

ANKARA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

KARBON NANOTÜPLERİN ELEKTRONİK ÖZELİKLERİ

Günay AHİSKA

FİZİK ANABİLİM DALI

ANKARA
2009

Her hakkı saklıdır

TEZ ONAYI

Günay AHISKA tarafından hazırlanan “ **Karbon Nanotüplerin Elektronik Özellikleri**” adlı tez çalışması 02/07/2009 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği ile Ankara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı’nda **YÜKSEK LİSANS TEZİ** olarak kabul edilmiştir.

Danışman : Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR
Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik A.B.D

Jüri Üyeleri :

Başkan : Doç. Dr. Burhanettin ÇİÇEK
Ankara Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Kimya Mühendisliği A.B.D

Üye : Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR
Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik A.B.D

Üye : Doç. Dr. Adnan TEĞMEN
Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik A.B.D

Yukardaki sonucu onaylarım

Prof. Dr. Orhan ATAKOL
Enstitü Müdür

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

KARBON NANOTÜPLERİN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ

Günay Ahıska

Ankara Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR

Grafenin kıvrılarak nanometrik çapa ve mikrometrik uzunluğa sahip içi boş silindir şeklini almasıyla meydana gelen karbon nanotüpler, günümüzde hem teorik hem de deneysel fizikçilerin ilgilendiği bir boyutlu yapıların başında gelmektedir. Karbon nanotüplerin, hiçbir katkı maddesi olmaksızın sadece geometrik parametrelerinin (çapı, tüp yüzeyinin yönü, v.s.) değiştirilmesiyle elektronik özelliklerinin de değiştirilebilir olması ve bu özelliklerinden dolayı elektronik uygulamalarda önemli yer tutarlar. Çalışmanın ilk bölümünde, öncelikle bir grafen tabakasının kristal örgü yapısı, daha sonra ise sıkı bağlanma ve etkin kütle yaklaşımlarıyla grafenin elektronik özellikleri incelenmiş, enerji durum yoğunlukları elde edilmiştir. Çalışmanın son bölümünde ise grafenden yola çıkarak tek duvarlı karbon nanotüplerin kristal örgü ve geometrik yapısı incelenmiş, akıral karbon nanotüplerin enerji dağılım bağıntıları ve enerji durum yoğunlukları elde edilmiştir. Bu çalışmada, birçok alanda önemli rol oynayacak karbon nanotüplerin temel elektronik özellikleri incelenerek, gelecekte yapılacak çalışmalara zemin hazırlanmak amaçlanmıştır.

Temmuz 2009 53 Sayfa

Anahtar Kelimeler: Grafen, karbon nanotüpler

ABSTRACT

Master Thesis

ELECTRONIC PROPERTIES OF CARBON NANOTUBES

Günay Ahıska

Ankara University

Graduate School of Nature and Applied Sciences

Department of Physics

Supervisor: Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR

Recently, carbon nanotubes which are formed rolling a graphene sheet into a hollow cylinder having diameters in nanometric scales and lengths in micrometers are one of the center of interest in quasi one-dimensional structures for both theoretical and experimental condensed matter physicists. Without doping, only changing their geometrical parameters is sufficient to change electronic properties and thus they have potential applications in both electronics and opto-electronics. In the first part of the thesis, firstly crystal lattice structure of a graphene sheet is studied, next electronic properties of graphene are analyzed within the frame work of tight binding and effective mass approaches, and then the density of states of graphene is investigated. Finally, crystal lattice and geometric structures of single walled carbon nanotubes are analyzed. The thesis aims to prepare necessary background to understand more sophisticated electronic properties of such structures which play vital role in future electronics.

July 2009 53 Pages

Key Words: Graphene, carbon nanotubes

TEŞEKKÜR

Çalışmalarımı yönlendiren, çalışmalarımın her aşamasında bilgi, öneri ve yardımlarını esirgemeyen danışman hocam sayın Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR'e, çalışmalarım süresince birçok fedakârlık göstererek beni destekleyen aileme en derin duygularıyla teşekkür ederim.

Günay Ahıska

Ankara,

İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	i
ABSTRACT	ii
TEŞEKKÜR	iii
SİMGELER DİZİNİ	vi
ŞEKİLLER DİZİNİ	vii
ÇİZELGELER DİZİNİ	viii
1.GİRİŞ	1
2.GRAFEN.....	3
2.1Grafenin Örgü Yapısı	5
2.2Grafende Sıkı Bağlanma Yaklaşımı	7
2.3Grafende Etkin Kütle Yaklaşımı	10
2.4Grafenin Enerji Durum Yoğunlukları.....	19
3.KARBON NANOTÜPLER	27
3.1Tek Duvarlı Karbon Nanotüpün Örgü Yapısı	28
3.2Karbon Nanotüplerin Elektronik Özellikleri	34
3.2.1Bölge katlama yaklaşımı.....	35
3.2.2Akıral karbon nanotüplerin enerji dağıtım bağıntıları.....	37
3.2.3Karbon nanotüplerin enerji durum yoğunlukları	41
4.TARTIŞMA VE SONUÇ.....	44

KAYNAKLAR	46
EK 1 Grafenin Enerji Durum Yoğunlukları	47
ÖZGEÇMİŞ.....	53

SİMGELER DİZİNİ

E	Toplam Enerji
V_f	Fermi Hızı
H	Hamiltonyen
Ψ	Dalga Fonsiyonu
$\vec{\sigma}$	Pauli Spin Matrisleri
$\vec{a}, \vec{b}$	Örgü Birim Vektörleri
$\vec{a}^*, \vec{b}^*$	Ters Örgü Vektörleri

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 1.1 Karbonun nano yapıları.....	2
Şekil 2.1 Grafenin elektronik bant yapısı.....	4
Şekil 2.2 Grafenin örgü yapısı ve birinci Brillouin bölgesi	7
Şekil 2.3 Grafende sıkı bağlanma modeli	10
Şekil 2.4 Grafende birim örgü vektörleri ve Brillouin bölgesinde simetri noktaları	11
Şekil 2.5 $X(E)$ -E grafiği	22
Şekil 2.6 Grafenin enerji durum yoğunluğu.....	26
Şekil 3.1 Tek duvarlı karbon nanotüp demetlerinin ve çok duvarlı karbon nanotüpün yüksek çözünürlüklü iletim elektron mikroskopundaki resimleri....	27
Şekil 3.2 Karbon nanotüpün örgü yapısı.....	29
Şekil 3.3 Grafenin 3 çeşit rulolanışı.....	30
Şekil 3.4 Karbon altıgen örgü içindeki bağlar ve bunlara karşılık gelen bantlar	35
Şekil 3.5 Bant katlama şeması	36
Şekil 3.6 Akiral karbon nanotüplerin birinci Brillouin bölgeleri.....	37
Şekil 3.7 Akiral karbon nanotüplerin bant yapıları.....	40
Şekil 3.8 (5,5) Koltuk nanotüp enerji durum yoğunluğu	42
Şekil 3.9 (9,0) ve (10,0) Zikzak nanotüplerin enerji durum yoğunlukları	42

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 3.1 (n, m) karbon nanotüp için yapısal parametreler.....	33
--	----

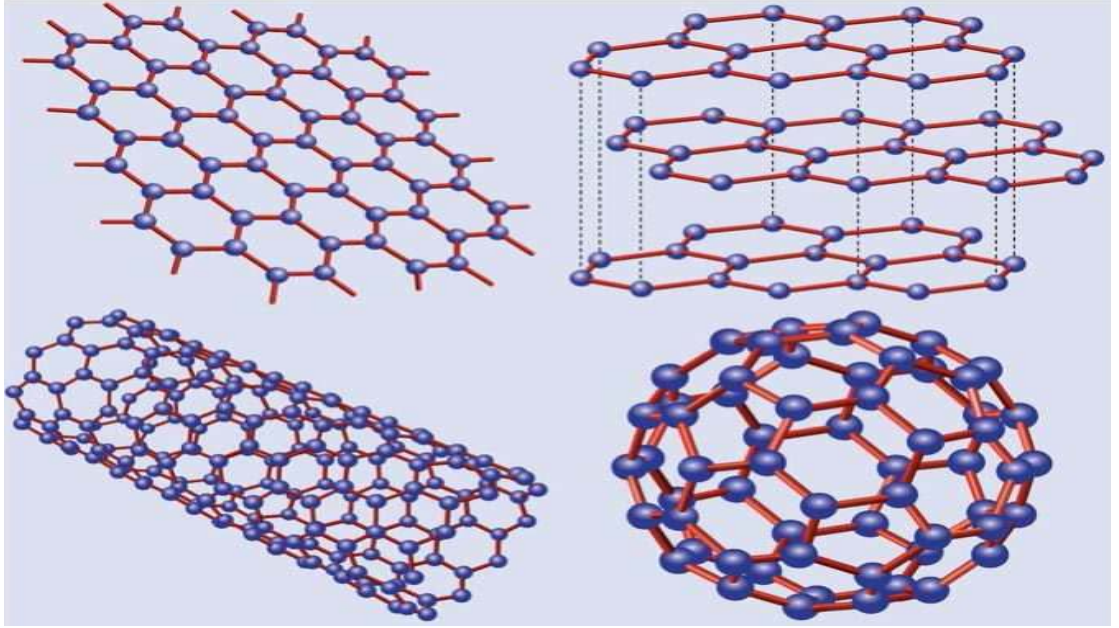
1.GİRİŞ

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

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

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

Fullerenler, karbon atomlarının küresel olarak düzenlenmesinden meydana gelen moleküllerdir ve sarmalanmış grafen olarak düşünülerek, grafenden elde edilebilirler. Karbon nanotüpler ise grafenin nanometrik çapa ve mikrometrik uzunluğa sahip içi boş silindir şeklinde rulolanmış, sadece altıgen yapıya sahip bir boyutumsu yapılardır. Karbonun çeşitli allotropları Şekil 1'de gösterilmiştir.



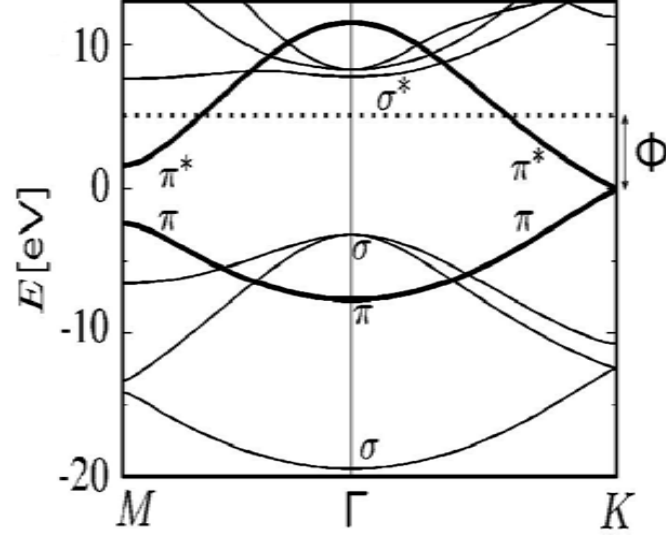
Şekil 1.1 Karbonun nano yapıları. Grafen (sol üstte), karbon atomlarının bal peteği örgüsünden meydana gelmiştir. Grafit (sağ üstte), grafen tabakalarının üst üste konularak oluşturduğu yapılardır. Karbon nanotüpler (sol altta) grafenin silindirik şeklinde rulolanmış halidir. Fullerenler(C_{60}) ise karbon atomlarının beşgen yüzeyler oluşturmasıyla meydana gelen küre şeklindeki yapılardır(Neto, Guniea, Peres, Novoselev, Geim 2007)

2.GRAFEN

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

İlginç yapıya ve elektronik esnekliğe sahip olması, grafeni kimyasal ve yapısal olarak değiştirilebilir yapmaktadır. Grafenin yapısal esnekliği, elektronik özelliklerini yansıtır. σ bantı, örgü yapısı içindeki tüm allotropların dayanıklılığından sorumludur. Pauli prensibinden dolayı bu bağlar dolmuş kabuklara sahip olduğundan derin valans bantı oluştururlar. Düzlemsel yapıya dik etkisiz p orbitali, π bandının biçimlenmesine sebep olan komşu karbon atomlarıyla kovalent bağ yapar. π bantı yarı doludur çünkü her p orbitali bir tane fazladan elektrona sahiptir. Bu yarı dolu bantlar grafenin elektronik özelliklerinde rol oynarlar. Şekil 2.1 'de yüksek simetri noktaları $M - \Gamma - K$ yönleri boyunca grafenin elektronik bantları gösterilmiştir. π ve π^* bantları, altıgen Brillouin bölgesinin köşe noktalarına karşı gelmektedir. Bu köşe noktaları, genellikle K harfi ile gösterilir. Sonuç olarak grafen, altıgen Brillouin bölgesinin altı farklı K noktasına indirgenmiş Fermi yüzeyine sahip özel yarı metaldir. Bağlanma ve antibağlanma σ bantları enerjileri tamamen ayrılmıştır. (Γ ' da $>10\text{eV}$) Bu bantlar, grafenin elektronik özelliklerinde önemli rol oynamayacak kadar Fermi seviyesinden uzakta olduklarından, yarı deneysel hesaplamalarda sıklıkla ihmal edilirler.

Sıkı-bağlanma Hamiltonyeni ile oldukça basit bir şekilde tanımlanan geriye kalan iki π bandı, enerji dağılımları ve buna bağlı öz durumları için analitik çözümlere yol açarlar(Charlier 2007).



Şekil 2.1 Grafenin elektronik bant yapısı. Bağlanma σ ve antibağlanma σ^* bantları geniş bir yasak bant tarafından ayrılmıştır. π bağlanması (en son valans bantında) ve antibağlanma π^* (ilk iletim bantında) bantları Brillouin bölgesinin K noktalarına karşı gelir. Fermi enerjisi sıfırda sıfır noktasındadır ve Φ iş fonksiyonunu tanımlar. Vakum seviyesi üstünde (noktalı yatay çizgi) uzay- zaman süreklisinin durumlarını tanımlamak ve σ^* bantları ile birleştirmek zordur.(Charlier 2007)

Grafenin en ilginç yönlerinden biri, grafenin düşük enerji uyarımları olan kütsüz, Dirac fermiyonları olarak tasvir edilebilmesidir. Grafende, kimyasal potansiyel tamamen Dirac noktasıyla çakışır. Grafen içindeki Dirac fermiyonları ışık hızının üç yüzde biri olan V_f hızıyla hareket ettiklerinden kuantum elektrodinamiğinin birçok değişik özelliğini grafen içinde gösterebiliriz.(Neto, Guinea, Peres, Novoselev, Geim 2007)

2.1 Grafenin Örgü Yapısı

Grafen düzlemi $(\vec{a}, \vec{b})$ vektörleri tarafından tanımlanan ve her birim örgü hücresinde iki farklı karbon atomu (A, B) bulunan altıgen örgüdür. İki boyutlu grafenin yapısı ve birinci Brillouin bölgesi Şekil2.2' de gösterilmiştir. Burada birim örgü vektörleri,

$$\begin{aligned}\vec{a} &= \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 1) \\ \vec{b} &= \frac{a}{2}(\sqrt{3}, -1)\end{aligned}\tag{2.1}$$

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

$$\begin{aligned}\vec{\tau}_1 &= \left(\frac{a}{\sqrt{3}}, 0\right) \\ \vec{\tau}_2 &= \left(\frac{-a}{2\sqrt{3}}, \frac{a}{2}\right) \\ \vec{\tau}_3 &= \left(\frac{-a}{2\sqrt{3}}, \frac{-a}{2}\right)\end{aligned}\tag{2.2}$$

ile ifade edilir. Burada ki a , $a = 0.246nm$ ile verilen örgü sabitidir. Şekil2.2'de gösterildiği gibi A ve B olarak adlandırılan karbon atomlarını içeren bir altıgen birim örgü hücrenin alanı,

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

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

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

şeklinde ifade edilir.

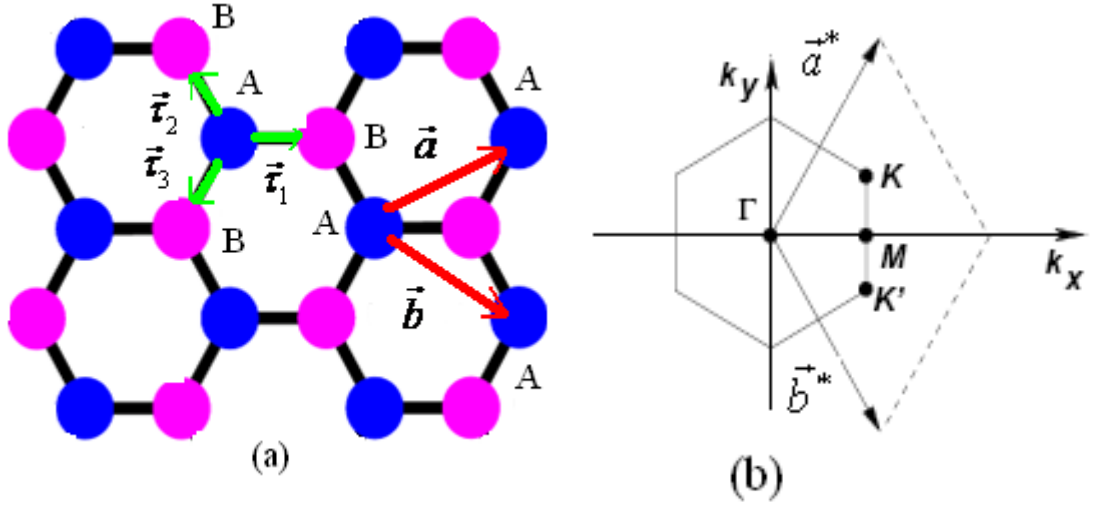
Altıgen olan birinci Brillouin bölgesinin alanı,

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

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

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

olarak bulunur.



Şekil 2.2 Grafenin örgü yapısı ve birinci Brillouin Bölgesi a.İki boyutlu grafenin örgü yapısında $\vec{a}$ ve $\vec{b}$ olarak adlandırılan birim örgü vektörleri. En yakın komşu atomlara uzaklığı belirten $\vec{\tau}_l$ ($l = 1, 2, 3$) birim öteleme vektörleri, b.İki boyutlu grafenin birinci Brillouin bölgesi. $\vec{a}^*$ ve $\vec{b}^*$ ise ters örgü vektörleri, Γ , M , K , K' birinci Brillouin bölgesinin en yüksek simetri noktalarıdır

2.2 Grafende Sıkı Bağlanma Yaklaşımı

Her karbon atomu dört valans elektronuna (ikisi $2s$ 'de, diğer ikisi $2p$ 'de) sahiptir. Şekil 2.2' de gösterildiği gibi, karbon atomları grafenin altıgen örgüsüne yerleştiğinde, farklı atomların dalga fonksiyonları üst üste gelir.

Ancak, simetriden dolayı p_z orbitallerinin, s ve p_x veya s ve p_y orbitallerinin üst üste gelmelerinin değeri sıfırdır. Sonuç olarak, grafendeki π bağlarını şekillendiren p_z elektronları, diğer valans elektronlardan bağımsız olarak değerlendirilebilir.

Bu π bant yaklaşımında, her bir atom konumu $p_z(\vec{r} - \vec{r}_A) [p_z(\vec{r} - \vec{r}_B)]$ 'ye bir orbital karşı gelmesi A atomuna [B atomunu] benzersiz şekilde tanımlar. Toplam Hamiltonienin elektronik spektrumunun türetilmesi için bu Hamiltoniene karşı gelen Schrödinger denklemi çözülmelidir ve Bloch teoremi $\{T_{\vec{a}_i} \Psi = e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_i} \psi, (i=1, \dots, 3)\}$ kullanılarak dalga fonksiyonları yazılmalıdır.

En yakın komşuluk sıkı-bağlanma modelinde, dalga fonksiyonları

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}_A} \psi_A(\vec{R}_A) \Phi(\vec{r} - \vec{R}_A) + \sum_{\vec{R}_B} \psi_B(\vec{R}_B) \Phi(\vec{r} - \vec{R}_B) \quad (2.7)$$

ile verilir, burada $\Phi(\vec{r})$, orijinde yerleşmiş karbon atomunun p_z orbitalinin dalga fonksiyonudur.

n ve m tamsayı olmak üzere A ve B atomlarının konum vektörleri $\vec{R}_A = n\vec{a} + m\vec{b} + \vec{c}_l$ ve $\vec{R}_B = n\vec{a} + m\vec{b}$ şeklinde ifade edilir. $-\gamma_0$ (elektronun en yakın komşu atoma sıçrama enerjisi, $-\gamma_0 = -2.8\text{eV}$ en yakın komşu karbon atomları arasındaki transfer integralidir. $\psi_A(\vec{R}_A)$ ve $\psi_B(\vec{R}_B)$ için Schrödinger denklemini,

$$\begin{aligned} \varepsilon \psi_A(\vec{R}_A) &= -\gamma_0 \sum_{l=1}^3 \psi_B(\vec{R}_A - \vec{c}_l), \\ \varepsilon \psi_B(\vec{R}_B) &= -\gamma_0 \sum_{l=1}^3 \psi_A(\vec{R}_B + \vec{c}_l) \end{aligned} \quad (2.8)$$

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

$\psi_A(\vec{R}_A) \propto f_A(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_A)$ ve $\psi_B(\vec{R}_B) \propto f_B(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_B)$ varsayılıp, bu bağıntılar (2.8) bağıntısında ki Schrödinger denklemlerinde yerine konulur ise ve $h_{AB} = -\gamma_0 \sum_l \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}_l)$ olmak üzere,

$$\begin{aligned} \varepsilon \vec{f}_B(\vec{k}) &= \vec{f}_B(\vec{k}) h_{AB}^* \\ \varepsilon \vec{f}_A(\vec{k}) &= \vec{f}_A(\vec{k}) h_{AB} \end{aligned} \quad (2.9)$$

denklemleri elde edilir. Oluşturulan bu denklemlerle $f_A(\vec{k})$ ve $f_B(\vec{k})$ ifadeleri için (2.9) bağıntısıyla verilen enerji öz değer denklemi

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

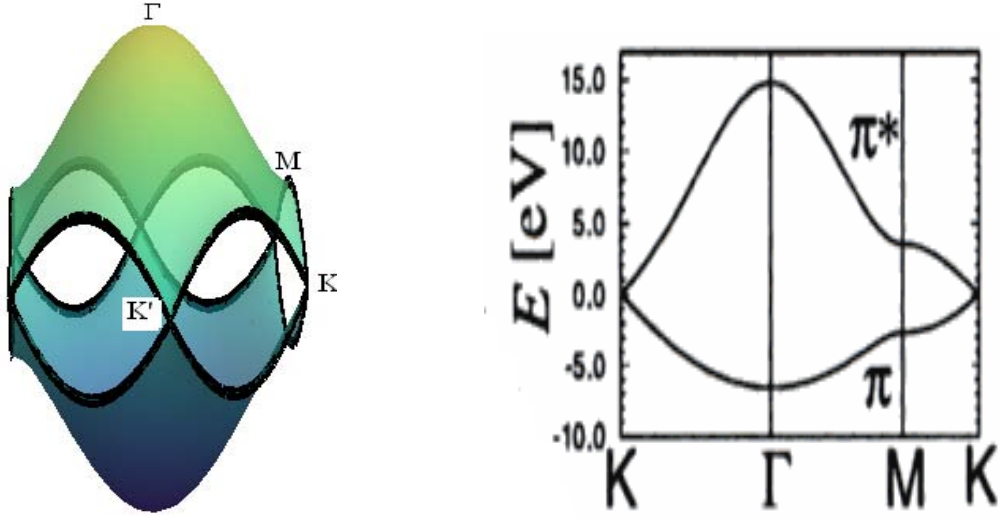
şeklinde yazılabilir. (2.10) öz değer denklemi çözülerek enerji öz değerleri , $\vec{k} = k_x \bar{x} + k_y \bar{y}$ olmak üzere

$$\varepsilon_{\pm}(\vec{k}) = \pm \gamma_0 \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{ak_y}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}ak_x}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{ak_y}{2}\right)} \quad (2.11)$$

şeklinde yazılabilir. Burada, (+), en yüksek π bantına, (-), en düşük π^* bantına ait enerjilerdir. (2.11) bağıntısı K ve K' noktalarında $\varepsilon_{\pm}(\vec{K}) = \varepsilon_{\pm}(\vec{K}') = 0$ değerini alır. K ve K' noktaları yakınında $\varepsilon_{\pm}(\vec{k} + \vec{K})$ ve $\varepsilon_{\pm}(\vec{k} + \vec{K}')$ özdeğerlerini, $|\vec{k}|a \ll 1$ için $\gamma = \frac{\sqrt{3}a\gamma_0}{2}$ olmak üzere,

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

şeklinde yazmak mümkündür. K ve K' noktaları çevresindeki bu şekildeki lineer dağılım, iki boyutlu grafenin çeşitli elektronik ve iletim özelliklerinde önemli bir rol oynar. Grafenin bant yapısı Şekil2.3' de gösterilmiştir.



Şekil 2.3 Grafende sıkı bağlanma modeli. $K \rightarrow \Gamma \rightarrow M \rightarrow K$ boyunca en yakın komşulukta sıkı bağlanma modeliyle elde edilen iki boyutlu grafenin π bant yapısı. Fermi seviyesi $\epsilon=0$ noktası boyunca uzanır. Brillouin bölgesinin tüm alanı boyunca gösterilen iki boyutlu grafen için enerji dağılım bağıntıları.

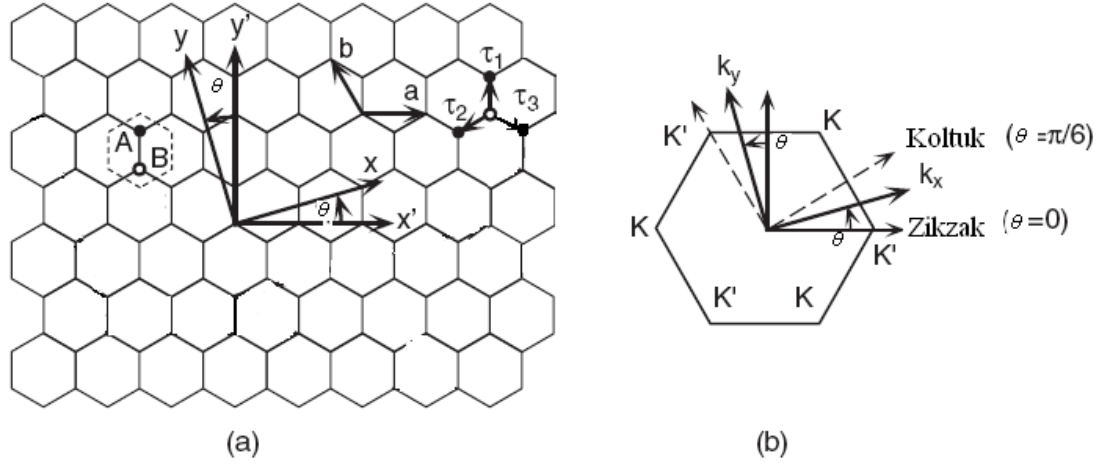
2.3 Grafende Etkin Kütle Yaklaşımı

Bir önceki bölümde de tarif ettiğimiz gibi grafen düzlemi $(\vec{a}, \vec{b})$ vektörleri tarafından tanımlanan ve her birim hücresinde iki farklı karbon atomu (A, B) bulunan altıgen örgüdür.

İki boyutlu grafenin yapısı ve birinci Brillouin bölgesi Şekil2.2'dekine benzer olarak farklı örgü vektörleri ile Şekil2.4' de de gösterilmiştir. Burada birim örgü vektörleri,

$$\begin{aligned}\vec{a} &= a(1, 0) \\ \vec{b} &= a(-1/2, \sqrt{3}/2)\end{aligned}\quad (2.13)$$

ile verilir.



Şekil 2.4 Grafende birim örgü vektörleri ve Brillouin bölgesinde simetri noktaları ,a.İki boyutlu grafenin kristal örgü yapısı ve koordinat sistemi. $\vec{a}$ ve $\vec{b}$ olarak adlandırılan iki öteleme vektörü. Bir altıgen birim hücre, A ve B ile adlandırılan iki karbon atomunu içeren kesikli çizgi ile gösterilmiştir. B ’den en yakın A ’lara doğrultulan üç birim öteleme vektörleri, $\vec{\tau}_l$ ($l=1,2,3$) ile verilir. Grafendeki değişmeden kalan x' ve y' koordinatları, x ve y ise sırayla tüp çevresi ve eksen boyunca olan koordinatlardır ve θ , krial açıdır, b.İki boyutlu grafenin birinci Brillouin bölgesi. K ve K' noktaları olarak adlandırılan altıgenin köşeleridir (Ando 2004)

En yakın komşu karbon atomlarını birleştiren vektörleri ise,

$$\begin{aligned}\vec{\tau}_1 &= a(0, 1/\sqrt{3}) \\ \vec{\tau}_2 &= a(-1/2, -1/2\sqrt{3}) \\ \vec{\tau}_3 &= a(1/2, -1/2\sqrt{3})\end{aligned}\quad (2.14)$$

ile verilir. $\vec{a}^*$ ve $\vec{b}^*$ ters örgü vektörleri ise bu notasyonda,

$$\begin{aligned}\vec{a}^* &= \left(\frac{2\pi}{a}\right)(1, 1/\sqrt{3}) \\ \vec{b}^* &= \left(\frac{2\pi}{a}\right)(0, 2/\sqrt{3})\end{aligned}\tag{2.15}$$

ile ifade edilirler. Grafende, iletim ve valans bantları K ve K' noktalarına değen π durumlarında oluşur. Bu K ve K' simetri noktalarının koordinatları ise,

$$\begin{aligned}\vec{K} &= \left(\frac{2\pi}{a}\right)(1/3, 1/\sqrt{3}) \\ \vec{K}' &= \left(\frac{2\pi}{a}\right)(2/3, 0)\end{aligned}\tag{2.16}$$

olarak elde edilir. $w = \exp(2\pi i / 3)$ olmak üzere, $\exp(i\vec{K} \cdot \vec{\tau}_1) = w$, $\exp(i\vec{K} \cdot \vec{\tau}_2) = w^{-1}$, $\exp(i\vec{K} \cdot \vec{\tau}_3) = 1$, $\exp(i\vec{K}' \cdot \vec{\tau}_1) = 1$, $\exp(i\vec{K}' \cdot \vec{\tau}_2) = w^{-1}$, $\exp(i\vec{K}' \cdot \vec{\tau}_3) = w$ bağıntılarını elde edebiliriz.

En yakın komşuluk sıkı bağlanma modeline dayanan etkin kütle veya $\vec{k} \cdot \vec{p}$ denklemi, K ve K' noktaları çevresindeki durumları tanımlar. Ancak, bant değişkenleri uygun bir şekilde seçilirse, etkin kütle şeması daha genel olur çünkü etkin Hamiltonienin biçimini sistemin simetrisi belirler. Şekil-4 de gösterildiği gibi, orijinal (x', y') koordinatlarının yanı sıra Θ tarafından orijin etrafında döndürülen (x, y) koordinatlarını da ele alırız.

İki boyutlu grafenin $\varepsilon=0$ Fermi seviyesi etrafındaki durumları için, toplam dalga fonksiyonu,

$$\begin{aligned}\psi_A(\vec{R}_A) &= e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}_A} F_A^K(\vec{R}_A) + e^{i\theta} e^{i\vec{K}'\cdot\vec{R}_A} F_A^{K'}(\vec{R}_A), \\ \psi_B(\vec{R}_B) &= -we^{i\theta} e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}_B} F_B^K(\vec{R}_B) + e^{i\vec{K}'\cdot\vec{R}_B} F_B^{K'}(\vec{R}_B)\end{aligned}\quad (2.17)$$

olarak yazılabilir. Bu denklemlerdeki $F_A^K, F_B^K, F_A^{K'} ve F_B^{K'}$ yavaş değişen zarf fonksiyonlarıdır.(2.17) denklemlerini iki bileşenli matris şeklinde şu şekilde yazabiliriz.

$$\begin{aligned}\psi_A(\vec{R}_A) &= \begin{pmatrix} e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}_A} & e^{i\theta} e^{i\vec{K}'\cdot\vec{R}_A} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_A^K \\ F_A^{K'} \end{pmatrix} = \vec{a}(\vec{R}_A)^\dagger \vec{F}_A(\vec{R}_A), \\ \psi_B(\vec{R}_B) &= \begin{pmatrix} -we^{i\theta} e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}_B} & e^{i\vec{K}'\cdot\vec{R}_B} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_B^K \\ F_B^{K'} \end{pmatrix} = \vec{b}(\vec{R}_B)^\dagger \vec{F}_B(\vec{R}_B)\end{aligned}\quad (2.18)$$

Burada, $\vec{a}$ ve $\vec{b}$,

$$\begin{aligned}\vec{a}(\vec{R}_A)^\dagger &= \begin{pmatrix} e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}_A} & e^{i\theta} e^{i\vec{K}'\cdot\vec{R}_A} \end{pmatrix}, \\ \vec{b}(\vec{R}_B)^\dagger &= \begin{pmatrix} -we^{i\theta} e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}_B} & e^{i\vec{K}'\cdot\vec{R}_B} \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (2.19)$$

iki bileşenli vektörler şeklinde, $\vec{F}_A$ ve $\vec{F}_B$ vektörleri ise,

$$\vec{F}_A = \begin{pmatrix} F_A^K \\ F_A^{K'} \end{pmatrix}, \vec{F}_B = \begin{pmatrix} F_B^K \\ F_B^{K'} \end{pmatrix}\quad (2.20)$$

şeklindedir. $\vec{F}$ için enerji öz değer denkleminin elde edilmesi için (2.18) denklemini (2.8) denkleminde yerleştirirsek

$$\begin{aligned}\varepsilon \vec{a}(\vec{R}_A)^\dagger \vec{F}_A(\vec{R}_A) &= -\gamma_0 \sum_{l=1}^3 \vec{b}(\vec{R}_A - \vec{\tau}_l)^\dagger \vec{F}_B(\vec{R}_A - \vec{\tau}_l) \\ \varepsilon \vec{b}(\vec{R}_B)^\dagger \vec{F}_B(\vec{R}_B) &= -\gamma_0 \sum_{l=1}^3 \vec{a}(\vec{R}_B + \vec{\tau}_l)^\dagger \vec{F}_A(\vec{R}_B + \vec{\tau}_l)\end{aligned}\quad (2.21)$$

bağıntıları elde edilir.

(2.21) bağıntısının ilk denklemini $g(\vec{r}' - \vec{R}_A)\vec{a}(\vec{R}_A)$ ile çarpıp, $\vec{R}_A$ üzerinden toplar isek

$$\begin{aligned} & \varepsilon \sum_{R_A} g(\vec{r} - \vec{R}_A) \vec{a}(\vec{R}_A) \vec{a}(\vec{R}_A)^\dagger \vec{F}_A(\vec{R}_A) \\ &= -\gamma_0 \sum_{l=1}^3 \sum_{R_A} g(\vec{r} - \vec{R}_A) \vec{a}(\vec{R}_A) \vec{b}(\vec{R}_A - \vec{\tau}_l)^\dagger \vec{F}_B(\vec{R}_A - \vec{\tau}_l) \end{aligned} \quad (2.22)$$

buluruz. Buradaki $g(\vec{r})$, $|r| \leq a$ aralığında yavaşça değişen ve $|r| \gg a$ için hızla azalan düzgünleştirici fonksiyondur. $g(\vec{r})$,

$$\begin{aligned} \sum_{R_A} g(\vec{r}' - \vec{R}_A) &= \sum_{R_B} g(\vec{r}' - \vec{R}_B) = 1 \\ \int d\vec{r} g(\vec{r}' - \vec{R}_A) &= \int d\vec{r}' g(\vec{r}' - \vec{R}_B) = \Omega_0 \end{aligned} \quad (2.23)$$

bağıntılarındaki koşulları sağlamalıdır. $g(\vec{r}' - \vec{R})$ fonksiyonu, $\vec{F}$ gibi düzgün bir fonksiyon ile çarpıldığında,

$$g(\vec{r}' - \vec{R}) \approx \Omega_0 \delta(\vec{r}' - \vec{R}) \quad (2.24)$$

delta fonksiyonu ile yer değiştirir. $g(\vec{r}' - \vec{R})$ fonksiyonunun (2.24)' deki özelliğinden dolayı (2.22) bağıntısındaki $\vec{F}_A(\vec{R}_A)$ ve $\vec{F}_B(\vec{R}_A - \vec{\tau}_l)$ fonksiyonları sırayla $\vec{F}_A(\vec{r}')$ ve $\vec{F}_B(\vec{r}' - \vec{\tau}_l)$ fonksiyonları ile yer değiştirir. Böylece (2.22) denklemi,

$$\begin{aligned}
& \varepsilon \sum_{R_A} g(\vec{r}' - \vec{R}_A) \vec{a}(\vec{R}_A) \vec{a}(\vec{R}_A)^\dagger \vec{F}_A(\vec{r}') \\
& = -\gamma_0 \sum_{l=1}^3 \sum_{R_A} g(\vec{r}' - \vec{R}_A) \vec{a}(\vec{R}_A) \vec{b}(\vec{R}_A - \vec{\tau}_l)^\dagger \vec{F}_B(\vec{r}' - \vec{\tau}_l)
\end{aligned} \tag{2.25}$$

halini alır. Burada $\vec{F}_B = (\vec{r}' - \vec{\tau}_l)$ fonksiyonunu Taylor serisine açtığımızda (2.25) denklemi,

$$\begin{aligned}
& \varepsilon \sum_{R_A} g(\vec{r}' - \vec{R}_A) \vec{a}(\vec{R}_A) \vec{a}(\vec{R}_A)^\dagger \vec{F}_A(\vec{r}') \\
& = -\gamma_0 \sum_{l=1}^3 \sum_{R_A} g(\vec{r}' - \vec{R}_A) \vec{a}(\vec{R}_A) \vec{b}(\vec{R}_A - \vec{\tau}_l)^\dagger \times [\vec{F}_B(\vec{r}') - (\vec{\tau}_l - \frac{\partial}{\partial \vec{r}'}) \vec{F}_B(\vec{r}') + \dots]
\end{aligned} \tag{2.26}$$

denklemine döndürür. (2.26) denkleminin sol tarafını bulmaya çalışırsak,

$$\sum_{R_A} g(\vec{r}' - \vec{R}_A) \vec{a}(\vec{R}_A) \vec{a}(\vec{R}_A)^\dagger \approx \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{2.27}$$

elde ederiz. Böylece (2.26) denkleminin ilk tarafını $\varepsilon \vec{F}_A(\vec{r})$ olarak ifade edebiliriz. (2.26) denkleminin sağ tarafını bulmaya çalıştığımızda ise,

$$\sum_{R_A} g(\vec{r}' - \vec{R}_A) \vec{a}(\vec{R}_A) \vec{b}(\vec{R}_A - \vec{\tau}_l)^\dagger \approx \begin{pmatrix} -w e^{i\theta} e^{-i\vec{K} \cdot \vec{\tau}_l} & 0 \\ 0 & e^{-i\theta} e^{-i\vec{K}' \cdot \vec{\tau}_l} \end{pmatrix} \tag{2.28}$$

elde ederiz. Bu sonuç, (2.26) denkleminin sağ tarafındaki ilk terimin yok olmasına neden olduğundan, ikinci terimi alıp, diğer terimleri de ihmal ederiz. Böylelikle, (2.26) denklemi,

$$\begin{aligned}
\varepsilon \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \vec{F}_A(\vec{r}') &= \gamma_0 \sum_l \begin{pmatrix} -w e^{i\theta} e^{-i\vec{K} \cdot \vec{\tau}_l} & 0 \\ 0 & e^{-i\theta} e^{-i\vec{K}' \cdot \vec{\tau}_l} \end{pmatrix} \vec{\tau}_l \cdot \partial r' \vec{F}_B(\vec{r}') \\
&= \gamma_0 \begin{pmatrix} -w e^{i\theta} \sum_l e^{-i\vec{K} \cdot \vec{\tau}_l} \cdot \vec{\tau}_l & 0 \\ 0 & e^{-i\theta} \sum_l e^{-i\vec{K}' \cdot \vec{\tau}_l} \cdot \vec{\tau}_l \end{pmatrix} \partial r' \vec{F}_B(\vec{r}')
\end{aligned} \tag{2.29}$$

şeklinde olur. (2.29) denkleminin sağ tarafındaki matris elemanlarını hesapladığımızda,

$$\begin{aligned}
\sum_l e^{-i\vec{K} \cdot \vec{\tau}_l} \cdot \vec{\tau}_l &= \sum_l e^{-i\vec{K} \cdot \vec{\tau}_l} \begin{pmatrix} \tau_l^x & \tau_l^y \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{3}}{2} w^{-1} a \begin{pmatrix} i & 1 \end{pmatrix} \\
\sum_l e^{-i\vec{K}' \cdot \vec{\tau}_l} \cdot \vec{\tau}_l &= \sum_l e^{-i\vec{K}' \cdot \vec{\tau}_l} \begin{pmatrix} \tau_l^x & \tau_l^y \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{3}}{2} \begin{pmatrix} -i & 1 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{2.30}$$

(2.30) denklemini elde ederiz ve son olarak (2.30) denklemini,

$$\begin{aligned}
\varepsilon \vec{F}_A(\vec{r}') &= \gamma_0 \begin{pmatrix} -w \frac{\sqrt{3}}{2} w^{-1} a \begin{pmatrix} i & 1 \end{pmatrix} & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} a \begin{pmatrix} -i & 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r'} \vec{F}_B(\vec{r}') \\
&= \frac{\sqrt{3}}{2} a \gamma_0 \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} -i & -1 \end{pmatrix} & 0 \\ 0 & \begin{pmatrix} -i & 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial/\partial x \\ \partial/\partial y \end{pmatrix} \vec{F}_B(\vec{r}') \\
&= \gamma \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} i - \frac{\partial}{\partial y} & 0 \\ 0 & -i \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix} \vec{F}_B(\vec{r}')
\end{aligned} \tag{2.31}$$

denklemine dönüşür. Burada, $\vec{k} = \vec{k}_x \bar{x} + \vec{k}_y \bar{y} \equiv -i\vec{\nabla} = -i\frac{\partial}{\partial x} \bar{x} - i\frac{\partial}{\partial y} \bar{y}$ olarak alınıp, $\vec{r}'$ yerine $\vec{r}$ yazıldığında (2.31) denklemi

$$\varepsilon \vec{F}_A(\vec{r}) = \gamma \begin{pmatrix} \bar{k}_x - i\bar{k}_y & 0 \\ 0 & \bar{k}_x + i\bar{k}_y \end{pmatrix} \vec{F}_B(\vec{r}) \quad (2.32)$$

denklemine dönüşür. (2.11) bağıntısını kullanarak (2.20) denklemini tekrar yazarsak,

$$\begin{aligned} \varepsilon F_A^K &= \gamma (\bar{k}_x - i\bar{k}_y) F_B^K \\ \varepsilon F_A^{K'} &= \gamma (\bar{k}_x + i\bar{k}_y) F_B^{K'} \end{aligned} \quad (2.33)$$

denklemleri elde edilir. $\vec{F}_B(\vec{r})$ için de benzer şekilde enerji öz değer denklemi,

$$\varepsilon \vec{F}_B(\vec{r}) = \gamma \begin{pmatrix} \bar{k}_x + i\bar{k}_y & 0 \\ 0 & \bar{k}_x - i\bar{k}_y \end{pmatrix} \vec{F}_A(\vec{r}) \quad (2.34)$$

şeklinde elde edilir. (2.20) bağıntısını kullanarak (2.34) denklemini tekrar yazarsak,

$$\begin{aligned} \varepsilon F_B^K &= \gamma (\bar{k}_x + i\bar{k}_y) F_A^K \\ \varepsilon F_B^{K'} &= \gamma (\bar{k}_x - i\bar{k}_y) F_A^{K'} \end{aligned} \quad (2.35)$$

denklemleri elde ederiz. (2.33) ve (2.35) denklemlerini birleştirdiğimizde Schrödinger denklemini,

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

olmak üzere

$$\begin{pmatrix} KA & KB & K'A & K'B \\ 0 & \gamma(\bar{k}_x - i\bar{k}_y) & 0 & 0 \\ \gamma(\bar{k}_x + i\bar{k}_y) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma(\bar{k}_x + i\bar{k}_y) \\ 0 & 0 & \gamma(\bar{k}_x - i\bar{k}_y) & 0 \end{pmatrix} \vec{F}(\vec{r}) = \varepsilon \vec{F}(\vec{r}) \quad (2.36)$$

şeklinde yazmak mümkündür.

(2.36) denklemindeki $\vec{F}(\vec{r})$,

$$\vec{F}(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \vec{F}^K(\vec{r}) \\ \vec{F}^{K'}(\vec{r}) \end{pmatrix} \quad (2.37)$$

(2.37) denklemindeki $\vec{F}^K(\vec{r})$ ve $\vec{F}^{K'}(\vec{r})$ ifadeleri ise,

$$\vec{F}^K(\vec{r}) = \begin{pmatrix} F_A^K \\ F_B^K \end{pmatrix}, \quad \vec{F}^{K'}(\vec{r}) = \begin{pmatrix} F_A^{K'} \\ F_B^{K'} \end{pmatrix} \quad (2.38)$$

ifadelerle temsil edilir. (2.33) ve (2.35) denklemlerini, $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ Pauli spin matrislerini kullanarak ve $\bar{k}_{x'} = \bar{k}_x$ ve $\bar{k}_{y'} = -\bar{k}_y$ olarak tekrar yazarsak,

$$\begin{aligned}\gamma(\vec{k} \cdot \vec{\sigma}) \vec{F}^K(\vec{r}) &= \varepsilon \vec{F}^K(\vec{r}), \\ \gamma(\vec{k} \cdot \vec{\sigma}) \vec{F}^{K'}(\vec{r}) &= \varepsilon \vec{F}^{K'}(\vec{r})\end{aligned}\tag{2.39}$$

denklemlerini elde ederiz. (2.39)'deki denklemler, nötrino için Weyl Denklemi olarak bilinen kütsüz rölativistik Dirac denklemdir.

Zarf fonksiyonları için yukarda ki Schrödinger denklemi en yakın komşu sıkı bağlanma modeline dayanarak elde edilir. Fakat bu denklemler, iki boyutlu grafenin genel bant yapısı için kesinlikle daha genel ve geçerlidir.(Ando 2004)

2.4 Grafenin Enerji Durum Yoğunlukları

Durum yoğunluğu, E, E + ΔE enerji aralığındaki durumların sayısını tanımlar ve

$$D(E) = \frac{1}{\Omega} \text{Tr}[\delta(E - H)]\tag{2.40}$$

ile tanımlanır. Burada Ω, düşünülen sistemin hacmi, spektral bir ölçü olan ve tam bazlar içinde genişletilebilen $\text{Tr}[\delta(E - H)]$ ise

$$G_n(E \mp i\delta) = \frac{1}{E - E_n \mp i\delta} \pm i\pi\delta(E - E_n)\tag{2.41}$$

Green fonksiyonun 0 (sıfır) limitindeki imajiner kısmını tanımlar. Böylece, durum yoğunluğu,

$$D(E) = -\frac{1}{\pi\Omega} \sum_{\{n\}} \text{Im} G_{\{n\}}(E_{\{n\}} \pm i\delta) = \frac{v_s v_v}{(2\pi)^d} \sum_n \int d^d k \delta(E - E_n)\tag{2.42}$$

bağıntısına dönüşür. Burada n , girilebilir enerji durumlarını, ν_s , spin dejenereliğini, ν_v , E_n enerji değerindeki işaretlerin sayısını(+,- olmak üzere 2 tane), d ise k uzayının boyutunu tanımlar. Grafenin durum yoğunluğunu hesaplarken, (2.11) bağıntısı E_n enerji değeri olarak alınır. Böylece grafenin durum yoğunluğunu,

$$D_g(E) = \frac{1}{\pi^2} \iint dk_x dk_y \delta \left(E - \gamma_0 \sqrt{1 + 4 \cos \frac{ak_y}{2} \cos \frac{\sqrt{3}ak_x}{2} + 4 \cos^2 \frac{ak_y}{2}} \right) \quad (2.43)$$

olarak elde ederiz. (2.43) bağıntısında $\cos \left(\frac{a\sqrt{3}k_x}{2} \right) \rightarrow x$ ve $\cos \left(\frac{ak_y}{2} \right) \rightarrow y$ dönüşümü yaparak grafenin durum yoğunluğunu,

$$D(E) = \frac{4}{a^2 \sqrt{3} \pi^2} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \frac{dx dy}{\sqrt{1-x^2} \sqrt{1-y^2}} \delta \left(E - \sqrt{1 + 4y^2 + 4xy} \right) \quad (2.44)$$

şeklinde elde ederiz. Dirac delta fonksiyonun, $\delta(f(x)) = \sum_{i=1} \delta(x - x_i) \left| \frac{df}{dx} \right|_{x_i}$ (x_i , $i=1, 2, 3$; $f(x)$ fonksiyonun kökleri olmak üzere) özelliği kullanılarak (2.44) bağıntısını yeniden düzenlenir ise,

$$\begin{aligned} D(E) &= \frac{4}{a^2 \sqrt{3} \pi^2} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \frac{dx dy}{\sqrt{1-y^2} \sqrt{1-x^2}} E \frac{\delta(x - x_1)}{-2y} \\ &= -\frac{2E}{a^2 \sqrt{3} \pi^2} \int_{-1}^1 \frac{dy}{\sqrt{1-y^2}} \frac{1}{\sqrt{1-x_1^2}} \frac{1}{y} \end{aligned} \quad (2.45)$$

bağıntısı elde edilir. Burada $x_1 = \frac{1}{4y}(-4y^2 + E^2 - 1)$ değerini alır. (2.45) bağıntısının paydasında bazı düzenlemeler yaptığımızda durum yoğunluğu,

$$D(E) = \frac{-16E}{a^2 \sqrt{3}\pi^2} \int_0^1 \frac{dy}{\sqrt{1-y^2}} \frac{1}{[-16y^4 + 8(E^2 + 1)y^2 - (E^2 - 1)^2]^{1/2}} \quad (2.46)$$

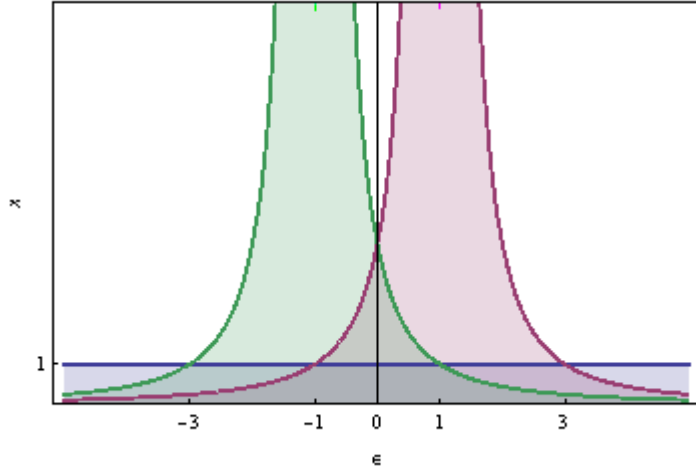
şekline dönüşür. Burada $y^2 = 1/x$ dönüşümü yaparak durum yoğunluğunu yeniden yazdığımızda,

$$D(E) = \frac{16E}{a^2 \sqrt{3}\pi^2} \int_1^\infty \frac{dx}{\sqrt{x-1}} \frac{1}{[-(E^2 - 1)^2 x^2 + 8(E^2 + 1)x - 16]^{1/2}} \quad (2.47)$$

bağıntısını elde ederiz. Bu bağıntıda paydanın kökleri,

$$\begin{aligned} x_1 &= 1 \\ x_2 &= 4 \frac{1}{(E+1)^2} \\ x_3 &= 4 \frac{1}{(E-1)^2} \end{aligned} \quad (2.48)$$

şeklinde elde edilir. Elde ettiğimiz bu köklerin E göre davranışı Şekil2.5'deki grafikte gösterilmiştir.



Şekil2.5 $x(E) - E$ grafiği

Böylece durum yoğunluğu,

$$D(E) = \frac{16E}{a^2 \sqrt{3}\pi^2} \int_1^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{X}} \quad (2.49)$$

olarak yazılabilir. Burada, $X = \prod_{i=1}^3 (x - x_i)$ şeklinde yazılabilir. (2.49) bağıntısındaki integral bir eliptik integraldir. Eliptik integrallerin özellikleri kullanılarak $X = (x - \alpha)(x - \beta)(x - \gamma)$ ifadesi $\infty > x > \alpha$ şartıyla x, E grafiğindeki bölgelere göre $\alpha > \beta > \gamma$, α, β, γ (Greenhill,1959) (2.48) bağıntısındaki kökler olmak üzere,

$$\begin{aligned}
x - \gamma &= (\alpha - \gamma) \csc^2 \Phi \\
x - \beta &= (\beta - \gamma) \Delta^2 \Phi \csc^2 \Phi \\
x - \alpha &= (\alpha - \gamma) \cot^2 \Phi
\end{aligned} \tag{2.50}$$

İfadelerinin çarpımı olarak yazılabilir. Burada, $\Delta \Phi = \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \Phi} = \sqrt{1 - k \sin^2 \Phi}$ ve $\kappa^2 = k = (\beta - \gamma)/(\alpha - \gamma)$ değerlerini alır. (2.50) bağıntılarını, $X = (x - \alpha)(x - \beta)(x - \gamma)$ bağıntısında yerine yazarak

$$\begin{aligned}
X &= (x - \alpha)(x - \beta)(x - \gamma) \\
&= (\alpha - \gamma)^2 (\beta - \gamma) \csc^2 \Phi \Delta^2 \Phi \csc^2 \Phi \cot^2 \Phi
\end{aligned} \tag{2.51}$$

elde ederiz. Böylelikle (2.49) bağıntısını da, (2.51) bağıntısını sağlayan eliptik integrallerin bu özelliğini kullanılarak çözebiliriz. X, E grafiğindeki Her bölge için k değeri hesaplanarak (2.49) bağıntısı her bölge için elde edilebilir.

$3 > E > 1$ aralığında, $\alpha > \beta > \gamma$, yani $x_3 > x_1 > x_2$ olmak üzere k ,

$$k = \frac{\beta - \gamma}{\alpha - \gamma} = \frac{x_1 - x_2}{x_3 - x_2} = \frac{1}{4E} \left[\frac{1}{4} (E^2 - 1)^2 - (E - 1)^2 \right] \tag{2.52}$$

değerini alır. $1 > E > -1$ aralığında $\alpha > \beta > \gamma$, yani $x_3 > x_2 > x_1$ ve $x_2 > x_3 > x_1$ olmak üzere k ,

$$k = \frac{x_2 - x_1}{x_3 - x_1} = \frac{4E}{(E+1)^2 - \frac{1}{4}(E^2-1)^2} + 1 \quad (2.53)$$

değerini alır. Son olarak $x_2 > x_3 > x_1$ aralığında ise k,

$$k = \frac{x_3 - x_1}{x_2 - x_1} = \frac{4E}{(E-1)^2 - \frac{1}{4}(E^2+1)^2} + 1 \quad (2.54)$$

değerini alır. $-1 > E > -3$ $\alpha > \beta > \gamma$, $x_2 > x_1 > x_3$ olmak üzere k,

$$k = \frac{x_1 - x_3}{x_2 - x_3} = \frac{-1}{4E} \left[\frac{1}{4}(E-1)^2 - (E+1)^2 \right] \quad (2.55)$$

değerini alır. (2.49) bağıntısındaki integrali hesaplamak için (2.50) bağıntısındaki denklemlerden herhangi birini kullanarak dx türevini bulabiliriz. (2.50) bağıntısındaki

$$x - \alpha = (\alpha - \gamma) \cot^2 \Phi \quad (2.56)$$

denklemini seçip, dx 'i,

$$dx = (\alpha - \gamma) d \cot^2 \Phi = -2(\alpha - \gamma) \cos \Phi \sin \Phi \frac{1}{\sin^4 \Phi} d\Phi \quad (2.57)$$

olarak elde ederiz. Bulduğumuz sonuçları (2.49) bağıntısındaki $\frac{dx}{\sqrt{X}}$ ifadesi yerine yazarsak,

$$\frac{dx}{\sqrt{X}} = \frac{-2}{\sqrt{\beta-\gamma}} \frac{d\Phi}{\Delta\Phi} = \frac{-2}{\sqrt{\beta-\gamma}} \frac{d\Phi}{\sqrt{1-k\sin^2\Phi}} \quad (2.58)$$

bağıntısını elde ederiz. (2.49) bağıntısındaki $[1, \infty]$ integral sınırları,

$$x - \alpha = (\alpha - \gamma) \cot^2 \Phi \quad (2.59)$$

bağıntısıyla Φ 'ye göre $[\pi/2, 0]$ şeklinde değişir. Sonuç olarak (2.49) bağıntısında değişen integral sınırlarını yerine yazarsak, durum yoğunluğu,

$$D(E) = \frac{8E}{a^2 \sqrt{3}\pi^2} \int_1^\infty \frac{dx}{\sqrt{X}} = \frac{16E}{a^2 \sqrt{3}\pi^2 \sqrt{\beta-\gamma}} \int_0^{\pi/2} \frac{d\Phi}{\sqrt{1-\kappa^2 \sin^2 \Phi}} \quad (2.60)$$

şeklini alır.(2.60) bağıntısındaki bu integrali,

$$F\left(\frac{\pi}{2}, K\right) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\Phi}{\sqrt{1-\kappa^2 \sin^2 \Phi}} \quad (2.61)$$

şeklinde yazıp, $\sqrt{\beta-\gamma} = Z_0$ ve $K = \sqrt{\frac{(\beta-\gamma)}{(\alpha-\gamma)}} = \sqrt{\frac{Z_1}{Z_0}}$ kısaltmalarını tanımlarsak (2.60)

bağıntısı,

$$D(E) = \frac{4E}{\pi^2 \sqrt{\beta-\gamma}} \int_0^{\pi/2} \frac{d\Phi}{\sqrt{1-\kappa^2 \sin^2 \Phi}} = \frac{4E}{\pi^2 \sqrt{Z_0}} F\left(\frac{\pi}{2}, \sqrt{\frac{Z_1}{Z_0}}\right) \quad (2.62)$$

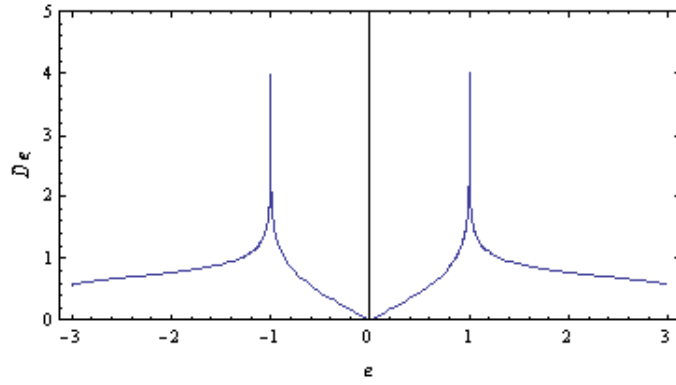
şeklini alır. Z_0 ve Z_1 değerlerini x, E grafiğindeki bölgelere göre sınıflandırırsak,

$$Z_1 = \begin{cases} 4|E| & -1 \leq E \leq 1 \\ (1+|E|)^2 - \frac{1}{4}(E^2 - 1)^2 & -3 \leq E \leq -1 \text{ ve } 1 \leq E \leq 3 \end{cases}$$

$$Z_0 = \begin{cases} (1+|E|)^2 - \frac{1}{4}(E^2 - 1)^2 & -1 \leq E \leq 1 \\ 4|E| & -3 \leq E \leq -1 \text{ ve } 1 \leq E \leq 3 \end{cases}$$

(2.63)

bağıntıları geçerlidir. Bu şekilde analitik olarak elde edilen $D(E) - E$ grafiği Şekil2.6'da gösterilmiş ve hesaplamalardaki ara işlemler Ek1'de verilmiştir.

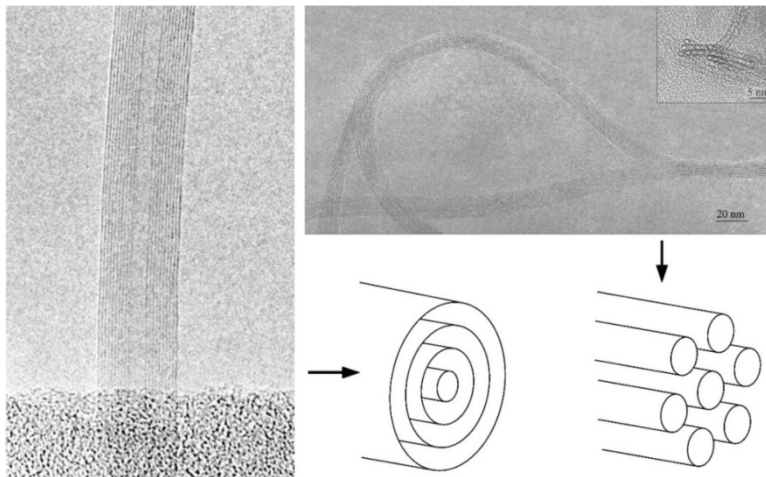


Şekil2.6 Grafenin enerji durum yoğunluğu

3. KARBON NANOTÜPLER

Karbon nanotüpler, grafenin bal peteğini andıran atom düzleminin, nanometrik çapa ve mikrometrik yüksekliğe sahip silindir şeklinde sarılmış bir şekli olarak düşünülebilir. Düzgün karbon nanotüp yapılarında atomlar birbirleriyle sp^2 şeklinde (grafen de olduğu gibi) bağlanır. Bu yapılarıdaki atomlar sadece altıgen geometri oluşturur ve her atomun sadece üç komşusu bulunur. Grafenin kıvrılarak silindir şekline gelmesiyle içi boş boru şeklinde oluşan karbon nanotüpler, farklı çap ve boyda, uçları da açık veya kapalı, ya tek, ya da iç içe geçmiş silindirler şeklinde olabilirler. Karbon nanotüpler ilk kez çok duvarlı olarak NEC laboratuvarlarında (Japonya) Iijima tarafından 1991’de keşfedilmiştir (Iijima,1991). Bu tüpler, dış çapları 3 nm’den 30 nm’ye kadar değişen en az iki, genellikle daha fazla tabaka içerirler. Çok duvarlı karbon nanotüplerin keşfinden sonra, tek duvarlı karbon nanotüpler, geçiş metali kullanılan metal katalizör veya ark-buharlaştırma tekniği kullanılarak sentezlenmişlerdir.

Bu tüpler, $1\text{ nm}=(10^{-9}\text{ m})$ düzeyinde oldukça küçük çaplara sahiptirler ve lazer buharlaştırma, ark- buharlaştırma ve kimyasal buhar depoziti (CVD) teknikleri kullanılarak sentezlenebilir.



Şekil 3.1 Tek duvarlı nanotüp demetlerinin ve çok duvarlı karbon nanotüpün yüksek çözünürlüklü iletim elektron mikroskopundaki resimleri (Charlier 2007)

Grafenin kıvrılma yönüne göre nanotüpler değişik mekanik ve elektronik özelliklere sahiptirler. Geometrilere bağlı olarak yarıiletken veya metalik özellik gösterebilirler. Hiçbir katkı maddesi olmaksızın, nanotüpün geometrik parametrelerinin (çapı, tüp yüzeyinin yönü vs.) değiştirilmesiyle elektronik özelliklerinin de değiştirilebilir olması, tüplere elektronik uygulamalarda önemli bir yer vermektedir. Karbon nanotüpün elektronik özellikleri, tüpün çapına ve kiralitesine bağlıdır. Karbon nanotüpün çapına ve kiralitesine bağlı olarak, bant aralığının sıfırdan onlarca eV' e kadar değişmesi, tüplerin hem (yarı)metal hem de yarıiletken olabileceklerini gösterir.

3.1 Tek Duvarlı Karbon Nanotüpün Örgü Yapısı

Tek duvarlı karbon nanotüpler, rulolanmış tek grafen tabakaları gibi düşünülebilir. Tek duvarlı karbon nanotüplerin mikroskopik yapısı, grafenin mikroskopik yapısıyla yakından ilişkili olduğundan, bu tüpler grafen örgü vektörleri ile tanımlanabilirler. Tek duvarlı nanotüpün yapısı, grafen tabakası üstünde kristnolgrafik olarak eşit iki konumu (A ve A') birleştiren kiral vektör (AA') olarak adlandırılan, tüpün çevresel vektörü ($\vec{C}_h$) ile belirlenir (Şekil3.2). Böylece, tek duvarlı karbon nanotüpün geometrisi (n,m) tam sayı çifti olmak üzere,

$$\vec{C}_h = n\vec{a} + m\vec{b} \quad (3.1)$$

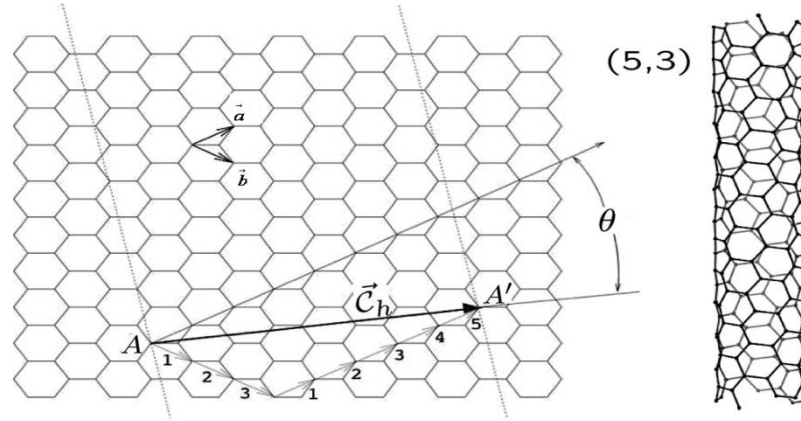
kiral vektörü ile ifade edilir. $\vec{a}$ ve, $\vec{b}$ altıgen bal peteği örgüsünün birim vektörleridir). Kiral vektör, tüpün çevresini tanımlar. Kiral vektör verildiğinde karbon naotüpün çapı,

$$d = \frac{|\vec{C}_h|}{\pi} = \frac{a}{\pi} \sqrt{n^2 + nm + m^2} \quad (3.2)$$

denklemleriyle elde edilir. Buradaki $a = \sqrt{3}a_{cc}$ ($a_{cc} = 1.42 \text{ \AA}$, C-C bağ uzunluğu) altıgen örgünün örgü sabitidir. Kiral vektör (n,m) tamsayı çifti ile ifade edilir. Ayrıca $\vec{C}_h$ ve $\vec{a}$ (grafene tabakasının zikzak yönü, Şekil3.2) arasındaki açı olan kiral açı θ ile tanımlanır. Kiral açı θ ,

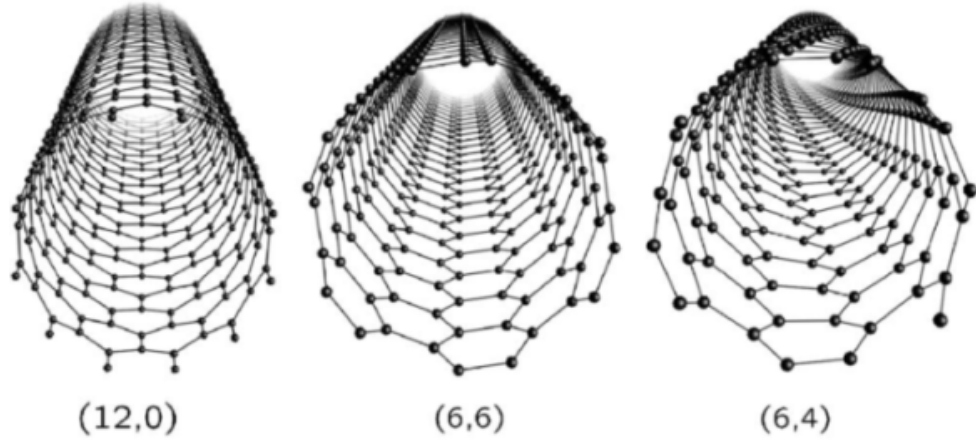
$$\cos \theta = \frac{\vec{C}_h \cdot \vec{a}}{|\vec{C}_h| |\vec{a}|} = \frac{2n+m}{2\sqrt{n^2+nm+m^2}} \quad (3.3)$$

ifadesiyle kolaylıkla hesaplanabilir.



Şekil3.2 Karbon nanotüpün örgü yapısı. Örgü birim vektörleri, $\vec{a}$ ve $\vec{b}$ ile grafene bal peteği örgüsü. Kiral vektör, $\vec{C}_h = 5\vec{a} + 3\vec{b}$, tüp şeklinde sarmalanmış iki boyutlu grafene tabakasını temsil eder. $\vec{C}_h$ 'nin yönü, tüp eksenine diktir. Kiral açı θ , grafene örgüsünün zikzak yönü $\vec{a}$ ve $\vec{C}_h$ vektörü tarafından tanımlanır. Buradaki örnek, $(5,3)$ nanotüp içindir (Charlier 2007)

Grafen örgüsünün altıgen simetrisinden dolayı, Θ 'nın değeri $0^\circ \leq |\theta| \leq 30^\circ$ aralığındadır. Θ aynı zamanda nanotüpün eksen yönüyle ilgili olan altıgenin eğim açısını tanımlar. Grafen tüp şekline aşağıdaki Şekil3.3'de gösterildiği gibi üç ayrı yolla rulolanabilir. Bunlardan ilk ikisi 'koltuk' ve "zikzak" yüksek derecede simetriye sahiptir. Koltuk ve zikzak terimleri çeper çevresindeki düzenin yapısından dolayı verilmiştir. Zikzak tüpler $(n,0)$, $(\theta = 0^\circ)$, tüp çevresi boyunca zikzak desen gösterirler. Bu tüplerde, tüp eksenini karbon-karbon bağına paraleldir. Koltuk tüpler (n,n) , $(\theta = 30^\circ)$ ise, tüp çevresi boyunca koltuk deseni gösterirler ve tüp eksenini karbon- karbon bağına diktir. Zikzak ve koltuk tüpler akiral olarak adlandırılır. Bunlar dışında kalan $(n,m \neq n \neq 0)$, $(0^\circ < \theta < 30^\circ)$ tüpler ise kiral tüpler olarak adlandırılır.



Şekil3.3 Grafenin 3 çeşit rulolanışı, zikzak (12,0) , koltuk (6,6) , kiral (6,4) nanotüplerin atomik yapıları (Charlier 2007)

Grafen örgünün geometrisi ve kiral vektör, sadece tüpün çapını değil aynı zamanda birim hücreyi ve karbon atomlarının sayısını da belirler. Tüp eksenini boyunca öteleme periyodu T 'yi tanımlayan en küçük grafen örgü vektörü $\vec{T}$, $\vec{C}_h$ 'e diktir. Öteleme vektörü,

$$\vec{T} = t_1 \vec{a} + t_2 \vec{b} \quad (3.4)$$

Birim örgü vektörleriyle ifade edilebilir. $\vec{C}_h \cdot \vec{T} = 0$ şartı kullanılarak denklem (3.4)'deki t_1 ve t_2 ,

$$t_1 = \frac{2m+n}{N_R},$$

$$t_2 = -\frac{2n+m}{N_R} \quad (3.5)$$

ifadeleriyle tanımlanır. Buradaki N_R , $(2m+n)$ ve $(2n+m)$ 'in en büyük ortak bölenidir. Öteleme vektörünün büyüklüğü t ise,

$$t = |\vec{T}| = \frac{\sqrt{3a}\sqrt{n^2 + nm + m^2}}{N_R} \quad (3.6)$$

denklemini ile tanımlanır. Nanotüpün birim hücresi, $\vec{C}_h$ ve $\vec{T}$ 'nin tanımladığı, yüksekliği t ve çapı d olan silindirik yüzey tarafından biçimlenir. Her birim hücredeki karbon atomlarının sayısı N_C , n ve m 'nin fonksiyonu olarak,

$$N_C = 2 \frac{|\vec{C}_h \times \vec{T}|}{|\vec{a} \times \vec{b}|} = \frac{4(n^2 + nm + m^2)}{N_R} \quad (3.7)$$

denkleminde ifade edilir. Burada, $|\vec{C}_h \times \vec{T}|$ toplam birim hücre alanını, $|\vec{a} \times \vec{b}|$ bir altıgenin tanımladığı bölgeyi gösterir. Denklem (3.7)'deki 2 çarpanın olmasının nedeni ise, her altıgen örgü içerisinde 2 karbon atomunun bulunmasıdır. Karbon nanotüplerin simetrisi, dönmeler veya yansımalar benzer nokta-grup simetrisine ek olarak, ötelemelerini içeren bir boyutlu sistemlerin tam uzay grubu olan ve çizgi grubu olarak da adlandırılan gruplar tarafından tanımlanabilir.

Her zaman bir dönme eksenini içeren karbon nanotüplerin çizgi grupları simetrik olmayan gruplardır. Her (n, m) karbon nanotüp, farklı çizgi grubu tarafından temsil edilir.

Sadece koltuk (n, n) ve zikzak $(n, 0)$ tüpler aynı n 'ye sahipse aynı simetri grubuna aittirler. Bu nokta grupları, kiral nanotüpler $(n, m \neq n \neq 0)$ için D_q , (n, n) veya $(n, 0)$ gibi akiral tüpler için ise D_{2nh} 'dir. Nanotüplerin nokta grubunu ve en temel yapısal özelliklerini (çapı, kiralitesi, örgü ve ters örgü vektörleri Tablo 1 'de verilmiştir) kullanılarak nanotüpün simetri işlemleri tanımlandıktan sonra buna karşı gelen grafen demeti yapılandırılabilir ve silindirik şekilde rulolanabilir. (Charlier 2007)

Çizelge 3.1 (n, m) karbon nanotüp için yapısal parametreler. Bu tabloda n, m, t_1, t_2 tam sayıdır.

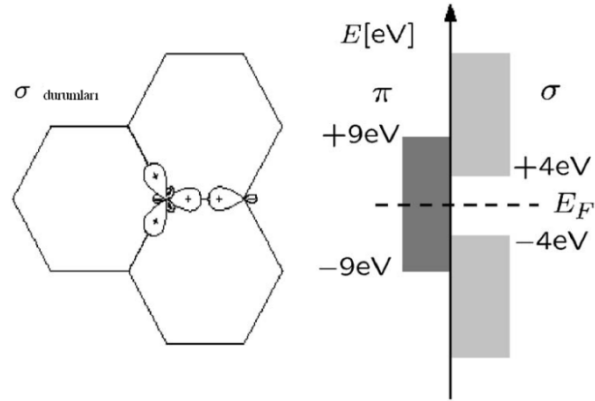
Sembolü	İsmi	Formülü	Değeri
a	Örgü sabiti	$a = \sqrt{3} a_{cc} \approx 2.46 \text{ \AA}$	$a_{cc} \approx 1.42 \text{ \AA}$
$\vec{a}, \vec{b}$	Örgü birim vektörleri	$\left(\frac{\sqrt{3}}{2}; \frac{1}{2}\right)a, \left(\frac{\sqrt{3}}{2}; -\frac{1}{2}\right)a$	
$\vec{a}^*, \vec{b}^*$	Ters örgü vektörleri	$\left(\frac{1}{\sqrt{3}}; 1\right)\frac{2\pi}{a}, \left(\frac{1}{\sqrt{3}}; -1\right)\frac{2\pi}{a}$	
$\vec{C}_h$	Kiral vektör	$\vec{C}_h = n\vec{a} + m\vec{b} = (n, m)$	$(0 \leq m \leq n)$
d	Tüp çapı	$d = \frac{ \vec{C}_h }{\pi} = \frac{a}{\pi} \sqrt{n^2 + nm + m^2}$	
θ	Kiral açı	$\sin \theta = \frac{\sqrt{3}m}{2\sqrt{n^2 + nm + m^2}}$ $\cos \theta = \frac{2n + m}{2\sqrt{n^2 + nm + m^2}}$	$0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{6}$ $\tan \theta = \frac{\sqrt{3}m}{2n + m}$
$\vec{T}$	Öteleme vektörü	$\vec{T} = t_1\vec{a} + t_2\vec{b} = (t_1, t_2)$ $t_1 = \frac{2m + n}{N_R}, t_2 = -\frac{2n + m}{N_R}$	$\text{ebob}(t_1, t_2) = 1^a$ $N_R = \text{ebob}(2m + n, 2n + m)^a$
N_C	Her birim hücredeki karbon atomunun sayısı	$N_C = 2 \frac{ \vec{C}_h \times \vec{T} }{ \vec{a} \times \vec{b} } = \frac{4(n^2 + nm + m^2)}{N_R}$	

^aebob (n, m) , n ve m tamsayılarının en büyük ortak bölenini tanımlar.

3.2 Karbon Nanotüplerin Elektronik Özellikleri

Karbon nanotüpler, grafene benzer şekilde düzlemsel sp^2 hibridleşmesi gösteren iki çeşit bağ tarafından karakterize edilir. Karbon atomlarının dört valans orbitali arasından ($2s, 2p_x, 2p_y$ ve $2p_z$) orbitalleri), (s, p_x, p_y) orbitalleri, düzlem σ (bağlanma veya meydana gelme) ve σ^* (anti bağlanma veya yok olma) orbitallerini şekillendirmek için birleşirler (Şekil3.4).Bu orbitaller düzlemsel simetriyle ilgilidir. σ bağları, güçlü kovalent bağlardır ve grafen tabakasının elastik özelliklerinden ve bağlanma enerjilerinin çoğundan sorumludur. Geriye kalan p_z orbitali ise, grafen tabakasından dışarı doğru, düzlemsel simetriye göre tek ve σ durumlarıyla eşleşmez. Komşu p_z orbitalleri arasındaki yanal etkileşmesi ($pp\pi$ etkileşmesi olarakta adlandırılır) yerleşmemiş π (bağlanma) ve π^* (anti bağlanma) orbitalleri yaratır. Benzer şekilde, altıgen örgü şeklindeki nanotüpdeki σ bağları, güçlü bir şekilde tüpün silindirik duvarındaki karbon atomlarına bağlıdır.

π bağları ise, nanotüp yüzeyine diktir ve saf grafendeki karbon tabakaları arasındaki zayıf etkileşmeye benzer şekilde, bir demetteki tek duvarlı nanotüpler arasındaki zayıf etkileşmelerden sorumludur. Grafendeki Fermi enerjisinden uzaktaki enerji seviyeleri, düzlemsel olmayan σ bağları ile ilgilidir (Şekil3.4, sağda) ve nanotüpün elektronik özelliklerinde anahtar rol oynamazlar. Bağlanma ve anti bağlanma π bağları ise, grafenin Brillouin bölgesindeki yüksek simetri noktalarındaki Fermi seviyesine karşı gelir



Şekil 3.4 Karbon altıgen örgü içindeki bağlar ve bunlara karşılık gelen bantlar. Karbon altıgen örgü içindeki σ bağları karbon atomlarını bağlar ve grafen tabakasının elastik özelliklerinden ve bağlanma enerjisinden sorumludur(solda). π bağları, tabakanın yüzeyine diktir. Bağlanma ve anti bağlanma σ bağına karşı gelen bantlar, büyük bir enerji boşluğu ile ayrılırken (sağda), bağlanma ve anti bağlanma π bağlarına karşılık gelen bantlar, Fermi seviyesinin (E_F) çevresinde bulunur (Charlier 2007)

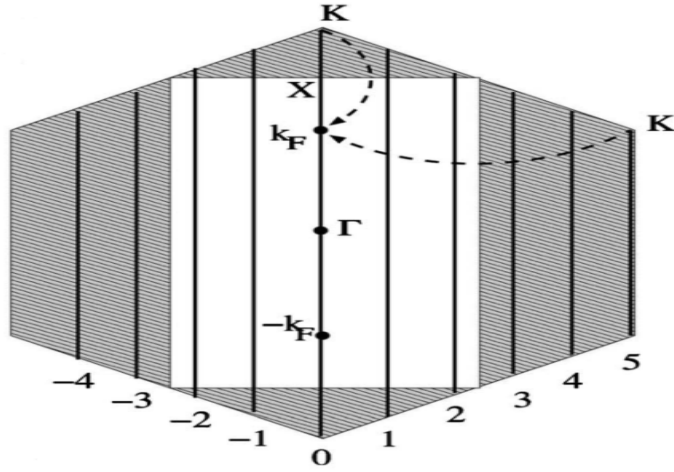
3.2.1 Bölge- katlama yaklaşımı

Karbon nanotüplerde, nanotüpün çevresel yönü boyunca periyodik sınır koşullarından dolayı, nanotüpün çevresi etrafındaki dalga vektörleri kuantumlanır, yani sadece kesikli değerler alırlar. Bunun aksine, nanotüp eksenine (iletim vektörü $\vec{T}$ yönünde) boyunca olan dalga vektörleri sürekli (sınırlı tüpler için) kalırlar. Grafenin Brillouin bölgesi içinde verilen bir nanotüp için çizilen vektörler, paralel çizgilerin bir serisini meydana getirir. Bu kesilmiş çizgilerin uzunluğu, sayısı ve yönelimleri nanotüpün kiral indislerine (n, m) bağlıdır. Önce ki bölümde bahsettiğimiz gibi, kiral vektörün büyüklüğü $|\vec{C}_h|$, $\sqrt{3}a_{cc}\sqrt{n^2 + nm + m^2}$ veya πd (d ; nanotüpün çapı)’ye eşittir.

Tüp çevresi etrafında uygulanan periyodik sınır koşulları,

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{C}_h) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{C}_h} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (3.8)$$

bağıntısında gösterildiği gibi, dalga fonksiyonunun kuantum fazı üzerinde bazı sınırlamalara neden olur. (3.8) bağıntısında $\vec{r}$ ve $\vec{k}$ vektörleri, tüp yüzeyi üzerinde alınır. İlk eşitlik Bloch teoreminden kaynaklanır. Tüp simetrisine bağlı olarak, kiral vektör $\vec{C}_h = (n, m)$ üzerinde iki durum meydana gelebilir. Bant katlama şeması Şekil 3.5’de verilmiştir.



Şekil 3.5 Bant katlama şeması. Grafinin Brillouin bölgesi olan beyaz dikdörtgen, örgü

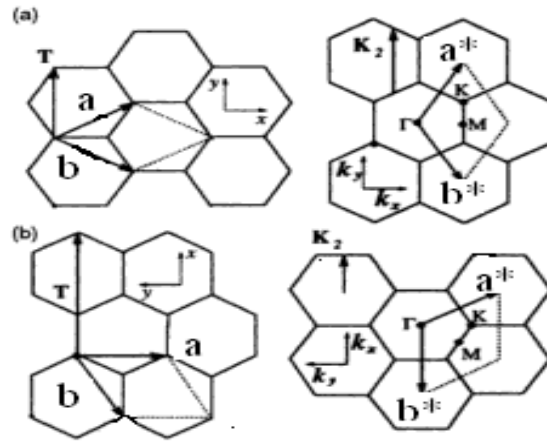
vektörleri $\frac{\vec{C}_h}{n} = \vec{a} + \vec{b}$ ve $\vec{T}$ 'in ($\vec{T} = \vec{a} - \vec{b}$, koltuk nanotüp için) oluşturduğu dört atomlu hücreye bağlı olan Brillouin bölgesindedir. Kalın çizgiler, (5,5) koltuk nanotüp için izin verilen $\vec{k}$ çizgileridir. Bant katlama yaklaşımı içinde (5,5) tüp için bant yapısını elde etmek için, elde edilen kalın çizgilerin uzunluğu $2\pi/|\vec{T}|$ boyunca hesaplanan grafinin enerji bantları üst üste konulur ve dikdörtgen hücre üstünden renkli köşeler katlanır. Özellikle, ΓX 'in üçte ikisinde (veya ΓX 'in ters simetrisinde) $\vec{K}$ noktaları katlanır. Bantlar, $\vec{k} \cdot \vec{C}_h = 2\pi q$ 'daki (bu şart denklem (3.8) şartından gelmektedir) tamsayı q ile belirlenir. (5,5) tüpe karşı gelen q , aynı zamanda azimutal kuantum sayısıdır (Charlier 2007)

3.2.2 Akıral nanotüplerin enerji dağınım bağıntıları

Yeterince büyük yarıçapa sahip nanotüplere, çevresel yön boyunca periyodik sınır koşulları uygulanarak enerji bantları elde edilebilir. Yukarıda da bahsettiğimiz (3.8) bağıntısının uygulanması

$$\exp(i\vec{k} \cdot \vec{C}_h) = 1 \Rightarrow \vec{k} \cdot \vec{C}_h = 2\pi q \quad (3.9)$$

şartını meydana getirir. Bu şart, çevresel yön boyunca olan dalga vektörünü kesikli yapar. $\vec{C}_h$ 'ye dik dalga vektörü ise sürekliliğini korur. k uzayındaki bu düz çizgilerle bir boyutta enerji bantları elde edilir.



Şekil 3.6 Akıral karbon nanotüplerin birinci Brillouin bölgeleri, a. koltuk ve b. zikzak karbon nanotüplerin birim hücrelerinin bir bölümü ve genişletilmiş Brillouin bölgeleri. $\vec{a}$ ve $\vec{b}$ grafenin örgü vektörleri, $\vec{a}^*$ ve $\vec{b}^*$ ise grafenin ters örgü vektörleridir. $\vec{T}$ öteleme vektörü, $\vec{K}_2$ ise öteleme vektörüne karşılık gelen örgü vektörüdür.

Dağınım bağıntıları için açık bir ifade elde etmek için, en basit durum olan en yüksek simetriye sahip nanotüpleri düşünürüz. $\vec{k} = k_x \bar{x} + k_y \bar{y}$ olmak üzere, (3.9) bağıntısındaki periyodik sınır şartını örgü vektörleri (Şekil3.6a) ve kiral vektörü,

$$\begin{aligned}\vec{a} &= a \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right) \\ \vec{b} &= a \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right) \\ \vec{C}_h &= n\vec{a} + n\vec{b} = a(n+n)\frac{\sqrt{3}}{2}\bar{x} + \frac{a}{2}(n-n)\bar{y} = a\sqrt{3}n\bar{x}\end{aligned}\tag{3.10}$$

olan (n,n) koltuk nanotüpe uyguladığımızda,

$$n\sqrt{3}k_{x,q}a = 2\pi q \quad (q = 1, \dots, 2n)\tag{3.11}$$

bağıntısını elde ederiz. Bölüm 2’de grafen için bulduğumuz (2.11) enerji dağınım bağıntısı, (n, n) koltuk nanotüp için (3.11) periyodik sınır koşulunu uyguladığımızda,

$$\varepsilon_q^k(k) = \pm \gamma_0 \sqrt{1 \pm 4 \cos\left(\frac{q\pi}{n}\right) \cos\left(\frac{ka}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{ka}{2}\right)}, \quad (-\pi < ka < \pi), (q = 1, \dots, 2n)\tag{3.12}$$

denklemini elde ederiz. Burada k, koltuğun k’ası, $\vec{k}$ ise $\vec{T}$ vektörüne (dalga vektörlerinin sürekli kaldığı yön) karşılık gelen karşıt örgü vektörü $\vec{K}_2 = (\vec{a}^* - \vec{b}^*)/2$ yönünde bir boyutlu vektördür. $\vec{K}_2$ vektörünün yönü, grafenin iki boyutlu Brillouin bölgesi içindeki Γ (en yüksek simetri noktası) noktasından K (ikinci en yüksek simetri noktası) noktasına çizilen vektörün yönündedir. Bütün koltuk nanotüpler için, bölge sınırlarında ($ka = \pi$) enerji bantlar dejenerelik gösterirler. Böylece, grafen için (2.11) denklemi,

$$\varepsilon\left(k_{x,q}, \frac{\pi}{a}\right) = \pm \gamma_0\tag{3.13}$$

denklemine dönüşür.

Tüm (n,n) koltuk nanotüpler, Fermi seviyesiyle çakışan bantların bulunduğu $k = \pm 2\pi/(3a)$ noktasında, en üsteki valans bantı ve en altaki iletim bantı arasında bir bant dejenerliğine sahiptir. Bu yüzden tüm koltuk nanotüpler, iki boyutlu grafene benzer şekilde metalik özellik gösterir. (3.8) şartını,

$$\begin{aligned}\vec{a} &= a(0, -1) \\ \vec{b} &= a\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right) \\ \vec{C}_h &= n\vec{a} = -n\vec{a}\end{aligned}\tag{3.14}$$

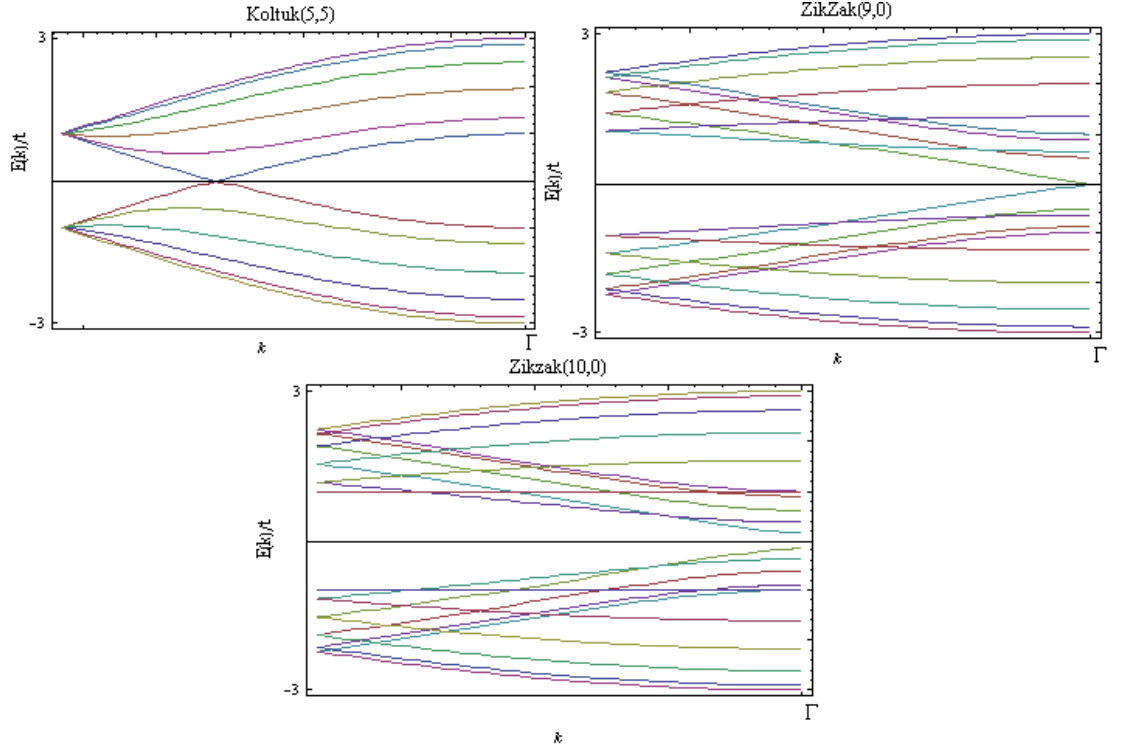
(3.14) bağıntısındaki örgü vektörlerine ve kiral vektöre sahip (n,0) zikzak nanotüplere uyguladığımızda,

$$nk_{y,q}a = 2\pi q \quad (q=1, \dots, 2n)\tag{3.15}$$

bağıntısını elde ederiz. Bu bağıntıyı, (2.11) enerji dağılım bağıntısına uyguladığımızda (2.11) denklemi,

$$\varepsilon_q^z(k) = \pm \gamma_0 \sqrt{1 \pm 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}ka}{2}\right) \cos\left(\frac{q\pi}{n}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{q\pi}{n}\right)}, \left(-\frac{\pi}{\sqrt{3}} < ka < \frac{\pi}{\sqrt{3}}\right), (q=1, \dots, 2n)\tag{3.16}$$

bağıntısına dönüşür. (n,0) tüm zikzak nanotüpler için $k=0$ noktasında n, 3'ün katı ise enerji aralığı sıfır olurken n, 3'ün katı değilse enerji boşluğu oluşur.. (5,5) koltuk, (9,0) ve (10,0) zikzak nanotüpler için bir boyutlu enerji dağılım bağıntıları Şekil3.7'de gösterilmiştir.



Şekil 3.7 Akiral karbon nanotüplerin bant yapıları. (5,5) koltuk, (9,0) ve (10,0) zikzak nanotüpler için bir boyutlu enerji dağılım bağıntıları

Şekil3.7 gösterildiği gibi (5,5) koltuk nanotüp metalik özellik gösterirken, (9,0) zikzak nanotüp Γ noktasında bulunan Fermi yüzeyinde metalik, (10,0) zikzak nanotüp ise aynı noktada sınırlı yasak bant gözükür.

Genel olarak bütün (n,n) koltuk nanotüpler matalik özellik gösterirken, $(n,0)$ zikzak nanotüpler ise n , 3'ün katı ise $k=0$ (Γ noktası)'da yasak bant gözükmezken, n , 3'ün katı değilse Γ 'da yasak bant gözükür.

3.2.3 Karbon nanotüpün enerji durum yoğunlukları

Önceki bölümde grafen için de bulduğumuz enerji durum yoğunluğu incelenen yapının boyutuyla doğrudan ilişkilidir. Durum yoğunluklarındaki (DOS) bu sivri uçlar (spikes) Van Hove tekillikleri (VHSs) olarak adlandırılır ve tüp eksenine dik yönlerdeki sınırlandırılmış özellikleri gösterir (Şekil3.8). Van Hove tekilliklerinin konumları, analitik olarak dağınım bağıntılarından türetilebilir.

Bölüm 2.5’de gösterildiği gibi enerji durum yoğunluğu (2.40) bağıntısıyla ifade edilir. Tüm metalik nanotüpler için Fermi enerjisinde (E_f) nanotüp eksenine boyunca her birim uzunluktaki durum yoğunluğu sabittir ve bu analitik olarak ifade edilebilir (Mintmire ve While 1998).

$$D(E) = 2\sqrt{3}a_{cc}/(\pi\gamma_0|\vec{C}_h|) \quad (3.17)$$

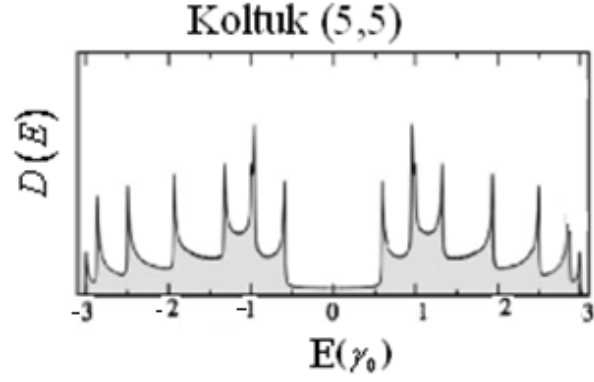
Ayrıca Van Hove tekilliklerinin konumları, koltuk nanotüpler için (3.12), zikzak nanotüpler için ise (3.16) bağıntılarından türetilebilir. Örneğin koltuk nanotüpler için (3.12) bağıntısından yola çıkarak basit bir hesaplama ile

$$E_q = \pm\gamma_0 \sin(q\pi/n) \quad (3.18)$$

Van Hove tekilliklerinin konumları belirlenmiş olur. Şekil3.8’de (5,5) koltuk nanotüp için durum yoğunluğundaki sivrilikler,

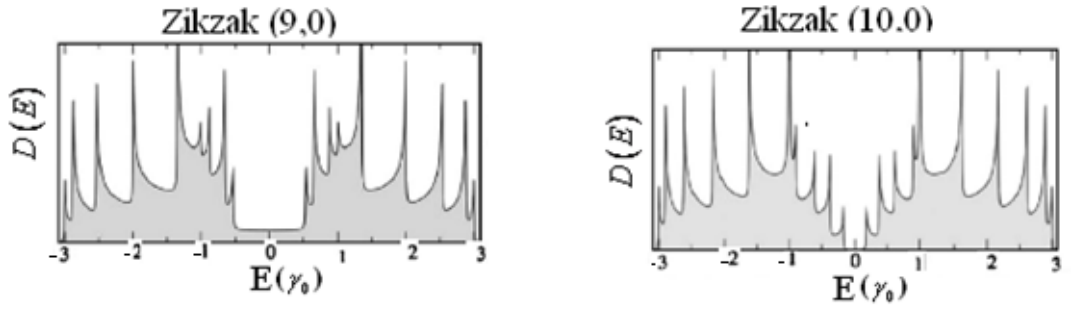
$$E_q = \pm\gamma_0 \sin(q\pi/5) \quad (3.19)$$

enerji noktalarına yerleşmiştir (Charlier 2007).



Şekil 3.8 (5,5) koltuk nanotüpün durum yoğunluğu (γ_0 en yakın komşu C-C sıkı bağlanma üst üste gelme enerjisi~2,9eV) $[-3\gamma_0; 3\gamma_0]$ enerji aralığında gösterilmiştir (Charlier 2007)

(9,0) ve (10,0) zikzak nanotüpler için durum yoğunlukları ise Şekil3.9’da gösterilmiştir.



Şekil 3.9 (9,0) ve (10,0) zikzak nanotüplerin durum yoğunlukları (γ_0 en yakın komşu C-C sıkı bağlanma üst üste gelme enerjisi~2,9eV) $[-3\gamma_0; 3\gamma_0]$ enerji aralığında gösterilir (Charlier 2007)

Şekil3.9’da görüldüğü üzere (9,0) zikzak metalik nanotüp için durum yoğunluğu Fermi enerjisinde sıfırdan farklı küçük bir değer alırken, (10,0) yarıiletken zikzak nanotüp için ise sıfır değeri alır.

Metalik nanotüplerde, Fermi enerji seviyesine yakın bantlar için k değerleri, sırasıyla koltuk nanotüpler için $k = \pm 2\pi/3|\vec{T}|$, zikzak nanotüpler için ise $k=0$ noktasıdır. Bu k değerleri aynı zamanda zikzak nanotüpler içinde yasak bandın yerini göstermektedir. (n,m) kiral nanotüplerde ise, $(n-m)$ 3’ün katı olduğunda $k = \pm 2\pi/3|\vec{T}|$ noktasına yakın bantlarda metalik özellik gösterirken, $(n-m)$ 3’ün katı değilse $k=0$ noktasında yasak bant meydana gelir. Yarıiletken zikzak veya kiral nanotüplerde yasak bant genişliği kiraliteden bağımsız ve nanotüpün çapıyla ters orantılı olarak değişir (Charlier 2007).

$$\Delta E_g = 2\gamma_0 a_{cc}/d \quad (3.20)$$

Tarama tüneleme spektroskopisiyle (STS) elde edilen enerji durum yoğunluğu ölçümleri, karbon nanotüplerin elektronik yapısını araştırmak için önemli bir araştırmadır. Bu ölçümler yarıiletken nanotüplerin enerji bant aralığının yaklaşık olarak $1/d$ ile orantılı ve nanotüplerin yaklaşık $1/3$ ‘ünün iletken, kalan $2/3$ ‘ünün ise yarıiletken olduğunu ispatlamıştır (Odom 1998, Wildöer 1998).

4. TARTIŞMA VE SONUÇ

Yaşam için temel maddelerden biri olan karbonun, farklı bağlanma geometrileri gösterebilen ve buna bağlı olarak sıfır boyuttan üç boyuta kadar izomerleri olabilen tek element olması, karbonu birçok alanda rakipsiz bir element yaparken, aynı zamanda günümüzün ilgi duyulan araştırma konularından biri de yapmaktadır. Karbon atomlarının oluşturduğu altıgen yapıların bir bal peteği şeklinde düzenlenmiş hali olan grafende bu araştırmaların başında gelmektedir. Bu çalışmanın ilk kısmında sıkı bağlanma yaklaşımıyla incelenen grafenin ilginç elektronik özelliklere sahip olduğu gözükmemektedir. Birinci Brillouin bölgesinin K ve K' simetri noktalarında metalik özellik gösteren grafenin diğer kısımlarda ise yasak bant aralığına sahip olduğu ortaya çıkmaktadır. Ayrıca, grafenin yük taşıyıcıları, ışık hızının üç yüzde biri olan v_f hızıyla hareket eden kütsüz Dirac fermiyonlarının, nötrino için Weyl Denklemi olarak bilinen kütsüz relativistik Dirac denkleminin uyduklarının grafen üzerinde incelediğimiz etkin kütle yaklaşımıyla bir kez daha elde edilmesi, ışık hızından daha küçük hızlarda kuantum elektrodinamiğinin birçok değişik özeliğinin grafen için de geçerli olduğunu göstermektedir.

Grafenin bal peteğini andıran atom düzleminin, nanometrik çapa ve mikrometrik yüksekliğe sahip silindir şeklinde sarılmış bir şekli olarak düşünülen karbon nanotüplerin kristal örgü yapısının ve elektronik özelliklerinin incelendiği ikinci kısımda, grafenin kıvrılma yönüne bağlı olarak hiçbir katkı maddesi olmaksızın, geometrik parametrelerinin değiştirilmesiyle elektronik özelliklerinin de değiştirilebilir olduğu, elde edilen dağınım bağıntıları ve bant yapılarıyla ortaya konulmuştur. Enerji dağınım bağıntıları elde edilen akiral nanotüplerin koltuk ya da zikzak olmasına göre metalik ya da yarıiletken özellik göstermesi nanotüpün sadece geometrik yapısını yani kiral vektörün (n,m) katsayıları değiştirilerek elektronik özelliklerinin değiştiğini ispatlamaktadır. Karbon nanotüpler bu özellikleriyle birçok elektronik uygulamada önemli bir yer tutmaktadır.

Ayrıca son kısımda karbon nanotüpler için elde edilen enerji durum yoğunlukları gelecekte karbon nanotüpler için elektron-elektron, elektron-fonon etkileşmelerinin incelenmesi için zemin oluşturmaktadır.

Elektronik uygulamalarda gelecek vaat eden karbon nanotüplerin, grafenden yola çıkarak incelendiği bu tez ile karbon nanotüplerin elektronik özellikleri hakkında temel bilgi verilerek, gelecekte bu alanda yapılacak elektron-elektron ve elektron- fonon etkileşmelerinin bu elektronik özellikleri nasıl değiştireceği gibi çalışmalara zemin oluşturulmaya çalışılmıştır.

KAYNAKLAR

- Ando, T. 2004. Theory of electronic states and transport in carbon nanotubes. Journal of the Physical Society of Japan, 74,3.
- Charlier, J.- C., Blase, X., Roche, S. 2007. Electronic and transport properties of nanotubes. Reviews of modern physics, 79, April-June 2007
- Greenhill, A. G. 1959 The Applications of Elliptic Functions Dover Pub. ,200, USA
- Iijima, S., 1991 Helical microtubules of graphitic carbon. Nature(London). 354,56
- Neto, A. H.C., Guinea, F., Peres, N.M.R., Novoselov, K.S. and Geim, A.K. 2007. The electronic properties of graphene, <http://arxiv.org/0709.1163v1>. Eriřim Tarihi: 15.01.2008
- Saito, R. , Dresselhaus, G., Dresselhaus, M. S. 2000. Physical Properties of Carbon Nanotubes. Imperial College Press, 259, USA.

Ek-1

Grafenin durum yoğunluğunu

$$D_g(E) = \frac{1}{\pi^2} \iint dk_x dk_y \delta \left(E - \gamma_0 \sqrt{1 + 4 \cos \frac{ak_y}{2} \cos \frac{\sqrt{3}ak_x}{2} + 4 \cos^2 \frac{ak_y}{2}} \right) \quad (1)$$

olarak elde edilmiştir. (1) bağıntısında $\cos \left(\frac{a\sqrt{3}k_x}{2} \right) \rightarrow x$ ve $\cos \left(\frac{ak_y}{2} \right) \rightarrow y$ dönüşümü yaparak grafenin durum yoğunluğunu,

$$D(E) = \frac{4}{a^2 \sqrt{3} \pi^2} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \frac{dx dy}{\sqrt{1-x^2} \sqrt{1-y^2}} \delta \left(E - \sqrt{1 + 4y^2 + 4xy} \right) \quad (2)$$

şeklinde elde ederiz. Dirac delta fonksiyonun,

$$\delta(f(x)) = \sum_{i=1} \frac{\delta(x-x_i)}{\left| \frac{df}{dx} \right|_{x_i}} \quad (3)$$

(x_i , $i=1, 2, 3$ $f(x)$ fonksiyonun kökleri olmak üzere) özelliğini kullanarak (2) bağıntısını yeniden elde edebiliriz. Burada, $f(x) = \delta(E - \sqrt{1 + 4y^2 + 4xy})$ ve $x_1 = (-4y^2 + E^2 - 1)/4y$ olmak üzere (3) bağıntısını $x_i = x_1$ köküne göre hesapladığımızda,

$$\delta(f(x)) = \sum_{i=1} \frac{\delta(x-x_i)}{\left| \frac{df}{dx} \right|_{x_i}} = E \frac{\delta(x-x_1)}{-2y} \quad (4)$$

şeklinde elde ederiz. (3) bağıntısını (2) bağıntısında yerine yazdığımızda,

$$D(E) = -\frac{2E}{a^2 \sqrt{3}\pi^2} \int_{-1}^1 \frac{dy}{\sqrt{1-y^2}} \frac{1}{\sqrt{1-x_1^2}} \frac{1}{y} \quad (5)$$

elde edilir. Buradaki, $\sqrt{1-y^2} \sqrt{1-x_1^2} y$ terimi, yapılan düzenlemelerle

$$y\sqrt{1-y^2} \sqrt{1-\left(-y+\frac{E^2-1}{4y}\right)^2} = \sqrt{1-y^2} \left[-y^4 + \frac{1}{2}(E^2+1)y^2 - \frac{1}{16}(E^2-1)^2\right]^{1/2} \quad (6)$$

şeklinde yazılabilir. Böylelikle,(5) bağıntısındaki durum yoğunluğu,

$$D(E) = \frac{-16E}{a^2 \sqrt{3}\pi^2} \int_0^1 \frac{dy}{\sqrt{1-y^2}} \frac{1}{[-16y^4 + 8(E^2+1)y^2 - (E^2-1)^2]^{1/2}} \quad (7)$$

şeklini alır.(7) bağıntısı üzerinde bazı düzenlemeler yaptığımızda

$$D(E) = \frac{-8E}{a^2 \sqrt{3}\pi^2} \int_{-1}^1 \frac{dy}{\sqrt{1-y^2}} \frac{1}{[-y^4 + \frac{1}{2}(E^2+1)y^2 - \frac{1}{16}(E^2-1)^2]^{1/2}} \quad (8)$$

(7) bağıntısı şekline dönüşür. Bu bağıntıda,

$$y^2 = \frac{1}{x} \Rightarrow 2ydy = \frac{-1}{x^2} dx \Rightarrow dy = \frac{-1}{2yx^2} dx = \frac{-1}{2x^{2/3}} dx \quad (9)$$

dönüşümü yapılarak durum yoğunluğunu yeniden yazdığımızda,

$$D(E) = \frac{8E}{a^2 \sqrt{3}\pi^2} \int_1^\infty \frac{dx}{\sqrt{1-\frac{1}{x}}} \frac{1}{[-(E^2-1)^2 X^2 + 8(E^2+1)x - 16]^{1/2}} \quad (10)$$

bağıntısını elde ederiz. Bu bağıntıda parantez içindeki denklemin köklerini,

$$x_{2,3} = \frac{4}{(E^2 - 1)^2} \left\{ (E^2 + 1) \mp [4E^2]^{1/2} \right\} \quad (11)$$

olarak elde ederiz. Böylece (8) bağıntısının kökleri,

$$\begin{aligned} x_1 &= 1 \\ x_{2,3} &= 4 \frac{(E \mp 1)^2}{(E+1)^2(E-1)^2} \\ x_2 &= 4 \frac{1}{(E+1)^2} \\ x_3 &= 4 \frac{1}{(E-1)^2} \end{aligned} \quad (12)$$

şeklinde elde ederiz. Böylece durum yoğunluğu,

$$D(E) = \frac{8E}{a^2 \sqrt{3}\pi^2} \int_1^\infty \frac{dx}{\sqrt{X}} \quad (13)$$

olarak yazılabilir. Burada $X = \prod_{i=1}^3 (x - x_i)$ değerini alır. $k = \frac{1}{4E} \left[\frac{1}{4}(E^2 - 1)^2 - (E - 1)^2 \right]$

(13) bağıntısı bir eliptik integraldir. Eliptik integrallerin kökleri $X = (x - \alpha)(x - \beta)(x - \gamma)$, $\infty > x > \alpha$ şartıyla x , E grafiğindeki bölgelere göre $\alpha > \beta > \gamma$, α, β, γ (12) bağıntısındaki kökler olmak üzere,

$$\begin{aligned} x - \gamma &= (\alpha - \gamma) \csc^2 \Phi \\ x - \beta &= (\beta - \gamma) \Delta^2 \Phi \csc^2 \Phi \\ x - \alpha &= (\alpha - \gamma) \cot^2 \Phi \end{aligned} \quad (14)$$

özelliklerine sahiptirler. Burada, $\Delta \Phi = \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \Phi} = \sqrt{1 - k \sin^2 \Phi}$ ve $\kappa^2 = k = (\beta - \gamma)/(\alpha - \gamma)$ değerlerini alır. (14) bağıntılarını $X = (x - \alpha)(x - \beta)(x - \gamma)$ bağıntısında yerine yazarak,

$$X = (\alpha - \gamma)^2 (\beta - \gamma) \csc^2 \Phi \Delta^2 \Phi \csc^2 \Phi \cot^2 \Phi \quad (15)$$

elde ederiz. (13) bağıntısını da, (15) bağıntısını sağlayan eliptik integrallerin bu özelliğini kullanılarak çözebiliriz. Her bölge için k değeri hesaplanarak (1) bağıntısı her bölge için elde edilebilir.

$3 > E > 1$ aralığında, $\alpha > \beta > \gamma$, $x_3 > x_1 > x_2$ olmak üzere k,

$$k = \frac{\beta - \gamma}{\alpha - \gamma} = \frac{x_1 - x_2}{x_3 - x_2} \quad (16)$$

olmak üzere

$$k = \frac{1}{4E} \left[\frac{1}{4} (E^2 - 1)^2 - (E - 1)^2 \right] \quad (17)$$

değerini alır. $1 > E > -1$ aralığında $\alpha > \beta > \gamma$, $x_3 > x_2 > x_1$ ve $x_2 > x_3 > x_1$ olmak üzere k,

$x_3 > x_2 > x_1$ aralığında

$$k = \frac{x_2 - x_1}{x_3 - x_1} = \frac{4E}{(E + 1)^2 - \frac{1}{4}(E^2 - 1)^2} + 1 \quad (18)$$

değerini alır. $x_2 > x_3 > x_1$ aralığında ise k,

$$k = \frac{x_3 - x_1}{x_2 - x_1} = \frac{4E}{(E - 1)^2 - \frac{1}{4}(E^2 + 1)^2} + 1 \quad (19)$$

değerini alır. $-1 > E > -3$ $\alpha > \beta > \gamma$, $x_2 > x_1 > x_3$ olmak üzere k,

$$k = \frac{x_1 - x_3}{x_2 - x_3} = \frac{-1}{4E} \left[\frac{1}{4} (E-1)^2 - (E+1)^2 \right] \quad (20)$$

değerini alır.(13) bağıntısındaki integrali hesaplamak için (14) bağıntısındaki denklemlerden herhangi birini kullanarak dx türevini bulabiliriz. Böylelikle (14) bağıntısındaki,

$$x - \alpha = (\alpha - \gamma) \cot^2 \Phi \quad (21)$$

denklemini seçip, dx 'i

$$dx = (\alpha - \gamma) d \cot^2 \Phi = -2(\alpha - \gamma) \cos \Phi \sin \Phi \frac{1}{\sin^4 \Phi} d\Phi \quad (22)$$

olarak elde ederiz. Bulduğumuz sonuçları (13) bağıntısındaki $dx/\sqrt{X}$ bağıntısında yerine yazarsak,

$$\frac{dx}{\sqrt{X}} = \frac{-2}{\sqrt{\beta - \gamma}} \frac{d\Phi}{\Delta\Phi} = \frac{-2}{\sqrt{\beta - \gamma}} \frac{d\Phi}{\sqrt{1 - k \sin^2 \Phi}} \quad (23)$$

bağıntısını elde ederiz. (13) bağıntısındaki $[1, \infty]$ integral sınırları,

$$x - \alpha = (\alpha - \gamma) \cot^2 \Phi \quad (24)$$

bağıntısıyla Φ 'ye göre $[\pi/2, 0]$ değerlerini alır. (13) bağıntısında (22) ve (23) bağıntılarını yerine yazarsak,

$$D(E) = \frac{4E}{\pi^2 \sqrt{\beta - \gamma}} \int_0^{\pi/2} \frac{d\Phi}{\sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \Phi}} \quad (25)$$

durum yoğunluğu (25) şeklini alır. (25) bağıntısındaki integrali

$$F\left(\frac{\pi}{2}, K\right) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\Phi}{\sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \Phi}} \quad (26)$$

şeklinde yazılıp, $\sqrt{\beta - \gamma} = Z_0$ ve $K = \sqrt{(\beta - \gamma)/(\alpha - \gamma)} = \sqrt{Z_1/Z_0}$ kısaltmalarını tanımlarsak (25) bağıntısı,

$$D(E) = \frac{16E}{a^2 \sqrt{3\pi^2} \sqrt{\beta - \gamma}} \int_0^{\pi/2} \frac{d\Phi}{\sqrt{1 - K^2 \sin^2 \Phi}} = \frac{16E}{a^2 \sqrt{3\pi^2} \sqrt{Z_0}} F\left(\frac{\pi}{2}, \sqrt{\frac{Z_1}{Z_0}}\right) \quad (27)$$

şeklini alır. Z_0 ve Z_1 değerlerini x,E grafiğindeki bölgelere göre sınıflandırırsak,

$$Z_1 = \begin{cases} 4|E| & -1 \leq E \leq 1 \\ (1 + |E|)^2 - \frac{1}{4}(E^2 - 1)^2 & -3 \leq E \leq -1 \text{ ve } 1 \leq E \leq 3 \end{cases}$$

$$Z_0 = \begin{cases} (1 + |E|)^2 - \frac{1}{4}(E^2 - 1)^2 & -1 \leq E \leq 1 \\ 4|E| & -3 \leq E \leq -1 \text{ ve } 1 \leq E \leq 3 \end{cases}$$

(27)

bağıntıları geçerlidir.

ÖZGEÇMİŞ

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

Eğitim Durumu (Kurum ve Yıl)

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