**, 91 (1966)

Berezinskii V. L., Zh. Eksp. Teor. Fiz. **65**, 1251 (1973), [Sov. Phys. JETP **38**, 620, 1974]

Bergmann G., Phys. Rep. **107**, 2 (1984)

Bergmann G., Phys. Rev. B **28**, 2914 (1983)

Castellani C., DiCastro C., Kotliar G., and Lee P. A., Phys. Rev. Lett. **56**, 1179 (1986)

Denteneer J. H. *et al.*, Phys. Rev. Lett. **87**, 146 401 (2001)

Devoret M.H. and Grabert H., “*Single Charge Tunneling. Coulomb Blockade Phenomena in Nanostructures*”, Proceedings of a NATO Advanced Study Institute, Les Houches, 1991 (Plenum, London, 1992), p. 1

Dresselhaus M. S., Dresselhaus G., and Saito R., in “*Physical Properties of High Temperature Superconductors*”, edited by D. M. Ginsberg (World Scientific, Singapore, 1994) Vol. 4, pp. 471–565.

Dyson F.J., Phys. Rev. **92**, 1331 (1953)

Efetov K.B., Adv. Phys. **32**, 53 (1983)

Eggarter T. P. and Riedinger R., Phys. Rev. B **18**, 569 (1978)

Eilmes A., Römer R., and Schreiber M., Eur. Phys. J. B **1**, 29 (1998)

Fukuyama H. and Abrahams E., Phys. Rev. B **27**, 5976 (1983)

Fukuyama H., in “*Electron-Electron Interactions in Disordered Systems*”, edited by A. L. Efros and M. Pollak (Elsevier, New York, 1985), Chap. 2

Gade R., Nucl. Phys. B **398**, 499 (1993)

Gogolin A. A. and Melnikov V. I., Zh. Eksp. Teor. Fiz. **73**, 706 (1977)  
[Sov. Phys. JETP **46**, 369, 1977]

Gorkov L. P. and Dorokhov O. N., Solid State Commun. **20**, 789 (1976)

Gorkov L. P., Larkin A. I., and Khmel'nitskii D. E., Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **30**, 248 (1979), [JETP Lett. **30**, 228 (1979)]

Hirsch J. E. and Eggarter T. P., Phys. Rev. B **14**, 2433 (1976)

Hirsch J. E., Phys. Rev. B **31**, 4403 (1985)

Hu W. M., Dow J. D., and Myles C. W., Phys. Rev. B **30**, 1720 (1984)

Imry Y., in *"Introduction to mesoscopic physics"* (Oxford university press, 1997)

Inui M., Trugman S. A., and Abrahams E., Phys. Rev. B **49**, 3190 (1994)

Josephson B.D., Phys. Lett. **1**, 251 (1962)

Kramer B. and Kinnon A. M., Rep. Prog. Phys. **56**, 1969 (1993)

Kravchenko S. V. et al., Phys. Rev. B **50**, 8039 (1994)

Kravtsov V. E. and Lerner I. V., Phys. Rev. Lett. **74**, 2563 (1995)

Langer J. S. and Neal T., Phys. Rev. Lett. **16**, 984 (1966)

Larkin A. I., Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **31**, 239 (1980)  
[JETP Lett. **31**, 219 (1980)]

Lee P. A. and Stone A. D., Phys. Rev. Lett. **55**, 1622 (1985)

Lee P. A., Stone A. D., and Fukuyama H., Phys. Rev. B **35**, 1039 (1987)

Lifshits I. M., Gredeskul S. A., and Pastur L. A., *"Introduction to the theory of disordered systems"* (Wiley, New York, 1988)

Likharev K. K. and Zorin A. B. J. Low Temp. Phys. **59**, 347 (1985)

Lopes dos Santos J. M. B., Phys. Rev. B **28**, 1189 (1983)

Mc Millan W. L. and Mochel J., Phys. Rev. Lett., **46**, 556 (1981)

Mehta M. L., *"Random Matrices"* (Academic, New York, 1991)

Mirlin A. D., Phys. Rep. **326**, 259 (2000)

Mohanty P., Jariwala E.M.Q., and Webb R.A., Physical Review Letters, **78**, 3366 (1996)

Mohanty P., Of Decoherent Electrons and Disordered Conductors, in book *"Complexity from Microscopic to Macroscopic Scales: Coherence and Large Deviations"*, NATO ASI, Edited by A. T. Skjeltorp and T. Vicsek (Kluwer, Dordrecht, 2001)

Mot N. F. t and Twose W. D., Adv. Phys. **10**, 107 (1961)

Nakhmedov E. P., Feldmann H., Oppermann R., and Kumru M., Phys. Rev. B **62**, 13 490 (2000b)

Nakhmedov E. P., Kumru M., and Oppermann R., Phys. Rev. Lett. **84**, 3930 (2000a)

Nakhmedov E. P., Prigodin V. N., and Şaşıoğlu E., Phys. Rev. B **66**, 075106 (2002)

Nakhmedov E.P., and Prigodin V.N., Phys. Rev. B **65**, 235107 (2002)

Oppermann R. and Wegner F., Z. Phys. B **34**, 327 (1979)

Prigodin V. N., Phys. Rev. B **47**, 10 885 (1993)

Rammer J. in book *"Quantum Transport Theory"* Perseus books, 1998 Chapter 3.

Ribeiro E. *et al.*, Phys. Rev. Lett. **82**, 996 (1999)

Rickayzen G., *"Green's Functions and Condensed Matter"* (Academic Press, New York, London, 1980)

Rowel J. M. *"Tunneling Phenomena in Solids"* Edited by E. Burstein and S. Lundqvist (Plenum press, New York 1969)

Ruvalds J. et al., Phys. Rev. B **51**, 3797 (1995)

Schmid A, Z. Phys. **271**, 251 (1974)

Schmid A., Phys. Rev. Lett. **66**, 80 (1991)

Schön J. H., Kloc Ch., and Batlogg B., Nature (London) **293**, 2432 (2001)

Schulz H. J., in “*Strongly Correlated Electronic Materials*”, The Los Alamos Symposium, 1993, edited by K. S. Bedell et al. (Addison-Wesley, Reading, MA, 1994), p. 187.

Shepelyansky D. L., Phys. Rev. Lett. **73**, 2607 (1994)

Shklovskii B. I., Shapiro B. Sears B. R., Lambrianides P., and Shore H., Phys. Rev. B **47**, 11 487 (1993)

Stein J. and Krey U., Z. Phys. B **37**, 13 (1980)

Şaşıoğlu E., M.S. Thesis “*Effects of Electron-electron Correlation on Density of States in Disordered Systems*”, Fatih Üniversitesi, 1999, Chapter 4.

Thouless D. J., Phys. Rev. Lett. **39**, 1167 (1977)

Voit J., Rep. Prog. Phys. **57**, 977 (1994)

Weissman M. and Cohan N. V., J. Phys. C **8**, 109 (1975)

Ziman J.M., in book “*Principles of Theory of Solids*”, Cambridge, 1964.

Zirnbauer M., J. Math. Phys. **37**, 4986 (1996)

## ÖZGEÇMİŞ

1975 yılında Antalya'nın Kaş ilçesinde doğdu. İlk ve Orta öğrenimini Yeşilköy İlkokulu ve Kalkan Süleyman Yılmaz Ortaokulunda tamamladı. 1992'de Antalya Lisesinden mezun olduktan sonra aynı yıl Ege Üniversitesi Fen Fakültesi Astronomi ve Uzay Bilimleri Bölümünde üniversite öğrenimine başladı. 1996 yılında bölüm birinciliğiyle mezun olduktan sonra aynı yıl Fatih Üniversitesi Fen ve Mühendislik Bilimleri Enstitüsü Fizik Bölümünde yüksek lisansa başladı. Bir yıl İngilizce hazırlık okudu. Bir yılda yeterli yüksek lisans derslerini tamamladıktan sonra 1998 yılında araştırma görevlisi olarak bu üniversitede çalışmaya başladı. "Effects of Electron-electron Correlation on Density of States in Disordered Systems" başlıklı tez çalışmasını tamamlayarak 1999 yılında mezun oldu. Aynı yıl G.Y.T.E Mühendislik ve Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında doktora başladı.