

**ANKARA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

DOKTORA TEZİ

**GRAFEN KUANTUM NOKTA VE KARŞIT NOKTALARIN ELEKTRONİK
ÖZELLİKLERİ**

Günay ÖMER

FİZİK ANABİLİM DALI

**ANKARA
2014**

Her hakkı saklıdır

TEZ ONAYI

Günay ÖMER tarafından hazırlanan “ **Grafen Kuantum Nokta ve Karşıt Noktaların Elektronik Özellikleri**” adlı tez çalışması 16.05.2014 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği ile Ankara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı’nda **DOKTORA TEZİ** olarak kabul edilmiştir.

Danışman: Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR

Jüri Üyeleri:

Başkan :Prof. Dr. Satılmış ATAĞ
Ankara Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı

Üye :Prof. Dr. Hamit YURTSEVEN
Orta Doğu Teknik Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü

Üye : Prof. Dr. Mehmet ÇAKMAK
Gazi Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü

Üye : Prof. Dr. Abdullah VERÇİN
Ankara Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı

Üye : Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR
Ankara Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı

Yukardaki sonucu onaylarım.

Prof.Dr. İbrahim DEMİR
Enstitü Müdürü

ETİK

Ankara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez içindeki bütün bilgilerin doğru ve tam olduğunu, bilgilerin üretilmesi aşamasında bilimsel etiğe uygun davrandığımı, yararlandığım bütün kaynakları atıf yaparak belirttiğimi beyan ederim.

Günay ÖMER

ÖZET

Doktora Tezi

GRAFEN KUANTUM NOKTA VE KARŞIT NOKTALARIN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ

Günay ÖMER

Ankara Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR

Gerçekleştirilebilir çeşitli geometrilere ve büyüklüklere sahip grafen kuantum noktalar üzerinde deneysel tekniklerle ek hapsolme mekanizmaları kurularak elde edilebilen grafen kuantum karşıt nokta, günümüzde hem teorik hem de deneysel yoğun madde fizikçilerinin ilgilendiği yapıların başında gelmektedir. Değiştirilebilir parametrelere (kuantum noka ve antinoktanın çapı) sahip olmalarından dolayı elektronik özelliklerinin de değiştirilebilir olması, grafen kuantum nokta ve karşıt noktayı gelecekteki elektronik uygulamaların önemli elemanlarından yapmaktadır. Çalışmanın başlangıç bölümünde, öncelikle bir grafen tabakasının kristal örgü yapısı, daha sonra ise sıkı bağlanma yaklaşımıyla elektronik özellikleri incelenmiştir. Ayrıca, grafenin düşük enerji ifadesiyle, Dirac-Wely denklemiyle, grafen kuantum nokta ve karşıt nokta için geliştirilen model ile enerji öz değerleri analitik olarak varyasyon yöntemiyle elde edilmiş; enerji seviyelerinin, grafen noktanın ve karşıt noktanın yarıçapıyla ve manyetik alanla değişimi araştırılmıştır. Grafen kuantum nokta ve karşıt noktanın elektronik özellikleri üzerine bu çalışmada sunulan sonuçlar, benzer yapılar üzerinde gelecekte yapılacak çalışmalara zemin hazırlamayı amaçlamaktadır.

Mayıs 2014, 54 sayfa

Anahtar Kelimeler: Grafen, kuantum nokta, karşıt nokta

ABSTRACT

Ph.D. Thesis

ELECTRONIC PROPERTIES OF GRAPHENE QUANTUM DOTS AND ANTIDOTS

Günay ÖMER

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

Supervisor: Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR

Graphene quantum antidots, obtained additional confinement mechanisms through experimental techniques on graphene quantum dots with various realizable geometries and sizes, are of interest for both theoretic and experimental condensed matter physicists nowadays. Graphene quantum dots and antidots are important components for future electronic applications due to their tunable parameters (radius of quantum dots and antidots) enabling to adjust their electronic properties. In the first part of the study, crystal lattice structure of a graphene layer and then its electronic properties are investigated within the tight binding approximation. Moreover, with the low-energy description of graphene, i.e., Dirac-Weyl description, energy eigenvalues are obtained analytically by using variational method through the model developed for graphene quantum dots and antidots; dependencies of energy levels on radius of graphene dots and antidots, and magnetic field are studied. The results presented here on electronic properties of graphene quantum dots and antidots, aims to establish a basis for future studies on similar structures.

May 2014, 54 pages

Key Words: Graphene, quantum dot, quantum antidot

TEŞEKKÜR

Çalışmalarımı yönlendiren, çalışmalarımın her aşamasında bilgi, öneri ve yardımlarını esirgemeyen danışman hocam Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR'e (Ankara Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı), çalışmalarım süresince birçok fedakârlık göstererek beni destekleyen anneme, babama, eşime, kardeşime ve biricik tatlı kızım Aysima ÖMER'e en derin duygularıyla teşekkür ederim.

Günay ÖMER

Ankara, Mayıs 2014

İÇİNDEKİLER

TEZ ONAY SAYFASI

ETİK.....	i
ÖZET.....	ii
ABSTRACT	iii
TEŞEKKÜR	iv
SİMGELER DİZİNİ	vi
ŞEKİLLER DİZİNİ	vii
ÇİZELGELER DİZİNİ	viii
1. GİRİŞ	1
2. GRAFEN.....	3
2.1 Grafenin Örgü Yapısı	3
2.2 Grafende Sıkı Bağlanma Yaklaşımı	6
3. DIRAC DENKLEMİ	10
4. GRAFEN KUANTUM NOKTA VE KARŞIT NOKTA	12
4.1 Grafen Kuantum Nokta ve Karşıt Nokta İçin Dirac Hamiltonyeni Çözümleri.....	13
4.2 Grafen Kuantum Nokta ve Karşıt Nokta İçin Enerji Bant Yapıları	22
5. TARTIŞMA VE SONUÇ.....	30
KAYNAKLAR	32
EK 1 Grafen Kuantum Nokta ve Karşıt Nokta İçin Dirac Hamiltonyeni Çözümleri.....	37
ÖZGEÇMİŞ.....	54

SİMGELER DİZİNİ

$\vec{a}, \vec{b}$	Birim örgü vektörleri
a	Bağ uzunluğu
$\vec{a}^*, \vec{b}^*$	Ters örgü vektörleri
$\vec{\tau}_1$	Birim öteleme vektörleri
$\vec{\alpha}, \beta$	Dirac matrisleri
v_F	Fermi hızı
J_0	En yakın karbon atomuna sıçrama enerjisi
τ	Pseudospin indeksi
l_B	Magnetik uzunluk
r_0	Grafen kuantum karşıt noktanın iç yarıçapı
R_0	Grafen kuantum karşıt noktanın dış yarıçapı
R	Kuantum noktanın büyüklüğünü karakterize eden birim uzunluk
$U_0(U'_0)$	Grafen kuantum nokta şiddeti
γ_0	Sistemin karaktersitik uzunluğunun tersi
γ	Varyasyon parametresi
$\bar{l}_0$	Efektif uzunluk

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 1.1 Karbonun nano yapıları.....	2
Şekil 2.1 Grafenin örgü yapısı ve birinci Brillouin bölgesi	4
Şekil 2.2 Grafende sıkı bağlanma modeli	8
Şekil 4.1 Grafen kuantum nokta.....	12
Şekil 4.2 Grafen kuantum karşıt nokta.....	12
Şekil 4.3 Grafen karşıt noktanın modellenmesi	13
Şekil 4.4 GKKN'nın enerji spektrumunun magnetik alana bağıllığı	22
Şekil 4.5 $n = 0, 1, 2, 3, 4$ kuantum sayıları için GKN'nın ve GKKN'nın enerji spektrumunun kuantum nokta yarıçapına bağıllığı.....	24
Şekil 4.6 $n = 1$ kuantum sayısının $m = 0, -1, -2, -3$ alt enerji seviyeleri için GKN'nın ve GKKN'nın enerji spektrumunun kuantum nokta yarıçapına bağıllığı	25
Şekil 4.7 $n = 0, 1, 2, 3, 4$ kuantum sayıları için GKN'nın ve GKKN'nın enerji spektrumunun efektif nokta şiddetine $U = U_0/R_0^2$ bağıllığı.	27
Şekil 4.8 $n = 1$ kuantum sayısının $m = 0, -1, -2, -3$ alt enerji seviyeleri için GKN'nın ve GKKN'nın enerji spektrumunun efektif nokta şiddetine $U = U_0/R_0^2$ bağıllığı.	28

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 4.1 $\mathbb{M}_n$ tüm durumlar için ifadeleri	16
Çizelge 4.2 $\mathbb{N}_n$ tüm durumlar için ifadeleri	17

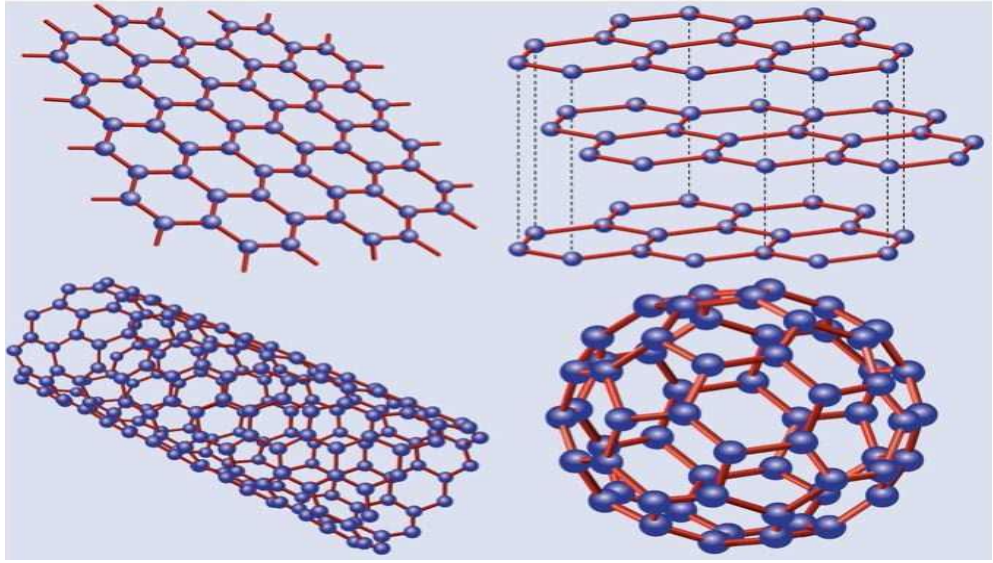
1. GİRİŞ

Karbon elementi yaşam için temel bir madde olup, yapısında karbon içermeyen hiçbir canlı varlık yoktur. Karbon atomu 6 elektronu ile ($1s^2 2s^2 2p^2$) periyodik tabloda IV. grup elementlerinin ilk elemanıdır. Karbon atomları kendi aralarında, bağlanmaya karışan elektronların sayısına göre sp^1 , sp^2 ve sp^3 gösterimleriyle ifade edilen üç farklı bağlanma gösterirler. Karbon elementi, her üç bağlanma geometrisini gösterebilen tek element olması bakımından istisnai bir özelliğe sahiptir. Karbon atomlarından oluşan malzemeler karbon atomlarının kendi aralarındaki bağlanma geometrisine göre, çok farklı fiziksel ve kimyasal özelliklere sahip olmalarının yanı sıra, sınırsız sayıda farklı yapılanmalar da gösterirler. Bu farklı özelliklerin büyük bir kısmı bu yapıların boyutlarının sonucudur. Karbondan oluşan makroskopik boyutlardaki malzemeler, elmas, karbon fiberler, karbin ve karbolitler (zincir ve polimer şeklinde yapılar) ve ayrıca birbirleriyle zayıf bağlanmış grafen tabakalarının üst üste konularak oluşturduğu yapı olan grafitir.

Karbon, elmas ve grafit gibi kristal yapılardan başka, sonlu boyutlarda da sağlam yapılara da sahip olması bakımından istisnai bir elementtir. Karbon periyodik tabloda mevcut elementler içerisinde sıfır boyuttan (0B) üç boyuta (3B) kadar izomerleri (aynı kimyasal bileşime sahip olup, atomları arasındaki bağlantı yapıları farklı olan moleküller) olabilen bir elementtir. Karbonun, bir boyutlu 1B ve 0B yapıları nanometre düzeyinde oldukları için bu yapılara nano yapılar denilmektedir.

Bütün bu yapılar arasında, iki boyutlu (2B) karbon allotropları (aynı elementin uzayda farklı şekildeki kristalleri) ve grafen, diğer allotropların elektronik özelliklerini anlayabilmemizi sağlar. Grafen, karbon atomlarının oluşturduğu altıgen yapıların bir bal peteği şeklinde düzenlenmiş halidir.

Fullerenler, karbon atomlarının küresel olarak düzenlenmesinden meydana gelen moleküllerdir ve sarmalanmış grafen olarak düşünülerek, grafenden elde edilebilirler. Karbon nanotüpler ise grafenin nanometrik çapa ve mikrometrik uzunluğa sahip içi boş silindir şeklinde rulolanmış, sadece altıgen yapıya sahip bir boyutumsu yapılardır. Karbonun çeşitli allotropları şekil 11’de gösterilmiştir.



Şekil 1.1 Karbonun nano yapıları (Neto vd. 2007)

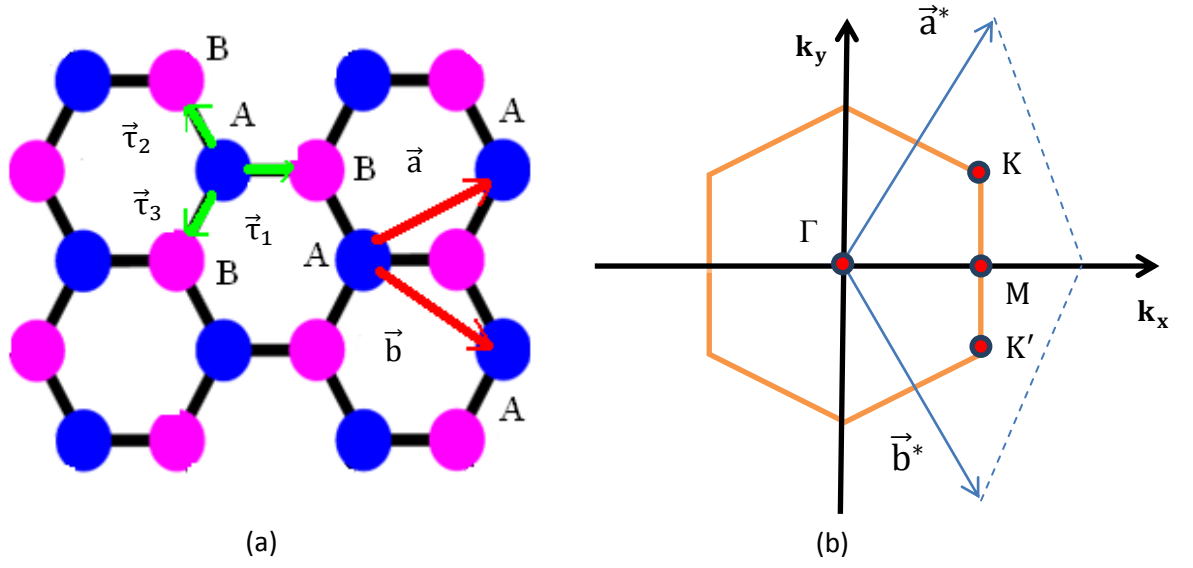
Grafen (sol üstte), karbon atomlarının bal peteği örgüsünden meydana gelmiştir. Grafit (sağ üstte), grafen tabakalarının üst üste konularak oluşturulmuş yapıdır. Karbon nanotüpler (sol altta) grafenin silindirik şeklinde rulolanmış halidir. Fullerenler (C_{60}) ise karbon atomlarının beşgen ve altıgen yüzeyler oluşturmasıyla meydana gelen küre şeklindeki yapılardır

2. GRAFEN

Grafen, karbon atomlarının oluşturduğu altıgen yapıların bir bal peteği şeklinde düzenlenmiş halidir. Bir kâğıt parçasına kurşun kalemle bastırdığımızda, grafen tabakaları üretilir. Bu grafen tabakaları arasında tek tek gözlemleyebileceğimiz grafen tabakaları da olabilir. Grafen, farklı karbon allotroplarının temeli olmasına ve kurşun kalemle yazdığımızda bile üretilebilmesine rağmen, keşfedildikten 440 yıl sonra ancak günümüzde izole edilebilmiştir (Neto vd. 2007). Bunun birinci nedeni olarak, hiç kimsenin grafende serbest durumların var olduğunu beklememesi, ikincisi ise, makroskopik alanları kaplayan kurşun kalem döküntüleri arasından bir atomik kalınlıklı ince tabakayı araştırarak hiçbir deneysel aracın olmamasıdır.

2.1 Grafenin Örgü Yapısı

Grafen düzlemi ($\vec{a}$, $\vec{b}$) vektörleri tarafından tanımlanan ve her birim örgü hücresinde iki farklı karbon atomu (A,B) bulunan altıgen örgüdür. İki boyutlu grafenin yapısı ve birinci Brillouin bölgesi şekil 2.1’de gösterilmiştir.



Şekil 2.1 Grafenin örgü yapısı ve birinci Brillouin Bölgesi

a. İki boyutlu grafenin örgü yapısında $\vec{a}$ ve $\vec{b}$ olarak adlandırılan birim örgüvektörleri. En yakın komşu atomlara uzaklığı belirten $\vec{\tau}_l$ ($l=1, 2, 3$) birim öteleme vektörleri, b. İki boyutlu grafenin birinci Brillouin bölgesi. $\vec{a}^*$ ve $\vec{b}^*$ ise ters örgü vektörleri olup, Γ , M , K , K' birinci Brillouin bölgesinin en yüksek simetri noktalarıdır

Burada birim örgü vektörleri,

$$\vec{a} = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 1)$$

$$\vec{b} = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, -1) \quad (2.1)$$

ile verilir. Böylelikle, en yakın komşu karbon atomlarını birleştiren vektörler ise,

$$\vec{\tau}_1 = a\left(\frac{1}{\sqrt{3}}, 0\right)$$

$$\vec{\tau}_2 = a\left(\frac{-1}{2\sqrt{3}}, \frac{1}{2}\right)$$

$$\vec{\tau}_3 = a\left(\frac{-1}{2\sqrt{3}}, \frac{-1}{2}\right) \quad (2.2)$$

ile ifade edilir. Burada ki a , $a = 0.246 \text{ nm}$ ile verilen örgü sabitidir. Şekil 2.2’de gösterildiği gibi A ve B olarak adlandırılan karbon atomlarını içeren bir altıgen birim örgü hücrenin alanı,

$$\Omega_0 = |\vec{a} \times \vec{b}| = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 \quad (2.3)$$

ile verilir. $\vec{a}^*$ ve $\vec{b}^*$ ters örgü vektörleri $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$ şartına bağlı olarak,

$$\begin{aligned} \vec{a}^* &= \left(\frac{2\pi}{a}\right) \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, 1\right) \\ \vec{b}^* &= \left(\frac{2\pi}{a}\right) \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, -1\right) \end{aligned} \quad (2.4)$$

şeklinde ifade edilir.

Altıgen olan birinci Brillouin bölgesinin alanı,

$$\Omega_0^* = |\vec{a}^* \times \vec{b}^*| = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}} \quad (2.5)$$

ile verilir. Grafende, iletim ve valans bantları, $\vec{K}$ ve $\vec{K}'$ noktalarına değen π durumlarında oluşur. Brillouin bölgesinin köşelerindeki $\vec{K}$ ve $\vec{K}'$ noktaları, birim hücre üzerinde geometrik hesap yapılarak

$$\begin{aligned} \vec{K} &= \left(\frac{2\pi}{a}\right) \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{3}\right) \\ \vec{K}' &= \left(\frac{2\pi}{a}\right) \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{3}\right) \end{aligned} \quad (2.6)$$

olarak bulunur.

2.2 Grafende Sıkı Bağlanma Yaklaşımı

Grafende sıkı bağlanma yaklaşımında, grafen için toplam Hamiltonienin elektronik spektrumunun türetilmesi için bu Hamiltoniene karşı gelen Schrödinger denklemi çözülmelidir ve Bloch teoremi $\{T_{\vec{a}_i} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_i} \Psi, (i = 1, \dots, 3)\}$ kullanılarak dalga fonksiyonları yazılmalıdır. En yakın komşuluk sıkı-bağlanma modelinde, dalga fonksiyonları

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{R_A} \Psi_A(\vec{R}_A) \Phi(\vec{r} - \vec{R}_A) + \sum_{R_B} \Psi_B(\vec{R}_B) \Phi(\vec{r} - \vec{R}_B) \quad (2.7)$$

ile verilir (Saito vd. 2000), burada $\Phi(\vec{r})$, orijinde yerleşmiş karbon atomunun p_z orbitalinin dalga fonksiyonudur. n ve m tamsayı olmak üzere A ve B atomlarının konum vektörleri $\vec{R}_A = n\vec{a} + m\vec{b} + \vec{\tau}_1$ ve $\vec{R}_B = n\vec{a} + m\vec{b}$ şeklinde yazılabilir. $J_0 = 2.7$ eV en yakın komşu karbon atoma sıçrama enerjisi, $\Psi_A(\vec{R}_A)$ ve $\Psi_B(\vec{R}_B)$ ise A ve B atomlarına karşı gelen dalga vektörleridir. Bu dalga vektörleri için Schrödinger denklemini,

$$\begin{aligned} \epsilon \Psi_A(\vec{R}_A) &= -J_0 \sum_{l=1}^3 \Psi_B(\vec{R}_A - \vec{\tau}_l) \\ \epsilon \Psi_B(\vec{R}_B) &= -J_0 \sum_{l=1}^3 \Psi_A(\vec{R}_B + \vec{\tau}_l) \end{aligned} \quad (2.8)$$

şeklinde yazabiliriz. Burada işlemleri basitleştirmek için en yakın A ve B komşulukları arasındaki üst üste gelme integrali $\{S_{ii'}(\vec{k}) = \langle \Psi_i | \Psi_{i'} \rangle, (i, i' = 1, \dots, n)\}$ tamamen ihmal edilmiştir (Saito vd. 2000).

$\Psi_A(\vec{R}_A)$ ve $\Psi_B(\vec{R}_B)$ dalga fonksiyonları, Bloch Teorimi kullanarak $\Psi_A(\vec{R}_A) \propto \vec{f}_A \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_A)$ ve $\Psi_B(\vec{R}_B) \propto \vec{f}_B \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_B)$ bağıntılarıyla ifade edilir. Bu bağıntılar 2.8 bağıntısında yerine konulur ise

$$\varepsilon \vec{f}_B = f_B(\vec{k}) h_{AB}^*$$

$$\varepsilon \vec{f}_A = f_A(\vec{k}) h_{AB} \quad (2.9)$$

denklemleri bulunur. Burada $h_{AB} = -J_0 \sum_l \exp(i\vec{k} \cdot \vec{\tau}_l)$ olarak tanımlanır. Oluşturulan bu denklemlerle $\vec{f}_A$ ve $\vec{f}_B$ ifadeleri için 2.9 bağıntısıyla verilen enerji öz değeri denklemi,

$$\begin{pmatrix} 0 & h_{AB}(\vec{k}) \\ h_{AB}^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_A(\vec{k}) \\ f_B(\vec{k}) \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} f_A(\vec{k}) \\ f_B(\vec{k}) \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

şeklinde yazılabilir. 2.10 özdeğer denklemi çözülerek enerji özdeğerleri, $\vec{k} = k_x \bar{x} + k_y \bar{y}$ olmak üzere

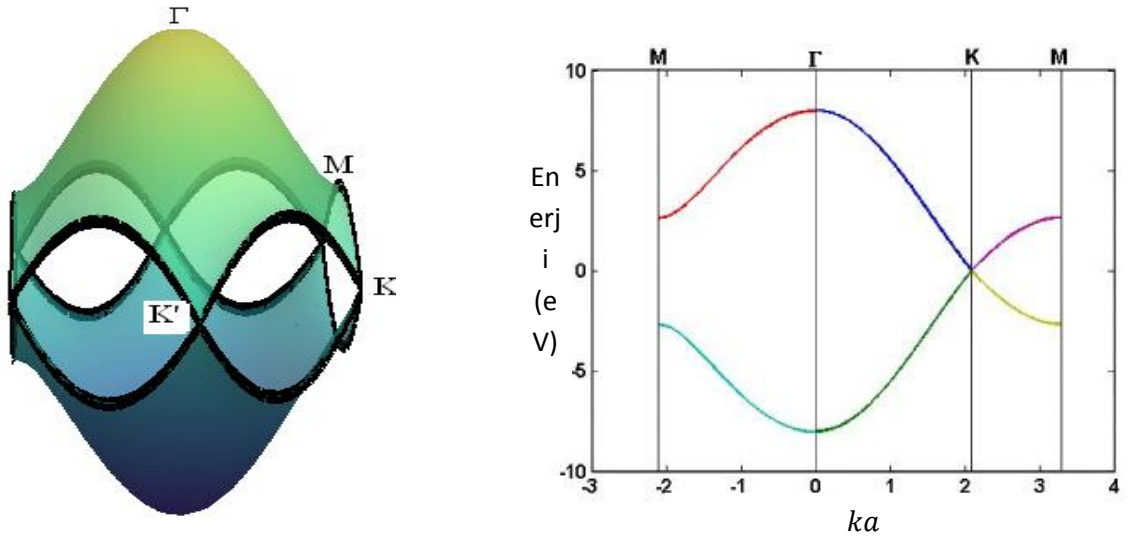
$$\varepsilon_{\pm}(\vec{k}) = \pm J_0 \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{ak_y}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}ak_x}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{ak_y}{2}\right)} \quad (2.11)$$

şeklinde bulunabilir. Burada, (+), en yüksek π^* bantına, (−) ise en düşük π bantına ait enerjilerdir.

(2.11) bağıntısı K ve K' noktalarında $\varepsilon_{\pm}(\vec{K}) = \varepsilon_{\pm}(\vec{K}') = 0$ değerini alır. K ve K' noktaları yakınında $\varepsilon_{\pm}(\vec{k} + \vec{K})$ ve $\varepsilon_{\pm}(\vec{k} + \vec{K}')$ özdeğerlerini, $|\vec{k}|a \ll 1$ için $J = \sqrt{3}a J_0/2$ olmak üzere,

$$\varepsilon_{\pm}(\vec{k} + \vec{K}) = \varepsilon_{\pm}(\vec{k} + \vec{K}') = \pm J \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \quad (2.12)$$

şeklinde yazmak mümkündür. K ve K' noktaları çevresindeki bu şekildeki lineer dağılım bağıntısı, iki boyutlu grafenin çeşitli elektronik ve iletim özelliklerinde önemli bir rol oynar. Grafenin bant yapısı şekil 2.2' de gösterilmiştir



Şekil 2.2 Grafende sıkı bağlanma modeli(Van Nam Do ve Thanh Huy Pham 2010)

$M \rightarrow \Gamma \rightarrow K \rightarrow M$ boyunca en yakın komşulukta sıkı bağlanma modeliyle elde edilen iki boyutlu grafenin π bant yapısı. Fermi seviyesi $\varepsilon=0$ noktası boyunca uzanır. Brillouin bölgesinin tüm alanı boyunca gösterilen iki boyutlu grafen için enerji dağılım bağıntıları.

Grafenin en ilginç yönlerinden biri, grafenin düşük enerji uyarımları olan kütlesiz, Dirac fermiyonları olarak tasvir edilebilmesidir. Grafende, kimyasal potansiyel tamamen Dirac noktasıyla çakışır. Elektronlar Fermi-Dirac istatistiğiyle betimlenen parçacıklardır ve katı hal fiziğinin sınırları içerisinde genellikle görelili olmayan parçacıklar kategorisinde değerlendirilirler. Zira, elektron katı haldeki madde içerisindeki hızları ışık hızından oldukça düşüktür ve görelili olmayan parçacık denklemi (Schrödinger denklemi) elektronların katılardaki davranışlarını oldukça iyi bir şekilde betimler. Ancak, grafen için durum oldukça farklıdır. Grafen elektronları için yazılan denklemlerle gerçekten göreceli parçacıklar için yazılan denklem arasındaki tek fark denklemdaki ışık hızının değeridir. Ayrıca, grafendeki elektronların etkin kütleleri sıfırdır. Bu yüzden grafen elektronlarına kütlesiz Dirac fermiyonları da denmektedir.

3. DIRAC DENKLEMİ

Klein- Gordon denkleminde karşılaşılan negatif enerjili çözümler ve negatif olasılık yoğunluğu probleminin üstesinden gelmek amacıyla 1927 yılında Dirac $\partial/\partial t$ ve $\vec{\nabla}$ ye göre lineer yapıda olan bir relativistik kuantum mekaniği denklemi önerdi. Dirac Hamiltonyeni aşağıda verilmiştir.

$$\mathcal{H} = (c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2) \quad (3.1)$$

Burada, $\vec{\alpha}$, β Dirac matrisleri,

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

şeklindedir. m elektronun kütlesi, c ise ışık hızıdır.

Bu Hamiltonyen için enerji özdeğer denklemi,

$$\mathcal{H}\Psi_n = E_n \Psi_n \quad (3.3)$$

şeklinde ifade edilir.

Manyetik alan varlığında bir elektron için Dirac Hamiltonyeni ise,

$$\mathcal{H} = c\vec{\alpha} \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right) + \beta mc^2 \quad (3.4)$$

şeklindedir.

Burada $\vec{A}$, vektör potansiyeli, $\vec{p}$ ise momentum operatörüdür.

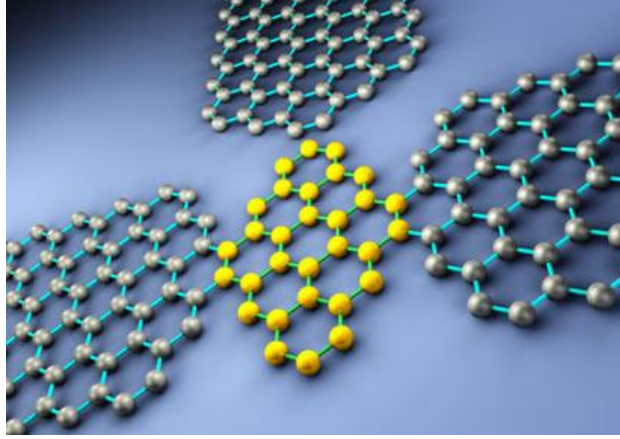
Grafende ise manyetik alan içerisindeki bir elektron için Dirac Hamiltoniyeni,

$$\mathcal{H} = v_F \vec{\alpha} \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right) + \beta m v_F^2 \quad (3.5)$$

şeklinde yazmak mümkündür. Burada v_F , ışık hızının üç yüzde biri olan fermi hızıdır (Neto vd. 2007).

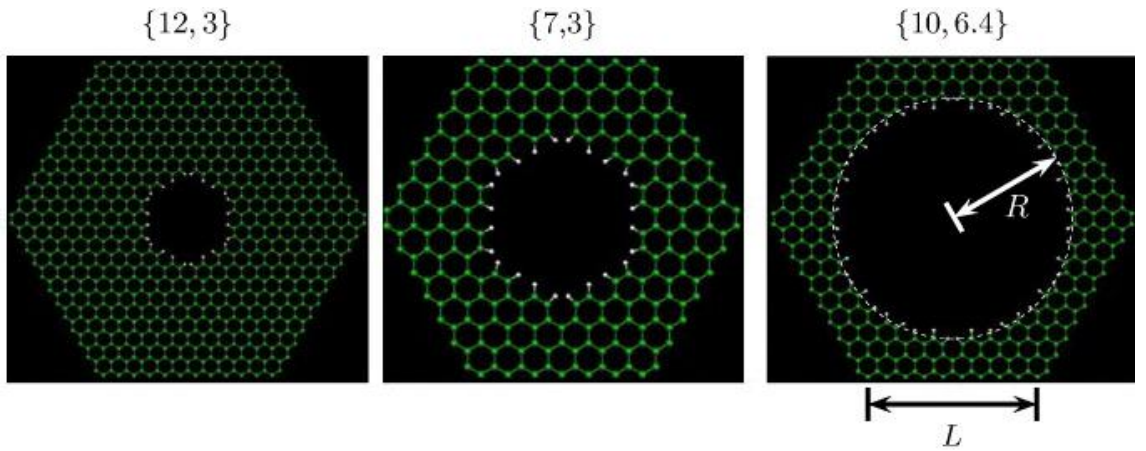
4. GRAFEN KUANTUM NOKTA VE KARŞIT NOKTA

Bir grafen kuantum nokta (GKN) örgüsü, farklı şekillerde kesilmiş grafen örgüsünden oluşur. Bu farklı şekiller altıgen olabileceği gibi kare, disk de olabilir.



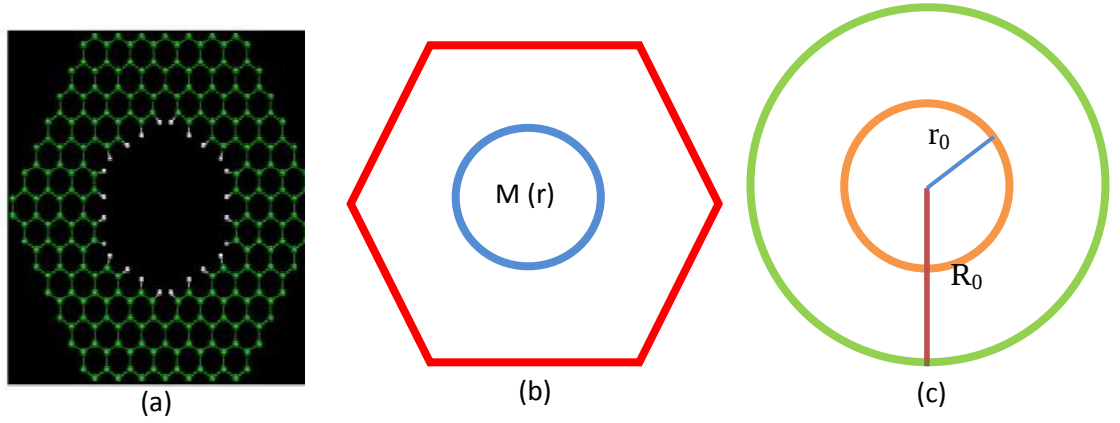
Şekil 4.1 Grafen kuantum nokta ([http://lifedaily.net/an-advanced-architecture-for-scalable-quantum-computers/.](http://lifedaily.net/an-advanced-architecture-for-scalable-quantum-computers/))

Bir grafen kuantum karşıt nokta ise (GKKN), bir grafen tabakasında periyodik delikli yapılardan oluşur.



Şekil 4.2 Grafen kuantum karşıt nokta (Furst vd. 2009)

GKKN yapısı $\{L, R\}$ sayı çifti ile ifade edilir. L, tamsayı değerler alırken, R'in tamsayı olması şart değildir. Manyetik alan varlığında grafen kuantum nokta ve karşıt noktalardaki tek elektronun Dirac Hamiltonyeni, manyetik alan varlığında grafendeki tek elektronun Dirac Hamiltonyenine, grafen noktanın yarıçapına ve karşıt noktanın delik yarıçapına bağlı r ile orantılı bir potansiyel terimi eklenerek modelleme yapılarak çözülebilmektedir.



Şekil 4.3 Grafen karşıt noktanın modellenmesi

a. Grafen karşıt nokta b. Grafen karşıt noktayı modellemek için Dirac denklemine eklenecek potansiyel terimi $M(r)$ c. Grafen karşıt nokta için yapılan modelleme, burada r_0 , karşıt noktanın iç yarıçapı, R_0 ise grafen karşıt noktanın dış yarıçapıdır.

4.1 Grafen Kuantum Nokta ve Karşıt Nokta İçin Dirac Hamiltonyeni Çözümleri

Manyetik alan içerisindeki GKKN'daki tek elektron için Dirac Hamiltonyeni,

$$\mathcal{H} = v_F \vec{\alpha} \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right) + \beta \left(\frac{\Delta}{r} + \Delta_0 r^2 \right) \quad (4.1)$$

şeklinde yazılabilir.

Burada $\Delta_0 r^2$, GKN, $\frac{\Delta}{r} + \Delta_0 r^2$ terimlerinin toplamı ise GKKN'yı temsil etmektedir. Denklemdaki $\Delta_0 = U_0/2R_0^2$, $\Delta = U'_0 r_0$ olarak tanımlanmıştır. Burada $U_0(U'_0)$ nokta şiddeti, $R_0(r_0)$ kuantum karşıt noktanın dış (iç) yarıçapını, $v_F = (3a/2)J_0$ fermi hızını tanımlar. 4.1 denklemindeki $\vec{A}$ vektör potansiyeli için simetrik ayar alınarak $\vec{A} = B_0(-y, x, 0)/2$, kullanılabilir. $\Delta_0 r^2|_{R_0} = \mu = \Delta/r|_{r_0}$ sınır değerlerinde kimyasal potansiyele eşit olmasını gerektirmektedir. Denklem 3.5 çözümü safsızlık varlığında Kandemir ve Mogulkoç (2010) tarafından yapılmıştır. Manyetik alan varlığında GKN ve GKKN için Dirac Hamiltonyeni ise manyetik alan varlığındaki grafen için Dirac Hamiltonyenine r 'ye bağlı potansiyel terimleri eklenerek çözülebilmektedir.

4.1 denklemini 3.3 denkleminde yerine koyup çözdüğümüzde dört bileşenli pozitif enerji spinörleri,

$$\begin{aligned}\Psi_n^K(x, \varphi) &= R_n(x) e^{im\varphi} e^{-x^2/2} \begin{pmatrix} \mathbb{L}^0 \\ 0 \\ 0 \\ \mathbb{L}^K \end{pmatrix} \\ \Psi_n^{K'}(x, \varphi) &= R_n(x) e^{im\varphi} e^{-x^2/2} \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbb{L}^0 \\ \mathbb{L}^{K'} \\ 0 \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (4.2)$$

şeklinde elde edilir. Burada, $R_n(x) = [v!/2\pi(v + |m|)!]^{1/2} \gamma_0 x^{|m|}$ şeklinde değer alır. $\mathbb{L}^0(x) = L_v^{|m|}(x^2)$ olmak üzere $\mathbb{L}^K, \mathbb{L}^{K'}$

$$\begin{aligned}\mathbb{L}^K &= \frac{ixe^{+i\varphi}}{\sqrt{n}} \begin{cases} L_v^{|m|+1}(x^2) & m \geq 0 \\ -\frac{n}{x^2} L_{v+1}^{|m|-1}(x^2) & m < 0, \end{cases} \\ \mathbb{L}^{K'} &= \frac{ixe^{-i\varphi}}{\sqrt{n}} \begin{cases} -\frac{n}{x^2} L_v^{|m|-1}(x^2) & m \geq 0 \\ L_{v+1}^{|m|+1}(x^2) & m < 0 \end{cases}\end{aligned}\quad (4.3)$$

değerlerini alır.

$l_B = (\hbar c / eB)^{1/2}$ magnetik uzunluk, $\varepsilon_n = \hbar v_F \sqrt{2n} / l_B$ olmak üzere, λ ise -1 değeri ile grafenin valans, +1 değeri ile iletim bantına karşılık gelen iki farklı değer alır. Grafen için 4.1 denklemindeki enerji spinörlerine karşılık gelen enerji özdeğerleri, $E_n = \lambda \varepsilon_n$ denkleminde elde edilir. τ grafendeki K vadisinde +1, K' vadisinde ise -1 değerini alan pseudospin indeksi olmak üzere n ise, $n = \nu + (|m| + m + \tau + 1)/2$ denkleminde ifade edilir. Denklem 4.3'deki $x = \gamma_0 \rho$ boyutsuz bir parametre olup, γ_0 ise sistemin karaktersitik uzunluğunun tersi boyuttur. Uzaysal parabolik hapsedilme durumu olmadığında, $\gamma_0 = \gamma = 1/\sqrt{2} l_B$ magnetik uzunluk olan l_B ile ters orantılıyken, uzaysal hapsedilme durumunda ise grafen sistemini tanımlayan 4.1 denkleminde, grafendeki skaler parabolik kuantum noktanın büyüklüğünü karakterize eden birim uzunluk $R = (\hbar v_F R_0^2 / U_0)^{1/3}$ i içermektedir (Silvestrov ve Efetov 2007, Chen, Apalkov, Chakraborty 2007). $\gamma_0^2 = \gamma^2 + R^{-2}$ bağıntısı ile tanımlanan; sistemi karakterize eden γ varyasyon parametresi, $R \rightarrow \infty$ limitinde $1/\sqrt{2} l_B$ indirgenerek tek parametreye, yani, l_B bağımlı olmaktadır (Chen vd. 2007). Bu durumda 4.1 denkleminde varyasyonel enerji özdeğerleri;

$$E_n(\gamma_0) = \int d^2r \Psi_n^\dagger(\gamma_0) \left[\boldsymbol{\alpha} \cdot \left(-i\boldsymbol{\nabla} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A} \right) + \beta \left(\frac{\Delta}{r} + \Delta_0 r^2 \right) \right] \Psi_n(\gamma_0) \quad (4.4)$$

4.4 denkleminde elde edilebilir. Burada, $\Psi_n(\gamma_0)$ ve $\Psi_n^\dagger(\gamma_0)$ fonksiyonları, $\Psi_n^K(x, \varphi)$ ve $\Psi_n^{K'}(x, \varphi)$ enerji spinörlerini temsil etmektedir. 4.3 ifadesini 4.2 ifadesiyle birlikte (4.4) ifadesinde yerine yazılarak çözüldüğünde sistemin varyasyonel enerji için

$$E_n(\gamma_0) = \frac{1}{1 + \frac{\pi}{\Gamma^2}} \left[\left(\frac{2n}{\Gamma} + \frac{U'_0 r_0}{\hbar v_f} N_n \right) \gamma_0 + \frac{1}{\gamma_0} \frac{eB}{\hbar c} + \frac{1}{\gamma_0^2} \frac{1}{2} \frac{U_0}{\hbar v_f R_0^2} M_n \right] \quad (4.5)$$

ifadesi elde edilir. Burada $\Gamma(M_0, n)$, $\Gamma(M_0, n) = l_B / \sqrt{2} \left\{ M_0 + [M_0^2 + (2n/l_B)^2]^{1/2} \right\}$ denkleminde ifade edilirken (Kandemir ve Mogulkoç 2010), M_n 'nin değerleri çeşitli durumlar için ifadeleri çizelge 4.1'de verilmiştir.

Çizelge 4.1 $\mathbb{M}_n$ 'nin tüm durumlar için ifadeleri

m, τ	$\mathbb{M}_n$	$\bar{I}_4$	$\bar{I}_5$
$m \geq 0, \tau = +1$	$\frac{(n-m-1)!}{(n-1)!} \left(\bar{I}_4 - \frac{1}{\Gamma^2} \bar{I}_5 \right)$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m +1} L_{n-m-1}^m ^2$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m +2} L_{n-m-1}^{m+1} ^2$
$m \geq 0, \tau = -1$	$\frac{(n-m)!}{n!} \left(\bar{I}_4 - \frac{n^2}{\Gamma^2} \bar{I}_5 \right)$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m +1} L_{n-m}^{ m } ^2$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m } L_{n-m}^{ m -1} ^2$
$m < 0, \tau = +1$	$\frac{(n-1)!}{(n- m -1)!} \left(\bar{I}_4 - \frac{n^2}{\Gamma^2} \bar{I}_5 \right)$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m +1} L_{n-1}^{ m } ^2$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m +2} L_{n-1}^{ m -1} ^2$
$m < 0, \tau = -1$	$\frac{n!}{(n+ m)!} \left(\bar{I}_4 - \frac{1}{\Gamma^2} \bar{I}_5 \right)$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m +1} L_n^{ m } ^2$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m +2} L_{n-1}^{ m +1} ^2$

Tüm bu durumlar için $\mathbb{M}_n$ ifadesinin genel denklemi,

$$\mathbb{M}_n = \mathbb{F}_n - \frac{1}{\Gamma^2} \mathbb{G}_n \quad (4.6)$$

şeklinde yazılabilir. Denklem 4.6'da $\mathbb{F}_n$ ve $\mathbb{G}_n$ integralleri ise

$$\mathbb{F}_n = \frac{v!}{(v+|m|)!} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|+1} |L_v^{|m|}(r^2)|^2$$

$$\mathbb{G}_n = \frac{v!}{(v+|m|)!} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|+1} \mathbb{H}_{v,\alpha}^{|m|}(r) \quad (4.7)$$

Şeklinde ifade edilir. Buradaki $\mathbb{H}_{v,\alpha}^{|m|}(r)$ terimi ise

$$\mathbb{H}_{v,\alpha}^{|m|}(r) = \begin{cases} r |L_{v,\alpha}^{|m+1|}(r)|^2, \alpha = \begin{cases} 0 & m \geq 0 \tau = +1 \\ -1 & m < 0 \tau = -1 \end{cases} \\ \frac{n^2}{r} |L_{v,\alpha}^{|m-1|}(r)|^2, \alpha = \begin{cases} 0 & m \geq 0 \tau = +1 \\ +1 & m < 0 \tau = -1 \end{cases} \end{cases} \quad (4.8)$$

ifadesiyle temsil edilir.

Bu çalışmada spin orbit etkileşimi gibi ek bir kütleel M_0 terimi olmadığından $\Gamma = \sqrt{n}$ değerini alır ve böylece Denklem 4.6,

$$\mathbb{M}_n = \mathbb{F}_n - \frac{1}{n} \mathbb{G}_n \quad (4.9)$$

şeklinde yazılabilir.

Denklem 4.5’de $\mathbb{N}_n$ ifadesi için çeşitli durumlarda aldığı değerler çizelge 4.2’de verilmiştir.

Çizelge 4.2 $\mathbb{N}_n$ ’nin tüm durumlar için ifadeleri

m, τ	$\mathbb{N}_n$	$\bar{I}_2$	$\bar{I}_3$
$m \geq 0, \tau = +1$	$\frac{(n-m-1)!}{(n-1)!} \left(\bar{I}_2 - \frac{1}{\Gamma^2} \bar{I}_3 \right)$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m -\frac{1}{2}} \left L_{n-m-1}^{(m)} \right ^2$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m +\frac{1}{2}} \left L_{n-m-1}^{(m)+1} \right ^2$
$m \geq 0, \tau = -1$	$\frac{(n-m)!}{n!} \left(\bar{I}_2 - \frac{n^2}{\Gamma^2} \bar{I}_3 \right)$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m -\frac{1}{2}} \left L_{n-m}^{(m)} \right ^2,$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m -\frac{3}{2}} \left L_{n-m}^{(m)-1} \right ^2$
$m < 0, \tau = +1$	$\frac{(n-1)!}{(n- m -1)!} \left(\bar{I}_2 - \frac{n^2}{\Gamma^2} \bar{I}_3 \right)$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m -\frac{1}{2}} \left L_{n-1}^{(m)} \right ^2$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m -\frac{3}{2}} \left L_n^{(m)-1} \right ^2$
$m < 0, \tau = -1$	$\frac{n!}{(n+ m)!} \left(\bar{I}_2 - \frac{1}{\Gamma^2} \bar{I}_3 \right)$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m -\frac{1}{2}} \left L_n^{(m)} \right ^2$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m +\frac{1}{2}} \left L_{n-1}^{(m)+1} \right ^2$

Tüm bu durumları $\mathbb{N}_n$ ’nin genel denklemi

$$\mathbb{N}_n = \tilde{\mathbb{F}}_n - \frac{1}{\Gamma^2} \tilde{\mathbb{G}}_n \quad (4.10)$$

şeklinde yazılabilir. Denklem 4.10’daki $\tilde{\mathbb{F}}_n$ ve $\tilde{\mathbb{G}}_n$ integralleri ise,

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbb{F}}_n &= \frac{v!}{(v+|m|)!} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|-\frac{1}{2}} |L_v^{(m)}(r^2)|^2 \\ \tilde{\mathbb{G}}_n &= \frac{v!}{(v+|m|)!} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|-\frac{1}{2}} \mathbb{H}_{v,\alpha}^{(m)}(r)\end{aligned}\quad (4.11)$$

denklemleriyle ifade edilir. $\Gamma = \sqrt{n}$ değeri denklem 4.11’de yerine yazıldığında, N_n için

$$N_n = \tilde{\mathbb{F}}_n - \frac{1}{n} \tilde{\mathbb{G}}_n \quad (4.12)$$

ifadesi elde edilir. Denklem 4.5’i $(3J_0/2a)$ ile çarparak boyutsuzlaştırma yaptığımızda,

$$\begin{aligned}E_n(\gamma_0) &= \frac{3J_0}{2a} \frac{1}{1+\frac{n}{\Gamma^2}} \left[\left(\frac{2n}{\Gamma} + \frac{U'_0 r_0}{\hbar v_f} N_n \right) \gamma_0 + \frac{1}{\gamma_0} \frac{eB}{\hbar c} + \frac{1}{\gamma_0^2} \frac{1}{2} \frac{U_0}{\hbar v_f R_0^2} \mathbb{M}_n \right] \\ E_n(\gamma_0) &= \frac{3J_0}{2} \frac{1}{1+\frac{n}{\Gamma^2}} \left[(\gamma_0 a) \left(\frac{2n}{\Gamma} + \frac{U'_0 r_0 N_n}{\hbar v_f} \right) + \frac{1}{(\gamma_0 a)} \frac{2n}{\Gamma} \frac{eBa^2}{\hbar c} + \frac{1}{(\gamma_0 a)^2} \frac{1}{2} \frac{U_0 a^3}{\hbar v_f R_0^2} \mathbb{M}_n \right]\end{aligned}\quad (4.13)$$

denklemini elde ederiz. $\gamma_0 a = \bar{\gamma}_0$, $u = U'_0 \bar{r}_0 / 3J_0$ seçimi yapıldığında boyutsuz karşıt nokta şiddeti, $\bar{r}_0 = r_0/a$; boyutsuz karşıt nokta iç yarıçapı, olarak tanımlanır. Bu durumda $1/\bar{R}^3 = 3U_0 a^3 / 2\hbar v_f R_0^2$, $eBa^2/\hbar c = 1/\bar{l}_B^2$ ifadeleri denklem 4.13 yerine yazılırsa,

$$\bar{E}_n(\bar{\gamma}_0) = \frac{1}{1+\frac{n}{\Gamma^2}} \left[\left(\frac{2n}{\Gamma} + u N_n \right) \bar{\gamma}_0 + \frac{2n}{\Gamma} \frac{1}{2\bar{l}_B^2} \frac{1}{\bar{\gamma}_0} + \frac{1}{2\bar{R}^3} \frac{1}{\bar{\gamma}_0^2} \mathbb{M}_n \right] \quad (4.14)$$

elde edilir. $\Gamma = \sqrt{n}$ değeri de denklem 4.14’de yerine yazıldığında, boyutsuz varyasyonel enerji ifadesi

$$\bar{E}_n(\bar{\gamma}_0) = \left[\left(\sqrt{n} + \frac{1}{2} u N_n \right) \bar{\gamma}_0 + \sqrt{n} \frac{1}{2\bar{l}_B^2} \frac{1}{\bar{\gamma}_0} + \frac{1}{4\bar{R}^3} \frac{1}{\bar{\gamma}_0^2} \mathbb{M}_n \right] \quad (4.15)$$

şeklinde yazılabilir.

$\bar{\gamma}$ boyutsuz varyasyon parametresi olmak üzere sistemi karakterize eden $\bar{\gamma}_0, \bar{\gamma}_0^2 = \bar{\gamma}^2 + \bar{R}^{-2}$ bağıntısı ile belirtilir (Chen vd. 2007). Denklem 4.15) $\bar{\gamma}$ ve $\bar{R}$ cinsinden,

$$\begin{aligned} \bar{E}_n(\bar{\gamma}) = & \frac{1}{1 + \frac{n}{\bar{r}^2}} \left[\left(\bar{\gamma}^2 + \bar{R}^{-2} \right)^{1/2} \left(\frac{2n}{\bar{r}} + uN_n \right) + \left(\bar{\gamma}^2 + \bar{R}^{-2} \right)^{-1/2} \frac{2n}{\bar{r}} \frac{1}{2\bar{l}_B^2} \right. \\ & \left. + \left(\bar{\gamma}^2 + \bar{R}^{-2} \right)^{-1} \frac{1}{2\bar{R}^3} M_n \right] \end{aligned} \quad (4.16)$$

şeklinde yeniden yazılabilir İntegral tabloları (Gradshteyn ve Rzyhik 2000) kullanılarak denklem 4.6'deki M_n integrali için,

$$\begin{aligned} F_n &= \frac{v!}{(v + |m|)!} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|+1} \left| L_v^{(|m|)}(r^2) \right|^2 = (2v + |m| + 1) \\ G_n &= \frac{v!}{(v + |m|)!} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|+1} \mathbb{H}_{v,\alpha}^{(|m|)}(r) = 2n - m \\ M_n &= F_n \frac{n}{\bar{r}^2} G_n = (2v + |m| + 1) - \frac{n}{\bar{r}^2} (2n - m) \end{aligned} \quad (4.17)$$

analitik ifadeleri bulunabilir. Denklem 4.17'de, $v = n - |m| + m + \tau + 1/2$ yazıldığında M_n için

$$M_n = (2n - m) \left(1 - \frac{n}{\bar{r}^2} \right) - \tau \quad (4.18)$$

olduğu görülebilir. Böylelikle 4.16 ifadesi ,

$$\begin{aligned} \bar{E}_n(\bar{\gamma}) = & \frac{1}{1 + \frac{n}{\bar{r}^2}} \left\{ \left(\bar{\gamma}^2 + \bar{R}^{-2} \right)^{1/2} \left(\frac{2n}{\bar{r}} + uN_n \right) + \left(\bar{\gamma}^2 + \bar{R}^{-2} \right)^{-1/2} \frac{2n}{\bar{r}} \frac{1}{2\bar{l}_B^2} \right. \\ & \left. + \left(\bar{\gamma}^2 + \bar{R}^{-2} \right)^{-1} \frac{1}{2\bar{R}^3} [(2n - m) \left(1 - \frac{n}{\bar{r}^2} \right) - \tau] \right\} \end{aligned} \quad (4.19)$$

şeklinde yeniden yazılabilir. Son olarak spin orbit etkileşmesi gibi terimleri temsil eden kütle terimi $M_0 = 0$ olduğu durumda ise denklem 4.19,

$$\begin{aligned} \bar{E}_n(\bar{\gamma}) = & \frac{1}{2} \{ (\bar{\gamma}^2 + \bar{R}^{-2})^{1/2} (2\sqrt{n} + uN_n) + (\bar{\gamma}^2 + \bar{R}^{-2})^{-1/2} 2\sqrt{n} \frac{1}{2\bar{l}_B^2} \\ & + (\bar{\gamma}^2 + \bar{R}^{-2})^{-1} \frac{1}{2\bar{R}^3} (-\tau) \} \end{aligned} \quad (4.20)$$

şeklinde yazılabilir. Ayrıca, her n değeri için N_n terimi de analitik olarak hesaplanabilir. Örneğin, $n=0$ değeri için, $N_n = \Gamma(|m| + 1/2)/\Gamma(|m| + 1)$ değerini alır, $\Gamma(x)$ ise Gamma fonksiyonudur.

Denklem 4.20'yi nümerik olarak minimize etmeden önce, bazı limit durumlarında denklem 4.20'deki enerji ifadesi için yaklaşık analitik ifadeleri incelemek de mümkündür. Uzaysal hapsolme potansiyelinin yokluğunda, yani $\bar{R} \rightarrow \infty$ ve $\bar{r}_0 \rightarrow 0$ limitinde, varyasyon parametresi olan $\bar{\gamma}$, $\bar{\gamma} = 1/\sqrt{2}\bar{l}_B$ değerini aldığı anda, denklem (4.20)'deki enerji ifadesinin minimum değeri için $\bar{E}_n = \sqrt{2n}/\bar{l}_B$ ifadesi bulunur. Böylece, kütsüz grafen için bilinen Landau düzeyleri (LD) elde edilebilir. Sonuç olarak, denklem (4.20)'de varyasyon parametresi olan $\bar{\gamma}$, $\bar{\gamma} = 1/\sqrt{2}\bar{l}_B$ kullanarak enerji ifadesinin yaklaşık ilk değeri için,

$$\bar{E}_0 = \frac{1}{2} u \frac{\Gamma(|m|+1/2)}{\Gamma(|m|+1)} \frac{1}{\bar{l}_0} + \frac{1}{4} \frac{\bar{l}_0^2}{\bar{R}^3} \quad (4.21)$$

olduğu bulunabilir. $1/\bar{l}_0^2 = 1/2\bar{l}_B^2 + 1/\bar{R}^2$ şeklinde tanımlanan $\bar{l}_0$ efektif uzunluk olup, $\bar{R} \rightarrow \infty$ giderken $1/\bar{l}_0^2 = 1/2\bar{l}_B^2$ değerine eşit olur. Magnetik alanın sıfır olduğu durumda $1/\bar{l}_0^2 = 1/\bar{R}^2$ olur ve böylece denklem 4.21,

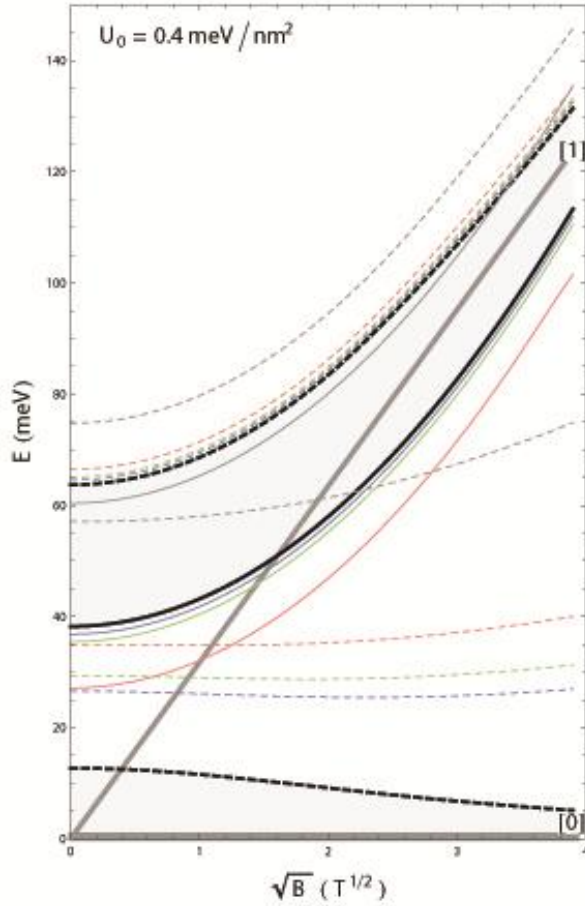
$$\bar{E}_0 = \frac{1}{6} \bar{U}_0 \frac{\Gamma(|m|+1/2)}{\Gamma(|m|+1)} \frac{\bar{r}_0}{\bar{l}_0} + \frac{1}{4\bar{R}} \quad (4.22)$$

biçimine indirgenir. Burada, $\bar{U}_0$, $\bar{U}_0 = U_0/J_0$ şeklinde tanımlanmıştır. denklem 4.22, hapsolma potansiyelinin neden olduğu vadi yarılımları hakkında bilgi vermektedir. Karşıt nokta potansiyelinin olmadığı durumda, yani kuantum nokta durumunda ve magnetik alan sıfır olduğunda, $\bar{E}_0(B = 0) = 1/4 \bar{R}$ değerini almaktadır. Bu değer de, parabolik hapsolma potansiyelinin neden olduğu vadi yarılımlarının büyüklüğünün yaklaşık $1/2 \bar{R}$ ile orantılı olduğu görülmekte ve $\bar{R}$ sonuza giderken vadi yarılımları yok olmaktadır.

Mikro üretim ürünü olan grafen cihazlar üzerinde yapılan araştırmalarda (Ponomarenko vd. 2008), çapı $D=40$ nm olan grafen kuantum noktalar için hapsedilme durumu, 10 meV’lik bir enerji bant aralığını oluşmasını sağlarken, denklem 4.22 ile yapılan hesaplarda ise bu değer 14 meV’lik bir enerji bant aralığı ortaya koyduğu görülmektedir. Çapı $D=1$ nm olan çok küçük çaplı G aletlerde bile, denklem 4.22 ile hesaplanan enerji bant aralığı değeri ile deneysel olarak elde edilen değer birbiriyle örtüşmektedir. Örneğin, çapı $D=1$ nm olan GKN için deneysel enerji bant aralığı yaklaşık 0.5 eV değerini alırken denklem 4.22 ile hesaplanan değer 0.57eV’dir. Ancak, büyüklüğü ~ 15 nm olan kuantum nokta aletlerde deneysel vadi genişliği değerlerinin 50 meV değerini geçerken, denklem 4.22 ile elde edilen bu enerji değeri yaklaşık 38 meV’dir. Bu değer bilinen deneysel değerden küçük ancak kabul edilebilir bir değerdir. Çünkü, bu fark vadi genişliğinin sistemin geometrisine bağlı olmasından kaynaklanmaktadır. Böylece, bu tezdeki teorik hesapların deneysel olarak test edilebilir sonuçlar verdiği görülmektedir. Sonuç olarak, tezde önerilen yöntemin GKN için güvenilir sonuçlar verdiği görülür. denklem 4.21 ve 4.22 ortaya koyduğu, GKN potansiyelinin meydana getirdiği vadi yarılımlarının, magnetik alanın olmadığı durumda bile kuantum noktanın merkezinde meydana gelebilecek kuantum karşıt nokta potansiyelinin varlığında güvenilir olduğu sonucu çıkmaktadır. Bu argüman magnetik alanın varlığında da sonuçların çakışacağı izlenimini vermektedir.

4.2 Grafen Kuantum Nokta ve Karşıt Nokta İçin Enerji Bant Yapıları

Denklem (4.15) verilen enerji özdeğerlerinin GKN'nın yarıçapıyla, karşıt noktanın delik yarıçapıyla ve manyetik alanla nasıl değiştiği şekil 4.4.'de verilmiştir.



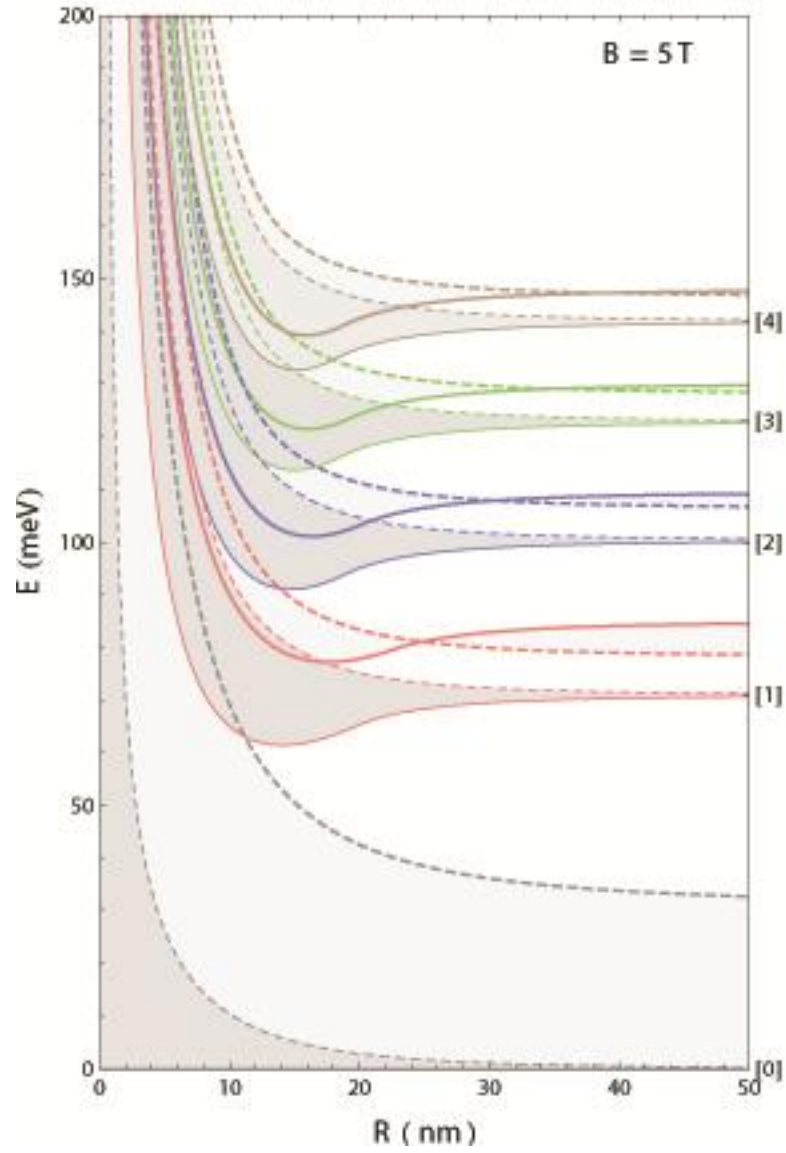
Şekil 4.4 GKN'nın enerji spektrumunun manyetik alana bağlılığı

Koyu gri düz çizgiler, $\bar{R} \rightarrow \infty$ ve $r_0 \rightarrow 0$ limitinde, yani enerji bant aralığı olmayan grafenin LD'ini betimleyen $[n]$ ile nitelendirilmiştir. Siyah kalın kesikli (düz) çizgiler, $U_0 = 0.4 \text{ meV/nm}^2$ 'de $r_0 = 0$ yani sadece kuantum nokta potansiyelinin neden olduğu uzaysal hapsolme durumunda $K'(K)$ vadilerine karşı gelmektedir. İnce düz çizgiler, şiddeti $r_0 = R_0/10$ olan karşıt nokta spektrumunu betimlemektedir. Tüm eğriler için, yukarıdan aşağıya doğru $m = 0, -1, -2, -3$ seviyelerine sırayla gri, kırmızı, yeşil ve mavi renklere karşı gelirken, kesikli ve düz çizgiler sırayla K' ve K vadilerine karşı gelmektedir.

Şekil 4.4’de $U_0 = 0.4 \text{ meV/nm}^2$ ’de GKKN’nın ilk iki enerji seviyesi $\sqrt{B}$ ‘nin bir fonksiyonu olarak çizilmiştir. Şekil 4.4’de dikkat edilmesi gereken, skaler parabolik kuantum nokta potansiyelinin, enerji bant aralığı olmayan grafenin LD’iyle (koyu düz gri çizgiler (K’ ve K)) karşılaştırdığımızda vadi yarılmasına (koyu kesikli (K’) ve koyu düz (K) çizgiler) neden olmasıdır. Bu kuantum nokta potansiyeline itici karşıt nokta potansiyelini de dahil edildiğinde m kuantum seviyelerinde de (ince kesikli (K’) ve ince düz (K) çizgiler) vadi yarılmaları meydana gelmektedir.

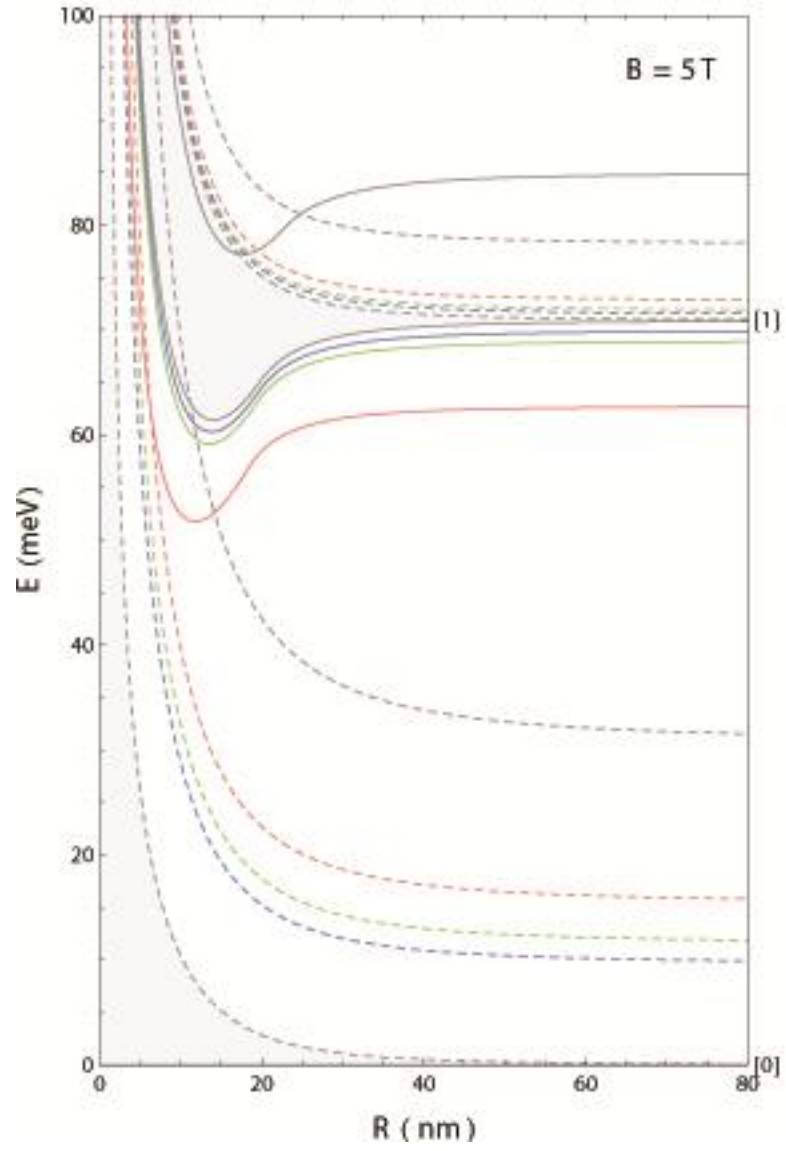
Karşıt nokta potansiyeli, açısal momentum kuantum sayıları negatif değerli olan görelî LD’nin dejenerliğini artırmaktadır. Şekil 4.4’de m ‘nin sadece ilk dört değeri; $m = 0, -1, -2, -3$ gösterilmiştir. Magnetik alanın yüksek değerlerinde, nokta yapısı kaybolmakta ve enerji bant aralığı olmayan yapının LD’i tekrar ortaya çıkmaktadır.

Şekil 4.5 ve 4.6’da $B=5\text{T}$ sabit magnetik alanda, toplam uygulanan potansiyellerin etkisini anlamak için kuantum noktanın yarıçapının $R = (\hbar v_F R_0^2 / U_0)^{1/3}$ bir fonksiyonu olarak enerji özdeğerleri çizilmiştir.



Şekil 4.5 $n = 0, 1, 2, 3, 4$ kuantum sayıları için GKN'nın ve GKKN'nın enerji spektrumunun kuantum nokta yarıçapına bağlılığı

$B=5T$ sabit magnetik alanda, kuantum noktanın yarıçapının $R = (\hbar v_F R_0^2 / U_0)^{1/3}$ bir fonksiyonu olarak grafen kuantum noktanın düşük enerji seviyeleri. Düz çizgiler, pseudospin indeks olarak tanımladığımız τ 'nın $+1$ değerini betimleyerek, grafenin K vadisine, kesikli çizgiler ise τ 'nın -1 değerini betimleyerek grafenin K' vadisine karşı gelmektedir. İnce çizgiler, GKN'nın enerji seviyelerine karşı gelirken, kalın çizgiler GKKN'nın enerji seviyelerine karşı gelmektedir.



Şekil 4.6 $n = 1$ kuantum sayısının $m = 0, -1, -2, -3$ alt enerji seviyeleri için GKN'nın ve GKKN'nın enerji spektrumunun kuantum nokta yarıçapına bağlılığı

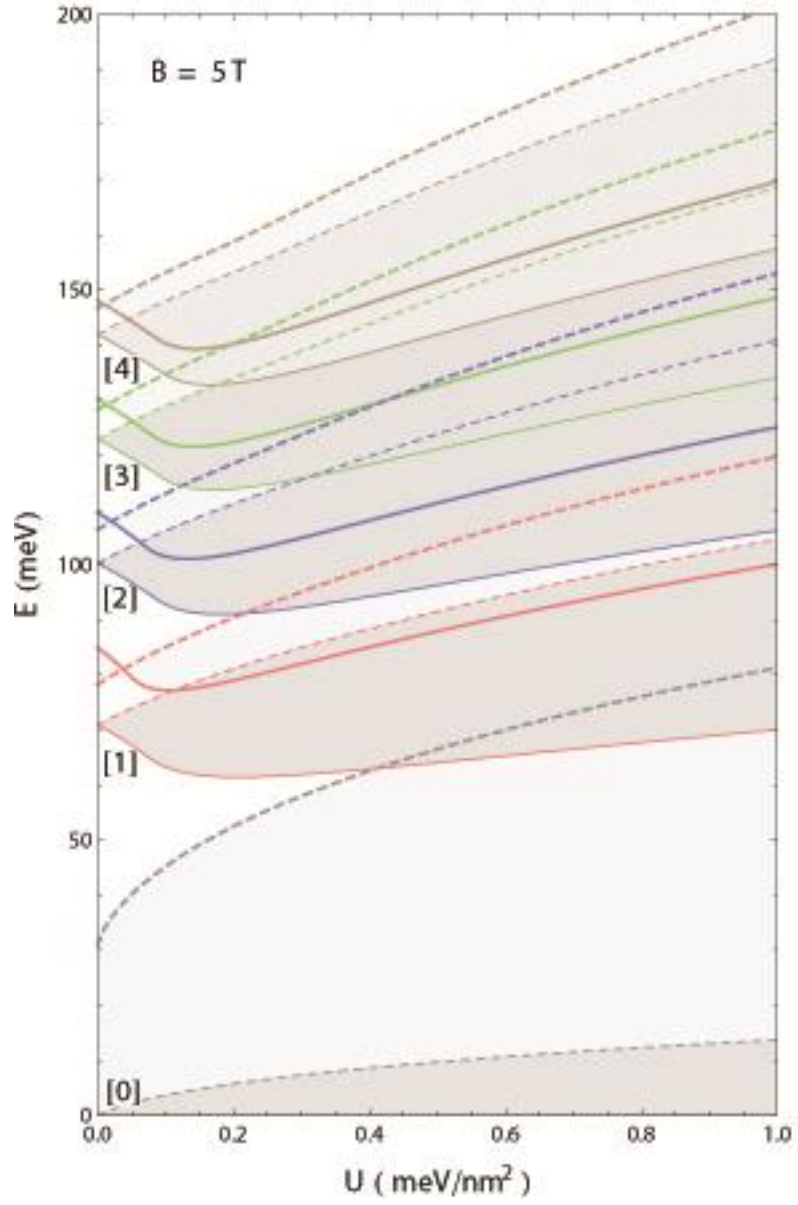
Kuantum sayıları $m = 0$ (gri), $m = -1$ (kırmızı), $m = -2$ (yeşil), $m = -3$ (mavi) renkleriyle gösterilmiştir.

Şekil 4.5 ve 4.6’da ince çizgiler, merkezi itici karşıt nokta potansiyelin yokluğundaki enerji seviyelerini, yani GKN’nın enerji seviyelerini, kalın çizgiler ise merkezi itici karşıt nokta potansiyelin varlığındaki, yani GKKN’nın enerji seviyelerini betimlemektedir.

Şekil 4.5’de itici karşıt nokta potansiyel varlığında, $n = 0, 1, 2, 3, 4$ kuantum sayıları için yüksek enerjiler ortaya çıkmaktadır. Diğer bir taraftan itici potansiyelin varlığında vadi yarılmalarının büyüklüğü, kuantum noktanın şiddeti artıkça azalmaktadır. İtici karşıt nokta potansiyelinin olmadığı durumda ise kuantum noktanın şiddeti azaldıkça, yani kuantum noktanın yarıçapı büyüdükçe, vadi yarılmaları zayıflamakta ve hatta negatif m değerlerinde tüm enerji düzeyleri dejenere olmaktadır.

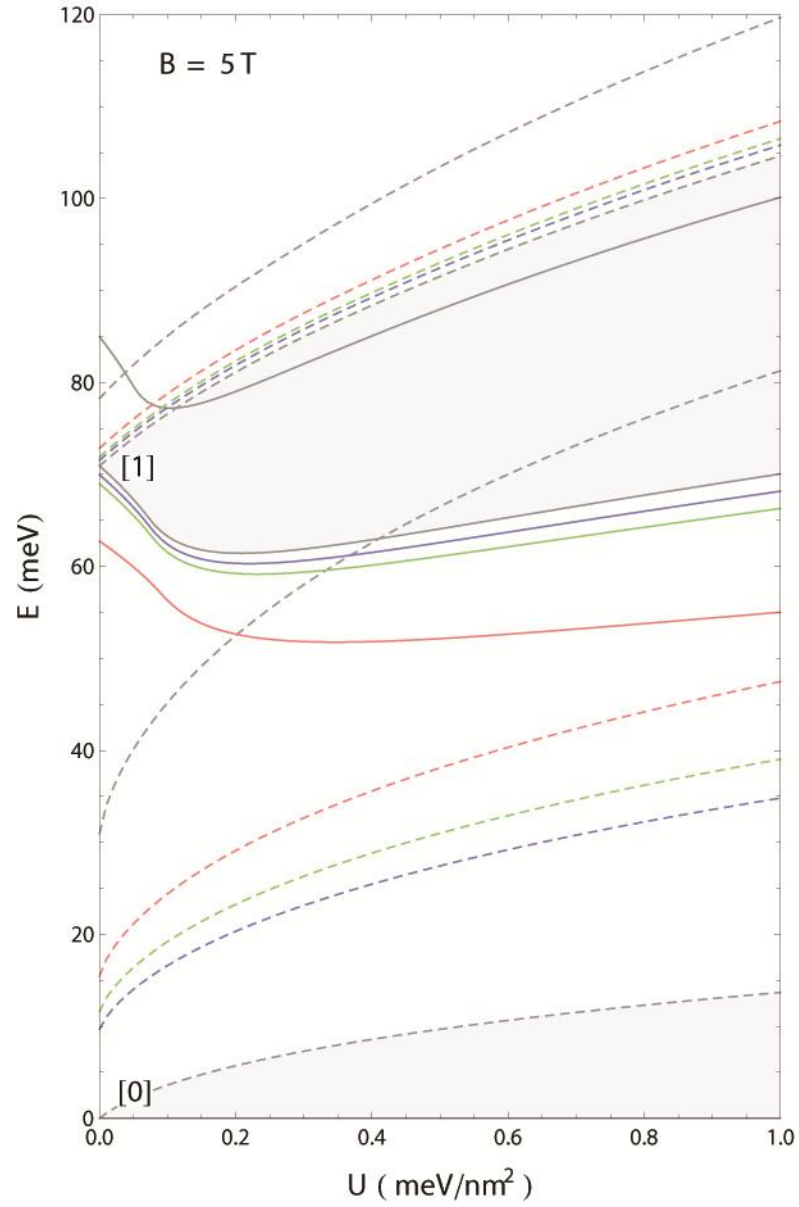
Molitor vd. (2009) tarafından deneysel olarak ortaya konulduğu üzere yüksek magnetik alanda enerji spekturumu grafenin göreceli LD’ine asimtatik olarak ulaşmaktadır. İtici karşıt nokta potansiyelin varlığında, nokta şiddeti azaldıkça tüm enerji değerleri sonlu değere ulaşırken, m değerlerindeki dejenerelik artmaktadır. Bundan dolayı, grafen nokta yarıçapı sonsuza götürdüğümüzde bile karşıt nokta potansiyelinin etkisi hala devam eder.

Şekil 4.7 ve 4.8’de, GKN’nın ve GKKN’nın enerji seviyelerinin efektif nokta şiddetine $U = U_0/R_0^2$ bağıllığı grafikleri gösterilmektedir.



Şekil 4.7 $n = 0, 1, 2, 3, 4$ kuantum sayıları için GKN'nın ve GKKN'nın enerji spektrumunun efektif nokta şiddetine $U = U_0/R_0^2$ bağılılığı

Düz çizgiler, pseudospin indeks olarak tanımladığımız τ 'nın +1 değerini betimleyerek, grafenin K vadisine, kesikli çizgiler ise τ 'nın -1 değerini betimleyerek grafenin K' vadisine karşı gelmektedir. İnce çizgiler, GKN'nın enerji seviyelerine karşı gelirken, kalın çizgiler GKKN'nın enerji seviyelerine karşı gelmektedir.



Şekil 4.8 $n = 1$ kuantum sayısının $m = 0, -1, -2, -3$ alt enerji seviyeleri için GKN'nın ve GKKN'nin enerji spektrumunun efektif nokta şiddetine $U = U_0/R_0^2$ bağılılığı

Kuantum sayıları $m = 0$ (gri), $m = -1$ (kırmızı), $m = -2$ (yeşil), $m = -3$ (mavi) renkleriyle gösterilmiştir.

İtici karşıt nokta potansiyelinin varlığında, nokta şiddeti artıkça belirli kuantum nokta yarıçaplarında vadi dejenerliği yeniden ortaya çıkar.

Bu durum Şekil 4.7 ve 4.8’de çizilen enerji seviyelerinin efektif nokta şiddetine, $U = U_0/R_0^2$, bağımlılığını gösteren grafiklerde görülebilmektedir.

Karşıt nokta potansiyelinin olmadığı durumda, U azaldıkça vadi dejenerliliği yeniden ortaya çıkmaktadır. Ancak karşıt nokta potansiyelinin olduğu durumda, merkezde bulunan kaybolmayan itici karşıt noktadan dolayı vadi dejenerliliği sonlu bir değerde kalmaktadır.

5. TARTIŞMA VE SONUÇ

Yaşam için temel maddelerden biri olan karbonun, farklı bağlanma geometrileri gösterebilen ve buna bağlı olarak sıfır boyuttan üç boyuta kadar izomerleri olabilen tek element olması, karbonu birçok alanda rakipsiz bir element yaparken, aynı zamanda günümüzün ilgi duyulan araştırma konularından biri de yapmaktadır. Karbon atomlarının oluşturduğu altıgen yapıların bir bal peteği şeklinde düzenlenmiş hali olan grafende bu araştırmaların başında gelmektedir. Bu çalışmanın ilk kısmında sıkı bağlanma yaklaşımıyla incelenen grafenin, ilginç elektronik özelliklere sahip olduğu gözükmemektedir. Ayrıca, grafenin yük taşıyıcıları, ışık hızının üç yüzde biri olan v_F hızıyla hareket eden kütesiz Dirac fermiyonlarının, ışık hızından daha küçük hızlarda kuantum elektrodinamiğinin birçok değişik özelliğinin grafen içinde geçerli olduğunu göstermektedir.

Grafen kuantum nokta ve karşıt noktalarının elektronik özelliklerinin incelendiği tezin ikinci kısmında, grafen kuantum nokta ve karşıt nokta için geliştirdiğimiz model ile enerji öz değerleri analitik olarak varyasyon yöntemi ile elde edilerek, enerjinin grafen noktanın yarıçapıyla, karşıt noktanın delik yarıçapıyla ve manyetik alanla nasıl değiştiği nümerik olarak grafen kuantum nokta ve karşıt noktanın enerji bant yapıları elde edilmiştir. Sabit magnetik alanda grafen kuantum nokta ve karşıt noktanın enerji seviyelerinin hesabı, kuantum noktanın şiddetinin bir fonksiyonu olarak yapılmıştır. Bu hesap yapılırken, uzaysal hapsolme durumunda varyasyon yöntemi kullanılmıştır. Vadi yarılmalari, uzaysal hapsolme durumundan dolayı meydana gelmekte ve kuantum nokta yarıçapı azaldıkça artmaya devam etmektedir.

Ayrıca küçük yarıçaplı grafen kuantum noktalarda bu vadi yarılmalariinin daha belirgin ve magnetik alana bağlı olduğu gösterilmiştir. Elde edilen bu sonuçlar, Recher vd. (2009) tarafından teorik olarak bulunan dikey magnetik alan altında, sonsuz kütle sınır şartı ile meydana gelen dairesel GKN'nin enerji spektrumu ile niteliksel olarak kıyaslandığında benzer sonuçlar vermektedir. Ayrıca, bu çalışma, Ponomarenko vd. (2008) ve Molitor vd. (2009) tarafından yayınlanan deneysel bulgularla uyuşan teorik sonuçlar öngörmektedir. Aynı zamanda, kuantum noktanın yapısının ve karşıt nokta

potansiyelinin varlığı gibi etkenlerin, vadi yarılmalarının büyüklüğünü arttırdığı bulunmuştur.

Sonuç olarak, bu çalışmada, grafen kuantum karşıt noktanın geometrik parametreleri ve dış magnetik alanın şiddeti tarafından meydana getirilen vadi yarılmalarının nasıl kontrol edilebileceğini gösteren bir model öne sürülmüştür. Bu model de analitik olarak çözüm yapmak için kuantum karşıt nokta potansiyeli, kuantum noktanın merkezinde sonsuz yükseklikte bir bariyer ($U \sim 1/r$) olarak düşünülerek modellenmiştir. Sonlu bir bariyere örnek olarak ,elektrostatik olarak meydana getirilen bir bariyer gibi düşünülen Gaussian formu verilebilir. Bu form, Klein paradoksuna izin vermek için kullanılabileceği gibi, Dirac parçacıklarının karşıt nokta bölgesine girmesine izin verdiği için, Klein paradoksunun meydana gelip gelmediğini, test etmek için de teoretik model olarak kullanılabilir. Ayrıca bu metod, Kandemir (2013), Kandemir ve Moğulkoç (2013) tarafından yayınlanan çalışmalardaki elektron-fonon etkileşimi veya GKN'larındaki elektron-elektron etkileşimi gibi çok parçacıklı etkileri incelemek için de genelleştirilebilir.

Ayrıca, bu tezde araştırılan konu, sadece GKKN'ların üretiminde değil, aynı zamanda Gibertini vd. (2009) ve Gomes vd. (2012) tarafından yapılan çalışmalara konu olan yapay grafen yapılar gibi Dirac malzemelerinin tasarımında da kullanılabileceği düşünülmektedir.

KAYNAKLAR

- Anonymous. 2012. Web Sitesi: <http://lifedaily.net/an-advanced-architecture-for-scalable-quantum-computers/>. Erişim Tarihi: 20.05.2012
- Bardarson, J.H., Titov, M. and Brouwer, P.W. 2009. Electrostatic Confinement of Electrons in an Integrable Graphene Quantum Dot. Phys. Rev. Lett.102, 226803-226807
- Charlier, J.- C., Blase, X. and Roche, S. 2007. Electronic and transport properties of nanotubes. Reviews of modern physics,79,
- Chen, H., Apalkov, V. and Chakraborty, T. 2007. Fock-Darwin States of Dirac Electrons in Graphene-Based Artificial Atoms . Phys. Rev. Lett., 98, 186803-186807
- De Martino, A., Dell’Anna, L. and Egger, R. 2007. Magnetic Confinement of Massless Dirac Fermions in Graphene.Phys. Rev. Lett.,98, 066802-066806
- De Martino, A., Dell’ Anna, L. and Egger, R. 2007. Magnetic barriers and confinement of Dirac-Weyl quasiparticles in graphene . Sol. StateCommun.,144, 547-550
- Fuerst, Joachim A, Pedersen, Jesper G., Flindt, Christian, Mortensen, Niels Asger, , Pedersen, Thomas G Brandbyge, Mads and Jauho, Antti-Pekka 2009. Electronic properties of graphene antidot lattices .New J. Phys., 11,095020- 095039
- Giavaras, G., Maksym, P.A. and Roy, M. .2009. Magnetic field induced confinement–deconfinement transition in graphene quantum dots.J. Phys.Condens. Matter 21, 102201-102207
- Giavaras, G. and Nori, F. 2010. Graphene quantum dots formed by a spatial modulation of the Dirac gap. Appl. Phys. Lett. ,97, 243106-243109
- Giavaras, G. and Nori, F. 2011. Dirac gap-induced graphene quantum dot in an electrostatic potential. Phys. Rev. B,83, 165427-165436

- Gibertini, M., Singha, A., Pellegrini, V. and Polini, M.2009. Electron-Electron Interactions in Artificial Graphene. Phys. Rev. B,79, 241406-241411
- Gradshteyn, I.S. and Rzyhik, I.M. 2000.Table of Integrals, Series and Products, 6th edn.Academic Press, New York
- Güüttinger, J., Stampfer, C., Libisch, F., Frey, T., Burgdörfer, J., Ihn,T. and Ensslin, K. 2009. Electron-Hole Crossover in Graphene Quantum Dots .Phys. Rev. Lett.,103, 046810-046814
- Güüttinger, J., Molitor, F., Stampfer, C., Schnez, S., Jacobsen, A., Dröscher, S., Ihn, T. and Ensslin, K. 2012. Transport through graphene quantum dots. Rep. Prog. Phys. ,75, 126502-126506
- Hewageegana, P. and Apalkov, V. 2008. Electron localization in graphene quantum dots . Phys. Rev. B 77, 245426 -245436
- Kandemir, B.S. and Mogulkoc, A. 2010. Variational approach for the effects of periodic modulations on the spectrum of massless Dirac fermion Eur. Phys. J. B,74, 391-396
- Kandemir, B.S. 2013. Possible formation of chiral polarons in graphene. J. Phys Condens. Matter,25, 025302-025307
- Kandemir, B.S. and Mogulkoc, A. 2013. Zone-boundary phonon induced mini band gap formation in graphene. <http://arxiv.org/1211.358v2>. Eriřim Tarihi: 15.06.2013
- Katsnelson, M.I. and Guinea, F. 2008. Transport through evanescent waves in ballistic graphene quantum dot Phys. Rev. B,78, 075417-075421
- Kim, S.C., Park, P.S. and Eric Yang, S.-R.2010. States near Dirac points of a rectangular graphene dot in a magnetic field. Phys. Rev. B 81,085432-085438
- Maiti, S. and Chubukov, A.V. 2010. Transition to Landau levels in graphene quantum dot Phys. Rev. B 81, 245411-245420
- Masir, M.R., Matulis, A. and Peeters, F.M. 2009. Quasibound states of Schrödinger and Dirac electrons in a magnetic quantum dot Phys. Rev. B,79, 155451-155459

- Matulis, A. and Peeters, F.M.2008. Quasibound states of quantum dots in single and bilayer graphene.Phys. Rev. B,77, 115423-115430
- Molitor, F., Jacobsen, A., Stampfer, C., Güttinger, J., Ihn,T. and Ensslin, K. 2009. Transport gap in side-gated graphene constrictions Phys. Rev. B,79, 075426-075431
- Molitor, F., Güttinger, J. G., Stampfer, C., Dröscher,S., Jacobsen,A., Ihn,T. and Ensslin, K..2011. Electronic properties of graphene nanostructures.J. Phys. Condens. Matter 23, 243201-243206
- Neto, A. H.C., Guinea, F., Peres, N.M.R., Novoselov, K.S. and Geim, A.K. 2007. The electronic properties of graphene, <http://arxiv.org/0709.1163v1>. Erişim Tarihi: 15.01.2008
- Novoselov, K.S., Geim, A.K., Morozov, S.V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S.V., Grigorieva,I.V. and Firsov, A.A.2004. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films.Science,306, 666-669
- Novoselov, K.S., Jiang, D., Schedin,F., Booth, T.J., Khotkevich, V.V., Morozov, S.V. and Geim, A.K. 2005. Two-dimensional atomic crystals..Proc. Natl. Acad.Sci.,102,10451- 10453
- Park, P.S., Kim, S.C. and Eric Yang, S.-R. 2010. Electronic properties of a graphene antidot in magnetic fields J. Phys.Condens.Matter,22, 375302-375307
- Ponomarenko, L.A., Schedin, F., Katsnelson, M.I., Yang, R., Hill, E.W., Novoselov, K.S. and Geim, A.K. 2008. Chaotic Dirac Billiard in Graphene Quantum Dots. Science,320, 356-358
- Rasanen, E., Rozzi, C.A., Pittalis, S. and Vignale, G.2012. Electron-Electron Interactions in Artificial Graphene Phys.Rev. Lett.,108, 246803-246807
- Recher, P., Nilsson, J., Burkard, G. and Trauzettel, B. 2009. Bound states and magnetic field induced valley splitting in gate-tunable graphene quantum dots.Phys.Rev. B 79, 085407- 085418

- Recher, P. and Trauzettel, B. .2010.Quantum dots and spin qubits in graphene..Nanotechnology,21, 302001-302006
- Romanovsky, I., Yannouleas, C. and Landman, U. 2009. Edge states in graphene quantum dots: Fractional quantum Hall effect analogies and differences at zero magnetic field. Phys. Rev.B 79, 075311-075323
- Rozhkova, A.V., Giavaras, G., Bliokh, Y.P., Freilikher, V. and Nori, F. 2011. Electronic properties of mesoscopic graphene structures: Charge confinement and control of spin and charge transport Phys. Rep.,503, 77-114
- Rycerz, A., Tworzydło, J. and Beenakker, C.W.J. 2007. Tunable single particle and many body physics in graphene. Nat. Phys.,3,172- 344
- Saito, R., Dresselhaus, G. and Dresselhaus, M. S. 2000. Physical Properties of Carbon Nanotubes.Imperial College Press,259,USA.
- Schnez, S., Ensslin, K.,Sigrist, M. and Ihn, T. 2008. Analytic model of the energy spectrum of a graphene quantum dot in a perpendicular magnetic field.Phys. Rev. B,78, 195427-195431
- Silvestrov, P.G. and Efetov, K.B..2007. Quantum Dots in Graphene Phys. Rev. Lett.,98, 016802 –016806
- Singha, A., Gibertini, M., Karmakar, B. Yuan, S., Polini, M., Vignale, G., Katsnelson, M.I., Pinczuk, A., Pfeiffer, L.N., West, K.W. and Pellegrini, V. 2011. Two-dimensional Mott-Hubbard electrons in an artificial honeycomb lattice Science 332, 1176-1186
- Stander, N., Huard, B. and Gordon, D.G. 2009. Evidence for Klein Tunneling in Graphene *p-n* Junctions Phys. Rev. Lett.,102, 026807 –026811
- Van, Nam Do and Thanh, Huy Pham. 2010. Graphene and its one-dimensional patterns: from basic properties towards applications. Adv. Nat. Sci.: Nanosci. Nanotechnol., 1 033001- 033032

- Wimmer, M., Akhmerov, A.R. and Guinea, F. 2010. Robustness of edge states in graphene quantum dots Phys. Rev. B,82, 045409-045418
- Wunsch, B., Stauber, T. and Guinea, F. 2008. Electron-electron interactions and charging effects in graphene quantum dots.Phys. Rev. B,77,035316-035325
- Xiao, D., Yao, W. and Niu, Q. 2007. Valley-Contrasting Physics in Graphene: Magnetic Moment and Topological Transport Phys. Rev. Lett.,99, 236809-236813
- Young, A.F. and Kim, P. 2009. . Nat. Phys.,5, 222-
- Zarenia, M., Chaves,A., Farias, G.A. and Peeters, F.M. 2011. Energy levels of triangular and hexagonal graphene quantum dots: A comparative study between the tight-binding and Dirac equation approach. Phys.Rev. B,84, 245403-245415
- Zhang, Z.Z., Chang, K. and Peeters, F.M. 2008. Tuning of energy levels and optical properties of graphene quantum dots Phys. Rev. B,77, 235411-235416
- Zhang, Y.-T., Li, Q.-M. and Li, Y.-C. ., Zhang,Y.-Y, Zhai,F. 2010. J. Phys.Condens. Matter,22, 315304-
- Zhou, S.Y., Gweon, G.-H., Fedorov ,A.V., First, P.N., Heer, W.A.de, Lee, D.-H., Guinea, F., Castro Neto, A.H. and Lanzara, A. 2007. . Nat. Mater.,6, 770-
- Zhou, S.Y., Gweon, G.-H., Fedorov, A.V., First, P.N., de Heer, W.A., Lee,D.-H., Guinea, F., Castro Neto, A.H. and Lanzara, A. 2007. . Nat. Mater. 6, 916-
- Zhu, Jia-Lin and Sun, Songyang.2012. Dirac donor states controlled by magnetic field in gapless and gapped graphene. Phys. Rev. B,85, 035429-035438

Ek 1 Grafen Kuantum Nokta ve Karşıt Nokta İçin Dirac Hamiltonyeni Çözümleri

Kandemir ve Mogulkoç (2010) tarafından ,

$$\mathcal{H} = v_f \vec{\alpha} \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right) + \beta (m v_F^2) - \frac{Z e^2}{\epsilon r} \quad (1)$$

(4.1) denklemindeki sabit magnetik alanda safsızlık potansiyel enerjisi altındaki grafen için Dirac Hamiltonyeni varyasyon yaklaşım yöntemi ile çözülmüş ve safsızlık potansiyeli olmadan pozitif enerji spinörleri;

$$\begin{aligned} \Psi_n^K(\rho, \varphi) &= \sqrt{\frac{a_{nm}}{\pi}} \gamma_0^{|m|+1} \begin{pmatrix} \mathbb{L}^0 \\ 0 \\ 0 \\ \mathbb{L}^K \end{pmatrix} \\ \Psi_n^{K'}(\rho, \varphi) &= \sqrt{\frac{a_{nm}}{\pi}} \gamma_0^{|m|+1} \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbb{L}^{0'} \\ \mathbb{L}^{K'} \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2)$$

şeklinde elde edilmiştir. Burada Denklem (2)'deki normalize edilmiş dalga fonksiyonları için normalizasyon katsayısı a_{nm} ,

$$a_{nm} = \frac{1}{1 + \frac{n}{r^2}} \frac{\theta!}{(\theta + |m|)!} \quad (3)$$

denklemiyle ifade edilir. Denklem (2)' de $\mathbb{L}^0, \mathbb{L}^{0'}$

$$\begin{aligned}
\mathbb{L}^0 &= \rho^{|m|} e^{im\varphi} e^{-\gamma_0^2 \rho^2/2} \begin{cases} L_{n-m-1}^{(|m|)}(\gamma_0^2 \rho^2) & m \geq 0 \\ L_{n-1}^{(|m|-1)}(\gamma_0^2 \rho^2) & m < 0, \end{cases} \\
\mathbb{L}^{0'} &= \rho^{|m|} e^{im\varphi} e^{-\gamma_0^2 \rho^2/2} \begin{cases} L_{n-|m|}^{(|m|)}(\gamma_0^2 \rho^2) & m \geq 0 \\ L_n^{(|m|)}(\gamma_0^2 \rho^2) & m < 0, \end{cases}
\end{aligned} \tag{4}$$

değerlerini alır. Denklem (4) 'de $\mathbb{L}^K$ ve $\mathbb{L}^{K'}$;

$$\begin{aligned}
\mathbb{L}^K &= \rho^{|m|} e^{im\varphi} e^{-\gamma_0^2 \rho^2/2} \frac{i\gamma_0 \rho e^{i\varphi}}{\Gamma(M_0, n)} \begin{cases} L_{n-m-1}^{(|m|+1)}(\gamma_0^2 \rho^2) & m \geq 0 \\ -\frac{n}{\gamma_0^2 \rho^2} L_n^{(|m|-1)}(\gamma_0^2 \rho^2) & m < 0, \end{cases} \\
\mathbb{L}^{K'} &= \rho^{|m|} e^{im\varphi} e^{-\gamma_0^2 \rho^2/2} \frac{i\gamma_0 \rho e^{-i\varphi}}{\Gamma(M_0, n)} \begin{cases} -\frac{n}{\gamma_0^2 \rho^2} L_{n-|m|}^{(|m|-1)}(\gamma_0^2 \rho^2) & m \geq 0 \\ L_{n-1}^{(|m|+1)}(\gamma_0^2 \rho^2) & m < 0 \end{cases}
\end{aligned} \tag{5}$$

denklemleriyle ifade edilir. Burada $\Gamma(M_0, n)$,

$$\Gamma(M_0, n) = \frac{l_B}{\sqrt{2}} \left\{ M_0 + [M_0^2 + (2n/l_B)^2]^{1/2} \right\} \tag{6}$$

Denklemin, n ise $n = v + |m| + m + \tau + 1/2$ denklemiyle ifade edilir. Varyasyon yaklaşım yöntemi ile enerji özdeğerlerini şu şekilde elde edebilir.

$$\begin{aligned}
E_n(\gamma_0) &= \frac{1}{\hbar v_f} \int d^2r \Psi_n^\dagger(\gamma_0) \left[v_f \boldsymbol{\alpha} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A} \right) + \beta \left(\frac{U'_0 r_0}{r} + \frac{1}{2} \frac{U_0}{R_0^2} r^2 \right) \right] \Psi_n(\gamma_0) \\
&= \int d^2r \Psi_n^\dagger(\gamma_0) \left[\frac{1}{\hbar} \vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right) + \beta \left(\frac{W'_0}{r} + \frac{1}{2} \frac{W_0}{R_0^2} r^2 \right) \right] \Psi_n(\gamma_0) \\
&= \int d^2r \Psi_n^\dagger(\gamma_0) \begin{bmatrix} \mathbb{1} \left(\frac{W'_0}{r} + \frac{1}{2} \frac{W_0}{R_0^2} r^2 \right) & \vec{\sigma} \cdot \left(-i\vec{\nabla} + \frac{e}{\hbar c} \vec{A} \right) \\ \vec{\sigma} \cdot \left(-i\vec{\nabla} + \frac{e}{\hbar c} \vec{A} \right) & -\mathbb{1} \left(\frac{W'_0}{r} + \frac{1}{2} \frac{W_0}{R_0^2} r^2 \right) \end{bmatrix} \Psi_n(\gamma_0)
\end{aligned} \tag{7}$$

Burada $W'_0 = U'_0 r_0 / \hbar v_f$, $W_0 = U_0 / \hbar v_f R_0^2$ denklemleri, Denklem (7)'de yerine yazıldığında

$$E_n(Y_0) = \int d^2r \Psi_n^\dagger(Y_0) \begin{bmatrix} \frac{W'_0}{r} + \frac{1}{2} \frac{W_0}{R_0^2} r^2 & 0 & 0 & -i\tilde{D}_- \\ 0 & \frac{W'_0}{r} + \frac{1}{2} \frac{W_0}{R_0^2} r^2 & -i\tilde{D}_+ & 0 \\ 0 & -i\tilde{D}_- & -\frac{W'_0}{r} - \frac{1}{2} \frac{W_0}{R_0^2} r^2 & 0 \\ -i\tilde{D}_+ & 0 & 0 & -\frac{W'_0}{r} - \frac{1}{2} \frac{W_0}{R_0^2} r^2 \end{bmatrix} \Psi_n(Y_0) \quad (8)$$

şeklinde elde edilir. Burada $\tilde{D}_\mp = (\partial_x \mp i \partial_y) \pm \frac{eB}{2\hbar c} (x \mp iy)$ denklemiyle ifade edilir. (8) denkleminde (2), (3), (4) ve (5) denklemlerini yerine yazıldığında K ve K' vadileri için ayrı ayrı varyasyonel enerji özdeğerleri,

$$E_n(Y_0) = \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} \int d^2r [\mathbb{L}^{0*} \quad 0 \quad 0 \quad \mathbb{L}^{K*}] \times \begin{bmatrix} \Sigma^+ \mathbb{L}^0 - i\tilde{D}_- \mathbb{L}^K \\ 0 \\ 0 \\ \Sigma^- \mathbb{L}^K - i\tilde{D}_+ \mathbb{L}^0 \end{bmatrix}$$

$$E'_n(Y_0) = \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} \int d^2r [0 \quad \mathbb{L}^{0'*} \quad \mathbb{L}^{K'*} \quad 0] \times \begin{bmatrix} 0 \\ \Sigma^+ \mathbb{L}^{0'} - i\tilde{D}_+ \mathbb{L}^{K'} \\ \Sigma^- \mathbb{L}^{K'} - i\tilde{D}_- \mathbb{L}^{0'} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (9)$$

elde edilir. Burada $\Sigma^+ = \frac{W'_0}{r} + \frac{1}{2} \frac{W_0}{R_0^2} r^2$, $\Sigma^- = -\frac{W'_0}{r} - \frac{1}{2} \frac{W_0}{R_0^2} r^2$ denklemleriyle ifade edilir. Matrisler çarpıldığında K vadisi için (9) denklemi,

$$E_n(Y_0) = \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} \int d^2r [\mathbb{L}^{0*} \Sigma^+ \mathbb{L}^0 + \mathbb{L}^{K*} \Sigma^- \mathbb{L}^K + \mathbb{L}^{0*} (-i\tilde{D}_- \mathbb{L}^K) + \mathbb{L}^{K*} (-i\tilde{D}_+) \mathbb{L}^0] \quad (10)$$

şeklinde yazılarak (10) denkleminde karteyzen koordinatlardan kutupsal koordinatlara geçecek olursak $\tilde{D}_\mp = (\partial_x \mp i \partial_y) \pm \frac{eB}{2\hbar c} (x \mp iy) = e^{\mp i\varphi} (\frac{\partial}{\partial \rho} \mp \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \pm \frac{eB\rho}{2\hbar c})$ ifadesine dönüşür. Bu ifadeyi denklem (11)'de kullanıldığında

$$\begin{aligned}
E_n(\gamma_0) = & \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} \frac{\gamma_0}{\Gamma} \int d\varphi \int \rho d\rho \rho^{2|m|+1} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} \left\{ \mathbb{L}^{0*} \left[\frac{|m| + m + 2}{\rho} - \left(\gamma_0^2 - \frac{eB}{2\hbar c} \right) \rho \right] \mathbb{L}^K \right\} \\
& + \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} \frac{\gamma_0}{\Gamma} \int d\varphi \int \rho d\rho \rho^{2|m|+1} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} \left\{ \mathbb{L}^{K*} \left[\frac{m - |m|}{\rho} + \left(\gamma_0^2 + \frac{eB}{2\hbar c} \right) \rho \right] \mathbb{L}^K \right\} \\
& - \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} \frac{\gamma_0}{\Gamma} \int d\varphi \int \rho d\rho \rho^{2|m|+1} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} (\mathbb{L}^{K*} \mathbb{L}^0 + \mathbb{L}^{0*} \mathbb{L}^K) \\
& + \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} W'_0 \int d\varphi \int d\rho \rho^{2|m|} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} \left[|\mathbb{L}^0|^2 - \frac{\gamma_0^2 \rho^2}{\Gamma^2} \right] \\
& + \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} \frac{1}{2} W_0 \int d\varphi \int \rho d\rho \rho^{2|m|} \rho^2 e^{-\gamma_0^2 \rho^2} \left[|\mathbb{L}^0|^2 - \frac{\gamma_0^2 \rho^2}{\Gamma^2} \right] \quad (11)
\end{aligned}$$

denklemini elde edilir.

$m \geq 0$ durumu için K vadisindeki varyasyonel enerji özdeğeri,

$$\begin{aligned}
E_1 = & \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} \frac{\gamma_0}{\Gamma} 2\pi \int_0^\infty \rho d\rho \rho^{2|m|+1} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} \left(\frac{-2}{\rho} + \frac{eB}{\hbar c} \rho \right) L_{n-m-1}^m L_{n-m-1}^{m+1} \\
& + \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} \frac{\gamma_0}{\Gamma} 2\pi \int_0^\infty \rho d\rho \rho^{2|m|+1} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} L_{n-m-1}^m L_{n-m-1}^{m+1}{}' - L_{n-m-1}^{m+1} L_{n-m-1}^m{}' \quad (12) \\
& + \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} 2\pi \left\{ W'_0 \int_0^\infty \rho^{2|m|} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} |L_{n-m-1}^m|^2 d\rho - \frac{\gamma_0^2}{\Gamma^2} \int_0^\infty \rho^{2|m|+2} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} |L_{n-m-1}^{m+1}|^2 d\rho \right\} \\
& + \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} 2\pi \frac{1}{2} W_0 \left\{ \int_0^\infty \rho^{2|m|+3} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} |L_{n-m-1}^m|^2 d\rho - \frac{\gamma_0^2}{\Gamma^2} \int_0^\infty \rho^{2|m|+5} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} |L_{n-m-1}^{m+1}|^2 d\rho \right\} \quad (12)
\end{aligned}$$

şeklinde yazılabilir. (13) denklemini düzenlendiğinde,

$$\begin{aligned}
E_n(\gamma_0) = & \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} \frac{\gamma_0}{\Gamma} 2\pi I_1 \\
& + \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} 2\pi \left\{ W'_0 I_2 - W'_0 \frac{\gamma_0^2}{\Gamma^2} I_3 + \frac{1}{2} W_0 I_4 - \frac{\gamma_0^2}{\Gamma^2} \frac{1}{2} W_0 I_5 \right\} \quad (13)
\end{aligned}$$

ifadesi ortaya çıkar. (13) denkleminde integral değişkeni $\gamma_0^2 \rho^2$, $\gamma_0^2 \rho^2 = r$ ile değiştirdiğimizde $d\rho$ türevi, $d\rho = dr/2\gamma_0^2$ eşit olur. Böylece Denklem (13)'teki I_2 integrali,

$$I_2 = \int_0^\infty \rho^{2|m|} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} |L_{n-m-1}^m|^2 d\rho = \int_0^\infty \frac{dr}{2\gamma_0^2} \frac{\sqrt{r}^{2|m|}}{\gamma_0} e^{-r \frac{\gamma_0}{\sqrt{r}}} |L_{n-m-1}^m|^2$$

$$I_2 = \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+1}} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|-\frac{1}{2}} |L_{n-m-1}^m|^2 = \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+1}} \bar{I}_2 \quad (14)$$

şeklinde değişir. Aynı şekilde diğer integraller, Laguarre polinomları için özellikleri kullanarak, $L_{n-m-1}^{m+1}{}' = -L_{n-m-2}^{m+2}$ ve $L_{n-m-1}^m{}' = -L_{n-m-2}^{m+1}$ türevlerine eş değerleri olmak üzere

$$I_1 = \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+3}} \left\{ 2\gamma_0(m+1) \frac{(n+1)!}{(n-m-1)!} + \frac{eB}{\hbar c} \frac{1}{\gamma_0} \frac{n!}{(n-m-1)!} + 2\gamma_0 \frac{(n-1)!}{(n-m-2)!} \right\}$$

$$I_3 = \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+3}} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|+\frac{1}{2}} |L_{n-m-1}^{m+1}|^2 = \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+3}} \bar{I}_3$$

$$I_4 = \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+4}} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|+1} |L_{n-m-1}^m|^2 = \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+4}} \bar{I}_4$$

$$I_5 = \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+6}} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|+2} |L_{n-m-1}^{m+1}|^2 = \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+6}} \bar{I}_5 \quad (15)$$

değer alırlar. Böylece (14) denklemi,

$$E_n(\gamma_0) = \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} \frac{\gamma_0}{\Gamma} 2\pi \left\{ \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+3}} \left\{ 2\gamma_0(m+1) \frac{(n+1)!}{(n-m-1)!} + \frac{eB}{\hbar c} \frac{1}{\gamma_0} \frac{n!}{(n-m-1)!} + 2\gamma_0 \frac{(n-1)!}{(n-m-2)!} \right\} \right.$$

$$+ \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} 2\pi \left\{ W_0' \left(\frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+1}} \bar{I}_2 - \frac{\gamma_0^2}{\Gamma^2} \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+3}} \bar{I}_3 \right) + \frac{1}{2} W_0 \left(\frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+4}} \bar{I}_4 - \right. \right.$$

$$\left. \left. \frac{\gamma_0^2}{\Gamma^2} \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+6}} \bar{I}_5 \right) \right\} \quad (16)$$

yazılabilir.

(3) denklemini (16) denkleminde yerine yazılıp düzenlendiğinde,

$$E_n(\gamma_0) = \frac{1}{1+\frac{n}{\Gamma^2}} \left[\frac{2n}{\Gamma} \left(\gamma_0 + \frac{eB}{\hbar c \gamma_0} \right) + W'_0 \gamma_0 N_n + \frac{1}{2} W_0 \frac{1}{\gamma_0^2} M_n \right] \quad (17)$$

elde edilir.

$m < 0$ durumu için K vadisindeki varyasyonel enerji özdeğeri,

$$\begin{aligned} E_n(\gamma_0) &= \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} \frac{\gamma_0}{\Gamma} 2\pi \int_0^\infty \rho d\rho \rho^{2|m|+1} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} \left[\frac{-2}{\rho} + \left(\gamma_0^2 - \frac{eB}{\hbar c} \right) \rho + \frac{2|m|}{\rho} \right] \frac{n}{\gamma_0^2 \rho^2} L_n^{|m|-1} L_{n-1}^{|m|} \\ &\quad - \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} \frac{\gamma_0}{\Gamma} 2\pi \int_0^\infty \rho d\rho \rho^{2|m|+1} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} \left[- \left(\gamma_0^2 + \frac{eB}{\hbar c} \right) \rho + \frac{2}{\rho} \right] \frac{n}{\gamma_0^2 \rho^2} L_n^{|m|-1} L_{n-1}^{|m|} \\ &\quad - \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} \frac{\gamma_0}{\Gamma} 2\pi \int_0^\infty \rho d\rho \rho^{2|m|+1} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} \frac{n}{\gamma_0^2 \rho^2} \left(L_{n-|m|}^{|m|-1} L_{n-|m|}^{|m|} - L_{n-1}^{|m|} L_n^{|m|-1} \right) \\ &\quad + \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} 2\pi W'_0 \int_0^\infty \rho^{2|m|-1} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} |L_{n-1}^{|m|}|^2 \rho d\rho \\ &\quad - \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} 2\pi W'_0 \frac{n^2}{\gamma_0^2 \Gamma^2} \int_0^\infty \rho^{2|m|-3} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} |L_n^{|m|-1}|^2 \rho d\rho \\ &\quad + \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} 2\pi \frac{1}{2} W_0 \int_0^\infty \rho^{2|m|+2} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} |L_{n-1}^{|m|}|^2 \rho d\rho \\ &\quad - \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} 2\pi \frac{1}{2} W_0 \frac{n^2}{\gamma_0^2 \Gamma^2} \int_0^\infty \rho^{2|m|} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} |L_n^{|m|-1}|^2 \rho d\rho \end{aligned} \quad (18)$$

şeklinde yazılabilir. (18) denklemi düzenlendiğinde,

$$E_n(\gamma_0) = \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} \frac{\gamma_0}{\Gamma} 2\pi I_1 + \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} 2\pi.$$

$$\left\{ W'_0 I_2 - W'_0 \frac{n^2}{\gamma_0^2 \Gamma^2} I_3 + \frac{1}{2} W_0 I_4 - \frac{n^2}{\gamma_0^2 \Gamma^2} \frac{1}{2} W_0 I_5 \right\} \quad (19)$$

elde edilir. (18) denklemindeki integraller, Laguarre polinomları için özellikleri kullanarak, $L_{n-|m|}^{(|m|)'} = -L_{n-|m|-1}^{(|m|+1)}$ ve $L_n^{(|m|-1)'} = -L_{n-1}^{(|m|)}$ türevlerinin eşdeğeri olmak üzere

$$\begin{aligned}
I_1 &= \frac{(n-1+|m|)!}{2\gamma_0^{2|m|+3}(n-1)!} \left(\frac{eB}{\hbar c} \frac{n}{\gamma_0} + 2n\gamma_0 \right) \\
I_2 &= \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+1}} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|-\frac{1}{2}} \left| L_{n-1}^{(|m|)} \right|^2 = \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+1}} \bar{I}_2 \\
I_3 &= \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|-1}} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|-\frac{3}{2}} \left| L_n^{(|m|-1)} \right|^2 = \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|-1}} \bar{I}_3 \\
I_4 &= \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+4}} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|+1} \left| L_{n-1}^{(|m|)} \right|^2 = \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+4}} \bar{I}_4 \\
I_5 &= \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+2}} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|+2} \left| L_n^{(|m|-1)} \right|^2 = \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+2}} \bar{I}_5
\end{aligned} \tag{20}$$

şeklinde değer alırlar. Böylece (3) denklemini (19) denkleminde yerine yazılarak düzenlendiğinde,

$$E_n(\gamma_0) = \frac{1}{1+\frac{n}{\gamma_0^2}} \left[\frac{2n}{\Gamma} \left(\gamma_0 + \frac{eB}{\hbar c \gamma_0} \right) + W'_0 \gamma_0 N_n + \frac{1}{2} W_0 \frac{1}{\gamma_0^2} M_n \right] \tag{21}$$

elde edilir.

$m \geq 0$ durumu için K' vadisindeki varyasyonel enerji özdeğeri,

$$\begin{aligned}
E'_n(\gamma_0) &= \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} \frac{\gamma_0}{\Gamma} 2\pi \left\{ \int_0^\infty \rho d\rho \rho^{2|m|+1} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} \left[-\frac{2}{\rho} - \left(\gamma_0^2 + \frac{eB}{\hbar c} \right) \rho - \frac{2|m|}{\rho} \right] \frac{n}{\gamma_0^2 \rho^2} L_{n-|m|}^{(|m|-1)} L_{n-|m|}^{(|m|)} \right. \\
&\quad + \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} \frac{\gamma_0}{\Gamma} 2\pi \left\{ \int_0^\infty \rho d\rho \rho^{2|m|+1} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} \left[\left(\gamma_0^2 - \frac{eB}{\hbar c} \right) \rho + \frac{2}{\rho} \right] \frac{n}{\gamma_0^2 \rho^2} L_{n-|m|}^{(|m|-1)} L_{n-|m|}^{(|m|)} \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} \frac{\gamma_0}{\Gamma} 2\pi \left\{ \int_0^\infty \rho d\rho \rho^{2|m|+1} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} \frac{n}{\gamma_0^2 \rho^2} \left[L_{n-|m|}^{(|m|-1)} L_{n-|m|}^{(|m|)'} - L_{n-|m|}^{(|m|)} L_{n-|m|}^{(|m|-1)'} \right] \right. \right. \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} 2\pi W'_0 \int_0^\infty \rho^{2|m|} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} |L_{n-m}^{(m)}|^2 d\rho - \\
& - \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} 2\pi W'_0 \frac{n^2}{\gamma_0^2 \Gamma^2} \int_0^\infty \rho^{2|m|-2} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} |L_{n-m}^{(m-1)}|^2 d\rho \\
& + \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} 2\pi \frac{1}{2} W_0 \int_0^\infty \rho^{2|m|+3} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} |L_{n-m}^{(m)}|^2 d\rho \\
& - \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} 2\pi \frac{1}{2} W_0 \frac{n^2}{\gamma_0^2 \Gamma^2} \int_0^\infty \rho^{2|m|+1} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} |L_{n-m}^{(m-1)}|^2 \rho d\rho
\end{aligned} \tag{22}$$

şeklinde yazılabilir. (21) denklemi düzenlendiğinde ise,

$$\begin{aligned}
E'_n(\gamma_0) &= \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} \frac{\gamma_0}{\Gamma} 2\pi I_1 \\
& + \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} 2\pi \left\{ W'_0 I_2 - W'_0 \frac{\gamma_0^2}{\Gamma^2} I_3 + \frac{1}{2} W_0 I_4 - \frac{\gamma_0^2}{\Gamma^2} \frac{1}{2} W_0 I_5 \right\}
\end{aligned} \tag{23}$$

ifadesi elde edilir. (23) denklemindeki integraller, Laguarre polinomları için özellikleri kullanarak $L_{n-|m|}^{(m)'} = -L_{n-|m|-1}^{(m+1)}$ ve $L_{n-|m|}^{(m-1)'} = -L_{n-|m|-1}^{(m)}$ türevlerinin eşdeğerleri olmak üzere

$$\begin{aligned}
I_1 &= \frac{n}{\gamma_0} \left\{ \frac{1}{\gamma_0^{2|m|+2}} \left(2\gamma_0 |m| \frac{(n-1)!}{(n-m)!} + \frac{eB}{\hbar c} \frac{1}{\gamma_0} \frac{n!}{(n-m)!} + \frac{(n-1)!}{(n-m-1)!} \right) \right\} \\
I_2 &= \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+1}} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|-\frac{1}{2}} |L_{n-m}^{(m)}|^2 = \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+1}} \bar{I}_2 \\
I_3 &= \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|-1}} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|-\frac{3}{2}} |L_{n-m}^{(m-1)}|^2 = \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|-1}} \bar{I}_3 \\
I_4 &= \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+4}} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|+1} |L_{n-m}^{(m)}|^2 = \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+4}} \bar{I}_4 \\
I_5 &= \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+2}} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|} |L_{n-m}^{(m-1)}|^2 = \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+2}} \bar{I}_5
\end{aligned} \tag{24}$$

şeklinde değer alırlar. Böylece (3) denklemini (23) denkleminde yerine yazılarak düzenlenirse,

$$\begin{aligned}
E'_n(\gamma_0) &= \frac{1}{1+\frac{n}{\Gamma^2}} \left[\frac{2n}{\Gamma} \left(\gamma_0 + \frac{eB}{\hbar c \gamma_0} \right) + W'_0 \gamma_0 \frac{(n-m)!}{n!} \left(\bar{I}_2 - \frac{n^2}{\Gamma^2} \bar{I}_3 \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} W_0 \frac{1}{\gamma_0^2} \frac{(n-m)!}{n!} \left(\bar{I}_4 - \frac{n^2}{\Gamma^2} \bar{I}_5 \right) \right] \\
E'_n(\gamma_0) &= \frac{1}{1+\frac{n}{\Gamma^2}} \left[\frac{2n}{\Gamma} \left(\gamma_0 + \frac{eB}{\hbar c \gamma_0} \right) + W'_0 \gamma_0 \mathbb{N}_n + \frac{1}{2} W_0 \frac{1}{\gamma_0^2} \mathbb{M}_n \right] \quad (25)
\end{aligned}$$

ifadesi elde edilir. $m < 0$ durumu için K' vadisindeki varyasyonel enerji özdeğeri,

$$\begin{aligned}
E'_n(\gamma_0) &= \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} \frac{\gamma_0}{\Gamma} 2\pi \left\{ \int_0^\infty \rho d\rho \rho^{2|m|+1} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} \left[\frac{2|m|+2}{\rho} - \frac{eB}{\hbar c} \rho \right] L_n^{|m|} L_{n-1}^{|m|+1} \right. \\
&\quad \left. + \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} \frac{\gamma_0}{\Gamma} 2\pi \left\{ \int_0^\infty \rho d\rho \rho^{2|m|+1} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} L_n^{|m|} L_{n-1}^{|m|+1'} - L_{n-1}^{|m|+1} L_n^{|m|} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} 2\pi W'_0 \int_0^\infty \rho^{2|m|} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} |L_n^{|m|}|^2 d\rho \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} 2\pi W'_0 \frac{\gamma_0^2}{\Gamma^2} \int_0^\infty \rho^{2|m|+2} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} |L_{n-1}^{|m|+1}|^2 d\rho \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} 2\pi \frac{1}{2} W_0 \int_0^\infty \rho^{2|m|+3} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} |L_n^{|m|}|^2 d\rho \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} 2\pi \frac{1}{2} W_0 \frac{\gamma_0^2}{\Gamma^2} \int_0^\infty \rho^{2|m|+5} e^{-\gamma_0^2 \rho^2} |L_{n-1}^{|m|+1}|^2 d\rho \right\} \quad (26)
\end{aligned}$$

şeklinde yazılabilir. (26) denklemi düzenlendiğinde,

$$\begin{aligned}
E'_n(\gamma_0) &= \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} \frac{\gamma_0}{\Gamma} 2\pi I_1 \\
&\quad + \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} 2\pi \left\{ W'_0 I_2 - W'_0 \frac{\gamma_0^2}{\Gamma^2} I_3 + \frac{1}{2} W_0 I_4 - \frac{\gamma_0^2}{\Gamma^2} \frac{1}{2} W_0 I_5 \right\} \quad (27)
\end{aligned}$$

ifadesi elde edilir. (27) denklemindeki integraller, Laguarre polinomları için özellikleri kullanarak, $L_{n-1}^{|m|+1'} = -L_{n-2}^{|m|+2}$ ve $L_n^{|m|'} = -L_{n-1}^{|m|+1}$ türevlerinin eş değerleri olmak üzere

$$\begin{aligned}
I_1 &= \frac{(n+|m|)!}{(n-1)!} \left(\frac{eB}{\gamma_0 \hbar c} + \gamma_0 \right) \\
I_2 &= \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+1}} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|-\frac{1}{2}} \left| L_n^{|m|} \right|^2 = \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+1}} \bar{I}_2 \\
I_3 &= \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+3}} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|+\frac{1}{2}} \left| L_{n-1}^{|m|+1} \right|^2 = \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+3}} \bar{I}_3 \\
I_4 &= \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+4}} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|+1} \left| L_n^{|m|} \right|^2 = \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+4}} \bar{I}_4 \\
I_5 &= \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+6}} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|+2} \left| L_{n-1}^{|m|+1} \right|^2 = \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+6}} \bar{I}_5
\end{aligned} \tag{28}$$

şeklinde değer alırlar. (28) denklemini (27) denkleminde yerine yazarak,

$$\begin{aligned}
E'_n(\gamma_0) &= \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} \frac{\gamma_0}{\Gamma} 2\pi \frac{(n+|m|)!}{(n-1)!} \left(\frac{eB}{\gamma_0 \hbar c} + \gamma_0 \right) \\
&+ \frac{a_{nm}}{\pi} \gamma_0^{2|m|+2} 2\pi \left\{ W'_0 \left(\frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+1}} \bar{I}_2 - \frac{\gamma_0^2}{\Gamma^2} \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+3}} \bar{I}_3 \right) + \frac{1}{2} W_0 \left(\frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+4}} \bar{I}_4 - \right. \right. \\
&\left. \left. \frac{\gamma_0^2}{\Gamma^2} \frac{1}{2\gamma_0^{2|m|+6}} \bar{I}_5 \right) \right\}
\end{aligned} \tag{29}$$

denklemini elde edilir. (3) denklemini (29) denkleminde yerine yazılıp düzenlendiğinde,

$$E'_n(\gamma_0) = \frac{1}{1+\frac{n}{\Gamma^2}} \left[\frac{2n}{\Gamma} \left(\gamma_0 + \frac{eB}{\hbar c \gamma_0} \right) + W'_0 \gamma_0 \frac{(n-m-1)!}{(n-1)!} \left(\bar{I}_2 - \frac{\bar{I}_3}{\Gamma^2} \right) + \frac{1}{2} W_0 \frac{1}{\gamma_0^2} \frac{(n-m-1)!}{(n-1)!} \left(\bar{I}_4 - \frac{\bar{I}_5}{\Gamma^2} \right) \right]$$

$$E'_n(\gamma_0) = \frac{1}{1+\frac{n}{\Gamma^2}} \left[\frac{2n}{\Gamma} \left(\gamma_0 + \frac{eB}{\hbar c \gamma_0} \right) + W'_0 \gamma_0 \mathbb{N}_n + \frac{1}{2} W_0 \frac{1}{\gamma_0^2} \mathbb{M}_n \right] \quad (30)$$

ifadesi bulunur. Böylece tüm durumlar için genel denklem; $W'_0 = U'_0 r_0 / \hbar v_f$, $W_0 = U_0 / \hbar v_f R_0^2$ ifadeleri yerine yazılarak,

$$E_n(\gamma_0) = \frac{1}{1+\frac{n}{\Gamma^2}} \left[\left(\frac{2n}{\Gamma} + \frac{U'_0 r_0}{\hbar v_f} \mathbb{N}_n \right) \gamma_0 + \frac{1}{\gamma_0} \frac{eB}{\hbar c} + \frac{1}{\gamma_0^2} \frac{1}{2} \frac{U_0}{\hbar v_f R_0^2} \mathbb{M}_n \right] \quad (31)$$

elde edilir. Buradaki $\mathbb{M}_n$ 'nin tüm durumlar için ifadeleri çizelge 1' de verilmiştir.

Çizelge 1 $\mathbb{M}_n$ 'nin tüm durumlar için ifadeleri

m, τ	$\mathbb{M}_n$	$\bar{I}_4$	$\bar{I}_5$
$m \geq 0, \tau = +1$	$\frac{(n-m-1)!}{(n-1)!} \left(\bar{I}_4 - \frac{1}{\Gamma^2} \bar{I}_5 \right)$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m +1} L_{n-m-1}^m ^2$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m +2} L_{n-m-1}^{m+1} ^2$
$m \geq 0, \tau = -1$	$\frac{(n-m)!}{n!} \left(\bar{I}_4 - \frac{n^2}{\Gamma^2} \bar{I}_5 \right)$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m +1} L_{n-m}^{ m } ^2$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m } L_{n-m}^{ m -1} ^2$
$m < 0, \tau = +1$	$\frac{(n-1)!}{(n- m -1)!} \left(\bar{I}_4 - \frac{n^2}{\Gamma^2} \bar{I}_5 \right)$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m +1} L_{n-1}^{ m } ^2$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m +2} L_n^{ m -1} ^2$
$m < 0, \tau = -1$	$\frac{n!}{(n+ m)!} \left(\bar{I}_4 - \frac{1}{\Gamma^2} \bar{I}_5 \right)$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m +1} L_n^{ m } ^2$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m +2} L_{n-1}^{ m +1} ^2$

Tüm bu durumlar için $\mathbb{M}_n$ ifadesinin genel denklemi,

$$\mathbb{M}_n = \mathbb{F}_n - \frac{1}{\Gamma^2} \mathbb{G}_n \quad (32)$$

şeklinde yazılabilir. (32) denkleminde $\mathbb{F}_n$ ve $\mathbb{G}_n$ integralleri,

$$\mathbb{F}_n = \frac{v!}{(v+|m|)!} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|+1} |L_v^{[m]}(r^2)|^2$$

$$\mathbb{G}_n = \frac{v!}{(v+|m|)!} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|+1} \mathbb{H}_{v,\alpha}^{[m]}(r) \quad (33)$$

denklemleriyle ifade edilir. Buradaki $\mathbb{H}_{\vartheta,\alpha}^{[m]}(r)$ terimi ise

$$\mathbb{H}_{v,\alpha}^{[m]}(r) = \begin{cases} r |L_{v,\alpha}^{[m+1]}(r)|^2, & \alpha = \begin{cases} 0 & m \geq 0 \tau = +1 \\ -1 & m < 0 \tau = -1 \end{cases} \\ \frac{n^2}{r} |L_{v,\alpha}^{[m-1]}(r)|^2, & \alpha = \begin{cases} 0 & m \geq 0 \tau = +1 \\ +1 & m < 0 \tau = -1 \end{cases} \end{cases} \quad (34)$$

ifadesiyle temsil edilir. Bu çalışmada kütle terimi $M_0 = mv_f/\hbar$ sıfırdır. Bu yüzden (6)

denklemindeki $\Gamma = \sqrt{n}$ değerini alır ve böylece (32) denklemi,

$$\mathbb{M}_n = \mathbb{F}_n - \frac{1}{n} \mathbb{G}_n \quad (35)$$

şeklinde ifade edilir. Denklem (31)'de N_n 'nin tüm durumlar için ifadeleri çizelge 2'de verilmiştir.

Çizelge 2 N_n 'nin tüm durumlar için ifadeleri

m, τ	N_n	$\bar{I}_2$	$\bar{I}_3$
$m \geq 0, \tau = +1$	$\frac{(n-m-1)!}{(n-1)!} \left(\bar{I}_2 - \frac{1}{\Gamma^2} \bar{I}_3 \right)$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m -\frac{1}{2}} L_{n-m-1}^{[m]} ^2$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m +\frac{1}{2}} L_{n-m-1}^{[m+1]} ^2$
$m \geq 0, \tau = -1$	$\frac{(n-m)!}{n!} \left(\bar{I}_2 - \frac{n^2}{\Gamma^2} \bar{I}_3 \right)$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m -\frac{1}{2}} L_{n-m}^{[m]} ^2$,	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m -\frac{3}{2}} L_{n-m}^{[m-1]} ^2$
$m < 0, \tau = +1$	$\frac{(n-1)!}{(n- m -1)!} \left(\bar{I}_2 - \frac{n^2}{\Gamma^2} \bar{I}_3 \right)$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m -\frac{1}{2}} L_{n-1}^{[m]} ^2$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m -\frac{3}{2}} L_n^{[m-1]} ^2$
$m < 0, \tau = -1$	$\frac{n!}{(n+ m)!} \left(\bar{I}_2 - \frac{1}{\Gamma^2} \bar{I}_3 \right)$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m -\frac{1}{2}} L_n^{[m]} ^2$	$\int_0^\infty dr e^{-r} r^{ m +\frac{1}{2}} L_{n-1}^{[m+1]} ^2$

Tüm bu durumları N_n 'nin genel denklemi;

$$N_n = \tilde{F}_n - \frac{1}{\Gamma^2} \tilde{G}_n \quad (36)$$

şeklinde yazılabilir. Buradaki $\tilde{F}_n$ ve $\tilde{G}_n$ integralleri ise,

$$\begin{aligned} \tilde{F}_n &= \frac{v!}{(v+|m|)!} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|-\frac{1}{2}} |L_v^{(m)}(r^2)|^2 \\ \tilde{G}_n &= \frac{v!}{(v+|m|)!} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|-\frac{1}{2}} \mathbb{H}_{v,\alpha}^{(m)}(r) \end{aligned} \quad (37)$$

denklemleriyle ifade edilir. Bu çalışmada kütle terimi $M_0 = mv_f/\hbar$ sıfır olarak alınmıştır. Bu yüzden (6) denklemindeki $\Gamma = \sqrt{n}$ değerini (36) denkleminde yerine yazılarak, N_n için

$$N_n = \tilde{F}_n - \frac{1}{n} \tilde{G}_n \quad (38)$$

ifadesi elde edilir. (32) denklemini $3J_0/2a$ ile çarparak boyutsuzlaştırma yapıldığında,

$$\begin{aligned} E_n(\gamma_0) &= \frac{3J_0}{2a} \frac{1}{1+\frac{n}{\Gamma^2}} \left[\left(\frac{2n}{\Gamma} + \frac{U'_0 r_0}{\hbar v_f} N_n \right) \gamma_0 + \frac{1}{\gamma_0} \frac{eB}{\hbar c} + \frac{1}{\gamma_0^2} \frac{1}{2} \frac{U_0}{\hbar v_f R_0^2} M_n \right] \\ E_n(\gamma_0) &= \frac{3J_0}{2} \frac{1}{1+\frac{n}{\Gamma^2}} \left[(\gamma_0 \bar{a}) \left(\frac{2n}{\Gamma} + \frac{U'_0 r_0 N_n}{\hbar v_f} \right) + \frac{1}{(\gamma_0 \bar{a})} \frac{2n}{\Gamma} \frac{eBa^2}{\hbar c} + \frac{1}{(\gamma_0 \bar{a})^2} \frac{1}{2} \frac{U_0 a^3}{\hbar v_f R_0^2} M_n \right] \end{aligned} \quad (39)$$

denklemini elde edilir. $\gamma_0 \bar{a} = \bar{\gamma}_0$, $u = U'_0 \bar{r}_0/3J_0$; boyutsuz karşıt nokta şiddeti, $\bar{r}_0 = r_0/a$; boyutsuz karşıt nokta iç yarıçapı, a birim hücre uzunluğu olarak tanımlanır.

$1/\bar{R}^3 = 3U_0 a^3/2\hbar v_f R_0^2$, $eBa^2/\hbar c = 1/\bar{I}_B^2$ ifadeleri (39) denkleminde yerine yazılırsa,

$$E_n(\bar{Y}_0) = \frac{1}{1+\frac{n}{\Gamma^2}} \left[\left(\frac{2n}{\Gamma} + uN_n \right) \bar{Y}_0 + \frac{2n}{\Gamma} \frac{1}{2l_B^2} \frac{1}{\bar{Y}_0} + \frac{1}{2R^3} \frac{1}{\bar{Y}_0^2} M_n \right] \quad (40)$$

elde edilir. (40) denkleminde $\Gamma = \sqrt{n}$ yazılarak,

$$\bar{E}_n(\bar{Y}_0) = \left[\left(\sqrt{n} + \frac{1}{2} uN_n \right) \bar{Y}_0 + \sqrt{n} \frac{1}{2l_B^2} \frac{1}{\bar{Y}_0} + \frac{1}{4R^3} \frac{1}{\bar{Y}_0^2} M_n \right] \quad (41)$$

denklemini bulunur. γ varyasyon parametresi olmak üzere sistemi karakterize eden $\bar{Y}_0$, $\bar{Y}_0^2 = \bar{Y}^2 + \bar{R}^{-2}$ bağıntısı ile belirtilir (Chen, Apalkov, Chakraborty 2007). Denklem (41), $\bar{Y}$ ve $\bar{R}$ cinsinden

$$\begin{aligned} \bar{E}_n(\bar{Y}) = & \frac{1}{1+\frac{n}{\bar{Y}^2}} \left[\left(\bar{Y}^2 + \bar{R}^{-2} \right)^{1/2} \left(\frac{2n}{\Gamma} + uN_n \right) + \left(\bar{Y}^2 + \bar{R}^{-2} \right)^{-1/2} \frac{2n}{\Gamma} \frac{1}{2l_B^2} \right. \\ & \left. + \left(\bar{Y}^2 + \bar{R}^{-2} \right)^{-1} \frac{1}{2R^3} M_n \right] \end{aligned} \quad (42)$$

yazılabilir. Denklem (42)'de M_n integrali için genel bir ifade,

$$\begin{aligned} F_n &= \frac{v!}{(v+|m|)!} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|+1} \left| L_v^{(|m|)}(r^2) \right|^2 = (2v+|m|+1) \\ G_n &= \frac{v!}{(v+|m|)!} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|+1} \mathbb{H}_{v,\alpha}^{(|m|)}(r) = 2n-m \\ M_n &= F_n \frac{n}{r^2} G_n = (2v+|m|+1) - \frac{n}{r^2} (2n-m) \end{aligned} \quad (43)$$

şekildeki gibi elde edilir. Denklem (43)'de, $v = n - |m| + m + \tau + 1/2$ yazarsak M_n için

$$M_n = (2n-m) \left(1 - \frac{n}{r^2} \right) - \tau \quad (44)$$

ifadesi bulunur. Böylelikle (42) ifadesi ,

$$\begin{aligned}\bar{E}_n(\bar{Y}) = & \frac{1}{1+\frac{n}{\bar{r}^2}} \{ (\bar{Y}^2 + \bar{R}^{-2})^{1/2} \left(\frac{2n}{\bar{r}} + uN_n \right) + (\bar{Y}^2 + \bar{R}^{-2})^{-1/2} \frac{2n}{\bar{r}} \frac{1}{2\bar{l}_B^2} \\ & + (\bar{Y}^2 + \bar{R}^{-2})^{-1} \frac{1}{2\bar{R}^3} [(2n - m) \left(1 - \frac{n}{\bar{r}^2} \right) - \tau] \} \end{aligned} \quad (45)$$

denklemine dönüşür.

Kütle terimi $M_0 = 0$ olduğu durumda ise denklem (45),

$$\begin{aligned}\bar{E}_n(\bar{Y}) = & \frac{1}{2} \{ (\bar{Y}^2 + \bar{R}^{-2})^{1/2} (2\sqrt{n} + uN_n) + (\bar{Y}^2 + \bar{R}^{-2})^{-1/2} 2\sqrt{n} \frac{1}{2\bar{l}_B^2} \\ & + (\bar{Y}^2 + \bar{R}^{-2})^{-1} \frac{1}{2\bar{R}^3} (-\tau) \} \end{aligned} \quad (46)$$

şeklinde yazılabilir. Uzaysal hapsolme potansiyelinin yokluğunda yani $\bar{R} \rightarrow \infty$ ve $\bar{r}_0 \rightarrow 0$ limitinde varyasyon parametresi olan $\bar{Y}$, $\bar{Y} = 1/\sqrt{2}\bar{l}_B$ değerini alırken, $\bar{Y}_0^2 = 1/2\bar{l}_B^2 + \bar{R}^{-2}$ değerini alır.

Taban durumu ($n=0$) için $N_0 = \Gamma(|m| + 1/2)/\Gamma(|m| + 1)$ şeklinde tanımlanarak, $\bar{R} \rightarrow \infty$ ve $\bar{r}_0 \rightarrow 0$ limitinde denklem (46),

$$\bar{E}_0 = \frac{1}{2} u \frac{\Gamma(|m|+1/2)}{\Gamma(|m|+1)} \frac{1}{\bar{l}_0} + \frac{1}{4} \frac{\bar{l}_0^2}{\bar{R}^3} \quad (47)$$

ifadesine indirgenir. $1/\bar{l}_0^2 = 1/2\bar{l}_B^2 + 1/\bar{R}^2$ şeklinde tanımlanan $\bar{l}_0$ efektif uzunluk, $\bar{R} \rightarrow \infty$ giderken $1/\bar{l}_0^2 = 1/2\bar{l}_B^2$ değerine eşit olur. Magnetik alanın sıfır olduğu durumda $1/\bar{l}_0^2 = 1/\bar{R}^2$ olur ve böylece denklem (47),

$$\bar{E}_0 = \frac{1}{6} \bar{U}_0 \frac{\Gamma(|m|+1/2)}{\Gamma(|m|+1)} \frac{\bar{r}_0}{\bar{l}_0} + \frac{1}{4\bar{R}} \quad (48)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $\bar{U}_0$, $\bar{U}_0 = U_0/J_0$ denklemiyle tanımlanır. (2) denkleminde belirttiğimiz pozitif enerji spinörlerini, (2) denkleminde (3) ve (4) denklemlerini yerine yazılarak düzenlendiğinde,

$$\Psi_n^K(\rho, \varphi) = \sqrt{\frac{v!}{\pi[1+\frac{n}{\Gamma^2}(v+|m|)!]}} \gamma_0^{|m|+1} \rho^{|m|} e^{im\varphi} e^{-\gamma_0^2 \rho^2/2} \begin{pmatrix} \begin{cases} L_{n-m-1}^{(|m|)}(\gamma_0^2 \rho^2) & m \geq 0 \\ L_{n-1}^{(|m|-1)}(\gamma_0^2 \rho^2) & m < 0, \end{cases} \\ 0 \\ 0 \\ \frac{i\gamma_0 \rho e^{+i\varphi}}{\Gamma(M_0, n)} \begin{cases} L_{n-m-1}^{(|m|+1)}(\gamma_0^2 \rho^2) & m \geq 0 \\ -\frac{n}{\gamma_0^2 \rho^2} L_n^{(|m|-1)}(\gamma_0^2 \rho^2) & m < 0, \end{cases} \end{pmatrix} \quad (49)$$

$$\Psi_n^{K'}(\rho, \varphi) = \sqrt{\frac{v!}{\pi[1+\frac{n}{\Gamma^2}(v+|m|)!]}} \gamma_0^{|m|+1} \rho^{|m|} e^{im\varphi} e^{-\gamma_0^2 \rho^2/2} \begin{pmatrix} 0 \\ \begin{cases} L_{n-|m|}^{(|m|)}(\gamma_0^2 \rho^2) & m \geq 0 \\ L_n^{(|m|)}(\gamma_0^2 \rho^2) & m < 0, \end{cases} \\ \frac{i\gamma_0 \rho e^{-i\varphi}}{\Gamma(M_0, n)} \begin{cases} -\frac{n}{\gamma_0^2 \rho^2} L_{n-|m|}^{(|m|-1)}(\gamma_0^2 \rho^2) & m \geq 0 \\ L_{n-1}^{(|m|+1)}(\gamma_0^2 \rho^2) & m < 0 \end{cases} \\ 0 \end{pmatrix}$$

denklemleri elde edilir. Denklem (50)'de Laguerre polinomlarını, v kuantum sayısı cinsinden yazılır, yazılırken de K vadisinde $\tau = +1$, K' vadisinde $\tau = -1$ değerlerini alınarak, ve $x = \gamma_0 \rho$ denklemini aracılığıyla enerji spinörleri x cinsinden elde edilirse, (50) denklemi,

$$\Psi_n^K(x, \varphi) = \sqrt{\frac{v!}{\pi[1+\frac{n}{\Gamma^2}(v+|m|)!]}} \gamma_0 x^{|m|} e^{im\varphi} e^{-x^2/2} \begin{pmatrix} L_v^{(|m|)}(x^2) \\ 0 \\ 0 \\ \frac{ixe^{+i\varphi}}{\Gamma(M_0, n)} \begin{cases} L_v^{(|m|+1)}(x^2) & m \geq 0 \\ -\frac{v+1}{x^2} L_{v+1}^{(|m|-1)}(x^2) & m < 0, \end{cases} \end{pmatrix}$$

$$\Psi_n^{K'}(x, \varphi) = \sqrt{\frac{v!}{\pi[1+\frac{n}{\Gamma^2}(v+|m|)!]}} \gamma_0 x^{|m|} e^{im\varphi} e^{-x^2/2} \begin{pmatrix} 0 \\ L_v^{(|m|)}(x^2) \\ \frac{ixe^{-i\varphi}}{\Gamma(M_0, n)} \begin{cases} -\frac{v+|m|}{x^2} L_v^{(|m|-1)}(x^2) & m \geq 0 \\ L_{v+1}^{(|m|+1)}(x^2) & m < 0 \end{cases} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (50)$$

şeklini alır.

Bu tezde kütle terimi $M_0 = 0$ olarak alındığından, daha önceden de bahsedildiği gibi

$\Gamma(n) = \sqrt{n}$ değerini alır. Böylelikle denklem (50)'deki denklemler,

$$\Psi_n^K(x, \varphi) = \sqrt{\frac{v!}{2\pi(v+|m|)!}} \gamma_0 x^{|m|} e^{im\varphi} e^{-x^2/2} \begin{pmatrix} L_v^{|m|}(x^2) \\ 0 \\ 0 \\ \frac{ixe+i\varphi}{\sqrt{n}} \begin{cases} L_v^{|m|+1}(x^2) & m \geq 0 \\ -\frac{v+1}{x^2} L_{v+1}^{|m|-1}(x^2) & m < 0, \end{cases} \end{pmatrix}$$

$$\Psi_n^{K'}(x, \varphi) = \sqrt{\frac{v!}{2\pi(v+|m|)!}} \gamma_0 x^{|m|} e^{im\varphi} e^{-x^2/2} \begin{pmatrix} 0 \\ L_v^{|m|}(x^2) \\ \frac{ixe-i\varphi}{\sqrt{n}} \begin{cases} -\frac{v+|m|}{x^2} L_v^{|m|-1}(x^2) & m \geq 0 \\ L_{v+1}^{|m|+1}(x^2) & m < 0 \end{cases} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (51)$$

denklemlerine indirgenir. Bu denklemler $R_n(x) = [v!/2\pi(v+|m|)!]^{1/2} \gamma_0 x^{|m|}$ olmak üzere düzenlendiğinde,

$$\Psi_n^K(x, \varphi) = R_n(x) e^{im\varphi} e^{-x^2/2} \begin{pmatrix} \mathbb{L}^0 \\ 0 \\ 0 \\ \mathbb{L}^K \end{pmatrix}$$

$$\Psi_n^{K'}(x, \varphi) = R_n(x) e^{im\varphi} e^{-x^2/2} \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbb{L}^0 \\ \mathbb{L}^{K'} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (52)$$

şeklinde yazılabilir. Denklem (52)'de $\mathbb{L}^0(x) = L_v^{|m|}(x^2)$ olmak üzere $\mathbb{L}^K, \mathbb{L}^{K'}$

$$\mathbb{L}^K = \frac{ixe+i\varphi}{\sqrt{n}} \begin{cases} L_v^{|m|+1}(x^2) & m \geq 0 \\ -\frac{v+1}{x^2} L_{v+1}^{|m|-1}(x^2) & m < 0, \end{cases}$$

$$\mathbb{L}^{K'} = \frac{ixe-i\varphi}{\sqrt{n}} \begin{cases} -\frac{v+|m|}{x^2} L_v^{|m|-1}(x^2) & m \geq 0 \\ L_{v+1}^{|m|+1}(x^2) & m < 0 \end{cases} \quad (53)$$

değerlerini almaktadır.

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Günay ÖMER
Doğum Yeri : Azerbaycan, Bakü
Doğum Tarihi : 08.10.1984
Medeni Hali : Evli
Yabancı Dili : İngilizce

Eğitim Durumu (Kurum ve Yıl)

Lise : Ankara İncesu Anadolu Lisesi (2003)
Lisans : Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü (2007)
Yüksek Lisans : Ankara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı (2009)
Doktora : Ankara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı (Eylül 2009- Haziran 2014)

Yayınlar (SCI)

Kandemir B. S. and Omer G. 2013. Variational calculations on the energy levels of graphene quantum antidots. Eur.Phys.J.B, 86; 299-305