

**ANKARA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

**GRAFEN VE GRAFEN BENZERİ İKİ BOYUTLU DIRAC
MALZEMELERİNDE ELEKTRONLARIN ELEKTROSTATİK VE
MANYETİK HAPSİ**

İsmail Burak ATEŞ

FİZİK ANABİLİM DALI

**ANKARA
2023**

Her hakkı saklıdır

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

GRAFEN VE GRAFEN BENZERİ İKİ BOYUTLU DIRAC MALZEMELERİNDE ELEKTRONLARIN ELEKTROSTATİK VE MANYETİK HAPSI

İsmail Burak ATEŞ

Ankara Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Şengül KURU

Bu tezde öncelikle grafenin bazı genel özellikleri anlatılmış ve sıkı bağ modeli kullanılarak elektronik bant yapısı elde edilmiştir. Fermi düzeyine yakın enerji bantları, Dirac noktalarında, düşük enerjilerde spektrum için Dirac – Weyl denklemine yol açan doğrusal forma sahiptir. Daha sonra süpersimetrik kuantum mekaniği yöntemleri incelenmiştir: çarpanlara ayırma, Darboux dönüşümü, şekil değişmezliği ve bağlaştırm. Pöschl – Teller potansiyeli, şekil değişmezliğe bir örnek olarak verilmiştir. Son olarak Dirac fermiyonlarının grafen içerisindeki elektrik ve manyetik alanların etkisi altındaki hareketlerini açıklayan Dirac – Weyl denkleminin saf manyetik alan, saf elektrik alan ve orantılı elektromanyetik alan için çözümleri elde edilmiştir. Bu problemde çözümleri bulmak için süpersimetrik kuantum mekaniği yöntemleri kullanılmıştır.

Ocak 2023, 53 Sayfa

Anahtar Kelimeler: Grafen, Dirac – Weyl denklemi, Dirac parçacıkları, süpersimetrik kuantum mekaniği yöntemleri, çarpanlara ayırma yöntemi.

ABSTRACT

MSc. Thesis

ELECTROSTATIC AND MAGNETIC CONFINEMENT OF ELECTRONS IN GRAPHENE AND IN TWO DIMENSIONAL DIRAC MATERIALS LIKE GRAPHENE

İsmail Burak ATEŞ

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

Supervisor: Prof. Dr. Şengül KURU

Firstly, in this thesis, some general properties of graphene are described and its electronic band structure was obtained by using the tight-binding model. The energy bands near the Fermi level, at the Dirac points, have a linear form leading to a Dirac – Weyl equation for the spectrum at low energies. Afterwards, supersymmetric quantum mechanics methods have been examined: factorization, Darboux transform, shape invariance and intertwining. The Pöschl – Teller potential is given as an example of shape invariance. Finally, solutions of the Dirac – Weyl equation describing the motions of Dirac fermions under the influence of electric and magnetic fields in graphene have been obtained for pure magnetic field, pure electric field and proportional electromagnetic field. Supersymmetric quantum mechanics methods have been used to find a solution to this problem.

January 2023, 53 Pages

Key Words: Graphene, Dirac – Weyl equation, Dirac particles, supersymmetric quantum mechanics methods, factorization method.

TEŞEKKÜR

Eğitim hayatım boyunca desteklerini esirgemeyen öğretmenlerime ve lisans eğitimimden bu zamana kadar bilgisini, tecrübelerini ve desteğini esirgemeyen ve göstermiş olduğu hoşgöründen dolayı değerli hocam Prof. Dr. Şengül KURU'ya (Ankara Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı) sonsuz teşekkürler.

Beni yetiştiren ve bugünlere gelmemi sağlayan annem Yasemin ATEŞ ve babam Hüseyin ATEŞ'e en içten teşekkürlerimi sunarım. Hep yanımda olan ve desteğini esirgemeyen ablam Gülşah ATEŞ'e sonsuz teşekkürler.

İsmail Burak ATEŞ
Ankara, Ocak 2023

İÇİNDEKİLER

TEZ ONAYI	
ETİK.....	i
ÖZET.....	ii
ABSTRACT	iii
TEŞEKKÜR	iv
SİMGELER DİZİNİ	vii
ŞEKİLLER DİZİNİ	viii
1. GİRİŞ.....	1
2. GRAFEN	3
2.1 Düz Örgü.....	5
2.2 Ters Örgü.....	6
2.3 Elektronik Bant Yapısı	7
2.4 Sıkı Bağ Enerji Dağılımı.....	9
2.5 Fermi Enerjisi.....	16
2.6 Çizgisel Enerji Dağılımı.....	18
3. SÜPERSİMETRİK KUANTUM MEKANİĞİ YÖNTEMLERİ.....	19
3.1 Çarpınlara Ayırma Yöntemi.....	20
3.2 Darboux Dönüşümü	22
3.3 Şekil Değişmezlik.....	24
3.4 Bağlaştırım Yöntemi	24
3.5 Pöschl – Teller Potansiyeli.....	25
4. GRAFENDE ELEKTRİK VE MANYETİK ALAN ETKİSİ ALTINDA DİRAC FERMİYONLARININ ANALİTİK ÇÖZÜMLERİ	29
4.1 Düzlemde Dirac – Weyl Denklemi ve SUSY Eş Hamilton İşlecileri	29
4.2 Çözülebilir Durumlar	31
4.2.1 Saf manyetik alan $\mathcal{V}(x) = 0$	31
4.2.1.1 Sabit manyetik alan.....	34
4.2.1.2 Hiperbolik bariyer	35
4.2.1.3 Trigonometrik kuyu.....	37
4.2.2 Saf elektrik alan $\mathcal{A}(x) = 0$	39
4.2.2.1 Kare kuyu potansiyeli.....	41
4.2.3 Orantılı elektromanyetik alan $\mathcal{V} \propto \mathcal{A}$	46

4.2.3.1 Harmonik salınıcı potansiyeli: $\mathcal{A}(x) = \beta x$	48
5. SONUÇ.....	50
KAYNAKLAR	51
ÖZGEÇMİŞ.....	53



SİMGELER DİZİNİ

$\mathcal{H}$	Hilbert uzayı
H	Hamilton işlemcisi
p	Momentum işlemcisi
σ	Pauli spin matris vektörü
$V_l(x)$	Potansiyel
c	Işık hızı
$\mathcal{L}$	Bağlaştırım işlemcisi
A	Vektör potansiyeli
B	Manyetik alan
Q_i	Süperyük işlemcileri
$\mathcal{W}(x)$	Wronskian matrisi
$W(x)$	Süperpotansiyel
Ψ_n	Dirac spinörü
$A, A^\dagger$	Çarpan işlemcileri
a_{c-c}	Grafende iki karbon atomu arası uzaklık (1.42 Å)
Γ	Brillouin bölgesinin merkez noktası
K, K'	Brillouin bölgesinin eşdeğer olmayan noktaları
M	Brillouin bölgesinin eşdeğer noktalarının orta noktası

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1 Karbon elementinin elektron dizilimi (Wong ve Akinwande 2011).	3
Şekil 2.2 Grafenin yapısı (Wong ve Akinwande 2011).	4
Şekil 2.3 Grafenin 3 farklı boyuttaki (sırasıyla 0, 1, 3-boyuttaki) şekilleri (Wong ve Akinwande 2011).	4
Şekil 2.4 Grafenin altıgen örgü yapısı (Wong ve Akinwande 2011).	6
Şekil 2.5 Grafenin ters örgüsü. İlk Brillouin bölgesi, yüksek simetri noktaları olan Γ , M, K' ve K ile gri renkte gösterildi (Wong ve Akinwande 2011).	7
Şekil 2.6 Grafenin bant yapısı (Wong ve Akinwande 2011).	8
Şekil 2.7 Grafenin sıkı bağ ve ab-initio dağılımları. Burada, $\gamma = 2.7$ eV ve $s_o = 0$ olarak alınmıştır (Wong ve Akinwande 2011). Burada, s_o üst üste binme integrali olarak adlandırılır ve pozitif ve sıfıra yakın değerli bir parametredir.	16
Şekil 2.8 Grafenin en yakın komşu sıkı bağ bant yapısı. Altıgen Brillouin bölge üst üste biner ve K-noktalarında enerji bantları dokunur (Wong ve Akinwande 2011).	17
Şekil 2.9 Dirac konisi (Wong ve Akinwande 2011).	18
Şekil 3.1 A ve $A^\dagger$ işlemcilerinin etkisi ve süperes potansiyellerin enerji düzeyleri.	22
Şekil 3.2 Şekil değişmez potansiyellere karşılık gelen enerji özdeğerleri.	24
Şekil 3.3 Hiyerarşide yer alan Hamilton işlemcilerine karşı gelen potansiyeller. Sağ taraftan itibaren sırası ile $l = 2$, $l = 3$ ve $l = 4$ için potansiyeller.	27
Şekil 3.4 $A_l^\pm$ ve $A_{l+1}^\pm$ işlemcilerinin H_l ve H_{l+1} işlemcilerinin özfonksiyonlarına etkileri.	28
Şekil 4.1 Sol taraftaki grafikte; $V_1(x)$ (en üste), $V_2(x)$ (en altta) ve $B(x) = \frac{1}{2}$ (ortada) manyetik alan çizdirilmiştir. Sağ taraftaki grafikte ise $n = 0, 1, \dots, 5$ için enerji özdeğerleri çizdirilmiştir.	35
Şekil 4.2 $B(x) = 0.5$ sabit bir manyetik alanı için, sol taraftaki grafik olasılık yoğunluğunu ($n = 0, 1, 2, 3$) ve sağ taraftaki grafik ise y yönündeki akım yoğunluğu ($n = 1, 2, 3$) göstermektedir.	35
Şekil 4.3 Hiperbolik bariyer: Soldaki grafikte, $\alpha = 1$, $D = 6$ ve $k = 1$ için, V_1 ve V_2 efektif potansiyelleri ve manyetik alanın grafiği çizdirilmiştir. Sağdaki grafikte ise k dalga sayısına bağlı ayrı enerji özdeğerleri verilmiştir.	36
Şekil 4.4 Sol tarafta olasılık yoğunluğu $\rho_n(x)$ ve sol tarafta akım yoğunluğu $j_n(x)$ farklı n değerleri için çizdirilmiştir. Burada, $\alpha = 1$, $k = 1$ ve $D = 6$ alınmıştır.	37
Şekil 4.5 İlk grafik trigonometrik kuyu için efektif potansiyel olan V_1 , V_2 ve manyetik alan $B(x)$ 'in grafiğidir. İkinci grafik ise k 'ya bağlı enerji özdeğerlerinin grafiğidir.	38
Şekil 4.6 İlk grafik $\rho_n(x)$, $n = 0, 1, 2, 3$ için ve sağdaki grafik ise $j_n(x)$ ve $n = 1, 2, 3$ için çizildi. Burada, parametreler $\alpha = 1$, $D = 4$ ve $k = 2$ olarak alınmıştır.	38
Şekil 4.7 $ \varepsilon < k$ ve $ \varepsilon + v_0 > k$ ile belirlenmiş v değerleri için enerji özdeğerleri. $v_0 = 8$, $k > 0$ için enerji özdeğerleri.	43

Şekil 4.8 (Sol) k 'nın fonksiyonu olarak $\nu_0 = 8$ belirlenmiş değeri için enerji özdeğer grafiği ve sınır çizgileri $\varepsilon = \pm k$ (yeşil düşey çizgi $k = 3$ 'dür). (Sağ) $k = 3$ için kuyunun ν_0 derinliğine karşılık gelen ε enerji özdeğer grafiği. Her iki grafikte düşey yeşil çizgilerin karşılık geldikleri spektrumlar uyumlu olmalıdırlar.....	43
Şekil 4.9 (Sol) $\nu_0 = 2$ değeri için $Im(det M) = 0$ grafiği (enerji özdeğerleri) ve sınır değerleri $\varepsilon = \pm k$; (sağ) $k = 2$ için kuyunun ν_0 derinliğine karşılık ε enerji grafiği.....	45
Şekil 4.10 $\nu_0 = 2, k = 2$ ve $\varepsilon_1 = 0.354274$ için $\tilde{\psi}_{11}(x)$ 'in reel (kesikli) ve sanal (sürekli) kısımlarının grafikleri.....	45
Şekil 4.11 $\nu_0 = 2, k = 2$ ve $\varepsilon_2 = 1.13356$ için $\tilde{\psi}_{12}(x)$ 'in reel (kesikli) ve sanal (sürekli) kısımlarının grafikleri.....	45
Şekil 4.12 $\nu_0 = 2, k = 2$ ve $\varepsilon_3 = 1.92583$ için $\tilde{\psi}_{13}(x)$ 'in reel (kesikli) ve sanal (sürekli) kısımlarının grafikleri.....	46
Şekil 4.13 $\nu_0 = 2, k = 2$ ve $n = 1, 2, 3$ için olasılık ve akım yoğunluğu grafikleri.	46
Şekil 4.14 $\alpha = 0.1, \beta = w/2$ ve $w = 1$ için $n = 0, 1, 2, 3, 4$ enerji düzeyleri	49

1. GİRİŞ

Grafen önemli elektronik ve optik özelliklerinden dolayı fizikte çok fazla dikkat çekmiştir ve hala çekmektedir (Neto vd. 2009). Grafende düşük enerji dinamikleri, kütsüz, spini $\frac{1}{2}$ ve Fermi hızına sahip Dirac elektronlarının (2+1)-boyutlu Dirac – Weyl denklemi ile betimlenir. Dış manyetik ve elektrik alan etkisinde bu denklemin analitik çözümleri ve onun sonuçlarının yorumlanması, son yıllarda grafen ve karbonun diğer allotropları için dikkat çekmiştir. Örneğin, yapay atom olarak bilinen grafen kuantum noktalar, grafen nanoşeritler, nanotüp, nanoteller ve nanoribbonların elektronik özelliklerini çok iyi anlamak önemlidir. Grafendeki Dirac elektronlarını hapisleme (tuzaklama) mekanizmasını anlamak üzerine sadece teorik değil deneysel çalışmalar da vardır. Grafende elektrostatik potansiyel kullanılarak Dirac elektronlarının tuzaklanması Klein tünellemesi nedeniyle zor iken, manyetik alan ile bu daha kolaydır (Beenakker 2008, Katsnelson vd. 2006). Ancak, uygulamada elektrostatik potansiyel kullanmak daha avantajlıdır. Bu da son yıllarda elektrostatik potansiyel ile tuzaklama üzerine yapılan çalışmaların artmasına neden olmuştur.

Bu çalışmanın amacı, grafende dış manyetik ve elektrik alanların varlığında Dirac – Weyl denkleminin çözümlerini elde etmek için analitik metotlar araştırmaktır. Bu çalışmada, saf manyetik alan, saf elektrik alan ya da her ikisinin birlikte var olduğu durumlarda, y yönü boyunca öteleme simetrisine sahip sistemler ele alınmıştır. Saf elektrik alan durumunun bazı özellikleri, örneğin; k momentumunun rolü ve kompleks süpersimetrik eş potansiyeller, bir örnek ile gösterilmiştir.

Süpersimetrik kuantum mekaniği, bazı 1-boyutlu problemlerin tam çözümlerini analiz etmek ve analitik olarak çözümleri bulmak için kullanılan çok kullanışlı bir araçtır (Infeld ve Hull 1951, Matveev ve Salle 1991, Junker 1996, Cooper vd. 2001). Bu metot 2-boyutlu Dirac – Weyl denklemine de uygulanabilir (Kuru vd. 2009, Pozdeeva ve Halberg 2010, Contreras-Astorga vd. 2012). Bu tez çalışmasında, bu metot ile çözülebilen manyetik veya elektrik alanları içeren durumlar ele alınmıştır (Ateş vd.

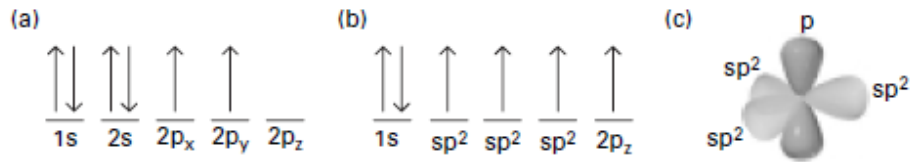
2022). Bu tip alanların teorik olarak analiz edilmesi, pratikte karşılaşılan bazı zorlukları daha rahat anlamaya katkı sağlayacaktır.

Bu çalışmanın ikinci bölümünde grafen tanıtılmış ve grafenin enerji bant yapısı sıkı bağ yaklaşımı ile elde edilmiştir. Üçüncü bölümde süpersimetrik kuantum mekaniği yöntemleri gözden geçirilmiş ve dördüncü bölümde bu yöntemler yardımıyla Dirac – Weyl denklemi, problemin bazı simetrileri de göz önünde bulundurularak analitik olarak çözülmeye çalışılmıştır. Saf manyetik alan durumunda analitik çözümler (Kuru vd. 2009, Ateş vd. 2022) elde edilmiştir. Analitik çözümün tam olarak elde edilemediği saf elektrik alan durumunda nümerik yöntemler ile çözümler elde edilip sonuçlar grafiklerle açıklanmaya çalışılmıştır. Ayrıca hem elektrik hem de manyetik alanın bulunduğu durumda da çözümler bulunmuştur (Ateş vd. 2022). Son bölüm sonuç ve tartışma ile tez tamamlanmıştır.

2. GRAFEN

Karbonun 2-boyutlu allotropu olan grafenin elektronik bant yapısını anlamak önemlidir. Grafenin özelliklerinin iyi bilinmesi, nanoteknoloji açısından çok önemli olan karbon nanotüplerin bant yapısının kökenini, karbonun diğer allotroplarının ve grafen benzeri diğer 2-boyutlu malzemelerin elektronik özelliklerini anlamamızı sağlar. Ayrıca, grafen tabanlı elektronik cihazların geliştirilmesine de olumlu katkı sağlar. Bu bölümde grafenin kristal örgüsü ve enerji bant yapısı incelenecektir.

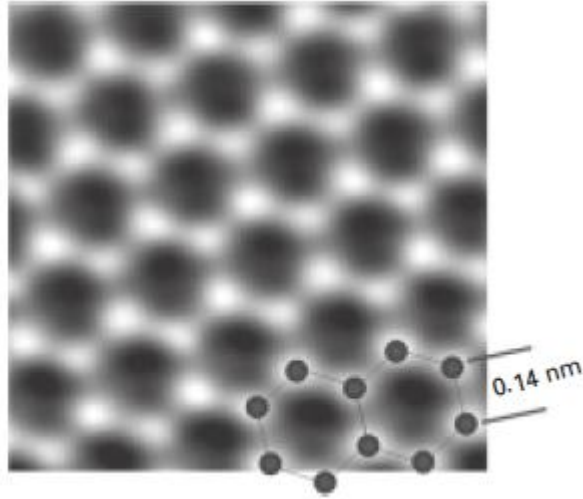
Karbon, birçok moleküler yapının ve kristal katıların üretiminde kullanılan bir 4A grubu elementidir. 4 tane değerlik elektronuna sahiptir ve bunlar birbirleriyle etkileşerek karbonun çeşitli allotroplarını oluştururlar. Bu değerlik elektronları 2s ve 2p yörüngelerinde (orbitallerinde) bulunur. Karbon atomları bir kristal oluşturmak için bir araya geldiklerinde, 2s yörüngesinde bulunan elektronlardan biri komşu atom çekirdeğinden enerji kazanarak $2p_z$ yörüngesine geçer (Wong ve Akinwande 2011). Atomik yörüngelerin etkileşmesi ya da karıştırılması, kimyada hibritleşme (melezleşme) olarak adlandırılır.



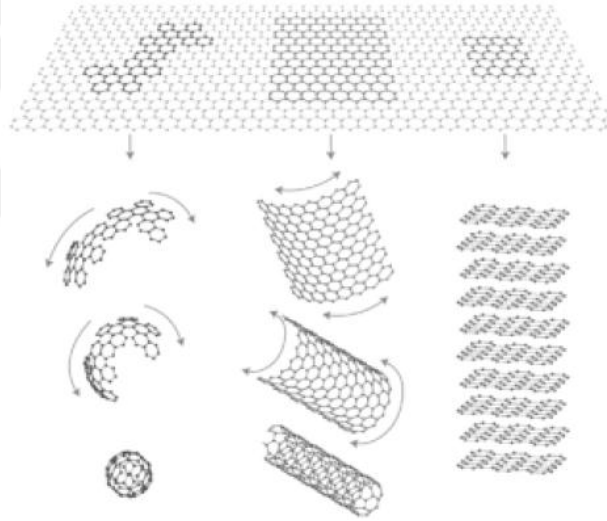
(a) Karbon elementinin elektron dizilimi. (b) 2. katmandaki s ve p orbitallerinin kovalent bağ olarak sp^2 hibritleşmesi (c) Grafenin 3 Boyutta orbitalleri

Şekil 2.1 Karbon elementinin elektron dizilimi (Wong ve Akinwande 2011)

Grafenin düzlemsel bal peteği (altıgen) yapısı (bakınız şekil 2.2) Andre Geim ve Konstantin Novoselov tarafından 2004 yılında sentezlenmiştir (Novoselov 2004).



Şekil 2.2 Grafenin yapısı (Wong ve Akinwande 2011)



Şekil 2.3 Grafenin 3 farklı boyuttaki (sırasıyla 0,1,3-boyuttaki) şekilleri (Wong ve Akinwande 2011)

Şekil 2.3’de de görüldüğü gibi, 2-boyutlu grafen bir küre şeklinde katlandığında fulleren (buckyballs) (0-boyutlu), bir silindir gibi katlandığında nanotüp (1-boyutlu), birkaç grafen üst üste koyulduğunda grafit (3-boyutlu) ve dahası grafen küçük şeritler halinde kesildiğinde nanoşeritler (nanoribbon) oluşur.

Grafende, $2s$ yörüngeleri, $2p_x$ ve $2p_y$ yörüngeleri ile etkileşerek, şekil 2.1’deki gibi 3 tane sp^2 hibrit (melez) yörünge oluşturur. Bu etkileşmelerden dolayı oluşan bağlara σ

bağı denir. Bu bağ, kovalent bağın en güçlü tipidir. σ bağları, karbon atomlarını bağlayan düzlem boyunca yerleşmiş elektronlara sahiptir ve bu bağlar karbon nanotüp ve grafenin mekaniksel özelliklerinden ve dayanıklılığından sorumludur. $2p_z$ elektronu π bağı olarak adlandırılan kovalent bağ oluşturur öyle ki orada elektron bulutu karbon atomlarının bulunduğu düzleme dik dağılmıştır. $2p_z$ elektronları, çekirdeğe zayıf bağ ile bağlıdır ve bu yüzden nispeten sınırlandırılmamışlardır. Bu zayıf bağı (yerelleşmemiş) elektronlar karbon nanotüp ve grafenin elektronik özelliklerinden sorumludur.

2.1 Düz Örgü

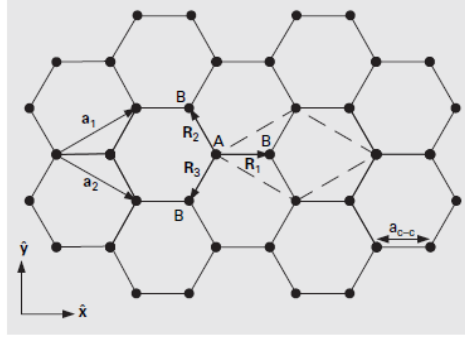
Şekil 2.4’de gösterildiği gibi, grafen iki farklı alt örgüden oluşan altıgen örgü yapısına sahiptir. İki nokta arasındaki çizgi, iki karbon atomu arasındaki σ bağını temsil eder ve uzunluğu yaklaşık olarak $a_{C-C} \approx 1.42 \text{ Å}$ ($1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$) ile verilir. Grafenin her bir birim örgü hücresinde A ve B olarak adlandırılan iki karbon atomu bulunur. Bravais örgüsü, bir altıgen örgüdür ve ilkel birim hücresi, bir kenar uzunluğu $a = \sqrt{3}a_{C-C} = 2.46 \text{ Å}$ olan bir paralelkenar olarak düşünülebilir (Wong ve Akinwande 2011). Baz vektörleri,

$$\mathbf{a}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2} a, +\frac{a}{2} \right), \quad \mathbf{a}_2 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2} a, -\frac{a}{2} \right) \quad (2.1.1)$$

ile verilir. Burada, $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = a$ ’dır. İlkel hücre kristali temsil eden en küçük birimdir ve tüm kristal uzayı bu ilkel hücrenin ötelemeleri ile elde edilir.

Her karbon atomu, en yakın 3 komşu atomuna bağlıdır ve karşı gelen vektörler aşağıdaki gibidir:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_1 &= \left(\frac{a}{\sqrt{3}}, 0 \right) \\ \mathbf{R}_2 &= -\mathbf{a}_2 + \mathbf{R}_1 = \left(-\frac{a}{2\sqrt{3}}, -\frac{a}{2} \right) \\ \mathbf{R}_3 &= -\mathbf{a}_1 + \mathbf{R}_1 = \left(-\frac{a}{2\sqrt{3}}, \frac{a}{2} \right) \\ |\mathbf{R}_1| &= |\mathbf{R}_2| = |\mathbf{R}_3| = a_{C-C} \end{aligned} \quad (2.1.2)$$



Şekil 2.4 Grafenin altıgen örgü yapısı (Wong ve Akinwande 2011)

2.2 Ters Örgü

Grafenin ters örgüsü şekil 2.5’de gösterildiği gibi, şekil 2.4’de gösterilen altıgen bir örgünün 90^0 döndürülmüş halidir. Düz örgü vektörleri ile ters örgü vektörleri aşağıdaki bağıntıyı sağlarlar:

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij} \quad (2.2.1)$$

Bu bağıntı, aşağıdaki şekilde de ifade edilebilir (Wong ve Akinwande 2011):

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= 2\pi \frac{\mathbf{R}_{90}(\mathbf{a}_2)}{\det(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)} \\ \mathbf{b}_2 &= 2\pi \frac{\mathbf{R}_{90}(-\mathbf{a}_1)}{\det(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)} \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

Burada, $\mathbf{R}_{90}$ işlemcisi düzlemde saat yönünde 90^0 dönmeye karşılık gelen işlemcidir ve genel olarak herhangi bir θ açısı için iki boyutta

$$\mathbf{R}_\theta = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

şeklinde tanımlanır. Denklem (2.2.1) ya da (2.2.2) kullanılarak ters örgü vektörleri aşağıdaki gibi bulunur:

$$\mathbf{b}_1 = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{a} \right), \quad \mathbf{b}_2 = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, -\frac{2\pi}{a} \right) \quad (2.2.3)$$

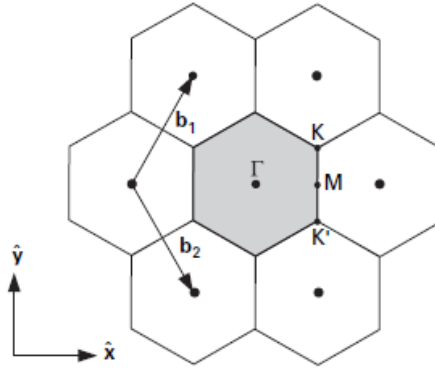
Burada, $|\mathbf{b}_1| = |\mathbf{b}_2| = 4\pi/\sqrt{3}a$ ’dır.

Brillouin bölgesi, şekil 2.5’de gösterildiği gibi bir kenar uzunluğu $b_{BZ} = \frac{|b_1|}{\sqrt{3}} = \frac{4\pi}{3a}$ olan, gri renkli altıgendir. Brillouin bölgesindeki yüksek simetrik noktalar, Γ, M, K ve K' olarak adlandırılır. Bu bölge için,

$$\Gamma M = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, 0 \right), \quad \Gamma K = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{3a} \right) \quad (2.2.4)$$

$|\Gamma M| = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}$, $|\Gamma K| = \frac{4\pi}{3a}$ ve $|MK| = \frac{2\pi}{3a}$ olarak verilir. Brillouin bölgesinin eşdeğer olmayan noktaları (köşeleri) K ve K' ile, hücre merkezi Γ ile, K ve K' noktalarına ait kenarın orta noktasını ise M ile gösterilir. Brillouin bölgesinin diğer dört köşesi, K ve K' noktalarına ters örgü baz vektörleri tarafından üretilen ötelemeler ile elde edilirler. K ve K' noktalarının eşdeğer olmamasının nedeni, grafenin altıgen örgü yapısının, iki alt Bravais örgüsüne sahip olmasıdır. Bu noktalar, grafenin elektronik özellikleri açısından önemli noktalar.

Ters uzay bazen $\mathbf{k}$ -uzayı olarak adlandırılır. $\mathbf{k}$ vektörü, Brillouin bölgesi içinde herhangi bir noktadaki dalga vektörüdür.



Şekil 2.5 Grafenin ters örgüsü. İlk Brillouin bölgesi, yüksek simetri noktaları olan Γ, M, K' ve K ile gri renkte gösterildi (Wong ve Akinwande 2011)

2.3 Elektronik Bant Yapısı

Grafenin enerji bant yapısı şekil 2.6’da gösterildiği gibidir. Bu bant yapısı numerik olarak hesaplanmıştır ve karbonun değerlik elektronlarını oluşturan π ve σ elektronlardan kaynaklanan bir çok enerji dalını gösterir. Burada, amaç grafenin enerji

bant yapısı için analitik bir ifade bulmaktır. H , Hamilton işlemcisi için zamandan bağımsız Schrödinger denklemi,

$$H\Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (2.3.1)$$

ile verilir. Burada, $\Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ dalga fonksiyonunu ve E enerji özdeğerini gösterir. Periyodik bir katı içindeki bağımsız elektronlar için Hamilton işlemcisi aşağıdaki gibidir:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \sum_{i=1}^N U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \quad (2.3.2)$$

Burada ilk terim kinetik enerji işlemcisi, diğeri ise potansiyel enerji işlemcisidir. Potansiyel enerjideki $\mathbf{R}_i$ terimi i 'nci Bravais örgü vektörü ve N ise ilkel birim hücre sayısıdır. $U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$, i 'nci ilkel birim hücreden gelen potansiyel enerji periyodik Coulomb potansiyelidir ($1/r$ ile orantılıdır).

Kristal bir katı içindeki dalga fonksiyonları Bloch teoremini sağlarlar (Wong ve Akinwande 2011) ve aşağıdaki özelliğe sahiptirler:

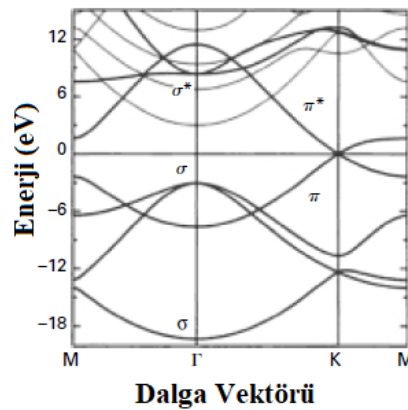
$$\Psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{ik \cdot \mathbf{R}} \Psi(\mathbf{r}) \quad (2.3.3)$$

Burada, $\mathbf{R}$ Bravais örgü vektörüdür. Ek olarak periyodik sınır koşulları dalga fonksiyonlarına, dalga vektörünün izinli değerlerini belirlemek için uygulanır.

Sınır koşulu;

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r} + \mathbf{S}) = e^{ik \cdot \mathbf{S}} \Psi(\mathbf{r}) \Rightarrow e^{ik \cdot \mathbf{S}} = 1 \quad (2.3.4)$$

ile verilir. Burada, $\mathbf{S}$ boyut vektörüdür ve kristal örgünün uzaysal boyutlarını verir.



Şekil 2.6 Grafenin bant yapısı (Wong ve Akinwande 2011)

Genel olarak, dalga fonksiyonu ve bant yapısını elde etmek için iki tane teknik vardır. İlki neredeyse serbest elektron modelidir. En dıştaki değerlik elektronlarının, çekirdeğin uyguladığı zayıf Coulomb kuvveti dışında, serbest olduğu düşünülür. Sonuç olarak, tamamen periyodik potansiyel, zayıf bir pertürbe potansiyel ile yer değiştirir ve Schrödinger denklemi standart pertürbasyon teknikleri ile çözülür. Bu model ile elde edilen enerji bant yapısı paraboliktir.

Diğer bir teknik ise sıkı bağ yaklaşımıdır. Doğal olarak, en dıştaki elektronların kendi atom çekirdeklerine büyük ölçüde sınırlandırıldığı varsayılır ve atom yörüngeleri kesikli enerji düzeyleri ile tanımlanır. Yalıtılmış olmayan atomlar düzenli katı içinde olduklarından, N birim hücreli katı içindeki komşu atomların özdeş elektronlarının yörüngeleri üst üste biner ve yarı-sürekli enerji bandına genişler. Dalga fonksiyonlarının üst üste binmesi genel olarak, bir katıdaki elektronları tanımlamak için uygun olmasa da, çok çok küçük özel üst üste binme durumlarında yaklaşık bir analitik bant yapısı elde etmek için sıkı bağ yaklaşımı kullanılabilir.

Bant yapısını analitik olarak elde etmek için bu iki model arasından seçim yapmak gerekir. Eğer grafende enerji dağılımı parabolik benzeri olsaydı, nerdeyse serbest elektron modelini seçmek uygun olurdu. Fakat, grafende Fermi enerjisi çevresinde enerji dağılımı çizgisel olduğundan sıkı bağ yaklaşımı modelini seçmek uygundur.

2.4 Sıkı Bağ Enerji Dağılımı

Sıkı bağ modelindeki ilk zorluk, atomun karakterini bozmadan Bloch teoremini sağlayan uygun bir dalga fonksiyonunu oluşturmaktır. Daha sonra, bu dalga fonksiyonundan enerji bant yapısı elde edilir. Genel bir sıkı bağ için dalga fonksiyonu önerisi, Bloch tarafından 1928'de atomun yörüngelerinin çizgisel bir kombinasyonu olarak yapılmıştır. Grafenin birim hücresinde iki atom vardır ve bu durum için dalga fonksiyonu aşağıdaki gibi yazılır:

$$\Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = C_A \Phi_A(\mathbf{k}, \mathbf{r}) + C_B \Phi_B(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (2.4.1)$$

A ve B indisleri, birim hücredeki iki farklı atoma aittir. C_A ve C_B ağırlıkları ise genel olarak $\mathbf{k}$ 'nın bir fonksiyonu olup $\mathbf{r}$ 'den bağımsızdır. m bazlı bir kristal toplam m tane alt örgü terimi içerir. Böylece, Bloch fonksiyonları atomun yörüngelerinin veya dalga fonksiyonlarının bir çizgisel kombinasyonu olarak ifade edilir:

$$\Phi_A(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j^N e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{A_j}} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A_j}) \quad (2.4.2)$$

$$\Phi_B(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j^N e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{B_j}} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{B_j}) \quad (2.4.3)$$

Burada, N örgüdeki birim hücrelerin sayısıdır. $\mathbf{R}_A$ ve $\mathbf{R}_B$ ise grafendeki tüm A ve B atomlarının yerlerini gösteren Bravais örgü vektörleridir. $\mathbf{R}_j$ merkez noktasından uzaklaşan mesafelerde ϕ ortonormal fonksiyonları (Wannier fonksiyonu olarak bilinirler) çok hızlı bir şekilde sıfıra gider (Marzari vd. 1997). Burada toplam, tüm örgü vektörleri üzerindendir. $\frac{1}{\sqrt{N}}$, Bloch fonksiyonlarının normalizasyon sabitidir. Bloch fonksiyonları Bloch teoremini sağlamalıdır:

$$\Phi_A(\mathbf{r} + \mathbf{R}_{A_l}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j^N e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{A_j}} \phi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_{A_l} - \mathbf{R}_{A_j}) \quad (2.4.4)$$

$$\Phi_A(\mathbf{r} + \mathbf{R}_{A_l}) = \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{A_l}}}{\sqrt{N}} \sum_j^N e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{A_j} - \mathbf{R}_{A_l})} \phi(\mathbf{r} - (\mathbf{R}_{A_j} - \mathbf{R}_{A_l}))$$

İki Bravais örgü vektörü arasındaki fark, başka Bravais örgü vektörüdür:

$$\Phi_A(\mathbf{r} + \mathbf{R}_{A_l}) = \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{A_l}}}{\sqrt{N}} \sum_m^N e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{A_m}} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A_m}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{A_l}} \Phi_A(\mathbf{r}) \quad (2.4.5)$$

Bloch fonksiyonu periyodik sınır koşullarını sağlamalıdır. Ters örgü vektörü $\mathbf{k}$ 'yı bileşenleri cinsinden, $\mathbf{k} = k_x \hat{x} + k_y \hat{y}$ olarak ve grafen Bravais örgüsünün büyüklük vektörünü de, $\mathbf{S} = aN_o \hat{x} + aN_o \hat{y}$ olarak alalım. Burada, $N_o = \sqrt{N}$ 'dir. Periyodik sınır koşullarını uygulanırsa;

$$e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{S}} = \cos[ak_x N_o + ak_y N_o] + i \sin[ak_x N_o + ak_y N_o] = 1 \quad (2.4.6)$$

(2.4.6) eşitliğinin sadece,

$$k_x = \frac{2\pi p}{aN_o}, \quad k_y = \frac{2\pi p}{aN_o}, \quad p = 0, 1, 2, \dots, N_o - 1 \quad (2.4.7)$$

olduğunda sağlandığı görülür. Enerji dağılımı için çözümlere yol açan izinli dalga vektörlerinin kümesi, ilk Brillouin bölgesi ile sınırlıdır. Brillouin bölgesindeki k durumlarının maksimum sayısı, $N_o^2 = N$ 'dir.

Şimdi, grafenin enerji bant yapısı elde edilebilir. Denklem (2.4.1) Schrödinger denkleminde yerine yazılırsa;

$$C_A H \Phi_A(\mathbf{k}, \mathbf{r}) + C_B H \Phi_B(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = E(\mathbf{k}) C_A \Phi_A(\mathbf{k}, \mathbf{r}) + E(\mathbf{k}) C_B \Phi_B(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (2.4.8)$$

ve elde edilen bu denklem ayrı ayrı Φ_A ve Φ_B 'nin kompleks eşleniği ile çarpılırsa aşağıdaki denklemler bulunur:

$$\begin{aligned} C_A \Phi_A^* H \Phi_A + C_B \Phi_A^* H \Phi_B &= E C_A \Phi_A^* \Phi_A + E C_B \Phi_A^* \Phi_B \\ C_A \Phi_B^* H \Phi_A + C_B \Phi_B^* H \Phi_B &= E C_A \Phi_B^* \Phi_A + E C_B \Phi_B^* \Phi_B \end{aligned} \quad (2.4.9)$$

Örgünün bulunduğu tüm uzay boyunca bu iki denklemin integrali alınırsa,

$$\begin{aligned} C_A \int_{\Omega} \Phi_A^* H \Phi_A d\mathbf{r} + C_B \int_{\Omega} \Phi_A^* H \Phi_B d\mathbf{r} \\ = E C_A \int_{\Omega} \Phi_A^* \Phi_A d\mathbf{r} + E C_B \int_{\Omega} \Phi_A^* \Phi_B d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (2.4.10)$$

$$\begin{aligned} C_A \int_{\Omega} \Phi_B^* H \Phi_A d\mathbf{r} + C_B \int_{\Omega} \Phi_B^* H \Phi_B d\mathbf{r} \\ = E C_A \int_{\Omega} \Phi_B^* \Phi_A d\mathbf{r} + E C_B \int_{\Omega} \Phi_B^* \Phi_B d\mathbf{r} \end{aligned}$$

denklemleri elde edilir. Burada, fonksiyonların $\mathbf{k}$ ve $\mathbf{r}$ bağımlılığı kolaylık olsun diye yazılmadı. Denklemleri daha sade yazmak için aşağıdaki şekilde sembolik bir dönüşüm yapılır:

$$H_{ij} = \int_{\Omega} \Phi_i^* H \Phi_j d\vec{r}, \quad S_{ij} = \int_{\Omega} \Phi_i^* \Phi_j d\vec{r} \quad (2.4.11)$$

H_{ij} , matris Hamiltoniyeninin elemanları veya transfer integralidir ve enerji birimindedir. S_{ij} ise Bloch fonksiyonları arasında üst üste binme matris elemanlarını

verir ve birimsizdir. Birim hücredeki iki atom özdeş olduğundan, tüm A atomları arasındaki üst üste binme, tüm B atomları arasındaki üst üste binme ile aynı olur: $S_{AA} = S_{BB}$ ve $H_{AA} = H_{BB}$. Böylece, matris elemanları sadeleşebilir. Bunlar fiziksel gözlenebilir olduğundan Hermitseldir ve bu durumda $H_{AB}^* = H_{BA}$ ve $S_{AB}^* = S_{BA}$ olur. Böylece, Denklem (2.4.10), aşağıdaki gibi yeniden yazılır:

$$C_A(H_{AA} - ES_{AA}) = C_B(ES_{AB} - H_{AB}) \quad (2.4.12)$$

$$C_A(H_{AB}^* - ES_{AB}^*) = C_B(ES_{AA} - H_{AA}) \quad (2.4.13)$$

Denklem (2.4.13)'den C_B çekilip, denklem (2.4.12)'de yerine yazıldığında kuadratik bir denklem bulunur. Bu denklem enerji için çözüldüğünde ise, enerji ifadesi elde edilir:

$$E(\mathbf{k})^\pm = -\frac{E_o(\mathbf{k}) \pm \sqrt{E_o(\mathbf{k})^2 - 4(S_{AA}(\mathbf{k})^2 - |S_{AB}(\mathbf{k})|^2)(H_{AA}(\mathbf{k})^2 - |H_{AB}(\mathbf{k})|^2)}}{2(S_{AA}(\mathbf{k})^2 - |S_{AB}(\mathbf{k})|^2)} \quad (2.4.14)$$

$$E_o(\mathbf{k}) = -(H_{AB}^*S_{AB} + S_{AB}^*H_{AB} - 2H_{AA}S_{AA}) \quad (2.4.15)$$

Denklem (2.4.14) ile verilen pozitif ve negatif enerjiler, sırasıyla iletkenlik (π^*) ve değerlik (π) bandı olarak adlandırılır. Şimdi, (2.4.14) ile verilen enerji ifadelerinde sıkı bağ yaklaşımı varsayımları kullanılabilir. Burada amaç, özellikle Fermi enerjisi çevresinde şekil 2.6'daki bant yapısına benzeyen analitik bir çözüm bulmaktır. Bu varsayımlar ve ilgili matematiksel sonuçlar:

1. *En yakın komşu sıkı bağ yaklaşım modeli:* Herhangi bir ilkel hücredeki elektronun dalga fonksiyonu sadece en yakın komşularının dalga fonksiyonları ile üst üste biner. Şekil 2.4'ten görüldüğü gibi, bir grafen örgüsündeki A atomuna en yakın üç tane özdeş B atomu vardır. En yakın komşu sıkı bağ yaklaşımı, bir A atomunun p_z dalga fonksiyonu ile üç en yakın komşu atomunun p_z dalga fonksiyonlarının üst üste gelmesini şart koşar. Bu durumda, A atomu uzak atomlarla üst üste gelmez. Böylece, matematiksel olarak, denklem (2.4.14) oldukça basitleşir:

$$H_{AA}(\mathbf{k}) = \int_{\Omega} \Phi_A^* H \Phi_A d\mathbf{r} = \frac{1}{N} \sum_j^N \sum_l^N e^{-ik \cdot \mathbf{R}_{Aj}} e^{ik \cdot \mathbf{R}_{Al}} \quad (2.4.16)$$

$$\begin{aligned}
& \times \int_{\Omega} \phi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A_j}) H \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A_l}) d\mathbf{r} \\
H_{AA} &= \frac{1}{N} \sum_j \sum_l^N e^{ik \cdot (\mathbf{R}_{A_l} - \mathbf{R}_{A_j})} E_{2p} \delta_{jl} = E_{2p} \quad (2.4.17)
\end{aligned}$$

δ_{jl} , kronecker delta fonksiyonudur. E_{2p} sabiti, yalıtılmış karbondaki 2p orbitallerinin enerjisine çok yakındır, ancak örgünün Hamiltoniyeni, tek yalıtılmış atomun Coulomb potansiyelinin aksine, periyodik bir potansiyele sahip olduğundan kesinlikle eşit değildir. Benzer olarak, üst üste gelme matrisi aşağıdaki hale gelir:

$$S_{AA}(\mathbf{k}) = \int_{\Omega} \Phi_A^* \Phi_A d\mathbf{r} = \frac{1}{N} \sum_j \sum_l^N e^{-ik \cdot \mathbf{R}_{A_j}} e^{ik \cdot \mathbf{R}_{A_l}} \quad (2.4.18)$$

$$\begin{aligned}
& \times \int_{\Omega} \phi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A_j}) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A_l}) d\mathbf{r} \\
S_{AA} &= \frac{1}{N} \sum_j \sum_l^N e^{ik \cdot (\mathbf{R}_{A_l} - \mathbf{R}_{A_j})} \delta_{jl} = 1 \quad (2.4.19)
\end{aligned}$$

Burada, Wannier fonksiyonunun normalize olduğu göz önünde bulundurulmuştur:

$$\int \phi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r} = 1$$

2. *Elektron - deşik simetrisi:* Şekil 2.6'ya bakıldığında Fermi enerjisi çevresinde K noktasında π ve π^* bantları benzer yapıya sahiptir. En azından enerjileri E_F 'ye yakındır. Bu sınırlı alan içinde elektronların enerjileri yaklaşık olarak birbirlerinin ayna görüntüsüdür. π^* bandında elektronlar, π bandında ise deşikler hareketli yüklerdir ve bu yaklaşım elektron-deşik simetrisi olarak adlandırılır. Şekil 2.6'dan görüldüğü gibi bu simetri Fermi enerjisine çok yakın enerjilerde geçerlidir. Bu yaklaşım çok kullanışlıdır. Çünkü pratik cihazlardaki elektron dinamiğinin çoğu Fermi enerjisine yakın nispeten küçük mesafelerde meydana gelir. Matematiksel olarak bu simetri $S_{AB}(\mathbf{k}) = 0$ 'ı gerektirir. Bu açık bir şekilde görünmez, ancak denklem (2.4.14)'ün bu simetriye sahip tek kısmının artı/eksi kare köklerinin olmasından görülür, yani $-\sqrt{f(\mathbf{k})}$, $\sqrt{f(\mathbf{k})}$ 'nın ayna görüntüsüdür:

$$E(\mathbf{k})^{\pm} = E_{2p} \pm \sqrt{H_{AB}(\mathbf{k})H_{AB}^*(\mathbf{k})} \quad (2.4.20)$$

Elektron-deşik simetrisi Fermi enerjisi çevresinde, herhangi bir kayıp olmadan denklem (2.4.14)'ü basitleştirmede oldukça etkilidir. Burada enerji keyfi referans potansiyelinde tanımlanarak, $E_{2p} = 0$ olarak alınabilir. Bu referans potansiyel grafen için Fermi enerjisidir ($\mathbf{k}$ 'dan bağımsız bir parametre) ve bu enerji alışıldığı gibi 0 eV olarak ayarlanabilir. $\mathbf{k}$ 'dan bağımsız tek parametre E_{2p} 'dir. $E_{2p} = E_F = 0 \text{ eV}$ olarak alındığında,

$$E(\mathbf{k})^{\pm} = \pm \sqrt{H_{AB}(\mathbf{k})H_{AB}^*(\mathbf{k})} \quad (2.4.21)$$

elde edilir.

Bu duruma karşılık gelen etkin H matris Hamilton işlemcisi

$$H = \begin{pmatrix} 0 & H_{AB}(\mathbf{k}) \\ H_{AB}^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix}$$

şeklinde ve $H_{AB}(\mathbf{k})$ matris elemanı aşağıdaki gibi hesaplanır:

$$H_{AB}(\mathbf{k}) = \int_{\Omega} \Phi_A^* H \Phi_B d\mathbf{r} = \frac{1}{N} \sum_j^N \sum_l^N e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{A_j} - \mathbf{R}_{B_l})} \quad (2.4.22)$$

$$\times \int_{\Omega} \phi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A_j}) H \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{B_l}) d\mathbf{r}$$

Her A atomu en yakın üç komşu B atomu ile etkileşir. En yakın komşuların uzaklıkları, $\mathbf{R}_1 = \mathbf{R}_{A_j} - \mathbf{R}_{B_j}$, $\mathbf{R}_2 = \mathbf{R}_{A_j} - \mathbf{R}_{B_{j+1}}$ ve $\mathbf{R}_3 = \mathbf{R}_{A_j} - \mathbf{R}_{B_{j-1}}$ olarak tanımlanır. Burada, $j, j+1, j-1$ 'ler en yakın ilkel hücrelerdeki B atomlarının indisleridir. Burada, en yakın B atomları, j hücresindeki A atomu ile sınırlıdır:

$$H_{AB}(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \sum_j^N \sum_{m=1}^3 e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m} E_m \quad (2.4.23)$$

Burada E_m , en yakın komşu Wannier fonksiyonlarının sonlu integral değeridir. $E_1 = E_2 = E_3$ alınır, çünkü integraller radyal olarak bağımlıdır ve en yakın komşu mesafeleri radyal olarak simetriktir. γ pozitif değerli bir parametre olmak üzere, $E_m = \gamma$ olarak alınabilir. γ , sıklıkla en yakın komşuların üst üste gelme enerjisi, atlama ya da transfer

enerjisi veya karbon-karbon etkileşim enerjisi olarak adlandırılabilir. Sonuç olarak, Hamilton matris elemanları üç terimli bir toplam haline gelirler:

$$H_{AB}(\mathbf{k}) = \gamma(e^{-ik \cdot \mathbf{R}_1} + e^{-ik \cdot \mathbf{R}_2} + e^{-ik \cdot \mathbf{R}_3}) \quad (2.4.24)$$

ve

$$\begin{aligned} H_{AB}(\mathbf{k})H_{AB}^*(\mathbf{k}) &= \gamma^2(e^{-ik \cdot \mathbf{R}_1} + e^{-ik \cdot \mathbf{R}_2} + e^{-ik \cdot \mathbf{R}_3})(e^{ik \cdot \mathbf{R}_1} + e^{ik \cdot \mathbf{R}_2} \\ &+ e^{ik \cdot \mathbf{R}_3}) \end{aligned} \quad (2.4.25)$$

$$\begin{aligned} H_{AB}(\mathbf{k})H_{AB}^*(\mathbf{k}) &= \gamma^2[3 + e^{ik \cdot (\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)} + e^{-ik \cdot (\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)} + e^{ik \cdot (\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_3)} \\ &+ e^{-ik \cdot (\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_3)} + e^{ik \cdot (\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_3)} + e^{-ik \cdot (\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_3)}] \end{aligned} \quad (2.4.26)$$

$$\begin{aligned} H_{AB}(\mathbf{k})H_{AB}^*(\mathbf{k}) &= \gamma^2\{3 + 2 \cos[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)] \\ &+ 2 \cos[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_3)] + 2 \cos[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_3)]\} \end{aligned} \quad (2.4.27)$$

Burada, üstel ifadeleri sadeleştirmek için Euler formülü ($e^{ix} + e^{-ix} = 2\cos[x]$) kullanılmıştır. Böylece,

$$H_{AB}(\mathbf{k})H_{AB}^*(\mathbf{k}) = \gamma^2 \left(1 + 4\cos\frac{\sqrt{3}a}{2}k_x \cos\frac{a}{2}k_y + 4\cos^2\frac{a}{2}k_y \right) \quad (2.4.28)$$

denklemini, denklem (2.4.21)'de yerine yazılırsa enerji ifadesi,

$$E(\mathbf{k})^\pm = \pm \gamma \sqrt{1 + 4\cos\frac{\sqrt{3}a}{2}k_x \cos\frac{a}{2}k_y + 4\cos^2\frac{a}{2}k_y} \quad (2.4.29)$$

olarak elde edilir. Bu formül yaygın olarak karbon nanotüp yapısından türetilen en yakın komşu sıkı bağ yaklaşımında kullanılır. γ 'nın kesin değerini analitik olarak belirlemek zordur. γ 'nın değeri yaygın olarak 2.7 eV ile 3.3 eV arasındadır. γ 'nın değeri grafende Fermi hızının deneysel ölçümünden $\gamma \approx 3.1 \text{ eV}$ olarak bulunmuştur. Değerlik bandı içindeki en yüksek enerji bandı ve iletkenlik bandı içindeki en düşük enerji bandı durumlarını tanımlamak önemlidir. Bu durumlar, $E = 0 \text{ eV}$ enerjisine karşılık gelen K noktasında meydana gelirler.

Bu enerji özdeğerlerine karşılık gelen öz durumlar

$$\begin{pmatrix} 0 & H_{AB} \\ H_{AB}^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_A \\ C_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} C_A \\ C_B \end{pmatrix} \quad (2.4.30)$$

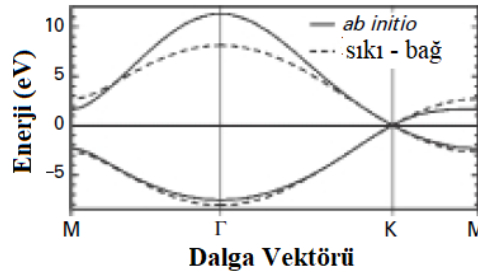
matris denkleminde kolaylıkla bulunurlar. $C_A(k) = 1$ için normalize (bire boylandırılmış) öz durumlar,

$$\psi^\pm(k) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\pm \frac{e^{-i\frac{a}{2\sqrt{3}}k_x} (e^{i\frac{\sqrt{3}a}{2}k_x} + 2\cos\frac{a}{2}k_y)}{\sqrt{1 + 4\cos\frac{\sqrt{3}a}{2}k_x\cos\frac{a}{2}k_y + 4\cos^2\frac{a}{2}k_y}} \right) \quad (2.4.31)$$

olarak bulunurlar.

Düşük enerjilerde π bandı için en yakın komşu sıkı bağ dağılımı, ab-initio (ilk prensipler) ile elde edilen ile uyumludur (bakınız şekil 2.7). Ab-initio hesaplamaları, Pauli dışarlama ilkesi ile Fermi istatistiğine uyan elektronlar ve çekirdekler arasında sadece Coulomb etkileşimleri gözönünde bulundurularak elektronik yörüngelerin (orbitalerin) hesaplanmasıdır (Wong ve Akinwande 2011). Yüksek enerjilerde ise elektron-deşik simetrisi gevşetilerek, yani $S_{AB}(\mathbf{k}) \neq 0$ alınarak, iyi bir uyum sağlanır. Bu durumda enerji dağılımı aşağıdaki şekilde olur:

$$E(\mathbf{k})^\pm = \frac{\pm\gamma\sqrt{1 + 4\cos\frac{\sqrt{3}a}{2}k_x\cos\frac{a}{2}k_y + 4\cos^2\frac{a}{2}k_y}}{1 \mp s_o\sqrt{1 + 4\cos\frac{\sqrt{3}a}{2}k_x\cos\frac{a}{2}k_y + 4\cos^2\frac{a}{2}k_y}} \quad (2.4.32)$$



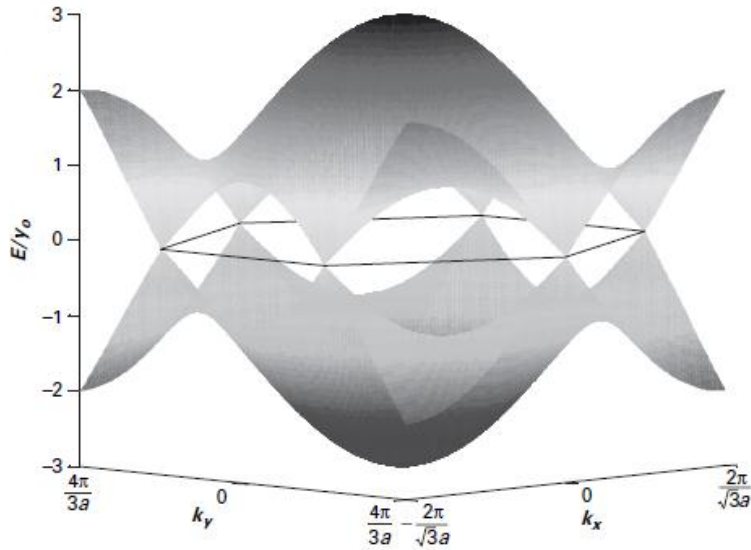
Şekil 2.7 Grafenin sıkı bağ ve ab-initio dağılımları. Burada, $\gamma = 2.7$ eV ve $s_o = 0$ olarak alınmıştır (Wong ve Akinwande 2011). Burada, s_o üst üste binme integrali olarak adlandırılır ve pozitif ve sıfıra yakın değerli bir parametredir.

2.5 Fermi Enerjisi

Kararlı Fermi enerjisi, 0 K'de katı taban durumundayken en yüksek düzeyde dolu olan k durumunun enerjisidir. E_F , Brillouin bölgesindeki k durumlarının Pauli dışarlama ilkesine göre katı içindeki tüm π elektronlarıyla doldurulmasıyla belirlenir. Değerlik

bandında N tane k durumu vardır ve bunlar spin dejenereliğiyle birlikte $2N$ tane elektronla doldurulabilir. Her karbon atomu bir p_z elektronu sağlar ve böylece birim hücrede iki elektron olur. N tane birim hücre olduğundan, değerlik bandını dolduracak $2N$ tane elektron vardır. En enerjik elektronların bulunduğu en yüksek dolu düzey K noktasındadır ve karşı gelen enerji Fermi enerjisidir ($E_F = 0$). Elektronların Fermi enerjisi çevresindeki özellikleri genellikle elektronik cihazların özelliklerini belirler.

Şekil 2.8, en yakın komşu sıkı bağ yaklaşımı enerji bant yapısının Brillouin bölgesi boyunca üç boyutlu dağılımını verir. Dağılımın üst bölgesi iletkenlik (π^*) bandı, alt bölgesi ise değerlik (π) bandıdır. Fermi enerjisinde bir bant aralığının olmaması nedeniyle (değerlik ve iletkenlik bantlarının E_F 'de birbirine değdiği gerçeğiyle), grafen normal bir metalin aksine, yarı-metal ya da sıfır bant aralıklı yarı-iletken olarak düşünülür (Wong ve Akinwande 2011). Metalde E_F tipik olarak iletkenlik bandındadır ve yarı-iletkende ise E_F sonlu bant aralığı içindedir.



Şekil 2.8 Grafenin en yakın komşu sıkı bağ bant yapısı. Altıgen Brillouin bölge üst üste biner ve K-noktalarında enerji bantları dokunur (Wong ve Akinwande 2011).

Elektrik veya manyetik alan uygulandığında (denge olmadığı durumlarda) ya da safsızlık atomu olduğunda (dış koşullar altında), Fermi enerjisi kararlı değeri olan

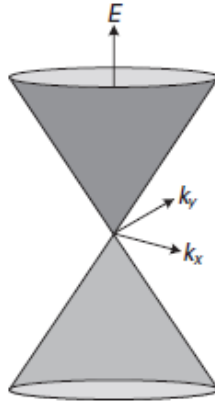
0 eV'dan uzaklaşır. E_F 'nin kararlı değerinden sapması genellikle alanın gücünü belirlemede ya da safsızlık atomlarının yoğunluğunu belirlemede önemlidir.

2.6 Çizgisel Enerji Dağılımı

Fermi enerjisinde grafen (Dirac) elektronlarının davranışları yoğun madde fiziğinde önemli bir alandır. Çünkü kütsüz parçacıklar (sıfır etkin kütleli parçacıklar) için enerji çizgisel bir dağılıma sahiptir. Grafende iletim ve değerlik bantlarının dokunduğu K noktaları genellikle Dirac noktası olarak adlandırılır. Bu K noktalarında ve yakın enerjilerde, yani K noktası civarında enerji, bir lineer denklem olarak basit bir şekilde ifade edilebilir:

$$E_{\text{çizgisel}}^{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \hbar v_F |\mathbf{k}| = \pm \hbar v_F \sqrt{k_x^2 + k_y^2} = \pm \hbar v_F k \quad (2.6.1)$$

Burada, $\hbar = 2\pi\hbar$ Planck sabitidir ve Fermi hızı, Fermi enerjisi cinsinden tanımlanır: $v_F = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k}$. Şekil 2.9'da gösterildiği gibi, çizgisel dağılımın 3-boyutta grafiği Dirac konisi olarak adlandırılır.



Şekil 2.9 Dirac konisi (Wong ve Akinwande 2011).

Denklem (2.6.1) ile uyumlu olarak, grafende Dirac noktasındaki kütsüz parçacıkların dinamiği Dirac – Weyl Hamilton işlemcisi ile betimlenir (Greiner 2000):

$$H = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \quad (2.6.2)$$

σ 'lar Pauli spin matrisinin bileşenleri ve v_F ise Fermi hızı ve $\frac{c}{300}$ 'dür.

3. SÜPERSİMETRİK KUANTUM MEKANİĞİ YÖNTEMLERİ

H Hamilton işlemcisi ile betimlenen bir kuantum mekaniksel sistemde, Hilbert uzayı ($\mathcal{H}$) üzerine etki eden N tane $Q_i = Q_i^\dagger$, $i = 1, 2, 3, \dots, N$ kendine eşlenik işlemci olduğu varsayalım. Tüm $i, j = 1, 2, 3, \dots, N$ için,

$$\{Q_i, Q_j\} = H\delta_{ij} \quad (3.1)$$

bağıntısı geçerliyse, $\{H, Q_1, Q_2, \dots, Q_N | \mathcal{H}\}$ ile belirlenen kuantum mekaniksel sistem süpersimetriktir denir. Q_{ij} 'ler süper yük işlemcileridir. Bu işlemciler SUSY kuantum mekaniğinde fermiyonlar ile bozonlar arasında bir dönüşüm üretmezler, ancak bir matris Hamilton işlemcisinin aynı özdeğerine karşılık gelen iki dik özfonksiyonu arasında dönüşüm üretirler. (3.1) ile verilen süpercebilden,

$$H = 2Q_1^2 = 2Q_2^2 = \dots = 2Q_N^2 = \frac{2}{N} \sum_{i=1}^N Q_i^2 \quad (3.2)$$

ve

$$[H, Q_i^2] = 0 \quad (2.3)$$

elde edilir (Junker 1996). Süperyük işlemcileri zamana açıkça bağlı olmadıklarından hareket sabitidirler:

$$\frac{dQ_i}{dt} = [H, Q_i] + \frac{\partial Q_i}{\partial t} \quad (2.4)$$

(3.1)'den $H = 2Q_i^2$ 'ler elde edilir. Buradan da açıkça görüldüğü gibi H 'nin özdeğerleri negatif olamaz, yani $E_0 \geq 0$ dır. $E = 0$ ise SUSY kuantum sistemi iyi SUSY'e, $E > 0$ ise kırılmış SUSY'e sahiptir. İyi SUSY durumunda tüm taban durumları süperyükler tarafından yok edilir. SUSY kırılmış ise en az bir i, j çifti için $Q_i \psi_j^{(0)} \neq 0$ dır. Burada, j 'ler $E_0 = 0$ enerjisinin mümkün dejenereliğini etiketler (Junker 1996).

$N = 2$ için süpersimetrik kuantum mekaniği,

$$\{Q_1, Q_2\} = 0, \quad H = 2Q_1^2 = 2Q_2^2 = Q_1^2 + Q_2^2 \quad (3.5)$$

$$Q_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & A_1 \\ A_1^\dagger & 0 \end{pmatrix}, \quad Q_2 = \frac{-i}{\sqrt{2}} \sigma_3 Q_1 = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -A_1 \\ A_1^\dagger & 0 \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

$$Q = \frac{Q_1 + iQ_2}{\sqrt{2}} \quad (3.7)$$

olarak verilir.

3.1 Çarpanlara Ayırma Yöntemi

Süpersimetrik kuantum mekaniği yöntemlerinden biri olan çarpanlara ayırma yöntemi Infeld ve Hull tarafından 1951 yılında kuantum mekaniğinde bir boyutta çözülebilen problemleri sınıflandırmak amacıyla ortaya atılmıştır (Cooper vd. 2001, Infeld ve Hull 1951, Junker 1996). Çarpanlara ayırma yöntemi, çözümü bilinen bir Hamilton işlemcisiinden başlayarak çözülebilen Hamilton işlemci hiyerarşisi kurmaya yarayan bir yöntemdir (Cooper vd. 2001).

Tek parçacık için, tek boyutta kuantum mekaniksel Hamilton işlemcisi,

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_1(x) \quad (3.1.1)$$

olarak tanımlanır. Taban durumu enerjisini $E_{1,0} = 0$ ve karşılık gelen dalga fonksiyonunu $\psi_{1,0}(x)$ ile gösterelim. Eğer, H_1 Hamilton işlemcisinin taban durumu enerjisi sıfır değilse sıfır olacak şekilde bir sayı eklenir ya da çıkartılır. Taban durumu için Schrödinger denklemi aşağıdaki şekilde yazılır:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_{1,0}(x)}{dx^2} + V_1(x) \psi_{1,0}(x) = 0 \quad (3.1.2)$$

Buradan,

$$V_1(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_{1,0}''(x)}{\psi_{1,0}(x)} \quad (3.1.3)$$

olarak elde edilir. Burada, $\psi_{1,0}''(x) = d^2 \psi_{1,0}(x)/dx^2$ şeklinde tanımlıdır. (3.1.3) denklemi $V_1(x)$ potansiyelini taban durumu cinsinden bulmaya izin verir. $V_1(x)$ potansiyel enerjisine sahip Hamilton işlemcisi aşağıdaki gibi çarpanlarına ayrılır:

$$H_1 = A^\dagger A \quad (3.1.4)$$

Burada, $A^\dagger$ ve A birinci mertebeden diferansiyel işlemcilerdir ve birbirlerinin Hermitsel eşleniğidirler:

$$A = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W(x), \quad A^\dagger = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dx} + W(x) \quad (3.1.5)$$

H_1 Hamilton işlemcisine karşılık gelen potansiyel

$$V_1(x) = W^2(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x) \quad (3.1.6)$$

olarak tanımlanır. Burada, $W'(x) = dW(x)/dx$ 'dir. (3.1.6) denklemi bir Ricatti denklemdir. Burada, $W(x)$ genel olarak SUSY kuantum mekaniğinde süperpotansiyel olarak adlandırılır. $H_1\psi_{1,0}(x) = A^\dagger A\psi_{1,0}(x) = 0$ denkleminde $A\psi_{1,0}(x) = 0$ olduğu aşıkardır. Böylece, süperpotansiyel bu eşitlikten taban durumu cinsinden aşağıdaki şekilde yazılır:

$$W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\psi'_{1,0}(x)}{\psi_{1,0}(x)} \quad (3.1.7)$$

H_1 Hamilton işlemcisi ile ilgili SUSY teorisini oluşturmanın sonraki adımı H_2 Hamilton işlemcisini tanımlamaktır. H_2 Hamilton işlemcisi,

$$H_2 = AA^\dagger \quad (3.1.8)$$

olarak tanımlanır. H_2 Hamilton işlemcisinin potansiyeli $V_2(x)$ de süperpotansiyel cinsinden ifade edilir:

$$H_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_2(x), \quad V_2(x) = W^2(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x) \quad (2.1.9)$$

$V_1(x)$ ve $V_2(x)$ potansiyelleri süpersimetrik eş potansiyellerdir. H_1 ve H_2 'nin özdeğerleri, $n > 0$ için yarı pozitif ($E_n^{(1,2)} \geq 0$) olarak tanımlıdır (Cooper vd. 2001). H_1 Hamilton işlemcisinin $E_{1,n}$ özdeğerli özfonksiyonunu $\psi_{1,n}(x) \equiv \psi_{1,n}$ ile gösterelim. H_1 için Schrödinger denklemi,

$$H_1\psi_{1,n} = A^\dagger A\psi_{1,n} = E_{1,n}\psi_{1,n} \quad (3.1.10)$$

şeklindedir. H_2 Hamilton işlemcisinin $E_{2,n}$ özdeğerli özfonksiyonu $\psi_{2,n}$ olmak üzere, H_2 için Schrödinger denklemi,

$$H_2\psi_{2,n} = AA^\dagger\psi_{2,n} = E_{2,n}\psi_{2,n} \quad (3.1.11)$$

olarak yazılır. H_1 için olan Schrödinger denklemi soldan A işlemcisi ile çarpılırsa,

$$A(A^\dagger A\psi_{1,n}) = E_{1,n}(A\psi_{1,n}) \quad (3.1.12)$$

$$(AA^\dagger)A\psi_{1,n} = E_{1,n}(A\psi_{1,n}) \quad (3.1.13)$$

elde edilir. Burada, $AA^\dagger = H_2$ 'dir.

$$H_2\psi_{2,n-1} = E_{1,n}\psi_{2,n-1} \quad (3.1.14)$$

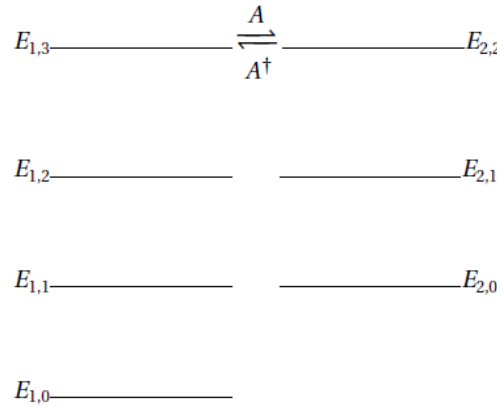
Böylece,

$$E_{1,n} = E_{2,n-1} \quad \text{ya da} \quad E_{1,n+1} = E_{2,n}, \quad E_{1,0} = 0 \quad (1.1.15)$$

sonucuna ulaşılır. Bire boylandırılmış özfonksiyonlar da aşağıdaki şekilde bulunur:

$$\begin{aligned} \psi_{2,n} &= (E_{1,n+1})^{-1/2} A\psi_{1,n+1} \\ \psi_{1,n+1} &= (E_{2,n})^{-1/2} A^\dagger\psi_{2,n} \end{aligned} \quad (3.1.16)$$

Kurulan hiyerarşi sayesinde, H_1 'in özfonksiyonlarına A işlemcisi etki ettirilerek H_2 'nin özfonksiyonları belirlenebilir. Aynı şekilde, H_2 Hamilton işlemcisinin özfonksiyonlarına $A^\dagger$ işlemcisi etki ettirilerek H_1 Hamilton işlemcisinin özfonksiyonları da, taban durumu hariç, oluşturulabilir.



Şekil 3.1 A ve $A^\dagger$ işlemcilerinin etkisi ve süperpoze potansiyellerin enerji düzeyleri.

3.2 Darboux Dönüşümü

Çarpanlarına ayırma yöntemi, çizgisel sistemler için Hamilton işlemcileri arasında bir hiyerarşi oluşturur. Darboux dönüşümleri ise çizgisel ve çizgisel olmayan sistemler için tam olarak çözülebilen problemler hiyerarşisi kurmaya yarayan bir yöntemdir. Darboux dönüşümü ilk olarak 1882'de Jean Gaston Darboux tarafından, Sturm – Liouville diferansiyel denkleminin özel bir durumunun ayar dönüşümü etkisindeki bazı

değişmezlik özelliklerinin incelenmesi sırasında ortaya atılmıştır (Matveev ve Sale 1991).

Sturm-Liouville denklemini ele alalım:

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} + U\psi = \lambda\psi \quad (3.2.1)$$

Burada, U potansiyel, λ özdeğer ve $\psi \equiv \psi(x)$ λ özdeğerine karşılık gelen özfonksiyondur. Darboux dönüşümü altında bu denklem form (şekil) olarak değişmez kalır. Denklemin $\lambda = \lambda_1$ özdeğerine karşılık gelen özfonksiyonu $\psi_1 = \psi_1(x, \lambda)$ olsun ve ψ_1 'in logaritmik türevi $\sigma_1 = \psi_1'/\psi_1$ olarak tanımlansın. Burada $\psi_1' = d\psi_1/dx$ 'dir. Denklemin keyfi ψ özfonksiyonu için Darboux dönüşümü;

$$\psi[1] = \left(\frac{d}{dx} - \sigma_1\right)\psi = \psi' - \frac{\psi_1'}{\psi_1}\psi = \frac{\mathcal{W}(\psi_1, \psi)}{\psi_1} \quad (2.2.2)$$

şeklinde tanımlanır. Burada, $\mathcal{W}(\psi_1, \psi) = \psi_1\psi' - \psi_1'\psi$ Wronskian determinantıdır. Darboux dönüşümü aranan fonksiyonda yapılan bir dönüşümdür. $\psi[1]$ çözümü de λ özdeğerli Sturm – Liouville denklemini sağlar:

$$-\psi''[1] + U[1]\psi[1] = \lambda\psi[1] \quad (3.2.3)$$

Burada potansiyel ise,

$$U[1] = U - 2\sigma_1' = U - 2\frac{d^2}{dx^2}\ln(\psi_1) \quad (3.2.4)$$

olarak dönüşür.

Bu dönüşüm art arda tekrarlanarak Sturm – Liouville denkleminin bir hiyerarşisi kurulabilir. Darboux dönüşümlerinin genel bir ifadesi, 1955 yılında Crum tarafından bulunmuştur. $\psi_1, \dots, \psi_N$ Sturm – Liouville denkleminin $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ özdeğerlerine karşılık gelen çözümleri olmak üzere, keyfi bir ψ özfonksiyonuna N kere Darboux dönüşümü uygulandığında

$$\psi[N] = \frac{\mathcal{W}(\psi_1, \dots, \psi_N, \psi)}{\mathcal{W}(\psi_1, \dots, \psi_N)} \quad (3.2.5)$$

elde edilir (Matveev ve Salle 1991). Bu çözüm de Sturm – Liouville denklemini sağlar:

$$-\psi''[N] + U[N]\psi[N] = \lambda\psi[N] \quad (3.2.6)$$

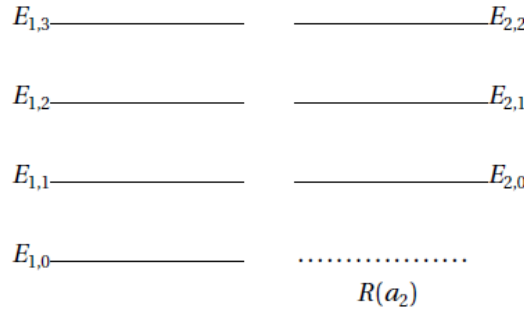
Burada potansiyel $U[N] = U - 2\frac{d^2}{dx^2}\ln[\mathcal{W}(\psi_1, \dots, \psi_N)]$ olarak dönüşür.

3.3 Şekil Değişmezlik

Süpersimetrik kuantum mekaniğinde şekil değişmezlik kavramı ilk kez Gendestein tarafından 1983'te ortaya atılmıştır. Bu metot, analitik olarak çözülebilen durumlar için kullanılır ve tüm bağlı durum enerji özdeğerlerini ve özfonksiyonlarını verir (Cooper vd. 2001). Önceki bölümde $V_1(x)$ ve $V_2(x)$ olarak tanımladığımız eşpotansiyeller, şekil olarak aynı fakat bağlı oldukları bazı parametreler birbirinden farklı olduğundan şekil değişmez potansiyel olarak adlandırılır. Örneğin, kuyu potansiyeli için, kuyunun genişliğinin ya da derinliğinin değişmesi durumudur (Cooper vd. 2001). Bu parametrelere bağlı eş potansiyeller $V_1(x; a_2)$ ve $V_2(x; a_1)$ şeklinde tanımlanır. Burada, a_1 ve a_2 'ler eş potansiyellerin parametreleridir:

$$V_2(x; a_1) = V_1(x; a_2) + R(a_1) \quad (3.3.1)$$

Yukarıdaki koşulu sağlayan potansiyeller şekil değişmez olarak adlandırılır. $R(a_1)$, x 'den bağımsızdır ve a_1, a_2 'nin bir fonksiyonudur ($a_2 = f(a_1)$) (Cooper vd. 2001).



Şekil 3.2 Şekil değişmez potansiyellere karşılık gelen enerji özdeğerleri.

3.4 Bağlaştırm Yöntemi

Bağlaştırm yöntemi, tam olarak çözülebilen çizgisel ve çizgisel olmayan problemleri çözmek ve bunların hiyerarşilerini kurmak için kullanılan bir yöntemdir. $\mathcal{L}$ bağlaştırm işlemcisi, aynı tipte diferansiyel denklem veya matris işlemcilerini birbirine bağlar. $\mathcal{L}$, kuantum mekaniğinde çizgisel diferansiyel işlemci olarak kullanılır. $\mathcal{L}$ işlemcisi, H_0 ve H_1 Hamilton işlemcilerini aşağıdaki gibi birbiri ile ilişkilendirir:

$$\mathcal{L}H_0 = H_1\mathcal{L} \quad (3.4.1)$$

Bu bağıntıdan aşağıdaki iki sonuç çıkartılabilir:

(i) Eğer ψ_0 , H_0 'ın E_0 özdeğerli bir özfonksiyonu ise $\psi_1 = \mathcal{L}\psi_0$ da H_1 'in aynı E_0 özdeğerli bir özfonksiyonudur.

(ii) $\mathcal{L}^\dagger$, ters yönde bağlaştırım işlemini gerçekleştirir:

$$\mathcal{L}^\dagger H_1 = H_0\mathcal{L}^\dagger \quad (3.4.2)$$

(3.4.2)'yi soldan $\mathcal{L}$ ile çarpılıp,

$$\mathcal{L}\mathcal{L}^\dagger H_1 = \mathcal{L}H_0\mathcal{L}^\dagger$$

(3.4.1) ifadesi de kullanılarak aşağıdaki bağıntı elde edilir:

$$[\mathcal{L}\mathcal{L}^\dagger, H_1] = 0 \quad (3.4.3)$$

Buradan, $\mathcal{L}\mathcal{L}^\dagger$ 'in H_1 Hamilton işlemcisinin simetri işlemcisi olduğu sonucu çıkartılır. Benzer olarak, H_0 'ın simetrisi de aşağıdaki gibi bulunur:

$$[H_0, \mathcal{L}^\dagger\mathcal{L}] = 0 \quad (3.4.4)$$

Çarpanlarına ayırma yöntemi için bağlaştırım bağıntıları ise aşağıdaki şekilde tanımlanır:

$$\begin{aligned} AH_0 &= H_1A \\ A^\dagger H_1 &= H_0A^\dagger \end{aligned} \quad (3.4.5)$$

3.5 Pöschl – Teller Potansiyeli

Pöschl –Teller potansiyeli ismini Herta Pöschl ve Edward Teller'den alır (Libby vd. 2010). Trigonometrik Pöschl –Teller ya da Scarf potansiyeli

$$V_l(x) = \frac{l(l-1)}{\cos^2(x)} \quad (3.5.1)$$

şeklinde tanımlıdır. Bu potansiyele karşılık gelen Hamilton işlemcisi ve Schrödinger denklemi aşağıdaki gibi yazılır:

$$H_l = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{l(l-1)}{\cos^2(x)} \quad (3.5.2)$$

$$H_l \psi_{l,n} = E_{l,n} \psi_{l,n}, \quad E_{l,n} = (l+n)^2, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (3.5.3)$$

Burada, l potansiyeli, n de enerji düzeylerini etiketler. Notasyonu kolaylaştırmak için, $\hbar^2 = 2m = 1$ alınmıştır. Bu Schrödinger denklemi özel fonksiyonlar cinsinden tam olarak çözülebilir.

H_l Hamilton işlemcisi aşağıdaki gibi çarpanlarına ayrılabilir:

$$H_l = A_l^+ A_l^- + \lambda_l \quad (3.5.4)$$

ve H_l Hamilton işlemcilerinin bir hiyerarşisi kurulabilir. Burada kolaylık açısından, (3.1) kesiminde A^+ ve A^- olarak tanıtilan birinci mertebeden diferansiyel işlemciler, sırasıyla A^+ ve A^- olarak adlandırılmıştır. Daha önce tanıtilan çarpanlara ayırma yönteminden farkı taban durumunun sıfır olmamasıdır. Taban durumu $n = 0$ için $E_{l,0} = l^2$ olur. Taban durumu sıfır olacak şekilde, H_l 'den $E_{l,0} = l^2$ çıkartılır: $H_l - \lambda_l = A_l^+ A_l^-$.

Çarpan işlemcileri, $A^\pm = \mp \frac{d}{dx} + f_l(x)$ olarak seçilebilir. $A^\pm$ işlemcileri ile Pöschl – Teller potansiyelinin bir hiyerarşisi oluşturulur ve bu işlemciler aracılığı ile tüm potansiyellere ait özdeğer ve özfonksiyonlar elde edilir. Böylece, hiyerarşideki Hamilton işlemcilerine karşılık gelen bağlı durum diferansiyel denklemlerinin tamamını doğrudan çözme gereksinimi ortadan kalkar. $l \geq 2$ için bağlı durumlar vardır.

Şimdi, $f_l(x)$ fonksiyonlarını ve λ_l 'yi bulalım. Bu amaçla çarpan işlemcilerini (3.5.4)'de yerine yazalım:

$$H_l = A_l^+ A_l^- + \lambda_l = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{l(l-1)}{\cos^2(x)} \quad (3.5.5)$$

$$A_l^+ A_l^- + \lambda_l = -\frac{d^2}{dx^2} - \frac{df_l(x)}{dx} + f_l^2(x) + \lambda_l \quad (3.5.6)$$

(3.5.5) ve (3.5.6) denklemleri karşılaştırıldığında, potansiyel $f_l(x)$ cinsinden

$$V_l(x) = \frac{l(l-1)}{\cos^2(x)} = -\frac{df_l(x)}{dx} + f_l^2(x) + \lambda_l \quad (3.5.7)$$

şeklinde ifade edilir. Bu eşitlikten, $f_l(x) = a \tan(x)$ ve λ_l de

$$\lambda_l = a^2 = l^2 \quad (3.5.8)$$

olarak bulunur. Böylece, çarpan işlemcilerinin açık ifadesi

$$A^\pm = \mp \frac{d}{dx} + l \tan(x) \quad (3.5.9)$$

elde edilir.

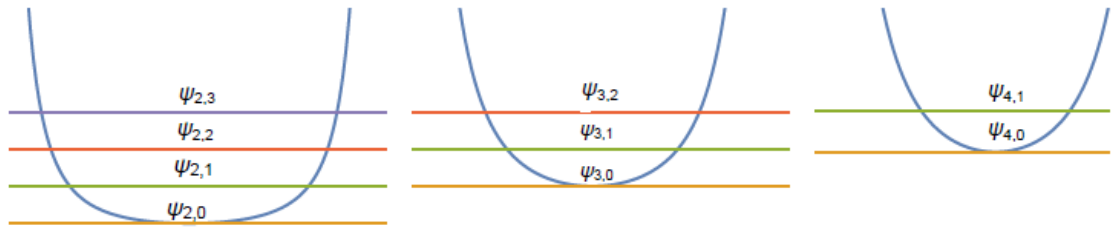
$A^\pm$ işlemcilerinin yerleri değiştirilip, yukarıdaki işlemler tekrar yapıldığında,

$$H_{l+1} = A_l^- A_l^+ + l^2 = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{l(l+1)}{\cos^2(x)} \quad (3.5.10)$$

elde edilir. (3.5.5) ve (3.5.10) kullanılarak,

$$H_l = A_l^+ A_l^- + \lambda_l = A_{l-1}^- A_{l-1}^+ + \lambda_{l-1} \quad (3.5.11)$$

Hamilton işlemcileri için hiyerarşiyi veren eşitlik bulunmuş olur. Hiyerarşide yer alan potansiyeller şekil değişmez potansiyellerdir. Şekil 3.3'ten görüleceği gibi potansiyelin parametresi değiştiğinde potansiyellerin sadece derinlikleri değişmektedir.

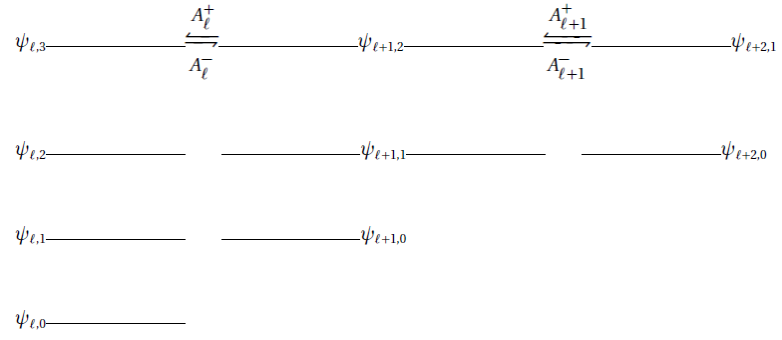


Şekil 3.3 Hiyerarşide yer alan Hamilton işlemcilerine karşı gelen potansiyeller. Sağ taraftan itibaren sırası ile $l = 2$, $l = 3$ ve $l = 4$ için potansiyeller.

Buradan, bağlantırım bağıntıları kolaylıkla yazılır:

$$A_l^- H_l = H_{l+1} A_l^-, \quad A_l^+ H_{l+1} = H_l A_l^+ \quad (3.5.12)$$

Eğer, H_l Hamilton işlemcisinin özfonksiyonları biliniyorsa, H_{l+1} işlemcisinin özfonksiyonları, A_l^- işlemcisi H_l 'nin özfonksiyonlarına etki ettirilerek elde edilebilir. Ya da tersine H_{l+1} 'in özfonksiyonlarına A_l^+ işlemcileri etki ettirilerek H_l 'ninkiler elde edilir. Şekil 3.4'de bu etkiler gösterilmiştir.



Şekil 3.4 $A_l^\pm$ ve $A_{l+1}^\pm$ işlemcilerinin H_l ve H_{l+1} işlemcilerinin özfonksiyonlarına etkileri.

4. GRAFENDE ELEKTRİK VE MANYETİK ALAN ETKİSİ ALTINDA DİRAC FERMİYONLARININ ANALİTİK ÇÖZÜMLERİ

4.1 Düzlemde Dirac – Weyl Denklemi ve SUSY Eş Hamilton İşlemcileri

Grafende dış manyetik ve elektrik alan etkisi altında, kütsesiz, spini $\frac{1}{2}$ ve yükü elektronun yüküne eşit olan Dirac parçacıklarının hareketini tanımlayan Dirac – Weyl denklemi aşağıdaki gibidir (Greiner 2000, Kuru vd. 2009, Ateş vd. 2022):

$$v_F(\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}))\Psi(\mathbf{x}) = (E - V(\mathbf{x}))\Psi(\mathbf{x}) \quad (4.1.1)$$

Burada, v_F parçacıkların grafendeki Fermi hızı, $\mathbf{x} = (x, y)$, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ Pauli spin matrisi, $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$ momentum işlemcisi, $\mathbf{A}$ manyetik vektör potansiyel ve $V(\mathbf{x})$ ise elektriksel potansiyeldir. Bu potansiyellerin y – yönündeki ötelemeler boyunca simetrik olduğunu ve birbirlerine dik olduklarını varsayalım. Yani elektrik alan xy – düzleminde, manyetik alan ise grafen düzlemine (xy – düzlemine) dik (z – yönünde) olsun. Böylece, bu potansiyeller (Kuru vd. 2009),

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}) = (0, A_y(x), 0), \quad V(\mathbf{x}) = V(x) \quad (4.1.2)$$

olarak seçilirse, manyetik alan $\mathbf{B}(x) = A'_y(x)\hat{z} = \frac{dA_y(x)}{dx}\hat{z}$ ve elektrik alan $\mathbf{E}(x) = -V'(x)\hat{x} = -\frac{dV(x)}{dx}\hat{x}$ şeklindedir. Burada $\hat{z}$, z – yönündeki ve $\hat{x}$ de x – yönündeki birim vektörlerdir. Daha sonra, (4.1.1)'deki dalga fonksiyonu, $p_y = -i\hbar d/dy$ öteleme işlemcisinin $\hbar k$ özdeğerli özfonksiyonu olacak şekilde seçilebilir:

$$\Psi(\mathbf{x}) = \Psi(x, y) = e^{iky} \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ i\psi_2(x) \end{pmatrix}, \quad p_y \Psi(x, y) = \hbar k \Psi(x, y) \quad (4.1.3)$$

Burada, i kompleks birim sayıdır. Bu alanlar ve işlemciler (4.1.1)'de yerine yazıldığında,

$$\begin{aligned} \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \partial_x + k - \frac{e}{\hbar} A_y(x) \\ -\partial_x + k - \frac{e}{\hbar} A_y(x) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix} \\ = (E - V(x)) \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.1.4)$$

elde edilir. Burada, $\partial_x \equiv \frac{d}{dx}$ olarak tanımlıdır. Bu denklem bir matris diferansiyel özdeğer problemi olarak değerlendirilebilir. Eşitliğin sol tarafındaki matris diferansiyel işlemci Hermitseldir ve E enerji özdeğeridir. Bu denklemi çözmek amacıyla, öncelikle bu denklemin köşegen hale getirilip getirilemeyeceğini görmek için düzenleyelim:

$$\begin{pmatrix} \partial_x & 0 \\ 0 & \partial_x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(k + \frac{e}{\hbar} A_y(x)\right) & -(E - V(x))/\hbar v_F \\ (E - V(x))/\hbar v_F & -\left(k + \frac{e}{\hbar} A_y(x)\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (4.1.5)$$

Denklemi daha basit hale getirmek için, aşağıdaki dönüşümler yapılabilir:

$$W(x) = k + \frac{e}{\hbar} A_y(x) \equiv k + \mathcal{A}_y(x), \quad \Delta(x) = \frac{E}{\hbar v_F} - \frac{V(x)}{\hbar v_F} \equiv \varepsilon - \mathcal{V}(x) \quad (4.1.6)$$

Burada, $W(x)$ ve $\Delta(x)$ sırası ile manyetik ve elektriksel potansiyeller ile ilişkilidir. Böylece, Dirac – Weyl denklemi iki denklemden oluşan bir çizgisel denklem sistemi olarak ifade edilebilir (Ateş vd. 2022):

$$\partial_x \Psi_R(x) = M \Psi_R(x) \quad (4.1.7)$$

Burada $M \equiv M(x)$, 2×2 'lik bir kare matris ve $\Psi_R(x)$ ise 2×1 'lik bir sütun matrisidir:

$$M = \begin{pmatrix} W(x) & -\Delta(x) \\ \Delta(x) & -W(x) \end{pmatrix}, \quad \Psi_R(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix} \quad (4.1.8)$$

Şimdi, (4.1.7) ile verilen reel denklem sisteminin, $\Psi_R(x) = \Psi_R^*(x)$ reel çözümlerini bulalım:

$$\psi_1(x) = \psi_1^*(x), \quad \psi_2(x) = \psi_2^*(x)$$

Farklı özdeğerlere karşılık gelen $\Psi_R(x)$ özfonksiyonları dik (ortogonal) olmalıdır. Yani, eğer $E \neq E'$ ise $\langle \Psi_R(x), \Psi_{R'}(x) \rangle = 0$ 'dır.

(4.1.7)'nin bir kez daha türevi alınırsa

$$\partial_{xx} \Psi_R(x) = (M' + M^2) \Psi_R(x) \quad (4.1.9)$$

elde edilir. Burada, $\partial_{xx} \equiv \frac{d^2}{dx^2}$ olarak tanımlıdır ve M^2 köşegendir, fakat $M' \equiv \frac{dM(x)}{dx}$ köşegen değildir:

$$M' = \begin{pmatrix} W'(x) & -\Delta'(x) \\ \Delta'(x) & -W'(x) \end{pmatrix}, \quad M^2 = \begin{pmatrix} W^2(x) - \Delta^2(x) & 0 \\ 0 & W^2(x) - \Delta^2(x) \end{pmatrix} \quad (4.1.10)$$

Ancak, M' köşegen hale getirilebilir. Bunun için öncelikle M' 'nin karesini alınır:

$$M'^2 = (W'(x)^2 - \Delta'(x)^2)I \quad (4.1.11)$$

Burada, I birim matrisdir. Böylece, M'^2 'nin özdeğerlerinden yararlanılarak, M' 'nin iki özdeğeri elde edilir:

$$\lambda_{\pm} = \pm \sqrt{W'(x)^2 - \Delta'(x)^2} = \pm \sqrt{\mathcal{A}_y'^2 - \mathcal{V}'^2} \quad (4.1.12)$$

4.2 Çözülebilir Durumlar

Bu bölümde, M' matrisi ∂_{xx} diferansiyel işlemcisi ile sıra değiştiren bir sabit matris (T) aracılığıyla $M' \rightarrow D = T^{-1}MT$ köşegenleştirilebilir. Bunun mümkün olduğu üç durum vardır (Ateş vd. 2022).

4.2.1 Saf manyetik alan $\mathcal{V}(x) = 0$

İlk durumda $\Delta'(x) = \mathcal{V}'(x) = 0$ 'dır, yani sadece manyetik alan vardır:

$$M' = \begin{pmatrix} W'(x) & 0 \\ 0 & -W'(x) \end{pmatrix}, \quad M^2 = (W(x)^2 - \varepsilon^2)I \quad (4.2.1)$$

Bu en basit durumdur. Bu durumda manyetik alan xy – düzlemine diktir. M' matrisi ise köşegendir. (4.1.9) denklemi aşağıdaki gibi olur ve sistemin süpersimetrik formunu gösterir:

$$\begin{pmatrix} -\partial_{xx} + W'(x) + W^2(x) & 0 \\ 0 & -\partial_{xx} - W'(x) + W^2(x) \end{pmatrix} \Psi_R(x) = \varepsilon^2 \Psi_R(x) \quad (4.2.2)$$

Burada, $W(x)$ süperpotansiyeldir ve (4.1.6) daki gibi tanımlıdır.

(4.1.5) denklemi sadece manyetik alanın varlığında aşağıdaki şekilde bağlaşımlı iki denklem olarak yazılabilir (Kuru vd. 2009):

$$\left(\frac{d}{dx} + k + \frac{e}{\hbar} A_y \right) \psi_2(x) = \varepsilon \psi_1(x) \quad (4.2.3)$$

$$\left(-\frac{d}{dx} + k + \frac{e}{\hbar} A_y \right) \psi_1(x) = \varepsilon \psi_2(x) \quad (4.2.4)$$

(4.2.3)'den $\psi_1(x)$ çekilip, (4.2.4)'de ve (4.2.4)'den $\psi_2(x)$ çekilip (4.2.3)'de yerine yazılırsa, iki tane birbirinden bağımsız Schrödinger denklemi elde edilir:

$$H_1\psi_1(x) = \left[-\frac{d^2}{dx^2} + \left(k + \frac{eA_y}{\hbar} \right)^2 + \frac{e}{\hbar} \left(\frac{dA_y}{dx} \right) \right] \psi_1(x) = \varepsilon^2 \psi_1(x) \quad (4.2.5)$$

$$H_2\psi_2(x) = \left[-\frac{d^2}{dx^2} + \left(k + \frac{eA_y}{\hbar} \right)^2 - \frac{e}{\hbar} \left(\frac{dA_y}{dx} \right) \right] \psi_2(x) = \varepsilon^2 \psi_2(x) \quad (4.2.6)$$

Burada, $\varepsilon = \varepsilon^2 = E^2/v_F^2\hbar^2$ 'dir. H_1 ve H_2 efektif Hamilton işlemcileri aşağıdaki şekilde yazılır:

$$H_1 = -\frac{d^2}{dx^2} + V_1(x), \quad H_2 = -\frac{d^2}{dx^2} + V_2(x) \quad (4.2.7)$$

$$V_1(x) = \left(k + \frac{eA_y}{\hbar} \right)^2 + \frac{e}{\hbar} \left(\frac{dA_y}{dx} \right), \quad V_2(x) = \left(k + \frac{eA_y}{\hbar} \right)^2 - \frac{e}{\hbar} \left(\frac{dA_y}{dx} \right)$$

Şimdi, birbirlerinin Hermitsel eşleniği olan birinci mertebeden diferansiyel işlemcileri tanımlayalım:

$$L^\pm = \mp \frac{d}{dx} + W(x) \quad (4.2.8)$$

Burada, $W(x)$ süperpotansiyeli aşağıdaki gibi tanımlıdır (Kuru vd. 2009):

$$W(x) = k + \frac{eA_y}{\hbar} \quad (4.2.9)$$

Bu işlemciler kullanılarak (4.2.3) ve (4.2.4) denklemleri

$$L^-\psi_2(x) = \varepsilon\psi_1(x), \quad L^+\psi_1(x) = \varepsilon\psi_2(x) \quad (4.2.10)$$

olarak yazılır. Böylece, H_1 ve H_2 Hamilton işlemcileri,

$$H_1 = L^-L^+, \quad H_2 = L^+L^- \quad (4.2.11)$$

olarak çarpanlarına ayrılabilir. Bu Hamilton işlemcilerine süpersimetrik Hamilton işlemcileri denir. $V_1(x)$ ve $V_2(x)$ süperpoş potansiyelleri de süperpotansiyel cinsinden aşağıdaki şekilde tanımlanır:

$$V_1(x) = W^2(x) + W'(x), \quad V_2(x) = W^2(x) - W'(x) \quad (4.2.12)$$

Burada, W 'lar x 'in türevlenebilir fonksiyonudur ve $W'(x) = dW(x)/dx$ olarak tanımlıdır. H_1 ve H_2 için bağlaştırmı bağıntıları ise aşağıdaki şekildedir:

$$L^+ H_1 = H_2 L^+, \quad L^- H_2 = H_1 L^- \quad (4.2.13)$$

H_2 Hamilton işlemcisinin enerji özdeğerleri $\varepsilon_{2,n}$, $n = 0, 1, 2, \dots$ ile ifade edilir. L^- , H_2 Hamilton işlemcisinin taban durumunun yok edici işlemcisi olsun (Kuru vd. 2009):

$$L^- \psi_{2,0}(x) = 0 \quad (4.2.14)$$

H_2 'nin taban durumu enerji özdeğeri $\varepsilon_{2,0} = 0$ 'dır. H_1 'in enerji özdeğerleri $\varepsilon_{1,n}$ ve normalize edilmiş özfonksiyonu ise $\psi_{1,n}$ ile gösterilir:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,n-1} &= \varepsilon_{2,n} \\ \psi_{1,n-1}(x) &= \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{2,n}}} L^- \psi_{2,n}(x) \end{aligned} \quad (4.2.15)$$

Yukarıdaki sonuçlar, (4.1.3) ile verilen Dirac–Weyl denkleminde yerine yerleştirildiğinde,

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\pm,n} &= \pm \sqrt{\varepsilon_{2,n}} = \pm \sqrt{\varepsilon_{1,n-1}} \\ \Psi_0(x, y) &= e^{iky} \begin{pmatrix} 0 \\ i\psi_{2,0}(x) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.2.16)$$

$$\Psi_n(x, y) = e^{iky} \begin{pmatrix} \psi_{1,n-1}(x) \\ i\psi_{2,n}(x) \end{pmatrix}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.2.17)$$

elde edilir. (4.2.16) ve (4.2.17) ile verilen kesikli spektrum, birbirlerinin simetriği olan pozitif ve negatif enerjiye sahiptir. Bunlar sırası ile elektronlar ve deşiklerle ilgilidir.

(4.2.16)'dan yararlanılarak olasılık yoğunluğu aşağıdaki şekilde hesaplanır:

$$\rho_n(x) = (\Psi_n)^\dagger \Psi_n = \left(\psi_{1,n-1}(x) \right)^2 + \left(\psi_{2,n}(x) \right)^2 \quad (4.2.18)$$

y doğrultusundaki akım yoğunluğu ise,

$$j_n(x) = ev_F (\Psi_n)^\dagger \sigma_y \Psi_n = 2ev_F \psi_{1,n-1}(x) \psi_{2,n}(x) \quad (4.2.19)$$

olur.

4.2.1.1 Sabit manyetik alan

Grafen yüzeyine dik, pozitif z yönünde sabit manyetik alan elde etmek için, $A_y(x) = B_0 x$ olarak seçilir ve $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ 'dan $\mathbf{B} = (0, 0, B_0)$ olarak elde edilir. (4.2.9)'dan süperpotansiyel ve manyetik alan aşağıdaki şekilde yazılır (Kuru vd. 2009):

$$W(x) = k + \frac{eB_0}{\hbar} x \equiv k + \frac{1}{2} \omega x, \quad B_0 = \frac{\hbar}{2e} \omega \quad (4.2.20)$$

$V_1(x)$ ve $V_2(x)$ süperpotansiyelleri, $W(x)$ cinsinden aşağıdaki şekilde elde edilir:

$$\begin{aligned} V_1(x) &= \frac{\omega^2}{4} \left(x + \frac{2k}{\omega} \right)^2 + \frac{1}{2} \omega \\ V_2(x) &= \frac{\omega^2}{4} \left(x + \frac{2k}{\omega} \right)^2 - \frac{1}{2} \omega \end{aligned} \quad (2.2.21)$$

Bu potansiyeller şekil değişmezdir ve bunlara karşılık gelen Hamilton işlemcileri (H_1 ve H_2) için enerji özdeğerlerinin ilişkisi aşağıdaki gibidir (Cooper vd. 2001):

$$\varepsilon_{2,0} = 0, \quad \varepsilon_{1,n-1} = \varepsilon_{2,n} = n\omega, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.2.22)$$

Harmonik salınıcı potansiyeline karşılık gelen özfonksiyonlar, Hermite polinomları cinsinden aşağıdaki şekildedir:

$$\begin{aligned} \psi_{2,n}(z(x)) &= \psi_{1,n}(z(x)) = C_n e^{-\frac{1}{2}z^2} H_n(z) \equiv \varphi_n(x), \\ z(x) &= \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(x + \frac{2k}{\omega} \right) \end{aligned} \quad (4.2.23)$$

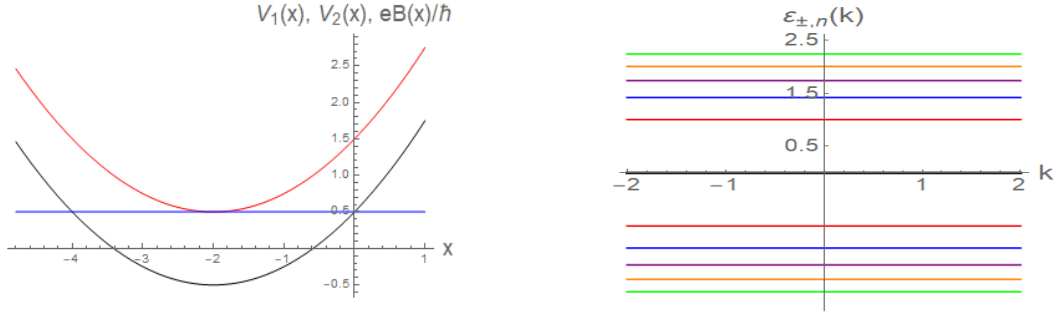
C_n , normalizasyon sabitidir. $\varepsilon = \varepsilon^2 = E^2 / v_F^2 \hbar^2$ gözönünde bulundurularak, (4.2.22)'den Dirac–Weyl denkleminin özdeğerleri,

$$\varepsilon_{\pm,n} = \pm \sqrt{n\omega}, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (4.2.24)$$

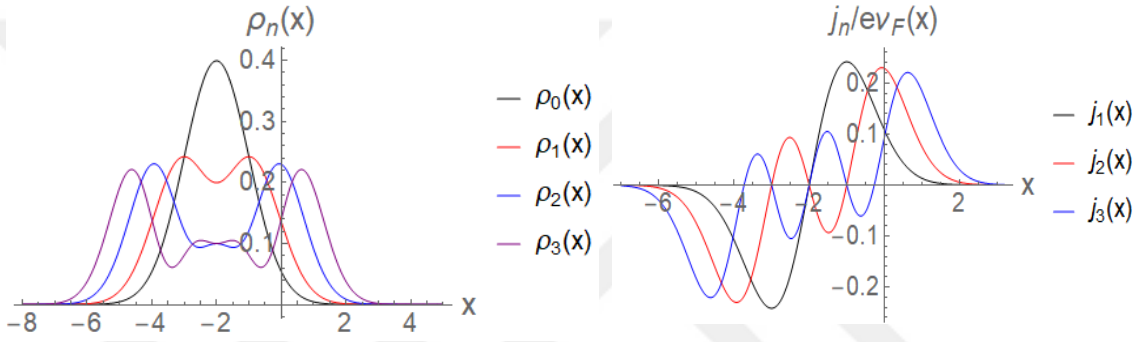
ve (4.2.17)'den karşılık gelen dalga fonksiyonu aşağıdaki şekilde bulunur:

$$\begin{aligned} \Psi_0(x, y) &= e^{iky} \begin{pmatrix} 0 \\ i\varphi_0(x) \end{pmatrix}, \\ \Psi_n(x, y) &= e^{iky} \begin{pmatrix} \varphi_{n-1}(x) \\ i\varphi_n(x) \end{pmatrix}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (4.2.25)$$

(4.2.22) kesikli spektrumu, k dalga sayısına bağlı değildir.



Şekil 4.1 Sol taraftaki grafikte; $V_1(x)$ (en üste), $V_2(x)$ (en altta) ve $B(x) = \frac{1}{2}$ (ortada) manyetik alan çizdirilmiştir. Sağ taraftaki grafikte ise $n = 0, 1, \dots, 5$ için enerji özdeğerleri çizdirilmiştir.



Şekil 4.2 $B(x) = 0.5$ sabit bir manyetik alanı için, sol taraftaki grafik olasılık yoğunluğunu ($n = 0, 1, 2, 3$) ve sağ taraftaki grafik ise y yönündeki akım yoğunluğu ($n = 1, 2, 3$) göstermektedir.

4.2.1.2 Hiperbolik bariyer

Bir diğer çözülebilir durum, hiperbolik Pöschl – Teller potansiyeline yol açan vektör potansiyeli seçimidir: $A_y(x) = \frac{B_0}{\alpha} \tanh \alpha x$. Böylece, pozitif z yönündeki hiperbolik manyetik alan aşağıdaki şekilde yazılır (Kuru vd. 2009):

$$\mathbf{B}(x) = \left(0, 0, \frac{B_0}{\cosh^2 \alpha x}\right) \quad (4.2.26)$$

Bu durumda, süperpotansiyel

$$W(x) = k + D \tanh \alpha x, \quad D = \frac{eB_0}{\hbar c \alpha} \quad (4.2.27)$$

ve süpereş potansiyeller

$$\begin{aligned} V_1(x) &= D^2 + k^2 - D(D - \alpha) \operatorname{sech}^2 \alpha x + 2kD \tanh \alpha x \\ V_2(x) &= D^2 + k^2 - D(D + \alpha) \operatorname{sech}^2 \alpha x + 2kD \tanh \alpha x \end{aligned} \quad (4.2.28)$$

şeklindedir. Bu potansiyeller Rosen – Morse II potansiyeli olarak adlandırılırlar (Cooper vd. 2001). Sadece $k < D$ için H_1 ve H_2 Hamilton işlemcileri sonlu kesikli bir spektruma sahip olur ve enerji özdeğerleri,

$$\varepsilon_{2,n} = \varepsilon_{1,n-1} = D^2 + k^2 - (D - n\alpha)^2 - \frac{k^2 D^2}{(D - n\alpha)^2} > 0 \quad (4.2.29)$$

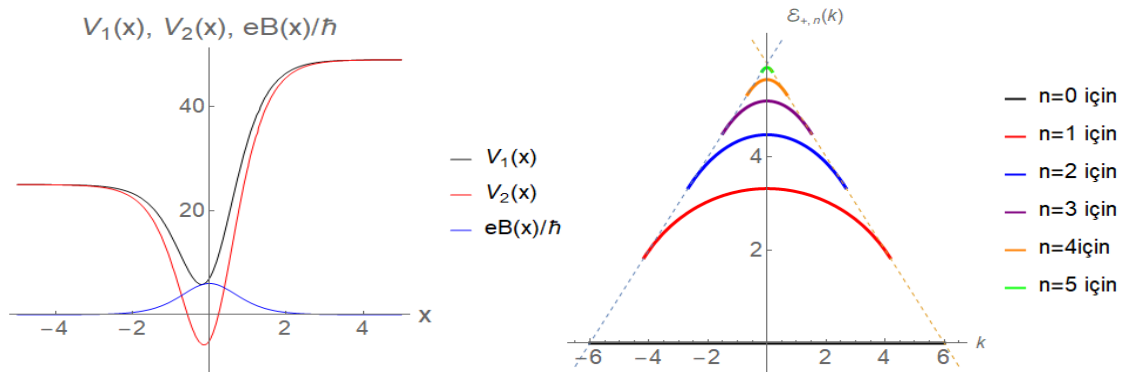
ile verilir. Burada, $n = 0, 1, 2, \dots, N$ değerlerini alır ve $N\alpha < D < (N + 1)\alpha$ 'dır. (4.2.28)'deki potansiyeller için çözüm Jacobi polinomları cinsinden bulunurlar:

$$\begin{aligned} \psi_{j,n}(z(x)) &= (1 - z)^{(s_j - n + a_j)/2} (1 + z)^{(s_j - n - a_j)/2} \\ &\times P_n^{(s_j - n + a_j, s_j - n - a_j)}(z) \end{aligned} \quad (4.2.30)$$

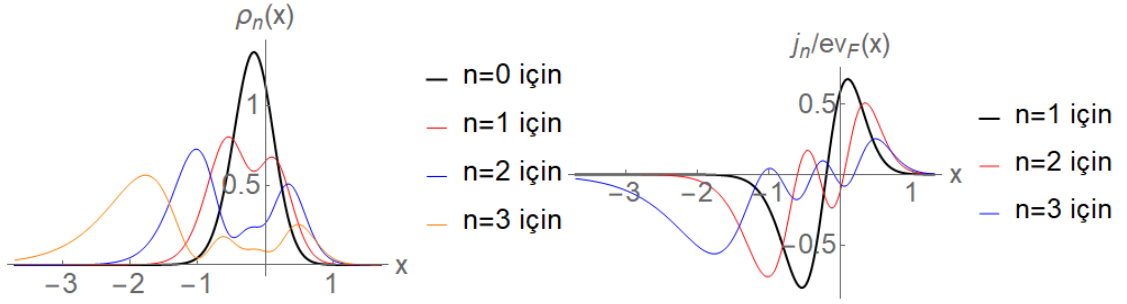
Burada, $z = \tanh \alpha x$, $s_1 = \frac{D}{\alpha} - 1$, $s_2 = s_1 + 1$, $a_1 = \frac{kD}{\alpha(D - n\alpha + \alpha)}$ ve $a_2 = \frac{kD}{\alpha(D - n\alpha)}$ 'dır. $P_n^{(a,b)}$ ise Jacobi polinomlarını ($a, b > -1$) göstermektedir.

(4.1.1)'den Dirac – Weyl denkleminin kesikli enerji özdeğerleri aşağıdaki şekilde yazılır:

$$\mathcal{E}_{\pm,n} = \pm \hbar v_F \sqrt{D^2 + k^2 - (D - n\alpha)^2 - \frac{k^2 D^2}{(D - n\alpha)^2}} \quad (4.2.31)$$



Şekil 4.3 Hiperbolik bariyer: Soldaki grafikte, $\alpha = 1$, $D = 6$ ve $k = 1$ için, V_1 ve V_2 efektif potansiyelleri ve manyetik alanın grafiği çizdirilmiştir. Sağdaki grafikte ise k dalga sayısına bağlı ayrı enerji özdeğerleri verilmiştir.



Şekil 4.4 Sol tarafta olasılık yoğunluğu $\rho_n(x)$ ve sol tarafta akım yoğunluğu $j_n(x)$ farklı n değerleri için çizdirilmiştir. Burada, $\alpha = 1$, $k = 1$ ve $D = 6$ alınmıştır.

4.2.1.3 Trigonometrik kuyu

Çözülebilir durumlardan bir diğeri ise trigonometrik kuyudur. $+z$ yönünde trigonometrik manyetik alan aşağıdaki gibi verilir:

$$\mathbf{B}(x) = \left(0, 0, \frac{B_0}{\sin^2 \alpha x}\right), \quad 0 \leq \alpha x \leq \pi \quad (4.2.32)$$

Bu durumda, x için sınırlar $(0, \pi/\alpha)$ şeklindedir. Sınırlarda manyetik alan sonsuza gider. Bu manyetik alana yol açan vektör potansiyel, $A_y = -\frac{B_0}{\alpha} \cot \alpha x$ olarak tanımlıdır. Böylece, süperpotansiyel

$$W(x) = k - D \cot \alpha x, \quad D = \frac{eB_0}{\hbar \alpha} \quad (4.2.33)$$

ve süpereş potansiyeller

$$\begin{aligned} V_1(x) &= k^2 - D^2 + D(D + \alpha) \operatorname{cosec}^2 \alpha x - 2kD \cot \alpha x \\ V_2(x) &= k^2 - D^2 + D(D - \alpha) \operatorname{cosec}^2 \alpha x - 2kD \cot \alpha x \end{aligned} \quad (4.2.34)$$

şeklindedir (Cooper vd. 2001). Bu potansiyellere Rosen – Morse I potansiyeli denir. Bu potansiyellere karşılık gelen enerji özdeğerleri

$$\varepsilon_{2,n} = \varepsilon_{1,n-1} = -D^2 + k^2 + (D + n\alpha)^2 - \frac{k^2 D^2}{(D + n\alpha)^2} \quad (4.2.35)$$

ve özfonksiyonları

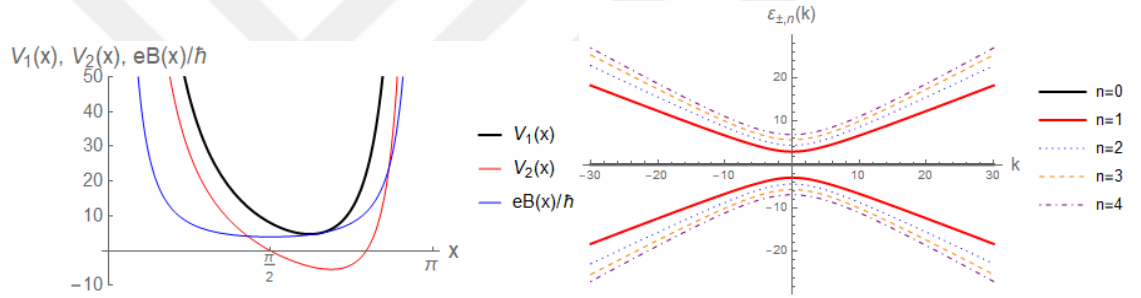
$${}_n(z(x)) = (z^2 - 1)^{-\frac{(s_j+n)}{2}} e^{a_j \alpha x} P_n^{(-s_j-n+ia_j, -s_j-n-ia_j)}(z), \quad j = 1, 2 \quad (4.2.36)$$

şeklindedir. Burada, $z = icot\alpha x$, $s_2 = \frac{D}{\alpha}$, $a_2 = -\frac{kD}{\alpha(D+n\alpha)}$, $s_1 = s_2 + 1$ ve $a_1 = -\frac{kD}{\alpha(D+\alpha+n\alpha)}$ 'dir. $P_n^{(a,b)}(z)$, kompleks Jacobi polinomudur.

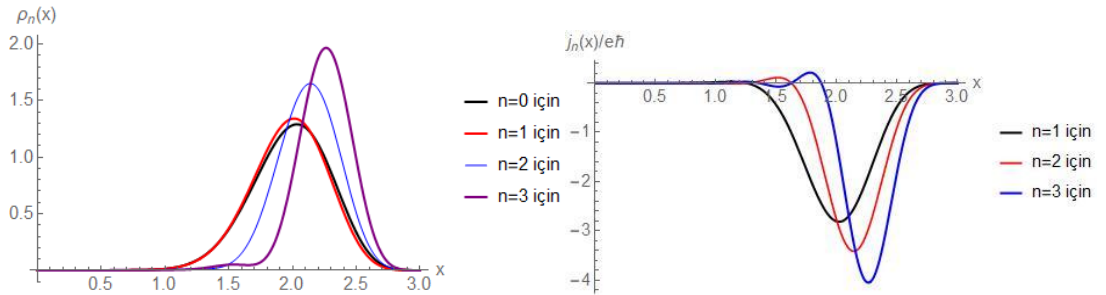
(4.1.1)'in enerji özdeğerleri aşağıdaki şekilde olur:

$$\mathcal{E}_{\pm,n} = \pm \sqrt{-D^2 + k^2 + (D + n\alpha)^2 - \frac{k^2 D^2}{(D + n\alpha)^2}} \quad (4.2.37)$$

Bu durumda, kesikli enerji özdeğerlerine karşılık gelen k değerleri için reel ekseninde herhangi bir sınırlama yoktur. Reel enerji özdeğerleri için (4.2.37)'deki karekökün içi sıfırdan büyük olmalıdır. Bu sistemler, sonsuz kesikli spektruma sahiptir ve bu spektrumun değerleri, sürekli artan k dalga sayısının fonksiyonudur. Bu davranış, önceki durumdaki manyetik bariyere terstir.



Şekil 4.5 İlk grafik trigonometrik kuyu için efektif potansiyel olan V_1 , V_2 ve manyetik alan $B(x)$ 'in grafiğidir. İkinci grafik ise k 'ya bağlı enerji özdeğerlerinin grafiğidir.



Şekil 4.6 İlk grafik $\rho_n(x)$, $n = 0, 1, 2, 3$ için ve sağdaki grafik ise $j_n(x)$ ve $n = 1, 2, 3$ için çizildi. Burada, parametreler $\alpha = 1$, $D = 4$ ve $k = 2$ olarak alınmıştır.

4.2.2 Saf elektrik alan $\mathcal{A}(x) = 0$

Bu durumda (4.1.9) denklemi aşağıdaki şekildedir:

$$\partial_{xx}\Psi_R(x) = \Delta'(x) \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \Psi_R(x) + (k^2 - \Delta(x)^2) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \Psi_R(x) \quad (4.2.38)$$

M' köşegen olmayan bir matristir:

$$M' = \Delta'(x) \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \mathcal{V}'(x) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.2.39)$$

Bu durumda özdeğerler kompleks sayıdır ve M' matrisi kompleks T matrisi aracılığıyla köşegenleştirilebilir:

$$T^{-1}M'T = \begin{pmatrix} -i\mathcal{V}'(x) & 0 \\ 0 & i\mathcal{V}'(x) \end{pmatrix}, \quad T = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix}, \quad T^{-1} = \frac{1}{2i} \begin{pmatrix} i & 1 \\ i & -1 \end{pmatrix} \quad (4.2.40)$$

Sütun matrisi $\tilde{\Psi}$,

$$\tilde{\Psi}(x) = T^{-1}\Psi_R(x) \Rightarrow \begin{cases} \tilde{\psi}_1(x) = \frac{1}{2}(\psi_1(x) - i\psi_2(x)) \\ \tilde{\psi}_2(x) = \frac{1}{2}(\psi_1(x) + i\psi_2(x)) \end{cases} \quad (4.2.41)$$

olarak tanımlanırsa, (4.2.38) denklemi aşağıdaki gibi yazılır:

$$\partial_{xx}\tilde{\Psi}(x) = (\tilde{M}'(x) + M^2)\tilde{\Psi}(x) \quad (4.2.42)$$

Bu matris denklem, iki tane birbirinin kompleks eşleniği olan denklem verir:

$$\begin{cases} (-\partial_{xx} + V_1(x))\tilde{\psi}_1(x) \equiv (-\partial_{xx} - (i\Delta)' + (i\Delta)^2)\tilde{\psi}_1(x) = -k^2\tilde{\psi}_1(x) \\ (-\partial_{xx} + V_2(x))\tilde{\psi}_2(x) \equiv (-\partial_{xx} + (i\Delta)' + (i\Delta)^2)\tilde{\psi}_2(x) = -k^2\tilde{\psi}_2(x) \end{cases} \quad (4.2.43)$$

Burada, $\Delta(x) \equiv \Delta$ olarak kullanılmıştır. Yukarıdaki iki denklemin sahip olduğu bazı özellikler aşağıdaki gibidir (Ateş vd. 2022):

1. Eğer $\tilde{\psi}_1(x)$, ilk denklemin çözümü ise ikinci denklemin çözümü bunun kompleks eşleniği $\tilde{\psi}_1^*(x) \equiv \tilde{\psi}_2(x)$ olur.
2. Bu iki denklem de PT (Parite-Time) simetrik (Bender ve Boettcher 1998) Hamilton işlemcisine sahip olabilir. P ve T 'nin etkileri aşağıdaki gibi ifade edilebilir:

$$P: x \rightarrow -x, \quad T: i \rightarrow -i$$

(4.2.43) ile verilen denklemler PT simetrisine sahiptir: Eğer potansiyel $\mathcal{V}(x)$ çift ise $V_i(x)$, $i = 1, 2$ de çifttir ve ∂_{xx} 'de işaret değişirmez. Bu durumda çözümler de PT simetrik olmalıdır.

3. Bu denklemler, başlangıçtaki Dirac – Weyl probleminin enerjilerine bağlı potansiyellere sahiptir. Bu durumda, k ve ε 'nin rolü (4.2.2)'deki saf manyetik durumuna göre değiş tokuş olmuştur. k sürekli değer alan bir parametredir ve k 'nın her değeri için $\varepsilon_n(k)$ kesikli değerler alır.

4. Bu denklemlerin kompleks çözümlerine karşılık gelen ε özdeğerleri (spektrum) reel olmalıdır. (4.1.7) Dirac – Weyl denklemine T^{-1} uygulanarak, denklem yeni bileşenlerde elde edilir:

$$\begin{cases} (\partial_x + i\Delta(x))\tilde{\psi}_1(x) = k\tilde{\psi}_2(x) \\ (\partial_x - i\Delta(x))\tilde{\psi}_2(x) = k\tilde{\psi}_1(x) \end{cases}, \quad \Delta(x) = \varepsilon - \mathcal{V}(x) \quad (4.2.44)$$

Bu yüzden (4.2.43) denklemlerini sağlayan çözümler, (4.2.44)'ü de sağlamak zorundadır. (4.2.44) denklemleri PT simetrik değildir, ancak $PT\sigma_3$ altında simetrik ve

$$[H, PT\sigma_3] = 0$$

sıradışı bağıntısını sağlarlar. Bu nedenle H ve $PT\sigma_3$ ortak özfonksiyonlara sahiptirler. Bu durumda,

$$PT\sigma_3 \tilde{\Psi}(x) = \lambda \tilde{\Psi}(x), \quad PT\tilde{\psi}_1(x) = \mu \tilde{\psi}_1(x), \quad \tilde{\psi}_2(x) = \tilde{\psi}_1^*(x)$$

eşitlikleri sağlanmalıdır. λ and μ özdeğerlerdir ve $\mu = \pm i$ olarak elde edilirler. Çözümlerin bu özellikleri sağladığı örnek potansiyel için tartışılacaktır.

5. (4.2.43) ile (4.2.44), SUSY kuantum mekaniğine benzer formdadır. Buradaki bağlaştırma işlemcileri $L^\pm$, kompleks süperpotansiyellere sahiptir: $L^\pm = \partial_x \pm i\Delta(x)$.

(4.2.43) denklemi $\mathcal{V}(x)$ potansiyeli cinsinden yazılırsa

$$(-\partial_{xx} + (i\mathcal{V}'(x) + 2\varepsilon\mathcal{V}(x) - \mathcal{V}^2(x)))\tilde{\psi}_1(x) = -(k^2 - \varepsilon^2)\tilde{\psi}_1(x) \quad (4.2.45)$$

denklemi elde edilir. Kompleks efektif potansiyel enerji ve enerji özdeğeri aşağıdaki gibidir:

$$V_{ef}(x) = i\mathcal{V}'(x) + 2\varepsilon\mathcal{V}(x) - \mathcal{V}^2(x) \quad (4.2.46)$$

$$E_{ef} = -(k^2 - \varepsilon^2) \quad (4.2.47)$$

Örneğin, $x \rightarrow \pm\infty$ giderken $V_{ef}(x)^\pm \rightarrow 0$ gittiğini varsayalım, bu durumda karesi integrallenebilir bir özfonksiyon elde etmek için $|\varepsilon| < k$ olmalıdır. Diğer bir deyişle

grafandeki kütsesiz Dirac paracıklarının k momentumu, Dirac paracığındaki kütle rolüne benzer bir rol oynar.

Bu koşulları sağılayan, analitik özömlere sahip potansiyeller oldukça azdır. Daha önceden literatürde ele alınan bazı potansiyel örnekleri aşağıdaki gibidir:

- a) $\mathcal{V}(x) = \frac{e}{|x|}$, 1-boyutta Coulomb potansiyeline benzer (Downing 2019).
- b) $\mathcal{V}(x) = \frac{e}{1+x^2}$, Lorentz potansiyeli (Downing 2019).
- c) $\mathcal{V}(x) = \tanh x$, Pöschl – Teller benzeri potansiyel (Hartmann ve Portnoi 2017).

Özfonsiyonları kısmen elde etmenin yolu, potansiyeller için paralı düzgün fonsiyonlardan yararlanmaktır ve sonrasında süreklilik koşullarını uygulamaktır. Bu duruma karşılık gelen bir örnek aşağıdaki kesimde detaylı olarak tartışılacaktır. Bu örnek, kesikli spektrumun ve elektriksel etkileşimin pek ok özelliğini verecektir: spektrumun sınırlarını, potansiyelin derinliğine bağı atomik ökmeleri, momentumun (k 'nın) rolünü.

4.2.2.1 Kare kuyu potansiyeli

Aşağıdaki şekilde bir kare kuyu potansiyeli tanımlayalım:

$$\mathcal{V}(x) = \begin{cases} -\nu_0, & |x| < 1 \\ 0, & |x| > 1 \end{cases} \quad (4.2.48)$$

(4.2.46)'da (4.2.48) fonsiyonu kullanılarak elde edilen efektif potansiyele karşılık gelen Schrödinger denklemi aşağıdaki şekildedir (Ateş vd. 2022):

$$-\tilde{\psi}_1''(x) + V_{ef}\tilde{\psi}_1(x) = -(k^2 - \varepsilon^2)\tilde{\psi}_1(x) \quad (4.2.49)$$

Burada, efektif potansiyel komplekstir ve

$$V_{ef}(x) = \begin{cases} -i\nu_0\delta(x+1) + i\nu_0\delta(x-1) - 2\nu_0\varepsilon - \nu_0^2 & |x| \leq 1 \\ 0 & |x| > 1 \end{cases} \quad (4.2.50)$$

olarak verilir. Bu potansiyel için 3 farklı bölge vardır: $x < -1$, $-1 < x < 1$, $x > 1$. Birinci ve üçüncü bölgelerde potansiyel sıfır ve ikinci bölgede ise $(-2\nu_0\varepsilon - \nu_0^2)$ 'dir. Bu bölgelerde sırası ile $\tilde{\psi}_{1,I}(x)$, $\tilde{\psi}_{1,II}(x)$ ve $\tilde{\psi}_{1,III}(x)$ özömleri bulunabilir:

$x < -1$: I. Bölge

$$\begin{aligned} -\tilde{\psi}_{1,I}''(x) &= -p^2 \tilde{\psi}_{1,I}(x), & p^2 &= k^2 - \varepsilon^2 \\ \tilde{\psi}_{1,I}(x) &= Ae^{px}, & p &= \sqrt{k^2 - \varepsilon^2} > 0 \end{aligned} \quad (4.2.51)$$

$-1 < x < 1$: II. Bölge

$$\begin{aligned} -\tilde{\psi}_{1,II}''(x) + (-2\nu_0\varepsilon - \nu_0^2)\tilde{\psi}_{1,II}(x) &= -p^2 \tilde{\psi}_{1,II}(x), \\ q^2 &= 2\nu_0\varepsilon + \nu_0 - p^2 > 0 \\ \tilde{\psi}_{1,II}(x) &= Ce^{iqx} + De^{-iqx}, & q &= \sqrt{(\varepsilon + \nu_0)^2 - k^2} \end{aligned} \quad (4.2.52)$$

$x > 1$: III. Bölge

$$\begin{aligned} -\tilde{\psi}_{1,III}(x) &= -p^2 \tilde{\psi}_{1,III}(x), & p^2 &= k^2 - \varepsilon^2 \\ \tilde{\psi}_{1,III}(x) &= Ee^{-px}, & p &= \sqrt{k^2 - \varepsilon^2} > 0 \end{aligned} \quad (4.2.53)$$

Bu çözümler $x = -1$ ve $x = 1$ 'de süreklilik koşullarını yerine getirmelidir:

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_{1,I}(-1) &= \tilde{\psi}_{1,II}(-1), & \tilde{\psi}'_{1,I}(-1) &= \tilde{\psi}'_{1,II}(-1) + i\nu_0 \tilde{\psi}_{1,I}(-1) \\ \tilde{\psi}_{1,II}(1) &= \tilde{\psi}_{1,III}(1), & \tilde{\psi}'_{1,II}(1) &= \tilde{\psi}'_{1,III}(1) - i\nu_0 \tilde{\psi}_{1,III}(1) \end{aligned} \quad (4.2.54)$$

Süreklilik koşullarından, bilinmeyen A, C, D, E katsayıları için homojen bir denklem sistemi elde edilir:

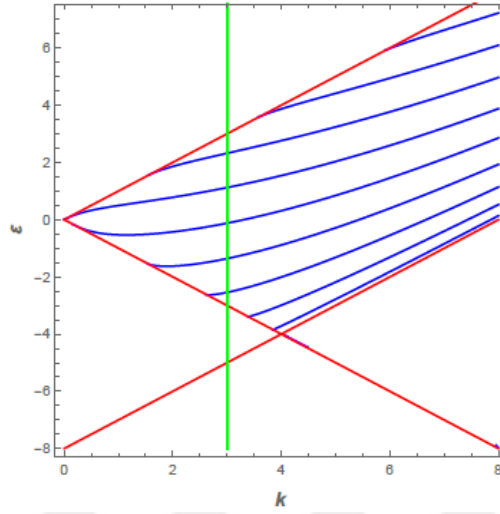
$$\begin{aligned} Ae^{-p} - Ce^{-iq} - De^{iq} &= 0 \\ A(pe^{-p} - i\nu_0 e^{-p}) - C(iq)e^{-iq} + D(iq)e^{iq} &= 0 \\ Ce^{iq} + De^{-iq} - Ee^{-p} &= 0 \\ C(iq)e^{iq} + D(-iq)e^{-iq} + E(pe^{-p} + i\nu_0 e^{-p}) &= 0 \end{aligned} \quad (4.2.55)$$

Katsayılar determinantı sıfıra eşitlenerek, ε, k, ν_0 arasındaki ilişki aşağıdaki gibi bulunur:

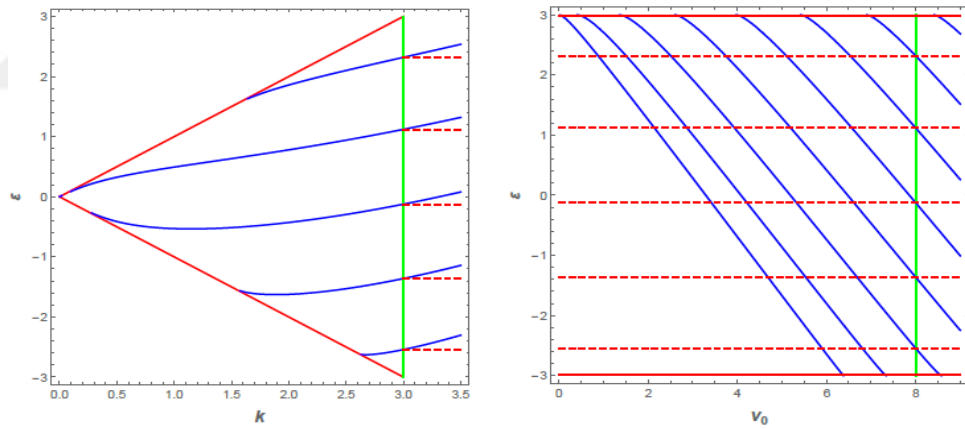
$$\begin{aligned} Im(\det M) &= (\sqrt{k^2 - \varepsilon^2} \sqrt{(\varepsilon + \nu_0)^2 - k^2} \cos(2\sqrt{(\varepsilon + \nu_0)^2 - k^2}) - \\ &(\varepsilon(\varepsilon + \nu_0) - k^2) \sin(2\sqrt{(\varepsilon + \nu_0)^2 - k^2})) = 0 \end{aligned} \quad (4.2.56)$$

Şekil 4.7, belirlenmiş $\nu_0 = 8$ değeri için, ε ve k 'ya göre $Im(\det M) = 0$ grafiğini gösterir. Mavi eğriler enerji özdeğerlerini gösterir. $\varepsilon = \pm k$ doğruları çözümün olabileceği bölgeleri belirler ve bağlı durumlar için kritik değerlere karşılık gelirler. Diğer bir sınır koşulu ise $\varepsilon + \nu_0 = k$ 'dır. Bundan dolayı sadece $\varepsilon + \nu_0 > k$ ve $\varepsilon < k$ olduğunda önceki denklemlerin çözümleri vardır. Bu eşitsizlikler, şekil 4.7'de kırmızı çizgiler ile gösterilmiştir. k 'nın belirlenmiş değerleri için ν_0 potansiyelinin ε

bağılılığının grafiği, bağlı durumların çöküşünün gözlenmesi açısından oldukça önemlidir.



Şekil 4.7 $|\varepsilon| < k$ ve $|\varepsilon + v_0| > k$ ile belirlenmiş v değerleri için enerji özdeğerleri. $v_0 = 8$, $k > 0$ için enerji özdeğerleri.



Şekil 4.8 (Sol) k 'nın fonksiyonu olarak $v_0 = 8$ belirlenmiş değeri için enerji özdeğer grafiği ve sınır çizgileri $\varepsilon = \pm k$ (yeşil dikey çizgi $k = 3$ 'dür). (Sağ) $k = 3$ için kuyunun v_0 derinliğine karşılık gelen ε enerji özdeğer grafiği. Her iki grafikte dikey yeşil çizgilerin karşılık geldikleri spektrumlar uyumlu olmalıdırlar.

Bu durum şekil 4.8'in sağ tarafında bulunan $v_0 = 8$ 'e karşılık gelen spektrum grafiğinden görülmektedir. Spektrumun en düşük enerjili durumu daha önceki durumların çökmüş olması nedeniyle taban durumu değil, ikinci uyarılmış durumdur.

Şekil 4.9 $\nu_0 = 2$ ve şekil 4.8 $\nu_0 = 8$ için çizdirilmiştir. Şekil 4.9'dan $k = 2$ olduğunda herhangi bir çöküş olmadığı görülür. Spektrumun yeşil çizgi ile belirlenen üç noktası $\nu_0 = 2$ için kesikli enerji öz durumlarına karşılık gelen enerji değerlerini verir. Bu kompleks özfonksiyonlar bazı temel özelliklere sahiptirler: i) Her spinörün iki bileşeni birbirinin kompleks eşleniğidir: $\tilde{\psi}_1(x) = \tilde{\psi}_2^*(x)$. ii) Farklı enerji düzeylerine karşılık gelen $\tilde{\Psi}$ spinörleri diktir. E^a enerjili bir $\tilde{\Psi}^a$ durumunun spinör bileşenleri $\tilde{\Psi}^a = (\tilde{\psi}_1^a, \tilde{\psi}_2^a)$ ve $E^a \neq E^b$ enerjili $\tilde{\Psi}^b$ spinörü de benzer şekilde tanımlı olsun, o zaman diklik aşağıdaki şekilde tanımlı olur:

$$\langle \tilde{\Psi}^a, \tilde{\Psi}^b \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} (\tilde{\psi}_2^a \tilde{\psi}_1^b + \tilde{\psi}_1^a \tilde{\psi}_2^b) dx = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} (\psi_1^a \psi_1^b + \psi_2^a \psi_2^b) dx = 0$$

iii) $\tilde{\psi}_1(x)$ ve $\tilde{\psi}_2(x)$ sadece (4.2.43) ve kompleks eşleniğini sağlamaz ayrıca (4.2.44)'ü de sağlar. Bu yüzden $\tilde{\psi}_1$ ve $\tilde{\psi}_2$ 'nin kompleks eşlenik fazlar ile çarpılması gereklidir. Dalga fonksiyonlarının spinör elementlerinin grafikleri, şekil 4.10-4.12'de verilmiştir. Bu grafiklerden çözümlerin PT simetrisine sahip olduğu görülebilir. Diğer bir deyişle $\tilde{\psi}_k(x)$ enerji özfonksiyonları PT işlemcisinin $\pm i$ 'li özdeğerli özfonksiyonlarıdır:

$$PT\tilde{\psi}_k(x) \equiv \tilde{\psi}_k^*(-x) = (\pm i)\tilde{\psi}_k(x), \quad k = 1, 2$$

Burada, P parite ($x \rightarrow -x$) ve T de kompleks eşleniği ($i \rightarrow -i$) göstermektedir. $\tilde{\psi}_{1,2}(x)$ kullanılarak, (4.1.3) ile verilen Dirac – Weyl denkleminin çözümleri elde edilebilir: $\tilde{\psi}_{1,2}(x)$ cinsinden $\psi_{1,2}(x)$ 'leri elde etmek için (4.2.41) denklemi kullanılır. Böylece, Dirac – Weyl denkleminin spinör çözümleri

$$\Psi_n(x, y) = 2e^{iky} \begin{pmatrix} \text{Re}(\tilde{\psi}_{1,n}) \\ \text{Im}(\tilde{\psi}_{1,n}) \end{pmatrix} \quad (4.2.57)$$

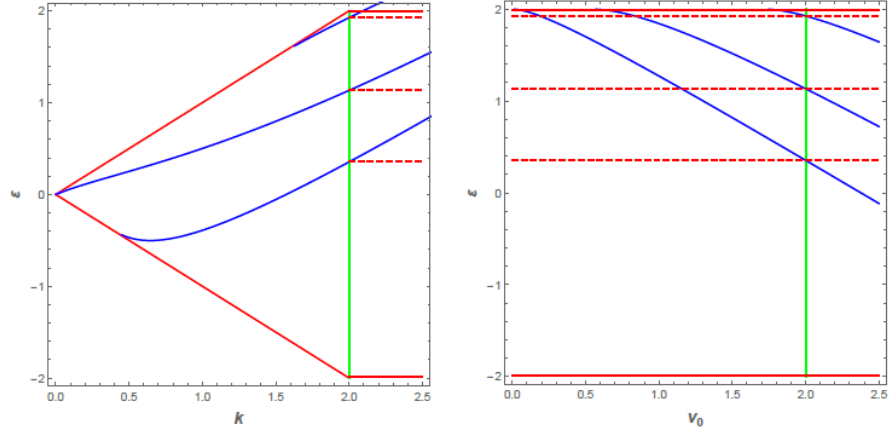
olarak elde edilir. Bu durumda olasılık yoğunluğu

$$\rho_n = |\Psi_n(x, y)|^2 = 4 \left(\left(\text{Re}(\tilde{\psi}_{1,n}) \right)^2 + \left(\text{Im}(\tilde{\psi}_{1,n}) \right)^2 \right) \quad (4.2.58)$$

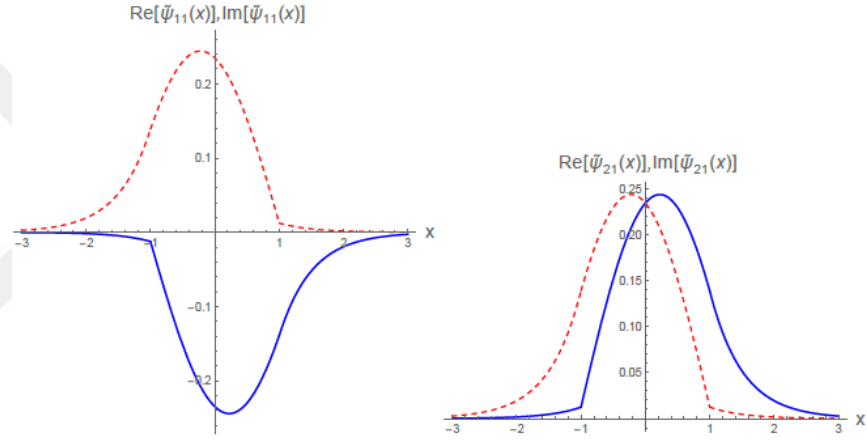
ve akım yoğunluğu

$$\begin{aligned} J_{nx} &= \Psi_n^\dagger(x, y) \sigma_x \Psi_n(x, y) = 0, \\ J_{ny} &= \Psi_n^\dagger(x, y) \sigma_y \Psi_n(x, y) = -8 \left(\text{Re}(\tilde{\psi}_{1,n}) \right) \left(\text{Im}(\tilde{\psi}_{1,n}) \right) \end{aligned} \quad (4.2.59)$$

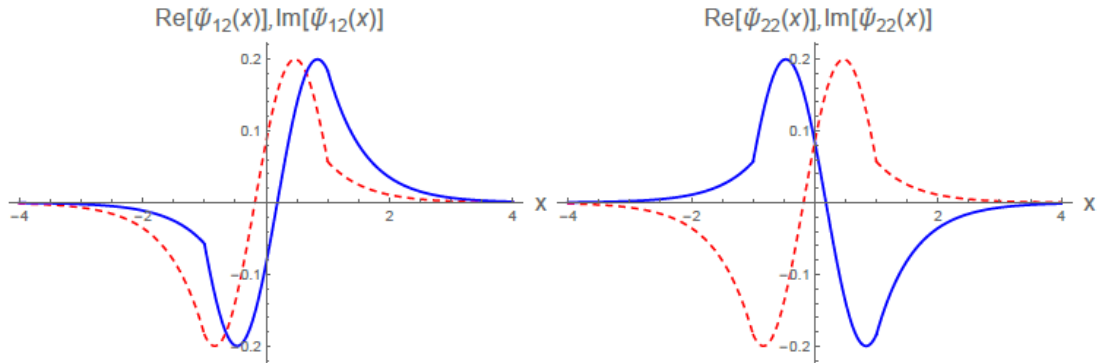
olarak bulunur. Belirli k ve ν değerleri için olasılık ve akım yoğunluklarının grafikleri şekil 4.13'de verilmiştir.



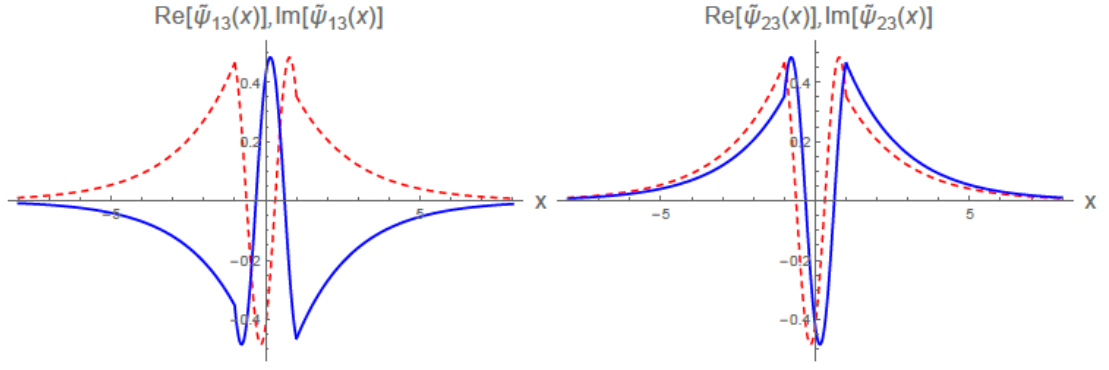
Şekil 4.9 (Sol) $v_0 = 2$ değeri için $Im(det M) = 0$ grafiği (enerji özdeğerleri) ve sınır değerleri $\varepsilon = \pm k$; (sağ) $k = 2$ için kuyunun v_0 derinliğine karşılık ε enerji grafiği.



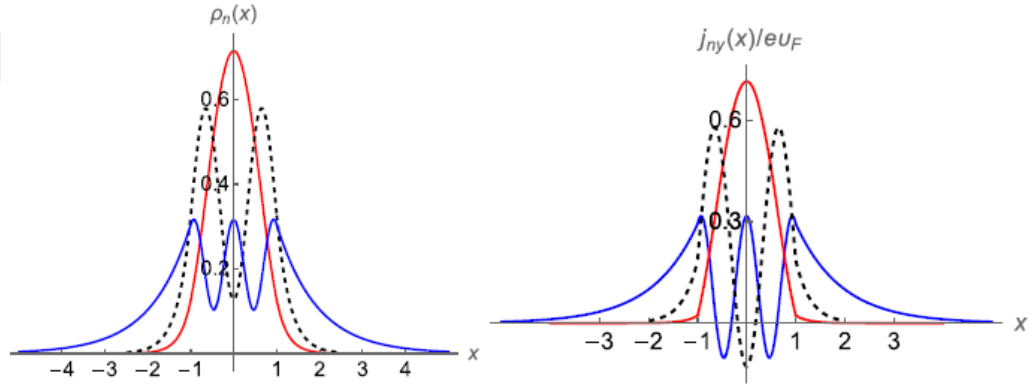
Şekil 4.10 $v_0 = 2$, $k = 2$ ve $\varepsilon_1 = 0.354274$ için $\tilde{\psi}_{11}(x)$ 'in reel (kesikli) ve sanal (sürekli) kısımlarının grafikleri.



Şekil 4.11 $v_0 = 2$, $k = 2$ ve $\varepsilon_2 = 1.13356$ için $\tilde{\psi}_{12}(x)$ 'in reel (kesikli) ve sanal (sürekli) kısımlarının grafikleri.



Şekil 4.12 $\nu_0 = 2$, $k = 2$ ve $\varepsilon_3 = 1.92583$ için $\tilde{\psi}_{13}(x)$ 'in reel (kesikli) ve sanal (sürekli) kısımlarının grafikleri.



Şekil 4.13 $\nu_0 = 2$, $k = 2$ ve $n = 1, 2, 3$ için olasılık ve akım yoğunluğu grafikleri.

4.2.3 Orantılı elektromanyetik alan $\mathcal{V} \propto \mathcal{A}$

Bu durumda iki potansiyel birbiriyle orantılıdır (Ateş vd. 2022):

$$\mathcal{V}(x) = \alpha \mathcal{A}(x) \Rightarrow \begin{cases} W(x) = k + \mathcal{A}(x) \\ \Delta(x) = \alpha(\tilde{\varepsilon} - \mathcal{A}(x)) \end{cases} \quad (4.2.60)$$

Burada, $\varepsilon = \alpha \tilde{\varepsilon}$ olarak tanımlıdır. $W(x)$ ve $\Delta(x)$ 'in türevleri,

$$\Delta'(x) = -\alpha \mathcal{A}'(x), \quad W'(x) = \mathcal{A}'(x) \quad (4.2.61)$$

$$M' = \mathcal{A}'(x) \begin{pmatrix} 1 & \alpha \\ -\alpha & -1 \end{pmatrix} \equiv \mathcal{A}'(x) M'_\alpha, \quad M^2 = ((k + \mathcal{A})^2 - (\varepsilon - \alpha \mathcal{A})^2) I \quad (4.2.62)$$

şeklindedir. Böylece, M' ve M^2 matrisleri aşağıdaki gibi olur.

Bu durumda karakteristik polinom, $\det(M'_\alpha - \lambda I) = 0$ şeklindedir. Buradan, M'_α 'nın özdeğerleri için, $\lambda^2 = 1 - \alpha^2$ denklemi elde edilir. Böylece, aşağıdaki olası 3 durum vardır:

- a) $|\alpha| < 1$ (trigonometrik veya $\mathcal{A}$ dominanttır.)
- b) $|\alpha| > 1$ (hiperbolik veya $\mathcal{V}$ dominanttır.)
- c) $\alpha = \pm 1$ (parabolik veya $\mathcal{V} = \mathcal{A}$)

Bundan sonra, $0 < |\alpha| < 1$ olarak alalım. İkinci mertebeden denklem olan (4.1.9) aşağıdaki şekilde olur:

$$-\Psi_R'' + (\mathcal{A}'(x)M'_\alpha + ((k + \mathcal{A})^2 - (\varepsilon - \alpha\mathcal{A})^2)I)\Psi_R = 0 \quad (4.2.63)$$

M' matrisi, M'_α sabit matrisinin özfonksiyon ve özdeğerleri aracılığı ile köşegenleştirilir:

$$\lambda_\pm = \pm\sqrt{1 - \alpha^2}, \quad \mathbb{V}_\pm = \begin{pmatrix} \alpha \\ -1 \pm \sqrt{1 - \alpha^2} \end{pmatrix} \quad (4.2.64)$$

Burada, $\alpha = \sin\gamma$ notasyonu kullanılabilir. Bu durumda (4.2.64) denklemi aşağıdaki şekilde olur:

$$\lambda_\pm = \pm\cos\gamma, \quad \mathbb{V}_\pm = \begin{pmatrix} \sin\gamma \\ -1 \pm \cos\gamma \end{pmatrix} \quad (4.2.65)$$

Böylece M' , T matrisi aracılığı ile köşegenleştirilebilir:

$$\begin{aligned} \Psi_R &= T\Psi_D, \quad D_\alpha = T^{-1}M'T = \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \alpha^2} & 0 \\ 0 & -\sqrt{1 - \alpha^2} \end{pmatrix}, \\ T &= \begin{pmatrix} \alpha & \alpha \\ -1 + \sqrt{1 - \alpha^2} & -1 - \sqrt{1 - \alpha^2} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.2.66)$$

(4.2.62)'de yerlerine yerleştirildiğinde, (4.2.62) denklemi aşağıdaki gibi yazılır:

$$-\Psi_D'' + \left(\mathcal{A}'(x)D_\alpha + \left(\left(\frac{\varepsilon\alpha + k}{\sqrt{1 - \alpha^2}} + \sqrt{1 - \alpha^2}\mathcal{A} \right)^2 - \frac{(\varepsilon + \alpha k)^2}{1 - \alpha^2} \right) I \right) \Psi_D = 0 \quad (4.2.67)$$

ψ_D^+ ve ψ_D^- sırası ile Ψ_D 'nin üst ve alt bileşenleri olmak üzere, iki skaler denklem elde edilir:

$$-(\psi_D^\pm)'' + (W^2(x) \pm W'(x) - \mu)\psi_D^\pm = 0 \quad (4.2.68)$$

Burada, süperpotansiyel

$$W(x) = \frac{\varepsilon\alpha + k}{\sqrt{1 - \alpha^2}} + \sqrt{1 - \alpha^2} \mathcal{A}(x), \quad \mu = \frac{(\varepsilon + \alpha k)^2}{1 - \alpha^2} \quad (4.2.69)$$

veya

$$W(x) = \frac{\varepsilon \sin\gamma + k}{\cos\gamma} + \cos\gamma \mathcal{A}(x), \quad \mu = \frac{(\varepsilon + k \sin\gamma)^2}{\cos^2\gamma} \quad (4.2.70)$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada, $\psi_D^\pm$ elemanları iki süpereş Hamilton işlemcisinin özfonksiyonlarıdır.

Bu formüller, $0 < |\alpha| < 1$ 'de manyetik alanlar için geçerlidir. Ancak bunlar $|\alpha| > 1$ ile elektriksel potansiyel durumuna da genişletilebilir.

Trigonometrik durum için $\mathcal{A}(x) = \beta x$ seçilirse harmonik salıncı efektif potansiyeli elde edilir.

4.2.3.1 Harmonik salıncı potansiyeli: $\mathcal{A}(x) = \beta x$

Hesaplamayı kolaylaştırmak için

$$K = \frac{\varepsilon\alpha + k}{\sqrt{1 - \alpha^2}}, \quad a = \sqrt{1 - \alpha^2} \quad (4.2.71)$$

notasyonu kullanılırsa, süperpotansiyel aşağıdaki gibi olur:

$$W(x) = K + a\mathcal{A}(x) = K + a\beta x, \quad W'(x) = a\beta \quad (4.2.72)$$

İlgili süpereş potansiyeller ise aşağıdaki gibi olur:

$$V^\pm(x) = W^2(x) \pm W'(x) = (K + a\beta x)^2 \pm a\beta \quad (4.2.73)$$

Denklem (4.2.70)'den, süpereş Hamilton sisteminin enerji özdeğeri $\mu = \frac{(\varepsilon + \alpha k)^2}{1 - \alpha^2}$ şeklindedir. $a\beta = \frac{w}{2}$ olarak tanımlanırsa, (4.2.73) potansiyelleri çok iyi bilinen süpereş potansiyel şekline gelir:

$$V^\pm(x) = \frac{w^2}{4} \left(\frac{2K}{w} + x \right)^2 \pm \frac{w}{2} \quad (4.2.74)$$

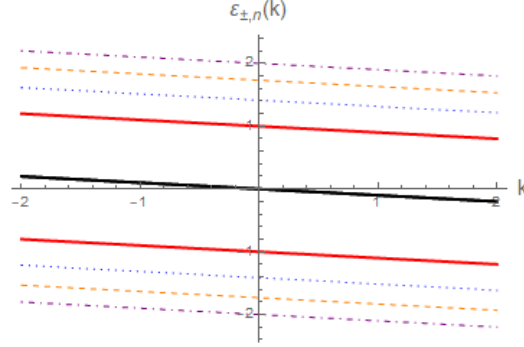
Buradaki enerji özdeğerleri ise aşağıdaki gibidir:

$$\mu_n^+ = \mu_{n-1}^- = n w, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.2.75)$$

Bu eşitlikten, aşağıdaki Dirac – Weyl denkleminin özdeğerleri elde edilir:

$$\varepsilon_n^\pm = -\alpha k \pm \frac{\omega}{2\beta} \sqrt{n\omega}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.2.76)$$

Enerji düzeylerinin grafiği şekil 4.14’te verilmiştir.



Şekil 4.14 $\alpha = 0.1$, $\beta = \frac{\omega}{2}$ ve $\omega = 1$ için $n = 0, 1, 2, 3, 4$ enerji düzeyleri

Burada, $\alpha = 0$ ($\alpha = 1, \beta = \omega/2$) olduğunda sadece manyetik alan vardır. Sabit manyetik alan için enerji özdeğerleri $\varepsilon_n^\pm = \pm \sqrt{n\omega}$ olur. $\psi_D^\pm$ özfonksiyonları aşağıdaki şekilde olur:

$$\psi_{D,n}^-(z(x)) = \psi_{D,n}^+(z(x)) = C_n e^{-\frac{1}{2}z^2} H_n(z(x)) \equiv \varphi_n(x) \quad (4.2.77)$$

Burada, C_n normalizasyon sabitidir ve $z(x) = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(\frac{2K}{\omega} + x \right)$ olarak tanımlıdır. Bu çözümler $\Psi_{R,n} = T\Psi_{D,n}$ ’de yerine yerleştirilirse, (4.1.3) ile verilen Dirac – Weyl denkleminin çözümleri bulunur.

5. SONUÇ

Bu tez çalışmasında ilk olarak, karbon atomlarının altıgen dizilimi ile oluşan 2-boyutlu grafen incelenmiştir (Neto vd. 2009). Grafitin bir tek katmanı olan grafen, 2004 yılında K. Novoselov ve arkadaşları tarafından sentezlenmiştir (Novoselov 2004) ve 2010 yılında K. Novoselov ve A. Geim bu çalışmaları ile Nobel Fizik Ödülüne layık görülmüşlerdir. Grafen sahip olduğu önemli özellikleri, örneğin; sertlik, esneklik, incelik, iletkenlik, ışığa duyarlılık vs., nedeniyle çok ilgi çekmiştir. Burada özel olarak, sıkı bağ enerji yaklaşımı kullanılarak grafenin enerji bant yapısı elde edilmiştir. Fermi düzeyine yakın (Dirac noktalarında) enerji bantları, düşük enerjilerde spektrum için bir Dirac – Weyl denklemine yol açan doğrusal forma sahiptir.

Daha sonra süpersimetrik kuantum mekaniği yöntemleri incelenmiştir. Bu yöntemlerden ilk olarak çarpanlara ayırma yönteminde çözülebilen bir Hamilton işlemcisi başlanılarak Hamilton işlemcilerinin bir hiyerarşisi oluşturulmuş ve bu hiyerarşinin Hamiltoniyenleri arasında geçiş yapmayı sağlayan diferansiyel işlemciler elde edilmiştir. Diğer yöntemler; Darboux dönüşümü, şekil değişmezlik ve bağlaştırım yöntemleri de gözden geçirilmiş ve şekil değişmezliğe örnek olarak Pöschl – Teller potansiyeli verilmiştir.

Grafende, $\frac{1}{2}$ spinli, kütleli rölativistik (görelî) parçacıkların hareketini betimleyen Dirac – Weyl denklemi y yönünde öteleme simetrisine sahip analitik çözülebilen elektrik ve manyetik potansiyeller için incelenmiştir (Ateş 2022). SUSY yöntemlerinden biri olan çarpanlara ayırma yöntemi kullanılarak, bu alanlara karşılık gelen 2. mertebeden skaler Hamiltoniyenlerin çözümleri elde edilmiş ve Dirac – Weyl denkleminin çözümleri de bu süpereş Hamiltoniyenlerin çözümleri cinsinden bulunmuştur. Saf manyetik alan, saf elektrik alan ve birbirleri ile orantılı elektrik-manyetik alanlar için analitik çözülebilme koşulları incelenmiştir. Saf elektrik alan için kare kuyu potansiyeli, saf manyetik alan için örnek olarak sabit manyetik alan, hiperbolik bariyer, trigonometrik kuyu ve her iki alanın varlığında ise harmonik salıncı potansiyelleri ayrıntılı olarak çözülmüştür. Bu potansiyeller için Dirac – Weyl denkleminin enerji özdeğerleri ve karşılık gelen öz fonksiyonları bulunmuştur. Böylece, teorik olan bu çalışmada SUSY yöntemlerinin bu tip problemlerin çözümlerini elde etmede nasıl kullanıldığı gösterilmiştir.

KAYNAKLAR

- Ateş, İ. B., Kuru, Ş. ve Negro, J. 2023. Graphene Dirac fermions in symmetric electric and magnetic fields: the case of an electric square well. *Physica Scripta*, 98, 015816.
- Beenakker, C. W. J. 2008. Andreev reflection and Klein tunneling in graphene. *Reviews of Modern Physics*, 80, 1337.
- Bender, C. M. ve Boettcher, S. 1998. Real spectra in non-Hermitian Hamiltonians having PT symmetry. *Physical Review Letter*, 80, 5243.
- Contreras-Astorga, A., Fernandez C., D. J., Negro, J. 2012. Solutions of the Dirac equation in a magnetic field and intertwining operators. *SIGMA*, 8, 082.
- Cooper, F., Khare, A., Sukhatme, U. P. 2001. *Supersymmetry in Quantum Mechanics*. World Scientific, 137, Singapore.
- Downing, C. A. ve Portnoi M. E. 2019. Zero-Energy vortices in Dirac materials. *Physica Status Solid B*, 259, 9.
- Greiner, W. 2000. *Relativistic Quantum Mechanics Wave Equations*. Springer, 424, Heidelberg.
- Hartmann, R. R. and Portnoi, M. E. 2017. Two-dimensional Dirac particles in a Pöchl-Teller waveguide, *Scientific Report*, 7, 11599.
- Infeld, L., Hull, T. E. 1951. The factorization method. *Reviews of Modern Physics*, 23, 21.
- Junker, G. 1996. *Supersymmetric Methods in Quantum and Statistical Physics*. Springer Verlag, 172, Berlin.
- Katsnelson, M. I., Novoselov K. S., Geim A. K. 2006. Chiral tunneling and the Klein paradox in graphene. *Nature Physics*, 2, 620 – 625.
- Kuru, Ş., Negro, J. ve Nieto, L. M. 2009. Exact analytic solutions for a Dirac electron moving in graphene under magnetic fields. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21, 455305.
- Libby, S. B., van Bibber, K. A. 2010. *Edward Teller Centennial Symposium*. World Scientific.162, Singapore.
- Marzani, N., Vanderbilt, D. 1997. Maximally Localized Generalized Wannier Functions For Composite Energy Bands. *Physical Review B*, 56 (20), 12847-12865.
- Matveev, V. B., Salle, M. A. 1991. *Darboux Transformations and Solitons*. Springer-Verlag, 120, Berlin.

Neto. A. H. C., Guinea. F., Peres, N. M. R., Novoselov, K. S., Geim, A. K. 2009. The Electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics*, 81, 109-162.

Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S.V., Grigorieva, I. V., Firsov. 2004. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 306, 5696.

Pozdeeva, A., Schulze-Halberg, A. 2010. Darboux transformations for a generalized Dirac equation in two dimensions. *Journal of Mathematical Physics*, 51, 113501.

Wong, H. S. P., Akinwande, D. 2011. *Carbon Nanotube and Graphene Device Physics*. Cambridge University Press, 244, Cambridge.

