



Grafende Elektron-Akustik Fonon Etkileşmesi

Aybey MOĞULKOÇ*

Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü 06100 Tandoğan Ankara, TÜRKİYE

Received: 29.07.2013; Accepted: 27.08.2013

Özet. Bu çalışmada, elektronların akustik fononlar ile etkileşmesinden kaynaklanan kiral polaron oluşumu incelenmiştir. Elektron-fonon sistemlerinin taban durumunu hesaplayabilmek için Lee-Low-Pines teorisi çerçevesinde analitik bir metot geliştirilmiştir. Grafenin dejenere band yapısının kiral polaron oluşumunu desteklediği tespit edilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Grafen, elektron, akustik fonon, akustik, kiral polaron.

Electron-Acoustic Phonon Interaction in Graphene

Abstract. In this study, chiral polaron formation due to interactions of the electrons with acoustic phonon was investigated. In order to calculate ground states of the electron-phonon systems, an analytical method was developed within the frame of Lee-Low-Pines theory. It was identified that degenerate band structure supports the chiral polaron formation.

Keywords: Graphene, electron, acoustic phonon, chiral polaron.

1. GİRİŞ

Grafenin sentezlenmesiyle[1,2] birlikte elektron-fonon etkileşmesi üzerine birçok çalışma gerçekleştirilmiştir [3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11,12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20,21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28,29]. Γ noktası civarındaki iki katlı dejenere optik fononlar (E_{2g}) ile elektronların etkileşmesi Dirac noktalarında bir enerji aralığı oluşturmadığı bilinmekle birlikte [6,30],bu etkileşmenin vadiler arası – bandlar arası ve vadiler arası – band içi saçılmaları mümkün kıldığı gözlenmiştir [31]. Elektron- E_{2g} fononunun etkileşmesi sonucu kiral polaron oluşumu tespit edilmiş ve Fermi hızının renormalize olduğu gözlenmiştir [29]. Grafenin düzlem içi modları dikkate alındığında K ve K' noktalarında elektron-fonon etkileşmesine katkının ise en yüksek frekanslı A_{1g} fononundan geldiği bilinmektedir [26]. Bu etkileşme terimi Dirac noktalarında grafenin alt örgü simetrisi olan kiral simetriyi kırmadan bir aralık oluşturduğu gösterilmiştir [26]. Γ noktası civarında lineer davranan iki akustik fonon modunun katkılarında da bakmak mümkündür. Akustik fononlar optik olanlara göre daha düşük enerjiye sahip olmakla birlikte optik fononlar ile benzer etkiler gösterirler.

Bu çalışmada Γ noktası civarındaki akustik fononlar ile elektronların etkileşmesi analitik olarak incelenmiştir. Bu etkileşme teriminin grafenin enerji spektrumunu nasıl etkilediği tartışılmıştır.

* Corresponding author. *Email address:* mogulkoc@science.ankara.edu.tr

2. TEORİ

Sınır merkez akustik fononların K ve K' noktalarındaki etkileşme Hamiltonyeni

$$\begin{aligned}
 H_{e-p}^K &= -\frac{3\kappa\beta}{b^2}\gamma_0 \begin{bmatrix} 0 & u_{xx}(\vec{r}) - u_{yy}(\vec{r}) + 2iu_{xy}(\vec{r}) \\ u_{xx}(\vec{r}) - u_{yy}(\vec{r}) - i2u_{xy}(\vec{r}) & 0 \end{bmatrix}, \\
 H_{e-p}^{K'} &= -\frac{3\kappa\beta}{b^2}\gamma_0 \begin{bmatrix} 0 & -u_{xx}(\vec{r}) + u_{yy}(\vec{r}) + i2u_{xy}(\vec{r}) \\ -u_{xx}(\vec{r}) + u_{yy}(\vec{r}) - 2iu_{xy}(\vec{r}) & 0 \end{bmatrix}
 \end{aligned} \quad (1)$$

olarak elde edilir [32]. Burada, γ_0 en yakın komşuluk transfer (rezonans) integrali ki 2.77 eV mertebesinde, $\beta = -d \ln \gamma_0 / d \ln a$ $b = |\vec{\tau}_l| = a / \sqrt{3}$ ilkel öteleme vektörünün büyüklüğü, $a = 2.46 \text{ nm}$ ise örgü parametresidir. Değerlik-Kuvvet Alanı metodu için $\kappa \sim 1/3$ civarındadır [33]. (1) denklemindeki matris elemanları, yer değiştirme vektörü ve kutuplanma vektörleri

$$\begin{aligned}
 u_{xx} &= \frac{\partial u_x}{\partial y}, \quad u_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y}, \quad 2u_{xy} = \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \\
 \vec{u}_\mu(\vec{r}) &= \sum_{\vec{q}} \left[\frac{\hbar}{2NM_C \omega_\mu(q)} \right]^{1/2} (\vec{b}_{\vec{q}\mu} + \vec{b}_{\vec{q}\mu}^\dagger) \varepsilon_\mu(\vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \\
 \varepsilon_{LA}(\vec{q}) &= i [\cos \phi(\vec{q}), \sin \phi(\vec{q})] = \frac{i}{q} (q_x, q_y) \\
 \varepsilon_{TA}(\vec{q}) &= i [-\sin \phi(\vec{q}), \cos \phi(\vec{q})] = \frac{i}{q} (-q_y, q_x), \quad q = |\vec{q}|
 \end{aligned} \quad (2)$$

ile verilir. Burada $\mu = 1$ ve 2 sırası ile boyuna akustik (LA) ve enine akustik (TA) fononlarını etiketler. Bu durumda, toplam Hamiltonyeni

$$H = H_0 + \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_\mu(\vec{q}) \vec{b}_{\vec{q}\mu}^\dagger \vec{b}_{\vec{q}\mu} + H_{e-p}^K \quad (3)$$

olarak yazılabilir. burada, $H_0 = v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{p}$ özdeğerleri $\varepsilon_{ks} = s \hbar v_F k$ ($s = \pm 1$, kiralite indisi) olan pertürbe olmamış serbest durum Hamiltonyenidir. Bu Hamiltonyene ait serbest durum özketlerinin

$$\langle \vec{r} | \vec{k}s \rangle = \frac{1}{\sqrt{2L}} \left[\begin{matrix} s \\ e^{i\theta(\vec{k})} \end{matrix} \right] e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (4)$$

oldukları kolayca gösterilebilir. (3) denklemindeki etkileşme Hamiltonyenini

Grafende Elektron-Akustik Fonon Etkileşmesi

$$H_{e-p}^K = \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \left[\tilde{M}_{\mu}^K(\vec{q}) \vec{b}_{\vec{q}\mu} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} + H.C. \right] \quad (5)$$

olarak kompak bir biçimde yazmak mümkündür. Burada, $\tilde{M}_{\mu}^K(\vec{q})$, etkileşmeye ait momentum bağımlı matris elemanıdır ve $\tilde{M}_{\mu}^K(\vec{q}) = \bar{M}_{\mu}^K(\vec{q}) M_{\mu}(\vec{q})$ şeklindedir. Matris elemanı,

$$M_{\mu}(\vec{q}) = \begin{bmatrix} 0 & M_{BA}(\bar{q}_x + i\bar{q}_y) e^{i\phi(\vec{q})} \\ M_{AB}(\bar{q}_x - i\bar{q}_y) e^{i\phi(\vec{q})} & 0 \end{bmatrix} \quad (6)$$

olarak ifade edilir. Burada $\bar{q} = qa_{c-c}$ ile verilirken, LA (TA) fonon modları için $M_{AB} = +1(-i)$ ve $M_{BA} = +1(+i)$ şeklindedir. $\bar{M}_{\mu}^K(\vec{q}) = \alpha_{\mu} / \sqrt{N\bar{q}}$ olarak tanımlanır iken, $\alpha_{\mu} = \kappa a_{\mu} q_0 J_0 / 2\sqrt{3}$, $a_{\mu} = (\hbar / 2M_C \bar{\omega}_{\mu})^{1/2}$ ve $\omega_{\mu} = \bar{\omega}_{\mu} \bar{q}^2$ şeklindedir. (3) denklemini çözebilmek için Lee-Low-Pines (LLP) metoduna [34] dayanan bir köşegenleştirme süreci dikkate alınmıştır [29]. LLP metodu toplam Hamiltonyene iki üniter dönüşümün uygulandığı bir köşegenleştirme prosedürü olarak bilinir. Bu dönüşümlerden biri, toplam sistemin momentumunun hareket sabiti olduğu gerçeğine dayanan ve elektron koordinatlarını yok eden bir karaktere sahiptir. İkinci üniter dönüşüm ise yer değiştirmiş – salıncı dönüşümü (Displaced – Oscillator Transformation) olarak da bilinmekle beraber fonon koordinatları üzerine etkiyen ve fonon operatörlerini bilineer forma dönüştüren bir süreçtir. Grafen $k=0$ noktasında elektron-deşik dejenereliğine sahiptir. Bu nedenle, grafenin aralıksız band yapısına uygun olarak kiralpolaronun taban durumu vektörü için

$$|\phi\rangle_{pol}^s = \sum_{\lambda'} \alpha_s^{s'} |s' \vec{k}\rangle \otimes U_1 U_2^{ss'} |0\rangle_{ph} \quad (7)$$

şeklinde bir önermede bulunulur [29] ve bu durum $H|\Phi\rangle_{pol}^s = E_{\lambda} |\Phi\rangle_{pol}^s$ şeklinde bir özdeğer denklemini sağlar. (7) ifadesinde $|0\rangle_{ph}$ vakum durumuna karşılık gelir. Polaronik dalga fonksiyonu $|+\vec{k}\rangle$ ve $|-\vec{k}\rangle$ durumlarının lineer kombinasyonu olması nedeniyle, $\alpha_s^{s'} |s' \vec{k}\rangle$, $\alpha_s^{s'}$ uygun kesirli genliği ile tanımlanan elektronik durum vektörüne karşılık gelir. Diğer bir ifadeyle, $|\pm \vec{k}\rangle$ serbest durumlara karşılık gelirken, $|\phi\rangle_{pol}^{\pm}$ elektron-fonon etkileşmesinden kaynaklanan pertürbe durumlara karşılık gelir. Elektron koordinatlarını ortadan kaldıran ilk üniter dönüşüm

$$U_1 = \exp \left[-i\vec{r} \cdot \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \vec{q} \vec{b}_{\vec{q}\mu}^{\dagger} \vec{b}_{\vec{q}\mu} \right] \quad (8)$$

şeklinde tanımlanır. Üniter dönüşüm altında fonon yaratıcı (yok edici) ve momentum operatörünün dönüşmüş biçimleri sırasıyla, $\tilde{b}_{\vec{q}\mu} = b_{\vec{q}\mu} \exp[-i\vec{q} \cdot \vec{r}]$ ($\tilde{b}_{\vec{q}\mu}^{\dagger} = b_{\vec{q}\mu}^{\dagger} \exp[i\vec{q} \cdot \vec{r}]$) ve $\tilde{\vec{p}} = \vec{p} - \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \hbar \vec{q} \vec{b}_{\vec{q}\mu}^{\dagger} \vec{b}_{\vec{q}\mu}$ olarak verilir. İlk üniter dönüşüm sonucunda (3) denklemi,

$$\tilde{H} = v_F \vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \hbar \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \vec{q} \vec{b}_{\vec{q}\mu}^{\dagger} \vec{b}_{\vec{q}\mu} \right) + \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{\mu}(\vec{q}) \vec{b}_{\vec{q}\mu}^{\dagger} \vec{b}_{\vec{q}\mu} - \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \left[\tilde{M}_{\mu}^K(\vec{q}) \vec{b}_{\vec{q}\mu} + H.C. \right] \quad (9)$$

olarak dönüşür. (9) denklemi fonon koordinatlarınca hâlen köşegen değildir. Bunun için ikinci bir üniter dönüşüm önerilir. İkinci üniter LLP dönüşümü

$$U_2^{ss'} = \exp \left\{ \sum_{\vec{q}} \left[\tilde{M}_{0\mu}^*(\vec{q}) \langle s' \vec{k} | M_{\mu}^{\dagger}(\vec{q}) | s \vec{k} \rangle \vec{b}_{\vec{q}\mu}^{\dagger} - H.C. \right] \right\} \quad (10)$$

olarak ifade edilir ve yer değiştirmiş-salınıcı dönüşümü olarak bilinir. Genlik $\tilde{M}_{0\mu}(\vec{q}) = \tilde{M}_{0\mu}^K(\vec{q}) / \hbar \omega_{\mu}(\vec{q})$ şeklinde ifade edilirken, yaratıcı (yok edici) operatörler $\tilde{b}_{\vec{q}\mu} = b_{\vec{q}\mu} + \tilde{M}_{0\mu}^*(\vec{q}) \langle s' \vec{k} | M_{\mu}^{\dagger}(\vec{q}) | s \vec{k} \rangle$ ($\tilde{b}_{\vec{q}\mu}^{\dagger} = b_{\vec{q}\mu}^{\dagger} + \tilde{M}_{0\mu}(\vec{q}) \langle s' \vec{k} | M_{\mu}(\vec{q}) | s \vec{k} \rangle$) olarak dönüşürler. Sonuç olarak, $U_2^{\lambda\lambda'}$ dönüşümü altında Hamiltonyen $\tilde{H} = H^0 + H_1$ olarak dönüşür.

Burada H^0 ve H_1 , sırasıyla

$$\begin{aligned} H^0 = v_F \vec{\sigma} \cdot & \left[\vec{p} - \hbar \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \vec{q} |\tilde{M}_{0\mu}(\vec{q})|^2 \left| \langle s' \vec{k} | M_{\mu}^{\dagger}(\vec{q}) | s \vec{k} \rangle \right|^2 \right] \\ & + \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{\mu}(\vec{q}) |\tilde{M}_{0\mu}(\vec{q})|^2 \left| \langle s' \vec{k} | M_{\mu}^{\dagger}(\vec{q}) | s \vec{k} \rangle \right|^2 \\ & - \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \left[\tilde{M}_{\mu}^K(\vec{q}) \tilde{M}_{0\mu}^*(\vec{q}) \langle s' \vec{k} | M_{\mu}^{\dagger}(\vec{q}) | s \vec{k} \rangle + H.C. \right] \\ & + \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \left[\hbar \omega_{\mu}(\vec{q}) - \hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{q} \right] \vec{b}_{\vec{q}\mu}^{\dagger} \vec{b}_{\vec{q}\mu} \end{aligned} \quad (11)$$

ve

$$H_1 = \sum_{\mu} \sum_{\vec{q}} \left[\tilde{M}_{\mu}^K(\vec{q}) + \left[\hbar \omega_{\mu}(\vec{q}) - \hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{q} \right] \tilde{M}_{0\mu}(\vec{q}) \langle s' \vec{k} | M_{\mu}(\vec{q}) | s \vec{k} \rangle \vec{b}_{\vec{q}\mu} + H.C. \right] \quad (12)$$

ile verilir. (11) ve (12) ifadelerine fonon vakum durumları uygulandığında katkı H^0 ifadesinin köşegen kısmından gelir. Bu durumda etkin Hamiltonyen

$$\begin{aligned} \bar{H} = v_F \bar{\sigma} \cdot & \left[\bar{p} - \hbar \sum_{\mu} \sum_{\bar{q}} \bar{q} |\bar{M}_{0\mu}(\bar{q})|^2 \left| \langle s' \bar{k} | M_{\mu}^{\dagger}(\bar{q}) | s \bar{k} \rangle \right|^2 \right] \\ & + \sum_{\mu} \sum_{\bar{q}} \hbar \omega_{\mu}(\bar{q}) |\bar{M}_{0\mu}(\bar{q})|^2 \left| \langle s' \bar{k} | M_{\mu}^{\dagger}(\bar{q}) | s \bar{k} \rangle \right|^2 \\ & - \sum_{\mu} \sum_{\bar{q}} \left[M_{\mu}(\bar{q}) |\bar{M}_{0\mu}(\bar{q})|^2 \left| \langle s' \bar{k} | M_{\mu}^{\dagger}(\bar{q}) | s \bar{k} \rangle \right|^2 + H.C. \right] \end{aligned} \quad (13)$$

olarak ifade edilir. İç çarpımlar yapılırsa α_{\pm}^+ ve α_{\pm}^- katsayıları için iki denkleme ulaşılır. Bu denklemler matris formunda

$$\begin{bmatrix} E_{\pm} - \hbar v_F k + \hbar v_F \Sigma_{++}(\bar{k}) + \Sigma_{++}^0(\bar{k}) & \hbar v_F \Sigma_{+-}(\bar{k}) + 2\Sigma_{+-}^0(\bar{k}) \\ \hbar v_F \Sigma_{-+}(\bar{k}) + 2\Sigma_{-+}^0(\bar{k}) & E_{\pm} + \hbar v_F k + \hbar v_F \Sigma_{--}(\bar{k}) + \Sigma_{--}^0(\bar{k}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{\pm}^+ \\ \alpha_{\pm}^- \end{bmatrix} = 0 \quad (14)$$

olarak yazılır. İlgili matris elemanları ise

$$\begin{aligned} \left. \begin{array}{l} \Sigma_{++}(\bar{k}) \\ \Sigma_{+-}(\bar{k}) \end{array} \right\} &= \frac{1}{2} \sum_{\mu} \sum_{\bar{q}} |\bar{M}_{0\mu}(\bar{q})|^2 \left\{ \bar{q}^2 \pm s_{\mu} \left[(\bar{q}_x^2 - \bar{q}_y^2) \cos 2(\theta + \phi) - 2\bar{q}_x \bar{q}_y \sin 2(\theta + \phi) \right] \right\} \\ & \times \begin{cases} \bar{q} \cos(\theta - \phi) \\ i\bar{q} \sin(\theta - \phi) \end{cases}, \quad (15) \\ \Sigma_{ss'}^0(\bar{k}) &= \frac{1}{2} \sum_{\mu} \sum_{\bar{q}} |\bar{M}_{0\mu}(\bar{q})|^2 \hbar \omega_{\mu}(\bar{q}) \\ & \times \left\{ \bar{q}^2 \pm s_{\mu} s s' \left[(\bar{q}_x^2 - \bar{q}_y^2) \cos 2(\theta + \phi) - 2\bar{q}_x \bar{q}_y \sin 2(\theta + \phi) \right] \right\} \end{aligned}$$

olarak bulunur. Burada, $\Sigma_{--} = -\Sigma_{++}$ ve $\Sigma_{-+} = \Sigma_{+-}^*$ şeklindedir ve $\theta(\phi)$, $\bar{k}(\bar{q})$ momentumlarına ait azimutal açılarıdır. s_{μ} ise boyuna (enine) modlar için +1 (-1) değer alır. (15) ifadesindeki toplamı integrale $\left(\sum_{\bar{q}} \rightarrow (S/4\pi^2) \int d^2\bar{q} \right)$ dönüştürülürse, q integralinden dolayı $\Sigma_{ss'}(\bar{k})$ terimlerinin katkısı olmazken, $\Sigma_{ss'}^0(\bar{k})$ terimleri katkı verir. Burada $S=L^2=N\Omega_0$ sistemin alanı olmakla birlikte, $\Omega_0=3\sqrt{3}a^2/2$ birim hücrenin alanıdır. α_{\pm}^+ ve α_{\pm}^- katsayılarının aşikâr (trivial) olmayan çözümünü bulmak için (14) denklemindeki katsayılar determinantı sıfıra eşitlenir ve ikinci dereceden bir denkleme ulaşılır. Bu denklem analitik olarak çözüldüğünde enerji özdeğeri, k 'nin fonksiyonu olarak

$$E_{\pm} = \pm \left\{ (\hbar v_F k)^2 + 4 \left[\Sigma_{\pm\mp}^0(\vec{k}) \right]^2 \right\}^{1/2} - \left| \Sigma_{\pm\pm}^0(\vec{k}) \right| \quad (16)$$

şeklinde elde edilir. (16) denklemindeki integraller alınırken üst sınırın getirdiği ıraksaklıklardan kurtulabilmek için değeri $2k$ ($q \in [0, 2k]$) olan bir üst kesilim (cut-off) frekansı tanımlanır ve böylece integral sonlu olur. Sonuç olarak, k -bağımlı katkı

$$\Sigma_{\lambda\lambda}^0(\vec{k}) = \frac{3\sqrt{3}}{4\pi} \bar{k}_0^2 \sum_{\mu} \frac{\alpha_{\mu}^2}{\Xi_{\mu}} \quad (17)$$

olarak gelir. Burada $\Xi_{\mu} = \hbar \bar{\omega}_{\mu} = \hbar v_{\mu} / a$ olarak tanımlanırken, v_{μ} farklı modlara ait ses hızıdır. Boyuna akustik fononlar için $v_{LA} = 24300$ m/sn iken, enine akustik fononlar için $v_{TA} = 13950$ m/s'dir [35]. (16) denklemi boyutsuzlandırılarak

$$\bar{E}_{\pm} = \pm \bar{k}_0 \left\{ 1 + 4 \left[\frac{1}{72\pi\sqrt{3}} \alpha_{\mu}(0) \bar{k}_0 \right]^2 \right\}^{1/2} - \frac{1}{72\pi\sqrt{3}} \alpha_{\mu}(0) \bar{k}_0^2 \quad (18)$$

şeklinde yazılır. Burada, $\alpha_{\mu}(0) = q_0^2 J_0 \sum_{\mu} a_{\mu}^2 / \Xi_{\mu}$ ile verilir. Boyutsuz enerji

$\bar{E}_{\pm} = a_{c-c} E_{\pm} / \hbar v_F$ olarak tanımlanırken, $\alpha_{\mu}(0)$ ifadesi $q_0 = 2(2.5) \text{ \AA}^{-1}$ seçimine bağlı olarak enine modlar için 0.84 (1.31), boyuna modlar içinse 0.28 (0.44) olarak bulunur. Etkileşme Hamiltonyenine ait öz değerden serbest elektron enerjisini çıkartmak suretiyle polaron öz-enerjisine ulaşılır. Öz-enerjinin negatif çıkması grafende kararlı polaron oluşumunun varlığı için önemli bir kıstastır. Şekil 1'de akustik fonon-elektron etkileşmesinin yol açtığı polaron taban durumu enerjisi gösterilmektedir. Şekilden görüldüğü üzere polaron öz-enerjisi artan \bar{k}_0 değerleri ile artmaktadır. Γ noktası civarındaki akustik fononların enerjisi optik fononlara göre daha düşüktür, bu nedenle akustik fononlar için polaron enerjisinin mertebesi optik fononlara [29] göre farklılık gösterir. Bununla birlikte, Kuantum Renk Dinamiğinde (QCD) olduğu gibi [36] değişen (running) çiftlenim sabiti de tanımlamak mümkündür. k 'nın fonksiyonu olarak değişen çiftlenim sabiti

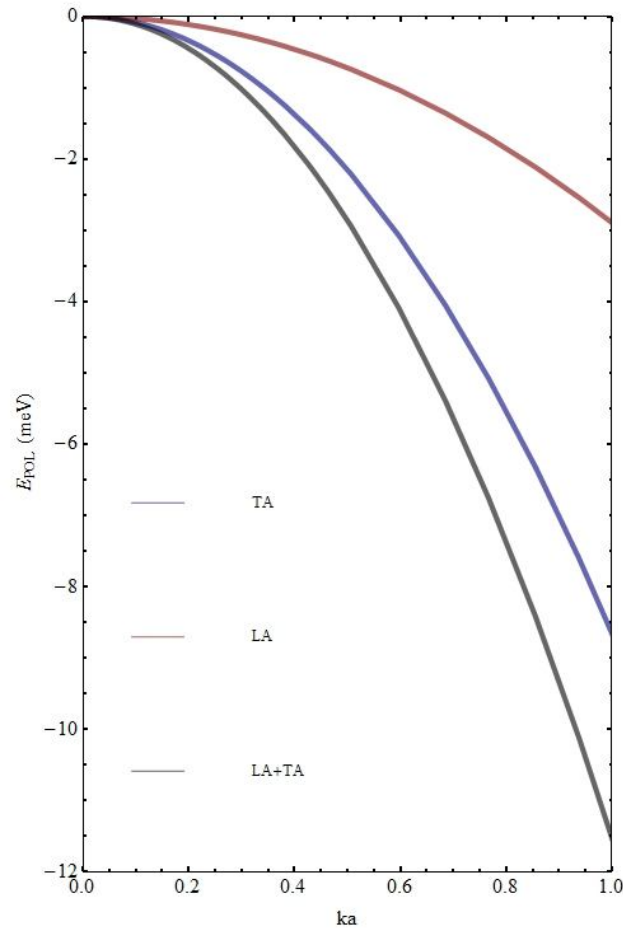
$$\tilde{\alpha}(\bar{k}_0) = \frac{1}{72\pi\sqrt{3}} \alpha_{\mu}(0) \bar{k}_0 \quad (19)$$

şeklinde tanımlamak mümkündür. Elektron-fonon çiftlenimi Dirac noktaları civarında Fermi hızını da renormalize eder. Renormalize Fermi hızı

Grafende Elektron-Akustik Fonon Etkileşmesi

$$\tilde{v}_F(\bar{k}_0) = v_F \left[\sqrt{1 + 4\tilde{\alpha}^2(\bar{k}_0)} \mp \tilde{\alpha}(\bar{k}_0) \right] \quad (20)$$

olarak elde edilir. Fermi hızının değişim yüzdesini $[\tilde{v}_F(\bar{k}_0) - v_F] / \tilde{v}_F(\bar{k}_0)$ ifadesinde hesap etmek mümkündür. Akustik fononların etkisini dikkate aldığımızda TA (LA) modu için grafenin etkin band hızı v_F , $\bar{k}_0 = 0.05$ ve $\bar{k}_0 = 0.1$ için enerjiye bağlı olarak sırasıyla, % 0.01 (0.004) - % 0.2 (0.07) oranında azalır. Fermi hızındaki bu değişimin mertebesi yukarıda bahsedildiği üzere akustik fononların Γ noktası civarındaki enerjileriyle alakalıdır.



Şekil 1. Polaron taban durumu enerjisi

3. SONUÇLAR

Sonuç olarak, bu çalışma Γ noktası civarındaki akustik fononlar ile elektronların etkileşmesinin grafenin enerji spektrumuna olan katkısının araştırıldığı ilk teorik çalışma niteliği taşır. Daha önce benzer bir yaklaşım kullanılarak hesaplanan elektron- E_{2g} fonon etkileşmesinin getirdiği katkılara [29] kıyasla hem polaron öz-enerjisi hem de renormalize Fermi enerjisi daha düşük elde edilmiştir.

İzlenen yöntemin getirdiği bazı limit durumlar da söz konusudur. Kullanılan hesap tekniği sürekli (continuum) bir yaklaşım olması nedeniyle grafen için 1 eV civarında ve altında geçerlidir. Daha yüksek enerjiler daha yüksek k dalga vektörlerini gerektirir ve bu durumda grafenin band yapısı konik yapıdan biraz uzaklaşır. Daha yüksek k vektörlerini de içerecek şekilde genişletilen hesap tekniğinde üçgensel eğrilik (trigonalwarp) etkisi de göz önünde bulundurulmalıdır. Diğer bir limit durum ise, bu çalışmada elektron enerji aralığı için fonon rezonansı ($0 < E < \hbar\omega_{\Gamma}(0)$) civarı dikkate alınmıştır. Bu eşiğin üzerindeki ($E > \hbar\omega_{\Gamma}(0)$), durumları inceleyebilmek için farklı yaklaşımlar dikkate alınmalıdır.

KAYNAKLAR

- [1]Novoselov, K.S., Geim, A.K., Morozov, S.V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S.V., Grigorieva, I.V. and Firsov, A.A., 2004. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films, Science, 306, 666.
- [2] Novoselov, K.S., Jiang, D., Schedin, F., Booth, T.J., Khotkevich, V.V., Morozov, SV., and Geim, A.K., 2005. Two-dimensional atomic crystals, Proc. Nat. Acad. Sci. USA, 102, 10451.
- [3] Lazzeri, M., Piscanec, S., Mauri, F., Ferrari, A.C., and Robertson, J., 2005. Electron Transport and Hot Phonons in Carbon Nanotubes, Physical Review Letters, 95, 236802.
- [4] Lazzeri, M., Attacalite, C.,Wirtz, L., and Mauri, F., 2008. Impact of the electron-electron correlation on phonon dispersion: Failure of LDA and GGA DFT functionals in graphene andgraphite, Physica IReview B ,78 081406, (R).
- [5] Lazzeri, M., Piscanec, S., Mauri, F., Ferrari, A.C., and Robertson, J., 2006. Phonon line widths and electron-phonon coupling in graphite and nanotubes, Physical Review B, 73, 155426.
- [6] Pisana, S., Lazzeri, M., Casiragh, I.C., Novoselov, K.S., Geim, A.K., Ferrari, A.C. and Mauri, F., 2007. Breakdown of the adiabatic Born-Oppenheimer approximation in graphene, Nature Materials, 3, 198.
- [7] Park, C-H., Giustino, F.,Cohen, Marvin, L., and Louie, S.G., 2007. Velocity Renormalization and Carrier Lifetime in Graphene from the Electron-Phonon Interaction, Physical Review Letters, 99, 086804.

- [8] Yan, J., Zhang, Y., Kim, P., and Pinczuk, A., 2007. Electric Field Effect Tuning of Electron-Phonon Coupling in Graphene, *Physical Review Letters*, 98, 166802.
- [9] Calandra, M. and Mauri, F., 2007. Electron-phonon coupling and electron self-energy in electron-doped graphene: Calculation of angular-resolved photoemission spectra, *Physical Review B*, 76, 205411.
- [10] Basko, D.M., 2007a. Theory of resonant multiphonon Raman scattering in graphene, *Physical Review B*, 78, 125418.
- [11] Basko, D. M., 2007b. Effect of inelastic collisions on multiphonon Raman scattering in graphene, *Physical Review B*, 76, 081405, (R).
- [12] Goerbig, M.O., Fuchs J.-N., Kechedzhi K. and Fal'ko V.I., 2007. Filling-Factor-Dependent Magneto phonon Resonance in Graphene, *Physical Review Letters*, 99, 087402.
- [13] Samsonidze, G.G., Barros E.B., Saito, R., Jiang, J., Dresselhaus, G., and Dresselhaus, M. S., 2007. Electron-phonon coupling mechanism in two-dimensional graphite and single-wall carbon nanotubes, *Physical Review B*, 75, 155420.
- [14] Stauber, T., and Peres, N.M.R., 2008. Effect of Holstein phonons on the electronic properties of graphene, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 20, 055002.
- [15] Stauber, T., Peres, N.M.R., and Castro Neto, A.H. 2008. Conductivity of suspended and non-suspended graphene at finite gate voltage. *Physical Review B* 78, (085418).
- [16] Basko, D.M. and Aleiner, I.L., 2008. Interplay of Coulomb and electron-phonon interactions in graphene, *Physical Review B*, 77, 041409, (R).
- [17] Mariani, E. and Oppen, Felix von., 2010. Temperature-dependent resistivity of suspended graphene, *Physical Review B*, 82, 195403.
- [18] Mariani, E. and Oppen, Felix von., 2008. Flexural Phonons in Free-Standing Graphene, *Physical Review Letters*, 100, 076801.
- [19] Faugeras, C., Amado, M., Kossacki, P., Orlita, M., Sprinkle, M., Berger, C., de Heer W.A., and Potemski, M., 2009. Tuning the Electron-Phonon Coupling in Multilayer Graphene with Magnetic Fields, *Physical Review Letters*, 103, 186803.
- [20] Stojanović, V.M., Vukmirović, N., Bruder, C., 2010. Polaronic signatures and spectral properties of graphene antidot lattices, *Physical Review B*, 82, 165410.
- [21] Carbotte, J.P., Nicol, E.J. and Sharapov S.G., 2010. Effect of electron-phonon interaction on spectroscopies in graphene, *Physical Review B*, 81, 04541.
- [22] Hwang, E.H., Sarmar, R. and Das Sarma S., 2010. Plasmon-phonon coupling in graphene, *Physical Review B*, 82, 195406.
- [23] Li, W-P., Wang, Z-W., Yin, J-W. and Yu, Y-F.J., 2012. The effects of the magneto polaron on the energy gap opening in graphene, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 24, 135301.
- [24] Araujo, P.T., Mafra, D.L., Sato, K., Saito, R., Kong, J. and Dresselhaus, M. S., 2012. Phonon self-energy corrections to non-zero wave vector phonon modes in single-layer graphene, *Physical Review Letters*, 109, 046801.

- [25] Badalyan, S.M. and Peeters, F.M., 2012. Electron-phonon bound state in graphene, *Physical Review B*, 85, 205453.
- [26] Kandemir, B.S. and Mogulkoc, A., 2012. Zone Boundary Phonon Induced Mini Band Gap Formation in Graphene, arXiv:1211.3528.
- [27] Krastajić, P.M. and Peeters, F.M., 2012. Energy-momentum dispersion relation of plasmarons in graphene, *Physical Review B*, 85, 205454.
- [28] Zhu, J., Badalyan, S.M. and Peeters, F.M., 2012. Electron-Phonon Bound States in Graphene in a Perpendicular Magnetic Field, *Physical Review Letters* 109, 256602.
- [29] Kandemir, B.S., 2013. Chiral Polaron Formation in Graphene. *Journal of Physics.:Condensed Matter* 25, 025302.
- [30] Dubay, O. and Kresse, G., 2003. Accurate density functional calculations for the phonon dispersion relations of graphite layer and carbon nanotubes, *Physical Review B*, 67, 035401.
- [31] Rana, F., George P.,A., Strait J.,H., Jahan,D., Shriram, S., Chandrashekhar, Mvs. and Spencer, M.G. 2009. Carrier recombination and generation rates for intravalley and intervalley phonon scattering in graphene, *Physical Review B*, 79, 115447.
- [32] Suzuura, H. and Ando, T., 2002. Phonons and electron-phonon scattering in carbon nanotubes, *Physical Review B*, 65, 235412.
- [33] Harrison, W.A., 1980. *Electronic Structure and the Properties of Solids*. W.H. Freeman and Company, 586 p. San Francisco.
- [34] Lee, T.D., Low, F.E. and Pines, D., 1953. The Motion of Slow Electrons in a Polar Crystal, *Physical Review* 90, 297.
- [35] Kandemir, B.S. and Altanhan, T., 2008. Analytical approach to phonons and electron-phonon interactions in single-walled arm chair carbon nanotubes, *Physical Review B*, 77, 045426.
- [36] Griffiths, D., 1987. *Introduction to Elementary Particles*, Wiley. 249 p. Singapore.