

T. C
FIRAT ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

DÜZENSİZ MADDELERİN ELEKTRONİK YAPILARININ
YENİ BİR TEKNİKLE HESAPLANMASI

Cengiz TATAR

119 532

DOKTORA TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

ELAZIĞ-2002

119532

T.C. YÜKSEKÖĞRETİM BAKANLIĞI
DOKÜMANİZASYON MERKEZİ

T. C
FIRAT ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

DÜZENSİZ MADDELERİN ELEKTRONİK YAPILARININ YENİ BİR TEKNİKLE
HESAPLANMASI

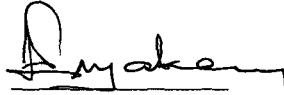
Cengiz TATAR

DOKTORA TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

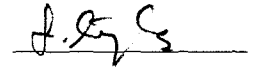
Bu Tez,/...../..... Tarihinde, Aşağıda Belirtilen Jüri Tarafından Oybirliği İle
Başarılı / Başarısız Olarak Değerlendirilmiştir.


Danışman

Doç. Dr. Abdulkadir YILDIZ



Doç. Dr. Eyuphan YAKINCI



Doç. Dr. Ferihte GÖĞTAŞ

TEŞEKKÜR

“Düzensiz Maddelerin Elektronik Yapılarının Yeni Bir Teknikle Hesaplanması” Konulu doktora tezimin yöneticiliğini üstlenen ve hazırlanmasında ilgi ve yardımlarını esirgemeyen sayın hocam Doç.Dr.Abdulkadir YILDIZ’ a şükranlarımı sunarım. Çalışmalarım süresince değerli bilgilerinden yararlandığım sayın Doç.Dr.Fahrettin GÖĞTAŞ’a teşekkür ederim.

Çalışmalarım sırasında benimle sıkıntılara ortak olan eşim Zehra, oğullarım Mehmet Ali, Yusuf Ayberk ve kızım İkranur’a en derin sevgilerimi sunarım.

Bu tez çalışması TUBİTAK (proje no: **TBAG-1739**) ve Fırat Üniversitesi Araştırma Fonu (proje no: **330**) tarafından desteklenmiştir.

Cengiz TATAR



ÖZET**DOKTORA TEZİ****DÜZENSİZ MADDELERİN ELEKTRONİK YAPILARININ YENİ BİR
TEKNİKLE HESAPLANMASI**

Cengiz TATAR

Fırat Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı
2002, Sayfa : 77

Bu çalışmada, düzensiz sistemlerin elektronik yapılarını hesaplamak için çoklu saçılmaya dayanan teoriksel bir metod takdim ediliyor. Teorisi Beeby tarafından geliştirilmiş olan metod, hem yapısal hemde mevkisel düzensiz sistemlere uygulanmak amacıyla iki versiyon adı altında tanıtılıyor. Yapısal olarak düzensiz sistemler için geliştirilmiş versiyon, Beeby-Hayes metodu olup, bu gruba giren iki boyutlu bir model sistem olan zar örgüsüne uygulandı ve elektronik durum yoğunluğu hesaplandı. Bu hesaplamada bu örgüyü oluşturan 3-bağlı ve 6-bağlı örgülerin bağli konsantrasyonlarının değerlerine göre, durum yoğunluğundaki değişim araştırıldı. Elektronik durum yoğunluğunun, sistemi oluşturan farklı iki örgünün konsantrasyonlarına bağli olarak değiştiğı ve şekillendiğı gözlemlendi.

Mevkisel düzensiz alaşımlara uygulanan metodun ikinci versiyonu Beeby metodu olarak tanımlandı. Bu metod, öncelikle basit kübik, yüzey merkezli kübik, cisim merkezli kübik örgülere uygulanıp bu düzenli örgülerin durum yoğunlukları hesaplandı. Literatörle tamamen uyumlu sonuçlar elde edildi. Daha sonra, konsantrasyonları bakımında farklı iki ve üç atomun bu düzenli örgüler üzerinde rastgele dağıldığını varsayarak durum yoğunlukları hesaplandı. Durum yoğunluklarının her bileşenin konsantrasyonları ölçüsünde tanımlanan bağli durum enerjileri üzerinde yığıldığı gözlemlendi. Ayrıca band genişliğinin (W) bağli durum enerji farkı (ΔE) oranına göre ($W/\Delta E$), durum yoğunlukları tek bir band veya birden fazla ayrı banda ayrılarak bağli durum enerjiler üzerinde toplandığı görüldü.

Anahtar Kelimeler : Elektronik Durum yoğunluğu, Yapısal Düzensiz Sistemler, Düzensiz alaşımlar, Çoklu Saçılma Teorisi.

ABSTRACT**Ph.D THESIS****CALCULATION OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF DISORDERED SYSTEMS BY A NEW TECHNIQUE**

Cengiz TATAR

Firat University
 Graduate school of Science and Technology
 Department of Physics
 2002, Page :77

In this study, a method based on multiple scattering theory is introduced for calculating the electronic structure of disordered systems. The method, of which theory was developed by Beeby, is defined within two versions for the purpose of applying to both structurally disordered and substitutional disordered systems. The version defined for structurally disordered systems called Beeby-Hayes method is applied to a model known as diced lattice, which is a kind of structural disordered, and the density of states is calculated. In this calculation, the variation of the density of states of the model to the concentration values of 3-fold and 6-fold lattices is investigated. It was found that the density of states forms with respect to the values of the concentrations

The second version applied to substitutional disordered systems is a self-consistent one introduced as Beeby method. The method is first applied to basic cubic, face centre cubic and body centre cubic lattices and their electronic density of states are calculated. The results are in agreement perfectly with the literature. Then, the density of states is investigated to the concentrations of two and three components distributed randomly on these lattices. It has been obtained that the densities of states appear at their bound state energies defined for each component. Moreover, it has also been obtained that the density of states varies with respect to the ratio of bandwidth (W) to bound state energies (ΔE), ($W/\Delta E$).

Keywords: Electronic Density of States, Structural disordered systems, Substitutional Disordered, Multiple Scattering Theory.

İÇİNDEKİLER

TEŞEKKÜR.....	III
ÖZET.....	IV
ABSTRACT.....	V
ŞEKİLLER LİSTESİ.....	VI
1. GİRİŞ.....	1
2. DÜZENSİZ SİSTEMLER.....	6
2.1 Düzensiz Sistemler ve Düşük boyuttaki Sistemler.....	9
2.2 İki Boyutlu Düzensiz Sistemler.....	10
2.3 Band Teorisi ve Elektronik Yapılar.....	12
3. DÜZENSİZ SİSTEMLER VE BEEBY -HAYES METODU (BH).....	16
3.1 Çoklu Saçılma Teorisi ve Metodun Temel Bağlılıkları.....	17
3.2 Beeby-Hayes Metodu (BH) ve İki Boyutlu Düzensiz Sistemler.....	22
4. DÜZENSİZ YAPILARIN DURUM YOĞUNLUĞUNUN HESAPLANMASI...30	
4.1 Zar Örgüsü (Diced lattice) ve Tekniğin Uygulanması.....	31
4.2 Durum Yoğunluğunun Hesaplanması.....	36
5. MEVKİSEL DÜZENSİZ ALAŞIMLARIN ELEKTRONİK YAPILARI.....45	
5.1 Mevkisel Düzensiz Alaşımlar Tanıtılması.....	45
5.2 Metot ve Formülasyon.....	47
5.3 Durum Yoğunluğunun Hesaplanması.....	55
6. SONUÇLAR VE TARTIŞMA.....67	
7. KAYNAKLAR.....70	

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 2 1 : Bazı düzensiz modeller : (a) yapısal olarak düzensiz, (b) mevkisel düzensiz (substitutional), (c) yapısal ve mevkisel olarak düzensiz, (d) Penrose örgüsü.....	8
Şekil 4.1 : Zar örgüsü (diced lattice) : bal peteği (a) ve üçgen örgünün (b) birleşimi ile oluşan sistem.....	33
Şekil 4.2 : Zar örgüsü (düz çizgi) ve Bal peteği örgüsü (kesikli çizgi) durum yoğunlukları : (a) BH metodu ile hesaplanan, (b) Horiguchi ve Chen tarafından hesaplanan (Horiguchi ve Chen, 1972).....	40
Şekil 4.3 : $\eta_3=0.0$, $\eta_6 = 1.0$ değerlerine tekabül eden üçgen örgünün durum yoğunluğu.	41
Şekil 4.4 : $\eta_3=0.1$, $\eta_6 = 0.9$ değerlerine tekabül eden zar örgünün durum yoğunluğu. ..	41
Şekil 4.5 : $\eta_3=0.2$, $\eta_6 = 0.8$ değerlerine tekabül eden zar örgünün durum yoğunluğu. ..	42
Şekil 4.6 : $\eta_3=0.5$, $\eta_6 = 0.5$ değerlerine tekabül eden zar örgünün durum yoğunluğu. ..	42
Şekil 4.7 : $\eta_3=0.8$, $\eta_6 = 0.2$ değerlerine tekabül eden zar örgünün durum yoğunluğu. ..	43
Şekil 4.8 : $\eta_3=0.9$, $\eta_6 = 0.1$ değerlerine tekabül eden zar örgünün durum yoğunluğu. ..	43
Şekil 4.9 : $\eta_3 =1.0$, $\eta_6 = 0.0$ değerlerine tekabül eden bal peteği örgünün durum yoğunluğu.....	44
Şekil 5.1: T-matrisi için diyagramatik gösterimi: (a) ortalaması alınmış her t-matrisi, (b) ilk mertebeden düzeltme terimli saçılma, (c) ikinci mertebeden düzeltme terimli saçılma, (d) yasaklı bir saçılma (Beeby, 1969).....	51
Şekil 5.2: (a) Basit kübik örgünün durum yoğunluğu, (b) farklı konsantrasyonlu iki bileşenli alaşım durum yoğunluğu.....	58
Şekil 5.3: Basit kübik örgü üzerinde farklı konsantrasyonlu iki bileşenli düzensiz alaşımın durum yoğunlukları.....	59
Şekil 5.4 : Basit kübik örgü üzerinde farklı konsantrasyonlu üç bileşenli düzensiz alaşımın durum yoğunlukları.....	60
Şekil 5.5 : (a) fcc örgünün durum yoğunluğu, (b) fcc örgüsünde farklı konsantrasyonlu iki bileşenli alaşım durum yoğunluğu.....	61
Şekil 5.6 : FCC örgüde farklı konsantrasyonlu iki bileşenli düzensiz alaşımın durum yoğunlukları.....	62
Şekil 5.7 : FCC örgüde farklı konsantrasyonlu üç bileşenli düzensiz alaşımın durum yoğunlukları.....	63

Şekil 5.8: (a) BCC örgünün durum yoğunluğu, (b) BCC örgüsünde farklı konsantrasyonlu iki bileşenli alaşım durum yoğunluğu.....64

Şekil 5.9 : BCC örgüde farklı konsantrasyonlu iki bileşenli düzensiz alaşımın durum yoğunlukları.....65

Şekil 5.10 : BCC örgüde farklı konsantrasyonlu üç bileşenli düzensiz alaşımın durum yoğunlukları.....66



1. GİRİŞ

Düzensiz maddelerin fiziksel özellikleri ile ilgili dikkate değer teorik çalışmaların başlangıcı 1960 lı yıllara kadar gitmektedir. Ancak son 15-20 yıldan beri kullanılan metotlar, bu sistemleri en iyi bir şekilde tanımlayabilecek ve bunlar hakkında en doğru sonuçlar verebilecek yaklaşımlara dayanmaktadır. Ayrıca teknolojiadaki ilerlemelere paralel olarak çelik alaşımlar, amorf yarıiletkenler, sıvı metaller ve camlar gibi maddelerin ileri teknoloji sürecinin özünü oluşturmaları nedeniyle bunlarla ilgili çalışmalarda hem deneysel hem de teorik olarak dikkate değer bir artış olmuştur. Sonuç olarak her iki alanda da düzensiz maddelerin özelliklerinin anlaşılması amacıyla araştırma konusu olan bir çok fiziksel soru açıklığa kavuşmuştur. Örneğin, iki ve üç boyuttaki durum yoğunluğunun band kenarlarında meydana gelen fiziksel davranışlar, iletkenlik ve lokalizasyon kavramlarının boyuta bağlılığı gibi gelişmeler verilebilir (Rusek ve Orlowski,1995; Schreiber ve Ottomeier,1992).

Bütün bu gelişme ve çalışmalara rağmen, düzensiz sistemler ile ilgili alınan aşamaları düzenli (veya kristal) sistemler ile karşılaştırmak gerekirse, düzensiz sistemler hakkında çok az mesafe alındığı sonucu ortaya çıkar (Dean, 1972). Bunun başlıca iki sebepten kaynaklandığı iddia edilebilir. Birincisi, düzensiz sistemlerin fiziksel özelliklerinin belirlenmesinde veya çalışılmasında doğal olarak ortaya çıkan matematiksel güçlükler; ikincisi, bu sistemlerin sahip oldukları geometrik karmaşıklık ve zorluklardır. Diğer bir ifadeyle, Yoğun madde fiziği anlatımıyla, öteleme değişmezlik simetrisinin olmayışıdır. Öteleme değişmezliği simetrisine sahip olan sistemdeki tek bir kusurun olması dahi matematiksel açıdan bir çok zorluk meydana getirir. Bu bakımdan bu sistemlerin yapılarının periyodiklik özelliğine sahip olmaması nedeniyle kristaller için kullanılan Bloch teoremi gibi mevcut güçlü teorik tekniklerin uygulanmasını geçersiz kılar. Çünkü en genel anlamda momentum korunumu geçersiz olur ve $\mathbf{k}$ dalga vektörünün seçim kuralları kaybolur. Böylece, herhangi bir makroskobik yada mikroskobik niceliği belirlemek için her parçacığı tek tek ele alma zorunluluğu ortaya çıkar.

Bir kristali oluşturan atomların en dış yörüngelerindeki elektronlar serbest olduklarından, bu elektronlar kristal içerisinde her yerde eşit ihtimalle bulunabilirler. Sonsuz bir sistemi tek birim hücreye indirgeyip Bloch teoreminin bu en küçük birime uygulanması ile sistem hakkındaki tüm fiziksel özellikler kolayca hesaplanabilir.

Ancak, düzensiz sistemlere gelince kristallerdeki elektronları ve özelliklerini tanımlayan quasi-momentum, birim hücre, Brillouin sınırı, simetri, dalga numarası gibi fiziksel nicelikler geçerliliğini kaybeder. Dolayısıyla band yapıları ile ilgili olan dağıtkanlık bağıntısı da bir bakıma geçersiz kalır. İşte bu nedenlerden dolayı düzensiz sistemlerin çalışılması için değişik teknik ve metotların geliştirilmesi ve denenmesi kaçınılmaz olur.

Düzensiz sistemlerin optiksel, elektriksel, manyetik, yapısal ve elastik özellikleri gibi fiziksel özellikler üzerindeki çalışmalar hem deneysel hem de teorik olarak yapılmaktadır (Haerle vd., 1998; Wang vd., 2001). Deneysel çalışmalarda elektron difraksiyonu, nötron saçılması, foto emisyon ve sürekli x-ışını gibi teknikler, teknoloji ve metalurjideki ilerlemelere paralel olarak daha kapsamlı ve kesin deneysel çalışmaları beraberinde getirdi. Öte yandan, bu durumlar teorik çalışmalarda da çok daha gerçekçi modellerle düzensizliği tanımlama gereksinimini ortaya çıkardı (Elliot vd., 1974). Özellikle Green fonksiyonlarının kullanılmasına dayanan çoklu saçılma teorisi gibi güçlü perturbasyon tekniklerin geliştirilmesi ile, düzensiz bir ortamı tanımlayan ve diferansiyel bağıntılara dayanan Schrödinger denkleminin çözümüne bağlı olan zorunluluğu kısmen ortadan kaldırdı. Ayrıca, daha kapasiteli dijital ve hızlı bilgisayarların geliştirilmesi ile teoriksel sonuçlarla model sistemlere dayanan ve çok sayıda gelişigüzel dağılım ihtiva eden simülasyon sonuçlarının karşılaştırılma olanağı da sağlanmış oldu. Bilgisayar simülasyonları iki önemli amaca hizmet etmektedir. Birincisi; yaklaşık teoriksel teknikleri denemek amacıyla, bir anlamda yarı deneysel hesaplamaları yaparak standart bir mukayese için tam çözümlerin en azında bazı önemli özelliğinin ortaya çıkmasını sağlar. İkincisi; kompleks olmayan maddeleri çalışırken deneylere ön bilgi vermesi bakımında da önemli bir hizmet teşkil eder. Tabiatıyla bilgisayar simülasyonlarında uzun bilgisayar zamanı gerektirir. Elde edilen sayısal sonuçları genelleştirmek ve yorumlamak oldukça zor olduğundan genel teorilere (yaklaşımlara dayanan teoriler dahi) ihtiyaç vardır.

Ayrıca, makul büyüklükte gelişigüzel dağılmış düzensiz model sistemleri hesaplayabilecek kapasiteli bilgisayarların gelişmesi sonucu; değişik sayısal tekniklerin kullanım imkanlarının ortaya çıkmasıyla birlikte, bilgisayarlara bağlı olarak farklı bilgisayar simülasyonları ve fiziksel model tasarımları kullanarak rastgele düzensiz ağların (network) yapısını ve topolojinin anlaşılmasında önemli gelişmeler sağlandı.

Kısaca, günümüzde hem teorik hemde nümerik tekniklere dayanan hesaplamalarda en büyük rolü ve katkısı günden güne değişen bilgisayarlar sağlamaktadır.

Bir maddenin düzenli, kusurlu ya da düzensiz olup olmadığını belirlemek için bir çok fiziksel nicelik vardır. Bu niceliklerden birisi elektronik durum yoğunluğudur. Kristal yapıdaki maddelerin elektronik durumları band yapılarının hesaplanması ile belirlenebilir. Kristallerdeki band yapılarına karşılık, düzensiz sistemler için geçerli olan (bütün sistemler de geçerli olduğu gibi) en önemli niceliklerden birisi elektronik durum yoğunluğudur. Durum yoğunluğu, maddenin cinsine ve yapısına göre davranır. Kristallerin durum yoğunluğu ile düzensiz sistemlerin durum yoğunluğu kendini belirgin bir şekilde gösterir. Örneğin, kristallerde durum yoğunluğunun sıfır olduğu yasak band aralıkları ile birbirinden ayrılmış enerji bandları bulunurken, bu bandlara karşılık gelen durum yoğunlukları keskin pikler (van Hove pikleri) gösterirler. Öte yandan rasgele bir potansiyel yada bir safsızlığın mevcut olduğu sistemlerde (katkılı kristaller, sıvı metaller, amorf maddeler, sıvı karışımları, v.s.) düzensizlik olacağı için durum farklı olur ve bu düzensizliğin etkisi elektronik yapılarında değişik şekilde kendini gösterir (Lifshits vd., 1988). Örneğin, kristallerde belirgin olarak oluşan band aralıkları kendini gösterirken, düzensiz sistemlerde bu aralıklara elektronik seviyeler yerleşir. Aslında, yasak enerji bölgelerin yok olması ile enerji bandlarında iki sonuç görülebilir. Birincisi, band kenarlarında kaymalar olacağından normal band da genişleme olur. Diğer etki ise, uzun-mesafe düzenliliğin (long-range order) yok olması sonucu durum yoğunluğundaki keskin bandlar daha yumuşak bir yapıya dönüşür. Ayrıca, düzenli yapılara sahip olan maddelerde safsızlık varsa içerdiği safsızlık yoğunluğuna göre band aralıklarında seviyeler kendini gösterir.

Maddelerin elektronik yapılarının teorik olarak hesaplanmasında farklı potansiyel yaklaşımları kullanılmıştır. Bunların bir çoğu basitleştirilmiş potansiyel modelleriyle sınırlandırılmıştır. Örneğin, Sıkı-bağ (Tight-binding), Serbest Elektron yaklaşımı (Free Electron Approximation), Yaklaşık Serbest Elektron yaklaşımı (Nearly Free Electron Approximation), ab initio yaklaşımı, vs. gibi modeller yaygın olarak kullanılanlardır. Aslında katıhal teorisinin başlangıcından beri çok iyi bilinen iki alternatif yaklaşım bulunmaktadır. Bunlar yaklaşık serbest elektron ve sıkı-bağ yaklaşımları olup her ikisi de düzensiz sistemlere uygulanmıştır. Ancak serbest veya yaklaşık serbest elektron yaklaşımı metallere uygulamada, sıkı-bağ yaklaşımı ise kristal

ve düzensiz sistemlere uygulamada daha makul sonuçlar vermiştir (Traiber vd. 1996). Bununla beraber, eğer atomik potansiyel küresel simetrik olarak (muffin-tin) alınırsa çoklu saçılmaya dayanan teknikler başarılı bir şekilde kullanılmış olur (Györffy ve Stocks, 1966). Özellikle alaşımlar ve sıvılar gibi düzensiz sistemler için kullanılan teorik çalışmalar daha çok çoklu saçılmaya dayanmaktadır. Genellikle, çoklu saçılmada kullanılan atomik potansiyel muffin-tin potansiyeli olup, sıkı-bağ yaklaşımı içinde tanımlanan bir model potansiyeli şeklindedir. Bu potansiyel hem kompleks problemlerin çözümlerini kolaylaştırır hem de makul sonuçlar verir (Lax, 1951; Ehrenreich ve Schwartz, 1976; Papaconstantopoulos, 2001). En genel ifadeyle çoklu saçılma teorisi; Bloch teorisi veya Fourier örgü transformunun uygulanamadığı düzensiz ve farklı bileşenli alaşımlar, safsızlık ihtiva eden maddeler ve yapısal olarak düzensiz maddeler gibi sistemlerin çalışılmasında kullanıldığı için Schrödinger denkleminin de çoklu saçılma teorisine dayanan bir formülasyonla çözümü yapılır. Ayrıca her ne kadar dalga fonksiyonu genellikle ihtiyacımızdan daha çok bilgi ihtiva etse de, bu fonksiyonun hesaplamasına dayanan metotları kullanarak düzensiz sistemlerin termodinamik özelliklerini hesaplamak zaman israfından başka bir şey değildir. Bu bakımdan, bu sistemlerin teorik olarak çalışılmasında kullanılan metotlar içinde; temeli çoklu saçılma yaklaşımı ve ortalama Green fonksiyon metoduna dayanan yaklaşımlar en uygunlarıdır (Morgan, 1969; Ehrenreich ve Schwartz, 1976; Lax, 1951; Inglesfield, 1984). Özellikle, Green fonksiyonu birbirini örtmeyen (non-overlapping) atomik orbitallerdeki sıkı-bağ yaklaşımına uygun sistemler için, uygulaması en kolay ve pratik olan bir metottur. Green fonksiyonu, Korringa, Kohn ve Rostoker (KKR) tarafında tanıtıldıktan sonra alaşım sistemlerin elektriksel iletkenliğini hesaplamak için 1958'de Edwards tarafından geliştirilmiştir (Edwards, 1958). Genelde bütün sistemin saçılma matrisini Green fonksiyonu belirler. Bu fonksiyonun hesaplanan ortalama değeri ise sistemin denge ve taşıma (transport) özelliklerinin hesaplanması ile alakalıdır (Lax, 1951). Bunun için etkin ortama (tüm sistem) karşılık gelen ortalama Green fonksiyonunu bulmak gerekir (Abrikosov, 1997). Bu kendi içinde tutarlı (self-consistently) yada tutarsız (non-self consistently) olarak belirlenebilir. Örneğin, düzensiz alaşımların elektronik yapılarını araştırmada bu yaklaşıma bağlı olan en güçlü ve en başarılı teorik teknikler Koharent Potansiyel yaklaşımı (CPA) ve Ortalama T-matrix (ATA) yaklaşımıdır (Alexander Moroz ve Adriaan Tip, 1997). Koharent potansiyel yaklaşımında atomlar arasındaki

koordinasyon etkisi pek dikkate alınmaz ve alařım benzeri sistemler iin en gl teknikerlerden biri olduėu kabul edilir. İkinci yaklařım olan ATA Beeby tarafında geliřtirilmiř olup kendi iinde tutarlı olmayan yaklařımı kullanır ve daha ziyade yapısal olarak dzensiz sistemlere uygulamada kısmen bařarılı olan ilk yaklařımdır (Beeby, 1967). Bazen CPA ve ATA tekniklerinin ne kadar bařarılı olduėu ve aralarındaki farkların ne lde olduėu literatrde bir ok alıřmada tartiřılmıřtır (Elliott, vd., 1974).

Bu tez alıřmasında, Beeby&Hayes tekniėi olarak bilinen ve oklu saılmaya dayanan teoriksel bir teknik kullanılarak ncelikle iki boyuttaki bazı yapısal dzensiz sistemlerin elektronik durum yoėunluėu hesaplanacak. Bunun iin tekniėin dayandıėı temel matematiksel baėıntılar, iki ve  boyuttaki dzensiz sistemler iin tanımlanacaktır. Daha sonra Beeby tarafında dzensiz alařımlara gre yeniden formle edilmiř olan bir metod,  boyuttaki basit kbik, BCC ve FCC rgler zerinde rastgele řekilde daėılmıř iki- ve -bileřenli alařımlara uygulamaları yapılacak ve elektronik durum yoėunluklarının nasıl deėiřtiėi tartiřılacaktır. Sonu olarak, elde edilen sonulara gre dzensiz sistemlere uygulanmak amacıyla geliřtirilen bir tekniėe bu alıřmada nasıl bir katkı yapıldıėı tartiřılacaktır.

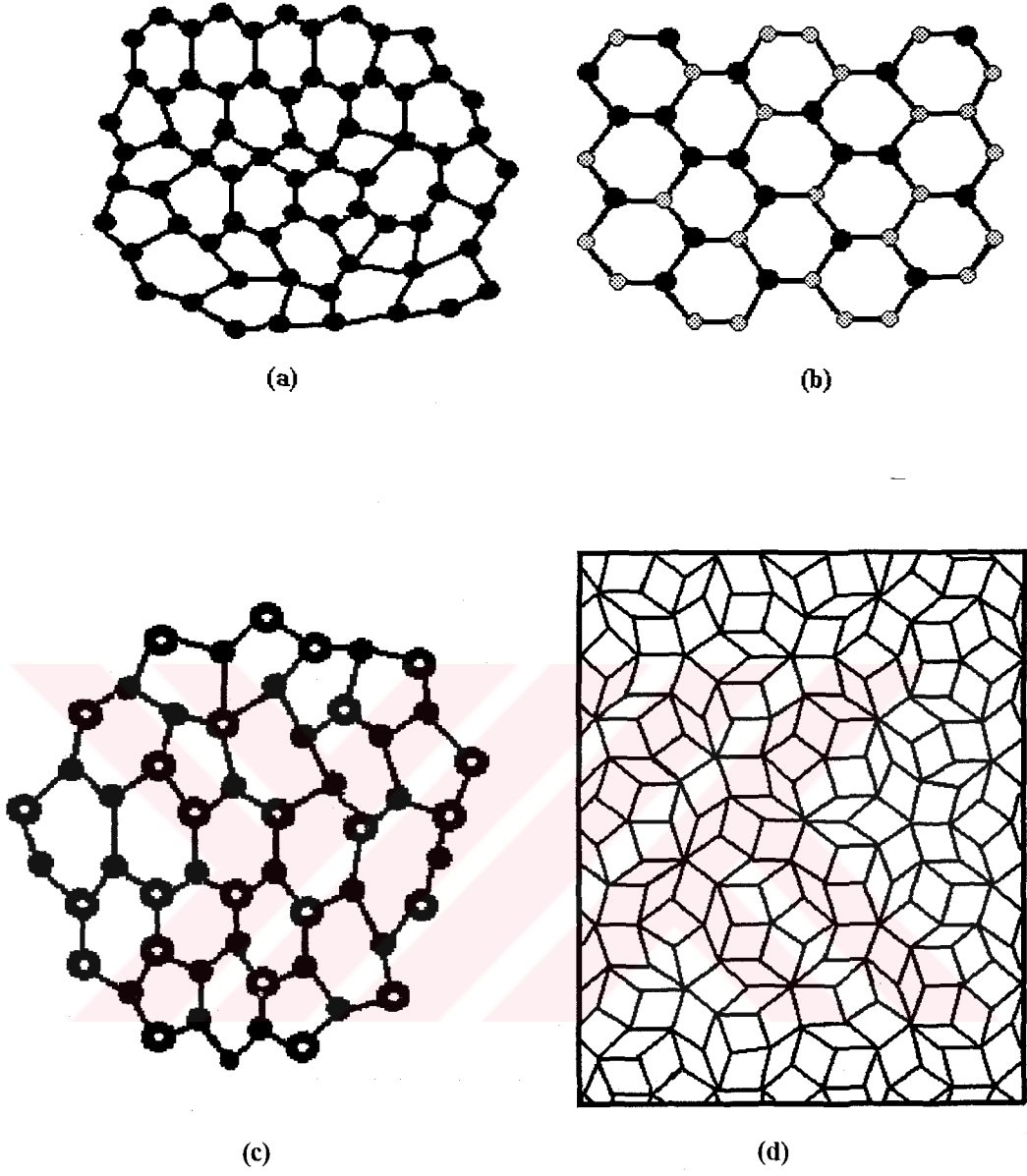
2. DÜZENSİZ SİSTEMLER

Düzensizlik, kavram olarak düzenlilikten yoksun veya istatistiksel olarak gelişigüzel, kestirilemeyen veya rasgelelik şeklinde tanımlanmaktadır (Ziman,1979). Vakum en yüksek uzaysal düzen derecesine sahip en basit düzenli örnektir. Vakuma yakın en yüksek düzenlilik kristallerde bulunur. Bilindiği gibi, kristaller sonsuz sayıdaki özdeş atomların yada moleküllerin düzenli sıralar ve düzlemler halinde paketlenip bir araya gelmesiyle oluşan sistemler olarak tanımlanır. Bu uzaysal düzen matematiksel olarak öteleme değişmezliği cinsinden açıklanır. Böylece bir kristalde bir $\mathbf{r}$ noktasındaki fiziksel durum herhangi bir $\mathbf{r}'$ noktasındaki fiziksel duruma eşittir ($\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{l} = l_1\mathbf{a}_1 + l_2\mathbf{a}_2 + l_3\mathbf{a}_3$). O zaman, katıhal fiziği bakış açısıyla, periyodiklik özelliği olmayan ve gelişigüzel bir yapıyı oluşturan sistemler düzensiz yapılar olarak adlandırılır. Çelik alaşımları, amorf yarı iletkenler, sıvı metaller, camlar ve fotovoltaiik uygulamalarda kullanılan ince film aygıtları v.s düzensiz sistemler olarak verilebilir (Chen ve Robert, 1998; Knief ve Von Niessen, 1999; Yıldız, 1995).

Çoğu gerçek kristallerde, bir eksen etrafında dönme, yansımalar yada tersinmeler gibi nokta grup operasyonlarının varlığına işaret ederiz. Bu operasyonların uygulaması sistemi kendisiyle çakıştırır. Bu nedenle, mükemmel bir kristalin fiziği, temel matematiksel bağıntılarla sınırlı grup teorisi içinde yapılır. Fakat düzensizliğin etkisi her zaman bazı simetrileri bozduğundan yoğun madde fiziğindeki en güçlü matematiksel bağıntılar artık geçersiz kalmaktadır. Bununla birlikte çoğu kristaller, bilindiği gibi mümkün olduğu kadar küresel olarak atomların bir araya gelmesiyle meydana gelirler ve bu basit simetri özellikleri altında mümkün olur. Fakat fcc yada hcp örgülerinde de olduğu gibi küresel atomlar tüm hacmi işgal etmezler. Kalan ara bölgeleri etkisiz duruma getirmek için, kristal *Wigner-Seitz* hücresi olarak bildiğimiz aynı özellikte en küçük birim hücrelere bölünüp, sistem bu birim hücrelerin tekrerrü olarak kabul edilir ve tüm teoriksel işlemler bu hücre üzerinde hesaplanabilir. Öte yandan, düzensiz sistemlerde, aynı kimyasal sınırlamalar yada geometriler içinde sıkı-paket oluşturulurken bütün sistem için tek yapı veya tipte hücre oluşturulması mümkün değildir. Düzensiz sistemleri düzenli sistemlerden ayıran en önemli özelliklerden biri olan bu hücreler sistem içinden birden fazla olup birbirinden farklıdır. Bu hücrelere *Voronoi* çokgenleri denir (Ziman, 1979). Her *Voronoi* hücresini çevresi farklı

olduğundan sistem hakkında bilgi sahibi olmak için bunların ayrı ayrı hesaplanması gerekir. Bu da kristallerdeki gibi kolay ve pratik değildir.

Bir çok çalışmada düzensiz sistemler sınıflandırırken, yapısal olarak düzensiz sistemler, hücre yapısına göre düzensiz sistemler, topolojik düzensiz sistemler olarak ve manyetik özelliklere göre farklı kategorilerde toplamışlardır (Weaire ve Thorpe, 1971; Ziman, 1979; Gonis, 1992; Yıldız, 1995). Ancak düzensiz sistemleri daha genel olarak tipleri ve yapılarındaki düzensizlik derecesine bağlı olarak iki grup altında toplamak mümkündür. Birincisi, örgü yapısı düzgün fakat *örgü yerlerini işgal eden atomların örgüdeki düzenlenişleri rastgele* olup en az iki farklı potansiyel (veya atom) e sahip olan sistemlerdir (Soven, 1967). Bu tür sistemlere en genel anlamda mevkisel düzensiz alaşımlar (substitutional) denir. Bu sistemlerde bir r noktasında başka bir $r + 1$ noktasına öteleme operasyonu uygulanırsa başka bir atoma varılır. Fakat aynı atom olup olmadığının garantisi yoktur. Bunlar genellikle konsantrasyonları c ve $1-c$ olan, A ve B gibi iki veya üç farklı atomun rastgele (gelişigüzel) örgü üzerinde dağılması ile oluştuğu kabul edilir ve buna göre teorik hesaplamalar yapılır. Bu düzensiz sistemler bir çok metaller, bazı yarıiletkenlerde ve iyonik kristallerde meydana gelir. Bu sistemler üzerinde Bölüm 5 de detaylı bir şekilde tartışılıp bazı model sistemlerin elektronik durum yoğunlukları hesaplanacaktır. İkinci grup düzensizler ise, düzensizliği *yapısında* bulunduran sistemler olup bunlara *topological* veya yapısal olarak düzensiz sistemler denir (Siringo, 1996). Bunlarda artık düzenli örgünün hiçbir izi kalmamıştır. Atomlar yada moleküller mevcut uzayda rastgele dağılmışlardır. Örneğin, atom veya moleküller arasındaki bağlar veya atomların büyüklükleri yada kimyasal bağlar üzerinde herhangi bir kısıtlama yoktur. Bunların atom yapılarında ise kısa mesafeli (atomlarda) bir düzen vardır ve bu sıvılarda, amorf maddelerde ve gaz sistemlerinde oluşur. Ayrıca, mevkisel düzensiz alaşımlar ve topolojik düzensiz maddeler de birlikte yeni bir düzensiz yapıyı oluşturabilirler. Yani en az farklı iki atomun yapısal olarak düzensiz bir sistem üzerinde gelişigüzel dağılması halinde meydana gelen yapılardır. Sıvı alaşımlar ve spin camları bu yapılara örnek teşkil eden maddeler olup henüz bir çok yönü ile bilinmeyen sistemlerdir. Kuşkusuz düzensiz alaşımlar ve topolojik düzensiz maddeler en yaygın ve mevcut olan yapılardır. Ayrıca, son zamanlarda farklı bir sistem olarak keşfedilen ve kendine has ilginç özellikleriyle ortaya çıkan bir diğer madde ise *kuasikristaller* dir.



Şekil 2 1 : Bazı düzensiz modeller : (a) yapısal olarak düzensiz, (b) mevkisel düzensiz (substitutional), (c) yapısal ve mevkisel olarak düzensiz, (d) Penrose örgüsü.

Göstermiş olduğu fiziksel özelliklerle ne tam düzenli ne de düzensiz sistemler olup her iki yapı arasında bir yerde bulunan başka bir sistem olarak tanımlanmaktadır. Farklı bazı düzensiz model yapılar ve bir kuasikristal modeli şekil-1 de gösterilmiştir.

2.1 Düzensiz Sistemler ve Düşük boyuttaki Sistemler

Gerçek dünyamızda cisimler, üç boyutlu sistemler olduklarından onların yapısı hakkında doğru bilgi sahibi olmak için üç boyutlu uzayda yapıların incelenmesi gerekir. Ancak özellikle düzensiz sistemlerde bu her zaman mümkün olmayabilir. Çünkü çoğu kez oldukça karmaşık problemlerle karşı karşıya kalmaktayız. Genellikle, fizikte de karmaşık bir problem hakkında bilgi sahibi olmanın en uygun ve basit yolu, problemi temel özelliğini değiştirmeden en basit formuna indirgeyip çözümünü aramaktır. Bunun bir çok yolu olmasına rağmen bunlardan bir tanesi boyutunu indirgemektir. Dolayısıyla, sistemi tanımlayan problemin anlamını değiştirmeden bir veya iki boyutta indirgeyip çözümü aramak hem daha basit hem de çözümü tam olan bağıntılar verir.

Düşük boyuttaki çalışmaların başlangıcı yıllar öncesine kadar gitmektedir. Bir ve iki boyuttaki bu teorik çalışmalar daha çok model sistemler üzerine kurulmuş olmasına rağmen, son yıllarda düşük boyutlu model sistemler üzerinde yapılan çalışmalar gerçek sistemlere de uygulanmaya başlanmıştır (Morita ve Horiguchi, 1972). Dean cam benzeri bir boyuttaki düzensiz lineer zincir şeklindeki bir sistemin titreşim durum yoğunluğunu hesaplamıştır (Dean, 1964), Jones bir boyuttaki sıvı modelinin durum yoğunluğunu (Jones, 1969), Edwards zayıf bir potansiyel içerisinde elektronların durum yoğunluklarını (Edwards, 1961), Beeby ve Edwards elektronların band yapılarını araştırmışlar (Beeby ve Edwards, 1963), Taylor ve Coulsun iki boyuttaki bal peteği (honeycomb) ni (Taylor ve Coulson, 1952; Horiguchi, 1972), Silva ve Fahbi ise bir kare örgüdeki sıçrama matrisinin üç-boyuttan iki boyuta değişmesi durumundaki hassasiyeti araştırmak gibi bir çalışma yapılmışlardır (Silva ve Fabbri, 1984). Kısaca, düşük boyuttaki sistemlerin teorik olarak çalışılması vermiş olduğu tam çözümler ve deneysel çalışmalarla uyum sağladığı için de bilimsel çalışmaları devamlı teşvik etmiştir.

Düşük boyuttaki sistemlerin bir başka önemi, günümüzde gerçek sistemlerde doğal olarak ortaya çıkmasıdır. Örneğin, mükemmel örgü (super lattice) olarak bilinen

sistemlerde bir ve iki boyuttaki Fibonacci örgüsüne (Naumis,G. ve Aragon, 1988; Vekilov vd., 2000) benzer yapıların varlığı, iki-boyuttaki Penrose örgüsünün göstermiş olduğu bazı fiziksel özelliklerin üç boyuttaki gerçek kuasikristallerde de ortaya çıkması gibi örnekler verilebilir. Ayrıca teknolojide kullanılan yarıiletkenler, metal-oksit-yarıiletkenleri ve çok tabakalı yarıiletken tabakaların ara yüzeylerinde elektronların hareketinin tabakalar boyunca kısıtlanması iki boyuttaki sistemler olarak verilebilir. Çalışmamızın bir kısmı iki boyuttaki düzensiz sistem üzerinde olduğu için bu sistemler aşağıda detaylı bir şekilde tanımlanacaktır.

2.2 İki Boyutlu Düzensiz Sistemler

İki boyutlu düzensiz sistemler, katıhal fiziğinde iki boyutlu elektron gaz sistemi olarak basit bir tanımla verilir. Teorik bir kabul olarak iki boyutlu elektron gaz sistemi, elektronların x-y düzleminde hareketlerinin serbest olması; ancak z-yönünde bir potansiyelin uygulanması nedeniyle hareketinin yasaklanması durumunda ortaya çıkan ortamdır. Örneğin, sıvı Helyum yüzeyi üzerinde yakalanmış iki boyutlu elektron tabakası iki boyutlu bir elektron gaz sistemidir. Burada Helyumun yüzeyinde oluşan 1eV luk potansiyel farkı elektronların sıvı yüzeyine difüze edilmesini engeller ve böylece elektronlar sadece sıvı yüzey boyunca hareket eder veya elektronlara tekabül eden dalga fonksiyonu yüzey üzerinde lokalize edilebilir (Stikova, 1989). Aslında, hem teorik açıdan hem de deneysel açıdan iki boyuttaki kristallerin geçmişi 1920 ve 1930 lara kadar gitmektedir. İlk olarak Davisson ve Germer direkt kristal yüzey yapısını incelemek için elektron difraksiyonu ile yaptığı klasik deneylerinde bir kristalin yüzey yapısını gözlemlemeyi başardı. Daha sonra, Landau ve Peierls iki boyutlu kristallerin imkansızlığı üzerinde bir teorem geliştirdiler (Lyuksyutov vd., 1992). Ancak çalışmaların daha çok 1950 lerden sonra yoğunlaştığı görülmektedir (Yıldız, 1999, Dean, 1972; Shawyer ve Dean, 1972).

İki boyutlu sistemler, katıhal fiziğinin aktif alanı olup temel fiziği çalışmak ve bir çok fiziksel olayın gözlemlenmesi için yeni bir laboratuvar sağlamıştır. Özellikle son yıllardaki teorik ve deneysel çalışmalardaki gelişmeler, bu sistemlerde elektron-fonon etkileşimleri, polaron etkileri, güçlü ve zayıf lokalizasyon, siklotron rezonansı, sıcak elektron etkileri, kuantum ve kesirli kuantum etkisi, vs. gibi elektronik ve optiksel

özelliklerinin *bilimsel* ve *teknolojik* olarak araştırılmasına büyük bir hız kazandırmıştır. Bu çalışmaların doğal sonucu olarak düşük boyuttaki sistemler (Low-Dimensional systems) adı atındaki düzenli olarak yapılan ulusal ve uluslararası konferanslar ve toplantılar düzenlenmektedir. Ayrıca, sadece bu konuların çalışılması ile kalmayıp değişik teknikler, araç ve gereçler bu bilimsel etkinliklerde sunulmaktadır (Soukoulis ve Economou, 1999). Örneğin, bilgisayara dayalı teorik ve yarı deneysel teknikler, yarıiletken maddelerin teknolojisinde önemli bir yeri olan ve iki boyutlu sistemlerin iyonlar, atomlar ve moleküllerle olan etkileşmelerini anlamak için kullanılan x-ışını, elektron, iyon, ve atom saçılması gibi teorik ve deneysel teknikler bazılarıdır. Ayrıca, mikro elektronik aygıtlarındaki yarıiletken ara yüzeylerin kullanımının bir sonucu olarak superörgüler, heteroyapılar (çok tabakalı) ve tersinir tabakalar üzerindeki çalışmalar günden güne artmaktadır (Ando vd., 1982; Kamimura ve Aoki, 1989).

İki boyutlu sistemlerdeki çalışmalarda önemli diğer iki kavram elektron lokalizasyonu (Rusek ve Orlowski., 1995) ve kuantum Hall olayının keşfedilmesidir (Klitzing vd. 1980). Lokalizasyon üzerinde Anderson'un (Anderson, 1958) ilk çalışmasından bu yana dikkate değer teorik (Andereck, 1984; Aiko, 1985) ve deneysel (van Albada vd., 1990; Newson vd., 1987) çalışmalarda önemli sonuçlar bulunmuştur. Bunlardan bir kısmı kısaca şunlardır : *i)* İki boyutta lokalizasyonun çalışmasının en önemli sebebi bu boyuttan Anderson lokalizasyonu için kritik bir boyut olması, *ii)* bir ve iki boyutta düzensizliğin herhangi bir değeri sonlu bir lokalizasyona sebep olurken üç boyutta belli düzensizlik derecesi gerekir, *iii)* eğer örgüdeki değişimler dalga fonksiyonunun hücreden hücreye üstel olarak azalan bir fonksiyon şeklini almasına sebep oluyorsa, o zaman bir boyutta dalga fonksiyonu lokalize olur (Khor ve Smith., 1971; Mott,1993). Benzer olarak Khor ve Smith'e göre iki boyuttaki band uçlarında bütün düzensiz sistemlerde dalga fonksiyonu kesinlikle lokalize olmasına rağmen (Khor ve Smith., 1971) daha yüksek boyutlar için genel bir sonuç yoktur. Abraham tarafından lokalizasyon ile ilgili sunulan Scaling Teorisine göre eğer sistemin boyutu iki ve daha düşük ise düzensiz sistemlerin elektronik yapılarının hepsi lokalize olur (Bulka vd., 1985; Abraham vd., 1979).

Bir metal-oksit-yarıiletken alan etkili transistörün (MOSFET) iki boyutlu tersinir tabakasındaki Hall direncinin ölçülmesi önemli bir çalışma olarak literatüre geçmiştir (Tan Yong, 1994). MOSFET tersinir tabakasında bulunan potansiyelin şekli,

elektronların sadece oksit yarı iletken ara yüzeye paralel olan düzlemde serbest hareket etmesini sağlar. Kısaca görüldüğü gibi bu sistemlerin hepside gerçek iki boyutlu bir gaz sistemidir (Schweitzer vd., 1984; Stratford, 1993). Özellikle bir çok alanda temel fiziğe ve teknolojik uygulamalarda önemli bir yere sahip olan MOSFET yarıiletken heteroyapılar iki boyutlu düzensizliği çalışılabilecek ideal sistemlerdir. Çünkü bu tür sistemlerde bazı düzensiz potansiyelin varlığı her zaman mümkün olmaktadır.

2.3 Band Teorisi ve Elektronik Yapılar

Bir kristal katıyı oluşturmak için yalıtılmış atomlar birleştikleri zaman, bir atomun belirli enerji durumlarındaki elektronlar (özellikle çekirdekten en uzakta olan hareketli elektronlar) diğer atomlardaki elektronlarla etkileşirler. Bu etkileşme atomik durumların genişlemesine ve enerji bandları olarak tanımlanan birbirine yakın enerji seviyelerinin oluşmasına sebep olur. Bu bandların çoğu katılarda mevcut olan ve elektronik durumlar bulunmayan enerji bölgeleri (aralıkları) birbirinden ayrılmışlardır. Bu enerji aralıkları özellikle zon sınırları etrafında oluşur. Band teorisinin amacı, kristallerin band yapılarını hesaplamak için teoriler geliştirmektir. Band yapılarını incelemek içinde enerji (E) in momentum dalga vektörü ($\mathbf{k}$) ya göre değişimini araştırmak gerekir. Bununla beraber, gerçek maddelerin band yapılarının hesaplanması oldukça zordur. Fakat yaklaşık çözümlerle problemin çözümü yapılabilir. Band teorisi hesaplama tekniklerinden bazıları şunlardır:

Bazı basit yaklaşımlar : i) Adyabatik yaklaşım, sistemin dinamik denklemi Born-Oppenheimer yaklaşımı kapsamında olan çözüm şeklidir. ii) Tek parçacık yaklaşımı çoklu saçılmada düzensiz sistemler için en yaygın olarak kullanılan yaklaşım olup, her elektron ortalama bir potansiyel (iyon merkezlerinin ve diğer elektronların oluşturduğu potansiyellerin ortalaması) içinde hareket eder. Elektron bu potansiyel içinde diğer elektron ve atomlar ile etkileşimleri çeşitli işlemlerle mümkün olduğu kadar doğru hesaplanmaya çalışılır.

Sıkı-bağ yaklaşımı : İlk kez 1923 yılında Bloch tarafından önerildi (Bassani ve Parravicini, 1975). Bir kristalin veya molekülün dalga fonksiyonunu tek tek atomların dalga fonksiyonlarının toplamı olarak hesaplayan yaklaşımdır. Çünkü bu yaklaşımda her elektron kendi atomuna sıkıca bağlı olup diğer atomların elektronları ile olan

etkileşmelerini ihmal etmektedir. Dolayısıyla atomlar sistemi oluştururken elektronlar kendi atomlarındaki yerlerini (lokalize) koruduklarından, bunların liner süperpozisyonları cinsinden bir yaklaşım gerekir. Bu yaklaşım aynı zamanda LCAO (Lineer Coordinations of Atomic Orbitals) olarak adlandırılır ve hem kristal hem de düzensiz sistemler için en çok kullanılan yaklaşımlardan birisidir.

Pseudopotansiyel Metodu : Phillips ve Kleinman, Bassani ve Celli tarafından ilk kez kristaller için geliştirilen bu yaklaşımda; valans ve iletim elektronların durumları kor elektronların (iç bölgelerdeki elektronlar) durumlarına dik olarak olarak alıp problemi çözmektedir (Harrison, 1966).

Hücreselel metot : Wigner ve Seitz tarafından (Wigner ve Seitz, 1933) 1933 yılında sodyum kristalini çalışmak için önerilen metot olup, sistemde birim hücrede tek bir atomun olacağını kabulüne dayanır.

Green Fonksiyon metodu : Bu metot KKR ve Morse 1956 tarafından kristaller için ilk kez önerilen metot; düzensiz sistemler için Edwards, Edwards ve Beeby tarafından [Edwards, 1959; Edwards ve Beeby, 1961] uygulanmıştır. Bu metot Green fonksiyon tekniğini kullanarak Schrödinger diferansiyel denklemini eşdeğer integral şekline dönüştürür. Hücreselel metoda benzer olarak sınır şarlarından gelen zorlukları ortadan kaldırır. Ancak potansiyel yaklaşımı olarak muffin-tin potansiyel yaklaşımını kullanır (Friedman, 1956).

Band teorisinde önemli bir anlamı ve yeri olan temel fiziksel kavramlardan biri, belli bir enerji aralığındaki elektronik durumlarının sayısının bilinmesidir. Elektron durumların sayısı, durum yoğunluğu fonksiyonu olarak tanımlanan $n(E)$ in hesaplanması ile belirlenir. Kristallerde geçerli olup, düzensiz sistemlerde geçerliliğini kaybeden bir çok kavram olmasına rağmen, durum yoğunluğunun anlamını kaybetmediği için maddelerin bir çok elektronik özelliklerinin bilinmesinde önemli bir yeri vardır. Düzensiz sistemlerin elektronik özelliklerinin bilinmesi; elektronik durum yoğunluğunun yanında, Anderson ve Mott geçişleri, iletkenlik ve iletkenlik değişimleri, lokalizasyon, kuantum ve kuantum Hall etkisini belirleyen band yapısı gibi kavramlar hakkında da bilgi edinmek için önemlidir.

Bu durumda, bir elektronun enerji bandlarının hesaplanması o sistemdeki elektronik durum yoğunluklarını hesaplamakla mümkün olur. Bu durumda eğer, durum

yoğunluğu, $n(E)d(E)$ şeklinde verilirse; bu gösterim birim hacim başına E ve $E + dE$ aralığında bulunabilecek enerji seviyelerin sayısı olarak tanımlanabilir. Elektronik enerji seviyeleri, mükemmel kristaller gibi öteleme periyodikliğine sahip sistemlerde artık iyi bilinip tanımlanabiliyor ve $E = E(\mathbf{k})$ şeklindeki dağıtkanlık bağıntısını veren enerjinin kuasi-momentumun bir fonksiyonu olarak tanımlanır. Bu ifadelerin kristaller için taşıdığı fiziksel anlam: durum yoğunluğu sadece $E = E(\mathbf{k})$ fonksiyonunun ekseni boyunca sıfırdan farklıdır ve sadece Bloch dalga fonksiyonunun her değeri için değil sadece uygun bileşenlerini veren E ve $\mathbf{k}$ değerleri bu fonksiyona katkı yapar. O zaman kristaller için $n(E)$ in dağıtkanlık bağıntısı cinsinden ifadesi matematiksel olarak

$$n(E) \equiv -\frac{1}{\pi} \text{Im Tr} [G^+(E)] = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - E(\mathbf{k})) \quad (2.3.1)$$

verilir. Burada $G^+(E)$, $E + i0^+$ enerjisi için Hamiltonyenin Green fonksiyonudur. Diğer yandan Düzensiz sistemlerde kuasi-momentum ifadesi geçerliliğini kaybettiği için bu sistemlerde genellikle durum yoğunluğunun hesaplanması ile alakalı tanımlanan fiziksel kavram spektral fonksiyon olarak ($\rho(\mathbf{k}, E)$) yada lokal yoğunluk (yoğunluk matrisi) fonksiyonu ($\rho(\mathbf{r}, E)$) ifadesidir. Spektral fonksiyon $\rho(\mathbf{k}, E)$, bir elektronun sistem içinde gerçek $\mathbf{k}$ (kuasi değil) momentumu ve E enerjisinde bulunma olasılığı olarak tanımlanır. Genişletilmiş zon içinde gözönüne alınırsa bu fonksiyon $E = E(\mathbf{k})$ eğrisi boyunca sıfırdan farklıdır. Düzensiz sistemlerde $\rho(\mathbf{k}, E)$, $\mathbf{k}$ ve E uzayının oluşturduğu bölgede gelişigüzel dağılmıştır. Herhangi bir E enerjisinde durum yoğunluğuna bütün momentlerden (veya $\mathbf{k}$ değerlerinden) katkı vardır. Böylece kristal yapılar için detaylı bilgiyi veren Bloch dalga fonksiyonunun yerine düzensiz sistemlerde $\rho(\mathbf{k}, E)$, fonksiyonu momentum dağılımı hakkındaki bilgiyi ihtiva eder. Bu yüzden bu fonksiyon durum yoğunluğundan daha genel bir fonksiyon olup aralarındaki bağıntı

$$n(E) = \sum_{\mathbf{k}} \rho(\mathbf{k}, E) = \frac{1}{2\pi} \Omega_0 \int \rho(\mathbf{k}, E) d\mathbf{k} \quad (2.3.2)$$

ile verilir. Burada Ω_0 tüm sistemin hacmidir.

Ayrıca, düzensiz bir sistemde tek atomların veya sınırlı bir bölgenin durum yoğunluğunu hesaplamak istersek; bu durum yerel veya lokal durum yoğunluğunun hesaplanmasını gerektirir. Her atomun çevresi farklı olabileceğinden bu kavram toplam durum yoğunluğundan farklıdır ve lokal durum yoğunluğu $\rho(\mathbf{r}, E)$ fonksiyonundan hesaplanabilir. Bu da önemli bir kavram olup ilk kez Friedel tarafından (Friedel, 1954) tanıtıldı. Yerel durum yoğunluk fonksiyonu ise

$$\rho(\mathbf{r}, E) = \sum_n |\varphi(\mathbf{r})_n|^2 \delta(E - E_n) \quad (2.3.3)$$

ile verilir (Haydock vd., 1972). Burada sağdaki birinci terim durum yoğunluğuna katkı yapan ağırlık faktörüdür. Çok büyük düzensiz bir sistem için tüm yerel durum yoğunluğunu hesaplamak oldukça zordur. Bu yüzden, bu tür sistemler için bazı yaklaşımlara dayanan teoriksel teknikleri geliştirip ortalama durum yoğunluğunu hesaplamak daha uygundur. Bu çalışmamızda yerel durum yoğunluğunu hesaplamadığımızdan, bu kavram üzerinde fazla durmayacağız.

Elektronik durum yoğunluklarının bilinmesi fiziğin bir çok dalı için önemlidir. Örneğin, band kenarlarında durum yoğunluğunun şeklinin verdiği fiziksel anlamlar, iki ve üç boyutta elektron lokalizasyonun limit durumu, lokalizasyondan hareketli (extended) duruma geçişin yapısı, saçılma genlikleri, uzun mesafe düzenliliğinin olmadığı durumda band aralığının varlığı gibi olaylarda oldukça önemli rol oynar.

3. DÜZENSİZ SİSTEMLER VE BEEBY -HAYES METODU (BH)

Günümüzde maddelerin ve özelliklerinin temel seviyede anlaşılması, kuantum mekaniği ilkelerinin bu maddelerin mikroskobik dünyasındaki yapısına uygulama başarımıza bağlıdır. Özellikle, bu tür problemlerin temel dayanağı olan ve bir çok parçacık arasındaki etkileşmeyi dikkate alıp çözümü sağlayan matematiksel bağıntı, zamandan bağımsız Schrödinger denklemidir. Bu denklemin en genel formu

$$(-\nabla^2 + V)\Psi = E\Psi \quad (3.1)$$

şeklinde yazılır. Burada verilen potansiyel terimi (V) nin genelde parçacıklar arasında mümkün olabilecek elektron-elektron, nötron-nötron ve elektron-nötron etkileşmeler gibi tüm etkileşmeleri kapsadığı için, bu denklemin gerçek anlamda çözümü tam olarak henüz mümkün olamamıştır. Mikroskobik seviyede maddenin gerçek anlamda anlaşılması için en az 1 mol luk bir miktarının araştırmada gözönüne alınması gerekir. Avagadro sayısı kadar parçacığa sahip olan böyle bir sistemin, hareketini ve etkileşmesini ihtiva eden denklemi dalga fonksiyonuna bağlı tam olarak çözmek tabiatıyla oldukça zordur. Fakat tüm bu zorluklara rağmen farklı teoriksel yaklaşımlar içerisinde en uygun potansiyel formları alınarak denklem (3.1) in çözümü yapılmaktadır. Sonuçta elde edilen dalga fonksiyonun değerlendirilmesi ile, sistemin fiziksel özellikleri hakkında yaklaşık da olsa bir çok bilgi elde edilmektedir.

Maddelerin elektronik yapıları veya fiziksel özelliklerinin bilinmesi bu maddelerin anlaşılmasında ve teknolojiye verimli bir şekilde kullanılmasında önemli bir rol oynar. Özellikle çalışmamız kapsamındaki düzensiz katı maddelerin teknolojiye önemi bakımından düzenli maddelere göre de henüz daha iyi anlaşılammış olmaları nedeniyle, bunlar üzerinde çalışmak büyük bir önem taşımaktadır. Bu bakımdan düzensiz maddelerin elektronik yapıları hesaplamak için temeli Beeby tarafından atılmış daha sonra Beeby ve Hayes tarafından modife edilerek yeniden düzenlenmiş çoklu saçılmaya dayanan farklı bir metod bu çalışmada tanıtılacaktır. Aynı zamanda tek-elektron veya tek-parçacık Schrödinger denkleminin çözüm mantığını benimseyerek geliştirilmiştir. Tek elektron yaklaşımı; bir çok teoriksel teknik tarafından kullanılmakta olup tanımlanan ortalama bir V potansiyel (diğer elektron ve çekirdekler tarafından

oluşan ortalama potansiyel) etkisinde hareket eden tek elektron davranışının çözümünü sağlayan Schrödinger denklem yapısıdır. Takdim edeceğimiz bu farklı metotta düzensiz sistemlerin elektronik yapılarını hesaplamak için; Schrödinger dalga denkleminin doğrudan çözümü yerine aynı sınır şartlarını sağlayan Green fonksiyonu ve toplam saçılma matris (veya T-matris fonksiyonu) operatörlerine dayanan çoklu saçılma işlemi kullanılacaktır. Green fonksiyonunun literatörde farklı problem çözümleri için yaygın olarak kullanılması ve çoklu saçılmada da maddelerin elektronik yapıları ile ilgili bağıntıyı direkt ve tam olarak vermesi bakımında oldukça önemlidir. Örneğin, dalga fonksiyonu düzensiz alaşımlar ve safsızlıklar ihtiva eden maddelerin çalışılmasında çok az kullanım imkanına sahiptir. Herhangi bir sistem için Green fonksiyonu hiç bir zaman anlamını ve özelliğini kaybetmediği için, dalga fonksiyonunun aksine bu fonksiyon genel anlamda bir çok durumda fiziksel bilgiyi doğrudan verir. Bununla beraber çoklu saçılma teorisi hem dalga fonksiyonu cinsinden hemde Green fonksiyonu cinsinden yaygın bir şekilde kullanılmaktadır. Ancak Green fonksiyonunu kullanmak hem pratik hemde kolaydır.

Bu bölümde, Beeby ve Hayes tarafında yapısal olarak düzensiz sistemlerin elektronik yapılarını hesaplamak için geliştirilmiş olan teoriksel teknik kısaca izah edilip, elektronik yapıların hesaplamasında kullanılacak temel matematiksel bağıntılar verilecektir. Teknik daha çok yapısal olarak düzensiz sistemlere uygulanmaya yönelik olarak geliştirilmiş olduğundan bu sistemlere uygulanabilir 2-boyuttaki önemli bağıntılar bu bölümde verilecektir. Bağıntıların uygulamaları ileri bölümlerde detaylı bir şekilde model sistemler üzerinde detaylı bir şekilde gösterilecektir. Bundan başka, teknik çoklu saçılma teorisine (ÇST) dayandığı için çoklu saçılma teorisi ve bu teoride kullanılan Green fonksiyonu $G(z)$ ve toplam saçılma fonksiyonu $T(z)$ operatörleri üzerinde de durulacaktır.

3.1 Çoklu Saçılma Teorisi ve Metodun Temel Bağıntıları

Bu kısımda, çoklu saçılma tanımı ve matematiksel bağıntıları ile birlikte Beeby teorisinin temeli ve çoklu saçılma ile olan ilişkisi kısaca tanımlanacaktır. Bir elektronun yada bir dalganın çok parçacık ihtiva eden kuantumsal bir sistemle etkileşmesi çok cisimli saçılma (many-body) problemi olarak ele alınabilir ve bu kuantumsal sistemin

etkileşmesi bir saçılma silsilesi veya zinciri olarak görülebilir. Dalganın veya elektronun çoklu sistemle yaptığı saçılma silsilesinin süreci *çoklu saçılma* olarak tanımlanmaktadır. Çoklu saçılma işlemi, bir çok kompleks sisteminin özelliklerini tek saçılma merkezi cinsinden belirlemede bir takım avantajlara sahiptir. Bu nedenle bu avantajlar elektronlar, nötronlar, ses, ışık, x-ışını gibi kuantumsal nicelikleri içine alan değişik problemlere uygulanmaktadır. Çoklu saçılma teorisi özellikle alaşımlar, sıvılar ve amorf maddeler gibi düzensiz sistemlerin elektronik yapılarını hesaplamak için yaygın olarak kullanılan teoriksel bir yaklaşımdır (Lax, 1951). ÇST nin temeli yaklaşık yüz yıl öncesine dayanır. İlk orijinal bir çalışmanın Lord Rayleigh tarafından dalga saçılması üzerine yapıldığı ve daha sonra düzensiz sistemlere uygulamada ise 1950 lerde Lax, Korringa ve Beeby nin çalışmaları öncülük etmiştir (Yıldız, 1995).

Green fonksiyonu ($G(z)$) ve toplam saçılma matris fonksiyonu ($T(z)$) çoklu saçılma teorisinde kullanılan güçlü ve kullanışlı en genel iki operatördür. Düzensiz sistemler için bu operatörleri kullanmanın başlıca amacı, durum yoğunlukları, elektriksel iletkenlik gibi bazı fiziksel kavramların bu fonksiyonlarla doğrudan alakalı olmasıdır. Bu iki operatör değişik metodlarda farklı özelliklere karşılık gelmesine rağmen, kullandığımız metotta sahip olduğu özellikleri veya anlamları şu şekilde açıklanabilir : $T(z)$, *çok sayıda saçıcı merkezden oluşan bir sistem üzerine gelen belli bir momentumu ve enerjisi olan elektronun saçılmasını tanımlar ve bu merkezler tarafından meydana gelen potansiyeller içinde hareket ederken bu potansiyellerin elektron üzerine olan etkisini verir.* Bu anlamda bu fonksiyon incelenen sistemin bazı fiziksel özelliklerine sahip olması bakımında oldukça önemlidir. Öte yandan, $G(z)$ operatörü veya fonksiyonu ise en genel anlamda sistem içinde yayılan (propagation) elektronu temsil eder. Ancak bazen $G(z)$ fonksiyonu $T(z)$ fonksiyonunun yerine kullanıldığı için bir sistemin tüm özelliğini ihtiva eder. Bu oluşum da değişik fiziksel kavramların hesaplanmasında kullanılır. Örneğin, tek-parçacık ortalama Green fonksiyonunun çözümü, elektronik durum yoğunluğu ile ilgili bilgiler verirken, iki-parçacık ortalama Green fonksiyonu ise taşınım ile ilgili fiziksel özellikleri (iletkenlik gibi) verir.

Herhangi ÇST ve kuantumsal bir sistem için denklem (3.1) de verilen Schrödinger denklemini sağlayan konum boyutundaki Green fonksiyonu

$$[E + \nabla^2 + i\varepsilon - V(\mathbf{r})]G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (3.1.1)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ fonksiyonu denklem (3.1) de verilen Ψ dalga fonksiyonu ile aynı sınır şartlarını sağlar. Bu denklemin çözümü, verilen sınır şartları içinde enerji özdeğerleri ve özfonksiyonları cinsinden kolayca bulunabilir. Ancak amacımız çoklu saçılma bağıntısını türetmek olduğundan, denklem (3.1.1) de sistemin toplam hamiltonyen operatörü H ise, $H = H_0 + V$ olarak yazılabilir. Burada H_0 sistemde rahatsız edici (unperturbed) bir potansiyel olmadığı durumdaki hamiltonyeni ve V ise sistemin ortalama potansiyelini temsil eder. Ayrıca, elektronun veya parçacığın yayılmasını temsil eden Green fonksiyonu $G(z)$ ve toplam saçılma matrisi $T(z)$ olduğuna göre, potansiyelin olmadığı (unperturbed) Green fonksiyon $G_0 = (z - H_0)$ olarak yazılır. Burada z terimi enerjiyi temsil etmektedir. Bu durumda alanın veya parçacığın (EM dalga, ışık, elektron, v.s) kaynaktan herhangi bir sisteme veya noktaya nasıl yayıldığını temsil eden Green fonksiyonu,

$$\begin{aligned} G(z) &= (z - H)^{-1} = (z - H_0 - V)^{-1} = \left[(z - H_0) \left(1 - (z - H_0)^{-1} V \right) \right]^{-1} \\ &= [1 - G_0(z) V]^{-1} G_0(z) \end{aligned} \quad (3.1.2)$$

olarak yazılabilir. Burada sistemin enerjisini temsil eden z terimini kullanmaktaki amaç, bağlı olduğu fonksiyonu tek-değerli (singularity) bir fonksiyondan çok-değerli bir fonksiyona sahip olma özelliğini kazandırmaktır. Aynı zamanda $G(z)$ operatörünün diğer bir özelliği H ın kesikli olan enerji özdeğer ve özvektörlerini doğrudan vermesi ve taşıdığı fiziksel özelliklerinden dolayı büyük öneme sahiptir. Denklem (3.1.2) ün sol tarafındaki parantezi kuvvet serisi açılımı yapılarak çoklu saçılma işlemi

$$G = G_0 + G_0 V G_0 + G_0 V G_0 V G_0 + \dots \quad (3.1.3)$$

bulunur. Bu denklem sonsuz bir seriyi temsil ettiğinden dolayı mevcut haliyle tamamen düzensiz bir sisteme uygulayıp çözümü yapmak oldukça güçtür. Bu yüzden daha uygun veya kontrol edilebilir bir şekli

$$G = G_0 + G_0 V G \quad (3.1.4)$$

formunda yazılır. Burada G_0 serbest uzayda yayılan bir dalganın, değişik kusurlar veya düzensizlik ihtiva eden bir sistem üzerine geldiğini ve bu sistemden saçılma sürecini göstermektedir. Sistemin tüm özelliklerini tam olarak tanımlayan denklemin çözümü yakınsak ise, o zaman G fonksiyonu bir anlama sahiptir. Denklem (3.1.4) bazan toplam bazen de integral şeklinde yazılır. Örneğin, lineer homojen olmayan integral gösterimi

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \int G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') V(\mathbf{r}'') G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') d\mathbf{r}'' \quad (3.1.5)$$

dir. Benzer işlemler T -matris operatörü için de yapılabilir ve bir boşluğu, kusuru, düzensizliği veya en genel anlamda bir potansiyeli temsil eden V cinsinden

$$T(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \int V(\mathbf{r}) G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') T(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') d\mathbf{r}'' \quad (3.1.6)$$

olarak yazılabilir. Bu denklem çok sayıda parçacık ihtiva eden tek bir sistemden saçılan toplam saçılma matrisi olarak tanımlanır. Bazen V potansiyelinden toplam saçılma genliğini veren geçiş (transition) matrisi olarak da tanımlanır. $T(z)$ nin analitik anlamı $G(z)$ nin anlamına benzerdir. $T(z)$ nin de kompleks düzlemde çözümü olup reel eksen üzerindeki çözüm değerleri H ın kesikli değerlerini verir. $T(z)$ bir bütün olarak sistemin toplam saçılmasını gösterdiğinden, sistemi oluşturan saçıcı merkezlerin ayrı ayrı saçılma matrisleri cinsinden tanımlamak daha uygundur. Bu durumda, tek saçıcı merkezin toplam saçılma matrisi t_i ise, N tane farklı saçıcı merkez için toplam saçılma fonksiyonu

$$T = \sum t_\alpha + \sum_{\alpha \neq \beta} t_\alpha G_0 t_\beta + \sum_{\alpha \neq \beta \neq \gamma} t_\alpha G_0 t_\beta G_0 t_\gamma + \dots + \quad (3.1.7)$$

şeklinde yazılır. Bu denklem Beeby teorisini matematiksel ve fiziksel olarak temsil eden ilk ve temel bağıntı olup, ÇST ile olan ilişkiyi açıkça göstermektedir. Denklemin tam olarak çözümü olmadığı için değişik yaklaşımlar ve teknikler geliştirilerek çözümü Beeby, Beeby ve Hayestarafından yapılmıştır. Bu denklemin sağ tarafındaki ilk terim

tek-saçıcı merkezden, ikinci terim iki tane farklı saçıcı merkezden olan saçılmayı, üçüncü terim de üç farklı saçıcı merkezden olan saçılmayı, v.s. gibi çoklu bir saçılma silsilesini ifade etmektedir. Ayrıca, denklem (3.1.7) deki her fonksiyon konumun veya momentum uzayında tanımlı fonksiyonu olabilir. Bu değişkenler kullanım amacına göre Fourier dönüşüm tekniği uygulanarak elde edilir. Çoklu saçılmada problemin çözüm kolaylığı bakımından en geçerli olan potansiyel şekli, küresel olarak simetrik (s-dalga saçılması) ve muffin-tin şeklinde kabul edilen potansiyeldir. Dolayısıyla bizde hesaplamalarımızda bu potansiyel şekline göre işlem yapacağız. Ayrıca denklem (3.1.7) deki tek saçıcı potansiyel cinsinden t-matris fonksiyonu ise,

$$t_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = v_{\alpha}(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + v_{\alpha}(\mathbf{r})G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}')v_{\alpha}(\mathbf{r}') + \int v_{\alpha}(\mathbf{r})G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}'')v_{\alpha}(\mathbf{r}'')G_0(\mathbf{r}'' - \mathbf{r})v_{\alpha}(\mathbf{r}')dr'' + \dots \quad (3.1.8)$$

veya daha kullanışlı şekli

$$t_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = v_{\alpha}(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \int v_{\alpha}(\mathbf{r})G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}'')t_{\alpha}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}')dr'' \quad (3.1.9)$$

olarak tanımlanıyor (Yıldız, 1995). Yukarıdaki denklemlerden de görüldüğü gibi, bir takım matematiksel işlemler yapılarak yapılarak $T(z)$ ve $G(z)$ operatörleri birbiri cinsinden

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \int G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}'')T(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''')G_0(\mathbf{r}''' - \mathbf{r}')dr''dr''' \quad (3.1.10)$$

bir denklem altında yazılabilir. Bu denklemden de görüldüğü gibi $T(z)$ nin bilinmesi durumunda $G(z)$ nin de bilinmesini sağlar veya tersi de geçerlidir. Aynı zamanda denklem (3.1.10) tek-parçacık saçılma fonksiyonu cinsinden

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \sum_{\alpha \neq \beta \neq \dots} \int G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}'')t_{\alpha}(\mathbf{r}'' - \mathbf{R}_{\alpha}, \mathbf{r}''' - \mathbf{R}_{\alpha})G_0(\mathbf{r}''' - \mathbf{r}')dr''dr''' + \dots \quad (3.1.11)$$

olarak yazılabilir. Burada sistem N saçıcı merkezden olmasına rağmen $(N + 1)$ terimin hesaplamada dikkate alınması gerekir. Çünkü parçacık N tane potansiyelden saçıldıktan sonra başladığı potansiyel üzerindeki bir r' bir noktasına geri dönüyor. Bu sonsuz saçılma silsilesi matematiksel olarak takip edilmesi ve fiziksel olarak daha kolay anlaşılması için Beeby (Beeby, 1964) denklem (3.1.11) deki herhangi iki potansiyel arasındaki saçılma kısmını

$$\sum_{R_\alpha \neq R_\beta \neq \dots R_N} \int G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) t_\alpha(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_\alpha, \mathbf{r}'_1 - \mathbf{R}_\alpha) G_0(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_2) t_\beta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_\beta, \mathbf{r}'_2 - \mathbf{R}_\beta) \dots G_0(\mathbf{r}'_N - \mathbf{r}'_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}'_1 \dots d\mathbf{r}'_N \quad (3.1.12)$$

şeklinde yazılabileceğini göstermiştir. Bu denklemin yorumu ise şu şekilde izah edilmektedir; elektron, yarıçapı R_α olan bir potansiyel içinde r noktasında başlar ve serbest bir parçacık olarak sırasıyla aynı potansiyel içinde önce r_1 noktasına ve oradanda aynı r'_1 noktasına yayınlanır. Daha sonra r'_1 noktasından R_β potansiyeli içindeki herhangi bir r_2 noktasına gider. Bu işlem N saçıcı merkez için devam eder ve sonuçta elektron r' noktasına ulaşır.

Yukarıda verilen matematiksel işlemler metodun teorisine dayanan temel bağıntılardır. Bu bağıntılardaki G , G_0 ve t terimleri enerji ve momentum uzayında tanımlı fonksiyonlar olduğu için bunların açık ifadelerinin yazılması gerekir. Bunun için Fourier transformunu kullanarak bu dönüşüm kolayca yapılabilir. Üç boyutlu sistemlere uygulanabilecek bağıntıların dönüşümleri detaylı olarak Beeby (Beeby, 1964; Beeby ve Hayes, 1985) tarafından ve iki boyutlu sistemler için de Yıldız(Yıldız, 1995) tarafından yapılmıştır. Bu yüzden yukarıda verilen denklemlerin bu detayları üzerinde bu çalışmada durmayacağız. Ancak, bunun yerine çalışmamızda kullanacağımız temel denklemlerin önemli olanlarının bazılarının dönüşümlerini verip fiziksel anlamı üzerinde duracağız

3.2 Beeby-Hayes Metodu (BH) ve İki Boyutlu Düzensiz Sistemler

Beeby-Hayes metodu, teorisi Beeby tarafından geliştirilmiş olup denklem (3.1.7) ile verilen matematiksel bağıntı yapısal ve mevkisel düzensiz sistemlere 1960 lı yıllarda

Beeby tarafından yapıldı (Beeby, 1964). Son yıllarda Beeby ve Hayes tarafından yapılan bir çalışma ile Beeby nin teorisine dayanan denklem (3.1.7) nin uygulanma şekli değiştirilip daha pratik ve uygulanması kolay bir forma indirgenmiştir (Beeby ve Hayes, 1984). Bu yüzden bu tekniğe BH metodu adı verilmiştir. Düzensiz sistemlerin elektronik özelliklerini hesaplayan uygun bir teori kuşkusuz oldukça karmaşıktır. Çünkü doğal olarak gerçek potansiyellerin kullanılması yanında farklı sayıda ve çeşitte komşu atomlar, bunlar arasındaki uzaklık değişimleri, açısal dağılımlar v.s gibi parametrelerin hesaba katılması gerekir. Bu kadar çok sayıda parametrelere sahip sistemlerin elektronik durum yoğunluğunu hesaplamak için geliştirilmiş olan Beeby-Hayes (BH) metodu, bazı yönleriyle esnek ve güçlü olmasına rağmen aslında cebirsel olarak da oldukça karmaşıktır. Ancak bu karmaşık bağıntılar bazı makul yaklaşımlar yapılarak daha uygun bağıntılar durumuna indirgenebilir. Şöyleki, elektron-atom etkileşmesi ile ilgili kullanılan en önemli yaklaşım; potansiyellerin birbirini örtmeyecek şekilde kabul edildiği *muffin-tin* yaklaşımıdır. Bu potansiyel yaklaşımı, çoklu saçılmaya dayanan bir çok yaklaşımda kullanılması yanında band yapı hesaplamalarında gerçek değerlere oldukça yakın değerleri bulmada kullanılmaktadır. Bu yüzden potansiyel, küreler içerisinde dikkatli bir şekilde seçildiği sürece çoğu düzensiz sistemler için gayet makul bir potansiyel yaklaşımı olarak kabul edilebilir.

BH metoduna göre, elektronik durumlar hesaplanırken durum yoğunluğuna olan katkı her atomdan bir elektronun katkı yapacağı şartına göre hesaplamayı yapar ve bu katkı aynı zamanda komşu atomların konumlarına bağlıdır. Bu katkı uzak atomlardan daha ziyade yakın komşu atomların konumlarıyla doğrudan alakalıdır. Bunun için orijinal atom olarak alınacak herhangi bir atomun durum yoğunluğunu hesaplamada çevresini tanımlayan bir takım parametreler seçilir. Parametreler, seçilen yerel koordinat eksenine göre; komşu atomların sayısını, tipini, band uzunluğu v.s gibi değişkenleri ihtiva eder. Bunlar belirlendikten sonra, diğer atomlar ile ilgili her atoma katkırı bu tür parametreleri de içine alacak şekilde bir integral takımı yazılır. Bu integral denklemleri tanımlandıktan sonra düzensiz sistemin tümü üzerinde ortalaması alınır. Ayrıca Orijinal atomun çevresini tanımlayan parametrelere ilave olarak; komşu atomların çevresini bulmak için kullanılan parametrelere bağlı yapısal bilgiyi ihtiva eden şartlı bir olasılık dağılım fonksiyonu ile tanımlanır. Yapısal bilginin durum yoğunluğu üzerine olan etkisi iki şekilde kendini gösterir. Birincisi, düzensiz sistemi tanımlamak için kullanılan tüm

sistem üzerine seçilen parametrelere bağlı olasılık dağılım fonksiyonundan gelen etkidir. İkincisi, komşu atomlar ile alakalı parametre değerlerine bağlı tanımlanan olasılık dağılımında gelen etkidir. Metodun hesaplamada dikkate aldığı bir başka varsayım ise, özdeş parametrelere sahip olan özdeş atomlar durum yoğunluğuna özdeş katkı yapar.

Metodun uygulanmasında, orijinal atomun yakın çevresini tanımlarken yerel (lokal) çevresi üzerinde herhangi bir yaklaşım veya ihmal yapılmayıp olduğu gibi alınıyor. Sadece düzensiz sistem içindeki uzak komşu atomların konumlarının ortalaması alınıyor. Bunun sağlamış olduğu etki, her atomun lokal görünümü sonsuz bir network süreci oluşturdukları için ve özellikleri kendi içinde tutarlı olarak (self-consistently) belirleniyor. Sonuçta ise her atom kendi öz lokal yapısıyla özdeş duruma geliyor. Bu özellikler, BH metodunu düzensiz sistemler için kullanılan diğer teorilerden ayıran en önemli özelliklerden birisidir. Kısaca, BH teorisi yapısal olarak tamamen düzensiz bir sistemden düzenli bir sisteme ve kısa mesafe düzenlilik derecesi ihtiva eden herhangi bir sisteme uygulanabilir. Yeterki seçilen atomun yerel çevresi iyi tanımlanmış ve atomik potansiyel muffin-tin yapısında olsun. Özellikle bu potansiyelde sadece s-dalga saçılması hesaplanıyorsa metodun uygulanması ve elde edilen denklemlerin çözümü çok daha pratik ve kolaydır.

Yukarıda tanımlanan özelliklere ve yaklaşımlara sahip olan BH metodu, öncelikle üç-boyutlu bir sistem olarak tek-tip atomlu tetrahedral bağlı amorf yarıiletkenlerin durum yoğunluklarını hesaplamada kullanıldı ve ispatlandı (Beeby ve Hayes, 1985). Daha sonra 3-boyuttaki benzer sistemlerin durum yoğunluğunun potansiyel parametreleri ve local değişkenlere nasıl değiştiğini göstermek için uygulandı (Yıldız, 1995; Beeby ve Hayes, 1993 ve 1994). Ayrıca, iki boyuttaki bazı sistemlerde düzensizliğe göre durum yoğunluğunun nasıl değiştiği yıldız, yıldız ve Beeby tarafından uygulandı (Yıldız ve Beeby, 1997 ve 1999). Metodun henüz geliştirme aşamasında olması nedeniyle farklı sistemler üzerinde uygulaması devam etmektedir. Bu çalışmanın başlıca amaçlarından birisi de, düzensiz sistemler için geliştirilmiş olan bu tekniği farklı yapılar üzerinde uygulayarak gelişmesine ve kullanımının kanıtlanmasına kısmen bir katkı sağlamaktır.

Bölüm 2 de elektronik durum yoğunluğu ilgili temel bağıntılar hem düzenli hemde düzensiz sistemler için kısaca tartışıldı. Düzensiz sistemler için, toplam durum

yoğunluğunun ($n(E)$) nin spektral fonksiyon ($\rho(\mathbf{k}, E)$) cinsinden hesaplanacağı ifade edilmişti. BH metoduna göre spektral fonksiyonu, denklem (3.1.7) tanımlanan toplam saçılma fonksiyonunun cinsinde

$$\rho(\mathbf{k}, E) = -(\pi A_0)^{-1} (E - k^2)^{-2} \text{Im} \langle T(\mathbf{k}) \rangle \quad (3.2.1)$$

bağıntısı ile hesaplanır ve durum yoğunluğu ile ilgili en genel bağıntıdır. Burada A_0 sistemin toplam alanı (2-boyutlu) veya hacmi (3-boyutlu), $\text{Im}T$ tüm sistemin toplam saçılma fonksiyonu ortalamasının kompleks kısmı ve $\langle . \rangle$ parentezi düzensizliği tanımlayan tüm şekiller üzerinde alınan ortalamayı gösterir. Denklem (3.2.1) de görüldüğü gibi $T(\mathbf{k})$ fonksiyonu tek atom için toplam saçılma matrisinin Fourier transformunun köşegen kısmı olup, kompleks kısmı doğrudan $\rho(\mathbf{k}, E)$ yi verir. O zaman, bu denklemdeki T -fonksiyonun (aynı şekilde t -fonksiyonları) momentum ve enerji boyutundaki açık ifadesinin tanımlanması gerekir. Fourier transformu denklem (3.1.7) de her fonksiyona ayrı ayrı uygulanırsa

$$\begin{aligned} T(\mathbf{k}) &= \int e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} T(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \\ &= \int e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \left\{ \sum_{\alpha} t_{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\alpha}, \mathbf{r}' - \mathbf{R}_{\alpha}) + \int \sum_{\alpha \neq j} t_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\alpha}, \mathbf{r}'' - \mathbf{R}_{\alpha}) \right. \\ &\quad \left. G_0(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}''') t_{\beta}(\mathbf{r}''' - \mathbf{R}_{\beta}, \mathbf{r}' - \mathbf{R}_{\beta}) d\mathbf{r}'' + \dots \right\} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \end{aligned} \quad (3.2.2)$$

formunda yapılabilir. Burada α, β indisleri sırasıyla $\mathbf{R}_{\alpha}, \mathbf{R}_{\beta}$ konumlarındaki atomları göstermektedir. Orijindeki tek atomun saçılma matrisini veren denklem (3.1.9) un açılmal momentum cinsinden açılımı ise

$$t(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{2\pi} \sum_{-\infty}^{\infty} e^{im\theta_r} t_{mm'}(r, r') e^{-im'\theta_{r'}} \quad (3.2.3)$$

dir. Burada m açılmal momentum olup, $m = 0, \pm 1, \pm 2$, gibi tam sayı değerleri alır. Ayrıca, denklem (3.1.11) de elektronun yayılmasını temsil eden sadece iki potansiyel arasındaki Green fonksiyonu $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$,

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{mm'} \int e^{im\theta_r} G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}' + \mathbf{R}) e^{-im'\theta_{r'}} \exp(-il\mathbf{R}) d\theta_r d\theta_{r'} \quad (3.2.4)$$

şeklinde veriliyor (Beeby, 1964). Bu denklemin çözümü için potansiyele gelen ve potansiyelden geri yansıyan düzlem dalgayı temsil eden üstel ifadenin açılımı

$$e^{\mp i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \sum_v (\pm i)^v J_v(kr) e^{\mp iv(\theta_r - \theta_R)} \quad (3.2.5)$$

olarak yazılabilir ve bu açılım son denklemde kullanılırsa,

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \int dl (i)^{m'} J_{m'}(lr'') e^{-im'\theta_l} \frac{e^{il\mathbf{R}}}{E - l^2 + i\epsilon} (-i)^{m''} J_{m''}(lr''') e^{-im''\theta_l} \\ &= 2\pi \int dl (i)^{m'-m''} \frac{J_{m'}(lr'') J_{m''}(lr''')}{E - l^2 + i\epsilon} (i)^{m''-m'} J_{m''-m'}(lR) e^{i(m''-m')\theta_R} \\ &= 2\pi e^{i(m''-m')\theta_R} \int_0^\infty J_{m'}(lr'') J_{m''}(lr''') \frac{1}{2} \frac{\left[H_{m''-m'}^{(1)}(lR) + H_{m''-m'}^{(2)}(lR) \right]}{E - l^2 + i\epsilon} dl \\ &= \pi e^{i(m''-m')\theta_R} \int_{-\infty}^\infty \frac{J_{m'}(lr'') J_{m''}(lr''') H_{m''-m'}^{(1)}(lR)}{E - l^2 + i\epsilon} l dl \\ &= -i\pi^2 J_{m'}(i\mu r'') J_{m''}(i\mu r''') H_{m''-m'}^{(1)}(i\mu R) e^{i(m''-m')\theta_R} \end{aligned} \quad (3.2.6)$$

sonucu bulunur. Burada $\mu \equiv (-E)^{1/2}$, H Henkel fonksiyonları ve J tam sayı indisli Bessel fonksiyonudur. Hesaplamalarda kullanılan potansiyel için $E < 0$ ve potansiyel küresel simetriklik özelliğine sahiptir. t-fonksiyonun Fourier dönüşümü ise,

$$\begin{aligned} \int e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} t(\mathbf{r}-\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' &= \frac{1}{2\pi} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \sum (i)^{m''} J_{m''}(kr) e^{-im''(\theta_r - \theta_k)} \\ &\quad (i)^{m'''} J_{m'''}(kr') e^{-im'''(\theta_{r'} - \theta_k)} e^{im\theta_r} t_{mm'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{-im'\theta_{r'}} \\ &= 2\pi \sum \int (i)^{m'-m} J_m(kr) J_{m'}(kr') t_{mm'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') r dr r' dr' \end{aligned}$$

$$= 2\pi \sum \int (i)^{m'-m} e^{i(m'-m)\theta} t_{mm'}(k, k') \quad (3.2.7)$$

bulunur. Buradaki $t_{m,m'}(k, k')$ terimi en genel şekilde

$$t_{mm'}(p, q) = \int J_m(pr) t_{mm'}(r, r') J_{m'}(qr') r dr r' dr' \quad (3.2.8)$$

olarak yazılabilir. Denklem (3.2.2) deki ikinci ve diğer terimlerin dış tarafından kalan t-fonksiyonları,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi} \int e^{-ik \cdot r} e^{im\theta} t_{mm'}(r, r') J_{m'}(i\mu r') r dr r' dr' d\theta, \\ & = (i)^{-m} e^{im\theta} t_{mm'}(k, i\mu) \end{aligned} \quad (3.2.9)$$

ve arada kalan terimler ise

$$\begin{aligned} t(r, r') &= \frac{1}{2\pi} \int J_m(i\mu r) t_{mm'}(r, r') J_{m'}(i\mu r') r dr r' dr' \\ &= \frac{t_{mm'}(i\mu, i\mu)}{2\pi} \end{aligned} \quad (3.2.10)$$

olarak bulunur. Sonuç olarak, eğer tek çeşit potansiyel varsa denklem (3.2.2) in Fourier dönüşümü

$$\begin{aligned} T(\mathbf{k}) &= 2\pi \sum_{mm'} (-i)^{m-m'} \exp[i(m-m')\theta_k] \{t(k, k) + \sum_{\beta(\neq\alpha)} t(k, \kappa) \cdot G^{\alpha\beta}(\kappa, k) \cdot t(\kappa, k) \\ &+ \sum_{\beta(\neq\alpha), \gamma(\neq\beta)} t(k, \kappa) \cdot G^{\alpha\beta}(\kappa, k) t(\kappa, \kappa) \cdot G^{\beta\gamma}(\kappa, k) \cdot t(\kappa, k) + \dots\}_{mm'} \end{aligned} \quad (3.2.11)$$

şeklinde elde edilir. Burada t ve G matrislerin elemanları m ve m' indisleriyle belirlenir. Bu son denklemde enerjiyi tek bir sembolle göstermek için $\kappa = i\mu$ olarak alındı. Bu denklemin en önemli özelliği bir atomdan diğer atoma yayılamayı temsil eden $G^{\alpha\beta}$ matrisi atomik düzenleme ile ilgili tüm bilgileri ihtiva eder. Tek tip potansiyel

kullanılırsa tüm $\mathbf{G}$ ler birbirine eşit olup sonsuz seride ortak paranteze alınabilir. Elde edilen denklemin yakınsaklığını veren ifade $T(\mathbf{k})$ nin kompleks ve real kısmı olarak yazılabilir.

Eğer potansiyeller farklı ise, o zaman denklem (3.2.11) düzensiz sistem ile ilgili bilgiyi ihtiva eden kısmın

$$\sum_{\alpha, \beta \neq \alpha} \mathbf{G}^{\alpha\beta} + \sum_{\alpha, \beta \neq \gamma} \mathbf{G}^{\alpha\beta} \mathbf{t} \mathbf{G}^{\beta\gamma} + \dots + \quad (3.2.12)$$

şeklinde yazılabileceğini ve. u denklemin de

$$\sum_{\alpha, \beta \neq \alpha} \mathbf{G}^{\alpha\beta} \{1 + \sum \mathbf{t} \mathbf{G}^{\beta\gamma} + \sum \mathbf{t} \mathbf{G}^{\beta\gamma} \mathbf{t} \mathbf{G}^{\gamma\delta} + \dots\} \quad (3.2.13)$$

olarak düzenlenebileceğini gösterdi (Beeby ve Hayes, 1984). Bu denklemde görüldüğü gibi parantez içindeki saçılmanın orijinal atom olarak gösterilen α atomundan olmayıp ikinci atom olan β atomunun olan saçılmayı temsil etmektedir. Bu durumda denklem (3.2.13) β atomundan başlayan saçılmayı temsil eden kısım enerji ve momentumun fonksiyonu olarak

$$\mathbf{F}^{\beta}(\kappa, \mathbf{k}) = 1 + \sum_{\beta \neq \gamma} \mathbf{t}(\kappa, \kappa) \mathbf{G}^{\beta\gamma}(\kappa, \mathbf{k}) \mathbf{F}^{\gamma}(\kappa, \mathbf{k}). \quad (3.2.14)$$

şeklinde yazılabilir. Benzer şekilde α atomu için

$$\mathbf{F}^{\alpha}(\kappa, \mathbf{k}) = 1 + \sum_{\alpha \neq \beta} \mathbf{t}(\kappa, \kappa) \mathbf{G}^{\alpha\beta}(\kappa, \mathbf{k}) \mathbf{F}^{\beta}(\kappa, \mathbf{k}). \quad (3.2.15)$$

bağıntısı tanımlanabilir. Bu iki denklemde kendi için tutarlı (self-consistent) denklemlerdir. Denklem (3.2.15) saçılmanın (orijinal atom) α atomundan başladığını ve ilk yakın komşu atomunda β atomu olduğunu göstermek bakımında oldukça pratik ve kullanışlıdır. Bu denklemleri tanımladıktan sonra, asıl amacımız durum yoğunluğunu

veren ifadeyi bulmak olduğundan, durum yoğunluğu ile ilgili spektral fonksiyon bu denklemin kompleks kısmından hesaplanabilir. O zaman kompleks bileşen ise

$$Im < T(k) > = 2\pi Im \sum (-i)^{m-m'} \exp [i(m-m')\theta_k] x [t_m(k, \kappa) / t_m(\kappa, \kappa)] t_{m'}(\kappa, \kappa) x$$

$$< F^a(\mathbf{k}, \kappa) >_{mm'} [t_{m'}(\kappa, k) / t_{m'}(\kappa, \kappa)]. \quad (3.2.16)$$

şeklinde verilir (Yıldız, 1995). Burada potansiyel ile ilgili olan tek atom saçılma fonksiyonlarının belirlenmesi gerekir. Bunun için; bir model potansiyel seçilir ve bu potansiyel üzerine gelen serbest parçacığa tekabül eden Schrödinger dalga denkleminin radyal kısmı çözülür ve bu terimler belirlenir. Hesaplamalarda sadece s-dalga saçılması dikkate alınacağından bu t matrisi tek bir indise bağlı bir fonksiyon olur ve $E < 0$ için;

$$t_m(k, i\kappa) / t_m(i\kappa, i\kappa) = t_m(k) / t_m(i\kappa) = t_m(i\kappa, k) / t_m(i\kappa, i\kappa) \quad (3.2.17)$$

bağıntıları yazılabilir. Sonuç olarak durum yoğunluğunu bulmak için, (3.2.16) denklemini denklem (3.2.1) de yazarsak spektral fonksiyon,

$$\rho(\mathbf{k}, E) = - \left[E - k^2 \right]^{-2} Im \sum (-i)^{m-m'} \exp [i(m-m')\theta_k] x [t_m(k, \kappa) / t_m(\kappa, \kappa)] t_{m'}(\kappa, \kappa) x$$

$$< F^a(\mathbf{k}, \kappa) >_{mm'} [t_{m'}(\kappa, k) / t_{m'}(\kappa, \kappa)] \quad (3.2.18)$$

olur. Buradan da durum yoğunluğu $n(E)$ ise,

$$n(E) = \frac{A_0}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^0 \rho(\mathbf{k}, E) d\mathbf{k} \quad (3.2.19)$$

bağıntısından hesaplanabilir.

4. DÜZENSİZ YAPILARIN DURUM YOĞUNLUĞUNUN HESAPLANMASI

Bölüm 3 de çoklu saçılmaya dayanan BH metodunun matematiksel formülasyonu genel olarak verildi. Bu bölümde ise, bu bağıntıların incelenecek bir sisteme nasıl uygulanacağı ve elektronik durum yoğunluğunun nasıl hesaplanacağı detaylı bir şekilde izah edilecektir. Doğal olarak, farklı şekilde düzensiz sistemlerin mevcut olması ve bunun sonucu olarak yapılarının karmaşık olması nedeniyle henüz genel bir teoremin geliştirilemediği; ancak Recursion ve CPA gibi bir çok tekniğin, farklı yaklaşımlar altında düzensiz sistemlere uygulandığı ve kısmen bir çok sonuç elde edildiği önceki bölümlerde tartışıldı. Bu uygulanan sistemler bazen modellere dayandığı gibi bazen de gerçek maddeler olarak alınmaktadırlar. BH metodu da bu tekniklerden birisi olup şu ana kadar hem gerçek sistemlere hemde model sistemlere uygulanmıştır. Ancak, uygulamalar ve uygulayanların sayısı hala sınırlı kalmıştır.

Bu bölümde, iki boyutlu bazı model sistemler düşünülüp bunların durum yoğunlukları hesaplanacaktır. Bunun için ilk aşamada, iki boyutlu düzgün bir örgüye sahip olan ve *zar örgüsü* (diced lattice) olarak tanımlanan, sistemin elektronik durum yoğunluğu hesaplanacaktır. Bu örgü düzgün bir sistem gibi görünmesine rağmen, 3-bağlı bal peteği ve 6-bağlı üçgen örgüsü olmak üzere farklı iki birim hücreden meydana gelmesi bakımında ilginç bir özelliğe sahiptir. Bu özellik kendini elektronik band yapısında daha belirgin olarak gösterecektir. Çünkü bir sistemin elektronik enerji bandı, sistemin yapısal özellikleriyle doğrudan alakalıdır. Diğer bir ifadeyle, bu örgü içerisinde çevresel veya yakın komşu atom sayısı farklı olan iki tane örgünün olması nedeniyle band yapılarında tek tip örgünün vereceği özelliğini göstermeyecektir. Bunu durum yoğunluğunu hesaplayarak daha belirgin olarak gözlemlenmeye çalışacağız. Ayrıca, zar örgüsünün sayısal olarak başka teknikle çalışılmış olması dolayısıyla sonuçlarımızın doğruluğunun karşılaştırma imkanı da olacaktır.

Bu örgü üzerinde uygulanacak ikinci aşamada ise, bal peteği örgüsünden başlayarak 6-bağlı üçgen yapıya geçişi sağlayacak ara değerdeki farklı konsantrasyonlarını alarak bu sistemin durum yoğunluğunun her örgünün konsantrasyonuna göre nasıl değiştiğini araştıracağız. Bunu için BH metodunu kullanarak; zar örgüsünü oluşturan 3-bağlı ve 6-bağlı saçıcı merkezlerini çevresel faktörler cinsinden tanımlayan bir çoklu saçılmayı temsil eden F^i fonksiyonun belirlenmesi gerekir. Teorinin dayandığı yaklaşımlara göre; tanımlanan bu

fonksiyonun tüm sistem üzerinde ortalaması alınır. Bir takım matematiksel işlemlerden sonra simetrik olmayan bir matris elde edilir. Bu matris tekrar uygulanacak bazı matematiksel manipulasyonlardan sonra uygun bir forma indirgenip (simetrik veya hermityen) çözümü yapılır. Bulunan özdeğerlerden uygun olanları ve bunlara tekabül eden özvektörleri alınarak spektral fonksiyon veya durum yoğunluğu hesaplanır.

4.1 Zar Örgüsü (Diced lattice) ve Tekniğin Uygulanması

Şekil-1 de görüldüğü gibi zar örgüsü, bal peteği (a) ve üçgen yapının (b) belli bir düzende birleşmesiyle oluşmuş bir sistemdir. Bu örgü, iki boyutlu uzayda 3-bağlı ve 6-bağlı örgülerden meydana gelmesi nedeniyle iki farklı birim hücreye sahiptir. Atomlararası bağların uzunlukları birbirine eşit olup, atomik etkileşmeler sadece bağ doğrultuları boyunca olduğunu varsayarak her atomun çevresini; tanımlanan bir referans koordinat sistemine göre iki atom arasındaki bağ açıları, bağların uzunlukları ve her farklı atomun sistem içindeki konsantrasyonları cinsinden tanımlanması gerekir. Bu parametrelere göre bir atomun çevresini yakın komşu atomlar cinsinden tanımlamak için polar koordinat sisteminde her farklı örgü noktası birbirlerine göre tanımlanan açısız ve radyal bir fonksiyonla belirlenir. Bu fonksiyon, bir atomu komşu atomların sayısı ve konumu cinsinde bu değişkenlerle belirleyen bir Fourier fonksiyonudur. Bu durumda, herhangi bir atomu temsil etmek için tanımlanan bu fonksiyon, eğer komşu atomların tüm özelliklerini tanımlanan atoma yansıtacak şekilde belirlenmişse; o zaman BH teorisini formal olarak uygulamış oluruz. Özellikle en yakın komşu atomlar orijin olarak alınan atoma katkıda bulunduğu için, toplam saçılma fonksiyonu T veya bu fonksiyonun değiştirilmiş uygulanabilir şekli olan F fonksiyonu kolayca tanımlanabilir. F fonksiyonun en pratik ve uygulanabilir şekli

$$F^a = 1 + \sum t.G^{ab} + \sum t.G^{ab}.t.G^{bc} + \dots = 1 + \sum t.G^{ab}.F^b \quad (4.1.1)$$

dir. Burada G^{ab} ifadesi, iki atom arasındaki elektronun yayılmasını temsil eden Green fonksiyonudur. Bu fonksiyon

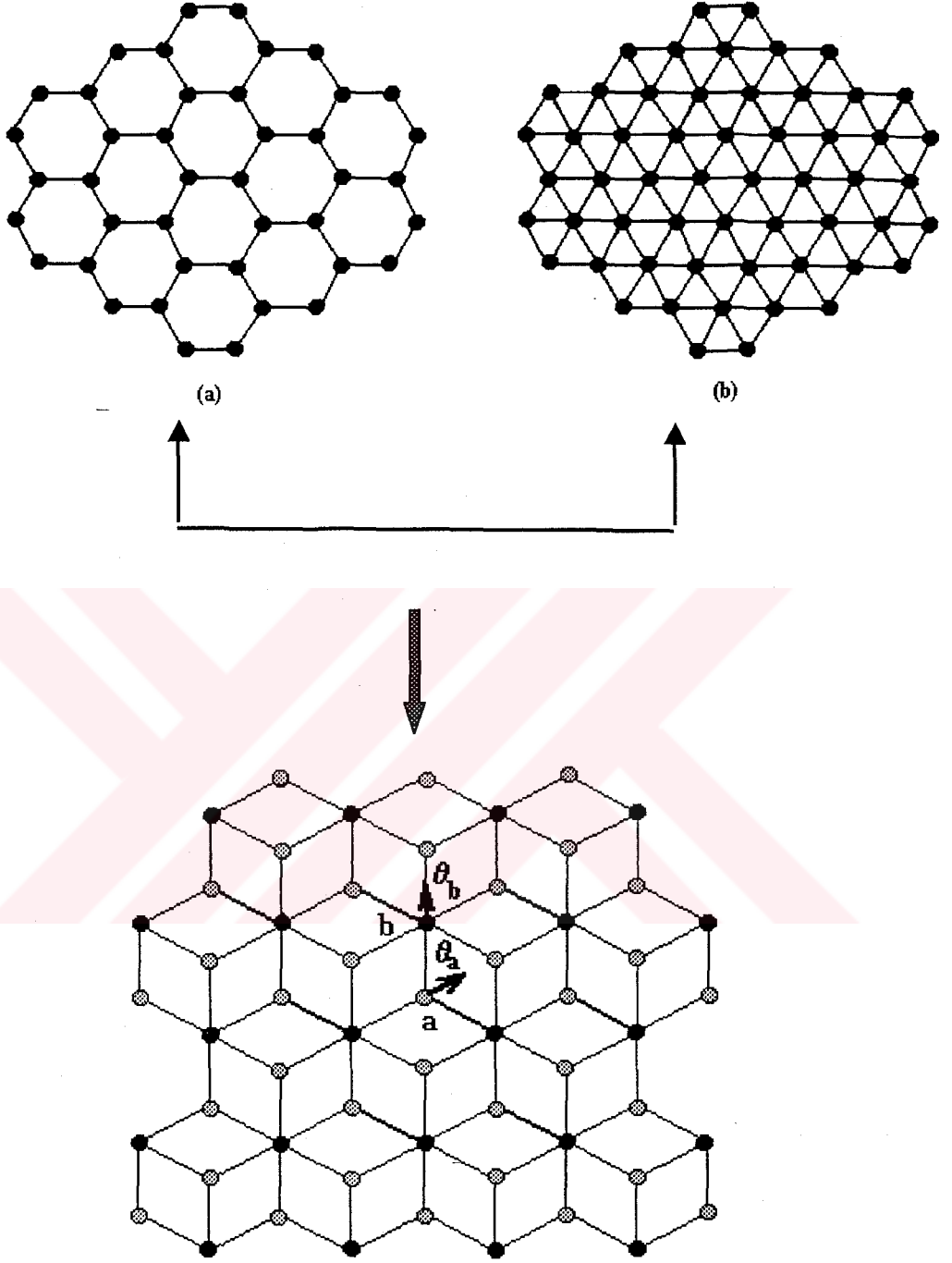
$$G_{mm'}^{ab}(r, r') = - \sum_{\nu m''} (-i)^\nu J_\nu(kR) K_{m'-m}(\mu R) e^{i(m'-m-\nu)\theta_R} e^{i\nu\theta_k} \quad (4.1.2)$$

olarak elde edilmişti. Burada $E < 0$ alındığı için $\mu = (-E)^{1/2}$ olup reel bir değerdir. R iki atom arasındaki mesafe olup, küresel kabul edilen potansiyellerin çapından büyük veya eşit alınmalıdır ($R \geq 2r$). Ayrıca, potansiyel küresel simetrik olarak kabul edildiğinden, $t_{mm'} = t_m \delta_{mm'}$ ve açısal momentum indislerine bağlı değişen diyagonal bir matristir. Eğer sadece s-dalga saçılması hesaplandığında $m = m' = 0$ olur. Böylece matris formundaki $t = t_0$ alınıp, enerjiye bağlı skaler bir fonksiyon haline gelir.

Yukarıdaki bilgiler kapsamında orijin atomu olarak ilk saçılmanın üç bağlı örgü üzerindeki a atomunda olduğunu kabul edersek, xy düzleminde en yakın komşu 6-bağlı örgü üzerindeki b atomu olur. Laboratuvar koordinat sisteminde kabul edilen eksene göre a atomunun b ye göre doğrultusu θ_a ile verilsin (Şekil 4.1). Bu durumda, tanımlanan referans koordinat sisteminde b atomu a atomundan $(\theta_a + \pi/3)$, $(\theta_a - \pi)$ ve $(\theta_a - \pi/3)$ doğrultularında bulunur. İki atom arasındaki mesafe eşit olduğu için R mesafesi atomik birimde uygun bir değer alınır. Farklı başka atom bulunmadığı için b nin a etrafında bulunma olasılığı $P_a^b = 1$ dir. Tüm sistem içinde 3-bağlı atomların konsantrasyonlarını η_3 ile gösterirsek bunu kolayca hesaplayabiliriz. Tüm sistem içinde 3-bağlı örgü için hesaplanan $\eta_3 = 0.67$ ve 6-bağlı atomların konsantrasyonları $\eta_6 = 0.33$ olarak bulundu. Dolayısıyla a atomunun çevresi ve komşu atomlar ile ilgili parametreler tanımlanmış oldu. Benzer şekilde b atomu orijinal atom olarak alınırsa, a atomu b atomuna göre (θ_a) , $(\theta_b + \pi/3)$, $(\theta_b - \pi/3)$, $(\theta_b + 2\pi/3)$, $(\theta_b - 2\pi/3)$ ve $(\theta_b - \pi)$ doğrultularında bulunur ve $P_b^a = 1$ dir. Bu değerlere göre denklem (4.1.1) her iki atoma kolayca uygulanabilir. Böylece, tanımlanan parametreler cinsinden a atomunu temsil eden fonksiyon F^3 ise

$$F^3(\theta_a) = 1 + t_0 [G(\theta_a - \pi) F^6(\theta_a - \pi) + G(\theta_a + \pi/3) F^6(\theta_a + \pi/3) + G(\theta_a - \pi) F^6(\theta_a - \pi/3)] \quad (4.1.3)$$

olarak yazılır. Burada, denklem (4.1.2) de enerjiye bağlı bir fonksiyon olan $K(\mu R)$ Bessel fonksiyonu ve elektronun yayılımını temsil eden tam sayılı $J_n(kR)$ Bessel



Şekil 4.1 : Zar örgüsü (diced lattice) : bal peteği (a) ve üçgen örgünün (b) birleşimi ile oluşan sistem.

fonksiyonu açık olarak yazılmadı. Burada G , bu terimleri ihtiva etmesine rağmen sadece notasyon gösterim uygunluğu olması amacıyla açığa bağlı kısımları ile temsil edildi. Benzer olarak 6-bağlı yapıda orijinal atom olarak alınan b atomunu temsil eden fonksiyon F^6 ile gösterilirse, o zaman saçılma fonksiyonu

$$F^6(\theta_b) = 1 + t_0 [G(\theta_b)F^3(\theta_b) + G(\theta_b + \pi/3)F^3(\theta_b + \pi/3) + G(\theta_b - \pi/3)F^3(\theta_b - \pi/3) + G(\theta_b + 2\pi/3)F^3(\theta_b + 2\pi/3) + G(\theta_b - 2\pi/3)F^3(\theta_b - 2\pi/3) + G(\theta_b - \pi)F^3(\theta_b - \pi)] \quad (4.1.4)$$

olur. Son iki denkleminin Fourier transformlarını almadan önce bu iki denklemi temsil eden tek bir genel gösterimle

$$F_m^a(\theta_b) = 1 + \sum_{y.km\eta m} P_a^b t \sum_{y.km\eta m} G^{ab} F_{m'}^b(\theta_b) \quad (4.1.5)$$

şeklinde yazılabilir. Burada siyah yazılmış olan **1**, birim matris olduğunu gösteriyor. Fourier transformu bu denklemin her iki tarafına uygulanırsa,

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} F_m^a(\theta) e^{im\theta} d\theta = 1 \delta_{m,0} + \sum_{y.km\eta m} P_a^b \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \sum e^{im\theta} t_0 G_v(\mathbf{R}) e^{iv(\theta \mp \alpha\pi/3)} F_{m'}^b(\theta \mp \beta\pi/3) \quad (4.1.6)$$

olur. Burada örgü bağları arasındaki açılar $\pi/3$ ün tam sayı katları olduğu için, bu tam sayıları genel olarak α ve β ile gösterdik. Bu denklemin her iki tarafı θ açısına göre integrali alınır,

$$F_m^a = 1 \delta_{m,0} + \sum_{y.km\eta m} P_a^b t_0 K_0(\mu R) \sum_{m'} (-i)^v J_v(kR) \Omega(\gamma_a, \gamma_b; m, m') F_{m'}^b \delta_{m, m' + v} \quad (4.1.7)$$

haline gelir. Burada Ω parametresi sistemi oluşturan her farklı atomun yapısal parametrelerini ihtiva eden fonksiyon olduğu için buna *yapısal faktör* denir. Bu faktör içindeki 3-bağlı yapıya tekabül eden açılal yapı faktörü $\gamma_a = 2 \cos(m\pi/3) + \cos m\pi$ ve

6-bağlı yapıya tekabül eden ise $\gamma_b = 2 \cos(2m\pi/3) + 2 \cos(m\pi/3) + \cos m\pi$ dir. Buradan görüldüğü gibi m tam sayılarından dolayı $\mathbf{F}$ in katsayıları bir matris denklemini verir. Ayrıca bu hesaplamada sadece s-dalga saçılması kabul edildiğinden, $\mathbf{F}^a$ ve $\mathbf{F}^b$ fonksiyonları sadece m ve m' tam sayılarına göre değer alan birer vektör durumuna indirgenirler. Buna göre bu vektörleri ve katsayıların oluşturduğu matrisiyle beraber daha genel bir gösterimle

$$\mathbf{F}_m = \mathbf{e} + \mathbf{M}_{mm'} \mathbf{F}_{m'} \quad (4.1.8)$$

şeklinde yazabiliriz. Burada $\mathbf{M}$, 2×2 şeklindeki bir blok matristir ve blokların her elemanı m ve m' indisleriyle belirlenir. $\mathbf{e}$, $m = 0$ olduğu zaman değeri 1 $m \neq 0$ ise 0 olan blok matristir. Ayrıca $\mathbf{M}$, $\mathbf{G}$ den dolayı bu haliyle simetrik olmayan kompleks bir matristir. Fakat fiziksel olarak özdeğerleri reel olması gerekir. Bu yüzden matrisin Hermityen bir matrise eşit olması gerekir. Spektral fonksiyonu veren kompleks kısmı bulmak için denklem (4.1.8)

$$\mathbf{F} = (\mathbf{I} - \mathbf{M}_{mm'})^{-1} \cdot \mathbf{e} \quad (4.1.9)$$

olarak yazılır. Bu denklemin çözümü özdeğer ve özvektörleri cinsinden

$$\mathbf{F} = \sum_i \mathbf{u}_i (1 - \lambda_i)^{-1} \mathbf{u}_i^T \cdot \mathbf{e} \quad (4.1.10)$$

bağıntısı ile verilebilir. Burada $\mathbf{u}_i$ ve $\mathbf{u}_i^T$ sırasıyla matrisin sağdan ve soldan özvektörleri, λ_i özdeğerleridir. Matris simetrik olmadığından hem normal haliyle çözmek hemde transposunu alıp çözmek gerekir. Çünkü simetrik olmayan matrisin özvektörleri birbirinden farklıdır. Ancak matrisi bu haliyle çözmek sonuçların doğruluğu ve uzun bilgisayar zamanı bakımından tercih edilmez. Bu bakımdan matrisi simetrik bir forma indirmek gerekir. Durum yoğunluğunun hesaplanması için bu işlem aşağıdaki bölümde detaylı olarak tartışılacaktır.

4.2 Durum Yoğunluğunun Hesaplanması

Denklem (4.1.8) durum yoğunluğunun hesaplanmasında kullanmak için, ilk aşama olarak öncelikle matrisi simetrik bir forma indirgemek gerekir. Bunu yapmak için denklem (4.1.7) de yapısal kısmı ile F vektörünü $X_{m'} = \sum_{m,m'} \Omega(\gamma_a, \gamma_b) F$ olarak yazalım ve daha sonra bu denklemin her iki tarafını $\sqrt{\gamma_a}$ ve $\sqrt{\gamma_b}$ faktörleri ile çarpıp bölelim. Bu işlemler sonucunda denklem (4.1.7)

$$X_i \frac{1}{\sqrt{\Omega_i}} = \frac{1}{\Omega_0} + t_0 \sum_{m''v} G_{m''v} \sqrt{\gamma_i} \Omega(m, m') \sqrt{\gamma_j} X'_j \frac{1}{\sqrt{\Omega_j}} \quad (4.2.1)$$

haline gelir. Burada $t_0 \sum_{m''v} G_{m''v} \sqrt{\gamma_i} \Omega(m, m') \sqrt{\gamma_j}$ katsayıları simetrik bir matris olup sayısal olarak ispatlanabilir. Bu bağıntıda karekök içerisindeki terimlerden biri 3-bağlı yapısal parametreleri ihtiva ederken diğeri de 6-bağlı yapının parametrelerini ihtiva ediyor. Bu durumda, transpose matrisin çözümüne gerek olmaksızın, simetrik matrisin determinanı

$$\left| t_0^{-1} - \mathbf{M}_{mm'} \right|_{N \times N} = 0 \quad (4.2.2)$$

olarak gösterebilir. Bu da band yapı hesaplamalarında bilinen sekular determinanttır. Bu durumda determinantın özdeğer ve özvektörleri sırasıyla λ_n ve v_n olmak üzere, kompleks kısım

$$\text{Im} X_0 = -\pi t_0^{-1} \sum_i \left(\sum_j \mu_j v_{i,j} \right)^2 \delta(t_0^{-1} - \lambda_i(\mathbf{k})) \cdot \mathbf{e}. \quad (4.2.3)$$

olarak yazılabilir. Burada μ her farklı atomun konsantrasyonu olup durum yoğunluğuna kendi ölçüsünde katkı yapar. Bu bağıntıdan, bal peteği örgüsünden üçgen örgüye geçiş durumunu belirliyen konsantrasyon değişimlerini kullanırken faydalanacağız.

Hesaplamayı yapmadan önce ikinci aşama ise, spektral fonksiyonu belirleyen t-fonksiyonlarını tanımlanacak bir potansiyele göre belirlemektir. Basit bir uygulama olarak muffin-tin potansiyel şartını sağlayan bir kare potansiyeli için, $R/2 \geq r$ olmalıdır. Ayrıca, potansiyelin küresel simetrik ve sadece s-dalgası saçılmasını sağladığı varsayılıyor. Burada r potansiyeli yarıçapı olup, R iki komşu atomun merkezleri arasındaki mesafedir. t-fonksiyonlarını bulmak için schröndiger dalga denkleminin radyal kısmını çözümü gerekir. Bu ise,

$$\frac{d^2 R_0}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR_0}{dr} + \left(k^2 - \frac{n^2}{r^2} \right) R_0 = 0 \quad (4.2.4)$$

ile verilir. Burada R_0 s-dalgasını gösteren radyal dalga, $k = \xi = \sqrt{-(E + V)}$ ve n tam sayıdır. Durumların bulunacağı enerji bölgesi $V_{sd} < E < 0$ dir. Burada V_{sd} s-dalgası saçılmasını yapan potansiyeli gösteriyor. Denklem (4.2.2) nin çözümü iki boyuttaki bir sistem için (Yıldız, 1995)

$$\begin{aligned} s_0(iK) &= \int_0^{r_{sw}} r' dr' J_0(iKr) s_0(r') = V_{sw} B \int_0^{r_{sw}} J_0(iKr) J_0(\xi r) r' dr' \\ &= \frac{V_{sw} r_{sw} B}{(iK)^2 - \xi^2} [iK J_1(iKr_{sw}) J_0(\xi r_{sw}) - \xi J_1(\xi r_{sw}) J_0(iKr_{sw})] \\ s_0(k) &= \frac{(\pi/2) r_{sw} I_0(kr_{sw}) [K J_1(Kr_{sw}) J_0(\xi r_{sw}) + \xi J_1(\xi r_{sw}) I_0(Kr_{sw})]}{J_0(\xi r_{sw}) - r_{sw} K_0(Kr_{sw}) [K J_1(Kr_{sw}) J_0(\xi r_{sw}) + \xi J_1(\xi r_{sw}) I_0(Kr_{sw})]} \\ s_0(k) &= \int_0^{r_{sw}} r' dr' J_0(kr) s_0(r') = V_{sw} B \int_0^{r_{sw}} J_0(iKr) J_0(\xi r) r' dr' \\ &= \frac{V_{sw} B r_{sw}}{k^2 - \xi^2} [K J_1(Kr_{sw}) J_0(\xi r_{sw}) - \xi J_1(\xi r_{sw}) J_0(Kr_{sw})] \\ \frac{s_0(k)}{s_0(iK)} &= - \frac{V_{sw}}{k^2 - \xi^2} \left[\frac{K J_1(Kr_{sw}) J_0(\xi r_{sw}) - \xi J_1(\xi r_{sw}) J_0(Kr_{sw})}{K J_1(Kr_{sw}) J_0(\xi r_{sw}) + \xi J_1(\xi r_{sw}) I_0(Kr_{sw})} \right] \end{aligned} \quad (4.2.5)$$

olarak veriliyor. Burada t-fonksiyonlarının yerine s-fonksiyonlarının gösterimi kullanılmıştır. Anlam olarak aynı olup sadece notasyon değişikliği yapılmıştır. Ayrıca

s-fonksiyonundaki 0 indisi s-saçılma seviyelerini temsil etmektedir. Sonuç olarak spektral fonksiyon bu yeni fonksiyonlar cinsinden,

$$\rho(\mathbf{k}, E) = \frac{V_{sw}^2}{(E - k^2)^2 (k^2 - \xi^2)^2} \left[\frac{k J_1(k r_{sw}) J_0(\xi r_{sw}) - \xi J_1(\xi r_{sw}) J_0(k r_{sw})}{\kappa I_1(\kappa r_{sw}) J_0(\xi r_{sw}) + \xi J_1(\xi r_{sw}) I_0(\kappa r_{sw})} \right]^2 \quad (4.2.6)$$

$$\sum_i \mathbf{u}_i^2 \delta(E - E_i(k)) [\lambda_i(\mathbf{k}) \partial U / \partial E]^{-1} \mathbf{e}$$

olarak yazılabilir ve durum yoğunluğunu veren bağıntı ise

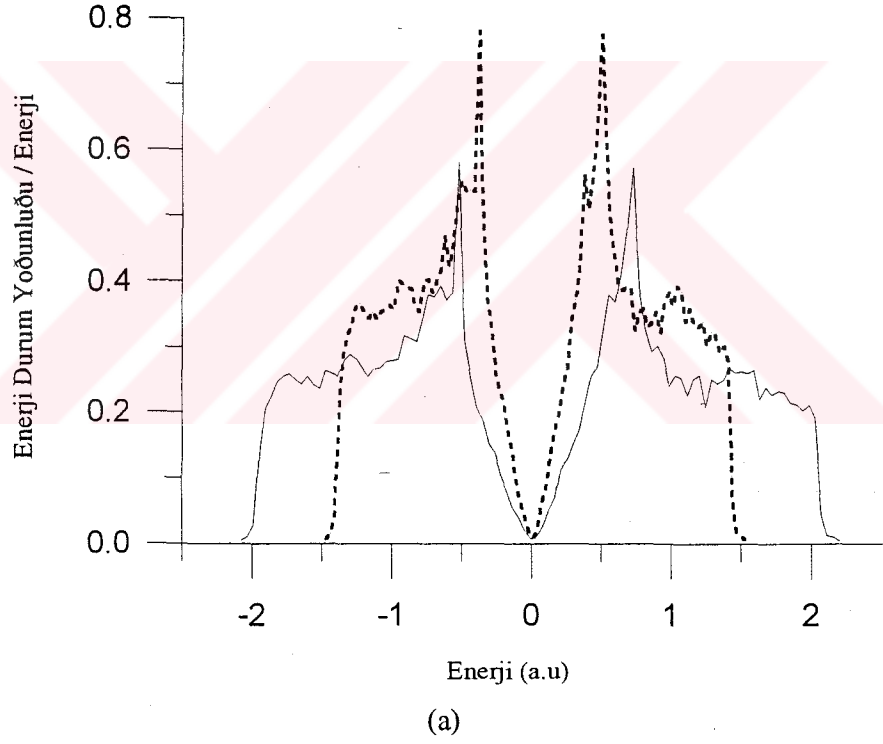
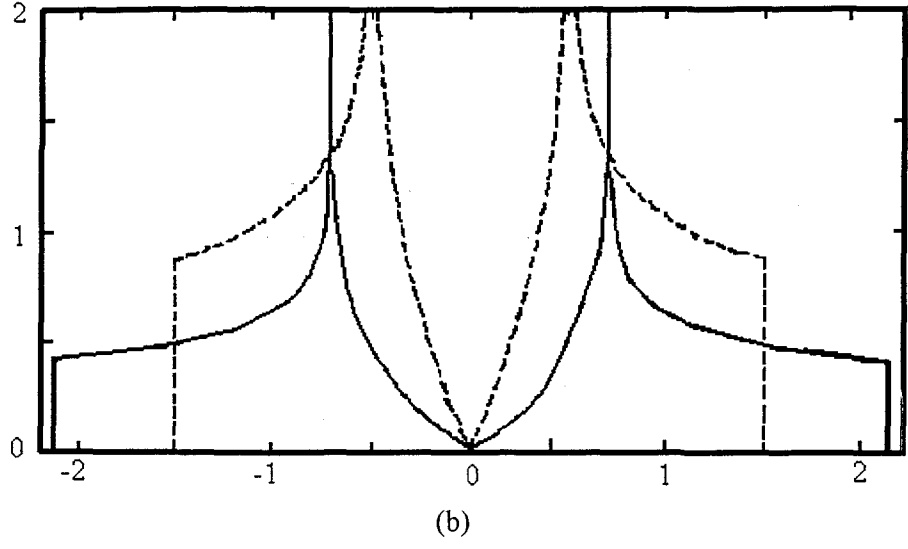
$$N(E) = \frac{A_0}{(2\pi)^2} \int \rho(\mathbf{k}, E) d\mathbf{k} \quad (4.2.7)$$

olur. Burada A_0 sistemin alanıdır. Diğer parametreler ise, potansiyel yarıçapı $r = 0.9$ (a.b), iki potansiyel arasındaki uzaklık $R = 2.0$ (a.b) ve bu değerlerden taban durum enerjisi $E_0 = -30$ (a.b) olarak bulundu. Bu değerleri kullanarak denklem (4.2.2) çözümü yapıp özdeğer ve özvektörler denklem (4.2.6) kullanılırsa, spektral fonksiyon hesaplanır. Sonuç olarak tüm k değerleri üzerinde toplam durum yoğunluğunun hesaplanması denklem (4.2.7) yapılır.

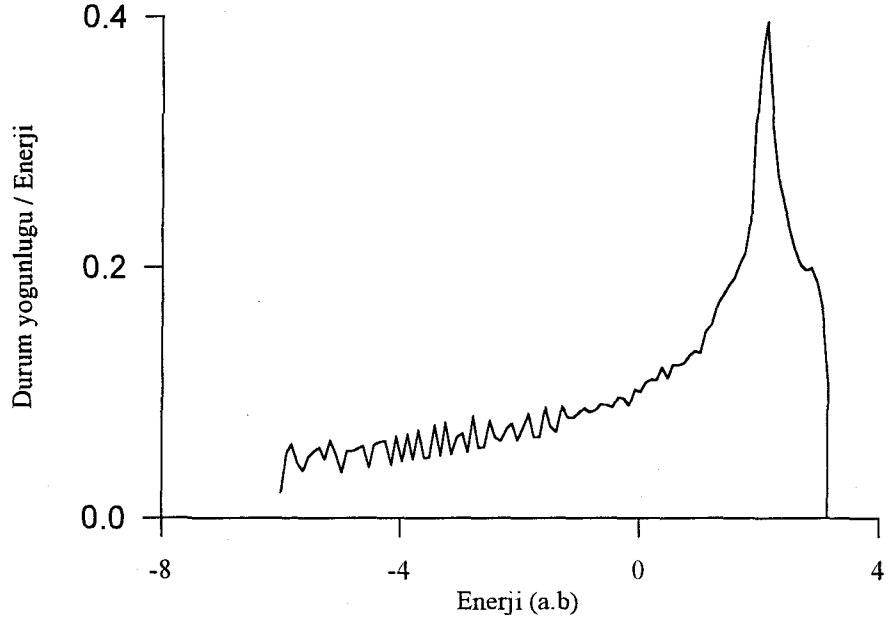
İlk hesaplamada, Horiguchi ve Chen (Horiguchi ve Chen, 1972) tarafından zar örgüsü için yapılan hesaplama ile karşılaştırma yapmak amacıyla bu örgünün $\eta_3 = 0.67$ ve $\eta_6 = 0.33$ değerleri ve yukarıdaki potansiyel parametreler için matris denkleminin çözümü yapıldı ve durum yoğunluğu hesaplandı. Elde edilen sonuç şekil 4.2 (a) karşılaştırma amacıyla veriliyor. Aynı şeklin (b) şıkkı ise Horiguchi ve Chen tarafından hesaplandı. Görüldüğü gibi sonuçlar birbirine uyumludur. İkinci hesaplamada ise, bal peteği limitinden üçgen limitine geçişi durumu araştırmak için seçilen bazı konsantrasyon değerlerine karşı durum yoğunlukları hesaplandı. Bu amaç için alınan konsantrasyon değerleri ise **a)** $\eta_3 = 0$, $\eta_6 = 1.0$; **b)** $\eta_3 = 0.1$, $\eta_6 = 0.9$; **c)** $\eta_3 = 0.2$, $\eta_6 = 0.8$; **d)** $\eta_3 = 0.5$, $\eta_6 = 0.5$; **e)** $\eta_3 = 0.8$, $\eta_6 = 0.2$; **f)** $\eta_3 = 0.9$, $\eta_6 = 0.1$, **g)** $\eta_3 = 1.0$, $\eta_6 = 0.0$ olarak seçildi. Bu değerleri kullanarak aynı şekilde matris denkleminin çözümü

yapılı, her değ er i in durum yoğ unlukları hesaplandı. Bulunan sonu lar  ekil 4.3-4.9 da veriliyor.

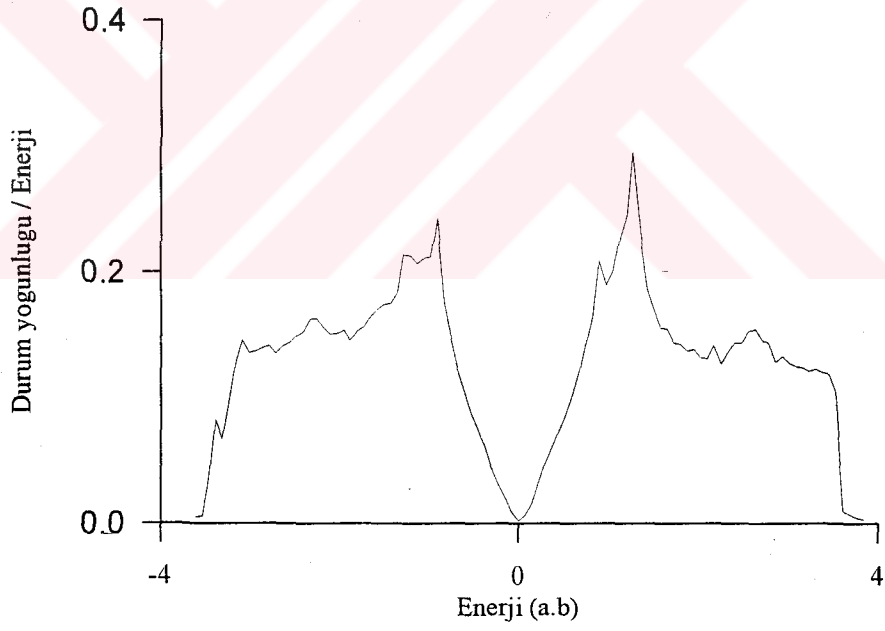




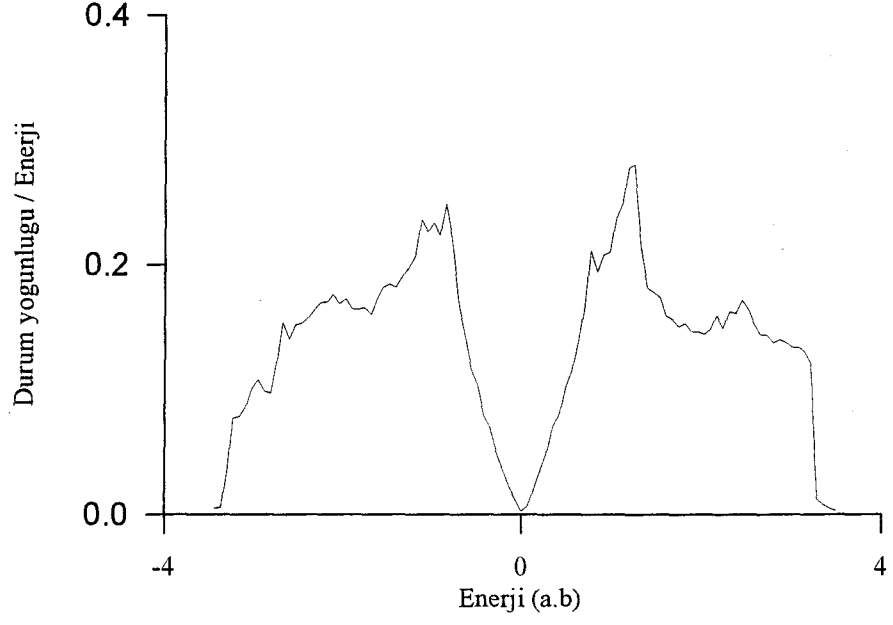
Şekil 4.2 : Zar örgüsü (düz çizgi) ve Bal peteği örgüsü (kesikli çizgi) durum yoğunlukları : (a) BH metodu ile hesaplanan, (b) Horiguchi ve Chen tarafından hesaplanan (Horiguchi ve Chen, 1972).



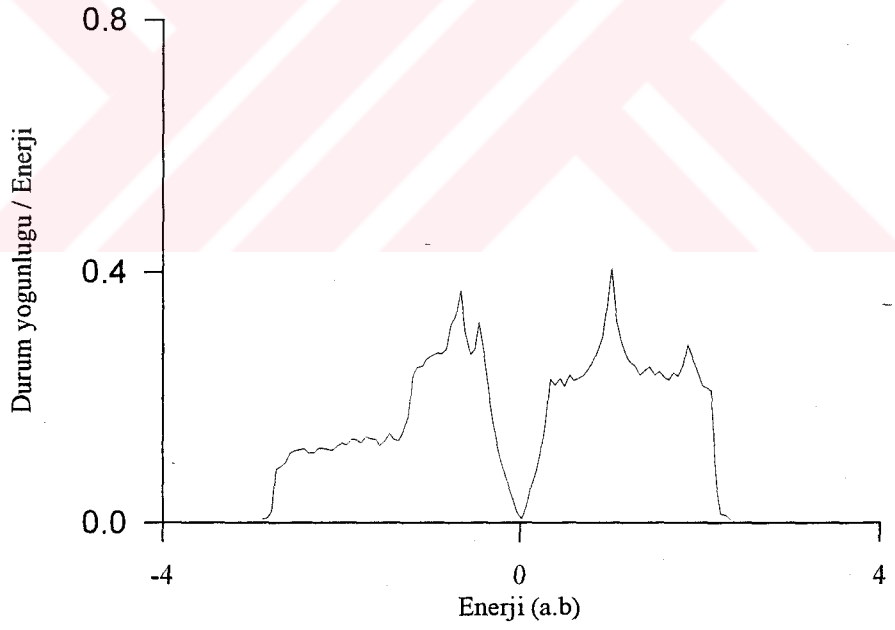
Şekil 4.3 : $\eta_3=0.0$, $\eta_6 = 1.0$ değerlerine tekabül eden üçgen örgünün durum yoğunluğu.



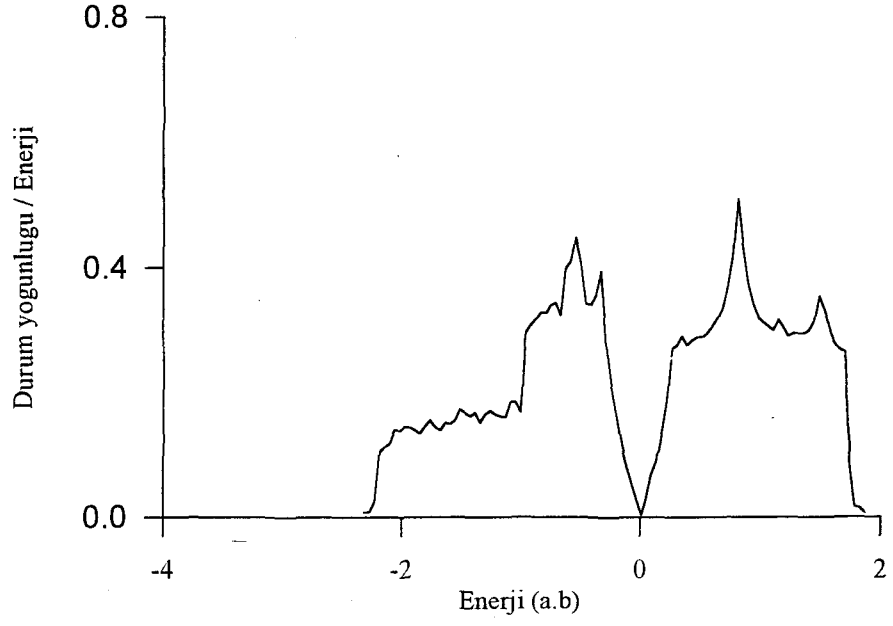
Şekil 4.4 : $\eta_3=0.1$, $\eta_6 = 0.9$ değerlerine tekabül eden zar örgünün durum yoğunluğu.



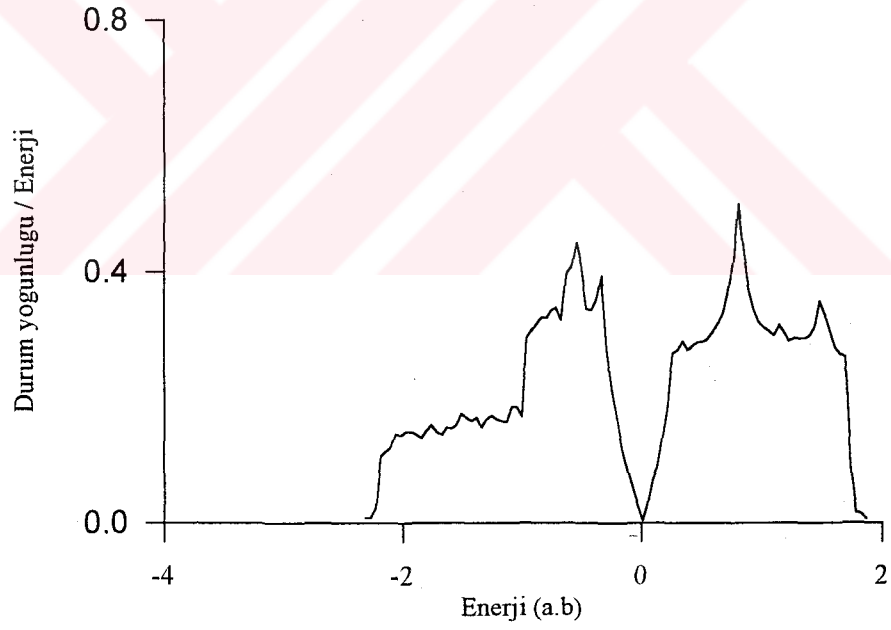
Şekil 4.5 : $\eta_3=0.2$, $\eta_6=0.8$ değerlerine tekabül eden zar örgünün durum yoğunluğu.



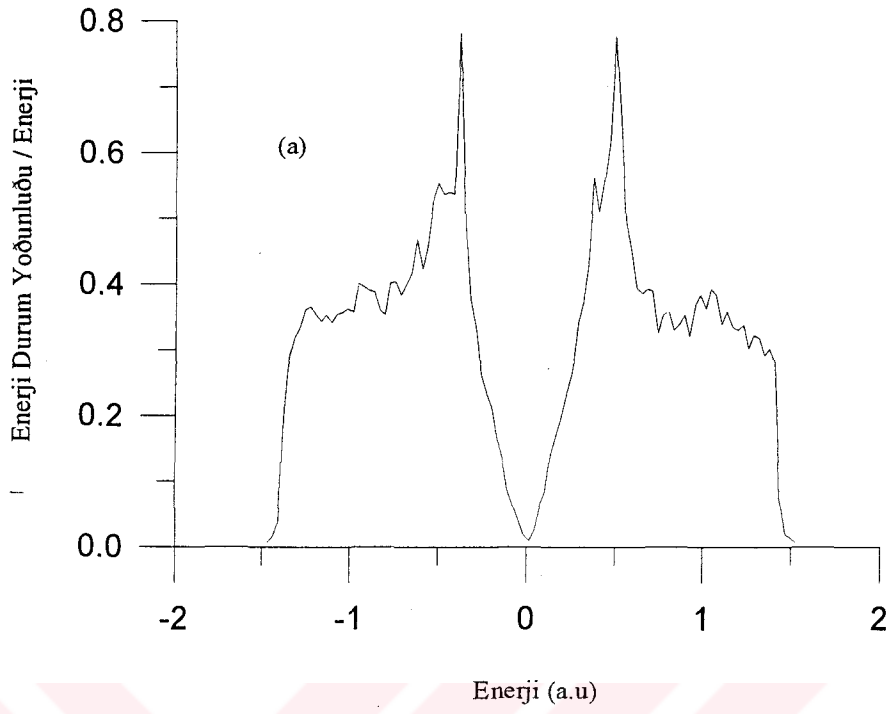
Şekil 4.6 : $\eta_3=0.5$, $\eta_6=0.5$ değerlerine tekabül eden zar örgünün durum yoğunluğu.



Şekil 4.7 : $\eta_3=0.8$, $\eta_6=0.2$ değerlerine tekabül eden zar örgütün durum yoğunluğu.



Şekil 4.8 : $\eta_3=0.9$, $\eta_6=0.1$ değerlerine tekabül eden zar örgütün durum yoğunluğu.



Şekil 4.9 : $\eta_3=1.0$, $\eta_6 = 0.0$ değerlerine tekabül eden bal peteği örgünün durum yoğunluğu.

5. MEVKİSEL DÜZENSİZ ALAŞIMLARIN ELEKTRONİK YAPILARI

Son yıllarda düzensiz alaşımların elektronik durum yoğunlukları ile ilgili hesaplamalarda büyük bir gelişme sağlandı. Özellikle teorik olarak Koharent Potansiyel yaklaşımı (CPA) ilk kez Soven tarafından bu sistemler için takdim edildi (Soven, 1967) ve bu güne kadar değişik versiyonları altında çok sayıda bilim adamı tarafından çeşitli alaşımlara uygulandı (Kirkpatrick, vd., 1969; Kim ve Lynch, 1989). Uzun bir süreç geçmesine rağmen, CPA kristal sistemler için geliştirilen Bloch teoremiyle hala mukayese edilecek seviyede değildir. Ancak mevcut teorik teknikler içerisinde bu tür sistemler için en güçlü teknik olduğu kabul görmüştür (Carlsson ve Fedders, 1986).

Bu bölümde, daha önceki bölümlerde yapısal düzensiz sistemler için geliştirilmiş olan bir metodun teorisine dayanan ancak hem alaşımlara uygulama hem de bunların değerlendirmesi bakımından farklı olan bir metod takdim edilecektir. Beeby tarafından CPA ya alternatif olarak düzensiz alaşımların elektronik durum yoğunluğunu hesaplamak için geliştirilmiş olan bu metod, rastgele dağılmış bir alaşımdaki atomların işgal ettikleri yerleri istatistiksel bir ortalama ile hesaplayan özel bir yaklaşıma dayanmaktadır. Bu bölümdeki hesaplamada, basit kübik (sc), cisim merkezli kübik (bcc) ve yüzey merkezli kübik (fcc) yapıların örgü noktalarına iki ve üç farklı atomun belli bağlı enerji durumlarında farklı konsantrasyonda rastgele dağılması halinde durum yoğunluklarının değişimleri hesaplanacaktır.

5.1. Mevkisel Düzensiz Alaşımlar Tanıtılması

En zayıf düzensiz tip olan bu alaşımlar, çoğu zaman mükemmel bir kristaldeki bir A atomunun (örneğin Ag) diğer bir B (Au) atomu ile kristal yapıyı bozmadan yer değiştirmesi halinde oluşan sistemlerdir. Örneğin, metaller, yarıiletkenler ve iyonik kristallerdeki farklı bir çok element için meydana gelen bu olay metalurjide ve madde biliminin diğer branşlarında büyük bir öneme sahiptir. Kristal kafesin örgü noktalarının farklı atomlar tarafından rastgele işgal edilmesi durumunda *mekvikel* (substitutional) düzensizlik tanımı karşımıza gelir. Teorik çalışmalara dayanan hesaplamalarda, alaşımı oluşturan atomların bu şekildeki dağılımı istatistiksel olarak tanımlanmalıdır. En basit dağılım, bunların rastgele dağıldığını varsaymaktır. Örneğin B atomunun bir yeri işgal etme olasılığı C_B olarak tanımlanırsa, toplam atomların sayısına göre bu atom türünün

konsantrasyonunu verir. Doğal olarak bu gerçekçi bir yaklaşım değildir. Çünkü aynı cins iki komşu atom arasındaki çekici (cohesive) enerjinin farklı olmasından dolayı bunları aynı tür kabul etmek % 100 gerçekçi değildir.

Mevkisel safsızlık örgüdeki bir boşluk veya noktasal bir kusur olabilir. Her ne kadar yüksek konsantrasyonlarda boşluklarla böyle sistemleri oluşturmak mümkün olmasa da sıvı fazdaki sistemler için model sistemler üzerinde çok sayıda çalışma mevcuttur (Saha, vd., 1996). O halde, *en genel bir ifadeyle daha önce açıklandığı gibi çalışmamız kapsamındaki mevkisel düzensiz alaşımlar (substitutional disorder), düzenli kristal yapısı olan bir sistemin örgü noktalarına yerleşen A ve B gibi iki atomun (veya daha fazla farklı atom) bu noktaları rastgele işgal etmesi durumunda oluşan sistemler olarak tanımlanabilir.* Eğer sistem içinde sadece bir kaç tane yabancı (veya farklı) atom bu şekilde yerleşmişse bu yabancı atomlar safsızlık olarak diğerleri ise asıl (host) atomlar olarak bilinmektedir. Düzensiz alaşımlarda en eski örnek bir model olarak Ising modeli verilebilir (bir örgü noktasının zıt yönlü yönelmiş iki spin tarafından işgal edilmesi) veya gerçek maddeler için NiCu, AgPd, gibi alaşımlar da birer örnek olarak verilebilir (Kirkpatrick, vd., 1969). Bu tür düzensiz sistemler veya alaşımlar, özellikle çelik ve bilgisayar endüstrisinde büyük öneme sahip olması nedeniyle son yıllarda oldukça çok çalışılan maddelere olmuştur (Leiro, vd., 2001; Wang, vd., 2001).

Teorik çalışmalarda bu kapsamındaki düzensiz bir maddede veya malzemede bir atomun bir başka atom ile yer değiştirmesi durumunda sebep olacağı başlıca etkiler şunlardır:

- i) Yer değiştirmiş atomun en önemli etkisi bu yerdeki meydana gelen potansiyel değişimidir. TB yaklaşımı içinde site-diyagonal enerjisi ε_0 dan ε'_0 gibi yeni bir enerjiye değişebilir. Değişime uğramış bu yerin potansiyeli, herhangi bir yerin gösterimine tekabül eden Hamiltonyenin köşegen elamanlarını etkiler ve genellikle *köşegen düzensiz* olarak tanımlanır.
- ii) Değişikliğe uğramış yerdeki potansiyel sadece kendisi bu değişime maruz kalmaz aynı zamanda yakın komşuların potansiyelinde de etkilenebilir.
- iii) Potansiyeldeki bir değişim ve buradan safsızlık ile alakalı dalga fonksiyonundaki bir değişim elektron yayılımını yada komşu atomlarında yük akışını etkileyebilir. Yük akışı ve potansiyel değişimi birbiriyle alakalı olup eşit zeminde ele alınmalıdır. Bunlar genellikle kendi içinde tutarlı (self-consistently)

olarak incelenmektedir. TB yaklaşımını Hamiltoniana göre ; W_{ij} sıçrama (hopping) terimleri safsız atom yakın komşu atomlarındaki i konumunda j konumuna değişebilir ve o zaman $W_{ij}^{\text{asıl atom}} \neq W_{ij}^{\text{safsız}}$ eşitsizliği ortaya çıkar.

iv) Kararlı katı bir kristalin bir yerine bir başka atomun yerleşmesinin varsayımı pek gerçekçi bir varsayım değildir. Farklı atomlar çoğu zaman farklı büyüklükte ve katı içinde farklı iyonik büyüklüğe sahiptirler. Bu nedenle elektrostatik kuvvet, iyonların yada atomların birbirine doğru veya birbirinden ters yöne doğru hareket etmesine neden olur.

v) Mevkiyel (substitutional) düzensizlerde, genellikle sistemi oluşturan farklı atomların düzenli bir örgüde rastgele dağılım gösterdiği kabul edilir. Böyle alaşımlarda bir yerde bulunabilecek atom çeşidinin bulunma ihtimali yakın komşu yerleri işgal eden atomların doğasından bağımsızdır. Bununla beraber atomların büyüklükleri ve elektrostatik etkileri gibi değişik etkiler atomların yığılmasına sebep olabilir yada klastır oluşturma etkileri veya düzenleme etkisi olarak tanımlanan bir atomun farklı bir tür atom tarafında sarılması durumu, bir bütün olarak kısa mesafe düzenlilik (SRO) etkilerine götürür. Kısa mesafe düzenlilik gösteren alaşımlar ise rastgele dağılmış sistemler olmayıp, bunları çalışmak için geliştirilmiş metotlarla matematiksel olarak hesaplanması daha karmaşıktır (Gonis, 1992).

Bu bölümdeki tartışmamızda, rastgele mevkisel olarak dağılmış farklı bileşenli alaşımları sıkı-bağ yaklaşımı kapsamında muamele eden Beeby metodunu kullanarak durum yoğunluklarını hesaplayacağız. Özellikle, A_cB_{1-c} gibi iki bileşenli ve $A_xB_yC_{1-x-y}$ gibi üç bileşenli alaşımların elektronik durum yoğunluklarının alaşımı oluşturan bileşenlerin konsantrasyonlarına göre değişimlerini inceleyeceğiz.

5.2 Metot ve Formulasyon

Bir alaşımdaki durum yoğunluklarını hesaplamak için diğer düzensiz sistemlerde olduğu gibi yine T-matrix kavramını kullanabiliriz. En basit bir tanımla t-matrisi küresel bir potansiyel üzerine gelen ve etkileşip giden dalgayı tanımlar. Sonsuz bir sistem olması durumunda farklı fiziksel olaylar vuku bulur. Bu olaylarda baskın olan en önemli özellik, bir potansiyel kuyusu üzerine gelen serbest elektronun saçılma kesit alanının

(cross-section) sonsuz olduğu enerjide *bir bağlı durumuna* (bound-state) sahip olmasıdır. Her potansiyeli temsil eden t-matrisi bir bağlı durum verirse, o zaman N tane saçılmada enerji bandları meydana gelir. Bu özelliği kendisinden taşıyan T-matris ifadesi

$$T = \sum_{\alpha} t_{\alpha} + \sum_{\alpha \neq \beta} t_{\alpha} G_0 t_{\beta} + \sum_{\alpha \neq \beta \neq \gamma} t_{\alpha} G_0 t_{\beta} G_0 t_{\gamma} + \dots + \quad (5.2.1)$$

olup bunun çözüm değerleri (poles) uygulanan sistemin enerji seviyelerini verir. Çünkü daha önceki bölümlerde durum yoğunluğunun bu fonksiyonun kompleks kısmı ile orantılı olduğunu detaylı bir şekilde tartıştık. Ayrıca sıkı-bağ yaklaşımı kapsamında enerjinin negatif olduğu değerde, bu denklemin temsil ettiği sonsuz saçılma serisindeki terimlerin hepsi reeldir ve kompleks kısım bu serinin yakınsak olduğu durumda tanımlıdır. Diğer bir ifadeyle, bağlı durumlar ancak serinin yakınsak olduğu noktalarda kendini gösterir. İşte Beeby teorisi, yukarıdaki bağıntıyı düzensiz alaşımlara uygulayarak bağlı durumlarla doğrudan alakalı olan durum yoğunluklarını hesaplamak için, bu sonsuz serinin yakınsak olduğu değerlerdeki çözüm değerlerini araştırır.

Mevkisel düzensiz alaşımlar için geliştirilmiş olan bu metot, rastgele dağılmış bir alaşımdaki atomların işgal ettikleri yerleri istatistiksel bir ortalama ile hesaplayan özel bir işleme dayanmaktadır. Potansiyel yaklaşımı olarak yine muffin-tin potansiyeli kullanılmaktadır. Aslında bu potansiyel kristaller için uygun olmasına rağmen alaşımlar için pek uygun değildir. Çünkü sistem içinde yerel ara bölgelerde potansiyel yerden yere değişebilir. Bu bölgelere tekabül edecek etkili bir potansiyel tanımlayıp çözümü yapmak oldukça güçtür ve henüz mümkün olmamıştır. Bu yüzden kolaylık olması için alaşımı oluşturan her bileşen için muffin-tin potansiyellerin çevresinden bağımsız olduğu varsayılır. Bundan başka, Beeby metodunda ortaya çıkan en önemli zorluk, elektronun saçılma sürecinde aynı mevkiye birden fazla gelmesi durumunda hesaplamada dikkate alınmasında ortaya çıkan zorluktur. Buna ilave olarak daha karmaşık yüksek mertebeden terimlerin gelmesi sonucu yukarıdaki denklemin yakınsaklık (convergency) işlemini de güçleştirir. Bu problemi ortadan kaldırmak için, metodun kendi içinde tutarlı (self-consistent) bir işleme dayanması nedeniyle sonsuz seri içindeki terimlerin tanımlanan şartlarda ortalaması alınıyor. Bu işlemler, genellikle

çoklu saçılmaya dayanan tekniklerde basit diyagramatik gösterimlerle izah edilir. Beeby metodu da bu tür bir gösterimi kullanıyor.

Denklem (5.2.1) deki yüksek terimler atomlardan oluşan bir sistem içindeki saçılma şeklini gösterdiğine göre, düzensiz durum için en basit yaklaşım her saçıcı merkezin tamamen bağımsız olduğunu kabullenmektir. Bu kabullenme, ortalama t-matrisi (ATA) olarak bilinen yaklaşıma gider ki bu doğru bir yaklaşım olmaz. Çünkü elektron aynı merkeze birden fazla uğrarsa hesaplama işleminde bu dikkate alınmıyor anlamındadır. Bu yüzden sağlıklı bir yaklaşım olamaz. Şöyle ki, band genişliği tek potansiyelin bağlı durumlarından büyük olursa hesaplanan durum yoğunluğunda hatalar oluşur. Benzer problem farklı yaklaşımlar tarafından da belirtildiği gibi (Jones, R., 1969; Ziman, J. M., 1979; Yıldız ve Beeby, 1999), Beeby metodu bu hatalarda sakınmak için bir düzeltme terimi tanımlanıyor. Metot, bu problemi daha basit olarak ele alarak yerel düzenliliğin olmadığını ve her hangi bir mevkideki bir atom türü belirleyen olasılık fonksiyonu ile istatistiksel topluluk cinsinden tanımlıyor. Örneğin, türü α olan herhangi bir yerdeki atomun bulunma olasılığının c_α olacağı kabul edilir. Buna göre T-matris serisinde i, j, k , v.s şeklinde bağımsız atomların olduğu varsayılırsa, o zaman sistem içinde bulunma durumları uygun bir olasılık dağılım ile tüm sistem üzerinde ortalaması alınarak hesaplanır. Öte yanda bunların bazıları birbirine eşit ise (örneğin $i = k$ ise) o zaman farklı bir tanımlama gerekir. Herşeye rağmen, bu metodun ilgilendiği farklı atomlar olup bunlara *bağımsız* atomlar denir. Bu düşüncüyü formal bir işlemle tanımlamak gerekirse, i mevkisindeki (yerindeki) atomu α_i olsun. Bu α_i atomunun dağılım olasılığı

$$p(\alpha_i) = \sum_{\alpha} c_{\alpha} \delta_{\alpha, \alpha_i}, \quad (5.2.2)$$

olarak tanımlanır. Buna benzer olarak diğer atomlar için aynı fonksiyon

$$P(\alpha_i, \beta_j, \gamma_k, \dots) = \prod_i^* p(\alpha_i), \quad (5.2.3)$$

olur. Burada çarpım sembolü üzerindeki yıldız (*) işareti $i, j, k, \dots$ farklı atom takımı içerisindeki bağımsız atomların varlığını gösteriyor. Dolayısıyla denklem (5.2.1) de

değişik terimler içindeki bağımsız mevkilerin belirlenmesi bu teorenin başlıca amacıdır. O zaman, bu işlem için başlangıç noktası olarak denklem (5.2.3) de olabilecek bağımlı mevkilerin belirlenmesi gerekir. Aksi halde ATA dan farklı olamaz. Bağımlı mevkiler için bu denklem matematiksel olarak

$$\begin{aligned} P(\alpha_i, \beta_j, \gamma_k, \dots) &= \Pi_i^* p(\alpha_i) \Pi_b^{**} [p(\alpha_b) + 1 - p(\alpha_b)] \\ &= \Pi_i p(\alpha_i) \Pi_b^{**} \left(1 + \frac{1 - p(\alpha_b)}{p(\alpha_b)} \right) \end{aligned} \quad (5.2.4)$$

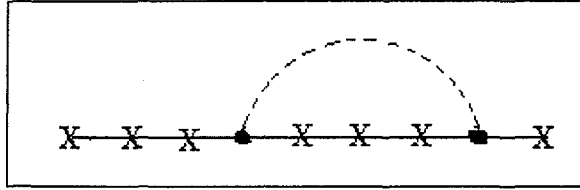
şeklinde yeniden yazılabilir. Burada çift yıldız (**) b ile gösterilen tüm *bağımlı* (aynı mevkiler anlamında) mevkiler üzerinde olan çarpım işlemi gösterir. İlk satırın sağ tarafındaki üst parantez içindeki terimlerin toplamının bir olduğu açıkça görülüyor. Bağımlı ve bağımsız mevkileri birbirinden ayırmak için bu denklemin alt satırı matematiksel açılım kullanarak elde ediliyor. Bağımlı mevkileri temsil eden çarpım kısmının

$$\Pi_b^{**} \left(1 + \frac{1 - p(\alpha_b)}{p(\alpha_b)} \right) = 1 + \sum_b \left(\frac{1 - p(\alpha_b)}{p(\alpha_b)} \right) + \sum_{b,c} \left(\frac{1 - p(\alpha_b)}{p(\alpha_b)} \right) \left(\frac{1 - p(\alpha_c)}{p(\alpha_c)} \right) + \dots \quad (5.2.5)$$

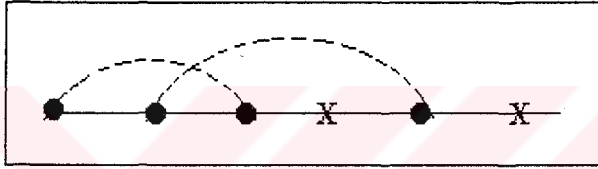
şeklinde açılımı yapılabilir. Burada b ve c seri içinde bağımlı mevkilerin farklı elemanlarıdır. Ayrıca her saçılma mevkisinin birbirinden bağımsız olan bu açılımdaki değişik terimler, yukarıda bahsedilen düzeltme işlemini yapıyorlar ve bu terimler içerisinde en önemli olanları belirlenmek bu teorenin kapsamı içindedir. Bu denklemin bazı terimlerinin basit diyagramatik olarak gösterimi Şekil.5.1 de veriliyor. Denklem (5.2.5) nin diyagramatik gösterimi şekilde (a), (b) ve (c) kısaca şu şekilde özetlenebilir; (a) diyagramında X işareti her t-matrislerin bağımsız ortalamasının alındığını ifade eder. Eğer doğrusal çizgi üzerinde X yerine noktalar alınsaydı o zaman her bir nokta sadece t-matrisini, iki nokta arasındaki düz çizgi ise G_{ij} ile tanımlanan mevkiler arasındaki

X X X X X X X X

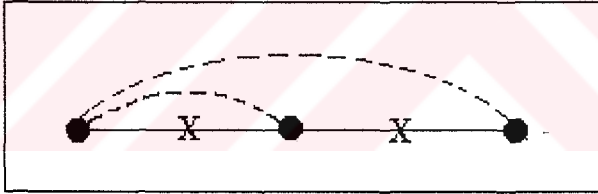
(a)



(b)



(c)



(d)

Şekil 5.1: T-matrisi için diyagramatik gösterimi: (a) ortalaması alınmış her t-matrisi, (b) ilk mertebeden düzeltme terimli saçılma, (c) ikinci mertebeden düzeltme terimli saçılma, (d) yasaklı bir saçılma (Beeby, 1969).

yayılan elektronu temsil eder. Bir saçılma serisinde kendini tekrar eden bir saçılma merkezi denklem (5.2.5) ile izah ediliyor. Bu denklemin ilk toplamındaki ilk terim aynı saçıcı merkezinin tekrarlanma sınırlamasını yok sayan bir olasılık dağılım fonksiyonuyla (P)

$$P\left(c_i^1, c_j^2, c_k^3, \dots\right) \cong P(c_i^1)P(c_j^2)P(c_k^3) \dots \quad (5.2.6)$$

şeklinde verilir. Burada bir mevkinin işgal edilme olasılık dağılımı

$$P(c_i^1) = \sum_{c_i^\mu} \delta_{c_i^1, c_i^\mu} \{c \delta_{c_i^\mu, c_i^\alpha} + (1-c) \delta_{c_i^\mu, c_i^\beta}\} \quad (5.2.7)$$

olur ve bir yerdeki t-fonksiyonunu yansıması

$$\sum_{c_i^\mu} t_\mu c_i^\mu P(c_i^1) = c t_\alpha + (1-c) t_\beta = \langle t \rangle \quad (5.2.8)$$

şeklinde tanımlanır. Bu denklem, iki bileşenli bir alaşımdaki bir yerin farklı bileşenler tarafından işgal edilmesini veren ortalama t-matrisi olarak bilinir (Beeby, 1969). Diyagramın (b) şıkkındaki şekilde noktaların birleşimiyle izah edilen, denklem (5.2.5) in ikinci terim olan toplamdaki kısım olup tekrarlanan her mevkiyi kendisiyle tekrar birleştirir. Diyagramda elektron 6 farklı yerden saçıldıktan sonra tekrar dördüncü yere geri döner ve sonra tekrar iki farklı yerden saçılır. Aynı denklemin üçüncü toplam terimi iki tekrarlamayı, dördüncü terim üç tane tekrarlamayı, vs., ihtiva eder. Üçüncü terime karşılık gelen (c) şıkkında elektronun dördüncü ve beşinci saçılmasında sonra ilk ve ikinci yerlerine tekrar dönüyor. Diyagramın (e) şıkkında ise yasaklı bir saçılma durumu olup elektron aynı yönde aynı şekilde iki yere saçılamaz. Buna benzer diyagramlara dayanan çalışmalar çoklu saçılmada yaygın olarak kullanılmıştır (Das ve Joshi, 1971). Herşeye rağmen, bu diyagramlar gerçek sistemlerde olabilecek tam saçılmaları yansıtmayabilir.

Yukarıdaki yaklaşımlara göre, şimdi üç-boyuttaki düzensiz bir alaşım üzerinde bu işlemlerin nasıl formülize edileceğini takdim edebiliriz. Aynı saçıcı merkezleri ihtiva eden üç boyuttaki bir düzensiz örgü üzerinde rastgele hareket edersek, aynı saçıcı ile karşılaşmamız yakın komşu atomların (Z) sayına bağlı olup $1/Z$ ile orantılıdır. Böyle bir durumda, saçılmada aynı yeri tekrar gören sürecin hesaplanması üzerinde yoğunlaşmamız gerekir. Eğer denklem (5.2.3) kullanılıp bu doğru bir şekilde hesaplanırsa ilave edilecek diğer düzeltmeler i, j, i, j şeklindeki saçılma silsilesinde olmalıdır. Bu saçılma süreci boyunca başka yerlerden gelen tekrarlamalı saçılmaları da tam olarak ilave edilmelidir. Düzeltme terimlerinin etkisi, gerçek sonuçlarla yaklaşımın sonuçları arasında bir fark doğuracağından, band kenarları gibi band yapılarının bazı özel yerlerinde önemli bir değişime sebep olur. Bu bakımdan, herhangi bir tekrarlamayı ihtiva etmeyen bir saçılma terimini düşünelim. Yani, denklem (5.2.5) ile temsil edilen bağlı yerlerin tamamen olmadığını farz edelim. Böyle bir silsileyi kabul etmek bizi yaklaşık ortalama t -matrisi (ATA) uygulamasına götürür ki bu da band uçlarında yanlış değerler verir. Onun için, yaklaşımı daha ileriye götürerek herhangi bir saçılmada j gibi bir yerin ilk yere dönmesinde iki kez karşılaştığını kabul edilir. j deki saçılmayla birlikte aynı yere dönerken saçılmalar arasından j den j ye uğramalar için bir düzeltme yapılması gerekir. Aynı yeri tekrar tekrar ziyaret etmesi durumunda bu yerin normalize edilmesini gerektirir. Bunun için bu yeri temsil eden t -fonksiyonu yerine etkili saçılma denilen τ fonksiyonu tanımlanıyor.

Orijin atom olarak, j konumundaki atomu alalım ve saçılmanın bu atomdan başlayıp ara saçılmaları da ihtiva eden bir saçılma silsilesinden sonra tekrar başladığı yere geldiğini ifade eden toplam saçılmayı I_1 ile gösterelim. O zaman

$$I_1 = I_0 + I_0 \tau I_0 + I_0 \tau I_0 \tau I_0 + \dots = \langle t + t I_0 t + t I_0 t I_0 t + \dots \rangle \quad (5.2.9)$$

veya kısaca uygun bir gösterimle

$$I_0 = I_1 (1 + \tau I_1)^{-1} \quad (5.2.10)$$

eşitlikleri tanımlanabilir. Burada I_0 bir yerde başlayıp tekrar aynı yere geldikten sonraki saçılmaların toplamı olup ara saçılmaları ihtiva etmemektedir. Burada denklem (5.2.1)

de t nin yerine τ tanımlanmış olup, j de olabilecek saçılmanın ilk veya son olup olmadığı zorunluluğunu ortadan kaldırıyor. İşte bu işlem, self-consistency olarak tanımlanan kendi içinde tutarlı bir sürece götürür (Abrikosov, vd., 1997). Çünkü artık τ herhangi özel bir yeri göstermiyor. Buna göre ilk yaklaşım olarak, saçılmada t_i nin ortaya çıktığı her yer τ ile yerdeğiştirmelidir. Ancak j gelişigüzel seçildiği için bu yerdeğiştirme her yer için yapılabilir. Bu durumda denklem (5.2.1) ile verilen toplam saçılma fonksiyonu,

$$T = \tau + \tau G \tau + \tau G \tau G + \dots = \tau (1 - \tau G)^{-1} \quad (5.2.11)$$

olarak yazılabilir. Burada serbest parçacık hareketine karşılık gelen $G_{ij} = G(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)$ olup elektronun bir mevkiden diğer mevkiye yayılmasını gösterir. Böylece, yukarıda verilen tanımları kullanarak, bir yerden başlayıp tüm ara saçılmalar dahil olmak üzere aynı yere gelmesi durumundaki saçılmaların toplamı

$$I_1 = \frac{1}{\Omega_{BZ}} \int G^2(\mathbf{k}) \frac{\tau}{1 - \tau G(\mathbf{k})} d\mathbf{k}, \quad (5.2.12)$$

bağıntısıyla verilir. Dolayısıyla bu denklemin kompleks kısmı ilgilendiğimiz fiziksel kavram olan durum yoğunluğu ile alakalıdır. Ayrıca, burada momentum boyutunda G nin tüm örgü vektörleri üzerine toplamı

$$G(\mathbf{k}) = \sum G(\mathbf{R}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}) \quad (5.2.13)$$

ve mükemmel bir örgü için ters Fourier transformu da

$$G(\mathbf{R}) = \frac{1}{v} \int G(\mathbf{k}) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}) d\mathbf{k} \quad (5.2.14)$$

olur. Burada v Brillouin zone hacmi olup, $\mathbf{k}$ değişkeni bu hacim üzerinde alınıyor. Sonuç olarak Denklem (5.2.12) yi kullanarak elektronik durum yoğunluğunu hesaplayabiliriz. Tabii elektronik durumu yoğunluğu bu denklemin kompleks kısmı ile

orantılı olduğu için kompleks kısmının belirlenmesi gerekir. Bu denklemdeki τ nun (veya I_0) ın kompleks bir fonksiyon olması nedeniyle denklemin kompleks kısmı kolayca elde edilir. Bununla ilgili detaylar aşağıdaki bölümde detaylı olarak açıklanacaktır.

5.3 Durum Yoğunluğunun Hesaplanması

Bu bölümde yukarıda verilen bağıntılar kullanılarak basit kübik (sc), yüzey merkezli kübik (fcc) ve cisim merkezli kübik (bcc) yapılara uygulanacaktır. Bu yapılara sahip sistemlerin farklı konsantrasyonlu iki ve üç bileşenli alaşımların durum yoğunlukları hesaplanacaktır. Bunu yapmak için, yukarıdaki denklemlerden I_0 , τ ve G_0 (k) fonksiyonların tanımlanması gerekir. Her saçıcı nokta veya t-matrisi kompleks olan τ ile temsil edildiğinden, başlangıç yeri rastgele seçilebilir. Bu fiziksel olarak şu anlama gelir; elektron tüm sistem içinde yayılırken yakın komşularını dikkate alarak son noktaya ulaşıyor.

Hesaplamalarda I_0 , I_1 ve τ nin belirlenmesi tamamen birbirine bağlıdır. Çünkü denklem (5.2.10) de görüldüğü gibi bunlar arasında bir ilişki vardır ve metodun kendi içinde tutarlı (self-consistent) bir işleme dayanması bakımından birinin belirlenmesi halinde diğerlerini de bunun cinsinden bazı iterasyonlar sonucunda verir. Denklem (5.2.4) den $A_c B_{1-c}$ şeklindeki bir alaşım için

$$\tau = \frac{ct_1}{1 - (t_1 - \langle t \rangle)I_0} + \frac{(1-c)t_2}{1 - (t_2 - \langle t \rangle)I_0} \quad (5.3.1)$$

olarak yazılabilir. Burada sıkı-bağ yaklaşımında dar s bandı ve $E \ll 0$ için $t_i = W / (E - E_i)$ alınabilir. W band genişliği ile ilgili parametre (overlap integralinden gelen), E_i potansiyelin (veya saçıcı merkezin) bağlı durum enerjisidir. $\langle t \rangle$ ortalama t-matrisi olup denklem (5.2.8) den,

$$\langle t \rangle = \frac{c}{E - E_A} + \frac{(1-c)}{E - E_B} \quad (5.3.2)$$

ve

$$t_i - \langle t \rangle = \frac{(1-c)(E_i - E_j)}{(E - E_i)(E - E_j)} \quad (5.3.3)$$

bağıntıları yazılır ve denklem (5.3.1) de kullanılırsa, bu denklem daha basit bir şekle indirgenir. Burada $W = 1.0$ olarak alındı. Ayrıca, $I_0 = I_{01} + iI_{02}$ reel ve kompleks kısımları cinsinden tanımlanıp denklem (5.3.1) bunlar kullanılırsa τ kompleks fonksiyonu enerji ve I_0 cinsinden bulunur. Sadece bu fonksiyonun kompleks kısmı durum yoğunluğu için kullanılır. Burada bc, fcc ve bcc band yapılarına Brillouin zon sınırları içinde tekabül eden $G(\mathbf{k})$ dağıtıklık bağıntısından kolayca bulunabilir. Basit kübik 6, fcc 12 ve bcc 8 yakın komşu atoma sahip olup sırasıyla

$$G(\mathbf{k}) \cong 2(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a), \quad (5.3.4)$$

$$G(\mathbf{k}) \cong 4(\cos k_x a \cos k_y a + \cos k_y a \cos k_z a + \cos k_x a \cos k_z a), \quad (5.3.5)$$

$$G(\mathbf{k}) \cong 8 \cos k_x a \cos k_y a \cos k_z a \quad (5.3.6)$$

olarak yazılabilir. Burada a örgü sabiti, $a = 1$ (a.u) olarak alınacaktır. Her örgü için $G(\mathbf{k})$ nin bu eşitlikleri denklem (5.2.12) kolayca kullanılabilir. Ancak hesaplamada karşımıza çıkan bir güçlük τ dan gelen terimlerin ve bağlı olduğu fonksiyonların bir çok iterasyondan sonra gerçek değerini bulması oldukça uzun bir bilgisayar zamanı alıyor. Ayrıca bazı enerji değerlerinde durum yoğunluğunun beklenmeyen negatif değerler vermesi nedeniyle, teoremin bu haliyle uygulanıp elde edilen bağıntıların çözümünün zor olduğunu gördük. Bu nedenle öncelikle daha basit mertebeden olan saçılmaları dikkate alıp denklem (5.2.12) nin çözümü tercih edildi. Kullandığımız yaklaşım sıkı-bağ yaklaşımına dayandığı için; t -matrisinin tersi sabit bir enerji değerinde $t^{-1} = E - E_i$ olarak alınır. O zaman, iki bileşenli alaşım için denklem (5.2.9)

$$\frac{1}{\tau^{-1} - I_0} = \frac{c_A}{E - E_A - I_0} + \frac{c_B}{E - E_B - I_0} \quad (5.3.7)$$

şeklinde yaklaşık ifadesi tanımlanır. Aynı yaklaşımlar kapsamında bulunan denklemler CPA da da kullanılıyor (Kumar,V. vd., 1982). Dolayısıyla (5.2.12)nin çözümü daha basit bir şekle indirgenir. Ayrıca, denklem (5.2.12) deki integrali delta fonksiyonu metodunu kullanarak iki parçaya bölüp, çözüm daha da basit bir şekle indirgenebilir. Bunun için denklem (5.2.12)

$$I_1 = \int dq \int dk G^2(\mathbf{k}) \frac{1}{\tau^{-1} - G(\mathbf{k})} \delta(q - G(\mathbf{k})) \quad (5.3.8)$$

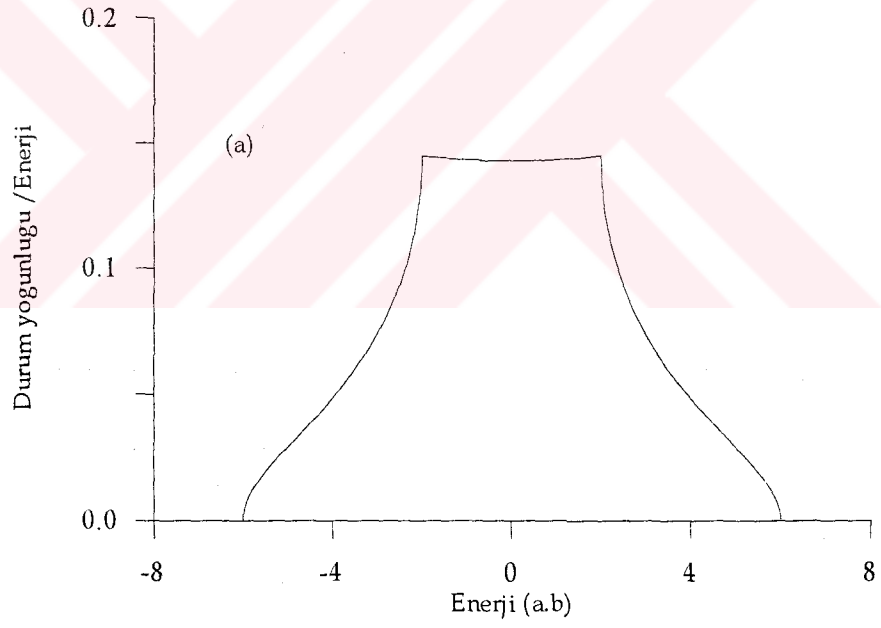
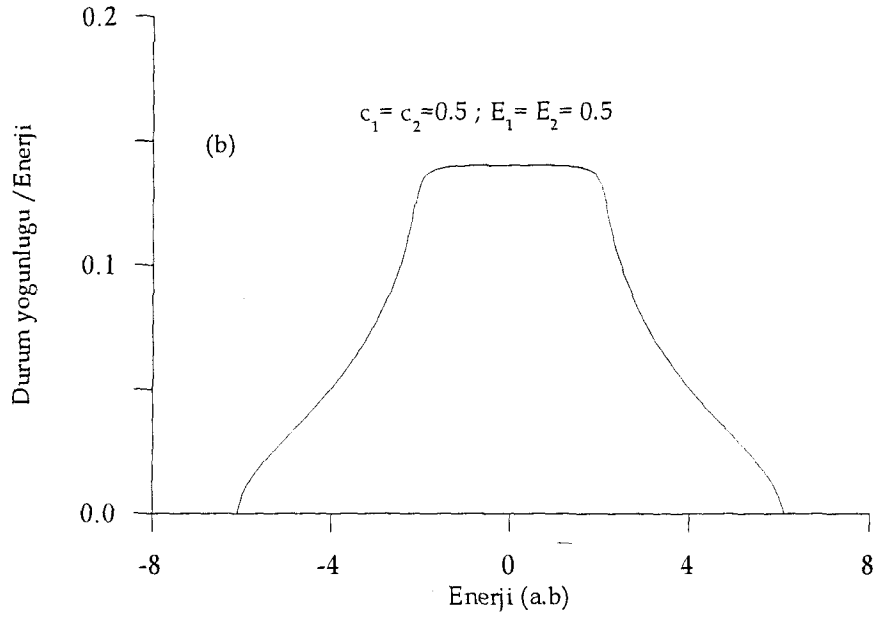
yazılabilir. Bu denklem

$$I_1 = \frac{1}{\Omega} \int q^2 dq \frac{1}{\tau^{-1} - q} g(q), \quad (5.3.9)$$

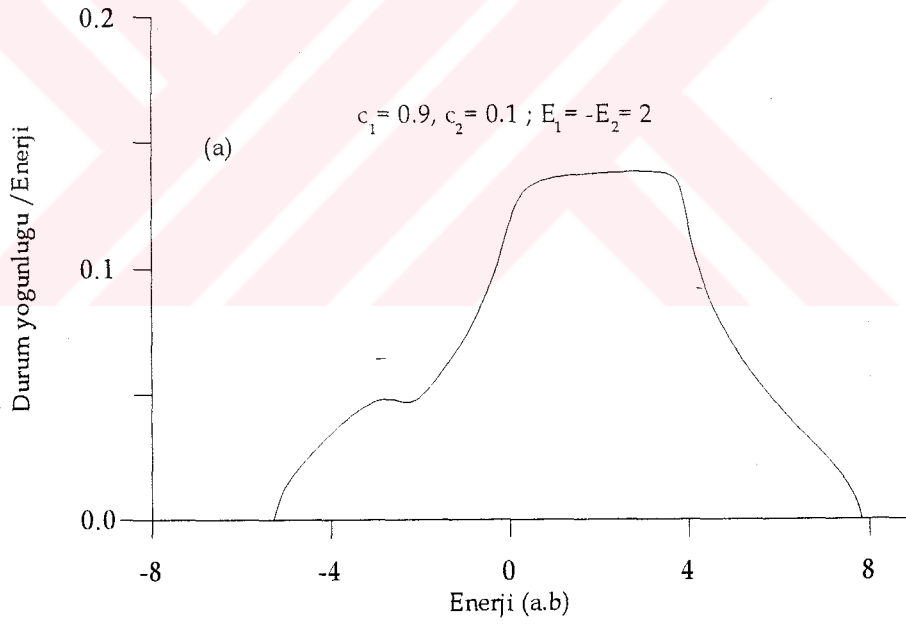
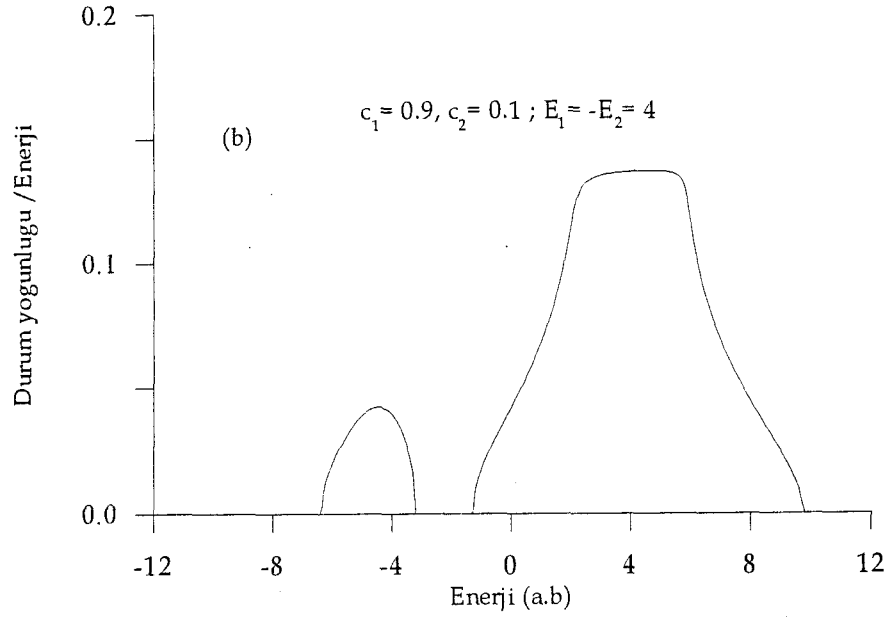
ve

$$g(q) = \int_{BZ} dk \delta(q - G(\mathbf{k})). \quad (5.3.10)$$

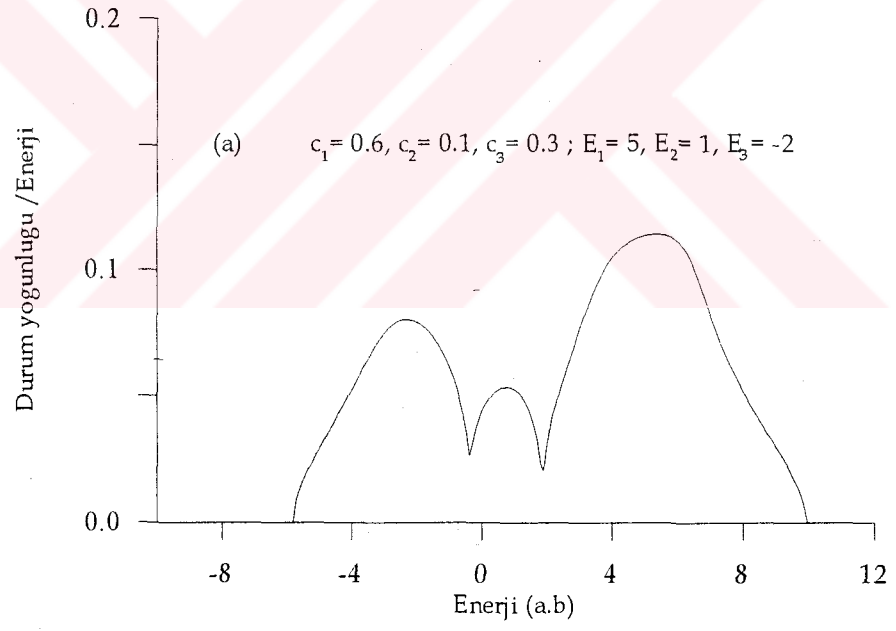
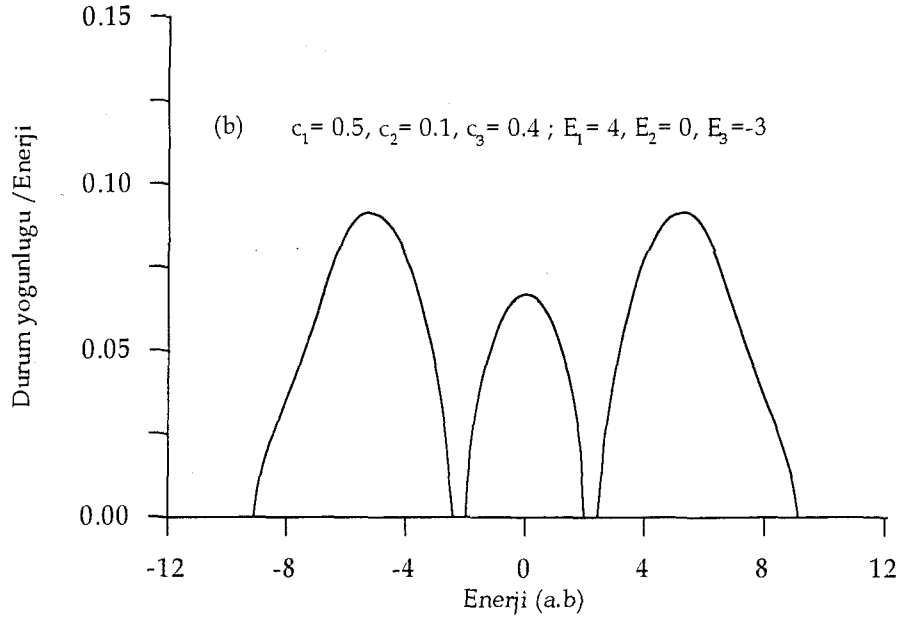
olarak çok iterasyon gerektirmeyen bir şekle indirgenir. Denklem (5.3.10) sıkı-bağ yaklaşımında mükemmel bir örgünün durum yoğunluğunu verir. Öncelikle bu denklem hesaplanarak bulunan değerler (5.3.9) da yerine yazılır ve farklı konsantrasyonlar için durum yoğunlukları hesaplanır. Her örgü yapısında farklı konsantrasyon ve bağlı enerji değerleri için durum yoğunluklarının değişimleri hesaplandı ve bulunan değerler şekil 5.2-5.10 de açık bir şekilde grafiklerle izah edildi.



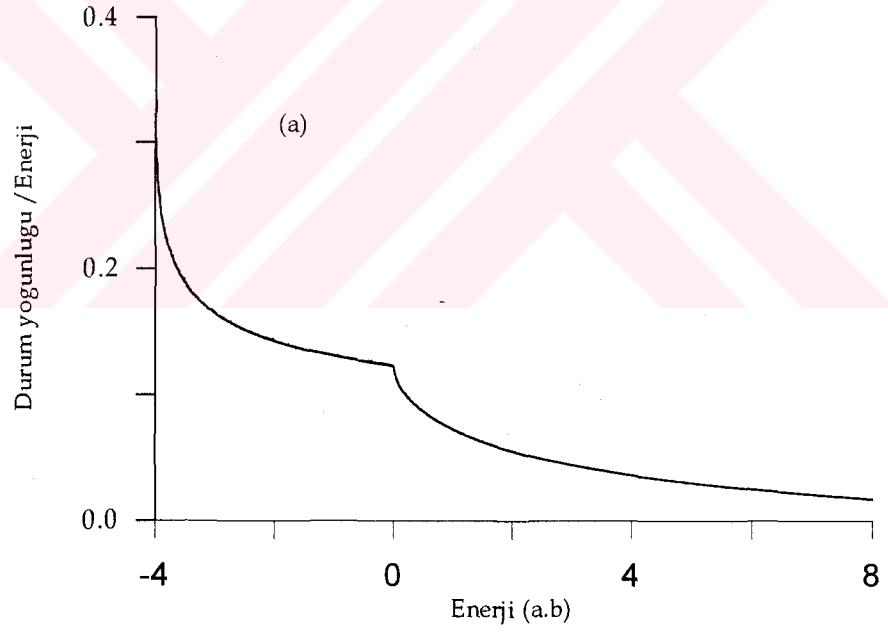
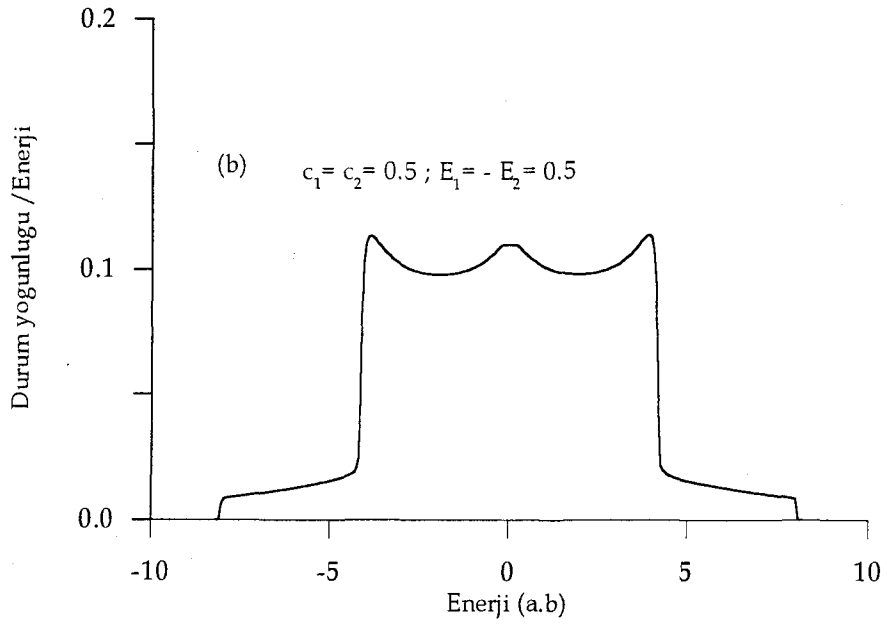
Şekil 5.2: (a) Basit kübik örgünün durum yoğunluğu, (b) farklı konsantrasyonlu iki bileşenli alaşım durum yoğunluğu.



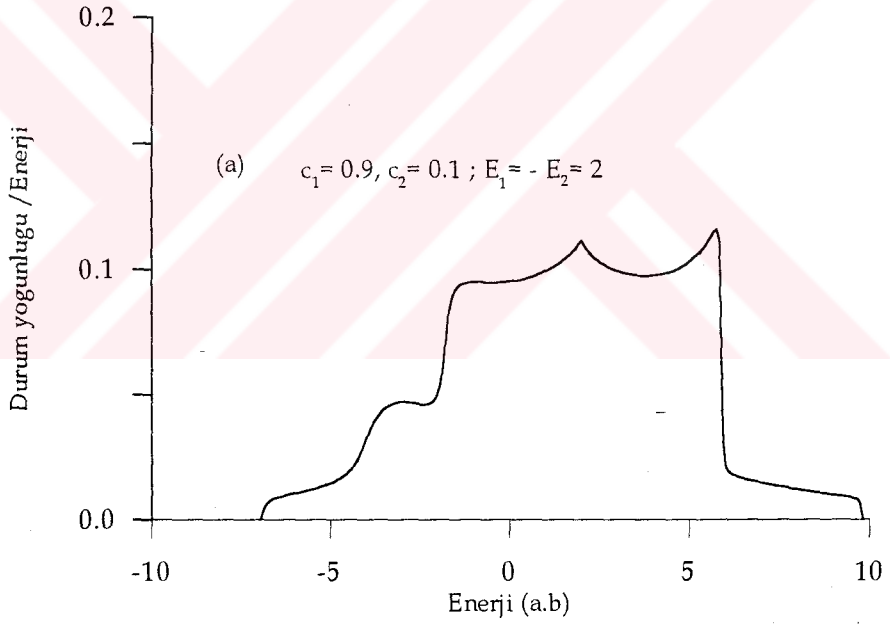
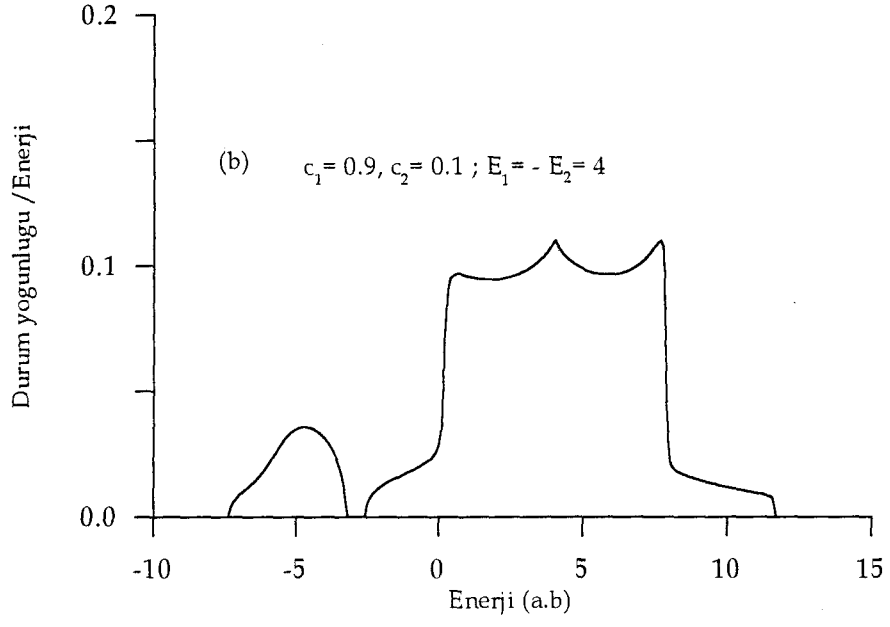
Şekil 5.3: Basit kübik örgü üzerinde farklı konsantrasyonlu iki bileşenli düzensiz alaşımın durum yoğunlukları.



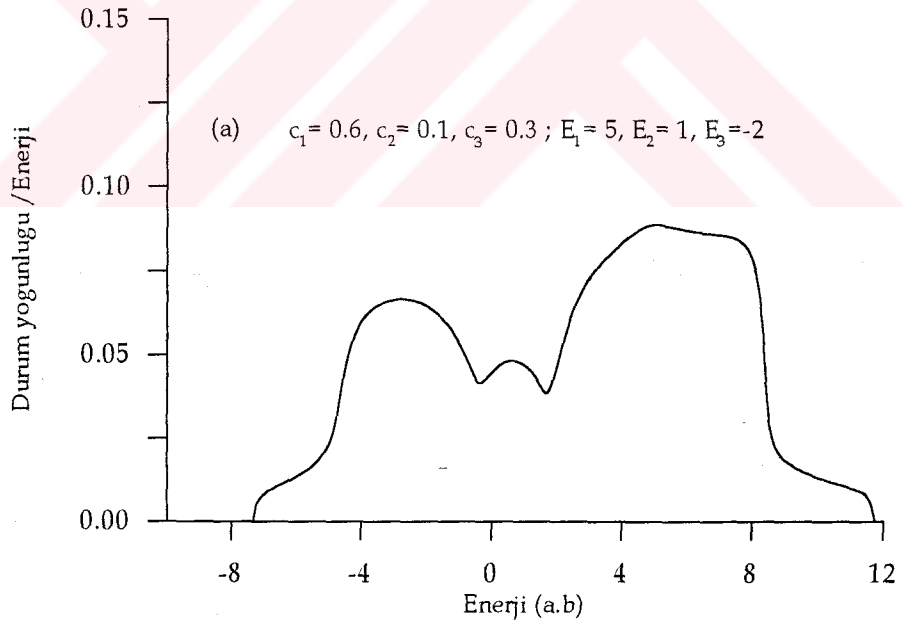
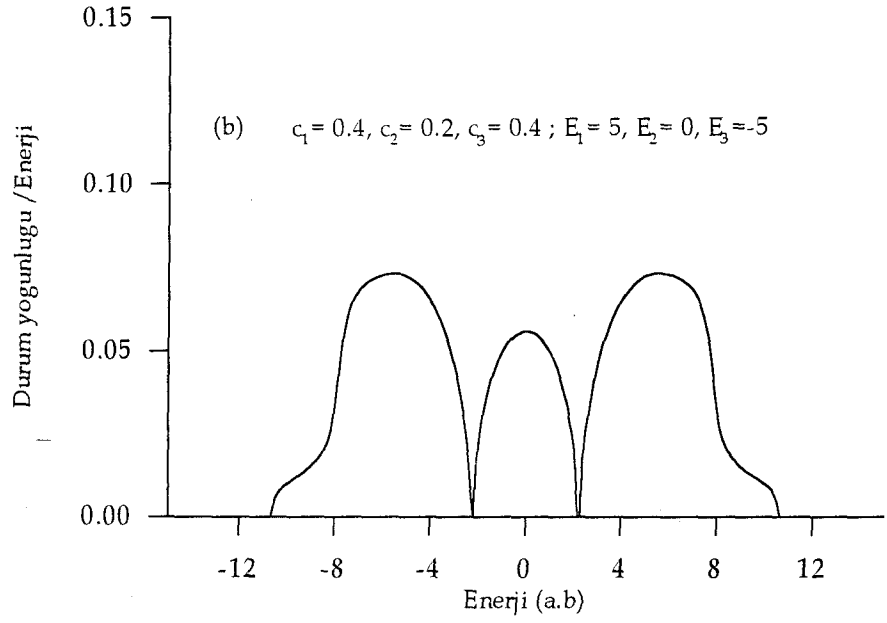
Şekil 5.4 : Basit kübik örgü üzerinde farklı konsantrasyonlu üç bileşenli düzensiz alaşımın durum yoğunlukları.



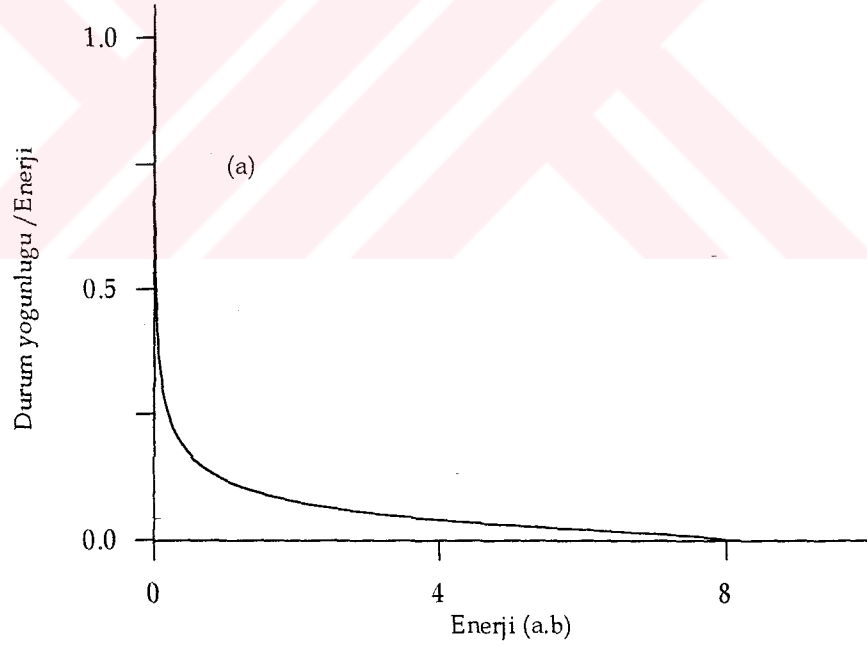
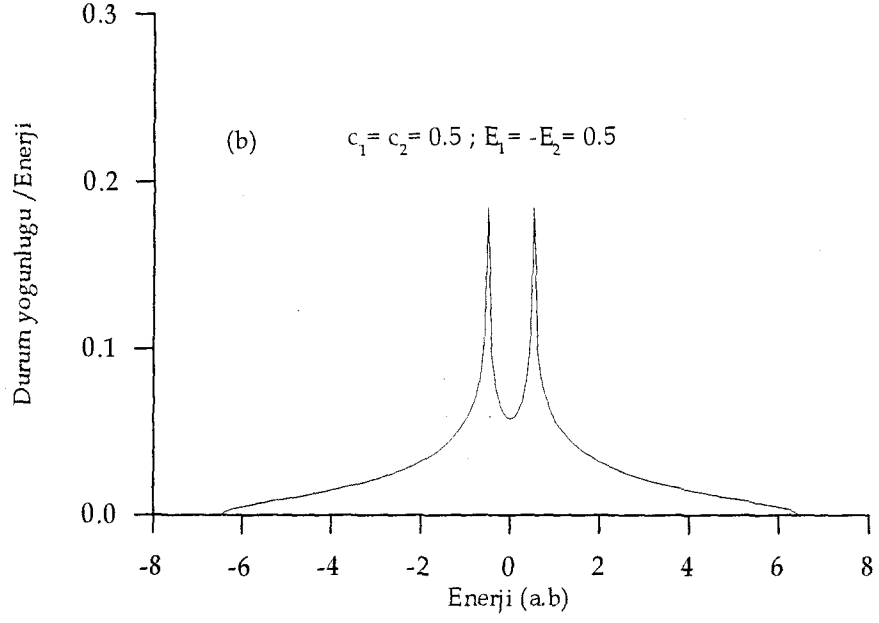
Şekil 5.5 : (a) fcc örgünün durum yoğunluğu, (b) fcc örgüsünde farklı konsantrasyonlu iki bileşenli alaşım durum yoğunluğu.



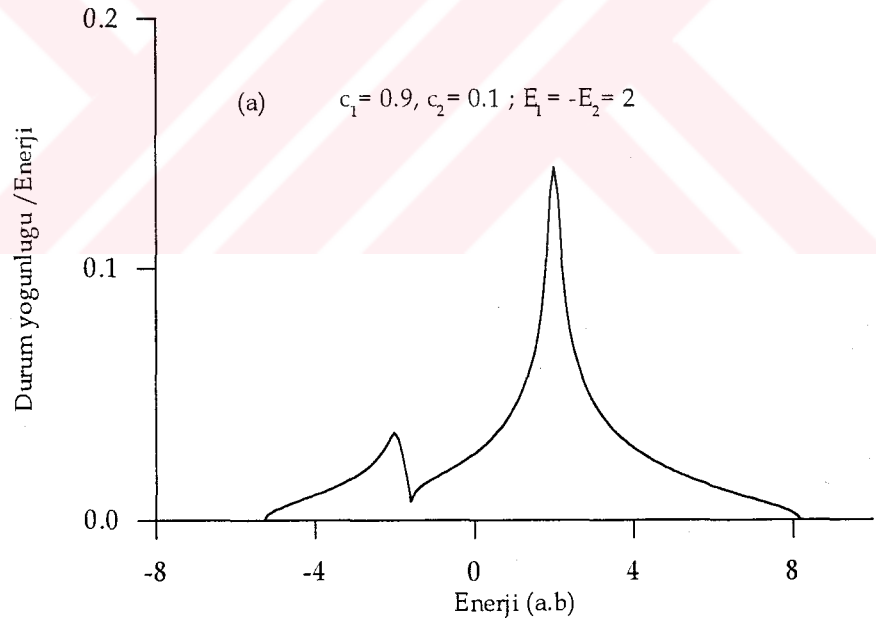
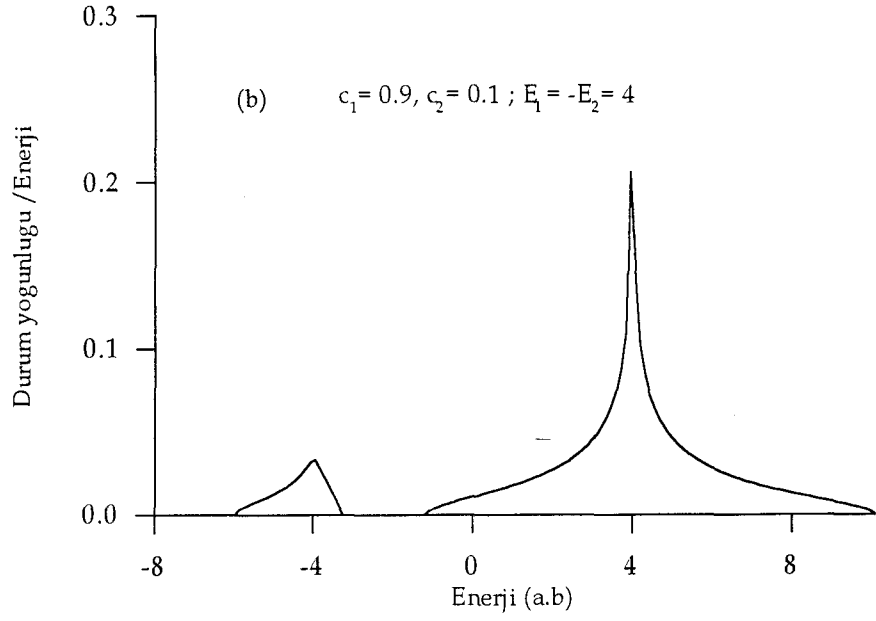
Şekil 5.6 : FCC örgüde farklı konsantrasyonlu iki bileşenli düzensiz alaşımın durum yoğunlukları.



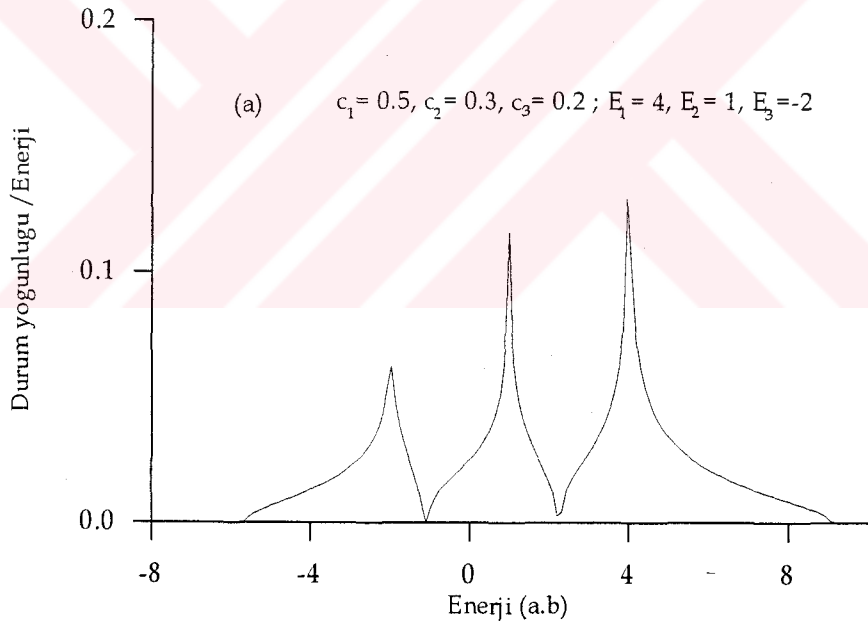
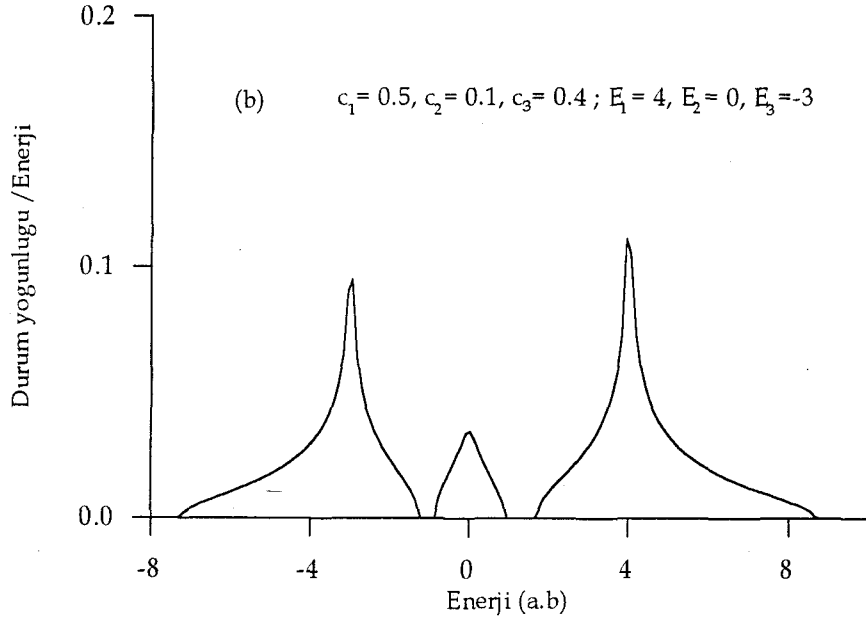
Şekil 5.7 : FCC örgüde farklı konsantrasyonlu üç bileşenli düzensiz alaşımın durum yoğunlukları.



Şekil 5.8: (a) BCC örgünün durum yoğunluğu, (b) BCC örgüsünde farklı konsantrasyonlu iki bileşenli alaşım durum yoğunluğu.



Şekil 5.9 : BCC örgüde farklı konsantrasyonlu iki bileşenli düzensiz alaşımın durum yoğunlukları.



Şekil 5.10 : BCC örgüde farklı konsantrasyonlu üç bileşenli düzensiz alaşımın durum yoğunlukları.

6. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu tez çalışmasında, kendi teoriksel çalışma programımızı yapmadan önce düzensiz sistemler hakkında genel bir literatör taraması yaparak; bu sistemlerin tanımı, sınıflandırılması ve bunlar üzerinde yapılan önemli teorik çalışmaları araştırıp genel bir ön bilgi hazırlandı. Bu tarama sonucunda, düzensiz sistemler için henüz güçlü ve genel bir teoremin geliştirilmediği; ancak her şeye rağmen bir çok alternatif metodun veya tekniğin önerilip bu sistemlere farklı yaklaşımlar altında uygulandığı kanısına varıldı. Bu izlenimden yola çıkarak, geliştirilen bu alternatif metodlar içerisinde birisi olan Beeby ve Beeby-Hayes metodlarını ve genel teorisini bu çalışmada tanıtip düzensiz sistemlere uygulayarak durum yoğunluklarını hesaplamak çalışmamızın ana amacını teşkil etti. Bunu gerçekleştirmek için iki versiyona ayrılan Beeby teorisini uygulamadan önce, düzensiz sistemleri yapısal olarak düzensiz ve mevkisel düzensiz alaşımlar olarak iki grup altında ele alıp farklı iki metodla inceledik ve elektronik durum yoğunluklarını hesapladık.

Programımızın ilk aşamasında, yapısal olarak düzensiz sistemler için Beeby ve Hayes tarafından geliştirilen BH metodunu sıkı bağ yaklaşımı içinde öncelikle iki boyuttaki bir zar örgüsüne uyguladık ve bu örgünün elektronik durum yoğunluğunu hesapladık. Bu örgü 3-bağlı ve 6-bağlı olmak üzere iki farklı yapı ihtiva ettiği için, bu sistemin iki özelliğini araştırdık: *Birincisi*, kullandığımız metodun güvenilirliğini ispatlamak amacıyla; bu örgü için hesapladığımız durum yoğunluğunun doğruluk derecesini daha önce Horiguchi ve Chen (Horiguchi ve Chen, 1972) tarafından farklı sayısal bir metodla aynı örgü için hesaplanan sonuçlarıyla karşılaştırdık. Şekil 4.2 (a) kullandığımız metodun uygulanması sonucu zar örgüsü için hesapladığımız durum yoğunluğunu gösterirken, (b) şikkındaki şekil Horiguchi ve Chen tarafından sayısal olarak tam bir hesaplamayla bulunan sonucu göstermektedir. Şekillerde görüldüğü gibi her iki grafiğin de uyumlu ve aynı olması bakımından kullandığımız metodun veya tekniğin doğru olduğunun bir ispatını göstermektedir. Araştırdığımız *ikinci özellik ise*, 3-bağlı ve 6-bağlı yapıların konsantrasyonlarının değişimlerine göre durum yoğunluğunun nasıl bir değişim gösterdiğini incelemek. Bunun için bağ sayıları ile alakalı konsantrasyonun fonksiyonu olarak tamamen 3-bağlı bir yapıdan (bal peteği) 6-bağlı (üçgen yapı) bir yapıya geçişi halinde durum yoğunluklarının nasıl bir değişim gösterdiği hesaplandı. Bu geçiş için alınan konsantrasyon değerleri 3-bağlı ve 6-bağlı

yapılar için sırasıyla : **a)** $\eta_3 = 0$, $\eta_6 = 1.0$; **b)** $\eta_3 = 0.1$, $\eta_6 = 0.9$; **c)** $\eta_3 = 0.2$, $\eta_6 = 0.8$; **d)** $\eta_3 = 0.5$, $\eta_6 = 0.5$; **e)** $\eta_3 = 0.8$, $\eta_6 = 0.2$; **f)** $\eta_3 = 0.9$, $\eta_6 = 0.1$, **g)** $\eta_3 = 1.0$, $\eta_6 = 0.0$.

Yukarıda alınan değerler pal peteğinden üçgen yapıya geçişi kademe kademe gösteren değerler olduğundan, her iki yapı da mükemmellik limitlerini gösterirler. Bu iki limit ($\eta_3 = 0$, $\eta_6 = 1.0$ ----- $\rightarrow$ üçgen yapı ve $\eta_3 = 1.0$, $\eta_6 = 0.0$ ----- $\rightarrow$ bal peteği) değerlerine karşılık gelen durum yoğunlukları daha önce çok iyi bilindiği ve bir çok çalışmada sunulduğu için üzerinde durmayacağız. Ancak ara değerler ile ilgili herhangi bir çalışma araştırdığımız kadarıyla olmadığı için önemli bir hesaplama niteliğindedir. Çünkü benzer seviyedeki çalışmaları literatörde görmek mümkündür. Örneğin, yakın zamanda Grimm vd. (Grimm, vd., 1998) tarafından hem üçgen hemde bal peteği örgüsü üzerindeki bir çalışmada topolojik düzensizlerde enerji seviyesinin sıkı bağ yaklaşımında nasıl değiştiği araştırılmıştır. Bu bakımdan ara değerler kullanılarak hesaplanan durum yoğunlukları şekil (4.3-4.8) de açık bir şekilde görülmektedir. Şekillerde görüldüğü gibi tek tip mükemmel örgüye tekabül eden durum yoğunlukları yerini; artık her iki yapının durum yoğunluklarını ihtiva eden karma bir örgünün durum yoğunluklarına bırakmaktadır. Bununla birlikte, sistem bal peteğinden üçgen yapıya doğru giderken band yapısının genişlemesi ve simetrik olmayan daha yayvan bir şekil göstermesi beklenmektedir. Çünkü 6-bağlı örgüde yakın komşu atom sayısı daha fazla olduğu için dağıtkanlık bağıntısındaki band parametresi olan W büyür ve temel enerji seviyesi olarak alınan bir enerji seviyesi (E_0) etrafında enerji bandı oluşur. Bu arguman bazı şekillerde görünürken, bazılarında görünmemektedir. Teorik olarak beklenen değerler tam olarak şekillerde görülmemesinin sebebi tamamen nümerik ve programlama hatasından kaynaklanmıştır. Ayrıca, durum yoğunluklarının daha yumuşak (piksiz) elde edilmesi için büyük boyuttaki matrislerin çözümü ile edilebilirdi, ancak yeteri kadar hızlı ve yüksek kapasiteli bilgisayarın olmayışı nedeniyle beklenen bu sonuçları elde edemedik.

Programımızın ikinci aşamasında ise, mevkisel düzensiz alaşımların elektronik durum yoğunluklarını hesapladık. Bunları incelemek için Beeby tarafından geliştirilen kendi içinde tutarlı bir teknik, yine sıkı bağ yaklaşımı kullanılarak; öncelikle durum yoğunlukları iyi bilinen basit kübik, yüzey merkezli kübik ve cisim merkezli kübik örgülere uyguladık ve elektronik durum yoğunluklarını hesapladık. Şekil 5.2 (a) basit kübik, şekil 5.5 (a) yüzey merkezli kübik ve şekil 5.8 (a) cisim merkezli kübik örgülerin

durum yoğunlukları olup teorik olarak beklenen sonuçlarla tamamen uyum içerisinde. Fakat buradaki hesaplamada asıl amacımız, bu düzenli örgülerin durum yoğunluklarını hesaplamadan ziyade, bu örgüler düzensiz alaşımlar ihtiva etmesi durumunda durum yoğunlukları nasıl değişir sorusunu araştırmaktır. Bunun için konsantrasyonları bakımında farklı iki bileşenli(A_c , B_{1-c}) ve üç bileşenli düzensiz alaşımın (ternary alloy) rastgele sistem içinde örgüler üzerinde dağılması durumunda durum yoğunluklarının nasıl değiştiğini araştırdık. Bu hesaplamada, öncelikle ikili bir alaşım için band genişliğinin (W) bağlı enerji farkına (ΔE) oranına bağlı olarak durum yoğunluğunun şekillendiğini gördük. Teorik olarak beklenen bu olayda ($W/\Delta E$) *küçük olduğu zaman*, her bir band tanımlanan bağlı enerji üzerinde ve tanımlanan konsantrasyona eşit oranda olmak üzere ayrık iki band olarak ayrılıp şekillenir. Öte yandan ($W/\Delta E$) *büyük olduğu zaman*, tek bir bandın görünmesi gerekir. Örneğin şekil 5.2 (b) de $W=12$ ve $\Delta E (0.5-(-0.5))=1.0$ ve $W/\Delta E=12$ değeri büyük bir değer olduğu için, tek bir band şeklinde ortaya çıktığı görülüyor. Benzer olarak şekil 5.5 (b) aynı oran geçerli olup tek bir band olduğu bu şekilde de görülüyor. Bu oranın küçük olduğu değerlere karşılık gelen ise şekiller 5.3 (b), şekil 5.6 (b) ve şekil 5.9 (b) olup; bu şekiller için oran yaklaşık olarak $W/\Delta E = 1.5$ dir ve durum yoğunluğunun yapısı iki ayrık band olarak ortaya çıktığı görülüyor. Bu bandların değerleri verilen bağlı enerji değerleri üzerindeki konsantrasyon oranlarına eşit olup, toplamlarında 1'e eşittir. Bandların bu şekilde ayrılması veya birleşmesi fiziksel olarak bir anlamının olması gerekir. Bu anlam ise şu şekilde yorumlanabilir: kullanılan potansiyel yaklaşımı nedeniyle (muffin-tin) iki atom (veya potansiyel) birbirinden yeteri kadar ayrılırsa her potansiyel bağlı durumlarını oluşturur. Ancak bunlar birbirine yaklaştırılırsa seviyeler birbirine girer ve tek band meydana gelir. Benzer hesaplamalar farklı enerji ve konsantrasyon değerleri için üç bileşenli alaşımlar üzerinde yapıldı. Aynı şekilde, durum yoğunlukları verilen sayısal değerlere göre tek band, iki band ve üç band şeklinde kendini gösterdi

7. KAYNAKLAR

Abraham, E. A., Anderson, P. W., Licciardello, D. C. ve Ramakrishnan, T.V., 1979, Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two dimensions, **Phys. Rev. Lett.**, **42**, 673.

Abrikosov, I. A., Simak, S. I. ve Johansson, B., 1997, Locally self-consistent function approach to the electronic structure problem, **Phys. Rev.**, **B**, **56**, 129.

Alexander Moroz. ve Adriaan Tip., 1997, On shell T-matrices in multiple scattering, **Phys. Lett.**, **A**, **235**, 195.

Andereck, B. S., 1984, Anderson localization in two dimensions for small disorder, **J. Phys.**, **C**, **17**, 97.

Anderson, P. W., 1958, Absence of Diffusion in Certain Random Lattices, **Phys. Rev.**, **109**, 1492.

Ando, T., Fowler, A. B. ve Stern, F., 1982, Electronic Properties of two dimensional systems, **Rev. Mod. Phys.**, **54**, 437.

Aoki, H., 1985, Two dimensional localization of electron on a lattice in magnetic fields, **J. Phys.**, **C**, **18**, 67.

Bassani, F. ve Pastori Parravicini, G., 1975, Electronic States and Optical Transitions in Solids (ed. Ballinger, R.A.), Pergamon Press, Oxford & New York & Toronto.

Beeby, J. L. ve Edwards, S. F., 1963, The electronic structure of liquid insulators, **Proc. Roy. Soc.**, **A**, **274**, 395.

Beeby, J. L., 1964, Electronic structure of Alloys, **Proc. Roy. Soc.**, **A**, **279**, 82.

Beeby, J. L., 1964, Electronic structure of Alloys, **Phys. Rev.**, **A135**, 130.

Beeby, J. L., 1967, The density of electrons in a perfect or imperfect lattice, **Proc. Roy. Soc., A**, **302**, 113.

Beeby, J. L. ve Hayes, T. M., 1985, New method to calculate the electronic properties of disordered materials, **Phys. Rev., B**, **32**, 6464.

Beeby, J. L. ve Hayes, T. M., 1993, Electronic density of states of a disordered tetrahedrally bonded semiconductor , **Phys. Rev., B**, **48**, 17732.

Beeby, J. L. ve Hayes, T. M., 1994, Calculation of the density of states for a disordered system, **Phys. Rev., B**, **49**, 14128.

Carlsson, A. E. ve Fedders, P.A., 1986, Maximum-entropy method for electronic properties of alloys, **Phys. Rev., B**, **34**, 3567.

Chen, C. W. ve Robertson, J., 1998, Nature of Disorder and Localization in Amorphous Carbon, **J. Non-Cryst. Solid.**, **227**, 602.

Coulson, C.A. ve Taylor, R., 1952, Studies in Graphite and Related Compounds I: Electronic Band structure in Graphite, **Proc. Roy. Soc., LXV**, 815.

Das, M. P. ve Joshi, S. K., 1971, Electronic States in a Disordered Binary Alloys, **Phys. Rev., B**, **4**, 4363.

Dean, P., 1964, **Proc. Roy. Soc.**, **84**, 724.

Dean, P., 1972, The Vibrational Properties of Disordered Systems: Numerical Studies , **Rev. Mod. Phys.**, **44**, 127.

Edwards, S. F., 1958, A new Method for the Evaluation of Electric Conductivity in metals, **Phil. Mag.**, **3**, 1020.

Edwards, S. F., 1961, The electronic structure of liquid metals , **Proc. Roy. Soc., A**, **267**, 518.

Ehrenreich, H. Ve Schwartz, L., 1976, Solid State Physics (ed. Ehrenreich, H., Schwartz, L. Ve Turnbull, D.), **31**, Academic Press, New York & London.

Elliott, R. J., Krumhansl, J. A. ve Leath, P. L., 1974, The theory and properties of randomly disordered crystals and related physical systems, **Rev. Mod. Phys.**, **46**, 465.

Friedel, J., 1954, **Adv. Phys.**, **3**, 446.

Friedman, B., 1956, Principles and Techniques of Applied Mathematics., Benjamin.

Gonis, A., 1992, Green Function For Ordered and Disordered Systems, North-Holland Elsevier Sci. Publishers, Amsterdam.

Grimm, U., Römer, R. A. ve Schliecker, G., 1998, Electronic States Topologically Disordered Systems, **Annalen der Physik**, **1**.

Györfy, B. L.ve Stocks, G. M., 1979, Electronic in Disordered metals and Metallic Surfaces, Plenum Press, **NATO ASI Series Physics B**, **42**, 89, New York

Haerle, R., Haydock, R. Ve Ronald, L. T., 1995, Estimating average densities of states for disordered systems, **Computer Physics Communications**, **90**, 81.

Harrison, W. A., 1966, Pseudopotentials in the Theory of Metals., Benjamin.

Haydock, R., Volker, H. Ve Kelly., 1972, Electronic structure based on the local atomic environment for tight-binding bands, **J. Phys.**, **C**, **5**, 2845.

Horiguchi, T., 1972, Lattice Green's Functions for the Triangular and Honeycomb Lattices, **J. Math. Phys.**, **13**, 141.

Horiguchi, T. ve Chen, C.C., 1972, Lattice Green's Functions for the Diced Lattice, **J. Math. Phys.**, **15**, 659.

Inglesfield, J. E., 1984, Electronic Properties of Surfaces (Compiled by Prutton, M.), 62, Adam Hilger Ltd., Bristol.

Jones, R., 1969, The density of states of a one dimensional liquid, **J. Phys.**, **C, 2**, 1683.

Kamimura, H. ve Aoki, H., 1989, The Physics of Interacting electrons in Disordered Systems, Clarendon Press, Oxford.

Khor, K. E. ve Smith, P. V., 1971, Localization of electron states in two dimensional disordered potential arrays, **J. Phys.**, **C, 4**, 2029.

Kim, J. K. ve Lynch, D. V., 1989, Electronic structure of NiAl alloys studied by spectroscopic ellipsometry, **Phys. Rev.**, **B, 39**, 9882.

Kirkpatrick, S., Velicky, B. ve Ehrenreich, H., 1970, Paramagnetic NiCu Alloys: Electronic Density of States in the Coherent-Potential Approximation, **Phys. Rev.**, **B, 1**, 3250.

Klitzing, V. K., Dorda, G. ve Pepper, M., 1980, New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance, **Phys. Rev. Lett.**, **45**, 494.

Knife, S. ve Von Niessen, W., 1999, The electronic structure of amorphous silicon carbon alloys, **J. Non-Cryst. Solid.**, **255**, 242.

Kumar, V., Mookerjee, A. ve Srivastava, V. K., 1982, Electronic structure of disordered alloys I: Self-Consistent cluster CPA incorporating off-diagonal disorder and short range order, **J. Phys. C: Solid State Phys.**, **15**, 1939.

Lax, M., 1951, Multiple Scattering of Waves, **Rev. Mod. Phys.**, **23**, 287.

Leiro, J. A., Kokko, K. ve Laihia, R., 2001, Electronic Structure of AuMg and AuZn, **J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena**, **113**, 167.

Lifshits, M., Gredeskul, S. A., Pastur, L.A. ve Yankovsky, E., 1988, Introduction To the Theory of Disordered Systems, John Wiley & Sons, New York,

Lyuksyutov, I., Naumovets, A. G. Ve Pokrovsky, V., 1992, Two Dimensional Crystals, Academic press , Inc., San Diego.

Morgan, G. J., 1969, Electron transport in liquid metals I. The Boltzman equation, **J. Phys.**, **C**, **17**, 1454.

Morita, T. ve Horiguchi, T., 1972, Analytic Properties of the lattice Green function , **J. Phys.**, **A**, **5**, 67.

Mott, N. F., 1993, Conduction in Non-crystalline Materials, Clarendon Press , Oxford.

Naumis Gerardo, G. ve Aragon, J. L., 1998, The influence of phason disordered on the electronic spectrum and eigenstates of Fibonnaci lattice, **Phys. Lett.**, **A**, **244**, 133.

Newson, D. J., Pepper, M. ve Thornton, T. J., 1987, Quantum interference and dimensionality in semiconductor structure, **Phil. Mag.**, **B**, **56**, 775.

Papaconstantopoulos, D., Lach-hab, A. M., Mehl, M. J., 2001, Tight-binding Hamiltonians for realistic electronic structure calculations, **Physica B**, **296**, 129.

Rusek, M. ve Orlowski, A., 1995, Analytical approach to localization of electromagnetic waves two dimensional random media , **Phys. Rev.**, **E**, **51**, 2763.

Saha, T., Dasgupta, I. Ve Mookerjee, A., 1996, Electronic structure of random binary alloys, **J. Physics: Condens. Matter.**, **8**, 1979.

Schreiber, M. ve Ottemeier, M., 1992, Localization of electronic states in 2D disordered systems, **J. Physics: Condens. Matter.**, **8**, 1959.

Schwartz, L., Brouers, F., Vedyayev, A. V. ve Ehrenreich, E., 1971, Comparison of the Average-t-Matrix and Coherent Potential Approximations in Substitutional Alloys, **Physica B**, **4**, 3383.

Shawyer, R. E., ve Dean, P., 1972, Atomic vibrations in orientationally disordered systems I.A Two dimensional model, **J. Phys.**, **C**, **5**, 1017.

Silva, A. F ve Fabbri, M., 1984, A cluster model for two dimensional disordered systems, **J. Phys.**, **C**, **17**, L5.

Soukoulis, C. M. ve Economou, E. N., 1999, Electronic Localization in disordered systems, **Waves Random Media.**, **9**, 255.

Soven, P., 1967, Coherent Potential Models of Substitutional Disordered Alloys, **Phys. Rev.**, **156**, 809.

Sringo, F., 1996, On the conductivity of topologically disordered systems, **J. Physics: Condens. Matter.**, **8**, 1169.

Stikova, H., Smrcka, L. ve Isihara, A., 1989, Landau levels in confined two-dimensional electron gas: calculation by the finite-element method, **Solid State Physics.**, **C**, **42**, 7965.

Stratford, K., 1993, Electronic Transport in One- and Quasi-one-Dimensional Quantum Wires (Ph.D thesis), University of Liecester, Dept. of Phys., Liecester.

Tan Yong., 1994, Localization and quantum Hall effect in a two dimensional periodic potential, **J. Physics: Condens. Matter.**, **8**, 1169.

Traiber, A. J. S., Turchi, P. E. A., Waterstrat, R. M. ve Allen, S. M., 1996, Electronic structure and phase equilibria in ternary substitutional alloys, **J. Physics: Condens. Matter.**, **8**, 6357.

Van Albada, M. P., Lagendijk, A. ve van der Mark, M. B., 1990, Analogies in Optics and Micro Electronic (ed. Van Haeringen, W. ve Lenstra, D.), 85., Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.

Vekilov, Y. K., Isaev, E. I. Ve Gordeev, I. A., 2000, Electronic Spectrum of the two dimensional Fibonacci lattice, **Material Science and Engineering**, 553.

Wang, Y. C., Poduska, K. M., Roald Hoffmann., DiSalvo, F. J., 2001, Structure and physical properties of CeSbTe, **Journal of Alloys and Compounds.**, **314**, 132.

Weaire, D. ve Thorpe, M. F., 1971, Electronic Properties of an Amorphous Solid I.A Simple Tight-Binding Theory, **Phys. Rev.**, **B**, **4**, 2508.

Wigner, E. ve Seitz, F., 1933, On the Constitution of Metallic Sodium, **Phys. Rev.**, **43**, 804.

Yildiz, A.K. ve Beeby, J.L., 1996, A new technique to calculate the electronic structure of two-dimensional quasicrystals, **Phil. Mag.**, **B**, **74**, 387.

Yildiz, A.K. ve Beeby, J.L., 1997, A new technique to calculate the electronic structure of two-dimensional disordered systems, **J. Phys. : Condens. Matter.**, **9**, 981.

Yildiz, A.K. ve Beeby, J.L., 1999, An investigation of the momentum dependence of the electronic spectrum for a disordered system, **Phil. Mag. Lett.**, **79**, 129.

Yıldız, A.K. ve Beeby, J.L., 1999, Densities of electronic states for substitutionally disordered alloys, **J. Phys. : Cond. Matter.**, **11**, 5119.

Yıldız, A.K., 1995, A New Technique to Calculate the Electronic Structure of Disordered and Quasicrystal Systems in Two-Dimensional, University of Leicester, **Doktora Tezi**, Leicester (England).

Ziman, J. M., 1979, Models of Disorder, Cambridge University Press, Cambridge.

Ziman, J. M., 1979, Principles of the Theory of Solids, Cambridge University Press, Cambridge., London & New york

