ÇUKUROVA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

DOKTORA TEZİ

Meryem Derya ÖZDEMİR

TEK KATMANLI GRAFENİN ELEKTRONİK TAŞINIM ÖZELLİKLERİNİN MONTE CARLO YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ

FİZİK ANABİLİM DALI

ADANA, 2015

ÇUKUROVA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

TEK KATMANLI GRAFENİN ELEKTRONİK TAŞINIM ÖZELLİKLERİNİN MONTE CARLO YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ

Meryem Derya ÖZDEMİR

DOKTORA TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

Bu tez ..... tarihinde aşağıdaki jüri üyeleri tarafından Oybirliği/Oyçokluğu ile kabul edilmiştir.

.....	.....	.....
Prof. Dr. Metin ÖZDEMİR	Prof. Dr. Doğan DÖNMEZ	Doç. Dr. Faruk KARADAĞ
DANIŞMAN	ÜYE	ÜYE
.....	.....	
Prof. Dr. Mustafa ÖZCAN	Doç. Dr. Zeki YARAR	
ÜYE	ÜYE	

Bu tez Enstitümüz Fizik Anabilim Dalında hazırlanmıştır.
Kod No:

Prof. Dr. Mustafa GÖK
Enstitü Müdürü

Bu Çalışma Ç.Ü. Bilimsel Araştırma Projeleri Birimi Tarafından Desteklenmiştir.
Proje No: FEF2012D18

Not: Bu tezde kullanılan özgün ve başka kaynaktan yapılan bildirişlerin, çizelge, şekil ve fotoğrafların kaynak gösterilmeden kullanımı, 5846 sayılı Fikir ve Sanat Eserleri Kanunundaki hükümlere tabidir.

ÖZ

DOKTORA TEZİ

TEK KATMANLI GRAFENİN ELEKTRONİK TAŞINIM ÖZELLİKLERİNİN MONTE CARLO YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ

Meryem Derya ÖZDEMİR

ÇUKUROVA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI

Danışman : Prof. Dr. Metin ÖZDEMİR
: Yıl: 2015, Sayfa: 127
Jüri : Prof. Dr. Metin ÖZDEMİR
: Prof. Dr. Doğan DÖNMEZ
: Doç. Dr. Faruk KARADAĞ
: Prof. Dr. Mustafa ÖZCAN
: Doç. Dr. Zeki YARAR

Grafen (graphene) ilk defa 2004 yılında sentezlenmiş tek bir atom kalınlığında bal peteği örgüsüne sahip karbon atomlarının oluşturduğu bir malzemedir. Bir katmanlı grafende ters örgü uzayında Dirac noktaları olarak bilinen noktalar civarında düşük enerjiler için elektron enerjisi dalga vektörüne doğrusal olarak bağlıdır, bu nedenle etkin elektron kütlesi sıfırdır, ayrıca malzemenin yasak enerji aralığı yoktur. Doğrusal bant yapısından dolayı grafende elektron hareketi, parçacıkların Fermi hızı ($\approx c/300$) ile hareket eden sıfır durgun kütleli rölativistik parçacıkları taklit ettiği Dirac denklemi ile ifade edilir. Bu tez çalışmasında tek katmanlı grafenin elektronik taşınım özellikleri ensemble Monte Carlo (EMC) yöntemi ile incelenmiştir. Bu amaçla grafendeki akustik, polar olmayan optik, yüzey polar optik fononlardan, yüklü safsızlıklardan ve arayüzey buruşukluğundan kaynaklanan saçılma mekanizmaları göz önüne alınmıştır. Yüklü safsızlık saçılması ve yüzey polar fonon saçılması durumlarında perdeleme etksi de hesaba katılmıştır. Uygulanan bir alan altında elektronların hız-zaman eğrileri bulunmuş, belirli malzeme parametreleri ve uygulanan alan değerlerinde ani hızlanma (overshoot) ve yavaşlama (undershoot) etkileri gözlenmiştir. Ayrıca hız-alan eğrileri elde edilmiş, saf grafen durumunda belirli malzeme parametreleri değerinde negatif diferansiyel direnç olgusu ortaya çıkmıştır. Bu etki akustik fonon saçılma oranlarının artması ile azalarak tamamen yok olmuştur. Arayüzey buruşukluğu ve safsızlık saçılmaları elektron mobilitesini büyük oranda azaltmaktadır. Mobilite değerleri hem iletkenlik hesaplamalarından hem de Monte Carlo hesaplamalarından bulunmuştur. Mobilitenin sıcaklığa bağımlılığı hesaplanmış ve sıcaklık ile monoton olarak azaldığı gözlenmiştir. Ayrıca mobilitenin elektron yoğunluğuna bağımlılığı da incelenmiştir. Elektron yoğunluğuna bağımlılık temel olarak elektronların fermi enerjisinin elektron yoğunluğuna bağımlılığından kaynaklanmaktadır.

Anahtar Kelimeler: Tek tabaka grafen, Monte Carlo, Saçılma, Sürüklenme hızı, Mobilite.

ABSTRACT

PhD THESIS

INVESTIGATION OF ELECTRONIC TRANSPORT PROPERTIES OF MONOLAYER GRAPHENE BY MONTE CARLO METHOD

Meryem Derya ÖZDEMİR

DEPARTMENT OF PHYSICS
INSTITUTE OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES
UNIVERSITY OF ÇUKUROVA

Supervisor : Prof. Dr. Metin ÖZDEMİR
: Year: 2015, Pages: 127
Jury : Prof. Dr. Metin ÖZDEMİR
: Prof. Dr. Doğan DÖNMEZ
: Assoc. Prof. Dr. Faruk KARADAĞ
: Prof. Dr. Mustafa ÖZCAN
: Assoc. Prof. Dr. Zeki YARAR

Graphene, synthesized for the first time in 2004, consists of a single layer of carbon atoms arranged in a honeycomb lattice. In monolayer graphene, near the so called Dirac points in the reciprocal space the electron energy linearly depends on wave vector for low values of electron energy. Because of this, the effective mass of electrons is zero and moreover no forbidden energy gap exists. Because of linear energy dispersion relation, the motion of electrons in graphene is governed by Dirac equation where the particles mimic relativistic particles moving with Fermi velocity ($\approx c/300$) with zero rest mass. In this thesis, the electronic transport properties of monolayer graphene is investigated in detail by using an ensemble Monte Carlo (EMC) method. For this purpose, the scattering rates due to acoustic, non-polar optic, surface polar optic, ionized impurity and interface roughness mecahnisms are taken into account. For the ionized impurity and surface polar phonon scattering cases, the effect of screening is also considered. The velocity-time curves under an applied field are obtained, and for specific material and applied field values overshoot and undershoot effects are observed. Furthermore, velocity-applied field curves are obtained, and for the case of intrinsic graphene, negative differential phenomenon is observed for specific material parameters. This effect decreased with the increase of acoustic phonon scattering rates and disappeared completely. Both interface roughness and impurity scattering decreases the mobility of electrons considerably. The mobility values are calculated both from conductivity and EMC calculations. The dependence of mobility on temperature is found and it is observed that it decreases with temperature monotonically. The dependence of mobility on electron concentration is also investigated. The dependence on electron concentration basicly comes from the depencence of Fermi energy on electron concentration.

Key Words: Monolayer graphene, Monte Carlo, Scattering, Drift velocity, Mobility.

TEŞEKKÜR

Lisans ve Doktora eğitimim boyunca bana yol gösteren, desteğini benden bir an olsun hiç esirgemeyen, insani ve ahlaki değerleri ile de örnek aldığım, yanında çalışmaktan onur duyduğum değerli hocam Prof. Dr. Metin ÖZDEMİR'e sonsuz teşekkürlerimi sunuyorum.

Ayrıca çalışmalarım sırasında benden yardımını ve desteğini hiç esirgemeyen hocalarım Yrd. Doç. Dr. Berrin ÖZDEMİR ve Doç. Dr. Zeki YARAR'a ve tabi çalışma arkadaşım Öznur SOYLU ATASEVER'e çok teşekkür ederim.

Bugünlere beni getiren canımdan çok sevdiğim aileme, her zaman yanımda olan ve manevi desteğini benden hiç esirgemeyen ikinci ailem KARAGENÇ ailesine teşekkürü bir borç bilirim.

İÇİNDEKİLER **SAYFA**

ÖZ I
ABSTRACT II
TEŞEKKÜR III
İÇİNDEKİLER IV
ÇİZELGELER DİZİNİ VI
ŞEKİLLER DİZİNİ VII
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ XII
1. GİRİŞ 1
2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR 5
3. TEORİK ALT YAPI 13
3.1. Grafenin Temel Elektronik Özellikleri 13
3.2. Grafenin Enerji Bant Yapısı-Sıkı Bağlanma Metodu 15
3.3. Taşıyıcı Saçılması ve Fermi'nin Altın Kuralı 19
3.4. Örgü Titreşimleri 23
3.5. Grafende Saçılma Mekanizmaları 25
3.5.1. Yüklü Safsızlık Saçılması 25
3.5.1.1. Polarizasyon Fonksiyonu 30
3.5.1.2. Grafen için Durum Yoğunluğu 34
3.5.1.3. Grafende Üst Üste Gelme Faktörü 35
3.5.2. Akustik Fonon Saçılması 35
3.5.3. Polar Olmayan Optik Fonon Saçılması 41
3.5.3.1. Soğurma 43
3.5.3.2. Yayınım 46
3.5.4. Yüzey Polar Optik Fonon Saçılması 49
3.5.5. Yüzey Pürüzlülük Saçılması 50
3.6. Tek Parçacık Monte Carlo Simülasyonu 54
3.6.1. Serbest Uçuş Zamanının Belirlenmesi 55
3.6.2. Saçılma Olaylarının Seçimi 59
3.6.3. Saçılmadan Sonraki Açıların Hesaplanması 59
3.6.3.1. Grafen için Akustik Fonon Saçılma Açısının Hesabı 64

3.6.3.2. Grafen için Polar Olmayan Optik Fonon Saçılma Açısının Hesabı 65
3.6.3.3. Grafen için Yüklü Safsızlık Saçılma Açısının Hesabı 66
3.6.3.4. Grafen için Yüzey Pürüzlülüğünden Kaynaklanan Saçılma Açısının Hesabı 67
3.6.4. Hareket Denklemleri 67
3.7. Ensemble Monte Carlo Simülasyonu 68
4. BULGULAR VE TARTIŞMA 71
4.1. Grafen 71
4.1.1. Kimyasal Potansiyel 71
4.1.2. Polarizasyon Fonksiyonu 72
4.2. Saçılma Mekanizmaları 73
4.2.1. Akustik Fonon Saçılması 75
4.2.2. Polar olmayan Optik Fonon Saçılması 77
4.2.3. Yüklü Safsızlık Saçılması 77
4.2.4. Yüzey Pürüzlülük Saçılması 78
4.2.5. Yüzey Polar Optik Fonon Saçılması 79
4.3. Sürüklenme Hızı ve Mobilite Hesabı 80
4.3.1. Saf Grafen Durumu 82
4.3.2. Kirli Grafen Durumları 83
4.4. İletkenlik Hesabı 89
4.4.1. İletkenlik Hesabında Kullanılan Saçılma Oranlarının Hesaplanması . 94
4.4.1.1. Akustik Fonon Saçılması 95
4.4.1.2. Polar Olmayan Optik Fonon Saçılması 95
4.4.1.3. Yüklü Safsızlık Saçılması 99
4.4.1.4. Yüzey Pürüzlülük Saçılması 99
5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER 117
KAYNAKLAR 121
ÖZGEÇMİŞ 128

ÇİZELGELER DİZİNİ **SAYFA**

Çizelge 4.1.Hesaplamalarda kullanılan materyal parametreleri 89

ŞEKİLLER DİZİNİ **SAYFA**

Şekil 2.1. Az katmanlı grafende alan etkisi 6

Şekil 3.1. Grafen örgüsü ve ters örgü 15
Şekil 3.2. Grafenin enerji bant yapısı 19
Şekil 3.3. Açıların seçimi 22
Şekil 3.4. (a) Akustik ve optik fononlar için tipik dağınım bağıntıları. (b) Akustik ve optik fononlar için kullanılan yaklaşık dağınım ilişkileri 24
Şekil 3.5. Bir safsızlık tarafından saçılan elektronun θ açısı ve $\vec{q}$ vektörü arasındaki ilişkinin k-uzayındaki gösterimi (DAVIES, 1998) 28
Şekil 3.6. Soğurma ve yayınım gösterimi; $\mathbf{k}$ ve $\mathbf{q}$ vektörleri arasındaki ϕ, ve $\mathbf{k}$ ve $\mathbf{k}'$ vektörleri arasındaki θ polar açılarının tanımlanması (TOMIZAWA, 1993) 39
Şekil 3.7. Tek parçacık Monte Carlo hesabının akış diyagramı 56
Şekil 3.8. Toplam zaman aralığının küçük Δt_k aralıklarına bölünmesi 57
Şekil 3.9. Γ ile normalize edilmiş saçılma oranlarının kısmi toplamının gösterimi 59
Şekil 3.10. Laboratuvar çerçevesinde açıların gösterimi 61
Şekil 3.11. İlk durum dalga vektörüne ($\mathbf{k}$) göre son durum dalga vektörünün ($\mathbf{k}'$) polar (θ) ve tepe (ϕ) açılarının gösterimi (TOMIZAWA, 1993) 62
Şekil 3.12. k_z-ekseninin başlangıç dalga vektörüne paralel olduğu yeni çerçeve ile laboratuvar çerçevesi arasındaki ilişki 63
Şekil 3.13. $\mathbf{k}$'ne göre $\mathbf{k}'$'nün polar açısının gösterimi (iki boyut) 63
Şekil 3.14. k_x-ekseninin başlangıç dalga vektörüne paralel olduğu yeni çerçeve ile laboratuvar çerçevesi arasındaki ilişki (iki boyut) 63
Şekil 3.15. Ensemble Monte Carlo simülasyonunun zaman akış diyagramı 69
Şekil 3.16. Ensemble Monte Carlo programının akış diyagramı 70

Şekil 4.1. Değişik elektron konsantrasyonlarında sıcaklığın bir fonksiyonu olarak kimyasal potansiyel 73
Şekil 4.2. Polarizasyon fonksiyonunun oda sıcaklığında değişik elektron konsantrasyonlarında dalga vektörü ile değişimi 74

Şekil 4.3. Polarizasyon fonksiyonunun değişik sıcaklıklarda dalga vektörü ile değişimi 74
Şekil 4.4. T=300 K'de bütün saçılma mekanizmalarına karşılık gelen saçılma oranları 75
Şekil 4.5. $n = 1 \times 10^{12}$ cm^{-2} için farklı sıcaklıklarda akustik fonon saçılma oranları 76
Şekil 4.6. $n = 1 \times 10^{12}$ cm^{-2} alınarak farklı deformasyon potansiyel sabitleri için akustik fonon saçılma oranları 76
Şekil 4.7. $n = 1 \times 10^{12}$ cm^{-2} için farklı sıcaklıklarda nonpolar optik fonon soğurma saçılma oranları 77
Şekil 4.8. $T = 300$ K'de farklı safsızlık konsantrasyonlarında yüklü safsızlık saçılma oranları 78
Şekil 4.9. $T = 300$ K'de farklı elektron konsantrasyonlarında yüklü safsızlık saçılma oranları 79
Şekil 4.10. $T = 300$ K'de farklı elektron konsantrasyonlarında yüzey pürüzlülük saçılma oranları 80
Şekil 4.11. $n = 1 \times 10^{12}$ cm^{-2}'de farklı sıcaklıklarda yüzey polar optik fonon soğurma saçılma oranları 81
Şekil 4.12. $T = 300$ K'de farklı elektron konsantrasyonlarında yüzey polar optik fonon soğurma saçılma oranları 81
Şekil 4.13. $T = 300$ K'de farklı elektron konsantrasyonlarında yüzey polar optik fonon yayınım saçılma oranları 82
Şekil 4.14. Saf grafenin sürüklenme hızının çok düşük elektrik alanlarda zamanla değişimi 84
Şekil 4.15. Saf grafenin sürüklenme hızının düşük elektrik alanlarda zamanla değişimi 84
Şekil 4.16. Saf grafenin sürüklenme hızının yüksek elektrik alanlarında zamanla değişimi 85
Şekil 4.17. Saf grafen için farklı sıcaklıklarda elektrik alanla kararlı durum sürüklenme hızının değişimi 85
Şekil 4.18. $T = 300$ K'de farklı elektrik alanlarında taşıyıcıların ortalama enerjilerinin zamanla değişimi 86

Şekil 4.19. 10 kV/cm elektrik alan altında elektron enerjilerinin iki farklı sıcaklık ve deformasyon sabiti değerine göre zamanla değişimi 86
Şekil 4.20. EMC yöntemi ile hesaplanan mobilitenin sıcaklıkla değişimi 87
Şekil 4.21. Kirli grafen durumunda sürüklenme hızının farklı elektrik alanlarında zamanla değişimi 90
Şekil 4.22. Oda sıcaklığında saf grafen durumuna IMP ve IMP+SR eklendiğinde sürüklenme hızlarının, farklı elektron konsantrasyonlarında uygulanan elektrik alanla değişimi 90
Şekil 4.23. Oda sıcaklığında saf grafen durumuna IMP ve IMP+SR+SPOP eklendiğinde sürüklenme hızlarının, farklı elektron konsantrasyonlarında uygulanan elektrik alanla değişimi 91
Şekil 4.24. Oda sıcaklığında saf grafen durumuna IMP+SR ve IMP+SR+SPOP eklendiğinde sürüklenme hızlarının, farklı elektron konsantrasyonlarında uygulanan elektrik alanla değişimi 91
Şekil 4.25. Oda sıcaklığında saf grafen durumuna IMP+SR ve IMP+SR+SPOP eklendiğinde sürüklenme hızlarının, düşük elektron konsantrasyonlarında uygulanan elektrik alanla değişimi 92
Şekil 4.26. Kirli grafen durumunda T=300 K'de farklı elektrik alanlarında taşıyıcı enerjilerinin zamanla değişimi 92
Şekil 4.27. Saf grafen durumuna IMP ve SR mekanizmaları eklenerek EMC yöntemi ile hesaplanan mobilitenin elektron konsantrasyonuyla değişimi 93
Şekil 4.28. Saf grafen durumuna IMP, SR ve SPOP mekanizmaları eklenerek (tüm mekanizmalar varken, kirli grafen durumu) EMC yöntemi ile hesaplanan mobilitenin elektron konsantrasyonuyla değişimi 93
Şekil 4.29. Saf grafen için farklı elektron konsantrasyonlarında sıcaklıkla mobilite değişimi 101
Şekil 4.30. Saf grafen için farklı elektron konsantrasyonlarında sıcaklıkla iletkenlik değişimi 101
Şekil 4.31. Kendinden (düşük miktarda) safsızlık barındıran akustik deformasyon potansiyeli düşük olan saf grafen için farklı sıcaklıklarda elektron konsantrasyonu ile mobilite değişimi 102

Şekil 4.32. Kendinden (düşük miktarda) safsızlık barındıran akustik deformasyon potansiyeli düşük olan saf grafen için farklı sıcaklıklarda elektron konsantrasyonu ile iletkenlik değişimi 103
Şekil 4.33. Kendinden (düşük miktarda) safsızlık barındıran akustik deformasyon potansiyeli yüksek olan saf grafen için farklı elektron konsantrasyonlarında sıcaklıkla mobilite değişimi 103
Şekil 4.34. Kendinden (düşük miktarda) safsızlık barındıran akustik deformasyon potansiyeli yüksek olan saf grafen için farklı elektron konsantrasyonlarında sıcaklıkla iletkenlik değişimi 104
Şekil 4.35. Saf grafen durumuna ek olarak IMP eklenen durum için farklı elektron konsantrasyonlarında sıcaklıkla mobilite değişimi 104
Şekil 4.36. Saf grafen durumuna ek olarak IMP eklenen durum için farklı elektron konsantrasyonlarında sıcaklıkla iletkenlik değişimi 105
Şekil 4.37. Saf grafen durumuna ek olarak IMP eklenen durum için farklı sıcaklıklarda elektron konsantrasyonu ile mobilite değişimi 105
Şekil 4.38. Saf grafen durumuna ek olarak IMP eklenen durum için farklı sıcaklıklarda elektron konsantrasyonu ile iletkenlik değişimi 106
Şekil 4.39. Saf grafen durumuna ek olarak SR eklenen durum için farklı elektron konsantrasyonlarında sıcaklıkla mobilite değişimi 106
Şekil 4.40. Saf grafen durumuna ek olarak SR eklenen durum için farklı elektron konsantrasyonlarında sıcaklıkla iletkenlik değişimi 107
Şekil 4.41. Saf grafen durumuna ek olarak IMP ve SR eklenen durum için farklı elektron konsantrasyonlarında sıcaklıkla mobilite değişimi 108
Şekil 4.42. Saf grafen durumuna ek olarak IMP ve SR eklenen durum için farklı elektron konsantrasyonlarında sıcaklıkla iletkenlik değişimi 108
Şekil 4.43. Saf grafen durumuna ek olarak IMP ve SR eklenen durum için farklı sıcaklıklarda elektron konsantrasyonu ile mobilite değişimi 109
Şekil 4.44. Kirli grafen durumunda T=300 K için momentum uzayında parçacıkların dağılımı 109
Şekil 4.45. Kirli grafen durumunda T=300 K için momentum uzayında parçacıkların Fermi dağılım fonksiyonu 110

Şekil 4.46. Kirli grafen durumunda T=10 K için momentum uzayında parçacıkların dağılımı 110
Şekil 4.47. Kirli grafen durumunda T=10 K için momentum uzayında parçacıkların Fermi dağılım fonksiyonu 111
Şekil 4.48. Saf grafen durumunda T=300 K için momentum uzayında parçacıkların dağılımı 111
Şekil 4.49. Saf grafen durumunda T=300 K için momentum uzayında parçacıkların Fermi dağılım fonksiyonu 112
Şekil 4.50. Saf grafen durumunda T=50 K için momentum uzayında parçacıkların dağılımı 112
Şekil 4.51. Saf grafen durumunda T=50 K için momentum uzayında parçacıkların Fermi dağılım fonksiyonu 113
Şekil 4.52. Kirli grafen durumunda T=300 K için farklı elektrik alanlarında hız-konum eğrileri 113
Şekil 4.53. Kirli grafen durumunda T=10 K için farklı elektrik alanlarında hız-konum eğrileri 114
Şekil 4.54. Saf grafen durumunda T=300 K için farklı elektrik alanlarında hız-konum eğrileri 114
Şekil 4.55. Saf grafen durumunda T=50 K için farklı elektrik alanlarında hız-konum eğrileri 115

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

$\mathbf{a_1}$, $\mathbf{a_2}$	: örgü vektörleri
$\mathbf{b_1}$, $\mathbf{b_2}$	: ters örgü vektörleri
k	: elektron dalga vektörü
q	: fonon dalga vektörü
$D(E)$	: durum yoğunluğu
D_a	: akustik deformasyon potansiyeli
D_o	: optik deformasyon potansiyeli
e	: elektron yükü
E, E_k	: enerji
E_F	: Fermi enerjisi
$f(E)$, f_{sk}	: Fermi dağılım fonksiyonu
$\mathbf{F}$	: Elektrik alan
g_s	: spin dejenere faktörü
g_v	: vadi dejenere faktörü
j	: akım yoğunluğu
k_B	: Boltzmann sabiti
k_F	: Fermi dalga vektörü
κ	: dielektrik sabiti
$\varepsilon(q)$	: dielektrik fonksiyonu
$\Pi(q)$	: Polarizasyon fonksiyonu
τ	: iki saçılma olayı arasında geçen süre
SLG	: tek tabaka grafen
K, K'	: Dirac noktaları
AC	: Akustik fonon saçılması
NPOP(abs)	: Polar olmayan optik fonon saçılması (soğurma)
NPOP(ems)	: Polar olmayan optik fonon saçılması (yayınım)
IMP	: Safsızlık saçılması
SR	: Yüzey pürüzlülük saçılması
SPOP(abs)	: Yüzey polar optik fonon saçılması (soğurma)
SPOP(ems)	: Yüzey polar optik fonon saçılması (yayınım)

NDR : Negatif Diferensiyel Direnç

A : alan

v_F : Fermi hızı

v_s : ses hızı

ρ : malzemenin yoğunluğu

c_L : malzemenin elastik sabiti

α : etkin ince yapı sabiti

$\mathcal{F}_v$: elektron-fonon çiftlenim parametresi

$W_0(E_k)$: kendiliğinden saçılma oranı

$W_T(E_k)$: toplam saçılma oranı

r : rastgele sayı

σ : iletkenlik

γ_0 : katman içerisindeki etkileşim parametresi

γ_1 : katmanlar arasındaki etkileşim parametresi

1. GİRİŞ

İki boyutlu kristal yapılarına her dönem ilgi gösterilmiştir. 1930'larda iki boyutlu yapıların kararlı olamayacakları ve bu nedenle üretilmelerinin mümkün olmadığı gösterilmiştir (PEIERLS, 1923,1935; LANDAU, 1937). Peierls ve Landau standart harmonik yaklaşımla, termal dalgalanmaların uzun erimli mesafelerde malzemeye zarar verebileceğini, bunun sonucu olarak da iki boyutlu bir örgünün herhangi bir sonlu sıcaklıkta eriyebileceğini göstermiştir. Bununla birlikte, Mermin ise belirli şartlar altında iki boyutta kristallerin var olabileceğini göstermiştir (MERMIN, 1968). Teorilerin de desteklediği gibi, ince filmler üzerine yapılan birçok deney, genellikle düzinelerce atomik tabakadan oluşan filmlerin belirli bir kalınlığın altında, üç boyutlu kristalin örgü yapısıyla uyumlu bir parçası olmadığı sürece termodinamik olarak kararsız olacağını gösterdi. Her ne kadar teori, iki boyutlu uzayda mükemmel kristalin olmasına izin vermiyorsa da, üç boyutlu uzayda neredeyse mükemmel iki boyutlu kristallerin olmasını yasaklamıyordu (MEYER vd., 2007). Harmonik yaklaşımın uygulandığı iki boyutlu kristal probleminin detaylı bir analizi yapıldığında, uzun dalga boyuna sahip fononlar arasındaki bükme ve germe etkileşimleri nedeniyle atomik düzeydeki ince katmanların üçüncü boyutta deformasyona uğrayarak kararlı kalabildikleri gösterilmiştir (NOVOSELOV vd., 2004, 2005b). Tamamıyla iki boyutlu özellikler gösteren ilk malzeme grafen olup ilk defa Novoselov ve ark. tarafından 2004 (NOVOSELOV vd., 2004) yılında üretilmiştir. Grafen düzgün altıgen karbon örgüye sahip karbon atomlarından oluşan iki boyutlu bir malzemedir. Grafen kararlı iki boyutlu yapısına ek olarak, iyi bir iletken, düzlem içindeki kuvvetli bağlardan dolayı çok sağlam, saydam, özelliklerini kaybetmeden eğilip bükülebilen bir yapıya sahiptir. Grafende yük taşıyıcıları sıfır etkin kütleleriyle ve oda sıcaklığında saçılmaya uğramadan mikrometrelerce mesafe katedebilerek devasa mobiliteler sergilerler. Bakırdan altı kat daha fazla akım yoğunluklarını taşıyabildiği gibi, termal iletkenliği de çok iyidir. Ayrıca grafen helyum gazı da dahil olmak üzere gazlara geçirgen değildir (ZHANG vd., 2005; BUNCH vd., 2008). Kırılganlık ve esneklik gibi çelişkili nitelikleri barındırır. Ayrıca grafen kuantum Hall etkisi, Aharonov-Bohm etkisi, Klein paradoksu gibi temel fizik konularının çalışılması için de bir yapı sunmaktadır (ZHANG vd., 2005; BEENAKKER vd., 2008; BOLOTIN vd., 2009; HUEFNER vd., 2010).

Grafen araştırmalarının tarihsel gelişimini anlamak için, grafenin, grafitin en az katmanlı limiti olduğunu göz önünde bulundurmakta fayda vardır. Grafit birbirlerine zayıf bağlarla bağlı karbon atom tabakalarından oluşur. Bir kurşun kaleminde olduğu gibi zayıf bağlarla etkileşen bu tabakalar birbirlerinin üzerinden kolayca kayabilirler. Bol ve doğal olduğundan grafit neredeyse 500 yıldır bir mineral olarak bilinir, bu bakımdan, balpeteği karbonun sıradışı özellikleri aslında yeni değildir.

Karbon ise doğada temel bir rol oynar, periyodik tabloda en merak uyandıran elementlerden biridir. Birçok allotrop formları olup, bazıları (elmas ve grafit) çok eski zamanlardan beri bilinir, bazısı da (fullerenler ve nanotüpler) yaklaşık 20 yıl önce keşfedilmiştir. İlginç olan ise, iki boyutlu formu olan grafenin, oldukça dikkat çeken özellikleri olmasına rağmen çok yakın bir geçmişte keşfedilmiş olmasıdır. Grafende elektronlar lineer dispersiyon bağıntısına uyarken, kütlesiz rölativistik parçacıklar gibi davranırlar. Bu davranışın sonucu olarak da bu ilk iki boyutlu malzemede, çok sayıda - anormal kuantum Hall etkisinden, lokalizasyonun olmayışına kadar - oldukça tuhaf elektronik özellikler gözlenmiştir. Ayrıca yoğun madde fiziği ile kuantum elektrodinamiği arasında bir köprü niteliğinde olup karbon-temelli elektroniğe dayalı yeni ufuklar açmıştır.

İki boyutlu balpeteği örgü yapısıyla karbon atomlarından oluşan grafen; tam olarak bir atom kalınlığındadır ve her bir karbon atomu aslında bir yüzey atomudur. Bu nedenle kullanılan alttaban malzemesinden (SiO_2, SiC, HfO_2 vd.) kaynaklanan yapısal bozulmalar, yüzeye tutunan tanecikler, yerel yük dengesizlikleri, sınırlardaki atomik yapı ve atomik düzeydeki kusurlar bile grafendeki elektronik taşınım özelliklerinin etkilenmesine yeterli olabilecek düzeydedir. Bu nedenlerle, deneysel olarak, grafene dayalı aygıt üretiminde çevre faktörünün kontrolü önemli olduğu kadar da zordur. Genellikle grafen için alttaban dielektriği olarak kullanılan SiO_2, tuzaklanmış oksit yüklerinin etkisindedir.

Grafenin enerji bant yapısı ilk defa Wallace tarafından 1947de çıkarılmış (WALLACE, 1947) ve diğer malzemelerin tersine Dirac noktaları olarak bilinen belirli noktalar civarında enerjinin momentum ile doğrusal değiştiği ve yasak enerji aralığının olmadığı gösterilmiştir. Grafen enerji bant yapısının bu özelliği nedeniyle yarıiletken ara yüzeylerinde oluşturulan iki boyutlu yapılardan çok farklı elektronik özellikler sergilemektedir (CASTRO NETO vd., 2009; Das SARMA vd., 2011). Grafen yeni nesil teknolo-

jiler için silikon tabanlı cihazların alternatifi olarak düşünülmektedir. Gösterdiği elektronik ve optik özellikler bakımından grafene olan ilgi artarak devam etmektedir.

Bu tez çalışmasının temel amacı grafen malzemesinde, uygulanan bir elektrik alanı altında elektron taşınım olgusunu bütün detayları ile çalışmak ve elektron mobilite ve iletkenlik hesabı yapmaktır. Bu tezde grafenin elektron taşınım özellikleri inceleneceğinden, grafen içinde elektronların saçılmasına sebep olan olguların detaylı bilinmesi gerekir. Bunlar temel olarak fononlardan (akustik ve optik) (HWANG ve Das SARMA, 2008; SHISHIR ve FERRY, 2009), iyonlardan (ANDO, 2006; HWANG ve Das SARMA, 2009), alt taban malzemesindeki fonon ve yüklü parçacıklardan kaynaklanan saçılmalar ve buruşuk yüzey/ara yüzey saçılmasıdır (ADAM vd., 2007; FRATINI ve GUINEA, 2008; SHISHIR vd. 2009; LI vd. 2010). Grafen için saçılma mekanizmalarının detaylı olarak çıkarılması, analitik olarak çıkarılamayanların sayısal olarak hesaplanması, uygulanan elektrik alana, ortam sıcaklığına, taşıyıcı yoğunluğuna, alt taban malzemesine, katkılama oranına göre sistemin kimyasal potansiyelinin, taşıyıcıların hız-zaman, hız-yer değiştirme, hız-alan, hız-taşıyıcı yoğunluğu davranışlarının sayısal yöntemlerle hesaplanması tezin hedefleri arasındadır. Ayrıca taşıyıcıların momentum uzayındaki dağılımları, doluluk oranları, her bir saçılma mekanizmasından kaynaklanan saçılma oranlarının karşılaştırmalarının yapılması tez çalışmasının amaçları içindedir. Böylece grafende mobilitenin değişik ortam şartları, katkılama, alt taban malzemesinin özelliklerine ve farklı saçılma mekanizmalarına bağımlılığı ortaya çıkarılmış olacaktır. Bu özellikler en temel malzeme özellikleri olup, ileride yapılabilecek aygıt tasarım ve üretim aşamalarında en gerekli parametrelerdir.

Yapılacak çalışmada uygulanacak kuramsal yaklaşımın en temel dayanakları şöyle olacaktır: (i) Grafenin enerji bant yapısının elde edilmesi için sıkı bağlanma metodunun kullanılması, (ii) Grafende temel saçılma mekanizmalarının ve geçişlerin hesaplanması için Fermi'nin Altın Kuralının belirli yaklaşıklıklar çerçevesinde kullanılması, (iii) Grafende elektronların perdelenmesinin, dielektrik sabitinin, polarizasyon fonksiyonunun bulunması için Thomas-Fermi ve/veya Linhard tipi perdelenme teorisinin kullanılması, (iv) Grafen içindeki elektron taşınımının modellenmesi için kinetik Monte Carlo (KMC) yönteminin (JACOBONI ve LUGLI, 1989; FICHTHORN ve WEINBERG, 1991) kullanılması. KMC yönteminde en can alıcı nokta çok iyi test edilmiş rasgele

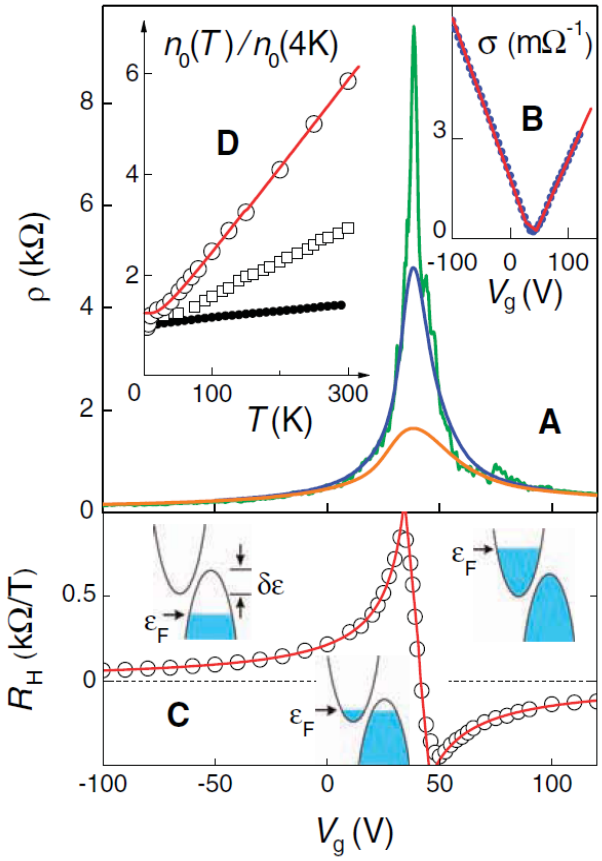
sayı üreteçlerinin kullanılmasıdır. KMC malzemeye uygulanan bir elektrik alanı altında Boltzmann taşınım denkleminin stokastik süreçler kullanılarak çözülmesini sağlayan, gerçek deneysel zamanla uyumlu, değişik süreçlerin dinamik olarak sisteme eklenebildiği etkin bir yöntemdir (JACOBONI ve LUGLI, 1989; FICHTHORN ve WEINBERG, 1991; TOMIZAWA, 1993). Ayrıca hesaplanan saçılma oranları kullanılarak elektronların ortalama sürüklenme süresinin bulunması ile iletkenlik hesabı da yapılacaktır.

2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR

Grafen ilk kez teorik olarak 1947'de P. R. Wallace tarafından çalışılmıştır (WALLACE, 1947). Wallace çalışmasında grafenin yapısını ve enerjinin sahip olduğu lineer dispersiyon bağıntısını bulmuştur. 1956'da da uyarımlar için dalga denklemi J. W. McClure tarafından yazılmıştır (McCLURE, 1956) ve Dirac eşitliği ile benzerliği G. W. Semenoff tarafından 1984'de tartışılmıştır (SEMENOFF, 1984), ayrıca DiVincenzo ve Mele'ın çalışmasına da bakılabilir (DiVINCENZO ve MELE, 1984).

2004 yılından önce, kararlı grafen katmanlarının izolasyonunun mümkün olacağı düşünülmemiştir. Manchester Üniversitesi (UK) ve Chernogolovka'daki (Russia) Mikroelektronik Teknolojileri Enstitüsü'nden Andre Geim, Konstantin Novoselov ve arkadaşlarının grafeni elde etmeyi başarması tamamıyla sürpriz olmuştur. Ekim 2004'de Science dergisinde yayınlanan (NOVOSELOV vd. 2004) çalışmalarında grafenin fabrikasyonu (nasıl elde edildiği), tanımı ve karakterizasyonu yapıldı. Basit fakat etkili bir mekanik soyma (eksfoliasyon) yöntemi kullanılmıştır. Bunun için basit bir seloteyp ile bir grafit kristalinden ince grafit katmanları çıkarılmış ve bu katmanlar bir silikon alt taban üzerine transfer edilmiştir. Bu metod ilk olarak R. Ruoff'un grubu tarafından önerilmiş ve denenmişti fakat herhangi bir tek katman tespit edilememişti (LU vd. 1999). Manchester grubu ise sadece birkaç katmandan oluşan parçaların elde edilmesinde ve optik bir metod kullanarak (NOVOSELOV vd. 2004) bu katmanların kolaylıkla tespit edilmesinde başarılı olmuşlardır. Bazı durumlarda ise bu ince tabakalar tek bir katmandan oluşuyordu, yani grafen tespit edilmişti. Elde edilen bulguların önemli bir parçası, örneğe dik olarak uygulanan elektrik alanın bir fonksiyonu olarak ölçülen dirençte gözlenen her iki kutuplu (ambipolar) alan etkisidir. Elde edilen bu sonucun verileri Şekil 2.1.'de gösterilmiştir. Levha direncinin belirgin bir maksimumu olup bu maksimumun her iki tarafında da düşüşler bulunmaktadır. Bu durum maksimumun sağ tarafındaki elektron artışını ve sol tarafındaki deşik artışını göstermektedir. Maksimum levha direncinin 9 kΩ olduğu not edilmelidir çünkü bu sonuç direncin kuantumlanma miktarı kadardır.

Grafen katmanlarının fabrikasyonu, tespit edilmesi ve elektrotlara bağlanması teknolojisi bir kez uygulandıktan sonra, hem Manchester grubu hem de diğer gruplar tarafından hızlı bir şekilde çok sayıda yeni deneyler yapılmıştır (NOVOSELOV vd.



Şekil 2.1. Az katmanlı grafende alan etkisi. (A) Az katmanlı grafen direncinin farklı sıcaklıklarda gerilime tipik bağımlılığı. (B) Filmlerin iletkenliklerinin değişimine bir örnek. (C) Aynı film için $T = 5$ K de Hall katsayısının uygulanan voltajla değişimi. (D) Taşıyıcı konsantrasyonlarının sıcaklıkla değişimi (NOVOSELOV vd., 2004)

2005a; ZHANG vd. 2005; NOVOSELOV vd. 2005b; BARBOLINA vd. 2006; HILL vd. 2006). Bu çalışmalar anormal kuantum Hall etkisini ve BN'ün tek katmanları gibi diğer iki boyutlu (2D) kristallerinin hazırlanmasını da içermektedir.

Mekanik soyma metodundan ayrı olarak, özellikle Georgia Tech.'den W. A. de Heer önderliğinde bir grup tarafından, oldukça ince karbon filmlerinin büyütülmesi için farklı yollar da çalışılmıştır. de Heer grubu bir SiC yüzeyinden silikonun yakılması suretiyle geride ince bir karbon tabakası bırakan bir metod geliştirmişti. Bu işlem SiC kristalinin 1300 derece civarında ısıtılmasıyla yapılmıştır. Aynı metod birkaç grup tarafından daha önce denenmiş (Van BOMMEL, 1975; FORBEAUX, 1998), fakat bu çalışmalarda yüzey fiziği üzerine yoğunlaşılmış ve taşınım (transport) ölçümleri yapılmamıştır. Aralık 2004'de Novoselov ve arkadaşlarının yayınından sadece 2 ay sonra de Heer'in grubu ince karbon filmlerinin taşınım ölçümleri üzerine ilk makalelerini yayınlamışlardır (BERGER, 2004). Magneto rezistans ölçümlerini ve aynı zamanda zayıf bir elektrik alan etkisi ölçümlerini de sunmuşlardır. de Heer ve çalışma arkadaşları elektronik aygıtların ince karbon filmlerden nasıl üretileceğine dair patent de almışlardır (De HEER, 2006).

P. Kim önderliğinde Columbia Üniversitesi'nden bir grup da ince karbon katmanlar yapmak için alternatif bir yaklaşım bulmuşlardır. Bir grafit kristalini bir atomik kuvvet mikroskobunun ucuna (tip) yerleştirmişler ve onu bir yüzey boyunca sürüklemişlerdir. Bu yolla yaklaşık 10 katmana kadar ince grafit katmanları üretebilmişlerdir.

Grafende Fermi seviyesi civarında elektron ve deşikler için dispersiyon bağıntısı doğrusaldır. Etkin kütle enerji bandının eğriliğinden kaynaklandığı için bu durum sıfır etkin kütleye karşı gelmektedir. Bu nedenle grafende kütlesiz ve sabit bir hızla hareket eden fermiyonları tanımlayan Dirac eşitliği geçerlidir. Yaklaşık 1 eV'a kadar enerjiler için geçerli olan bu durum, grafen ve parçacık fiziği arasında ilginç benzetmelere yol açmaktadır. 1 eV üstü enerjiler için ise dispersiyon bağıntısı doğrusal olmaktan uzaklaşır. Bu özel dispersiyon bağıntısının bir sonucu olarak, kuantum Hall etkisi grafende olağandan farklı olur. Olağan olmayan (anormal) kuantum Hall etkisine yol açan bu dispersiyon bağıntısı, iki farklı grup tarafından bağımsız olarak ispatlanmıştır, ayrıca Manchester grubu ve P. Kim önderliğindeki bu iki grup şu an mekanik soyma metodunu kullanmaktadırlar. Kasım 2005'de aynı konulu iki makale de arka arkaya Na-

ture dergisinde yayınlanmıştır (NOVOSELOV, 2005a; ZHANG, 2005).

Grafen ve onun özellikleri ile alakalı giderek artan sayıda makale üretimi ile, 2005'ten beri bu alandaki çalışmalarda kelimenin tam anlamıyla bir patlama yaşanmıştır. Tek katmanlı grafenle kıyaslandığında farklı özelliklere sahip çift katmanlı grafen de bütün yönleriyle çalışılmaktadır (CASTRO vd. 2007; KUZMENKO vd. 2009; MOROZOV vd. 2008; NOVOSELOV vd. 2006; OHTA vd. 2006). Grafende kesirli kuantum Hall etkisinin araştırılması için daha yüksek manyetik alanlarda çalışmalar yapılmıştır (DU vd. 2009). Bununla birlikte grafen üzerine yapılan mekanik çalışmalar grafenin mekanik olarak oldukça kuvvetli olduğunu, en kuvvetli çelikten bile 100 kat daha güçlü olduğunu göstermiştir (LEE vd. 2008). Diğer önemli bir keşif ise grafenin ışık soğurmasının ince yapı sabitiyle (fine structure constant) alakalı olmasıdır (NAIR vd. 2008). Grafen aslında pratikte geçirgendir. Optik bölgede ışığın sadece yüzde 2.3'ünü soğurur. Bu sayı aslında $\pi\alpha$ ile verilir, burada α ise elektromanyetik kuvvetin derecesini belirleyen ince yapı (ayar) sabitidir.

Ayrıca Dirac eşitliğine dayalı parçacık fiziği ile benzerliklerini açıklayan önemli bir dizi makale vardır. Grafen ve Dirac fermiyonları arasındaki uyarımların biçimsel benzerliği, İsveç fizikçi Oskar Klein tarafından öne sürülen, Klein tünellemesi olarak anılan olgunun test edilmesine de olanak sağlamıştır (KLEIN, 1929). Bu olgu bir tünel bariyerine dik olarak gelen kütlesiz parçacıklar için tünel bariyerinin tamamen geçirgen olabileceğini öngörür. Belli bazı durumlar altında geçirgenlik enerjinin bir fonksiyonu olarak salınımlar yapabilir. Bu olgu yine grafende Katsnelson, Geim ve Novoselov tarafından 2006 yılında test edilebilmiş (KATSNELSON, 2006) ve 2009 yılında da Young ve Kim tarafından doğrulanmıştır (YOUNG ve KIM 2009). Ayrıca, tamamıyla rölativistik bir fenomen olan, bir süperiletkende parçacıktan anti parçacığa dönüşüm, grafen sayesinde saf bir hayal ürünü olmaktan çıkmıştır. Andreev yansıması olarak bilinen bu dönüşüm süreci grafende kütlesiz elektron ve deşiklerin birbirlerine süperiletken çiftlenim potansiyeli ile dönüşmesi sonucu gerçekleşir. Bu iki fenomen hakkında ayrıntı bilgiye C. W. J. Beenakker'in 2008'deki yayınından ulaşılabilir (BEENAKKER, 2008).

Klasik mekanikten farklı olarak, kuantum teorisinde elektromanyetik potansiyellerin yüklü parçacıklar üzerine olan etkisinin bir faz farkı yarattığı olgu Aharonov-Bohm etkisi olarak bilinir (AHARONOV, 1959). 1959 yılında Y. Aharonov ve D.

Bohm tarafından teorik olarak ispatlanan bu olgunun varlığı, teorik ve deneysel olarak grafende sırasıyla 2007 ve 2008 yıllarında A. F. Morpurgo ve arkadaşları tarafından ortaya çıkarılmıştır (RECHER, 2007; RUSSO, 2008). Ayrıca Magdalena Huefner ve arkadaşlarının da grafen ile 2010 yılında yapmış oldukları çalışmada Aharonov-Bohm osilasyonlarını yüzde 5 civarında görebilme imkanları olmuştur (HUEFNER, 2010).

Grafende iyonize safsızlıklardan kaynaklanan perdeleme ve elektron saçılmasının incelenmesinde iletkenliğin elektron yoğunluğu ile arttığı ve mobilitenin Fermi enerjisine bağlı olmadığı gösterilmiştir (ANDO, 2006). Aynı çalışmada perdelemenin sıcaklık ile arttığı kaydedilmiştir. İyonize safsızlıklar grafenin yüzeyinde bulunabilir ve/veya alt taban malzemesinden kaynaklanabilir. Elektronların grafende mikroskopik buruşukluklardan saçılması Katsnelson ve Geim tarafından incelenmiştir (KATSNELSON, 2008). Bu çalışmada kısa erimli potansiyellerin (nötr safsızlıklar) grafenin elektronik taşınımında hiç rol oynamadıkları fakat yüklü safsızlıkların ve grafendeki mikroskopik buruşuklukların elektronun taşınım karakteristiklerinde ve serbest uçuş mesafesinin tanımlanmasında önemli olabileceği gösterilmiştir. Aynı çalışmada belirli buruşukluk tiplerinin, iyonik safsızlıkların saçılma potansiyellerine benzer şekilde uzun erimli potansiyeller oluşturabilecekleri gösterilmiştir.

Yüklü parçacıkların rasgele dağılıma sahip olduğu bir durum için, taşınım problemini elektron yoğunluğu ile iyonize safsızlıkların yoğunluklarının oranı cinsinden ele alan bir çalışma, Das Sarma ve ark. tarafından yapılmıştır (HWANG vd., 2007). Bu çalışmada iki boyutlu elektronların iyonize safsızlıkları perdeleme etkisi Linhard yaklaşımı çerçevesinde ele alınmış, yüksek yoğunluklarda Boltzmann taşınım teorisi kullanılarak elektron taşınım problemi incelenmiştir. Aynı grubun Dirac noktaları civarında iletkenliğin elektron yoğunluğuna çeşitli mertebelerde bağlı olduğunu gösterdiği çalışmasında (ADAM vd., 2008a) çeşitli saçılma mekanizmaları göz önüne alınmış, iletkenlik Boltzmann taşınım teorisi çerçevesinde ele alınmıştır. Burada yarıiletken heteroeklemler (veya oksit yarıiletken ara yüzleri) için geliştirilen buruşuk yüzey saçılması grafene uygulanmaya çalışılmıştır. Akustik fononlardan kaynaklanan saçılmaların sınırladığı mobilite değerleri katkılanmış veya gerilim uygulanmış (elektrotlu) bir grafen tabakası için çalışılmış, mobilitenin sıcaklığa ve elektron yoğunluğuna bağlılığı elde edilmeye çalışılmıştır (HWANG ve Das SARMA, 2008). Herhangi bir alt

tabakadan etkilenmemesi için asılı olarak üretilen grafenin elektronik özellikleri Adam ve Das Sarma tarafından çalışılmıştır (ADAM ve Das SARMA, 2008b). Bu çalışmada mobiliteyi sınırlayan en önemli etkenin grafen yüzeyine bulaşmış iyonize safsızlıklardan kaynaklandığı kabul edilmiştir. Grafenin perdelemeye ve sıcaklığa bağlı iletkenlik özelliklerinin araştırıldığı başka bir çalışmada iletkenliğin sıcaklık ile monoton olmadığı, düşük sıcaklıklarda azaldığı ve yüksek sıcaklıklarda arttığı gösterilmiştir (HWANG ve Das SARMA, 2009; ADAM vd., 2009).

Grafenin elektronik özellikleri ve grafende yük taşınım probleminin genel bir tekrarı için sırası ile (NETO vd., 2009; Das SARMA vd., 2011) makalelerine bakılabilir. Grafende yük taşınımının Monte Carlo yöntemi ile incelendiği sınırlı sayıda çalışma vardır. Aktürk ve Goldsmann (AKTURK ve GOLDSMAN, 2008) tarafından grafen birim hücresine sıkı bağlanma metodu uygulanarak elektron ve fononların enerji dağınımı bulunmuş, daha sonra Ferminin Altın Kuralı kullanılarak deformasyon potansiyel enerji yaklaşımı çerçevesinde elektronların fononlardan saçılma oranları bulunmuş ve bu bilgiler hem elektron hem de fononlar için bütün enerji bandını kapsayan bir Monte Carlo programı kullanılarak elektron taşınımı incelenmiş ve farklı yönlerde mobilite hesabı yapılmıştır.

Perdeleme etkilerini ihmal ederek iyonik safsızlık saçılmasının yaklaşık bir şekilde göz önüne alındığı başka bir çalışmada, akustik ve optik fonon saçılmaları da göz önüne alınarak grafende deneysel olarak gözlenen (MERIC vd., 2008) hız ve akım doyumunu MC yöntemi ile açıklamaya çalışmışlardır (CHAUHAN ve GUO, 2009). Bu çalışmada doyum akımının yük yoğunluğunun kökü ile orantılı olduğu iddia edilmiştir. Shishir ve Ferry saf grafende sadece akustik ve optik fonon saçılmalarını göz önüne alarak, yarı klasik MC yöntemini kullanarak elektron taşınım problemini göz önüne almışlar, doyuma ulaşmış sürüklenme hızının elektron yoğunluğuyla doğrusal olarak azaldığını göstermişlerdir (SHISHIR ve FERRY 2009). Li ve ark. (LI vd., 2010) elektronların yüzey polar fononlarından esnek olmayan saçılmalarının grafenin taşınım özelliklerine etkisini MC yöntemi ile farklı alt taban malzemeleri için incelemişler, farklı alt tabanların doyum hızını farklı etkilediklerini, çok düşük sıcaklıklarda bile yüzey fononlarının grafenin elektriksel özelliklerini etkileyebileceğini göstermişlerdir. Yüksek elektrik alanlarında grafendeki elektron taşınım problemi yarı analitik denklemler ve

MC yöntemi kullanılarak optik fonon saçılmasının etkin olduğu bir durum için Fang ve ark. tarafından incelenmiştir (FANG vd., 2011). Aynı çalışmada elektron-elektron etkileşmeleri de göz önüne alınmış ve sıcak fonon etkisinin akım doyumunda baskın rol oynadığı, elektron-elektron saçılmasının grafendeki sıcak taşıyıcı popülasyonunu şiddetli şekilde termalize ettiği gözlenmiştir.

3. TEORİK ALT YAPI

3.1. Grafenin Temel Elektronik Özellikleri

Grafenin bir birim hücresinde iki karbon atomu bulunmaktadır. Her karbon atomunun dört valans elektronu olup, bunlardan üçü grafen düzleminde güçlü σ bağını oluştururlar. Grafendeki bu güçlü karbon bağları ona yeryüzündeki bilinen en sağlam malzemelerden biri olma özelliğini kazandırmıştır. Geriye kalan $2p_z$ orbitali (π bağı) ise grafen düzlemine dik olup yarı dolu π-bağını oluştururlar. Grafit bir çok grafen tabakasının bir araya gelmesi ile oluşur. Bu grafen katmanlar arasındaki bağlar oldukça zayıftır, bu nedenle örneğin grafitten oluşan kurşun kalemi kağıda sürtüldüğünde bu zayıf bağlar kırılmakta ve kağıda yayılan grafen tabakalarından oluşan grafit yazı izlerini oluşturmaktadır. Grafene sıradışı özellikleri kazandıran ve grafende iletimden sorumlu olan yine bu π bağıdır.

Bal peteği örgüsüne sahip iki boyutlu grafenin kristal yapısı Bravais örgüsü özelliklerini sağlamaz çünkü bal peteği örgüsünde her örgü noktasındaki atom ve her atom etrafındaki atomik dağılım aynı olmasına rağmen her atom etrafındaki yönelim farklıdır. Bu nedenle birim hücre iç içe geçmiş iki üçgen hücreden oluşuyormuş gibi göz önüne alınır. Bu seçim grafenin birçok özelliğini açıklamakta anahtar rol oynar.

Grafen düzlemi $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$ vektörleri tarafından tanımlanan ve her birim hücresinde iki karbon atomu bulunan (A, B) altıgen örgü yapısı ve buna karşılık gelen ters örgü Şekil 3.1.'de gösterilmiştir. Şekildeki birim örgü vektörleri

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= \frac{a}{2}(-1, \sqrt{3}) \\ \mathbf{a}_2 &= \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}) \end{aligned}$$

ile verilir. Burada a grafenin örgü sabiti olup 0.246 nm'dir, atomlar arası en yakın komşu uzaklığı (A ve B atomları arasındaki uzaklık) ise $a_0 = 0.142$ nm'dir. Yani $a = \sqrt{3}a_0$ ilişkisi vardır. A ve B olarak adlandırılan karbon atomlarını içeren birim hücrenin alanı

$$\Omega = |\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2| = \frac{\sqrt{3}a^2}{2}$$

olarak bulunur. En yakın komşu atomlarını birleştiren vektörler ise,

$$\begin{aligned}\tau_1 &= (0,-\frac{a}{\sqrt{3}}) \\ \tau_2 &= (\frac{a}{2\sqrt{3}},\frac{a}{2}) \\ \tau_3 &= (\frac{a}{2\sqrt{3}},-\frac{a}{2})\end{aligned}$$

olup, $\mathbf{b}_1$ ve $\mathbf{b}_2$ ters örgü vektörleri,

$$\begin{aligned}\mathbf{b}_1 &= \frac{2\pi}{a}(1,-\frac{1}{\sqrt{3}}) \\ \mathbf{b}_2 &= \frac{2\pi}{a}(-1,-\frac{1}{\sqrt{3}})\end{aligned}$$

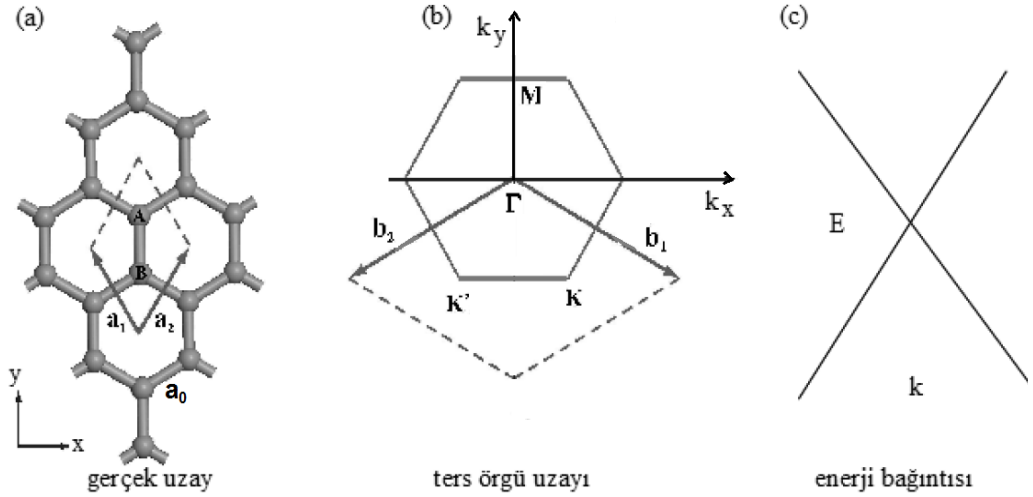
ile verilir. Ters örgü uzayında birinci Brillouin bölgesinin alanı ise,

$$\Omega^* = |\mathbf{b}_1 \times \mathbf{b}_2| = \frac{8\pi^2}{\sqrt{3}a^2}$$

ile verilir. Hekzagonal Brillouin bölgesinin köşelerinde iletim ve valans bantlarının değme noktaları olan, grafen fiziğinin temelini oluşturan, biraz aşağıda gösterileceği gibi enerji dispersiyon bağıntısının lineer olduğu $\mathbf{K}$ ve $\mathbf{K}'$ Dirac noktaları birim hücre üzerinde geometriden faydalanarak

$$\begin{aligned}\mathbf{K} &= \frac{2\pi}{a}(-\frac{1}{2\sqrt{3}},\frac{1}{2}) \\ \mathbf{K}' &= \frac{2\pi}{a}(-\frac{1}{2\sqrt{3}},-\frac{1}{2})\end{aligned}$$

olarak bulunur.



Şekil 3.1. Grafende gerçek uzayda örgü vektörleri ve ters örgü uzayında örgü vektörleri. Aynı zamanda ters örgü uzayındaki K ve K' noktaları gösterilmiştir. En sağda grafenin enerji bant yapısı dalga vektörünün bir fonksiyonu olarak gösterilmiştir.

3.2. Grafenin Enerji Bant Yapısı-Sıkı Bağlanma Metodu

Grafenin bant yapısı sıkı bağlanma metodu ile hesaplanabilir. Bu hesap ise ilk olarak Wallace (1947) tarafından yapılmıştır. Bu hesaba Bloch dalgalarının genel formunu kullanarak başlayabiliriz. n ve m tam sayılar olmak üzere $\mathbf{R} = n\mathbf{a_1} + m\mathbf{a_2}$ bir örgü vektörüdür. Bu durumda

$$\psi = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \tag{3.1}$$

yazılabilir. Burada $\phi(\mathbf{r})$ A ve B atomlarının bulunduğu konumlarda lokalize olmuş dalga fonksiyonlarının lineer bir kombinasyonu olan yavaşça değişen zarf fonksiyonudur. Birim hücrede iki karbon atomu bulunduğundan dolayı bu dalga fonksiyonu aşağıdaki gibi yazılabilir

$$\phi = b_1\phi_1 + b_2\phi_2 \tag{3.2}$$

Burada b_1 ve b_2 henüz bilinmeyen sabitlerdir. Tüm karbon atomlarından kaynaklanan bir atomik potansiyelin etkisinde olan bir tek elektronun Hamiltonyeni aşağıdaki gibi yazılabilir

$$H = \frac{\nabla^2}{2m} + \sum_{\mathbf{R}} \{V_{\text{atom}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1 - \mathbf{R}) + V_{\text{atom}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2 - \mathbf{R})\} \tag{3.3}$$

Burada $\mathbf{r}_1$ ve $\mathbf{r}_2$ birim hücredeki iki atomun konumlarıdır. b_1 ve b_2 Schrödinger denklemi kullanılarak elde edilebilir.

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{3.4}$$

İki parametre (b_1 ve b_2) için iki eşitliğe ihtiyaç vardır. Buna ise (3.4) eşitliğinin ϕ_1 ve ϕ_2 durumlarına iz düşümü alınarak ulaşılabilir, $j = 1$ veya 2 olmak üzere,

$$\langle\phi_j|H|\psi\rangle = E\langle\phi_j|\psi\rangle \tag{3.5}$$

elde edilir.

Öncelikle eşitlik (3.1) kullanılarak $\langle\phi_j|\psi\rangle$ hesaplanmalıdır. Sıkı bağlanma metodunda her ϕ_j fonksiyonu kendi ilgili atomu üzerinde lokalize olduğundan sadece en yakın komşu atomlarının etkileşmesinin göz önüne alınması yeterlidir. Böylece (3.1) eşitliğinde toplam sadece $\mathbf{R} = 0, \pm\mathbf{a}_1$ ve $\pm\mathbf{a}_2$ terimleri göz önüne alınacaktır. Sonuç olarak aşağıdaki eşitlikler elde edilir.

$$\begin{aligned}
\langle\phi_1|\psi\rangle &= b_1 + b_2\langle\phi_1|\phi_2\rangle(1 + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2}) \\
\langle\phi_2|\psi\rangle &= b_2 + b_1\langle\phi_2|\phi_1\rangle(1 + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2})
\end{aligned} \tag{3.6}$$

Simetriden dolayı $\langle\phi_1|\phi_2\rangle = \langle\phi_2|\phi_1\rangle$ olduğu kolayca görülür.

$\langle\phi_j|H|\psi\rangle$'ye tekrar dönelim. Toplam Hamiltonyen H, 1 nolu atomu için tam atomik Hamiltonyen $H_1 = \frac{\nabla^2}{2m} + V_{\text{atom}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)$ ve bu atomun geriye kalan diğer bütün atomlarla etkileşme potansiyeli ΔH_1'in toplamından oluşur. Aynı durum 2 nolu atomu için de söz konusudur. Böylece,

$$H = H_1 + \Delta H_1 = H_2 + \Delta H_2 \tag{3.7}$$

yazılabilir. ϕ_j'ler, H_j'lerin özfonksiyonu olduğu için daha basit bir bağıntı,ε_j, $2p_z$ orbitalinin enerji özdeğeri olmak üzere,

$$H_j|\phi_j\rangle = \varepsilon_j|\phi_j\rangle \tag{3.8}$$

elde edilir. 1 ve 2 nolu atomlar tamamen özdeş olduğundan $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ olduğu açıktır, dolayısıyla $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_0$ olsun. Bununla birlikte, $\varepsilon_0 = 0$ seçebiliriz, çünkü bu seçim sadece enerjinin referans alındığı noktayı değiştirir. Şimdi elimizde

$$\begin{aligned} \langle\phi_1|H|\psi\rangle &= \langle\phi_1|H_1 + \Delta H_1|\psi\rangle \\ &= \langle\phi_1|\Delta H_1|\psi\rangle \end{aligned} \tag{3.9}$$

$$\begin{aligned} \langle\phi_2|H|\psi\rangle &= \langle\phi_2|H_2 + \Delta H_2|\psi\rangle \\ &= \langle\phi_2|\Delta H_2|\psi\rangle \end{aligned} \tag{3.10}$$

gibi iki deklem vardır. Aşağıdaki kısaltmalar kullanılırsa

$$\begin{aligned} \beta &= \langle\phi_1|\Delta H_1|\phi_1\rangle \\ \gamma_1 &= \langle\phi_1|\Delta H_1|\phi_2\rangle = \langle\phi_2|\Delta H_2|\phi_1\rangle \\ \gamma_0 &= \langle\phi_1|\phi_2\rangle = \langle\phi_2|\phi_1\rangle \\ f(\mathbf{k}) &= 1 + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2} \end{aligned} \tag{3.11}$$

$\langle\phi_j|\Delta H_j|\psi\rangle$ terimleri

$$\begin{aligned} \langle\phi_1|\Delta H_1|\psi\rangle &= b_1\beta + b_2\gamma_1 f^*(\mathbf{k}) \\ \langle\phi_2|\Delta H_2|\psi\rangle &= b_2\beta + b_1\gamma_1 f(\mathbf{k}) \end{aligned} \tag{3.12}$$

olur. (3.11) ve (3.12) eşitlikleri (3.5) Schrödinger eşitliğinde yazılarak aşağıdaki formdaki gibi bir özdeğer denklemi yazılabilir.

$$\begin{pmatrix} \beta & f^*(\mathbf{k})(\gamma_1 - \gamma_0 E) \\ f(\mathbf{k})(\gamma_1 - \gamma_0 E) & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \tag{3.13}$$

Bu özdeğer denkleminden enerjinin dispersiyon bağıntısı $E = E(\mathbf{k})$ elde edilir. β grafen düzleminde diğer karbon atomları tarafından indüklenen, p_z atomik orbitalindeki enerji değişimidir. Enerji bandındaki küçük bir kaymaya karşılık gelir, bu nedenle ihmal edilebilir. (3.11) denklemlerinde görüldüğü gibiγ_0 iki komşu karbon atomu üzerinde lokalize olmuş dalga fonksiyonlarının üst üste gelme miktarı ile orantılıdır. Bu nedenle γ_0 değerinin çok küçük olduğu gerçeği kullanılarak biraz daha sadeleştirme yapılabilir. b_1 ve b_2 için sıfırdan farklı çözümlerin ancak katsayı matrisinin determinantının sıfırlanması ile bulunabileceği gerçeği kullanılarak enerji dispersiyon bağıntısının en sade hali aşağıdaki gibi bulunmuş olur.

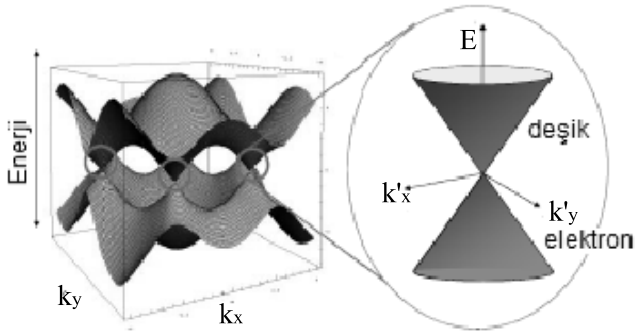
$$E(\mathbf{k}) = \pm\gamma_1 |f(\mathbf{k})|$$
$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm\gamma_1 \sqrt{1 + 4\cos\left(\frac{k_x a}{2}\right)\cos\left(\frac{k_y\sqrt{3}a}{2}\right) + 4\cos^2\left(\frac{k_x a}{2}\right)} \tag{3.14}$$

Burada k_x ve k_y, xy düzleminde $\mathbf{k}$'nın bileşenleridir. $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$ civarında $E_{\pm}(k) = \hbar v_F |\mathbf{k}|$ olur. v_F malzeme geometrisine ve etkileşme enerjilerine bağlı olarak aşağıdaki gibi verilir (SHAH, 2013).

$$v_F = \frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{A_c x \rho_t}{2}}$$

Burada $A_c = \frac{3\sqrt{3}a_0^2}{2}$ ve $\rho_t = \sqrt{3}t_0^2$ olarak verilir. Atlama (hopping) parametresi $t_0 = 3.1eV$ kullanılırsa $v_F \approx 1x10^6$ m/s olur.

(3.14) eşitliği ile verilen enerji bant yapısı Şekil 3.2.'de görülmektedir. Grafende enerjinin sıfırdan küçük olduğu ($E < 0$) valans bandı ve büyük olduğu ($E > 0$) iletim bandı olmak üzere iki bant bulunmaktadır. Bu bantlar Brillouin bölgesi köşelerinde altı noktada temas ederler, bu temas noktaları daha öncede belirtildiği gibi, üçü ($\mathbf{K}$) noktaları ve diğer üçü ($\mathbf{K}'$) noktalarıdır. Her karbon atomu bir elektronla katkıda bulunduğundan dolayı iletim bandı Fermi seviyesinin bulunduğu bu altı noktada da tam doludur. Bu nedenle, grafen sıfır bant aralıklı yarıiletken/yarımetal olarak bilinir.



Şekil 3.2. Grafenin enerji bant yapısı. Dirac noktaları civarında enerji momentum ile doğrusal değişir ve iletim bandı ile değerlik bandı birbirine değer.

3.3. Taşıyıcı Saçılması ve Fermi'nin Altın Kuralı

Tam olarak çözülebilen ve zamandan bağımsız H_0 Hamiltonyeni ile temsil edilen bir sistem göz önüne alalım. Zamandan bağımsız Schrödinger denklemi

$$H_0\psi_k(\mathbf{r}) = E_k\psi_k(\mathbf{r})$$

olacaktır. Burada E_k enerji özdeğerleri olmak üzere, zamana bağlı $\psi_k(\mathbf{r},t)$ durumları

$$\psi_k^0(\mathbf{r},t) = \psi_k(\mathbf{r})e^{-iE_kt/\hbar}$$

şeklinde yazılabilir. Aslında bu fonksiyon zamana bağlı Schrödinger denkleminin çözümüdür çünkü $\psi_k(\mathbf{r},t)$

$$i\hbar\frac{\partial\psi_k^0(\mathbf{r},t)}{\partial t} = H_0\psi_k^0(\mathbf{r},t)$$

denklemini sağlamaktadır. Sisteme zamana bağlı bir $H^{'}$ pertürbasyonunun etki ettiğini varsaydığımızda sırası ile sistemin toplam Hamiltonyeni ve zamana bağlı Schrödinger denklemi

$$\begin{aligned} H &= H_0 + \lambda H' \\ i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} &= (H_0 + \lambda H')\psi(\mathbf{r},t) \end{aligned} \tag{3.15}$$

olacaktır. Burada λ pertürbasyon yaklaşıklığının mertebesini takip etmek için kullanılan bir parametre olup işlemlerin sonunda bire eşitlenecektir. Pertürbasyon olmadığında λ sıfırdır. H' pertürbasyonunun H_0 ile kıyaslandığında çok küçük olduğu varsayılmıştır.

$\psi_k^0(\mathbf{r},t)$ fonksiyonlar kümesi tam ortonormal bir set oluşturduğundan pertürbe olmuş sistemin çözümü, $\psi_k^0(\mathbf{r},t)$'nin lineer bir kombinasyonu olarak ifade edilebilir. Bu durumda,

$$\psi(\mathbf{r},t) = \sum_k C_k(t)\psi_k^0(\mathbf{r},t) = \sum_k C_k(t)\psi_k(\mathbf{r})e^{-iE_kt/\hbar}$$

yazılabilir. Bu çözüm (3.15) eşitliğindeki Schrödinger dalga denkleminde yerine yazılır ve yeniden düzenlenirse

$$i\hbar\sum_k \frac{\partial C_k}{\partial t}\psi_k(\mathbf{r})e^{-iE_kt/\hbar} = \lambda\sum_k H'C_k(t)\psi_k(\mathbf{r})e^{-iE_kt/\hbar} \tag{3.16}$$

elde edilecektir. C_k'ya göre birinci mertebeden olan bu denklemler Schrödinger dalga denklemi ile tam olarak benzer biçimdedir. Ayrıca eğer $\psi(\mathbf{r},t)$ normlanmış ise $\int \psi_{k'}^*(\mathbf{r})\psi_k(\mathbf{r})dV = \delta(k,k')$ ifadesi kullanılarak

$$\sum_k |C_k(t)|^2 = 1 \tag{3.17}$$

olduğu gösterilebilir. Burada $|C_k(t)|^2$ katsayısı sistemin t anında pertürbe olmamış k durumunda bulunma olasılığıdır. Bunun yanında $C_{k'}(t)$ katsayılarının her birini bulmak için aşağıdaki ifadeyi göz önüne alalım:

$$\begin{aligned}\int \psi_{k'}^*(\mathbf{r})\psi_k(\mathbf{r},t)dV &= \int \sum_k C_k\psi_{k'}^*(\mathbf{r})\psi_k(\mathbf{r})e^{-iE_kt/\hbar}dV \\ &= C_{k'}(t)e^{-iE_{k'}t/\hbar}\end{aligned} \tag{3.18}$$

Buradan

$$C_{k'}(t) = e^{iE_{k'}t/\hbar}\int \psi_{k'}^*(\mathbf{r})\psi_k(\mathbf{r},t)dV$$

elde edilir. C_k'ler için bir ifade (3.16) denkleminin uygun başlangıç şartları altında çözülmesinden elde edilir (TOMIZAWA, 1993).

Pertürbasyon potansiyelinin zamana bağlı kısmının harmonik olduğu kabul edilirse pertürbasyon potansiyeli

$$H' = H'_0 e^{\pm i\omega t}$$

şeklinde yazılabilir. Burada H'_0 pertürbasyon potansiyelinin sadece koordinatlara bağlı kısmını temsil eder.

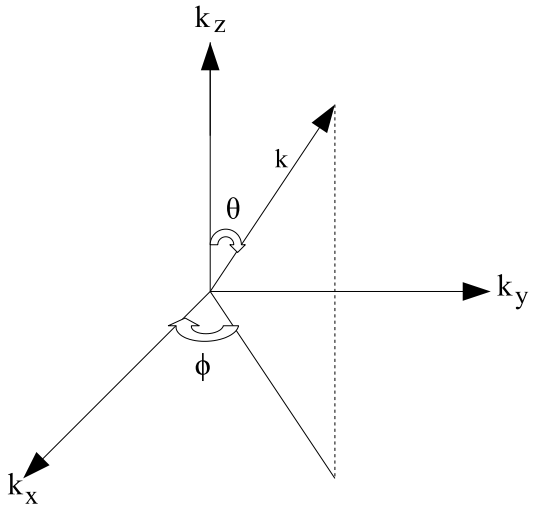
Bir elektronun t zamanında $\mathbf{k}'$ durumunda bulunma olasılığı $|C_{k'}(t)|^2$ ile verildiğinden, elektronun bir başlangıç $\mathbf{k_i}$ durumundan bir $\mathbf{k}'$ durumuna birim zamandaki geçiş olasılığını veren geçiş oranı aşağıdaki gibidir.

$$S(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}') = \lim_{t\to\infty} \frac{|C_{k'}(t)|^2}{t}$$

$C_{k'}(t)$ için bulunan ifade kullanılarak yukarıdaki limit alınırsa

$$S(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |\left\langle k'|H'_0|k_i\right\rangle|^2 \delta(E_{k'} - E_{k_i} \pm \hbar\omega) \tag{3.19}$$

sonucu bulunur. Bu eşitlik "Fermi'nin Altın Kuralı" olarak bilinir. Bu denklem, yarıiletkenlerde taşıyıcılara uygulanacak olan saçılma teorisinin temelini oluşturur, eşitlikte görülen delta fonksiyonu basitçe enerjinin korunumunu ifade eder. Delta fonksiyonundaki artı işareti $(E_{k'} = E_{k_i} - \hbar\omega)$ saçılma esnasında enerji yayınımı olduğunu (elektron enerji kaybeder), eksi işareti ise $(E_{k'} = E_{k_i} + \hbar\omega)$ enerji soğurması olduğunu gösterir. Bu çıkarım tüm $\mathbf{k}'$ son durumlarının boş olduğu varsayılarak yapılmıştır. Fakat gerçekte elektronun saçılabileceği bazı durumlar dolu olabilir. Bu durumda bu varsayım geçerli olmayacaktır. Bu etki hesaba katılırsa çıkarımda durum yoğunluğunun kullanılması gereklidir. Yani son durumlara bağlı enerjilerin durum yoğunluğu $D(\varepsilon_{k'})$ değerlerinin bilinmesine ihtiyaç vardır. O zaman girilebilir durumların sayısı $D(\varepsilon_k)(1 - f(\varepsilon_k))$ olur, parantez içindeki ifade durumların boş olma olasılığını verir. Elektronun gidebileceği bazı durumların dolu olma ihtimali bu tez çalışmasında kullanılan Monte Carlo yöntemlerinde



Şekil 3.3. Açıların seçimi

bir reddetme tekniği kullanılarak probleme dahil edilir. Bu konudan ileride daha ayrıntılı olarak bahsedilecektir. (3.19) Denklemindeki birinci terim bra-ket notasyonu $\langle k'|H_0'|k\rangle = \int \psi_{k'}^* H_0' \psi_k dV$ kullanılarak gösterilmiştir ve saçılma matrisi olarak bilinir. Bu terim pertürbasyon teriminin uzaysal koordinatlara bağlı kısmını temsil eder ve bu terimin hesaplanmasından momentumun korunması kuralı çıkar. Bu nedenle Fermi'nin Altın Kuralı'nın uygulanabilmesi için saçılmaya sebep olan pertürbasyon potansiyelinin bilinmesi gerekir.

Fermi'nin Altın Kuralı olarak bilinen denklem (3.19)'deki $S(\mathbf{k}',\mathbf{k})$ tüm $\mathbf{k}'$ son durumları üzerinden integre edilerek saçılma oranı $W(\mathbf{k})$ elde edilebilir. Ters örgü uzayındaki bir $d\mathbf{k}'$ hacmindeki durumların sayısı $\frac{(2\pi)^3}{\Omega}$ şeklindedir (KITTEL, 1996). Buna göre saçılma oranı

$$W(\mathbf{k}) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int S(\mathbf{k},\mathbf{k}') d\mathbf{k}'$$
$$W(\mathbf{k}) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\infty} S(\mathbf{k},\mathbf{k}') k'^2 \sin\theta d\theta d\phi dk' \tag{3.20}$$

olarak elde edilir. Burada yer alan açılar Şekil 3.3.'de gösterilmiştir.

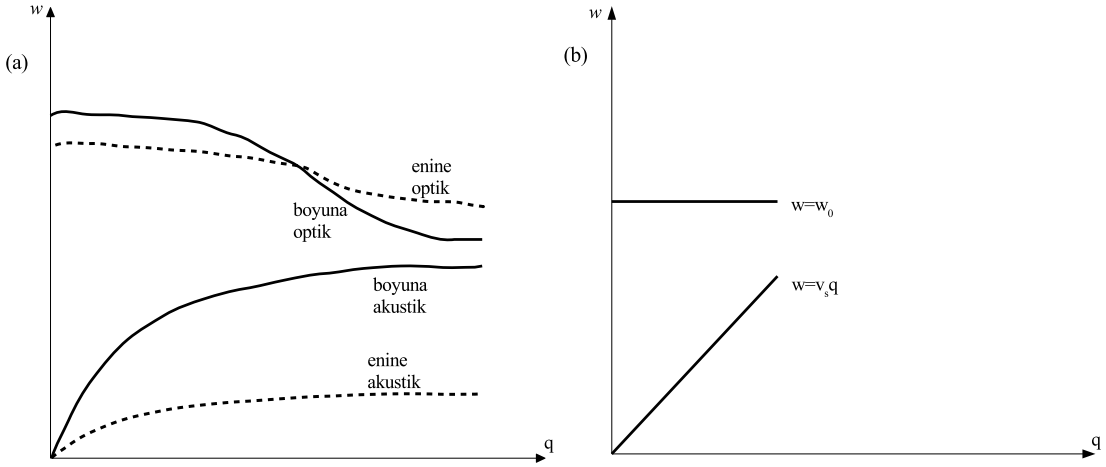
3.4. Örgü Titreşimleri

Yarıiletkenlerde meydana gelen saçılmaların çoğu örgü titreşimlerinden kaynaklanır. Bu nedenle oluşan bu saçılmaların genel özelliklerinin anlaşılması önemlidir. Bir atom denge noktasından uzaklaştığında bağ kuvvetleri onu geri dönmeye zorlar. Böylece denge noktası civarında bir salınım meydana gelir. Örgü dalgaları periyodik bir ortamda ilerlediğinden, Bloch dalgalarının özelliklerine benzer özellikler sergilerler. Bloch elektronları kusursuz bir kristaldeki öz durumları verdiğinden, bu elektronlar periyodik potansiyel tarafından saçılmaya uğratılmazlar. Ancak kristal potansiyelinin periyodikliğini bozan birçok neden olduğundan, meydana gelen örgü titreşimleri elektronların kristalde rahatlıkla ilerlemesine engel olur ve saçılmalar meydana gelir. Kristaldeki bir iyonun küçük bir yer değiştirmesi bile kristal potansiyelinde bir değişime neden olur. Meydana gelen bu değişim ya da bozulma teorik olarak örgü titreşimlerinin genliği ile açıklanabilir. Ayrıca kristal potansiyelinin kendisini bilmek zor olduğundan dolayı periyodiklikteki bu sapma "deformasyon potansiyel metodu" olarak adlandırılan fenomenolojik (olgusal) bir yolla açıklanır. Örgü titreşimlerinin dalga doğası "fonon" olarak kuantize edildiğinden, örgü titreşimlerinin elektron hareketine etkisi "elektron-fonon etkileşimi" olarak adlandırılan kuantum yöntemi ile açıklanabilir.

Elektron-fonon etkileşimi yarıiletken aygıtlardaki baskın saçılma mekanizmalarından biridir. Küçük ölçekli aygıtlardaki taşıyıcılar, yüksek elektrik alan uygulanarak, daha yüksek enerji düzeylerine çıkarılabilirler. Bu nedenle fononların kendiliğinden yayınımını temel alan saçılmalar, yük taşıyıcıları yeterli enerjiye sahipse, düşük sıcaklıklarda bir kaç fonon olsa bile oluşabilirler.

Akustik ve optik olarak adlandırılan iki çeşit fonon modu vardır. Akustik moddaki fononlar ses dalgaları gibidir ve bu modda komşu atomlar aynı yönde hareket ederler, yani atomlar aynı fazda titreşir. Optik fononlarda komşu atomlar birbirine zıt yönde hareket ederler, yani faz dışı salınım yaparlar. Akustik ve optik fonon saçılmaları, örgü titreşimlerini bant enerjilerindeki değişimle ilişkilendiren deformasyon potansiyeli yardımıyla açıklanabildiğinden dolayı, deformasyon potansiyel saçılması olarak adlandırılırlar.

Şekil 3.4.'de, silikon ve galyum arsenür benzeri kübik yarıiletkenlerdeki elastik dalgalar için tipik bir dağınım bağıntısı (frekansın dalga vektörüne göre değişimi $\omega(q)$-q)



Şekil 3.4. (a) Akustik ve optik fononlar için tipik dağınım bağıntıları. (b) Akustik ve optik fononlar için kullanılan yaklaşık dağınım ilişkileri

grafiği gösterilmiştir. Üçü akustik modlara ve üçü optik modlara karşılık gelen altı çeşit elastik dalga mevcuttur. Akustik modlardan biri boyuna akustik (longitudinal acoustic-LA) diğer ikisi enine (tansverse acoustic-TA) akustiktir. Boyuna dalgalar için atomlar ilerleme yönünde yer değiştirirler. Şekil 3.4.'de abartılı olarak çizilmiş olan optik modlar için dağınım bağıntısı gerçekte dalga vektörüne göre çok küçük bir değişim gösterir. Elektronlar optik fononlar tarafından saçılarak aynı vadide kalırlarsa dağınım bağıntısı için ω_0 bir sabit olmak üzere $\omega(q) = \omega_0$ yaklaşıklığı kullanılabilir. Akustik fononlar için Brillouin bölgesi civarındaki küçük q değerleri için dağınım bağıntısı doğrusaldır. Bu nedenle υ_s ses hızı olmak üzere akustik fononlar için dağınım bağıntısı

$$\omega(q) = \upsilon_s q \tag{3.21}$$

şeklinde yazılabilir. Şekil 3.4.(b) akustik ve optik modlar için basitleştirilmiş dağınım bağıntılarını göstermektedir ve çoğunlukla saçılma hesaplarında bu ifadeler kullanılmaktadır.

Örgü titreşimleri harmonik salınıcının titreşimlerine çok benzer olduğundan dolayı her bir normal modun enerjisi de aşağıdaki gibi kuantize edilmelidir:

$$E_q = \hbar\omega(q)(N_q + \frac{1}{2}) \tag{3.22}$$

Enerji kuantumu fonon olarak adlandırılan bir parçacık olarak görüldüğünden, fononların sayısı Bose-Einstein faktörü ile bulunabilir:

$$N_q = \frac{1}{e^{\hbar\omega(q)/k_BT} - 1} \tag{3.23}$$

Akustik fonon enerjileri çok küçük olduğundan $k_BT_L \gg \hbar\omega(q)$ olur ve böylece bu faktör aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$N_q \approx \frac{1}{1 + \frac{\hbar\omega(q)}{k_BT_L} - 1} = \frac{k_BT_L}{\hbar\omega(q)} \tag{3.24}$$

Burada T_L örgü sıcaklığıdır. Bu sonuç eş bölüşüm ilkesi olarak bilinir ve akustik fononlar için çok düşük sıcaklıklar dışında genellikle doğrudur. k_BT_L (oda sıcaklığında 26 meV) termal enerjiyi gösterirken $\hbar\omega(q)$ (yaklaşık 0.1-0.3 meV) fonon enerjisini gösterir.

3.5. Grafende Saçılma Mekanizmaları

3.5.1. Yüklü Safsızlık Saçılması

Safsızlık saçılması diğer saçılma mekanizmalarının baskın olmadığı düşük sıcaklıklarda etkili olan bir mekanizma olup, elektronların mobilitesini sınırlar. Yüklü safsızlık saçılmasının potansiyelinin doğası oldukça değişkendir. İyonize donorlar ve akseptorlar gibi yüklü safsızlıklar uzun erimli Coulomb potansiyeline sahipken, nötral safsızlıklar karmaşık kısa erimli potansiyele sahiptir. Bu iki durumun da toplam saçılmaya farklı etkileri vardır.

Grafen için saçılmadan önceki ve saçılmadan sonraki dalga fonksiyonları sırası ile aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\begin{aligned} \psi_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \tfrac{1}{\sqrt{A}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \cdot F_{s\mathbf{k}}, \qquad F_{s\mathbf{k}} = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\theta_{\mathbf{k}}} \\ s \end{pmatrix} \\ \psi_{s'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) &= \tfrac{1}{\sqrt{A}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \cdot F_{s'\mathbf{k}'}, \quad F_{s'\mathbf{k}'} = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\theta_{\mathbf{k}'}} \\ s' \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{3.25}$$

Burada $F_{s\mathbf{k}}$ terimi, grafenin örgü simetrisinden kaynaklanan, üst üste gelme (overlap) faktörü olarak bilinir. s ve s' terimleri ise grafende iki farklı vadiyi temsil ederken, $\theta_{\mathbf{k}}$ açısı ise momentum vektörü $\mathbf{k}$'nın polar açısıdır. Dielektrik sabiti κ olan ortamdaki rasgele dağılmış olan perdelenmiş safsızlık yük merkezlerinin matris elemanı ise, saçılma potansiyeli

$$V(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{\kappa r} \tag{3.26}$$

olmak üzere

$$\begin{aligned}\langle s'\mathbf{k}'|V(\mathbf{r})|s\mathbf{k}\rangle &= \frac{1}{A}\int e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}V(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}d^2\mathbf{r}\cdot(\mathbf{F}^{\dagger}_{s'\mathbf{k}'}\cdot\mathbf{F}_{s\mathbf{k}}) \\ &= \frac{1}{A}\int V(\mathbf{r})e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}d^2\mathbf{r}\cdot(\mathbf{F}^{\dagger}_{s'\mathbf{k}'}\cdot\mathbf{F}_{s\mathbf{k}}) \\ &= \frac{1}{A}V(\mathbf{q})\cdot(\mathbf{F}^{\dagger}_{s'\mathbf{k}'}\cdot\mathbf{F}_{s\mathbf{k}})\end{aligned} \tag{3.27}$$

ile verilir. Burada $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ olmak üzere, ilk terim etkin alttaban örgü dielektrik sabiti ile $V(\mathbf{r})$ saçılma potansiyelinin iki boyutta Fourier dönüşümüdür. İkinci terim ise örgü simetrisinden kaynaklanan üst üste binme faktörüdür. Bu iki terim sırası ile

$$(\mathbf{F}^{\dagger}_{s'\mathbf{k}'}\cdot\mathbf{F}_{s\mathbf{k}}) = \frac{1}{2}(1 + ss'\cos\theta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}) \tag{3.28}$$

$$V(\mathbf{q}) = \frac{2\pi e^2}{\kappa q} \tag{3.29}$$

şeklinde elde edilir. Birinci ifadenin çıkarımı bir alt bölümde yapılmıştır. Burada $\theta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$, $\mathbf{k}$ ve $\mathbf{k}'$ vektörleri arasındaki açıdır. Saçılma potansiyeli ise, grafen tabakasının alt tabandan d kadar uzak olduğu durum ve perdeleme etkisinin varlığında aşağıdaki gibi yazılır.

$$V(\mathbf{q}) = \frac{2\pi e^2}{\kappa q\varepsilon(\mathbf{q})}\cdot\exp(-qd) \tag{3.30}$$

Burada $\varepsilon(q)$ statik dielektrik fonksiyonu olup

$$\varepsilon(q) = 1 + \frac{2\pi e^2}{\kappa q}\Pi(q) \tag{3.31}$$

ile verilir. $\Pi(q)$ ise, polarizasyon fonksiyonu olup çıkarımı ayrıca yapılmıştır. Ayrıca saçılma olayı sadece tek bir vadi göz önüne alınarak inceleneceğinden $s = s'$ olarak alınabilir. (3.27) denklemiyle ifade edilen bu matris elemanı, Fermi'nin altın kuralı denklem (3.19)'de yerine yazılarak $\mathbf{k}$ durumundan $\mathbf{k}'$ durumuna saçılma oranı sade bir şekilde aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$S_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} = \frac{1}{A^2}\frac{2\pi}{\hbar}|V(\mathbf{q})|^2\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}})\frac{1}{2}(1+\cos\theta) \tag{3.32}$$

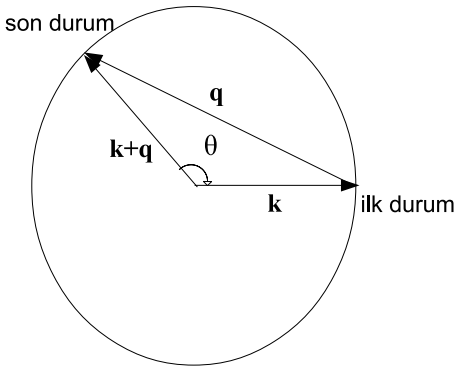
$\mathbf{k}$ durumundan herhangi bir son duruma toplam saçılma oranı, bir elektron için göz önüne alındığında $\mathbf{k}$'nın bir fonksiyonu olarak $1/\tau_i$ şeklinde ifade edilir. Son durumların boş olduğu göz önüne alındığında Fermi faktörünün kullanılmasına gerek kalmaz. Dolayısıyla tek bir safsızlıktan kaynaklanan toplam saçılma oranı (3.32) oranının tüm dalga vektörleri üzerinden toplanmasıyla

$$\left(\frac{1}{\tau_i}\right)_{1safsızlık} = \sum_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} \tag{3.33}$$

elde edilir. Toplam yerine $\mathbf{q}$ üzerinden integral alınmak istenirse aşağıdaki dönüşüm kullanılarak bu işlem yapılabilir.

$$\sum_{\mathbf{q}} \to \frac{A}{(2\pi)^2}\int d^2\mathbf{q} \tag{3.34}$$

Gerçek bir sistemde çok sayıda safsızlık bulunur, birim alan başına ortalama yoğunluk n_i ise grafen için A alanında bulunan safsızlıkların toplam sayısı $N_i = An_i$ olur. Her bir safsızlıktan kaynaklanan saçılmanın diğerlerinden bağımsız olduğu düşünüldüğünde toplam saçılma oranı, denklemin N_i ile çarpılmasıyla bulunur.



Şekil 3.5. Bir safsızlık tarafından saçılan elektronun θ açısı ve $\mathbf{q}$ vektörü arasındaki ilişkinin k-uzayındaki gösterimi (DAVIES, 1998)

$$\begin{aligned}\frac{1}{\tau_i} &= (An_i)\frac{A}{(2\pi)^2}\int \frac{1}{A^2}\frac{2\pi}{\hbar}|V(\mathbf{q})|^2\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'}-\varepsilon_{\mathbf{k}})\frac{1}{2}(1+\cos\theta)d^2\mathbf{q} \\ &= (n_i)\frac{2\pi}{\hbar}\int |V(\mathbf{q})|^2\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'}-\varepsilon_{\mathbf{k}})\frac{1}{2}(1+\cos\theta)\frac{d^2\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \end{aligned} \tag{3.35}$$

Dikkat edilmesi gereken önemli bir nokta da tek parçacık için elde edilen bu saçılma oranı τ_i'nin analitik olarak hesaplanan iletkenlik ve mobilite hesaplarında kullanılmadığıdır. İletkenlik ve mobilite hesabında kullanılan taşınım (transport) saçılma oranı olup τ_{tr} ile ifade edilir. Bir örnek verilecek olursa mobilite taşınım saçılma oranıyla orantılı olup, $\mu = e\tau_{tr}/m$ şeklinde hesaplanır. τ_i ve τ_{tr} arasındaki farklılık farklı çarpışmalar arasındaki ağırlık faktöründen kaynaklanır. Şekil 3.5.'de saçılmanın geometrisi ve elektronun saçıldığı açı θ ile $\mathbf{q}$ dalga vektörü arasındaki ilişki görülmektedir. Enerjinin korunumu saçılmadan önceki ve sonraki dalga vektörlerinin aynı büyüklükte olmasını gerektirdiğinden dolayı $|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}+\mathbf{q}|$ olup bu vektörler k-uzayında bir daire üzerindedirler. Trigonometrinin yardımıyla açı ve dalga vektörü arasındaki ilişki

$$q = 2k\sin\frac{\theta}{2} \tag{3.36}$$

olarak elde edilir. Tek parçacık saçılma oranı (eşitlik 3.35) üstüste binme faktörü göz önüne alınmadığında, tüm çarpışmaların eşit ağırlıkta etkili olduğu tüm saçılma süreçleri üzerinden olan toplamı ifade eder. Bunun anlamı çok küçük açılarda saçılmaların da geri saçılmalar ($\theta = \pi$) kadar elektronun yönünü tersine çevirebileceğidir. Ancak

grafende altörgü simetrisinden kaynaklanan üstüste binme faktöründeki $(1+\cos\theta)$ teriminin varlığından dolayı geniş açılara saçılmanın etkisi bastırılmış olur. Ayrıca normal parabolik iki boyutlu sistemlerde elastik saçılma içeren taşınım teorilerinde daima kullanılagelen ağırlık faktörü terimi $(1-\cos\theta)$ ise, geniş açılara saçılma miktarını arttıran bir etkendir. Grafende etkin ağırlık faktörü $(1-\cos\theta)\times(1+\cos\theta)$ olmalıdır. Bu faktör ise, hem büyük hem de küçük açılara saçılma miktarını azaltır. Dolayısıyla grafende taşınım saçılma oranı büyük ve küçük açılara saçılmaların her ikisine de duyarsızdır denilebilir. Ayrıca denklem (3.36)'dan $1-\cos\theta = q^2/2k^2$ olduğu da gösterilebilir. Bu bilgilerin de dahil edilmesiyle taşınım saçılma oranı

$$\frac{1}{\tau_{tr}} = (n_i)\frac{2\pi}{\hbar}\int |V(\mathbf{q})|^2\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'}-\varepsilon_{\mathbf{k}})\frac{1}{2}(1+\cos\theta)(1-\cos\theta)\frac{d^2\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \tag{3.37}$$

olarak elde edilmiş olur. Eklenen $(1-\cos\theta)$ faktörü ile büyük açılara saçılmanın etkisi de hesaba katılmış olur.

Eşitlik (3.37)'den başlayarak taşınım saçılma oranını son durumların $\mathbf{k}' = \mathbf{k}+\mathbf{q}$ dalga vektörü terimleri cinsinden yazmak daha uygun olur. Buradan

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\tau_{tr}} &= \frac{\pi(n_i)}{\hbar(2\pi)^2}\int_{-\pi}^{\pi}\int_0^{\infty}|V(\mathbf{q})|^2\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'}-\varepsilon_{\mathbf{k}})(1-\cos^2\theta)k'dk'd\theta \\
&= \frac{(n_i)}{\hbar(2\pi)}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty}|V(\mathbf{q})|^2\delta(\hbar\upsilon_F\mathbf{k}'-\hbar\upsilon_F\mathbf{k})(1-\cos^2\theta)k'dk'd\theta \\
&= \frac{(n_i)k}{2\pi\hbar^2\upsilon_F}\int_0^{\pi}|V(\mathbf{q})|^2(1-\cos^2\theta)d\theta
\end{aligned} \tag{3.38}$$

elde edilir. Görüldüğü gibi bu integralin saçılma potansiyelindeki q'ya olan bağlılığının (3.36) eşitliği kullanılarak çözülmesi gerekir. Dolayısıyla geriye kalan sadece açıya bağlı bir integral hesabı olup yüklü safsızlık saçılması için taşınım oranı

$$\frac{1}{\tau_{tr}} = \frac{(n_i)k}{2\pi\hbar^2\upsilon_F}\int_0^{\pi}|V(2k\sin\frac{\theta}{2})|^2(1-\cos^2\theta)d\theta \tag{3.39}$$

şeklinde elde edilmiş olur.

Çıkarımı aşağıda yapılmış olan polarizasyon fonksiyonu, aşağıdaki (3.40) ifadesinde yerine yazıldığında geriye kalan sadece θ'ya bağlı bir integral hesabıdır. Fakat polarizasyon fonksiyonunun q'ya olan bağımlılığı nedeniyle bu son integralin q cinsinden yazılarak çözülmesi daha uygun olur.

$$\frac{1}{\tau_{tr}} = \frac{(n_i)}{2\pi\hbar^2 \upsilon_F k^2} \int_0^{2k} |V(\mathbf{q})|^2 q^2 \left[1 - \left(\frac{q}{2k}\right)^2\right]^{1/2} dq \tag{3.40}$$

Bu integralin hesabı ise analitik olarak yapılamadığından sayısal olarak yapılmıştır.

Monte Carlo simülasyonunda kullanılan saçılma oranı $1/\tau_i$ ise aşağıdaki gibidir.

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_i} &= \frac{(n_i)}{\pi\hbar^2 \upsilon_F} \int_0^{2k} |V(\mathbf{q})|^2 \left[1 - \left(\frac{q}{2k}\right)^2\right]^{1/2} dq \\ \frac{1}{\tau_i} &= \frac{(n_i)E}{\pi\hbar^3 \upsilon_F^2 k} \int_0^{2k} |V(\mathbf{q})|^2 \left[1 - \left(\frac{q}{2k}\right)^2\right]^{1/2} dq \end{aligned} \tag{3.41}$$

3.5.1.1. Polarizasyon Fonksiyonu

Polarizasyon fonksiyonu (ANDO, 2006; Das SARMA, 2009)

$$\Pi(q) = -\frac{g_v g_s}{A} \sum_{s,s',\mathbf{k}} (f_{s\mathbf{k}} - f_{s'\mathbf{k}'}) \frac{|(\mathbf{F}^{\dagger}_{s\mathbf{k}} \cdot \mathbf{F}_{s'\mathbf{k}'})|^2}{\varepsilon_{s\mathbf{k}} - \varepsilon_{s'\mathbf{k}'}} \tag{3.42}$$

şeklinde tanımlanır. Burada $f_{s\mathbf{k}}$ Fermi dağılım fonksiyonu olup, μ kimyasal potansiyeli ve T sıcaklık olmak üzere

$$f_{s\mathbf{k}} = f(\varepsilon_{s\mathbf{k}}) \equiv \left[\exp\left(\frac{\varepsilon_{s\mathbf{k}} - \mu}{k_B T}\right) + 1\right]^{-1} \tag{3.43}$$

şeklinde tanımlıdır. Kimyasal potansiyel elektron yoğunluğundan hesaplanabilir ve nasıl bulunacağı daha sonra Bölüm 4'de tartışılacaktır. Fermi seviyesinin iletim bandında olduğu düşünülerek,

$$\tilde{f}_{s\mathbf{k}} = f_{s\mathbf{k}} - f^0_{s\mathbf{k}} \tag{3.44}$$

tanımı yapılırsa

$$\Pi(q) = -\frac{g_v g_s}{A} \sum_{s,s',\mathbf{k}} (\tilde{f}_{s\mathbf{k}} - \tilde{f}_{s'\mathbf{k}'}) \frac{|(\mathbf{F}^{\dagger}_{s\mathbf{k}}.\mathbf{F}_{s'\mathbf{k}'})|^2}{\varepsilon_{s\mathbf{k}} - \varepsilon_{s'\mathbf{k}'}} \tag{3.45}$$

elde edilir.

$$f^0_{s\mathbf{k}} = \begin{cases} 1 & (s=-1 \text{ için}) \\ 0 & (s=+1 \text{ için}) \end{cases} \tag{3.46}$$

olduğundan $\tilde{f}_{s\mathbf{k}} - \tilde{f}_{s'\mathbf{k}'} = 2\tilde{f}_{s\mathbf{k}}$ olur. Buradan,

$$\begin{aligned}
\Pi(q) &= -2\frac{g_v g_s}{A} \sum_{s,s',\mathbf{k}} \tilde{f}_{s\mathbf{k}} \frac{|(\mathbf{F}^{\dagger}_{s\mathbf{k}}.\mathbf{F}_{s'\mathbf{k}'})|^2}{\varepsilon_{s\mathbf{k}} - \varepsilon_{s'\mathbf{k}'}} \\
&= -\frac{g_v g_s}{A} \sum_{s,s',\mathbf{k}} \tilde{f}_{s\mathbf{k}} \frac{[1 + ss'\cos(\theta_{kk'})]}{\varepsilon_{s\mathbf{k}} - \varepsilon_{s'\mathbf{k}'}} \\
&= -\frac{g_v g_s}{A} \sum_{s,\mathbf{k}} \tilde{f}_{s\mathbf{k}} \left\{ \frac{[1 + s\cos(\theta_{kk'})]}{\varepsilon_{s\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'_-}} + \frac{[1 - s\cos(\theta_{kk'})]}{\varepsilon_{s\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'_+}} \right\} \\
&= -\frac{g_v g_s}{A} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \tilde{f}_{\mathbf{k}_+} \left[\frac{[1+\cos\theta]}{\varepsilon_{\mathbf{k}_+} - \varepsilon_{\mathbf{k}'_+}} + \frac{[1-\cos\theta]}{\varepsilon_{\mathbf{k}_+} - \varepsilon_{\mathbf{k}'_-}} \right] \right. \\
&\quad \left. + \tilde{f}_{\mathbf{k}_-} \left[\frac{[1-\cos\theta]}{\varepsilon_{\mathbf{k}_-} - \varepsilon_{\mathbf{k}'_+}} + \frac{[1+\cos\theta]}{\varepsilon_{\mathbf{k}_-} - \varepsilon_{\mathbf{k}'_-}} \right] \right\}
\end{aligned} \tag{3.47}$$

(3.47) Denkleminde $\varepsilon_{\mathbf{k}_+} = \varepsilon_{s\mathbf{k}}\big|_{s=1}$ ve $\varepsilon_{\mathbf{k}_-} = \varepsilon_{s\mathbf{k}}\big|_{s=-1}$ olarak tanımlanmıştı. Böylece

$$\left.\begin{aligned} \varepsilon_{k_+} &= \hbar\upsilon_F|\mathbf{k}| & \varepsilon_{k'_+} &= \hbar\upsilon_F|\mathbf{k}+\mathbf{q}| \\ \varepsilon_{k_-} &= -\hbar\upsilon_F|\mathbf{k}| & \varepsilon_{k'_-} &= -\hbar\upsilon_F|\mathbf{k}+\mathbf{q}| \end{aligned}\right\} \tag{3.48}$$

olur. $\gamma = \hbar\upsilon_F$ olmak üzere sonuç olarak

$$\begin{aligned}
\Pi(q) = -\frac{g_v g_s}{A} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \tilde{f}_{\mathbf{k}_+} \left[\frac{[1+\cos\theta]}{\gamma|\mathbf{k}| - \gamma|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} + \frac{[1-\cos\theta]}{\gamma|\mathbf{k}| + \gamma|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} \right] \right. \\
\left. + \tilde{f}_{\mathbf{k}_-} \left[\frac{[1-\cos\theta]}{-\gamma|\mathbf{k}| - \gamma|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} + \frac{[1+\cos\theta]}{-\gamma|\mathbf{k}| + \gamma|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} \right] \right\}
\end{aligned} \tag{3.49}$$

elde edilir. İşaretler yeniden düzenlenirse

$$\Pi(q) = -\frac{g_v g_s}{A}\sum_{\mathbf{k}}\left\{\tilde{f}_{\mathbf{k}_+}\left[\frac{[1+\cos\theta]}{\gamma|\mathbf{k}|-\gamma|\mathbf{k}+\mathbf{q}|}+\frac{[1-\cos\theta]}{\gamma|\mathbf{k}|+\gamma|\mathbf{k}+\mathbf{q}|}\right]\right.$$
$$\left.+\,\tilde{f}_{\mathbf{k}_-}\left[-\frac{[1-\cos\theta]}{\gamma|\mathbf{k}|+\gamma|\mathbf{k}+\mathbf{q}|}-\frac{[1+\cos\theta]}{\gamma|\mathbf{k}|-\gamma|\mathbf{k}+\mathbf{q}|}\right]\right\} \tag{3.50}$$

bulunur. Bu son elde edilen ifade daha sade bir şekilde yazılabilir.

$$a=\frac{[1+\cos\theta]}{\gamma|\mathbf{k}|-\gamma|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} \quad \text{ve} \quad b=\frac{[1+\cos\theta]}{\gamma|\mathbf{k}|+\gamma|\mathbf{k}+\mathbf{q}|}$$

olmak üzere polarizasyon fonksiyonu

$$\Pi(q) = -\frac{g_v g_s}{A}\sum_{\mathbf{k}}\{(f_{k_+}-f^0_{k_+})[a+b]+(f_{k_-}-f^0_{k_-})[-b-a]\} \tag{3.51}$$

şeklinde yazılabilir. Ayrıca $f^0_{k_+}=0$ ve $f^0_{k_-}=1$ olduğundan, bu değerler kullanılarak yukarıdaki denklem düzenlenirse sonuç olarak

$$\begin{aligned}
\Pi(q) &= -\frac{g_v g_s}{A}\sum_{\mathbf{k}}\{f_{k_+}(a+b)-f_{k_-}(a+b)+(a+b)\}\\
&= -\frac{g_v g_s}{A}\sum_{\mathbf{k}}\{(f_{k_+}-f_{k_-}+1)(a+b)\}\\
&= -\frac{g_v g_s}{A}\sum_{\mathbf{k}} f^+(\varepsilon_k)(a+b) = -\frac{g_v g_s}{A}\sum_{\mathbf{k}} f^+(\varepsilon_k)\left[\frac{1+\cos\theta}{\varepsilon_{\mathbf{k}}-\varepsilon_{\mathbf{k}'}}+\frac{1-\cos\theta}{\varepsilon_{\mathbf{k}}+\varepsilon_{\mathbf{k}'}}\right]\\
&= -\frac{g_v g_s}{A}\sum_{\mathbf{k}} f^+(\varepsilon_k)\left[\frac{(1+\cos\theta)(\varepsilon_{\mathbf{k}}+\varepsilon_{\mathbf{k}'})+(1-\cos\theta)(\varepsilon_{\mathbf{k}}-\varepsilon_{\mathbf{k}'})}{\varepsilon_k^2-\varepsilon_{k'}^2}\right]\\
\Pi(q) &= -2\frac{g_v g_s}{A}\sum_{\mathbf{k}} f^+(\varepsilon_k)\left[\frac{\varepsilon_k+\varepsilon_{k'}\cos\theta}{\varepsilon_k^2-\varepsilon_{k'}^2}\right]
\end{aligned} \tag{3.52}$$

elde edilir. Burada

$$f^+(\varepsilon_k)=\sum_{s=\pm 1} s\tilde{f}_{s\mathbf{k}} = f(\varepsilon_k)+f(\varepsilon_k+2\mu)$$

olduğu göz önünde bulundurularak, toplam integrale çevrilirse

$$\Pi(q) = -2\frac{g_v g_s}{A}\frac{A}{(2\pi)^2}\int_0^{\infty}\int_0^{2\pi} f^+(\varepsilon_k)\left\{\frac{\gamma|\mathbf{k}|+\gamma|\mathbf{k}+\mathbf{q}|\cos\theta_{kk'}}{\gamma^2|\mathbf{k}|^2-\gamma^2|\mathbf{k}+\mathbf{q}|^2}\right\}kdkd\theta \tag{3.53}$$

elde edilir. Şekil 3.6.'da gösterildiği gibi $\mathbf{k}$ ve $\mathbf{k}'$ arasındaki açının kosinüsü $\cos\theta_{kk'} = (\frac{k+q\cos\phi}{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|})$ şeklinde yazılabilir. Bu değer (3.52) denkleminde yerine yazılırsa,

$$\begin{aligned}
\Pi(q) &= -2\frac{g_v g_s}{(2\pi)^2}\int_0^{\infty}\int_0^{2\pi} f^+(\varepsilon_k)\left\{\frac{\gamma|\mathbf{k}|+\gamma|\mathbf{k}+\mathbf{q}|\cdot(\frac{k+q\cos\phi}{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|})}{\gamma^2|\mathbf{k}|^2-\gamma^2|\mathbf{k}+\mathbf{q}|^2}\right\}kdkd\theta \\
&= -2\frac{g_v g_s}{(2\pi)^2}\int_0^{\infty}\int_0^{2\pi} f^+(\varepsilon_k)\left\{\frac{\gamma k+\gamma(k+q\cos\phi)}{\gamma^2k^2-\gamma^2(k^2+2kq\cos\phi+q^2)}\right\}kdkd\theta \\
\Pi(q) &= 2\frac{g_v g_s}{\gamma(2\pi)^2}\int_0^{q/2}\int_0^{2\pi} f^+(\varepsilon_k)\left\{\frac{2k+q\cos\phi}{q^2+2kq\cos\phi}\right\}kdkd\theta \\
&\quad +2\frac{g_v g_s}{\gamma(2\pi)^2}\int_{q/2}^{\infty}\int_0^{2\pi} f^+(\varepsilon_k)\left\{\frac{2k+q\cos\phi}{q^2+2kq\cos\phi}\right\}kdkd\theta
\end{aligned} \tag{3.54}$$

Yukarıdaki eşitlikte ilk integral $(k < \frac{q}{2})$ olduğunda, ikinci integral ise $(k > \frac{q}{2})$ olduğunda hesaplanır. Açıya bağlı kısımların integralleri aşağıdaki gibidir.

$$\int_0^{2\pi} f^+(\varepsilon_k)\frac{2k+q\cos\phi}{q^2+2kq\cos\phi}d\phi = \left(\frac{q+q\sqrt{1-(\frac{2k}{q})^2}}{kq}\right)\pi \quad (q<2k \text{ ise})$$

$$\int_0^{2\pi} f^+(\varepsilon_k)\frac{2k+q\cos\phi}{q^2+2kq\cos\phi}d\phi = \left(\frac{q-q\sqrt{1-(\frac{2k}{q})^2}}{kq}\right)\pi \quad (q>2k \text{ ise})$$

Böylece polarizasyon fonksiyonu

$$\begin{aligned}
\Pi(q) &= \frac{g_v g_s}{\gamma(2\pi)}\int_0^{q/2} f^+(\varepsilon_k)\left(1-\sqrt{1-(\frac{2k}{q})^2}\right)dk \\
&\quad +\frac{g_v g_s}{\gamma(2\pi)}\int_{q/2}^{\infty} f^+(\varepsilon_k)\left(1+\sqrt{1-(\frac{2k}{q})^2}\right)dk
\end{aligned} \tag{3.55}$$

şeklinde elde edilir. $(q < 2k)$ ise ikinci terimin ikinci integrali sanal olacağından kullanılamaz. Sonuç olarak (ANDO, 2006; Das SARMA, 2009)

$$\Pi(q) = \frac{g_v g_s}{2\pi\gamma}\left\{\int_0^{\infty} f^+(\varepsilon_k) - \int_0^{q/2} f^+(\varepsilon_k)\sqrt{1-(\frac{2k}{q})^2}\right\}dk \tag{3.56}$$

elde edilir. Yukarıda (3.56) denlemindeki birinci integral analitik olarak çözülebilir, ikincisi sayısal yöntemlerle hesaplanacaktır.

Bu polarizasyon fonksiyonu sayısal yöntemlerle hesaplanarak (3.31) numaralı denklemde yerine yazıldığında ve (3.31) numaralı denklem de (3.40) numaralı denklemde yerine yazıldığında yüklü safsızlık saçılması için taşınım saçılma oranı elde edilmiş olur. Bu hesaplamalar ve sonuçları 4. Bölümde verilmiştir (Şekil 4.2., Şekil 4.3.).

3.5.1.2. Grafen için Durum Yoğunluğu

İki boyutta $k = |\mathbf{k}|$ olmak üzere girilebilir durum sayısı

$$N = \frac{\pi k^2}{\Delta k_x \Delta k_y} = \frac{\pi k^2}{(\frac{2\pi}{L})^2} = \frac{A}{4\pi}k^2 \tag{3.57}$$

ile verilir. Grafen için υ_F Fermi hızı olmak üzere

$$E = \hbar \upsilon_F k \tag{3.58}$$

olduğundan

$$N = \frac{A}{4\pi}\frac{E^2}{\hbar^2 \upsilon_F^2} \tag{3.59}$$

olur. Durum yoğunluğu birim enerji aralığı başına girilebilir durum sayısı olduğundan

$$D(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{A}{4\pi}\frac{2E}{\hbar^2 \upsilon_F^2} = \frac{A}{2\pi}\frac{E}{\hbar^2 \upsilon_F^2} \tag{3.60}$$

Böylece durum yoğunluğu $D(E) = \frac{2A\cdot E}{\pi\gamma^2}$ olur. Bu ifade spin ve vadi ($s = \pm 1$) dejenereliği nedeniyle $2 \times 2 = 4$ ile çarpılmıştır.

3.5.1.3. Grafende Üst Üste Gelme Faktörü

Alt bant dalga fonksiyonları ile ilişkili olan üst üste gelme (overlap) faktörü

$$F_{sk} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\theta_k} \\ s \end{pmatrix} \qquad F^{\dagger}_{sk} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\theta_k} & s \end{pmatrix}$$
$$F_{s'k'} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\theta_{k'}} \\ s' \end{pmatrix} \qquad F^{\dagger}_{s'k'} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\theta_{k'}} & s' \end{pmatrix}$$

olmak üzere, aşağıdaki gibi hesaplanır

$$\begin{aligned} F_{ss'}(\mathbf{k},\mathbf{k}') &= (F^{\dagger}_{sk}F_{s'k'})(F^{\dagger}_{sk}F_{s'k'})^{\dagger} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\theta_k} & s \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\theta_{k'}} \\ s' \end{pmatrix} \\ &\quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\theta_{k'}} & s' \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\theta_k} \\ s \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{3.61}$$

$\theta = \theta_k - \theta_{k'}$ kullanarak

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{4}(1 + 2ss'\cos\theta + (ss')^2), \qquad (ss')^2 = 1 \\ &|F^{\dagger}_{sk}F_{s'k'}|^2 = \frac{1}{2}(1 + ss'\cos\theta) \end{aligned} \tag{3.62}$$

burada $s = \pm 1$ iletim (+1) ve valans (-1) bandı ifade eder ve $\theta_{\mathbf{k}} = \tan(k_y/k_x)$ ise momentum vektörü $\mathbf{k}$'nın polar açısıdır.

3.5.2. Akustik Fonon Saçılması

Akustik fonon saçılmasına ait saçılma oranlarının bulunabilmesi için önce matris elemanının hesaplanması gerekir. Matris elemanının hesaplanabilmesi için de,

öncelikle saçılmadan sorumlu olan pertürbasyon potansiyelini tanımlamak gereklidir. Bir yarıiletkenin bant yapısı kristal potansiyeli tarafından belirlendiğinden dolayı, potansiyel örgü uzaklıklarındaki değişimlerden etkilenir. Basınç altındaki bir yarıiletkenin iletim bant kıyısında periyodik değişimler meydana gelir, bundan dolayı örgü sabitinde de periyodik değişimler meydana gelir. Bu nedenle, elektronun potansiyel enerjisi konuma bağlıdır ve $E_c(\mathbf{r},t) - E_0^0 = \delta E_c$ elektron-fonon etkileşimine neden olan pertürbasyon potansiyelidir. δE_c değişimi kristal hacmine bağlı olarak

$$\delta E_c = \frac{\partial E_c}{\partial V}\partial V = V\frac{\partial E_c}{\partial V}\frac{\partial V}{V} = D_a \nabla \cdot \mathbf{u}, \qquad D_a \equiv V\frac{\partial E_c}{\partial V} \tag{3.63}$$

şeklinde yazılabilir. Burada D değeri, deneysel olarak bulunan deformasyon potansiyel sabiti olarak tanımlanır. $\mathbf{u}$ fononlar için yer değiştirme vektörüdür.

Bir kristalde titreşen atomlar, normal kip salınımlarının süperpozisyonu (üst üste binmiş hali) olarak tanımlanabilir. Her bir normal kip, bağımsız bir harmonik salınıcı gibi salınım yapar ve kuantize edilebilir. Fonon olarak adlandırılan bu son kuantalar, sırasıyla $a_q^\dagger$ ve a_q yaratma ve yoketme operatörleri yardımıyla yaratılıp yok edilebilirler. t zamanında $\mathbf{r}$ noktasındaki örgüdeki yer değiştirme aşağıdaki gibi tanımlanabilir (ASHCROFT ve MERMIN, 1976)

$$\mathbf{u}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_q \left(\frac{\hbar}{2m\omega_q}\right)^{1/2} \hat{e}_q(a_q + a_{-q}^\dagger)e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \tag{3.64}$$

burada $\mathbf{u}$ normal kip salınımı, ρ materyalin yoğunluğu, Ω kristalin hacmi olmak üzere süreklilik limiti yardımıyla

$$\rho = \frac{mN}{\Omega} \tag{3.65}$$

yazılabilir ve normal kip salınım genliği

$$\mathbf{u}(\mathbf{r},t) = \sum_q \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_q}\right)^{1/2} \hat{e}_q(a_q + a_{-q}^\dagger)e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \tag{3.66}$$

olur. Burada $\hat{e}_q$ birim polarizasyon vektörü, q dalga vektörü, ω_q salınımın açısal frekansı,

N kristaldeki atom sayısıdır. Akustik fononlar için uzun dalga boyu limitinde ($q \longrightarrow 0$) ses hızı Denklem (3.21) ile tanımlanmıştı. Anılan denklemdeki ses hızı aynı zamanda malzemenin esneklik sabiti ve yoğunluğu cinsinden $\upsilon_s = \sqrt{\frac{C_L}{\rho}}$ şeklinde yazılabilir, burada C_L boyuna titreşimler için materyalin esneklik sabitidir. Akustik fononlar için pertürbasyon potansiyeli denklem (3.63)'da tanımlanmıştı. Sadece boyuna akustik fononların saçılmaya neden olduğu bir durum için

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = i\mathbf{q} \cdot \mathbf{u} = \sum_q \left(\frac{\hbar}{2\rho \Omega \omega_q} \right)^{1/2} i\hat{e}_q \cdot \mathbf{q} (a_q + a_{-q}^{\dagger}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \tag{3.67}$$

elde edilir. Ayrıca

$$\hat{e}_q \cdot \mathbf{q} = \begin{cases} 0 & \text{enine salınımlar için} \\ \neq 0 & \text{boyuna salınımlar için} \end{cases} \tag{3.68}$$

olduğundan ve polarizasyon vektörünün dalga vektörüne paralel alındığı bir durum için ($\hat{e}_q \cdot \mathbf{q} = q$) akustik fononlar için pertürbasyon potansiyeli

$$V_{ac}(r) = \sum_q iqD \left(\frac{\hbar}{2\rho \Omega \omega_q} \right)^{1/2} (a_q + a_{-q}^{\dagger}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \tag{3.69}$$

olur.

Elektronlar için saçılmadan önce ve sonra, serbest elektron (düzlem dalga) çözümleri kullanılabilir. Yaratma ve yok etme operatörlerinin ancak $n_q \pm 1$, n_q durumları arasındaki matris elemanları sıfırdan farklı değerler alır. Burada n_q fonon sayısıdır.

Fonon durumları için

$$|q\rangle = \Pi_q |n_q\rangle \qquad \text{dalga fonksiyonları,} \tag{3.70}$$

elektron durumları için

$$|k\rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{A}} \cdot F_{s\mathbf{k}} \qquad \text{dalga fonksiyonları} \tag{3.71}$$

ve ayrıca fononlar için aşağıdaki matris özellikleri kullanılarak

$$\langle n'|a|n\rangle = 0 \qquad n' \neq n-1$$

$$\langle n-1|a|n\rangle = \sqrt{n}$$

$$\langle n+1|a^{\dagger}|n\rangle = \sqrt{n+1}$$

matris elemanları (denklem 3.69'deki verilen pertürbasyon potansiyeli kullanılarak) hesaplanabilir (SHANKAR, 1980).

$$\langle n'k'|V_{ac}(r)|nk\rangle = \sum_q iqD_a \left(\frac{\hbar}{2\sigma A\omega_q}\right)^{1/2} \int \frac{e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{A}} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{A}} (F_{s\mathbf{k}'}\cdot F_{s\mathbf{k}})\langle n'_k|(a_q + a^{\dagger}_{-q})|n_k\rangle e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^2\mathbf{r} \tag{3.72}$$

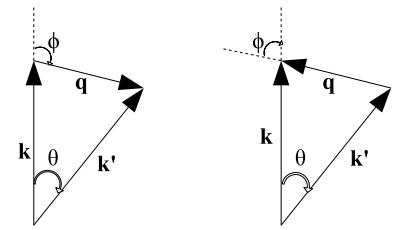
$$\langle k', n_q \mp 1|V_{ac}(q)|k, n_q\rangle = iqD_a \left(\frac{\hbar}{2\sigma A\omega_q}\right)^{1/2} (F_{s\mathbf{k}'}\cdot F_{s\mathbf{k}}) \begin{cases} \sqrt{n_q}\,\delta(\mathbf{k}'-\mathbf{k}-\mathbf{q}) \\ \sqrt{n_q+1}\,\delta(\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}) \end{cases} \tag{3.73}$$

şeklinde elde edilir. Burada her bir denklemdeki delta fonksiyonu, elektron-fonon etkileşimi sırasında kristal momentumunun korunduğunu gösterir. Bu sonuç, soğurma ve yayınım işlemleri birleştirilerek akustik fononlar için geçiş oranı, öncelikle matris elemanının karesi alınarak Fermi'nin altın kuralında yerine yazılırsa

$$|\langle k', n_q \mp 1|V_{ac}(q)|k, n_q\rangle|^2 = q^2 D_a^2 \left(\frac{\hbar}{2\sigma A\omega_q}\right) |(F_{s\mathbf{k}'}\cdot F_{s\mathbf{k}})|^2 \begin{cases} (n_q)\,\delta(\mathbf{k}'-\mathbf{k}-\mathbf{q}) \\ (n_q+1)\,\delta(\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}) \end{cases} \tag{3.74}$$

$$S(k,k') = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{D_a^2 q^2 \hbar}{2\sigma A\omega_q} |(F_{s\mathbf{k}'}\cdot F_{s\mathbf{k}})|^2 (n_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2})\,\delta(\mathbf{k}'-\mathbf{k}\pm\mathbf{q})\,\delta(E'_k - E_k \pm \hbar\omega_q) \tag{3.75}$$

olarak elde edilir. Denklemdeki iki delta fonksiyonu sırası ile momentum ve enerjinin korunumunu ifade eder, artı işareti fonon soğurulması ve eksi işareti fonon yayınımını göstermek üzere aşağıdaki gibi iki denklem yazılabilir.



Şekil 3.6. Soğurma ve yayınım gösterimi; **k** ve **q** vektörleri arasındaki ϕ, ve **k** ve $\mathbf{k}'$ vektörleri arasındaki θ polar açılarının tanımlanması (TOMIZAWA, 1993)

$$E_{k'} = E_k \mp \hbar\omega_q \tag{3.76}$$

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} \mp \mathbf{q} \tag{3.77}$$

Grafen için enerjinin korunumu,

$$\hbar\upsilon_F|\mathbf{k}'| = \hbar\upsilon_F|\mathbf{k}| \mp \hbar\omega_q \tag{3.78}$$

şeklindedir. Momentumun korunumu kullanılarak $\mathbf{k}'$ denklemde yerine konulursa, iki ayrı delta fonksiyonu tek bir delta fonksiyonuna dönüştürülebilir:

$$k'^2 = k^2 + q^2 \mp 2kq\cos\phi \tag{3.79}$$

Burada ϕ, Şekil 3.6.'de gösterildiği gibi **k** ve **q** arasındaki polar açıdır.

$$\begin{aligned}\delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} \pm \mathbf{q})\delta(E_{k'} - E_k \pm \hbar\omega_q) &= \delta(\hbar\upsilon_F|\mathbf{k}'| - \hbar\upsilon_F|\mathbf{k}| \pm \hbar\omega_q) \\ &= \delta(\hbar\upsilon_F\sqrt{k^2 + q^2 \mp 2kq\cos\phi} - \hbar\upsilon_F k \pm \hbar\omega_q)\end{aligned}$$

a bir sabit olmak üzere, $\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$ olduğundan, yukarıdaki denklem

$$= \frac{1}{\hbar\upsilon_F}\delta(\sqrt{k^2 + q^2 \mp 2kq\cos\phi} - k \pm \frac{\omega_q}{\upsilon_F}) = \frac{1}{\hbar\upsilon_F}\delta(k' - k \pm q) \tag{3.80}$$

şeklinde yazılabilir. Ayrıca akustik fonon enerjisi $\hbar\omega_q$, oda sıcaklığındaki k_BT enerjisinden çok küçük olduğundan, eş bölüşüm ilkesi kullanılabilir. Böylece akustik fonon saçılması elastik (enerjide değişim yok $\hbar\omega_q = 0$) olarak kabul edilir ve bu yaklaşıklıklar altında saçılma oranı yeniden düzenlenerek

$$n_q \simeq n_q + 1 \simeq \frac{1}{\exp^{\hbar\omega_q/k_BT} - 1} \simeq \frac{1}{1 + \frac{\hbar\omega_q}{k_BT} - 1} \simeq \frac{k_BT}{\hbar\omega_q} = \frac{k_BT}{\hbar\upsilon_s q} \tag{3.81}$$

$$S(k,k') = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{D_a^2 q^2 \hbar}{2\sigma A \upsilon_s q}\left(\frac{k_BT}{\hbar\upsilon_s q}\right)\frac{1}{\hbar\upsilon_F}\delta(k'-k)\frac{1}{2}(1+\cos\theta) \tag{3.82}$$

Burada (3.82) numaralı denklemde θ açısına bağlı son ifade, grafen için üst üste gelme faktörü olup çıkarımı daha önce yapılmıştı. θ açısı ise, $\mathbf{k}$ ve $\mathbf{k}'$ dalga vektörleri arasındaki açıyı tanımlar. Elde edilen bu saçılma oranının tüm k' 'ler üzerinden integrali alınarak toplam saçılma oranı hesaplanabilir.

$$W(k) = \frac{A}{(2\pi)^2}\int S(k,k')d^2k' \qquad d^2k' = k'dk'd\theta \tag{3.83}$$

$$W(k) = \frac{A}{(2\pi)^2}\frac{\pi D_a^2 k_BT}{\sigma A \upsilon_s^2 \hbar^2 \upsilon_F}\int_0^\infty\int_0^{2\pi}\delta(k'-k)k'dk'\frac{1}{2}(1+\cos\theta)d\theta \tag{3.84}$$

Elastik saçılmada $k' = k$ olduğundan delta fonksiyonunun integrali kolayca alınabilir

$$\frac{1}{4\pi^2}\frac{\pi D_a^2 k_BT}{\sigma\upsilon_s^2\hbar^2\upsilon_F}k\int_0^{2\pi}\frac{1}{2}(1+\cos\theta)d\theta \tag{3.85}$$

$$= \frac{D_a^2 k_BT}{4\sigma\upsilon_s^2\hbar^2\upsilon_F}k \qquad \text{ya da} \qquad = \frac{D_a^2 k_BT}{4\sigma\upsilon_s^2\hbar^3\upsilon_F^2}E$$

$$W(k) = \frac{\pi D_a^2 k_BT}{8\sigma\upsilon_s^2\hbar}D(E_k) \tag{3.86}$$

Burada $D(E_k)$ grafen için durum yoğunluğu olup aşağıda verilmiştir ve çıkarımı daha önce yapılmıştı.

$$D(E_k) = \frac{g \times E}{2\pi\gamma^2} \qquad (g = g_s \times g_v = 2 \times 2 = 4) \qquad (\gamma = \hbar\upsilon_F) \tag{3.87}$$

Akustik fonon saçılması için soğurma ve yayılma olayları eşit olduğundan toplam saçılma oranının bulunması için sonucun 2 ile çarpılması gerekir.

$$W(k) = \frac{D_a^2 k_B T}{2\sigma\upsilon_s^2\hbar^2\upsilon_F}k \qquad \text{ya da} \qquad W(k) = \frac{D_a^2 k_B T}{2\sigma\upsilon_s^2\hbar^3\upsilon_F^2}E \tag{3.88}$$

veya durum yoğunluğu cinsinden toplam saçılma oranı

$$W(k) = \frac{\pi D_a^2 k_B T}{4\sigma\upsilon_s^2\hbar}D(E_k) \tag{3.89}$$

olarak da yazılabilir.

3.5.3. Polar Olmayan Optik Fonon Saçılması

Polar olmayan optik fonon saçılması için pertürbasyon potansiyeli aşağıdaki gibidir.

$$V_{op} = D_0\left(\frac{\hbar}{2\sigma A\omega_0}\right)^{1/2}(a_q + a_{-q}^{\dagger})e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \tag{3.90}$$

Burada D_0 deformasyon potansiyel sabiti, σ yüzeysel kütle yoğunluğu ω_0 optik fononların frekansıdır. Polar olmayan optik fonon saçılması için matris elemanı

$$\langle n'k'|V_{op}(r)|nk\rangle = \sum_q D_0\left(\frac{\hbar}{2\sigma A\omega_0}\right)^{1/2}\int\frac{e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{A}}\frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{A}}(F_{s\mathbf{k}'}\cdot F_{s\mathbf{k}})\langle n'|(a_q + a_{-q}^{\dagger})|n\rangle e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}d^2\mathbf{r} \tag{3.91}$$

$$\langle k', n_0 \mp 1|V_{op}(q)|k, n_0\rangle = D_0\left(\frac{\hbar}{2\sigma A\omega_0}\right)^{1/2}(F_{s\mathbf{k}'}\cdot F_{s\mathbf{k}})\begin{cases}\sqrt{n_0}\,\delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q}) \\ \sqrt{n_0+1}\,\delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{q})\end{cases} \tag{3.92}$$

olarak elde edilirken, matris elemanının karesi

$$|\langle k', n_0 \mp 1|V_{op}(q)|k, n_0\rangle|^2 = D_0^2 \left(\frac{\hbar}{2\sigma A \omega_0}\right) |(F_{s\mathbf{k}'} \cdot F_{s\mathbf{k}})|^2 \begin{cases} (n_0)\delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q}) \\ (n_0+1)\delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{q}) \end{cases} \tag{3.93}$$

olur. Geçiş oranı yine Fermi'nin altın kuralı kullanılarak

$$S(k,k') = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{D_0^2 \hbar}{2\sigma A \omega_0} |(F_{s\mathbf{k}'} \cdot F_{s\mathbf{k}})|^2 (n_0 + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}) \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} \mp \mathbf{q}) \delta(E_{k'} - E_k \mp \hbar\omega_0) \tag{3.94}$$

Denklemdeki iki delta fonksiyonu enerji ve momentumun korunumunu ifade eder, artı işareti fonon soğurulması ve eksi işareti fonon yayınımını gösterir. n_0 polar olmayan optik fonon sayısıdır ve Bose-Einstein dağılımı ile verilir.

$$E_k = \hbar \upsilon_F |\mathbf{k}|$$

$$E_{k'} = \hbar \upsilon_F |\mathbf{k}'|$$

olmak üzere

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} \pm \mathbf{q} \tag{3.95}$$

$$\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k}' = (\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) \cdot (\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) \tag{3.96}$$

$$k'^2 = k^2 + q^2 \pm 2kq\cos\phi \tag{3.97}$$

Soğurma ve yayınım durumlarının ayrı ayrı incelenmesi kolaylık sağlayacaktır:

3.5.3.1. Soğurma

Soğurma durumunda $\hbar\omega_0$ enerjili bir fonon soğurulur.

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q} \qquad k'^2 = k^2 + q^2 + 2kq\cos\phi \tag{3.98}$$

$$E_{k'} = E_k + \hbar\omega_0 \qquad k' = \sqrt{k^2 + q^2 + 2kq\cos\phi} \tag{3.99}$$

$$\hbar\upsilon_F k' = \hbar\upsilon_F k + \hbar\omega_0 \tag{3.100}$$

(3.99-3.100) denklemleri kullanılarak

$$\sqrt{k^2 + q^2 + 2kq\cos\phi} - k - \frac{\hbar\omega_0}{\hbar\upsilon_F} = 0 \tag{3.101}$$

yazılabilir.

$$W(k) = \frac{A}{(2\pi)^2}\int S(k,k')d^2k' \tag{3.102}$$

$$= \frac{A}{(2\pi)^2}\frac{2\pi}{\hbar}\frac{D_0^2\hbar}{2A\sigma\omega_0}(n_0 + \frac{1}{2} - \frac{1}{2})\int_0^{2\pi}\int_{q_{min}}^{q_{max}} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q})\delta(E_{k'} - E_k - \hbar\omega_0)|(F_{s\mathbf{k}'}\cdot F_{s\mathbf{k}})|^2 d^2k' \tag{3.103}$$

$d^2k' = k'dk'd\theta$ veya $d^2k' = qdqd\phi$ kullanılarak yukarıdaki integral hesaplanabilir. İşlemlerin kolay takip edilebilmesi için

$$I = \int_0^{2\pi}\int_{q_{min}}^{q_{max}} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q})\delta(E_{k'} - E_k - \hbar\omega_0)|(F_{s\mathbf{k}'}\cdot F_{s\mathbf{k}})|^2 qdqd\phi \quad \text{olsun.}$$

Ayrıca bu integrale grafenin üstüste binme faktörünün ϕ cinsinden değerinin de eklenmesi ile polar olmayan optik fonon saçılması için hesaplanması gereken integral aşağıdaki hali alır.

$$I = \int_0^{2\pi} \int_{q_{min}}^{q_{max}} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q}) \delta(E_{k'} - E_k - \hbar\omega_0)(1 + \frac{q}{2k}\cos\phi) q dq d\phi$$

Bu integrali iki kısma ayırarak çözüm yapmak kolaylık sağlayacağından

$$I_1 = \int_0^{2\pi} \int_{q_{min}}^{q_{max}} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q}) \delta(E_{k'} - E_k - \hbar\omega_0) q dq d\phi$$

ve

$$I_2 = \int_0^{2\pi} \int_{q_{min}}^{q_{max}} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q}) \delta(E_{k'} - E_k - \hbar\omega_0) \frac{q^2}{2k}\cos\phi dq d\phi$$

olsun ve I_1 integrali öncelikle hesaplansın. Momentumun korunumu kullanılarak, iki ayrı delta fonksiyonu tek bir delta fonksiyonuna dönüştürüldüğünde:

$$I_1 = \int_0^{2\pi} \int_{q_{min}}^{q_{max}} \delta\left(\sqrt{k^2 + q^2 + 2kq\cos\phi} - k - \frac{\hbar\omega_0}{\hbar\upsilon_F}\right) \frac{1}{\hbar\upsilon_F} q dq d\phi$$

olur. x_i, $g(x)$ fonksiyonunun kökleri olmak üzere

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(g(x)) f(x) dx = \sum_i \frac{f(x_i)}{|g'(x_i)|} \tag{3.104}$$

özelliği kullanılarak

$$I_1 = \int_0^{2\pi} \int_{q_{min}}^{q_{max}} \delta(g(q)) f(q) dq d\phi$$

halini alır. Burada,

$$f(q) = q/\hbar\upsilon_F$$

$$g(q) = \sqrt{k^2 + q^2 + 2kq\cos\phi} - k - \frac{\omega_0}{\upsilon_F}$$

olduğundan aranan integral

$$I_1 = \int_0^{2\pi} \sum_i \frac{f(q_i)}{|g'(q_i)|} d\phi$$

halini alır. Bu integralde $g(q)$ fonksiyonunun kökleri bulunup türevinde yerine yazılmalıdır.

$$\frac{dg(q)}{dq} = g' = \frac{q + k\cos\phi}{\sqrt{k^2 + q^2 + 2kq\cos\phi}}$$

$g(q)$ fonksiyonunun kökleri, $a = \omega_0/\upsilon_F$ ve $b = a^2 + 2ak$ olmak üzere

$$q_{1,2} = -k\cos\phi \pm \sqrt{k^2\cos^2\phi + b} \longrightarrow q_1 = -k\cos\phi + \sqrt{k^2\cos^2\phi + b}$$

olarak bulunur. Soğurma için q_2 kökü, I_1 integral limitleri içerisinde olmadığından hesaba dahil edilmemiştir. Böylece

$$I_1 = \frac{1}{\hbar\upsilon_F} \int_0^{2\pi} \frac{-k\cos\phi + \sqrt{k^2\cos^2\phi + b}}{|(q_1 + k\cos\phi)/\sqrt{k^2 + q_1^2 + 2kq_1\cos\phi}|} d\phi$$

olur. q_1 kökü yerine yazıldığında

$$I_1 = \frac{1}{\hbar\upsilon_F} \int_0^{2\pi} \frac{-k\cos\phi + \sqrt{k^2\cos^2\phi + b}}{\sqrt{k^2\cos^2\phi + b}/\sqrt{k^2 + b}} d\phi$$

$$I_1 = \frac{1}{\hbar\upsilon_F} \left\{ \int_0^{2\pi} \frac{-k\cos\phi\sqrt{k^2 + b}}{\sqrt{k^2\cos^2\phi + b}} d\phi + \int_0^{2\pi} \sqrt{k^2 + b}\, d\phi \right\} \tag{3.105}$$

olarak elde edilir. İlk terimin integrali sıfır olduğundan;

$$I_1 = \frac{1}{\hbar \upsilon_F} \int_0^{2\pi} \sqrt{k^2+b}\, d\phi = \frac{1}{\hbar \upsilon_F} (\sqrt{k^2+b})\, 2\pi \ , \ b = a^2 + 2ak \ , \ a = \frac{\omega_0}{\upsilon_F}$$
$$I_1 = (k + \frac{\omega_0}{\upsilon_F}) \frac{2\pi}{\hbar \upsilon_F} \tag{3.106}$$

elde edilir. İkinci kısmın integralinin benzer şekilde hesabı ise bize

$$I_2 = -(k + \frac{\omega_0}{\upsilon_F}) \frac{\pi}{\hbar \upsilon_F}$$

değerini vereceğinden soğurma için saçılma oranı

$$W(k) = \frac{D_0^2}{4\pi\sigma\omega_0} (n_0 + \frac{1}{2} - \frac{1}{2})(I_1 + I_2)$$

$$W(k) = \frac{D_0^2}{4\pi\sigma\omega_0} (n_0 + \frac{1}{2} - \frac{1}{2})(k + \frac{\omega_0}{\upsilon_F}) \frac{\pi}{\hbar \upsilon_F}$$

$$W(k) = \frac{D_0^2}{4\sigma\omega_0 \hbar \upsilon_F} (n_0)(k + \frac{\omega_0}{\upsilon_F}) \tag{3.107}$$

şeklinde bulunmuş olur.

3.5.3.2. Yayınım

Yayınım durumunda $\hbar\omega_0$ enerjili bir fonon salınır.

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} - \mathbf{q} \qquad k'^2 = k^2 + q^2 - 2kq\cos\phi \tag{3.108}$$

$$E_{k'} = E_k - \hbar\omega_0 \qquad k' = \sqrt{k^2 + q^2 - 2kq\cos\phi} \tag{3.109}$$

$$\hbar \upsilon_F k' = \hbar \upsilon_F k - \hbar\omega_0 \tag{3.110}$$

$$\sqrt{k^2 + q^2 - 2kq\cos\phi} - k + \frac{\hbar\omega_0}{\hbar \upsilon_F} = 0 \tag{3.111}$$

$$J = \int_0^{2\pi} \int_{q_{min}}^{q_{max}} \delta(\sqrt{k^2+q^2-2kq\cos\phi} - k + \frac{\hbar\omega_0}{\hbar\upsilon_F}) \frac{1}{\hbar\upsilon_F}(1+\frac{q}{2k}\cos\phi) q dq d\phi$$

Aynı işlemler yayınım integrali için de tekrarlanır. Öncelikle yine ilk kısmın integrali J_1'i hesaplayalım:

$$J_1 = \int_0^{2\pi} \int_{q_{min}}^{q_{max}} \delta(g(q)) f(q) dq d\phi$$

Burada $f(q) = q/\hbar\upsilon_F$ ve

$$g(q) = \sqrt{k^2+q^2-2kq\cos\phi} - k + \frac{\omega_0}{\upsilon_F}$$

olur. Aranan integral

$$J_1 = \int_0^{2\pi} \sum_i \frac{f(q_i)}{|g'(q_i)|} d\phi$$

olduğundan

$$\frac{dg(q)}{dq} = g' = \frac{q - k\cos\phi}{\sqrt{k^2+q^2-2kq\cos\phi}}$$

$g(q)$ fonksiyonunun kökleri $c = a^2 - 2ak$ ve $a = \frac{\omega_0}{\upsilon_F}$ aşağıdaki gibi hesaplanır:

$$q_{1,2} = \frac{2k\cos\phi \pm \sqrt{4k^2\cos^2\phi + 4c}}{2}$$

$$q_{1,2} = k\cos\phi \pm \sqrt{k^2\cos^2\phi + c} \longrightarrow q_1 = k\cos\phi + \sqrt{k^2\cos^2\phi + c}$$

Soğurmada olduğu gibi yayınım için de q_2 kökü, J_1 integral limitleri içerisinde olmadığından hesaba dahil edilmemiştir.

$$J_1 = \frac{1}{\hbar \upsilon_F} \int_0^{2\pi} \frac{k\cos\phi + \sqrt{k^2\cos^2\phi + c}}{|(q_1 - k\cos\phi)/\sqrt{k^2 + q_1^2 - 2kq_1\cos\phi}|} d\phi$$

q_1 kökü yerine yazıldığında

$$J_1 = \frac{1}{\hbar \upsilon_F} \int_0^{2\pi} \frac{k\cos\phi + \sqrt{k^2\cos^2\phi + c}}{\sqrt{k^2\cos^2\phi + c}/\sqrt{k^2 + c}} d\phi$$

$$J_1 = \frac{1}{\hbar \upsilon_F} \left\{ \int_0^{2\pi} \frac{k\cos\phi\sqrt{k^2 + c}}{\sqrt{k^2\cos^2\phi + c}} d\phi + \int_0^{2\pi} \sqrt{k^2 + c}\, d\phi \right\} \tag{3.112}$$

olarak elde edilir. İlk terimin integrali sıfır olduğundan;

$$J_1 = \frac{1}{\hbar \upsilon_F} \int_0^{2\pi} \sqrt{k^2 + c}\, d\phi = \frac{1}{\hbar \upsilon_F} (\sqrt{k^2 + c})\, 2\pi \ , \ c = a^2 - 2ak \ , \ a = \frac{\omega_0}{\upsilon_F}$$

$$J_1 = (k - \frac{\omega_0}{\upsilon_F}) \frac{2\pi}{\hbar \upsilon_F} \tag{3.113}$$

elde edilir. İkinci kısmın integrali de benzer şekilde hesaplandığında

$$J_2 = -(k - \frac{\omega_0}{\upsilon_F}) \frac{\pi}{\hbar \upsilon_F}$$

değerini vereceğinden yayınım için geçiş oranı

$$W(k) = \frac{D_0^2}{4\pi\sigma\omega_0} (n_0 + \frac{1}{2} + \frac{1}{2})(J_1 + J_2)$$

$$W(k) = \frac{D_0^2}{4\sigma\omega_0\hbar\upsilon_F} (n_0 + 1)(k - \frac{\omega_0}{\upsilon_F}) \tag{3.114}$$

olarak elde edilir.

Soğurma ve yayınım aşağıdaki gibi tek bir eşitlikle gösterilebilir:

$$W(k) = \frac{D_0^2}{4\sigma\omega_0(\hbar\upsilon_F)^2}\{n_0(\hbar\upsilon_F k + \hbar\omega_0) + (n_0+1)(\hbar\upsilon_F k - \hbar\omega_0)\Theta(\hbar\upsilon_F k - \hbar\omega_0)\} \tag{3.115}$$

Polar olmayan optik fonon saçılması için geçiş oranı aşağıdaki gibi elde edilmiş olur.

$$W(k) = \frac{D_0^2}{4\sigma\omega_0(\hbar\upsilon_F)^2}\{n_0(E_k + \hbar\omega_0) + (n_0+1)(E_k - \hbar\omega_0)\Theta(E_k - \hbar\omega_0)\} \tag{3.116}$$

Burada Θ basamak fonksiyonu olup ancak $\hbar\omega_0$ kadarlık bir enerji soğurulduğunda fonon yayınımı olabileceği anlamına gelir.

3.5.4. Yüzey Polar Optik Fonon Saçılması

Bir katının fonon spektrumunda yüzey kipleri kristalin sonlu olmasından dolayı ortaya çıkar. Polar malzemelerde, boyuna yüzey kipleri nedeniyle fonon alanı, yüzey boyunca ilerler ve bunun dışında sıfır olmayan azalan bir elektrik alanı oluşturur. Bu nedenle grafen alt taban malzemesinden belirli bir şekilde etkilenir. Grafen tabakası ile alt taban malzemesi arasındaki mesafe d olmak üzere yüzey polar optik fononlar için grafen içindeki elektronların etkilendiği pertürbasyon potansiyeli (FISCHETTI ve ark, 2001; MORI ve ark, 1989; SAK, 1972; WANG, 1972)

$$H' = e\mathcal{F}\sum_q \left[\frac{e^{-qz}}{\sqrt{q}}(e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}a_q^\dagger + e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}a_q)\right] \tag{3.117}$$

olarak yazılır. Burada $a_q^\dagger$ ve (a_q) yüzey fononları için artırma ve eksiltme operatörleridir. $\mathcal{F}$ ise elektron-fonon çiftlenim parametresi olup

$$\mathcal{F} = \frac{\hbar\omega_{SO}}{2A\varepsilon_0}\left(\frac{1}{\varepsilon_{ox}^\infty + 1} - \frac{1}{\varepsilon_{ox}^0 + 1}\right) \tag{3.118}$$

ile verilir. Burada, ε_{ox}^∞ (ε_{ox}^0) yüksek (düşük) frekanslı dielektrik sabiti ve A grafenin alanı,

ω_{SO} polar optik fononların frekansıdır. Yük taşıyıcıları grafen düzlemine hapsedildiği için, elektron dalga fonksiyonunun z yönündeki değişimi delta fonksiyonu biçiminde olduğunu varsaymak yerinde olacaktır: $|\langle z|X(z)\rangle|^2 = \delta(z-d)$ formunda olduğu varsayılır. d, grafen tabakasının oksit yüzeyden olan uzaklığıdır. Bu durumda saçılma matrisi (KONAR, 2011),

$$|\langle \mathbf{k}|H'|\mathbf{k}_i\rangle|^2 = \mathcal{F}_v^2 \left(\frac{e^{-2qd}}{q}\right)\cos^2\frac{\theta}{2} \tag{3.119}$$

olur. Burada, $q = |\mathbf{k}' - \mathbf{k}|$ elektronun ilk ve son momentumu arasındaki fark ve θ saçılma açısıdır. Bu matris elemanı Fermi'nin altın kuralı denkleminde yerine yazıldığında

$$S(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{e^2\mathcal{F}_v^2 e^{-2qd}}{q\varepsilon(q)^2}\left(n_0 + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\right)\delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} \mp \mathbf{q})\delta(E_{k'} - E_k \mp \hbar\omega_{SO})\frac{1}{2}(1+\cos\theta)$$

elde edilir. Böylece saçılma oranı denklemi, soğurma ve yayınım beraber olmak üzere, aşağıdaki gibi yazılır.

$$W(k) = \frac{e^2\mathcal{F}_v^2}{4\pi\hbar^2 v_F}\left(n_0 + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\right)\int_0^{2\pi}\left[\frac{e^{-2qd}}{q\varepsilon(q)^2}(1+\cos\theta)\left(k \pm \frac{\omega_{SO}}{v_F}\right)\right]d\theta \tag{3.120}$$

Yukarıdaki denklemde q'nun büyüklüğü k ve θ cinsinden

$$q = \left[\left(k \pm \frac{\omega_{SO}}{v_F}\right)^2 + k^2 \mp 2k\left(k \pm \frac{\omega_{SO}}{v_F}\right)\cos\theta\right]^{1/2} \tag{3.121}$$

ile verilir ve (3.120) denkleminin çözümünde bu değer kullanılmalıdır. (3.120) Denklemi sayısal olarak çözülecek, çözümde dielektrik fonksiyonu daha önce bahsedildiği gibi hesaplanarak kullanılacaktır.

3.5.5. Yüzey Pürüzlülük Saçılması

Yüzey pürüzlülüğünden kaynaklanan saçılma oranlarının hesaplanabilmesi için pürüzlülüğün ara yüzey potansiyelinde meydana getirdiği değişikliğin bilinmesi gerekir.

Ara yüzey V(z) potansiyelinde meydana gelen değişiklik çoğunlukla

$$V(z+\Delta(r)) = V(z) + \Delta(r)\frac{dV(z)}{dz} \tag{3.122}$$

biçiminde yazılır. Burada $\Delta(r)$ pürüzlülüğün oto korelasyon fonksiyonu olarak bilinir. Bu fonksiyon ara yüzeydeki pürüzlülükten kaynaklanan saçılma merkezlerinin korelasyonunu verir. Bunun için gaussiyen, eksponansiyel ve lorentsiyen biçiminde fonksiyonlar alınabilir. (3.122) denkleminden faydalanarak pürüzlülükten dolayı potansiyel enerjide meydana gelen fark

$$H_{SR} = -e[V[z+\Delta(r)] - V(z)] \cong -e\Delta(r)\frac{dV(z)}{dz} \tag{3.123}$$

$$H_{SR} = \Delta(r)\left(-e\frac{dV(z)}{dz}\right) = \Delta(r)E(z) \tag{3.124}$$

şeklinde yazılabilir. $E(z) = -e(\partial V/\partial z) = eF$ olduğundan, burada e elektronun yükü ve F yüzeye dik elektrik alanı temsil eder. Böylece bu modele göre buruşuk yüzey saçılması için gerekli potansiyel

$$H_{SR} = eF\Delta(r) \tag{3.125}$$

olarak yazılabilir. Bu denklemde de görüldüğü gibi saçılma oranlarının hesaplanabilmesi için $\Delta(r)$' nin biçiminin bilinmesi gerekir. Bu oto korelasyon fonksiyonunun tam biçimi bilinmemekle beraber burada oto korelasyon fonksiyonu olarak eksponansiyel fonksiyonu kullanılacaktır. Eksponansiyel yaklaşım için oto korelasyon fonksiyonu

$$\Delta(r) = \Delta_e^2 e^{-\sqrt{2}r/L_e} \tag{3.126}$$

olarak alınır. Burada L_e pürüzlü yüzeyin korelasyon uzunluğu, Δ_e arayüzeyin kare ortalama kök (rms) büyüklüğü olup, oto korelasyon fonksiyonunun Fourier dönüşümü

$$|\Delta(q)|^2 = \frac{1}{A}\int_0^{\infty}\int_0^{2\pi} \Delta_e^2 e^{-\sqrt{2}r/L_e} e^{-i\vec{qr}} r dr d\theta \tag{3.127}$$

$$= \frac{2\pi}{A}\Delta_e^2 \int_0^{\infty} e^{-\sqrt{2}r/L_e} J_0(qr) r dr \tag{3.128}$$

$$|\Delta(q)|^2 = \frac{\pi\Delta_e^2 L_e^2}{A}\left(1+\frac{L_e^2 q^2}{2}\right)^{-3/2} \tag{3.129}$$

olarak elde edilir. Bu sonuç saçılma oranın hesabında kullanılacaktır.

Konuyu tamamlamak için matris elemanlarının hesaplanmasında yine

$$\psi_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \cdot F_{s\mathbf{k}} \tag{3.130}$$

dalga fonksiyonu kullanılarak

$$|\langle k'|H_{SR}|k\rangle|^2 = (eF)^2 |\Delta(q)|^2 |(F_{s\mathbf{k}'} \cdot F_{s\mathbf{k}})|^2 \tag{3.131}$$

olarak yazılabilir. Bu ifade aslında yukarıda hesaplanmış olan oto korelasyon fonksiyonunun Fourier dönüşümünü içermektedir. Yüzey elemanı düzlem kutupsal koordinatlarda $d^2k' = kdkd\theta$ kullanılarak

$$|\langle k'|H_{SR}|k\rangle|^2 = (eF)^2 \frac{\pi\Delta_e^2 L_e^2}{A}\left(1+\frac{L_e^2 q^2}{2}\right)^{-3/2} \cdot \frac{1}{2}(1+\cos\theta)$$

şeklinde matris elemanının karesi elde edilmiş olur. Dolayısı ile buruşuk yüzeyden saçılma oranı

$$W(k) = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{A}{(2\pi)^2}\int |\langle k'|H_{SR}|k\rangle|^2 \delta(E_{k'} - E_k) d^2k' \tag{3.132}$$

olur. Yine $\delta(ax) = \delta(x)/|a|$ özelliği kullanılarak saçılma oranı

$$W(k) = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{A}{(2\pi)^2}\frac{1}{\hbar\upsilon_F}\int_0^{\infty}\int_{\theta=0}^{2\pi} |\langle k'|H_{SR}|k\rangle|^2 \delta(k'-k) k' dk' d\theta \tag{3.133}$$

$$W(k) = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{A}{(2\pi)^2}\frac{(eF)^2}{\hbar\upsilon_F}2\int_{\theta=0}^{\pi}\frac{\pi\Delta_e^2L_e^2}{A}\left(1+\frac{L_e^2q^2}{2}\right)^{-3/2}k\cdot\left(\frac{1+\cos\theta}{2}\right)d\theta \quad (3.134)$$

şeklinde yazılabilir.

$$W(k) = \frac{(eF)^2}{\hbar^2\upsilon_F}\Delta_e^2L_e^2k\int_0^{\pi}\left(1+\frac{L_e^2q^2}{2}\right)^{-3/2}\cdot\left(\frac{1+\cos\theta}{2}\right)d\theta \quad (3.135)$$

Daha önce çıkarımı yapılmış olan $q^2 = 4k^2(\sin^2\frac{\theta}{2})$ eşitliği de kullanılarak

$$W(k) = \frac{(eF)^2}{2\hbar^2\upsilon_F}\Delta_e^2L_e^2k\int_0^{\pi}\left(1+2L_e^2k^2\sin^2\frac{\theta}{2}\right)^{-3/2}\cdot(1+\cos\theta)\,d\theta \quad (3.136)$$

açıya bağlı saçılma oranı elde edilmiş olur. F elektrik alan değeri yerine, σ birim alan başına düşen yük yoğunluğu olmak üzere $\sigma = e\times n_s$ ve $F = \sigma/2\varepsilon$ yazılır ve çözülürse

$$\begin{aligned} W(k) &= \frac{(eF)^2}{\hbar^2\upsilon_F}\Delta_e^2L_e^2k\left\{\frac{2E\left(\frac{2L_e^2k^2}{1+2L_e^2k^2}\right)}{\sqrt{1+2L_e^2k^2}}\right\} \\ &= \frac{e^2F^2\Delta_e^2L_e^2}{\hbar^2\upsilon_F}k\left\{\frac{2}{\sqrt{1+2L_e^2k^2}}E\left(\frac{2L_e^2k^2}{1+2L_e^2k^2}\right)\right\} \\ &= e^2\frac{\sigma^2}{(2\varepsilon)^2}\frac{1}{\hbar^2\upsilon_F}\Delta_e^2L_e^2k\left\{\frac{2}{\sqrt{1+2L_e^2k^2}}E\left(\frac{2L_e^2k^2}{1+2L_e^2k^2}\right)\right\} \end{aligned} \quad (3.137)$$

yüzey pürüzlülüğünden kaynaklanan saçılma oranı aşağıdaki gibi elde edilmiş olur

$$W(k) = \frac{2k}{\upsilon_F}\left(\frac{\Delta_eL_en_se^2}{2\varepsilon\hbar}\right)^2\cdot\left\{\frac{1}{\sqrt{1+2L_e^2k^2}}E\left(\frac{2L_e^2k^2}{1+2L_e^2k^2}\right)\right\} \quad (3.138)$$

Burada $E(k)$ ikinci tip tam eliptik integral fonksiyonudur (GRADSHTEYN ve RYZHIK, 1965; PRESS vd., 1989). Veya

$$W(k) = (\frac{\Delta_e L_e n_s e^2}{2\varepsilon\hbar\upsilon_F})^2 \frac{E_k}{2\hbar} \int_0^\pi \left(1 + 2L_e^2 k^2 \sin^2\frac{\theta}{2}\right)^{-3/2} \cdot (1+\cos\theta)\, d\theta \qquad (3.139)$$

olarak da hesaplanabilir. Elde edilen bu sonuç ise analitik olarak hesaplanamadığından dolayı sayısal olarak hesaplanmıştır.

3.6. Tek Parçacık Monte Carlo Simülasyonu

Monte Carlo metodu, olaslık teorisi üzerine kurulu bir sistemdir. Monte Carlo metodunda istatistiksel ve matematiksel tekniklerle bir deneyi veya çözülmesi gereken bir fiziksel olayı rasgele sayıları defalarca kullanarak simüle edip çözmek esastır. Bu yöntem, özellikle 1930'lardan sonra hızla gelişmeye başlamış bir tekniktir. Los Alamos laboratuarlarında nükleer silah geliştirilmesi projesinde çalışan bilim adamları tarafından ilk kez ortaya atılmıştır. Bu metodlar olasılık teorisine tabidir. Metodun bir probleme uygulanması, problemin rasgele sayıları kullanarak simüle edilip hesaplanmak istenen parametrenin bu simülasyonların sonuçlarına bakılarak yaklaşık hesaplanması fikrine dayanır.

Monte Carlo yönteminin temeli, özel bir denemede ya da bir simülasyon çalışmasında bir ya da daha çok olasılık dağılımından rasgele sayılar üreterek, mikroskobik süreçleri tanımlamak için bu sayıları kullanıyor olmasıdır. Yarıiletkenlerde yük taşınımında kullanılan Monte Carlo metodunda, uygulanan bir elektrik ve manyetik alanın varlığında ve çeşitli saçılma mekanizmalarının etkisinde, kristal içindeki bir ya da daha fazla elektronun hareketinin simülasyonu söz konusudur. Taşıyıcının serbest uçuş zamanı (iki saçılma olayı arasındaki zaman) ve çeşitli olasılıklara göre stokastik olarak seçilen saçılma olayları mikroskobik süreçleri tanımlamada kullanılır. Sonuç olarak herhangi bir Monte Carlo metodu, çeşitli dağılım olasılıkları ile belli bir aralıkta rasgele sayıların üretilmesi sonucuna dayanır. Böyle bir teknik ise, günümüzde herhangi bir bilgisayarla yeterince hızlı bir sürede 0 ve 1 arasında dağılan rasgele sayılar üretilebileceğinden oldukça avantajlıdır. Analizlerin amacı kararlı durum olgusunu (steady-state phenomena) araştırmak olduğundan, homojen numuneleri, bir tek parçacık hareketinin simülasyonuna genellemek yeterlidir; kolaylık olması açısından yeterince uzun bir mesafe göz önüne alınarak bir örnekteki tüm elektron gazının davranışı hakkında bilgi edinilebilir. Tersine,

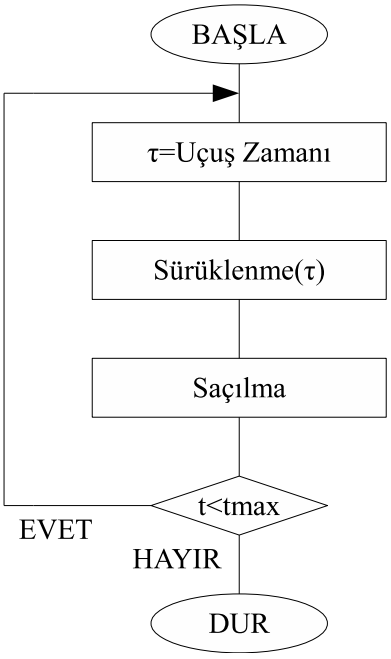
homojen olmayan ya da durağan olmayan numunelerin taşınım süreci araştırılırken ise çok sayıda parçacığın simüle edilmesi gerekir ve ilgilenilen süreçte istenen bilgiyi elde etmek için de her birinin dinamik geçmişi izlenmelidir.

Tek parçacık Monte Carlo simülasyonları, parçacığın hareketini yeterince uzun bir zaman periyodunda takip ederek, homojen numunelerde kararlı durum olgusunu modellemede kullanılır. Zaman aralığı çok uzun tutularak, elde edilen bilgiler elektron gazının davranışını tanımlamada kullanılabilir. Sistemde sadece bir parçacık kullanıldığından, uzun bir geçmişe ait bilgi sıradan bir bilgisayarla bile elde edilebilir. Monte Carlo simülasyonlarında fiziksel sisteme ait malzeme parametrelerinin, enerji bant yapısının, saçılma oranlarının ve örgü sıcaklığının ayrıntılı olarak tanımlanması gerekir. Uygulanan dış alan ve başlangıç koşulları ayrıca tanımlanmalıdır. Bu veriler kullanılarak stokastik saçılma süreçlerini kontrol eden rasgele sayılarla, momentum uzayındaki elektron hareketini gösteren simülasyon elde edilebilir. Her bir elektronun hareketi çarpışmalar arasındaki serbest uçuş zamanlarını içerir. Genellikle çarpışmalar arasında elektronun sabit bir alanda ivmelendirildiği ve malzemenin enerji bant yapısının belirlediği klasik hareket yasalarına uyduğu varsayılır. Saçılmalar enerjinin bir fonksiyonu olarak belirli olasılıklara sahip rasgele olaylardır. Rasgele sayılar, serbest uçuş zamanını ve saçılma süreçlerini (seçilen saçılma mekanizması ve saçılmadan sonraki dalga vektörünün yönü) kontrol eder. Her bir uçuş zamanı sırasında edinilen bilgi simülasyon için gerekli olan parametreleri elde etmede kullanılır (SNOWDEN, 1988).

Bir yarıiletkende parçacık taşınımının analizi karşılıklı etkileşen çok parçacık problemi olduğundan dolayı yapılması zor bir iştir. Bununla birlikte çok parçacık sistemi bağımsız parçacıkların bir bütünü olarak göz önüne alınırsa, tek bir parçacığın bir çok saçılmaya uğraması izlenerek parçacıkların bütününü simüle edecek bir basitleştirme yapılabilir. Tek parçacık Monte Carlo tekniğinin temel fikri budur.

3.6.1. Serbest Uçuş Zamanının Belirlenmesi

Taşınım analizlerine uygulanan tek parçacık Monte Carlo metodunun temeli momentum uzayındaki bir parçacığın hareketinin simüle edilmesidir. Bu simülasyon, taşıyıcının serbest uçuş zamanı ve saçılma olayının stokastik olarak seçilmesi ile oluşturulabilir. Dolayısıyla simülasyon rasgele sayılar artarda seçilerek yapılabilir.

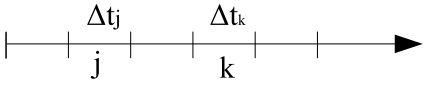


Şekil 3.7. Tek parçacık Monte Carlo hesabının akış diyagramı

Simülasyon programı sürüklenme ve saçılma süreçlerini kontrol eden alt programlar (subroutine) kullanılarak yapılabilir. Taşıyıcının sürüklenme işlemini, sürüklenme ve saçılma işlemini, saçılma olarak adlandırılan alt programların yaptığı düşünülerek basit bir akış diyagramı ile programın ana hatları gösterilebilir (Şekil 3.7.). Simülasyon işlemi sırasında saçılmalar ve sabit bir elektrik alan altındaki sürüklenme hareketi sürekli kendini tekrar eden bir iterasyon işlemi olarak hesaplanır. Şekil 3.7.'de görüldüğü gibi bu iki alt program sürekli dönüşümlü olarak çalışır ve her iterasyonda uçuş zamanı hesaplanır. Serbest uçuş zamanı, farklı saçılma oranlarının toplamı olan toplam saçılma oranına bağlıdır. Her bir saçılma mekanizmasının saçılma oranı enerjiye bağlı olduğundan toplam saçılma oranı da elektron enerjisinin bir fonksiyonudur. N saçılma mekaniizmalarının sayısı olmak üzere, W_T toplam saçılma oranı olsun

$$W_T = \sum_{i=1}^{N} W_i(E) \tag{3.140}$$

Toplam zaman aralığı Şekil 3.8.'deki gibi küçük Δt_k aralıklarına bölünebilir. Bir saçılma olayının k'nıncı aralıkta olma olasılığı



Şekil 3.8. Toplam zaman aralığının küçük Δt_k aralıklarına bölünmesi

$$P_k \Delta t_k = W_T(t_k)\Delta t_k \tag{3.141}$$

ile verilir. Bu saçılma olayının j aralığında olmama olasılığı ise

$$P_j \Delta t_j = 1 - W_T(t_j)\Delta t_j \tag{3.142}$$

şeklinde yazılabilir. Farklı aralıklardaki olayların stokastik olarak birbirinden bağımsız olduğunu varsayalım. O zaman k aralığında olan olayları aşağıdaki gibi çarpım şeklinde yazabiliriz

$$P\Delta t_k = \prod_{j=1}^{k-1} P_j \Delta t_j P_k \Delta t_k \tag{3.143}$$

$$= \prod_{j=1}^{k-1} [1 - W_T(t_j)\Delta t_j] W_T(t_k)\Delta t_k \tag{3.144}$$

iki tarafın logaritması alınır ve $\Delta t \to 0$ limiti ile denklem düzenlenirse

$$Pdt = W_T(t)[e^{-\int_0^t W_T(t')dt'}]dt \tag{3.145}$$

elde edilir. Hesaplarda kolaylık olması açısından elektronun durumunun değişmediği W_0 oranı ile adlandırılan yeni bir "kendi kendine saçılma (self scattering)" mekanizması tanımlanabilir

$$W_0(E_k) = \Gamma - \sum_{j=1}^{N} W_j(E_k) \tag{3.146}$$

burada

$$\Gamma = \sum_{j=0}^{N} W_j(E_k) \tag{3.147}$$

bir sabittir. $W_T = \Gamma$ olmak üzere

$$P(t)dt = W_T e^{-\int_0^t W_T dt'} dt \tag{3.148}$$

$$P(t)dt = \Gamma e^{-\int_0^t \Gamma dt'} dt \tag{3.149}$$

$$P(t)dt = \Gamma e^{-\Gamma t} dt \tag{3.150}$$

olur. Serbest uçuş zamanı τ aşağıdaki gibi bulunabilir

$$S(\tau) = \int_0^{\tau} \Gamma e^{-\Gamma t} dt = r \tag{3.151}$$

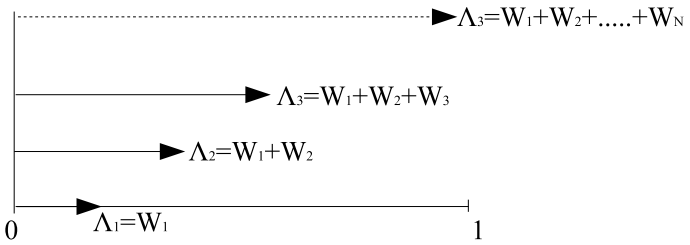
burada r sayısı (0-1) aralığında seçilen düzgün rasgele bir sayıdır. İntegral çözülürse

$$1 - e^{-\Gamma t} = r \Rightarrow \tau = -\ln(1-r)/\Gamma \tag{3.152}$$

olur. Burada r 0 ve 1 arasında rasgele bir sayı olduğundan τ genellikle aşağıdaki gibi yazılır

$$\tau = -\frac{1}{\Gamma}\ln(r) \tag{3.153}$$

Kendi kendine saçılmanın negatif olmaması için Γ, W_T'nin en büyük değerinden daha büyük olmalıdır. Bunun yanında kendi kendine saçılma olaylarını minimize etmek için de mümkün olduğunca küçük olmalıdır.



Şekil 3.9. Γ ile normalize edilmiş saçılma oranlarının kısmi toplamının gösterimi

3.6.2. Saçılma Olaylarının Seçimi

Saçılma mekanizmasının seçilebilmesi için aşağıdaki gibi bir fonksiyon tanımlanabilir

$$\Lambda_n(E_k) = \frac{\sum_{j=1}^{n} W_j(E_k)}{\Gamma}, n = 1,2,.....,N \tag{3.154}$$

Bu değerler saçılma oranlarının kısmi toplamlarının Γ ile normalize edilmiş halidir. Γ toplam saçılma oranı, N saçılma mekanizmalarının toplam sayısıdır. Her bir W_j saçılma olayının gerçekleşme olasılığı W_j/Γ ile orantılıdır. Bu olasılık ile (0-1) aralığında rasgele sayılar arasında bir bağlantı kurulabilir. Bu bağlantı yukarıdaki fonksiyon kullanılarak kurulabilir. Λ_{n-1} ve Λ_n gibi iki artarda gelen fonksiyon arasındaki fark n'inci saçılma mekanizmasını verir. Bundan dolayı E_k enerjili bir elektron için saçılma mekanizmasının seçimi r_2 sayısı (0-1) aralığında rasgele bir sayı olmak üzere,

$$\Lambda_{n-1}(E_k) < r_2 < \Lambda_n(E_k), n = 1,2,.....,N \tag{3.155}$$

koşulu ile verilir (Şekil 3.9.).

3.6.3. Saçılmadan Sonraki Açıların Hesaplanması

Saçılma mekanizmasının bulunmasından sonra saçılmadan sonraki dalga vektörü $\mathbf{k}'$'nün bilinmesi gerekir. Bu vektörün büyüklüğü enerjinin korunumundan bulunabilir.

Saçılma izotropik ise saçılan elektronun yönü saçılmadan sonra her yönde eşit olasılıkla bulunabilir. Üç boyutta olasılık yoğunluğu $P(\theta',\phi')d\theta'd\phi'$, $\mathbf{k}'$ yarıçaplı küre üzerindeki girilebilir durumların sayısı ile orantılıdır. θ' ve ϕ' yarıiletken üzerinde sabitlenmiş (k_x^L,k_y^L,k_z^L) laboratuvar çerçevesine (Şekil 3.10.) göre ölçülen açılar olmak üzere

$$P(\theta,\phi)d\theta d\phi = \frac{dA}{A} = \frac{k'^2\sin\theta d\theta d\phi}{4\pi k'^2} = \frac{1}{4\pi}\sin\theta d\theta d\phi \tag{3.156}$$

yazılabilir. Buna göre

$$P(\theta',\phi') = \frac{1}{4\pi}\int_0^{\phi'}\int_0^{\theta'}\sin\theta d\theta d\phi \tag{3.157}$$

$$= \frac{\phi'}{2\pi}(\frac{1-\cos\theta'}{2}) \tag{3.158}$$

elde edilir. Burada $\frac{\phi'}{2\pi} \in [0,1]$ ve $(\frac{1-\cos\theta'}{2}) \in [0,1]$ olduğundan her ikisi de ayrı ayrı 0 ile 1 aralığındaki rasgele sayılara eşitlenebilir. Birincisi r_1 ikincisi r_2 gibi bir rasgele sayıya eşitlenirse

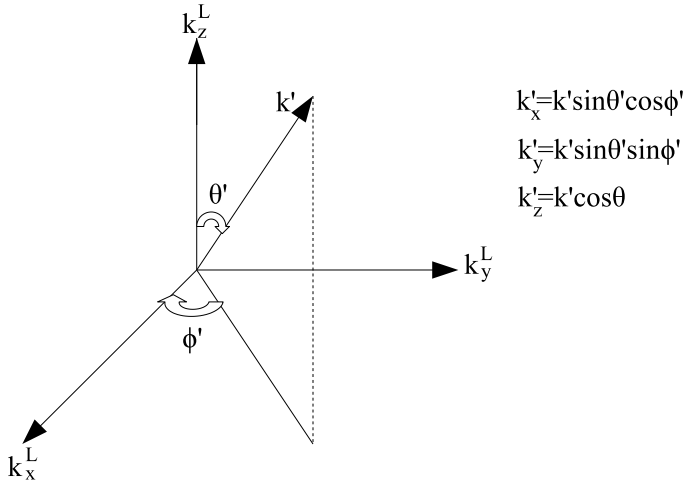
$$\phi' = 2\pi r_1 \tag{3.159}$$

$$\cos\theta' = 1-2r_2 \tag{3.160}$$

yazılabilir.

Saçılma izotropik değilse $\mathbf{k}'$'nü seçilen laboratuvar çerçevesine göre k'_x,k'_y,k'_z terimleri cinsinden açıklamamız gerekir. Saçılmadan sonraki elektron dalga vektörünü, k'_z eksenine paralel alınarak oluşturulacak yeni bir koordinat sisteminde çalışmak çok daha kolay olur. Yeni çerçeve (k_x^L,k_y^L,k_z^L) laboratuvar çerçevesinin k_x ekseninde α kadar k_z ekseninde β kadar döndürülmesi ile elde edilebilir. Bu dönüşümün matrisi aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$A_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\alpha & -\sin\alpha \\ 0 & \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\beta & -\sin\beta & 0 \\ \sin\beta & \cos\beta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{3.161}$$



Şekil 3.10. Laboratuvar çerçevesinde açıların gösterimi

θ ve ϕ açıları, **k**'ne göre **k**$'$'nün polar ve tepe açıları olsun. O zaman (k'_x, k'_y, k'_z) çerçevesindeki **k**'nün bileşenleri Şekil 3.11.'deki gibi olur. Saçılmadan sonra (k^L_x, k^L_y, k^L_z) çerçevesindeki **k**$'$'nün bileşenleri aşağıdaki gibi elde edilebilir

$$\begin{pmatrix} k'_x \\ k'_y \\ k'_z \end{pmatrix} = A^{-1}_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} k' \sin\theta \cos\phi \\ k' \sin\theta \sin\phi \\ k' \cos\theta \end{pmatrix} \tag{3.162}$$

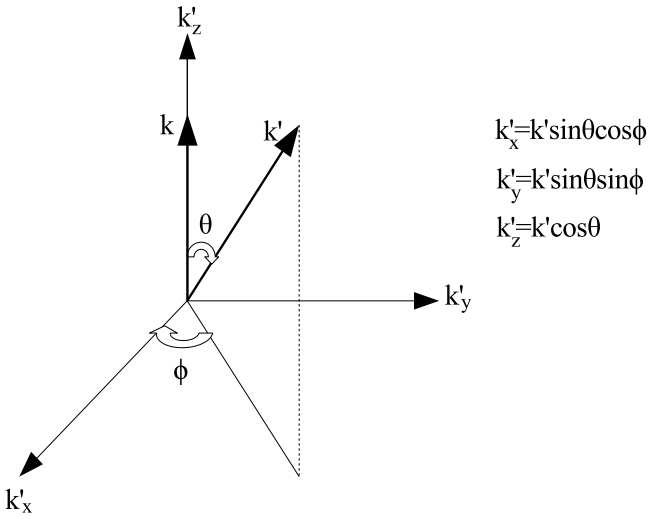
burada $A^{-1}_{\alpha\beta}$ yukarıda verilmiş olan $A_{\alpha\beta}$ ifadesinin tersidir ve aşağıdaki gibi yazılabilir

$$A_{\alpha\beta}{}^{-1} = \begin{pmatrix} \cos\beta & \cos\alpha\sin\beta & \sin\alpha\sin\beta \\ -\sin\beta & \cos\alpha\cos\beta & \sin\alpha\cos\beta \\ 0 & -\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \tag{3.163}$$

matris elemanında bulunan sinüs ve kosinüs açıları ise aşağıda verilmiştir

$$\sin\alpha = \frac{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}{k}, \quad \cos\alpha = \frac{k_x}{k} \tag{3.164}$$

$$\sin\beta = \frac{k_x}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}, \quad \cos\beta = \frac{k_y}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} \tag{3.165}$$



Şekil 3.11. İlk durum dalga vektörüne (**k**) göre son durum dalga vektörünün (**k**′) polar (θ) ve tepe (ϕ) açılarının gösterimi (TOMIZAWA, 1993)

bu sonuçlar kullanılarak saçılmadan sonraki dalga vektörünün bileşenleri aşağıdaki gibi yazılabilir.

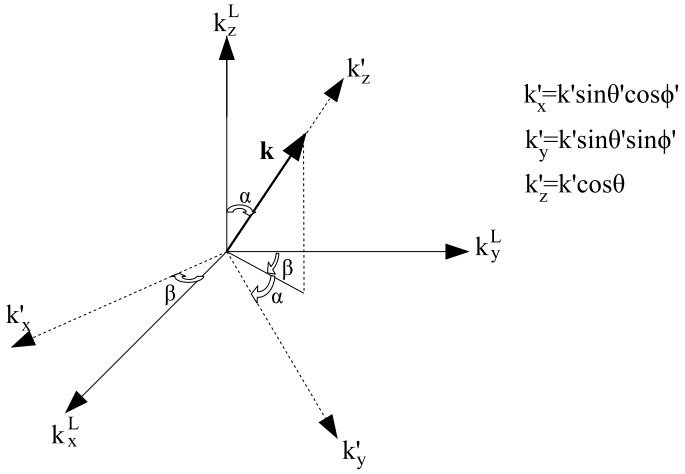
$$\begin{pmatrix} k'_x \\ k'_y \\ k'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{k_y}{\sqrt{k_x^2+k_y^2}} & \frac{k_x k_z}{k\sqrt{k_x^2+k_y^2}} & \frac{k_x}{k} \\ \frac{-k_x}{\sqrt{k_x^2+k_y^2}} & \frac{k_y k_z}{k\sqrt{k_x^2+k_y^2}} & \frac{k_y}{k} \\ 0 & \frac{-\sqrt{k_x^2+k_y^2}}{k} & \frac{k_z}{k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k' \sin\theta\cos\phi \\ k' \sin\theta\sin\phi \\ k'\cos\theta \end{pmatrix} \tag{3.166}$$

Yukarıdaki matris denkleminde (k'_x, k'_y, k'_z) saçılmadan sonraki dalga vektörünün bileşenleridir. k' saçılmadan sonraki dalga vektörünün büyüklüğü olup enerjinin korunumundan bulunabilir. θ ve ϕ açıları saçılmadan önceki dalga vektörüne göre saçılmadan sonraki dalga vektörünün polar ve tepe açılarıdır.

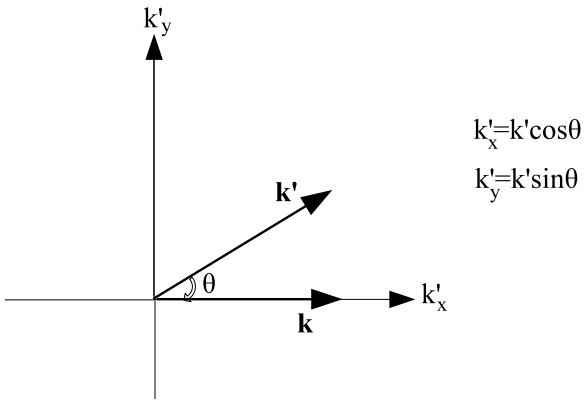
Grafen için ise iki boyutta dönüşüm yapılması gereklidir. İki boyutta dönüşüm matrisi ise aşağıdaki gibi yazılır.

$$A_\alpha = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \tag{3.167}$$

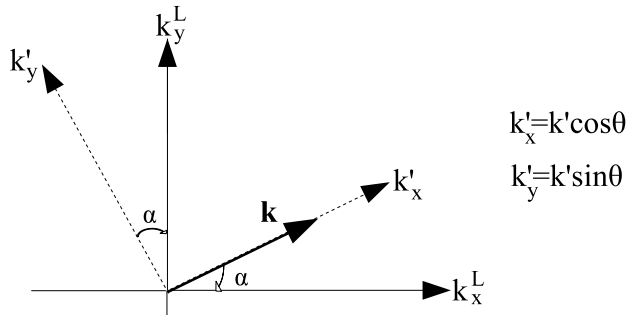
θ açısı, **k**'ne göre **k**′'nün polar açısı olsun. O zaman (k'_x, k'_y) çerçevesindeki **k**'nün bileşenleri Şekil 3.13.'deki gibi olur. Saçılmadan sonra (k_x^L, k_y^L) çerçevesindeki **k**′'nün



Şekil 3.12. k_z-ekseninin başlangıç dalga vektörüne paralel olduğu yeni çerçeve ile laboratuvar çerçevesi arasındaki ilişki



Şekil 3.13. **k**'ne göre **k′**'nün polar açısının gösterimi (iki boyut)



Şekil 3.14. k_x-ekseninin başlangıç dalga vektörüne paralel olduğu yeni çerçeve ile laboratuvar çerçevesi arasındaki ilişki (iki boyut)

bileşenleri aşağıdaki gibi elde edilebilir

$$\begin{pmatrix} k'_x \\ k'_y \end{pmatrix} = A_\alpha^{-1} \begin{pmatrix} k' \cos\theta \\ k' \sin\theta \end{pmatrix} \tag{3.168}$$

burada A_α^{-1} yukarıda verilmiş olan A_α ifadesinin tersidir ve aşağıdaki gibi yazılabilir

$$A_\alpha{}^{-1} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ -\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \tag{3.169}$$

matris elemanında bulunan sinüs ve kosinüs açıları ise aşağıda verilmiştir

$$\sin\alpha = \frac{k_y}{k}, \quad \cos\alpha = \frac{k_x}{k} \tag{3.170}$$

bu sonuçlar kullanılarak saçılmadan sonraki dalga vektörünün bileşenleri aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\begin{pmatrix} k'_x \\ k'_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{k_x}{k} & \frac{k_y}{k} \\ \frac{-k_y}{k} & \frac{k_x}{k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k' \cos\theta \\ k' \sin\theta \end{pmatrix} \tag{3.171}$$

Yukarıdaki matris denkleminde (k'_x, k'_y) saçılmadan sonraki dalga vektörünün bileşenleridir. k' saçılmadan sonraki dalga vektörünün büyüklüğü olup enerjinin korunumundan bulunabilir. θ açısı saçılmadan önceki dalga vektörüne göre saçılmadan sonraki dalga vektörünün polar açısıdır.

3.6.3.1. Grafen için Akustik Fonon Saçılma Açısının Hesabı

Monte Carlo hesaplamalarında kesim 3.4.2'deki akustik fonon saçılma oranının yanında elektronların saçılmadan sonraki son durumlarının da bilinmesi gerekir. Bunu ortaya koyacak bir formül kullanılarak $\vec{k'}$ ve $\vec{k}$ arasındaki polar açı bulunabilir. Denklem (3.85) kullanılarak elektronun θ ve $\theta + d\theta$ arasındaki açılara saçılma olasılığı yazılabilir

$$W(\theta)d\theta = \frac{1}{2\pi^2} \frac{\pi D^2 k_B T}{\sigma \upsilon_s^2 \hbar^2 \upsilon_F} k \frac{1}{2}(1 + \cos\theta) d\theta$$

$$W(\theta)d\theta = \frac{g_s \cdot g_v D^2 k_B T}{8\pi\sigma\upsilon_s^2\hbar^2\upsilon_F} k\frac{1}{2}(1+\cos\theta)d\theta \tag{3.172}$$

$$W(k) = \frac{D^2 k_B T}{4\sigma\upsilon_s^2\hbar^3\upsilon_F^2}E = \frac{g_s \cdot g_v D^2 k_B T}{16\sigma\upsilon_s^2\hbar^3\upsilon_F^2}E \tag{3.173}$$

0 ve θ arasındaki saçılma olasılığı, denklem (3.172)'in 0 ile θ arasında integrali alınarak ve elde edilen sonucun denklem (3.173) e bölünmesi ile bulunabilir. $W(\theta)$ ve $W(k)$'nin oranı olan bir $f(\theta)$ fonksiyonunu aşağıda verildiği gibi tanımlayalım:

$$\begin{aligned} f(\theta) = \frac{W(\theta)}{W(k)} = \frac{1}{W(k)}\int_0^\theta P(\beta)d\beta \quad &= \frac{\frac{g_s g_v D^2 k_B T \frac{E}{\hbar\upsilon_F}}{8\pi\sigma\upsilon_s^2\hbar^2\upsilon_F}\frac{1}{2}\int_0^\theta(1+\cos\beta)d\beta}{\frac{g_s g_v D^2 k_B T E}{8\sigma\upsilon_s^2\hbar^3\upsilon_F^2}} \\ &= \frac{1}{2\pi}\int_0^\theta(1+\cos\beta)d\beta \\ &= \frac{1}{2\pi}(\theta+\sin\theta) \end{aligned} \tag{3.174}$$

$f(\theta)$ sıfırdan büyük ve θ ile monoton artan bir fonksiyon olduğundan, bu ifade 0 ile 1 arasında bulunan rasgele bir sayıya eşitlenerek, θ saçılma açısı bulunabilir.

$$f(\theta) = \frac{1}{2\pi}(\theta+\sin\theta) = r \qquad (r\text{: rastgele seçilen sayı}), \quad r \in [0,1] \tag{3.175}$$

Buradan elde edilen $(\theta+\sin\theta) - 2\pi r = 0$ denklemini sağlayan kökler bir kök bulma metodu, örneğin yarılama metodu ile sayısal olarak bulunabilir.

3.6.3.2. Grafen için Polar Olmayan Optik Fonon Saçılma Açısının Hesabı

Soğurma için saçılma oranının açıya bağımlılığı aşağıdaki gibi idi

$$W(\theta) = \frac{D_0^2}{4\pi\sigma\omega_0}\frac{(n_0)(E+\hbar\omega_0)}{2(\hbar\upsilon_F)^2}\int_0^{2\pi}(1+\cos\theta)d\theta$$

$$W(k) = \frac{D_0^2}{4\sigma\omega_0(\hbar\upsilon_F)^2}(n_0)(E+\hbar\omega_0)$$

0 ve θ arasındaki bir açıya saçılma olasılığı aşağıdaki gibi bir $f(\theta)$ fonksiyonu tanımlayarak yapılabilir.

$$f(\theta) = \frac{W(\theta)}{W(k)} = \frac{1}{W(k)} \int_0^\theta P(\beta) d\beta \qquad = \frac{1}{2\pi} \int_0^\theta (1+\cos\beta) d\beta$$
$$= \frac{1}{2\pi}(\theta + \sin\theta) \tag{3.176}$$

$f(\theta)$ (0,1) aralığında ve θ ile monoton artan bir fonksiyon olduğundan, bu ifade 0 ile 1 arasında bulunan rasgele bir sayıya eşitlenerek, θ saçılma açısı bulunabilir.

$$f(\theta) = \frac{1}{2\pi}(\theta + \sin\theta) = r \qquad (r: \quad \text{rastgele seçilen sayı}), \quad r \in [0,1]$$

Verilen bir r rasgele sayısı için $(\theta + \sin\theta) - 2\pi r = 0$ denklemini sağlayan θ değeri, sayısal olarak kök bulma yöntemlerinin biri kullanılarak hesaplanabilir.

Benzer şekilde yayınım için de aynı işlemler tekrarlanırsa, soğurma için bulunan denklemin aynısı yayınım için de bulunur.

3.6.3.3. Grafen için Yüklü Safsızlık Saçılma Açısının Hesabı

Yüklü safsızlık saçılması için de 3.39 denkleminin tek parçacık için olan formu kullanılarak θ ve $\theta + d\theta$ arasındaki açıların saçılma olasılığı yazılabilir

$$W(\theta)d\theta = \frac{(n_i)k}{2\pi\hbar^2 \upsilon_F} |V(2k\sin\frac{\theta}{2})|^2 (1+\cos\theta) d\theta \tag{3.177}$$

0 ve θ arasındaki saçılma olasılığı, yukarıdaki denklemin 0 ile θ arasında integrali alınarak ve elde edilen sonucun aşağıdaki denkleme bölünmesi ile bulunabilir.

$$\frac{1}{\tau_i} = W(k) = \frac{(n_i)E}{\pi\hbar^3 \upsilon_F^2 k} \int_0^{2k} |V(\mathbf{q})|^2 \left[1 - \left(\frac{q}{2k}\right)^2\right]^{1/2} dq \tag{3.178}$$

$$\frac{W(\theta)}{W(k)} = \frac{1}{W(k)} \int_0^{\theta} P(\beta) d\beta \tag{3.179}$$

$W(\theta)/W(k)$ sıfırdan büyük (0,1) aralığında ve θ ile monoton artan bir fonksiyon olduğundan, bu ifade 0 ile 1 arasında bulunan rasgele bir sayıya eşitlenerek, θ saçılma açısı bulunabilir. Ancak bu durum için analitik bir fonksiyon olmadığından, elektronun olası her enerji değeri için bir $f(\theta) - \theta$ tablosu oluşturulur. Rasgele sayılardan faydalanarak verilen bir enerji değerine karşılık gelen tablodan olası bir saçılma açısı seçilir.

3.6.3.4. Grafen için Yüzey Pürüzlülüğünden Kaynaklanan Saçılma Açısının Hesabı

Yüzey pürüzlülüğünden kaynaklanan saçılma açısının hesabı da yüklü safsızlık saçılmasında olduğu gibi, işlemlerin sayısal olarak yapılması dolayısıyla, polar açının olası değerleri yine sayısal olarak listelenebilir. 3.139 denkleminin 3.138 denklemine oranı kullanılarak θ saçılma açısı bulunabilir.

3.6.4. Hareket Denklemleri

Monte Carlo tekniği düzgün bir elektrik alan altında, yarıiletkendeki taşıyıcı hızının hesabında da kullanılır. Bu kısımda taşıyıcı hızı ve enerji hesabında kullanılan temel denklemler verilecektir. k-uzayında her bir hacim elemanı içindeki bir elektronun, uçuş zamanına ait bilgiler saklandığında, ortalama taşıyıcı hızı ve enerjinin hesaplanabileceği dağılım fonksiyonları oluşturulabilir. Bu işlem k-uzayında çok sayıda veri saklanması gerektirdiğinden büyük oranda hafıza gerektirir. Çok hafıza gerektiren bu işlemi yapmak yerine, her bir elektronun uçuşu doğrudan izlenerek, hız ve enerjinin ortalama değerleri hesaplanabilir ve sonrasında tüm uçuşlar üzerinden bir ortalama alınabilir.

Sabit bir elektrik alanı altında ani taşıyıcı hızı (grup hızı) aşağıdaki gibi yazılabilir

$$v_g = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \Delta_k E_v(k) \tag{3.180}$$

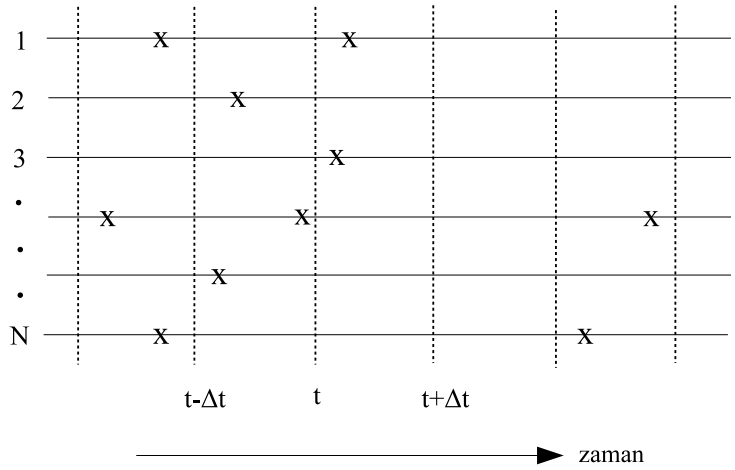
$$\frac{d\mathbf{k}}{dt} = \frac{-e\mathbf{F}}{\hbar} \tag{3.181}$$

burada **F** elektrik alanıdır. Bunlar yarı-klasik hareket denklemleri olarak bilinir.

3.7. Ensemble Monte Carlo Simülasyonu

Bir önceki bölümde tartışıldığı gibi tek parçacık Monte Carlo metodu özellikle statik ve düzgün bir elektrik alan altında kararlı durum taşıyıcı geçirgenliği gibi geçirgenlik hesapları için çok kullanışlı bir yöntemdir. Bununla beraber ensemble Monte Carlo metodu taşıyıcı difüzyonunun analizi, homojen olmayan bir alanda taşıyıcı geçirgenliği, taşıyıcıların kararsız davranışı vb gibi birçok değişik amaç için kullanılabilir. Böyle bir ensemble Monte Carlo metodu külçe (bulk) kristaldeki taşıyıcı geçirgenliğine uygulanabilir. Ensemble Monte Carlo metodu küçük bir Δt zaman artışı esnasında birçok parçacığın hız ve konumunun eş zamanlı olarak hesaplanmasını temel alır. Metot dinamik olduğundan kararlı duruma ulaşıncaya kadar hesaplamalara devam edilirse kararlı durum problemlerine de uygulanabilir. Şekil 3.15. bir ensemble Monte Carlo hesabının sistematik akış diyagramını göstermektedir. Yatay çizgiler zaman ekseni üzerindeki parçacıkların yörüngelerini gösterir. Eksenin sağ tarafına ilerledikçe zaman artmaktadır. Dikine kesikli çizgiler çok parçacık sisteminin gözlendiği zamanları gösterir. İki komşu kesikli çizgi arasındaki aralık, iki gözlem arasındaki Δt zaman artışına bağlıdır. Yatay çizgiler üzerindeki her bir **x** saçılmanın oluştuğu zamanı gösterir. Böylece iki komşu **x** arasındaki mesafe serbest uçuş zamanını gösterir. Tüm parçacık sisteminin gözlenebilmesi için gerçek uzay ve momentum uzayındaki parçacık konumlarının her bir Δt zamanı için hesaplanması gerekir. Uygulanan elektrik alan kararlı olsa bile değişen elektron enerjilerinin zamanla güncellenebilmesi için Δt zaman artışı yeterince küçük (fs mertebesinde) seçilmelidir.

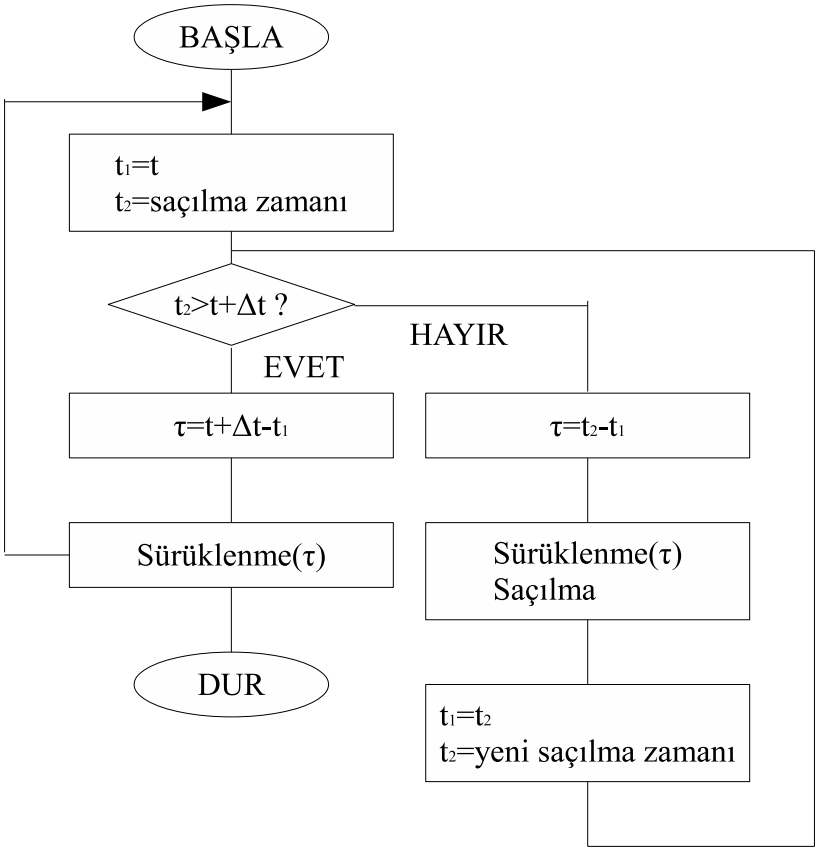
Ensemble Monte Carlo metodu sürüklenme ve saçılma işlemlerini içeren iki alt programla yapılabilir. Tek parçacık Monte Carlo metodu için yazılan alt programlar küçük değişikliklerle ensemble Monte Carlo metodu için de kullanılabilir. En önemli fark ensemble Monte Carlo hesabının tüm parçacıklar için Δt zamanında saçılma ve sürüklenme hesaplarının tekrarlanmasını gerektirmesidir. Δt zaman aralığında (t ve $t+\Delta t$ arası olsun) bulunan bir parçacığın hareketine bakılırsa saçılma olaylarının rasgele olduğu görülür. Bundan dolayı Δt zamanında parçacığın kaç kez saçılacağı bilinemez. t'den



Şekil 3.15. Ensemble Monte Carlo simülasyonunun zaman akış diyagramı. Yatay düz çizgiler her parçacığın yolunu gösterirken dikey kesikli çizgiler modelleme zamanını gösterir. Düz çizgiler üzerindeki **x** işareti ise saçılma zamanını gösterir.

$t+\Delta t$'ye kadar olan böyle bir hareketi simüle edebilmek için t zamanındaki konum ve momentum vektörlerinin bilindiği ve t'den sonraki ilk saçılma zamanı t_s'nin rasgele bir sayıyla bulunabileceği varsayılsın. Eğer t_s, $t+\Delta t$'den büyükse o zaman parçacık Δt süresi kadar sürüklenir. t_s, $t+\Delta t$'den küçükse o zaman parçacık $t+\Delta t$'den önce saçılır. Bu durumda parçacık $t_s - t$ zamanı kadar sürüklenir ve t_s zamanında saçılır. O zaman yeni saçılma zamanı t_s diğer bir rasgele sayıyla bulunmalıdır. Bunun ardından yeni t_s değerinin $t+\Delta t$ değerinden büyük olup olmadığına bakılır ve bu adımlar simülasyon sonuna kadar tekrarlanır. Ensemble Monte Carlo hesabı için burada anlatılan sırayı takip eden bir alt program Şekil 3.16.'da gösterilmiştir.

Elektron geçirgenlik aygıtları olası yüksek frekans ve yüksek hız uygulamalarından dolayı ilginç olduğundan çok çalışılmaktadır. Bir aygıt içindeki elektronların geçiş zamanı elektronların durulma zamanı ile kıyaslanabilir yada ondan daha küçük ise aygıta gelen soğuk (cold) elektronlar aygıttan geçişleri sırasında kararlı durum hızına ulaşamayabilirler. Bundan dolayı tek parçacık Monte Carlo yöntemi ile hesaplanan hız-alan eğrileri küçük ölçekteki aygıtlardaki elektronların geçirgenliği için kullanılamaz. Soğuk elektronun aygıta enjeksiyonundan sonra oluşan geçiş olayları ortalama hızın doyum hızına nazaran ani bir yükseliş (overshoot) göstermesine neden olur. Bu olgu ensemble Monte Carlo metodu ile geniş bir alanda çalışılmıştır.



Şekil 3.16. Ensemble Monte Carlo programının akış diyagramı

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

4.1. Grafen

Grafenin elektronik yapısı elektronların rölativistik parçacıkları taklit edecek şekilde davranmasına neden olur. Safsızlıklar ve yapısal bozulmaların (disorder) olmadığı mükemmel bir grafen katmanında Fermi enerjisi, girilebilir elektronik durumların yoğunluğunun sıfıra gittiği, 'Dirac noktası' olarak bilinen konumdadır. Ancak kaçınılmaz olan yapısal bozulmaların (disorder) varlığında teori, eşit olasılıkla elektron ve deşik bakımından zengin gölcük (puddle) şeklinde bölgelerin oluşabileceğini gösterir. Düşük elektron yoğunluklarında ($n \leq 10^{12}$ cm^{-2}) deneysel olarak gözlenen grafen iletkenliğinin doyuma ulaşması durumunun (grafene voltaj uygulanmadan bile gözlenen minimum iletkenlik durumunun) yüklü safsızlıkların varlığından kaynaklandığı düşünülmektedir. Büyük ölçeklerde safsızlıkların varlığı kaçınılmazdır. İki boyutlu taşıyıcı sistemlerinde, iki boyutlu yoğunluk dalgalanmalarının, ortalama yoğunluktan büyük olması durumunda, yoğunluğun homojen olmamasına neden olur ve sistemde sıfır voltajda bile sonlu bir iletkenliğin üretildiği rasgele iki boyutlu elektron-deşik gölcüklerinin oluşmasına neden olur. Safsızlıklardan kaynaklanan yük dağılımlarının homojen olmaması durumu (elektron-deşik gölcükleri) grafende voltaj uygulanmadan bile gözlenen minimum iletkenlik durumunun kaynağı olarak gösterilmektedir (HWANG vd., 2007). Nitekim J. Martin ve ark.'nın 2007 yılına ait yayınından bu elektron ve deşik gölcüklerinin varlığının gözlendiği bilinmektedir (MARTIN vd., 2008).

Aşağıda grafenin elektronik taşınım özelliklerinin çeşitli malzeme ve ortam şartlarına nasıl bağlı olduğu detaylı bir şekilde incelenmiştir. Bu tezde kullanılan malzeme parametrelerinin tamamı Çizelge 4.1'de verilmiştir.

4.1.1. Kimyasal Potansiyel

Grafenin elektron taşınım özelliklerini inceleyebilmek için grafen içinde hareket eden taşıyıcıların saçılmasına neden olan mekanizmaların bilinmesi gerekir. Bu tezde ele alınan saçılma mekanizmaları; akustik, polar olmayan optik fonon saçılmaları, yüklü safsızlık saçılması, yüzey pürüzlülüğünden kaynaklanan saçılma mekanizması ve

yüzey polar optik fonon saçılmasıdır. Yüklü safsızlık saçılması ve yüzey polar optik fonon saçılmaları elektron yoğunluğuna ve dolayısı ile kimyasal potansiyele ve sıcaklığa bağlıdırlar. Bu nedenle kimyasal potansiyelin hesaplanması gerekir. Kimyasal potansiyel ise toplam elektron yoğunluğunun korunumundan hesaplanabilir (HWANG vd., 2009). Bu eşitlik

$$\frac{1}{2}\left(\frac{T_F}{T}\right)^2 = \{F_1(\mu\beta) - F_1(-\mu\beta)\}$$

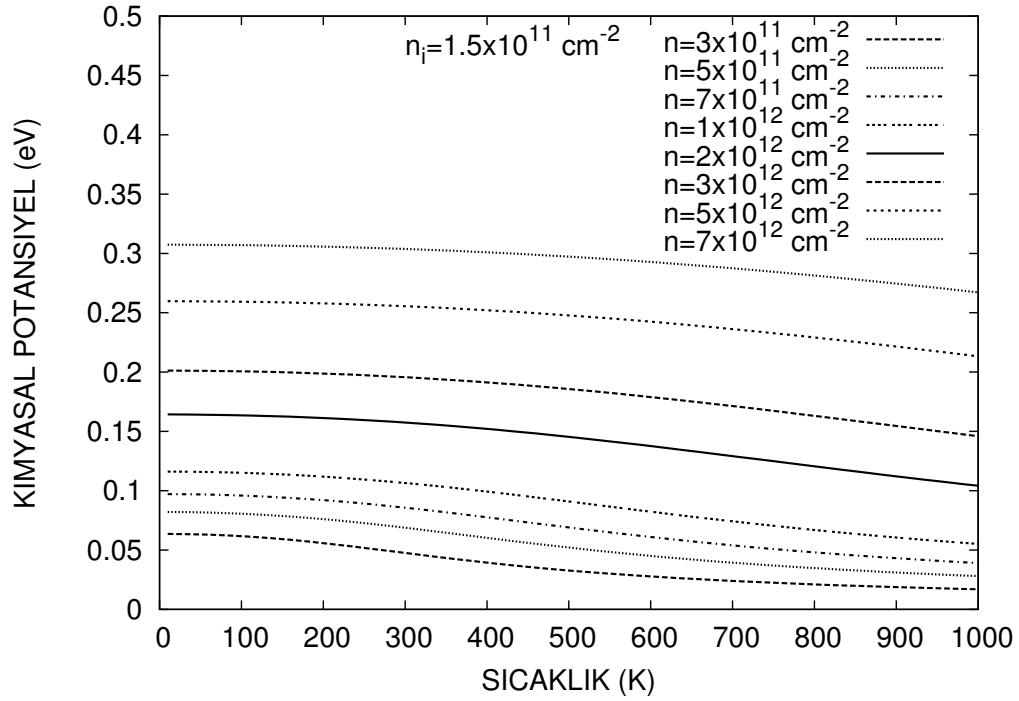
ile verilir. Burada $F_n(x) = \int_0^\infty \frac{t^n dt}{1+e^{t-x}}$ şeklindeki Fermi integralleridir. Grafen için, n elektron konsantrasyonu olmak üzere $k_F = \sqrt{\pi n}$ ile verilir. Böylece $E_F = \hbar v_F k_F = k_B T_F$ yazılabilir. Bu fadeler yukarıdaki kimyasal potansiyel denklemine yerleştirilirse elektron yoğunluğu için

$$n = \frac{2(k_B T)^2}{\pi(\hbar v_F)^2}\{F_1(\mu\beta) - F_1(-\mu\beta)\}$$

ifadesi elde edilir. Bu denklemin verilen bir sıcaklık ve elektron yoğunluğunda kökleri bulunabilir. Bulunan kökler ise kimyasal potansiyelin kendisini verir. Burada Fermi integraleri sayısal olarak hesaplanmış ve kökler yarılama metodu kullanılarak bulunmuştur. Şekil 4.1.'de kimyasal potansiyelin sıcaklıkla değişimi farklı elektron konsantrasyonları için görülmektedir. Şekilde görüldüğü gibi elektron konsantrasyonu arttıkça kimyasal potansiyel (enerji) artmaktadır. Sıcaklıkla değişim ise çok azdır.

4.1.2. Polarizasyon Fonksiyonu

Malzeme içerisindeki serbest elektronların bir kısmı pozitif yüklü safsızlıklar tarafından çekilerek yüklü safsızlıkların saçılmadaki etkileri indirgenmiş olur. Bu duruma kısaca perdeleme denir. Perdeleme etkisinin varlığında incelenen saçılma mekanizmaları Bölüm 3.5'te verilmiştir. Bu kısımda perdelemede rol alan polarizasyon fonksiyonunun farklı elektron konsantrasyonu ve sıcaklıklar için dalga vektörü ile değişimi incelenmiştir (Şekil 4.2., Şekil 4.3.). Sistemdeki elektron yoğunluğunun artmasıyla perdeleme artmış olup saçılma etkisini de azaltmıştır. Heteroeklemlerde oluşan iki boyutlu elektron gazı

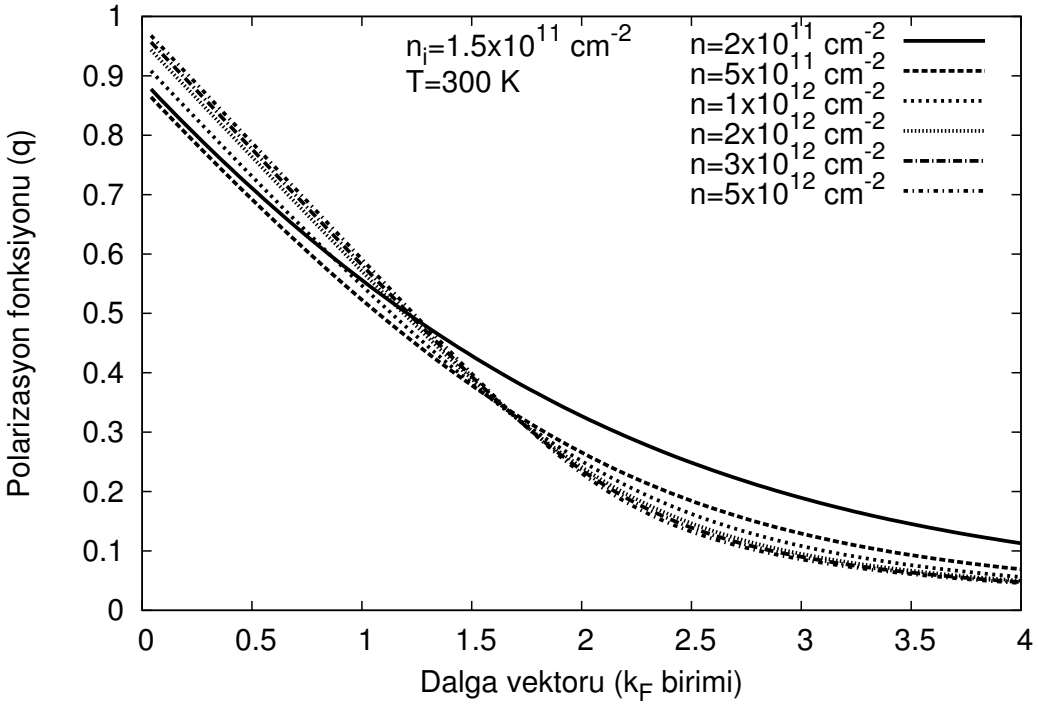


Şekil 4.1. Değişik elektron konsantrasyonlarında sıcaklığın bir fonksiyonu olarak kimyasal potansiyel

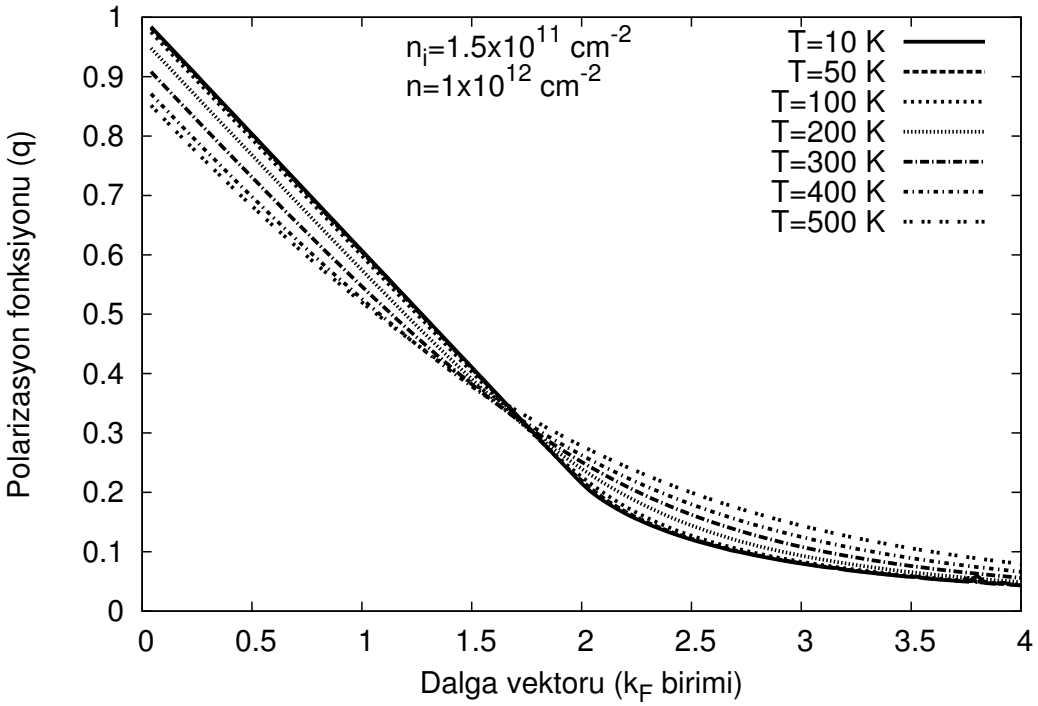
için polarizasyon fonksiyonu özellikle düşük sıcaklıklarda $q = 2k_F$ civarında tekilliğe sahiptir. Grafende de bariz bir tekillik olmamakla birlikte bu noktadan itibaren sabit bir değere sahip olmaya başlamaktadır. Sıcaklık arttıkça da azalmakta olup bu durumun saçılmaya etkisinin çok fazla olmadığı görülmüştür.

4.2. Saçılma Mekanizmaları

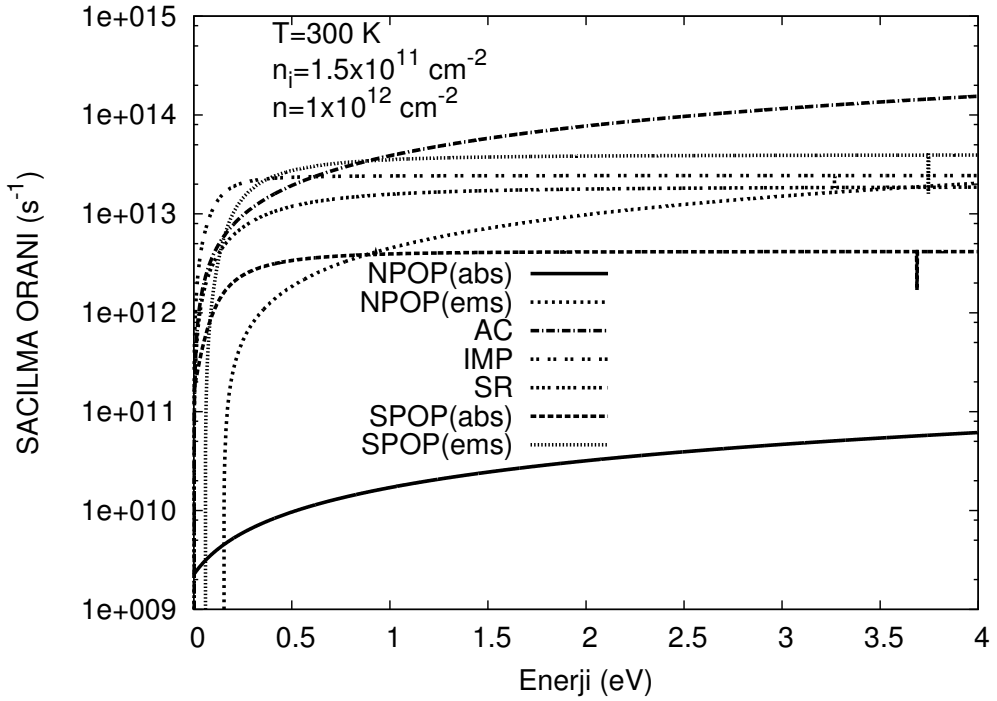
Saçılma mekanizmaları farklı malzeme ve ortam şartları için incelenmiştir. Bunlar saf grafen ve kirli grafen durumları olmak üzere ikiye ayrılabilir. Saf grafen olarak adlandırdığımız alt taban malzemesi olmaksızın asılı grafen durumu olup, kirli grafen durumu ise safsızlık saçılması (IMP), yüzey pürüzlülüğünden (SR) kaynaklanan saçılma ve yüzey polar fonon (SPOP) saçılma mekanizmalarının eklendiği durumları içerir. Oda sıcaklığında tüm saçılma mekanizmalarının bir arada olduğu bir kirli grafen durumuna ait saçılma oranları elektron enerjisinin bir fonksiyonu olarak Şekil 4.4.'de görülmektedir. Bu şekilden tüm saçılma mekanizmalarının genel mertebeleri oda sıcaklığında kıyaslanabilir. Şekilden de görüldüğü gibi ortalama saçılma oranı 10^{13} s^{-1} mertebesindedir.



Şekil 4.2. Polarizasyon fonksiyonunun oda sıcaklığında değişik elektron konsantrasyonlarında dalga vektörü ile değişimi



Şekil 4.3. Polarizasyon fonksiyonunun değişik sıcaklıklarda dalga vektörü ile değişimi

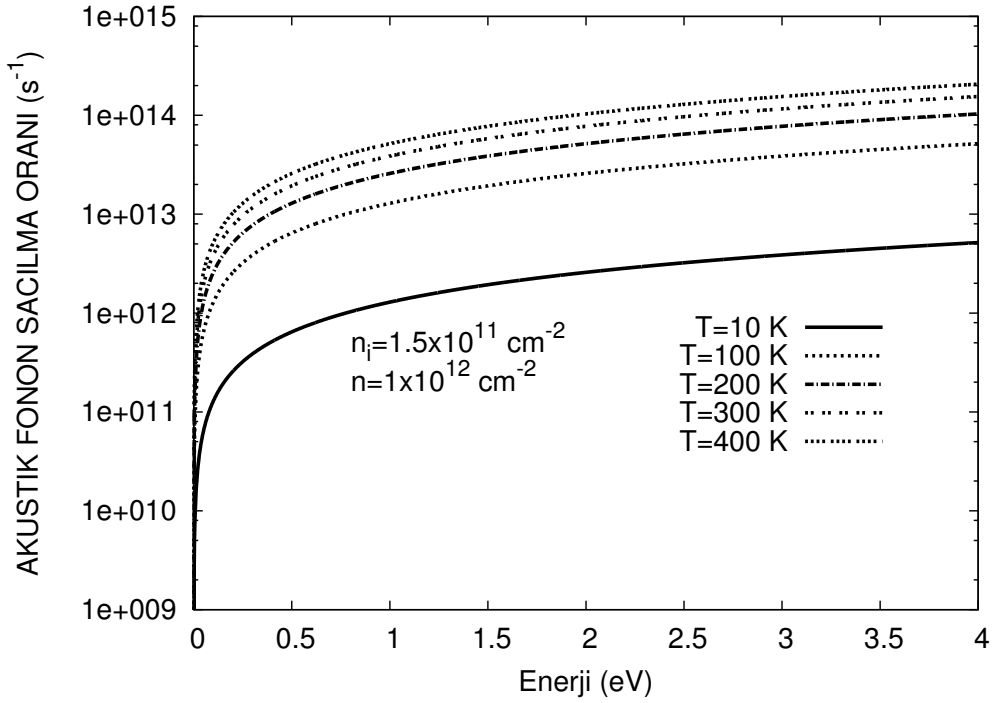


Şekil 4.4. T=300 K'de bütün saçılma mekanizmalarına karşılık gelen saçılma oranları

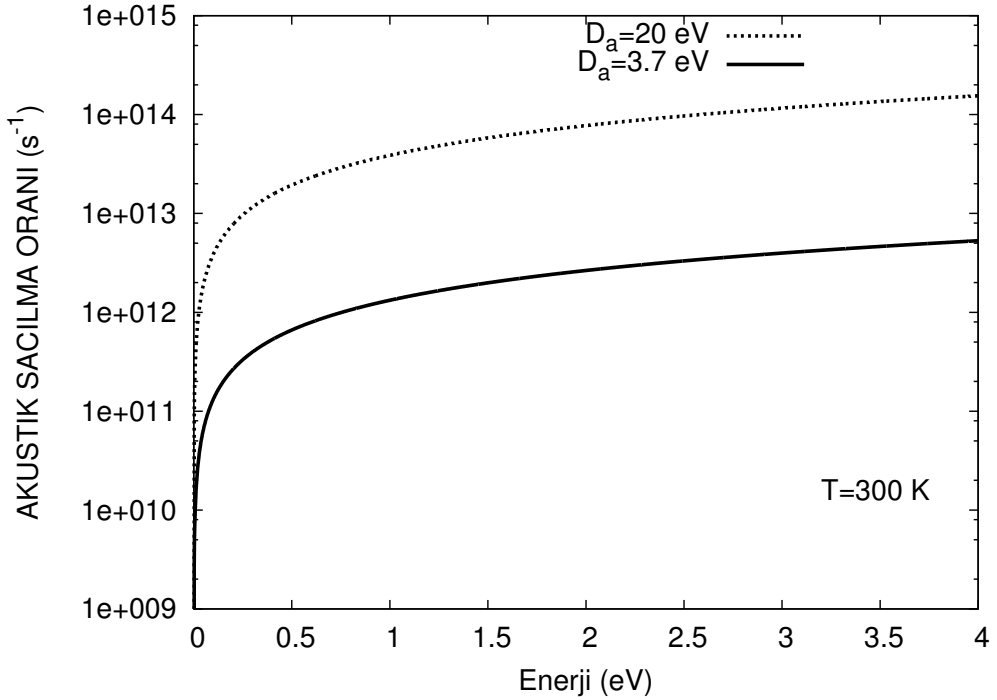
4.2.1. Akustik Fonon Saçılması

Elastik olarak ele alınan akustik fonon saçılması ise elektron enerjisi ve sıcaklık ile doğru orantılı olduğundan sıcaklık değişimi oldukça etkili bir parametredir (Denklem 3.88). Yeterince yüksek sıcaklıklarda elektron-akustik fonon etkileşimi saf grafen durumunda önem arz eder. Şekil 4.5.'de akustik fonon saçılmasının $D_a = 20$ eV deformasyon potansiyel değeri kullanılarak farklı sıcaklıklar için elde edilen değerleri verilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi akustik fonon saçılması sıcaklıkla doğru orantılı olarak artmıştır.

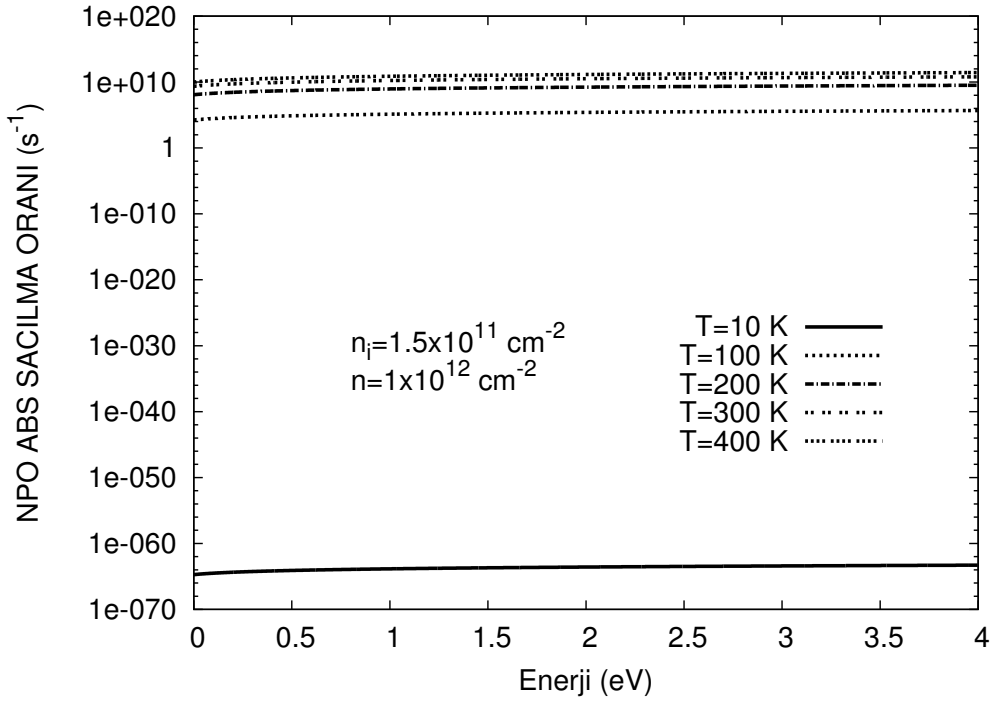
Akustik deformasyon sabiti için literatürde (3.7 - 30) eV aralığında değerler bulunmaktadır. Bu sabitin etkisini göstermek üzere Şekil 4.6.'da D_a'nın iki ayrı değeri için açılma oranları verilmiştir. Bu şekilden akustik deformasyon potansiyel sabitinin ne derece önemli bir parametre olduğu görülmektedir. Çünkü akustik fonon saçılma oranı bu sabitin karesi ile orantılıdır.



Şekil 4.5. $n = 1 \times 10^{12}$ cm^{-2} için farklı sıcaklıklarda akustik fonon saçılma oranları



Şekil 4.6. $n = 1 \times 10^{12}$ cm^{-2} alınarak farklı deformasyon potansiyel sabitleri için akustik fonon saçılma oranları



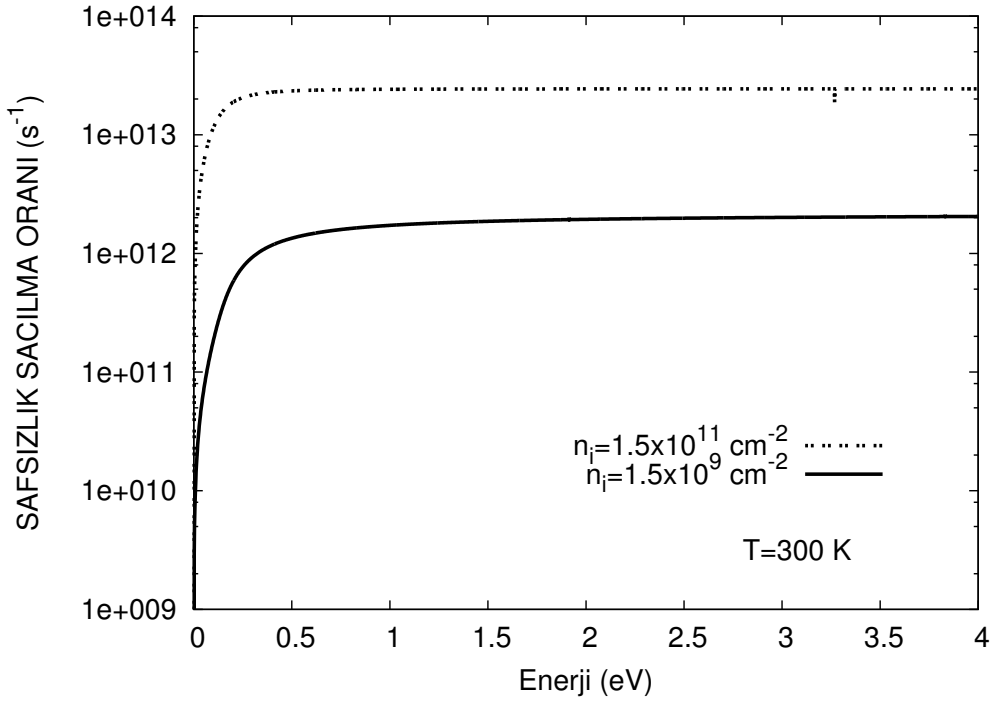
Şekil 4.7. $n = 1 \times 10^{12}$ cm^{-2} için farklı sıcaklıklarda nonpolar optik fonon soğurma saçılma oranları

4.2.2. Polar olmayan Optik Fonon Saçılması

İnelastik olarak ele alınan polar olmayan optik fonon saçılmasında elektron yeterince yüksek enerjiye ulaştığında ($E \geq \hbar\omega_0$) yayınım meydana getireceğinden bu enerji değerine kadar elektron bu mekanizmadan saçılmaya uğramaz. Şekil 4.4.'den oda sıcaklığındaki NPOP yayınım oranı görülebilir ve bu değer sıcaklığa bağlı olmayıp, NPOP soğurma oranı sıcaklığa bağlıdır. Şekil 4.7.'de NPOP soğurmasının sıcaklıkla değişimi verilmektedir. Şekilden görüldüğü gibi soğurma oranının etkisi çok yüksek mertebelerde değildir. Fonon yayınımı ile ilgili saçılma oranı 10^{12-13} s^{-1} mertebesinde iken, fonon soğurma olayına karşılık gelen saçılma ancak 10^{10} s^{-1} mertebesindedir ve bu belirli bir enerjinin üzerinde bu çalışmada göz önüne alınan bütün saçılma oranlarından daha küçüktür.

4.2.3. Yüklü Safsızlık Saçılması

Yüklü safsızlık saçılmasında safsızlıklar grafenin kendinden kaynaklandığı gibi alttabandan da kaynaklanabilir. Safsızlık saçılma oranı safsızlık yoğunluna bağlıdır ve

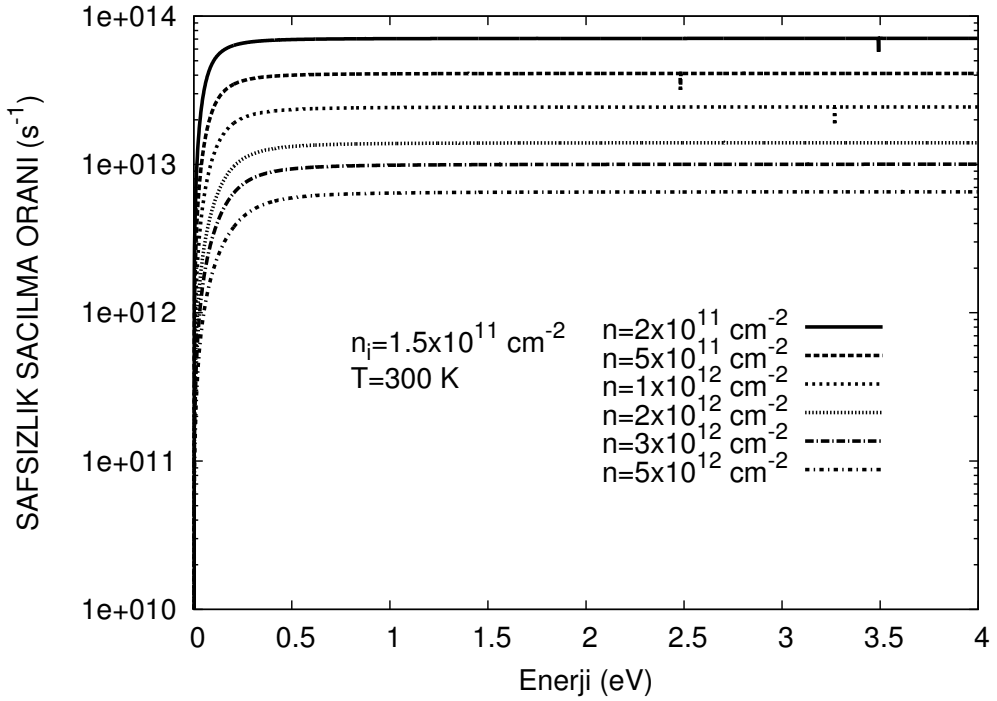


Şekil 4.8. $T = 300$ K'de farklı safsızlık konsantrasyonlarında yüklü safsızlık saçılma oranları

safsızlık arttıkça artar (Şekil 4.8.). Elektron yoğunluğu arttırıldığında ise polarizasyon faktörünün öngördüğü gibi saçılmanın azaldığı (Şekil 4.9.) ve sıcaklıkla fazla bir değişim olmadığı görülmüştür. Alttabandan olan uzaklığa da bağlı olan bu mekanizma kullanılan alttaban malzemesine göre de (alttaban dielektrik sabiti) değişiklik gösterir. Bu tezde alttaban olarak dielektrik sabiti $\kappa = 3.9$ olan SiO_2 ve alttaban uzaklığı olarak $d = 1$ nm kullanılmıştır. Ayrıca safsızlık saçılmalarının safsızlık miktarına bağlı olarak düşük enerjilerde ve sıcaklıklarda da etkili olduğu, yüksek sıcaklık ve enerjilerde ise fononlardan kaynaklanan saçılmalardan da daha etkili olabildiği görülmüştür.

4.2.4. Yüzey Pürüzlülük Saçılması

Yüzey pürüzlülük saçılması alttabanın topografisinden kaynaklanabileceği gibi yüzey dalgalanmalarından da meydana gelebilir. Grafen yüzeyinin tamamen düzlemsel olmadığı, çeşitli genliklerdeki küçük dalgacıklardan oluştuğu bilinmektedir. Bu saçılma mekanizmasında eksponansiyel otokorelasyon fonksiyonu kullanılmıştır. Ara yüzey kare ortalama kök (rms) büyüklüğü olarak Δ_e =5 $\AA$ ve pürüzlü yüzeyin korelasyon (etkileşim) uzunluğu olarak da $L_e = 1$ nm kullanılmıştır. İndüklenen taşıyıcı yoğunluğu n_s ise

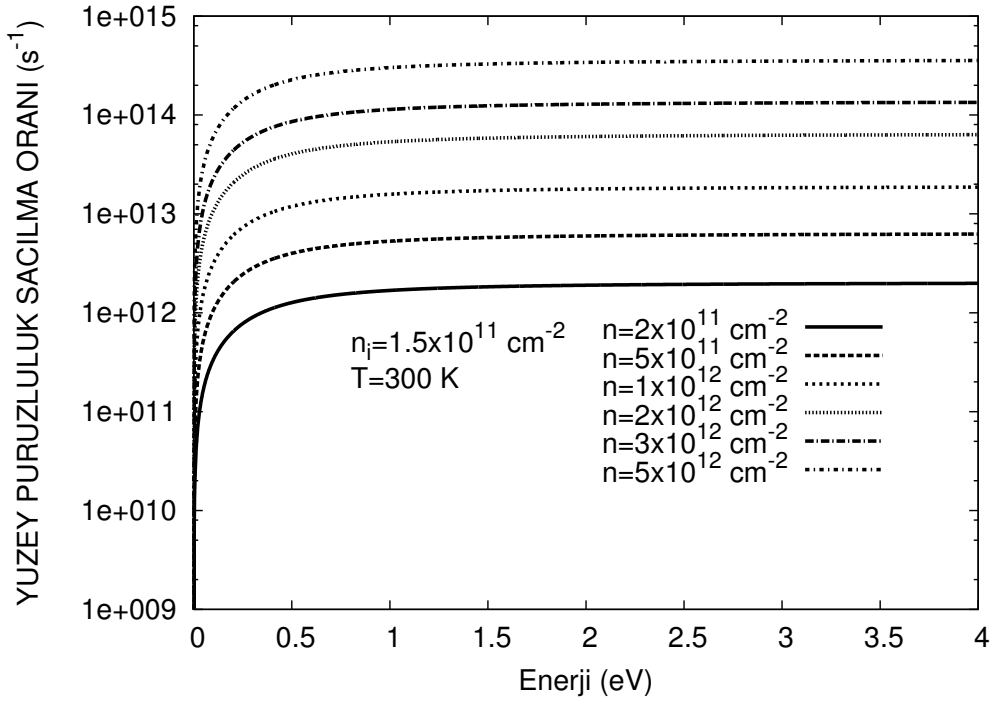


Şekil 4.9. $T = 300$ K'de farklı elektron konsantrasyonlarında yüklü safsızlık saçılma oranları. Elektron konsantrasyonu arttıkça perdeleme arttığından, yüklü safsızlıklardan kaynaklanan saçılma oranı azalır.

safsızlık miktarına ek olarak elektron konsantrasyonunun belirli bir yüzdesi baz alınarak kullanılmıştır. Aslında Denklem 3.139'dan de görüldüğü gibi saçılma oranı ($\Delta_e L_e n_s$) çarpımının karesi ile orantılıdır. Bu nedenle aynı saçılma oranı Δ_e, L_e ve n_s'nin değişik oranları için elde edilebilir. O nedenle bu mekanizma elektron konsantrasyonuna bağlı olarak elektron konsantrasyonu arttıkça artar (Şekil 4.10.) ve sıcaklığa bağımlı değildir.

4.2.5. Yüzey Polar Optik Fonon Saçılması

Yüzey polar optik fonon saçılma mekanizmasının iyonik yapısından dolayı saçılma oranı elektron yoğunluğuna dolayısıyla perdeleme etkisine bağlıdır. Ayrıca saçılma mekanizması bir fonon saçılması olduğundan sıcaklığa da bağlıdır. Yüzey polar fonon soğurma saçılma oranının farklı sıcaklıklardaki değerleri $n = 1 \times 10^{12}$ cm^{-2} için Şekil 4.11.'de ve $T = 300$ K için farklı elektron konsantrasyonlarındaki değerleri Şekil 4.12.'den görülmektedir. Yüzey polar fonon yayınım saçılma oranı sıcaklıkla az değişim gösterirken elektron konsantrasyonuyla değişimi Şekil 4.13.'den görüldüğü gibi elektron konsantrasyonu ile azalmaktadır. Yüzey polar optik fonon saçılması hesabında

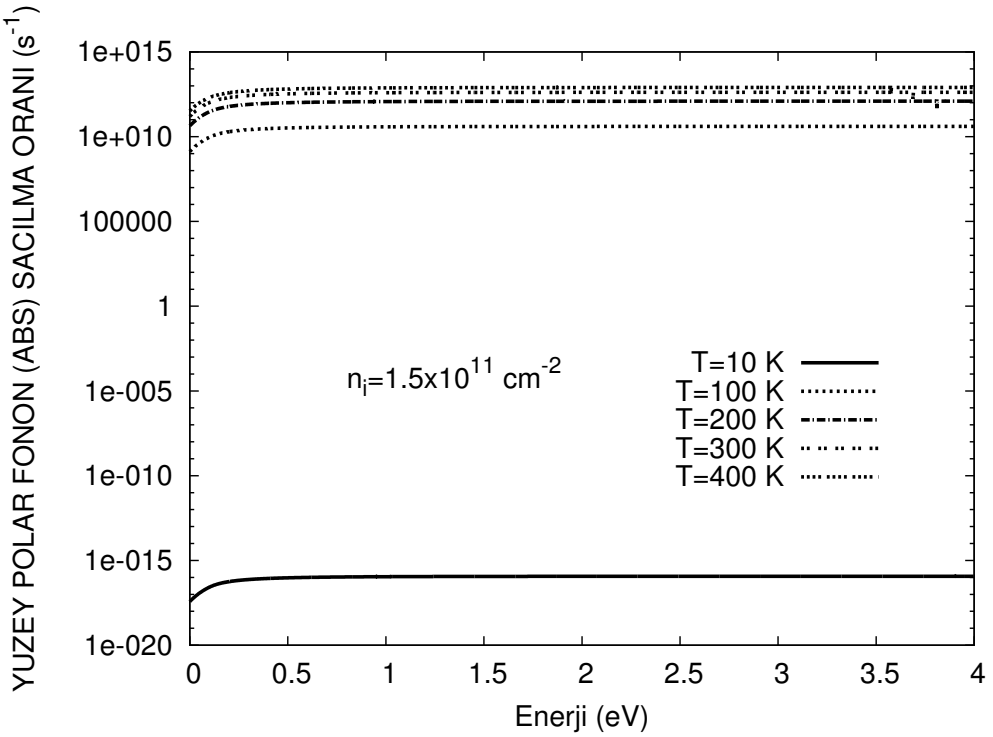


Şekil 4.10. $T = 300$ K'de farklı elektron konsantrasyonlarında yüzey pürüzlülük saçılma oranları. Elektron konsantrasyonu ve safsızlık oranı arttıkça saçılma oranları da artar, çünkü yüzeydeki yüklerin oluşturduğu yüzeye dik elektrik alanın şiddeti artar.

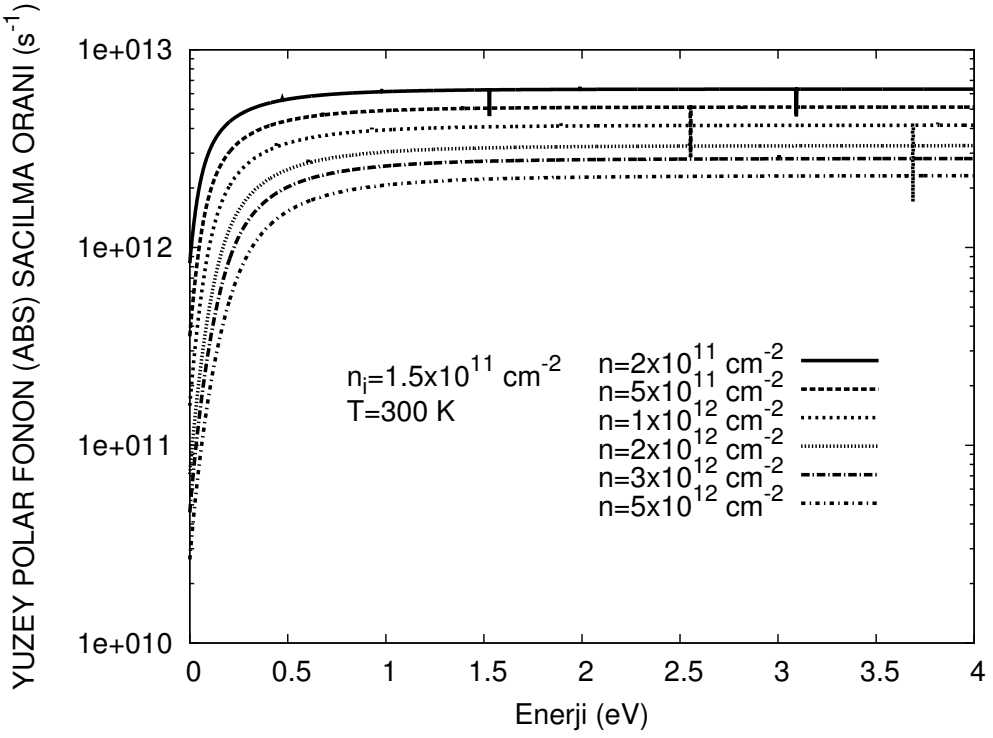
perdelemenin etkisi de göz önüne alınmıştır. Elektron konsantrasyonu ile azalmasının sebebi dielektrik fonksiyonunun elektron konsantrasyonu ile değişmesinden kaynaklanır. Bu şekillerden yayınımdan kaynaklanan saçılmanın soğurmaya göre bir mertebe daha büyük olduğu görülebilir.

4.3. Sürüklenme Hızı ve Mobilite Hesabı

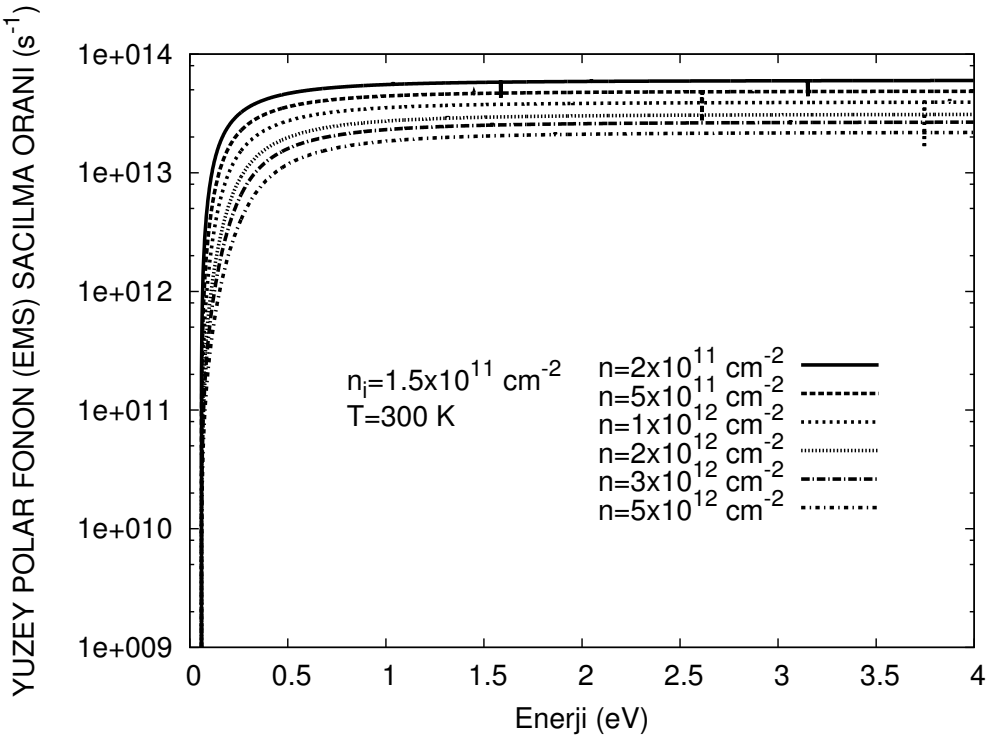
Yukarıda bahsedilen saçılma mekanizmalarının varlığında, saf ve kirli grafen durumları için sürüklenme ve mobilite hesapları ensemble Monte Carlo (EMC) yöntemi ile yapılmıştır. Heteroeklemlerde oluşan iki boyutlu elektron gazında elektronların sürüklenme hızları yarı-klasik denklemler kullanılarak bulunur. Bu hesaplamada elektronun etkin kütlesi gereklidir. Fakat grafende parçacıkların hareketi sıfır durgun kütleli rölativistik parçacıkların taklit edildiği Dirac eşitliği ile verilir. Her ne kadar lineer dispersiyon bağıntısı sıfır kütle gerektirse de, grafende elektronların siklotron kütleleri sıfır değildir ve $m^* = E/v_F^2$ ile verilir (NOVOSELOV vd., 2005a). Görüldüğü gibi siklotron kütlesi enerjiyle doğru orantılı olarak değişmektedir. Bu nedenle elektronların



Şekil 4.11. $n = 1 \times 10^{12}$ cm^{-2}'de farklı sıcaklıklarda yüzey polar optik fonon soğurma saçılma oranları



Şekil 4.12. $T = 300$ K'de farklı elektron konsantrasyonlarında yüzey polar optik fonon soğurma saçılma oranları



Şekil 4.13. $T = 300$ K'de farklı elektron konsantrasyonlarında yüzey polar optik fonon yayınım saçılma oranları

sürüklenme hızı

$$v_d = v_F \frac{k_x}{|\mathbf{k}|} \tag{4.1}$$

ifadesinden bulunabilir. Burada k_x uygulanan alan yönündeki dalga vektörüdür. Dalga vektöründeki değişim 3.181 denkleminden bulunabilir.

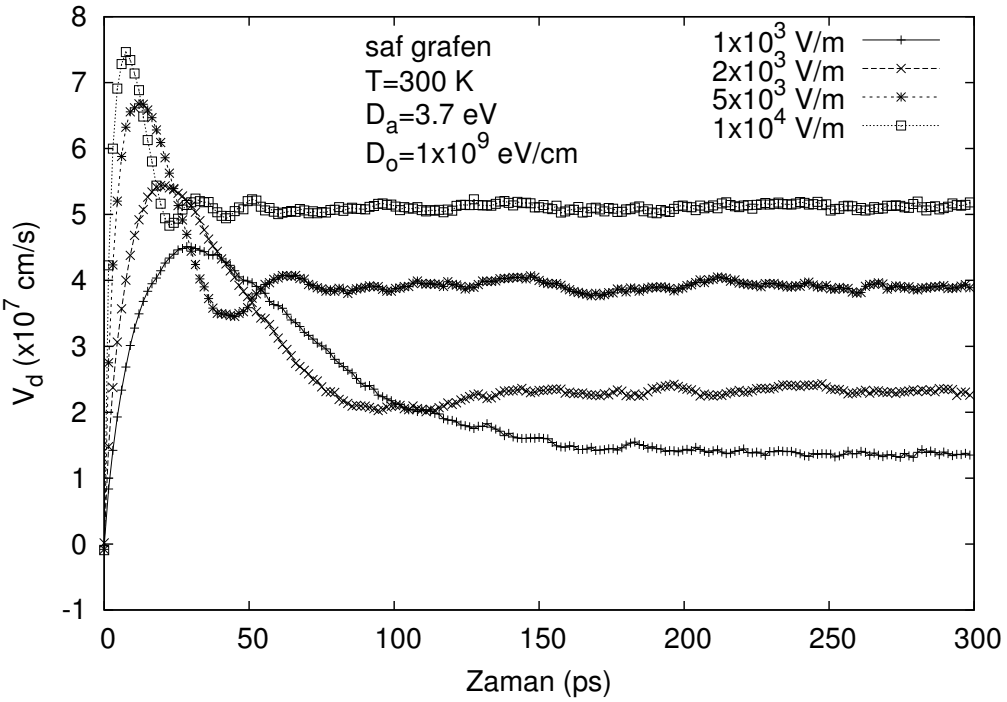
4.3.1. Saf Grafen Durumu

Saf grafeni alttaban malzemesi olmaksızın asılı grafen durumu olarak nitelendirebiliriz. Bu durumda göz önünde bulundurulan saçılma mekanizmaları; nonpolar optik fonon (NPOP) ve akustik fonon (AC) saçılmaları olup, kullanılan malzeme parametreleri; akustik deformasyon potansiyel sabiti $D_a = 3.7$ eV, optik deformasyon potansiyel sabiti $D_0 = 1 \times 10^9$ eV/cm ve optik fonon enerjisi 152 meV'dir. Şekil 4.14., Şekil 4.15. ve Şekil 4.16.'da saf grafenin farklı elektrik alanlarında sürüklenme hızlarındaki değişim zamanın bir fonksiyonu olarak verilmiştir. Bu şekillerden yaklaşık 1 kV/cm'e kadar "undershoot" (ani yavaşlama) etkisinin varlığı görülebilir. "Undershoot" etkisi, elektronun

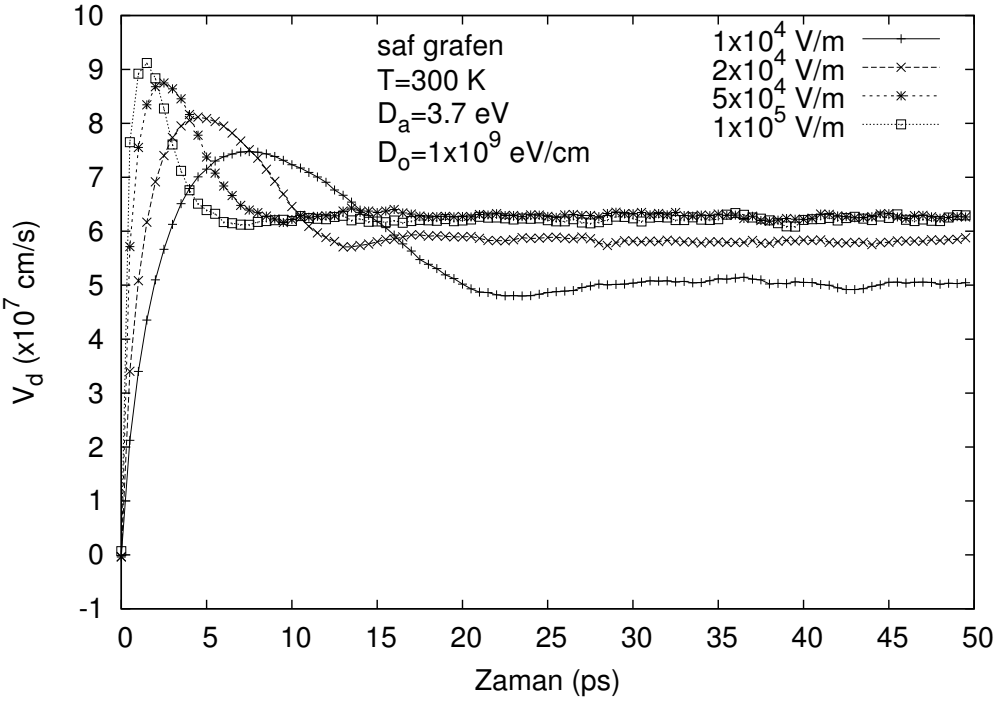
ani hızının ortalama kararlı durum hızından daha düşük olması durumudur. "Overshoot" (ani hızlanma) etkisi ise bütün uygulanan alan değerleri için mevcuttur. Bu verilerden elde edilen hız-alan eğrisi ise Şekil 4.17.'de verilmektedir. Bu şekilden de görüldüğü gibi saf grafen için bir negatif diferansiyel direnç (NDR) etkisi söz konusudur. Bu etki ise yaklaşık yine 1 kV/cm'den sonra gözlenebilir. Akustik fonon saçılması enerji ile lineer olarak artarken, optik fonon saçılmalarından yayınım sürecinin oluşması için 0.15 eV kadarlık bir enerjiye ihtiyaç vardır (Şekil 4.4.), bu enerjiye ulaşılana kadar elektronlar optik fonon yayınımından saçılmaya uğramazlar. Bu nedenle bu enerjiye ulaşılana kadar taşıyıcıların sürüklenme hızı artar, daha sonra ise optik fonon yayınım saçılması nedeni ile büyük oranda enerji kaybederek taşıyıcılar yavaşlar. Bu durum Şekil 4.17.'de gözlenen NDR etkisinin kaynağı olarak tayin edilebilir. Şekil 4.18.'den saf grafen için taşıyıcı enerjilerinin zamanla değişimi görülebilir. Bu şekil bize saf grafende sürüklenme hızının elektrik alanla değişim eğrisinin davranışını açıklamamıza yardımcı olur (Şekil 4.17.). Saf grafende taşıyıcı enerjileri sıcaklıkla az da olsa azalır. Deformasyon potansiyel sabitinin değeri arttırıldığında ise bu azalış daha bariz bir şekilde olur (Şekil 4.19.). Saf grafenin EMC yöntemi ile hesaplanan düşük alan mobilitesinin sıcaklıkla değişimi ise Şekil 4.20.'de verilmiştir. Mobilite değerleri Şekil 4.17.'de gösterilen hız-alan eğrilerinin düşük alanlardaki eğiminden hesaplanmıştır. Saf grafen için elde edilen bu sonuçlar literatürle uyum içindedir (PEREBEINOS, 2010).

4.3.2. Kirli Grafen Durumları

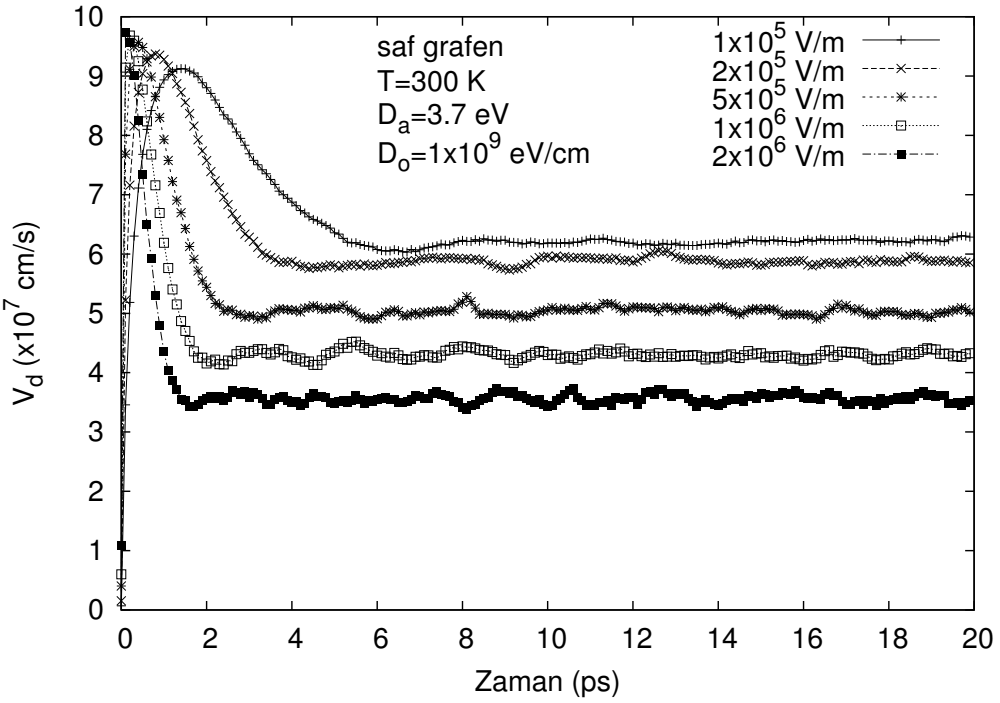
Kirli grafen durumu; safsızlık saçılması (IMP), yüzey pürüzlülüğünden (SR) kaynaklanan saçılma ve yüzey polar optik fonon (SPOP) saçılma mekanizmalarının eklendiği durumları içerir. Bu kısımda bu durumlar ayrı ayrı ele alınarak sürüklenme hızına ve mobiliteye olan etkileri incelenecektir. Bu kısımda kullanılan malzeme parametreleri saf grafenden biraz farklı olarak; akustik deformasyon potansiyel sabiti $D_a = 20$ eV, safsızlık konsantrasyonu $n_i = 1.5 \times 10^{11}$ cm^{-2}, yine optik deformasyon potansiyel sabiti $D_0 = 1 \times 10^9$ eV/cm ve optik fonon enerjisi 152 meV'dir. Ayrıca kullanılan diğer materyal parametreleri için Çizelge 4.1'e bakınız. Şekil 4.21.'de kirli grafenin farklı elektrik alanlarında sürüklenme hızlarındaki değişim verilmiştir. Burada görüldüğü gibi bütün alanlar için kararlı durum hız değerleri aynı değere yakınsar. Bu davranış tüm kirli grafen durumları



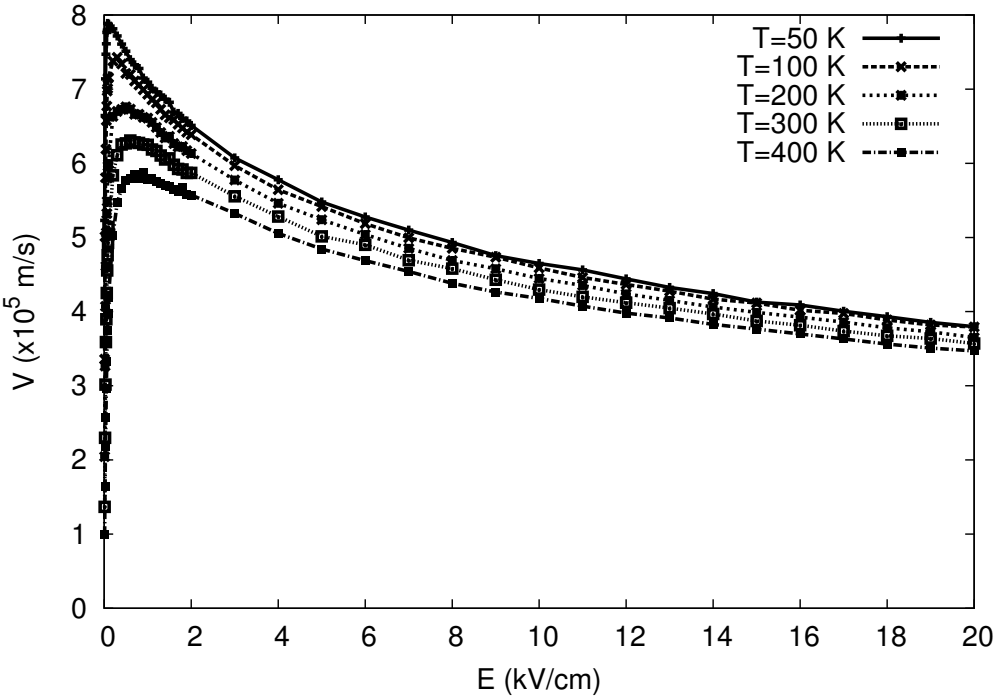
Şekil 4.14. Saf grafenin sürüklenme hızının çok düşük elektrik alanlarda zamanla değişimi



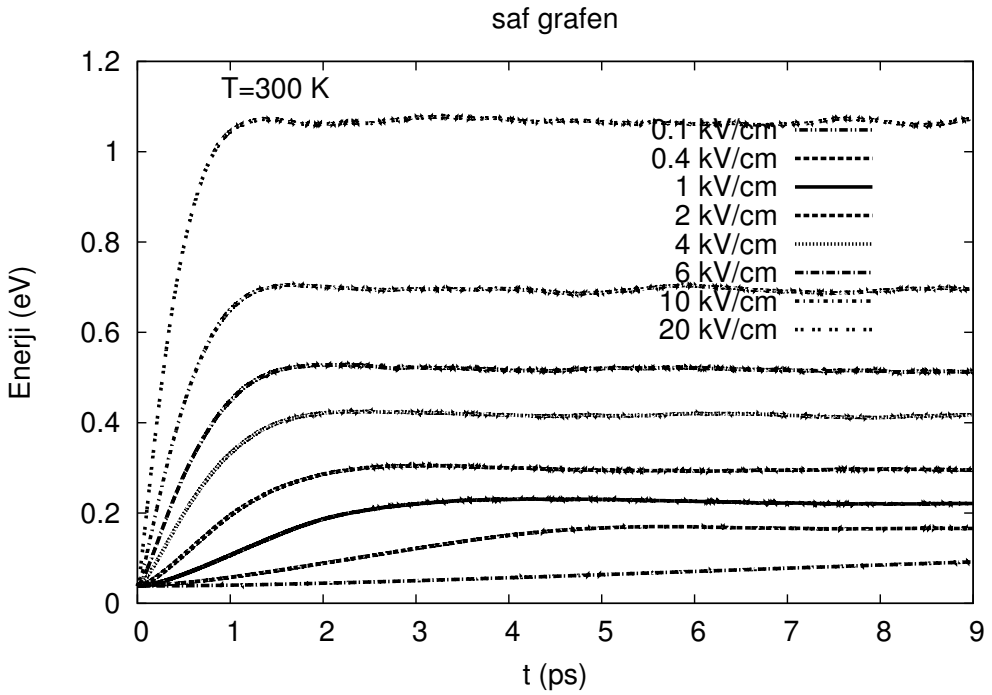
Şekil 4.15. Saf grafenin sürüklenme hızının düşük elektrik alanlarda zamanla değişimi



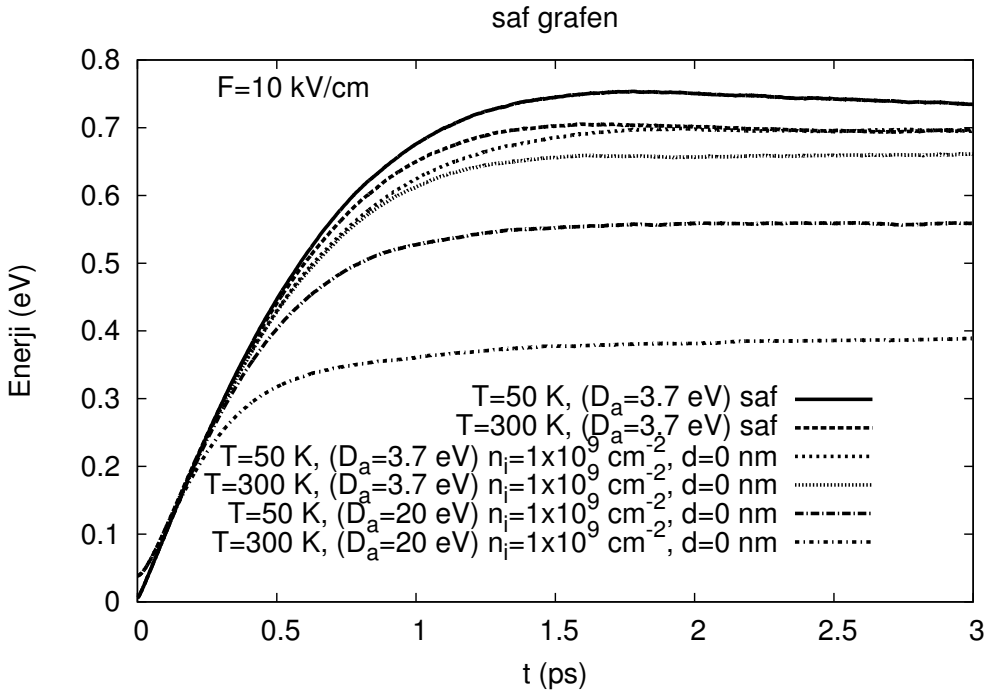
Şekil 4.16. Saf grafenin sürüklenme hızının yüksek elektrik alanlarında zamanla değişimi



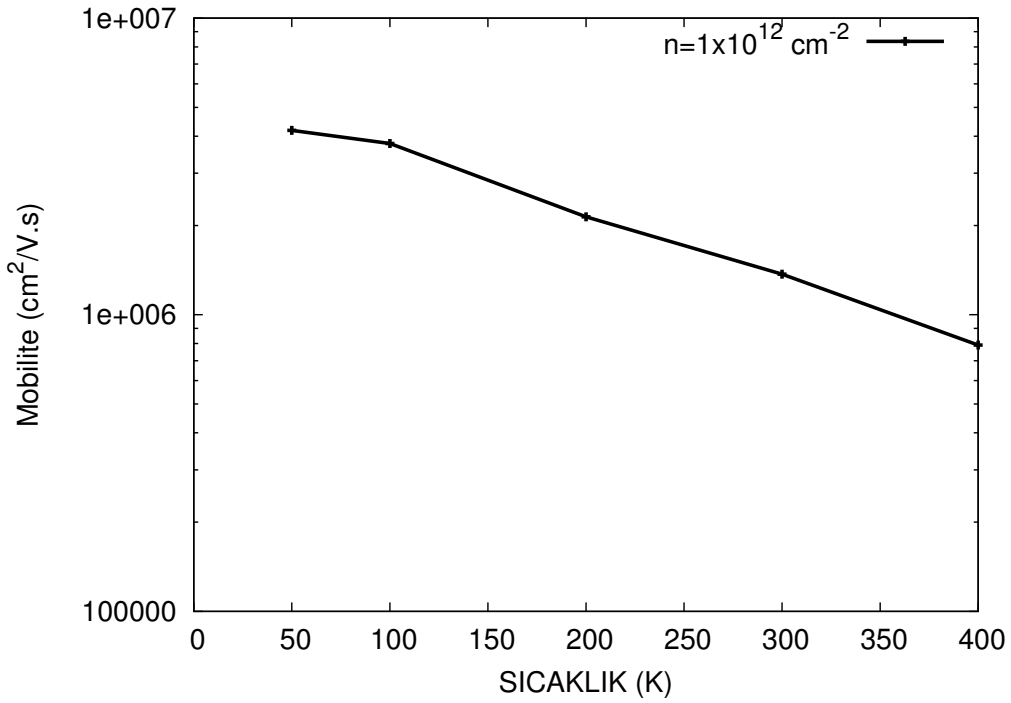
Şekil 4.17. Saf grafen için farklı sıcaklıklarda elektrik alanla kararlı durum sürüklenme hızının değişimi



Şekil 4.18. $T = 300$ K'de farklı elektrik alanlarında taşıyıcıların ortalama enerjilerinin zamanla değişimi



Şekil 4.19. 10 kV/cm elektrik alan altında elektron enerjilerinin iki farklı sıcaklık ve deformasyon sabiti değerine göre zamanla değişimi



Şekil 4.20. EMC yöntemi ile hesaplanan mobilitenin sıcaklıkla değişimi

için benzerdir. Saf grafen durumuna ek olarak aşama aşama yukarıda bahsedilen saçılma mekanizmalarının etkilerini görebilmek için Şekil 4.22., Şekil 4.23. ve Şekil 4.24.'de oda sıcaklığı için farklı elektron konsantrasyonlarında elde edilen hız-elektrik alan sonuçları incelenebilir. Saf grafen durumuna sadece safsızlık saçılması eklendiğinde elektron konsantrasyonu ile hızda artış olduğu görülürken, bu durum üzerine yüzey pürüzlülüğü de eklendiğinde tam tersi bir davranış gözlenmiştir (Şekil 4.22.). Ayrıca sadece saf grafene safsızlık eklenmesi ile NDR olgusu varlığını korumuş fakat iki farklılık ortaya çıkmıştır. Birincisi NDR'nin başlangıç alan değeri yüksek değerlerine kaymıştır. Örneğin Şekil 4.22.'den görüldüğü gibi $n = 5\times\ 10^{12}$ cm^{-2} için NDR etkisi 5 kV/cm alan değerinden sonrabelirgin olarak görülmektedir. İkincisi ise elektron konsantrasyonu arttıkça NDR etkisi daha düşük alan değerlerinde ortaya çıkmaya başlamakta ve aynı zamanda alanla hızdaki azalma oranı da artmaktadır. Şekil 4.23.'te görüldüğü gibi saf grafene IMP, SR, ve SPOP saçılmaları eklendiğinde NDR etkisi tamamen yok olmakta, hız değerleri azalmaktadır. Son iki şekilden şu sonuca varabiliriz: Saf grafene sadece yüklü safsızlık eklendiğinde NDR etkisi elektron konsantrasyonunun artması ile daha belirgin hale gelmektedir. Saf grafende yüklü safsızlık saçılması (IMP) varken bunlara yüzey pürüzlülük (SR) veya yüzey polar optik fonon (SPOP) saçılması eklendiğinde NDR etkisi azalıp

yok olmaktadır. Tüm saçılma mekanizmaları varken ise, yani en son durum üzerine yüzey polar fonon saçılması eklenmesi ile (Şekil 4.24.), sadece hızda bir azalma olmuş ama bu azalış düşük elektron konsantrasyonlarında daha belirgin olarak gözlenmiştir. Saf grafene sadece safsızlık saçılması eklendiğinde, elektron konsantrasyonu arttıkça hızın artmasının sebebi, elektron konsantrasyonunun artması ile perdelemenin artarak safsızlıklardan kaynaklanan saçılmayı azaltmasıdır. Daha düşük elektron konsantrasyonlarında ise durum daha da farklıdır (Şekil 4.25.). Perdeleme etkisi ve elektron enerjilerinin elektron konsantrasyonu (n) ile artıyor olması göz önünde bulundurulduğunda çeşitli saçılma mekanizmalarının varlığında elde edilen sürüklenme hızlarının nedeni kolayca anlaşılmış olur. Safsızlık saçılması ve yüzey polar optik fonon saçılmalarında elektron konsantrasyonunun artması ile perdeleme etkisinin artmış olması bu mekanizmalardan saçılmayı azaltmıştır. Dolayısı ile saf grafen durumuna safsızlık saçılmasının eklenmiş olması sürüklenme hızında artışa neden olmuştur. Ortalama elektron enerjisinin uygulanan farklı alanlar için zamanla değişimi Şekil 4.26.'da gösterilmiştir. Burada görüldüğü gibi ortalama enerji bir süre sonra doyuma ulaşmaktadır. Saf grafen durumuna safsızlık (IMP), yüzey pürüzlülük (SR) ve yüzey polar optik fonon (SPOP) saçılma mekanizmalarının eklenmesiyle oda sıcaklığında elde edilen mobilite değerleri Şekil 4.22., Şekil 4.23. ve Şekil 4.24.'de gösterilen hız-alan eğrilerine benzer eğrilerin düşük alanlarda eğimi alınarak hesaplanmıştır. EMC yöntemi ile hesaplanan bu mobilitelerin elektron konsantrasyonu ile değişimi Şekil 4.27. ve Şekil 4.28.'den görülebilir. Elde edilen bu sonuçlar da deneysel sonuçlarla uyum içindedir (ZHU, 2009). Yüzey pürüzlülüğü eklendiğinde Şekil 4.22.'de görüldüğü gibi kararlı durum sürüklenme hızının azalmasının sebebi, elektronların ara yüzeye daha çok yakın bölgelerde yoğunlaşması nedeni ile pürüzlülük saçılmasının artmasından kaynaklanır. IMP ve SR'nin varlığındaki hız-alan eğrisi (Şekil 4.22.) ve SPOP'nin eklenmesi ile elde edilen kirli grafen durumu için elde edilen hız-alan eğrileri karşılaştırıldığında (Şekil 4.24.) en büyük farkın düşük elektron yoğunluğunda ortaya çıktığı görülür. Elektron yoğunluğu arttıkça fark gittikçe ortadan kalkar çünkü elektron yoğunluğu ile perdeleme arttığından SPOP'nin etkisi azalır. Bu durum Şekil 4.24.'de açıkça gösterilmiştir. Şekil 4.25.'de ise Şekil 4.24.'den daha düşük elektron yoğunlukları için elde edilen hız-alan eğrileri verilmiştir. Dikkatle incelendiğinde özellikle SPOP eklenen kirli durum için Şekil 4.24.'den daha yüksek hızlar

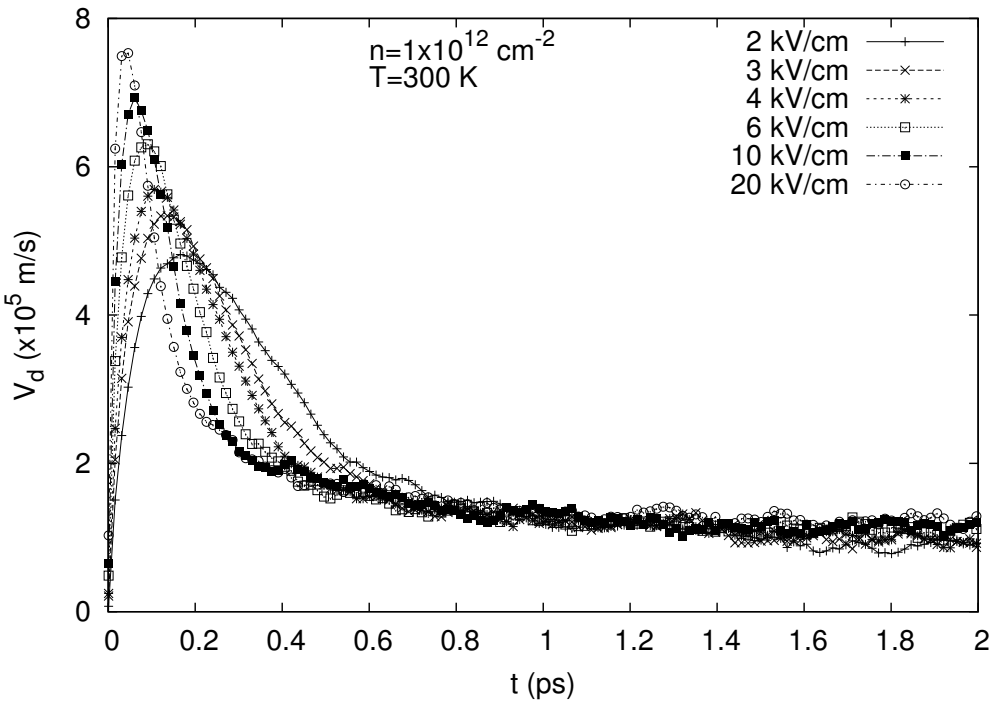
Çizelge 4.1. Hesaplamalarda kullanılan materyal parametreleri

Elektron konsantrasyonu (n)	1×10^{12}, 7×10^{12} cm^{-2}
Safsızlık konsantrasyonu (n_i)	$1 \times 10^{9-11}$ cm^{-2}
Fermi hızı (v_F)	1×10^{6} m/s
Ses hızı (v_p)	1×10^{4} m/s
Polar olmayan optik fonon enerjisi	152 meV
Optik deformasyon sabiti (D_o)	1×10^{9} eV/cm
Akustik deformasyon sabiti (D_a)	3.7-20 eV
Ara yüzey pürüzlülüğünün kare ortalama kök (rms) büyüklüğü (Δ)	1-5 Å
Ara yüzey pürüzlülüğünün enine erimi (L)	1-5 nm
İndüklenen taşıyıcı yoğunluğu (n_s)	$(n_i + 0.8 \times n)$ cm^{-2}
Düşük frekans dielektrik sabiti (κ_{0x}^{0})	3.9
Yüksek frekans dielektrik sabiti (κ_{0x}^{∞})	2.5
Yüzey polar optik fonon enerjisi ($\hbar\omega$)	58.9 meV

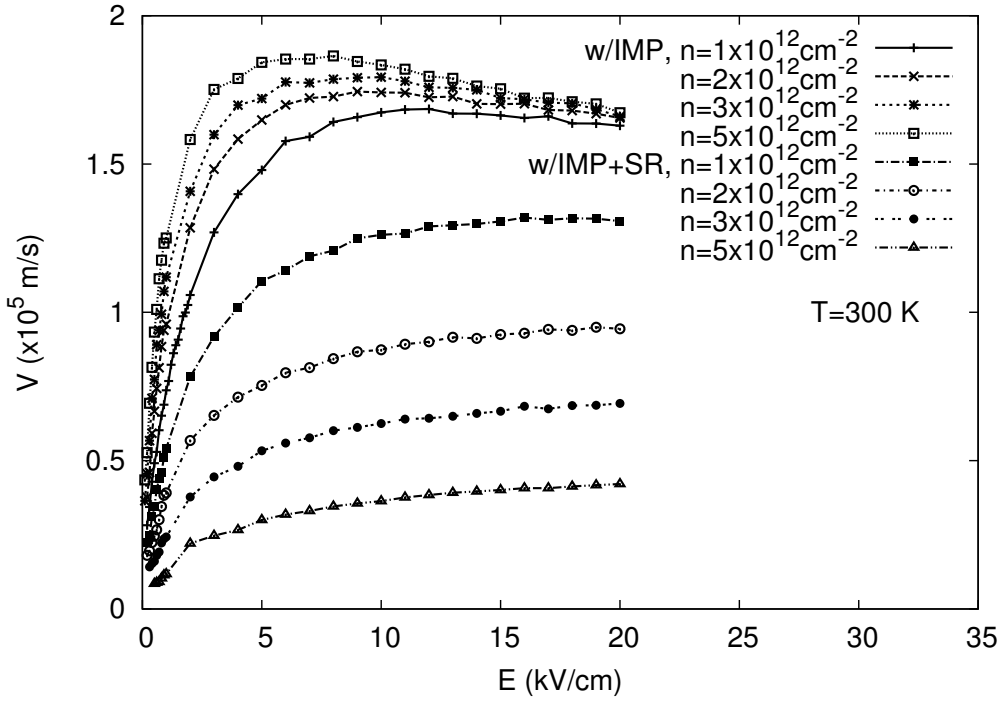
elde edildiği görülebilir. Bunun nedeni ise yine düşük elektron yoğunluklarında SR'nin çok fazla etkili olmaması ve SPOP'deki perdeleme etkisinin düşük yoğunluklarda çok fazla etkin olmaması olarak düşünülebilir. Elektron konsantrasyonunun artışı ile hem yüklü safsızlık saçılma oranı hem de yüzey polar optik fonon saçılma oranı azalır. Buna karşılık yüzey pürüzlülük saçılması elektron konsantrasyonu ile artış gösterir. Bu nedenle bu mekanizmalar arasında bir rekabet vardır. Akustik (AC) ve polar olmayan optik fonon (NPOP) saçılmalarının doğrudan elektron konsantrasyonuna bağımlılığı yoktur. Şekil 4.27. ve Şekil 4.28.'de mobilitenin önce artıp sonra sonra azalması yukarıda anlatılan IMP ve SR ile SPOP saçılmalarının elektron konsantrasyonu ile değişimi göz önüne alınarak açıklanabilir.

4.4. İletkenlik Hesabı

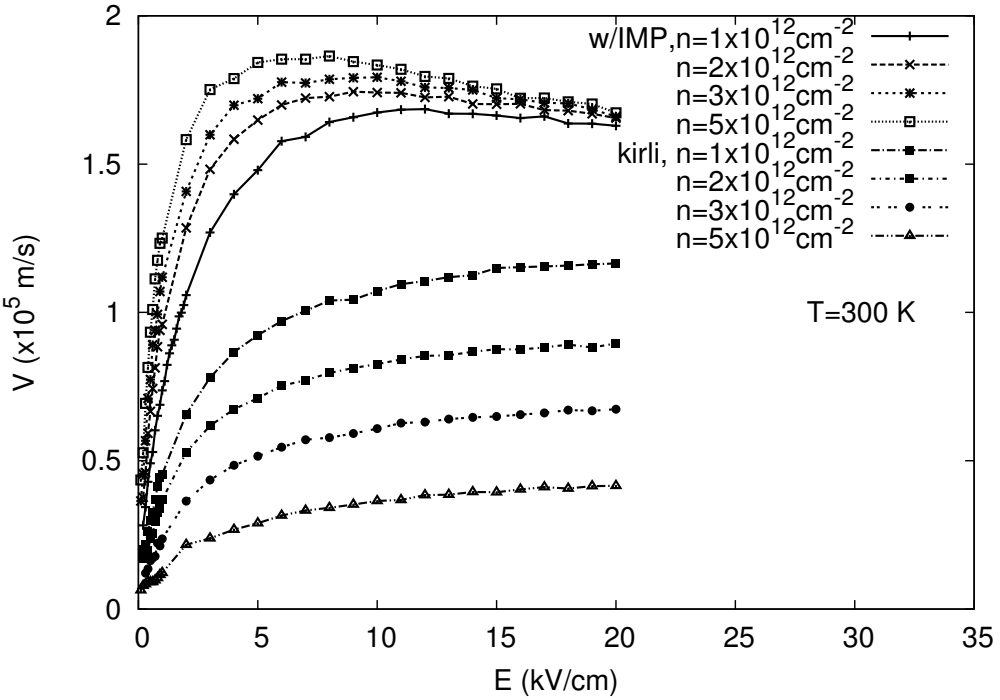
Yarı klasik (diffusive) iletkenlik denklemi kullanılarak iletkenlik hesabı yapılmıştır (ADAM, 2007).



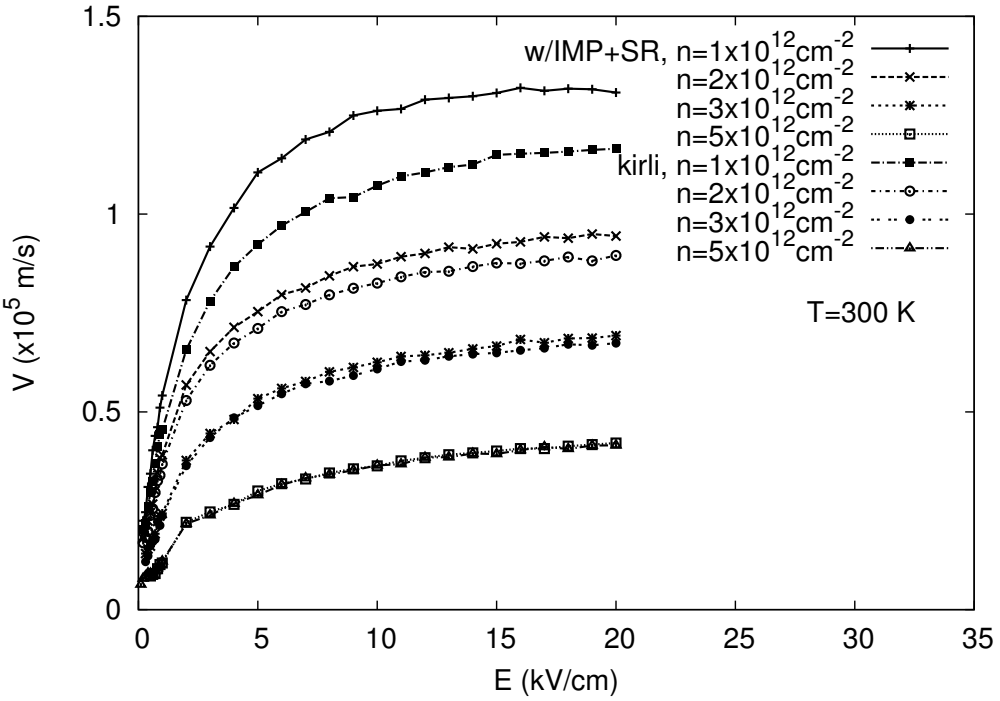
Şekil 4.21. Kirli grafen durumunda sürüklenme hızının farklı elektrik alanlarında zamanla değişimi



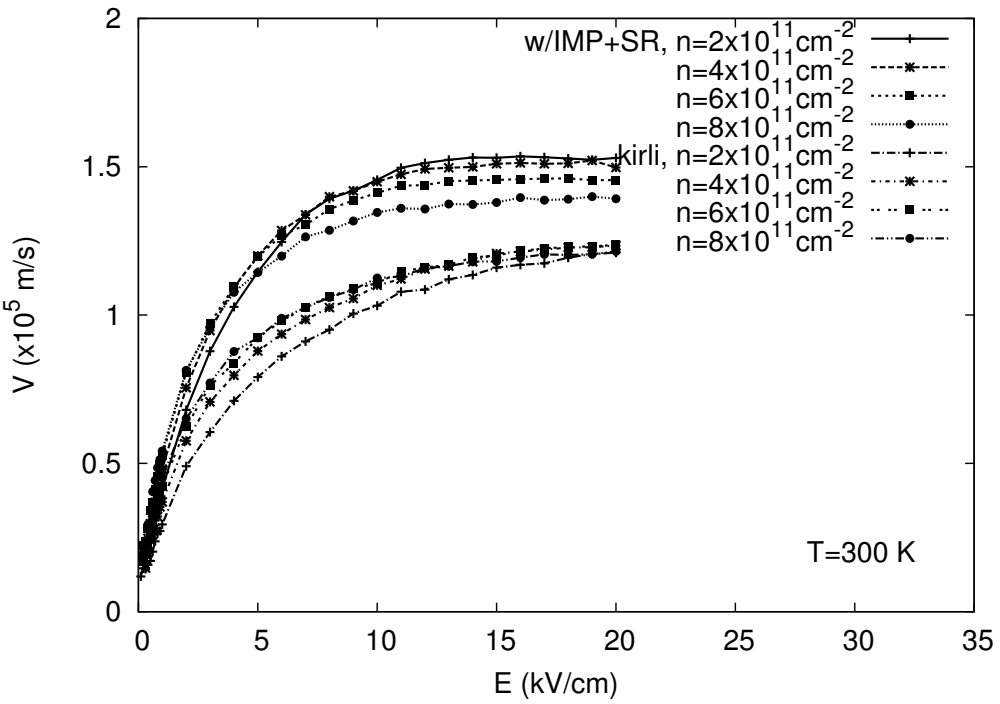
Şekil 4.22. Oda sıcaklığında saf grafen durumuna IMP ve IMP+SR eklendiğinde sürüklenme hızlarının, farklı elektron konsantrasyonlarında uygulanan elektrik alanla değişimi



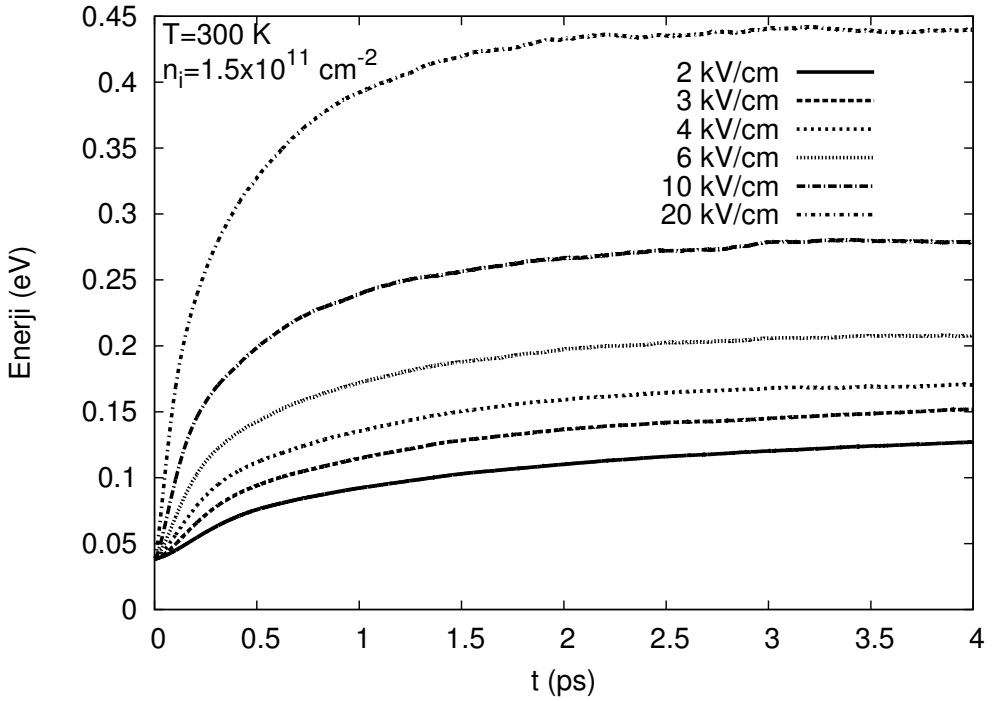
Şekil 4.23. Oda sıcaklığında saf grafen durumuna IMP ve IMP+SR+SPOP eklendiğinde sürüklenme hızlarının, farklı elektron konsantrasyonlarında uygulanan elektrik alanla değişimi



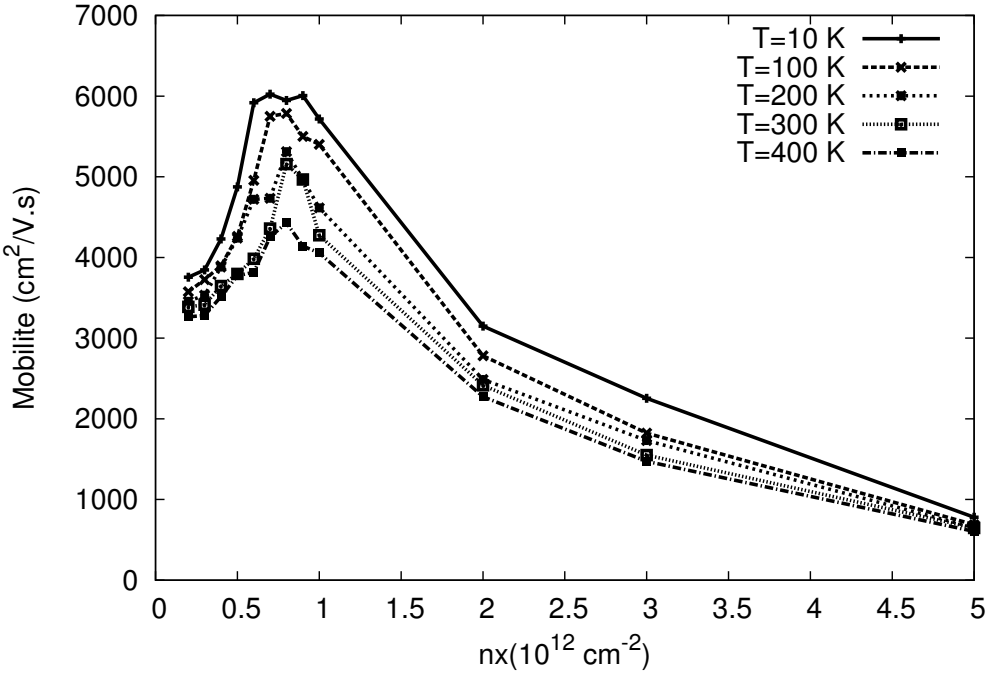
Şekil 4.24. Oda sıcaklığında saf grafen durumuna IMP+SR ve IMP+SR+SPOP eklendiğinde sürüklenme hızlarının, farklı elektron konsantrasyonlarında uygulanan elektrik alanla değişimi



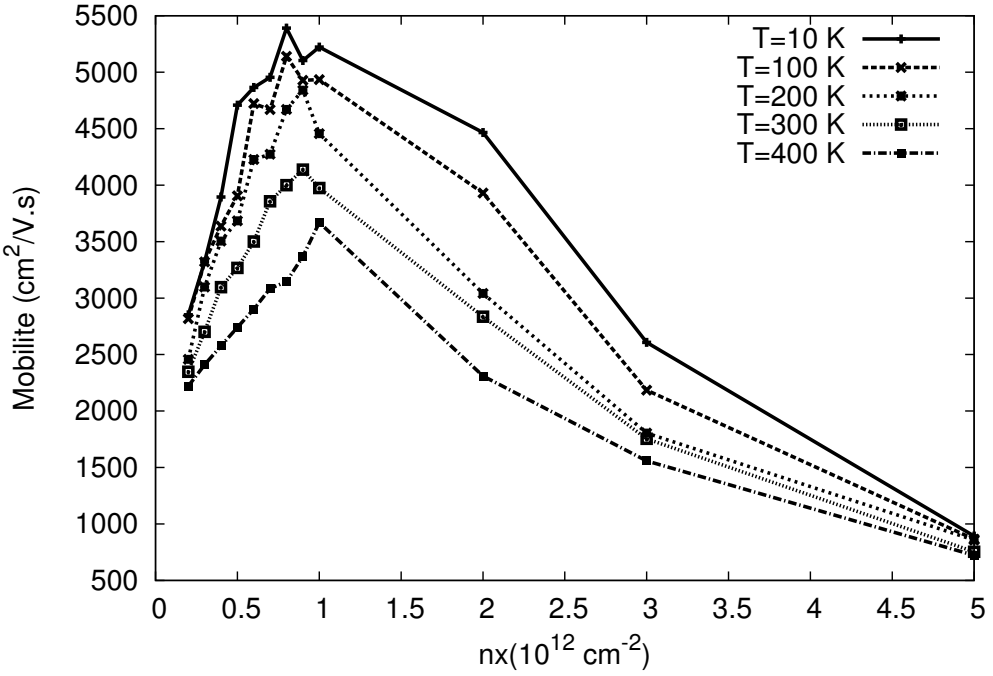
Şekil 4.25. Oda sıcaklığında saf grafen durumuna IMP+SR ve IMP+SR+SPOP eklendiğinde sürüklenme hızlarının, düşük elektron konsantrasyonlarında uygulanan elektrik alanla değişimi



Şekil 4.26. Kirli grafen durumunda T=300 K'de farklı elektrik alanlarında taşıyıcı enerjilerinin zamanla değişimi



Şekil 4.27. Saf grafen durumuna IMP ve SR mekanizmaları eklenerek EMC yöntemi ile hesaplanan mobilitenin elektron konsantrasyonuyla değişimi



Şekil 4.28. Saf grafen durumuna IMP, SR ve SPOP mekanizmaları eklenerek (tüm mekanizmalar varken, kirli grafen durumu) EMC yöntemi ile hesaplanan mobilitenin elektron konsantrasyonuyla değişimi

$$\sigma = \frac{g_v g_s e^2}{h} \frac{E_F}{2\hbar} \langle \tau \rangle = \left(\frac{2e^2}{h} \right) \frac{E_F}{\hbar} \langle \tau \rangle \tag{4.2}$$

$\langle \tau \rangle$ ortalama saçılma zamanı olup (HWANG ve Das SARMA, 2008)

$$f(\varepsilon_k) = \frac{1}{e^{(\varepsilon_k - \mu)\beta} + 1} \tag{4.3}$$

Fermi-Dirac dağılımı olmak üzere

$$< \tau >= \frac{\int_0 d\varepsilon_k \varepsilon_k \tau(\varepsilon_k) \left(\frac{-\delta f}{\delta \varepsilon_k} \right)}{\int_0 d\varepsilon_k \varepsilon_k \left(\frac{-\delta f}{\delta \varepsilon_k} \right)} \tag{4.4}$$

ile verilir. Mobilite ise iletkenlik denkleminden

$$\mu = \frac{\sigma}{ne} \tag{4.5}$$

veya Monte Carlo simülasyonu sonucu elde edilen hız-alan grafiğinin eğimi kullanılarak düşük alan mobiliteleri elde edilebilir.

4.4.1. İletkenlik Hesabında Kullanılan Saçılma Oranlarının Hesaplanması

İletkenlik hesaplamalarında, normal parabolik iki boyutlu sistemlerde elastik saçılma içeren taşınım teorilerinde daima kullanılagelen ağırlık faktörü terimi $(1 - \cos\theta)$ hesaba dahil edilir. İletkenlik hesabında kullanılan taşınım (transport) saçılma oranı olup τ_{tr} ile ifade edilir. τ_i ve τ_{tr} arasındaki farklılık, farklı çarpışmalar arasındaki ağırlık faktöründen kaynaklanır.

Tek parçacık saçılma oranı üstüste binme faktörü göz önüne alınmadığında, tüm çarpışmaların eşit ağırlıkta etkili olduğu tüm saçılma süreçleri üzerinden olan toplamı ifade eder. Bunun anlamı çok küçük açılarda saçılmaların da geri saçılmalar $(\theta = \pi)$ kadar elektronun yönünü tersine çevirebileceğidir. Ancak grafende altörgü simetrisinden kaynaklanan üstüste binme faktöründeki $(1 + \cos\theta)$ teriminin varlığından dolayı geniş açılara saçılmanın etkisi bastırılmış olur. Taşınım teorilerinde kullanılan ağırlık faktörü terimi

$(1-\cos\theta)$ ise, geniş açılara saçılma miktarını arttıran bir etkendir. İletkenlik hesaplamalarında grafen için etkin ağırlık faktörü $(1-\cos\theta)\times(1+\cos\theta)$ olmalıdır. Bu faktör ise, hem büyük hem de küçük açılara saçılma miktarını azaltır. Dolayısıyla grafende taşınım saçılma oranı büyük ve küçük açılara saçılmaların her ikisine de duyarsızdır denilebilir.

4.4.1.1. Akustik Fonon Saçılması

Akustik fonon saçılması için hesaplanan integral kısmını, iletkenlik hesabında ağırlık faktörü teriminin dahil edilmesiyle yeniden hesaplayalım.

$$W(k)=\frac{1}{4\pi^2}\frac{\pi D^2 k_B T}{\sigma v_s^2 \hbar^2 v_F}k\int_0^{2\pi}\frac{1}{2}(1-\cos^2\theta)d\theta \tag{4.6}$$

Sonuç

$$W(k)=\frac{D^2 k_B T}{8\sigma v_s^2 \hbar^2 v_F}k \qquad \text{ya da} \qquad W(k)=\frac{D^2 k_B T}{8\sigma v_s^2 \hbar^3 v_F^2}E \tag{4.7}$$

olacaktır. Akustik fonon saçılması için soğurma ve yayılma olayları eşit olduğundan toplam saçılma oranının bulunması için sonucun 2 ile çarpılması gerekir. Böylece akustik fononlar için taşınım saçılma oranı

$$W(k)=\frac{D^2 k_B T}{4\sigma v_s^2 \hbar^2 v_F}k \qquad \text{ya da} \qquad W(k)=\frac{D^2 k_B T}{4\sigma v_s^2 \hbar^3 v_F^2}E \tag{4.8}$$

olur.

4.4.1.2. Polar Olmayan Optik Fonon Saçılması

Bölüm 3'de polar olmayan optik fonon için soğurma ve yayınım durumlarında hesaplanan saçılma oranı tek parçacık durumu için geçerliydi. Soğurma ve yayınım durumlarında iletkenlik hesabında taşınım saçılma oranının hesaplanabilmesi için $(1-\cos\theta)$ ağırlık faktörü teriminin hesaba katılması gereklidir.

Soğurma:

Soğurma durumu için hesaplanan integral kısmını, iletkenlik hesabında ağırlık faktörü teriminin dahil edilmesiyle yeniden hesaplayalım.

$$I = \int_0^{2\pi} \int_{q_{min}}^{q_{max}} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q}) \delta(E_{k'} - E_k - \hbar\omega_0) \frac{(1+\cos\theta)}{2} (1-\cos\theta) q dq d\phi$$

Ayrıca üst üste binme faktörü ve ağırlık faktörü terimlerinin ϕ cinsinden değeri kullanılarak

$$\frac{(1+\cos\theta)}{2} = (1 + \frac{q}{2k}\cos\phi) \quad \text{ve} \quad (1-\cos\theta) = -\frac{q}{k}\cos\phi$$

bulunur ve

$$I = \int_0^{2\pi} \int_{q_{min}}^{q_{max}} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q}) \delta(E_{k'} - E_k - \hbar\omega_0) (1 + \frac{q}{2k}\cos\phi)(-\frac{q}{k}\cos\phi) q dq d\phi$$

elde edilir. Bu integrali iki kısma ayırarak çözüm yapmak kolaylık sağlayacağından

$$I_1 = \int_0^{2\pi} \int_{q_{min}}^{q_{max}} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q}) \delta(E_{k'} - E_k - \hbar\omega_0) (-\frac{q^2}{k}\cos\phi) dq d\phi$$

$$I_2 = \int_0^{2\pi} \int_{q_{min}}^{q_{max}} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q}) \delta(E_{k'} - E_k - \hbar\omega_0) (-\frac{q^3}{2k^2}\cos^2\phi) dq d\phi$$

olsun ve I_1 integrali öncelikle hesaplayalım. Momentumun korunumu kullanılarak, iki ayrı delta fonksiyonu tek bir delta fonksiyonuna dönüştürüldüğünde:

$$I_1 = \int_0^{2\pi} \int_{q_{min}}^{q_{max}} \delta\left(\sqrt{k^2 + q^2 + 2kq\cos\phi} - k - \frac{\omega_0}{v_F}\right) \frac{1}{\hbar v_F} (-\frac{q^2}{k}\cos\phi) dq d\phi$$

olur. x_i, $g(x)$ fonksiyonunun kökleri olmak üzere

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(g(x)) f(x) dx = \sum_i \frac{f(x_i)}{|g'(x_i)|}$$

özelliği kullanılarak

$$I_1 = \int_0^{2\pi} \int_{q_{min}}^{q_{max}} \delta(g(q)) f(q) dq d\phi$$

halini alır. Burada,

$$f(q) = -\frac{q^2}{\hbar v_F k} \cos\phi$$

$$g(q) = \sqrt{k^2 + q^2 + 2kq\cos\phi} - k - \frac{\omega_0}{v_F}$$

olmak üzere

$$I_1 = \int_0^{2\pi} \sum_i \frac{f(q_i)}{|g'(q_i)|} d\phi$$

integralinde $g(q)$ fonksiyonunun kökleri bulunup türevinde yerine yazılmalıdır.

$$\frac{dg(q)}{dq} = g' = \frac{q + k\cos\phi}{\sqrt{k^2 + q^2 + 2kq\cos\phi}}$$

$g(q)$ fonksiyonunun kökleri aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$g(q) = \sqrt{k^2 + q^2 + 2kq\cos\phi} - k - \frac{\omega_0}{v_F} = 0$$

$$q_{1,2} = \frac{-2k\cos\phi \pm \sqrt{4k^2\cos^2\phi + 4b}}{2}$$

$$q_{1,2} = -k\cos\phi \pm \sqrt{k^2\cos^2\phi + b} \longrightarrow q_1 = -k\cos\phi + \sqrt{k^2\cos^2\phi + b}$$

Soğurma için q_2 kökü, I_1 integral limitleri içerisinde olmadığından hesaba dahil edilmemiştir.

$$I_1 = -\frac{1}{\hbar v_F k}\int_0^{2\pi} \frac{(-k\cos\phi + \sqrt{k^2\cos^2\phi + b})^2\cos\phi}{|(q_1 + k\cos\phi)/\sqrt{k^2+q_1^2+2kq_1\cos\phi}|}d\phi$$

Ayrıntılı ara işlemlerden sonra;

$$I_1 = \frac{1}{\hbar v_F}\left\{\int_0^{2\pi} 2\cos^2\phi\sqrt{k^2+b}d\phi\right\} = \frac{2\pi}{\hbar v_F}\sqrt{k^2+b}\ ,\ b = a^2+2ak\ ,\ a = \frac{\omega_0}{v_F}$$
$$I_1 = \frac{2\pi}{\hbar v_F}\sqrt{k^2+a^2+2ak} = \frac{2\pi}{\hbar v_F}\sqrt{(k+a)^2} = \frac{2\pi}{\hbar v_F}(k+a)$$
$$I_1 = (k+\frac{\omega_0}{v_F})\frac{2\pi}{\hbar v_F} \tag{4.9}$$

elde edilir. İkinci kısmın integralinin benzer şekilde hesabı ise bize

$$I_2 = -\frac{\pi}{\hbar v_F}(k+\frac{\omega_0}{v_F})(\frac{3}{2}+\frac{\omega_0^2}{2v_F^2k^2}+\frac{\omega_0}{v_Fk})$$

değerini vereceğinden

$$W(k) = \frac{D_0^2}{4\pi\sigma\omega_0}(n_0+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}).(I_1+I_2)$$

$$W(k) = \frac{D_0^2}{4\sigma\omega_0\hbar v_F}(n_0)(k+\frac{\omega_0}{v_F})(\frac{1}{2}-\frac{\omega_0^2}{2v_F^2k^2}-\frac{\omega_0}{v_Fk}) \tag{4.10}$$

soğurma için geçiş oranı bulunmuş olur.

Yayınım:

Benzer şekilde yayınım durumu için de hesaplanan integral kısmını, iletkenlik hesabında üst üste binme faktörü ve ağırlık faktörü terimlerinin ϕ cinsinden değeri kullanılarak yeniden hesaplanırsa

$$W(k) = \frac{D_0^2}{4\sigma\omega_0\hbar v_F}(n_0+1)(k-\frac{\omega_0}{v_F})\left\{\frac{1}{2}-\frac{\omega_0^2}{2v_F^2k^2}+\frac{\omega_0}{v_Fk}\right\} \tag{4.11}$$

yayınım için geçiş oranı bulunmuş olur.

4.4.1.3. Yüklü Safsızlık Saçılması

Yüklü safsızlık saçılması için hesaplanan integral kısmını, iletkenlik hesabında ağırlık faktörü teriminin dahil edilmesiyle hesaplanır.

$$\frac{1}{\tau_{tr}} = W(k) = \frac{(n_i)k}{2\pi\hbar^2 v_F}\int_0^{\pi} |V(2k\sin\frac{\theta}{2})|^2(1-\cos^2\theta)d\theta \tag{4.12}$$

Fakat polarizasyon fonksiyonunun q'ya olan bağımlılığı nedeniyle bu son integralin q cinsinden yazılarak çözülmesi daha uygun olur.

$$\begin{aligned} W(k) &= \frac{(n_i)}{2\pi\hbar^2 v_F k^2}\int_0^{2k} |V(\mathbf{q})|^2 q^2 \left[1-\left(\frac{q}{2k}\right)^2\right]^{1/2} dq \\ W(k) &= \frac{(n_i)E}{2\pi\hbar^3 v_F^2 k^3}\int_0^{2k} |V(\mathbf{q})|^2 q^2 \left[1-\left(\frac{q}{2k}\right)^2\right]^{1/2} dq \end{aligned} \tag{4.13}$$

Bu integralin hesabı ise analitik olarak yapılamadığından sayısal olarak yapılmıştır.

4.4.1.4. Yüzey Pürüzlülük Saçılması

Yüzey pürüzlülüğünden kaynaklanan saçılma oranını, iletkenlik hesabı için üst üste binme faktörü ve ağırlık faktörü terimlerinin çarpımı kullanılarak yeniden hesaplayalım.

$$W(k) = (\frac{\Delta_e L_e n_s e^2}{2\varepsilon\hbar v_F})^2 \frac{E_k}{2\hbar}\int_0^{\pi} \left(1+2L_e^2k^2\sin^2\frac{\theta}{2}\right)^{-3/2} \cdot \left(1-\cos^2\theta\right) d\theta \tag{4.14}$$

İntegral hesabı ayrıca yapılacak olursa elde edilen ifade aşağıdaki gibi olur

$$\begin{aligned}
&\int_0^{\pi} \left(1+a^2\sin^2\frac{\theta}{2}\right)^{-3/2} \cdot \left(1-\cos^2\theta\right) d\theta \ , \ a=\sqrt{2}L_e k \\
&= \frac{8\left(-2(1+a^2)E(\frac{a^2}{1+a^2})+(2+a^2)K(\frac{a^2}{1+a^2})\right)}{a^4\sqrt{1+a^2}} \\
&= \frac{2E\left(\frac{a^2}{1+a^2}\right)}{\sqrt{1+a^2}}\left\{\frac{-8(1+a^2)}{a^4}\right\} + \frac{2K\left(\frac{a^2}{1+a^2}\right)}{\sqrt{1+a^2}}\left\{\frac{4(2+a^2)}{a^4}\right\}
\end{aligned} \tag{4.15}$$

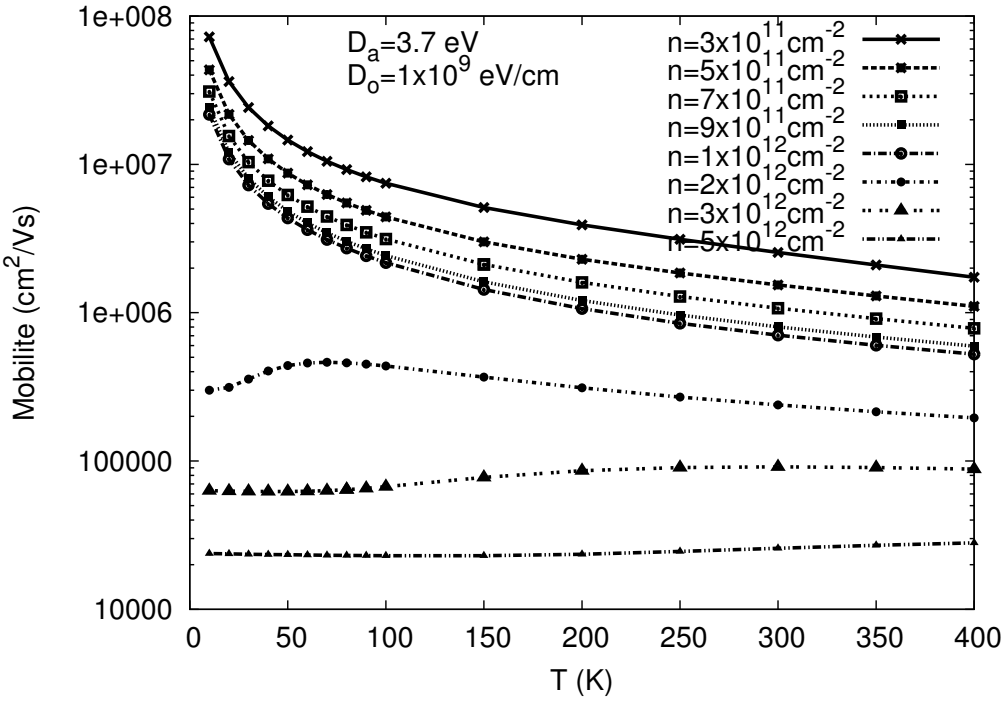
Bu ifade ise yerine yazılarak yüzey pürüzlülüğü için iletkenlik hesabında kullanılan saçılma oranı aşağıdaki gibi elde edilmiş olur.

$$\begin{aligned}
W(k) &= (\frac{\Delta_e L_e n_s e^2}{2\varepsilon\hbar v_F})^2 \frac{E_k}{2\hbar} \frac{2E\left(\frac{a^2}{1+a^2}\right)}{\sqrt{1+a^2}}\left\{\frac{-8(1+a^2)}{a^4}\right\} + \frac{2K\left(\frac{a^2}{1+a^2}\right)}{\sqrt{1+a^2}}\left\{\frac{4(2+a^2)}{a^4}\right\} \\
&= (\frac{\Delta_e L_e n_s e^2}{2\varepsilon\hbar v_F})^2 \frac{2E_k}{\hbar} \frac{2E\left(\frac{a^2}{1+a^2}\right)}{\sqrt{1+a^2}}\left\{\frac{-2(1+a^2)}{a^4}\right\} + \frac{2K\left(\frac{a^2}{1+a^2}\right)}{\sqrt{1+a^2}}\left\{\frac{(2+a^2)}{a^4}\right\}
\end{aligned} \tag{4.16}$$

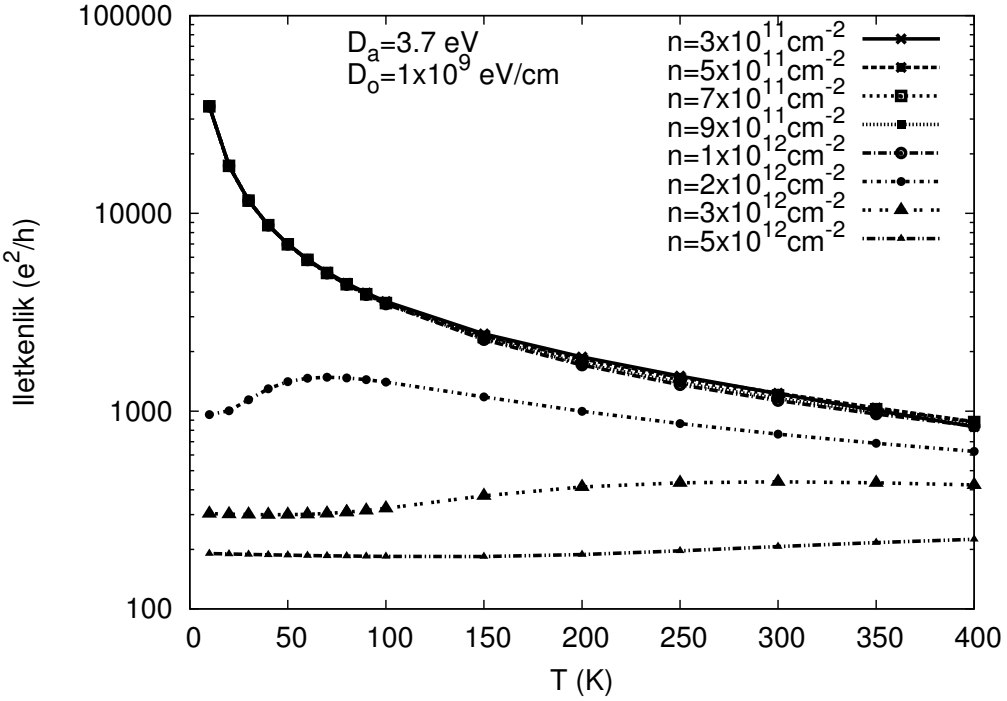
Elde edilen bu sonuç ise analitik olarak yapılmadığından dolayı sayısal olarak yapılmıştır. Burada $E(k)$ ikinci tip tam eliptik ve $K(k)$ birinci tip tam eliptik integral fonksiyonlarıdır (GRADSHTEYN ve RYZHIK, 1965; PRESS vd., 1989).

İletkenlik hesabı ile elde edilen saçılma oranları kullanılarak saf grafen ve kirli grafen durumlarının iletkenlik ve mobilite sonuçları altı farklı durum olarak incelenmiştir. Bu durumlar içerisinde saf grafenin mobilite ve iletkenlik sonuçları Şekil 4.29. ve Şekil 4.30.'da verilmiştir. Bu sonuçlardan mobilitenin elektron konsantrasyonunun ve sıcaklığın artması ile belli bir değere kadar ($n = 1\times10^{12}$ cm^{-2}) azalmış olduğu ve bu değerden sonra ise sıcaklığa bağımlılığın değişmekte olduğu görülmüştür. Ancak bu sonuçlar $D_a = 3.7$ eV ve $D_o = 1\times10^9$ eV/cm için elde edilmiş olup, optik deformasyon sabitinin 100 kat azaltılması ile $n = 5\times10^{12}$ cm^{-2} değeri için de literatürle oldukça uyumlu sonuçlar elde edilmiştir (PEREBEINOS, 2010).

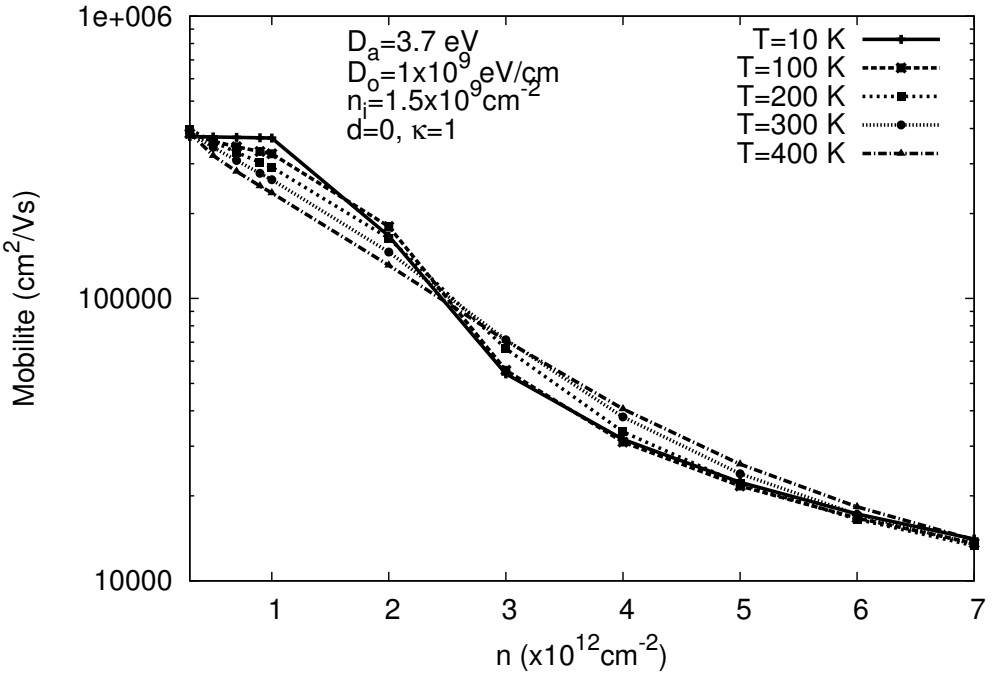
Bir sistemde meydena gelen saçılmalar alttabandan kaynaklanabildiği gibi malzemenin kendinden de kaynaklanabilmektedir. Saf grafenin kendi içinde barındırdığı safsızlıkların varlığında mobilite ve iletkenliğe etkisini görebilmek için yine iletkenlik hesabından elde edilen sonuçları akustik deformasyon potansiyel sabitinin iki farklı değeri



Şekil 4.29. Saf grafen için farklı elektron konsantrasyonlarında sıcaklıkla mobilite değişimi



Şekil 4.30. Saf grafen için farklı elektron konsantrasyonlarında sıcaklıkla iletkenlik değişimi



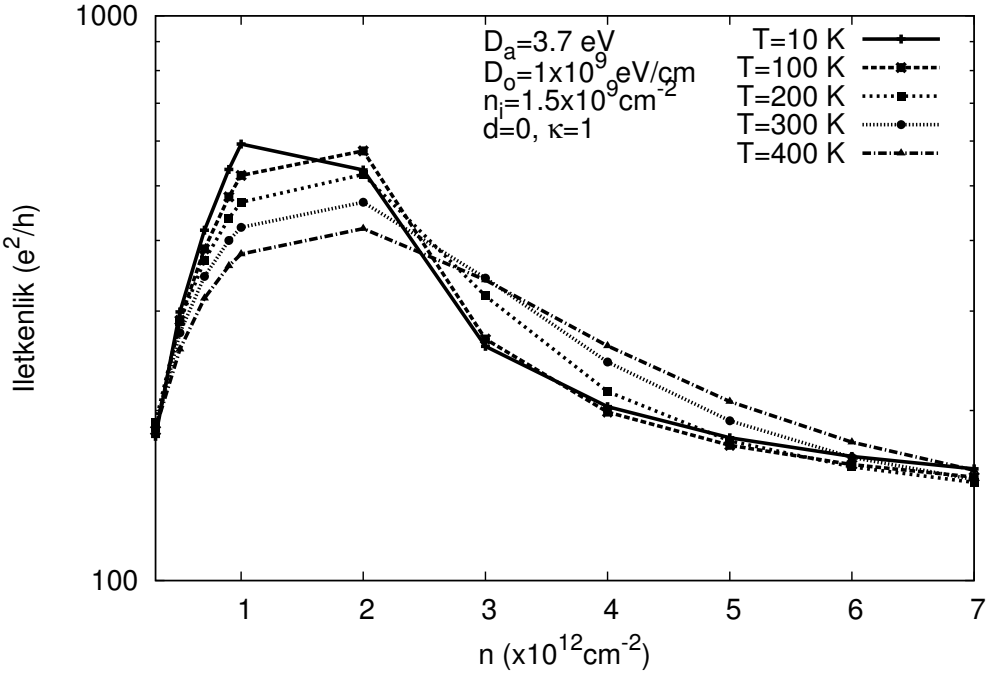
Şekil 4.31. Kendinden (düşük miktarda) safsızlık barındıran akustik deformasyon potansiyeli düşük olan saf grafen için farklı sıcaklıklarda elektron konsantrasyonu ile mobilite değişimi

için ($D_a = 3.7$ eV ve $D_a = 20$ eV) konsantrasyonla değişimi Şekil 4.31. ve Şekil 4.32.'den, sıcaklıkla değişimi Şekil 4.33. ve Şekil 4.34.'de gösterilmiştir. Bu sonuçlardan akustik deformasyon potansiyel sabitinin seçiminin ne derece önemli olduğu, her durum için farklı değerler kullanılması gerekliliği anlaşılmaktadır.

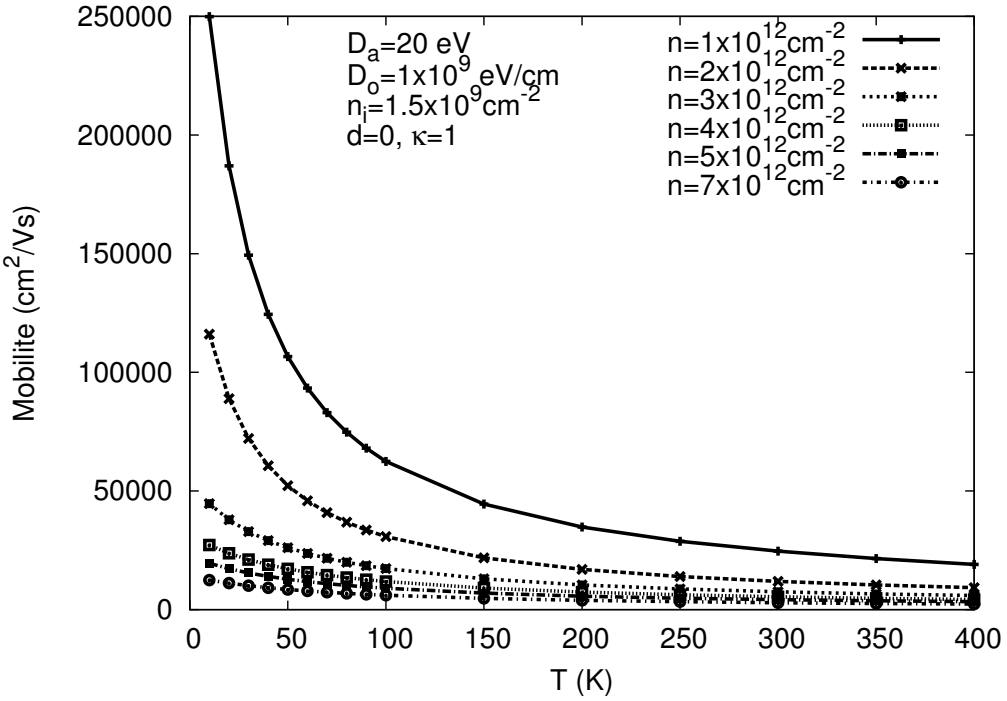
Alttabanın varlığında ise saf grafen durumuna ek olarak safsızlık saçılmasının eklenmesi ile iletkenlik hesabından yapılan mobilite ve iletkenlik sonuçlarının farklı elektron konsantrasyonlarında sıcaklıkla değişimi (Şekil 4.35., Şekil 4.36.) ve farklı sıcaklıklarda elektron konsantrasyonu ile değişimleri (Şekil 4.37., Şekil 4.38.) verilmiştir. Bu durum için de literatürle benzer sonuçlar elde edildiği Şekil 4.38.'den görülebilir (STAUBER, 2007).

Ayrıca yine saf grafen durumuna ek olarak sadece yüzey pürüzlülük saçılması eklendiğinde mobilite ve iletkenliğin sıcaklıkla değişimleri Şekil 4.39., Şekil 4.40.'de verilmiştir.

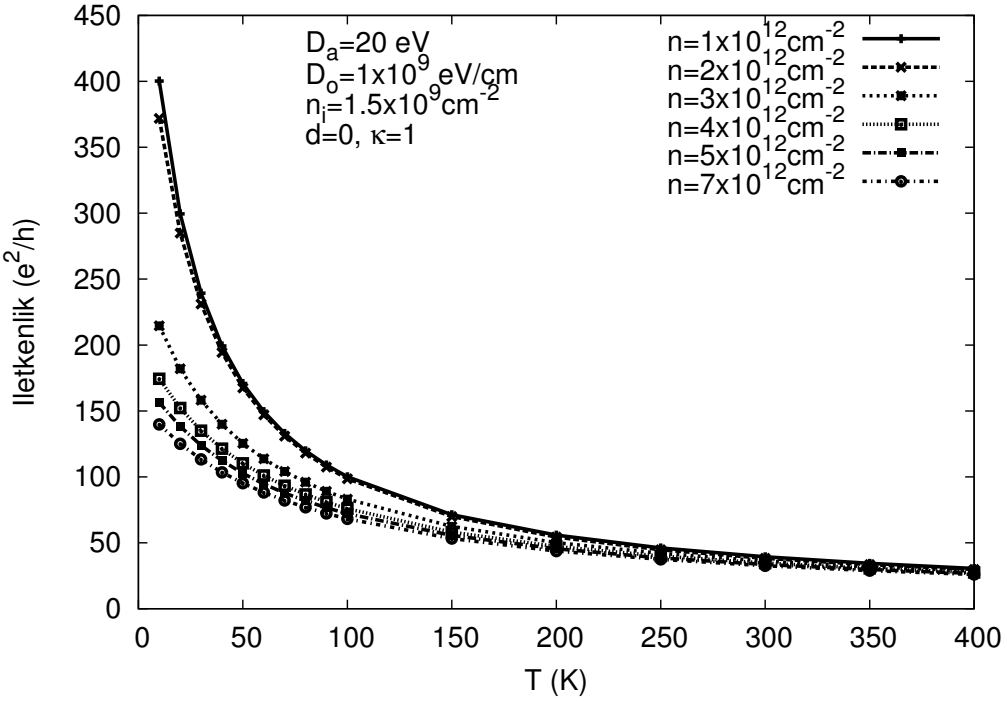
Tüm saçılma mekanizmalarının varlığında ise (saf grafen durumuna ek olarak yüklü safsızlık ve yüzey pürüzlülük saçılmalarının eklenmesi) mobilite ve iletkenliğin sıcaklıkla değişimi farklı elektron konsantrasyonları için Şekil 4.41. ve Şekil 4.42.'de



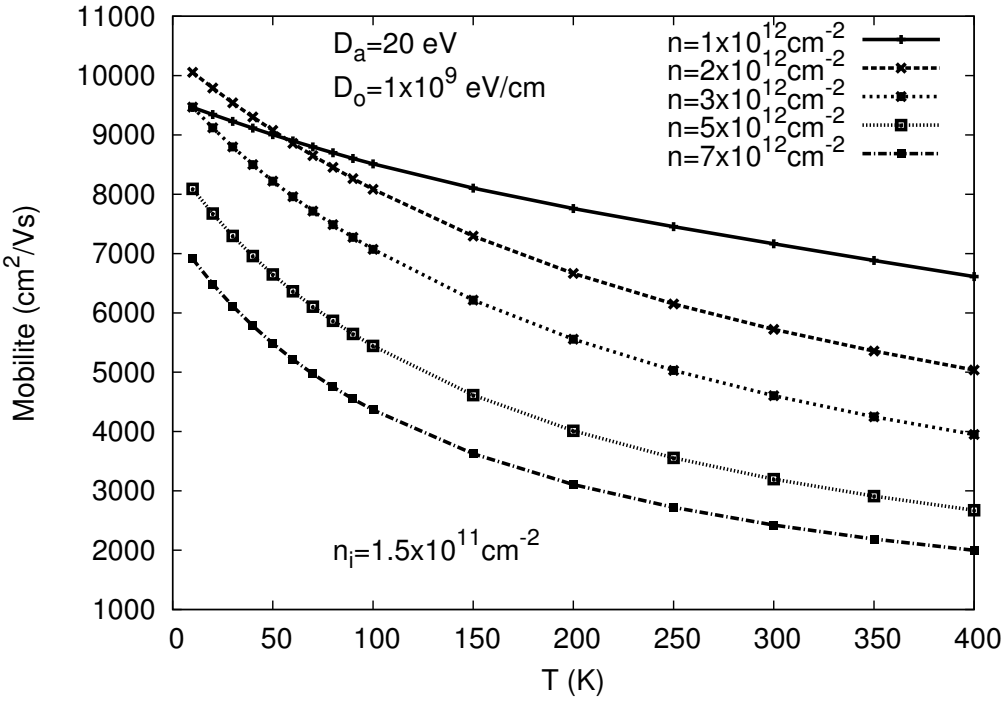
Şekil 4.32. Kendinden (düşük miktarda) safsızlık barındıran akustik deformasyon potansiyeli düşük olan saf grafen için farklı sıcaklıklarda elektron konsantrasyonu ile iletkenlik değişimi



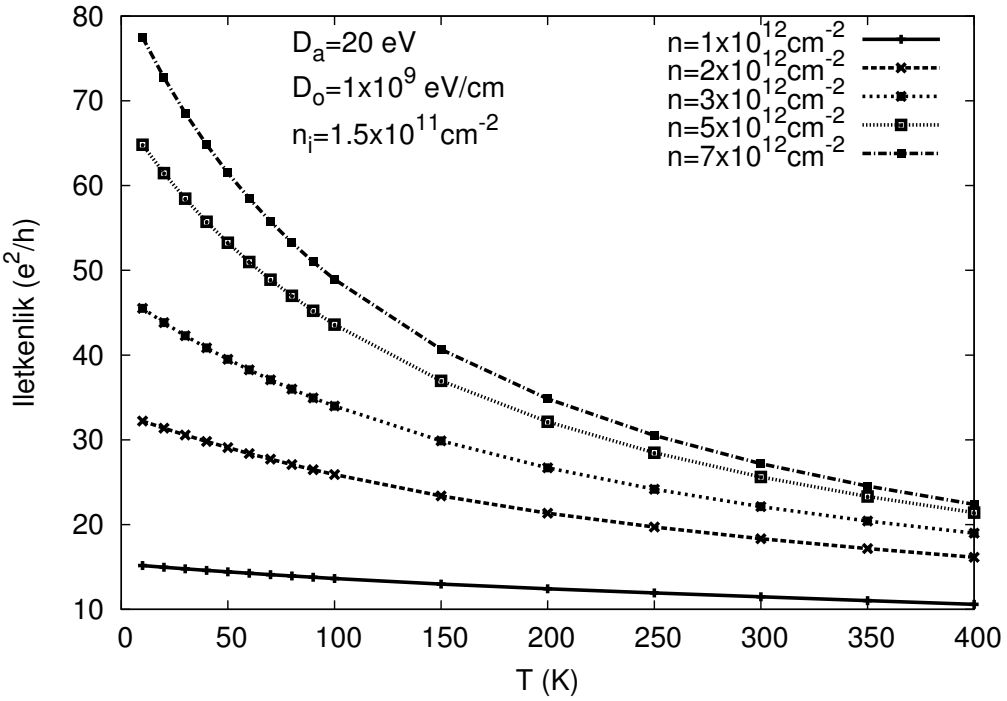
Şekil 4.33. Kendinden (düşük miktarda) safsızlık barındıran akustik deformasyon potansiyeli yüksek olan saf grafen için farklı elektron konsantrasyonlarında sıcaklıkla mobilite değişimi



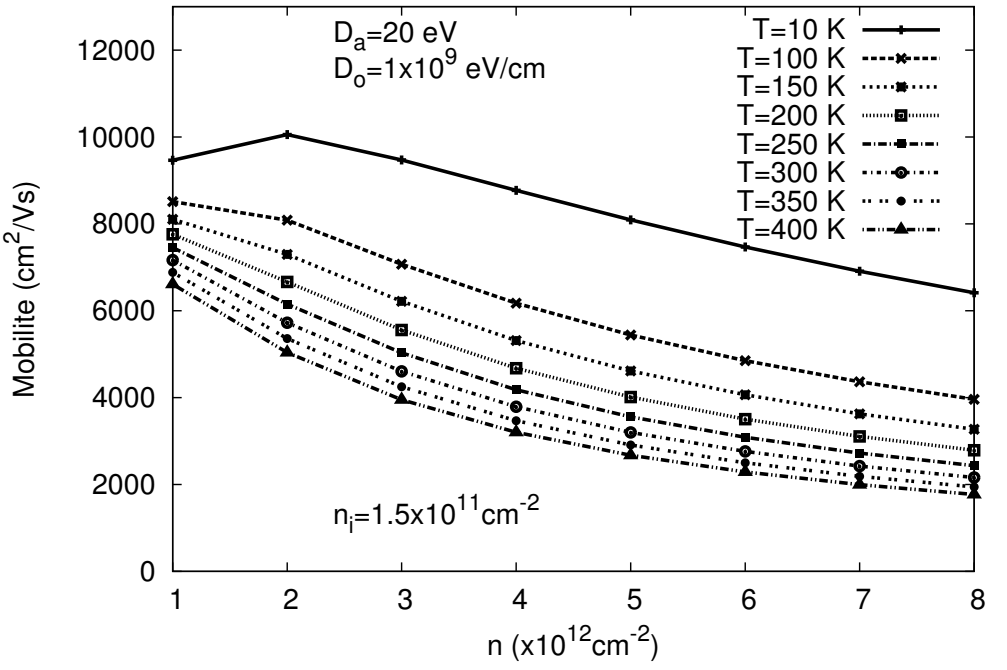
Şekil 4.34. Kendinden (düşük miktarda) safsızlık barındıran akustik deformasyon potansiyeli yüksek olan saf grafen için farklı elektron konsantrasyonlarında sıcaklıkla iletkenlik değişimi



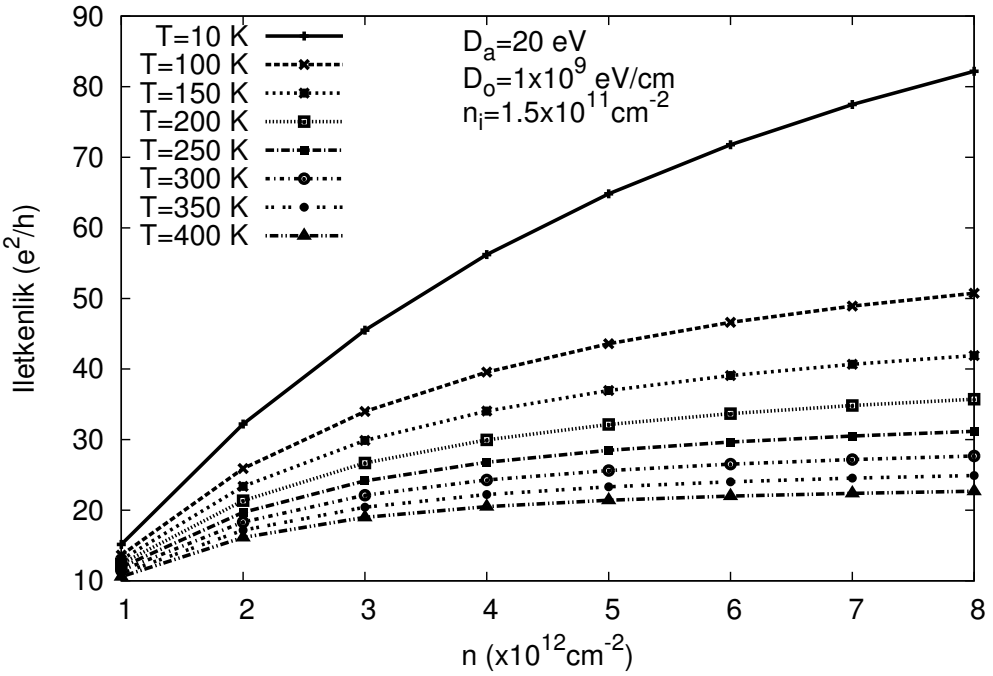
Şekil 4.35. Saf grafen durumuna ek olarak IMP eklenen durum için farklı elektron konsantrasyonlarında sıcaklıkla mobilite değişimi



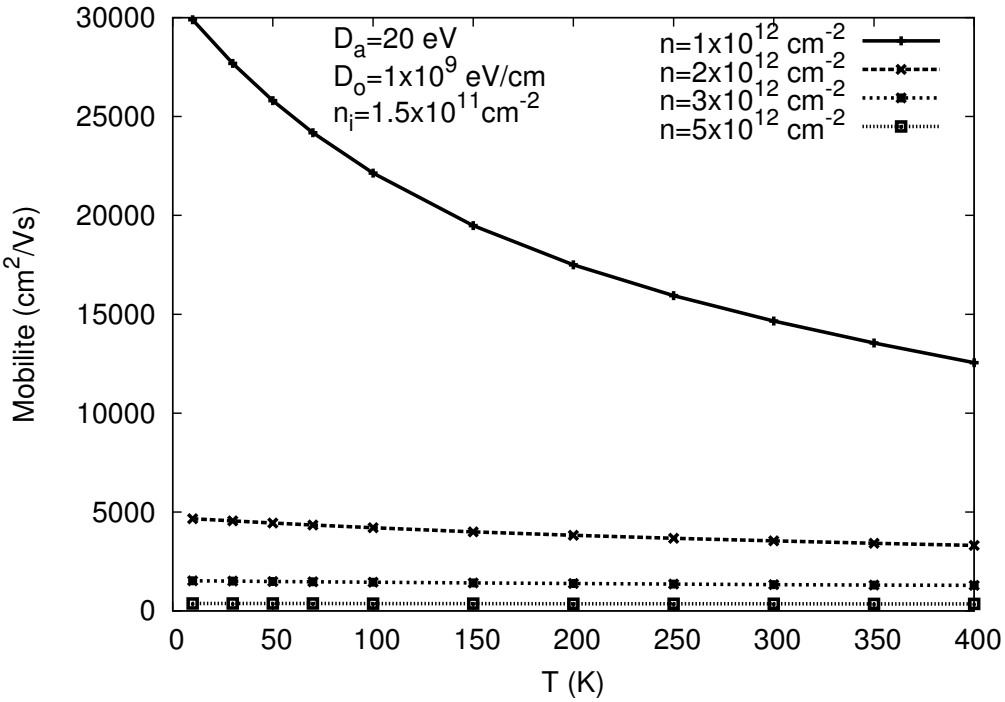
Şekil 4.36. Saf grafen durumuna ek olarak IMP eklenen durum için farklı elektron konsantrasyonlarında sıcaklıkla iletkenlik değişimi



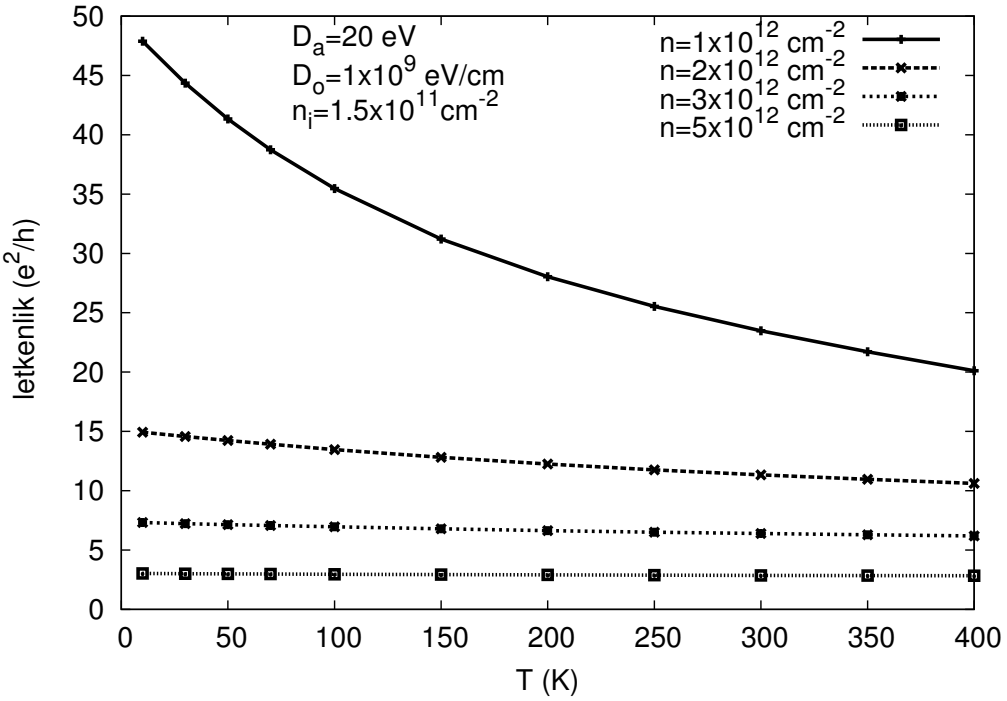
Şekil 4.37. Saf grafen durumuna ek olarak IMP eklenen durum için farklı sıcaklıklarda elektron konsantrasyonu ile mobilite değişimi



Şekil 4.38. Saf grafen durumuna ek olarak IMP eklenen durum için farklı sıcaklıklarda elektron konsantrasyonu ile iletkenlik değişimi



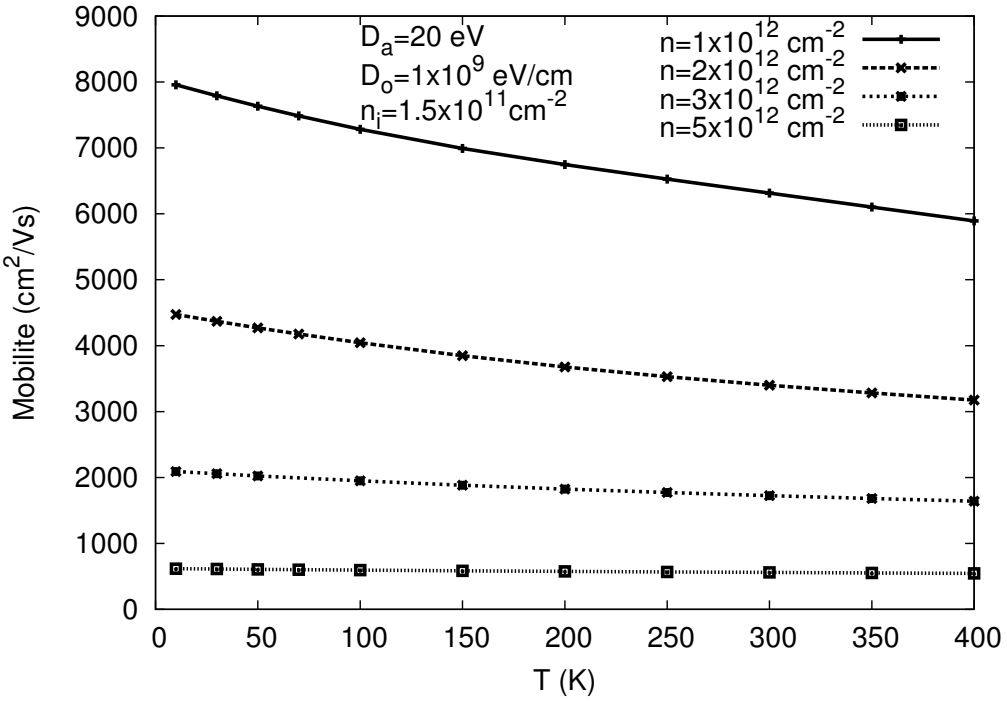
Şekil 4.39. Saf grafen durumuna ek olarak SR eklenen durum için farklı elektron konsantrasyonlarında sıcaklıkla mobilite değişimi



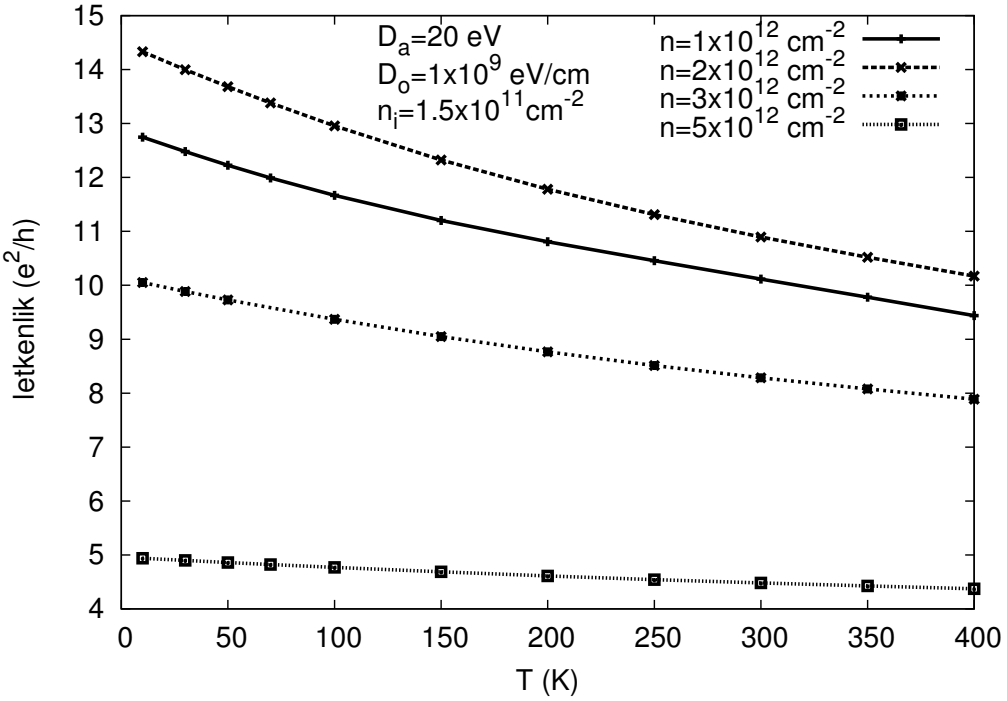
Şekil 4.40. Saf grafen durumuna ek olarak SR eklenen durum için farklı elektron konsantrasyonlarında sıcaklıkla iletkenlik değişimi

verilmiştir. Yine bu durumda (kirli grafen) mobilitenin farklı sıcaklıklar için elektron konsantrasyonu ile olan değişimi ise Şekil 4.43.'de verilmiştir. Bu sonuçların EMC ile elde edilen sonuçlarla benzer aralıkta sonuçlar verdiği görülebilir (Şekil 4.27.).

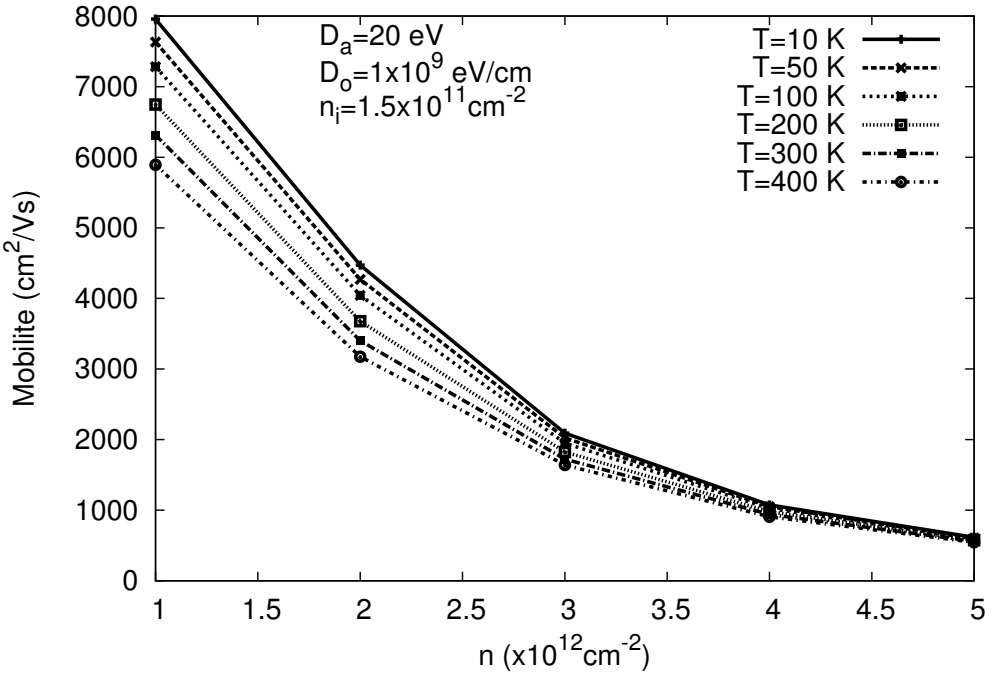
Ayrıca saf ve kirli grafen durumları için momentum uzayında parçacık dağılımları (Şekil 4.44., Şekil 4.45., Şekil 4.46., Şekil 4.47., Şekil 4.48., Şekil 4.49., Şekil 4.50., Şekil 4.51.) ve farklı elektrik alanlarında hız-konum eğrileri de (Şekil 4.52., Şekil 4.53., Şekil 4.54., Şekil 4.55.) elde edilmiştir. Saf grafen için katedilen mesafenin kirli grafene göre oldukça fazla olduğu rahatlıkla görülebildiği gibi, saf grafende gözlenen NDR etkisinden dolayı artan elektrik alanla alınan mesafe azalmıştır. Kirli grafen durumunda ise tam tersine alınan yol artan elektrik alanla artmıştır fakat bu mesafe saf grafene göre oldukça düşüktür.



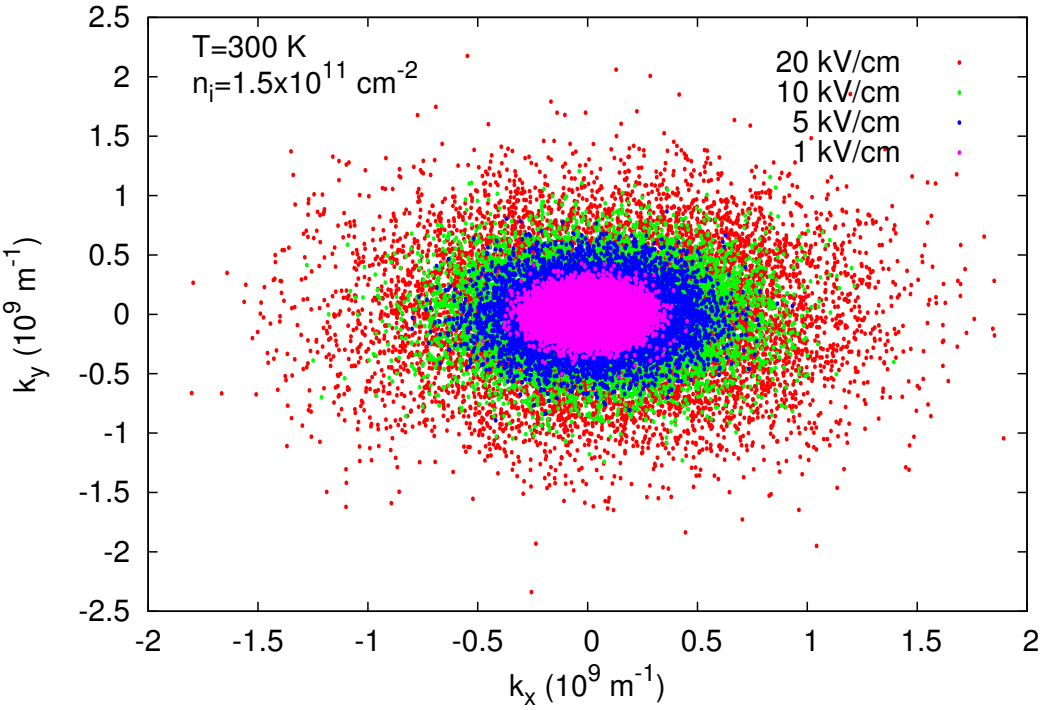
Şekil 4.41. Saf grafen durumuna ek olarak IMP ve SR eklenen durum için farklı elektron konsantrasyonlarında sıcaklıkla mobilite değişimi



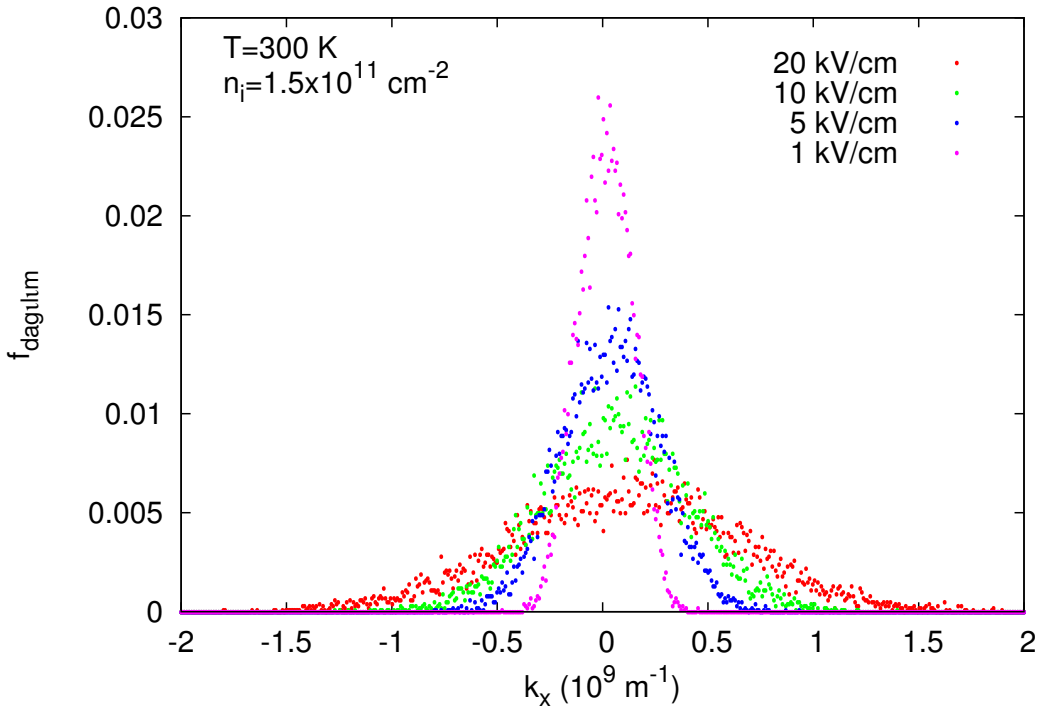
Şekil 4.42. Saf grafen durumuna ek olarak IMP ve SR eklenen durum için farklı elektron konsantrasyonlarında sıcaklıkla iletkenlik değişimi



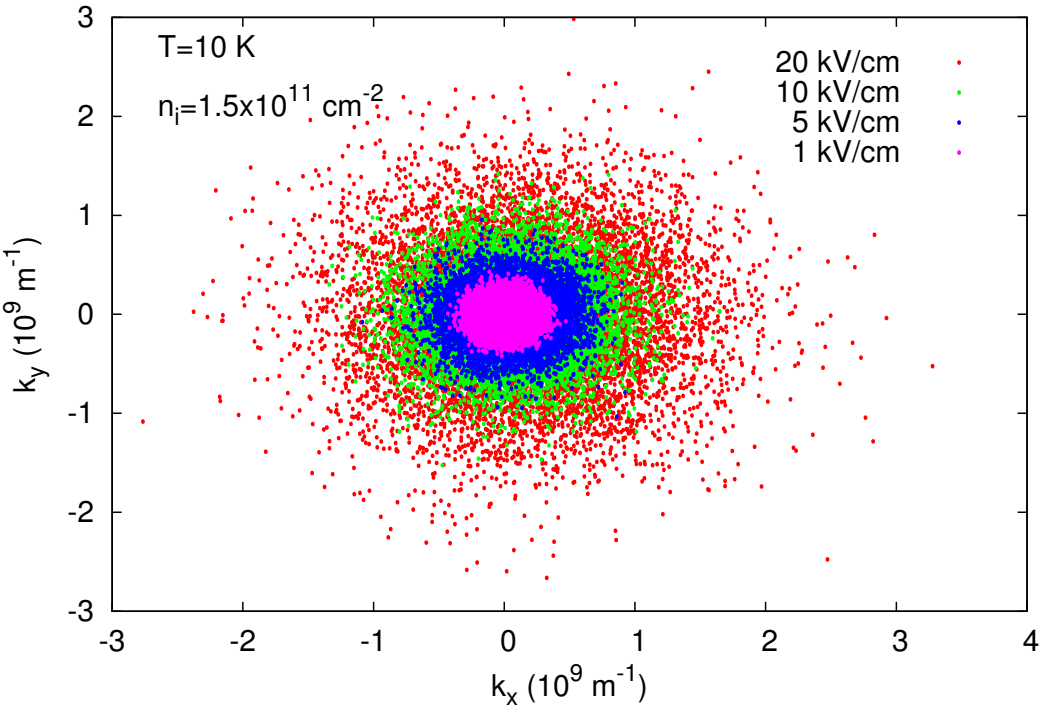
Şekil 4.43. Saf grafen durumuna ek olarak IMP ve SR eklenen durum için farklı sıcaklıklarda elektron konsantrasyonu ile mobilite değişimi



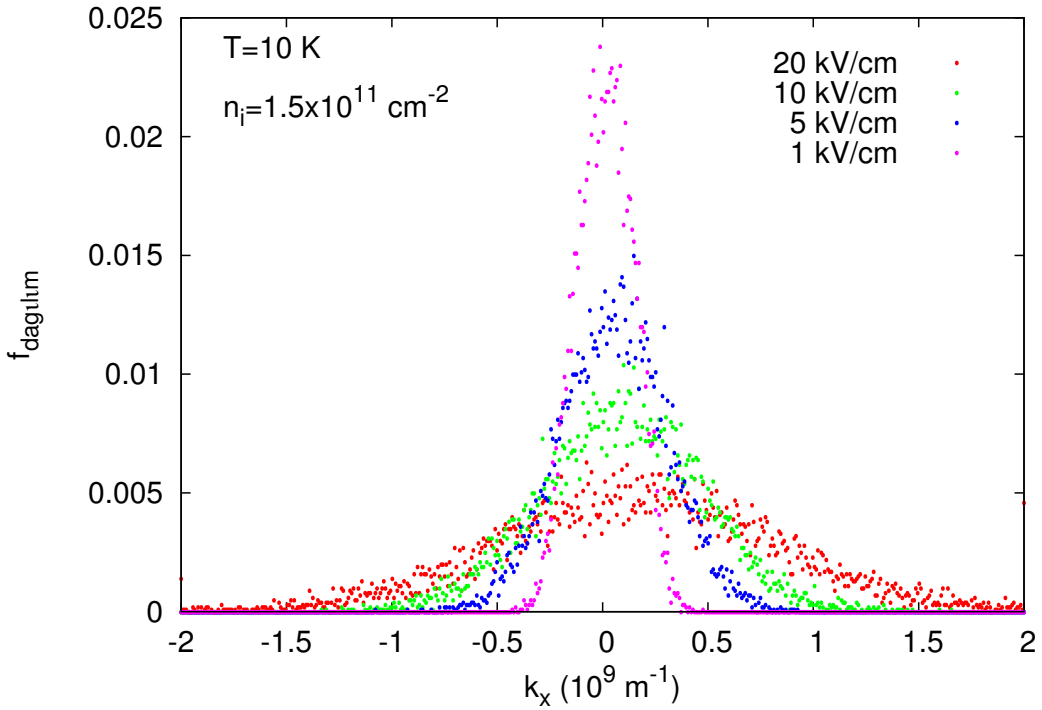
Şekil 4.44. Kirli grafen durumunda T=300 K için momentum uzayında parçacıkların dağılımı



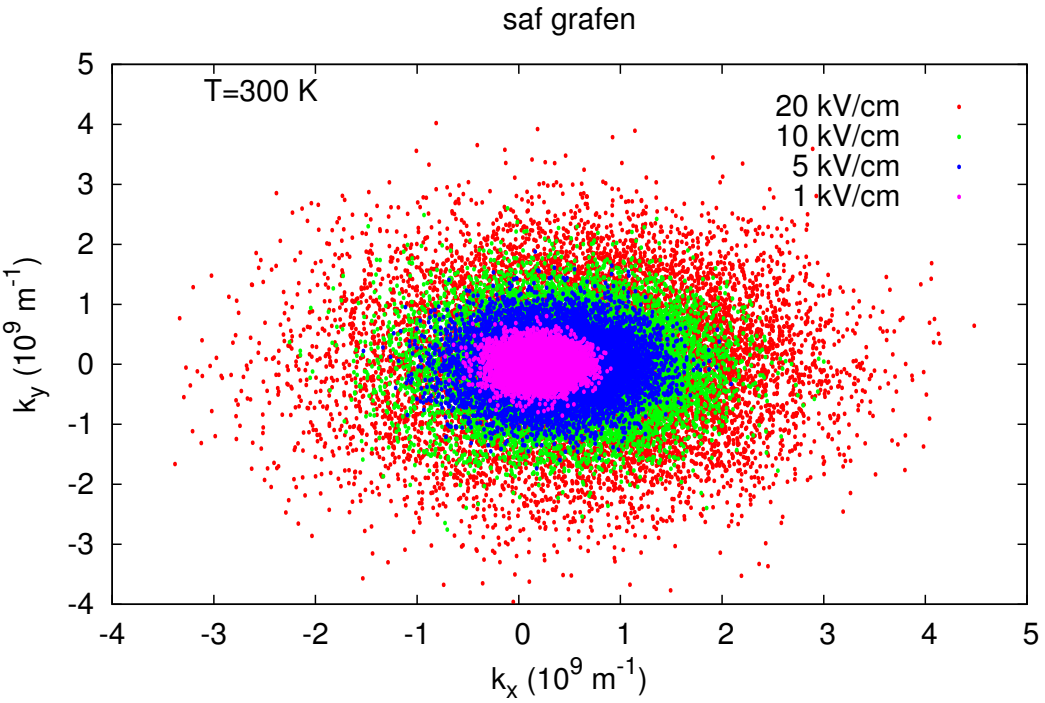
Şekil 4.45. Kirli grafen durumunda T=300 K için momentum uzayında parçacıkların Fermi dağılım fonksiyonu



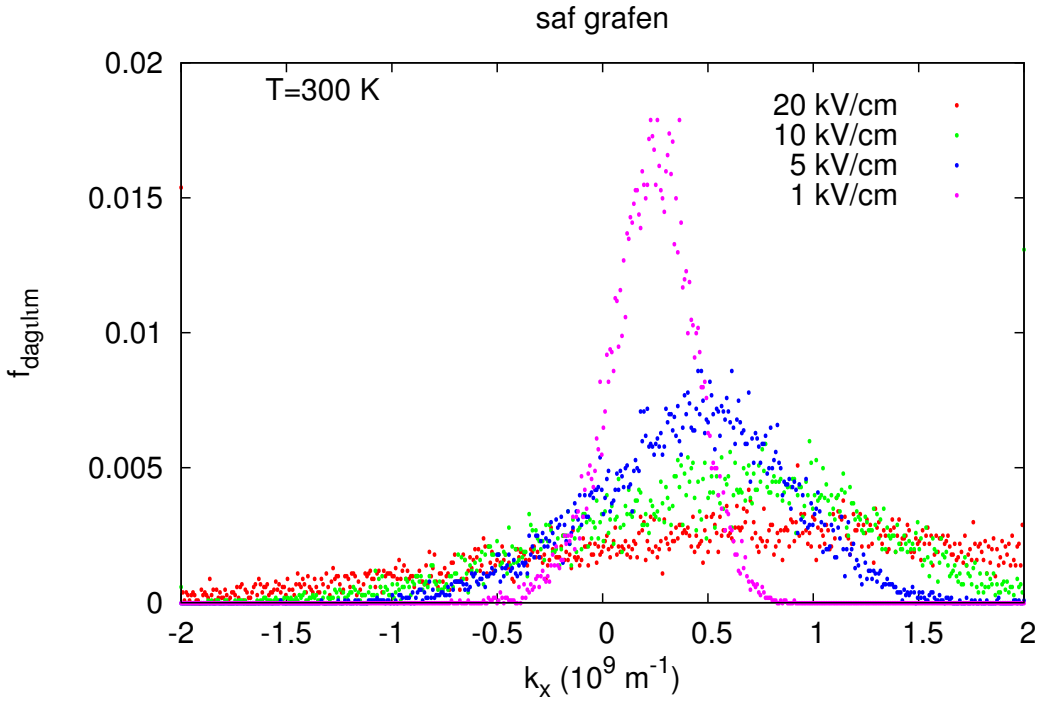
Şekil 4.46. Kirli grafen durumunda T=10 K için momentum uzayında parçacıkların dağılımı



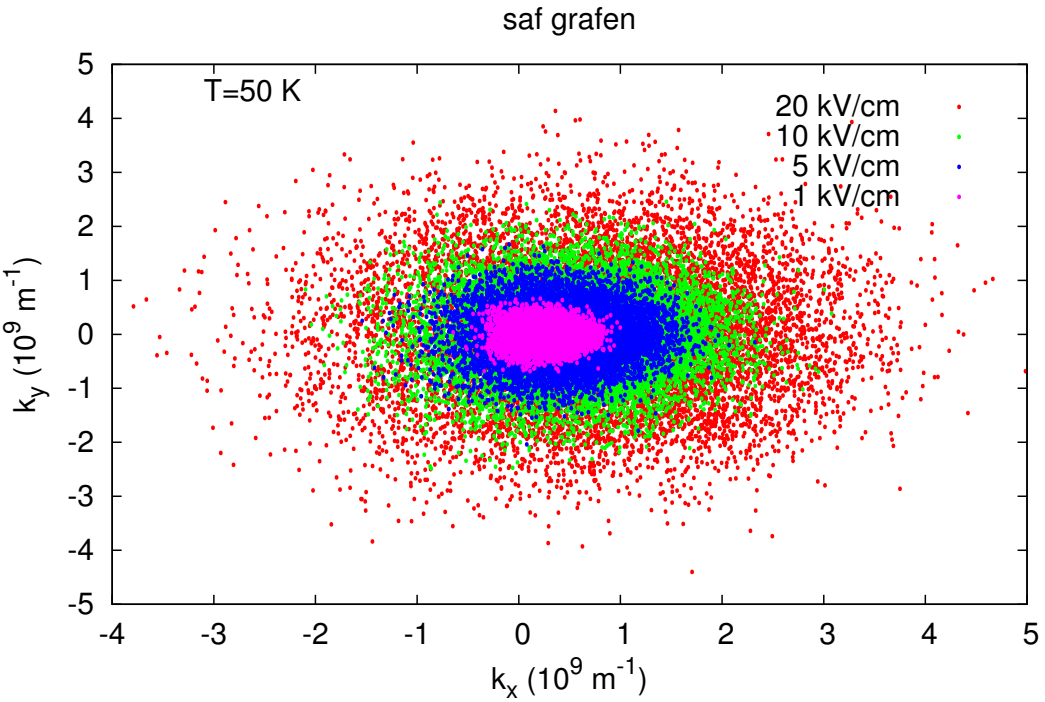
Şekil 4.47. Kirli grafen durumunda T=10 K için momentum uzayında parçacıkların Fermi dağılım fonksiyonu



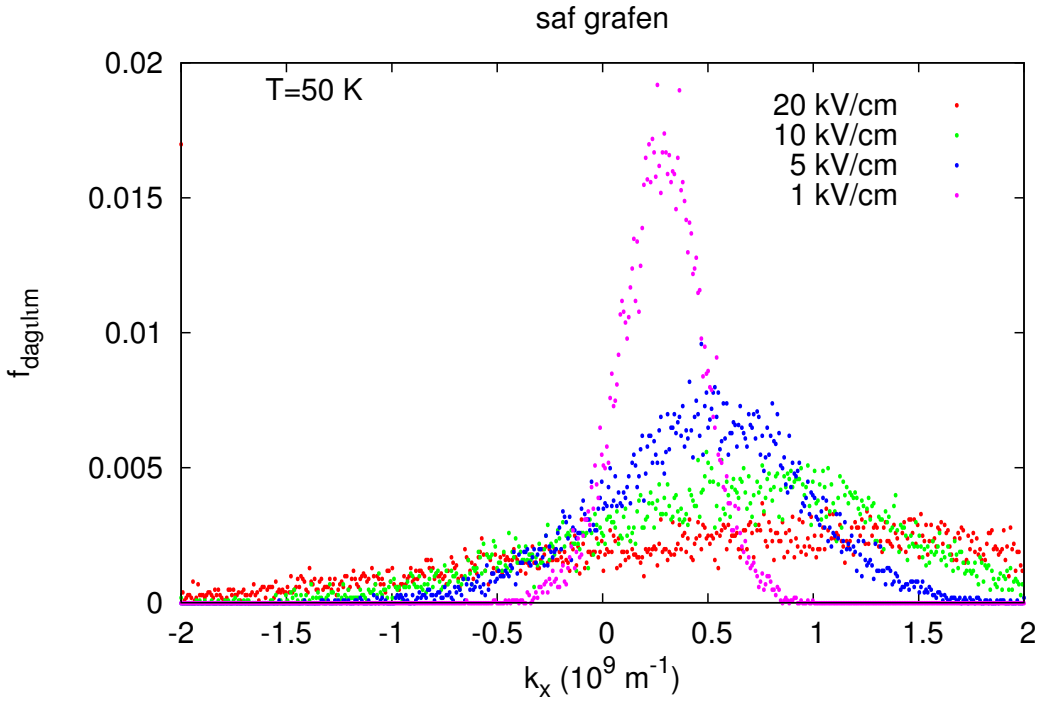
Şekil 4.48. Saf grafen durumunda T=300 K için momentum uzayında parçacıkların dağılımı



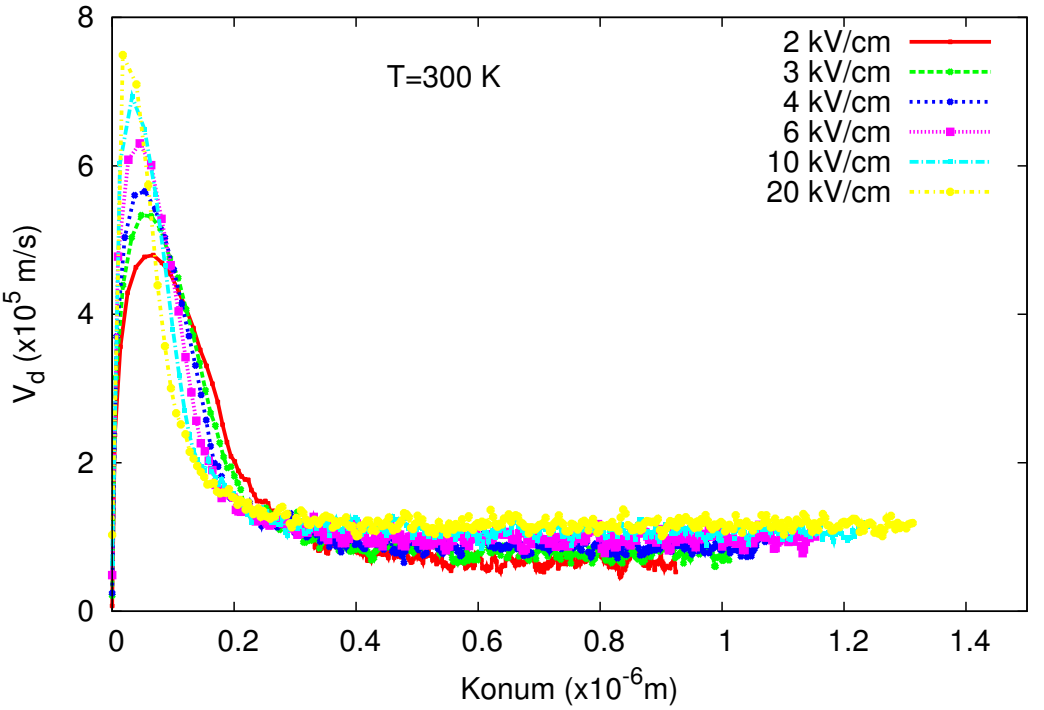
Şekil 4.49. Saf grafen durumunda T=300 K için momentum uzayında parçacıkların Fermi dağılım fonksiyonu



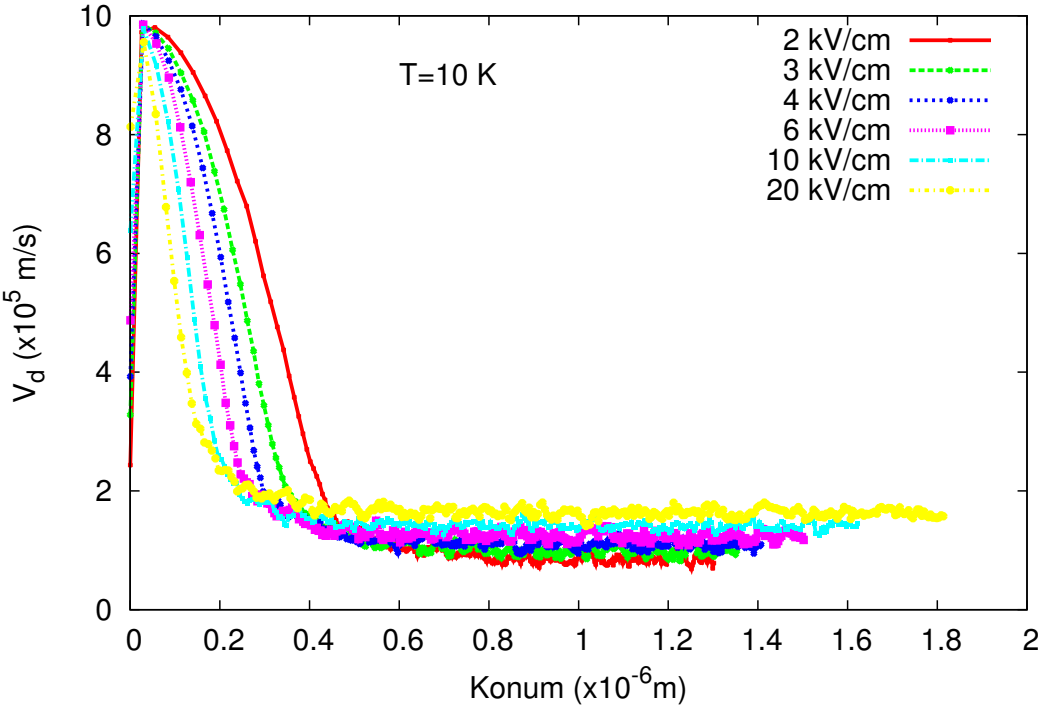
Şekil 4.50. Saf grafen durumunda T=50 K için momentum uzayında parçacıkların dağılımı



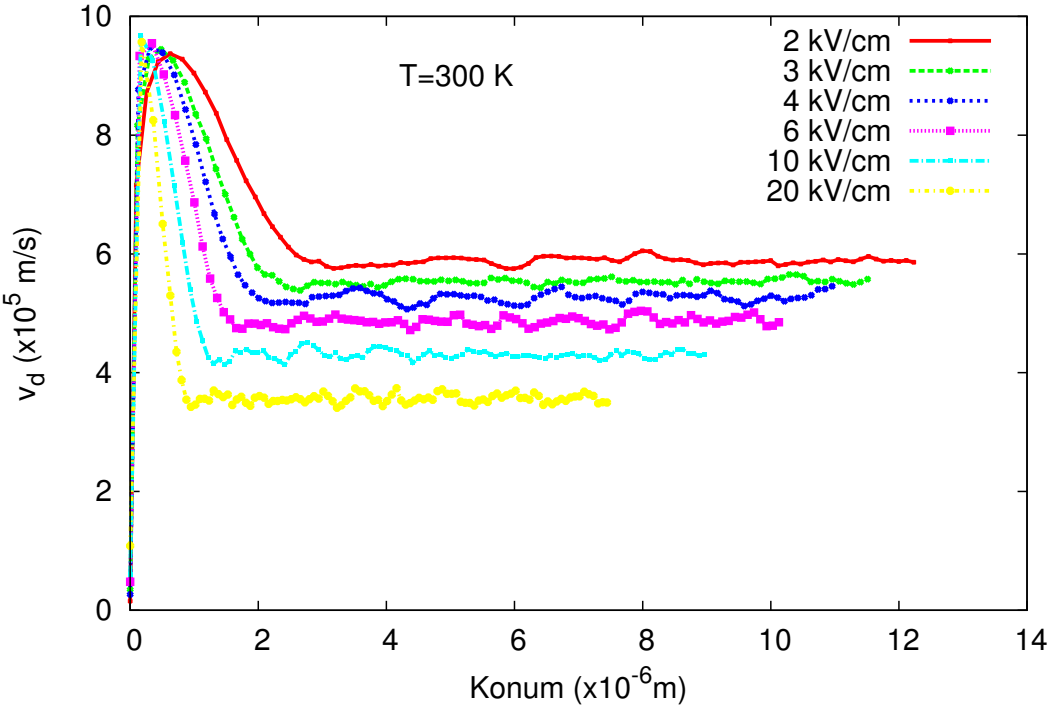
Şekil 4.51. Saf grafen durumunda T=50 K için momentum uzayında parçacıkların Fermi dağılım fonksiyonu



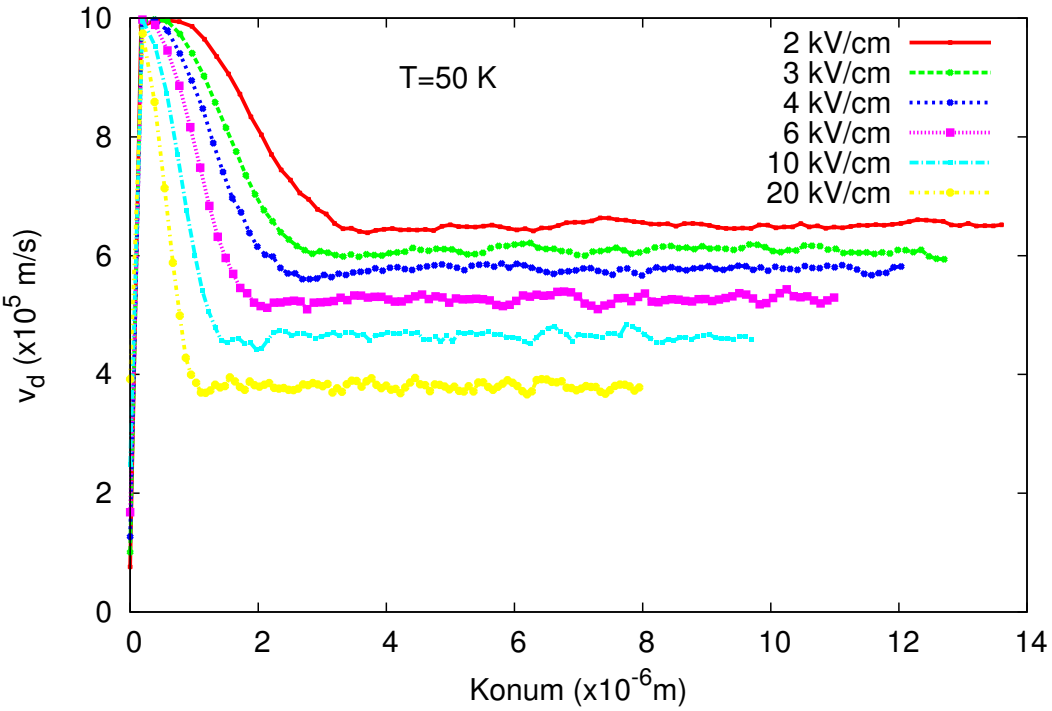
Şekil 4.52. Kirli grafen durumunda T=300 K için farklı elektrik alanlarında hız-konum eğrileri



Şekil 4.53. Kirli grafen durumunda T=10 K için farklı elektrik alanlarında hız-konum eğrileri



Şekil 4.54. Saf grafen durumunda T=300 K için farklı elektrik alanlarında hız-konum eğrileri



Şekil 4.55. Saf grafen durumunda T=50 K için farklı elektrik alanlarında hız-konum eğrileri

5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Grafenin düzgün altıgen yapısında atomların yönelim ve dağılım açısından oluşturdukları örgü bir Bravais örgüsünün özelliklerini sağlamaz. Bu nedenle ters örgü uzayı da Bravais örgü özelliklerini sağlamaz. Bal peteği örgüsünde her noktadaki atomlar aynı olmasına rağmen yönelim farklı olduğundan, yapı iki bazlı üçgensel bir örgü veya iki adet iç içe geçmiş üçgen örgü olarak seçilebilir. Bu yüzden grafenin ters örgü uzayı iç içe geçmiş iki üçgen örgünün toplamı olarak düşünülür. Bu iki farklı örgüye karşılık gelen ters örgü uzayında Brillouin Bölgesindeki noktalar genel olarak K ve K' noktaları olarak bilinir ve bunlar Dirac noktaları olarak anılır. Grafenin tamamıyla iki boyutlu olmasının yanında en önemli özelliklerinden bir tanesi, enerjinin ters örgü uzayında K ve K' noktaları civarında momentumla doğrusal değişmesi ve bu nedenle taşıyıcı etkin kütlesinin sıfır olması, diğeri ise yasak enerji aralığının olmamasıdır. Grafen enerji bant yapısının bu özelliği nedeniyle yarıiletken ara yüzeylerinde oluşturulan iki boyutlu yapılardan çok farklı elektronik özellikler sergilemektedir. Grafen yeni nesil teknolojiler için silikon tabanlı cihazların alternatifi olarak düşünülmektedir. Gösterdiği elektronik ve optik özellikler bakımından grafene olan ilgi artarak devam etmektedir.

Bu tez çalışmasında tek tabaka grafenin elektron taşınım olgusu, uygulanan bir elektrik alanı altında bütün detayları ile ensemble Monte Carlo yöntemi ile incelenmiştir. Bu tezde göz önüne alınan saçılma mekanizmaları: akustik ve polar olmayan optik fononlar (soğurma ve yayınım), yüklü safsızlık saçılması, buruşuk yüzey (yüzey/ara yüzeyden kaynaklanan) saçılması ve yüzey polar fonon (soğurma ve yayınım) saçılmalarıdır. Bu saçılma mekanizmalarının her biri ayrı ayrı incelenmiş olup faklı durumlarda sürüklenme hızlarına olan etkileri değişik ortam koşullarına göre incelenmiştir. Tek tabaka grafenin saf olarak kabul edildiği asılı grafen durumu ve alt tabandan kaynaklı veya grafenin kendisinden kaynaklanan çeşitli safsızlıkların varlığında oluşan kirli grafen durumları ayrı ayrı ele alınmıştır.

Saf grafen durumunda etkili saçılma mekanizmaları akustik ve optik fononlar olup, bu durum için düşük elektrik alanlar altında elektronların kararlı duruma ulaşma süreleri diğer durumlara göre oldukça uzun sayılır. Çünkü malzemeye uygulanan elektrik alan arttıkça elktron hızı ve enerjisi artmakta ve optik fonon saçılmaları devreye girmekte-

dir. Optik fonon enerjileri yüksek olduğundan optik fonon saçılmasına uğrayan elektronlar büyük oranda enerji kaybederek tekrar düşük enerjili elektronlar haline dönüşürler. Yani optik fonon saçılmaları neredeyse bir enerji bariyeri gibi davranarak elektronların kararlı hıza ulaşmasındaki en büyük etken niteliğindedirler. Sıcaklık arttıkça da elektronların sürüklenme hızlarının azaldığı görülmüştür.

Heteroeklem yapılarda görülen negatif diferansiyel direnç (NDR), yani uygulanan alanın artmasıyla hızın azalması durumu saf grafen için de gözlenmiş olup, kirli grafen durumlarında ortam ve malzeme parametrelerine bağlı olarak ya hiç gözlenmemiş veya etkisi daha az olmuştur. Saf grafen için akustik deformasyon sabitinin artması NDR etkisini önemli ölçüde azaltmaktadır. Bu optik fonon saçılmasının akustik fonon saçılması ile baskılanmasından kaynaklanır.

Kirli grafen durumlarında göz önüne alınan saçılma mekanizmaları: akustik ve optik fonon saçılmalarına ek olarak ayrı ayrı veya bir bütün halinde diğer saçılma mekanizmalarıdır. Bu durumlar için ise genel olarak; eğer yüksek oranda safsızlık mevcutsa yüklü safsızlık saçılmasının düşük sıcaklıklarda bile en etkili mekanizma olduğu söylenebilir. Ayrıca kirli grafen için, saf grafen durumundan farklı bir davranış sergileyen hız-alan eğrisi elde edilmiştir. Kirli grafen için, örneğin saf grafene ek olarak sadece yüklü safsızlık saçılması göz önüne alındığında, NDR etkisi daha belirgin hale gelmeye başlamaktadır. Fakat yüklü safsızlık saçılmasına ek olarak yüzey pürüzlülük saçılması eklendiğinde NDR etkisi gözlenmemektedir. Bu durumlar için ayrıca EMC yöntemi ile düşük alan mobilite hesapları da yapılmış olup elde edilen sonuçlar deneysel gözlemlerle tutarlıdır.

Aynı zamanda yarı klasik iletkenlik denklemi kullanılarak da iletkenlik ve mobilite hesaplamaları yapılmış olup literatürle kıyaslamaları yapılmıştır. Saf grafen için iletkenlik hesabı ile hesaplanan mobilite ile EMC ile hesaplanan mobilitelerin oldukça uyumlu olduğu görülmüş, her iki yöntemle elde edilen kirli grafen durumlarının mobiliteleri ise benzer sonuçlar vermiştir. Her durum için iletkenliklerin genellikle sıcaklıkla azaldığı, IMP saçılması varlığında incelenen durumun konsantrasyonla arttığı gözlenmiştir. Bu gözlem de literatürle uyum içindedir.

Grafenin elektron taşınım özelliklerinin Monte Carlo yöntemi ile incelenmesi literatürde fazla çalışılmış bir konu değildir. Ayrıca bazı saçılma mekanizmaları, örneğin

buruşuk yüzey saçılması, tam olarak incelenmemiştir. Ayrıca deneysel çalışma yapan gruplara çeşitli öngörülerde bulunabilmesi açısından bu tez çalışması yol gösterici olabilecektir. Grafen üzerine kurulu teknoloji henüz günlük hayatın bir parçası olmuş değildir, bu nedenle bu tez çalışması özellikle grafen tabanlı aygıt tasarımı ve modellenmesine yol gösterici nitelikte bir çalışma olacaktır. Diğer yanda tek katmanlı bu yapının incelenmesine ek olarak daha çok katmanlı grafendeki olası saçılma mekanizmalarının etkilerinin incelenmesi için de bir ilk adım niteliğindedir.

KAYNAKLAR

ADAM, S., HWANG, E. H., GALITSKI, V. M., and Das SARMA, S., 2007. A self-consistent theory for graphene transport, PNAS, vol. 104, no. 47: 1839218397.

ADAM, S., HWANG, E. H., and Das SARMA, S., 2008. Scattering mechanisms and Boltzmann transport in graphene, Physica E 40: 1022.

ADAM, S., and Das SARMA, S., 2008. Transport in suspended graphene, Solid State Commun. 146: 356.

ADAM, S., HWANG, E. H., ROSSI, E., and Das SARMA, S., 2009. Theory of charged impurity scattering in two-dimensional graphene, Solid State Commun. 149: 1072.

AHARONOV, Y., and BOHM, D., 1959. Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory, Phys. Rev. 115: 485.

AKTURK A., and GOLDSMAN, N., 2008. Electron transport and full-band electron-phonon interactions in graphene, J. App. Phys. 103: 053702.

ANDO, T., FOWLER, A. B., and STERN, F., 1982. Electronic properties of two-dimensional systems, Rev. Mod. Phys. 54: 437.

ANDO, T., 2006. Screening Effect and Impurity Scattering in Monolayer Graphene, Journal of the Physical Society of Japan 75: 074716.

ASHCROFT, N. W. and MERMIN, N. D., 1976. Solid state physics, Cornell University, 848s.

BARBOLINA, I. I., NOVOSELOV, K. S., MOROZOV, S. V., DUBONOS, S. V., MISSOUS, M., VOLKOV, A. O., CHRISTIAN, D. A., GRIGORIEVA, I. V., and GEIM, A. K., 2006. Submicron sensors of local electric field with single-electron resolution at room temperature, Appl. Phys. Lett. 88: 013901.

BEENAKKER C. W. J., 2008. Andreev reflection and Klein tunneling in graphene, Rev. Mod. Phys. 80: 1337.

BERGER, C., SONG, Z. M., LI, T. B., LI, X. B., OGBAZGHI, A. Y., FENG, R., DAI, Z. T., MARCHENKOV, A. N., CONRAD, E. H., FIRST, P. N., and de HEER, W. A., 2004. Ultrathin epitaxial graphite: 2D electron gas properties and a route toward graphene-based nanoelectronics, J. Phys. Chem. B 108: 19912.

BOLOTIN, K. I., GHAHARI, F., SHULMAN, M. D., STORMER, H. L., and KIM, P.,

2009. Observation of the fractional quantum Hall effect in graphene, Nature, 462: 196.

BUNCH, J. S., VERBRIDGE, S. S., ALDEN, J. S., VAN DER ZANDE, A. M., PARPIA, J. M., CRAIGHEAD, H. G. and MCEUEN, P. L., 2008. Nano Lett., 8:2458.

CASTRO, E. V., NOVOSELOV, K. S., MOROZOV, S. V., PERES, N. M. R., Dos SANTOS, J., NILSSON, J., GUINEA, F., GEIM, A. K., and NETO, A. H. C., 2007. Biased bilayer graphene: semiconductor with a gap tunable by electric field effect, Phys. Rev. Lett. 99: 216802.

CASTRO NETO, A. H., GUINEA, F. and PERES, N. M. R., NOVOSELOV, K. S., GEIM, A. K., 2009. The Electronic Properties of Graphene, Rev. Mod. Phys., Vol. 81, No. 1.

CHAUHAN, J. and GUO, J., 2009. High-field transport and velocity saturatiaon in graphene, Applied Physics Letters 95, 023120.

Das SARMA, S., ADAM, S., HWANG, E. H., ROSSI, E., and 2011. Electronic transport in two-dimensional graphene, Rev. Mod. Phys. 83: 407.

DAVIES, J. H., 1998. The Physics of Low-Dimensional Semiconductors: an Introduction, Cambridge University Press, Oxford.

De HEER, W. A., BERGER, C., and FIRST, P. N., 2006. Patterned thin film graphite devices and methods for making same, US 7015142 B2.

DiVINCENZO, D. P., and MELE, E. J., 1984. Self-consistent effective-mass theory for intralayer screening in graphite intercalation compounds, Phys. Rev. B 29: 1685.

DU, X., SKACHKO, I., DUERR, F., LUICAN, A., and ANDREI, E. Y., 2009. Fractional quantum Hall effect and insulating phase of Dirac electrons in graphene, Nature, 462: 192.

FANG, T., KONAR, A., XING, H., and JENA, D., 2011. High-field transport in two-dimensional graphene, Phys. Rev. B 84: 125450.

FICHTHORN, K. A., and WEINBERG, W. H., 1991. Theoretical foundations of dynamical Monte Carlo simulations, J. Chem. Phys. 95(2).

FISCHETTI, M. V., NEUMAYER, D. A. and CARTIER, E. A., 2001. Effective electron mobility in Si inversion layers in metaloxidesemiconductor systems with a high-κ insulator:The role of remote phonon scattering, Journal of Applied

Physics, 90(9):45874608.

FORBEAUX, I., THEMLIN, J., and DEBEVER, J., 1998. Heteroepitaxial graphite on 6H-SiC(0001): Interface formation through conduction-band electronic structure, Phys. Rev. B 58: 16396.

FRATINI, S., and GUINEA, F., 2008. Substrate-limited electron dynamics in graphene, Phys. Rev. B 77, 195415.

GRADSHTEYN, I. S., and RYZHIK, I. M., 1965. Table of Integrals Series and Products 4th ed. London: Academic Press, Inc.

HILL, E. W., GEIM, A. K., NOVOSELOV, K., SCHEDIN, F., and BLAKE, P., 2006. Graphene Spin Valve Devices, IEEE Transactions on Magnetics 42: 2694.

HUEFNER, M., MOLITOR, F., JACOBSEN, A., PIODA, A., STAMPFER, C., ENSSLIN, K., and IHN, T., 2010. The AharonovBohm effect in a side-gated graphene ring, 12: 043054.

HWANG, E. H., ADAM, S., and Das SARMA, S., 2007. Carrier Transport in Two-Dimensional Graphene Layers, Phys. Rev. Lett. 98: 186806.

HWANG, E. H., and Das SARMA, S., 2008. Acoustic phonon scattering limited carrier mobility in two-dimensional extrinsic graphene, Phys. Rev. B 77: 115449.

HWANG, E. H., and Das SARMA, S., 2009. Screening-induced temperature-dependent transport in two-dimensional graphene, Phys. Rev. B 79: 165404.

JACOBONI, C., and LUGLI, P., 1989. The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation, Springer-Verlag/Wien New York.

KATSNELSON, M. I., NOVOSELOV, K. S., and GEIM, A. K., 2006. Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene, Nature Physics, 2: 620.

KATSNELSON, M. I., and GEIM, A. K., 2008. Electron scattering on microscopic corrugations in graphene, Phil. Trans. R. Soc. A 366: 195.

KITTEL, C., 1996. Introduction to Solid State Physics 7th ed. New York: John Wiley and Sons, Inc.

KLEIN, O., 1929. Die Reflexion von Elektronen an einem Potentialsprung nach der relativistischen Dynamik von Dirac, Zeitschrift für Physik, 53: 157.

KONAR, A., FANG, T. and JENA, D., 2010. Effect of high κ-gate dielectrics on charge transport in graphene-based field effect transistors, PHYSICAL REVIEW B 82,

115452.

KUZMENKO, A. B., van HEUMEN, E., van der MAREL, D., LERCH, P., BLAKE, P., NOVOSELOV, K. S., and GEIM, A. K., 2009. Infrared spectroscopy of electronic bands in bilayer graphene, Phys. Rev. B 79: 115441.

LANDAU, L. D., 1937. Theory of phase transformations. I, Phys. Z. Sowjetunion 11: 26.

LEE, C., WEI, X. D., KYSAR, J. W., and HONE, J., 2008. Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene, Science, 321: 385.

LI, X., BARRY, E. A., ZAVADA, J. M., NARDELLI, M. B., and KIM, K. W., 2010. Surface polar phonon dominated electron transport in graphene, Appl. Phys. Lett. 97: 232105.

LU, X. K., YU, M. F., HUANG, H., and RUOFF, R. S., 1999. Tailoring graphite with the goal of achieving single sheets, Nanotechnology, 10, 269.

MARTIN, J., AKERMAN, N., ULBRICHT, G., LOHMANN, T., SMET, J. H., Von KLITZING, K. and YACOBY, A., 2008. Observation of elctron-hole puddles in graphene using a scanning single-electron transistor, Nature, 4: 144-148.

McCLURE, J. W., 1956. Diamagnetism of Graphite, Phys. Rev. 104: 666.

MERIC, I., HAN, M. Y., YOUNG, A. F., OZYILMAZ, B., KIM P., and SHEPARD, K. L., 2008. Current saturation in zero-bandgap, topgated graphene field-effect transistors, Nature, 3: 654.

MERMIN, N. D., 1968. Crystalline order in two dimensions, Phys. Rev., 176: 250.

MEYER, J. C., GEIM, A. K., KATSNELSON, M. I., NOVOSELOV, K. S., BOOTH, T. J., ROTH, S., 2007. The structure of suspended graphene sheets, Nature, 446: 60.

MORI, N. and ANDO, T., 1989. Phys. Rev. B, 40(9):61756188.

MOROZOV, S. V., NOVOSELOV, K. S., KATSNELSON, M. I., SCHEDIN, F., ELIAS, D. C., JASZCZAK, J. A., and GEIM, A. K., 2008. Giant Intrinsic Carrier Mobilities in Graphene and Its Bilayer, Phys. Rev. Lett. 100: 016602.

NAIR, R. R., BLAKE, P., GRIGORENKO, A. N., NOVOSELOV, K. S., BOOTH, T. J., STAUBER, T., PERES, N. M. R., and GEIM, A. K., 2008. Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene, Science, 320: 1308.

NETO A. H. C., GUINEA, F., PERES, N. M. R., NOVOSELOV, K. S., and GEIM, A. K.,

2009. The electronic properties of graphene, Rev. of Mod. Phys. 81: 109.

NOVOSELOV, K. S., MOROZOV, S. V., JIANG, D., ZHANG, Y., DUBONOS, S. V., GRIGORIEVA, I. V., and FIRSOV, A. A., 2004. Electric field effect in atomically thin carbon films, Science, 306: 666.

NOVOSELOV, K. S., GEIM, A. K., MOROZOV, S. V., JIANG, D., KATSNELSON, M. I., GRIGORIEVA, I. V., DUBONOS, S. V., and FIRSOV, A. A., 2005. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene, Nature, 438: 197.

NOVOSELOV, K. S., JIANG, D., SCHEDIN, F., BOOTH, T. J., KHOTKEVICH, V. V., MOROZOV, S. V., and GEIM, A. K., 2005. Two-dimensional atomic crystals, Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA, 102: 10451.

NOVOSELOV, K. S., McCANN, E., MOROZOV, S. V., FALKO, V. I., KATSNELSON, M. I., ZEITLER, U., JIANG, D., SCHEDIN, F., and GEIM, A. K., 2006. Unconventional quantum Hall effect and Berry's phase of 2π in bilayer graphene, Nature Physics, 2: 177.

OHTA, T., BOSTWICK, A., SEYLLER, T., HORN, K., and ROTENBERG, E., 2006. Controlling the electronic structure of bilayer graphene, Science, 313: 951.

PEIERLS, R. E., 1923. Helv. Phys. Acta, 7: 81.

PEIERLS, R. E., 1935. Quelques proprietes typiques des corpses solides, Ann. Inst. H. Poincare 5: 177.

PEREBEINOS, V., and AVOURIS, P., 2010. Inelastic scattering and current saturation in graphene, Physical Review B 81 195442.

PRESS, W. H., FLANNERY, B. P., TEUKOLSKY, S. A. and VETTERLING, W. T., 1989. Numerical Recipes: The art of scientific computing (Fortran version), Cambridge University Press.

RECHER, P., TRAUZETTEL, B., RYCERZ, A., BLANTER, Ya. M., BEENAKKER, C. W. J., and MORPURGO, A. F., 2007. Aharonov-Bohm effect and broken valley degeneracy in graphene rings, Phys. Rev. B 76: 235404.

RUSSO, S., OOSTINGA, J. B., WEHENKEL, D., HEERSCHE, H. B., SOBHANİ, S. S., VANDERSYPEN, L. M. K., and MORPURGO, A. F., 2008. Observation of Aharonov-Bohm conductance oscillations in a graphene ring, Phys. Rev. B 77: 085413.

SAK, J., 1972. Phys. Rev. B, 6(10):39813986.

SEMENOFF, G. w., 1984. Condensed-Matter Simulation of a Three-Dimensional Anomaly, Phys. Rev. Lett. 53: 2449.

SHAH, R., TARIQ M. G. M., and RAM, N. S., 2013. Giant Reduction of Charge Carrier Mobility in Strained Graphene, Modern Physics Letters B, 27: 3.

SHISHIR, R. S., and FERRY, D. K., 2009. Velocity saturation in intrinsic graphene, J. Phys.: Condens. Matter 21: 344201.

SHISHIR, R. S., CHEN, F., XIA, J., TAO, N.J., and FERRY, D. K., 2009. Room temperature carrier transport in graphene, J Comput Electron, 8: 4350.

SNOWDEN, C. M., 1998. Semiconductor device Modeling. Peter Peregrinus Ltt., London, United Kingdom, 213s.

STAUBER, T., PERES, N. M. R., and GUINEA, F., 2007. Electronic transport in graphene: A semi-classical approach including midgap states, Phys. Rev. B 76: 205423.

TAN, Y. -W., ZHANG, Y., BOLOTIN, K., ZHAO, Y., ADAM, S., HWANG, E. H., Das SARMA, S., STORMER, H. L., and KIM, P., 2007. Measurement of scattering rate and minimum conductivity in graphene, Physical Review Letters, 99: 246803.

TOMIZAWA, K., 1993. Numerical Simulation of Submicron Semiconductor Devices, Artech House Inc, Boston.

Van BOMMEL, A., CROMBEEN, J., and Van TOOREN, A., 1975. LEED and Auger electron observations of the SiC(0001) surface, Surface Science, 48: 463.

WALLACE, P. R., 1947. The Band Theory of Graphite, Phys. Rev. 71: 622.

WANG, S. Q. and MAHAN, G. D., 1972. Phys. Rev. B, 6(12): 45174524.

YOUNG, A. F., and KIM, P., 2009. Quantum interference and carrier collimation in graphene heterojunctions, Nature Physics, 5: 222.

ZHANG, Y. B., TAN, Y. W., STORMER, H. L., and KIM, P., 2005. Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene, Nature, 38: 201.

ZHU, W., PEREBEINOS, V., FREITAG, M., and AVOURIS, P., 2009. Carrier scattering, mobilities, and electrostatic potential in monolayer, bilayer, and trilayer graphene, Physical Review B 80: 235402.

ÖZGEÇMİŞ

1 Nisan 1982 tarihinde K.Maraş/Afşin'de doğdu. Afşin Anadolu Lisesi'nden 2000 yılında mezun oldu. Aynı yıl Çukurova Üniversitesi Fizik bölümünü kazandı ve 2004 yılında lisans eğitimini tamamlayıp 2006 yılında da yüksek lisans derecesini aldı. 2009 yılında Çukurova Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsünde doktora öğrenimine başladı. 2009 yılından beri ise Aksaray Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü'nde Araştırma Görevlisi olarak çalışmalarını sürdürmektedir.