

154420

**ÜÇ, İKİ VE BİR BOYUTLU ELEKTRONİK SİSTEMLERİN KOLLEKTİF
UYARIM SPEKTRUMLARININ KARŞILAŞTIRILMASI**

Nurgül AKINCI

**Zonguldak Karaelmas Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalında
Bilim Uzmanlığı Tezi
Olarak Hazırlanmıştır**

**ZONGULDAK
Ağustos 2004**

KABUL:

Nurgül AKINCI tarafından hazırlanan "ÜÇ, İKİ VE BİR BOYUTLU ELEKTRONİK SİSTEMLERİN KOLLEKTİF UYARIM SPEKTRUMLARININ KARŞILAŞTIRILMASI" başlıklı bu çalışma jürimiz tarafından değerlendirilerek, Fizik Anabilim Dalında Bilim Uzmanlığı Tezi olarak kabul edilmiştir.

06 / 08 / 2004

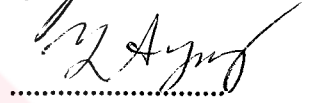
Başkan : Doç. Dr. Dilek DADAYLI PAKTAŞ (ZKÜ)



Üye : Prof. Dr. Cafer TOPAÇLI (HÜ)




Üye : Doç. Dr. Yüksel AYAZ (ZKÜ)



ONAY:

Yukarıdaki imzaların, adı geçen öğretim üyelerine ait olduğunu onaylıyorum.

31 / 08 / 2004



Prof. Dr. Etem KİŞİOĞLU

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

ÖZET

Bilim Uzmanlığı Tezi

ÜÇ, İKİ VE BİR BOYUTLU ELEKTRONİK SİSTEMLERİN KOLLEKTİF UYARIM SPEKTRUMLARININ KARŞILAŞTIRILMASI

Nurgül AKINCI

Zonguldak Karaelmas Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

Tez Danışmanı: Doç. Dr. Yüksel AYAZ

Ağustos 2004, 56 sayfa.

Üç, iki ve bir boyutlu elektronik sistemlerin kollektif uyarım spektrumları en alt-bandın dolu olduğu varsayımı altında rasgele-faz-yaklaşımı çerçevesinde teorik olarak incelenmiştir. Küçük dalga vektörü limitinde, üç boyutlu (3D) elektronik sistemin dispersiyon eğrisi belli bir sabit değerden (3D klasik plazma frekansı) başlamaktadır ve 3D dalga vektörüne göre ikinci mertebeden değişim göstermektedir. İki boyutlu (2D) elektronik sistemlerin plazma frekansı sıfırdan başlamakta ve 2D dalga vektörünün kareköküyle değişmektedir. Bir boyutlu (1D) elektronik sistemler durumunda plazma frekansı sıfırdan başlar ve 1D dalga vektörü ile logaritmik olarak değişir. 1D plazmonların sönüme uğramamalarından dolayı yaşam süreleri 3D ve 2D plazmonların yaşam sürelerinden daha uzundur. Bu özellik, elektron transport etkileri açısından, 1D elektronik sistemleri 3D ve 2D elektronik sistemlere göre daha önemli kılmaktadır.

Anahtar sözcükler: Kollektif uyarımlar, tek-parçacık uyarımları, dispersiyon bağıntısı, plazmonlar, dielektrik fonksiyonu.

Bilim Kodu: 404.05.01

ABSTRACT

M.Sc. Thesis

COMPARISON OF THE COLLECTIVE EXCITATION SPECTRA OF THREE, TWO AND ONE DIMENSIONAL ELECTRONIC SYSTEMS

Nurgül AKINCI

**Zonguldak Karaelmas University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Physics**

Thesis Advisor: Assoc. Prof. Dr. Yüksel AYAZ

August 2004, 56 pages.

Collective excitation spectra of three, two, and one dimensional electronic systems are analyzed theoretically within the framework of the random-phase-approximation under the assumption of the lowest subband population. In the low wavevector limit, the dispersion curve of three dimensional (3D) electronic systems starts from a constant value (3D classical plasma frequency) and changes quadratically with the 3D wavevector. Plasma frequency of two dimensional (2D) electronic systems starts from zero and changes with the square-root of the 2D wavevector. Plasma frequency for one dimensional (1D) electronic systems starts from zero and changes logarithmically with the 1D wavevector. Since 1D plasmons are undamped, their life time is longer than those of 3D and 2D plasmons. Due to this property, 1D electronic systems are more important on electron transport effects than 3D and 2D electronic systems.

Key Words: Collective excitations, single-particle excitations, dispersion relation, plasmons, dielectric function.

Science Code: 404.05.01

TEŐEKKÜR

Bu tezde ele alınan konuyu öneren, gerek tez konusunun incelenmesinde gerekse tezin bilimsel dilde yazılmasında çok yakın yardımlarını gördüğüm tez danışmanım Doç. Dr. Yüksel AYZ'a teşekkürlerimi sunmayı bir borç bilirim.

Tez çalışmalarım sırasında yararlı görüş, eleştiri ve katkılarından dolayı saygı değer hocalarım Prof. Dr. M. Haluk GÜVEN'e, Doç. Dr. Dilek DADAYLI PAKTAŐ'a ve Prof. Dr. Cafer TOPAÇLI'ya teşekkür ederim.

Manevi desteklerinden dolayı anneme, babama ve eşim Harun'a içtenlikle teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	iii
ABSTRACT.....	iv
TEŞEKKÜR.....	v
İÇİNDEKİLER.....	vi
ŞEKİLLER DİZİNİ	ix
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	x
BÖLÜM 1 GİRİŞ.....	1
BÖLÜM 2 KOLLEKTİF UYARIMLAR VE TEK PARÇACIK UYARIMLARI.....	3
2.1 BOYUNA TEPKİ FONKSİYONLARI.....	3
2.2 KOLLEKTİF UYARIMLAR.....	6
2.3 TEK PARÇACIK UYARIMLARI.....	7
BÖLÜM 3 ÜÇ BOYUTLU ELEKTRONİK SİSTEMLERİN KOLLEKTİF UYARIM SPEKTRUMLARI.....	9
3.1 3D-GREEN FONKSİYONU.....	9
3.2 3D-DİELEKTRİK FONKSİYONU.....	12
3.3 3D-DİSPERSİYON BAĞINTISI.....	19
BÖLÜM 4 İKİ BOYUTLU ELEKTRONİK SİSTEMLERİN KOLLEKTİF UYARIM SPEKTRUMLARI.....	22

İÇİNDEKİLER (devam ediyor)

	<u>Sayfa</u>
4.1 2D-GREEN FONKSİYONU.....	22
4.2 2D-DİELEKTRİK FONKSİYONU.....	23
4.3 2D-DİSPERSİYON BAĞINTISI.....	29
BÖLÜM 5 BİR BOYUTLU ELEKTRONİK SİSTEMLERİN KOLLEKTİF UYARIM SPEKTRUMLARI.....	 32
5.1 1D-GREEN FONKSİYONU.....	32
5.2 1D-DİELEKTRİK FONKSİYONU.....	33
5.3 1D-DİSPERSİYON BAĞINTISI.....	36
BÖLÜM 6 3D, 2D VE 1D ELEKTRONİK SİSTEMLERİN KOLLEKTİF UYARIM SPEKTRUMLARININ KARŞILAŞTIRILMASI.....	 40
KAYNAKLAR.....	42
EK AÇIKLAMALAR A MOMENTUM-FREKANS TEMSİLİNDE 3D YOĞUNLUK-PERTÜRBASYON TEPKİ FONKSİYONU.....	 43
EK AÇIKLAMALAR B 3D-ELEKTRONİK SİSTEMLER İÇİN FERMİ DALGA VEKTÖRÜ VE COULOMB POTANSİYELİ.....	 47
B.1 3D-FERMİ DALGA VEKTÖRÜ.....	48
B.2 COULOMB POTANSİYELİNİN 3D-FOURİER DÖNÜŞMÜŞÜ.....	48
EK AÇIKLAMALAR C 2D-ELEKTRONİK SİSTEMLER İÇİN FERMİ DALGA VEKTÖRÜ VE COULOMB POTANSİYELİ.....	 50

İÇİNDEKİLER (devam ediyor)

	<u>Sayfa</u>
C.1 2D-FERMİ DALGA VEKTÖRÜ.....	52
C.2 COULOMB POTANSİYELİNİN 2D-FOURIER DÖNÜŞMÜŞÜ.....	52
EK AÇIKLAMALAR D 1D-ELEKTRONİK SİSTEMLER İÇİN FERMİ DALGA VEKTÖRÜ VE COULOMB POTANSİYELİ.....	53
D.1 1D-FERMİ DALGA VEKTÖRÜ.....	54
D.2 COULOMB POTANSİYELİNİN 1D-FOURIER DÖNÜŞMÜŞÜ.....	54
ÖZGEÇMİŞ.....	56

ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>No</u>		<u>Sayfa</u>
3.1	3D elektronik sistem için uyarım spektrumu.....	21
4.1	2D elektronik sistem için uyarım spektrumu.....	31
5.1	1D elektronik sistem için uyarım spektrumu.....	39



SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

A	: Spektral ağırlık fonksiyonu
α	: Polarizasyon fonksiyonu
δ	: Dirac-delta fonksiyonu
ε	: Direkt dielektrik fonksiyonu
ε_F	: Fermi enerjisi
f_0	: Fermi-Dirac dağılım fonksiyonu
G	: Green fonksiyonu
K	: Ters dielektrik fonksiyonu
k_F	: Fermi dalga vektörü
m	: Elektron efektif kütlesi
μ	: Kimyasal potansiyel
θ	: Birim adım fonksiyonu
R	: Yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonu
ρ	: Yük yoğunluğu
U	: Dış potansiyel
v	: Coulomb potansiyeli
v_F	: Fermi hızı
V	: Efektif potansiyel
ω_p	: 3D klasik plazma frekansı
ω_{2D}	: 2D plazma frekansı
ω_{1D}	: 1D plazma frekansı

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ (devam ediyor)

KISALTMALAR

- 3D : Üç boyutlu
- 2D : İki boyutlu
- 1D : Bir boyutlu
- 1DQW : Bir boyutlu kuantum teli
- 2DEG : İki boyutlu elektron gazı
- RPA : Rasgele-faz-yaklaşımı – random-phase-approximation
- ÜYD : Üst yarı-düzlem
- AYD : Alt yarı-düzlem

BÖLÜM 1

GİRİŞ

Kuantum kuyuları, kuantum telleri ve kuantum noktaları olarak adlandırılan ve, sırasıyla, iki, bir ve sıfır boyutlu olarak bilinen düşük boyutta elektronik sistemler üzerine geçmişte yapılan teorik ve deneysel araştırmalar günümüzde yeni boyutlara ulaşmıştır. Bu tür elektronik sistemler, daha küçük boyutlu ve daha hızlı hesaplama, iletişim ve benzeri alanlar için ihtiyaç duyulan malzeme dizaynı ve üretimi teknolojisinde önemli rol oynamaktadırlar. Yukarıda belirtilen elektronik sistemler, üç boyutlu (3D) elektronik sistemden hareketle göz önüne alınabilir. Serbest elektron gazı olarak bilinen ve her bir uzaysal doğrultuda hareket serbestisine sahip 3D elektronik sistem üzerine bir doğrultu boyunca sınırlama getirildiğinde elektronların hareketi sadece iki boyutta (2D) mümkün olur. Bu kısıtlama bir boyutlu potansiyel engeli olarak düşünülebilir. Elektron hareketi kısıtlaması iki boyutta sürdürülürse bir boyutlu (1D) elektronik sistemler elde edilir. Bu durumda elektronlar sadece bir doğrultu boyunca hareket serbestisine sahiptirler. Parçacık hareketi her bir uzaysal doğrultu boyunca kısıtlanmış ise sıfır boyutlu (0D) olarak bilinen kuantum noktaları (veya yapay atomlar) elde edilmiş olur. Dolayısıyla, bir elektronik sistemin hareket serbestlik derecesi azaldıkça elektronik ve transport özellikleri önemli ölçüde değişmektedir. Bu tezde, önceki yıllarda ayrı ayrı ele alınan üç, iki ve bir boyutlu elektronik sistemlerin kolektif uyarım spektrumları detaylı bir şekilde analitik olarak bir arada ele alınmaktadır.

Kollektif uyarımlar, Coulomb etkileşmesi yoluyla sistemdeki elektronların bir bütün olarak salındıkları boyuna plazma salınımlarıdır. Bu, bir elektronik sistemin dış bir etken tarafından uyarıldığında (etken ortadan kalktığında bile) “*elektronların belirli enerjilerde ortaklaşa salınımları*” şeklinde yorumlanabilir. Bu kuantumlanmış plazma salınımları “*plazmon*” lar olarak adlandırılır ve elektronik sistemin boyutu ile ilgili olarak farklı özellikler gösterirler.

Elektronik sistemlerin plazmon modlarını belirlemek amacıyla bir çok yöntem geliştirilmiştir. Bu tezin kapsamında rasgele faz yaklaşımı – random phase approximation (RPA) – denilen bir yöntem kullanılacaktır. Bu yöntem ile zayıf bir dış etkiye karşı elektronik sistemin lineer tepkisini veren tepki fonksiyonları - direkt dielektrik fonksiyonu ve ters dielektrik fonksiyonu - araştırılacak ve bu sayede yukarıda verilen elektronik sistemlerin kolektif mod-dispersiyon bağıntısı incelenecektir.

Bölüm 2’de kolektif uyarımlar RPA çerçevesinde teorik olarak incelenecek ve ayrıca tek-parçacık uyarımları denilen elektron-boşluk çifti oluşumu tartışılacaktır. Her bir elektronik sistem için etkileşimsiz tek-parçacık termodinamik Green fonksiyonundan hareketle yoğunluk pertürbasyon tepki fonksiyonları hesaplanacak ve buradan direkt-dielektrik fonksiyonu ile ters dielektrik fonksiyonu arasındaki ilişki ortaya konulacaktır. Bu fonksiyonlar elektronik sistemler için kolektif modlar ve sönüm olayları hakkında bilgi verdiklerinden ve perdeleme etkilerini açıkladıklarından önem arzederler.

Bölüm 3’de, 3D elektronik sistemler için etkileşimsiz tek-parçacık Green fonksiyonu elde edilecektir. Bu fonksiyon yardımıyla sistemin polarizasyon ve dolayısıyla dielektrik fonksiyonu belirlenecektir. Buradan hareketle 3D elektronik sistemlerin kolektif uyarım modları incelenecektir.

Bölüm 4 ve Bölüm 5’de, sırasıyla, iki ve bir boyutlu elektronik sistemlerin kolektif uyarım spektrumları incelenecektir. Bunun için, Bölüm 3’ de incelenen 3D sistem için elde edilen fonksiyonlar baz alınacaktır. Bölüm 6’da önceki bölümlerde tek tek ele alınan üç, iki ve bir boyutlu elektronik sistemlerin kolektif uyarım spektrumları detaylı olarak tartışılacaktır.

BÖLÜM 2

KOLLEKTİF UYARIMLAR VE TEK PARÇACIK UYARIMLARI

2.1 BOYUNA TEPKİ FONKSİYONLARI

Bu kısımda, elektron gazı için boyuna tepki fonksiyonları tartışılacaktır. Herhangi bir elektronik sistem zamana bağlı yerel olmayan keyfi bir dış potansiyel $U(2)$, $[2 \equiv \vec{r}_2, t_2]$ ile uyarıldığında, sistemdeki elektronlar polarize olarak yerel olmayan efektif bir potansiyele $V(1)$, $[1 \equiv \vec{r}_1, t_1]$ katkıda bulunurlar. Dolayısıyla efektif potansiyel, uygulanan potansiyel ile sistemdeki tüm parçacıkların ürettiği ortalama bir potansiyelin toplamıdır:

$$V(1) = U(1) + \int d2v(1-2)\rho(2) \quad (2.1)$$

burada $d2 = d\vec{r}_2 dt_2$ ve ρ , yük yoğunluğu ve $v(1-2) = \delta(t_1 - t_2) |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^{-1}$ ani Coulomb potansiyelidir. Buna göre, sistemin dış alana karşı lineer tepkisi dielektrik fonksiyonları tanımlanarak ve Green fonksiyonları kullanılarak incelenebilir (Horing 1965; Ayaz 1999):

(i) Uygulanan potansiyel $U(2)$ ile efektif potansiyel $V(1)$ arasındaki lineer ilişkiyi veren ters dielektrik fonksiyonu $K(1, 2)$:

$$V(1) = \int d2K(1, 2)U(2) \quad (2.2)$$

başka bir deyişle, ters dielektrik fonksiyonu $K(1, 2)$, $V(1)$ efektif potansiyelinin $U(2)$ ye göre varyasyonel (fonksiyonel) türevi olarak tanımlanır:

$$\frac{\delta V(1)}{\delta U(2)} = K(1, 2) \quad (2.3)$$

(Tersi olarak, direkt dielektrik fonksiyonu $\varepsilon(1, 2)$, efektif potansiyel $V(2)$ ile uygulanan potansiyel $U(1)$ arasındaki ilişkiyi verir, $U(1) = \int d2\varepsilon(1, 2)V(2)$. Aslında bu eşitlik, basit anlamda $D = \varepsilon E$ eşitliğine benzerdir; bununla birlikte yukarıdaki ifade, plazma tepkisinin homojen olmayışını, yerel olmayışını ve dinamikliğini hesaba katmaktadır.) Bu durumda $K(1, 2)$, $\varepsilon(1, 2)$ ile uzay-zaman matris-tersi anlamda,

$$\int d2\varepsilon(1, 2) K(2, 1') = \int d2K(1, 2)\varepsilon(2, 1') = \delta(1 - 1') \quad (2.4)$$

integral denklemini sağlar; burada $\delta(1 - 1') = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}'_1)\delta(t_1 - t'_1)$ dört boyutlu Dirac-delta fonksiyonunu temsil eder.

(ii) Poisson denklemi yoluyla elektronik sistemin tepkisini tanımlayan Green fonksiyonu $G(1, 1')$. Bu fonksiyon, efektif potansiyeli $[V(1)]$ birim nokta yük yoğunluğuna $[\delta(1 - 1')]$ direkt olarak bağlar. Birim nokta yükün Coulomb potansiyeli $G_0(2, 1') = v(2, 1') = \delta(t_2 - t'_1) / |\vec{r}_2 - \vec{r}'_1|$ ile tanımlanırsa (2.2) denklemi uyarınca Green fonksiyonu

$$G(1, 1') = \int d2K(1, 2)G_0(2, 1') \quad (2.5)$$

şeklinde ifade edilebilir. (2.1) denkleminde $V(1)$ potansiyelinin $U(2)$ potansiyeline göre varyasyonel türevi alınır ve ilgili ifadede (2.3) denklemi ile betimlenen $K(1, 2)$ 'nin tanımı kullanılırsa, ters dielektrik fonksiyonu için RPA integral denklemi,

$$K(1, 2) = \delta(1 - 2) + \int d1' \int d2' G_0(1, 1') \frac{\delta\rho(1')}{\delta V(2')} K(2', 2) \quad (2.6)$$

şeklinde yazılabilir. Bu ifadede, varyasyonel türevin zincir kuralı, $\delta\rho(1')/\delta U(2) = \int d2[\delta\rho(1')/\delta V(2')][\delta V(2')/\delta U(2)]$ kullanıldı ve varyasyonel türevdeki ikinci terim $K(2', 2)$ ile ifade edildi. Fonksiyonel türevdeki ilk terim yoğunluk pertürbasyon tepki fonksiyonu $R(1', 2')$ olarak tanımlanır:

$$R(1', 2') \equiv \frac{\delta\rho(1')}{\delta V(2')} \quad (2.7)$$

Bu fonksiyon, RPA çerçevesinde, elektronik sistemi temsil eden etkileşimsiz tek-elektron termodinamik Green fonksiyonları cinsinden

$$R(1', 2') = -iG(1', 2') G(2', 1'') \quad (2.8)$$

olarak ifade edilebilir. Denklemdaki '' indisi t_1' zamanına göre zamanda çok küçük bir artışı temsil eder. Sistemin polarizasyon fonksiyonu

$$\alpha(1, 2') \equiv - \int d1' G_0(1, 1') R(1', 2') \quad (2.9)$$

denklemleri ile tanımlanırsa, sistemin ters dielektrik fonksiyonu

$$K(1, 2) = \delta(1 - 2) - \int d2' \alpha(1, 2') K(2', 2) \quad (2.10)$$

şeklinde tekrar yazılabilir. (2.10) eşitliğin her iki tarafının $\varepsilon(2, 1')$ ile çarpılıp 2 indisi üzerinden integre edilmesi

$$\int d2 K(1, 2) \varepsilon(2, 1') = \int d2 \delta(1 - 2) \varepsilon(2, 1') - \int d2' \alpha(1, 2') \int d2 K(2', 2) \varepsilon(2, 1') \quad (2.11)$$

sonucunda [sol taraftaki ilk terim (2.4) denklemleri uyarınca $\int d2 K(1, 2) \varepsilon(2, 1') = \delta(1 - 1')$ olurken, sağ taraftaki ikinci terimde 2 indisi üzerinden integral $\int d2 K(2', 2) \varepsilon(2, 1') = \delta(2' - 1')$ verir] (2.11) denklemleri

$$\varepsilon(1, 1') = \delta(1 - 1') + 4\pi\alpha(1, 1') \quad (2.12)$$

halini alır. Bu ifade, polarizasyon fonksiyonunu doğrudan dielektrik fonksiyonuna bağlamaktadır. Polarizasyon fonksiyonunun (2.12) denklemindeki ifadesi (2.10) eşitliğiyle verilen RPA integral denkleminde yerine yazılarak (2.10) denklemleri

$$\int d1' \varepsilon(1, 1') K(1', 2) = \delta(1 - 2) \quad (2.13)$$

şeklinde tekrar tekrar elde edilir. Bu denklem önceden ifade edilen (2.4) denkleminde eşdeğerdir. Konuma ve zamana göre öteleme özelliğine sahip bir elektronik sistem için Fourier konvolüsyon teoremi kullanılarak tepki fonksiyonları momentum-frekans uzay temsiliinde de yazılabilirler. Örneğin, 3D bir elektronik sistem için bu duruma geçiş, $\vec{R} = \vec{r}_1 - \vec{r}'_1 \rightarrow \vec{p}$, $T = t_1 - t'_1 \rightarrow \omega$ ve $\varepsilon(\vec{R}, T) \rightarrow \varepsilon(\vec{p}, \omega)$ şeklinde temsil edilebilir. Daha açık olarak, [(2.9) ve (2.11) denklemleri gereği] momentum-frekans temsiliinde polarizasyon fonksiyonu

$$4\pi\alpha(\vec{p}, \omega) = -v(\vec{p}) R(\vec{p}, \omega) \quad (2.14)$$

ve dielektrik fonksiyonu

$$\varepsilon(\vec{p}, \omega) = 1 + 4\pi\alpha(\vec{p}, \omega) = 1 - v(\vec{p}) R(\vec{p}, \omega) \quad (2.15)$$

şeklinde yazılırlar.

Genel formları ile verilen bu fonksiyonlar oldukça önemlidirler, çünkü ilerki bölümlerde incelenecek olan değişik boyutlardaki elektronik sistemlerin kolektif uyarım spektrumlarını (normal mod-plazma salınımları) ve sönmüm olaylarını (damping) belirlerler.

2.2 KOLLEKTİF UYARIMLAR

Metal için serbest elektron gazı modelinde olduğu gibi, bir kristaldeki negatif yüklerin eşit ve pozitif yüklü iyonize homojen arka plana karşı yerdeğiştirmesi “plazma” olarak bilinmektedir. Elektronların, belli bir frekansta salınımları için uyarılmaları mümkündür. Bu özgün davranışın sebebi, düzgün ve uyumlu bir biçimde elektronların hareketini sağlayan Coulomb etkileşmesidir. Serbest elektron gazının bu tür salınımları “plazma salınımları” olarak tanımlanır. İnce bir metal film içinden bir elektron geçirilerek veya bu filmde bir elektron saçılarak uyarılma gerçekleştirilebilir. Dielektrik filmlerde de kolektif plazma salınımlarını uyarmak mümkündür. Bu iki örnekte plazma salınımları temelde benzerdir; bütün valans elektronları iyon merkezlerine göre hep birlikte boyuna salınırlar. Boyuna plazma salınımlarının kuantalanmasına *plazmon* denilir. Basit kuantum harmonik titreşken durumunda

olduđu gibi, bu plazma salınımlarının enerjileri kuantumlanmıştır. Bu tür salınımlar cinsinden homojen elektron gazının incelenmesi kollektif uyarım spektrumları ile yapılabilir. Boyuna plazmonlar için dispersiyon ilişkisi sistemi tanımlayan dielektrik fonksiyonun sıfır noktalarının incelenmesiyle elde edilir. Bu söyleyiş, genelde kompleks bir fonksiyon olan $\varepsilon(\vec{p}, \omega)$ için momentum-frekans temsilinde

$$[\text{Re } \varepsilon^R(\vec{p}, \omega)]^2 + [\text{Im } \varepsilon^R(\vec{p}, \omega)]^2 = 0 \quad (2.16)$$

şeklinde ifade edilir. Eşitlik, dielektrik fonksiyonunun hem reel ve hem de imajiner kısımlarının eş-zamanlı olarak sıfır olduđu durumda gerçekleşir; yani, $\text{Re } \varepsilon^R(\vec{p}, \omega) = \text{Im } \varepsilon^R(\vec{p}, \omega) = 0$. (Bonitz, 2000). Denklem çiftini sağlayan ω - değışkeni genelde kompleks bir fonksiyondur: $\omega \rightarrow \tilde{\omega} + i\gamma$; ifadede $\tilde{\omega}$, reel bir fonksiyon ve γ , sistemdeki sönümü temsil eden bir sabittir. Plazmon sönümü çok zayıf olduđu durumda ($|\gamma| \ll \tilde{\omega}$ ve $[\text{Im } \varepsilon^R(\vec{p}, \omega)] \ll [\text{Re } \varepsilon^R(\vec{p}, \omega)]$)

$$[\text{Re } \varepsilon^R(\vec{p}, \tilde{\omega})]_{\gamma=0} = 0 \quad (2.17)$$

eşitliđi yazılabilir. Bu ifade, plazmon dispersiyon bağıntısının sadece “dielektrik fonksiyonunun reel kısmı” ile tanımlandığı anlamındadır. Tezin ilerki bölümlerinde elektronik sistemler için dielektrik fonksiyonları ve dolayısıyla kollektif uyarımlar, Bölüm 2.1’de incelendiđi üzere, rasgele-faz-yaklaşımı çerçevesinde elde edilecektir (Davoudi and Tanatar, 2000).

2.3 TEK PARÇACIK UYARIMLARI

Herhangi bir elektronik sistemde kollektif uyarımların yanı sıra tek-parçacık uyarımları denilen uyarımlar da mevcut olabilir ve bunlar spektrumda “tek-parçacık sürekliliđi” denilen sürekli bir bölge oluştururlar. Bu durum dalga vektörü k ’nın Fermi dalga vektörü k_F ’den küçük olduđu durumlarda gerçekleşir. Bant yapısı ihmal edilirse, p kuantum durumu ile temsil edilen bir elektron orbitali $\varepsilon_{\vec{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$ enerjisine sahiptir. Taban durumunda Fermi yüzeyinin içinde bulunan tüm orbitaller doludur ve dalga vektörü için $|\vec{k}| < k_F$ (veya enerji durumları için $\varepsilon_{\vec{k}} < \varepsilon_F$) koşulunu sağlayan durumlar olasıdır. (ε_F , Fermi enerjisidir.) Diđer taraftan, \vec{p} dalga vektörüne ve ω

frekansına sahip bir dış alan, Fermi denizindeki \vec{k} dalga vektörüne ve $\varepsilon_{\vec{k}}$ enerjisine sahip bir elektronu uyararak $\vec{k} + \vec{p}$ dalga vektörüne ve $\varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}}$ enerjisine sahip bir üst enerji seviyesine çıkarabilir. $\varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}}$ enerji seviyesine uyarılan elektron arkasında (Fermi denizinde) $\varepsilon_{\vec{k}}$ enerjisinde bir boşluk bırakır. Elektron-boşluk çiftinin oluşması için gerekli enerji $\hbar\omega_{\vec{k},\vec{p}} = \hbar^2(\vec{k} + \vec{p})^2/2m - \hbar^2k^2/2m$ kadardır ve elektronun geçiş enerjisi olarak adlandırılır. Genel anlamda, tek-parçacık uyarımlarının fiziksel karakteri sistemi betimleyen dielektrik fonksiyonun imajiner kısmı (sıfır noktaları) incelenerek araştırılabilir. Bu uyarımlar bölgesindeki dalga vektörleri için plazmonlar kolektif davranış özelliklerini kaybederler ve elektron-boşluk çiftinin karakteristiği,

$$\frac{-\text{Im } \varepsilon[\vec{p}, \tilde{\omega}]_{\gamma=0}}{(d/d\omega) \text{Re } \varepsilon[\vec{p}, \tilde{\omega}]_{\gamma=0}} \approx \gamma \quad (2.18)$$

ile verilen bir γ sönüm sabitiyle tanımlanır (Bonitz, 2000). Sönüm sabitini etkileyen etkenler sisteme uygulanan pertürbasyonla ilgilidir. Örneğin, sıcaklık arttıkça sönüm bölgesinin sınırları da genişler. Bunun sonucu, çok-cisim etkileri önem kazanır (Allen,1996).

BÖLÜM 3

ÜÇ BOYUTLU ELEKTRONİK SİSTEMLERİN KOLLEKTİF UYARIM SPEKTRUMLARI

3.1 3D-GREEN FONKSİYONU

Üç boyutlu (3D) elektronik sistemi tanımlayan etkileşimsiz tek-parçacık termodinamik Green fonksiyonu $G(1, 1')$,

$$(\nabla_1^2/2m + \mu + i\partial/\partial t_1) G(\vec{r}_1, t_1; \vec{r}'_1, t'_1) = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}'_1) \delta(t_1 - t'_1) \quad (3.1)$$

denklemini çözülerek elde edilebilir; burada μ , T sıcaklığında sistemin kimyasal potansiyelidir (Kadanoff and Baym 1962). Homojen bir sistem için konum ve zamana göre öteleme özelliğinden $[\vec{R} = \vec{r}_1 - \vec{r}'_1, T = t_1 - t'_1]$, (3.1) denklemini,

$$(\nabla_{\vec{R}}^2/2m + \mu + i\partial/\partial T) G(\vec{R}, T) = \delta(\vec{R})\delta(T) \quad (3.2)$$

şeklinde yeniden yazılabilir. Yukarıda verilen denklemleri sağlayan tek-parçacık Green fonksiyonunu elde edebilmek için, $t_1 > t'_1$ iken $G = G_>$ ve $t_1 < t'_1$ iken $G = G_<$ olacak şekilde iki fonksiyon tanımlansın. Zamana göre uygun sınır koşulları ile bu iki fonksiyon birbirine

$$G_<(\vec{R}, T) = -e^{\beta\mu} G_>(\vec{R}, T - i\beta) \quad (3.3)$$

şeklinde bağlıdır; burada $i\beta$ değişkeni zaman argümanlarının kompleks değerini göstermektedir (Kadanoff and Baym, 1962). $G_>$ ve $G_<$ fonksiyonları arasındaki bu ilişki, (3.1) denklemini sağlayan Green fonksiyonunun elde edilmesinde önemlidir.

Fourier dönüşümü yardımıyla $G_<$ fonksiyonu momentum-frekans temsilinde

$$G_<(\vec{p}, \omega) = \int d^3R \int dT e^{-i\vec{p}\cdot\vec{R} + i\omega T} G_<(\vec{R}, T) \quad (3.4)$$

şeklinde ifade edilir. $G_<(\vec{R}, T)$ için (3.3) denklemi ile birlikte $G_>(\vec{R}, T - i\beta)$ için ters Fourier transformu kullanılarak, $G_<(\vec{p}, \omega)$ ve $G_>(\vec{p}, \omega)$ arasında

$$G_<(\vec{p}, \omega) = -e^{-\beta\mu} \int d^3R \int dT e^{-i\vec{p}\cdot\vec{R} + i\omega T} \int \frac{d^3p'}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega'}{2\pi} e^{i\vec{p}'\cdot\vec{R} - i\omega'(T - i\beta)} G_>(\vec{p}', \omega') \quad (3.5)$$

bağıntısı elde edilir. Dirac-delta fonksiyonunun integral temsili ile (3.5) denklemi

$$G_<(\vec{p}, \omega) = -e^{-\beta(\omega - \mu)} G_>(\vec{p}, \omega) \quad (3.6)$$

şeklinde tekrar yazılabilir. $G_<$ ve $G_>$ fonksiyonları cinsinden bir “Spektral-ağırlık fonksiyonu” $A(\vec{R}, T)$ tanımlansın:

$$G_>(\vec{R}, T) - G_<(\vec{R}, T) = -i \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega T} A(\vec{R}, \omega) = -iA(\vec{R}, T) \quad (3.7)$$

ve momentum-frekans temsilinde,

$$A(\vec{p}, \omega) = i [G_>(\vec{p}, \omega) - G_<(\vec{p}, \omega)] \quad (3.8)$$

(Kadanoff and Baym, 1962). $G_<$ ve $G_>$ fonksiyonlarını birbirine bağlayan (3.6) ilişkisini (3.8) denkleminde kullanarak $A(\vec{p}, \omega)$ ile $G_<(\vec{p}, \omega)$ ve $G_>(\vec{p}, \omega)$ fonksiyonları arasındaki ilişki doğrudan elde edilebilir:

$$iG_<(\vec{p}, \omega) = -f_0(\omega)A(\vec{p}, \omega) \quad (3.9a)$$

$$iG_>(\vec{p}, \omega) = [1 - f_0(\omega)]A(\vec{p}, \omega) \quad (3.9b)$$

Yukarıdaki ifadede $f_0(\omega) = 1/[e^{\beta(\hbar\omega - \mu)} + 1]$ Fermi-Dirac dağılım fonksiyonunu temsil eder. $G_{\geq}(\vec{R}, T)$ fonksiyonlarının her biri (3.2) denklemi ile verilen diferansiyel denklemi sağladıklarından, (3.7) denklemi ile tanımlı $A(\vec{R}, T)$ benzer bir homojen diferansiyel denklemi sağlar:

$$(\nabla_{\vec{R}}^2/2m + \mu + i\partial/\partial T) A(\vec{R}, T) = 0 \quad (3.10)$$

Bu denklemin konum-zaman temsilindeki çözümü $[\nabla^2/2m \rightarrow \hbar^2 p^2/2m]$

$$A(\vec{R}, T) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} e^{i\vec{p}\cdot\vec{R}} e^{i(\mu - \hbar^2 p^2/2m)T} \quad (3.11)$$

ve momentum-zaman temsilindeki çözümü

$$A(\vec{p}, T) = e^{i(\mu - \hbar^2 p^2/2m)T} \quad (3.12)$$

verir. (3.12) eşitliğinin her iki tarafı $\exp(i\omega T)$ ile çarpılıp T değişkeni üzerinden integre edilirse spektral ağırlık fonksiyonunun momentum-frekans uzayındaki temsili

$$A(\vec{p}, \omega) = 2\pi\delta(\hbar\omega + \mu - \hbar^2 p^2/2m) \quad (3.13)$$

şeklinde elde edilir. $G_{\geq}(\vec{R}, T)$ fonksiyonlarının tanımları ile birlikte zaman sıralamalı etkileşimsiz tek-parçacık Green fonksiyonu $G(\vec{R}, T)$ genel formda

$$G(\vec{R}, T) = \theta_+(T) G_{>}(\vec{R}, T) + \theta_-(T) G_{<}(\vec{R}, T) \quad (3.14)$$

şeklinde yazılabilir. İfadedeki $\theta_{\pm}(T)$ fonksiyonları birim adım fonksiyonlarını temsil eder. $G(\vec{R}, T)$ fonksiyonunun momentum-frekans uzayındaki temsilini elde etmek için G_{\geq} Green fonksiyonlarının momentum-frekans uzay temsilindeki ifadeleri [(3.9) ve (3.13) denklemleri] ve birim adım fonksiyonlarının

$$\theta_{\pm}(T) = \pm \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{e^{-i\omega'T}}{\omega' \pm i\epsilon} \quad (3.15)$$

integral temsilleri ile Fourier konvolüsyon teoremini gözönüne almak yeterlidir. Sonuç

$$G(\vec{p}, \omega) = \frac{1 - f_0(\varepsilon_{\vec{p}})}{\omega - \varepsilon_{\vec{p}} + i\epsilon} + \frac{f_0(\varepsilon_{\vec{p}})}{\omega - \varepsilon_{\vec{p}} - i\epsilon} \quad (3.16)$$

ile verilir. Burada, $\varepsilon_{\vec{p}}$, \vec{p} momentumuna sahip bir elektronun kinetik enerjisini ($\varepsilon_{\vec{p}} = \hbar^2 p^2 / 2m$) temsil eder. (3.16) denklemi, 3D elektronik sistemin tepki fonksiyonlarının elde edilmesinde kullanılacak Green fonksiyonunun genel formunu teşkil eder (Fetter and Walecka, 1971).

3.2 3D-DİELEKTRİK FONKSİYONU

Sistemin polarizasyon fonksiyonuna ve dolayısıyla direkt dielektrik fonksiyona geçişi sağlayacak olan yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonu [denklem (2.8)] (3.16) denklemi ile verilen Green fonksiyonları cinsinden yazılabilir. Homojen bir sistem için bu fonksiyon uzay-zaman temsiliinde [$\vec{R} \equiv \vec{r}_1 - \vec{r}'_1$, $T \equiv t_1 - t'_1$]

$$R(\vec{R}, T) = -iG(\vec{R}, T)G(-\vec{R}, -T) \quad (3.17)$$

ve momentum-frekans temsiliinde

$$R(\vec{p}, \omega) = -i \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega'}{2\pi} G(\vec{p}', \omega') G(\vec{p}' - \vec{p}, \omega' - \omega)$$

formundadır. İntegralde $\vec{p}' - \vec{p} \rightarrow \vec{k}$ ve $\omega' - \omega \rightarrow \omega'$ değişken değiştirmeleri ile yeniden yazıldığında

$$R(\vec{p}, \omega) = -i \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega'}{2\pi} G(\vec{k} + \vec{p}, \omega' + \omega) G(\vec{k}, \omega) \quad (3.18)$$

olur. (3.18) denklemindeki ω - değişkeni üzerinden integrali yapmak için $G(\vec{p}, \omega)$ 'nın (3.16) denklemindeki formu kullanılırsa ortaya çıkacak dört integral kontur integrali metoduyla çözülebilir. (Ayrıntılı çözümler Ek-A'da sunulmuştur.) Ek-A'da verilen sonuçlar (3.18) denkleminde kullanılarak $R(\vec{p}, \omega)$ [$\epsilon \rightarrow 0^+$]

$$R(\vec{p}, \omega) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left[\frac{f_0(\varepsilon_{\vec{k}})[1 - f_0(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}})]}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}} + i\epsilon} - \frac{[1 - f_0(\varepsilon_{\vec{k}})]f_0(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}})}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}} - i\epsilon} \right] \quad (3.19)$$

şeklinde ifade edilebilir. Denklemdaki $f_0(\varepsilon_{\vec{k}})$ terimi, \vec{k} durumunda $\varepsilon_{\vec{k}}$ enerjili bir orbitalin dolu olma olasılığını temsil eder. Diğer taraftan, $[1 - f_0(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}})]$ terimi, $\vec{k} + \vec{p}$ durumunda $\varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}}$ enerjili bir orbitalin boş olma olasılığını belirtir. Dolayısıyla, (3.19) denkleminde ilk terimin içerdiği Fermi-Dirac dağılım fonksiyonlarının çarpımı, $\varepsilon_{\vec{k}}$ enerjili orbitaldeki bir elektronun $\varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}}$ enerjili bir orbitale geçiş olasılığını temsil eder. Benzer olarak, ikinci terimin içerdiği Fermi-Dirac dağılım fonksiyonlarının çarpımı, $\varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}}$ orbitaldeki bir elektronun $\varepsilon_{\vec{k}}$ enerjili bir orbitale geçiş olasılığını temsil eder. Dirac özdeşliği ile,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm i\epsilon} = P\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\pi\delta(x) \quad (3.20)$$

yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonunun reel kısmı $R_1(\vec{p}, \omega)$

$$R_1(\vec{p}, \omega) = P \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left[\frac{f_0(\varepsilon_{\vec{k}}) - f_0(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}})}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}}} \right] \quad (3.21)$$

ve imajiner kısmı $R_2(\vec{p}, \omega)$

$$R_2(\vec{p}, \omega) = -\pi \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \delta(\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}}) \times \left[f_0(\varepsilon_{\vec{k}})[1 - f_0(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}})] + [1 - f_0(\varepsilon_{\vec{k}})]f_0(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}}) \right] \quad (3.22)$$

şeklinde elde edilir. Bu noktadan itibaren elektronik sistemin dış pertürbasyona karşı lineer tepkisi gecikmeli yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonu $R^R(\vec{p}, \omega)$ ile betimlenecektir, çünkü ortamın tepkisini fiziksel anlamda temsil eden bu fonksiyondur. Aslında, $R^R(\vec{p}, \omega)$ ile $R(\vec{p}, \omega)$ fonksiyonları arasında yakın bir ilişki vardır (Fetter and Walecka, 1971). $\text{Re } R^R(\vec{p}, \omega) \equiv R_1^R(\vec{p}, \omega)$ ve $\text{Im } R^R(\vec{p}, \omega) \equiv R_2^R(\vec{p}, \omega)$ olmak üzere, $R^R(\vec{p}, \omega)$ ile $R(\vec{p}, \omega)$ fonksiyonlarının reel kısımları arasındaki ilişki

$$R_1^R(\vec{p}, \omega) = R_1(\vec{p}, \omega) \quad (3.23a)$$

olurken, imajiner kısımları

$$R_2^R(\vec{p}, \omega) = R_2(\vec{p}, \omega) \text{sign}(\omega) \quad (3.23b)$$

ilişkisini sağlar. Her ne kadar, $R_1^R(\vec{p}, \omega)$ ve $R_1(\vec{p}, \omega)$ arasındaki (3.23a) ilişkisinin türetilmesi matematiksel detay içerse de, $R_2^R(\vec{p}, \omega)$ ve $R_2(\vec{p}, \omega)$ arasındaki (3.23b) bağıntısı kolaylıkla elde edilebilir. Bu şu şekilde görülebilir. (3.22) denkleminde $R_2(\vec{p}, \omega)$ 'nin içerdiği Dirac-delta fonksiyonlarından dolayı ω , pozitif veya negatif olabilir; dolayısıyla enerji farkının pozitif veya negatif olma hali vardır. Bu durum, $\omega > 0$ iken $\omega_{\vec{k}} - \omega_{\vec{k}+\vec{p}} < 0$ ve $\omega < 0$ iken $\omega_{\vec{k}} - \omega_{\vec{k}+\vec{p}} > 0$ şeklindedir, aksi takdirde Dirac-delta fonksiyonları integrale katkıda bulunmazlar. (3.23b) denkleminde $\text{sign}(\omega)$, işaret fonksiyonunu temsil eder ve $\omega < 0$ için -1 ve $\omega > 0$ için $+1$ değerini alır. Spin durumları gözönüne alınarak $R^R(\vec{p}, \omega)$ fonksiyonu

$$\begin{aligned} R^R(\vec{p}, \omega) &= 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{f_0(\varepsilon_{\vec{k}}) - f_0(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}})}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}} + i\epsilon} \\ &= 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{f_0(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}}) - f_0(\varepsilon_{\vec{k}})}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}} - \varepsilon_{\vec{k}} + i\epsilon} \end{aligned} \quad (3.24)$$

olarak elde edilir. Dikkat edilirse, $R^R(\vec{p}, \omega)$ ve $R(\vec{p}, \omega)$ arasındaki fark $\pm i\epsilon$ kadardır. Dirac özdeşliği [denklem (3.20)] ile $R^R(\vec{p}, \omega)$ fonksiyonunun reel kısmında $\vec{k} \rightarrow -\vec{k} - \vec{p}$ değişken değişimi yapılarak $R_1^R(\vec{p}, \omega)$

$$R_1^R(\vec{p}, \omega) = P \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f_0(\varepsilon_{\vec{k}}) \left[\frac{1}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}}} - \frac{1}{\hbar\omega - \varepsilon_{\vec{k}} + \varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}}} \right] \quad (3.25)$$

olur. Benzer şekilde, $R^R(\vec{p}, \omega)$ fonksiyonunun imajiner kısmı

$$\begin{aligned} R_2^R(\vec{p}, \omega) &= 2\pi \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left[f_0(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}}) - f_0(\varepsilon_{\vec{k}}) \right] \delta(\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}}) \\ &= 2\pi \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f_0(\varepsilon_{\vec{k}}) \left[\delta(\hbar\omega - \varepsilon_{\vec{k}} + \varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}}) - \delta(\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}}) \right] \end{aligned} \quad (3.26)$$

şeklinde yazılabilir. (3.25) ve (3.26) denklemlerinde görülen enerji farkı

$$\varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}} - \varepsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k} + \vec{p})^2 - \frac{\hbar^2}{2m}k^2 = \frac{\hbar^2 p^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m}\vec{p} \cdot \vec{k}$$

kadardır.

$R_1^R(\vec{p}, \omega)$ fonksiyonunda görülen integraller küresel koordinatlarda kolayca hesaplanabilir. γ , \vec{k} ve \vec{p} arasındaki açı olmak üzere, (3.25) denklemini

$$R_1^R(\vec{p}, \omega) = \frac{2}{(2\pi)^3} P \int_0^\infty dk k^2 f_0(\varepsilon_{\vec{k}}) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \times \left[\frac{1}{\hbar\omega - \frac{\hbar^2 p^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{m}pk \cos \gamma} - \frac{1}{\hbar\omega + \frac{\hbar^2 p^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m}pk \cos \gamma} \right] \quad (3.27)$$

şeklinde yazılabilir. k - değişkeni üzerinden integrali sonlu sıcaklık değerinde analitik olarak hesaplamak mümkün değildir. Bununla birlikte, k - değişkeni üzerinden integral mutlak sıfır sıcaklıkta ($T = 0$ K) analitik olarak ele alınabilir. Bu durumda, Fermi fonksiyonu $\varepsilon_{\vec{k}} > \varepsilon_F$ için $f_0(\varepsilon_{\vec{k}}) = 0$ ve $\varepsilon_{\vec{k}} < \varepsilon_F$ için $f_0(\varepsilon_{\vec{k}}) = 1$ olur, dolayısıyla $f_0(\varepsilon_{\vec{k}}) \rightarrow \theta(\varepsilon_F - \varepsilon_{\vec{k}}) \equiv \theta(k_F - k)$. (k_F , 3D Fermi vektörüdür.) Diğer taraftan, integralde görülen γ açısı küresel koordinatlarda $\cos \gamma = \sin \theta \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi') + \cos \theta \cos \theta'$ şeklinde verilir. (Burada üslü değişkenler \vec{p} vektörünün küresel bileşenlerini temsil ederler.) İntegral sonucu üslü değişkenlere bağlı olmayacağından, basitlik için, \vec{p} vektörü z - ekseninde seçilirse $\theta' = 0$ ve $\cos \gamma = \cos \theta$ olur ve $\cos \gamma$, φ değişkeninden bağımsız olur. Böylelikle, (3.27) denkleminde φ - açısı üzerinden integral 2π değerini verir. $\int du/(\alpha + \beta u) = (1/\beta) \ln(\alpha + \beta u)$ integral özdeşliği ile (3.27) denkleminde θ -değişkeni üzerinden integraller yapıldığında $R_1^R(\vec{p}, \omega)$

$$R_1^R(\vec{p}, \omega) = -\frac{m}{2\pi^2 \hbar^2 p} \int_0^\infty dk k \theta(k_F - k) \left[\ln \left| \frac{k + (\frac{p}{2} - \frac{m\omega}{\hbar p})}{k - (\frac{p}{2} - \frac{m\omega}{\hbar p})} \right| + \ln \left| \frac{k + (\frac{p}{2} + \frac{m\omega}{\hbar p})}{k - (\frac{p}{2} + \frac{m\omega}{\hbar p})} \right| \right] \quad (3.28)$$

şeklini alır. Geriye kalan k - değişkeni üzerinden integralde, birim adım fonksiyonu integralin üst sınırını k_F değerine sınırlar. $\frac{p}{2} \mp \frac{m\omega}{\hbar p} \equiv \alpha_{\mp}$ olmak üzere ve $k \pm \alpha_- \equiv x$ ve $k \pm \alpha_+ \equiv y$ dönüşümleri altında ve ayrıca $\int u \ln u du = (u^2/2)(\ln u - 1/2)$ belirsiz

integral eşitliği yardımıyla (3.28) denklemindeki k - üzerinden integraller kolayca yapılabilir. Sonuç

$$R_1^R(\vec{p}, \omega) = -\frac{mk_F^2}{4\pi^2\hbar^2p} \left\{ \frac{2p}{k_F} + \left[1 - \left(\frac{p}{2k_F} - \frac{m\omega}{\hbar pk_F} \right)^2 \right] \ln \left| \frac{1 + \left(\frac{p}{2k_F} - \frac{m\omega}{\hbar pk_F} \right)}{1 - \left(\frac{p}{2k_F} - \frac{m\omega}{\hbar pk_F} \right)} \right| \right. \\ \left. + \left[1 - \left(\frac{p}{2k_F} + \frac{m\omega}{\hbar pk_F} \right)^2 \right] \ln \left| \frac{1 + \left(\frac{p}{2k_F} + \frac{m\omega}{\hbar pk_F} \right)}{1 - \left(\frac{p}{2k_F} + \frac{m\omega}{\hbar pk_F} \right)} \right| \right\} \quad (3.29)$$

ile verilir. Burada genel formuyla verilen $R_1^R(\vec{p}, \omega)$ fonksiyonu bir sonraki kısımda kısa dalga vektörü limitinde ($p \rightarrow 0$) incelenecektir.

$R^R(\vec{p}, \omega)$ fonksiyonunun imajiner kısmı $R_2^R(\vec{p}, \omega)$, küresel koordinatlarda yazıldığında

$$R_2^R(\vec{p}, \omega) = 2\pi \int_0^\infty \frac{dk}{(2\pi)^3} k^2 f_0(\varepsilon_{\vec{k}}) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \\ \times \left[\delta\left(\hbar\omega + \frac{\hbar^2 p^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m} pk \cos \theta\right) - \delta\left(\hbar\omega - \frac{\hbar^2 p^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{m} pk \cos \theta\right) \right] \quad (3.30)$$

olur. İfadedeki Dirac-delta fonksiyonlarından dolayı $R_2^R(\vec{p}, \omega)$ sonlu sıcaklıkta hesaplanabilir. $\hbar\omega + \frac{\hbar^2 p^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m} pk \cos \theta = u_+$ dönüşümüyle ve $[d/dx] \theta(x - x') = \delta(x - x')$ eşitliğiyle, (3.30) denklemindeki θ - değişkeni üzerinden birinci integral aşağıdaki şekilde ele alınabilir:

$$\int_0^\pi d\theta \sin \theta \delta\left(\hbar\omega + \frac{\hbar^2 p^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m} pk \cos \theta\right) = \frac{m}{\hbar^2 pk} \int_{\lambda_-}^{\lambda_+} du_+ \delta(u_+) = \frac{m}{\hbar^2 pk} [\theta(\lambda_+) - \theta(\lambda_-)]$$

Burada, $\lambda_\pm \equiv \hbar\omega + \frac{\hbar^2 p^2}{2m} \pm \frac{\hbar^2}{m} pk$. İkinci integral de benzer şekilde ele alınabilir. Dolayısıyla, θ -değişkeni üzerinden bütün integraller yapıldığında $R_2^R(\vec{p}, \omega)$

$$R_2^R(\vec{p}, \omega) = \frac{m}{2\pi^2\hbar^2p} \int_0^\infty dk k f_0(\varepsilon_{\vec{k}}) \left[\theta\left(\hbar\omega + \frac{\hbar^2 p^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m} pk\right) - \theta\left(\hbar\omega + \frac{\hbar^2 p^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{m} pk\right) \right. \\ \left. + \theta\left(\hbar\omega - \frac{\hbar^2 p^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m} pk\right) - \theta\left(\hbar\omega - \frac{\hbar^2 p^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{m} pk\right) \right], \quad (3.31)$$

formunu alır. Geriye kalan k - değişkeni üzerinden integraller aşağıdaki şekilde

değerlendirilebilir: Birim adım fonksiyonlarının integrallere katkı vermesi için : (i) ilk terimde $k > -\alpha_+$ olmalıdır (bu koşul integral sınırlarına etki etmez), (ii) ikinci terimde $k < \alpha_+$ olmalıdır (bu durumda alt limit α_+ değerinden başlar), (iii) üçüncü terimde $k > \alpha_-$ olmalıdır (bu durumda $p > \omega$ ise integralin alt sınırı α_- olur, fakat $p < \omega$ ise integral sınırlarında değişiklik olmaz), ve (iv) dördüncü terimde $k < -\alpha_-$ olmalıdır (bu durumda $p < \omega$ ise integralin üst sınırı α_- olur, fakat $p > \omega$ ise integralin sınırları tanımlı değildir). Bütün bu durumlar birleştirilerek $R_2^R(\vec{p}, \omega)$

$$R_2^R(\vec{p}, \omega) = \frac{m}{2\pi^2 \hbar^2 p} \left[\int_0^\infty dk k f_0(\varepsilon_{\vec{k}}) - \int_{|\alpha_+|}^\infty dk k f_0(\varepsilon_{\vec{k}}) - \theta(p - \omega) \int_{|\alpha_-|}^\infty dk k f_0(\varepsilon_{\vec{k}}) - \theta(\omega - p) \int_0^{|\alpha_-|} dk k f_0(\varepsilon_{\vec{k}}) + \theta(\omega - p) \int_0^{|\alpha_-|} dk k f_0(\varepsilon_{\vec{k}}) \right]$$

formunda ifade edilebilir, veya yeniden düzenlenerek

$$R_2^R(\vec{p}, \omega) = \frac{m}{2\pi^2 \hbar^2 p} \left[\int_{|\frac{p}{2} + \frac{m\omega}{\hbar p}|}^\infty dk k f_0(\varepsilon_{\vec{k}}) - \int_{|\frac{p}{2} - \frac{m\omega}{\hbar p}|}^\infty dk k f_0(\varepsilon_{\vec{k}}) \right] \quad (3.32)$$

olur. k - değişkeni üzerinden integral sonlu sıcaklıkta yapılarak $R_2^R(\vec{p}, \omega)$ [Fermi dağılım fonksiyonu $f_0(\varepsilon_{\vec{k}}) = (\exp[(\hbar^2/2mk_B T)(k^2 - k_F^2)] + 1)^{-1}$]

$$R_2^R(\vec{p}, \omega) = -\frac{m^2 k_B T}{2\pi \hbar^4 p} \ln \left| \frac{1 + \exp \left[\varepsilon_F / k_B T - \varepsilon_F / k_B T \left(\frac{p}{2k_F} - \frac{m\omega}{\hbar p k_F} \right)^2 \right]}{1 + \exp \left[\varepsilon_F / k_B T - \varepsilon_F / k_B T \left(\frac{p}{2k_F} + \frac{m\omega}{\hbar p k_F} \right)^2 \right]} \right| \quad (3.33)$$

olur. Yukardaki integralin hesaplanmasında $\int du/(e^u + 1) = u - \ln(e^u + 1)$ belirsiz integral eşitliği kullanılmıştır. Diğer taraftan, mutlak sıfır sıcaklıkta ($T = 0K$), $R_2^R(\vec{p}, \omega)$ aşağıdaki şekilde verilir:

$$\begin{aligned} R_2^R(\vec{p}, \omega) &= \frac{m}{2\pi \hbar^2 p} \left(\int_{|\frac{p}{2} + \frac{m\omega}{\hbar p}|}^{k_F} dk k - \int_{|\frac{p}{2} - \frac{m\omega}{\hbar p}|}^{k_F} dk k \right) \\ &= \frac{m k_F^2}{4\pi \hbar^2 p} \left\{ \left[1 - \left(\frac{p}{2k_F} + \frac{m\omega}{\hbar p k_F} \right)^2 \right] \theta \left(1 - \left| \frac{p}{2k_F} + \frac{m\omega}{\hbar p k_F} \right| \right) \right. \\ &\quad \left. + \left[1 - \left(\frac{p}{2k_F} - \frac{m\omega}{\hbar p k_F} \right)^2 \right] \theta \left(1 - \left| \frac{p}{2k_F} - \frac{m\omega}{\hbar p k_F} \right| \right) \right\} \quad (3.34) \end{aligned}$$

3D elektronik sistem için gecikmeli yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonu analitik

olarak elde edildikten sonra, sistemin fiziksel karakterini tanımlayan tepki fonksiyonları ele alınabilir (dielektrik fonksiyonu ve ters dielektrik fonksiyonu). Fiziksel polarizasyon fonksiyonu $\alpha^R(1, 1')$, gecikmeli yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonu $R^R(1, 1')$ cinsinden ifade edilebilir:

$$4\pi\alpha^R(1, 1') = - \int d^3v(1-3)R^R(3, 1') \quad (3.35)$$

Fiziksel polarizasyon fonksiyonu ve fiziksel dielektrik fonksiyonu arasındaki ilişki ise

$$\varepsilon^R(1, 1') = \delta(1-1') + 4\pi\alpha^R(1, 1') \quad (3.36)$$

şeklindedir. Polarizasyon fonksiyonu kompleks bir fonksiyon olduğundan (\vec{p}, ω) uzayında dielektrik fonksiyonu reel ve imajiner kısımlara sahiptir. Örneğin, 3D elektronik sistemin fiziksel karakterini tanımlayan dielektrik fonksiyonu ε^R , sistemin dielektrik fonksiyonu ε cinsinden

$$\begin{aligned} \varepsilon^R(\vec{p}, \omega) &= \text{Re} \varepsilon(\vec{p}, \omega) + i \text{sign} \omega \text{Im} \varepsilon(\vec{p}, \omega) \\ &= \varepsilon_1^R(\vec{p}, \omega) + i\varepsilon_2^R(\vec{p}, \omega) \end{aligned} \quad (3.37)$$

şeklinde verilir. Diğer taraftan, ters dielektrik fonksiyonu K , dielektrik fonksiyonu ε ile (2.4) ilişkisini sağladığından bu fonksiyonların benzerleri olan fiziksel ters dielektrik fonksiyonu K^R ve fiziksel dielektrik fonksiyonu ε^R arasında

$$\int d1' \varepsilon^R(1, 1') K^R(1', 2) = \delta(1-2) \quad (3.38)$$

ilişkisi mevcuttur. Bu ilişki, momentum-frekans temsilinde

$$K^R(\vec{p}, \omega) = [\varepsilon^R(\vec{p}, \omega)]^{-1} = \frac{1}{1 - v(\vec{p}) R^R(\vec{p}, \omega)} \quad (3.39)$$

şeklindedir.

3.3 3D-DİSPERSİYON BAĞINTISI

Bir önceki kısımda elde edilen fiziksel dielektrik fonksiyonunun sıfır noktaları ($\epsilon^R \rightarrow 0$) veya fiziksel ters dielektrik fonksiyonunun kutup noktaları ($K^R \rightarrow \infty$) sistemin kolektif uyarım modlarını (boyuna plazma salınımlarını) tanımlarlar. Bu modlar, p sonlu olmak üzere kısa dalga vektörü ($p \rightarrow 0$) limitinde incelenebilir. (3.29) denklemi yüksek frekans limitinde ($\hbar p k_F / m\omega \ll 1$)

$$\lim_{p \rightarrow 0} R_1^R(\vec{p}, \omega) = \frac{p^2 k_F^3}{3\pi^2 m\omega^2} \left[1 + \frac{1}{\omega^2} \left(\frac{3}{5} \frac{\hbar^2 p^2 k_F^2}{m^2} + \frac{1}{4} \frac{\hbar^2 p^4}{m^2} \right) + O\left(\frac{1}{\omega^4}\right) \right] \quad (3.40)$$

olur. Bu ifadenin elde edilmesinde $\ln(1+x) = x - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3}x^3 - \frac{1}{4}x^4 + \dots$, ($-1 < x \leq 1$), açılımı kullanılmıştır ve (3.40) denkleminde görülen $k_F = (3\pi^2 n_{3D})^{1/3}$ ve n_{3D} , sırasıyla, 3D Fermi dalga vektörü ve elektron yoğunluğudur (Bakınız Ek B.). [(3.34) denklemi ile tanımlı imajiner kısım $R_2^R(\vec{p}, \omega)$, içerdiği birim adım fonksiyonlarının $\hbar p k_F / m\omega \ll 1$ limit durumunda sıfır olmalarından dolayı sıfırdır; yani $R_2^R(\vec{p}, \omega) = 0$.] Dolayısıyla, $p \rightarrow 0$ limitinde $R^R(\vec{p}, \omega) = R_1^R(\vec{p}, \omega)$ olur, böylece $R^R(\vec{p}, \omega)$ fonksiyonu tamamiyle reel kısım ile ifade edilir.

Diğer taraftan, (3.35) denklemi gereği momentum-frekans temsilinde $\alpha^R(\vec{p}, \omega)$ fonksiyonu $p \rightarrow 0$ limitinde

$$\lim_{p \rightarrow 0} 4\pi\alpha^R(\vec{p}, \omega) = -\lim_{p \rightarrow 0} v(\vec{p}) R^R(\vec{p}, \omega) = -\lim_{p \rightarrow 0} v(\vec{p}) R_1^R(\vec{p}, \omega) \quad (3.41)$$

olarak yazılabilir. Burada, $v(\vec{p}) = 4\pi e^2 / p^2$, 3D Coulomb potansiyelinin Fourier dönüşümüdür (Bakınız Ek-B). $R_1^R(\vec{p}, \omega)$ [denklem (3.40)] ve $v(\vec{p})$, (3.41) denkleminde yerine konulacak olursa

$$\lim_{p \rightarrow 0} 4\pi\alpha^R(\vec{p}, \omega) = -\frac{4\pi e^2 n_{3D}}{m\omega^2} \left[1 + \frac{1}{\omega^2} \left(\frac{3}{5} \frac{\hbar^2 p^2 k_F^2}{m^2} + \frac{1}{4} \frac{\hbar^2 p^4}{m^2} \right) + O\left(\frac{1}{\omega^4}\right) \right] \quad (3.42)$$

olarak elde edilir. Bu yaklaşımlar altında sistemin dielektrik fonksiyonu tamamiyle reel bir fonksiyondur [$\epsilon^R(\vec{p}, \omega) = \epsilon_1^R(\vec{p}, \omega)$] ve

$$\lim_{p \rightarrow 0} \varepsilon^R(\vec{p}, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \left[1 + \frac{1}{\omega^2} \left(\frac{3}{5} p^2 v_F^2 + \frac{\varepsilon_p^2}{\hbar^2} \right) \right] \quad (3.43)$$

ile verilir. Denklemdaki $\omega_p = (4\pi e^2 n_{3D}/m)^{1/2}$ terimi, (arka planın dielektrik sabitinin birim kabul edildiği varsayımıyla) 3D klasik plazma frekansını temsil eder ve $v_F = \hbar k_F/m$ Fermi hızıdır. Plazma salınım frekansı ω_p , $\varepsilon^R(p=0, \omega) = 0$ denkleminde elde edilir: Plazma frekansının dalga vektörüne bağıllığı, (3.43) denkleminde p sonlu kalmak kaydıyla p^2 li terimi terimleri dikkate alarak

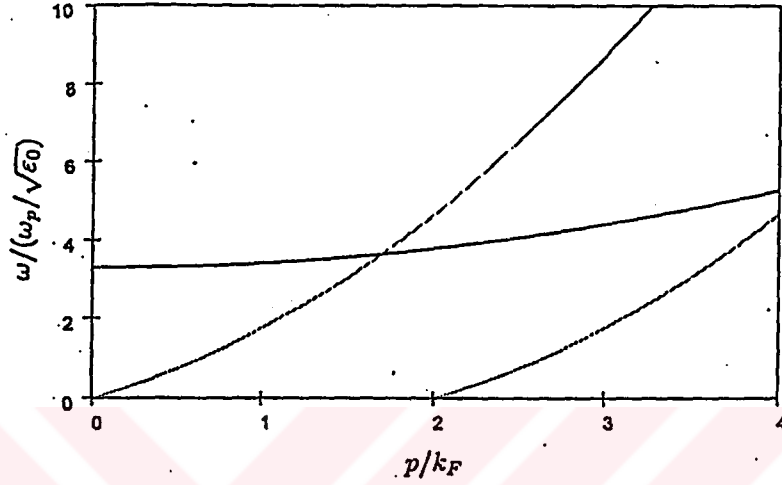
$$\omega = \omega_p \left[1 + \frac{3}{10} p^2 v_F^2 / \omega_p^2 + \dots \right] \quad (3.44)$$

şeklinde verilir (Zou and Lee,2001). Plazma salınımları deneysel olarak metaller ve üst atmosfer gibi bir çok sistemde gözlenmiştir. Üst atmosfer kısmen iyonizedir ve basit bir yaklaşımla bir elektron gazı olarak değerlendirilebilir.

Şekil 3.1, momentum-frekans uzayında mutlak sıfır sıcaklıkta bir 3D elektronik sistemin plazmon dispersion eğrisini ve tek-parçacık süreklilik bölgesini göstermektedir. (3.44) denklemin gereği, plazmon eğrisi ω , küçük dalga vektörü değerlerinde $p = 0$ 'da ω_p değerinden başlar ve p 'ye göre parabolik bir değişim gösterir. Diğer taraftan, şekildeki tek-parçacık süreklilik bölgesinin sınırları, dielektrik fonksiyonunun imajiner kısmında [bağılantılı olarak, denklem (3.34)] içerilen birim adım fonksiyonlarından tanımlanır. (3.34) denklemindeki ilk birim adım fonksiyonunun argümanının ω için çözümü, p 'ye göre iki eğri (parabol) verir [$\hbar\omega = -\varepsilon_p \pm \hbar p v_F$]; ancak bu eğriler, ω - p düzleminin alt kısmında bulunur. ($\varepsilon_p = \hbar^2 p^2 / 2m$.) İkinci birim adım fonksiyonunun argümanından elde edilen ω ise ω - p düzleminin üst kısmında p 'ye göre parabolik değişim gösteren iki eğri içerir [$\hbar\omega = \varepsilon_p \pm \hbar p v_F$].

Şekil 3.1'in elde edilmesinde, katkılama yoğunluğu $n_{3D} = 1.0 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$, Fermi dalga vektörü $k_F = 6.7 \times 10^5 \text{cm}^{-1}$, efektif elektron kütlesi $m = 0.067 m_e$ (m_e , serbest elektron kütlesi) ve arka planın yüksek frekans dielektrik sabiti $\varepsilon_0 = 10.9$ olan bir n-tipi bir GaAs örneği göz önüne alınmıştır. Yukardaki nümerik değerlere karşılık gelen plazma salınım frekansı $\omega_p = 2.2 \times 10^{13} \text{s}^{-1}$ dir. Şekilden açıkça görüldüğü üzere, 3D plazmonlar, dış alanın enerjisinin plazmon enerjisi $\hbar\omega_p$ 'den büyük olduğu

dar bir frekans aralığında oluşurlar. Diğer taraftan, p , kritik bir p_c değerinden büyük olduğunda plazmon çizgisi elektron-boşluk çifti bölgesine girer ve plazmonlar sönmeye uğrar. Bu durumda kolektif uyarımlar Bölüm 2.3'de bahsedilen tek-parçacık uyarımlarına dönüşür. Sonuç itibariyle, 3D plazma salınımları, elektron transport özellikleri açısından, yalnızca ω_p frekansının üzerinde dar bir frekans bölgesinde etkili olmaktadır.



Şekil 3.1 3D elektronik sistem için uyarım spektrumu. Sürekli çizgi plazmon dispersiyon eğrisini ve noktalı çizgiler tek-parçacık süreklilik bölgesi sınırlarını gösterir.

BÖLÜM 4

İKİ BOYUTLU ELEKTRONİK SİSTEMLERİN KOLLEKTİF UYARIM SPEKTRUMLARI

4.1 2D-GREEN FONKSİYONU

Bir hetero-eklemin ya da inversiyon tabakanın arayüzeyine sınırlanmış iki boyutlu elektron gazı (2DEG) için, hareket sadece iki doğrultu boyunca mümkün olur. Başka bir deyişle, sistemdeki parçacıkların hareketi z -doğrultusu boyunca sınırlandırılmış ise elektronların serbest hareketi sadece x - y düzlemine paraleldir. Bu durumdaki sistemin yoğunluk pertürbasyon tepki fonksiyonunu yazabilmek için 3D elektronik sistemler için yapıldığı gibi,

$$\left(\nabla_{\vec{R}_n}^2 / 2m + \frac{1}{2m} \partial^2 / \partial z_1^2 + \mu + i\partial / \partial T \right) G(z_1, z'_1, \vec{R}_n, T) = \delta(z_1 - z'_1) \delta(\vec{R}_n) \delta(T) \quad (4.1)$$

$[\vec{R}_n \equiv \vec{r}_{1n} - \vec{r}'_{1n}, \vec{r}_{1n} \equiv (x_1, y_1)$ ve $T \equiv t_1 - t'_1]$ denklemini çözerek tek-elektron etkileşimsiz Green fonksiyonunu elde etmek gerekir. İlgilenilen iki boyutlu elektronik sistemde hareket \vec{r}_n ile tanımlı olduğundan, sistem bu düzlemde öteleme özelliğine sahiptir. (Bir boyutlu potansiyel kuyusundan dolayı parçacığın z -doğrultusundaki hareketi sınırlanmıştır.) Dolayısıyla, Schrödinger denkleminin çözümünden (Ek-C'de sunulmuştur) enerji özdeğerleri $\varepsilon_{\vec{p}_n, j} = \hbar^2 p_n^2 / 2m + \varepsilon_j$ ve özfonksiyonları $\varphi(\vec{r}'_1) = \exp(i\vec{p}_n \cdot \vec{r}'_{1n}) \varphi_j(z_1)$ ile verilir. Burada, $\vec{p}_n \equiv (p_x, p_y)$; $\varepsilon_{\vec{p}_n, j}$, elektronun düzlemde kinetik enerjisini ve ε_j , z -doğrultusu boyunca hareket sınırlamasından dolayı quantize olmuş enerji seviyeleridir. (4.1) denklemini sağlayan Green fonksiyonunun (normalize olduğu varsayılan) özfonksiyonlar cinsinden ifadesi

$$G(z_1, z'_1, \vec{R}_n, \omega) = \sum_{\vec{p}_n, j} e^{i\vec{p}_n \cdot \vec{R}_n} \varphi_j(z_1) \varphi_j^*(z'_1) \left[\frac{1 - f_0(\varepsilon_{\vec{p}_n, j})}{\omega - \varepsilon_{\vec{p}_n, j} + i\epsilon} + \frac{f_0(\varepsilon_{\vec{p}_n, j})}{\omega - \varepsilon_{\vec{p}_n, j} - i\epsilon} \right] \quad (4.2)$$

olarak yazılabilir.

4.2 2D-DİELEKTRİK FONKSİYONU

3D sistemin yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonuna [denklem (3.17)] benzer olarak 2D sistemin yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonu şu şekilde yazılabilir:

$$R(z_1, z'_1, \vec{R}_{11}, T) = -iG(z_1, z'_1, \vec{R}_{11}, T)G(z'_1, z_1, -\vec{R}_{11}, -T) \quad (4.3)$$

Parçacıkların z -ekseni boyunca hareket serbestisinin kısıtlanmasından dolayı bu ifadede z -değişkenine bağıllık açıkça gösterilmiştir. Düzlemde ve zamanda öteleme özelliğinden dolayı Fourier dönüşümleri yardımıyla momentum-frekans temsiline geçmek mümkündür ($\vec{R}_{11} \rightarrow \vec{p}_{11}$ ve $T \rightarrow \omega$):

$$R(z_1, z'_1, \vec{p}_{11}, \omega) = -i \int \frac{d^2 k_{11}}{(2\pi)^2} \int \frac{d\omega'}{2\pi} G(z_1, z'_1, \vec{k}_{11} + \vec{p}_{11}, \omega' + \omega) G(z_1, z'_1, \vec{k}_{11}, \omega') \quad (4.4)$$

Burada,

$$G(z_1, z'_1, \vec{k}_{11}, \omega') = \sum_j \varphi_j(z_1) \varphi_j^*(z'_1) G(\vec{k}_{11}, \omega') \quad (4.5)$$

ve

$$G(\vec{k}_{11}, \omega') = \left[\frac{1 - f_0(\varepsilon_{\vec{k}_{11},j})}{\omega' - \varepsilon_{\vec{k}_{11},j} + i\epsilon} + \frac{f_0(\varepsilon_{\vec{k}_{11},j})}{\omega' - \varepsilon_{\vec{k}_{11},j} - i\epsilon} \right] \quad (4.6)$$

ile verilirler. (4.4) denkleminde iki Green fonksiyonun çarpımı sonucu elde edilecek dört integral (Bakınız Ek-A) rezidü teoremine göre değerlendirilebilir. $R(z_1, z'_1, \vec{p}_{11}, \omega)$ için sonuç

$$R(z_1, z'_1, \vec{p}_{11}, \omega) = \sum_{j,j'} \varphi_j(z_1) \varphi_j^*(z'_1) \varphi_{j'}(z'_1) \varphi_{j'}^*(z_1) \int \frac{d^2 k_{11}}{(2\pi)^2} \times \left[\frac{f_0(\varepsilon_{\vec{k}_{11},j})[1 - f_0(\varepsilon_{\vec{k}_{11} + \vec{p}_{11},j'})]}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}_{11},j} - \varepsilon_{\vec{k}_{11} + \vec{p}_{11},j'} + i\epsilon} - \frac{f_0(\varepsilon_{\vec{k}_{11} + \vec{p}_{11},j'})[1 - f_0(\varepsilon_{\vec{k}_{11},j})]}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}_{11},j} - \varepsilon_{\vec{k}_{11} + \vec{p}_{11},j'} - i\epsilon} \right] \quad (4.7)$$

ile verilir. Burada, j ve j' üzerinden toplamlar, sistemin tüm enerji öz durumlarını içermektedirler. Tünelleme etkisi ihmal edilecek olursa (dalga fonksiyonu aynı kuantum kuyusu içine sınırlanmış ise) $j = j'$ yazılabilir. Bu durumda (4.7) denklemi,

$$R(z_1, z'_1, \vec{p}_n, \omega) = \sum_j |\varphi_j(z_1)|^2 |\varphi_j(z'_1)|^2 R(\vec{p}_n, \omega) \quad (4.8)$$

şekline dönüşür. (4.8) denkleminde görülen ve sadece momentum ve frekans değişkenlerine bağlı yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonu

$$R(\vec{p}_n, \omega) = \int \frac{d^2 k_n}{(2\pi)^2} \left[\frac{f_0(\varepsilon_{\vec{k},j})[1 - f_0(\varepsilon_{\vec{k}_n + \vec{p}_n, j'})]}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}_n + \vec{p}_n} + i\epsilon} - \frac{f_0(\varepsilon_{\vec{k}_n + \vec{p}_n, j'})[1 - f_0(\varepsilon_{\vec{k},j})]}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}_n + \vec{p}_n} - i\epsilon} \right] \quad (4.9)$$

ile tanımlanır. Elektron yoğunluğunun çok yüksek olmadığı (dolayısıyla sadece en alt bandın dolu olduğu) varsayımı altında $\varepsilon_j = \varepsilon_0$ ve $\varepsilon_{\vec{p}_n, j} = \hbar^2 p_n^2 / 2m + \varepsilon_0$ yazılabilir. (Bundan sonra genellikle bir şey kaybetmeksizin $\varepsilon_0 = 0$ olarak seçilecektir.)

Bölüm 3'de 3D elektronik sistemler için yapılan incelemelerin ışığı altında, 2D elektronik sistemlerin dış pertürbasyona karşı lineer tepkisini, gecikmeli yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonu cinsinden ifade etmek mümkündür. Genel olarak, (3.23) denklemlerinden hareketle, benzer şekilde, 2D bir elektronik sistem için yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonu $[R(\vec{p}_n, \omega) = R_1(\vec{p}_n, \omega) + iR_2(\vec{p}_n, \omega)]$ ile fiziksel/gecikmeli yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonu $[R^R(\vec{p}_n, \omega) = R_1^R(\vec{p}_n, \omega) + iR_2^R(\vec{p}_n, \omega)]$ arasındaki ilişki

$$R_1^R(\vec{p}_n, \omega) = R_1(\vec{p}_n, \omega) \quad (4.10a)$$

ve

$$R_2^R(\vec{p}_n, \omega) = R_2(\vec{p}_n, \omega) \text{sign}(\omega) \quad (4.10b)$$

ile temsil edilirler. Bu ilişkiler sayesinde gecikmeli yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonu $[R^R(\vec{p}_n, \omega)]$ kolaylıkla elde edilebilir. (4.9) denklemi ile tanımlı $R(\vec{p}_n, \omega)$ fonksiyonunun imajiner kısmının hesaplanmasında Dirac-delta fonksiyonunun

varlığından dolayı enerji farkı 3D elektronik sisteminkine benzer durumlar oluşturur. Dolayısıyla, (4.10a) ve (4.10b) denklemleri gereği (spin durumları hesaba katılarak) gecikmeli yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonu $[R^R(\vec{p}_{||}, \omega)]$

$$R^R(\vec{p}_{||}, \omega) = 2 \int \frac{d^2 k_{||}}{(2\pi)^2} \frac{f_0(\varepsilon_{\vec{k}_{||}}) - f_0(\varepsilon_{\vec{k}_{||} + \vec{p}_{||}})}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}_{||}} - \varepsilon_{\vec{k}_{||} + \vec{p}_{||}} + i\epsilon} \quad (4.11)$$

şeklinde ifade edilebilir. Dirac özdeşliği ile $R^R(\vec{p}_{||}, \omega)$ 'nın reel kısmı $R_1^R(\vec{p}_{||}, \omega)$

$$R_1^R(\vec{p}_{||}, \omega) = 2P \int \frac{d^2 k_{||}}{(2\pi)^2} f_0(\varepsilon_{\vec{k}_{||}}) \left[\frac{1}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}_{||}} - \varepsilon_{\vec{k}_{||} + \vec{p}_{||}}} - \frac{1}{\hbar\omega - \varepsilon_{\vec{k}_{||}} + \varepsilon_{\vec{k}_{||} + \vec{p}_{||}}} \right] \quad (4.12)$$

ve imajiner kısmı $R_2^R(\vec{p}_{||}, \omega)$

$$R_2^R(\vec{p}_{||}, \omega) = -2\pi \int \frac{d^2 k_{||}}{(2\pi)^2} f_0(\varepsilon_{\vec{k}_{||}}) \left[\delta(\hbar\omega - \varepsilon_{\vec{k}_{||}} + \varepsilon_{\vec{k}_{||} + \vec{p}_{||}}) - \delta(\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}_{||}} - \varepsilon_{\vec{k}_{||} + \vec{p}_{||}}) \right] \quad (4.13)$$

formunda yazılabilir. (4.11) denkleminde ve dolayısıyla (4.12) ve (4.13) denklemlerinde farklı momentum durumları için enerji farkı $\varepsilon_{\vec{k}_{||} + \vec{p}_{||}} - \varepsilon_{\vec{k}_{||}} = \frac{\hbar^2 p_{||}^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m} \vec{p}_{||} \cdot \vec{k}_{||}$ kadardır. $R_1^R(\vec{p}_{||}, \omega)$ fonksiyonunu hesaplamak üzere $\vec{p}_{||}$, y -ekseni boyunca seçilecek olursa (4.12) denklemi polar koordinatlarda,

$$R_1^R(\vec{p}_{||}, \omega) = -\frac{m}{2\pi^2 \hbar^2 p_{||}} P \int_0^\infty dk_{||} k_{||} f_0(\varepsilon_{\vec{k}_{||}}) \times \int_0^{2\pi} d\theta \left[\frac{1}{\frac{p_{||}}{2} - \frac{m\omega}{\hbar p_{||}} + k_{||} \cos \theta} + \frac{1}{\frac{m\omega}{\hbar p_{||}} + \frac{p_{||}}{2} + k_{||} \cos \theta} \right] \quad (4.14)$$

şeklinde ifade edilebilir. $a_{\pm} \equiv \frac{p_{||}}{2} \pm \frac{m\omega}{\hbar p_{||}}$ değişkeni tanımlanarak ve

$$\int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{a_{\pm} + k_{||} \cos \theta} = \text{sign}(a_{\pm}) \frac{2\pi}{\sqrt{a_{\pm}^2 - k_{||}^2}} \quad (a_{\pm}^2 > k_{||}^2)$$

integral eşitliği kullanılarak (4.14) denklemindeki θ -değişkeni üzerinden integral yapılacak olursa ($a_{\pm}^2 < k_{||}^2$ durumu için integralin Cauchy principal değeri sıfır verir), (4.14) denklemi

$$\begin{aligned}
R_1^R(\vec{p}_{||}, \omega) &= -\frac{m}{\pi \hbar^2 p_{||}} P \int_0^\infty dk_{||} k_{||} f_0(\varepsilon_{\vec{k}_{||}}) \\
&\times \left[\text{sign}\left(\frac{p_{||}}{2} - \frac{m\omega}{\hbar p_{||}}\right) \frac{\theta\left(\left(\frac{p_{||}}{2} - \frac{m\omega}{\hbar p_{||}}\right)^2 - k_{||}^2\right)}{\sqrt{\left(\frac{p_{||}}{2} - \frac{m\omega}{\hbar p_{||}}\right)^2 - k_{||}^2}} \right. \\
&\quad \left. + \text{sign}\left(\frac{p_{||}}{2} + \frac{m\omega}{\hbar p_{||}}\right) \frac{\theta\left(\left(\frac{p_{||}}{2} + \frac{m\omega}{\hbar p_{||}}\right)^2 - k_{||}^2\right)}{\sqrt{\left(\frac{p_{||}}{2} + \frac{m\omega}{\hbar p_{||}}\right)^2 - k_{||}^2}} \right]
\end{aligned}$$

formunda yazılabilir. Birim adım fonksiyonlarının özellikleri dikkate alınarak bu son ifade

$$\begin{aligned}
R_1^R(\vec{p}_{||}, \omega) &= -\frac{m}{\pi \hbar^2 p_{||}} P \left\{ \int_0^{\left|\frac{p_{||}}{2} - \frac{m\omega}{\hbar p_{||}}\right|} dk_{||} k_{||} f_0(\varepsilon_{\vec{k}_{||}}) \frac{\text{sign}\left(\frac{p_{||}}{2} - \frac{m\omega}{\hbar p_{||}}\right)}{\sqrt{\left(\frac{p_{||}}{2} - \frac{m\omega}{\hbar p_{||}}\right)^2 - k_{||}^2}} \right. \\
&\quad \left. + \int_0^{\left|\frac{p_{||}}{2} + \frac{m\omega}{\hbar p_{||}}\right|} dk_{||} k_{||} f_0(\varepsilon_{\vec{k}_{||}}) \frac{\text{sign}\left(\left(\frac{p_{||}}{2} + \frac{m\omega}{\hbar p_{||}}\right)\right)}{\sqrt{\left(\frac{p_{||}}{2} + \frac{m\omega}{\hbar p_{||}}\right)^2 - k_{||}^2}} \right\} \quad (4.15)
\end{aligned}$$

şeklinde yeniden düzenlenebilir. $R_1^R(\vec{p}_{||}, \omega)$ için geriye kalan $k_{||}$ -değişkeni üzerinden integral, sonlu sıcaklıkta Fermi dağılım fonksiyonu kullanılarak analitik olarak hesaplanamayacağı için, mutlak sıfır sıcaklıkta ($T = 0\text{K}$) ele alınacaktır. Bu durumda, $f_0(\varepsilon_{\vec{k}_{||}}) \rightarrow \theta(k_F - k_{||})$ olur (k_F , iki boyutlu Fermi dalga vektörüdür). $k_F > |a_{\pm}|$ olmak üzere integral, $(0, |a_{\pm}|)$ aralığında tanımlıdır. Diğer taraftan, $k_F < |a_{\pm}|$ olduğu durumlarda integral, $(0, k_F)$ aralığına sınırlanmıştır. $\int dx \frac{x}{\sqrt{a_{\pm}^2 - x^2}} = -\sqrt{a_{\pm}^2 - x^2}$ belirsiz integral eşitliği ile (4.15) denklemindeki $k_{||}$ -değişkeni üzerinden integraller

$$\begin{aligned}
&\int_0^{|a_{\pm}|} dk_{||} k_{||} f_0(\varepsilon_{\vec{k}_{||}}) \text{sign}(a_{\pm}) \frac{1}{\sqrt{a_{\pm}^2 - k_{||}^2}} \\
&= -\theta(k_F - |a_{\pm}|) |a_{\pm}| + \theta(|a_{\pm}| - k_F) [\sqrt{a_{\pm}^2 - k_F^2} - |a_{\pm}|]
\end{aligned}$$

verecek şekilde yapılabilir. Birim adım fonksiyonları için $\theta(x) = 1 - \theta(-x)$ özelliği kullanılarak $R_1^R(\vec{p}_{||}, \omega)$ fonksiyonu genel formda

$$R_1^R = \frac{mk_F}{\pi\hbar^2 p_{||}} \left[-\frac{p_{||}}{k_F} + \text{sign}\left(\frac{p_{||}}{2} - \frac{m\omega}{\hbar p_{||}}\right) \theta\left(\left(\frac{p_{||}}{2k_F} - \frac{m\omega}{\hbar p_{||}k_F}\right)^2 - 1\right) \sqrt{\left(\frac{p_{||}}{2k_F} - \frac{m\omega}{\hbar p_{||}k_F}\right)^2 - 1} \right. \\ \left. + \text{sign}\left(\frac{p_{||}}{2} + \frac{m\omega}{\hbar p_{||}}\right) \theta\left(\left(\frac{p_{||}}{2k_F} + \frac{m\omega}{\hbar p_{||}k_F}\right)^2 - 1\right) \sqrt{\left(\frac{p_{||}}{2k_F} + \frac{m\omega}{\hbar p_{||}k_F}\right)^2 - 1} \right] \quad (4.16)$$

olarak yazılabilir.

Benzer şekilde, $R_2^R(\vec{p}_{||}, \omega)$ fonksiyonunun hesabında, (4.13) denklemindeki integraller polar koordinatlarda ele alınabilir. Bu durumda, $R_2^R(\vec{p}_{||}, \omega)$

$$R_2^R(\vec{p}, \omega) = -\frac{2\pi}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dk_{||} k_{||} f_0(\varepsilon_{\vec{k}_{||}}) \\ \times \int_0^{2\pi} d\theta \left[\delta\left(\hbar\omega + \frac{\hbar^2 p_{||}^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m} p_{||} k_{||} \cos\theta\right) \right. \\ \left. - \delta\left(\hbar\omega - \frac{\hbar^2 p_{||}^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{m} p_{||} k_{||} \cos\theta\right) \right] \quad (4.17)$$

şeklinde yazılır. $k_{||} \cos\theta = t$ dönüşümü altında θ -değişkeni üzerinden integral

$$\int_0^{2\pi} d\theta \delta\left(\frac{m\omega}{\hbar p_{||}} \pm \frac{p_{||}}{2} \pm k_{||} \cos\theta\right) = 2 \int_{-k_{||}}^{k_{||}} \frac{dt}{\sqrt{k_{||}^2 - t^2}} \delta\left(\frac{m\omega}{\hbar p_{||}} \pm \frac{p_{||}}{2} \pm t\right)$$

formunda yeniden ifade edilebilir. $[d/dx]\theta(x - x') = \delta(x - x')$ özelliği kullanılarak (4.17) denklemindeki eski θ -değişkeni üzerinden integral şimdi yeni t -değişkeni üzerinden kolaylıkla yapılabilir:

$$R_2^R(\vec{p}_{||}, \omega) = -\frac{m}{\pi\hbar^2 p_{||}} \int_0^\infty dk_{||} k_{||} f_0(\varepsilon_{\vec{k}_{||}}) \left[\frac{\theta\left(k_{||}^2 - \left(\frac{p_{||}}{2} + \frac{m\omega}{\hbar p_{||}}\right)^2\right)}{\sqrt{k_{||}^2 - \left(\frac{p_{||}}{2} + \frac{m\omega}{\hbar p_{||}}\right)^2}} - \frac{\theta\left(k_{||}^2 - \left(\frac{p_{||}}{2} - \frac{m\omega}{\hbar p_{||}}\right)^2\right)}{\sqrt{k_{||}^2 - \left(\frac{p_{||}}{2} - \frac{m\omega}{\hbar p_{||}}\right)^2}} \right] \quad (4.18)$$

$R_2^R(\vec{p}_{||}, \omega)$ 'nin hesaplanmasında geriye kalan $k_{||}$ -değişkeni üzerinden integral, sonlu sıcaklıkta analitik olarak çözülemez. Ancak mutlak sıfır sıcaklıkta kolaylıkla hesaplanabilir. Sonuç şudur:

$$R_2^R(\vec{p}_\parallel, \omega) = \frac{mk_F}{\pi \hbar^2 p_\parallel} \left\{ \theta \left(1 - \left(\frac{p_\parallel}{2k_F} + \frac{m\omega}{\hbar p_\parallel k_F} \right)^2 \right) \sqrt{1 - \left(\frac{p_\parallel}{2k_F} + \frac{m\omega}{\hbar p_\parallel k_F} \right)^2} \right. \\ \left. - \theta \left(1 - \left(\frac{p_\parallel}{2k_F} - \frac{m\omega}{\hbar p_\parallel k_F} \right)^2 \right) \sqrt{1 - \left(\frac{p_\parallel}{2k_F} - \frac{m\omega}{\hbar p_\parallel k_F} \right)^2} \right\} \quad (4.19)$$

İki boyutlu sistemin bundan sonraki analizi, direkt dielektrik fonksiyonu $\varepsilon(1, 2)$ üzerine yoğunlaştırılacaktır. Fiziksel polarizasyon fonksiyonu momentum-frekans temsilinde

$$\alpha^R(z_1, z'_1) = - \int dz_3 v(z_1, z_3) R^R(z_3, z'_1) \quad (4.20)$$

olarak ifade edilir (Horing, 2001). z -doğrultusu boyunca parçacık hareketi sınırlanmış olmasından polarizasyon fonksiyonda z -değişkenleri açıkça gösterilmiştir. (Gerekli olmadıkça \vec{p}_\parallel ve ω değişkenleri açıkça yazılmayacaktır.) Sonsuz incelikte bir potansiyel kuyusu için (4.8) denklemindeki z_1 ve z'_1 -değişkenlerine bağlı (konum) olasılık yoğunlukları (sadece en altbandın dolu olduğu kabulünde, $j = 1$) $|\varphi(z_1)|^2 \rightarrow \delta(z_1)$ ve $|\varphi(z'_1)|^2 \rightarrow \delta(z'_1)$ olarak yazılırsa $R^R(z_3, z'_1)$ fonksiyonu,

$$R^R(z_3, z'_1) = \delta(z_3) \delta(z'_1) R^R(\vec{p}_\parallel, \omega) \quad (4.21)$$

formunu alır; burada, $R^R(\vec{p}_\parallel, \omega)$, 2D yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonunun dalga vektörüne ve frekansa bağlı kısmını temsil eder. Böylelikle fiziksel polarizasyon fonksiyonu

$$\alpha^R(z_1, z'_1, \vec{p}_\parallel, \omega) = - (2\pi e^2 / p_\parallel) \int dz_3 \exp(-|z_1 - z_3| p_\parallel) \delta(z_3) \delta(z'_1) R^R(\vec{p}_\parallel, \omega) \quad (4.22)$$

şeklinde tekrar yazılabilir. [$v(z_1, z_3, \vec{p}_\parallel) = (2\pi e^2 / p_\parallel) \exp(-|z_1 - z_3| p_\parallel)$ iki boyutlu Coulomb potansiyeli Ek-C'de açık olarak sunulmuştur.] Sonuç olarak, sistemin fiziksel dielektrik fonksiyonu $\varepsilon^R(z_1, z'_1)$, fiziksel polarizasyon fonksiyonu $\alpha^R(z_1, z'_1)$ cinsinden

$$\varepsilon^R(z_1, z'_1) = \delta(z_1 - z'_1) + 4\pi \alpha^R(z_1, z'_1) \quad (4.23)$$

olarak ifade edilir (Ayaz and Horing, 1999).

4.3 2D-DİSPERSİYON BAĞINTISI

Sistemin kollektif mod-dispersiyon bağıntısı $\varepsilon^R(\vec{p}_\parallel, \omega)$ fonksiyonunun sıfır noktalarından elde edilir. Momentum-frekans temsilinde $\alpha^R(\vec{p}_\parallel, \omega)$ ve $R^R(\vec{p}_\parallel, \omega)$ arasında 3D elektronik sisteme benzer olarak

$$4\pi\alpha^R(\vec{p}_\parallel, \omega) = -v(\vec{p}_\parallel)R^R(\vec{p}_\parallel, \omega) \quad (4.24)$$

ilişkisi vardır. Bundan sonra kısa dalga vektörü limitinde ($p_\parallel \rightarrow 0$) polarizasyon fonksiyonu $\alpha^R(\vec{p}_\parallel, \omega)$ elde edilecektir. Bu bağlamda iki boyutlu dielektrik fonksiyonun reel ve imajiner kısımlarının incelenmesiyle sistemin boyuna salınım frekanslarını belirlemek mümkün olacaktır:

$$\varepsilon^R(\vec{p}_\parallel, \omega) = \varepsilon_1^R(\vec{p}_\parallel, \omega) + i\varepsilon_2^R(\vec{p}_\parallel, \omega) = 1 + 4\pi\alpha^R(\vec{p}_\parallel, \omega) = 1 - v(\vec{p}_\parallel)R^R(\vec{p}_\parallel, \omega) \quad (4.25)$$

(4.16) denkleminde açık olarak yazılı $R_1^R(\vec{p}_\parallel, \omega)$ fonksiyonu $p_\parallel \rightarrow 0$ limitinde

$$\begin{aligned} \lim_{p_\parallel \rightarrow 0} R_1^R(\vec{p}_\parallel, \omega) &= \lim_{p_\parallel \rightarrow 0} \frac{mk_F}{\pi\hbar^2 p_\parallel} \left[-\frac{p_\parallel}{k_F} + \text{sign}\left(\frac{p_\parallel}{2} - \frac{m\omega}{\hbar p_\parallel}\right) \theta\left(\left(\frac{p_\parallel}{2k_F} - \frac{m\omega}{\hbar p_\parallel k_F}\right)^2 - 1\right) \right. \\ &\quad \times \sqrt{\left(\frac{p_\parallel}{2k_F} - \frac{m\omega}{\hbar p_\parallel k_F}\right)^2 - 1} + \text{sign}\left(\frac{p_\parallel}{2} + \frac{m\omega}{\hbar p_\parallel}\right) \\ &\quad \left. \times \theta\left(\left(\frac{p_\parallel}{2k_F} + \frac{m\omega}{\hbar p_\parallel k_F}\right)^2 - 1\right) \sqrt{\left(\frac{p_\parallel}{2k_F} + \frac{m\omega}{\hbar p_\parallel k_F}\right)^2 - 1} \right] \quad (4.26) \end{aligned}$$

formunu alır. 2D sistemin dış etkiye karşı lineer tepkisi yüksek frekans limitinde ($\hbar p_\parallel k_F / m\omega \ll 1$) inceleneceğinden, dielektrik fonksiyonu (ve bağlantılı olarak gecikmeli yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonu) bu limit değerinde ifade edilmelidir. Bunun için, öncelikle, (4.26) denkleminde görülen birim adım fonksiyonlarının ve işaret fonksiyonlarının incelenmesi gerekir. Bu durum, birim adım fonksiyonu için

$$\theta\left(\left(\frac{p_\parallel}{2k_F} \pm \frac{m\omega}{\hbar p_\parallel k_F}\right)^2 - 1\right) = \begin{cases} 1 & \left(\frac{p_\parallel}{2k_F} \pm \frac{m\omega}{\hbar p_\parallel k_F}\right)^2 > 1 \text{ ise,} \\ 0 & \left(\frac{p_\parallel}{2k_F} \pm \frac{m\omega}{\hbar p_\parallel k_F}\right)^2 < 1 \text{ ise,} \end{cases}$$

ve işaret fonksiyonu için $\text{sign}\left(\frac{p_\parallel}{2} - \frac{m\omega}{\hbar p_\parallel}\right) = -1$ ve $\text{sign}\left(\frac{p_\parallel}{2} + \frac{m\omega}{\hbar p_\parallel}\right) = 1$ olmaktadır. Ayrıca,

(4.26) denklemindeki $\sqrt{\left(\frac{p_{\parallel}}{2k_F} \pm \frac{m\omega}{\hbar p_{\parallel} k_F}\right)^2 - 1}$ terimleri, $\sqrt{1+x^2} = 1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2 + \dots$ seri açılımı yardımıyla seriye açılarak, $R_1^R(\vec{p}_{\parallel}, \omega)$ fonksiyonu

$$\lim_{p_{\parallel} \rightarrow 0} R_1^R(\vec{p}_{\parallel}, \omega) = \frac{mk_F}{\pi \hbar^2 p_{\parallel}} \left\{ \frac{\hbar^2 p_{\parallel}^2 k_F}{4m^2 \omega^2} - \frac{\hbar^2 p_{\parallel}^5}{16m^2 \omega^2 k_F} + \dots \right\} \quad (4.27)$$

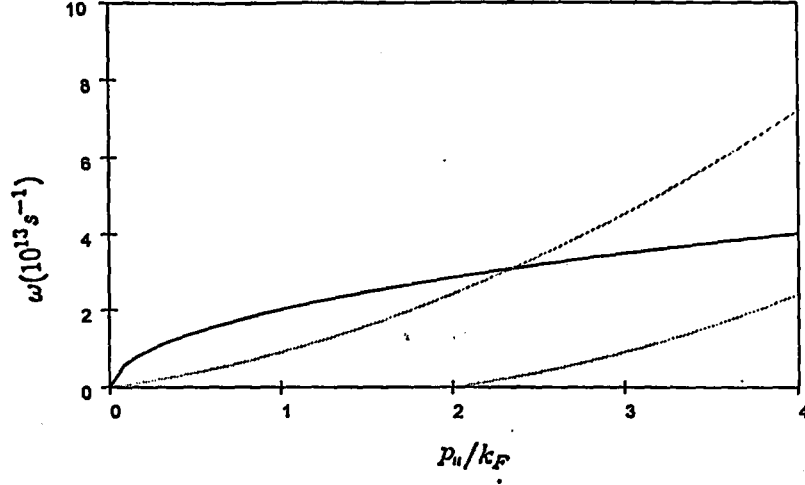
formunda yeniden yazılabilir. İmajiner kısım $R_2^R(\vec{p}_{\parallel}, \omega)$, aynı limit durumunda incelendiğinde, [(4.19) denkleminde birim adım fonksiyonlarının ($\hbar p_{\parallel} k_F / m\omega \ll 1$) durumunda $\theta [1 - (p_{\parallel}/2k_F \pm m\omega/\hbar p_{\parallel} k_F)] = 0$ olmasında dolayı] $\lim_{p_{\parallel} \rightarrow 0} R_2^R(\vec{p}_{\parallel}, \omega) = 0$ olduğu görülür. Dolayısıyla, yüksek frekans limitinde gecikmeli yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonu sadece reel kısmı ile ifade edilir; $R^R(\vec{p}_{\parallel}, \omega) = R_1^R(\vec{p}_{\parallel}, \omega)$. Böylelikle, polarizasyon fonksiyonu ($\alpha^R = \alpha_1^R + i\alpha_2^R$) [$k_F = \sqrt{2\pi n_{2D}}$, 2D Fermi dalga vektörü ve n_{2D} , elektron yoğunluğudur; bakınız Ek-C] dalga vektörüne (p_{\parallel}) göre lineer terimleri içerecek şekilde

$$\lim_{p_{\parallel} \rightarrow 0} 4\pi\alpha^R(\vec{p}_{\parallel}, \omega) = \lim_{p_{\parallel} \rightarrow 0} 4\pi\alpha_1^R(\vec{p}_{\parallel}, \omega) = -\frac{2\pi e^2 n_{2D}}{m} \frac{p_{\parallel}}{\omega^2} \quad (4.28)$$

olmak üzere sadece reel kısmı ile temsil edilir. $p \rightarrow 0$ limitinde $R_2^R(\vec{p}_{\parallel}, \omega) = 0$ olduğundan $\alpha_2^R = 0$. Bu durumda sistemin fiziksel dielektrik fonksiyonu sadece reel kısmıyla $\varepsilon^R(\vec{p}_{\parallel}, \omega) = \varepsilon_1^R(\vec{p}_{\parallel}, \omega) = 1 - (2\pi e^2 n_{2D}/m)(p_{\parallel}/\omega^2)$ ifade edilebilir, çünkü $\alpha_2^R(\vec{p}_{\parallel}, \omega) = 0$ olması nedeniyle imajiner kısım $\varepsilon_2^R(\vec{p}_{\parallel}, \omega) = 0$ dır. 2D sistemin plazmon modları $\varepsilon_1^R(\vec{p}_{\parallel}, \omega) = 0$ denkleminin kökleri ile tanımlanır. Dolayısıyla, 2D plazma frekansı $\omega_{2D} = \sqrt{(2\pi e^2 n_{2D}/m)p_{\parallel}}$ ile verilir ve 2D plazma frekansı ω_{2D} 'nin dalga vektörü p_{\parallel} 'in kareköküyle orantılı olduğu görülür.

Şekil 4.1, 2D bir sistemin dalga vektörüne bağlı olarak plazmon spektrumunu göstermektedir. 2D plazmon eğrisi $\omega(p_{\parallel})$, $p_{\parallel} = 0$ noktasından itibaren p_{\parallel} 'in kareköküyle orantılı olarak değişir. Spektrumda tek-parçacık süreklilik bölgesinin sınırlarını belirleyen eğriler, dielektrik fonksiyonunun imajiner kısmı ile tanımlanır. 2D bir sistem için bu eğrilerin genel karakteri, Kesim 3.3'de 3D bir sistem için tek-parçacık süreklilik durumunda tartışılanlarınkine benzer özellikler gösterirler. Şeklin çizimi için bir GaAs-AlGaAs örneği gözönüne alınmıştır. Örnekteki elektron yoğunluğu $n_{2D} = 1.0 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$, Fermi dalga vektörü $k_F = 7.9 \times 10^5 \text{cm}^{-1}$ olarak seçilmiştir. Ayrıca, 3D sisteminkine benzer olarak, GaAs için etkin elektron kütlesi $m = 0.067m_e$

ve optik dielektrik sabiti $\epsilon_0 = 10.9$ olarak alınmıştır. Şekilden görüldüğü üzere, p_n 'nin büyük değerlerinde plazmon eğrisi tek-parçacık süreklilik bölgesine geçer ve plazmonlar söntüme uğrar.



Şekil 4.1: 2D elektronik sistem için uyarım spektrumu. Sürekli çizgi plazmon dispersiyon eğrisini ve noktalı çizgiler tek-parçacık süreklilik bölgesi sınırlarını belirtir.

BÖLÜM 5

BİR BOYUTLU ELEKTRONİK SİSTEMLERİN KOLLEKTİF UYARIM SPEKTRUMLARI

5.1 1D-GREEN FONKSİYONU

y ve z -doğrultuları boyunca uzaysal sınırlamanın olduğu bir elektronik sistemde parçacıkların serbest hareketi sadece x -doğrultusu boyunca mümkün olur. “*Nano*” ölçekte (10^{-9} m mertebesinde) böyle bir sisteme “bir boyutlu kuantum teli” (1DQW – one-dimensional quantum wire) denilmektedir. Parçacık hareketine y ve z -doğrultuları boyunca olan sınırlamalar, “parçacıkların derin potansiyel kuyularında hapsedilmesi” şeklinde izah edilebilir. Dolayısıyla, parçacıklar, sınırlamanın olduğu doğrultular boyunca kuantumlanmış enerji düzeylerine, hareketin serbest olduğu doğrultu boyunca serbest parçacık enerjisine sahiptir.

1D elektronik sistemi tanımlayan etkileşimsiz tek-parçacık termodinamik Green fonksiyonu $G(1, 1')$

$$\begin{aligned} & (\nabla_X^2/2m + (1/2m)[\partial^2/\partial y_1^2 + \partial^2/\partial z_1^2] + \mu + i\partial/\partial T) G(y_1, y'_1, z_1, z'_1, X, T) \\ & = \delta(y_1 - y'_1)\delta(z_1 - z'_1)\delta(x_1 - x'_1)\delta(T) \end{aligned} \quad (5.1)$$

diferansiyel denklemini çözerek elde edilir. Burada, $X = x_1 - x'_1$ kuantum teli boyunca bağıl koordinatı temsil eder ve $T = t_1 - t'_1$ zaman farkıdır. (5.1) denklemini sağlayan Green fonksiyonu, y ve z -doğrultularında potansiyel kuyularından dolayı Schrödinger denklemini sağlayan ve sırasıyla ϵ_i ve ϵ_j ($i, j = 1, 2, \dots$) enerji öz durumlarına karşılık gelen (normalize) özfonksiyonlar $\xi_i(y)$ ve $\chi_j(z)$ cinsinden seriye açılabilir:

$$G(y_1, y'_1, z_1, z'_1, X, T) = \sum_{i,j} \xi_i(y_1) \xi_i^*(y'_1) \chi_j(z_1) \chi_j^*(z'_1) G(X, T) \quad (5.2)$$

Denklem (5.2)'deki $G(X, T)$, kuantum teli boyunca zamana göre parçacık hareketini tanımlayan Green fonksiyonu kısmını temsil eder. Kuantum teli eksenini boyunca (x -ekseni) öteleme değişmezliğini ve zamana göre öteleme özelliğini kullanarak Fourier dönüşümü yardımıyla uzay ve zaman temsilinden 1D dalga vektörü p_x ve frekans ω temsiline geçerek, $X \rightarrow p_x$ ve $T \rightarrow \omega$, Green fonksiyonu

$$G(y_1, y'_1, z_1, z'_1, p_x, \omega) = \sum_{i,j} \xi_i(y_1) \xi_i^*(y'_1) \chi_j(z_1) \chi_j^*(z'_1) G(p_x, \omega) \quad (5.3)$$

formunda ifade edilir. Kesim 4.1'de incelenen 2D sistemin Green fonksiyonu temsilinin elde edilmesine benzer bir yol takip edilerek, 1D sistem için $G(p_x, \omega)$

$$G(p_x, \omega) = \left[\frac{1 - f_0(\epsilon_{p_x, i, j})}{\omega - \epsilon_{p_x, i, j} + i\epsilon} + \frac{f_0(\epsilon_{p_x, i, j})}{\omega - \epsilon_{p_x, i, j} - i\epsilon} \right] \quad (5.4)$$

formunda yazılabilir.

5.2 1D-DİELEKTRİK FONKSİYONU

1D elektronik sistemin dış alana karşı lineer tepkisini betimleyen dielektrik fonksiyonu ϵ yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonu R cinsinden ifade edilebilir. Denklem (2.8) uyarınca, R fonksiyonu (p_x, ω) temsilinde

$$R(y_1, y'_1, z_1, z'_1, p_x, \omega) = -i \int \frac{dk_x}{2\pi} \int \frac{d\omega'}{2\pi} G(y_1, y'_1, z_1, z'_1, k_x, \omega') \times G(y_1, y'_1, z_1, z'_1, k_x + p_x, \omega + \omega') \quad (5.5)$$

şeklinde yazılabilir. (5.3) ve (5.4) denklemleriyle verilen Green fonksiyonları yukarıdaki ifadede yerine yazılarak $R(y_1, y'_1, z_1, z'_1, p_x, \omega)$

$$R(y_1, y'_1, z_1, z'_1, p_x, \omega) = \sum_{i, i', j, j'} \xi_i(y_1) \xi_i^*(y'_1) \xi_{i'}(y'_1) \xi_{i'}^*(y_1) \times \chi_j(z_1) \chi_j^*(z'_1) \chi_{j'}(z'_1) \chi_{j'}^*(z_1) R(p_x, \omega) \quad (5.6)$$

şeklini alır. Kuantum teli için sadece en alt-bandın dolu olduğu varsayımı ve tünelleme olayının ihmali ile $i = i' = 1$ ve $j = j' = 1$ ve konum olasılık yoğunlukları için $|\xi_i(y_1)|^2 = \delta(y_1)$ ve $|\chi_j(z_1)|^2 = \delta(z_1)$ vb. yazılmak üzere, (5.6) denklemi

$$R(y_1, y'_1, z_1, z'_1, p_x, \omega) = \delta(y_1) \delta(y'_1) \delta(z_1) \delta(z'_1) R(p_x, \omega), \quad (5.7)$$

formunu alır. [Yukarıdaki varsayımlar altında enerji özdeğerleri $\varepsilon_i = \varepsilon_j = \varepsilon_1$ olur, ancak genellikle bir şey kaybetmeksizin $\varepsilon_1 = 0$ seçilecektir.] (5.7) denkleminde görülen ve sadece p_x ve ω -değişkenlerine bağlı yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonu, (5.4) denklemiyle verilen Green fonksiyonu cinsinden

$$R(p_x, \omega) = -i \int \frac{dk_x}{2\pi} \int \frac{d\omega'}{2\pi} G(k_x + p_x, \omega + \omega') G(k_x, \omega') \quad (5.8)$$

şeklinde ifade edilebilir.

Kesim 3.2'de 3D sistemler için ve Kesim 4.2'de 2D sistemler için izlenen tartışmalara benzer olarak, 1D sistem için yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonu $[R(p_x, \omega) = R_1(p_x, \omega) + iR_2(p_x, \omega)]$ ve fiziksel yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonu $[R^R(p_x, \omega) = R_1^R(p_x, \omega) + iR_2^R(p_x, \omega)]$ arasındaki ilişki doğrudan

$$R_1(p_x, \omega) = R_1^R(p_x, \omega) \quad \text{ve} \quad \text{sign}(\omega) R_2(p_x, \omega) = R_2^R(p_x, \omega) \quad (5.9)$$

olarak yazılabilir. Böylelikle, $R^R(p_x, \omega)$

$$R^R(p_x, \omega) = 2 \int \frac{dk_x}{2\pi} \frac{f_0(\varepsilon_{k_x}) - f_0(\varepsilon_{k_x+p_x})}{\hbar\omega + \varepsilon_{k_x} - \varepsilon_{k_x+p_x} + i\epsilon} \quad (5.10)$$

denklemi uyarınca hesaplanır. Dirac bağıntısı kullanılarak ve ayrıca $f_0(\varepsilon_{k_x+p_x})$ terimini içeren integralde $k_x \rightarrow -(k_x + p_x)$ dönüşümü yapılarak $R^R(p_x, \omega)$ fonksiyonunun reel kısmı $R_1^R(p_x, \omega)$

$$R_1^R(p_x, \omega) = \frac{2}{2\pi} P \int dk_x f_0(\varepsilon_{k_x}) \left[\frac{1}{\hbar\omega + \varepsilon_{k_x} - \varepsilon_{k_x+p_x}} - \frac{1}{\hbar\omega - \varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_x+p_x}} \right] \quad (5.11)$$

ve imajiner kısmı $R_2^R(p_x, \omega)$

$$R_2^R(p_x, \omega) = 2\pi \int \frac{dk_x}{2\pi} f_0(\varepsilon_{k_x}) [\delta(\hbar\omega - \varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_x+p_x}) - \delta(\hbar\omega + \varepsilon_{k_x} - \varepsilon_{k_x+p_x})] \quad (5.12)$$

şeklinde yazılabilir. Yukarıdaki her iki denklemde farklı momentum durumları için enerji farkı $\varepsilon_{k_x+p_x} - \varepsilon_{k_x} = (\hbar^2 p_x^2 / 2m) + (\hbar^2 p_x k_x / m)$ kadardır. (5.11) denkleminde k_x -değişkeni üzerinden integral iki kısma ayrılarak ($\int_{-\infty}^{\infty} \rightarrow \int_{-\infty}^0 + \int_0^{\infty}$) ve ikinci kısımda $k_x \rightarrow -k_x$ değişken değişimi yapılarak $R_1^R(p_x, \omega)$

$$R_1^R(p_x, \omega) = \frac{m}{\hbar^2 \pi p_x} P \int_0^{\infty} dk_x f_0(\varepsilon_{k_x}) \left[\frac{1}{\frac{m\omega}{\hbar p_x} - \frac{p_x}{2} + k_x} - \frac{1}{\frac{m\omega}{\hbar p_x} + \frac{p_x}{2} - k_x} + \frac{1}{\frac{m\omega}{\hbar p_x} - \frac{p_x}{2} - k_x} - \frac{1}{\frac{m\omega}{\hbar p_x} + \frac{p_x}{2} + k_x} \right] \quad (5.13)$$

şeklinde yeniden ifade edilebilir. Bu son ifade mutlak sıfır sıcaklıkta ($T = 0K$) analitik olarak hesaplanabilir. Bu durumda $f_0(\varepsilon_{k_x}) \rightarrow \theta(k_F - k_x)$ olduğundan, birim adım fonksiyonları integrale $k_F > k_x$ durumda katkı verir ve integraller $(0, k_F)$ aralığında hesaplanır. İntegraller kolaylıkla yapılarak sonuç kapalı formda aşağıdaki şekilde verilir:

$$R_1^R(p_x, \omega) = \frac{m}{\hbar^2 \pi p_x} \ln \left| \frac{1 - \left(\frac{\hbar p_x^2}{2m\omega} - \frac{\hbar p_x k_F}{m\omega} \right)^2}{1 - \left(\frac{\hbar p_x^2}{2m\omega} + \frac{\hbar p_x k_F}{m\omega} \right)^2} \right| \quad (5.14)$$

İmajiner kısım $R_2^R(p_x, \omega)$ [denklem (5.12)] içerdiği Dirac-delta terimleri yüzünden sonlu sıcaklıkta değerlendirilebilir [Fermi-dağılım fonksiyonu $f_0(\varepsilon_{\vec{k}}) = (\exp[(\hbar^2/2mk_B T)(k^2 - k_F^2)] + 1)^{-1}$]. Sonuç şudur:

$$R_2^R(p_x, \omega) = \frac{m}{\hbar^2 |p_x|} \left\{ \frac{1}{\exp\left[\frac{\hbar^2}{2mk_B T} \left(\frac{p_x}{2} + \frac{m\omega}{\hbar p_x} \right) - \frac{\varepsilon_F}{k_B T}\right] + 1} - \frac{1}{\exp\left[\frac{\hbar^2}{2mk_B T} \left(\frac{p_x}{2} - \frac{m\omega}{\hbar p_x} \right) - \frac{\varepsilon_F}{k_B T}\right] + 1} \right\} \quad (5.15)$$

Diğer taraftan, $R_2^R(p_x, \omega)$ mutlak sıfır sıcaklıkta ($T = 0K$)

$$R_2^R(p_x, \omega) = \frac{m}{\hbar^2 |p_x|} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \theta(k_F - k_x) \left[\delta \left(\frac{m\omega}{\hbar p_x} + \frac{p_x}{2} + k_x \right) - \delta \left(\frac{m\omega}{\hbar p_x} - \frac{p_x}{2} - k_x \right) \right] \quad (5.16)$$

formunda yeniden yazılabilir. İntegraldeki birim adım fonksiyonları gereği, integral sadece $k_F > k_x$ durumunda sıfırdan farklıdır. Ayrıca, ilk Dirac-delta fonksiyonu $k_x = -\left(\frac{m\omega}{\hbar p_x} + \frac{p_x}{2}\right)$ noktasında ve ikinci Dirac-delta fonksiyonu $k_x = \left(\frac{m\omega}{\hbar p_x} - \frac{p_x}{2}\right)$ değerinde integrallere katkıda bulunur. Bu durumda, Fermi dalga vektörü k_F ve dalga vektörü p_x arasında $k_F > \left|\frac{p_x}{2} \pm \frac{m\omega}{\hbar p_x}\right|$ koşulu mevcuttur. Bu koşul birim adım fonksiyonu cinsinden ifade edilerek, $R_2^R(p_x, \omega)$

$$R_2^R(p_x, \omega) = \frac{m}{\hbar^2 |p_x|} \left\{ \theta \left(k_F - \left| \frac{p_x}{2} + \frac{m\omega}{\hbar p_x} \right| \right) - \theta \left(k_F - \left| \frac{p_x}{2} - \frac{m\omega}{\hbar p_x} \right| \right) \right\}, \quad (5.17)$$

olur. 1D sistemin fiziksel polarizasyon fonksiyonu $\alpha(y_1, y_1', z_1, z_1', p_x, \omega)$

$$4\pi\alpha^R(y_1, y_1', z_1, z_1', p_x, \omega) = -v(|z_1 - z_1'|, |y_1 - y_1'|, p_x) R^R(y_1, y_1', z_1, z_1', p_x, \omega), \quad (5.18)$$

ifadesi gereği hesaplanır (Ayaz, 2003). (5.17) denkleminde $v(|z_1 - z_1'|, |y_1 - y_1'|, p_x) = 2e^2 K_0(p_x \sqrt{(y_1 - y_1')^2 + (z_1 - z_1')^2})$ ile verilir ve Coulomb potansiyelinin 1D Fourier dönüşümünü temsil eder. Ayrıca, fiziksel 1D yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonu [denklem (5.7)'ye benzer olarak] $R^R(y_1, y_1', z_1, z_1', p_x, \omega) = \delta(y_1) \delta(y_1') \delta(z_1) \delta(z_1') R^R(p_x, \omega)$ şeklinde yazılabilir. Bu ifadelerin (5.18) denkleminde kullanılmasıyla ve Kesim 4.2'deki adımların takip edilmesiyle, 1D sistemin fiziksel dielektrik fonksiyonu

$$\varepsilon^R(y_1, y_1', z_1, z_1', p_x, \omega) = \delta(z_1 - z_1') \delta(y_1 - y_1') + 4\pi\alpha^R(y_1, y_1', z_1, z_1', p_x, \omega) \quad (5.19)$$

şeklinde ifade edilebilir.

5.3 1D-DİSPERSİYON BAĞINTISI

1D sistem için dispersiyon bağıntısı, fiziksel dielektrik fonksiyonunun dalga vektörü ve frekansa bağlı kısmından tanımlanır. Fiziksel dielektrik fonksiyonu $\varepsilon^R(p_x, \omega)$ fiziksel

polarizasyon fonksiyonu $\alpha^R(p_x, \omega)$ cinsinden

$$\varepsilon^R(p_x, \omega) = 1 + 4\pi\alpha^R(p_x, \omega) \quad (5.20)$$

şeklindedir. $\alpha^R(p_x, \omega)$ için (5.18) denklemi ile verilen ifade yukarıda kullanılırsa

$$\varepsilon^R(p_x, \omega) = 1 - v(p_x) R^R(p_x, \omega) \quad (5.21)$$

olur. Denklem (5.21)'den (küçük dalga vektörü limitinde $p_x \rightarrow 0$) hareketle 1D sistemin kollektif modlarını belirlemek için öncelikle gecikmeli yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonu $R^R(p_x, \omega)$ ele alınmalıdır. Yüksek frekans limitinde ($\hbar p_x k_F / m\omega \ll 1$, $\hbar p_x^2 / m\omega \ll 1$) bu fonksiyonun reel kısmı, (5.14) denklemi uyarınca, [$x \equiv \hbar p_x^2 / 2m\omega$ ve $y \equiv \hbar p_x k_F / m\omega$]

$$R_1^R(p_x, \omega) = \lim_{p_x \rightarrow 0} \frac{m}{\hbar^2 \pi p_x} [\ln(1 - (x - y)^2) - \ln(1 - (x + y)^2)] \quad (5.22)$$

şeklindedir. $\ln(1 + t) \simeq t$, ($t < 1$) yaklaşımı ile (5.22) denklemindeki logaritmik terimler farkı $4xy$ olur. Bu değer [x ve y için tanımları ile birlikte] (5.22) denkleminde kullanılması, $\lim_{p_x \rightarrow 0} R_1^R(p_x, \omega) \simeq (2/\pi)(p_x^2 / m\omega^2)k_F$ verir. Bu sonuç, 1D parçacık yoğunluğu n_{1D} cinsinden ($k_F = n_{1D}\pi/2$, 1D Fermi dalga vektörü)

$$R_1^R(p_x, \omega) \simeq \frac{n_{1D} p_x^2}{m\omega^2}, \quad (p_x \rightarrow 0) \quad (5.23)$$

şeklinde yeniden yazılabilir. Diğer taraftan, (5.21) denkleminde görülen 1D Coulomb potansiyeli $v(p_x)$, çok ince bir kuantum teli durumunda, kuantum telinin genişliği ve/veya yarıçapı 'a' cinsinden $v(p_x) = 2e^2 K_0(p_x a)$ şeklinde yazılabilir [Bakınız Ek-D]. $v(p_x)$ için $2e^2 K_0(p_x a)$ ve $R_1^R(p_x, \omega)$ için (5.22) denklemiyle verilen ifadenin (5.21) denkleminde yerlerine yazılmasıyla fiziksel dielektrik fonksiyonun reel kısmı $\varepsilon_1^R(p_x, \omega)$

$$\varepsilon_1^R(p_x, \omega) = 1 - 2e^2(n_{1D}/m)(p_x^2/\omega^2)K_0(p_x a), \quad (p_x \rightarrow 0) \quad (5.24)$$

olarak elde edilir. Bununla birlikte, fiziksel dielektrik fonksiyonunun imajiner kısmı

$\varepsilon_2^R(p_x, \omega)$, düşük dalga vektörü ($p_x \rightarrow 0$) limitinde sıfır değerini alır; $\varepsilon_2^R(p_x, \omega)$. Bu durum, gecikmeli 1D yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonunun imajiner kısmı $R_2^R(p_x, \omega)$ 'nin [(5.17) denklemi] içerdiği birim adım fonksiyonlarının yüksek frekans limitinde ($\hbar p_x k_F / m\omega \ll 1, \hbar p_x^2 / m\omega \ll 1$) sıfır olmasından kaynaklanır. Böylelikle, $p_x \rightarrow 0$ limitinde, fiziksel dielektrik fonksiyonu reel bir fonksiyon olur; $\varepsilon^R(p_x, \omega) = \varepsilon_1^R(p_x, \omega)$.

1D plazmon modu, frekans için, $\varepsilon^R(p_x, \omega) = 0$ denkleminin çözümünden bulunur. Bu koşulun (5.24) denleminde kullanılmasıyla 1D plazma frekansı ω_{1D}

$$\omega_{1D} = [(2e^2 n_{1D} / m)(p_x^2) K_0(p_x a)]^{1/2} \quad (5.25)$$

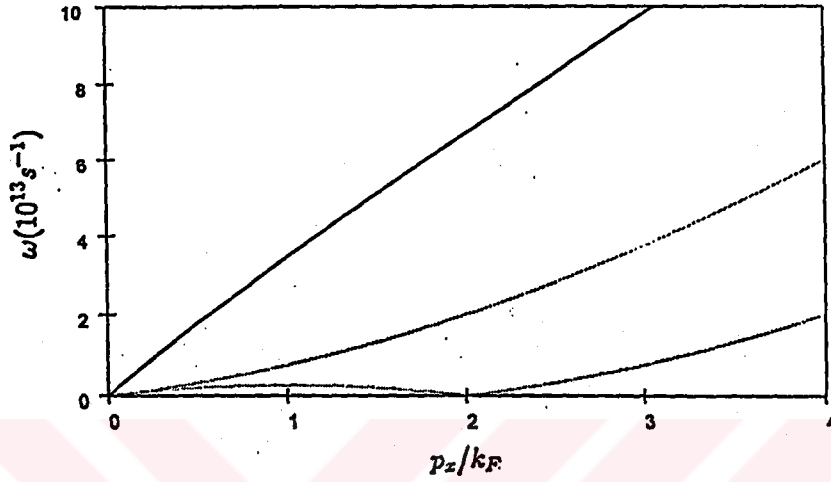
olarak elde edilir. $x \ll 1$ için $K_0(x) \rightarrow -\ln(x/2)$ özelliği kullanılarak, ω_{1D}

$$\omega_{1D} = (2e^2 n_{1D} / m)^{1/2} (p_x) [-\ln(p_x a / 2)]^{1/2} \quad (5.26)$$

şeklinde yeniden yazılabilir. (5.26) denkleminde açıkça görüldüğü üzere, ω_{1D} logaritmik dispersiyona sahiptir.

Şekil 5.1, 1D bir sistemin dalga vektörüne bağlı olarak plazmon spektrumunu göstermektedir. Şeklin çizilmesinde, elektron yoğunluğu $n_{1D} = 5.0 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$, Fermi dalga vektörü $k_F = 7.85 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ ve kuantum telinin genişliği ve/veya yarıçapı $a = 10 \text{ nm}$ olan n-tipi bir GaAs kuantum teli gözönüne alınmıştır. Ayrıca, GaAs için etkin elektron kütlesi $m = 0.067 m_e$ ve optik dielektrik sabiti $\varepsilon_0 = 10.9$ olarak alınmıştır. 1D plazmon eğrisi $\omega(p_x)$, dalga vektörü p_x 'e bağlı olarak sıfır değerinden başlar ve logaritmik olarak artar. Tek-parçacık süreklilik bölgesinin sınırlarını belirleyen eğriler dielektrik fonksiyonunun (veya bağlantılı olarak yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonunun) imajiner kısmından tanımlanır. Spektrumda gösterilen bu eğriler, [(5.17) denklemi uyarınca birim adım fonksiyonlarının argümanlarının sifıra eşitlenmesiyle elde edilen] $\omega = (\hbar/2m)(p_x^2 + 2p_x k_F)$ ve $\omega = (\hbar/2m) |p_x^2 - 2p_x k_F|$ koşullarını sağlarlar. Şekilden görüldüğü üzere, plazmon eğrisi daima tek-parçacık süreklilik

bölgesinin sınırları dışında kalmaktadır. Bu durum, 1D plazmonların "sönüme uğramaması" şeklinde ifade edilebilir. Bundan başka, 1D plazmonlar, tek-parçacık uyarım bölgesinin altında bir bölgede daha düşük enerji değerlerinde bir kollektif uyarım bölgesine sahiptir. Bu durum, 1D plazmonların daha düşük enerjilerde uyarılabilmelerini mümkün kılmaktadır.



Şekil 5.1: 1D elektronik sistem için uyarım spektrumu. Sürekli çizgi plazmon dispersiyon eğrisini ve noktalı çizgiler tek-parçacık süreklilik bölgesi sınırlarını gösterir.

BÖLÜM 6

3D, 2D ve 1D ELEKTRONİK SİSTEMLERİN KOLLEKTİF UYARIM SPEKTRUMLARININ KARŞILAŞTIRILMASI

Önceki bölümlerde 3D, 2D ve 1D elektronik sistemlerin dış alanlara karşı lineer tepkileri, rasgele-faz-yaklaşımı (RPA) çerçevesinde teorik olarak ele alınıp dalga vektörü ve frekans değişkenlerine bağlı dielektrik fonksiyonlar cinsinden ifade edildi. Dalga vektörleri çok küçük fakat sonlu kalmak ($p \rightarrow 0$) koşulu ile sistemlerin kollektif uyarım modları dielektrik fonksiyonlarının reel kısımlarından (sıfır noktalarından) ve tek-parçacık uyarımları dielektrik fonksiyonlarının imajiner kısımlarından tanımlandı ve uyarım spektrumları çizildi. Bu incelemeler sonucunda, 3D, 2D ve 1D sistemlerin (plazmonların) dispersion bağıntıları, uyarım özellikleri, yaşam süreleri ve elektron transport özellikleri karşılaştırılarak aşağıdaki sonuçlar çıkarılmıştır.

3D sistemin dispersion eğrisi $\omega(p)$, 3D plazma frekansı ω_p sabit-değerinden başlar ve 3D dalga vektörü p 'ye göre ikinci dereceden yavaş bir değişim gösterir (Şekil 3.1). 2D sistemde kollektif-mod-dispersion eğrisi $\omega(p_{||}) \equiv \omega_{2D}$, sıfırdan başlamakta ve 2D dalga vektörü $p_{||}$ 'nin karekökü ile artmaktadır (Şekil 4.1). 1D sistemlerde bu durum, $\omega(p_x) \equiv \omega_{1D}$ için sıfırdan başlar ve 1D dalga vektörü p_x ile logaritmik olarak değişir (Şekil 5.1). Ayrıca ω_{1D} , 1D sistemin (kuantum telinin) genişliğine ve/veya yarıçapına "a" bağıllık gösterir. ω_p , yoğunluğa (n_{3D}) bağlı bir sabit olduğundan 3D plazmonlar $\hbar\omega_p$ enerjisinde uyarılabilirler. Diğer taraftan, 2D ve 1D plazmonların (dispersion eğrileri sıfırdan başladıkları için) düşük frekanslarda uyarılmaları mümkündür.

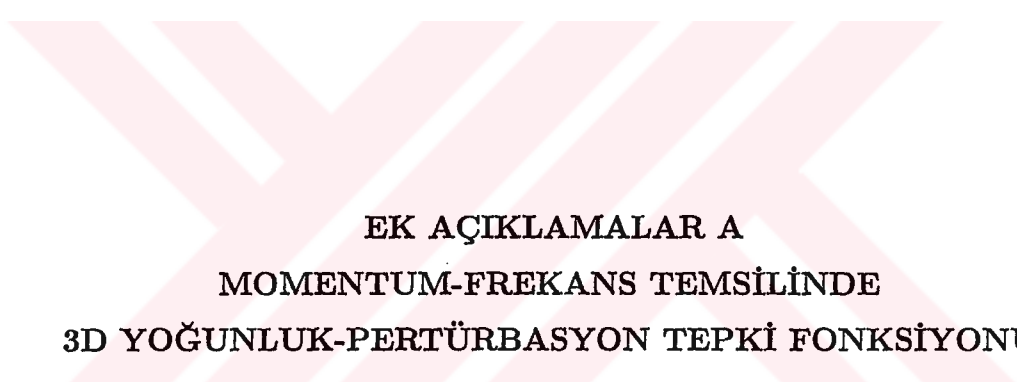
3D plazmon eğrisi 3D dalga vektörüne göre kısa bir aralıktan sonra tek-parçacık süreklilik bölgesine geçmektedir ve 3D plazmonlar sönmeye uğramaktadır. Bu durum, 2D plazmon eğrisi için 2D dalga vektörüne göre daha geniş bir aralıktan sonra tek-parçacık süreklilik bölgesine geçtiği ve 2D plazmonların sönmeye uğradığı şeklindedir.

Bu yüzden, 2D plazmonların yaşam süreleri 3D plazmonlarınkine göre daha uzun ömürlüdür. Diğer taraftan, 1D plazmon eğrisi 1D dalga vektörüne göre her zaman tek-parçacık süreklilik bölgesi dışında kalır ve 1D plazmonlar hiç bir zaman kolektif salınım özelliklerini kaybetmezler. Bu özellikten dolayı, 1D plazmonlar, 2D ve 3D plazmonlardan daha uzun ömre sahiptir. Bundan başka, 1D plazmonlar, tek-parçacık uyarım bölgesinin altında bir bölgede daha düşük enerji değerlerinde bir kolektif uyarım bölgesine sahiptir. Bu durum, 1D plazmonların (2D plazmonların aksine) daha düşük enerjilerde uyarılabilmesini olası kılmaktadır. Ayrıca, belirtilen bu özelliklerle bağlantılı olarak, 1D sistemler, elektron transport etkisi açısından, 2D ve 3D sistemlere göre daha önemlidirler.



KAYNAKLAR

- Allen, P. B. (1996) Single particle versus collective electronic excitations, *From Quantum Mechanics to Technology*, edited by Z. Peru, J. Przystawa and K. Rapcewicz, Springer, Berlin, pp. 125-141.
- Ayaz, Y. (1999) *Electrostatic and electrodynamic response properties of nanostructures*, Doctoral thesis, Stevens Institute of Technology (USA)
- Ayaz, Y. (2003) Analytical results for coupled collective modes in a periodic superlattice of quantum wires embedded in a local bulk medium, *Physical Review B*, Vol. 67, pp. 1-5.
- Ayaz, Y. and Horing, N. J. M. (1999) Nonlocality effects of a bulk semiconductor plasma in interaction with quantum well superlattice plasmons, *Physical Review B*, Vol. 61, pp. 12636-12638.
- Bonitz, B. (2000) Nonequilibrium plasmons in optically excited semiconductors, *Physical Review B*, Vol. 62, pp. 15724-15734.
- Davoudi, B., and Tanatar, B. (2001) Plasmon dispersion and damping in double-layer electron systems, *Solid State Communications*, Vol. 117, pp. 89-92.
- Fetter, A.L., and Walecka, J. D. (1971) *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, Mc. Graw Hill.
- Gradshteyn, I. S., and Ryzhik, I. M. (1994) *Table of Integrals, Series and Products*, Fifth Edition, edited by A. Jeffrey, Academic Press.
- Horing, N. J. M. (1965) Quantum theory of electron gas plasma oscillations in a magnetic field, *Annals of Physics*, Vol. 31, pp. 1-63.
- Horing, N. J. M. (2001) Coupling of 2D plasmons to nonlocal plasmons, *Physica B*, Vol. 299, pp. 165-172.
- Kadanoff, L., and Baym, G. (1962) *Quantum Statistical Mechanics*, Addison-Wesley Publishing Co.
- Zou, Z. Q., and Lee, Y.P. (2001) Comparison of the collective excitation spectra of three, two- and one-dimensional electron systems, *Physica B*, Vol. 305, pp.155-163.



EK AÇIKLAMALAR A
MOMENTUM-FREKANS TEMSİLİNDE
3D YOĞUNLUK-PERTÜRBASYON TEPKİ FONKSİYONU

MOMENTUM-FREKANS TEMSİLİNDE 3D YOĞUNLUK-PERTÜRBASYON TEPKİ FONKSİYONU

Bölüm 3'de 3D elektronik sistemin dielektrik fonksiyonu hesaplamak için 3D yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonu

$$R(\vec{p}, \omega) = -i \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega'}{2\pi} G(\vec{k} + \vec{p}, \omega' + \omega) G(\vec{k}, \omega') \quad (\text{A.1})$$

ifadesiyle yazılmıştı [bakınız denklem (3.18)]. İfadede yer alan her bir Green fonksiyonu için (3.16) denklemi ile verilen temsil kullanılarak, iki Green fonksiyonu çarpımı

$$\begin{aligned} G(\vec{k} + \vec{p}, \omega' + \omega) G(\vec{k}, \omega') &= \left[\frac{1 - f_0(\varepsilon_{\vec{k}})}{\hbar\omega' - \varepsilon_{\vec{k}} + i\epsilon} \right] \left[\frac{1 - f_0(\varepsilon_{\vec{k} + \vec{p}})}{\hbar(\omega' + \omega) - \varepsilon_{\vec{k} + \vec{p}} + i\epsilon} \right] \\ &+ \left[\frac{1 - f_0(\varepsilon_{\vec{k}})}{\hbar\omega' - \varepsilon_{\vec{k}} + i\epsilon} \right] \left[\frac{f_0(\varepsilon_{\vec{k} + \vec{p}})}{\hbar(\omega' + \omega) - \varepsilon_{\vec{k} + \vec{p}} - i\epsilon} \right] \\ &+ \left[\frac{f_0(\varepsilon_{\vec{k}})}{\hbar\omega' - \varepsilon_{\vec{k}} - i\epsilon} \right] \left[\frac{1 - f_0(\varepsilon_{\vec{k} + \vec{p}})}{\hbar(\omega' + \omega) - \varepsilon_{\vec{k} + \vec{p}} + i\epsilon} \right] \\ &+ \left[\frac{f_0(\varepsilon_{\vec{k}})}{\hbar\omega' - \varepsilon_{\vec{k}} - i\epsilon} \right] \left[\frac{f_0(\varepsilon_{\vec{k} + \vec{p}})}{\hbar(\omega' + \omega) - \varepsilon_{\vec{k} + \vec{p}} - i\epsilon} \right] \quad (\text{A.2}) \end{aligned}$$

olarak yazılabilir. (A.1) denklemi uyarınca, (A.2) denkleminin her iki tarafı $1/2\pi$ ile çarpılıp ω' -değişkeni üzerinden integre edilirse, oluşan integraller kontur integrallerine dönüştürülerek rezidü teoremine göre değerlendirilebilir. Bunun için, (A.2) denkleminin ω' -üzerinden integre edilmesi sonucu oluşan terimlerin ilki (I_1)

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \left[\frac{1 - f_0(\varepsilon_{\vec{k}})}{\hbar\omega' - \varepsilon_{\vec{k}} + i\epsilon} \right] \left[\frac{1 - f_0(\varepsilon_{\vec{k} + \vec{p}})}{\hbar(\omega' + \omega) - \varepsilon_{\vec{k} + \vec{p}} + i\epsilon} \right] \quad (\text{A.3})$$

şeklinde yazılabilir.

Genel anlamda, bir $f(z)$ fonksiyonu kapalı bir C eğrisi içinde ve üzerindeki bölgede analitik bir fonksiyon olmak üzere ve z -noktası C eğrisi içinde ise, Cauchy-Riemann (CR) denklemi

$$\oint_C dz \frac{f(z)}{z - z_0} = 2\pi i f(z_0) \quad (\text{A.4})$$

olduğunu söyler. $f(z)$, reel eksen üzerinde kutup noktası içermeyen rasyonel bir fonksiyon olmak üzere ve ayrıca $f(z)$ 'nin paydasının mutlak değeri payın mutlak değerine göre iki derece büyük ise kontur integrali uyarınca

$$\oint_C f(z) dz = \int_{-\rho}^{\rho} f(x) dx + \int_{C'} f(z) dz \quad (\text{A.5})$$

yazılabilir. Burada, C' eğrisi, üst-yarı-düzlemde (ÜYD) veya alt-yarı-düzlemde (AYD) ρ -yarıçaplı bir yarı-çember ile temsil edilir. ÜYD'de kutup noktaları için $f(z)$ 'nin C' eğrisi üzerinden integrali $\rho \rightarrow \infty$ limitinde

$$\lim_{\rho \rightarrow \infty} \left| \int_{C''} f(z) dz \right| \rightarrow 0 \quad (\text{A.6})$$

olur. Dolayısıyla, rezidü teoremine göre

$$\oint_{C'} f(z) dz = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = 2\pi i \sum_{y>0} \text{Rezidü } [f(z)] \quad (\text{A.7})$$

yazılır. Böylelikle, (A.7) denklemi uyarınca, (A.3) denkleminde I_1 ile temsil edilen integral

$$I_1 \rightarrow \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(x) dx = \frac{1}{2\pi} \oint_{C_1} F(z) dz \quad (\text{A.8})$$

formunda yeniden ifade edilebilir. Burada, $F(z)$ fonksiyonu kompleks z -değişkeni ile (A.3) denklemindeki integrandı temsil eder. Ayrıca, C_1 eğrisi, $F(z)$ 'nin kutup noktalarını içeren kapalı bir eğridir. İntegrand, $\tilde{h}z_1 = \varepsilon_{\tilde{k}} - i\varepsilon$ ve $\tilde{h}z_2 = \varepsilon_{\tilde{k}+\tilde{p}} - \tilde{h}\omega - i\varepsilon'$ da kutup noktalarına sahiptir ve bunlar AYD'de bulunur. C_1 eğrisinin ÜYD'de seçimi I_1

için sıfır sonucunu verir. C_1 eğrisinin AYD'de seçimi, $F(z)$ fonksiyonunun rezidüleri toplamı sıfır olduğundan, I_1 için yine sıfır verir. Bu iki durum birleştirilerek $I_1 = 0$ elde edilir. Benzer şekilde, (A.2) denklemindeki dördüncü terimin ω' -değişkeni üzerinden integralinin (I_4) sıfır olduğu görülür:

$$I_4 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \left[\frac{f_0(\varepsilon_{\vec{k}})}{\hbar\omega' - \varepsilon_{\vec{k}} - i\epsilon} \right] \left[\frac{f_0(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}})}{\hbar(\omega' + \omega) - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}} - i\epsilon} \right] = 0 \quad (\text{A.9})$$

Diğer taraftan, rezidü teoremine göre (A.2) denklemindeki ikinci ve üçüncü terimlerin ω' -değişkeni üzerinden integralleri (I_2 ve I_3)

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \left[\frac{1 - f_0(\varepsilon_{\vec{k}})}{\hbar\omega' - \varepsilon_{\vec{k}} + i\epsilon} \right] \left[\frac{f_0(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}})}{\hbar(\omega' + \omega) - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}} - i\epsilon} \right] \\ &= -i \left[\frac{[1 - f_0(\varepsilon_{\vec{k}})]f_0(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}})}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}} - i\epsilon} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

ve

$$\begin{aligned} I_3 &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \left[\frac{f_0(\varepsilon_{\vec{k}})}{\hbar\omega' - \varepsilon_{\vec{k}} - i\epsilon} \right] \left[\frac{1 - f_0(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}})}{\hbar(\omega' + \omega) - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}} + i\epsilon} \right] \\ &= i \left[\frac{f_0(\varepsilon_{\vec{k}})[1 - f_0(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}})]}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}} + i\epsilon} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

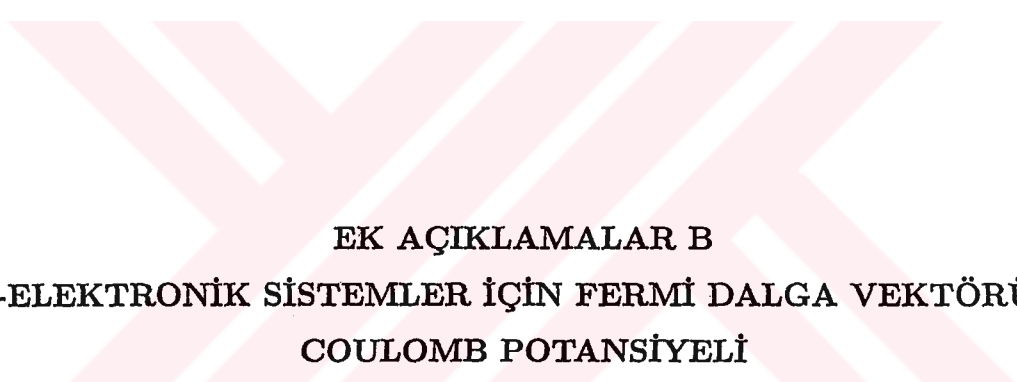
sonuçlarını verir. Dolayısıyla, $I_1 + I_2 + I_3 + I_4$ toplamı sonucu

$$\int \frac{d\omega'}{2\pi} G(\vec{k} + \vec{p}, \omega' + \omega) G(\vec{k}, \omega') = i \left[\frac{f_0(\varepsilon_{\vec{k}})[1 - f_0(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}})]}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}} + i\epsilon} - \frac{[1 - f_0(\varepsilon_{\vec{k}})]f_0(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}})}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}} - i\epsilon} \right] \quad (\text{A.12})$$

elde edilir. Bu sonucun (A.1) denkleminde kullanılmasıyla, 3D yoğunluk-pertürbasyon tepki fonksiyonu momentum-frekans temsilinde $R(\vec{p}, \omega)$

$$R(\vec{p}, \omega) = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \left[\frac{f_0(\varepsilon_{\vec{k}})[1 - f_0(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}})]}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}} + i\epsilon} - \frac{[1 - f_0(\varepsilon_{\vec{k}})]f_0(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}})}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{p}} - i\epsilon} \right] \quad (\text{A.13})$$

ile verilir. Bu denklem, Bölüm 3'de sonlu sıcaklıkta ve/veya mutlak sıfır sıcaklıkta 3D sistemin tepki fonksiyonlarının incelenmesinde kullanılacaktır.



EK AÇIKLAMALAR B
3D-ELEKTRONİK SİSTEMLER İÇİN FERMİ DALGA VEKTÖRÜ VE
COULOMB POTANSİYELİ

3D-ELEKTRONİK SİSTEMLER İÇİN FERMİ DALGA VEKTÖRÜ VE COULOMB POTANSİYELİ

B.1 3D-FERMİ DALGA VEKTÖRÜ

N serbest elektronlu bir sistemin taban durumunda dolu yörüngeler \vec{k} -uzayında bir küre içinde noktalar olarak temsil edilirler. Küre yüzeyi üzerindeki enerji değeri Fermi enerjisi ϵ_F olarak bilinir ve Fermi dalga vektörü k_F cinsinden $\epsilon_F = (\hbar^2/2m)k_F^2$ olarak yazılır. \vec{k} -uzayında, her $(2\pi/L)^3$ hacim elemanı için bir dolu yörünge olduğundan, her yörünge bir dalga vektörü \vec{k} veya (k_x, k_y, k_z) üçlüsü ile temsil edilir. Şu halde, $4\pi k_F^3/3$ hacimli Fermi küresi içindeki toplam yörüngeler sayısı ($V = L^3$)

$$2 \left(\frac{4\pi k_F^3/3}{[2\pi/L]^3} \right) = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3 = N \quad (\text{B.1})$$

kadardır. İfadedeki 2 katsayısı elektronların spin durumlarını hesaba katmak için yazılmıştır. Bu ifadeden Fermi dalga vektörü k_F çekilerek (elektron yoğunluğu $n_{3D} = N/V$ cinsinden)

$$k_F = (3\pi^2 n_{3D})^{1/3} \quad (\text{B.2})$$

bulunur.

B.2 COULOMB POTANSİYELİNİN 3D-FOURIER DÖNÜŞMÜŞÜ

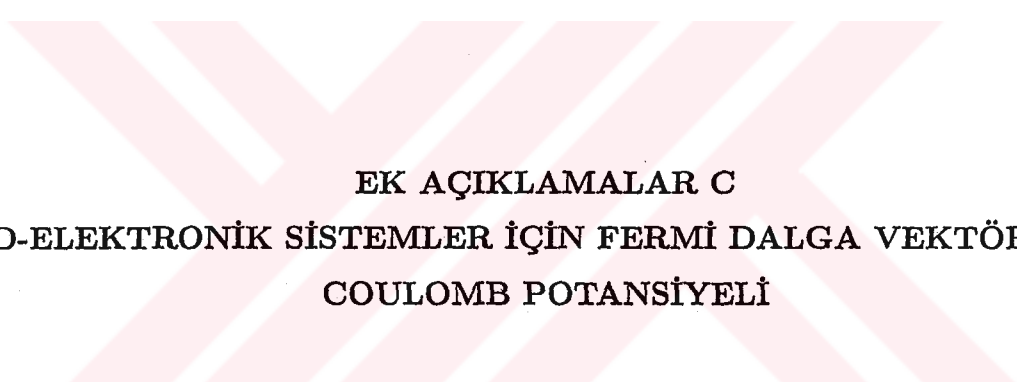
Konum uzayında Coulomb potansiyeli $v(\vec{r}) = e^2/|\vec{r}|$ ile verilir. 3D-Fourier dönüşümü ile momentum uzayında Coulomb potansiyeli

$$v(\vec{p}) = \int d^3r e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} v(\vec{r}) \quad (\text{B.3})$$

temsili ile yazılır. İntegralde $v(\vec{r})$ için $e^2/|\vec{r}|$ yazılarak ve üç boyutlu integral küresel koordinatlarda [$d^3r = r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi$, $0 < r < \infty$, $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$] değerlendirilerek

$$\begin{aligned}
 v(\vec{p}) &= e^2 \int_0^\infty r^2 dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin \theta e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} \left(\frac{1}{r}\right) \\
 &= 2\pi e^2 \int_0^\infty r dr \int_{-1}^1 d(\cos \theta) e^{ipr \cos \theta} \\
 &= \frac{4\pi e^2}{p^2}
 \end{aligned} \tag{B.4}$$

elde edilir. Yukardaki ifadenin elde edilmesinde, özel durum olarak, \vec{r} -vektörü z-ekseni boyunca seçilmiştir; ancak bu seçim, $v(\vec{p})$ 'nin genel formunu etkilememektedir.



EK AÇIKLAMALAR C
2D-ELEKTRONİK SİSTEMLER İÇİN FERMİ DALGA VEKTÖRÜ VE
COULOMB POTANSİYELİ

2D-ELEKTRONİK SİSTEMLER İÇİN FERMİ DALGA VEKTÖRÜ VE COULOMB POTANSİYELİ

C.1 2D-FERMİ DALGA VEKTÖRÜ

2D sistem için momentum uzayında her $(2\pi/L)^2$ yüzey elemanı içinde bir dolu orbital mevcut olduğundan πk_F^2 ile temsil edilen Fermi yüzeyi içindeki toplam yörünge sayısı (her elektron için iki farklı spin durumunu göz önüne alarak)

$$2 \left(\frac{\pi k_F^2}{[2\pi/L]^2} \right) = N \quad (C.1)$$

ile verilir. Böylelikle, 2D-Fermi dalga vektörü k_F , 2D yoğunluk $n_{2D} = N/L^2$ cinsinden

$$k_F = \sqrt{2\pi n_{2D}} \quad (C.2)$$

olarak ifade edilir.

C.2 COULOMB POTANSİYELİNİN 2D-FOURIER DÖNÜŞMÜŞÜ

Coulomb potansiyelinin $v(\vec{r}) = e^2/|\vec{r}| = e^2/\sqrt{r_{\parallel}^2 + z^2}$, $[\vec{r}_{\parallel} \equiv (x, y)]$, momentum temsilinde 2D-Fourier dönüşümü

$$v(z, p_{\parallel}) = \int d^2r_{\parallel} e^{i\vec{p}_{\parallel} \cdot \vec{r}_{\parallel}} v(\vec{r}) \quad (C.3)$$

ifadesinden hesaplanır. $v(\vec{r})$ 'nin $e^2/\sqrt{r_{\parallel}^2 + z^2}$ ile verilen ifadesi yukarıdaki denklemde yerine yazılarak ve iki boyutlu konum integrali polar koordinatlarda ifade edilerek ($d^2r_{\parallel} = r_{\parallel} dr_{\parallel} d\varphi$, $0 < r_{\parallel} < \infty$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$), (C.3) denklemi

$$v(z, p_{||}) = e^2 \int_0^{\infty} r_{||} dr_{||} \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{1}{\sqrt{r_{||}^2 + z^2}} [\cos(p_{||} r_{||} \cos \varphi) + i \sin(p_{||} r_{||} \cos \varphi)] \quad (\text{C.4})$$

formunu alır. Yukarıda, $e^{ix} = \cos(x) + i \sin(x)$ özdeşliği kullanılmıştır.

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \cos(p_{||} r_{||} \cos \varphi) = 2\pi J_0(p_{||} r_{||}) \quad (\text{C.5})$$

ve

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \sin(p_{||} r_{||} \cos \varphi) = 0 \quad (\text{C.6})$$

belirli integral değerleri kullanılarak [Gradshteyn and Ryzhik, 1994] (C.4) denklemindeki φ -açısı üzerinden integraller yapılacak olursa $v(z, p_{||})$

$$v(z, p_{||}) = 2\pi e^2 \int_0^{\infty} \frac{r_{||} dr_{||} J_0(p_{||} r_{||})}{\sqrt{r_{||}^2 + z^2}} \quad (\text{C.7})$$

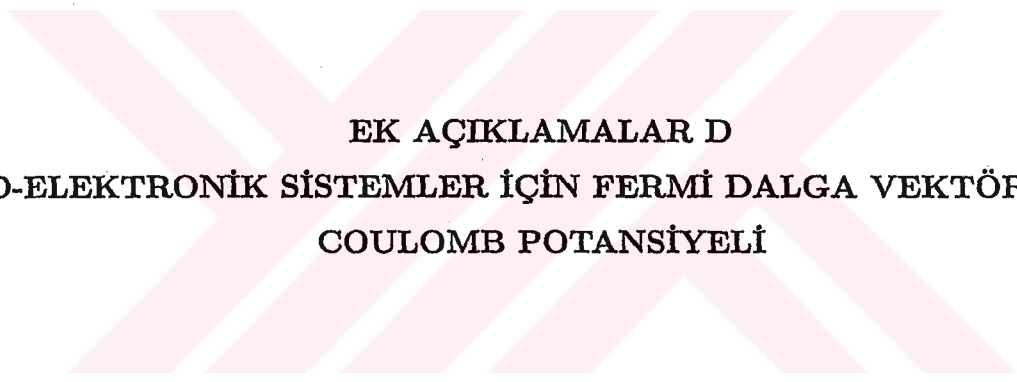
şeklinde yazılır. Burada $J_0(x)$, sıfırıncı mertebeden Bessel fonksiyonunu temsil eder. Geriye kalan $r_{||}$ -değişkeni üzerinden integral yapılacak olursa [Gradshteyn and Ryzhik, 1994], $v(z, p_{||})$

$$\begin{aligned} v(z, p_{||}) &= 2\pi e^2 \int_0^{\infty} \frac{r_{||} dr_{||} J_0(p_{||} r_{||})}{\sqrt{r_{||}^2 + z^2}} \\ &= 2\pi e^2 \left[\frac{1}{p_{||}} \text{sign}(z) (\text{sign} z \cosh zp_{||} - \sinh zp_{||}) \right] \\ &= 2\pi e^2 \left[\frac{1}{p_{||}} (\cosh zp_{||} - \text{sign} z \sinh zp_{||}) \right] \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

olarak elde edilir. Burada, $\text{sign}(z)$ işaret fonksiyonunu temsil eder ve $z > 0$ için $\text{sign}(z) = 1$ ve $z < 0$ için $\text{sign}(z) = -1$ olur. İşaret fonksiyonunun bu özelliği (C.8) denkleminde kullanılırsa Coulomb potansiyelinin 2D-Fourier dönüşümü $v(z, p_{||})$

$$v(z, p_{||}) = \frac{2\pi e^2}{p_{||}} e^{-|zp_{||}|} \quad (\text{C.9})$$

formunda yeniden yazılabilir.



EK AÇIKLAMALAR D
1D-ELEKTRONİK SİSTEMLER İÇİN FERMİ DALGA VEKTÖRÜ VE
COULOMB POTANSİYELİ

1D-ELEKTRONİK SİSTEMLER İÇİN FERMİ DALGA VEKTÖRÜ VE COULOMB POTANSİYELİ

D.1 1D-FERMİ DALGA VEKTÖRÜ

L uzunlukta bir doğru üzerine hapsedilmiş bir elektron için p_x -dalga vektörünün alabileceği değerler n kuantum sayısı olmak üzere $(\pi/L, 2\pi/L, \dots, n\pi/L)$ ile verilir. N -adet elektron en düşük enerji seviyesinden ($n = 1$) itibaren üst enerji seviyelerini dolduracak şekilde yerleştirildiğinde, Fermi dalga vektörü k_F

$$k_F = \frac{N\pi}{2L} \quad (\text{D.1})$$

ile verilir. (Pauli dışarlama ilkesi uyarınca her bir yörünge en fazla iki elektron içereceğinden, en-üst enerji seviyesi $n_F = N/2$ koşulunu sağlar.) $n_{1D} = N/L$ terimi 1D elektron yoğunluğu olmak üzere k_F

$$k_F = \frac{n_{1D}\pi}{2} \quad (\text{D.2})$$

olarak yeniden yazılabilir.

D.2 COULOMB POTANSİYELİNİN 1D-FOURIER DÖNÜŞMÜŞÜ

$v(\vec{r}) = e^2/(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$ Coulomb potansiyeli için momentum temsilinde 1D-Fourier dönüşümü

$$v(y, z, p_x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ip_x x} v(x, y, z) \quad (\text{D.3})$$

ifadesi uyarınca hesaplanır. $v(x, y, z)$ için $e^2/(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$ ile verilen ifadeyi yukarıdaki denklemde yerine yazılacak olursa, sonuç doğrudan yazılabilir [Gradshteyn

and Ryzhik, 1994]:

$$v(y, z, p_x) = 2e^2 K_0(p_x \sqrt{y^2 + z^2}) \quad (\text{D.4})$$

Burada, $K_0(x)$ sıfıncı mertebeden modifiye Bessel fonksiyonunu temsil eder.

Kesim 5.3'de 1D sistemin plazmon modları incelenirken çok ince bir kuantum teli ($y, z \rightarrow 0$) göz önüne alınmaktadır. Ancak, (D.4) denklemi uyarınca, Coulomb potansiyeli $v(y, z, p_x)$ 'nin içerdiği Bessel fonksiyonu $K_0(x)$, sıfır argümanda ıraksak olur. İyi tanımlı bir fiziksel sistemde bu ıraksaklığı ortadan kaldırmak için, kuantum telinin bir *genişlik* ve/veya *yarıçapa* ' a ' sahip olduğu kabul edilir. Bu kabul, karesel kuantum teli durumunda, (D.4) denklemindeki Bessel fonksiyonunun argümanında (genellikle bir şey kaybetmeksizin) $y = 0$ ve $z = a$ yazmayı olası kılar. Diğer taraftan, silindirik kuantum teli için, Bessel fonksiyonunun argümanı $\rho = [y^2 + z^2]^{1/2} \rightarrow a$ ile değiştirilir. Böylelikle, her iki durum için, (D.4) denklemindeki $K_0(p_x [y^2 + z^2]^{1/2})$ terimi, $K_0(p_x a)$ terimi ile yazılabilir. Dolayısıyla, çok ince bir kuantum teli durumunda, Coulomb potansiyelinin 1D-Fourier dönüşümü [denklem (D.4)]

$$v(y, z, p_x) = 2e^2 K_0(p_x a) \quad (\text{D.5})$$

şeklini alır.

ÖZGEÇMİŞ

Nurgül Akıncı 1978'de Zonguldak'ta doğdu. İlk ve orta öğrenimini aynı şehirde tamamladı. Çaycuma Anadolu Ticaret Meslek Lisesi'nden mezun olduktan sonra 1997 yılında Trakya Üniversitesi Fizik Bölümü'ne girdi. 2001 yılında mezuniyetiyle 2002 yılında Zonguldak Karaelmas Üniversitesi Fizik Bölümüne araştırma görevlisi olarak atandı. Halen Zonguldak Karaelmas Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı'nda yüksek lisans öğrenimini sürdürmektedir.

ADRES BİLGİLERİ:

Adres: Zonguldak Karaelmas Üniversitesi
Fizik Bölümü
67100 ZONGULDAK

Tel: (372) 257 4010-1403

Faks: (372) 257 4181

E-posta: nurozdede@yahoo.com