



# **Grafen Yapılarda Elektronik Fısıldayan Galeri Modları ve Güçlenmiş RKKY Etkileşimleri**

**PROJE SONUÇ RAPORU**

**Program Kodu: 1001**

**Proje No: 115F408**

Proje Yürütücüsü:

**Doç. Dr. Özgür Çakır**

Araştırmacı:

**Doç. Dr. Hâldun Sevinçli**

**MAYIS 2019 ANKARA**



TÜBİTAK'a projemize verdiği destekten dolayı teşekkür ederiz.

Proje sonuçları üzerine hazırlanıp dergiye gönderilen ve şu anda hakem değerlendirme aşamasında olan yayınlar:

- *"Enhanced indirect exchange interactions in the presence of circular potentials in graphene"*  
A. U. Canbolat, Ö. Çakır, Phys. Rev. B

Proje sonuçları üzerine şu anda yayına hazırlanmakta olan çalışmalar:

- "RKKY interaction in group 15 elements: Effect of quartic dispersion " A. U. Canbolat, H. Sevincli, Ö. Çakır

Proje süresince proje ekibince şu bildiriler sunulmuştur:

- "Grafen Yapılarda Elektronik Fısıldayan Galeri Modları ve Güçlenmiş RKKY Etkileşimleri"  
A. U. Canbolat, Ö. Çakır  
Yoğun Madde Fiziği İzmir toplantısı, 21 Nisan 2017, İzmir
- "Grafen Yapılarda Elektronik Fısıldayan Galeri Modları ve Güçlenmiş RKKY Etkileşimleri"  
A. U. Canbolat, Ö. Çakır  
24. İstatistiksel Fizik Günleri, 29 Haziran 2017, İzmir
- "Enhanced RKKY Interaction by Whispering Gallery Modes in Graphene"  
A. U. Canbolat, Ö. Çakır  
2. Kuantum Optiği ve Bilişimi toplantısı, 1-2 Şubat 2018, İstanbul

Proje kapsamında desteklenen aşağıdaki bursiyerler, lisansüstü eğitimini proje yürütücüsünün danışmanlığında tamamlamıştır:

- Hazan Özkan, Temmuz 2018.

Dr. Özgür Çakır

İzmir, Mayıs 2019



# İÇİNDEKİLER

<b>ÖNSÖZ</b>	<b>i</b>
<b>ÖZET</b>	<b>ix</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>xi</b>
<b>1. GİRİŞ</b>	<b>1</b>
1.1. İndirekt manyetik etkileşimler . . . . .	1
1.2. Dış potansiyeller vasıtasıyla RKKY etkileşimlerinin ve adatomlar arası kuvvetlerin kontrolü . . . . .	2
1.3. Enerji bant yapısına bağlı olarak RKKY etkileşiminin değişimi . . . . .	3
1.4. Projenin Amaç, Hedef ve Sonuçlarına Dair . . . . .	3
<b>2. RKKY Etkileşimlerinin Dış Potansiyeller Varlığında Hesaplanması</b>	<b>4</b>
2.1. Yığınsal Grafen Yapılarda RKKY etkileşimleri . . . . .	5
2.2. Yığınsal Nötr Grafende RKKY Etkileşimi . . . . .	8
2.3. Dairesel potansiyel altında elektronik modların belirlenmesi ve RKKY etkileşimlerinin hesaplanması . . . . .	9
2.4. Green fonksiyonları ve RKKY etkileşiminin hesaplanması . . . . .	14
<b>3. Sıkı Bağlanma Modeli ile RKKY etkileşimlerinin Modellenmesi</b>	<b>19</b>
3.1. Gauss Potansiyeli . . . . .	19
3.2. Farklı Potansiyellerin Etkisi . . . . .	21
3.3. Katkılama Etkisi . . . . .	25
3.4. Sıkı Bağlanma Modeli Altında RKKY etkileşimi: Kısmi-bağlı durumların RKKY etkileşimine katkısı . . . . .	27
3.4.1. Yığınsal Grafen Sonuçları . . . . .	27
3.4.2. Sigmoid Potansiyel Sonuçları . . . . .	29
3.5. Kesin köşegenleştirme yöntemi ile RKKY Etkileşiminin Hesaplanması . . . . .	30
<b>4. Dış Potansiyeller Altında Grafen Üzerinde Adatomlar Arası Etkileşim</b>	<b>34</b>
4.1. Doğrusal yönde adatomlar arası uzaklık enerji ilişkisi . . . . .	35
4.2. Dairesel kuyu potansiyeli altında adatomlar arası uzaklık enerji ilişkisi . . . . .	36
4.3. Adatomlar arası etkileşimin sıkı bağlanma modeliyle incelenmesi . . . . .	37
4.3.1. Yerel durum yoğunluğu . . . . .	37



4.3.2. Dairesel kuyu potansiyeli altında adatomlar arası mesafeye bağlı enerji değişimi . . . . .	39
<b>5. Altıgen Nanopullar Üzerinde RKKY Etkileşiminin Hesaplanması</b>	<b>42</b>
5.1. RKKY Etkileşiminin Altıgen Nanopulda Hesaplanması . . . . .	43
<b>6. Coulomb Etkileşimlerinin RKKY etkileşimi üzerindeki etkileri</b>	<b>45</b>
<b>7. Kuartik Enerji-Momentum Dağılımına Sahip İki Boyutlu Sistemlerde RKKY Etkileşimi</b>	<b>48</b>
7.1. Green fonksiyonları ve RKKY etkileşiminin hesaplanması . . . . .	49
7.2. Sıkı bağlanma modeli ve kesin köşegenleştirme yöntemi ile RKKY etkileşiminin hesaplanması . . . . .	51
<b>8. Sonuç</b>	<b>53</b>
<b>9. REFERANSLAR</b>	<b>54</b>



## ŞEKİLLER LİSTESİ

- 1 (a)Grafen örgüsü: x ve y yönleri burada gösterildiği şekilde kullanılmıştır. (b)Grafen Brillouin Bölgesi: Dirac noktaları K ve K' gösterilmiştir. . . . . 5
- 2 Dairesel bir potansiyel altında iki manyetik atom ve Brillouin bölgesi gösterilmiştir. 9
- 3 (a)DOS( $r > R$ ) dalga vektörüne ve potansiyele bağlı olarak gösterilmiştir, burada enerji ve dalga vektörü arasında  $q = (E + V_0)/\hbar v_F$  ilişkisi vardır. (b)LDOS  $V = 4\hbar v_F/R$  durumu için gösterilmiştir(solda). Sağ taraftaki şekilde LDOS( $r = 0.92R$ )  $j = 1/2, 3/2, \dots, 11/2$  açıl momentum değerleri için gösterilmiştir. . . . . 11
- 4 DOS( $r < R$ )(mavi eğri) ve değeri(kırmızı eğri) gösterilmiştir. . . . . 11
- 5 Merkezden  $r = 0.92R$  atomik pozisyonda bulunan iki manyetik atom arası RKKY etkileşimleri(kesiksiz) ve atomik düzeydeki salınımların ortalaması(kırmızı kesikli çizgi) gösterilmiştir.  $V = 4\hbar v_F/R$ ,  $R = 20a$  durumu için Fermi enerjileri rezonans değerlerinde seçilmiştir:  $J_{AA}$  for a) $q_F = 3.8875/R(j = 1/2)$ , b) $q_F = 4.8675/R(j = 3/2)$ , and  $J_{AB}$  for c) $q_F = 3.8875/R(j = 1/2)$ , c) $q_F = 4.8675/R(j = 3/2)$ . . . . . 12
- 6 (a) $J_{AA}$  ve (b) $J_{AB}$  iki manyetik atomun merkezden  $r_1 = 0.50R$ ,  $r_2 = 0.92R$  mesafesinde (kesikli çizgi), ve  $r_1 = r_2 = 0.92R$ (kesiksiz çizgi) durumlar için Fermi enerjisinin  $j = 1/2$  durumuna ait rezonans değerinde  $q_F = 3.8875/R$  olduğu durum için gösterilmiştir. . . . . 13
- 7  $J_{AA}$  iki manyetik atom merkezden  $r = 0.92R$  mesafesinde iken, Fermi enerjisi ise  $q_F = 3.95/R$ (noktalı),  $q_F = 3.80/R$ (kesikli) and nötr grafen(kesiksiz) durumları için gösterilmiştir. . . . . 14
- 8  $J_{AA}$  Fermi enerjisinin üç farklı değeri için gösterilmiştir. Kırmızı grafik için  $E_F = -0.1126\hbar v_F/R$  yarı bağlı durum(QBS) enerjisiyle çakışmakta ve RKKY değerleri güçlenmekte ve ferromanyetik karakterini korumaktadır. . . . . 17
- 9  $J_{AB}$  Fermi enerjisinin üç farklı değeri için gösterilmiştir. Kırmızı grafik için  $E_F = -0.1126\hbar v_F/R$  yarı bağlı durum(QBS) enerjisiyle çakışmakta ve RKKY değerleri güçlenmekte ve ferromanyetik karakterini korumaktadır. . . . . 18
- 10  $70 \times 70$  sistemde Gauss potansiyeli. . . . . 19
- 11  $70 \times 70$  sistemde RKKY etkileşimin potansiyelin uygulandığı durumun uygulanmadığı duruma oranı. . . . . 20
- 12  $V = \hbar v_F/R$  olan Gauss potansiyeli altında potansiyel kuyunun çeperi üzerindeki noktaların çeperin üzerindeki bir safsızlığa göre açığa bağlı olarak RKKY etkileşimi. 22
- 13  $V = 2\hbar v_F/R$  olan Gauss potansiyeli altında potansiyel kuyunun çeperi üzerindeki noktaların çeperin üzerindeki bir safsızlığa göre açığa bağlı olarak RKKY etkileşimi. 22



14	$V = 3\hbar v_F/R$ olan Gauss potansiyeli altında potansiyel kuyunun çeperi üzerindeki noktaların çeperin üzerindeki bir safsızlığa göre açığa bağlı olarak RKKY etkileşimi.	23
15	$V = 4\hbar v_F/R$ olan Gauss potansiyeli altında potansiyel kuyunun çeperi üzerindeki noktaların çeperin üzerindeki bir safsızlığa göre açığa bağlı olarak RKKY etkileşimi.	23
16	$V = 5\hbar v_F/R$ olan Gauss potansiyeli altında potansiyel kuyunun çeperi üzerindeki noktaların çeperin üzerindeki bir safsızlığa göre açığa bağlı olarak RKKY etkileşimi.	24
17	Grafik potansiyel kuyunun çeperinde açığa bağlı olarak değişen RKKY etkileşimini logaritmik ölçekte gösterir. Bu grafikte $R = 20$ atom uzunluğundadır ve çizgiler farklı doluluk oranlarını (occupation number) temsil eder. Potansiyel değeri ise $V = 4\hbar v_F/R$ şeklindedir. Doluluk oranı 0.5 olduğu durum Fermi seviyesinin tam Dirac noktasında bulunduğu duruma karşılık gelir. . . . .	26
18	Bu grafikte $R = 20$ atom uzunluğundadır ve çizgiler farklı doluluk oranlarını (occupation number) temsil eder. Potansiyel değeri ise $V = 4\hbar v_F/R$ şeklindedir. Diğer şekille(Şekil-17) aynı bilgileri içermektedir. . . . .	26
19	$150 \times 150$ karbon atomundan oluşan grafen yapının üzerine uygulanan $R = 30a$ yarıçaplı potansiyelin profili . . . . .	27
20	$150 \times 150$ atomlu sistemde AA tipi RKKY etkileşiminin $30a \times 30a$ alanında olduğu bölge logaritmik ölçekteki grafiği. . . . .	28
21	$150 \times 150$ atomlu sistemde AB tipi RKKY etkileşiminin $30a \times 30a$ alanında olduğu bölge logaritmik ölçekteki grafiği. . . . .	28
22	$150 \times 150$ atomlu sistemde LDOS'un Dirac noktası etrafındaki davranışı. . . . .	29
23	$150 \times 150$ atomlu sistemde LDOS'u 'local maxima' olan dalga fonksiyonunun profili.	30
24	$150 \times 150$ atomlu sistemde potansiyel bölgesindeki $J_{AA}$ grafiği. Kırmızı halka ile gösterilen noktada bir manyetik moment sabitlenmiştir. Diğer manyetik moment ise aynı alt örgüde farklı hücrelerde bulunduğu durumdaki RKKY etkileşiminin büyüklüğü gösterilmektedir. . . . .	30
25	$150 \times 150$ atomlu sistemde potansiyel bölgesindeki $J_{AB}$ grafiği. Kırmızı halka ile gösterilen noktada bir manyetik moment sabitlenmiştir. Diğer manyetik moment ise aynı alt örgüde farklı hücrelerde bulunduğu durumdaki RKKY etkileşiminin büyüklüğü gösterilmektedir. . . . .	31
26	Kesin köşegenleştirme yapılarak hesaplanan "zigzag" doğrultusundaki $J_{AA}$ aradaki mesafeye bağlı olarak gösterilmiştir. . . . .	32
27	Kesin köşegenleştirme yapılarak hesaplanan zigzag doğrultusundaki $J_{AB}$ aradaki mesafeye bağlı olarak gösterilmiştir. . . . .	32
28	Kesin köşegenleştirme yapılarak hesaplanan armchair doğrultusundaki $J_{AA}$ aradaki mesafeye bağlı olarak gösterilmiştir. . . . .	33



29	Kesin köşegenleştirme yapılarak hesaplanan armchair doğrultusundaki $J_{AB}$ aradaki mesafeye bağlı olarak gösterilmiştir. . . . .	33
30	Grafenin heksagonal örgüsünün temsili gösterimi. Aynı altörgü atomları kırmızı ve siyah renklerle birbirinden ayrılmıştır. $V$ ve $W$ yönleriyle gösterilen vektörler sırasıyla koltuk (armchair) ve zikzak (zigzag) yönlerdeki hareketleri temsil etmektedir. Örgü noktalarının büyüklüğü, uygulanan dairesel dış potansiyelin o noktadaki büyüklüğüyle orantılı olarak seçilmiştir. . . . .	34
31	Dış potansiyel sıfıra eşitken bir adatom sabit tutulmak kaydıyla diğer adatom a) koltuk, b) zikzak tipi yönlerde ilerlerken (Şekil 30'deki $V$ ve $W$ yönleri) hesaplanan enerjinin adatomlar arası uzaklıkla değişimi. b) grafiğinde referans adatomuyla aynı atomların uzaklık - enerji değişimi mavi düz çizgiyle, referans ile zıt atomların uzaklık enerji ilişkisi kırmızı kesikli çizgi ile gösterilmiştir. . . . .	35
32	Dairesel kuyu şeklinde dış potansiyel uygulanırken bir adatom dairenin çeperinde bir noktada sabit tutulmak kaydıyla diğer adatom çember üzerinde a) zıt örgü noktalarındayken, b) aynı örgü noktalarındayken hesaplanan enerji değerlerinin ikinci adatomun polar koordinatlarda taradığı açığa bağlı olarak değişimi. . . . .	36
33	Grafenin heksagonal örgüsünün temsili gösterimi. Aynı altörgü atomları kırmızı ve siyah renklerle birbirinden ayrılmıştır. $V$ ve $W$ yönleriyle gösterilen vektörler sırasıyla koltuk (armchair) ve zikzak (zigzag) yönlerdeki hareketleri temsil etmektedir. örgü noktalarının büyüklüğü, uygulanan dairesel dış potansiyelin o noktadaki büyüklüğüyle orantılı olarak seçilmiştir. . . . .	38
34	$100 \times 180$ atomluk bir örgü için yerel durum yoğunluğu. Merkezden kuyu potansiyelinin yarıçapının 3 katı olan $90^\circ$ 'a kadar uzaklığa kadar olan noktalar ve olası bütün enerji değerleri için hesaplanmıştır. . . . .	38
35	$100 \times 180$ atomluk bir örgü için yerel durum yoğunluğu. Merkezden kuyu potansiyelinin yarıçapının 3 katı olan $90^\circ$ 'a kadar uzaklığa kadar olan noktalar ve enerji aralığının $-0.2\text{eV}$ 'tan $0.2\text{eV}$ 'a kadar olan dar bir bandı için hesaplanmıştır. . . . .	39
36	Adatomların enerjisine ( $U/t$ ) göre en lokalize durumun enerjisinin ( $E$ ) grafiği. . . . .	40
37	Dairesel kuyu dış potansiyel altında, bir adatom dairenin çeperinde bir noktada sabit tutulmak kaydıyla diğer adatom çember üzerinde sabit tutulan atomla aynı tip atomlara karşılık gelen örgü noktalarındayken hesaplanan enerji değerlerinin ikinci adatomun polar koordinatlarda taradığı açığa bağlı olarak değişimleri. $r = 30$ civarında 7 farklı merkezden uzaklık ve 3 farklı fermi enerjisi değerler grafikte gösterilmiştir. . . . .	40



38	Dairesel kuyu dış potansiyel altında, bir adatom dairenin çeperinde bir noktada sabit tutulmak kaydıyla diğer adatom çember üzerinde sabit tutulan atomdan farklı tip atomlara karşılık gelen örgü noktalarındayken hesaplanan enerji değerlerinin ikinci adatomun polar koordinatlarda taradığı açığa bağlı olarak değişimleri. $r = 30$ civarında 7 farklı merkezden uzaklık ve 3 farklı fermi enerjisi değerler grafikte gösterilmiştir. . . . .	41
39	Enerji özdeğerler indislerinin enerjiye göre grafiği. Altıgenin her kenarı boyunca $N_s = 10$ atom bulunmaktadır. Enerjiler $t$ cinsinden hesaplanmıştır. . . . .	42
40	Enerji özdeğerler indislerinin enerjiye göre grafiği. Altıgenin her kenarı boyunca $N_s = 20$ atom bulunmaktadır. Enerjiler $t$ cinsinden hesaplanmıştır. . . . .	43
41	RKKY etkileşimin bütün uzayda hesaplanması. . . . .	43
42	RKKY etkileşimin bütün uzayda hesaplanması. . . . .	44
43	2500 atomluk bir sistemde (a) $K - K'$ BZ vektörüne dik yönde aynı tip atomlar arasındaki RKKY etkileşimi $J_{AA}$ gösterilmiştir. (b) $K - K'$ BZ vektörü doğrultusuna aynı tip atomlar arasındaki RKKY etkileşimi $J_{AA}$ gösterilmiştir. . . . .	46
44	2500 atomluk bir sistemde $K - K'$ BZ vektörüne dik yönde farklı tip atomlar arasındaki RKKY etkileşimi $J_{AB}$ gösterilmiştir. . . . .	47
45	Şekil (a) kuartik enerji-momentum dağılımını göstermektedir. Şekil (b) ise iki boyuta bu kuartik enerji dağılımına karşılık gelen durum yoğunluğunu göstermektedir. . . . .	48
46	Duygunluk fonksiyonu $\chi(R)$ . . . . .	50
47	$k_c = 0$ durumu için RKKY etkileşimi gösterilmektedir. . . . .	51
48	RKKY etkileşiminin uzaklığa bağlı davranışı sırasıyla Fermi enerjisinin (a) $k_F = 0.180/a$ , (b) $k_F = 0.256/a$ değerleri için gösterilmiştir. Burada $a$ örgü sabitidir. Sistem $150 \times 150 = 25000$ atomdan oluşmaktadır ve periyodik sınır koşulları kullanılmıştır. . . . .	52



## TABLULAR LİSTESİ

- 1 nitrojene (N), phosphorene (P), arsenene (As), antimonene (Sb) and bismuthene (Bi) için kuartik enerji dağılım parametreleri. . . . . 48



## ÖZET

RKKY(Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida) etkileşimi manyetik momentler arasında Fermi denizini oluşturan elektronlar vasıtasıyla ortaya çıkan indirekt etkileşimlerdir. Bu etkileşimler nadir toprak elementlerinde ortaya çıkan manyetizmada, seyreltilmiş manyetik yarı-iletkenlerde rol oynamaktadır. Farklı kuantum noktacıklarda elektron spinlerinin RKKY tipi etkileşimler vasıtasıyla kuantum eş-evreli bir şekilde kontrol edilebileceği deneysel olarak gösterilmiştir[7]. RKKY etkileşimleri vasıtasıyla birbirinden ferromanyetik etkileşim altında birbirinde uzak elektronik spinlerin temel durumları dolanık bir duruma denk gelmektedir. Spintronik uygulamalarında, manyetizmada ve elektronik spinlerin eşevreli kontrol edilebilmeleri konularında RKKY etkileşimi önemli bir fiziksel mekanizma olarak öne çıkmaktadır.

Projede ilk olarak RKKY etkileşimlerin dış potansiyeller altında RKKY etkileşiminin davranışı incelenmiştir. Dış potansiyeller varlığında, belirli enerjilerde yüksek durum yoğunluğuna sahip uzaysal olarak uzun erimli elektronik durumların varlığı elektronik çınlaç etkisine yol açmaktadır. Grafende Klein tünellemesi olmasına rağmen, potansiyel uygulanan bölgede yüksek genliğe ve durum yoğunluğuna sahip yarı bağılı durumlar(quasi bound states) mevcuttur. Dairesel potansiyeller altında grafen ve benzeri malzemelerde fısıldayan galeri modları olarak adlandırılan elektronik durumlar vasıtasıyla manyetik momentlerin uzak mesafelerde dahi birbirleriyle güçlü bir şekilde etkileşebildiği gösterilmiştir. Fermi enerjisinin QBS enerji değerleri ile çakıştığı durumda uzun erimli, güçlenmiş manyetik etkileşimler ortaya çıktığı numerik ve teorik olarak gösterilmiştir. Yığınsal grafende manyetik atomların buldukları alt-örgüye bağılı olarak ya ferromanyetik ya da antiferromanyetik karakterli etkileşimler oluşmaktadır. Ancak dairesel potansiyel varlığında bu etkileşimin uzak mesafelerde, manyetik momentlerin buldukları örgüden bağımsız olarak, ferromanyetik bir karaktere büründüğü gösterilmiştir. Grafen yüzeyinde bulunan adatomlar arasında Fermi denizindeki elektronlar vasıtasıyla, elektronik Casimir etkisi olarak adlandırılan etkileşimler ortaya çıkmaktadır. Numerik sonuçlar sonucunda dış potansiyeller varlığında, uzak erimli kuvvetlerin varlığı öngörülmüştür.

RKKY etkileşimi enerji momentumu dağınımı momentumun dördüncü kuvvetine bağılı olarak değişim gösteren iki boyutlu altıgen yapılarda sıkı bağlanma modeli kullanılarak ve Green fonksiyonları kullanılarak analitik olarak hesaplanmıştır. Bu malzemeler Grup 15 elementlerinin oluşturdukları iki boyutlu yapılar olup, bant kenarlarında enerji  $E \propto -(k^2 - k_c^2)^2$  şeklinde bir dağınım göstermektedir. Buna bağılı olarak bant kenarında bir tekillik ortaya çıkmakta ve boşluk/elektron katkılanması altında, Fermi enerjisi bant kenarına yaklaştıkça RKKY etkileşimlerinin büyüklüğü ve menzilin artışı gösterdiği görülmüştür. Yakın mesafelerde ferromanyetik



olan etkileşim Fermi falga boyunda salınım göstermekte, Fermi enerjisi bant kenarına yaklaştıkça, RKKY etkileşimlerinin hem büyüklüğünün hem de menzilin artışı göstereceği hesaplanmıştır.

çalışılmıştır. Bu tür sistemlerde Coulomb etkileşimleri sebebiyle manyetik temel durumların ortaya çıktığı gösterilmiştir.

**Anahtar kelimeler:** Grafen, RKKY etkileşimi, Düşük boyutlu sistemlerin manyetik özellikleri, Fısıldayan galeri modları, Casimir etkisi, Klein tünellemesi



## ABSTRACT

RKKY(Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida) interactions are indirect magnetic interactions mediated by the Fermi sea electrons. RKKY interactions give rise to magnetism of rare earth elements, dilute magnetic semiconductors. It was shown that electronic spins in spatially separated quantum dots can be controlled coherently via RKKY interactions[7]. Therefore control of RKKY interactions can be very vital in magnetism, spintronics and in coherent control of spins.

In the first part of the project we calculate indirect exchange interaction between two magnetic impurities in pristine graphene in the presence of a circular potential. In bulk graphene structures indirect exchange interaction, also known as RKKY(Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida) interaction, shows a power law decay with distance for both doped and undoped cases. Here we show that under a circular electric potential quasibound states lead to enhanced RKKY interactions between magnetic moments located in the vicinity of the potential well. It is shown that strength of the potential well and Fermi energy can be tuned to create enhanced, non-decaying, long ranged RKKY interactions. We show that when the Fermi level lies at the quasibound state energy, the scattering processes between the states of the same chirality dominates over the other scattering channels and this leads to a predominantly ferromagnetic, non-decaying interaction between the impurities at long distances. The predicted effect can enable electrical control of RKKY interactions in graphene or other two dimensional materials. Fermi sea electrons can also mediate forces between adatoms, which is called the electronic Casimir force. We also predicted forces between adatoms that can be controlled by the external electric potentials. The external forces were shown to lead to long ranged, enhanced interactions between adatoms in comparison with pristine graphene.

We investigated RKKY interactions in two dimensional materials, in particular group 15 elements, with quartic dispersion relation  $E \propto (k^2 - k_c^2)^2$ , where a singularity is present at the band edge. Due to singularity in DOS and the form of the dispersion RKKY interactions are drastically modified in comparison with materials with quadratic or linear dispersion. As the Fermi energy approaches the band edge, from numerical and analytic calculations, we have seen an enhancement in the strength and the range of RKKY interactions. RKKY interactions are of ferromagnetic character at short distances, and they show oscillations at the Fermi wavelength. As the Fermi energy approaches the band edge, via electron/hole doping, the distance and the magnitude of magnetic interactions increase.

**Keywords:** Graphene, RKKY interaction, magnetic properties of low dimensional systems, whispering gallery modes, Klein tunneling, Casimir effect





# 1. GİRİŞ

## 1.1. İndirekt manyetik etkileşimler

Lokalize manyetik momentler arasında, Fermi denizindeki elektronlar vasıtasıyla ortaya çıkan indirekt etkileşim Ruderman, Kittel, Kasuya ve Yosida'nın bu alanda yaptığı çalışmalarla teorik ve deneysel olarak ortaya konmuştur. Bu bilim insanlarına ithafen bu etkileşim "RKKY etkileşimi" olarak literatürde yerini almıştır. Ruderman ve Kittel tarafından Fermi denizini oluşturan elektronlar vasıtasıyla nükleer spinler arasında indirekt bir etkileşim olduğu ortaya konulmuştur. Bu modele göre iki manyetik moment arasında Fermi denizi elektronları vasıtasıyla Heisenberg tipi bir etkileşim ortaya çıkmaktadır

$$V = J\mathbf{I}_1 \cdot \mathbf{I}_2. \quad (1)$$

Manyetik değiş-tokuş enerji katsayısı  $J = J(R)$  iki moment arasındaki mesafeye bağlı olarak değişmektedir. RKKY etkileşimi sayesinde metalik gümüşte gözlemlenen nükleer spin rezonanslarını açıklamada başarılı olmuştur[21]. Metallerdeki paramanyetik iyonların arasındaki manyetik etkileşimler ve bunların yol açtığı elektriksel direnç Yosida ve Kasuya tarafından çalışılmıştır[31, 12, 13]. Nadir toprak elementlerinin f orbitalleri arasındaki indirekt etkileşimler ve ortaya çıkan manyetizmada[20], seyreltilmiş manyetik yarıiletkenlerde ferromanyetizmanın ortaya çıkmasında RKKY tipi etkileşimlerin önemli bir rolü vardır[9, 10].

Parabolik bant yapısına sahip elektronik sistemlerde RKKY etkileşimi, üç boyutta Fermi dalga boyuna kıyasla uzak mesafelerde  $\cos(2k_F R)/R^3$  şeklinde davranırken, iki boyutta  $\sin(2k_F R)/R^2$  şeklinde boyuta bağlı bir davranış göstermektedir[11]. Bir boyutlu, parabolik bant yapısına sahip, sistemlerde, ideal ve süper örgülerden oluşan bir boyutlu sistemlerde Yafet tarafından çalışılmıştır, ideal bir boyutta  $\cos(2k_F R)/R$  şeklinde, süper örgü sistemde  $\sin(2k_F R)/R^2$  davranış göstermektedir[30]. Yapılan bu çalışmalara sayesinde RKKY etkileşiminin uzaklığa bağlı değişiminde sistemin boyutu ve enerji-momentum dağılımının belirleyici olduğu görülmüştür. Normal metallerde yakın mesafelerde etkileşimlerin ferromanyetik karakterde olduğu, ve mesafeye bağlı olarak Fermi dalga boyu periyodunda  $J = 0$  sıfır değeri etrafında salınımlar göstermekte, yani mesafeye bağlı olarak ferromanyetik( $J < 0$ )/anti-ferromanyetik( $J > 0$ ) karakter göstermektedir.

Öbür taraftan iki boyutlu bir malzeme olan grafen katmanda enerjinin momentuma lineer olarak bağlı olması sebebi ile RKKY etkileşiminin uzak mesafelerde  $1/R^3$  şeklinde davrandığı öngörülmüştür[22]. Karbon zincirlerinde/nanotüplerde ve şeritlerde çalışılmış, manyetik etkileşimlerin  $1/R$  şeklinde davrandığı gösterilmiştir[24, 3, 15].



Manyetik ve manyetik olmayan metal katmanlardan oluşan bir yapıda manyetik olmayan katmanların kalınlığına bağlı olarak direncin salınımlar gösterdiği bulunmuştur[19, 4].

Farklı kuantum noktacıklardaki elektron spinlerinin RKKY tipi etkileşimler vasıtasıyla kuantum eş evreli(phase coherent) bir şekilde kontrol edilebileceği deneysel olarak gösterilmiştir[7]. Spinlerin kuantum eşevreli bir şekilde kontrol edilebilmesi kuantum bilgi işleme teknolojilerinde önemli unsurlarından birisidir, ve bu çalışma sayesinde uzaktaki elektron spinlerin kuantum dolanık durumlarının yaratılmasının önü açılmıştır. Optik sistemlerde ışık mikroçınlaçlar (micro-cavity) içerisinde, tam iç yansımalarla (total internal reflection) belirli bir bölgeye hapsedilmekte ve rezonant modların ortaya çıkmasını sağlamaktadır. Elektromanyetik mod yoğunluğu belirli frekanslarda yüksek değerler alırken belirli frekanslarda sıfıra yaklaşmaktadır. Bunun sayesinde, mikro çınlaçlar yüksek duyarlıklı sensör sistemlerinde, lazer sistemlerinde, kovuk kuantum elektrodinamiği gibi bir çok konuda uygulama alanı bulmuştur[28]. Fiziksel bariyerlerle elektromanyetik, ses, isik dalgalarının hapsedilmesiyle ortaya çıkan modlara fısıldayan galeri modları adı verilir. Fısıldayan galeri modlarının elektronik sistemlerde de ortaya çıkması beklenebilir. İlk olarak 1990'lı yıllarda metal yüzeyinde adatomlardan oluşturulan dairesel bölgelerde(yaklaşık 15 nm çapında), oluşan elektron durum yoğunluğunun fısıldayan galeri modlarıyla uyumlu olduğu gösterilmiştir[8]. Bu etki optik sistemlerde iyi bilinen fısıldayan galeri modlarının elektronik sistemlerdeki benzeşidir. Daha sonraki yıllarda yapılan çalışmada elektronların adatomların oluşturduğu elips şeklindeki yapılarda odaklanabileceği gösterilmiştir[18]. 2015 yılında grafen sistemlere uygulanan dış potansiyeller vasıtasıyla fısıldayan galeri modlarının olduğu bildirilmiştir[33]. Zhao vd. Tarafından yapılan çalışmada Şekil-1'de gösterildiği gibi taramalı tünelleme mikroskobu ile yapılan ölçümlerde galeri modlarında akımın voltaja göre değişiminde rezonanslar görülmüştür.

## **1.2. Dış potansiyeller vasıtasıyla RKKY etkileşimlerinin ve adatomlar arası kuvvetlerin kontrolü**

Fotonik sistemlerde oldukça yaygın uygulama alanına sahip çınlaçların elektronik benzerlerinin uygulamaları konusunda teorik ve deneysel çalışmalarda bir açık sözkonusudur. Manyetik momentlerin Fermi denizi vasıtasıyla etkileşimi fotonik modlar vasıtasıyla etkileşen yayıcıların etkileşimine benzerlik göstermektedir. Fotonik sistemlere benzer şekilde zengin bir fizik ve uygulamalarının mevcut olduğu görülmektedir. Manyetik etkileşimlerin kontrolü bu tür sistemlerin manyetizasyonunun kontrolünü, ferromanyetik antiferromanyetik karakterinin kontrolü konusudna yol açıcı olabilecektir. Özel olarak grafen ve benzeri iki boyutlu yapılar son on yılda büyük bir yol katetmiştir. İki boyutlu yapıların elektronik yapısının dış potansiyeller vasıtasıyla kontrolü üç boyutlu yığın yapılara göre daha kolay olması beklenmektedir. Grafende elektronlar kiral özellik göstermekte, yalancı spin(pseudo-spin) yönelimi momentuma bağlı olmaktadır. Manyetik momentlerin buldukları alt örgüye göre ferromanyetik/antiferromanyetik etkileşim



göstermektedirler. İki boyutlu yapılarda dış potansiyeller altında manyetik etkileşimlerin çalışılması hedeflenmiştir.

### 1.3. Enerji bant yapısına bağlı olarak RKKY etkileşiminin değişimi

Grafenle başlayan iki boyutlu malzemeler üzerine olan araştırmalar birçok başka iki boyutlu malzemenin keşfedilmesine yol açmıştır. Bunlardan özel olarak grup 5A elementlerinin oluşturduğu iki boyutlu malzemeler, bant aralığına sahiptir, bunun yanı sıra iletim ve valans bant kenarlarında enerji  $E \propto (k^2 - k_c^2)^2$  şeklinde bir momentum bağılılığı göstermektedir. Bu enerji dağılımı, elektron durum yoğunluğunda Van Hove tipi tekillikler yaratmaktadır. Bunun yanı sıra momentuma dördüncü dereceden bağlı olması da manyetik etkileşimlerin uzaklığa bağlı değişimini belirlemektedir. Bu tür yeni malzemelerin getirdiği elektronik yapıdaki zenginlik manyetik etkileşimlerin büyüklüğü ve uzaklığa bağlı davranışı üzerinde çalışılmıştır.

### 1.4. Projenin Amaç, Hedef ve Sonuçlarına Dair

Projede şu konuların numerik ve analitik yöntemler kullanılarak çalışılması amaçlanmıştır:

#### Amaçlar

1. Dış potansiyeller altında elektronik durum yoğunluğunu, elektronik modların uzaysal davranışının belirlenmesi ve bunların manyetik etkileşimler üzerindeki etkisi.
2. Grafen yapılarda dış potansiyeller vasıtasıyla RKKY etkileşiminin değişimi ve kontrolü.
3. Grafen yapılarda dış potansiyeller altından atomlar arası kuvvetlerin davranışı.
4. Grafen nanopullarda elektronik yapının belirlenmesi ve bunun manyetik momentler arası etkileşimler üzerindeki etkisinin, ve Coulomb etkileşimleri altında temel durumun belirlenmesi.
5. Grup 15 elementlerinin oluşturduğu iki boyutlu altıgen yapıların enerji momentum dağılımında dördüncü dereceden bağıntıya bağlı olarak manyetik etkileşimlerin davranışının incelenmesi.

Bu çalışmalar sonunda deneysel çalışmalara yön verebilecek sonuçlara ulaşılması amaçlanmıştır.

## 2. RKKY Etkileşimlerinin Dış Potansiyeller Varlığında Hesaplanması

Grafen yapının gerçek uzaydaki örgüsü ve buna karşılık momentum uzayında Brillouin bölgesi şekilde gösterildiği şekildedir. Brillouin bölgesinde  $K$  ve  $K'$  noktaları civarında  $K$  Dirac noktası etrafında Dirac denklemi şu şekilde yazılabilir.

$$H^K = V(\mathbf{r})\mathbb{1} + v_F\sigma \cdot p \quad (2)$$

$$= \begin{pmatrix} V(\mathbf{r}) & v_F(p_x - ip_y) \\ v_F(p_x + ip_y) & V(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (3)$$

öbür taraftan  $K'$  Dirac noktası etrafında ise şu şekildedir

$$H^{K'} = V(\mathbf{r})\mathbb{1} + v_F\sigma^* \cdot p \quad (4)$$

$$= \begin{pmatrix} V(\mathbf{r}) & v_F(p_x + ip_y) \\ v_F(p_x - ip_y) & V(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (5)$$

Integrallerde  $V(\mathbf{r})$  atomik örgü sabitine kıyasla yavaş değişim gösteren dış bir potansiyeli göstermektedir. Burada  $\hbar v_F/a = 3t/2$  ilişkisinden Fermi hızı  $v_F$  tanımlanmıştır. Bu ilişkide  $a \simeq 2.47$  örgü sabitini,  $t \simeq 2.8$  eV sıkı bağlanma modelinde Hamiltonyenin en yakın komşu  $p_z$  orbitali ile olan melezleşmeyi göstermektedir. Burada Fermi hızı yaklaşık  $v_F \sim 10^6$  m/s civarındadır. Grafen örgüsü ve Brillouin bölgesi şekilde (Şekil 1) gösterilmiştir.

Dirac noktaları etrafında sabit potansiyel altında Hamiltonyenin çözümleri şu şekilde yazılabilir

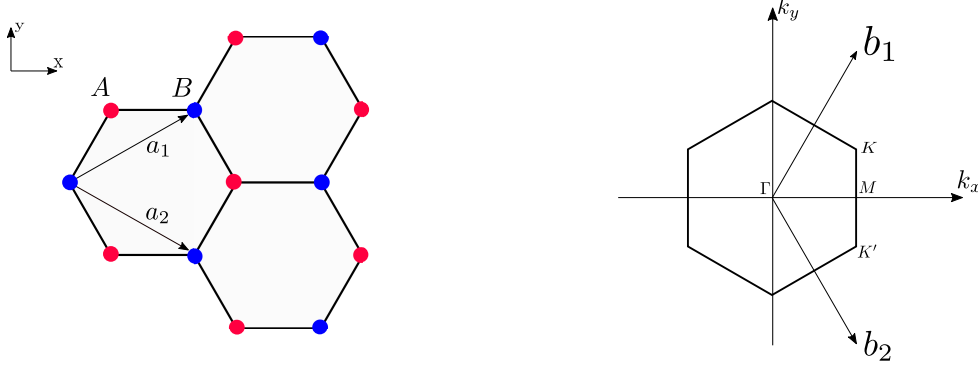
$$\psi_{s,k}^K(r) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\phi} \end{pmatrix} e^{ik \cdot r + iK \cdot R} \quad (6)$$

$$\psi_{s,k}^{K'}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ se^{-i\phi} \end{pmatrix} e^{ik \cdot r + iK' \cdot R} \quad (7)$$

$$E_{sk} = s \cdot \hbar v_F |k|, \quad s = \pm 1 \quad (8)$$

Spinörlerin ilk bileşeni dalga fonksiyonunun  $A$  alt örgüsü üzerindeki, ikinci bileşeni ise  $B$  alt örgüsündeki genliğini göstermektedir.  $k$  momentumu ise Dirac noktasına göre tanımlanmıştır. Burada  $k = (k_x, k_y)$  momentum,  $\tan \phi = k_y/k_x$  momentumun yönünü belirler. Yalancı spinin(pseudo-spin) kutuplanma yönü  $s = +1$  için momentum yönünde,  $s = -1$  için momentuma ters yöndedir.

belirlemektedir.  $s = \pm 1$  iletim ve valans bantlarını göstermektedir. Grafen nötr durumda iken  $s = 1$  bandı boş,  $s = -1$  bandı tamamen dolu olmaktadır.



**Şekil 1:** (a)Grafen örgüsü: x ve y yönleri burada gösterildiği şekilde kullanılmıştır. (b)Grafen Brillouin Bölgesi: Dirac noktaları K ve K' gösterilmiştir.

## 2.1. Yığınsal Grafen Yapılarda RKKY etkileşimleri

Burada ilk olarak karbon atomlarıyla atomik olarak etkileşen safsızlık atomları ele alınacaktır:

$$V = \sum_{\alpha=1,2} J_{\alpha} \mathbf{I}_{\alpha} \cdot \mathbf{S} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\alpha}) \quad (9)$$

Bu Hamiltonyende  $R_{\alpha}$  manyetik momentlerin pozisyonlarını, sırasıyla  $I_{\alpha}$ ,  $\alpha = 1, 2$  ve  $S$  manyetik spinleri ve elektron spinlerini göstermektedir. Safsızlık atomlarının her ikisi her aynı alt örgüye ait ya da farklı farklı altörgüdeki atomlarla etkileşebilir. Ruderman, Kittel, Kasuya ve Yosida tarafından ortaya koyulduğu üzere metal içersindeki iki manyetik moment metaldaki elektronlar vasıtasıyla etkileşmekte ve ortaya bir değiş tokuş etkileşimi ortaya çıkmaktadır. Grafendeki serbest elektronlar vasıtasıyla iki manyetik moment arasında ikinci dereceden etkileşim şu şekilde olacaktır:

$$H_J = -J \mathbf{I}_1 \cdot \mathbf{I}_2 \quad (10)$$

RKKY etkileşimi ikinci dereceden elektronik geçişler vasıtasıyla ortaya çıkmaktadır. Fermi denizinde bulunan elektronlar vasıtasıyla manyetik momentler arasında ortaya çıkan değiş tokuş etkileşimi efektif olarak şu şekilde ifade edilir[14]:

$$J = -2 \sum_{k,k'} \frac{\langle k \downarrow, \uparrow \downarrow | V | k' \uparrow, \downarrow \downarrow \rangle \langle k' \uparrow, \downarrow \downarrow | V | k' \downarrow, \downarrow \uparrow \rangle}{\epsilon_k - \epsilon_{k'}} n_k (1 - n_{k'}) \quad (11)$$

Burada  $|k \uparrow (\downarrow)\rangle$  elektronun durumunu ve spinini,  $\uparrow (\downarrow)$  ise manyetik moment spinlerini



göstermektedir. Noktasal etkileşimler için değiş tokuş etkileşimi şu şekilde olacaktır:

$$J_{AA'} = -2J_1J_2 \sum \frac{\psi_{sk,A'}^*(R_2)\psi_{s'k',A'}(R_2)\psi_{s'k',A}^*(R_1)\psi_{sk,A}(R_1)}{\epsilon_{sk} - \epsilon_{s'k'}} n_{sk}(1 - n_{s'k'}) \quad (12)$$

Burada  $\psi_{sk,A'}(r)$ , iletim( $s = +1$ ) veya valans bantta( $s = -1$ ) bulunan  $k$  momentumuna sahip elektronun,  $A' = A(B)$  örgüsündeki dalga fonksiyonu genliğidir. Manyetik momentlerin her ikisi  $A$  ya da  $B$  örgüsünde olması durumunda değiş tokuş etkileşimi  $J_{AA}$ , diğer durumda ise  $J_{AB}$  ile gösterilecektir. Burada dikkat edilmesi gereken bir nokta ise etkileşimlerin noktasal olması büyük momentum değişimlerini mümkün kılmakta, iki Dirac vadisi arasında elektron saçılması değiş tokuş etkileşimine katkı vermektedir. Denklem(12)'de  $R_1$  noktasındaki manyetik momentte  $k \rightarrow k'$  saçılımına uğrayan elektron,  $R_2$  noktasında tekrar eski durumuna dönmekte, ve bu sayede iki manyetik moment etkileşmektedir.

Nötr durumdaki grafen için, iki manyetik spinin de  $A(B)$  tipi atomla etkileşimi sonucu ortaya çıkan deęiřtokuş etkileşimi şu şekilde olacaktır.

$$J_{AA} = -\frac{J_1J_2}{4\mathcal{A}^2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \frac{e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_1} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_2}}{\epsilon_{sk} - \epsilon_{s'k'}} \cdot n_{sk}(1 - n_{s'k'}) \cdot F(\mathbf{R}) \quad (13)$$

$$F(\mathbf{R}) = [2 + 2 \cos((\mathbf{K} - \mathbf{K}') \cdot \mathbf{R})] \quad (14)$$

Burada  $R = |\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|$  iki manyetik moment arasındaki mesafeyi göstermektedir. Bu denklemdaki son terim iki Dirac vadisinin kendi içlerinde ve aralarında olan elektron saçılmasını anlatmaktadır. Dirac vadileri arası saçılma sonucu  $2 \cos((\mathbf{K} - \mathbf{K}') \cdot \mathbf{R})$ ,  $\mathbf{K} - \mathbf{K}' = 4\pi/(3\sqrt{3}a)\hat{y}$  şeklinde atomik mesafelerde salınım gösteren bir terim ortaya çıkmaktadır. Ayrıca bu terim RKKY etkileşiminin grafen örgü üzerinde farklı zig-zag ve "armchair" yönlerinde farklı davranış göstermesine neden olacaktır. Uzaklık vektörü( $\mathbf{R}$ )  $(\mathbf{K} - \mathbf{K}')$ 'ye dik olduğu zaman, yani  $\mathbf{R}$  vektörü zigzag yönünde olduğu zaman salınım ortadan kalkacaktır.

Öbür taraftan manyetik momentler farklı altörgü atomlarıyla etkileştikleri durumda ortaya çıkan etkileşim şu şekilde olacaktır:

$$J_{AB} = -2\frac{J_1J_2}{4\mathcal{A}^2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \frac{e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)} (-e^{i(\varphi-\varphi')})}{\epsilon_{sk} - \epsilon_{s'k'}} \cdot n_{sk}(1 - n_{s'k'}) \cdot F(\mathbf{R}) \quad (15)$$

Burada  $F(\mathbf{R})$  örgü sabiti periyodunda hızlı bir şekilde salınım gösteren bir terimdir. Öncelikle  $J_{AA}$  tipi etkileşiminin hesabını yapacağız. Denklem (14)'de verilen ifade sonsuz büyüklükte bir grafen yapı için hesaplandığı zaman, alanın sonsuza gittiği limitte  $\mathcal{A} \rightarrow \infty$  deęiřtokuş fonksiyonları şu şekilde yazılabilir:

$$J_{AA}(\mathbf{R}) = -2 \frac{J_1 J_2}{4(2\pi)^2} \int_0^{k_c} k dk \int_0^{k_c} k' dk' \frac{J_0(kR) J_0(k'R)}{\hbar v_F (sk - s'k')} n_{sk} (1 - n_{s'k'}) F(\mathbf{R}) \quad (16)$$

$$J_{AB}(\mathbf{R}) = +2 \frac{J_1 J_2}{4(2\pi)^2} \int_0^{k_c} k dk \int_0^{k_c} k' dk' \frac{J_1(kR) J_1(k'R)}{\hbar v_F (sk - s'k')} n_{sk} (1 - n_{s'k'}) F(\mathbf{R}) \quad (17)$$

Buradaki ifadelerde momentuma bağlı doğrusal bir enerji dağılımı alınmıştır. RKKY etkileşiminde en önemli katkı Dirac noktası yakınlığından gelmekte ve manyetik momentler birbirlerinden örgü sabitine kıyasla uzak olmaları durumunda ( $R \gg a$ ) enerji dağılımının doğrusal alınması ve momentum integrallerinde üst limitlerin sonsuza götürülmesi  $k_c \rightarrow \infty$  mümkün olmaktadır. Bu durum aşağıda gösterilecektir.

Denklem (15)'teki açısal integraller Jacobi-Anger ilişkisi kullanılarak hesaplanmaktadır:

$$e^{ikr \cos \varphi} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^m J_m(kr) e^{im\varphi} \quad (18)$$

Jacobi-Anger açılımı kullanılarak RKKY etkileşimi hesaplamalarında faydalı olacak şu ifade elde edilebilir:

$$\int_0^{\infty} dx x^n e^{-px} J_m(x) = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial p^n} \frac{(\sqrt{p^2 + 1} - p)^m}{\sqrt{p^2 + 1}} \quad (19)$$

Sıfır sıcaklıkta  $J_{AA}$  ve  $J_{AB}$  kesin olarak hesaplanabilir[16, 27]. Nötr grafen yapıda RKKY etkileşimleri hesaplanırken denklem (16)'da paydadaki enerji farkı teriminin şu şekilde ifade edilmesi durumunda

$$\frac{1}{sk - s'k'} = - \int_0^{\infty} d\tau \exp[(sk - s'k')\tau], \quad (20)$$

momentum integralleri birbirinden ayrılabilir. Bu ifadede  $s'k' \geq sk$  koşulu sağlanmaktadır. Çalışmalarımızda analitik ve numerik hesaplamalarda bu form oldukça faydalı olacaktır.

## 2.2. Yığınsal Nötr Grafende RKKY Etkileşimi

Denklem(20) kullanılarak nötr durumda ( $s = -1, s' = +1$ )  $J_{AA}$  terimi şu şekilde ifade edilebilir:

$$J_{AA}(\mathbf{R}) = -2 \frac{J_1 J_2 F(\mathbf{R})}{4(2\pi)^2 \hbar v_F R^3} \int_0^\infty d\tau \int_0^\infty \tilde{k} d\tilde{k} J_0(\tilde{k}) e^{-\tilde{k}\tau} \int_0^\infty \tilde{k}' d\tilde{k}' J_0(\tilde{k}') e^{-\tilde{k}'\tau} \quad (21)$$

$$J_{AB}(\mathbf{R}) = +2 \frac{J_1 J_2 F(\mathbf{R})}{4(2\pi)^2 \hbar v_F R^3} \int_0^\infty d\tau \int_0^\infty \tilde{k} d\tilde{k} J_1(\tilde{k}) e^{-\tilde{k}\tau} \int_0^\infty \tilde{k}' d\tilde{k}' J_1(\tilde{k}') e^{-\tilde{k}'\tau} \quad (22)$$

Burada boyutsuz birimler olarak  $\tilde{k} = kR$  ve  $\tilde{k}' = k'R$  tanımlanmıştır.

Sonuç olarak bu ifade şu şekilde yazılabilir

$$J_{AA}(\mathbf{R}) = -2 \frac{J_1 J_2 F(\mathbf{R})}{4(2\pi)^2 \hbar v_F R^3} \int_0^\infty d\tau \left( \frac{\partial}{\partial \tau} \frac{1}{\sqrt{\tau^2 + 1}} \right)^2 \quad (23)$$

$$J_{AB}(\mathbf{R}) = +2 \frac{J_1 J_2 F(\mathbf{R})}{4(2\pi)^2 \hbar v_F R^3} \int_0^\infty d\tau \left( \frac{\partial}{\partial \tau} \frac{(\sqrt{\tau^2 + 1} - \tau)}{\sqrt{\tau^2 + 1}} \right)^2 \quad (24)$$

Bu ifadeden de görüldüğü üzere  $R \gg a$  olduğu durumlarda integrallerde üst limitin sonsuza götürülmesi  $k_c \rightarrow \infty$  bir hata oluşturmayacaktır. Ancak atomik mesafelerle kıyaslanabilir mesafelerde bu doğru olmayacak, RKKY etkileşim genliği  $1/R^3$  davranışından sapacaktır. Bu durumda Dirac momentumundan uzak noktadaki yüksek momentum durumları da etkileşime katkıda bulunacak, doğrusal enerji dağılımı varsayımı da doğru bir yaklaşım olmayacaktır.  $R \gg a$  durumunda  $\tau$  integrallerinin alınmasıyla RKKY etkileşimi şu forma dönüşür:

$$J_{AA}(\mathbf{R}) = -\frac{J_1 J_2}{64\pi \hbar v_F} \frac{1 + \cos((\mathbf{K} - \mathbf{K}') \cdot \mathbf{R})}{R^3} \quad (25)$$

$$J_{AB}(\mathbf{R}) = \frac{3J_1 J_2}{64\pi \hbar v_F} \frac{1 + \cos((\mathbf{K} - \mathbf{K}') \cdot \mathbf{R})}{R^3} \quad (26)$$

Görüldüğü üzere iki moment aynı tür alt örgü üzerinde buldukları zaman ferromanyetik, farklı alt örgü üzerinde iken ise antiferromanyetik bir özellik göstermektedir. Nötr grafende RKKY etkileşimleri karakteristik olarak uzaklığın küpüyle orantılı olarak azalmaktadır. Ancak katkılama yapılması durumunda ise  $1/R^3$  davranışı uzak mesafelerde  $1/R^2$  şeklinde azalan bir RKKY etkileşimi ortaya çıkmakta aynı zamanda  $J_{AA}$  ve  $J_{AB}$  uzaklığa bağlı olarak ferromanyetik ve antiferromanyetik durumlar arasında değişim göstermektedir[26, 17].

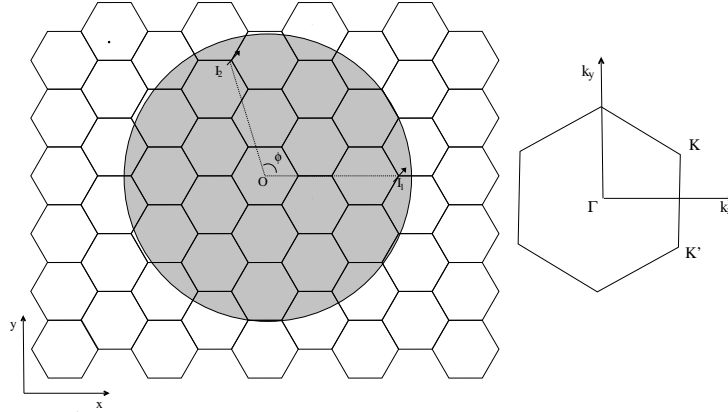


### 2.3. Dairesel potansiyel altında elektronik modların belirlenmesi ve RKKY etkileşimlerinin hesaplanması

Şekil (2)'de gösterildiği şekilde Brillouin bölgesinde  $K, K'$  Dirac noktaları çevresinde elektronlar iki boyutlu pozisyon uzayında kütleless Dirac fermionları olarak davranırlar ve Hamiltonyenleri şu şekilde ifade edilebilir[23, 6]:

$$\begin{aligned} H_K &= V(\mathbf{r})\sigma_0 + v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ H_{K'} &= V(\mathbf{r})\sigma_0 + v_F \boldsymbol{\sigma}^* \cdot \mathbf{p} \end{aligned} \quad (27)$$

$H_K$  ve  $H_{K'}$  Hamiltonyenlerine göre korunan toplam açısal momentum değeri  $\mathbf{J} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \pm \hbar\boldsymbol{\sigma}/2$  şeklinde verilmektedir. Burada  $\boldsymbol{\sigma}$  yalancı spin(pseudo-spin) operatörüdür. A ya da B alt-örgüsünde olmasına bağlı olarak  $\sigma_z = \pm 1$  değerini almaktadır.



**Şekil 2:** Dairesel bir potansiyel altında iki manyetik atom ve Brillouin bölgesi gösterilmiştir.

$V(r) = -V_0\theta(R - r)$  daireysel potansiyel kuyusu altında ( $V_0 > 0$ ),  $E$  enerjisine karşılık gelen öz-fonksiyonlar şu şekilde elde edilebilir

$$\psi_m^{K(K')}(k, r) = \begin{cases} \frac{A}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} J_m(qr) \\ \pm i s_1 J_{m\pm 1}(qr) e^{\pm i\varphi} \end{pmatrix} e^{im\varphi}, & r < R \\ \frac{\cos\theta}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} J_m(kr) \\ \pm i s_2 J_{m\pm 1}(kr) e^{\pm i\varphi} \end{pmatrix} e^{im\varphi} - \frac{\sin\theta}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} N_m(kr) \\ \pm i s_2 N_{m\pm 1}(kr) e^{\pm i\varphi} \end{pmatrix} e^{im\varphi}, & r > R \end{cases} \quad (28)$$

$$k = \frac{E}{s_2 \hbar v_F}, \quad q = \frac{E + V_0}{s_1 \hbar v_F},$$

Bu çözüm  $K(K')$  Dirac noktası etrafındaki çözüm için toplam açısal momentum değeri  $j = m \pm 1/2$  değerini almaktadır.  $s_1 = \text{sgn}(E + V_0)$ ,  $s_2 = \text{sgn}(E)$  değerlerini almaktadır.

Sınır koşullarının sağlanmasıkoşulu gerekli katsayıları şu şekilde türetecektir:

$$A = \frac{2s_1s_2}{\pi kR} \frac{1}{\sqrt{f_m^2 + g_m^2}}, \quad \tan \theta = \frac{f_m}{g_m} \quad (29)$$

$$\begin{aligned} f_m(E) &= J_m(qR)J_{m\pm 1}(kR) - s_1s_2J_{m\pm 1}(qR)J_m(kR) \\ g_m(E) &= J_m(qR)N_{m\pm 1}(kR) - s_1s_2J_{m\pm 1}(qR)N_m(kR) . \end{aligned} \quad (30)$$

Sistemin yerel durum yoğunluğu(LDOS) şu şekilde ifade edilebilir:

$$D(E, r) = g \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{\alpha=K, K'} \int_0^{\infty} k dk \delta(E - s\hbar v_F k) \psi_m^{\alpha \dagger}(k, r) \psi_m^{\alpha}(k, r) \quad (31)$$

$g = 2$  spin serbestisini göstermektedir.

Şekil (3 a)'da kuyu bölgesi içersindeki durum yoğunluğu(DOS)( $r < R$ ) =  $\int_{r < R} d^2\mathbf{r} \text{LDOS}(r)$  gösterilmiştir. LDOS'ta kuantum kuyunun varlığı sebebiyle ortaya çıkan rezonanslar toplam açısıl momentumlarına bağlı olarak gösterilmiştir.  $E=0$ ( $q = V/\hbar v_F$ ) çevresinde tam iç yansımalar sebebiyle oluşan rezonanslar gösterilmiştir.

Şekil (3 b)'de  $V = 4\hbar v_F/R$  değerinde yerel durum yoğunluğu ve  $r = 0.92R$  noktasındaki enerjiye bağlı LDOS gösterilmiştir.  $\theta = \pi/2$  durumunda yarı bağlı durumlar ortaya çıkmaktadır. Bu durumun gerçekleşebilmesi için denklem (30)'deki  $g_m = 0$  değerini sağlaması gerekmektedir.

Şekil 4a'da ise DOS( $r < R$ ) durumuna ait rezonansların genişliği(FWHM) mavi eğrilerle, değeri ise kırmızı eğrilerle gösterilmiştir.

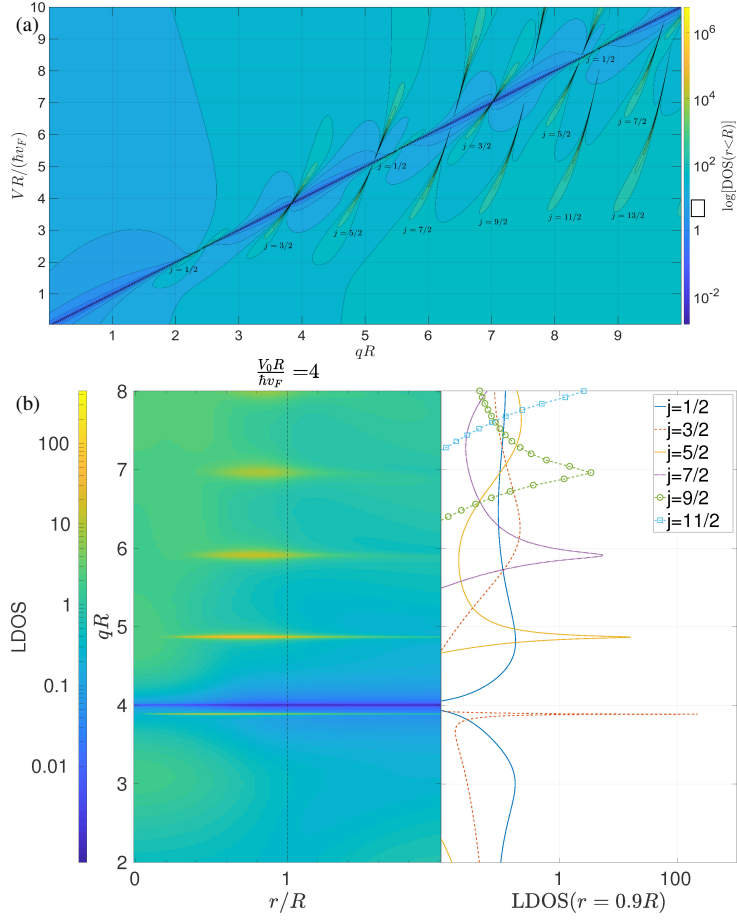
Grafende Dirac tünellemesinden dolayı bağlı durumlar yoktur, ancak kuyu bölgesinde yüksek yerel durum yoğunluğuna sahip kısmi bağlı durumların(Quasi Bound State:QBS) olduğu tespit edilmiştir. Artan açısıl momentumla birlikte rezonansların keskinleştiği görülmektedir.

Kuyunun içersinde ( $\rho_i, \phi_i$ ),  $i = 1, 2$  pozisyonunda iki manyetik momentin bulunduğu durumu ele alacağız. Aynı şekilde Bu çözümleri kullanarak kuyunun içersinde bulunan iki manyetik spin arasındaki RKKY etkileşimini şu şekilde ifade edebiliriz

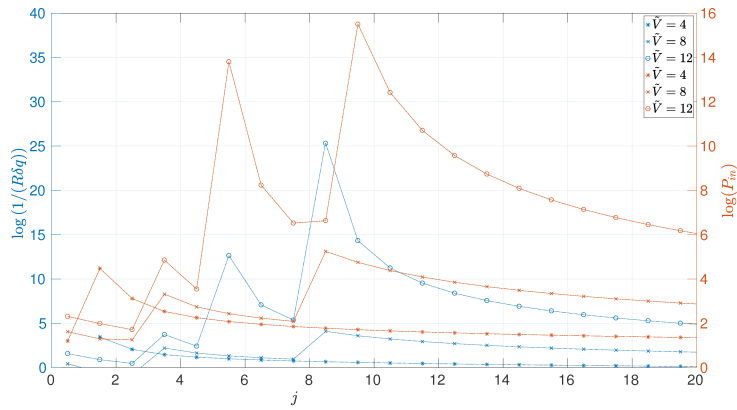
$$\begin{aligned} J_{AA} &= \frac{J_1J_2}{32\pi^2\hbar v_F} \left(\frac{2}{\pi}\right)^4 \sum_{m, m'} \int_0^{\infty} k dk \int_0^{\infty} k' dk' \frac{1}{(kR)^2(k'R)^2} \dots \\ &\times \frac{J_m(q\rho_1)J_m(q\rho_2)J_{m'}(q\rho_1)J_{m'}(q\rho_2)e^{i(m-m')(\varphi_1-\varphi_2)}}{(f_m(k, q)^2 + g_m(k, q)^2) \cdot (f_{m'}(k', q')^2 + g_{m'}(k', q')^2)} \times \frac{n_{s_1}(q)(1 - n_{s_1'}(q'))}{(s_1q - s_1'q')} \cdot F(\mathbf{R}) \end{aligned} \quad (32)$$

$$s_1q = s_2k + V_0, \quad s_1q' = s_2k' + V_0 \quad (33)$$

Dirac vadilerinin kendi içlerinde ve birbirleri arasındaki saçılma terimleri nötr Grafende olduğu gibi  $F(\mathbf{R}) = (2 + 2 * \cos(K - K') \cdot R)$  terimi katkı vermektedir. İki farklı alt örgü arasında bulunan



**Şekil 3:** (a)  $DOS(r > R)$  dalga vektörüne ve potansiyele bağlı olarak gösterilmiştir, burada enerji ve dalga vektörü arasında  $q = (E + V_0)/\hbar v_F$  ilişkisi vardır. (b) LDOS  $V = 4\hbar v_F/R$  durumu için gösterilmiştir (solda). Sağ taraftaki şekilde LDOS( $r = 0.92R$ )  $j = 1/2, 3/2, \dots, 11/2$  açısıl momentum değerleri için gösterilmiştir. .



**Şekil 4:**  $DOS(r < R)$  (mavi eğri) ve değeri (kırmızı eğri) gösterilmiştir.

manyetik atomlar arasında değiş tokuş etkileşimi ise şu şekildedir

$$J_{AB} = \frac{J_1 J_2}{32\pi^2 \hbar v_F} \left(\frac{2}{\pi}\right)^4 \sum_{m,m'} \int_0^\infty k dk \int_0^\infty k' dk' \frac{s_1 s_1'}{(kR)^2 (k'R)^2} \dots$$

$$\times \frac{J_{m-1}(q\rho_1) J_m(q\rho_2) J_{m'-1}(q\rho_1) J_{m'}(q\rho_2) e^{i(m-m')(\varphi_1-\varphi_2)}}{(f_m(k,q)^2 + g_m(k,q)^2) \cdot (f_{m'}(k',q')^2 + g_{m'}(k',q')^2)} \times \frac{n_{s_1}(q)(1-n_{s_1'}(q'))}{(s_1 q - s_1' q')} \cdot F(\mathbf{R}) \quad (34)$$

$$s_1 q = s_2 k + V_0, \quad s_1 q' = s_2 k' + V_0 \quad (35)$$

$V_0 = 0$  limitinde  $q = k, s_1 = s_2, s_1' = s_2'$  olmakta  $f = 0, g = 2/(\pi k R)$  değerini almakta, Jacobi-Anger bağıntısını

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)] = 2\pi \sum_m J_m(kR_1) J_m(kR_2) \quad (36)$$

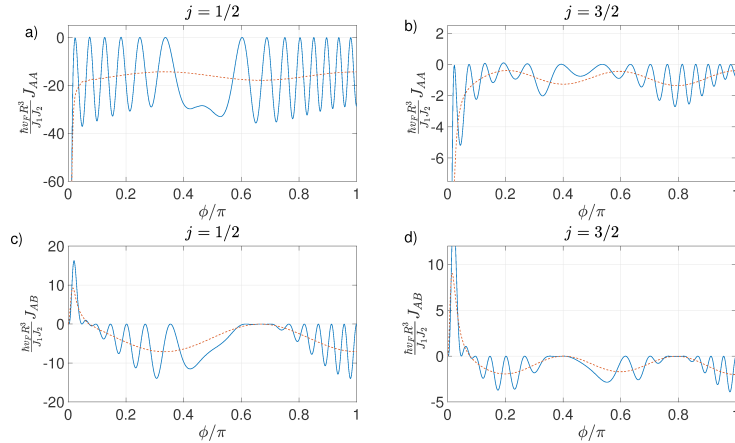
$$= 2\pi J_0(k|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|) \quad (37)$$

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)] e^{-i\varphi} = 2\pi \sum_m J_{m-1}(kR_1) J_m(kR_2) \quad (38)$$

$$= 2\pi J_1(k|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|) \quad (39)$$

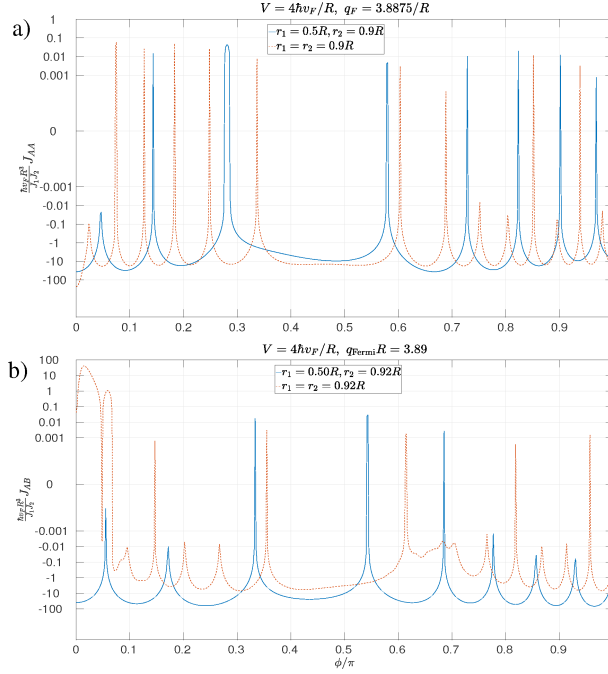
kullanarak RKKY etkileşimlerinin nötr grafen sonucuna indirgendiği görülecektir.

Şekil (5)'de potansiyel merkezinden  $r = 0.92R$  mesafede bulunan iki manyetik atom arası RKKY etkileşimi aynı tür ve farklı tür alt örgü durumlarında buldukları durumlar için , Fermi enerjisinin rezonant enerjilerle örtüştüğü durumlar için gösterilmiştir. RKKY etkileşiminde mesafeye bağlı olarak güçlenmeler grafiklerde açıkça görülmektedir.



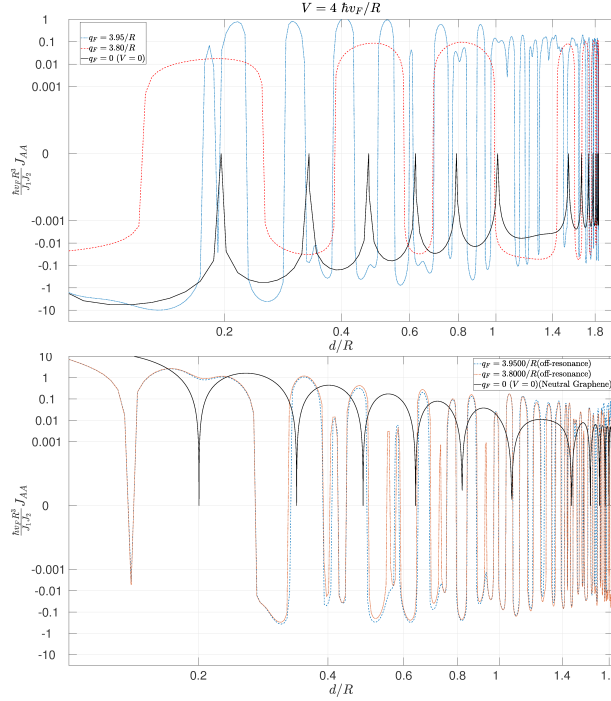
**Şekil 5:** Merkezden  $r = 0.92R$  atomik pozisyonda bulunan iki manyetik atom arası RKKY etkileşimleri(kesiksiz) ve atomik düzeydeki salınımların ortalaması(kırmızı kesikli çizgi) gösterilmiştir.  $V = 4\hbar v_F/R, R = 20a$  durumu için Fermi enerjileri rezonans değerlerinde seçilmiştir:  $J_{AA}$  for a)  $q_F = 3.8875/R(j = 1/2)$ , b)  $q_F = 4.8675/R(j = 3/2)$ , and  $J_{AB}$  for c)  $q_F = 3.8875/R(j = 1/2)$ , d)  $q_F = 4.8675/R(j = 3/2)$ .

Şekil 6'da ise manyetik atomların farklı mesafelerde olduğu durum incelenmiş, ve RKKY etkileşiminin güçlenmesi ve  $J_{AB}$  için belirli bir mesafeden sonra ferromanyetik karaktere geçiş gözlenmiştir.



**Şekil 6:** (a)  $J_{AA}$  ve (b)  $J_{AB}$  iki manyetik atomun merkezden  $r_1 = 0.50R, r_2 = 0.92R$  mesafesinde (kesikli çizgi), ve  $r_1 = r_2 = 0.92R$  (kesiksiz çizgi) durumlar için Fermi enerjisinin  $j = 1/2$  durumuna ait rezonans değerinde  $q_F = 3.8875/R$  olduğu durum için gösterilmiştir.

Şekil (7)'de ise Fermi enerjisinin kuyunun rezonant enerjisiyle örtüşmediği durumlar incelenmiş, ve RKKY etkileşimlerinde güçlü salınımlar olmasına rağmen genliğinin azaldığı gözlenmiştir.



**Şekil 7:**  $J_{AA}$  iki manyetik atom merkezden  $r = 0.92R$  mesafesinde iken, Fermi enerjisi ise  $q_F = 3.95/R$ (noktalı),  $q_F = 3.80/R$ (kesikli) and nötr grafen(kesiksiz) durumları için gösterilmiştir.

## 2.4. Green fonksiyonları ve RKKY etkileşiminin hesaplanması

Bu kısımda Green fonksiyonlarının doğrudan hesaplanması ve duyunluk fonksiyonu ve RKK etkileşimleri Green fonksiyonları kullanarak hesaplanacaktır. RKKY etkileşimi ikinci dereceden elektronik geçişler vasıtasıyla ortaya çıkmaktadır. Elektron yoğunluğunun uygulanan potansiyelle duyunluğu  $\chi(r, r') = \delta n(r)/\delta V(r')$  kullanılarak RKKY etkileşimi hesaplanmaktadır[27]. Bu yaklaşımda elektron yoğunluğu Green fonksiyonu cinsinden yazıldığında

$$n_\alpha(r) = -\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{E_f} dE \text{Im}[G_{\alpha\alpha}(r, r, E)] \quad (40)$$

Dyson denklemini  $G = G^0 + G^0 V G$  kullanarak duyunluk perturbatif olarak sıfır sıcaklık Green fonksiyonları cinsinden hesaplanabilir

$$\chi_{\alpha\beta}(r, r') = -\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{E_F} dE \text{Im}[G_{\alpha\beta}^0(r, r', E) G_{\beta\alpha}^0(r', r, E)] \quad (41)$$



Burada  $\alpha(\beta) = A, B$  grafen altörgüsünü gösteren indekslerdir. Sıfır sıcaklıkta gecikmeli(retarded) Green fonksiyonu

$$G^0(r, r', E) = \sum_k \frac{\psi_k(r)\psi_k^\dagger(r')}{E - E_k + i\delta} \quad (42)$$

$$\delta > 0 \quad (43)$$

formundadır.  $\psi_k$  ise serbest ya da dış potansiyel altındaki grafene ait elektronik modlardır(8). Sonuç olarak duygunluk

$$J_{\alpha\beta} = -\frac{J_1 J_2}{4} \chi_{\alpha,\beta} \quad (44)$$

Denklem (44)'nin hesaplanması sonucu çıkan sonuç Fermi denizindeki elektronların adiyabatik olarak elimine edilmesiyle ortaya çıkan değiş tokuş etkileşimini anlatan bir ifadedir.

Denklem (27) ile verilen Hamiltonyenle birlikte Green fonksiyonlarının sağlaması gereken denklem şu şekildedir:

$$(E - H_K)\hat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \hat{\delta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (45)$$

Bu Green fonksiyonu  $2 \times 2$  matris formunda olup sağlaması bileşenleri  $\hat{G}_{\alpha\beta}^K(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ ,  $\alpha = A, B, \beta = A, B$  şeklindedir. Özel olarak  $G_{AA}^K$  aşağıdaki diferensiyal denklemi sağlamaktadır:

$$\left[ (E - V) - \hat{p}_- \frac{1}{E - V} \hat{p}_+ \right] G_{AA}^K(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (46)$$

$K'$  Dirac noktası etrafında ise şu ilişkiyi sağlar:

$$\left[ (E - V) - \hat{p}_+ \frac{1}{E - V} \hat{p}_- \right] G_{AA}^{K'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (47)$$

Burada  $\hat{p}_\pm = p_x \pm ip_y = -i\hbar \exp(\pm i\varphi)(\partial_r \pm i\partial_\varphi/r)$ . Diferensiyal denklemi koordinat uzayında doğrudan çözümlenerek şu sonucu elde edebiliriz

$$\hat{G}_{AA}^{K(K')}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{s_1 q}{4\hbar v_F} \left( N_0(q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) + \sum_{m=-\infty}^{\infty} (G_{\pm m}^r + iG_{\pm m}^i) \dots \right. \\ \left. \times J_m(qr) J_m(qr') e^{im(\varphi - \varphi')} \right). \quad (48)$$

Burada

$$G_m^r = \frac{f_m \tilde{g}_m - \tilde{f}_m g_m}{f_m^2 + g_m^2} \quad (49)$$

$$G_m^i = \frac{-4s_1 s_2}{(\pi^2 k q R^2)(f_m^2 + g_m^2)} \quad (50)$$

Katsayılar  $\tilde{f}_m, \tilde{g}_m$  şu şekildedir

$$\tilde{f}_m = s_1 s_2 N_{m+1}(qR) N_m(kR) - N_m(qR) N_{m+1}(kR) \quad (51)$$

$$\tilde{g}_m = -s_1 s_2 N_{m+1}(qR) J_m(kR) + N_m(qR) J_{m+1}(kR), \quad (52)$$

$f_m, g_m$  daha önce denklem (30) ile tanımlanmıştır.

Sonuç olarak grafen üzerinde aynı alt örgü üzerinde bulunan iki nokta için Green fonksiyonu şu şekilde elde edilmiştir:

$$G_{AA}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_{AA}^K(\mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} + G_{AA}^{K'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{i\mathbf{K}' \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \quad (53)$$

Farklı alt örgülerde bulunan noktalar için Green fonksiyonu şu şekildedir:

$$G_{AB}^{K(K')} = \frac{iq}{4\hbar v_F} \left( \frac{r_{>} - r_{<} e^{-i(\varphi - \varphi')}}{r_{>} - r_{<} e^{i(\varphi - \varphi')}} \right)^{\mp \frac{\text{sgn}(r - r')}{2}} e^{\mp i\theta(r - r')\varphi - i\theta(r' - r)\varphi'} N_{\pm \text{sgn}(r - r')}(q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \dots$$

$$+ \sum_{m=-\infty}^{\infty} (G_{\mp m}^r + iG_{\mp m}^i) J_{m \mp 1}(qr) J_m(qr') e^{i(m \mp 1)\varphi - im\varphi'} \quad (54)$$

İki Dirac noktası  $K, K'$  göz önünde bulundurularak, grafen için  $G_{AB}$  Green fonksiyonu şu şekilde yazılabilir

$$G_{AB}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_{AB}^K(\mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} + G_{AB}^{K'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{i\mathbf{K}' \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \quad (55)$$

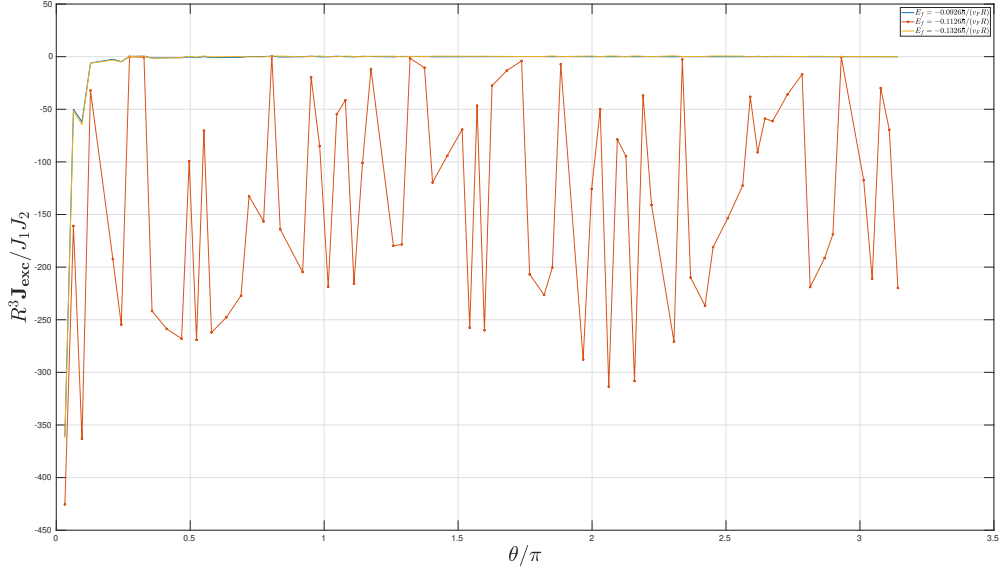
Burada  $\text{sgn}(x)$  işaret fonksiyonu,  $\theta(x)$  is the Heaviside basamak fonksiyonudur. Green fonksiyonlarını ifade ederken toplam formülleri kullanılmıştır[29].

Green fonksiyonları kompleks düzlemde tekilliklere sahiptir, örneğin denklem Eq. (50)'e göre  $m = 2, -3$   $j = 5/2$  ( $V = 4\hbar v_F/R$  tekilliklerin bir kısmı  $\{\dots, 3.6 \times 10^{-1} \pm 2.4 \times 10^{-4}i, 4.9 \pm 9.1 \times 10^{-3}i, 7.6 \pm 6.0 \times 10^{-1}i, \dots\}$  değerlerinde yer almaktadır.

Denklemler (41,44) ve elde ettiğimiz Green fonksiyonları kullanılarak duygunluk ve RKKY etkileşimleri hesaplanabilir. Şekil (8)'de  $J_{AA}$ , şekil 9)'de ise  $J_{AB}$  kuyu potansiyeli merkezinden  $0.9R$  mesafede bulunan iki safsızlık için gösterilmiştir. Aradaki mesafeye göre tekrar güçlenen bir etkileşim mevcuttur. Aynı şekilde  $J_{AB}$  ferromanyetik karaktere bürünmektedir. Bu sonuçlar

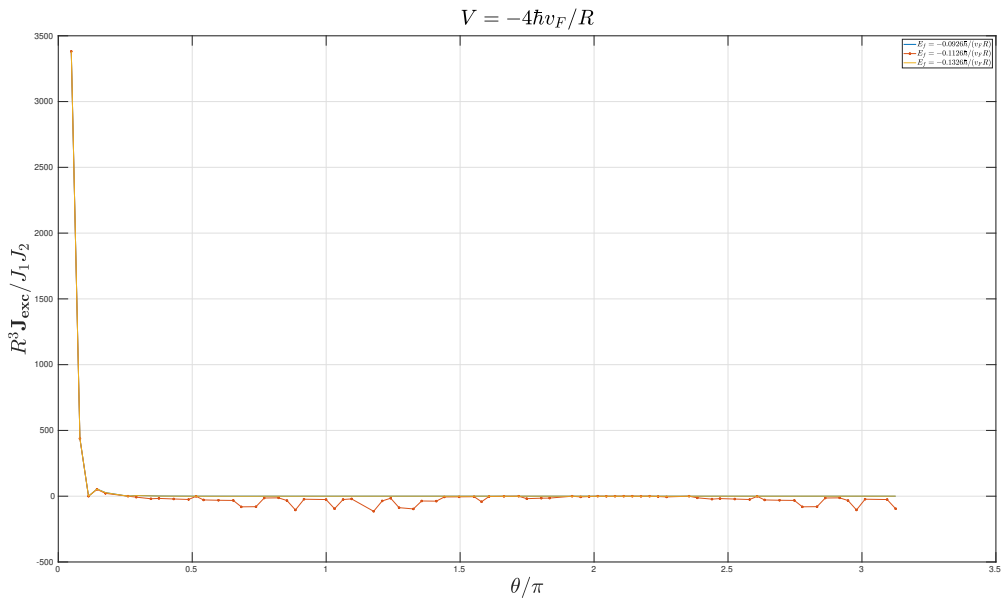


$$V = -4\hbar v_F/R$$



**Şekil 8:**  $J_{AA}$  Fermi enerjisinin üç farklı değeri için gösterilmiştir. Kırmızı grafik için  $E_F = -0.1126\hbar v_F/R$  yarı bağlı durum(QBS) enerjisiyle çakışmakta ve RKKY değerleri güçlenmekte ve ferromanyetik karakterini korumaktadır.

doğrudan dalga fonksiyonlarını kullanarak yaptığımız sonuçlarla uyumludur. Green fonksiyonları kullanılarak elde edilen sonuçlarda tek katlı integraller numerik olarak hesaplanmıştır.

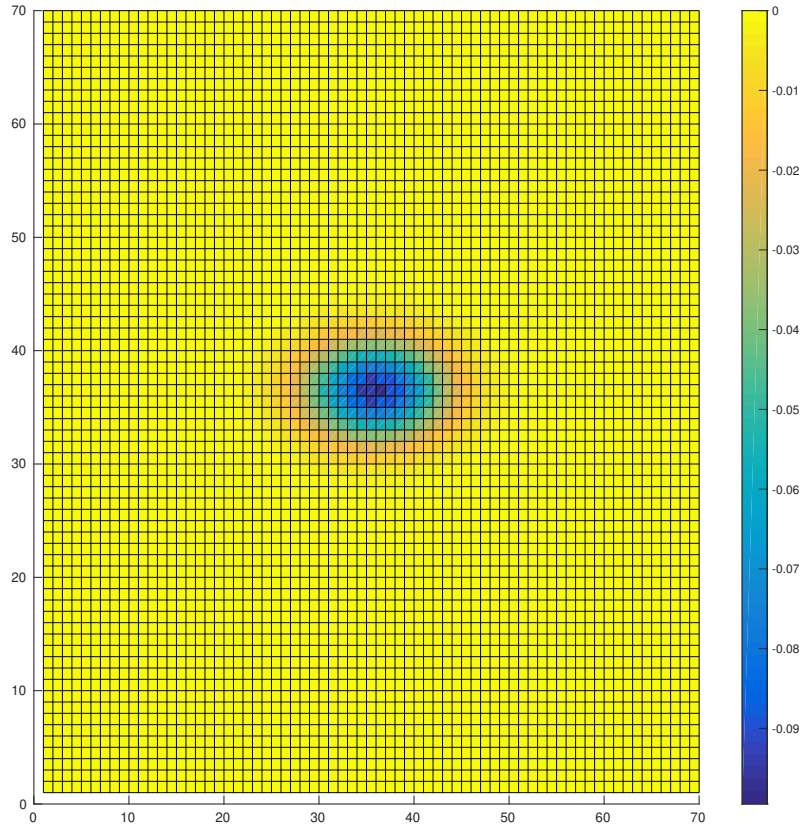


**Şekil 9:**  $J_{AB}$  Fermi enerjisinin üç farklı değeri için gösterilmiştir. Kırmızı grafik için  $E_F = -0.1126\hbar v_F/R$  yarı bağlı durum(QBS) enerjisiyle çakışmakta ve RKKY değerleri güçlenmekte ve ferromanyetik karakterini korumaktadır.

### 3. Sıkı Bağlanma Modeli ile RKKY etkileşimlerinin Modellenmesi

#### 3.1. Gauss Potansiyeli

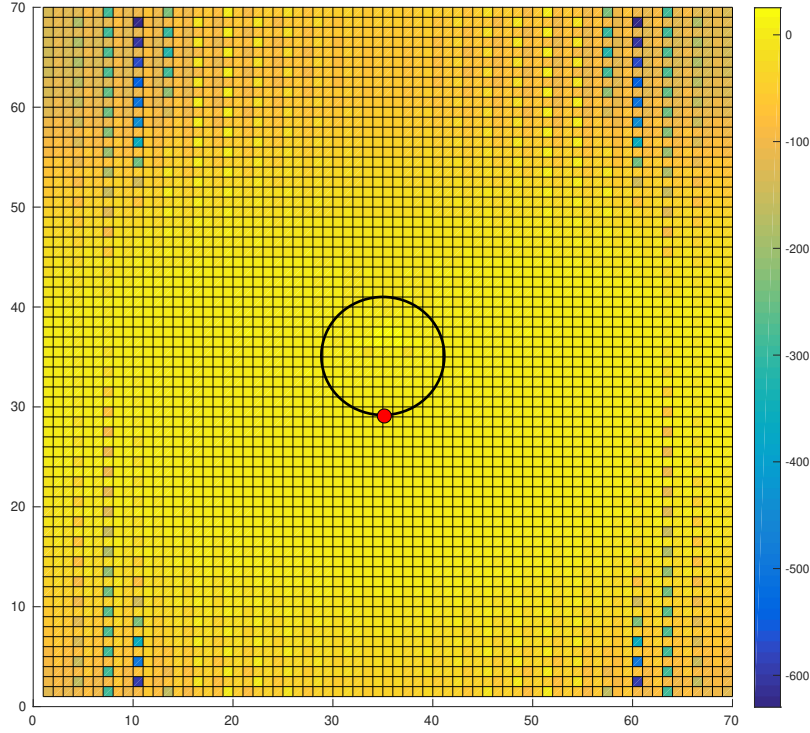
İlk olarak fııldayan galeri modlarının etkisini görmek için aşağıdaki şekil 10 görüldüğü gibi Gauss potansiyeli seçilmiştir. Kuyunun çeperlerinde potansiyel değışimin örgü sabiti ölçeğinde yavaş olması istendiğinden bu tip bir potansiyel seçilmiştir. Bunun nedeni ise keskin potansiyel değışimlerinin ters örgüdeki  $K$  ve  $K'$  Dirac noktaları arasındaki saçılmayı tetiklemesidir. Potansiyel kuyunun derinliğı zıplama (hopping) parametresi  $t$ 'nin  $1/10$ 'u olarak seçilmiştir.



**Şekil 10:**  $70 \times 70$  sistemde Gauss potansiyeli.

RKKY etkileşimin hesabında potansiyel kuyusu, sistemin tam ortasına konulmuştur. Safsızlıklardan biri potansiyelin yarıya düştüğü yere konulmuş, etkileşimin olduğu diğer safsızlık ise bütün kristal üzerinde dolaştırılarak her nokta için etkileşim hesaplanmıştır. Böylece etkileşimin gücü sistemin her noktasında görülebilmektedir. RKKY etkileşimi önce potansiyelin olduğu duruma daha sonra da potansiyelin olmadığı duruma göre hesaplanmıştır. Daha sonra da

kristaldeki her noktanın potansiyelin olduğu durumun olmadığı duruma oranı hesaplanıp grafiği çizilmiştir. Böylece potansiyel kuyunun etkisi görülebilmektedir.

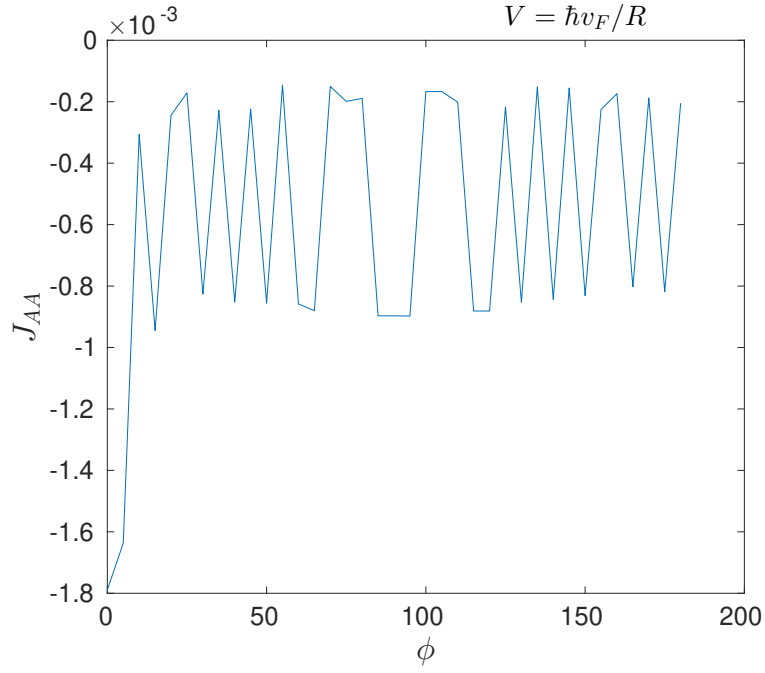


**Şekil 11:**  $70 \times 70$  sistemde RKKY etkileşimin potansiyelin uygulandığı durumun uygulanmadığı duruma oranı.

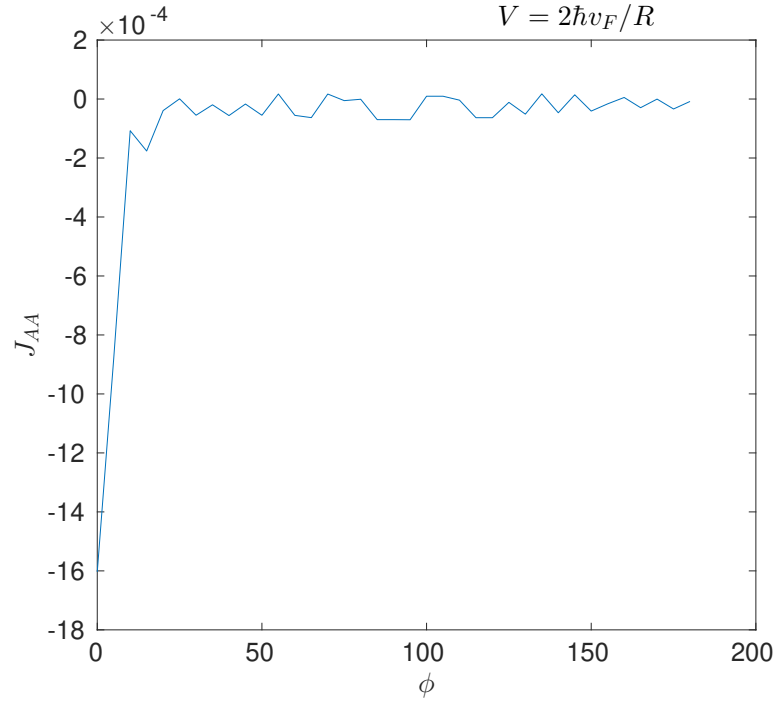
Şekil 11'deki siyah çember gauss potansiyelinin yarıya düştüğü noktaları, çemberin üzerindeki kırmızı nokta ise potansiyelin çeperindeki safsızlığı göstermektedir. RKKY etkileşimin bu potansiyel altında beklenildiği gibi çeper üzerinde değil potansiyel kuyunun dışında 600 kata kadar arttığı görülmüştür. Bunun nedeni sonlu sistem boyutu ve Veselago lens etkisi olduğu düşünülmektedir. Veselago lens etkisini düşündüğümüzde dairesel gauss potansiyeli iki boyutlu küresel bir mercek gibi davranıp elektron dalgalarını potansiyel kuyunun dışına odaklamaktadır. Bunun da RKKY etkileşiminin bu noktalarda güçlenmesine neden olduğu düşünülmektedir.

### 3.2. Farklı Potansiyellerin Etkisi

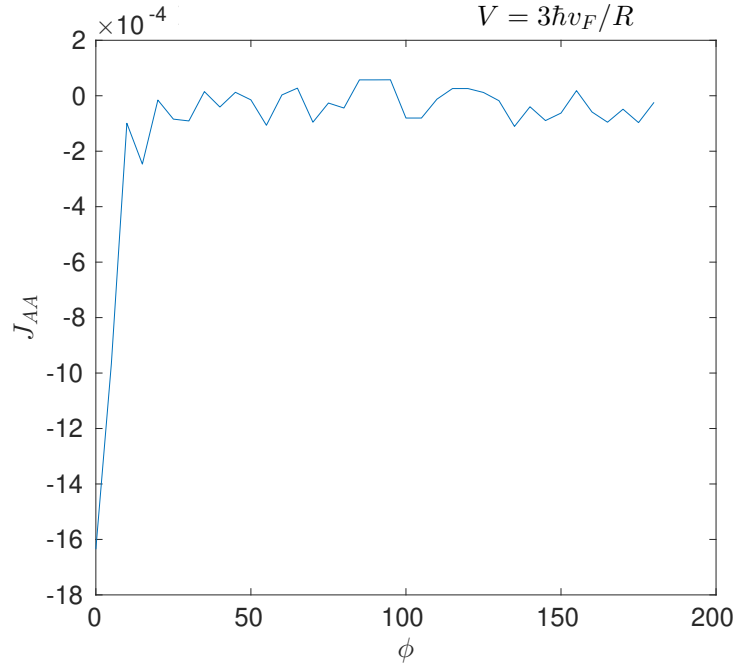
Sisteme özgü enerji ölçeği  $\hbar v_F/R$  şeklinde tanımlanır. Bu durumda potansiyel kuyunun derinliğinin bu enerji ölçeğine orantılı olması gerekir. Bu hesap için Gauss potansiyelinin yarıçapı 20 örgü sabiti uzunluğunda alınmıştır ve  $\frac{V}{\hbar v_F/R}$  oranı 1,2,3,4,5 olacak şekilde beş farklı hesaplama yapılmıştır. Sistemin sonlu olması ve periyodik sınır koşulları yüzünden potansiyelin yarıçapı büyüdüğünde örgüde alınan bir nokta, kendisine uzak olan potansiyeli de hissedebilir. Bu nedenle bu hesaplamada sistem boyutu  $70 \times 70$  yerine  $120 \times 120$  olarak alınmıştır. Sistem boyutu büyüdüğünde RKKY ekleşiminin örgü üzerindeki her nokta için hesaplanması çok uzun süreceğinden, bu hesaplamada sadece potansiyelin çeperi üzerinde kalan noktaların potansiyel kuyunun çeperi üzerindeki safsızlıkla etkileşimi hesaplanmıştır.



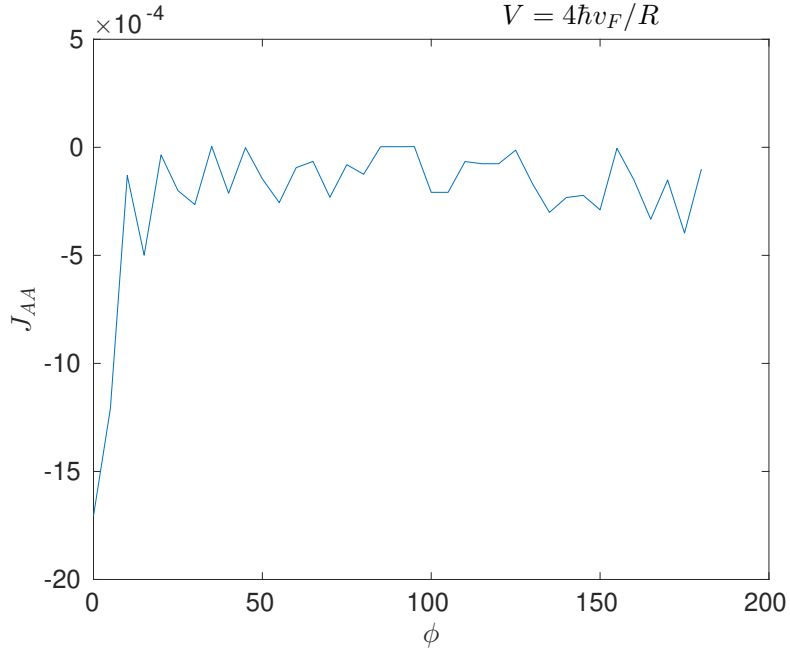
**Şekil 12:**  $V = \hbar v_F/R$  olan Gauss potansiyeli altında potansiyel kuyunun çeperi üzerindeki noktaların çeperin üzerindeki bir safsızlığa göre açığa bağlı olarak RKKY etkileşimi.



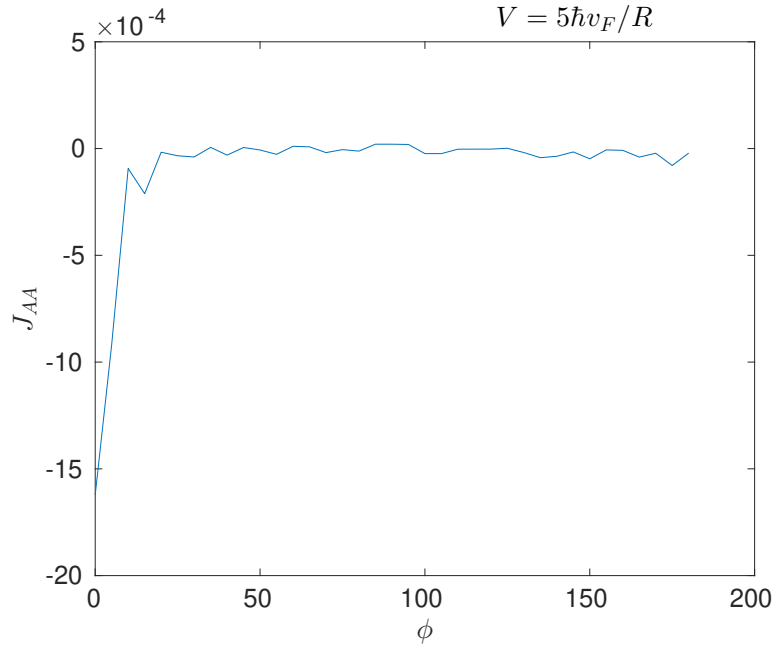
**Şekil 13:**  $V = 2\hbar v_F/R$  olan Gauss potansiyeli altında potansiyel kuyunun çeperi üzerindeki noktaların çeperin üzerindeki bir safsızlığa göre açığa bağlı olarak RKKY etkileşimi.



**Şekil 14:**  $V = 3\hbar v_F/R$  olan Gauss potansiyeli altında potansiyel kuyunun çeperi üzerindeki noktaların çeperin üzerindeki bir safsızlığa göre açığa bağlı olarak RKKY etkileşimi.



**Şekil 15:**  $V = 4\hbar v_F/R$  olan Gauss potansiyeli altında potansiyel kuyunun çeperi üzerindeki noktaların çeperin üzerindeki bir safsızlığa göre açığa bağlı olarak RKKY etkileşimi.



**Şekil 16:**  $V = 5\hbar v_F/R$  olan Gauss potansiyeli altında potansiyel kuyunun çeperi üzerindeki noktaların çeperin üzerindeki bir safsızlığa göre açığa bağlı olarak RKKY etkileşimi.





$V/(\hbar v_F/R)$  oranı 1 olduğunda şekil 12'de görüldüğü üzere çeperde sönümlenmeden kalan fısıldayan galeri modu olduğu görülüyor. Oran 2,3,4,5 olduğunda ise böyle bir etki görülüyor.

### 3.3. Katkılama Etkisi

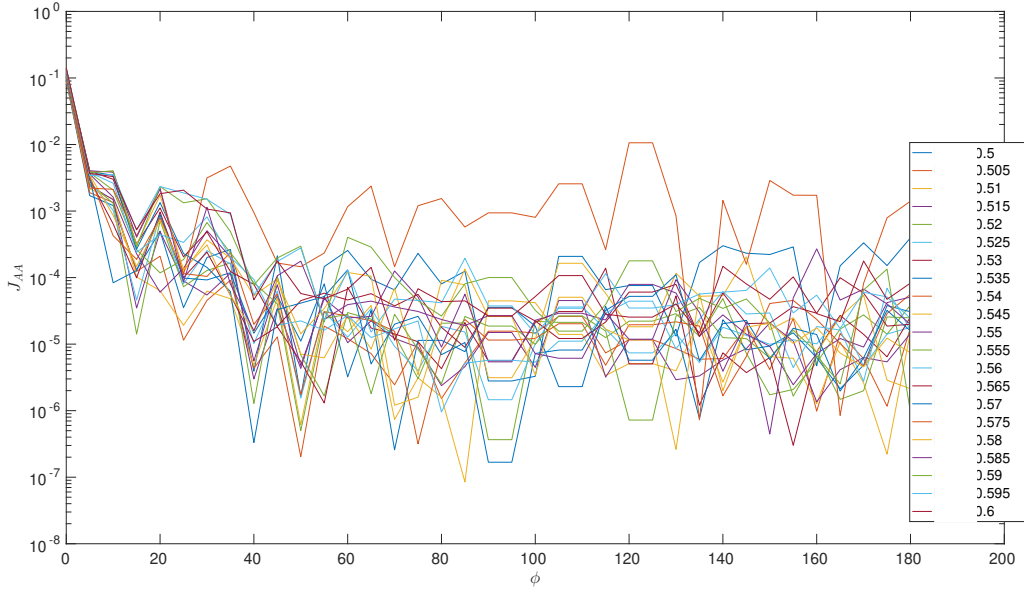
Belirli bir bölgeye Gauss potansiyeli uygulamak o bölgedeki yük derişimini deęiştirse de Fermi seviyesindeki deęişim büyük deęildir. Katkılama yapılarak Fermi seviyesi artırılıp azaltılabilir. Bu hesapta sisteme özgü enerji ölçeęi  $V/(\hbar v_F/R)$  oranı 4 olarak seçilmiştir.  $n_k$  ve  $n'_k$  deęerlerini deęiştirerek katkılama etkisini görebiliriz.

Sistemimizde  $x$  ve  $y$  yönlerinde  $m$ 'er tane atom olsun. Toplam atom sayısı  $m^2$  olacaktır. Her atom 2 tane durum katkıda bulunacaęından toplamda  $2m^2$  durum olur.  $r$  oranında katkılama yaptığımızda sisteme  $2m^2r$  kadar elektron eklemiş oluruz. Her A ve B tipi atom çifti birer birim hücre oluşturduğundan, toplam birim hücre sayısı  $n^2/2$ 'dir. Böylece birim hücre başına düşen elektron miktarı

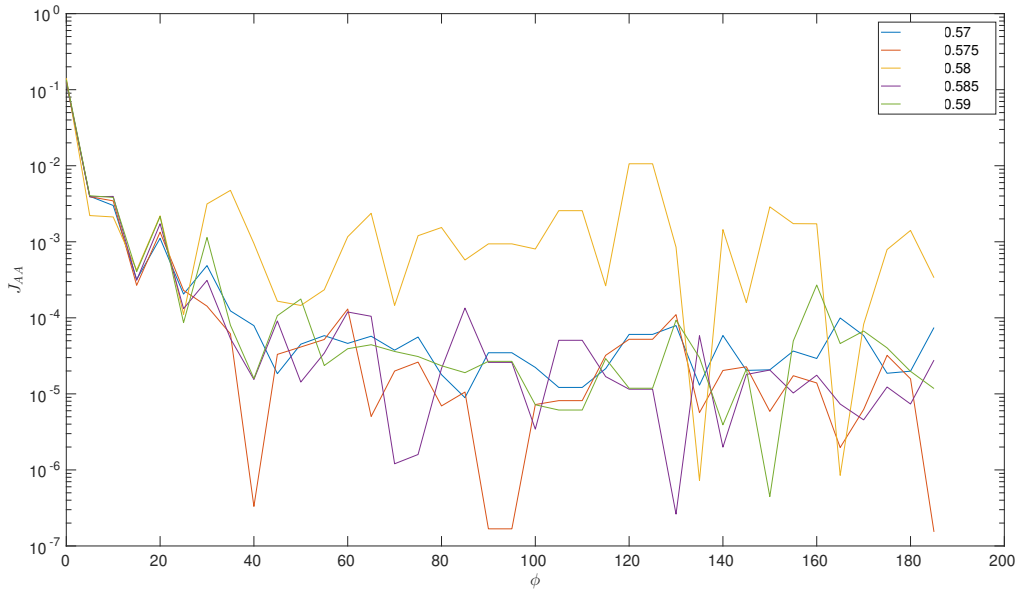
$$n_{\text{elektron}} = \frac{2m^2r}{\frac{m^2}{2}} = 4r \quad (56)$$

olur. İlgilendiğimiz sistemi ele alırsak  $m = 120$ 'dir. Şekil 17 ve 18'deki Ratio katkılanmış sistemin Fermi seviyesinin katkılanmamış sistemin Fermi seviyesine oranıdır. Örneğin, Ratio=0.570 ise Fermi seviyesi Ratio=0.5 kabul ettiğinden  $r = 0.14$  olur. Böylece Ratio=0.570 için birim hücre başına  $4r = 4 \times 0.14 = 0.56$  adet elektron katkı yaptığımızı söyleyebiliriz.

Külçe grafende RKKY etkileşiminin  $1/R^3$  ile orantılıdır. Şekil 18 'da görüldüğü üzere küçük  $\phi$  deęerlerinde RKKY etkileşimi hızlı bir şekilde düşmekte, açı büyüdüğünde ise külçe durumun aksine sıfıra yaklaşmak yerine sabit kalmaktadır. Bunun nedeni potansiyel kuyunun çeperine paralel hareket eden elektronların katkısıdır. Ratio'nun 0.58 olduğu durumda ise güçlenmiş bir RKKY etkileşimi görülmektedir.



**Şekil 17:** Grafik potansiyel kuyunun çeperinde açığa bağlı olarak değişen RKKY etkileşimini logaritmik ölçekte gösterir. Bu grafikte  $R = 20$  atom uzunluğundadır ve çizgiler farklı doluluk oranlarını (occupation number) temsil eder. Potansiyel değeri ise  $V = 4\hbar v_F/R$  şeklindedir. Doluluk oranı 0.5 olduğu durum Fermi seviyesinin tam Dirac noktasında bulunduğu duruma karşılık gelir.



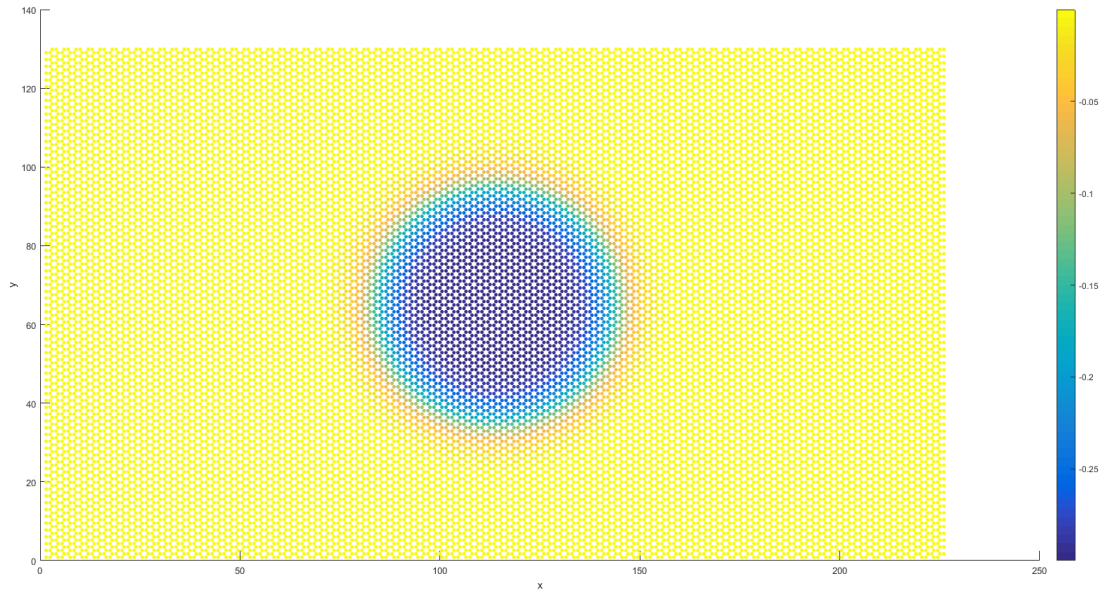
**Şekil 18:** Bu grafikte  $R = 20$  atom uzunluğundadır ve çizgiler farklı doluluk oranlarını (occupation number) temsil eder. Potansiyel değeri ise  $V = 4\hbar v_F/R$  şeklindedir. Diğer şekille(Şekil-17) aynı bilgileri içermektedir.

### 3.4. Sıkı Bağlanma Modeli Altında RKKY etkileşimi: Kısmi-bağlı durumların RKKY etkileşimine katkısı

Bu çalışmada hesaplamalar boyutları  $150 \times 150 = 22500$  atomdan oluşan sistem üzerinde yapılmıştır. Daha önceki hesaplamalarda kullanılan Gaussyen potansiyel yerine, bu çalışmada sigmoid potansiyel kullanılmıştır. Bunun nedeni sigmoid potansiyelinin formunun Heaviside potansiyeline daha çok benzemesi ve Klein tünellemesini baskılamayacak kadar da yumuşak değişmesidir. Sigmoid fonksiyonunun formu aşağıdaki gibidir.

$$f(r) = \frac{k}{\exp(r - r_0)/\sigma + 1} \quad (57)$$

Burada  $r_0$  potansiyelin merkezini,  $\sigma$  potansiyelin ne kadar hızla değiştiğini,  $k$  ise potansiyelin derinliğini göstermektedir. Şekil 19'de potansiyelin grafen örgü üzerindeki profili görülmektedir.

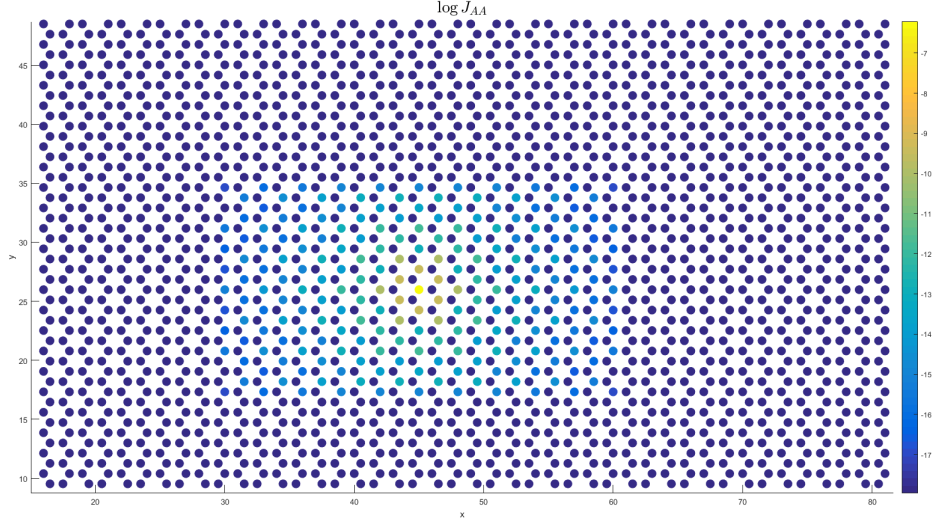


**Şekil 19:**  $150 \times 150$  karbon atomundan oluşan grafen yapının üzerine uygulanan  $R = 30a$  yarıçaplı potansiyelin profili

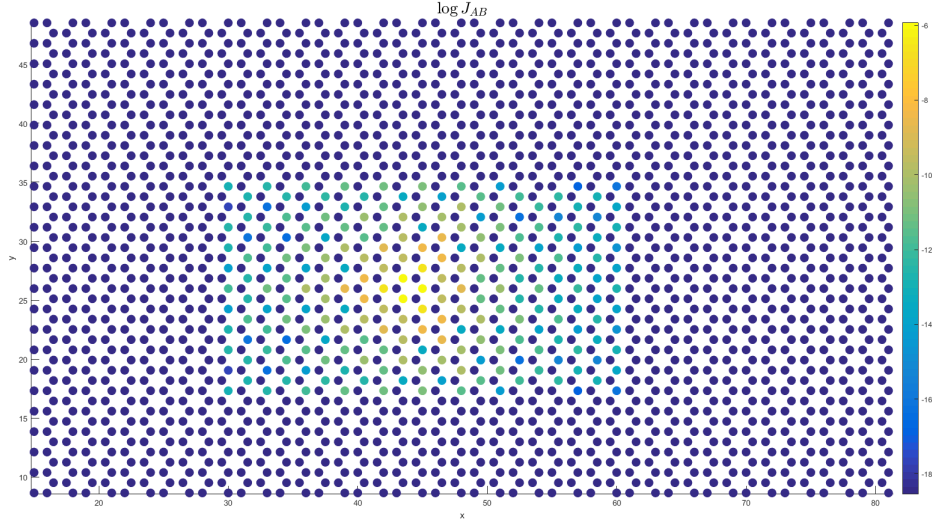
#### 3.4.1. Yığınsal Grafen Sonuçları

Şekil 20 ve 21'da yığınsal grafendeki RKKY etkileşiminin logaritmik ölçekte çizilmiş hali gösterilmektedir. Manyetik safsızlıklardan biri sistemin tam ortasına konulmuş, diğer safsızlık ise  $30a \times 30a$  alanında bir kutunun içindeki tüm noktalarda dolaştırılarak etkileşim gücü hesa-

planmıştır. Burada AA be AB tipi etkileşimlerin, manyetik safsızlıklar arası uzaklık olan  $R$ 'nin küpüyle azaldığı görülmüştür.



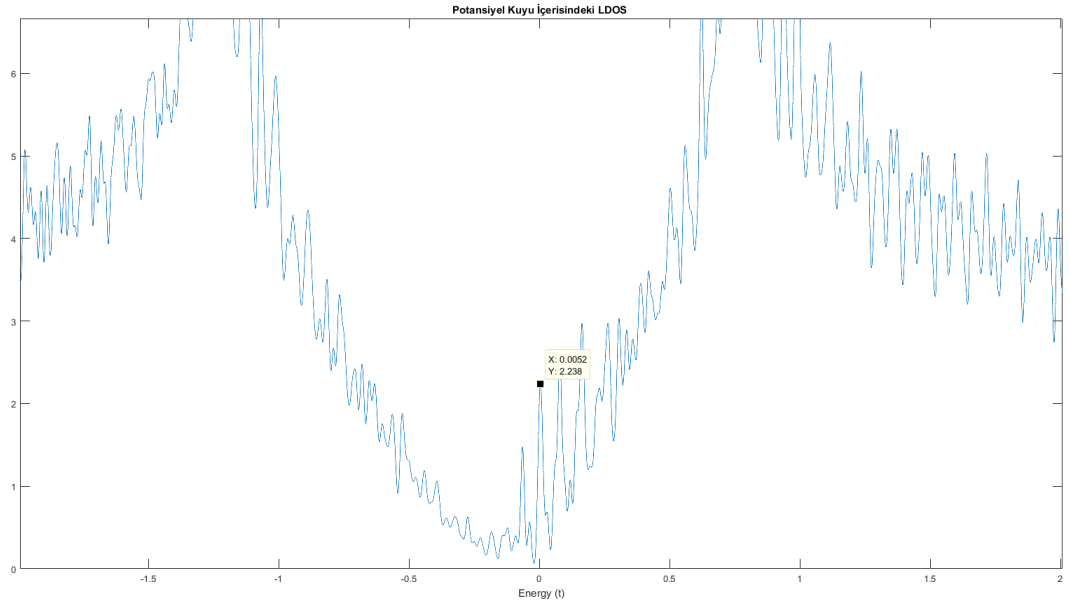
**Şekil 20:**  $150 \times 150$  atomlu sistemde AA tipi RKKY etkileşiminin  $30a \times 30a$  alanında olduğu bölge logaritmik ölçekteki grafiği.



**Şekil 21:**  $150 \times 150$  atomlu sistemde AB tipi RKKY etkileşiminin  $30a \times 30a$  alanında olduğu bölge logaritmik ölçekteki grafiği.

### 3.4.2. Sigmoid Potansiyel Sonuçları

Bu çalışmada öncekinden farklı olarak sigmoid potansiyelin içerisinde kalan bölgedeki LDOS bulundu. Bunun nedeni, potansiyel kuyu içerisinde LDOS'u yüksek olan dalga fonksiyonunun RKKY etkileşiminin güçlenmesine katkı vereceğinin düşünülmesidir. Potansiyel derinliği sistemin karakteristik enerji skalası olan  $\hbar v_F/R = (3/2)/30 = 1/20$ 'nin 4 katı olan  $-0.2t$  ( $t$  hoplama parametresi) olarak seçilmiştir. 22500 atomlu sistem için LDOS şekil 22 'teki gibi olduğu görüldü.



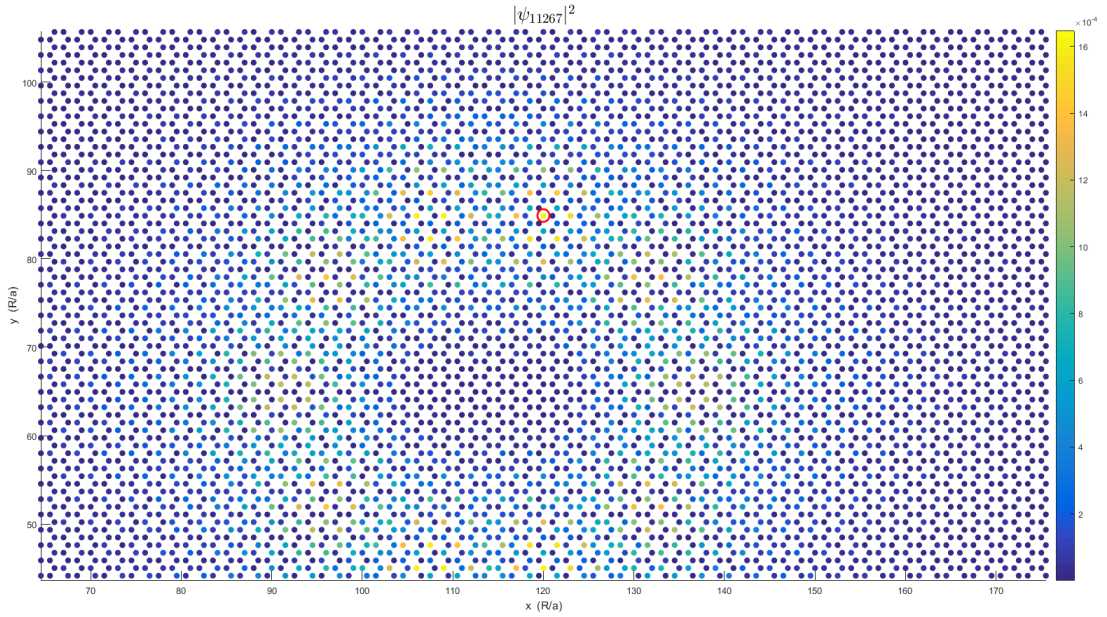
**Şekil 22:**  $150 \times 150$  atomlu sistemde LDOS'un Dirac noktası etrafındaki davranışı.

Potansiyel kuyunun içerisinde LDOS'u yüksek olan dalga fonksiyonu bulundu. Fermi seviyesi bu dalga fonksiyonunun enerji seviyesine çekilerek sistem ile dalga fonksiyonunun rezonansa gelmesi sağlandı. Bu dalga fonksiyonunun grafen örgü üzerindeki profili şekil 23 'de görülmektedir.

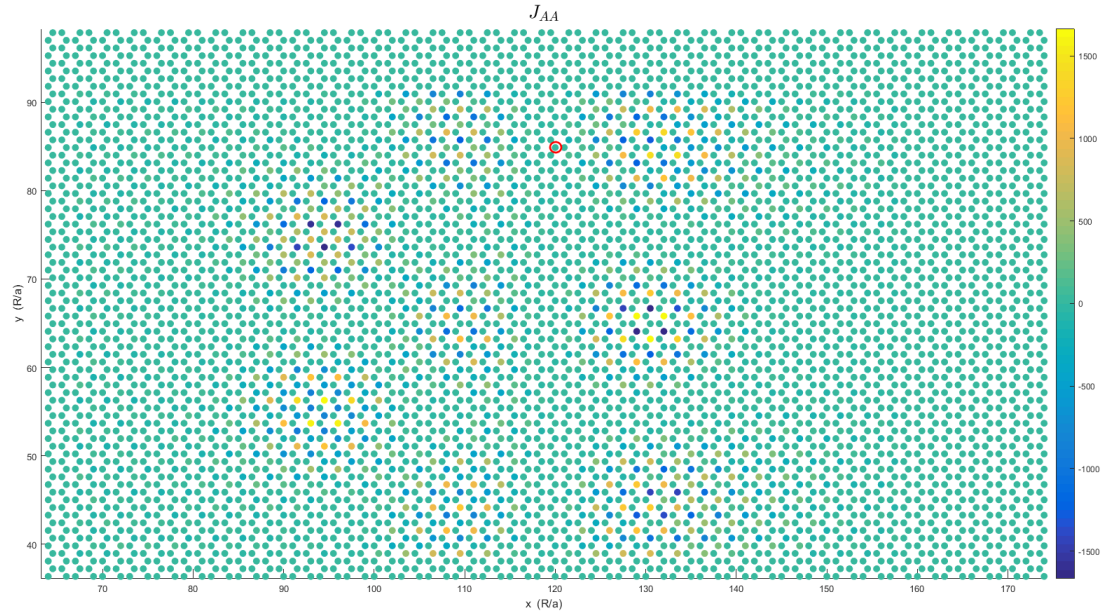
Şekil 23 'de de görüldüğü üzere LDOS'u yüksek olan dalga fonksiyonu, potansiyel kuyunun çeperi etrafında lokalize olmuştur. Manyetik safsızlıklardan biri dalga fonksiyonunun genliğinin yüksek olduğu modların birine konuldu. Diğer manyetik safsızlık ise potansiyel kuyuyu içine alan  $30 \times 30$  atomdan oluşan kare bölge içerisindeki noktaların her biri üzerinde dolaştırılarak aralarındaki RKKY etkileşimi hesaplandı. Aşağıda AA ve AB tipi etkileşimler için hazırlanmış iki grafik yer alıyor:

Şekil 24 ve 25'de görüldüğü üzere RKKY etkileşimi çeper üzerinde lokalize olmuş modlar vasıtası ile güçlenmiştir.





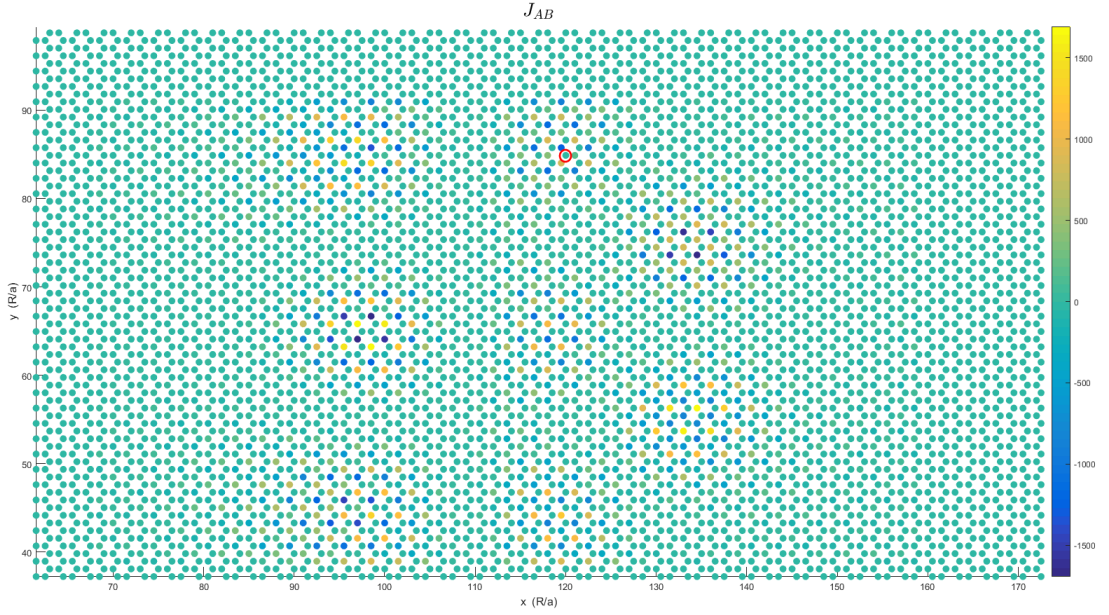
**Şekil 23:**  $150 \times 150$  atomlu sistemde LDOS'u 'local maxima' olan dalga fonksiyonunun profili.



**Şekil 24:**  $150 \times 150$  atomlu sistemde potansiyel bölgesindeki  $J_{AA}$  grafiği. Kırmızı halka ile gösterilen noktada bir manyetik moment sabitlenmiştir. Diğer manyetik moment ise aynı alt örgüde farklı hücrelerde bulunduğu durumdaki RKKY etkileşiminin büyüklüğü gösterilmektedir.

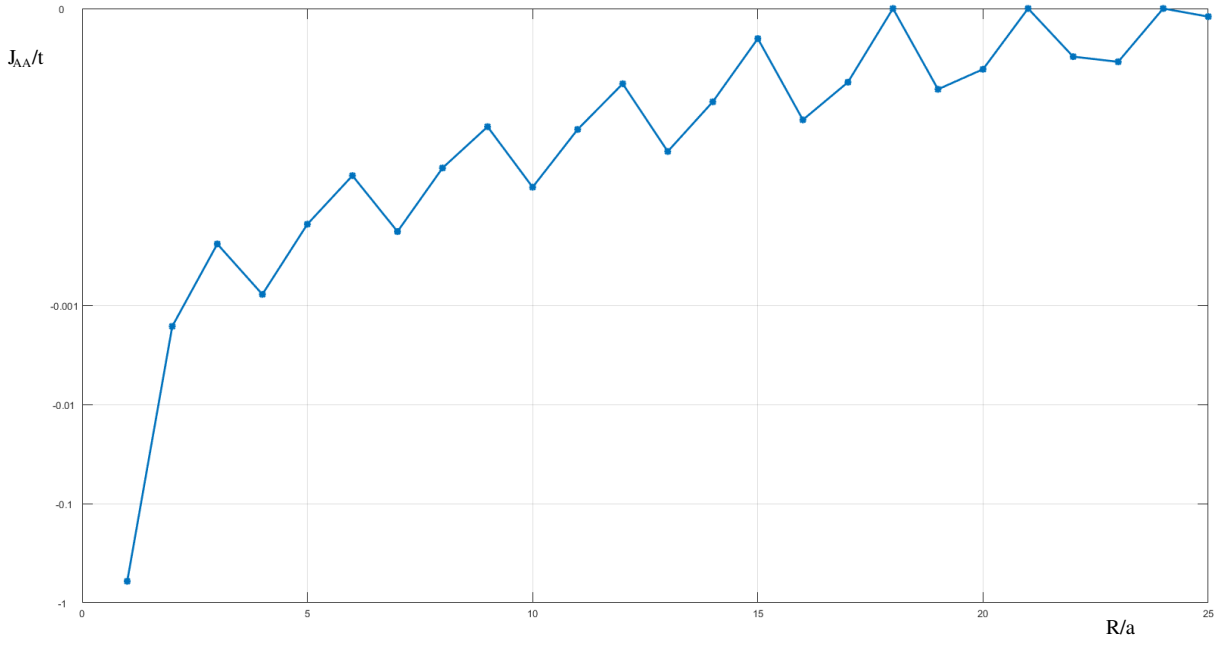
### 3.5. Kesin köşegenleştirme yöntemi ile RKKY Etkileşiminin Hesaplanması

Bu çalışmada da RKKY modelinden farklı olarak değiş tokuş etkileşimi Hubbard ortalama alan modeli kullanılarak hesaplanmıştır. Manyetik safsızlıklar için iki durum vardır. Birincisi spin-

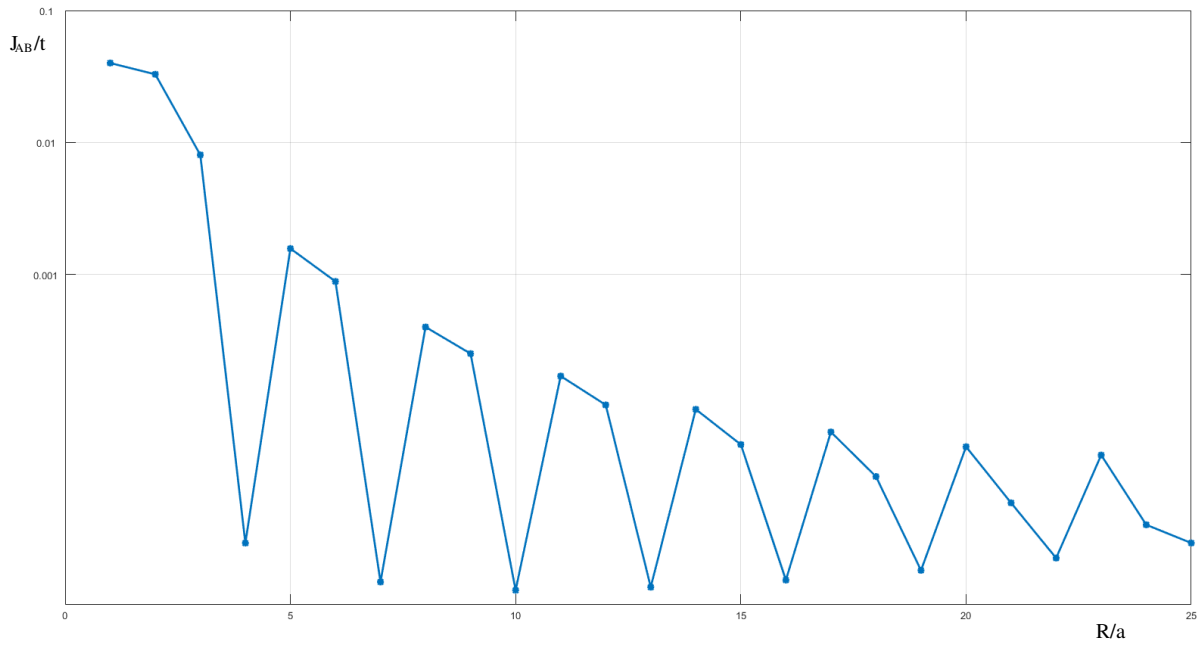


**Şekil 25:**  $150 \times 150$  atomlu sistemde potansiyel bölgesindeki  $J_{AB}$  grafiği. Kırmızı halka ile gösterilen noktada bir manyetik moment sabitlenmiştir. Diğer manyetik moment ise aynı alt örgüde farklı hücrelerde bulunduğu durumdaki RKKY etkileşiminin büyüklüğü gösterilmektedir.

lerinin aynı yöne bakması (ferromagnetik durum) ve spinlerinin ters yöne bakması (antiferromanyetik durum). Ferromanyetik ve antiferromanyetik durumların enerji farkı ( $E(\text{FM})-E(\text{AFM})$ ), değiş tokuş etkileşimi gücü  $J$  ile orantılıdır[2]. Burada grafen örgü üzerinde iki atom safsızlık olarak alınmış ve üzerlerinde Ferromanyetik ya da antiferromanyetik durumda birer tane elektronun bulunduğu iki durum ele alınmış,  $U = 3t$  için enerji farkı hesaplanmıştır. Bu enerji farkı bize değiş tokuş enerjisini vermesi beklenmektedir. Hesaplamalar kesin köşegenleştirme("exact diagonalization") kullanılarak yapılmıştır.  $100 \times 100 = 10000$  atomdan oluşan nötr durum için manyetik safsızlıklar arası değiş tokuş etkileşimi hesaplanmıştır. Hesaplamalar işlem gücü açısından daha az maliyetli olduğundan sadece zigzag ve armchair yönlerinde iki doğrultuda, AA ve AB tipi atomlar için hesaplanmıştır.

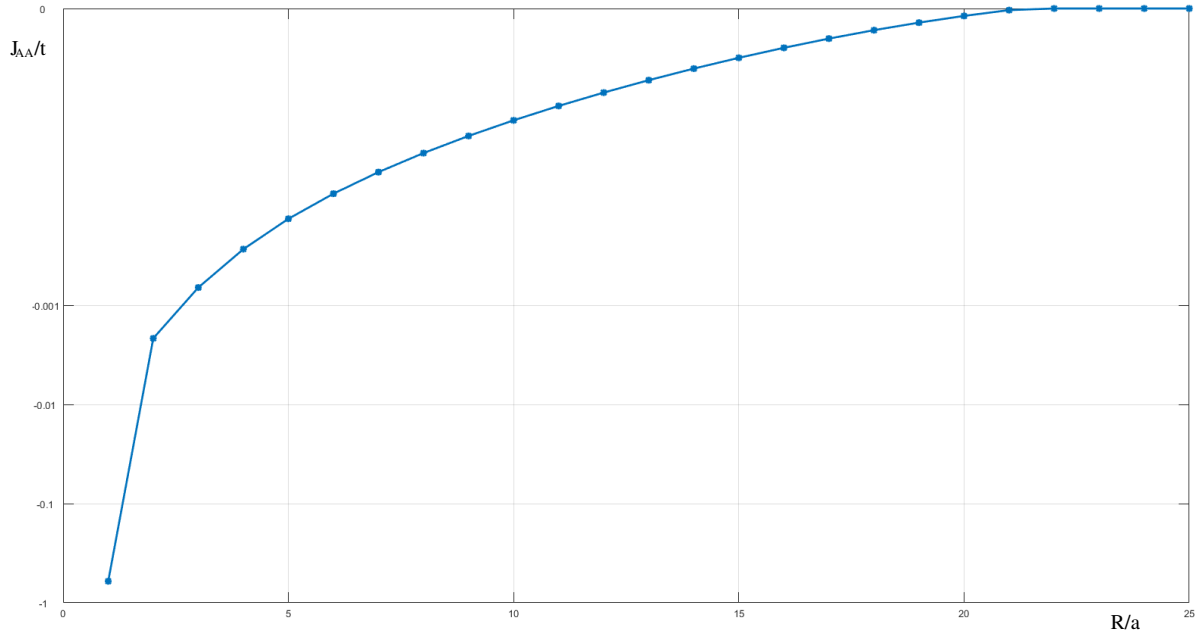


**Şekil 26:** Kesin köşegenleştirme yapılarak hesaplanan "zigzag" doğrultusundaki  $J_{AA}$  aradaki mesafeye bağlı olarak gösterilmiştir.

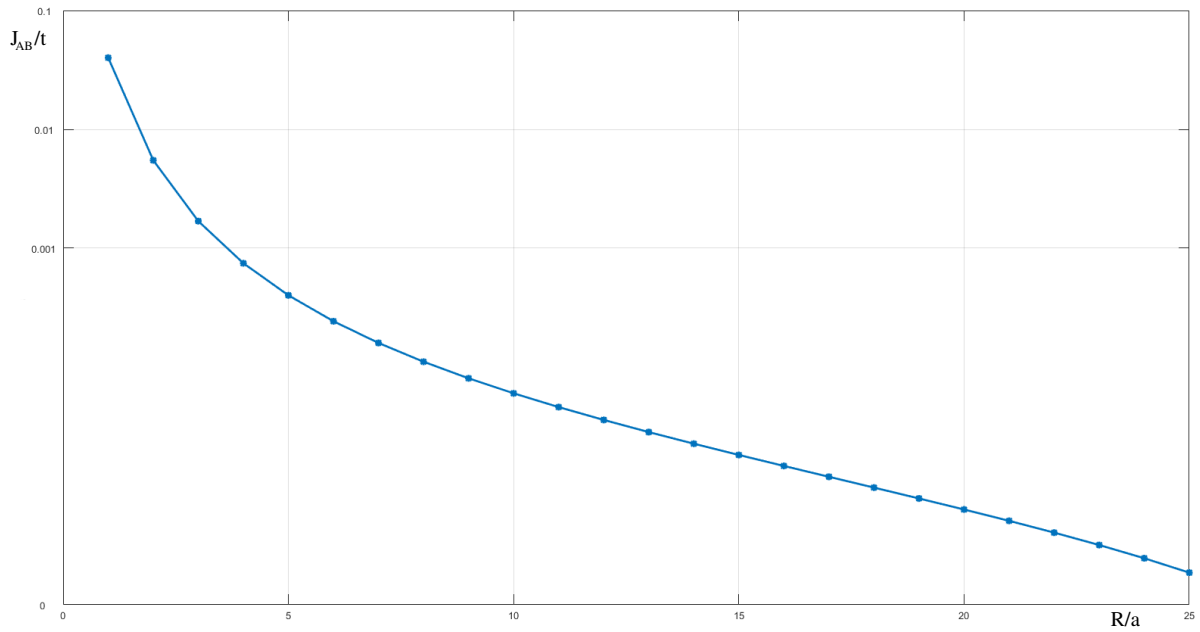


**Şekil 27:** Kesin köşegenleştirme yapılarak hesaplanan zigzag doğrultusundaki  $J_{AB}$  aradaki mesafeye bağlı olarak gösterilmiştir.





**Şekil 28:** Kesin köşegenleştirme yapılarak hesaplanan armchair doğrultusundaki  $J_{AA}$  aradaki mesafeye bağlı olarak gösterilmiştir.



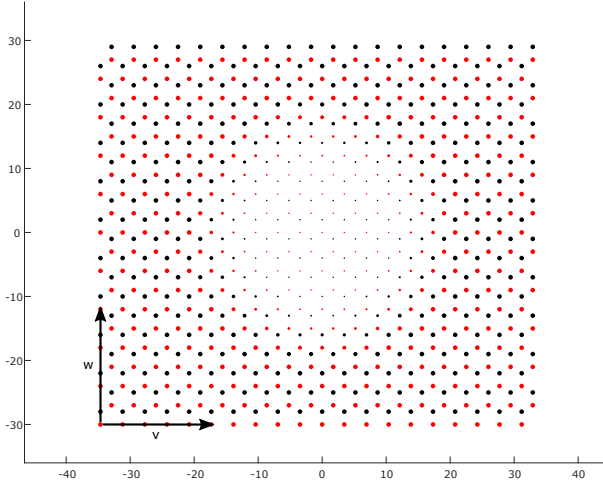
**Şekil 29:** Kesin köşegenleştirme yapılarak hesaplanan armchair doğrultusundaki  $J_{AB}$  aradaki mesafeye bağlı olarak gösterilmiştir.

## 4. Dış Potansiyeller Altında Grafen Üzerinde Adatomlar Arası Etkileşim

Projenin bu bölümünde seçilen büyüklükte bir tek katmanlı grafene iki adatom eklenerek bu yapı , sıkı bağlanma (tight-binding) varsayımı altında numerik yollarla incelenmiştir. Adatomların arasındaki uzaklığın sistemin toplam enerjisini nasıl değiştirdiği incelenerek adatomlar arasındaki etkin kuvvetin çekim -itim yönü ve karakteristiği genel olarak incelenmiştir. Sistemin Hamiltonyeni

$$H = t \sum_{\{r,r'\}} (c_r^\dagger c_{r'} + c_r c_{r'}^\dagger) + V_{ad} \sum_r c_r^\dagger c_r \quad (58)$$

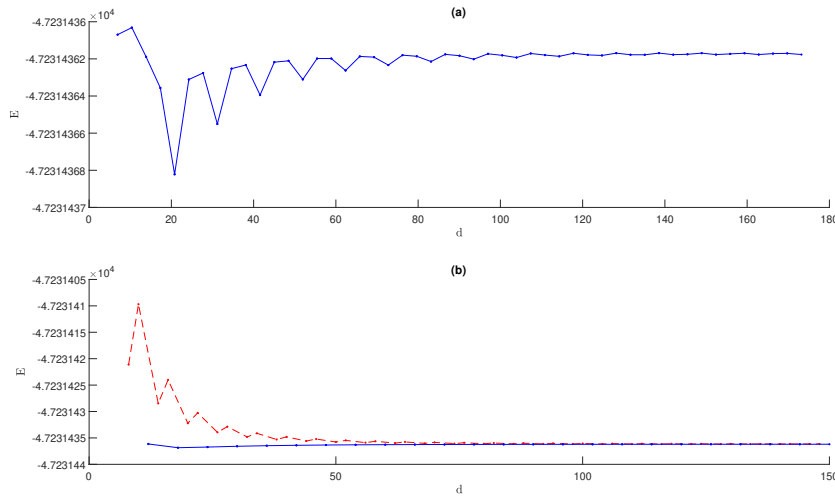
şeklinde verilebilir. Burada  $c_r^\dagger$  ve  $c_r$  grafen örgüsündeki  $r$  etiketli noktada sırasıyla elektron yaratma ve yok etme operatörleridir. Denklem 60'de ilk toplam örgüdeki tüm en yakın komşular üzerinden, ikinci toplam da sadece adatomlar üzerinden alınmalıdır. Burada  $t$ , sekme(hopping) enerjisi literatürdeki tipik değer olan  $-3eV$  olarak, adatomların örgüde oluşturduğu potansiyel ise  $V_{ad} = 18eV$  olarak alınmıştır. Periyodik sınır koşulları gereği iki boyutlu yapı torus yüzeyi olarak düşünülmelidir. Şekil 30'de örnek bir grafen örgüsü verilmiştir. Sayfada rahat görülebilmesi açısından hesaplamalarda kullanılan örneklerden daha küçük boyutlarda bir örnek çizilmiştir.



**Şekil 30:** Grafenin heksagonal örgüsünün temsili gösterimi. Aynı altörgü atomları kırmızı ve siyah renklerle birbirinden ayrılmıştır.  $V$  ve  $W$  yönleriyle gösterilen vektörler sırasıyla koltuk(armchair) ve zikzak(zigzag) yönlerdeki hareketleri temsil etmektedir. Örgü noktalarının büyüklüğü, uygulanan dairesel dış potansiyelin o noktadaki büyüklüğüyle orantılı olarak seçilmiştir.

#### 4.1. Doğrusal yönde adatomlar arası uzaklık enerji ilişkisi

İlk önce 20000 atomluk bir sisteme herhangi bir dış potansiyel uygulanmadan Şekil 30'deki  $V$  ve  $W$  doğrultuları nda uzaklık - kuvvet ilişkisi incelenmiştir. İlk olarak adatomlardan bir tanesi başlangıç noktası ,  $(0,0)$  koordinatları na yerleştirilmiş, diğer adatom ise  $V$  yönünde birer atom ilerletilerek her seferinde Denklem 60'de verilen Hamiltonyen diyagonalize edilmiştir. Sistemin taban durumunda olduğu varsayımıyla Fermi enerjisine kadar olan kuantum durumların enerjilerinin toplamı sistemin toplam enerjisi olarak kaydedilmiştir.  $V$  yönünde hep aynı tip altörgü atomları olması dolayısıyla tek bir karakteristik elde edilmiştir. Enerji-uzaklık ilişkisi Şekil 31(a)'daki gibidir.



**Şekil 31:** Dış potansiyel sıfıra eşitken bir adatom sabit tutulmak kaydıyla diğer adatom a) koltuk, b) zikzak tipi yönlerde ilerlerken (Şekil 30'deki  $V$  ve  $W$  yönleri) hesaplanan enerjinin adatomlar arası uzaklıkla değişimi. b) grafiğinde referans adatomuyla aynı atomların uzaklık - enerji değişimi mavi düz çizgiyle, referans ile zıt atomların uzaklık enerji ilişkisi kırmızı kesikli çizgi ile gösterilmiştir.

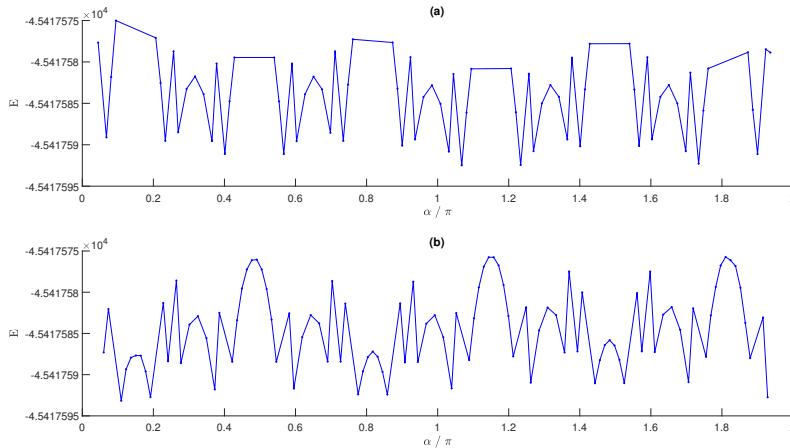
$W$  yönündeki zikzak hareketindeyse bir aynı tip bir farklı tip atomun üzerinden geçilmesi dolayısıyla aynı yöntemle iki farklı grafik elde edilmiştir. Şekil 31(b)'deki kırmızı renkte ve aralıklı çizgilerle verilen sonuç adatomlar farklı tür altörgüler üzerindeyken elde edilen ilişkiyi karakterize ederken mavi ve düz çizgilerle verilen grafik aynı tür altörgülerdeki adatomlar arası ilişkiyi karakterize etmektedir. Grafiklerden görülebileceği üzere adatomlar aynı tip altörgülere yerleştirildiğinde aradaki uzaklıkla artan bir enerji söz konusuysa, farklı tip altörgülere yerleştirilme durumunda uzaklıkla azalan bir enerji gözlenmiştir. Bu da aynı altörgülerdeki adatomlar üzerindeki etkin kuvvetin çekim kuvveti olarak, farklı örgü tiplerinde yer almaları durumunda etkin kuvvetin birbirini itme kuvveti olarak ortaya çıktığını göstermektedir.

## 4.2. Dairesel kuyu potansiyeli altında adatomlar arası uzaklık enerji ilişkisi

İkinci olarak yine 20000 atomluk sistemde bir kenarın yaklaşık 0.4 katı yarıçaplı bir dairesel potansiyel kuyu oluşturulmuş ve

$$H = t \sum_{\{r,r'\}} (c_r^\dagger c_{r'} + c_r c_{r'}^\dagger) + V_{ad} \sum_r c_r^\dagger c_r + V(r) \sum_r c_r^\dagger c_r \quad (59)$$

ile verilen Hamiltonyen elde edilmiştir. Burada ilk iki toplam Denklem 60 ile aynı olup üçüncü terimdeki potansiyel  $V(r) = V_0/(1 + e^{-s(r-r_0)})$  şeklindeki sigmoid fonksiyonu olarak alınmıştır. Dış potansiyel dairenin içinde yaklaşık 0 iken dairenin dışında hızlıca  $V_0$  a yakınsamaktadır. Aradaki geçişin keskinliği  $s$  terimiyle verilmiştir. Potansiyelin sıfıra düşmesi için yaklaşık 5 – 6 atomluk yol kat edeceği bir  $s$  değeri seçilmiştir. Şekil 32'de verilen sonuçlar için  $s = 0.6$  olarak alınmıştır. Şekil 32'de bir adatom çemberin çeperinde bir noktada sabit tutulurken, diğer adatom çember çevresinde dolaştırıldığında hesaplanan toplam taban durum enerjisi verilmiştir. Şekil 32(a)'da referans atomuna zıt, 32(b)'de ise referans adatomuyla aynı örgü noktalarına denk gelen adatomlar için açığa bağlı enerji grafikleri çizilmiştir. Farkedileceği üzere  $2\pi$ 'ye yakın bir açı aralığında 3 defa aynı örüntünün tekrarlandığı görülmektedir. Bu grafenin altılı simetrisinden kaynaklanıyor olabilir. Dikkat edilmesi gereken bir nokta, iki adatom arası uzaklık yaklaşık iki yarıçap kadar olabilmesine rağmen enerjinin ortalamada yok fazla değişmemesidir. Bu durum potansiyelin çeperlerinde yaşayan galeri modları benzeri modların adatomlar arası etkin kuvvetin etkin menzilini arttırmasından dolayı olabilir.



**Şekil 32:** Dairesel kuyu şeklinde dış potansiyel uygulanırken bir adatom dairenin çeperinde bir noktada sabit tutulmak kaydıyla diğer adatom çember üzerinde a) zıt örgü noktalarındayken, b) aynı örgü noktalarındayken hesaplanan enerji değerlerinin ikinci adatomun polar koordinatlarda taradığı açığa bağlı olarak değişimi.

### 4.3. Adatomlar arası etkileşimin sıkı bağlanma modeliyle incelenmesi

Daha önceki rapor döneminde seçilen büyüklükte bir tek katmanlı grafene iki adatom eklenerek bu yapı, sıkı bağlanma (tight-binding) varsayımı altında Hamiltoniyenin numerik diyagonalizasyonu yoluyla incelenmişti. Adatomların arasındaki uzaklığın nötr bir sistemin toplam enerjisini nasıl değiştirdiğine bakılarak adatomlar arasındaki etkin kuvvetin çekim - itim yönü genel olarak karakterize edilmişti. Bu rapor döneminde bu metodla yapılan incelemelerde fısıldayan galeri modlarının incelenmesi açısından daha çok dairesel kuyu içindeki kuvvet hesabına ağırlık verilmiştir. Daha ayrıntılı söylemek gerekirse, yarıçapı belli bir dairesel potansiyel kuyunun sadece duvarlarının olduğu yerde değil, kuyunun çeperlerinin etrafındaki bölgede birden fazla örnek çember üzerinden hesap yapılmıştır. Aynı zamanda daha önce sadece nötr grafen için yapılan hesap, sistemin rezonansları da hesaba katılarak nötr duruma yakın bazı enerjiler üzerinden incelenmiştir. Yani sistemin fermi enerjisinin  $E = 0\text{eV}$  civarındaki rezonanslarda farklı değerler almasıyla adatomlar arası kuvvet ilişkisinde bir değişim olup olmadığı araştırılmıştır.

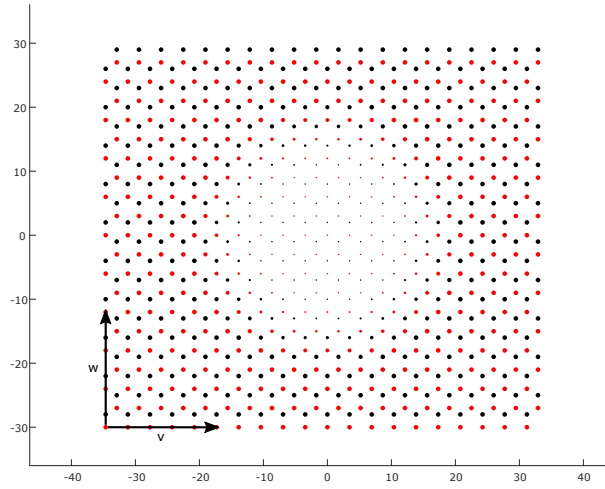
Sistemin Hamiltoniyeni

$$H = t \sum_{\{r,r'\}} (c_r^\dagger c_{r'} + c_r c_{r'}^\dagger) + V_{ad} \sum_r c_r^\dagger c_r \quad (60)$$

şeklinde verilebilir. Burada  $c_r^\dagger$  ve  $c_r$  grafen örgüsündeki  $r$  etiketli noktada sırasıyla elektron yaratma ve yok etme operatörleridir. Denklem 60'de ilk toplam örgüdeki tüm en yakın komşular üzerinden, ikinci toplam da sadece adatomlar üzerinden alınmalıdır. Sınır koşulları periyodik olarak seçilmiştir. Bu sebeple iki boyutlu yapı topolojik olarak bir torus yüzeyine denktir. Burada  $t$ , sekme enerjisi  $-1\text{eV}$  olarak alınmıştır. Adatomların örgüde oluşturduğu potansiyel ise  $V_{ad} = 11.7\text{eV}$  olarak alınmıştır. Bu değer nasıl seçildiği biraz ileride açıklanacaktır. Şekil 33'de örnek bir grafen örgüsü verilmiştir. Sayfada rahat görülebilmesi açısından hesaplamalarda kullanılan örneklerden daha küçük boyutlarda bir örnek çizilmiştir. Sistemin asıl boyutları ise  $100 \times 180 = 18000$  atom olarak seçilmiştir. Bir Sonraki Dönemde Yapılması Planlanan Çalışmalar

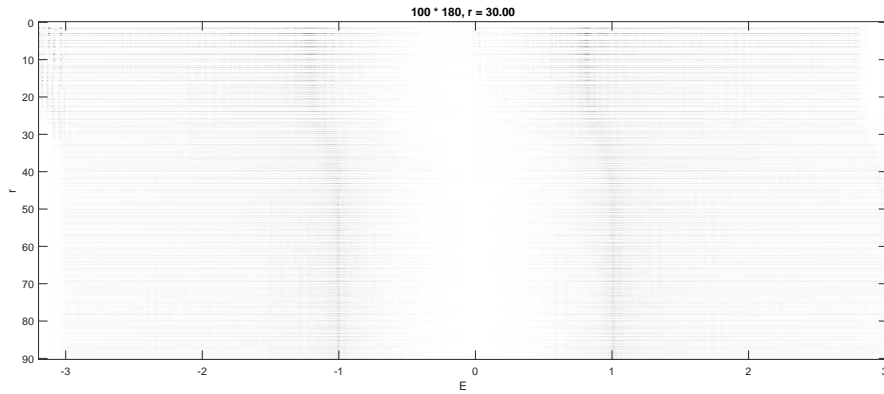
#### 4.3.1. Yerel durum yoğunluğu

Numerik diyagonalizasyonla enerji karakteristiği incelenmeden önce  $r = 30$  atom boyunda ve  $|V| = 0.2\text{eV}$  derinliğinde bir potansiyel kuyu için adatomlar yerleştirilmeden yarıçapa bağlı yerel durum yoğunluğu (local density of states) hesaplanmıştır. Yerel durum yoğunluğu, sistemdeki elektronların adatomların olduğu örgü noktalarıyla etkileşimini belirleyen potansiyel enerji parametresinin seçimi açısından önemlidir. Şekil 34'de kuyu potansiyelinin yarıçapının 3 katına kadar olan uzaklıklar ve tüm enerji değerleri için hesaplanan durum yoğunluğu verilmiştir. Şekil 34'den görülebileceği gibi atom boyu kuyunun yarıçapından büyük ( $r \gtrsim 30$ ) değerlerde mutlak değeri zıplama potansiyeli  $t = 1\text{eV}$ 'a eşit enerjilerde en yüksek yerel yoğunluklar gözlenirken,  $r \lesssim 30$  için düşük enerjili yeni seviyeler ortaya çıkmaktadır. Bu seviyelerin



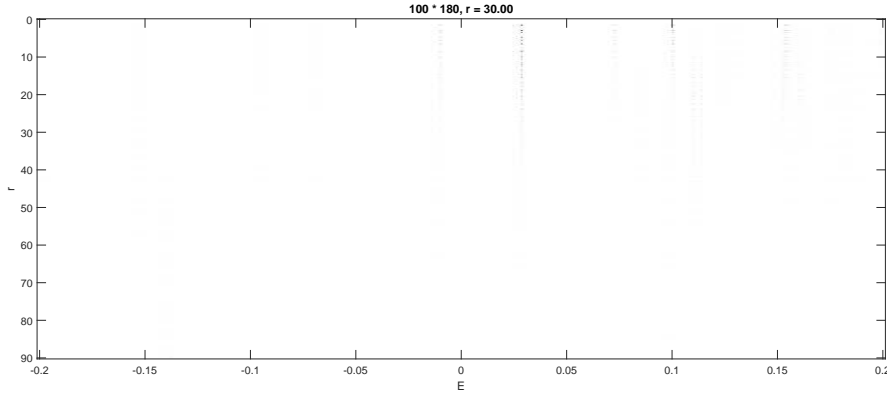
**Şekil 33:** Grafenin heksagonal örgüsünün temsili gösterimi. Aynı altörgü atomları kırmızı ve siyah renklerle birbirinden ayrılmıştır.  $V$  ve  $W$  yönleriyle gösterilen vektörler sırasıyla koltuk(armchair) ve zikzak(zigzag) yönlerdeki hareketleri temsil etmektedir. örgü noktalarının büyüklüğü, uygulanan dairesel dış potansiyelin o noktadaki büyüklüğüyle orantılı olarak seçilmiştir.

ortaya çıkmasıyla en yüksek yoğunluk bölgeleri yaklaşık  $0.2\text{eV}$  kadar düşük enerjilerde kendini göstermektedir. Ayrıca grafiğin en solunda  $E < -3\text{eV}$  değerleri ve  $r < 30$  uzaklıkları için, yani kuyunun içindeki düşük seviyeli enerjiler için kısmi bağlı durumların(quasi-bound states) oluştuğu rahatlıkla görülmektedir.



**Şekil 34:**  $100 \times 180$  atomluk bir örgü için yerel durum yoğunluğu. Merkezden kuyu potansiyelinin yarıçapının 3 katı olan  $90$ 'a kadar uzaklığa kadar olan noktalar ve olası bütün enerji değerleri için hesaplanmıştır.

Şekil 35'te ise aynı yerel durum yoğunluğunun enerji aralığı  $-0.2\text{eV} \leq E \leq 0.2\text{eV}$  aralığındaki değerlere sabitlenerek  $E = 0\text{eV}$  civarındaki enerji yoğunlukları daha ayrıntılı gösterilmiştir.



**Şekil 35:**  $100 \times 180$  atomluk bir örgü için yerel durum yoğunluğu. Merkezden kuyu potansiyelinin yarıçapının 3 katı olan 90'a kadar uzaklığa kadar olan noktalar ve enerji aralığının  $-0.2\text{eV}$ 'tan  $0.2\text{eV}$ 'a kadar olan dar bir bandı için hesaplanmıştır.

#### 4.3.2. Dairesel kuyu potansiyeli altında adatomlar arası mesafeye bağlı enerji değişimi

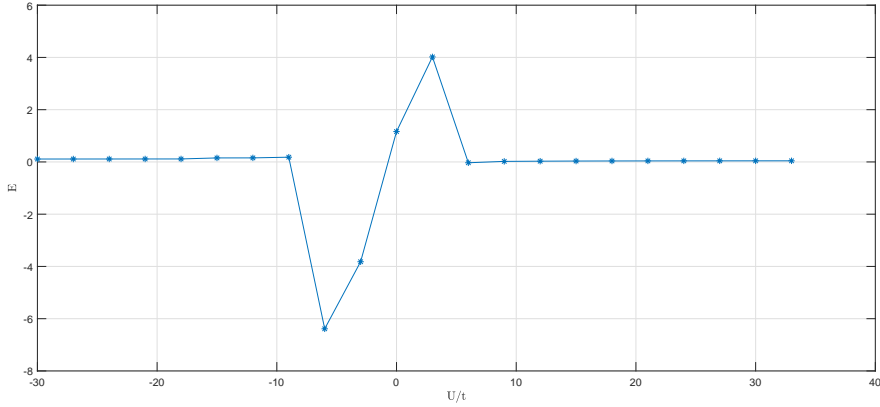
$100 \times 180$  atomluk sistemde  $r = 30$  atom yarıçaplı bir dairesel potansiyel kuyu oluşturulmuş ve

$$H = t \sum_{\{r,r'\}} (c_r^\dagger c_{r'} + c_r c_{r'}^\dagger) + V_{ad} \sum_r c_r^\dagger c_r + V(r) \sum_r c_r^\dagger c_r \quad (61)$$

ile verilen Hamiltonyen elde edilmiştir. Burada ilk iki toplam Denklem 60 ile aynı olup üçüncü terimdeki potansiyel, kuyunun sınırlarındaki keskin artış ve azalışların incelemek istediğimiz enerji seviyelerine bozucu etki etmemesi açısından  $V(r) = V_0 / (1 + e^{(r-r_0)/s})$  şeklindeki sigmoid fonksiyonu olarak alınmıştır. Dış potansiyel dairenin içinde yaklaşık 0 iken dairenin dışında hızlıca  $V_0 = -0.2\text{eV}$  a yakınsamaktadır. Aradaki geçişin keskinliği  $s$  terimiyle verilmiştir. Potansiyelin sıfıra düşmesi için yaklaşık 5–6 atomluk yol kat edeceği bir  $s$  değeri seçilmiştir. Şekil 37'de verilen sonuçlar için  $s = 3$  olarak alınmıştır.

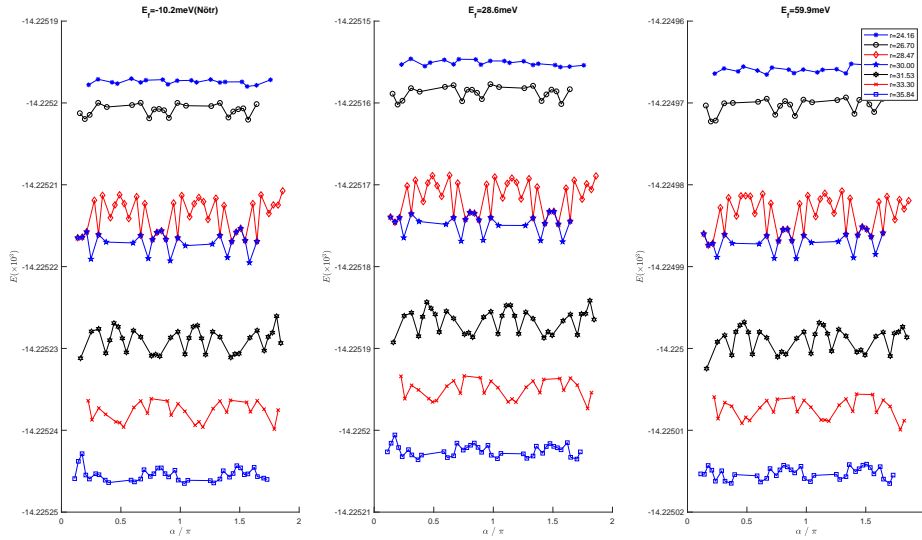
Şekil 36'te adatomların enerjisine göre lokalizasyonu en yüksek durumun enerjisi verilmiştir. Lokalizasyonu en yüksek durum ile adatomlardan kaynaklı enerjilerin çakışabilmesi için adatomların örgü etkileşim enerjileri Şekil 35'te görülebileceği gibi en yüksek yerel yoğunluklu  $E \simeq 28\text{meV}$  seviyesine denk gelen seviyeler seçilmiştir. Şekil 36'ten bu seviyeye karşılık yabancı atomların enerji etkileşim enerjilerinin  $\simeq 11.7\text{eV}$  olarak seçilmesinin en uygun olacağına karar verilmiştir.

Buna göre bir adatom çemberin çeperinde, merkeze kuyunun yarıçapına yakın bir uzaklıkta sabit tutulurken, diğer adatom aynı uzaklığı yarıçap olarak kabul eden çember çevresinde dolaştırıldığında hesaplanan toplam taban durum enerjileri değişik fermi enerjilerine kadar doldurulan grafen örgü için hesaplanmıştır.



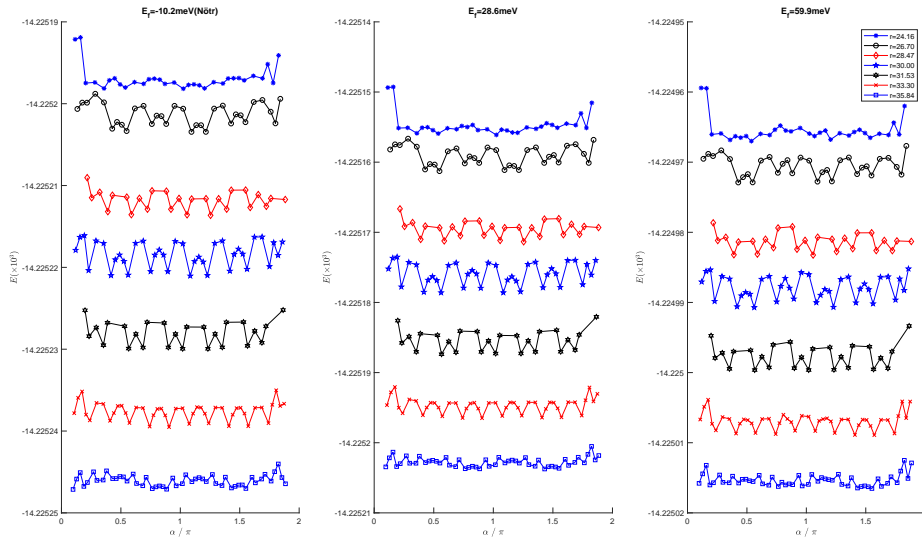
**Şekil 36:** Adatomların enerjisine ( $U/t$ ) göre en lokalize durumun enerjisinin ( $E$ ) grafiği.

Şekil 37'da referans adatomuyla aynı, 38'de ise referans adatomuna zıt örgü noktalarına denk gelen adatomlar için açığa bağlı enerji grafikleri çizilmiştir. Atom çeperde dolaştırılırken kuvvetin çok azalmadığı daha önceki raporda da gözlemlenmişti. Bu iki grafikte merkezden değişik uzaklıklarda çember üzerinde giderken adatomlar arası kuvvet karakteristiğinin, ufak çapta merkezden uzaklığa bağlı değişiklikler gösterdiği fakat örgünün Fermi enerjisinden çok etkilenmediği görülmektedir.



**Şekil 37:** Dairesel kuyu dış potansiyel altında, bir adatom dairenin çeperinde bir noktada sabit tutulmak kaydıyla diğer adatom çember üzerinde sabit tutulan atomla aynı tip atomlara karşılık gelen örgü noktalarındayken hesaplanan enerji değerlerinin ikinci adatomun polar koordinatlarda taradığı açığa bağlı olarak değişimleri.  $r = 30$  civarında 7 farklı merkezden uzaklık ve 3 farklı fermi enerjisi değerler grafikte gösterilmiştir.





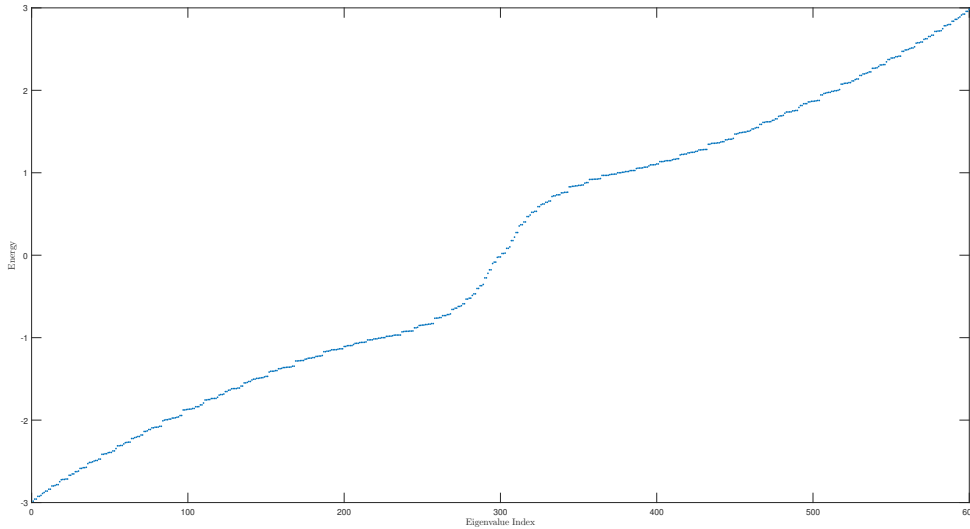
**Şekil 38:** Dairesel kuyu dış potansiyel altında, bir atomun dairenin çevresinde bir noktada sabit tutulmak kaydıyla diğer atomun çember üzerinde sabit tutulan atomdan farklı tip atomlara karşılık gelen örgü noktalarındayken hesaplanan enerji değerlerinin ikinci atomun polar koordinatlarda taradığı açığa bağlı olarak değişimleri.  $r = 30$  civarında 7 farklı merkezden uzaklık ve 3 farklı fermi enerjisi değerler grafikte gösterilmiştir.

## 5. Altıgen Nanopullar Üzerinde RKKY Etkileşiminin Hesaplanması

Hesaplamalar zigzag kenarlı altıgen nanopullar için yapılmıştır.  $N_s$  her bir kenardaki atom sayısı olmak üzere  $N_s = 10$  ve  $N_s = 20$  olduğu sistemler için enerji seviyeleri ve RKKY etkileşimi hesaplanmıştır.  $N_s = 10$  ve  $N_s = 20$  olan sistemlerde sırasıyla toplamda 600 ve 2400 atom bulunmaktadır. Bu nanopulların büyüklükleri de sırasıyla 14.68 ve 60.78 nm<sup>2</sup>'dir[32]. Hesaplar sıkı bağlanma metodu kullanılarak yapılmıştır. Sıkı bağlanma Hamiltonyeni

$$H = \sum_n E_n c_n c_n^\dagger + \sum_{\langle n,m \rangle} (t c_n^\dagger c_m + \text{h.c.}) \quad (62)$$

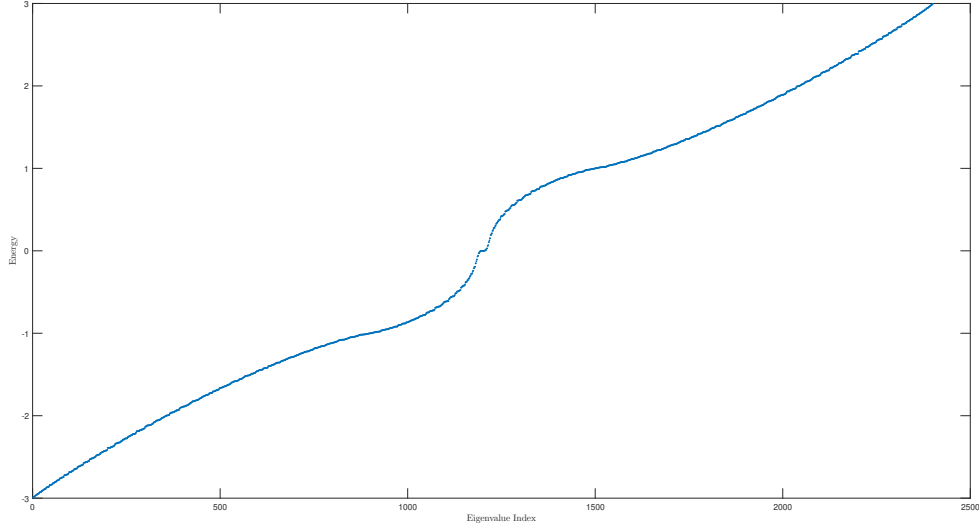
olarak yazılır. Burada  $c_n^\dagger$  ve  $c_n$  sırasıyla n'inci konumdaki yaratma ve yok etme operatörleri,  $t$  ise hoplama parametresidir. Toplam sadece en yakın komşuluklar üzerinden yapılır. Sistemin Hamiltonyeni yazılıp enerji özdeğerleri bulunduğunda, enerji özdeğerlerinin enerjiye bağlı grafiği aşağıdaki şekillerdeki (39,40) gibi bulunur.



**Şekil 39:** Enerji özdeğerler indislerinin enerjiye göre grafiği. Altıgenin her kenarı boyunca  $N_s = 10$  atom bulunmaktadır. Enerjiler  $t$  cinsinden hesaplanmıştır.

Şekil-(39)'de gösterilen nanopul kenarı  $N_s = 10$  atomdan oluşan sistemdir.  $E = 0$  değerine sahip durumlar yoktur. Sıfır enerjili durumlar sistem büyüklüğü arttıkça artar.

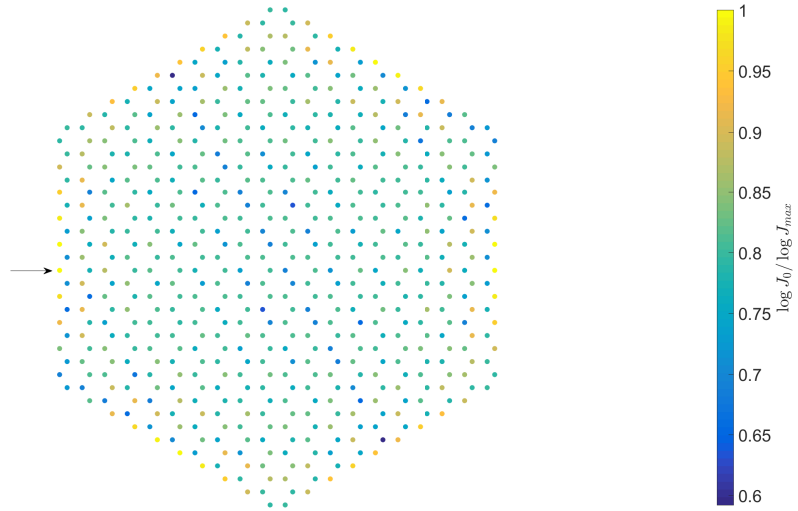
$N_s = 20$  durumunda ise, Şekil 40'de görüldüğü üzere enerjisi sıfır enerjiye sahip değerler vardır. Bu değerler kenar durumlarına karşılık gelmektedir.



**Şekil 40:** Enerji özdeğerler indislerinin enerjiye göre grafiği. Altıgen pulun her kenarı boyunca  $N_s = 20$  atom bulunmaktadır. Enerjiler  $t$  cinsinden hesaplanmıştır.

### 5.1. RKKY Etkileşiminin Altıgen Nanopulda Hesaplanması

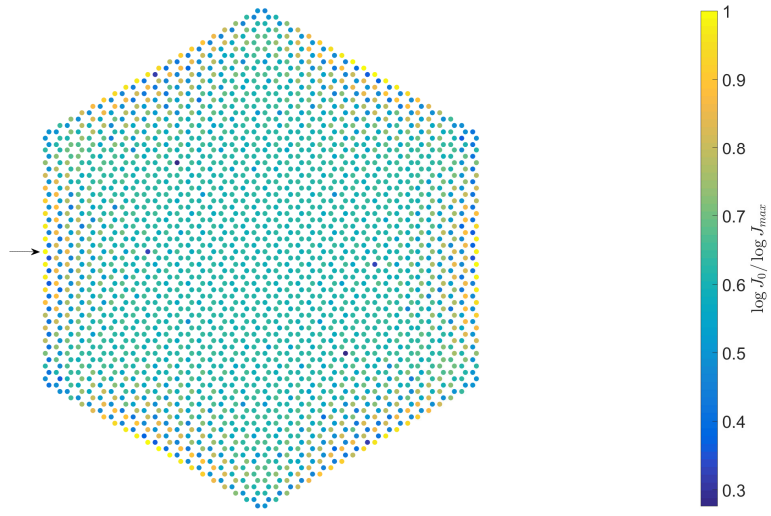
RKKY etkileşimi altıgen geometriye sahip zigzag kenarlı nanopul için hesaplanmıştır. İlk olarak altıgen kenar boyunca  $N_s = 10$  ve sonra  $N_s = 20$  atom bulunduğu durum için hesaplanmıştır.



**Şekil 41:** RKKY etkileşiminin bütün uzayda hesaplanması.

Manyetik momentlerden biri şekil 41'de ok işareti ile gösterilen yere konulmuş diğer manyetik

moment ise nanopulun her noktasında dolaştırılarak bu noktalar için RKKY etkileşimi hesaplanmıştır. Şekil logaritmik ölçeğe göre çizilmiş ve her noktadaki etkileşim gücü maksimum değere oranlanmıştır. RKKY etkileşiminin yığınsal grafende  $1/R^3$  ( $R$ , manyetik momentler arasındaki mesafe) ile orantılı şekilde azaldığı daha önce gösterilmiştir[27]. Bu sistemde kenar bölgelerinde etkileşimin sönümlenmeden kaldığı görülür. Yani kenar bölgelerde bulunan manyetik momentler birbirleriyle daha güçlü bir şekilde etkileşir. Bu sistemin x-eksenine göre simetrik olmasını bekleriz. Kenar atom sayısı  $N_s = 10$  olduğu için beşinci atoma konulan manyetik moment simetriyi kırar. Manyetik moment alt tarafa görece daha yakın olduğundan alt komşu kenardaki etkileşim üst komşu kenara göre biraz daha kuvvetli olur.



**Şekil 42:** RKKY etkileşimin bütün uzayda hesaplanması.

Şekil 42'te ise  $N_s = 20$  için aynı işlem tekrarlanmıştır. Burada da  $N_s = 10$  sistemindeki benzer şekilde kenar durumlarında etkileşimin sönümlenmeden kaldığı görülmüştür. Böylece etkileşimin sistem boyutundan bağımsız olduğu sonucuna varılır.

## 6. Coulomb Etkileşimlerinin RKKY etkileşimi üzerindeki etkileri

Bu kısımda nötr grafende Coulomb etkileşimlerinin RKKY etkileşimleri üzerindeki etkisi ortalama alan teorisi çerçevesinde ele alınmıştır. Coulomb etkileşimleri ise Hubbard modeli ile modellenmiştir. Sistemin Hamiltonyeni şu şekilde yazılabilir

$$H = H_0 + V \quad (63)$$

$$H_0 = -t \sum_{\langle ij \rangle} a_i^\dagger b_j + b_i^\dagger a_j \quad (64)$$

$$V = \sum_i U \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \quad (65)$$

Burada  $\hat{n}_{i\uparrow(\downarrow)}$ ,  $i$  indeksli karbon atomu üzerindeki elektron sayı operatörüdür. Uzun erimli Coulomb etkileşimleri ise ihmal edilmiştir. Ortalama alan teorisi yaklaşımında elektron sayı operatörü ortalama bir değer etrafında dalgalanmalar göstermektedir  $\hat{n} = \langle \hat{n} \rangle + \delta \hat{n}$ . Hamiltonyende dalgalanma operatörü  $\delta \hat{n}$ 'e göre ikinci dereceden terimler ihmal edilmesi suretiyle ortalama alan yaklaşımında etkileşim Hamiltonyeni elde edilebilir:

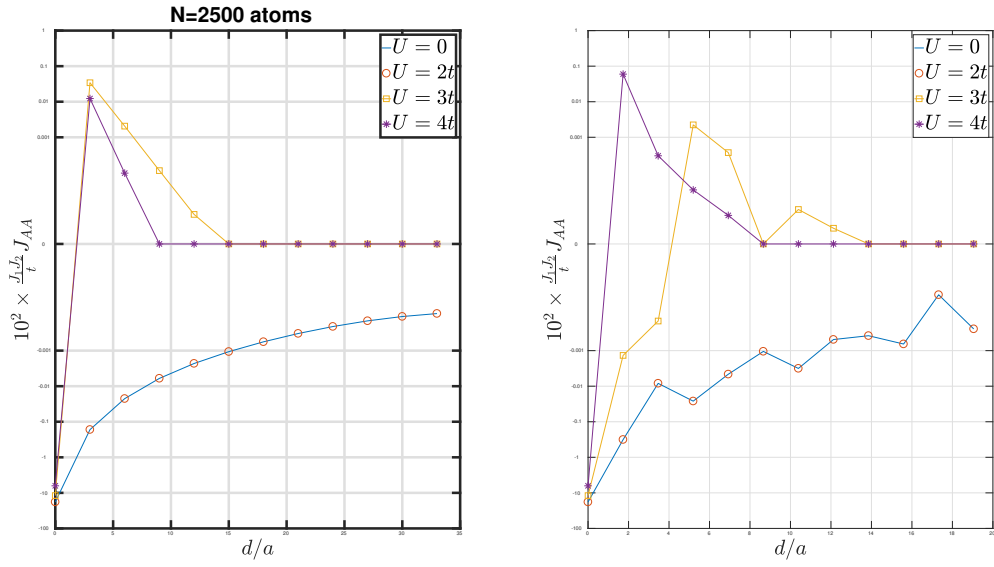
$$\hat{V} = U \sum_i \langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle \hat{n}_{i\downarrow} + \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle \hat{n}_{i\uparrow} - \langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle \quad (66)$$

Sistem kendisiyle tutarlı bir şekilde çözülmek suretiyle sistemin öz durumları hesaplanıp, bu öz durumları kullanarak RKKY etkileşimleri hesaplanmıştır. Burada temel duruma karşılık gelen enerji seviyeleri kendisiyle tutarlı bir şekilde hesaplanmaktadır. Ancak yaptığımız ikinci bir yaklaşım ise uyarılmış durumların hesaplanırken temel durumda iken hesaplanmış uyarılmış durumları kullanmış olmamızdır.

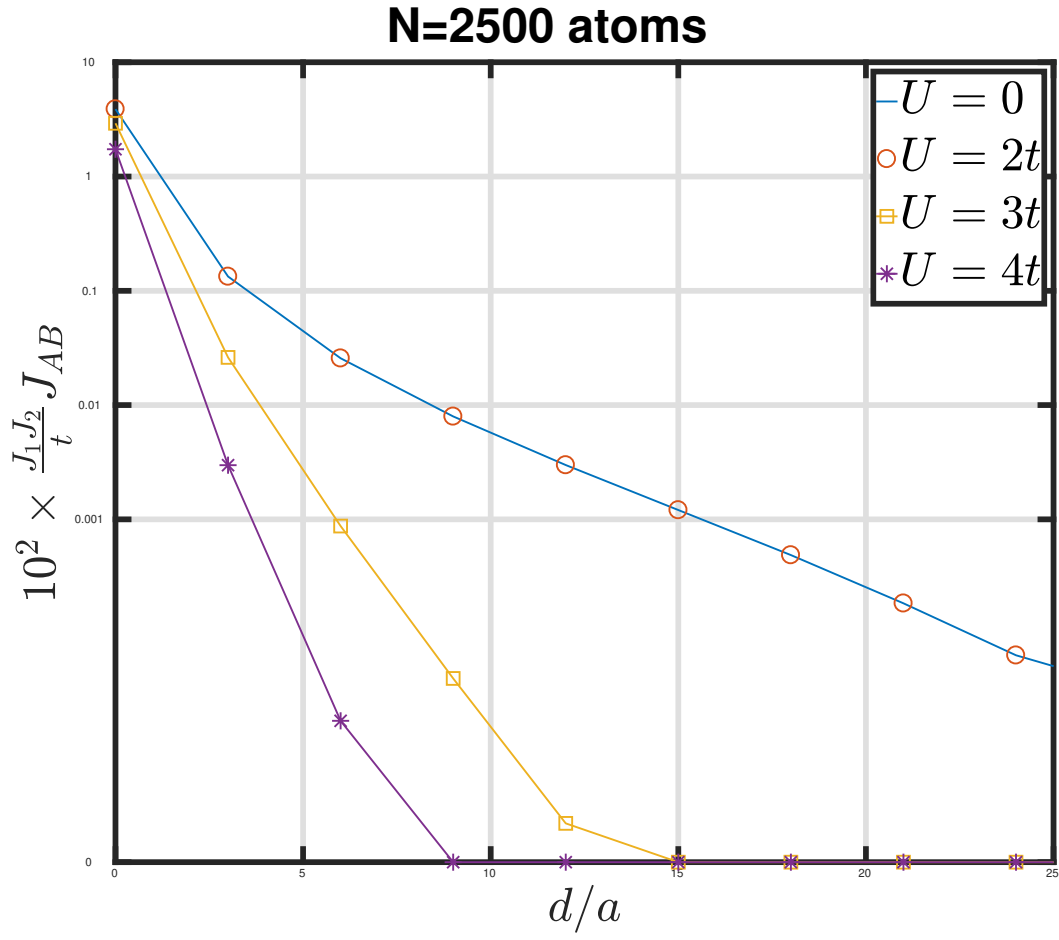
Şekil (43)'de dört farklı  $U$  değeri için  $J_{AA} K - K'$  BZ vektörleri doğrultusunda ve dik yönlerde gösterilmiştir. Görüldüğü üzere  $U = 0$  ve  $U = 2t$  durumlarında RKKY değerleri örtüşmekteyken,  $U = 3t$ ,  $4t$  iken Coulomb etkileşimleri RKKY etkileşimlerinin yakın mesafelerde ferromanyetikten anti-ferromanyetiğe geçiş yapmasına yol açmaktadır. Daha uzak mesafelerde de değerinin düşmesine yol açmaktadır.

Şekil-(44)'de ise manyetik momentlerin farklı tür örgü atomlarla etkileşmeleri durumu için  $J_{AB}$  gösterilmiştir. Bu durumda yine  $U = 3t$   $4t$  değerlerinde RKKY etkileşiminde bir azalma görülmüştür.

Literatürde altıgen örgüde grafen benzeri yarı metal malzeme için  $U/t \simeq 3.8$  değerinde anti-ferromanyetik bir geçiş öngörülmüştür[1]. Sonuçlarımız antiferromanyetik fazın ortaya çıkışının RKKY etkileşimlerini baskıladığına işaret etmektedir. Ama saf nötr grafende grafen herhangi manyetik bir faz öngörülmemiştir[5]. Bu sebeple Coulomb etkileşimlerinin yığınsal grafende RKKY etkileşimleri üzerinde herhangi bir etkiye yol açması beklenmemektedir. Bu konuda çalışmalara devam edilecektir.



**Şekil 43:** 2500 atomluk bir sistemde (a)  $K - K'$  BZ vektörüne dik yönde aynı tip atomlar arasındaki RKKY etkileşimi  $J_{AA}$  gösterilmiştir. (b)  $K - K'$  BZ vektörü doğrultusuna aynı tip atomlar arasındaki RKKY etkileşimi  $J_{AA}$  gösterilmiştir.



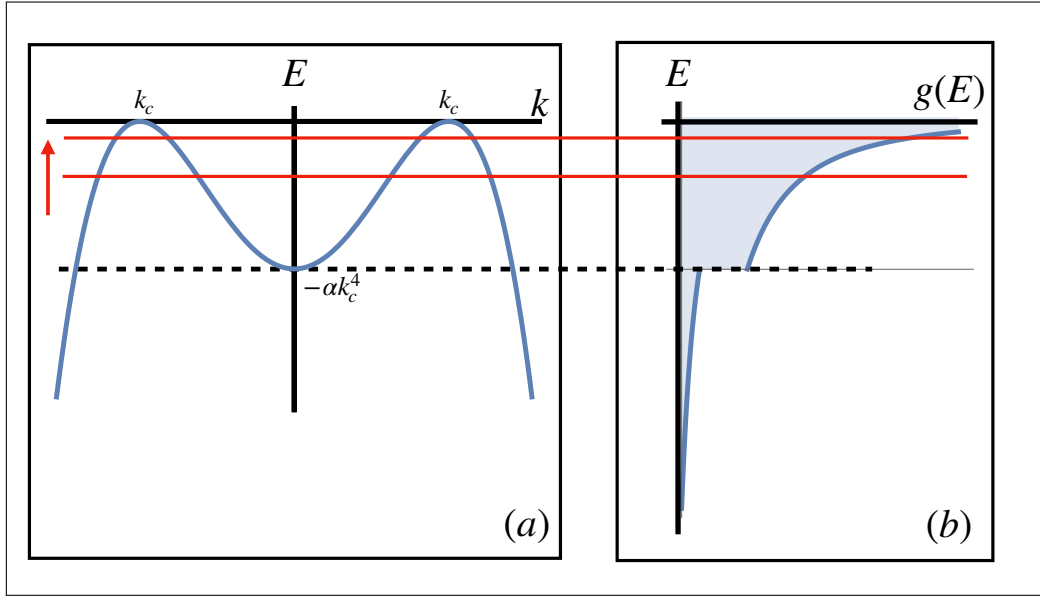
**Şekil 44:** 2500 atomluk bir sistemde  $K - K'$  BZ vektörüne dik yönde farklı tip atomlar arasındaki RKKY etkileşimi  $J_{AB}$  gösterilmiştir.

## 7. Kuartik Enerji-Momentum Dağıntımına Sahip İki Boyutlu Sistemlerde RKKY Etkileşimi

Grafenin yanı sıra birçok iki boyutlu sistem bulunmuştur. Bunlar arasında grup 15 elementlerinin oluşturduğu iki boyutlu altıgen yapılarda enerji momentuma dördüncü dereceden(kuartik) bağlıdır. Bunun sonucu olarak bant kenarlarında durum yoğunluğunda(DOS) tekillikler ortaya çıkmaktadır.  $E = \alpha(k^2 - k_c^2)^2$  formundadır,  $\alpha$  ve  $k_c$  malzemeye bağlı sabitlerdir. Tablo-(1) grup 15 elementleri için ilgili parametreleri göstermektedir[25].

	N	P	As	Sb	Bi
$\alpha$ ( $\text{\AA}^4$ eV)	1.155	2.887	3.914	5.518	8.983
$k_c$ 1/ $\text{\AA}$	0.798	0.613	0.474	0.396	2.258

**Tablo 1:** nitrojene (N), phosphorene (P), arsenene (As), antimonene (Sb) and bismuthene (Bi) için kuartik enerji dağıntım parametreleri.



**Şekil 45:** Şekil (a) kuartik enerji-momentum dağıntımını göstermektedir. Şekil (b) ise iki boyuta bu kuartik enerji dağıntımına karşılık gelen durum yoğunluğunu göstermektedir.

Sistemi anlatan Hamiltonyen şu şekilde verilebilir:

$$H = -t_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) - t_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) - J \sum_{i=1,2} I_i \cdot S_i \quad (67)$$

$c_{i\sigma}^\dagger$  ve  $c_{i\sigma}$  yaratma ve yok etme operatörleri olup, birinci ve ikinci komşuluklar atlama genlikleri  $t_1$  ve  $t_2$  ile gösterilmiştir. Hamiltonyendeki son terim ise elektron spin manyetik momentlerin





Heisenberg tipi etkileşimini tarif eden terimdir, burada  $S_i = c_{i\sigma}^\dagger S_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma'}$ .  $J = 0$  durumu için enerji dağılımı  $E_{\pm} = \pm\sqrt{3 + f(k)} - t_2 f(k)$  where  $f(k) = 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos(\sqrt{3}k_y a/2) \cos(3k_x a/2)$  şeklindedir. Burada  $a$  örgü sabiti,  $k_x, k_y$  dalg vektörleridir. Grup 15 elementleri için negatif değerli bant dolu, diğer bant ise tamamen boştur. Katkılama durumunda Fermi düzeyi bu bantlardan birisini kesecektir.

## 7.1. Green fonksiyonları ve RKKY etkileşiminin hesaplanması

RKKY tipi etkileşim şu şekilde yazılabilir

$$E(R) = J I_1 \cdot I_1 \quad (68)$$

$J$  değiş tokuş etkileşim sabiti olup, uygunluk cinsinden ifade edilebilir

$$J = \frac{J_1 J_2 \hbar^2}{4} \chi(R) \quad (69)$$

$$\chi(R) = -\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{E_F} dE \operatorname{Im}\{G(R, E)^2\} \quad (70)$$

Sistemin serbest gecikmeli Green fonksiyonu şu şekilde yazılabilir

$$G(r_1, r_2) = \sum_k \frac{\phi_k^*(r_2) \phi_k(r_1)}{\epsilon - k^4 - i\delta} \quad (71)$$

burada  $\phi_k(r) = e^{ik \cdot r} / \sqrt{\text{Area}}$ . Burada sistem  $\Gamma$  noktası etrafında simetrik ve  $G_{AA}(r, r') = G_{AB}(r, r')$ .

$$G(r_1, r_2) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \frac{e^{ik \cdot r_1} e^{-ik \cdot r_2}}{\alpha(k_y^2 + k_x^2 - k_c^2)^2 - k_0^4 + i\delta} \quad (72)$$

Hesabın sonucu olarak  $E > -\alpha k_c^4$  durumunda

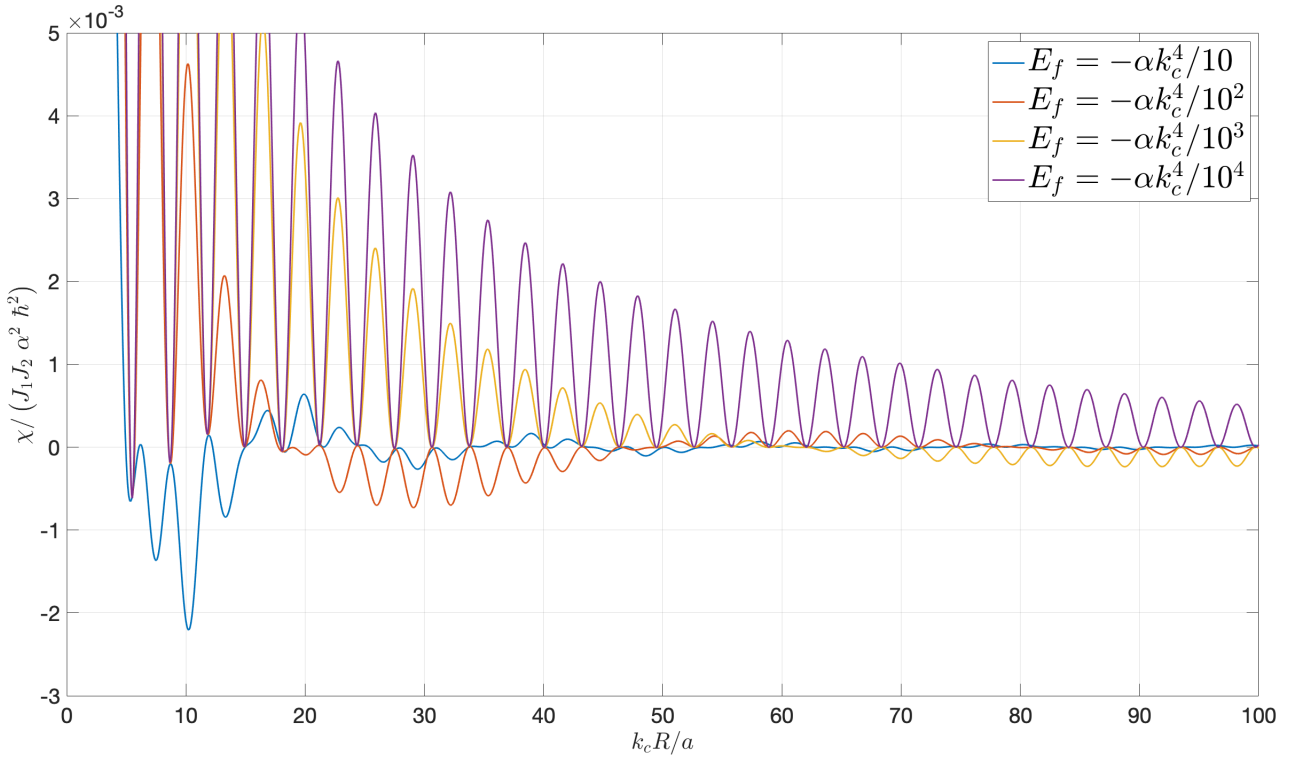
$$G(k, k_c, R) = -\frac{1}{8\pi\alpha k^2} \left[ 2K_0 \left( \sqrt{k_0^2 - k_c^2} R \right) + i\pi H_0^{(1)} \left( \sqrt{k_0^2 + k_c^2} R \right) \right] \quad (73)$$

ve  $E < -\alpha k_c^4$  durumu için

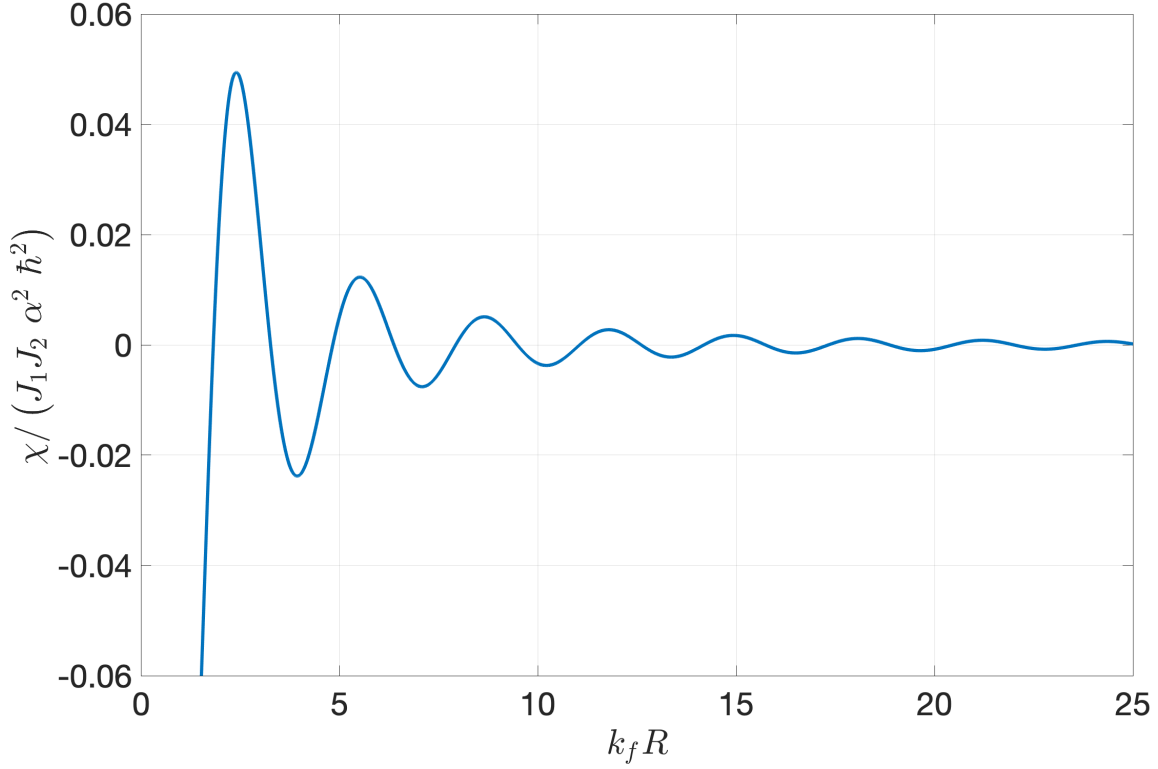
$$G(k, k_c, R) = \frac{i}{8\alpha k^2} \left[ H_0^{(1)} \left( \sqrt{k_c^2 - k^2} R \right) + H_0^{(1)} \left( \sqrt{k_c^2 + k^2} R \right) \right] \quad (74)$$

Burada  $K_0$  and  $H_0^{(1)}$  2. tip modifiye Bessel fonksiyonu ve 1. tip Hankel fonksiyonudur.

Şekil (46)'de farklı Fermi enerjileri için duyunluk fonksiyonu hesaplanmıştır. Fermi enerjisi bant kenarına yaklaştıkça Fermi dalga boyu uzamakta, RKKY etkileşiminin genliği güçlenmektedir. Şekil (46)'de görülebileceği üzere Fermi enerjisi bant kenarına yaklaştıkça RKKY etkileşiminin düğümleri daha uzak bir mesafede gerçekleşmekte ve etkileşimin menzili artmaktadır. Fonksiyonlarda iki periyot mevcuttur, bir tanesi  $2\pi/k_c$  periyodunda olup kısa bir periyottur. Öbür taraftan zarf fonksiyonu olarak bir salınım gelmekte ve bu salınının periyodu  $2\pi/k_F$  değerindedir.  $k_F \rightarrow 0$  durumunda zarf fonksiyonunun periyodu ıraksayacaktır.  $k_c = 0$  olması durumunda  $E = -\alpha k^4$  şeklinde olup salınım periyodu Fermi dalga boyundadır(Şekil-47). Fermi enerjisi bant kenarına yaklaştıkça,  $k_F \rightarrow 0$ , manyetik etkileşimlerin menzili sonsuza girmektedir.



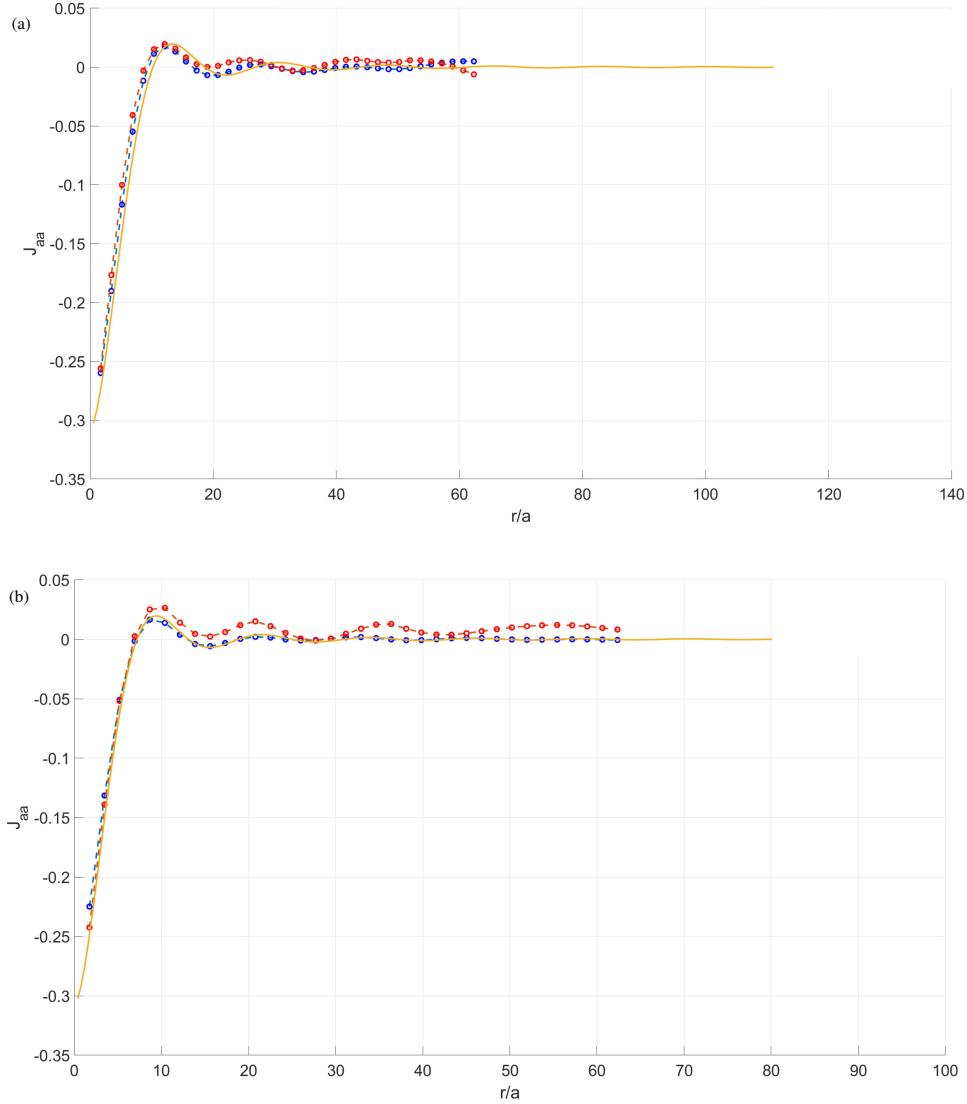
Şekil 46: Duygunluk fonksiyonu  $\chi(R)$



Şekil 47:  $k_c = 0$  durumu için RKKY etkileşimi gösterilmektedir.

## 7.2. Sıkı bağlanma modeli ve kesin köşegenleştirme yöntemi ile RKKY etkileşiminin hesaplanması

Saf kuartik durum için ( $k_c = 0$ ), ve farklı  $k_F$  değerleri için manyetik deęiş tokuş etkileşimleri 22500 atom içeren bir sistem için hesaplanmıştır ve şekil (48)'de sonuçlar gösterilmiştir. Sıkı bağlanma modelinden elde edilen öz fonksiyonlar kullanılarak RKKY etkileşimi ikinci dereceden hesaplanmış, mavi eğri ile gösterilmiştir. Bu sonuç kesin köşegenleştirme yönteminden elde edilen sonuçla kıyaslandığında (kırmızı eğri) karşılaştırıldığında sonuçların oldukça uyumlu olduğu görülmüştür. Sarı renkli eğri ise etkin kütle yöntemiyle, Green fonksiyonları kullanılarak hesaplanan ikinci dereceden RKKY etkileşiminin kıyaslaması yapılmıştır.  $k_F$  küçüldükçe simülasyon yapılan sistemin sonlu olmasından kaynaklı etkiler ortaya çıkmaktadır. Kesin köşegenleştirme yöntemi ile hesaplanan manyetik etkileşim sonucu ve ikinci dereceden hesaba karşılık gelen RKKY hesaplamalarında farklılıklar mevcuttur.



**Şekil 48:** RKKY etkileşiminin uzaklığa bağlı davranışı sırasıyla Fermi enerjisinin (a)  $k_F = 0.180/a$ , (b)  $k_F = 0.256/a$  değerleri için gösterilmiştir.  $150 \times 150 = 25000$  atomluk bir sistem için kesin köşegenleştirme yöntemi ile edilen sonuçlar kırmızı ile, sıkı bağlanma modeli ile perturbatif olarak edilen sonuçlar mavi ile gösterilmiştir. Son olarak sarı renk ile sonsuz bir sistem için perturbatif olarak hesaplanan değiş tokuş enerjileri gösterilmiştir. Burada  $a$  örgü sabitidir.



## 8. Sonuç

Proje sonucunda grafen ve benzeri sistemlerde dış potansiyeller vasıtasıyla RKKY etkileşimlerinin kontrol edilebileceği gösterilmiştir. Grafende Klein tünellemesine rağmen yarı bağlı durumların oluşabileceği gösterilmiştir. Buna karşılık yüksek yerel durum yoğunlukları(LDOS) ve uzun erimli elektronik modlar ortaya çıkmaktadır. Bu elektronik modların RKKY etkileşimini uzak mesafelere taşıdığı sonucuna varılmıştır. Fermi seviyesinin LDOS'taki maksimumlara denk gelmesi durumunda manyetik etkileşimlerin uzun menzilli olabileceği ve güçlendirebileceği gösterilmiştir. Bu sonuçlara analitik numerik yöntemlerle teyit edilmiştir. Grafen yüzeyine tutunan adatomlar arası kuvvetlerin de benzer şekilde güçleneceği, Van der Waals/Casimir kuvvetlerine benzer uzun mesafeli kuvvetlerin ortaya çıkabileceği gösterilmiştir. Bu kuvvetler tamamen Fermi denizi vasıtasıyla oluşan ve iletilen kuvvetlerdir.

Bunun yanı sıra altıgen grafen nanoyapılarda RKKY etkileşimi çalışılmış, geometrik sınırlamadan, ve de kenar durumlarından dolayı RKKY etkileşiminin nano yapı boyunca güçlendiği görülmüştür.

Grup 15 elementlerinin oluşturduğu iki boyutlu yapılarda, bant kenarında enerjinin momentuma dördüncü dereceden bağlı olmasından kaynaklı olarak Van-Hove tipi tekillikler ortaya çıkmakta ve bunlar da RKKY etkileşimlerini güçlendirmektedir. Fermi enerjisi bant kenarına yaklaştıkça RKKY etkileşimin etkin olduğu mesafenin arttığı görülmüştür. Yakın mesafelerde ferromanyetik olan bu etkileşim uzak mesafelerde Fermi dalga boyunda salınım göstermekte, ferromanyetik/antiferromanyetik karakterler arasında dalgalandığı görülmüştür.

## 9. REFERANSLAR

### ABC

- [1] S. Arya, P. V. Sriluckshmy, S. R. Hassan, and A.-M. S. Tremblay. Antiferromagnetism in the hubbard model on the honeycomb lattice: A two-particle self-consistent study. *Phys. Rev. B*, 92:045111, Jul 2015.
- [2] Annica M. Black-Schaffer. Rkky coupling in graphene. *Phys. Rev. B*, 81:205416, May 2010.
- [3] Bernd Braunecker, Pascal Simon, and Daniel Loss. Nuclear magnetism and electronic order in  $^{13}\text{C}$  nanotubes. *Phys. Rev. Lett.*, 102:116403, Mar 2009.
- [4] P. Bruno and C. Chappert. Ruderman-kittel theory of oscillatory interlayer exchange coupling. *Phys. Rev. B*, 46:261–270, Jul 1992.
- [5] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, 81:109–162, Jan 2009.
- [6] A. H.. Castro Neto, NMR M. R.. Peres, K. S.. Novoselov, A. K.. Geim, F. Guinea, and AHC Neto. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, 81(1):109–162, 2009.
- [7] N. J. Craig, J. M. Taylor, E. A. Lester, C. M. Marcus, M. P. Hanson, and A. C. Gossard. Tunable Nonlocal Spin Control in a Coupled-Quantum Dot System. *Science*, 2004.
- [8] M. F. Crommie, C. P. Lutz, and D. M. Eigler. Confinement of electrons to quantum corrals on a metal surface. *Science*, 1993.
- [9] T. Dietl, A. Haury, and Y. Merle d’Aubigné. Free carrier-induced ferromagnetism in structures of diluted magnetic semiconductors. *Phys. Rev. B*, 55:R3347–R3350, Feb 1997.
- [10] Tomasz Dietl and Hideo Ohno. Dilute ferromagnetic semiconductors: Physics and spintronic structures. *Rev. Mod. Phys.*, 86:187–251, Mar 2014.
- [11] Baruch Fischer and Michael W. Klein. Magnetic and nonmagnetic impurities in two-dimensional metals. *Phys. Rev. B*, 11:2025–2029, Mar 1975.
- [12] Tadao Kasuya. A Theory of Metallic Ferro- and Antiferromagnetism on Zener’s Model. *Progress of Theoretical Physics*, 16(1):45–57, 1956.
- [13] Tadao Kasuya. Electrical resistance of ferromagnetic metals. *Progress of Theoretical Physics*, 16(1):58–63, 07 1956.
- [14] Charles Kittel. *Quantum theory of solids*. Wiley, New York, 1963.
- [15] Jelena Klinovaja and Daniel Loss. Rkky interaction in carbon nanotubes and graphene nanoribbons. *Phys. Rev. B*, 87:045422, Jan 2013.
- [16] E. Kogan. Rkky interaction in graphene. *Phys. Rev. B*, 84:119909, Sep 2011.
- [17] E. Kogan. Rkky interaction in gapped or doped graphene. *ArXiv e-prints*, November 2012.
- [18] H. C. Manoharan, C. P. Lutz, and D. M. Eigler. Quantum mirages formed by coherent projection of electronic structure. *Nature*, 403(6769):512–515, 2000.



- [19] S. S P Parkin, N. More, and K. P. Roche. Oscillations in exchange coupling and magnetoresistance in metallic superlattice structures: Co/Ru, Co/Cr, and Fe/Cr. *Physical Review Letters*, 1990.
- [20] Yves-André Rocher. L'Étude de la Structure Électronique des Métaux des Terres Rares. *Advances in Physics*, 11(43):233–279, 1962.
- [21] M. A. Ruderman and C. Kittel. Indirect exchange coupling of nuclear magnetic moments by conduction electrons. *Phys. Rev.*, 96(1):99–102, 1954.
- [22] Saeed Saremi. RKKY in half-filled bipartite lattices: Graphene as an example. *Phys. Rev. B*, 76(18):184430, 2007.
- [23] Gordon W. Semenoff. Condensed-Matter simulation of a three-Dimensional anomaly. *Phys. Rev. Lett.*, 53(26):2449–2452, 1984.
- [24] H Sevincli, R T Senger, E Durgun, and S Ciraci. Oscillatory exchange coupling in magnetic molecules. *J. Phys. Condens. Matter*, 19(21):216205, 2007.
- [25] Hâldun Sevinçli. Quartic dispersion, strong singularity, magnetic instability, and unique thermoelectric properties in two-dimensional hexagonal lattices of group-va elements. *Nano Letters*, 17(4):2589–2595, 2017.
- [26] M. Sherafati and S. Satpathy. Analytical expression for the RKKY interaction in doped graphene. *Phys. Rev. B*, 84(12):125416, September 2011.
- [27] M. Sherafati and S. Satpathy. RKKY interaction in graphene from the lattice Green's function. *Phys. Rev. B*, 83(16):165425, April 2011.
- [28] K. J. Vahala. Optical microcavities. *Nature*, 424:839, 2003.
- [29] G. N. Watson. *A Treatise on the Theory of Bessel Functions*. Cambridge University Press, London, 1944.
- [30] Y. Yafet. Ruderman-kittel-kasuya-yosida range function of a one-dimensional free-electron gas. *Phys. Rev. B*, 36:3948–3949, Sep 1987.
- [31] Kei Yosida. Magnetic properties of Cu-Mn alloys. *Phys. Rev.*, 106(5):893–898, 1957.
- [32] M. Zarenia, A. Chaves, G. A. Farias, and F. M. Peeters. Energy levels of triangular and hexagonal graphene quantum dots: A comparative study between the tight-binding and dirac equation approach. *Phys. Rev. B*, 84:245403, Dec 2011.
- [33] Yue Zhao, Jonathan Wyrick, Fabian D Natterer, J. F. Rodriguez-Nieva, Cyprian Lewandowski, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Leonid S Levitov, Nikolai B Zhitenev, and Joseph A Stroscio. Creating and probing electron whispering-gallery modes in graphene. *Science*, 348(6235):672–675, 2015.

**TÜBİTAK**  
**PROJE ÖZET BİLGİ FORMU**

Proje Yürütücüsü:	Doç. Dr. ÖZGÜR ÇAKIR
Proje No:	115F408
Proje Başlığı:	Grafen Yapılarda Elektronik Fısıldayan Galeriler ve Güçlenmiş RKKY Etkileşimleri
Proje Türü:	1001 - Araştırma
Proje Süresi:	36
Araştırmacılar:	HALDUN SEVİNÇLİ
Danışmanlar:	
Projenin Yürütüldüğü Kuruluş ve Adresi:	İZMİR YÜKSEK TEKNOLOJİ ENSTİTÜSÜ FEN F. FİZİK B.
Projenin Başlangıç ve Bitiş Tarihleri:	01/04/2016 - 01/04/2019
Onaylanan Bütçe:	462388.0
Harcanan Bütçe:	264481.86
Öz:	<p>RKKY(Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida) etkileşimi manyetik momentler arasında Fermi denizini oluşturan elektronlar vasıtasıyla ortaya çıkan indirekt etkileşimlerdir. Bu etkileşimler nadir toprak elementlerinde ortaya çıkan manyetizmada, seyreltilmiş manyetik yarı-iletkenlerde rol oynamaktadır. Farklı kuantum noktalarında elektron spinlerinin RKKY tipi etkileşimler vasıtasıyla kuantum eş-evreli bir şekilde kontrol edilebileceği deneysel olarak gösterilmiştir[1]. RKKY etkileşimleri vasıtasıyla birbirinden ferromanyetik etkileşim altında birbirine uzak elektronik spinlerin temel durumları dolanık bir duruma denk gelmektedir. Spintronik uygulamalarında, manyetizmada ve elektronik spinlerin eşevreli kontrol edilebilmeleri konularında RKKY etkileşimi önemli bir fiziksel mekanizma olarak öne çıkmaktadır.</p> <p>Projede ilk olarak RKKY etkileşimlerin dış potansiyeller altında RKKY etkileşiminin davranışı incelenmiştir. Dış potansiyeller varlığında, belirli enerjilerde yüksek durum yoğunluğuna sahip uzaysal olarak uzun erimli elektronik durumların varlığı elektronik çınlaç etkisine yol açmaktadır.</p> <p>Grafende Klein tünellemesi olmasına rağmen, potansiyel uygulanan bölgede yüksek genliğe ve durum yoğunluğuna sahip yarı bağılı durumlar(quasi bound states) mevcuttur. Dairesel potansiyeller altında grafen ve benzeri malzemelerde fısıldayan galeriler modları olarak adlandırılan elektronik durumlar vasıtasıyla manyetik momentlerin uzak mesafelerde dahi birbirleriyle güçlü bir şekilde etkileşebildiği gösterilmiştir. Fermi enerjisinin QBS enerji değerleri ile çakıştığı durumda uzun erimli, güçlenmiş manyetik etkileşimler ortaya çıktığı deneysel ve teorik olarak gösterilmiştir. Yığınsal grafende manyetik atomların buldukları alt-örgüye bağılı olarak ya ferromanyetik ya da antiferromanyetik karakterli etkileşimler oluşmaktadır. Ancak dairesel potansiyel varlığında bu etkileşimin uzak mesafelerde, manyetik momentlerin buldukları örgüden bağımsız olarak, ferromanyetik bir karaktere büründüğü gösterilmiştir. Grafen yüzeyinde bulunan atomlar arasında Fermi denizindeki elektronlar vasıtasıyla, elektronik Casimir etkisi olarak adlandırılan etkileşimler ortaya çıkmaktadır. Numerik sonuçlar sonucunda dış potansiyeller varlığında, uzak erimli kuvvetlerin varlığı öngörülmüştür.</p> <p>RKKY etkileşimi enerji momentumu dağılımı momentumun dördüncü kuvvetine bağılı olarak değişim gösteren iki boyutlu altgen yapılarda sıkı bağlanma modeli kullanılarak ve Green fonksiyonları kullanılarak analitik olarak hesaplanmıştır. Bu malzemeler Grup 15 elementlerinin oluşturdukları iki boyutlu yapılar olup, bant kenarlarında enerji <math>E \propto (k^2 - k_c^2)^2</math> şeklinde bir dağılım göstermektedir. Buna bağılı olarak bant kenarında bir teklik ortaya çıkmakta ve boşluk/elektron katkılanması altında, Fermi enerjisi bant kenarına yaklaştıkça RKKY etkileşimlerinin büyüklüğü ve menzilin artışı gösterdiği görülmüştür. Yakın mesafelerde ferromanyetik olan etkileşim Fermi falga boyunda salınım göstermekte, Fermi enerjisi bant kenarına yaklaştıkça, RKKY etkileşimlerinin hem büyüklüğünün hem de menzilin artışı göstereceği hesaplanmıştır.</p>
Anahtar Kelimeler:	Grafen, RKKY etkileşimi, Fısıldayan galeriler modları, Casimir etkisi, Klein tünellemesi



Fikri Ürün Bildirim Formu Sunuldu Mu?:	Hayır
Projeden Yapılan Yayınlar:	1- Electronic Whispering Gallery Modes and Enhanced Magnetic Interactions in Graphene (Bildiri - Ulusal Bildiri - Sözlü Sunum), 2- Grafen Yapılarda Elektronik Fısıldayan Galeri Modları ve Güçlenmiş RKKY Etkileşimleri (Bildiri - Ulusal Bildiri - Sözlü Sunum), 3- Whispering-Gallery Modes and RKKY Interaction in Graphene (Bildiri - Ulusal Bildiri - Poster Sunum),

TÜBİTAK