ANKARA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

YARIİLETKENLERDE POLARON OLUŞUMU

Ata SEVİM

FİZİK ANABİLİM DALI

ANKARA
2008

Her hakkı saklıdır

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

YARI İLETKENLERDE POLARON OLUŞUMU

Ata SEVİM

Ankara Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Mesude SAĞLAM

Bu çalışmanın amacı yarıiletkenlerde polaron oluşumunu araştırmak ve bunu Gaussiyen kuantum noktalarındaki polaron etkilerine genişletmektir. Bu çalışmada; ilk olarak polaron konusuna giriş yapıldı ve yarıiletkenlerde polaron oluşumu incelendi. Daha sonra Fröhlich Hamiltoniyeni türetildi. Ardından Gaussiyen kuantum noktalarında polaron etkilerinin incelendiği bir örnek sunuldu. Örnekte, öncelikle N-boyutlu V' Gaussiyen potansiyelde hareket eden m Bloch kütleli elektronun, ω_0 frekanslı boyuna optik (LO) fononlarla etkileştiği sistemin Fröhlich Hamiltoniyeni tanımlandı. Burada Feynman birimleri ile çalışıldı. Hesaplamalar Lee-Low-Pines-Huybrechts (LLPH) metodu ile yapıldı. N-boyutta elde edilen sonuçlar iki ve üç boyuta indirgenerek incelendi. LLPH metodu ile elde edilen sonuçlar, Rayleih-Schrodinger Pertürbasyon teorisi (RSPT) ve Feynman-Haken Path-İntegral metodu (FHPIM) ile elde edilen sonuçlarla karşılaştırıldı.

Temmuz 2008, 50 sayfa

Anahtar Kelimeler: Polaron, elektron-fonon etkileşmesi, Fröhlich Hamiltoniyeni, boyuna optik (LO) fonon, Gaussiyen potansiyel, Lee-Low-Pines-Huybrechts (LLPH) metodu.

ABSTRACT

Master Thesis

THE POLARON FORMATION IN SEMICONDUCTORS

Ata SEVİM

Ankara University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Physics

Supervisor: Assoc.Prof. Dr. Mesude SAĞLAM

The aim of this work is to investigate the polaron formation in semiconductors and then extend it to the polaron effects in the Gauusian dots. In this work, first an introduction to the subject of polaron is given and then the polaron formation in semiconductors is studied. Later the Fröclich Hamiltonian is derived. Afterword an example which deals with the polaron effects in the Gauusian dots is given. In that example the Fröclich Hamiltonian is defined for an electron of Bloch mass m moving in an N- dimensional Gauusian potential V' and interacting with the longitudinal optical (LO) phonons of ω_0 frequency. Here the Feynman units are used. The calculations are carried out by Lee-Low-Pines-Huybrechts (LLPH) method. The results that found for N-dimensions are reduced and then anlysed to two and three dimensions. The results obtaied by the LLPH method are compared with that of the Rayleih-Schrodinger Pertürbasyon theory (RSPT) and the Feynman-Haken Path-İntegral method (FHPIM).

July 2008, 50 pages

Key Words: Polaron, electron-phonon interaction, Fröhlich Hamiltonian, longitudinal optical (LO) phonons, Gauusian potential, Lee-Low-Pines-Huybrechts (LLPH) method.

TEŞEKKÜR

Yüksek lisans tez çalışmalarım sırasında gösterdiği büyük ilgi ve yardımlarından dolayı değerli danışmanım sayın Prof. Dr. Mesude SAĞLAM'a, yararlı tartışmalarından dolayı Sayın Prof. Dr. Ashok CHATTERJEE ve eşi Soma MUKHOPADHYAYA'a ve Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü'nün tüm personeline teşekkürlerimi sunarım.

Ayrıca, çalışmalarım sırasında ilgisini ve desteğini benden esirgemeyen değerli arkadaşım Sibel ERCİYAS'a ve her türlü desteğini benden esirgemeyen aileme teşekkür ederim.

Ata SEVİM
Ankara, Temmuz 2008

İÇİNDEKİLER

ÖZET ..... **i**
ABSTRACT ..... **ii**
TEŞEKKÜR ..... **iii**
SİMGELER DİZİNİ ..... **v**
ŞEKİLLER DİZİNİ ..... **vi**
1. GİRİŞ **1**
2. FRÖHLICH HAMİLTONİYENİ **9**
3. GAUSSYEN KUANTUM NOKTASINDA POLARON ETKİLERİ **17**
3.1 Model **17**
3.2 Formülasyon **18**
3.2.1 Rayleih-Schrodinger Pertürbasyon Teorisi (RSPT) **18**
3.2.2 Feynman-Haken Yol İntegrali Metodu (FHPIM) **24**
3.2.3 Lee-Low-Pines-Huybrechts (LLPH) Metodu **25**
4. SAYISAL SONUÇLAR VE TARTIŞMA **31**
5. MATERYAL VE YÖNTEM **46**
6. SONUÇ **47**
KAYNAKLAR **49**
ÖZGEÇMİŞ **50**

SİMGELER DİZİNİ

$b_{\vec{q}}^{+}(b_{\vec{q}})$	Fonon yaratma (yoketme) operatörler
$c_{i\sigma}^{+}(c_{j\sigma})$	Elektron yaratma (yok etme) operatörleri
K	Dalga vektörü
m_e	Elektron kütlesi
m^*	Elektronun etkin kütlesi
e	Elektron yükü
α	Çiftlenim sabiti
V	Kristal hacmi
ε_∞	Yüksek frekans dielektrik sabiti
ε	Statik dielektrik sabiti
$\|0\rangle$	Örgünün fonon içermeyen durumu
t_{ij}	Hopping integrali
$n_{i\sigma}$	Elektron sayı operatörü
X	Konum operatörü
P	Momentum operatörü
r_p	Polaron yarıçapı
$\vec{r}_{el}$	Elektron yarıçapı
μ	Kimyasal potansiyel
$\rho(\vec{r})$	Olasılık yoğunluğu
$V(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$	İyonik potansiyel
$\vec{P}(\vec{r})$	Polarizasyon vektörü
$\vec{E}$	Elektrik alan vektörü
$\vec{D}$	Elektriksel yer değiştirme vektörü
$\xi_{\vec{q}}$	Elektron fonon etkileşme katsayısı
l	Efektif uzaklık
H_{eff}	Efektif Hamiltoniyen

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 4.1 Feynman birimlerinde, polaron self-enerjisinin, tuzaklama Gaussiyen potansiyelinin genişliğine göre grafiği 31
Şekil 4.2 Feynman birimlerinde, polaron self-enerjisinin $V_0 = 10,20,30$ için 2- ve 3- boyutta, R'nin fonksiyonu olarak grafiği 32
Şekil 4.3 Feynman birimlerinde 2- ve 3-boyutlu gaussyen kuantum noktalarında, polaron self-enerjisinin, $V_0 = 10$ ve $\alpha = 0.01,0.02,0.03$ için, R'nin fonksiyonu olarak grafiği 34
Şekil 4.4 Feynman birimlerinde, 2- ve 3-boyutta, $\alpha = 1$, $\alpha = 2$ ve $V_0 = 10$ için, polaron self-enerjisinin R'ye göre grafiği 35
Şekil 4.5 Feynman birimlerinde, 2- ve 3-boyutta, $\alpha = 7$ ve $V_0 = 10$ için polaron self-enerjisinin R'ye göre grafiği 36
Şekil 4.6 Feynman birimlerinde, 2- ve 3-boyutlu kuantum noktalarında, $\alpha = 1$ ve V_0'ın üç farklı değeri için polaron self-enerjisinin R'ye göre grafiği 37
Şekil 4.7 3-boyutta, farklı α değerleri ve $V_0 = 10$ için, fonon sayısının R'ye göre grafiği 38
Şekil 4.8 3-boyutta, farklı R değerleri için, fonon sayısının V_0'a göre grafiği..... 39
Şekil 4.9 Farklı R değerleri için fonon sayısının α'ya göre grafiği..... 40
Şekil 4.10 3-boyutta, farklı α değerleri için, polaron yarıçapının R'ye göre grafiği..... 41
Şekil 4.11 Farklı R değerleri için polaron yarıçapının V_0'a göre grafiği 42
Şekil 4.12 Farklı R değerleri için, polaron yarıçapının α'ya göre grafiği 43
Şekil 4.13 V_0'ın farklı değerleri için, polarizasyon potansiyelinin r'ye göre grafiği 44
Şekil 4.14 α'nın birkaç değeri için, polarizasyon potansiyelinin r'ye göre grafiği..... 44
Şekil 4.15 R'nin birkaç değeri için, polarizasyonunun r'ye göre grafiği..... 45

1. GİRİŞ

Son yıllarda iki boyutlu sistemlerde özellikle heteroyapılar, kuantum kuyuları, kuantum telleri ve kuantum noktalarındaki polaron oluşumu çalışmaları giderek önem kazanmıştır (Chen *et al.* 1990, Kotthaus *et al.* 1990, Rudin and Reinecke 1990, Chen *et al.* 1991, Chatterjee *et al*. 2006, Bronold and Fehske 2002). Bu sistemlerde elektron dalga boyunun elektronun sınırlandığı bölgenin boyutu mertebesinde olmasından dolayı da kuantum etkilerinin önemi büyüktür. Bundan dolayı bu sistemler gerek kuantum mekaniksel sonuçlarının test edilmesi gerek nanoteknolojik uygulamalarından dolayı (QD laserler, opto-elektronik aygıtlar, tek elektron transistörler ve kuantum bilgisayarlar) minik bir laboratuar görevi de yaparlar (Sonay *et al.* 2008). Bu sistemlerde metal-yalıtkan geçişleri için polaron etkilerinin öneminin fazla olduğu düşünülmektedir (Govorov *et al.* 2002, Dobrosavljevic and Kotliar 1997). Bu sistemlerden özellikle kuantum noktaları polar yarıiletkenlerden yapıldığı için polaron etkileri büyüktür. Bunun dışında çok yüksek magneto-direnç gösteren CMR (colossal magnetoresistence) yapılarda ve yüksek sıcaklık süper iletkenlerde de polaron etkilerinin büyük olduğu bilinmektedir. Bu çalışmanın amacı özellikle Gaussiyen potansiyelli kuantum noktalar için polaron oluşumunu araştırmaktır.

Polaron kavramı bir iyonik veya polar yarıiletken kristalde bir elektronun hareketine dayalı bir kavramdır. Elektronun, kristalin iyonları ile olan uzun erimli Coulomb etkileşmesi iyonların kendi denge konumlarından uzaklaşması sonucu elektron çevresinde bir polarizasyon alanı oluşturur. Başka bir deyişle elektron, kristalin fonon modları ile çiftlenir. Sonuçta elektronun çevresinde bir fonon bulutu oluşur ve elektronun hareketine bu fonon bulutu da eşlik eder. Elektron ve elektronun hareketine eşlik eden fonon bulutuna (örgü bozukluğuna) birlikte polaron denir.

Polaron problemi için ilk kavramsal yaklaşım 1933 yılında Landau tarafından geliştirildi. Landau, elektronun iyonik kristalin iyonları ile yaptığı Coulomb etkileşmesi sonucu oluşan polarizasyon potansiyelde elektronun kendini tuzaklama düşüncesini tanımladı. Holstein bu düşünce ışığında tek boyutlu moleküler kristal modelini geliştirdi. Holstein'in bu modeli şimdiye kadar polaron konusunda yapılan birçok çalışmanın temelini oluşturdu.

Polarona, polar yarıiletkenlerde boyuna optik fononlarla etkileşen fazla bir yavaş elektron olarak bakılabilir (Kuper and Whitfield 1963, Devreese 1972). Buna göre sistemin toplam Hamiltoniyeni $H = H_L + H_e + H_{int}$ şeklinde yazılabilir. Burada H_L örgü terimini, H_e elektron terimini ve H_{int} elektron-örgü etkileşmesini belirtir. 1950'de Fröclich polaron problemini ele alarak sistemin Hamiltoniyenini

$$H = \sum_k \hbar\omega b_k^+ b_k + \frac{p^2}{2m_e} + \sum_k (V_k b_k e^{ik.r} + V_k^+ b_k^+ e^{-ik.r}) \tag{1.1}$$

şeklinde tasvir etti (Fröclich 1954). Burada birinci terim fonon terimidir (**k** dalga vektörlü fonon için yaratma(yoketme) operatörleri b_k^+ (b_k)'dir). İkinci terim elektron terimidir ve son terim ise elektron-fonon etkileşme terimidir ki burada Einstein yaklaşımındaki fononlar (hepsi aynı ω_0 frekanslı) ile momentumu $\mathbf{p}=\hbar\mathbf{k}$ ve band kütlesi m_e olan elektron arasındaki V_k genlikli etkileşmeyi tanımlar. Burada

$$V_k = -\frac{i\hbar\omega}{k}.\left(\frac{\hbar}{2m_e\omega_0}\right)^{1/4}.\left(\frac{4\pi\alpha}{V}\right)^{1/2} \tag{1.2}$$

ile verilir; V kristalin hacmi, α ise boyutsuz çiftlenim sabiti olup α aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar}\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon}\right)\sqrt{\frac{m_e}{2\hbar\omega_0}} \tag{1.3}$$

Burada ε_∞ ve ε sırasıyla yüksek frekans ve statik dielektrik sabitleridir.

Elektron-fonon etkileşmesi ihmal edildiğinde sistemin Hamiltoniyeni $H_o = H_L + H_e$ olur. Zamandan bağımsız Schrödinger denklemini sağlayan dalga fonksiyonu $\psi_0 = \phi_p|0\rangle = e^{i.\vec{p}.\vec{r}}|0\rangle$'dir. Burada $|0\rangle$ örgünün sıfır nokta (T=0) titreşimlerinin dışında fonon içermeyen boş durumdur (vacum state). ψ_0'a karşı gelen enerji özdeğeri $E_0 = \frac{p^2}{2m_e}$ (burada fononlar için sıfır nokta enerjisi, enerji ekseninin sıfır noktası olarak

alınır). Küçük bir etkileşme teriminin varlığında H'in tedirgeme (pertürbasyon) metodu ile bulunan özdeğerleri; $E=E_0 + \Delta E$ olup

$$\Delta E = -\sum_n \frac{\left|\langle n|H_{\text{int}}|0\rangle\right|^2}{E_n - E_0} \tag{1.4}$$

dır. (1.4) denkleminde H_{int} yerine konulması ile

$$\Delta E = -\alpha\hbar\omega_0 - \frac{\alpha}{6}\frac{p^2}{2m_e} + \mathrm{O}(p^4) \tag{1.5}$$

Şeklinde yazılabilir. Buna göre sistemin toplam enerjisi E

$$\mathrm{E}= E_0 + \Delta E = \frac{p^2}{2m_e}\left\{1 - \frac{\alpha}{6}\right\} - \alpha\hbar\omega_0 + O(p^4) \tag{1.6}$$

olacaktır. Buradan şu sonuca varılabilir: Polaron oluşumunda sistemin enerjisi

$$\mathrm{W_p} = -\alpha\hbar\omega_0 \tag{1.7}$$

kadar azalırken elektronun etkin kütlesi de polaron kütlesi

$$m^* = \frac{m_e}{1 - \alpha/6} \tag{1.8}$$

ile yer değiştirir. Burada α boyutsuz çiftlenim sabitidir. (1.8) denklem ifadesinden şu sonuca varılabilir: Elektron-fonon etkileşmesinin polaron Hamiltoniyeninde tedirgeme (pertürbasyon) terimi olarak ele alınabilmesi için $\alpha < 6$ olması gerekir (Mitra *et al.* 1987). Oysa α'nın 6'dan büyük olduğu durumlar da olabilir ve bunun için de varyasyon teknikleri kullanılmaktadır. Ancak α'nın 6'dan çok daha büyük olduğu durumlar için polaron yarıçapı kavramının verilmesinde yarar vardır.

Sürekli ortam modelinde polaron yarıçapı, r_p, yi bulmak için önce iyonik bir kristal içinde yavaş hareket eden ve iyonlarla etkileşen bir elektron için sistemin toplam enerjisi, polaron enerjisi W_p aşağıdaki gibi üç terimin toplamı olarak yazılabilir.

$$W_p = -\frac{e^2}{\bar{\varepsilon} r_p} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2 m_e r_p^2} + \frac{e^2}{2\bar{\varepsilon} r_p}. \qquad (1.9)$$

Burada $\bar{\varepsilon} = \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon} \right)^{-1}$ etkin dielektrik sabitidir. (1.9) denkleminde birinci terim elektron tarafından oluşturulan örgü bozukluğundan dolayı r_p yarıçaplı küre içindeki toplam +e yükü ile elektronunu toplam potansiyel enerjisidir. İkinci terim ise r_p yarıçaplı potansiyel kuyusu içindeki elektronun kinetik enerjisi $\frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$'dir. Heisenberg belirsizlik bağıntısından ($\hbar k$) momentumu ($\frac{2\pi\hbar}{r_p}$) ile verilir. Böylece Kinetik enerji $\frac{\hbar^2 \pi^2}{2 m_e r_p^2}$ olur. Üçüncü terim ise r_p yarıçaplı kürenin dışında bulunan elektrik alandan gelen enerji olup $\frac{1}{8\pi} \int_{r_p}^{\infty} \bar{\varepsilon} E^2 dV = \int_{r_p}^{\infty} \bar{\varepsilon} \frac{e}{\bar{\varepsilon}^2 r^4}^2 4\pi r^2 dr = \frac{e^2}{2 r_p \bar{\varepsilon}}$ ile ifade edilir. (1.9) ifadesinin r_p'ye göre minimum olması koşulundan

$$r_p = \frac{2\pi^2 \hbar^2 \bar{\varepsilon}}{m_e e^2} \qquad (1.10)$$

elde edilir. (1.10) denkleminin (1.9) denkleminde yerine konulmasından

$$W_p = -\frac{e^2}{2\varepsilon r_p} \qquad (1.11)$$

elde edilir. Denklem (1.11) ve (1.7)'nin karşılaştırılmasından polaron yarıçapı, r_p'nin çiftlenim sabiti α ile ters orantılı olduğu görülür ve ayrıca tedirgeme yönteminin uygulandığı ($\alpha < 6$) durumları için, r_p nin örgü aralığından büyük olduğu ($r_p >> a$)

gösterilebilir ve buna büyük polaron denir. Bunun tersi için ($\alpha >> 6$) polaron yarıçapı örgü aralığı mertebesinde ($r_p \cong a$) olabilir ve bu kez de polarona küçük polaron denir ki bu durumda yukarıda tasvir edilen sürekli ortam yaklaşımı geçerli olmadığı gibi elektron-örgü etkileşmesi çok büyüktür ve tedirgeme terimi olarak ele alınamaz. Bu durumda örgünün kesikli yapısı göz önüne alınmalıdır. Bu kuvvetli çiftlenim durumu için çizgi-integrali ve Green fonksiyonu gibi yöntemler uygulanmışsa da küçük polaronu en iyi tasvir eden model Holstein tarafından verilmiştir (Holstein 1959). Holstein küçük polaron ($r_p \cong a$) için uygun olan bu modeline tek boyutlu moleküler kristal modeli (TBMKM) denir ve küçük polaron koşulunun kristalin band genişliği 2J'nin polaronun bağlanma enerjisinden küçük olduğunda

$$2J < \frac{A^2}{2M\omega_0^2} \tag{1.12}$$

için gerçekleşeceğini gösterdi. Bu koşul küçük polaronun özellikle dar-bant yarıiletkenlerde oluşacağını söyler. TBMKM'de polaron dalga fonksiyonu, ψ sıkı bağ yaklaşımına uygun olarak moleküler dalga fonksiyonu φ'lerin çizgisel toplamı olarak yazılır.

$$\Psi(r, x_1, ..., x_N) = \sum_{n=1}^{N} a_n(x_1, ..., x_N)\ \phi(r - na, x_n) \tag{1.13}$$

Burada ϕ, her bir molekülün bulunduğu moleküler konuma ve o molekülün, x_n koordinatına bağlıdır. Polaron dalga fonksiyonunun bulunması, Denk.(13) deki a_n katsayılarını zamana bağlı Schrödinger denkleminden elde etmekle olur.

$$i\hbar \frac{\partial a_n}{\partial t} = \left[\sum_{m=1}^{N} \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial x_m^2} + \frac{1}{2} M\omega_0^2 x_m^2 + \frac{1}{2} \omega_1^2 x_m x_{m+1} \right) - A x_n \right] a_n - J\left(a_{n+1} + a_{n-1}\right) \tag{1.14}$$

Burada köşeli parantez içindeki ilk terim elektronun yokluğunda örgü Hamiltoniyenidir. Burada fononlar için ($\omega_k^2 = \omega_0^2 + \omega_1^2 \cos ka$) şeklinde bir dispersiyon alınmıştır ve bunun polaron iletimi için zorunlu koşul olduğu da gösterilmiştir. İkinci terim ($-Ax_n$) ise x_n'nin bir çizgisel fonksiyonu olarak kabul edilen elektron-örgü etkileşmesidir. Sağ taraftaki son terim ise elektronik üstüne taşma (overlap) terimidir ki bu kristalin band genişliği 2J ile orantılıdır. TBMKM'de elektron-örgü etkileşmesi tedirgeme terimi olarak ele alınmaz ama J ile orantılı olan bu son terim tedirgeme terimi olarak ele alınır ve böylece α üzerindeki sınırlama da kalkmış olur. Sıfırdan farklı üstüne taşma teriminden dolayı elektron bir konumdan komşu bir konuma (en yakın komşu etkileşmesi) atlayarak sıçrama iletimi (hopping conduction) oluşturur. Holstein TBMKM'ni kullanarak yeterince düşük sıcaklıkta polaronun Bloch tipi bir bant hareketi yapacağını gösterdi. Sıcaklık arttıkça daha fazla saçılma olacağından polaronun ortalama serbest yolu kısalır. Sonuçta geçiş (transition) sıcaklığı $T_t \approx (1/2)\Theta_D$, ($\Theta_D$: Debye sıcaklığı) denilen bir sıcaklığa erişildiğinde ortalama serbest yol örgü aralığına ya çok yaklaşır ki bu noktada Bloch durumları bant özelliğini yitirir ve polaron lokalize olur. Polaronun hareketi bir konumdan başka bir konuma sıçrama şeklindedir. Bu durumda kristal yalıtkan özelliği gösterir.

Yukarıda tasvir edilen TBMKM küçük polaron için oldukça iyi bir model olmakla birlikte iki boyutlu (2D) sistemlerde söz konusu olan yüksek elektron yoğunluğu ve bunun sonucunda ortaya çıkan kuvvetli ilişki (corelation) ve spin etkilerini hesaba katamaz. TBMKM'nin devamı olarak tek boyutta elektron ilişkisini (corelation) ve spin etkilerini ele alan Hamiltoniyen Holstein-Hubbard (HH) Hamiltonyenidir ki bu dar-band kristallerde ilişkili elektronlar için iyi baz oluşturur (Krisna *et al.* 2004).

$$H = -\sum_{<i,j>\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{+} c_{j\sigma} + U \sum_{r} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \omega_0 \sum_{i} b_i^{+} b_i + \sum_{i\sigma} g n_{i\sigma} (b_i + b_i^{+}) \qquad (1.15)$$

burada $c_{i\sigma}^{+}(c_{i\sigma})$ spini σ olan ve i numaralı örgü konumundaki elektron için yaratma (yok etme) operatörünü, $n_{i\sigma}(=c_{i\sigma}^{+}c_{i\sigma})$ elektron sayı operatörünü , t_{ij} hopping integralini ve U, i numaralı konumundaki Coulomb etkileşmesidir. Son olarak $b_i^{+}(b_i)$ ise

dispersiyonsuz olarak düşünülen ω_0 frekanslı optik fonon için yaratma (yok etme) operatörü ve $g = \sqrt{\alpha}\omega_0$ ise elektron-fonon etkileşim sabitidir.

Denklem (1.15) varyasyon yöntemi ile çözülebilir. Varyasyon parametresi ve çiftlenim sabitinin hangi değerleri için sistemin metalik ve hangi değerleri için de yalıtkan özellik göstereceği Chatterjee ve grubu tarafından çalışılmıştır (Chatterjee and Sil 1995, Chatterjee and Mukhopadhyay 2001).

Denk.(1.15)'deki Hamiltoniyen için iki boyutlu sistemleri tasvir edebilmesi önce Holstein-Hubbard (HH) Hamiltonyeninin iki boyutlu sistemler için yazılması ve en azından ($\omega_k^2 = \omega_0^2 + \omega_1^2 \cos ka$) şeklindeki fonon dispersiyon bağıntısının ele alınması gerektiğini düşünülüyor. Bu durumda varyasyon yöntemi kullanarak varyasyon parametresi ve çiftlenim sabitinin hangi değerleri için sistemin metalik ve hangi değerleri için de yalıtkan özellik göstereceğini araştırılacak. Bulunan sonuçlar manyetik alana bağlı metal-yalıtkan geçişleri sonuçları ile karşılaştırılacaktır (Bockstedte and Fisher 1993).

Bu tez çalışmasının ikinci bölümünde ideal iyonik bir kristalde hareket eden yavaş bir elektronun kristaldeki iyonlarla Coulomb etkileşmesi sonucu kristal örgüde meydana gelen örgü bozukluğundan doğan polarizasyon potansiyelindeki Hamiltoniyeni türetilmiştir. İkinci bölümdeki Hamiltoniyen elde edilirken ilk önce klasik elektrodinamiğin temel denklemlerinden yola çıkarak elde edilen Hamiltoniyen, kanonik dönüşümler yardımıyla operatörler cinsinden ifade edilmiştir. Uygun değişken değiştirmeler ile elde edilen Hamiltoniyen boyutsuz formda yazılmıştır. Bu çalışmanın üçüncü bölümü polaron probleminin bir uygulamasını oluşturmaktadır. Üç alt bölümden oluşan üçüncü bölümün ilk alt bölümünde ikinci bölümde elde edilen Fröhlich Hamiltoniyenine ek bir terim olarak bir Gaussiyen potansiyel terimi eklenerek Hamiltoniyen yeniden düzenlenmiştir. İkinci alt bölümde Rayleih-Schrodinger Pertürbasyon Teorisi, Feynman-Haken Yol İntegrali Metodu ve Lee-Low-Pines-Huybrechts Metodu kullanılarak polaronik etkinin elektronun taban durumu enerjisine etkisi tartışılmıştır. Dördüncü bölümde, N boyutta elde edilen polaronik etkiler N = 2 ve N = 3 özel durumları için analitik olarak elde edilmiştir. N = 2 ve N = 3 özel durumları

için polaronik etkinin V_0 potansiyeline, R polaron yarıçapına ve α çiftlenim sabitine göre değişimi grafiklerle belirtilmiş olup karşılaştırılmıştır. Altıncı bölüm olan sonuç bölümünde de bu araştırmalardan çıkan sonuçlar özetle sunulmuştur.

2. FRÖHLICH HAMİLTONİYENİ

Bu bölümde, iyonik bir kristaldeki bir elektron ve ona eşlik eden polarizasyon alanı için Hamiltoniyeni türetmesi verilecektir. Elektronun, örgü üzerindeki etkisini polarizasyon $(\vec{P}(\vec{r}))$ olarak tanımlayabiliriz. Fröhlich, toplam polarizasyonu $(\vec{P}_{top}(\vec{r}))$, optik $(\vec{P}_{op}(\vec{r}))$ ve infrared $(\vec{P}_{ir}(\vec{r}))$ polarizasyonların lineer bir kombinasyonu olarak düşünmüştür.

$$\vec{P}_{top}(\vec{r}) = \vec{P}_{op}(\vec{r}) + \vec{P}_{ir}(\vec{r}) \tag{2.1}$$

Polarizasyon, Basit Harmonik Hareket (B.H.H.) denklemini sağlamaktadır. İlk olarak, elektronun yokluğunda, örgüyü göz önünde bulunduracağız. Bu durumda B.H.H. denklemleri;

$$\ddot{\vec{P}}_{ir}(\vec{r}) + \omega_{ir}^2 \vec{P}_{ir}(\vec{r}) = 0 \tag{2.2}$$

$$\ddot{\vec{P}}_{op}(\vec{r}) + \omega_{op}^2 \vec{P}_{op}(\vec{r}) = 0 \tag{2.3}$$

olur. Burada ω_{ir} ve ω_{op}, infrared ve optik bölge frekanslarıdır. Yavaş elektron için $\vec{B} = 0$ olacağından;

$$\vec{\nabla} \times \vec{P}(\vec{r}) = 0 \tag{2.4}$$

aşikardır. Elektronun varlığında ise B.H.H. denklemleri şu şekildedir;

$$\ddot{\vec{P}}_{ir}(\vec{r}) + \omega_{ir}^2 \vec{P}_{ir}(\vec{r}) = \frac{1}{\gamma} \vec{D}(\vec{r}, \vec{r}_{el}) \tag{2.5}$$

$$\ddot{\vec{P}}_{op}(\vec{r}) + \omega_{op}^2 \vec{P}_{op}(\vec{r}) = \frac{1}{\gamma'} \vec{D}(\vec{r}, \vec{r}_{el}) \tag{2.6}$$

Burada γ ve γ', limit durumlarının göz önünde bulundurulduğu tamsayılardır. $\vec{D}$ ise elektriksel yerdeğiştirme olup, aşağıdaki bağıntıları sağlamaktadır.

$$\vec{\nabla} \times \vec{D} = 0 \tag{2.7}$$

$$\vec{D} = -\vec{\nabla} \frac{e}{|\vec{r} - \vec{r}_{el}|} \tag{2.8}$$

$$\vec{\nabla}.\vec{D} = 4\pi e \delta(\vec{r} - \vec{r}_{el}) \tag{2.9}$$

Klasik elektrodinamiğin genel denklemlerinden $\vec{D} = \vec{E} + 4\pi\vec{P}$ ve $\vec{D} = \varepsilon(\omega)\vec{E}$ 'yi göz önünde bulunduralım. Buradan;

$$\vec{P} = \frac{1}{4\pi}\left(1 - \frac{1}{\varepsilon(\omega)}\right)\vec{D} \tag{5.10}$$

Bağıntısı elde edilir. Statik alan limitinde denklem (2.10)

$$\vec{P} = \frac{1}{4\pi}\left(1 - \frac{1}{\varepsilon}\right)\vec{D} \tag{2.11}$$

olur. Burada ε, statik dielektrik sabitidir. Yüksek frekans limit durumunda $(\omega_{op} >> \omega_{\infty} >> \omega_{ir})$ $\vec{P}_{op}$ aynı statik değere sahip olur.

$$\vec{P}_{op} = \frac{1}{4\pi}\left(1 - \frac{1}{\varepsilon_{\infty}}\right)\vec{D} \tag{2.12}$$

Burada ε_{∞} yüksek frekans dielektrik sabitidir. Statik ve yüksek frekans limit durumlarını birleştirecek olursak;

$$\vec{P}_{ir} = \frac{1}{4\pi}\left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty}} - \frac{1}{\varepsilon}\right)\vec{D} \tag{2.13}$$

sonucuna ulaşırız. $\vec{P}_{op}$ ve $\vec{P}_{ir}$, denklem (2.5) ve (2.6) 'da yerlerine konacak olursa $(\ddot{\vec{P}}_{op}=0, \ddot{\vec{P}}_{ir}=0)$

$$\frac{1}{\gamma}=\frac{\omega_{ir}^2}{4\pi}\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty}-\frac{1}{\varepsilon}\right) \tag{2.14}$$

$$\frac{1}{\gamma'}=\frac{\omega_{op}^2}{4\pi}\left(1-\frac{1}{\varepsilon_\infty}\right) \tag{2.15}$$

elde edilir. Sistemin Lagranjiyeni;

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}_{el}^{\,2}+\int L(\vec{r},\vec{r}_{el})d\vec{r} \\ &= \frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}_{el}^{\,2}+\frac{1}{2}\gamma\int\left[\dot{\vec{P}}_{ir}^{2}(\vec{r})-\omega_{ir}^2\vec{P}_{ir}^{2}(\vec{r})\right]d\vec{r} \\ &\quad +\frac{1}{2}\gamma'\int\left[\dot{\vec{P}}_{op}^{2}(\vec{r})-\omega_{op}^2\vec{P}_{op}^{2}(\vec{r})\right]d\vec{r} \\ &\quad +\int\vec{D}(\vec{r},\vec{r}_{el})\left[\vec{P}_{ir}(\vec{r})+\vec{P}_{op}(\vec{r})\right]d\vec{r} \end{aligned} \tag{2.16}$$

Burada $\vec{r}_{el}$, $\vec{P}_{ir}(\vec{r})$ ve $\vec{P}_{op}(\vec{r})$ karşı gelen konjuge momentumların genelleştirilmiş koordinatlarıdır. $\left[m\dot{\vec{r}}_{el}=\frac{\partial L}{\partial\dot{r}_{el}}, \gamma\dot{\vec{P}}_{ir}(\vec{r})=\frac{\partial L}{\partial\dot{\vec{P}}_{ir}(\vec{r})}, \gamma'\dot{\vec{P}}_{op}(\vec{r})=\frac{\partial L}{\partial\dot{\vec{P}}_{op}(\vec{r})}\right]$

Hamiltoniyeni şu şekilde tanımlanır:

$$H=\sum_{\vec{q}}\vec{p}\dot{\vec{q}}-L \tag{2.17}$$

Burada $\vec{q}$ ve $\vec{p}$ genelleştirilmiş koordinat $(\vec{r}_{el},\vec{P}_{ir},\vec{P}_{op})$ ve momentumdur $(m\dot{r}_{el},\gamma\dot{P}_{ir},\gamma'\dot{P}_{op})$. Toplam işareti, alan değişkenleri üzerinden integrali ifade etmektedir.

$$H = \frac{1}{2} m \dot{\vec{r}}_{el}^{\,2} + \frac{1}{2}\gamma \int \left[\dot{\vec{P}}_{ir}(\vec{r}) + \omega_{ir}^2 \vec{P}_{ir}^{\,2}(\vec{r}) \right] d\vec{r}$$
$$+ \frac{1}{2}\gamma' \int \left[\dot{\vec{P}}_{op}(\vec{r}) + \omega_{op}^2 \vec{P}_{op}^{\,2}(\vec{r}) \right] d\vec{r} \qquad (2.18)$$
$$- \int \vec{D}(\vec{r}, \vec{r}_{el}) \left[\vec{P}_{ir}(\vec{r}) + \vec{P}_{op}(\vec{r}) \right] d\vec{r}$$

Denklem (2.18); $r = r_{el}$ noktasında, $\vec{D} = -\nabla \frac{e}{|\vec{r} - \vec{r}_{el}|}$'den dolayı tanımsızdır. Yavaş elektron için $\ddot{P}$ terimi göz ardı edilir. $\omega_{op}^2 >> \omega_{ir}^2$ olduğundan $\vec{P}_{op}^{\,2} << \vec{P}_{ir}^{\,2}$ dir. Bunu denklem (2.5) ve (2.6)'dan görmek mümkündür. Sonuç olarak polarizasyon alanının optik kısmı, sistemin dinamiğine bir katkısı olmayacağı için, sabit olarak kabul edilebilir. Bu kısım denklem (2.18)'den çıkarıldığında, yavaş elektronun iyonik örgü ile etkileşmesinden doğan Hamiltoniyen şu hale dönüşür:

$$H = \frac{1}{2} m \dot{\vec{r}}_{el}^{\,2} + \int \frac{1}{2}\gamma \left[\dot{\vec{P}}^2(\vec{r}) + \omega^2 \vec{P}(\vec{r}) \right] d\vec{r} - \int \vec{D}(\vec{r}, \vec{r}_{el}) \vec{P}(\vec{r})\, d\vec{r} \qquad (2.19)$$

Burada $\vec{P}_{ir}(\vec{r})$ yerine $\vec{P}(\vec{r})$ ve ω_{ir} yerine de ω kullanılmıştır ve bundan sonra da böyle kullanılacaktır. Birinci terim elektronun Hamiltoniyeni, ikinci terim boyuna optik fononun Hamiltoniyeni, üçüncü terim ise elektron-fonon etkileşme Hamiltoniyeni olup, $-\vec{D}(\vec{r}, \vec{r}_{el}) \vec{P}(\vec{r})$ terimi etkileşme enerji yoğunluğunu ifade etmektedir.

Problemi kuantum mekaniksel açıdan incelemeden önce $\vec{P}(\vec{r})$ ve $\dot{\vec{P}}(\vec{r})$'nin lineer kombinasyonundan oluşmuş, yeni bir alan değişkeni $(\vec{B})$ tanımlamak kullanışlı olacaktır.

$$\vec{B}(\vec{r}) = \left(\frac{\gamma\omega}{2\hbar} \right)^{1/2} \left[\vec{P}(\vec{r}) + \frac{i}{\omega} \dot{\vec{P}}(\vec{r}) \right] \qquad (2.20)$$

$$\vec{B}^{+}(\vec{r}) = \left(\frac{\gamma\omega}{2\hbar} \right)^{1/2} \left[\vec{P}(\vec{r}) - \frac{i}{\omega} \dot{\vec{P}}(\vec{r}) \right] \qquad (2.21)$$

Buradan;

$$\vec{P}(\vec{r}) = \left(\frac{\hbar}{2\gamma\omega}\right)^{1/2}\left[\vec{B}^{+}(\vec{r}) + \vec{B}(\vec{r})\right] \tag{2.22}$$

$$\dot{\vec{P}}(\vec{r}) = \left(\frac{\hbar\omega}{2\gamma}\right)^{1/2} i\left[\vec{B}^{+}(\vec{r}) - \vec{B}(\vec{r})\right] \tag{2.23}$$

elde edilir. Denklem (2.22) ve (2.23)'ü denklem (2.19)'da yerine koyarak, sistemin Hamiltoniyenini yeniden düzenleyebiliriz. İlk olarak denklem (2.19)'un ikinci terimini göz önüne alalım.

$$\frac{1}{2}\gamma\left[\dot{P}^2(\vec{r}) + \omega^2\vec{P}^2(\vec{r})\right]d\vec{r} = \hbar\omega\int \vec{B}^{+}(\vec{r})\vec{B}(\vec{r})d\vec{r} \tag{2.24}$$

Denklem (2.19)'un üçüncü terimini göz önüne alalım. $\vec{\nabla}\times\vec{P}(\vec{r}) = 0$ olduğundan, $\vec{P}(\vec{r}) = -\vec{\nabla}\Phi_p$ olarak düşünebiliriz. Dolayısıyla;

$$\begin{aligned}
-\int \vec{D}(\vec{r},\vec{r}_{el})\vec{P}(\vec{r})d\vec{r} &= -\frac{1}{4\pi}\int \vec{\nabla}\frac{e}{|\vec{r}-\vec{r}_{el}|}\vec{\nabla}\Phi_p(\vec{r})d\vec{r} \\
&= -\frac{1}{4\pi}\left[\int \vec{\nabla}\left(\Phi_p(\vec{r})\vec{\nabla}\frac{e}{|\vec{r}-\vec{r}_{el}|}\right)d\vec{r} - \int \Phi_p(\vec{r})\nabla^2\frac{e}{|\vec{r}-\vec{r}_{el}|}d\vec{r}\right] \\
&= -\frac{1}{4\pi}\left[\int \Phi_p(\vec{r})\nabla\frac{e}{|\vec{r}-\vec{r}_{el}|}\right]d\vec{s} - \int \Phi_p(\vec{r})\nabla^2\frac{e}{|\vec{r}-\vec{r}_{el}|}d\vec{r}
\end{aligned} \tag{2.25}$$

Diverjans teoreminden dolayı ilk terim $\int \Phi_p(\vec{r})\vec{\nabla}\frac{e}{|\vec{r}-\vec{r}_{el}|}d\vec{s}$ şekline dönüşmüştür. $d\vec{s}\to\infty$ için polarizasyon sıfır olacağından sonuç sıfırdır. $\nabla^2\frac{e}{|\vec{r}-\vec{r}_{el}|} = 4\pi\delta(\vec{r}-\vec{r}_{el})$ olduğundan denklem (2.25) şu hale dönüşür:

$$-\int \vec{D}(\vec{r},\vec{r}_{el})\vec{P}(\vec{r})d\vec{r} = e\Phi(\vec{r}_{el}) \tag{2.26}$$

Denklem (2.24) ve (2.26)'yı, denklem (2.19)'da yerine koyalım.

$$H = \frac{1}{2} m \dot{\vec{r}}_{el}^{2} + \hbar\omega \int \vec{B}^{+}(\vec{r}) \vec{B}(\vec{r}) d\vec{r} + e\Phi(\vec{r}_{el}) \tag{2.27}$$

$\vec{B}(\vec{r})$'yi $L^{3} = V'$ şeklinde normalize edilmiş düzlem dalga formunda açıldığında

$$\vec{B}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V'}} \sum_{\vec{q}'} b_{q'} \frac{\vec{q}'}{q'} \exp\left(i\vec{q}'.\vec{r}\right) \tag{2.28}$$

$$\vec{B}^{+}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V'}} \sum_{\vec{q}'} b_{q'}^{+} \frac{\vec{q}'}{q'} \exp\left(-i\vec{q}'.\vec{r}\right) \tag{2.29}$$

Burada $q_i' = \frac{2\pi}{L'} n_i, n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ Bu durumda denklem (2.27) ile verilen Hamiltoniyen şu hale gelir:

$$H = \frac{P_{el}^{2}}{2m} + \frac{\hbar\omega}{2} \sum_{\vec{q}'} \left(b_{q}^{+} b_{q'} + b_{q'} b_{q'}^{+} \right) + 4\pi i \left(\frac{e^{2}\hbar}{2\lambda\omega V'} \right)^{1/2} \sum_{\vec{q}'} \frac{1}{\vec{q}'} \left[b_{q}^{+} e^{-i\vec{q}'.\vec{r}_{el}} - b_{q'} e^{i\vec{q}'.\vec{r}_{el}} \right] \tag{2.30}$$

Burada $b_q (b_q^{+})$, fononun yok etme (yaratma) operatörüdür. Denklem (2.30)'da birinci terim elektronun kinetik enerjisi $\left(\frac{1}{2} m \dot{r}_{el}^{2} \right)$, ikinci terim örgü alan enerjisi $\left(\frac{1}{2} \gamma \int \left[\dot{\vec{P}}^{2}(\vec{r}) + \omega^{2} \vec{P}^{2}(\vec{r}) \right] d\vec{r} \right)$ ve son terim de etkileşme enerjisi $\left(- \int \vec{D}(\vec{r}, \vec{r}_{el}) \vec{P}(\vec{r}) d\vec{r} \right)$ dir.

Denklem (2.30) ile verilen Hamiltoniyen, klasik bir yapıya sahip. $(p, \gamma\dot{P})$ ve (r_{el}, P_{el}) konjuge değişkenleri arasında uygun sıra değiştirme bağıntıları uygulanarak, bu denklemi kuantize etmek mümkündür.

$$H_{op} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2_{r_{el}} + \frac{1}{2}\hbar\omega\sum_{q`}\ (b^+_{q'}b_{q'} + b_{q'}b^+_{q'}) \\ +4\pi i\left(\frac{e^2\hbar}{2\gamma\omega V'}\right)^{1/2}\sum_{\vec{q}'}\frac{1}{\vec{q}'}\left[b^+_{q'}e^{-i\vec{q}.\vec{r}_{el}} - b_{q'}e^{i\vec{q}.\vec{r}_{el}}\right] \tag{2.31}$$

Burada $r_{el}, P_{el}, b_{q'}$ ve $b^+_{q'}$ kuantum operatörleridir ve aşağıdaki sıra değiştirme bağıntılarını sağlarlar.

$$\left[\vec{r}_i, \vec{P}_j\right] = i\hbar\delta ij \tag{2.32}$$

$$\left[b_{q'}, b^+_{q''}\right] = \delta q'q'' \tag{2.33}$$

Son olarak boyutsuz dalga vektörü u'yu tanımlayalım:

$$\frac{\hbar^2u^2}{2m} = \hbar\omega, u = \left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \tag{2.34}$$

$$r_o = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}, u = \frac{1}{r_o} \tag{2.35}$$

Denklem (2.35)'ten de anlaşılacağı gibi, boyutsuz dalga vektörü "u" ters uzaklık olarak tanımlanır. Bu durumda Fröhlich Hamiltoniyeninin boyutsuz formu aşağıdaki gibidir.

$$H = \frac{H_{op}}{\hbar\omega} = -\nabla r^2 + \sum_{\vec{q}} b^+_q b_q + i\left(\frac{4\pi\alpha}{V}\right)^{1/2}\sum_{\vec{q}}\frac{1}{\vec{q}}\left[b^+_q e^{-i\vec{q}.\vec{r}} - b_q e^{i\vec{q}.\vec{r}}\right] \tag{2.36}$$

Burada $\vec{r} = \vec{r}_{el}.u$ boyutsuz elektron koordinatı, $\vec{q} = \frac{\vec{q}'}{u}$ boyutsuz fonon dalga vektörü, $V = V'u^3$ kristalin boyutsuz hacmi ve α ise Fröhlich çiftlenim sabitidir ve şu şekilde tanımlanır:

$$\alpha = \frac{2\pi e^2u}{\hbar\gamma\omega^3} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon}\right)\frac{e^2u}{\hbar\omega} = \frac{1}{2}\left(\frac{e^2}{\bar{\varepsilon}r_o}\right)\frac{1}{\hbar\omega} \tag{2.37}$$

Burada $\frac{1}{\bar{\varepsilon}} = \frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon}$ ve r_o zayıf etkileşim (weak-coupling) polaron yarıçapını göstermektedir.

3. GAUSSİYEN KUANTUM NOKTASINDA POLARONİK ETKİLER

3.1 Model

N boyutlu V' Gaussiyen potansiyelinde hareket eden Bloch kütlesi m olan bir elektronun ω_0 frekanslı boyuna optik (LO) fononlarla etkileşmesi sonucu oluşan sistemin Hamiltoniyeni aşağıdaki gibidir:

$$H' = \frac{\vec{p}'^2}{2m} + V'\left(\vec{r}'\right) + \hbar\omega_0 \sum_{\vec{q}'} b_{\vec{q}'}^{+} b_{\vec{q}'} + \sum_{\vec{q}'} \left(\xi_{\vec{q}'}' e^{-i\vec{q}'.\vec{r}} b_{q'}^{+} + h.c.\right) \tag{3.1}$$

Denklem (3.1)'de Fröhlich Hamilyoniyeni'ne $V'\left(\vec{r}'\right)$ terimi eklendi. Denklem (6.1)'deki bütün vektörler N-boyutludur. $\vec{r}'$ elektronun N-boyutlu konum vektörü, $\vec{p}'$ lineer momentum operatörü, $b_{\vec{q}'}^{+}\left(b_{\vec{q}'}\right)$ dalga vektörü $\vec{q}'$ ve frekansı ω_0 olan boyuna optik bir fonon için yaratma (yok etme) operatörü, $\xi_{\vec{q}'}$ elektron-fonon etkileşme katsayısıdır. $V'\left(\vec{r}'\right)$ tuzaklama potansiyeli olup Gaussiyen bir potansiyel düşünüldüğünden aşağıdaki gibi olacaktır:

$$V'\left(\vec{r}'\right) = -V_0' e^{-r'^2/2R'^2} \tag{3.2}$$

Bu kısımda Feynman birimlerinde hesaplamalar yapılacaktır. Enerji ölçeği $\hbar\omega_0$, uzunluk ölçeği zayıf-etkileşme polaron yarıçapı olan $r_0 = \left(\frac{\hbar}{m\omega_0}\right)^{1/2}$ ve dalga vektörü ölçeği $q_0 = \frac{1}{r_0}$ dır. Bu, $\hbar = m = \omega_0 = 1$'e eşdeğerdir. Bu ölçeklendirmeler Denklem (3.1)'e uygulandıktan sonra aşağıdaki gibi bir boyutsuz Hamiltoniyen elde edilecektir.

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2} - V_0 e^{-r^2/2R^2} + \sum_{\vec{q}} b_{\vec{q}}^{+} b_{\vec{q}} + \sum_{\vec{q}} \left(\xi_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}.\vec{r}} b_{\vec{q}}^{+} + h.c.\right) \tag{3.3}$$

Burada bütün terimler boyutsuzdur:

$H = \frac{H'}{\hbar\omega_0}, \vec{r} = \frac{\vec{r}'}{r_0}, \vec{q} = \frac{\vec{q}'}{q_0}, p = \frac{\vec{p}'}{\hbar q_0}, V_0 = \frac{V'}{\hbar\omega_0}, R = \frac{R'}{r_0}$ ve $\xi_{\vec{q}} = \frac{\xi'_{\vec{q}'}}{\hbar\omega_0}$. Elektron-fonon etkileşme katsayısı şu şekilde tanımlanır:

$$\left|\xi_{\vec{q}}\right|^2 = \left[\frac{\Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right)2^{N-3/2}\pi^{(N-1)/2}}{v_N q^{N-1}}\right]\alpha \tag{3.4}$$

Burada N sistemin boyutu, v_N N-boyutlu kristalin boyutsuz hacmi, V_0 tuzaklama potansiyelinin derinliği, R potansiyelin genişliği ve α boyutsuz elektron-fonon çiftlenim sabitidir. Denklem (3.4)'te N=2 ve N=3 değerleri için sırasıyla iki ve üç boyutta elektron-fonon etkileşme katsayıları aşağıdaki gibi bulunur.

$$\left|\xi_{\vec{q}}\right|^2 = \left(\frac{\sqrt{2}\pi}{vq}\right)\alpha \quad , \text{ N=2 için} \tag{3.5}$$

$$\left|\xi_{\vec{q}}\right|^2 = \left(\frac{2\sqrt{2}\pi}{vq^2}\right)\alpha \quad , \text{ N=3 için} \tag{3.6}$$

3.2 Formülasyon

3.2.1 Rayleih-Schrodinger Pertürbasyon Teorisi (RSPT)

Tuzaklama potansiyelinin parabolik potansiyele kıyasla yeterince küçük olduğu kabulünden yola çıkarak problem parabolik potansiyel artı bir pertürbasyon şeklinde düşünülebilir. Bu, küçük r değeri için uygun bir kabuldür. Kuantum noktasında r değeri küçük olduğundan yukarıdaki pertürbasyon kabulü oldukça iyi bir yaklaşım olarak düşünülebilir. Dolayısıyla Denklem (6.3) aşağıdaki gibi yeniden düzenlenebilir.

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2} + \frac{1}{2}\tilde{\omega}_h^2 r^2 - V_0 + \sum_{\vec{q}} b_{\vec{q}}^+ b_{\vec{q}} - \lambda\left[\frac{1}{2}\tilde{\omega}_h^2 r^2 + V_0\left(e^{-r^2/2R^2} - 1\right)\right] + \sum_{\vec{q}}\left(\xi_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}.\vec{r}} b_{\vec{q}}^+ + h.c.\right) \tag{3.7}$$

Denklem (3.7)'de terim ekleme çıkarma yapılıp, $\widetilde{\omega}_h^2 = V_0 / R^2$ alınmış ve λ pertürbasyon katsayısı eklenmiştir. $\lambda = 0$ durumu parabolik kuantum noktasına (PQD) ve $\lambda = 1$ Gaussiyen kuantum noktasına (GQD) karşılık gelir. Pertürbe edilmemiş problem, Schrödinger denklemini sağlar.

$$H_0\left[\Phi_{[j]}(\vec{r})\Psi_{ph}\right] = E^0_{[j],[n]}\left[\Phi_{[j]}(\vec{r})\Psi_{ph}\right] = \left(\frac{\vec{p}^2}{2} + \frac{1}{2}\widetilde{\omega}_h^2 r^2 - V_0 + \sum_{\vec{q}} b^+_{\vec{q}} b_{\vec{q}}\right)\left[\Phi_{[j]}(\vec{r})\Psi_{ph}\right]$$
$$= \left(E_{[j]} + \sum_{\vec{q}} n_{\vec{q}}\right)\left[\Phi_{[j]}(\vec{r})\Psi_{ph}\right] \tag{3.8}$$

Burada $\Phi_{[j]}(\vec{r})$, pertürbe olmayan elektronik dalga fonksiyonu olup aşağıdaki gibidir.

$$\Phi_{[j]}(\vec{r}) = \Phi_{j_1, j_2, j_3 \ldots . j_N}(\vec{r})$$
$$= \left[\frac{\widetilde{\omega}_h^{N/2}}{\pi^{N/2} 2^{j_1 + j_2 + \ldots + j_N} j_1! j_2! \ldots j_N!}\right]^{1/2} H_{j_1}\left(\sqrt{\widetilde{\omega}_h} x_1\right) H_{j_2}\left(\sqrt{\widetilde{\omega}_h} x_2\right) \ldots H_{j_N}\left(\sqrt{\widetilde{\omega}_h} x_N\right) e^{-\frac{1}{2}\widetilde{\omega}_h r^2} \tag{3.9}$$

$E_{[n]}$, $\Phi_{[j]}(\vec{r})$ pertürbe olmayan elektronik dalga fonksiyonuna karşılık gelen elektronik enerji olup aşağıdaki gibi verilir:

$$E_{[j]} = E_{j_1, j_2, j_3 \ldots j_N} = \left(j_1 + j_2 + j_3 + \ldots + j_N + \frac{N}{2}\right)\widetilde{\omega}_h - V_0 \tag{3.10}$$

Ψ_{ph} ise serbest fonon Hamiltoniyeninin öz fonksiyonu olup aşağıdaki şekilde yazılır.

$$\left|\Psi_{ph}\right\rangle \equiv \left|[n]\right\rangle = \prod_{\vec{q}} \left|n_{\vec{q}}\right\rangle \tag{3.11}$$

Ψ_{ph} ise serbest fonon Hamiltoniyenine karşı gelen enerji ise

$$E_{ph} = \sum_{\vec{q}} n_{\vec{q}} \tag{3.12}$$

Şeklindedir. Burada n_q, $\vec{q}$ durumundaki fononların sayısıdır. Bu problemde sistemin taban durumu ile ilgilenileceği için pertürbe olmayan dalga fonksiyonu ve enerji değeri

$$\Phi_0(\vec{r}) = \left[\frac{\tilde{\omega}_h^{N/2}}{\pi^{N/2}}\right]^{1/2} e^{-\frac{1}{2}\tilde{\omega}_h r^2} \tag{3.13}$$

$$\left|\Psi_{ph}^0\right\rangle = \left|[0]\right\rangle = \prod_{\vec{q}} \left|0_{\vec{q}}\right\rangle \tag{3.14}$$

Şeklinde alınacaktır. Burada;

$$b_{\vec{q}}\left|0_{\vec{q}}\right\rangle = 0, \qquad \forall \vec{q} \tag{3.15}$$

$$E_0 = \left(\frac{N}{2}\right)\vec{\omega}_h - V_0 \tag{3.16}$$

$$\varepsilon_{ph}^0 = 0 \tag{3.17}$$

dir. Pertürbe olmayan tam çözülebilir H_0 Hamiltoniyeninin pertürbasyonu iki terimden oluşur.

$$H_{per} = H_1 + H_2 \tag{3.18}$$

Burada,

$$H_1 = -\lambda\left[\frac{1}{2}\tilde{\omega}_h^2 r^2 + V_0\left(e^{-r^2/2R^2} - 1\right)\right] \tag{3.19}$$

ve

$$H_2 = \sum_{\vec{q}} \left(\xi_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}.\vec{r}} b_{\vec{q}}^{+} + h.c. \right) \tag{3.20}$$

H_1 terimi çok büyük olmadığından H_1'in birinci mertebe pertürbasyo katkısı alınacaktır. Başka bir deyişle H_1'in katkısını pertürbe olmayan parabolik potansiyelin frekansını birinci mertebe pertürbasyona göre yeniden normalize edilecektir. Bundan dolayı H_1 aşağıdaki gibi yeniden yazılacaktır.

$$\begin{aligned} H_1 = & -\lambda \left[\frac{1}{2}\widetilde{\omega}_h^2 + \left(\frac{V_0}{r^2} \right) \left(e^{-r^2/2R^2} - 1 \right) \right] r^2 \approx -\lambda \left\langle \Phi_0(\vec{r}) \right| \left[\frac{1}{2}\widetilde{\omega}_h^2 + \frac{V_0}{r^2} \left(e^{-\frac{r^2}{2R^2}-1} \right) \right] \left| \Phi_0(\vec{r}) \right\rangle r^2 \\ & = \lambda V_0 \left[\frac{2\widetilde{\omega}_h}{N-2} - \frac{1}{R^2} - \frac{2\widetilde{\omega}_h^{N/2}}{(N-2)\left(\widetilde{\omega}_h + \frac{1}{2R^2} \right)^{\frac{N}{2}-1}} \right] r^2 \end{aligned} \tag{3.2}$$

Gaussiyen kuantum nokta problemi, şimdi aşağıdaki gibi tanımlanacak etkin parabolik kuantum nokta problemine dönüşüyor.

$$\widetilde{H} = H_0^{eff} + H_2 = \frac{\vec{p}^2}{2} + \frac{1}{2}\widetilde{\omega}_h^2 r^2 - V_0 + \sum_{\vec{q}} b_{\vec{q}}^{+} b_{\vec{q}} + H_2 \tag{3.22}$$

Burada,

$$\omega_h = \left[(1-\lambda)\widetilde{\omega}_h^2 + \frac{4\lambda V_0 \widetilde{\omega}_h}{(N-2)} \left(1 - \frac{1}{\left(1 + \frac{\widetilde{\omega}_h}{2V_0} \right)\frac{N}{2} - 1} \right) \right]^{1/2} \tag{3.23}$$

dır. Birinci-mertebe pertürbasyonun H_0^{eff}'e katkısı, H_2 den dolayı sıfırdır. Elektron-fonon etkileşmesi fonon yaratma (yok etme) operatörüne göre lineer olduğundan bu terim ikinci mertebe pertürbasyon olarak katkısı alınacaktır. H_2'den gelen ikinci-mertebe pertürbasyon düzeltmesi ΔE_{RSPT}^2 aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\Delta E^2_{RSPT} = \sum_{[j],[n]} \frac{\left| \left\langle \Phi_{[j]} \left| \langle [n] | \sum_{\vec{q}} \left(\xi_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}.\vec{r}} b^+_{\vec{q}} \right) | [0] \rangle \right| \Phi_0 \right\rangle \right|^2}{\left(E_{[0],[0]} - E_{[j],[n]} \right)} \tag{3.24}$$

Fonon durumları üzerinden alının toplam sonucunda,

$$\Delta E^2_{RSPT} = \sum_{[j],\vec{q}} \frac{\left| \left\langle \Phi_{[j]} \left| \xi_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}.\vec{r}} \right| \Phi_0 \right\rangle \right|^2}{E_{[j]} - E_0 + 1} \tag{3.25}$$

elde edilir.

$$\frac{1}{E_m - E_0 + 1} = \int_0^\infty e^{-(E_m - E_0 + 1)t} dt \tag{3.26}$$

$$\sum_{\vec{q}} \frac{e^{-i\vec{q}.(\vec{r}-\vec{r}')}}{\vec{q}^{\,N-1}} = \left[\frac{v_N}{2^{N-1} \pi^{(N-1)/2} \Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right)} \right] \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \tag{3.27}$$

$$\sum_n \frac{1}{2^n n!} H_n\left(\sqrt{\lambda} x\right) H_n\left(\sqrt{\lambda} x'\right) e^{-\left|\frac{\lambda}{2}\left(x^2 + x'^2\right) + 2np\right|} = \frac{e^p}{\sqrt{2\sinh(2p)}} e^{-\frac{\lambda}{4}\left[(x+x')^2 \tanh p + (x-x')^2 \coth p\right]} \tag{3.28}$$

(3.26), (3.27), (3.28) denklemleri kullanılarak denklem (3.25) aşağıdaki forma dönüşür.

$$E^{ND}_{RSPT} = \frac{N}{2} \omega_h - V_0 - \left(\frac{\alpha\sqrt{\pi}}{2\sqrt{\omega_h}} \right) \left[\frac{\Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)} \right] \left[\frac{\Gamma\left(\frac{1}{\omega_h}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{\omega_h} + \frac{1}{2}\right)} \right] \tag{3.29}$$

Toplam elektron enerjisinin ya da başka bir değişle polaron self-enerjisinin polaronik düzeltmesi, (3.29) ile verilen ifadeden $\alpha = 0$ durumundaki enerjinin çıkarılmasıyla elde edilir;

$$\Delta E_{RSPT}^{ND} = \left[E_{RSPT}^{ND}(\alpha) - E_{RSPT}^{ND}(\alpha = 0)\right] = -\left(\frac{\alpha\sqrt{\pi}}{2\sqrt{\omega_h}}\right)\left[\frac{\Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)}\right]\left[\frac{\Gamma\left(\frac{1}{\omega_h}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{\omega_h}+\frac{1}{2}\right)}\right] \tag{3.30}$$

Parabolik nokta ile uyumlu bir etkin uzunluk

$$l = \left[\omega_h\right]^{-1/2} \tag{3.31}$$

şekilinde tanımlanırsa; (3.30) denklemi şu şekilde yazılır:

$$\Delta E_{RSPT}^{ND} = -\left(\frac{\alpha\sqrt{\pi}}{2}\right)\left[\frac{\Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)}\right]\left[\frac{\Gamma\left(l^2+1\right)}{\Gamma\left(l^2+\frac{1}{2}\right)}\right] \tag{3.32}$$

(i) Zayıf-etkileşme limiti (Week Coupling):

Bu limitte, V_0 küçük ve tuzaklama potansiyelinin genişliği R ise büyüktür. Dolayısıyla $\widetilde{\omega}_h$ ve ω_h'ın her ikisi de sıfıra gider ve sonuç olarak $l \to \infty$ dur. (3.32) denklemi, bu limit durumunda, şu hale dönüşür:

$$\Delta E_{RSPT}^{ND} = -\left(\frac{\alpha\sqrt{\pi}}{2}\right)\left[\frac{\Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)}\right] \tag{3.33}$$

N=2 ve N=3 için (3.33) denklemi aşağıdaki değerleri alır:

$$\Delta E_{RSPT}^{2D,WC} = -\frac{\alpha\pi}{2} \tag{3.34}$$

$$\Delta E_{RSPT}^{3D,WC} = -\alpha \tag{3.35}$$

(3.34) ve (3.35) sonuçları, zayıf-etkileşme rejiminde, bulk polaron limit değerleridir.

(ii) Güçlü-etkileşme limiti (Strong Coupling):

Güçlü-etkileşme durumunda, V_0 büyük ve R küçük olduğundan l^2 küçük olur. Polaron self-enerjisi;

$$\Delta E_{RSPT}^{ND,SC} = -\left(\frac{\alpha}{2}\right)\left[\frac{\Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)}\right]\frac{1}{l} \tag{3.36}$$

N=2 ve N=3 için (3.36) denklemi aşağıdaki gibi olur:

$$\Delta E_{RSPT}^{2D,SC} \approx -\left(\frac{\alpha\sqrt{\pi}}{2}\right)\left(\frac{V_0}{\sqrt{R}}\right)^{1/4} \tag{3.37}$$

$$\Delta E_{RSPT}^{3D,SC} \approx -\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)\left(\frac{V_0}{\sqrt{R}}\right)^{1/2} \tag{3.38}$$

Bu sonuçlar yeni sonuçlar olup, daha önceki bazı sonuçlarla kıyaslanamaz. Tuzaklama potansiyelinin kapsadığı bütün alan için sonuçlar nümerik olarak alınacaktır. Bölüm 4'te nümerik sonuçlar tartışılacaktır.

3.2.2 Feynman-Haken Yol İntegrali Metodu (FHPIM)

Bu bölümde denklem (3.3)'in taban durumu ile ilgilenilecektir. Hesaplamanın detayına girilmeden sonuçlar verilecektir. Harmonik salınıcı yaklaşımı çalışıldığı için etkin potansiyel aşağıdaki gibi olacaktır.

$$V_{eff}\left(\vec{r}\right) = \frac{1}{2}\omega^2 r^2 \tag{3.39}$$

Feynman-Haken varyasyonel enerjisi aşağıdaki ifadeyi verir.

$$E_{FH}^{ND} = \frac{N}{2}(2-\lambda)\omega - \frac{\lambda V_0}{1+\frac{1}{2\omega R^2}} - \left(\frac{\alpha\sqrt{\pi}}{2\sqrt{\omega}}\right)\left[\frac{\Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)}\right]\left[\frac{\Gamma\left(\frac{1}{\omega}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{\omega}+\frac{1}{2}\right)}\right] \tag{3.40}$$

Polaronik düzeltme terimi ΔE_{FH} aşağıdaki gibi olur.

$$\Delta E_{FH}^{ND} = E_{FH}^{ND}(\alpha) - E_{FH}^{ND}(\alpha=0) = -\left(\frac{\alpha\sqrt{\pi}}{2\sqrt{\omega}}\right)\left[\frac{\Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)}\right]\left[\frac{\Gamma\left(\frac{1}{\omega}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{\omega}+\frac{1}{2}\right)}\right] \tag{3.41}$$

Polaronik düzeltme terimi ile ilgili nümerik sonuçlar bölüm ….'de tartışılacaktır.

3.2.3 Lee-Low-Pines-Huybrechts (LLPH) Metodu

Bir önceki bölümde bağlanma parametresinin bütün değer aralığı için çözümler veren Feynman-Haken yol integrali metodunun sonuçları verildi. Bu metot sadece taban durumuna uygulanabilir olup uyarılmış durumlar için iyi bir metot değildir. Ayrıca bu metot polaronda fonon sayısı, polaron büyüklüğü, polarizasyon potansiyeli gibi büyüklüklerin hesaplanmasında çok kullanışlı bir metot değildir. Bundan dolayı bu bölümde bütün çiftlenim değerleri için sonuç veren bir varyasyon metodu olan Lee-Low-Pines-Huybrechts (LLPH) tekniği tartışılacaktır. LLPH metodunda aşağıdaki iki üniter dönüşüm kullanılacaktır(Lee *et al.* 1953).

$$U_1 = e^{S_2} = \exp\left[-ia\sum_{\vec{q}}(\vec{q}.\vec{r})b_{\vec{q}}^{+}b_{\vec{q}}\right] \tag{3.42}$$

ve

$$U_2 = e^{S_2} = \exp\left[\sum_{\vec{q}}\left(f_{\vec{q}}b_{\vec{q}}^{+} - f_{\vec{q}}^{*}b_{\vec{q}}\right)\right] \tag{3.43}$$

Burada a ve $f_{\vec{q}}$ varyasyonel parametrelerdir. Bunlar daha sonra etkin elektronik Hamiltoniyeni elede etmek için sıfır-fonon durumuna uygulanacaktır. Bu durum, deneme varyasyonel dalga fonksiyonunu seçmeye eşdeğerdir.

$$\left|\Psi\right\rangle = e^{\left(-ia\sum_{\vec{q}}(\vec{q}.\vec{r})b_{\vec{q}}^{+}b_{\vec{q}}\right)}e^{\left(\sum_{\vec{q}}(f_{\vec{q}}b_{\vec{q}}^{+}-f_{\vec{q}}^{*}b_{\vec{q}})\right)}\left|0\right\rangle\left|\Phi(\vec{r})\right\rangle \tag{3.44}$$

Burada $\left|0\right\rangle$ pertürbe olmayan sıfır-fonon durumu ve $\Phi(\vec{r})$ ise elektronik dalga fonksiyonu olup daha sonra seçilecektir. Enerji $E = \left\langle\Psi\left|H\right|\Psi\right\rangle$ ile veriliyor. (3.44) denklemi; $a = 1$ alınırsa LLP metoduna, $a = 0$ alındığında ise Landau-Peker metoduna indirgenir. Sınırları (0,1) olan a bir varyasyon parametresi olarak uygulandığında çiftlenim parametresi uzayının bütünü için iyi bir tanımlama elde edilebilir. Enerji şu şekilde yazılabilir:

$$E = \left\langle\Psi\left|H\right|\Psi\right\rangle = \left\langle\Phi(\vec{r})\right|\left\langle 0\left|\tilde{\tilde{H}}\right|0\right\rangle\left|\Phi(\vec{r})\right\rangle \tag{3.45}$$

Burada $\tilde{\tilde{H}}$ aşağıdaki gibidir.

$$\tilde{\tilde{H}} = U_2^{-1}U_1^{-1}HU_1U_2 = U_2^{-1}\tilde{H}U_2 \tag{3.46}$$

Bir dizi hesaplama sonunda $\tilde{\tilde{H}}$ elde edilir.

$$\begin{aligned}\tilde{\tilde{H}} = {} & \frac{\vec{p}^{\,2}}{2} - V_0 e^{-r^2/2R^2} + \sum_{\vec{q}}\left(1 - a\vec{p}.\vec{q} + \frac{a^2q^2}{2}\right)\left(b_{\vec{q}}^{+} + f_{\vec{q}}^{*}\right)\left(b_{\vec{q}} + f_{\vec{q}}\right) \\ & + \frac{a^2}{2}\sum_{\vec{q},\vec{q}'}\vec{q}.\vec{q}'\left(b_{\vec{q}}^{+} + f_{\vec{q}}^{*}\right)\left(b_{\vec{q}'}^{+} + f_{\vec{q}'}^{*}\right)\left(b_{\vec{q}} + f_{\vec{q}}\right)\left(b_{\vec{q}'} + f_{\vec{q}'}\right) + \sum_{\vec{q}}\left(\xi_{\vec{q}}e^{-(1-a)\vec{q}.\vec{r}}\left(b_{\vec{q}}^{+} + f_{\vec{q}}^{*}\right) + h.c.\right)\end{aligned} \tag{3.47}$$

Efektif elektronik Hamiltoniyeni sıfır-fonon durumuna uygulandığında aşağıdaki gibi olur:

$$\begin{aligned}H_{el}^{eff} = \left\langle 0\left|\tilde{\tilde{H}}\right|0\right\rangle = {} & \frac{\vec{p}^{\,2}}{2} - V_0 e^{-r^2/2R^2} + \frac{a^2}{2}\left[\sum_{\vec{q}}\vec{q}\left|f_{\vec{q}}\right|^2\right]^{1/2} + \sum_{\vec{q}}\left(1 - a\vec{p}.\vec{q} + \frac{a^2q^2}{2}\right)\left|f_{\vec{q}}\right|^2 \\ & + \sum_{\vec{q}}\left[\xi_{\vec{q}}e^{-(1-a)\vec{q}.\vec{r}}f_{\vec{q}}^{*} + h.c.\right]\end{aligned} \tag{3.48}$$

LLPH varyasyonel enerji ise şu şekildedir:

$$E_{LLPH} = \langle \Phi | H_{el}^{eff} | \Phi \rangle =$$

$$\frac{1}{2}\langle \Phi | \vec{p}^{\,2} | \Phi \rangle - V_0 \langle \Phi | e^{-r^2/2R^2} | \Phi \rangle + \sum_{\vec{q}} \left(1 - a\vec{q}.\langle \Phi | \vec{p} | \Phi \rangle + \frac{a^2 q^2}{2} \right) \left| f_{\vec{q}} \right|^2$$

$$+ \frac{a^2}{2} \left[\sum_{\vec{q}} \vec{q} \left| f_{\vec{q}} \right|^2 \right]^{1/2} + \sum_{\vec{q}} \left[\xi_{\vec{q}} \langle \Phi | e^{-(1-a)\vec{q}.\vec{r}} | \Phi \rangle f_{\vec{q}}^{*} + c.c. \right] \tag{3.49}$$

E_{LLPH} 'nin $f_{\vec{q}}^{*}$ 'ye göre minimize edilmesi sonucu

$$f_{\vec{q}}^{*} = -\frac{\xi_{\vec{q}} \rho_{\vec{q}}^{*}}{1 - a\langle \Phi | \vec{p} | \Phi \rangle.\vec{q} + \frac{a^2 q^2}{2}} \tag{3.50}$$

elde edilir. Burada $\rho_{\vec{q}}$ aşağıdaki gibidir.

$$\rho_{\vec{q}} = \langle \Phi | e^{-(1-a)\vec{q}.\vec{r}} | \Phi \rangle \tag{3.51}$$

Simetrik bir kuantum noktası için mantıklı bir yaklaşım olan aşağıdaki şart koşulsun.

$$\sum_{\vec{q}} \vec{q} \left| f_{\vec{q}} \right|^2 = 0 \tag{3.52}$$

Simetrik nokta için ayrıca $\langle \Phi | \vec{p} | \Phi \rangle = 0$ dır. Böylece (3.50) ve (3.51) denklemleri aşağıdaki şekle indirgenir:

$$f_{\vec{q}} = -\frac{\xi_{\vec{q}} \rho_{\vec{q}}^{*}}{1 + \frac{a^2 q^2}{2}} \tag{3.53}$$

$$E_{LLPH} = \frac{1}{2}\langle \Phi | \vec{p}^{\,2} | \Phi \rangle - V_0 \langle \Phi | e^{-r^2/2R^2} | \Phi \rangle + \sum_{\vec{q}} \frac{\left| \xi_{\vec{q}} \right|^2 \left| \rho_{\vec{q}} \right|^2}{1 + \frac{a^2 q^2}{2}} \tag{3.54}$$

LLPH metodu kapsamında polaron probleminin diğer bazı niceliklerin ele alınmasında fayda vardır.

Polaron etrafındaki fonon bulutundaki fonon sayısı şu şekilde tanımlanır:

$$N_{pol} = \left\langle \Psi \left| \sum_{\vec{q}} b_{\vec{q}}^{+} b_{\vec{q}} \right| \Psi \right\rangle \tag{3.55}$$

Yapılan bir dizi hesaplamalar sonucunda N-boyutta fonon sayısı,

$$N_{pol}^{ND} = \sum_{\vec{q}} \frac{\left|\xi_{\vec{q}}\right|^2 \left|\rho_{\vec{q}}\right|^2}{\left(1+\frac{a^2 q^2}{2}\right)^2} \tag{3.56}$$

olarak bulunur.

Polaron yarıçapı aşağıdaki gibi bulunabilir.

$$R_{pol} = \left\langle \Psi \left| r \right| \Psi \right\rangle \tag{3.57}$$

Polarizasyon potansiyeli ise aşağıdaki gibi göz önüne alınacak:

$$V_{pol}\left(\vec{r}^{\,'}\right) = \left\langle \Psi \left| v\left(\vec{r} - \vec{r}^{\,'}\right) \right| \Psi \right\rangle \tag{3.58}$$

Burada;

$$v\left(\vec{r}\right) = -\frac{1}{e} \sum_{\vec{q}} \left(\xi_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}.\vec{r}} b_{\vec{q}}^{+} + h.c. \right) \tag{3.59}$$

Yapılan işlemler sonucunda;

$$-eV_{pol}\left(\vec{r}\right) = -2 \sum_{\vec{q}} \frac{\left|\xi_{\vec{q}}\right|^2 \left|\rho_{\vec{q}}\right|^2}{1+\frac{a^2 q^2}{2}} \cos\left(\vec{q}.\vec{r}\right) \tag{3.60}$$

elde edilir. Henüz elektronik fonksiyon tanımlamamıştır. Burada, temel durumda, N-boyutta, harmonik salınıcı yaklaşımında seçilen $\Phi(\vec{r})$ elektronik fonksiyonu ile ilgilenilecek.

$$\left|\Phi_{GS}\right\rangle = \left(\frac{\delta^N}{\pi^{N/2}}\right)^{1/2} e^{-\left(\delta^2 r^2/2\right)} \tag{3.61}$$

Burada δ varyasyonel parametresidir. Elektronik dalga fonksiyonu denklem (3.61)'deki gibi tanımlandıktan sonra bu dalga fonksiyonu denklem (3.51)'de yerine yazılırsa $\rho_{\vec{q}}$ aşağıdaki gibi bulunur.

$$\rho_{\vec{q}} = e^{-\frac{(1-a)^2}{4\delta^2}q^2} \tag{3.62}$$

Taban durumu enerjisi

$$E_{LLPH}^{ND} = \frac{N}{4\delta^2} - V_0\left[1+\frac{\beta^2}{\delta^2}\right]^{-N/2} - \frac{\alpha\sqrt{\pi}}{2}\frac{\Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)}(1+\delta t)e^{t^2}erfc(t) \tag{3.63}$$

şeklindedir. Burada yeni bir varyasyonel parametre (t) tanımlanmıştır. t parametresi a parametresinin yerine tanımlanmıştır. Burada $t = (1-a)a/\delta$ dır. Diğer nicelikler ise şöyledir:

$$N_{pol,LLPH}^{ND} = \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi}}\frac{\Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)}\int_0^\infty dq\,\frac{e^{-\frac{(1-a)^2q^2}{2\delta^2}}}{\left(1+\frac{a^2q^2}{2}\right)^2} \tag{3.64}$$

$$R_{pol.LLPH}^{ND} = \frac{\Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)}\frac{1}{\delta} \tag{3.65}$$

$$-eV_{pol,LLPH}^{ND} = -\left(\frac{2^{\frac{N-1}{2}}\Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right)}{\sqrt{\pi}}\right)\left(\frac{\alpha}{r^{\left(\frac{N}{2}-1\right)}}\right)\int_0^\infty dq \frac{e^{-\frac{(1-a)^2 q}{2\delta^2}}}{q^{\left(\frac{N}{2}-1\right)}\left(1+\frac{a^2q^2}{2}\right)} J_{\frac{N}{2}-1}(qr) \qquad (3.66)$$

N=2 ve N=3 için sayısal sonuçları bir sonraki bölümde sunulacaktır.

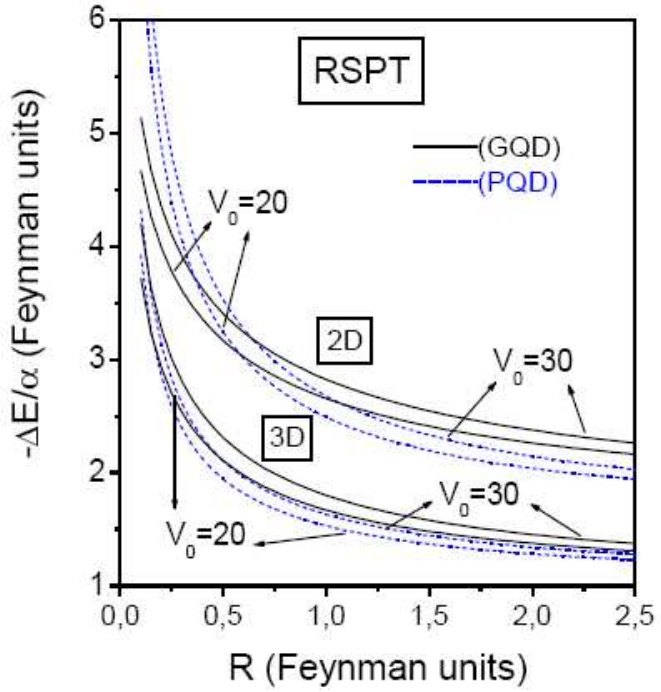
4. SAYISAL SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bölüm 3'te N-boyut için sonuçlar elde edilmişti. Bu örnekte N=2 ve N=3 boyutları ile ilgilenileceği için nümerik sonuçlar N=2 ve N=3 için karşılaştırılacaktır. N=2 ve N=3 değerleri için RSPT'ne göre polaronun self-enerjisi aşağıdaki ifadelere indirgenir.

$$-\frac{\Delta E_{RSPT}}{\alpha}=\sqrt{\omega_h}\left[\frac{\Gamma\left(\frac{1}{\omega_h}+1\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{\omega_h}+\frac{1}{2}\right)}\right], \quad \text{N=3 için} \tag{4.1}$$

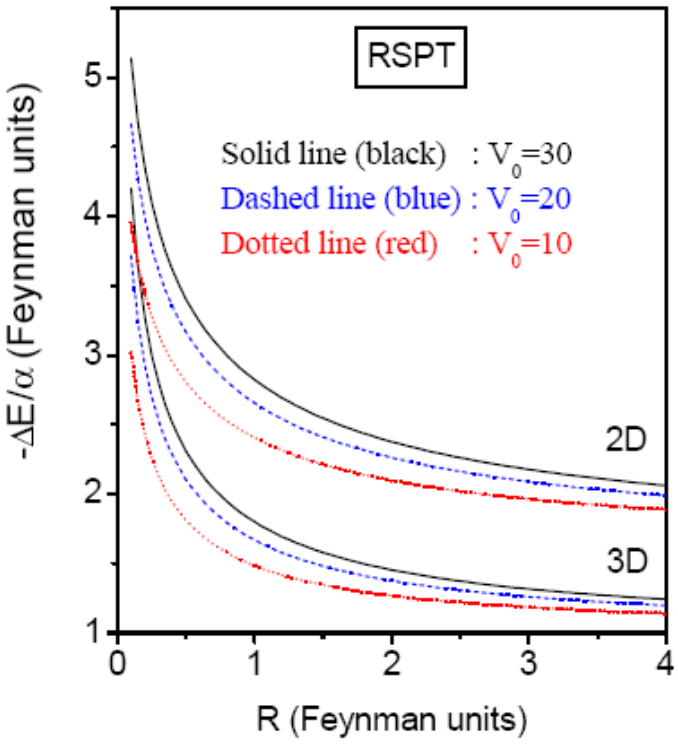
$$-\frac{\Delta E_{RSPT}}{\alpha}=\frac{\pi}{2}\sqrt{\omega_h}\left[\frac{\Gamma\left(\frac{1}{\omega_h}+1\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{\omega_h}+\frac{1}{2}\right)}\right], \quad \text{N=2 için} \tag{4.2}$$

İlk olarak, V_0'ın $V_0=20$ ve $V_0=30$ değerleri için N=2 ve N=3 boyutlu sistemlerde RSPT'ne göre elde edilen sonuçlar Gaussiyen potansiyel ve parabolik potansiyel için karşılaştırıldı. Sonuçlar şekil 4.1'de gösterildi.



Şekil 4.1 Feynman birimlerinde, polaron self-enerjisinin, tuzaklama Gaussiyen potansiyelinin genişliğine göre grafiği

Şekil 4.1'den iki potansiyel için elde edilen sonuçlar için ölçülebilir bir fark gözlenmektedir. Büyük tuzaklama uzaklıkları için parabolik potansiyel için polaronik düzeltmeler Gaussiyen potansiyel için elde edilen değerlerinden daha küçüktür. Bu fark V_0'ın artması ile daha belirginleştiği görülmektedir. Diğer taraftan, Küçük tuzaklama uzaklıkları için ilginç sonuçlar elde edildi. Küçük tuzaklama uzaklıklarında parabolik potansiyel için elde edilen polaronik düzeltme değerinin daha büyük olduğu gözlendi. Şekil 4.1 dikkatlice okunduğunda küçük tuzaklama uzaklıkları için parabolik potansiyel ile Gaussiyen potansiyel arasında oluşan polaronik düzeltme değerleri arasındaki farkın N=2 boyutta daha büyük olduğu görülüyor. Bir Gaussiyen kuantum noktası ile parabolik kuantum noktası arasında □-değerlerindeki fark N=3 boyutta biraz daha küçük fakat N=2 boyutta oldukça büyüktür ve bundan dolayı N=2 boyutta R küçüldükçe polaronik etkinin parabolik kuantum noktası ile karşılaştırıldığında Gaussiyen kuantum noktasında küçüldüğü gözlenmektedir. Buradan şu sonuca varılır: Bir kuantum noktası için tuzaklama uzaklığının bütün değerleri için parabolik potansiyelin daha gerçekçi olan Gaussiyen potansiyelin zayıf bir yaklaşıklığıdır.



Şekil 4.2 Feynman birimlerinde, polaron self-enerjisinin $V_0 = 10,20,30$ için 2- ve 3-boyutta, R'nin fonksiyonu olarak grafiği

Şekil 4.2'de RSPT'ne göre taban durumu enerjilerine polaronik düzeltmelerin katkısının N=2 ve N=3 boyutlarının ikisi için V_0, Gaussiyen potansiyel derinliğinin R, potansiyelin erimine göre fonksiyonu olarak hesaplandı. Potansiyel derinliğinin artışına bağlı olarak polaronik etkilerin arttığı gözlendi. Şekil 4.2'deki N=2 ve N=3 boyutları için elde edilen eğriler karşılaştırıldığında her iki boyut için polaronik düzeltme davranışının benzerlik gösterdiği ancak polaronik etkinin iki boyutta çok daha güçlü olduğu görülmektedir. Bu sonuç genel kabul olan "boyut küçülmesine karşılık polaronik etki artar" ile uyumludur.

Şimdi üç farklı metotta elde edilen sonuçlar karşılaştırılacaktır. Feynman-Haken yol integrali sonuçları için denklem (3.40)'daki λ için λ=1 olarak alınması gerekir. N=2 ve N=3 boyutları için Feynman-Haken taban durumu enerjileri sırasıyla aşağıdaki gibidir.

$$E_{FH}^{2D} = \frac{1}{2\mu^2} - \frac{V_0}{\left(1+\frac{\mu^2}{2R^2}\right)} - \left(\frac{\alpha\pi}{2\mu}\right)\frac{\Gamma\left(\mu^2+1\right)}{\Gamma\left(\mu^2+\frac{1}{2}\right)} \tag{4.3}$$

$$E_{FH}^{3D} = \frac{3}{2\mu^2} - \frac{V_0}{\left(1+\frac{\mu^2}{2R^2}\right)^{3/2}} - \left(\frac{\alpha\pi}{2\mu}\right)\frac{\Gamma\left(\mu^2+1\right)}{\Gamma\left(\mu^2+\frac{1}{2}\right)} \tag{4.4}$$

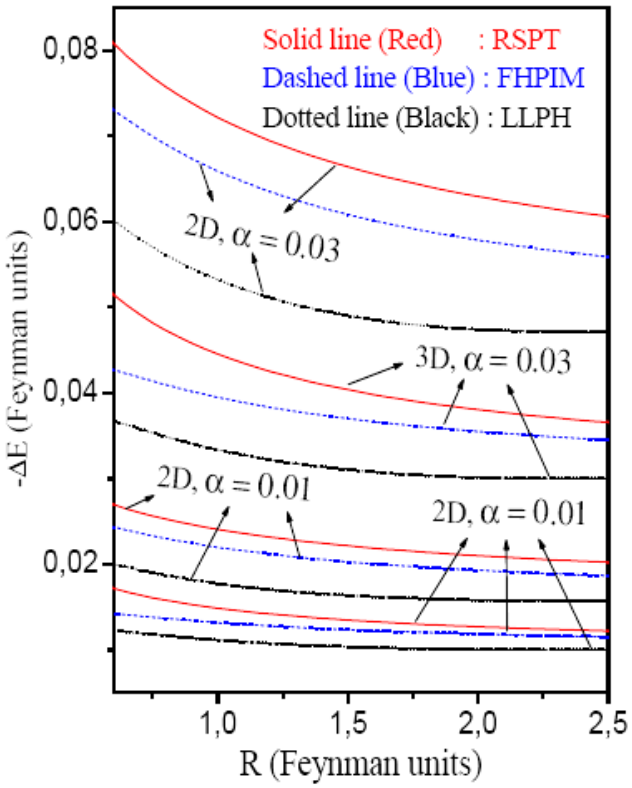
Burada $\mu^2 = 1/\omega$ dır.

LLPH metodunda taban durumu enerjileri N=2 ve N=3 boyutları için aşağıdaki gibidir.

$$E_{LLPH}^{2D} = \frac{1}{2}\delta^2 - \frac{V_0}{\left(1+\frac{1}{2R^2\delta^2}\right)} - \frac{\alpha\pi}{2}\left(1+\delta t\right)e^{t^2}\,erfc\left(t\right) \tag{4.5}$$

$$E_{LLPH}^{3D} = \frac{3}{4}\delta^2 - \frac{V_0}{\left(1+\frac{1}{2R^2\delta^2}\right)^{3/2}} - \alpha\left(1+\delta t\right)e^{t^2}\,erfc\left(t\right) \tag{4.6}$$

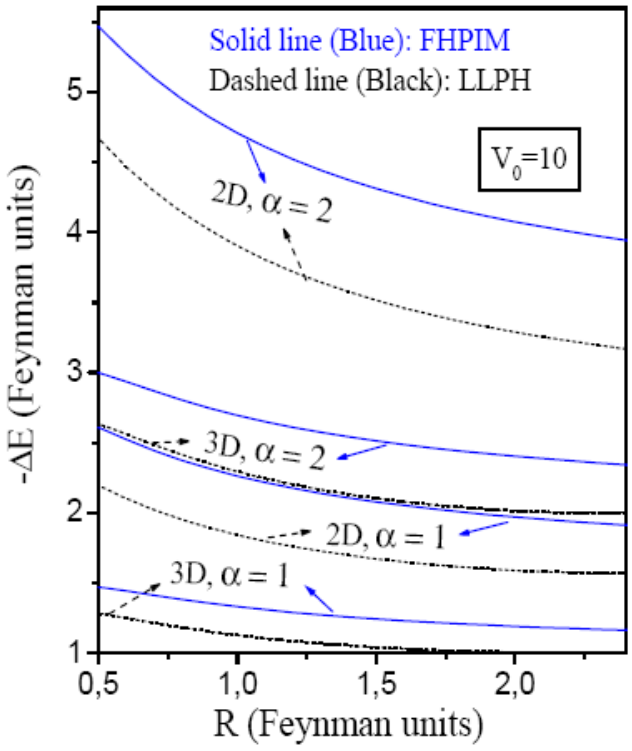
Yukarıdaki ifadeler, taban durumu enerjisinin üst bağlanma seviyeleri için δ ve t varyasyonel parametrelerine göre nümerik olarak minimize edilirler. $V_0 = 0$ bulk polaron sonuçlarını verir. (4.5) ve (4.6)'da α=0 alınıp bulunan sonuçlar varyasyon parametrelerine göre minimize edildikten sonra elde edilen sonuçlar (4.5) ve (4.6)'dan çıkartılarak polaronik düzeltmeler elde edilir.



Şekil 4.3 Feynman birimlerinde iki ve üç boyutlu Gaussiyen kuantum noktalarında, polaron self-enerjisinin $V_0 = 10$ ve $\alpha = 0.01, 0.02, 0.03$ için, R'nin fonksiyonu olarak grafiği

Şekil 4.3'de, iki ve üç boyutlu kuantum noktaları için zayıf çiftlenim aralığında polaron self-enerjisinin R'nin fonksiyonu olarak verilmiştir. Her üç metodun sonuçlarından görülüyor ki R azaldığında polaronik etki artmakta ve beklenildiği gibi α elektron-fonon çiftlenim sabitinin artışıyla polaron self-enerjisi artmaktadır. Diğer taraftan potansiyel erimi yeterince büyüdüğünde polaron self-enerjisi eğrisi R'ye göre değişmeyen sabit değer almaktadır ki bu da bulk polaron limitindeki sonuçtur. Daha önce vurgulandığı gibi şekil 4.3'te de polaronik etkinin iki boyut, üç boyuttakinden çok daha güçlüdür. Bu

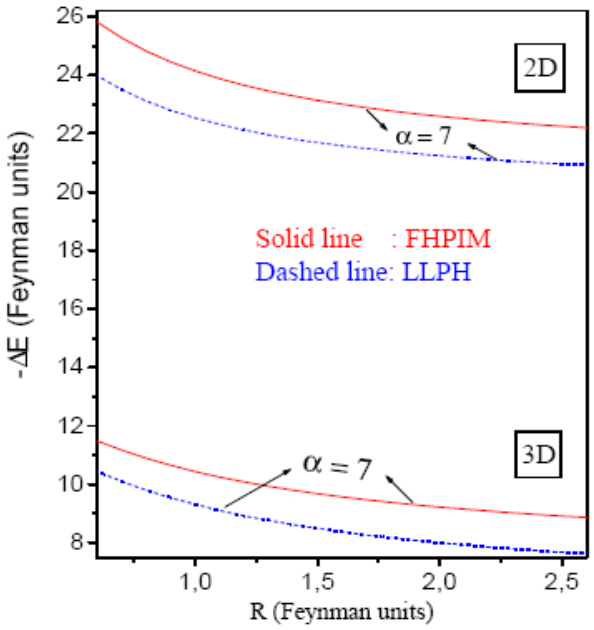
sonuçlar beklenen sonuçlardı. Fakat bundan sonra vurgulanacak sonuçlar daha önemlidir. Örneğin, grafikten de görüldüğü gibi RSPT en düşük sonuçları veriyor. LLPH sonuçları beklenen değerinden çok daha büyük sonuçlar veriyor. FHPIM sonuçları ise RSPT sonuçları ile LLPH sonuçları arasında ancak RSPT sonuçlarına daha yakın değerler vermektedir. Parabolik potansiyel durumunda zayıf çiftlenim limitinde her üç metodun yaklaşık aynı enerji değerleri verdiği çok iyi bilinmektedir. α'nın çok küçük değerleri için her üç metotta elde edilen enerji değerleri arasındaki fark yeterince belirgin değil. Fakat α'nın yeterince büyük değerleri için her üç metottaki enerji değerleri arasındaki fark ihmal edilmeyecek kadar büyüktür. α ile ilgili bu gerçek bir sonraki şekilde değinilecektir.



Şekil 4.4 Feynman birimlerinde, 2- ve 3-boyutta, $\alpha = 1$, $\alpha = 2$ ve $V_0 = 10$ için, polaron self-enerjisinin R'ye göre grafiği

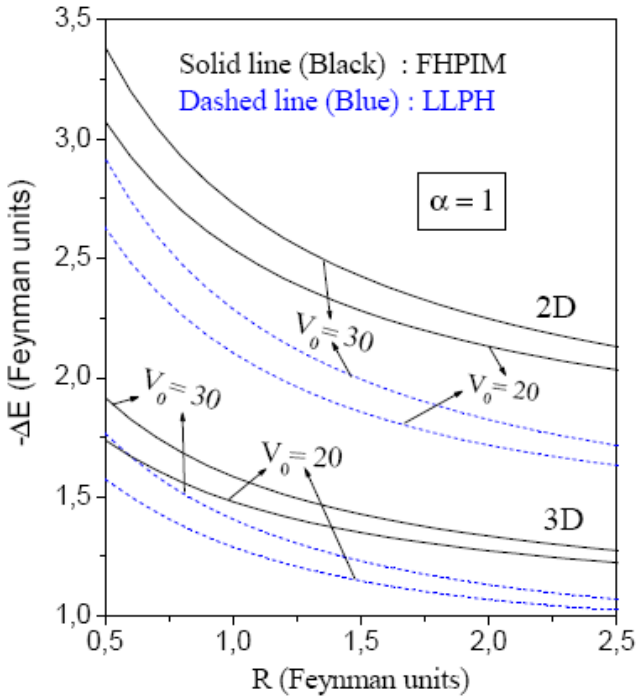
Şekil 4.4'de iki ve üç boyutlu kuantum noktaları için orta seviye çiftlenim aralığında Feynman-Haken enerji değerleri LLPH enerji değerleri ile karşılaştırılmıştır. Beklendiği gibi Feynman-Haken enerji değerlerinin LLPH enerji değerlerinden daha büyük olduğu görülmektedir. Fakat iki metotta elde edilen enerji değerleri arasındaki fark bir önceki

paragrafta açıklanan nedenden dolayı çok daha büyüktür. Üç boyutlu durum ve α'nın küçük değerli durumları için enerji değerleri arasındaki fark biraz daha küçüktür. İki boyuttaki polaronik etkilerin üç boyuttakinden daha güçlü olduğunu buradan da görülebilmektedir. Bütün durumlarda büyük R değerleri için polaron self-enerjisi α'ya bağlı olarak bazı asimptotik değerlere gitmektedir. Bu asimptotik değerler bulk polaron limitidirler.



Şekil 4.5 Feynman birimlerinde, 2- ve 3-boyutta, $\alpha = 7$ ve $V_0 = 10$ için polaron self-enerjisinin R'ye göre grafiği

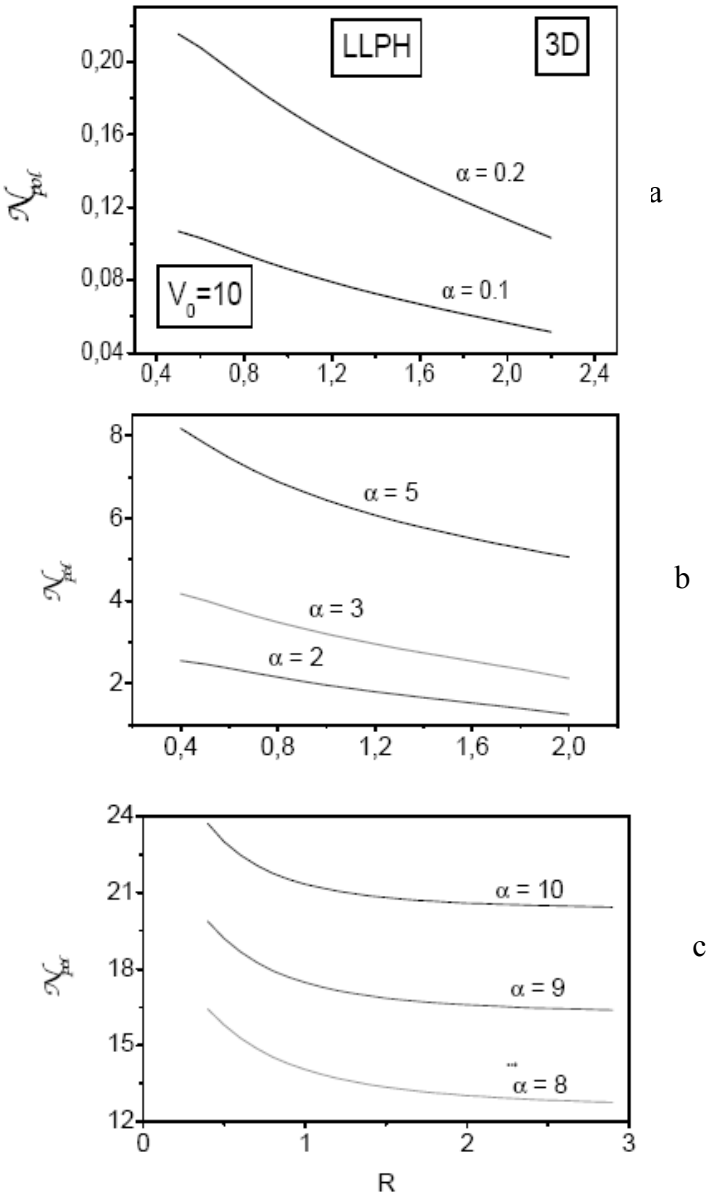
Şekil 4.5'de FHPIM ve LLPH metotlarından elde edilen güçlü çiftlenim sonuçlarının grafikleri çizildi. $\alpha = 7$ için sonuçlar gösterildi. Bu grafikte LLPH sonuçlarının bağıl doğruluğu daha iyidir. Buradan yola çıkarak LLPH metodu sadece bazı çiftlenim aralıklar için değil bütün çiftlenim aralıkları için iyi bir metot hissi oluşmaktadır.



Şekil 4.6 Feynman birimlerinde, 2- ve 3-boyutlu kuantum noktalarında $\alpha = 1$ ve V_0'ın üç farklı değeri için polaron self-enerjisinin R'ye göre grafiği

Şekil 4.6'da $\alpha = 1$ gibi bir sabit α değeri için V_0'ın farklı değerlerinde her üç metotta elde edilen sonuçlar karşılaştırılacaktır. İki boyutta LLPH metodunun, üç boyuta göre daha iyi sonuçlar verdiğini ve doğruluğun artan R değeriyle orantılı olduğu görülmektedir. Bu, her ne kadar LLPH metodunun her zaman doğru sonuçlar vereceğini göstermese de, avantaj sağladığını göstermektedir.

Bu aşamadan sonra LLPH metodunu kullanarak sistemin dalga fonksiyonuna göre ortalaması alınan bazı diğer polaronik özellikler ile ilgili sonuçlar elde edilecektir. Bölüm 3.2.3'de LLPH metoduna göre polaron içinde fonon sayısı, polaron yarıçapı ve polarizasyon potansiyeli için biçimsel ifadeler elde edilmişti. δ ve t varyasyon parametrelerinin değerleri optimize edilerek fonon sayısı, polaron yarıçapı ve polarizasyon potansiyeli için nümerik değerleri belirlenmelidir. Şimdi bu nümerik sonuçlar tartışılacaktır.

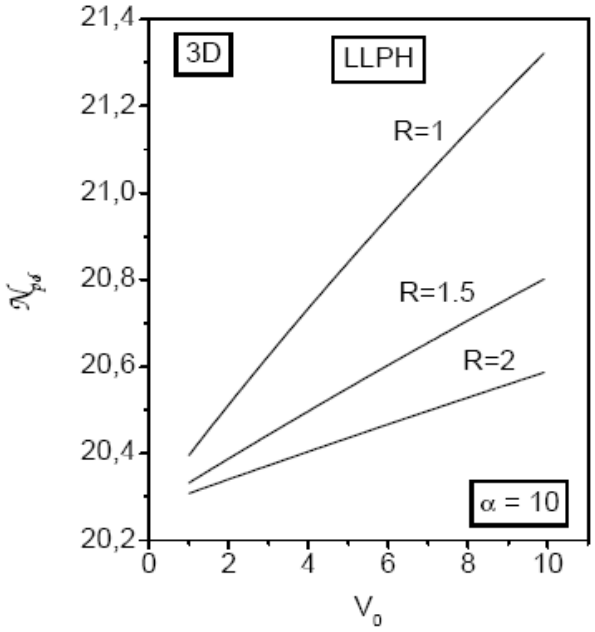


Şekil 4.7 Üç boyutta, farklı α değerleri ve $V_0 = 10$ için, fonon sayısının R'ye göre grafiği

a- zayıf-etkileşme sınırında fonon sayısı
b- orta seviyede-fonon sayısı
c- güçlü-etkileşme sınırındaki fonon sayısı

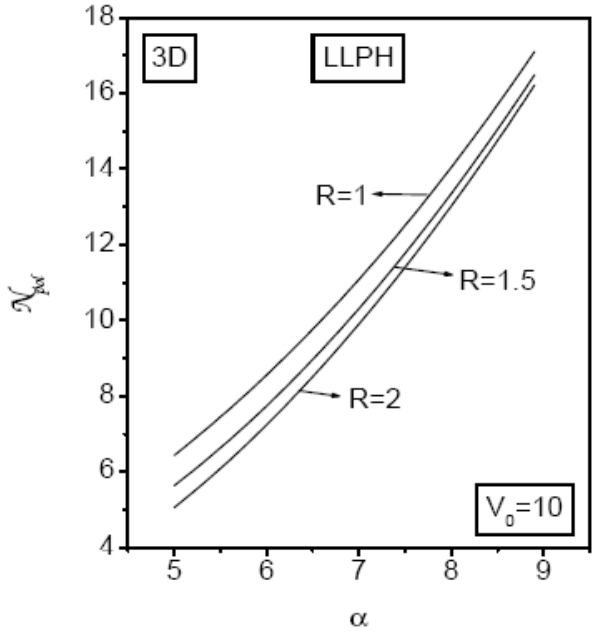
Şekil 4.7, fonon sayısı N_{pol} 'ın, R'nin fonksiyonu olarak davranışını göstermektedir. Şekil 4.7.a'da üç boyutta zayıf çiftlenim aralığında N_{pol}'un R'ye bağlı değişimi gösterilmektedir. Şekil 4.7.b'de orta seviye çiftlenim aralığı, şekil 4.7.c'de ise güçlü etkileşim durumu grafikleri çizildi. Her üç grafikte R'nin azalmasıyla N_{pol} polaron

sayısının arttığı görülmektedir. Bu sonuç aynı V_0 değeri için tuzaklama potansiyelinin eriminin azalması ile polaron bulutuna bağlı olan fonon sayı artmaktadır. Ayrıca küçük α değerleri için fonon sayısının R'ye göre yaklaşık lineer olduğu görülmektedir. Buna karşın α değerindeki artışla birlikte R'nin azalmasına karşılık fonon sayısındaki artışın hızlandığı görülmektedir. Burada sadece üç boyut durumu için grafikler elde edildi ancak iki boyutta durumun benzer olduğu ancak iki boyut ile üç boyut arasındaki tek fark iki boyutta etkinin daha güçlü oluşu olacaktır.



Şekil 4.8 Üç boyutta, farklı R değerleri için, fonon sayısının V_0 'ın fonksiyonu olarak değişimi grafiği

Şekil 4.8'de fonon sayısının V_0 'ın artışı ile arttığı, R'nin artışı ile azaldığı görülmekte. Fonon sayısı V_0 'a göre lineer olduğu grafikten okunabilir. V_0 potansiyelinin derinliği arttıkça polaron durumu daha düşük enerjilerde gerçekleştirmektedir ki bu, kendi kendini tuzaklama durumunu verir.

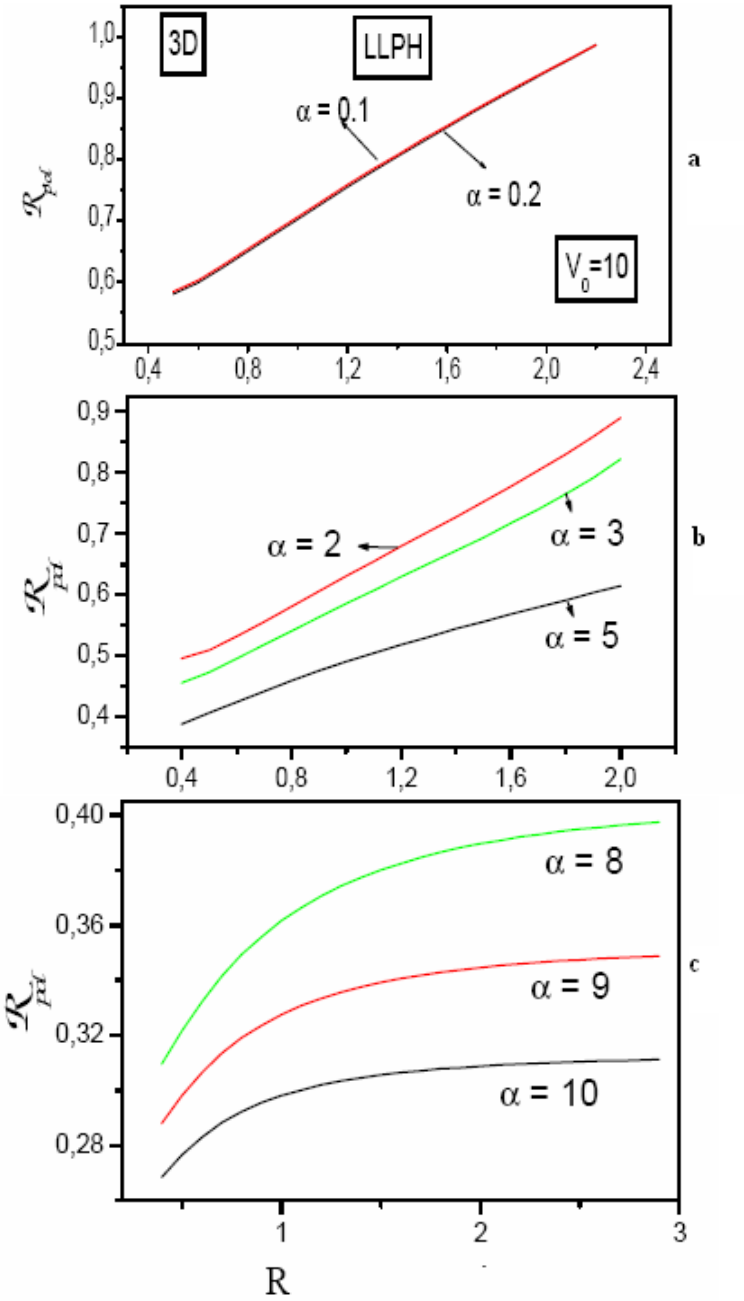


Şekil 4.9 Farklı R değerleri için fonon sayısının α 'nın fonksiyonu olarak değişimi

Şekil 4.9'da R'nin üç değeri için N_{pol} fonon sayısının, α elektron-fonon çiftlenim sabitinin fonksiyonu olarak grafiği çizildi. Burada da fonon sayısının α 'nın aratan bir fonksiyonu olduğu görülmektedir. Küçük α değerlerinde eğrinin yaklaşık lineer olduğu görülmektedir. Bu, en azından küçük V_0 için beklenen bir sonuçtur. Buna karşı büyük V_0 değerleri için fonon sayısı α 'nın hızlı artan bir fonksiyon olmaktadır.

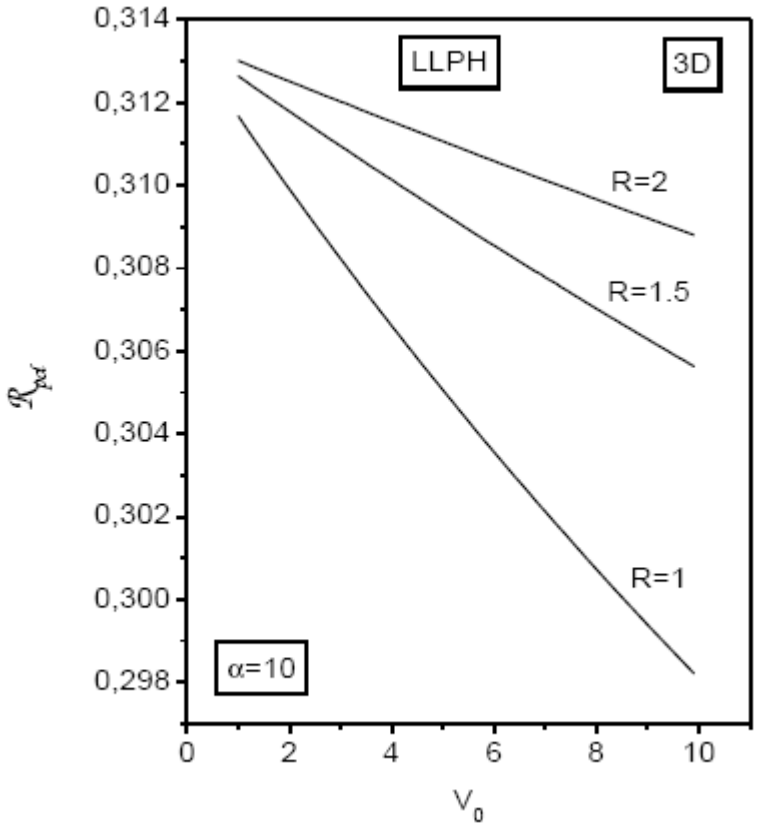
Şekil 4.10'da polaron büyüklüğü, R_{pol} 'un doğasının R eriminin fonksiyonu olarak üç boyutta çalışıldı. Burada zayıf, orta seviye ve güçlü etkileşim bölgeleri için R_{pol} 'un davranışı incelendi. Şekil 4.10.a, $\alpha = 0.01$ ve $\alpha = 0.02$ için R_{pol} 'un davranışını göstermektedir. Polaron yarıçapı, R'nin arştı ile artmakta ve α çiftlenim sabitine bağlılığı zayıf etkileşim bölgesinde ihmal edilebilecek kadar düşüktür. Şekil 4.10.b'de orta seviye etkileşim bölgesinde $\alpha = 2,3,5$ değerleri için R_{pol} 'un değişim incelenmiştir. Burada ilginç bir sonuçla karşılaşıldı. Küçük R değerleri için değişim yaklaşık lineerdir. Fakat α =2 ve α =3 değerleri için R'nin artışıyla polaron büyüklüğündeki artış lineerlikten ayrılarak artan bir grafik sergilemektedir. Ancak α =5 değeri için polaron yarıçapı küçük değerler almaktadır. α =5 için gözlenen bu farklılık orta seviye

durumundan ayrılışı göstermektedir. Bu yüzden α=5 değeri güçlü etkileşim bölgesine ait olduğu görünümünü vermektedir. Şekil 4.10.c'de güçlü etkileşme bölgesindeki α=8,9,10 değerleri için polaron yarıçapının grafiği çizildi. Büyük α değerleri için polaron yarıçapının daha küçük olduğu görülmektedir.



Şekil 4.10 Üç boyutta, farklı α değerleri için, polaron yarıçapının R'ye göre grafiği

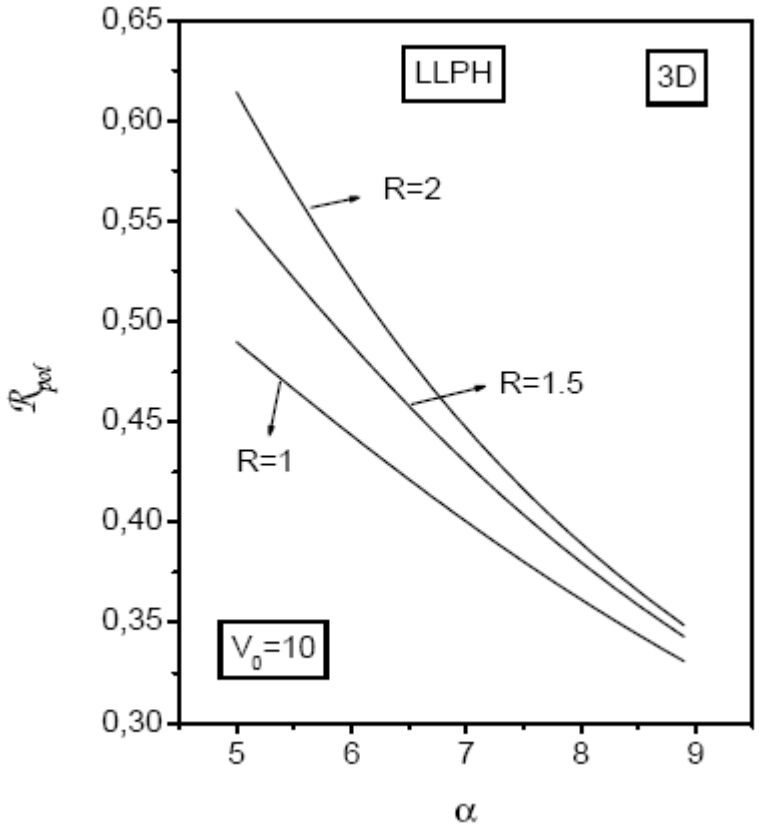
a. zayıf etkileşme, b. orta seviye etkileşme, c. güçlü etkileşme



Şekil 4.11 Farklı R değerleri için polaron yarıçapının V_0'a göre grafiği

Şekil 4.11'de R'nin birkaç değeri için, etkin polaron yarıçapı R_{pol}'nın tuzaklama potansiyelinin derinliği olan V_0'a göre davranışı çalışıldı. V_0 artıkça polaron yarıçapının monoton olarak küçüldüğü görülmektedir. Polaron yarıçapındaki azalma yaklaşık lineerdir. Küçük R değeri için azalma lineerlikten uzaklaşarak daha da hızlıdır. Bu anlaşılabilir bir durumdur. Çünkü aynı R değeri için tuzaklama potansiyeli derinleştikçe, polaron potansiyelinin diplerine doğru düşmektedir ve dolayısıyla da taban durumu enerjisi azalmaktadır. Sonuç olarak polaron yarıçapı azalmaktadır. R'nin küçük değerlerinde, polaron yarıçapında hızlı bir azalma olmaktadır. Bu, güçlü-tuzaklama rejimidir.

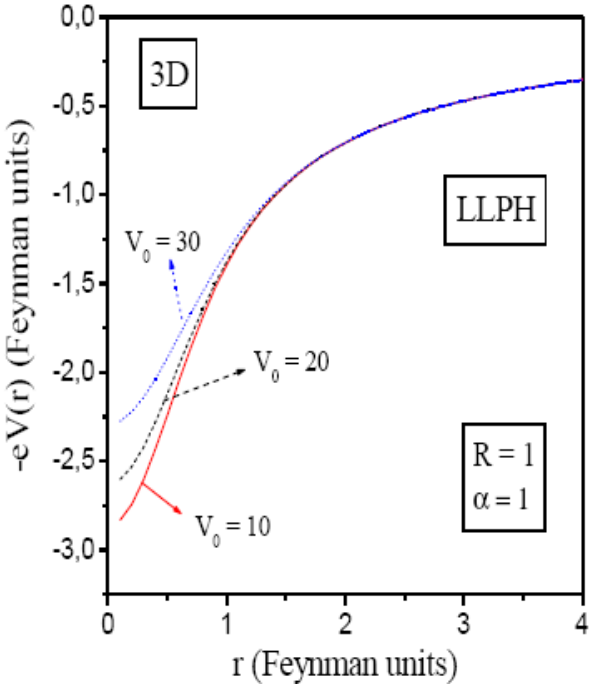
Şekil 4.12'de, R'nin birkaç değeri için, polaron büyüklüğünün α'ya bağlılığı gösterilmektedir. α'nın küçük değerlerinde, polaron yarıçapı büyüktür. Ancak α büyüdükçe yarıçap küçülmektedir. Bu davranışı şu şekilde açıklanabilir: Büyük α değerlerinde polaron kendi kendini tuzaklayan lokalize durumu içine girmekte ve sonuç olarak polaronun büyüklüğü yeterince küçülmekte ve limit durumunda R_{pol} değeri bir örgü uzayının büyüklüğü civarında olur. Bu limit durumunda polaron büyüklüğü potansiyel erimi ve R'den bağımsız olur. Bu, güçlü etkileşme limitidir. Burada ulaşılan sonuç daha önce tartışılan güçlü etkileşim durumundan farklı olup lokalize durma karşılık olan sonuçtur.



Şekil 4.12 Farklı R değerleri için, polaron yarıçapının α'ya göre grafiği

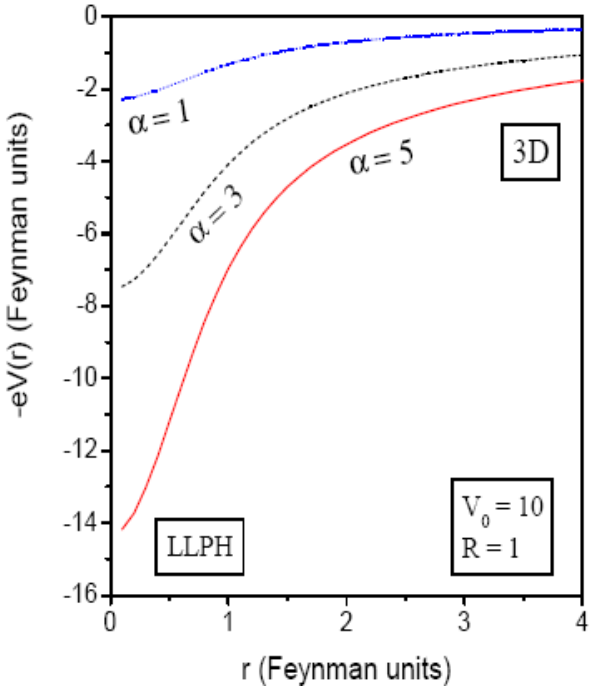
Bir sonraki çalışma, polarizasyon poyansiyeli $-eV(\vec{r})$'nin, r'nin fonksiyonu olarak davranışını incelemek olacaktır. Şekil 4.13, potansiyel derinliği V_0'ın birkaç değeri için,

polarizasyon potansiyelinin r'ye göre grafiğini göstermektedir. Tuzaklama potansiyeli derinleştikçe, küçük r değerlerinde, polarizasyon potansiyeli de derinleşir.

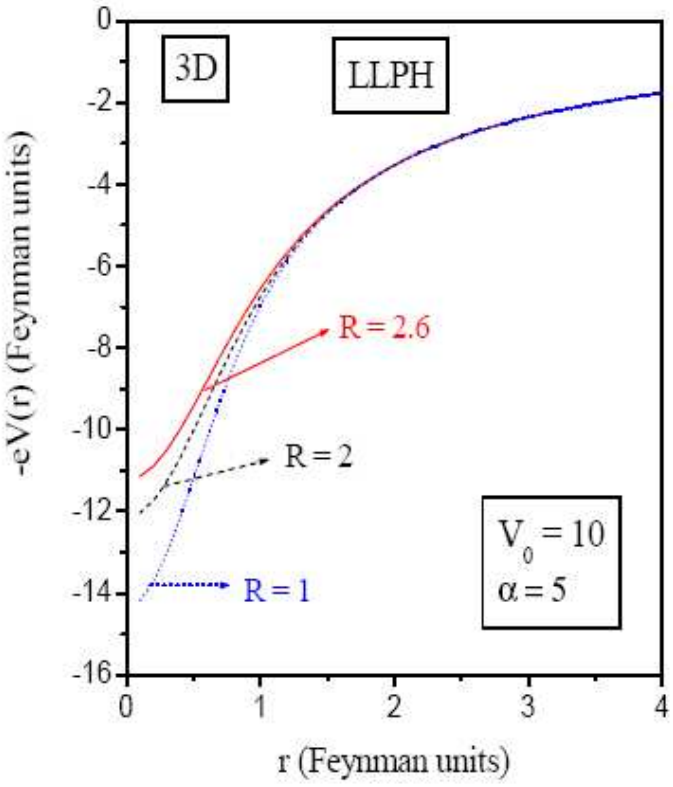


Şekil 4.13 V_0'ın farklı değerleri için, polarizasyon potansiyelinin r'ye göre grafiği

Şekil 4.14'de ise yukarıdaki durumu farklı α değerleri için gösterilmeye çalışılmıştır. Yine, α arttıkça polarizasyon potansiyelinin derinleştiği görülmektedir.



Şekil 4.14 α 'nın birkaç değeri için, polarizasyon potansiyelinin r'ye göre grafiği



Şekil 4.15 R'nin birkaç değeri için, polarizasyonunun r'ye göre grafiği

Son olarak, Şekil 4.15'de $-eV(\vec{r})$ polarizasyon potansiyelinin davranışını birkaç R değeri için incelenmiştir. Burada, R arttıkça polarizasyon potansiyelinin beklendiği gibi yeterince sığ olmaktadır.

5. MATERYAL VE YÖNTEM

Bu tez çalışmasında genel olarak analitik yöntem kullanılmıştır. Ayrıca bölüm 3'deki integral hesaplamaları ve bölüm 4'teki grafik çizimleri için bilgisayar programlarından faydalanılmıştır.

6. SONUÇ

Bu çalışmada Gaussyen potansiyeline sahip simetrik kuantum noktalarındaki boyuna optik (LO) fononlarla etkileşen elektron problemi tartışıldı. İki ve üç boyutlu sistemler için problem incelendi. Rayleigh-Schrödinger pertürbasyon teorisi, LLPH metodu ve Feynman-Haken path integral tekniği kullanılarak sistemin taban durum enerjisi, buradan yola çıkarak da polaronun self-enerjisi hesaplandı. Gaussiyen potansiyeli tam çözülebilir olmadığından, ikinci-mertebe pertürbasyon hesaplaması yapıldı. Potansiyelin geniş sınırları için Gaussiyen tuzaklama potansiyeli parabolik potansiyele göre güçlü polaronik etkiye sahiptir. Ancak R'nin küçük değerleri için parabolik potansiyel daha güçlü bir bağlanma vermektedir. İki ve üç boyutta da nitel davranışlar benzerdir, ancak Gaussiyen potansiyeli ile parabolik potansiyel arasındaki farklılık iki boyutta, üç boyuttakine göre daha fazladır. Bütün R değerleri için parabolik potansiyel yaklaşımı zayıf bir yaklaşımdır. V_0 arttıkça polaronik erkinin güçlü olduğunu ve bu etkinin iki boyutta, üç boyuttakine göre daha güçlü olduğunu görüldü. Pertürbasyon teorisi, LLPH metodu ve FHPIM ile elde ettiğimiz polaron self-enerji sonuçları karşılaştırıldı. Zayıf-etkileşme rejiminde, RSPT sonuçları en güçlü polaronik etkiyi verdi ve LLPH metodu da en zayıf etkiyi verdi. FHPIM sonuçları ise diğerlerine göre ortalardaydı. Bütün metotlar nitel olarak benzer davranışlar sergilediler: Polaronik etkiler azalan R ile artmakta, artan α ile artmakta ve bu artışlar iki boyutta, üç boyuttakine göre daha büyük olmaktadır. Orta seviye ve güçlü-etkileşme rejiminde yine FHPIM, LLPH metoduna göre daha iyi sonuçlar vermektedir. Kolay olması nedeniyle LLPH metodunu, polaron etrafındaki fonon sayısını, polaron yarıçapını ve polarizasyon potansiyelini bulmak için kullanıldı. Fonon sayısı, α'nın artan değerleri ile artmakta, R'nin artan değerleri ile azalmakta ve V_0'ın artan değerleri ile artmaktadır. Zayıf etkileşme alanında N_{pol}'deki azalma α'da lineerdir. N_{pol}'ün V_0 ile davranışı da lineerdir. Polaron yarıçapı ilginç bir davranış sergilemektedir. Zayıf etkileşme sınırında polaron yarıçapı R ile lineer olarak artmaktadır, ancak α'dan bağımsız görünmektedir. Orta seviye-etkileşme sınırında, R_{pol}, büyük R değerlerinde yukarı doğru küçük bir kıvrım göstermektedir. Güçlü-etkileşmede polaron yarıçapı, α'ya bağlı olan bazı R değerlerinde sabit olmaktadır. Polaronun yarıçapının V_0'ın fonksiyonu olarak lineer bir

şekilde azaldığı görüldü. Bu azalma küçük R değerlerinde hızlı olmaktadır. Polaron yarıçapı artan α değerleri ile azalmaktadır. Polaron yarıçapı azalan α değerleri ile çok hızlı bir şekilde artmaktadır. Polaron yarıçapı tuzaklama potansiyelinin genişliği ile sınırlandırılmıştır. Polarizasyon potansiyelinin şekli LLPH metodu kullanılarak tayin edilmiştir. Kuantum noktasının merkezinde minimum bir yapı gösterilmektedir. Bu minimum, artan V_0 ve α ve de azalan R ile derinleşmektedir. Büyük r değerlerinde polarizasyon potansiyeli, tuzaklama potansiyelinin genişliğine ya da derinliğine bağlı değildir. Bütün bu davranışlar, iki boyutlu kuantum noktalarında, daha güçlü bir etki göstermektedir.

KAYNAKLAR

Kuper, C. G. and Whitfield G.D. 1963. Polarons and Excitons. Plenum Pres, NewYork.

Devreese J.T. (Ed.) 1972. Polarons in Ionic Crystals and Polar Semiconductors. Plenum Pres, NewYork.

Chatterjee, A. Mitra, T.K. and Mukhopadhyay, S. 1987. Polarons. Phys. Rep. **153**, 91.

Chen, R., George, T.F. and Lin, D.L. 1990. Phys. Rev. **B41**, 1435

Kotthaus, Lorke, A.J.P. and Ploog, K. 1990. Phys. Rev. Lett. **64**, 2559

Rudin, S. and Reinecke, T.L. 1990. Phys. Rev**. B41**, 7713

Lin, D.L., Chen, R. and George, T.F. 1991. Phys. Rev. **B43**, 9328

Chatterjee, A., Krishna, P.M. and Mukhopadhyay, S. 2006. Solid State Commun. **138,** 285

Bronold, F.X. and Fehske, H. 2002. Phys. Rev.B. **66**, 073102

Govorov, O., Ulloa, S.E. and Zhang, W. 2002. Europhys. Lett. **58**, 857

Dobrosavljevic, V. and Kotliar, G. 1997. Phys. Rev. Lett.**78,** 3943

Fröhlich, H. 1954. Phil. Mag. Suppl. **3**, 325

Lee, T. D., Low, F. and Pines, D. 1953. Phys. Rev. **90**, 297

Holstein, T. 1959. Annals of Phys. **8,** 343

Chatterjee, A. Krisna, R. P. M. and Mukhopadhyay, S. 2004. Phys. Lett. A **327**, 67

Chatterjee, A. and Sil, S. 1995. Phys. Rev. B **51**, 2223

Chatterjee, A. and Mukhopadhyay, S. 2001. Acta. Phys. Pol. B **32**, 473

Bockstedte, M. and Fisher, S. F. 1993. J. Phys. Condens. Matter **5** , 6043

Chatterjee, A. Mitra, T. K. and Mukhopadhyay, s. 1987. Phys. Rep. 153, 91.

Yanar, S., Sevim, A., Boyacıoğlu, B., Sağlam, M.,Mukhopadhyaya, S. and Chatterjee, A. 2008. Superlattices and Microstructures **208-239**

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Ata SEVİM

Doğum Yeri: Beşiri - BATMAN

Doğum Tarihi: 01/05/1977

Medeni Hali: Bekar

Yabancı Dili: İngilizce

Eğitim Durumu

Lise : Akçadağ Anadolu Öğretmen Lisesi (1997)

Lisans : Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü (2002)

Yüksek Lisans : Ankara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı (Temmuz 2008)

Çalıştığı Kurum/Kurumlar ve Yıl:

Batman / Sason İlçe Milli Eğitim Müdürlüğü
Vekil öğretmen (2004 – 2005)

İçişleri Bakanlığı Eğitim Dairesi Başkanlığı / Ankara (2007 -)