

**ANKARA ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**DOKTORA TEZİ**

**GRAFEN TABANLI NANO YAPILARDA TOPOLOJİK ETKİLER**

**Defne AKAY**

**FİZİK ANABİLİM DALI**

**ANKARA  
2016**

**Her hakkı saklıdır**

## **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 olarak belirttiğimi beyan ederim.

15.08.2016

Defne AKAY

# ÖZET

Doktora Tezi

GRAFEN TABANLI NANO YAPILARDA TOPOLOJİK ETKİLER

Defne AKAY

Ankara Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR

Bu tez çalışmasında uzun menzilli yüklü Coulomb safsızlıklı aralıklı grafen koninin enerji spektrumu üzerindeki homojen manyetik alanın etkileri pertürbasyon teorisi çerçevesinde incelenmiştir. Topolojik kusurlar nedeniyle açılal momentum kanallarının dejenereliğinin kalkması yanı sıra, karşılık gelen enerji seviyelerinin boyutu homojen bir manyetik alanın devreye girmesiyle arttığı tespit edilmiştir. Dahası, grafende elektronların  $A_{1g}$  fonon çiftlenimi Rashba spin-yörünge etkileşmesi varlığında incelenmiştir. Elektron-fonon sistemini sürekli limit çerçevesinde tanımlamak için Fröhlich tipi Hamiltoniyen kullanılmıştır.  $A_{1g}$  simetrisine sahip en yüksek frekanslı bölge sınır fononu ile yük taşıyıcılarının etkileşmesinin kiral simetriyi kırmaksızın band aralığı yarattığı belirlenmiştir. Buna ek olarak, Rashba spin-yörünge çiftleniminin ve Haldane kütle teriminin birleştirilmiş etkilerinin elektron- $A_{1g}$  fonon etkileşimi üzerindeki etkileri araştırılmıştır. Haldane kütlelerinin devreye girmesi ile mevcut kiral simetrisinin kırıldığı ve vadi dejenereliğinin ortadan kalktığı tespit edilmiştir.

**Ağustos 2016, 111 sayfa**

**Anahtar Kelimeler:** Grafen, topolojik kusur, elektron-fonon etkileşmesi, Rashba spin yörünge etkileşmesi, Haldane kütleleri.

# ABSTRACT

Ph. D. Thesis

TOPOLOGICAL EFFECTS IN GRAPHENE BASED NANO STRUCTURES

Defne AKAY

Ankara University

Graduate School of Natural and Applied Science

Department of Physics

Supervisor: Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR

In this thesis, the effect of homogenous magnetic field on the energy spectrum of gapped graphene cones with long range charged Coulomb impurity is investigated within the framework of perturbation theory. It is found that, besides lifting the degeneracy of angular momentum channels due to topological defects, the size of the corresponding splitting is enhanced by introduction of a homogenous magnetic field. Also, interaction of electrons with  $A_{1g}$  phonon coupling is examined in the presence of Rashba spin-orbit coupling in graphene. We use Fröhlich type Hamiltonian to describe the electron-phonon system within the continuum limit. It is found that interaction of charge carriers with the highest frequency zone boundary phonon mode with  $A_{1g}$  symmetry induces a band gap without breaking chiral symmetry. Additionally, we investigate the simultaneous effects of Rashba spin-orbit coupling and Haldane mass term on electron- $A_{1g}$  phonon interaction. By the introduction of Haldane mass term, it is found that existing chiral symmetry is broken and valley degeneracy is lifted.

**August 2016, 111 pages**

**Key Words:** Graphene, topological defects, electron-phonon interactions, Rashba spin orbit coupling, Haldane mass.

## TEŐEKKÖR

“Grafen Tabanlı Nano Yapılarda Topolojik Etkiler” başlıklı doktora tezim süresince, çalışmalarımı birlikte yürüttüğüm yalnızca bilimsel olarak değil, beşeri anlamda da bana çok şey kazandıran danışman hocam, sayın Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR’e (Ankara Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı) en içten duygularıyla teşekkür ederim. Ayrıca doktora tezi çalışmalarımı 113F103 no’lu proje kapsamında destekleyen TÜBİTAK’a da teşekkürü bir borç bilirim.

Bu çalışmamı, çalışmalarım süresince özveri ve desteğini her daim hissettiğim eşim, Önder AKAY’a ve yaşam bağım oğlum Ege AKAY’a ithaf ediyorum.

Defne AKAY

Ankara, Ağustos 2016

## İÇİNDEKİLER

### TEZ ONAY SAYFASI

ETİK.....	i
ÖZET.....	ii
ABSTRACT.....	iii
TEŞEKKÜR.....	iv
SİMGELER DİZİNİ.....	vii
ŞEKİLLER DİZİNİ .....	ix
ÇİZELGE DİZİNİ.....	xi
1. GİRİŞ.....	1
2. GRAFEN.....	6
2.1 Grafenin Elektronik ve İletim Özellikleri.....	8
2.2 Grafenin Üretim Metodları.....	18
2.2.1 Mikro mekanik soyma yöntemi.....	18
2.2.2 Grafiti pul pul dökme yöntemi.....	19
2.2.3 Silikon Karbid (SiC) ın ısıl ayrışması.....	20
2.2.4 Grafenin epitaksiyel büyütme yöntemi.....	22
3. GRAFENDE YAPISAL KUSURLAR.....	23
3.1 Grafende Noktasal Kusurlar.....	24
3.1.1 Stone-Wales kusuru.....	24
3.1.2 Tek boşluk kusuru.....	25
3.1.3 Çoklu boşluk kusuru.....	26
3.1.4 Karbon adatom kusuru.....	28
3.1.5 Karbon olmayan adatom kusuru.....	29
3.1.6 Yerdeğiştirme(substitutional impurities) safsızlık kusuru.....	30

3.1.7 Topolojik kusur.....	31
4. TOPOLOJİK KUSURLU GRAFEN.....	34
4.1 Topolojik Kusurlu Grafen Nano Konilerin Elde Edilmesi.....	35
4.1.1 Grafen yüzeyin merkezlenmiş hegzagonal halkası çevresindeki pentagonal kusurlar aracılığıyla elde edilen grafen nano-koniler.....	36
4.1.2 Grafen yüzeyin merkezlenmiş hegzagonal halkası üzerinden yapılan dışarılamalar ile elde edilen grafen nano koniler.....	39
4.2 Topolojik Kusurlu Grafen Yapıların Eğri Uzayda Alan Teorisi ile Temsili.....	40
4.3 Topolojinin Grafende Kritik Yük Üzerine Etkisi.....	42
4.4 Topolojik Kusurlu Grafende Konilerde Pseudo-Zeeman Yarılmasının Manyetik Alan ile Kontrolü.....	52
5. GRAFENDE SPİN YÖRÜNGE ETKİLEŞMESİ.....	61
5.1 Grafende Rashba Spin Yörünge Etkileşmesi.....	63
5.2 Grafende Haldane Kütle Terimi.....	65
6. ELEKTRON-FONON ETKİLEŞMESİ.....	70
6.1 Elektron- $A_{1g}$ Fonon Etkileşmesinin Grafende Rashba Spin Yörünge Çiftlenimine Katkısı.....	72
6.2 Elektron- $A_{1g}$ Fonon Etkileşmesinin Grafende Rashba Spin Yörünge Etkileşmesi ve Haldane Kütle Varlığındaki Katkısı.....	85
7. TARTIŞMA VE SONUÇ.....	96
KAYNAKLAR.....	98
EK 1 Haldane Kütle Varlığında Matris Elemanları.....	106
ÖZGEÇMİŞ.....	109

## SİMGELER DİZİNİ

$\hbar$	Planck Sabiti
$k$	Elektron Dalga Vektörü
$q$	Fonon Dalga Vektörü
$e$	Elektronun Yüğü
$c$	Işık Hızı
$Z$	Atom Numarası
$v_F$	Fermi Hızı
$p$	Momentum Operatörü
$B$	Manyetik Alan
$A$	Vektör Potansiyeli
$l$	Manyetik Uzunluk
$\sigma_i$	Pauli Spin Matrisleri
$H$	Hamiltoniyen
$\Psi$	Dalga Fonksiyonu
$E$	Enerji
$u$	Yerdeğiştirme Vektörü
$N_{n,j}$	Normalizasyon Sabiti
$L$	Toplam Yüzey Alanı
$a$	Örgü Parametresi
$\mu$	Band İndeksi
$\nu$	Spin İndeksi

$H_{eff}$	Etkin Hamiltoniyen
$L_n$	Laguerre Polinomu
$\omega$	Fonon Frekansı
$\pi (\pi^*)$	Değerlik (İletim) Bandları
$\mathcal{P}$	Parite
$\mathcal{T}$	Zaman Terslenme Simetrisi
$\Delta$	Haldane Kütle Terimi
$N$	Hücre Sayısı
$K$	Yüksek Simetri Noktası
$\mathbf{q}$	Fonon Dalga Vektörü
$\theta_{\mu'\mu}$ $\nu'\nu$	Azimuthal Açısı
$S$	Sistemin Alanı
$\Delta_K(\Delta_{K'})$	Bozulma Genlikleri
$\rho(\epsilon)$	Durum Yoğunluğu

### **Kısaltmalar**

LLP	Lee-Low-Pines
TEM	Geçirimli Elektron Mikroskobu
SEM	Taramalı Elektron Mikroskobu

## ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1	Grafen Tabanlı formlar.....	7
Şekil 2.2	$k_x$ ve $k_y$ momentum fonksiyonu olarak grafenin band yapısı.....	8
Şekil 2.3	$\Gamma$ $M$ $K$ yüksek simetri noktaları boyuca enerji dağılımı.....	9
Şekil 2.4	a. Grafenin örgü yapısı, b. Grafenin birinci Brillouin bölgesi.....	10
Şekil 2.5	Grafen örgü.....	12
Şekil 2.6	Grafende kenarların zikzak ve koltuk tipi türleri.....	17
Şekil 2.7	Mikro mekanik soyma yöntemi kullanılarak elde edilmiş grafen.....	19
Şekil 2.8	Pul pul soyma yöntemi ile grafenin ele edilmesi.....	20
Şekil 2.9	Termal ayrışma metodunun şematik gösterimi.....	21
Şekil 2.10	Ru(0001) yüzeyi üzerinde grafenin epitaksiyel büyümesinin şematik gösterimi.....	22
Şekil 3.1	Kusurların karbon yapılar üzerindeki manyetik etkileri.....	24
Şekil 3.2	Stone-Wales kusuru.....	25
Şekil 3.3	Tek boşluk kusuru.....	26
Şekil 3.4	Çoklu boşluk kusuru.....	27
Şekil 3.5	Karbon adatomlar.....	29
Şekil 3.6	Karbon olmayan adatom kusuru.....	30
Şekil 3.7	Yerdeğiştirme safsızlık kusuru ile bir ve iki tane absorbe edilmiş geçiş metali atomunun atomik konfigürasyonu.....	31
Şekil 3.8	Topolojik kusur.....	32
Şekil 4.1	Grafen örgü üzerinde dışarlama ile oluşturulan grafen koniler.....	36
Şekil 4.2	Beş farklı koninin üstten ve yandan görünüşleri.....	37
Şekil 4.3	Kapalı koni modeli kullanılarak elde edilen grafen konilerin mikroyapısal görüntüleri.....	38
Şekil 4.4	$60^\circ$ lik dışarlama açısı ile düzlem grafenden bir tek nano koni oluşumu .....	39

Şekil 4.5	Hekzagonal grafen yüzeyinden bir silindir ve beş farklı koni yapısının nasıl hazırlandığının örnekleri.....	40
Şekil 4.6	Grafen koni.....	43
Şekil 4.7	Koordinat sisteminin dönmesinden dolayı yeni koordinat sistemi.....	44
Şekil 4.8	Grafen düzleminden $2\pi/6$ lık açılı sektörünün kaldırılmasıyla oluşan grafen koni.....	45
Şekil 4.9	Grafen koni.....	47
Şekil 4.10	Koninin tepesi civarında durum yoğunluğu.....	51
Şekil 4.11	Düzlem grafenin ve grafen koninin enerji seviyelerindeki yarılmalar.....	55
Şekil 4.12	Enerji yarılmaları.....	57
Şekil 4.13	Pseudo- Zeeman yarılmaları kütle fonksiyonu.....	58
Şekil 4.14	a. $B = 1T$ lık manyetik alan varlığında pseudo-Zeeman yarılmalarının çiftlenim sabitine bağımlılığı, b. Kontor ilişkisi.....	59
Şekil 6.1	Polaron görünümü.....	70
Şekil 6.2	Rashba SYE katkısı.....	82
Şekil 6.3	Rashba SYE enerji bağımlılığı.....	84
Şekil 6.4	Haldane etkileşme potansiyelinin katkısı.....	92

## ÇİZELGE DİZİNİ

Çizelge 4.1 $n$ kusur sayısının ve $j$ açısai momentumun farklı deęerleri için konik-grafenin kritik yük deęerleri.....	50
--	----

## 1. GİRİŞ

Periyodik tablodaki en ilginç elementlerden biri karbon atomudur. Karbon atomlarından oluşan malzemeler karbon atomlarının kendi aralarındaki bağlanma geometrisine göre çok farklı fiziksel ve kimyasal özelliklere sahip olmasının yanı sıra, sınırsız sayıda farklı yapılanmalar da gösterebilir. Ayrıca, karbon elementi periyodik tabloda mevcut elementler içerisinde sıfır boyuttan üç boyuta kadar izomerleri olabilen bir elementtir. Bu özelliklerde başka bir elementin olmaması karbonu farklı kılmaktadır. Grafen, karbon atomunun bal peteği örgülü yapılarından bir tanesine verilen isimdir. Grafen üzerine yapılan bilimsel ve teknolojik araştırmaların son yıllarda artmasıyla birlikte teorik ve deneysel yoğun madde fiziğinin gözbebeği haline gelen bu malzemeye bu denli ilgi duyulmasının en önemli nedeni, günümüzde devam eden yoğun bilimsel araştırmalarla birlikte, gelecekte önemli uygulama alanları bulabileceğine dair yaygın bir kanaat oluşmasıdır. 2010 Nobel ödülü de bu malzeme üzerine elde ettikleri ilginç deneysel sonuçlarla 2004 yılında grafen çıkırını başlatan Manchester üniversitesinden Andre Geim ve Konstantin Novoselov'a verilmiştir. Bilim dünyasında oldukça fazla heyecan uyandıran grafen aslında çok nadir bulunan bir malzeme değildir. Kurşun kalemlerin içerisindeki grafit, grafen tabakalarının üst üste gelmiş halidir. Öyle ki bir kurşun kalem ile kağıt üzerine çizgi çekildiğinde, üst üste bir çok grafen yaprağı elde edilmiş olur. Andre Geim ve Konstantin Novoselov iki boyutlu grafen kristallerini sıradan bir selobantı grafit üzerine tekrar tekrar yapıştırıp kaldırarak tekil grafen katmanını ayırmayı başarmışlardır. Şaşırtıcı şekildeki basit bir yöntemle izole ettikleri grafen katmanı basit bir optik mikroskop ile gözlemlenmiştir. Grafenin sentezlenmesinde bu şekildeki mekanik soyma yöntemi kullanılacağı gibi süreç sonunda elde edilen numunenin daha düzgün bir yapıya sahip olmasına yönelik geliştirilen kimyasal ayrıştırma yöntemi 1975 yılına kadar dayanmaktadır (Bommel vd. 1975). Epitaksiyel büyütme (Yang 2013), silisyum-karbon yöntemi (Novoselov vd. 2004) ve ısıtma yöntemleri (Hass vd. 2008) de en çok kullanılan yöntemlerden birkaçıdır.

Grafen fiziği oldukça ilginçtir ve fiziksel kavramlara yeni açılımlar getirmektedir. Bunlardan biri de yoğun madde fiziğinde yarı iletkenlerin  $k^2$  bağımlı kuadratik bir band davranışı göstermesi ve elektronların göreceli olmayan doğasından dolayı Schrödinger

denklemleri ile formülize edilmesidir. Bu tür sistemlerde bir elektron  $m^* = \hbar^2 \left( \frac{d^2E}{dk^2} \right)^{-1}$  şeklindeki sonlu etkin kütleli parçacık ile modellenir. Bu kütle etkileşmeyen elektron kütlelerinden ve elektron-elektron, elektron-fonon gibi çok parçacıklı etkileşimler göz önüne alındığında kullanılan normalizasyon kütlelerinden farklıdır. Bunun yanısıra, elektronların hızı  $v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k}$  bağlı elektronların enerjisinin fonksiyonu olarak değişir. Ancak, grafende elektronların taşınımı Schrödinger denklemi ile betimlenmez. Grafende elektronlar bir tek karbon atomu kalınlığındaki karbon tabakası içerisinde kütlelessiz gibi davranırlar ve sanki kütleleri yokmuşcasına etkin olarak, ışık hızının 300 de biri olan  $v_F$  sabit Fermi hızında hareket ederler. Dijital teknolojinin süper malzemesi olan silikon, grafen ile mukayese edildiğinde elektronların silikon içerisindeki hızlarının grafen içerisindeki hızlarına göre 100 kat daha yavaş olduğu görülür. Dahası, bal peteği örgü yapısına sahip olan grafende enerji momentum ilişkisi  $E = \pm v_F p$  şeklindedir ve grafendeki konik davranış lineer bir dalga denklemini gerektirir. Bu ilişki nötrino gibi kütlelessiz görelî parçacıklarla aynıdır. Yüksek enerji fiziğinde nötrinolara kütlelessiz Dirac fermiyonları aracılığı ile çoktandır aşınayız. Böylece, grafen bize yüksek parçacık hızlandırıcıları olmadan malzemedeki temel etkileşimleri kuantum alan teorisi ile tanımlama imkanı verir (Neto 2006). Fakat nötrinolar elektrik yükü birimi taşımazlar ve dolayısıyla herhangi bir madde ile güçlü etkileşimde bulunmazlar. Ancak, grafende Dirac fermiyonları elektrik yükü birimi taşıdığından elektromanyetik alandan etkilenirler.

Evrendeki bütün fiziksel olaylar dört tür etkileşim ile açıklanabilmektedir. Bunlar kütle çekim, elektromanyetik, güçlü ve zayıf çekirdek etkileşimleridir. Bu etkileşimlerin şiddeti ve erimleri çok farklıdır. En zayıfı kütle çekim (gravitasyon) etkileşimidir. Bundan yaklaşık  $10^{30}$  mertebesinde daha şiddetli olan etkileşim ise elektromanyetik etkileşimdir. Bunların ikisinin de erimleri sonsuzdur. Diğer iki etkileşim ise kısa erimlidir. Öyle ki ancak atom çekirdeği içinde etkilidirler. Doğada var olan her etkileşim için o etkileşimin şiddetini veren bir de bağlaşım sabiti vardır. Bağlaşım sabitleri doğanın anlaşılmasında önemli rol oynadığından doğru olarak belirlenmeleri büyük önem taşımaktadır. Bu bağlaşım sabitlerinden biri de elektromanyetik etkileşimlerin gücünün bir ölçüsünü gösteren ince yapı sabitidir. İnce yapı sabiti

grafende ilginç olan fiziksel kavramlardan biridir. Geçtiğimiz yıllarda bazı kozmolojik ölçümler yapan bilim insanları bu sabitin zaman içinde değiştiğini öne sürmüşlerdir (Webb 1999). Ancak daha sonraki çalışmalarda değişimin henüz tespit edilemeyecek düzeyde olduğundan ve şimdilik böyle bir değişimden söz edilemeyeceğinden bahsedilmiştir (Srianand 2004). Bu değişimin henüz tespit edilemeyecek boyutta olmasına rağmen, evrensel bir sabit olan ince yapı sabitinin evrenselliği kuantum elektrodinamiksel özellik gösteren grafen malzemesiyle birlikte tekrardan tartışılır duruma gelmiştir. Bu tez çalışmasında temelini oluşturan, topolojik kusurlu grafen yapılar yani grafen koniler yerel yapısı düz olan grafenin bal peteği örgü yapısından meydana gelmişlerdir. Yerel yapısı düz olmasına rağmen yapı bozulduğunda uzay-zamanın evrensel yapısı konikleşir. Bu değişim evrensel yapı içinde parçacıkların yörüngesinin evrensel özelliğini etkiler. Uzay-zamanın koniksel yapısı parçacıkların yörüngesinin eğilmesine sebep olurken, koniksel metrik ile grafenin geometrisini tanımlama imkanı verir.

1879'da Amerikalı fizikçi Edwin H. Hall akım taşıyan bir iletken manyetik alan içine yerleştirildiğinde taşıyıcı akış doğrultusuna dik yönde bir **B** manyetik alanı uygulanacak olursa, malzemede hem taşıyıcı akış doğrultusuna hem de manyetik alan doğrultusuna dik doğrultuda bir potansiyel farkı oluşturduğunu keşfetmiş ve bunu kuantum Hall olayı olarak tanımlamıştır. Hall olayı, yüzyılı aşkın bir süre önce keşfedilmiş olmasına rağmen yarı iletken malzemelerin yük yoğunluğunu, elektriksel öz direncini ve taşıyıcıların mobilitesini belirlemede en önemli tekniklerden biri olmaya devam etmektedir. Öyle ki, grafende oda sıcaklığında bile kuantum Hall etkisini gözlemek mümkündür. Bu etki standart Hall etkisine göre platoları  $1/2$  faktörlük kaymaya uğratar (Novoselov 2007).

Bu tez çalışmasında, topolojik safsızlıklar kullanılarak, grafenden oluşturulmuş grafitik konilerin elektronik spektrumları elde edilmiş ve grafende Zeeman yarılmasının safsızlık (kritik) yükü ve manyetik alan ile nasıl değiştiği görülmüştür. Elde edilen sonuçlar ve analizler dikkate alınarak oluşturulan makale (Kandemir ve Akay 2015) SCI kapsamındaki yüksek etki faktörlü dergide basılmıştır. Aynı şekilde topolojik kusurlu grafen koni hem grafen düzlemine dik hem de grafen düzlemi boyunca

bileşenleri olan bir manyetik alana koyulduğunda elektronik spektrumu üzerine etkileri araştırılmış ve deneysel verilere ışık tutmak konusunda elde edilen gelişmeler sunulmuştur (Akay 2015).

Ayrıca bu tez çalışmasının içeriğinde olan grafende elektron- $A_{1g}$  fonon etkileşmesinin Rashba tipi spin-yörünge etkileşmesine katkısı araştırılmıştır. Elektron-fonon etkileşmesi, grafen malzemesinde fonon değiş-tokuşunun çok hızlı ve güçlü olmasından dolayı büyük önem taşırken, Rashba spin-orbit etkileşmesi, elektronların elektrik alanı manyetik alan olarak algıladığı göreceli (rölativistik) bir olgudur. Rashba spin-yörünge etkileşmesi pseudospin ve gerçek spin karışımına sebep olduğundan hem Kekule tipi distorsiyonun indüklediği bir aralık hem de kuantum Hall durumlarının deneysel aktivasyon enerjisi ile uyumlu manyetik alan etkileri gözlenmiştir. Elde edilen sonuçlar yayına dönüştürülüp (Kandemir ve Akay 2016) SCI kapsamındaki dergiye gönderilmiştir.

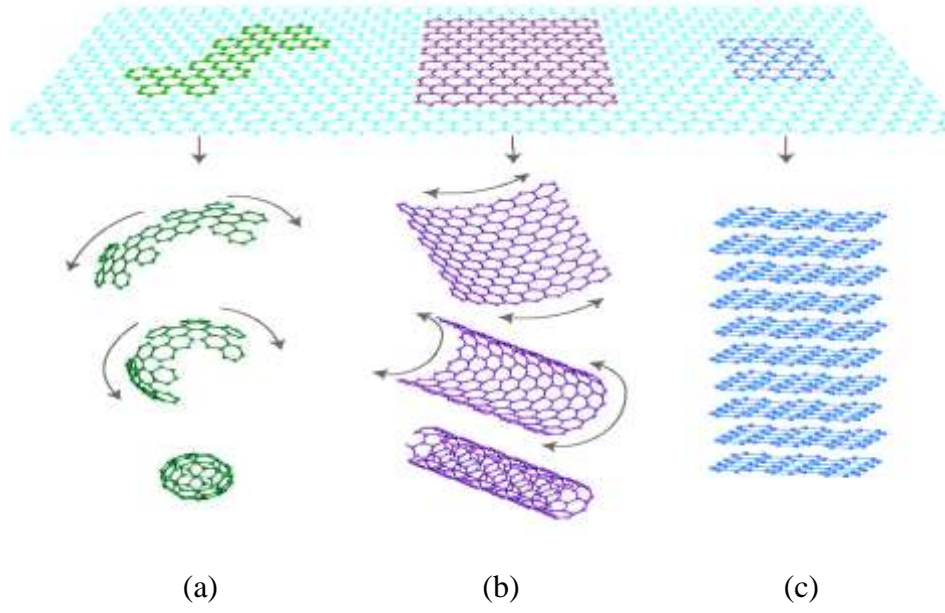
Bu tez çalışmasının 5. bölümünde grafende elektron- $A_{1g}$  fonon etkileşmesinin Haldane tipi kütle potansiyeli üzerine etkilerine odaklanıldı. Genellikle Haldane kütle modeli Brillouin bölgesinin izole olmuş noktalarında değerlik ve iletim bandlarının dejenere olduğu iki boyutlu yarı iletken malzemelerde göz önüne alınmakla birlikte, iki boyutlu elektron gazında kuantum Hall etkileri Landau seviyelerine sebep olan uygulanmış bir dış manyetik alanın varlığı ile ilişkilidir. Buna rağmen 1988 yılında Haldane sistemde dış bir manyetik alan olmadığında ancak zaman terslenme simetrisinin kırılması ile birlikte quantum Hall etkilerini gözlemleyebileceğimizi göstermiştir. Bu bağlamdaki sonuçlar yayın dahilinde (Kandemir ve Akay 2016) SCI kapsamındaki dergiye gönderilmiştir.

Grafenin keşfiyle birlikte, fiziksel özelliklerini anlamak için birçok deneysel ve teorik çalışma gerçekleştirilmiştir. Bu doktora tezi çalışması kapsamında da Dirac elektronlarının Fermi hızı, band dispersiyonunun yapısı, grafenin morfolojik yapısı ve geometrisi, elektron-fonon etkileşmesi, manyetik alan altındaki davranışı, topolojik kusurların etkisi, Rashba tipi spin-yörünge etkileşmesi ve Haldane kütle potansiyeli incelendi. Ayrıca, grafen malzemesinin bu niceliklere nasıl bağlı oldukları belirlenip,

etkilerinin teorik olarak modellenmesi yapılmıştır. Bununla birlikte deneysel ve teorik araştırma olarak yayınlanıp tartışılan topolojik kusurlu grafende Dirac elektronlarının manyetik alan aracılığıyla nasıl kontrol edilebileceğine ve grafende elektron-fonon etkileşmesine Rashba tipi spin-yörünge etkileşmesinin nasıl katkı vereceğine dair bulgulara ışık tutabilecek teorik bir model sunulmuştur. Rashba spin-yörünge mekanizmasının grafen tabanlı spintronik cihazların tasarımında önemli rol oynayacağı düşünülmektedir. Ayrıca, laserler ve LED (Light Emitting Diode) diğer tabiri ile ışık yayan diyot'lar geleceğin bilgi teknolojisinde kullanılması ön görülen en önemli ışık kaynaklarıdır. Foto-ışınımın uygulaması olan bu önemli ışık kaynakları, grafen malzemesi üzerinde kendisini Haldane kütlesi olarak göstereceğinden dolayı çalışmaların sonuçlarının grafen fiziğine ve uygulama alanlarına bir taban oluşturarak yenilikler getireceğine inanılmaktadır.

## 2. GRAFEN

Grafen, karbonun bal peteđi Őeklindeki altıgen örgölü iki boyutlu kristal yapısıdır. Karbon atomları kendi aralarında üç farklı bağlanma gösterir, buna göre valans orbitalleri  $sp^1, sp^2, sp^3$  gibi farklı formlarda bulunabilirler. Bu formlar karbon atomlarının farklı yerelleŐmelerinden kaynaklanır ve malzemenin boyutu ile ilişkilendirilir. Karbon atomları kovalent bağ aracılığı ile bağlanır ve bu bağlanma doğadaki en güçlü kimyasal bağ olarak nitelenir. Bu gösterimler aynı zamanda bağlanma geometrisini de temsil eder.  $sp$  ile tanımlanan bağlanmada, karbon atomları birbiri ile doğrusal bir geometri oluşturur ve iki bağ yapar.  $sp^2$  ile tanımlanan bağlanmada karbon atomları birbiri ile üçgen bir geometri oluşturur ve aynen grafende olduđu gibi her atomda üç bağ bulunur.  $sp^3$  ile tanımlanan bağlanmada ise karbon atomları birbirleri ile piramit bir geometri oluşturur ve her atomda elmas kristalinde olduđu gibi dört bağ bulunur. Burada her farklı geometrik Őekil farklı bir malzeme anlamına gelir. Karbon elementi her üç bağlanma geometrisini gösterebilen tek element olması bakımından istisnai bir özelliđe sahiptir. Öte yandan karbon tabanlı malzemelerin  $sp^1, sp^2, sp^3$  Őeklinde bağ yapmalarının malzemenin boyutu ile ilişkilendirileceđinden bahsedilmiŐti. Karbon elementi periyodik tabloda mevcut elementler ięerisinde 0 (sıfır) boyuttan 3 (üç) boyuta kadar izomerleri olan olabilen tek elementtir. İzomer, aynı kimyasal bileŐime sahip olup, aynı atom sayısında atomları arasında bağlantı yapıları farklı olan moleküllerdir. Ayrıca, atomları arasındaki bağlantı yapılarının farklı olması boyut kavramının doğmasına sebep olmaktadır.



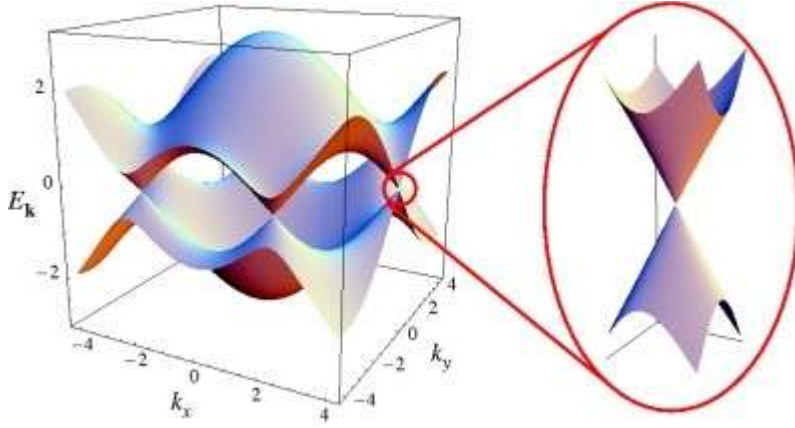
Şekil 2.1 Grafen Tabanlı formlar (Geim vd. 2007).

a. fullerenler 0 (sıfır) boyutumsudurlar, b. karbon nanotüpler 1 (bir) boyutumsudurlar, c. grafit ise 3 (üç) boyutumsu bir yapıdır

Karbon atomlarının bal peteği şeklindeki iki boyutlu kristal yapısı olan grafen, karbon atomlarının en ilginç allotroplarından biridir. Grafende,  $2s, 2p_x, 2p_y$  orbitallerinin birleşmesiyle  $sp^2$  (katıda sigma bağı) hibritleşmesi oluşur. Bu orbitaller bir çizgi boyunca 120 derecelik açı ile yönlendirilir ve bu grafenin altıgen örgü yapısında olmasının sebebinin teşkil eder. Grafit ise, düzlemde karbon atomlarının üst üste gelmesiyle oluşan,  $sp^2$  şeklinde bağlanan, 3 (üç) boyutlu yapısal formudur. Bu yüzden grafeni tanımlarken tek boyutlu grafit yapı dersek yanılmış olmayız. Ayrıca, karbon nanotüpler karbon atomlarının rulolanmış şeklindeki 1 (bir) boyutlu yapılarıdır. Fullerenler ise, karbon atomlarının küresel olarak düzenlenmesinden meydana gelen, sarmalanmış 0 (sıfır) boyutumsu grafen olarak düşünülebilir. Yapısal formlarının bu kadar çeşitli olmasının nedeni karbon atomu orbitlerinin hibritleşmesinden ötürü birkaç çeşit değerlik bandı oluşturabilmesidir (Saito vd. 1998).

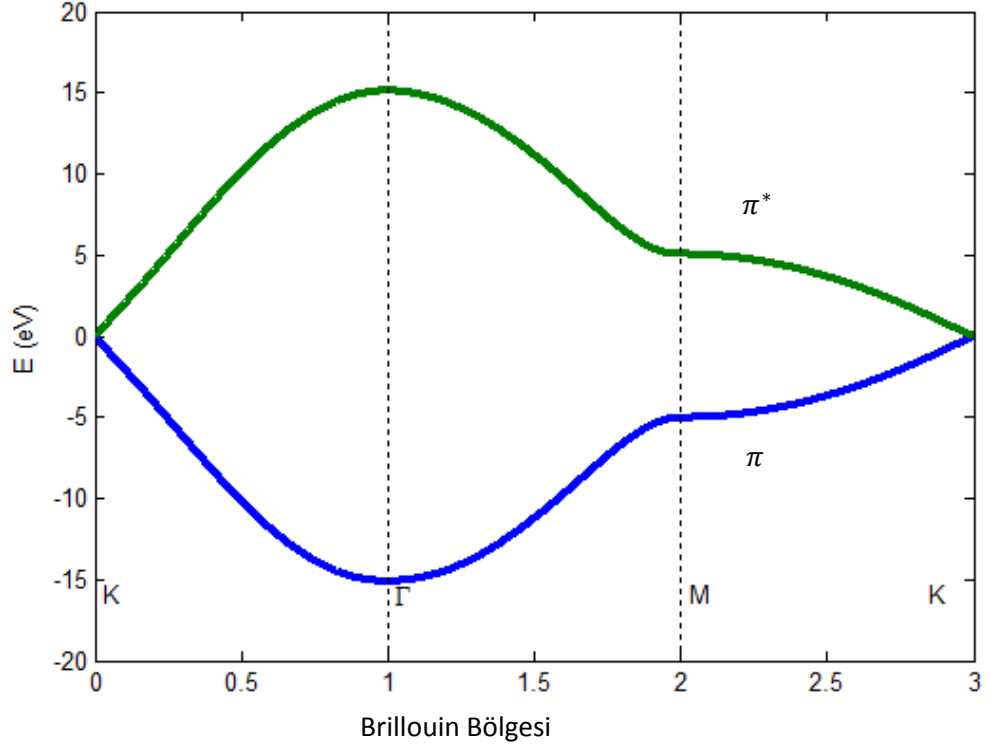
## 2.1 Grafenin Elektronik ve İletim Özellikleri

Elektronik yapı elde edilirken  $\pi$  bandları göz önüne alınır. Bunun nedeni elmas dışındaki karbon materyallerde  $\pi$  elektronlarının değerlik (valans) elektronları olması ve  $\sigma$ -bağlarının görece olarak zayıf olmasıdır. Karbon atomları  $sp^2$  hibritleşmesi yaparak  $x - y$  düzleminde  $\sigma$  bağlarını ve bunlara dik  $z$ -yönünde  $\pi$  bağı oluştururlar. Elmas dışında karbon materyallerde  $\pi$  elektronları valence elektronlardır ve katı özelliklerini bu elektronlar belirler.



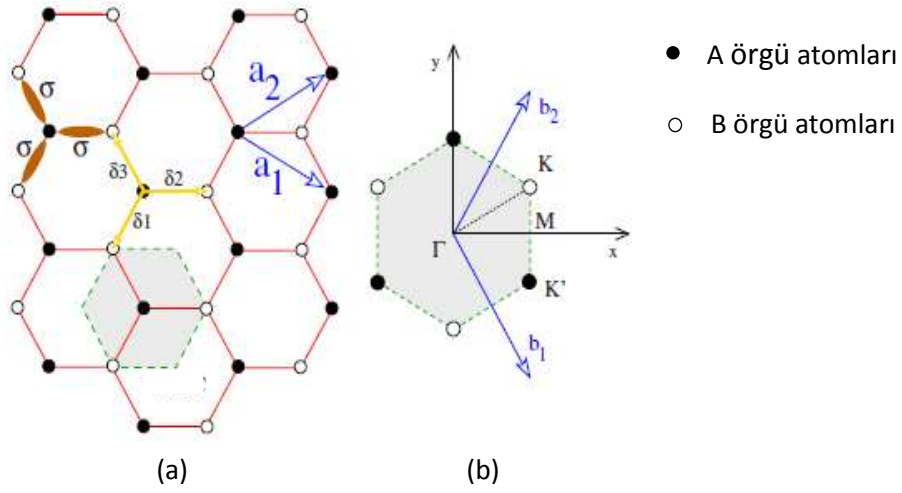
Şekil 2.2  $k_x$  ve  $k_y$  momentum fonksiyonu olarak grafenin band yapısı (grafenin enerji dağılım ilişkisi) (Neto 2009)

Alt enerji bandı valans (değerlik) bandı, üst enerji bandı ise iletim bandıdır. Yapılan büyütme ile bandın ucunda neredeyse birbirine dokunan lineer bir dağılım bağıntısı gözlenir.



Şekil 2.3  $\Gamma$  M K yüksek simetri noktaları boyuca enerji dağılımı (Gray 2009)

Sıkı bağ hesabı ile grafit ya da grafit ile ilişkili materyaller için elektronik band enerjisi elde edilir. Grafende iletim bandı değerlik bandına K ve K' noktalarında temas eder ve enerji ifadesi tam değme noktalarında konik bir band yapısı oluşturur.



Şekil 2.4.a. Grafenin örgü yapısı, b. Grafenin birinci Brillouin bölgesi (Pereira 2008)

$\mathbf{a}_1$  ve  $\mathbf{a}_2$  iki boyutlu grafenin reel uzayda birim örgü vektörleridir.  $\delta_1$ ,  $\delta_2$  ve  $\delta_3$  birim öteleme vektörleri ve  $\sigma$ 'lar ise grafenin en yakın komşulukları ile yaptıkları bağı olup,  $\mathbf{b}_1$  ve  $\mathbf{b}_2$  ise momentum uzayında ters örgü vektörleri,  $\Gamma$ ,  $M$ ,  $K$ ,  $K'$  birinci Brillouin bölgesinin en yüksek simetri noktalarıdır.  $\mathbf{a}_1$  ve  $\mathbf{a}_2$  vektörleri reel uzayda birim örgü vektörleri olup,

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 1)$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, -1) \tag{2.1}$$

ile tanımlanırlar. Burada  $a = |\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = 0.246nm$  değerindeki örgü sabitidir (Neto 2008).

Böylelikle, birim öteleme vektörleri,  $i = 1, 2$ , ve 3 değerlerini almak üzere,

$$\delta_1 = \left(\frac{a}{\sqrt{3}}, 0\right)$$

$$\delta_2 = \left(\frac{-a}{2\sqrt{3}}, \frac{a}{2}\right)$$

$$\delta_3 = \left(\frac{-a}{2\sqrt{3}}, \frac{-a}{2}\right) \quad (2.2)$$

ile ifade edilebilirler.  $\mathbf{a}$  birim örgü vektörleri ile  $\mathbf{b}$  ters örgü vektörleri arasındaki bağıntısı ise,

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (2.3)$$

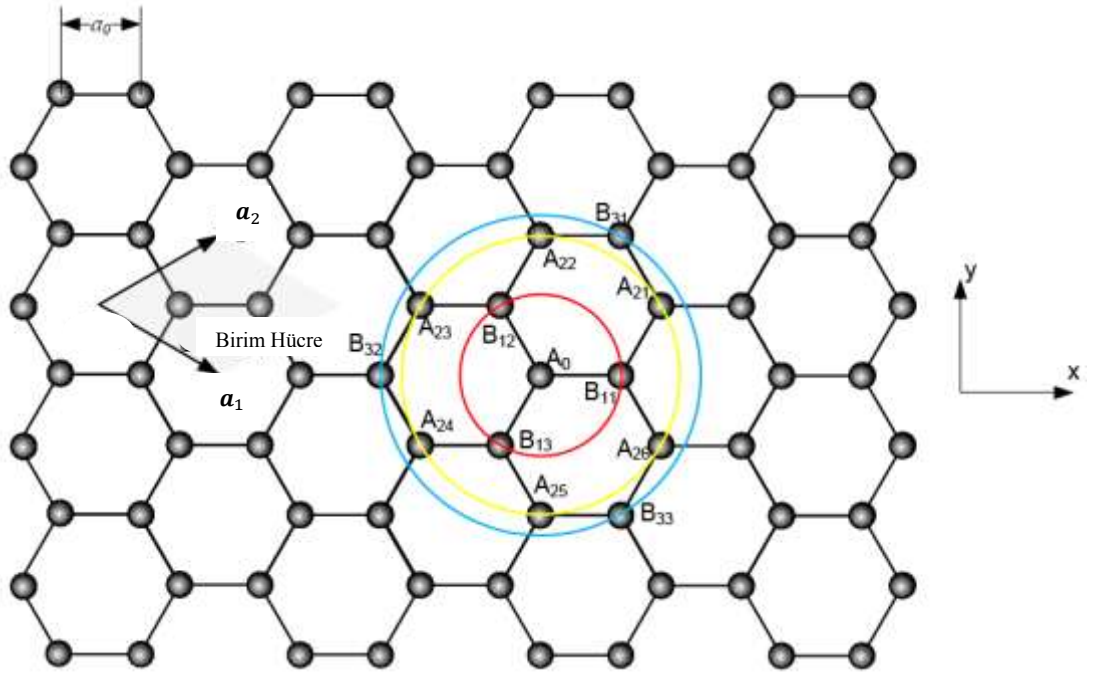
şeklindedir.

Bu koşuldan ters örgü vektörleri,

$$\mathbf{b}_1 = \left(\frac{2\pi}{a}\right) \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, -1\right) \quad (2.4)$$

$$\mathbf{b}_2 = \left(\frac{2\pi}{a}\right) \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, 1\right)$$

olarak bulunur.



Şekil 2.5 Grafen örgü (Wu 2012)

Karbon atomları geçiş ve kimyasal bağlar ile temsil edilen  $P_z$  orbitallerinden türetilen çizgilerde yerleşir ve  $a_{1,2}$  ilkel örgü vektörlerini temsil etmek üzere birim hücreinde  $A$  ve  $B$  ile temsil edilen iki karbon atomu bulunmakla birlikte ortak merkezli çemberlerin artan yarı çapları sırasıyla  $A_0$  karbon atomunun en yakın birinci, ikinci ve üçüncü yakın komşuluklarını gösterir

Grafende  $\pi$  elektronları olarak tanımlanan değerlik elektronları katı malzemenin iletim özellikleri ve elektronik durum özellikleri ile ilgilidir.  $\pi$  elektronları için sıkı-bağ hesaplamaları basit fakat grafen ve grafen bağlantılı malzemeler için  $\pi$  bantları ve enerji seviyelerinin elektronik yapısını anlamak için önemli ölçüde öngörü sağlamakla birlikte deney sonuçları ile iyi bir uyum içerisindedir (Wallace 1947, Saito vd. 1998, Mccann 2012, Raza 2012).

Burada  $k$  dalga vektörü olmak üzere  $e^{ikR_\alpha}$  şeklinde faz faktörlü atomik orbitallerin  $\varphi_j(r - R_\alpha)$  dalga fonksiyonu üzerinden Bloch fonksiyonlarının toplamı ile Bloch teoremi (Bloch 1929) kullanılarak temel dalga fonksiyonları kümesi elde edilir.

Şekil 2.5’de görülen grafen örgü üzerinde  $A$  ve  $B$  iki eşit olmayan karbon atomları için atomik orbitallerden iki tane Bloch fonksiyonu oluşturulur.  $A$  ve  $B$  atomlarının Bloch orbitalleri,

$$\phi_j(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}_\alpha} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_\alpha} \varphi_j(\mathbf{r} - \mathbf{R}_\alpha) \quad (2.5)$$

şeklinde verilir. Burada  $N$  birim hücrenin sayısı;  $\alpha$ ,  $A$  ve  $B$  atomlarını temsil etmek üzere,  $\mathbf{R}_\alpha$  örgüdeki  $A$  ve  $B$  atomlarının koordinatını ve  $\varphi_j$ ,  $j$  durumundaki atomik dalga fonksiyonunu belirtir. Bir elektronik dalga fonksiyonu  $N$  farklı Bloch fonksiyonlarının lineer kombinasyonu alınarak oluşturulabilir.

$$\psi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N c_i \phi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (2.6)$$

$j$ . bandın enerjisi aşağıdaki gibi yazılabilir

$$E_j(\mathbf{k}) = \frac{\langle \psi_j | H | \psi_j \rangle}{\langle \psi_j | \psi_j \rangle} = \frac{\int \psi_j^* H \psi_j \, dr}{\int \psi_j^* \psi_j \, dr} \quad (2.7)$$

Denklem 2.6 ifadesi 2.7 ile verilen enerji ifadesinde yerine yazıldığında,

$$E_j(\mathbf{k}) = \frac{\sum_{i=1}^N c_i c_j^* \langle \phi_j | H | \phi_j \rangle}{\sum_{i=1}^N c_j^* c_j \langle \phi_j | \phi_j \rangle} = \frac{\sum_{i=1}^N c_j c_j^* H_{jj'}}{\sum_{i=1}^N c_j c_j^* S_{jj'}} \quad (2.8)$$

şeklindeki grafen malzemeyi tanımlayan enerji ilişkisi elde edilir.

$H$  malzemenin Hamiltoniyenini temsil etmek üzere  $H_{jj'}(\mathbf{k}) = \langle \phi_j | H | \phi_{j'} \rangle$  transfer integrali olarak tanımlanır. Enerji ilişkisinde payda da  $S_{jj'}$  ifadesi overlap integralidir. Buradan, 2x2 şeklindeki matris Hamiltoniyeni elde edilir. Denklem (2.5) transfer integrali tanımında yerine konulursa  $H_{\alpha\beta'}$  ( $\alpha, \beta = A, B$ ) konuma bağlı Hamiltoniyen elde edilir.

$$\begin{aligned}
H_{AA}(r) &= \frac{1}{N} \sum_{R, R'} e^{ik(R-R')} \langle \varphi_A(r-R') | H | \varphi_A(r-R) \rangle \\
&= \frac{1}{N} \sum_{R=R'} \epsilon_{2p} + \frac{1}{N} \sum_{R=R' \pm a} e^{\pm ika} \langle \varphi_A(r-R') | H | \varphi_A(r-R) \rangle + R = R' \pm 2a
\end{aligned} \tag{2.9}$$

(2.9) denkleminde maksimum katkı  $R = R'$  den katkı gelir ve  $2p$  orbitalinin enerjisini  $\epsilon_{2p}$  olarak verir.  $R = R' \pm a$  ve  $R = R' \pm 2a$  katkıları ihmal edilebilir. Benzer şekilde  $H_{BB}$  nin enerji katkısında  $\epsilon_{2p}$  olarak elde edilir. Çapraz terimlerden gelen katkıyı hesaplamak için  $H_{AB}$  ve  $H_{BA}$  dan gelen katkılara bakılır.  $H_{AB}$  ve  $H_{BA}$  terimlerine en fazla katkı  $A$  ve  $B$  karbon atomlarına birinci yakın komşuluklarından gelir. Bu yüzden sadece  $R = R' \pm a/2$  toplam durumları alınıp diğerleri göz ardı edilir.

$$H_{AB}(r) = \frac{1}{N} \sum_R \left\{ e^{\frac{ika}{2}} \langle \varphi_A(r-R) | H | \varphi_B\left(r-R-\frac{a}{2}\right) \rangle + e^{-\frac{ika}{2}} \langle \varphi_A(r-R) | H | \varphi_B\left(r-R+\frac{a}{2}\right) \rangle \right\} = 2t \cos(ka/2) \tag{2.10}$$

Burada ,  $t = \langle \varphi_A(r-R) | H | \varphi_B\left(r-R \pm \frac{a}{2}\right) \rangle$  tanımlanan transfer integralidir. Örneğin,  $H_{AB}$  çapraz terimini göz önüne alındığında  $A$  karbon atomu ile ilişkili  $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2$  ve  $\mathbf{R}_3$  vektörleri ile tanımlanabilecek üç tane karbon atomu vardır. O halde denklem (2.9),

$$H_{AB} = t(e^{ik \cdot \mathbf{R}_1} + e^{ik \cdot \mathbf{R}_2} + e^{ik \cdot \mathbf{R}_3}) = t f(\mathbf{k}) \tag{2.11}$$

şeklinde ifade edilebilir.  $f(\mathbf{k})$  grafenin birim hücrenin  $x - y$  koordinat sistemi kullanılarak elde edilir ve aşağıdaki gibi verilir.

$$f(\mathbf{k}) = e^{ik_x a / \sqrt{3}} + 2e^{-\frac{ik_x a}{\sqrt{3}}} \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) \tag{2.12}$$

$f(\mathbf{k})$  kompleks bir fonksiyon olduğundan  $H_{AB} = H_{BA}^*$  burada (\*) kompleks eşleniği tanımlar. Denklem (2.12) kullanılarak, üst-üste binme (overlap) integral matrisi bileşenleri  $S_{AA} = S_{BB} = 1$ , ve  $S_{AB} = sf(k) = S_{BA}^*$  olarak tanımlanır. Burada  $s$ ,  $A$  ve  $B$  en yakın komşuluklu karbon atomlarının üst-üste binme integrali olmak üzere,  $s = \left\langle \varphi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \left| \varphi_B \left( \mathbf{r} - \mathbf{R} \pm \frac{a}{2} \right) \right. \right\rangle$  olarak tanımlanır. Böylece üst-üste binme matrisi ve Hamiltoniyen sırası ile aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$S = \begin{bmatrix} 1 & sf(\mathbf{k}) \\ sf(\mathbf{k})^* & 1 \end{bmatrix} \quad (2.13)$$

$$H = \begin{bmatrix} \epsilon_{2p} & tf(\mathbf{k}) \\ tf(\mathbf{k})^* & \epsilon_{2p} \end{bmatrix}.$$

(2.13) denklemlerini ve  $\det(H - ES) = 0$  şeklinde özdeğer denklemi kullanıldığında,

$$\det \left( \begin{pmatrix} \epsilon_{2p} & tf(\mathbf{k}) \\ tf(\mathbf{k})^* & \epsilon_{2p} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} E & sf(\mathbf{k}) \\ sf(\mathbf{k})^* & E \end{pmatrix} \right) = 0 \quad (2.14)$$

enerji özdeğeri  $E(\mathbf{k})$  y1  $w(\mathbf{k}) = \sqrt{|f(\mathbf{k})|^2}$  nın fonksiyonu olarak

$$E_{g2D}(\mathbf{k}) = \frac{\epsilon_{2p} \pm tw(\mathbf{k})}{1 \pm sw(\mathbf{k})} \quad (2.15)$$

şeklinde elde edilir. Daha detaylı bir çıkarım için (McCann 2014) çalışmasına bakılabilir. Ayrıca,  $t$  ifadesi ise yoğunluk fonksiyonu teorisi gibi diğer teorilerden hesaplanabilir. (2.15) ile gösterilen denklem ile  $E_+$  ve  $E_-$  enerji bandları arasında bir asimetri olduğunu göstermektedir. Ayrıca, bu bandlar arasındaki asimetrinin  $s$  overlap parametresinden kaynakladığı da görülebilir. Böylelikle, birinci yakın komşulukta sıkıbağ yaklaşımında enerji öz değerleri kapalı formda

$$\varepsilon(k_x, k_y) = \pm \gamma_0 \left[ 1 + 4 \cos \frac{\sqrt{3}k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + 4 \cos^2 \frac{k_y a}{2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.16)$$

olarak elde edilir.  $\gamma_0$  en yakın komşuluklar arasındaki transfer integralidir. Ancak bu formülün çıkarımında örgü siteleri üzerindeki elektron orbitalleri arasındaki overlap integralleri ihmal edilmiştir. Öte yandan grafenin band yapısının tam tanımı için  $\sigma$  bağları da dahil edilmelidir. Çünkü, birinci Brillouin bölgesinin merkezi yakınında en düşük enerji bandıdır. Buna rağmen grafenin iletim özellikleri K noktaları yakınındaki düşük enerjili band yapısı ile belirlenir. İki boyutlu grafenin enerji dağılım ilişkisi  $\mathbf{k}$  dalga vektörünün fonksiyonu olarak bu formüle göre çizilmiştir. Denklem (2.16) denkleminde, (+) artı işaretli pay ve payda ile alındığında üst eğrilik  $\pi^*$  veya anti-bonding band olarak adlandırılırken, alt eğrilik  $\pi$  bonding band olarak tanımlanır. Alt  $\pi$  bandı tamamen dolu iken, üst  $\pi^*$  bandı tamamen boştur.

$$\mathbf{K} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\left(\frac{1}{3}, \frac{1}{\sqrt{3}}\right) \quad \text{ve} \quad \mathbf{K}' = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\left(-\frac{1}{3}, \frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

ters örgü vektörleriyle tanımlanan K noktalarında bu iki band dejeneredir ve Fermi enerjisi bu K noktalarında ( $\varepsilon = 0$ ) sıfırdır. Düşük enerji özelliği Fermi enerjisi yakınındaki elektronik durumlara karşılık gelir ve K noktaları civarındaki enerji dağılım açılımıyla tanımlanır. Grafenin  $\mathbf{q} = \mathbf{K} + \mathbf{k}$  dalga vektörünü yazarak  $|\mathbf{k}|a \ll 1$  olduğundan, K noktaları civarındaki enerji dağılım bağıntısının  $\varepsilon_{\pm}(\mathbf{q})$  Taylor açılımı alındığında,

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \frac{\sqrt{3}}{2} \gamma_0 a \mathbf{k} = \pm v_F \hbar \mathbf{k} \quad (2.17)$$

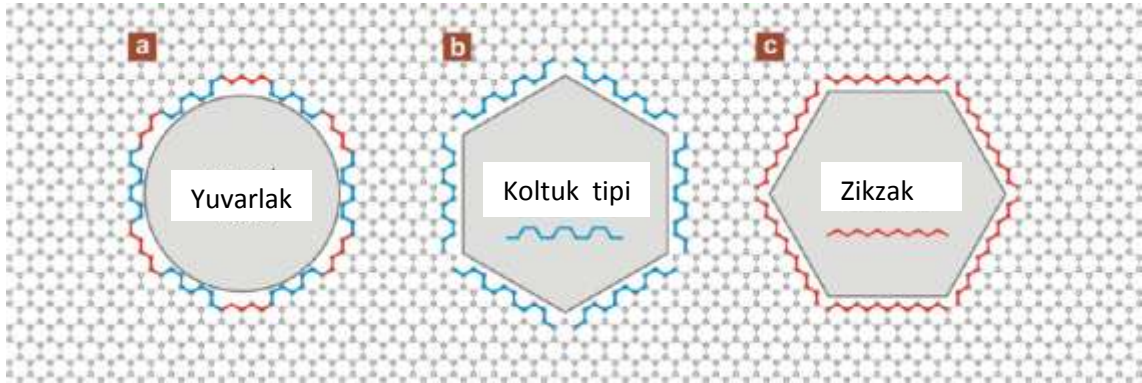
enerji dispersiyon açılımı elde edilir. Burada,  $v_F = \sqrt{3} \gamma_0 a / 2 \hbar \approx 10^6 \text{ m/s}$  Fermi hızıdır. Denklem 2.17 ile dağılım bağıntısı sıfır etkin kütleli ve ışık hızından  $\approx 300$  kez daha küçük Fermi hızı ile yer değiştirilmiş olan Einstein'nın görelilik teorisinde formalize edilmiş,  $E = \pm \sqrt{(m^2 c^4 + c^2 p^2)}$  şeklindeki dağılım bağıntısına benzerdir. Bu da grafende elektronların, kuantum teorisinin iki boyutlu versiyonu olduğunu gösterir. Bu yüzden grafende düşük enerjili sanki-parçacıklar Dirac Fermiyonları, değerlik ve iletim bandlarının birleştiği bu noktalara da Dirac noktaları adı verilir. Şekil 2.3'de  $E_F$  Fermi enerjisi civarındaki düşük enerji dispersiyonlarının şematik bir çizimini gösterir. Grafende Fermi yüzeyi tam bir Fermi yüzeyinden ziyade altı tane nokta içerir ve Fermi hızı yük taşıyıcıların yoğunluğundan bağımsızdır. Dolayısıyla, iki koninin birleştiği K

noktasında enerji dispersiyon bağıntısı dalga vektörü üzerinde lineer bağımlıdır. Bu durumda,

$$\rho(\epsilon) \propto |\epsilon| \quad (2.15)$$

şeklinde karşılık gelen durum yoğunluğu da, enerjiye doğrusal bağımlılık gösterir ve K noktasında durum yoğunluğu sıfırdır. Geleneksel iki boyutlu elektron gazında ise, durum yoğunluğu bir sabittir. Durum yoğunluğu üzerinde de alışılmamış bir davranış sergileyen grafen yüzeyi üzerinde, topolojik kusur oluşturulduğunda ise koninin tepesi yakınında enerji durum yoğunluğu dikkate değer şekilde koninin açıklık açısına bağımlılık gösterir (Chakraborty 2013).

Grafen ve grafenin yapısı üzerindeki diğer bir dikkat çeken özellik ise kenar durumlarıdır. İdeal grafen sonlu olduğun dolayı, kenar durumları grafenin elektronik özellikleri üzerinde oldukça etkindir (Neto vd. 2009). Zikzak (kırmızı) ve koltuk-tipi (mavi) olarak adlandırılan olası iki kenar türü ve bu iki türün kombinasyonundan oluşan yuvarlak delik kenarı da aşağıda şekilde gösterilmiştir.



Şekil 2.6 Grafende kenarların zikzak ve koltuk tipi türleri (Krauss vd. 2010)

Bir grafen kenarına ilişkin elektronik durumlar teorik yoğun madde fiziği alanında en çok çalışılan konulardan biridir (SonI vd. 2006, SonII vd. 2006, Han vd 2007, Yang vd. 2007, Moghaddam vd. 2007).

Zikzak kenarlı grafen yapılar yarı iletken olabilir ve spin polarize kenarlar olarak kendini gösterir. Bu özellik grafen malzemesinin elektrik ve manyetik özelliklerini etkiler (Jung 2009).

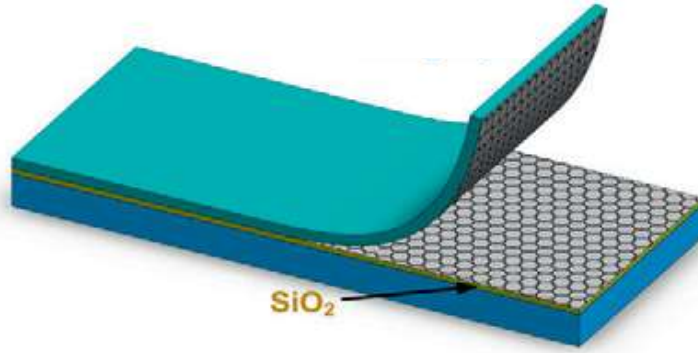
Grafen teoride, bal peteği şeklindeki karbon atomlarından oluşmuş, bir atom kalınlığındaki malzeme olarak tanımlanmasına rağmen pratikte sadece bir atom kalınlığındaki malzemeler grafen olarak tanımlanmamaktadır. Malzemenin elektronik karakteristiği, yüzeylerinin sayısı ile hızlı bir şekilde değişmektedir. Ancak pratikte grafenden, grafitte geçiş olarak 10 atom kalınlığındaki yüzeylere kadar göz önünde bulundurulmaktadır (Geim 2007).

## **2.2 Grafen Üretim Metodları**

2004 yılında Andre Geim ve Konstantin Novoselov tarafından ilk grafen yüzeyler elde edildiğinde, grafen üretimine dair çok çeşitli teknikler geliştirilmiştir. Üretim metodunun önemi ise, grafen yüzeylerin kusurlara dair yüksek hassasiyet göstermesidir. Bu bölümde yapısal kusurlar öncesinde, üretim metodları incelenecektir.

### **2.2.1 Mikro mekanik soyma yöntemi**

Bu metod grafit için çok uzun yıllardır bilinmesine ve kullanılmasına rağmen (Torres 2014), grafen için ilk kez 2004 yılında Geim ve Novoselov tarafından kullanılmıştır (Novoselov 2004). Bu yöntemde grafen levhalar (grafen düzlemleri) çok sayıda grafit kristalinden ayırarak elde edilir. Bu amaçla yapışkan izola bant kullanılmıştır.

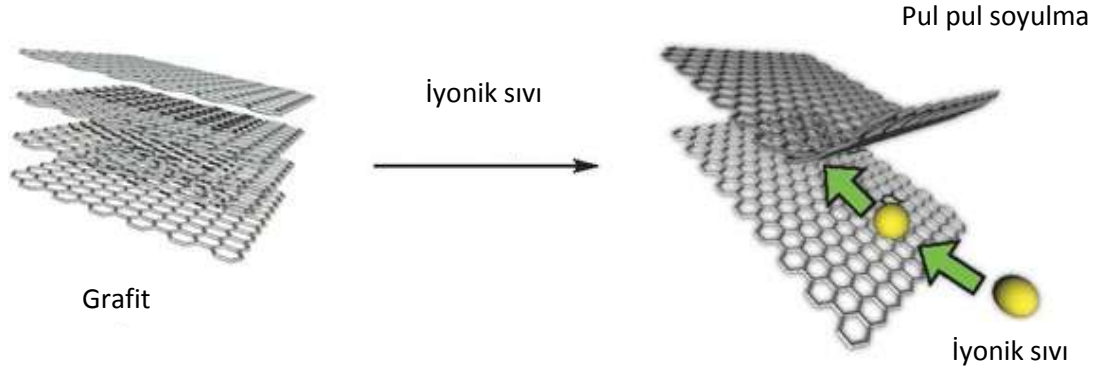


Şekil 2.7 Mikro mekanik soyma yöntemi kullanılarak elde edilmiş grafen yüzeyi (Bonaccorso vd. 2012)

Bu düşük üretimli yöntem, grafenin temel özelliklerini araştırmada kaliteli sonuçlar veriyor olduğundan halen kullanılmaktadır.

### 2.2.2 Grafiti pul pul dökme yöntemi

Bilindiği gibi grafit çoklu grafen yüzeylerinin üst üste güçlü ve çekici van der Waals bağları ile istiflenmiş halidir. Bu istiflenmiş yüzeyleri pek çok ayrı yöntem ile ayırabileceğimizi biliyoruz. Bu yöntemlerden bir tanesi de pul pul dökme yöntemidir. Kullanılan bu yöntem ile grafen mekanik soyma yönteminin aksine üretimi en fazla yapılabilen ve en rahat olarak fabrikasyon hale getirilebilecek malzemedir. Pul pul dökme sürecinde, komşu yüzeyler arasındaki güçlü van der Waals bağları dış kuvvet aracılığı ile birbirinden ayrılmalıdır. Bu selobant yöntemiyle (Bonaccorso vd. 2012, Novoselov 2004) yapılabilceği gibi, organik bir çözücü yardımı ile de yapılabilir (Geng vd. 2010).

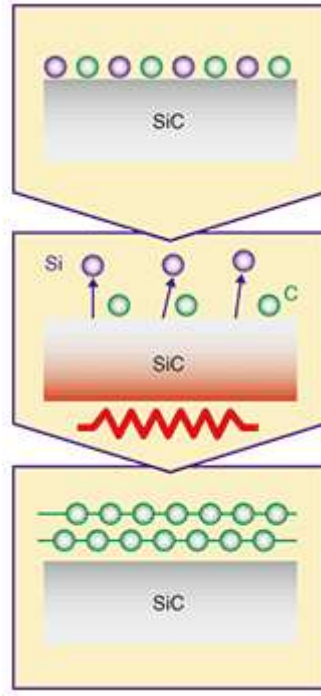


Şekil 2.8 Pul pul soyulma yöntemi ile grafenin ele edilmesi (Yusuke 2013)

Böylece, başlangıçta saf grafitte  $0.34 \text{ nm}$  civarında olması beklenen grafen yüzeyleri arasındaki mesafe organik kimyasal çözücü yardımı ile  $1 \text{ nm}$  veya daha fazla bir açılma göstererek önemli ölçüde artış sağlanır. Böylece, yüzeyler arasındaki çekici kuvvet azalır ve grafen düzlemlerinin pul pul dökülmesi gözlenebilir. Ayrıca bu yöntem, ısıtma işlemi (Cai vd. 2012) uygulanması ile de başarılabilir. Isıtma işlemi boyunca grafitin tabakaları arasında gaz birikir ve bu gaz içsel bir basınç oluşturması ile birlikte tabakalar arasındaki mesafeyi artırır. Şekilde de görüldüğü gibi soyulma gerçekleşebilir. Ancak bu metod da diğer bazı metodlar gibi kullanılan çözücü tarafından grafen yüzeyinin kusurlandırılmasına sebep olmuştur.

### 2.2.3 Silikon Karbid (SiC) in ısısal ayrışması

Bu yöntem silikon karbid (SiC) in ısısal ayrışması ile grafenin yapısal ve fiziksel özelliklerini araştırmak için kullanılır. Metod, SiC yüzeyi üzerinde grafen filminin epitaksiyel büyütülmesine dayanır.

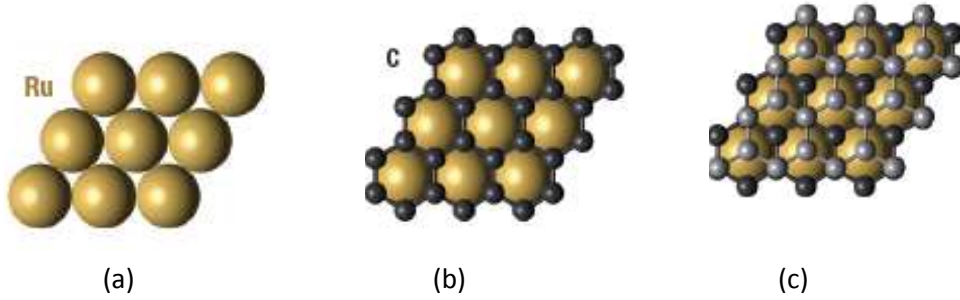


Şekil 2.9 Termal ayrışma metodunun şematik gösterimi (Hibino vd. 2010)

Bu yüzey hekzagon yapıda ve grafenin örgü parametrelerine yakın sonuçlar vermektedir (Ohta vd. 2010). Büyütme işlemi, silikonun süblümleştirilmesi ve 1200-1800 °C arasında ısıtılması ile yüzeyin yeniden yapılandırılması tekniğine dayanmaktadır. SiC alttaşı yüksek sıcaklıkta tavlı (yüksek sıcaklıkta ısıtıp, sonra yavaş yavaş soğutarak yumuşatmak) hale geldiğinde, Si atomları yüzeyden ayrışır ve yüzeyde doğal olarak sadece C atomları birkaç karbon atomu kalınlığında kalır. SiC geniş band aralıklı bir yarı-iletken olduğundan, SiC üzerinde birkaç karbon atomu kalınlığında elektronik uygulamalar için grafen alttaşı olarak hizmet eder. SiC teknolojisi üretim ve bütçe açısından çok fazla gelişen bir teknoloji alanı olduğundan, bir-kaç-tabaka yüzey fabrikasyonu için termal ayrışma yönteminin doğru bir metod olduğunu gösterir. Ancak, bu yöntemin endüstriyel olarak kullanılması için fabrike edilmeden önce çözülmesi gereken iki problemi vardır. Birincisi, bugüne kadar ki elde edilen yüzeyler birkaç karbon atomu kalınlığındadır. Malzemenin yüzey kalınlığı elektronik özelliklerini etkilediğinden dolayı, yüzey kalınlığı tam kestirilebilir olmalıdır. İkincisi ise SiC alttaşının birkaç karbon atomu kalınlığındaki yapının fiziksel özelliklerini ne kadar etkilediği tam olarak anlaşılmalıdır.

## 2.2.4 Grafenin epitaksiyel büyütülmesi yöntemi

Grafen SiC alttaşı üzerinde büyütüldüğü gibi, diğer malzemeler üzerinde de büyütülebilir. Aşağıdaki şekilde Ru (Rutenyum)(0001) elementinden oluşmuş yüzey üzerinde epitaksiyel büyütme işlemi yapılmıştır. Bilindiği üzere (Tetlow vd. 2014) Ru (Rutenyum)(0001), Rh (Rodyum)(111), Ir (İridyum)(111), Pt (Platin)(111), Ni (Nikel)(111), Cu (Bakır)(111), ve Cu (Bakır)(110) gibi geçiş metali olan yüzeyler grafen yüzeylerin özelliklerini anlamak için epitaksiyel yapılan yüzeylerin başında gelmektedir. Geçiş metali olan yüzeylerde grafen büyütüldüğü zaman, grafen ile metal yüzeyler arasında örgü uyumsuzluğu olduğundan dolayı çeşitli özellikler meydana gelir. Karbon-karbon bağları, karbon-metal bağlarından güçlü bağlardır. Alt taş üzerinde büyütme işlemi sırasında, grafende iki eksenli gerilme sırasında epitaksiyel stres meydana gelir. Bu durum enerji olarak maliyetli bir durumdur.



Şekil 2.10 Ru(0001) yüzeyi üzerinde grafenin epitaksiyel büyümesinin şematik gösterimi (Sutter 2008)

a. Rutenyum elementinden oluşmuş yüzey, b. bir tabakalı grafen yüzeyinin rutenyum yüzeyi üzerinde, c. iki tabakalı grafen yüzeyi rutenyum yüzeyi üzerinde

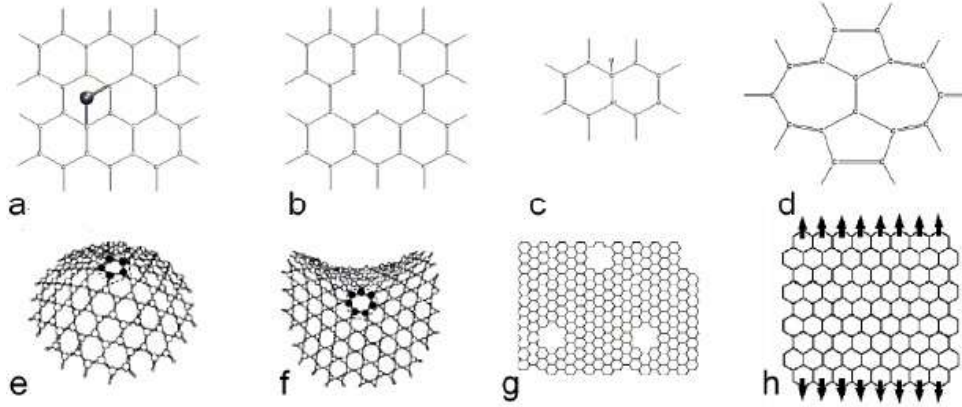
### 3. GRAFENDE YAPISAL KUSURLAR

İdeal bir grafen, mükemmel olarak düzenlenmiş bal peteği örgü yapısındaki bir karbon atomu kalınlığında karbon atomlarından oluşmuş bir malzemedir. Her bir karbon atomu diğer üç karbon atomu ile  $120^\circ$  lik düzlem-içi bağ yapmaktadır. Bu yapıdaki grafen malzemesi nanoteknoloji alanında son derece umut verici bir malzemedir. Bilindiği gibi saf ve yapısal olarak mükemmel grafen son derece yüksek taşıyıcılıklı balistik elektron üretimine ve oda sıcaklığında kuantum Hall etkileri gibi göze çarpan elektronik olgulara sahiptir.

Yüksek mükemmellikte atomik örgülere sahip olan saf grafen örneklerinin elektronik ve mekanik özellikleri dikkat çekici olmasına rağmen büyütme ve işleme sırasında görülen yapısal kusurlar grafen tabanlı cihazların mekanik, elektriksel, kimyasal ve optiksel özelliklerini değiştirdiğinden performansını etkilemektedir. Ancak bu mükemmellikten sapmalar yeni işlevler elde etmek ve grafenin yerel özelliklerini ihtiyaç duyulan özelliklere uygun hale getirmek için bazı uygulamalarda kullanışlı olabilir. Çünkü bu durum malzemeyi kontrol edilebilir kılarak malzeme üzerindeki kusurların faydalı uygulamalar için kullanılmasını sağlayabilir. Örneğin, mükemmel grafende band aralığının olmayışı grafen tabanlı transistörlerde yeterli yükseklikte açma-kapama oranlı anahtarlama için izin vermemektedir. Dolayısıyla karmaşık devre üretiminde ve hatta temel cihaz yapımında dahi grafen ihtiyaca uygun olarak modifiye edilebilir.

Bilindiği gibi ideal grafen bir diamanyetik malzemedir (McClure 1956, Safran vd. 1979). Bütün malzemelerde olduğu gibi diamanyetizm malzemelerin kendi öz yapılarında mevcut olduğundan dolayı karbonun bütün allotropları da oda sıcaklığında diamanyetik hassasiyet gösterir (Kuzemsky 2013). Eğer grafit yüzeyi basamaklı (steplike) bir yüzey ise düşük sıcaklıklarda paramanyetik ve antiferromanyetik özellik sergileyebilir (Makarova 2004). Ancak kusurların varlığında manyetik moment ile etkileşip, paramanyetik özellikler de gösterebilir. Hatta, kusurların grafenin manyetik momentinde artışa sebep olduğu deneysel (Ugeda vd. 2010, Nair vd. 2012) ve teorik (Yazyev 2007) çalışmalarda da gösterilmiştir. Ferromanyetik ve antiferromanyetik malzemeler üzerine yapılan çalışmaların teorik öngörülleri, grafenin iki parçalı yapısı

aracılığı ile manyetik çiftlenimin farklı olasılıkları üzerinden açıklanır. Eğer manyetizma tek alt örgü kusurundan kaynaklanıyor ise malzemenin ferromanyetik, iki farklı alt örgü kusurlarından kaynaklanıyor ise malzemenin antiferromanyetik olduğu söylenir (Yazyev 2007).



Şekil 3.1 Kusurların karbon yapılar üzerindeki manyetik etkileri (Makarova 2011)

a. yabancı atom problemi, b. boşlu kusuru, c. hidrojen atomu problemi, d. Stone-Wales kusuru, e. pozitif eğrilik kusuru, f. negatif eğrilik kusuru, g. gözenekli yapı kusuru, h. zikzak kenarlar

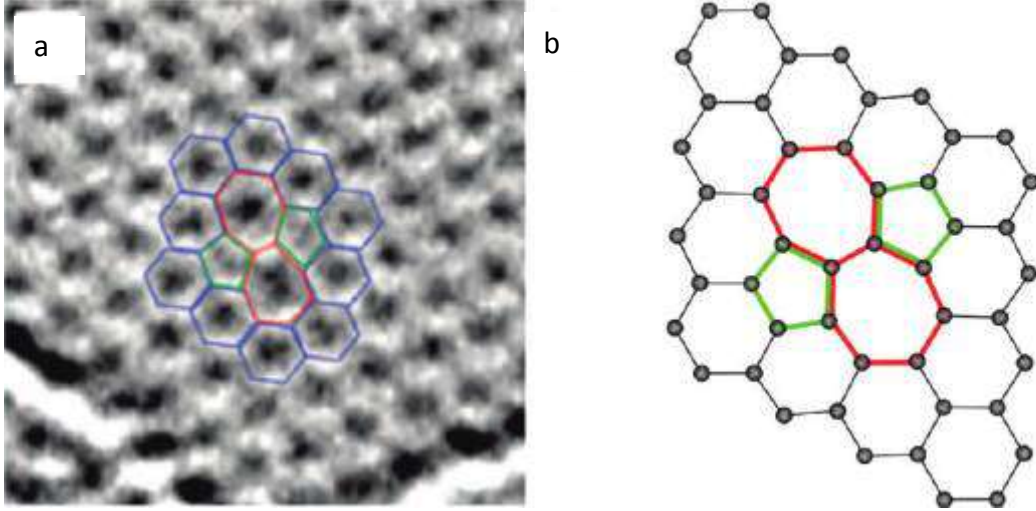
Bu çalışmada özellikle potansiyel uygulamalarda ilginç etkilere sebep olacak ve grafenin benzersiz özelliklerini yeniden yapılandıracak olan nokta kusurlardan topolojik kusurlar üzerine odaklanılacaktır.

### 3.1 Grafende Nokta Kusurlar

#### 3.1.1 Stone-Wales kusuru

Grafen örgünün benzersiz özelliklerinden birisi de altıgen olmayan halkalar oluşturularak yeniden yapılandırılabilmesidir. Stone-Wales (S-W) kusuru grafen içindeki altıgen üyeli karbon halkaların beşgen ve yedigen olarak yeniden düzenlenmesine karşılık gelir. Bu düzenleme, altıgen yapı 4 halkanın C-C bağlarının

90 derece döndürülmesi ile 2'si beşgen 2'si yedigen halkaya dönüştürülmesi ile elde edilir. S-W kusur oluşum enerjisi yaklaşık 5 eV civarındadır.



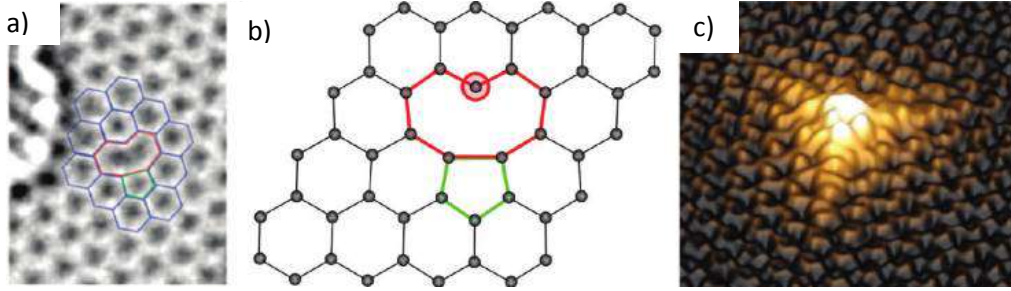
Şekil 3.2 Stone-Wales kusuru (J.Meyer vd. 2008, Banhart vd. 2010)

a. Kusurun deneysel TEM görüntüsü, b. Yoğunluk fonksiyonu teorisi aracılığıyla elde edilmiş atomik yapısı

### 3.1.2 Tek boşluk kusuru

Herhangi bir malzeme üzerindeki en basit kusur, örgü kristali üzerindeki eksik örgü atomu kusurudur. Tek örgü atomu kusuru grafende deneysel olarak TEM (Geçirimli Elektron Mikroskobu) ve STM (Taramalı Elektron Mikroskobu) ile gözlemlenebilmektedir. Şekil 3.2'den de görülebileceği gibi tek atom kusuru, bir karbon atomunun eksikliği ile üç tane asılı bağdan iki tanesinin kaybolmasına sebep olmuştur. Geriye kalan bir tane asılı bağın ise geometrik sebepten dolayı şekil değiştirdiği Jahn-Teller biçimsizliğine sebebiyet verir. Jahn-Teller biçimsizliğinde, doğrusal olmayan atomik düzenlemeler geometrik bozulmalar altında dejenereliği kaldırmak ve böylece sistemin toplam enerjisini en düşük seviyede tutmak için dejenere taban durumu enerjisine sahip olduğu kusur durumudur.

Şekil 3.3'de görüldüğü gibi bir tane beş üyeli, bir tane de dokuz üyeye sahip halka oluşur. Bu şekilde tek karbon atomu boşluğu olan kusurlu grafende hesaplanmış olan geçiş bariyeri yaklaşık olarak 1.3 eV'dur.



Şekil 3.3 Tek boşluk kusuru (J.Meyer vd. 2008, Banhart vd. 2010, Ugeda vd. 2010)

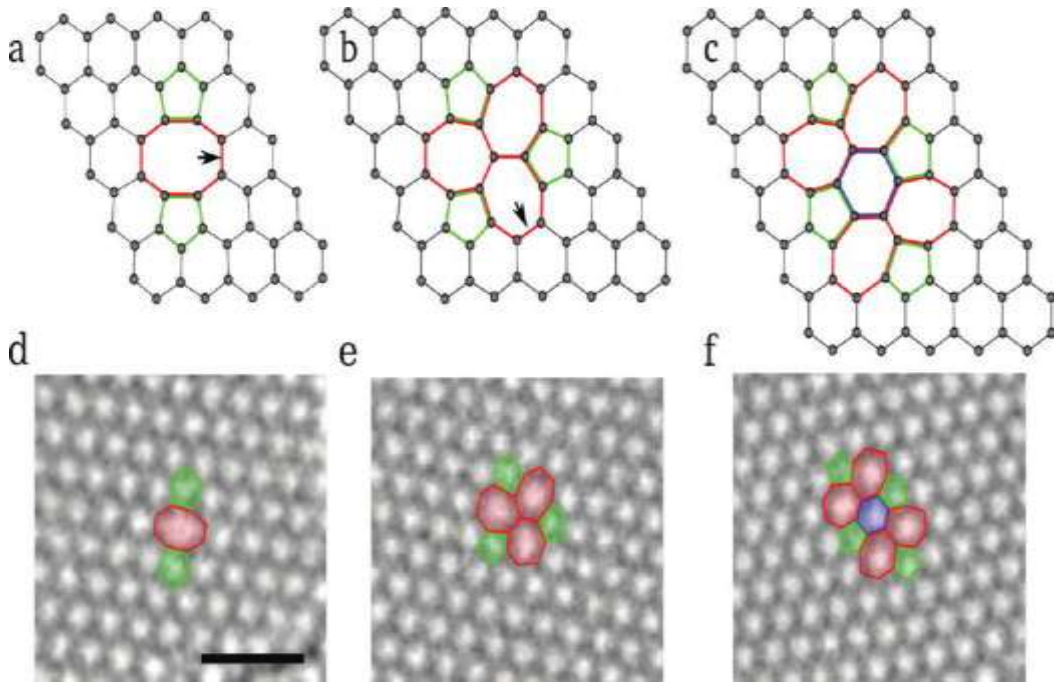
a. Kusurun deneysel TEM görüntüsü, b. Yoğunluk fonksiyonu teorisi ile elde edilen atomik yapısı, c. Tek boşluk kusurunun deneysel STM görüntüsü

### 3.1.3 Çoklu boşluk kusuru

Çift boşluk kusurları ya iki boşluk kusurunun birleşmesiyle ya da iki komşu karbon atomunun kaldırılmasıyla oluşur. Şekil 3.4.a'dan da görüldüğü gibi çift eksik örgü atomlu yapının tamamen yeniden yapılanmasıyla hiç bir asılı bağ bulunmamaktadır. Kusursuz grafende dört tane altı hücreli halkanın yerine iki tane beşgen, bir tane sekizgen halka oluşur. Simülasyonlar, çift boşluk kusurunun yapılanma enerjisinin tek boşluk kusurunun yapılanma enerjisi ile aynı olduğunu göstermektedir. İki karbon atomunun kaçtığı durumda herbir kaçan atomun enerjisi tek boşluk kusurundakinden çok daha az olacağından, çift boşluk kusurları tek boşluk kusurlarına göre termodinamik olarak daha avantajlı görünmektedir. İki karbon atomunun kaçtığı kusur durumunda iki beşgen, bir sekizgen halka oluşması tek yol değildir. Stone Wales kusurunun oluşmasına benzer olarak beş-sekiz-beş(5-8-5) kusurundaki sekizgen halkanın bağlarından birinin döndürülmesiyle şekil 3.4.b'den de görülebileceği gibi üç yedigen, üç beşgen(555-777) halka düzenlenmesiyle oluşan kusurlu yapıya dönüşür. Bu kusurun enerji yapılanması (5-8-5) kusurlu yapısına göre daha düşüktür. Bir adım ötesinde, (555-777) kusuru da bir diğer bağın döndürülmesiyle şekil 3.4.c'de görülebilen (5555-

6-7777) iki karbon atomunun kaçtığı kusurlu yapıya dönüşür. Bu kusurlu yapının enerji şekillenmesi ise (5-8-5) li yapı ile (555-777) li yapılar arasındadır. İki karbon atomundan daha fazla sayıda karbon atomun kaçtığı durumlar ise daha büyük ve kompleks konfigürasyonlara sebep olacaktır.

Genel olarak kristal örgü üzerinde, çift sayıda kaçan atom ile yeniden yapılanma gerçekleştiğinde açıkta bağ kalmadığından ve enerji yapılanması açısından ise daha düşük enerji kaybı olduğundan dolayı tek sayıda karbon atomunun kaçtığı duruma göre daha çok tercih edilen bir kusur durumudur.

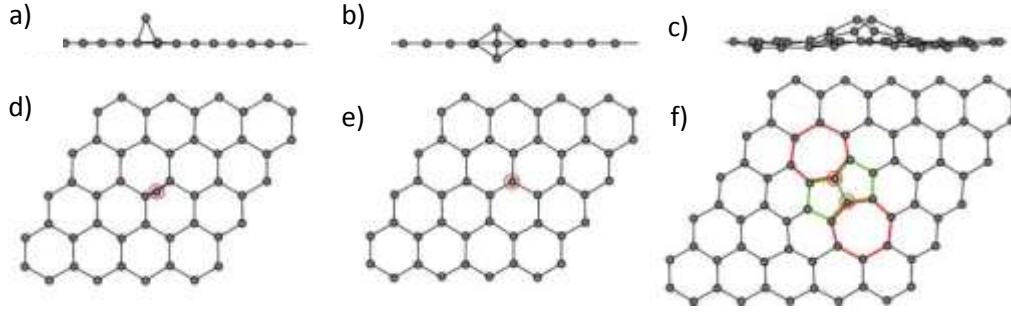


Şekil 3.4 Çoklu boşluk kusuru (Banhart vd. 2010, Meyer vd. 2008 )

(a-c). yoğunluk fonksiyonu teorisi (DFT) ile elde edilen çift boşluk kusurlu grafenin yeniden yapılanmış atomik yapısı, (d-f). Aynı yapının deneysel TEM görüntüleri, a. ve d. çift karbon atomunun kaçtığı (5-8-5)'li yapı, b. ve e. (5-8-5)'li yapıdan (555-777)'li yapıya dönüştürülmüş yapısı, c. ve f. (555-777)'li yapıdan (5555-6-7777) kusurlu yapıya dönüştürülmüş görüntüleri

### 3.1.4 Karbon adatom kusuru

Karbon adatom kusurunda aradaki bölgede atomlar üç boyutlu kristalde olduğu gibi grafen düzleminde yerleşemezler. Grafende düzlem içi pozisyondaki örneğin altıgen halkanın merkezindeki ek atomlar iki boyutlu yerel yapıyı germesinden ziyade üçüncü boyutu kullanırlar. Böylece bir karbon atomu, mükemmel grafen tabakası ile etkileştiği zaman tabaka içindeki karbon atomlarının hibridizasyonunda değişikliğe sebebiyet verir. Grafen düzleminde yatan karbon atomlar ile karbon adatomlar arasında  $sp^3$  hibridizasyonu sonucu iki yeni kovalent bağ oluşur. Şekil 3.5.a'da görüldüğü gibi köprü konfigürasyonu gösteren karbon adatomların bağlanma derecesi 1.5-2 eV civarındadır. Köprü konfigürasyonuna ek olarak diğer yarı-kararlı konfigürasyonlar da mümkündür. Oda sıcaklığında, grafen yüzeyi üzerinde adatomlar kolayca ve çok hızlı hareket edebildiğinden dolayı bu kusurlu yapının bazı deneysel verilerini TEM veya STM ile elde edebilmek mümkün değildir. Önceki kesimde bahsedilen eksik örgü atomu boşluğu oluşturulduğunda, bu kovulmuş karbon atomları grafen yüzeyinde kalabilir. Ancak adatom kusurları, eksik örgü atomu boşluğuna nispeten hareketli olduğundan dolayı bu şekildeki “boşluk+arayer” çifti (Frenkel çiftine analog) oda sıcaklığının altında dahi kararsız durumdadır. Şekil 3.5'den de görülebildiği gibi bu göç sadece örgü üzerinde değil, aynı zamanda örgü boyunca da mümkündür. Şekil 3.5.b dambıl konfigürasyonu, şekil 3.5.a ile gösterilen köprü konfigürasyonundan 0.5eV daha yüksek yapılanma enerjisi vardır. Bu konfigürasyonlar özellikle bir kaç tabaka ve çoklu tabakalarda önem teşkil eder. İki tane göç eden atom birbirleri ile karşılaşırlar ve ikili oluşturdukları zaman, şekil 3.5.c'de görüldüğü gibi yerel yapının eğrilmesi pahasına karbon atomları ile  $sp^2$  hibritleşmesi yaparak kristal örgüye dahil olabilirler. Ayrıca, saf grafen yüzeyi üzerindeki karbon adatomlar yüzeye nüfuz ederek şekil 3.5.f'de görüldüğü gibi iki tane beşgen, iki tane yedigen halkadan oluşmuş ters-Stone-Wales (I-S-W) kusuru olarak adlandırılan kusurlu yapıya da dönüştüğü görülebilir. Bu hexagonal olmayan düzenlenmiş halka Stone-Wales kusurundan farklıdır.

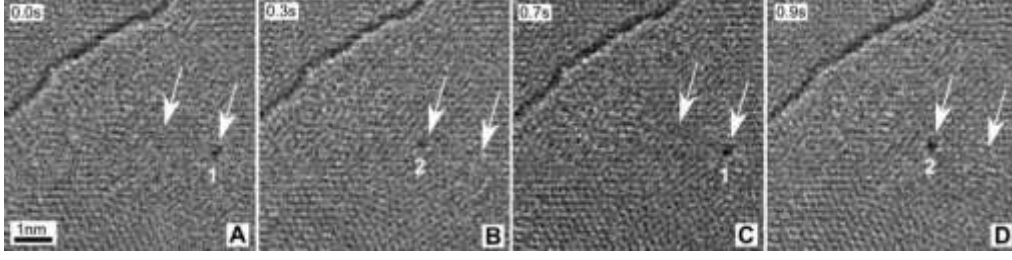


Şekil 3.5 Karbon adatomlar (Banhart vd. 2010)

a. ve d. DFT ile hesaplanmış köprü konfigürasyonunda tek adatom, b. ve e. halter konfigürasyonunda tek adatom, c. ve f. iki karbon adatomun oluşturduğu Inverse Stone-Wales (I-S-W) kusuru

### 3.1.5 Karbon olmayan adatom kusuru

Yabancı atomun grafenin elektronik ve iletim özellikleri üzerindeki etkisi grafen ile yabancı atom arasındaki bağa bağlıdır. Eğer, grafen yüzeyi ile yabancı atom arasındaki bağ zayıf ise Van der Waals etkileşiminden dolayı sadece fiziksel absorpsiyon olur. Ancak eğer bağ kuvvetli ise, en yakın karbon atomları ile yabancı atom arasında kovalent bağ oluşur. Karbon adatomda tartışılan tüm konfigürasyonlar burada aynı şekilde geçerlidir. Grafen yüzeyi ile yabancı atomlar arasındaki bağları çalışmak için en iyi yol yabancı atomları grafen örgü üzerinde taşınımaları sırasında gözlemlemektir. Adatomların, grafen örgünün elektronik özellikleri üzerine etkisi hemen yüzeyi üzerindeki konumlarına bağlı olmasının yanı sıra eğer grafen örgü ayrıca yapısal kusurlar barındırıyor ise yabancı atomlar kusurlar tarafından da tutulabilirler. Örneğin, (555-777) kusuru metal atomlarını tuzaklayabilir. Kusur etrafındaki gerilmiş alan, yüzey üzerinde taşınan metal atomlarla kusur arasında çekici bir etkileşime sebep olur. Bu durum şekil 3.6'da TEM ile görüntüsünün elde edildiği üzere iki kusurlu yapı barındıran grafen örgü yüzeyi üzerinde karbon olmayan yabancı atomun iki kusur arasında bir ileri bir geri zıplaması olarak gözlenmiştir.

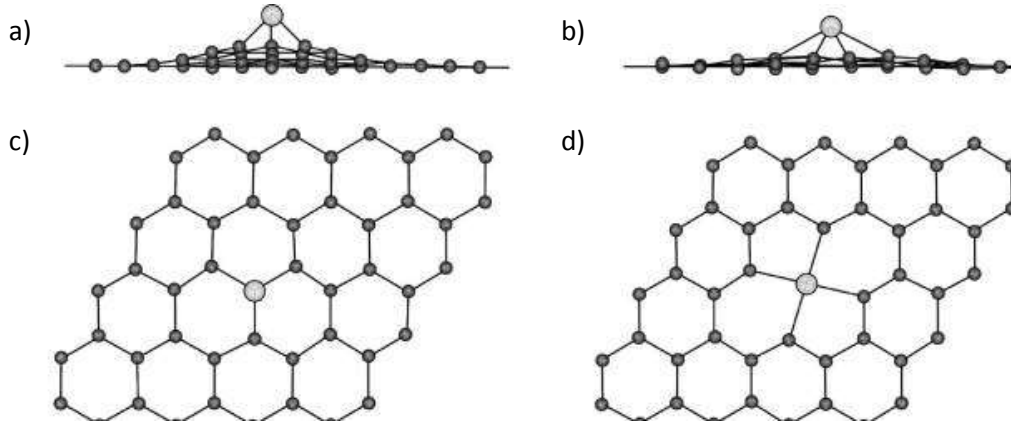


Şekil 3.6 Karbon olmayan adatom kusuru (Cretu vd. 2010)

W atomunu çeken grafen üzerindeki iki kusurlu yapı arasında W atomunun bir ileri, bir geri zıplamasının TEM görüntüsü

### 3.1.6 Yerdeğiştirme(substitutional impurities) safsızlık kusuru

Yabancı atomlar grafen yüzeyi üzerine yerdeğiştirme safsızlıkları olarak da dahil edilebilirler. Bu durumda safsızlık atomları bir veya iki karbon atomu ile yerdeğiştirir. Yaklaşık olarak aynı atomik yarıçapa sahip olmalarına rağmen boron (B) (atom numarası 5) bir elektron eksikliğine ve azot (N) (atom numarası 7) bir elektron fazlasına sahip olduğundan dolayı karbon yapılarında doğal dopant olarak işlev görürler. Dahası karbon (C) atomu boron (B) veya azot (N) atomları ile yer değiştirdiğinde oluşan safsızlık sadece Fermi seviyesinin konumunu değil aynı zamanda grafenin elektronik yapısını da değiştirdiğinden bu tür safsızlıklar oldukça önemlidir. Örneğin, geçiş metali atomları ile yerdeğiştirme safsızlıkları gerçekleştirildiğinde grafen örgünün elektron sistemine yük verme özelliklerinden dolayı bu tür kusurların etkisi oldukça dikkat çektiği görülmüştür.



Şekil 3.7 Yerdeğiştirme safsızlık kusuru ile bir ve iki tane absorbe edilmiş geçiş metali atomunun atomik konfigürasyonu (Banhart vd. 2010)

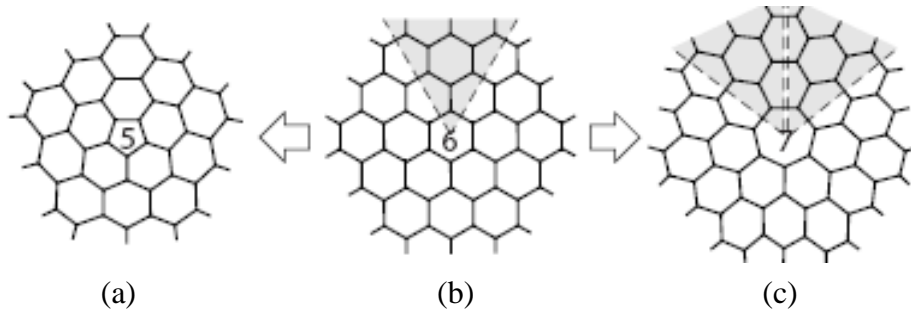
a. tek boşluk üzerindeki metal atomu yan görünüşü, b. çift boşluk metal atomu yan görünüşü, c. tek boşluk üzerindeki metal atomu üst görünüşü, d. çift boşluk metal atomu üst görünüşü

### 3.1.7 Topolojik kusur

Topoloji Yunanca'da yer, yüzey veya uzay anlamına gelen topos ve bilim anlamına gelen logos sözcüklerinden türetilmiştir. Topoloji geometri yapmak için atılan ilk adımdır. İki yüzey arasındaki geçiş, ancak topolojileri gözeten ve sürekli denen gönderimlerle olası olmakla birlikte iki yapının denkliği aralarındaki topolojiyi koruyan homeomorfizma denen sürekli bir gönderimin varlığı ile ortaya çıkar. Bir başka deyişle, X ve Y yüzeyleri homeomorf ise, X ve Y yüzeyleri aynı topolojik özelliklere sahiptir. Kabaca, topoloji nesnelere yırtmadan ve koparmadan, eğip bükerek sürekli bir biçimde bir başka nesneye dönüştürür.

Kusursuz iki boyutlu grafen yapılar üzerinde topolojik kusurlar yerinden oynatma (dislocation) ve döndürme (disclination) gibi yüzey kusurları indüklenerek oluşturulur. Yerinden oynatma tipi topolojik kusurlar grafen yüzeyi üzerinde karbon atomu sektörlerinin yüzeyden dışarılandığı veya yüzeye dahil edilen karbon atomları ile birlikte yüzey üzerinde yerleşmiş karbon atomlarını yerinden oynatıp öteleme simetrisi uyumsuzluğuna sebep olurken, döndürme tipi topolojik kusurlar ise yüzey üzerinde

dönme simetrisi uyumsuzluğundan kaynaklanmaktadır. Bu tip topolojik kusurlarda yüzey üzerine oturmuş karbon atomları yerinden oynamaz ancak dönme simetrisi uyumsuzluğundan dolayı yüzey üzerinde süreksizlikler oluşur. Öteleme simetrisi uyumsuzluğundan kaynaklı kristal kusurları Burger vektörü (Juan vd. 2010, Kochetov vd. 2010, Bakke ve Furtado 2013) ile ölçülebilirken, dönme simetrisinden kaynaklı kristal kusurları ise Frank vektörü (Bakke ve Furtado 2013) aracılığıyla karakterize edilir. Bu çalışmada dönme tipi topolojik yüzey kusurları üzerine odaklanılmıştır. Topolojik yüzey kusurlarının grafen gibi düşük boyutlu sistemlerin elektronik özellikleri üzerinde önemli rol oynadığı 1980'lerin ikinci yarısında fullerenlerin keşfinden beri oldukça iyi bilinmektedir (Stone 1986, Kroto 1987, Wu 1987). Grafenin hexagonal bal peteği yapısı üzerinde hexagonal olmayan halkalar grafen yüzeyi üzerinde eğriliklere neden olur.



Şekil 3.8 Topolojik kusur (Yazyev ve Louie 2010)

Grafen yüzeyi üzerinde pozitif ve negatif topolojik kusurlar 60 derecelik karbon atomu sektörlerinin yüzeyden sırasıyla dışarlama ve dahil etmelerle gerçekleşir

Şekil 3.8.b.'den de görüldüğü üzere kusursuz grafen örgüler altıgen halkalar barındırır. Ancak, şekil 3.8a'da grafen örgü yüzeyi üzerinde bir karbon atomu sektörüne karşılık gelen 60°'lik dışarlama ile merkezlenmiş altıgen halka beşgensel kusurlu halkaya dönüşürken, şekil 3.8.c.'de ise grafen örgü yüzeyi üzerine bir karbon halka sektörünün dahil edilmesi ile yedigensel kusurlu halka oluşur. Beşgensel kusurlu halkalar grafen düzlemi üzerinde pozitif (küresel) eğriliklere sebep olurken, yedigen kusurlu halkalar ile grafen düzlemi üzerinde negatif (eyer yüzeyi) eğriliklere sebep olur (Banhart vd.

2010). Bu tür kusurlar yerel potansiyeller tarafından oluşturulan örgü atom boşlukları ve diğer safsızlık modellerinden daha farklı olarak grafenin elektronik yapısını etkiler ve elektronik dalga fonksiyonunda uzun menzilli safsızlıklara sebep olur (Cortijo vd. 2007). Bu tür kusurlu yapının ayrıntılı bir incelemesi bölüm 4’de yapılacaktır.

#### 4. TOPOLOJİK KUSURLU GRAFEN

Üç boyutlu konisel uzaylar uzun zamandır bilinmesine rağmen fizikçiler arasında ilk kez M. Fierz tarafından bu yapıların ilginç özellikleri üzerine dikkat çekilmiştir (Weber ve Wheeler 1957). Konisel yapıların fiziksel özellikleri üzerine ilk detaylı araştırma ise L. Marder tarafından yapılmıştır (Marder 1958, Marder 1959). Evrenin erken döneminde (hala tam olarak anlaşılamamıştır) faz geçişleri sırasında sürekli simetrisinin kendiliğinden kırılmasının topolojik kusurlu yapılar ile yani kozmik halkalarla ilişkili olması bu tür uzaylara (yapılara) ilgiyi oldukça arttırmıştır. Kozmik kelimesi kozmosdan türemiştir. Kozmos, uzay ve uzayda bulunan tüm madde ve enerji biçimlerini içeren bütünün adıdır. Kozmik halkalar ise evrenin erken dönemlerinde oluşmuş olabilecek bir cisim olarak tanımlanır. Kozmik halkalar ilk kez 1970'lerin sonlarına doğru teorik fizikçi Tom W. B. Kibble tarafından ünlü Higgs teoremini de içerek şekilde bazı alan teorisi sonuçları içerisinde bahsedilmiştir. Genellikle kozmik halkalar iki parametre ile karakterize edilirler, bunlardan biri manyetik girdap akısı ki bu ayar simetrisine karşılık gelirken, diğeri açıklık açısı olmak üzere halkanın lineer kütlesi ile ilişkilidir (Kim 2006) .

Kozmik halkalarda olduğu gibi grafitik koniler de ek parametrelerle karakterize edilebilirler. İki boyutlu bal peteği örgü yapılı grafende topolojik kusurlar aşıl原因arak elde edilen grafen koniler diğere bir deyişle eğrilmiş grafen yüzeyler üzerinde grafenin düşük enerjili tanımının, yalnızca eğrilmiş yüzeye karşılık gelen Dirac denkleminle karşılanabileceği düşünülür. Ancak bu tam olarak öyle değildir. Eğrilik ayar alanı indükler böylece Dirac denkleminin içine girer. Bu son tanımla birlikte manyetik akıya sahip sentetik bir ayar alanı molekül yüzeyi boyunca gider (Pachos 2008). Bu eğrilmiş yüzeyler üzerinde kusur açıları hem pozitif hem de negatif değerli olabilir. Negatif kusurlu yapılar semer yüzeyi olarak adlandırılırken, pozitif kusur açılı yapılar grafitik koniler olarak adlandırılır.

Kısaca, bir grafitik koni iki boyutlu düzlem grafen yüzeyine topolojik kusur aşıl原因arak elde edilir ki bu durum açılal sınır değerlerini değıştirmekle mümkündür. İki boyutlu yapıların kararlı bir şekilde bulunabileceğini gösteren grafen yapılarında açılal sınır

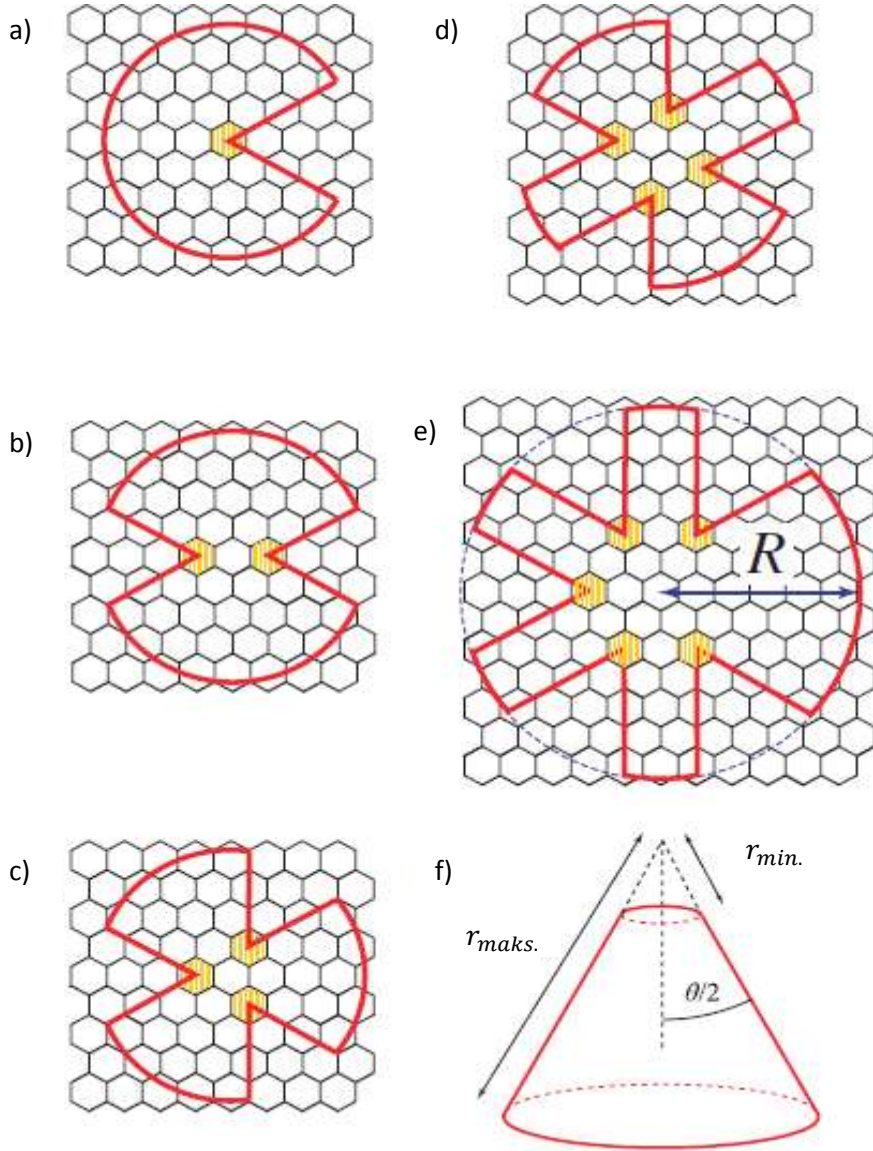
koşulları ise Dirac spinorları aracılığıyla değiştirilir. Bizim çalışmamızda pozitif kusur açılı grafen nano koniler üzerine odaklanılacaktır.

#### **4.1 Topolojik Kusurlu Grafen Nano Konilerin Elde Edilmesi**

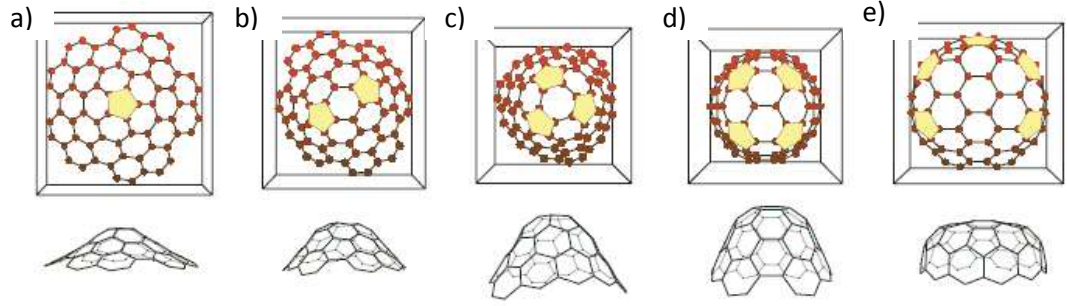
Bugüne kadar ki pozitif kusur açılı grafen nano koniler üzerine yapılan çalışmalarda, grafen örgülerden elde edilebilen koniler 2 farklı dışarlama yapısı ve 6 farklı dışarlama sayısına göre sınıflandırılmışlardır. Dışarlama yapısına göre sınıflandırıldığında koninin tepesi çevresinde yerleşmiş pentagonal karbon halkalar olarak görülebileceği gibi (Siber 2007), koninin tepesi üzerinde merkezlenmiş bir tek hekzagonal halkası üzerindeki değişen dışarlama sayılarına göre de farklılık gösterebilir (Treacy ve Kilian 2001).

#### 4.1.1 Grafen yüzeyin merkezlenmiş hegzagonal halkası çevresindeki pentagonal kusurlar aracılığıyla elde edilen grafen nano-koniler

Kusursuz grafen yüzey düzleminde merkezlenmiş hegzagonal halkası çevresinde kes-katla metodu ile elde edilen pentagonal kusurlar aracılığıyla beş farklı grafen nano-koni elde edilir.



Şekil 4.1 Grafen örgü üzerinde dışarlama ile oluşturulan grafen koniler (Siber vd. 2007)



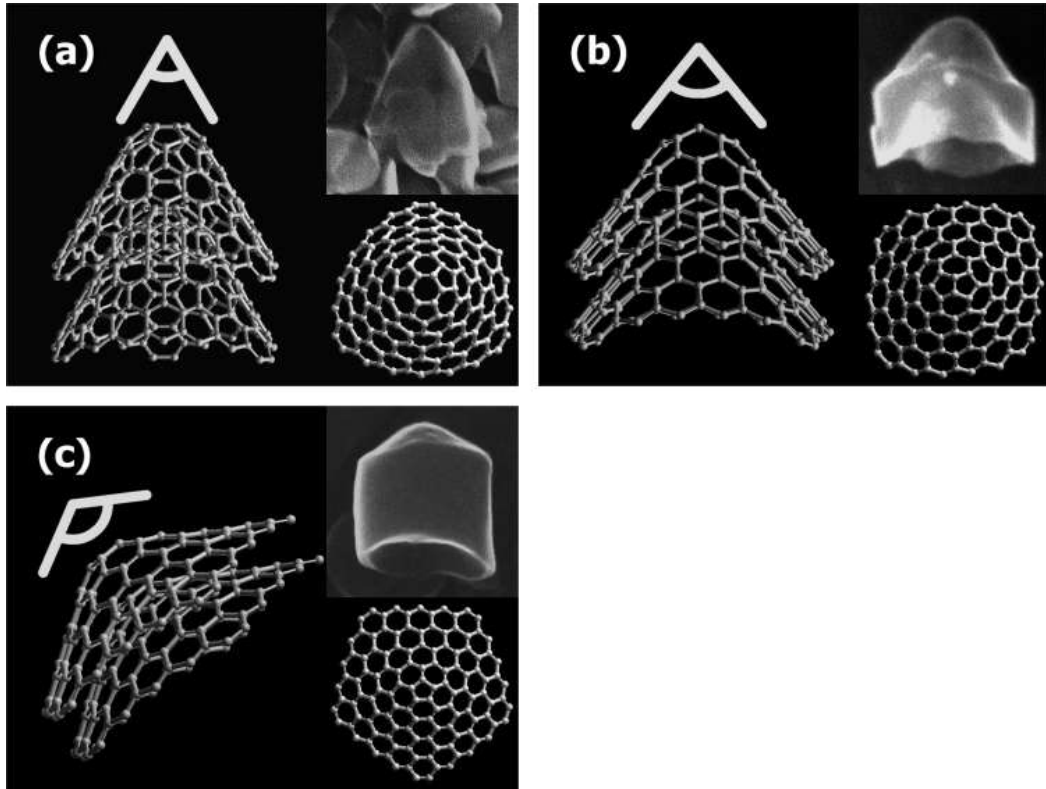
Şekil 4.2 Beş farklı koninin üstten ve yandan görünüşleri (Siber vd. 2007)

Şekil 4.1’de grafen düzleminin merkezlenmiş hexagonal halkasının çevresinde pentagonal halkaların sayısına göre parçalarının beş farklı şekilde kesilip katlandığı görülmektedir. Şekil 4.1.a’da grafen yüzey üzerindeki bir tane beşgensel halkanın varlığı ile eğrilmiş yüzeyden oluşturulmuş grafen nano koni temsil edilmektedir. Bu durum  $60^\circ$ ’lik bir karbon atomu sektörünün dışarlanmasına karşılık gelmekle birlikte şekil 4.2.a’da ayrıntılı bir şekilde görülebileceği gibi koni tepesinde  $112,9^\circ$ ’lik bir tepe açısı oluşmaktadır. Aynı şekilde, şekil 4.1.b’de merkezlenmiş heksagonal halkanın çevresinde simetrik iki pentagonal halkanın oluşturulmasıyla iki karbon atomu sektörüne karşılık gelen  $120^\circ$ ’lik açı dışarlamasıyla oluşan eğri yüzeyden elde edilen kapalı koni yapısının tepesinde  $83,6^\circ$ ’lik bir tepe açısı oluşmaktadır. Benzer yöntemle, şekil 4.1.c üç pentagonal halkanın oluşturulmasıyla üç karbon atomu sektörüne karşılık gelen  $180^\circ$ ’lik, şekil 4.1.d dört pentagonal halkanın oluşturulmasıyla dört karbon atomu sektörüne karşılık gelen  $240^\circ$ ’lik, şekil 4.1.e’de ise beş pentagonal halkanın oluşturulmasıyla beş karbon atomu sektörüne karşılık gelen  $300^\circ$ ’lik dışarlamalar ile oluşan eğrisel yüzeylerden elde edilen konilere karşılık gelir. Sırasıyla  $60^\circ$ ,  $38,9^\circ$  ve  $19,2^\circ$ ’lik tepe açılarına sahiptirler. Yukarıdaki şekilde görmediğimiz  $360^\circ$ ’lik karbon atomu sektörlerinin dışarlaması ise karbon nanotüp şapka (cap)lar olarak adlandırılmış ve geçen zaman içerisinde geniş bir çalışma alanı bulmuş olan sarmalanmış grafen yüzey olarak da adlandırılan karbon nanotüplere karşılık gelir. Görece yarı fullerenlere benzerdir (Reich 2005). Şekil 4.2’de a.’dan e.’ye kadarki temsiller ise sırasıyla  $60^\circ$ ,  $120^\circ$ ,  $180^\circ$ ,  $240^\circ$  ve  $300^\circ$ ’lik dışarlamalar ile oluşturulan konilerin tepe ve yan görüntüleridir.

Nano-konilerin tepe açıları,

$$\theta_n = 2 \arcsin \left( 1 - \frac{n}{6} \right) \quad (4.1)$$

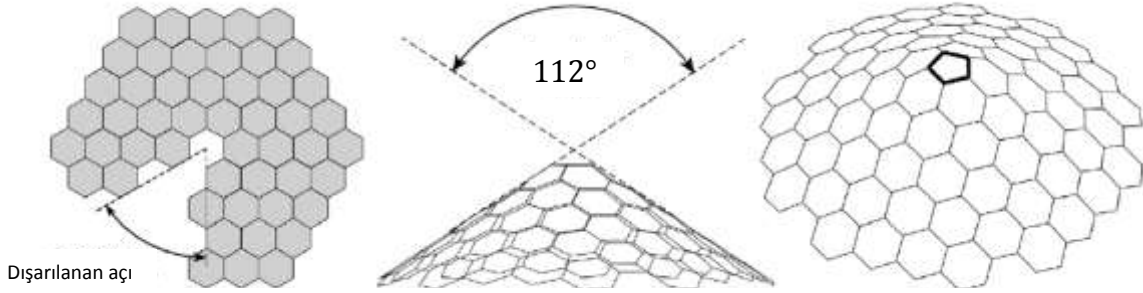
şeklindeki Euler teoremi (Hardy ve Wright 1980) yardımıyla kolayca hesaplanabilir. Burada  $\theta$  koni açısı ve  $n$  ise 1'den 6'ya kadar değer alabilen pentagonal karbon halkaların sayısıdır. Bu yapıların özel bir hali olarak  $n = 0$  düzlem grafeni ele aldığımızda,  $\theta_0 = 180^\circ$  tepe açısı elde edildiğinden düzlem grafen olduğu doğrulanmış olur. Grafen nano-konilerin düşük enerjili elektronik yapısı nano-konilerin tepe açıları ve dışarılanmış  $60^\circ$  lik karbon atomu sektörleri ile ilişkilendirilmiş geometrisinden büyük oranda etkilenir (Gupta ve Saxena 2011).



Şekil 4.3 Kapalı koni modeli kullanılarak elde edilen grafen konilerin mikroyapısal görüntüleri (Lin vd. 2007)

Hekzagonal grafen yüzeyinde şekil 4.3.a üç tane beşgensel yapı kullanılarak elde edilen grafen-koni şekil 4.3.b iki tane beşgensel yapı kullanılarak elde edilen grafen koni ve

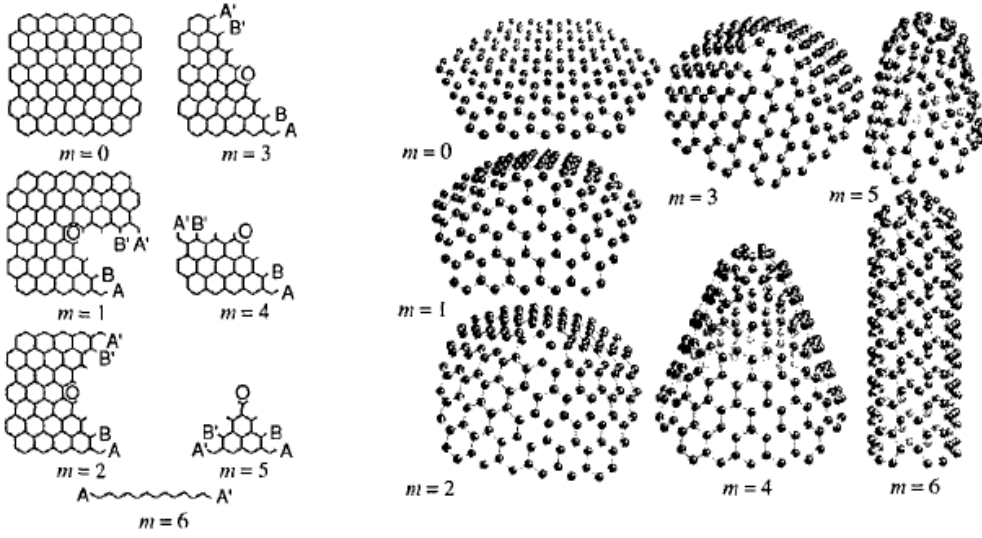
şekil 4.3.c’de ise bir tane beşgensel yapı kullanılarak elde edilen grafen-koninin SEM (taramalı elektron mikroskop) ile elde edilmiş görüntüleri elde edilir. Bu görüntüler ile birlikte öteleme simetrisi uyumsuzluğundan kaynaklı kusur türleri örneklenmektedir.



Şekil 4.4 60°’lik dışarlama açısı ile düzlem grafenden bir tek nano koni oluşumu (Ekşioğlu ve Nadarajah 2006)

#### 4.1.2 Grafen yüzeyin merkezlenmiş hekzagonal halkası üzerinden yapılan dışarlamalar ile elde edilen grafen nano koniler

Çalışmanın bu bölümünde düzlemsel grafen yüzeylerden dışarlamalar yalnızca merkezlenen hekzagonal halkalar üzerinden yapılmaktadır. Yine dışarlama sektörlerimiz bir karbon atomu sektörüne karşılık gelen 60° ve katları şeklinde devam etmektedir. Şekil 4.5’de de görüldüğü gibi dışarlamalar ile birlikte, eksik bölgenin kapanması için döndürülerek  $A$ ,  $A'$  ve  $B$ ,  $B'$  noktaları birleştirilir. Birleşen çizgiler boyunca dönme simetrisi uyumsuzluğu ile birlikte grafitik nano-koniler oluşur. Burada  $m$ , merkezlenmiş altıgen halka yüzeyinden dışarılanmış karbon atomu sektörlerinin sayısını göstermektedir.



Şekil 4.5 Hekzagonal grafen yüzeyinden bir silindir ve beş farklı koni yapısının nasıl hazırlandığının örnekleri (Treachy ve Kilian 2001)

Bu şekilde merkezdeki halka yüzeyinden uzaklaştırılan (dahil edilen)  $60^\circ$ 'lik karbon atomu sektörleri ile oluşturulan koni (semer yüzeyi) dönme tipi topolojik kusurdur.

Deneysel araştırmacılar bu tür grafen konilerin nasıl üretileceğine odaklanırken, bu çalışmada koninin tepesindeki topolojik kusurun, karbon nano ölçekli bu yeni sınıfın elektronik özelliklerinin nasıl değiştirdiği konusu üzerine odaklanılacaktır.

## 4.2 Topolojik Kusurlu Grafen Yapıların Eğri Uzayda Alan Teorisi ile Temsili

Topolojik kusur varlığında Dirac denklemi aracılığıyla sistemin düşük enerjili yapısı diferensiyel geometri formalizminde ayar alanları ile temsil edilebilir. Genel bir eğri uzay, metrik  $g^{\mu\nu}$  ve torsiyon  $T_{\mu\nu}^\lambda$  olmak üzere iki tensör alanı bilindikten sonra standart prosedürler kullanılarak elde edilir. Biz çalışmamızda daha önce de belirtildiği gibi dönme simetrisi uyumsuzluğundan kaynaklı topolojik kusurlar ile ilgileniyoruz. Ancak torsiyon alanı sistemde Burger vektörü aracılığıyla temsil edilen topolojik kusurlar varlığında örgü üzerinde öteleme kusurları oluştuğunda dahil olduğundan, bu çalışmada sadece  $g^{\mu\nu}$  metrik tensör aracılığıyla Dirac denkleminde kendini gösterir.

Eğri uzay- zamanda kütlelesiz Dirac spinorlarının dinamiği,

$$i\gamma^\mu(\mathbf{r})\nabla_\mu\Psi = 0 \quad (4.2)$$

şeklindeki Dirac denklemi ile tanımlanır. Burada  $\gamma$  Pauli (gamma) matrisi,  $\nabla_\mu\Psi$  ise Dirac spinorlarının türevidir.  $\gamma$  Pauli matrisi eğri-uzayda

$$\{\gamma^\mu(\mathbf{r}),\gamma^\nu(\mathbf{r})\} = 2g^{\mu\nu}(\mathbf{r}) \quad (4.3)$$

anti-komütasyon ilişkisini sağlamak zorundadır. 2 + 1 boyutta Einstein denkleminin çözümü olarak ise,

$$ds^2 = dr^2 + \alpha^2 r^2 d\theta^2 \quad (4.4)$$

şeklindeki metrik elde edilir. Bu koniksel metrik sürekli limitte topolojik kusurlu grafenin geometrisini tanımlama imkanı verirken  $\alpha = 1 - \frac{n}{6}$  ile ilişkilendirilir.

(4.4) denkleminde verilen metrik ifadesi daha bilinen formuyla,

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \alpha^2 r^2 \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

şeklinde ifade edilir. Bu ifade de dikkat edilirse, uzayın kendisi eğri değildir. Sadece eğrisel koordinatlar kendi geometrik faktörlerini diğer bir deyişle kusurlu yüzeylerini içinde barındırır. Düz uzayda kutupsal koordinatlarda Dirac Hamiltoniyeni,

$$H = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \partial_r + i\frac{\partial_\theta}{r} + \frac{1}{2r} \\ \partial_r - i\frac{\partial_\theta}{r} + \frac{1}{2r} & 0 \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

şeklinde dir. Bu çalışma kapsamında ele alınan problemde eğrisel yüzey veren geometrik faktörleri düz uzaydaki Dirac Hamiltoniyenine etkin bir ayar potansiyeli ile dahil edilir.

### 4.3 Topolojinin Grafende Kritik Yük Üzerine Etkisi

Bu kesimde, Coulomb yüklü grafen koniler için koninin ucunda Dirac denklemini kuracağız. Dirac noktaları yakınında sanki parçacıkların düşük enerji özellikleri aşağıdaki gibi dört bileşenli Dirac dalga denklemi ile tanımlanır.

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} \quad (4.7)$$
$$\psi_A = \begin{pmatrix} \psi_{A+} \\ \psi_{A-} \end{pmatrix} \quad \text{ve} \quad \psi_B = \begin{pmatrix} \psi_{B+} \\ \psi_{B-} \end{pmatrix}$$

$A$  ve  $B$  pseudo spin indisleri grafenin ilkel hücresinin iki alt örgüsünü etiketlerken, (+) ve (-) vadi indisleri sırasıyla eşit olmayan  $K_+$  ve  $K_-$  Dirac noktalarını işaret eder.

Dalga fonksiyonunun  $K_-$  bileşeni için, uygun olduğu çerçeve ( $x$  ve  $y$  eksenleri)  $180^\circ$  döndürüldüğünde  $K_+$  ile ilişkilendirilebilir. Buna rağmen  $\pm\pi/2$  fazının uygun değişimi ile bütün bileşenler için  $K_+$  çerçevesi kullanılır. Bu çerçeve örgü alt yüzeyi için kilit nokta olmamakla birlikte koni gibi bilinmeyen yüzeylerin incelenmesinde kullanışlıdır.  $K_+$  Dirac noktaları civarında düşük enerjili uyarımları düşünülerek  $Ze$  Coulomb yükü varlığında düzlem aralıksız grafen için Dirac denklemi aşağıdaki gibi verilir.

$$H\Psi = \left[ -i\hbar v_F (\sigma_1 \partial_x + \sigma_2 \partial_y) + \sigma_0 \left( -\frac{\alpha}{r} \right) \right] \Psi = E\Psi \quad (4.8)$$

Burada  $r$  iki boyutlu  $x - y$  düzleminde radial koordinat,  $\sigma_{1,2,3}$  Pauli spin matrisleri,  $\sigma_0$  birim matrisi ve  $\alpha = \frac{Ze^2}{\hbar\kappa v_F}$  Coulomb etkileşim gücünü temsil etmektedir.

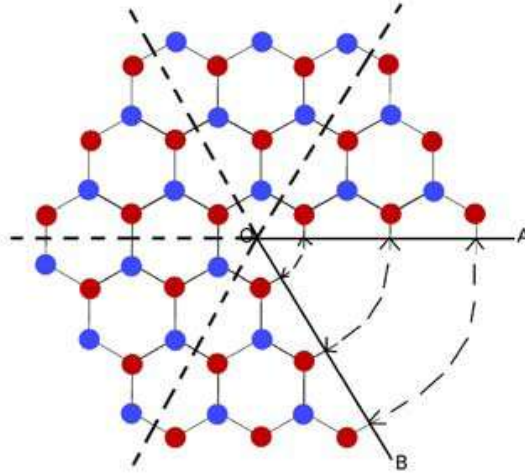
1984 yılında, kapalı kuantal bir sistemde taşınan elektronların Berry fazı adı verilen geometrik bir faz kazanacakları M. V. Berry tarafından ispatlanmıştır (Berry 1984). Bu tip bir faz faktörü elektromanyetik Aharonov-Bohm etkisi olmakla birlikte manyetik akı etrafında dolanan bir elektronun dalga fonksiyonunda kendini gösterir. Bu kuantumsal

holonomik faz tamamen geometrik kökenli olup, fiziğin çeşitli alanlarında önemli ve temel bir role sahiptir.

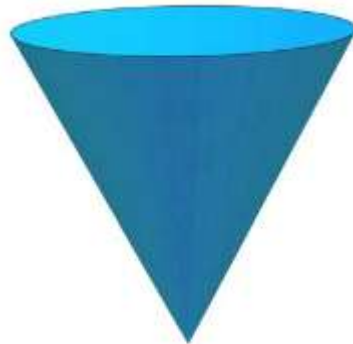
İki boyutlu düzlem grafende kapalı bir yol boyunca Dirac spinorları için, açısal sınır koşulları dalga fonksiyonunda

$$\Psi(\mathbf{r}, \theta = 2\pi) = e^{i\pi\sigma_3} \Psi(\mathbf{r}, \theta = 0) \quad (4.9)$$

şeklindeki gibi kendini gösterir. Ancak koniksel topolojiye sahip kusurlu grafende sanki-parçacık dalga fonksiyonları için bir koni şekil 4.6'da görüldüğü gibi iki boyutlu düzleme topolojik kusur aşılıyarak elde edilir. Bu durum açısal sınır koşullarını değiştirmekle mümkün olmaktadır.



(a)

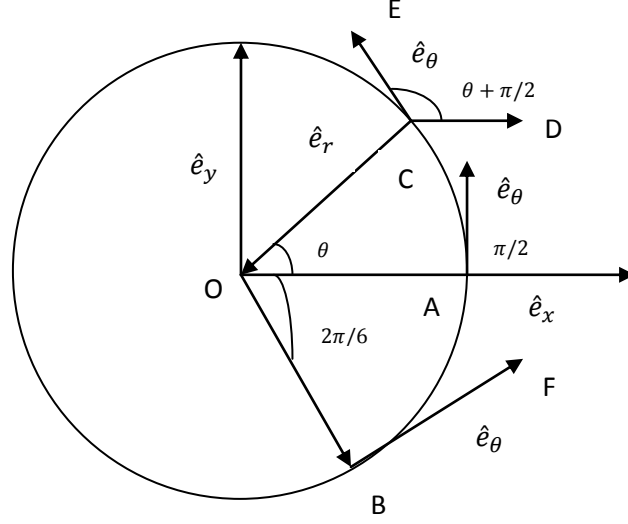


(b)

Şekil.4.6 Grafen koni (Chakraborty vd 2011)

a. Düzlemsel grafen tabakasından kesip yapıştırma yöntemi ile grafen koni oluşturma, b. Grafen yüzeyinden koninin elde edilişi

Şekil 4.6.a'da görülen  $AOB$  sektörü kaldırılınsın ve  $AO$  kenarı  $\theta = 0$  açısı ve  $OB$  kenarı ise  $\theta = 2\pi$  ile etiketlensin.  $AOB$  ye karşılık gelen açı  $O$  merkezinden  $2\pi/6$  lık bir açı değeridir.  $AO$  ve  $OB$  kenarları boyunca birleştirilmesiyle oluşan bir koni ise şekil 4.6.b'de görülmektedir.



Şekil 4.7 Koordinat sisteminin dönmesinden dolayı oluşan yeni koordinat sistemi (Chakraborty vd. 2011)

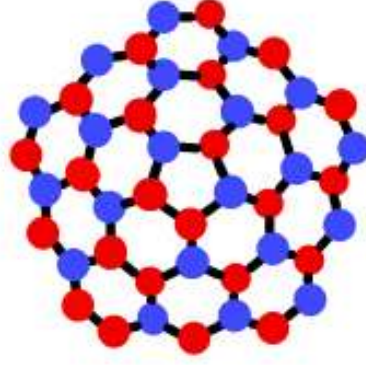
Bu durumda  $\{e_x, e_y\}$  eski çerçeve yeni çerçeve göre saat ibrelerinin tersi yönünde  $\phi = \theta + \frac{\pi}{2}$  lik açı ile dönmüş olur ve birleşen çizgi boyunca bir süreksizlik oluşur. Bu problem yeni koordinat çerçevesinin

$$\hat{e}'_x = \hat{e}_\theta, \quad \hat{e}'_y = -\hat{e}_r \quad (4.10)$$

şeklinde tanımlanmasıyla çözülür. Eğer  $n$  sektör düzlemde uzaklaştırılan  $60^\circ$ 'lik karbon atomu sektörlerini temsil ettiği düşünülürse ki  $n = 1, 2, 3, 4, 5$  sadece kesikli değerleri alır. Bu durumda dalga fonksiyonu,

$$\Psi(\mathbf{r}, \theta = 2\pi) = -e^{i2\pi\left(1-\frac{n}{6}\right)\frac{\sigma_3}{2}}\Psi(\mathbf{r}, \theta = 0) \quad (4.11)$$

şeklinde dönüştürülmelidir.



Şekil 4.8 Grafen düzleminde  $2\pi/6$  lık açı sektörünün kaldırılmasıyla oluşan grafen koni (Chakraborty vd. 2011)

Dirac denklemleri ile tanımladığımız iki boyutlu grafen yapısını, momentum-uzay notasyonuna geçerek değerlendirebileceği düşünebilir. Ancak burada momentum-uzay notasyonunu kullanamıyoruz. Çünkü grafen koniler gibi kusurlu formlar dönme kusurları barındırdığından bir elektronik faz açığa çıkarılır. Yani, koordinat çerçevesi  $\{e_x, e_y\}$  saat ibrelerinin tersi yönünde  $\theta$  kadar döndürülürse, dalga fonksiyonu da eş zamanlı olarak  $\exp(\frac{i\theta\sigma_3}{2})$  ile çarpılarak döndürüldüğünde Hamiltoniyenin formu korunur. Ayrıca, dalga fonksiyonunun açısal kısmı  $e^{ij\theta}$  şeklindedir,  $j$  yarı tam sayıdır. Bu yüzden dikkat edilirse, dalga fonksiyonu açısal kısmı ve radyal kısmı olmak üzere iki parçaya ayırdığımızda,

$$\Psi(\mathbf{r}, \theta) = \sum_j \chi^j(\mathbf{r}) e^{ij\theta} \quad (4.12)$$

dalga fonksiyonunun açısal kısmında  $j$  yarı tam sayı değerlerini aldığından (-) negatif işaret olarak dalga fonksiyonunun önünde yerini alır. Öte yandan eğer bir koni  $2\pi/6$  açıklık tek bir aralığın kaldırılmasıyla oluşmuş ise şekil 4.8'den de görüldüğü gibi tanımlanan noktalar aynı alt örgü çizgisinin iki yanı üzerindeki bitişik noktalardır. Bu özellik mümkün bütün tek  $n$  'ler için geçerlidir. Böylelikle sistem tek Fermi noktalı sistem olur. Diğer bir deyişle hexagonal örgünün iki parçalı doğası kırılmış olur.

Bu faktörler de göz önüne alındığında  $n$ 'nin genel değerleri için açısız sınır koşulları sağlanır ve dalga fonksiyonuna ek bir faz çarpanı gelir ve

$$\Psi(\mathbf{r}, \theta = 2\pi) = -e^{2\pi i \left[ -\left(\frac{n\tau}{4}\right) + \frac{(1-\frac{n}{6})\sigma_3}{2} \right]} \Psi(\mathbf{r}, \theta = 0) \quad (4.13)$$

ile gösterilir.  $n = 0$  açısız koşulu 2 boyutlu düzlem grafen için kapalı bir yoldur.  $n = 2$  ve  $n = 4$  çift değerleri için denklem (4.13)'den de görüleceği gibi  $\tau$  açısız sınır koşullarında rol oynamaz. Böylece,  $n = 1, 3, 5$  değerleri için Dirac denkleminin enerji öz durumları dalga fonksiyonunda  $\tau$  spin görevi görüyor.  $\tau$  spin görevi gördüğünden özdeğerleri  $\pm 1$  olduğundan açısız sınır koşulları ile birlikte (4.14) ile verilen dalga fonksiyonu kullanılacak olup,  $n$  nin bütün tek değerleri izinli sayılacaktır.

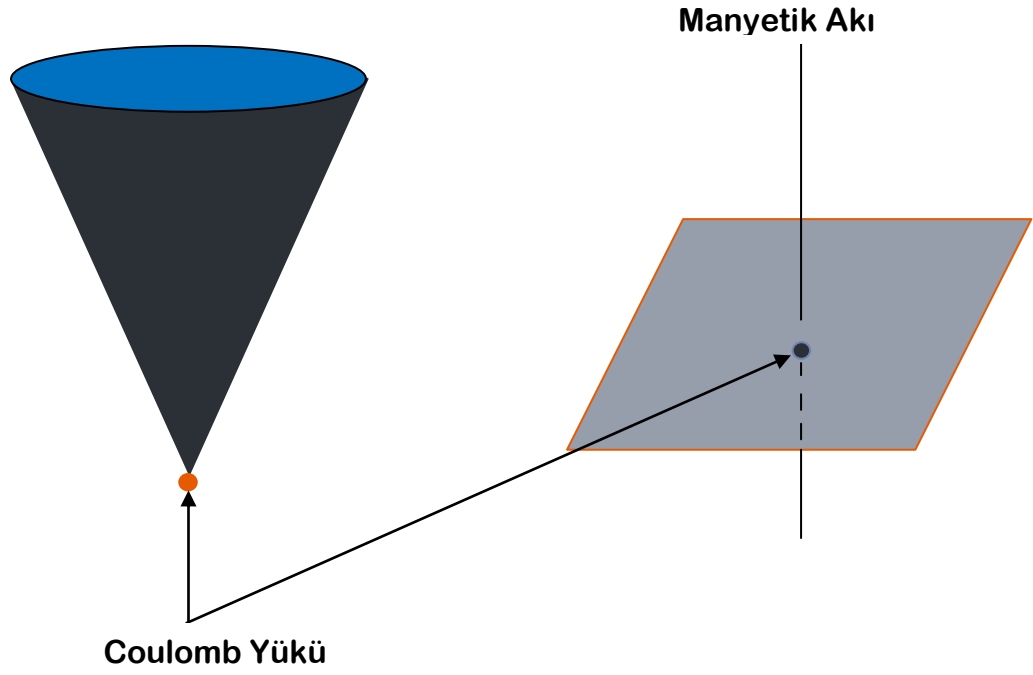
$$\Psi(\mathbf{r}, \theta = 2\pi) = -e^{2\pi i \left[ \pm \left(\frac{n}{4}\right) + \frac{(1-\frac{n}{6})\sigma_3}{2} \right]} \Psi(\mathbf{r}, \theta = 0) \quad (4.14)$$

Şimdiye kadar dalga fonksiyonunun açısız sınır koşullarından bahsedildi. Dalga fonksiyonu üzerindeki açısız sınır koşulları koninin tepesi boyunca manyetik akı geçişine karşılık gelecek şekilde tanımlanır.

Manyetik vektör potansiyelinin varlığında Dirac spinorları üzerindeki sınır koşulları değişir ve

$$\Psi(\mathbf{r}, \theta = 2\pi) = -\exp(i e \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}) \Psi(\mathbf{r}, \theta = 0) \quad (4.15)$$

şeklindeki dalga fonksiyonuna karşılık gelecek şekilde tanımlanır.



Şekil 4.9 Grafen koni

Koninin tepesinden  $r$  kadar mesafede koninin çevresi üzerindeki çizgi elemanı  $d\mathbf{l}$  alınsın.

$$d\mathbf{l} = \hat{e}_\theta r \left(1 - \frac{n}{6}\right) d\theta \quad (4.16)$$

Denklem (4.16), denklem (4.15)'de yerine yazıldığında ve  $A_\theta$  nın  $\theta$  açısından bağımsız olduğunu varsayımı altında

$$\Psi(\mathbf{r}, \theta = 2\pi) = -\exp\left(ie \oint \mathbf{A} \cdot \hat{e}_\theta r \left(1 - \frac{n}{6}\right) d\theta\right) \Psi(\mathbf{r}, \theta = 0) \quad (4.17)$$

sonucuna ulaşılması ile

$$\Psi(\mathbf{r}, \theta = 2\pi) = -\exp\left(ie 2\pi r \left(1 - \frac{n}{6}\right) A_\theta\right) \Psi(\mathbf{r}, \theta = 0) \quad (4.18)$$

şeklindeki koniksel topolojik etkinin gözlemlendiği durumdaki dalga fonksiyonu tanımlanır. Bu dönüşümü sağlayan vektör potansiyel nedir sorusundan yola çıkılarak (4.14) ve (4.18) ifadelerinin eşitliği sağlatıldığında ise

$$A_\theta = \frac{1}{er} \left[ \pm \frac{n/4}{(1-\frac{n}{6})} + \frac{\sigma_3}{2} \right] \quad (4.19)$$

olarak elde edilen vektör potansiyeli elde edilir. Böylece, koni tepesinde Coulomb yüklü grafen-koni için hamiltoniyen bu etkin tanım ile birlikte

$$H = -i(\sigma_1 \partial_x + \sigma_2 \partial_y) - e(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{e}_\theta) A_\theta - \sigma_0 \left( -\frac{\alpha}{r} \right) \quad (4.20)$$

şeklindeki gibi verilir. Bu hamiltoniyenin momentum uzayına geçilerek çözülebileceği düşünülebilir. Ancak, simetrinin topolojik olarak kırıldığı durumlarda momentum uzayına geçilemeyeceği hatırlanırsa,  $(x', y')$  koordinat sisteminden  $(r, \theta)$  yeni koordinat sistemine geçişi problemin çözümü için tanımlanan  $\hat{e}'_x = \hat{e}_\theta$  ve  $\hat{e}'_y = -\hat{e}_r$  şeklindeki baz vektörleri yardımı ile gerçekleştirilebilir.

Böylece, malzeme hakkındaki bilginin uzay-zamanın yapısı içinde saklandığı görülür ve yerel yapısının düz olmasına rağmen grafen malzemesinin topolojisi bozulduğunda uzay-zamanın yapısı konikleşir. Uzay zamanın koniksel yapısı parçacıkların yörüngesinin eğilmesine sebep olur ve bu eğilme koninin açıklık açısına yani grafen yapı üzerinde bir karbon atomu sektörüne karşılık gelen  $2\pi/6$  lık açıklıkların sayısına bağlıdır. Bununla birlikte, bu çalışmada görülüyor ki Dirac spinorları kusurlu koni çevresinde hareket ettiğinde aşikar olmayan bu fazı algılar ve bu faz dalga fonksiyonuna ayar alanları ile girerek kendini gösterir. Böylece, topolojik kusur sıfırdan farklı bir Berry fazına sebep olur.

Dirac denklemi formunda temsil edilen (4.8) denklemi matris formunda ise aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$H \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\alpha}{r} & \partial_r - \frac{i}{r(1-\frac{n}{6})} \partial_\theta \pm \frac{\frac{n}{4} + \frac{1}{2r}}{r(1-\frac{n}{6})} \\ -\partial_r - \frac{i}{r(1-\frac{n}{6})} \partial_\theta \pm \frac{\frac{n}{4} - \frac{1}{2r}}{r(1-\frac{n}{6})} & -\frac{\alpha}{r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} \quad (4.21)$$

(4.21) denklemi ile verilen hamiltoniyenin çözümü için dalga fonksiyonunun,

$$\Psi(\mathbf{r}, \theta) = \sum_j \begin{pmatrix} \psi_A^{(j)}(\mathbf{r}) \\ i\psi_B^{(j)}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \exp(-iEr) r^{\gamma-(1/2)} \exp(ij\theta) \quad (4.22)$$

yapısında olması gerektiği öngörülür ve ansatz olarak önerilir. Dalga fonksiyonunun açılmal bağımlılığı düzlem grafenden farklıdır. Bu farklılık topolojik kusurlu grafen yüzeyini tanımlamak için seçtiğimiz koordinat çerçevesinden kaynaklanmaktadır. Denklem (4.22)'yı, denklem (4.21) ile verilen Hamiltoniyen ifadesinde yerine yazdığımızda, dalga fonksiyonunun kısa menzilli davranışı  $\psi_{A,B}^{(j)}(r) \sim r^{\gamma-(1/2)}$  şeklinde gözlenmiş olur.

$$\gamma = \sqrt{v^2 - \alpha_c^2} \quad (4.23)$$

$$v = \frac{(j \pm \frac{n}{4})}{(1 - \frac{n}{4})}$$

Grafende çiftlenimin kritik değeri  $\alpha_c$ , açılmal momentum  $j$  değerine ve grafen koni elde etmek için düzlemden uzaklaştırılan karbon atomu sektörünün sayısına bağımlılık gösterir. Grafenin kritik yük değeri  $\alpha_c$  yani,  $|v|$ 'nin minimum değerinin grafen koninin açıklık açısına bağımlılığı aşağıda oluşturulan çizelgede gösterilmiştir.

Çizelge 4.1  $n$  kusun sayısının ve  $j$  açısai momentumun farklı değeri için konik-grafenin kritik yük değeri

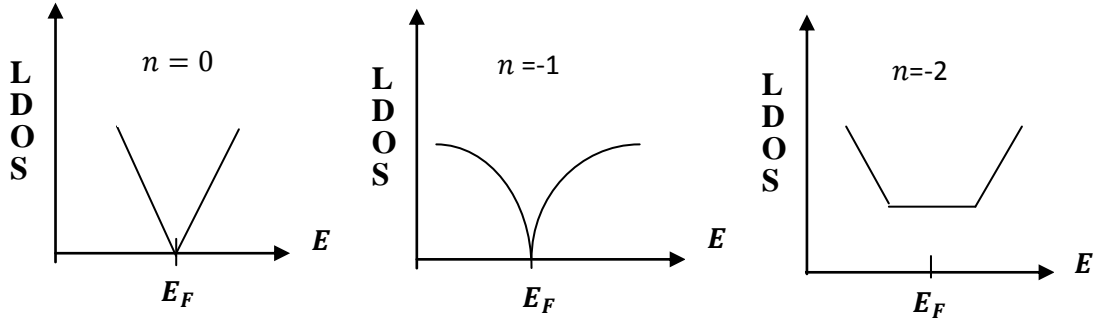
$n$ kusun sayısı	kritik yük değeri	$j$ açısai momentum
0	0.5	$\pm\frac{1}{2}$
1	0.3	$\pm\frac{1}{2}$
2	0	$\pm\frac{1}{2}$
3	0.5	$\pm\frac{1}{2}$
4	1.5	$\pm\frac{1}{2}$
5	1.5	$\pm\frac{3}{2}$

$n = 2$  değeri durumunda kritik yük değeri sıfır olması şaşırtıcı bir sonuç olarak karşımıza çıktı. Daha önce belirtildiği gibi bağıli durum çözümleri elde edilerek analizlerimiz yapıldı.  $n = 2$  değeri için hesaplamalar süperkritik rejime düştüğünden kritik yük değeri sıfır olduđu anlaşıyor.

Kritik yük değeri, diğeri bir deyişle ince yapı sabiti elektromanyetik etkileşimlerin gücünün bir ölçüsüdür. Elektronların atom ve moleküller içinde çekirdeklere bağılandıkları gücün derecesini belirtir. Dış potansiyel varlığında Dirac parçacıkları için bu ince yapı sabiti  $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$  civarında değeri alırken, aralıksız grafende düşük enerji uyarımları iki boyutlu kütlesiz Dirac denklemleriyle tasvir edilirken küçük bir dış yük safsızlığında Coulomb etkileşim gücü  $\alpha = \frac{Ze^2}{\hbar\kappa v_F} \sim 1$  şeklinde ifade edildiğinden güçlü pertürbatif olmayan etkiler meydana getirir. Burada  $\kappa$  dielektrik sabitidir. Grafeni incelediğimiz alttaşa bağıli olmakla birlikte silikon gibi bir alttaş üzerinde  $\kappa \sim 5$  alınabilir. Böylece grafenin, güçlü kuantum elektrodinamik etkileşimlerin analizinde ideal bir

sistem olduğu anlaşılıyor. Ayrıca, topolojik kusurlu konik-grafenin üzerindeki kusur sayısına bağlı olarak değişen kritik yük değeriyle birlikte evrensel bir sabit olan ince yapı sabitinin evrenselliğinin tartışılır duruma geldiği görülür.

Öte yandan denklem (4.23) ifadesinden de görüldüğü gibi  $|\alpha|$  değeri  $|\nu|$  yü aştığında,  $\gamma$  imajiner olur.  $\Psi_{A,B}^{(K)}(\mathbf{r})$  ve  $\Psi_{A,B}^{(K')}(\mathbf{r})$  öz durumları hızlı bir salınım gösterir ve  $r \rightarrow 0$  a giderken iyi tanımlılığını yitirir ve güçlü Coulomb alanında görelî kuantum mekaniksel bir olay olan zitterbewegung fenomenine karşılık gelir (Rusin ve Zawadzki 2009). Bu kavram görelî kuantum parçacığının pozisyonundaki belirsizliktir ve pozisyon ölçümündeki anti-parçacık yaratılmasının kaçınılmaz olmasından kaynaklanmaktadır. Dahası, böyle bir sistemin durum yoğunluğu analizi de yapılabilir. Serbest elektron gazında durum yoğunluğu bir sabit olduğundan, düzlem grafende K noktaları civarında durum yoğunluğu da sıfır değerini alır (Lambert ve Crespi 2000). Topolojik kusurun oluşturulduğu grafen yüzeylerde ise koninin tepesi yakınında enerji durum yoğunluğu dikkate değer şekilde koninin açıklık açısına bağlılık gösterir (Lambert ve Crespi 2000).



Şekil 4.10 Koninin tepesi civarında durum yoğunluğu (Lambert ve Crespi 2000)

$n = 0$  kusurun bulunmadığı durumdaki enerji durum yoğunluğu,  $n = 1$   $2\pi/6$  lık açıklık açısının bulunduğu durumdaki durum yoğunluğu,  $n = 2$ ,  $4\pi/6$  lık açıklık açısının olduğu durumdaki enerji durum yoğunluğunun şematik gösterimidir.

#### 4.4 Topolojik Kusurlu Aralıklı Grafen Konilerde Pseudo-Zeeman Yarılmasının Manyetik Alan ile Kontrolü

Çalışmanın bu kısmında, alt kritik rejimde pertürbasyon teorisi çerçevesinde aralıklı grafen koninin tepesinde uzun menzilli yüklü Coulomb safsızlığının varlığında elektronik enerji spektrumu üzerine manyetik alanın etkileri araştırılıp, sistemin bağlı durum çözümleri elde edildi. Öncelikle, topolojik kusurlardan dolayı açılmal momentum kanalları üzerinde dejenereliğin ortadan kalktığı görüldü. Devamında ise sistem homojen bir manyetik alana maruz bırakıldığında, sistemin enerji seviyelerindeki aralıkların manyetik alanın etkisiyle açıldığı gözlemlendi. Böylelikle, grafen koni üzerinde pseudo-Zeeman yarılmalarının homojen manyetik alan ve grafen koniyi oluşturan açıklıkların sayısı ile nasıl kontrol edilebileceği tartışılacaktır.

Öncelikle aralıklı grafenin Brillouin bölgesinin K noktaları civarında Coulomb yüklü safsızlıklı etkin düşük enerjili Dirac denklemi grafen düzlemine dik homojen bir manyetik alana maruz bırakıldığında

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix}, \Psi_{A,B} = \begin{pmatrix} \Psi_{AB+} \\ \Psi_{AB-} \end{pmatrix} \quad (4.24)$$

spinor dalga fonksiyonları aracılığı ile

$$H\Psi = \left[ v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) + \sigma_0 \left( -\frac{Ze^2}{\epsilon r} \right) + mv_F^2 \sigma_3 \right] \Psi \quad (4.25)$$

şeklinde elde edilir. Burada  $v_F = 3t_0 a/2 \approx 10^6 \text{ m/s}$  elektronun Fermi hızı,  $a$  ise grafen örgünün bağ uzunluğu,  $t_0$  hopping parametresi,  $\sigma_i$ 'ler Pauli spin matrisleri,  $A = B(-y, x, 0)/2$  olarak simetrik ayarda seçilmiş vektör potansiyeli ve  $Ze^2/\epsilon$  ise Coulomb etkileşim gücünü temsil etmektedir.  $Z$  safsızlık atom numarası,  $\epsilon$  dielektrik sabiti ve buradaki  $m$  ise, örneğin spin-yörünge çiftlenimi veya grafeni büyütme tekniği kullanarak yüzeyden ayırıştırma sırasında oluşan kusurdan dolayı alt örgü simetrisinin kırılmasıyla oluşan Dirac kütesidir. Denklem (4.24) ifadesinde  $A$  ve  $B$  pseudospin indislerini,  $+$  ve  $-$  ise  $K$  ve  $K'$  vadilerini temsil etmektedir.

Öncelikle topolojik kusurları sistemi dahil etmek için  $\Psi$  spinor dalga fonksiyonları üzerinde holonomik etkiyi yaratan (pseudo) sanki manyetik ayar alanı denklem (4.25)'e dahil edilir. Bununla birlikte simetrik ayarda seçilmiş etkin homojen manyetik vektör potansiyeli ile birlikte koninin tepesinde Coulomb yüklü safsızlığın varlığında konik grafenin düşük enerjili uyarımları  $\bar{H} = \bar{H}_0 + \bar{H}'$  şeklindeki iki Hamiltoniyenin toplamı olarak yazılır.

$$\bar{H}_0 = \begin{pmatrix} m_0 - \frac{\alpha}{r} & \partial_r - \frac{i}{r(1-\frac{n}{6})} \partial_\theta \pm \frac{\frac{n}{4}}{r(1-\frac{n}{6})} + \frac{1}{2r} \\ -\partial_r - \frac{i}{r(1-\frac{n}{6})} \partial_\theta \pm \frac{\frac{n}{4}}{r(1-\frac{n}{6})} - \frac{1}{2r} & -m_0 - \frac{\alpha}{r} \end{pmatrix} \quad (4.26)$$

ve

$$\bar{H}' = \begin{pmatrix} 0 & -\bar{B}r/2a^2 \\ -\bar{B}r/2a^2 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.27)$$

burada  $\bar{B} = eBa^2/\hbar c = B/B_0$  ise  $B_0 = 3.26 \times 10^4 T$  ve  $a = 1.42 \text{ \AA}$  aracılığı ile yazılmış boyutsuz manyetik alan terimidir. Ayrıca, denklem (4.26) ifadesinde Dirac kütlesi ve Coulomb etkileşim genliği ifadeleri sırası ile boyutsuz nicelikler cinsinden  $m_0 = mv_F/\hbar$  ve  $a = Ze^2/\epsilon\hbar v_F$  şeklindeki gibi tanımlanmıştır. (4.26)  $\bar{H}_0$  Hamiltoniyei pertürbe olmamış Hamiltoniyen kısmı olduğundan dolayı tam çözümü elde edilebilir. Karşılık gelen enerji özdeğerleri,

$$N_{n,j}(m_0, \alpha) = \left\{ \frac{\Gamma(n+1)\lambda^3 [j + \sqrt{a^2 + (n+\gamma)^2}]}{\Gamma(n+2\gamma+1)m_0^2 \alpha} \right\}^{1/2} \quad (4.28)$$

normalizasyon sabiti ve  $C_{21} = -n + 2\gamma/(j + m_0\alpha/\lambda)$  olmak üzere

$$\left. \begin{matrix} F_{n,j} \\ G_{n,j} \end{matrix} \right\} = (-1)^n N_{n,j}(m_0, a) \sqrt{m_0 \pm \bar{\epsilon}_{n,j}^0} e^{-\lambda r} (2\lambda r)^{\gamma-1/2} [L_n^{2\gamma}(2\lambda r) \pm C_{21} L_{n-1}^{2\gamma}(2\lambda r)] \quad (4.29)$$

şeklinde tanımlanan Laguerre polinomları aracılığı ile

$$\Psi(r, \theta) = \begin{pmatrix} F_{n,j} e^{i\theta(j-1)} \\ i G_{n,j} e^{i\theta(j)} \end{pmatrix} \quad (4.30)$$

$F_{n,j}$  ve  $G_{n,j}$  öz fonksiyonları cinsinden tarif edilir. Böylece, pertürbe olmamış kısmın çözümü

$$\bar{\varepsilon}_{n,j}^0 = \frac{m_0 \operatorname{sgn}(a)}{\left[1 + \frac{a^2}{(n + \sqrt{v^2 - a^2})}\right]^{1/2}} \quad (4.31)$$

şeklinde elde edilir. (4.29) Laguerre polinomları içerisinde tanımlı ifadelerden  $\lambda = a m_0 / \sqrt{a^2 + (n + \gamma)^2}$  ve  $\gamma = \sqrt{v^2 - a^2}$  şeklinde verilir.  $v = (j \pm n_\Omega/4)/(1 - n_\Omega/6)$ ,  $j$  değerine olduğu kadar aralıklı grafenden topolojik kusurlu yapılar elde etmemize yarayan  $n_\Omega$  dışarlama sektörlerinin sayısına bağlıdır.  $j = m_j + 1/2$  ise,  $J_z$  toplam açısal momentumun özdeğeridir.  $n$  kuantum sayısı eğer  $m_j \geq 0$  ise  $0, 1, 2, \dots$  değerlerini ve  $m_j < 0$  ise  $1, 2, 3, \dots$  değerlerini alır. Dikkat edilmesi gereken nokta ise, en düşük açısal momentum değeri  $j = \pm 1/2$  değerinde  $n_\Omega = 0$  olduğu düzlem grafen durumunda kritik çiftlenim sabiti  $\alpha_c = 0.5$  değerini alır. Kritik çiftlenim sabiti  $\alpha_c$  değeri aralıklı grafenden uzaklaştırılan karbon atomu sektörlerinin artmasıyla birlikte  $n_\Omega = 2$  değeri haricinde bir artış gösterir.

Aralıklı konik grafende, manyetik alanın düşük enerjili özdeğerleri üzerindeki etkileri denklem (4.27) aracılığı ile birinci dereceden pertürbasyon teorisi aracılığı ile

$$\Delta \bar{\varepsilon}_{n,j} = \int d^2r \Psi^\dagger(r, \theta) \bar{H}' \Psi(r, \theta) \quad (4.32)$$

ifadesi kullanılarak analiz edildiğinde,

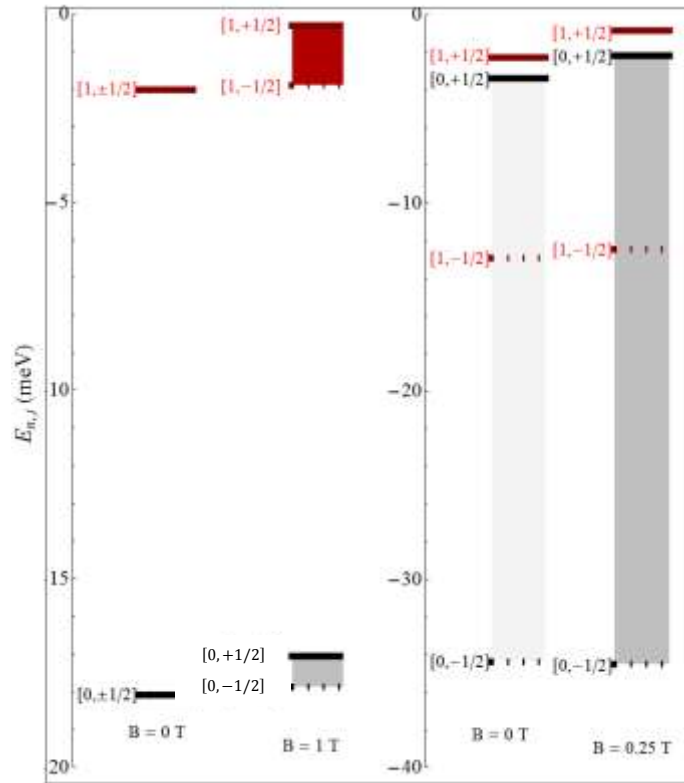
$$\Delta \bar{\epsilon}_{n,j} = \frac{1}{4} \frac{\bar{B}}{\bar{m}_0} \frac{1}{[\alpha^2 + (n+\gamma)^2]^{1/2}} \left[ (2n + \sqrt{v^2 - \alpha^2})v + [\alpha^2 + (n + \gamma)^2]^{1/2} \right] \quad (4.33)$$

şeklinde elde edilir.

Böylelikle, toplam Hamiltoniyen ifadesinin tam çözümü,

$$\begin{aligned} \bar{\epsilon}_{n,j} = & \frac{m_0 \text{sgn}(a)}{\left[ 1 + \frac{a^2}{(n + \sqrt{v^2 - a^2})} \right]^{1/2}} + \frac{1}{4} \frac{\bar{B}}{\bar{m}_0} \frac{1}{[\alpha^2 + (n + \gamma)^2]^{1/2}} \\ & \times \left[ (2n + \sqrt{v^2 - \alpha^2})v + [\alpha^2 + (n + \gamma)^2]^{1/2} \right] \end{aligned} \quad (4.34)$$

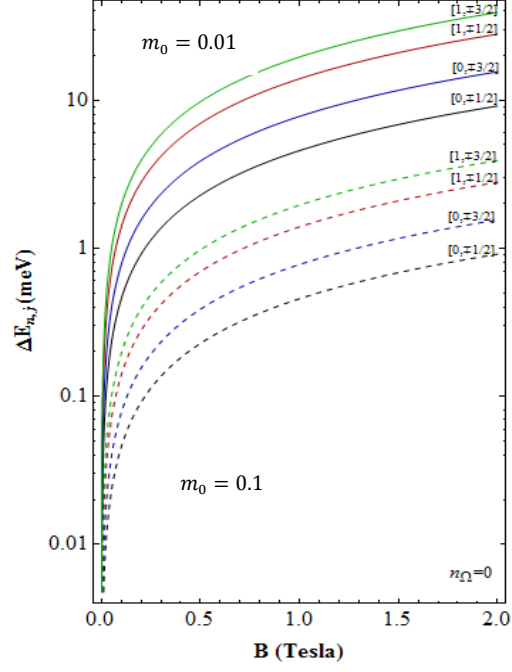
olarak bulunur.



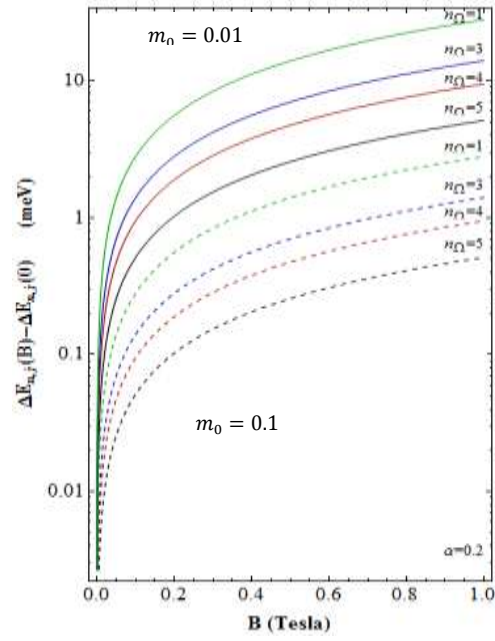
Şekil 4.11 Düzlem grafenin ve grafen koninin enerji seviyelerindeki yarılmalar

Şekil 4.11 de sol panelde sırasıyla magnetik alanın olmadığı ( $B = 0 T$ ) ve magnetik alanın  $B = 1 T$  olduğu durumlarda,  $n_{\Omega} = 0$  yani düzlem grafenin ilk iki enerji seviyesi analiz edilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi en düşük iki açisal momentum değerinde  $j = +1/2$  ve  $j = -1/2$  enerji seviyeleri dejeneredir. 1 Teslalık manyetik alanın sisteme dahil edilmesiyle enerji seviyelerindeki yarılmalar ile birlikte dejenereliğin ortadan kalktığı görülmektedir. Aynı şekilde sağ panelde bağlı durum enerji seviyeleri  $n_{\Omega} = 4$  grafen koninin tepesinde çizgisel iki karbon atomu olduğu durumdaki konik grafen yapı için manyetik alanın olmadığı ve manyetik alanın  $B = 0.25 T$  olduğu durumda analiz edilmiştir. Sağ panelin ilk blogundan da kolayca görülebileceği gibi manyetik alanın olmadığı durumda  $B = 0 T$ ,  $n_{\Omega} = 4$  değerli topolojik kusurun varlığında enerji seviyelerindeki dejenerelik ortadan kalkıyor. Üstelik topolojik kusurlu durumun sisteme vermiş olduğu manyetik alan etkisi, 1 Teslalık manyetik alanın enerji seviyelerine etkisinin daha fazla olduğu görülüyor. Ayrıca bu sisteme  $B = 0.25 T$ 'lık küçük bir magnetik alan katkısına bakıldığında ise enerji seviyelerinin daha da açıldığı görülür. Aynı şekilde bu enerji seviyelerindeki yarılmaların magnetik alanla değişimini daha da iyi görmek açısından, şekil 4.12.a ve 4.12.b çizilmiştir. Şekil 4.12.a Coulomb yüklü safsızlığın varlığında topolojik kusurun olmadığı aralıklı düzlem grafenin en düşük ilk iki enerji seviyesi  $n = 0$  ve  $n = 1$ , ve ilk iki en düşük açisal momentum kanalı  $j = \pm 1/2$  ve  $j = \pm 3/2$  için pseudo-Zeeman yarılmasının büyüklüğünün ( $\Delta E_{n,j} = E_{n,|j|} - E_{n,-|j|}$ ) magnetik alanın fonksiyonu olarak sırasıyla düz ve kesikli çizgilerle iki farklı kütle parametresi temsil edilmek üzere  $m_0 = 0.01$  ve  $m_0 = 0.1$  için çizilmiştir. Grafen malzemesi üzerinde manyetik alan değeri arttıkça pseudo-Zeeman yarılmasının arttığı görülür. Ayrıca, sistem üzerinde spin-yörünge etkileşmesi veya sistemin alttaş ile etkileşmesini temsil eden kütle parametresinin ise manyetik alanın aksine, azalan değerlerinde pseudo-Zeeman yarılmasını arttırdığı tespit edilir. Dahası şekil 4.12.b'nin analizinde ise, manyetik alanın sıfırdan farklı pseudo-Zeeman yarılmasının büyüklüğünün, manyetik alanın olmadığı durumdaki sadece topolojik kusurlardan ötürü oluşan pseudo-Zeeman yarılma enerjisi farkları, iki farklı kütle parametresi için manyetik alanın fonksiyonu olarak incelenir. Enerji seviyelerinin dört farklı topolojik kusurlu konik grafen oluşturmak için yüzeyden uzaklaştırılan  $n_{\Omega}$  ( $60^{\circ}$ 'lik karbon sektörleri) sayısına da şiddetli bir şekilde bağlı olduğu görülür. Artan kusur sayısı ile birlikte enerji seviyelerinin ise düştüğü görülmekle birlikte kütle

parametreleri ile bağlantılı enerji yüzeylerine bakıldığında ise yine artan kütle değeri ile birlikte enerji düzeylerinin azaldığı sonucuna varılır.



(a)



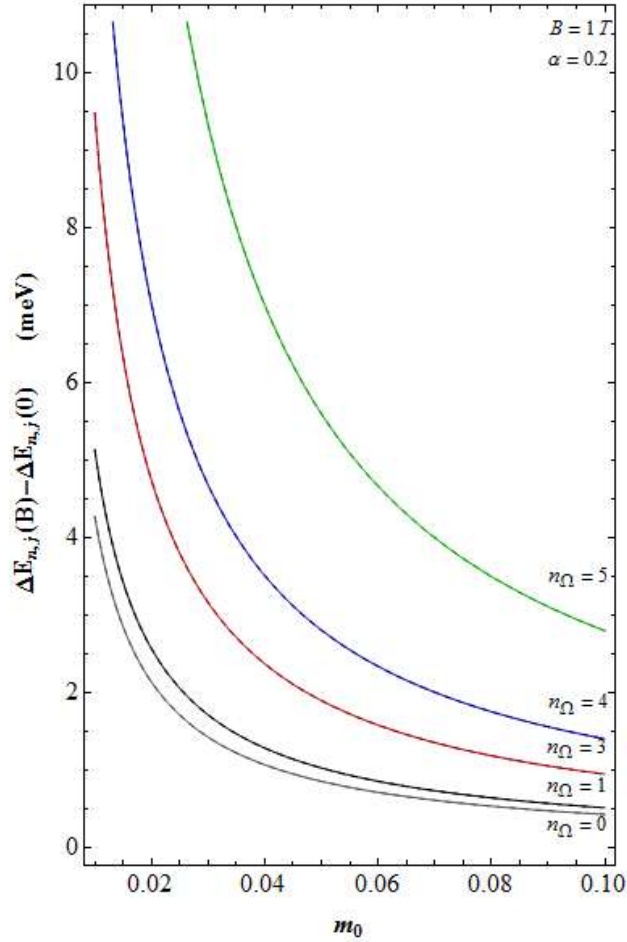
(b)

Şekil 4.12 Enerji yarılmaları

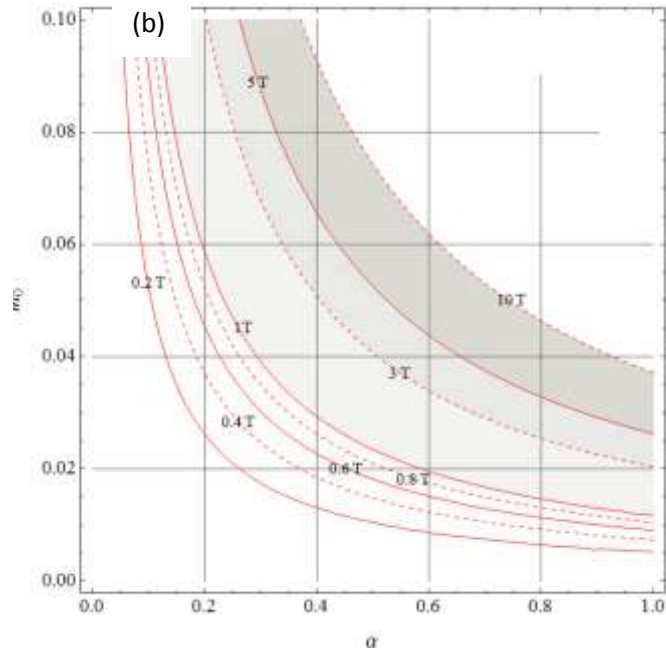
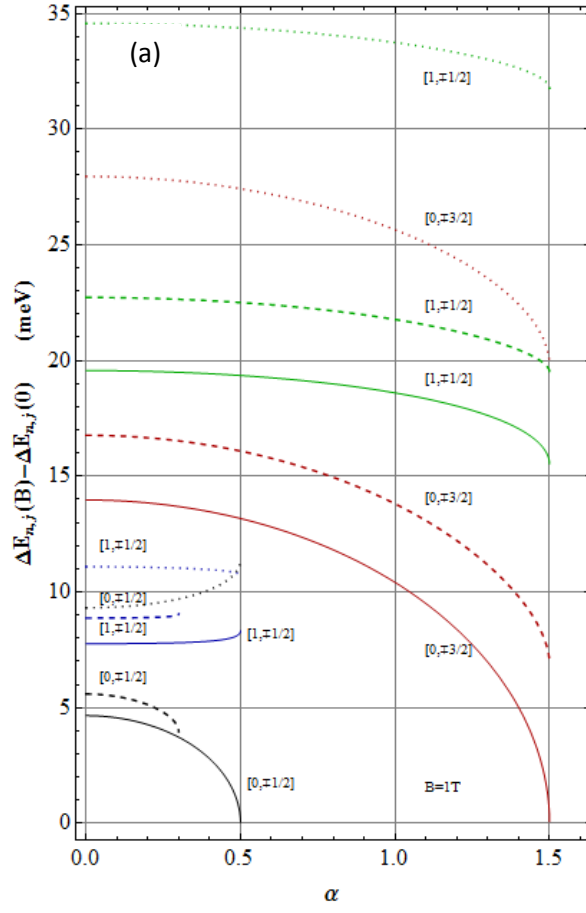
a. Coulomb yüklü aralıklı grafende topolojik kusurun olmadığı durumda pseudo-Zeeman yarılmalarının manyetik alana göre değişimi, b. topolojik kusurun olduğu durumda  $\alpha = 0.2$  ve  $m_0 = 0.01$  için manyetik alanın fonksiyonu olarak pseudo-Zeeman yarılmaları gösterilmektedir

Topolojik kusurların enerji seviyelerindeki rolünü daha iyi anlamak amacıyla ayrıca şekil 4.13 analiz edilmiştir. Sistemde 1 T'lik manyetik alanın sebep olduğu pseudo-Zeeman yarılmasının büyüklüğünün, manyetik alanın olmadığı durumdaki sadece topolojik kusurlardan dolayı oluşan pseudo-Zeeman yarılmasının enerjisi farkları düzlem grafen ve dört farklı konik grafen için kütle parametresinin fonksiyonu olarak incelenmiştir.

Şekilden de kolayca anlaşılacağı üzere manyetik alan etkileri grafen yüzeyinden uzaklaştırılan sektör sayısı arttıkça daha hızlı bir düşüş göstermekle birlikte, artan kütle parametresi değeri ile enerji düzeyleri azalış gösterir.



Şekil 4.13 Pseudo-Zeeman yarılması kütle fonksiyonu. Manyetik alandan dolayı pseudo-Zeeman yarılmasının  $m_0$  kütle teriminin fonksiyonu olarak,  $B = 1T$  lık manyetik alan değerinde ve  $\alpha = 0.2$ 'lik çiftlenme sabiti değerinde analiz edilmiştir



Şekil. 4.14.a.  $B = 1T$  lık manyetik alan varlığında pseudo-Zeeman yarılmalarının çiftlenim sabitine bağımlılığı, b. Kontor ilişkisi

Son olarak alt kritik rejimin sınır koşullarını ve problemde kullandığımız yaklaşımı daha iyi analiz edilebilmesi için şekil 4.14.a ve şekil 4.14.b çizilmiştir. Şekil 4.14.a dört farklı açısız momentum kanalı ( $j = \pm 1/2, \pm 3/2$ ) ve  $n_\Omega = 0$  düzlem grafen ve  $n_\Omega = 1$  ve  $n_\Omega = 3$  topolojik kusurlu koniler için enerji seviyeleri aralıklarını gösterir. Daha önce hesaplanan ve hesaplar dahilinde oluşturulan çizelge 4.1  $n$  kusur sayısının ve  $j$  açısız momentumun farklı değerleri için konik-grafenin kritik yük değerleri de şekil 4.14.a yardımı ile doğrulanmış olunur. Dikkat edilirse,  $n_\Omega = 0$  düzlem grafen için belirlenen güçlü pertürbatif olmayan kritik çiftlenim değeri de yine hesaplar doğrultusunda çizilen grafik ile birlikte doğrulanmış olunur. Ayrıca, homojen dış manyetik alanın Coulomb yüklü aralıklı konik grafenin enerji seviyelerine katkısı birinci dereceden pertürbasyon teorisi yardımı ile hesaplanır.  $\bar{B} \ll \alpha^2 m_0^2 / 2$  şeklindeki pertürbasyon koşulunu sağlayan manyetik alan değerleri için oluşturulan kontor yardımı ile pertürbasyon teorisinin geçerli olduğu aralık hakkında bilgi ise şekil 4.14.b yardımı ile sunulmuştur.

Uzun menzilli yüklü Coulomb safsızlıklı bir topolojik kusurun ve homojen bir manyetik alanın, aralıklı grafenin enerji seviyeleri üzerine etkileri pertürbasyon teorisinin etkin olduğu aralıkta yani zayıf alan rejiminde analiz edilmiştir. Topolojik kusurlardan kaynaklı pseudo-Zeeman yarılmalarının manyetik alanla birlikte daha da genişlediği görülmüştür.

## 5. GRAFENDE SPİN-YÖRÜNGE ETKİLEŞMELERİ

Atom fiziğinde, spin-yörünge etkileşimi (SYE) Dirac denkleminin görelî olmayan yaklaşımından kaynaklanır. Serbest bir elektron Hamiltoniyeni SYE varlığında

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{k} \times \nabla V) \quad (5.1)$$

şeklinde gösterilir. Burada  $m_0$  serbest elektron kütlesi,  $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$  momentum operatörü,  $V$  Coulomb potansiyeli ve  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  Pauli spin matris vektörüdür. SYE terimi spin paralel ve spin anti-paralel yörüngeler olarak dejenere enerji seviyelerini yarabilir. Yani, serbest atomda spin-yörünge etkileşimi zıt spinli ancak aynı yörüngesel dalga fonksiyonlu durumların dejenereliğini ortadan kaldırabilir. Ancak, katılarda kristal simetrisinden dolayı bu şekildeki enerji yarılımları yasaklanabilir. Kuantum mekaniğinin temel ilkelerinden birisi, zaman terslenme simetrisinin her zaman bir fonksiyon ile o fonksiyonun kompleks eşleniği arasındaki Kramers dejenereliğinin, elektronun spini ve dalga fonksiyonunun eş zamanlı olarak tersleneceğinden dolayı korunduğunu söyler. Bir katı kristalde elektronların hareketi  $E_n(\mathbf{k})$  enerji band dağılımları ile tanımlanmak üzere,  $n$  elektronların yörüngesel hareketini betimlerken,  $\mathbf{k}$  ise kuasi-momentum operatörüdür. Böylece, Brillouin bölgesinin herhangi bir noktasında, zaman terslenme simetrisi enerji band dispersiyonunda

$$E_n(\mathbf{k}, \uparrow) = E_n(-\mathbf{k}, \downarrow) \quad (5.2)$$

şeklindeki Kramers teoreminin geçerli olduğunu ifade ederken, daha genel olarak kristal örgü terslenme simetrisine sahip sistemlerde enerji band dağılımlarının,

$$E_n(\mathbf{k}, \uparrow) = E_n(-\mathbf{k}, \uparrow) \text{ ve } E_n(\mathbf{k}, \downarrow) = E_n(-\mathbf{k}, \downarrow) \quad (5.3)$$

şeklinde olduğu sonucuna varılır. Bu iki sonucun birleştirilmesiyle,

$$E_n(\mathbf{k}, \uparrow) = E_n(\mathbf{k}, \downarrow) \quad (5.4)$$

enerjinin elektronun spinine bağılı olmadığı görülmesiyle birlikte örgüde spin dejenereliğinin korunduğu söylenir.

Spin yörünge etkileşmesi, zıt spinli ancak aynı yörüngesel dalga fonksiyonlu durumlarda dejenereliği kaldırmakla birlikte, bir elektronun eş zamanlı olarak spininin ve açısal momentumun yer değiştirmesi veya genel olarak bir yörünge dalga fonksiyonundan diğerine geçiş olarak tanımlanır. Spin ve yörünge hareketinin karışması elektronun Dirac modelinden türetilen relativistik bir olgudur. Bu etkileşim, civa (Hg) ( $Z = 80$ ), kadmiyum (Cd) ( $Z = 48$ ) ve tellür (Te) ( $Z = 52$ ) gibi ağır iyonların elektronik band yapısında oldukça önemli ve büyük bir düzeltmeye sahip olmasının beklenmesinin yanı sıra karbon (C) ( $Z = 6$ ) gibi hafif atomlarda, spin-yörünge etkileşmesinin zayıf olması beklenir. Ancak, grafende spin-yörünge etkileşmesi, iki alt örgüde iki farklı işaretli, her bir Dirac noktasında etkin kütle olarak rol oynayan yörüngelerin spin bağımlı kaymasına sebep olurken, bu aralık 2+1 boyutta relativistik alan teorisinde parite anomalisine benzer ve aşikar olmayan spin hall iletkenliğine sebep olur.

Grafende iki tür spin-yörünge etkileşmesi mevcuttur. Bunlardan biri içsel spin yörünge etkileşmesi (intrinsic spin-orbit) olarak bilinmekle birlikte, bu çiftlenimin mertebesi  $\Delta = 0.01 - 0.05$  meV civarındadır. Bu çiftlenimin etkisini artırabilecek mekanizmalar grafen fiziğinin çalışma alanlarından biri olmasına rağmen etkisi ihmal edilebilecek kadar zayıf olduğu düşünülmektedir. Diğer spin-yörünge etkileşmesi ise yapının alttaşı ile etkileşmesi ya da dış elektrik alan ile ortaya çıktığı düşünülen Rashba spin-yörünge etkileşmesidir. Grafenin Ni (111) yüzeyi üzerindeki Rashba spin yörünge etkileşmesi  $\lambda = 225$  meV civarındadır. Bu çiftlenim sabitinin potansiyel spintronik cihazların tasarımında önemli bir role sahip olacağı düşünülmektedir. Dolayısıyla, bu tez çalışması kapsamında ele aldığımız spin yörünge çiftlenim türü Rashba spin yörünge etkileşmesi olacaktır.

## 5.1 Grafende Rashba Spin-Yörünge Etkileşmesi

Grafen ve grafen tabanlı malzemelerde Rashba SYE nin etkileri oldukça önemlidir. Bir sistem manyetik alana maruz bırakıldığında spin dejenereliğinin ortadan kalkması Zeeman olayı olarak tanımlanır. SYE hareketli elektronların elektrik alanı manyetik alan olarak gördüğü görelidir. Ancak Rashba SYE manyetik alan olmadığında dahi sistemin spin dejenereliği (katlılığı) ni ortadan kaldırmakla kalmaz sistemin spin bağımlı fiziksel karakterizasyonunu da belirler. Grafenin üzerine konulduğu alttaşıla etkileşmesi ya da dışarıdan uygulanan elektrik alan ile bal peteği örgü yapısının terslenme simetrisinin kırılması sistemde Rashba spin-yörünge etkileşmesi meydana getirir.

Kütlesiz Dirac Fermiyonları için Dirac Hamiltoniyeni  $H_G$  olmak üzere,

$$H_G = \gamma(\sigma_x \tau k_x + \sigma_y k_y) \quad (5.5)$$

şeklinde yazılabilir. Burada  $v_F \approx 10^6 m/s$  olarak tanımlanan Fermi hızı olmak üzere  $\gamma = \hbar v_F$  dir.  $\sigma$  ve  $\tau$  Pauli spin matrisleri olmak üzere sırasıyla  $A$  ve  $B$  alt örgülerini ve  $K(K')$  vadi serbestlik derecelerini tanımlar. Böyle bir sisteme Rashba spin yörünge etkileşmesi ise,

$$H_R = \frac{\lambda_R}{2} (\sigma_x \tau_z s_y - \sigma_y s_x) \quad (5.6)$$

şeklindeki bir ek terimle dahil edilebilir. O halde  $K$  noktasında Rashba spin-yörünge etkileşmesi varlığında tek tabakalı düzlem grafenin Hamiltoniyeninde  $k_{\pm} = k_x \pm k_y$  şeklindeki momentum operatörlerini temsil etmek üzere,

$$H_{R+G}^K = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \gamma k_- & 0 \\ 0 & 0 & i\lambda & \gamma k_- \\ \gamma k_+ & -i\lambda & 0 & 0 \\ 0 & \gamma k_+ & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.7)$$

şeklinde ifade edilebilir. Böylece, grafende Rashba spin-yörünge etkileşmesi varlığında K Dirac noktasında enerji özdeğerleri,

$$E_{\nu,\mu} = \frac{\mu\nu}{2} (\Lambda_k - \mu\lambda)^{1/2} \quad (5.8)$$

olarak elde edilir.  $\Lambda_k = \sqrt{\lambda^2 + 4\gamma^2 k^2}$  şeklinde tanımlanırken,  $\mu = \pm 1, \nu = \pm 1$  sırasıyla grafende spin indeksini ve kiral indeksini betimler. (5.8) ifadesinden de görüldüğü gibi grafende Rashba SYE varlığında enerji özdeğerleri dejeneredir yani katlılık gösterir. Bu enerji özdeğerine karşılık gelen dalga fonksiyonu K noktasında,

$$\Psi_{\mu\nu}^K = \begin{pmatrix} \Psi_A^{K+} \\ \Psi_A^{K-} \\ \Psi_B^{K+} \\ \Psi_B^{K-} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\gamma k}{L\sqrt{\Lambda_k^2 - \mu\lambda\Lambda_k}} \begin{pmatrix} i\nu k_- / k_+ \\ -\left(\frac{\nu\lambda - \nu\mu\Lambda_k}{2\gamma k_+}\right) \\ -i\left(\frac{\lambda - \mu\Lambda_k}{2\gamma k_+}\right) \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.9)$$

şeklinde elde edilir. Benzer şekilde K' noktasında elde edilen etkin Hamiltoniyen,

$$H_{R+G}^{K'} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \gamma k_+ & -i\lambda \\ 0 & 0 & 0 & \gamma k_+ \\ -\gamma k_- & 0 & 0 & 0 \\ i\lambda & -\gamma k_- & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.10)$$

olarak verilir. K' Dirac noktalarında enerji özdeğerleri ise,

$$\Psi_{\mu\nu}^{K'} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \Psi_A^{K'+} \\ \Psi_A^{K'-} \\ \Psi_B^{K'+} \\ \Psi_B^{K'-} \end{pmatrix} = \frac{\gamma k}{L\sqrt{\Lambda_k^2 - \mu\lambda\Lambda_k}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ i\left(\frac{\lambda - \mu\Lambda_k}{2\gamma k_+}\right) \\ 1 \\ i\nu k_- / k_+ \\ \left(\frac{\nu\lambda - \nu\mu\Lambda_k}{2\gamma k_+}\right) \end{pmatrix} \quad (5.11)$$

olarak elde edilir. Özdeğer ifadelerinde yer alan  $L$  ifadesi ise sistemin toplam yüzey alanını temsil eder.

## 5.2 Grafende Haldane Kütle Terimi

İki boyutlu elektron gazında kuantum Hall etkileri genellikle enerji spektrumunda Landau seviyelerine sebep olan uygulanmış dış bir manyetik alanın varlığı ile ilişkilendirilmiştir. Ancak daha sonradan 1988 yılında Haldane tarafından, sistemler üzerindeki kuantum Hall etkilerinin dış bir manyetik alan var olmadığında da gözlemlenebileceğinin farkına varılmıştır ve homojen olmayan bir manyetik alanın etkisi altındaki örgü yapısı üzerinde, zaman terslenme simetrisinin kırılması ile birlikte kuantum Hall etkilerinin gözlemlenebileceği gösterilmiştir.

Grafende İçsel (Intrinsic) SYE de tamamen karbon atomlarının bal peteği örgüsünün simetri özelliğinden kaynaklanır. Bu yarı-iletkenlerde Dresselhaus spin-yörünge etkileşmesine benzer. Ancak Haldane tipi kütle modeli, genellikle Brillouin bölgesinin izole olmuş noktalarındaki değerlik ve iletim bandlarının dejenere olduğu iki boyutlu yarı iletken malzemelerde göz önüne alınır. Terslenme simetrisinin kırıldığı, band aralığının açıldığı ve sistemin normal bir yalıtıkana dönüştüğü spinsiz fermiyonlar için bir modeldir.

Çalışmanın bu kısmında, daha önce tanımlanan Rashba spin-yörünge etkileşmesi varlığında tek tabakalı düzlem grafen Hamiltoniyenine ek olarak Haldane tipi potansiyel olarak da tanımlanan

$$H_H = \Delta(\boldsymbol{\tau}_z \boldsymbol{\sigma}_z \otimes \mathbf{1}) \quad (5.12)$$

şeklindeki kütle potansiyel terimi de göz önüne alınacaktır.

Tartışmamızı daha ileriye götürmeden önce  $H_H$  şeklindeki Haldane kütle potansiyeli Hamiltoniyeni üzerindeki parite ( $\mathcal{P} : \mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ ) ve zaman terslenmesi ( $\mathcal{T} : \mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}, \mathbf{S} \rightarrow -\mathbf{S}$ ) etkilerine bakalım.

Şekil (2.4) üçgensel örgünün, hegzagonal şekilli birinci Brillouin bölgesini göz önüne alalım. En basit tanım ile birlikte eğer 1 ve 2 alt örgülerinin serbestlik dereceleri, spin yukarı ( $\uparrow$ ) ve spin aşağı ( $\downarrow$ ) şeklindeki psödo(sanki)-spin vektörleri olarak tanımlansın.

$$\mathcal{P} : \boldsymbol{\sigma}_z \rightarrow -\boldsymbol{\sigma}_z \quad (5.13)$$

parite ile birlikte 1 alt örgüsü yerine 2'yi, 2 alt örgüsü yerine de 1'i alabiliriz. Aynı zamanda  $\boldsymbol{\tau}$  psödo-spin değişkeni  $k_{\pm}$  vadi dejenereliği üzerinde rol oynar

$$\mathcal{P} : \boldsymbol{\tau}_z \rightarrow -\boldsymbol{\tau}_z . \quad (5.14)$$

Böylece, Hamiltoniyedeki  $\boldsymbol{\tau}_z \boldsymbol{\sigma}_z$  şeklindeki terimin parite altında değişmeyeceği söylenir. Ancak zaman terslenme simetrisi altındaki momentum operatörleri işaret değiştireceğinden,  $\mathcal{T} : \boldsymbol{\tau}_z \rightarrow -\boldsymbol{\tau}_z$  böyle bir terim zaman terslenme simetrisini bozar. Buna rağmen,  $\mathcal{T} : \boldsymbol{\sigma}_z \rightarrow \boldsymbol{\sigma}_z$  alt örgü serbestlik dereceleri üzerine rol oynamazlar. Ancak elektron spininin  $s_z$  şeklindeki z bileşeni göz önüne alındığında

$$H_{Kane-Mele} = \boldsymbol{\tau}_z \boldsymbol{\sigma}_z s_z \quad (5.15)$$

şeklindeki grafen ve grafen benzeri 2 boyutlu yapılara en çok uygulanan ve toplam akının sıfır olduğu homojen olmayan manyetik alanın etkisi altındaki spinsiz Fermiyonlar için bir model olan Haldane modelinden esinlenilmiş, spinli Fermiyonlar için bir model olan Kane-Mele tipi kütle terimi elde edilir. Parite dönüşümü altında  $s_z$  elektron spininin z- bileşeni değişmez kalırken, zaman terslenme simetrisi altında

$\mathcal{T} : \mathbf{s}_z \rightarrow -\mathbf{s}_z$  dönüşümü ile birlikte üçlü çarpım terimleri parite ve zaman terslenme simetrisi altında değişmez kalır.

Böylece,  $H_H$  şeklindeki Haldane kütle potansiyeli teriminin en basit halinin parite ve zaman terslenme simetrisi altındaki değişimi incelenmiş olması ile birlikte buradan anlaşılıyor ki, Haldane tipi kütle potansiyeli terimleri, Kane-Mele tipi topolojik kütle terimlerinden ve geleneksel kütle terimlerinden farklıdır. Geleneksel kütle terimi, etkin tek parçacık grafen Hamiltoniyeni ile anti-komite eder ve böylece pariteyi koruduğundan dolayı her bir Dirac noktası civarında eşit değer verir. Kane-Mele (Kane ve Mele 2005) tipi aralık parametresi ile  $s_z = \pm 1$  spinleri zaman terslenme simetrisine uymaz ve bu durum net akının olmadığı periyodik manyetik alan aracılığı ile gerçekleşen Haldane nin spinli elektron modeline karşılık gelir.

Böylece, Haldane kütle potansiyelinin de dahil edildiği sistemin toplam Hamiltoniyeni,

$$H = \gamma(\sigma_x \tau_z k_x + \sigma_y k_y) + \frac{\lambda_R}{2}(\tau_z \sigma_x s_y - \sigma_y s_x) + \Delta \tau_z \sigma_z \quad (5.16)$$

şeklinde ifade edilir.

Denklem (5.16)' ya dikkat edilirse farklı alt uzayları tarif eden ve Pauli matrisleri ile temsil edilen, reel ve sanki(pseudo) spinler olmak üzere  $\boldsymbol{\sigma}$ ,  $\boldsymbol{\tau}$  ve  $\mathbf{s}$  şeklinde üç farklı spin sistemine sahiptir.  $\Delta$  ise Haldane kütle potansiyelinin etkin etkileşim genliğini temsil etmektedir.

O halde K noktasında Rashba spin-yörünge etkileşmesi ve Haldane kütle potansiyeli varlığında tek tabakalı düzlem grafenin Hamiltoniyeni

$$H_{R+G+H}^K = \begin{pmatrix} \Delta & 0 & \gamma k_- & 0 \\ 0 & \Delta & i\lambda & \gamma k_- \\ \gamma k_+ & -i\lambda & -\Delta & 0 \\ 0 & \gamma k_+ & 0 & -\Delta \end{pmatrix} \quad (5.17)$$

şeklinde ifade edilir. Böylece, sisteme karşılık gelen K Dirac noktasında enerji özdeğerleri,

$$E_{\mu\nu} = \frac{\mu\nu}{2} \sqrt{(2\Delta)^2 + (\Lambda_k - \mu\lambda)^2} \quad (5.18)$$

olarak elde edilir. K noktasında denklem (5.18) ile verilen enerji özdeğerlerine karşılık gelen normalize olmuş enerji özvektörleri,

$$\Psi_{\mu\nu}^K = \begin{pmatrix} \Psi_A^{K+} \\ \Psi_A^{K-} \\ \Psi_B^{K+} \\ \Psi_B^{K-} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{2}}{L} \frac{\gamma k}{\sqrt{\Lambda_k^2 - \mu\lambda\Lambda_k}} \frac{C_{\mu\nu}}{D_{\mu\nu}} \begin{pmatrix} i\nu \frac{k_- (\lambda - \mu\Lambda_k)}{k_+ 2(E_{\mu\nu} - \Delta)} \\ \frac{E_{\nu\mu} - \Delta}{\gamma k_+} \\ -i \left( \frac{\lambda - \mu\Lambda_k}{2\gamma k_+} \right) \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.16)$$

$C_{\mu\nu} = \pm 2(E_{\mu\nu} - \Delta)$  ve  $D_{\mu\nu} = \pm \sqrt{(\Lambda_k - \mu\lambda)^2 + 4(E_{\mu\nu} - \Delta)^2}$  olmak üzere şekilde verilir.

Benzer şekilde grafende K' noktasındaki etkin Hamiltoniyen,

$$H_{R+G+H}^{K'} = \begin{pmatrix} -\Delta & 0 & -\gamma k_+ & -i\lambda \\ 0 & -\Delta & 0 & \gamma k_+ \\ -\gamma k_- & 0 & \Delta & 0 \\ i\lambda & -\gamma k_- & 0 & \Delta \end{pmatrix} \quad (5.17)$$

ve karşılık gelen enerji özvektörleri ise,

$$\Psi_{\mu\nu}^{K'} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \Psi_A^{K'+} \\ \Psi_A^{K'-} \\ \Psi_B^{K'+} \\ \Psi_B^{K'-} \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{2}}{L} \frac{\gamma k}{\sqrt{\Lambda_k^2 - \mu\lambda\Lambda_k}} \frac{C_{\mu\nu}}{D_{\mu\nu}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ i \left( \frac{\lambda - \mu\Lambda_k}{2\gamma k_+} \right) \\ 1 \\ i\nu \frac{k_- (\lambda - \mu\Lambda_k)}{k_+ 2(E_{\mu\nu} - \Delta)} \\ - \frac{(E_{\mu\nu} - \Delta)}{\gamma k_+} \end{pmatrix} \quad (5.18)$$

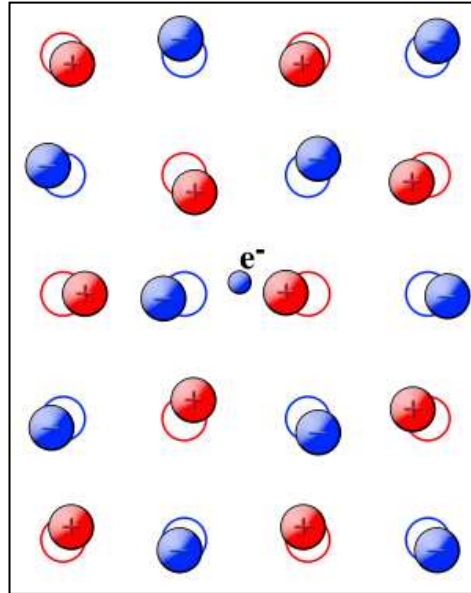
olarak elde edilir. Daha önce de belirtildiği gibi özdeğer ifadelerinde yer alan  $L$  ifadesi ise sistemin toplam yüzey alanını temsil eder.

Çalışmanın bundan sonraki kısmında grafende Rashba SYE ve Rashba SYE ile birlikte Haldane tipi kütle potansiyeline, grafende band aralığı oluşturma potansiyeli olarak görülen elektron-fonon etkileşmesinin katkısı araştırılmıştır. Öncelikle, grafenin düzlem içi fonon modlarından Brillouin bölgesinin K noktası civarındaki fonon modları dikkate alınmıştır. Grafende, Rashba SYE ve Haldane kütle potansiyelinin varlığında K noktaları civarındaki elektron-fonon etkileşmesi de göz önüne alınarak, sisteme ait Fröhlich tipi çok parçacık Hamiltonyeninin enerji özdeğerleri ardıl iki kanonik dönüşüm içeren Lee-Low-Pines tipi üniter dönüşümler kullanılarak hesaplanır.

## 6. ELEKTRON-FONON ETKİLEŞMESİ

Homojen, düzgün dağılımlı bir katı malzemenin örgü kafesi düşünüldüğünde elektron bu örgüde hareket ederken çevresini polarize eder ve etrafındaki polarizasyon bulutunu da hareketi esnasında kendisi ile birlikte sürükler. Elektron ve polarizasyon bulutu beraber parçacığimsı bir yapı oluşturur. Çevrenin polarize olması ve örgünün bozulması, optik fononların uyarılması anlamına gelir ki optik fonon bulutu ile çevrilmiş bu elektrona, yani bu parçacığimsı yapıya polaron adı verilir (Mahan 1990).

İyonik kristallerde bir elektronun hareketi problemi yani polaron problemi katıhal fiziğinin başlayıp gelişmeye başladığı 1930'lerden beri büyük bir ilgi odağı olmuştur (Landau 1933). Bu problemlerdeki ilginin bugünlere kadar sürmesinin altında iki ana sebep vardır. Birincisi, yarı-iletken fiziğine kolayca uygulanabilir olması, ikinci ve daha büyüğü ise, kuantum alan teorisinde etkileşen parçacıklar için laboratuvar görevi görürken, yeni metodlar için test edilebilecek bir taban durumu oluşturmasıdır (Kuper ve Whitfield 1962).



Şekil 6.1 Polaron görünümü (Devreese 1979)

İyonik kristallerdeki iletim elektronları negatif iyonları iter, pozitif iyonları çeker ve böylece kendi kendine oluşan bu potansiyel, elektron üzerinde rol oynar ve fiziksel özelliklerini değiştirir.

Polaron problemine ilk doğrudan yaklaşım 1933 yılında Landau (Landau 1933) tarafından yapılmıştır. F-yüzlü sistemleri açıklamak için girişimde bulunduğu sırada kendini tuzaklayan elektron düşüncesiyle tanışmıştır. Bu, elektronun iyonik kristalin iyonları ile Coulomb etkileşmesinin polarizasyona sebep olacağı ve polarizasyonun elektronu tuzaklayan bir potansiyel teşkil edeceği görüşüydü. İyonlar elektrondan daha ağır olduğundan dolayı tuzaklama potansiyelinde hareket eden elektronun yarım periyodu gibi kısa bir sürede iyonların denge konumlarına tekrar dönemeyeceği düşünüldüğünden, bu teoride bir sonraki adım da kutuplama potansiyeli ile birlikte bir katı yükün örgü boyunca hareket edeceği düşüncesi olmuştur.

Bu çalışmasından başka, Landau'nun katılarda elektronlar üzerine ilk çalışmaları örgü tarafından üretilmiş periyodik alanlarda elektronların Bloch teorisine dayanır. Bu teori, elektronların saçılmasını ve dolayısı ile mobilitenin belirlenmesi için, örgünün termal titreşimleri ile elektronların etkileşimlerinin hesaplarını içerir. Örgü titreşimleri ile elektronların etkileşimini göz önüne alarak, örgü titreşimlerinin alanı yani kutuplama alanı kavramı ortaya atılmıştır (Fröhlich 1937). Alan teorisi kavramlarının uygulanmasından tam 11 yıl sonra süper iletkenlik problemine giriş için hazırlık araştırması olarak tanıtılan bu çalışmada sadece saçılma problemi değil, aynı zamanda örgüdeki elektronun öz(self) enerjisi de hesaplanmıştır.

Teorik açıdan bir fizik problemine yaklaşımda en kritik adım problemin formülasyonudur. Örgü titreşim alanıyla yani, fononlar ile elektronun etkileşim Hamiltoniyeni,

$$H = H_{elektron} + H_{fonon} + H_{etkileşim} \quad (6.1)$$

şeklinde verilir.  $H_{elektron}$ ,  $H_{fonon}$  ve  $H_{etkileşim}$  sırası ile elektron, fonon, elektron-fonon etkileşim Hamiltoniyenlerini göstermektedir. Öz (self) enerjinin iraksamadığı süreç,

genel alan teorisi çerçevesinde görelî olmayan bir problemdir. Sonrasında, Feynman'ın path integral metodunun uygulanması polaronların dikkat çekici uygulamalar için kullanımını sağladı. Bu bahsedilen metod, polarizasyon alanına sürekli yöntem ile yaklaştığından, güçlü çiftlenim durumunda realistik olmayan sonuçlara götürmüştür. İyonik bir kristal üzerinde elektron-fonon etkileşmesi, durgun elektronun enerjisinin düşmesine yani, değerlik ve iletim bandlarının görelî pozisyonlarının kaymasına neden olur. Bu durum elektronun etkin kütleğinde değişime sebep olurken, fononlar aracılığı ile elektronların saçılması ile birlikte elektronun hareketini belirler (Pines 1953, Bohm ve Pines 1953, Lee vd. 1955).

1957 yılında Fröhlich tarafından önerilmiş olan daha realistik yaklaşım türü bizim çalışmamızda da iki boyutlu nano yapılardan grafen üzerinde elektron-fonon etkileşmesinin etkileri araştırılırken kullanılmış ve bu çalışmada Hamiltoniyen Fröhlich Hamiltoniyeninin görelî analogu ile yapılandırılmıştır.

### **6.1 Elektron- $A_{1g}$ Fonon Etkileşmesinin Grafende Rashba Spin Yörünge Çiftlenimine Katkısı**

Grafenin keşfinden (Novoselov vd. 2004, Novoselov vd 2005) bu yana optiksel ve elektronik özelliklerini anlamak için elektron-fonon etkileşmeleri üzerine pek çok çalışma yapılmıştır (Lazzeri vd. 2005, Pisana vd. 2007, Yan vd. 2007, Clandra ve Mauri 2007, Goerbig vd. 2007, Basko 2007, Basko ve Aleiner 2008, Lazzeri vd. 2008, Basko 2008, Stauber ve Peres 2008, Mariana ve Oppen 2008, Faugeras vd. 2009, Stojanovic ve Vukmirovic 2010, Carbotte vd. 2010, Mariani ve Oppen 2010, Hwang vd. 2010, Li vd. 2012, Araujo vd. 2012, Badalyan ve Peters 2012). Genellikle elektron-fonon etkileşimleri üzerine yapılan çalışmalarda intraband geçişleri için pertürbasyonel yöntemler kullanılmış intra ve interband saçılmalarının birleştirilmiş etkileri göz önüne alınmamıştır. Diğer deyişle, tek band yaklaşımı alınıp sadece intraband geçişleri göz önüne alınmış ve band aralığı ihmal edilmiştir. Tek band yaklaşımında  $\pi(\pi^*)$  valans(iletim) bandından  $\pi^*(\pi)$  iletim(valans) bandına geçiş ihmal edilir.

Bu tez konusunun da kapsamında olan Rashba tipi spin-yörünge çiftlenimi varlığında elektron-fonon etkileşmesi göz önüne alınacağından dolayı  $\pi$  valans ve  $\pi^*$  iletim bandları arasındaki geçişleri tanımlayan interband geçişini de göz önünde bulundurmak durumundayız.

Bu motivasyon çerçevesinde, grafenin kiral doğasını da göz önüne alarak uzun dalga boylu  $A_{1g}$ -optik fononları ile grafen elektronlarının etkileşmesinin Rashba tipi spin-yörünge etkileşmesi varlığındaki hesabına analitik metod kullanılarak yaklaşılacaktır. Bunun için etkileşim Hamiltoniyeni Fröhlich Hamiltoniyenin görelisi analogu aracılığı ile yapılandırılmış ve çözümü için iyi bilinen bir dönüşüm olan Lee-Low-Pines (LLP) kanonik dönüşümü olarak adlandırılan ardıl iki kanonik dönüşüm kullanılmıştır.

Düşük enerjili sürekli limiti çerçevesinde Rashba spin yörünge etkileşmesine sahip grafene ait Hamiltoniyen,

$$H' = H_G + H_R = \gamma(\sigma_x \tau_z k_x + \sigma_y k_y) + \frac{\lambda_R}{2}(\sigma_x \tau_z s_y - \sigma_y s_x) \quad (6.2)$$

şeklinde verilir. (6.2) ifadesi pertürbe olmamış Hamiltoniyen olup,  $E_{v\mu} = \frac{v\mu}{2}(\Lambda_k - \mu\lambda)$  özdeğerli spektrum sergilediği ve  $\mu = \pm 1$  şeklindeki spin indeksine ve  $v = \pm 1$  band indeksine sahip olduğu önceki bölümde elde edildi.

Böylelikle, Rashba SYE varlığında elektron- $A_{1g}$  fonon etkileşmesini tasvir eden Hamiltoniyen,

$$H = H' + H_{ph} + H_{e-ph} \quad (6.3)$$

şeklinde ifade edilir. Denklem (6.3) de verilen ikinci terim fonon terimini temsil etmek üzere,

$$H_{ph} = \sum_{\eta} \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\eta}(\mathbf{q}) b_{\eta,\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\eta,\mathbf{q}} \quad (6.4)$$

olarak verilir. (6.3) denklemi ile verilen Hamiltoniyendeki son terim olan  $H_{e-ph}$  terimi ise elektron ile  $A_{1g}$  optiksel fonon etkileşim Hamiltoniyeni olup,

$$H_{e-ph} = 2 \frac{\beta_K \gamma}{\alpha^2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & \omega^{-1} \Delta_{K'}(r) \sigma_y & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \omega^{-1} \Delta_{K'}(r) \sigma_y \\ \omega \Delta_K(r) \sigma_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega \Delta_K(r) \sigma_y & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.5)$$

biçimindedir. İfadedeki  $\beta_K = -d \ln J_0 / d \ln \alpha$ ,  $\gamma = (3\alpha/2)J_0$  ve  $\omega = \exp(2\pi i/3)$  olmak üzere,  $J_0$  ise 2.77 eV civarındaki en yakın iki komşu karbon atomu arasındaki rezonans integralidir.  $\sigma_y$  ise  $2 \times 2$  şeklindeki Pauli spin matris vektörüdür. (6.5) denkleminin K ve K' noktalarındaki bozulma (distorsiyon) genlikleri sırasıyla,

$$\Delta_K(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2NM_C \omega_K(\mathbf{q})}} (b_{K,\mathbf{q}} + b_{K',-\mathbf{q}}^\dagger) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \quad (6.6)$$

$$\Delta_{K'}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2NM_C \omega_K(\mathbf{q})}} (b_{K',\mathbf{q}} + b_{K,-\mathbf{q}}^\dagger) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$$

şeklinde tanımlanır. Burada N birim hücrenin sayısı ve  $M_C$  karbon atomunun kütlesidir.  $b_{K,\mathbf{q}}$  ( $b_{K',\mathbf{q}}$ ) ve  $b_{K,\mathbf{q}}^\dagger$  ( $b_{K',\mathbf{q}}^\dagger$ ) ise  $\omega_K(\mathbf{q})$  frekanslı ve  $\mathbf{q}$  fonon dalga vektörlü K (K') noktalarındaki fonon yaratıcı ve yokedicilerdir. Böylece denklem (6.5) ile verilen ifade uygun bir şekilde aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$H_{e-ph} = - \sum_{\eta \neq \xi} \sum_{\mathbf{q}} [\tilde{M}_{\eta\xi} b_{\eta,\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} + h.c.]. \quad (6.7)$$

$\tilde{M}_{\eta\xi} = M_0 M_{\eta\xi}$  olarak tanımlanır ve

$$M_{KK'} = \frac{\omega}{\sqrt{N}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sigma_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_y & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.8)$$

$M_{K'K} = [M_{KK'}]^T$ ,  $M_0 = 3a_0q_0J_0$  şeklinde yazılır.  $a_0 = (\hbar/2M_C\omega_K(0))^{1/2}$  ve  $q_0 = (\partial J_0/\partial a)/J_0$  ifadelerinin ise 1980 yılında Pietronero ve arkadaşları tarafından  $2 \text{ \AA}^{-1}$  ile  $2.5 \text{ \AA}^{-1}$  civarında olduğu belirtilmiştir (Pietronero vd. 1980). Ayrıca üst-kesilim (cut-off) frekansı  $\bar{q}_c = q_c a$  olarak tanımlanır. Böylece enerji ifadesi hesaplanırken alınan integraller sonlu olur ve ıraksaması önlenmiş olur.

Bu tanımlamalar ışığında (6.3) denklemini çözebilmek için iki tane ardı ardına üniter dönüşüm içeren LLP metoduna dayanan köşegenleştirme süreci gerçekleştirilir (Lee vd. 1953). Tüm sistemin band yapısına uygun taban durumu vektörü

$$|\Psi\rangle = \sum_{\eta' \neq \xi'} \sum_{\mu' \nu'} \alpha_{\pm}^{\eta' \mu' \nu'} |\eta' \mu' \nu' \mathbf{k}\rangle \otimes U_1 U_2 |0\rangle_{ph} \quad (6.9)$$

olarak önerilmiştir. Sistemin taban durumunun band yapısına ait durum vektörü yazılırken B. S. Kandemir'in 2013 yılındaki çalışması göz önünde bulundurulmuştur (Kandemir, 2013). Denklem (6.9) içinde gösterilen  $|0\rangle_{ph}$  ifadesi fonon vakum durumuna karşılık gelirken,  $\alpha_{\pm}^{\eta' \mu' \nu'} |\eta' \mu' \nu' \mathbf{k}\rangle$  ise uygun kesir genliği ile tanımlanan elektronik durum vektörüne karşılık gelir.

Birinci üniter dönüşüm uygulanırsa,

$$U_1 = \exp[-i\mathbf{r} \cdot \sum_{\eta} \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} \mathbf{b}_{\mathbf{q},\eta}^{\dagger} \mathbf{b}_{\mathbf{q},\eta}] \quad (6.10)$$

elektron koordinatlarını ortadan kaldıracığından, fonon yaratıcı (yokedici) operatörü ve momentumun sırasıyla  $\tilde{\mathbf{b}}_{\mathbf{q},\eta} = \mathbf{b}_{\mathbf{q},\eta} \exp[-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}]$  ( $\tilde{\mathbf{b}}_{\mathbf{q},\eta}^{\dagger} = \mathbf{b}_{\mathbf{q},\eta}^{\dagger} \exp[i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}]$ ) ve  $\tilde{\mathbf{p}} = \mathbf{p} - \sum_{\eta} \sum_{\mathbf{q}} \hbar \mathbf{q} \mathbf{b}_{\mathbf{q},\eta}^{\dagger} \mathbf{b}_{\mathbf{q},\eta}$  dönüştürülmüş biçimleri elde edilir. Ancak fonon koordinatlarında

köşegenleştirmeye ihtiyaç olduğu görüldüğünden, yer değiştirmiş salınıcı dönüşümü olarak da bilinen ikinci bir üniter dönüşüm uygulanır.

$$U_2 = \exp\{\sum_{\mathbf{q}}[\mathcal{F}_{\eta}\mathbf{b}_{\mathbf{q},\eta}^{\dagger} - h.c.]\} \quad (6.11)$$

burada  $\mathcal{F}_{\eta} = \bar{\epsilon}_0 \langle \eta' \mu' \nu' \mathbf{k} | M_{\eta}^{\dagger} | \eta \mu \nu \mathbf{k} \rangle$  etkileşim genliklerinin büyüklüklerini göstermek üzere, dönüşümün uygulanmasıyla birlikte, fonon alt durumları için koherent durumlar üreteceğinden dolayı fonon koordinatlarını  $\bar{\epsilon}_0 = \epsilon_0 / \hbar \omega_K$  kadar kaydırır. Böylece, yaratıcı (yok edici) operatörünü  $\tilde{\mathbf{b}}_{\mathbf{q},\eta} = \mathbf{b}_{\mathbf{q},\eta} + \mathcal{F}_{\eta}$  ( $\tilde{\mathbf{b}}_{\mathbf{q},\eta}^{\dagger} = \mathbf{b}_{\mathbf{q},\eta}^{\dagger} + \mathcal{F}_{\eta}^{\dagger}$ ) şeklinde dönüştürür. Dönüşüme uğramış toplam Hamiltoniyen iki parça halinde  $\tilde{H} = H_0 + H_1$  şeklinde ifade edilir. Burada,  $H_1$  yaratıcı ve yok edici operatörlerin içinde lineer, bilineer ve kuadratik terimler içerir, ve fonon beklenen değerleri alındığında bütün terimler sifıra eşit olurken,  $H_0$  terimi elektron-fonon etkileşim sabitini içerir ve Hamiltoniyen

$$H^0 = H' - \sum_{\eta} \sum_{\mathbf{q}} (\sigma_x \tau q_x + \sigma_y q_y) |\mathcal{F}_{\eta}(\mathbf{q})|^2 + \sum_{\eta} \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\eta}(\mathbf{q}) |\mathcal{F}_{\eta}(\mathbf{q})|^2 - \sum_{\eta} \sum_{\mathbf{q}} (M_{\eta\xi} \mathcal{F}_{\eta}(\mathbf{q}) + M_{\eta\xi}^* \mathcal{F}_{\eta}^*(\mathbf{q})) \quad (6.12)$$

formunda elde edilir. (6.12) ifadesi fonon vakum durumuna vurulduğunda,  $H|\Psi\rangle_{pol}^{\eta' \mu' \nu'} = E_{\lambda} |\Psi\rangle_{pol}^{\eta' \mu' \nu'}$  özdeğer denklemini yapılandırmak amacı ile  $\alpha_{\pm}^{\eta' \mu' \nu'} | \eta' \mu' \nu' \mathbf{k} \rangle$  uygulayıp,  $\eta' \mu' \nu'$  üzerinden toplam alınıp,  $| \eta' \mu' \nu' \mathbf{k} \rangle$  durumlarının ilgili katsayılarını mukayese etmek için iç çarpımları alınır ve  $\alpha_{\pm}^{K++}, \alpha_{\pm}^{K--}, \alpha_{\pm}^{K+-}, \alpha_{\pm}^{K-+}, \alpha_{\pm}^{K'++}, \alpha_{\pm}^{K'--}, \alpha_{\pm}^{K'+-}, \alpha_{\pm}^{K'-+}$  için sekiz tane eş zamanlı denklemler elde edilir. Eş zamanlı denklemler aşağıdaki matris formunda düzenlenir.

$$\begin{bmatrix} H_D^{KK} & H_{ND}^{KK'} \\ H_{ND}^{K'K} & H_D^{K'K'} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{\pm}^K \\ \alpha_{\pm}^{K'} \end{bmatrix} = 0 \quad (6.13)$$

denklem (6.13) 'ün matris elemanlarının her biri de ayrı bir matris elemanı olmak üzere matrisin köşegen bileşenleri

$$H_D^{KK} = \begin{bmatrix} E_{\pm} + \Sigma_{++}^{KK} & \Phi_{+-}^{KK} & \Phi_{++}^{KK} & \Phi_{+-}^{KK} \\ \Phi_{++}^{KK} & E_{\pm} + \Sigma_{++}^{KK} & \Phi_{--}^{KK} & \Phi_{+-}^{KK} \\ \Phi_{+-}^{KK} & \Phi_{--}^{KK} & E_{\pm} + \Sigma_{--}^{KK} & \Phi_{+-}^{KK} \\ \Phi_{--}^{KK} & \Phi_{+-}^{KK} & \Phi_{--}^{KK} & E_{\pm} + \Sigma_{--}^{KK} \end{bmatrix} \quad (6.14a)$$

ve

$$H_D^{K'K'} = \begin{bmatrix} E_{\pm} + \Sigma_{++}^{K'K'} & \Phi_{+-}^{K'K'} & \Phi_{++}^{K'K'} & \Phi_{+-}^{K'K'} \\ \Phi_{++}^{K'K'} & E_{\pm} + \Sigma_{++}^{K'K'} & \Phi_{--}^{K'K'} & \Phi_{+-}^{K'K'} \\ \Phi_{+-}^{K'K'} & \Phi_{--}^{K'K'} & E_{\pm} + \Sigma_{--}^{K'K'} & \Phi_{+-}^{K'K'} \\ \Phi_{--}^{K'K'} & \Phi_{+-}^{K'K'} & \Phi_{--}^{K'K'} & E_{\pm} + \Sigma_{--}^{K'K'} \end{bmatrix} \quad (6.14b)$$

formunda elde edilirken, köşegen olmayan terimler ise,

$$H_{ND}^{KK'} = \begin{bmatrix} \Omega_{++}^{KK'} & \Omega_{+-}^{KK'} & \Omega_{++}^{KK'} & \Omega_{+-}^{KK'} \\ \Omega_{+-}^{KK'} & \Omega_{++}^{KK'} & \Omega_{--}^{KK'} & \Omega_{+-}^{KK'} \\ \Omega_{++}^{KK'} & \Omega_{+-}^{KK'} & \Omega_{++}^{KK'} & \Omega_{+-}^{KK'} \\ \Omega_{+-}^{KK'} & \Omega_{--}^{KK'} & \Omega_{--}^{KK'} & \Omega_{+-}^{KK'} \end{bmatrix} \quad (6.14c)$$

$$H_{ND}^{K'K} = \begin{bmatrix} \Omega_{++}^{K'K} & \Omega_{+-}^{K'K} & \Omega_{++}^{K'K} & \Omega_{+-}^{K'K} \\ \Omega_{++}^{K'K} & \Omega_{++}^{K'K} & \Omega_{+-}^{K'K} & \Omega_{+-}^{K'K} \\ \Omega_{+-}^{K'K} & \Omega_{+-}^{K'K} & \Omega_{++}^{K'K} & \Omega_{+-}^{K'K} \\ \Omega_{+-}^{K'K} & \Omega_{+-}^{K'K} & \Omega_{+-}^{K'K} & \Omega_{+-}^{K'K} \end{bmatrix} \quad (6.14d)$$

şeklinde ifade edilir. Denklem (6.14) ile verilen matris elemanlarının içinde tanımlı

$\Sigma_{\mu'\mu}^{KK(K'K')}$ ,  $\Phi_{\mu'\mu}^{KK(K'K')}$ ,  $\Omega_{\mu'\mu}^{KK'(K'K)}$  ifadeleri ise,

$$\Sigma_{\mu'\mu}^{KK(K'K')} = \pm \frac{(\Lambda_k \pm \lambda)}{2} + \sum_q \sum_{\eta \neq \xi} |\tilde{M}_0|^2 \Delta_{\mu'\mu}^{KK(K'K')} \left[ q \theta_{\mu'\mu} + \hbar \omega_K \right] \quad (6.15a)$$

$$\Phi_{\mu'\mu}^{KK(K'K')} = \sum_q \sum_{\eta \neq \xi} |\tilde{M}_0|^2 \left[ \Delta_{\mu'\mu}^{KK(K'K')} q \theta_{\mu'\mu} + \hbar \omega_K \Delta_{\mu'\mu}^{KK(K'K')} \right] \quad (6.15b)$$

$$\Omega_{\mu'\mu}^{KK'(K'K)} = \sum_q \sum_{\eta \neq \xi} \hbar \omega_K |\tilde{M}_0|^2 \Delta_{\mu'\mu}^{KK'(K'K)} \quad (6.15c)$$

şeklinde verilir ve yukarıdaki ilgili matris elemanlarının içinde tanımlı olan  $k(\mathbf{q})$

momentum azimuthal açısı olarak tanımlanan  $\theta_{\mu'\mu}$  ise,

$$\theta_{\mu'\mu} = \frac{\gamma^2 k^2}{4 \sqrt{\Lambda_k^2 + \mu \Lambda_k \lambda / 2} \sqrt{\Lambda_k^2 + \mu' \Lambda_k \lambda / 2}} \left[ (e^{i\phi} E_{\nu\mu'} + e^{-i\phi} E_{\nu\mu}) \left( \frac{q}{\gamma k} 2 \cos \theta \right) \right] \quad (6.16)$$

olarak ifade edilir. Ayrıca matris elemanları içerisinde tanımlı olan  $\Delta_{\mu'\mu}^{KK'(K'K)}$  ifadesi ise

$$\Delta_{\mu'\mu}^{\rho\rho'} = |\langle \rho' \mu' \nu' \mathbf{k} | M_{\rho\rho'} | \rho \mu \nu \mathbf{k} \rangle|^2 \quad (6.17)$$

olarak tanımlıdır.

(6.17) eşitliği özel durumlar çerçevesinde aşağıdaki gibi değerlendirilir.

(i)  $\rho = \rho'$  ise

$$\Delta_{\mu'\mu}^{\rho\rho(\rho'\rho')} = 0 \quad (6.18a)$$

(ii)  $\rho \neq \rho'$  ve  $\nu = \nu'$  ise

$$\Delta_{\mu'\mu}^{\rho\rho(\rho'\rho')} = 0 \quad (6.18b)$$

(iii)  $\rho \neq \rho'$ ,  $\nu \neq \nu'$  ve  $\mu = \mu'$  ise,

$$\Delta_{\mu'\mu}^{\rho\rho'} = \frac{\lambda^2}{\Lambda_k^2} \quad (6.18c)$$

(iv)  $\rho \neq \rho'$ ,  $\nu \neq \nu'$  ve  $\mu \neq \mu'$  ise,

$$\Delta_{\mu'\mu}^{\rho\rho'} = \frac{4\gamma^2 k^2}{\Lambda_k^2} \quad (6.18d)$$

(6.15) denklemleri üzerindeki  $\mathbf{q}$  toplamı  $\sum_{\mathbf{q}} \rightarrow (S/4\pi^2) \int d^2\mathbf{q}$  şeklinde integrale dönüştürülür. Burada,  $S = NS_0$  sistemin alanı olmak üzere,  $S_0$  ise  $S_0 = 3\sqrt{3} a^2/2$  şeklindeki birim hücrenin alanıdır. (6.17) ifadesinden de kolayca anlaşılacağı gibi  $\Omega_{\nu'\nu}^{K'K}$  ve  $\Omega_{\nu'\nu}^{KK'}$  terimleri sıfırdan farklı olmakla birlikte  $\Sigma_{\nu'\nu}^{KK}$ ,  $\Phi_{\nu'\nu}^{KK}$  ifadeleri ve bunlara karşılık gelen  $K'$  partnerleri ise ifade içinde yok olurlar. Yok olmayan terimler ise aşağıdaki gibi elde edilirler.

$$\Omega_{\nu'\nu}^{KK'} = \Omega_{\nu'\nu}^{K'K} = \frac{\lambda^2}{\Lambda_k^2} \frac{3\sqrt{3}}{\pi} J_0 \alpha_0 \bar{q}_c^2 \quad (6.19)$$

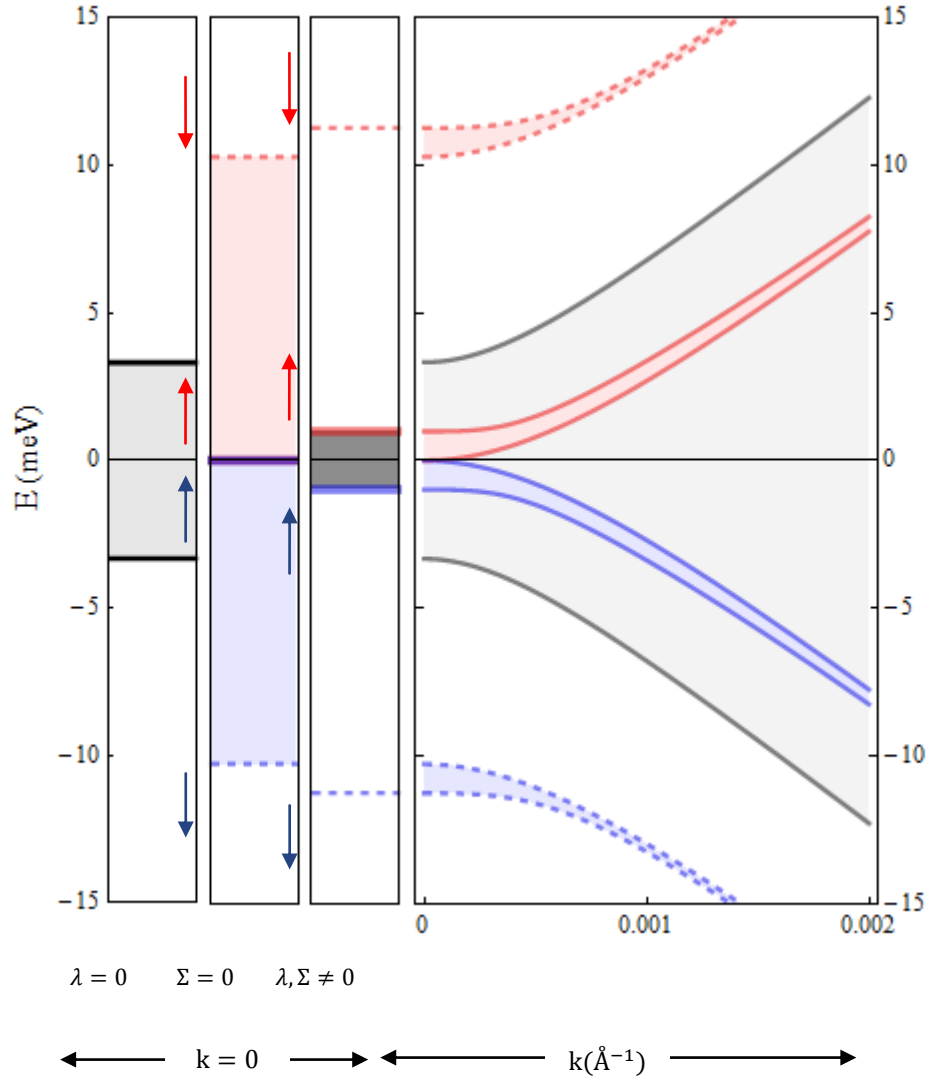
$$\Omega_{\nu'\nu}^{KK'} = \Omega_{\nu'\nu}^{K'K} = \frac{4\gamma^2 k^2}{\Lambda_k^2} \frac{3\sqrt{3}}{\pi} J_0 \alpha_0 \bar{q}_c^2$$

Denklem 6.20 ifadesinde tanımlı  $\alpha_0$  ise,  $\alpha_0 = |M_0|^2/(4J_0 \hbar\omega_K(0))$  olduğundan,  $q_c$ 'ın sırası ile  $2.0 A^{-1}$  ve  $2.5 A^{-1}$  değerlerine karşılık gelen 0.305 ve 0.477 değerlerini alır (Pietronero 1980). (6.15) matris elemanları hesaplanırken alınan integrallere,  $\bar{q}_c = q_c a$  şeklinde bir üst kesilim frekansı uygulanırsa ıraksaklıklardan kurtulunabilir. (6.13) denkleminde matrisin determinantının çözülmesi kaydı ile sırasıyla  $K$  ve  $K'$  noktalarında  $E_{\pm}$  şeklindeki enerji özdeğerleri denklem (6.13) ile gösterilen katsayılar determinantının sifıra eşitlenmesi ile kapalı formda analitik olarak

$$E_{\pm}^K = \pm \sqrt{\left( \frac{3\sqrt{3}}{\pi} J_0 \alpha_0 \bar{q}_c^2 \right)^2 \frac{4\gamma^2 k^2 + \lambda^4}{\Lambda_k^2} + \frac{2\gamma^2 k^2 + \lambda^2}{2} + \sqrt{2 \left( \frac{3\sqrt{3}}{\pi} J_0 \alpha_0 \bar{q}_c^2 \right)^2 \frac{\lambda^4}{\Lambda_k^2} \left( \left( \frac{3\sqrt{3}}{\pi} J_0 \alpha_0 \bar{q}_c^2 \right)^2 \frac{4\gamma^2 k^2}{\Lambda_k^2} + \frac{\lambda^2}{4} \right) + \frac{\lambda^2}{4} \left( 4\gamma^2 k^2 + \frac{\lambda^2}{4} \right)}} \quad (6.20)$$

$$E_{\pm}^{K'} = \pm \sqrt{\left( \frac{3\sqrt{3}}{\pi} J_0 \alpha_0 \bar{q}_c^2 \right)^2 \frac{4\gamma^2 k^2 + \lambda^4}{\Lambda_k^2} + \frac{2\gamma^2 k^2 + \lambda^2}{2} - \sqrt{2 \left( \frac{3\sqrt{3}}{\pi} J_0 \alpha_0 \bar{q}_c^2 \right)^2 \frac{\lambda^4}{\Lambda_k^2} \left( \left( \frac{3\sqrt{3}}{\pi} J_0 \alpha_0 \bar{q}_c^2 \right)^2 \frac{4\gamma^2 k^2}{\Lambda_k^2} + \frac{\lambda^2}{4} \right) + \frac{\lambda^2}{4} \left( 4\gamma^2 k^2 + \frac{\lambda^2}{4} \right)}}$$

şeklinde elde edilir. Denklem (6.20) ile gösterilen enerji ifadelerinin her biri  $(E_{\pm}^K, E_{\pm}^{K'})$  hem  $k$  dalga fonksiyonu hem de  $\lambda$  Rashba spin-yörünge etkileşim genliklerine bağımlı olmakla birlikte, K ve K' noktaları civarındaki vadiler arasındaki saçılmalarda önemli rol oynayan bölge-sınır fononları da denilen (Ando 2011) elektron- $A_{1g}$  fonon etkileşim genliklerine de bağımlılık gösterir.  $A_{1g}$  simetrlili en yüksek optiksel fonon modlu elektron(deşik) etkileşimleri de Kekulé tipi bozulmalara sebep olur.

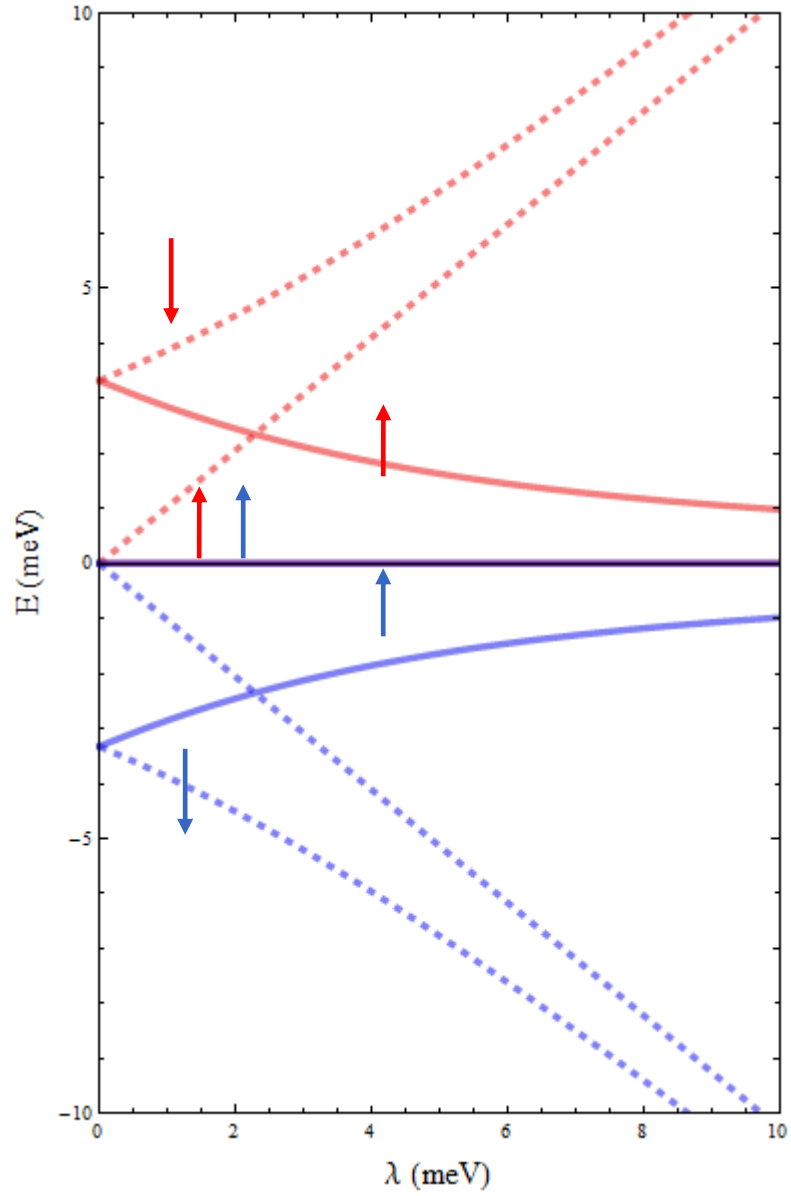


Şekil 6.2 Rashba SYE katkısı

Elektron- $A_{1g}$  fonon etkileşmesinin olduğu ve olmadığı durumdaki enerji analizi

Denklem (6.20) ile verilen hesaplanmış enerji ifadesi,  $\mathbf{k}$  dalga vektörünün fonksiyonu olarak şekil (6.2) yardımıyla incelenmiştir. Ayrıca, şeklin sol yanında üç panel verilmiştir. Bu üç panelden soldan birinci panel, sadece elektron- $A_{1g}$  fonon etkileşmesinin olduğu durumda,  $k = 0$  da analiz edilmiş, band aralığının oluşmasına rağmen üst iletim bandının spin aşağı ve spin yukarı enerji özdeğerleri ile alt değerlik bandının spin aşağı ve spin yukarı enerji özdeğerlerinin dejenere olduğu görülmüştür. İkinci panel ise, elektron- $A_{1g}$  fonon etkileşmesinin olmadığı, sadece Rashba spin

yörünge çiftleniminin varlığında yine  $k = 0$  da analiz edilmiş ve üst iletim bandının spin yukarı durumu ile alt değerlik bandının spin yukarı durumunun dejenere olduğu görülmekle birlikte iletim ve değerlik bandlarının spin yukarı ve spin aşağı durumları arasındaki band aralığının arttığı görülmüştür. Üçüncü panel ise; hem elektron- $A_{1g}$  fonon etkileşmesinin olduğu, hem de Rasha SYE çiftleniminin olduğu durumu göstermektedir. Bahsedilen iki etkileşmenin birlikte olduğu durumda üst iletim bandının spin yukarı durumu ile alt değerlik bandının spin yukarı durumları arasında da band aralığı oluşmuş ve band degenereliğinin ortadan kalktığı görülmüştür. Yine, iletim bandının spin aşağı durumu ile değerlik bandının spin aşağı durumları arasında da band aralığının arttığı görülmüştür. Yalnızca Rashba SYE olduğu durum ile Rashba SYE ile birlikte elektron-fonon etkileşmesinin birlikte olduğu durumda üst iletim bandında spin aşağı durumları ile alt değerlik bandının spin aşağı durumları da artan  $k$  değeri ile birlikte katlılık gösterir. Böylece, Rashba SYE ve elektron-fonon etkileşmeleri, hatta bu iki etkileşmenin birlikte olduğu durumlar Kekulé tipi bozulmalar olarak karşımıza çıkar. Bu tür bozulmalar sadece bağ uzunluğunu değiştirir ve alt örgü kiralitesini korur. Böylelikle, örgünün kiral simetrisinin kırılmaksızın band aralığının oluştuğu , K ve K' vadi dejenereliğini korunduğu söylenir.



Şekil 6.3 Enerjinin Rashba SYE genliğine bağlılığı

Denklem 6.20 ile verilen enerji ifadesinin, Rashba SYE genliğinin fonksiyonu olarak analizi yapılmıştır. Şekil 6.3 ile verilen enerji ifadesinin, Rashba SYE genliğine bağlı grafikte lineer kesik çizgili iki dal ile  $E = 0$  da dejenere iki dal elektron- $A_{1g}$  fonon etkileşmesinin olmadığı durumları temsil etmektedir. Sisteme elektron- $A_{1g}$  fonon etkileşmesinin katkısı dahil edildiğinde  $E = 0$  da bulunan iki dejenere dal üzerindeki band dejenereliğinin kalktığı görülmektedir. Ayrıca, dejenere olmayan iki lineer dal üzerinde de lineerliğin bozulduğuna şahit olunmaktadır. Dahası, artan etkileşim genliği

ile birlikte, elektron- $A_{1g}$  fonon etkileşmesinin olmadığı durumda lineer bir artış gözlenirken, elektron- $A_{1g}$  fonon etkileşmesinin olduğu durumda dört daldan iki dalın parabolik ve yavaşlayan bir artış göstermesi ile birlikte diğer iki dalın Rashba SYE etkileşme genliğine bağlı olarak enerjisi azalan bir eğrilik göstermektedir. Böylelikle, Rashba spin-yörünge genliği ve elektron- $A_{1g}$  fonon etkileşmesi ile band aralıklarının kontrol edilebileceği görülmüştür.

Grafen literatüründe, Rashba SYE ve elektron- $A_{1g}$  fonon etkileşmelerinin toplam etkisini araştırmaya dayalı çalışmalar olmasına rağmen, teorik olarak tam analitik hesaba dayalı çalışma bulunmamaktadır. Bu yüzden, çalışmanın grafendeki elektron-fonon etkileşmesinin ve Rashba SYE'nin anlaşılmasına yönelik önemli katkıda bulunacağı düşünülmektedir.

## **6.2 Elektron- $A_{1g}$ Fonon Etkileşmesinin Grafende Rashba Spin Yörünge Etkileşmesi ve Haldane Kütle Varlığındaki Katkısı**

Önceki kesimde incelenen  $A_{1g}$  en yüksek frekanslı optiksel fonon modu ile grafende yük taşıyıcıların etkileşimine Rashba tipi spin-yörünge çiftlenimi varlığında incelenmişti. Burada mevcut sisteme ek olarak Haldane kütle potansiyeli de göz önünde bulundurularak elektronik enerji spektrumu  $\pi$  valans ve  $\pi^*$  iletim bandları arasındaki geçişleri tanımlayan interband geçişini de dahil edilmek suretiyle incelenmiştir.

Bu motivasyon çerçevesinde, grafenin kiral doğasını da göz önüne alarak uzun dalga boylu  $A_{1g}$ -fononları ile grafen elektronlarının etkileşmesini Rashba tipi spin-yörünge etkileşmesi ve Haldane kütle potansiyeli varlığındaki hesabına analitik metod kullanılarak yaklaşmıştır. Bunun için etkileşim Hamiltoniyeni Fröhlich Polaron Hamiltoniyenin görelî analogu aracılığı ile yapılandırılıp, çözümü için iyi bilinen bir dönüşüm olan Lee-Low-Pines (LLP) kanonik dönüşümü olarak adlandırılan ardıl iki kanonik dönüşüm kullanılmıştır.

Düşük enerjili sürekli limit çerçevesinde Rashba spin yörünge etkileşmesi ve Haldane kütle potansiyeline sahip grafene ait Hamiltoniyen ifadesi

$$H' = H_G + H_R + H_H = \gamma(\sigma_x \tau_z k_x + \sigma_y k_y) + \frac{\lambda_R}{2}(\sigma_x \tau_z s_y - \sigma_y s_x) + \Delta \tau_z \sigma_z \quad (6.21)$$

şeklinde verilir. Pertürbe olmamış Hamiltoniyen olup,  $E_{\nu\mu} = \frac{\nu\mu}{2} \sqrt{(2\Delta)^2 + (\Lambda_k - \mu\lambda)^2}$  özdeğerli spektrum sergilediği önceki bölümde elde edilmişti.

Bu çerçevede, elektron- $A_{1g}$  fonon etkileşmesini tasvir eden Hamiltoniyen,

$$H = H' + H_{ph} + H_{e-ph} \quad (6.22)$$

şeklinde ifade edilir. Denklem 6.22 deki ikinci terim fonon terimini,

$$H_{ph} = \sum_{\eta} \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\eta}(\mathbf{q}) b_{\eta,\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\eta,\mathbf{q}} \quad (6.23)$$

üçüncü terim ise,

$$H_{e-ph} = - \sum_{\eta} \sum_{\mathbf{q}} [\tilde{M} b_{\eta,\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} + H. c] \quad (6.24)$$

şeklindeki elektron-  $A_{1g}$  fonon etkileşmesi terimini temsil etmektedir.

Denklem 6.24 ile verilen Hamiltoniyen matris formunda

$$H_{e-ph} = 2 \frac{\beta_K \gamma}{\alpha^2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & \omega^{-1} \Delta_{K'}(r) \sigma_y & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \omega^{-1} \Delta_{K'}(r) \sigma_y \\ \omega \Delta_K(r) \sigma_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega \Delta_K(r) \sigma_y & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.25)$$

şeklinde ifade edildiği de bir önceki alt bölümde verilmişti. İfade içinde tanımlı  $\beta_K = -d \ln J_0 / d \ln \alpha$ ,  $\gamma = (3\alpha/2) J_0$  ve  $\omega = \exp(2\pi i/3)$  olmak üzere,  $J_0$  ise 2.77 eV civarındaki en yakın iki komşu karbon atomu arasındaki rezonans integralidir. (6.25) denkleminin K ve K' noktalarındaki bozulma (distorsiyon) genlikleri de önceki alt

bölümde de belirtildiği üzere (6.6) denkleminde olduğu gibi ele alınmıştır. (6.22) denkleminin çözümü için iki tane ardı ardına üniter dönüşüm içeren LLP metoduna dayanan köşegenleştirme süreci gerçekleştirilir (Lee vd. 1953). Tüm sistemin band yapısına uygun taban durumu vektörünü

$$|\Psi\rangle = \sum_{\eta' \neq \xi'} \sum_{\mu' \nu'} \alpha_{\pm}^{\eta' \mu' \nu'} |\eta' \mu' \nu' \mathbf{k}\rangle \otimes U_1 U_2 |0\rangle_{ph} \quad (6.26)$$

şeklinde önerelim.

Birinci üniter dönüşüm uygulanırsa,

$$U_1 = \exp[-i\mathbf{r} \cdot \sum_{\eta} \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} \mathbf{b}_{\mathbf{q},\eta}^{\dagger} \mathbf{b}_{\mathbf{q},\eta}] \quad (6.27)$$

elektron koordinatlarını ortadan kaldıracığından, fonon yaratıcı (yokedici) operatörü ve momentumun sırasıyla  $\tilde{\mathbf{b}}_{\mathbf{q},\eta} = \mathbf{b}_{\mathbf{q},\eta} \exp[-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}]$  ( $\tilde{\mathbf{b}}_{\mathbf{q},\eta}^{\dagger} = \mathbf{b}_{\mathbf{q},\eta}^{\dagger} \exp[i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}]$ ) ve  $\tilde{\mathbf{p}} = \mathbf{p} - \sum_{\eta} \sum_{\mathbf{q}} \hbar \mathbf{q} \mathbf{b}_{\mathbf{q},\eta}^{\dagger} \mathbf{b}_{\mathbf{q},\eta}$  dönüştürülmüş biçimleri elde edilir ve yer değiştirmiş salıncı dönüşümü olarak da bilinen ikinci bir üniter dönüşüm uygulanır.

$$U_2 = \exp\{\sum_{\mathbf{q}} [\mathcal{F}_{\eta} \mathbf{b}_{\mathbf{q},\eta}^{\dagger} - h.c.]\} \quad (6.28)$$

$\mathcal{F}_{\eta} = \bar{\epsilon}_0 \langle \eta' \mu' \nu' \mathbf{k} | M_{\eta}^{\dagger} | \eta \mu \nu \mathbf{k} \rangle$  etkileşim genliklerinin büyüklüklerini göstermek üzere, yaratıcı (yok edici) operatörünü  $\tilde{\mathbf{b}}_{\mathbf{q},\eta} = \mathbf{b}_{\mathbf{q},\eta} + \mathcal{F}_{\eta}$  ( $\tilde{\mathbf{b}}_{\mathbf{q},\eta}^{\dagger} = \mathbf{b}_{\mathbf{q},\eta}^{\dagger} + \mathcal{F}_{\eta}^{\dagger}$ ) şeklinde dönüştüğü bir önceki alt bölümde bahsedilmişti. Dönüşüme uğramış toplam Hamiltoniyen yine iki parça halinde  $\tilde{H} = H_0 + H_1$  şeklinde ifade edilir.  $H_0$  terimi elektron-fonon etkileşim sabitini içerir ve Hamiltoniyen

$$H^0 = H' - \sum_{\eta} \sum_{\mathbf{q}} (\sigma_x \tau q_x + \sigma_y q_y) |\mathcal{F}_{\eta}(\mathbf{q})|^2 + \sum_{\eta} \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\eta}(\mathbf{q}) |\mathcal{F}_{\eta}(\mathbf{q})|^2 - \sum_{\eta} \sum_{\mathbf{q}} (M_{\eta\xi} \mathcal{F}_{\eta}(\mathbf{q}) + M_{\eta\xi}^* \mathcal{F}_{\eta}^*(\mathbf{q})) \quad (6.29)$$

formunda elde edilir. (6.29) ifadesi fonon vakum durumuna vurulur ve,  $H|\Psi\rangle_{pol}^{\eta'\mu'\nu'} = E_\lambda|\Psi\rangle_{pol}^{\eta'\mu'\nu'}$  özdeğer denklemini yapılandırılması amacı ile  $\alpha_\pm^{\eta'\mu'\nu'}|\eta'\mu'\nu'\mathbf{k}\rangle$  uygulanıp,  $\eta'\mu'\nu'$  üzerinden toplam alınıp,  $|\eta'\mu'\nu'\mathbf{k}\rangle$  durumlarının ilgili katsayılarını mukayese etmek için iç çarpımları alınır ve  $\alpha_\pm^{K++}, \alpha_\pm^{K--}, \alpha_\pm^{K+-}, \alpha_\pm^{K-+}, \alpha_\pm^{K'+++}, \alpha_\pm^{K'--}, \alpha_\pm^{K'+-}, \alpha_\pm^{K'-+}$  için sekiz tane eş zamanlı denklem elde edilir. Eş zamanlı denklemler aşağıdaki matris formunda düzenlenir.

$$\begin{bmatrix} H_D^{KK} & H_{ND}^{KK'} \\ H_{ND}^{K'K} & H_D^{K'K'} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_\pm^K \\ \alpha_\pm^{K'} \end{bmatrix} = 0 \quad (6.30)$$

denklem (6.30) de matris elemanlarının her biri de ayrı bir matris olmak üzere matrisin köşegen bileşenleri önceki alt bölümde olduğu gibi değişen tanımlamalar ışığında aynı semboller ile verilir.

$$H_D^{KK} = \begin{bmatrix} E_\pm + \Sigma_{++}^{KK} & \Phi_{++}^{KK} & \Phi_{++}^{KK} & \Phi_{+-}^{KK} \\ \Phi_{++}^{KK} & E_\pm + \Sigma_{++}^{KK} & \Phi_{+-}^{KK} & \Phi_{+-}^{KK} \\ \Phi_{+-}^{KK} & \Phi_{+-}^{KK} & E_\pm + \Sigma_{--}^{KK} & \Phi_{--}^{KK} \\ \Phi_{--}^{KK} & \Phi_{--}^{KK} & \Phi_{--}^{KK} & E_\pm + \Sigma_{--}^{KK} \end{bmatrix} \quad (6.31a)$$

ve

$$H_D^{K'K'} = \begin{bmatrix} E_\pm + \Sigma_{++}^{K'K'} & \Phi_{++}^{K'K'} & \Phi_{++}^{K'K'} & \Phi_{+-}^{K'K'} \\ \Phi_{++}^{K'K'} & E_\pm + \Sigma_{++}^{K'K'} & \Phi_{+-}^{K'K'} & \Phi_{+-}^{K'K'} \\ \Phi_{+-}^{K'K'} & \Phi_{+-}^{K'K'} & E_\pm + \Sigma_{--}^{K'K'} & \Phi_{--}^{K'K'} \\ \Phi_{--}^{K'K'} & \Phi_{--}^{K'K'} & \Phi_{--}^{K'K'} & E_\pm + \Sigma_{--}^{K'K'} \end{bmatrix} \quad (6.31b)$$

formunda elde edilirken, köşegen olmayan terimler ise,

$$H_{ND}^{KK'} = \begin{bmatrix} \Omega_{++}^{KK'} & \Omega_{+-}^{KK'} & \Omega_{++}^{KK'} & \Omega_{+-}^{KK'} \\ \Omega_{-+}^{KK'} & \Omega_{++}^{KK'} & \Omega_{-+}^{KK'} & \Omega_{+-}^{KK'} \\ \Omega_{++}^{KK'} & \Omega_{+-}^{KK'} & \Omega_{++}^{KK'} & \Omega_{+-}^{KK'} \\ \Omega_{-+}^{KK'} & \Omega_{-+}^{KK'} & \Omega_{-+}^{KK'} & \Omega_{-+}^{KK'} \end{bmatrix} \quad (6.31c)$$

$$H_{ND}^{K'K} = \begin{bmatrix} \Omega_{++}^{K'K} & \Omega_{+-}^{K'K} & \Omega_{++}^{K'K} & \Omega_{+-}^{K'K} \\ \Omega_{-+}^{K'K} & \Omega_{++}^{K'K} & \Omega_{-+}^{K'K} & \Omega_{+-}^{K'K} \\ \Omega_{++}^{K'K} & \Omega_{+-}^{K'K} & \Omega_{++}^{K'K} & \Omega_{+-}^{K'K} \\ \Omega_{-+}^{K'K} & \Omega_{-+}^{K'K} & \Omega_{-+}^{K'K} & \Omega_{-+}^{K'K} \end{bmatrix} \quad (6.31d)$$

şeklinde ifade edilir. Denklem (6.31) ile verilen matris elemanlarının içinde tanımlı

$\Sigma_{\mu'\mu}^{KK(K'K')}$ ,  $\Phi_{\mu'\mu}^{KK(K'K')}$ ,  $\Omega_{\mu'\mu}^{KK'(K'K)}$  ifadeleri ise,

$$\Sigma_{\mu'\mu}^{KK(K'K')} = \pm \frac{\sqrt{(2\Delta)^2 + (\Lambda_K \pm \lambda)^2}}{2} + \sum_q \sum_{\eta \neq \xi} |\tilde{M}_0|^2 \Delta_{\mu'\mu}^{KK(K'K')} \left[ q \theta_{\mu'\mu} + \hbar \omega_K \right] \quad (6.32a)$$

$$\Phi_{\mu'\mu}^{KK(K'K')} = \sum_q \sum_{\eta \neq \xi} |\tilde{M}_0|^2 \left[ \Delta_{\mu'\mu}^{KK(K'K')} q \theta_{\mu'\mu} + \hbar \omega_K \Delta_{\mu'\mu}^{KK(K'K')} \right] \quad (6.32b)$$

$$\Omega_{\mu'\mu}^{KK'(K'K)} = \sum_q \sum_{\eta \neq \xi} \hbar \omega_K |\tilde{M}_0|^2 \Delta_{\mu'\mu}^{KK'(K'K)} \quad (6.32c)$$

olarak elde edilir. Yukarıdaki ilgili matris elemanlarının içinde tanımlı olan  $k(\mathbf{q})$

momentum azimutal açısı olarak tanımlanan  $\theta_{\mu'\mu}$  ise,

$$\theta_{\mu'\mu}^{v'v} = q\gamma k \frac{C_{v\mu}C_{v'\mu'}}{D_{v\mu}D_{v'\mu'}\sqrt{\Lambda_k^2 - \mu'\lambda\Lambda_k}\sqrt{\Lambda_k^2 - \mu\lambda\Lambda_k}} \times \left\{ e^{i(\theta-\phi)} \frac{(\lambda - \mu\Lambda_k)(\lambda - \mu'\Lambda_k)}{2(E_{v'\mu'} - \Delta)} + e^{-i(\theta-\phi)} \frac{(\lambda - \mu\Lambda_k)(\lambda - \mu'\Lambda_k)}{2(E_{v\mu} - \Delta)} \right\} \quad (6.33)$$

şeklinde elde edilirken, matris elemanları içerisinde tanımlı olan  $\Delta_{\mu'\mu}^{KK'(K'K)}^{v'v}$  ifadesi ise,

$$\Delta_{\mu'\mu}^{\rho\rho'} = |\langle \rho' \mu' v' \mathbf{k} | M_{\rho\rho'} | \rho \mu v \mathbf{k} \rangle|^2 \quad (6.34)$$

şeklinde verilir.

Denklem (6.34) ile verilen ifade özel durumlar çerçevesinde değerlendirildiğinde (Ek 2)  $A_{\mu(\mu')} = (\Lambda_k - \mu(\mu')\lambda)$  olmak üzere ve normalizasyon katsayısı içinde tanımlı ifadeleri de ( $C_{v\mu}$  ve  $D_{v\mu}$ ) içerek şekilde

(i)  $\rho = \rho'$  ise,

$$\Delta_{\mu'\mu}^{\rho\rho(\rho'\rho')} = 0 \quad (6.35a)$$

(ii)  $\rho \neq \rho'$  ise,  $\mu = \mu'$  ve  $v = v'$

$$\Delta_{\mu'\mu}^{\rho\rho'} = \frac{\lambda^2}{\Lambda_k^2} \left| \frac{A_{\mu}^2 - C_{v\mu}^2}{D_{v\mu}^2} \right|^2 \quad (6.35b)$$

(iii)  $\rho \neq \rho'$  ise,  $v = v'$  ve  $\mu \neq \mu'$

$$\Delta_{\substack{\rho\rho' \\ \mu'\mu \\ \nu'\nu}} = \frac{4\gamma^2 k^2}{\Lambda_k^2} \left| \frac{A_\mu A_{\mu'} + C_{\nu\mu} C_{\nu'\mu'}}{D_{\nu\mu} D_{\nu'\mu'}} \right|^2 \quad (6.35c)$$

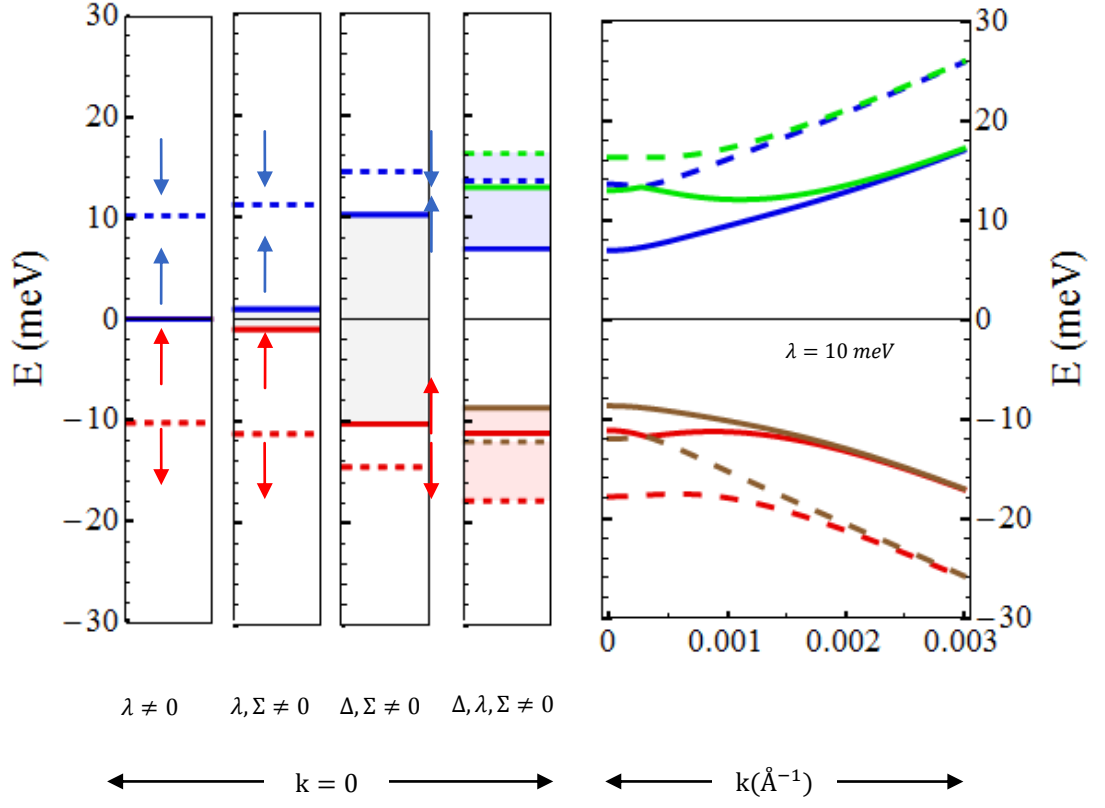
(iv)  $\rho \neq \rho'$  ise,  $\mu = \mu'$  ve  $\nu \neq \nu'$

$$\Delta_{\substack{\rho\rho' \\ \mu'\mu \\ \nu'\nu}} = \frac{\lambda^2}{\Lambda_k^2} \left| \frac{A_\mu^2 - C_{\nu\mu} C_{\nu'\mu}}{D_{\nu\mu} D_{\nu'\mu}} \right|^2 \quad (6.35d)$$

(v)  $\rho \neq \rho'$  ise,  $\nu \neq \nu'$  ve  $\mu \neq \mu'$

$$\Delta_{\substack{\rho\rho' \\ \mu'\mu \\ \nu'\nu}} = \frac{4\gamma^2 k^2}{\Lambda_k^2} \left| \frac{A_\mu A_{\mu'} + C_{\nu\mu} C_{\nu'\mu'}}{D_{\nu\mu} D_{\nu'\mu'}} \right|^2 \quad (6.35e)$$

şeklinde tanımlanır. (6.35) denklemleri üzerindeki  $\mathbf{q}$  toplamı  $\sum_{\mathbf{q}} \rightarrow (S/4\pi^2) \int d^2\mathbf{q}$  şeklinde integrale dönüştürülür. Burada,  $S = NS_0$  sistemin alanı olmak üzere,  $S_0$  ise  $S_0 = 3\sqrt{3} \alpha^2/2$  şeklindeki birim hücrenin alanıdır. Matris elemanları içerisindeki  $\Sigma_{\substack{KK(K'K') \\ \mu'\mu \\ \nu'\nu}}$ ,  $\Phi_{\substack{KK(K'K') \\ \mu'\mu \\ \nu'\nu}}$ ,  $\Omega_{\substack{KK'(K'K) \\ \mu'\mu \\ \nu'\nu}}$  terimleri Ek 1'de tanımlı  $\Delta_{\substack{KK'(K'K) \\ \mu'\mu \\ \nu'\nu}}$  ifadelerin açık bir şekilde yerine yazılması ve matris elemanları hesaplanırken ıraksaklıklardan kurtulmak için alınan integrallere,  $\bar{q}_c = q_c a$  şeklinde bir üst kesilim frekansı uygulanması koşulu ile birlikte matrisin determinantının nümerik hesabının yapılması ile enerji analizi elde edilir.



Şekil 6.4 Haldane etkileşme potansiyelinin katkısı

(6.35) ile verilen matris ifadesinin özel durumlar çerçesinde değerlendirilmiş elemanları yerlerine yazılıp, nümerik yaklaşım metodu kullanılarak hesaplanmış enerji ifadesinin  $\mathbf{k}$  dalga vektörünün fonksiyonu olarak şekil (6.4) yardımıyla değerlendirilmiştir. Çizilmiş olan grafiğin sol yanında dört panel verilmiştir. Bu dört panelden soldan birincisi sistemde elektron- $A_{1g}$  fonon etkileşmesinin ve Haldane kütle potansiyelinin olmadığı, sadece Rashba spin yörünge çiftleniminin varlığında  $k = 0$  da analiz edilmiş ve üst iletim bandının spin yukarı durumu ile alt değerlik bandının spin yukarı durumunun dejenere olduğu görülmekle birlikte iletim ve değerlik bandlarının spin yukarı ve spin aşağı durumları arasındaki aralığın arttığı görülmüştür. İkinci panelde ise, hem elektron- $A_{1g}$  fonon etkileşmesinin, hem de Rasha SYE çiftleniminin olduğu ancak Haldane kütle potansiyelinin olmadığı durumu göstermektedir. Bahsedilen iki etkileşmenin birlikte olduğu durumda üst iletim bandının spin yukarı durumu ile alt değerlik bandının spin

yukarı durumları arasında da band aralığı oluşmuş ve band degenereliğinin ortadan kalktığı görülmüştür. Yine, iletim bandının spin aşağı durumu ile değerlik bandının spin aşağı durumları arasında da band aralığının arttığı görülmüştür. Soldan ilk iki panel önceki kesimde yapılmış analizi doğrulamakla birlikte henüz Haldane kütle terimini içermemektedir. Üçüncü panel, Haldane kütle potansiyeli ile birlikte, elektron- $A_{1g}$  fonon etkileşmesi varlığında incelenmiştir. İletim ve değerlik bandlarının aynı spin konfigürasyonuna sahip spin yukarı durumlarının band aralığını büyük oranda arttırmış olmakla birlikte, iletim ve değerlik bandlarının kendi içindeki farklı spinli konfigürasyonlarını birbirine yaklaştırmıştır. Ancak, grafende örgünün yine kiral simetrisinin kırılmaksızın band aralığının oluştuğu, K ve K' vadi dejenereliğini koruduğu Kekulé tipi bozulmalar olarak karşımıza çıkmıştır. Dördüncü panelde, Haldane kütle potansiyeli ve Rashba SYE ile birlikte, elektron- $A_{1g}$  fonon etkileşmesinin katkısı birlikte incelenmiştir. Bu üç terimin birlikteki etkileşimi sistem üzerinde vadi dejenereliğini kaldırmıştır.

Ayrıca, ana grafik  $k \neq 0$  durumu için analiz edilmiş olup, artan  $k$  değeri ile birlikte lineer bir artış göstermeyip dalların asimetric yönelimine şahit olunmuştur. Bu asimetri Haldane kütle potansiyelinin katkısının fotovoltaiik etki olarak kendine göstermesinden kaynaklanmıştır. Çünkü, fotovoltaiik etkinin açıklaması örgü asimetrisine dayanmaktadır (Glass 1974). Dahası, grafen malzemesi üzerine periyodik olarak elektromanyetik ışınma uygulanmasına karşılık gelen etki, foton ışınması yardımıyla zaman terslenme simetrisi kırılmasına neden olur ve K ve K' simetri noktalarında farklı aralığa sebep olur. Foton ışınmalı bu durumla birlikte malzemenin özellikleri ve band yapısı da yeniden şekillendirebilir (Ezawa 2013).

Özetle, ideal düzlemsel grafende Dirac elektronları kütsesiz ve band yapısında enerji aralığı yoktur. Ancak birkaç meV değerinden bir kaç yüz meV değerine kadar bu enerji aralığını manipule etmek mümkündür. Grafen malzemesi yapısal olarak terslenme simetrisine sahip olduğundan dolayı verilen momentum değerlerinde ( $k = 0, k \neq 0$ ) enerji analizleri yapıldığında Rashba SYE varlığında dahi spin dejenereliği gösterir. Ancak, yörünge ile spin serbestlik derecelerinin etkileştiği Rashba SYE grafende

elektronlara sonlu kütle kazandırarak, enerji spektrumunda sonlu aralığa sebep olur. Elektronların spin yönelimini kontrol etmek için kullanışlı bir araç olan spin-yörünge etkileşimi elektronik cihazlara etkin bir şekilde uygulanabileceği düşüncesi ile spin hafıza cihazları (Zutic vd. 2004), spin filtreler (Koga vd. 2002) ve spin transistörler (Datta vd. 1990) gibi nanoelektronik cihazların yapımında kullanılır. Bu çalışmada grafende en yüksek simetri noktalarında elektronik spektrumun yine aralık oluşturan bir mekanizma olan elektron- $A_{1g}$  fonon etkileşmesi varlığında incelenmiş olmasıyla birlikte Rashba SYE etkileşmesiyle katkılarıyla kıyaslanmış ve oluşan aralığın manipüle edilmesi ile birlikte daha kontrol edilebilir bir yapı halini aldığı görülmüştür. Pratikte düşük boyutlu sistemlerde elektron-fonon çiftlenimi spin olgusunu tam anlamıyla anlamak için gerekli olmasının yanı sıra, deneysel olarak da organik alan etkili transistörler yardımıyla bu çiftlenim kontrol edilebilirdir (Hulea vd. 2006). Dahası, aralıklı grafende Rashba SYE ve Haldane kütle potansiyelinin birleştirilmiş etkileri elektron- $A_{1g}$  fonon etkileşmesi varlığında araştırılmış ve grafen malzemesinin üzerinde sadece aralık oluşturan bir mekanizma olmayıp, K ve K' vadi dejenereliğinin ortadan kalktığı görülmüştür. Ayrıca, Haldane kütle potansiyeli fotovoltajik etki ile örgü asimetrisinden dolayı K ve K' simetri noktalarında farklı aralığa neden olmuştur.

## 7. TARTIŞMA VE SONUÇ

2004 yılında Andre Geim ve Konstantin Novoselov tarafından ilk grafen yüzeylerin elde edilip araştırılması ile birlikte, grafen malzemesi üzerine yapılan araştırmalar güncel teknolojik uygulamalarda önemli yere sahip olacağı ve elektronik cihazların üretiminde büyük bir potansiyele sahip olduğu öngörüsüyle, dikkate değer bir şekilde artış göstermiştir.

Bu tez çalışması kapsamında grafen literatürüne katkı sağlamak, hem de teorik açıdan mevcut boşluğu doldurmak amacıyla grafen tabanlı nano yapılarda topolojik etkilere ve sonrasında yine bu tezin kapsamına dahil edilen grafende Rashba spin yörünge etkileşmesi, Haldane kütle potansiyeli ve bu etkileşmelerin birleştirilmiş katkıları incelenmiştir. Sonrasında, grafenin elektronik spektrumu üzerine en yüksek simetri noktalarında elektron-fonon etkileşmeleri araştırılmıştır. Dahası, yukarıda bahsi geçen bu potansiyellerin elektron-fonon etkileşmeleri altında grafenin elektronik enerji spektrumuna katkıları gözlenmiş ve gelecek çalışmalara rehber olması açısından detaylı araştırması yapılmıştır. Bu kapsamlı tez çalışması sırasında izlenen yöntemler, çıkarılan sonuçlar ve yapılan analizler sırasıyla aşağıdaki gibi özetlenmiştir.

Öncelikle, grafenin güçlü kuantum elektrodinamik etkileşimlerin analizinde ideal bir sistem olduğu, geometrisi hakkında bilginin uzay-zamanın yapısı içinde saklandığı açıklanmıştır. Yerel yapısı düz olmasına rağmen grafen malzemesinin topolojisi bozulduğunda örgü yapının konikleştiği ve parçacıkların yörüngesinin sınırlandığı tartışılmıştır. Grafenin koniksel yapısının, bal peteği şeklinde düzenlenmiş altıgen halkaları üzerindeki, karbon atomu sektörlerine karşılık gelen açıklıkların sayısına bağlı olduğu gösterilmiş ve evrensel bir sabit olan ince yapı sabitinin evrenselliği de grafitik konilerle birlikte tartışılır duruma geldiği sonucuna varılmıştır. Ayrıca, bu topolojik yapının geleneksel olmayan Hall iletkenliğinden dolayı sıfırdan farklı bir Berry fazı ortaya çıkmasına neden olduğu görülmüştür. Sonrasında, uzun menzilli yüklü Coulomb safsızlıklı topolojik kusurlu aralıklı grafenin elektronik enerji spektrumu elde edilmiş, topolojik kusurlu aralıklı grafende Dirac elektronlarının homojen bir manyetik alan aracılığı ile nasıl kontrol edilebileceği dair teorik bir model sunulmuştur. Bunun için

$\bar{B} \ll \alpha^2 m_0^2 / 2$  koşulunu sağlayan pertürbasyon koşulu kullanılarak, birinci dereceden pertürbasyon teorisi uygulanmıştır. Bu teorinin geçerli olduğu aralık da zayıf alan rejiminde analizi yapılmıştır. Bunun için gerekli kontör çizimi ile birlikte band aralığı tespit edilmiştir. Manyetik alan etkilerinin ise grafitik koni oluşturmak için yüzeyden dışarılanan karbon atomu sektörlerinin yanı sıra aralık oluşturma parametresine de bağlı olduğu görülmüştür.

Dahası, grafenin elektronik enerji spektrumu sırası ile Rashba tipi SYE ve Rashba SYE ile birlikte Haldane kütle potansiyelinin olduğu durumlarda analiz edilmiştir. Yapılan deneysel araştırmalarda Rashba SYE'nin grafenin elektronik enerji spektrumu üzerine etkisinin önemli olduğu vurgulanmasına rağmen, bu alanda teorik anlamda çok fazla çalışma gerçekleştirilmemiştir. Yapılan teorik çalışmalarda ise nümerik yöntemler başat olmuştur. Rashba spin-yörünge etkileşimleri hareketli elektronların elektrik alanı manyetik alan olarak gördüğü görelî bir olgudur. Sistemde manyetik alan olmadığında dahi sistemin spin dejenereliğini ortadan kaldırmakla kalmaz sistemin spin bağımlı fiziksel karakterizasyonunu da belirler. Haldane kütle potansiyeli ise, Kane-Mele tipi topolojik kütle terimlerinden ve geleneksel kütle terimlerinden farklıdır. Haldane kütle potansiyeli ile birlikte grafende örgü yapısı üzerinde, zaman terslenme simetrisinin kırılmasıyla kuantum Hall etkilerinin dış bir manyetik alan olmadığında da gözlemlenebileceğinin farkına varılmıştır. Grafende, Rashba SYE ve Haldane kütle potansiyelinin toplam etkisi iyonik bir kristalde durgun elektronun enerjisinin düşmesine, değerlik ve iletim bandlarının görelî pozisyonlarının kaymasına sebep olmuştur. Yine aralık açma parametresi olarak karşımıza çıkan elektron-fonon etkileşimleri altında Brillouin bölgesinin K ve K' yüksek simetri noktalarında mevcut bilgisi verilen yukarıda bahsi geçen potansiyeller ile etkileşimleri incelenmiştir.

Grafende, Rashba SYE ve elektron- $A_{1g}$  optik fononların etkileşmesinin birleştirilmiş etkileri göz önüne alındığında elektronik enerji spektrumunda kiral simetri kırılmaksızın band aralığının oluşumu gözlenmiştir. Enerji spektrumuna her iki etkileşimin ayrı ayrı katkıları benzer etkiler yaratsa da, bu etkileşimlerin katkıları kıyaslanmış ve oluşan aralığın manipüle edilmesi ve daha kontrol edilebilir bir yapı halini aldığı görülmüştür.

Son olarak, indüklediği fotovoltaiik etki ile ışık akımlarının sisteme nüfuz etmesi olarak açıklanan Haldane kütle potansiyel teriminin mevcut alana girmesi ile birlikte K ve K' simetri noktalarındaki mevcut kiral simetrisinin kırıldığı görülmüştür. Böylelikle, bu son terim katkısıyla birlikte K ve K' simetri noktalarının detaylı bilgisine sahip olduğumuzu söyleriz. Ayrıca, Haldane kütle potansiyeli iletim ve değerlik bandlarında kaymaya sebep olduğundan dolayı enerji band aralığının daha fazla açıldığı ve Haldane kütle potansiyelinin örgü kristaline vermiş olduğu asimetric etki ile örgü üzerindeki iki vadi arasında farklı aralığa sebep olduğu görülmüştür. Böylelikle, malzemenin fiziksel özellikleri üzerinde büyük değişime sebep olmuştur.

Bu tez kapsamında sunulmuş mevcut verilerin grafen tabanlı cihazların geliştirilmesinde motivasyon sağlayacağı ve önemli öngörüler kazandıracığı düşünülmektedir. Ayrıca, çalışmalarını teorik olarak grafen ve grafen tabanlı cihazlar üzerine sürdürecekler içinde bir rehber niteliğinde olacağı düşünülmektedir.

## KAYNAKLAR

- Basko, D. M. 2007. Effect of inelastic collisions on multiphonon Raman scattering in graphene. *Phys. Rev. B*, 76, 081405(R).
- 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. 2008. Theory of resonant multiphonon Raman scattering in graphene. *Phys. Rev. B* 78, 125418.
- Berashevich, J. and Chakraborty, T. 2010. Graphene and graphene: new stars of nanoscale electronics. 1003.6044v1. *Cond-matt.mtrl-sci*.
- Berry, M. V. 1984. Quantal Phase Factors Accompanying Adiabatic Changes. *Proceeding of the Royal Society A*.
- Bloch, F. 1929. Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* 52, 555–600.
- Bohm, D. and Pines, D. 1953. A collective description of electron interactions: III. Coulomb interactions in a degenerate electron gas. *Phys. Rev.* 92, 609.
- Bommel, van A. J., Crombeen, J. E. and Tooren, van A. 1975. LEED and Auger electron observations of the SiC(0001) surface. *Surf. Sci.* 48 (1975) 463-472.
- Bonaccorso, F., Lombardo, A., Hasan, T., Sun, Z., Colombo, L., and Ferrari, A. C. 2012. Production and processing of graphene and 2d crystals, *Materials today* 15, p. 564–589.
- Carvalho, Josevi de S., Passos E., Furtadoa, C. and Moraes, F. 2008. Berry's phase for a spin 1/2 particle in the presence of topological defects. *Eur. Phys. J. C.* 57, 817-822.
- Calandra, M. and Mauri, F. 2007. Electron-phonon coupling and electron self-energy in electron-doped graphene: Calculation of angular-resolved photoemission spectra. *Phys. Rev. B* 76, 205411.

- 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.
- Chakraborty, B., Kumar, S. G. and Sen, S. 2013. Effect of topological defects and Coulomb charge on the low energy quantum dynamics of gapped graphene. *J. Phys. A: Mathematical and Theoretical* 46, 055303.
- Cooper, D. R., D'Anjou, B., Ghattamaneni, N., Harack, B., Hilke, M., Horth, A., Majlis, N., Massicotte, M., Vandsburger, L., Whiteway, E., et al. 2011. Experimental review of graphene. preprint arXiv:1110.6557
- Cretu, O., Krasheninnikov, A. V., Rodríguez-Manzo, J. A., Sun, L., Nieminen, R. and Banhart, F. 2010. Migration and Localization of Metal Atoms on Graphene. *Phys. Rev. Lett.* 105, 196102.
- Datta, S., Das, B. 1990. Electronic analog of the electro-optic modulator. *Appl. Phys. Lett.* 56, 665.
- Ezawa, M. 2013. Photoinduced Topological Phase Transition and a Single Dirac-Cone State in Silicene. *Phys. Rev. Lett.* 110, 026603.
- Fröhlich, H. 1937. Theory of Electrical Breakdown in Ionic Crystals. *Proc. Roy. Soc. A* 160, 230.
- 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. *Phys. Rev. Lett.*, 103, 186803.
- Geim, A. K. 2009. Graphene: status and prospects. *Science* 324 (2009), 1530–1534.
- Geim, A. K. and Novoselov, K. S. 2007. The rise of graphene, *Nature Mat.* 6, 183-190.
- Geng, J., Kong, B.-S., Yanga, B. S. and Jung, H.-T. 2010. Preparation of graphene relying on porphyrin exfoliation of graphite. *Chem. Commun.* 46, p. 5091-5093.

- Glass, A. M., von der Linde, D. and Negran, T. J. 1974. High-voltage bulk photovoltaic effect and the photorefractive process in  $\text{LiNbO}_3$ . *Appl. Phys. Lett.* 25, 233.
- Gray, D., McCaughan, A., Mookerji, B. 2009. *Electronic Band Structure of Graphene 6.730—Physics for Solid State Applications.*
- Goerbig, M. O., Fuchs, J. N., Kechedzhi, K. and Falko, V. I. 2007. Filling-Factor-Dependent Magnetophonon Resonance in Graphene. *Phys. Rev. Lett.* 99, 087402.
- Gupta, K.S. and Rajeev S. G. 1993. Renormalization in quantum mechanics. *Phys. Rev. D* 48, 5940.
- Gupta, Kumar, S. and Sen, S. 2009. Bound states in graphene. *Mod. Phys. Lett.* 24, 99.
- Hardy, G. H. and Wright, E. M. (1980). *An Introduction to the Theory of Numbers (Fifth edition)*, Oxford: Oxford University Press, ISBN 978-0-19-853171-5.
- Hass, J., de Heer, W. A. and Conrad, E. H. 2008. The growth and morphology of epitaxial multilayer graphene. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 20 323202(1-27).
- Hibino, H., Kageshima, H. and Nagase, M. 2010. Graphene Growth on Silicon Carbide. *Special Feature: Front-line Materials Research, NTT Basic Research Laboratories Atsugi-shi, 243-0198 Japan, Vol. 8 No. 8 Aug.*
- Hulea, I. N., Fratini, S., Xie, H., Mulder, C. L., Lossad, N. N., Rastelli, G., Ciuchi, S., Morpurgo, A. F. 2006. Tunable Fröhlich polarons in organic single-crystal transistors. *Nature Materials* 5, 982.
- Hwang, E. H., Sensarma R. and Das Sarma, S. 2010. Plasmon-phonon coupling in graphene. *Phys. Rev. B* , 82, 195406.
- Jung, J., Pereg-Barnea ,T. and MacDonald, A. H. 2009. Theory of Interedge Superexchange in Zigzag Edge Magnetism. *Phys. Rev. Lett.* 102.

- Kane, C. L. and Mele, E. J. 2005. Quantum Spin Hall Effect in Graphene. *Phys. Rev. Lett.* 95, 226801.
- Kane, C. L. and Mele, E. J. 2005. Z<sub>2</sub> Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect. *Phys. Rev. Lett.* 95, 146802.
- Kim, S., Park, K.-S. and Yi, K. S. 2006. Unconventional Quantum Hall Effects and Role of Topology in Graphene. *Journal of the Korean Physical Society*, 70, 575-579.
- Koga, T., Nitta, J., Takayanagi, Datta, S. 2002. Spin-Filter Device Based on the Rashba Effect Using a Nonmagnetic Resonant Tunneling Diode. *Phys. Rev. Lett.* 88, 126601.
- Kroto, H. W. 1987. The stability of the fullerenes C<sub>n</sub>, with  $n = 24, 28, 32, 36, 50, 60$  and 70. *Nature* 329, 529–531.
- Kuzemsky A. L. 2013. Unconventional and exotic magnetism in carbon-based structures and related materials. *International Journal of Modern Physics B* 27, 40 pages.
- Lammert, Paul, E. and Crespi, Vincent, H. 2000. Topological phases in graphitic cones. *Phys. Rev. Lett.* 85, 5190.
- Lammert, Paul, E. and Crespi, Vincent, H. 2004. Graphene cones: Classification by fictitious flux and electronic properties. *Phys. Rev. B* 69, 035406.
- Landau, L. D. 1933. Über Die Bewegung der Elektronen in Kristallgitter, *Phys. Z. Sowjetunion*, Vol. 3, pp. 644-645.
- Lazzeri, M., Piscanec, S., Mauri, F., Ferrari, A. C., ve Robertson, J., 2005. Electronic transport and hot phonons in carbon nanotubes. *Phys. Rev. Lett.* 95, 236802.
- Lazzeri, M., Piscanec, S., Mauri, F., Ferrari, A. C., ve Robertson, J., 2006. Phonon linewidths and electron-phonon coupling in graphite and nanotubes. *Phys. Rev. B* 73, 155426.

- Lee, T. D., Low, F. E. and Pines, D. 1955. The motion of slow electrons in polar crystals. *Phys. Rev.* 90, 297 .
- Lazzeri, M., Attaccalite, C., Wirtz, L. and F. Mauri, F. 2008. Impact of the electron-electron correlation on phonon dispersion: Failure of LDA and GGA DFT functionals in graphene and graphite. *Phys. Rev. B*, 78, 081406(R).
- Makarova T. L. 2004. *Magnetic Properties of Carbon Structures Semiconductors* 38, pp. 615–638.
- Mariani, E. and Von Oppen, F. 2008. Flexural Phonons in Free-Standing Graphene. *Phys. Rev. Lett.* 100, 076801. [Erratum *Phys. Rev. Lett.* 100, 249901 (2008)]
- Mariani, E. and von Oppen, F. 2010. Temperature-dependent resistivity of suspended graphene. *Phys. Rev. B*, 82, 195403.
- Marder, L. 1958. Gravitational Waves in General Relativity. I. Cylindrical Waves. *Proceedings of the Royal Society A*, 244, 524 .
- Marder, L. 1959. Flat Space-times with Gravitational Fields. *Proceedings of the Royal Society A*, 252, 45-50 .
- McCann, E. 2012. Electronic properties of monolayer and bilayer graphene. *Graphene Nanoelectronics* , 237–275.
- McClure, J. W. 1956. Diamagnetism of Graphite. *Phys. Rev.* 104, 666.
- Meyer, J. C., Geim, A. K., Kastnelson, M. I., Novoselov, K. S., Booth, T. J. and Roth, S. 2007. The structure of suspended graphene sheets. *Nature* 446 , 60–63.
- Meyer, J. C., Kisielowski, C., Erni, R., Rossell, M. D., Crommie, M. F. and Zettl, A. 2008. Direct Imaging of Lattice Atoms and Topological Defects in Graphene Membranes. *Nano Lett.* 8, 3582–3586.
- Minzhen Cai, M., Thorpe, D., Adamson, D. H. and Schniepp, H. C. 2012. Methods of graphite exfoliation, *J. Mater. Chem.* 22, p. 24992- 25002.

- Nair, R. R., Sepioni, M., Tsai, I.-L., Lehtinen, O., Keinonen, J., Krasheninnikov, A. V., Thomson, T., Geim, A. K. and Grigorieva, I. V. 2012. Spin-half paramagnetism in graphene induced by point defects, *Nature Physics* 8, p. 199–202.
- Neto, A. H. C., Guinea, F., Peres, N. M. R., Novoselov, K. S. and Geim, A. K. 2009. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109.
- Novoselov, K. S. and Geim, A. K. 2007. The Rise of Graphene. *Nature* 6, 183-191.
- Ohta, T., Bartelt, N. C., Nie, S., Thürmer, K. and Kellogg, G. L. 2010. Role of carbon surface diffusion on the growth of epitaxial graphene on SiC, *Phys. Rev. B* 81, 121411.
- Pines, D. 1953. A collective description of electron interactions: IV. Electron interactions in metals. *Phys. Rev.* 92, 626.
- 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. *Nature Mater.* 6, 198.
- Raza, H. 2012. Metrology, Synthesis, Properties and Applications. Graphene Nanoelectronics, Springer Verlag.
- Reich, S., Li, L. and Robertson, J. 2005. Structure and formation energy of carbon nanotube caps. *Phys. Rev. B* 72, 165423.
- Rusin, T. M. and Zawadzki, W. 2009. Theory of electron Zitterbewegung in graphene probed by femtosecond laser pulses. *Phys. Rev. B* 80, 045416.
- Safran, S. A. and DiSalvo, F. J. 1979. Theory of magnetic susceptibility of graphite intercalation compounds. *Phys. Rev. B* 20, 4889.
- Saito, R., Dresselhaus, G. and Dresselhaus M. S. 1998. Physical properties of carbon nanotubes. Imperial College Press, London.
- Semenoff, W. G. 1984. Condensed Matter Simulation of a Three-Dimensional anomaly. Volume 53, PACS numbers; 05.50.+q

- Shytov, A.V., Katnelson, M. I. and Levitov, L.S. 2007. Vacuum Polarization and Screening of Supercritical Impurities in Graphene. *Phys. Rev. Lett.* 99, 236801.
- Shytov, A.V., Katnelson, M. I. and Levitov, L.S. 2007. Atomic Collapse and Quasi-Rydberg States in Graphene. *Phys. Rev. Lett.* 99, 246802.
- Srianand, R., Jean, P. P., Chand, H. and Aracil, B. 2004. Constraining on Straining the Time Variation Of the Fine Structure Constant European Southern Observatory archive no. 116- 25-28.
- Stauber, T. and Peres, N. M. R. 2008. Effect of Holstein phonons on the electronic properties of graphene. *J. Phys.: Condens. Matter* 20, 055002.
- Stojanovic, V. M. and Vukmirovic, N. 2010. Polaronic signatures and spectral properties of graphene antidot lattices. *Phys. Rev. B* 82, 165410.
- Stone, A. J. and Wales, D. J. 1986. Theoretical studies of icosahedral C<sub>60</sub> and some related species. *Chem Phys Lett.* 128, 501–503.
- Sutter, P. W., Flege, J-I and Sutter, E. A. 2008. Epitaxial graphene on ruthenium. *Nature Materials* 7, 406 – 411.
- Tetlow, H., J. Posthuma de Boer, P., I.J. Ford, I. J., D.D. Vvedensky, D. D., Coraux, J. and Kantorovich, L. 2014. Growth of epitaxial graphene: Theory and experiment. *Physics Reports* 542, 195-205.
- Torres L. and Armas L. G. Seabra A. C. 2014. Optimization of Micromechanical Cleavage Technique of Natural Graphite by Chemical Treatment. *Graphene* 3.
- Ugeda, M. M., Brihuega, I., Guinea, F. and Gómez-Rodríguez, J. M. 2010. Missing Atom as a Source of Carbon Magnetism. *Phys. Rev. Lett.* 104, 096804.
- Wallace, P. R. 1947. The band theory of graphite. *Physical Review* 71, 622.

- Webb, J. K., Flambaum, V. V., Churchill, C. W., Drinkwater, M. J. and Barrow, J. D. . 1999. Search for Time Variation of the Fine Structure Constant. *Phys. Rev. Lett.* 82, 884.
- Weber, J. and Wheeler, J. A. 1957. Reality of the Cylindrical Gravitational Waves of Einstein and Rosen. *Rev. Mod. Phys.* 29, 509 .
- Wu, Y., University of Birmingham 2012. Simulation of graphene electronic devices” phd thesis.
- Wu, Z., Jelski, D. A. and George, T. F. 1987. Vibrational motions of buckminsterfullerene. *Chem. Phys. Lett.* 137, 291-294.
- Yan, J., Zhang, Y., Kim, P. and Pinczuk, A. 2007. Electric Field Effect Tuning of Electron-Phonon Coupling in Graphene. *Phys. Rev. Lett.* 98, 166802.
- Yang, W., Chen, G., Liu, C-C., Zhang, L., Xie, G., Wang, D., Yang, R., Shi, D., Watanabe, K., Taniguchi, T., Yao, Y., Zhang, Y. and Zhang, G. 2013. Epitaxial growth of single-domain graphene on hexagonal boron nitride. *Nature Materials*, 12, 792-797.
- Yazyev O. V. and Helm L. 2007. Defect-induced magnetism in graphene. *Phys. Rev. B.*, 75, 125408.
- Yusuke, S. 2013. Department of Chemistry and Biotechnology, wins Poster Award at 24th Symposium on Physical Organic Chemistry. September 12, <http://www.t.u-tokyo.ac.jp/etpage/topics/2013/2013091200002.html>.
- Zhou, S. Y., Gweon, G. H., Fedorov, A. V., First, P. N., Heer, W. A., Lee, D. H., Guinea, F., Neto, A. H. C. and Lanzara, A. 2007. Substrate-induced bandgap opening in epitaxial graphene. 10.1038/nmat2003.
- Zutić, I, Fabian, J. and Das Sarma, S. 2004. Spintronics: Fundamentals and application. *Rev. Mod. Phys.* 76,323.

## EK 1 Haldane Kütlesi Varlığında Matris Elemanları

$$\Delta_{\mu'\mu}^{\rho\rho'} = |\langle \rho' \mu' \nu' \mathbf{k} | M_{\rho\rho'} | \rho \mu \nu \mathbf{k} \rangle|^2 \quad (1.1)$$

$$\begin{aligned} \Delta_{++}^{KK'} &= |\langle K' + + \mathbf{k} | M_{KK'} | K + + \mathbf{k} \rangle|^2 \\ &= \left( \frac{3\sqrt{3}}{\pi} J_0 \alpha_0 \bar{q}_c^2 \right) \frac{\lambda^2}{\Lambda_k^2} \left| \frac{(\Lambda_k - \lambda)^2 - 4(E_{++} - \Delta)^2}{(\Lambda_k - \lambda)^2 + 4(E_{++} - \Delta)^2} \right|^2 \end{aligned} \quad (1.2)$$

$$\begin{aligned} \Delta_{--}^{KK'} &= |\langle K' - - \mathbf{k} | M_{KK'} | K - - \mathbf{k} \rangle|^2 \\ &= \left( \frac{3\sqrt{3}}{\pi} J_0 \alpha_0 \bar{q}_c^2 \right) \frac{\lambda^2}{\Lambda_k^2} \left| \frac{(\Lambda_k - \lambda)^2 - 4(E_{--} - \Delta)^2}{(\Lambda_k - \lambda)^2 + 4(E_{--} - \Delta)^2} \right|^2 \end{aligned} \quad (1.3)$$

$$\begin{aligned} \Delta_{++}^{KK'} &= |\langle K' + + \mathbf{k} | M_{KK'} | K + + \mathbf{k} \rangle|^2 \\ &= \left( \frac{3\sqrt{3}}{\pi} J_0 \alpha_0 \bar{q}_c^2 \right) \frac{4 \gamma^2 k^2}{\Lambda_k^2} \left| \frac{(\Lambda_k^2 - \lambda^2) - 4(E_{++} - \Delta)(E_{--} + \Delta)}{\sqrt{(\Lambda_k - \lambda)^2 + 4(E_{++} - \Delta)^2} \sqrt{(\Lambda_k + \lambda)^2 + 4(E_{--} - \Delta)^2}} \right|^2 \end{aligned} \quad (1.4)$$

$$\begin{aligned} \Delta_{+-}^{KK'} &= |\langle K' - - \mathbf{k} | M_{KK'} | K + - \mathbf{k} \rangle|^2 \\ &= \left( \frac{3\sqrt{3}}{\pi} J_0 \alpha_0 \bar{q}_c^2 \right) \frac{4 \gamma^2 k^2}{\Lambda_k^2} \left| \frac{(\Lambda_k^2 - \lambda^2) - 4(E_{++} + \Delta)(E_{--} - \Delta)}{\sqrt{(\Lambda_k - \lambda)^2 + 4(E_{++} + \Delta)^2} \sqrt{(\Lambda_k + \lambda)^2 + 4(E_{--} - \Delta)^2}} \right|^2 \end{aligned} \quad (1.5)$$

$$\begin{aligned} \Delta_{+-}^{KK'} &= |\langle K' + - \mathbf{k} | M_{KK'} | K + - \mathbf{k} \rangle|^2 \\ &= \left( \frac{3\sqrt{3}}{\pi} J_0 \alpha_0 \bar{q}_c^2 \right) \frac{\lambda^2}{\Lambda_k^2} \left| \frac{(\Lambda_k - \lambda)^2 - 4(E_{++} + \Delta)^2}{(\Lambda_k - \lambda)^2 + 4(E_{++} + \Delta)^2} \right|^2 \end{aligned} \quad (1.6)$$

$$\begin{aligned}
\Delta_{++}^{KK'} &= |\langle K' - +\mathbf{k} | M_{KK'} | K - +\mathbf{k} \rangle|^2 \\
&= \left( \frac{3\sqrt{3}}{\pi} J_0 \alpha_0 \bar{q}_c^2 \right) \frac{\lambda^2}{\Lambda_k^2} \left| \frac{(\Lambda_k + \lambda)^2 - 4(E_{--} + \Delta)^2}{(\Lambda_k + \lambda)^2 + 4(E_{--} + \Delta)^2} \right|^2
\end{aligned} \tag{1.7}$$

$$\begin{aligned}
\Delta_{+-}^{KK'} &= |\langle K' + +\mathbf{k} | M_{KK'} | K - -\mathbf{k} \rangle|^2 \\
&= \left( \frac{3\sqrt{3}}{\pi} J_0 \alpha_0 \bar{q}_c^2 \right) \frac{4\gamma^2 k^2}{\Lambda_k^2} \left| \frac{(\Lambda_k^2 - \lambda^2) + 4(E_{++} - \Delta)(E_{--} - \Delta)}{\sqrt{(\Lambda_k - \lambda)^2 + 4(E_{++} - \Delta)^2} \sqrt{(\Lambda_k + \lambda)^2 + 4(E_{--} - \Delta)^2}} \right|^2
\end{aligned} \tag{1.8}$$

$$\begin{aligned}
\Delta_{+-}^{KK'} &= |\langle K' - +\mathbf{k} | M_{KK'} | K + -\mathbf{k} \rangle|^2 \\
&= \left( \frac{3\sqrt{3}}{\pi} J_0 \alpha_0 \bar{q}_c^2 \right) \frac{4\gamma^2 k^2}{\Lambda_k^2} \left| \frac{(\Lambda_k^2 - \lambda^2) + 4(E_{++} + \Delta)(E_{--} + \Delta)}{\sqrt{(\Lambda_k - \lambda)^2 + 4(E_{++} + \Delta)^2} \sqrt{(\Lambda_k + \lambda)^2 + 4(E_{--} + \Delta)^2}} \right|^2
\end{aligned} \tag{1.9}$$

$$\begin{aligned}
\Delta_{+-}^{KK'} &= |\langle K' + +\mathbf{k} | M_{KK'} | K + -\mathbf{k} \rangle|^2 \\
&= \left( \frac{3\sqrt{3}}{\pi} J_0 \alpha_0 \bar{q}_c^2 \right) \frac{\lambda^2}{\Lambda_k^2} \left| \frac{(\Lambda_k^2 - \lambda^2) + 4(E_{++}^2 - \Delta^2)}{\sqrt{(\Lambda_k - \lambda)^2 + 4(E_{++} - \Delta)^2} \sqrt{(\Lambda_k - \lambda)^2 + 4(E_{++} + \Delta)^2}} \right|^2
\end{aligned} \tag{1.10}$$

$$\begin{aligned}
\Delta_{-+}^{KK'} &= |\langle K' - -\mathbf{k} | M_{KK'} | K - +\mathbf{k} \rangle|^2 \\
&= \left( \frac{3\sqrt{3}}{\pi} J_0 \alpha_0 \bar{q}_c^2 \right) \frac{\lambda^2}{\Lambda_k^2} \left| \frac{(\Lambda_k + \lambda)^2 + 4(E_{--}^2 - \Delta^2)}{\sqrt{(\Lambda_k + \lambda)^2 + 4(E_{--} - \Delta)^2} \sqrt{(\Lambda_k + \lambda)^2 + 4(E_{--} + \Delta)^2}} \right|^2
\end{aligned} \tag{1.11}$$

$$\Delta_{++}^{KK'} = \Delta_{++}^{K'K} \tag{1.12a}$$

$$\Delta_{--}^{KK'} = \Delta_{--}^{K'K} \quad (1.12b)$$

$$\Delta_{++}^{KK'} = \Delta_{++}^{KK'} = \Delta_{++}^{K'K} = \Delta_{++}^{K'K} \quad (1.12c)$$

$$\Delta_{+-}^{KK'} = \Delta_{+-}^{KK'} = \Delta_{+-}^{K'K} = \Delta_{+-}^{K'K} \quad (1.12d)$$

$$\Delta_{++}^{KK'} = \Delta_{++}^{K'K} \quad (1.12e)$$

$$\Delta_{++}^{KK'} = \Delta_{++}^{K'K} \quad (1.12f)$$

$$\Delta_{+-}^{KK'} = \Delta_{+-}^{KK'} = \Delta_{+-}^{K'K} = \Delta_{+-}^{K'K} \quad (1.12g)$$

$$\Delta_{+-}^{KK'} = \Delta_{+-}^{KK'} = \Delta_{+-}^{K'K} = \Delta_{+-}^{K'K} \quad (1.12h)$$

$$\Delta_{+-}^{KK'} = \Delta_{+-}^{KK'} = \Delta_{+-}^{K'K} = \Delta_{+-}^{K'K} \quad (1.12i)$$

$$\Delta_{+-}^{KK'} = \Delta_{+-}^{KK'} = \Delta_{+-}^{K'K} = \Delta_{+-}^{K'K} \quad (1.12j)$$

## ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Defne AKAY

Doğum Yeri : Ankara

Doğum Tarihi : 14.05.1985

Medeni Hali : Evli (1 çocuk)

Yabancı Dili : İngilizce

### Eğitim Durumu

Lise : Mehmetçik Lisesi, yabancı dil ağırlıklı lise (2003)

Lisans : Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü (2007)

Yüksek Lisans : Ankara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı

(Eylül 2008 - Ağustos 2010 )

Doktora: Ankara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı

(Eylül 2010 - Ağustos 2016)

### Çalıştığı Kurum

Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü (Mart 2010-)

### YAYINLAR

#### (SCI) Kapsamındaki Hakemli Dergiler

B. S. Kandemir, D. Akay "Tuning the pseudo-Zeeman splitting in graphene cones by magnetic field", Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 384, 2015. DOI: 10.1016/j.jmmm.2015.02.019 .

B. S. Kandemir, D. Akay (gönderildi)

B. S. Kandemir, D. Akay (gönderildi)

### **Uluslararası Hakemli Dergiler**

Defne Akay, “ The Effect of Tilted Magnetic Field in Graphene Cone”, Procedia-Social and Behavioral Sciences. DOI: 10.1016/j.sbspro.2015.06.236.

Defne Akay, Bekir S. Kandemir, “Magnetic Field Effects on Parabolic Graphene Quantum Dots with Topological Defects”, International Journal of Chemical, Molecular, Nuclear, Materials and Metallurgical Engineering, vol. 10, pp. 54-58, 2016.

B. S. Kandemir, D. Akay , “Off-plane Impurity Effects in Graphene Quantum Dots” Cumhuriyet Science Journal. TÜBİTAK/ULAKBİM dergipark, DOI:10.17776/csj.14715. Vol. 17, No. 1, 2016.

### **Ulusal Kongre Sunum**

D. Akay, Ü. Ertem, "Topolojik Kusurlu Grafen Konilerinin Eğik Bir Manyetik Alanda Sınırlanması" Hacettepe University, 20. Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısı, 26 Aralık 2014 (Poster sunum)(Birincilik Ödülü). pp:64.

### **Uluslararası Kongre Sunum**

D. Akay, B. S. Kandemir, "Topological Defects in Graphene Cone " Graphene & Related materials (GRM-2014) Workshop & Summer School, 9-11 Temmuz 2014 (Sözlü sunum).

D. Akay, "The Effect of Tilted Magnetic Field on Graphene Cone " Istanbul University World Conference on Technology, innovation and entrepreneurship, 28-30 Mayıs 2015 (Sözlü sunum). OP322, pp. 77.

D. Akay, B. S. Kandemir, “Magnetic Field Effects on Parabolic Graphene Quantum Dots with Topological Defects” 18th International Conference on Engineering Materials and Applications, 25-26 Ocak 2016 (Sözlü sunum). International Scholarly and Scientific Research & Innovation 3(1) 2016.

D. Akay, B. S. Kandemir, “Electron-Zone Boundary Phonon Interactions in Graphene: Effect of Haldane-like Mass” 2016 Graphene & Related Materials Conference (GRM-2016), 13-15 Temmuz 2016 (Poster Sunum)

### **Projeler**

“Carbon nanostructures: graphene dot, graphene anti-dot, and carbon nanotubes” Ankara University BAP Project, no:12B420009. Görevi: arařtırmacı.

“Bench-Top Particle Physics and Gravitation in Graphene ” TUBITAK, no:113F103. Görevi: bursiyer.

“Şimdi Bilim Gerçek Hayat Atölyelerinde Herkes için” Yürütücü: Güler Tanrıverdi TUBITAK, no:1168072. Görevi: rehber. (10-12 Mayıs 2016)