

ANKARA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

DOKTORA TEZİ

ELEKTRON-FONON ETKİLEŞMESİ VE TOPOLOJİK
KUSURLARIN GRAFENİN FERMİ YÜZEYİ TOPOLOJİSİNE
ETKİLERİ

Neslihan GÖKÇEK

FİZİK ANABİLİM DALI

ANKARA
2017

Her hakkı saklıdır

TEZ ONAYI

Neslihan GÖKÇEK tarafından hazırlanan “Elektron-Fonon Etkileşmesi ve Topolojik Kusurların Grafenin Fermi Yüzeyi Topolojisine Etkileri” adlı tez çalışması 21/02/2017 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

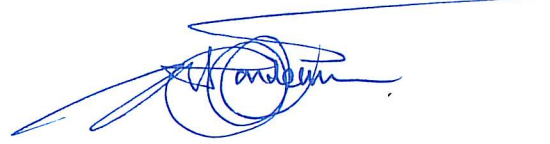


Jüri Üyeleri:

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



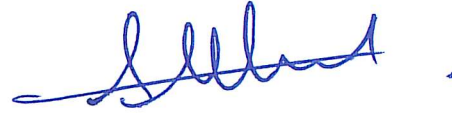
Üye : Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR
Ankara Üniversitesi / Fizik Anabilim Dalı



Üye : Prof. Dr. Şengül KURU
Ankara Üniversitesi / Fizik Anabilim Dalı



Üye : Prof. Dr. Mehmet ÇAKMAK
Gazi Üniversitesi / Fizik Anabilim Dalı



Üye : Doç. Dr. Bülent YILMAZ
Ankara Üniversitesi / Fizik Anabilim Dalı



Yukarıdaki sonucu onaylarım.

Prof. Dr. Atila YETİŞEMİYEN
Enstitü Müdürü

ETİK

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

21/02/2017



Neslihan GÖKÇEK

ÖZET

Doktora Tezi

ELEKTRON-FONON ETKİLEŞMESİ VE TOPOLOJİK KUSURLARIN GRAFENİN FERMİ YÜZEYİ TOPOLOJİSİNE ETKİLERİ

Neslihan GÖKÇEK

Ankara Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR

Bu tezde, topolojik kusurların ve elektron-fonon etkileşmelerinin grafenin elektronik spektrumu üzerine etkileri analitik olarak araştırılmıştır. Elektron-fonon kuplajı ve üçgensel eğriliğin birleşmiş etkilerinin grafenin elektronik spektrumuna ve Fermi hızına etkilerini bulmak için Lee-Low Pines teorisi çerçevesinde bir çalışma yürütülmüştür. Fermi hızının renormalize olmasına ek olarak, üçgensel eğrilikten dolayı güçlü bir anizotropi sergilediği sonucuna varılmıştır. Dahası, topolojik kusurların ve Rashba spin-yörünge etkileşmesinin grafenin elektronik spektrumuna etkileri analitik olarak analiz edilmiştir. Dejenere pertürbasyon teorisi kullanılarak yapılan bu çalışma sonucunda, sözde Zeeman yarılmasının topolojik kusur ve Rashba spin-yörünge etkileşmesi ile kontrol edilebilir olduğu bulunmuştur. Son olarak, grafen kuantum noktasının elektronik spektrumunun, hidrojenimsi bir safsızlık ile güçlü biçimde değiştiği varyasyonel yöntem kullanarak gösterilmiştir.

Şubat 2017, 63 sayfa

Anahtar Kelimeler: grafen, topolojik kusurlar, elektron-fonon etkileşmesi

ABSTRACT

Ph.D. Thesis

EFFECTS OF ELECTRON-PHONON INTERACTION AND TOPOLOGICAL DEFECTS ON THE FERMI SURFACE TOPOLOGY OF GRAPHENE

Neslihan GÖKÇEK

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

Supervisor: Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR

In this thesis, the effects of topological defects and electron-phonon interactions on the electronic spectrum of graphene are investigated analytically. To find the combined effects of electron-phonon coupling and trigonal warping on the electronic spectrum of graphene, a work performed within the framework of Lee-Low Pines theory. It is shown that, in addition to its renormalization, Fermi velocity exhibits strong anisotropy due to trigonal warping. Moreover, the effects of topological defects and Rashba spin-orbit interaction on the electronic spectrum of graphene are analyzed. As a result of performing the degenerate perturbation theory in this study, it is found that pseudo-Zeeman splitting can be tuned by topological defect and Rashba spin-orbit interaction. Finally, using the variational method it is shown that the electronic spectrum of graphene quantum dot strongly changed by a hydrogenic impurity.

February 2017, 63 pages

Key Words: graphene, topological defects, electron-phonon interaction

TEŞEKKÜR

Bilgi ve deneyimleriyle kendimi yetiştirmeme katkıda bulunan saygıdeğer hocam Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR'e (Ankara Üniversitesi, Fizik Anabilim Dalı) teşekkür ederim. Ayrıca, bu tezdeki çalışmalarımı 113F103 no'lu proje kapsamında destekleyen TÜBİTAK'a teşekkür ederim.

Hayatımın her anında olduğu gibi, doktora sürecimde de her anlamda destek olan kıymetli annem Nesrin GÖKÇEK'e ve kıymetli babam Nurettin GÖKÇEK'e sonsuz teşekkür ederim. Hayatımı kolaylaştıran, bana her daim güvenen ve inanan ablam Nilüfer AKCİ'ye ve abim Emre AKCİ'ye teşekkür ederim. Ve değerli yeğenlerim, umut ışıklarım, neşe kaynaklarım Furkan AKCİ'ye ve Gürkan AKCİ'ye en içten hislerimle teşekkür ederim.

Neslihan GÖKÇEK
Ankara, Şubat 2017

İÇİNDEKİLER

TEZ ONAY SAYFASI

ETİK	i
ÖZET.....	ii
ABSTRACT	iii
TEŞEKKÜR	iv
SİMGELER DİZİNİ	vi
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	vii
1. GİRİŞ	1
2. GRAFEN	5
2.1 2010 Fizik Nobel'ine Uzanan Tarih	5
2.2 Grafenin Sentezlenmesi ve Karakterizasyonu	11
2.3 Grafende Kuantum ve Kuantum Alanlarının Fiziği	11
2.3.1 3+1 boyutta Dirac teorisi	12
2.3.2 2+1 boyutta kütesiz kiral Dirac elektronları	16
2.4 Grafende Fononlar ve Raman Modları	18
2.5 Üçgensel Eğrilik	21
2.6 Topolojik Kusurlar	22
2.7 Grafende Spin Yörünge Etkileşmesi	25
2.8 Grafen Kuantum Noktaları	26
3. GRAFENDE HIZIN RENORMALİZASYONU: ÜÇGENSEL EĞRİLİĞİN VE ELEKTRON-FONON BAĞLAŞIMININ ETKİLERİ	27
4. RASHBA TİPİ SPİN-YÖRÜNGE ETKİLEŞMESİNİN HİDROJENİKSAFSIZLIK VARLIĞINDA GRAFENİN ELEKTRONİK DURUMLARINA ETKİLERİ	38
5. HİDROJENİMSİ SAFSIZLIK VARLIĞINDA GRAFEN KUANTUM NOKTASI	45
6. TARTIŞMA VE SONUÇ	54
KAYNAKLAR	56
ÖZGEÇMİŞ	63

SİMGELER DİZİNİ

c	Işık hızı
$\hbar$	Planck sabiti
v_F	Fermi hızı
a	Örgü parametresi
a_{c-c}	İki karbon atomu arasındaki uzaklık
$\mathbf{k}$	Elektron dalga vektörü
$\mathbf{q}$	Fonon dalga vektörü
ψ	Dalga fonksiyonu
σ	Pauli spin matrisleri
α	Dirac matrisleri
H	Hamiltonyen
K	Yüksek simetri noktası
K'	Yüksek simetri noktası
Γ	Yüksek simetri noktası
E_{2g}	Simetri grubunun indirgenemez temsili
Ω_0	Birim hücrenin alanı
M_μ	Etkileşme genliği
e	Elektron yükü
$\mathbf{A}$	Vektör potansiyel
$\mathbf{p}$	Momentum
L_n	Laguerre Polinomları
n_Ω	Atom sektörü sayısı
λ_R	Rashba spin-yörünge etkileşme gücü

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 1.1 Karbon allotropları	2
Şekil 2.1 Grafeni bantla soyma işlemi	5
Şekil 2.2 Asılı tek tabaka grafenin TEM görüntüsü	6
Şekil 2.3 Grafenin alt örgü tanımlaması	8
Şekil 2.4 Grafenin bant yapısı	9
Şekil 2.5 Grafenin fonon dağılım bağıntısı	19
Şekil 2.6 Olası beş grafen koni için örnek	22
Şekil 3.1 Grafenin BB'nin K noktasında iletim bandının k'ya bağımlılığı	31
Şekil 3.2 Grafenin BB'nin K noktasında değerlik bandının k'ya bağımlılığı	32
Şekil 3.3 Grafenin BB'nin K' noktasında iletim bandının k'ya bağımlılığı	32
Şekil 3.4 Grafenin BB'nin K' noktasında değerlik bandının k'ya bağımlılığı	33
Şekil 3.5 K ve K' (içteki) vadilerinde enerjilere polaronik katkılar	34
Şekil 3.6 Renormalize Fermi hızının K vadisi iletim bandı için k'ya bağımlılığı	35
Şekil 3.7 Renormalize Fermi hızının K vadisi değerlik bandı için k'ya bağımlılığı	35
Şekil 3.8 Renormalize Fermi hızının K' vadisi iletim bandı için k'ya bağımlılığı	36
Şekil 3.9 Renormalize Fermi hızının K' vadisi iletim bandı için k'ya bağımlılığı	36
Şekil 4.1 Grafende enerji yarılmalarının RSYE'ne bağımlılığı	41
Şekil 4.2 Enerji yarılmalarının $\lambda_{\{R\}}$ bağımlılığı	42
Şekil 4.3 Enerji yarılmalarının Z bağımlılığı	43
Şekil 5.1 Manyetik alanın fonksiyonu olarak parabolik GKN enerji spektrumu	49
Şekil 5.2 Enerji özdeğerlerinin etkin nokta yarıçapına bağımlılığı	50
Şekil 5.3 Enerji özdeğerleri etkin nokta gücüne bağımlılığı	51
Şekil 5.4 Manyetik alan yokluğunda Z' a bağımlı GKN enerjileri	52

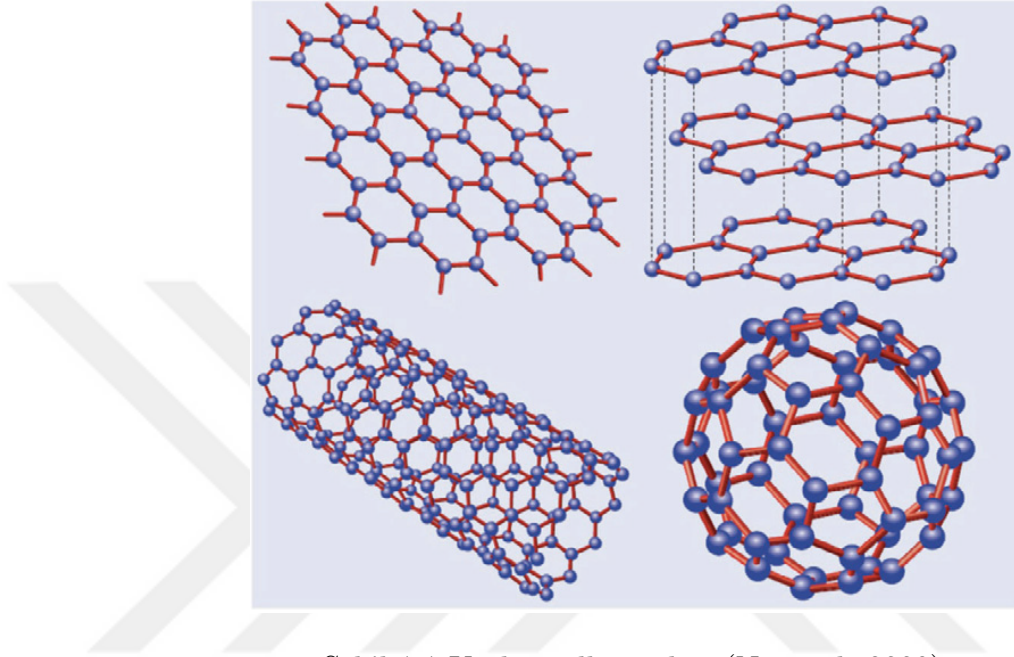
1. GİRİŞ

İnsanlar eski devirlerden bu yana yeni materyalleri keşfetme çabasında olmuştur. Bu durum onun gelişiminin bir göstergesidir. Şu an gündelik yaşantımızın vazgeçilmez bir parçası olan bilgisayar, akıllı telefon gibi teknoloji aygıtlarının, küresel birlikteliğimizi sağlayan internetin ortaya çıkışı 20. yy'a denk geldiğinden, materyal bilminde en büyük ilerleyişin bu dönemde olduğunu söylemek hiç de yanlış değildir. Böylesine bir oluşumun temelini ise 20. yy'ın başlarından itibaren gelişerek ilerleyen kuantum mekaniği oluşturur.

20. yy'ın son yarısından günümüze kadar uzanan devir, silikon tabanlı teknolojinin hakim olduğu bir devirdir ve bu yüzden silikon (Si) devri olarak adlandırılır. Ancak, günü geldiğinde silikon gibi yarıiletkenlerin egemen olduğu bu teknoloji yerini başka temellere dayalı bir teknolojiye bırakacaktır. Yarıiletkenler için yapılan araştırmaların, yarıiletkenler teknolojisinin yerini karbon tabanlı nanoelektronik alacağını öngörmesi hiç de şaşırtıcı bir durum değildir. Bunun nedeni, materyal tarihi açısından bakıldığında gelecek mikroelektronik için karbonun seçilmiş olma ihtimalinin kuvvetli oluşudur.

1950'lerde Bell laboratuvarlarında germanyum tabanlı olan ilk transistör yapılmıştır. Bundan kısa bir süre sonra daha az maliyetle, daha düşük enerji kaybıyla elektrik iletimi sağlayan Si'ye geçilmiştir. Bu durumda dikkat edilmesi gereken husus, en üst satırında karbon (C) atomunu bulunduran periyodik tablonun VI A sütununda bir üst satıra geçilmiş olmasıdır. Aynı sütunda bulunan bu elemanlar en üst kabuklarında aynı sayıda elektrona sahip olduklarından kimyasal özellikleri aynıdır, fakat elektronik dalga fonksiyonlarının boyutları ve onların enerjileri büyük değişim gösterir. Örneğin Si atomu C atomundan sekiz fazla elektrona sahip olduğundan Coulomb etkileşmesini perdeleyen daha geniş elektron bulutuna sahiptir ve bu durum Si kristallerinde C kristallerine kıyasla daha zayıf ve uzun kimyasal bağlara yol açar, yani C'da bu uzunluk 1,42 Å iken, Si'da 2,35 Å'dur. C 3500 °C ile en yüksek

erime ve süblimleşme sıcaklığına sahipken Si için bu sıcaklık 1700 °C'dir. Aralarındaki bu farklılık, Si'nun yeryüzünde sadece kayalık ve kumlarda var ederken, C'nun yaşam için neden gerekli eleman olduğunu anlamaya yardımcı olmaktadır (Neto 2010).



Şekil 1.1 Karbon allotropları (Neto vd. 2009)

Karbon kimyasının en ilgi çekici yönlerinden biri, karbonun elektronik durumlarının saf s ve p hidrojenimsi durumlarının hibritleşmesiyle daha iyi tanımlanmasıdır. Bu yapılar, kristal yapıları ve karbon atomlarının orada hibritleşmesiyle ayırt edilebilir. Hibritleşen bu yörüngeler çok sayıda farklı kristal yapı veya allotropun oluşumuna sebep olan güçlü yönlü kovalent bağları oluştururlar. Saf karbon elması, grafiti, fulleren'i ve bu ailenin en son üyesi olan grafeni içerecek şekilde bir çok farklı yapıda bulunur. Ancak, karbonun başka elementlerle bağlanması, kararlı olmasına rağmen kimyasal tepkimelerle kolayca değiştirilebilir ve ortaya çıkan bileşikler genelde şaşırtıcı derecede birbirinden farklıdır. Örneğin bir karbon çiftine bağlanan bir hidrojen atomu asetileni (etin) oluştururken, iki ve üç hidrojen atomu sırasıyla etilen (eten) ve etan oluşturur. Elmasta atomlar sp^3 hibritleşirler ve iki iç içe geçmiş yüzey merkezli kübiklerden oluşan kübik yapıda elmas içinde yerleşirler. Grafit tabakasal yapıya sahiptir ve sp^2 hibritleşmesi yapan grafitteki karbon atomları her bir düz-

lemde altıgen örgüde düzenlenirken, düzlemler kendilerince AB (Bernal) yığılmışlardır ve van der Waals kuvvetleriyle birbirine bağlıdırlar. Amorf karbon ise isminden de anlaşılacağı üzere uzun mesafe kristal düzenlemesine sahip değildir, ancak atomlar yerel olarak birbirine kovalent biçimde bağlıdırlar. Ayrıca amorf karbon sp^2 ve sp^3 hibritleşmesi yapan karbon atomların karışık bileşiminden oluşur. Diğer yandan, elmas nano-elmas yapılanmak için nano boyuta indirgenebilirken, gerçek düşük boyutlu allotroplara indirgenebilir olan grafittir (Vijayaraghavan 2013).

Bu tezin temelini oluşturan grafen de grafitin tek tabakası olarak tanımlanır. Şekil 1.1’de gösterilen saf karbon allotropları yakından incelendiğinde hepsinin aynı altıgen zincir motifine sahip olduğu anlaşılır. Linus Pauling, 1950’lerde hazırladığı yüksek lisans tezi "The Nature of the Chemical Bond"’da, o zamanlar bilinen tek allotrop grafitin çok büyük molekül tabakalarından (şu anda grafen olarak adlandırılan) oluştuğunu belirterek karbon allotroplarının doğasını anlayan ilk isim olmuştur. Karbon allotroplarından grafenin sarmalanmış olan fullerenerler sıfır boyutlu yapılar olup 1985 yılında keşfedilmiş ve tanımlanmışlardır. Grafenin rulo haline getirilmiş olarak düşünülebilen karbon nanotüpler ise bir boyutlu yapılardır ve 1991 yılında sentezlenip, atomik yapısı izah edilmiştir.

Grafen terimi ilk kez 1987 yılında, grafit bileşeninin tabakaları arasına molekül veya iyon eklerken, grafitin iki değişen tabakasından birini tanımlamak için kullanılmıştır. O zamanlar, yüzey enerjisini küçültmek için daha kararlı bir allotropa kendiliğinden dönüşmesi gerektiği düşünülen grafenin, serbest halde bulunamayacağı kabul edilmiştir. Bunun yanı sıra, 1970’lerden bu yana bilinen epitaksiyel grafeni de içeren desteklenmiş karbon tek tabakalar çok önceleri sentezlenip tanımlanmıştır. Ayrıca, grafitin grafit oksit gibi kimyasal türevlerinin varlığı 1950’ler kadar evvela gitmektedir ve tek tabakalarca (grafen oksit) var olabilir. Ancak, yapılarının kararlı halde bulunmasını sağlayan düzlem dışı atomlardan ötürü bunlar gerçek iki boyutlu tabakalar değildir.

Bahsi geçen bütün bu allotropların dikkat edilmesi gereken ortak noktası ise, elek-

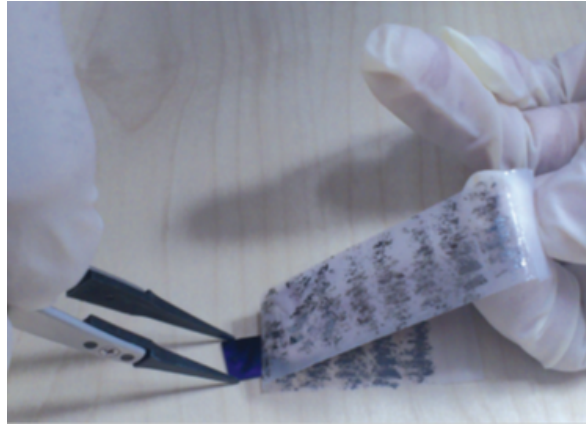
tronik ve yapısal özelliklerinin diğer bir karbon allotropu olan grafenin temel özelliklerinden elde edilebilmesidir. Dolayısıyla grafen, diğer karbon allotropları için teorik yapı taşı olarak adlandırılabilir.

Tezin ikinci bölümünde, diğer allotropları anlamada temel olma özelliğiyle bilinen grafeni anlamada temel oluşturan konulara değinilmiştir. Tezin üçüncü bölümünde ise, grafende Fermi hızının renormalize oluşuna üçgensel eğrilik ve elektron-fonon etkileşmelerinin birleşmiş etkilerinin araştırıldığı çalışmaya yer verilmiştir. Üçgensel eğrilik varlığında elektronlar ile grafenin iki kere dejenere-optiksel fonon kiplerinin etkileşmesini tanımlayan Fröhlich Hamiltonyen'ine Lee-Low-Pines teorisi çerçevesinde analitik çözüm sunulmuştur. Ortaya konulan modele dayanılarak, Fermi hızının renormalizasyonuna ek olarak üçgensel eğrilmeden dolayı güçlü anizotropi sergilediği analitik olarak gösterilmiştir. Ayrıca üçgensel eğrilmenin başladığı bölgede elektron-fonon bağlaşımı nedeniyle enerji bantlarında bükülme ve güçlü anizotropi gözlenmiştir. Tezin dördüncü bölümüne gelindiğinde, Rashba spin-yörünge etkileşmesinin hidrojenik safsızlığa sahip aralıklı grafene topolojik kusurlar varlığında etkisinin teorik olarak araştırıldığı analitik çalışmaya yer verilmiştir. Aralıklı grafenin elektronik spektrumunun safsızlığın ve Rashba spin-yörünge kuplajının gücüne bağlılığı dejenere pertürbasyon teorisi kullanılarak incelenmiştir. Yapılan bu çalışma sonucunda, Rashba spin-yörünge etkileşmesinin gücü arttıkça topolojik kusurun neden olduğu enerji seviyelerindeki sözde-Zeeman yarılmasının arttığı gözlenmiştir. Dolayısıyla, bu sözde-Zeeman yarılmasını Rashba spin-yörünge etkileşmesinin ve hidrojenik safsızlığın büyüklüğü aracılığıyla ayarlamak mümkündür. Tezin beşinci bölümünü oluşturan çalışmada ise, merkezinde hidrojenimsi safsızlığı bulunan çembersel grafen kuantum noktasının elektronik enerji seviyeleri araştırılmıştır. Grafen noktanın geometrisinden dolayı yük taşıyıcıların hapislenmesini ve manyetik alanın etkilerini de hesaba katacak şekilde deneme dalga fonksiyonları oluşturulup, varyasyonel yaklaşım uygulanarak çözüme gidilmiştir. Safsızlığın, grafen kuantum noktasının elektronik spektrumunu ciddi anlamda modifiye ettiği bulunmuştur. Ayrıca, kritik safsızlık güç değeri noktanın yarıçapına bağlı olarak elde edilmiştir. Son olarak da altıncı bölümde tartışma ve sonuçlara yer verilmiştir.

2. GRAFEN

2.1 2010 Fizik Nobel'ine Uzanan Tarih

Grafenin erken tarihinde yapılan ilk hesaplama kristal örgüsündeki elektronların dinamiği hakkında bilgi içeren bant yapısı ile ilgilidir. 1947 yılında Wallace tarafından yapılan bu hesaplamada, tek tabaka grafenin k-momentum uzayı dalga vektörü cinsinden olan enerji dağılımı bağıntısı $E(k)$ 'nın doğrusal olduğu ispat edilmiştir (Wallace 1947). Gordon Semenoff'un grafenin kuantum elektrodinamiğinin $(2 + 1)$ boyutlu katıhal analogunu sağlayabileceğini farketmesinin ardından grafen Kuantum Elektrodinamiği'nin çeşitli sorularına yanıt bulmak için kullanılan bir oyuncak model olmuştur (Semenoff 1984). Grafen iki boyutlu olduğu için düzlemsel yapısının termodinamik olarak kararsız olacağını ve karbon kurumuna dönüşeceğini düşünen bilim insanları tek tabaka iki boyutlu grafenin serbest durumda var olamayacağını on yıllarca varsaymıştır.



Şekil 2.1 Grafeni bantla soyma işlemi (Savage 2012)

Grafen İngiltere'de bulunan Manchester Üniversitesi'nde Andre Geim'ın liderliğini yaptığı bir grup tarafından 2004 yılında ilk kez sentezlenmiştir (Novoselov vd. 2004). Doğal yoldan bulk grafitin bileşeni olarak bulunan grafeni serbest halde elde etmek için grafiti kullanmaları bu grubu başarılı sonuca götüren mantıklı adım olmuştur. Aynı zamanda, bilimsel ileri teknoloji araştırmalarının pahalı ve karmaşık olduğu bir

dönemde, grafeni grafitten izole etmek için kullandıkları yöntem oldukça şaşkınlık yaratmıştır. Grafit katmanları arasında zayıf van der Waals bağlanması olduğundan, çok zayıf bağlı olan tabakaları grafit kristalinden ayırmak için şekil 2.1’de gösterildiği gibi yapışkan bant kullanmışlardır (Savage 2012). Ardından, ayırdıkları bu tabakayı basit optiksel bir mikroskopla gözlemlemişlerdir. Daha sonra yöntemlerini geliştirerek sert bir yüzey boyunca küçük grafit kristallerini nazıkçe sürterek yüksek nitelikte grafen üretmişlerdir. Ayırdıkları bu tabakaları oksitlenmiş silikon yüzeyi üzerine sürtmüşlerdir; çünkü grafen tek atom kalınlığında olmasına rağmen, uygun olarak seçilmiş SiO_2 alttaşı üzerine yerleştirildiğinde sıradan bir optik mikroskopla gözlenebilir.



Şekil 2.2 Asılı tek tabaka grafenin TEM görüntüsü (Meyer vd. 2007)

Şekil 2.2’de tek tabaka grafenin taramalı elektron mikroskobu (TEM) ile elde edilen görüntüsü verilmiştir. Karbon tabakada atomik skalada yüzey enerji fazlasını karşılayan dalgalanmalar bulunmaktadır ve böylece grafenin iki boyutlu yapısını kararlaştırmaktadır. Bu nedenle, grafenin yarı-iki boyutlu (2B) bir materyal olduğu tartışmaya açıktır. Buna rağmen, grafenin 2B fiziğe has birçok özellik sergilediği de gösterilmiştir. Ancak grafenin tam anlamıyla araştırma alanı içerisine dahil eden çalışma ABD’de Coulombia Üniversitesi’nde bulunan Geim ve Philip’in grupları tarafından gerçekleştirilen anormal Hall etkisi ölçümü ile 2005 yılında gerçekleştirilmiştir. Bu deneyler neticesinde grafendeki elektronların ışık hızının 300’de biri hızla hareket ettiği ve göreceli bir davranış sergilediği kanıtlanmıştır. Dirac parçacıkları olarak adlandırılan bu parçacıklar bal peteği örgüde bulunduklarından, Paul-

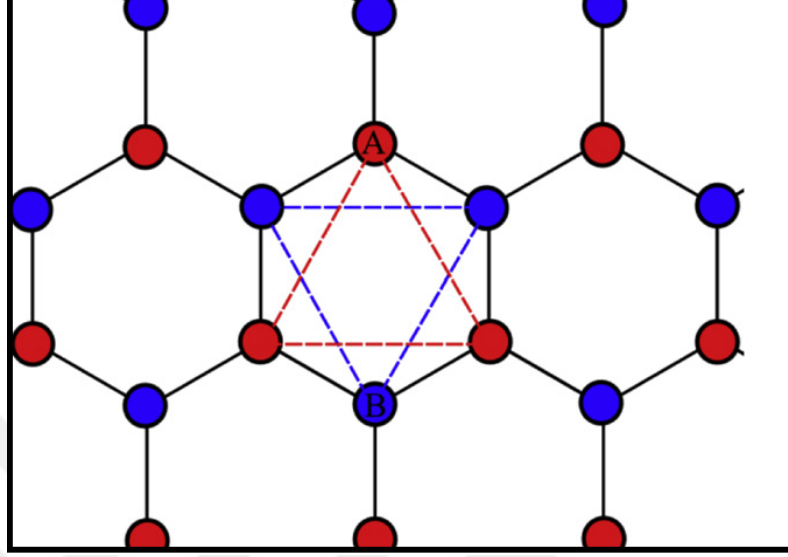
ing'in çok büyük molekül olarak adlandırdığı grafenin aslında kristal olduğunu Geim ve Novoselov kanıtlamıştır. Böylelikle, Geim ve Novoselov 2010 yılı Fizik Nobel ödülünü almaya hak kazanmışlardır.

Düşük enerjilerde ve yüksek dalga boylarında grafen elektronlarının göreceli parçacıklar gibi davranması (Novoselov vd. 2004) bir çok bilim insanı gibi deneysel ve teorik çalışan katıhal fizikçilerinin de ilgisini çekmiştir. Bunun sebebi, daha önce parçacık ve nükleer fizik alanlarında öngörülen ancak sadece nötron yıldızları veya kara delikler yakınında var olabilecek çok büyük elektrik ve manyetik alan gibi koşullar gerektirdiği için uygulanması denenemeyen deneylerin gerçekleştirilmesini sağlayacak bir alan oluşturmastır.

Diğer yandan, grafene duyulan bilimsel ve teknolojik yoğun ilgi, grafenin kendine özgü elektronik özelliklerinden kaynaklanmaktadır. Bunlara örnek olarak, yüksek taşıyıcı mobilitesi, oda sıcaklığında kuantum Hall olayı, yük taşıyıcıların balistik iletimi ile birlikte iki kutuplu elektrik alan etkisi verilebilir. Aynı derecede önemli olan diğer bazı özellikleri ise, beyaz ışığın beklenmedik şekilde yüksek emilimi, yüksek esnekliği, sıradışı manyetik özellikleri, yüksek yüzey alanı, gaz adsorpsiyonu ve moleküllerle yük-iletim etkileşimidir. Grafenin elektronik özelliklerini anlayabilmek için öncelikli olarak bant yapısını incelemek gerekir. Tek tabaka grafenin bant yapısı iyi bir yaklaşıklıkla en yakın komşu sıkı bağ hesaplanmasıyla elde edilebilir. Bu bant yapısı incelendiğinde tek tabaka grafende böylesine bir ilgiyi uyandıran üç elektronik özellik hemen ortaya çıkar. Bunlar, Dirac noktalarında yük yoğunluğunun yok olması, sözde spinin varlığı ve yük taşıyıcıların göreceli doğasıdır.

Grafen örgüdeki her bir karbon atomu en yakın üç komşusuna güçlü düzlem içi kovalent bağlarla bağlıdır. σ bağları olarak bilinen bu bağlar $2s$, $2p_x$ ve $2p_y$ değerlik yörüngelerindeki elektronlardan meydana gelir. Dördüncü değerlik elektronu grafen düzlemine dik olarak yönelmiş $2p_z$ yörüngesindedir, dolayısıyla düzlem içi σ elektronlarıyla etkileşmezler. Komşu atomların $2p_z$ yörüngeleriyle üst üste gelmesi yerleşmemiş π (doldurulmuş veya değerlik) ve π^* (doldurulmamış veya iletim)

bantlarına yol açar. Grafenin elektronik özelliklerinin bir çoğu bu π bantları ile anlaşılabilir.



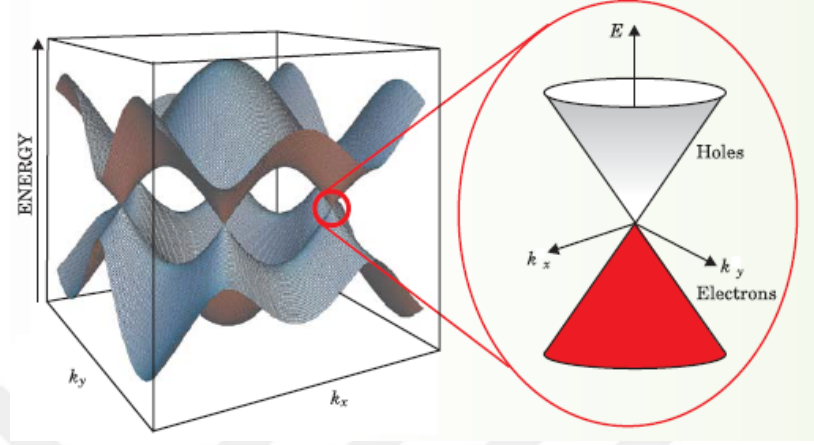
Şekil 2.3 Grafenin alt örgü tanımlaması (Warner vd. 2013)

Altıgen grafen örgütün birim hücresi birbirinden $a_{c-c} = 1,42$ Å uzaklığı ile ayrılan iki karbon atomundan meydana gelir. Şekil 2.3’de görüldüğü üzere grafen örgüyü iki üçgen alt örgüden meydana gelmiş, çoğunlukla A ve B ile gösterilen, olarak tanımlamak daha yol göstericidir. Bu alt örgü tanımı Geim ve Novoselov’un yeni ufuklar açan makalesi yayınlanmadan yaklaşık 57 yıl önce Wallace tarafından tek tabaka grafenin ilk bant yapısı hesaplamasında kullanılmıştır. Tek tabaka grafenin bant yapısı atom başına tek bir π elektronunu dikkate alıp basit bir en yakın komşu sıkı bağ yaklaşımı kullanarak yeterli biçimde tanımlanabilir (Wallace 1947, Reich vd. 2002, Neto vd. 2009). Sonucunda ortaya çıkan dağılım bağıntısı şu şekilde yazılabilir:

$$E^{\pm}(k_x, k_y) = \pm\gamma_0 \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right)} \quad (2.1)$$

Burada, k_x ve k_y sırasıyla x ve y yönünde dalga vektörü, $a = \sqrt{3}a_{c-c}$ ve en yakın komşu üst üste gelme integrali γ_0 2,5 eV’den 3 eV’a kadar değer almaktadır (Reich

vd. 2002). Denklem 2.1'i kullanarak hesaplanan grafenin bant yapısı şekil 2.4'de gösterilmiştir.



Şekil 2.4 Grafenin bant yapısı

Değerlik ve iletim bantları yüksek K ve K' noktalarında çakışmaktadır. Katkılanmamış grafende her bir karbon atomu değerlik bandını tamamen dolduran bir elektron sağlamaktadır ve iletim bandını boş bırakmaktadır. E_F Fermi seviyesi iletim ve değerlik bantlarının değdiği enerji değerinde bulunmaktadır. Bunlar Dirac veya nötr noktaları olarak bilinmektedir. Dağılım bağıntısının hesaplanması $K = [2\sqrt{3}\pi/3a, 2\pi/3a]$ ve $K' = [2\sqrt{3}\pi/3a, -2\pi/3a]$ Dirac noktalarına sınırlandırılabilir; çünkü diğer noktalar ters örgü vektörünü çevirmek aracılığıyla eşit olur. Momentum uzayındaki bu iki Dirac noktaları iki gerçek uzay grafen alt örgüsüne doğrudan ilişkilendirilebilir, yani, K A alt örgüsündeki elektronlardan dolayı ve K' B alt örgüsündeki elektronlardan dolayı. Denklem 2.1 Dirac noktaları civarında (K ve K') genişletildiğinde $E(k)$ enerjisi ve $\mathbf{k}$ momentumu arasındaki doğrusal ilişkiyi gösteren iyi bilinen dağılım bağıntısı

$$E^\pm(\mathbf{k}) = \pm \hbar v_F |\mathbf{k} - \mathbf{K}| \quad (2.2)$$

şeklinde elde edilir. Öyle ki $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ ve $v_F = \sqrt{3}\gamma_0 a / 2\hbar \approx 10^6 \text{ms}^{-1}$ olan Fermi hızıdır. K (K') yakınlarında dağılım bağıntısının bölgesi şekil 2.4'de gösterilmiştir. Buradan, Dirac konilerinin doğrusal doğası görülmektedir. Özetle, basit en yakın

komşu sıkı bağ yaklaşıklığı tanımını kullanarak grafenin bant yapısı hesaplanabilir. Buradan ortaya çıkan üç önemli özelliğe ulaşmak mümkündür ve bunlar bu materyal içinde elektron iletiminin doğasını tanımlamaktadır. Birincisi, dolu değerlik bandı ve boş iletim bandı, durum yoğunluğunun sıfır olduğu Dirac noktasında değmektedir. Dolayısıyla grafen sıfır aralıklı yarıiletken olarak en iyi şekilde tanımlanabilir. İkincisi, Fermi enerjisi yakınında grafen bant yapısı K ve K''de konuçlanan iki özdeş olmayan Dirac konisi cinsinden tanımlanabilir. Bir elektronun K noktasından K''ne saçılması büyük momentum değişimini gerektirir. Dolayısıyla grafende elektron iletimi K ve K' Dirac konilerinden (grafenin iki alt örgüsü A ve B'ye ait) meydana geldiği düşünülebilir. Grafende böyle yük taşıyıcıları yörünge ve spin kuantum sayılarına ek olarak iki kez dejenere bir vadi ve sözde-spin kuantum sayısına sahiptir. Sözde spin teriminin kullanılması gerçek spin ile benzeşmesindendir. Son olarak, grafenin dağıtım bağıntısı Dirac noktası yakınında doğrusal olma özelliğine sahiptir. Dolayısıyla, K ve K' noktaları yakınında kütesiz parçacıklar için Hamiltonyen göreceli Dirac denklemi

$$H_K = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

ile hesaplanabilir. Bu Hamiltonyen,

$$H_K = \hbar v_F \begin{pmatrix} \sigma_x & \sigma_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \end{pmatrix} = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \quad (2.4)$$

şeklinde yazılabilir. Burada, σ_x ve σ_y Pauli spin matrisleri ve $\mathbf{p}$ momentum operatörüdür. Burada, σ A ve B alt örgülerinin K noktası yakınında elektronik dalga fonksiyonlarına göreli katkılarını yansıtan sözde-spindir. Son zamanlarda ilgi çeken konu, karbon atomları arasında elektron-hoplama genliğini değiştiren esnek germe kullanarak sözde-spini ayarlamak dolayısıyla da etkin vektör potansiyel oluşturmaktadır. Gerilmeden indüklenmiş ayar alanından meydana gelen sözde-manyetik alanın, grafendeki yüksek gerilmiş nano-baloncukların tarama tünelleme mikroskopundan 300 T kadar büyük olduğu deneysel olarak gösterilmiştir. Sözde manyetik

alanlar kullanarak elektronik durumları ayarlama olasılığı sözde kuantum Hall etkisi gibi pek çok ilginç iddiaya yol açar.

2.2 Grafenin Sentezlenmesi ve Karakterizasyonu

Grafen normalde sp^2 bağlı karbon atomlarının tek bir tabakasını belirtirken, iki ve az-katmanlı grafenlere yönelik önemli araştırmalar da vardır. Grafenin ilk keşfinde kullanılan yöntem olan grafit tabakalarını mikromekaniksel bölmeye uğratma işleminden sonra, grafen senteziyle ilgili bir çok ilerleme olmuştur. Daha yüksek kalitede tek tabaka grafenler ve az-katmanlı grafenler hazırlamanın pek çok yöntemi vardır. Bunlar geniş olarak pul pul dökülme, kimyasal buharlaştırma yöntemi, ark boşalması ve grafen oksidin indirgenmesi olarak sınıflandırılabilir. Pul pul dökülme yöntemi mekaniksel ve kimyasal olmak üzere ikiye ayrılır.

Grafenin karakterizasyonu da grafen araştırmasının önemli bir bölümünü oluşturur ve çeşitli mikroskopik ve spektroskopik tekniklere dayalı ölçümleri içerir. Karakterizasyon tabaka sayısının belirlenmesini ve örneğin kusur varlığı veya yokluğu cinsinden safsızlığını içerir. Grafen tabakaların farklı alttaşlar üzerindeki optiksel kıyaslanması, tabakaların sayısını belirlemek için en basit ve etkili yöntemdir. TEM ile görüntünün kıyaslanması tabakaların sayısını belirlemede bir başka yöntemdir. Öte yandan Raman spektroskopisi, grafenin yapısal ve karakteristik özelliklerini incelemek için yoğun olarak kullanılan tahribatsız bir araçtır. Aynı zamanda, grafenin keşfinden bu yana, tabakaların sayısını, niteliğini ve hangi sırada istiflendiğini karakterize etmekte, elektron-fonon çiftleniminde nicel ölçümler için, katkılama seviyeleri, gerilme, nanoşeritlerde kenar kiralitesi ve Brillouin bölgesinin K noktası civarında fonon dağılımları için oldukça güçlü bir inceleme tekniği olarak ortaya çıkmıştır (Rao ve Sood 2013).

2.3 Grafende Kuantum ve Kuantum Alanlarının Fiziği

Alan kavramı fiziğin temelidir ve fiziksel bir durumun özünü yansıtır. Elektrodinamik, esneklik ve akışkan mekaniği ile başlayan bu kavram geçtiğimiz yüzyılda

kuantum uzmanlığına kuantum alanlar olarak evrilmiştir. Bose ve Fermi alanları ve onların kuantası yoğun madde fiziğine de nüfuz etmiştir, pek çok sistemin düşük-enerji ve düşük-sıcaklık özellikleri zayıf etkileşen bozonlar ve fermiyonlar ile iyi tanımlanmıştır. Yoğun madde fiziğinin fazları ile ilgili çalışmalarda alanlar mer-tebe parametreleri olarak ortaya çıkar. Yoğun madde fiziği sistemlerinin zenginliği yeni ve kuvvetli etkileşen kuantum alanlar aracılığıyla meydan okumalara (chal-lenges) devam etmektedir. Kuvvetli manyetik alanda heteroyapıların arayüzeyinde elektron gazı gibi iki boyutlu sistemler veya yarı-2B'lu kuprat süperiletkenleri bun-lara örneklerdir. Bu kategoride en yeni örnek grafendir. Basitliğine rağmen, grafen, $p\pi$ -bağlı karbon atomlarının balpeteği ağı, kuantum ve kuantum alanlarının beklen-medik bir çeşitliliğini destekler. Sonuç olarak, zengin düşük enerji fiziği ortaya çıkar. Kuantum alan teorisi tanımı grafende pek çok deneyi anlamak için kullanışlı ve bazı durumlarda, gerekli bir araçtır. Dahası, kuantum alan teorisi yaklaşımı önemli ve doğrulanabilir tahminler yapmıştır. Nitel anlamda fizik bakış açısıyla grafenin kuantum alan yönlerini bilmek önemlidir. Grafene ilginin keskin bir şekilde artış göstermesinin nedeni, grafendeki yarıparçacıkların göreli, $2 + 1$ boyutlu, kütsesiz ve kiral Dirac parçacığımsı davranışlarıdır.

2.3.1 $3 + 1$ boyutta Dirac teorisi

Grafende elektronların $2 + 1$ boyutlu göreli davranışını anlamak için gerekli olan kavramları incelemeden önce, $3 + 1$ boyutlu göreli Dirac denklemini anlamak gerekir. İyi bilindiği üzere, Dirac, denklemini göreli olmayan Schrödinger denklemini göreli duruma genişletirken keşfetti. Klein, Gordon ve Schrödinger tarafından yapılan daha önceki girişimler

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial^2 t} = (m^2 c^4 - c^2 \hbar^2 \nabla^2) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.5)$$

ile verilen Klein-Gordon denklemine yol açtı.

Bu denklem, Lorentz dönüşümleri altında simetrik olmasına rağmen, olasılığın fizik-sel olmayan ve negatif değerlerine yol açmaktadır. Bu başarısızlık, denklemin zaman

değişkenine ikinci dereceden bağlı olmasıdır. Bunun ardından Dirac, kendi adını taşıyan birinci dereceden bir denklem keşfetmiştir:

$$-i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{r},t) = (-i\hbar c\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + mc^2\beta)\psi(\mathbf{r},t) \quad (2.6)$$

Bunun için Dirac'ın yapması gereken 4×4 komutatif olmayan Dirac matrislerini, $(\boldsymbol{\alpha}, \beta)$ tanımlamasıydı ve Klein-Gordon denkleminde beliren kompleks sayı tek bileşen dalga fonksiyonu $\psi(\mathbf{r},t)$ 'yi dört bileşenli spinöre genelleştirmesi idi: $\Psi(\mathbf{r},t)$. Ashında, Dirac tek bir atışta doğanın çeşitli gizemlerini sırasıyla keşfetti: spin serbestlik derecesinin görelî doğası, helisite, kiralite, anti-parçacık (pozitron), fermiyonlarla dolu bir deniz olarak vakum, beklenmedik sonsuzluklar ve dahası. Tarihsel olarak gerçek şu ki, Dirac doğadaki temel parçacıklar için görelî kuantum alan teorisinin temelini atmıştır. İlk başarılı teori kuantum elektrodinamiği idi. Bu bir dereceye kadar büyüdü ve elektromanyetik, zayıf ve güçlü etkileşmelerin standart modeli oldu.

Dört bileşenli Dirac spinörü zengin bir fiziği içerir. Bunu görmek için, Dirac denkleminin matris formunda

$$-i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{r},t) = \begin{pmatrix} mc^2I & c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & -mc^2I \end{pmatrix} \psi(\mathbf{r},t) \quad (2.7)$$

şeklinde yazılır (Rao ve Sood 2013). Öyle ki, $\boldsymbol{\sigma}$ 'lar 2×2 Pauli matrisleri ve I 2×2 birim matristir ve spinör aşağıdaki gibi verilir:

$$\psi(\mathbf{r},t) = \begin{pmatrix} e_{\uparrow} \\ e_{\downarrow} \\ p_{\uparrow} \\ p_{\downarrow} \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

$\psi(\mathbf{r},t)$ 'nin üst iki satırı pozitif enerji (elektron) genliğinin yukarı ve aşağı spin bileşenlerini temsil etmektedir. Alt iki satırı ise negatif enerji (pozitron) genliğini temsil etmektedir. İlginç olan şey, görelî dinamikler (köşegen üzerinde olmayan elemanların momentum işlemcisi) pozitif ve negatif enerjileri tek-parçacık seviyesinde

karıştırmaktadır ve karışmanın miktarı köşegen matris elemanı mc^2 ile belirlenir. Bu karışımı görmek için, düzlem-dalga serbest-parçacık çözümüne bakılır. Böyle bir özfonksiyon elektron özfonksiyonudur:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{E + mc^2}{2EV}} \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \frac{cp}{E+mc^2} \left(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right) \end{pmatrix} e^{i\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar}} \quad (2.9)$$

Burada E parçacığın enerjisi ve V sistemin hacmi, $\hat{\mathbf{p}}$ üçlü momentum $\mathbf{p}$ boyunca uzanan birim vektördür. Yukarıda söz edilen dört bileşenli spinörün ilk iki satırı elektronun pozitif enerji bileşenlerinin seçilmiş pozitif z-doğrultusu boyunca spin izdüşümüne sahip olanları belirtmektedir. Sadece ilk iki bileşeni katıhal fizikindeki elektronların non-relativistik tanımında kullanılan Pauli spinörleridir ki burada, iyi bir yaklaşıklıkla, spin ve yörünge hareketleri bağılaşsımsızdır ve bağımsızdır. Non-relativistik hızlarda bir Dirac parçacığı için ilk iki bileşenler büyük bileşenler olarak adlandırılırken, son ikisi küçük bileşenler olarak adlandırılır. Son iki bileşen Dirac elektronunun negatif enerjisini ya da pozitron bileşenini temsil eder. Rölativistik olmayan hızlar için bu bileşen küçüktür. Uzay zaman resminde, zaman evrimi esnasında bir elektron zamanın bir kısmını pozitron olarak geçirir ama zamanda ters hareket ederek. İlginç olan şey bu bileşenin Dirac elektronunun spinini hareketinin doğrultusu boyunca doğrultmasının yatkinlığını temsil eder. İki olasılık mevcuttur: ya hareket doğrultusuna paralel ya da antiparalel olacaktır. Bu önemli özellik helisite olarak adlandırılır. Bu Dirac spinörünü

$$\begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \frac{-pc}{E+mc^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} + \frac{pc}{E + mc^2} \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \left((1 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right) \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

şeklinde yeniden yazarak görülebilir.

Birinci kısım Dirac parçacığının hem parçacık ve bir küçük anti-parçacık bileşeni olduğu; ama spinin pozitif z-ekseni boyunca yöneldiği bir spinör durumudur. İkinci kısım, $(1 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})$ işlemcisinin spini $\hat{\mathbf{p}} = (p_x, p_y, p_z)$ birim vektörü boyunca olan momentum yönünde döndürdüğü saf antiparçacık durumudur. Yani, spin tam olarak parçacığın hareketinin yönü boyunca işaret etmektedir. Bu özellik helisitedir. Eğer spin yerel hızın yönelimi boyunca gösteriyorsa $+1$, tersini gösteriyorsa -1 'dir.

Katılarda elektronlarla çalışılırken, Dirac spinörün antiparçacık bileşenini ihmal etmek ve tek bir iki-bileşenli Pauli spinörü bırakmak alışkanlıktır. Ancak, parçacık görelî hızlara ulaştığında, yörünge hareketi pozitron bileşenin spin helisite özelliği aracılığıyla elektron spin dinamiğini etkilemeye başlar. Bu spin-yörünge etkileşmesinin temelidir.

Kütlesiz Dirac parçacıkları özeldir. Bunu görebilmek adına, küçük kütle limiti uygulanır, yani $mc^2 \ll pc$. Bu limitteki fizik Weyl temsiliinde anlaşılır:

$$-i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{r},t) = \begin{pmatrix} c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & mc^2I \\ mc^2I & -c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \end{pmatrix} \psi(\mathbf{r},t) \quad (2.11)$$

Bu temsilde kütle terimi köşegen dışı elemanlar olarak belirlemektedir. Dolayısıyla, parçacık ve antiparçacık arasında bir karışım neden olurlar. Dirac temsili katılardaki veya ağır kuarklardaki elektronlar gibi hemen hemen görelî olmayan fermiyonlar için daha uygun bir temsildir. Weyl temsili ise, nötrinolar gibi hemen hemen görelî parçacıklar için daha idealdir.

$m = 0$ için, parçacık ve antiparçacıkların ayrıştığı Weyl denklemi elde edilir. Parçacıklar için iki ayrı iki-bileşenli denklem elde edilir. Kolaylıkla görülebilir ki Weyl denklemi pariteyi ihlal etmektedir. Aynı zamanda, Dirac-Weyl Hamiltonyen'i kiralite olarak adlandırılan ve korunan yeni bir niceliğe sahiptir ve

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

matrisini kullanarak tanımlanır. $m = 0$ durumunda, hem kiralite ve hem de helisite aynı olmaktadır. Parçacık ve antiparçacıklar zıt helisiteye sahiptir.

2.3.2 $2 + 1$ boyutta kütesiz kiral Dirac elektronları

Grafen, $2 + 1$ boyutlu Dirac teorisi ile betimlenir. sp^2 bağlarıyla bağlanan grafendeki karbon atomları π elektronlarının basit sıkı-bağlanmasıyla sonuçlanır. Karbon atomlarının üç değerlik orbitali, $2s, 2p_x$ ve $2p_y$, sp^2 hibritleşmesine uğrar ve böylece güçlü σ bağı oluşur. Her bir karbon atomundan üç elektron bu güçlü (120°) bağda bulunur ve her bir karbon atomunun üçkatlı koordinasyonu ile düzlemsel altıgen yapı meydana gelir. Geriye bir tane $2p_z$ orbitali ve karbon atomu başına bir elektron kalır. Bu yalnız kalan elektronlar en yakın komşu $p\pi$ bağlanmasını oluştururlar.

Etkileşim olmadığı durumda sıkı bağ Hamiltonyen'i

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (a_{i,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma} + H.c.) \quad (2.13)$$

şeklinde verilir. Petegimsi örgü iki alt örgü ve birim hücre başına iki atoma sahiptir. Burada, $(a_{i,\sigma}^\dagger, a_{i,\sigma})$ ve $(b_{j,\sigma}^\dagger, b_{j,\sigma})$ A ve B altörgüleri için yaratıcı ve yok edici operatörlerdir. Öteleme değişmezliği ve periyodik sınır koşulları göz önüne alındığında sıkı bağ Hamiltonyen'i

$$H = -t \sum_{k,\sigma} \gamma(\mathbf{k}) a_{k,\sigma}^\dagger b_{k,\sigma} + H.c. \quad (2.14)$$

olarak yazılır. Burada, $\gamma(\mathbf{k}) = \sum_{\Delta} e^{i\mathbf{k} \cdot \Delta}$ ve $\Delta = (\Delta_1, \Delta_2, \Delta_3)$ A alt örgüsündeki üç vektörü B altörgüsündeki en yakın komşularına bağlayan üç vektördür.

Verilen bir $\mathbf{k}$ için, yukarıda bahsi geçen tek parçacık Hamiltonyen'i

$$\begin{pmatrix} 0 & -t\gamma(\mathbf{k}) \\ -t\gamma(\mathbf{k})^* & 0 \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

olarak verilir ve iki alt örgüdeki Bloch durumları dağınımsızdır ve sıfır enerjide iki dejenere düz bant meydana getirir. Alt örgüler arasındaki en yakın komşu hiplaması bu bantları karıştırır (k-bağılı anlamında) ve dağınımı meydana getirir. Sonuç olarak, elektron-benzeri ve deşik-benzeri ayrı bantlar oluşur. Ortaya çıkan Hamiltonyen,

$$H = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k (\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}\sigma} - \beta_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \beta_{\mathbf{k}\sigma}) \quad (2.16)$$

şeklindedir. Burada, $\varepsilon_k = t\sqrt{1 + 4\cos\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\cos\frac{\sqrt{3}k_y a}{2} + 4\cos^2\frac{k_y a}{2}}$, dir. Yaratma ve yok etme operatörleri α 'lar ve β 'lar sırasıyla pozitif ve negatif Bloch durumlarına karşı gelir. İki bant, Brillouin bölgesinin K ve K' noktalarında birbirine değmektedir ve bu iki ayrı Dirac düğüm noktasına yol açmaktadır. Nötr grafen sıfır enerjide kimyasal potansiyele sahiptir. Ayrıca, spektrum parçacık-deşik simetrisine sahiptir.

Semenoff grafen için tek elektron Bloch dalga fonksiyonunun iki bileşenli spinör olarak uygun şekilde olduğunu göstermiştir. Spinörün iki bileşeni A ve B alt örgülerindeki tek parçacık dalga fonksiyonunun genliklerini temsil etmektedir. Grafende karbon çekirdeğinin iki boyutlu potansiyelinde hareket eden görelî olmayan elektronlar vardır. Tek parçacık dalga fonksiyonları Schrödinger denklemini sağlar. Semenoff'un elde ettiği Dirac denklemi Schrödinger denklemini organize etmenin uygun bir yoludur.

$\mathbf{k}$ dalga vektörünü K noktasına göre ölçülüp doğrusal dağınıma bakılırsa, k uzayı tek parçacık Hamiltonyen'i

$$H = -i\hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & k_x + ik_y \\ k_x - ik_y & 0 \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

şeklinde yazılır. Dolayısıyla yukarıdaki Hamiltonyen' de Pauli matrislerinin sadece $x-$ ve $y-$ bileşenleri görünür. Aynı benzer kütleless Dirac denklemi K' noktasında k_y 'yi $-k_y$ ile değiştirerek elde edilir.

Herhangi bir dış potansiyelin varlığında, dört Bloch durumu şöyledir: i) K noktası civarında pozitif enerji elektron durumları, ii) K noktası yakınında negatif enerji deşik durumu, iii) K' yakınında pozitif enerji elektron durumu ve iv) K' noktası yakınında negatif enerji deşik durumu. İki bileşenli spinör şu biçimi alır,

$$\begin{pmatrix} s \\ e^{i\tau_z\theta_k} \end{pmatrix} e^{i\tau_z\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.18)$$

$\tau_z = \pm 1$ K ve K' vadilerine karşılık gelmektedir; $s = \pm 1$ pozitif enerji (elektron) ve negatif enerji (deşik) durumuna karşı gelmektedir.

Spinörün anlamının ne olduğu üzerinde durulursa; öncelikle $3 + 1$ boyutlu durumun tersine, $2 + 1$ boyutta Dirac matrisleri basitçe Pauli matrisleridir. Spinörlerin iki bileşeni, spin serbestlik derecesini temsil etmemektedir. Parçacık anti-parçacık serbestlik derecesini temsil etmektedirler. Grafen bağlamında, parçacık ve anti-parçacık spinörleri sözde-spin adını almaktadır. Grafen için iki bileşenli spinör bir parçacığı (elektron) ve onun antiparçacığını (deşik) bulma genliğidir. Grafen durumunda uyarılmanın kütesiz karakteri, fiziksel parçacığı elektronumsu ve deşigimsi durumların süperpozisyonu yapar.

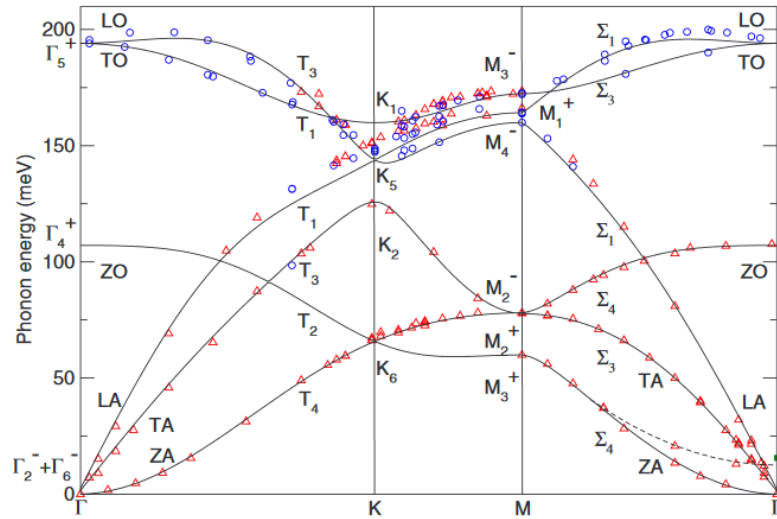
Kütesiz Dirac parçacıkları $3 + 1$ boyutta helisite ve kiraliteye sahiptir. Bunun $2 + 1$ boyutta analogu, helisite, (spinörün) sözde-spinin yönünün düzlem içindeki momentumun yönüne paralel veya antiparalel olması anlamında kullanılır. Bu da K ve K' noktaları etrafında Bloch durumlarının fazlarının kiralite özelliğine yol açar.

Dirac'a göre, fiziksel bir elektron pozitron bileşenine (antiparçacık) sahiptir. Bunun gözlenebilir bir sonucu Schrödinger tarafından keşfedilen Zitterbewung'dır.

2.4 Grafende Fononlar ve Raman Modları

Örgü titreşimlerinin kuantası olan fonon, adını Yunanca'da ses anlamına gelen phoné'dan almıştır; çünkü uzun dalga boylu fononların özellikleri sese yol açmaktadır

(Kumar vd. 2013). Kuantum mekaniksel olarak fononlarla karakterize edilen örgü dinamiğinin özellikleri bir materyal içerisindeki atomik etkileşmeler ile ilgili temel bilgileri edinmemizi sağlar. Bu dinamiğin çerçevesi ana hatlarıyla 1920’lerde Born tarafından ortaya atılmıştır ve Debye, Einstein, Mott ve diğerleri ise bunu takip eden on yıllarda gelişimini sağlamışlardır. Örgü dinamiği atomik skalada bir teori olsa da, makroskobik olaylara ve özelliklere doğrudan bağlantısı yapılabilmektedir. Fononlar, materyalin elastik özellikleri, uzak-kızılötesi spektral aralığında optiksel özellikleri, termal ve elektriksel iletimleri de dahil pek çok fiziksel özelliğini belirlemede önemli rol oynarlar. En küçük birim hücresinde birden fazla atom olan kristallerde akustik ve optiksel olmak üzere iki tip fonon vardır. Akustik fononlar uzun dalga boylarında küçülen frekanslara sahiptir. Komşu örgü konumlarındaki negatif ve pozitif iyonlar zamanla değişen elektrik dipol moment yaratarak birbirlerine karşı sallandığı titreşim moduna ise optik mod karşılık gelir. Optik denmesinin sebebi iyonik kristallerde özellikle kızıl ötesi ışın olmak üzere ışık tarafından kolayca uyarılabilir olmasından kaynaklanmaktadır. Optiksel fononlar Raman saçılmasıyla doğrudan ölçülebilir.



Şekil 2.5 Grafenin fonon dağılımı bağıntısı (Mohr vd. 2007)

Grafenin birim hücresindeki iki özdeş olmayan karbon atomunun göreceli hareketlerinden kaynaklanan uzun dalga boylu E_{2g} fononları Brillouin bölgesinin Γ noktasındaki optiksel fononlardır. Diğer yandan, böyle bir yer değiştirmeden ötürü

gelen tedirgeme Dirac noktaları boyunca olan direkt, yani $\Delta k = 0$, elektronik geçişlerin meydana gelmesinde etkindir. E_{2g} fononları grafene özgü olan düşük enerji iç bant uyarılmalarına verimli biçimde bağlanır (Faugeras vd. 2009). Grafendeki en yüksek fonon modu yaklaşık 300 THz frekans ile düzlem içi optik fonon modudur. Optiksel modun bir salınım döngüsü içerisinde 1 fs zaman aralığı için yaklaşık 20 simülasyon adımı vardır (Jiang vd. 2015). Γ noktasında ($q=0$), optiksel fononlar indirgenemez temsil E_{2g} (Raman aktif) ve B_{2g} 'ye aittir. İki komşu atomun yaklaşık olarak 1582 cm^{-1} frekansla birbirlerinin zıttı yönde düzlem-içi titreşimleri ile E_{2g} modu dejenere enine optiksel (TO) ve boyuna optiksel (LO) modlardır. Bölge optiksel (ZO) ve bölge akustik (ZA) dalları grafen düzleminden dışa doğru olan atomların titreşimine aittir. ZA dalı için, diğer akustik dallar boyuna akustik ve enine akustik fononların aksine, dağılım kuadratikdir, yani, wq^2 ile doğru orantılıdır. Kristal ortamından birinci dereceden Raman saçılması $q \approx 0$ dalga vektörlü fononlar içermektedir. Tek tabaka grafende yaklaşık 1582 cm^{-1} 'deki Raman çizgisi G-bandı olarak adlandırılır ve Brillouin bölgesinde Γ -noktası yakınındaki E_{2g} fononu ile ilgilidir (Rao ve Sood 2013).

Grafende çok parçacık etkileri göz ardı edilemezdir. Bunlardan biri olan elektron-fonon etkileşmesi nano yapıların elektriksel ve optiksel özelliklerini anlamakta önemli bir role sahiptir. Bu etki başlıca elektronun self enerjisine ek özellikler getirir ve elektronik durumlarını önemli ölçüde değişikliğe uğratar (Pisana vd. 2007, Samsonidze vd. 2007, Yan vd. 2007, Park vd. 2007, Stauber vd. 2008a, Stauber vd. 2008b, Basko vd. 2008, Mariani vd. 2008, Faugeras vd. 2009, Carbotte vd. 2010, Mariani vd. 2010, Li vd. 2012, Badalyan and Peeters 2012, Kandemir 2013, Kandemir ve Mogulkoc 2014, Mogulkoc ve Kandemir 2015, Wang vd. 2015). Bunlardan iki kere dejenere E_{2g} -optiksel fononların grafenin yük taşıyıcıları ile etkileşmesi Fermi hızının (Kandemir 2013) renormalizasyonuna yol açar. Diğer yandan, bu yük taşıyıcıların A_{1g} -simetrik bölge-sınır fonon moduyla etkileşmesi ise grafen alttaşı terslenme simetrisini kırmadan THz bölgesinde küçük bant aralığına sebep olur (Kandemir ve Mogulkoc 2014). Dahası, tek düze manyetik alan varlığında bu ikinci etkileşme doğrusal olmayan manyetik alan bağımlılığıyla sonuçlanan dinamik bant ara-

lığı oluşumuna yol açar (Kandemir ve Mogulkoc 2015), ki bu grafende gözlenen aktivasyon enerji aralığı ile yakından ilişkilidir (Zhang vd. 2006, Jiang vd. 2007). Elektronların optik fonon moduyla etkileşme mekanizması Fröhlich Hamiltonyen'i yardımıyla modellenir.

2.5 Üçgensel Eğrilik

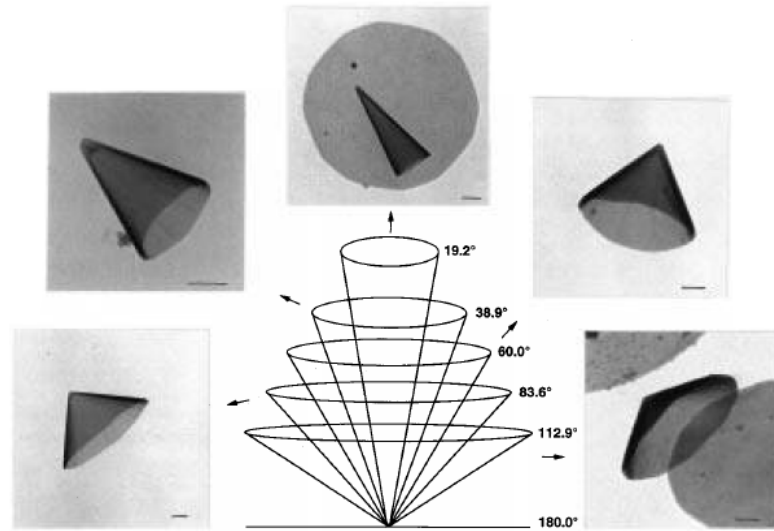
Grafende gerçek mikroskobik Hamiltonyen Dirac spektrumuna bir çok düzeltme içerir. Tek tabaka grafenin düşük enerji Hamiltonyen'ine eklenen bir katkı da Dirac noktalarında etkin Hamiltonyen'in simetrisinin kırılmasıyla (Ajiki ve Ando 1996) oluşan üçgensel eğrilme etkisidir (TWE). Bu etki enerji skalası arttıkça taşıyıcıların koniksel dağılımının kristal örgütünün simetrisinden dolayı değişime uğramasıdır (Pereira vd. 2009). Sıfır olmayan Fermi enerjisiyle sonuçlanan kapı gerilimi uygulandığında, elektronik Fermi yüzeylerinin kesiti mükemmel çemberden sapar: böylelikle, üçgensel eğrilik her bir vadideki Fermi yüzeyinin $p \rightarrow -p$ simetrisini kırar. Zayıf olmasına rağmen, Fermi yüzeyinin böylesine bükülmesi görünür etkilere yol açar: üçgensel eğrilme yerelleşmemeyi bastırır, bu aksi takdirde geri saçılmanın olmadığı durumda beklenen bir sonuçtur (Narozhny 2007). TWE'nin dahil edilmesi, vadi bağımlı iletimin anizotropisine yol açar ve grafende vadi-kutuplu akım üretmenin alternatif bir yolu elde edilmiş olur (Pereira vd. 2009).

Kesitlerde enerji yüzeyleri konikseldir, ancak bu kesitlerden yukarı doğru veya aşağı doğru artan enerji değerlerinde üçgensel eğrilik daha etkin olur. Bir yandan, bu yük taşıyıcıların düşük enerji spektrumu, kesitleri izoenerji konturları olan yani çemberler koniksel bant yapısına sahip (Brillouin bölgesinde (BB) K ve K' noktaları civarında). Diğer yandan enerjiyi arttırdıkça bu eğriler çemberden üçgene dönüşür ve üçgensel eğrilik meydana gelir. Bu etki her bir vadideki doğrusal momentumda zaman terslenme simetrisini kırar ve spektrumu anizotropik yapar. Sonuç olarak, antilokalizasyon (McCann vd. 2006), zayıf lokalizasyon (Fal'ko vd. 2007), taşıyıcı multiplikasyonu (Basko 2013), izotropik olmayan direnç (Azizi vd. 2015), iletkenlik (Kchedzhi vd. 2007), doğrusal olamayan optiksel tepki (Margulis vd. 2013) ve

Coulomb sürüklenmesi (Narozhny 2007) gibi grafenin çeşitli elektronik ve optiksel özelliklerini etkiler.

2.6 Topolojik Kusurlar

Kusurlar, kristaller ve grafitik sistemler dahil nano yapıların özelliklerinde önemli rol oynarlar. Grafen tabanlı sistemler o kadar çok yönlüdür ki hem yapılarını hem de fizikokimyasal özelliklerini tamamen değiştiren farklı türde kusurları barındırabilirler. Özellikle, yapıyı değiştiren kusurlar topoloji ve eğriligi de değiştirebilir özelliktedirler (Terrones vd. 2010).



Şekil 2.6 Olası beş grafen koni için örnek (Thomas 1998)

Topolojik kusurlar, diğer karbon atomlarının üç katlı düzenini etkilemeden bir veya bir çok karbon atomunu balpeteği örgüden çıkarmanın (ya da örgüye dahil etmenin) sonucu olarak meydana gelir, uygun olarak, kusurun bulunduğu konumda oluşan pozitif (ya da negatif) eğrilikten dolayı grafen örgü yüzeyi eğrilir (Sitenko vd. 2007). Daha açık belirtmek gerekirse, grafende topolojik kusurlar bir altıgenin $6 - n_\Omega$ kenarlı bir poligonla değişiminden ileri gelen balpeteği örgüdeki disklinasyonlardır. n_Ω , 6'dan küçük olan bir tamsayıdır. $n_\Omega > 0$ ($n_\Omega < 0$) ile oluşan poligonlar yerel pozitif

(ya da negatif) eğrilik meydana getirir, yani kusurlu bir grafen tabakası bir koni şeklini alır. Tepeden konik yüzey olan grafen tabakası, kusurdan uzaklarda düzdür. Bir ile beş arası beşgen kusur içeren grafen yüzeyleri olan grafen koniler sentezlenmişlerdir (Lammert ve Crespi 2004). Olası beş grafen koni şekil 2.2’de gösterilmiştir.

Bir koni onun açılım açısıyla (tepe açısı) veya buna eş olarak kaldırılan atomların (sektörlerin) sayısı n_Ω ile sınıflandırılır (Sitenko vd. 2007). Kusur boyunca, hem alt örgüler hem de özdeş olmayan Fermi noktaları, kusurun tipine bağlı olarak birleşir veya olduğu gibi kalır. Bu durum grafen tabakasında elektronik dalga fonksiyonu üzerinde bir koşulu düzenlemeyi gerektirir; çünkü, büyük bir koni nazikçe eğrilmiş grafen tabakası olmasına rağmen, elektronik özellikleri önemli ölçüde değişime uğramıştır. Kusur etrafında dönme altında bir faza gereksinim vardır. Yani, koniksel topoloji kendini sözde parçacık dalga fonksiyonları için aşikar olmayan holonomiler biçiminde gösterir. Böyle holonomiler, merkezden geçen uygun bir manyetik akı tüpü tanımlayarak modellenenebilir (Chakraborty vd. 2011).

Bu inceleme, grafenin "süreklilik teorisi" (continuum theory) çerçevesinde yapılır. Yerel olarak grafitik ancak büzülmeyen kapalı ilmek içeren, yani koninin tepesini çevreleyen, yapıları ele almak için esnek gerçek-uzay sürekliliği formülasyonuna gereksinim duyulur. Beşgen bir kusuru beşli bir halka olarak değil de, grafen yapıda bir delik olarak varsayarak bütün bir koninin yerel olarak grafen benzeri yapıya sahip olduğu düşünülebilir. Süreklilik teorisinde örgü kaybolur: oluşan halkalar bütün disklinasyonlar ve dislokasyonların elektronik etkilerini kodlayan yerleşmiş yapay ayar akıları olarak hesaba katılırlar. Bu durumda, kusurlar saf ayar alanları olarak temsil edilebilirler. Böyle bir sürekli tanım, topolojik yönler atomik uzunluk skalasında incelendiği müddetçe ideallliğini korur (Lammert ve Crespi 2000).

Coulomb yükü *Z*evanlığında, tek bir vadi (K vadisi) için grafenin düşük enerji uyarılmaları,

$$H \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = [-iv_F(\sigma_1\partial_x + \sigma_2\partial_y) + \sigma_0(-\frac{\alpha}{r})] = E \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

ile verilir. Burada, σ 'lar Pauli spin matrisleri, r x-y düzleminde radyal koordinat ve α Coulomb etkileşme sabitidir.

n 1, 2, 3, 4, 5 kesikli değerleri almak üzere, düzlemden n sektör ayrıldığında (yani kusur varlığında) dalga fonksiyonundaki değişmezlik

$$\psi(\mathbf{r}, \theta = 2\pi) = -\exp(i2\pi[1 - (n/6)]\sigma_3/2)\psi(\mathbf{r}, \theta = 0) \quad (2.20)$$

ile ifade edilir. Bu değişmezlik,

$$\psi(\mathbf{r}, \theta = 2\pi) = -\exp(ie2\pi r[1 - (n/6)]A_\theta)\psi(\mathbf{r}, \theta = 0) \quad (2.21)$$

olmak üzere

$$A_\theta = \frac{1}{er}[\pm \frac{n/4}{(1 - n/6)} + \frac{\sigma_3}{2}] \quad (2.22)$$

ayar alanı ile verilir. Dolayısıyla koniksel topolojinin dalga fonksiyonu üzerine etkisi vektör potansiyel ile betimlenmiş olur.

Denklem 2.19 ile verilen Dirac denklemi,

$$H \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\alpha}{r} & -\partial_r - \frac{i}{r(1-n/6)}\partial_\theta + \Lambda_1 \\ -\partial_r - \frac{i}{r(1-n/6)}\partial_\theta + \Lambda_2 & -\frac{\alpha}{r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

olarak yazılabilir. Burada $\Lambda_1 = \pm \frac{n/4}{r(1-n/6)} + \frac{1}{2r}$ ve $\Lambda_2 = \pm \frac{n/4}{r(1-n/6)} - \frac{1}{2r}$ ile verilmektedir.

j bütün yarı tamsayı değerlerini almak üzere, denklem 2.23 dalga fonksiyonu için

$$\psi(\mathbf{r}, \theta) = \sum_j \begin{pmatrix} \psi_A^{(j)}(r) \\ i\psi_B^{(j)}(r) \end{pmatrix} e^{-iEr} r^{\gamma-1/2} e^{ij\theta} \quad (2.24)$$

şeklinde çözüm önerisinde bulunulur. Denklem 2.24, denklem 2.23'de yerine konulduğunda, dalga fonksiyonunun kısa mesafe davranışı, $\gamma = \sqrt{\nu^2 - \alpha^2}$ ve $\nu = \frac{(j+n/4)}{(1-n/6)}$ olmak üzere, $\psi_{A,B}^{(j)}(r) \sim r^{\gamma-(1/2)}$ olarak verilir (Chakraborty vd. 2011).

2.7 Grafende Spin Yörünge Etkileşmesi

Spin-yörünge (SY) bağlaşımı, yarıiletken spintroniğin anahtar bileşenidir. Spintronikteki uygulamalar SY bağlaşımının kontrolüne güçlü biçimde bağlıdır. Bu etkileşme grafende içsel (intrinsic) ve dışsal (extrinsic) bileşenlere sahiptir. İlkini serbest tabaka grafende oldukça zayıf olduğu bilinmektedir. Dışsal SY etkileşmesi grafenle alttaşı arasındaki arayüzden kaynaklanmaktadır (Rashba 2009).

İçsel SY etkileşmesi de grafenin enerji dağılımında bir aralık açabilir. Yapı terslenme asimetrisinden ortaya çıkan (grafen örgütünün terslenme simetrisi, yani $z \rightarrow -z$, kırıldığında) Rashba spin-yörünge etkileşmesi (RSYE), bir alttaşı yüzeyi veya dış elektrik alan tarafından meydana gelir (Hasanirakh vd. 2014, Gelderen ve Smith 2010).

Grafen, düşük enerji uyarılmaları süreklilik limiti (continuum limit) çerçevesinde Dirac noktaları olarak adlandırılan, K ve K' noktaları civarında doğrusal spektruma sahip olan, dolayısıyla Dirac Hamiltonyen'i ile çok iyi biçimde tasvir edilebilen iki boyutlu bir materyaldir. Brillouin bölgesinin (BB) bu noktaları yakınında yük taşıyıcılarının göreceli doğası uzun erimli safsızlıklar, topolojik kusurlar, elektron-fonon etkileşmeleri ya da spin-yörünge etkileşmelerinden etkilenebilir (Cortijo vd. 2007, Novikov 2007c, Furtado vd. 2008, Huertas vd. 2009, Chakraborty vd. 2011, Chakraborty vd. 2013, Kandemir 2013, Bai vd. 2015, Delkhosh vd. 2015, Shakouri vd. 2013, Kandemir ve Akay 2015). Grafen tabanlı nanoelektronik aygıtlar tasarlamakta önemli rol oynadıklarından, bu etkileşmelerin tek başına ya da toplu olarak etkileriyle ilgilenmek önemlidir. Grafende, içsel SY etkileşmesi RSYE'ne nazaran çok küçük bir aralığa ($1 - 50 \mu\text{eV}$) yol açar. RSYE'nin, Ni alttaşı söz konusu olduğunda 225 meV 'a kadar çıkabildiği gözlenmiştir. Ayrıca, Ni alttaşı ve grafen arasına Au

yerleştirerek 100 meV'a kadar çıkabildiği gözlenmiştir (Dedkov vd. 2008, Varykhalov vd. 2008, Rashba 2009, Marchenko vd. 2009, Lez vd. 2013, Shakouri vd. 2013, Bolívar vd. 2014, Hasanirokh vd. 2014).

2.8 Grafen Kuantum Noktaları

Yapay atomlar olarak da adlandırılan grafen kuantum noktaları oldukça küçük elektron adacıklarıdır. Kuantum hapislemeler, bu yapılarda önemli rol oynar ve elektronlar iki boyuta hapsedilmiştir, enerji seviyeleri kesiklidir. Aynı zamanda enerji spektrumu noktanın boyutuna, şekline ve kenar durumlarına bağlıdır. Düzensizlikler, etkileşmeler noktaların elektronik özelliklerinde önemli rol oynarlar (Matulis ve Peeters 2007, Abergel vd. 2010, Recher ve Trauzettel 2010).

Grafen kuantum noktaları, mekaniksel, elektrik veya manyetik alan ile grafen kuantum nokta elde etmek mümkündür. Mekaniksel anlamda, grafen tabakalarını istenilen istenilen nano boyutta ve biçimde keserek kesikli enerji seviyelerine sahip noktalar elde edilebilir. Elektrik alanla grafen kuantum noktası oluşturabilmek için grafende enerji aralığı oluşturmak gereklidir; çünkü sadece elektriksel potansiyel varlığında Klein tünellemesi (görelî parçacıkların geniş ve yüksek bariyerlerden mükemmel geçişi) nedeniyle bağlı durum oluşamamaktadır. Grafende aralık oluşturmak için çeşitli yöntemler uygulanabilir. Bunlara örnek olarak grafenin üzerine yerleştirildiği alttaşıla etkileşimi, özel sınır koşulları ile vadi dejenereliğinin kaldırılması verilebilir. meV mertebesinde açılan bu aralık grafene özgüdür ve yarıiletkenler için alışılmadık derecede küçük bir değerdir. Bir başka yöntem olan manyetik alan uygulamak Klein tünellemesine engel olduğundan bağlı durumlara yol açmaktadır. Böylece, kuantum noktası oluşumuna neden olmaktadır (Recher ve Trauzettel 2010, Rozhkov ve Nori 2011). Bu sayılan yöntemler haricinde, kazıma, aşındırma işlemleriyle grafen kuantum nokta elde etmek mümkündür. Dışarıdan uygulanan bükme ve germe işlemleri sebebiyle bir uzaysal değişimle aralık yaratılmış olur. Böylelikle bir grafen kuantum nokta tanımlanabilir. Grafen kuantum noktaları ayarlanabilir enerji spektrumuna sahip olduğundan elektronik aygıt yapımında kullanmak için uygundur.

3. GRAFENDE HIZIN RENORMALİZASYONU: ÜÇGENSEL EĞRİLİĞİN VE ELEKTRON-FONON BAĞLAŞIMININ ETKİLERİ

Tezin bu kısmını oluşturan çalışma, üçgensel eğrilik ve elektron-iki kere dejenere E_{2g} -optiksel fonon modlarının bağlaşım etkilerini birleştirmektedir. Bunun için ilgili Hamiltonyen'i köşegenleştirmek için Lee Low Pines (LLP) teorisi (Lee vd. 1953) çerçevesinde bir üniter dönüşümler şeması takip edilmiştir. Sonuç olarak, üçgensel eğrilik ve elektron-fonon kuplajından kaynaklanan vadi bağımlı hız renormalizasyonunun grafen tabanlı nano aygıtlarda vadi serbestlik derecesini ayarlamak için kullanılabileceğini göstermektedir.

Grafende K noktası civarında iki kere dejenere optiksel fononlarla etkileşen taşıyıcılar Dirac tasvirinde Frölich Hamiltonyen'i ile tanımlanabilir,

$$H^K = H_0^K + \sum_{\mathbf{q}, \mu} \hbar \omega_\mu(\mathbf{q}) \mathbf{b}_{\mathbf{q}\mu}^\dagger \mathbf{b}_{\mathbf{q}\mu} + H_{e-p}^K \quad (3.1)$$

burada

$$H_0^K = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} + \frac{1}{2} v_F B_0 [\sigma_+ p_+^2 + \sigma_- p_-^2] \quad (3.2)$$

enerji özdeğerleri $\epsilon_\lambda^K(\mathbf{k}) = \lambda \epsilon^K(\mathbf{k})$ olan pertürbe olmamış Hamiltonyen'dir (Ajiki ve Ando 1996, Katsnelson 2012). Bu Hamiltonyen'in özdeğerleri

$$\epsilon^K(\mathbf{k}) = [(\hbar v_F k)^2 + (v_F \hbar^2 k^2)^2 B_0^2 + 2 \hbar^3 v_F^2 k^3 B_0 \cos 3\theta]^{1/2} \quad (3.3)$$

ile verilmektedir. Grafenin iletim ve değerlik bantları üçgensel eğrilik varlığında bant indisi λ ile sırasıyla $+1$ ve -1 ile etiketlenmişlerdir. K' vadisi için bant dağılımı, yani $\epsilon_\lambda^{K'}(\mathbf{k})$, denklem 3.1'de θ 'yı $\pi/3$ kadar döndürerek, yani $\theta \rightarrow \theta + \pi/3$, kolaylıkla elde edilebilir. Denklem 3.3'de v_F grafen yük taşıyıcıların Fermi hızı, a grafenin bağ uzunluğu ve β birim mertebesinde bir sabit (Ajiki ve Ando 1996) olmak üzere $B_0 = \beta a / 4 \hbar$ olarak verilmektedir. σ_i Pauli matrisleri olmak üzere, $\sigma_\pm = \sigma_1 \pm i \sigma_2$ ve $p_\pm = p_1 \pm i p_2$ olmak üzere $\mathbf{p}$ iki bileşenli momentum operatörüdür.

Denklem 3.1'deki ikinci terim, sırasıyla $\mu = 1$ (boyuna optik-LO) ve $\mu = 2$ (enine optik-TO) dal indisi ile, $\mathbf{b}_{q\mu}^\dagger$ ve $\mathbf{b}_{q\mu}$ optiksel fonon yaratma ve yok etme operatörleri olmak üzere, serbest fonon Hamiltonyen'ini temsil etmektedir. Fonon dallarının dağılımları, $R_\mu(qa) = [1 - r_\mu(qa)]^2$ ve $\hbar w_\Gamma(0) = 0.196$ eV olmak üzere, $w_\mu(\mathbf{q}) = w_\Gamma(0)R_\mu(qa)$ 'dır. Burada r_1 ve r_2 sırasıyla 0.1138 ve 0.01979 ile verilmektedir (Stauber vd. 2008b). Denklem 3.1'deki üçüncü terim ise, grafendeki iki kere dejenere olan E_{2g} -simetrisine sahip optik fononlar ile etkileşen elektronlar için etkileşme Hamiltonyen'idir ve

$$H_{e-p}^K = - \sum_q \sum_\mu \widetilde{M}_\mu^K(q) b_{q\mu} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} + HC \quad (3.4)$$

şeklinde verilir (Kandemir 2013).

Burada, $\widetilde{M}_\mu^K(q) = \overline{M}_\mu^K(q) M_\mu(q)$ momentum bağımlı elektron-fonon bağlaşım matris elemanlarıdır ve

$$M_\mu(q) = \begin{pmatrix} 0 & M_{BA} e^{-i\phi(\mathbf{q})} \\ M_{AB} e^{i\phi(\mathbf{q})} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

şeklinde tanımlanır.

M_{AB} ve M_{BA} LO (TO) fononları için sırasıyla +1 (i) ve -1 (i) değerlerini alır ve $\phi(\mathbf{q}) = \arctan(q_y/q_x)$ fonon dalga vektörü $\mathbf{q}$ 'nın azimutal açısıdır. Aynı zamanda, $\overline{M} = 3a_0q_0J_0/\sqrt{2}$, $a_0 = (\hbar/2M_Cw_\Gamma(0))^{1/2}$ ve $q_0 = (\partial J_0/\partial a)/J_0$ olmakla birlikte 2 Å ve 2.5 Å civarında tahmin edilmektedir (Pietronero vd. 1980, Jishi vd. 1993, Tse ve Sarma 2007). Burada, diğer bir kısaltma ise $\overline{M}_\mu^K(q) = \overline{M}/\sqrt{NR_\mu(qa)}$ şeklinde tanımlanmıştır. Denklem 3.1'in enerji özdeğerlerini bulmak için, iki ardıl üniter dönüşüme dayalı olan LLP metodu kullanılmıştır ve tüm sisteme ait taban durumu için

$$|\Phi\rangle^\lambda = \sum_{\lambda'} \alpha_{\lambda'}^\lambda |k\lambda'\rangle \otimes U_1 U_2 |0\rangle_{ph} \quad (3.6)$$

şeklinde çözüm önerisinde bulunulur. Öyle ki, burada U_1 ve U_2 LLP dönüştürmeleri olup, sırasıyla

$$U_1 = \exp[-i\mathbf{r} \cdot \sum_q \sum_\mu \mathbf{q} \mathbf{b}_{q\mu}^\dagger \mathbf{b}_{q\mu}] \quad (3.7)$$

$$U_2 = \exp[-i\mathbf{r} \cdot \sum_q F(\mathbf{q}) \mathbf{b}_{q\mu}^\dagger - H.C.] \quad (3.8)$$

şeklinde verilirler.

İkinci üniter dönüştürme içerisinde bulunan $F(\mathbf{q})$, $\Delta_{\lambda'\lambda}(\mathbf{q}) = \langle \mathbf{k}\lambda' | M_\mu^\dagger(q) | \mathbf{k}\lambda \rangle$ ve $\overline{M}_{0\mu}(q) = \overline{M}_\mu^K(q)/\hbar w(\mathbf{q})$ olmak üzere $F(\mathbf{q}) = \overline{M}_{0\mu}^*(q) \Delta_{\lambda'\lambda}(\mathbf{q})$ olarak tanımlanmıştır. Denklem 3.6'de, $|0\rangle_{\text{ph}}$ fonon vakumunu belirtmektedir. Diğer yandan, $\alpha_\lambda^{\lambda'}$ kesirli genlikler ve $|k\lambda\rangle$ özetler olmak üzere $\alpha_\lambda^{\lambda'} |k\lambda'\rangle$ elektronik durum vektörünü temsil etmektedirler. Özetlerin konum uzayına izdüşümü ise

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{k}\lambda \rangle = \frac{1}{\sqrt{2L}} \begin{pmatrix} \lambda \\ \exp(i\theta(\mathbf{k})) \end{pmatrix} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (3.9)$$

şeklinde betimlenir.

Denklem 3.7 ile verilen U_1 üniter dönüştürme ise, $b_{q\mu}$ ve $\mathbf{p}$ 'yi sırasıyla $\tilde{b}_{q\mu} = U_1^{-1} b_{q\mu} U_1 = b_{q\mu} \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$ ve $\tilde{\mathbf{p}} = \mathbf{p} - \sum_{q,\mu} \hbar \mathbf{q} b_{q\mu}^\dagger b_{q\mu}$ şeklinde dönüştürür. Öyle ki, toplam etkin Hamiltonyen $U_1^{-1} H^K U_1 = \tilde{H}^K$ biçiminde yazılır ve

$$\tilde{H}^K = H_0^K - v_F \sum_{\mathbf{q},\mu} \sigma \cdot \mathbf{q} \mathbf{b}_{q\mu}^\dagger \mathbf{b}_{q\mu} + \frac{v_F}{2} B_0 [\sigma_+ (P_+^2 - 2p_+ P_+) + H.C.] \quad (3.10)$$

şeklinde bulunur.

Burada, $q_\pm = q_x \pm iq_y$ olmak üzere $P_\pm = \sum \hbar q_\pm b_{q\mu}^\dagger b_{q\mu}$ ile verilir. Denklem 3.8 ile belirtilmiş olan ikinci üniter dönüştürme U_2 fonon koordinatlarında yer değişimine sebep olduğundan ve fonon yok etme ve yaratma operatörlerini sırasıyla $U_2^{-1} b_{q\mu} U_2 = \tilde{b}_{q\mu} =$

$b_{q\mu} + F(q)$ ve $\tilde{b}_{q\mu}^\dagger = b_{q\mu}^\dagger + F^\dagger(\mathbf{q})$ şeklinde dönüştürür. Bu iki ardıl dönüştürme sonucunda denklem 3.1'deki etkin Hamiltonyen $\bar{H}^K = U_2^{-1} U_1^{-1} H^K U_1 U_2 = H_0^K + H_D^K + H_{ND}^K$ biçiminde elde edilir. Köşegenleştirilmiş kısmı temsil eden H_D^K Hamiltonyen

$$H_D^K = \sum_{\mathbf{q}, \mu} [\hbar w_\mu(\mathbf{q}) - \hbar v_F \sigma \cdot \mathbf{q}] |\bar{M}_{0\mu}(\mathbf{q})|^2 |\Delta_{\lambda'\lambda}(\mathbf{q})|^2 + [\frac{v_F}{2} \tilde{B} \hbar^2 \sigma_+ \Gamma_{\lambda'\lambda} - \Theta_{\lambda'\lambda} + H.C.] \quad (3.11)$$

şeklinde elde edilir. Bu denklem içerisindeki kısaltmalar ise

$$\begin{aligned} \Gamma_{\lambda'\lambda} &= \sum_{\mathbf{q}, \mu} q_+^2 |\bar{M}_{0\mu}(\mathbf{q})|^2 |\Delta_{\lambda'\lambda}(\mathbf{q})|^2 \\ \Theta_{\lambda'\lambda} &= \sum_{\mathbf{q}, \mu} \hbar w_\mu(\mathbf{q}) |\bar{M}_{0\mu}(\mathbf{q})|^2 M_\mu(\mathbf{q}) \Delta_{\lambda'\lambda}^\dagger(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (3.12)$$

şeklinde verilir. İki kere dönüştürme uygulanmış etkin Hamiltonyen'de belirtilen H_{ND}^K köşegenleşmemiş kısmı temsil eder ve fonon yaratma ve yok etme operatörlerini birinci ve ikinci dereceden içerir. Dolayısıyla $H^K |\Phi\rangle^\lambda = \tilde{E}_\lambda^K |\Phi\rangle^\lambda$ özdeğer denklemi kurulduğunda sıfır katkı vermektedir.

Sonuç olarak, $\alpha_\pm^+$ ve $\alpha_\pm^-$ için iki eşzamanlı denkleme ulaşılır. Bunlar,

$$\begin{bmatrix} \tilde{E}_\pm^K - \epsilon_\pm^0 - \Omega_\pm & 2\Sigma_{+-} - i\tilde{B} \\ 2\Sigma_{-+} + i\tilde{B} & \tilde{E}_\pm^K - \epsilon_\pm^0 - \Omega_\pm \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_\pm^+ \\ \alpha_\pm^- \end{bmatrix} = 0 \quad (3.13)$$

şeklindeki matris denklemiyle yazılabilir. Burada $\epsilon_\pm^0 = \pm \hbar v_F k$, $\tilde{B} = v_F (\hbar k)^2 B_0 \cos(3\theta)$ ve

$$\Sigma_{\lambda'\lambda} = \sum_{\mathbf{q}, \mu} \hbar w_\mu(\mathbf{q}) |M_\mu^0(\mathbf{q})|^2 |\Delta_{\lambda'\lambda}(\mathbf{q})|^2 \quad (3.14)$$

olarak verilmiştir. Denklem 3.13'ye aşık olmaya çözümleri bulabilmek için, bu denklemdeki matrisin determinantının sıfır olması gerekmektedir. Bu durum $\tilde{E}_\pm^K$ 'da kuadratik denkleme yol açar ki bunun çözümü kolaylıkla

$$\tilde{E}_{\pm}^K = \frac{1}{2}(\Omega_+ - \Omega_-) \pm \left[\frac{1}{4}(\Omega_+ - \Omega_-)^2 + \Pi \right]^{1/2} \quad (3.15)$$

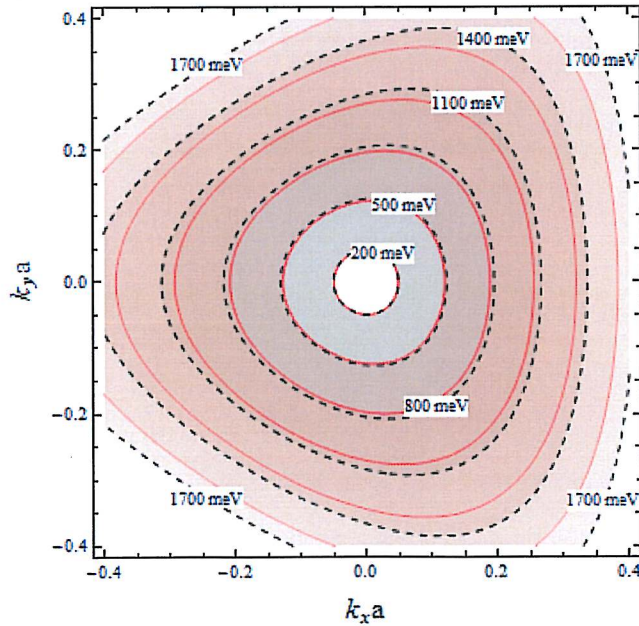
şeklinde bulunur. Burada, $\Pi = 4\Sigma_{+-}\Sigma_{-+} + \tilde{B}^2 + \Omega_+\Omega_- - \epsilon_-^0\Omega_+ + \epsilon_+^0\Omega_- - \epsilon_+^0\epsilon_-^0$ olarak verilmişlerdir. Denklem 3.14'daki $|\Delta_{\lambda'\lambda}(\mathbf{q})|^2$,

$$|\Delta_{\lambda'\lambda}(\mathbf{q})|^2 = \frac{1}{2}(1 + s_\mu\lambda'\lambda\cos(2\theta)) \quad (3.16)$$

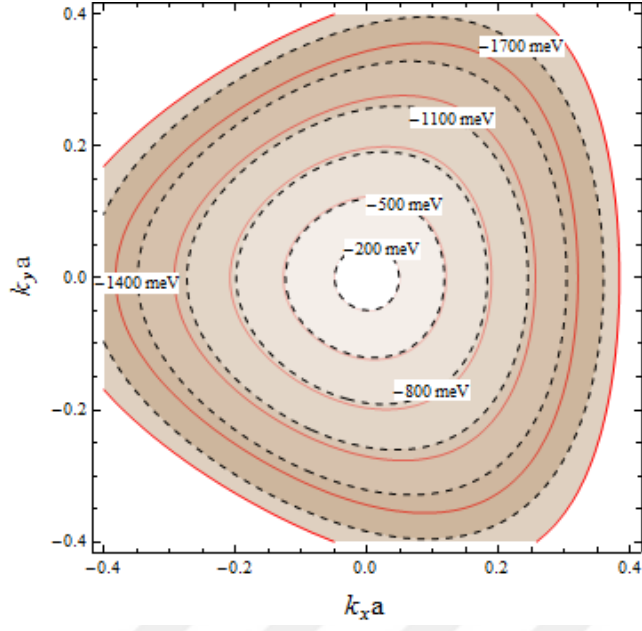
biçiminde kolayca elde edilebilir. Denklem 3.15'in açık formunu bulabilmek için, öncelikle denklem 3.14 ile verilen toplamalar q üzerinden integrale dönüştürülmelidirler. Yani, $S = L^2 = N\Omega_0$ sistemin alanı, N birim hücrelerin sayısı ve $\Omega_0 = 3\sqrt{3}a^2/2$ birim hücrenin alanı olmak üzere $\Sigma_{\mathbf{q}} \rightarrow (S/4\pi^2) \int d^2\mathbf{q}$ integrali alınır. Sonuç integralin değeri, $\Sigma = 6\sqrt{3}J_0\alpha a^2/\pi$ olmak üzere $\Sigma_{\lambda'\lambda} = \Sigma k^2$ olarak elde edilir. Denklem 3.15'in K' vadisindeki karşılığını bulmak için θ 'da $2\pi/3$ 'lük miktarda bir dönme uygulamak yeterlidir. Sonuç itibariyle, enerji özdeğerleri

$$\tilde{E}_{\lambda}^{\sigma}(\mathbf{k}) = -\Sigma k^2 + \lambda[4\Sigma^2 k^4 + \epsilon_{\lambda}^{\sigma}(\mathbf{k})^2]^{1/2} \quad (3.17)$$

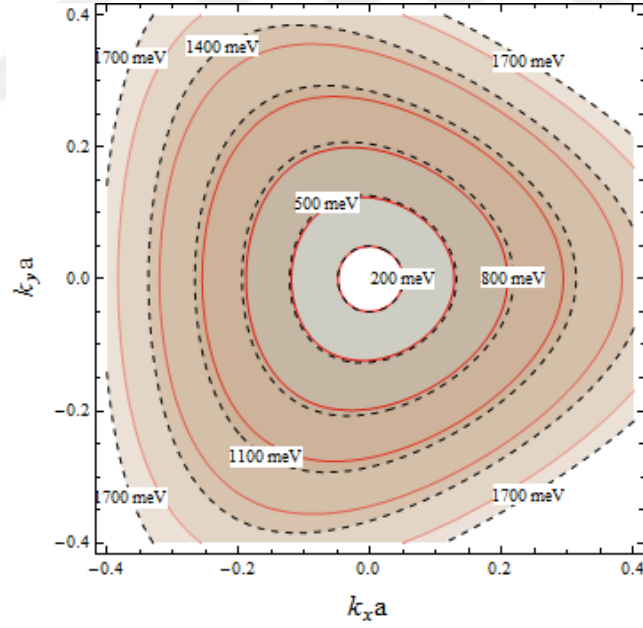
şeklinde yazılabilir. Burada, σ vadi indisi olarak tanımlanmıştır ve K vadisi için $\sigma = +1$, K' vadisi için $\sigma = -1$ değerlerini almaktadır.



Şekil 3.1 Grafenin BB'nin K noktasında iletim bandının k_y 'ya bağımlılığı



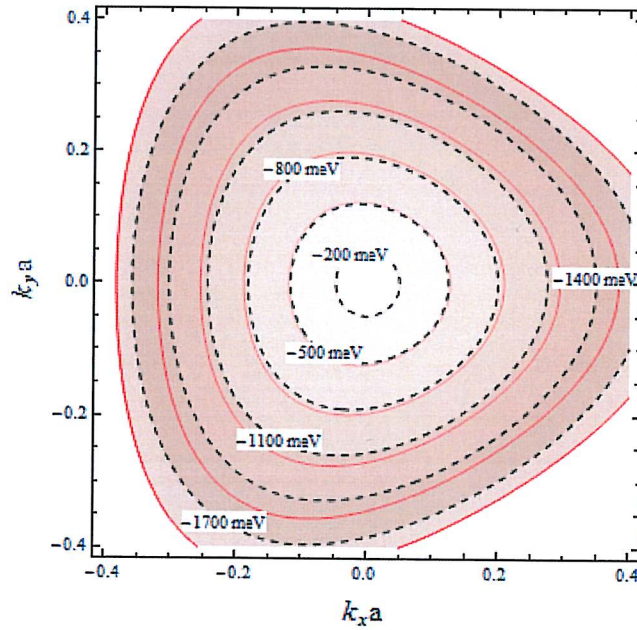
Şekil 3.2 Grafenin BB'nin K noktasında değerlik bandının $\mathbf{k}$ 'ya bağımlılığı



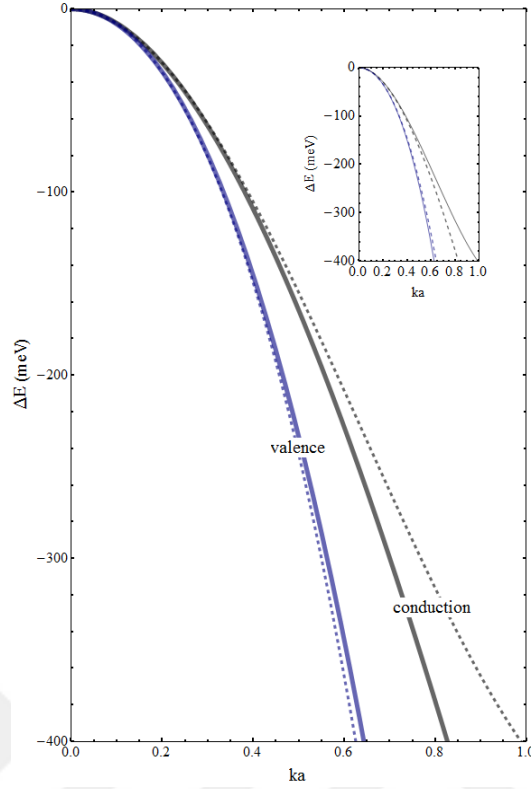
Şekil 3.3 Grafenin BB'nin K' noktasında iletim bandının $\mathbf{k}$ 'ya bağımlılığı

Denklem 3.3 ve denklem 3.17 ile verilen enerji değerlerini kullanarak, grafenin BB'nin K noktasında grafenin iletim ve değerlik (alttaki panel) bantlarının $\mathbf{k}$ 'ya bağımlılığını gösteren kontur grafikleri sırasıyla şekil 3.1 ve şekil 3.2'de verilmiştir. Şekil 3.3

ve şekil 3.4'den K' vadisi için grafenin iletim ve değerlik bantlarının k 'ya bağımlılığını gösteren aynı kontür grafikleri, K için çizilenleri $2\pi/3$ dereceyle döndürüldüğünde elde edilebileceği de rahatlıkla görülmektedir. Bu şekilden, izoenerji çizgilerinin elektron-fonon kuplajının dahil edildiği (kesikli çizgiler) durumda, edilmediği duruma kıyasla (düz çizgiler) nasıl büküldüğü açık bir şekilde görülmektedir. Düşük enerjilerde, bant yapısının yatay kesitleri dikkate alındığında elektron-fonon bağlaşımının bant dağılımına etkisi küçüktür. Enerji arttıkça, yani üçgensel eğrilmenin açıkça belirginleştiği bölgede, elektron-fonon bağlaşımının etkisi artmaya başlar ve bu etkileşmeden dolayı oluşan bozulma ortaya çıkar. Bu etki şekil 3.5'de açıkça fark edilmektedir. Denklem 3.3'nin denklem 3.17'den çıkartılmasıyla elde edilen polaronik öz enerji, ΔE , dalga vektörünün fonksiyonu olarak bu grafikte gösterilmektedir. Çizilen bu grafikten kolaylıkla şu sonuçlara ulaşılabilir, (i) elektron-fonon etkileşmesi nedeniyle yüksek k değerleri için elektron-deşik asimetrisi gözlenir. (ii) Tek bir vadi (K) için her bir bantta enerjilerin farklı anizotropik davranışı söz konusudur, ve son olarak (iii) bu davranış K' vadisi için tamamen farklıdır.



Şekil 3.4 Grafenin BB'nin K' noktasında değerlik bandının k 'ya bağımlılığı



Şekil 3.5 K ve K' (içteki) vadilerinde enerjilere polaronik katkılar

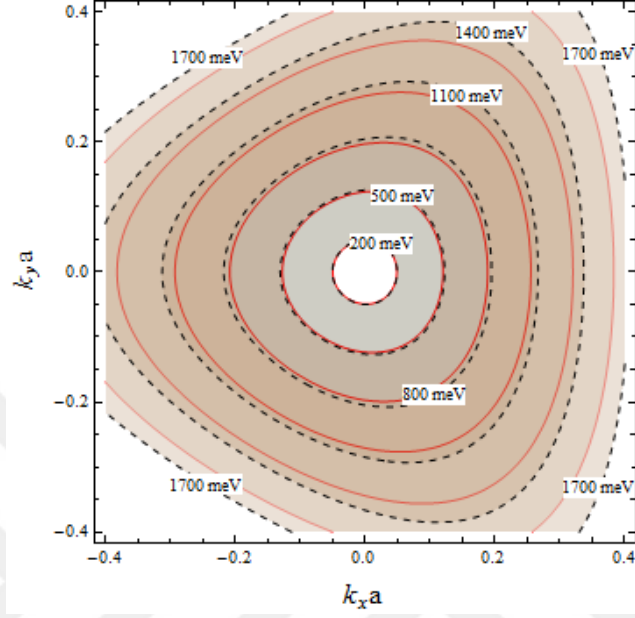
Denklem 3.17, $\tilde{E}_\lambda^\sigma = \lambda \hbar v_\lambda^\sigma(\bar{k}_0) \bar{k}_0$ biçiminde kolayca yeniden düzenlenebilir. Burada, bantların koniksel yapıda olduğu küçük k 'lar için geçerli olan boyutsuz dalga vektörünün değerini $\bar{k}_0 = ka$ tanımlanarak, boyutsuz renormalize olmuş Fermi hızı

$$v_\lambda^\sigma(\bar{k}_0)/v_F = -\lambda \tilde{\alpha}(\bar{k}_0) + \sqrt{1 + \frac{1}{16} \bar{k}_0^2 + 4 \tilde{\alpha}^2(\bar{k}_0) + \frac{1}{2} \sigma \bar{k}_0 \cos(3\theta)} \quad (3.18)$$

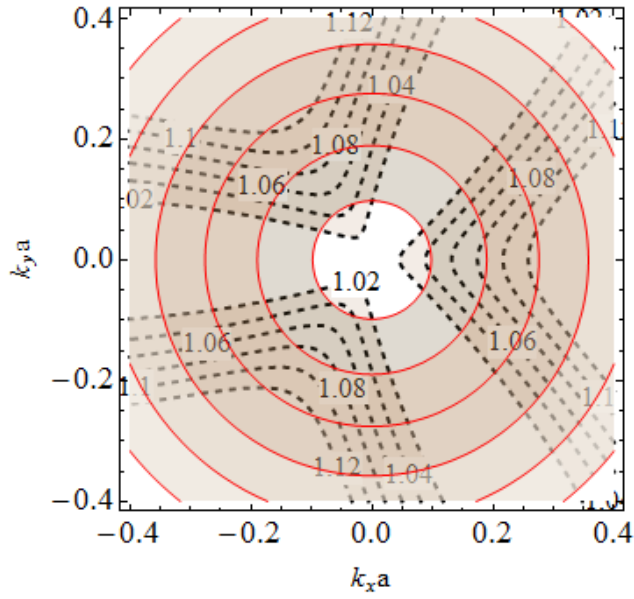
olarak elde edilebilir.

Burada, $\tilde{\alpha}(\bar{k}_0) = 4\sqrt{3}\alpha(0)\bar{k}_0/\pi$ şeklinde tanımlanmıştır. Denklem 3.18 ile verilen renormalize Fermi hızının kontur çizimleri grafenin K vadisinde iletim ve değerlik bantları için sırasıyla şekil 3.6 ve şekil 3.7'da gösterilmiştir. K' vadisi için kontur çizimleri şekil 3.8 ve şekil 3.9'da gösterilmiştir. Kontur çizimlerde düz çizgiler üçgensel eğrilme yok iken ancak elektron-fonon etkileşmesi var iken renormalize Fermi hızını göstermektedir. Elektron-fonon bağlaşımı nedeniyle iletim ve değerlik bantlarında oluşan asimetrikleşmeden ve üçgensel eğrilmeden kaynaklanan anizotropiden dolayı bu bantlar için renormalize olmuş Fermi hızı farklı niteliklere sahiptir. $\overline{E}_\lambda^\sigma = \lambda \hbar \tilde{v}_F k$

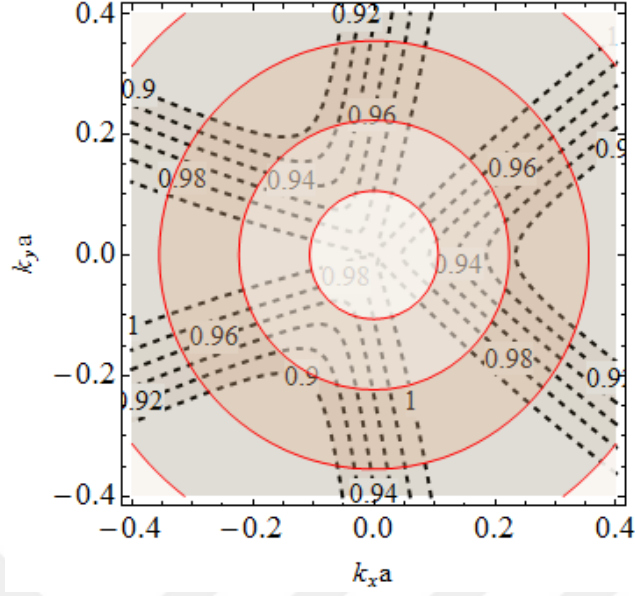
şeklinde renormalize Fermi hızını bulduğumuzdan denklem 3.18 küçük $\mathbf{k}$ değerleri için geçerlidir. Ancak, iki bant arasındaki asimetri ve üçgensel eğrilmeden dolayı olan anizotropi küçük $\mathbf{k}$ değerlerinde bile belirgindir.



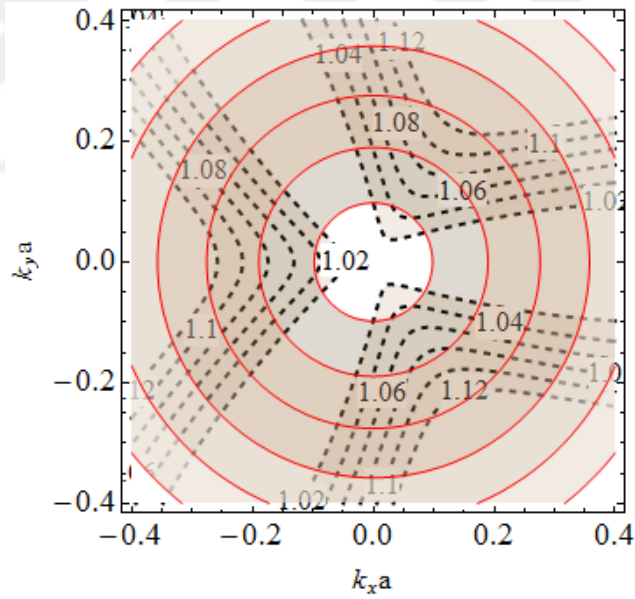
Şekil 3.6 Renormalize Fermi hızının K vadisi iletim bandı için $\mathbf{k}$ 'ya bağımlılığı



Şekil 3.7 Renormalize Fermi hızının K vadisi değerlik bandı için $\mathbf{k}$ 'ya bağımlılığı



Şekil 3.8 Renormalize Fermi hızının K' vadisi iletim bandı için $\mathbf{k}$ 'ya bağımlılığı



Şekil 3.9 Renormalize Fermi hızının K' vadisi iletim bandı için $\mathbf{k}$ 'ya bağımlılığı

Sonuç olarak, elektron- E_{2g} fonon modlarının bağlaşım etkisinin grafenin enerji bantlarına ve taşıyıcıların hızlarına etkisi üçgensel eğrilme varlığında LLP teorisi çerçevesinde analitik olarak araştırılmıştır. Üçgensel eğrilmenin belirgin olduğu bölgede, elektron-fonon bağlaşımından dolayı enerji bantlarında bozulma meydana gelmektedir ve bu bantlar güçlü anizotropi sergilemektedir. Bu etki kendini grafen yük

taşıyıcıların hızında da göstermektedir. Bu çalışmanın bir başka önemli sonucu da elektron-fonon etkileşmesinden dolayı grafenin iletim ve değerlik bantları arasındaki asimetridir. Bu çalışmanın grafenin elektronik yapısının deneysel analizinde onun başta söylenen antilokalizasyon, zayıf lokalizasyon, taşıyıcı multiplikasyonu, anizotropik öz direnç, iletkenlik, doğrusal olmayan optiksel tepki ve Coulomb sürüklenme gibi ilgi çekici özelliklerini bulmakta faydalı olması beklenmektedir.



4. RASHBA TİPİ SPİN-YÖRÜNGE ETKİLEŞMESİNİN HİDROJENİK SAFSIZLIK VARLIĞINDA GRAFENİN ELEKTRONİK DURUMLARINA ETKİLERİ

Tezin bu kısmındaki çalışmada, spin-yörünge bağlaşımlı grafenin enerji spektrumu hidrojenimsi safsızlık ve topolojik kusurlar varlığında araştırılmıştır. Grafenin enerji seviyelerine RSYE'nin etkilerini bulmak için dejenere pertürbasyon teorisine dayalı analitik bir yaklaşım sergilenmiştir. Bu seviyeler üzerine hidrojenimsi safsızlık ve topolojik kusurların birleşmiş etkisi de incelenmiştir. RSYE'nin gücü arttırıldıkça, topolojik kusur tarafından meydana gelen enerji seviyelerinin sözde-Zeeman yarılmamasının arttığı gösterilmiştir. Dolayısıyla, bu sözde Zeeman yarılmamasını RSYE'nin ve hidrojenik safsızlığın büyüklüklerini değiştirerek ayarlamak mümkündür.

Hidrojenimsi safsızlık varlığında, aralıklı grafenin yük taşıyıcıları Dirac-Weyl Hamiltonyen'i

$$H_0 = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} + \sigma_3 M v_F^2 - \sigma_0 \frac{Z e^2}{\epsilon r} \quad (4.1)$$

ile şeklinde tanımlanabilir: Burada M kütle olarak aralık terimini betimlemektedir. Aynı zamanda, σ_i 'ler Pauli spin matrisleridir ve $\mathbf{p}$ momentum operatörüdür. Dış alanların yokluğunda, H_0 'ın boyutsuz enerji özdeğerleri $\bar{\epsilon}_n = \pm(\bar{M}_0^2 + \bar{k}_0^2)^{1/2}$ ile verilmektedir. Bu ise, $\bar{M}_0 = aM_0$ aralık teriminin yokluğunda iletim (değerlik) bandı için $\bar{k}_0$ ($-\bar{k}_0$) doğrusal dağınımı belirlemektedir. a karbon-karbon atomları arasındaki uzaklık ve J_0 yaklaşık olarak ~ 2.7 eV değeriyle bunlar arasında hoplama integrali olmak üzere, $\hbar v_F = 3aJ_0/2$ tanımı ile birlikte $M_0 = M v_F/\hbar$ kısaltmaları kullanılmıştır. Dolayısıyla, $\bar{\epsilon}_n = \epsilon_n a/\hbar v_F$ ve $\bar{k}_0 = k_0 a$ sırasıyla, boyutsuz enerji ve dalga vektörüdür. RSYE hesaba katıldığında, sistem için toplam Hamiltonyen $H = H_0 + H_R$ olarak yazılabilir. Grafendeki elektronik durumlar için etkin düşük enerji Dirac denklemi $H\Psi_{\uparrow\downarrow} = \epsilon_n\Psi_{\uparrow\downarrow}$ ile verilir. λ_R , RSYE'nin büyüklüğünü belirlemek üzere H_R ,

$$H_R = \frac{1}{2}\lambda_R(\sigma_x s_y - \sigma_y s_x) \quad (4.2)$$

ile tanımlanır (Katsnelson 2012).

Denklem 4.1 ile verilen H_0 Hamiltonyen'i tam olarak çözülebilmektedir ve boyutsuz enerji özdeğerleri $\bar{\epsilon}_n^0 = \bar{M}_0[1 + \bar{Z}^2/(n + \gamma)^2]^{-1/2}$ ile verilir (Novikov 2007c). Bu enerji özdeğerlerine karşı gelen özfonksiyonlar ise,

$$\Psi_{nj}(r) = \frac{1}{\sqrt{r}} \begin{pmatrix} F_{nj}(r)e^{i\theta(j-1)} \\ iG_{nj}(r)e^{i\theta j} \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

şeklindedir. $F_{nj}(r)$ ve $G_{nj}(r)$ Laguerre polinomları cinsinden,

$$\left. \begin{matrix} F_{nj}(\mathbf{r}) \\ G_{nj}(\mathbf{r}) \end{matrix} \right\} = (-1)^n N_{nj}(\bar{Z}, M_0) \sqrt{M_0 \pm \epsilon_n} \times e^{-\lambda r} (2\lambda r)^{\gamma-1/2} [L_n^{2\gamma}(2\lambda r) \pm C_{21} L_{n-1}^{2\gamma}(2\lambda r)] \quad (4.4)$$

olarak elde edilmiştir ve burada $C_{21} = -\frac{n+2\gamma}{m_j+(\bar{Z}M_0/\lambda)}$ 'dir. Diğer yandan, $\lambda = \sqrt{M_0^2 - \epsilon_n^2}$, $\gamma = \sqrt{j^2 - \bar{Z}^2}$ olmak üzere normalizasyon katsayısı

$$N_{nj}(\bar{Z}, M_0) = \left\{ \frac{\Gamma(n+1)\lambda^3[m_j + (\bar{Z}M_0/\lambda)]}{\Gamma(n+2\gamma+1)\bar{Z}M_0^2} \right\}^{1/2} \quad (4.5)$$

olarak belirlenebilir. Boyutsuz Coulomb sabiti $\bar{Z} = Ze^2/\epsilon\hbar v_F$ olarak tanımlanabilir ve $j = m_j + 1/2$ toplam açısal momentum $J_z = L_z + S_z$ 'nin özdeğerleridir. Kuantum sayısı n 'nin değerleri $m_j \geq 0$ olduğu durumda $n = 0, 1, 2, \dots$ iken, $m_j < 0$ için $n = 1, 2, \dots$ 'dir (Kandemir 2013). Topolojik kusurlar varlığında ise, boyutsuz enerji özdeğerleri $\bar{\epsilon}_n^0$

$$\bar{\epsilon}_{n,\nu}^0 = \bar{M}_0[1 + \bar{Z}^2/(n + \sqrt{\nu^2 - \bar{Z}^2})^2]^{1/2} \quad (4.6)$$

şeklinde modifiye olmaktadır.

Denklem 4.6'de n_Ω tek tabaka grafenden çıkarılan atom sektörleri sayısı olmak üzere $\nu = (j + n_\Omega/4)/(1 - n_\Omega/6)$ olarak tanımlanmıştır (Chakraborty vd. 2011).

Topolojik kusur varlığında hidrojenimsi safsızlığa sahip aralıklı grafenin enerji spektrumuna RSYE'nin etkisini irdeleyebilmek için enerji özdeğerleri bulunmuştur. Spin durumları dejenere olduğundan, bunları bulabilmek için dejenere pertürbasyon teorisi uygulanmıştır. H_0 Hamiltonyen'ine ait olan ve denklem 4.3 ile verilen dalga fonksiyonları ile spin yukarı ve spin aşağı durumlar için spinör dalga fonksiyonları olan $\chi_{\uparrow\downarrow}$ 'in dış çarpımı alınarak öz fonksiyonlar $\Psi_{\uparrow\downarrow} = \psi \otimes \chi_{\uparrow\downarrow}$ şeklinde kurulmuştur. Spin yukarı ve spin aşağı durumlar için spinör dalga fonksiyonları sırasıyla

$$\chi_{\uparrow} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \exp(i\theta) \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

$$\chi_{\downarrow} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \exp(i\theta) \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

şeklinde yazılabilir.

Sonuç olarak, $\Psi_{\uparrow\downarrow}$ spin yukarı ve spin aşağı durumlar için sırasıyla

$$\Psi_{\uparrow} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} F_{nj}(r)e^{i\theta(j-1)} \\ F_{nj}(r)e^{i\theta(j)} \\ iG_{nj}(r)e^{i\theta(j)} \\ iG_{nj}(r)e^{i\theta(j+1)} \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

$$\Psi_{\downarrow} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} F_{nj}(r)e^{i\theta(j-1)} \\ -F_{nj}(r)e^{i\theta(j)} \\ iG_{nj}(r)e^{i\theta(j)} \\ -iG_{nj}(r)e^{i\theta(j+1)} \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

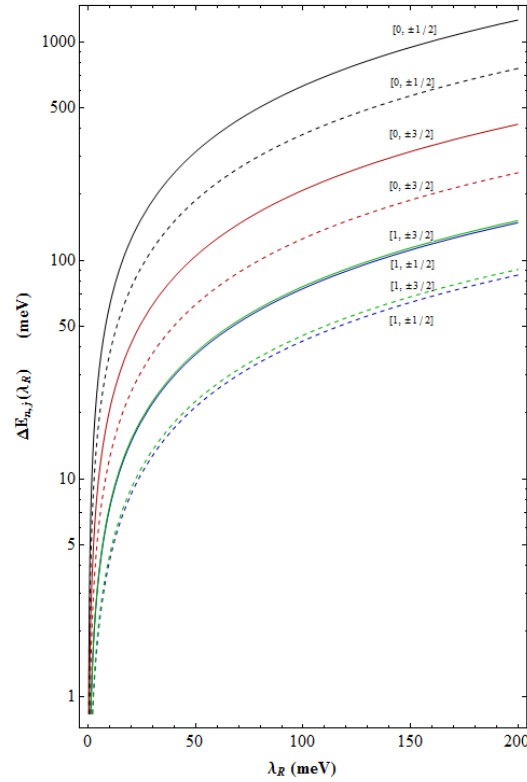
olarak elde edilirler. Dolayısıyla ilgili enerji özdeğeri, $\sum_i |\alpha_i|^2 = 1$ koşulu sağlanmak şartıyla,

$$(H_0 + H_R)(\alpha_1\psi_\uparrow + \alpha_2\psi_\downarrow) = \bar{\epsilon}_n(\alpha_1\psi_\uparrow + \alpha_2\psi_\downarrow) \quad (4.11)$$

ifadesinden bulunabilir. $\bar{\lambda}_R = \lambda_R(\frac{3}{2}J_0)^{-1}$ olmak üzere, denklem 4.11 çözülerek, RSYE'nin boyutsuz enerjiye katkısı,

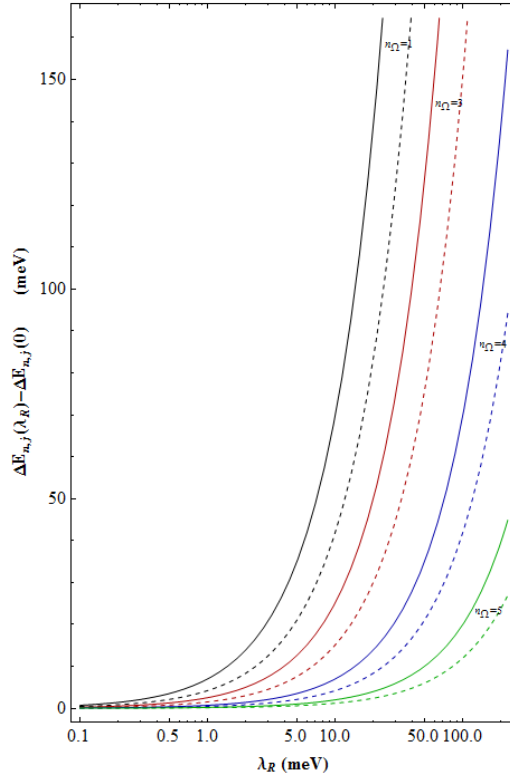
$$\Delta\bar{\epsilon}_n = \pi\bar{\lambda}_R \frac{\bar{Z}}{\bar{Z}^2 + (n + \gamma)^2} \left\{ \nu + \sqrt{\bar{Z}^2 + (n + \gamma)^2} - \frac{n(n + 2\gamma)}{\nu + \sqrt{\bar{Z}^2 + (n + \gamma)^2}} \right\} \quad (4.12)$$

olarak elde edilir. Sonuçta, toplam boyutsuz enerji denklem 4.6 ve denklem 4.12 ile verilen enerjilerin toplamından oluşur, yani $\bar{\epsilon}_n = \bar{\epsilon}_{n,\nu}^0 + \Delta\bar{\epsilon}_n$ 'dir. Pertürbe olmuş enerji $\bar{\epsilon}_n$ dejenere pertürbasyon teorisi aralığında geçerlidir. Bu durumda $\bar{\lambda}_R \ll \nu\bar{M}_0(1 + \bar{Z}^2/\nu^2 - \bar{Z}^2)^{-1/2}(2\pi\bar{Z})^{-1}$ 'dir. RSYE varlığında ve/veya bir topolojik kusur varlığında, j açısai momentum kanalları için grafenin enerji seviyelerindeki dejenerelek kalker, yani enerji seviyeleri yarılmıştır. Dahası, topolojik kusur varlığından meydana gelen yarılmaların büyüklüğü düşük bir RSYE gücünde bile artmaktadır.



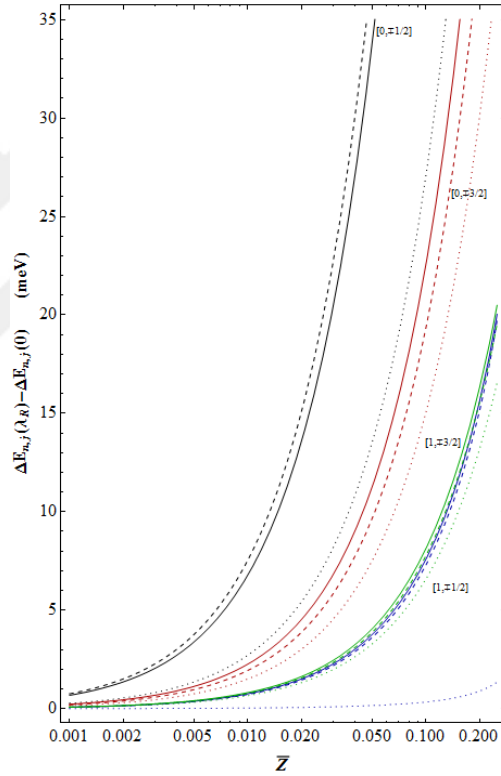
Şekil 4.1 Grafende enerji yarılmalarının RSYE'ne bağımlılığı

Enerji seviyelerindeki yarılmanın RSYE ile nasıl değiştiğini daha iyi anlamak için, şekil 4.1 ve şekil 4.2'deki grafikler çizilmiştir. Şekil 4.1'de hidrojenik safsızlık varken ancak topolojik kusur yokken $\Delta E_{n,j}(\lambda_R) = E_{n,|j|}(\lambda_R) - E_{n,-|j|}(\lambda_R)$ ile verilen yarılmanın büyüklüğü $n = 0$ ve $n = 1$ ile etiketlenen enerji seviyeleri için en düşük dört açısız momentum kanalları olan $j = \pm 1/2$ ve $j = \pm 3/2$ için iki farklı safsızlık değerinde, $\bar{Z} = 0.15$ (kesikli çizgiler) ve $\bar{Z} = 0.25$ (düz çizgiler), λ_R 'nın fonksiyonu olarak çizilmiştir. Seviyelerdeki bu yarılmanın, en düşük durum ve toplam açısız momentum sayısının $j = \pm 1/2$ değerleri için safsızlığın $\bar{Z} = 0.25$ değerinde daha etkili olduğu grafikten kolaylıkla anlaşılmaktadır. Yarılma toplam açısız momentum sayıları $j = \pm 1/2$ ve $j = \pm 3/2$ için $n = 0$ 'a kıyasla $n = 1$ durumunda daha küçüktür. Bu seviyelerdeki yarılma λ_R parametresini arttırdıkça artmaktadır. RSYE'nden dolayı ortaya çıkan yarılmanın büyüklüğü $\bar{Z} = 0.25$ (düz çizgiler) için $\bar{Z} = 0.15$ (kesikli çizgiler)'e kıyasla daha etkilidir. Ayrıca, hidrojenik safsızlık varlığında spin-yörünge bağlaşımının olduğu grafenin elektronik spektrumuna topolojik kusurların etkileri de çalışılmıştır.



Şekil 4.2 Enerji yarılmasının λ_R bağımlılığı

Şekil 4.2 topolojik kusurlar varlığında ortaya çıkan yarılmalara RSYE'nin etkisini göstermektedir. Bu şekilde, RSYE var iken ve yok ikenki durumlarda seviyelerdeki yarıma büyüklüğünün farkı, yani $\Delta E_{n,j}(\lambda_R) - \Delta E_{n,j}(0)$, topolojik kusur ile $\bar{Z} = 0.25$ (düz çizgiler) ve $\bar{Z} = 0.15$ (kesikli çizgiler) safsızlık gücü için λ_R 'nın fonksiyonu olarak çizilmiştir. RSYE'nin büyüklüğü λ_R 'nın artışıyla, çıkarılan atom sektörlerinin artan (azalan) sayısı ile farkın azaldığı (arttığı) bulunmuştur. RSYE $\bar{Z} = 0.25$ (düz çizgiler) için $\bar{Z} = 0.15$ 'e (kesikli çizgiler) kıyasla daha etkilidir. Özetlemek gerekirse, RSYE'nden ötürü seviyelerdeki yarılmaların büyümesi artan RSYE'nin büyüklüğüyle daha belirgin hale gelmektedir.



Şekil 4.3 Enerji yarılmalarının $\bar{Z}$ bağımlılığı

Şekil 4.3'de RSYE'den dolayı seviyeler arasındaki yarılmaların farkı $\lambda_R = 27$ meV ve $\lambda_R = 0$ meV için $M_0=0.01$ olduğu durumda ve ilk iki düşük durum için, yani $n = 0$ ve $n = 1$, ve ilk dört açısal momentum kanalı, yani $j = 1/2$, $j = 3/2$ ve $j = -1/2$, $j = -3/2$ için boyutsuz safsızlık büyüklüğü $\bar{Z}$ 'in fonksiyonu olarak çizilmiştir. Bu şekilde, düz çizgiler topolojik kusur yokkenki farkı göstermektedir. Tek bir atom sektörü kaldırıldığında, yani $n_\Omega = 1$ ve üç atom sektörü kaldırıldığında, yani $n_\Omega = 3$,

sırasıyla kesikli çizgiler ve noktalı çizgiler ile gösterilmiştir.

Sonuç olarak bu çalışmada, RSYE'nin uzun erimli safsızlık ve topolojik kusuru bir arada barındıran aralıklı grafenin elektronik spektrumuna katkısı araştırılmıştır. Çalışma dejenere pertürbasyon teorisi çerçevesinde yapılmıştır. Sonuçlar dejenere pertürbasyon teorisinin sağlandığı sınırlar bölgesi içinde geçerlidir. Topolojik bir kusur varlığında aralıklı grafenin enerji seviyelerinin sözde-Zeeman yarılması, RSYE'nin dahil edilmesiyle artmıştır.

5. HİDROJENİMSİ SAFSIZLIK VARLIĞINDA GRAFEN KUAN- TUM NOKTASI

Grafenin keşfinden bu yana, grafende safsızlık ile etkiler grafen literatüründe geniş yer kaplamaktadır (Ostrovsky vd. 2006, Katsnelson vd. 2006, Pereira vd. 2007, Fogler vd. 2007, Shytov vd. 2007a, Shytov vd. 2007b, Novikov 2007a, Novikov 2007c, Terekhov vd. 2008, Katsnelson vd. 2006, Chen vd. 2008, Pereira vd. 2007, Katsnelson ve Geim 2008, Zhu vd. 2009, Kandemir ve Mogulkoc 2010, Altanhan ve Kozal 2012, Zhu ve Sun 2012). Grafen kuantum noktalarında safsızlığı çalışmak başlıca önem arz eder; çünkü boyutluluğun azalmasıyla böyle yapılar üzerinde safsızlık etkilerinin daha etkili olması beklenmektedir. Tek tabaka grafenin yüzeyi üzerine konulan yüzey atomlarıyla yapılan deneyler grafenin mobilitelerini kısıtlanmaktan sorumlu olan uzun menzilli safsızlıkları işaret ettiğinden Coulomb benzeri hidrojenik safsızlıklar özellikle önemlidir. Dahası Coulomb etkileşmesinin gücünü belirleyen parametre, safsızlığın değeri $\alpha = e^2/\epsilon\hbar v_F$ ile tanımlanan boyutsuz $\bar{Z}$ ($Z\alpha$) niceliğiyle orantılıdır ve genel pertürbatif kuantum elektrodinamiğinden tamamıyla farklı olan yeni bir çeşit kuantum elektrodinamiği gerektirir. Burada ϵ dielektrik sabiti, v_F Fermi hızıdır. Geleneksel SiO_2 yüzeyi için α birim mertebesinde olduğundan uzun menzilli safsızlıkların meydana getirdiği etkileri araştırmak için böyle yeni bir alan pertürbatif olmayan yöntemlere ihtiyaç duyar. Bir yandan, kontrol edilebilir şekil ve boyutlarından ötürü GKN'lar, grafen fiziğinde hem deneysel hem de teorik çalışanların ilgi merkezini oluşturur (Silvestrov vd. 2007, Chen vd. 2007, Recher ve Trauzettel 2010, Pal vd. 2011, Zarenia vd. 2011). Diğer yandan kontrol edilebilir vadi yarılmasıyla GKN'larda spin kubitler oluşturmak bu alanda bir diğer aktif araştırma alanlarından birisidir. Yüzeye tutunan atomların (adatoms) grafende nereye yerleştirileceğini kontrol etmek mümkündür, safsızlıkla ilgili etkilerin kontrol edilmesi sadece grafen için değil, aynı zamanda GKN'lar gibi grafen tabanlı nano yapılar için de önemlidir. GKN'larda Dirac elektronlarının hapisleme durumlarının sürekli modeli bu gibi yapılarda bağlı durumların anlaşılması için basit bir fiziksel bakış açısı sağlar. Bu model yarıçapları karbon-

karbon arası uzaklıktan çok daha fazla olan kuantum noktaların bağlı durumları için yapılan sıkı bağ hesaplamalarıyla (SBH) elde edilen sonuçlarla tamamıyla uyumlu sonuçlar vermektedir. Sürekli model ile SBH arasındaki uyuşum küçük yarıçaplar da bile yüksek açısal momentum değerli düşük bağlı durumlar için her zaman kabul edilebilirdir. Bu, hapislemenin etkilerini çalışabilmek için sürekli yaklaşımın kullanılmasına olanak sağlar. Tezin bu bölümünde bunlardan alınan motivasyonla GKN'ndan kaynaklı kuantum hapislemenin ve onun merkezine yerleşmiş hidrojenik donor safsızlığın birleşik etkileri çalışılmıştır. Bunun için, GKN'sı çembersel hapisleme potansiyeli ile modellenmiş olup, noktanın merkezi üzerine hidrojenimsi safsızlık yerleştirilmiştir. Hesaplamalar varyasyonel yöntem çerçevesinde yapılmış olup deneme dalga fonksiyonu olarak kuantum nokta potansiyelinin olmadığı durumdaki Dirac-Weyl denkleminin tam çözümleri kullanılmıştır. İçerisinde verici (alıcı) bir iyonla bağlanmış bir elektron (deşik) bulunduran parabolik grafen kuantum noktası sisteminin, düzlemine dik uygulanan manyetik alan varlığında Hamiltonyen'i

$$H = v_F \boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}) + \beta \Delta_0 r^2 - \frac{Ze^2}{\epsilon r} \quad (5.1)$$

ile verilir. Burada, $\mathbf{A} = \mathbf{B}_0(-y, x, 0)/2$ simetrik ayarda seçilmiş vektör potansiyelidir. U_0 ve R_0 sırasıyla GKN'nın büyüklüğünü ve çapını belirlemek üzere $\Delta_0 = U_0/2R_0^2$ şeklinde belirlenmiştir. Denklem 5.1'de $\boldsymbol{\alpha}$ ve β Dirac matrisleri ve Fermi hızı $v_F = (3a/2)J_0$ 'dır. J_0 en yakın komşu karbon atomları arasındaki hoplama integrali olup, 2.7 eV mertebesinde ve a grafenin bağ uzunluğudur. Denklem 5.1'in GKN potansiyeli ve safsızlık olmadığı durumda çözümleri daha önce elde edilmiştir (Kandemir ve Mogulkoc 2010). Bu ikisinin birleşik etkilerini çalışmak için, ikisinin yokluğunda $H\Psi_n = E_n\Psi_n$ Dirac-Weyl denkleminin ait tam dalga fonksiyonu deneme dalga fonksiyonu olarak kullanılmıştır. Bu denklemdeki dört bileşenli spinörler, $R_n(x) = [\nu!/2\pi(\nu + |m|)!]^{1/2}\gamma_0 x^{|m|}$ olmak üzere

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

$$\Psi_n^{\mathbf{K}'}(x, \varphi) = R_n(x) e^{im\varphi} e^{-x^2/2} \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbb{L}^0 \\ \mathbb{L}^{\mathbf{K}'} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

ile verilirler. Denklem 5.2'de L^0 , $L^{\mathbf{K}}$, $L^{\mathbf{K}'}$ Laguerre polinomları cinsinden sırasıyla, $\mathbb{L}^0 = L_\nu^{|m|}(x^2)$,

$$\begin{aligned} \mathbb{L}^{\mathbf{K}} &= \frac{ixe^{+i\varphi}}{\sqrt{n}} \begin{cases} L_\nu^{|m|+1}(x^2) & m \geq 0 \\ -\frac{n}{x^2} L_{\nu+1}^{|m|-1}(x^2) & m < 0 \end{cases} \\ \mathbb{L}^{\mathbf{K}'} &= \frac{ixe^{-i\varphi}}{\sqrt{n}} \begin{cases} -\frac{n}{x^2} L_\nu^{|m|-1}(x^2) & m \geq 0 \\ L_\nu^{|m|+1}(x^2) & m < 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (5.3)$$

şeklinde tanımlanmışlardır.

Karşılık gelen özdeğerler $n = \nu + (|m| + m + \tau + 1)/2$ ile $\epsilon_n = \hbar v_F \sqrt{2n}/l_B$, λ kiralite indeksi grafenin değerlik bandı için -1 , iletim bandı için $+1$ olmak üzere $E_n = \lambda \epsilon_n$ ile verilir. Ayrıca, $l_B = (\hbar c/eB)^{1/2}$ manyetik hapisleme uzunluğunu, τ sözdespin indeksi olmak üzere -1 ve $+1$ değerlerinde sırasıyla $\mathbf{K}$ ve $\mathbf{K}'$ vadilerini belirtmektedir. Çalışmanın bundan sonraki kısmında sadece iletim bandıyla ilgilenilmiştir. Ancak, sonuçların diğer banda uygulanması oldukça basittir. Denklem 5.3'te $x = \gamma_0 \rho$ boyutsuz bir niceliktir ve γ_0 manyetik hapisleme uzunluğu l_B ile ters orantılıdır, yani $\gamma_0 = \gamma = 1/\sqrt{2}l_B$. Öte yandan uzaysal bir hapisleme varlığında Denk 5.1'de verilen Hamiltonyen ile tanımlanan grafen sistemi, grafende skaler parabolik bir kuantum noktanın boyutunu karakterize eden doğal bir uzunluk birimi $R = (\hbar v_F R_0^2/U_0)^{1/3}$ tanımlar (Silvestrov vd. 2007, Chen vd. 2007). Bu yüzden sistemi tek bir parametre ile karakterize etmek için Chen vd. 2007'in makalesinde verilen çözüm önerisi kullanılmıştır, yani $\gamma_0^2 = \gamma^2 + R^{-2}$ yazılmıştır ve γ varyasyon parametresi seçilerek $R \rightarrow \infty$ olduğu durumda $1/\sqrt{2}l_B$ 'ye indirgenmesi sağlanmıştır. Dolayısıyla GKN'na ait varyasyonel özenerjiler

$$E_n = \int d^2\mathbf{r} \Psi_n^\dagger \left[\alpha \cdot (-i\nabla + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}) + \beta \Delta_0 r^2 - \frac{Ze^2}{\epsilon r} \right] \Psi_n \quad (5.4)$$

ifadesinden elde edilmişlerdir.

Denklem 5.2 ve denklem 5.3'i denklem 5.4 içersine yerleştirildiğinde varyasyonel enerji için genel bir ifade,

$$\bar{E}_n = \left(\sqrt{n} - \frac{\bar{Z}}{2} \mathbb{M}_n^{\text{I}} \right) \bar{\gamma}_0 + \frac{\sqrt{n}}{2\bar{l}_B^2} \frac{1}{\bar{\gamma}_0} + \frac{1}{4\bar{R}^3} \frac{1}{\bar{\gamma}_0^2} \mathbb{M}_n^{\text{II}} \quad (5.5)$$

biçiminde elde edilir.

Denklem 5.5'de enerji ve bütün uzunluklar sırasıyla J_0 ve a birimleri cinsinden boyutsuz olarak ifade edilmiştir. Buradaki $\mathbb{M}_n^{\text{I}}$ ve $\mathbb{M}_n^{\text{II}}$ integralleri Laguerre polinomları cinsinden,

$$\mathbb{M}_n^{\text{I}} = \tilde{\mathbb{F}}_n + \frac{1}{n} \tilde{\mathbb{G}}_n \quad (5.6)$$

$$\tilde{\mathbb{F}}_n = \frac{\nu!}{(\nu + |m|)!} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|+\frac{1}{2}} |L_\nu^{|m|}(r)|^2 \quad (5.7)$$

$$\tilde{\mathbb{G}}_n = \frac{\nu!}{(\nu + |m|)!} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|-\frac{1}{2}} \mathbb{H}_{\nu,\alpha}^{|m|}(r) \quad (5.8)$$

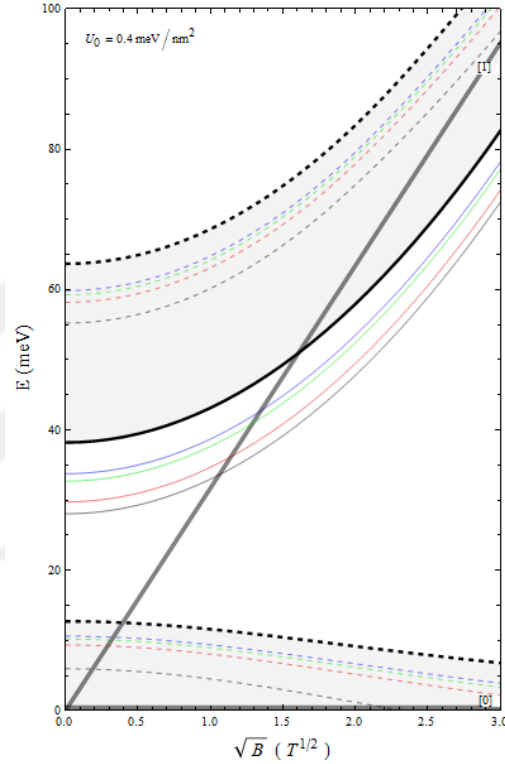
$$\mathbb{M}_n^{\text{II}} = \mathbb{F}_n - \frac{1}{n} \mathbb{G}_n \quad (5.9)$$

$$\mathbb{F}_n = \frac{\nu!}{(\nu + |m|)!} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|+1} |L_\nu^{|m|}(r)|^2 \quad (5.10)$$

$$\mathbb{G}_n = \frac{\nu!}{(\nu + |m|)!} \int_0^\infty dr e^{-r} r^{|m|+1} \mathbb{H}_{\nu,\alpha}^{|m|}(r) \quad (5.11)$$

$$\mathbb{H}_{\nu,\alpha}^{|m|}(r) = \begin{cases} r \left| L_{\nu+\alpha}^{|m|+1}(r) \right|^2, & \alpha = \begin{cases} 0 & m \geq 0 & \tau = +1 \\ -1 & m < 0 & \tau = +1 \end{cases} \\ \frac{n^2}{r} \left| L_{\nu+\alpha}^{|m|-1}(r) \right|^2, & \alpha = \begin{cases} 0 & m \geq 0 & \tau = +1 \\ -1 & m < 0 & \tau = +1 \end{cases} \end{cases} \quad (5.12)$$

olarak tanımlanmıştır.



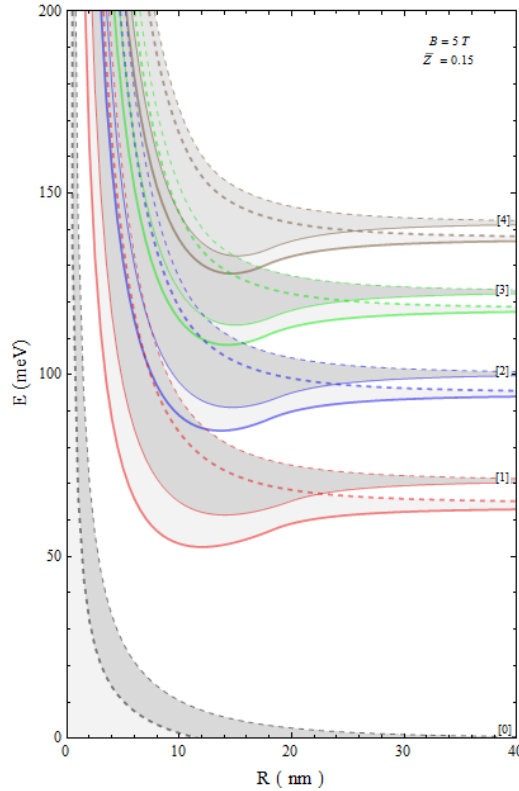
Şekil 5.1 Manyetik alanın fonksiyonu olarak parabolik GKN enerji spektrumu

$\mathbb{M}_n^{\text{II}}$ analitik olarak hesaplandığı zaman, $\mathbb{F}_n = 2\nu + |m| + 1$ ve $\mathbb{G}_n = 2n - m$ 'i vermektedir. Böylece, tam olarak $\mathbb{M}_n^{\text{II}} = -\tau$ elde edilir. Her bir n değeri için, $\mathbb{M}_0^{\text{I}}$ de analitik olarak integre edilebilir (Gradhsteyn ve Rhyzik 2000). Öyle ki, örnek olarak, $\Gamma(x)$ Gamma fonksiyonu olmak üzere, $n = 0$ için $\mathbb{M}_0^{\text{I}} = \Gamma(|m| + 1/2)/\Gamma(|m| + 1)$ elde edilir. Denklem 5.5 ile verilen enerji için yaklaşık analitik bir ifade elde etmek için, enerjinin bazı limit değerleri hesaplanmıştır. Safsızlığın olmadığı, durumda enerjinin $\bar{\gamma}$ 'a göre minimizasyonu, $\bar{R}$ sonsuza giderken, $\bar{\gamma} = 1/\sqrt{2\bar{l}_B}$ vermektedir. Bu değer ilgili varyasyonel enerji ifadesinde yerleştirildiğinde, kütesiz grafen için çok iyi bilinen Landau seviyeleri $\bar{E}_n = \sqrt{2n}/\bar{l}_B$ elde edilir. Sonuç olarak, bu değer

tekrar denklem 5.5’de yerleştirildiğinde birinci dereceden yaklaşıklıkla

$$\bar{E}_0 = -\frac{\bar{Z}}{2\bar{l}_0} \frac{\Gamma(|m| + 1/2)}{\Gamma(|m| + 1)} - \tau \frac{\bar{l}_0^2}{4\bar{R}^3} \quad (5.13)$$

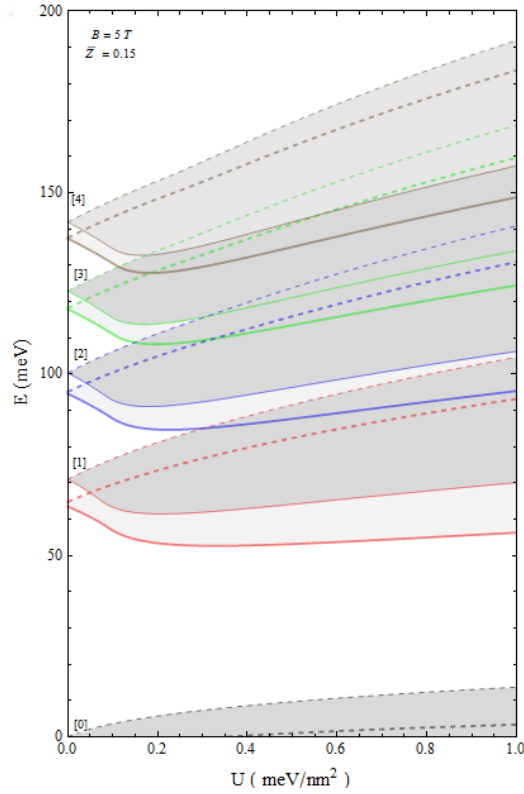
enerji değeri elde edilir. Öyle ki, etkin hapisleme uzunluğunu $1/\bar{l}_0^2 = 1/2\bar{l}_B^2 + 1/\bar{R}^2$ olarak tanımlanmıştır. Denklem 5.13, parabolik bir GKN’nın enerji spektrumuna hidrojenimsi donör safsızlığın etkisiyle ilgili bir fikir verebildiği gibi kritik safsızlık büyüklük değeri ilgili bilgi de verir. Safsızlık ve manyetik alan yok iken denklem 5.13 iyi sonuç vermektedir. Kandemir ve Omer 2013’in makalesinde belirtildiği gibi, Ponomarenko vd. (Ponomarenko vd. 2008) tarafından oluşturulan grafen aygıtlarda $D = 40 - 1.0$ nm çaplarındaki GKN’lar $0.010 - 0.5$ eV aralık değerlerine sahiptirler. Denklem 5.13 kullanarak bunlar için bu değerler $0.014 - 0.57$ eV olarak öngörülmüştür. Yüksek manyetik alanlarda bile deneysel (Molitor vd. 2009) olarak da doğrulanmış, iyi bilinen göreceli Landau seviyelerini sağlamaktadırlar. Denklem 5.13’den $\bar{Z}$ ’ın kritik değeri $\bar{Z}_{kri} = \frac{\bar{l}_0^3}{2\bar{R}^3} \frac{\Gamma(|m|+1)}{\Gamma(|m|+1/2)}$ olarak hesaplanabilir. Bu kritik değer manyetik alanın yokluğunda $\bar{Z}_{kri} = 1/2\sqrt{\pi}$ değerine indirgenmektedir.



Şekil 5.2 Enerji özdeğerlerinin etkin nokta yarıçapına bağımlılığı

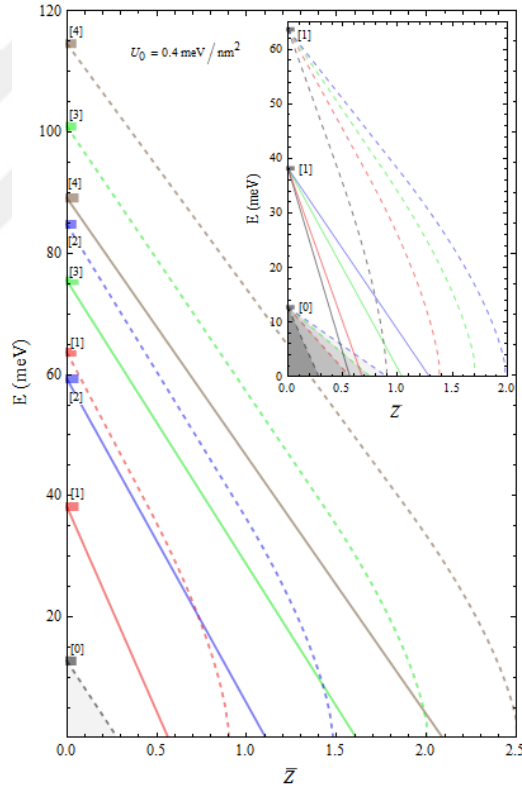
Şekil 5.1’de $[n]$ ile etiketlenmiş koyu gri çizgiler pertürbe olmamış Landau seviyelerini ($\bar{R} \rightarrow \infty$ limitinde), kesikli (düz) çizgiler ise $\mathbf{K}'$ ($\mathbf{K}$) vadileri temsil etmektedir. Bütün eğriler aşağıdan yukarıya $m = 0, -1, -2$ ve -3 seviyeleri, gri, kırmızı, yeşil ve mavi renklerle gösterilmiştir. Şekil 5.1’de parabolik GKN’nın taban ve birinci uyarılmış enerji durumları hidrojenik safsızlık varlığında (ince kesikli ($\mathbf{K}'$) ve ince düz ($\mathbf{K}$)) ve yokluğunda (koyu kesikli ($\mathbf{K}'$) ve koyu düz ($\mathbf{K}$)) $\sqrt{B}$ ’nin fonksiyonu olarak çizilmiştir.

Karşılaştırma için aralıksız grafenin ilk iki Landau seviyesi gri renkle kalın çizgiyle gösterilmiştir. GKN’nda safsızlık enerji seviyeleri sabit bir U_0 değeri için B manyetik alanı arttırıldığında iyi bilinen Landau seviyelerine doğru ulaşmaktadır (Şekil 5.2). Şekil 5.2’de sabit bir manyetik alan ve safsızlık gücünde; yani hapislemenin tek başına sabit bir safsızlık gücünde safsızlık enerji seviyelerine etkisini anlamak için, sırasıyla $B = 5T$ ve $\bar{Z} = 0.15$, GKN’nın en düşük enerji özdeğerleri etkin nokta yarıçapı R ’nin fonksiyonu olarak verilmiştir.



Şekil 5.3 Enerji özdeğerleri etkin nokta gücüne bağımlılığı

Aynı enerji seviyelerinin $m = 0$ için etkin nokta büyüklüğü $U = U_0/R_0^2$ 'ye bağımlılığı şekil 5.3'de gösterilmiştir. Şekil 5.2 ve şekil 5.3'de ilgili seviyelere ait vadi yarılmasını daha iyi görebilmek için yarılmadan kaynaklı boşluk gri ile renklendirilmiştir. Daha dar nokta daha güçlü hapisleme oluşturduğundan vadi yarılması değeri hapisleme güçlendikçe büyümüştür. Vadi dejenereliğinin büyüklüğü, GKN'nın büyüklüğünü azalttıkça, önce yavaşça azaldığı ve sonra aralıksız grafendeki değeri olan sıfıra ulaştığı belirlenmiştir. Bu durum şekil 5.3'de daha açıkça görülmektedir. Bununla birlikte, donör bir safsızlığın dahil edilmesi bu seviyelerin düşük enerji seviyelerine kaymasına sebep olur ve sabit U değeri için vadi yarılmasının büyüklüğünde artışa yol açar. Diğer yandan, uzun menzilli bir hidrojenik donör safsızlığın dahil edilmesi vadi yarılmasında azalmaya neden olur.



Şekil 5.4 Manyetik alan yokluğunda $\bar{Z}$ ' a bağımlı GKN enerjileri

Şekil 5.4'de ilgili enerji seviyeleri $\bar{Z}$ safsızlık büyüklüğünün fonksiyonları olarak çizilmiştir. Bu grafikte kalın çizgiler $\tau = +1$ enerji seviyelerini temsil ederken, kesikli çizgiler $\tau = -1$ için olanları temsil etmektedirler. İç kısımdaki grafikte ise yine enerji seviyeleri, kırmızıyla $m = -1$, yeşille $m = -2$ ve maviyle $m = -3$ hem

de griyle $m = 0$ 'ın dahil edilmesiyle gösterilmiştir.

Sonuç olarak, tezin bu kısmında yapılan çalışmada parabolik grafen kuantum noktasının enerji seviyelerine hidrojenimsi donor bir safsızlığın etkileri araştırılmıştır. Bunun için, taşıyıcıların hapislenmesiyle birlikte manyetik alanın etkisini de hesaba katan deneme dalga fonksiyonlarının seçilmesine dayalı varyasyonel yöntem kullanılmıştır. Bunlar doğrultusunda, vadi yarılması değerinin safsızlığın ve manyetik alanın gücüne son derece kuvvetli biçimde bağlı olduğu ve vadi yarılmasının büyüklüğünün kolayca safsızlık değeriyle kontrol edilebilir olduğu neticesine erişmek mümkündür. Elde edilen bu sonuçların, GKN'ların bazı elektronik özelliklerinin safsızlıkla nasıl kontrol edilebileceğine yönelik bir görüş kazandırmakta faydalı olacağı düşünülmektedir.

6. TARTIŞMA VE SONUÇ

Sonuç olarak, ortaya konulan ilk çalışmada, elektron- E_{2g} fonon modlarının bağlaşım etkisinin grafenin enerji bantlarına ve taşıyıcıların Fermi hızlarına etkisi üçgensel eğrilme varlığında LLP teorisi çerçevesinde analitik olarak araştırılmıştır. Üçgensel eğrilmenin belirlediği bölgede, elektron-fonon bağlaşımından dolayı enerji bantlarında bozulma meydana gelmektedir ve bu bantlar güçlü anizotropi sergilemektedir. Bu etki kendini grafen yük taşıyıcıların hızında da göstermektedir. Bu çalışmanın bir başka önemli sonucu, elektron-fonon etkileşmesinden dolayı grafenin iletim ve değerlik bantları arasındaki asimetridir. Bu çalışmanın grafenin elektronik yapısının deneysel analizinde onun başta söylenen antilokalizasyon, zayıf lokalizasyon, taşıyıcı multiplikasyonu, anizotropik öz direnç, iletkenlik, doğrusal olmayan optiksel tepki, ve Coulomb sürüklenmesi gibi ilgi çekici özelliklerini bulmakta faydalı olması umulmaktadır.

İkinci çalışmanın neticesinde, RSYE'nin uzun erişimli safsızlık ve topolojik kusuru birarada barındıran aralıklı grafenin elektronik spektrumuna katkısı araştırılmıştır. Çalışma dejenere pertürbasyon teorisi çerçevesinde yapılmıştır. Sonuçlar dejenere pertürbasyon teorisinin sağlandığı sınırlar bölgesi içinde geçerlidir. Dahası, artış safsızlığın gücüne oldukça bağlıdır. Topolojik bir kusur varlığında aralıklı grafenin enerji seviyelerinin sözde-Zeeman yarılmaları RSYE'nin dahil edilmesiyle artmıştır.

Tezin son kısmında bulunan çalışmada parabolik grafen kuantum noktasının enerji seviyelerine hidrojenimsi donör bir safsızlığın etkileri araştırılmıştır. Bunun için, taşıyıcıların hapislenmesiyle birlikte manyetik alanın etkisini de hesaba katan deneysel dalga fonksiyonlarının seçilmesine dayalı varyasyonel yöntem kullanılmıştır. Bunlar doğrultusunda, vadi yarılmaları değerinin safsızlığın ve manyetik alanın gücüne son derece kuvvetli bir biçimde bağlı olduğu ve vadi yarılmalarının büyüklüğünün kolayca safsızlık değeriyle kontrol edilebilir olduğu neticesine erişilmiştir. Elde edilen bu sonuçların, GKN'ların bazı elektronik özelliklerinin safsızlıkla nasıl kontrol edilebile-

ceğine yönelik bir görüş kazandırmakta faydalı olacağı düşünülmektedir.



KAYNAKLAR

- Abergel, D.S L, Apalkov, V., Berashevich, J., Ziegler, K., Chakraborty, T. 2010. *Properties of graphene: a theoretical perspective*. Advances in Physics, 59, 261-482.
- Ajiki, H. and Ando, T. 1996. *Energy Bands of Carbon Nanotubes in Magnetic Fields*. J Phys Soc Jpn 65, 505-514.
- Altanhan, T. and Kozal, B. 2012. *Impurity Effects in Graphene*. Eur. Phys. J. 85, 222.
- Azizi J., Phirouznia A. and Hasanirokh K., 2015. *Anisotropic resistivity of the monolayer graphene in the trigonal warping and connectred Fermi curve regimes*. Physica E, 68, 28-32.
- Badalyan, S.M. and Peeters, F.M. 2012. *Electron phonon bound state in graphene*. Phys Rev B, 85, 205453.
- Bai, C., Wang, J., Yang, G. and Yang, Y. 2015. *Sub-gap transport in graphene-based double junctions*. Indian J Phys, 87, 133-139.
- Basko D.M. and Aleiner, I. L. 2008. *Interplay of Coulomb and electron-phonon interactions in graphene*. Phys Rev B 77, 041409(R).
- Basko, D.M., 2013. *Effect of anisotropic band curvature on carrier multiplication in graphene*. Phys. Rev. B 87, 165437.
- Bolívar, N., Medina, E. and Berche, B. 2014. *Persistent charge and spin currents in the long-wavelength regime for graphene rings*. Phys Rev B 89, 125413-10.
- Carbotte, J.P., Nicol, E.J. and Sharapov, S.G. 2010. *Effect of Electron-phonon interaction on spectroscopies in graphene*. Phys Rev B 81, 045419.
- Castro Neto, A.H., Guinea, F., Peres, N.M R., Novoselov, K.S. and Geim, A.K. 2009. *The electronic properties of graphene*. Reviews of modern Physics 81, 109-162.
- Castro Neto, A.H., 2010. *The Carbon New Age*. Materials Today, 13, 12-17.
- Chakraborty, B., Gupta, K.S. and Sen S. 2011. *Effect of topology on the critical charge in graphene*. Physical Review B, 83, 115412.
- Chakraborty, B., Gupta, K.S. and Sen, S. 2013. *Effect of topological defects and Coulomb charge on the low energy quantum dynamics of gapped graphene*. J Phys A Theor, 46, 055303.
- Chen, H., Apalkov, V. and Chakraborty, T. 2007. *Fock-Darwin States of Dirac Electrons in Graphene-Based Artificial Atoms* Physical Review Letters. 98,186803.
- Chen, J.H., Jang, C., Adam, S. Fuhrer, M.S., Williams, E. D and Ishigami, M. 2008. *Charged-impurity scattering in graphene* Nature Physics 4, 377.

- Cortijo, A. and Vozmediano, M. A.H. 2007. *Effects of topological defects and local curvature on the electronic properties of planar graphene*. Nuclear Physics B, 763, 293-308.
- Dedkov, Y.S., Fonin, M., Rüdiger, U. and Laubschat, C. 2008. *Rashba Effect in the Graphene/ Ni(111) System*. Phys Rev Lett, 100, 107602-4.
- Delkhosh, F. and Phirouznia, A. 2015. *Rashba coupling induced spin susceptibility and magnetic phase transition of conduction electrons in monolayer graphene*. Physica E, 66, 252-256.
- Ebbesen, T.W. 1998. *Cones and Tubes: Geometry in the Chemistry of Carbon*. Acc. Chem. Res. 31, 558-566.
- Fal'ko V.I., Kchedzhi K., McCann E., Altshuler B.L., Suzuura H. and Ando T., 2007. *Weak-Localization in Graphene*. Solid State Communications 143, 33-38.
- 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.
- Fogler, M.M., Novikov, D. and Shklovskii, B. I. 2007. Phys Rev B 76, 233402.
- Furtado, C., Moraes, F. and Carvalho, M. 2008. *Geometric phase in graphitic cones*. Physics Letters A, 372, 5368-5371.
- Gelderen, R. and Smith, C. M. 2010. *Rashba and intrinsic spin-orbit interactions in biased bilayer graphene*. Physical Review B, 81, 125435.
- Giavaras, G. and Nori, N. 2010. *Graphene quantum dots formed by a spatial modulation of the Dirac gap*.
- Gradshteyn, I.S. and Ryzhik, I.M. 2007. *Table of Integrals, Series and Products Seventh edition*, USA.
- Hasanirokh, K., Esmaelpour, M., Mohammadpour, H. and Phirouznia, A. 2014. *Quantum transport in ferromagnetic graphene superlattice in the presence of Rashba spin-orbit coupling*. Phys Lett A, 378, 1888-1892.
- Hosur, P. and Qi, X. 2013. *Recent developments in transport phenomena in Weyl semimetal*. C. R. Physique 14, 857-870.
- Huertas-Hernando, D., Guinea, F. and Brataas, A. 2009. *Spin-Orbit-Mediated Spin Relaxation in Graphene*. Phys Rev Letter 103, 146801-4.
- Ibach, H. and Lüth, H. 2009. *Solid-State Physics*. Springer, 543, Germany.
- Ivanovskii, A.L. 2012. *Graphene based and graphene like materials*. Russian Chemical Reviews 81, 571-605.
- Jiang, Z., Zhang, Y., Stormer, H.L. and Kim, P. 2007. *Quantum Hall States near the Charge-Neutral Dirac Point in Graphene*. Phys Rev Lett 99, 106802.

- Jiang, J.W., Wang, B. S., Wang, J. S. and Park, H. S. 2015. *A Review on Flexural Mode of Graphene: Lattice Dynamics*. J. Phys.: Cond. Matter 27, 083001.
- Jishi, R. A. and Dresselhaus, G. 1993. *Electron-phonon coupling and the electrical conductivity of fullerene nanotubules*. Phys Rev B 48, 11385-11389.
- Kandemir, B.S. and Mogulkoc, A. 2010. *Variational approach for the effects of periodic modulations on the spectrum of massless Dirac fermion*. Eur. Phys. J. 74, 391-396.
- Kandemir, B.S. 2013. *Possible formation of chiral polarons in graphene*. Journal of Physics.:Condensed Matter, 25, 025302.
- Kandemir, B.S. 2013. *Pseudo-Spin-Orbit Coupling in Graphene within Hydrogenic Impurity Context*. J Phys Soc Jpn, 82, 094706.
- Kandemir, B.S. and Omer, G. 2013. *Variational calculations on the energy levels of graphene quantum antidots* Eur Phys J B. 86, 299.
- Kandemir, B.S and Mogulkoc A. 2014. *Zone boundary phonon induced mini band gap formation in graphene*. Solid State Communications,177, 80-83.
- Kandemir, B.S and Mogulkoc A. 2015. *Chiral Symmetry breaking by a magnetic field in graphene*. Phys. Lett. A 379, 2120-2124.
- Kandemir, B.S. and Akay, D. 2015. *Tuning the pseudo-Zeeman splitting in graphene cones by magnetic fields*. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 384, 101.
- Katsnelson, M.I. 2006. *Nonlinear screening of charge impurities in graphene*. Phys Rev B, 74, 201401.
- Katsnelson, M.I., Geim, A.K. 2008. *Electron scattering on microscopic corrugations in graphene*. Phil. Trans. R. Soc. A. 366, 195-204.
- Katsnelson, M.I. 2012. *Carbon in Two Dimensions*. Cambridge University Press, Newyork. p13.
- Kechedzhi K., McCann E., Fal'ko V.I., Suzuura H., Ando T. and Altshuler B.L., 2007. *Weak Localization in monolayer and bilayer graphene*. Eur. Phys. J. Spec. Top. 148, 39-54.
- Kumar, D., Verma, V., Bhatti, H. S. and Dharamvir, K. 2013. *Phonon dispersions in graphene sheet and single-walled carbon nanotubes*. Pramana-J, Phys, 81, 6.
- Lammert, P.E. and Crespi, V.H. 2000. *Topological Phases in Graphitic Cones*. Physical Review Letters, 85, 5190-5193.
- Lammert, P.E. and Crespi, V.H. 2004. *Graphene cones: Classification by fictitious flux and electronic properties*. Physical Review B, 69, 035406.

- Lee, T.D., Low, F.E. and Pines, D. 1953. *The Motion of Slow Electrons in a Polar Crystal*. Phys Rev 90, 297.
- Lenz, L., Urban, D.F. and Bercieux, D. 2013. *Rashba spin-orbit interaction in graphene armchair nanoribbons*. Eur Phys J B, 86, 502-9.
- Li, W.P., Wang, Z. -W, Yin, W. and Yu, Y.F. 2012. *The effects of the magnetopolaron on the energy gap opening in graphene*. J Phys Cond Matter 24, 135301.
- Marchenko, D., Varykhalov, A., Scholz, M.R., Bihlmayer, G., Rashba, E., Rybkin, A., Shikin, A.M. and Rader, O. 2009. *Giant Rashba splitting in graphene due to hybridization with gold*. Nat Commun, 3, 1232-6.
- Margulis V.I.A., Muryumin E.E. and Gaiduk E.A., 2013. *A Large nonlinear optical rectification in atomic hexagonal layers with broken space inversion symmetry*. J. Opt. 15, 105204.
- Mariani, E. and von Oppen F. 2008. *Flexural Phonons in Free-Standing Graphene*. Phys Rev Letter, 100, 076801.
- Mariani, E. and von Oppen F. 2010. *Temperature-dependent resistivity of suspended graphene*. Phys Rev B 82, 195403.
- Matulis, A. and Peeters, F.M. 2007. *Quasibound states of quantum dots in single and bilayer graphene*. Physical Review B 77, 115423.
- McCann E., Kchedzhi K., Fal'ko V.I., Suzuura H., Ando T. and Altshuler B. L. 2006. *Weak-Localization Magnetoresistance and Valley Symmetry in Graphene*. Phys Rev Lett 97, 146805.
- Meyer, J.C., Geim, A.K., Katsnelson, M.I., Novoselov, K.S., Booth, T.J. and Roth, S. 2007. *The structure of suspended graphene sheets*. Nature Letters 446, 60-63.
- Mogulkoc A., Modarresi, M. and Kandemir, B.S. 2015. *Spin-dependent polaron formation in pristine graphene*. Eur Phys J B 88, 49.
- 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.
- Molitor, F., Jacobsen, A., Stampfer, C., Güttinger, J., Ihn, T. and Ensslin, K. 2009. *Transport gap in side-gated graphene constrictions*. Phys Rev B 79, 075426.
- Narozhny, B.E., 2007. *Coulomb drag as a measure of trigonal warping in doped graphene*. Phys Rev B, 76, 153409.
- Novikov, D.S. 2007a. *Numbers of donors and acceptors from transport measurements in graphene*. Appl. Phys Lett, 91, 102102.

- Novikov, D.S. 2007c. *Elastic scattering theory and transport in graphene*. Phys Rev B, 76, 245435.
- Novoselov, K.S., Jiang, D., Schedin, F., Booth, T.J., Khotkevich, V.V., Morozov, S.V. and Geim, A.K. 2005. *Two-dimensional atomic crystals*. Proc Natl Acad Sci, 102, 10451.
- Novoselov K S., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S.V., Grigorieva I.V. and Firsov A.A. 2004. *Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films*. Science, 306 666-669.
- Ostrovsky, P.M., Gornyi, I.V. and Mirlin, A.D. 2006. *Electron transport in disordered graphene*. Phys Rev B 74, 235443.
- Pal, G., Apel, W. and Schweitzer, L. 2011. *Electric transport through circular graphene quantum dots: Presence of disorder*. Phys. Rev. B, 84, 075446
- Park C.H., Guistino, F., Cohen, M.L. and Louie S.G. 2007. *Velocity Renormalization and Lifetime in Graphene from the Electron-Phonon Interaction*. Phys Rev Lett, 99, 086804.
- Pereira Jr, J.M., Peeters, F.M., Costa Filho R.N. and Farias, G.A. 2009. *Valley polarization due to trigonal warping on tunneling electrons in graphene*. J. Phys.: Condens. Matter 21, 045301.
- Pereira, V.M., Nilsson, J. and Castro Neto, A.H. 2007, *Coulomb Impurity Problem in Graphene*. Phys Rev Lett 99, 166802.
- Pereira, V.M., Kotov, V.N. and Castro Neto, A.H. 2008. *Supercritical Coulomb impurities in gapped graphene*. Phys Rev B 78, 085101.
- Pietronero, L., Strässler, S., Zeller, H.R. and Rice, M.J. 1980. *Electrical conductivity of a graphite layer*. Phys Rev B 22, 904-916.
- Pisana, S., Lazzeri, M., Casiraghi, C., Novoselov K.S., Geim A.K., Ferrari, A.C. ve Mauri, F. 2007. *Breakdown of the adiabatic Born Oppenheimer approximation in graphene*. Nat Mater, 6, 198-201
- Ponomarenko, F. Schedin, M. I. Katsnelson, R. Yang, E. W. Hill, K. S. Novoselov, A. K. Geim 2008. *Chaotic Dirac Billiard in Graphene Quantum Dots*. Science 320, 356.
- Pop, E., Varshney, V. and Roy, A.K. 2012. *Thermal properties of graphene: Fundamentals and applications*. Materials Research Society, 37, 1273-1281.
- Rao, C.N.R. and Sood A.K. 2012. *Graphene: Synthesis, Properties, and Phenomena*. Wiley-VCH Verlag and Co, 438, Germany.
- Rashba, E.I. 2009. *Graphene with structure-induced spin-orbit coupling: Spin-polarized states, spin zero modes, and quantum Hall effect*. Phys Rev B, 79, 161409.

- Recher, P. and Trauzettel, B. 2010. *Quantum dots and spin qubits in graphene*. Nanotechnology, 21, 302001.
- Reich, S., Maultzsch, J. and Thomsen, C. 2002. *Tight-binding description of graphene*. Phys Rev B 66, 035412.
- Rozhkov, A.V. and Nori, F. 2011. *Electronic properties of mesoscopic structures: charge confinement and control of spin and charge transport*. Physics Report 503, 77-114.
- Samsonidze Ge.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*. Phys Rev B 75, 155420.
- Savage, N. 2012. *Super Carbon*. Nature 483, 30-31.
- Semenoff, G.W. 1984. *Condensed-Matter Simulation of a Three-Dimensional Anomaly*. Physical Review Letters, 53, 2449-2452.
- Shakouri, K., Masir, M.R., Jellal, A., Choubabi, E.B. and Peeters, F.M. 2013. *Effect of spin-orbit couplings in graphene with and without potential modulation*. Phys Rev B 88, 115408-9.
- Shokri, A.A. and Safari, E.K. 2015. *Ab-initio study of planar strain on electronic structure properties of graphene sheets with nanoholes*. Indian J Phys, 89, 23-29.
- Shytov, A.V., Katsnelson, M.I. and Levitov, L.S. 2007. *Vacuum Polarization and Screening of Supercritical Impurities in Graphene*. Phys Rev Lett 99, 236801.
- Shytov, A.V., Katsnelson, M.I. and Levitov, L.S. 2007. *Atomic Collapse and Quasi-Rydberg States in Graphene*. Phys Rev Lett 99, 246802.
- Silvestrov, P.G. and Efetov, K. B. 2007. *Quantum Dots in Graphene*. Phys. Rev. Lett., 98, 016802.
- Sitenko, Y.A. and Vlasii, N.D. 2007. *Electronic properties of graphene with a topological defect*. Nuclear Physics B, 787, 241-259.
- Stauber, T. and Peres, N.M.R., 2008. *Effect of Holstein phonons on the electronic properties of graphene*. J. Phys. Cond. Matter, 20, 055002.
- Stauber, T., Peres, N.M.R and Castro Neto, A.H. 2008. *Conductivity of suspended and non-suspended graphene at finite gate voltage* Phys Rev B 78, 085418.
- Terekhov, I.S., Milstein, A.I., Kotov, V.N. and Sushkov, O.P. 2008. *Screening of Coulomb Impurities in Graphene*. Phy. Rev. Letter, 100, 076803.
- Terrones, M., Botello-Méndez, A.R., Campos-Delgado, J., López-Uriás, F., Vega-Cantú, Y.I., Rodríguez-Macías, F.J., Elías, A.L., Muñoz-Sandoval, E., Cano-Márquez, A.G., Charlier, J.C. and Terrones, H. 2010. *Graphene and graphite*

- nanoribbons: *Morphology, properties, synthesis, defects and applications*. Nano Today, 5, 351-372.
- Tse, W.K. and Das Sarma, S. 2007. *Phonon-Induced Many Body Renormalization of the Electronic Properties of Graphene*. Phys Rev Lett 99, 236802.
- Varykhalov, A., Sanchez-Barriga, J., Shikin, A.M., Biswas, C., Vescovo, E., Rybkin, A., Marchenko and D., Rader, O. 2008. *Electric and Magnetic Properties of Quasifreestanding graphene on Ni*, Phys Rev Lett 101, 157601-4
- Vajtai, R. 2013 *Springer Handbook of Nanomaterials* Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1221 p., Berlin.
- Wallace, P.R. 1947. *The band theory of graphite*. Phys Rev 71, 622-634.
- Wang, Z.W., Liu, L. and Li, Z.Q. 2015. *Energy gap induced by the surface optical polaron in graphene on polar substrates*. Appl Phys Letter, 106, 101601.
- Warner, J.H., Schafer, F., Bachmatiuk, A. and Rummeli, M.H. 2013. *Graphene Fundamentals and emergent applications* Elsevier, 450, USA.
- Yan, J., Zhang, Y., Kim, P. and Pinczuk A., 2007. *Electric Field Effect Tuning of Electron-Phonon Coupling in Graphene*. Phys. Rev. Letter, 98, 166802.
- Zarenia, M., Chaves, A., Farias, G. A., Peeters, F. M. 2011. *Electric transport through circular graphene quantum dots: Presence of disorder* Physics Review B, 84, 245403.
- Zhang, Y., Jiang, Z., Small, J.P., Purewal, 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*. Phys Rev Letter 96, 136806.
- Zhu, W., Wang, Z., Shi, Q., Szeto, K.Y. and Chen, J. 2009. *Electronic structure in gapped graphene with a Coulomb potential*. Phys Rev B, 79, 155430.
- Zhu, J.L. and Sun, S. 2012. *Dirac donor states controlled by magnetic field in gapless and gapped graphene*. Phys Rev B, 85, 035429.

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Neslihan GÖKÇEK

Doğum Yeri : Ankara

Doğum Tarihi : 21/06/1985

Medeni Hali : Bekar

Yabancı Dili : İngilizce

Eğitim Durumu (Kurum ve Yıl):

Lise : TED Ankara Koleji Vakfı Özel Lisesi (2003)

Lisans : Ankara Üniversitesi Fizik Bölümü (2008)

Yüksek Lisans : Ankara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı (Eylül 2008- Ocak 2011)

Çalıştığı Kurum/Kurumlar ve Yıl:

Ankara Üniversitesi (Şubat 2010-Şubat 2017)

Yayınları:

Gökçek, N. and Kandemir, B. S. 2016. *Graphene Quantum Dot with a Hydrogenic Impurity*, Journal of Physics Conference Series 707, 012008.