

**ANKARA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

DOKTORA TEZİ

GRAFENDE ELEKTRON-FONON ETKİLEŞMESİ

Aybey MOĞULKOÇ

FİZİK ANABİLİM DALI

ANKARA

2013

Her hakkı saklıdır

TEZ ONAYI

Aybey MOĞULKOÇ tarafından hazırlanan “**Grafende Elektron-fonon Etkileşmesi**” adlı tez çalışması 19.06.2013 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. Tacettin ALTANHAN
Ankara Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı

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

Üye : Prof. Dr. Hamit YURTSEVEN
Orta Doğu Teknik Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı

Üye : Prof. Dr. Oğuz GÜLSEREN
Bilkent Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı

Üye : Doç. Dr. Şengül KURU
Ankara Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı

Yukarıdaki sonucu onaylarım

Prof. Dr. İbrahim DEMİR

Enstitü Müdürü

ÖZET

Doktora Tezi

GRAFENDE ELEKTRON-FONON ETKİLEŞMESİ

Aybey MOĞULKOÇ

Ankara Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR

Bu tez çalışmasında elektronların akustik fononlar ile etkileşmesinden kaynaklanan kiral polaron oluşumu ile birlikte, elektronların A_{1g} fonon çiftlenimi ile etkileşmesinin sebep olduğu küçük band aralığı oluşumu teorik olarak incelenmiştir. Dahası, grafen düzlemine dik bir magnetik alanın elektron- A_{1g} fonon çiftlenimine olan etkisi analiz edilmiştir. Elektron-fonon sistemlerinin taban durumunu hesaplayabilmek için Lee-Low-Pines teorisi çerçevesinde analitik bir metot geliştirilmiştir. Grafenin dejenere band yapısının kiral polaron oluşumunu desteklediği tespit edilmiştir. Teorik analizlerin çerçevesinde, A_{1g} simetrisine sahip en yüksek frekanslı bölge sınır fononu ile yük taşıyıcılarının etkileşmesinin grafenin Brillouin bölgesinin köşelerinde, kiral simetri kırılmaksızın küçük bir band aralığı yarattığı belirlenmiştir. Bunlara ek olarak, magnetik alanın devreye girmesiyle mevcut kiral simetrinin kırıldığı ve enerji band aralığı oluştuğu tespit edilmiştir.

Haziran 2013, 94 sayfa

Anahtar Kelimeler: Grafen, elektron-fonon etkileşmesi, grafende elektronik taşınım, nano ölçekteki malzemelerin elektronik yapısı, fononlar.

ABSTRACT

Ph. D. Thesis

ELECTRON-PHONON INTERACTION IN GRAPHENE

Aybey MOĞULKOÇ

Ankara University

Graduate School of Natural and Applied Sciences

Department of Physics

Supervisor: Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR

In this thesis, chiral polaron formation arising from interaction of electrons with acoustic phonons together with mini band gap formation due to interaction of electrons with A_{1g} phonon coupling are theoretically investigated in graphene. Moreover, effects of perpendicular magnetic field on electron- A_{1g} phonon coupling are analyzed. An analytical method is developed to calculate the ground-state of the electron-phonon system within the framework of the Lee-Low-Pines theory. It is found that the degenerate band structure of the graphene promotes the chiral polaron formation. Within the framework of theoretical analysis, it is also determined that the interaction of charge carriers with the highest frequency zone-boundary phonon mode with A_{1g} -symmetry induces a mini band gap at the corners of the two-dimensional Brillouin zone of the graphene without breaking chiral symmetry. Additionally, by the introduction of magnetic field, it is found that existing chiral symmetry is broken, and an energy band gap is formed.

June 2013, 94 pages

Key Words: Graphene, electron-phonon interactions, electronic transport in graphene, electronic structure of nanoscale materials, phonons.

TEŞEKKÜR

2007 yılından beri beraber çalıştığım, hayata, bilime ve sanata karşı sergilediği özgün bakış açısı ile ufkumu genişleten değerli danışman hocam Bekir Sıtkı KANDEMİR'e (Ankara Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı) doktora çalışmam boyunca sağladığı yardımları, bilgi birikimini paylaşmak konusunda gösterdiği cömertliği ve tüm bilimsel kazanımlarım için teşekkür etmek isterim.

Hayatımı şekillendiren birçok öğretinin ilk kaynağını oluşturan, sabırlı çalışması, okuması, okurken sorgulaması ile bana örnek olan ve kazandırdığı birçok etik değer için babama, ve beni yetiştirip bugünlere getiren anneme teşekkür ederim.

Aynı mesleği icrâ etmeye çalıştığım ve dolayısıyla beni en iyi anlayan eşim Yeşim MOĞULKOÇ'a her konuda gösterdiği desteği, sabrı ve özverisi için teşekkür ederim. Bu çalışmamı, dünyaya gelişiyle bizi mutluluğa boğan, yaşama sevincimiz biricik oğlum Bartu'ya ithaf ediyorum.

Aybey MOĞULKOÇ

Ankara, Haziran 2013

İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	i
ABSTRACT	ii
TEŞEKKÜR	iii
KISALTMALAR VE SİMGELER DİZİNİ	v
ŞEKİLLER DİZİNİ	vii
1. GİRİŞ	1
2. GRAFENİN KISA TARİHİ	4
2.1 Grafenin Elde Edilişi.....	5
2.2 Grafenin Etkileyici Özellikleri	8
3. GRAFENİN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ.....	13
3.1 Grafen ve Dirac Denklemi.....	13
3.2 Grafende Etkin Kütle Tasviri (k-p Teorisi)	19
4. GRAFENİN FONON DAĞINIM BAĞINTILARI	28
4.1 Kuvvet Sabiti Metodu (Değerlik-Kuvvet Alanı).....	29
4.2 Kuvvet Sabiti Metodunun Grafene Uygulanması.....	32
4.3 Yüksek Simetri Noktalarındaki Fonon Hamiltonyenleri	34
5. GRAFENDE ELEKTRON-FONON ETKİLEŞMESİ	37
5.1 Elektron – Optik Fonon (E_{2g}) Etkileşmesi	41
5.2 Elektron – Akustik Fonon Etkileşmesi.....	52
5.3 Elektron – A_{1g} Fonon Etkileşmesi.....	56
5.4 Magnetik Alan Altında Elektron- A_{1g} Fonon Etkileşmesi.....	65
6. TARTIŞMA VE SONUÇ	73
KAYNAKLAR	76
EK 1: Dirac Denklemi.....	85
ÖZGEÇMİŞ.....	94

KISALTMALAR VE SİMGELER DİZİNİ

AFM	Atomik Kuvvet Mikroskopyu
CVD	Kimyasal Buhar Biriktirme
TO	Enine Optik
LO	Boyuna Optik
TA	Enine Akustik
LA	Boyuna Akustik
LLP	Lee-Low-Pines
QED	Kuantum Elektrodinamiği
$\vec{R}$	Ters örgü vektörleri
$\vec{k}$	Elektron dalga vektörü
$\vec{q}$	Fonon dalga vektörü
$\vec{\tau}$	Öteleme vektörü
$\vec{F}$	Zarf fonksiyonu
α	Çiftlenim sabiti
E	Enerji
E_{pol}	Polaron öz-enerjisi
c	Işık hızı
$\hbar$	Planck sabiti
ψ	Dalga fonksiyonu
$\hat{\sigma}$	Pauli spin matrisleri
$\vec{\alpha}$	Dirac matrisleri
I	Birim matris
H	Hamiltonyen
V	Deformasyon potansiyeli
$\vec{u}$	Yer değiştirme vektörü
θ	Elektron dalga vektörünün azimutal açısı
ϕ	Fonon dalga vektörünün azimutal açısı
K	Yüksek simetri noktası

K'	Yüksek simetri noktası
Γ	Yüksek simetri noktası
A_{1g}	Simetri grubunun indirgenemez temsili
E_{2g}	Simetri grubunun indirgenemez temsili
v_F	Fermi hızı
a	Örgü parametresi
a_{c-c}	İki karbon atomu arasındaki uzaklık
Ω_0	Birim hücrenin alanı
$\vec{\epsilon}$	Kutuplanma vektörü
M_μ	Etkileşme genliği
M_C	Karbon atomunun kütlesi
$\vec{j}$	Akım operatörü
$\hat{h}$	Helisite
$\vec{B}$	Magnetik alan
e	Elektron yükü
$\vec{A}$	Vektör potansiyel
$\vec{p}$	Momentum
$\vec{\pi}$	Kanonik momentum
ω	Fonon frekansları
H_n	Hermite Polinomları
L_n	Laguerre Polinomları
ℓ	Magnetik uzunluk

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1 Farklı karbon allotroplarının kristal yapıları.....	4
Şekil 2.2 Grafenin sentezlenme yöntemleri	6
Şekil 2.3 Mekanik soyma süreci	7
Şekil 2.4 Tek-atomik kalınlıkta grafen kristalleri	8
Şekil 2.5 Grafenin band yapısı	9
Şekil 2.6 Kiral yük taşıyıcıları	11
Şekil 3.1 İki üçgen alt örgünün üst üste binmesiyle oluşan bal peteği örgüsü.....	13
Şekil 3.2 Brillouin bölgesi	14
Şekil 3.3 Grafenin temel örgü ve öteleme vektörleri	19
Şekil 3.4 Grafenin enerji dağınım bağıntısı	22
Şekil 4.1 Grafenin fonon dağınım eğrisi	28
Şekil 4.2 Düzlem-içi modların atomik yerdeğiřtirmeleri.....	29
Şekil 4.3 Bağ esnemesi ve bağ bükülmesinin şematik gösterimi.....	30
Şekil 4.4 Grafenin düzlem-içi modlarına ait fonon dağınımı	34
Şekil 5.1.a. Kekulé distorsiyonu, b. A_{1g} fonon modları	40
Şekil 5.2 Polaron taban durumu enerjisi (Optik Fononlar)	48
Şekil 5.3.a. Elektron-deşik band dağınımı, b. Band dağınımına ait konturlar	49
Şekil 5.4 Üçgensel eğrilik	51
Şekil 5.5 Polaron taban durumu enerjisi (Akustik Fononlar)	56
Şekil 5.6 A_{1g} fononundan kaynaklanan aralık.....	64
Şekil 5.7 Magnetik alan varlığında band yapısının deęiřimi	71
Şekil 5.8 Etkileşme durumunda Landau seviyeleri.....	72
Şekil 1 Dirac denizi.....	92

1. GİRİŞ

Karbon ağırlıkça yerkabuğunda altıncı sırada bulunan, atom sayısı 6 ve atom ağırlığı 12,011 olan IV A grubu elementidir. Simgesel olarak “C” harfi ile gösterilir. Karbon tüm yaşam için temel bir element olup, tarih öncesi çağlarda keşfedilmiştir. Organik maddelerin yeterli oksijenle tepkimesi sonucunda açığa çıkmasıyla öğrenilmiştir. Karbon ismi Latince “carbo” kökünden gelmektedir, anlamı ise odun kömürüdür (Glare 1983).

Farklı yapıdaki karbon-karbon bağlarının sonucu olarak çeşitli özelliklere sahip karbon tabanlı yapılar meydana gelir. Bunlara örnek olarak grafit ve bilinen en sert madde olan elmas verilebilir. Karbonun önemli allotroplarından biri de grafitir. Grafit adı 1789’da Abraham Gottlob Werner tarafından Grekçedeki “graphein” kelimesinden türetilmiştir. Grafit pratik olarak çok kullanılan kurşun kalemlerin içeriğini de oluşturur. Elmasın tersine, grafit elektriği iletir. Karbonun diğer bir yapay allotropu da fullerendir. Fullerenler 1985’de Sussex ve Rice üniversitelerinden Robert Kurl, Harold Kroto ve Richard Smalley tarafından keşfedilmişlerdir (Kroto vd. 1985). Fulleren ismi ise daha sonraları mimar Richard Buckminster Fuller’e atfen Buckminster Fulleren olarak da isimlendirilmiştir. Değişik yapıda fullerenler mevcuttur, bunların en önemlilerinden biri de nanotüplerdir. Nanotüpler silindirik fullerenlerdir. Bu karbon tüpleri sadece birkaç nanometre genişliğindedirler, fakat uzunluk olarak, birkaç milimetre uzunluktan, mikrometreden daha az uzunluğa sahip olacak şekilde değişim gösterirler. Nanotüpler 1991 yılında Sumio Iijima tarafından keşfedilmişlerdir (Iijima 1991). Nanotüplerin özel moleküler yapıları sıra dışı makroskobik özellikler gösterirler.

Diğer önemli bir karbon yapı ise ilgi çekici fiziksel özelliklere sahip olan Grafendir. Grafenler sp^2 bağ yapısına sahip olan tek tabakalı, düzlemsel ve hegzagonal hücrelerden oluşan karbon yapılarıdır. Tek duvarlı karbon nanotüpler grafenin silindire yuvarlanmış hali olarak düşünülebilirler. Grafende karbon nanotüp gibi sıra dışı fiziksel özellikler gösterir. Grafen fiziğinin teorik zemini 1940’lı yıllara dayanmasına karşın, bu materyale duyulan ilgi, Manchester Üniversitesi’nden Konstantin Novoselov ve Andre Geim’in 2004 yılında serbest durumdaki tek tabakayı sentezlemesiyle artmıştır. Bu konudaki

tarihsel gelişim 2. ve 3. bölümlerde detaylandırılmıştır. Grafenin gösterdiği ilginç elektriksel, yapısal ve optik özellikler grafeni daha şimdiden gelecek uygulamalı fiziğinin ve teknolojisinin önemli bir yapı taşı haline getirmiştir.

Grafen fiziğinin belki de en önemli olgusu yük taşıyıcılarının kütesiz ve ışık hızının üç yüzde biri hıza sahip olmalarıdır. Bu durum grafen sistemini tasvir etmesi bakımından relativistik bir denklem olan Dirac denkleminin kullanılmasına imkân sağlar. 3. bölümde irdelendiği üzere, grafen yapısı dikkate alınarak ve sıkı-bağ yaklaşımı kullanılarak elde edilen Hamiltonyen aslında Dirac Hamiltonyenidir. Grafen fiziğinin relativistik doğasını ve bu yapının gösterdiği birçok ilginç fiziksel özelliği Dirac denklemini inceleyerek anlamak mümkündür. Dirac denklemi her ne kadar yüksek enerjili parçacıkların saçılma durumlarını incelemek için kullanılsa da grafenin keşfi ile bu denkleme ait bağlı durumlar teorik fizikçilerin başlıca araştırma alanları arasına girmiştir.

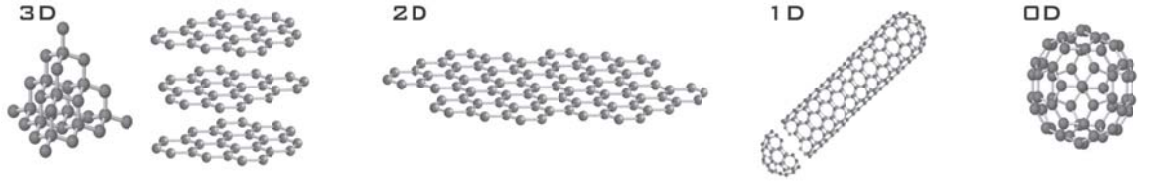
Grafen fiziğini anlamak adına Dirac denkleminin bazı bağlı durumları ve grafen fiziğine yön verecek bazı fiziksel süreçler doktor öncesinde ve doktora çalışması esnasında analitik olarak incelenmiştir. Yüksek lisans çalışmasının da konusunu oluşturan periyodik magnetik modülasyonda grafendeki yük taşıyıcılarının davranışı SCI kapsamında bir dergide basılmıştır (Kandemir and Mogulkoc 2010a). Dahası, magnetik alanın ve safsızlık atomunun varlığında yük taşıyıcılarının davranışı yine analitik olarak incelenmiş ve yayınlanmıştır (Kandemir and Mogulkoc 2010b). Bu anlamda Dirac denklemi ve grafen fiziği hakkında dikkate değer bir bilgi birikimine sahip olduğunu söylemek mümkündür. Dirac denkleminin kökenine ve relativistik kuantum mekaniğine ilişkin bazı temel bilgiler tez çalışmasının EK 1 kısmında sunulmuştur.

Bu tez çalışmasının da başlığını oluşturan “Grafende Elektron-Fonon Etkileşmesi” grafen fiziğinin önemli araştırma alanlarından biridir. Elektron-fonon etkileşmesinin bazı malzemelerin yük taşıyıcılarına ait dinamiği önemli ölçüde değiştirdiği bilinen bir gerçektir. Özellikle boyutlar küçüldükçe bu etki daha da artar. Grafende elektron-fonon etkileşmesine dayalı hatırı sayılır miktarda çalışma (Bkz. 5. bölüm) mevcut olmasına karşın, analitik olarak gerçekleştirilen hesap oldukça azdır. Literatürdeki bu boşluk,

ilgili tez kapsamında yapılan alıřmalara motivasyon oluřturmuřtur. Grafenin fonon spektrumuna ait bilgiler gerek deneysel ve nümerik, gerekse teorik yaklařımlarla incelenmiřtir. Bu konudaki literatür özetini ve izlenen metot 4. bölümde tartiřılmıřtır. Bu bilgiler ıřıęında grafenin yüksek simetri noktalarındaki ve civarındaki elektron-fonon etkileřmesi ve bu etkileřmenin grafenin enerji spektrumuna olan katkısı analitik olarak incelenmiřtir. İlgili hesaplamalara ve incelemelere tez alıřmasının 5. bölümünde yer verilmiřtir.

2. GRAFENİN KISA TARİHİ

Doğada yaşamsal bir öneme sahip olan karbon farklı yapılara bürünerek sıra dışı özellikler gösterir. Eski zamanlardan beri bilinen üç boyutlu grafit ve elmas, günümüzde ise üzerinde sıklıkla çalışılan sıfır boyutlu buckyball, tek boyutlu nanotüp ve iki boyutlu grafen karbon tabanlı yapılardan başlıcalarıdır. Grafitin insan hayatına kurşun kalem olarak girdiği 1500'lü yıllardan bu yana fizikçiler ve kimyacılar karbon atomunun farklı allotropları ile ilgili birçok çalışma gerçekleştirmiştir. Günümüz dünyasında boyutların küçülmesiyle karbon nanotüp ve grafen fiziği özellikle yoğun madde fizikçilerinin odaklandığı alanların başında gelmektedir.



Şekil 2.1 Farklı karbon allotroplarının kristal yapıları (Katsnelson 2007)

Önceleri, iki boyutlu yapılar dikkat çekici olarak literatürde çok fazla yer almamış ve deneysel olarak gözlenmesi de pek mümkün olmamıştır. Bilindiği üzere boyut, materyali tanımlayan en önemli parametrelerden biridir. 1930'larda, Landau ve Peierls tam olarak iki boyutlu kristallerin termodinamik olarak kararlı olmadığını ve dolayısıyla var olamayacağını kanıtlamaya çalışmışlardır (Peierls 1935, Landau 1937). Bu teori, düşük boyutlardaki kristal örgülerdeki termal dalgalanmaların ıraksayan katkılarının, sonlu bir sıcaklıkta atomların yer değiştirmelerinin atomlar arası mesafelerle karşılaştırılabilir olduğunu göstermiştir. Bu tartışma daha sonraları Mermin tarafından genişletilmiş ve birçok deneysel gözlem ile desteklenmiştir (Mermin 1968). Gerçekten, ince filmlerin donma noktası, azalan kalınlıkla hızla düşmekle birlikte düzinelerce atomik tabaka kalınlığında kararsız hale gelirler. Bu nedenden dolayı, atomik tek tabakalar daha büyük üç boyutlu yapıların temel parçaları olarak bilinirler. 3D yapılar olmaksızın, iki boyutlu yapıların varlığı (Novoselov vd. 2004) 2004 yılına kadar öngörülememiştir, bu inanış deneysel olarak grafenin keşfedilmesiyle ve diğer serbest

durumdaki iki boyutlu kristallerin (tek tabakalı boron nitrit ve yarı tabakalı BSCCO) gözlenmesiyle değişmiştir (Geim ve Novoselov 2007).

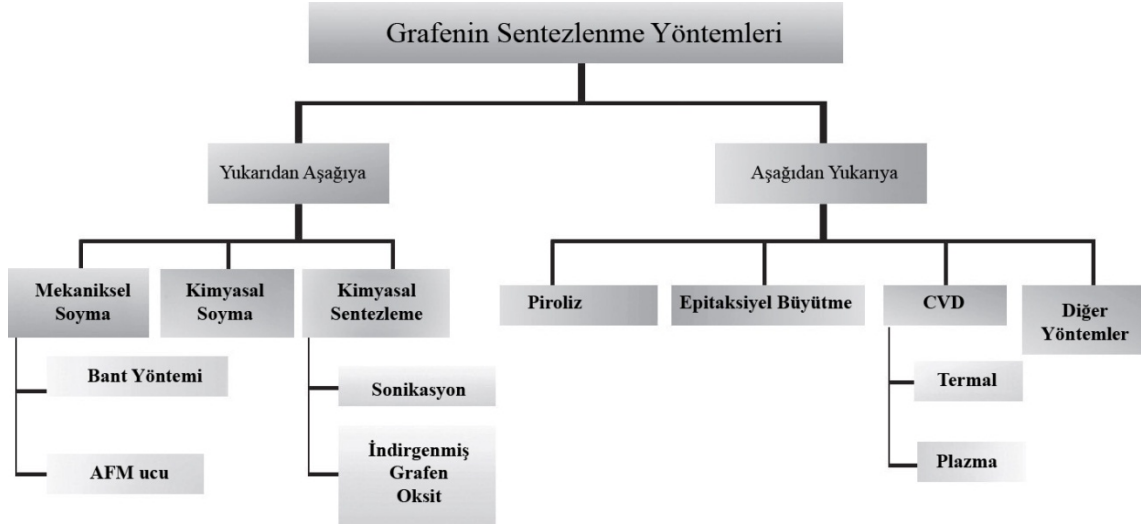
Tek atomik tabaka iki boyutlu kristal olarak bilindiği gibi yüz tabakalı bir yapı da üç boyutlu bir malzemenin ince filmi olarak isimlendirilebilir. Tabaka sayısı arttıkça elektronik özellikler de değişmeye başlar. Grafit için limit olan on tabakadan sonra elektronik özellikler ciddi ölçüde değişim gösterir (Partoens ve Peeters 2006). Bu anlamda, hem tek tabaka hem de çift tabaka grafen tek tip elektronların ve tek tipdeşiklerin olduğu, sıfır-aralıklı yarıiletken olması nedeniyle elektronik spektrumları bakımında benzerlikler gösterir. Tabaka sayısı üç ve daha fazla olduğu durumlarda spektrum girift bir hâl alır ve farklı yük taşıyıcıları ortaya çıkar (Geim ve Novoselov 2007).

İki boyutlu bal peteği örgüsüne sahip olan grafen 2004 yılında Andre Geim ve Konstantin Novoselov'un grubu tarafından sentezlenmiştir. "Grafen" kelime olarak tek tabaka karbon folyoları isimlendirmek amacıyla ilk olarak Hanns-Peter Boehm tarafından kullanılmıştır (Boehm vd. 1962).

2.1 Grafenin Elde Edilişi

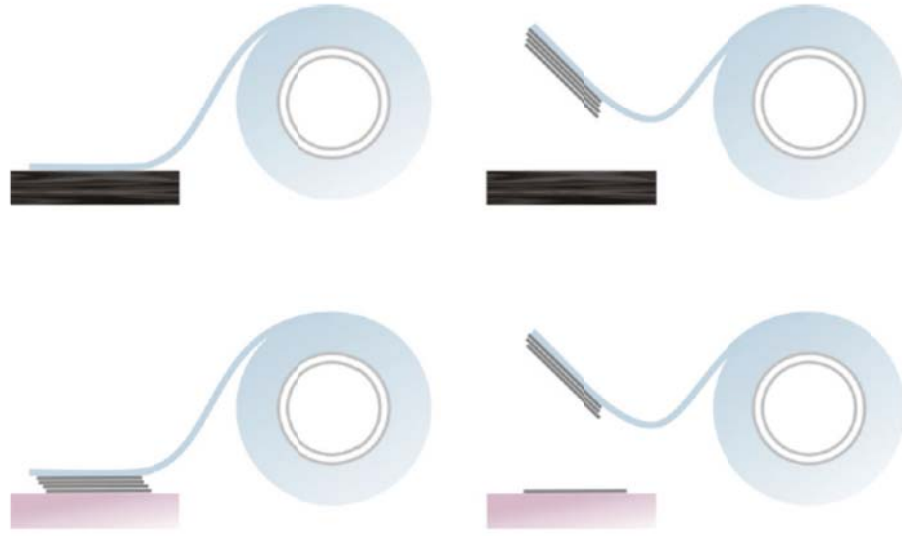
Grafeni sentezleyebilmek için çeşitli yöntemler geliştirilmiştir. Bu yöntemleri şekil 2.2'de görüldüğü gibi sınıflandırmak mümkündür. Bant yöntemi grafeni ilk olarak sentezleyen grubun kullandığı, grafitin tabaka tabaka soyulduğu bir yöntem olmakla birlikte mekaniksel soyma sürecinde Atomik Kuvvet Mikrokobu (AFM) ucu da kullanılabilmektedir. Bant üzerindeki tabakalar SiC alttaşın üzerine yapıştırılarak ilgili görüntüleme ve karakterizasyon işlemleri yapılabilmektedir. Kimyasal soyma sürecinde ise grafit yapısına eklenmiş alkali metalleri bir çözeltide çözmek suretiyle birkaç tabaka grafen izole edilebilir. Kimyasal soyma sürecine benzer diğer bir süreç de kimyasal sentezleme sürecidir. Bu süreç uygun bir çözücü içinde dağınan tek tabaka grafen oksitlerden tek tabaka grafen elde etme prensibine dayanır. Bu yöntemlerin dışında Kimysal Buhar Biriktirme (CVD) yöntemi ile, epitaksiyel büyütme yöntemi ile ve

karbon nanotüpleri açmak (unzipping) suretiyle grafen elde etmek mümkündür (Choi ve Lee 2012).



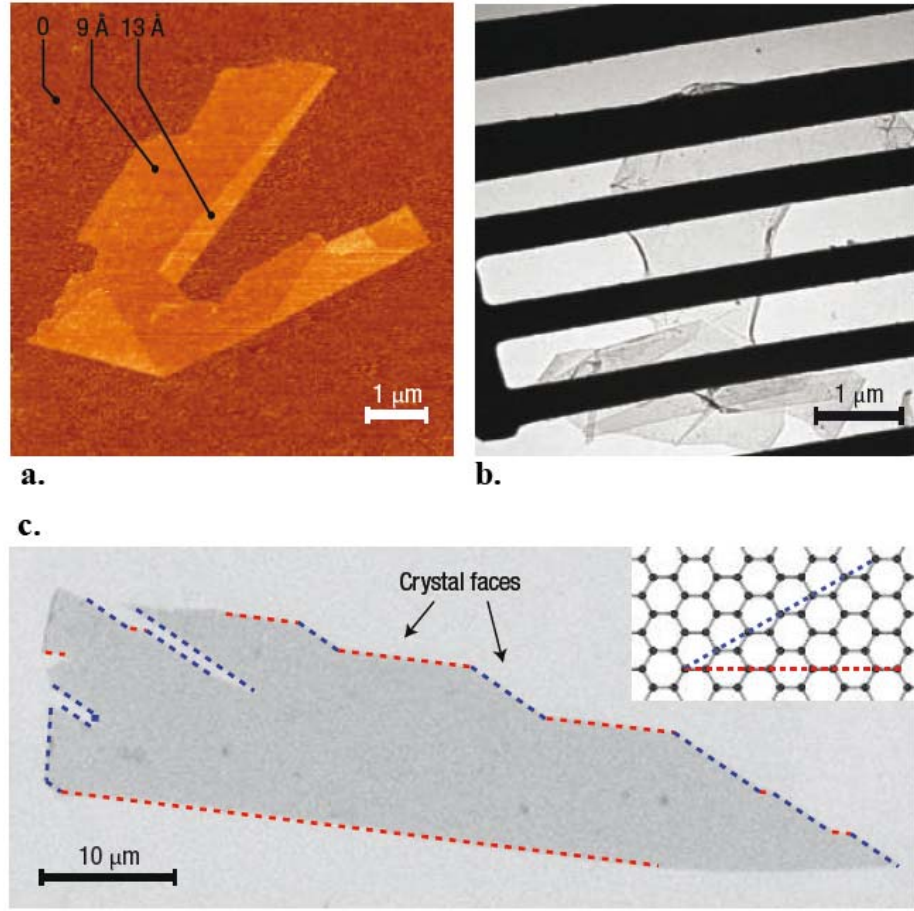
Şekil 2.2 Grafenin sentezlenme yöntemleri (Choi ve Lee 2012)

Grafenin ilk olarak sentezlenmesinde mekanik soyma süreci (Şekil 2.3) büyük bir önem teşkil etmesine karşın bu süreç sonunda elde edilen numuneler düzgün olmayan yapılara sahip olduğu gözlenmiştir. Dahası, elde edilen numunelerin azimutal yönelimleri numune üzerindeki kontrolü kısıtlar. Grafene özgü elektronik özellikleri kullanmayı amaçlayan uygulamaları gerçekleştirebilmek için büyük ölçeklerde koherent grafen yapısına veya alttaş üzerinde tek bir azimutal yönelimdeki grafen tabaklarına ihtiyaç duyulur (Avouris ve Dimitrakopoulos 2012). Bunun için yukarıda bahsedilen farklı sentezleme teknikleri geliştirilmiştir. Bu tekniklerden CVD yöntemi ile grafen üretimi, mekanik soyma sürecine göre daha ucuzdur ve boyutlandırılması daha kolaydır. Bu yöntem hazne içerisine salınan karbon gazının uygun bir yüzey ile etkileşmesine ve yüzey üzerine tutunarak katman bırakmasına dayanır. CVD yöntemi ile altta bulunan bakır levhanın kristolografik yönelimi kontrol edilerek, uygun ölçülerde kusur içermeyen grafen tabakaları sentezlenebilir.



Şekil 2.3 Mekanik soyma süreci (Novoselov 2011)

Mekanik soyma süreci ile sentezlenen ve bazı süreçler sonucu elde edilen, 100 μm büyüklüğüne kadar değişen yüksek kaliteli grafen kristallerine ait görüntüler şekil 2.4’de verilmiştir. Şekil 2.4’deki görüntüler tek-atomik kalınlıkta grafen tabakalarına aittir. Şekil 2.4.a’da AFM’ye ait bir görüntü mevcuttur. Göreli olarak $\approx 4 \text{ \AA}$ yüksekliğe sahip katlanmış bölge numunenin tek tabaka olduğunu göstermektedir. Şekil 2.4.b’deki görüntü bir mikrometre büyüklüğündeki ızgara grid üzerinde serbest bir şekilde bulunan grafen tabakasının geçirimli elektron mikroskopundaki (TEM) görüntüsüdür. Şekil 2.4.c’deki görüntü ise göreli olarak daha büyük bir grafen kristalinin taramalı elektron mikroskobu (SEM) görüntüsüdür. Burada zik-zak ve koltuk kenarların kristalde hangi bölgelere karşılık geldiğini gösteren ek bir şekil de mevcuttur.



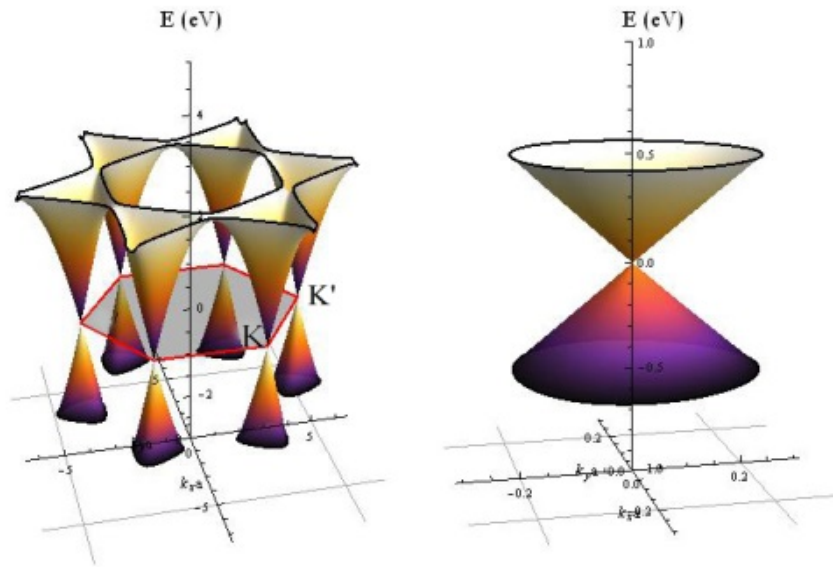
Şekil 2.4 Tek-atomik kalınlıkta grafen kristalleri (Geim ve Novoselov 2007)

2.2 Grafenin Etkileyici Özellikleri

Grafenin keşfiyle birlikte, grafenin fiziksel özelliklerini anlamak için birçok deneysel ve teorik çalışma gerçekleştirilmiştir. Grafendeki karbon atomları sp^2 hibritleşmesine sahiptirler. Üç elektron güçlü σ bağlarını oluştururken, dördüncü elektron ortak kullanılan π bağlarını oluşturur. sp^3 hibritleşmesine sahip grafitte durum farklıdır. Grafitin dış kabuğundaki dört elektron da σ bağı oluşturur ve elektronik band yapısında büyük bir aralığa (gap) sebep olur. sp^2 hibritleşmesinin sonucu olarak grafen metalik karakter gösterir ve elektrik alan etkisine karşı hassasiyet sergiler. Bu anlamda grafenin derin olmayan aralıklı yarıiletken veya düşük olarak üst-üste gelmiş (overlap olmuş) yarı metale benzerlik gösterdiğini söylemek mümkündür. Grafendeki yük taşıyıcıları, yüksek n konsantrasyonlarda (10^{13} cm^{-2}) elektronlar ile boşluklar arasında ayarlanabilir ve $15.000 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ gibi yüksek bir μ mobilite sergilerler. Dahası

mobiletenin sıcaklığa bağımlılığı düşüktür ve bu durum safsızlıklardan saçılma sürecini sınırlandırır. Bu durum aynı zamanda yük taşıyıcılarının balistik olarak iletimine de imkân sağlar.

Bu ilginç elektronik özelliklerin yanı sıra, oda sıcaklığında bile kuantum Hall etkisi gözlemlenmek mümkündür. Bu etki literatürdeki sıcaklık aralığını on kat artırır. Standart kuantum Hall etkisine göre platolar $\frac{1}{2}$ faktörlük kaymaya uğrar (Geim ve Novoselov 2007, Novoselov 2011).



Şekil 2.5 Grafenin band yapısı

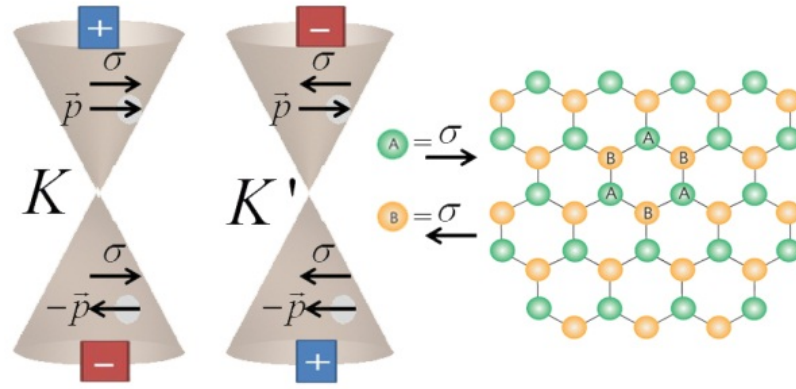
Grafenin band yapısı dikkate alındığında, band diplerinde konik bir davranış sergilerken artan dalga vektörü k değerleriyle yerini parabolik bir davranışa bırakır (şekil 2.5). Brillouin bölgesinde grafenin değerlik ve iletim bandları iki noktada temas eder (K ve K'). Bu durum grafen örgüsündeki hegzagonal simetrinin sonucudur. Alt üçgen örgülerdeki karbon atomlarının p_z orbitalleri hibritleşerek π ve π^* bandlarını oluşturur. Bu bandlar K ve K' noktalarında kesişerek lineer davranışlı aralıksız spektrumu oluşturur. Elektronik özelliklerin belirlenmesinde düşük k vektörlü konik bölge ($|E| < 1\text{eV}$) etkilidir. Yoğun madde fiziğinde birçok sistemin band yapısı k^2 bağımlı olması nedeniyle Schrödinger denklemi ile tasvir edilir. Ancak, grafendeki bu konik davranış lineer bir dalga denklemini gerektirir. Grafendeki yük taşıyıcılarının, yani

‘kütlesiz Dirac fermiyonlarının’ hızı $v_F \approx 10^6$ m/s gibi yüksek bir değere sahip olması grafeni tasvir etmesi bakımından (2+1) boyutlu Dirac denklemini önemli bir aday haline getirir. Bu denklem,

$$H = \hbar v_F \begin{bmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{bmatrix} = \hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{k} \quad (2.1)$$

olarak ifade edilir. Burada, $\vec{\sigma}$ Pauli spin matrisleri (EK 1) ve $\vec{k} = (k_x, k_y)$ dalga vektörü olarak bilinir. Kütlesiz Dirac fermiyonları kütlesini kaybetmiş elektronlar ya da elektron yüküne sahip nötrinolar olarak tasvir edilebilirler. Bu nedenle grafeni tasvir eden denklem Dirac-Weyl denklemi olarak da isimlendirilebilir. Grafenin bal peteği örgüsü A ve B olarak isimlendirilen, karbon atomlarından meydana gelen iki eşdeğer üçgen alt örgünün üst üste gelmesiyle oluşmuştur (Şekil 3.1). Dirac-Weyl denkleminin çözümleri olarak gelen iki bileşenli spinörlerin bileşenleri bu alt örgüleri tasvir etmektedir. Yani bu alt örgüler kuantum elektrodinamiğindeki (QED) spin indisine karşılık gelirler. Grafende bu bileşenler spinden ziyade pseudospin olarak adlandırılırlar. Spin-yörünge etkileşmesi sonucu pseudospin ve gerçek spin durumları karışır ve spektrumda aralık oluşur (Kane ve Mele 2005).

QED ile diğer bir benzerlik ise kiralite kavramıdır. Kiralite (Helisite) kütlesiz parçacıklar için spin işlemcisinin momentum işlemcisi üzerine olan iz düşümü olarak tanımlanır (Bjorken ve Drell 1964) (EK 1). Bu nicelik, elektronlar için pozitifken, deşikler için negatiftir (şekil 2.4). Özünde, grafendeki kiralitenin anlamı, aynı karbon alt örgülerinden kaynaklanması nedeniyle k elektron durumları ile $-k$ deşik durumlarının girift olarak birbirleriyle bağlantılı olmasıdır. Yük eşleniği altında elektron ve deşik durumlarının simetrik olması kiral simetri olarak bilinir. Kiralite kavramı önemlidir, çünkü birçok elektronik süreç bu niceliğin korunmasıyla anlaşılır (Geim ve Novoselov 2007, Novoselov 2011).



Şekil 2.6 Kiral yük taşıyıcıları

QED çerçevesinde, yüklü parçacıklar arasındaki etkileşmelerin sanal bir foton değiş tokuşu suretiyle gerçekleştiği iyi bilinmektedir. Bu etkileşmeler, ince yapı sabitinin ($\alpha = e^2 / \hbar c = 1/137$) kuvvetlerini içeren pertürbatif açılım ile tanımlanan fermiyonik bir Coulomb potansiyeli ile tasvir edilirler. Bu durum, aşırı ağır çekirdeklerde geçerli değildir ve $\alpha \sim 1$ mertebesinde (Greiner vd. 1985). Pertürbatif olmayan (açılımın ıraksamasıyla karşılaşılan güçlüklerden dolayı) yaklaşımın zorunlu olduğu bu $Z\alpha > 1$ durum fizikçilerin her daim ilgisini çekmiştir. Yaygın olarak kullanılan SiO_2 alttaşı (Katsnelson 2006b, Shytov vd. 2007a,b, Fogler vd. 2007, Pereira vd. 2008) için grafendeki etkin çiftlenim sabitinin $\alpha = e^2 / \epsilon \hbar v_F \sim 1$ mertebesinde olmasından dolayı, bu durum yoğun madde fizikçilerinin gerek deneysel ve gerekse de teorik araştırma alanları arasına girmiştir. Bu anlamda grafen fiziği “yeni bir QED” olarak da adlandırılabilir.

Grafendeki yük taşıyıcıları etkin olarak ışık hızının 1/300’lük kesrinde kütesiz Dirac denklemi ile tasvir edilebilmesi nedeniyle bazı relativistik olguların da araştırılmasına imkân sağlar. Bunlardan bir tanesi Klein paradoksudur. Klein paradoksu olarak bilinen kavram, relativistik parçacığın yüksek ve geniş potansiyel bariyerine engelsiz nüfuz etmesidir. Klein paradoksu kuantum elektrodinamiğinin oldukça ilginç sonuçlarından biridir. Bu fenomen parçacık fiziği, nükleer fizik ve astrofizik alanlarında oldukça tartışılmış ancak temel parçacıklarla test edilemeyeceği kanıtlanmıştır. Grafende yük taşıyıcılarının kiral doğası böyle bir deneye imkân sağlar. Gerçek grafen numunelerinde düzensizlik içeren iyi belirlenmiş bir engel oluşturmak için, deneylerde $\epsilon \approx 10^5 \text{ V cm}^{-1}$

büyükliğünde bir elektrik alan kullanılabilir. Bu büyüklük temel parçacıklar için Klein paradoksunun gözlenmesi için gerekli alanın on bir merteye küçüğüdür. Böyle bir olgunun grafende test edilmesi 2006 yılında Katsnelson vd. (2006) tarafından önerilmiştir. Bu düşünce deneyi (gedanken) 2009 yılında Young ve Kim (2009) tarafından deneysel olarak doğrulanmıştır. Diğer bir relativistik olgu ise parçacık-anti parçacık durumları arasında salınma sebep olan Zitterbewegung'dur. Zitterbewegung'un grafenin minimal iletkenliğinden sorumlu olabileceği düşünülmektedir (Katsnelson 2006a).

Çift tabaka grafende durum biraz farklılık gösterir. Bu durumda sistemi tasvir eden Hamiltonyen ne relativistik olmayan Schrödinger denklemine ne de relativistik Dirac denklemine benzerlik gösterir. Hamiltonyen Dirac denkleminde olduğu gibi köşegen dışı terimlere sahipken, $\vec{p}^2/2m$ gibi Schrödinger benzeri terimler içerir. Yük taşıyıcıları, kütsüz Dirac fermiyonları gibi kiral olmalarına karşın sonlu bir kütleye $m \approx 0.05m_0$ sahiptirler (Geim ve Novoselov 2007). Çift tabaka grafene ait Hamiltonyen ise,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \begin{bmatrix} 0 & (k_x - ik_y)^2 \\ (k_x + ik_y)^2 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.2)$$

olarak ifade edilir. Bu durumda, çift tabaka grafenin band yapısı sıfır aralığa sahip, parabolik şekildedir. Bu Hamiltonyenin öz durumları, özel Landau kuantizasyonu, özel saçılmalar vb. gibi ilginç kiral özellikler gösterir (Novoselov vd. 2006, Katsnelson 2012).

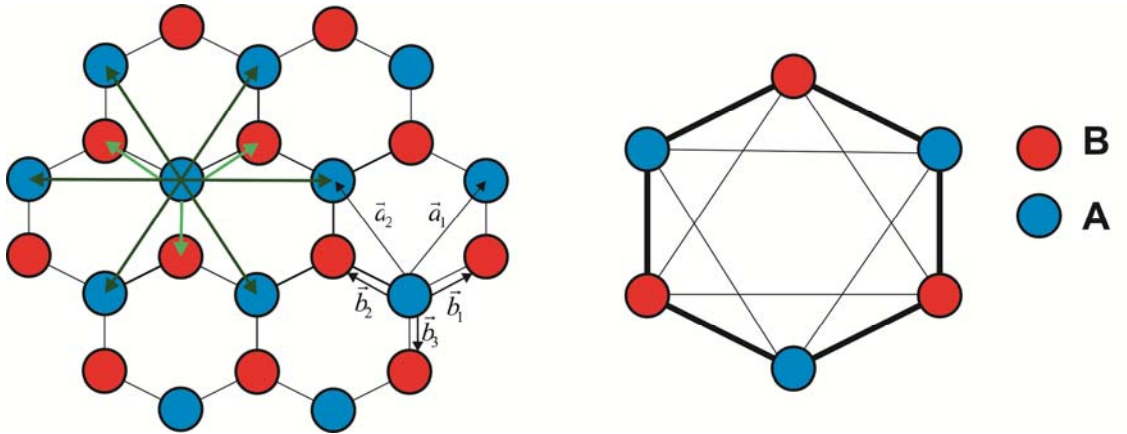
Sıra dışı elektronik özelliklerinin yanı sıra grafen, tüm görünür spektrum için gösterdiği %97.7'lik optik geçirgenliği (Blake vd. 2008) ve yapısal çelikten 300 kat daha fazla mukavemeti ile şimdiden yüksek teknolojinin en fazla çalışılan malzemeleri arasına girmiştir. 1 m² grafen tabakasının ağırlığı sadece 0.77 gr'dır. Bu etkileyici özellikleriyle grafen, günümüz elektronik mimarisinin ve savunma sanayisinin en gözde malzemelerinden biridir.

3. GRAFENİN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ

Grafenin band yapısı ile ilgili yapılan ilk çalışma P. R. Wallace'ın "The Band Theory of Graphite" adlı yayınıdır (Wallace 1947). Bu çalışmada iki boyutlu grafitin, yani, grafenin elektronik özellikleri sıkı-bağ yaklaşımı kullanılarak incelenmiştir.

3.1 Grafen ve Dirac Denklemi

Grafenin elektronik özelliklerinin konu olduğu diğer önemli yayın G. W. Semenoff'un "Condensed-Matter Simulation of a Three Dimensional Anomaly" adlı yayınıdır (Semenoff 1984). Bu yayında iki boyuttaki anomaliliklerin sonuçlarını tartışmak amaçlanmıştır.



Şekil 3.1 İki üçgen alt örgünün üst üste binmesiyle oluşan bal peteği örgüsü

Şekil 3.1 ile verilen grafenin temel örgü vektörleri

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right) a \\ \vec{a}_2 &= (0, 1) a\end{aligned}\tag{3.1}$$

olup, yine şekil üzerinde gösterilen herhangi bir A atomunun yakın komşuluğundaki üç adet B atomunun bunlar cinsinden yer vektörleri

$$\begin{aligned}
\vec{b}_1 &= \left(\frac{1}{2\sqrt{3}}, \frac{1}{2} \right) a \\
\vec{b}_2 &= \left(\frac{1}{2\sqrt{3}}, -\frac{1}{2} \right) a \\
\vec{b}_3 &= \left(-\frac{1}{\sqrt{3}}, 0 \right) a
\end{aligned} \tag{3.2}$$

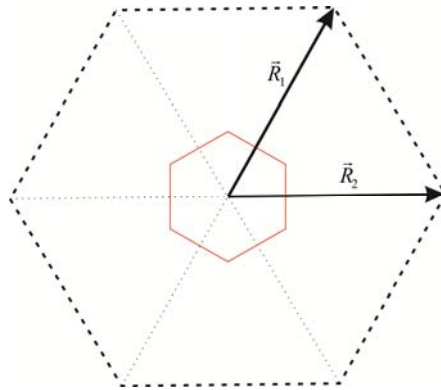
ile verilir. Bunlara karşılık gelen ters örgü vektörleri

$$\begin{aligned}
\vec{R}_1 &= \left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \right) (1, 0) \\
\vec{R}_2 &= \left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \right) \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right)
\end{aligned} \tag{3.3}$$

şeklindedir. Brillouin bölgesindeki q simetri vektörleri ise

$$\begin{aligned}
\vec{q}_1 &= \left(\frac{R_{1x}}{2}, \frac{R_{2y}}{3} \right) = \left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \right) \times \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2\sqrt{3}} \right) \\
\vec{q}_2 &= -\vec{q}_1
\end{aligned} \tag{3.4}$$

ile verilir. Grafenin Brillouin bölgesi şekil 3.2’de gösterilmiştir.



Şekil 3.2 Brillouin bölgesi

A ve B atomlarının farklı türde atomlar olduğunu varsayarak genel iki atomlu bir sistem ele alınır. A ve B de bulunan elektronların enerji farkı β ile parametrize edilir. Sıkı bağ yaklaşımı kullanarak ve en yakın komşuluklar dikkate alarak, sistemin toplam Hamiltonyeni

$$H = \alpha \sum_{\vec{A}, i} \left[a_{\vec{A}}^{\dagger}(\vec{A}) b_{\vec{B}}(\vec{A} + \vec{b}_i) + b_{\vec{B}}^{\dagger}(\vec{A} + \vec{b}_i) a_{\vec{A}}(\vec{A}) \right] + \beta \sum_{\vec{A}} \left[a_{\vec{A}}^{\dagger}(\vec{A}) a_{\vec{A}}(\vec{A}) - b_{\vec{B}}^{\dagger}(\vec{A} + \vec{b}_1) b_{\vec{B}}(\vec{A} + \vec{b}_1) \right] \quad (3.5)$$

olarak yazılır. İlk iki terim B’de yok olup A’da ve A’da yok olup B’de elektron yaratılmasını ifade eder. Son iki terim ise A’da yok olup A’da ve B’de yok olup B’de yaratılmayı ifade eder. Yaratıcı ve yok edici operatörler için Fourier dönüşümleri

$$a(\vec{A}) = \int_{\Omega} \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{A}} a(\vec{k})$$

$$b(\vec{B}) = \int_{\Omega} \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{B}} b(\vec{k}) \quad (3.6)$$

ile verilir ve k uzayında Hamiltonyen

$$H = \int \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} \left[\Gamma(\vec{k}) a^{\dagger}(\vec{k}) \cdot b(\vec{k}) + \Gamma^*(\vec{k}) a(\vec{k}) \cdot b^{\dagger}(\vec{k}) \right] + \beta \int \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} \left[a^{\dagger}(\vec{k}) a(\vec{k}) + b^{\dagger}(\vec{k}) b(\vec{k}) \right] \quad (3.7)$$

şeklini alır. Burada Γ ,

$$\Gamma(\vec{k}) = \alpha \sum_i \exp(i\vec{k} \cdot \vec{b}_i) \quad (3.8)$$

ile verilir. Bu durumda Denklem 3.7’deki Hamiltonyeni daha da kompakt olarak

$$H = \int_{\Omega} \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} \begin{bmatrix} a^\dagger & b^\dagger \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta & \Gamma \\ \Gamma^* & -\beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \quad (3.9)$$

şeklinde yazmak mümkündür. Hamiltonyenin özdeğerleri

$$\begin{vmatrix} \beta - E & \Gamma \\ \Gamma^* & -\beta - E \end{vmatrix} = 0 \quad (3.10)$$

karakteristik determinanı ile bulunur. Determinant hesaplanır ise enerji özdeğerleri

$$E = \pm \left[\beta^2 + |\Gamma|^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.11)$$

olarak bulunur. Burada,

$$\Gamma = \sum_i \exp(i\vec{k} \cdot \vec{b}_i) \quad (3.12)$$

olarak yeniden tanımlanır. Γ ifadesinde çeşitli trigonometrik özdeşlikler kullanmak suretiyle Denklem 3.11'deki enerji ifadesi

$$E = \left\{ \beta^2 + \alpha^2 \left[1 + 4 \cos^2 \left(\frac{k_y a}{2} \right) + 4 \cos \left(\frac{k_y a}{2} \right) \cos \left(\frac{3k_x a}{2\sqrt{3}} \right) \right] \right\}^{1/2} \quad (3.13)$$

şeklinde yazılabilir. Denklem 3.13, P. R. Wallace'ın bulduğu enerji ifadesiyle uyum gösterir. $\vec{q}_1$ ve $\vec{q}_1 = -\vec{q}_2$ gibi iki farklı simetri noktası olduğu dikkate alınarak, Denklem 3.9'daki Hamiltonyen

$$H = \int_{\Omega} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \begin{bmatrix} a^\dagger(\vec{k} + \vec{q}_i) & b^\dagger(\vec{k} + \vec{q}_i) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta & \alpha \cdot \Gamma(\vec{k} + \vec{q}_i)/2 \\ \alpha \cdot \Gamma^*(\vec{k} + \vec{q}_i)/2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a(\vec{k} + \vec{q}_i) \\ b(\vec{k} + \vec{q}_i) \end{bmatrix} \quad (3.14)$$

$$+ \int_{\Omega} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \begin{bmatrix} a^\dagger(\vec{k} + \vec{q}_i) & b^\dagger(\vec{k} + \vec{q}_i) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & \alpha \cdot \Gamma(\vec{k} + \vec{q}_i)/2 \\ \alpha \cdot \Gamma^*(\vec{k} + \vec{q}_i)/2 & -\beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a(\vec{k} + \vec{q}_i) \\ b(\vec{k} + \vec{q}_i) \end{bmatrix}$$

şeklinde yazılabilir. $\vec{q}_1 = -\vec{q}_2$ özdeşliğinden yararlanılarak Denklem 3.14

$$H = \int_{\Omega} \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} \frac{\alpha}{2} \left\{ \begin{bmatrix} a^\dagger(\vec{k} - \vec{q}_1) & b^\dagger(\vec{k} - \vec{q}_1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta / \alpha & \Gamma(\vec{k} + \vec{q}_1) \\ \Gamma^*(\vec{k} + \vec{q}_1) & -\beta / \alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a(\vec{k} - \vec{q}_1) \\ b(\vec{k} - \vec{q}_1) \end{bmatrix} \right\} \\ + \int_{\Omega} \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} \frac{\alpha}{2} \left\{ \begin{bmatrix} a^\dagger(\vec{k} + \vec{q}_1) & b^\dagger(\vec{k} + \vec{q}_1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta / \alpha & \Gamma(\vec{k} + \vec{q}_1) \\ \Gamma^*(\vec{k} + \vec{q}_1) & -\beta / \alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a(\vec{k} + \vec{q}_1) \\ b(\vec{k} + \vec{q}_1) \end{bmatrix} \right\} \quad (3.15)$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada

$$\Gamma(\vec{k} \mp \vec{q}_1) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{b}_1 \mp i\vec{q}_1 \cdot \vec{b}_1) + \exp(i\vec{k} \cdot \vec{b}_2 \mp i\vec{q}_1 \cdot \vec{b}_2) + \exp(i\vec{k} \cdot \vec{b}_3 \mp i\vec{q}_1 \cdot \vec{b}_3) \quad (3.16)$$

ile verilir. Denklem 3.11'deki Γ ifadesi simetri noktaları çevresinde

$$\Gamma(\vec{k} \mp \vec{q}_1) = \frac{i\sqrt{3}}{4} (1 \mp i\sqrt{3})(k_x a \mp ik_y a) \\ \Gamma^*(\vec{k} \mp \vec{q}_1) = -\frac{i\sqrt{3}}{4} (1 \pm i\sqrt{3})(k_x a \pm ik_y a) \quad (3.17)$$

şeklinde seriye açılır ise Hamiltonyen bandın dip noktalarında

$$H = \int_{\Omega} \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} \alpha \frac{\sqrt{3}a}{4} \left\{ \begin{bmatrix} a^\dagger(\vec{k} - \vec{q}_1) & b^\dagger(\vec{k} - \vec{q}_1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2\beta / \sqrt{3}a\alpha & i(1-i\sqrt{3})k_- / 2 \\ -i(1-i\sqrt{3})k_+ / 2 & -2\beta / \sqrt{3}a\alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a(\vec{k} - \vec{q}_1) \\ b(\vec{k} - \vec{q}_1) \end{bmatrix} \right. \\ \left. + \begin{bmatrix} a^\dagger(\vec{k} + \vec{q}_1) & b^\dagger(\vec{k} + \vec{q}_1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2\beta / \sqrt{3}a\alpha & i(1-i\sqrt{3})k_+ / 2 \\ -i(1-i\sqrt{3})k_- / 2 & -2\beta / \sqrt{3}a\alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a(\vec{k} + \vec{q}_1) \\ b(\vec{k} + \vec{q}_1) \end{bmatrix} \right\} \quad (3.18)$$

formunu alır. Burada, $m = 2\beta / \sqrt{3}a\alpha$ ve $k_{\mp} = k_x \mp ik_y$ olmak kaydı ile, Hamiltonyen

$$\begin{aligned}
H = \int \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} & \left\{ \alpha \frac{\sqrt{3}a}{4} \begin{bmatrix} a_-^\dagger & b_-^\dagger \end{bmatrix} \exp(i\pi\sigma_3/3) \begin{pmatrix} m & ik_- \\ -ik_+ & -m \end{pmatrix} \right. \\
& \times \exp(-i\pi\sigma_3/3) \begin{bmatrix} a_- \\ b_- \end{bmatrix} + \alpha \frac{\sqrt{3}a}{4} \begin{bmatrix} a_+^\dagger & b_+^\dagger \end{bmatrix} \sigma_1 \exp(i\pi\sigma_3/3) \begin{pmatrix} m & ik_+ \\ -ik_- & -m \end{pmatrix} \\
& \left. \times \sigma_1 \exp(-i\pi\sigma_3/3) \begin{bmatrix} a_+ \\ b_+ \end{bmatrix} \right\}
\end{aligned} \tag{3.19}$$

şeklinde yeniden ifade edilebilir. Bu Hamiltonyene ait öz fonksiyonlar

$$\begin{aligned}
\psi_1(\vec{k}) &= \frac{1}{2} \alpha a \sqrt{3} \exp(-i\pi\sigma_3/3) \begin{bmatrix} a_- \\ b_- \end{bmatrix} \\
\psi_2(\vec{k}) &= \frac{1}{2} \alpha a \sqrt{3} \exp(-i\pi\sigma_3/3) \sigma_1 \begin{bmatrix} a_+ \\ b_+ \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{3.20}$$

olmak kaydı ile Denklem 3.19

$$H = \int \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} \left[\bar{\psi}_1(\vec{k})(\vec{\gamma} \cdot \vec{k} + m)\psi_1(\vec{k}) + \bar{\psi}_2(\vec{k})(\vec{\gamma} \cdot \vec{k} - m)\psi_2(\vec{k}) \right] \tag{3.21}$$

şeklinde yazılır. γ ifadesi $\gamma_\mu = (\sigma_3, i\sigma_1, i\sigma_2)$ şeklinde tanımlanmıştır. Burada

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{3.22}$$

şeklinde olup, Pauli spin matrisleri olarak bilinirler (EK 1). Denklem 3.21 ifadesi uzaysal koordinatlarda yazılırsa aşağıdaki Hamiltonyen elde edilir.

$$H = \int \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} \left[\bar{\psi}_1(x)(i\vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} + m)\psi_1(x) + \bar{\psi}_2(x)(i\vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} - m)\psi_2(x) \right] \tag{3.23}$$

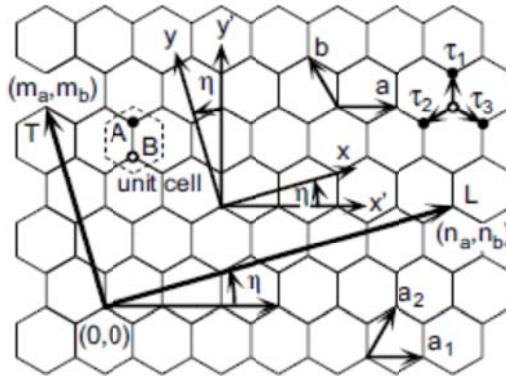
Kütlesiz limitte yani $\beta=0$ veya $m=0$ durumunda, sistem grafen sistemine karşılık gelir. Bunun sebebi Grafenin temel örgüsünde atomlar her ne kadar A ve B atomları olarak isimlendirilseler de bu atomların özdeş karbon atomları olmasıdır. $\beta \neq 0$ durumu ise, A ve

B atomlarının sırasıyla Boron ve Azot atomlarına karşılık geldiği Boron Nitrit (BN) sistemini betimlemektedir (Semenoff 1984).

3.2 Grafende Etkin Kütle Tasviri (k·p Teorisi)

k·p metodu malzemenin band yapısını kestirmeye (extrapolate) yarayan fenomenolojik bir yöntemdir. k·p metodu periyodik kristallerde yaklaşık olarak türetilmiş enerji bandından yola çıkarak yaklaşık Hamiltonyeni bulmak için kullanılır. Periyodik olmayan sistemler için ise k·p metodu dağınım bağıntısının minimum ve maksimumları civarında iyi işleyen ve yaklaşık dalga fonksiyonunu bulmayı amaçlayan bir yöntemdir. Bu metod için iki kategori söz konusudur. Bunlardan birincisi standart pertürbasyon teorisinden Kane'nin pertürbasyon metoduna kadar çeşitli yaklaşımlar içerir. Diğer kategori ise zarf fonksiyonu yaklaşımına (Luttinger-Kohn yaklaşımı ve Burt yaklaşımı) dayanır. Yarı iletkenlerde zarf fonksiyonu yaklaşımı enerji dağınım bağıntısının maksimum ve minimumları civarında elektronun etkin kütlesini hesaplamak için kullanılır. Bu nedenle zarf fonksiyonu yaklaşımı aynı zamanda “etkin kütle yaklaşımı” olarak da isimlendirilir (Lew Yan Voon ve Willaten 2009).

Tek tabaka grafende zarf fonksiyonu denklemi Dirac denklemine karşılık gelir ve kütsüz fermiyonlarında etkin kütle ortaya çıkmaz. Dolayısıyla grafen için bu yaklaşım literatürde çoğunlukla zarf fonksiyonu yaklaşımı olarak adlandırılır (Marconcini ve Macucci 2011).



Şekil 3.3 Grafenin temel örgü ve öteleme vektörleri (Ando 2004)

Grafen tabakasının yapısı şekil 3.3’de gösterilmiştir. İlkel öteleme vektörleri $\vec{a} = a(1, 0)$ ve $\vec{b} = a(-1/2, -\sqrt{3}/2)$ olarak tanımlanırken en yakın komşuluk karbon atomlarını birbirlerine bağlayan vektörler $\vec{\tau}_1 = (0, 1/\sqrt{3})a$, $\vec{\tau}_2 = (-1/2, 1/2\sqrt{3})a$ ve $\vec{\tau}_3 = (1/2, -1/2\sqrt{3})a$ olarak tanımlanırlar. Burada a örgü parametresidir ve $a = 2.46 \text{ nm}$ dir. Yüksek simetri noktalarından K ve K' noktalarının koordinatları sırasıyla $\vec{K} = 2\pi(1/3, 1/\sqrt{3})/a$ ve $\vec{K}' = 2\pi(2/3, 0)/a$ olarak verilir.

Sıkı-bağ modelinde grafen tabakasındaki tüm atomlarının $2p_z$ orbitalleri baz fonksiyonu olarak kullanılır. Bu orbitaller π bandlarına sebep olur. Grafen tabakasında iletim ve değerlik bandları K ve K' durumlarında birbirlerine temas eden π durumlarından meydana gelir. Dalga fonksiyonu

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}_A} \psi_A(\vec{R}_A) \varphi(\vec{r} - \vec{R}_A) + \sum_{\vec{R}_B} \psi_B(\vec{R}_B) \varphi(\vec{r} - \vec{R}_B) \quad (3.24)$$

olarak atomik orbitallerin lineer kombinasyonu olarak yazılır. Burada $\varphi(\vec{r})$ orijinde bulunan karbon atomuna ait p_z orbitalinin dalga fonksiyonu, n_a ve n_b tam sayı olmak üzere $\vec{R}_A = n_a \vec{a} + n_b \vec{b} + \vec{\tau}_1$ ve $\vec{R}_B = n_a \vec{a} + n_b \vec{b}$ olarak tanımlanır. Hamiltonyen operatörünün tanımından yola çıkarak enerji

$$E = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\sum_{j,j'=A,B} \sum_{\vec{R}_{jn}} \sum_{\vec{R}_{j'm}} \psi_j^*(\vec{R}_{jn}) \psi_{j'}(\vec{R}_{j'm}) h_{\vec{R}_{jn}, \vec{R}_{j'm}}}{\sum_{j,j'=A,B} \sum_{\vec{R}_{jn}} \sum_{\vec{R}_{j'm}} \psi_j^*(\vec{R}_{jn}) \psi_{j'}(\vec{R}_{j'm}) s_{\vec{R}_{jn}, \vec{R}_{j'm}}} \quad (3.25)$$

olarak yazılabilir, burada $h_{\vec{R}_{jn}, \vec{R}_{j'm}}$ transfer integrali olarak tanımlanırken, $s_{\vec{R}_{jn}, \vec{R}_{j'm}}$ üst-üste gelme (overlap) integrali olarak tanımlanır. Denklem 3.25’deki enerji minimize edilip tekrar düzenlenirse

$$\sum_{j'=A,B} \sum_{\vec{R}_{j'm}} \psi_{j'}(\vec{R}_{j'm}) h_{\vec{R}_{jn}, \vec{R}_{j'm}} = E \sum_{j'=A,B} \sum_{\vec{R}_{j'm}} \psi_{j'}(\vec{R}_{j'm}) s_{\vec{R}_{jn}, \vec{R}_{j'm}} \quad (3.26)$$

bağıntısına ulaşılır. Sadece en yakın komşuluklar ile ilgili integraller dikkate alınırsa Denklem 3.26

$$\begin{aligned} \psi_A(\vec{R}_A)h_{\vec{R}_A,\vec{R}_A} + \sum_{\ell=1}^3 \psi_B(\vec{R}_{B_\ell})h_{\vec{R}_A,\vec{R}_{B_\ell}} &= E \left[\psi_A(\vec{R}_A)s_{\vec{R}_A,\vec{R}_A} + \sum_{\ell=1}^3 \psi_B(\vec{R}_{B_\ell})s_{\vec{R}_A,\vec{R}_{B_\ell}} \right] \\ \psi_B(\vec{R}_B)h_{\vec{R}_B,\vec{R}_B} + \sum_{\ell=1}^3 \psi_A(\vec{R}_{A_\ell})h_{\vec{R}_B,\vec{R}_{A_\ell}} &= E \left[\psi_B(\vec{R}_B)s_{\vec{R}_B,\vec{R}_B} + \sum_{\ell=1}^3 \psi_A(\vec{R}_{A_\ell})s_{\vec{R}_B,\vec{R}_{A_\ell}} \right] \end{aligned} \quad (3.27)$$

şeklini alır. Burada

$$\begin{aligned} h_{\vec{R}_{jn},\vec{R}_{j'm}} &= \begin{cases} -\gamma_0 & \vec{R}_{jn} \neq \vec{R}_{j'm} \text{ (en yakın komşuluklar için)} \\ 0 & \text{Diğer durumlar} \end{cases} \\ s_{\vec{R}_{jn},\vec{R}_{j'm}} &= \begin{cases} 1 & \vec{R}_{jn} = \vec{R}_{j'm} \\ 0 & \vec{R}_{jn} \neq \vec{R}_{j'm} \end{cases} \end{aligned} \quad (3.28)$$

olarak tanımlanır. γ_0 en yakın komşuluk transfer (rezonans) integralidir. Sonuç olarak, sıkı-bağ ifadesi

$$\begin{aligned} -\gamma_0 \sum_{\ell=1}^3 \psi_B(\vec{R}_{B_\ell}) &= E\psi_A(\vec{R}_A) \\ -\gamma_0 \sum_{\ell=1}^3 \psi_A(\vec{R}_{A_\ell}) &= E\psi_B(\vec{R}_B) \end{aligned} \quad (3.29)$$

şeklinde bulunur. Birinci yakın komşuluklardaki atomların konumlarını

$$\begin{aligned} \vec{R}_{B_1} &= \vec{R}_A - \vec{\tau}_1, & \vec{R}_{A_1} &= \vec{R}_B + \vec{\tau}_1 \\ \vec{R}_{B_2} &= \vec{R}_A - \vec{\tau}_2, & \vec{R}_{A_2} &= \vec{R}_B + \vec{\tau}_2 \\ \vec{R}_{B_3} &= \vec{R}_A - \vec{\tau}_3, & \vec{R}_{A_3} &= \vec{R}_B + \vec{\tau}_3 \end{aligned} \quad (3.30)$$

olarak da tanımlamak mümkündür. Bu durumda Denklem 3.29

$$\begin{aligned}
-\gamma_0 \sum_{\ell=1}^3 \psi_B(\vec{R}_A - \vec{\tau}_\ell) &= E \psi_A(\vec{R}_A) \\
-\gamma_0 \sum_{\ell=1}^3 \psi_A(\vec{R}_B + \vec{\tau}_\ell) &= E \psi_B(\vec{R}_B)
\end{aligned} \tag{3.31}$$

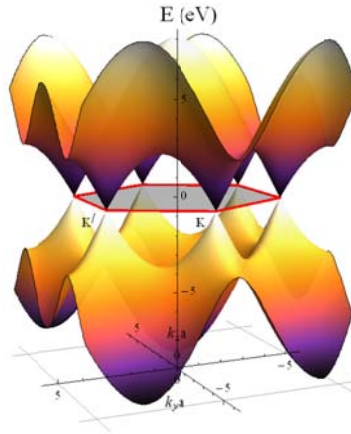
halini alır. Dalga fonksiyonlarını $\psi_A(\vec{R}_A) \propto f_A(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_A)$ ve $\psi_B(\vec{R}_B) \propto f_B(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_B)$ formunda dikkate alırsak Denklem 3.31'i

$$\begin{bmatrix} 0 & h_{AB}(\vec{k}) \\ h_{AB}(\vec{k})^* & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_A(\vec{k}) \\ f_B(\vec{k}) \end{bmatrix} = \varepsilon \begin{bmatrix} f_A(\vec{k}) \\ f_B(\vec{k}) \end{bmatrix}, \quad h_{AB}(\vec{k}) = -\gamma_0 \sum_{\ell} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{\tau}_\ell) \tag{3.32}$$

olarak ifade etmek mümkündür. Sonuç olarak, enerji ifadesi

$$\varepsilon_{\pm}(\vec{k}) = \pm \gamma_0 \sqrt{1 + 4 \cos \frac{ak_x}{2} \cos \frac{\sqrt{3}ak_y}{2} + 4 \cos^2 \frac{ak_x}{2}} \tag{3.33}$$

şeklinde ve şekil 3.4'de gösterilmiştir. Enerji ifadesi dikkate alındığı takdirde K ve K' noktalarında $\varepsilon_{\pm}(\vec{K}) = \varepsilon_{\pm}(\vec{K}') = 0$ dır.



Şekil 3.4 Grafenin enerji dağılım bağıntısı

Denklem 3.33'ün K ve K' noktaları civarındaki davranışını görebilmek için dalga vektörü $\vec{k} = \vec{K} + \delta\vec{k}$ şeklinde ifade edilir ve $\delta\vec{k} = 0$ civarında seri açılım yapılır. Sonuç olarak, K ve K' noktaları civarında enerji ifadesi

$$\varepsilon_{\pm}(\vec{k}) = \pm\gamma\sqrt{k_x^2 + k_y^2} \quad (3.34)$$

olarak elde edilir. Burada, $\gamma = \sqrt{3}a\gamma_0/2$ şeklindedir. K ve K' noktaları civarındaki bu lineer davranış grafenin birçok elektronik özelliğinde önemli rol oynamaktadır.

Grafen için k·p denklemini türetebilmek için öncelikle şekil 3.3'de gösterildiği üzere (x,y) koordinatlarının orijin etrafında η açısı kadar döndürülüp (x',y') koordinat sistemine geçilmesi gerekir. Grafenin Fermi seviyesi civarında, ki bu grafen için $\varepsilon_F = 0$, toplam dalga fonksiyonu

$$\begin{aligned} \psi_A(\vec{R}_A) &= e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}_A} F_A^K(\vec{R}_A) + e^{i\eta} e^{i\vec{K}'\cdot\vec{R}_A} F_A^{K'}(\vec{R}_A) \\ \psi_B(\vec{R}_B) &= -\omega e^{i\eta} e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}_B} F_B^K(\vec{R}_B) + e^{i\vec{K}'\cdot\vec{R}_B} F_B^{K'}(\vec{R}_B), \quad \omega = \exp(2\pi i/3) \end{aligned} \quad (3.35)$$

olarak zarf fonksiyonlarının uygun lineer kombinasyonları şeklinde yazılır. Burada $F_A^K, F_B^K, F_A^{K'}$ ve $F_B^{K'}$ uzaysal değişimi yavaş gerçekleşen zarf fonksiyonlarıdır. Denklem 3.35

$$\vec{a}(\vec{R}_A) = \begin{bmatrix} e^{-i\vec{K}\cdot\vec{R}_A} \\ e^{-i\eta} e^{-i\vec{K}'\cdot\vec{R}_A} \end{bmatrix}, \quad \vec{b}(\vec{R}_B) = \begin{bmatrix} -\omega^* e^{-i\eta} e^{-i\vec{K}\cdot\vec{R}_B} \\ e^{-i\vec{K}'\cdot\vec{R}_B} \end{bmatrix} \quad (3.36)$$

ve

$$\vec{F}_A = \begin{bmatrix} F_A^K \\ F_A^{K'} \end{bmatrix}, \quad \vec{F}_B = \begin{bmatrix} F_B^K \\ F_B^{K'} \end{bmatrix} \quad (3.37)$$

olmak kaydıyla

$$\begin{aligned}\psi_A(\vec{R}_A) &= \vec{a}(\vec{R}_A)^\dagger \vec{F}_A \\ \psi_B(\vec{R}_B) &= \vec{b}(\vec{R}_B)^\dagger \vec{F}_B\end{aligned}\quad (3.38)$$

şeklinde ifade edilir. Burada, dört zarf fonksiyonu iki eşdeğer olmayan alt örgüye ve Dirac noktasına karşılık gelmektedir. Özdeğer denklemini elde edebilmek için öncelikle Denklem 3.38, Denklem 3.31’de yerine konulur ve $g(\vec{r}' - \vec{R})$ ile çarpılır. $g(\vec{r}' - \vec{R})$; $|\vec{r}| \leq a$ civarında uzaysal olarak yavaşça değişen, $|\vec{r}| \gg a$ civarında hızla düşüp, kaybolan bir fonksiyondur. Bu bakımdan Dirac-Delta fonksiyonu ile benzerlik gösterir ve

$$\begin{aligned}\sum_{\vec{R}_A} g(\vec{r}' - \vec{R}_A) &= \sum_{\vec{R}_B} g(\vec{r}' - \vec{R}_B) = 1, \\ \int d\vec{r}' g(\vec{r}' - \vec{R}_A) &= \int d\vec{r}' g(\vec{r}' - \vec{R}_B) = \Omega_0, \\ g(\vec{r}' - \vec{R}) &\approx \Omega_0 \delta(\vec{r}' - \vec{R})\end{aligned}\quad (3.39)$$

özelliklerine sahiptir. Burada, $\Omega_0 = (2/\sqrt{3})(2\pi/a)^2$, hegzagonal birim hücrenin alanıdır. Sonuç olarak, Denklem 3.38’i

$$\begin{aligned}\varepsilon \sum_{\vec{R}_A} g(\vec{r}' - \vec{R}_A) \vec{a}(\vec{R}_A) \vec{a}(\vec{R}_A)^\dagger \vec{F}_A(\vec{r}') &= -\gamma_0 \sum_l \sum_{\vec{R}_A} g(\vec{r}' - \vec{R}_A) \vec{a}(\vec{R}_A) \vec{b}(\vec{R}_A - \vec{\tau}_l)^\dagger \\ &\times \left[\vec{F}_B(\vec{r}') - \left(\vec{\tau}_l \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}'} \vec{F}_B(\vec{r}') \right) + \dots \right]\end{aligned}\quad (3.40)$$

olarak yeniden düzenlemek mümkündür. Zarf fonksiyonları küçük dalga vektörlü bileşenlere sahiptirler. Bu nedenle sadece dalga fonksiyonunun Dirac noktaları civarındaki bileşenleri dikkate alınır (Denklemin sağ tarafındaki Taylor açılımı sadece ilk terimi içerir). İlgili toplamalar alınırsa denklemin sol tarafı

$$\sum_{\vec{R}_A} g(\vec{r}' - \vec{R}_A) \vec{a}(\vec{R}_A) \vec{a}(\vec{R}_A)^\dagger \approx \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\quad (3.41)$$

olarak elde edilirken, denklemin sağ tarafı

$$\sum_{\vec{R}_A} g(\vec{r}' - \vec{R}_A) \vec{a}(\vec{R}_A) \vec{b}(\vec{R}_A - \vec{\tau}_l)^\dagger \approx \begin{bmatrix} -\omega e^{i\eta} e^{-i\vec{K} \cdot \vec{\tau}_l} & 0 \\ 0 & e^{-i\eta} e^{-i\vec{K}' \cdot \vec{\tau}_l} \end{bmatrix} \quad (3.42)$$

olarak yazılır. l üzerinden toplamalar ise

$$\begin{aligned} \sum_l e^{-i\vec{K} \cdot \vec{\tau}_l} \begin{bmatrix} \tau_l^x & \tau_l^y \end{bmatrix} &= \frac{\sqrt{3}}{2} \omega^{-1} a \begin{bmatrix} i & 1 \end{bmatrix} \\ \sum_l e^{-i\vec{K}' \cdot \vec{\tau}_l} \begin{bmatrix} \tau_l^x & \tau_l^y \end{bmatrix} &= \frac{\sqrt{3}}{2} a \begin{bmatrix} -i & 1 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.43)$$

ifadeleri kullanılarak alınır. Sonuç olarak, $\vec{F}_A(\vec{r})$ ye ait özdeğer denklemi

$$\varepsilon \vec{F}_A(\vec{r}) = \gamma \begin{bmatrix} k_x - ik_y & 0 \\ 0 & k_x + ik_y \end{bmatrix} \vec{F}_B(\vec{r}) \quad (3.44)$$

olarak bulunur. Benzer süreç, $\vec{F}_B(\vec{r})$ için de işletilirse, K ve K' noktaları civarındaki Hamiltonyen

$$H_0 = \begin{bmatrix} 0 & \gamma(k_x - ik_y) & 0 & 0 \\ \gamma(k_x + ik_y) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma(k_x + ik_y) \\ 0 & 0 & \gamma(k_x - ik_y) & 0 \end{bmatrix} \quad (3.45)$$

biçiminde yazılır ve sonuç olarak özdeğer denklemi

$$H_0 \vec{F}(\vec{r}) = \varepsilon \vec{F}(\vec{r}) \quad (3.46)$$

şeklini alır. Burada

$$F^K(\vec{r}) = \begin{bmatrix} F_A^K \\ F_B^K \end{bmatrix}, \quad F^{K'}(\vec{r}) = \begin{bmatrix} F_A^{K'} \\ F_B^{K'} \end{bmatrix}, \quad F(\vec{r}) = \begin{bmatrix} F^K \\ F^{K'} \end{bmatrix} \quad (3.47)$$

şeklinde tanımlanır. Denklem 3.46 tekrar düzenlenecek olursa,

$$\begin{aligned} \gamma(\vec{\sigma} \cdot \vec{k}) \vec{F}^K(\vec{r}) &= \varepsilon \vec{F}^K(\vec{r}) \\ \gamma(\vec{\sigma}^* \cdot \vec{k}) \vec{F}^{K'}(\vec{r}) &= \varepsilon \vec{F}^{K'}(\vec{r}) \end{aligned} \quad (3.48)$$

şeklinde yazılabilir. Burada, $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ Pauli spin matrisleridir. Denklem 3.48 Dirac-Weyl denklemi olarak bilinir (EK 1). Bu denkleme ait enerji özdeğerlerinin rahatlıkla

$$\varepsilon_s(\vec{k}) = s\gamma |\vec{k}| \quad (3.49)$$

olduğu gösterilebilir. Burada $s=+1$ ve $s=-1$ sırasıyla iletim ve değerlik bandlarına karşılık gelmektedir. Serbest durumdaki parçacığın enerji özdeğerlerine karşılık gelen özfonksiyonlar band indisini de içerecek şekilde

$$\begin{aligned} \vec{F}_{s\vec{k}}^K(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{2L}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \begin{bmatrix} s \\ e^{i\varphi(\vec{k})} \end{bmatrix}, \\ \vec{F}_{s\vec{k}}^{K'}(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{2L}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \begin{bmatrix} e^{i\varphi(\vec{k})} \\ s \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (3.50)$$

olarak ifade edilirler. Burada L^2 kutu normalizasyonundan kaynaklanır ve sistemin alanını tanımlar (Ando 2004).

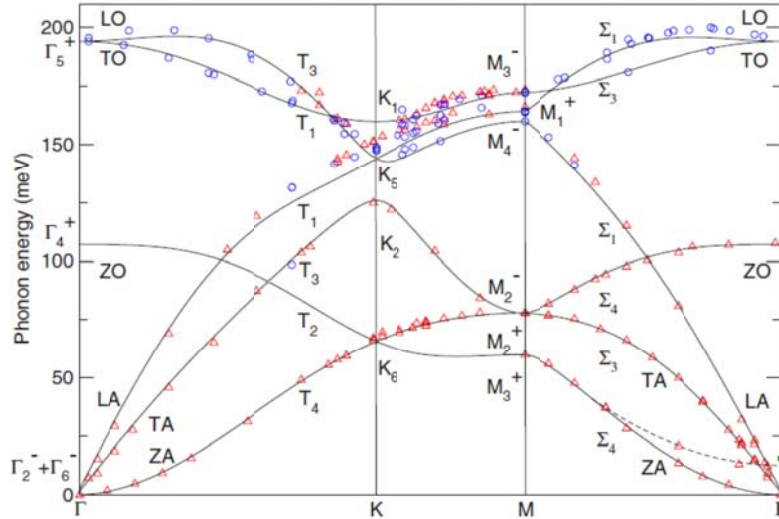
k·p yaklaşımı açık olarak pertürbatif bir yaklaşımdır. Zarf fonksiyonları Dirac noktası civarında dalga fonksiyonu davranışı gösterirken, ilgili parametreler ($\gamma = \hbar v_F$, $E = \gamma |\vec{k}|$, $v_F = (1/\hbar)(d|E|/dk) = \gamma/\hbar$) Dirac noktası için hesaplanır. Yani

Grafende $k \cdot p$ metodu Dirac noktasındaki bilinen parametrelerle bu nokta civarındaki davranışı tasvir eder (Marconcini ve Macucci 2011).

4. GRAFENİN FONON DAĞINIM BAĞINTILARI

Bilindiği üzere fonon yoğun madde içerisindeki örgü titreşimlerinin kuantumlanmasıyla oluşan parçacıksıdır (quasi-particle). Kristal malzemeler için fonon spektrumu önemlidir. Ses hızı, termal iletkenlik veya ısı sığası gibi birçok fiziksel özellik fonon spektrumuna bakılarak belirlenebilir. Ayrıca, fononlar uyarılmış durum dinamiğinde ve elektriksel taşınım özelliklerinde önemli rol oynarlar. Optik ya da elektronik uyarılmalar titreşimsel uyarımlara dönüşebildiği gibi farklı durumlara fononlarca saçılabilirler.

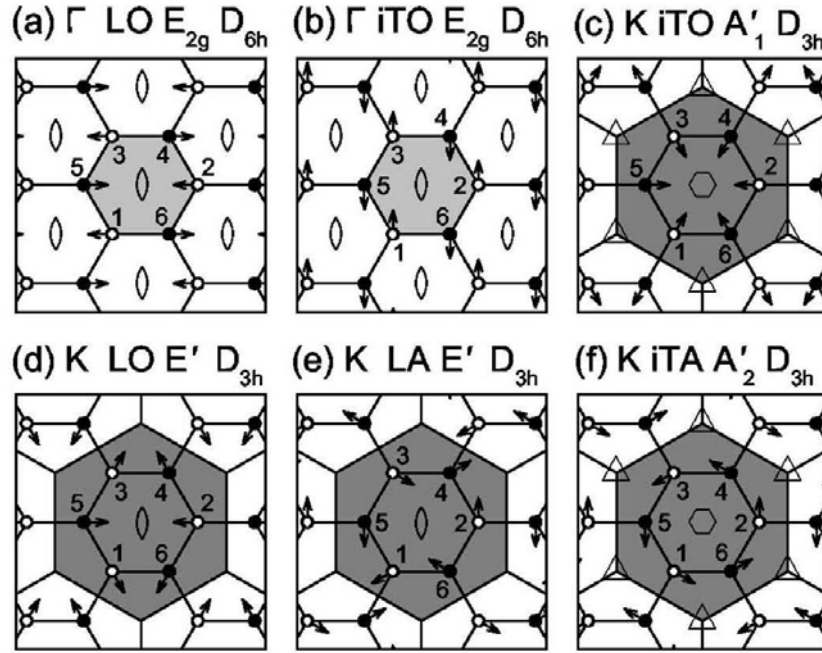
Grafenin fonon spektrumu kısmi olarak inelastik nötron saçılımıyla, elektron enerji kayıp spektroskopisiyle ve inelastik X-ışını açılması ile ölçülür. Dispersiyon deneysel olarak çoğunlukla Γ -K, Γ -M ve K-M doğrultusunda ölçüm yapılarak elde edilir. 400 cm^{-1} altındaki modları belirlemek için inelastik nötron saçılması deneyleri kullanılırken (Maultzch vd. 2004) yüksek enerjili modları belirlemek için X-ışını saçılması deneyleri kullanılır (Mohr vd. 2007). Grafen D_{6h} nokta-grup simetrisine sahip olup, grafende altı fonon modu mevcuttur. Bunlardan dört tanesi düzlem-içi (in-plane) modlara karşılık gelirken diğer ikisi düzlem dışı (out-of-plane) modlara karşılık gelir.



Şekil 4.1 Grafenin fonon dağılım eğrisi (Mohr vd. 2007)

Düzlem-içi modlar (Şekil 4.1) boyuna optik (LO), enine optik (TO), boyuna akustik (LA) ve enine akustik (TA) modlardan oluşmaktadır. Düzlem dışı modlar ise optik (ZO)

ve akustik modlardır (ZA). LA ve TA modları Γ noktası civarında lineer bir davranış sergilerken, ZA kuadratik (q^2) bir davranış sergiler. K noktası civarında ise LA/LO ve ZA/ZO modları lineer kesişme (crossing) davranışı gösterirler.

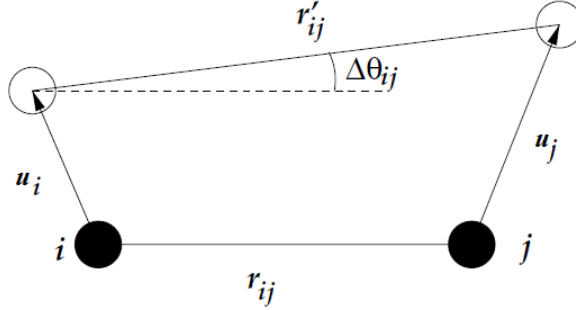


Şekil 4.2 Düzlem-içi modların atomik yerdeğiřtirmeleri (Samsonidze vd. 2007)

4.1 Kuvvet Sabiti Metodu (Değerlik-Kuvvet Alanı)

Elektronik durumdaki sıkı-bağ yaklaşımına benzerlik gösteren kuvvet sabiti metodu dinamik matris hesabına dayanır. Kuvvet sabiti metodunda temel olarak iyonlar arasındaki bağlar kullanılırken, elektronik durumlarda atomik orbitaller kullanılır. İdeal durumda, yani sıfır-sıcaklık diziliminde bir kristal için, içindeki her atomun en yakın komşu atomuyla bir bağ yaptığı düşünülebilir. İdeal pozisyonuna ve yönelimine göre iki tür bağ distorsiyonu söz konusudur; bağ esnemesi (bağ boylarının kısalıp uzaması) ve bağ bükülmesi (bağ yönelimlerinin orijinal konumuna göre değişmesi). Harmonik yaklaşım dikkate alınarak, bağ esnemesindeki enerjinin, esnemenin karesi ile orantılı olduğu, bağ bükülmesinde ise enerjinin, bağ yönelimini tanımlayan açının karesi ile orantılı olduğu göz önünde bulundurulur (Kaxiras 2003).

Bağ esnemesinin ve bağ bükülmesinin potansiyel enerjiye olan katkısını belirleyebilmek için şekil 4.2 dikkate alınır.



Şekil 4.3 Bağ esnemesi ve bağ bükülmesinin şematik gösterimi (Kaxiras 2003)

Burada $\vec{r}_i$ ve $\vec{u}_i$ sırasıyla, iyonik konumlar ve yer değiştirmeleri olarak kullanılacaktır.

Bağ esnemesi terimi

$$V_r = \frac{1}{2} \alpha \sum_{ij} \left(\Delta |\vec{r}_{ij}| \right)^2 \quad (4.1)$$

olarak verilir. Burada α bağ esnemesine ait kuvvet sabitidir. Tüm bağ boylarının b 'ye eşit olduğu düşünülürse, i ve j atomları arasındaki bağ boyu değişimi $\Delta |\vec{r}_{ij}| = |\vec{r}'_{ij}| - b$ olarak yazılır. Burada $\vec{r}'_{ij}$ i ve j atomları arasındaki yeni uzaklıktır ve $\vec{r}'_{ij} = \vec{u}_j - \vec{u}_i + \vec{r}_{ij}$ olduğundan

$$|\vec{r}'_{ij}| = \left[(\vec{u}_j - \vec{u}_i + \vec{r}_{ij})^2 \right]^{1/2} \quad (4.2)$$

olarak tanımlanır. Harmonik yaklaşımla uyumlu olarak, $\vec{u}_i$ yer değiştirmesinin $\vec{r}_{ij}$ bağ uzaklığından çok daha küçük olduğu dikkate alınır ise, $|\vec{u}_i - \vec{u}_j|/b$ teriminin küçük kuvvetleri cinsinden seri açılımı yapılır $\vec{r}'_{ij} = b \left(1 + \vec{r}_{ij} \cdot (\vec{u}_i - \vec{u}_j) / b^2 \right)$ ve Denklem 4.2

$$\Delta |\vec{r}_{ij}| = |\vec{r}'_{ij}| - b = \hat{r}_{ij} \cdot (\vec{u}_i - \vec{u}_j) \quad (4.3)$$

olarak elde edilir. Sonuç olarak, Denklem 4.3, Denklem 4.1’de yerine konulursa, bağ esneme potansiyeli

$$V_r = \frac{1}{2} \alpha \sum_{ij} [(\vec{u}_i - \vec{u}_j) \cdot \hat{r}_{ij}]^2 \quad (4.4)$$

olarak elde edilir. Benzer argümanlar kullanılarak bağ bükülmesi potansiyelini de yazmak mümkündür. Bağ bükülmesi potansiyeli

$$V_\theta = \frac{1}{2} \beta \sum_{ij} b^2 (\Delta\theta_{ij})^2 \quad (4.5)$$

olarak tanımlanır. Burada β , bağ bükülmesine ait kuvvet sabitiyken, $\Delta\theta_{ij}$, i ve j atomları arasındaki bağ yöneliminin değişimini tanımlar. Benzer harmonik yaklaşım ve notasyon kullanılarak, bağ bükülmesi terimi, $\vec{r}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij} = |\vec{r}_{ij}| b \cos(\Delta\theta_{ij})$ olmak kaydıyla

$$\vec{r}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij} \approx \left[1 - \frac{1}{2} (\Delta\theta_{ij})^2 \right] |\vec{r}_{ij}| b \quad (4.6)$$

olarak ifade edilir. Denklem 4.6’nın sol tarafını $\vec{r}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij} / |\vec{r}_{ij}| b$ olarak düzenlemek mümkündür. Bu ifade, $(1+x)^{-1/2}$ ’nin Taylor açılımı kullanılarak ve ikinci mertebeye kadar $|\vec{u}_i - \vec{u}_j| / b$ terimlerini koruyarak,

$$\frac{\vec{r}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij}}{|\vec{r}_{ij}| b} = 1 - \frac{|\vec{u}_i - \vec{u}_j|^2}{2b^2} + \frac{[(\vec{u}_i - \vec{u}_j) \cdot \vec{r}_{ij}]^2}{2b^4} \quad (4.7)$$

olarak hesaplanır. Bulunan ifade Denklem 4.6’da yerine konulursa,

$$(\Delta\theta_{ij})^2 b^2 = |\vec{u}_i - \vec{u}_j|^2 - [(\vec{u}_i - \vec{u}_j) \cdot \hat{r}_{ij}]^2 \quad (4.8)$$

ifadesi elde edilir. Sonuç olarak, bağ bükülmesine ait potansiyel

$$V_\theta = \frac{\beta}{2} \sum_{ij} \left[|\vec{u}_i - \vec{u}_j|^2 - [(\vec{u}_i - \vec{u}_j) \cdot \hat{r}_{ij}]^2 \right] \quad (4.9)$$

şekline sokulabilir (Kaxiras 2003).

4.2 Kuvvet Sabiti Metodunun Grafene Uygulanması

Grafenin fonon dağınım bağıntılarını bulabilmek için kuvvet sabiti metodu kullanılır. Önceki kesimde açıklandığı gibi iki tür potansiyel dikkate alınmalıdır. Bu iki potansiyel grafenin düzlem-içi fonon modlarının elde edilmesine imkân tanır. Bağ esneme potansiyeli Denklem 4.4'deki gibi ifade edilir. Hegzagonal bir örgü için bağ bükülme potansiyeli ise

$$V_\theta = \frac{1}{2} \beta \sum_{ijk} (\cos \theta_{ijk} - \cos \theta_0)^2 \quad (4.10)$$

olarak tanımlanır. Burada θ_{ijk} , i - j bağları ve i - k bağları arasında oluşan açıdır. θ_0 ise denge açısı olup, hegzagonal örgü için 120° dir. Önceki kesimdeki süreç işletilirse, grafen yapısı için en yakın iki bağ arasındaki açı

$$\cos \theta_{ijk} = \frac{[\vec{r}_{ij} + (\vec{u}_i - \vec{u}_j)] \cdot [\vec{r}_{ik} + (\vec{u}_i - \vec{u}_k)]}{|\vec{r}_{ij} + (\vec{u}_i - \vec{u}_j)| |\vec{r}_{ik} + (\vec{u}_i - \vec{u}_k)|} \quad (4.11)$$

olarak elde edilir. Denklem 4.11 harmonik yaklaşım kullanılarak küçük $\vec{u}_{i,j,k}$ 'lar cinsinden seri açılır ve

$$\cos \theta_{ijk} = \left[-\frac{1}{2} - \left(\frac{\hat{r}_{ij}}{2} + \hat{r}_{ik} \right) \cdot (\vec{u}_i - \vec{u}_j) - \left(\frac{\hat{r}_{ik}}{2} + \hat{r}_{ij} \right) \cdot (\vec{u}_i - \vec{u}_k) \right] \quad (4.12)$$

ifadesine ulaşılır. Her iki potansiyel dikkate alınarak, hareket denklemi

$$u = M_C \omega^2 \quad (4.13)$$

olmak kaydıyla, dinamik matris

$$\begin{bmatrix} u - X_1 & F & A & C \\ F^* & u - X_2 & C & B \\ A^* & C^* & u - X_1 & F^* \\ C^* & B^* & F & u - X_2 \end{bmatrix} \quad (4.14)$$

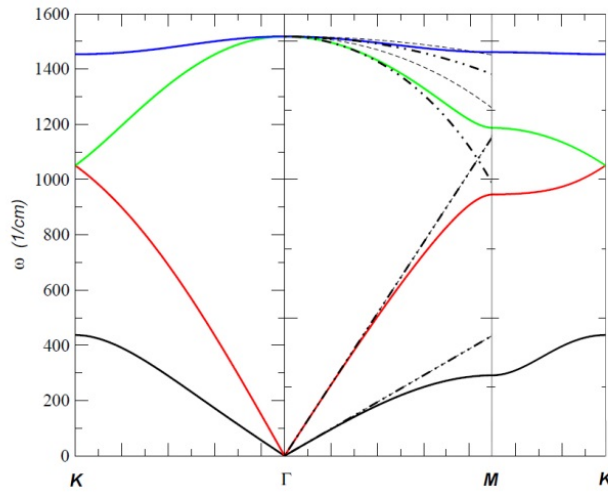
olarak elde edilir. Burada matris elemanları

$$\begin{aligned} X_1 &= \frac{3}{2}\alpha + \frac{45}{8}\beta + \frac{9}{8}\beta \cos(\sqrt{3}Q_y a) \\ X_2 &= \frac{3}{2}\alpha + \frac{45}{8}\beta - \frac{3}{8}\beta \cos(\sqrt{3}Q_y a) + \frac{3}{2}\beta \cos\left(\frac{3Q_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}Q_y a}{2}\right) \\ A &= \alpha e^{iQ_x a} + \left(\frac{\alpha}{2} + \frac{27}{4}\beta \right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}Q_y a}{2}\right) e^{-iQ_x a/2} \\ B &= \frac{9}{2}\beta e^{iQ_x a} + \left(\frac{3}{2}\alpha + \frac{9}{4}\beta \right) \cos(\sqrt{3}Q_y a) e^{-iQ_x a/2} \\ C &= -i\sqrt{3} \left(\frac{\alpha}{2} - \frac{9}{4}\beta \right) \sin\left(\frac{\sqrt{3}Q_y a}{2}\right) e^{-iQ_x a/2} \\ F &= i\beta \frac{3\sqrt{3}}{8} \left[\sin(\sqrt{3}Q_y a) - 2 \sin\left(\frac{\sqrt{3}Q_y a}{2}\right) e^{-i3Q_x a/2} \right] \end{aligned} \quad (4.15)$$

şeklindedir. Burada, $a = \sqrt{3}a_{c-c}$ dir. $a_{c-c} = 1.42 \text{ Å}$ iki karbon atomu arasındaki uzaklık olarak tanımlanırken, M_C karbon atomunun kütlesidir. Denklem 4.14'deki dinamik matris dikkate alınarak, yüksek simetri noktalarındaki (Γ , K ve M) frekans değerleri

$$\begin{aligned}
M\omega_{\Gamma,1,2}^2 &= 0, & M\omega_{\Gamma,3,4}^2 &= 3\alpha + \frac{27\beta}{2}, \\
M\omega_{K,1}^2 &= 3\alpha, & M\omega_{K,2}^2 &= \frac{27\beta}{2}, & M\omega_{K,3,4}^2 &= \frac{3\alpha}{2} + \frac{27\beta}{8}, \\
M\omega_{M,1}^2 &= 3\alpha + \frac{3\beta}{2}, & M\omega_{M,2}^2 &= 2\alpha, & M\omega_{M,3}^2 &= \alpha + \frac{27\beta}{2}, & M\omega_{M,4}^2 &= 6\beta,
\end{aligned} \tag{4.16}$$

olarak elde edilir (Woods ve Mahan 2000).



Şekil 4.4 Grafenin düzlem-içi modlarına ait fonon dağılımı (Stauber vd. 2008)

Dört düzlem-içi modun davranışı şekil 4.3’de gösterilmiştir. Spektrum elde edilirken Γ noktasındaki optik frekans 1600 cm^{-1} olacak şekilde kuvvet sabitleri $\alpha = 500 \text{ N/m}$ ve $\beta = 10 \text{ N/m}$ olarak seçilmiştir (Stauber vd. 2008).

4.3 Yüksek Simetri Noktalarındaki Fonon Hamiltonyenleri

Γ noktası civarındaki fonon Hamiltonyenini elde edebilmek için dinamik matrisin elemanları ikinci mertebeye kadar seriye açılır, ve $\vec{u} = (\vec{u}_A + \vec{u}_B) / \sqrt{2}$ ve $\vec{v} = (\vec{u}_A - \vec{u}_B) / \sqrt{2}$ dönüşümleri yapılır (Stauber vd. 2008). Sonuç olarak, akustik moda ait Hamiltonyen

$$H = K_1 a^2 \begin{bmatrix} Q_x^2 & Q_x Q_y \\ Q_x Q_y & Q_y^2 \end{bmatrix} + K_2 a^2 \begin{bmatrix} Q_x^2 + Q_y^2 & 0 \\ 0 & Q_x^2 + Q_y^2 \end{bmatrix} \quad (4.17)$$

elde edilir. Burada, $K_1 = 3\alpha / 8$ ve $K_2 = 27\alpha\beta / (8\alpha + 36\beta)$ ile verilir. Benzer şekilde optik mod için ise, Hamiltonyeni

$$H = K_0 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - K_3 a^2 \begin{bmatrix} Q_x^2 & Q_x Q_y \\ Q_x Q_y & Q_y^2 \end{bmatrix} - K_4 a^2 \begin{bmatrix} Q_x^2 + Q_y^2 & 0 \\ 0 & Q_x^2 + Q_y^2 \end{bmatrix} \quad (4.18)$$

olarak yazmak mümkündür. Burada, $K_0 = 3(\alpha + 9\beta / 2)$, $K_3 = (3\alpha / 8 - 27\beta / 8)$ ve $K_4 = 27\beta(\alpha + 9 / 4\beta) / (4\alpha + 18\beta)$ şeklindedir.

K ve K' noktalarındaki fonon Hamiltonyenini ise dinamik matris elemanlarının bu koordinatlardaki değerleri yerine konulmak sureti ile bulunur (Ando vd. 2008).

$K = (2\pi / a)(1/3, 1/3\sqrt{3})$ noktası için Hamiltonyen

$$H_{ph}^K = \frac{3\alpha}{4} \begin{bmatrix} 2 & (\sigma_z + i\sigma_x)e^{-i\pi/3} \\ (\sigma_z - i\sigma_x)e^{i\pi/3} & 2 \end{bmatrix} + \frac{9\beta}{16} \begin{bmatrix} 9 + 3\sigma_y & -6(\sigma_z + i\sigma_x)e^{-i\pi/3} \\ -6(\sigma_z - i\sigma_x)e^{i\pi/3} & 9 + 3\sigma_y \end{bmatrix} \quad (4.19)$$

olarak elde edilirken, kutuplanma vektörleri

$$\begin{aligned} \chi_1^{*K} &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -ie^{i\pi/3} & e^{i\pi/3} & -i & 1 \end{bmatrix}, & \chi_2^{*K} &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} ie^{i\pi/3} & e^{i\pi/3} & -i & 1 \end{bmatrix}, \\ \chi_3^{*K} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 0 & i & 1 \end{bmatrix}, & \chi_4^{*K} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} -i & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.20)$$

şeklinde hesaplanır. K' noktasındaki Hamiltonyeni bulabilmek için ise

$$H_{ph}^{*K'} = \begin{bmatrix} \omega & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} H_{ph}^K \begin{bmatrix} \omega^{-1} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.21)$$

dönüşümü yapılır. Burada, $\omega = e^{i2\pi/3}$. Sonuç olarak, Hamiltonyen

$$H_{ph}^{K'} = \frac{3\alpha}{4} \begin{bmatrix} 2 & (\sigma_z - i\sigma_x)e^{-i\pi/3} \\ (\sigma_z + i\sigma_x)e^{i\pi/3} & 2 \end{bmatrix} + \frac{9\beta}{16} \begin{bmatrix} 9 - 3\sigma_y & -6(\sigma_z - i\sigma_x)e^{-i\pi/3} \\ -6(\sigma_z + i\sigma_x)e^{i\pi/3} & 9 + 3\sigma_y \end{bmatrix} \quad (4.22)$$

olarak elde edilir. Hamiltonyene ait kutuplanma vektörleri ise

$$\begin{aligned} \chi_1^{*K'} &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} ie^{i\pi/3} & -e^{-i\pi/3} & i & 1 \end{bmatrix}, \quad \chi_2^{*K'} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -ie^{i\pi/3} & e^{i\pi/3} & i & 1 \end{bmatrix}, \\ \chi_3^{*K'} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 0 & -i & 1 \end{bmatrix}, \quad \chi_4^{*K'} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} i & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.23)$$

şeklinde hesaplanır. K_1 ve K_2 'yi sırasıyla α ve $3\beta/4$ seçmek suretiyle Suzuura ve Ando (2002) çalışmasındaki sonuçlara ulaşılır.

5. GRAFENDE ELEKTRON-FONON ETKİLEŞMESİ

1930'lu yıllardan beri üzerinde sıklıkla çalışılan elektron-fonon etkileşmesi yoğun madde fiziğinde birçok fiziksel özelliğin belirlenmesinde önemli rol oynar. Elektrostatik bir etkileşme olan elektron-fonon etkileşmesinin katkısı kovalent kristallerde, metallere ve yarı-iletkenlere göre oldukça zayıftır. Günümüzde yarıiletken teknolojisinin gelişmesi ile ve boyutların küçülmesi ile elektron-fonon etkileşmesinin önemi yadsınamaz düzeydedir.

İletim elektronları, pozitif iyon korlarının oluşturduğu ideal bir periyodik örgünün her türlü deformasyonundan etkilenirler. Elektron ve fonon arasındaki bu çiftlenim aşağıdaki başlıca etkilere sebebiyet verir:

- a) $\vec{k}$ durumundan $\vec{k}'$ durumuna saçılan elektronlar elektriksel dirence sebep olur.
- b) Elektron-fonon etkileşmesi elektron gazının öz ısını değiştirir.
- c) Fonon soğurulması (ya da yaratılması): iletim elektronları ile fononlar arasındaki etkileşme metaller içerisindeki ultrasonik dalgaların zayıflamasında önemli rol oynar.
- d) İki elektron arasında çekici etkileşme: Bu tip bir etkileşme süperiletkenlik için önemlidir ve sanal fonon soğurulmasıyla ya da yaratılmasıyla gerçekleşir. Fononun indüklediği elektron-elektron etkileşmesi olarak da bilinir.
- e) Elektron her zaman için bir örgü kutuplanma alanını da beraberinde taşır. Elektron ve fonon alanından oluşan bu kompozit parçacık *polaron* olarak adlandırılır. Polaronik etki pertürbe olmamış örgüdeki elektronun etkin kütlesini artırır (Kittel 1987).

Burada Born-Oppenheimer metodu (adyabatik yaklaşım) dikkate alınmalıdır. Bu yaklaşım karakteristik fonon enerjilerinin, karakteristik elektron enerjilerinden çok daha küçük olması gerçeğine dayanır. Adyabatik yaklaşımda, örgüdeki iyonlar belirli bir konfigürasyonda sabit olarak düşünülebilir ve bu şekilde elektronların enerjisi hesap edilebilir. Adyabatik yaklaşımın sonucu olarak sistemin elektronik durumları ve titreşimsel durumları birbirlerinden bağımsız bir hâl alır. Bu iki bağımsız durum toplam enerjiye ayrı katkı vermelerine rağmen, elektronik dalga fonksiyonu halen örgüdeki

iyon koordinatlarına bağımlıdır ve dolayısıyla elektronlar iyonları adyabatik olarak takip ederler. Bu durum elektron-fonon çiftlenimine sebebiyet verir.

Katı içerisindeki tek bir elektron ile boyuna fononların etkileşmesini tasvir eden Hamiltonyene Fröhlich Hamiltonyeni denir. Örneğin, elektron optik fonon etkileşmesini temsil eden Fröhlich Hamiltonyeni

$$H = \frac{p^2}{2m} + \omega_0 \sum_{\vec{q}} \vec{b}_{\vec{q}}^\dagger \vec{b}_{\vec{q}} + \sum_{\vec{q}} \frac{M_0}{\sqrt{V}} \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}}{|\vec{q}|} (\vec{b}_{\vec{q}} + \vec{b}_{-\vec{q}}^\dagger) \quad (5.1)$$

$$M_0 = \frac{4\pi\alpha\hbar(\hbar\omega_0)^{3/2}}{\sqrt{2m}}, \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar} \left(\frac{m}{2\hbar\omega_0} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right)$$

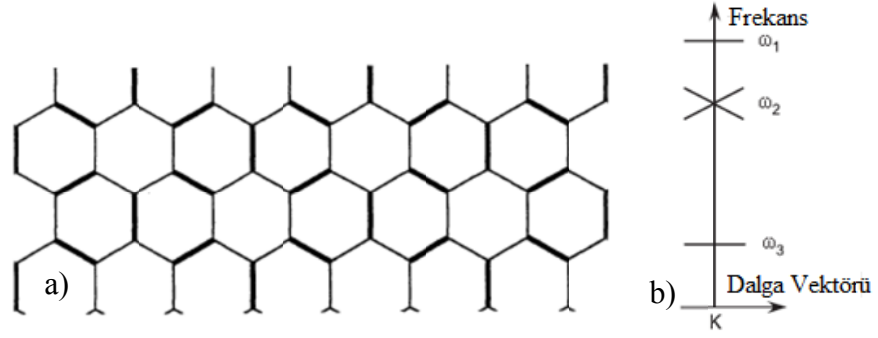
ile verilir. Burada m pertürbe olmamış elektronun kütlesidir. Bu model Γ noktasında enerji minimumuna ve izotropik etkin kütleye sahip yarı-iletkenlerin iletim bandlarındaki bazı durumlara ve iyonik katılara uygulanabilir. Diğer simetri noktaları için ise bu model, bandların dejenereliği ve etkin kütledeki anizotropi hesaba katılarak daha da genişletilebilir (Mahan 1990). Denklem 5.1'deki α , elektron-fonon çiftlenim sabiti olarak tanımlanır ve materyale göre ~ 0.01 ile ~ 10 aralığında değerler alır (Kartheuser 1972). Fröhlich Hamiltonyeninin tam olarak çözmek mümkün değildir. Polaron teorisinde, α sabitinin değerine göre farklı yaklaşım teknikleri uygulanır. Zayıf ve orta düzey çiftlenim bölgesi için kanonik dönüşüm tekniklerini (Low vd. 1953), yol integraline dayanan varyasyon prensibini (Feynmann 1953) ve pertürbasyon teorisini (Brillouin-Wigner ve Rayleigh-Schrödinger) kullanan yaklaşımlar uygulanırken, güçlü çiftlenim bölgesi için Landau ve Pekar'ın geliştirdiği güçlü çiftlenim teorisi kullanılır (Landau ve Pekar 1948).

Grafenin keşfedilmesiyle (Novoselov vd. 2004, 2005) birlikte elektron-fonon etkileşmesi üzerine birçok çalışma yapılmıştır (Lazzeri vd. 2005, 2006, 2008, Pisana vd. 2007, Park vd. 2007, Yan vd. 2007, Calandra vd. 2007, Basko 2007a,b, Goerbig vd. 2007, Samsonidze vd. 2007, Stauber ve Peres 2008, Stauber vd. 2008, Basko ve Aleiner 2008, Mariani ve Oppen 2008, 2010, Faugeras vd. 2009, Stonjanovic vd. 2010, Carbotte vd. 2010, Hwang vd. 2010, Li vd. 2012, Araujo vd. 2012, Badalyan ve Peeters 2012,

Kandemir ve Mogulkoc 2012, Krastajić ve Peeters 2012, Zhu vd. 2012, Kandemir 2013). Γ noktası civarındaki iki katlı dejenere optik fononlar ile elektronların etkileşmesi Dirac noktalarında bir enerji aralığına sebep olmamakla birlikte (Dubay ve Kresse 2003, Pisana vd. 2007), vadiler arası – bandlar arası ve vadiler arası – band içi saçılmalara önemli katkılar getirir (Rana vd. 2009). Bu fonon modları, iki alt örgünün (A ve B) farklı fazlı düzlem içi yer değiştirmelerini içermesi sebebiyle sadece K (K') noktalarını kaydıran bir etki gösterirler. Bundan dolayı bandlar hala Dirac konileri ile tasvir etmek mümkündür (Pisana vd. 2007). Grafenin yarı-metal (sıfır – aralıklı yarı iletken) olması sebebiyle elektron- E_{2g} fonon etkileşmesi için Dirac konileri birbirlerinden bağımsız olarak ele alınamazlar. Tek band yaklaşımları sadece bandlar arası geçişi dikkate alır ve enerji aralığının olup olmasını göz ardı eder. Bu nedenle π (π^*) değerlik (iletim) bandından π^* (π) iletim (değerlik) bandına elektron (deşik) geçişi ihmal edilir.

Γ noktası civarında lineer davranan iki akustik fonon modunun katkılarına bakmak da mümkündür. Akustik fononlar optik olanlara göre daha düşük enerjiye sahip olmakla birlikte optik fononlar ile benzer etkiler gösterirler.

Öte yandan, elektron ile en yüksek frekanslı A_{1g} fononunun etkileşmesi Kekulé distorsiyonuna neden olmakla birlikte aralık oluşumundan sorumlu mekanizmalardan birisi olarak bilinir (Samsonidze vd. 2007). Kekulé distorsiyonu, klasik benzen molekülünde olduğu gibi kısa ve uzun bağların değiştiği hegzagon ağından oluşur. Bu etkinin grafenin enerji spektrumuna olan katkısı daha önce teorik olarak incelenmemiştir. Elektron – A_{1g} fononu etkileşmesinden kaynaklanan aralık oluşumuna ait niceliksel bir tartışma ilk olarak Samsonidze vd. (2007)'nin çalışmasında verilmiştir. Bu çalışmada, 10 meV'luk mini aralık oluşumundan ve Kohn anomaliden (Piscanec vd. 2004, Samsonidze vd. 2007) sorumlu elektron-fonon çiftlenimi, oda sıcaklığında sıkı-bağ yaklaşımı dikkate alınarak incelenmiştir.



Şekil 5.1.a. Kekulé distorsiyonu, b. A_{1g} fonon modları (Ando ve Suzuura 2008)

Grafen tabanlı nano yapılarda aralık oluşumu ve aralığın kontrolü günümüz yoğun madde fiziğinin önemli araştırma alanlarından birini oluşturmaktadır. Buna bağlı olarak aralık oluşumu, zorlanma (strain) (Zhen Hua vd. 2008, Farjam ve Rafii-Tabar 2008, Sung-Hoon vd. 2011) ve alttaşı etkisi (Zhou vd. 2007, 2008, Calandra vd. 2007) ile gerçekleştirilebilir.

Elektron- A_{1g} fonon çiftlenimine ek olarak grafen düzlemine dik bir magnetik alan uygulandığında hem Kekulé tipi distorsiyonun indüklediği bir aralığı ve hem de magnetik alanın sebep olduğu vadi yarılmalarını incelemek mümkündür. Bu suretle $n=0$ durumundaki dört katlı dejenerelik kalkmış olur. Magnetik alanın grafenin elektronik spektrumu üzerine etkisinin ve relativistik Landau seviyelerinin belirlenmesi ile ilgili hem teorik hem de deneysel çalışmalar yapılmıştır (Sadowski vd. 2006, Li ve Andrei 2007). Grafenin kendine özgü kuantum Hall rejiminde altörgü ve spin dejenereliğinin kalkması ile oluşan ekstra Hall platolarından (Zhang vd. 2006, Jiang vd. 2007a) elektron-fonon çiftleniminin sorumlu olabileceği de tartışılmaktadır (Li vd. 2012, Wang vd. 2012). Literatürde ayrıca, magnetik alanın elektron-fonon çiftlenimi üzerine etkisine dair önemli ölçüde çalışma mevcuttur (Faugeras vd. 2009, Pound vd. 2011, Wang vd. 2011, Pound vd. 2012, Goler vd. 2012, Zhu vd. 2012, Li vd. 2012). Magnetik alan tek başına aralık açmamak ile birlikte, elektron-elektron etkileşmesi, elektron-fonon çiftlenimi ve zorlanmanın indüklediği bir deformasyon enerji aralığına sebep olabilir (Nomura ve MacDonald 2006, Jiang vd. 2007b, Yang 2007, Sarma ve Yang 2009, Pereira 2009). Magnetik alan ile lineer değişen $n=0$ düzeyindeki bir aralığın spin serbestlik derecesinden kaynaklandığını iddia eden çalışmalar da mevcuttur (Giesbers vd. 2007, Giesbers vd. 2009). Fuchs ve Lederer (2007) ise çalışmalarında düzlem dışı

örgü distorsiyonun ve magnetik alanın olduğu durumda enerji aralığının magnetik alan ile lineer değiştiğini tespit etmişler. Elektron-elektron etkileşmesinden kaynaklanan aralığın tartışıldığı bazı çalışmalarda (Nomura ve MacDonald 2006, Jiang vd. 2007b, Henriksen vd. 2010) da aralığın magnetik alanın karekökü ile değiştiği vurgulanmaktadır. Diğer bir çalışmada (Gusynin vd. 2006) ise uzun erimli elektron etkileşmelerinin magnetik kataliz olarak isimlendirilen egzitonik bir vadi aralığına sebep olduğu iddia edilmiştir.

Magnetik alan altında elektron- A_{1g} fonon çiftleniminin sebep olduğu $\sqrt{B}$ bağımlı aralığın ve vadi yarılmasının tartışıldığı, doktora tezi kapsamında yapılan bu çalışma dışında literatürde henüz mevcut değildir.

5.1 Elektron – Optik Fonon (E_{2g}) Etkileşmesi

E_{2g} optik fononu, komşu karbon atomları arasındaki mesafeyi bozar (distort) ve karbon atomları arasındaki rezonans integralini (Bölüm 3) değiştirerek band yapısını modifiye eder. $\vec{u}_A(\vec{R}_A)$ ve $\vec{u}_B(\vec{R}_B)$, sırasıyla A ve B sitelerindeki örgü yer değiştirmelerine karşılık gelmekle birlikte, $\vec{R}_A$ ve $\vec{R}_A - \vec{\tau}_l$ ’deki atomlar arasındaki rezonans integrali (Denklem 3.29)

$$-\frac{\partial \gamma_0(b)}{\partial b} \left[\left| \vec{\tau}_l + \vec{u}_A(\vec{R}_A) - \vec{u}_B(\vec{R}_A - \vec{\tau}_l) \right| - b \right] = -\frac{\partial \gamma_0(b)}{\partial b} \frac{1}{b} \vec{\tau}_l \cdot \left[\vec{u}_A(\vec{R}_A) - \vec{u}_B(\vec{R}_A - \vec{\tau}_l) \right] \quad (5.2)$$

olarak değişim gösterir. Burada, $b = |\vec{\tau}_l| = a / \sqrt{3}$ şeklinde tanımlanır. Bu değişim Denklem 3.44’ün sağ tarafına ekstra bir terim olarak yansır. Bu ekstra terim Denklem 3.42’den yola çıkarak,

$$\begin{aligned} & \sum_l \sum_{\vec{R}_A} g(\vec{r}' - \vec{R}_A) \vec{a}(\vec{R}_A) \vec{b}(\vec{R}_A - \vec{\tau}_l)^\dagger \left[-\frac{\partial \gamma_0(b)}{\partial b} \right] \frac{1}{b} \vec{\tau}_l \cdot \left[\vec{u}_A(\vec{R}_A) - \vec{u}_B(\vec{R}_A - \vec{\tau}_l) \right] \vec{F}_B(\vec{r}) \\ &= \sum_l \begin{bmatrix} -\omega e^{i\eta} e^{-i\vec{K} \cdot \vec{\tau}_l} & 0 \\ 0 & e^{-i\eta} e^{-i\vec{K} \cdot \vec{\tau}_l} \end{bmatrix} \left[-\frac{\partial \gamma_0(b)}{\partial b} \right] \frac{1}{b} \vec{\tau}_l \cdot \left[\vec{u}_A(\vec{R}_A) - \vec{u}_B(\vec{R}_A - \vec{\tau}_l) \right] \vec{F}_B(\vec{r}) \end{aligned} \quad (5.3)$$

olarak hesaplanır. Optik fononlar için (Ishikawa ve Ando 2006) yer deęiřtirmeler

$$\vec{u}_A(\vec{r}) - \vec{u}_B(\vec{r} - \vec{\tau}_l) \approx \sqrt{2}\vec{u}(\vec{r}) \quad (5.4)$$

olmak kaydıyla, Denklem 5.2'deki ekstra terim

$$\sqrt{2} \frac{\beta\gamma}{b^2} \begin{bmatrix} u_y(\vec{r}) + iu_x(\vec{r}) & 0 \\ 0 & -u_y(\vec{r}) + iu_x(\vec{r}) \end{bmatrix} \vec{F}_B(\vec{r}) \quad (5.5)$$

řeklinde yazılabilir. Benzer iřlemleri dięer bileřen için de yapmak mümkündür. Sonuç olarak, K ve K' noktalarındaki etkileřme Hamiltonyenini

$$\begin{aligned} H_{e-p}^K &= -\sqrt{2} \frac{\beta\gamma}{b^2} \begin{bmatrix} 0 & u_y(\vec{r}) + iu_x(\vec{r}) \\ u_y(\vec{r}) - iu_x(\vec{r}) & 0 \end{bmatrix}, \\ H_{e-p}^{K'} &= -\sqrt{2} \frac{\beta\gamma}{b^2} \begin{bmatrix} 0 & u_y(\vec{r}) - iu_x(\vec{r}) \\ u_y(\vec{r}) + iu_x(\vec{r}) & 0 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (5.6)$$

olarak yazmak mümkündür. Böylelikle, grafenin düşük enerjili sürekli (continuum) modelinde toplam Hamiltoniyen

$$H = H_0 + \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \hbar\omega_{\mu}(\vec{q}) \vec{b}_{\vec{q}\mu}^{\dagger} \vec{b}_{\vec{q}\mu} + H_{e-p}^K \quad (5.7)$$

burada, $H_0 = v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{p}$ özdeęerleri $\varepsilon_{ks} = s\hbar v_F k$ ($s=\pm 1$, kiralite indisi) olan pertürbe olmamıř serbest durum Hamiltonyenidir. Bu Hamiltonyene ait serbest durum özketlerinin

$$\langle \vec{r} | \vec{k}s \rangle = \frac{1}{\sqrt{2L}} \begin{bmatrix} s \\ e^{i\theta(\vec{k})} \end{bmatrix} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (5.8)$$

oldukları kolayca gösterilebilir. Denklem 5.6'daki H_{e-p}^K terimi ise elektron-fonon etkileşme terimi olup,

$$H_{e-p}^K = -\sqrt{2} \frac{\beta\gamma}{a^2} \sum_{\mu} [\vec{\sigma} \times \vec{u}_{\mu}(\vec{r})]_z \quad (5.9)$$

şeklinde de ifade edilebilir. Burada, $\vec{u}_{\mu}(\vec{r})$ iki alt örgünün görelî yer değıştirmeleri

$$\vec{u}_{\mu}(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} \left[\frac{\hbar}{2NM_C\omega_{\mu}(q)} \right]^{1/2} (\vec{b}_{\vec{q}\mu} + \vec{b}_{\vec{q}\mu}^{\dagger}) \varepsilon_{\mu}(\vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \quad (5.10)$$

olarak dikkate alınır. Burada $\vec{b}_{\vec{q}\mu}^{\dagger} (\vec{b}_{\vec{q}\mu})$ optik fonon yaratıcı (yok edici) operatörleri iken $\mu=1$ (TO) ve 2 (LO), sırasıyla enine ve boyuna optik fonon modlarını ifade eden indistir. Bu fononlara ait dağınım ise $\omega_{\mu}(\vec{q}) = \omega_{\Gamma}(0)R_{\mu}(qa_{c-c})$ olmak üzere, boyutsuz kısım $R_{\mu}(qa_{c-c}) = [1 - r_{\mu}(qa_{c-c})]^{1/2}$ ve $\omega_{\Gamma}(0) = 0.196 \text{ eV}$ olarak tanımlanır. Burada r_1 ve r_2 , sırasıyla 0.1138 ve 0.01979 olarak bulunur (Stauber vd. 2008). Denklem 5.10'daki N , birim hücre sayısı, M_C karbon atomunun kütlesi ve $\beta = -d \ln J_0 / d \ln a_{c-c}$ şeklindedir. Burada J_0 , en yakın komşuluklar arası rezonans integrali olup değeri yaklaşık olarak 2.77 eV mertebesindedir (Suzuura ve Ando 2008). İlgili fonon modlarına ait kutuplanma vektörlerinin ise $\varepsilon_1(\vec{q}) = i(q_x, q_y)/2$ ve $\varepsilon_2(\vec{q}) = i(-q_y, q_x)/2$ oldukları kolaylıkla gösterilebilir. Denklem 5.9, Denklem 5.10'da yerine konulursa, etkileşme terimi

$$H_{e-p}^K = \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} [\tilde{M}_{\mu}^K(\vec{q}) \vec{b}_{\vec{q}\mu} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} + H.C.] \quad (5.11)$$

şeklinde yazılabilir. Burada, $\tilde{M}_{\mu}^K(\vec{q})$, etkileşmeye ait momentum bağımlı matris elemanıdır ve $\tilde{M}_{\mu}^K(\vec{q}) = \bar{M}_{\mu}^K(\vec{q}) M_{\mu}(\vec{q})$ olarak ifade edilir. Matris elemanı,

$$M_{\mu}(\vec{q}) = \begin{bmatrix} 0 & M_{BA}e^{-i\phi(\vec{q})} \\ M_{AB}e^{i\phi(\vec{q})} & 0 \end{bmatrix} \quad (5.12)$$

olarak ifade edilir. Burada LO (TO) fonon modları için $M_{AB}=+1(i)$ ve $M_{BA}=-1(i)$ şeklindedir (Tse ve Das Sarma 2007). $\phi(\vec{q})$, $\vec{q}$ dalga vektörlü fononun azimutal açısıdır. $\bar{M}_{\mu}^K(\vec{q}) = \bar{M} / \sqrt{NR_{\mu}(qa_{c-c})}$ olarak tanımlanır iken $\bar{M} = 3a_0q_0J_0 / \sqrt{2}$ ve $a_0 = (\hbar / 2M_c\omega_F(0))^{1/2}$ şeklindedir. Burada $q_0 = (\partial J_0 / \partial a) / J_0$ ifadesinin 2 veya 2.5 Å⁻¹ civarında olduğu tahmin edilmektedir (Pietronero vd. 1980, Jishi vd. 1993).

Denklem 5.7'yi çözebilmek için Lee-Low-Pines (LLP) metoduna (Lee vd. 1953) dayanan bir köşegenleştirme süreci dikkate alınmıştır (Kandemir 2013). LLP metodu toplam Hamiltonyene iki üniter dönüşümün uygulandığı bir köşegenleştirme prosedürü olarak bilinir. Bu dönüşümlerden biri, toplam sistemin momentumunun hareket sabiti olduğu gerçeğine dayanan ve elektron koordinatlarını yok eden bir karaktere sahiptir. İkinci üniter dönüşüm ise yer değiştirmiş – salıncı dönüşümü (Displaced – Oscillator Transformation) olarak da bilinmekle beraber fonon koordinatları üzerine etkiyen ve fonon operatörlerini bilineer forma dönüştüren bir süreçtir. Grafen $k=0$ noktasında elektron-deşik dejenereliğine sahiptir. Bu nedenle, grafenin aralıksız (gapless) band yapısına uygun olarak kiral polaronun taban durumu vektörü için

$$|\phi\rangle_{pol}^s = \sum_{\lambda'} \alpha_s^{s'} |s'\vec{k}\rangle \otimes U_1 U_2^{ss'} |0\rangle_{ph} \quad (5.13)$$

şeklinde bir önermede bulunulur (Kandemir 2013) ve bu durum $H|\Phi\rangle_{pol}^s = E_{\lambda}|\Phi\rangle_{pol}^s$ şeklinde bir özdeğer denklemini sağlar. Denklem 5.13'de $|0\rangle_{ph}$ vakum durumuna karşılık gelir. Polaronik dalga fonksiyonu $|+\vec{k}\rangle$ ve $|-\vec{k}\rangle$ durumlarının lineer kombinasyonu olması nedeniyle, $\alpha_s^{s'}|s'\vec{k}\rangle$, $\alpha_s^{s'}$ uygun kesirli genliği ile tanımlanan elektronik durum vektörüne karşılık gelir. Diğer bir ifadeyle, $|\pm\vec{k}\rangle$ serbest durumlara

karşılık gelirken, $|\phi\rangle_{pol}^{\pm}$ elektron-fonon etkileşmesinden kaynaklanan pertürbe durumlara karşılık gelir. Elektron koordinatlarını ortadan kaldıran ilk üniter dönüşüm

$$U_1 = \exp \left[-i\vec{r} \cdot \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \vec{q} \vec{b}_{\vec{q}\mu}^{\dagger} \vec{b}_{\vec{q}\mu} \right] \quad (5.14)$$

şeklinde tanımlanır. Üniter dönüşüm altında fonon yaratıcı (yok edici) ve momonetum operatörünün dönüşmüş biçimleri sırasıyla, $\tilde{b}_{\vec{q}\mu} = b_{\vec{q}\mu} \exp[-i\vec{q} \cdot \vec{r}]$ ($\tilde{b}_{\vec{q}\mu}^{\dagger} = b_{\vec{q}\mu}^{\dagger} \exp[i\vec{q} \cdot \vec{r}]$) ve $\tilde{\vec{p}} = \vec{p} - \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \hbar \vec{q} \vec{b}_{\vec{q}\mu}^{\dagger} \vec{b}_{\vec{q}\mu}$ olarak verilir. İlk üniter dönüşüm sonucunda Denklem 5.7,

$$\tilde{H} = v_F \vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \hbar \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \vec{q} \vec{b}_{\vec{q}\mu}^{\dagger} \vec{b}_{\vec{q}\mu} \right) + \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{\mu}(\vec{q}) \vec{b}_{\vec{q}\mu}^{\dagger} \vec{b}_{\vec{q}\mu} - \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \left[\tilde{M}_{\mu}^K(\vec{q}) \vec{b}_{\vec{q}\mu} + H.C. \right] \quad (5.15)$$

olarak dönüşür. Denklem 5.15 fonon koordinatlarınca hâlen köşegen değildir. Bunun için ikinci bir üniter dönüşüm önerilir. İkinci üniter LLP dönüşümü

$$U_2^{ss'} = \exp \left\{ \sum_{\vec{q}} \left[\bar{M}_{0\mu}^*(\vec{q}) \langle s' \vec{k} | M_{\mu}^{\dagger}(\vec{q}) | s \vec{k} \rangle \vec{b}_{\vec{q}\mu}^{\dagger} - H.C. \right] \right\} \quad (5.16)$$

olarak ifade edilir ve yer değiştirmiş-salınıcı dönüşümü olarak bilinir. Genlik $\bar{M}_{0\mu}(\vec{q}) = \bar{M}_{0\mu}^K(\vec{q}) / \hbar \omega_{\mu}(\vec{q})$ şeklinde ifade edilirken, yaratıcı (yok edici) operatörler $\tilde{b}_{\vec{q}\mu} = b_{\vec{q}\mu} + \bar{M}_{0\mu}^*(\vec{q}) \langle s' \vec{k} | M_{\mu}^{\dagger}(\vec{q}) | s \vec{k} \rangle$ ($\tilde{b}_{\vec{q}\mu}^{\dagger} = b_{\vec{q}\mu}^{\dagger} + \bar{M}_{0\mu}(\vec{q}) \langle s' \vec{k} | M_{\mu}(\vec{q}) | s \vec{k} \rangle$) olarak dönüşürler. Sonuç olarak, $U_2^{\lambda\lambda'}$ dönüşümü altında Hamiltonyen $\bar{H} = H^0 + H_1$ olarak dönüşür. Burada H^0 ve H_1 , sırasıyla

$$\begin{aligned}
H^0 = & v_F \vec{\sigma} \cdot \left[\vec{p} - \hbar \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \vec{q} |\bar{M}_{0\mu}(\vec{q})|^2 \left| \langle s' \vec{k} | M_{\mu}^{\dagger}(\vec{q}) | s \vec{k} \rangle \right|^2 \right] \\
& + \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{\mu}(\vec{q}) |\bar{M}_{0\mu}(\vec{q})|^2 \left| \langle s' \vec{k} | M_{\mu}^{\dagger}(\vec{q}) | s \vec{k} \rangle \right|^2 \\
& - \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \left[\tilde{M}_{\mu}^K(\vec{q}) \bar{M}_{0\mu}^*(\vec{q}) \langle s' \vec{k} | M_{\mu}^{\dagger}(\vec{q}) | s \vec{k} \rangle + H.C. \right] \\
& + \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \left[\hbar \omega_{\mu}(\vec{q}) - \hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{q} \right] \bar{b}_{\vec{q}\mu}^{\dagger} \bar{b}_{\vec{q}\mu}
\end{aligned} \tag{5.17}$$

ve

$$H_1 = \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \left[\tilde{M}_{\mu}^K(\vec{q}) + \left[\hbar \omega_{\mu}(\vec{q}) - \hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{q} \right] \bar{M}_{0\mu}(\vec{q}) \langle s' \vec{k} | M_{\mu}(\vec{q}) | s \vec{k} \rangle \bar{b}_{\vec{q}\mu} + H.C. \right] \tag{5.18}$$

ile verilir. Denklem 5.17 ve Denklem 5.18'e fonon vakum durumları uygulandığında katkı H^0 ifadesinin köşegen kısmından gelir. Bu durumda efektif Hamiltonyen

$$\begin{aligned}
\bar{H} = & v_F \vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \hbar \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \vec{q} |\bar{M}_{0\mu}(\vec{q})|^2 \left| \langle s' \vec{k} | M_{\mu}^{\dagger}(\vec{q}) | s \vec{k} \rangle \right|^2 \right) \\
& + \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{\mu}(\vec{q}) |\bar{M}_{0\mu}(\vec{q})|^2 \left| \langle s' \vec{k} | M_{\mu}^{\dagger}(\vec{q}) | s \vec{k} \rangle \right|^2 \\
& - \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \left[M_{\mu}(\vec{q}) |\bar{M}_{0\mu}(\vec{q})|^2 \left| \langle s' \vec{k} | M_{\mu}^{\dagger}(\vec{q}) | s \vec{k} \rangle \right|^2 + H.C. \right]
\end{aligned} \tag{5.19}$$

olarak elde edilir. Denkem 5.13'deki önermeyi göz önünde bulundurarak ve s' üzerindeki toplamları alarak $\bar{H} |\Phi\rangle_{pol}^s = E_{\lambda} |\Phi\rangle_{pol}^s$ özdeğer denkleminde ulaşılır. Sonuç olarak, iç çarpımlar yapılırsa $\alpha_{\pm}^+$ ve $\alpha_{\pm}^-$ katsayıları için iki denkleme ulaşılır. Bu denklemler matris formunda

$$\begin{bmatrix} E_{\pm} - \hbar v_F k + \hbar v_F \Sigma_{++}(\vec{k}) + \Sigma_{++}^0(\vec{k}) & \hbar v_F \Sigma_{+-}(\vec{k}) + 2\Sigma_{+-}^0(\vec{k}) \\ \hbar v_F \Sigma_{-+}(\vec{k}) + 2\Sigma_{-+}^0(\vec{k}) & E_{\pm} + \hbar v_F k + \hbar v_F \Sigma_{--}(\vec{k}) + \Sigma_{--}^0(\vec{k}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{\pm}^+ \\ \alpha_{\pm}^- \end{bmatrix} = 0 \tag{5.20}$$

şeklinde yazılır. İlgili matris elemanları ise

$$\begin{aligned}
\left. \begin{aligned} \Sigma_{++}(\vec{k}) \\ \Sigma_{+-}(\vec{k}) \end{aligned} \right\} &= \frac{1}{2} \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} |\bar{M}_{0\mu}(\vec{q})|^2 [1 + s_{\mu} \cos 2(\theta - \phi)] \begin{cases} q \cos(\theta - \phi) \\ iq \sin(\theta - \phi) \end{cases} \\
\Sigma_{ss'}^0(\vec{k}) &= \frac{1}{2} \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} |\bar{M}_{0\mu}(\vec{q})|^2 \hbar \omega_{\mu}(\vec{q}) [1 + s_{\mu} s_{s'} \cos 2(\theta - \phi)]
\end{aligned} \tag{5.21}$$

olarak elde edilir. Burada $\Sigma_{--} = -\Sigma_{++}$ ve $\Sigma_{-+} = \Sigma_{+-}^*$ şeklindedir. Denklem 5.21'deki $\theta(\phi)$, $\vec{k}(\vec{q})$ momentumlarına ait azimutal açılarıdır. s_{μ} ise boyuna (enine) modlar için +1 (-1) değer alır. Denklem 5.21'deki q toplamı integrale $\left(\sum_{\vec{q}} \rightarrow (S/4\pi^2) \int d^2\vec{q}\right)$ dönüştürülürse, q integralinden dolayı $\Sigma_{ss'}(\vec{k})$ terimlerinin katkısı olmazken, $\Sigma_{ss'}^0(\vec{k})$ terimleri katkı verir. Burada $S=L^2=N\Omega_0$ sistemin alanı olmakla birlikte, $\Omega_0=3\sqrt{3}a^2/2$ birim hücrenin alanıdır. $\alpha_{\pm}^+$ ve $\alpha_{\pm}^-$ katsayılarının aşikâr (trivial) olmayan çözümünü bulmak için Denklem 5.20'deki katsayılar determinantı sıfıra eşitlenir ve ikinci dereceden bir denkleme ulaşılır. Bu denklem analitik olarak çözüldüğünde, kapalı formda k 'nın fonksiyonu olarak

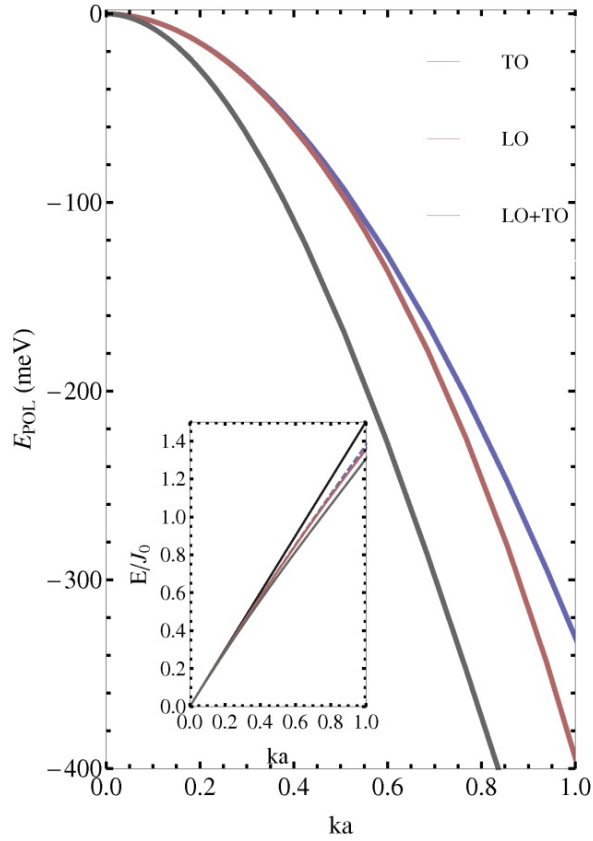
$$E_{\pm} = \pm \left\{ (\hbar v_F k)^2 + 4 \left[\Sigma_{\pm\mp}^0(\vec{k}) \right]^2 \right\}^{1/2} - \left| \Sigma_{\pm\pm}^0(\vec{k}) \right| \tag{5.22}$$

ifadesine ulaşılır. Denklem 5.22'deki son terim band içi geçişten kaynaklanırken, parantez içindeki ikinci terim bandlar arası geçişe sebep olan, değerlik ve iletim bandları arasındaki çiftlenimden kaynaklanır. Nitekim kiral polaron dağılımı değerlik ve iletim bandlarının kısmi karışımlarının katkısından meydana gelir. Denklem 5.22'deki integraller alınırken üst sınırın getirdiği ıraksaklıklardan kurtulabilmek için değeri $2k$ ($q \in [0, 2k]$) olan bir üst kesilim (cut-off) frekansı tanımlanır ve böylece integral sonlu olur. Sonuç olarak, k -bağımlı katkı

$$\Sigma_{ss'}^0(\vec{k}) = \sum_{\mu} \frac{3\sqrt{3}}{4\pi r_{\mu}} J_0 \alpha(0) \ln \left[\frac{1}{1 - r_{\mu} (2\bar{k}_0)^2} \right] \tag{5.23}$$

olarak elde edilir. Burada $\alpha(0) = |\bar{M}|^2 / 4J_0\hbar\omega_T(0)$ olarak ve boyutsuz dalga vektörü $\bar{k}_0 = ka_{c-c}$ şeklinde tanımlanır. $\alpha(0)$, $q_0 = 2(2.5) \text{ \AA}^{-1}$ seçimine bağlı olarak 0.054 (0.089) mertebesindedir.

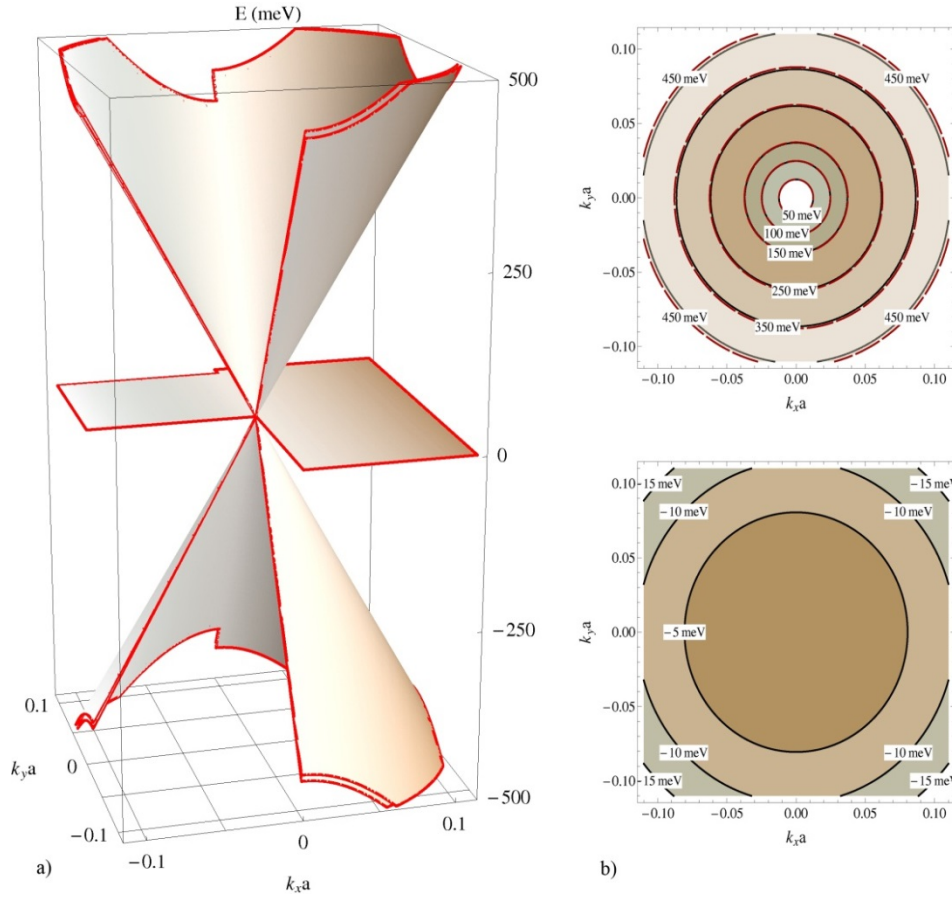
Grafende kiral polaron oluşumu ile ilgili niceliksel bir fikir elde edebilmek için polaron öz-enerjisine bakılır. Polaron öz-enerjisi, öz-tuzaklanmış polaron durumu ile serbest elektron (deşik) durumu arasındaki ayrımın bir ölçüsüdür ve Denklem 5.22'den serbest durum dağılım ifadesi ($\varepsilon_{ks} = s\varepsilon_k$) çıkarılarak elde edilir. Öz-enerjinin negatif çıkması grafende kararlı polaron oluşumunun varlığı için önemli bir kıstastır.



Şekil 5.2 Polaron taban durumu enerjisi (Optik Fononlar)

Denklem 5.22'nin analizini şekil 5.2'de Fermi hızı renormalizasyonu ve polaron öz-enerjisi olarak görmek mümkündür. şekil 5.2'de görüldüğü üzere polaron öz-enerjisi artan $\bar{k}_0$ değerleri ile artmaktadır. Şeklin içindeki ufak grafikte görüldüğü üzere

elektron-fonon çiftlenimi Dirac hızını renormalize eder (yukarıdan aşağıya ilk eğri elektron-fonon etkileşmesinin olmadığı durumu temsil etmektedir). Analizi daha açık bir şekilde görebilmek adına şekil 5.3’de, elektron (deşik)-fonon etkileşmesinin olduğu durumda ve olmadığı durumda $\bar{k}_0$ ’a bağlı olarak elektron-deşik band dağınımı gösterilmiştir. Şekil 5.3a’da iç koni elektron-fonon etkileşmesinin olmadığı durumu gösterirken dış koni etkileşmenin varlığı durumundaki band dağınımını gösterir. Şekil 5.3b’de üst panelde siyah düz ve kırmızı kesikli konturlar sırasıyla etkileşmesiz (undressed) ve etkileşmeli (dressed) elektron enerjilerine karşılık gelirken, alt panelde siyah düz konturlar bu enerjilerin farkını gösterir.



Şekil 5.3.a. Elektron-deşik band dağınımı, b. Band dağınımına ait konturlar

Fonon dağınımının göz ardı edildiği küçük k 'lar için Denklem 5.23'ü tekrar yazmak mümkündür. Logaritmik ifade kuvvet serisi ile açılıp Denklem 5.22'de yerine konulduğu takdirde

$$\bar{E}_{\pm} = \pm \bar{k}_0 \left\{ 1 + 4 \left[\frac{4\sqrt{3}}{\pi} \alpha(0) \bar{k}_0 \right]^2 \right\}^{1/2} - \frac{4\sqrt{3}}{\pi} \alpha(0) \bar{k}_0^2 \quad (5.24)$$

ifadesi elde edilir. Bu durumda dağılım r_{μ}' 'den bağımsız hale gelir. Burada $\bar{E}_{\pm} = a_{c-c} E_{\pm} / \hbar v_F$ olarak tanımlanır. Bandlar-arası geçiş teriminin varlığında Denklem 5.22'de kök içindeki ikinci terimin, standart öz-enerji hesabından temel farkı dejenere optik fononların band-içi geçişini de dikkate almasıdır. Bu hesaplar sonucunda Dirac konilerinin simetrisi, yani elektron-deşik simetrisi korunmuştur. Denklem 5.24'ü $\bar{E}_{\lambda} = \lambda \hbar v_F (\bar{k}_0) \bar{k}_0$ formunda tekrar düzenlemek mümkündür. Bunun sonucunda renormalize Fermi hızı

$$\tilde{v}_F(\bar{k}_0) = v_F \left[\sqrt{1 + 4\tilde{\alpha}^2(\bar{k}_0)} \mp \tilde{\alpha}(\bar{k}_0) \right] \quad (5.25)$$

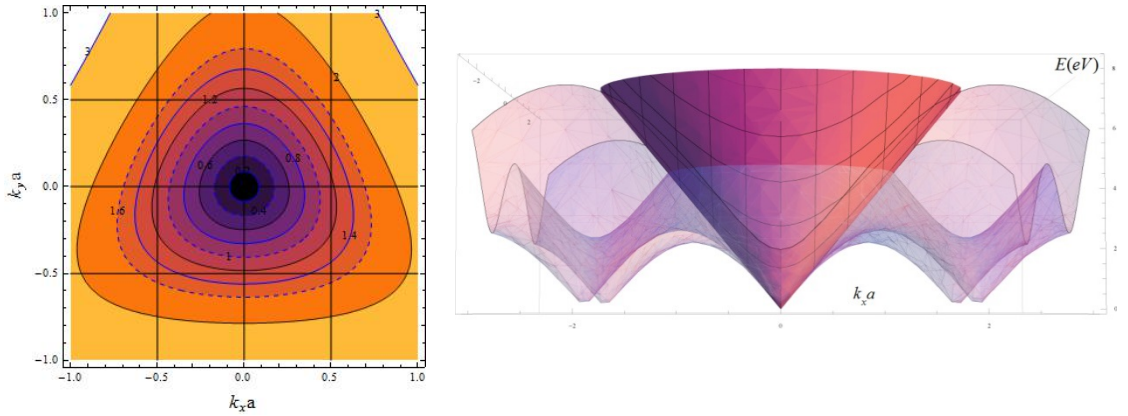
şeklinde ifade edilir. Bununla birlikte, Kuantum Renk Dinamiğinde (QCD) olduğu gibi (Griffiths 1987) değişen (running) çiftlenim sabiti de tanımlamak mümkündür. k 'nın fonksiyonu olarak değişen çiftlenim sabiti

$$\tilde{\alpha}(\bar{k}_0) = \frac{4\sqrt{3}}{\pi} \tilde{\alpha}(0) \bar{k}_0 \quad (5.26)$$

olarak tanımlanır. Fermi hızının değişim yüzdesini $[\tilde{v}_F(\bar{k}_0) - v_F] / \tilde{v}_F(\bar{k}_0)$ ifadesinde hesap etmek mümkündür. Grafenin etkin band hızı v_F , $\bar{k}_0 = 0.05$ ve $\bar{k}_0 = 0.1$ için enerjiye bağlı olarak sırasıyla, %1-%2 oranında azalır. Birkaç deneysel ve teorik çalışma dışında, Fermi hızı renormalizasyonuna dayanan araştırma yoktur. Bir çalışmada (Park vd. 2007), elektron katkılamanın $4 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ olduğu durum için Fermi hızı %4-%8 oranında azaldığı gözlenmiştir. Diğer bir çalışmada ise (Krastajić ve Peeters 2012), elektron konsantrasyonuna bağlı olarak bir plasmasonik band için %1-%3 oranında azaldığı gözlenmiştir. Park vd. (2007)'deki sonuçlar ile yukarıda elde edilen

sonuçlar arasındaki uyumsuzluğun sebebi incelenen enerji aralığıdır. $\bar{k}_0 = 0.05(0.1)$ değerleri 200 meV 'e (400 meV) karşılık gelmektedir, oysaki $4 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 'lik bir katkılama 600 meV 'lik bir Fermi düzeyine karşılık gelir. Bu enerji yukarıda izlenen hesap tekniğinin izin verdiği enerji aralığının dışındadır. LLP teorisine dayanan hesaplama tekniği sadece fonon rezonansının altında ($E < \hbar\omega_T(0) = 196 \text{ meV}$) geçerlidir.

İzlenen hesap tekniğinin sağladığı yaklaşımın geçerliliği için iki kısıtlama söz konusudur. Bunlardan ilki, kullanılan hesap tekniği sürekli (continuum) bir yaklaşım olması nedeniyle grafen için 1 eV civarında ve altında geçerlidir. Daha yüksek enerjiler daha yüksek k dalga vektörlerini gerektirir ve bu durumda grafenin band yapısı konik formdan biraz farklılık gösterir. Daha yüksek k vektörlerini de içerecek şekilde genişletilen hesap tekniğinde üçgensel eğrilik (trigonal warp) etkisi de göz önünde bulundurulmalıdır (Şekil 5.4). İkinci kısıtlama ise enerji aralığıdır. Yapılan çalışmada elektron enerji aralığı için fonon rezonansı ($0 < E < \hbar\omega_T(0)$) civarı dikkate alınmıştır. Bu eşğin üzerindeki ($E > \hbar\omega_T(0)$), durumları inceleyebilmek için Tamm-Dancoff yaklaşımının relativistik muadili dikkate alınmalıdır.



Şekil 5.4 Üçgensel eğrilik

5.2 Elektron – Akustik Fonon Etkileşmesi

Akustik moda ait deformasyon potansiyelini hesaplayabilmek için Denklem 5.2'deki ifade

$$\vec{u}_A(\vec{R}_A) - \vec{u}_B(\vec{R}_A - \vec{\tau}_l) = \kappa (\vec{\tau}_l \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} \quad (5.27)$$

olarak değiştirilir (Suzuura ve Ando 2002). Burada, Değerlik-Kuvvet Alanı metodu için $\kappa \sim 1/3$ civarındadır (Harrison 1980). Bu durumda, Denklem 5.5

$$\frac{3\kappa\beta}{4}\gamma_0 \begin{bmatrix} e^{i\eta} \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) (u_x + iu_y) & 0 \\ 0 & -e^{-i\eta} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) (u_x - iu_y) \end{bmatrix} \vec{F}_B(\vec{r}) \quad (5.28)$$

olarak yazılır. Sonuç olarak, K ve K' noktalarındaki etkileşme Hamiltoniyeni

$$\begin{aligned} H_{e-p}^K &= -\frac{3\kappa\beta}{b^2}\gamma_0 \begin{bmatrix} 0 & u_{xx}(\vec{r}) - u_{yy}(\vec{r}) + 2iu_{xy}(\vec{r}) \\ u_{xx}(\vec{r}) - u_{yy}(\vec{r}) - 2iu_{xy}(\vec{r}) & 0 \end{bmatrix}, \\ H_{e-p}^{K'} &= -\frac{3\kappa\beta}{b^2}\gamma_0 \begin{bmatrix} 0 & -u_{xx}(\vec{r}) + u_{yy}(\vec{r}) + 2iu_{xy}(\vec{r}) \\ -u_{xx}(\vec{r}) + u_{yy}(\vec{r}) - 2iu_{xy}(\vec{r}) & 0 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (5.29)$$

şeklinde ifade edilir. Burada matris elemanları, yer değiştirme vektörü ve kutuplanma vektörleri

$$\begin{aligned}
u_{xx} &= \frac{\partial u_x}{\partial y}, \quad u_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y}, \quad 2u_{xy} = \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \\
\vec{u}_\mu(\vec{r}) &= \sum_{\vec{q}} \left[\frac{\hbar}{2NM_c\omega_\mu(q)} \right]^{1/2} (\vec{b}_{\vec{q}\mu} + \vec{b}_{\vec{q}\mu}^\dagger) \varepsilon_\mu(\vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \\
\varepsilon_{LA}(\vec{q}) &= i [\cos \phi(\vec{q}), \sin \phi(\vec{q})] = \frac{i}{q} (q_x, q_y) \\
\varepsilon_{TA}(\vec{q}) &= i [-\sin \phi(\vec{q}), \cos \phi(\vec{q})] = \frac{i}{q} (-q_y, q_x), \quad q = |\vec{q}|
\end{aligned} \tag{5.30}$$

ile verilir. Burada $\mu = 1$ ve 2 sırası ile LA ve TA fononlarını etiketler. Bu durumda, toplam Hamiltonyen

$$H = H_0 + \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_\mu(\vec{q}) \vec{b}_{\vec{q}\mu}^\dagger \vec{b}_{\vec{q}\mu} + \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} [\tilde{M}_\mu^K(\vec{q}) \vec{b}_{\vec{q}\mu} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} + H.C.] \tag{5.31}$$

olarak yazılabilir. Burada, $\tilde{M}_\mu^K(\vec{q})$, etkileşmeye ait momentum bağımlı matris elemanıdır ve $\tilde{M}_\mu^K(\vec{q}) = \bar{M}_\mu^K(\vec{q}) M_\mu(\vec{q})$ şeklindedir. Matris elemanı,

$$M_\mu(\vec{q}) = \begin{bmatrix} 0 & M_{BA}(\bar{q}_x + i\bar{q}_y) e^{i\phi(\vec{q})} \\ M_{AB}(\bar{q}_x - i\bar{q}_y) e^{i\phi(\vec{q})} & 0 \end{bmatrix} \tag{5.32}$$

olarak ifade edilir. Burada $\bar{q} = qa_{c-c}$ ile verilirken, LA (TA) fonon modları için $M_{AB} = +1(-i)$ ve $M_{BA} = +1(+i)$ şeklindedir. $\bar{M}_\mu^K(\vec{q}) = \alpha_\mu / \sqrt{N\bar{q}}$ olarak tanımlanır iken, $\alpha_\mu = \kappa a_\mu q_0 J_0 / 2\sqrt{3}$, $a_\mu = (\hbar / 2M_c \bar{\omega}_\mu)^{1/2}$ ve $\omega_\mu = \bar{\omega}_\mu \bar{q}^2$ şeklindedir. Denklem 5.31'deki Hamiltonyeni çözebilmek için Denklem 5.13'deki durum vektörü kullanılarak elektron- E_{2g} fonon etkileşmesinde kullanılan köşegenleştirme yöntemi izlenir. Bunun için, Denklem 5.14'deki ve Denklem 5.16'daki üniter dönüşümler sırasıyla uygulanır. Sonuç olarak, dönüşmüş Hamiltonyen

$$\begin{aligned}
\bar{H} = & v_F \vec{\sigma} \cdot \left[\vec{p} - \hbar \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \vec{q} |\bar{M}_{0\mu}(\vec{q})|^2 \left| \langle s' \vec{k} | M_{\mu}^{\dagger}(\vec{q}) | s \vec{k} \rangle \right|^2 \right] \\
& + \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{\mu}(\vec{q}) |\bar{M}_{0\mu}(\vec{q})|^2 \left| \langle s' \vec{k} | M_{\mu}^{\dagger}(\vec{q}) | s \vec{k} \rangle \right|^2 \\
& - \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \left[M_{\mu}(\vec{q}) |\bar{M}_{0\mu}(\vec{q})|^2 \left| \langle s' \vec{k} | M_{\mu}^{\dagger}(\vec{q}) | s \vec{k} \rangle \right|^2 + H.C. \right]
\end{aligned} \tag{5.33}$$

olarak ifade edilir. İç çarpımlar yapılırsa $\alpha_{\pm}^{+}$ ve $\alpha_{\pm}^{-}$ katsayıları için iki denkleme ulaşılır.

Bu denklemler matris formunda

$$\begin{bmatrix} E_{\pm} - \hbar v_F k + \hbar v_F \Sigma_{++}(\vec{k}) + \Sigma_{++}^0(\vec{k}) & \hbar v_F \Sigma_{+-}(\vec{k}) + 2\Sigma_{+-}^0(\vec{k}) \\ \hbar v_F \Sigma_{-+}(\vec{k}) + 2\Sigma_{-+}^0(\vec{k}) & E_{\pm} + \hbar v_F k + \hbar v_F \Sigma_{--}(\vec{k}) + \Sigma_{--}^0(\vec{k}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{\pm}^{+} \\ \alpha_{\pm}^{-} \end{bmatrix} = 0 \tag{5.34}$$

olarak yazılır. İlgili matris elemanları ise

$$\begin{aligned}
\left. \begin{matrix} \Sigma_{++}(\vec{k}) \\ \Sigma_{+-}(\vec{k}) \end{matrix} \right\} &= \frac{1}{2} \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} |\bar{M}_{0\mu}(\vec{q})|^2 \left\{ \bar{q}^2 \pm s_{\mu} \left[(\bar{q}_x^2 - \bar{q}_y^2) \cos 2(\theta + \phi) - 2\bar{q}_x \bar{q}_y \sin 2(\theta + \phi) \right] \right\} \\
&\times \begin{cases} \bar{q} \cos(\theta - \phi) \\ i\bar{q} \sin(\theta - \phi) \end{cases}, \\
\Sigma_{ss'}^0(\vec{k}) &= \frac{1}{2} \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} |\bar{M}_{0\mu}(\vec{q})|^2 \hbar \omega_{\mu}(\vec{q}) \\
&\times \left\{ \bar{q}^2 \pm s_{\mu} s_{s'} \left[(\bar{q}_x^2 - \bar{q}_y^2) \cos 2(\theta + \phi) - 2\bar{q}_x \bar{q}_y \sin 2(\theta + \phi) \right] \right\}
\end{aligned} \tag{5.35}$$

olarak bulunur. Burada, $\Sigma_{--} = -\Sigma_{++}$ ve $\Sigma_{-+} = \Sigma_{+-}^*$ şeklindedir. s_{μ} ise boyuna (enine) modlar için +1 (-1) değer alır. Denklem 5.35'deki q toplamı integrale dönüştürülürse, q integralinden dolayı $\Sigma_{\lambda\lambda'}^0(\vec{k})$ terimlerinin katkısı olmazken, $\Sigma_{\lambda\lambda'}^0(\vec{k})$ terimleri katkı verir. Önceki kesimdeki süreç işletilirse, k 'nın fonksiyonu olarak enerji ifadesi

$$E_{\pm} = \pm \left\{ (\hbar v_F k)^2 + 4 \left[\Sigma_{\pm\mp}^0(\vec{k}) \right]^2 \right\}^{1/2} - \left| \Sigma_{\pm\pm}^0(\vec{k}) \right| \tag{5.36}$$

şeklinde elde edilir. Denklem 5.36'daki integraller alınırken yine üst sınırın getirdiği ıraksaklıklardan kurtulabilmek için değeri $2k$ ($q \in [0, 2k]$) olan bir üst kesilim (cut-off) frekansı tanımlanır ve böylece integral sonlu olur. Sonuç olarak, k -bağımlı katkı

$$\Sigma_{\lambda\lambda'}^0(\vec{k}) = \frac{3\sqrt{3}}{4\pi} \bar{k}_0^2 \sum_{\mu} \frac{\alpha_{\mu}^2}{\Xi_{\mu}} \quad (5.37)$$

olarak gelir. Burada $\Xi_{\mu} = \hbar\bar{\omega}_{\mu} = \hbar v_{\mu} / a$ olarak tanımlanırken, v_{μ} farklı modlara ait ses hızıdır. Boyuna akustik fononlar için $v_{LA}=24300 \text{ m/sn}$ iken, enine akustik fononlar için $v_{TA}=13950 \text{ m/sn}$ dir (Kandemir ve Altanhan 2008). Denklem 5.36 boyutsuzlandırılarak

$$\bar{E}_{\pm} = \pm \bar{k}_0 \left\{ 1 + 4 \left[\frac{1}{72\pi\sqrt{3}} \alpha_{\mu}(0) \bar{k}_0 \right]^2 \right\}^{1/2} - \frac{1}{72\pi\sqrt{3}} \alpha_{\mu}(0) \bar{k}_0^2 \quad (5.38)$$

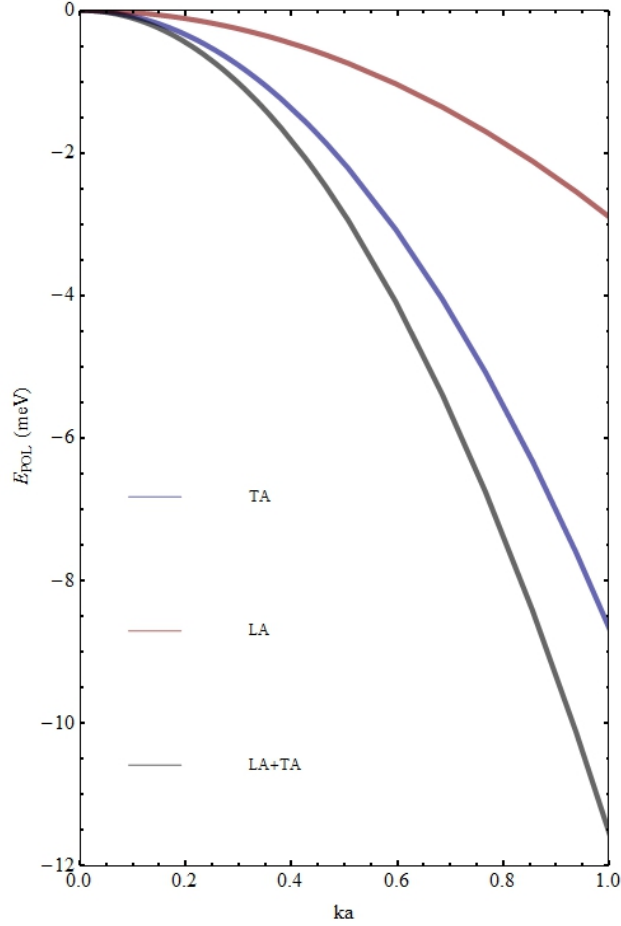
şeklinde yazılır. Burada, $\alpha_{\mu}(0) = q_0^2 J_0 \sum_{\mu} a_{\mu}^2 / \Xi_{\mu}$ ile verilir. Boyutsuz enerji

$\bar{E}_{\pm} = a_{c-c} E_{\pm} / \hbar v_F$ olarak tanımlanırken, $\alpha_{\mu}(0)$ ifadesi $q_0 = 2(2.5) \text{ \AA}^{-1}$ seçimine bağlı olarak enine modlar için 0.84 (1.31), boyuna modlar içinse 0.28 (0.44) olarak bulunur. Şekil 5.4'de polaron taban durumu enerjisi gösterilmektedir. Önceki kesimde optik fononların katkısı ile ilgili yapılan tartışma burada da geçerlidir. Ancak Γ noktası civarındaki akustik fononların enerjisi optik fononlara göre daha düşüktür (Şekil 4.3), bu nedenle şekil 5.4'den de görüldüğü üzere akustik fononlar için polaron enerjisinin mertebesi optik fononlara göre farklılık gösterir. Renormalize Fermi hızı ile ilgili benzer bir tartışmayı burada da yapmak mümkündür. k bağımlı değişen çiftlenim sabiti

$$\tilde{\alpha}(\bar{k}_0) = \frac{1}{72\pi\sqrt{3}} \alpha_{\mu}(0) \bar{k}_0 \quad (5.39)$$

olmak üzere renormalize Fermi enerjisi Denklem 5.25'deki gibi tanımlanır. Akustik fononların etkisini dikkate aldığımızda TA (LA) modu için grafenin etkin band hızı v_F , $\bar{k}_0 = 0.05$ ve $\bar{k}_0 = 0.1$ için enerjiye bağlı olarak sırasıyla, % 0.01 (0.004) - % 0.2 (0.07)

oranında azalır. Fermi hızındaki bu değişimin mertebesi yukarıda bahsedildiği üzere akustik fononların Γ noktası civarındaki enerjileriyle alakalıdır.



Şekil 5.5 Polaron taban durumu enerjisi (Akustik Fononlar)

Önceki kesimde açıklandığı gibi izlenen yöntemin getirdiği bazı limit durumlar söz konusudur. Daha yüksek k değerlerini içerecek bir hesaplama için “Üçgensel Eğrilik” etkisi de dikkate alınmalıdır. Yine elektronun enerji aralığı, düşük (Γ civarındaki) q dalga vektörleri için fonon rezonansı ($0 < E < \hbar\omega_T(q)$) civarındadır.

5.3 Elektron – A_{1g} Fonon Etkileşmesi

K ve K' noktaları civarındaki fononlara bölge-sınır fononları (zone-boundary phonons) denir. Bölge-sınır fononlarının K ve K' noktaları arasında, vadiler arası saçılmada

önemli rol oynadıkları düşünülmektedir (Ando ve Suzuura 2008). Grafenin dört fonon dalının K ve K' simetri noktalarındaki davranışları (Şekil 5.1) şu şekildedir: En yüksek frekanslı mod Kekulé distorsiyonuna sebep olurken, iki katlı dejenere mod, dalga vektörü k ile lineer değişim gösterir. En küçük frekanslı mod ise Denklem 4.16'dan anlaşılacağı üzere, bağ bükülmesine ait kuvvet sabiti olmadığı durumda sıfır olur. Örgü yer değiştirmelerinin varlığı dikkate alınırsa, $\vec{R}_A$ ve $\vec{R}_A - \vec{\tau}_l$ 'deki atomlar arasındaki rezonans integrali (Denklem 3.28)

$$-\frac{\beta\gamma_0}{b^2}\vec{\tau}_l \cdot [\vec{u}_A(\vec{R}_A) - \vec{u}_B(\vec{R}_B - \vec{\tau}_l)] \quad (5.40)$$

şeklindedir. Denklem 5.40'daki bağ boyu değişimi, Denklem 3.44'deki hareket denkleminin sağ tarafına

$$H_{\text{int}}^{AB} = -\frac{1}{b} \frac{\partial \gamma_0}{\partial b} \sum_l \sum_{\vec{R}_A} g(\vec{r}' - \vec{R}_A) a(\vec{R}_A) b(\vec{R}_B - \vec{\tau}_l)^\dagger \vec{\tau}_l \cdot [\vec{u}_A(\vec{R}_A) - \vec{u}_B(\vec{R}_B - \vec{\tau}_l)] \quad (5.41)$$

olacak şekilde katkı verir.

$$\begin{aligned} \vec{u}_A(\vec{R}_A) &= \vec{u}_A^K(\vec{R}_A) e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}_A} + \vec{u}_A^{K'}(\vec{R}_A) e^{i\vec{K}' \cdot \vec{R}_A}, \\ \vec{u}_B(\vec{R}_B) &= \vec{u}_B^K(\vec{R}_B) e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}_B} + \vec{u}_B^{K'}(\vec{R}_B) e^{i\vec{K}' \cdot \vec{R}_B} \end{aligned} \quad (5.42)$$

ifadesi Denklem 5.41'de yerine konulursa, K ve K' noktalarını tasvir edecek şekilde

$$H_{\text{int}}^{AB} \approx \begin{pmatrix} 0 & h_{\text{int}}^{AB} \\ h_{\text{int}}^{AB} & 0 \end{pmatrix} \quad (5.43)$$

ifadesi elde edilir. Denklem 5.43'e ait bileşenler ise

$$\begin{aligned}
h_{\text{int}}^{AB} &= \frac{1}{b} \frac{\partial \gamma_0}{\partial b} i\omega \frac{\sqrt{3}}{2} a \left[\omega (u_{Ax}^K - i u_{Ay}^K) + u_{Bx}^K + i u_{By}^K \right] \\
h_{\text{int}}'^{AB} &= \frac{1}{b} \frac{\partial \gamma_0}{\partial b} i\omega^{-1} \frac{\sqrt{3}}{2} a \left[u_{Ax}^{K'} + i u_{Ay}^{K'} + u_{Bx}^{K'} - i u_{By}^{K'} \right]
\end{aligned} \tag{5.44}$$

olarak yazılırlar. Burada $\omega = \exp(2\pi i / 3)$ olarak tanımlanır (Suzuura ve Ando 2008).

Denklem 5.44'deki bileşenler sadece $\omega_1 = \omega_K = 161.2 \text{ meV}$ (K ve K' noktalarındaki en yüksek frekans) frekansına ait kutuplanma ve yer değiştirme vektörleri cinsinden yazılabilir. Dolayısıyla K ve K' noktalarında etkileşme Hamiltonyenine katkı Kekulé distorsiyonuna neden olan ω_1 frekansından gelir. Bu doğrultuda, Denklem 5.44,

$$\begin{aligned}
h_{\text{int}}^{AB} &= \frac{1}{b} \frac{\partial \gamma_0}{\partial b} i\omega \sqrt{3} a \vec{e}_K^\dagger \vec{U}_K(\vec{r}) = \frac{1}{b} \frac{\partial \gamma_0}{\partial b} i\omega \sqrt{3} a \Delta_K \\
h_{\text{int}}'^{AB} &= \frac{1}{b} \frac{\partial \gamma_0}{\partial b} i\omega^{-1} \sqrt{3} a \vec{e}_{K'}^\dagger \vec{U}_{K'}(\vec{r}) = \frac{1}{b} \frac{\partial \gamma_0}{\partial b} i\omega^{-1} \sqrt{3} a \Delta_{K'}
\end{aligned} \tag{5.45}$$

şeklinde yazılabilir ve benzer işlemler $\vec{F}_B(\vec{r})$ için de yapılırsa hareket denklemleri,

$$\begin{aligned}
\varepsilon' \vec{F}_B^K &= \frac{2\beta_K \gamma}{b^2} i\omega^{-1} \Delta_{K'} \vec{F}_A^{K'} \\
\varepsilon' \vec{F}_B^{K'} &= \frac{2\beta_K \gamma}{b^2} i\omega \Delta_K \vec{F}_A^K \\
\varepsilon' \vec{F}_A^K &= \frac{2\beta_K \gamma}{b^2} (-i\omega^{-1}) \Delta_{K'} \vec{F}_B^{K'} \\
\varepsilon' \vec{F}_A^{K'} &= \frac{2\beta_K \gamma}{b^2} (-i\omega) \Delta_K \vec{F}_B^K
\end{aligned} \tag{5.46}$$

şeklinde ifade edilir. Burada $\beta_K = -(b / \gamma_0)(d\gamma_0 / db)$ olarak tanımlanır. Bu dört hareket denklemini matris şeklinde,

$$\varepsilon' \begin{bmatrix} F_A^K \\ F_B^K \\ F_A^{K'} \\ F_B^{K'} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -i\omega^{-1} \Delta_{K'} \\ 0 & 0 & i\omega^{-1} \Delta_{K'} & 0 \\ 0 & (-i\omega) \Delta_K & 0 & 0 \\ i\omega \Delta_K & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_A^K \\ F_B^K \\ F_A^{K'} \\ F_B^{K'} \end{bmatrix} \tag{5.47}$$

ve

$$\varepsilon' \begin{bmatrix} \vec{F}^K \\ \vec{F}^{K'} \end{bmatrix} = \frac{2\beta_K \gamma}{b^2} \begin{bmatrix} 0 & \omega^{-1} \sigma_y \Delta_{K'} \\ \omega \sigma_y \Delta_K & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{F}^K \\ \vec{F}^{K'} \end{bmatrix} \quad (5.48)$$

olarak yazılır. Dolayısıyla etkileşme Hamiltonyeni

$$\begin{aligned} \Delta_K(\vec{r}) &= \sum_{\vec{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2NM_C \omega_K}} (b_{K,\vec{q}} + b_{K',-\vec{q}}^\dagger) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \\ \Delta_{K'}(\vec{r}) &= \sum_{\vec{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2NM_C \omega_K}} (b_{K',\vec{q}} + b_{K,-\vec{q}}^\dagger) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \end{aligned} \quad (5.49)$$

olmak üzere,

$$H_{e-p}^{KK'} = \frac{2\beta_K \gamma}{b^2} \begin{bmatrix} 0 & \omega^{-1} \sigma_y \Delta_{K'} \\ \omega \sigma_y \Delta_K & 0 \end{bmatrix} \quad (5.50)$$

şekline sokulabilir (Ando ve Suzuura 2008).

Böylelikle, uzun dalga boyu rejiminde grafen elektronunun (ya da deşığının) A_{1g} fononu ile etkileşmesini tasvir eden Hamiltonyen

$$H = H_0 + \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{\mu}(\vec{q}) \vec{b}_{\vec{q}\mu}^\dagger \vec{b}_{\vec{q}\mu} + H_{e-p}^{KK'} \quad (5.51)$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada $H_0 = v_F \vec{\alpha} \cdot \vec{p}$, özdeğerleri $\varepsilon_{k\lambda} = s\hbar v_F k$ ($s=\pm 1$, kiralite indisi) olan pertürbe olmamış serbest durum Hamiltonyenidir. H_0 Hamiltonyenine karşılık gelen öz fonksiyonların

$$\langle \vec{r} | K s \vec{k} \rangle = \frac{\exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r})}{\sqrt{2L}} \begin{bmatrix} s \\ e^{i\theta(\vec{k})} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \langle \vec{r} | K' s \vec{k} \rangle = \frac{\exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r})}{\sqrt{2L}} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ e^{i\theta(\vec{k})} \\ s \end{bmatrix} \quad (5.52)$$

şeklinde olduğu rahatlıkla gösterilebilir. Denklem 5.50'deki etkileşme terimini

$$H_{e-p}^{KK'} = \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \left[\tilde{M}_{\mu\nu} \vec{b}_{\mu,\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} + H.C. \right] \quad (5.53)$$

şeklinde tekrar yazmak mümkündür. Burada $\tilde{M}_{\mu\nu}$, $M_0 M_{\mu\nu}$ olarak tanımlanırken,

$$M_{KK'} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \omega \sigma_y & 0 \end{bmatrix}, \quad M_{K'K} = \begin{bmatrix} 0 & \omega^{-1} \sigma_y \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (5.54)$$

olarak ifade edilir. Burada, $M_0 = 3a_0 q_0 J_0$ ve $a_0 = (\hbar / 2M_c \omega_K)^{1/2}$ şeklinde tanımlanır. Önceki kesimlerde de değinildiği üzere $q_0 = (\partial J_0 / \partial a) / J_0$ ifadesinin 2 veya $2.5 \text{ \AA}^{-1}$ civarında olduğu tahmin edilmektedir (Pietronero vd. 1980, Jishi vd. 1993).

Denklem 5.51'i köşegenleştirebilmek için önceki kesimlerde de işletildiği gibi Lee-Low-Pines (LLP) metoduna dayanan bir köşegenleştirme süreci dikkate alınmıştır. Mevcut problemde, Denklem 5.13'deki önermeye ek olarak K ve K' noktaları arasındaki vadiler-arası saçılmaya imkân veren kiralite korunumu da dikkate alınmalıdır. Bu durumda tüm sisteme ait taban durumu için

$$|\phi\rangle = \sum_{\mu' \neq \nu'} \sum_{s'} \alpha_{\pm}^{\mu' s'} |\mu' s' \vec{k}\rangle \otimes U_1 U_2 |0\rangle_{ph} \quad (5.55)$$

şeklinde bir önermede bulunulur, öyle ki $H|\Phi\rangle = E_{\pm}|\Phi\rangle$ şeklindedir. Denklem 5.55'de $|0\rangle_{ph}$ vakum durumuna karşılık gelir. $\alpha_{\pm}^{\mu' s'} |\mu' s' \vec{k}\rangle$ elektronik durum vektörüne karşılık

gelir. Elektronik durum vektörü, $\alpha_{\pm}^{\mu'\lambda'}$ uygun kesirli genliği cinsinden $|\mu'+\vec{k}\rangle$ ve $|\mu'-\vec{k}\rangle$ durumlarının lineer kombinasyonu olarak tanımlanır. Elektron koordinatlarını ortadan kaldıran ilk üniter dönüşüm

$$U_1 = \exp \left[-i\vec{r} \cdot \sum_{\vec{q}} \vec{q} \vec{b}_{\mu,\vec{q}}^{\dagger} \vec{b}_{\mu,\vec{q}} \right] \quad (5.56)$$

şeklinde tanımlanır. Üniter dönüşüm altında fonon yaratıcı ve momonetum operatörünün dönüşmüş biçimleri sırasıyla, $\tilde{b}_{\mu,\vec{q}} = b_{\mu,\vec{q}} \exp[-i\vec{q} \cdot \vec{r}]$ ve $\tilde{\vec{p}} = \vec{p} - \sum_{\vec{q}} \sum_{\mu \neq \nu} \hbar \vec{q} \vec{b}_{\mu,\vec{q}}^{\dagger} \vec{b}_{\mu,\vec{q}}$ olarak verilir. İlk üniter dönüşüm sonucunda Hamiltonyen

$$\tilde{H} = v_F \vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} - \hbar \sum_{\vec{q}} \sum_{\mu \neq \nu} \vec{q} \vec{b}_{\mu,\vec{q}}^{\dagger} \vec{b}_{\mu,\vec{q}} \right) + \sum_{\vec{q}} \sum_{\mu \neq \nu} \hbar \omega_K \vec{b}_{\mu,\vec{q}}^{\dagger} \vec{b}_{\mu,\vec{q}} - \sum_{\vec{q}} \sum_{\mu \neq \nu} [\tilde{M}_{\mu\nu} \vec{b}_{\mu,\vec{q}} + H.C.] \quad (5.57)$$

şeklini alır. Fonon koordinatlarını $\tilde{M}_0 = M_0 / \hbar \omega_K$ kadar kaydıran yer değiştirmiş- salıncı tipi ikinci üniter dönüşüm ise

$$U_2 = \exp \left\{ \sum_{\vec{q}} [\tilde{M}_0 \langle \mu' s' \vec{k} | M_{\mu\nu}^{\dagger} | \nu' s \vec{k} \rangle \vec{b}_{\mu,\vec{q}}^{\dagger} - H.C.] \right\} \quad (5.58)$$

olarak ifade edilir. Optik fonon operatörü $\tilde{b}_{\mu,\vec{q}} = b_{\mu,\vec{q}} + \tilde{M}_0(\vec{q}) \langle \mu' s' \vec{k} | M_{\mu\nu}^{\dagger} | \nu' s \vec{k} \rangle$ olarak dönüşür. Sonuç olarak, U_2 dönüşümü altında Hamiltonyen $\tilde{H} = H^0 + H_1$ olarak dönüşür. Burada H^0 ve H_1 , sırasıyla

$$\begin{aligned}
H^0 = & v_F \vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} - \hbar \sum_{\vec{q}} \sum_{\mu \neq \nu} \vec{q} |\tilde{M}_0|^2 \left| \langle \mu' s' \vec{k} | M_{\mu\nu}^\dagger | \nu' s \vec{k} \rangle \right|^2 \right) \\
& + \sum_{\vec{q}} \sum_{\mu \neq \nu} \hbar \omega_K |\tilde{M}_0|^2 \left| \langle \mu' s' \vec{k} | M_{\mu\nu}^\dagger | \nu' s \vec{k} \rangle \right|^2 \\
& - \sum_{\vec{q}} \sum_{\mu \neq \nu} \left[\hbar \omega_K |\tilde{M}_0|^2 \tilde{M}_{\mu\nu} \left| \langle \mu' s' \vec{k} | M_{\mu\nu}^\dagger | \nu' s \vec{k} \rangle \right|^2 + H.C. \right] \\
& + \sum_{\vec{q}} \sum_{\mu \neq \nu} [\hbar \omega_K - \hbar v_F \vec{\alpha} \cdot \vec{q}] \tilde{b}_{\mu, \vec{q}}^\dagger \tilde{b}_{\mu, \vec{q}}
\end{aligned} \tag{5.59}$$

ve

$$H_1 = \sum_{\vec{q}} \sum_{\mu \neq \nu} \left[M_{\mu\nu} + [\hbar \omega_K - \hbar v_F \vec{\alpha} \cdot \vec{q}] \tilde{M}_0 \langle \mu' s' \vec{k} | M_{\mu\nu}^\dagger | \nu' s \vec{k} \rangle \tilde{b}_{\mu, \vec{q}} + H.C. \right] \tag{5.60}$$

olarak elde edilir. Denklem 5.59 ve Denklem 5.60'a vakum durumları uygulandığında katkı köşegen olan H^0 ifadesinden gelir. Denklem 5.55'deki önermeyi göz önünde bulundurarak ve λ' üzerindeki toplamaları alarak $H|\Phi\rangle^{\mu\nu s} = E_\pm |\Phi\rangle^{\mu\nu s}$ özdeğer denkleminde ulaşılır. Sonuç olarak, iç çarpımlar yapılarak $|\mu' s' \vec{k}\rangle$ durumlarına ait $\alpha_\pm^{K+}$, $\alpha_\pm^{K-}$, $\alpha_\pm^{K'+}$ ve $\alpha_\pm^{K'-}$ katsayıları için dört denkleme ulaşılır. Bu denklemler matris formunda

$$\begin{bmatrix}
E_\pm + \Sigma_{++}^{(0)KK} & \Sigma_{--}^{(1)KK} & \Sigma_{++}^{(2)KK'} & \Sigma_{+-}^{(2)KK'} \\
\Sigma_{++}^{(1)KK} & E_\pm + \Sigma_{--}^{(0)KK} & \Sigma_{-+}^{(2)KK'} & \Sigma_{++}^{(2)KK'} \\
\Sigma_{++}^{(2)K'K'} & \Sigma_{+-}^{(2)K'K} & E_\pm + \Sigma_{++}^{(0)K'K'} & \Sigma_{--}^{(1)K'K'} \\
\Sigma_{-+}^{(2)K'K} & \Sigma_{--}^{(2)K'K} & \Sigma_{++}^{(1)K'K'} & E_\pm + \Sigma_{--}^{(0)K'K'}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
\alpha_\pm^{K+} \\
\alpha_\pm^{K-} \\
\alpha_\pm^{K'+} \\
\alpha_\pm^{K'-}
\end{bmatrix} = 0 \tag{5.61}$$

olarak yazılır. İlgili matris elemanları ise

$$\begin{aligned}
\Sigma_{\mp\mp}^{(0)KK} &= \pm \hbar v_F k + \sum_{\vec{q}} \sum_{\mu \neq \nu} |\tilde{M}_0|^2 \Delta_{\mp\mp}^{KK} [\hbar v_F q \Theta_{\mp\mp} + \hbar \omega_K] \\
\Sigma_{\mp\mp}^{(1)KK} &= \sum_{\vec{q}} \sum_{\mu \neq \nu} |\tilde{M}_0|^2 \Delta_{\mp\mp}^{KK} [\hbar v_F q \Delta_{\mp\mp}^{KK} \Theta_{\mp\pm} + 2 \hbar \omega_K \Delta_{\mp\pm}^{KK}] \\
\Sigma_{ss'}^{(2)KK'} &= 2 \hbar \omega_K \sum_{\vec{q}} \sum_{\mu \neq \nu} |\tilde{M}_0|^2 \Delta_{ss'}^{KK'} \\
\Delta_{ss'}^{\zeta\zeta'} &= \left| \langle \zeta' s' \vec{k} | M_{\mu\nu} | \zeta s \vec{k} \rangle \right|^2
\end{aligned} \tag{5.62}$$

şeklinde elde edilir. Burada $\Theta_{\lambda\lambda'}$,

$$\Theta_{ss'} = \frac{1}{2} [(s + s') \cos(\theta - \phi) - (s - s') \sin(\theta - \phi)] \tag{5.63}$$

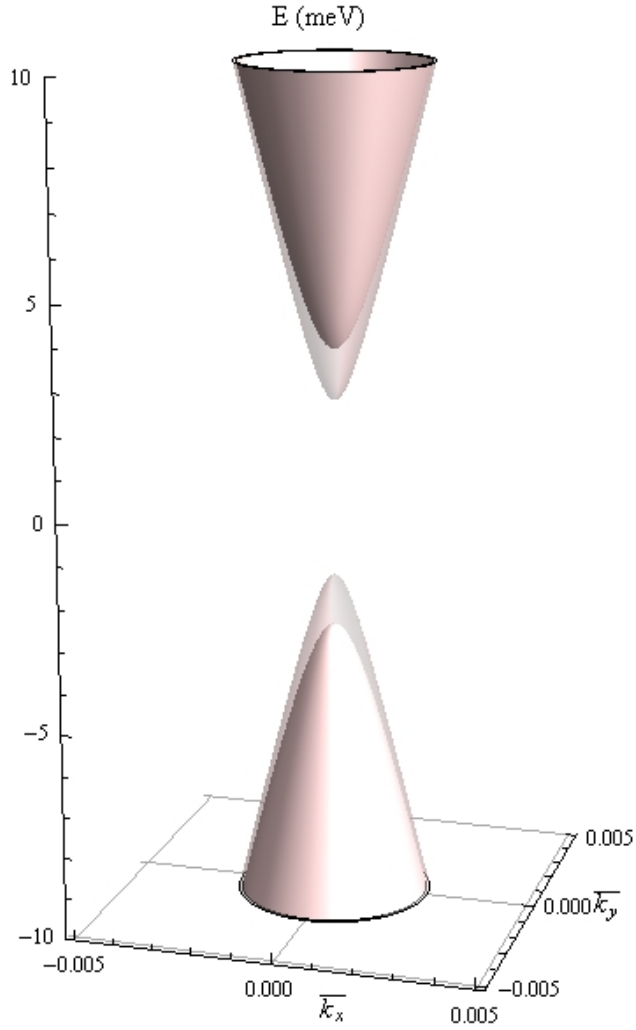
olarak tanımlanır. Toplamlar, q üzerinden integrale dönüştürülürse sadece $\zeta \neq \zeta'$ ve $s \neq s'$ durumları için $\Delta_{ss'}^{\zeta\zeta'}$ ifadesi bire eşittir, diğer matris elemanları sıfırdır. Bu durum vadiler-arası farklı bandlara saçılma sürecini yansıtır. Bu süreç ile alt örgü simetrisi olarak da bilinen grafenin kiral simetrisi kırılmaz. Denklem 5.63'deki $\theta(\phi)$, $\vec{k}(\vec{q})$ momentumlarına ait azimutal açılarıdır. Denklem 5.62'deki toplamlar q üzerinden integrallere çevrilirse, $\Sigma_{\mp\pm}^{(2)KK'}$ ve $\Sigma_{\mp\pm}^{(2)K'K}$ terimleri hariç, $\Sigma_{\mp\mp}^{(0)KK}$, $\Sigma_{\mp\mp}^{(1)KK}$ içeren tüm terimler ve K' muadilleri sıfıra eşittir. Sıfırdan farklı olan terim

$$\Sigma_{\mp\pm}^{(2)KK'} = \Sigma_{\mp\pm}^{(2)K'K} = \frac{1}{4\pi^2} \frac{3\sqrt{3}a_{c-c}^2}{2} 8J_0\alpha_0 \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{q_c} q dq = \frac{3\sqrt{3}}{\pi} J_0\alpha_0 \bar{q}_c^2 \tag{5.64}$$

şeklindedir. Burada $\alpha_0 = |M_0|^2 / 4J_0\hbar\omega_K$ ve $\Omega = 3\sqrt{3}a_{c-c}^2 / 2$ olarak tanımlanır. α_0 , $q_0 = 2 \text{ \AA}^{-1}$ ve $q_0 = 2.5 \text{ \AA}^{-1}$ değerleri için sırasıyla 0.305 ve 0.477 değerlerini alır. Burada üst kesilim (cut-off) frekansı $q_c = \omega_K / v_F = 0.027 \text{ \AA}^{-1}$ olarak seçilerek, enerji ölçeği fonon rezonansı civarına sınırlandırılmıştır. Denklem 5.61'deki determinant analitik olarak çözülerek, $E_{\pm}$ özdeğerleri kapalı formda

$$E_{\pm} = \pm \left[(\hbar v_F k)^2 + (\Sigma_{\mp\pm}^{(2)KK'})^2 \right]^{1/2} \quad (5.65)$$

olarak yazılır. Burada $\Sigma_{\mp\pm}^{(2)KK'}$ düzlem içi Kekulé distorsiyonundan kaynaklanan Dirac noktalarındaki yarıenerji aralığına (half-gap) karşılık gelir. Denklem 5.65'den görüldüğü üzere Kekulé tipi bir distorsiyon alt örgü kiralitesini korumaktadır.



Şekil 5.6 A_{1g} fononundan kaynaklanan aralık

Enerji ölçeğinin fonon rezonansı ω_K civarında sınırlandırılmasıyla yarı-aralık terimi 2.12 meV ($q_0 = 2 \text{ \AA}^{-1}$) ve 3.34 meV ($q_0 = 2.5 \text{ \AA}^{-1}$) olarak hesaplanır. Şekil 5.5'den görüldüğü üzere, enerji aralık terimi 4.24 meV (içteki mat eğri) ve 6.68 meV (dıştaki saydam eğri) olarak elde edilir. Bu sonuç literatürdeki mevcut diğer sonuca

(Samsonidze vd. 2007) göre daha küçüktür. Samsonidze vd. (2007) makalelerinde mini band aralığı oda sıcaklığında 10 meV civarındadır. Bu çalışmanın sıfır sıcaklıkta gerçekleştirildiği dikkate alınırsa Samsonidze vd. (2007) çalışmalarıyla kıyaslanabilir olduğu görülmektedir. Grafen literatüründe, elektron-elektron ve elektron- A_{1g} fonon etkileşmelerinin toplam etkisini araştırmaya dayalı iki teorik, bir de deneysel çalışma mevcuttur. Bu bakış açısıyla, elektron itmesi alt örgü simetrisini kırarken Kekulé örgü distorsiyonu bu simetriyi tekrar oluşturur. Böyle bir etkinin araştırılması için süperiletken düzen göz önünde bulundurulmalıdır (Araki 2011). Öte yandan, Giuliani vd. (2010) çalışmalarında Kekulé distorsiyonun yol açtığı aralığın elektron itmesiyle ciddi ölçüde artacağı öngörülmektedir. Bu çalışmanın grafendeki elektron-elektron etkileşmesinin anlaşılmasına önemli katkıda bulunabileceği düşünülmektedir.

5.4 Magnetik Alan Altında Elektron- A_{1g} Fonon Etkileşmesi

Burada önceki kesimde incelenen elektron- A_{1g} fonon etkileşmesine ek olarak grafen düzlemine dik yönde uygulanan düzgün (uniform) bir magnetik alanın enerji spektrumuna olan etkisi araştırılmıştır. Magnetik alan Dirac denkleminde minimal çiftlenim yoluyla, yani vektör potansiyel aracılığıyla dâhil olmaktadır. Magnetik alan altındaki Dirac Hamiltonyenini

$$H_0 = v_F \hat{\alpha} \cdot \vec{\pi} = v_F \hat{\alpha} \cdot \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right) \quad (5.66)$$

şeklinde ifade edilir. Burada $\vec{A}$ vektör potansiyelidir. Denklem 5.50'ye dayanarak, toplam Hamiltonyen

$$H = v_F \hat{\alpha} \cdot \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right) + \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{\mu}(\vec{q}) \vec{b}_{\vec{q}\mu}^{\dagger} \vec{b}_{\vec{q}\mu} + H_{e-p}^{KK'} \quad (5.67)$$

olarak yazılabilir. Burada, son terim Denklem 5.50'deki etkileşme terimidir. Grafen düzlemine dik magnetik alan ise $\vec{B} = (0, 0, B)$ olmak kaydıyla Landau ayarındaki vektör potansiyel $\vec{A} = (0, Bx, 0)$ aracılığı ile denkleme dâhil olmaktadır. Etkileşme terimini göz

ardı ettiğimizde Denklem 5.66'daki ifadeye ait özdeğerler $\varepsilon_{ns} = s\hbar v_F \sqrt{2n} / \ell$ ($s=\pm 1$, kiralite indisi) olarak ifade edilir. Bu durumda sistem x yönünde kuantumlanır ve Landau düzeyleri oluşur. Burada ℓ , magnetik hapis uzunluğu olarak tanımlanır ve $\ell = \sqrt{c\hbar / eB}$ olarak ifade edilir. Bu Hamiltonyenine karşılık gelen öz fonksiyonlar,

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | Ks | n \rangle &= \frac{C_n \exp(-iky)}{L} \begin{bmatrix} si^{|n|-1} \phi_{|n|-1}(x) \\ i^{|n|} \phi_{|n|}(x) \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \\ \langle \vec{r} | K's | n \rangle &= \frac{C_n \exp(-iky)}{L} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ i^{|n|} \phi_{|n|}(x) \\ si^{|n|-1} \phi_{|n|-1}(x) \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (5.68)$$

oldukları gösterilebilir. Burada,

$$\phi_{|n|}(x) = \frac{1}{\sqrt{2^{|n|} |n|!} \sqrt{\pi} \ell} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x - \ell^2 k^2}{\ell} \right)^2 \right] H_{|n|} \left(\frac{x - \ell^2 k^2}{\ell} \right) \quad (5.69)$$

olarak tanımlanırken, $n=0$ ($n \neq 0$) durumları için $C_n = 1$ ($C_n = 1/\sqrt{2}$) olarak tanımlanır.

$H_{|n|}$ ise Hermite polinomlarıdır. Denklem 5.67'deki sisteme ait özdeğerleri bulabilmek için önceki kesimlerdeki yöntem izlenmiştir. Sistemi tasvir eden taban durumu vektörü Denklem 5.55'deki gibi seçilerek ilk üniter dönüşüm

$$U_1 = \exp \left[-iy \sum_{\vec{q}} q_y \vec{b}_{\mu, \vec{q}}^\dagger \vec{b}_{\mu, \vec{q}} \right] \quad (5.70)$$

olarak tanımlanır. Burada, önceki kesimden farklı olarak Hamiltonyen momentum ile komütatif değildir. Sistem y yönünde serbest olması nedeniyle ilk üniter dönüşüm Denklem 5.70'deki gibi düzenlenir. Bu dönüşüm sonucunda Hamiltonyen y

doğrultusunda elektron bileşeni içermez. Üniter dönüşüm altında fonon yaratıcı ve momonetum operatörünün dönüşmüş biçimleri sırasıyla, $\tilde{b}_{\mu,\vec{q}} = b_{\mu,\vec{q}} \exp[-iq_y y]$ ve $\tilde{\pi} = \pi - \sum_{\vec{q}} \sum_{\mu \neq \nu} \hbar q_y \vec{b}_{\mu,\vec{q}}^\dagger \vec{b}_{\mu,\vec{q}}$ olarak verilir. Bu dönüşümler dikkate alındığında toplam Hamiltonyen

$$\begin{aligned} \tilde{H} = v_F \vec{\alpha} \cdot \left(\tilde{\pi} - \hbar \sum_{\vec{q}} \sum_{\mu \neq \nu} q_y \vec{b}_{\mu,\vec{q}}^\dagger \vec{b}_{\mu,\vec{q}} \right) + \sum_{\vec{q}} \sum_{\mu \neq \nu} \hbar \omega_K \vec{b}_{\mu,\vec{q}}^\dagger \vec{b}_{\mu,\vec{q}} \\ - \sum_{\vec{q}} \sum_{\mu \neq \nu} \left[\tilde{M}_{\mu\nu} \vec{b}_{\mu,\vec{q}} e^{-iq_x x} + H.C. \right] \end{aligned} \quad (5.71)$$

şeklinde dönüşür. İkinci üniter dönüşüm ise yine Denklem 5.58'de olduğu gibi

$$U_2 = \exp \left\{ \sum_{\vec{q}} \left[\tilde{M}_0 \langle \mu' s' | n | M_{\mu\nu}^\dagger e^{-iq_x x} | \nu' s | n | \rangle \vec{b}_{\mu,\vec{q}}^\dagger - H.C. \right] \right\} \quad (5.72)$$

şeklinde tanımlanır. Denklem 5.72'deki dönüşüm altında yok edici operatör $\tilde{b}_{\mu,\vec{q}} = b_{\mu,\vec{q}} + \tilde{M}_0(\vec{q}) \langle \mu' s' | n | M_{\mu\nu}^\dagger e^{-iq_x x} | \nu' s | n | \rangle$ olarak dönüşür. Sonuç olarak, dönüşmüş Hamiltonyen $\tilde{H} = H^0 + H_1$ olarak ifade edilir. Burada, H^0 ve H_1 , sırasıyla

$$\begin{aligned} H^0 = v_F \vec{\alpha} \cdot \left[\tilde{\pi} - \hbar \sum_{\vec{q}} \sum_{\mu \neq \nu} q_y |\tilde{M}_0|^2 \left| \langle \mu' s' | n | M_{\mu\nu}^\dagger | \nu' s | n | \rangle \right|^2 \right] \\ + \sum_{\vec{q}} \sum_{\mu \neq \nu} \hbar \omega_K |\tilde{M}_0|^2 \left| \langle \mu' s' | n | M_{\mu\nu}^\dagger | \nu' s | n | \rangle \right|^2 \\ - \sum_{\vec{q}} \sum_{\mu \neq \nu} \left[\hbar \omega_K |\tilde{M}_0|^2 \tilde{M}_{\mu\nu} \left| \langle \mu' s' | n | M_{\mu\nu}^\dagger | \nu' s | n | \rangle \right|^2 + H.C. \right] \\ + \sum_{\vec{q}} \sum_{\mu \neq \nu} \left[\hbar \omega_K - \hbar v_F \alpha_y q_y \right] \vec{b}_{\mu,\vec{q}}^\dagger \vec{b}_{\mu,\vec{q}} \end{aligned} \quad (5.73)$$

ve

$$H_1 = \sum_{\vec{q}} \sum_{\mu \neq \nu} \left[M_{\mu\nu} e^{iq_x x} + \left[\hbar \omega_K - \hbar v_F \alpha_y q_y \right] \tilde{M}_0 \langle \mu' s' | n | M_{\mu\nu} e^{iq_x x} | \nu' s | n | \rangle \vec{b}_{\mu,\vec{q}} + H.C. \right] \quad (5.74)$$

şeklinde elde edilir. Önceki kesimdeki benzer bir süreç işletilirse karakteristik matris

$$\begin{bmatrix} E_{\pm} + \Sigma_{++}^{(0)KK} & \Sigma_{--}^{(1)KK} & \Sigma_{++}^{(2)KK'} & \Sigma_{+-}^{(2)KK'} \\ \Sigma_{++}^{(1)KK} & E_{\pm} + \Sigma_{--}^{(0)KK} & \Sigma_{-+}^{(2)KK'} & \Sigma_{++}^{(2)KK'} \\ \Sigma_{++}^{(2)K'K'} & \Sigma_{+-}^{(2)K'K} & E_{\pm} + \Sigma_{++}^{(0)K'K'} & \Sigma_{--}^{(1)K'K'} \\ \Sigma_{-+}^{(2)K'K} & \Sigma_{--}^{(2)K'K} & \Sigma_{++}^{(1)K'K'} & E_{\pm} + \Sigma_{--}^{(0)K'K'} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{\pm}^{K+} \\ \alpha_{\pm}^{K-} \\ \alpha_{\pm}^{K'+} \\ \alpha_{\pm}^{K'-} \end{bmatrix} = 0 \quad (5.75)$$

olarak elde edilir. İlgili matris elemanları ise

$$\begin{aligned} \Sigma_{\mp\mp}^{(0)KK} &= \pm \hbar v_F \frac{\sqrt{2n}}{\ell} + \sum_{\bar{q}} \sum_{\mu \neq \nu} |\tilde{M}_0|^2 \Delta_{\mp\mp}^{KK} [\hbar v_F q_y \Theta_{\mp\mp} + \hbar \omega_K] \\ \Sigma_{\mp\mp}^{(1)KK} &= \sum_{\bar{q}} \sum_{\mu \neq \nu} |\tilde{M}_0|^2 \Delta_{\mp\mp}^{KK} [\hbar v_F q_y \Delta_{\mp\mp}^{KK} \Theta_{\mp\pm} + 2\hbar \omega_K \Delta_{\mp\pm}^{KK}] \\ \Sigma_{ss'}^{(2)KK'} &= 2\hbar \omega_K \sum_{\bar{q}} \sum_{\mu \neq \nu} |\tilde{M}_0|^2 \Delta_{ss'}^{KK'} \\ \Delta_{ss'}^{\zeta\zeta'} &= \left| \langle \zeta' s' | n \rangle | M_{\mu\nu} | \zeta s | n \rangle \right|^2 |\rho_n|^2 \end{aligned} \quad (5.76)$$

olarak elde edilir. Burada $\Theta_{ss'}$,

$$\Theta_{ss'} = \frac{|C_n|^2}{L} (s' + s) \sum_{\bar{q}} \left[q_y \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi_{|n|-1} \phi_{|n|} \right] \quad (5.77)$$

olarak tanımlanırken, $\rho_n = \langle \exp(iq_x x) \rangle$ olarak tanımlanır. $\langle \dots \rangle$ ifadesi elektronik koordinatlara göre beklenen değere karşılık gelmektedir. Denklem 5.77'deki ifade Hermite polinomlarının diklik bağıntısından dolayı sıfırdır. Sıfırdan farklı $\Delta_{ss'}^{KK'} (= \Delta_{ss'}^{K'K})$ içeren terimler ise

$$\Delta_{ss'}^{KK'} = \Delta_{ss'}^{K'K} = \Delta_{s_{\mu}}^n = \left(\frac{|C_n|^2}{L} \right)^2 \left| (-i\omega) I_{|n|} + (i\omega) s_{\mu} I_{|n|-1} \right|^2 \quad (5.78)$$

olarak ifade edilir. Burada, s_μ , vadiler-arası aynı banda (farklı banda) saçılmayı tasvir eden ve 1(-1) değerini alan yeni kiral indis olmakla birlikte,

$$I_{|n|} = \sum_{\tilde{q}} \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-iq_x x) \phi_{|n|}(x) \phi_{|n-1|}(x) \quad (5.79)$$

şeklinde tanımlanır. Denklem 5.78'deki integraller alınırsa

$$\bar{\Delta}_{s_\mu}^n = \left(\frac{|C_n|^2}{L} \right)^2 \left| \tilde{I}_{|n|} + s_\mu \tilde{I}_{|n-1|} \right|^2, \quad \tilde{I}_{|n|}(q_x) = \sum_{\tilde{q}} \exp\left(-\frac{\bar{q}_x \bar{\ell}^2}{4}\right) L_{|n|}\left(\frac{\bar{q}_x \bar{\ell}^2}{2}\right) \quad (5.80)$$

ifadesi elde edilir. Burada, $L_{|n|}$ Laguerre polinomlarıdır. Tüm uzunluklar boyutsuz olması için a_{c-c} cinsinden $\bar{q}_x = q_x a_{c-c}$ ve $\bar{\ell} = \ell / a_{c-c}$ olarak tanımlanmıştır. Denklem 5.76'daki toplamalar q üzerinden integrallere çevrilirse, $\Sigma_{\mp\pm}^{(2)KK'} \left(\Sigma_{\mp\pm}^{(2)K'K} \right)$ ve $\Sigma_{\pm\pm}^{(2)KK'} \left(\Sigma_{\pm\pm}^{(2)K'K} \right)$ terimleri hariç $\Sigma_{\mp\mp}^{(0)KK}, \Sigma_{\mp\mp}^{(1)KK}$ içeren tüm terimler ve K' muadilleri sıfıra eşittir. Sıfırdan farklı olan terimler

$$\begin{aligned} \Sigma_{\mp\pm}^{(2)KK'} &= \Sigma_{\mp\pm}^{(2)K'K} = \Gamma \Delta_{-1}^n \\ \Sigma_{\pm\pm}^{(2)KK'} &= \Sigma_{\pm\pm}^{(2)K'K} = \Gamma \Delta_{+1}^n \end{aligned} \quad (5.81)$$

şeklindedir. Burada $\Gamma = (3\sqrt{3} / \pi^2) \alpha_0 J_0$, $\alpha_0 = |M_0|^2 / 4J_0 \hbar \omega_K$ ve $\Omega = 3\sqrt{3} a_{c-c}^2 / 2$ olarak tanımlanır. α_0 , $q_0 = 2 \text{ \AA}^{-1}$ ve $q_0 = 2.5 \text{ \AA}^{-1}$ değerleri için sırasıyla 0.305 ve 0.477 değerlerini alır. $q_x \in [-\infty, \infty]$ aralığında tanımlı olması ve Denklem 5.81'in bu sınırlar içerisinde ıraksamaması nedeniyle sınırlara kesilim konulmamıştır. Ancak parçacığın y doğrultusunda serbest olması nedeniyle nümerik olarak önceki kesimdekine özdeş bir kesilim $q_y \in [-0.0346, 0.0346] \text{ \AA}^{-1}$ göz önünde bulundurulmuştur. Yani, y doğrultusunda serbest olan parçacığın enerji ölçeği yine fonon rezonansı civarına sınırlandırılmıştır. Önceki kesimdeki durum ile karşılaştırma yapabilmek açısından integrallere kesilim koyduğumuz takdirde ise sonuç bakımından önemli bir farklılık oluşmadığı

gözenmiştir. Denklem 5.75'deki determinant analitik olarak çözülerek, iki vadi için enerji özdeğerleri kapalı formda

$$\begin{aligned}
 E_{\pm}^K &= \pm \left[\left(\hbar v_F \frac{\sqrt{2n}}{\ell} \right)^2 + \left(\Sigma_{\mp\pm}^{(2)KK'} \right)^2 \right]^{1/2} + \Sigma_{\pm\pm}^{(2)KK'} \\
 E_{\pm}^{K'} &= \pm \left[\left(\hbar v_F \frac{\sqrt{2n}}{\ell} \right)^2 + \left(\Sigma_{\mp\pm}^{(2)K'K} \right)^2 \right]^{1/2} - \Sigma_{\pm\pm}^{(2)K'K}
 \end{aligned}
 \tag{5.82}$$

olarak yazılır. Denklem 5.82'deki q toplamları integraller dönüştürülürse $\Sigma_{\mp\pm}^{(2)KK'} \left(\Sigma_{\mp\pm}^{(2)K'K} \right)$ ve $\Sigma_{\pm\pm}^{(2)KK'} \left(\Sigma_{\pm\pm}^{(2)K'K} \right)$ terimleri

$$\begin{aligned}
 \Sigma_{\mp\pm}^{(2)KK'} &= \Sigma_{\mp\pm}^{(2)K'K} = \Gamma \Delta_{-1}^n = \left(|C_{|n|}|^2 \right)^2 \Gamma \\
 &\quad \times \int_{-\bar{q}_{c_y}}^{\bar{q}_{c_y}} d\bar{q}_y \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{q}_x \exp \left(\frac{-\bar{q}_x^2 \bar{\ell}^2}{2} \right) \left[L_{|n|} \left(\frac{\bar{q}_x \bar{\ell}^2}{2} \right) + L_{|n|-1} \left(\frac{\bar{q}_x \bar{\ell}^2}{2} \right) \right]^2 \\
 \Sigma_{\pm\pm}^{(2)KK'} &= \Sigma_{\pm\pm}^{(2)K'K} = \Gamma \Delta_{+1}^n = \left(|C_{|n|}|^2 \right)^2 \Gamma \\
 &\quad \times \int_{-\bar{q}_{c_y}}^{\bar{q}_{c_y}} d\bar{q}_y \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{q}_x \exp \left(\frac{-\bar{q}_x^2 \bar{\ell}^2}{2} \right) \left[L_{|n|} \left(\frac{\bar{q}_x \bar{\ell}^2}{2} \right) - L_{|n|-1} \left(\frac{\bar{q}_x \bar{\ell}^2}{2} \right) \right]^2
 \end{aligned}
 \tag{5.83}$$

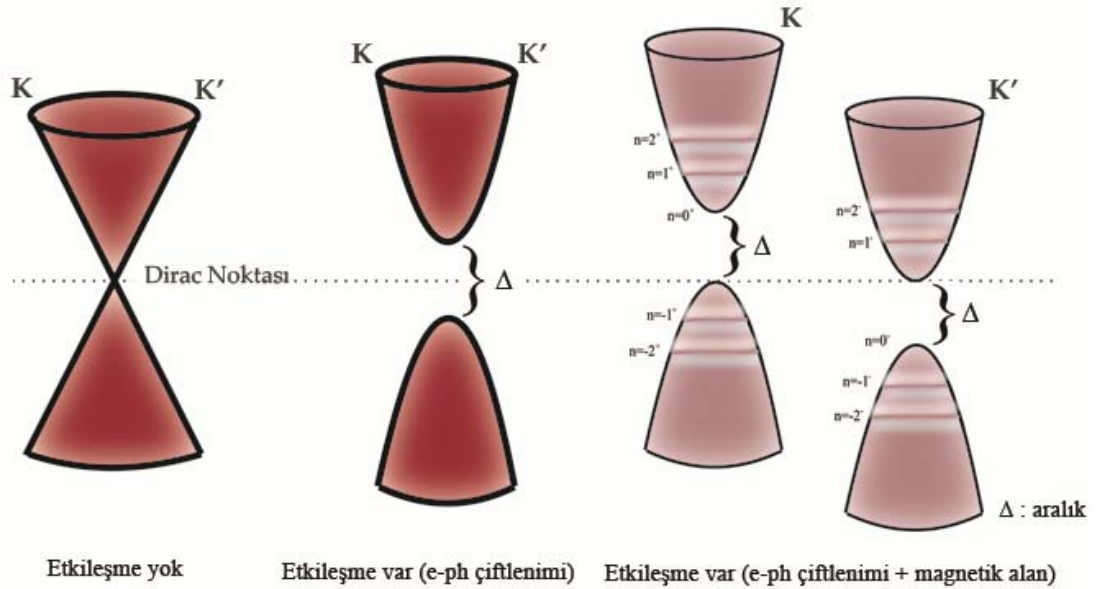
olarak hesaplanır. Burada Γ , $q_0 = 2 \text{ \AA}^{-1}$ ve $q_0 = 2.5 \text{ \AA}^{-1}$ değerleri için sırasıyla 0.444 ve 0.696 değerlerini alır.

Denklem 5.82' deki ifadeler bir önceki kesimde hesaplanan enerji ifadesine (Denklem 5.65) göre farklılık gösterir. Magnetik alanın olmadığı durumda elektron- A_{1g} fonon etkileşmesi sonucu oluşan enerji spektrumu sonlu bir enerji aralığına sahip olmakla birlikte K ve K' simetri noktalarında dejeneredir. Magnetik alanın devreye girmesiyle birlikte K ve K' noktalarındaki vadi dejenereliği kalkarak Landau düzeyleri oluşur. Diğer bir ifadeyle, elektron- A_{1g} fonon etkileşmesi kiral simetriyi kırmadan enerji aralığı oluştururken magnetik alanın devreye girmesiyle hem kiral simetri kırılır hemde vadi dejenereliği ortadan kalkar. Bu durum şekil 5.7'de görselleştirilmiştir. $n=0$ düzeyi için

Denklem 5.81'deki $\Sigma_{\mp\pm}^{(2)KK'} = \Sigma_{\pm\pm}^{(2)KK'}$ ($\Sigma_{\mp\pm}^{(2)K'K} = \Sigma_{\pm\pm}^{(2)K'K}$) ifadeleri eşit olur ve dolayısıyla K ve K' noktalarındaki enerji

$$\begin{aligned} E_{\pm}^K &= \pm \left[\left(\Sigma_{\mp\pm}^{(2)KK'} \right)^2 \right]^{1/2} + \Sigma_{\mp\pm}^{(2)KK'} \\ E_{\pm}^{K'} &= \pm \left[\left(\Sigma_{\mp\pm}^{(2)K'K} \right)^2 \right]^{1/2} - \Sigma_{\mp\pm}^{(2)K'K} \end{aligned} \quad (5.84)$$

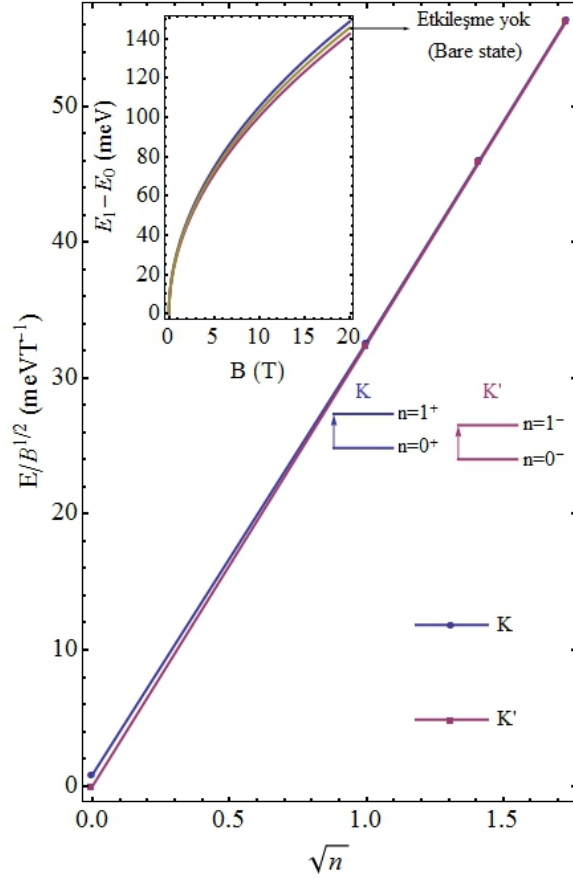
olarak elde edilir.



Şekil 5.7 Magnetik alan varlığında band yapısının değişimi

Elektron- A_{1g} fonon etkileşmesinin sonucu oluşan aralık magnetik alanın devreye girmesiyle alan bağımlı bir hal alır. $\sqrt{B}$ bağımlı mini band aralığı artık magnetik alanın sıfır olduğu durumdaki band aralığına (Denklem 5.64) indirgenemez. Sürekli bir spektrum kesikli bir spektrum haline getirecek etkinin küçük bir pertürbasyon olmayacağı aşikârdır (Peierls 2001). Bu nedenle sistem magnetik alanın etkisi altında girdiği takdirde bir önceki karakterini kaybeder ve sonuç olarak, iki durumu biri birine bağlayan herhangi bir limit durum söz konusu olmaz. $\sqrt{B}$ bağımlı bu aralık relativistik alan teorisi literatüründe dinamik kütleyle karşılık gelmektedir. 2+1 boyutta magnetik

alanın çeşni (flavor) simetrisini kırmasıyla oluşan bu dinamik kütle mekanizması Gusynin vd. (1994) çalışmasında incelenmiştir.



Şekil 5.8 Etkileşme durumunda Landau seviyeleri

Magnetik alan etkisi ile vadi dejenereliğinin kalkması sonucu Landau düzeylerini nasıl değiştiği, $q_0 = 2 \text{ \AA}^{-1}$ için şekil 5.8’de gösterilmiştir. Yeniden boyutlandırılan enerjinin $\sqrt{n}$ ile değişimine bakıldığı takdirde, yarılmanın başat olarak düşük enerji seviyelerinde olduğu gözlenmiştir. $n=0$ durumunda yarılma fazla iken n indisi artıkcça yarılmanın miktarı azalmıştır. İçerdeki grafikte ise $n=0$ ‘dan $n=1$ Landau durumuna geçiş enerjileri incelenmiştir. Elektron-fonon etkileşmesinin ve magnetik alanın varlığında, artan magnetik alan değerleri ile yarılmanın arttığı gözlenmiştir.

6. TARTIŞMA VE SONUÇ

2004 yılında serbest durumdaki grafen tabakasının sentezlenmesiyle birlikte grafen fiziğine dair yapılan araştırmaların sayısı dikkate değer bir şekilde artış göstermiştir. Yapılan araştırmalar arasında, elektron-fonon etkileşmesinin grafenin elektronik spektrumu üzerine etkisinin incelenmesi, grafen fiziği açısından önemli bir konu olmasına karşın bu alanda teorik anlamda çok fazla çalışma gerçekleştirilmemiştir. Tez konusunun kapsamı literatürdeki bu boşluk gözetilerek belirlenmiştir.

Öncelikle, grafenin düzlem içi fonon spektrumunun yüksek simetri noktalarındaki davranışı kuvvet sabiti yöntemi izlenerek incelenmiş ve bu noktalardaki bilinen frekans değerleri tekrar hesaplanmıştır. Grafenin düzlem içi fonon spektrumunda dört mod mevcuttur. İkincil olarak ise, Γ , K ve K' simetri noktalarındaki ve civarındaki bu dört modunun elektronlarla olan etkileşmesi analitik olarak incelenmiştir. Γ noktası civarındaki hem elektron- optik (E_{2g}) fonon etkileşme Hamiltonyeni ve hem de elektron-akustik fonon etkileşme Hamiltonyeni Ando'nun çalışmalarından yararlanılarak türetilmiştir. K ve K' noktalarında elektron- A_{1g} fonon etkileşme Hamiltonyeni yine Ando'nun ilgili çalışmasından elde edilmiştir. Frölich tipi toplam Hamiltonyen üniter dönüşüm teknikleri kullanılarak köşegenleştirilmiş ve elektron-fonon etkileşmelerinin elektronun öz-enerjisine olan katkıları hesaplanmıştır. Elde edilen ifadeler analiz edilerek şu sonuçlar çıkarılmıştır:

Optik modlar için elektron- E_{2g} fononu etkileşmesi sonucu grafende yeni bir tip polaronik oluşum gözlenmiştir. Bulunan sonuçlar dejenere olmayan band durumundaki standart öz-enerji hesaplarından farklılık göstermiştir. Kiral polaron dağılımı k bağımlı bir terim içerdiği gibi serbest bir terimde içermektedir. Bu serbest terim hem bandlar arası hem de band içi etkileşmeleri bir arada barındırmaktadır. Yine bu etkileşme sebebiyle Fermi hızı renormalize olmuş ve buna bağlı olarak değişen bir çiftlenim sabiti tanımlanmıştır. LO fonon-elektron etkileşmesinin TO'ya göre daha güçlü olduğu gözlenmiştir.

Akustik modlar için elektron-fonon etkileşmesi optik modlar için elde edilen sonuçlar ile paralellik gösterir. Optik modlara göre polaron oluşum enerjisi daha düşüktür. Yine fermi hızındaki değişim optik modlara göre daha azdır. Optik ve akustik modlardaki bu farklılıkların sebebi akustik modların enerji mertebesinin optik modlara oranla daha düşük olmasıdır. Bu nedenle, akustik fononlar grafenin enerji spektrumunda optik fononlar ile benzer etkiler yaratsa da, bu etkinin mertebesi daha düşüktür.

K ve K' noktalarında elektron- A_{1g} fonon etkileşme terimi dikkate alındığında sadece en yüksek frekanslı olan optik mod başattır. Yüksek frekanslı bu mod Kekulé tipi bir distorsiyona sebep olmakla birlikte enerji spektrumunda aralık oluşumuna sebep olur. Etkileşme Hamiltonyeni hem K ve hem de K' simetri noktalarının bilgisini içermekle birlikte sadece iki vadi arasında farklı bandlara saçılmaya izin vermektedir. Bu saçılma süreci ile kiral simetri kırılmadan aralık oluşumu gerçekleşir. Bu çalışma, sıfır sıcaklıkta elektron- A_{1g} fonon etkileşmesinden kaynaklanan küçük bir aralığın oluştuğu ilk teorik yaklaşım olma niteliğini taşır. Hesaplamalar her ne kadar sıfır sıcaklıkta yapılmış olsa da sonlu sıcaklıktaki hesaplar ile uyum içindedir.

Son olarak ise, grafen düzlemine dik homojen bir magnetik alanda elektron- A_{1g} fonon etkileşmesinin grafenin enerji spektrumuna olan katkısı araştırılmıştır. Elektron- A_{1g} fonon etkileşmesi kiral simetriyi kırmadan aralık oluştururken, magnetik alanın devreye girmesiyle birlikte kiral simetri kırılıp Landau düzeyleri oluşur. Kiral simetrisinin kırılması sonucu vadi dejenerliği ortadan kalkar ve iletim ve değerlik bandları kaymaya uğrar. Artık K ve K' vadilerindeki enerji ifadeleri farklı vadiler arası hem aynı banda ve hem de farklı banda saçılma terimleri içerir. Burada oluşan band aralığının magnetik alan göre değişimi, vadi dejenereliğinin ortadan kalkması ile oluşan yarılmalar ve farklı düzeyler arası dipol geçişleri ($n=0 \rightarrow n=1$) incelenmiştir. Bu anlamda elde edilen sonuçların literatürdeki ilgili çalışmalara ışık tutacağı düşünülmektedir

Elde edilen sonuçların, grafen fiziğini anlamak adına önemli bir bakış açısı kazandıracağı düşünülmektedir. Elektron-fonon etkileşmesinin grafenin yük taşıyıcıları üzerine olan etkisi muhtemel grafen tabanlı cihazların geliştirilmesinde önemli bir parametre olarak değerlendirileceği öngörülmektedir. Grafenin band aralığının magnetik

alan ile deęiřimi, band aralıęı mhendislięi kapsamında dikkate deęer bir konu olacaęı dřnlmektedir.

KAYNAKLAR

- Aitchison, I.Jr., and Hey, J.G. 2003. Gauge Theories in Particle Physics Vol. I, IOP Publishing, 406p. UK.
- Ando, T. 2004. Theory of Electronic States and Transport in Carbon Nanotubes. Journal of Physics Society Japan, Vol.74, pp. 777-817.
- Ando, T., and Suzuura, H. 2008. Zone Boundary Phonon in Graphene and Nanotube. Journal of Physics Society Japan, 77 (044703).
- Araki, Y. 2011, Chiral Symmetry Restoration in Monolayer Graphene Induced in by Kekulé Distortion. Physical Review B 84, (113402).
- Araujo, P.T. ,Mafra, D.L. ,Sato, K. ,Saito, R. ,Kong, J., and Dresselhaus, M. S. 2012. Phonon self-energy corrections to non-zero wavevector phonon modes in single-layer graphene. Physical Review Letters 109, (046801).
- Avouris, P., and Dimitrakopoulos, C. 2012. Graphene: Synthesis and Applications. MaterialsToday, Vol. 15, pp. 86-97.
- Badalyan, S.M. and Peeters, F.M. 2012. Electron-phonon bound state in graphene. Physical Review B 85, (205453).
- Basko, D.M. 2007a. Theory of resonant multiphonon Raman scattering in graphene. Physical Review B 78, (125418).
- Basko, D. M. 2007b. Effect of inelastic collisions on multiphonon Raman scattering in graphene. Physical Review B 76, (081405) (R).
- Basko, D.M., and Aleiner, I.L. 2008. Interplay of Coulomb and electron-phonon interactions in graphene. Physical Review B 77, (041409) (R).
- Bjorken, J. D., and Drell, S. D. 1964. Relativistic Quantum Mechanics. McGraw-Hill, 314 p. New York.
- Blake, P., Brimicombe, P.D., Nair, R.R., Booth, T.J., Jiang, D., Schedin, F., Ponoramenko, L.A., Morozov, S.V., Gleeson, H.F., Hill, E.W., Geim, A.K., and Novoselov, K.S. 2008. Graphene-Based Liquid Crystal Device. Nano Letters, Vol. 8 (6), pp. 1704-1708.
- Boehm, H. P., Clauss A., Fischer G. O., and Hofmann U. 1962. Das Adsorptionsverhalten sehr dünner Kohlenstoffolien. Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie, Vol. 316 (3–4), pp. 119–127.

- Calandra, M. and Mauri, F. 2007. Electron-phonon coupling and electron self-energy in electron-doped graphene: Calculation of angular-resolved photoemission spectra. *Physical Review B* 76, (205411).
- Carbotte, J.P., Nicol, E.J., and Sharapov S.G. 2010. Effect of electron-phonon interaction on spectroscopies in graphene. *Physical Review B* 81, (04541).
- Choi, W., and Lee, J-W. 2012. *Graphene: Synthesis and Applications*. Taylor&Francis Group, 373 p. London.
- Dirac, P.A.M. 1935. *The Principles of Quantum Mechanics*. Oxford, 297 p. Great Britain.
- Dubay, O. and Kresse, G. 2003. Accurate density functional calculations for the phonon dispersion relations of graphite layer and carbon nanotubes. *Physical Review B* 67, (035401).
- Falkovsky, L.A. 2008. Symmetry constraints on phonon dispersions in graphene. *Physics Letters A*, Vol. 372 (31), pp. 5189-5192.
- Farjam, M., and Rafii-Tabar, H. 2010. Uniaxial strain on gapped graphene. *Physica E*, Vol. 42, pp. 2109-2114.
- Faugeras, C. ,Amado, M. ,Kossacki, P. ,Orlita, M. , Sprinkle, M., Berger, C. , de Heer W.A., and Potemski, M. 2009. Tuning the Electron-Phonon Coupling in Multilayer Graphene with Magnetic Fields. *Physical Review Letters* 103, (186803).
- Feynmann, R.P. 1955. Slow Electrons in a Polar Crystal. *Physical Review* 97, (660).
- Fogler, M. M., Novikov, D. S., and Shklovski, B. I. 2007. Screening of a hypercritical charge in graphene. *Physical Review B* 76, (233402).
- Fuchs, J-N., and Lederer, P. 2007. Spontaneous Parity Breaking of Graphene in the Quantum Hall Regime. *Physical Review Letter* 98, (016803).
- Giesbers, A. J. M., Ponomarenko, L. A., Novoselov, K. S., Geim, A. K., Katsnelson, M. I., Maan, J. and Zeitler, U. 2009. Gap opening in the zeroth Landau level of graphene. *Physical Review B* 80, (201403) .
- Giesbers, A. J. M., Zeitler, U., Katsnelson, M. I., Ponomarenko, L. A., Mohiuddin, T. M., and Maan, J. 2007. Quantum-Hall Activation Gaps in Graphene. *Physical Review Letters* 99, (206803).
- Giuliani, A., Mastropietro, V., and Porta, M. 2010. Lattice Gauge Theory Model for Graphene. *Physical Review B* 82, (121418R).
- Glare, P. G. W. 1983. *Oxford Latin Dictionary*. Oxford University Press. 2150 p. USA.

- Goerbig, M.O., Fuchs J.-N., Kechedzhi K. and Fal'ko V.I. 2007. Filling-Factor-Dependent Magnetophonon Resonance in Graphene. *Physical Review Letters* 99, (087402).
- Goler, S., Yan, J., Pellegrini, V., and Pinczuk, A. 2012. Raman spectroscopy of magneto-phonon resonances in graphene. *Solid State Communications* 152, (1289).
- Greiner, W. 2000. *Relativistic Quantum Mechanics Wave Equations*. Springer. 424 p. Newyork.
- Greiner, W., Muller, B., and Rafelski, J. 1985. *Quantum Electrodynamics of Strong Fields*. Springer-Verlag. 606 p. Berlin Hidelberg.
- Griffiths D. 1987. *Introduction to Elementary Particles*. Wiley. 249 p. Singapore.
- Gusynin, V.P., Miransky, V.A., and Shovkovy, I.A. 1994. Catalysis of Dynamical Flavor Symmetry Breaking by a Magnetic Field in 2+1 Dimensions. *Physical Review Letters* 73, (3499).
- Gusynin, V.P., Miransky, V.A., Sharapov, S.G., and Shovkovy, I.A. 2006. Exitonic gap, phase transition, and quantum Hall effect in graphene. *Physical Review B* 74, (195429).
- Harrison, W. A. 1980. *Electronic Structure and the Properties of Solids*. W. H. Freeman and Company, 586 p. San Francisco.
- Henriksen, E.A., Cadden-Zimansky, P., Jiang, Z., Li, Z.Q., Tung, L.C., Schwartz, M. E., Takita, M., Wang, Y.J., Kim, P., and Stormer, H.L. 2010. Interaction-Induced Shift of the Cyclotron Resonance of Graphene Using Infrared Spectroscopy. *Physical Review Letters* 104, (206801).
- Hwang, E.H., Sensarma R., and Das Sarma S. 2010. Plasmon-phonon coupling in graphene. *Physical Review B* 82, (195406).
- Iijima, S. 1991. Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature*, Vol. 354, pp. 56-58.
- Ishikawa, K, and Ando, T. 2006. Optical Phonon Interacting with Electrons in Carbon Nanotubes. *Journal of the Physical Society of Japan* 75, (084713).
- Jiang, Z., Henriksen, E.A., Tung, L C., Wang, Y.J., Schwartz, M.E., Han, M.Y., Kim, P. and Stormer, H. L. 2007b. Infrared Spectroscopy of Landau Levels in Graphene. *Physical Review Letters* 98, (197403).
- Jiang, Z., Zhang, Y., Stormer, H.L., and Kim, P. 2007a. Quantum Hall States near the Charge-Neutral Dirac Point in Graphene. *Physical Review Letters* 99, (106802).

- Jishi R.A., Dresselhaus M.S., and Dresselhaus G. 1993. Electron-phonon coupling and the electrical conductivity of fullerene nanotubules. *Physical Review B* 48, (11385).
- Kandemir B.S., and Altanhan T. 2008. Analytical approach to phonons and electron-phonon interactions in single-walled armchair carbon nanotubes. *Physical Review B* 77, (045426).
- Kandemir, B.S. 2013. Chiral Polaron Formation in Graphene. *Journal of Physics.:Condensed Matter* 25, (025302).
- Kandemir, B.S. and Mogulkoc, A. 2010a. Variational Approach for the Effects of Periodic Modulations on the Spectrum of Massless Dirac Fermion. *Eur. Phys. J. B* 74, (3).
- Kandemir, B. S. and Mogulkoc, A. 2010b. Boundaries of Subcritical Coulomb Impurity Region in Gapped Graphene. *Eur. Phys. J. B* 74, (4).
- Kandemir, B.S. and Mogulkoc, A. 2012. Zone Boundary Phonon Induced Mini Band Gap Formation in Graphene. *arXiv:1211.3528* (2012).
- Kane, C.L., and Mele, E.J. 2005. Quantum Spin Hall Effect in Graphene. *Physical Review Letters* 95, (226801).
- Kartheuser, E. 1972. Polarons in Ionic Crystals and Polar Semiconductors. American Elsevier Publication Co. 717 p. Amsterdam.
- Katsnelson, M.I. 2006b. Nonlinear screening of charge impurities in graphene. *Physical Review B* 74, (201401)
- Katsnelson, M.I. 2006a. Zitterbewegung, chirality, and minimal conductivity in graphene. *The European Physical Journal B* 51, (157).
- Katsnelson, M.I. 2007. Graphene: carbon in two dimensions. *Materialstoday*, Vol. 10, pp. 20-27.
- Katsnelson, M.I. 2012. Graphene: Carbon in Two Dimensions. Cambridge University Press, 366 p. New York.
- Katsnelson, M.I., Novoselov, K.S. and Geim, A.K. 2006. Chiral tunnelling and Klein paradox in graphene. *Nature*, Vol. 2, pp. 620-625.
- Kaxiras, E. 2003. Atomic and Electronic Structure of Solids. Cambridge University Press, 667 p. New York.
- Kittel, C. 1987. Quantum Theory of Solids. Wiley. 425 p. Canada.

- Krastajić, P.M., and Peeters, F.M. 2012. Energy-momentum dispersion relation of plasmarons in graphene. *Physical Review B* 85, (205454).
- Kroto, H.W., Heath, J.R., O'Brien, S.C., Curl, R.F., and Smalley, R.E. 1985. C₆₀: Buckminsterfullerene. *Nature*, Vol. 318, pp. 162-163.
- Landau, L.D. 1937. Zur Theorie der phasenumwandlungen II. *Phys. Z. Sowjetunion*, Vol. 11, pp. 26-35.
- Landau, L.D., and Pekar, S.I. 1948. Effectivnaya Massa Polyarona. *Zhurnal Eksperimentalnoi I Teoreticheskoi Fiziki*, Vol. 18, pp. 419-423.
- Lazzeri, M., Piscanec, S., Mauri, F., Ferrari, A.C., and Robertson, J. 2005. Electron Transport and Hot Phonons in Carbon Nanotubes. *Physical Review Letters* 95, (236802).
- Lazzeri, M., Attaccalite, C., Wirtz, L., and Mauri, F. 2008. Impact of the electron-electron correlation on phonon dispersion: Failure of LDA and GGA DFT functionals in graphene and graphite. *Physical Review B* 78 (081406), (R).
- Lazzeri, M., Piscanec, S., Mauri, F., Ferrari, A.C., and Robertson, J. 2006. Phonon linewidths and electron-phonon coupling in graphite and nanotubes. *Physical Review B* 73, (155426).
- Lee, T.D., Low, F.E., and Pines, D. 1953. The Motion of Slow Electrons in a Polar Crystal. *Physical Review* 90, (297).
- Lew Yan Voon, L.C. and Willatzen, M. 2009. *The k·p Method, Electronic Properties of Semiconductors*. Springer. 445 p. Heidelberg.
- Li, G., Luican, A., and Andrei, E.Y. 2007. Observation of Landau levels of Dirac fermions in graphite. *Nature*, Vol. 3, pp. 623-627.
- Li, G., Luican, A., and Andrei, E.Y. 2009. Scanning Tunneling Spectroscopy of Graphene on Graphite. *Physical Review Letters* 102, (176804).
- Li, W-P., Wang, Z-W., Yin, J-W., and Yu, Y-F.J. 2012. The effects of the magnetopolaron on the energy gap opening in graphene. *Journal of Physics: Condensed Matter* 24, (135301).
- Mahan, G. D. 1990. *Many-Particle Physics*. Kluwer Academic/Plenum Publishers. 785 pp. New York.
- Maultzch, J., Reich, S., Thomsen, C., Requardt, H., and Ordejon, P. 2004. Phonon Dispersion in Graphite. *Physical Review Letters* 92, (075501).

- Marconcini, P., and Macucci, M. 2011. The k.p method and its application to graphene, carbon nanotubes and graphene nanoribbons: the Dirac equation. *La Rivista del Nuovo Cimento*, Vol. 34, pp. 489-584.
- Mariani, E. and Oppen, Felix von. 2010. Temperature-dependent resistivity of suspended graphene. *Physical Review B* 82, (195403).
- Mariani, E., and Oppen, Felix von. 2008. Flexural Phonons in Free-Standing Graphene *Physical Review Letters* 100, (076801).
- Mermin, N.D. 1968. Crystalline order in two dimensions. *Physical Review* Vol. 176, pp. 250-254.
- Mohr, M., Maultzsch, J., Dobardžić, E., Reich, S., Milošević, I., Damnjanović, M., Bosak, A., Krisch, M, and Thomsen, C. 2007. Phonon dispersions of graphite by inelastic x-ray scattering. *Physical Review B* 76, (035439).
- Nomura, K, and MacDonald, A. H. 2006. Quantum Hall Ferromagnetism in Graphene. *Physical Review Letters* 96, (256602).
- 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).
- Novoselov, K.S. 2011. Nobel Lecture: Graphene: Materials in the Flatland. *Reviews of Modern Physics* 83, (3).
- Novoselov, K.S., Jiang, D., Schedin, F., Booth, T.J. , Khotkevich, V.V., Morozov, SV. , and Geim, A.K. 2005. Two-dimensional atomic crystals. *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* 102, (10451) .
- Novoselov, K.S., McCann, E., Morozov, S.V., Falko, V.I., Katsnelson, M.I., Zeitler, U., Jiang, D., Schedin, F. and Geim, A.K. 2006. Unconventional quantum Hall effect and Berry's phase of 2π in bilayer graphene. *Nature Physics* 2, (177).
- Novoselov, K.S. and Geim, A.K. 2007. The rise of graphene. *Nature*, Vol. 6, pp. 183-191.
- Park C-H., Gustino F., Cohen M.L. And Louie S.G. 2007. Velocity Renormalization and Carrier Lifetime in Graphene from the Electron-Phonon Interaction. *Physical Review Letters* 99, (086804).
- Park, C-H. ,Giustino, F.,Cohen, Marvin, L., and Louie, S.G. 2007. Velocity Renormalization and Carrier Lifetime in Graphene from the Electron-Phonon Interaction. *Physical Review Letters* 99, (086804).
- Partoens, B. and Peeters, F.M. 2006. From graphene to graphite: Electronic structure around the K point. *Physical Review B* 74, (075404).

- Peierls, R.E. 1935. Quelques proprietes typiques des corps solides. Ann. I. H. Poincare Vol. 5, pp. 177-222.
- Peierls, R. E. 2001. Quantum Theory of Solids. Oxford. 229 p., Great Britain.
- Pereira, A. L. C. 2009. Splitting of critical energies in the $n=0$ Landau level of graphene. New Journal of Physics 11, (095019).
- Pereira, V.M., Kotov V.N., and Castro Neto, A. H. 2008. Supercritical Coulomb impurities in gapped graphene. Physical Review B 78, (085101).
- Pietronero L., Strässler S. , and Zeller H.R. , Rice M.J. 1980. Electrical conductivity of a graphite layer. Physical Review B 22, (904).
- Pisana, S., Lazzeri, M., Casiragh, I.C., Novoselov, K.S. , Geim, A.K. , Ferrari, A.C. and Mauri, F. 2007. Breakdown of the adiabatic Born-Oppenheimer approximation in graphene. Nature Materials 3, (198).
- Piscanec, S., Lazzeri, M., Mauri, F., Ferrari, A.C., and Robertson, J. 2004. Kohn Anomalies and Electron-Phonon Interaction in Graphite. Physical Review Letters 93, (185503).
- Pound, A., Carbotte, J.P., and Nicol, E.J. 2011. Effects of electron-phonon coupling on Landau levels in graphene. Physical Review B 84, (085125).
- Pound, A., Carbotte, J.P., and Nicol, E.J. 2011. Phonon structures in the electronic density of states of graphene in magnetic field. EPL 94, (57006).
- Pound, A., Carbotte, J.P., and Nicol, E.J. 2012. Magneto-optical conductivity in graphene including electron-phonon coupling. Arxiv:1204.1919v1.
- Rana, F., George P., A., Strait J., H., Jahan, D., Shriram, S., Chandrashekhar, Mvs. , and Spencer, M.G. 2009. Carrier recombination and generation rates for intravalley and intervalley phonon scattering in graphene. Physical Review B 79, (115447).
- Sadowski, M.L., Martinez G., Potemski, M., Berger, C., and de Heer W.A. 2006. Landau Level Spectroscopy of Ultrathin Graphite Layers. Physical Review Letters 97, (266405).
- Samsonidze, G.G. , Barros E.B. , Saito R. , Jiang J. , Dresselhaus G., and Dresselhaus M. S. 2007. Electron-phonon coupling mechanism in two-dimensional graphite and single-wall carbon nanotubes. Physical Review B 75, (155420).
- Sarma, S.D., and Yang, K. 2009. The enigma of the $\nu=0$ quantum Hall effect in graphene. Solid State Communications 149, (1502).

- Semenoff, W.G. 1984. Condensed-Matter Simulation of a Three-Dimensional Anomaly. *Physical Review Letters*, Vol. 53(26), pp. 2449-2452.
- Shytov, A.V., Katsnelson, M.I., and Levitov, L.S. 2007a. Atomic Collapse and Quasi-Rydberg States in Graphene. *Physical Review Letters* 99, (236801).
- Shytov, A.V., Katsnelson, M.I., and Levitov, L.S. 2007b. Vacuum Polarization and Screening of Supercritical Impurities in Graphene. *Physical Review Letters* 99, (246802).
- Stauber, T., Peres, N.M.R., and Castro Neto, A.H. 2008. Conductivity of suspended and non-suspended graphene at finite gate voltage. *Physical Review B* 78, (085418).
- Stauber, T., and Peres, N.M.R. 2008. Effect of Holstein phonons on the electronic properties of graphene. *Journal of Physics.:Condensed Matter*, 20 (055002).
- Stojanović, V. M., Vukmirović, N., Bruder, C. 2010. Polaronic signatures and spectral properties of graphene antidot lattices. *Physical Review B* 82, (165410).
- Strange, P. 1998. *Relativistic Quantum Mechanics with applications in condensed matter and atomic physics*. Cambridge University Press. 594 p. New York.
- Sung-Hoon, L., Hyun-Jong, C., Jinseong, H., Heejun, Y., Jaikwang, S., U-in, C., and Sunae, S. 2011. Band Gap Opening by Two-Dimensional Manifestation of Peierls Instability in Graphene. *ACS Nano*, Vol. 5 (4), pp. 2964-2969.
- Suzuura, H., and Ando, T. 2002. Phonons and electron-phonon scattering in carbon nanotubes. *Physical Review B* 65, (235412).
- Tse, W-K., and Das Sarma S. 2007. Phonon-Induced Many-Body Renormalization of the Electronic Properties of Graphene. *Physical Review Letters* 99, (236802).
- Wallece, P.R. 1946. The Band Theory of Graphite. *Physical Review Letters*, Vol. 71(9), pp. 622-634.
- Wang, Z-W., and Li, S-S. 2012. Lattice Relaxation of graphene under high magnetic field. *Journal of Physics.:Condensed Matter* 24, (265302).
- Woods, L.M., and Mahan, G.D. 2000. Electron-phonon effects in graphene and armchair (10,10) single-wall carbon nanotubes. *Physical Review B*, Vol. 61, pp. 10651-10663.
- Yan, J., Zhang, Y., Kim, P., and Pinczuk, A. 2007. Electric Field Effect Tuning of Electron-Phonon Coupling in Graphene. *Physical Review Letters* 98, (166802).
- Yang, K. 2007. Spontaneous symmetry breaking and quantum Hall effect in graphene. *Solid State Communications* 143, (27).

- Young, A.F., and Kim, P. 2009. Quantum interference and Klein tunnelling graphene heterojunctions. *Nature Physics*, Vol. 5, pp. 222-226.
- Zhang, Y., Jiang, Z., Small, J.P., Purewall, M.S., Tan, Y. W., Fazlollahi, M., Chudow, J. D., Jaszczak, J.A., Stormer, H.L., and Kim, P. 2006. Landau Level Splitting in Graphene in High Magnetic Fields. *Physical Review Letters* 96, (136806).
- Zhen, H.N., Ting, Y., Yun, H.L., Ying, Y.W., Yuan, P.F., and Ze, X.S. 2008. Uniaxial Strain on Graphene: Raman Spectroscopy Study and Band-Gap Opening. *ACS Nano*, Vol. 2 (11), pp. 2301-2305.
- Zhou, S.Y., Siegel, D.A., Fedorov, A.V. and Lanzara, A. 2008. Kohn anomaly and interplay of electron-electron and electron-phonon interactions in epitaxial graphene. *Physical Review B* 78, (193404).
- Zhou, S.Y., Gweon, G.H., Federov, A.V., First, P.N., De Heer W.A., Lee, D.-H., Guinea, F., Castro Neto, A. H. and Lanzara A. 2007. Substrate-induced band gap opening in epitaxial graphene. *Nature Materials* 6, (770).
- Zhu, J., Badalyan, S.M., and Peeters, F.M. 2012. Electron-Phonon Bound States in Graphene in a Perpendicular Magnetic Field. *Physical Review Letters* 109, (256602).

EK 1: Dirac Denklemi

Relativistik olmayan kuantum mekaniği için hareket denklemi Schrödinger dalga denklemi olarak bilinir. Schrödinger teorisi Lorentz invaryant bir teori değildir. Zamana ve konuma bağlı kısmi türevlerin mertebeleri eşit değildir. Bu teori tam olarak klasik relativistik olmayan dinamiğin muadilidir. Kuantum mekaniğinin relativistik eşdeğerini inşa edebilmek için relativistik parçacığı tasvir eden denklemin Lorentz invaryant olması gereklidir. Bunun için konum durumlarının (x, y, z) yanı sıra zaman (t) bağımlılığı da denklemin içinde açık bir şekilde bulunmalıdır. Dolayısıyla bu denklemin çözümü olacak ψ dalga fonksiyonu sadece x, y, z 'nin değil t 'nin de fonksiyonu olacaktır (Dirac 1935).

Relativistik enerji-momentum ifadesi $E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$ olmak üzere, Klein-Gordon denklemi

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = (-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + m^2 c^4)^{1/2} \psi(\vec{r}, t) \quad (1.1)$$

şeklinde ifade edilir. Dörtlü notasyonda bu denklem

$$-\hbar^2 \partial^\mu \partial_\mu \psi - m^2 c^4 \psi = 0 \quad (1.2)$$

olarak ifade edilir.

$$j^\mu = (\rho, \vec{j}) = \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*) \quad (1.3)$$

olmak üzere, dörtlü notasyondaki süreklilik denklemi

$$\partial^\mu j_\mu = 0 \quad (1.4)$$

olarak verilir. Klein-Gordon tasvirindeki güçlükler dörtlü akım ifadesinin zamansal bileşenini oluşturan olasılık yoğunluğunun yorumuyla baş gösterir. Bu güçlüğü

açıklayabilmek için Schrödinger ve Klein-Gordon tasvirindeki olasılık yoğunlukları sırasıyla,

$$\begin{aligned}\rho_{\text{Schrödinger}} &= \psi^* \psi \\ \rho_{\text{Klein-Gordon}} &= \frac{i\hbar}{2mc^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right)\end{aligned}\quad (1.5)$$

şeklinde göstermek faydalı olabilir. Klein-Gordon denkleminin zamana bağımlı ikinci mertebeden türev içermesi nedeniyle olasılık yoğunluğu ifadesinde zamana bağımlı birinci mertebeden türevler mevcuttur. Bu durum negatif olasılık yoğunluğunu mümkün kılmaktadır. N normalizasyon sabiti olmak kaydıyla Klein-Gordon denklemine ait düzlem dalga çözümleri $\psi = Ne^{i(\vec{p}\cdot\vec{x}-Et)/\hbar}$ şeklindedir. Dolayısıyla, serbest durum için olasılık yoğunluğu

$$\rho = 2|N|^2 E \quad (1.6)$$

olarak verilir. Negatif enerjili durumlar için olasılık yoğunluğu negatif çıkmaktadır (Aitchison and Hey 2003). Bu durum olasılık yorumunu sekteye uğratır. Aynı zamanda Klein-Gordon denklemi spin bilgisini de içermez. Bu anlamda Klein-Gordon denklemi, kaonlar ve pionlar gibi spin-sıfır parçacıkları için uygun bir denklemdir (Greiner 2000). Ancak nötron, proton ve elektron gibi bilinen birçok parçacığın spinleri sıfır değildir. Bu sebeple Klein-Gordon denklemi spini sıfırdan farklı olan parçacıklar için relativistik dinamiği tasvir edemez.

Dirac denkleminin kökenine ilişkin iki önemli argüman mevcuttur. Bunlardan bir tanesi simetri, diğeri ise enerji argümanıdır. Lorentz dönüşümleri zamanı ve uzayı dört boyutlu tek bir niceliğe birleştiren dönüşümlerdir. Relativistik kuantum teorisinin altında yatan temel denklem bu birleşmeyi barındırmalıdır. Bunun anlamı, denklemin uzaysal ve zamansal kısımları arasında tam bir simetri olması gerekliliğidir. Birinci dereceden zaman türevi ve ikinci dereceden uzaysal türev içermesi sebebiyle Schrödinger denklemi bu simetriyi içermez. Bu nedenle uzaysal türevler lineer olmalıdır (Strange

1998). Momentumun bileşenlerini ve enerjiyi temsil eden diferansiyel operatörler sırasıyla,

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \quad (1.7)$$

$$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (1.8)$$

şeklindedir. Denklem 1.7 ve Denklem 1.8 ifadelerindeki işaret farklılığı relativitenin gereğidir. Klasik relativitede serbest parçacığın enerjisi

$$\left[E/c - (m^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)^{1/2} \right] \psi = 0 \quad (1.9)$$

dalga denklemini sağlar. Denklem 1.9 ifadesi

$$\left[E/c + (m^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)^{1/2} \right] \psi = 0 \quad (1.10)$$

ifadesi ile soldan çarpılırsa, relativistik olarak invariant

$$\left[E^2/c^2 - m^2 c^2 - p_x^2 - p_y^2 - p_z^2 \right] \psi = 0 \quad (1.11)$$

ifadesi elde edilir. Momentum ve enerji ifadelerince lineer olan, Dirac'ın önerdiği denklem

$$\left[E/c + \alpha_x p_x + \alpha_y p_y + \alpha_z p_z + \beta mc \right] \psi = 0 \quad (1.12)$$

şeklindedir. Denklemin sol tarafı

$$\left[E/c - \alpha_x p_x - \alpha_y p_y - \alpha_z p_z - \beta mc \right] \psi = 0 \quad (1.13)$$

ifadesi ile çarpılırsa,

$$\left\{ E^2 / c^2 - \sum_{xyz} \left[\alpha_x^2 p_x^2 + (\alpha_x \alpha_y + \alpha_y \alpha_x) p_x p_y + (\alpha_x \beta + \beta \alpha_x) mc \right] - (\beta mc)^2 \right\} \psi = 0 \quad (1.14)$$

elde edilir. Denklem 1.11 ve Denklem 1.14 ifadeleri karşılaştırılırsa $\hat{\alpha}$ ve $\hat{\beta}$, lar için

$$\begin{aligned} \alpha_x^2 &= \alpha_y^2 = \alpha_z^2 = 1 \\ \alpha_x \beta + \beta \alpha_x &= \alpha_y \beta + \beta \alpha_y = \alpha_z \beta + \beta \alpha_z = 0 \\ \alpha_x \alpha_y + \alpha_y \alpha_x &= \alpha_y \alpha_z + \alpha_z \alpha_y = \alpha_x \alpha_z + \alpha_z \alpha_x = 0 \end{aligned} \quad (1.15)$$

bağıntılarını yazmak mümkündür (Dirac 1935). $\hat{\alpha}$ ve $\hat{\beta}$ matrisleri konvansiyonel temsilde Pauli spin matrisleri cinsinden, sırasıyla

$$\begin{aligned} \alpha_x &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{bmatrix} \\ \alpha_y &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{bmatrix} \\ \alpha_z &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_z \\ \sigma_z & 0 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (1.16)$$

ve

$$\beta = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{bmatrix} \quad (1.17)$$

şeklinde yazmak mümkündür. $\hat{\alpha}$ ve $\hat{\beta}$ matrislerinin çeşitli temsilleri olduğu gibi, $\vec{\sigma}$ Pauli matrislerinin de çeşitli temsilleri mevcuttur. Standart temsilde Pauli spin matrisleri

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.18)$$

şeklindedir. Bu koşulların sağlanması kaydıyla, enerji için geçerli bir ifade yazmak mümkün hale gelir. Relativistik teoride zaman ve uzay değişkenleri birbirleriyle bağlantılıdır. Sezgisel olarak zaman ve uzayın birliği çok açık değildir. Ancak özel relativitenin bu öğretisi doğrudur. Sonuç olarak, Dirac denklemi

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} &= -\hat{\alpha} \cdot \nabla \psi(\vec{r}, t) - \frac{imc}{\hbar} \hat{\beta} \psi(\vec{r}, t) \\ i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \hat{H} \psi(\vec{r}, t) = (c\hat{\alpha} \cdot \vec{p} + \hat{\beta} mc^2) \psi(\vec{r}, t) \end{aligned} \quad (1.19)$$

Denklem 1.19 dikkate alındığında ve, $\hat{\alpha}$ ve $\hat{\beta}$ matrislerinin 4×4 matrisler olduğu göz önünde bulundurulduğunda durağan durumlar için

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar} = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r}) \\ \psi_2(\vec{r}) \\ \psi_3(\vec{r}) \\ \psi_4(\vec{r}) \end{pmatrix} e^{-iEt/\hbar} \quad (1.20)$$

ifadesi elde edilir. Bu durumlar için zaman türevi alındığında, denklem özdeğer denklemi

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = (c\hat{\alpha} \cdot \vec{p} + \hat{\beta}mc^2)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (1.21)$$

şeklini alır. Denklem 1.21 serbest bir parçacığın Hamiltonyenini tanımlar. E ise enerji özdeğeridir. Eğer Denklem 1.20'deki çözüm $\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})e^{iEt/\hbar}$ olarak seçilmiş olsaydı, Denklem 1.21'e benzer bir denklem elde edilirdi. Ancak, denklemin sağ tarafındaki E ifadesi $-E$ ile değiştirilmesi gerekirdi. Böyle bir dalga fonksiyonu, hem zamanda ters yönde hareket eden bir parçacığı hem de negatif enerji durumuna sahip olan bir parçacığı temsil eder.

Elektromagnetik alan altındaki Dirac denklemi ve bunun eşleniğini

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} &= [c\hat{\alpha}(\vec{p} - e\vec{A}(\vec{r})) + V(\vec{r}) + \hat{\beta}mc^2]\psi(\vec{r}, t) \\ -i\hbar \frac{\partial \psi^\dagger(\vec{r}, t)}{\partial t} &= [c(-\vec{p} - e\vec{A}(\vec{r})) \cdot \psi^\dagger(\vec{r}, t)\hat{\alpha} + \psi^\dagger(\vec{r}, t)(V(\vec{r}) + \hat{\beta}mc^2)] \end{aligned} \quad (1.22)$$

şeklinde yazmak mümkündür. Bu denklemin relativistik olmayan limiti Pauli denklemine indirgenir. Pauli denklemi Schrödinger denkleminden farklı olarak spin bilgisi içeren Stern-Gerlach ($\vec{\sigma} \cdot \vec{B}$) terimi barındırır. Magnetik alan ifadesi sıfır olduğu takdirde ise Pauli denklemi spin bilgisi içeren Schrödinger denklemine dönüşür. Bir sonraki adım ise, Denklem 1.22'deki ilk denklemi $\psi^\dagger(\vec{r}, t)$ ile ikinci denklemi ise $\psi(\vec{r}, t)$ ile çarpıp, birbirilerinin farkını almaktır. Sonuç olarak,

$$i\hbar \left(\psi^\dagger \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} \psi \right) = \frac{\hbar c}{i} \left(\psi^\dagger \hat{\alpha} \cdot \nabla \psi + (\nabla \psi^\dagger) \cdot \hat{\alpha} \psi \right) \quad (1.23)$$

denklemi elde edilir. Türevin çarpım kuralından yararlanarak, bu denklem

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^\dagger \psi) = -\nabla \cdot (\psi^\dagger c\hat{\alpha} \psi) \quad (1.24)$$

biçimide yazılır. Bu denklem aslında süreklilik denklemidir. Denklem 1.24’de, olasılık yoğunluğu $\rho = \psi^\dagger \psi$ şeklinde ve akım yoğunluğu $\vec{j} = c \psi^\dagger \hat{\alpha} \psi$ olmak üzere

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{j} \quad (1.25)$$

şeklinde yazılabilir. Bu durumda olasılık yoğunluğu için bir denklem mevcuttur. Tüm uzay üzerinden integralin sıfır olması beklenen bir olgudur. Bu durum dört bileşenli dalga fonksiyonunun nasıl normalize edileceği hakkında bilgi verir. Denklem 1.20’deki dalga denklemi kullanılırsa

$$\rho = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^\dagger \psi d\vec{r} = \int_{-\infty}^{\infty} (\psi_1^* \psi_1 + \psi_2^* \psi_2 + \psi_3^* \psi_3 + \psi_4^* \psi_4) d\vec{r} = 1 \quad (1.26)$$

elde edilir. Görüldüğü üzere, Dirac denklemi için olasılık yoğunluğu pozitif tanımlıdır. Bu anlamda, Klein-Gordon denklemindeki Denklem 1.6 ifadesini olasılık yoğunluğundan ziyade yük yoğunluğu olarak adlandırmak daha doğrudur. Beklenen değer Denklem 1.26 ifadesinden yola çıkarak, relativistik olmayan duruma benzer olarak

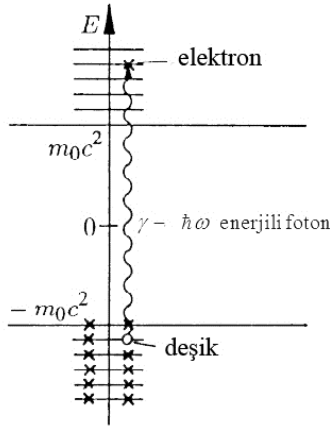
$$\langle \hat{A} \rangle = \int \psi^\dagger \hat{A} \psi dV \quad (1.27)$$

şeklinde tanımlanır. Dolayısıyla, biçimsel olarak Dirac kuantum mekaniği, relativistik olmayan teoriye oldukça benzerlik gösterir (Strange 1998).

Nötrinolar gibi kütesiz spin $\frac{1}{2}$ parçacıklarını tasvir etmek için Weyl tarafından 1929 yılında iki bileşenli bir denklem önerilmiştir. Bu denklem, Dirac denkleminin kütesiz muadili olmak kaydıyla

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r})}{\partial t} = c \hat{\alpha} \cdot \vec{p} \psi(\vec{r}) \quad (1.28)$$

şeklinde yazılır. Bu durumda, Dirac denklemi artık β matrisini içermez (Greiner 2000).



Şekil 1 Dirac denizi (Greiner 2000)

Hem Dirac hem de Klein-Gordon denklemleri negatif enerjili çözümlere sahiptirler. İlk başlarda bu çözümlerin varlığı fiziksel olarak yorumlanamamıştır. Gerçek elektronların bulunmadığı vakum durumunda tüm negatif enerji durumları elektronlar ile doludur. Bu negatif enerji sürekliliğine (continuum) Dirac denizi denir. Dirac denizindeki bir elektron belirli frekanstaki bir ışımayı soğurabilir. Eğer enerji aralığından daha büyük $\hbar\omega$ enerjili bir foton soğurulursa ($\hbar\omega > 2m_0c^2$), Dirac denizindeki bir elektron pozitif enerji durumuna uyarılabilir (Şekil 1). Bu durumda, gerçek bir elektron ve deşik oluşur. Deşik (Hole) $+|e|$ yüküne sahip bir parçacık olarak davranır, çünkü $-|e|$ yüküne sahip bir elektron ile karşılaştığında yok olur. Relativistik kuantum mekaniğindeki bu yorum deşik teorisi olarak adlandırılır (Greiner 2000). Bu teori, elektronun anti parçacığı olan pozitronun 1932 yılında gözlenmesiyle doğrulanmıştır.

Dirac denkleminin tasvir ettiği spini $\frac{1}{2}$ olan parçacıklara Dirac parçacıkları ya da Dirac fermiyonları denir. Dirac denkleminin negatif ve pozitif enerjili öz durumları arasındaki simetri dönüşümüne parite denir. Dirac fermiyonlarının parite dönüşümü altında değişmez kalmalarına kiral simetri denir. Kütleli fermiyonlar bu simetriyi kırar. Kütsüz fermiyonlar ise kiral simetriye sahiptirler. Kütsüz durumda kiralite tanımı helisite tanımı ile özdeştir. Öz durumları karakterize etmek için kullanılan helisite, spin

doğrultusu boyunca momentum operatörünün izdüşümü olarak tanımlanır. Helisite işlemcisi, kuantum mekaniksel olarak

$$\hat{h} = \frac{1}{2} \vec{\sigma} \frac{\vec{p}}{|p|} \quad (1.29)$$

şeklinde gösterilir. Parçacığın spini momentumu ile paralel ise sağ-elli olarak, anti paralel ise sol-elli olarak adlandırılır.

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Aybey MOĞULKOÇ

Doğum Yeri : Ankara

Doğum Tarihi : 11.09.1983

Medeni Hali : Evli

Yabancı Dili : İngilizce

Eğitim Durumu:

Lise : Ankara Atatürk Anadolu Lisesi (2000)

Lisans : Ankara Üniversitesi Fizik Mühendisliği Bölümü (2005)

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

Çalıştığı Kurum:

Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü, Araş. Gör. (2007-)

Yayınları:

Mogulkoc A. and Kandemir B.S., *Balkan Physics Letters*, **16**, 161006 (2009).

Kandemir B.S. and **Mogulkoc A.**, *Eur. Phys. J. B*, **74**, 391-396 (2010).

Kandemir B.S. and **Mogulkoc A.**, *Eur. Phys. J. B*, **74**, 535-541 (2010).