

**T.C.  
MUĞLA ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**FİZİK ANABİLİM DALI**

**KESİRLİ KUANTUM HALL OLAYININ PERDELEME TEORİSİ İLE  
SANKİ-PARÇACIK İNTERFEROMETRELERİNİN ANALİTİK VE  
NÜMERİK İNCELENMESİ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**HÜSEYİN ATCI**

**HAZİRAN 2011  
MUĞLA**

**T.C.  
MUĞLA ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**FİZİK ANABİLİM DALI**

**KESİRLİ KUANTUM HALL OLAYININ PERDELEME TEORİSİ İLE  
SANKİ-PARÇACIK İNTERFEROMETRELERİNİN ANALİTİK VE  
NÜMERİK İNCELENMESİ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**Hüseyin ATCI**

**MUĞLA 2011**

**T.C.**  
**MUĞLA ÜNİVERSİTESİ**  
**Fen Bilimleri Enstitüsü**

Yrd. Doç. Dr. Uğur Erkarlan danışmanlığında Hüseyin Atıcı tarafından hazırlanan *Kesirli Kuantum Hall Olayının Perdeleme Teorisi İle Sanki-Parçacık İnterferometrelerinin Analitik Ve Nümerik İncelenmesi* başlıklı tez, 14/06/2011 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Fizik Ana Bilim Dalı'nda yüksek lisans tezi olarak oybirliği ile kabul edilmiştir.

Başkan : Doç. Dr. Afif SİDDİKİ

İmza :



Üye : Yrd. Doç. Dr. Uğur ERKARSLAN

İmza :



Üye : Yrd. Doç. Dr. Ergün TAŞARKUYU

İmza :



## ÖNSÖZ

Çalışmalarım boyunca her türlü konuda yardım ve desteğini eksik etmeyen, engin bilgi ve tecrübeleriyle bana yol gösteren, değerli yorumlarıyla beni yönlendiren ve daha fazla çalışmaya motive eden çok değerli hocalarım Muğla Üniversitesi Fizik Bölümü Öğretim Üyesi Sayın Yrd. Doç. Dr. Uğur ERKARSLAN'a ve İstanbul Üniversitesi Fizik Bölümü Öğretim Üyesi Sayın Doç. Dr. Afif SİDDİKİ'ye teşekkürü bir borç bilirim.

Yurtdışında araştırma olanağı sağlayan, akademik yönden çalışmalarına farklı bir bakış açısı kazandıran, Jyväskylä Üniversitesi Nanobilim Merkezi ve Fizik Bölümü Öğretim Üyesi Dr. Esa RÄSÄNEN'e;

Yaptığım çalışmaların bir kısmını beraber yürüttüğüm Akdeniz Üniversitesi Öğretim Üyesi Yrd. Doç. Dr. Melike YÜCEL'e, Araş. Gör. Aysevil SALMAN'a ve Erkan KÖYMEN'e;

Karşılaştığım teknik sorunların çözümünde yardımcı olan Dokuz Eylül Üniversitesi Öğretim Üyesi Yrd. Doç. Dr. Kadir AKGÜNGÖR'e ve Trakya Üniversitesi Öğretim Üyesi Dr. Engin ÇİÇEK ve Deniz EKŞİ'ye;

Yardımlarından dolayı Muğla Üniversitesi Öğretim Üyesi Yrd. Doç. Dr. Görkem OYLUMLUOĞLU ve Selman MİRİOĞLU'na;

Çalışmalarımda emeği geçen, bilgi ve tecrübelerinden faydalandığım ve üyesi bulunduğum tüm ELEKTRO-NANO ARAŞTIRMA GRUBU ÜYELERİ'ne;

Lisansa başladığım günden bugüne kadar geçen süre içerisinde her zaman destek olup yönlendiren çok değerli abim Anadolu Üniversitesi Fizik Bölümü Öğretim Üyesi Araş. Gör. M. Menderes ALYÖRÜK'e

ve çalışmalarım boyunca yardımları olan herkese teşekkür ederim.

Ayrıca; maddi ve manevi desteklerini hiçbir zaman esirgemeyen, her zaman yanımda olan hayatım boyunca emeklerini ödeyemeyeceğim çok kıymetli aileme şükranlarımı sunarım.

Bu çalışma, Yarı İletken Parçacık İnterferometrelerinin Öz-Uyumlu Hesaplama Yöntemleriyle İncelenmesi ve Aygıt Tasarımı adlı 109T083 no'lu TÜBİTAK projesiyle desteklenmiştir.

Hüseyin ATCI

Muğla, 2011

## İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa No</u>
ÖNSÖZ .....	II
İÇİNDEKİLER .....	III
ÖZET .....	V
ABSTRACT .....	VI
ŞEKİLLER DİZİNİ .....	VII
SEMBOLLER DİZİNİ .....	XI
KISALTMALAR DİZİNİ .....	XIV
1. GİRİŞ .....	1
2. KAYNAK ÖZETLERİ .....	3
2.1. Hall Olayı .....	3
2.1.1. Klasik Hall olayı .....	3
2.1.2. Kuantum Hall olayı .....	5
2.1.2.1. <i>Tam sayılı kuantum Hall olayı</i> .....	5
2.1.2.2. <i>Kesirli kuantum Hall olayı</i> .....	7
2.2. İki Boyutlu Elektron Sistemi .....	8
2.2.1. GaAs/AlGaAs heteroyapıda iki boyutlu elektron sistemi .....	8
2.2.2. Dik manyetik alan altında iki boyutlu elektron sistemi: Landau seviyeleri .....	10
2.2.3. Kenar durumu resmi .....	12
2.2.4. Perdeleme teorisi: Sıkıştırılabilir ve sıkıştırılamaz şartlar .....	14
2.3. Kesirli İstatistik .....	18
2.4. Kompozit Fermiyon Teorisi .....	23
2.5. Sanki-Parçacık İnterferometreleri .....	29
2.6. Spin Damlacıkları (Droplets) .....	33
3. MATERYAL ve YÖNTEM .....	36
3.1. Elektronik Yapı Hesaplama Yöntemleri .....	36
3.1.1. Çok parçacık sistemleri .....	36
3.1.2. Born-Oppenheimer yaklaşımı .....	38
3.1.3. Hartree yaklaşımı .....	39

3.1.4. Hartree-Fock yaklaşımı .....	39
3.1.5. Yoğunluk fonksiyonel teorisi .....	41
3.1.6. Thomas-Fermi teorisi .....	41
3.1.7. Hohenberg-Kohn teoremi .....	42
3.1.8. Kohn-Sham teoremi .....	43
3.1.9. Spin yoğunluk fonksiyonel teorisi .....	46
3.1.10. Değiş-tokuş korelasyon enerjisi için yaklaşımlar .....	47
3.1.10.1. <i>Yerel yoğunluk yaklaşımı</i> .....	47
3.1.10.2. <i>Yerel spin yoğunluk yaklaşımı</i> .....	49
4. ARAŞTIRMA BULGULARI .....	50
4.1. GaAs/AlGaAs heteroyapısının modellenmesi .....	50
4.2. Doldurma Faktörü $\nu = 1, 2$ ve $1/3$ için Sıkıştırılmaz Şeritlerin Yerlerinin ve Kalınlıklarının Belirlenmesi .....	55
4.3. Doldurma Faktörü $\nu = 5/2$ için Spin Damlacıklarının Gözlenmesi .....	64
5. SONUÇLAR ve TARTIŞMA .....	70
KAYNAKLAR .....	72
ÖZGEÇMİŞ .....	75

**KESİRLİ KUANTUM HALL OLAYININ PERDELEME TEORİSİ İLE  
SANKİ-PARÇACIK İNTERFEROMETRELERİNİN ANALİTİK VE  
NÜMERİK İNCELENMESİ**

**(Yüksek Lisans Tezi)**

**Hüseyin ATCI**

**MUĞLA ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**2011**

**ÖZET**

Bu çalışmada, GaAs/AlGaAs heteroyapısındaki metalik kapılara voltaj uygulayarak ya da kimyasal kesme yaparak iki boyutlu elektron sistemlerinde elektrostatik olarak özel bir geometri yaratıldı ve bu geometrinin elektron dağılımı ve potansiyel profili elde edildi. Güçlü manyetik alanın varlığında, doldurma faktörü  $\nu = 1,2$  ve  $1/3$  'de sıkıştırılmaz şeritlerin yerleri ve kalınlıkları araştırıldı. Yarı iletken kuantum noktalar doldurma faktörü  $2 < \nu < 3$  aralığında incelendi ve spin damlacık bölgesinin başlangıcı  $\nu = 5/2$  'de bulundu.

**Anahtar Kelimeler :** Sıkıştırılmaz şeritler, kuantum noktalar, spin damlacıkları

**Sayfa adedi** : 75

**Tez yöneticisi** : Yrd. Doç. Dr. Uğur Erkarslan

**ANALYTICAL AND NUMERICAL INVESTIGATIONS OF QUASI -  
PARTICLE INTERFEROMETERS WITHIN THE SCREENING THEORY  
OF FRACTIONAL QUANTUM HALL EFFECT**

**(M. Sc. Thesis)**

**Hüseyin ATCI**

**MUĞLA UNIVERSITY  
INSTITUTE of SCIENCE and TECHNOLOGY**

**2011**

**ABSTRACT**

In this work, a special geometry is defined electrostatically in two dimensional electron systems by chemically etching and applying a voltage to metal gates on the surfaces of GaAs/AlGaAs heterostructures, potential profiles and the electron distribution for this geometry is obtained. The widths and the positions of the incompressible strips are investigated at filling factors  $\nu = 1, 2$  and  $1/3$  in the presence of strong, perpendicular magnetic field. Two dimensional semiconductor quantum dots are studied in the filling factor range  $2 < \nu < 3$  and the onset of the spin droplet regime is found at  $\nu = 5/2$ .

**Key Words** : Incompressible strips, quantum dots, spin droplets

**Page number** : 75

**Adviser** : Assist. Prof. Dr. Uğur Erkarslan

## ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>Şekil No</u>	<u>Sayfa No</u>
Şekil 2.1. Hall olayının şematik gösterimi .....	3
Şekil 2.2. Manyetik alana karşı Hall direncinin değişimi .....	5
Şekil 2.3. Tam sayılı kuantum Hall olayının gösterimi .....	6
Şekil 2.4. Kesirli kuantum Hall olayının gösterimi .....	7
Şekil 2.5. GaAs/AlGaAs heteroyapısı ve enerji düzeyleri a) GaAs/AlGaAs heteroyapısının şematik gösterimi b) Donorsuz heteroyapının enerji düzeyleri c) Donorlu heteroyapının enerji düzeyleri .....	9
Şekil 2.6. Malzeme boyunca akım taşıyan kenarlardan saçılan elektron yörüngeleri .....	13
Şekil 2.7. Sonlu boyutta ideal iki boyutlu elektron sisteminin enerji spektrumu (Halperin, 1982) .....	13
Şekil 2.8. Kenar kanallarının şematik gösterimi .....	14
Şekil 2.9. CSG teorisinde kullanılan heteroyapının temsili görüntüsü (Chlovskii vd., 1992) .....	15
Şekil 2.10. Kendinden tutarlı elektrostatik resme karşılık kenar durumu resmi (a)-(c) Tek parçacık resmi a) Kenar yakınlarındaki iki boyutlu elektron sisteminin üstten görünüşü Oklar iki kenar kanalındaki elektron akış doğrultusunu temsil eder. b) Tuzaklama potansiyelinden dolayı kenar yakınlarında Landau seviyelerinin bükülmesi. Daireler Landau seviyelerinin yerel doldurulmalarını ifade eder. ○ boş; ● dolu c) Sınır uzaklığın bir fonksiyonu olarak elektron yoğunluğu (d)-(f) Kendinden tutarlı elektrostatik resim d) Kenar yakınında iki boyutlu elektron sistemin üstten görünümü. Gölgele şeritler tam sayı olmayan doldurma faktörü ile verilen bölgeleri (sıkıştırılabilir şeritler), gölgesiz şeritler ise tam sayılı doldurma faktörü bölgelerini (sıkıştırılmaz şeritler) temsil eder. Oklar elektronun akış doğrultusunu gösterir. e) Kenar yakınlarında Landau seviyelerinin ve elektrostatik potansiyelin bükülmesi. Landau seviyelerinin yerel doldurulmalarını ifade eder. ○ boş; ● dolu f) Tükenme bölgesinin ortasına uzaklığın bir fonksiyonu olarak elektron yoğunluğu (Chklovskii, 1992) .....	17
Şekil 2.11. İki parçacığın yer değiştirmesi a) A ve B parçacıkları, $\vec{r}$ görelî koordinatın sürekli olarak $\pi$ açısı kadar dönmesiyle yer değiştirir. b) Yer değiştirme iki kez yapmada net olay, bir parçacığı (B konumundaki) sürekli olarak başlangıç konumuna göndermek ve bir ilmek çizerek aynı konumuna getirmek için hareket ettirmektir. İlmek, A noktasını bir kez çevreler. c) İlmek, üç boyutlu uzayda A noktasını çaprazlamadan sürekli olarak bir	

- noktaya geri döndürülebilir; fakat iki boyutlu uzayda A noktasını çaprazlamadan bu yapılamaz (Jain, 2007) ..... 21
- Şekil 2.12. Anyon ve kompozit fermiyon tasviri a) Bir anyon, akı taşıyan bir bozon veya fermiyon olarak alınmaktadır. b) Alternatif olarak, bir anyona bir Chern-Simons (CS) akısı tutturulduğunda bir kompozit parçacık oluşturulur. c) Kompozit parçacık, Chern-Simons akısı manyetik alan tarafından ortadan kaldırıldığı zaman fiziksel bir gerçeklik kazanır (Jain, 2007) ..... 22
- Şekil 2.13. Kompozit fermiyon oluşumunun tasviri. Elektron (nokta) çift sayıda vorteks (iki ok) yakalayarak kompozit fermiyona dönüşür. Kompozit fermiyon oklarla tutturulmuş nokta olarak tasvir edilmiştir (Jain, 2007) ..... 23
- Şekil 2.14. Kompozit fermiyon tarafından hissedilen indirgenmiş manyetik alan ifadesinin şematik gösterimi. a)  $\phi_0$  şiddetinde yirmi tane akı kuantasına (oklar) karşılık gelen manyetik alanda yedi tane etkileşen elektron (noktalar) içeren birim alanı göstermektedir. b) Altı tane akı kuantasına karşılık gelen etkin manyetik alanda yedi tane oldukça zayıf etkileşen kompozit fermiyon sistemi oluşturularak elektronların her birinin iki tane akı kuantası yakaladığı kompozit fermiyonlara dönüştürülmüştür (Jain, 2007) ..... 25
- Şekil 2.15. a) iki, b) dört ve c) altı vorteks taşıyan kompozit fermiyonun üç türünün şematik gösterimi. Bunlar sırasıyla  ${}^2CF$ ,  ${}^4CF$  ve  ${}^6CF$  olarak ifade edilir. Her bir ok vorteksleri belirtir. Vorteksler, akı kuantası olarak ifade edilebilir (Jain, 2007) ..... 26
- Şekil 2.16.  $\nu^* = n$  'de elektron taban durumunun şematik gösterimi (sol sütun). Kompozit fermiyonların n tane dolu Lamda seviyesi için  $\nu = n/(2n + 1)$  'de kompozit fermiyon taban durumunun şematik gösterimi (sağ sütun). Kompozit fermiyonların Lamda seviyeleri  $\nu^*$  'de elektronların Landau seviyelerine benzetilebilir. Sol sütunlardaki yatay çizgiler elektronların Landau seviyelerini, sağ taraftakiler ise kompozit fermiyonların Lamda seviyelerini belirtir (Jain, 2007) ..... 27
- Şekil 2.17. Doldurma faktörü  $\nu = 1/3$  'den  $\nu = 2/5$  durumuna değişiminin şematik gösterimi (Doldurma faktörü manyetik alanın değişimiyle değişir.) a)  $1/3$  durumu, yani kompozit fermiyonların bir tane dolu Lamda seviyesi b) Kompozit fermiyon sanki-parçacığı, yani boş Lamda seviyesindeki bir kompozit fermiyon c) Ara durum d) İki tane dolu Lamda seviyesine eşit olan  $2/5$  taban durumu (Jain, 2007) ..... 28
- Şekil 2.18. Aharonov-Bohm olayının şematik gösterimi ..... 29
- Şekil 2.19. Aharonov-Bohm interferometresinin şematik gösterimi (Siddiki vd., 2010) ..... 32

Şekil 2.20. Mach-Zehnder interferometresinin şematik gösterimi (Heiblum vd., 2003) .....	33
Şekil 2.21. Farklı doldurma faktörlerinde elektronların Landau seviyelerine yerleşimleri (Räsänen, 2010) .....	34
Şekil 3.1. Moleküler koordinat sistemi .....	37
Şekil 3.2. Kohn-Sham şeması .....	43
Şekil 3.3. Kohn-Sham sisteminin kendinden tutarlı çözümü .....	45
Şekil 3.4. Homojen olmayan sistemin homojen elektron gazı sistemiyle analogisi (Räsänen, 2010) .....	48
Şekil 4.1. Kesme tanımlı heteroyapının şematik gösterimi a) Yapının yüzeyinde herhangi bir kapı ve ya bir kesme işlemi olmaksızın gösterimi. Gösterimde tek donör katmanı kullanılmış ve AlGaAs/GaAs arayüzeyde elektron gazı gösterilmiştir. b) Kimyasal kesme işlemi. Kalması istenilen bölgeler maskelenerek korunmuş, diğer bölgeler ise kimyasal kesme işlemi sonucu yapıdan uzaklaştırılmıştır. b)' de ise kesme işleminin elektron gazına kadar yapıldığı görülmektedir (Siddiki, 2009) .....	50
Şekil 4.2. Yüzeyde kapı tanımlı heteroyapının şematik gösterimi. a) Yapının yüzeyinde herhangi bir kapı ve ya bir kesme işlemi olmaksızın gösterimi. Gösterimde tek donör katmanı kullanılmış ve AlGaAs/GaAs arayüzeyde elektron gazı gösterilmiştir. b) Yüzeye konulan metalik kontakların gösterimi (Siddiki, 2009) .....	51
Şekil 4.3. Kesme ve kapı koyma durumunda potansiyelin değişimi a) Yüzeyden itibaren uygulanan kesme işleminden dolayı oluşan yan yüzey yüklerinin ve bu yan yüzey yüklerinin iki boyutlu elektron sisteminde oluşturduğu potansiyelin gösterimi. b) Yüzeye yerleştirilmiş kapının oluşturduğu potansiyelin gösterimi (Siddiki, 2009) .....	52
Şekil 4.4. İki boyutlu elektron sistemini elde etmek için kullanılan katman profili (Goldman vd., 2005; Goldman vd., 2007) .....	53
Şekil 4.5. Yüzey görüntüsü (Bu tez kapsamında yapılan çalışmalarda kullanılan örneğin yüzey görüntüsü) (siyah renkli kısımlar) ...	54
Şekil 4.6. Yüzeyden aşağıya doğru kesme uygulanması sonucu elde edilen elektron yoğunluklarının uzaysal dağılımı. a) 20 nm (bir katman), b) 80 nm (dört katman) .....	54
Şekil 4.7. Yüzeydeki kapılara negatif gerilim uygulanması sonucu elde edilen elektron yoğunluklarının uzaysal dağılımı a) $V_g = -1.2$ V, b) $V_g = -1.6$ V .....	55
Şekil 4.8. Manyetik alan 3 Tesla'da sabit tutulup yüzeyden aşağıya doğru farklı katmanlar keserek elde edilen sıkıştırılmaz şeritlerin	

yerleri ve kalınlıkları. a) 1 katman (20 nm), b) 2 katman (40 nm), c) 3 katman (60 nm), d) 6 katman (120 nm) .....	57
Şekil 4.9. Yüzeiden aşağıya doğru 5 katman (100 nm) keserek ve farklı manyetik alanlar uygulayarak elde edilen sıkıştırılmaz şeritlerin yerleri ve kalınlıkları a) 2.5 T, b) 2.7 T, c) 3T, d) 3.2 T .....	58
Şekil 4.10. Manyetik alanı 3 Tesla'da sabit tutup kapılara sırasıyla a) -1.2 V b) -1.6 V c) -1.8 V d) -2.0 V potansiyel uygulayarak elde edilen sıkıştırılmaz şeritlerin yerleri ve kalınlıkları .....	59
Şekil 4.11. Kapılara sabit -1.6 V potansiyel uygulayıp sırasıyla a) 2.8T, b) 3T, c) 3.2T, d) 3.3T manyetik alan altında sıkıştırılmaz şeritlerin yerleri ve kalınlıkları .....	60
Şekil 4.12. Manyetik alanı 18 Tesla'da sabit tutup yüzeiden aşağıya doğru a) 1 katman (20 nm), b) 2 katman (40 nm), c) 3 katman (60 nm), d) 6 katman (120 nm) keserek elde edilen sıkıştırılmaz şeritlerin yerleri ve kalınlıkları .....	61
Şekil 4.13. Yüzeiden aşağıya doğru 5 katman (100 nm) keserek ve sırasıyla a) 9T, b) 12T, c) 15T, d) 18T manyetik alan altında sıkıştırılmaz şeritlerin yerleri ve kalınlıkları .....	62
Şekil 4.14. Manyetik alanı 18 Tesla'da sabit tutup kapılara sırasıyla a) -1.2 V, b) -1.6 V, c) -1.8 V, d) -2.0 V potansiyel uygulayarak elde edilen sıkıştırılmaz şeritlerin yerleri ve kalınlıkları .....	63
Şekil 4.15. Kapılara sabit -1.6 V potansiyel uygulayıp sırasıyla a) 18T, b) 19.5T, c) 21T, d) 24T manyetik alan altında sıkıştırılmaz şeritlerin yerleri ve kalınlıkları .....	64
Şekil 4.16. Dış potansiyel .....	65
Şekil 4.17. Spin droplet bölgesinde yoğunluk fonksiyonel teorisi ile hesaplanan N=48 elektronlu kuantum noktanın spin durumlarının toplam enerjisi .....	67
Şekil 4.18. Spin droplet bölgesinde yoğunluk fonksiyonel teorisi ile hesaplanan N=47 elektronlu kuantum noktanın spin durumlarının toplam enerjisi .....	67
Şekil 4.19. N=48 elektron için DFT ile hesaplanan kimyasal potansiyel .	68
Şekil 4.20. Yoğunluk fonksiyonel teorisi ile hesaplanan 48 elektronlu kuantum noktanın doldurma faktörü $\nu = 2$ 'de spin yoğunlukları .....	69
Şekil 4.21. Yoğunluk fonksiyonel teorisi ile hesaplanan 48 elektronlu kuantum noktanın doldurma faktörü $\nu = 5/2$ 'de spin yoğunlukları .....	69

**SEMBOLLER DİZİNİ**

$I$	Akım
$\vec{B}$	Manyetik alan
$\vec{F}_B$	Manyetik kuvvet
$\vec{F}_e$	Elektriksel kuvvet
$\vec{v}_s$	Sürüklenme hızı
$e$	Elektron yükü
$W$	İletkenin genişliği
$N$	Birim hacim başına elektron yoğunluğu
$A$	İletkenin kesit alanı
$d$	Malzemenin kalınlığı
$R_{xx}$	Boylamsal direnç
$V_{xx}$	Boylamsal doğrultuda oluşan gerilim düşmesi
$R_{xy}$	Hall direnci
$V_{xy}$	Hall gerilimi
$h$	Planck sabiti
$\nu$	Doldurma faktörü
$R_{K-90}$	von Klitzing sabiti
$z$	Kompleks koordinat
$l_B$	Manyetik uzunluk
$E_C$	İletkenlik bandı
$E_V$	Valans bandı
$E_F$	Fermi enerjisi
$m^*$	Etkin elektron kütlesi
$\vec{A}$	Vektör potansiyel
$\hat{p}$	Kanonik momentum
$n_r$	Kuantumlu Landau seviyeleri
$j$	Açısal momentum kuantum sayısı
$\omega_c$	Siklotron frekansı
$\hbar$	İndirgenmiş Planck sabiti

$n$	Kuantum sayısı
$L$	Sistemin uzunluğu
$n_L$	Birim alan başına durumların sayısı
$N_L$	Toplam durumların sayısı
$\phi$	Toplam manyetik akı
$\phi_0$	Manyetik akı kuantası
$\mu_B$	Bohr manyetonu
$g^*$	Lande g-faktörü
$n$	Elektron yoğunluğu
$\epsilon$	Dielektrik sabiti
$2l$	Tükenme şeridinin uzunluğu
$n_0$	Külçe bölgesindeki elektron yoğunluğu
$x_n$	Sıkıştırılmaz şeridin konumu
$a_k$	k. sıkıştırılmaz şeridin genişliği
$\psi$	Dalga fonksiyonu
$e^{2i\alpha\pi}$	Faz faktörü
$\alpha\pi$	Yer değiştirme fazı
$\alpha$	İstatistiksel parametre
$\hat{P}_{ij}$	Parite operatörü
$\hat{s}$	Spin operatörü
$B^*$	İndirgenmiş etkin manyetik alan
$P_{LLL}$	En düşük Landau seviyesine izdüşüm operatörü
$\Delta\phi$	Faz kayması
$\hat{H}$	Hamiltoniyen operatörü
$E$	Sistemin toplam enerjisi
$\hat{T}_e$	Elektronun kinetik enerji operatörü
$\hat{T}_N$	Çekirdeğin kinetik enerji operatörü
$\hat{V}_{eN}$	Elektron-çekirdek etkileşme potansiyeli operatörü
$\hat{V}_{ee}$	Elektron-elektron etkileşme potansiyeli operatörü

$\hat{V}_{NN}$	Çekirdek-çekirdek etkileşme potansiyeli operatörü
$Z$	Atom numarası
$M_A$	Elektronun kütesinin $A$ çekirdeğin kütesine oranı
$\vec{r}_{iA}$	$i$ . elektron ile $A$ . çekirdek arasındaki uzaklık
$\vec{r}_{ij}$	$i$ . elektron ile $j$ . elektron arasındaki uzaklık
$\vec{R}_{AB}$	$A$ . çekirdek ile $B$ . çekirdek arasındaki uzaklık
$\phi(\vec{r}; \vec{R})$	Elektronik dalga fonksiyonu
$\chi(\vec{R})$	Çekirdek dalga fonksiyonu
$\hat{f}$	Fock operatörü
$\xi$	Spin polarizasyon yoğunluğu
$\mu$	Kimyasal potansiyel

**KISALTMALAR DİZİNİ**

<i>IQHE</i>	Integer Quantum Hall Effect (Tam sayılı Kuantum Hall Olayı)
<i>FQHE</i>	Fractional Quantum Hall Effect (Kesirli Kuantum Hall Olayı)
<i>2BES</i>	İki Boyutlu Elektron Sistemi
<i>GaAs</i>	Galyum Arsenid
<i>AlGaAs</i>	Alüminyum Galyum Arsenid
<i>CSG</i>	Chklovskii-Shklovskii-Glazman
<i>ISs</i>	Incompressible Strips (Sıkıştırılmaz Şeritler)
<i>CSs</i>	Compressible Strips (Sıkıştırılabilir Şeritler)
<i>CS</i>	Chern-Simons
<i>CF</i>	Kompozit Fermiyon
<i>SCF</i>	Self Consistent Field (Kendinden Tutarlı Alan)
<i>DFT</i>	Density Functional Theory (Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi)
<i>TFA</i>	Thomas Fermi Approximation (Thomas Fermi Yaklaşımı)
<i>SDFT</i>	Spin Density Functional Theory (Spin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi)
<i>LDA</i>	Local Density Approximation (Yerel Yoğunluk Yaklaşımı)
<i>LSDA</i>	Local Spin Density Approximation (Yerel Spin Yoğunluk Yaklaşımı)
<i>EST3D</i>	ElectroStatic in 3 Dimensions

## 1. GİRİŞ

Yarı iletken fiziğinin uygulamaya geçmesi ile büyük bir devrim yapan bilgi işleme teknolojisi, son yıllarda yapılan yarı iletken aygıtların boyutlarının nanometreler ölçeğine gelmesi ile gelişmesinin limitlerine ulaşmak üzeredir. Bu nano ölçekli elektronik aygıtlarda, elektronların kuantum mekaniksel doğasının anlaşılması, katıhal fiziği araştırmacıları için önemli bir çalışma alanı oluşturmaktadır. Özellikle GaAs/AlGaAs gibi III-V grubu yarı iletkenlerin ara yüzeyinde oluşan iki boyutlu elektron sisteminde kimyasal kesme (chemical etching), metalik kapı (metallic gate) veya benzeri yöntemlerle oluşturulan sanki bir boyutlu (kuantum kuyular) ve sanki sıfır boyutlu (kuantum noktalar) yapıların modellenmesi ve yük taşınımının incelenmesi (Siddiki, 2010) birçok kuramsal fizikçinin ilgisini çekmektedir. Bu ve benzeri iki boyutlu elektron sistemlerinde yapılan deneylerin çeşitliliği, aygıt/deneye özel modellemelerin temel ilkelerden yola çıkılarak yapılmasını zorunlu kılmaktadır.

Bu tür iki boyutlu elektron sistemlerinde, düşük sıcaklıkta yüksek manyetik alan uygulanması ile birçok fiziksel olay incelenebilmektedir. Yüksek manyetik alanda düşük sıcaklıklarda elektronlar Landau yörüngelerine yerleşmektedir. Bu şartlar altında yapılan bir deney sonucunda manyetik alana karşı Hall direncinin değişimi incelendiğinde belli manyetik alan ve doldurma faktörü değerlerinde basamaklar oluştuğu ve oluşan bu basamakların kuantumlu olduğu gözlemlenmiş ve bu olgu kuantum Hall olayı olarak ifade edilmiştir (Klitzing vd., 1980). Landau seviyelerinin tamamen dolu ya da kısmen dolu olmasına göre tam sayılı kuantum Hall olayı (Klitzing vd., 1980) ve kesirli kuantum Hall olayı (Tsui vd., 1982) olarak sınıflandırılmıştır. Her iki durumun oluşum şartları ve elde edilen sonuçları birbirine oldukça benzer olmasına rağmen her iki durumun altında yatan fizik farklıdır. Tam sayılı kuantum Hall olayında, elektronlar etkileşmeyen parçacıklar olarak; kesirli kuantum Hall olayında ise etkileşen parçacıklar olarak ele alınır. Bazı kesirli doldurma faktörü durumlarını açıklamak için, manyetik alan içerisinde birbiriyle oldukça güçlü etkileşen elektronların çift sayıda vorteks yakalayarak oluşturduğu kompozit fermiyonlar (Jain, 1989) kullanılır. Bazı kesirli durumlarda ise elektronlar Pfaffian dalga fonksiyonu (Moore ve Read, 1991) ile tanımlanarak açıklanır.

İki boyutlu elektron gazının manyetik alana konulmasıyla birlikte, elektron sisteminde akımın aktığı sıkıştırılmaz şeritler oluşmaktadır. Bu şeritler Fermi seviyesinin altındaki Landau seviyesinin tamsayı olduğu durumlarda gerçekleşmektedir. Ayrıca en düşük Landau seviyesi kısmen dolu olduğunda ise güçlü etkileşmelerden dolayı bir enerji aralığı oluşmakta ve bunun sonucunda ortaya çıkan kesirli doldurma faktörlerinde de sıkıştırılmaz şeritler elde edilmektedir (Chklovskii vd., 1992). Belli manyetik alan değerlerinde bu şeritler örneğin kenarlarında yer almakta ve interferometre uygulamalarının temelini oluşturmaktadır.

Bu çalışmanın ilk kısmında, elektron ve sanki-parçacık interferometrelerindeki elektrostatik potansiyeli ve elektron dağılımını elde etmek için iki boyutlu elektron sistemlerinde tanımlanmış olan kuantum noktalarda kendinden tutarlı Thomas-Fermi-Poisson yaklaşımı kullanılarak (Siddiki ve Gerhardts, 2003; Siddiki ve Gerhardts, 2004) analitik ve nümerik yöntemlerle sıkıştırılmaz şeritlerin yani kenar durumlarının genişlikleri (Chklovskii vd., 1992) güçlü dik manyetik alanın varlığında doldurma faktörü  $\nu = 1, 2$  ve  $1/3$ 'de incelenecektir. Sıkıştırılmaz şeritlerin uzaysal dağılımını bulmak için farklı Lande  $g^*$  faktörleri ele alınıp, fenomenolojik bir modele dayalı olarak kesirli kuantum Hall etkisinin mikroskobik bir resmi ortaya konulacaktır. Girişim şartları, uygulanan manyetik alanın yanı sıra hapsolme potansiyelinin dikliğinin ve kapı voltajının bir fonksiyonu olarak incelenecektir.

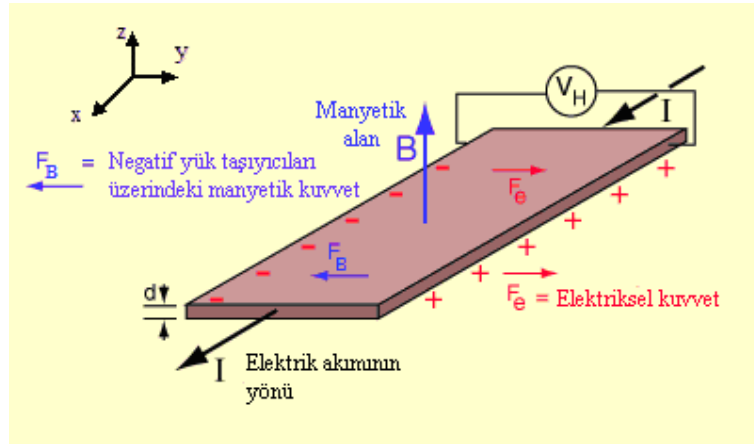
İkinci kısmında ise, son zamanlarda hem teorik hem deneysel çalışmalarda oldukça ilgi çeken doldurma faktörü  $\nu = 5/2$  durumunda spin damlacıklarının oluşumu nümerik çok elektron metotları kullanılarak incelenecektir (Räsänen vd., 2008). İki boyutlu elektron gazında doldurma faktörü  $\nu = 5/2$  durumu, genellikle Pfaffian dalga fonksiyonu ile çiftlenmiş elektronların bir taban durumuna yoğunlaşması olarak yorumlanmıştır (Moore ve Read, 1992). Bu durumu açıklamak için alternatif model olarak, kompozit fermiyon teorisi kullanılmaktadır (Jain, 2007). Doldurma faktörü  $\nu = 5/2$  durumunun uyarılmalarını açıklayabilen non-Abelian örgü istatistiği, yüksek hata toleranslı topolojik kuantum hesaplamalar için olası bir adaydır (Das Sarma vd., 2008). Bununla birlikte, deneylerde  $\nu = 5/2$  durumunun oldukça kırılğan olduğu gözlenmiştir. Yani bu durum safsızlıkların varlığında ve dar kuantum nokta kontaklarda yok olmaktadır (Miller vd., 2007).

## 2. KAYNAK ÖZETLERİ

### 2.1. Hall Olayı

#### 2.1.1. Klasik Hall olayı

İçerisinden  $I$  akımı geçen ince iletken bir şerit, iletken düzlemine dik, düzgün manyetik alan içerisine yerleştirildiğinde hem akıma hem de manyetik alana dik doğrultuda bir gerilim farkının oluştuğu gözlenmiştir. 1879 yılında Edwin Hall tarafından gözlemlenen bu olaya Hall olayı adı verilmiştir (Hall, 1879). Hall olayı, metallerin ve yarıiletkenlerin elektronik özelliklerini anlamaya, yük taşıyıcılarının işaretlerini ve yoğunluğunu belirlemeye olanak sağlamaktadır. Bu yolla katihal elektroniğinde, yeni geliştirilmiş elektronik malzemelerin yük taşıyıcılarının işaretleri belirlenebilmektedir. Hall olayı, bir iletkendeki yük taşıyıcılarının ortalama hızlarını hesaplamak için de kullanılabilir.



Şekil 2.1. Hall olayının şematik gösterimi

Hall olayını gözlediği düzenek Şekil 2.1'de gösterilmiştir. Bu olay,  $\vec{B}$  manyetik alan içerisinde  $\vec{v}_s$  sürüklenme hızıyla hareket eden yüklü parçacıklar için  $\vec{F}_B = q\vec{v}_s \times \vec{B}$  olarak ifade edilen Lorentz kuvveti yardımıyla açıklanabilir. Taşıyıcı yükler elektronlar ise; manyetik alanın yokluğunda  $x$  doğrultusu boyunca yol almakta iken yüklerin hareket doğrultusuna dik bir manyetik alan uygulandığında, Lorentz kuvvetinin etkisiyle izledikleri yollar sapma gösterecek ve iletkenin bir kenarına birikecektir. Diğer kenarda da aynı sayıda pozitif yükler bırakmış olacaktır.

Böyle bir yük dağılımı, iletken içinde Hall elektrik alanı denilen enine bir elektrik alan oluşturur ve bu alan manyetik kuvvete zıt bir elektrostatik kuvvet meydana getirir.

$$F_e = \frac{eV_H}{W} \quad (2.1)$$

Burada,  $e$  elektron yükü,  $W$  iletkenin genişliği ve  $V_H$  ise iki kenar arasında oluşan gerilim farkını yani Hall gerilimini ifade eder.

Yüklerin kenarlarda birikmesi elektrostatik denge koşulu sağlanıncaya kadar devam eder. Bu denge koşuluna ulaşıldığında, elektronlar sapma göstermez. Artık, elektrostatik kuvvet ile manyetik kuvvet birbirine eşittir.

$$\frac{eV_H}{W} = ev_s B \quad (2.2)$$

Malzeme boyunca akan akım,

$$I = Nev_s A \quad (2.3)$$

olarak tanımlanır. Burada,  $N$  birim hacim başına elektron yoğunluğu,  $A$  ise iletkenin kesit alanıdır.  $d$  malzemenin kalınlığı olmak üzere  $A = Wd$  olarak ifade edilir. Hız için (2.3) denkleminin yeniden düzenlenmesiyle ve (2.2) denklemi içerisinde yerine konulmasıyla Hall gerilimi, akım ve manyetik alan arasında bir ilişki elde edilecektir.

$$V_H = \frac{IB}{Ned} \quad (2.4)$$

Boylamsal doğrultuda taşınım (yani uygulanan akım doğrultusunda) manyetik alandan etkilenmez ve böylece boylamsal direnç,  $R_{xx}$ , Ohm yasası bağıntısına göre,

$$R_{xx} = \frac{V_{xx}}{I} \quad (2.5)$$

olarak verilir.  $V_{xx}$ , boylamsal doğrultuda örnek boyunca oluşan gerilim düşmesidir.

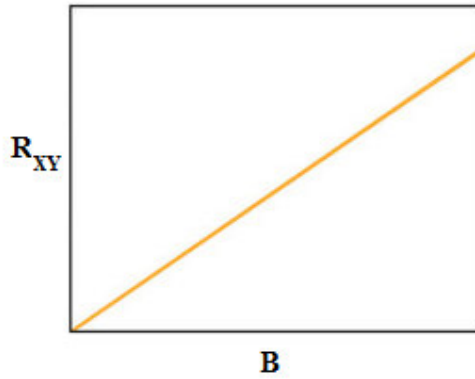
Sistem dengeye ulaştığında akımın akmadığı enlemsel doğrultuda Hall direnci,  $R_H$ , denilen benzer bir direnç bağıntısı tanımlanır:

$$R_H = \frac{V_H}{I} \quad (2.6)$$

ve (2.6) bağıntısına göre yeniden düzenlendiğinde

$$R_H = \frac{B}{Ned} \quad (2.7)$$

elde edilir. Şekil (2.2) manyetik alanla Hall direncinin değişimini göstermektedir. Genellikle Hall direnci ve Hall gerilimi sırasıyla  $R_{XY}$  ve  $V_{XY}$  olarak ifade edilir.



Şekil 2.2. Manyetik alana karşı Hall direncinin değişimi (Hall, 1879)

Yük taşıyıcıları pozitif ise, pozitif yüklerin sol kenarda birikmesine ve diğer kenarda ise negatif yük fazlalığına neden olur. Bu nedenle bu malzemede oluşan Hall geriliminin işareti, elektronların sapsmasından kaynaklanan gerilimin işaretinin tam tersidir. Buna dayanarak yük taşıyıcılarının işareti belirlenir.

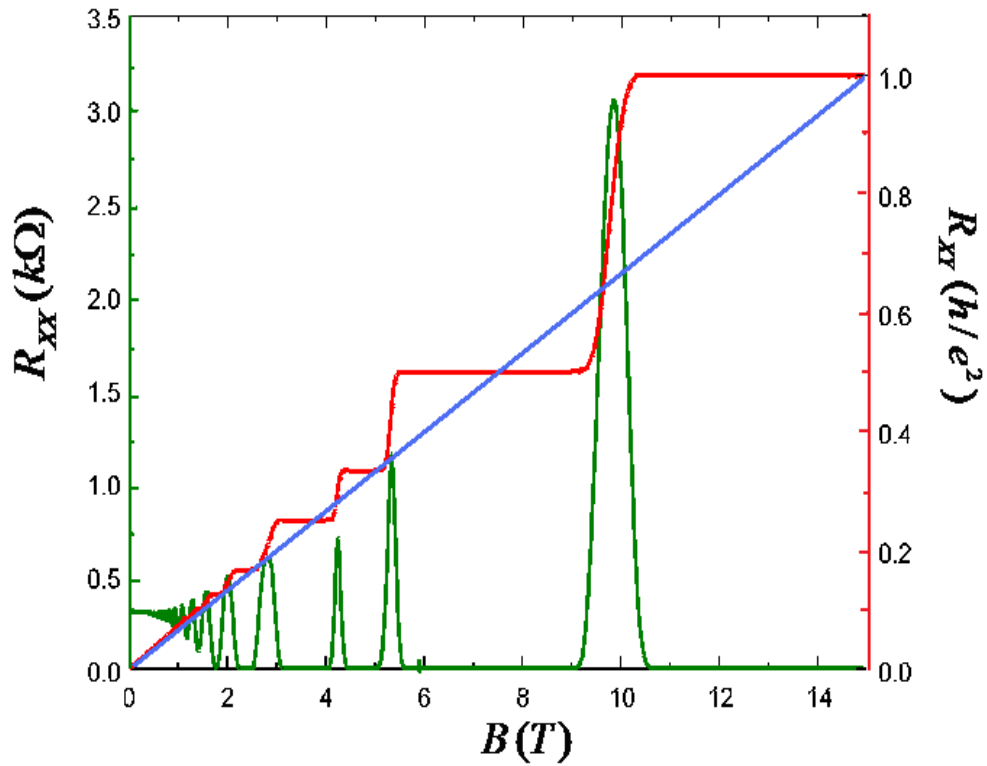
## 2.1.2. Kuantum Hall olayı

### 2.1.2.1. Tam sayılı kuantum Hall olayı

Klasik Hall olayının bulunuşundan yaklaşık yüz yıl sonra 1980 yılında düşük sıcaklık ve yüksek manyetik alan altında Si-MOSFET'deki iki boyutlu elektron sisteminin elektriksel taşınım özelliklerinin ölçümleri gerçekleştirilmiştir. Bu şartlarda yapılan deneyden elde edilen sonuca göre; manyetik alana karşılık Hall direnci klasik Hall olayında olduğu gibi lineer bir davranış göstermemiş, belli manyetik alan değerlerinde basamakların oluştuğu gözlenmiştir. Bu basamakların

$$R_{xy} = \frac{h}{\nu e^2} \quad (2.8)$$

şeklinde kuantize olduğu tespit edilmiştir. Burada,  $h$  Planck sabiti,  $e$  elektron yükü,  $\nu$  pozitif bir tamsayı olmak üzere dolu olan enerji seviyelerinin sayısını belirtir. Hall basamaklarının olduğu geniş manyetik alan değerlerinde boylamsal direnç ise sıfıra gitmiştir (Şekil 2.3). Klaus von Klitzing tarafından gözlemlenen bu olaya tam sayılı kuantum Hall olayı (Integer Quantum Hall Effect, IQHE) adı verilmiş ve bu çalışmasından dolayı 1985 yılında Nobel Fizik Ödülü ile onurlandırılmıştır.



Şekil 2.3. Tam sayılı kuantum Hall olayının gösterimi (Klitzing vd., 1980)

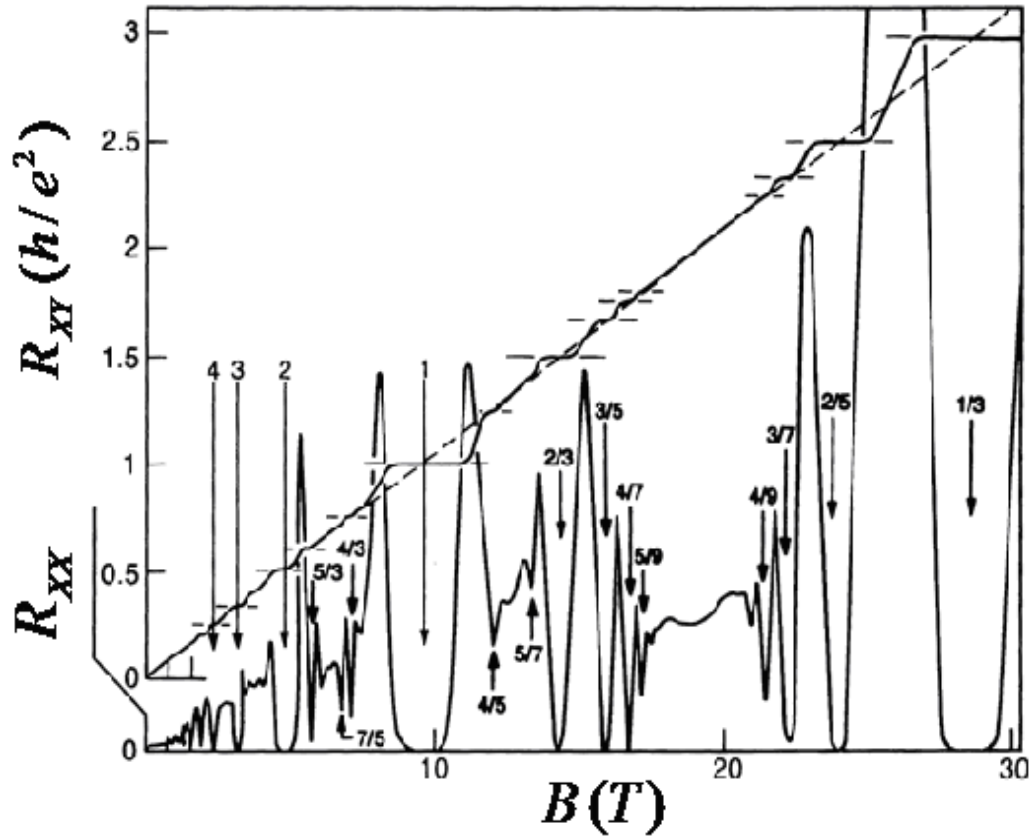
$\nu = 1$  için kuantize direnç değeri,

$$R_{K-90} = \frac{h}{e^2} = 25812,807 \Omega \quad (2.9)$$

şeklinde ve bu değer von Klitzing sabiti olarak ifade edilmekte ve 1990 yılından itibaren temel direnç birimi olarak kullanılmaktadır (Klitzing vd., 1980; Klitzing, 1986).

### 2.1.2.2. Kesirli kuantum Hall olayı

İki boyutlu elektron sistemi, 1982 yılında D. Tsui ve H. Störmer tarafından tam sayılı kuantum Hall olayına göre daha yüksek manyetik alanlarda, daha düşük sıcaklıklarda ve oldukça yüksek mobiliteli örneklerde incelenmiş, Hall direncinin Denklem 2.8'deki gibi kuantize olup tam sayılı kuantum Hall olayında görülen benzer, ancak bazı kesirli sayılarda Hall basamaklarının oluştuğu ve boylamsal direncin sıfıra gittiği gözlemlenmiştir (Şekil 2.4) (Tsui vd., 1982). Tsui, Stormer ve Laughlin'e 1998 yılında Nobel Fizik Ödülünü kazandıran bu olgu, doldurma faktörü  $\nu$  kesirli bir sayı olduğundan kesirli kuantum Hall olayı (Fractional Quantum Hall Effect, FQHE) olarak adlandırılır. Birçok kesirli kuantum Hall durumu için,  $\nu = n/m$  ifadesinde  $n$  ve  $m$  tamsayı olmak üzere  $m$  değeri genellikle tek sayıdır. ( $\nu = 1/3, 2/5, 3/7, \dots$  durumları) Ancak paydası çift olan kesirli kuantum Hall durumları da mevcuttur ( $\nu = 5/2, 7/2, \dots$  durumları) (Willett vd., 1987).



Şekil 2.4. Kesirli kuantum Hall olayının gösterimi (Tsui vd., 1982)

Tam sayılı kuantum Hall olayı ile kesirli kuantum Hall olayı birbirine oldukça benzer görünmesine rağmen, her iki durumun altında yatan fizik oldukça farklıdır. Tam sayılı kuantum Hall olayı, etkileşmeyen tek-parçacık resmiyle kısmen açıklanırken, elektron-elektron etkileşmeleri kesirli kuantum Hall olayının anlaşılmasında önemli rol oynar.

Bazı kesirli kuantum Hall durumlarının varlığını ( $\nu = 1/m$  durumu için  $m = 3, 5, 7, \dots$  olmak üzere) açıklamak için 1983 yılında R. Laughlin elektron-elektron etkileşmelerini içeren taban durumu çok parçacık dalga fonksiyonunu

$$\Psi_{1/m} = \prod_{i < j} (z_i - z_j)^m \exp\left(-\frac{1}{4l_B^2} \sum_k |z_k|^2\right) \quad (2.10)$$

olarak ifade etmiştir. Burada;  $z_i = x_i + iy_i$  olmak üzere iki boyutlu düzlemdeki elektronların kompleks koordinatını,  $l_B$  ise manyetik uzunluğu ( $l_B = \sqrt{\hbar c / eB}$ ) belirtir. Üst kuvvet katsayısı  $m$ , herhangi iki elektronun konumunun yer değiştirmesi sonucunda antisimetrik olmasını sağlaması için tek tamsayı olmalıdır. Doldurma faktörü  $\nu = 1/m$  durumunda, parçacıklar  $e/m$  büyüklüğünde kesirli bir yüke sahiptir (Laughlin, 1983).

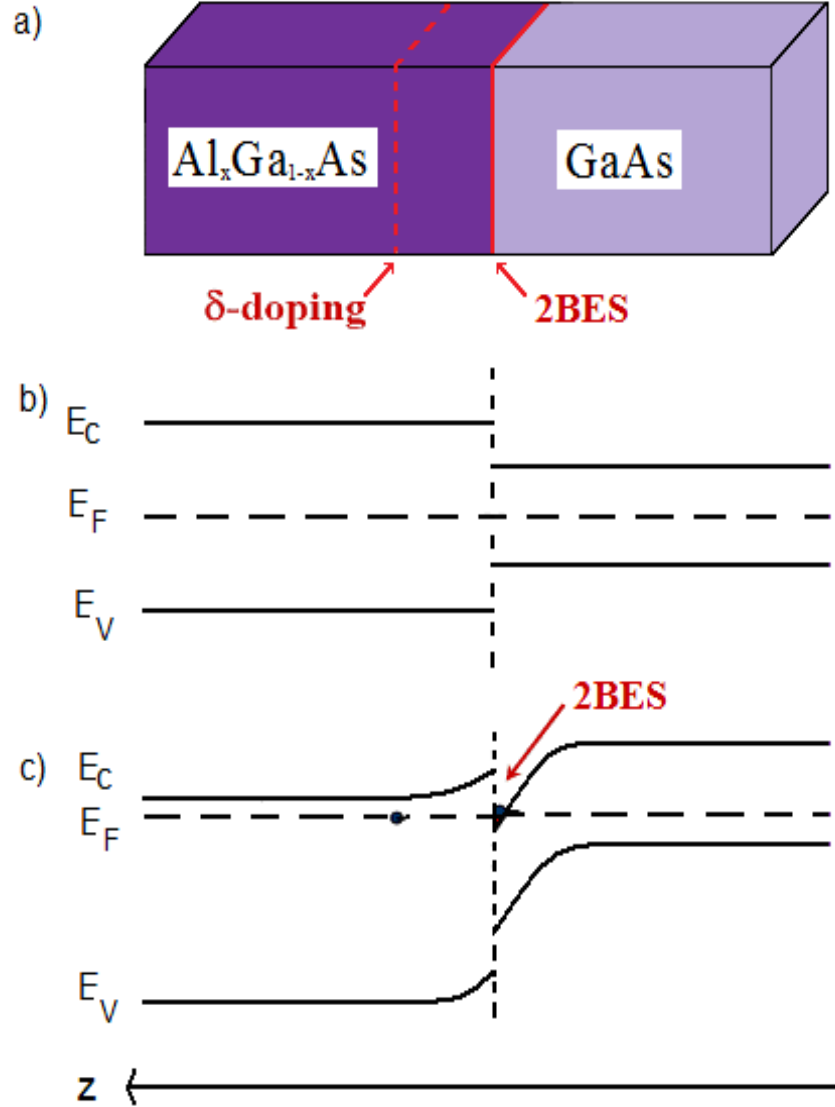
## 2.2. İki Boyutlu Elektron Sistemi

### 2.2.1. GaAs/AlGaAs heteroyapıda iki boyutlu elektron sistemi

Farklı enerji bant yapılarına sahip iki yarıiletkenin bir araya getirilip üst üste büyütülmesi ile oluşan yapıya heteroyapı adı verilir. Heteroyapılar çoğunlukla epitaksi kristal büyütme teknikleri ile üretilirler. Tipik bir aygıt GaAs/AlGaAs heteroyapısıdır.

GaAs ve  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  katmanlarından oluşan bir heteroyapının arakesitinin şematik gösterimi Şekil 2.5.a'da verilmiştir.  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  katmanı iletkenlik bandına elektron sağlayan ince bir silisyum tabaka ile katkılanmıştır. Şekil 2.5.b katkılamanın olmadığı durumda heteroyapının enerji seviyelerini göstermektedir. Burada,  $E_C$  iletkenlik bandını,  $E_V$  valans bandını ve  $E_F$  ise Fermi enerjisini ifade eder. Katkılama sonucu oluşan enerji seviyeleri ise Şekil 2.5.c'de görülmektedir. İki farklı

yarıiletkenin düzlemsel ara yüzeyinde oluşan potansiyel kuyusu elektronları oldukça ince bir tabakaya hapseder. Sıcaklık oldukça düşük olduğunda elektronların arayüze paralel düzlemdeki hareketi kısıtlanır ve böylece sistem sanki iki boyutlu olur. Böylece AlGaAs ve GaAs heteroyapısının ara yüzeyinde iki boyutlu elektron sistemi (2BES) oluşturulmuştur. Buradaki elektronlar  $xy$  düzleminde serbestçe hareket edebilir.



Şekil 2.5. GaAs/AlGaAs heteroyapısı ve enerji düzeyleri a) GaAs/AlGaAs heteroyapısının şematik gösterimi b) Donorsuz heteroyapının enerji düzeyleri c) Donorlu heteroyapının enerji düzeyleri

Kuantum kuyunun enerji seviyeleri arayüze paralel düzlemdeki hareketine göre kuantizedir. Dolayısıyla toplam enerji şu şekildedir:

$$\mathcal{E}(i, k_x, k_y) = \mathcal{E}_i + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} \quad i = 0, 1, 2, \dots \quad (2.11)$$

Burada;  $\mathcal{E}_i$  arayüze paralel doğrultudaki kuantize özenerjileri belirtir.  $k_x$  ve  $k_y$ ,  $x$  ve  $y$  doğrultusunda momentum bileşenleridir.  $m^*$  ise GaAs'ın iletkenlik bandındaki etkin elektron kütesidir (Ezawa, 2008).

### 2.2.2. Dik manyetik alan altında iki boyutlu elektron sistemi: Landau seviyeleri

Düzleme dik ve düzgün bir manyetik alan altında bulunan iki boyutlu elektron sisteminde hareket eden elektronların enerji seviyeleri kuantize değerler alır.  $\vec{A}$  vektör potansiyeli olmak üzere  $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$  dış manyetik alanda, elektron-elektron etkileşmelerinin ihmal edildiği durumda,  $m$  kütleli,  $-e$  yüklü spinsiz tek bir elektronun Hamiltoniyen işlemcisi şu şekildedir:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \quad (2.12)$$

Burada,  $\hat{p}$  kanonik momentum operatörüdür.  $A = B(-y\hat{i} + x\hat{j})/2$  simetrik ayarında  $\hat{H}$  işlemcisi

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{e}{2mc} \vec{B} \cdot \vec{L} + \frac{1}{8} m \omega^2 (x^2 + y^2) \quad (2.13)$$

şeklinde yazılabilir. Bu ifadenin  $x^2 + y^2 = r^2$  ile orantılı son teriminden dolayı silindirik koordinatlar ele alındığında hareketin zamandan bağımsız Schrödinger denklemi

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - i \frac{m\omega}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \theta} - \left( \frac{m\omega}{2\hbar} \right)^2 r^2 \right] \psi = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi \quad (2.14)$$

olarak verilir ve

$$\psi(r, \theta, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ij\theta} e^{ikz} u(r) \quad (2.15)$$

özfonksiyonlarına sahiptir. Burada  $(2\pi)^{-1/2} \exp(ij\theta)$ , açılal momentumun bire boylandırılmış özfonksiyonları olup, tek değeri olabilmeleri için

$$j = 0, \mp 1, \mp 2, \dots \quad (2.16)$$

olmalıdır. Buna göre enerji özdeğeri

$$E_{n_r, jk} = \hbar\omega \left( n_r + \frac{1}{2} + \frac{|j| - j}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (2.17)$$

ve özfonksiyonları

$$\psi_{n_r, jk}(r, \theta, z) = \left( \frac{2\hbar}{m\omega} \right)^{-1/2} \left[ \frac{2(n_r!)}{(n_r + |j|)!} \right]^{1/2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left( r \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \right)^{|j|} e^{ij\theta} e^{ikz} e^{-r^2/2 \left( \frac{2\hbar}{m\omega} \right)} L_{n_r}^{|j|} \left( r^2 \frac{m\omega}{2\hbar} \right) \quad (2.18)$$

şeklinde bulunmuş olur. Enerji özdeğeri ifadesindeki ilk terim, manyetik alana dik düzlemdeki siklotron hareketinin katkısı olup  $\hbar^2 k^2 / 2m$  terimi ise  $z$  yönündeki hareketin enerji özdeğerlerine katkısıdır. Sistemin  $z$  yönündeki hareketi dikkate alınmadığında elde edilen enerji özdeğerleri, Landau seviyeleri olarak adlandırılır. Kuantize Landau seviyeleri  $n_r = 0, 1, 2, \dots$  olmak üzere,

$$E_{n_r, j} = \hbar\omega_c \left( n_r + \frac{1}{2} + \frac{|j| - j}{2} \right) \quad (2.19)$$

$$= \hbar\omega_c \begin{cases} n_r + \frac{1}{2} & j \geq 0 \text{ için} \\ n_r + \frac{1}{2} + |j| & j < 0 \text{ için} \end{cases}$$

enerji spektrumuna sahiptir ve sonsuz tane  $j \geq 0$  değerlerinin hepsi, verilen bir  $n_r$  için aynı enerjiye karşılık geldiğinden sonsuz kere dejeneredir. Burada;  $j$  açılal momentum kuantum sayısıdır. Landau seviyeleri arasındaki enerji farkı ise,  $\omega_c = eB/mc$  siklotron frekansı olmak üzere  $\hbar\omega_c$ 'dir.

Landau seviyeleri ile bir boyutlu harmonik osilatörün enerji seviyeleri birbirine oldukça benzer. Aralarındaki en önemli fark, bir boyutlu harmonik salıncının enerji seviyeleri dejenere değilken, Landau seviyelerinin dejenere olmasıdır. Eğer kuantum sayısı

$$n = n_r + \frac{|j| - j}{2} = 0, 1, 2, \dots \quad (2.20)$$

şeklinde yazılırsa (2.19) ifadesi aşağıdaki gibi olur ve harmonik osilatör enerji spektrumuna benzer olduğu görülür.

$$E_n = \hbar \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (2.21)$$

Birim alan başına durumların sayısı,

$$n_L = \frac{eB}{h} \quad (2.22)$$

olarak ifade edilir. Toplam durumların sayısı  $N_L$  ise,

$$N_L = n_L A = \frac{BA}{he} = \frac{\phi}{\phi_0} \quad (2.23)$$

şeklinde. Burada;  $\phi$  iki boyutlu elektron sisteminin alanı boyunca toplam manyetik akı ve  $\phi_0 = h/e$  ise manyetik akı kuantasıdır.

Sonlu dejenerelik durumunda önemli bir parametre,

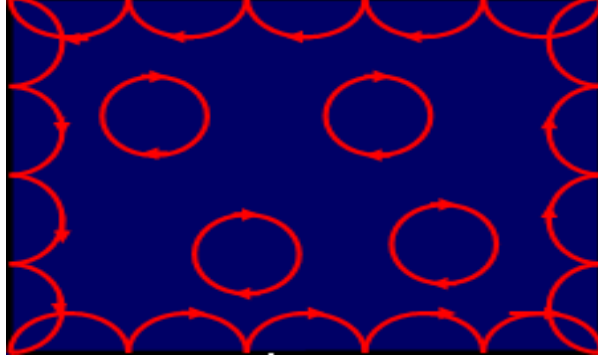
$$\nu = \frac{n}{n_L} = \frac{h}{eB} n \quad (2.24)$$

elektron yoğunluğunun akı yoğunluğuna oranı olarak tanımlanan  $\nu$  doldurma faktörüdür. Doldurma faktörü, sistem taban durumunda iken Fermi seviyesinin altında tüm işgal edilen Landau seviyelerinin sayısını verir (Dereli ve Verçin, 2009).

### 2.2.3. Kenar durumu resmi

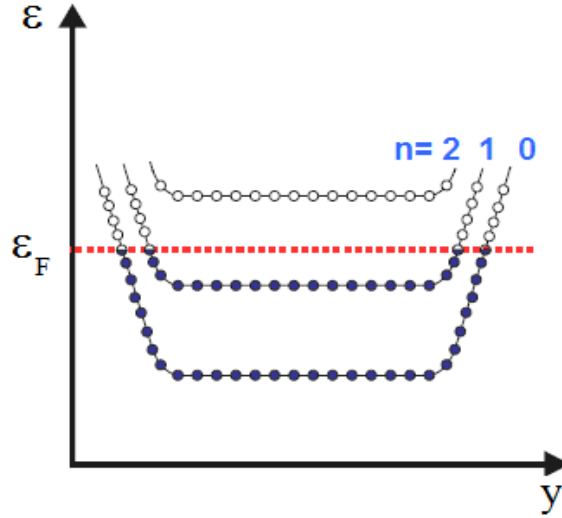
Halperin kuantum Hall olayının taşınım özelliklerini açıklamak için ilk kez akım taşıyan kenar durumlarının varlığından söz etmiştir. Bu modele göre, düzgün manyetik alan içerisinde bulunan elektronlar malzemenin kenarları boyunca klasik olarak helis biçiminde bir yol izlemekte ve akım malzemenin kenarlarından bir boyutlu kanallar boyunca akmaktadır. Malzemenin kenarlarındaki elektronlar duvara çarparak saçıldığından dolayı tam daire hareketlerini tamamlayamaz. Bu yüzden malzemenin kenarlarında ilerleyen elektronlar bir elektrik akımı taşırlar. Elektronlar

iki zıt kenarda farklı doğrultuda hareket ederler. Üst kenarda elektronlar sola doğru ilerlerken, alt kenarda ise sağa doğru ilerlemektedir (Şekil 2.6) (Halperin, 1982).



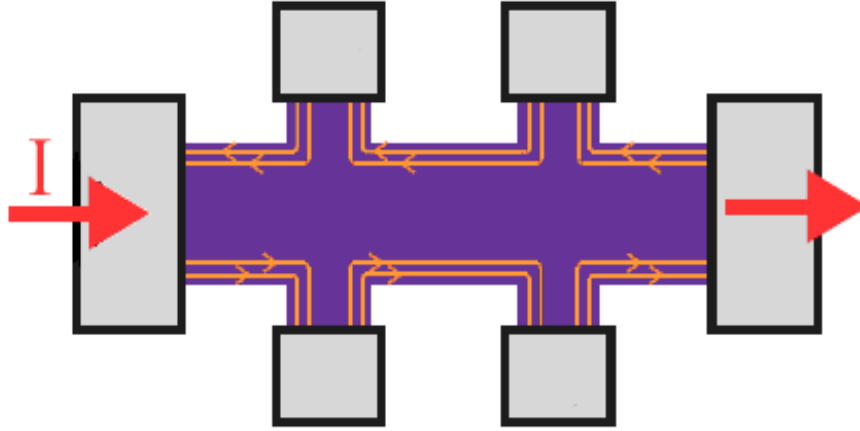
Şekil 2.6. Malzeme boyunca akım taşıyan kenarlardan saçılan elektron yörüngeleri

Kenar durumları gerçek örneklerde malzemenin kenarlarının varlığından dolayı meydana gelir. Kenarlar boyunca yoğunluk sıfıra gider. Sonuç olarak, potansiyel kenarlar boyunca yükselir ve Landau seviyeleri yukarıya doğru bükülerek Fermi seviyesi ile kesişir. Bulk kısımda Fermi seviyesinin altındaki Landau seviyeleri tamamen işgal edildiğinden yerleşmiş durumlar mevcuttur ve dolayısıyla akım kenar durumlarından akar (Şekil 2.7) (Halperin, 1982).



Şekil 2.7. Sonlu boyutta ideal iki boyutlu elektron sisteminin enerji spektrumu (Halperin, 1982)

Bir Hall çubuğunun kenarları boyunca oluşan bir boyutlu kenar kanallarının şematik gösterimi Şekil (2.8)'de verilmiştir.

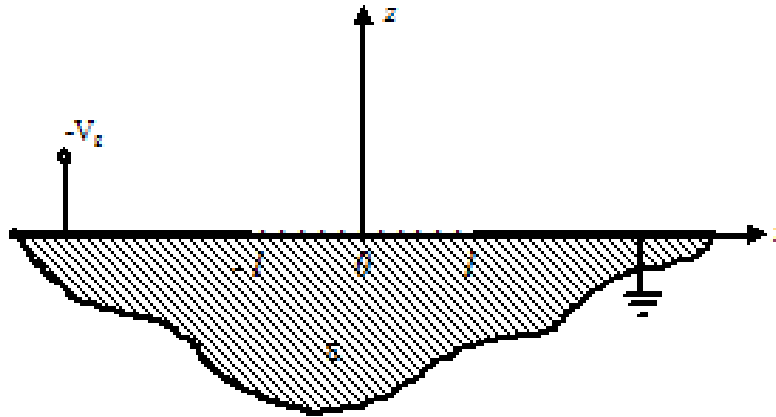


Şekil 2.8. Kenar kanallarının şematik gösterimi

#### 2.2.4. Perdeleme teorisi: Sıkıştırılabilir ve sıkıştırılamaz şeritler

Kenar durumu resmi, örnek kenarlarındaki akım kanallarını açıklayabilmekte ancak sıkıştırılabilir ve sıkıştırılamaz şeritlerin varlığına sebep olan iki boyutlu elektron sisteminin elektrostatik perdeleme etkisini açıklayamaz. Bu etki Beenakker (Beenakker, 1990) ve Chang (Chang, 1990) tarafından nitel tanımlaması yapılmıştır. Ancak bu tanımlama şeritlerin yerleri ve kalınlıkları hakkında hiçbir bilgi vermez.

Kenar kanallarının elektrostatığı D. B. Chklovskii, B. I. Shklovskii ve L. I. Glazman (CSG) tarafından incelenmiş ve analitik olarak çözülmüştür (Chklovskii vd., 1992). CSG modelinde; GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heteroyapısındaki iki boyutlu elektron sisteminin sınırları, örneğin üzerindeki kapı elektroda negatif gerilim uygulanarak yaratılır. Sistemin  $y$  doğrultusu değişmez olduğundan kapının iki boyutlu elektron sistemi düzlemine olan uzaklığı ve düzlem tabakanın kalınlığı ihmal edilmektedir. Böylece pozitif arka alan, kapı ve iki boyutlu elektron sistemi aynı ( $z = 0$ ) düzlemde yer almakta ve problem etkin olarak iki boyutlu hale gelmektedir.  $z < 0$  yarı-düzlemi dielektrik sabiti  $\epsilon \gg 1$  olan yarıiletken ile işgal edilmiştir (Şekil 2.9).



Şekil 2.9. CSG teorisinde kullanılan heteroyapının temsili görüntüsü (Chlovskii vd., 1992)

Problem verilen sınır şartları altında Poisson denkleminin analitik çözümünden başka bir şey değildir. Sıfır manyetik alanda, külçe kısma doğru kenarlardaki elektron yoğunluğu şu şekildedir:

$$n = n_0 \sqrt{\frac{x-l}{x+l}} \quad (2.25)$$

Burada,  $2l$  tükenme şeridinin uzunluğu,  $n_0$  ise külçe (bulk) bölgesindeki elektron yoğunluğudur.  $x < l$  için yoğunluk sıfırdır ve bulk bölgesine doğru düzgünce artar.

İki boyutlu elektron sistemi düzlemine dik manyetik alan uygulandığında durum oldukça farklıdır (Şekil 2.10): Şeklin sol tarafında tek elektron, sağ tarafında ise kendinden tutarlı elektrostatik resim gösterilmiştir. Tek elektron resminde Fermi enerjisi bir Landau enerjisi ile kesiştiği zaman elektron yoğunluğu basamak şeklinde bir artış gösterir ve geniş bir uzunluk skalası boyunca sabit kalır. Halbuki; elektron yoğunluk dağılımı, sıfır manyetik alan durumundan çok farklı değildir.

Manyetik alanın etkisi, elektronların Landau seviyelerine yerleşmesiyle birlikte, girilebilir durumların varlığına bağlı olarak iki boyutlu elektron sisteminin perdeleme özellikleri ortaya çıkar. Yerel doldurma faktörünün yani Fermi enerjisi altındaki Landau seviyesinin tam sayılı değerlerinde girilebilir durum olmadığından perdeleme olmaz, fakat tam sayılı olmayan değerlerinde perdeleme mükemmeldir. Tam sayılı yerel doldurma faktörlü bölgede girilebilir durumların olmaması nedeniyle,

sıkıştırılmaz şeritler olarak adlandırılan yalıtkan şeritler oluşur dolayısıyla sıkıştırılmaz şeritlerde elektron yoğunluğu sabittir. Girilebilir durumların olduğu Fermi seviyesine sıkıştırılabilir adı verilmekte ve bu bölgelerde tuzaklama potansiyeli perdelenmekte dolayısıyla sıkıştırılabilir şeritler içerisinde elektrostatik potansiyel sabit kalmaktadır.

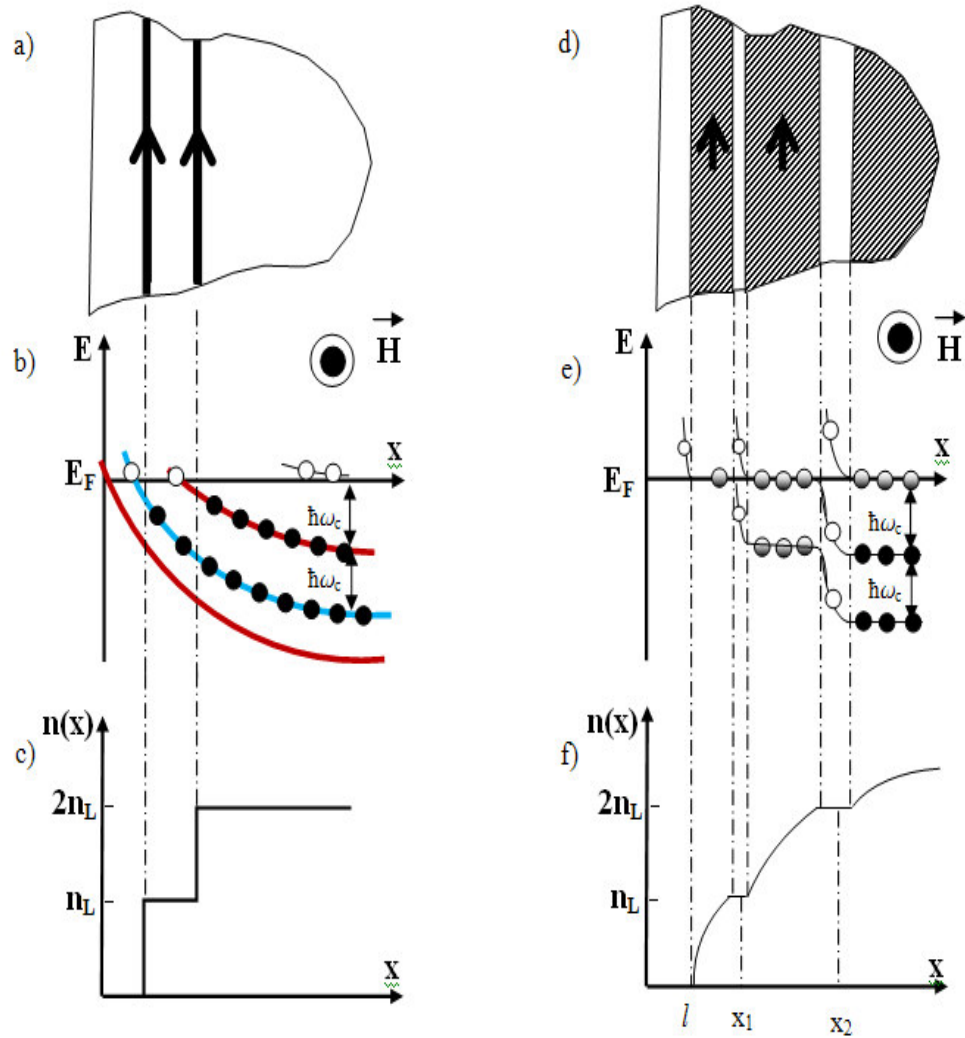
Kendinden tutarlı elektrostatik teoriden k. sıkıştırılmaz şeridin konumu şu şekilde bulunur:

$$x_n = l \frac{v^2 + k^2}{v^2 - k^2} \quad (2.26)$$

k. sıkıştırılmaz şeridin genişliği ise

$$a_k = \left( \frac{8\epsilon\epsilon_0\hbar\omega_c}{\pi e^2 dn/dx|_{x=x_k}} \right)^{1/2} \quad (2.27)$$

şeklindedir. CSG teorisi sıkıştırılabilir ve sıkıştırılmaz şeritler hakkında çok önemli bilgiler vermesine rağmen, iki önemli özelliği açıklamaması teorinin eksikliğidir. Analitik çözüm sıfır sıcaklık çözümüdür ve elektrokimyasal denge sağlanmaz.



Şekil 2.10. Kendinden tutarlı elektostatik resme karşılık kenar durumu resmi. (a)-(c) Tek parçacık resmi. a) Kenar yakınlarındaki iki boyutlu elektron sisteminin üstten görünüşü. Oklar iki kenar kanalındaki elektron akış doğrultusunu temsil eder. b) Tuzaklama potansiyelinden dolayı kenar yakınlarında Landau seviyelerinin bükülmesi. Daireler Landau seviyelerinin yerel doldurulmalarını ifade eder.  $\circ$  boş;  $\bullet$  dolu c) Sınır uzaklığın bir fonksiyonu olarak elektron yoğunluğu (d)-(f) Kendinden tutarlı elektostatik resim. d) Kenar yakınında iki boyutlu elektron sistemin üstten görünümü. Gölgele şeritler tam sayı olmayan doldurma faktörü ile verilen bölgeleri (sıkıştırılabilir şeritler), gölgesiz şeritler ise tam sayılı doldurma faktörü bölgelerini (sıkıştırılamaz şeritler) temsil eder. Oklar elektronun akış doğrultusunu gösterir. e) Kenar yakınlarında Landau seviyelerinin ve elektostatik potansiyelin bükülmesi. Landau seviyelerinin yerel doldurulmalarını ifade eder.  $\circ$  boş;  $\bullet$  dolu f) Tükenme bölgesinin ortasına uzaklığın bir fonksiyonu olarak elektron yoğunluğu (Chklovskii, 1992)

### 2.3. Kesirli İstatistik

Bütün iç, özgün özellikleri (kütle, yük, spin gibi) aynı, fiziksel özellikleri ile birbirinden fark edilemeyen parçacıklara özdeş parçacıklar denilir. Özdeş parçacıklardan oluşmuş, en genel anlamda, sistemin fiziksel özelliklerinde hiçbir değişikliğe yol açmadan birbirlerinin yerine geçebilen parçacıklardan oluşmuş sistemlere özdeş parçacık sistemleri denilir. Özdeş parçacık kavramı veya daha doğru bir ifade ile özdeş parçacıkların ayırt edilemezliği, kuantum mekaniksel bir kavram olup klasik mekaniksel bir karşılığı yoktur (Dereli ve Verçin, 2009).

İstatistik, iki parçacığın yer değiştirmesiyle ilgili bir özelliktir. Üç boyutlu uzayda iki özdeş parçacık yer değiştirirse, dalga fonksiyonu  $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ 'ye  $e^{i\alpha\pi}$  faz faktörü gelir, çünkü dalga fonksiyonunun kendisi gözlenebilir bir nicelik değildir.

$$\Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = e^{i\alpha\pi} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (2.28)$$

Burada  $\alpha$ , istatistik parametre ve  $\alpha\pi$ , yer değiştirme fazıdır.

Yer değiştirme iki kez yapılırsa, konfigürasyon başlangıç durumuna döner ve faz faktörü  $e^{2i\alpha\pi} = 1$  olur. Bu durumda; bozonlar için +1 ve fermiyonlar için -1 olmak üzere faz faktörü  $e^{i\alpha\pi} = \mp 1$  dir. Sonuç olarak, üç boyutlu uzayda sadece iki tip özdeş parçacık sistemi vardır: bozonlar ve fermiyonlar. Bunlar spinleri (bozonlar için  $s = 0, 1, 2, \dots$  ve fermiyonlar için  $s = 1/2, 3/2, \dots$ ), yer değiştirme istatistiği (iki özdeş parçacık yer değiştirdiğinde, fermiyonların dalga fonksiyonu işaret değiştirir, fakat bozonların dalga fonksiyonu işaret değiştirmez) ve Pauli Dışarlama İlkesi (Pauli, 1940) (çok sayıda bozon tek bir kuantum durumuna yerleşebilir, fakat tek bir kuantum durumuna bir fermiyondan daha fazlası yerleşemez.) ile ayırt edilebilir (Ezawa, 2008).

Buna göre, N tane özdeş parçacıklı bir sistemin enerji özfonksiyonları, herhangi iki parçacığın yer değiştirmesi sonucunda ya simetrik ya da antisimetrik olmak zorundadır; bunun dışında enerji özfonksiyonları olamaz. Herhangi iki parçacığın yer değiştirmesi sonucunda işaret değiştirmeyen dalga fonksiyonlarına simetrik dalga fonksiyonu, işaret değiştiren dalga fonksiyonlarına ise antisimetrik dalga fonksiyonları denir.

Sistemin dalga fonksiyonunun simetrik veya antisimetrik olması sistemi oluşturan özdeş parçacıkların türüne bağlıdır. Simetrik dalga fonksiyonu ile belirtilen ve bozon olarak adlandırılan parçacıklar Bose-Einstein istatistiğine uymakta; antisimetrik dalga fonksiyonu ile belirtilen ve fermiyon olarak ifade edilen parçacıklar ise Fermi-Dirac istatistiğine uymaktadır.

$$\text{Bozonlar:} \quad P_{ij} \Psi(1,2,\dots,i,\dots,j,\dots,N) = \Psi(1,2,\dots,j,\dots,i,\dots,N) \quad (2.29)$$

$$\text{Fermiyonlar:} \quad P_{ij} \Psi(1,2,\dots,i,\dots,j,\dots,N) = -\Psi(1,2,\dots,j,\dots,i,\dots,N) \quad (2.30)$$

Burada  $\hat{P}_{ij}$  parite operatörüdür.

Spin, parçacığın iç açısal momentumudur. Burada,  $S_j$  üç spin operatörüdür; çünkü üç bağımsız dönme söz konusudur. Bunlar non-Abelian cebiri sağlarlar ve  $\hbar/2$  biriminde spin kuantizasyonunu verirler:

$$[S_i, S_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} S_k; \quad i, j, k = x, y, z \text{ için} \quad (2.31)$$

Fermiyon alan operatörü  $\Psi(t, \vec{x})$  olmak üzere,

$$\Psi(t, \vec{y})\Psi(t, \vec{x}) = -\Psi(t, \vec{x})\Psi(t, \vec{y}) \quad (2.32)$$

antikomütasyon bağıntısı,  $\Psi(t, \vec{x})\Psi(t, \vec{x}) = 0$  Pauli dışarlama ilkesini verir (Ezawa, 2008).

Yukarıdaki argümanın yeterince genel olduğu düşünülse de, iki boyutlu uzaydaki parçacıklar için uygulanabilir değildir. Bu Şekil 2.11'de gösterilmektedir. İki boyutlu uzayda yer değiştirme bir düzleme kısıtlanmıştır. İlmeği büzmek ve küçültmek parçacıklardan birinin pozisyonu ile kesişmeden mümkün değildir. Fermiyonlar, Pauli dışarlama ilkesine göre birbirleri ile kesişemezler. Göz önüne alınan parçacıkların dışarlama ilkesini sağlaması için üst üste gelmelerinin engellenmeleri gerekir.

$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  dalga fonksiyonunun tek değerli olmaya ihtiyacı yoktur, ve bu nedenle  $e^{i\alpha\pi} = \mp 1$  olması gerekli değildir. Bir  $n$  parametresi ile, iki boyutlu uzayda birbirinin

üzerinden geçmeden, bir noktanın diğer noktanın etrafında kaç kez daire çizeceğinin topolojik sayısını tanımlarsak,

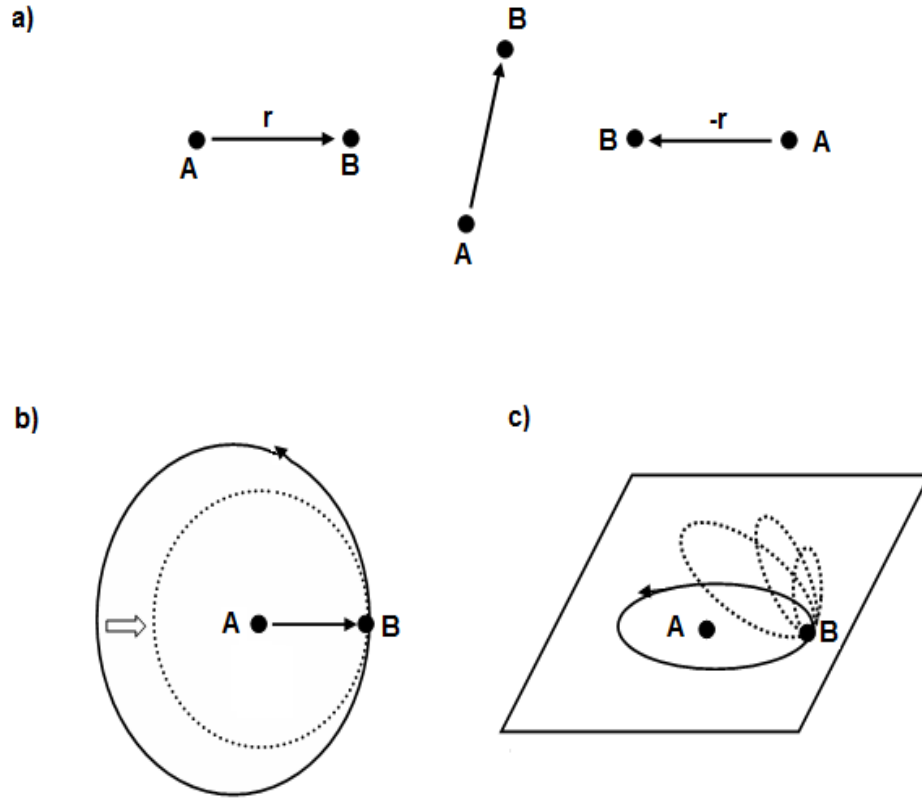
$$\Psi^{(n)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = (e^{i2\alpha\pi})^n \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (2.33)$$

olur. Burada  $\alpha$  parametresi, özdeş parçacıklara has keyfi gerçel bir sayıdır. Kesirli spin, iki boyutlu uzayda mümkündür.; çünkü burada sadece bir dönme yolu mümkündür. Spin operatörü  $S_z$  ' dir.  $S_z$  ' nin özdeğeri, dönme grubu Abelian olduğu için keyfidir. Bu durum parçacıkların iki boyutlu uzayda kesirli spin ve istatistiğe sahip olabileceğinin mantıksal bir nedenidir. Böylece, iki boyutlu uzaydaki özdeş parçacık sistemlerinde, kesirli spin ve istatistiğe sahip, Wilczek tarafından anyon olarak adlandırılan egzotik parçacıklara izin verilir (Wilczek, 1982).  $s = \frac{1}{2}\alpha$  bağıntısının ( $s\hbar$ ) spini ve ( $\alpha$ ) arasındaki ilişkisi, anyon istatistiğinde gösterilmiştir. Kesirli istatistik iki boyutlu uzaya has topolojik bir özelliktir.

Denklemler 2.32'deki antikomütasyon bağıntısına göre, anyon komütasyon bağıntısı

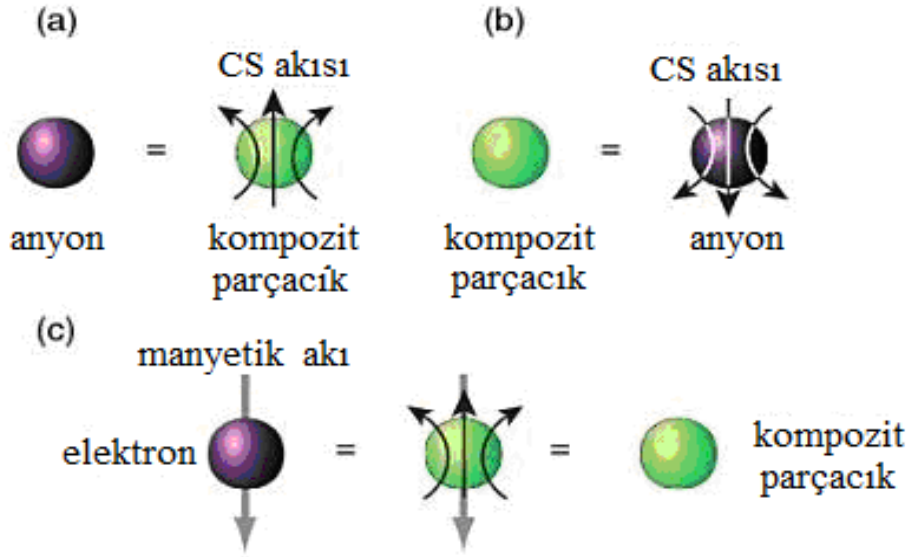
$$\Psi(t, \vec{y})\Psi(t, \vec{x}) = e^{i\alpha\pi} \Psi(t, \vec{x})\Psi(t, \vec{y}) \quad (2.34)$$

olarak genelleştirilmektedir (Ezawa, 2008).



Şekil 2.11. İki parçacığın yer değiştirmesi a) A ve B parçacıkları,  $\vec{r}$  göreli koordinatın sürekli olarak  $\pi$  açısı kadar dönmesiyle yer değiştirir. b) Yer değiştirme iki kez yapmada net olay, bir parçacığı (B konumundaki) sürekli olarak başlangıç konumuna göndermek ve bir ilmek çizerek aynı konumuna getirmek için hareket ettirmektir. İlmek, A noktasını bir kez çevreler. c) İlmek, üç boyutlu uzayda A noktasını çaprazlamadan sürekli olarak bir noktaya geri döndürülebilir; fakat iki boyutlu uzayda A noktasını çaprazlamadan bu yapılamaz (Jain, 2007)

Bir anyon, akı taşıyan parçacık (bozon ya da fermiyon) olarak temsil edilebilir; burada akı manyetik akı değil, Chern-Simons akısıdır ve Chern-Simons ayar teorisi ile tasvir edilir. Bunlara kompozit parçacık (kompozit bozonlar ya da fermiyonlar) denilir. Kompozit parçacık, bir anyonun tamamen matematiksel olarak karşılığı olan objedir, fiziksel olarak onu oluşturmak mümkün değildir. Kuantum mekaniksel olarak anyonları, “istatistik etkileşme” yapan parçacıklar gibi formüle etmek kolaydır (Wu, 1984; Wu, 1994). Anyonların alan teorisi, kompozit parçacık (bozon ya da fermiyon) alanı ve Chern-Simons alanı kullanılarak oluşturulur (Şekil 2.12).



Şekil 2.12. Anyon ve kompozit fermiyon tasviri a) Bir anyon, akı taşıyan bir bozon veya fermiyon olarak alınmaktadır. b) Alternatif olarak, bir anyona bir Chern-Simons (CS) akısı tutturulduğunda bir kompozit parçacık oluşturulur. c) Kompozit parçacık, Chern-Simons akısı manyetik alan tarafından ortadan kaldırıldığı zaman fiziksel bir gerçeklik kazanır (Jain, 2007)

#### 2.4. Kompozit Fermiyon Teorisi

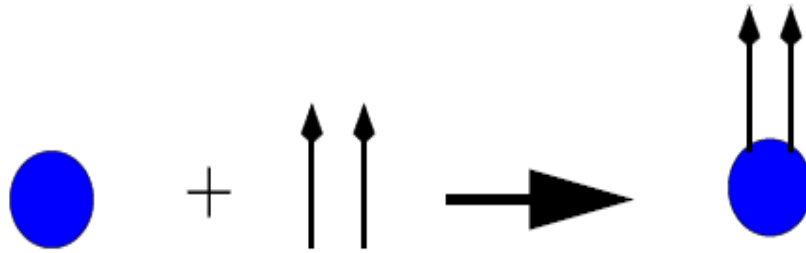
Kompozit fermiyon teorisi, kuantum Hall sistemlerinde bazı kesirli doldurma faktörlerinde kesirli kuantum Hall olayını açıklamakta kullanılır. 1989 yılında J. Jain elektronların kesirli kuantum Hall olayının kompozit fermiyon olarak adlandırılan yeni tür parçacıkların tam sayılı kuantum Hall olayından başka bir şey olmadığını ifade etmiştir (Jain, 1989). Bu yaklaşıma neden olan önemli gözlem, kesirli kuantum Hall olayı olgusunun tam sayılı kuantum Hall olayı olgusuna oldukça benzer olmasıdır. Her iki olguda da boylamsal direncin sifıra gitmesiyle Hall direncinde platolar oluşmaktadır.

Kompozit fermiyon teorisine göre; birbiriyle oldukça güçlü etkileşen elektronlar, zayıf etkileşen kompozit fermiyonlara dönüştürülür. Kompozit fermiyon, çok parçacık dalga fonksiyonunun  $2p$  kadar çift sayıda kuantum mekaniksel vorteks taşıyan elektronun bağlı durumu olarak tanımlanır ve şematik olarak Şekil 2.13'de gösterilmiştir. Burada,  $p$  tamsayıdır. Vorteks sayısı çift tam sayı olduğundan

fermionik özelliğe sahiptir ve bu durumda kompozit fermiyon sistemdeki diğer parçacıkların varlığına ihtiyaç duyan yeni bir çok parçacık objesi olarak ifade edilebilir. Sonuç olarak kompozit fermiyonlar aşağıda belirtilen indirgenmiş etkin manyetik alanı görür.

$$B^* = B - 2p\rho\phi_0 \quad (2.35)$$

Burada;  $\rho$  iki boyutta elektronların yoğunluğu,  $\phi_0 = hc/e$  ise manyetik akı kuantasıdır.



Şekil 2.13. Kompozit fermiyon oluşumunun tasviri. Elektron (nokta) çift sayıda vorteks (iki ok) yakalayarak kompozit fermiyona dönüşür. Kompozit fermiyon oklarla tutturulmuş nokta olarak tasvir edilmiştir (Jain, 2007)

Kompozit fermiyonların hissettiği manyetik alan elektronlara göre daha düşük bir değere sahip olurken, elektronların doldurma faktöründen daha büyük  $\nu^* = \rho\phi_0 / |B^*|$  doldurma faktörüne sahiptir. Elektron doldurma faktörünü kullanarak,  $\nu = \rho\phi_0 / |B|$ ,  $\nu$  ve  $\nu^*$  arasında şu şekilde bir bağıntı elde edilir:

$$\nu = \frac{\nu^*}{2p\nu^* \pm 1} \quad (2.36)$$

Denklem 2.36'daki eksi işareti, etkin manyetik alanın zıt manyetik alana yöneldiği durumu belirtir. Örneğin; her bir elektrona iki akı kuantası tutturulursa ( $p = 1$ ) ve bir tane kompozit fermiyon Landau seviyesini doldurursa ( $\nu^* = 1$ ) elektronların  $\nu = 1/3$  doldurma faktörü elde edilir.

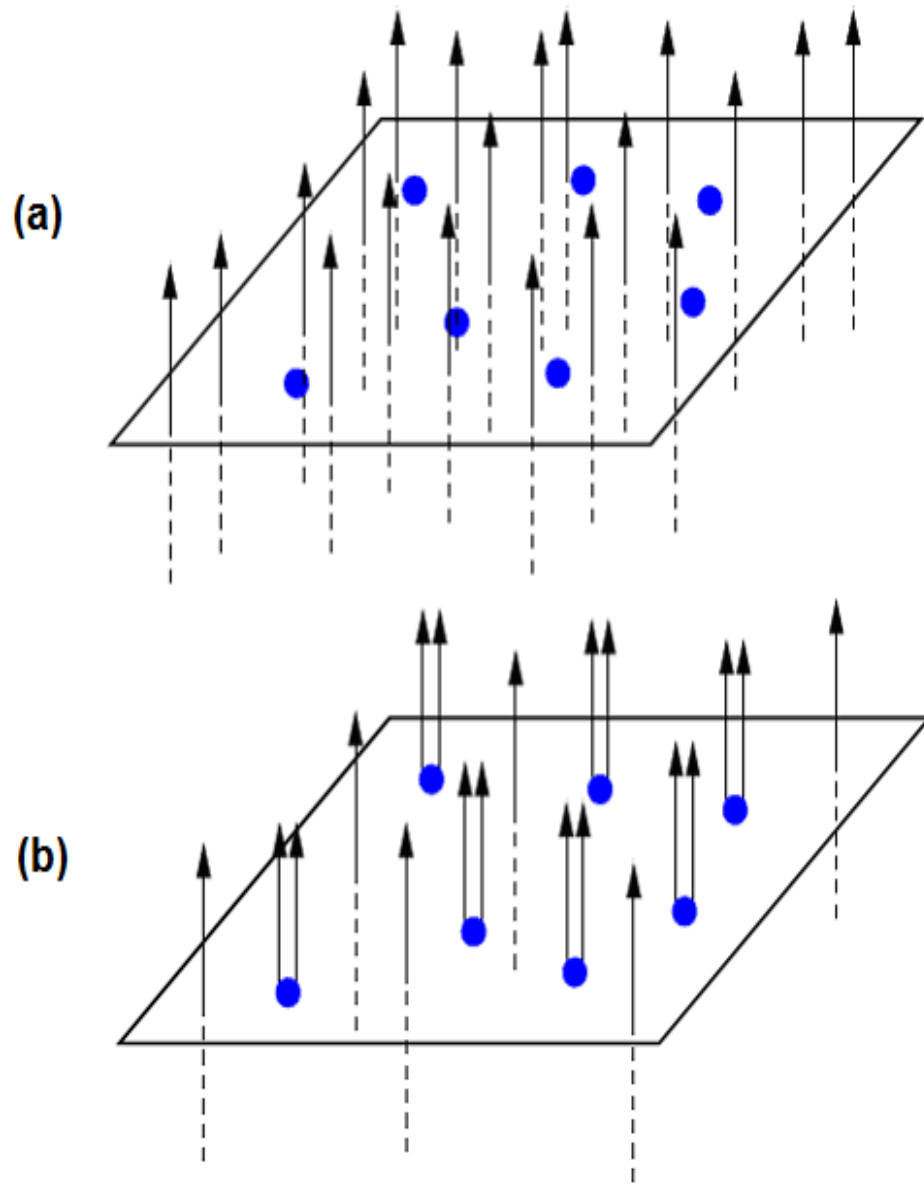
Kompozit fermiyon teorisine göre;  $\nu$  doldurma faktöründe  $\Psi_\nu$  çok parçacık dalga fonksiyonu ile tanımlanan oldukça şiddetli etkileşen elektron sistemi,  $\nu^*$

doldurma faktöründe  $\Phi_{\nu^*}$  dalga fonksiyonu ile tanımlanan zayıf etkileşen kompozit fermiyon sistemine eşleştirilebilir.

$$\Psi_{\nu} = P_{LLL} \prod_{j < k} (z_j - z_k)^{2p} \Phi_{\nu^*} \quad (2.37)$$

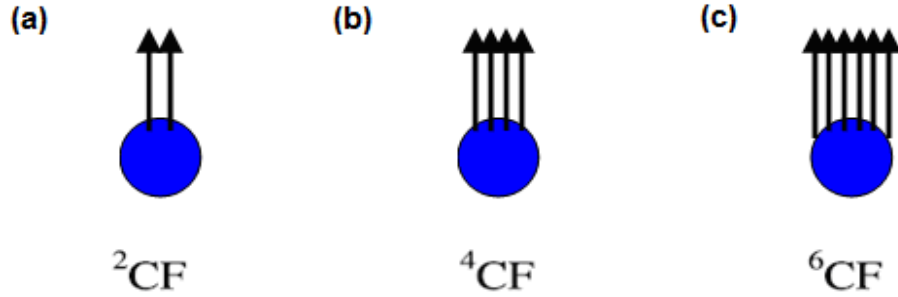
Burada;  $P_{LLL}$  en düşük Landau seviyesine izdüşüm operatörüdür.  $\prod_{j < k} (z_j - z_k)^{2p}$  çarpanı, Jastrow faktörü olarak adlandırılır ve  $\Phi_{\nu^*}$ 'de her bir elektron için  $2p$  kuantize vorteks yakalar.

Vorteksler, topolojik olarak manyetik akı kuantasına eşittir. Bir akı kuantası veya bir vorteks etrafında kapalı ilmek boyunca ilerleyen bir elektron aynı Aharonov-Bohm fazını elde eder. Bu nedenle, kompozit fermiyonlar  $2p$  akı kuantalı bir elektronun bağlı durumu olarak düşünülebilir. Diğer bir deyişle,  $\rho$  yoğunluğundaki elektronlar daha küçük etkin alana (Denklem 2.35) neden olan manyetik alandan  $2p$  akı kuantası soğurur. Bu durum, şematik olarak Şekil 2.14'de gösterilmiştir.



Şekil 2.14. Kompozit fermiyon tarafından hissedilen indirgenmiş manyetik alan ifadesinin şematik gösterimi. a)  $\phi_0$  şiddetinde yirmi tane akı kuantasına (oklar) karşılık gelen manyetik alanda yedi tane etkileşen elektron (noktalar) içeren birim alanı göstermektedir. b) Altı tane akı kuantasına karşılık gelen etkin manyetik alanda yedi tane oldukça zayıf etkileşen kompozit fermiyon sistemi oluşturularak elektronların her birinin iki tane akı kuantası yakaladığı kompozit fermiyonlara dönüştürülmüştür (Jain, 2007)

Kompozit fermiyonların oluşumunda her bir elektrona bağlı vorteks sayısı farklı olabilir ve kompozit fermiyonların birkaç türü Şekil 2.15’de gösterilmiştir.  $2p$ ’li kompozit fermiyon türü  $^{2p}CF$  olarak ifade edilir.

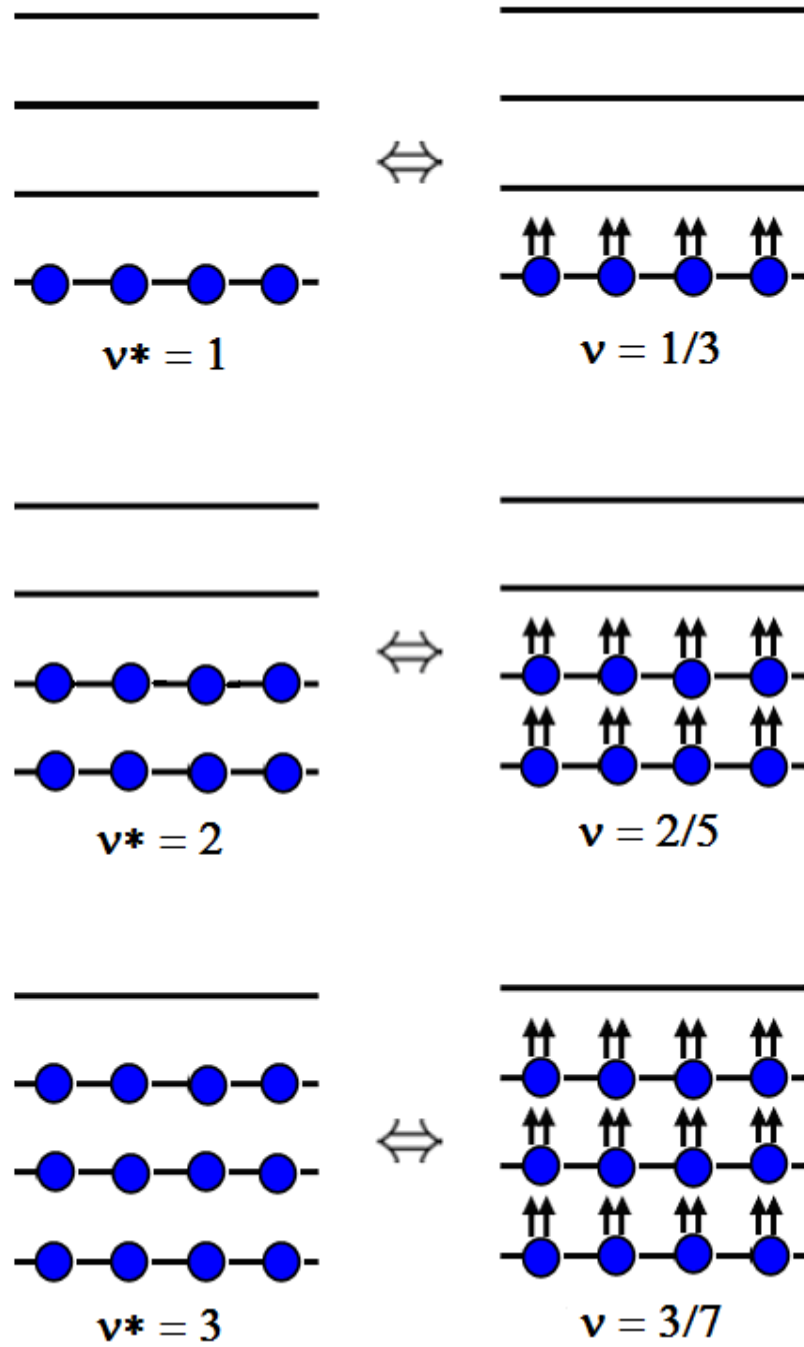


Şekil 2.15. a) iki, b) dört ve c) altı vorteks taşıyan kompozit fermiyonun üç türünün şematik gösterimi. Bunlar sırasıyla  $^2CF$ ,  $^4CF$  ve  $^6CF$  olarak ifade edilir. Her bir ok vorteksleri belirtir. Vorteksler, akı kuantası olarak ifade edilebilir (Jain, 2007)

Zayıf etkileşen kompozit fermiyonların en düşük Landau seviyesinde kinetik enerjisi, kompozit fermiyon sanki-Landau seviyeleri içerisinde kuantizedir. Elektronların Landau seviyesi ile kompozit fermiyonların sanki-Landau seviyelerini ayırt etmek için kompozit fermiyonların sanki-Landau seviyeleri,  $\Lambda$  seviyeleri (Lamda seviyeleri) olarak adlandırılır. İki ardışık Lamda seviyesi arasındaki boşluk, kompozit fermiyonların etkin kütlesi  $m^*$  ve siklotron frekansı  $\omega_c = eB^*/m^*c$  olmak üzere  $\hbar\omega_c^*$ ’dir. Eğer  $\nu^* = n$  (  $n$  tam sayı) ise, kompozit fermiyonlar Lamda seviyelerinin bir tam sayılı durumunu doldurur ve tam sayılı kuantum Hall etkisini karşılık geldiği varsayılır.  $\nu^* = n$  durumunda elektron doldurma faktörüne dönüşür ve

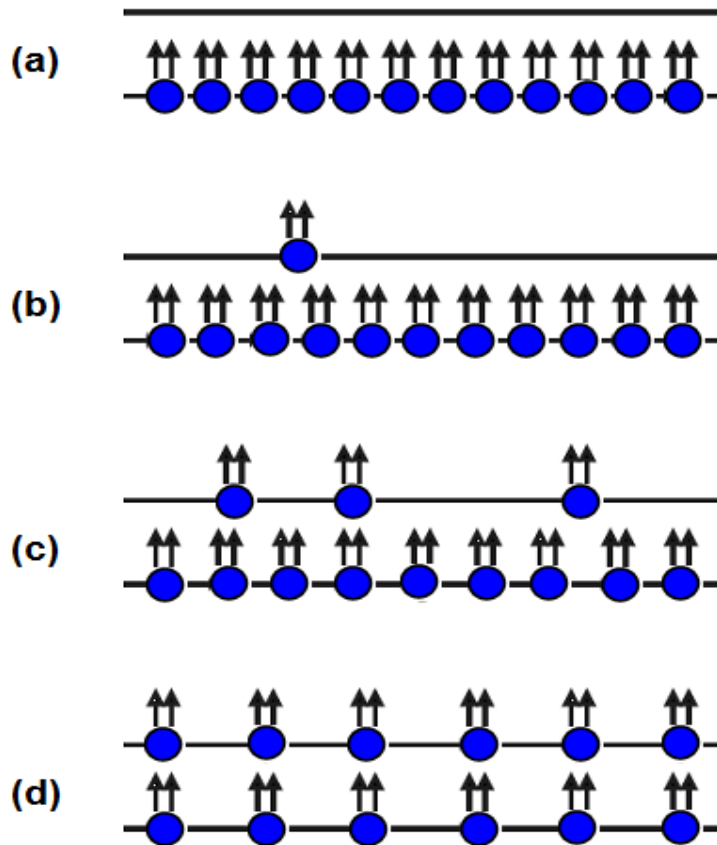
$$\nu = \frac{n}{2pn \pm 1} \quad (2.38)$$

olarak verilir. Buradan elde edilen değerler, kesirli kuantum Hall olayında gözlemlenen değerlerle aynıdır. Örneğin; elektronların  $\nu^* = 1$  durumu kompozit fermiyonların  $\nu = 1/3$  durumuna karşılık gelir.  $\nu^* = n$  durumunda elektronun taban durumu ile  $\nu = n/(2n + 1)$  durumunda kompozit fermiyonların taban durumunda yerleşimleri Şekil 2.16’da gösterilmiştir.



Şekil 2.16.  $\nu^* = n$  'de elektron taban durumunun şematik gösterimi (sol sütun). Kompozit fermiyonların  $n$  tane dolu Lamda seviyesi için  $\nu = n/(2n+1)$  'de kompozit fermiyon taban durumunun şematik gösterimi (sağ sütun). Kompozit fermiyonların Lamda seviyeleri  $\nu^*$  'de elektronların Landau seviyelerine benzetilebilir. Sol sütunlardaki yatay çizgiler elektronların Landau seviyelerini, sağ taraftakiler ise kompozit fermiyonların Lamda seviyelerini belirtir (Jain, 2007)

$\nu = n/(2n+1)$  kesirli doldurma faktörleri, kompozit fermiyonların tam sayılı doldurma faktörlerine benzetilebilir; burada taban durumu tam sayılı Lamda seviyelerini doldurur. Şekil 2.17 doldurma faktörünün  $\nu = 1/3$  'den  $\nu = 2/5$  'e geçişinde sistemin nasıl değiştiğini göstermektedir. Uyarılmış kompozit fermiyonlar, kompozit fermiyon sanki-parçacıkları olarak adlandırılır, yani boş Lamda seviyesindeki bir kompozit fermiyondur. Kompozit fermiyon-sanki parçacıkları, genellikle sanki parçacıklar olarak ifade edilir. Kesirli yük ve kesirli örgü istatistiği gibi topolojik özelliklere sahip zayıf etkileşen karmaşık yapıdaki objelerdir (Jain, 2007).



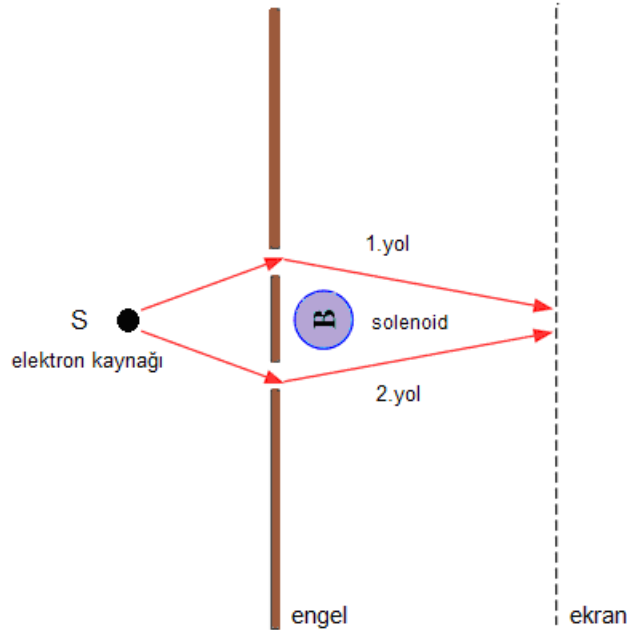
Şekil 2.17. Doldurma faktörü  $\nu = 1/3$  'den  $\nu = 2/5$  durumuna değişiminin şematik gösterimi (Doldurma faktörü manyetik alanın değişimiyle değişir.). a)  $1/3$  durumu, yani kompozit fermiyonların bir tane dolu Lamda seviyesi. b) Kompozit fermiyon sanki-parçacığı, yani boş Lamda seviyesindeki bir kompozit fermiyon. c) Ara durum. d) İki tane dolu Lamda seviyesine eşit olan  $2/5$  taban durumu (Jain, 2007)

## 2.5. Sanki - Parçacık İnterferometreleri

İnterferometreler günlük hayatta birçok uygulama alanı bulan ve temel fizik yasalarının araştırılmasında ve anlaşılmasında önemli etkileri olan mekanizmalardır. Çeşitli uygulama alanlarına göre çok sayıda interferometre türü vardır. Biz bu çalışma çerçevesinde kuantum mekaniğinin bir sonucu olan ve kuantum mekaniğinin testi için önemli bir veri kaynağı Aharonov-Bohm interferometresi anlatılacaktır. Ayrıca yaygın olarak kullanılan parçacık interferometrelerinden Mach-Zehnder interferometresinden de kısaca bahsedilecektir.

Aharonov-Bohm olayı, elektromanyetik alanın sıfır olduğu bölgede hareket eden yüklü parçacıkların kuantum mekaniksel davranışlarında gözlenebilir etkiler oluşturur ve tamamen kuantum mekaniksel olup hiçbir şekilde klasik karşılığı yoktur. Aharonov-Bohm olayını ilk kez 1959 yılında Y. Aharonov ve D. Bohm önermiştir (Aharonov ve Bohm, 1959).

Aharonov-Bohm olayını açıklayan deney düzeneğinin şematik gösterimi Şekil 2.18’de verilmiştir. S elektron kaynağından koherent olarak yayılan elektron demetleri, arkasında sayfa düzlemine dik olarak yerleştirilmiş bir solenoidin bulunduğu çift yarık içeren engelin üzerine gönderilir (Dereli ve Verçin, 2009).



Şekil 2.18. Aharonov-Bohm olayının şematik gösterimi

Solenoidden akım geçmediği zaman her yerde manyetik alan sıfırdır ve çift yarıktan geçen elektron demetleri ekranda normal girişim deseni oluşturur. Solenoidden akım geçirildiğinde ise solenoidin içerisinde manyetik alan oluşur, dışarıda manyetik alan sıfırdır. Dışarıda manyetik alan sıfır olmasına rağmen girişim deseninde bir kayma görülür. Klasik fizik yasalarına göre manyetik alan sıfır olduğundan buradan geçen elektronların manyetik alandan etkilenmemesi gerekir. Dolayısıyla bu olay tamamen kuantum mekaniksel bir olgudur. Çünkü, solenoidin içerisinde hem akım geçtiği hem de akımın geçmediği durumda yani dışarıda elektronların hareket ettiği bölgede manyetik alan olmadığından, elektronların hareketi her iki durum için aynı olmalıdır.

Elektronların hareket ettiği bölgede Hamiltoniyen işlemcisi şu şekildedir:

$$\hat{H}' = \frac{1}{2m} \left( \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}' \right)^2 \quad (2.39)$$

Elektronların hareket ettiği bölgede manyetik alan sıfır olmasına karşın  $\vec{A}'$  vektör potansiyel sıfır alınmaz,  $\vec{\nabla} \times \vec{A}' = 0 = \vec{B}$  koşulunu sağlayacak şekilde

$$\vec{A}' = \vec{\nabla} f \quad (2.40)$$

bir  $f(\vec{r}, t)$  fonksiyonunun gradyenti olarak yazılabilir. Solenoidi çevreleyen  $\gamma$  kapalı ilmek üzerinden yazılan bu fonksiyon aşağıdaki bağıntı ile hesaplanabilir.

$$f = \oint_{\gamma} \vec{A}' \cdot d\vec{r}' = \int_{\gamma} \vec{B} \cdot d\vec{S} = \phi \neq 0 \quad (2.41)$$

Hamiltoniyen işlemcisi için zamana bağlı Schrödinger denkleminin çözümü

$$\psi'(\vec{r}, t) = e^{-2\pi i \frac{f}{\phi_0}} \psi_0(\vec{r}, t) \quad (2.42)$$

$\psi_0(\vec{r}, t)$ 'ye bağlıdır.

Deney düzeneğinde, 1. ve 2. yoldan ilerleyen elektronlar ekranda üst üste gelerek bir girişim deseni oluşturur. Bu durumda, toplam dalga fonksiyonu

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_1'(\vec{r}, t) + \psi_2'(\vec{r}, t) \quad (2.43)$$

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-2\pi i \frac{f_1}{\phi_0}} \Psi_{01}(\vec{r}, t) + e^{-2\pi i \frac{f_2}{\phi_0}} \Psi_{02}(\vec{r}, t) \quad (2.44)$$

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-2\pi i \frac{f_2}{\phi_0}} \left[ e^{-2\pi i \frac{f_1 - f_2}{\phi_0}} \Psi_{01} + \Psi_{02} \right] \quad (2.45)$$

elde edilir. İki dalga fonksiyonu arasında

$$\Delta\varphi = -2\pi \frac{f_1 - f_2}{\phi_0} \quad (2.46)$$

$$\Delta\varphi = -\frac{2\pi}{\phi_0} \left[ \int_1 \vec{A}' \cdot d\vec{r}' - \int_2 \vec{A}' \cdot d\vec{r}' \right] \quad (2.47)$$

$$\Delta\varphi = -\frac{2\pi}{\phi_0} \oint_{\gamma} \vec{A}' \cdot d\vec{r}' = -2\pi \frac{\phi}{\phi_0} \quad (2.48)$$

kadarlık bir faz kayması oluşur. Ekrandaki girişim deseni, yani elektron olasılık yoğunluğu

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \left| e^{-2\pi i \phi / \phi_0} \Psi_{01} + \Psi_{02} \right|^2 \quad (2.49)$$

solenoidden geçen akıya bağlıdır. Çünkü, farklı yollardan ilerleyerek ekranda üst üste gelen dalga fonksiyonları arasındaki fark,  $\phi$  akısı ile orantılıdır (Dereli ve Verçin, 2009).

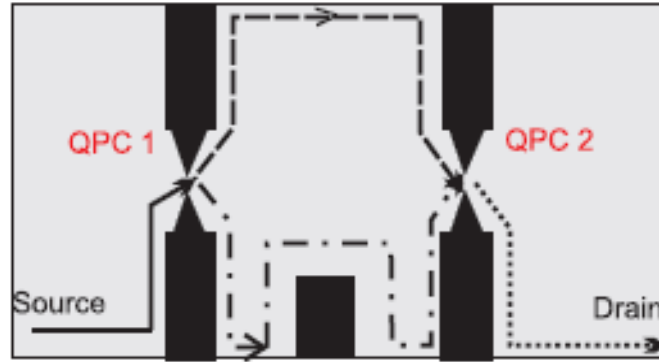
İnterferometreler, kimyasal kesme veya metalik kapı elektrotları ile iki boyutlu elektron sistemlerinde de oluşturulur. Aygıt üzerinde oluşturulan kuantum tuzakları düzlemine dik uygulanan manyetik alan akım taşıyan durumları kuantumlar ve akımın taşındığı kenar durumlarını oluşturur. Bu kuantize kenar durumları optik interferometre türlerindeki monokromatik ışık ışınlarının yerine geçer, bu nedenle koherent taşınım meydana gelir.

Kuantum Hall tabanlı bu interferometrelerde, etkileşme etkilerinin parçacıkların ilerlediği yolun uzunluğunun girişim deseninden bağımsız olması gibi birçok beklenmedik bulgu, gerçeğe uygun örnek ve geometriye bağlı ayrıntılar ele alınarak incelenmesi ve gözlemlenebilen birçok olgunun anlaşılabilmesi için gerekli olduğu

öngörülmektedir. Buna açıklık getiren teorik aday, platolar arasındaki geçişlerle birlikte hem boylamsal direncin yok olmasını hem de platoların tam kuantize olmasını mikroskobik olarak açıklayabilen tam sayılı kuantum Hall olayının perdeleme teorisidir (Siddiki vd., 2010).

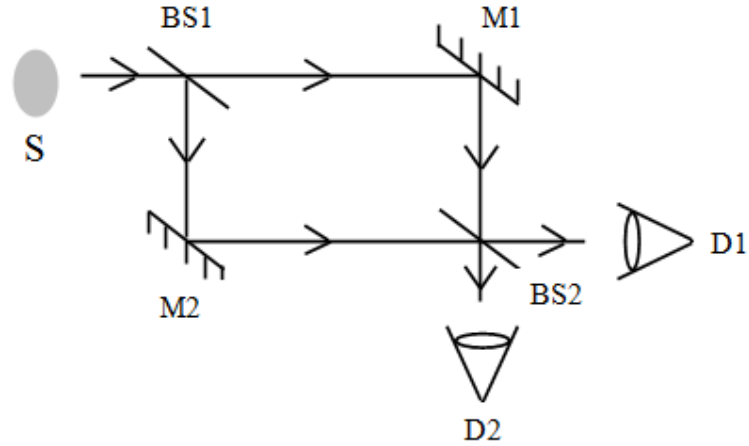
Dolayısıyla; Aharonov-Bohm ve Mach-Zehnder gibi farklı geometrilerdeki sanki-parçacık interferometrelerinde etkileşme etkileri ele alınarak taşınım özellikleri incelenebilir.

Tipik bir Aharonov-Bohm interferometresinin şematik gösterimi Şekil 2.19'da görülmektedir. Kenar durumları koherent ışık demetlerinin yerine geçer ve kuantum nokta kontaklar yarı-geçirgen aynalar gibi davranır. Yolun uzunluğu, modülasyon kapılarına uygulanan potansiyel ile değiştirilerek fazı etkileyen koherent parçacıkların çevirdiği değişken bir alan oluşturulur ve farklı yollardan ilerleyen parçacıklar için bir faz farkı meydana getirir (Siddiki vd., 2010).



Şekil 2.19. Aharonov-Bohm interferometresinin şematik gösterimi (Siddiki vd, 2010)

Yaygın olarak kullanılan sanki-parçacık interferometrelerinden bir diğeri, Mach-Zehnder interferometresidir ve Şekil 2.20'de gösterilmiştir. BS1 ışın ayırıcısı, S kaynağından gelen monokromatik ışık demetini iki ışına ayırır ve M1 ve M2 aynalarından yansıdıktan sonra D1 ve D2 detektörleriyle algılanan iki ışın birleşerek girişim oluşturur. Yollardan biri boyunca fazın değişimi, hem D1 hem de D2 dedektörlerindeki sinyallerde faz farkından dolayı osilasyon gösterir.



Şekil 2.20. Mach-Zehnder interferometresinin şematik gösterimi (Heiblum vd., 2003)

## 2.6. Spin Damlacıkları (Droplets)

İki boyutlu elektron sisteminde doldurma faktörü  $5/2$  durumu, doldurma faktörü 2 olan spin-eşleşmiş tam dolu en düşük Landau seviyesi (0LL) ve Pfaffian dalga fonksiyonu ile tanımlanan doldurma faktörü  $1/2$  spin-polarize yarım dolu bir sonraki Landau seviyesinin (1LL) karışımını içerir. Dolu olan 0LL'deki elektronların perdeleme etkisini veren etkileşme Hamiltoniyeni ve doldurma faktörü  $1/2$ 'nin Pfaffian dalga fonksiyonu kullanılarak  $5/2$ 'nin özellikleri analiz edilebilir (Räsänen vd., 2008). Spin polarize durumlar için Pfaffian dalga fonksiyonu aşağıdaki gibi ifade edilir (Moore ve Read, 1991):

$$\psi_{1/m}^{Pf}(z_1, z_2, \dots, z_N) = Pf \left( \frac{1}{z_i - z_j} \right) \prod_{i < j} (z_i - z_j)^m \exp \left( -\frac{1}{4l_B^2} \sum_k |z_k|^2 \right) \quad (2.50)$$

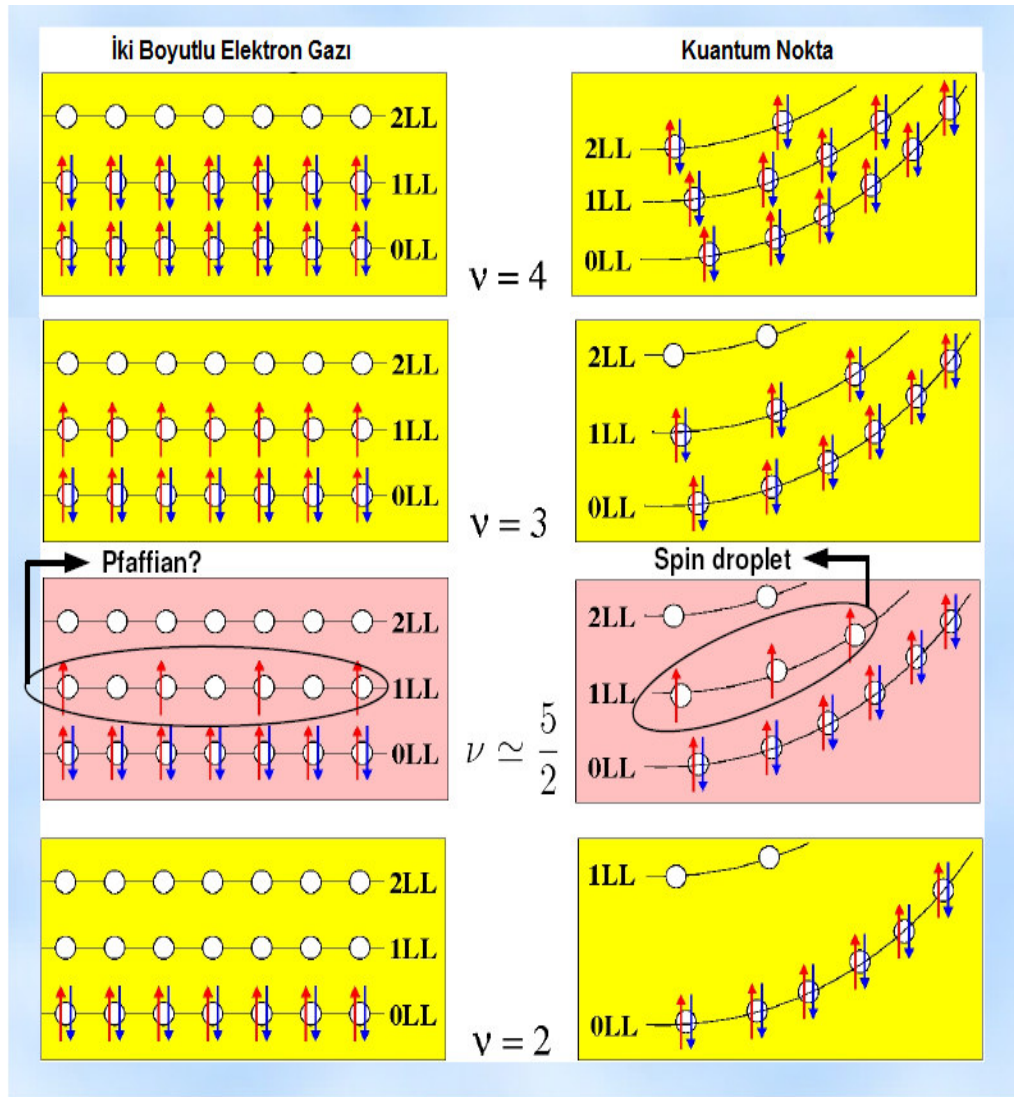
Burada,  $Pf(M)$  Pfaffian operatörüdür.  $M_{ij}$  antisimetrik matrisin elemanlarıdır.

$$Pf M_{ij} = A(M_{12} M_{34} \dots M_{N-1,N}) \quad (2.51)$$

Pfaffian faktörünün olmadığı durumda dalga fonksiyonu, Laughlin tarafından ifade edilen doldurma faktörü  $\nu = 1/m$ 'deki bir sistemi tanımlar.

Doldurma faktörü  $5/2$  durumu, yarı iletken kuantum noktalar gibi tuzaklanmış iki boyutlu sistemlerde de gözlemlenmiş ve karakterize edilmiştir (Reimann vd., 2002). Dış tuzaklamadan dolayı, bu çok parçacık durumları iki boyutlu elektron gazındaki

benzer durumlardan oldukça farklıdır. Bu durumun iki boyutlu elektron gazındaki durum ile ilginç benzerlikler ve farklılıklara sahip olduğu görülmüş, yarım dolu Landau seviyesinin Pfaffian dalga fonksiyonu ile tanımlamanın yetersiz olduğu gösterilmiştir (Räsänen vd., 2006). Tam sayılı ve kesirli kuantum Hall durumunda iki boyutlu elektron gazında ve kuantum noktada farklı doldurma faktörleri için elektronların Landau seviyelerine yerleşimleri Şekil 2.21’de gösterilmiştir. İki boyutlu elektron gazında doldurma faktörü  $\nu = 5/2$  durumunda ikinci en düşük Landau seviyesi (1LL) Pfaffian dalga fonksiyonu ile tanımlanırken (sol blok), kuantum noktada ise aynı seviye spin droplet yardımıyla açıklanmaktadır.



Şekil 2.21. Farklı doldurma faktörlerinde elektronların Landau seviyelerine yerleşimleri (Räsänen, 2010)

Doldurma faktörü  $5/2 \geq \nu > 2$  'ye sahip kuantum Hall bölgesinde kuantum noktaların taban durumunda özellikleri, tamsayılı doldurma faktörü bölgeleri içerisinde spin ve yük yoğunluklarının dallanması ile karakterize edilir. Bu durum, en yüksek işgal edilen Landau seviyesindeki spin-polarize elektronların sıkıştırılmaz dropletleri olan spin dropletlerin oluşumuyla sonuçlanır. Spin dropletlerin oluşumu, kollektif etkileşen elektronlar olgusudur ve kuantum noktalarda toplam elektron sayısı yeterince fazla olduğunda (yaklaşık olarak 30'dan fazla) meydana gelir (Räsänen vd., 2006; Räsänen vd., 2008).

Spin droplet bölgesindeki spin-eşleşmiş yoğunluk fonksiyonel teorisi kullanılarak yapılan hesaplamalar, Fermi seviyesi yakınlarındaki ikinci en düşük Landau seviyesinin (1LL) tek parçacık durumlarının (Kohn-Sham) yüksek bir dejenereliğe sahip olduğunu gösterir.

Literatürde bu konuda yapılan son çalışmalardan birinde, N tane elektronlu kuantum nokta sistemi için standart etkin kütle Hamiltoniyeni aşağıdaki gibi tanımlanmıştır:

$$H = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{(\vec{p}_i + e\vec{A})^2}{2m^*} + V_c(r_i) + g^* \mu_B S_{z,i} \right] + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_i} \sum_{i<j} \frac{1}{r_{ij}} \quad (2.52)$$

Dış tuzaklama potansiyeli  $V_c = m^* \omega_0^2 r^2 / 2$  olarak ifade edilmiş olup GaAs yarıiletken ortam için etkin malzeme parametreleri  $m^* = 0.0067m_e$ ,  $\epsilon = 12.4\epsilon_0$  ve  $g^* = -0.44$  olarak alınmıştır. Burada  $\vec{A}$  kuantum nokta düzlemine dik homojen  $\vec{B}$  manyetik alanın vektör potansiyelidir. Kuantum noktalar gibi düşük boyutlu sistemlerin taban ve uyarılmış durum gibi elektronik özellikleri, çok parçacık sistemler için kullanılan metotlardan olan spin yoğunluk fonksiyonel teorisi ile Schrödinger denklemi çözülerek bulunabilir (Räsänen vd., 2008).

### 3. MATERYAL ve YÖNTEM

#### 3.1. Elektronik Yapı Hesaplama Yöntemleri

##### 3.1.1. Çok parçacık sistemleri

Kuantum mekaniğinin uygulamalarında büyük önem taşıyan etkileşen çok parçacık sistemlerinin fiziksel özelliklerinin tanımlanması, anlaşılması ve bazı ölçülebilir niceliklerinin hesaplanabilmesi için Schrödinger denkleminin çözülebilmesi gerekir. Ancak Schrödinger denkleminin analitik olarak çözülebildiği fiziksel problemlerin sayısı oldukça sınırlıdır. Bu yüzden sistem içerisindeki elektronların ve çekirdeklerin oluşturduğu çok parçacık sisteminin Schrödinger denklemini çözmek için çeşitli yaklaşımlara ya da nümerik hesaplamalara ihtiyaç duyulur. Bununla birlikte parçacık sayısının artması nümerik olarak da bu tür problemlerin çözümlerini de imkansız hale getirmektedir. Bu nedenle nümerik hesaplamalarda da bazı yaklaşımlar yapılmaktadır. Bu bölüm içerisinde bu yaklaşık yöntemler ele alınmıştır.

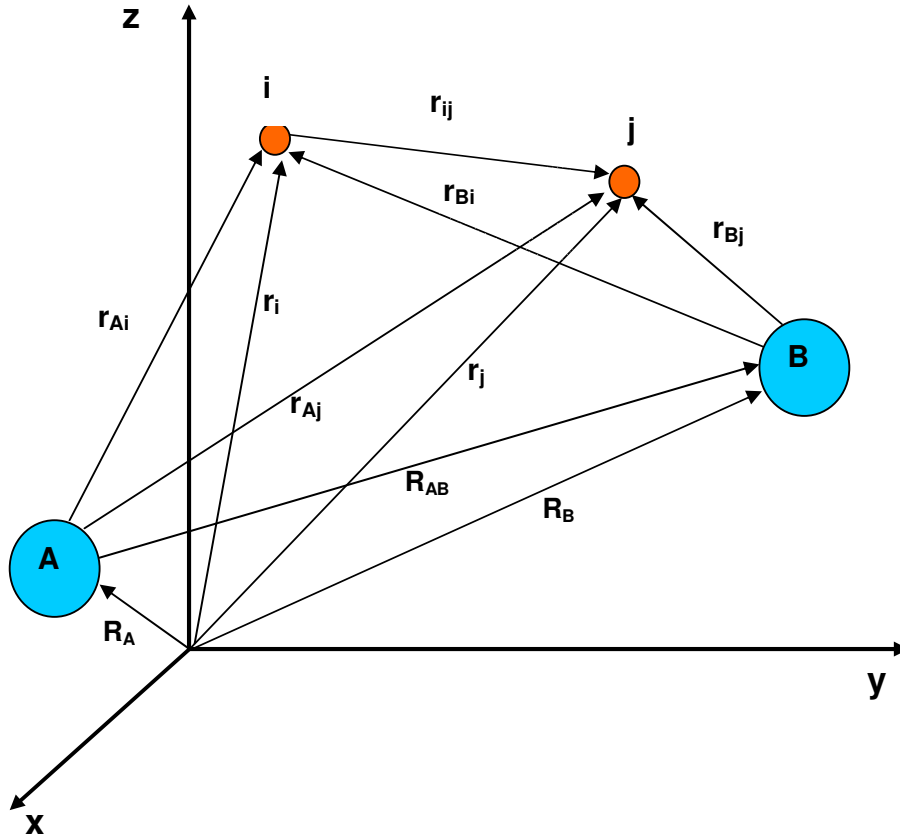
Moleküler bir sistem için zamandan bağımsız görelî olmayan Schrödinger denkleminin en genel biçimi şu şekildedir:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (3.1)$$

Burada  $\Psi$  dalga fonksiyonu,  $E$  sistemin toplam enerjisi,  $\hat{H}$  ise Hamiltoniyen operatörüdür. En genel Hamiltoniyen operatörü aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\hat{H} = \hat{T}_e(\vec{r}) + \hat{T}_N(\vec{R}) + \hat{V}_{eN}(\vec{r}, \vec{R}) + \hat{V}_{ee}(\vec{r}) + \hat{V}_{NN}(\vec{R}) \quad (3.2)$$

ilk terim; elektronlar için kinetik enerji operatörü, ikinci terim; çekirdekler için kinetik enerji operatörüdür. Sonraki üç terim ise sırasıyla; elektron-çekirdek, elektron-elektron ve çekirdek-çekirdek etkileşimleridir.



Şekil 3.1. Moleküler koordinat sistemi

Bu Hamiltoniyenin açık ifadesi, Şekil 3.1'deki koordinat sistemi gösterilen bir moleküler yapı için elektronların  $i$  ve  $j$  ile, çekirdeklerin ise  $A$  ve  $B$  ile temsil edildiği  $N$  tane elektron ve  $M$  tane çekirdekten oluşan çok parçacık sistemi olarak atomik birimde aşağıdaki gibi yazılır:

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{A=1}^M \frac{1}{2M_A} \nabla_A^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{A=1}^M \frac{Z_A}{r_{iA}} + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{1}{r_{ij}} + \sum_{A=1}^M \sum_{B>A}^M \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}} \quad (3.3)$$

Burada;  $M_A$ , elektronun kütesinin  $A$  çekirdeğinin kütesine oranını,  $Z$  ise atom numarasını ifade eder. Burada  $i$ . elektron ve  $A$ . çekirdek arasındaki uzaklık  $\vec{r}_{iA} = |\vec{r}_{iA}| = |\vec{r}_i - \vec{r}_A|$ ,  $i$ . elektron ve  $j$ . elektron arasındaki uzaklık  $\vec{r}_{ij} = |\vec{r}_{ij}| = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ ,  $A$ . çekirdek ve  $B$ . çekirdek arasındaki uzaklık ise  $\vec{R}_{AB} = |\vec{R}_{AB}| = |\vec{R}_A - \vec{R}_B|$ 'dir.

### 3.1.2. Born-Oppenheimer yaklaşımı

Born ve Oppenheimer tarafından 1927 yılında öngörülen bu yaklaşımda ana düşünce; elektronun kütesinin çekirdeğin kütesinden çok küçük olması ve bu nedenle çekirdeklerin sabit, çakılı parçacıklar olarak düşünülmesidir. Elektronlar çekirdeğin konumundaki anlık değişmeye hemen karşılık vermektedir (Born ve Oppenheimer, 1927).

Çekirdek hareket etmediğinden kinetik enerjisi sıfırdır ve böylece çekirdeğin kinetik enerji terimi yok olur.  $\hat{V}_{NN}(\vec{R})$  terimi ise çekirdekler arasındaki  $\vec{R}$  uzaklığına bağlı olduğundan ve etkileşme süresince  $\vec{R}$  sabit kabul edildiğinden  $\hat{V}_{NN}(\vec{R})$  terimi sabittir. Bu durumda Hamiltoniyendeki  $\hat{V}_{NN}(\vec{R})$  terimi de ihmal edilebilir. Bu durumlar göz önünde bulundurulur ise Hamiltoniyen,

$$\hat{H} = \hat{T}_e(\vec{r}) + \hat{V}_{eN}(\vec{r}; \vec{R}) + \hat{V}_{ee}(\vec{r}) \quad (3.4)$$

şeklinde yeniden yazılır. Burada elektron-çekirdek etkileşme terimi  $\hat{V}_{eN}(\vec{r}, \vec{R})$ , oldukça büyüktür ve ihmal edilemez. Dolayısıyla Hamiltoniyeni elektron ve çekirdek dalga fonksiyonlarına ayırarak çözmemize de engel teşkil eder. Buna rağmen; toplam dalga fonksiyonu, konumu sabitlenmiş çekirdeklerin elektronik durumları ifade eden elektronik dalga fonksiyonu  $\phi(\vec{r}; \vec{R})$  ile çekirdek koordinatlarını ifade eden çekirdek dalga fonksiyonun  $\chi(\vec{R})$  çarpımı olarak yazılabilir.

$$\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \phi(\vec{r}; \vec{R})\chi(\vec{R}) \quad (3.5)$$

ve Schrödinger denklemi

$$\hat{H} \phi(\vec{r}; \vec{R}) = E \phi(\vec{r}; \vec{R}) \quad (3.6)$$

olarak ifade edilir (Sherrill, 2005).

Born-Oppenheimer yaklaşımına göre; çok parçacık probleminde sadece elektronlar rol oynar. Çekirdekler bu durumda etkisiz olup, sadece dışarıdan elektronlara etki ederler.

### 3.1.3. Hartree yaklaşımı

Elektronik Schrödinger denkleminin çözülebilmesi için 1928 yılında Hartree dalga fonksiyonlarını ele alarak bir yaklaşımda bulunmuştur. Bu yaklaşımda; çok elektronlu sistemin dalga fonksiyonu, N tane tek elektronun dalga fonksiyonunun çarpımı olarak yazılır. Bu durumda etkileşmeyen elektronlardan oluşan sistemin elektronik dalga fonksiyonu ile Hamiltoniyen operatörü,

$$\Psi_H(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \Psi_1(\vec{r}_1)\Psi_2(\vec{r}_2)\dots\Psi_N(\vec{r}_N) \quad (3.7)$$

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N h_i \quad (3.8)$$

şeklinde ifade edilir. Burada  $h_i$ ,  $i$ . elektronun kinetik ve potansiyel enerjisini tanımlayan operatördür. İlgili  $\hat{H}\Psi_H = E\Psi_H$  özdeğer denklemi çözülerek toplam enerji elde edilir (Szabo, 1996).

$$E = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \dots + \varepsilon_N \quad (3.9)$$

Hartree yaklaşımının bir kusuru, herhangi iki elektronun yer değiştirmesi sonucu dalga fonksiyonu simetrik kaldığı için Pauli dışarlama ilkesine uymamasıdır. Çünkü Pauli dışarlama ilkesine göre elektronik dalga fonksiyonu antisimetrik olmalıdır.

Ayrıca bu yaklaşımda, aynı spinli iki elektronun konumlarının yer değişmesi durumunda sistemin enerjisinde oluşturduğu değiş-tokuş etkisi ve sistemdeki diğer elektronların hareketlerinin her bir elektronun enerjisinde oluşturduğu dinamik etki (korelasyon) hesaba katılmaz.

### 3.1.4. Hartree-Fock yaklaşımı

Hartree yaklaşımının aksine Hartree-Fock (1928; 1930) yaklaşımında; sistemin dalga fonksiyonu Pauli dışarlama ilkesi gereği, sistemdeki herhangi iki elektronun  $\vec{r}$  koordinatının (hem uzay hem de spin) yer değiştirmesi sonucu antisimetriktir ve değiş-tokuş etkilerinin oluşturduğu etki hesaba katılır.

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = -\Psi_1(\vec{r}_1)\Psi_2(\vec{r}_2)\dots\Psi_N(\vec{r}_N) \quad (3.10)$$

N parçacıklı sistemin dalga fonksiyonu, ortonormal spin orbitallerinin (tek parçacık dalga fonksiyonlarının) antisimetrik Slater determinanı ile ifade edilir.

$$\begin{aligned} \Psi_{HF} &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_1(\vec{r}_1) & \Psi_2(\vec{r}_1) & \dots & \Psi_N(\vec{r}_1) \\ \Psi_1(\vec{r}_2) & \Psi_2(\vec{r}_2) & \dots & \Psi_N(\vec{r}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Psi_1(\vec{r}_N) & \Psi_2(\vec{r}_N) & \dots & \Psi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \det[\Psi_1 \Psi_2 \dots \Psi_N] \end{aligned} \quad (3.11)$$

Burada her  $\Psi_i(\vec{r})$  fonksiyonu,  $\phi(\vec{r})$  uzaysal yörünge ile  $\chi(s)$  spin fonksiyonu çarpımından oluşmaktadır.

$$\Psi_i(\vec{r}) = \phi(\vec{r}) \cdot \chi(s) \quad (3.12)$$

Normalizasyon integrali  $\langle \Psi_{HF} | \Psi_{HF} \rangle = 1$  olup, antisimetrik dalga fonksiyonlu Hamiltoniyen operatörünün beklenen değeri varyasyonel ilkesi kullanılarak enerji fonksiyoneli minimize edilir ve Hartree-Fock enerjisini bulunur (Parr ve Yang, 1989).

$$E_{HF} = \langle \Psi_{HF} | \hat{H} | \Psi_{HF} \rangle \quad (3.13)$$

Spin orbitallerinin seçimine göre enerji minimize edilerek Hartree-Fock denklemini adı verilen

$$\hat{f}_i \Psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \Psi_i(\vec{r}) \quad (3.14)$$

ifade türetilir. Burada;  $\hat{f}$  Fock operatörü olarak adlandırılan etkin tek elektron operatörüdür.

$$\hat{f}_i = -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{A=1}^M \frac{Z_A}{r_{iA}} + v_i^{HF} \quad (3.15)$$

Hartree-Fock potansiyeli  $v_i^{HF}$ , diğer elektronların varlığından dolayı  $i$ . elektron tarafından hissedilen ortalama potansiyeldir ve diğer elektronların spin orbitallerine bağlıdır. Dolayısıyla, Hartree-Fock denklemini lineer değildir ve kendinden tutarlı alan (SCF) metodu olarak bilinen yöntemle çözülür.

Kendinden tutarlı alan metodunun ana fikri şöyledir. Spin orbitallerinde bir başlangıç varsayımı yapılarak her bir elektron tarafından görülen ortalama alan ( $v_i^{HF}$ ) hesaplanır ve sonra spin orbitallerinin yeni bir seti için özdeğer denklemi (Denklem 3.14) çözülür. Bu yeni spin orbitaller kullanılarak, yeni alanlar elde edilir ve çözümde kendinden tutarlılık sağlanana kadar yani; alanların artık değişmediği ve Fock operatörünü oluşturan spin orbitalleri onun özfonksiyonları ile aynı oluncaya kadar bu işleme devam edilir. Hartree-Fock özdeğer denkleminin çözümü,  $\epsilon_i$  orbital enerjili ortonormal Hartree-Fock spin orbitallerinin bir setini oluşturur (Szabo, 1996).

### 3.1.5. Yoğunluk fonksiyonel teorisi

Yoğunluk fonksiyonel teorisi (Density Functional Theory, DFT), son zamanlarda atomların, moleküllerin ve katıların elektronik yapısını hesaplamak için kullanılan en başarılı ve aynı zamanda en güvenilir yaklaşımlardan biridir. Taban durumunu özelliklerini tanımlamak için temel değişken olarak çok elektron dalga fonksiyonu yerine elektron yoğunluğu ele alınır (Gross ve Dreizler, 1990; Gross ve Kurth, 2005).

Elektron yoğunluğu  $\rho(\vec{r})$ , uzayda  $\vec{r}$  noktasında birim hacim başına elektronların sayısı olarak tanımlanır. Pozitif bir fonksiyondur, gözlenebilir bir niceliktir ve deneysel olarak ölçülebilir. Elektron yoğunluğunun integrali toplam elektron sayısını verir.

$$\int \rho(\vec{r}) d\vec{r} = N \quad (3.16)$$

Elektron yoğunluğu  $\rho(\vec{r})$  ve çok parçacık dalga fonksiyonu  $\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N)$  arasında aşağıdaki gibi bir bağıntı vardır (Armiento, 2005):

$$\rho(\vec{r}) = N \int \dots \int |\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N)|^2 d\vec{x}_1 d\vec{x}_2 \dots d\vec{x}_N . \quad (3.17)$$

### 3.1.6. Thomas-Fermi teorisi

Yoğunluk fonksiyonel teorisi ile ilgili ilk çalışma 1927 yılında Thomas ve Fermi tarafından yapılmıştır. Bu modelde; elektronların toplam enerjisi, elektron yoğunluğunun bir fonksiyonu olarak ifade edilir.

Thomas ve Fermi; elektronların kinetik enerjisini, elektron yoğunluğunun bir fonksiyonu olarak

$$T_{TF}[\rho(\vec{r})] = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{2/3} \int \rho^{5/3}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (3.18)$$

denkleminde olduğu gibi vermiştir. Elektron-çekirdek ve elektron-elektron etkileşme potansiyeli terimleri kinetik enerjiye eklenirse

$$E^{TF}[\rho(\vec{r})] = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{2/3} \int \rho^{5/3}(\vec{r}) d\vec{r} - Z_A \int \frac{\rho(\vec{r}_i)}{r_{iA}} d\vec{r}_i + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\vec{r}_i)\rho(\vec{r}_j)}{r_{ij}} d\vec{r}_i d\vec{r}_j \quad (3.19)$$

toplam enerji elde edilir.

Denklem 3.19'da görüldüğü gibi Thomas Fermi modeli kinetik enerji için kaba bir yaklaşım kullanmaktadır. Toplam enerjiye değiş-tokuş ve korelasyon etkilerinden gelebilecek katkılar hesaba katılmamaktadır (Koch ve Holthausen, 2001).

### 3.1.7. Hohenberg-Kohn teoremi

1964 yılında Hohenberg ve Kohn tarafından ifade edilen bu teorem, yoğunluk fonksiyonel teorisinin temelini oluşturur.

Etkileşen elektronlardan oluşan tuzaklanmış bir sistem için rölativistik olmayan zamandan bağımsız Hamiltoniyen; kinetik enerji, dış tuzaklama potansiyeli (yani elektron-çekirdek etkileşme potansiyeli) ve Coulomb etkileşme potansiyelinin toplamı olarak yazılabilir:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}_{ext} + \hat{V}_{ee} \quad (3.20)$$

Hohenberg-Kohn teoremine göre; dış potansiyel  $V_{ext}$  ve taban durumu elektron yoğunluğu  $\rho(\vec{r})$  arasında birebir bir ilişki vardır (Hohenberg ve Kohn, 1964). Varyasyonel ilkesi kullanılarak bu kolayca ispatlanabilir. Dış potansiyel Hamiltoniyeni sabitlediği için, elektron yoğunluğu Hamiltoniyenden elde edilebilen sistemin tüm özelliklerini tam olarak belirler yani herhangi bir gözlenebilir beklenen değeri taban durumu yoğunluğunun tek bir fonksiyoneldir (Räsänen, 2004).

Hohenberg-Kohn teoremi aynı zamanda, gerçek taban durumu enerjisinin enerji fonksiyonelinin minimize edilmesiyle elde edilebileceğini ifade eder.

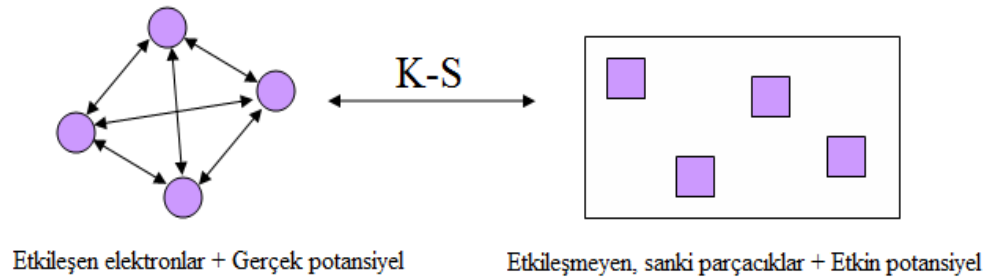
$$E[\rho] = \langle \psi[\rho] | (\hat{T} + \hat{V}_{ext} + \hat{V}_{ee}) | \psi[\rho] \rangle = F_{HK}[\rho] + \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) \hat{V}_{ext} \quad (3.21)$$

Burada  $F_{HK}[\rho]$ , elektron yoğunluğunun bir fonksiyoneli olup evrenselidir ve Hohenberg-Kohn fonksiyoneli olarak ifade edilir. Kinetik enerji ile elektron-elektron etkileşme enerjisi içerir. Dış potansiyele bağlı değildir (Hohenberg ve Kohn, 1964).

$$F_{HK}[\rho] = \langle \psi[\rho] | (\hat{T} + \hat{V}_{ee}) | \psi[\rho] \rangle \quad (3.22)$$

### 3.1.8. Kohn-Sham teoremi

Kohn-Sham şeması, Hohenberg-Kohn yoğunluk fonksiyonel teorisi içerisinde çok parçacık elektronik problemini çözmede oldukça kullanışlı bir yöntemdir. Bu yöntemde göre; çok parçacık etkileşen elektron sistemi aynı taban durum yoğunluğuna sahip Kohn-Sham sistemi olarak ifade edilen hayali bir etkileşmeyen elektron sistemine eşleştirilir (Şekil 3.2). Etkileşmeyen sistemdeki elektronlar Kohn-Sham potansiyeli olarak adlandırılan farklı bir dış potansiyelde hareket ederler (Kohn ve Sham, 1965).



Şekil 3.2. Kohn-Sham şeması

Değiş-tokuş ve korelasyon etkilerini de içeren  $F[\rho]$  fonksiyoneli, Kohn ve Sham (1965) tarafından aşağıdaki gibi düzenlenmiştir:

$$F[\rho] = T_0[\rho] + \frac{1}{2} \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) V_H(\vec{r}) + E_{xc}[\rho] \quad (3.23)$$

Burada,  $T_0[\rho]$  etkileşmeyen elektronların kinetik enerjisi,  $V_H(\vec{r})$  elektronların klasik elektrostatik (Hartree) potansiyeli ve  $E_{xc}[\rho]$  ise çok parçacık etkilerini içeren değiş-tokuş korelasyon enerjisidir. Enerji fonksiyonelinin varyasyoneli

$$\frac{\delta E[\rho]}{\delta \rho(\vec{r})} = \frac{\delta T_0}{\delta \rho(\vec{r})} + V_{ext}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho(\vec{r})} \quad (3.24)$$

ifadesini sağlar. Dış potansiyel, klasik elektrostatik potansiyel ve değiş-tokuş korelasyon potansiyelinden oluşan,  $V_{KS}(\vec{r})$  ile gösterilen Kohn-Sham potansiyeli aşağıdaki gibidir.

$$V_{KS}(\vec{r}) = V_{ext}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{xc}(\vec{r}) \quad (3.25)$$

Hartree potansiyeli;

$$V_H(\vec{r}) = \int d\vec{r}' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (3.26)$$

ve değiş-tokuş korelasyon potansiyeli;

$$V_{xc}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho(\vec{r})} \quad (3.27)$$

şeklindedir.

Ortonormal  $\psi_i$  Kohn-Sham orbitallerine göre Denklem 3.24'deki toplam enerji ifadesinin minimizasyonundan tek elektron Schrödinger denklemi elde edilir. Bu denklem, Kohn-Sham denklemi olarak bilinir ve aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$\left[ -\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{KS}(\vec{r}) \right] \psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\vec{r}) \quad (3.28)$$

Burada,  $\varepsilon_i$  Kohn-Sham özdeğerleridir. Hamiltoniyendeki her terim yoğunluğun fonksiyoneli olarak ifade edilir.

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\psi_i(\vec{r})|^2 \quad (3.29)$$

Kendinden tutarlı Kohn-Sham denklemleri (Denklem 3.25, Denklem 3.28 ve Denklem 3.29) tekrarlanarak çözülür ve toplam enerji elde edilir.

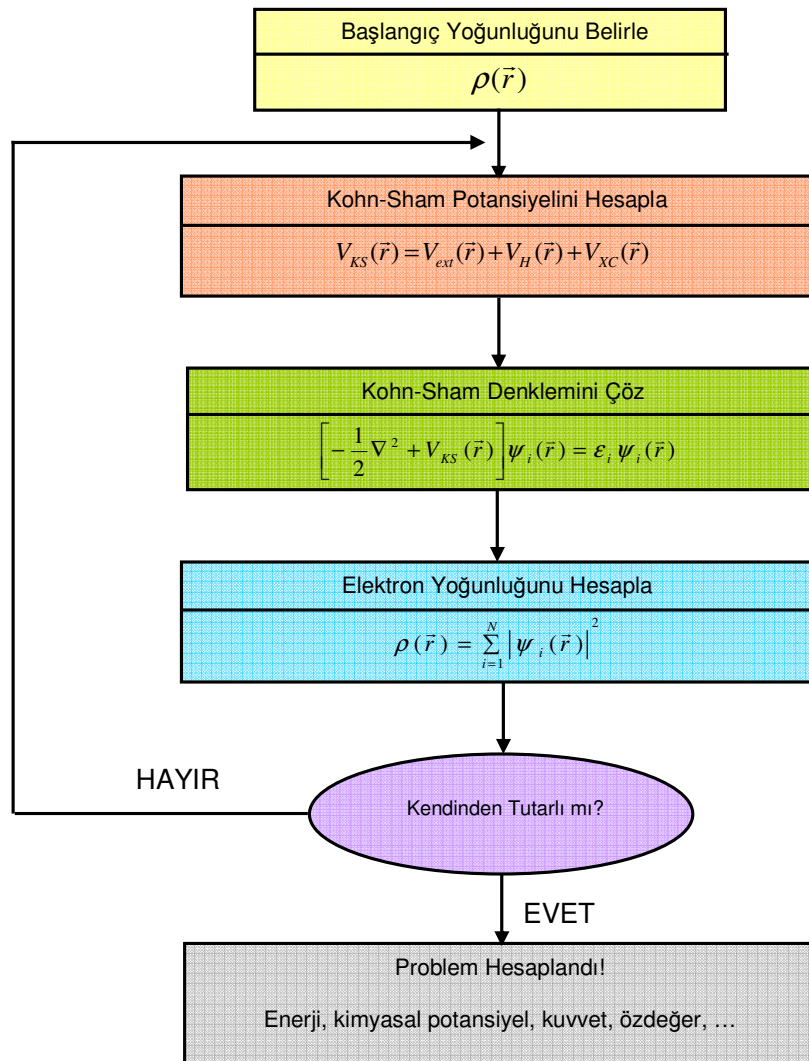
$$E_{toplam} = T_0[\rho] + \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) \left[ V_{ext}(\vec{r}) + \frac{1}{2} V_H(\vec{r}) + V_{xc}(\vec{r}) \right] \quad (3.30)$$

Denklem 3.30 ifadesine göre etkileşmeyen elektronların kinetik enerjisi

$$T_0[\rho] = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \langle \psi_i | \nabla^2 | \psi_i \rangle = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i - \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) V_{KS}(\vec{r}) \quad (3.31)$$

şeklindedir (Räsänen, 2004).

Şekil 3.3, Kohn-Sham denklemlerinin kendinden tutarlı olarak çözümünü göstermektedir. Verilen başlangıç yoğunluğundan Kohn-Sham potansiyeli (3.25) hesaplanır ve ardından Kohn-Sham denklemi (3.28) çözülür. Elde edilen Kohn-Sham orbitalleri ile yeni bir yoğunluk (3.29) elde edilir. Elde edilen yoğunluk ile bir önceki işlemde elde edilen yoğunluk birbirine eşit ya da çok yakın bir değer oluncaya kadar bu işlemlere devam edilir. Hesap bittiğinde elde edilen yoğunluk Denklem 3.30'da yerine yazılarak sistemin toplam enerjisi elde edilir (Thijssen, 1999).



Şekil 3.3. Kohn-Sham sisteminin kendinden tutarlı çözümü

### 3.1.9. Spin yoğunluk fonksiyonel teorisi

Kohn-Sham teorisini dış manyetik alanlardaki spin polarize sistemlere genişletmek için birbirinden bağımsız iki spin yoğunluğundan oluşan elektron yoğunluğunu ( $\rho = \rho_{\uparrow} + \rho_{\downarrow}$ ) ele almak yeterlidir. Bu yoğunlukların her biri kendinden tutarlı Kohn-Sham denklemlerini sağlayan Kohn-Sham spin orbitalleri ile oluşturulur.

$$\left[ -\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{KS,\sigma}(\vec{r}) \right] \psi_{i,\sigma}(\vec{r}) = \epsilon_{i,\sigma}(\vec{r}) \psi_{i,\sigma}(\vec{r}) \quad (3.32)$$

Burada alt indis  $\sigma$  spin bileşenlerini ( $\uparrow$  veya  $\downarrow$ ) ifade eder. Kohn-Sham potansiyeli

$$V_{KS,\sigma}[\rho_{\uparrow}(\vec{r}), \rho_{\downarrow}(\vec{r})] = V_{ext}[\rho(\vec{r})] + V_H[\rho(\vec{r})] + V_{XC,\sigma}[\rho_{\uparrow}(\vec{r}), \rho_{\downarrow}(\vec{r})] \quad (3.33)$$

ve değiş-tokuş korelasyon potansiyeli

$$V_{XC,\sigma}[\rho_{\uparrow}(\vec{r}), \rho_{\downarrow}(\vec{r})] = \frac{\delta E_{XC}[\rho_{\uparrow}(\vec{r}), \rho_{\downarrow}(\vec{r})]}{\delta \rho_{\sigma}(\vec{r})} \quad (3.34)$$

(3.25) ve (3.27) denklemlerinin yeniden düzenlenmesiyle elde edilir ve spin yoğunlukları aşağıdaki ifadeden hesaplanır.

$$\rho_{\sigma}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N_{\sigma}} |\psi_{i,\sigma}(\vec{r})|^2 \quad (3.35)$$

Burada,  $N_{\sigma}$  ifadesi işgal edilen spin orbitallerinin sayısıdır. (Hedin ve Barth, 1972)

Genellikle, değiş-tokuş korelasyon fonksiyonelleri toplam elektron yoğunluğu,

$$\rho(\vec{r}) = \rho_{\uparrow}(\vec{r}) + \rho_{\downarrow}(\vec{r}) \quad (3.36)$$

ve spin polarizasyon (veya manyetizasyon) yoğunluğu

$$\xi(\vec{r}) = \rho_{\uparrow}(\vec{r}) - \rho_{\downarrow}(\vec{r}) \quad (3.37)$$

cinsinden verilir.

Denklem (3.35) ve Denklem (3.36)'da ifade edilen yoğunluk,  $N_{\uparrow}$  ve  $N_{\downarrow}$  olmak üzere iki farklı elektron sayısı içerir.  $N_{\uparrow}$ , spin-yukarı yöndeki elektronların sayısını,

$N_{\downarrow}$  ise spin-aşağı yöndeki elektronların sayısını belirtir. Sistemdeki toplam elektron sayısı

$$N = N_{\uparrow} + N_{\downarrow} \quad (3.38)$$

şeklindedir.  $N_{\uparrow} = N_{\downarrow}$  şeklinde olması zorunlu değildir. Hatta, manyetik ve açık-kabuk sistemler dengesiz bir şekilde spin yönelimlerine sahiptir.  $N_{\sigma}$  değerlerinin, işgal edilen en düşük N için tek parçacık özdeğerlerine göre elde edilmesi gerekir. Bu,  $\varepsilon_F$  Fermi enerjisini tanımlar ve işgal edilen özdurumlar  $\varepsilon_{i,\sigma} < \varepsilon_F$  durumuna sahiptir (Kohanoff, 2006). Bu yaklaşım spin yoğunluk fonksiyonel teorisi (Spin Density Functional Theory, SDFT) olarak bilinir (Hedin ve Barth, 1972).

SDFT'de toplam enerji

$$E_{toplam}[\rho_{\uparrow}(\vec{r}), \rho_{\downarrow}(\vec{r})] = T_0[\rho_{\uparrow}(\vec{r}), \rho_{\downarrow}(\vec{r})] + \int V_{ext}\rho(\vec{r})d\vec{r} + \frac{1}{2} \int V_H\rho(\vec{r})d\vec{r} + E_{xc}[\rho_{\uparrow}(\vec{r}), \rho_{\downarrow}(\vec{r})] \quad (3.39)$$

ve kinetik enerji

$$T_0[\rho_{\uparrow}(\vec{r}), \rho_{\downarrow}(\vec{r})] = -\frac{1}{2} \sum_{\sigma=1}^2 \sum_{i=1}^{N_{\sigma}} \langle \psi_{i,\sigma} | \nabla^2 | \psi_{i,\sigma} \rangle \quad (3.40)$$

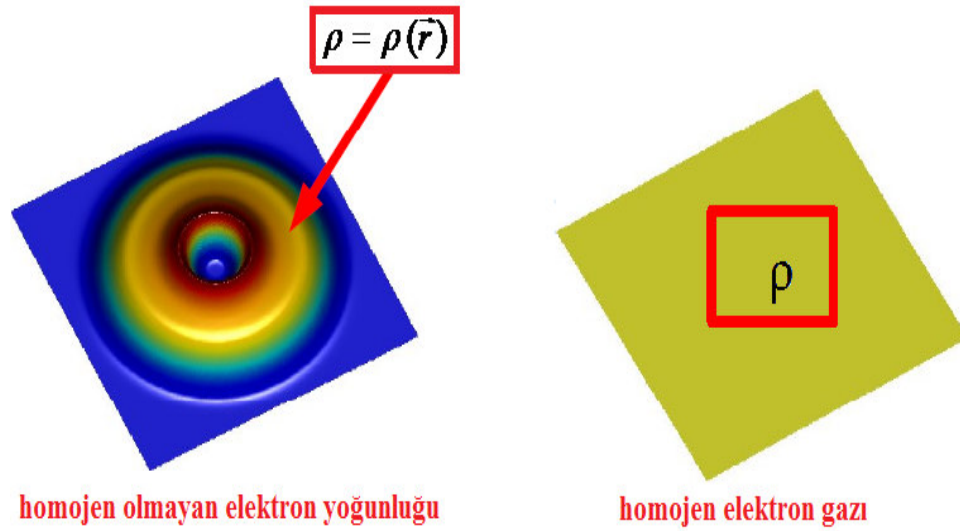
olarak yazılır.

Kohn-Sham denklemleri ile değiş-tokuş korelasyon enerjisini kesin olarak hesaplamak mümkün değildir. Bu terimin tam formu bilinmediği için yoğunluğun fonksiyoneli olarak yazmak zordur. Ancak geliştirilen bazı yaklaşımlarla değeri yaklaşık olarak hesaplanabilir.

### 3.1.10. Değiş-tokuş korelasyon enerjisi için yaklaşımlar

#### 3.1.10.1. Yerel yoğunluk yaklaşımı

Yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA), değiş-tokuş korelasyon enerjisini tanımlamada en basit ve en çok kullanılan metottur. Bu yaklaşımda, yoğunluğu homojen olmayan bir sistemin özellikleri, yerel olarak homojen elektron gazı sisteminin özellikleriyle tanımlanabilir (Şekil 3.4). Uzayda elektron yoğunluğunun çok yavaş değiştiği kabul edilir (Kohn ve Sham, 1965).



Şekil 3.4. Homojen olmayan sistemin homojen elektron gazı sistemiyle analogisi (Räsänen, 2010)

Homojen olmayan sistemdeki değiş-tokuş korelasyon enerjisi;

$$E_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})] = \int \varepsilon_{xc}^{\text{hom}}[\rho(\vec{r})] \rho(\vec{r}) d\vec{r} \quad (3.41)$$

şeklinde yazılır. Burada  $\varepsilon_{xc}^{\text{hom}}$ , elektron yoğunluğu  $\rho(\vec{r})$  olan homojen elektron gazında elektron başına değiş-tokuş korelasyon enerjisidir (Gross ve Dreizler, 1990).

Değiş-tokuş korelasyon potansiyeli, yerel yoğunluğuna bağlı olan değiş-tokuş korelasyon enerjisinin fonksiyonel türevidir. Yerel yoğunluk yaklaşımına göre, değiş-tokuş korelasyon potansiyeli

$$V_{xc}^{LDA}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{xc}[\rho(\vec{r})]}{\delta \rho(\vec{r})} = \varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r})] + \rho(\vec{r}) \frac{d\varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r})]}{d\rho(\vec{r})} \quad (3.42)$$

şeklinindedir (Parr ve Yang, 1989). Burada,  $\varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r})]$  terimi, değiş-tokuş ve korelasyon terimleri olarak iki kısma ayrılabilir. Yani,

$$\varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r})] = \varepsilon_x[\rho(\vec{r})] + \varepsilon_c[\rho(\vec{r})] \quad (3.43)$$

şeklinde değiş-tokuş ve korelasyondan gelen katkıların toplamı olarak yazılabilir (Ceperley ve Alder, 1980).

### 3.1.10.2. Yerel spin yoğunluk yaklaşımı

Manyetik ve açık-kabuk sistemler spin yoğunluk fonksiyonel teorisi (SDFT) ile daha iyi tanımlanır. SDFT’de (3.36) ve (3.37) denklemlerinde ifade edilen toplam elektron yoğunluğu ve spin polarizasyon yoğunluğu ile ilgisi olan  $\rho_{\uparrow}$  ve  $\rho_{\downarrow}$  yoğunlukları rol oynar. Dış potansiyel ve Hartree potansiyeli sadece toplam yoğunluğa  $\rho$  bağlı olmasına rağmen, etkileşmeyen kinetik enerji (Denklem 3.40) için yoğunluk spin-yukarı ve spin-aşağı katkılarından oluşur. Değiş-tokuş korelasyon fonksiyoneli de ayrı ayrı spin yoğunluklarına bağlıdır. Bu nedenle Kohn-Sham potansiyeli spine bağlı olur (Kohanoff, 2006).

Spin polarize sistemler için LDA’nın genişletilmiş biçimi, değiş-tokuş korelasyon enerji yoğunluğunun yeniden düzenlenmesiyle oluşan yerel spin yoğunluk yaklaşımı (Local Spin Density Approximation, LSDA) dır.

$$E_{XC}^{LSDA}[\rho_{\uparrow}(\vec{r}), \rho_{\downarrow}(\vec{r})] = \int \epsilon_{XC}^{\text{hom}}[\rho_{\uparrow}(\vec{r}), \rho_{\downarrow}(\vec{r})][\rho_{\uparrow}(\vec{r}) + \rho_{\downarrow}(\vec{r})] d\vec{r} \quad (3.44)$$

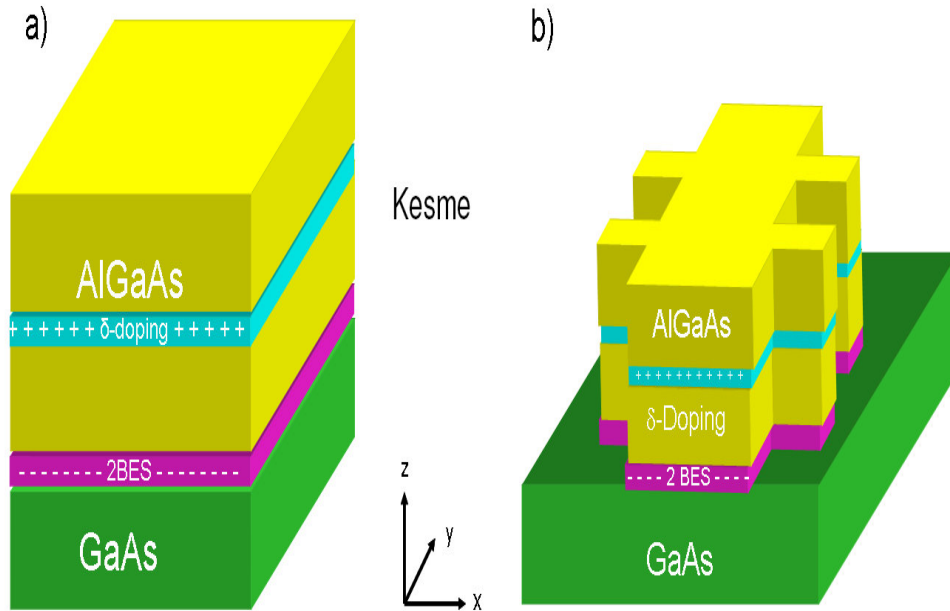
LDA ve LSDA, homojen ve yoğunluğun çok yavaş değiştiği sistemlere uygulandığında oldukça başarılı olmasına rağmen atomlar ve moleküller gibi homojen olmayan sistemlere uygulandığında ise çok iyi sonuçlar elde edilemez (Parr ve Yang, 1989).

## 4. ARAŞTIRMA BULGULARI

### 4.1. GaAs/AlGaAs Heteroyapısının Modellenmesi

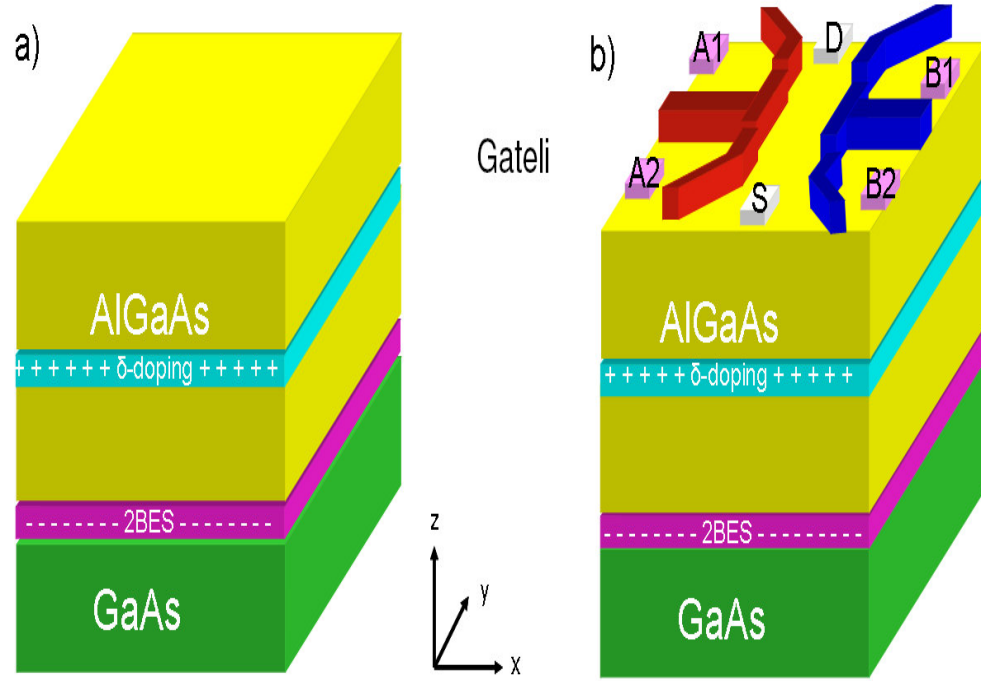
Heteroyapılar yarı iletken malzemelerin üretiminde oldukça sık kullanılan sistemlerdir. Düşük sıcaklıkta iki farklı yarı iletkenin ara yüzeyinde oluşan potansiyel kuyusunda elektronların bir boyuttaki hareketi kısıtlanarak iki boyutlu elektron sistemi oluşturulur. Elektronların hareketini tek boyuta indirgemek için ise metalik kapılara (metallic gate) gerilim uygulama, kimyasal kesme (chemical etching) gibi yöntemler kullanılır.

Kimyasal kesme işlemi, elde edilmek istenilen geometriyi oluşturmak için istenilen derinliğe kadar kimyasal yöntemlerle yapılır. Buna ilişkin bir örnek Şekil 4.1’de verilmiştir. Yüzeyden itibaren gerçekleşecek olan kesme işlemi elektron gazının bulunduğu katmana kadar inilmezse sıg kesme, elektron gazına kadar inilirse derin kesme işlemi olarak ifade edilir.



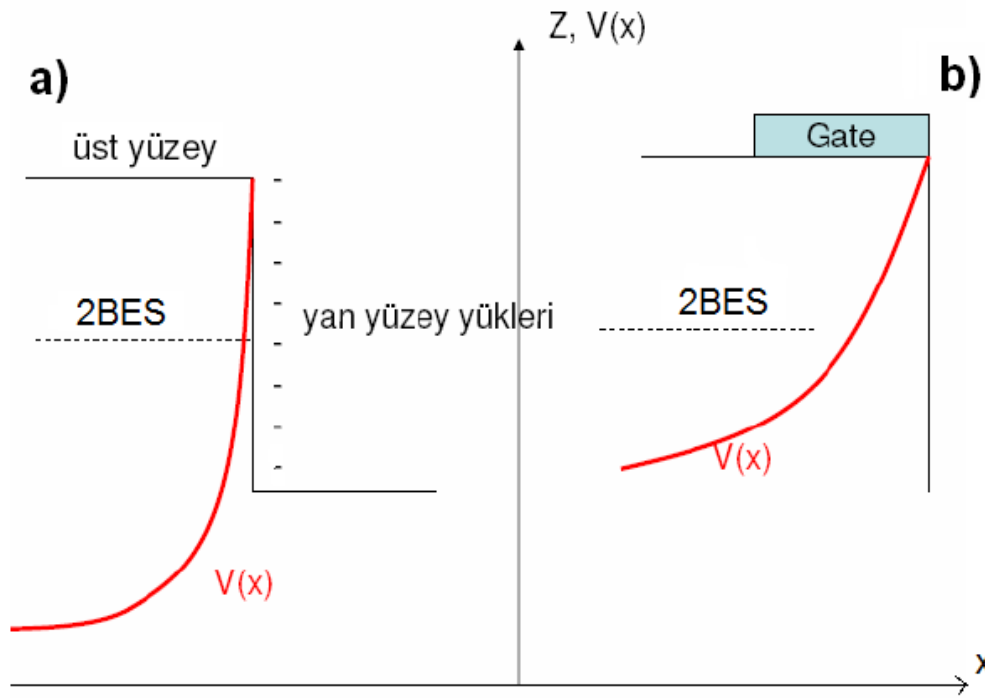
Şekil 4.1. Kesme tanımlı heteroyapının şematik gösterimi. a) Yapının yüzeyinde herhangi bir kapı ve ya bir kesme işlemi olmaksızın gösterimi. Gösterimde tek donör katmanı kullanılmış ve AlGaAs/GaAs arayüzeyde elektron gazı gösterilmiştir. b) Kimyasal kesme işlemi. Kalması istenilen bölgeler maskelenerek korunmuş, diğer bölgeler ise kimyasal kesme işlemi sonucu yapıdan uzaklaştırılmıştır. b)’ de ise kesme işleminin elektron gazına kadar yapıldığı görülmektedir (Siddiki, 2009)

Kapı işleminde iki boyutlu elektron sistemindeki elektron dağılımını belirlemek ve elektrostatik potansiyeli değiştirmek için yüzeye metalik kapılar koyarak negatif veya pozitif gerilim uygulanır. Kapı tanımlı yapılar, örnekte geri dönülmesi mümkün olmayan etkiler yaratmaz. Kuantum nokta kontaklar yüzeyde kapı olarak tanımlanabilir. Buna ilişkin bir örnek Şekil 4.2’de verilmiştir.



Şekil 4.2. Yüzeyde kapı tanımlı heteroyapının şematik gösterimi. a) Yapının yüzeyinde herhangi bir kapı ve ya bir kesme işlemi olmaksızın gösterimi. Gösterimde tek donör katmanı kullanılmış ve AlGaAs/GaAs arayüzeyde elektron gazı gösterilmiştir. b) Yüzeye konulan metalik kontaktların gösterimi (Siddiki, 2009)

Her iki yöntemin ayrı ayrı uygulanması sonucu farklı kenar potansiyel profilleri elde edilir. Kesme işlemi gerçekleştirildiğinde donör katmanından sağlanan elektronların bir kısmı iki boyutlu elektron sistemine gitmek yerine, malzemenin yan yüzeylerine kaçar. Bu elektronlarda elektrostatik olarak elektron sistemindeki elektronlara itici bir kuvvet uygularlar. Bu yan yüzey yüklerinin iki boyutlu elektron sisteminde oluşturduğu potansiyel, kapı uygulanan duruma göre daha keskin bir itici potansiyelin oluşmasını sağlar. Bu durum Şekil 4.3’de gösterilmiştir (Siddiki, 2009; Cicek, 2010).

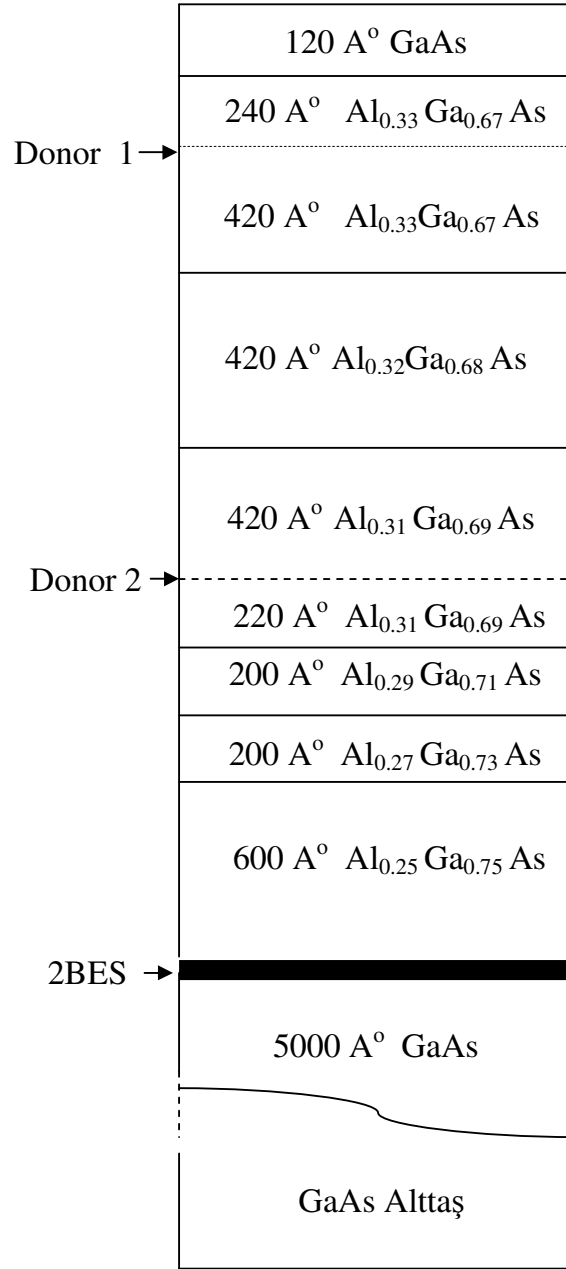


Şekil 4.3. Kesme ve kapı koyma durumunda potansiyelin değişimi. a) Yüzeyden itibaren uygulanan kesme işleminden dolayı oluşan yan yüzey yüklerinin ve bu yan yüzey yüklerinin iki boyutlu elektron sisteminde oluşturduğu potansiyelin gösterimi. b) Yüzeğe yerleştirilmiş kapının oluşturduğu potansiyelin gösterimi (Siddiki, 2009)

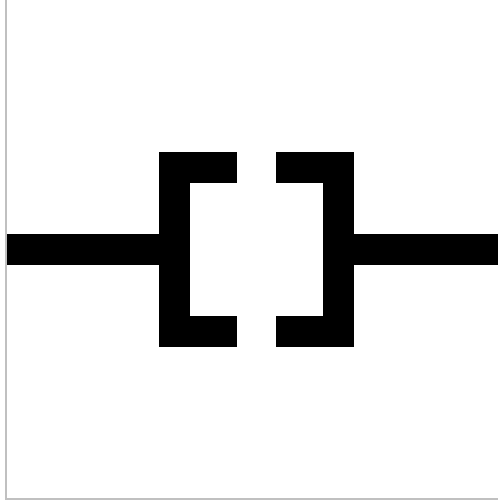
Sistemin yük ve potansiyel dağılımını elde etmek için, Dr. A. Weichselbaum'un tarafından yazılan ve S. Arslan tarafından geliştirilen ve heteroyapıların modellenmesi için kullanılan Poisson denkleminin üç boyutta nümerik çözümünü sağlayan EST3D (Elektrostatic in Three Dimensions) adlı program kullanılmıştır. Gerçeğe yakın bir modelleme olması için sistem parametreleri, yüzey görüntüsü, sınır şartları ve elektron-elektron etkileşmelerinin hesaba katılması gerekir (Arslan vd., 2008).

Bu çalışmada kullanılan heteroyapıya ait katman modeli, V.J. Goldman'ın deneysel çalışmalarda (Goldman vd., 2005; Goldman vd., 2007) kullandığı katman modeli ile aynı seçilmiştir. Ancak kullanılan yüzey görüntüsü ve uygulanan değerler farklıdır. Şekil 4.4'de görülen katman modelinde iki katman Si katkılama yapılmıştır. İlk donör katmanı yüzeyden 40 nm aşağıda, ikinci donör katmanı ise ilk katmandan yaklaşık 120 nm aşağıda seçilmiştir. Yüzeğe yakın kullanılan donör katmanı bu katmandaki elektronların yüzeğe gitmesini ve yüzeyin elektron yoğunluğunun artarak

daha aşağıdaki donör katmanından sağlanacak elektronların ise GaAs/AlGaAs ara yüzeyinde oluşan kuyularda tuzaklanmasını sağlayacaktır. Ortalama elektron yoğunluğu, yapılan donör katkılarının yoğunluğundan, kapılara uygulanan gerilimin büyüklüğünden ve kesme derinliğinden direkt olarak etkilenmektedir. Bu değerlerin uygun seçilmemesi elektron sisteminin oluşamamasına neden olabilir. Yapılan çalışmada yüzey alanı  $5100 \times 5100 \text{ nm}^2$  alınmıştır ve Şekil 4.5’de gösterilmiştir.



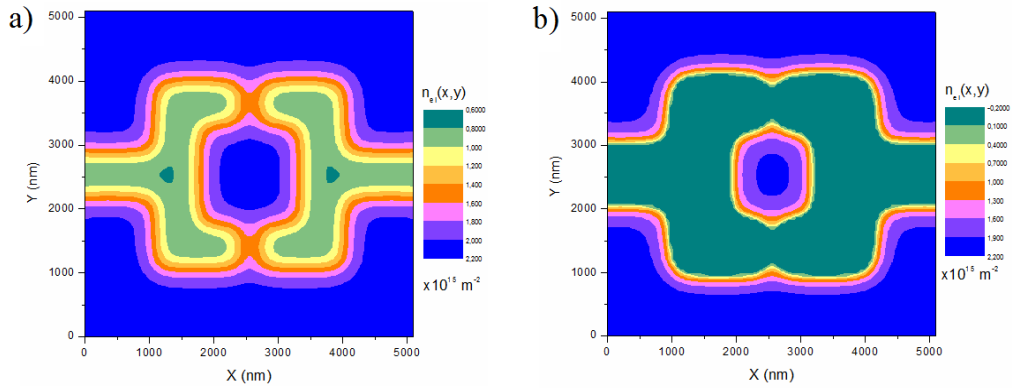
Şekil 4.4. İki boyutlu elektron sistemini elde etmek için kullanılan katman profili (Goldman vd., 2005; Goldman vd., 2007)



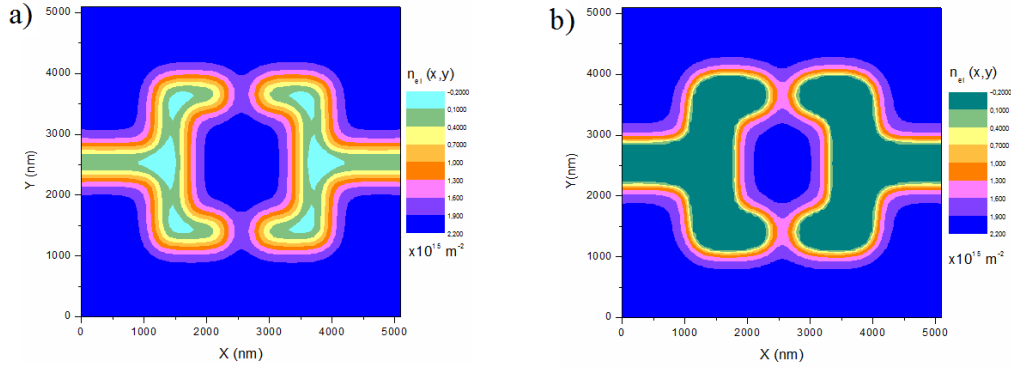
Şekil 4.5. Yüzey görüntüsü (Bu tez kapsamında yapılan çalışmalarda kullanılan örneğin yüzey görüntüsü) (siyah renkli kısımlar)

Şekil 4.5'deki gibi geometrideki örnek için farklı yöntemlerle dış potansiyel uygulanarak (sadece kesme ya da sadece kapı uygulayarak), nümerik yöntemlerle kendinden tutarlı Thomas-Fermi-Poisson yaklaşımı altında hesaplamalar yapılmıştır. Bu hesaplamalar sonucunda aygıt içerisinde, iki boyutlu elektron sisteminin bulunduğu bölgede elektron ve potansiyel dağılımı üç boyutlu uzayda elde edilmiştir.

Şekil 4.6 (a) ve Şekil 4.6 (b) ele alınan 5100 nm boyutlarındaki örnek modeli için yüzeyden aşağıya doğru sırasıyla 20 nm (bir katman) ve 80 nm (dört katman) keserek (etching) elde edilen elektron yoğunluklarının uzaysal dağılımını Şekil 4.7(a) ve Şekil 4.7(b) ise kapılara sırasıyla  $V_g = -1.2$  V ve  $V_g = -1.6$  V negatif potansiyel uygulayarak elde edilen elektron yoğunluklarının uzaysal dağılımını göstermektedir.



Şekil 4.6. Yüzeyden aşağıya doğru kesme uygulanması sonucu elde edilen elektron yoğunluklarının uzaysal dağılımı. a) 20 nm (bir katman), b) 80 nm (dört katman)



Şekil 4.7. Yüzeydeki kapılara negatif gerilim uygulanması sonucu elde edilen elektron yoğunluklarının uzaysal dağılımı. a)  $V_g = -1.2$  V, b)  $V_g = -1.6$  V

#### 4.2. Doldurma Faktörü $\nu = 1, 2$ ve $1/3$ için Sıkıştırılmaz Şeritlerin Yerlerinin ve Kalınlıklarının Belirlenmesi

Sıkıştırılabilir şeritlerin elektrostatik modelinde kenar durumların doldurma faktörüne bağlılığı üzerine analitik hesaplamalar yapılabilmektedir. Teorik çalışmalarında, yarıiletken malzemeye (GaAs/AlGaAs) donör katkılanması sonucu oluşan iki boyutlu elektron gazı (2BEG) sistemi ortaya çıkmaktadır. 2BEG'nin her iki tarafına metalik kontaklar yerleştirmesiyle, kapı (gate) potansiyeli uygulandığında problemi elektrostatik olarak incelemek mümkündür. Kontaklara bir negatif voltaj uyguladığında elektronlar itilerek bir tükenme bölgesi oluşturulur. Metal kontak bölgeleri iletken, elektronlarca boşaltılmış bölgeyi yalıtkan gibi ele alınarak, metal ve yalıtkan bölgelerde ayrı ayrı potansiyel çözümleri elde edilir. Böylece sıkıştırılmaz şeridin (IS) genişliği,  $a_k$ ,

$$a_k = \sqrt{\frac{2\epsilon\Delta E}{\pi^2 e^2 dn/dx|_{x=x_k}}} \quad (4.1)$$

şekindedir. IS genişliği, sisteme manyetik alanın uygulanması ile oluşan Landau seviyelerinin arasındaki enerji farkı  $\hbar\omega_c$  ile elektron dağılımının değişimine  $dn/dx|_{x=x_k}$  ve malzemenin dielektrik sabitine ( $\epsilon$ ) bağlı olarak değişmektedir. Kesirli kuantum Hall etkisi (FQHE) için de tam sayılı kuantum Hall etkisi (IQHE) deki enerji aralığına ( $\hbar\omega_c$ ) benzer bir enerji aralığı vardır, ancak bu enerji aralığını

yaratılan sadece yüksek manyetik alan değil aynı zamanda çok parçacık etkileşimleridir.

Elektronların dağılımı ve

$$n(x) = n_0 \sqrt{\frac{x-l_d}{x+l_d}} \quad (4.2)$$

sıkıştırılmaz şeritlerin olduğu konumlar için

$$x_k = l_d \frac{v_o^2 + k^2}{v_o^2 - k^2} \quad (4.3)$$

ifadeler yukarıdaki gibi elde edilmiştir. Burada  $n_0$  ortalama elektron sayı yoğunluğu,

$k$  şerit numarası ve  $l_d = \frac{V_g \epsilon}{4\pi^2 n_0 e}$  olarak elde edilen tükenme bölgesi genişliğidir.

Yukarıda bahsedilen elektrostatik yaklaşım formülasyonu ile kendinden tutarlı hesaplamalarda geliştirilmiş ve sonuç olarak kuantumlu Hall platoları ve sıkıştırılmaz şeritlerin yapısı arasındaki ilişki gösterilmiştir (Siddiki ve Gerhardt, 2004).

FQHE için IQHE'ye benzer olan enerji boşluğunu kullanarak elektrostatik yaklaşım formülasyonunu FQHE için de genelleştirilmiş ve kesirli kenar durumlarının (sıkıştırılmaz bölgelerin) konumlarını ve genişliklerini hesaplanmıştır. Kesirli sıkıştırılmaz şeritlerin konumları ve genişlikleri ifadeleri aşağıdaki gibi verilmektedir.

$$x_f = l_d \frac{v_o^2 + f^2}{v_o^2 - f^2} \quad (4.4)$$

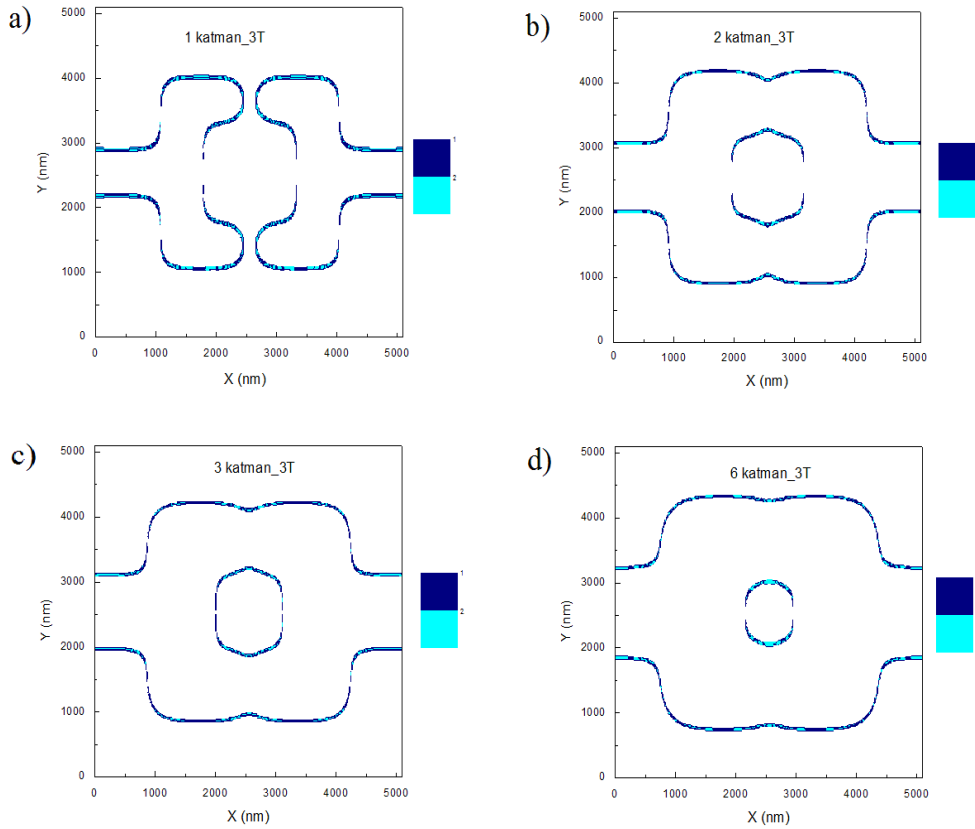
$$a_f = \sqrt{\frac{2\epsilon \Delta E}{\pi^2 e^2 dn/dx|_{x=x_f}}} \quad (4.5)$$

Burada  $\Delta E$  iki quazi Landau seviyesi arasındaki enerji aralığıdır. Bu teorik çalışmalar, nümerik hesaplamalarla birleştirilerek, yarı nümerik IS kenar durum hesaplamaları yapılmaktadır (Chklovskii vd., 1992).

Sıkıştırılmaz şeritlerin yani kenar durumlarının genişlikleri güçlü dik manyetik alanın varlığında doldurma faktörü  $\nu = 1, 2$  ve  $1/3$  'de incelenmiştir. Sıkıştırılmaz şeritlerin uzaysal dağılımını bulmak için farklı Lande  $g^*$  faktörleri ele alınıp, fenomenolojik bir modele dayalı olarak kuantum Hall etkisinin mikroskobik bir resmi ortaya konulmuştur.

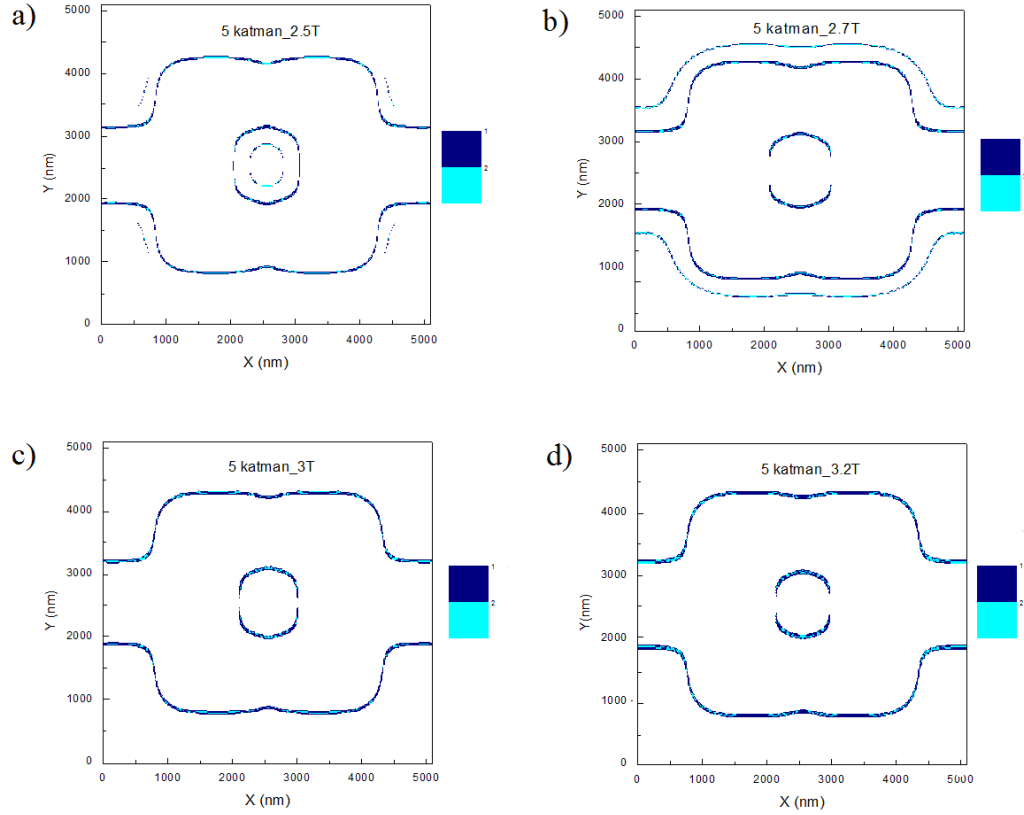
Aşağıda tam sayılı doldurma faktörü  $\nu = 1$  ve  $\nu = 2$  için değişik durumlarda sıkıştırılmaz şeritlerin yerlerini ve kalınlıklarını gösteren durumlar verilmiştir.

i) Manyetik alan 3 Tesla'da sabit tutulup yüzeyden aşağıya doğru değişik katmanlar keserek elde edilen sıkıştırılmaz şeritlerin yerlerini ve kalınlıklarını gösteren durum (Şekil 4.8):



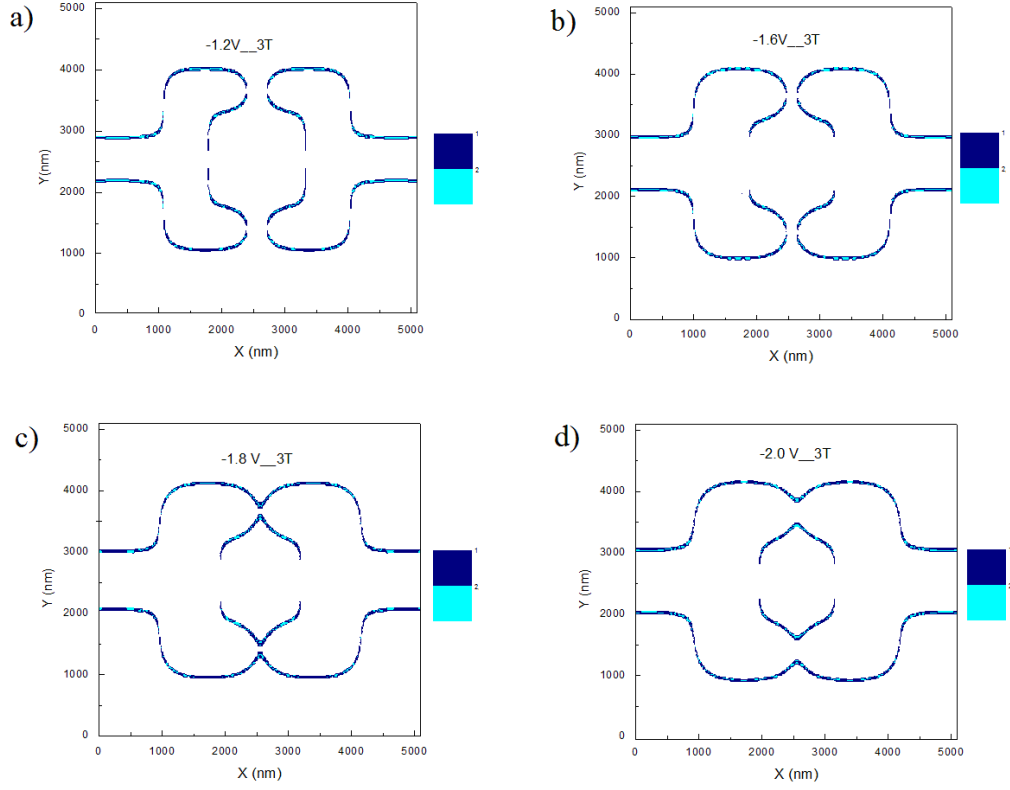
Şekil 4.8. Manyetik alan 3 Tesla'da sabit tutulup yüzeyden aşağıya doğru farklı katmanlar keserek elde edilen sıkıştırılmaz şeritlerin yerleri ve kalınlıkları. a) 1 katman (20 nm), b) 2 katman (40 nm), c) 3 katman (60 nm), d) 6 katman (120 nm)

ii) Yüzeyden aşağıya doğru 5 katman (100 nm) keserek değişik manyetik alanlarda elde edilen sıkıştırılamaz yerlerin yerlerini ve kalınlıklarını gösteren durum (Şekil 4.9):



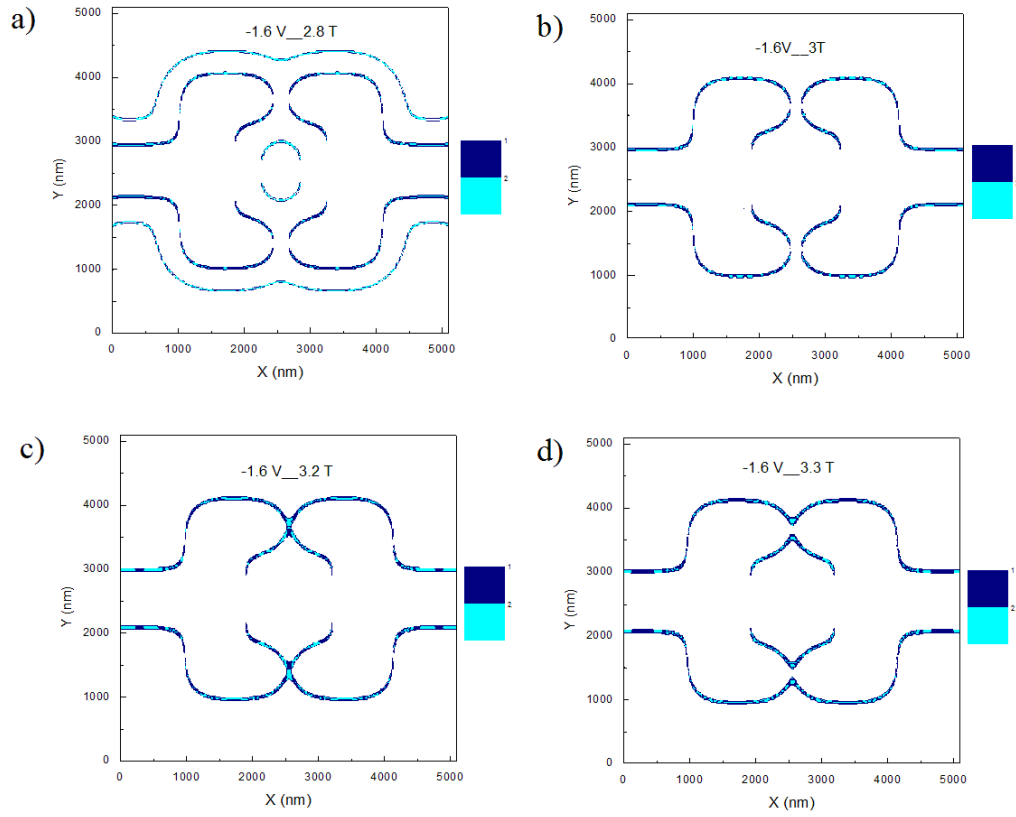
Şekil 4.9. Yüzeyden aşağıya doğru 5 katman (100 nm) keserek ve farklı manyetik alanlar uygulayarak elde edilen sıkıştırılamaz şeritlerin yerleri ve kalınlıkları. a) 2.5 T, b) 2.7T, c) 3T, d) 3.2 T

iii) Manyetik alan 3 Tesla'da sabit tutulduğunda kapılara değişik potansiyeller uygulayarak elde edilen sıkıştırılmaz şeritlerin yerlerini ve kalınlıklarını gösteren durum (Şekil 4.10):



Şekil 4.10. Manyetik alanı 3 Tesla'da sabit tutup kapılara sırasıyla a) -1.2 V, b) -1.6 V, c) -1.8 V, d) -2.0 V potansiyel uygulayarak elde edilen sıkıştırılmaz şeritlerin yerleri ve kalınlıkları

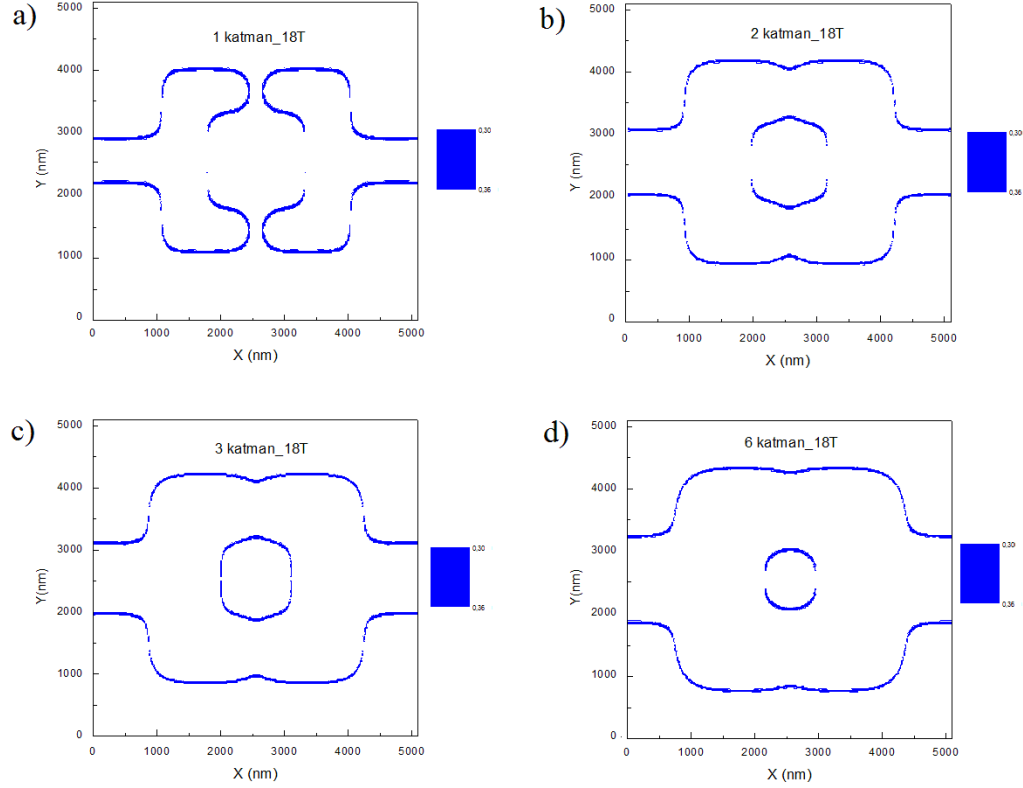
iv) Kapılara sabit  $-1.6$  V potansiyel uygulandığında deęişik manyetik alanlarda sıkıştırılmaz şeritlerin yerlerini ve kalınlıklarını gösteren durum (Şekil 4.11):



Şekil 4.11. Kapılara sabit  $-1.6$  V potansiyel uygulayıp sırasıyla a)  $2.8$ T, b)  $3$ T, c)  $3.2$ T, d)  $3.3$ T manyetik alan altında sıkıştırılmaz şeritlerin yerleri ve kalınlıkları

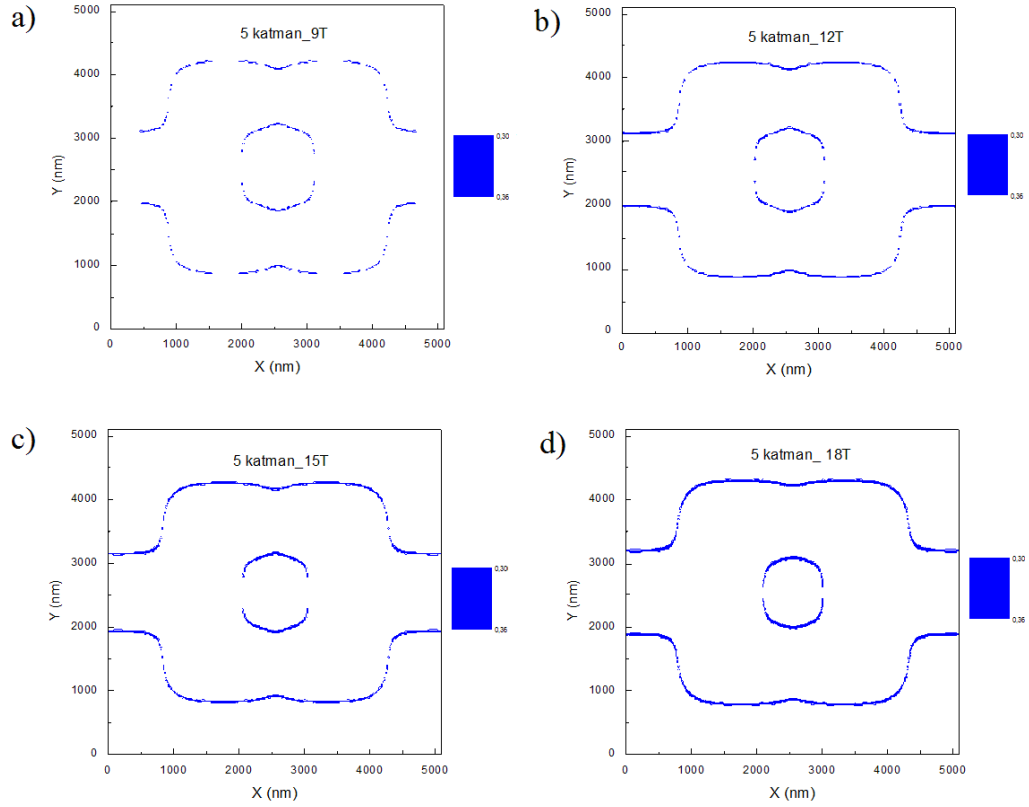
Aşağıda kesirli doldurma faktörü  $\nu = 1/3$  için deęişik durumlarda sıkıştırılmaz şeritlerin yerlerini ve kalınlıklarını gösteren durumlar verilmiştir.

v) Manyetik alan 18 Tesla'da sabit tutulup yüzeyden aşağıya doğru değişik katmanlar keserek elde edilen sıkıştırılmaz şeritlerin yerlerini ve kalınlıklarını gösteren durum (Şekil 4.12):



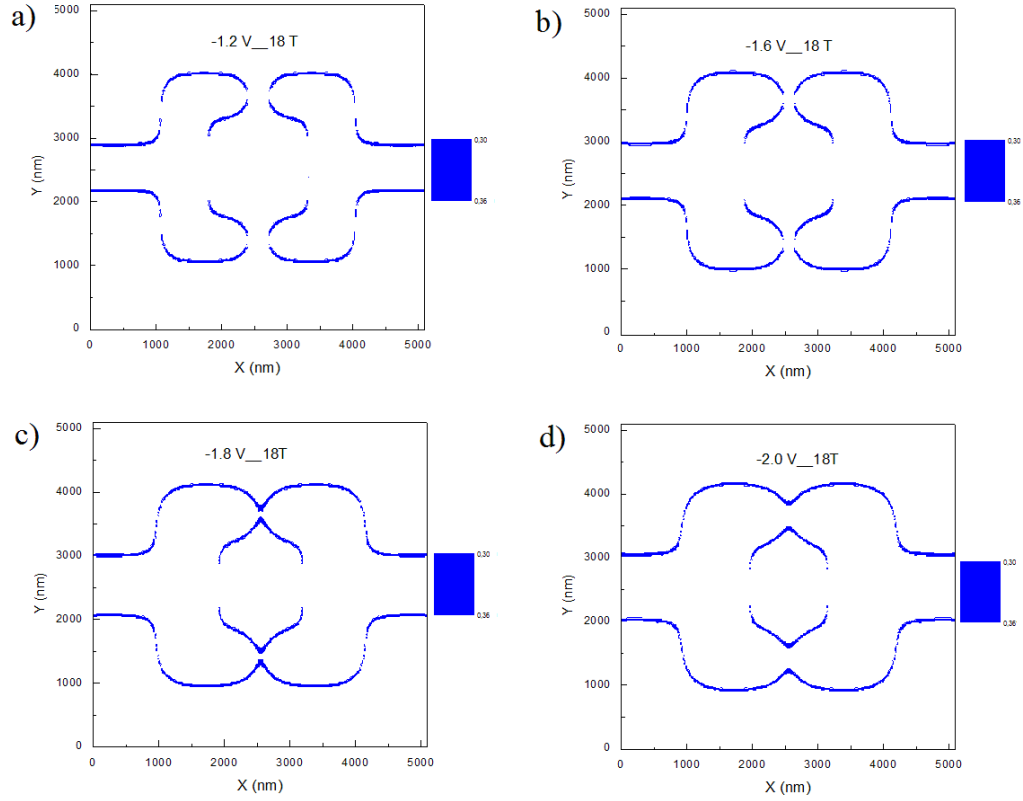
Şekil 4.12. Manyetik alanı 18 Tesla'da sabit tutup yüzeyden aşağıya doğru a) 1 katman (20 nm), b) 2 katman (40 nm), c) 3 katman (60 nm), d) 6 katman (120 nm) keserek elde edilen sıkıştırılmaz şeritlerin yerleri ve kalınlıkları

vi) Yüzeyden aşağıya doğru 5 katman (100 nm) keserek değişik manyetik alanlarda elde edilen sıkıştırılmaz yerlerin yerlerini ve kalınlıklarını gösteren durum (Şekil 4.13):



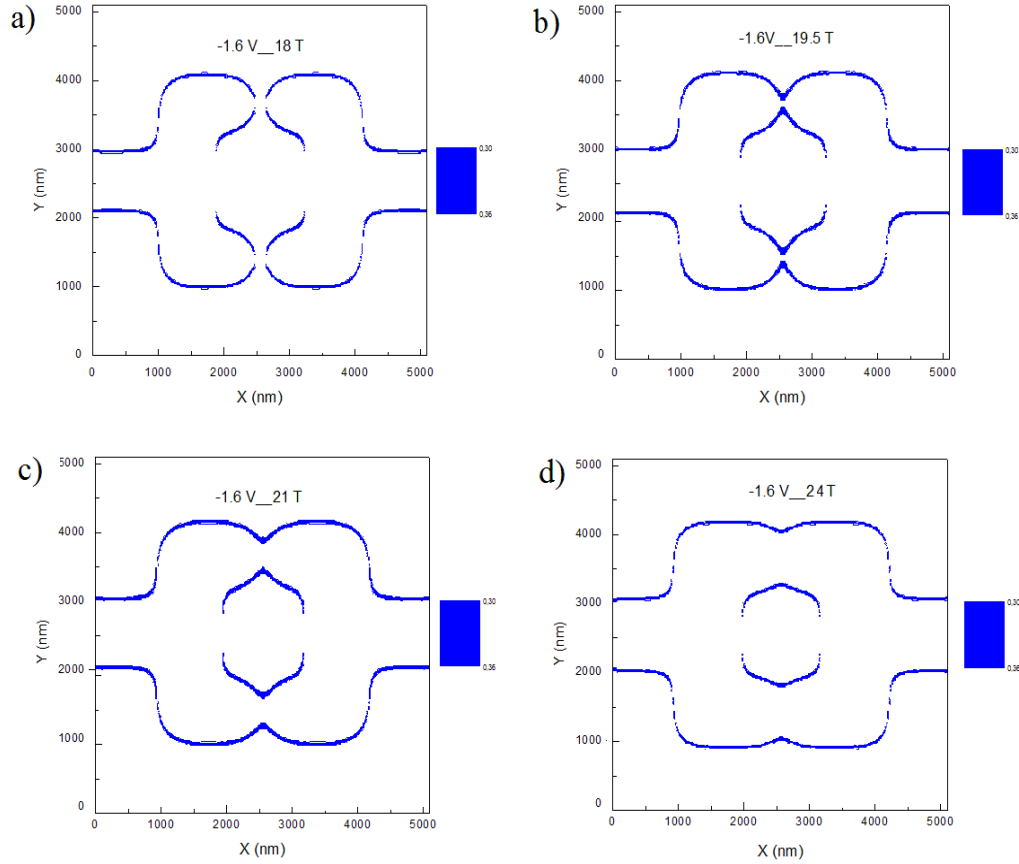
Şekil 4.13. Yüzeyden aşağıya doğru 5 katman (100 nm) keserek ve sırasıyla a) 9 T, b) 12 T, c) 15 T, d) 18 T manyetik alan altında sıkıştırılmaz şeritlerin yerleri ve kalınlıkları

vii) Manyetik alan 18 Tesla'da sabit tutulduğunda kapılara değişik potansiyeller uygulayarak elde edilen sıkıştırılmaz şeritlerin yerlerini ve kalınlıklarını gösteren durum (Şekil 4.14):



Şekil 4.14. Manyetik alanı 18 Tesla'da sabit tutup kapılara sırasıyla a) -1.2 V, b) -1.6 V, c) -1.8 V, d) -2.0 V potansiyel uygulayarak elde edilen sıkıştırılmaz şeritlerin yerleri ve kalınlıkları

viii) Kapılara sabit  $-1.6$  V potansiyel uygulandığında deęişik manyetik alanlarda sıkıştırılmaz şeritlerin yerlerini ve kalınlıklarını gösteren durum (Şekil 4.15):



Şekil 4.15. Kapılara sabit  $-1.6$  V potansiyel uygulayıp sırasıyla a) 18T, b) 19.5T, c) 21T, d) 24T manyetik alan altında sıkıştırılmaz şeritlerin yerleri ve kalınlıkları

### 4.3. Doldurma Faktörü $\nu = 5/2$ için Spin Damlacıklarının Gözlenmesi

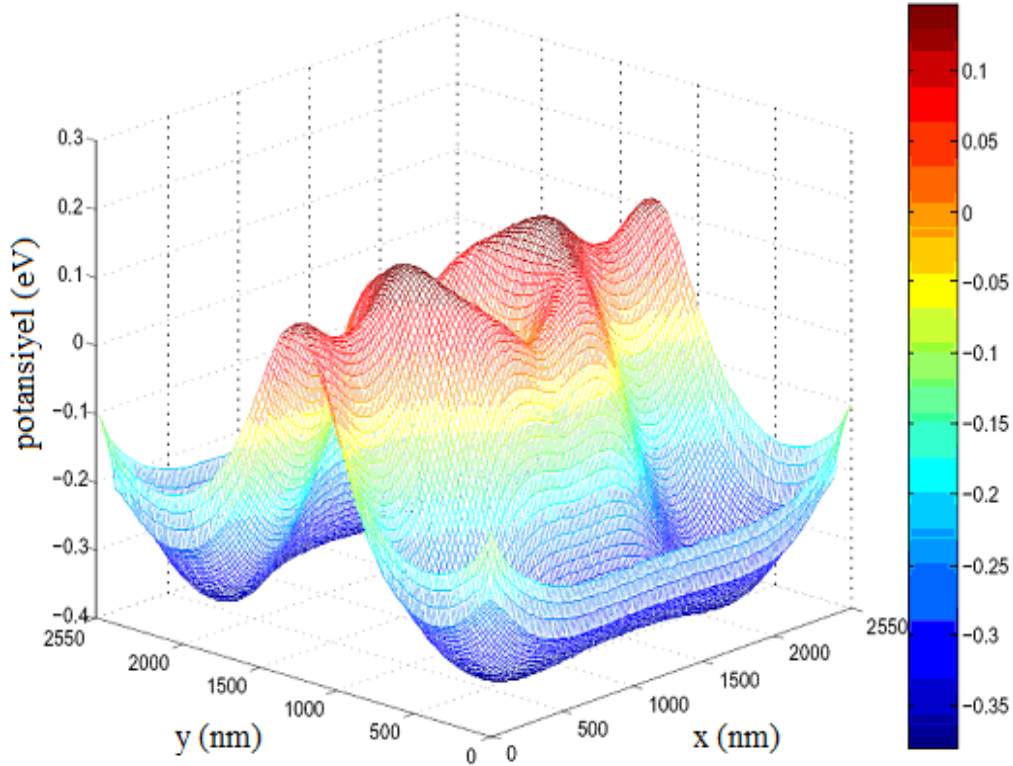
Bu kısımda, hem deneysel hem de teorik çalışmalarda son zamanlarda oldukça ilgi çeken kesirli kuantum Hall olayının doldurma faktörü  $\nu = 5/2$  durumunda spin damlacıklarının (droplets) oluşumu incelenmiştir. Bu oluşum Bölüm 2.6'da anlatılmıştı.

Kesirli kuantum Hall olayının oluşumu elektron-elektron etkileşmelerinin bir sonucu olduğundan, sistemde komplike korelasyon etkilerini dikkate alan nümerik metotlar kullanılmıştır. Kuantum noktaların elektronik yapısını hesaplamak için nümerik olarak çok parçacık metotlarından spin yoğunluk fonksiyonel teorisini

kullanarak Schrödinger denklemi OCTOPUS programıyla çözülmüştür. N tane elektron içeren kuantum nokta sistemi için standart etkin kütle Hamiltoniyeni aşağıdaki gibi tanımlanmıştır:

$$H = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{(\vec{p}_i + e\vec{A})^2}{2m^*} + V_c(r_i) + g^* \mu_B S_{z,i} \right] + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_i} \sum_{i<j} \frac{1}{r_{ij}} \quad (4.6)$$

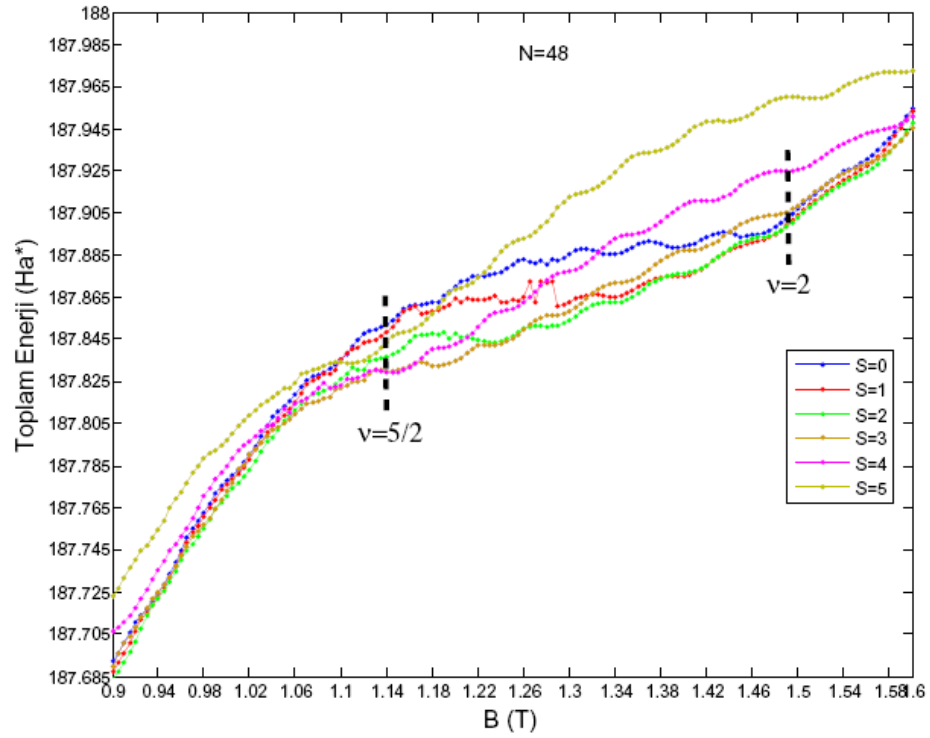
GaAs yarıiletken ortam için etkin malzeme parametreleri  $m^* = 0.067m_e$ ,  $\epsilon = 12.4\epsilon_0$  ve  $g^* = -0.44$  olarak ele alınmıştır. Burada;  $\vec{A}$ , kuantum nokta düzlemine dik homojen  $\vec{B}$  manyetik alanın vektör potansiyelidir. Şekil 4.5'te görülen geometrideki örnek için (burada örnek boyutları  $2550 \times 2550 \text{ nm}^2$  olarak ele alınmıştır) yüzeyden aşağıya 80 nm derinliğe kadar kimyasal yöntemlerle kesme yapılarak nümerik yöntemlerle kendinden tutarlı Thomas-Fermi-Poisson yaklaşımı altında dış potansiyel profili elde edilmiştir. Elde edilen dış potansiyel grafiği Şekil 4.16'da verilmiştir.



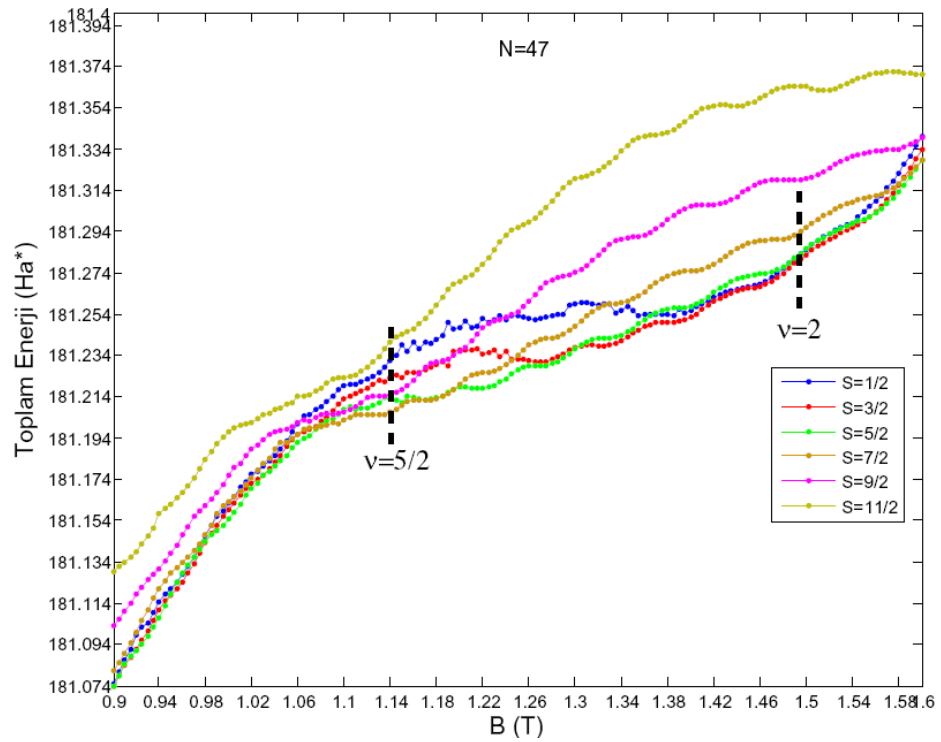
Şekil 4.16. Dış potansiyel

EST3D programından elde edilen potansiyel (Şekil 4.16) ele alınarak OCTOPUS programında, Şekil 4.5’de ifade edilen geometri için oluşturulan kuantum nokta bölgesinde manyetik alan ve spinleri hesaba katan spine dayalı yoğunluk fonksiyonel teorisi ile taban durumunda hesaplamalar yapılmıştır. Yoğunluk fonksiyonel teorisi ile hesaplanan 48 ve 47 elektronlu kuantum noktanın farklı spin durumlarının manyetik alana karşı toplam enerjileri sırasıyla Şekil 4.17 ve Şekil 4.18’de verilmiştir. Kuantum noktada  $\nu \geq 1$  bölgesinde doldurma faktörü  $\nu = 2N / N_{OLL}$  formülü ile tanımlanır. Burada;  $N$  toplam elektron sayısını,  $N_{OLL}$  ise en düşük Landau seviyesindeki ( $OLL$ ) elektronların sayısını ifade etmektedir.  $B < 1.1$  Tesla’daki manyetik alanlarda farklı spin polarizasyonlu çok elektron taban durumlarının dejenereliği oldukça yüksektir. Kuantum noktaların taban durumunun spin polarizasyonu ( $S$ ) yukarı spinlerin toplam sayısından ( $N^\uparrow$ ) aşağı spinlerin toplam sayısı ( $N^\downarrow$ ) çıkarılıp ikiye bölünmesiyle elde edilir. Manyetik alan arttırıldığında, kısmen spin polarize durumlar  $S = 0$  durumuna göre daha düşük enerjidedir. Sonuç olarak,  $B \sim 1.140$  Tesla’da kuantum nokta en yüksek spin polarizasyona ( $S=4$ ) ulaşır. Bu durum, kuantum nokta içerisindeki iki sıkıştırılmaz tamsayılı doldurma faktörü  $\nu = 2$  ve  $\nu = 3$  bölgeleri arasına düşen  $\nu = 5/2$  durumu olarak tanımlanabilir. Spin droplet bölgesi  $5/2 \geq \nu > 2$  aralığına (yani  $1.140 T < B < 1.492 T$  aralığı) karşılık gelmektedir.

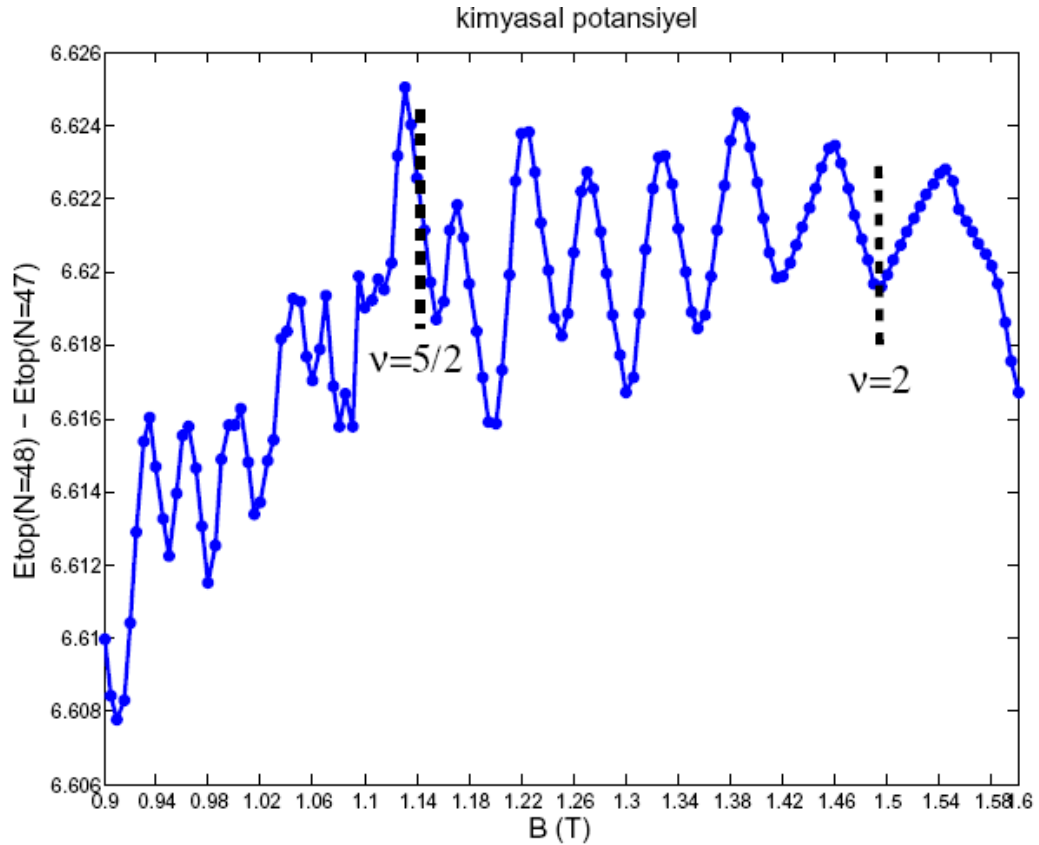
Kimyasal potansiyel,  $N-1$  elektronlu kuantum noktaya girebilmek için  $N$ . elektron tarafından harcanması gereken enerji olarak ifade edilir ve matematiksel olarak  $\mu(N, B) = E_{tot}(N, B) - E_{tot}(N - 1, B)$  olarak verilir. Şekil 4.19, parçacık sayısının 48 olduğu durumda yoğunluk fonksiyonel teorisi kullanılarak manyetik alanın her bir değeri için taban durumu belirlenip elde edilen kimyasal potansiyeli göstermektedir. Kimyasal potansiyeldeki osilasyonlar taban durumu geçişlerine karşılık gelmektedir. Doldurma faktörü  $\nu = 5/2$  ’de osilasyonlar birleşmeye başlayarak basamak özelliği göstermektedir. Bu durum, spin dropletin oluşumunun belirtisi olarak yorumlanabilir. Yapılan bu çalışmanın daha önceden yapılan çalışmalardaki teorik (Räsänen vd., 2008) ve deneysel (Ciorga vd., 2000; Kouwenhoven vd., 1999) sonuçlarla uyum içerisinde olduğu görülmektedir.



Şekil 4.17. Spin droplet bölgesinde yoğunluk fonksiyonel teorisi ile hesaplanan N=48 elektronlu kuantum noktanın spin durumlarının toplam enerjisi

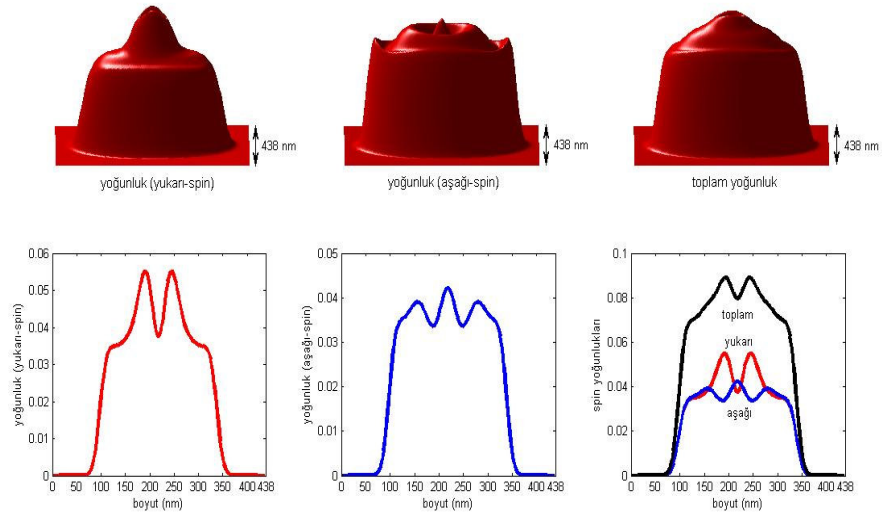


Şekil 4.18. Spin droplet bölgesinde yoğunluk fonksiyonel teorisi ile hesaplanan N=47 elektronlu kuantum noktanın spin durumlarının toplam enerjisi

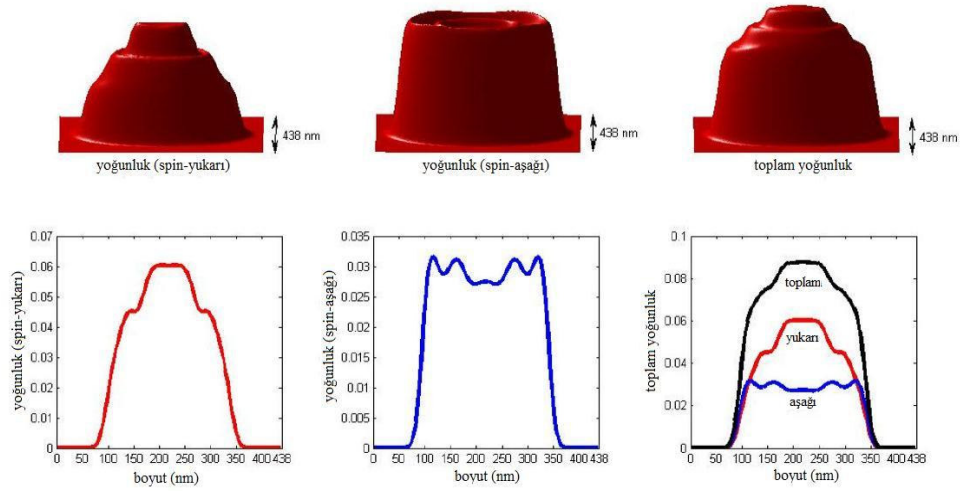


Şekil 4.19.  $N=48$  elektron için DFT ile hesaplanan kimyasal potansiyel

Doldurma faktörü  $\nu = 2$  için  $B = 1.492T$  'da spin yoğunlukları (spin yukarı, spin aşağı ve toplam spin yoğunlukları) ve doldurma faktörü  $\nu = 5/2$  için  $B \sim 1.140 T$  'da spin yoğunlukları (spin yukarı, spin aşağı ve toplam spin yoğunlukları) sırasıyla Şekil 4.20 ve Şekil 4.21'de verilmiştir. Doldurma faktörü  $\nu = 2$  'de spin droplet gözlenmezken, doldurma faktörü  $\nu = 5/2$  'de spin dropletin oluştuğu görülmektedir. Elektronlar spin-eşleşmiş en düşük Landau seviyesi ( $0LL$ ) ve tamamen spin polarize ikinci en düşük Landau seviyesine ( $1LL$ ) yerleşir. Elektronların oldukça düz olan zemine yerleştiği kısım spin-eşleşmiş en düşük Landau seviyesidir. Spin dropletin oluştuğu kısım ise tamamen spin polarize olan ikinci en düşük Landau seviyesidir.



Şekil 4.20. Yoğunluk fonksiyonel teorisi ile hesaplanan 48 elektronlu kuantum noktanın doldurma faktörü  $\nu = 2$  'de spin yoğunlukları



Şekil 4.21. Yoğunluk fonksiyonel teorisi ile hesaplanan 48 elektronlu kuantum noktanın doldurma faktörü  $\nu = 5/2$  'de spin yoğunlukları

## 5. SONUÇLAR ve TARTIŞMA

Bu çalışmada, farklı enerji band yapılarına sahip iki yarı iletkenin oluşan ve son zamanlarda malzeme üretiminde sıklıkla kullanılan GaAs/AlGaAs heteroyapısı ele alınmış ve düşük sıcaklıkta elektronların bir yöndeki hareketi kısıtlanarak bu iki yarı iletkenin ara yüzeyinde iki boyutlu elektron sistemi oluşturulmuştur. Bu durumda elektronlar yalnızca iki boyutta hareket edebilmektedir. Heteroyapının üst yüzeyinden aşağıya doğru belirli miktarda kesme yaparak ya da yüzeyin üzerine metalik kapı koyarak elektronların hareketi tek boyuta indirgenmiştir. İki boyutlu elektron sisteminin bulunduğu yerde sistemin yük ve potansiyel dağılımını elde etmek için üç boyutta Poisson denklemi nümerik olarak çözülmüştür. Bu işlemler sonucunda elde edilen potansiyel dağılımları incelendiğinde; kesme tanımlı durumun potansiyelinin kapı tanımlı duruma göre daha keskin bir şekilde değiştiği görülmüştür. Kesme işlemi gerçekleştirildiğinde elde edilen potansiyelin daha keskin olmasının sebebi, kesme yapıldığında yüzeydeki elektronların bir kısmının yan yüzeylere kaçarak elektrostatik olarak elektron sistemindeki elektronlara itici bir kuvvet uygulamasıdır.

Sıkıştırılamaz şeritlerin kalınlığı potansiyel değişimine bağlıdır. Yumuşak değişen potansiyellerde sıkıştırılamaz şeridin genişliği artmakta, potansiyelin keskin değiştiği bölgelerde sıkıştırılamaz şeridin genişliği daha dar olmaktadır. Elektronların dalga boyu sıkıştırılamaz şeritlerin genişliğinden daha büyük olduğunda bu şeritler gözlenmez. Ayrıca tek elektron interferometrelerinin gözlenebilmesi için kuantum nokta kontakların arasındaki uzaklık başka bir deyişle şeritler arasındaki uzaklık önemli bir parametre olarak ortaya çıkmaktadır. Şeritler arasındaki uzaklık elektronun dalga boyu ile karşılaştırılabilir düzeyde olduğunda tünelleme olayı gerçekleşebilmekte tek elektron girişimi gözlenebilmektedir. Aynı zamanda tünellemenin oluşabilmesi için kenar şeritlerinin birbirine yakın olması gerekmektedir.

Bu çalışmanın ilk kısmında, manyetik alan içerisindeki iki boyutlu elektron sisteminde oluşan akımın aktığı sıkıştırılamaz şeritlerin varlığı analitik ve nümerik yöntemler kullanılarak doldurma faktörü  $\nu = 1, 2$  ve  $1/3$  için incelenmiştir. Dış

potansiyel kesme yöntemiyle uygulandığında elektronlar yüzeyden daha fazla elektron itilmekte ve aygıtın orta bölgesine daha fazla elektron yoğunlaşmaktadır.

İkinci kısımda ise doldurma faktörü  $\nu = 5/2$  durumunda spin damlacıklarının oluşumu nümerik çok elektron metotları kullanılarak incelenmiştir. Özel bir geometri kullanarak elde edilen dış potansiyel dikkate alınarak kuantum nokta bölgesinde manyetik alan ve spinler hesaba katılarak spin yoğunluk fonksiyonel teorisi kullanılmış ve içerisinde 48 ve 47 tane elektron bulunan kuantum noktanın farklı spin durumları için manyetik alana karşılık gelen toplam enerjileri elde edilmiştir. Buna göre; manyetik alan arttırıldığında, kısmen spin polarize durumlar  $S=0$  durumuna göre daha düşük enerjide bulunmuştur. Kuantum nokta spin polarizasyonu  $S=4$ 'de taban durum enerjisine ulaşmıştır. Daha yüksek polarize durumlar  $S=0$  durumundan daha büyük toplam enerji değerlerine sahip olmakta ve uyarılmış Landau seviyelerine karşılık gelmektedirler. Doldurma faktörü  $5/2$  durumu  $B \sim 1.140$  T'ya karşı gelmektedir.  $5/2 > \nu > 2$  arasındaki bölge spin damlacık bölgesi olarak adlandırılmaktadır.

İki boyutlu elektron sisteminde elektronlar düz bir zemine yerleşmekte iken, geometrinin durumuna göre dış potansiyelin de değiştiği kuantum noktalarda elektronlar orta kısımlarda yoğunlaşmaktadır. Bu nedenle elde edilen toplam elektron yoğunluğu incelendiğinde doldurma faktörü  $\nu = 2$  durumunda orta kısımda bir çukur varken (Şekil 4.20), doldurma faktörü  $\nu = 5/2$  durumunda bir düzlüğün oluştuğu (Şekil 4.21) oluşmaktadır.

48 ve 47 parçacık için elde edilen taban durum enerji farkları alınarak kimyasal potansiyel elde edilmiştir. Kimyasal potansiyeldeki osilasyonlar çok parçacık taban durumlarındaki kesikli geçişleri göstermektedir. Bu osilasyon doldurma faktörü  $5/2$ 'de belirginleşmiştir. İşte bu durum spin damlacıklarının varlığını göstermektedir. Böylece bu çalışmanın hem teorik (Räsänen vd., 2008) hem de deneysel (Kouwenhoven vd., 1999; Ciorga vd., 2000) sonuçlarla uyumlu olduğu görülmüştür.

## KAYNAKLAR

- Aharonov, Y., Bohm, D. 1959. Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory. *Phys. Rev.*, 115, (3) : 485-491
- Armiento R., *The Many-Electron Energy in Density Functional Theory*, PhD. Thesis, AlbaNova University Center, 2005.
- Arslan, S., Cicek, E., Eksi, D., Aktas, S., Weichselbaum, A., Siddiki, A. 2008. Modeling of Quantum Point Contacts in High Magnetic Fields and with Current Bias Outside the Linear Response Regime. *Phys. Rev. B*, 78, (12) : 125423/1-15
- Beenakker, C. W. J. 1990. Edge Channels for the Fractional Quantum Hall Effect. *Phys. Rev. Lett.*, 64, (2) : 216-219
- Born M., Oppenheimer, J. R. 1927. Zur Quantentheorie der Molekeln. *Ann. Phys.*, 84: 457-484
- Ceperley, D., Alder, B. 1980. Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method, *Phys. Rev. Lett.*, 45, (7) : 566 – 569
- Chang., A. 1990. A Unified Transport Theory for the Integral and Fractional Quantum Hall Effects: Phase Boundaries, Edge Currents and Transmission/Reflection Probabilities. *Solid State Comm.*, 74, (9) : 871-876
- Chklovskii, D. B., Shklovskii, B. I., Glazman, L. I. 1992. Electrostatics of Edge Channels, *Phys. Rev. B*, 46, (7) : 4026-4034
- Cicek, E., *Bir Boyutlu Elektron Gazının Elektronik Özellikleri*, Doktora tezi, Trakya Üniversitesi, 2010.
- Ciorga, M., Sachrajda, A. S., Hawrylak, P., Gould, C., Zawadzki, P., Julian, S. 2000. Addition Spectrum of a Lateral Dot from Coulomb and Spin-Blockade Spectroscopy, *Phys. Rev. B*, 61, (24) : R16315-R16318
- Das Sarma S., Freedman, M., Nayak, C. 2005. Topologically Protected Qubits from a Possible Non-Abelian Fractional Quantum Hall State. *Phys. Rev. Lett.*, 94, (16) : 166802/1-4
- Dereli, T., Verçin, A., 2009. *Kuantum Mekaniği: Temel Kavramlar ve Uygulamaları*, Türkiye Bilimler Akademisi Ders Kitapları, Ankara, 452s.
- Ezawa, Z., 2008. *Quantum Hall Effects: Field Theoretical Approach and Related Topics*, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore, 706p.
- Gross, E. K. U., Dreizler, R. M., 1990. *Density Functional Theory: An Approach to the Quantum Many-Body Problem*, Springer Verlag Berlin Heidelberg Newyork, 302p.
- Gross, E. K. U., Kurth, S., 2005. *Density Functional Theory*, Encyclopedia of Condensed Matter Physics, 395-402p.
- Goldman, V. J., Camino, F. E., Zhou, W. 2005. Aharonov-Bohm Electron Interferometer in the High Regime. *Phys. Rev. B*, 72, (15) : 155313/1-6
- Goldman, V. J., Camino, F. E., Zhou, W., 2007.  $e/3$  Laughlin Quasiparticle Primary-Filling  $\nu = 1/3$  Interferometer. *Phys. Rev. Lett.*, 98, (7) : 076805/1-4

- Hall, E., 1879. On a New Action of the Magnet on Electric Currents. *Am. J. Math.* 2, (3) : 287-292
- Halperin, B. I. 1982. Quantized Hall Conductance, Current-Carrying Edge States and the Existence of Extended States in a Two-Dimensional Disordered Potential. *Phys. Rev. B*, 25, (4) : 2185-2190
- Hedin, L. and von Barth, U. 1972. A Local Exchange-Correlation Potential for the Spin Polarized Case. *J. Phys. C*, 5, (13) : 1629-1642
- Heiblum, M., Ji, Y., Chung, Y., Sprinzak, D., Mahalu, D., Shtrikman, H. 2003. An Electronic Mach-Zehnder Interferometer. *Nature*, 422 : 415-418
- Hohenberg, P., Kohn, W. 1964. Inhomogeneous Electron Gas, *Phys.Rev.*, 136, (3B) : B864-B871
- Jain, J., 1989. Composite-Fermion Approach for the Fractional Quantum Hall Effect, *Phys. Rev. Lett.*, 63, (2) : 199-202
- Jain, J., 2007. Composite Fermions, Cambridge University Press, UK, 543p.
- Klitzing K. V. 1986. The Quantized Hall Effect. *Rev. Mod. Phys.*, 58, (3) : 519-531
- Klitzing, K. V., Dorda, G., Pepper, M. 1980. New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance. *Phys. Rev. Lett.*, 45, (6) : 494-497
- Koch, W., Holthausen, M. C., 2001. *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*, Wiley-VCH, Weinheim, 293p.
- Kohanoff, J., 2006. *Electronic Structure Calculations for Solids and Molecules: Theory and Computational Methods*, Cambridge University Press, Cambridge, 348p.
- Kouwenhoven, L. P., Oesterkamp, T. H., Janssen, J. W., Austing, D. G., Honda, T., Tarucha, S. 1999. Maximum-Density Droplet and Charge Redistributions in Quantum Dots at High Magnetic Fields. *Phys. Rev. Lett.*, 82, (14) : 2931-2934
- Laughlin, R. B. 1983. Anomalous Quantum Hall Effect: An Incompressible Quantum Fluid with Fractionally Charged Excitations. *Phys. Rev. Lett.*, 50, (18) : 1395-1398
- Miller, J. B., Radu, I. P., Zumbuhl D. M., Levenson-Falk E. M., Kastner, M. A., Marcus, C. M., Pfeiffer, L. N., West K. W. 2007. Fractional Quantum Hall Effect in a Quantum Point Contact at Filling Fraction  $5/2$ . *Nat. Phys.* 3 : 561-565
- Moore, G., Read N. 1991. Nonabelions in the Fractional Quantum Hall Effect, *Nucl. Phys. B*, 360, 362-396
- Parr, R. G., Yang, W. 1989. *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*, Oxford University Press, New York, 333p.
- Pauli, W. 1940. The Connection Between Spin and Statistics. *Phys. Rev.* 58, (8) : 716-722
- Reimann, S. M., Manninen, M., 2002. Electronic Structure of Quantum Dots. *Rev. Mod. Phys.* 74, (4) : 1283-1342

- Räsänen, E., *Electronic Properties of Non-circular Quantum Dots*, PhD. Thesis, Helsinki University of Technology, 2004.
- Räsänen, E., Harju, A., Saarikoski H. 2006. Half-Integer Filling-Factor States in Quantum Dots. *Phys. Rev. Lett.*, 96, (12) : 126805/1-4
- Räsänen, E., Saarikoski, H., Harju, A., Ciorga, M., Sachrajda, A. S. 2008. Spin Droplets in Confined Quantum Hall Systems. *Phys. Rev. B*, 77, (4) : 041302(R)/1-4
- Räsänen, E., 2010. *Spin Droplets and the 5/2 State in Confined Quantum Hall Systems*, Jyväskylä University, Jyväskylä, 18p.
- Sham, L. J., Kohn, W. 1965. Self-consistent Equations Including Exchange Correlation Effects. *Phys. Rev.*, 140, (4A) : A1133-A1138
- Sherrill, D., 2005. *The Born-Oppenheimer Approximation*, Georgia Institute of Technology, 7p.
- Siddiki, A., Gerhardts R. R. 2003. Thomas-Fermi-Poisson Theory of Screening for Laterally Confined and Unconfined Two-Dimensional Electron Systems in Strong Magnetic Fields. *Phys. Rev. B*, 68, (12) : 125315/1-12
- Siddiki, A., Gerhardts R. R. 2004. Incompressible Strips in Dissipative Hall Bars as Origin of Quantized Hall Plateaus. *Phys. Rev. B*, 70, (19) : 195335/1-12
- Siddiki, A., Cicek, E., Mese, A.I., Ulas, M. 2010. Spatial Distribution of the Incompressible Strips at AB Interferometer. *Physica E*, 42, (4) : 1095–1098
- Siddiki, A., 2009. *II. Akyaka Nano-Elektronik Taşınım Toplantısı Ders Notları*, Akyaka, 50s.
- Siddiki, A., vd. 2010. *Multiscale Modelling*, Taylor and Francis, LLC, NW, USA.
- Szabo, A., 1996. *Modern Quantum Chemistry, Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*, Dover Publications, Inc., New York, 466p.
- Thijssen, J. M., 1999. *Computational Physics*. Cambridge University Pres, 546p.
- Tsui, D. C., Stormer, H. L., Gossard, A. C. 1982. Two-Dimensional Magnetotransport in the Extreme Quantum Limit. *Phys. Rev. Lett.*, 48, (22) : 1559-1562
- Wilczek, F. 1982. Magnetic Flux, Angular Momentum, and Statistics. *Phys. Rev. Lett.*, 48, (17) : 1144-1146
- Wilczek, F., 1982. Quantum Mechanics of Fractional-Spin Particles. *Phys. Rev. Lett.*, 49, (14) : 957-959
- Willett, R., Eisenstein, J. P., Störmer, H. L., Tsui, D. C., Gossard A. C., English, J. H. 1987. Observation of an Even-Denominator Quantum Number in the Fractional Quantum Hall Effect, *Phys. Rev. Lett.* 59, (15) : 1776 -1779
- Wu, Y-S. 1984. Multiparticle Quantum Mechanics Obeying Fractional Statistics. *Phys. Rev. Lett.*, 53, (2) : 111-114
- Wu, Y-S., 1994. Statistical Distribution for Generalized Ideal Gas of Fractional-Statistics Particles. *Phys. Rev. Lett.*, 73, (7) : 922-925

**ÖZGEÇMİŞ**

Hüseyin ATCI, 11 Şubat 1986 yılında Milas/Muğla'da dünyaya gelmiştir. İlkokulu 1997 yılında Ekinanbarı İlkokulu'nda, ortaokul ve liseyi 2005 yılında Milas Anadolu Lisesi'nde tamamladı. Aynı yıl Dumlupınar Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü'nü kazandı. Dört yıllık lisans eğitimini üç yılda bölüm birincisi ve fakültede derece yaparak 2008 yılında bitirdi. 2009 yılında ise Muğla Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Ana Bilim Dalı'nda yüksek lisans eğitimine başlamıştır.