

ANKARA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

ÜÇ BOYUTLU TOPOLOJİK YALITKANLARIN YÜZEY
DURUMLARI

Sevim ALKAN

FİZİK ANABİLİM DALI

ANKARA
2021

Her hakkı saklıdır

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

ÜÇ BOYUTLU TOPOLOJİK YALITKANLARIN YÜZEY DURUMLARI

Sevim ALKAN

Ankara Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR

Bu tez çalışmasında üç boyutlu (3B) topolojik yalıtkanların iki boyutlu iletken yüzey durumları incelenmiştir. Kenar ve yüzeylerdeki topolojik olarak korunan durumların altında yatan topolojik değişmezler tartışılmıştır. Somut bir örnek olarak 3B' lu topolojik yalıtkan olan Bi_2Se_3 ele alınıp özellikleri teorik olarak çalışılmıştır. 3B' lu topolojik yalıtkan için etkin modelden yola çıkarak, 2B' lu yüzey durumları için seçilen baz fonksiyonları yardımıyla hem yarı-uzay geometrisi hem de sonlu kalınlıktaki bir ince-film için etkin Hamiltoniyen çıkarımı yapılmıştır. Bu Hamiltoniyenlerin özdeğerleri bulunarak yüzey durumlarının enerji dağılımı bağıntıları elde edilmiş ve sonuçlar 2B' lu HgTe/CdTe kenar durumlarıyla karşılaştırılmıştır. Bi_2Se_3 yüzey durumları için iki önemli farklılığa dikkat çekilmiştir. Birincisi, sonlu kalınlık durumunda ortaya çıkan bant aralığını gözleyebilmek için, HgTe kenar durumlarının tersine, bu kalınlık bir kaç nanometrelik (nm) uzaklığa kadar küçültülmelidir. İkincisi, bu durumda açılan bant aralığı kalınlık L büyüdükçe salınımlı olarak üstel azalan bir özellik göstermektedir. Bu özellik HgTe kenar durumlarında yoktur.

Ağustos 2021 , 89 sayfa

Anahtar Kelimeler: Chern yalıtkanları, topolojik yalıtkanlar, spin-yörünge bağlaşımı, BHZ modeli, Bi_2Se_3 , yüzey durumları, sızma derinliği, sonlu-boyut etkisi

ABSTRACT

Master Thesis

SURFACE STATES OF THREE DIMENSIONAL TOPOLOGICAL INSULATORS

Sevim ALKAN

Ankara University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Physics

Supervisor: Prof.Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR

In this thesis, two-dimensional conductive surface states of three-dimensional topological insulators have been investigated. Topological invariants underlying topologically protected states at the edges and the surfaces were discussed. Specifically, it has been focused on the Bi_2Se_3 which is a three-dimensional topological insulator and its properties were studied theoretically. Starting from 3D effective model of topological insulator Hamiltonian we derived effective surface model Hamiltonians for both semi-infinite geometry and finite thickness thin-film based on certain basis functions. Energy dispersions of the surface states have been obtained and the results were compared with 2D topological insulator HgTe. We demonstrate two important distinctions in Bi_2Se_3 . First, as a finite thickness effect, contrary to HgTe, the surface-states in Bi_2Se_3 display a remarkable decreasing width L down to a few nanometer (nm) to open a gap. Second, this gap of the surface states due to finite size features an oscillating exponential decay as a function of L in contrast to HgTe.

August 2021, 89 pages

Key Words: Chern insulators, topological insulators, spin-orbit coupling, BHZ model, Bi_2Se_3 , surface states, penetration depth, finite-size effect

TEŞEKKÜR

“Üç Boyutlu Topolojik Yalıtkanların Yüzey Durumları” başlıklı yüksek lisans tezim süresince, çalışmalarımı birlikte yürüttüğüm danışman hocam, sayın Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR’ e (Ankara Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı) en içten duygularıyla teşekkür ederim. Çalışmalarım boyunca önerilerini ve desteklerini esirgemeyen kıymetli hocam Prof. Dr. Satılmış ATAĞ’ a (Ankara Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı) teşekkürü borç bilirim. Ayrıca yüksek lisans tezi çalışmalarımı 115F421 no’ lu proje kapsamında destekleyen TÜBİTAK’ a da teşekkür ederim. Son olarak sevgisini her daim hissettiren ve desteklerini esirgemeyen canım aileme gönülden teşekkürlerimi sunarım.

Sevim ALKAN
Ankara, Ağustos 2021

İÇİNDEKİLER

TEZ ONAY SAYFASI

ETİK.....	i
ÖZET.....	ii
ABSTRACT	iii
TEŞEKKÜR.....	iv
SİMGELER DİZİNİ	vi
ŞEKİLLER DİZİNİ	viii
ÇİZELGELER DİZİNİ	ix
1. GİRİŞ	1
2. KUANTUM HALL OLAYI	6
2.1 Tamsayı Kuantum Hall Olayı.....	8
2.2 Kuantum Spin Hall Olayı.....	9
2.2.1 Spin-yörünge bağlaşımı	11
3. TOPOLOJİK DEĞİŞMEZLER	13
3.1 Chern Sayısı ve Berry Eğriliği	14
3.2 Zaman-Tersinme Simetrisi.....	16
4. DIRAC DENKLEMİ	18
4.1 Dirac Denkleminin Bağlı Durum Çözümleri.....	19
4.2 Modifiye Dirac Denklemi	22
5. İKİ BOYUTLU TOPOLOJİK YALITKANLAR.....	37
5.1 HgTe/CdTe Kuantum Kuyusu.....	37
5.2 Helisel Kenar Durumları.....	41
5.3 Şerit Geometrisi İçin Çözümler	43
6. ÜÇ BOYUTLU TOPOLOJİK YALITKANLAR	46
6.1 Güçlü ve Zayıf Topolojik Yalıtkan Sınıfları.....	46
6.2 Yüzey Durumları.....	48
6.2.1 Bi ₂ Se ₃ yüzey durumları için etkin model.....	49
6.3 Bi ₂ Se ₃ İçin Genel Çözümler	54
6.3.1 Yarı-sonsuz sınır koşulları için yüzey durumları.....	58
6.3.2 Sonlu-kalınlıkta sınır koşulları için yüzey durumları	62
6.3.3 Üç boyutlu ince-film için etkin model.....	65
7. TARTIŞMA VE SONUÇ.....	74
KAYNAKLAR.....	76
EKLER.....	82
ÖZGEÇMİŞ.....	89

SİMGELER DİZİNİ

$\hbar$	Planck sabiti
l_B	Manyetik uzunluk
c	Işık boşluktaki sürati
e	Elemanter yük
$\mathbf{B}$	Manyetik alan
$\mathbf{E}$	Elektrik alan vektörü
σ_{xy}	Hall iletkenliği
τ	Durulma zamanı
σ_{xy}^s	Spin Hall iletkenliği
ρ	Özdirenç
σ_i	Pauli spin matrisleri
v_F	Fermi hızı
Γ	Yüksek simetri noktası
p	Momentum operatörü
$\Psi(x)$	Dalga fonksiyonu
$\mathbf{F}(\mathbf{k})_{xy}$	Berry eğriliği
ν	Dolgu faktörü
$\mathbf{A}(\mathbf{k})$	Berry bağlantısı
Θ	Zaman-Tersinme simetrisi operatörü
n	Chern sayısı
H	Hamiltoniyen
$\mathbf{J}$	Akım yoğunluğu
ω_B	Siklotron frekansı

H_{etkin}	Etkin Hamiltoniyen
$\mathcal{K}$	Gauss eğriliği
g	Genus
χ	Euler karakteristiği
k	Momentum uzayı
E	Enerji
ξ_s	Sızma derinliği

Kısaltmalar

BZ	Brillouin Bölgesi
TRS	Zaman-Tersinme Simetrisi
QHE	Kuantum Hall Olayı
QSHE	Kuantum Spin Hall Olayı
IQHE	Tamsayı Kuantum Hall Olayı
BHZ	Bernevig-Hughes-Zhang
SOI	Spin-yörünge Etkileşimi

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1	Tamsayı kuantum Hall olayı (Tong 2016)	9
Şekil 2.2	a) İki-boyutta, spin-yukarı ve spin-aşağı elektronların zıt yönlerde ilerlediği helisel kenar durumları b) Bulk enerji aralığına sahip QSH durumlarının enerji dağılımı	11
Şekil 3.1	Bir toroid şeklinin kahve fincanına dönüşümü (Ingram 2017)	14
Şekil 4.1	Konumun bir fonksiyonu olarak dalga fonksiyonu olasılık yoğunluğu	21
Şekil 4.2	Sıfır enerji bağlı durumu ile birlikte dağılım bağıntısı	22
Şekil 5.1	HgTe/Hg _{0.3} Cd _{0.7} Te kuantum kuyu modeli	38
Şekil 5.2	HgTe/CdTe kuantum kuyusu bulk enerji dağılımı	40
Şekil 5.3	$L = 200$ nm için (sürekli çizgiler) ve $L = 1000$ nm için (kesikli çizgiler) nümerik olarak elde edilen enerji- k_x davranışı	44
Şekil 5.4	HgTe/CdTe şerit geometrisinde L bağımlı enerji bant aralığı	45
Şekil 6.1	(a) Zayıf ve (b) güçlü bir topolojik yalıtkan için Brillouin bölgesindeki Fermi yüzeyi. (c) Fermi çemberiyle çevrelenmiş tek bir Dirac noktası; Dirac konisi (Hasan ve Kane 2010)	46
Şekil 6.2	Bi ₂ Se ₃ kristal yapısı, beş-atomlu atomik katmanları (Shen 2012) .	48
Şekil 6.3	Bi ₂ Se ₃ bulk yapısına ait enerji dağılımı.	56
Şekil 6.4	Bi ₂ Se ₃ yüzey ($E_{\uparrow,\downarrow}$) ve bulk durumlarının enerji dağılımı	60
Şekil 6.5	z -ekseni boyunca büyütülen üç boyutlu topolojik yalıtkan film . . .	62
Şekil 6.6	Sonlu-kalınlıkta Bi ₂ Se ₃ modelinde enerji bant aralığının (Δ) L' ye göre davranışı.	67
Şekil 6.7	Bi ₂ Se ₃ için $k = 0'$ da yüzey durumlarının oluşturduğu $\Delta(L)$ ' nin L' ye göre davranışı.	68
Şekil 6.8	a) $L = 20$ Å ve b) $L = 25$ Å için yüzey ve bulk durumlarının enerjisi	72
Şekil 6.9	c) $L = 32$ Å ve d) $L = 55$ Å için yüzey ve bulk durumlarının enerjisi	73

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 5.1	HgTe/CdTe kuantum kuyusu için materyal parametreleri	39
Çizelge 6.1	Üç boyutlu model Bi ₂ Se ₃ için materyal parametreleri (Shan vd. 2010)	65



1. GİRİŞ

Yoğun madde fiziğinde maddenin farklı durumları (iletkenler, yarı iletkenler, süperiletkenler vs.) kendiliğinden kırılan simetriler (terslenme, dönme, ayar simetrileri) ile sınıflandırılır. 1980 yılında kuantum Hall olayının (QHE) keşfi (von Klitzing vd. 1980; Thouless vd. 1982; von Klitzing 1986) kendiliğinden kırılmış bir simetriye sahip olmayan bir kuantum durumuna yol açarak farklı özelliklere sahip yeni materyallerin keşfedilmesine olanak sağlamıştır. QHE (Girvin 1998; Avron vd. 2003; Goerbig 2009; Tong 2016; Vagner vd. 2006), iki boyutlu yarı iletken içindeki elektronların güçlü bir manyetik alan altındaki davranışları ile ilgilidir. Tamsayı kuantum Hall olayında (IQHE), direnç değerinin materyal özelliklerinden bağımsız olarak bir sabitin ($\frac{e^2}{h}$) tam katlarına kuantumlanması ile kendini gösteren bu davranış daha önce bilinen tüm madde gruplarından topolojik olarak farklıdır. Bunun sonucunda elektronlar sadece yarı iletkenin sınırları boyunca hareket ederek kiralite denilen tek yönlü akım kanalı oluşturur.

Son yıllarda grafen modelinde farklı durumların keşfedilmesi (Kane ve Mele 2005a; Zhang vd. 2006; Lopatin 2007; Neto vd. 2009; Goerbig 2011; Orlita vd. 2013), uygulama alanı olarak fiziğe çok şey kazandırmasının yanı sıra topolojik yalıtkanların keşfi için de öncü model olmuştur. Özellikle yüksek manyetik alanda grafen üzerinde yapılan deneyler grafenin ilginç özelliklerini ortaya çıkarmıştır. Örneğin, tek-katmanlı grafende kesirli QHE' nin keşfi (Novoselov vd. 2005; Zhang vd. 2005), kütesiz Dirac fermiyonlarının varlığı ve iki-katmanlı grafende anormal IQHE' nin keşfi (Novoselov vd. 2006), relativistik kütleli yük taşıyıcılarının varlığı açısından büyük öneme sahiptir.

Haldane iki boyutlu grafen modelinde, IQHE olayını öngörmüştür (Haldane 1988). Manyetik alanın zaman-tersinme simetrisini (TRS) kırması ile sonuçlanan bu durumlar bir topolojik değişmez olan Chern sayıları ile ifade edilir ve bu materyallere Chern yalıtkanları denir.

Topolojik yalıtkanlar üzerinde yapılan çalışmalar, QHE' nin manyetik alan yokluğunda da meydana gelebileceği fikrinden doğmuştur (Nagaosa 2007; Büttiker 2009). Elektronun spini ve yörüngesel açısal momentumunun etkileşmesine dayalı spin-yörünge etkileşimi, bir kristal içerisinde elektronların dış manyetik alan olmaksızın spin-bağımlı bir kuvvet (Shen 2005) hissetmesine neden olur. Spin-yörünge bağlaşımı, QHE' deki gibi simetriyi kıran bir manteyik alan gerektirmeyen QSH olayına yol açar (Murakami vd. 2003; Murakami vd. 2004; Murakami 2006; Bernevig ve Zhang 2006). Bu etkileşim sayesinde zıt spinli elektronlar malzeme sınırlarında çift yönlü bir akım kanalına neden olarak helisel kenar durumlarını oluşturur.

Kane ve Mele tarafından, herhangi bir iki boyutlu malzeme için hesaplanabilen ve malzemenin kararlı bir kenar durumuna sahip olup olmadığının tahmin edilmesine izin veren yeni bir topolojik değişmez türü bulunmuştur (Kane ve Mele 2005b). Daha sonra Haldane modeline spin-yörünge etkileşmesi terimi de dahil edilerek simetri kırılmadığında da kütle terimine (enerji bant aralığına) izin veren durumlar keşfedilmiştir (Kane ve Mele 2006). Grafen modelinde keşfedilen kararlı kenar durumları, iki boyutlu topolojik yalıtkan malzemeler olduğunu göstermeye olanak sağlamıştır. Grafenin sahip olduğu düşük spin-yörünge bağlaşımından dolayı bu öneri pratik olarak gözlemlenemediği için yeni materyal arayışlarına girilmiştir.

İki-boyutlu zaman-tersinir topolojik yalıtkanlar, HgTe/CdTe kuantum kuyularında teorik olarak (Bernevig vd. 2006) öngörülmüştür ve bu çalışmalar Molenkamp ve grubu tarafından (König vd. 2007) deneysel olarak doğrulanmıştır. HgTe-tabanlı kuantum kuyu yapısı birbirleriyle TRS yoluyla bağlantılı olan kenar durumları barındırır ve bu durumlar bant terslenme mekanizmasına dayanır. Bant terslenmesi; sandviç edilen HgTe' nin kalınlığına bağlı olarak kritik bir kalınlıkta ($d_c = 6.3$ nm) gerçekleşir ve sadece HgTe' nin bant yapısında gerçekleşen terslenme ile iletim sağlanır. Bu keşif topolojik yalıtkanların sınıflandırılması adına önemli bir adım olmuştur. Chern sayıları (simetriye sahip olmayan) Chern yalıtkanlarını karakterize eder ve bunlar Z değişmezi ile sınıflandırılırken Z_2 topolojik değişmez sınıfı (simetriye sahip) QSH yalıtkanlarını temsil eder.

Z değişmezine örnek olan IQH olayı yalnızca iki boyutta gözlemlenir. Z_2 topolojik fazı ise hacimsel (bulk) olarak yalıtkan, kenarlarda/yüzeylerde iletkenlik taşıyan iki/üç boyutlu sistemleri sınıflandırır. Burada bir topolojik faz geçişi söz konusu olduğu için Chern sayısı topolojik olarak sıradan olup olmama durumuna göre 0 veya 1 değerlerini alabilir.

Bu keşiflerden sonra daha yüksek SOC' li ve topolojik yalıtkan fazına sahip başka materyallerin arayışına girilmiştir. Murakami'nin bizmut katmanlarının QSH olayı için alternatif bir alan sağlayabileceğini öne sürmesiyle (Murakami 2009), deneysel gözlem için yeni bir alan sağlanmıştır. Ardından üç teorik grup tarafından (Moore ve Balents 2007; Fu, Kane ve Mele 2007; Roy 2009b) QSH yalıtkanlarının üç boyutta da doğal bir genellemeye sahip olabileceğini gösteren faz, teorik olarak $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$ başta olmak üzere bir çok materyalde öngörülmüştür (Fu ve Kane 2007).

Üç boyutlu topolojik yalıtkanların ARPES (angle-resolved photoemission spectroscopy) deneyleri ile gözlemlenmesi ilk kez $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$ alaşımı ile olmuştur (Hsieh vd. 2008; Hsieh 2009). Ardından Bi_2Se_3 başta olmak üzere ikinci nesil topolojik yalıtkanlar, Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 deneysel olarak (Xia vd. 2009; Chen vd. 2009) ve teorik olarak (G. Zhang vd. 2009) keşfedilmiştir. Görece daha geniş bant aralığına sahip Bi_2Se_3 teorik bulgular ve deneysel gözlemler açısından daha pratik olarak kabul edilir. İkinci nesil materyaller yüzeyde, grafene benzer bir şekilde Dirac konisi oluşturur. Fakat burada Dirac konisi Fermi çemberi içinde tek sayıdadır. Grafende K ve K' şeklinde çift sayıdadır ve bozulmalara karşı kenar durumları korunmaz (Moore 2010).

TRS olan bir sistemde, Fermi düzeyi civarındaki elektronların enerjisini açıklamak için etkin Hamilyoniyen $k.p$ teorisinden türetilebilir (Zhou vd. 2008; Novik vd. 2005; Liu vd. 2010). Bu yaklaşımda kullanılan bazlar materyale özgüdür. İki-boyutlu kuantum kuyusu modeline ait etkin Hamiltoniyen 6-banlı baz kümesi seçilerek elde edilmektedir. Aynı yaklaşımla bu model üç boyutlu bir sistem için (Bi_2Se_3) geliştirilebilir. Elde edilen etkin Hamiltoniyen, göreceli olmayan (düşük enerji limitinde) limitte Dirac denklemi ile aynı matematiksel yapıya sahiptir (Shen vd. 2011).

Bu çalışmanın ikinci kısmında, kuantumlu Hall iletkenliğinden ve spin Hall iletkenliğinden spin-yörünge terimi bağlamında bahsedilmiştir.

Üçüncü bölümde; öncelikle topolojik yalıtkanların sınıflandırılmasını anlamak için önemli olan bazı topolojik kavramların fizikteki yeri vurgulanmıştır. Sonrasında TRS' ye sahip bir sistem ele alınacağından, spin-1/2 parçacıklar için Θ (TRS) operatörünün özelliği vurgulanmıştır.

Dördüncü bölümde Dirac denklemi detaylı olarak ele alınmıştır. Dirac denkleminin yoğun madde fiziğine uyarlanmış haline geçiş olması için bağlı durumlarda çözümlerine değinilmiştir. Daha sonra topolojik özelliği açısından farklılık gösteren modifiye Dirac denkleminin bir, iki ve üç boyuttaki çözümleri tartışılmıştır. Topolojik yalıtkan çözümü için gerekli parametre koşulları elde edildiğinde, iki boyutta kenar durumları ve üç boyutta yüzey durumlarının oluşabileceği gösterilmiştir.

Beşinci bölümde iki boyutlu HgTe topolojik yalıtkanın kenar durumlarının özellikleri ayrıntılara girilmeden, sadece üç boyutlu Bi_2Se_3 ' nin yüzey durum özellikleri ile karşılaştırma yapabilmek amacıyla gözden geçirilmiştir.

Son bölümde, bu tezin çalışma konusu olan üç boyutlu topolojik yalıtkanlara ait $k \cdot p$ yaklaşımı ile elde edilen etkin Hamiltoniyenin, Bi_2Se_3 parametreleri kullanılarak yüzey durumlarını tasvir eden model türetilmiştir. Bu kapsamda önce yarı-sonsuz uzay geometrisi ($z = 0 - \infty$) için hem tam çözüm hem de sadece z -bağımlı baz fonksiyonları yardımıyla etkin Hamiltoniyen elde edilerek enerji dağılımı ifadesi bulunmuştur. Burada yüzey durumları bir Dirac noktası olarak kendini göstermiştir. Nano uygulamalar için önemli olabilecek sonlu-kalınlıkta Bi_2Se_3 yüzey durumları için yine z -bağımlı baz fonksiyonları oluşturularak bulunan etkin Hamiltoniyenden enerji dağılımı bağıntısı kalınlığın (L) fonksiyonu olarak incelenmiştir. Ayrıca kalınlık küçüldükçe Dirac noktası civarında bant aralığının açıldığı gösterilmiştir.

Kalınlığa bağımlı bant aralığının L büyüdükçe salınımlı-üstel biçimde küçüldüğü görülmüş ve bu sonuç HgTe şerit geometrisi için elde edilen bant aralığı ile kıyaslandığında önemli farklılıklar dikkati çekmiştir.

Elde edilen bulgular Bi_2Se_3 'ün teknolojik uygulamalarda kullanımının önemini gösterir (Linder vd. 2009). Bi_2Se_3 'ün yüzey durumlarının kuantum hesaplama veya spintronik cihazlarda kullanılabileceği düşüncesi dikkate değerdir (Moore 2009a). Ayrıca topolojik yalıtkanların üç boyutlu materyaller üzerindeki sentezi, yoğun madde fizikinde yeni alanlara öncülük etmiştir.



2. KUANTUM HALL OLAYI

Kuantum Hall olayı, klasik Hall olayının iki boyutlu kuantum mekaniksel versiyonu olarak düşünülebilir. Bu nedenle öncelikle klasik Hall olayından bahsedilmesi gerekmektedir.

1879 da Edwin E. Hall katılarda, elektronların dışarıdan uygulanan bir elektrik alan ve manyetik alan etkisiyle saptırılmış hareketinden kaynaklanan voltajını ölçmüştür (Hall 1880). Klasik olarak, iki boyutlu xy düzleminde, harekete sınırlandırılmış elektronlar z yönünde sabit bir manyetik alana maruz bırakıldığında, elektronlar malzeme üzerinde saparlar ve burada bir yük yoğunluğu oluştururlar. Bu yük dağılımı bir elektrik alanı oluşturur ve I akımıyla birlikte enine V_H Hall potansiyel farkına yol açar. Burada parçacığın hareket denklemi aşağıdaki gibi yazılır:

$$m\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -e\mathbf{E} - e\mathbf{v} \times \mathbf{B} - \frac{m\mathbf{v}}{\tau}. \quad (2.1)$$

$\mathbf{v}$ sabit olduğundan eşitliğin sol tarafı sıfır olur ve yukarıdaki ifade bazı düzenlemeler yapılarak iki boyutta hareket eden parçacık için aşağıdaki formu alır.

$$\frac{ne^2\tau}{m}E_x = -\frac{ne}{v_x} - \frac{ne^2\tau}{m}v_yB, \quad (2.2)$$

$$\frac{ne^2\tau}{m}E_y = -\frac{ne}{v_y} + \frac{ne^2\tau}{m}v_xB, \quad (2.3)$$

denklemleri matris formunda yazılıp, $\mathbf{J}$ akım yoğunluğu ifadesi de yerine yazılarak bazı düzenlemeler yapıldığında, parçacığa özgü olan özdirenç ifadesi şöyle bulunur:

$$\rho = \sigma^{-1} = \frac{m}{ne^2\tau} \begin{pmatrix} 1 & -\omega_B\tau \\ \omega_B\tau & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

Burada τ durulma zamanı (saçılma zamanı) ve $\omega_B = \frac{qB}{m}$ siklotron frekansdır. (2.4)'deki matrisin köşegen elemanları, yani özdirencin ρ_{xx} ve ρ_{yy} bileşenleri τ durulma zamanına bağlıdır fakat köşegen dışı elemanları ρ_{xy} ve ρ_{yx} bileşenlerinde bu terim gider, bağımlılık kalkar. Bu ifadeler açık olarak aşağıdaki gibi yazılır:

$$\rho_{xy} = -\rho_{yx} = \frac{B}{ne}, \quad (2.5)$$

$$\rho_{xx} = \rho_{yy} = \frac{m}{ne^2\tau}. \quad (2.6)$$

(2.5) ve (2.6) ifadelerinden de anlaşılacağı gibi enine ve boyuna direnç manyetik alanda farklı değişimler gösterir. Enine direnç manyetik alanla değişime uğrar fakat boyuna direnç manyetik alana bağlı olmadığından manyetik alanla değişime uğramaz. Bu nedenle özdirencin köşegen dışı elemanları Hall olayından sorumludur (Tong 2016) ve özellikleri bakımından çok önemlidir. Saçılmadan sorumlu kirliliklerin (impurity) aksine malzemenin kendisi hakkında bilgi verir. Köşegen elemanlar ise safsızlığın ölçüsüdür (Tong 2016).

QHE, Klitzing ve arkadaşları tarafından (von Klitzing vd. 1980) deneysel olarak keşfedildi. Malzemenin yüzeyine dik olan manyetik alanın etkisindeki elektronlar çok küçük yarıçaplı daireler çizerler ve serbest bir şekilde hareket edemezler. Manyetik alan, malzeme yarı iletken olsa bile elektronları hapsedmiş olur ve malzemenin bulk denilen iç kısımlarında yalıtkanlığa yol açar. Ayrıca manyetik alanın değeri ne kadar büyük ise manyetik uzunluk (l_B) olarak adlandırılan, elektronların çizdiği dairelerin yarıçapı da o kadar küçük olur. Fakat kenarlarda elektronlar tam kapalı yörüngeler oluşturamadığından elektronlar kenar boyunca ilerler ve iletkenlik devam eder. Böylece sadece kenarlarda iletkenliğin sağlanması durumunda kiral kenar durumları oluşur. QHE' nin keşfi 1980' lerde topolojik özelliklerin keşfine yol açmıştır. Klaus von Klitzing, kuantumlanmış Hall olayını keşfetmesiyle Nobel Fizik Ödülü almıştır (von Klitzing 1985).

Klasikten Hall olayından farklı olarak düşük sıcaklıklarda ve yüksek manyetik alanda ortaya çıkan QHE' de Hall direnci tamsayı ve kesirli değerler alabilir. Bu çalışmada sadece tamsayı kuantum Hall olayına (IQHE) değinilecektir.

2.1 Tamsayı Kuantum Hall Olayı

IQHE, kuantumlanmış Hall iletkenliğinin tamsayı değerler almasına denir. QHE' de manyetik alana bağımlı olan enine direnç burada bir tamsayı ile kuantumlanır. Normal koşullarda akımı ölçmek için y yönünde dışarıdan elektrik alan uygulandığında, elektronlar elektrik akımı yönünde hareket ederek denklem (2.7) deki gibi y yönünde bir akım yoğunluğu (J_y) oluşturur. Fakat burada güçlü bir manyetik alan (≈ 10 T) olduğu için elektronlar x yönünde bir akım ve akım yoğunluğu (J_x) oluşturur. Bu Hall akımıdır ve iki durumda da akım yoğunluğu aşağıda verilmiştir:

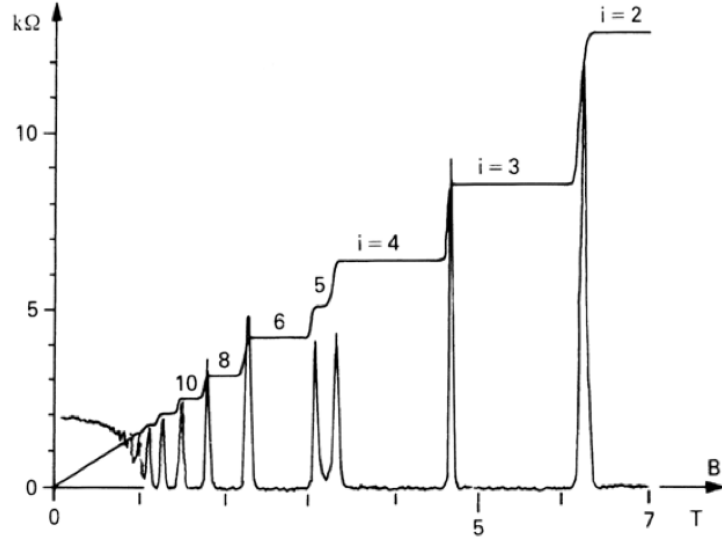
$$\mathbf{B} = 0 \quad ; J_y = \sigma E_y, \quad (2.7)$$

$$\mathbf{B} \neq 0 \quad ; J_x = \sigma_{xy} E_y, \quad (2.8)$$

$\frac{2\pi\hbar}{e^2}$ sabit olmak üzere, Hall direnci:

$$\rho_{xy} = \frac{2\pi\hbar}{e^2} \frac{1}{\nu} \quad , \quad \nu \in \mathbb{Z} \quad (2.9)$$

ile ifade edilir. Kuantumlanmış Hall direnci manyetik alanla birlikte basamaklı olarak artan değerler almaktadır. Şekil 2.1' de, düzlüklerde Hall direncinin değeri $\rho_{xy} = \frac{1}{\nu} \frac{h}{e^2}$ iken, boyuna direnç $\rho_{xx} = 0$ olur. Grafikteki düzlükler manyetik alanda kuantize olarak bir sonraki değere kadar sabit kalmaya devam eder.



Şekil 2.1 Tamsayı kuantum Hall olayı (Tong 2016)

İletkenlik $\frac{e^2}{h}$ sabitinin tamsayı değerlerine kuantumlanır (von Klitzing 1986). ν dolgu faktörü (filling factor) olarak isimlendirilir ve burada tamsayı ($\nu = 1, 2, \dots$) değerler alır. Dolgu faktörü Landau seviyeleri ile ilgilidir. Düzgün bir manyetik alanda yüklü bir parçacığın hareketi, kuantum mekaniğinde basit harmonik salıncı ile eşdeğerdir ve enerji seviyeleri $E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c$ şeklinde kuantize olur. Bu enerji seviyelerine Landau seviyeleri denir. Landau seviyeleri yüksek dejenereliğe sahiptir. Bir Landau düzeyi tamamen dolu iken, dolgu faktörü $\nu = 1$ dir ve bu durum Hall iletkenliğinin $\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h}$ olmasına karşılık gelir. Bu çalışmanın ilerleyen bölümlerinde ele alınacak olan, denklem (2.9)'daki ν tamsayısı aslında bir topolojik değişmezdir ve bir sonraki bölümde bahsedilecektir.

2.2 Kuantum Spin Hall Olayı

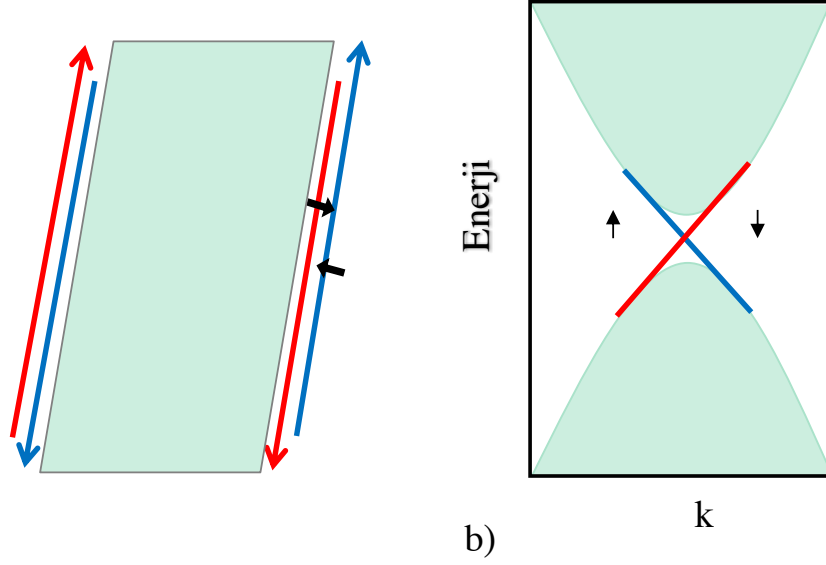
QSH olayının, parçacığın sahip olduğu spin-yörünge etkileşmesinin (SOI) bir sonucu olduğu ilk kez GaAs yapısında gözlemlenmiştir (Kato vd. 2004; Wunderlich vd. 2004) ve grafende SOI' nin QSH olayına yol açtığı öne sürülmüştür (Kane ve Mele 2005a).

Bu nedenle bu kısımda önce spin kavramından bahsedilecektir. Spin, parçacığın iç özelliğidir ve klasik olarak karşılığı bulunmaz. SOI, bir atomun elektronunun spini ile yörünge açısal momentumunun etkileşmesinden kaynaklanan etkileşmedir, QSHE ise bu etkileşmenin bir sonucudur.

QHE' nin spin versiyonu ilk olarak 1971 yılında Rus fizikçiler Dyakonov ve Perel tarafından önerilmiştir (Dyakonov ve Perel 1971). Her ne kadar IQHE' nin spin versiyonu olarak düşünülse de burada akım oluşması için manyetik alana gerek yoktur. Sıfır manyetik alanda bir topolojik yalıtkanın mümkün olmasının temel nedeni elektronların spin aracılığıyla kuantum özelliğine sahip olmasıdır. Kuantum spin Hall yalıtkanları, bir dış manyetik alan gerektirmedikinden, zaman-tersinme simetrisini (TRS) kırmaz. Simetrinin kırıldığı durumlarda kiral kenar durumları bir topolojik kuantum sayısı ile korunuyordu.

Dış manyetik alanın yokluğunda momentum bağımlı manyetik alan olan açısal momentumdan kaynaklanan içsel (intrinsic) spin-Hall iletkenliği $2\frac{e}{4\pi}$ ' nin birim katlarına kuantumlanır. Açısal momentum ve spin bağlaşımı spin yörünge etkileşimi teriminin içerisindedir. (2.11)' de verilen bu terim Dirac denkleminde düşük enerji yaklaşımı yapıldığında ortaya çıkan terimlerden biridir. Dirac denkleminde açık bir şekilde kendini göstermese de doğal olarak bulunur. Schrödinger denkleminde ise bu terim sonradan eklenir ve spin içeren terimler gelir. Buradan çıkan sonuç Dirac denklemindeki sonuçlar ile benzerdir.

Kuantum spin Hall olayında spin korunmaz, elektrik alan varlığında spini bulunan bir elektrik yükü etkin manyetik alan hissedebilir ve bu manyetik alanın yönü farklı spinler için zıttır. Bunun sonucunda spin-yukarı elektronlar ve spin-aşağı elektronlar ters yöne saparlar (Bernevig ve Zhang 2006). Bu nedenle iki boyutlu kenar durumları Şekil 2.2' deki gibi heliseldir. Helisel kenar durumları biri spin-yukarı biri spin-aşağı olan üst üste binmiş iki kiral durumdur. Dolayısıyla kuantum spin Hall yalıtkanlarının iki kenar durumu, her biri iletkenliğe $\frac{e^2}{h}$ ile katkıda bulunan bir boyutlu iki iletken kanal gibi davranır.



Şekil 2.2 a) İki-boyutta, spin-yukarı ve spin-aşağı elektronların zıt yönlerde ilerlediği helisel kenar durumları b) Bulk enerji aralığına sahip QSH durumlarının enerji dağılımını

2.2.1 Spin-yörünge bağlaşımı

Topolojik yalıtkan durumunun oluşumu için spin-yörünge bağlaşımı (spin-orbit coupling) çok önemlidir. Spin-yörünge etkileşim terimi, elektrik alan varlığında elektronun momentumunun spini ile etkileşiminden oluşan terimdir. Dirac denkleminde düşük enerji yaklaşıklığı yapıldığında Hamiltoniyene bir takım terimler gelir. Bunlardan bir tanesi aşağıda verilen spin-yörünge bağlaşım terimidir:

$$H_{SO} = -\frac{\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} \times \nabla(V)) . \quad (2.10)$$

Bu terim şu şekilde yorumlanabilir; referans çerçevesinin değişmesiyle v hızında bir elektron tarafından hissedilen bir $\mathbf{E} = -\nabla(V(r))$ elektrik alanı, bir $\mathbf{B} = -\frac{1}{c^2} \mathbf{v} \times \mathbf{E}$ manyetik alanına yol açar.

Bu manyetik alan Zeeman etkileşimi ($g\mu_B\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}$) ile elektronun spinine etki ettiğinde aşağıda verilen etkileşmeye yol açar:

$$\begin{aligned}
H_{SO} &= -\frac{\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} \times \nabla(V(r))) ; & \nabla(V(r)) &= \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \mathbf{r} , \\
&= -\frac{\hbar}{4m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{r}) , \\
&= -\frac{\hbar}{4m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}) . & (2.11)
\end{aligned}$$

$V(r)$ elektromanyetik potansiyel, σ Pauli matrisleri ve m elektronun kütlesi olmak üzere, potansiyel türevine ana katkı harici bir elektrik alandan değil kristal yapıdaki atomların varlığından gelir. $V(r)$ potansiyeli içerisinde Z atom numarası vardır, atom ağırlığı ne kadar büyükse spin-yörünge terimi de o kadar güçlüdür. Bu durum topolojik yalıtkan durumları gözlemlemek için ağır atomları kullanmanın önemini açıklar. Örneğin grafen bir topolojik yalıtkan gibi düşünülse de SOI hesaba katılarak oluşturulan enerji bant aralığı çok küçük olduğu için yalıtkan davranışının deneysel olarak gözlemlenmesi kolay değildir. Bunun nedeni grafenin oldukça hafif bir malzeme olan ($Z_C = 6$) karbon atomlarından oluşmasıdır. Buna karşın, $Z_{Hg} = 80$, $Z_{Te} = 52$, $Z_{Bi} = 83$, $Z_{Se} = 34$ gibi yüksek atom numarasına sahip atomlarda, elektronlar görece hızlarla hareket eder, spin-yörünge kuvveti güçlüdür. Bu tür atomlardan oluşan malzemelerde, bir önceki kısımda bahsedildiği gibi elektronlar güçlü bir spin ve momentuma bağlı kuvvet hisseder. Bu, spin değiştiğinde yönü değişen bir manyetik alana benzer (Kane ve Moore 2011).

3. TOPOLOJİK DEĞİŞMEZLER

Bu bölümde topolojik değişmezlerin daha iyi anlaşılabilmesi için öncelikle topoloji kavramı tanıtılıp, yoğun madde fiziğindeki yerinden bahsedilecektir.

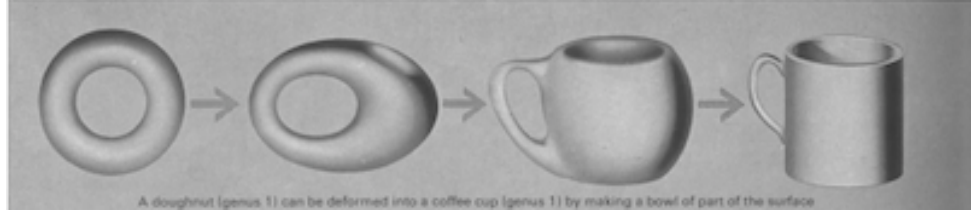
Yoğun madde fiziğinde topoloji kavramı

Hall direncinin kuantumlanması malzemenin topolojisi ile ilgilidir. Topoloji kavramı, geometrik şekillerin sıkıştırma, uzatma ve bükme gibi biçimsel değişimler altındaki değişmeyen özelliklerini inceler. Bu noktada topoloji fiziğe çok şey kazandırmaktadır. Bu değişmeyen nicelikler korunumu yani simetriyi verir. Daha açık bir ifade ile, sürekli bir şekil değişimi altında sistem değişmez kalıyorsa burada korunan bir nicelik vardır, bir kuantum sayısı olması gerekir. İlerleyen kesimde bahsedilecek olan Chern sayısı bir topolojik kuantum sayısıdır ve topolojik yalıtkanlarda malzemenin sahip olduğu iletkenlik özelliklerini açıklar.

Fizikte böyle bir düzgün deformasyon, malzemenin bulk bant aralığını kapatmadan çok parçacıklı bir sistemin Hamiltoniyenindeki değişime örnek olabilir. İki kuantum sistemi bant aralığı kapanmadan, yalnızca bir durumdan diğer duruma pürüzsüz (smooth) bir geçiş gerçekleştirebilirse topolojik olarak özdeştir ve (Moore 2010). Farklı bir topolojik durumuna geçiş olması için bant aralığının kapanması gerekir.

Katıların topolojik sınıflandırması malzemenin ayrıntıları değiştiğinde değişmeden kalan temel özelliklerini göz önünde bulundurur. Böylece kuantum durumlarının topolojik sınıflandırması katıların temel davranışının anlaşılması için güçlü bir teknik sağlar.

Topolojik değişmezlerin en yaygın örneği kahve fincanı ve toroid Şekil 3.1' de gösterilmiştir. Her ikisi de aynı topolojik değişmeze sahiptir, her ikisi için (delik sayısı) $g=1$ dir.



Şekil 3.1 Bir toroid şeklinin kahve fincanına dönüşümü (Ingram 2017)

Bir yalıtkanı karakterize eden topolojik değişmez malzeme yalıtkan bant aralığında kaldığı sürece değişmez. Belirli bir kuantum durumundan başka bir -topolojik olarak farklı- kuantum durumuna geçişin gerçekleşmesi için bant aralığı geçiş noktasında kapanmalıdır. Bant aralığının kapanması ara yüzeyde iletken metalik durumların oluşması ile eşdeğerdir. Bu nedenle Hamiltoniyenlerin topolojik farklılıklarını incelemek maddenin kuantum faz geçişlerinin açıklanmasında önemli rol oynamıştır ve 2016 Nobel ödülü bu konu ile ilgili olarak verilmiştir (Thouless, Haldane ve Kosterlitz 2016). Arayüzeyde oluşan iletken durumlar, sınır bölgelerde oluştuğundan kenar ve yüzey durumları denir ve bu durumların özellikleri Hamiltoniyenlerine bağlıdır. TRS' nin olmadığı ve Chern sayısının korunduğu durumlarda kiral kenar durumları, TRS' nin korunduğu durumlarda helisel kenar/yüzey durumları oluşmaktadır.

Topolojik yalıtkanları karakterize eden iki topolojik değişmez sınıftan biri $\mathbb{Z}$ sınıfıdır. Burada kiral akım durumları n Chern sayısının korunumundan kaynaklanır. Diğer sınıflandırma $\mathbb{Z}_2$ grubudur. TRS' nin korunduğu kenar ve yüzey durumlarını sınıflandırır.

3.1 Chern Sayısı ve Berry Eğriliği

QHE' da, malzeme sınırlarına hızlı hareket eden elektronlar lokalizasyonlara karşı dayanıklı olduklarından, safsızlıklardan veya kirliliklerden etkilenmezler. Buradaki iletkenlik büyük önem taşır ve malzemenin bulk yapısının sahip olduğu elektronik özellikler ile açıklanamaz, bir topolojik değişmez olan Chern sayısı (Moore ve Balents 2007) ile açıklanabilir:

$$\sigma_{xy} = n \frac{e^2}{h}, \quad n : \text{Chern sayısı} \quad (3.1)$$

Malzemenin bulk kısımlarında yalıtkan olması, buralarda sıradan (trivial) bir yalıtkan gibi bir bulk enerji aralığına sahip olmasını gerektirir. Bu benzerliğin ayrımını bir topolojik katsayı olan Chern sayısı yapar, kenar durumlarındaki farklılıkları açıklamak için kullanılır (Thouless vd. 1982). Chern sayısı, bulk kısımların sahip olduğu yalıtkanlığı ($n = 0$), kiral kenar durumlarından ($n \neq 0$) bir genus aracılığıyla ayırır. Kiral durumların bu topolojik yapının bir sonucudur. Chern sayısının yüzeyler ile olan ilişkisini açıklayan topolojik kavramlardan bu kısımda bahsedilecektir.

Yüzeyler için Gauss-Bonnet teoremi (Nakahara 2003) olarak bilinen teoreme göre, $\mathcal{K}$ Gauss eğriliğinin kapalı bir yüzey üzerindeki integrali Euler karakteristiği ($\chi = 2 - 2g$) olarak adlandırılan bir topolojik değişmez olan tamsayı tanımlar:

$$\frac{1}{2\pi} \int_S \mathcal{K} d\mathbf{a} = \chi. \quad (3.2)$$

Bu denklem geometrik bir özellik olan $\mathcal{K}$ ile genus' u ilişkilendirir. R yarıçaplı bir kürenin topolojik değişmezi bu teoreme göre bulunabilir. Kürenin eğriliği sabittir ve $1/R^2$ ' ye eşittir. (3.2)' den, $\chi = 2$ ve buradan $g = 0$ olarak bulunur. Fakat Şekil 3.1' deki toroid için $g = 1$ ' dir. Buradan bunların farklı topolojik değişmeze sahip olduğu anlaşılır. (3.2) numaralı denklem yoğun madde fizikine uyarlanır ise $\mathcal{K}$ Gauss eğriliğinin yerine $F(\mathbf{k})_{xy}$ Berry eğriliği gelir k momentum uzayında aşağıdaki gibi yazılabilir,

$$\frac{1}{2\pi} \int_S F(\mathbf{k})_{xy} d^2k = C. \quad (3.3)$$

İntegralin sonucu C , sabit bir kuantum sayısını verir. $F(\mathbf{k})_{xy} = (\nabla_k \times \mathbf{A}(\mathbf{k}))_z$ tanımını yerine yazılır,

$$\frac{1}{2\pi} \int_S (\nabla_k \times \mathbf{A}(\mathbf{k}))_z d^2k = C. \quad (3.4)$$

$\mathbf{A}(\mathbf{k})$ Berry bağlantısıdır. Daha önce (3.1) ile verilen n kuantumlanma miktarı, kapalı yüzeylerin sınıflandırılması için Euler karakteristiği ile aynıdır

$$\sigma_{xy} = n \frac{e^2}{h}; \quad n = \frac{1}{2\pi} \int_{BZ} F(\mathbf{k})_{xy} d^2k, \quad (3.5)$$

şeklinde periyodik bir sistemin Berry eğriliğinin Brillouin bölgesi üzerindeki integrali bir tamsayı verir, bu da Chern sayısıdır. Bu sayı sistemin bulk kısımlarının özelliklerine dayanarak kenar durumlarının sayısını verir.

3.2 Zaman-Tersinme Simetrisi

İlk kez 1932 yılında Eugene Paul Wigner tarafından önerilen (Wigner 1932) zaman-terstinme simetrisi (TRS) sistemin fiziksel özelliklerinin $t \rightarrow -t$ dönüşümü altında değişmez kalması anlamına gelir (Lamb ve Roberts 1998). $\mathbf{p}$ çizgisel momentumlu, $\mathbf{s}$ spinli ve $\mathbf{r}$ konumundaki bir parçacık için,

$$t \rightarrow -t; \quad \mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}, \quad \mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}, \quad \mathbf{s} \rightarrow -\mathbf{s},$$

dönüşümleri altında sistemin Hamiltoniyeni değişmiyor ise sistem zaman-terstinirdir. Zaman-terstinme operatörü Θ olmak üzere, kuantum mekaniğinde zaman tersinir bir Hamiltoniyen $[H, \Theta] = 0$ ile verilir. Shrödinger denkleminde dalga fonksiyonu ve Hamiltoniyene şu şekilde etki eder,

$$H\Psi = E\Psi; \quad (3.6)$$

$$(\Theta H \Theta^{-1}) \Theta \Psi = E \Theta \Psi , \quad (3.7)$$

denkleminde eğer $\Theta H \Theta^{-1} = H$ ise Ψ ve $\Theta \Psi$ fonksiyonları aynı Hamiltoniye'nin aynı özdeğerli çözümleridir. Ψ ve $\Theta \Psi$ arasındaki $\langle \Psi | \Theta \Psi \rangle$ matris elemanı parçacığın spinine bağlı olur. Spin-0 parçacıklar için $\Theta^2 = 1$ ve $\langle \Psi | \Theta \Psi \rangle \neq 0$ olur. Spin-1/2 parçacıklar için $\Theta^2 = -1$ ve $\langle \Psi | \Theta \Psi \rangle = 0$ olur, yani Ψ ve $\Theta \Psi$ birbirine ortogonaldir. Bu durum spin-1/2 parçacıklar için Kramers çiftleri adını alır.

$\Theta^2 = -1$ özelliğini sağlayan operatör

$$\Theta = i\sigma_y K ,$$

olur. Burada K kompleks eşlenik alır, σ_y Pauli spin matrisidir. $c_k^\dagger$, yaratma operatörü ve c_k , yok etme operatörü olmak üzere $H = \sum_k c_k^\dagger h(\mathbf{k}) c_k$ yazıldığında $\Theta H \Theta^{-1} = H$ simetrisinin sağlanması için

$$\Theta h(\mathbf{k}) \Theta^{-1} = h(-\mathbf{k}) , \quad (3.8)$$

ifadesi elde edilir. $h(\mathbf{k})$ Bloch Hamiltoniye'nin için özdeğer denkleminin bir çözümü $|\phi(\mathbf{k})\rangle$ ise

$$h(\mathbf{k}) |\phi(\mathbf{k})\rangle = E(\mathbf{k}) |\phi(\mathbf{k})\rangle \quad (3.9)$$

$$h(-\mathbf{k}) \Theta |\phi(\mathbf{k})\rangle = E(-\mathbf{k}) \Theta |\phi(\mathbf{k})\rangle \quad (3.10)$$

olur. Bunun sonucunda,

$$E(-\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}) \quad (3.11)$$

sağlandığı noktalarda Kramers dejenereliği ortaya çıkmaktadır.

4. DIRAC DENKLEMİ

Topolojik yalıtkanlar Dirac denkleminin çözümlerine dayanır. Topolojik yalıtkanların güçlü spin-yörünge etkileşmesine sahip olması görelilik olmayan limitte Dirac denkleminin bir sonucudur (Winkler 2003).

Spini 1/2 olan temel parçacığı tanımlayan görelilik kuantum mekaniksel dalga fonksiyonu için Dirac Hamiltoniyeni (Dirac 1928) aşağıda tanımlamıştır:

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H_D\Psi \quad ; (\hbar = 1) \quad (4.1)$$

$$H_D = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2, \quad (4.2)$$

α ve β Dirac matrisleridir ve Pauli spin matrisleri cinsinden yazılabilir:

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

$\mathbf{p} = -i\nabla$, $\alpha_i = \sigma_x \otimes \sigma_i$, $\beta = \sigma_z \otimes \sigma_0$ ile tanımlanır.

Durağan durum çözümleri dikkate alınırsa,

$$\Psi(r, t) = \Phi(r)e^{-iEt} \quad (4.4)$$

$$(c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2) \Phi = E\Phi \quad (4.5)$$

biçiminde özdeğer denklemi elde edilir. Burada $\Phi(r)$ dört bileşenli sütun matris ve Dirac denklemi 4×4 matris denklemdir. Serbest parçacık için Dirac denklemi çözüldüğünde ikisi pozitif enerjili ve ikisi negatif enerjili olmak üzere dört çözüm verir. Pozitif enerjili çözümler fermiyonları, negatif enerjili çözümler anti-fermionları temsil eder.

Dirac denklemi bazı deęişikliklerle $c \rightarrow v$ yazılarak, iletkenlik ve valans bandındaki elektron ve deşikleri temsil edecek biçimde bir, iki ve üç boyutta çözümlenerek yoğun madde fiziğinde kullanılabilir. Yapılan deęişiklikler ve eklenen terimler nedeniyle Dirac-tipi denklem ya da modifiye Dirac denklemi olarak isimlendirilir. Özellikle topolojik yalıtkanlar ve topolojik süperiletken çözümlerinde çok yoğun kullanım alanına sahiptir.

4.1 Dirac Denkleminin Bağlı Durum Çözümleri

Bir boyutta sıfır enerji çözümleri

Dirac-tipi denklemin sıfır enerji çözümleri, topolojik yalıtkan, topolojik süperiletken ve Majorana fermiyonlarının sıfır modlarını açıklamak için temel çalışmalardır:

$$h = v \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m v^2. \quad (4.6)$$

Burada tek boyutlu bir örnek ele alınır, çözümde $\boldsymbol{\alpha}$ ve $\mathbf{p}$ tek boyutta yazılır:

$$h(x) = v \alpha_x p_x + \beta m(x) v^2, \quad (4.7)$$

$p_x = -i\hbar \partial_x$, $\alpha_x = \sigma_x$, $\beta = \sigma_z$ ifadeleri (4.7) de yerine yazılır. Burada $m(x)$ terimi potansiyel gibi düşünülebilir ve sınır koşulları aşağıdaki gibi uygulanır.

$$m(x) = \begin{cases} -m_1 & , x < 0 \\ +m_2 & , x > 0 \end{cases} \quad (4.8)$$

Sınır koşulları yerine yazıldığında $x < 0$ için özdeğer denklemi yazılır:

$$h_1(x) = -i\hbar v \sigma_x \partial_x - m_1 v^2 \sigma_z \quad (4.9)$$

$$h_1(x) = \begin{pmatrix} -m_1 v^2 & -i\hbar v \partial_x \\ -i\hbar v \partial_x & m_1 v^2 \end{pmatrix}, \quad \psi(x) = e^{\lambda x} \begin{pmatrix} \varphi_1^- \\ \varphi_2^- \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

$$h_1(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (4.11)$$

$$[h_1(x) - E\mathbb{1}]\psi(x) = 0$$

$$\begin{pmatrix} -m_1v^2 - E & -i\hbar v\lambda_- \\ -i\hbar v\lambda_- & m_1v^2 - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1^- \\ \varphi_2^- \end{pmatrix} = 0 \quad (4.12)$$

matris denklemi sonucunda λ_- ifadesi bulunur:

$$\lambda_- = \pm \frac{\sqrt{m_1^2v^4 - E^2}}{\hbar v}.$$

$x > 0$ için sınır koşulları uygulanır ve aynı işlemler yapılır.

$$h_2(x) = -i\hbar v\sigma_x\partial_x + m_2v^2\sigma_x \quad (4.13)$$

$$h_2(x) = \begin{pmatrix} m_2v^2 & -i\hbar v\partial_x \\ -i\hbar v\partial_x & -m_2v^2 \end{pmatrix}; \quad \psi'(x) = e^{-\lambda_+x} \begin{pmatrix} \varphi_1^+ \\ \varphi_2^+ \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

(4.11) gibi özdeğer denklemi yazılarak λ_+ bulunur :

$$\lambda_+ = \pm \frac{\sqrt{m_2^2v^4 - E^2}}{\hbar v}.$$

$x = 0$ noktasında dalga fonksiyonları eşit olmalı. (4.10) ve (4.14) ile verilen dalga fonksiyonları eşitlenir :

$$\psi(x=0) = \psi'(x=0)$$

$$\begin{pmatrix} \varphi_1^- \\ \varphi_2^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_1^+ \\ \varphi_2^+ \end{pmatrix}. \quad (4.15)$$

Önceki işlemlerden φ_1^- , φ_2^- cinsinden ve φ_1^+ , φ_2^+ cinsinden yazılabilir. Elde edilenler (4.15) ifadesinde yerine yazılır ise enerji sıfır bulunur. Dalga fonksiyonu boylandırılır ve normalizasyon katsayısı ile spinörler,

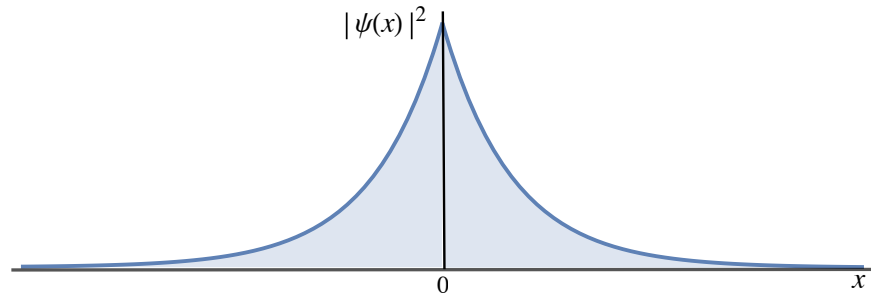
$$\psi(x) = \left(\frac{v}{\hbar} \frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_2)} \right)^{1/2} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} e^{m(x)vx/\hbar} \quad (4.16)$$

şeklinde verilir. N normalizasyon sabiti olmak üzere, $E = 0$ durumunda çözümler:

$$\psi(x) = N \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} e^{m_1 vx/\hbar} ; x < 0 \quad (4.17)$$

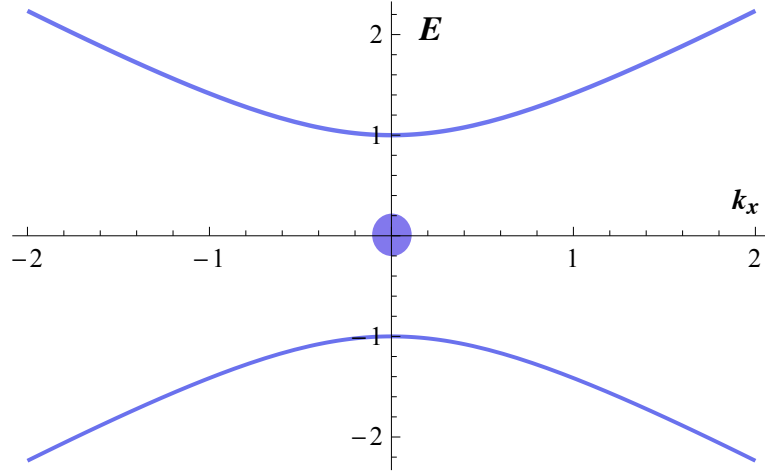
$$\psi(x)' = N \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} e^{-m_2 vx/\hbar} ; x > 0 \quad (4.18)$$

formuna girer ve aşağıdaki Şekil 4.1' de görüldüğü gibi $x = 0$ etrafında bağlı durum oluşturur.



Şekil 4.1 Konumun bir fonksiyonu olarak dalga fonksiyonu olasılık yoğunluğu

Denklemin $x < 0$ ve $x > 0$ bölgedeki davranışı topolojik olarak iki farklı durumunu temsil eder. Sıfır enerji bağlı durumu iki bölgenin sınırında $x = 0$ oluşur. Bu uç çözüm (end state) sabit noktadadır ve ilerlemez. Topolojik yalıtkan çözümlerinin temelini oluşturur.



Şekil 4.2 Sıfır enerji bağlı durumu ile birlikte dağılım bağıntısı

Aynı Dirac-tipi denkleme bulk çözümü olarak ($E \neq 0$) $e^{ik_x x}$ periyodik sınır koşulunu sağlayan bir çözüm önerirsek katsayı determinantı yöntemiyle bir yalıtkan enerji dağılım bağıntısını elde ederiz :

$$E = \pm \sqrt{k_x^2 + m^2 v^2} \quad ; (m_1 = m_2 = m \text{ alındı}) . \quad (4.19)$$

Sıfır enerji bağlı durumu ile birlikte dağılım bağıntısı Şekil 4.2' de görülmektedir.

4.2 Modifiye Dirac Denklemi

Dirac denkleminde bilindiği gibi enerji bant aralığında veya pozitif ve negatif kütle olan iki ortam arasında bağlı durumların bir çözümü vardır. Topolojik yalıtkan fazı kütle teriminin işareti ile ilgili bir durumdur. Dirac denkleminde ise topolojik olarak sıradan olup olmama durumu kütle teriminin işaretinden kolayca çıkarılamaz. Bu nedenle topolojik yalıtkan fazı açıklamak için Dirac denklemine ek bir terim tanımlanması gerekmektedir (Shen vd. 2011).

Bu ek terimle birlikte yeniden yazılan Hamilton işlemcisi :

$$H = v\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + (mv^2 - B\mathbf{p}^2)\beta. \quad (4.20)$$

$-B\mathbf{p}^2$ karesel terimdir. mv^2 terimi bant aralığını temsil eder; m kütle ve v hız boyutunda olduğundan B^{-1} kütle boyutundadır.

Bir boyutta modifiye Dirac denklemi

Bu kısımda modifiye Dirac denkleminin bir boyutta çözümlerine bakılacaktır. Dalga fonksiyonunun sınırlara yakın yerlerde sıfır olması beklenir. Bir boyutta Hamiltoniye aşağıdaki gibi yazılır.

$$h(x) = v\alpha_x p_x + (mv^2 - Bp_x^2)\beta \quad (4.21)$$

Yukarıdaki denklemde daha önce tanımlanan α_x , β matrisleri ve $p_x = -i\hbar\partial_x$ yerine yazılır. (4.21) deki ifadenin matris formu aşağıda verilmiştir.

$$h(x) = \begin{bmatrix} mv^2 + B\hbar^2\partial_x^2 & 0 & 0 & -i\hbar\partial_x v \\ 0 & mv^2 + B\hbar^2\partial_x^2 & -i\hbar\partial_x v & 0 \\ 0 & -i\hbar\partial_x v & -mv^2 - B\hbar^2\partial_x^2 & 0 \\ -i\hbar\partial_x v & 0 & 0 & -mv^2 - B\hbar^2\partial_x^2 \end{bmatrix} \quad (4.22)$$

Sınır koşullarına göre x sonsuza giderken dalga fonksiyonu sıfır olmalı. Bu nedenle dalga fonksiyonu $\psi(x) = ue^{-\lambda x}$ şeklinde yazılabilir. Bu verilenler özdeğer denkleminde yerine yazılır.

$$h(x)e^{-\lambda x}u = Ee^{-\lambda x}u; \quad (4.23)$$

$$\begin{pmatrix} H_{11} - E & 0 & 0 & i\hbar\lambda v \\ 0 & H_{22} - E & i\hbar\lambda v & 0 \\ 0 & i\hbar\lambda v & H_{33} - E & 0 \\ i\hbar\lambda v & 0 & 0 & H_{44} - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} = 0 \quad (4.24)$$

İçerisindeki ifadeler ; $H_{11} = H_{22} = mv^2 + B\hbar^2\lambda^2$, $H_{33} = H_{44} = -mv^2 - B\hbar^2\lambda^2$,
dir ve matris denkleminde spinörleri içeren ifadeler şöyle bulunur:

$$[mv^2 + B\hbar^2\lambda^2 - E]a_1 + [i\hbar v\lambda]a_4 = 0 \quad (4.25)$$

$$[mv^2 + B\hbar^2\lambda^2 - E]a_2 + [i\hbar v\lambda]a_3 = 0 \quad (4.26)$$

$$[i\hbar v\lambda]a_2 - [mv^2 + B\hbar^2\lambda^2 + E]a_3 = 0 \quad (4.27)$$

$$[i\hbar v\lambda]a_1 - [mv^2 + B\hbar^2\lambda^2 + E]a_4 = 0 \quad (4.28)$$

(4.25)' deki a_4 ifadesi, (4.28)' de yerine yazılır ise a_1 ve diğer spinörler de buradan yola çıkılarak elde edilir. Bu şekilde λ ifadesi bulunabilir:

$$[i\hbar v\lambda]^2 a_1 + [(mv^2 + B\hbar^2\lambda^2)^2 - E^2] a_1 = 0, \quad (4.29)$$

$$\lambda_{\pm}^2 = \frac{v^2}{2B^2\hbar^2} \left[(1 - 2mB) \pm \sqrt{1 - 4mB + \frac{4E^2 B^2}{v^4}} \right]. \quad (4.30)$$

Görüldüğü üzere λ iki değer alır, yeni dalga fonksiyonu

$$\psi(x) = Au_1 e^{-\lambda_1 x} + Bu_2 e^{-\lambda_2 x}, \quad (4.31)$$

şeklinde olmalıdır.

Dalga fonksiyonu için sınır şartları yazılır:

$$\psi(x=0) = \psi(x \rightarrow +\infty) = 0. \quad (4.32)$$

Böylece $x \rightarrow 0$ iken, $\psi(x=0) = A + B = 0 \Rightarrow A = -B$ olur ve çözüm yok olmaz.

Bu koşula göre $u_1 = u_2 = u$ olmalı:

$$\psi(x) = Au(e^{-\lambda_1 x} - e^{-\lambda_2 x}). \quad (4.33)$$

(4.31) ifadesi $\psi(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x)$ şeklinde yazılır ise, (4.23) ile verilen özdeğer denkleminde bu dalga fonksiyonları yerine yazılır, $h_1(x)\psi_1(x) = E\psi_1(x)$, $h_2(x)\psi_2(x) = E\psi_2(x)$. (4.21) deki ifade λ_1 ve λ_2 için,

$$h_1(x) = i\hbar v \lambda_1 \alpha_x + (mv^2 + \hbar^2 B \lambda_1^2) \beta, \quad (4.34)$$

$$h_2(x) = i\hbar v \lambda_2 \alpha_x + (mv^2 + \hbar^2 B \lambda_2^2) \beta. \quad (4.35)$$

Bu iki Hamiltoniyen yalnızca λ indisleri farklı olan iki matristir. Kolaylık olması için her ikisi de aşağıdaki gibi aynı matrisin içinde ifade edilmiştir.

$$h_{1,2}(x) = \begin{bmatrix} mv^2 + B\hbar^2 \lambda_{1,2}^2 & 0 & 0 & i\hbar v \lambda_{1,2} \\ 0 & mv^2 + B\hbar^2 \lambda_{1,2}^2 & i\hbar v \lambda_{1,2} & 0 \\ 0 & i\hbar v \lambda_{1,2} & -mv^2 - B\hbar^2 \lambda_{1,2}^2 & 0 \\ i\hbar v \lambda_{1,2} & 0 & 0 & -mv^2 - B\hbar^2 \lambda_{1,2}^2 \end{bmatrix} \quad (4.36)$$

Önceki adımlara benzer olarak $(h_{1,2}(x) - E\mathbb{1})\psi = 0$ hesaplanır:

$$[mv^2 + B\hbar^2 \lambda_{1,2}^2 - E]a_1 + [i\hbar v \lambda_{1,2}]a_4 = 0 \quad (4.37)$$

$$[mv^2 + B\hbar^2 \lambda_{1,2}^2 - E]a_2 + [i\hbar v \lambda_{1,2}]a_3 = 0 \quad (4.38)$$

$$[i\hbar v \lambda_{1,2}]a_2 - [mv^2 + B\hbar^2 \lambda_{1,2}^2 + E]a_3 = 0 \quad (4.39)$$

$$[i\hbar v \lambda_{1,2}]a_1 - [mv^2 + B\hbar^2 \lambda_{1,2}^2 + E]a_4 = 0 \quad (4.40)$$

Yukarıdaki ifadelerden enerji şu şekilde bulunur:

$$E = mv^2 - B\hbar^2 \lambda_1 \lambda_2 \quad (4.41)$$

Burada $E = 0$ iken, $\lambda_1 \lambda_2 = mv^2/B\hbar^2$ olur. (4.30) ifadesi ise

$$\lambda_{1,2}^2 = \frac{v^2}{4B^2\hbar^2} \left[Z^2 + 1 \pm 2Z \right] \quad (4.42)$$

şeklinde bulunur ve $Z^2 = 1 - 4mB$ olmak üzere,

$$\lambda_{1,2}^2 = \frac{v^2}{4B^2\hbar^2} (1 \pm Z)^2 \quad ; \quad \lambda_1 = \pm \text{sgn}(B) \frac{v}{2B\hbar} (1 + Z), \quad (4.43)$$

$$\lambda_2 = \pm \text{sgn}(B) \frac{v}{2B\hbar} (1 - Z) \quad (4.44)$$

halini alır. $x \rightarrow \infty$ ' da çözümlerin azalması için λ_1 ve λ_2 ' nin pozitif olan değerlerini alırız. Dalga fonksiyonuna ait (4.37), (4.40) ve (4.38), (4.39) ifadelerinde spinörler yalnız bırakılıp $\lambda_{1,2}$ kökleri yerine yazıldığında $ia_1 = \text{sgn}(B)a_4$ ve $ia_2 = \text{sgn}(B)a_3$ bulunur. C normalizasyon sabiti olmak üzere spinörler yazılır:

$$\psi_1(x) = \frac{C}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \text{sgn}(B) \\ 0 \\ 0 \\ i \end{bmatrix} (e^{-\lambda_1 x} - e^{-\lambda_2 x}), \quad (4.45)$$

$$\psi_2(x) = \frac{C}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ \text{sgn}(B) \\ i \\ 0 \end{bmatrix} (e^{-\lambda_1 x} - e^{-\lambda_2 x}). \quad (4.46)$$

λ_1 ve λ_2 köklerinin her ikisinin de reel ve pozitif olması gerektiğinden $\lambda_{1,2}$ içerisindeki terim $Z = \sqrt{1 - 4mB} < 1$ olmalıdır. Bunun için m ve B 'nin işareti önemlidir. Dalga fonksiyonu sınırlara yakın yerlerde yoğunlaşır ve uzaklaştıkça üstel biçimde azalır. Uç durumları karakterize eden iki önemli uzunluk ölçeği λ_1^{-1} ve λ_2^{-1} dir. $B \rightarrow 0$ iken $\lambda_1^{-1} = B\hbar/v \rightarrow 0$, $\lambda_2^{-1} = \hbar/mv$ ve $E = mv^2$ olur. Sınır koşulları sağlanmaz.

$m \rightarrow 0$ durumu ele alınırsa $\lambda_1^{-1} = B\hbar/v$, $\lambda_2^{-1} = \hbar/mv \rightarrow +\infty$ olur. Yani $m = 0$ durumunda uç durumlar yok olur ve bir topolojik kuantum faz geçişi mevcuttur.

Topolojik yalıtkan çözüm koşulunun $mB > 0$ 'dir. $mB < 0$ durumu ise sıradan yalıtkanı açıklar. Chern sayısı spin-yukarı ve spin-aşağı durumları için ayrı ayrı hesaplanır:

$$n_+ = [\text{sgn}(m) + \text{sgn}(B)] \frac{1}{2} \quad (4.47)$$

$$n_- = -[\text{sgn}(m) + \text{sgn}(B)] \frac{1}{2} \quad (4.48)$$

- m ile B aynı işaretli olduğunda, $n_{\pm} = \pm 1$ bulunur. Topolojik yalıtkanlıdır.
- m ile B zıt işaretli olduğunda, $n_{\pm} = 0$ bulunur. Normal yalıtkanlı çözümdür.

Buradaki çözümler tek boyutlu denklemi daha yüksek boyutlu sistemlere türetmek için kullanılabilir. Hamiltoniyen iki ve üç boyutta yazılarak topolojik yalıtkanların kenar ve yüzey durumları için çözümler elde edilecektir.

İki boyutta modifiye Dirac denklemi

İki boyutta Hamiltoniyen yazılırken, p ve α 'nın iki bileşeni vardır. $p_x = -i\hbar\partial_x$, $p_x^2 = -\hbar^2\partial_x^2$ ve y yönünde momentum değeri $p_y = \hbar k_y$ şeklinde sabit olup, iyi kuantum sayısıdır.

$$h(x, y) = v [\alpha_x p_x + \alpha_y p_y] + [mv^2 - B(p_x^2 + p_y^2)] \beta \quad (4.49)$$

Denklem $k_y = 0$ ' da bir boyutlu denklem ile aynı forma sahip olur. Çözümün x ' e bağımlı kısmı bir boyut için yazılan (4.21)' e eşit olur. Buradan yararlanılıp bir boyutta elde edilen iki çözüm $\psi_1(x)$ ve $\psi_2(x)$ baz olarak alınabilir. O halde, denklemin sadece y ' ye bağımlı kısmı şöyledir:

$$H_{2B} = v\alpha_y p_y - Bp_y^2 \beta. \quad (4.50)$$

Bu denklem tek boyutta daha önceden yazılan Hamiltoniyenin pertürbasyonu olarak kabul edilir. Bu şekilde helisel kenar durumları için tek boyutta bir etkin model yazılır:

$$H_{etkin} = \begin{pmatrix} \langle \psi_1 | H_0 + H_{2B} | \psi_1 \rangle & \langle \psi_1 | H_0 + H_{2B} | \psi_2 \rangle \\ \langle \psi_2 | H_0 + H_{2B} | \psi_1 \rangle & \langle \psi_2 | H_0 + H_{2B} | \psi_2 \rangle \end{pmatrix}. \quad (4.51)$$

H_0 ile tanımlanan Hamiltoniyen $h(x, y)$ ' nin x ' e bağılı kısmıdır ve etkin değere buradan gelen katkı sıfırdır. Bu nedenle sadece H_{2B} ifadesi açıkça yazılır ise,

$$H_{2B} = v \begin{pmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{pmatrix} p_y - Bp_y^2 \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\sigma_0 \end{pmatrix}, \quad (4.52)$$

$$= \begin{pmatrix} -Bp_y^2 & 0 & 0 & -ip_y v \\ 0 & -Bp_y^2 & ip_y v & 0 \\ 0 & -ip_y v & Bp_y^2 & 0 \\ ip_y v & 0 & 0 & Bp_y^2 \end{pmatrix}. \quad (4.53)$$

(4.53) ifadesi ve daha önce bulunan (4.45)' deki ψ_1 , (4.46)' deki ψ_2 dalga fonksiyonları ile matris bileşenleri şu hale gelir:

$$H_{etkin} = \begin{pmatrix} p_y v \operatorname{sgn}(B) & 0 \\ 0 & -p_y v \operatorname{sgn}(B) \end{pmatrix} \quad (4.54)$$

$$= p_y v \operatorname{sgn}(B) \sigma_z . \quad (4.55)$$

Özdeğer denklemi yardımı ile enerji dağınımı bulunur:

$$H_{etkin} \psi = E \psi ; \quad (4.56)$$

$$\det |H_{etkin} - E \mathbb{1}| = 0 \quad (4.57)$$

$$E_{\pm} = \pm v p_y \operatorname{sgn}(B) , \quad (4.58)$$

Enerjinin B nin işaretine bağımlı olduğu $\operatorname{sgn}(B)$ terimi ile görülmektedir. (4.49) denkleminde, bir boyutlu versiyonuna yapılan işlemlerin aynısı yapılarak $\lambda_{1,2}$ köklerini bulmak mümkündür.

$$\lambda_{1,2}^2 = \frac{p_y^2}{\hbar^2} + \frac{v^2}{2\hbar^2 B^2} \left[(1 - 2mB) \pm \sqrt{1 - 4mB + 4B^2 p_y^2 / v^2} \right] \quad (4.59)$$

Görüldüğü gibi bu sefer fazladan terim $p_y^2 / \hbar^2 = k_y^2$ vardır. Aynı şekilde dalga fonksiyonunun da x ' e bağlı kısmı denklem (4.33) ile aynı formdadır. y yönünde momentum sabit olduğu için $\psi(x, y) = Au(e^{-\lambda_1 x} - e^{-\lambda_2 x})e^{ik_y y}$ şeklinde yazılır.

ψ_1 pozitif enerjili ve ψ_2 negatif enerjili olmak üzere dalga fonksiyonlarının enerjileri farklıdır:

$$\psi_1(x, y) = \frac{C}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \text{sgn}(B) \\ 0 \\ 0 \\ i \end{bmatrix} (e^{-\lambda_1 x} - e^{-\lambda_2 x}) e^{ik_y y}, \quad (4.60)$$

$$\psi_2(x, y) = \frac{C}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ \text{sgn}(B) \\ i \\ 0 \end{bmatrix} (e^{-\lambda_1 x} - e^{-\lambda_2 x}) e^{ik_y y}. \quad (4.61)$$

(4.58) deki enerji ifadesine tekrar dönülür ise, enerjinin pozitif ve negatif değeri vardır ve hıza bağımlı çıkmıştır. Pozitif hızlı elektronlar ($+v$) ve negatif hızlı elektronlar ($-v$) farklı durumları temsil ederler. İki farklı duruma sahip bu elektronlar sınırlarda bir helisel kenar durumu çiftini oluştururlar.

Üç boyutta modifiye Dirac denklemi ve yüzey durumu

Üç boyutta modifiye Dirac Hamiltoniyeninde, $x = 0$ da $y - z$ düzlemindeki yüzey durumlarına bakılır. Momentum $y - z$ boyunca iyi kuantum sayılarıdır, bunların özdeğerleri $\hbar k_y$ ve $\hbar k_z$; p_y ve p_z momentum operatörlerinin yerine yazılarak tüm işlemler yapılır.

$$h(x, y, z) = v(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}) + [mv^2 - B\mathbf{p}^2]\beta \quad (4.62)$$

$$\mathbf{p}^2 = -\hbar^2 \partial_x^2 + p_y^2 + p_z^2; \quad p_x = -i\hbar \partial_x, \quad p_y = \hbar k_y, \quad p_z = \hbar k_z.$$

Buna göre üç boyutlu Hamiltoniyen aşağıdaki gibi yazılır.

$$h(x, y, z) = v(-i\hbar \alpha_x \partial_x + \alpha_y p_y + \alpha_z p_z) + [mv^2 - B(-\hbar^2 \partial_x^2 + p_y^2 + p_z^2)]\beta \quad (4.63)$$

Bir önceki kısımda enerji bulunurken, $p_x = 0$ alınıp denklemin sadece y bağımlı kısmı alınıp H_{2B} yazılmış ve bir boyutta elde edilen dalga fonksiyonları izdüşürülerek etkin Hamiltoniyen bulunmuştu. Burada da aynı yollar izlenerek yaklaşık bir çözüm bulunabilir. Fakat en başta kullanılan yöntem ile önce (4.63) ile verilen Hamiltoniyen özdeğer denklemi ile çözülüp λ kökleri bulunur. Daha sonra dalga fonksiyonu sınır koşullarına uygun yazılıp genel çözümden spinörler elde edilecektir. Son olarak λ kökleri yazılarak enerji dağılımı elde edilir.

Dalga fonksiyonu $\psi(x, y, z) = ue^{-\lambda x}e^{i(k_y y + k_z z)}$ şeklinde olup, u spinörleri temsil eder.

$$h(x, y, z)\psi = E\psi \quad (4.64)$$

$$h(x, y, z)\psi = \left[v(-i\hbar\lambda\alpha_x + \alpha_y p_y + \alpha_z p_z) + (mv^2 + B\hbar^2\lambda^2 - B(p_y^2 + p_z^2)) \beta \right] \psi \quad (4.65)$$

Burada momentumun x bileşenindeki türev operatörü λ parametresini getireceğinden $h(\lambda)$ indirgenmiş Hamiltoniyen olarak tanımlanabilir.

$$h(\lambda) = v(i\hbar\lambda\alpha_x + \alpha_y p_y + \alpha_z p_z) + [mv^2 + B\hbar^2\lambda^2 - B(p_y^2 + p_z^2)] \beta \quad (4.66)$$

$$\begin{aligned} &= i\hbar\lambda v \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix} + vp_y \begin{pmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{pmatrix} + vp_z \begin{pmatrix} 0 & \sigma_z \\ \sigma_z & 0 \end{pmatrix} \\ &+ [mv^2 + B\hbar^2\lambda^2 - B(p_y^2 + p_z^2)] \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\sigma_0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.67)$$

$$h(\lambda) = \begin{bmatrix} H_{11} & 0 & vp_z & iv(\hbar\lambda - p_y) \\ 0 & H_{22} & iv(\hbar\lambda + p_y) & -vp_z \\ vp_z & iv(\hbar\lambda - p_y) & H_{33} & 0 \\ iv(\hbar\lambda + p_y) & -vp_z & 0 & H_{44} \end{bmatrix} \quad (4.68)$$

$$H_{11} = H_{22} = [mv^2 + B\hbar^2\lambda^2 - B(p_y^2 + p_z^2)]$$

$$H_{33} = H_{44} = -[mv^2 + B\hbar^2\lambda^2 - B(p_y^2 + p_z^2)]$$

$h(\lambda)$ en sade haliyle yukarıdaki gibi yazılır ve (4.64) ifadesine dönülür ise aşağıdaki karakteristik denklemin çözülmesiyle λ kökleri bulunur.

$$\det |h(\lambda) - E\mathbb{1}| = 0 \quad (4.69)$$

$$B^2(p_\perp^2 - \lambda^2)^2 + 2Bmv^2(\lambda^2 - p_\perp^2) - E^2 + v^2(mv^2 + p_\perp^2 - \lambda^2) = 0$$

$$p_\perp^2 = p_y^2 + p_z^2$$

$$; \lambda_{1,2}^2 = \frac{v^2}{2B^2} \left[\left(1 - 2mB + \frac{2B^2 p_\perp^2}{v^2} \right) \pm \sqrt{1 - 4mB + \frac{4E^2 B^2}{v^4}} \right]$$

ifadesinde düzenlemeler yapılır, $Z = \sqrt{1 - 4mB + \frac{4E^2 B^2}{v^4}}$ ve $c^2 = \frac{4B^2}{v^4}(p_\perp^2 v^2 - E^2)$ tanımlamaları yerine yazılarak λ en sade hali ile yazılır:

$$\lambda_{1,2}^2 = \frac{v^2}{4B^2} [(1 \pm Z)^2 + c^2]$$

$$\lambda_{1,2} = \pm \text{sgn}(B) \frac{v}{2B} [(1 \pm Z)^2 + c^2]^{1/2} \quad (4.70)$$

Bundan sonraki işlemlerde B pozitif alınmıştır ve $\lambda_{1,2}$ 'nin reel ve pozitif değerleri kullanılacaktır. O halde, dalga fonksiyonuna sınır koşulları uygulandığında genel çözüm:

$$\psi(x, y, z) = (u_1 e^{-\lambda_1 x} - u_2 e^{-\lambda_2 x}) e^{i(k_y y + k_z z)} \quad (4.71)$$

$$h(\lambda_1)u_1 = Eu_1 \quad (4.72)$$

$$h(\lambda_2)u_2 = Eu_2 \quad (4.73)$$

Sınır koşullarından, $u_1 = u_2 = u = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & a_3 & a_4 \end{pmatrix}^T$ yazılabilir.

$$h(\lambda_1) = v(i\hbar\lambda_1\alpha_x + \alpha_y p_y + \alpha_z p_z) + [mv^2 + B\hbar^2\lambda_1^2 - Bp_\perp^2] \beta \quad (4.74)$$

$$h(\lambda_2) = v(i\hbar\lambda_2\alpha_x + \alpha_y p_y + \alpha_z p_z) + [mv^2 + B\hbar^2\lambda_2^2 - Bp_\perp^2] \beta \quad (4.75)$$

Bu ifadelerin determinantları daha önceden (4.68) ile yazılmıştır. Böylece (4.74) açık bir şekilde yazılarak aşağıdaki ifadeler elde edilir:

$$(H_{11}^1 - E)a_1 + vp_z a_3 + iv(\hbar\lambda_1 - p_y)a_4 = 0 \quad (4.76)$$

$$(H_{22}^1 - E)a_2 + iv(\hbar\lambda_1 + p_y)a_3 - vp_z a_4 = 0 \quad (4.77)$$

$$vp_z a_1 + iv(\hbar\lambda_1 - p_y)a_2 + (H_{33}^1 - E)a_3 = 0 \quad (4.78)$$

$$iv(\hbar\lambda_1 + p_y)a_1 - vp_z a_2 + (H_{44}^1 - E)a_4 = 0 \quad (4.79)$$

H_{11} , H_{22} , H_{33} ve H_{44} matris elemanları daha önce λ için verilmiştir. Burada aynı ifadelerin üzerine λ_1 ve λ_2 için sırasıyla 1 ve 2 yazılmıştır. Ayrıca $\lambda_{1,2}$ içerisindeki enerji değerleri karesel biçimde bulunduğundan, enerjinin pozitif ve negatif değerinin belirtilmesine ihtiyaç yoktur. Aynı adımlar (4.75) için uygulanır ve yine katsayılar determinantına başvurulur birbilerine bağımlı ifadeler elde edilir.

$$(H_{11}^2 - E)a_1 + vp_z a_3 + iv(\hbar\lambda_2 - p_y)a_4 = 0 \quad (4.80)$$

$$(H_{22}^2 - E)a_2 + iv(\hbar\lambda_2 + p_y)a_3 - vp_z a_4 = 0 \quad (4.81)$$

$$vp_z a_1 + iv(\hbar\lambda_2 - p_y)a_2 + (H_{33}^2 - E)a_3 = 0 \quad (4.82)$$

$$iv(\hbar\lambda_2 + p_y)a_1 - vp_z a_2 + (H_{44}^2 - E)a_4 = 0 \quad (4.83)$$

Yukarıda verilen iki denklem grubundan herhangi iki sıra alınıp determinantı bulunabilir:

$$[H_{11}^1 - H_{11}^2]a_1 + [iv\hbar(\lambda_1 - \lambda_2)]a_4 = 0 \quad (4.84)$$

$$[iv\hbar(\lambda_1 - \lambda_2)]a_1 + [H_{44}^1 - H_{44}^2]a_4 = 0 \quad (4.85)$$

$$\begin{pmatrix} H_{11}^1 - H_{11}^2 & iv\hbar(\lambda_1 - \lambda_2) \\ iv\hbar(\lambda_1 - \lambda_2) & H_{44}^1 - H_{44}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_4 \end{pmatrix} = 0 \quad (4.86)$$

Daha önceden bilinen aşağıdaki ifadeler yerine yazılarak kökler için bir ifade bulunur.

$$\begin{aligned} H_{11}^1 &= (mv^2 + B\hbar^2\lambda_1^2 - Bp_\perp^2) ; \quad H_{11}^1 = -H_{44}^1, \quad H_{11}^2 = -H_{44}^2 \\ (H_{11}^1 - H_{11}^2)^2 - v^2\hbar^2(\lambda_1 - \lambda_2)^2 &= 0 \\ (\lambda_1 - \lambda_2)^2 [B^2(\lambda_1 + \lambda_2)^2 - v^2] &= 0 \quad ; \quad (\hbar = 1) \\ (\lambda_1 + \lambda_2)^2 &= \frac{v^2}{B^2} \end{aligned}$$

Denklem (4.70) ile verilen λ_1 ve λ_2 ifadeleri bulunan koşulda yerine yazılır :

$$\begin{aligned} \frac{v^2}{4B^2} \left[((1+Z)^2 + c^2)^{1/2} + ((1-Z)^2 + c^2)^{1/2} \right]^2 &= \frac{v^2}{B^2} \\ \left[\sqrt{(1+Z)^2 + c^2} + \sqrt{(1-Z)^2 + c^2} \right]^2 &= 4 \end{aligned}$$

$c^2 = 0$ olması hâlinde bu sonuç sağlanır. Daha önce tanımlanan c^2 ifadesi sıfıra eşitlenir ise enerji dağılımı bağıntısı şu şekilde elde edilir:

$$E_\pm = \pm p_\perp v . \quad (4.87)$$

(4.84) denkleminde a_1 ve a_4 spinörleri, (4.77) ve (4.81) ifadelerinin farkı alınır ise a_2 ve a_3 spinörleri arasındaki ilişki $a_4 = ia_1$ ve $a_3 = ia_2$ şeklinde bulunur. Bu spinörlerin hepsinin a_1 cinsinden yazılması için (4.76) denkleminde a_4 ve aşağıda verilen enerji ifadesi yerine yazılır ise çözüm elde edilir. Enerjinin hem pozitif hem de negatif değerleri için spinörler ayrı ayrı bulunur ve bir takım düzenlemeler yapılır ise

$$E_+ = +p_\perp v \text{ için } ; \quad a_3 = \frac{(p_\perp - p_y)}{p_z} a_1 , \quad a_2 = -i \frac{(p_\perp - p_y)}{p_z} a_1 \quad (4.88)$$

$$E_- = -p_\perp v \text{ için } ; \quad a_3 = -\frac{(p_\perp + p_y)}{p_z} a_1 , \quad a_2 = i \frac{(p_\perp + p_y)}{p_z} a_1 . \quad (4.89)$$

ifadeleri elde edilir. Böylece enerjiler için spinörlerin hepsi a_1 cinsinden yazılır. (4.71)'deki dalga fonksiyonunun $\psi(x=0) = 0$ olması koşulu göz önünde bulundurularak $u_1 = u_2 = u$ yazılmıştı.

Burada da E_+ ve E_- çözümleri için $u(E_+) = u^+$ ve $u(E_-) = u^-$ ile gösterilmiştir. $p_\perp = \sqrt{p_y^2 + p_z^2}$, $p_y = p_\perp \cos \theta$, $p_z = p_\perp \sin \theta$, $\tan \theta = p_z/p_y$ ifadeleri kullanılarak yarım açı formülleri yardımıyla spinörler yeniden düzenlenir :

$$u^+ = a_1 \begin{bmatrix} 1 \\ i \tan \frac{\theta}{2} \\ \tan \frac{\theta}{2} \\ i \end{bmatrix} = \frac{a_1}{\cos \frac{\theta}{2}} \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ -\sin \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \\ i \cos \frac{\theta}{2} \end{bmatrix}, \quad (4.90)$$

$$u^- = a_1 \begin{bmatrix} 1 \\ i \cot \frac{\theta}{2} \\ \cot \frac{\theta}{2} \\ i \end{bmatrix} = \frac{a_1}{\sin \frac{\theta}{2}} \begin{bmatrix} \sin \frac{\theta}{2} \\ i \cos \frac{\theta}{2} \\ -\cos \frac{\theta}{2} \\ i \sin \frac{\theta}{2} \end{bmatrix}. \quad (4.91)$$

Böylece dalga fonksiyonunun negatif ve pozitif enerjili çözümleri şunlardır :

$$\psi_1 = C^+ \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ -i \sin \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \\ i \cos \frac{\theta}{2} \end{bmatrix} (e^{-\lambda_1 x} - e^{\lambda_2 x}) e^{i(k_y y + k_z z)}, \quad (4.92)$$

$$\psi_2 = C^- \begin{bmatrix} \sin \frac{\theta}{2} \\ i \cos \frac{\theta}{2} \\ -\cos \frac{\theta}{2} \\ i \sin \frac{\theta}{2} \end{bmatrix} (e^{-\lambda_1 x} - e^{\lambda_2 x}) e^{i(k_y y + k_z z)}. \quad (4.93)$$

$mB > 0$ olduğunda modifiye Dirac denkleminde daima sınır veya yüzey durumları vardır. Sonuç olarak elde edilen çözümlerden, bir boyutta sınırlarda sıfır enerjinin bağlı durumları, iki boyutta helisel kenar durumların ve üç boyutta yüzey durumların varlığı bulunmuştur. Böylece modifiye Dirac denkleminin bir ve daha yüksek boyutlardan oluşan topolojik yalıtkan sınıfına bir açıklama getirebileceği sonucuna varılmıştır.

Topolojik yalıtkanların yüzey durumlarını ifade eden enerji dağılımı bağıntısı aşağıda verilmiştir:

$$E = \pm v p_{\perp} . \quad (4.94)$$

Bu ifade enerji bant aralığı olmayan (gapless) bir Dirac konisinin yüzeyini tanımlar. Bununla ilgili somut örnekler kenar durumlarını ifade eden BHZ Hamiltoniyeni ve yüzey durumlarını ifade eden Bi_2Se_3 ' e ait Hamiltoniyen ile 5. ve 6. bölümde verilecektir.

5. İKİ BOYUTLU TOPOLOJİK YALITKANLAR

İki boyutlu topolojik yalıtkanlar kuantum spin Hall yalıtkanları olarak da bilinirler. Kuantum spin Hall yalıtkanları (iki boyutlu zaman tersinir topolojik yalıtkanlar) hem grafen hem de spin akımının helisel kenar durumları ile taşındığı iki boyutlu yarı iletkenlerde, iki bağımsız grup (Kane ve Mele 2005a, 2005b; Bernevig ve Zhang 2006) tarafından teorik olarak önerilmiştir. Bu öneri matematiksel olarak grafenin SOI' ye dayanır. Daha önce hafif bir element olan karbon atomlarından oluşan grafenin zayıf spin-yörünge etkileşimli olduğundan bahsedilmiştir. Enerji bant aralığı da küçüktür. Bu noktada QSHE ile ortaya çıkan topolojik yalıtkanların fizikini anlamak için ağır elementlerden yapılan güçlü spin-yörünge etkileşimli materyallere bakmak gerekir. Bu kısımda Bernevig-Hughes-Zhang (BHZ) tarafından önerilen (Bernevig vd. 2006) iki boyutlu HgTe/CdTe kuantum kuyusu 6. bölümdeki Bi₂Se₃ topolojik yalıtkan sonuçlarıyla kıyaslamak amacıyla önemli basamakları kısaca özetlenecektir.

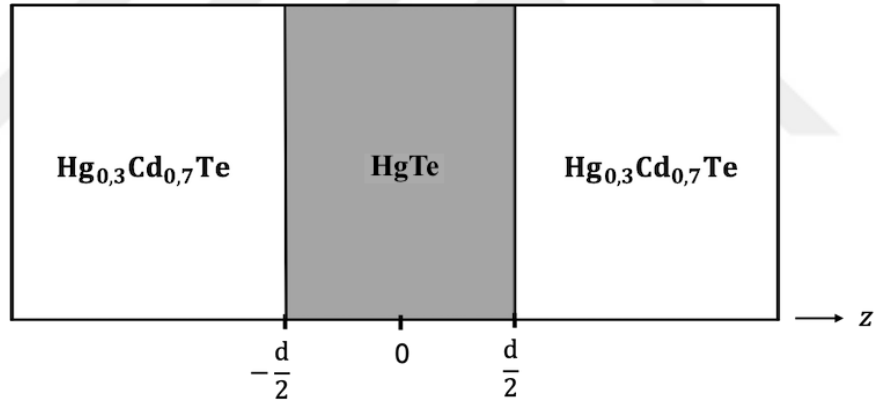
5.1 HgTe/CdTe Kuantum Kuyusu

Kuantum spin Hall olayını gözlemlemek için sunulan yöntemde CdTe kristallerinin arasına ince bir HgTe katmanı sandviç edilerek Şekil 5.1' deki gibi yarı iletken heteroyapı oluşturulmuştur. Böylece spin Hall durumları hem deneysel (König vd. 2007) hem de teorik (Bernevig vd. 2006) olarak HgTe/CdTe kuantum kuyularında gözlemlenmiştir. Kuantum kuyusunun genel mekanizması, iletkenlik bandı ve valans bandının olağan sıralamasının spin-yörünge bağlaşımı ile çevrildiği bant inversiyonuna dayanır. Bu yarı iletkenler şu koşulları sağladıkları için seçilmişlerdir:

- HgTe ve CdTe ağır elementlerden oluştuğundan güçlü spin-yörünge etkileşimleri olan yarı iletken malzemelerdir.
- Her ikisinin de örgü yapıları çok benzerdir: Zincblende (ZnS) denilen, bir örgü noktasında iki farklı atom içeren yüzey merkezli kübik örgüdür ve örgü sabitleri benzerdir (CdTe için 6.48 Å ve HgTe için 6.45 Å). Bu özellik bant yapılarını değiştirmeden heteroyapı oluşturmayı mümkün kılar.

- Terslenmiş bant yapısı vardır: CdTe normal bant yapısına sahip olduğu halde, HgTe' nin daha güçlü spin-yörünge etkileşmesinden dolayı ters dönmüş bant özelliği göstermektedir.

HgTe katmanı d çok ince olduğunda HgTe/CdTe kuantum kuyusunda bu terslenmiş bant yapısı hissedilmez, fakat kalınlığı artırıldığında heteroyapı tıpkı HgTe yarı iletkeni gibi terslenmiş bir bant yapısında olur. Bant terslenmesi, valans bandının iletkenlik bandının üzerine itilmesi ile gerçekleşir. Topolojik yalıtkan özelliği göstermesi de bu terslenmiş bant yapısından kaynaklanmaktadır. $d > d_c = 6.3$ nm için iki boyutlu bantlar terslenir. Terslenmiş bant yapısında kuyu kalınlığı d , d_c kritik kalınlıktan büyüktür. İletkenlik ve valans bantları birbirlerini $d = d_c$ noktasında keserler ve enerji bant aralığı yok olur. Artan d ' nin bir fonksiyonu olarak bantların terslenmesi normal yalıtkan ve QSH yalıtkanları arasında bir faz geçişi oluşturur. Bu iki durum arasındaki geçiş topolojik kuantum faz geçişi olarak adlandırılır.



Şekil 5.1 HgTe/Hg_{0.3}Cd_{0.7}Te kuantum kuyu modeli

BHZ (Bernevig-Hughes-Zhang) tarafından sunulan HgTe/CdTe kuantum kuyusu için etkin bir Hamiltoniyen aşağıdaki biçimde elde edilmiştir.

$$H_{BHZ}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} h(\mathbf{k})_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & h^*(-\mathbf{k})_{2 \times 2} \end{pmatrix}_{4 \times 4} \quad (5.1)$$

$$h(\mathbf{k}) = \epsilon_{\mathbf{k}} \mathbb{1}_2 + \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (5.2)$$

$$h(\mathbf{k}) = \epsilon_{\mathbf{k}} \mathbb{1}_2 + A(k_x \sigma_x + k_y \sigma_y) + (M - B\mathbf{k}^2) \sigma_z. \quad (5.3)$$

BHZ modeli blok-köşegen olduğundan 2×2 olan her blok bağımsız çözülebilir. Ancak alt bloktaki Hamiltoniyen $h_{\downarrow}$ üst bloktakinin zaman-tersinmiş eşleniğidir: $h_{\uparrow}(\mathbf{k}) = h_{\downarrow}^*(-\mathbf{k})$. Bu nedenle 4×4 Hamiltoniyen zaman-tersinme simetrisine sahiptir. $\psi_{\uparrow} = ue^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ çözüm önerisi kullanılarak üst blok için bulk (yığın) durum enerji dağılımı bağıntısı katsayı determinantı ile elde edilir.

Üst blok $h(\mathbf{k})_{2 \times 2}$ iletkenlik ve valans bandında spin-yukarı elektronları, alt blok $h^*(-\mathbf{k})_{2 \times 2}$ spin-aşağı elektronları açıklar. $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$, $\mathbf{d}(\mathbf{k}) = [Ak_x, Ak_y, \mathcal{M}(\mathbf{k})]$, $\mathcal{M}(\mathbf{k}) = M - B\mathbf{k}^2$, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, $\epsilon_{\mathbf{k}} = C - D\mathbf{k}^2$, $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$ ve $B_{\pm} = B \pm D$ olmak üzere, C , M , A , B ve D materyale bağlı parametrelerdir. Denklem (5.3) iki boyutlu modifiye Dirac denklemi için yazılan denklem (4.49) ile benzerdir, fazladan $\epsilon_{\mathbf{k}}$, kinetik enerji terimi içerir.

$$h_{\uparrow}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} M - B_+ \mathbf{k}^2 & Ak_- \\ Ak_+ & -(M - B_- \mathbf{k}^2) \end{pmatrix}; \quad (5.4)$$

$$h_{\uparrow}(\mathbf{k})\psi_{\uparrow} = E_{\uparrow}\psi_{\uparrow}; \quad (5.5)$$

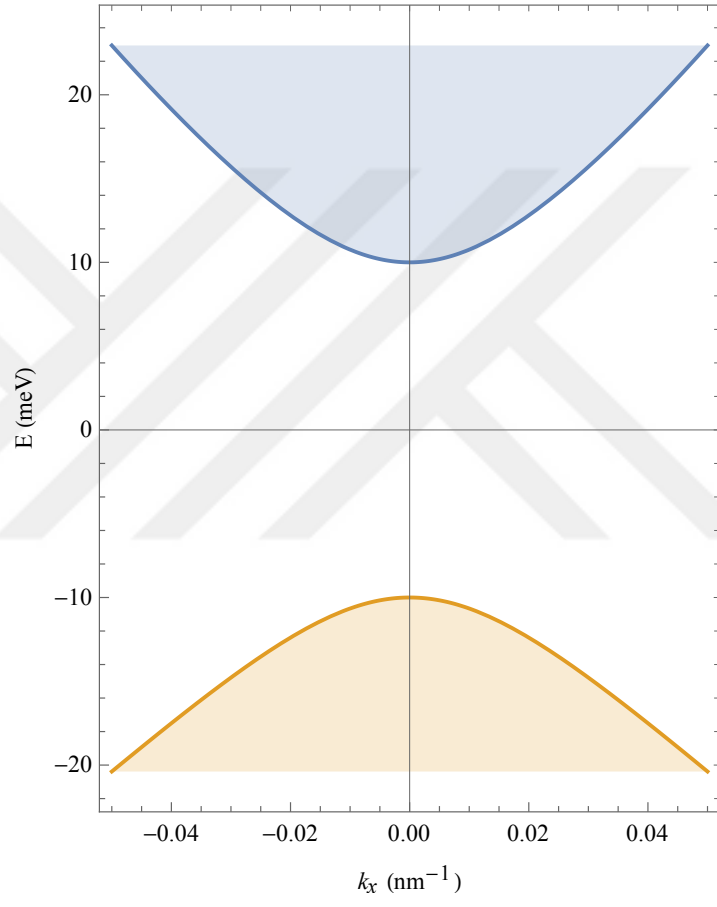
$$\det |h_{\uparrow}(\mathbf{k}) - E\mathbb{1}| = 0$$

$$E_{bulk}^{\pm}(\mathbf{k}) = \epsilon_{\mathbf{k}} \pm \sqrt{(M - B\mathbf{k}^2)^2 + A^2\mathbf{k}^2}. \quad (5.6)$$

$\mathbf{k} = 0$ noktasında $\Delta = E_+(\mathbf{k}) - E_-(\mathbf{k}) = 2M$ bant aralığına sahip bir yalıtkan olduğu açıktır. Enerji dağılımı bağıntısı Çizelge 5.1' deki parametreler kullanılarak Şekil 5.2' de çizilmiştir.

Çizelge 5.1 HgTe/CdTe kuantum kuyusu için materyal parametreleri

M (m eV)	A (m eV nm)	B (m eV nm ²)	D (m eV nm ²)	C (eV)
-10	364.47	-686.11	-512	0



Şekil 5.2 HgTe/CdTe kuantum kuyusu bulk enerji dağılımı

5.2 Helisel Kenar Durumları

BHZ modelinde kenar durumlarının çözümlerine bakılırken, $y = 0$ ' da açık sınır koşuluna sahip yarı-sonsuz bir düzlem göz önüne alınır. Bu durumda k_x iyi kuantum sayısıdır ve $k_y = -i\partial_y$ alınır. Denklem (5.1)' a bu koşullar uygulanır:

$$H_{BHZ}(k_x, -i\partial_y) = \begin{pmatrix} h_{\uparrow}(k_x, -i\partial_y) & 0 \\ 0 & h_{\downarrow}(k_x, -i\partial_y) \end{pmatrix} \quad (5.7)$$

Blok-köşegen matrisin, $h_{\downarrow}(\mathbf{k})$ ve $h_{\uparrow}(\mathbf{k})$ bloklarının özdeğer problemleri ayrı ayrı çözülebilir. Böylece birbirlerinin zaman-tersinmiş hali olan matris denklemleri önce $\psi_{\uparrow} = ue^{\lambda y}e^{k_x \cdot x}$ deneme dalga fonksiyonu ile ayrı ayrı hesaplanır. Bunun sonucunda dört tane λ değeri bulunur:

$$\lambda_{1,2}^2 = k_x^2 + F \pm Z; \quad (5.8)$$

$$Z = \sqrt{F^2 - \frac{(M^2 - E^2)}{B_+ B_-}}, \quad (5.9)$$

$$F = A^2 - 2(MB + ED)/(2B_+ B_-) \quad (5.10)$$

ve dalga fonksiyonuna $\psi_{\uparrow}(k_x, y = 0) = \psi_{\uparrow}(k_x, y \rightarrow +\infty) = 0$ (yarı-sonsuz) sınır koşulları uygulanır ise

$$\psi_{\uparrow} = u(e^{-\lambda_1 y} - e^{\lambda_2 y}); \quad u = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

$$(\lambda_{1,2} > 0)$$

bulunur. Bu yeni dalga fonksiyonu ile yazılan özdeğer denklemleri (λ_1 ve λ_2 içeren) yazılıp a, b spinör elemanları yardımıyla

$$E = M - B_+ [k_x^2 + k_x(\lambda_1 + \lambda_2) + \lambda_1 \cdot \lambda_2] \quad (5.11)$$

ifadesi bulunur.

λ_1 ve λ_2 yerine yazılarak, enerji $k_x = 0$ civarında Taylor serisine açıldığında kenar durumları için enerji spektrumu bulunur. Elektronun iki spin durumu için çözümler aşağıdaki şekildedir:

$$E_{\uparrow}(k_x) = -\frac{MD}{B} + A\sqrt{1 - \frac{D^2}{B^2}}k_x, \quad (5.12)$$

$$E_{\downarrow}(k_x) = -\frac{MD}{B} - A\sqrt{1 - \frac{D^2}{B^2}}k_x. \quad (5.13)$$

Bu iki enerjinin farkı alındığında bant aralığı $\Delta = E_{\uparrow} - E_{\downarrow} = 0$ sıfır olur. Sadece yönleri farklı olan bu çözümlerden grup hızı bulunabilir.

$$v_{\uparrow} = \frac{\partial E_{\uparrow}}{\partial k_x} = v_0 = -A\sqrt{1 - \frac{D^2}{B^2}} \quad (5.14)$$

$$v_{\downarrow} = \frac{\partial E_{\downarrow}}{\partial k_x} = -v_0 = A\sqrt{1 - \frac{D^2}{B^2}} \quad (5.15)$$

Hızlar zıt yönlüdür, spin-yukarı ve spin-aşağı elektronlar farklı yönlerde hareket ederler. Bu sonuç helisel kenar durumlarını oluşturan çift yönlü spin akımının varlığını gösterir. Zıt yönlü oldukları için toplam yük sıfırdır. İletkenlik yük akımı ile sağlanmaz.

(5.12) ve (5.13) enerjilerine karşı gelen durumlar Kramers çiftlerini oluşturur. $k_x = 0$ noktasına iki enerji eşit olduğundan Kramers dejenereliği ortaya çıkar. Bu durum zaman-tersinme simetrisinden kaynaklanır. Enerjinin k_x değişkenine bağlı grafiği Şekil 5.3' de verilmiştir.

5.3 Şerit Geometrisi İçin Çözümler

Bu kısımda sonlu L genişliğine sahip şerit geometrisi için enerjinin davranışına bakılacaktır.

$\psi_{\uparrow}(y = \pm \frac{L}{2}) = 0$, sınır koşullarını sağlayan y -bağımlı tek ve çift çözümler

$$f_{-}(k_x, y) = \frac{\sinh \lambda_1 y}{\sinh \frac{\lambda_1 L}{2}} - \frac{\sinh \lambda_2 y}{\sinh \frac{\lambda_2 L}{2}} \quad (5.16)$$

$$f_{+}(k_x, y) = \frac{\cosh \lambda_1 y}{\cosh \frac{\lambda_1 L}{2}} - \frac{\cosh \lambda_2 y}{\cosh \frac{\lambda_2 L}{2}} \quad (5.17)$$

şeklinde bulunur. Bu ifadeler spinör elemanlarıyla birlikte Hamiltoniyene yerleştirilerek enerji dağılımı bağıntısı kapalı biçimde aşağıdaki gibi bulunur:

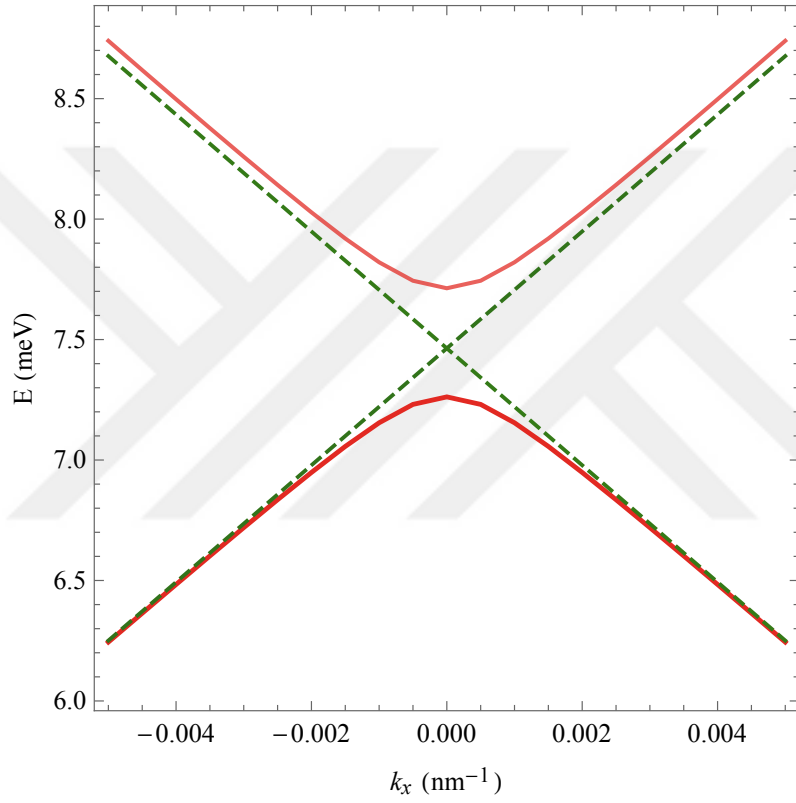
$$\frac{\alpha^2 \lambda_2^2 + \beta^2 \lambda_1^2 - k_x^2 (\alpha - \beta)^2}{\alpha \lambda_1 \beta \lambda_2} = \frac{\tanh \frac{\lambda_1 L}{2}}{\tanh \frac{\lambda_2 L}{2}} + \frac{\tanh \frac{\lambda_2 L}{2}}{\tanh \frac{\lambda_1 L}{2}}; \quad (5.18)$$

$$\alpha = E - M + B_+(k_x^2 - \lambda_1^2) \quad (5.19)$$

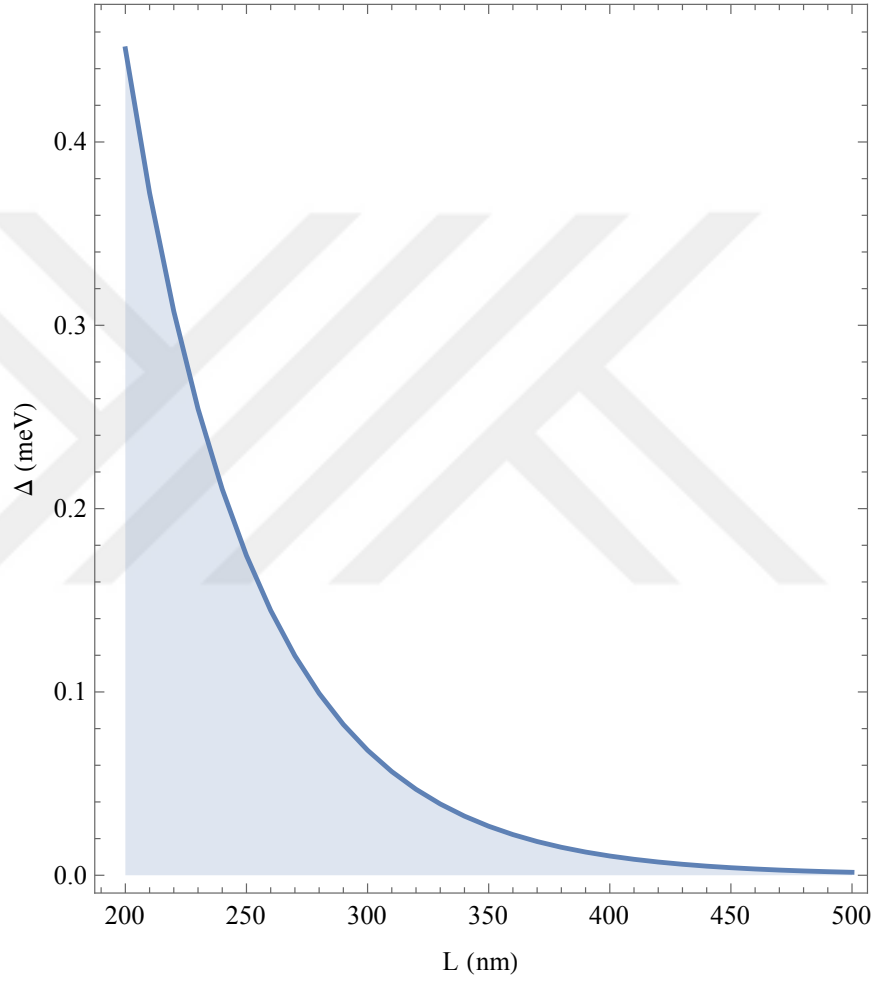
$$\beta = E - M + B_+(k_x^2 - \lambda_2^2) \quad (5.20)$$

(5.18) denklemi L genişliğine bağımlı olarak nümerik olarak çözülebilir. $L = 200$ nm genişlik için enerji grafiği Şekil 5.3' de çizilmiştir (sürekli çizgiler). Genişlik 200 nm ve altında bant aralığı açıldığı görülmektedir. Şekilde kıyaslama amacıyla $L = 1000$ nm için Dirac noktasında birbirini kesen k_x ile orantılı enerji grafikleri de (kesikli çizgiler) verilmiştir. Yani L büyüdükçe enerji bant aralığının kapandığı anlaşılmaktadır.

Ayrıca $k_x = 0$ alınarak bant aralığının L genişliğine bağımlılığını veren grafik yine nümerik olarak elde edilmiş ve $L = 200 - 500$ nm aralığında davranışı Şekil 5.4 grafiğinde gösterilmiştir. HgTe/CdTe kuantum kuyusu için enerji bant aralığının L büyüdükçe sürekli olarak üstel azaldığı şekilden görülmektedir.



Şekil 5.3 $L = 200$ nm için (süreklı çizgiler) ve $L = 1000$ nm için (kesikli çizgiler) nümerik olarak elde edilen enerji- k_x davranışı



Şekil 5.4 HgTe/CdTe şerit geometrisinde L bağımlı enerji bant aralığı

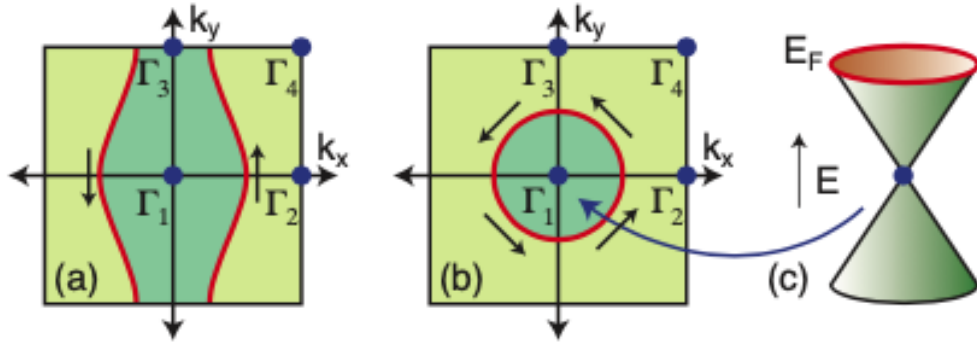
6. ÜÇ BOYUTLU TOPOLOJİK YALITKANLAR

Bu bölümde üç boyutlu topolojik yalıtkan materyal olan Bi_2Se_3 ' e ait yüzey durumları incelenecektir.

İki-boyutlu kuantum kuyusu için yazılan model genelleştirilerek üç boyutlu bir model elde edilir. Bu modeldeki parametreler farklılıklar gösterir. Yüzey durumlarından kaynaklanan enerji bant aralığının farklı bir davranış sergilemesi beklenmektedir. Bu davranışın sonlu-boyut etkisine bağlı olarak hangi kalınlıkta gerçekleşeceğini incelemek için enerji özdeğerleri üzerinde durulacaktır.

6.1 Güçlü ve Zayıf Topolojik Yalıtkan Sınıfları

Üç boyutlu topolojik yalıtkanlar $\nu_0; \nu_1\nu_2\nu_3$ olmak üzere dört adet Z_2 topolojik değişmezi ile karakterize edilir. Brillouin bölgesi yüzeyinde dört adet zaman-tersinir $\Gamma_{1,2,3,4}$ nokta vardır ve bu noktalarda Kramers dejenereliğinin var olması yüzey durumlarının olması anlamına gelir. Bu noktalardan uzakta dejenerelik kalkar. Bu dejenere noktalar yüzey bant yapısında iki boyutlu Dirac noktaları oluşturur.



Şekil 6.1 (a) Zayıf ve (b) güçlü bir topolojik yalıtkan için Brillouin bölgesindeki Fermi yüzeyi. (c) Fermi çemberiyle çevrelenmiş tek bir Dirac noktası; Dirac konisi (Hasan ve Kane 2010).

Yüzey durumlarını sınıflandıran dört değişmezden biri olan ν_0 özel bir öneme sahiptir; zayıf ve güçlü topolojik yalıtkanlar olarak adlandırılan sınıflandırmayı ayırt eder.

Zayıf topolojik yalıtkanlarda, Fermi yüzeyi iki (even number) Dirac noktasını içine alıp Brillouin bölgesini ikiye ayırır. $\nu_0 = 0$ zayıf topolojik yalıtkanlar sınıfını verir. $\nu_0 = 1$ ile karakterize edilen güçlü topolojik yalıtkanlarda Fermi yüzeyi, tek sayıda (odd number) Dirac noktasını çevreler ve bu tek Dirac noktalı durum Şekil 6.1 (c)'deki gibi bir Dirac konisini oluşturur.

Basitçe üst üste istiflenmiş iki boyutlu QSH yalıtkan katmanları oluşturularak en basit üç boyutlu zayıf topolojik yalıtkan elde edilebilir. Safsızlıklar durumunda, zayıf topolojik yalıtkanlar sıradan bir yalıtkan ile eşdeğerdir denilebilir, güçlü topolojik yalıtkanlar ise bu safsızlıkların varlığında geri-saçılımdan etkilenmez.

İkinci nesil materyaller: Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3

Deneyssel olarak gözlemlenen ilk üç boyutlu topolojik yalıtkan olan $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$ alaşımın yüzey yapısı karmaşık ve bant aralığı oldukça küçüktür. Daha geniş bant aralığı ve daha basit yüzey spektrumu olan ikinci nesil topolojik yalıtkanlar; Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 keşfedilmiştir (Xia vd. 2009; H. Zhang vd. 2009; Hsieh vd. 2008; Hsieh vd. 2009). Güçlü topolojik yalıtkan sınıfına dahil ikinci nesil materyaller arasından Bi_2Se_3 'nin referans materyal olabileceğini düşündüren başlıca nedenler aşağıda sıralanmaktadır (Moore 2009b).

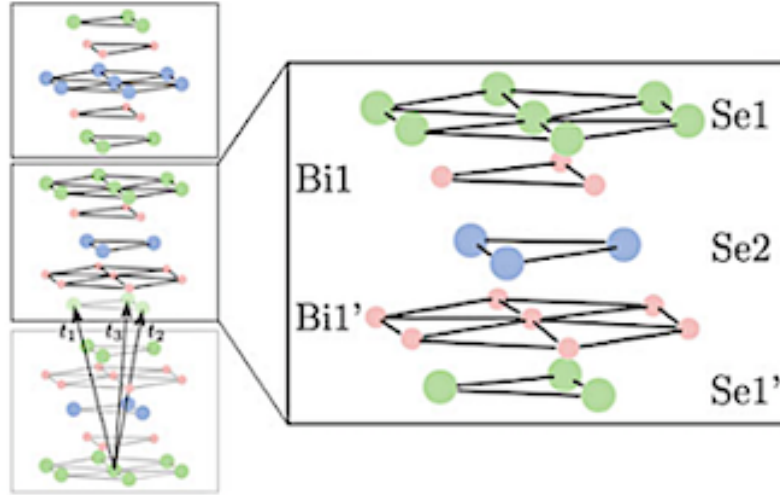
- Bi_2Se_3 'ün yüzey durumları genelleştirilmiş tek bir Dirac konisinden oluşur. Γ noktasında tek bir Dirac konisi oluşturan yüzey durumlarına sahiptir.
- Bi_2Se_3 , saf bir bileşiktir, $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$ gibi alaşım değildir. Bu nedenle yüksek saflıkta hazırlanabilir ve daha net sonuçlar verir.
- Uygulama açısından en uygun olanıdır. Yüksek saflık formunda oda sıcaklığından çok daha yüksek sıcaklıkta (3600 K) geniş bir bant aralığına sahiptir (~ 0.3 eV).

Bu bilgiler ışığında, üç boyutlu topolojik yalıtkanların başlıca özellikleri en basit Dirac konisi yüzey spektrumuna ve en geniş bant aralığına sahip Bi_2Se_3 için gösterilebilir.

6.2 Yüzey Durumları

Topolojik yalıtkanların yüzey durumlarını ifade eden çözümler Bi_2Se_3 üzerinden yapılacaktır. Bu nedenle öncelikle, kristal örgü yapısı ve örgünün sahip olduğu simetrilere bahsedilecektir.

Bi_2Se_3 kristali, bir katmanının içinde üçgen bir örgü olan katmanlı bir yapıya sahip olan (rhombohedral) kristal yapıdadır. x , y ve z eksenleri farklı simetrilere sahiptir ve z -ekseni boyunca dizilmiş beş atomlu katmanlardan (quintuple layers) oluşur. Şekil 6.2 ile verilen, bu katmanlardan yalnızca biri ele alınırsa: Se1 ve Se1' olan iki eşdeğer Se atomu, Bi1 ve Bi1' olan iki eşdeğer Bi atomu ve son olarak Se2 olan üçüncü bir Se atomu ile birlikte toplam beş katman vardır.



Şekil 6.2 Bi_2Se_3 kristal yapısı, beş atomlu atomik katmanları (Shen 2012)

Beş atomlu katmanlar arasındaki bağlanma (coupling), katman içindeki iki atomik katmanı arasındaki bağlanmaya göre çok daha zayıf bir bağlanmadır. Ayrıca merkezdeki Se2 atomu inversiyon merkezi rolündedir, bir inversiyon işlemi ile Se1(Bi1) katmanını Se1'(Bi1') ile değiştirir. Bu simetri sistem için belirli bir parite ile öz durumlar oluşturmayı sağlar. Daha önce bahsedilen Dirac noktalarını çevreleyen Fermi yüzeyine yakın elektronlar çoğunlukla Bi ($6s^26p^2$) ve Se ($4s^24p^2$) atomlarının p orbitallerinden gelir (Qi ve Zhang 2011).

Brilliouin bölgesindeki Γ noktası civarında sistemin düşük enerjili Hamiltoniyenini yazmak mümkündür. Bunun için en düşük dört durumdan (low-lying states) başlarsa Γ noktasında

$$\begin{aligned} &|P1_z^+, \sigma\rangle, \\ &|P2_z^-, \sigma\rangle \end{aligned}$$

durumları ile sistemin simetrisine dayanarak 4×4 lük bir Hamiltoniyen yazılabilir. Bu durumlar zıt pariteye ($\pm$) sahiptir ve $\sigma = \uparrow, \downarrow$ spinleri temsil eder.

6.2.1 Bi_2Se_3 yüzey durumları için etkin model

Düşük enerji etkin Hamiltoniyeni oluşturmak için bu dört durum baz olarak kullanılır (H. Zhang vd. 2009) ve elde edilen model Hamiltoniyen modifiye Dirac denklemi ile benzerlik gösterir. Bi_2Se_3 parametreleri için Hamiltoniyen aşağıdaki gibi elde edilmiştir:

$$H(k_x, k_y, k_z) = \begin{pmatrix} \mathcal{M}_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}} & A_1 k_z & 0 & A_2 k_- \\ A_1 k_z & -\mathcal{M}_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}} & A_2 k_- & 0 \\ 0 & A_2 k_+ & \mathcal{M}_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}} & -A_1 k_z \\ A_2 k_+ & 0 & -A_1 k_z & -\mathcal{M}_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \quad (6.1)$$

$$\mathcal{M}_{\mathbf{k}} = M - B_1 k_z^2 - B_2 k^2, \quad (6.2)$$

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = C + D_1 k_z^2 + D_2 k^2, \quad (6.3)$$

$$k_{\pm} = k_x \pm i k_y, \quad k^2 = k_x^2 + k_y^2.$$

Yüzey durumları için etkin model türetilirken bulk yapısından yararlanılabilir. $z = 0$ ' da $x - y$ düzlemine sınırlandırılmış bir sistem için k_x, k_y iyi kuantum sayılarıdır ve $k_z = -i\partial_z$ ile $z = 0$ da açık sınır koşullarına sahiptir. Önce $k_x = k_y = 0$ alınarak aşağıdaki gibi bir blok-köşegen matris elde edilir:

$$H(k_z = -i\partial_z) = \begin{bmatrix} H_1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{bmatrix}_{4 \times 4} ; \quad (6.4)$$

$$H_1 = \begin{bmatrix} L_1 - D_- \partial_z^2 & -iA_1 \partial_z \\ -iA_1 \partial_z & L_2 - D_+ \partial_z^2 \end{bmatrix}, \quad (6.5)$$

$$H_2 = \begin{bmatrix} L_1 - D_- \partial_z^2 & iA_1 \partial_z \\ iA_1 \partial_z & L_2 - D_+ \partial_z^2 \end{bmatrix}. \quad (6.6)$$

$L_{1,2} = C \pm M$, $D_{\pm} = D_1 \pm B_1$ ' dir. H_1 ve H_2 ayrı ayrı çözülebilir. Enerjiler aynı olduğu için yalnızca bir tanesi ile işlem yapmak çözüme ulaştırır. Buna göre deneme dalga fonksiyonları ile H_1 için özdeğer denklemi yazılır:

$$\psi_{1,2} = u_{1,2} e^{\lambda z}; \quad (6.7)$$

$$H_1 \psi_1 = E \psi_1 \quad (6.8)$$

$$\begin{bmatrix} L_1 - D_- \lambda^2 & -iA_1 \lambda \\ -iA_1 \lambda & L_2 - D_+ \lambda^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix} \quad (6.9)$$

ve karakteristik denklem çözülür:

$$\det |H_1 - E \mathbb{1}_2| = 0 \quad (6.10)$$

$$(D_+ D_-)(\lambda^2)^2 + [D_+(E - L_1) + D_-(E - L_2) + A_1^2] \lambda^2 + (E - L_1)(E - L_2) = 0$$

buradan aşağıda verilen kısaltmalar kullanılarak dört tane kök elde edilir :

$$\lambda_{1,2}^2 = \frac{1}{2D_+ D_-} [-F \pm \sqrt{R}]; \quad (6.11)$$

$$F = D_+(E - L_1) + D_-(E - L_2) + A_1^2, \quad (6.12)$$

$$R = F^2 - 4D_+D_-(E - L_1)(E - L_2). \quad (6.13)$$

Yarı-uzay sınır koşulları, dalga fonksiyonunun,

$$\psi_{1,2}(z = 0) = \psi_{1,2}(z \rightarrow \infty) = 0, \quad (6.14)$$

olmasını gerektirir. Dalga fonksiyonları yeniden yazılır:

$$\psi_1 = \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} (e^{-\lambda_1 z} - e^{-\lambda_2 z}), \quad \psi_2 = \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} (e^{-\lambda_1 z} - e^{-\lambda_2 z}). \quad (6.15)$$

(6.8)' deki özdeğer denklemi $\lambda_{1,2}$ için tekrar yazılır:

$$\begin{bmatrix} L_1 - D_- \lambda_{1,2}^2 - E & -iA_1 \lambda_{1,2} \\ -iA_1 \lambda_{1,2} & L_2 - D_+ \lambda_{1,2}^2 - E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{1,2} \\ b_{1,2} \end{bmatrix} = 0. \quad (6.16)$$

İki denklem taraf tarafa çıkarıldığında elde edilen 1. ve 2. eşitlikler ile katsayı determinantı kurulur:

$$\det \begin{vmatrix} D_-(\lambda_2^2 - \lambda_1^2) & iA_1(\lambda_2 - \lambda_1) \\ iA_1(\lambda_2 - \lambda_1) & D_+(\lambda_2^2 - \lambda_1^2) \end{vmatrix} = 0 \quad (6.17)$$

$$(\lambda_1 + \lambda_2)^2 = -\frac{A_1^2}{D_+ D_-} \quad (6.18)$$

$$E_0 = C + M \frac{D_1}{B_1} \quad (6.19)$$

(6.18) ifadesinde $\lambda_{1,2}$ değerleri yerine yazılarak enerji ifadesi yukarıdaki gibi bulunur.

Spinörleri bulmak için aşağıdaki adımlar uygulanır:

$$D_-(\lambda_2^2 - \lambda_1^2)a_1 + iA_1(\lambda_2 - \lambda_1)b_1 = 0; \quad (6.20)$$

$$\frac{a_1}{b_1} = \frac{-iA_1}{D_-(\lambda_2 + \lambda_1)} \quad (6.21)$$

$$D_-(\lambda_2^2 - \lambda_1^2)a_2 + -iA_1(\lambda_2 - \lambda_1)b_2 = 0; \quad (6.22)$$

$$\frac{a_2}{b_2} = \frac{iA_1}{D_-(\lambda_2 + \lambda_1)} \quad (6.23)$$

(6.19) denklemi (6.21) ve (6.23) ifadelerinde yazılır ise spinörler arasındaki ilişkiler $\frac{a_1}{b_1} = -i\sqrt{-D_+/D_-}$, $\frac{a_2}{b_2} = i\sqrt{-D_+/D_-}$ şeklinde bulunur. Dalga fonksiyonları için boylandırma işlemi yapılır ve diğer spinörler elde edilir.

$$\int_0^{+\infty} [\psi_1^* \psi_1] dz = \begin{pmatrix} a_1^* & b_1^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} \int_0^{+\infty} (e^{-\lambda_1 z} - e^{-\lambda_2 z})^2 dz = 1 \quad (6.24)$$

$$\left[|a_1|^2 + |b_1|^2 \right] \left(\frac{1}{2\lambda_1} - \frac{2}{\lambda_1 + \lambda_2} + \frac{1}{2\lambda_2} \right) = 1 \quad (6.25)$$

$$|a_1|^2 \left(1 - \frac{D_-}{D_+} \right) = |C|^2; \quad |C|^2 = \left(\frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2\lambda_1\lambda_2} - \frac{2}{\lambda_1 + \lambda_2} \right)^{-1} \quad (6.26)$$

$$a_1 = |C| \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{D_+}{B_1}} \quad (6.27)$$

Buna göre (6.7)' ye ait spinörler aşağıda verilmiştir:

$$u_1 = C_+ \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{D_+}{B_1}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{-D_-}{B_1}} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad u_2 = C_- \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{D_+}{B_1}} \\ \frac{-i}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{-D_-}{B_1}} \end{bmatrix} \quad (6.28)$$

C_+ ve C_- normalizasyon sabitleridir. $k_{x,y} = 0$ için geçerli olan bu çözümlerden $k_{x,y} \neq 0$ ' da bir çözüm elde etmek mümkündür. Daha önce (6.1) denklemi ile verilen $H_{3D} = H(k_x, k_y, -i\partial_z)$ ile bu iki çözüm baz olarak alınır. İzdüşürülmüş pertürbasyon yöntemi ile etkin Hamiltoniyen kurulur.

$$H_{etkin} = \begin{pmatrix} \langle \psi_1 | H_{3D} | \psi_1 \rangle & \langle \psi_1 | H_{3D} | \psi_2 \rangle \\ \langle \psi_2 | H_{3D} | \psi_1 \rangle & \langle \psi_2 | H_{3D} | \psi_2 \rangle \end{pmatrix} \quad (6.29)$$

İçerisindeki terimler tek tek hesaplandığında, $x - y$ düzleminde yüzey durumlarına ait etkin Hamiltoniyen elde edilir:

$$\begin{aligned} H_{etkin} &= \left[C + M \frac{D_1}{B_1} + \left(D_2 - B_2 \frac{D_1}{B_1} \right) k^2 \right] \mathbb{1}_2 + A_2 \sqrt{1 - \frac{D_1^2}{B_1^2}} (k_x \sigma_y - k_y \sigma_x) \\ &= \left[E_0 + \left(D_2 - B_2 \frac{D_1}{B_1} \right) k^2 \right] \mathbb{1}_2 + A_2 \sqrt{1 - \frac{D_1^2}{B_1^2}} (k \times \sigma)_z \end{aligned} \quad (6.30)$$

Fermi hızı $v_F = \pm A_2 \sqrt{1 - \frac{D_1^2}{B_1^2}}$ ile tanımlanır. Enerji dağılımı bağıntısı özdeğer denklemi ile elde edilir.

$$H_{etkin} |\psi\rangle = E |\psi\rangle ; \quad |\psi\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (6.31)$$

$$\det |H_{etkin} - E\mathbb{1}| = 0$$

$$E_{\pm} = E_0 \pm A_2 \sqrt{1 - \frac{D_1^2}{B_1^2}} k + \left(D_2 - B_2 \frac{D_1}{B_1} \right) k^2 \quad (6.32)$$

6.3 Bi₂Se₃ İçin Genel Çözümler

Genel çözümlere bakılırken, Bi₂Se₃ (6.1) ile verilen $k \cdot p$ yaklaşımından elde edilen Hamiltoniyenden başlanabilir:

$$H_{etkin} = \begin{pmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}} \mathbb{1}_2 + \mathcal{M}_{\mathbf{k}} \sigma_z + A_1 k_z \sigma_x & A_2 k_- \sigma_x \\ A_2 k_+ \sigma_x & \epsilon_{\mathbf{k}} \mathbb{1}_2 + \mathcal{M}_{\mathbf{k}} \sigma_z - A_1 k_z \sigma_x \end{pmatrix}_{4 \times 4} \quad (6.33)$$

Bu model hem simetri ilkelerine hem de $k.p$ pertürbasyon teorisine dayanarak dördüyük durumdan (low-lying states) elde edilir (Liu vd. 2010). Hamiltoniyendeki terimler açık şekilde (6.2) ve (6.3) ile daha önceden verilmiştir. $A_{1,2}, B_{1,2}, C, D_{1,2}$ ve M parametreleri Bi₂Se₃'nin bant yapısını açıklar. Bu model TRS ve inversiyon simetrisine sahiptir. Bir önceki bölümde kullanılan yöntemi takiben hem bulk hem de yüzey durumları için genel çözüm analitik olarak türetilebilir.

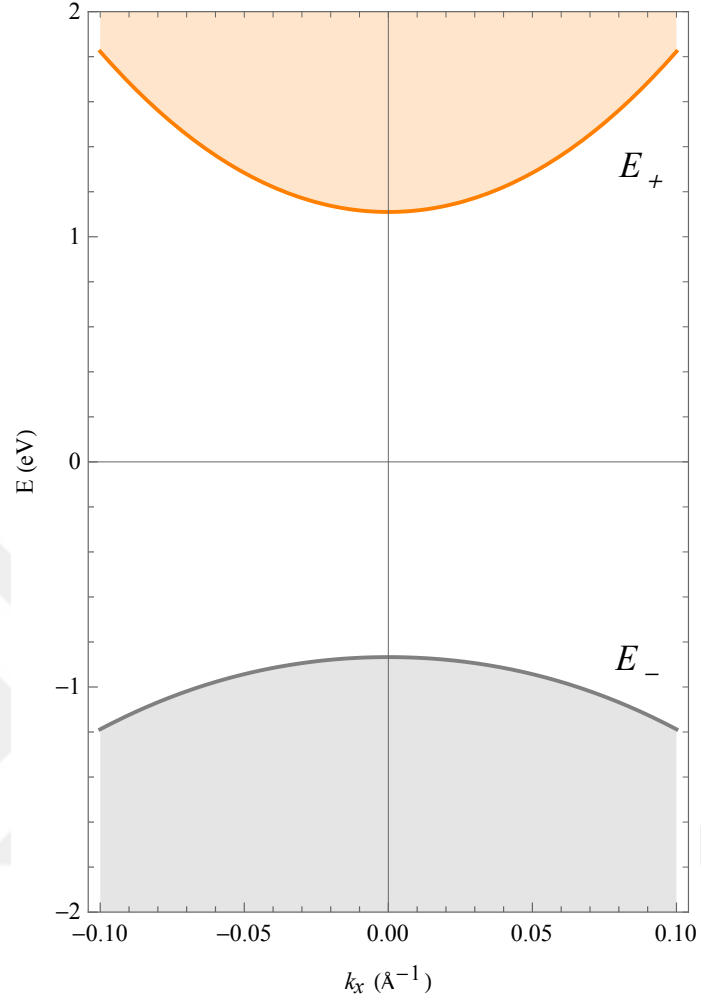
Hamiltoniyen köşegen dışında $A_2 k_{\pm}$ terimlerini içermektedir. İki boyutlu modeldeki gibi blok köşegen olmadığı için 2×2 'lik matrisin yerine 4×4 'lük matrisi çözmeyi gerektirir.

Öncelikle yüzey durumları ile karşılaştırma yapabilmek için bulk durumlarının enerjisini elde etmek gerekir. Bulk durumları için enerji elde edilirken hiçbir sınır koşulu uygulanmaz (6.33) matris denkleminde dalga fonksiyonunda bir kısıtlamaya gidilmeden başvurulur ise enerji dağılımı aşağıdaki gibi bulunur.

$$\det |H(k_x, k_y, k_z) - E\mathbb{1}_4| = 0 \quad (6.34)$$

$$\left[(A_1 k_z)^2 + (A_2 k_-)(A_2 k_+) - (L_1 + k_z^2 D_- - E)(L_2 + k_z^2 D_+ - E) \right]^2 = 0$$

$$E_{bulk}^{\pm} = C + D_2 k^2 - D_1 k_z^2 \pm \sqrt{A_2^2 k^2 + A_1^2 k_z^2 + [B_1 k_z^2 - (M - B_2 k^2)]^2} \quad (6.35)$$



Şekil 6.3 Bi₂Se₃ bulk yapısına ait enerji dağılımı.

$k_x = k_y = 0$ noktasında $\Delta_{bulk} = E_+ - E_- = 2M = 0.56$ eV bant aralığında yalıtkan davranış sergiler. Şekil 6.3’ de bulk durumların enerji dağılımı bulunurken (6.35) denkleminde $k_z = \frac{\pi}{10}$ alınmıştır, diğer materyal parametreleri Çizelge 6.1’ de verilmiştir.

Yüzey durumları için genel çözümü elde etmek amacıyla deneme dalga fonksiyonu özdeğer denkleminde yazılır:

$$\begin{aligned}\psi &\sim e^{\lambda z}, \\ H(k, -i\partial_z)\psi &= E\psi;\end{aligned}\tag{6.36}$$

$$H(k, -i\lambda) = \begin{bmatrix} \mathcal{M}_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}} & -iA_1\lambda & 0 & A_2k_- \\ -iA_1\lambda & -\mathcal{M}_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}} & A_2k_- & 0 \\ 0 & A_2k_+ & \mathcal{M}_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}} & iA_1\lambda \\ A_2k_+ & 0 & iA_1\lambda & -\mathcal{M}_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}} \end{bmatrix}\tag{6.37}$$

$$\mathcal{M}_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}} = C + M + k^2(D_2 - B_2) - \lambda^2(D_1 - B_1) = L_1 - \lambda^2 D_- ,\tag{6.38}$$

$$-\mathcal{M}_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}} = C - M + k^2(D_2 + B_2) - \lambda^2(D_1 + B_1) = L_2 - \lambda^2 D_+ .\tag{6.39}$$

Buna göre determinant işleminin sonucu şu şekildedir:

$$\det |H(k, -i\lambda) - E\mathbb{1}_4| = 0;\tag{6.40}$$

$$= \left[(-iA_1\lambda)^2 + (A_2k_-)(A_2k_+) - (L_1 - \lambda^2 D_- - E)(L_2 - \lambda^2 D_+ - E) \right]^2\tag{6.41}$$

$$\begin{aligned} &= (D_+ D_-) \lambda^4 + \left[D_+(E - L_1) + D_-(E - L_2) + A_1^2 \right] \lambda^2 \\ &\quad - A_2^2 k_+ k_- + E^2 - EL_1 - EL_2 + L_1 L_2 = 0 \end{aligned}$$

yukarıdaki ifadede (6.12) ve (6.23) eşitlikleri aşağıdaki versiyonlarıyla yeniden tanımlanarak kullanılır,

$$F = D_+(E - L_1) + D_-(E - L_2) + A_1^2\tag{6.42}$$

$$R = F^2 - 4(D_+ D_-) (-A_2^2 k_+ k_- + (E - L_1)(E - L_2))\tag{6.43}$$

olmak üzere dört çözüm bulunur.

$$\lambda_{1,2}^2 = \frac{1}{2D_+D_-} \left[-F \pm \sqrt{R} \right] \quad (6.44)$$

Genel çözüme sınır koşulları $z = 0$ da yalnızca tek bir yüzeye odaklanan yarı-uzay sınır koşulları ve diğeri $z = \pm L/2$ de iki zıt yüzeyi içeren sonlu-kalınlık için sınır koşulları olmak üzere iki farklı şekilde uygulanacaktır.

6.3.1 Yarı-sonsuz sınır koşulları için yüzey durumları

Yarı-sonsuz sınır koşulları z -yönü boyunca ilerleyen $x - y$ düzlemindeki model için tek bir yüzeye odaklanır. Sınır koşulları uygulanır ve dalga fonksiyonu :

$$\Psi(z = 0) = \Psi(z \rightarrow +\infty) = 0, \quad (6.45)$$

$$\Psi \sim \psi_{1,2}(e^{-\lambda_1 z} - e^{-\lambda_2 z}) \quad (6.46)$$

$\lambda_{1,2} > 0$ dir. Bu koşullar için (6.37) tekrar hesaplanır ve tüm satırların kendi arasında farkı alınır,

$$[(\lambda_2^2 - \lambda_1^2)D_-]a_1 + [iA_1(\lambda_1 - \lambda_2)]a_2 = 0 \quad (6.47)$$

$$[iA_1(\lambda_1 - \lambda_2)]a_1 + [(\lambda_2^2 - \lambda_1^2)D_+]a_2 = 0 \quad (6.48)$$

$$[(\lambda_2^2 - \lambda_1^2)D_-]a_3 + [iA_1(\lambda_2 - \lambda_1)]a_4 = 0 \quad (6.49)$$

$$[iA_1(\lambda_2 - \lambda_1)]a_3 + [(\lambda_2^2 - \lambda_1^2)D_+]a_4 = 0 \quad (6.50)$$

Bu şekilde (6.47) ve (6.48) ifadeleri ile 2×2 lik determinant deklemini yazılarak daha önce bulunan (6.18)' deki koşul elde edilir:

$$\det \begin{vmatrix} (\lambda_2^2 - \lambda_1^2)D_- & iA_1(\lambda_1 - \lambda_2) \\ iA_1(\lambda_1 - \lambda_2) & (\lambda_2^2 - \lambda_1^2)D_+ \end{vmatrix} = 0 \quad (6.51)$$

$$(\lambda_1 + \lambda_2)^2 = -\frac{A_1}{D_+D_-} \quad (6.52)$$

λ_1 ve λ_2 yerine yazılır ise $(-F + \sqrt{F^2 - R})/D_+D_- = -A_1/D_+D_-$ denkleminde,

son olarak F ile R ifadeleri de yerine yazıldığında küçük k değerleri dikkate alınarak yüzey durumları için enerji dağınımı şöyle bulunur:

$$E_{\pm} = C + M \frac{D_1}{B_1} \pm A_2 \sqrt{1 - \frac{D_1^2}{B_1^2}} k + \left(D_2 - B_2 \frac{D_1}{B_1} \right) k^2 \quad (6.53)$$

Enerji dağınımı Γ noktası civarında, $v_F = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_{\pm}}{\partial k} = \frac{A_2}{\hbar} \sqrt{1 - \frac{D_1^2}{B_1^2}}$ Fermi hızı ile Şekil 6.4' de gösterildiği gibi kütesiz bir Dirac konisini ifade eder. $k_x = k_y = 0$ noktasında yüzey durumları için enerji bant aralığı $\Delta_y = E_{\uparrow} - E_{\downarrow} = 0$ olur. Şekil 6.4' de enerji dağınımına bakılırken (6.53) dekleminde kullanılan diğer parametreler Çizelge 6.1' de verilmiştir.

Dalga fonksiyonlarının bulunması için (6.47), (6.48), (6.49), (6.50) ile verilen denklemler yardımıyla spinörlerin hepsi önce a_1 cinsinden yazılabilir ve içerisindeki terimlerde E_+ yerine yazılır,

$$a_2 = i \sqrt{\frac{-D_-}{D_+}} a_1, \quad a_3 = \frac{ik_+}{k} a_1, \quad a_4 = \frac{k_+}{k} \sqrt{\frac{-D_-}{D_+}} a_1 \quad (6.54)$$

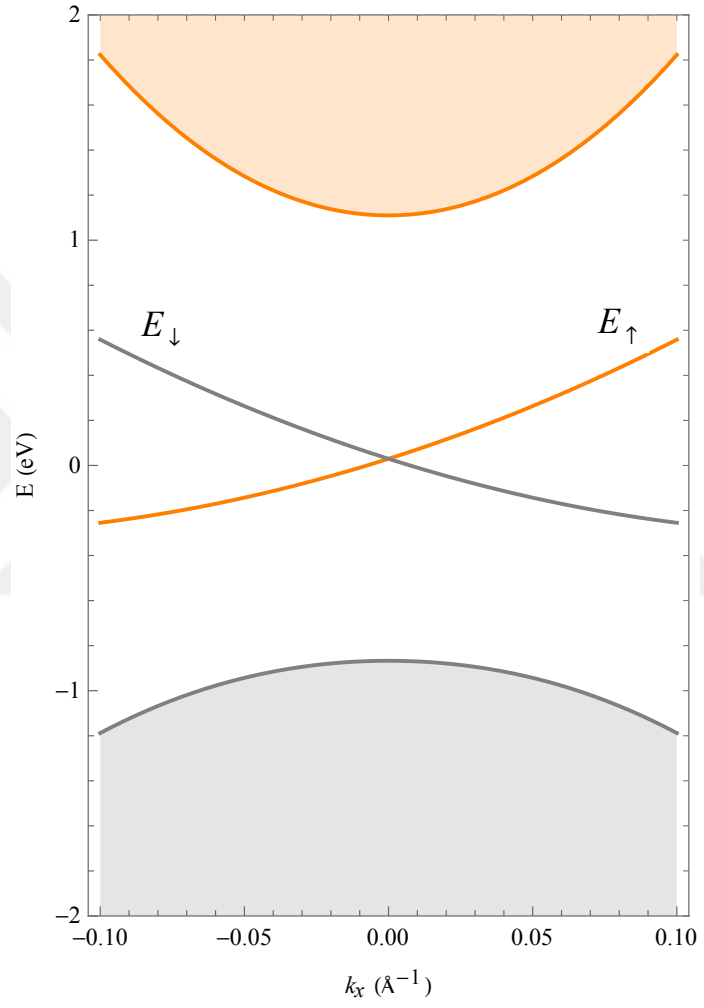
ve E_- yerine yazılır ise ,

$$a_2^* = i \sqrt{\frac{-D_-}{D_+}} a_1^*, \quad a_3^* = \frac{-ik_+}{k} a_1^*, \quad a_4^* = -\frac{k_+}{k} \sqrt{\frac{-D_-}{D_+}} a_1^* \quad (6.55)$$

bulunur. Dalga fonksiyonunun boylandırılması sonucu

$$|a_1|^2 = |C|^2 \frac{1}{4} \frac{D_+}{B_1}, \quad a_1 = \frac{i}{2} \sqrt{\frac{D_+}{B_1}}, \quad a_1^* = -\frac{i}{2} \sqrt{\frac{D_+}{B_1}} \quad (6.56)$$

ifadeleri elde edilir.



Şekil 6.4 Bi_2Se_3 yüzey ($E_{\uparrow,\downarrow}$) ve bulk durumlarının enerji dağılımı

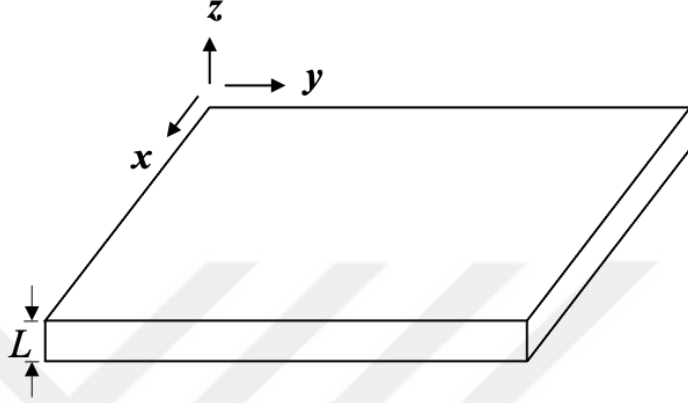
Böylece bulunan değerler E_+ ve E_- için yerine yazılarak dalga fonksiyonları bulunur. $C_{\pm}$ normalizasyon sabitleri ve $\lambda_{1,2}(E = E_{\pm}) = \lambda_{1,2}^{\pm}$ ’ dir. Silindirik koordinatlarda $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$; $k_x = k \cos \varphi$, $k_y = k \sin \varphi$, $\varphi = \arctan k_y/k_x$ eşitlikleri göz önüne alınarak spinörlerde k_+/k yerine $e^{i\varphi}$ yazılmıştır. $\lambda_{1,2}$ enerji özdeğerlerinin özellikleri dalga fonksiyonlarının dağılımını belirler.

$$\Psi_1 = C_+ \begin{bmatrix} \frac{i}{2} \sqrt{\frac{D_+}{B_1}} \\ -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{-D_-}{B_1}} \\ -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{D_+}{B_1}} e^{i\varphi} \\ \frac{i}{2} \sqrt{\frac{-D_-}{B_1}} e^{i\varphi} \end{bmatrix} (e^{-\lambda_1^+ z} - e^{-\lambda_2^+ z}) \quad (6.57)$$

$$\Psi_2 = C_- \begin{bmatrix} -\frac{i}{2} \sqrt{\frac{D_+}{B_1}} \\ \frac{1}{2} \sqrt{\frac{-D_-}{B_1}} \\ -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{D_+}{B_1}} e^{i\varphi} \\ \frac{i}{2} \sqrt{\frac{-D_-}{B_1}} e^{i\varphi} \end{bmatrix} (e^{-\lambda_1^- z} - e^{-\lambda_2^- z}) \quad (6.58)$$

6.3.2 Sonlu-kalınlıkta sınır koşulları için yüzey durumları

Şekil 6.5 ile gösterilen $x - y$ düzleminde z yönü boyunca L kalınlığında olan ince bir film göz önüne alınır.



Şekil 6.5 z -ekseni boyunca büyütülen üç boyutlu topolojik yalıtkan film

Eğer ince film kalınlığı alt ve üst katmanlardaki yüzey durumlarını çok iyi ayıracak kalınlıkta ($L \gg \lambda_{1,2}^{-1}$) ise Fermi seviyesinde iki bağımsız Dirac konisi oluşur. Fakat $\xi_s = \max\{\lambda_1^{-1}, \lambda_2^{-1}\}$ uzunluk ölçeği (karakteristik uzunluk) ince-film kalınlığı L ile karşılaştırılabilir boyutta ise alt ve üst yüzey durumlarının dalga fonksiyonları üst üste biner (overlap). Bu durumda iki yüzey durumu birbirine bağlanır Dirac noktasında bir enerji bant aralığı açılır. Buna sonlu-boyut etkisi (finite-size effect) denir. Karakteristik uzunluk, yüzey durumlarının yoğunluk profilini ve bunların bulk'a sızma derinliğini belirler (Linder vd. 2009).

Sonlu kalınlıkta bir model için genel çözüm önerisi şu şekilde olmalıdır:

$$\Psi = \psi_1 + \psi_2 ; \quad (6.59)$$

$$\psi_1 = u_1(\alpha_1 \sinh \lambda_1 z + \alpha_2 \sinh \lambda_2 z) \quad (6.60)$$

$$\psi_2 = u_2(\alpha_3 \cosh \lambda_1 z + \alpha_4 \cosh \lambda_2 z) \quad (6.61)$$

$$u_1 = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & a_3 & a_4 \end{pmatrix}^T$$

$$u_2 = \begin{pmatrix} b_1 & b_2 & b_3 & b_4 \end{pmatrix}^T$$

Genel çözüme $\Psi(z = \pm L/2) = 0$ sınır koşulları uygulanır ve katsayılar şu şekilde elde edilir:

$$\Psi(z = L/2) + \Psi(z = -L/2) = 0; \quad \alpha_4 = -\alpha_3 \left[\frac{\cosh \lambda_1 \frac{L}{2}}{\cosh \lambda_2 \frac{L}{2}} \right], \quad (6.62)$$

$$\Psi(z = L/2) - \Psi(z = -L/2) = 0; \quad \alpha_2 = -\alpha_1 \left[\frac{\sinh \lambda_1 \frac{L}{2}}{\sinh \lambda_2 \frac{L}{2}} \right]. \quad (6.63)$$

Bu sonuçlar aşağıdaki tanımlarla birlikte genel çözümde yerine yazılır:

$$\Psi(z) = u_1 \alpha_1 \sinh \left(\lambda_1 \frac{L}{2} \right) f_1 + u_2 \alpha_3 \cosh \left(\lambda_1 \frac{L}{2} \right) f_2; \quad (6.64)$$

bazı katsayılar yeniden tanımlanarak aşağıdaki forma getirilir:

$$\psi_1 = u_1 f_1, \quad \psi_2 = u_2 f_2 \quad (6.65)$$

$$f_1 = \frac{\sinh \lambda_1 z}{\sinh \lambda_1 \frac{L}{2}} - \frac{\sinh \lambda_2 z}{\sinh \lambda_2 \frac{L}{2}}, \quad (6.66)$$

$$f_2 = \frac{\cosh \lambda_1 z}{\cosh \lambda_1 \frac{L}{2}} - \frac{\cosh \lambda_2 z}{\cosh \lambda_2 \frac{L}{2}}. \quad (6.67)$$

ψ_1 ve ψ_2 dalga fonksiyonları (6.33)' e uygulanır,

$$H(\psi_1 + \psi_2) = E(\psi_1 + \psi_2) \quad (6.68)$$

İçerisindeki türevler Hamiltoniyene etki ettirildiğinde aşağıdaki gibi köşeli parantezlerin içi sıfıra eşitlenir,

$$\frac{\sinh \lambda_1 z}{\sinh \lambda_1 \frac{L}{2}} \left[(L_1 - D_- \lambda_1^2 - E) a_1 - (i A_1 \lambda_1 \tanh \lambda_1 L/2) b_2 + (A_2 k_-) a_4 \right] = 0 \quad (6.69)$$

$$\frac{\sinh \lambda_2 z}{\sinh \lambda_2 \frac{L}{2}} \left[(L_1 - D_- \lambda_2^2 - E) a_1 - (i A_1 \lambda_2 \tanh \lambda_2 L/2) b_2 + (A_2 k_-) a_4 \right] = 0 \quad (6.70)$$

$$\frac{\cosh \lambda_1 z}{\cosh \lambda_1 \frac{L}{2}} \left[(L_1 - D_- \lambda_1^2 - E) a_1 - (i A_1 \lambda_1 / \tanh \lambda_1 L/2) b_2 + (A_2 k_-) a_4 \right] = 0 \quad (6.71)$$

$$\frac{\cosh \lambda_2 z}{\cosh \lambda_2 \frac{L}{2}} \left[(L_1 - D_- \lambda_2^2 - E) a_1 - (i A_1 \lambda_2 / \tanh \lambda_2 L/2) b_2 + (A_2 k_-) a_4 \right] = 0 \quad (6.72)$$

Diğer spinörler için de aynı işlemler yapılır ve aşağıdaki forma getirilebilir:

$$-D_-(\lambda_1^2 - \lambda_2^2) a_1 - i A_1 (\lambda_1 \tanh \lambda_1 L/2 - \lambda_2 \tanh \lambda_2 L/2) b_2 = 0 \quad (6.73)$$

$$-D_+(\lambda_1^2 - \lambda_2^2) a_2 - i A_1 (\lambda_1 \tanh \lambda_1 L/2 - \lambda_2 \tanh \lambda_2 L/2) b_1 = 0 \quad (6.74)$$

$$-D_-(\lambda_1^2 - \lambda_2^2) a_3 - i A_1 (\lambda_1 \tanh \lambda_1 L/2 - \lambda_2 \tanh \lambda_2 L/2) b_4 = 0 \quad (6.75)$$

$$-D_+(\lambda_1^2 - \lambda_2^2) a_4 - i A_1 (\lambda_1 \tanh \lambda_1 L/2 - \lambda_2 \tanh \lambda_2 L/2) b_3 = 0 \quad (6.76)$$

$$-D_-(\lambda_1^2 - \lambda_2^2) b_1 - i A_1 (\lambda_1 / \tanh \lambda_1 L/2 - \lambda_2 / \tanh \lambda_2 L/2) a_2 = 0 \quad (6.77)$$

$$-D_+(\lambda_1^2 - \lambda_2^2) b_2 - i A_1 (\lambda_1 / \tanh \lambda_1 L/2 - \lambda_2 / \tanh \lambda_2 L/2) a_1 = 0 \quad (6.78)$$

$$-D_-(\lambda_1^2 - \lambda_2^2) b_3 - i A_1 (\lambda_1 / \tanh \lambda_1 L/2 - \lambda_2 / \tanh \lambda_2 L/2) a_4 = 0 \quad (6.79)$$

$$-D_+(\lambda_1^2 - \lambda_2^2) b_4 - i A_1 (\lambda_1 / \tanh \lambda_1 L/2 - \lambda_2 / \tanh \lambda_2 L/2) a_3 = 0 \quad (6.80)$$

Bu sekiz denklemde a_i ve b_i ($i = 1, 2, 3, 4$) spinör elemanları uygun biçimde sıralanarak matris denklemi oluşturulur ise, determinantları özdeş dört tane 2×2 blok-köşegen matris elde edilir. Herhangi 2×2 blok matrisin determinanı sıfıra eşitlenerek aşağıdaki ifade bulunur:

$$\frac{\frac{D_+ D_-}{A_1^2} (\lambda_1^2 - \lambda_2^2)^2 + (\lambda_1^2 + \lambda_2^2)}{\lambda_1 \lambda_2} = \frac{\tanh \lambda_1 \frac{L}{2}}{\tanh \lambda_2 \frac{L}{2}} + \frac{\tanh \lambda_2 \frac{L}{2}}{\tanh \lambda_1 \frac{L}{2}} \quad (6.81)$$

L' nin büyük limitinde $\tanh \lambda_{1,2} \frac{L}{2} = 1$ olur ve sonuç (6.52) denkleminde indirgenir. Daha önce bulunan $\lambda_{1,2}$ değerleri bu denklemde yazılarak, enerjinin değeri nümerik olarak bulunabilir.

Çizelge 6.1 Üç boyutlu model Bi_2Se_3 için materyal parametreleri (Shan vd. 2010)

M (eV)	A_1 (eVÅ)	A_2 (eVÅ)	B_1 (eVÅ ²)	B_2 (eVÅ ²)	D_1 (eVÅ ²)	D_2 (eVÅ ²)	C (eV)
0.28	2.2	4.1	10	56.6	1.3	19.6	-0.0068

6.3.3 Üç boyutlu ince-film için etkin model

Bu yaklaşımla en başta yazılan Hamiltoniyen iki parçaya ayrılarak şöyle ifade edilir:

$$H_{3D} = H_0(k=0) + H_2 ; \quad (6.82)$$

$$H_2 = \begin{bmatrix} D_2 k^2 - B_2 k^2 \sigma_z & A_2 k_- \sigma_x \\ A_2 k_+ \sigma_x & D_2 k^2 - B_2 k^2 \sigma_z \end{bmatrix} , \quad (6.83)$$

$$H_0 = \begin{bmatrix} h(A_1) & 0 \\ 0 & h(-A_1) \end{bmatrix}_{4 \times 4} ; \quad (6.84)$$

$$h(A_1) = \begin{bmatrix} L_1 - D_- \partial_z^2 & -i A_1 \partial_z \\ -i A_1 \partial_z & L_2 - D_+ \partial_z^2 \end{bmatrix} \quad (6.85)$$

H_0 blok köşegen bir matristir. Önce $h(A_1)\psi_\uparrow = E\psi_\uparrow$ için çözümler elde edilecek daha sonra $A_1 \rightarrow -A_1$ yazılıp $h(-A_1)$ bulunacaktır. Bu şekilde $\psi_\uparrow = u_\lambda e^{\lambda z}$ çözümünden dört kök bulunur:

$$h(A_1, -i\partial_z)\psi_\uparrow = E\psi_\uparrow ; \quad (6.86)$$

$$\lambda_{1,2}^2 = \frac{1}{2D_+ D_-} \left[-F \pm \sqrt{R} \right] . \quad (6.87)$$

Bir önceki kısımdaki sonlu-boyut için bulunan (6.66) ve (6.67) ile verilen dalga fonksiyonuna başvurulur,

$$(h(A_1) - E)\psi_{\uparrow}^1 = 0; \quad \psi_{\uparrow}^1 = u_1 f_1 \quad (6.88)$$

$$\frac{\sinh \lambda_1 z}{\sinh \lambda_1 \frac{L}{2}} \left[(L_1 - D_- \lambda_1^2 - E)a_1 - (iA_1 \lambda_1 \tanh \lambda_1 L/2)b_2 \right] = 0 \quad (6.89)$$

$$\frac{\sinh \lambda_1 z}{\sinh \lambda_1 \frac{L}{2}} \left[(L_2 - D_+ \lambda_1^2 - E)a_2 - (iA_1 \lambda_1 \tanh \lambda_1 L/2)b_1 \right] = 0 \quad (6.90)$$

$$\frac{\sinh \lambda_2 z}{\sinh \lambda_2 \frac{L}{2}} \left[(L_1 - D_- \lambda_2^2 - E)a_1 - (iA_1 \lambda_2 \tanh \lambda_2 L/2)b_2 \right] = 0 \quad (6.91)$$

$$\frac{\sinh \lambda_2 z}{\sinh \lambda_2 \frac{L}{2}} \left[(L_2 - D_+ \lambda_2^2 - E)a_2 - (iA_1 \lambda_2 \tanh \lambda_2 L/2)b_1 \right] = 0 \quad (6.92)$$

$$(h(A_1) - E)\psi_{\uparrow}^2 = 0; \quad \psi_{\uparrow}^2 = u_2 f_2 \quad (6.93)$$

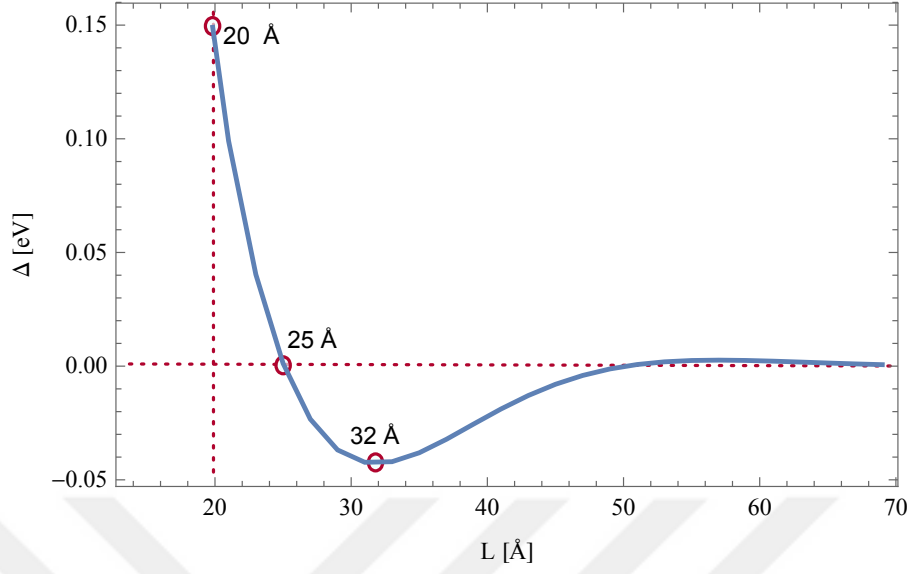
$$\frac{\cosh \lambda_1 z}{\cosh \lambda_1 \frac{L}{2}} \left[(L_1 - D_- \lambda_1^2 - E)b_1 - (iA_1 \lambda_1 / \tanh \lambda_1 L/2)a_2 \right] = 0 \quad (6.94)$$

$$\frac{\cosh \lambda_1 z}{\cosh \lambda_1 \frac{L}{2}} \left[(L_2 - D_+ \lambda_1^2 - E)b_2 - (iA_1 \lambda_1 / \tanh \lambda_1 L/2)a_1 \right] = 0 \quad (6.95)$$

$$\frac{\cosh \lambda_2 z}{\cosh \lambda_2 \frac{L}{2}} \left[(L_1 - D_- \lambda_2^2 - E)b_1 - (iA_1 \lambda_2 / \tanh \lambda_2 L/2)a_2 \right] = 0 \quad (6.96)$$

$$\frac{\cosh \lambda_2 z}{\cosh \lambda_2 \frac{L}{2}} \left[(L_2 - D_+ \lambda_2^2 - E)b_2 - (iA_1 \lambda_2 / \tanh \lambda_2 L/2)a_1 \right] = 0 \quad (6.97)$$

(6.95)/(6.97) ve (6.90)/(6.92) denklemlerinin oranlamasıyla aşağıdaki iki denklem bulunur.



Şekil 6.6 Sonlu-kalınlıkta Bi_2Se_3 modelinde enerji bant aralığının (Δ) L ’ye göre davranışı

$$\frac{(L_2 - D_+ \lambda_1^2 - E) \lambda_2}{(L_2 - D_+ \lambda_2^2 - E) \lambda_1} - \frac{\tanh \lambda_1 \frac{L}{2}}{\tanh \lambda_2 \frac{L}{2}} = 0, \quad (6.98)$$

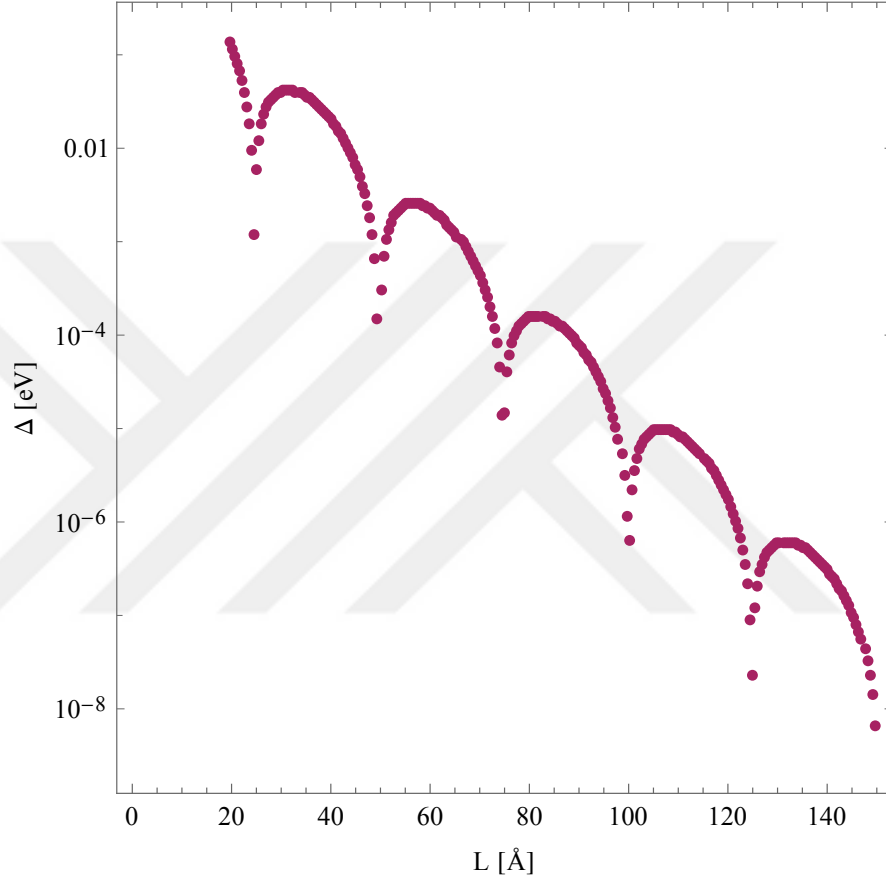
$$\frac{(L_2 - D_+ \lambda_1^2 - E) \lambda_2}{(L_2 - D_+ \lambda_2^2 - E) \lambda_1} - \frac{\tanh \lambda_2 \frac{L}{2}}{\tanh \lambda_1 \frac{L}{2}} = 0. \quad (6.99)$$

Bu denklemler L kalınlığına bağlıdır ve Çizelge 6.1’deki parametre değerleri yerine yazılarak nümerik olarak hesaplandığında Γ noktasında E_+^0 ve E_-^0 olmak üzere iki enerji değeri verir. Burada Γ noktasındaki ($k_x = k_y = 0$) enerji farkı L bağımlı bant aralığını verir.

$$\Delta(L) = E_+^0 - E_-^0$$

Nümerik olarak bulunan bant aralığının L kalınlığına göre davranışı Şekil 6.6’da çizilmiştir. Şekilden görüldüğü gibi Bi_2Se_3 yüzey durumları sonlu kalınlık L ’nin küçülmesine oldukça dirençlidir. Bir önceki bölümde kenar durumları enerjileri arasında ölçülebilen bant aralığı ancak $L \leq 200$ nm değerinde açılmakta idi (Şekil 5.4). Buradan çıkarılan önemli sonuç Bi_2Se_3 ile geliştirilen topolojik yalıtkanların nanoölçekteki uygulamalarda boyut olarak HgTe tabanlı topolojik yalıtkanlara göre daha uygun olabileceğidir.

Bunun yanında, Bi_2Se_3 yüzey durumları bant aralığının kalınlığına göre davranışının salınımlı olması dikkat çekicidir. Yani bant aralığı L küçüldükçe negatif ve pozitif bölgede değişim göstererek üstel artmaktadır. Bu değişimi daha iyi görebilmek için Şekil 6.7’ de bant aralığı (büyüklüğü) logaritmik olarak çizilmiştir.



Şekil 6.7 Bi_2Se_3 için $k = 0$ ’ da yüzey durumlarının oluşturduğu $\Delta(L)$ ’ nin L ’ ye göre davranışı

HgTe durumunda sadece üstel davranış vardır. Bunun nedeni HgTe için λ_1 , λ_2 parametreleri reel değerler verir. Bi_2Se_3 durumunda hem yarı-sonsuz uzay geometrisinde hem de sonlu kalınlık ince-film geometrisinde λ_1 ve λ_2 parametreleri kompleks çözümler verir. Ayrıca λ_1 ve λ_2 arasındaki ilişki $\lambda_1 = \lambda_2^*$ biçimindedir.

Etkin Hamiltoniyeni elde etmek için baz fonksiyonlarının seçilmesi gerekir. Bunun için denklem (6.88), (6.93)' daki dalga fonksiyonlarına ait spinörler birbirine aşağıdaki gibi bağlanabilir:

$$a_1 = \frac{-D_+}{iA_1} \eta_1 b_2, \quad \eta_1 = \frac{\lambda_1^2 - \lambda_2^2}{\lambda_1 \coth \lambda_1 \frac{L}{2} - \lambda_2 \coth \lambda_2 \frac{L}{2}} \quad (6.100)$$

$$b_1 = \frac{-D_+}{iA_1} \eta_2 a_2, \quad \eta_2 = \frac{\lambda_1^2 - \lambda_2^2}{\lambda_1 \tanh \lambda_1 \frac{L}{2} - \lambda_2 \tanh \lambda_2 \frac{L}{2}} \quad (6.101)$$

Görüldüğü gibi a_1 ve b_1 ile a_2 ve b_2 birbiri cinsinden yazılamaz. Burada iki ayrı çözüm çıkar. $h(A_1)\psi_\uparrow = E\psi_\uparrow$ özdeğer denklemi için

$$\psi_\uparrow = C \begin{bmatrix} a_1 f_1 + b_1 f_2 \\ a_2 f_1 + b_2 f_2 \end{bmatrix} \quad (6.102)$$

biçiminde yazıldığında $b_1 = 0$, $a_1 \neq 0$ birinci çözüm

$$\varphi_1 = C_1 \begin{bmatrix} a_1 f_1 \\ b_2 f_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -D_+ \eta_1^+ f_1^+ \\ iA_1 f_2^+ \end{bmatrix}_{E_+^0}, \quad (6.103)$$

elde edilir. $b_2 = 0$, $a_2 \neq 0$ seçildiğinde

$$\varphi_2 = C_2 \begin{bmatrix} b_1 f_2 \\ a_2 f_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -D_+ \eta_2^- f_2^- \\ iA_1 f_1^- \end{bmatrix}_{E_-^0}. \quad (6.104)$$

bulunur. φ_1, φ_2 çözümleri iki farklı enerjiye E_+^0, E_-^0 karşı gelir. Çünkü $k_x = k_y = 0$ için enerjiyi nümerik olarak bulacağımız denklemler $\frac{a_1}{b_2}$ ve $\frac{a_2}{b_1}$ oranları kullanılarak elde edilmişti. Normalizasyon sabitleri $C_{1,2}$ ' nin değeri ek kısmında verilmiştir. Buna göre alt blok $h(-A_1)$ için $A_1 \rightarrow -A_1$ yazılarak bulunan dalga fonksiyonları $\tilde{\varphi}_1$ ve $\tilde{\varphi}_2$ da dahil edilerek H_0 ' a ait dört bileşenli dalga fonksiyonları elde edilir:

$$\Phi_1 = C_1 \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ 0 \end{bmatrix}_{E_+}, \quad \Phi_2 = C_2 \begin{bmatrix} \varphi_2 \\ 0 \end{bmatrix}_{E_-}, \quad (6.105)$$

$$\Phi_3 = C_1 \begin{bmatrix} 0 \\ \tilde{\varphi}_1 \end{bmatrix}_{E_+}, \quad \Phi_4 = C_2 \begin{bmatrix} 0 \\ \tilde{\varphi}_2 \end{bmatrix}_{E_-}. \quad (6.106)$$

Bu dört durum baz alınarak Γ noktasına yakın bölgede (küçük $\mathbf{k}$) elde edilecek olan etkin Hamiltoniye'nin matris elemanları aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\mathcal{H}_{etkin}^{ij} = \int_{-L/2}^{L/2} dz (\Phi_i^* H_{3D} \Phi_j) ; \quad (i, j = 1, 2, 3, 4) \quad (6.107)$$

Bu Hamiltoniye'nin 4×4 matris biçimindedir. Baz fonksiyonlarının sırasını uygun biçimde alarak $[\Phi_1, \Phi_4, \Phi_2, \Phi_3]$ etkin Hamiltoniye'nin daha simetrik biçimde yazılabilir:

$$\mathcal{H}_{etkin} = E_0 \mathbb{1}_4 + \tilde{H}_2 = \begin{bmatrix} h_+ & 0 \\ 0 & h_- \end{bmatrix}; \quad (6.108)$$

$$h_+ = E_0 \mathbb{1}_2 - Dk^2 + \begin{bmatrix} \frac{\Delta}{2} - Bk^2 & \tilde{A}_2 k_- \\ \tilde{A}_2^* k_+ & -\frac{\Delta}{2} + Bk^2 \end{bmatrix} \quad (6.109)$$

$$h_- = E_0 \mathbb{1}_2 - Dk^2 + \begin{bmatrix} -\frac{\Delta}{2} + Bk^2 & -\tilde{A}_2^* k_- \\ -\tilde{A}_2 k_+ & \frac{\Delta}{2} - Bk^2 \end{bmatrix}, \quad (6.110)$$

ifadelerinde şu tanımlar kullanılmıştır:

$$D = \frac{1}{2} B_2 [\beta_1^+ + \beta_2^-] - D_2, \quad (6.111)$$

$$B = \frac{1}{2} B_2 [\beta_1^+ - \beta_2^-], \quad (6.112)$$

$$\tilde{A}_2 = i\hbar v_F; \quad v_F = A_1 A_2 D_+ \alpha_1. \quad (6.113)$$

$\alpha_1, \beta_1^+, \beta_2^-$ kısaltmaları matris elemanlarının içerisindeki integralleri tanımlar ve bunların açık hali ek kısmında verilmiştir. Bu ifadeler kullanılarak $h_{\pm}$, Pauli spin matrisleri cinsinden yazılır,

$$h_{\pm} = E_0 \mathbb{1}_2 - Dk^2 + \hbar v_F (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k})_z \pm \left(\frac{\Delta}{2} - Bk^2 \right) \sigma_z \quad (6.114)$$

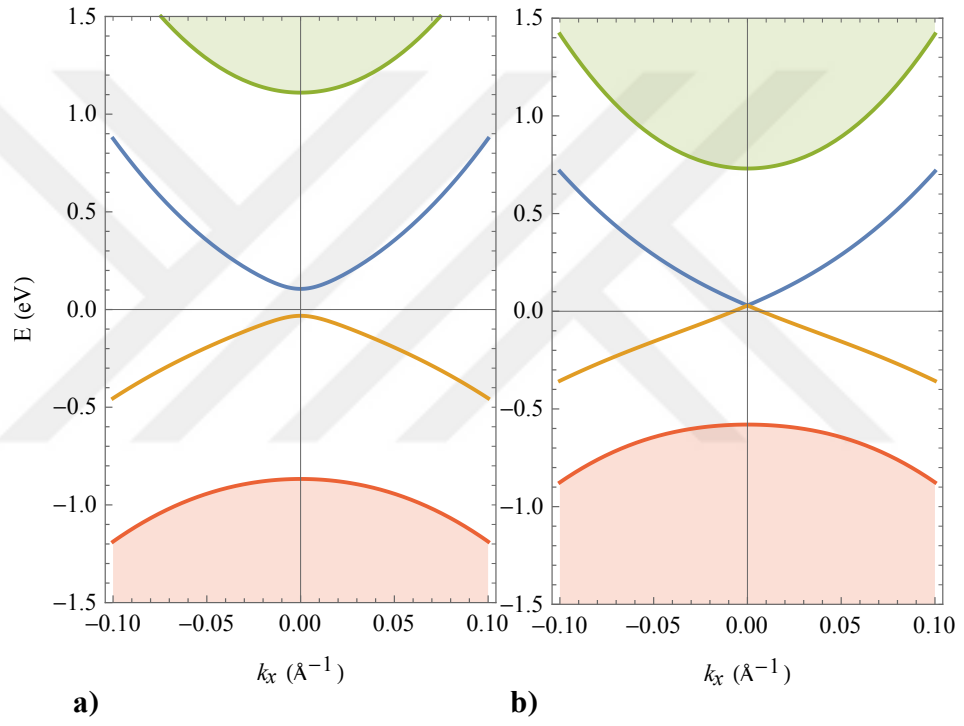
ve burada $E_0 = \frac{1}{2}(E_+^0 + E_-^0)$, $\Delta = (E_+^0 - E_-^0)$ tanımları ile birlikte etkin Hamiltoniyen, yüzey durumlarının enerji dağılımını şu şekilde verir:

$$\det |\mathcal{H}_{etkin} - E| = 0 ; \quad (6.115)$$

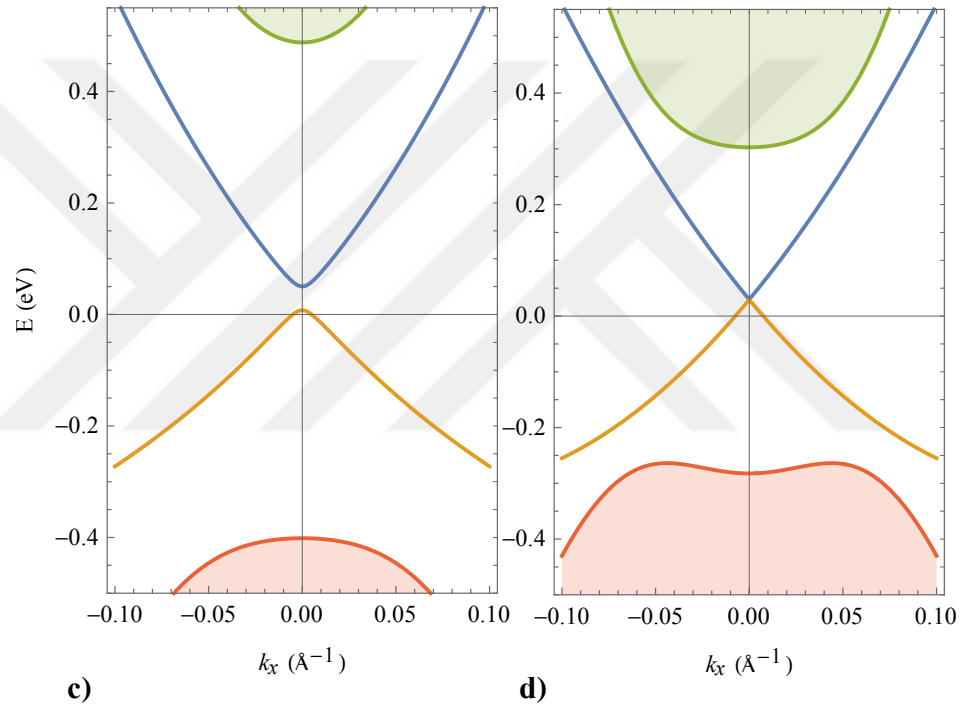
$$E_{\pm} = E_0 - Dk^2 \pm \sqrt{\left(\frac{\Delta}{2} - Bk^2 \right)^2 + v_F^2 k^2} \quad (6.116)$$

Enerji ifadesindeki E_0 ve Δ nicelikleri L kalınlığına bağlı olarak nümerik hesaplama sonucunda burada kullanılacağından (6.116) dağılım bağıntısı L değerine bağlı olacaktır. Şekil 6.8 ve Şekil 6.9' da enerji dağılım bağıntısı $L = 20, 25, 32, 55 \text{ \AA}$ değerleri için k_x ' in fonksiyonu olarak çizilmiştir. Aynı grafiklerde sonlu kalınlık sınır koşullarını sağlayan bulk enerji dağılımı da birlikte gösterilmiştir.

Daha önce Şekil 6.6' da görülen bant aralığının L kalınlığına bağlı davranışı enerji dağılım bağıntısında da kendisini göstermektedir. L büyüdükçe yüzey durumlarının bant aralığı salınımlı olarak azalmaktadır.



Şekil 6.8 a) $L = 20 \text{ \AA}$ ve b) $L = 25 \text{ \AA}$ için yüzey ve bulk durumlarının enerjisi



Şekil 6.9 c) $L = 32 \text{ \AA}$ ve d) $L = 55 \text{ \AA}$ için yüzey ve bulk durumlarının enerjisi

7. TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu tez çalışmasında matematiksel ve fiziksel hazırlık amacıyla bir, iki ve üç boyut için Dirac tipi denklemlerin özel çözümleri olan topolojik yalıtkan çözümleri, parametre uzayındaki koşulları dikkate alarak tartışılmıştır. Malzemelerin sınır bölgeleri topolojik yönden birbirinden farklı ortamları ayıran ara-kesitlerdir. Bu bölgelerde metalik (iletken) özellik kendini gösterdiği halde sınırlar dışında kalan bölgelerde sistemin yalıtkan olması topolojik yalıtkanların dayandığı matematiksel temeli oluşturur.

Çalışmanın ana konusunu oluşturan üç boyutlu topolojik yalıtkan olan Bi_2Se_3 ' ün özellikle yüzey durumlarının fiziksel özelliklerini ortaya çıkarmak amacıyla iki farklı geometri için inceleme yapılmıştır. Önce z -yönünde yarı-uzay sınır koşulları kapsamında özdeğer denklemi çözülerek enerji ve özfonksiyon çözümleri iki yöntemle elde edilmiştir. Bunlardan biri baz fonksiyonlarını kullanarak etkin Hamiltoniyen bulma yöntemi diğeri ise doğrudan çözümdür. Her iki yöntemle elde edilen enerji-dalga vektörü bağıntısının birbiri ile tutarlı olduğu gösterilmiştir.

Daha sonra z -yönünde sonlu kalınlık (L) göz önüne alınmış, yine etkin bir Hamiltoniyen bulunarak L -bağımlı enerji dağılımı bağıntısı ve öz durum spinörleri elde edilmiştir. Sonuçlar iki boyutlu HgTe kenar durumlarıyla karşılaştırılmış ve birbirinden oldukça farklı davranışlar ortaya çıkmıştır. HgTe şerit geometrisi durumunda şerit genişliği 200 nm iken Dirac noktası civarında bant aralığı oluşur ve genişlik küçüldükçe bu aralık düzenli olarak büyür ve L büyüdükçe bant aralığı üstel biçimde kapanmaya başlar, $L = 1000$ nm olduğunda tamamen kapanır ve Dirac noktası kendini gösterir.

Bi_2Se_3 yüzey durumlarının L kalınlığına karşı davranışı oldukça çarpıcıdır. Dirac konisinin ayrılıp, aralarında boşluk olan iki hiperboloit (hyperboloid) durumuna dönüşmesi için $L < 10$ nm uzaklığına ulaşılması gerekir. Üstelik L büyüdüğünde bant aralığı üstel-salınımlı biçimde küçülerek yok olur.

Bu davranış farkı üstel çözümlerdeki λ parametresinin HgTe durumunda reel fakat Bi₂Se₃ durumunda kompleks olmasından kaynaklanır. Ayrıca kritik bir kalınlıkta bu enerji bant aralığı işaret değiştirir.

Bu bulgular iki ve üç boyutlu topolojik yalıtkanların kuantum hesaplama ve spintronik gibi nano boyutlardaki uygulamalar için yüksek potansiyel oluşturabileceğini göstermektedir.



KAYNAKLAR

- Avron, J. E., Osadchy, D. and Seiler, R. 2003. A topological look at the quantum Hall effect. *Physics Today* 56(8): 38–42.
- Basak, S., Lin, H., Wray, L. A., Xu, S. Y., Fu, L., Hasan, M. Z., Bansil, A. 2011. Spin texture on the warped Dirac-cone surface states in topological insulators. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 84(12).
- Bernevig, B. A., and Zhang, S.-C. 2006. Quantum spin Hall effect. *Physical Review Letters* 96(10): 1–4.
- Bernevig, B. A., Hughes, T. L. and Zhang, S.-C. 2006. Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells. *Science* 314(5806): 1757–1761.
- Brüne, C., Liu, C.-X., Novik, E. G., Hankiewicz, E. M., Buhmann, H., Molenkamp, L. W., Chen, Y. L., Qi, X. L., Shen, Z. X., Zhang, S. C. 2011. Quantum Hall effect from the topological surface states of strained bulk HgTe. *Physical Review Letters* 106(126803): 1–7.
- Büttiker, M. 2009. Edge-state physics without magnetic fields. *Science* 325(5938): 278–279.
- Chen, X., Liu, Z.-X. and Wen, X.-G. 2011. Two-dimensional symmetry-protected topological orders and their protected gapless edge excitations. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 84(235141): 1–14.
- Chen, Y.L., Analytis, J. G., Chu, J.-H., Liu, Z. K., Mo, S.-K., Qi, X. L., Zhang, H. J., Lu, D. H., Dai, X., Fang, Z., Zhang, S. C., Fisher, I. R., Hussain, Z., Shen, Z.-X. 2009. Experimental realization of a three-dimensional topological insulator, Bi_2Te_3 . *Science* 325(5937): 178–181.
- Chu, R. L., Shan, W. Y., Lu, J. and Shen, S.-Q. 2011. Surface and edge states in topological semimetals. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 83(7): 1–10.
- Day, C. 2008. Quantum spin Hall effect shows up in a quantum well insulator, just as predicted. *Physics Today* 61(1): 19–23.
- Dirac, P. A. M. 1928. The quantum theory of the electron. *Proc. R. Soc.* 117(778): 610–624.
- Dyakonov, M. I. and Perel, V. I. 1971. Current-induced spin orientation of electrons in semiconductors. *Physics Letters A* 35A(6): 459–460.
- Fu, L. 2009. Theory of topological insulators. University of Pennsylvania, Doctor of Philosophy Thesis.

- Fu, L. and Kane, C. L. 2007. Topological insulators with inversion symmetry. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 76(045302): 1–17.
- Fu, L., Kane, C. L. and Mele, E. J. 2007. Topological insulators in three dimensions. *Physical Review Letters* 98(106): 1–4.
- Geim, A. K. and Novoselov, K.S. 2007. The rise of graphene. *Nature Materials* 6: 183–191.
- Girvin, S. M. 1998. The quantum Hall effect: novel excitations and broken symmetries. *Lecture Notes*: 1–120.
- Goerbig, M. O. 2011. Electronic properties of graphene in a strong magnetic field. *Reviews of Modern Physics* 83(4): 1193–1243.
- Haldane, F. D. M. 1988. Model for a quantum Hall effect without Landau levels: condensed-matter realization of the ‘parity anomaly’. *Nature* 61(18): 2016–2018.
- Haldane, F. D. M. 2016. Topological quantum matter. *Nobel Lecture*: 43–65.
- Hall, E. H. 1880. On a new action of the magnet on electric currents. *Nature* 21: 361.
- Hasan, M. Z. and Kane, C. L. 2010. Colloquium: topological insulators. *Reviews of Modern Physics* 82(4): 3045–3067.
- Hatsugai, Yasuhiro. 1993. Chern number and edge states in the integer quantum Hall effect. *Physical Review Letters* 71(22): 3697–3700.
- Hsieh, D. vd. 2008. A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase. *Nature* 452: 970–974.
- Hsieh, D. vd. 2009. Observation of unconventional quantum spin textures in topological insulators. *Science* 323(5916): 919–22.
- Ingram, W. T. Applications of pure mathematics. *Department of Mathematics and Statistics Ingram Lecture Series*: 1–10.
- Kane, C. L. and Mele, E. J. 2005a. Quantum spin Hall effect in graphene. *Physical Review Letters* 95(226801): 1–4.
- Kane, C. L. and Mele, E. J. 2005b. Z_2 Topological order and the quantum spin Hall effect. *Physical Review Letters* 95(146802).
- Kane, C. L. and Mele, E. J. 2006. A new spin on the insulating state. *Science* 314(5806): 1692–1693.
- Kato, Y. K., Myers, R. C., Gossard, A. C. and Awschalom, D. D. 2004. Observation of the spin Hall effect in semiconductors. *Science* 306(5703): 1910–13.

- Kaufmann, R. M., D. Li, and W.-K. Birgit. 2016. Notes on topological insulators. *Reviews in Mathematical Physics* 28(10)(1630003): 1–57.
- von Klitzing, K. 1985. The quantized Hall effect. Nobel Lecture: 316–346.
- von Klitzing, K. 1986. The quantized Hall effect. *Reviews of Modern Physics* 58(3): 519–531.
- von Klitzing, K, Dorda, G. and Pepper, M. 1980. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance. *Physical Review Letters* 45(6): 494–497.
- Kandemir, B. S. ve Atağ S. 2019. Substrate-Limited helical edge states. *Physical Review B* 100 (24508), 1-9.
- König, M., Molenkamp, L. W., Qi, X.-L. and Zhang, S.-C. 2007. Quantum spin Hall insulator state in HgTe quantum wells. *Science* 318(5851): 766–770.
- König, M., Buhmann, H., Molenkamp, L.W., Hughes, T. L., Liu, C.-X., Qi, X.-L., Zhang, S.-C. 2008. The quantum spin Hall effect: theory and experiment. *Journal of the Physical Society of Japan* 77(031007): 32.
- Krishtopenko, S. S. and Teppe, F. 2018. Realistic picture of helical edge states in HgTe quantum wells. *Physical Review B* 97(165408).
- Lamb, J. S. W. and Roberts, J. A. G. 1997. Time-reversal symmetry in dynamical systems: a survey. *Physica D: Nonlinear Phenomena* 112(1–2): 1–49.
- Linder, J., Yokoyama, T. and Sudbø, A. 2009. Anomalous finite size effects on surface states in the topological insulator Bi₂Se₃. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 80(205401): 1–5.
- Liu, C.-X. vd. 2010. Model Hamiltonian for topological insulators. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 82(045122): 1–19.
- Liu, C.-X., Zhang, H. vd. 2010. Oscillatory crossover from two-dimensional to three-dimensional topological insulators. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 81, 041307(R): 1–7.
- Lopatin, A. 2007. Graphene a new electronic material. FAU Erlangen-Nuernberg: 1–10.
- Lu, H. Z., Shan, W.Y., Yao, W., Niu, Q., Shen, S.-Q. 2010. Massive Dirac Fermions and spin physics in an ultrathin film of topological insulator. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 81(115407): 1–7.
- Lv, B., Qian, T. and Ding, H. 2019. Angle-resolved photoemission spectroscopy and its application to topological materials. *Nature Reviews Physics* 1(10): 609–26.

- Maciejko, J., Hughes, T. L. and Zhang, S.-C. 2011. The quantum spin Hall effect. *Annual Review of Condensed Matter Physics* 2: 31–53.
- Matusalem, F. vd. 2019. Quantization of spin Hall conductivity in two-dimensional topological insulators versus symmetry and spin-orbit interaction. *Physical Review B* 100(245430).
- Moore, J. E. 2009a. An insulator’s metallic side. *Nature* 460: 1090–1091.
- Moore, J. E. 2009b. Topological insulators: the next generation. *Nature Physics* 5: 378–80.
- Moore, J. E. 2010. The birth of topological insulators. *Nature* 464(7286): 194–198.
- Moore, J. E. and Balents, L. 2007. Topological invariants of time-reversal-invariant band structures. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 75(121306): 1–4.
- Murakami, S. 2006. Quantum spin Hall effect and enhanced magnetic response by spin-orbit coupling. *Physical Review Letters* 97(236805): 1–5.
- Murakami, S. 2007. Phase transition between the quantum spin Hall and insulator phases in 3D: emergence of a topological gapless phase. *New Journal of Physics* 9(356): 1–15.
- Murakami, S., Nagaosa, N. and Zhang, S.-C. 2003. Dissipationless quantum spin current at room temperature. *Science (New York, N.Y.)* 301(5638): 1348–1351.
- Murakami, S. 2011. Two-dimensional topological insulators and their edge states. *Journal of Physics: Conference Series* 302(1).
- Murakami, S., Nagaosa, N. and Zhang, S.-C. 2004. Spin-Hall insulator. *Physical Review Letters* 93(15): 1–4.
- Nagaosa, N. 2007. A new state of quantum matter. *Science* 318: 758–759.
- Nakahara, M. 2003. *Topology and physics*. Institute of Physics Publishing Geometry.
- Neto, A. H. C. vd. 2009. The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics* 81(1): 109–162.
- Novik, E. G., Pfeuffer-Jeschke, A., Buhmann, H. vd. 2005. Band structure of semi-magnetic $\text{Hg}_{1-y}\text{Mn}_y$ Te quantum wells. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 72(035321): 1–12.
- Novoselov, K. S. vd. 2005. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. *Nature* 438(10): 197–200.
- Novoselov, K. S. vd. 2006. Unconventional quantum Hall effect and Berry’s phase of 2π in bilayer graphene. *Nature Physics* 2: 177–180.

- Onoda, M., Avishai, Y. and Nagaosa, N. 2007. Localization in a quantum spin Hall system. *Physical Review Letters* 98(076802): 1–4.
- Orlita, M. vd. 2013. Graphene in high magnetic fields. *Comptes Rendus Physique* 14(1): 78–93.
- Qi, X.-L. and Zhang, S.-C. 2011. Topological insulators and superconductors. *Reviews of Modern Physics* 83(4): 20.
- Rachel, S. 2018. Interacting topological insulators: A review. *Reports on Progress in Physics* 81(116501): 1–34.
- Roy, R. 2009a. On the Z_2 Classification of quantum spin Hall models. *Physical Review B* 79(195321): 1–7.
- Roy, R. 2009b. Topological phases and the quantum spin Hall effect in three dimensions. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 79(19): 1–5.
- Sengupta, P. 2014. Theory of topological insulators and its applications. Purdue University, Doctor of Philosophy Thesis.
- Shan, W. Y., Lu, H. Z. and Shen, S.-Q. 2010. Effective continuous model for surface states and thin films of three-dimensional topological insulators. *New Journal of Physics* 12(043048): 1–23.
- Shen, S.-Q. 2005. Spin transverse force on spin current in an electric field. *Physical Review Letters* 95(187203): 1–4.
- Shen, S.-Q., Shan, W.-Y. and Lu, H.-Z. 2011. Topological insulator and the Dirac equation. *SPIN* 1(1): 33–44.
- Shen, S.-Q. 2012. Topological insulators: Dirac equation in condensed matters. eds. M. Cardona et al. Springer.
- Teo, J. C. Y., Fu, L. and Kane, C. L. 2008. Surface states and topological invariants in three-dimensional topological insulators: application to $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$. *Physical Review B* 78(045426): 1–15.
- Thouless, D. J., Kohmoto, M., Nightingale, M. P. and den Nijs, M. 1982. Quantized Hall conductance in a two dimensional periodic potential. *American Physical Society* 49(6): 405–408.
- Tian, W., Yu, W., Shi, J. and Wang, Y. 2017. The property, preparation and application of topological insulators: A Review. *Materials* 10(814): 1–45.
- Tokura, Y., Kawasaki, M. and Nagaosa, N. 2017. Emergent functions of quantum materials. *Nature Physics* 13(11): 1056–1068.
- Tong, D. 2016. Lectures on the quantum Hall effect. TIFR Infosys Lectures: 1–232.

- Urazhdin, S. vd. 2004. Surface effects in layered semiconductors Bi_2Se_3 and Bi_2Te_3 . Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics 69(085313): 1–7.
- Vagner, I. D., Gvoznikov, V. M. and Wyder, P. 2006. Quantum mechanics of electrons in strong magnetic field. HIT Journal of Science and Engineering 3(1): 5–55.
- Wang, J., and Zhang, S.-C. 2017. Topological states of condensed matter.” Nature Materials 16(11): 1062–67.
- Wigner, E. P. 1932. The operation of time reversal in quantum mechanics. Nachr. Ges. Wiss. Gottingen Math-physik K1, 32: 546.
- Winkler, R. 2003. Spin-orbit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems. Springer, Erlangen, Germany.
- Wu, C., Bernevig, B. A. and Zhang, S.-C. 2006. Helical Liquid and the edge of quantum spin Hall systems. Physical Review Letters 96(106401): 1–4.
- Wunderlich, J., Kaestner, B., Sinova, J. and Jungwirth, T. 2005. Experimental observation of the spin-Hall effect in a two-dimensional spin-orbit coupled semiconductor system. Physical Review Letters 94(047204): 1–4.
- Xia, Y., Qian, D., Hsieh, D., Wray, L., Pal, A., Lin, H., Bansil, A., Grauer, D., Hor, Y. S., Cava, R. J., Hasan, M. Z. 2009. Observation (theoretical prediction and experimental observation) of a large-gap topological-insulator class with a single Dirac cone on the surface. Nature Physics 5: 398–402.
- Zhang, G., Qin, H., Teng, J., Guo, J., Guo, Q., Dai, X., Fang, Z., Wu, K. 2009. Quintuple-layer epitaxy of thin films of topological insulator Bi_2Se_3 . Applied Physics Letters 95(053114): 1–3.
- Zhang, H. vd. 2009. Topological insulators in Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 with a single Dirac cone on the surface. Nature Physics 5: 438–442.
- Zhang, Y. vd. 2006. Landau-level splitting in graphene in high magnetic fields. Physical Review Letters 96(136806): 1–4.
- Zhang, Y., Tan, Y.-W., Stormer, H. L. and Kim, P. 2005. Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry’s phase in graphene. Nature 438: 201–204.
- Zhou, B. vd. 2008. Finite size effects on helical edge states in a quantum spin-Hall system. Physical Review Letters 101(246807): 1–4.

EKLER

EK 1 $\mathcal{H}_{etkin}$ içerisindeki matris elemanları :

$$\begin{aligned}
 \int_{-L/2}^{L/2} dz \langle \Phi_1 | H_2 | \Phi_1 \rangle &= |C_1|^2 \int_{-L/2}^{L/2} dz \begin{pmatrix} \varphi_2^* & 0 \end{pmatrix} H_2 \begin{pmatrix} \varphi_2 \\ 0 \end{pmatrix} \\
 &= D_2 k^2 - B_2 k^2 \left[|C_1|^2 \int_{-L/2}^{L/2} dz [D_+^2 \eta_1^{+*} \eta_1^+ f_1^{+*} f_1^+ - A_1^2 f_2^{+*} f_2^+] \right] \\
 \int_{-L/2}^{L/2} dz \langle \Phi_2 | H_2 | \Phi_2 \rangle &= |C_2|^2 \int_{-L/2}^{L/2} dz \begin{pmatrix} \varphi_2^* & 0 \end{pmatrix} H_2 \begin{pmatrix} \varphi_2 \\ 0 \end{pmatrix} \\
 &= D_2 k^2 - B_2 k^2 \left[|C_2|^2 \int_{-L/2}^{L/2} dz [D_+^2 \eta_2^{-*} \eta_2^- f_2^{-*} f_2^- - A_1^2 f_1^{-*} f_1^-] \right] \\
 \int_{-L/2}^{L/2} dz \langle \Phi_3 | H_2 | \Phi_3 \rangle &= |C_1|^2 \int_{-L/2}^{L/2} dz \begin{pmatrix} 0 & \tilde{\varphi}_1^* \end{pmatrix} H_2 \begin{pmatrix} 0 \\ \tilde{\varphi}_1 \end{pmatrix} \\
 &= D_2 k^2 - B_2 k^2 \left[|C_1|^2 \int_{-L/2}^{L/2} dz [D_+^2 \eta_1^{+*} \eta_1^+ f_1^{+*} f_1^+ - A_1^2 f_2^{+*} f_2^+] \right]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int_{-L/2}^{L/2} dz \langle \Phi_4 | H_2 | \Phi_4 \rangle &= |C_2|^2 \int_{-L/2}^{L/2} dz \begin{pmatrix} 0 & \tilde{\varphi}_2^* \end{pmatrix} H_2 \begin{pmatrix} 0 \\ \tilde{\varphi}_2 \end{pmatrix} \\
&= D_2 k^2 - B_2 k^2 \left[|C_2|^2 \int_{-L/2}^{L/2} dz [D_+^2 \eta_2^{-*} \eta_2^- f_2^{-*} f_2^- - A_1^2 f_1^{-*} f_1^-] \right] \\
\\
\int_{-L/2}^{L/2} dz \langle \Phi_1 | H_2 | \Phi_4 \rangle &= C_1^* C_2 \int_{-L/2}^{L/2} dz \begin{pmatrix} \varphi_1^* & 0 \end{pmatrix} H_2 \begin{pmatrix} 0 \\ \tilde{\varphi}_2 \end{pmatrix} \\
&= (i A_1 D_+ A_2 k_-) \left[C_1^* C_2 \int_{-L/2}^{L/2} dz [\eta_1^{+*} f_1^{+*} f_1^- + \eta_2^- f_2^{+*} f_2^-] \right] = \tilde{A}_2 k_- \\
\\
\int_{-L/2}^{L/2} dz \langle \Phi_2 | H_2 | \Phi_3 \rangle &= C_2^* C_1 \int_{-L/2}^{L/2} dz \begin{pmatrix} \varphi_2^* & 0 \end{pmatrix} H_2 \begin{pmatrix} 0 \\ \tilde{\varphi}_1 \end{pmatrix} \\
&= (i A_1 D_+ A_2 k_-) \left[C_2^* C_1 \int_{-L/2}^{L/2} dz [\eta_1^{+*} f_1^{+*} f_1^- + \eta_2^- f_2^{+*} f_2^-] \right] = -\tilde{A}_2^* k_- \\
\\
\int_{-L/2}^{L/2} dz \langle \Phi_4 | H_2 | \Phi_1 \rangle &= C_2^* C_1 \int_{-L/2}^{L/2} dz \begin{pmatrix} 0 & \tilde{\varphi}_2^* \end{pmatrix} H_2 \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ 0 \end{pmatrix} \\
&= (-i A_1 D_+ A_2 k_+) \left[C_2^* C_1 \int_{-L/2}^{L/2} dz [\eta_1^{+*} f_1^{+*} f_1^- + \eta_2^- f_2^{+*} f_2^-] \right] = \tilde{A}_2^* k_+
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int_{-L/2}^{L/2} dz \langle \Phi_3 | H_2 | \Phi_2 \rangle &= C_1^* C_2 \int_{-L/2}^{L/2} dz \begin{pmatrix} 0 & \tilde{\varphi}_1^* \end{pmatrix} H_2 \begin{pmatrix} \varphi_2 \\ 0 \end{pmatrix} \\
&= (-iA_1 D_+ A_2 k_+) \left[C_1^* C_2 \int_{-L/2}^{L/2} dz [\eta_1^{+*} f_1^{+*} f_1^- + \eta_2^- f_2^{+*} f_2^-] \right] = -\tilde{A}_2^* k_+
\end{aligned}$$

H_0 için katkı sadece köşegen terimlerden gelir, diğer terimler sıfırdır:

$$\langle \Phi_1 | H_0 | \Phi_1 \rangle = \langle \Phi_3 | H_0 | \Phi_3 \rangle = E_+ = \frac{1}{2} [(E_+^0 + E_-^0) + (E_+^0 - E_-^0)] = E_0 + \frac{\Delta}{2}$$

$$\langle \Phi_2 | H_0 | \Phi_2 \rangle = \langle \Phi_4 | H_0 | \Phi_4 \rangle = E_- = \frac{1}{2} [(E_+^0 + E_-^0) - (E_+^0 - E_-^0)] = E_0 - \frac{\Delta}{2}$$

$$\boldsymbol{\alpha}_1 = C_1^* C_2 \int_{-L/2}^{L/2} dz [\eta_1^{+*} f_1^{+*} f_1^- + \eta_2^- f_2^{+*} f_2^-] ; \quad \tilde{A}_2 = (iA_1 D_+ A_2) \boldsymbol{\alpha}_1$$

$$\boldsymbol{\beta}_1^+ = |C_1|^2 \int_{-L/2}^{L/2} dz [D_+^2 \eta_1^{+*} \eta_1^+ f_1^{+*} f_1^+ - A_1^2 f_2^{+*} f_2^+] ; \quad \tilde{B}_1 = B_2 \boldsymbol{\beta}_1^+$$

$$\boldsymbol{\beta}_2^- = |C_2|^2 \int_{-L/2}^{L/2} dz [D_+^2 \eta_2^{-*} \eta_2^- f_2^{-*} f_2^- - A_1^2 f_1^{-*} f_1^-] ; \quad \tilde{B}_2 = B_2 \boldsymbol{\beta}_2^-$$

$\mathcal{H}_{etkin}$ içerisindeki köşegen terimler:

$$\langle \Phi_1 | H_0 + H_2 | \Phi_1 \rangle = \langle \Phi_3 | H_0 + H_2 | \Phi_3 \rangle = E_+ + (D_2 - \boldsymbol{\beta}_1^+ B_2) k^2$$

$$= E_0 + \frac{\Delta}{2} + (D_2 - \tilde{B}_1) k^2 = E_0 + \frac{\Delta}{2} - (D + B) k^2$$

$$\langle \Phi_2 | H_0 + H_2 | \Phi_2 \rangle = \langle \Phi_4 | H_0 + H_2 | \Phi_4 \rangle = E_- + (D_2 - \beta_2 B_2) k^2$$

$$= E_0 - \frac{\Delta}{2} + (D_2 - \tilde{B}_2) k^2 = E_0 - \frac{\Delta}{2} - (D - B) k^2$$

$$\mathcal{H}_{etkin} = \begin{bmatrix} h_+ & 0 \\ 0 & h_- \end{bmatrix} ;$$

$$h_+ = \begin{bmatrix} E_0 - Dk^2 + \frac{\Delta}{2} - Bk^2 & \tilde{A}_2 k_- \\ \tilde{A}_2^* k_+ & E_0 - Dk^2 - \frac{\Delta}{2} + Bk^2 \end{bmatrix}$$

$$h_- = \begin{bmatrix} E_0 - Dk^2 - \frac{\Delta}{2} + Bk^2 & -\tilde{A}_2^* k_- \\ -\tilde{A}_2 k_+ & E_0 - Dk^2 + \frac{\Delta}{2} - Bk^2 \end{bmatrix}$$

EK 2 β_1^+ , β_2^- ve α_1 içerisindeki $|C_1|$, $|C_2|$ normalizasyon katsayıları:

$$|C_1|^2 = \frac{1}{D_+^2 |\eta_1^+|^2 \int_{-L/2}^{L/2} dz |f_1^+|^2 + A_1^2 \int_{-L/2}^{L/2} dz |f_2^+|^2} ;$$

$$\begin{aligned} \int_{-L/2}^{L/2} dz |f_1^+|^2 &= \frac{\coth\left(\lambda_1^+ \frac{L}{2}\right)}{\lambda_1^+} - \frac{L}{2} \frac{1}{\left[\sinh\left(\lambda_1^+ \frac{L}{2}\right)\right]^2} \\ &+ \frac{\coth\left(\lambda_2^+ \frac{L}{2}\right)}{\lambda_2^+} - \frac{L}{2} \frac{1}{\left[\sinh\left(\lambda_2^+ \frac{L}{2}\right)\right]^2} \\ &- \frac{4}{(\lambda_1^+)^2 - (\lambda_2^+)^2} \left[\lambda_1^+ \coth\left(\lambda_1^+ \frac{L}{2}\right) - \lambda_2^+ \coth\left(\lambda_2^+ \frac{L}{2}\right) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int_{-L/2}^{L/2} dz |f_2^+|^2 &= \frac{\tanh\left(\lambda_1^+ \frac{L}{2}\right)}{\lambda_1^+} - \frac{L}{2} \frac{1}{\left[\cosh\left(\lambda_1^+ \frac{L}{2}\right)\right]^2} \\ &+ \frac{\tanh\left(\lambda_2^+ \frac{L}{2}\right)}{\lambda_2^+} - \frac{L}{2} \frac{1}{\left[\cosh\left(\lambda_2^+ \frac{L}{2}\right)\right]^2} \\ &- \frac{4}{(\lambda_1^+)^2 - (\lambda_2^+)^2} \left[\lambda_1^+ \tanh\left(\lambda_1^+ \frac{L}{2}\right) - \lambda_2^+ \tanh\left(\lambda_2^+ \frac{L}{2}\right) \right] \end{aligned}$$

$$|C_2|^2 = \frac{1}{D_+^2 |\eta_2^-|^2 \int_{-L/2}^{L/2} dz |f_2^-|^2 + A_1^2 \int_{-L/2}^{L/2} dz |f_1^-|^2} ;$$

$$\int_{-L/2}^{L/2} dz |f_1^-|^2 = \frac{\coth\left(\lambda_1^- \frac{L}{2}\right)}{\lambda_1^-} - \frac{L}{2} \frac{1}{\left[\sinh\left(\lambda_1^- \frac{L}{2}\right)\right]^2}$$

$$+ \frac{\coth\left(\lambda_2^- \frac{L}{2}\right)}{\lambda_2^-} - \frac{L}{2} \frac{1}{\left[\sinh\left(\lambda_2^- \frac{L}{2}\right)\right]^2}$$

$$- \frac{4}{(\lambda_1^-)^2 - (\lambda_2^-)^2} \left[\lambda_1^- \coth\left(\lambda_1^- \frac{L}{2}\right) - \lambda_2^- \coth\left(\lambda_2^- \frac{L}{2}\right) \right]$$

$$\int_{-L/2}^{L/2} dz |f_2^-|^2 = \frac{\tanh\left(\lambda_1^- \frac{L}{2}\right)}{\lambda_1^-} - \frac{L}{2} \frac{1}{\left[\cosh\left(\lambda_1^- \frac{L}{2}\right)\right]^2}$$

$$+ \frac{\tanh\left(\lambda_2^- \frac{L}{2}\right)}{\lambda_2^-} - \frac{L}{2} \frac{1}{\left[\cosh\left(\lambda_2^- \frac{L}{2}\right)\right]^2}$$

$$- \frac{4}{(\lambda_1^-)^2 - (\lambda_2^-)^2} \left[\lambda_1^- \tanh\left(\lambda_1^- \frac{L}{2}\right) - \lambda_2^- \tanh\left(\lambda_2^- \frac{L}{2}\right) \right]$$

$$C_1^* C_2 = \frac{1}{\eta_1^{+*} \int_{-L/2}^{L/2} dz (f_1^{+*} f_1^-) + \eta_2^- \int_{-L/2}^{L/2} dz (f_2^{+*} f_2^-)} ;$$

$$\int_{-L/2}^{L/2} dz (f_1^{+*} f_1^-) = \frac{2 [\lambda_1^- \coth \lambda_1^- \frac{L}{2} - \lambda_1^+ \coth \lambda_1^+ \frac{L}{2}]}{(\lambda_1^-)^2 - (\lambda_1^+)^2}$$

$$+ \frac{2 [\lambda_2^- \coth \lambda_2^- \frac{L}{2} - \lambda_2^+ \coth \lambda_2^+ \frac{L}{2}]}{(\lambda_2^-)^2 - (\lambda_2^+)^2} + \frac{2 [\lambda_2^- \coth \lambda_2^- \frac{L}{2} - \lambda_1^+ \coth \lambda_1^+ \frac{L}{2}]}{(\lambda_1^+)^2 - (\lambda_2^-)^2}$$

$$+ \frac{2 [\lambda_2^+ \coth \lambda_2^+ \frac{L}{2} - \lambda_1^- \coth \lambda_1^- \frac{L}{2}]}{(\lambda_1^-)^2 - (\lambda_2^+)^2}$$

$$\int_{-L/2}^{L/2} dz (f_1^{+*} f_2^-) = \frac{2 [\lambda_1^- \tanh \lambda_1^- \frac{L}{2} - \lambda_1^+ \tanh \lambda_1^+ \frac{L}{2}]}{(\lambda_1^-)^2 - (\lambda_1^+)^2}$$

$$+ \frac{2 [\lambda_2^- \tanh \lambda_2^- \frac{L}{2} - \lambda_2^+ \tanh \lambda_2^+ \frac{L}{2}]}{(\lambda_2^-)^2 - (\lambda_2^+)^2} + \frac{2 [\lambda_2^- \tanh \lambda_2^- \frac{L}{2} - \lambda_1^+ \tanh \lambda_1^+ \frac{L}{2}]}{(\lambda_1^+)^2 - (\lambda_2^-)^2}$$

$$+ \frac{2 [\lambda_2^+ \tanh \lambda_2^+ \frac{L}{2} - \lambda_1^- \tanh \lambda_1^- \frac{L}{2}]}{(\lambda_1^-)^2 - (\lambda_2^+)^2} .$$