

**ANKARA ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**İKİ VE ÜÇ BOYUTTA TOPOLOJİK YALITKANLAR**

**Ertuğrul BAŞTİMUR**

**FİZİK ANABİLİM DALI**

**ANKARA  
2019**

**Her hakkı saklıdır**

## TEZ ONAYI

Ertuğrul BAŞTİMUR tarafından hazırlanan “2 ve 3 Boyutta Topolojik Yalıtkanlar” adlı tez çalışması 18/09/2019 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği / oy çokluğu ile Ankara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı’nda **YÜKSEK LİSANS TEZİ** olarak kabul edilmiştir.

**Danışman** : Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR

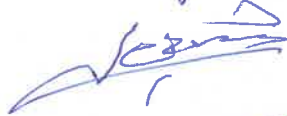


### Jüri Üyeleri:

**Başkan:** Prof. Dr. Hamit YURTSEVEN  
Ortadoğu Teknik Üniversitesi Fizik A.B.D



**Üye** : Prof. Dr. Abdullah VERÇİN  
Ankara Üniversitesi Fizik A.B.D.



**Üye** : Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR  
Ankara Üniversitesi Fizik A.B.D.



**Yukarıdaki sonucu onaylarım.**

**Prof. Dr. Özlem YILDIRIM**  
**Enstitü Müdür Vekili**

## ETİK

Ankara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez içindeki bütün bilgilerin doğru ve tam olduğunu, bilgilerin üretilmesi aşamasında bilimsel etiğe uygun davrandığımı, yararlandığım bütün kaynakları atıf yaparak belirttiğimi beyan ederim.

18.09.2019



Ertuğrul BAŞTİMUR

## ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

### İKİ VE ÜÇ BOYUTTA TOPOLOJİK YALITKANLAR

Ertuğrul BAŞTİMUR

Ankara Üniversitesi  
Fen Bilimleri Enstitüsü  
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR

Bu çalışmada, iki ve üç boyutta topolojik yalıtkanlar ile kıyı ve yüzey durumları çalışılmıştır. İlk olarak grafende sıkı-bağ yaklaşımı göz önüne alınmış ve düşük enerji teorisinde Dirac noktaları bulunmuştur.  $Z$  topolojik yalıtkanlar sınıfının bir üyesi olan spinsiz Haldane modeli üzerine analizler yapılmıştır. Daha sonra Kane-Mele modeli (QSHI) ki  $Z_2$  topolojik yalıtkanlar sınıfının bir üyesidir, Rashba spin-orbit etkileşiminin varlığında ve yokluğunda irdelenmiştir. Rashba spin-orbit etkileşmesinin yokluğunda, Kane-Mele modelin spin up ve spin down için Haldane modeline benzemektedir ve helisel kıyı durumlarına sahiptir. Üç boyutta topolojik yalıtkanlar 4  $Z_2$  değişmez ile karakterize edilirler. Bu değişmezlerden biri ‘güçlü’ veya ‘zayıf’ topolojik yalıtkanlardan hangisi olduğunu ayırt ederken diğerleri katmanların yönünü açıklayan Miller indisleri gibi düşünülebilir. Üç boyutta topolojik yalıtkanın yüzey durumları iki boyutlu kristal momentumu ile tanımlanır. Yüzey durumlarının elektronik yapısı grafene benzemektedir, ancak üç boyutta topolojik yalıtkanlarda yalnızca bir Dirac noktası mevcuttur.

Eylül 2019, 36 Sayfa

**Anahtar Kelimeler:** Topolojik yalıtkanlar, kıyı durumları, yüzey durumları

## ABSTRACT

Master Thesis

### TOPOLOGICAL INSULATORS IN TWO AND THREE DIMENSIONS

Ertuğrul BAŞTİMUR

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

Supervisor: Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR

In this study, topological insulators and their edge or surface states were worked in two and three dimensions. First of all, tight-binding approximation were considered in graphene. Dirac points in graphene were found with low energy theory. Spinless Haldane model which is member of  $Z$  topological insulators class were examined. Haldane model has chiral edge states. After that Kane-Mele model (QSHI) which is member of  $Z_2$  topological insulators class, was investigated in the presence of Rashba spin-orbit interaction and none. In the absence of Rashba-spin orbit interaction, Kane-Mele model looks like Haldane model with spin up and spin down, and have helical edge states. Topological insulators in three dimension are characterized by 4  $Z_2$  topological invariants. One of these invariants distinguishes which is one of the ‘strong’ or ‘weak’ topological insulators, while others can be thought of as Miller indices describing the direction of the layers. Surface states of topological insulator in three dimension defined by two dimensional crystal momentum. Electronic structure of surface states looks like graphene but 3D topological insulators has just one Dirac point.

**September 2019, 36 pages**

**Key Words:** Topological insulators, edge states, surface states

## TEŞEKKÜR

Çalışmalarında engin bilgi birikimi ile bana yol gösteren ve her şeyden önce bilimi sevmeyi öğreten danışman hocam Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR'e, çalışma ve araştırma konusunda her gün beni motive eden Prof. Dr. Satılmış ATAĞ'a, ve her zor durumumda yanımda olan Arş. Gör. Defne AKAY'a teşekkür ederim. Ayrıca yüksek lisans tezi çalışmalarımı 115F421 no'lu proje kapsamında destekleyen TÜBİTAK'a teşekkürü bir borç bilirim.

Bu çalışmayı hayatımın her anında yanımda olan ve desteklerini maddi manevi esirgemeyen aileme ithaf ediyorum.

Ertuğrul BAŞTİMUR

Ankara, Eylül 2019

## İÇİNDEKİLER

### TEZ ONAY SAYFASI

|                                                               |     |
|---------------------------------------------------------------|-----|
| ETİK.....                                                     | i   |
| ÖZET.....                                                     | ii  |
| ABSTRACT.....                                                 | iii |
| TEŞEKKÜR .....                                                | iv  |
| SİMGELER DİZİNİ .....                                         | vi  |
| ŞEKİLLER DİZİNİ .....                                         | vii |
| 1. GİRİŞ .....                                                | 1   |
| 2. GRAFEN.....                                                | 3   |
| 2.1 Sıkı-Bağ Modeli .....                                     | 3   |
| 2.2 Dirac Noktaları Civarında Düşük Enerji Etkin Teorisi..... | 7   |
| 2.3 Simetriler: Uzay İnversiyon Ve Zaman Tersinme .....       | 8   |
| 3. TOPOLOJİK DEĞİŞMEZLER .....                                | 10  |
| 3.1 Bloch Teoremi Ve Bant Teorisi.....                        | 10  |
| 3.2 Berry Fazı .....                                          | 11  |
| 3.3 Chern Sayısı.....                                         | 13  |
| 4. İKİ BOYUTTA TOPOLOJİK YALITKANLAR.....                     | 15  |
| 4.1 İki Bant Modeli.....                                      | 15  |
| 4.2 Haldane Modeli .....                                      | 15  |
| 5. KUANTUM SPIN HALL YALITKAN.....                            | 21  |
| 5.1 Kane-Mele Modeli.....                                     | 21  |
| 6. KIYI DURUMLARI .....                                       | 25  |
| 7. ÜÇ BOYUTTA TOPOLOJİK YALITKANLAR .....                     | 28  |
| 8. YÜZEY DURUMLARI .....                                      | 30  |
| 9. TARTIŞMA VE SONUÇ.....                                     | 32  |
| KAYNAKLAR .....                                               | 34  |
| ÖZGEÇMİŞ.....                                                 | 36  |

## SİMGELER DİZİNİ

|                |                                      |
|----------------|--------------------------------------|
| $H_0$          | Hamiltoniyen                         |
| $\hbar$        | Planck Sabiti                        |
| $\nu_F$        | Fermi Hızı                           |
| $c$            | Işık Hızı                            |
| $P$            | Uzay-inversiyon Simetrisi            |
| $T$            | Zaman-Tersinme Simetrisi             |
| $\sigma_i$     | Pauli Spin Matrisleri                |
| $\theta$       | Anti-üniter Zaman-Tersinme Operatörü |
| $A_n$          | Berry Vektör Potansiyeli             |
| $\gamma_c$     | Berry Fazı                           |
| $\Omega^n$     | Berry Eğriliği                       |
| $\lambda_{SO}$ | İçsel spin-orbit coupling genliği    |
| $\lambda_R$    | Rashba spin-orbit coupling genliği   |

## ŞEKİLLER DİZİNİ

|                                                                                                                                                                                                                                    |    |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Şekil 2.1 Grafenin bal peteği yapısı.....                                                                                                                                                                                          | 3  |
| Şekil 4.1 Haldane modelinin balpeteği örgü yapısı.....                                                                                                                                                                             | 16 |
| Şekil 7.1 (a) Zayıf topolojik yalıtkan yüzeyinde Fermi sarmalı (b) Güçlü topolojik yalıtkan yüzeyinde fermi sarmalı (c) En basit güçlü topolojik yalıtkan için Fermi sarmalının kapattığı tek bir Dirac noktası (Hasan, 2010)..... | 29 |



## 1. GİRİŞ

İki ve üç boyutlu topolojik yalıtkanlar, sıradan bir yalıtkan gibi bulk bant aralığına sahip olan ancak kıyı veya yüzeylerinde iletkenlik durumlarını koruyan elektronik malzemelerdir. Bu kıyı veya yüzey durumlarının varlığı, zaman-tersinme simetrisinin ve spin-orbit etkileşmeslerinin kombinasyonu nedeniyle mümkündür.

Son yıllarda, spin-yörünge etkileşmesinin topolojik yalıtkanlık elektronik fazlarına yol açmasının keşfedilmesi sonucu yoğun madde fiziğinde yeni bir alan ortaya çıkmıştır (Kane ve Mele, 2005a, 2005b; Fu vd. 2007; Moore ve Balents, 2007; Roy, 2009b). Daha sonraki çalışmalarda gerçek materyaller üzerinde bu fazlar öngörölmüş ve keşfedilmiştir (Bernevig vd. 2006; Fu ve Kane, 2007; König vd. 2007; Hsieh vd. 2008, Xia vd. 2009; Zhang vd. 2009). Topolojik yalıtkan, sıradan bir yalıtkan gibi iletkenlik ve değerlik bantları arasında bir enerji aralığına sahiptir. Bununla birlikte iki boyutta kıyısında veya üç boyutta yüzeyinde simetriler ile korunan boşluksuz durumları mevcuttur. Topolojik yalıtkanlar, Chern yalıtkanlar ve  $Z_2$  yalıtkanları olarak iki farklı tipte bulunurlar. Chern yalıtkanlar da (Haldane modeli ve Tam sayılı Kuantum Hall Etkisi) zaman tersinme simetrisi bozulur. Kiral kenar durumları mevcuttur.  $Z_2$  yalıtkanlar da (kuantum spin Hall etkisi), zaman tersinme simetrisi korunur. Helisel kenar durumları vardır.  $Z_2$  topolojik yalıtkanların varlığı, HgTe/CdTe kuantum kuyularında gözlenmiştir. Zayıf spin-orbit etkileşimine sahip grafen yerine güçlü spin-orbit etkileşimine sahip ağır elementler kullanma fikri sonucunda, Bernevig, Hughes ve Zhang (BHZ) (Bernevig vd, 2006) tarafından ortaya atılan HgTe/CdTe kuantum kuyularını dikkate alma fikri, Kuantum Spin Hall Yalıtkanın fazının deneysel keşfine yol açmıştır. König ve arkadaşları, kıyı durumları nedeniyle oluşan elektriksel iletkenliği ölçmüştür. (König vd., 2007)

2006 yazında üç grup bağımsız olarak Kuantum Spin Hall Yalıtkan durumlarının topolojik karakterizasyonunun üç boyutta genelleştirmesini keşfetmiştir. Moore ve Balents ‘topolojik yalıtkan’ terimini elektronik fazı tanımlamak için bulmuştur. (Moore ve Balents, 2007) Fu, Kane ve Mele, bulk topolojik düzen ve iletken yüzey durumları arasında bağlantı kurmuştur (Fu vd, 2007). 2008 de, ilk üç boyutlu topolojik yalıtkan

$Bi_{1-x}Sb_x$  deneysel olarak gözlenmiştir (Hsieh vd. 2008). 2009 da  $Bi_2Se_3$  da içeren ikinci-nesil topolojik yalıtkanlar teorik ve deneysel olarak tespit edildi.

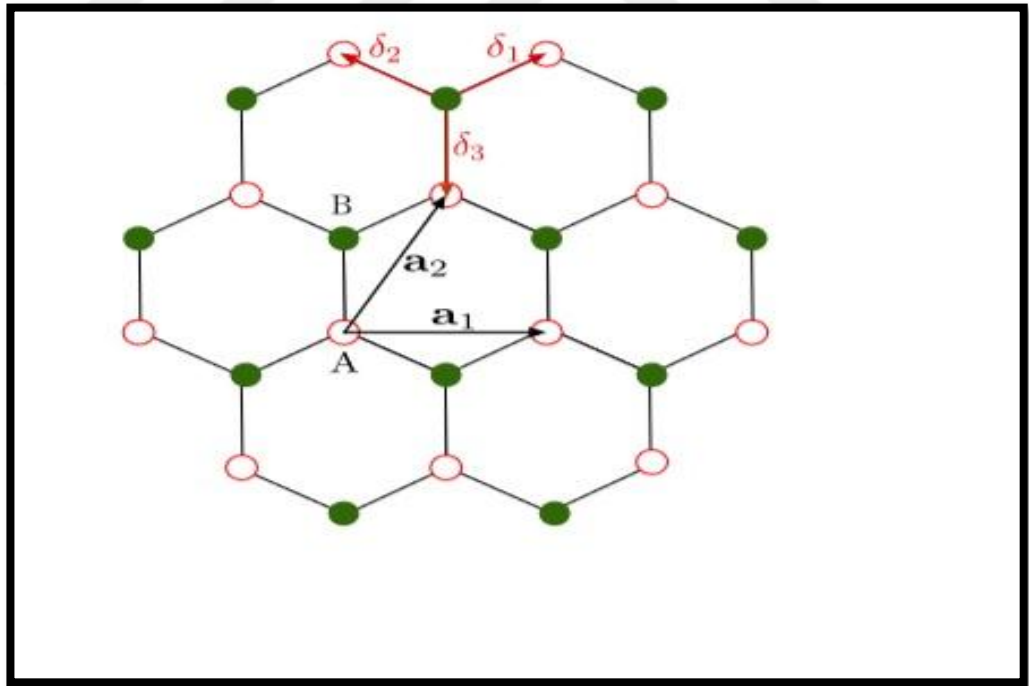
Matematiksel altyapı olarak kullanılan Dirac denklemi relativistik temel spin-1/2 parçacıklar için kuantum mekaniksel bir denklemdir ve topolojik yalıtkan alanına iki açıdan girer (P. A. M. Dirac, 1928). İlk olarak Topolojik yalıtkanların büyük bir sınıfı, güçlü spin-orbit çiftine sahiptirler ve relativistik olmayan limitte Dirac denkleminin bir sonucudur (R. Winkler, 2003). Diğer yandan Kuantum Spin Hall Etkisinin etkin Hamiltoniyeni ve üç boyutlu topolojik yalıtkanlar, Dirac denkleminin özgün matematiksel yapısına sahiptirler.

Karbonun iki boyutlu allotropu olan grafen, iki boyutlu Kuantum Spin Hall Yalıtkanların konseptini kavramaya yarar ve grafendeki Dirac elektronlarının fiziği üç boyutlu topolojik yalıtkanlara önemli paralellikler gösterir.

## 2. GRAFEN

Grafen, karbonun iki boyutta ilginç bir formudur (Novoselov vd. 2005). Grafeni elektronik olarak ilginç yapan özellik, iletkenlik ve değerlik bantlarının Brillouin bölgesinde iki noktada birbirlerine dokunmasıdır. Bu noktalar yakınında dispersiyon, Dirac eşitliği tarafından tanımlanan (Divincenzo ve Mele, 1984) kütlesiz relativistik parçacıkların lineer dispersiyonuna benzer. Karbon atomlarının atomik-ince tabakası olan grafen, 2004 yılında Manchester University (Novoselov vd. 2005) ve Columbia (Zhang vd. 2005) iki grup tarafından izole edilmiştir. Grafende, Fermi hızı ışık hızının yerini aldığı için spin-orbit çifti grafende çok zayıftır. Relativistik-gibi davranışlar ‘momentum-isospin’ eşleşmesine yol açan bal peteği örgünün yapısından kaynaklanmaktadır. İso-spin, gerçek elektronik spin değil alt sınıf indeksidir.

### 2.1 Sıkı-Bağ Modeli



Şekil 2.1 Grafenin bal peteği örgü yapısı. (Cayssol, 2013)

Şekil 2.1 de görüldüğü gibi grafen, iç içe geçmiş sırasıyla A ve B olarak adlandırılan iki üçgen alt örgünün oluşturduğu bal peteği yapısıdır. Bu yapıda yer alan karbon atomlarının her biri 6 elektrona sahiptir. 6 elektrondan 2 tanesi 1s iç kabuğunu doldurmaktadır, 3 elektron  $sp^2$  konfigürasyonunda üç düzlem içi kovalent bağ yapmaktadır ve bir elektron  $p_z$  orbitalini düzleme dik tutmaktadır.

Sıkı bağ hamiltoniyeni

$$H_0 = t \sum_{\mathbf{r}_A} \sum_{\alpha=1}^3 C_B^\dagger(\mathbf{r}_A + \delta_\alpha) C_A(\mathbf{r}_A) + H.C. \quad (2.1)$$

şeklinde olup, burada  $t$  iki komşu karbon atomu arasında hoplama genliğidir ve değeri  $-2.7 \text{ eV}$  dur.  $C_a(\vec{r}_i)$  operatörü  $p_z$  orbitalinde bir elektron yok eder.  $a = A, B$  alt örgülerini işaretlemektedir.  $\mathbf{r}_A$  üzerinden alınan toplam, baz vektörleri tarafından gerilen üçgen Bravais örgüsünü oluşturan A-bölgeleri üzerindendir. Üçgen Bravais örgüsünü geren baz vektörleri,

$$\mathbf{a}_1 = a(\sqrt{3}, 0) \quad (2.2a)$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 3) \quad (2.2b)$$

ile verilir. Denklem (2.2a) ve (2.2)'de yer alan  $a$  karbon-karbon bağının uzunluğudur ve değeri  $0.142 \text{ nm}$ 'dir.

$\delta_\alpha$  vektörleri bir A'yı üç tane en yakın komşuluk B'ye bağlar ve

$$\delta_{1,2} = \frac{a}{2}(\pm\sqrt{3}, 1) \quad (2.3a)$$

$$\delta_3 = a(0, -1) \quad (2.3b)$$

şeklinde tanımlanır. Bir sonraki en yakın komşu atoma hoplama matrisi elemanları,  $t$  komşu atoma hoplama matrisi elemanlarından çok çok küçük olması sebebiyle ihmal edilebilir.

Denklem (2.1) ile verilen Hamiltoniyeni köşegenleştirmek için

$$C_a(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_i} C_a(\mathbf{k}) \quad (2.4)$$

şeklindeki Fourier dönüşümü kullanılır. Denklem (2.4)'de,  $a = A, B$  alt örgü indeksi ve  $N$  toplam bölge sayısıdır. Gerekli işlemler ve düzenlemeler sonucu denklem (2.4)'de yer alan Hamiltoniyen

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} C_a^\dagger(\mathbf{k}) [h_0(\mathbf{k})]_{ab} C_b(\mathbf{k}) \quad (2.5)$$

halini alır ve momentum uzayında yer alan bir Hamiltoniyene dönüşmüş olur. Denklem (2.5)'de yer alan momentum  $\mathbf{k}$  1.Brillouin bölgesi üzerine sınırlıdır. Denklem (2.5)'de ki Hamiltoniyen

$$h_0(\mathbf{k}) = d_1(\mathbf{k})\sigma_1 + d_2(\mathbf{k})\sigma_2 \quad (2.6)$$

Bloch Hamiltoniyenidir ve altörgü izospini üzerinde rol oynar. Denklem (2.6)'ya, denklem (2.2) tarafından sadece köşegen olmayan sıçrama genlikleri eklenmiştir. Gerçek fonksiyonlar  $d_1(\mathbf{k})$  ve  $d_2(\mathbf{k})$

$$d_1(\mathbf{k}) + id_2(\mathbf{k}) = t \sum_{\alpha=1}^3 \exp(ik\delta_\alpha) \quad (2.7)$$

olarak tanımlanır ve momentumun sırasıyla çift ve tek fonksiyonlarıdır. Bu denklem tüm Brillouin bölgesi üzerindendir. Elektronik enerji spektrumu

$$E(\mathbf{k}) = \epsilon_0(\mathbf{k}) \pm |d(\mathbf{k})| = \pm \sqrt{d_1^2(\mathbf{k}) + d_2^2(\mathbf{k})} \quad (2.8)$$

$\mathbf{d} = (d_1, d_2)$  vektörünün boyu ile verilir. Enerji spektrumunun ‘-’ değerleri valans bandını, ‘+’ değerleri iletkenlik bandını tanımlar ve  $E = 0$  da bu bantlar simetriktir. Sıfır enerji A ve B alt örgüleri üzerindeki  $p_z$  orbitallerin ortak enerjisine karşı gelir. Valans ve iletkenlik bantları,  $\mathbf{d}(\mathbf{k}) = 0$  denkleminin çözülmesiyle elde edilen Brillouin bölgesinin izole noktalarında birbirine değır. Ters uzayda,

$$\mathbf{k} = \pm \mathbf{K} = \pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} (1, 0) \quad (2.9)$$

olarak bulunan eşit olmayan iki tane Dirac noktası mevcuttur.  $\mathbf{d}(\mathbf{k}) = 0$  denkleminin diğır çözümleri denklem (2.9) da ki çözümlerden birine ters örgü vektörü ile bağlanabilirler dolayısıyla aynı fiziksel durumu tasvir ederler.  $\mathbf{d}(\mathbf{k}) = 0$  denkleminin izole çözümlerinin varlığı, sistemin boşluklu olmasını önler (Cayssol, 2013). Denklem (2.3a) ve denklem (2.3b) denklem (2.9) da kullanılır ise değme noktaları  $K$  için

$$K\delta_1 = \frac{2\pi}{3} \quad (2.10)$$

$$K\delta_2 = -\frac{2\pi}{3} \quad (2.11)$$

$$K\delta_3 = 0 \quad (2.12)$$

şeklinde elde edilirken,  $K'$  için ise

$$K'\delta_1 = -K\delta_1 = -\frac{2\pi}{3} \quad (2.13)$$

$$K'\delta_2 = -K\delta_2 = \frac{2\pi}{3} \quad (2.14)$$

$$K'\delta_3 = -K\delta_3 = 0 \quad (2.15)$$

olarak gösterilir.

## 2.2 Dirac Noktaları Civarında Düşük Enerji Etkin Teorisi

Dirac noktaları civarında tek parçacıklı durum için düşük enerji teoremi göz önüne alındığında, sıfır enerjilerine yakın noktalarda ( $|q|a \ll 1$ ) momentum  $\mathbf{k} = \pm\mathbf{K} + \mathbf{q}$  formundadır ve bu durumlar için yoketme operatörü  $C_{A\pm K}(\mathbf{q}) = C_A(\pm\mathbf{K} + \mathbf{q})$  halini alır.  $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$  Dirac noktalarından küçük momentum sapmasıdır.  $\mathbf{k} = \xi\mathbf{K}$  ( $\xi = \pm 1$ ) yakınında düşük enerji uyarımlarını açıklayan Hamiltoniyen,

$$H_0^{(\xi K)} = v_F \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} C_{A\xi K}^\dagger(\mathbf{q}) & C_{B\xi K}^\dagger(\mathbf{q}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \xi q_x - iq_y \\ \xi q_x + iq_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{A\xi K}(\mathbf{q}) \\ C_{B\xi K}(\mathbf{q}) \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

ile verilirken burada  $v_F = (-3/2)at$  Fermi hızıdır ve değeri yaklaşık olarak  $c/300$ dür. Fermi hızı basit olarak Brillouin bölgesi büyüklüğü  $1/a$  ile bölünmüş  $t$  bant genişliğidir.

$C_\alpha^\dagger(\mathbf{q}) = (C_{AK}^\dagger \ C_{BK}^\dagger \ C_{A-K}^\dagger \ C_{B-K}^\dagger)$  spinor gösterimi kullanılırsa, tek bir elektron Hamiltoniyeni,

$$H_0 = \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\alpha, \beta=1}^4 c_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{q}) [v_F(q_x \sigma_1 \tau_3 + q_y \sigma_2)]_{\alpha\beta} c_{\beta}(\mathbf{q}) \quad (2.18)$$

şeklinde olup tam olarak sıfır kütleli spin- $\frac{1}{2}$  relativistik parçacıkları tanımlayan Dirac Hamiltoniyenidir. Denklem (2.18)'de  $\tau_3$   $K, -K$  Dirac noktalarına etki eden Pauli matrisidir. Denklem (2.18)'den elde edilen enerjinin dağılım bağıntısı,

$$E(\mathbf{q}) = v_F |\mathbf{q}| \quad (2.19)$$

kütesiz relativistik parçacıkların ışık hızı yerine Fermi hızı almış halidir.

### 2.3 Simetriler: Uzay İnverson Ve Zaman Tersinme

Dirac noktaları, temel simetrilere uyulduğu ve spin-orbit etkileşimleri zayıf olduğu sürece oldukça dayanıklıdır (Bernevig, 2013). Uyulması gereken temel simetriler uzay inverson simetrisi  $P$  ve zaman tersinme simetrisi  $T$ 'dir.

Zaman tersinme simetrisi,

$$\theta = \exp(i\pi S_y / \hbar) K \quad (2.20)$$

anti-üniter operatörü ile temsil edilir. Denklem (2.20)'de,  $S_y$  spin operatörü ve  $K$  kompleks eşlenik işlemini göstermektedir. Spin- $\frac{1}{2}$  elektronlar için zaman tersinme operatörü,  $\theta^2 = -1$  özelliğine sahiptir. Bu sonuç Kramers teoremine yol açar.  $T$  değişmez hamiltoniyenin tüm öz durumları en az iki kat dejeneredir. Spin-orbit etkileşimlerin yokluğunda, Kramers dejenereliği basitçe up ve down spinlerin dejenereliğidir.

$T$  değişmez Bloch hamiltoniyeni

$$\theta h(\mathbf{k})\theta^{-1} = h(-\mathbf{k}) \quad (2.21)$$

denklemini sağlar.



### 3. TOPOLOJİK DEĞİŞMEZLER

Topolojik yalıtkanlar için iki topolojik değişmez sınıfı mevcuttur. Bir tanesi tüm tamsayılardan oluşan  $Z$  grubunun elemanları ile, diğeri 0 ve 1 ya da 1 ve  $-1$  den oluşan  $Z_2$  grubunun elemanları ile karakterize edilir.

#### 3.1 Bloch Teoremi Ve Bant Teorisi

Bir Bloch dalgası veya Bloch durumu, periyodik potansiyeldeki bir elektronun dalga fonksiyonudur. Bloch Teoremi, periyodik potansiyeldeki  $\mathcal{H}(\mathbf{r}) = \mathcal{H}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$  formundaki bir Hamiltoniyeenin

$$|\psi_{n,k}(\mathbf{r})\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |u_{n,k}(\mathbf{r})\rangle \quad (3.1)$$

şeklinde olması gerektiğini söyler. Denklem (3.1)'de,  $u_{n,k}(\mathbf{r})$  kristal ile aynı periyodikliğe sahip periyodik bir fonksiyondur.  $u_{n,k}(\mathbf{r})$ ,  $H(\mathbf{k}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathcal{H}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  Hamiltoniyeenin hücre periyodik öz durumudur ve

$$H(\mathbf{k}) |u_{n,k}(\mathbf{r})\rangle = E_{n,k}(\mathbf{k}) |u_{n,k}(\mathbf{r})\rangle \quad (3.2)$$

bu hamiltoniyene karşı gelen özdeğer denklemdir. Denklem (3.2)'de yer alan enerji özdeğerleri  $E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k} + \mathbf{K})$ , ters örgü vektörünün periyodikliği  $\mathbf{K}$  ile periyodiktir.  $n$  indeksine karşı gelen her bir enerji  $\mathbf{k}$  dalga vektörü ile sürekli değişir ve band indeksi  $n$  ile tanımlanan bir enerji bandı şeklini alır. Verilen  $n$  için özdeğerler  $\mathbf{k}$  da periyodiktir;  $E_n(\mathbf{k})$ 'nın tüm farklı değerleri ters örgünün ilk Brillouin bölgesinde yereldir (Kittel, 1996). Pauli dışarlama ilkesine göre her seviye yalnızca bir elektron tarafından doldurulabilir. İşgal edilen en yüksek seviye Fermi seviyesi ya da Fermi enerjisi olarak adlandırılır. Fermi seviyesi yakınlarında, band kısmen dolu ise bu metalik durumdur.

Eğer değerlik bandı tamamen dolu ise ve iletkenlik bandı boş ise, iki band arasında enerji boşluğu vardır ve bu yalıtkanlık durumudur.

### 3.2 Berry Fazı

Berry fazı döngüsel bir adiyabatik evrimde ortaya çıkar. Kuantum adiyabatik teoremi,  $t$ 'yi değiştiren bir  $\mathbf{R}$  parametresine bağlı  $H(\mathbf{R}(t))$  olduğunda geçerlidir. Eğer  $n$ . özdeğer  $\varepsilon_n(\mathbf{R}(t))$  yol boyunca ( $C$  kapalı yolu) her yerde dejenere olmadan kalırsa ve  $t$  yeteri kadar yavaş ise, ozaman başlangıçta  $|u_n(\mathbf{R}(0))\rangle$  öz durumunda olan sistem, bir faza kadar süreç boyunca ani bir  $|u_n(\mathbf{R}(t))\rangle$  öz durumunda kalacaktır. Faz ile ilgili,  $t$  anındaki durum, (Sakurai, 2005 Modern Quantum)

$$|\phi(t)\rangle = e^{i\gamma_c(t)} \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \varepsilon_n(\mathbf{R}(t')) \right] |u_n(\mathbf{R}(t))\rangle \quad (3.3)$$

ve

$$\partial_t \gamma_c(t) = i \langle u_n(t) | \partial_t | u_n(t) \rangle \quad (3.4)$$

şeklinde olup denklem (3.3)'de yer alan ikinci üstel terim dinamik faz faktörüdür. Parametre uzayında faz faktörü,

$$\gamma_c = \int_C d\mathbf{R} \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \quad (3.5)$$

yol integrali olarak ifade edilebilir. Denklem (3.5)'de ki  $\mathbf{A}_n(\mathbf{R})$  vektörü,

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) = i\langle u_n(\mathbf{R}(t)) | \nabla_{\mathbf{R}} | u_n(\mathbf{R}(t)) \rangle \quad (3.6)$$

halinde olup Berry vektör potansiyeli ya da Berry bağlantısı olarak adlandırılır.  $\mathbf{A}_n(\mathbf{R})$  Berry bağlantısı ayara bağlı olduğundan,

$$|u_n(\mathbf{R}(t))\rangle \rightarrow e^{i\chi(t)} |u_n(\mathbf{R}(t))\rangle \quad (3.7)$$

denkleminde yer alan ayar dönüşümü uygulanırsa, Berry bağlantısı,

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \rightarrow \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) - \nabla_{\mathbf{R}}\chi \quad (3.8)$$

halini alır.  $\gamma_C$  fazı başlangıç ve bitiş noktalarına göre değişecektir. Kapalı bir  $C$  yolu boyunca sistemin çevrimsel evriminden dolayı,

$$\chi(\mathbf{R}(t = T)) - \chi(\mathbf{R}(t = 0)) = 2\pi m \quad (3.9)$$

olup  $m$  bir tam sayıdır. Bu nedenle, kapalı bir  $C$  yolu boyunca  $\gamma_C$ ,

$$\gamma_C = \oint_C d\mathbf{R} \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \quad (3.10)$$

ayardan bağımsızdır ve Berry fazı olarak bilinir. Stokes teoremi ile  $\gamma_C$ ,

$$\gamma_C = \int_S d\mathbf{S} \Omega(\mathbf{R}) \quad (3.11)$$

alan integrali olarak ifade edilebilir ve Berry eğriliği, Berry bağıntısından,

$$\Omega^n(\mathbf{R}) = \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \quad (3.12)$$

olarak tanımlanabilir. Berry eğriliği, Berry fazından türetilen rank-2 bir tensördür ve

$$\Omega_{\mu\nu}^n(\vec{R}) = i(\langle \partial_\mu u_n(\vec{R}) | \partial_\nu u_n(\vec{R}) \rangle - \langle \partial_\nu u_n(\vec{R}) | \partial_\mu u_n(\vec{R}) \rangle) \quad (3.13)$$

tensörün bileşenleri olup bu denklemde  $\partial/\partial R_\mu = \partial_\mu$  gösterimi kullanılmıştır.

Bloch bandında, Berry eğriliği,

$$\Omega^n(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times \langle u_n(\mathbf{k}) | i \nabla_{\mathbf{k}} | u_n(\mathbf{k}) \rangle \quad (3.14)$$

olarak tanımlıdır.

### 3.3 Chern Sayısı

$\sigma_{xy} = Ne^2/h$  ile karakterize edilen Kuantum Hall durumu ile sıradan yalıtkan arasındaki fark, Thouless, Kohmoto, Nightingale ve den Nijs (TKNN) (Thouless vd. 1982) tarafından topoloji meselesi olarak açıklanmıştır. İki boyutlu bant yapısı  $\mathbf{k}$  kristal momentumundan (Torus üzerinde tanımlı)  $\hbar(\mathbf{k})$  Bloch Hamiltoniyenine gönderimdir. Boşluklu bant yapıları enerji aralığını kapatmadan sürekli birbirine deforme olabilirken  $\hbar(\mathbf{k})$ 'nın eşdeğerlik sınıfları göz önüne alınarak sınıflandırılabilir. Bu sınıflar Chern değişmezi denilen,  $n \in Z$  ( $Z$  tamsayılar kümesi) topolojik değişmez ile ayırt edilebilir.

$\mathbf{k}$  kapalı bir ilmek etrafında taşınırken,  $|u_m(\mathbf{k})\rangle$   $A_m$ 'nin çizgi integrali tarafından verilen bir Berry fazı kazanır. Chern değişmezi, Brillouin bölgesindeki toplam Berry akısının

$$n_m = \frac{1}{2\pi} \int d^2\mathbf{k} \mathcal{F}_m \quad (3.15)$$

yüzey integralidir ve burada Berry akısı  $\mathcal{F}_m = \nabla \times \mathbf{A}_m$  olarak ifade edilir. Toplam Chern sayısı,

$$n = \sum_{m=1}^N n_m \quad (3.16)$$

şeklinde olup kısaca tüm işgal edilen bantlar üzerinden toplamdır.

## 4. İKİ BOYUTTA TOPOLOJİK YALITKANLAR

### 4.1 İki Bant Modeli

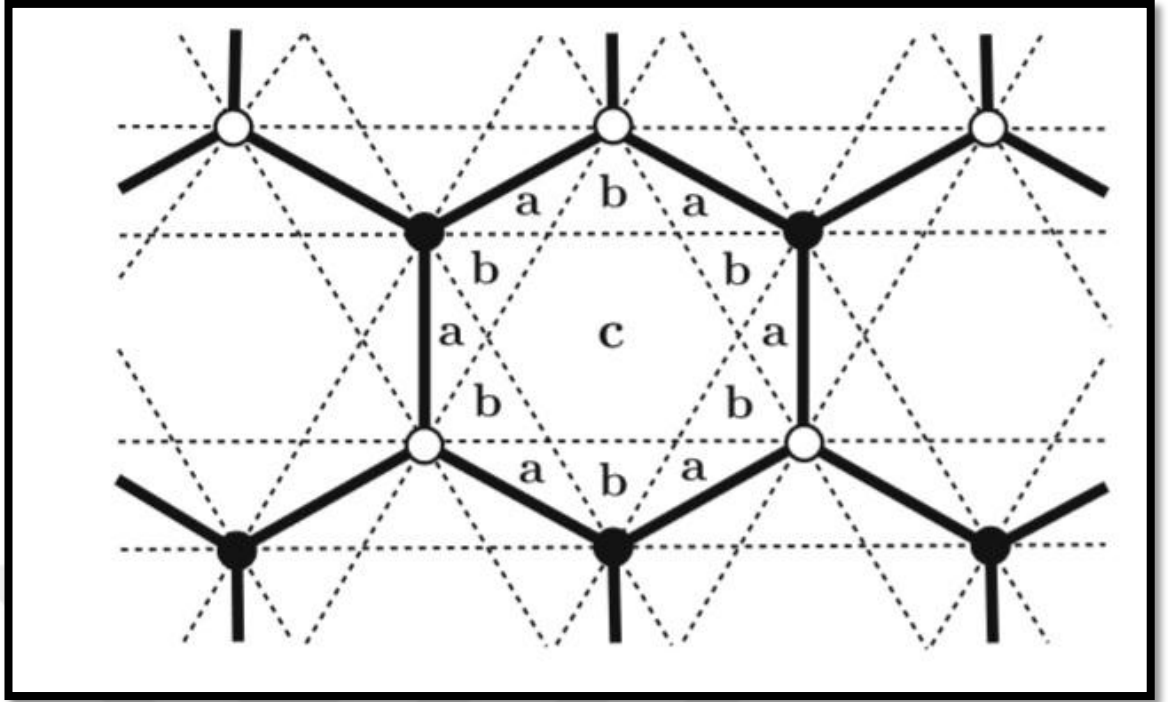
Grafen, bal peteği örgüsündeki birim hücrede birbirine eşdeğer atom üzerindeki  $p_z$  orbitalleri için iki bant modelini kullanır. Bloch Hamiltoniyeni

$$h(\mathbf{k}) = \epsilon_0(\mathbf{k})\sigma_0 + d_1(\mathbf{k})\sigma_1 + d_2(\mathbf{k})\sigma_2 + d_3(\mathbf{k})\sigma_3 = \epsilon_0(\mathbf{k})\sigma_0 + \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (4.1)$$

olup,  $2 \times 2$  bir matristir.

### 4.2 Haldane Modeli

Dirac noktalarındaki dejenerelikler,  $P$  ve  $T$  simetrileri tarafından korunurlar. Haldane modelinde, büyüklük olarak sıfır olan ve örgü üzerinde tam simetriye sahip olan bir manyetik alan eklenerek  $T$  simetrisinin kırılması dolayısıyla dejenereliğin kaldırılması düşünülmüştür. Şekil 4.1 de görülen a, b ve c bölgelerine  $T$  simetrisi toplamı sıfır olacak şekilde bölgesel akıların eklenmesi ile kırılabilir.



Şekil 4.1 Haldane modelinin balpeteği örgü yapısı. (Shen,2012)

Örgü, A ve B alt örgü bölgeleri olmak üzere çift taraflıdır. En yakın komşuluklar arasındaki hoplama terimi  $t_1$  birleşik hat üzerindeyken, sonraki en yakın komşuluklar arasındaki hoplama terimi  $t_2$  kesikli hat üzerindendir. A yerindeki enerji  $M$  ve B yerindeki enerji  $-M$ , A ve B altörgülerindeki inversiyon simetrisini kırmak için dahildir. Haldane, örgüye dik periyodik bir manyetik  $\mathbf{B}(r)$  akısı eklemiştir. a, b, c varsayımsal bölgeler olmak üzere:  $\phi_a$  a bölgelerindeki akı,  $\phi_b$  b bölgelerindeki akı,  $\phi_c$  c bölgelerindeki akıdır. Bu akılar nedeniyle  $t_1$  etkilenmez ancak  $t_2$ ,

$$\phi = \frac{2\pi}{\phi_0} (2\phi_a + \phi_b) \quad (4.2)$$

şeklinde bir faz kazanır. Denklem (4.2)'de  $\phi_0$  birim manyetik akı olmak üzere a,b ve c bölgesindeki akılar arasında

$$\phi_a = -\phi_b \quad (4.3a)$$

$$\phi_c = 0 \quad (4.3b)$$

ilişkisi mevcuttur. Sistemi temsil eden Hamiltoniyen

$$H = M \sum_i \epsilon_i C_i^\dagger C_i + t_1 \sum_{\langle i,j \rangle} C_i^\dagger C_j + t_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} e^{-i v_{ij} \phi} C_i^\dagger C_j \quad (4.4)$$

şeklinde olup  $i$  indisinin A ve B altörgü temsillerine göre  $\epsilon_A$  ve  $\epsilon_B$

$$i = A \rightarrow \epsilon_A = 1 \quad (4.5a)$$

$$i = B \rightarrow \epsilon_B = -1 \quad (4.5b)$$

değerlerini alır.

Denklem (4.4)'de, ilk terim kütle terimi, son terim en yakın ikinci komşuluk terimidir,  $v_{i,j} = \pm 1$  bazdır. En yakın komşuluk bölgelerini,

$$\mathbf{b}_1 = \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_3 \quad (4.6a)$$

$$\mathbf{b}_2 = \mathbf{a}_3 - \mathbf{a}_1 \quad (4.6b)$$

$$\mathbf{b}_3 = \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2 \quad (4.6c)$$

vektörleri birbirine bağlar. Denklem (4.4)'de yer alan Hamiltoniyene Fourier dönüşümü uygulanarak momentum uzayına geçilebilir. Momentum uzayında tanımlı

$$C_A(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} C_{k,A} \quad (4.7a)$$

$$C_A^\dagger(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} C_{k,A}^\dagger \quad (4.7b)$$

operatörleri sırasıyla yok etme ve yaratma operatörleridir. Bu operatörler cinsinden momentum uzayında yer alan Hamiltoniyen

$$H = \sum_k (C_{k,A}^\dagger \ C_{k,B}^\dagger) \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{k,A} \\ C_{k,B} \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

şeklindedir ve bu hamiltoniyende

$$h = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

Bloch Hamiltoniyenidir. Denklem (4.9)'da ki Bloch matrisinin bileşenleri sırasıyla,

$$a = M + 2t_2 \left( \cos \phi \sum_i \cos(\mathbf{k}\mathbf{b}_i) - \sin \phi \sum_i \sin(\mathbf{k}\mathbf{b}_i) \right) \quad (4.10)$$

$$b = t_1 \sum_i (\cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_i) - i \sin(\mathbf{k}\mathbf{a}_i)) \quad (4.11)$$

$$c = t_1 \sum_i (\cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_i) + i \sin(\mathbf{k}\mathbf{a}_i)) \quad (4.12)$$

$$d = -M + 2t_2 \left( \cos \phi \sum_i \cos(\mathbf{k}\mathbf{b}_i) + \sin \phi \sum_i \sin(\mathbf{k}\mathbf{b}_i) \right) \quad (4.13)$$

olup  $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$  B bölgesinden üç komşu A bölgesine yer değiştirmelerdir. Bloch hamiltoniyeni sonuç olarak

$$h(\mathbf{k}) = d_i(k)\sigma_i \quad (4.14)$$

formunda ifade edilir. Bloch Hamiltoniyeni Dirac noktalarında  $k$  için seriye açılırsa,  $K$  noktası için

$$h_+ = h(K + k) = -3t_2 \cos \phi + \frac{3}{2}at_1(-k_x\sigma_1 - k_y\sigma_2) + (M + 3\sqrt{3}t_2 \sin \phi)\sigma_3 \quad (4.15)$$

elde edilirken  $K'$  noktası için ise

$$h_- = h(K' + k) = -3t_2 \cos \phi + \frac{3}{2}at_1(k_x\sigma_1 - k_y\sigma_2) + (M - 3\sqrt{3}t_2 \sin \phi)\sigma_3 \quad (4.16)$$

ifadeleri elde edilir. Denklem (4.15) ve denklem (4.16) göz önüne alındığında  $M + 3\sqrt{3}t_2 \sin \phi$  Haldane kütle terimidir ve  $K$  ile  $K'$  vadilerinde işaret değiştirmiştir.  $3\sqrt{3}t_2 \sin \phi$  topolojik kütledir.



## 5. KUANTUM SPIN HALL YALITKAN

### 5.1 Kane-Mele Modeli

Haldane modeli spinsiz fermiyonlar için geçerlidir. 2005’de C. L. Kane ve E. G. Mele tarafından, Haldane modelinin zaman-tersinme değişmezliğini bozmayan spin-orbit yoluyla spini içeren bir genellemesi önerildi (Kane ve Mele, 2005a). Spin-orbit çiftinin varlığında, grafenin Dirac noktaları uzay inversiyon ve zaman-tersinme simetriteri tarafından korunmaktadır. İçsel spin-orbit çifti, bu simetriteri bozmadan Dirac noktalarında boşluk açarlar. Sonuçtaki yalıtkan, kuantum spin Hall yalıtkanı (QSHI) olarak adlandırılır.

Kane-Mele modeli için Hamiltoniyen

$$\begin{aligned} H = t \sum_{\langle i,j \rangle} C_i^\dagger C_j + i\lambda_{so} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} v_{ij} C_i^\dagger s_z C_j + i\lambda_R \sum_{\langle i,j \rangle} C_i^\dagger (s \times \mathbf{d}_{ij})_z C_j \\ + \lambda_v \sum_i \xi_i C_i^\dagger C_i \end{aligned} \quad (5.1)$$

şeklinde verilirken bu Hamiltoniyende ilk terim  $C_i^\dagger = (C_{i,\uparrow}^\dagger, C_{i,\downarrow}^\dagger)$  olmak üzere en yakın komşuluk hoplama terimidir. Denklem (5.1)’de ikinci terim, spin bağımlı ikinci komşuluğu içeren ayna simetrik spin-orbit etkileşmesidir.  $\lambda_{so}$  içsel spin-orbit coupling genliğidir.  $v_{ij} = \pm 1$  elektronun i’den j’ye geçip geçmediğine bağlı olarak sağ için +1 ve sol için -1 olur. Pauli matrisleri  $s_i$  elektron spinini tanımlar. Üçüncü terim açıkça  $z \rightarrow -z$  ayna simetrisini ihlal eden en yakın komşuluk Rashba terimidir.  $\lambda_R$  Rashba spin-orbit coupling genliğidir. Son terim, altörgü potansiyelidir. Rashba teriminin eklenmesi,  $s_z$  artık korunmadığı ve spin-up ve spin-down elektronlar birlikte çiftlendiği için sistemi daha karışık hale getirmektedir.

Hamiltoniyen köşegenleştirildikten sonra,

$$\mathbf{H}(k) = \sum_{a=1}^5 d_a(k) \Gamma^a + \sum_{a<b=1}^5 d_{ab}(k) \Gamma^{ab} \quad (5.2)$$

formunda olup Dirac matrisleri cinsinden ifade edilebilirken buradaki 5 Dirac matrisi,

$$\Gamma^a = (\sigma_x \otimes s_0, \sigma_z \otimes s_0, \sigma_y \otimes s_x, \sigma_y \otimes s_y, \sigma_y \otimes s_z) \quad (5.3)$$

şeklindedir. Denklem (5.3)'de  $\sigma_i$  Pauli matrisleri altörgü indislerini göstermektedir. Denklem (5.2)'de yer alan  $\Gamma^{ab}$ ,

$$\Gamma^{ab} = \frac{1}{2i} [\Gamma^a, \Gamma^b] \quad (5.4)$$

$\Gamma^a$  ve  $\Gamma^b$  arasındaki komütasyon bağıntısıdır.. Bu temsilde, zaman-tersinme operatörü  $\theta = i(\sigma_0 \otimes s_y)K$  olmak üzere,

$$\theta \Gamma^a \theta^{-1} = \Gamma^a \quad (5.5)$$

beş Dirac matrisi zaman-tersinmesi altında çift sayı iken,

$$\theta \Gamma^{ab} \theta^{-1} = -\Gamma^{ab} \quad (5.6)$$

on komütatör ise tek sayıdır. Zaman-tersinme altında değişmez bir Hamiltoniyen için, katsayılar,

$$d_a(-k) = d_a(k) \quad (5.7a)$$

$$d_{ab}(-k) = -d_{ab}(k) \quad (5.7b)$$

ilişkilerini sağlamalıdır. Kane-Mele modelindeki katsayılar,

$$d_1 = t \left( 1 + 2 \cos \frac{k_x}{2} \cos \frac{\sqrt{3}k_y}{2} \right) \quad (5.8a)$$

$$d_2 = \lambda_v \quad (5.8b)$$

$$d_3 = \lambda_R \left( 1 - \cos \frac{k_x}{2} \cos \frac{\sqrt{3}k_y}{2} \right) \quad (5.8c)$$

$$d_4 = -\sqrt{3}\lambda_R \sin \frac{k_x}{2} \sin \frac{\sqrt{3}k_y}{2} \quad (5.8d)$$

$$d_{12} = -2t \cos \frac{k_x}{2} \sin \frac{\sqrt{3}k_y}{2} \quad (5.8e)$$

$$d_{15} = \lambda_{SO} \left( 2 \sin k_x - 4 \sin \frac{k_x}{2} \cos \frac{\sqrt{3}k_y}{2} \right) \quad (5.8f)$$

$$d_{23} = -\lambda_R \cos \frac{k_x}{2} \sin \frac{\sqrt{3}k_y}{2} \quad (5.8g)$$

$$d_{24} = \sqrt{3}\lambda_R \sin \frac{k_x}{2} \cos \frac{\sqrt{3}k_y}{2} \quad (5.8h)$$

şeklinde olup, bu eşitlikler dört enerji bandı vermektedir. En alt iki bant tam doluyken, üstteki iki bant ve alttaki iki bant arasında enerji boşluğu varsa sistem yalıtkandır. Denklem (5.1)'de  $\lambda_R = 0$  olduğunda,

$$H = \sum_{s=\uparrow,\downarrow} H_s \quad (5.9)$$

olup, Hamiltoniyen spin-up ve spin-down şeklinde iki bağımsız parçaya ayrışır ve Hamiltoniyen

$$H_s = t \sum_{\langle i,j \rangle} C_{i,s}^\dagger C_{j,s} + is\lambda_{SO} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} v_{ij} C_{i,s}^\dagger C_{j,s} + \lambda_v \sum_i \xi_i C_{i,s}^\dagger C_{i,s} \quad (5.10)$$

halini alır. Denklem (5.10) kısaca, Haldane modelinin up ve down spinler için zıt işaretli kopyasıdır. Bu durum  $T$  simetrisini ihlal etmez çünkü zaman tersinme simetrisi, hem spin hem de Kuantum Hall iletkenliğini tersyüz eder.  $s_z$  korunmazken, Kuantum Spin Hall yalıtkanında kıyı durumları, spin korunumu Kramer dejenereliği tarafından ihlal edilse bile sağlamdır. Bu nedenle kuantum spin hall yalıtkanı topolojik faz olarak belirlenmiştir (Kane ve Mele, 2005a).

Kuantum spin hall kıyı durumları önemli bir spin filtreli özelliğe sahiptirler; up spinler bir yönde yayılır, down spinler diğer yönde yayılır. Helissel olarak isimlendirilen kıyı durumları (Wu, Bernevig, ve Zhang, 2006) ‘helisiti’ olarak bilinen bir parçacığın spin ve momentumu arasındaki korelasyona benzer.

## 6. KIYI DURUMLARI

$\mathbf{p}$  momentumunda  $-B\mathbf{p}^2$  kuadratik düzeltme terimi içeren modifiye Dirac denklemi

$$\mathbf{H} = v\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} + (mv^2 - B\mathbf{p}^2)\beta \quad (6.1)$$

şeklinde olup burada  $mv^2$  parçacığın bant aralığı ve sırasıyla  $m$  ve  $v$  kütle ve hızın boyutlarıdır. İki boyutta, denklem (6.1)

$$h_{\pm} = vp_x\sigma_x \pm vp_y\sigma_y + (mv^2 - Bp^2)\sigma_z \quad (6.2)$$

iki bağımsız denklem formunu alır. Denklemin bu iki altkümüsi,  $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$  ve  $p_i \rightarrow -p_i$  dönüşümleri altında zaman tersinme simetrisini bozarlar.  $x = 0$  da bağlı yarı-sonsuz bir düzlem de,  $p_y = 0$  da, 2-boyutlu denklem, 1-boyutlu denklem ile aynı çözüme sahiptir. Bağlı durumların çözümlerinin  $x$ -bağımlı kısmı 1-boyutla aynı forma sahiptir. Böylelikle iki 1-boyutlu  $\{\psi_1, \psi_2\}$  çözümleri baz olarak kullanılır.  $y$ -bağımlı kısım  $\Delta H_{2D} = vp_y\alpha_y - Bp_y^2\beta$  1-boyutlu hamiltoniyen pertürbasyonu olarak kabul edilir. Bu yolla, helisel kıyı durumları için

$$H_{eff} = (\langle \psi_1 |, \langle \psi_2 |) \Delta \mathbf{H} \begin{pmatrix} |\psi_1 \rangle \\ |\psi_2 \rangle \end{pmatrix} = vp_y \text{sgn}(B) \sigma_z \quad (6.3)$$

1-boyutlu etkin modele sahip olunur. Bu etkin modeldeki işarete bağlı  $B$  ayrıca eğer  $B = 0$  olursa helisel kenar durumlarının kaybolduğu gerçeğini yansıtır. Sınırdaki bağlı durumlar için dağılım ilişkisi

$$\epsilon_p = \pm vp_y \quad (6.4)$$

şeklindedir. Elektronlar iki farklı durumda sırasıyla pozitif  $(+v)$  ve negatif  $(-v)$  hıza sahip olacaklardır ve bir çift helisel kenar durumu formundadırlar. Böylece 2-boyutlu denklem kuantum spin Hall sistemini tanımlayabilir.

İki boyutlu denklemin kıyı durumlarının tam çözümleri 1-boyuttaki çözümlere benzer olup

$$\psi_1 = \frac{C}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \text{sgn}(B) \\ 0 \\ 0 \\ i \end{pmatrix} (e^{-x/\xi_+} - e^{-x/\xi_-}) e^{+ip_y y/\hbar} \quad (6.5a)$$

$$\psi_2 = \frac{C}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ \text{sgn}(B) \\ i \\ 0 \end{pmatrix} (e^{-x/\xi_+} - e^{-x/\xi_-}) e^{+ip_y y/\hbar} \quad (6.5b)$$

şeklindedir ve dispersiyon ilişkisi  $E_{p_y} = \pm v p_y \text{sgn}(B) \sigma_z$  formundadır (Zhou vd. 2008). Penetrasyon derinliği  $p_y$  bağımlı halde olup

$$\xi_{\pm}^{-1} = \frac{v}{2|B|\hbar} \left( 1 \pm \sqrt{1 - 4mB + 4B^2 p^2 y^2 / v^2} \right) \quad (6.6)$$

olarak ifade edilir.

İki boyutta, Thouless-Kohmoto-Nightingale-Nijs (TKNN) (Thouless vd. 1982) tamsayısı veya Chern sayısı sistemin topolojik olarak önemsiz veya önemsiz olmayan bir sistem olduğunu karakterize etmek için kullanılabilir. Denklem (6.2)'de hamiltoniyeni  $H = \mathbf{d}(p)\sigma$  formunda yazıldığında Chern sayısı,

$$n_c = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^2} \frac{\epsilon_{ijk} d_i \frac{\partial d_j}{\partial p_z} \frac{\partial d_k}{\partial p_y}}{d^3} \quad (6.7)$$

olarak ifade edilirken burada  $d^2 = \sum_{\alpha=x,y,z} d_\alpha^2$  formundadır (Thouless vd. 1982; Zhou vd. 2006). İntegral, örgü sistemi için birinci Brillouin bölgesinde tekrarlar. Numara, sonlu bir ilk Brillouin bölgesi için daima tam sayıdır ama sonsuz bir bölge için kesirli olabilir. Bu iki denklem için Chern sayısı

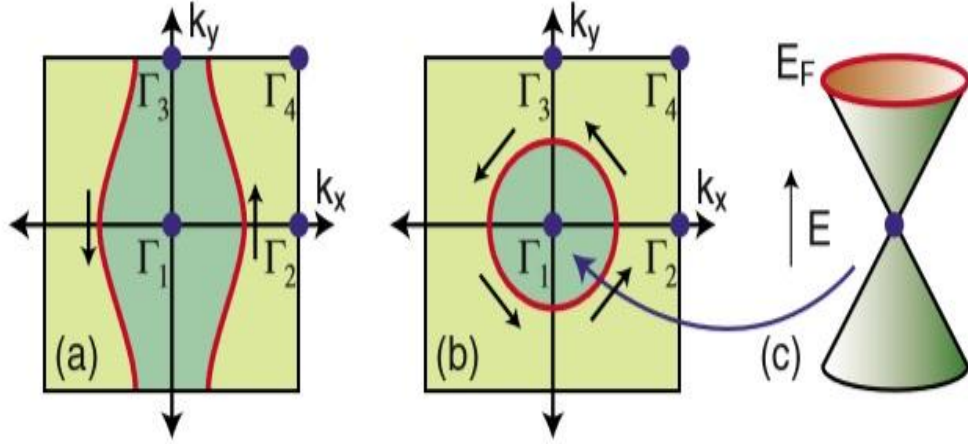
$$n_\pm = \pm (sgn(m) + sgn(B))/2 \quad (6.8)$$

formundadır ve Hall iletkenliği  $\sigma_\pm = n_\pm e^2/h$  verir (Shan vd. 2010, Lu vd. 2010).  $m$  ve  $B$  aynı işarete sahip olduğunda,  $n_\pm = \pm 1$  olur ve sistem topolojik olarak önemsiz olmayandır. Ama  $m$  ve  $B$  farklı işaretlere sahipse,  $n_\pm = 0$  olur. Topolojik olarak önemsiz olmayan durum varlığı kıyı durumlarının çözümünün varlığı ile uygun olur. Tam sayı kuantum Hall etkisinin bulk-kenar ilişkisini yansıtır (Hatsugai, 1993).

## 7. ÜÇ BOYUTTA TOPOLOJİK YALITKANLAR

Bir üç boyutlu topolojik yalıtkan 4  $Z_2$  topolojik invariant tarafından karakterize edilir ( $\nu_0, \nu_1, \nu_2, \nu_3$ ) (Fu vd. 2007; Moore ve Balents, 2007; Roy, 2009b). Bu değişmezlerden biri ( $\nu_0$ ) ‘güçlü’ veya ‘zayıf’ topolojik yalıtkanlardan hangisi olduğunu ayırt ederken, diğerleri ( $\nu_1, \nu_2, \nu_3$ ) katmanların yönünü açıklayan Miller indisleri gibi düşünülebilir. Üç boyutlu kristalin yüzey durumları, iki boyutlu kristal momentumu ile tanımlanır. Dört tane  $T$  invariant nokta  $\Gamma_{1,2,3,4}$  Brillouin Bölgesinin yüzeyinde mevcuttur, bunlar yüzey durumlarıdır ve Kramer dejenereliği olmalıdır. Özel noktaların uzağında, spin-orbit etkileşmesi dejenereliği kaldırır. Bu dejenere noktalar yüzey bant yapısında iki boyutlu Dirac noktaları formundadır.

En basit sıradan olmayan üç boyutlu yalıtkan, iki boyutlu kuantum spin Hall yalıtkan katmanları istiflenerek elde edilir. Bu yapı, üç boyutlu Tam sayılı Kuantum Hall durumlarına benzerdir. (Kohmoto vd. 1992) Tabakaların helisel kıyı durumları, anizotropik yüzey durumları halini alır.  $y$ -yönü boyunca yığılmış zayıf birleştirilmiş katmanlar için olası Fermi yüzeyi şekilde gösterilmiştir. Şekil 7.1.(a) da , tek bir yüzey bandı Fermi enerjisini  $\Gamma_1$  ve  $\Gamma_2$  arasında ve  $\Gamma_3$  ve  $\Gamma_4$  arasında kesiştirmektedir. Bu katmanlandırılmış durum Zayıf Topolojik Yalıtkan olarak adlandırılır ve  $\nu_0 = 0$  dir. Tek bir katmanın iki boyutlu helikal kıyı durumlarının aksine,  $T$  simetrisi yüzey durumlarını korumaz.



Şekil 7.1 (a) Zayıf topolojik yalıtkan yüzeyinde Fermi sarmalı (b) Güçlü topolojik yalıtkan yüzeyinde Fermi sarmalı (c) En basit güçlü topolojik yalıtkan için Fermi sarmalının kapattığı tek bir Dirac noktası (M. Z. Hasan, 2010)

$\nu_0 = 1$  ayırık fazı tanımlar ve Güçlü Topolojik yalıtkan olarak adlandırılır. Şekil 7.1.(a) da olduğu gibi  $\nu_0$ , Fermi sarmalı tarafından kapatılan yüzeyin Kramer noktalarının tek veya çift sayılarının olup olmadığını belirler. Güçlü Topolojik Yalıtkanlar'da Fermi yüzey sarmalı Dirac noktalarının Kramer dejenereliğinin tek sayıları olarak kapatır.

Tek bir Dirac noktası içeren en basit durum,

$$H_{Yüzey} = -i\hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \nabla \quad (7.1)$$

Hamiltoniyeni ile tanımlanırken, denklem (7.1)'de  $\boldsymbol{\sigma}$  spinleri karakterize eder.

Şekil 7.1(c) de görüldüğü gibi güçlü topolojik yalıtkanın yüzey elektronik yapısı, tek bir Dirac noktasına sahip olması dışında grafene benzer. Güçlü Topolojik Yalıtkanın yüzey durumları, iki boyutlu topolojik metalin bir formudur. (Fu ve Kane, 2007) Topolojik metal, sıradan bir metalden farklı olarak Fermi yüzeyinde her noktada up ve down spinlere sahiptir.

## 8. YÜZEY DURUMLARI

Üç boyutta,  $\mathbf{x} = \mathbf{0}$  da bir  $\mathbf{y} - \mathbf{z}$  düzlemi göz önüne alındığında, bağlı durumların 1-boyutta çözümleri yardımıyla yüzey durumları için etkin model türetilebilir.  $\mathbf{p}_y$  – ve  $\mathbf{p}_z$  –bağımlı bölümü 1-boyutlu  $\mathbf{H}_{1D}(\mathbf{x})$  için pertürbasyonu olarak düşünüldüğünde,

$$\Delta H_{3D} = v p_y \sigma_y + v p_z \sigma_z - B(p_y^2 + p_z^2) \beta \quad (8.1)$$

3-boyutlu Dirac denkleminin  $\mathbf{p}_y = \mathbf{p}_z = \mathbf{0}$  da çözümü iki 1-boyutta çözümle özdeşdir. 2-boyutlu durumdaki gibi açık bir hesaplama etkin Hamiltoniyen,

$$H_{eff} = (\langle \psi_1 |, \langle \psi_2 |) \Delta H_{3D} \begin{pmatrix} |\psi_1\rangle \\ |\psi_2\rangle \end{pmatrix} = v sgn(B) (\mathbf{p} \times \boldsymbol{\sigma})_x \quad (8.2)$$

olarak elde edilir. Üniter bir dönüşüm altında

$$\phi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1\rangle - i|\psi_2\rangle) \quad (8.3a)$$

$$\phi_2 = \frac{-i}{\sqrt{2}} (|\psi_1\rangle + i|\psi_2\rangle) \quad (8.3b)$$

yüzey durumları için boşluksuz bir Dirac denklemi,

$$H_{eff} = \frac{1}{2} (\langle \phi_1 |, \langle \phi_2 |) \Delta H_{3D} \begin{pmatrix} |\phi_1\rangle \\ |\phi_2\rangle \end{pmatrix} = v sgn(B) (p_y \sigma_y + p_z \sigma_z) \quad (8.4)$$

şeklindedir. Bu yöntemle yüzey durumlarının tek bir Dirac konisi için etkin model elde edilir. Bağlı olan bu 3-boyutlu denklemin yüzey durumlarının tam çözümü

$$\psi_{\pm} = C\psi_{\pm}^0(e^{-x/\xi_+} - e^{-x/\xi_-})\exp(+i(p_y y + p_z z)/\hbar) \quad (8.5)$$

olup bu denklemdaki  $\psi_+^0$  ve  $\psi_-^0$  sırasıyla

$$\psi_+^0 = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2}\text{sgn}(B) \\ -i\sin\frac{\theta}{2}\text{sgn}(B) \\ \sin\frac{\theta}{2} \\ i\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (8.6a)$$

$$\psi_-^0 = \begin{pmatrix} \sin\frac{\theta}{2}\text{sgn}(B) \\ i\cos\frac{\theta}{2}\text{sgn}(B) \\ -\cos\frac{\theta}{2} \\ i\sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (8.6b)$$

şeklinde verilir ve dispersiyon bağıntısı  $E_{\pm} = \pm v p \text{sgn}(B)$  ve  $p = \sqrt{p_y^2 + p_z^2}$  dir.

Penetrasyon derinliği  $p$  bağımlı olur ve

$$\xi_{\pm}^{-1} = \frac{v}{2|B|\hbar} \left( 1 \pm \sqrt{1 - 4mB + 4B^2 p^2/\hbar^2} \right) \quad (8.7)$$

olarak ifade edilir.

## 9. TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu tezde, maddenin yeni bir fazı olan topolojik yalıtkanların genel özellikleri, iki ve üç boyutta kıyı durumları ve yüzey durumları incelenmiştir.

Karbonun iki boyutlu yapılarından grafende sıkı bağ modeli kullanılmış, Dirac noktaları civarında düşük enerji etkin teorisi yardımı ile Dirac Hamiltoniyeni elde edilmiştir. Grafen ilginç özelliklerine rağmen, iletkenlik ve yalıtkanlık bantları arasında enerji boşluğuna sahiptir ve elektronik olarak yalıtkanlıktır. Düşük enerji teorisinde bu bantlar Dirac noktalarında birbirlerine dokunurlar.

Daha sonra topolojik değişmezler incelenmiş, Bloch teoremi, Bant teorisinin özellikleri üzerinde kısaca durulmuştur. Berry fazı elde edilmiş ve Topolojik yalıtkanlar için topolojik değişmezi denilen ve boşluklu bant yapıları enerji aralığını kapatmadan sürekli birbirine deforme olabilen Hamiltoniyenin eşdeğerlik sınıflarını ayırt etmeye yaran Chern değişmezi incelenmiş, tüm dolu bantlar üzerinden Chern sayısı bulunmuştur.

İki boyutlu topolojik yalıtkanlara ilk model grafen yapısındaki  $T$  zaman-tersinme simetrisinin, toplamı sıfır olacak şekilde bölgesel akılar ile kırılmasıyla oluşan Haldane modelidir. Haldane modelinde Haldane kütle terimi,  $K$  ve  $K'$  vadilerinde işaret değiştirir ve topolojik kütledir. Haldane modeli spinsiz fermiyonlar için geçerlidir. İşin içine spin dahil olduğunda, Kane-Mele modeli söz konusudur. Kane-Mele modelinde hem iç(intrinsic) spin-orbit etkileşmesi söz konusudur hem de Rashba spin-orbit etkileşmesi mevcuttur. Rashba spin-orbit etkileşmesinin söz konusu olmadığı durumlarda, Kane-Mele modelinin Hamiltoniyeni up ve down spinler için iki ayrı Haldane modeli Hamiltoniyeni olarak düşünülebilir. Kane-Mele modelinde up spinler bir yönde ve down spinler diğer yönde yayılır ve helisel kıyı durumları mevcuttur. Haldane modelinde tek bir yönde iletim olur ve kiral kıyı durumları mevcuttur.

Üç boyutta topolojik yalıtkanlar dört farklı  $Z_2$  topolojik invaryant yardımı ile karakterize edilirler. Üç boyutlu bir kristalin yüzey durumları, iki boyutlu kristal momentumu ile tanımlanır. En basit sıradan olmayan yalıtkan, iki boyutlu Kuantum Spin Hall Yalıtkanlarının istiflenmesi ile elde edilir. Anizotropik yüzey durumları mevcuttur. Üç boyutlu topolojik yalıtkanlar zayıf ve güçlü topolojik yalıtkanlar olarak sınıflandırılabilirler.



## KAYNAKLAR

- Bernevig, B. A., T. A. Hughes, and S.C. Zhang, 2006, Science 314, 1757.
- Bernevig, B., 2013. Topological Insulators and Superconductors. Cambridge University Press.
- Cayssol, J. 2013, C. R. Physique 14, 765.
- Dirac, P. A. M., 1982. Principles of Quantum Mechanincs, 4th edn. Clerandon, Oxford.
- Dirac, P. A. M., 1928 Proc. R. Soc. A 117,610.
- Divincenzo, D. P., and E. J. Mele, 1984, Phys. Rev. B 29, 1685.
- Fu, L., and C.L. Kane, 2007, Phys. Rev. B 76, 045302.
- Fu, L., C. L. Kane, and E. J. Mele, 2007, Phys. Rev. Lett. 98, 106803.
- Hatsugai Y., 1993, Phys. Rev. Lett. 71, 3697.
- Halperin, B. I., 1982, Phys. Rev. B 25, 2185.
- Hsieh, D., D. Qian, L. Wray, Y. Xia, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, 2008, Nature (London) 452, 970.
- Kane, C.L. and E.J.Mele , 2005a, Phys. Rev. Lett. 95, 226801.
- Kane, C.L. and E.J.Mele, 2005b, Phys. Rev. Lett. 95, 146802.
- Kittel, C., 1996. Introduction to Solid State Physics, 7th edn. Willey, New York.
- Kohmoto, M., B. I. Halperin, and Y. S. Wu, 1992, Phys. Rev. B 45, 13488.
- König, M., S. Wiedmann, C.Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X. L. Qi, and S. C. Zhang, 2007, Science 318, 766.
- Lu H. Z., W. Y. Shan, W. Yao, Q. Niu, and S. Q. Shen, 2010, Phys. Rev. B.
- Moore, J.E., and L. Balents, 2007, Phys. Rev. B 75, 121306(R).
- Novoselov, K. S., A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, 2005, Nature (London) 438, 197.
- Roy, R., 2009b, Phys. Rev. B 79, 195322.

- Shan W.Y., H. Z. Lu, and S. Q. Shen, 2010, New J. Phys. 12, 043048.
- Sakurai, J. J., 2005. Modern Quantum Mechanics. Revised Edition. Addison-Wesley.
- Thouless, D. J., M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, 1982, Phys. Rev. Lett. 49, 405.
- Winkler. R., 2003. Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electrons and Hole Systems. Springer, Berlin.
- Wu, C., B. A. Bernevig, and S. C. Zhang, 2006, Phys. Rev. Lett. 96, 106401.
- Xia, Y., D. Qian, D. Hsieh, L. Wray, A. Pal, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, 2009 Nat. Phys. 5, 398.
- Zhang, H., C. X. Liu, X. L. Qi, X. Dai, Z. Fang, and S. C. Zhang, 2009, Nat. Phys. 5, 438.
- Zhang, Y., Y. W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, 2005, Nature (London) 438, 201.
- Zhou B., L. Ren., and S. Q. Shen, 2006, Phys. Rev. B 73, 165303.
- Zhou B., H. Z. Lu, R. L. Chu, S. Q. Shen, and Q. Niu, 2008, Phys. Rev. Lett. 101, 246807.

## ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Ertuğrul BAŞTİMUR

Doğum Yeri : Ankara

Doğum Tarihi : 06.09.1989

Medeni Hali : Bekar

Yabancı Dil : İngilizce

### Eğitim Durumu

Lise : Yavuz Sultan Selim Anadolu Lisesi (2007)

Lisans : Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü (2014)

Yüksek Lisans : Ankara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı (Eylül 2015-Eylül 2019)

### Projeler

“Grafenden Topolojik Yalıtkanlara-Dirac Materyalleri: Elektron-fonon Etkileşmeleri, Dikroizm ve Analog Gravite” TUBITAK, no: 115F421. Görevi: bursiyer.