



Grafen Nanoşeritlerde Elektronik Korelasyon Etkileri

Program Kodu: 1001

Proje No: 114F331

**Proje Yürütücüsü
Doç. Dr. A. Devrim GÜÇLÜ**

Bursiyerler:

**Abdülmenaf ALTINTAŞ
Korhan Ertan ÇAKMAK
Anıl KOLAY
Mohsen MODARESSİ
Hakan Ulaş ÖZDEMİR**

Haziran 2018

İZMİR



ÖNSÖZ

Grafen, bilinen en ince malzeme olması (sadece bir atom kalınlığında), yüksek elektrik/ısı iletkenliği ve karbon atomlarının yeryüzündeki bolluğu, grafeni nanobilim ve nanoteknoloji alanlarında son yılların en popüler yapısı haline getirmiştir. Grafen, transistör yapımı, güneş pili teknolojisi, algılayıcı alet yapımı, spintronik gibi nanobilim alanlarında kullanıma potansiyeliyle büyük gelecek vadetmektedir.

Grafen nanoyapıların önemli bir özelliği günümüz bilişim teknolojilerinde kullanılan yarı-iletken ve manyetik malzemelerin yerini doldurabilecek potansiyele sahip olmasıdır. Çünkü grafen nanoyapılar bilişim teknolojilerinin gerektirdiği üç temel işlevi de (*bilginin işlemi, iletişimi ve depolanması*) yerine getirebilecek potansiyele sahiptir. Bunun nedeni, grafen nanoyapılarda hem elektronik, hem optik, hem de manyetik özelliklerin dışarıdan kontrolünün mümkün olmasıdır.

Projemizin temel konusu olan grafen nanoşeritler tek katmanlı grafenden 1-100 nanometre kalınlığında kesilen uzun bir şerit parçası olarak görülebilir. Bu boyuttaki yapıların elektronik, manyetik ve optik özelliklerinin teorik olarak incelenmesi toplam atom sayısının çokluğu ve grafen yapısının geometrisinin önemi sebebiyle büyük zorluklar içerir. Diğer yandan, günümüz bilgisayarlarının işlem gücü gittikçe artmakta ve önceleri imkansız gibi gözükten hesaplar artık erişilebilir düzeye gelmiştir. Bu araştırma projesinde, ortalama-alan teorileriyle birlikte, konfigürasyon etkileşimi, kuantum Monte Carlo gibi ileri düzey elektronik yapı hesaplama teknikleri kullanılarak grafen nanoşeritlerin elektronik ve manyetik özellikleri incelenmiş, elde edilen sonuçlar makaleler halinde basılmış, yurtiçi ve yurtdışı bilimsel toplantılarda bildiri olarak sunulmuştur. Ayrıca, projede bursiyer olarak çalışan lisansüstü öğrencilerin eğitim ve tezleri proje kapsamında yapılan çalışmalara dayandırılmış, böylece proje, genç araştırmacıların fiziğin güncel bir alanında yetişmesine katkıda bulunmuştur.

Bu 114F331 no.lu TÜBİTAK 1001 projesi, TÜBİTAK tarafından 306.000 TL bütçe ile desteklenmiştir. İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü'nde sürdürülüp sonuçlandırılan proje, Doç. Dr. A. Devrim Güçlü yönetiminde, bursiyerler Korhan Ertan Çakmak, Anıl Kolay, Hakan Ulaş Özdemir, Mohsen Modarresi ve Abdülmenaf Altıntaş'ın katkıları ile gerçekleşmiştir.

İÇİNDEKİLER DİZİNİ

	<u>Sayfa</u>
ÖNSÖZ	I
İÇİNDEKİLER DİZİNİ	II
ŞEKİLLER DİZİNİ	III
ÖZET	V
ABSTRACT	VI
1. GİRİŞ	1
1.1 Grafen ve nanoteknoloji	1
1.2 Grafen nanoşeritlerde manyetizma ve sıfır enerji bandı	2
1.4 Wigner kristalleşmesi	3
1.5 Düzensizlik, manyetik safsızlıklar ve RKKY etkileşimi	4
2. KULLANILAN YÖNTEMLER	6
2.1 Konfigürasyon etkileşimi	6
2.2 Kuantum Monte Carlo	7
3. ZİKZAK KENARLARDA WIGNER KRİSTALLEŞMESİ	9
3.1 İzole zikzak kenarlarda Wigner kristalleşmesi	9
3.2 Nanoşeritlerde Wigner kristalleşmesi	13
4. NANOŞERİTLERDE RASTLANTISAL DAĞILIMLI SAFSIZLIK ETKİLERİ	19
4.1 Uzun erimli safsızlık etkileri	19
4.2 Kısa erimli safsızlık etkileri	23
5. NANOŞERİTLERDE MANYETİK ADATOMLAR ARASI ETKİLEŞİMLER	26
5.1 İki safsızlık Green fonksiyonları	26
5.2 Kuantum Monte Carlo test sonuçları	27
5.3 Kenar durum etkileri	29
6. GENEL SONUÇLAR	32
KAYNAKLAR	33

ŞEKİLLER DİZİNİ

Sayfa

Şekil 1.1 (a) Zikzak ve armchair kesim yönleri. (b) Zikzak kenarlı grafen nanoşeridin enerji bandı ve sıfır-enerji bandındaki bir kenar durumun olasılık fonksiyonu.....	2
Şekil 3.1 Sıkı-bağlama metodu ile nanoşeridin Fermi seviyesi etrafındaki elektronik spektrumu.....	8
Şekil 3.2 Farklı kenar elektron sayıları için konfigürasyon-etkileşim metodu ile hesaplanmış iki boyutlu eş-korelasyon fonksiyonları.....	10
Şekil 3.3 (a) $N=6$ ve 11 elektron için Fourier bileşeni k cinsinden hesaplanmış güç spektrumu. (b) Güç spektrumunun $k=N$ 'deki pik değerinin N 'e bağlı değişimi.....	11
Şekil 2.4 Toplam spin sayısı S 'in elektron sayısı N 'e göre değişimi.....	11
Şekil 3.5 Farklı elektron sayıları için ve grafen kenarı doğrultusunda hesaplanmış spin-spin korelasyon fonksiyonları.....	12
Şekil 3.6 Deneysel olarak elde edilmiş 1.1 nm kalınlığındaki zikzak kenarlı grafen nanoşerit.....	13
Şekil 3.7 (a) Zikzak kenarlı grafen nanoşerit örgüsü. (b) Farklı boyutlardaki kenar durumlardaki elektron sayısına göre nanoşeritlerin temel durum spini.....	14
Şekil 3.8 Kalın ($W=28$) ve periodik nanoşeritlerde farklı elektron sayıları için eş-korelasyon.....	15
Şekil 3.9. İnce ($W=12$) ve periodik nanoşeritlerde farklı elektron sayıları için eş-korelasyon.....	16
Şekil 3.10 Kalın ($W=28$) ve sınırlı nanoşeritlerde farklı elektron sayıları için eş-korelasyon.....	16
Şekil 3.11 Toplam kenar elektronu sayısı cinsinden güç spektrumu piki.....	17
Şekil 3.12 (a) Kalın ($W=28$) ve periodik nanoşeritlerde farklı delik sayıları için eş-korelasyon fonksiyonu (b) Toplam kenar delik sayısı cinsinden güç spektrumu piki.....	18
Şekil 4.1 (a) Grafen nanoşeridin örgü yapısı. (b) Rastgele yaratılmış bir yabancı yük potansiyeli yüzeyi. (c) Hubbard ortalama-alan hesapları sonucunda elde edilen elektron-boşluk göletleri.....	19
Şekil 4.2 30 en yüksek enerjili dolu valans seviyesi (üst panel) ve 60 en yüksek enerjili dolu valans seviyesinin (alt panel), sıkı bağlanma ve Hubbard ortalama-alan modellerinden elde edilmiş elektron yoğunluk profilleri.....	20
Şekil 4.3 Antiferromanyetik ve ferromanyetik fazlarının değişik düzensizlik şiddetlerine göre enerji spektrumu.....	21
Şekil 4.4 (a) AFM ve FM fazları arasındaki atom başına enerji miktarı ve (b) 30 farklı düzensizlik konfigürasyonu için AFM fazı enerji band aralığı.....	22
Şekil 4.5 (a) A ve B tipi atomik kusurlu grafen nanoşerit. (b,d) AFM ve (c,e) FM fazlar için spin yoğunluk profilleri.....	23
Şekil 4.6 (a) Toplam spin S_z cinsinden atom başına düşen enerji.....	24
Şekil 5.1. Hirshe-Fye kuantum Monte Carlo algoritmamızın testi için kullandığımız, 10516 karbon atomlu 22 zikzak zincir kalınlığında ($W=44$) nanoşerit. Altta: iki manyetik adatomun farklı altörgülerde olası pozisyonlarının şematik gösterimi.....	27
Şekil 5.2. Hirshe-Fye kuantum Monte Carlo metoduyla hesaplanan zikzak AA ve zikzak AB konumlarında bulunan adatomların aralarındaki mesafe cinsinden spin alınganlıkları.....	28



- Şekil 5.3** Zikzak AA konfigürasyonunda yerleştirilmiş adatomlar arası spin alınganlıkları (a) adatomlar arası mesafe cinsinden (b) adatomların nanoşerit merkezine mesafesi cinsinden.....29
- Şekil 5.4** Zikzak BB konfigürasyonunda yerleştirilmiş adatomlar arası spin alınganlıkları (a) adatomlar arası mesafe cinsinden (b) adatomların nanoşerit merkezine mesafesi cinsinden.....30
- Şekil 5.5** Zikzak AB konfigürasyonunda yerleştirilmiş adatomlar arası spin alınganlıkları (a) adatomlar arası mesafe cinsinden (b) adatomların nanoşerit merkezine mesafesi cinsinden.....31



ÖZET

Bu projenin temel amacı grafen nanoşeritlerde elektron etkileşimleri ve farklı türde safsızlıkların sistemin elektronik ve manyetik özellikleri üzerine etkilerini araştırmaktır. Eşsiz manyetik özellikleri ve buna bağlı olarak spintronik alanında kullanılma potansiyelinden dolayı özellikle zikzak kenarlı nanoşeritler üzerine yoğunlaşmış, sayısal hesaplamalar ortalama-alan ve çok-parçacık teknikleri kullanarak yüksek performanslı bilgisayarlar yardımıyla gerçekleştirilmiştir.

Başlıca üç bölümden oluşan projenin ilk bölümde nanoşeritlerin zikzak kenarlarında elektron yoğunluğuna bağlı Wigner kristalleşmesini inceledik. İlk olarak izole bir zikzak kenar ele alıp, Wigner kristalleşmesinin oldukça yüksek sayılabilecek elektron yoğunluklarında ($3/5$ kenar doluluk oranında) oluşabildiğini konfigürasyon-etkileşim hesaplamalarıyla gösterdik. Nötr zikzak kenarlarda ferromanyetik bir durum olduğu bilinen bu yapılarda manyetizmasının da Wigner lokalizasyonuna bağlı olarak salınımlara tabi olduğunu ve komşu elektronların ferromanyetik eşleşmeden antiferromanyetik eşleşmeye geçiş yaptığını gösterdik. Ardından, şerit kalınlığına bağlı olarak, zıt kenarlarası etkileşimlerden dolayı 2 nm'den düşük kalınlıklarda Wigner kristalleşmesinin baskılandığını, daha kalın nanoşeritlerde ise hem elektronların hem de deliklerin kristalleşebileceğini gösterdik.

İkinci bölümde, rastgele dağılımlı uzun ve kısa erimli safsızlıkların zikzak kenarların manyetik fazlarına olan etkilerini inceledik. Uzun erimli safsızlıkların, güncel deneysel sonuçlarla uyumlu olarak, düzensizlik şiddeti arttıkça sistemin antiferromanyetik durumdan ferromanyetik duruma geçmesine neden olabileceğini gösterdik. Buna karşın, kısa erimli safsızlıkların ise antiferromanyetik fazın kararlılığını arttırdığını gözlemledik.

Projenin son bölümünde ise iki manyetik atom arasındaki spin-spin korelasyonlarının nanoşeritteki konumlarına göre nasıl değiştiğini Hirsch-Fye kuantum Monte Carlo tekniğini kullanarak araştırdık. Altörgü tipi, ve kenar durumlarına uzaklıklarının etkilerinin önemli olduğunu ve genel olarak spin alınganlıklarının kenar durumları tarafından sönümlendirildiklerini gördük. Fakat eğer safsızlıklar kenar atomlarıyla aynı altörgüde bulunuyorsa, spin alınganlıklarının kuvvetlenebileceğini de gösterdik.

Anahtar kelimeler: İki boyutlu malzemeler, Grafen, Grafen nanoyapılar, Elektronik ve manyetik özellikler.



ABSTRACT

The main object of this project is to investigate electron interactions and the effects of various types of impurities on the electronic and magnetic properties of graphene nanoribbons. Due to its unusual magnetic properties and potential use in spintronic applications, graphene nanoribbons with zigzag edges were investigated in detail using meanfield and many-particle techniques with the help of high performance computers.

The project is composed mainly of three parts. In the first part, we have investigated the electronic density dependent Wigner crystallization on the zigzag edges of graphene nanoribbons. We first considered an isolated graphene zigzag edge, and demonstrated that Wigner crystallization occurs at relatively high electron densities (for a $3/5$ shell filling) through configuration interaction calculations. While it is known that charge neutral zigzag edges have a ground state ferromagnetism, we have shown that Wigner localization is accompanied by magnetic instabilities and magnetic coupling between nearest electrons goes through from a ferromagnetic to antiferromagnetic coupling. Next, we have shown that due to interedge correlations, in nanoribbons thinner than 2 nm the Wigner crystallization is suppressed, and in larger nanoribbons both electrons and holes can both Wigner crystallize.

In the second part, we have investigated the effects of randomly distributed long range and short range impurities on the magnetic phases of the graphene nanoribbon edges. We have shown that, long range impurities with strong potential can cause a antiferromagnetic to ferromagnetic transition, in agreement with experimental results. In contrast, short range impurities tend to stabilize the ground state antiferromagnetic phase.

In the last part of the project, we have studied the spin-spin correlations between two magnetic adatoms in relations to their position using Hirsch-Fye quantum Monte Carlo method. We have demonstrated that the sublattice type and the distance to the zigzag edge have important effects and the spin susceptibilities can be suppressed by the edge states. But, if the adatoms are located on the same sublattice, spin susceptibilities can be enhanced.

Key words: Two Dimensional Materials, Graphene, Graphene nanostructures, Electronic and magnetic properties.



1. GİRİŞ

Karbon atomu organik kimyanın temel taşlarından olup, çok değişik ve zengin kimyasal yapılara (alotrop) yol açar. Grafen karbon atomunun bu allotroplarından birisidir ve atomların bir bal peteği gibi altıgen bir şekilde bir araya gelmesinden oluşur (Novoselov vd., 2004; Neto vd., 2009). Grafenin elektronik özellikleri ilk kez 1947'de Wallace (1947) tarafından teorik olarak incelenmiştir. Wallace'ın bu çalışmasıyla birlikte, grafen bazı diğer karbon allotroplarının da (grafit, karbon nanotüp, fülere gibi) incelenmesi için başlangıç noktası olarak günümüze kadar kullanılmasına rağmen 2004 yılına kadar kuramsal bir yapı olarak kalmıştır. 2004 yılında Geim ve Novoselov'un grafeni laboratuvar ortamında üretmesiyle grafenin malzeme ve nanobilim dallarındaki yeri gittikçe daha önem kazanmaktadır. Grafenin en önemli elektronik özelliklerinden biri düşük enerji elektronlarının rölativist özellik kazanmalarıdır. Bu düşük enerjili parçacıklar kütsüz parçacıklar (mesela ışık parçacıkları) gibi ama çok daha düşük hızlarda davranış gösterir. Yani grafen başka bir fizik dalı olan kuantum elektrodinamiğinin malzeme bilimi çerçevesinde hem teorik hem de deneysel olarak araştırılmasını sağlar. Bu temel bilimler açısından önemli bir unsurdur.

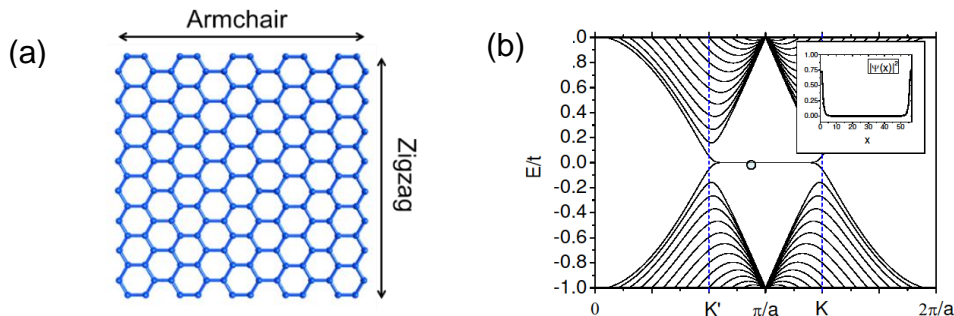
1.1 Grafen ve nanoteknoloji

Bilinen en ince malzeme olması, yüksek elektrik/ısı iletkenliği ve karbon atomlarının yeryüzündeki bolluğu, grafeni nanobilim ve nanoteknoloji alanlarında son yılların en popüler yapısı haline getirmiştir. Fakat günümüz teknolojisinde kullanılan yarı-iletken malzemelere göre daha üstün elektrik iletkenlik göstermesine rağmen bantlar arası enerji aralığının sıfır olması, grafenin transistör, elektrot, fotodetektör gibi teknolojik uygulamalarda kullanımını zorlaştırır. Prensipite, kuantum sınırlama yöntemiyle grafende enerji aralığı açmak mümkündür. Fakat, Klein paradoksu adı verilen ve grafenin çift üçgen alt örgüsüne bağlı bir fenomen yüzünden, grafenin elektronlarının kuantum sınırlanması elektrostatik olarak mümkün değildir. Ama nano-üretim alanındaki teknolojik gelişmeler sayesinde enerji aralığının açılması grafen yapıların ölçü, şekil, kenar ve elektron yoğunluğunun düzenlenmesiyle sağlanabilmektedir. Böylece, grafen yapılarının elektronik, manyetik ve optik özellikleri kontrol edilebilir hale gelmektedir (Güçlü vd., 2016). Bu yüzden, çeşitli grafen yapıların ve özellikle grafen nanoşerit ve grafen kuantum nokta gibi nanoyapıların bilimsel ve teknolojik açıdan önemi gittikçe artmaktadır.

1.2 Grafen nanoşeritlerde manyetizma ve sıfır enerji bandı

Karbon atomunun manyetik momentumu bulunmamaktadır. Bu ilk bakışta grafen yapılarında ilginç manyetik özelliklerin olmayacağı izlenimini bırakabilir. Fakat grafenin bal peteği örgüsü yüzünden durum oldukça farklıdır. Önceki paragrafta da değindiğimiz gibi bal peteği örgüsü aslında iç içe geçmiş iki üçgen alt örgüden oluşur. Lieb manyetizma kuralları (Lieb, 1989) adı verilen ve Hubbard modelinden kaynaklanan bir dizi teoreme göre eğer nötr yüklü sistemde iki alt örgü arasındaki denge bozulursa (yani farklı sayıda atom bulundurlurlarsa) elektron etkileşimleri yüzünden sistem manyetik duruma geçer ve toplam spin aradaki atom sayısı farkına orantılıdır. Eğer grafeni zikzak yönünde kesersek altörgüler arasındaki denge bozulacağı için kesilen kenarda yalnız kalan atomlar manyetizmaya sebep olur. Bu atomların hepsi aynı alt örgüye aittir (Şekil 2a). Kesme işlemini zikzak yönünde belirli bir mesafede tekrarlırsak nanoşerit oluşturmuş oluruz fakat bu ikinci kenarda yalnız kalan atomlar geometrik sebepten dolayı diğer alt örgüye ait olacaktır. Lieb teoremine göre nanoşeridin toplam spininin sıfır olması gerektiği için iki kenar birbiriyle antiferromanyetik olarak etkileşecektir. Nanoşeritlerin manyetik özellikleri teorik birçok araştırmacı sıkı-bağlama teorisi (Kane ve Mele, 2005; Wimmer vb., 2008; Korschuh vb., 2010, Gosalbez vb., 2011; Ezawa, 2006; Yao vb., 2009), etkin kütle modeli (Brey vb., 2006), yoğunluk fonksiyonel teorisi (Yao vb., 2007; Son vb., 2006; Ihnatsenka vb., 2011; Yazyev vb., 2008; Yang vb., 2008) ve ortalan Hubbard modelleriyle (Munoz-Rojas vb., 2009) incelenmiştir. Sayıca daha az olan çok-parçacık hesapları ise renormalizasyon grubu (Hikihara vb., 2003), kuantum Monte Carlo (Feldner vb., 2011) ve bizim çalışmamız da dahil konfigürasyon etkileşimi teknikleri (Güçlü vb., 2013; Dutta vb., 2008; Dutta vb., 2012) bazında kullanılmıştır.

Sadece karbon atomu temelli bir malzemenin manyetik özellikler taşıması oldukça göz alıcı bir durumdur. Üstelik karbon atomları nükleer spinden yoksundur dolayısıyla grafende elektron spininin iyi korunması beklenir. Bu yüzden grafen nanoşeritler hem bilgi depolamada hem de elektron spin temelli kuantum devre uygulamalarında kullanılmak için önemli bir potansiyele sahiptir.



Şekil 3.1 (a) Zikzak ve armchair kesim yönleri. (b) Zikzak kenarlı grafen nanoşeridin enerji bandı ve sıfır-enerji bandındaki bir kenar durumun olasılık fonksiyonu.

Yukarıda bahsettiğimiz gibi, zikzak kenarlar grafen nanoşeridinin alt örgü simetrisinin bozulmasına ve dolayısıyla sistemin manyetik özellikler kazanmasına sebep olur. Buna paralel olarak, alt örgü simetrisinin bozulması “kenar durumları” ya da “sıfır-enerji durumları” diye adlandırılan ve Fermi seviyesi civarında bant oluşturan katlı kuantum durumlarına da yol açar (Şekil 2b). Bu sıfır-enerji bandının nötr yüklü sistemde doluluk oranı birdir, yani durum başına çift değil tek elektron vardır. Bu elektronların birbirlerine göre göreceli kinetik enerjisi sıfıra yakın olduğu için, kesirli kuantum Hall etkisinde de olduğu gibi, kenar durumlarının elektron etkileşimlerine son derece duyarlı olması ve çok-parçacık korelasyonlarının önemli bir role sahip olması beklenir. Bu tür çok-parçacık korelasyonlarının özellikle manyetizma üzerindeki etkileri zikzak kenarlı kuantum noktalarda tarafımızdan (Ezawa, 2007; F.-Rossier vb., 2007; Wang vb., 2008; Akola vb., 2008; Güçlü vb., 2009; Potasz vb., 2010; Güçlü vb., 2010) ve şeritlerde (Hikihara vb., 2003; Feldner vb., 2011; Güçlü vb., 2013; Dutta vb., 2008; Dutta vb., 2012) teorik olarak incelenmiştir. Fakat aşağıda detaylı olarak bahsettiğimiz Wigner kristalleşmesi konusunda bir çalışma bulunmamaktadır.

1.4 Wigner kristalleşmesi

Wigner kristalleşmesi, düşük yoğunluktaki elektronların, kuvvetli elektron-elektron etkileşimi sonucu, Fermi sıvısı halinden lokalize olmuş kristal hale geçişine denir (Tanatar ve Ceperley, 1989; Kravchenko vb.,1992; Ghosal vb., 2006; Güçlü vb., 2008). Bir başka deyişle, çok-elektronlu bir sistemde, eğer etkileşim enerjisi kinetik enerjiden kuvvetliyse, elektronlar birbirlerini kuvvetle itecek, bunun sonucu her bir elektron klasik elektrostatik ile belirlenebilen noktalarda sabit konuma ulaşacaktır. Bu iki limit, yani yüksek yoğunluk (zayıf etkileşim) ve düşük yoğunluk (kuvvetli etkileşim) literatürde iyi bilinmektedir. Fakat iki limit arasındaki faz geçişinin incelenmesi çok-parçacık korelasyon etkilerinin kuvvetli olması nedeniyle çok daha zorlu ve bir o kadar da ilgi uyandıran bir temel bilim problemidir. Wigner kristalleşmesi iki ve üç boyutlu (Schrödinger tipi) elektron gazı için ve sonradan yarı-iletken kuantum nokta ve tellerde tarafımızdan da olmak üzere detaylı bir şekilde araştırılmıştır (Tanatar ve Ceperley, 1989; Kravchenko vb.,1992; Ghosal vb., 2006; Güçlü vb., 2008). Wigner kristalleşmesi nanoteknolojik açıdan da önemlidir çünkü sabitleşen elektronların iletkenlik ve manyetik özellikleri çok farklı olabilir.

Grafende ise Fermi seviyesindeki sözde-elektronların (Dirac elektronları) rölativist özelliklerinden dolayı durum iki boyutlu Schrödinger elektron gazından farklıdır. Eğer parçacıklar arası ortalama uzaklığa λ dersek, Dirac elektronlarının hem kinetik hem de Coulomb enerjileri $1/\lambda$ 'ya orantılıdır. Yani Schrödinger elektronlarının aksine elektron

yoğunluğu değiştirilerek Wigner faz geçişi sağlanamaz. Fakat grafen nanoşeritlerde yukarıda bahsettiğimiz sıfır-enerji bandında elektronların rölativist özelliği olmadığı için ve elektron etkileşimlerinin kuvvetli olması beklendiği için Wigner kristalleşmesi mümkündür. Wigner kristalleşmesi harici manyetik alan içindeki grafende (Cote vb., 2008) ve ayrıca çok yakın bir zamanda grafen kuantum noktalarda (Guerrero vb., 2014) etkin kütle modeliyle araştırılmış olmasına rağmen grafen nanoşeritlerde literatürde herhangi bir çalışma bulunmamaktadır.

1.5 Düzensizlik, manyetik safsızlıklar ve RKKY etkileşimi

Grafen nanoyapıların belirli geometri ve ölçüde deneysel olarak üretimi teknolojik ilerlemelere rağmen hala zor bir işlemdir. Pratikte, nanoyapıların kenarları kusurlu olabilir. Eksik ya da fazladan karbon atomları olabilir, hidrojen ya da flüor gibi safsızlık atomları bulunabilir. Bu tür kusurların grafen nanoyapıların elektronik, manyetik ve optik özelliklerini (negatif ya da pozitif bir biçimde) etkileyebilir. Bazı durumlarda, manyetik özelliği olan safsızlık atomları sisteme eklenmek istenebilir. Mesela, yarı-iletken sistemlerde manyetik atomlar eklenip sistemin spintronik özellikleri kontrol altına alınabilmiştir.

Literatürde grafende safsızlık atomları ağırlıklı olarak *yoğunluk fonksiyonel teorisyle* incelenmiştir: İlk olarak Sevinçli vb. (2008) Co, Cr, Fe, Mn, ve Ti gibi 3d metal-geçiş atomlarının grafen ve grafen nanoşeritlerde adsorbsiyonunu incelemiş; ardından Zhou vb. (2009), Cl, S, ve P elementlerinin etkilerini, Wehlin vb. (2010) ise Cr, Mn, Fe, Co, ve Ni atomlarının etkilerini incelemiştir. Grafen üstünde Co adatomlarının manyetik bilgi depolama kapasitesinin yüksek olduğu fark edilince (Xiao vb., 2009) Co/grafen sistemi başka gruplar tarafından da detaylı incelenmiştir (Jacob vb., 2010; Chan vb., 2011; Saffarzadeh vb., 2012; Rudenko vb., 2012).

Grafende tek safsızlık atomunun etkileri kuantum Monte Carlo metoduyla sadece bir grup tarafından incelenmiştir (Hu vb., 2011). Diğer yandan, iki safsızlık atomu arasındaki etkileşim üzerine çalışmalar Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida (RKKY) modeliyle sınırlı kalmıştır (Saremi, 2007; B-Schaffer, 2010; Sherafati vb., 2011). Bu modelde manyetik safsızlık atomları safsızlık spinleri olarak görülür ve birbirleriyle grafenin valans elektronları vasıtasıyla etkileşirler. Fakat çalışmalarımızda (Güçlü ve Bulut, 2015) RKKY modelinin grafende yetersiz kaldığını gösterdik; Hubbard *U*-terimine bağlı etkileşimler bu modelde göz ardı edilmiştir ve özellikle düşük sıcaklıklarda manyetik korelasyonlar RKKY modeline göre çok daha önemli bir hale gelmektedir. Literatürde iki manyetik adatom arasındaki uzaklığa bağlı indirekt etkileşim ve korelasyonlar 2D grafen yapısı için hem zikzak hem de armchair yönünde



sadece tarafımızdan incelenmiştir. Grafen nanoşeritler için ise zikzak kenarlı sistemler için Monte Carlo metodu ile yapılan yeni bir çalışma bulunmaktadır (Ma vb., 2012) ama bu çalışmada hem zikzak kenarların manyetikleşmesi göz ardı edilmiş hem de RKKY modeliyle detaylı bir karşılaştırma yapılmamıştır. Armchair kenarlı nanoşeritler ve rastgele düzensizliğin bulunduğu durumlar için ise herhangi bir çalışma bulunmamaktadır.

2. KULLANILAN YÖNTEMLER

Nanoyapıların elektronik özelliklerini kantitatif ve kalitatif yönden anlayabilmek için *sıkı-bağlama*, *Hartree-Fock*, *orataalan Hubbard*, ve *yoğunluk fonksiyonel* tekniklerine dayalı bazı yaklaşık sayısal metotlara sıkça başvurulur. Bu metotlar kullanılabilirlikleri sebebiyle tercih edilse de, elektron-elektron etkileşimlerinin önemli hale geldiği durumlarda, bu tür yaklaşık metotların ötesine gitmek, ve çok-elektron korelasyon etkilerini içeren, *konfigürasyon etkileşimi* ve *kuantum Monte Carlo* gibi ileri sayısal metotlar kullanmak gerekebilir.

2.1 Konfigürasyon etkileşimi

Bu teknik çok-parçacıklı kuvvetli korelasyon içeren kapalı bir sistemin incelenmesi için kullanılan en direkt metottur. İstenilen enerji seviyelerinin ve dalga fonksiyonlarının tamamına direkt olarak ulaşılabilmesini sağlar. Fakat, sayısal maliyetinin çok yüksek olması sebebiyle yüksek güçte bilgisayarlar gerektirir. Sayısal maliyeti elektron sayısı ile hızla arttığı için genellikle küçük sistemlerin kullanılmasında elverişli olur. Sıfır sıcaklık hesaplamaları için elverişlidir ve uyarılmış durumları da incelemeye olanak verir. Konfigürasyon etkileşim metodunda sistem Hamilton matrisi

$$H = \sum_{i\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{ijkl \\ \sigma\sigma'}} V_{ijkl} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma}^+ c_{k,\sigma} c_{l,\sigma} \quad (2.1)$$

denklemlerle kurulur. Burada $c_{i\sigma}$ 'ler i -durumunda ve σ spinli elektronları yok etme operatörü, t_{ij} i -durumundan j -durumuna hoplama parametresi (sistemin örgü simetri bilgisi, mesela grafen için balpeteği, burada saklıdır), V_{ijkl} ise iki-elektron etkileşim matrisi elemanıdır. Çoğu zaman yukarıdaki Hamiltonyen matrisi bilgisayar kapasitesini aşacak kadar çok büyük olduğundan bazı sınırlamalar getirilir. Mesela sistem önce Hartree-Fock metoduyla yani ortalama teorisi çerçevesinde incelenir. Bunun için aşağıda verilen Hartree-Fock matrisi oluşturulur:

$$H_{HF} = \sum_{i,l\sigma} \tau_{il\sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{l,\sigma} + \sum_{i,l\sigma} \left[\sum_{j,k,\sigma'} (\rho_{jk} - \rho_{jk}^{bulk}) (V_{ijkl} - V_{ijlk} \delta_{\sigma,\sigma'}) \right] c_{i,\sigma}^+ c_{l,\sigma} \quad (2.2)$$

Bu denklemde ρ_{jk} sistemin yoğunluk matrisidir. Bu matris kendisiyle tutarlı ("self-consistent") bir biçimde çözüldükten sonra Hartree-Fock Fermi seviyesine yakın elektronlar/uyarılmalar için konfigürasyon etkileşimi metodu kullanılır. Grafen nanoşeritlerde sıfır-enerji bandı diğer valans durumlarından enerjik olarak ayrışık olduğu için Hartree-Fock ve konfigürasyon

etkileşimi metotlarının bir arada kullanılması grafen nanoşeritler için çok uygundur ve tarafımızdan daha önce Möbius nanoşerit çemberlerin elektronik ve manyetik özelliklerini çalışmak için geçmişte de kullanılmıştır (Güçlü vb., 2013). Bu metodolojinin önemli bir avantajı literatürde çok kullanılan Hubbard-U etkileşiminin ötesine geçip uzun-erişimli etkileşim ve diğer saçılma olasılıklarını da içermesidir. Özellikle nötr yüklü olmayan sistemlerde ve Wigner kristalleşmesinin uzun erişimli etkileşim çok önemli bir rol oynamaktadır.

2.2 Kuantum Monte Carlo

Çok-elektronlu sistemlerin incelenmesini sağlayan bir başka hesap tekniği olan kuantum Monte Carlo, konfigürasyon etkileşimi metodundan daha az sayısal maliyeti sebebiyle bazı durumlarda tercih edilebilir. Kuantum Monte Carlo metodu, varyasyonel Monte Carlo ve difüzyon Monte Carlo gibi sıfır-sıcaklık teknikleriyle, yol integrali Monte Carlo ve determinant Monte Carlo gibi bitimli-sıcaklık tekniklerini içeren genel bir isimdir (Foulkes vb., 2001; Ceperley, 1995; Hirsch ve Fye, 1986). Bu projede daha çok örgülü sistemlerin modellenmesinde kullanılan determinant Monte Carlo tekniğinin Anderson modeline uyarlanmış hali olan Hirsch-Fye algoritmasını (Hirsch ve Fye, 1986 ; Bulut vb., 2007; Bulut vb., 2008) kullanacağız. Anderson Hamiltonyen'i manyetik atomlar barındıran grafen yapıların manyetik özellikleri ve ısıya karşı duyarlılıkları incelememizi sağlar. Hirsch-Fye kuantum Monte Carlo metodu Anderson modelinin nümerik olarak tam çözümünü sağlayan bir algoritmadır Anderson Hamiltonyen'i

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_{i\sigma} \varepsilon_d d_{i\sigma}^+ d_{i\sigma} + \sum_{ki\sigma} (V_{ki} c_{k\sigma}^+ d_{i\sigma} + h.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (2.3)$$

olarak geçer. Burada c 'ler grafen elektronlarının yok etme operatörleri, d 'ler ise atom elektronlarının yok etme operatörleridir. Son terimdeki Hubbard sabiti U safsızlık atomlarındaki elektron-elektron etkileşiminden doğar ve sistemin manyetik özelliklerinden sorumludur. Kuantum Monte Carlo tekniğini uygulamak için denklem (2.3) aşağıdaki şekilde yazılır:

$$H = H_0 + H_1 \quad (2.4)$$

$$H_0 = \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_{i\sigma} \left(\varepsilon_d + \frac{U}{2} \right) d_{i\sigma}^+ d_{i\sigma} + \sum_{ki\sigma} (V_{ki} c_{k\sigma}^+ d_{i\sigma} + h.c.) \quad (2.5)$$

$$(2.6)$$

$$H_1 = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \sum_{i\sigma} \frac{U}{2} n_{i\sigma}$$

Hirsch-Fye kuantum Monte Karlo (HFMC) tekniği uygulanmadan önce grafen sisteminin enerji seviyeleri $\epsilon_{k\sigma}$ ve seviyelerin safsızlıklarla olan tünel etkileşimleri V_{kl} 'ler ve pertürbe edilmemiş sistem (H_0) için Green fonksiyonları hesaplanmalıdır. Ardından sistemin bölüşüm fonksiyonu $Z = \text{Tr} \exp(-\beta H)$ Trotter yaklaşımı kullanılarak

$$Z \approx \text{Tr} \prod_{l=1}^L e^{-\frac{\beta}{L} H_0} e^{-\frac{\beta}{L} H_1} \quad (2.7)$$

şeklinde yazılır ve Hubbard-Stratonovich dönüşümüyle 4. derecelik bir denklemden 2. derecelik (bilineer) duruma getirilir. Monte Carlo metodu ise bilineer duruma getirilmiş bölüşüm fonksiyonunu kullanarak

$$G_{ij}(\tau\tau') = \langle T d_i(\tau) d_j^+(\tau') \rangle \quad (2.8)$$

türü Matsubara Green fonksiyonlarının sayısal olarak hesaplanmasını sağlar. Sistemin manyetik, elektronik özellikleri ve çok elektron korelasyon etkileri bu sayede incelenebilir. Mesela i ve j adatomları arası manyetik alınganlığı χ_{ij} 'yi hesaplamak için

$$\chi_{ij} = \int_0^\beta d\tau \langle M_i(\tau) M_j(0) \rangle \quad (2.9)$$

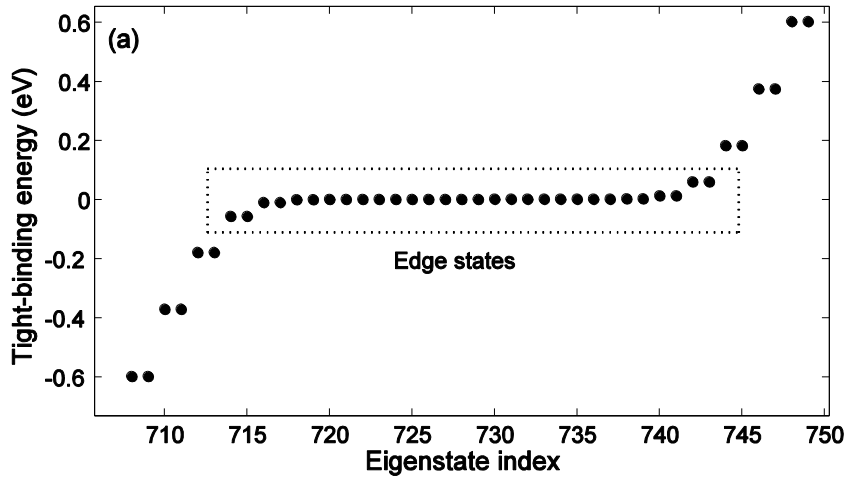
denklemini kullanılır. Burada β sistemin sıcaklığının tersi ($1/T$), $M_i = n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}$ ise i adatomunun manyetizasyonudur. Denklem (2.9) denklem (2.8)'deki gibi Matsubara Green fonksiyonları cinsinden yazılabilir. Daha önce de belirttiğimiz gibi bu yöntemi bir önceki çalışmalarımızda iki boyutlu grafen için denklem (2.9)'yu kullanarak uyarladık; zikzak ve armchair yönlerinde bulunan adatomlar için elde ettiğimiz sonuçları RKKY sonuçlarıyla karşılaştırdığımızda korelasyon etkilerinin düşük sıcaklıklarda önemini ortaya koyan farklar tespit ettik (Güçlü ve Bulut, 2015).

3. ZİKZAK KENARLARDA WİGNER KRİSTALLEŞMESİ

Bu bölümde, zikzak kenarlı nanoşeritlerde elektron yoğunluğuna bağlı Wigner kristalleşmesini iki aşamada inceleyeceğiz. Birinci aşamada izole bir zikzak kenara odaklanıp (yani zıt kenarı görmezden gelerek), konfigürasyon etkileşim metodunu kullanarak eş-korelasyon fonksiyonlarını hesaplayacağız. İkinci aşamada zıt kenarlar arası etkileşimlere odaklanacağız. Bu bölümde sunulacak sonuçlar Physical Review B dergisinde yayınlanmıştır (Güçlü, 2016; Modarresi ve Güçlü, 2017).

3.1 İzole zikzak kenarlarda Wigner kristalleşmesi

Zikzak kenarlarda elektron-elektron etkileşimlerini modellemek için periyodik sınır koşullu, $N_a = 1456$ atomlu, $L = 12.8$ nm uzunluğunda ve $W = 2.9$ nm genişliğinde bir nanoşerit sistemini ele aldık. Şekil 3.1'de gösterilen tek bant (sadece p_z orbitalleri) sıkı-bağlama hesaplama sonuçlarından da görüldüğü gibi bu sistemin toplam (sıfır enerjili) kenar durumu sayısı $n_s = 30$ 'dur. Yani her iki kenarda 15'er kenar durumu bulunmaktadır. Sistem nötr yüklüken toplam p_z elektronu sayısı 1456'dır. Sayısal hesaplamamızın ilk etabında kenar durumlarını tamamıyla boşaltıp, yani $(1456-30)/2$ yukarı spinli bir o kadar da aşağı spinli elektron için ortalama uzun-erimli Hubbard Hamiltonyenini,



Şekil 3.1 Sıkı-bağlama metodu ile nanoşeridin Fermi seviyesi etrafındaki elektronik spektrumu.

$$H_{MF} = \sum_{ij\sigma} \tau_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + U \sum_{i\sigma} (\langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle - 1/2) n_{i\sigma} + \sum_{ij\sigma} V_{ij} (\langle n_i \rangle - 1) n_{i\sigma} \quad (3.1)$$

kendiyle tutarlı bir biçimde çözdük. Elde ettiğimiz Hubbard kenar durumlarından üst kenara ait 15 kenar durumunu ayıklayıp, bu durumlar için iki-elektron etkileşim matris elemanlarını $V_{pqrs} = \langle pq|V|rs \rangle$, p_z orbitalleri saçılım matris elemanları $V_{ijkl} = \langle ij|V|kl \rangle$ cinsinden hesapladık. Ardından çok-parçacık konfigürasyon etkileşim matrisini

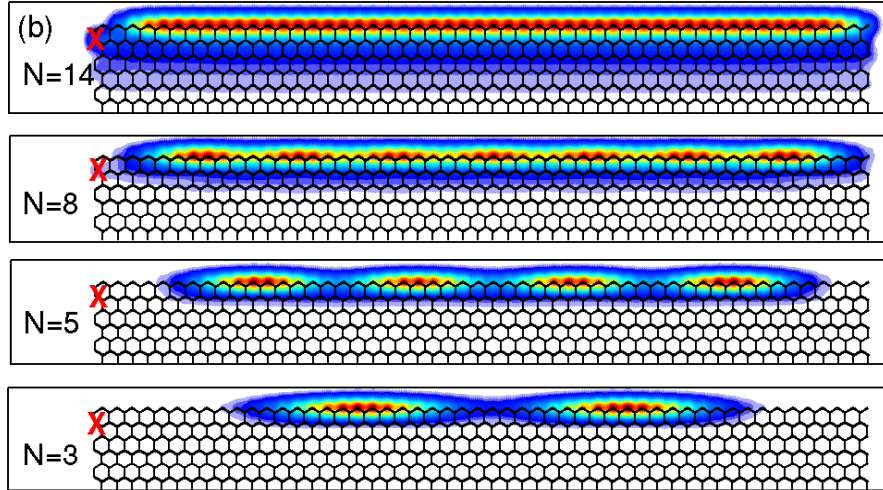
$$H_{CI} = \sum_{p\sigma} \varepsilon_p b_{p\sigma}^+ b_{p\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{pqrs \\ \sigma\sigma'}} \langle pq|V_{ee}|rs \rangle b_{p\sigma}^+ b_{q\sigma'}^+ b_{r\sigma} b_{s\sigma} \quad (3.2)$$

istediğimiz kenar durumu elektron sayısı N ve z -yönü toplam spini S_z cinsinden kurup köşegenleştirdik. Böylece, farklı (N, S_z) altuzaylarının temel durum enerjilerini hesaplayarak sistemin temel durum toplam spin S 'i ve çok-parçacık dalga fonksiyonlarını belirleyebildik. Bu çalışmada Lanczos metodu kullanarak köşegenleştirdiğimiz en büyük matrisin boyutu $2,927,925 \times 2,927,925$ oldu.

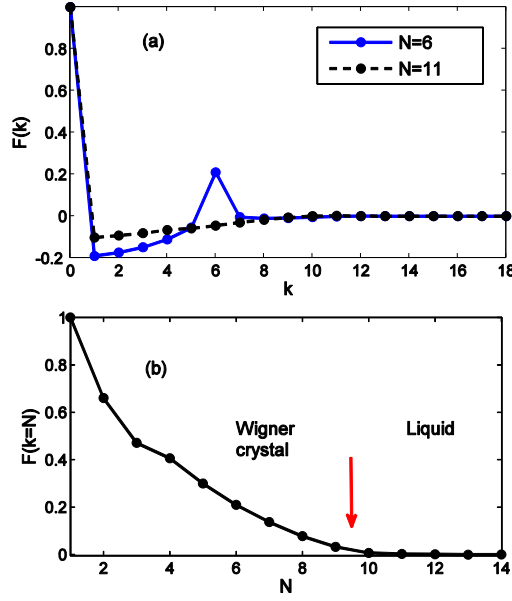
Wigner lokalizasyonu, eş-korelasyon fonksiyonları yani,

$$P_{\sigma_1\sigma_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle n_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) n_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2) \rangle = \sum_{\sigma_3 \dots \sigma_N} \int d\mathbf{r}_3 \dots d\mathbf{r}_N \times |\Psi(\mathbf{r}_1\sigma_1 \dots \mathbf{r}_N\sigma_N)|^2 \quad (3.3)$$

hesaplanarak incelenebilir. Bu fonksiyon, $(\mathbf{r}_1\sigma_1)$ koordinatlarında bir elektron bulunuyorsa $(\mathbf{r}_2\sigma_2)$ koordinatlarında başka bir elektronun bulunmasının şartlı olasılığını verir.

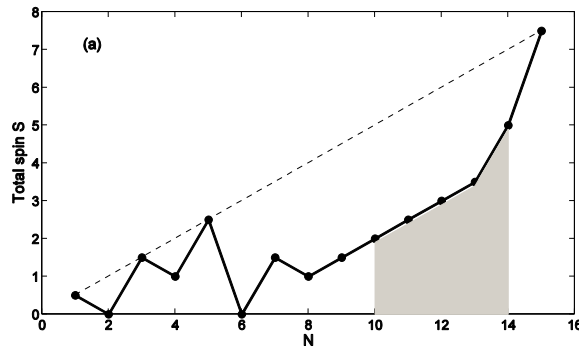


Şekil 3.2 Farklı kenar elektron sayıları için konfigürasyon-etkileşim metodu ile hesaplanmış iki boyutlu eş-korelasyon fonksiyonları.



Şekil 3.3 (a) $N=6$ ve 11 elektron için Fourier bileşeni k cinsinden hesaplanmış güç spektrumu. (b) Güç spektrumunun $k=N$ 'deki pik değerinin N 'e bağlı değişimi.

Şekil 3.2'de korelasyon-etkileşim Hamiltonyeni öz-fonksiyonları kullanılarak hesaplanmış eş-korelasyon fonksiyonları farklı elektron sayısı N için gösterilmektedir. Yukarı spinli sabit elektronun pozisyonu kırmızı çarpı işaretiyle gösterilmiştir. $N = 14$ için, yani sistem neredeyse nötr yüklükten, elektron yoğunluk dağılımında herhangi bir homojensizlik görülmemektedir (atomik seviyede lokalizasyon hariç). Yani sistemde Wigner lokalizasyonu yoktur. Fakat, elektron yoğunluğu düşürüldükçe salınımlar görülmektedir. $N = 8$ için, salınımlar zayıf olmasına rağmen 7 doruk (sabit elektron hariç) vardır ve bu Wigner lokalizasyonuna dair bir belirtidir. Daha da düşük yoğunluklarda lokalizasyonun gittikçe kuvvetlendiği görülmektedir.

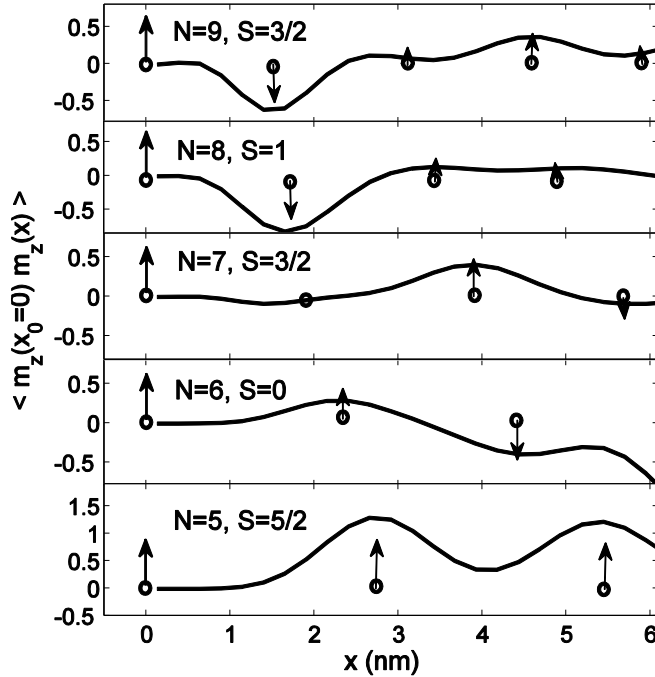


Şekil 4.4 Toplam spin sayısı S 'in elektron sayısı N 'e göre değişimi.

Wigner lokalizasyonu şiddetini daha detaylı ve kantitatif olarak anlamak için güç spektrumu olarak da adlandırılan eş-korelasyon fonksiyonunun x -yönünde Fourier dönüşümü $F(k)$ 'yi

inceleyebiliriz. Şekil 3.3a'da $F(k)$ 6 ve 11 elektron için gösterilmektedir. Altı elektron bulunduğu durumda $k = 6$ 'da belirgin bir pik görülmektedir, bu da Wigner lokalizasyonunun açık bir göstergesidir. On bir elektron için ise herhangi bir pik görülmemektedir, yani yüksek elektron yoğunluklarında Wigner lokalizasyonu mevcut değildir. Şekil 3.3b'de ise $F(k = N)$ pik yüksekliği elektron sayısı cinsinden gösterilmektedir. Bu sonuçlar elektron yoğunluğu azaltıldıkça pik yüksekliğinin de düştüğünü yani kristal bir elektron yoğunluk yapısından sıvı bir yapıya geçiş olduğunu göstermektedir. $N = 10$ 'un üzerindeki değerlerde yani sistem nötr yüklülüğe yakinken lokalizasyon görülmemektedir. Bu geçiş 0.8 nm^{-1} elektron yoğunluğu civarında oluşmaktadır. Bu da kenar durumlarında $3/5$ 'lik bir doluluk oranına rast gelir.

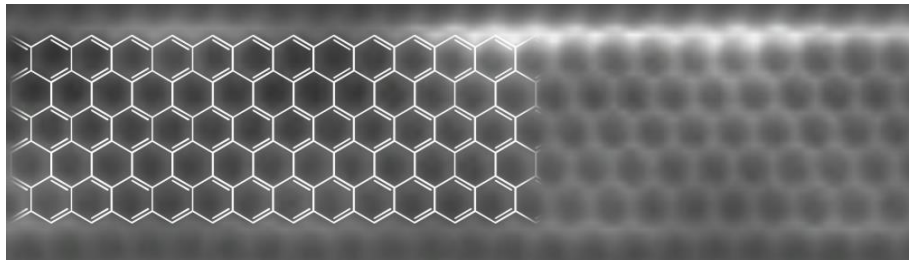
Sistemin manyetik özelliklerini incelemek için Şekil 3.4'de temel durum toplam spin S 'i elektron sayısı N cinsinden gösterilmektedir. Sistem nötr yüklüyken ($N = 15$) Lieb teoremine uygun olarak toplam spin alabileceği maksimum değer $S_{max} = 15/2$ 'ye ulaşır. Fakat, sistemin yükü arttıkça elektron korelasyon manyetizma üzerine etkilerinin önem kazanması beklenmektedir. Maksimum spin değeri Şekil 3.4'de kesik çizgiyle gösterilmektedir. Gölge alan ise hesaplamasal sınırlamalara bağlı belirsizliği göstermektedir (doğrusal boyutu 3 milyonu geçen matrislerin köşegenleştirilmesi mevcut bilgisayarlarımızla mümkün olmamıştır). Yine de, N azaldıkça sistemin manyetizmasında belirgin bir azalma görüldüğü açıktır.



Şekil 3.5 Farklı elektron sayıları için ve grafen kenarı doğrultusunda hesaplanmış spin-spin korelasyon fonksiyonları.

Wigner lokalizasyonu ile temel durum manyetizasyonunu daha detaylı anlamak için Şekil 3.5'de spin-spin korelasyon $\langle m_z(x_0)m_z(x) \rangle$ fonksiyonlarını kenar atomları doğrultusunda göstermekteyiz. Oklu küçük çemberler lokalize olmuş elektronların klasik pozisyonunu ve $x = 0$ 'da sabitlenmiş yukarı spinli elektrona göreceli efektif spini ifade etmektedir. $N = 9$ elektron için Wigner lokalizasyonun başladığını fakat hala zayıf olduğunu ve temel durum spininin $S = 3/2$ olduğunu görmüştük. Spin-spin korelasyon fonksiyonuna baktığımızda ise en yakın iki komşu elektron arasında antiferromanyetik eşleşme görüyoruz. $N = 9$ elektron için spin-spin korelasyonlarında belirgin bir değişiklik gözlemlenmemektedir. Fakat, elektron yoğunluğu daha da azaltılınca elektronlar arası ortalama uzaklık daha da hızlı artmakta ve bunun sonucunda manyetik korelasyonlar da çarpıcı bir şekilde etkilenmektedir. $N = 7$ elektron için komşular arası manyetik korelasyon sıfıra yakın, $N = 6$ elektron için ise ferromanyetik eşleşme görülmektedir. Bu ferromanyetik eşleşmenin $N = 5$ elektron için daha da önemli hale geldiğini görmekteyiz. Bu sonuçlar bize kenar manyetizmasının Wigner kristalleşmesiyle yakından ilişkili olduğunu göstermektedir.

Bu çalışmada zikzak kenarlı bir grafen nanoşeridin tek bir kenarına odaklanıp Wigner kristalleşmesinin oldukça yüksek sayılabilecek elektron yoğunluklarında ($3/5$ kenar doluluk oranında) oluşabildiğini konfigürasyon-etkileşim hesaplamalarıyla gösterdik. Sistemin manyetizmasının da Wigner lokalizasyonuna bağlı olarak salınımlara tabi olduğunu ve komşu elektronların ferromanyetik eşleşmeden antiferromanyetik eşleşmeye geçiş yaptığını gördük. Bundan sonraki proje döneminde her iki kenar durumlarını ele alıp kenarlar arası korelasyonları ve buna bağlı Wigner lokalizasyonunu ve manyetik özellikleri daha yakından inceleyeceğiz.

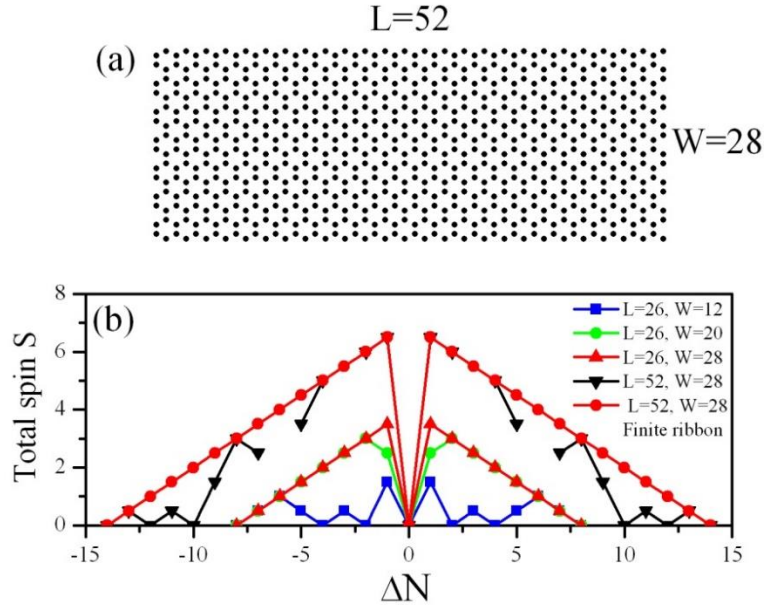


Şekil 3.6 Deneysel olarak elde edilmiş 1.1 nm kalınlığındaki zikzak kenarlı grafen nanoşerit (Ruffieux P. vb., 2016).

3.2 Nanoşeritlerde Wigner kristalleşmesi

Zikzak kenarlarda Wigner kristalleşmesini incelemek için 3.25 nm ve 6.5 nm uzunluklarında (atom sayısı cinsinden $L = 26$ ve 52), 1.1 ve 2.8 nm kalınlıklarında (atom sayısı cinsinden

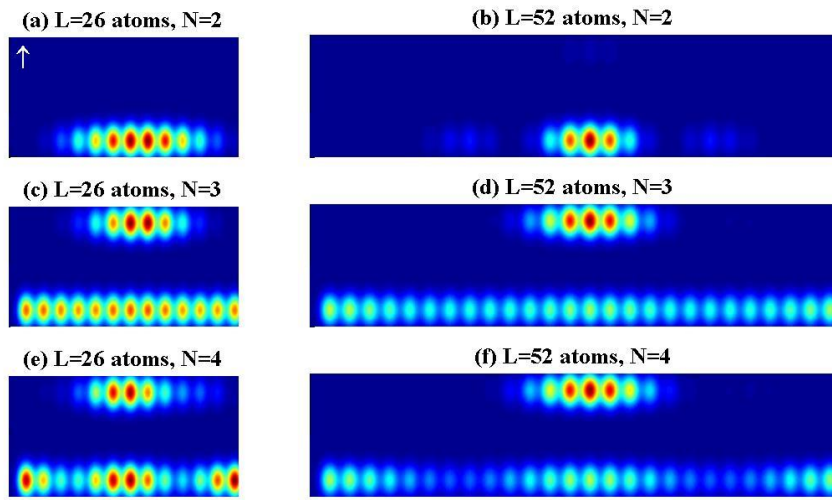
$W = 12$ ve 28) genişliklerinde periyodik ve bitimli sınır koşullu olmak üzere farklı nanoşerit sistemlerini ele aldık. Spesifik olarak 1.1 nm kalınlığındaki nanoşeritlere odaklanmamızın sebebi Şekil 3.6'da da görülebileceği üzere bu kalınlıkta son derece saf nanoşeritlerin laboratuvar ortamında üretilebilmiş olmasıdır. Fakat, aşağıda tartışacağımız teorik hesaplamalarımıza göre bu kalınlıktaki nanoşeritlerde Wigner kristalleşmesi meydana gelmemektedir. Şerit kalınlığının 2.8 nm olması durumunda ise Wigner kristalleşmesi hem elektron hem de delikler için gözlemlenmektedir.



Şekil 3.7 (a) Zikzak kenarlı grafen nanoşerit örgüsü. (b) Farklı boyutlardaki kenar durumlardaki elektron sayısına göre nanoşeritlerin temel durum spini.

Şekil 3.7a'da $L=52$, $W=28$ boyutlarındaki sistem örnek olarak gösterilmiştir. Önceki altbölümde de açıkladığımız üzere, sayısal hesaplamalarımızda önce kenar durumlarını tamamıyla boşaltıp ortaalan uzun-erimli Hubbard Hamiltonyenini, kendisiyle tutarlı bir biçimde çözdük. Elde ettiğimiz Hubbard kenar durumları için iki-elektron etkileşim matris elemanlarını $V_{pqrs} = \langle pq|V|rs \rangle$ p_z orbitalleri saçılım matris elemanları $V_{ijkl} = \langle ij|V|kl \rangle$ cinsinden hesapladık. Ardından çok-parçacık konfigürasyon etkileşim matrisini istediğimiz kenar durumu elektron sayısı $N = N^{up} + N^{dn}$ ve z -yönü toplam spini S_z cinsinden kurup köşegenleştirdik. Böylece, farklı (N, S_z) altuzaylarının temel durum enerjilerini hesaplayarak sistemin temel durum toplam spini S 'i ve çok-parçacık dalga fonksiyonlarını belirleyebildik. Bu rapor döneminde Lanczos metodu kullanarak köşegenleştirdiğimiz en büyük matrisin boyutu $1,093,092 \times 1,093,092$ oldu.

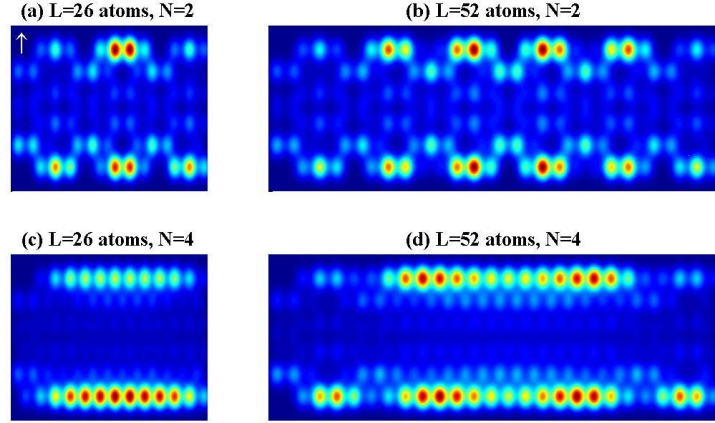
Sistemin manyetik özelliklerini incelemek için Şekil 3.7b'de temel durum toplam spin S 'i elektron sayısı N cinsinden gösterilmektedir. Sistem nötr yüklükten ($\Delta N = 0$) Lieb teoremine uygun olarak her bir zikzak kenar alabileceği maksimum toplam spin değerine ulaşır. Fakat zıt zikzak kenarlar farklı altölgülerde bulunduğu için kenarlar arası antiferomanyetik etkileşme oluşur ve sistemin toplam spini $S = 0$ dir. Fakat, sistem yüklenirse daha önceki çalışmalarda da görüldüğü üzere kenarlar arası feromanyetik etkileşim ve ΔN 'a bağlı spin dalgalanmaları oluşabilir. sistemin yükü arttıkça elektron korelasyon manyetizma üzerine etkilerinin önem kazanması beklenmektedir. Şekil 3.7b'de bu dalgalanmaların periodik sınır koşullu ve ince nanoşerit sistemlerinde önem kazandığını görmekteyiz.



Şekil 3.8 Kalın ($W=28$) ve periodik nanoşeritlerde farklı elektron sayıları için eş-korelasyon fonksiyonu.

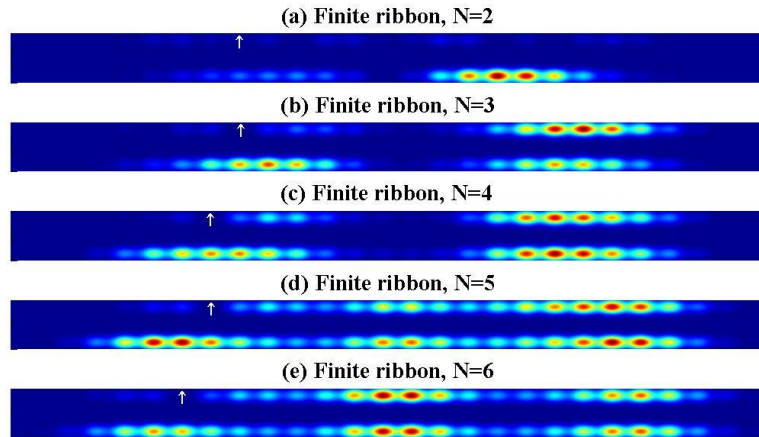
Şekil 3.8'de periyodik kalın ($W=28$) nanoşerit ve $L=26, 52$ değerleri için eş-korelasyon fonksiyonlarını göstermekteyiz. Sabit elektronun pozisyonu beyaz ok işaretliyle belirtilmiştir (üst-solda). Sistemde $N = 2$ elektron bulunurken, sabit olmayan tek elektron karşı kenarın ortasında lokalize olmuş bir şekilde bulunmaktadır. Yani iki elektron bu periodik sistem içerisinde birbirlerine olan mesafeyi maksimize etmişlerdir. Bu da Wigner kristalleşmesine dair bir işarettir. Elektron sayısı $N = 3$ 'e arttırıldığında ise farklı bir durum gözlemlemekteyiz. Sabitlenmiş elektron dışında bir elektron daha üst kenarda lokalize olmuş gözükmekte, alt kenarda ise lokalizasyon görülmemektedir. Elektron sayısı (ya da yoğunluğunun) artmasının Wigner lokalizasyonunu azaltması beklense bile, burada gözlemlenen durumun sebebi farklıdır. Toplam elektron sayısı tek sayı olduğu için her bir kenarda tek ya da çift sayıda elektron bulunma olasılığı sistem simetrisinden dolayı eşittir ve temel hal çifte dejeneredir. Şekil 3c ve d'de bu iki dejenere halin ortalamasını göstermekteyiz. Bu sonuçlardan Wigner

lokalizasyonunun nanoşeritlerde tek sayıda elektron bulunması halinde bastırılmış olabileceği sonucunu çıkartmaktayız. Fakat elektron sayısını $N = 4$ 'e çıkarınca Wigner kristalleşmesini 2 eelektron üst kenarda ve 2 eelektron da alt kenarda olmak üzere tekrar gözlemlemekteyiz. Bu elektronik konfigürasyonlar yapmış olduğumuz klasik konfigürasyon hesaplarıyla da uyuşmakta ve bu da Wigner kristalleşmesi gözlemlediğimizi doğrulamaktadır.



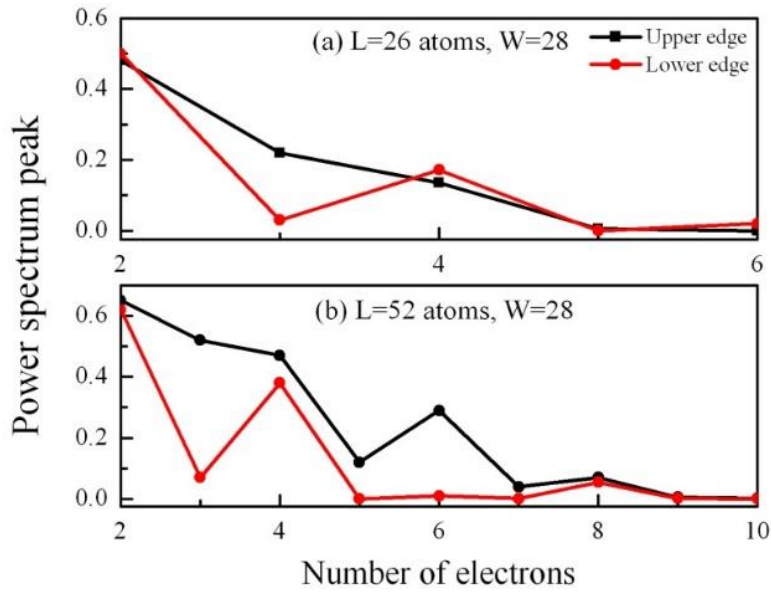
Şekil 3.9. İnce ($W=12$) ve periodik nanoşeritlerde farklı elektron sayıları için eş-korelasyon fonksiyonu.

Şekil 3.9'da daha ince bir yapı olan $W=12$ kalınlığındaki periodik sınır koşullu nanoşeritlerin eş-korelasyon fonksiyonlarını $N=2$ ve 4 elektron sayıları için gösterilmektedir. Bu kalınlıktaki nanoşeritler laboratuvar ortamında yakın geçmişte oldukça saf bir şekilde üretilebilmiştir (Ruffieux P. vb., 2016). Şekilde de görüldüğü üzere, yük dalgalanmaları olsa bile net bir Wigner lokalizasyonundan bahsetmek mümkün değildir. Bunun sebebi, zıt kenar durumlarına ait dalga fonksiyonlarının şeridin inceliğinden dolayı önemli miktarda örtüşmesi ve dolayısıyla kenar hallerinin ekstra kinetik enerji kazanmasıdır. Bu kinetik enerji ise uzun erimli Coulomb potansiyelini bastırmakta ve Wigner kristalinin oluşumunu engellemektedir.



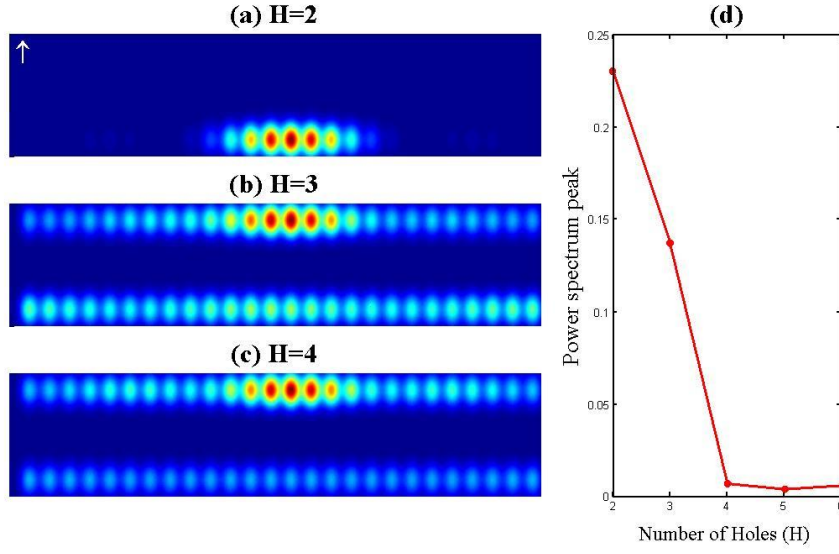
Şekil 3.10 Kalın ($W=28$) ve sınırlı nanoşeritlerde farklı elektron sayıları için eş-korelasyon fonksiyonu

Şekil 3.10'da bitimli sınır koşulunun etkisini incelemekteyiz. Periyodik nanoşeritlerin aksine bitimli nanoşeritlerde yük dağılımı homojen değildir. Bu yüzden, eş-korelasyon fonksiyonunu hesaplarken sabit elektronun konumu yük dağılımındaki maksimumlar göz önüne alınarak dikkatlice seçilmelidir. Bu yüzden Şekil 3.10'da beyaz oklarla gösterilen sabit elektron konumu elektron sayısına göre değişim göstermektedir. $N=2$ elektron için, periodik nanoşerit sonuçlarıyla uygun bir biçimde, 2. elektron sabit elektronun zıt çaprazında lokalize olmuştur. Şunu belirtmemiz gerekir ki, eğer klasik bir hesap yapacak olursak, bir elektron en solda ve üst köşede, diğer elektron en sağda ve alt köşede yer almalıdır. Buradaki hesaplarımızda ise sınır koşullarının yol açtığı kuantum etkileri yüzünden elektronların nanoşeridin orta kısımlarına doğru itelenmiş olduğunu görüyoruz. Yine de, periodik sistemlerimizde olduğu gibi, Wigner kristalleşmesi çift elektron sayıları için oluşabilmekte, tek sayılarda ise yük sayısı früstürasyonu yüzünden bastırılmıştır.



Şekil 3.11 Toplam kenar elektronu sayısı cinsinden güç spektrumu piki

Şekil 3.11'de, güç fonksiyonları pikleri, $L=26$, 52 ve $W=28$ sistemleri için toplam elektron sayısı cinsinden üst ve alt zikzak kenarlar için ayrı ayrı gösterilmiştir. Hesaplarımızda sabit elektron her zaman üst kenarda bulunduğu için üst kenar piklerinin alt kenar piklerinden daha kuvvetli olduğu görülmektedir. Önceki eş-korelasyon fonksiyonu tartışmalarımızla uygun bir şekilde, güç spektrumu piklerinde de elektron sayısına göre tek-çift etkisi görmekteyiz. Yani çift sayıda elektron durumlarında Wigner lokalizasyonu tek sayılı elektron durumlarına göre daha kuvvetli olmaktadır.



Şekil 3.12 (a) Kalın ($W=28$) ve periyodik nanoşeritlerde farklı delik sayıları için eş-korelasyon fonksiyonu (b) Toplam kenar delik sayısı cinsinden güç spektrumu piki.

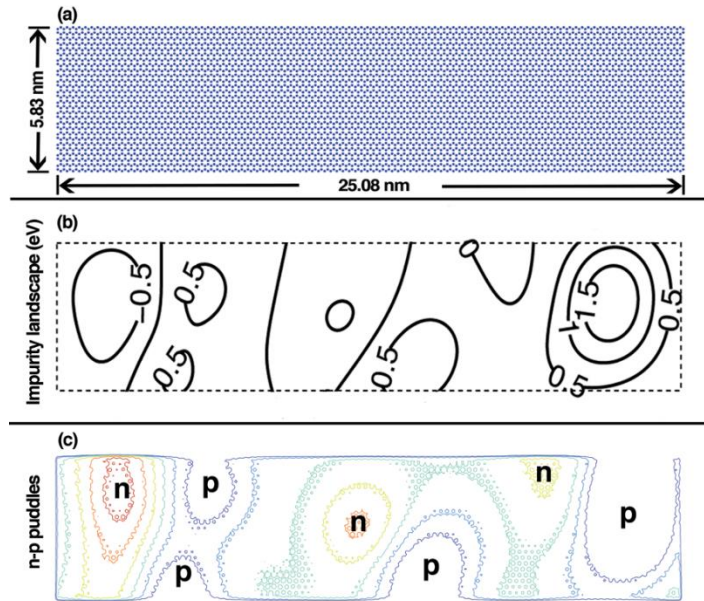
Başka bir ilginç nokta kenar deliklerinin (*edge holes*) Wigner kristalleşmesinin mümkün olup olmadığıdır. Burada kenar deliğinden kasıt, kenar hallerinin tamamen dolu olduğu duruma göre elektron yokluğudur. Şekil 3.12'de deliklerin kristalleşmesi incelenmektedir. Delik sayısı $H=2,3$ ve 4 için eş-korelasyon fonksiyonları şekil 7a,b,c'de gösterilmiştir. $H=2$ için kristalleşme belirgin bir şekilde görülmektedir. $H=3$ için elektronlarda olduğu gibi tek sayı durumu mevcuttur ve kristalleşme kısmen örtülmüştür. $H=4$ için ise sabit deliğin bulunduğu kenarda kristalleşme vardır ama karşı kenarda kristalleşme tamamen bastırılmıştır. Buradan nanoşeritlerde kristalleşmenin delikler için de mümkün olduğunu ama elektronlara göre daha zayıf olduğu sonucu çıkmaktadır.

Bu çalışmada nanoşeritlerde zikzak kenarlar arası korelasyonların Wigner kristalleşmesini nasıl etkilediğini yine konfigürasyon-etkileşim yöntemiyle araştırdık. Kalınlıkları 1.1 nm ve 2.8 nm olmak üzere iki farklı kalınlıktaki nanoşeritlere odaklandık ve ayrıca periyodik ve bitimli sınır koşullarına ayrı ayrı baktık. Teorik hesaplamalarımıza göre 1.1 nm kalınlığındaki nanoşeritlerde dalga fonksiyonu örtüşmesinden kaynaklanan kinetik enerji kazanımından ötürü Wigner kristalleşmesi meydana gelmediği ama şerit kalınlığının 2.8 nm olduğu durumlarda ise hem elektronların hem de deliklerin kristalleşebileceği ortaya çıktı. Ayrıca Wigner kristalleşmesinin sistemde tek sayıda elektron olduğu durumlarda elektron sayısı früstürasyonu yüzünden örtülü olabileceğini gösterdik.

4. NANOŞERİTLERDE RASTLANTISAL DAĞILIMLI SAFSIZLIK ETKİLERİ

Bu bölümde nanoşeritlerde rastlantısal dağılımlı safsızlıkların elektronik özelliklere ve manyetik fazgeçişlerine olan etkilerini inceleyeceğiz. Kısa bir süre önce Nature dergisinde yayınlanan deneysel bir makalede (Magda G. Z. vb., 2014) zikzak kenarlı nanoşeritlerde antiferromanyetik-ferromanyetik faz geçişi gözlemlendiği iddiası dikkatimizi çekti ve konunun öneminden dolayı çalışmalarımız bu yönde yoğunlaştı. Araştırmalarımızı uzun erimli ve kısa erimli safsızlıklar olarak iki altbaşıkta düzenledik. Elde ettiğimiz sonuçlar deneysel olarak gözlemlenen antiferromanyetik-ferromanyetik faz geçişinin uzun-erimli rastlantısal safsızlıklardan kaynaklanabileceğini, kısa erimli safsızlıkların ise antiferromanyetik fazın stabilitesini artırdığını göstermiştir. Bulgularımızı açıkladığımız iki makaleden biri yayınlanmış (Özdemir vb., 2016) diğeri ise hakemlik sürecindedir (Çakmak vb., 2018).

4.1 Uzun erimli safsızlık etkileri



Şekil 4.1 (a) Grafen nanoşeridin örgü yapısı. (b) Rastgele yaratılmış bir yabancı yük potansiyeli yüzeyi. (c) Hubbard ortalama-alan hesapları sonucunda elde edilen elektron-boşluk göletleri.

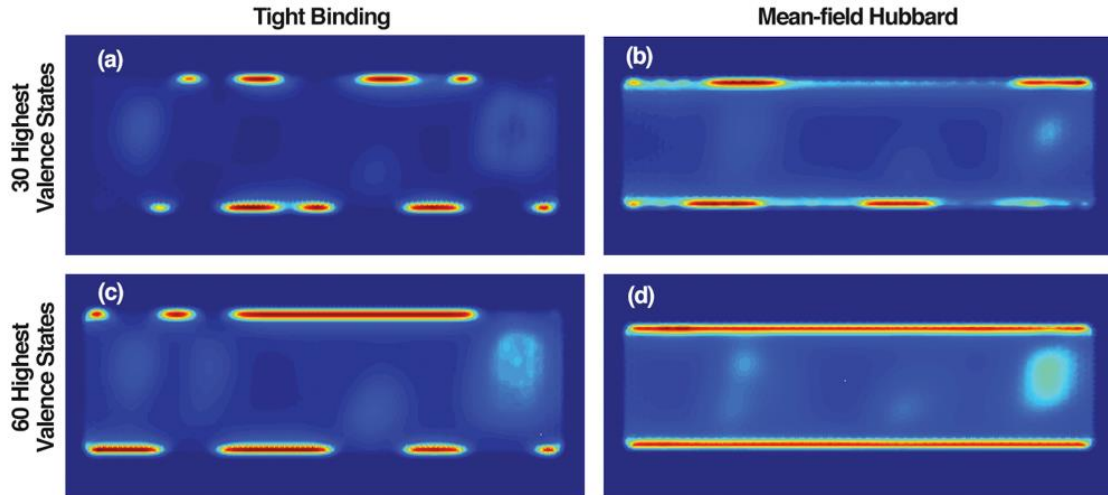
Bu çalışmada incelediğimiz sistem 5740 atomdan oluşmaktadır ve 60 kadar kenar durumuna sahiptir. İki karbon atomu arası mesafe 0.151 nm, Şekil 4.1’de görüldüğü gibi şeridin toplam kalınlığı 5.83 nm ve uzunluğu 25.08 nm`dir. Ortalama alan Hamilton operatörü farklı toplam spin değerleri $S_z = (n_\uparrow - n_\downarrow)/2$ için (yukarı ve aşağı spinli elektron sayısı sabit tutularak) kendi içinde tutarlı olarak çözülmüştür. En düşük enerjili manyetik durumu bulabilmek için bu işlem

birçok farklı spin değeri için tekrarlanmıştır. Aynı işlemler farklı ilk durumlar ile başlatılarak evrensel en düşük enerjili durumun saptandığından emin olunmuştur.

Yüklü yabancı parçacıklardan kaynaklanan uzun mesafeli elektron-boşluk göleti düzensizlikleri, elektrostatik Gauss fonksiyonun süperpozisyonu ile modellenmiş ve V_{imp} değeri rastgele seçilerek örnek üzerine yine rastgele dağıtılmıştır. Şekil 6b bu teknik ile yaratılan pürüzsüz potansiyel yüzeyi konfigürasyonlarından birisini göstermektedir. Yüklü safsızlık potansiyeli aşağıdaki şekilde verilmiştir

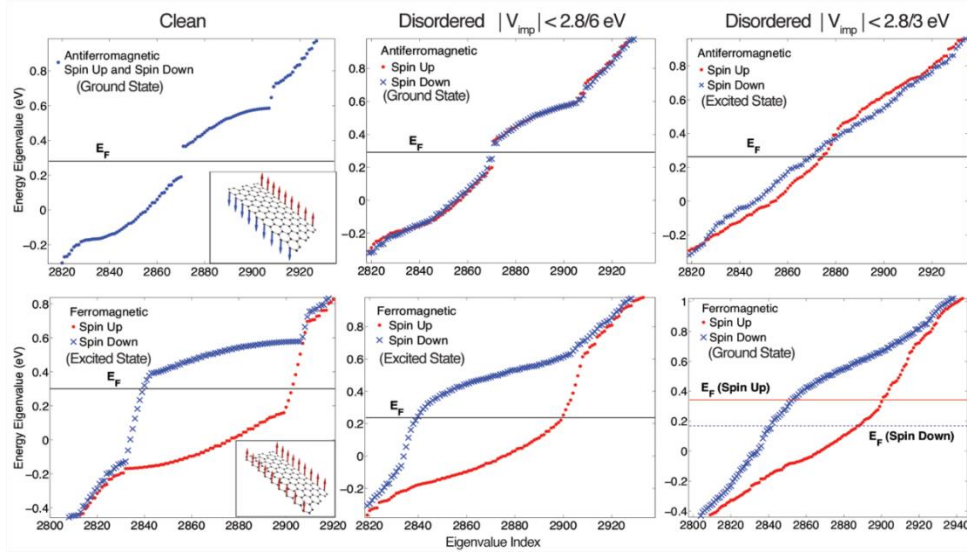
$$V_{imp}(i) = \sum_n V_n e^{-\frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_n)^2}{2\sigma^2}}. \quad (4.1)$$

Burada, r_n uzaklıkta ve n atomik alanında bulunan yabancı yüklü parçacığın potansiyel tepe değeri V_n 'dir (maksimum ve minimum bir değer arasında rastgele seçilmiştir). Gauss potansiyel fonksiyonun genişliği σ ve değeri 10 örgü sabitidir. Yapılan bütün hesaplarda toplam 16 adet yabancı yük kaynağı kullanılmıştır ve bütün hesaplarda bu konfigürasyon rastgele yaratılmıştır. Şekil 6c toplam ortalama alan elektron yoğunluğundan pozitif arkaplan yükünün çıkarılmasıyla oluşturulan elektron-boşluk göletlerini göstermektedir.



Şekil 4.2 30 en yüksek enerjili dolu valans seviyesi (üst panel) ve 60 en yüksek enerjili dolu valans seviyesinin (alt panel), sıkı bağlanma ve Hubbard ortalama-alan modellerinden elde edilmiş elektron yoğunluk profilleri.

Nanoşeritlerin manyetik özelliklerini tartışmadan önce, ilk olarak uzun mesafe potansiyel dalgalanmaları ve elektron-elektron etkileşiminin kenar durumlarının elektronik özellikleri üzerindeki toplam etkisine odaklanacağız. Şekil 4.2, Şekil 4.1'de gösterilen yabancı yüklü parçacık konfigürasyonu için en yüksek enerjili 30 ve 60 dolu valans seviyelerinin elektronik yoğunluk profilini göstermektedir. Şeklin sol tarafı sıkı bağlanma, sağ tarafı ise Hubbard ortalama-alan modeli hesaplamaları sonucunda ortaya çıkan yük yoğunluğunu gösterir. Saf sistemin valans bandı yaklaşık 30 kenar durumuna sahiptir. Elektron-elektron etkileşiminin yokluğunda eklenen düzensizliğin en büyük etkisi yüksek oranda bozulan kenar durumları olmuştur. Her ne kadar sıkı bağlanma sonuçları Şekil 4.1c'de gösterilen p (boşluk) bölgelerinde lokalize olmuş elektron yoğunluğu göstermese de, elektrostatik olarak daha doğru olan spin bağımlı genişletilmiş Hubbard modelinde elektron yoğunluğu beklendiği gibi bu bölgelere toplanmıştır. Bir başka önemli etki de elektron-elektron etkileşiminin eklenmesiyle, önceden bozulan kenar durumlarının en yüksek 60 valans seviyesi içerisinde temiz konfigürasyona yakın bir şekilde elde edilmesidir. Bu durum, elektron-elektron etkileşiminin sistemin simetrisini yeniden sağladığının ve kenar durumlarını düzensizlik etkilerine karşı güçlendirdiğinin göstergesidir. Ayrıca Şekil 4.2'de yığın safsızlık durumları da görülebilmektedir. Bu çalışmanın geriye kalan kısmında sistemin manyetik özelliklerinin elektron-elektron etkileşiminden ve yüklü düzensizliklerden nasıl etkilendiği sorusu üzerine yoğunlaşacağız.

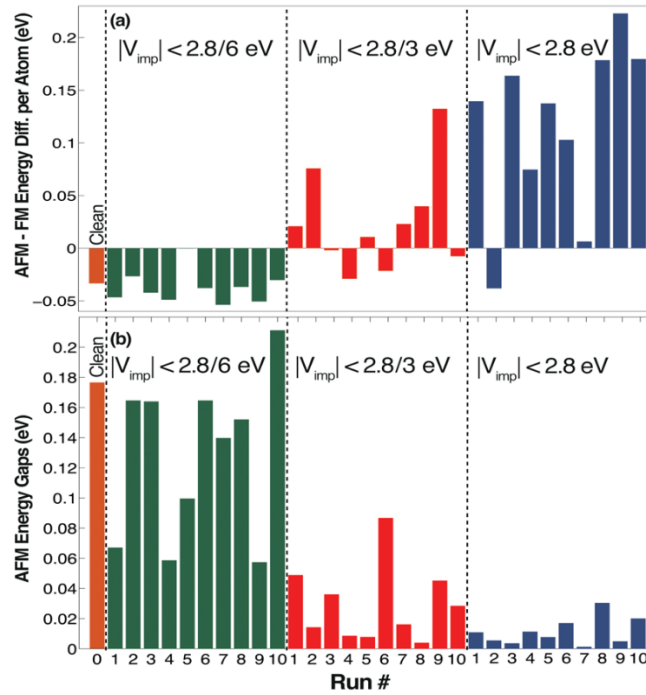


Şekil 4.3 Antiferromanyetik ve ferromanyetik fazlarının değişik düzensizlik şiddetlerine göre enerji spektrumu.

Şekil 4.3, antiferromanyetik (AFM, üst satır) ve ferromanyetik (FM, alt satır) fazların ortalama alan enerji spektrumlarını farklı şiddetlerde düzensizlikler için göstermektedir. Temiz sistemin

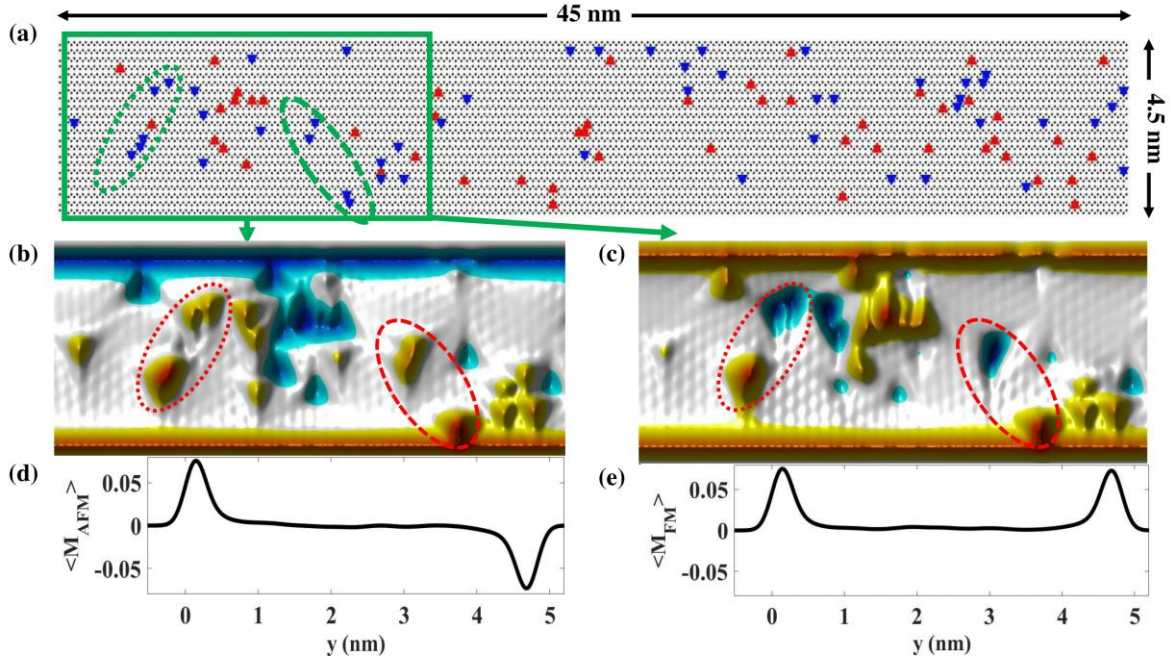
en kararlı hali AFM'tir. Ayrıca önceki teorik ve deneysel (Magda G. Z. vb., 2014) çalışmalarla uyuşan 0.17 eV'luk band aralığına da sahiptir. Sisteme, enerjisi $|V_{imp}| < |t_{nn}|/6$ aralığında değişen düzensizlik etkisi eklendiğinde en düşük enerjili faz hala AFM olsa da band aralığı 0.1 eV'a düşmüştür. Düzensizlik kuvveti iki katına çıkarıldığında ise, AFM fazın band aralığı tamamen kapanmış ve en düşük enerjili durum FM faz haline gelmiştir. Bu sonuçlar, band aralığı kapanmasını genişliği 7 nm'den fazla şeritler için gözlemleyen deneysel çalışmayla da uyumludur. Sözü edilen deneysel çalışmada band aralığının kapanması sıcaklık ve katkılama etkisiyle açıklansa da, bu çalışmada sistemimiz toplamda nötr olsa da, uzun mesafeli yüklü düzensizlikler etkisiyle oluşan yerel elektron-boşluk göletlerinin de AFM-FM geçişine yol açabileceği gösterilmiştir.

Şekil 4.3'de elde edilen sonuçlar Şekil 4.1'de gösterilen düzensizlik konfigürasyonuna özgüdür. Sonuçlarımızın doğruluğunu test etmek için aynı hesabı 30 farklı düzensizlik şiddeti ve konfigürasyonu için tekrarladık. Şekil 4.4a AFM ve FM fazları arasındaki enerji farkını göstermektedir. Şiddeti $|V_{imp}| < |t_{nn}|/6$ aralığında olan düzensizliklerin sistemde dramatik bir değişikliği yol açtığı gözlemlenmemektedir. Fakat $|V_{imp}| < |t_{nn}|/3$ için FM sistem baskın hale gelirken, $|V_{imp}| < |t_{nn}|$ şiddette düzensizliklere sahip 10 sistemden 9 tanesi FM davranış göstermektedir. AFM band aralığının gösterildiği Şekil 4.4b'de enerji aralığının artan düzensizlik şiddeti ile orantılı olarak kapandığı gözlemlenmiştir.



Şekil 4.4 (a) AFM ve FM fazları arasındaki atom başına enerji miktarı ve (b) 30 farklı düzensizlik konfigürasyonu için AFM fazı enerji band aralığı. Güçlü düzensizlik sistemi FM fazına geçirirken, düzensizlik şiddeti düşük AFM-FM faz geçişi şansı da azalmaktadır.

Özetle, elektron-elektron etkileşiminin ve rastgele potansiyel dalgalanmalarının kenar durumları ve manyetizma üzerindeki toplam etkisini inceledik. Şaşırtıcı olarak, elektronlar arası etkileşimin kenar durumlarını düzensizliklere karşı güçlü kıldığını ve güncel deneysel sonuçla uyumlu olarak düzensizlik şiddeti arttıkça sistemin antiferromanyetik durumdan ferromanyetik duruma geçtiği gözlemlendi. Bu geçişin kuramsal olarak mümkün olduğu yük katkılanmış sistemler için bilirse de, bizim hesaplarımızda nanoşerit nötr yüklüdür ve faz geçişi lokal yük nötrlüğünü kıran elektron-boşluk göletlerinden kaynaklanmaktadır.



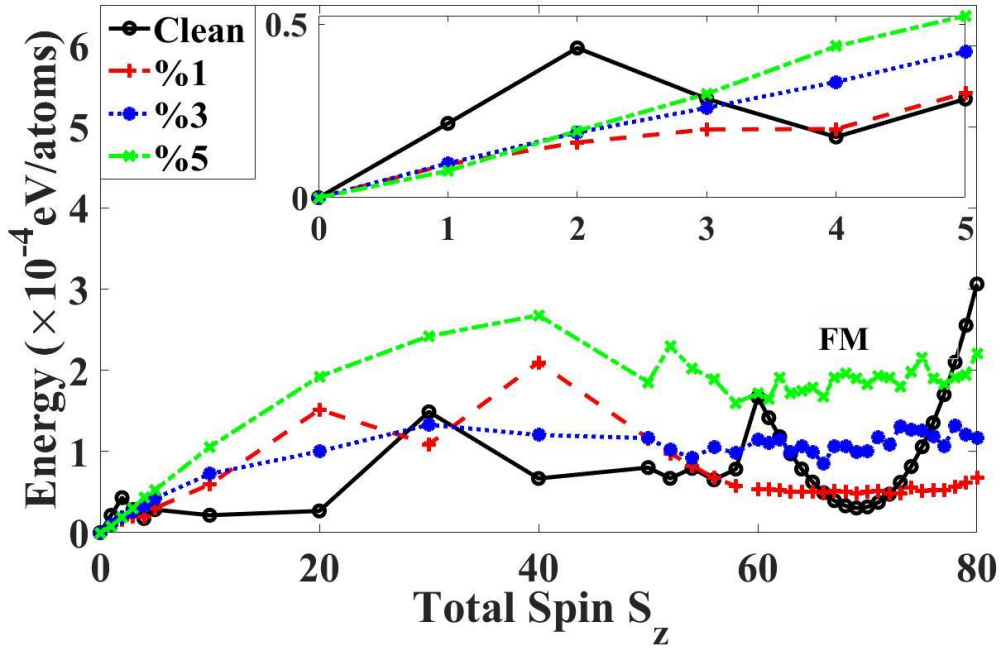
Şekil 4.5 (a) A ve B tipi atomik kusurlu grafen nanoşerit. (b,d) AFM ve (c,e) FM fazlar için spin yoğunluk profilleri.

4.2 Kısa erimli safsızlık etkileri

Bu çalışmada, rastgele dağıtılmış atomik (noktasal) kusurlu, 10010 karbon atomu içeren zikzak kenarlı grafen nanoşeritleri ortalama-alan Hubbard hesaplarıyla inceledik. Şekil 4.5a'da görüldüğü gibi, nanoşeridin boyu 45nm x 4.5nm civarındadır ve atomik kusurlar balpeteğinin A ve B altöğülerine rastgele fakat eşit sayıda dağıtılmıştır. Ayrıca, zikzak kenar atomlarının kusurlardan muaf olduğu varsayılmıştır. Pratikte atomik kusurlar adatom veya boşluklardan oluşabilir. Teorik hesaplamalarımız açısından bu kusurları boşluk olarak modelledik, yani kusurlu atomları simülasyonumuzdan tamamıyla çıkardık. Bir önceki çalışmamızda yaptığımız gibi, ortalama alan Hamilton operatörünü farklı toplam spin değerleri $S_z = (n_\uparrow - n_\downarrow)/2$ için (yukarı ve aşağı spinli elektron sayısı sabit tutularak) kendi

içinde tutarlı olarak çözdük. En düşük enerjili manyetik durumu bulabilmek için bu işlem birçok farklı spin değeri için tekrarladık.

Şekil 4.5b-c'de AFM ve FM fazlarının spin yoğunlukları gösterilmektedir. Lieb teoremiyle uygun bir biçimde sistemin temel hali AFM fazı yani $S_z = 0$ 'dır. Fakat, A ve B tipi noktasal kusurlar yine Lieb teoremiyle uyumlu şekilde, lokal olarak artı ve eksi manyetik momentlere yol açmaktadırlar. Diğer yandan, en düşük FM durumu ($S_z = 73$) sistemin temel hali olmadığından, spin yoğunluk dağılımını tahmin etmek AFM'ye göre daha zordur. İlginç bir şekilde, $S_z = 73$ durumunun kenar manyetizması güçlü kalmakta (bkz Şekil 4.5c) ve Şekil 4.6d-e'de göüldüğü üzere, yığın atomlarının ortalama manyetizması sıfırdır. Bu basit gözlemin AFM fazının kararlılığı açısından önemli bir sonucu var: FM fazında kenar durumlarına yakın olan kusurların yol açtığı manyetik momentlerin polaritesi, güçlü manyetizasyona sahip kenar durumlarının polaritesiyle belirlenmektedir. Bundan dolayı, kenarlardan daha uzakta altörgüler arası spin früstürasyonu oluşur ve bu da toplam FM enerji seviyesinin artmasına yol açar.



Şekil 4.6 (a) Toplam spin S_z cinsinden atom başına düşen enerji.

Yukarıda bahsettiğimiz, yığın bölgesindeki spin kararsızlıkları yüzünden FM fazının artan enerjisi aslında AFM fazının stabilitesini arttırmaya neden olur. Şekil 4.6'da farklı kusur oranları için atom başına düşen toplam enerji S_z cinsinden gösterilmektedir. Saf bir sistem için FM fazı $S_z = 69$ 'dur ve AFM-FM gapı 0.3×10^{-4} eV/atom kadardır. Kusur oranı %5'e arttırıldığında bu gap 1.6×10^{-4} eV/atom değerine ulaşmaktadır. Bu durum diğer S_z değerleri



için de genel olarak gözlenmektedir. Fakat, $S_z = 0$ civarında tek/birkaç spin çevirimi için harcanan enerji kusur oranıyla önce düşüş göstermekte daha sonra tekrar artışa geçmektedir (Bkz. Şekil 4.6 içkısım). Bu sonuç, düşük kusur konsantrasyonlarında, bir/bir kaç kenar spinini karşı kenara flip etmektense yakındaki bir kusura flip etmenin daha kolay olduğu gerçeğini yansıtmaktadır.

Özet olarak, balpeteği örgüsünün iki altörgüsüne eşit olarak dağıtılan atomik bozuklukların temel fazının AFM kaldığını ve bu fazın kusur yüzdesi arttıkça stabilitesinin de arttığını gösterdik. Kusur konsantrasyonu tarafından kontrol edilebilecek AFM-FM gapının kararlılığı spintronik ve manyetik nanoaygıt uygulamaları açısından yeni olasılıklar doğurma potansiyeline sahiptir.

5. NANOŞERİTLERDE MANYETİK ADATOMLAR ARASI ETKİLEŞİMLER

Bir önceki bölümde çok sayıda ve rastgele serpiştirilmiş noktasal kusurların grafen nanoşeritlerin manyetik özelliklerini ortalamaalan seviyesinde nasıl etkilediğini incelemiştik. Bu bölümde ise daha spesifik olarak, iki manyetik adatom arasındaki spin-spin korelasyonlarının nanoşeritteki konumlarına göre nasıl değiştiğini çalışacağız. Yığın grafen yapısı için yaptığımız geçmiş çalışmalar iki manyetik adatom arasındaki korelasyonların RKKY modelinin öngördüğü indirekt etkileşimden çok daha kuvvetli ve uzun erimli olduğunu göstermişti (Güçlü A. D. ve Bulut N. 2015). Dolayısıyla bu tür korelasyonların grafen nanoyapılarda da etkili olacağı ve elektronik taşınım ve spintronik gibi uygulamalarda ön plana çıkacağı beklenmektedir.

5.1 İki safsızlık Green fonksiyonları

Çalışmamızın ilk etabında iki boyutlu grafen için elimizde var olan Hirsh-Fye Monte Carlo algoritmasını grafen nanoşeritlere uyarladık. Raporun ikinci bölümünde tartıştığımız gibi, çok-elektronlu sistemlerin incelenmesini sağlayan bir hesap tekniği olan kuantum Monte Carlo, konfigürasyon etkileşimi metodundan daha az sayısal maliyeti sebebiyle bazı durumlarda tercih edilebilir. Bu projede daha çok örgülü sistemlerin modellemesinde kullanılan determinant Monte Carlo tekniğinin Anderson modeline uyarlanmış hali olan Hirsch-Fye algoritmasını kullanacağız.

Denklem (2.8)'de belirtilen Green fonksiyonlarının hesaplanabilmesi için önce pertürbe olmamış, yani H_0 Hamiltonyen'i için iki safsızlık G_{12}^0 Green fonksiyonları hesaplanmalıdır. Bunlar

$$G_{12}^0(\omega) = \frac{F_{12}}{g_{11}^{-1} - F_0} G_{11}^0 \quad (5.1)$$

$$G_{11}^0(\omega) = \frac{1}{g_{11}^{-1} - F_0 - \frac{F_{21}F_{12}}{g_{22}^{-1} - F_0}}$$

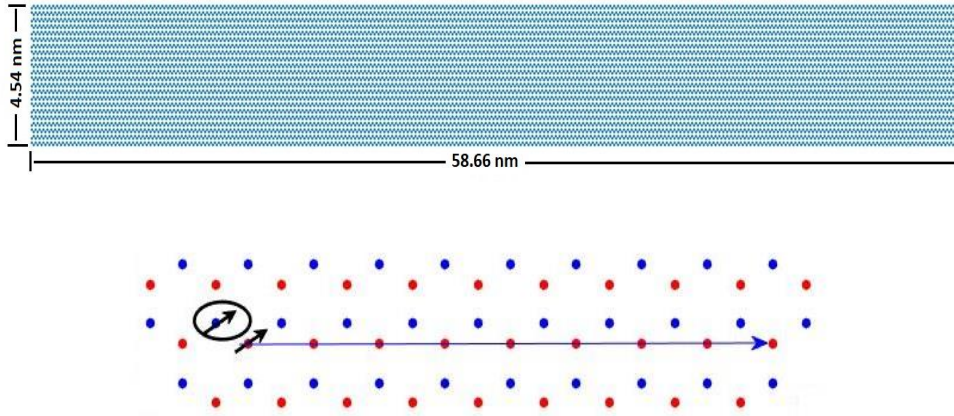
olarak verilir. Burada

$$F_0(\omega) = \sum_{k\gamma} |V_{kd_1}|^2 g_k \quad (5.2)$$

$$F_{12}(\omega) = \sum_{k\gamma} V_{kd_1} V_{d_2k} g_k$$

olarak tanımlanmıştır. Safsızlık atomlarının tünel etkileşimleri sıfırken sistemin Green fonksiyonları g_k ve g_{11} ile verilir ve bunların analitik formları sıkı-bağlama özenerjileri cinsinden mevcuttur. Tünel etkileşimleri V_{kd} 'lerin hesaplanabilmesi için ise grafen nanoşeridin sıkı-bağlama özfonksiyonları bilinmelidir. İki boyutlu grafen için sıkı-bağlama özenerji ve özfonksiyonları analitik olarak bilinmektedir ve mevcut kuantum Monte Carlo algoritmamız bu seçeneği içermektedir. Fakat grafen nanoşeritler için sayısal sıkı-bağlama hesaplama sonuçları kullanılmalıdır.

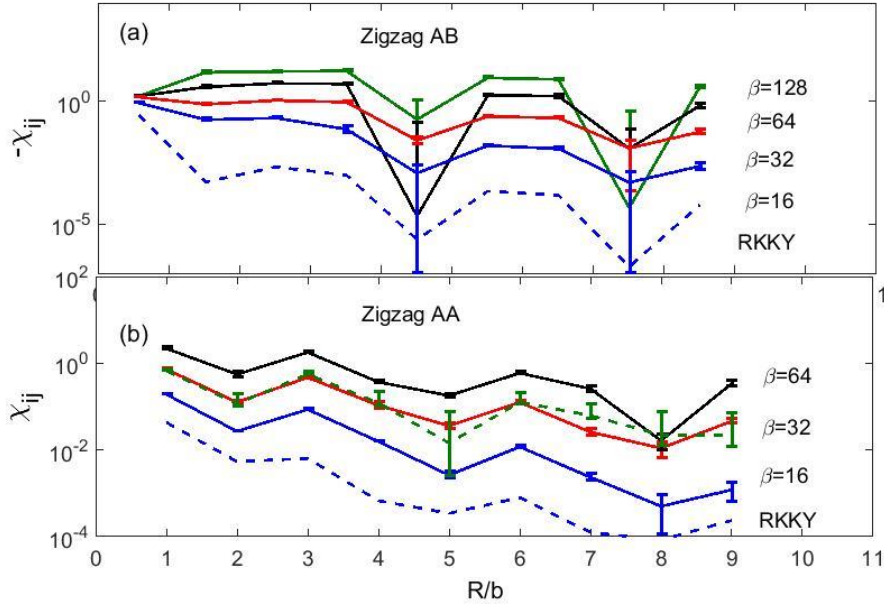
5.2 Kuantum Monte Carlo test sonuçları



Şekil 5.1. Hirshe-Fye kuantum Monte Carlo algoritmamızın testi için kullandığımız, 10516 karbon atomlu 22 zikzak zincir kalınlığında ($W=44$) nanoşerit. Altta: iki manyetik adatomun farklı altörgülerde olası pozisyonlarının şematik gösterimi.

Nanoşeritlere uyarlamak üzere, kuantum Monte Carlo metodunu sıkı-bağlama sayısal hesaplamalarımızla tümleştirmek üzere geliştirdiğimiz algoritmamızı test etmek üzere Şekil 5.1'de gösterilen 10516 atomlu ve 22 zikzak zincir kalınlığında ($W=44$) bir sistemi ele aldık. Şeridin orta kısmına, zikzak kenarlardan uzak kalacak şekilde iki adatom yerleştirdik. Zikzak yönde dizilmiş bu adatomlar arası uzaklığı değiştirmek suretiyle denklem (2.9)'da verilen spin alınganlığını hesapladık. Sonuçları daha önceki çalışmalarımızda elde ettiğimiz (Güçlü A. D. ve Bulut N. 2015) iki boyutlu grafende adatomlar arası spin alınganlıklarıyla karşılaştırdık (Şekil 5.2). Hesaplarımızda karbon-karbon tünel sabiti t birim bazı olarak kullanılmış, karbon-safsızlık atomu tünel sabiti $V = t$, etkileşim potansiyeli $U = 0.8t$, safsızlık atomu potansiyeli $\varepsilon_d = -U/2$, kimyasal potansiyel $\mu = 0$ olarak alınmıştır. Nanoşerit için hesaplamalarımızda sıcaklığın tersini $\beta=32$ aldık ve adatomları eş örgüye yerleştirdik (zikzak AA durumu).

Nanoşerit için elde edilen sonuçlar Şekil 5.2b'de yeşil kesik çizgiyle gösterilmiştir. *Adatomlar nanoşeridin ortalarında zikzak kenar etkilerinden uzakta buldukları için görüldüğü üzere spin alınganlıkları iki boyutlu grafen sonuçlarıyla uyuşmaktadır.*

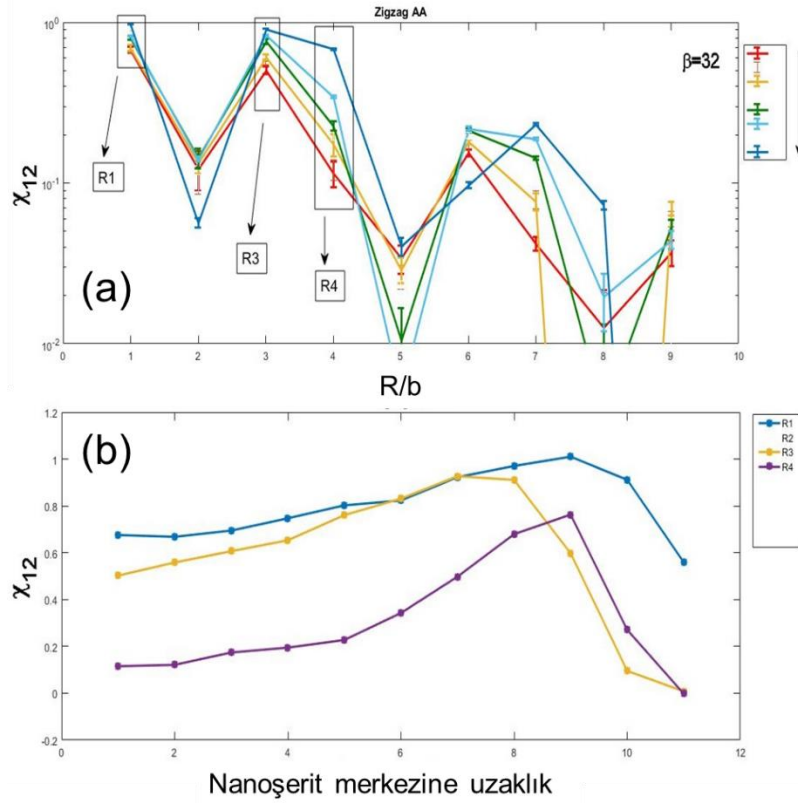


Şekil 5.2. Hirsch-Fye kuantum Monte Carlo metoduyla hesaplanan zikzak AA ve zikzak AB konumlarında bulunan adatomların aralarındaki mesafe cinsinden spin alınganlıkları. Bu rapor döneminde elde ettiğimiz grafen Zikzak AA, $\beta=32$ için nanoşerit test sonuçları kesik yeşil çizgiyle gösterilmiştir.

Şekil 5.2 ayrıca RKKY modelinden yola çıkılarak bulunmuş analitik değerleri de karşılaştırma amacıyla göstermektedir. Analitik sonuçlara göre safsızlıklar AA konumundayken etkileşim antiferomanyetiktir (negatif spin alınganlığı) ve R^{-3} oranıyla azalma gösterir. Her $3n+2$ 'nci komşuda bir minimum görülür. Anderson modeli temelli Monte Carlo hesaplarımızın da antiferomanyetik etkileşimi ve aynı minimumları öngördüğünü görmekteyiz. Fakat sıcaklık düştükçe, yani β arttıkça, Anderson modeliyle RKKY modeli arasında gittikçe artan önemli farklar olduğunu görüyoruz. Düşük sıcaklıklarda korelasyon etkileri daha önemli hale geldiği için uzun erimli düzenin (long range order) arttığını görüyoruz. $\beta=128$ ($T=270$ K) için Anderson modeli RKKY modelinden 500 kate kadar büyük bir sonuç veriyor. Bu da elektron etkileşim ve korelasyonların ne kadar önemli bir role sahip olduğunu göstermektedir. Benzer gözlemler zikzak AA durumu için de (Şekil 2b) yapılabilir. Bu durumda iki model de zikzak AB'nin aksine feromanyetik etkileşim (pozitif spin alınganlığı) ve her $3n+3$ 'üncü komşuda maksimum alınganlık öngörüyor. Ayrıca her iki model de zikzak AA feromanyetizmasının zikzak AA antiferomanyetizmasından özellikle kısa mesafelerde daha kuvvetli olduğunu

öngörüyor. Fakat sıcaklık düştükçe korelasyon etkileri yine önemli rol oynamaya başlıyor ve uzun erimli etkileşim artıyor. Hatta $\beta=64$ için uzun erimli AA ferromanyetizması AB antiferromanyetizmasından daha etkin bir hale geldiği görülmektedir.

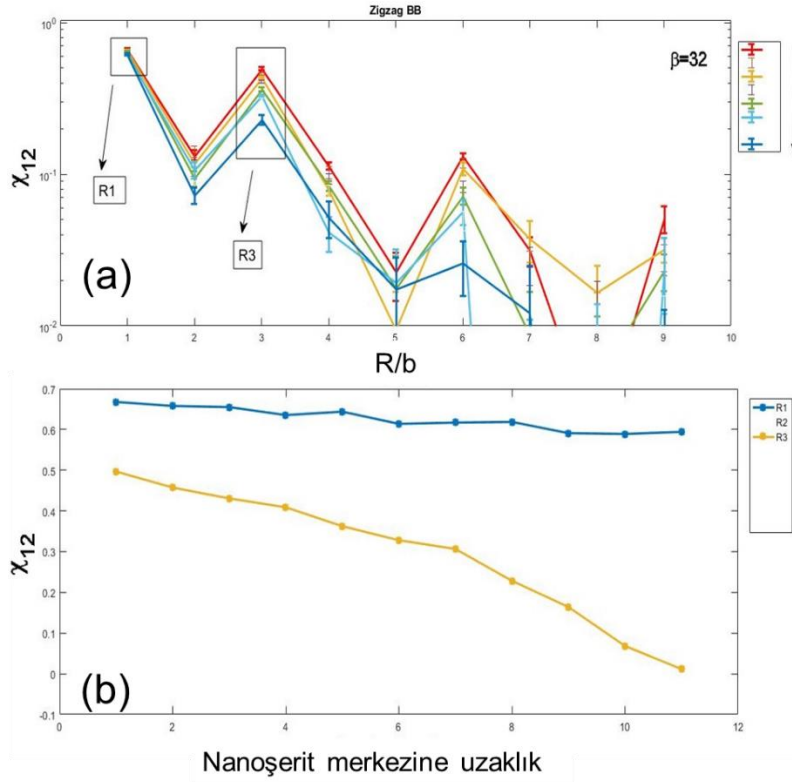
5.3 Kenar durum etkileri



Şekil 5.3 Zikzak AA konfigürasyonunda yerleştirilmiş adatomlar arası spin alınganlıkları (a) adatomlar arası mesafe cinsinden (b) adatomların nanoşerit merkezine mesafesi cinsinden.

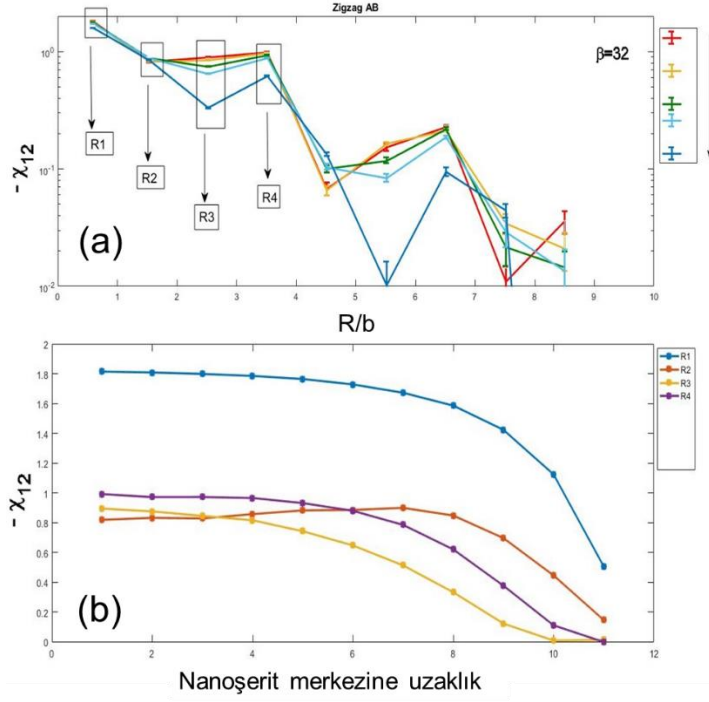
Şekil 5.3'de zikzak AA konfigürasyonunda iki manyetik safsızlık arası spin alınganlıkları gösterilmektedir. Manyetik alınganlıklar zikzak kenara paralel olarak yerleştirilmiş ve nanoşeridin merkez kısmından zikzak kenara doğru yaklaştırılarak hem merkeze farklı uzaklıklar hem de safsızlıklar arası farklı uzaklıklar için hesaplanmıştır. Şekil 5.3a'da mavi eğri şeridin orta kısmı için elde edilen sonuçları, kırmızı eğri ise en uç zikzak kenar atomları için elde edilen sonuçları göstermektedir. Görüldüğü gibi adatomların sistemin kenarlarına olan uzaklıkları spin alınganlıklarını önemli bir şekilde etkilemektedir. Spin alınganlıklarının nasıl etkilendiğini daha iyi anlayabilmek için Şekil 5.3b'de R1 ($R/b=1$, mavi eğri), R3 ($R/b=3$, sarı eğri) ve R4 ($R/b=4$, mor eğri) konfigürasyonları için nanoşerit merkezine uzaklık cinsinden gösterdik. İlginç olarak, adatomlar zikzak kenara yaklaştıkça spin alınganlıklarının önce arttığını, fakat sonra tekrardan düşüşe geçtiği görülmektedir. Burada hatırlamak gerekir

ki, 1. Bölüm'de değindiğimiz gibi sıfır enerjili kenar durumları A altöğüsünde bulunmaktadır. Bu yüzden manyetik safsızlıklar kenar durumların yaklaştıkça aralarındaki etkileşim manyetizmayı önce pozitif bir şekilde kuvvetlendirmektedir. Fakat mesafe çok kısalmıca adatomlarla kenar durumlarının hibritleşmesi yüzünden adatom doluluk durumları etkilenmekte ve bu da spin korelasyonlarını tekrar söndürmektedir.



Şekil 5.4 Zikzak BB konfigürasyonunda yerleştirilmiş adatomlar arası spin alınganlıkları (a) adatomlar arası mesafe cinsinden (b) adatomların nanoşerit merkezine mesafesi cinsinden.

Peki manyetik safsızlıklar BB konfigürasyonunda iseler, A-tipi kenar atomlarıyla etkileşimleri nasıl olur? Bu soruya cevap vermek için Şekil 5.4'te, Şekil 5.3'ün benzeri eğrileri zikzak BB konfigürasyonundaki adatomlar için gösterdik. Zikzak AA tipi konfigürasyona göre kenar durumlarının spin alınganlıklarını özellikle R1 eğrisi için daha az etkiliyor. Diğer R değerlerinde ise spin alınganlıklarında yavaş ve monotonik bir düşüş gözlemliyoruz. Bunun sebebi, BB tipi safsızlık çiftlerinin A tipi kenar durumlarıyla AA tipi safsızlıklar kadar kuvvetli etkilenmemesidir.



Şekil 5.5 Zikzak AB konfigürasyonunda yerleştirmiş adatomlar arası spin alınganlıkları (a) adatomlar arası mesafe cinsinden (b) adatomların nanoşerit merkezine mesafesi cinsinden.

Son olarak, Şekil 5.5’de, zikzak AB konfigürasyonunu inceliyoruz. Yani adatomlardan biri A altörgüsünde, diğeri B altörgüsünde bulunmaktadır. Bu durumda da, zikzak BB konfigürasyonunda olduğu gibi, adatomlar nanoşerit kenarına yakınlıkla spin etkileşimlerinin genel olarak sönümlendiğini gözlemliyoruz.

Sonuç olarak manyetik safsızlıklarda spin-spin korelasyonlarının nanoşerit kenar durumlarıyla olan etkileşimlerini kuantum Monte Carlo metoduyla inceledik. Safsızlıkların konfigürasyonu, altörgü tipi, ve kenar durumlarına uzaklıklarının etkilerinin önemli olduğunu ve genel olarak spin alınganlıklarının kenar durumları tarafından sönümlendirildiklerini gördük. Fakat eğer safsızlıklar kenar atomlarıyla aynı altörgüde bulunuyorlarsa, spin alınganlıklarının kuvvetlenebileceğini de gösterdik. İlerideki çalışmalarımızda nanoşerit elektronlarını önce ortalama alan Hubbard denklemleriyle çözüp, kenar durumlarının manyetizmasıyla safsızlıkların spin durumlarını arasındaki etkileşmeyi kuantum Monte Carlo metoduyla çözmeyi planlıyoruz.

6. GENEL SONUÇLAR

Nano-üretim alanındaki teknolojik gelişmeler sayesinde enerji aralığının açılması grafen yapıların ölçü, şekil, kenar ve elektron yoğunluğunun düzenlenmesiyle gün geçtikçe daha da mümkün olmaktadır. Böylece, grafen yapılarının elektronik, manyetik ve optik özellikleri kontrol edilebilir hale gelmektedir. Grafen nanoşeritler, bu nanoyapılar içinde özellikle spintronik alanında gelecek vadetmektedir. Bu potansiyelin gerçekleştirilmesi için istem dışı ya da kontrol amaçlı kullanılacak safsızlık atomlarının ve elektron etkileşimlerinden doğan manyetik durumların teorik olarak incelenip anlaşılması büyük bir önem taşımaktadır.

Bu projede grafen nanoşeritlerde elektron etkileşimlerinden doğan Wigner kristalleşmesinin ve rastgele dağılımlı uzun/kısa erimli safsızlık atomlarının manyetik fazlara olan etkilerini inceledik. Ayrıca, manyetik adatomlar arasında spin-spin korelasyonlarını Hirsch-Fye kuantum Monte Carlo tekniğini kullanarak araştırdık ve bu etkileşimleri yığın grafen ve RKKY sonuçlarıyla karşılaştırdık. Spesifik olarak:

- Wigner kristalleşmesinin oldukça yüksek sayılabilecek elektron yoğunluklarında ($3/5$ kenar doluluk oranında) oluşabildiğini konfigürasyon-etkileşim hesaplamalarıyla gösterdik.
- Zikzak kenar manyetizmasının Wigner lokalizasyonuna bağlı olarak salınımlara tabi olduğunu ve komşu elektronların ferromanyetik eşleşmeden antiferromanyetik eşleşmeye geçiş yaptığını gösterdik.
- Kenarlarası etkileşimlerden dolayı 2 nm'den düşük kalınlıklarda Wigner kristalleşmesinin baskılandığını, daha kalın nanoşeritlerde ise hem elektronların hem de deliklerin kristalleşebileceğini gösterdik.
- Uzun erimli safsızlıkların, güncel deneysel sonuçlarla uyumlu olarak, düzensizlik şiddeti arttıkça sistemin antiferromanyetik durumdan ferromanyetik duruma geçmesine neden olabileceğini gösterdik.
- Kısa erimli safsızlıkların ise antiferromanyetik fazın kararlılığını arttırdığını gösterdik.
- İki manyetik adatom arasındaki spin-spin korelasyonlarının altörgü tipine bağlı olarak, kenar durumları tarafından sönmülenebileceklerini ya da kuvvetlenebileceklerini gösterdik.

Grafen nanoşeritlerin özellikle manyetik özelliklerin kontrol edilebilirliğinin açısından sunduğu bu zenginlik, spintronik uygulamalar açısından büyük umut vadetmektedir.

KAYNAKLAR

- Akola J., Heiskanen H. P., and Manninen M. 2008, *Phys. Rev. B* **77**, 193410.
- Black-Schaffer A.M. 2010, *Phys. Rev. B* **81**, 205416.
- Brey L. and Fertig H. A. 2006, *Phys. Rev. B* **73**, 195408.
- Bulut N., Tanikawa K., Takahashi S., and Maekawa S. 2007, *Physical Review B* **76**, 045220.
- Bulut N., Tomoda Y., Tanikawa K., Takahashi S., and Maekawa S. 2008, *Advances in Nanoscale Magnetism, Springer Proceedings in Physics* **122**, 67.
- Çakmak KE, A Altıntaş, AD Güçlü 2018 “Effects of random atomic disorder on the magnetic stability of graphene nanoribbons with zigzag edges” arXiv preprint arXiv:1804.04645.
- Cai J. *et al* , 2010, *Nature* **466**, 470.
- Ceperley D. M. 1995, *Rev. of Mod. Phys.* **67**, 279.
- Chan K. T. *et al*. 2011. *Phys. Rev. B* **83**, 035405.
- Chuvilin *et al*, 2011, *Nat. Mater.* **10**, 687.
- Côté R., Jobidon J.-F., and Fertig H. A. 2008. *Phys. Rev. B* **78**, 085309.
- Dutta S. and Wakabayashi K. 2012, *Sci. Rep.* **2**, 519.
- Dutta S., Lakshmi S., and Pati S. K. 2008, *Phys. Rev. B* **77**, 073412.
- Ezawa M. 2007, *Phys. Rev. B* **76**, 245415.
- Ezawa M., *Phys. Rev. B* **73**, 045432 (2006).
- Fernandez-Rossier J., & Palacios J. J. 2007. *Phys. Rev. Lett.* **99**, 177204.
- Foulkes W. M. C., Mitas L., Needs R. J., and Rajagopal G. 2001, *Rev. of Mod. Phys.* **73**, 33.
- Ghosal A., Güçlü A. D., Umrigar C. J., Ullmo D., and Baranger H. U. 2006, *Nature Phys.* **2**, 336.
- Gosalbez-Martinez D., Palacios J. J., and Fernandez-Rossier J. 2011, *Phys. Rev. B* **83**, 115436.
- Güçlü A. D. ve Bulut N. 2015, “Spin-spin correlations of magnetic adatoms on graphene”, *Phys. Rev. B* **91**, 125403.
- Güçlü A. D., Ghosal A., Umrigar C. J., and Baranger H. U. 2008, *Phys. Rev. B Rapid Comm* **77**, 041301.
- Güçlü A. D., Grabowski M., and Hawrylak P., 2013 *Phys. Rev. B* **87**, 035435.
- Güçlü A. D., Potasz P., and Hawrylak P. 2010, *Phys. Rev. B* **82**, 155445.
- Güçlü A. D., Potasz P., Voznyy O., Korkusinski M., and Hawrylak P. 2009, *Phys Rev. Lett.* **103**, 246805.
- Güçlü A. D., Potasz P., Korkusinski M., and Hawrylak P. 2016, “Graphene Quantum Dots”, Springer.
- Güçlü A. D, 2016 “Wigner crystallization at graphene edges”, *Physical Review B* **93** (4), 045114.
- Guerrero Becerra K. A., Massimo Rontani, 2014 Wigner localization in a graphene quantum dot with a mass gap *Physical Rev. B* **90**, 125446.
- Guttinger J., Frey T., Stampfer C., Ihn T., and Ensslin K. 2010, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 116801.
- H. Feldner, Z. Y. Meng, T. C. Lang, F. F. Assaad, S. Wessel, and A. Honecker, 2011, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 226401
- Han M. Y., Ozyilmaz B., Zhang Y., and Kim P. 2007, *Phys. Rev. Lett* **98**, 206805.

- Hikihara T. , Hu X., Lin H.-H., Mou C.-Yu. 2003, *Phys. Rev. B* **68**, 035432.
- Hirsch J. E. and Fye R. M. 1986, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2521.
- Hu F.M. *et al.* 2011. *Phys. Rev. Lett.* **84**, 075414.
- Ihn T., Gustavsson S., Gasser U., Küng B., Müller T., Schleser R., Sigrist M., Shorubalko I., Leturcq R., and Ensslin K. 2009. *Solid St. Comm.* **149**, 1419, invited review.
- Ihnatsenka S. and Kirczenow G. 2011, *Phys. Rev. B* **83**, 245442.
- Jacob D. *et al.* 2010. *Phys. Rev. B* **82**, 085423.
- Jiao L., Zhang L., Wang X., Diankov G. & Dai H., 2009 *Nature* **458**, 877.
- Jung J. and MacDonald A. H. 2009, *Phys. Rev. B* **79**, 235433.
- Jung J. and MacDonald A. H. 2010, *Phys. Rev. B* **81**, 195408.
- Jürgen Wurm J., Adam Rycerz, Inanç Adagideli, Michael Wimmer, Klaus Richter, and Harold U. Baranger. 2009. *Phys. Rev. Lett.* **102**, 056806.
- Kane C. L. and Mele E. J. 2005, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 226801.
- Konschuh S., Gmitra M., and Fabian J. 2010, *Phys. Rev. B* **82**, 245412.
- Kravchenko S. V. and Sarachik M. P., *Rep. Prog. Phys.* **67**, 1.
- Leonardo C. Campos, Vitor R. Manfrinato, Javier D. Sanchez-Yamagishi, Jing Kong, and Pablo Jarillo-Herrero. 2009. *Nano Lett.* **9**, 2600.
- Libisch F., Stampfer C., & Burgdorfer J.. 2009. *Phys. Rev. B* **79**, 115423.
- Lieb E. H., 1989, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1201.
- Ma T., Liu S., Gao P., Huang Z. and Lin H.-Q. 2012. *J. Appl. Phys.* **112**, 073922.
- Magda G. Z. vb., 2014, *Nature* 514, 608.
- Modarresi M., Kandemir B.S., Roknabadia M.R., Shahtahmasebia N. 2014, *J. of Mag and Magnetic Mat*, 367, 81.
- Modarresi M., Güçlü A.D. 2017 “Effects of interedge scattering on the Wigner crystallization in graphene nanoribbons”, *Physical Review B* 95 (23), 235103.
- Munoz-Rojas F., Fernandez-Rossier J., and Palacios J. J. 2009, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 136810.
- Neto A. H. C., Guinea, Peres N. M. R., Novoselov K. S., and Geim A. K. 2009. *Rev. of Mod. Phys.* **81**, 109.
- Novoselov K. S. *et al.* 2004. *Science* **306**, 666.
- Özdemir HU, A Altıntaş, AD Güçlü, 2016 “Magnetic phases of graphene nanoribbons under potential fluctuations” *Physical Review B* 93 (1), 014415
- Ponomarenko L. A., Schedin F., Katsnelson M. I., Yang R., Hill E. W, Novoselov ., K. S., Geim A. K. 2008. *Science* **320**, 356.
- Potasz P., Güçlü A. D., Hawrylak P. 2010, *Phys. Rev. B* **81**, 033403.
- Rudenko A.N. *et al.* 2012. *Phys. Rev. B* **86**, 075422.
- Ruffieux P. vb., 2016 *Nature* 531, 489.
- Saffarzadeh A. *et al.* 2012. *Phys. Rev. B* **85**, 245429.
- Şahin H., Senger R.T., and Çıracı S. 2010, *J. Appl. Phys.* **108**, 074301.
- Saremi S. 2007. *Phys. Rev. B* **76**, 184430.
- Scott Bunch J., Yuval Yaish, Markus Brink, Kirill Bolotin, and McEuen Paul L. 2005. *Nano Lett.* **5**, 287.

- Sevinçli H. *et al.* 2008. *Phys. Rev. B* **77**,195434.
- Sherafati *et al.* 2011. *Phys. Rev. B* **83**, 165425.
- Son Y.-W., Cohen M. L. and Louie S. G. 2006, *Nature (London)* **444**, 347.
- Soriano D. and Fernandez-Rossier J. 2010, *Phys. Rev. B* **82**, 161302(R).
- Tanatar B. and Ceperley D. M. 1989. *Phys. Rev. B* **39**, 5005.
- Wallace P. R. 1947. *Phys. Rev.* **71**, 622.
- Wang W. L., Meng S., Kaxiras E. 2008, *Nano Lett.* **8**, 241.
- Wehling T.O. *et al.* 2010. *Phys. Rev. B* **81**, 115427.
- Wimmer M., Adagideli I., Berber S., Tomanek D., and Richter K. 2008, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 177207.
- Wunsch B., Stauber T., Guinea F. 2008. *Phys. Rev. B* **77**, 035316.
- Xiao R. *et al.* 2009. *Phys. Rev. Lett.* **103**, 187201.
- Yan X., Cui X., Li B., and L.-S. Li, *Nano Lett.* In press.
- Yang L., Cohen M. L., and Louie S.G. 2008, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 186401.
- Yao W., Yang S. A., and Niu Q. 2009, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 096801.
- Yao Y., Ye F., Qi X.-L., Zhang S.-C., and Fang Z. 2007, *Phys. Rev. B* **75**, 041401(R).
- Yazyev O. V. and Katsnelson M. I. 2008, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 047209.
- Zhang Z. Z., Kai Chang & Peeters F. M. 2008. *Phys. Rev. B* **77**, 235411.
- Zhou Y.G. *et al.* 2009. *Appl. Phys. Lett.* **95**, 123119.

TÜBİTAK
PROJE ÖZET BİLGİ FORMU

Proje Yürütücüsü:	Doç. Dr. ALEV DEVRİM GÜÇLÜ
Proje No:	114F331
Proje Başlığı:	Grafen Nanoşeritlerde Elektronik Korelasyon Etkileri
Proje Türü:	1001 - Araştırma
Proje Süresi:	36
Araştırmacılar:	
Danışmanlar:	
Projenin Yürütüldüğü Kuruluş ve Adresi:	İZMİR YÜKSEK TEKNOLOJİ ENS. FEN F. FİZİK B.
Projenin Başlangıç ve Bitiş Tarihleri:	15/04/2015 - 15/04/2018
Onaylanan Bütçe:	306000.0
Harcanan Bütçe:	245150.21
Öz:	<p>Bu projenin temel amacı grafen nanoşeritlerde elektron etkileşimleri ve farklı türde safsızlıkların sistemin elektronik ve manyetik özellikleri üzerine etkilerini araştırmaktır. Eşsiz manyetik özellikleri ve buna bağlı olarak spintronik alanında kullanıma potansiyelinden dolayı özellikle zikzak kenarlı nanoşeritler üzerine yoğunlaşmış, sayısal hesaplamalar ortalama alan ve çok-parçacık teknikleri kullanarak yüksek performanslı bilgisayarlar yardımıyla gerçekleştirilmiştir.</p> <p>Başlıca üç bölümden oluşan projenin ilk bölümde nanoşeritlerin zikzak kenarlarında elektron yoğunluğuna bağlı Wigner kristalleşmesini inceledik. İlk olarak izole bir zikzak kenar ele alıp, Wigner kristalleşmesinin oldukça yüksek sayılabilecek elektron yoğunluklarında (3/5 kenar doluluk oranında) oluşabildiğini konfigürasyon-etkileşim hesaplamalarıyla gösterdik. Nötr zikzak kenarlarda ferromanyetik bir durum olduğu bilinen bu yapılarda manyetizmasının da Wigner lokalizasyonuna bağlı olarak salınımlara tabi olduğunu ve komşu elektronların ferromanyetik eşleşmeden antiferromanyetik eşleşmeye geçiş yaptığını gösterdik. Ardından, şerit kalınlığına bağlı olarak, zıt kenarlarası etkileşimlerden dolayı 2 nm'den düşük kalınlıklarda Wigner kristalleşmesinin baskılandığını, daha kalın nanoşeritlerde ise hem elektronların hem de deliklerin kristalleşebileceğini gösterdik.</p> <p>İkinci bölümde, rastgele dağılımlı uzun ve kısa erimli safsızlıkların zikzak kenarların manyetik fazlarına olan etkilerini inceledik. Uzun erimli safsızlıkların, güncel deneysel sonuçlarla uyumlu olarak, düzensizlik şiddeti arttıkça sistemin antiferromanyetik durumdan ferromanyetik duruma geçmesine neden olabileceğini gösterdik. Buna karşın, kısa erimli safsızlıkların ise antiferromanyetik fazın kararlılığını arttırdığını gözlemledik.</p> <p>Projenin son bölümünde ise iki manyetik atom arasındaki spin-spin korelasyonlarının nanoşeritteki konumlarına göre nasıl değiştiğini Hirsch-Fye kuantum Monte Carlo tekniğini kullanarak araştırdık. Altörgü tipi, ve kenar durumlarına uzaklıklarının etkilerinin önemli olduğunu ve genel olarak spin alınganlıklarının kenar durumları tarafından sönümlendirildiklerini gördük. Fakat eğer safsızlıklar kenar atomlarıyla aynı altörgüde bulunuyorlarsa, spin alınganlıklarının kuvvetlenebileceğini de gösterdik.</p>
Anahtar Kelimeler:	İki boyutlu malzemeler, Grafen, Grafen nanoyapılar, Elektronik ve manyetik özellikler.
Fikri Ürün Bildirim Formu Sunuldu Mu?:	Hayır
Projeden Yapılan Yayınlar:	1- Wigner crystallization at graphene edges (Makale - Diğer Hakemli Makale), 2- Magnetic phases of graphene nanoribbons under potential fluctuations (Makale - Diğer Hakemli Makale), 3- Effects of interedge scattering on the Wigner crystallization in graphene nanoribbons (Makale - İndeksli Makale), 4- Zikzak grafen kenarlarda Wigner kristalleşmesi (Bildiri - Ulusal Konferans - Davetli Konuşmacı),