

**ANKARA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

**İKİ BOYUTLU TOPOLOJİK YALITKANLARDA ELEKTRON FONON
ETKİLEŞMESİ**

Pınar ORUÇ

FİZİK ANABİLİM DALI

**ANKARA
2020**

Her hakkı saklıdır

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

İKİ BOYUTLU TOPOLOJİK YALITKANLARDA ELEKTRON FONON ETKİLEŞMESİ

Pınar ORUÇ

Ankara Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR

Bu tez çalışması kapsamında iki boyutlu topolojik yalıtkanlardaki alttaş kaynaklı elektron fonon etkileşmesi incelenmiştir. Topolojik yalıtkanların anlatılmasında temel rol oynayan kuantum Hall olayı tartışılmıştır. Kuantum spin Hall olayının görüldüğü iki boyutlu $HgTe/CdTe$ hetero yapısından elde edilen kuantum kuyusunun bant yapısı incelenmiştir. Kıyı durumları ve yığın davranışının incelenmesi için Bernevig-Hughes-Zhang (BHZ) hamiltoniyenin çözümleri elde edilmiştir. İki boyutlu $HgTe/CdTe$ kuantum kuyusunda kullanılan alttaşa bağlı olarak ortaya çıkan değişiklikleri anlamak için Lee-Low-Pines yaklaşımı kapsamında elektron-yüzey optik fonon etkileşmesi göz önüne alınarak köşegenleştirme yapılmıştır. Fonon giydirilmiş BHZ hamiltoniyeni elde edilerek hangi alttaşların helisel kıyı durumlarını desteklediği gösterilmiştir.

Ağustos 2020, 65 sayfa

Anahtar Kelimeler: Kuantum Hall etkisi, grafen, Dirac-tipi denklem, modifiye Dirac denklemi, BHZ hamiltoniyeni, elektron-fonon etkileşmesi, LLP dönüşümleri, fonon-giydirilmiş BHZ hamiltoniyeni.

ABSTRACT

Master Thesis

ELECTRON PHONON INTERACTION IN TWO DIMENSIONAL TOPOLOGICAL INSULATORS

Pınar ORUÇ

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

Supervisor: Prof. Dr. Bekir Sıtkı KANDEMİR

In this thesis, surface optical phonon interaction due to the substrates with electrons in the two dimensional topological insulators is investigated. As the basis of topological insulators, quantum Hall effect is discussed in some detail. Energy band structure of two dimensional $HgTe/CdTe$ quantum well system where quantum spin Hall effect was first observed, is examined. Solutions of effective Bernevig-Hughes-Zhang (BHZ) hamiltonian for the bulk and the edge states are obtained. Effects of substrates on the $HgTe/CdTe$ quantum well solutions are provided by using Lee-Low-Pines approach to diagonalize BHZ hamiltonian with phonon interactions. In order to clarify which substrates favor the helical edge states, phonon dressed BHZ hamiltonian is developed.

August 2020, 65 pages

Key Words: Quantum Hall effect, graphene, Dirac-like equation, modified Dirac equation, BHZ hamiltonian, electron-phonon interaction, LLP transformation, phonon-dressed BHZ hamiltonian.

TEŞEKKÜR

Bu çalışma kapsamında yüksek lisans tezimi birlikte yürüttüğüm bilgi ve tecrübelerini, hiçbir zaman esirgemeyen danışman hocam, sayın Prof. Dr. Bekir Sıtkı Kandemir'e teşekkür ederim. Lisans hayatımdan beri deneyim ve bilgi birikimlerini benimle paylaşan bu tez çalışmasında da büyük emeği geçen, sayın hocam Prof. Dr. Satılmış Atağ'a teşekkürü bir borç bilirim. Ayrıca yüksek lisans tezi çalışmalarımı 115F421 no'lu proje ile destekleyen TÜBİTAK'A teşekkür ederim. Son olarak çalışmalarım süresince her zaman beni destekleyen aileme teşekkür ederim.

Pınar ORUÇ
Ankara, Ağustos 2020

İÇİNDEKİLER

TEZ ONAY SAYFASI

ETİK.....	ii
ÖZET.....	ii
ABSTRACT	iii
TEŞEKKÜR	iv
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	vii
ŞEKİLLER DİZİNİ	viii
ÇİZELGELER DİZİNİ	ix
1. GİRİŞ.....	1
2. KUANTUM HALL VE KUANTUM SPİN HALL OLAYI	4
2.1 Tam Sayılı Kuantum Hall Olayı	5
2.1.1 Kuantumlanmış Hall iletkenliği.....	6
2.1.2 Kıyı durumları.....	8
2.2 Kuantum Spin Hall Olayı.....	9
3. YOĞUN MADDE FİZİĞİNDE DİRAC TİPİ DENKLEM.....	11
3.1 Dirac Denklemi.....	11
3.2 Dirac-Tipi Denklem	12
3.3 Grafende Dirac-Tipi denklem.....	13
3.3.1 Grafen	13
3.3.2 Grafene ait enerji bant yapısı	14
3.3.3 K noktaları civarında enerji ifadesi ve Dirac-tipi denkleme geçiş	17
3.4 Modifiye Dirac-Tipi Denklem	22
3.4.1 Bir boyutta modifiye Dirac denklemi.....	23
3.4.2 İki boyutta modifiye Dirac denklemi: Helisel kıyı durumları	26
4. TOPOLOJİK YALITKANLARDA KIYI DURUMLARI	28
4.1 İki boyutlu $CdTe/HgTe/CdTe$ Kuantum Kuyusu.....	28
4.2 Yarı Uzay Geometrisinde Yığın Çözümleri.....	32

4.3 Yarı Uzak Geometrisinde Helisel Kıyı Çözümleri	34
4.3.1 Etkin elektron hızı.....	37
4.4 Topolojik Kuantum Sayıları	37
5. TOPOLOJİK YALITKANLARDA ELEKTRON FONON ETKİLEŞMESİ....	39
5.1 Örgü Titreşimleri ve Fononlar.....	39
5.2 İki Boyutlu Topolojik Yalıtkanlarda Elektron ve Yüzey Optik Fonon Etkileşme Hamiltoniyeni.....	40
5.3 Fonon Giydirilmiş Helisel Kıyı Durumları	47
6. SONUÇ	53
KAYNAKLAR	55
EKLER.....	61
EK 1 $H^{(1)}$ VE $H^{(2)}$ HAMILTONİYENLERİN AÇIK HALİ.....	62
EK 2 $A_{FG}, B_{FG}, C_{FG}, D_{FG}, M_{FG}$ PARAMETRELERİ İÇERİSİNDE BULUNAN İFADELER	64
ÖZGEÇMİŞ.....	65

SİMGELER DİZİNİ

$\vec{B}$	manyetik alan
$\vec{j}$	akım yoğunluğu
$\vec{E}$	elektrik alan
H	Hamiltoniyen
$\hbar$	Planck sabiti
$\Psi(x, y, z)$	dalga fonksiyonu
e	elektronun yükü
σ_i	Pauli spin matrisleri
$b^\dagger$	fonona ait yaratıcı operatör
b	fonona ait yokedicici operatör
v_F	Fermi hızı
c	ışık hızı
η	Helicity operatörü
γ^μ	Dirac matrisleri
U_1, U_2	dönüşüm matrisleri

Kısaltmalar

BHZ	Bernevig-Hughens-Zhang
LLP	Lee-Low-Pines
TKHO	Tam sayılı kuantum Hall olayı
KSHO	Kuantum spin Hall olayı

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1 Özdirencin ρ_{xy} bileşeninin manyetik alan değişimi karşısındaki davranışını göstermektedir.	8
Şekil 2.2 Kıyı durumları.....	9
Şekil 3.1 Ters örgü uzayında yüksek simetri bölgesi.....	15
Şekil 3.2 Grafene ait enerji bant yapısının iki boyuttaki hali.....	16
Şekil 3.3 K noktası civarı enerji bant yapısı.	17
Şekil 3.4 $\lambda = \eta\xi$ indislerinin şematik gösterimi. Birinci şekil K noktası ikinci şekil K' noktası için tanımlanır. Yatay eksen momentum, düşey eksen enerjiyi gösterir.	22
Şekil 3.5 Bir boyutlu modifiye Dirac denklemi bağlı durum dalga fonksiyon karesi. ...	26
Şekil 4.1 <i>CdTe</i> (sol) ve <i>HgTe</i> (sağ) ait bant yapısı. (S. Shen, Shan, ve Lu 2011).....	29
Şekil 4.2 <i>CdTe</i> ve <i>HgTe</i> kuantum kuyusu yapısı.....	29
Şekil 4.3 Safsızlıklarda meydana gelen saçılmaya karşı kıyı durumlarının korunması..	32
Şekil 4.4 <i>CdTe</i> ve <i>HgTe</i> iki boyut kuantum kuyusunun yüzey kısmına ait enerji bant yapısı. Burada $2M$ değerinde yasak enerji bant aralığı olduğunda yapı yalıtıcıdır. Grafikte ky parametre olarak alınmış olup her eğri farklı bir ky değerine karşı gelmektedir.....	33
Şekil 4.5 <i>CdTe/HgTe</i> kuantum kuyusunun helisel kıyı durumlarının enerji bant yapısı. Burada iletkenlik ve değerlik bantları arasında enerji aralığı (gap) yoktur.	36
Şekil 4.6 Topolojik yalıtkanların enerji bant yapısının şematik gösterimi.	36
Şekil 5.1 (Sağ taraftaki) Fonon giydirilmiş hamiltoniyenden elde edilen yığın ve kıyı durumlarına ait enerji grafikleri. Düz çizgiler elektron-fonon etkileşmesinin var olduğu sistem. Kesikli çizgiler ise ihmal edildiği sistem. (Sol taraf) Sağdaki grafiğin daha yakın halidir, kıyı durumlarının ne tarafa kaydığını gösterir.	48
Şekil 5.2 $z = 0,3 \text{ nm}$ için farklı alttaşların kıyı durumlarının derinlik katsayılarının tersinin (λ^2) davranışı. Eğriler aşağıdan yukarı doğru; <i>HfO2</i> , <i>CdTe</i> , <i>SiC</i> , $h - BN$ şeklinde sıralanır. En üst eğri alttaş etkisinin olmadığı durumdur. Düşey eksenin birimi ($1/\text{nm}$) ile verilir.....	50
Şekil 5.3 $4MB/A2$ kriterinin z -fonksiyonu olarak, değişik alttaşlar için davranışı. Sağdan-sola eğrilerin sırası <i>HfO2</i> , <i>SiC</i> , $h - BN$, <i>CdTe</i> ile verilir. En üst yatay çizgi alttaş etkisinin olmadığı durumdur.....	51

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 5.1 4×4 'lük matrislerin uzayındaki bazlar. $\mathbf{Y}$, $\mathbf{C}_6$ ya da $\mathcal{T}$ simetri operasyonları altında korunan matrisleri etiketler.....	42
Çizelge 5.2 Zaman tersinme ve parite değişmez elektron-fonon etkileşmesini inşa etmek için kullanılacak matrisler	42
Çizelge 5.3 Farklı altaşlara ait parametreler (Fischetti vd. 2001; De Paula vd. 1998) ..	48



1. GİRİŞ

Yoğun madde fiziğinin en yeni araştırma konularından bir tanesi topolojik yalıtkanlardır. Topolojik yalıtkanlar (Fu 2009; Moore 2010; Murakami 2011; Zhang, Kane, ve Mele 2012; Shen 2012; Marcel Franz 2013; Ortmann ve Roche 2015; Rachel 2018) sınırlarda iletken, iç kısımlarda yalıtkan olarak davranan bir kuantum durumudur.

Bant yapıları yarıiletkenlerle benzerlik gösterir yarıiletkenlerden farklı olarak, iki boyutlu malzemelerin kenarlarında, elektriksel iletim sağlanırken diğer alanlarda (yığında) elektriksel iletimi yoktur yalıtkan gibi davranır. Üç boyutlu materyallerde ise yüzeyde bir elektriksel iletim varken diğer alanlarda (yığında) elektriksel bir iletim olmaz ve yalıtkan gibi davranır.

Böyle bir kuantum durumunun kararlı ve dayanıklı olabilmesi sistemin simetri özelliklerine bağlıdır. Zaman tersinme simetrisi çoğu durumda önemli rol oynar.

Teknolojinin gelişmesi ile beraber bilgisayarlarda yapılan işlemler artmış ve daha yüksek kapasiteli bilgisayarlara ihtiyaç duyulmaya başlanmıştır. Bu ihtiyaç doğrultusunda klasik bilgisayarların yerini kuantum bilgisayarların alması öngörülmüştür. Kuantum bilgisayarlar, kuantum mekaniği prensipleri ile çalışması planlanan ve normal bilgisayarların çalışma prensibinden oldukça farklı olacak olan sistemlerdir. Kuantum bilgisayarların yapısını kubitler oluşturur. Kuantum bilgisayarların temelinde, kubitlerin kuantum durumlarını korumaları gerekmektedir, fakat çevreden ve oluşan hatalardan etkilenirler. Bu durumda kuantum durumları bozulur. Topolojik yalıtkanlar ile oluşturulan kubitler, yumuşak değişimler altında durumlarını koruyabilir ve daha dayanıklı olurlar (Yao vd. 2012). Topolojik yalıtkanlar yalıtkan ile iletken sınırında bulunan yeni bir fazdır. Bu teknoloji sayesinde atomik ölçekte bilgi depolamak mümkün olabilecektir (Lowrance 2019).

Topolojik yalıtkanların temeli, kuantum Hall olayı (KHO) ile başlar. Tam sayılı kuantum Hall (TKH) olayı (Halperin 1982; D. J. Thouless vd. 1982; Stormer ve Tsui 1986) ilk defa kıyı durumlarının olduğu sistemlere örnektir. Kuantum spin Hall (KSH) olayında ise (Haldane 1988; Murakami vd. 2004; Kane ve Mele 2005; Bernevig ve

Zhang 2006; Qi ve Zhang 2010) hem kıyı hem de yüzey durumları ortaya çıkar. Burada zıt yönlü spin durumuna sahip elektronlar zıt yönde ilerler. Bu nedenle elektrik akımı taşımaz, spin akımı taşırlar.

Topolojik yalıtkanlar topoloji dilinde, Z ve Z_2 tipinde olmak üzere iki farklı grupta incelenmektedir. TKH olayı Z topoloji ile tasvir edilir. Oluşan kıyı durumları kiral kıyı durumları olarak adlandırılır. Z tipi, Chern yalıtkanlar (Frank Ortmann, Stephan Roche 2015) olarak isimlendirilir. Bu tip yalıtkanların oluşabilmesi için dış bir manyetik alana ihtiyaç vardır ve zaman tersinme simetrisi yoktur. Bu tip yalıtkanlar, sadece iki boyutlu yapılarda gözlemlenir. *GaAs* (D. Zhang vd. 2013) Z tipi topolojik yalıtkanlara örnektir. TKH olayı üç boyutlu malzemelerde gözlemlenemediği için Z tipinde örnekleri mevcut değildir.

KSH olayı ise Z_2 topoloji ile anlatılır. KSH olayının gerçekleşebilmesi için herhangi bir dış manyetik alana gereksinim yoktur. Spin-yörünge etkileşmesi ile açıklanır. Bu tip topolojik yalıtkanlarda, zaman tersinme simetrisi kırılmaz ve topolojik faz ortadan kaybolmaz. Ayrıca KSH olayı üç boyutlu malzemelerde de gözlemlenebildiği için iki ve üç boyutlu örnekleri mevcuttur. Z_2 tipinde, iki boyutlu topolojik yalıtkanlarda oluşan kıyı durumları helisel kıyı durumları olarak isimlendirilir. İki boyutlu topolojik yalıtkanlardan bazıları *HgTe/CdTe* (Konig vd. 2007) iken üç boyutlu topolojik yalıtkanların bazıları *Bi₂Te₃*, *Bi₂Se₃* (H. Zhang vd. 2009) şeklindedir.

KSH olayında etkin hamiltoniyen $k \cdot p$ yaklaşımı kullanılarak elde edilebilir. Etkin hamiltoniyen matematiksel olarak Dirac denklemi ile benzer yapıya sahiptir. Dirac denklemi, elektron ve pozitronlar arasındaki ilişkiyi aynı dalga fonksiyonlarından yola çıkarak anlatır. Burada kullanılan modelde ise iletim ve değerlik (valans) bandında bulunan elektronlar arasındaki bağlantı benzer biçimde Dirac-tipi hamiltoniyen ile anlatılır. Etkin hamiltoniyen kullanılarak bulunan pozitif ve negatif enerji değerleri iletim ve valans bandını oluşturur.

Topolojik yalıtkanların büyük bir sınıfı güçlü spin-yörünge etkileşmesine sahiptir. Bu etkileşme ise Dirac denklemi içinde doğal olarak bulunmaktadır. Spin-yörünge etkileşmesinin açık biçimi Dirac denkleminin düşük enerji limitinde kendini gösterir.

KSH olayı deneysel olarak ilk kez $CdTe/HgTe/CdTe$ (Brune vd. 2007) hetero yapısında gözlemlenmiştir. Bu yapı sandviç şeklindedir ve sandviğin ortasında $HgTe$ kenarlarında ise $CdTe$ bulunmaktadır. Hetero yapıdaki $HgTe$ 'nin kalınlığı kritik uzunluğu ($d_c = 6,3 \text{ nm}$) geçtiği zaman topolojik faz geçişi mümkündür.

İki boyutlu KSH yapıların elde edilebilmesi için bir alttaş üzerine büyütme yapılması gerekmektedir. Bu yapıda bulunan taşıyıcılar (elektronlar) ile alttaşın yüzeyinde bulunan optik fononlar arasında etkileşmenin olması kaçınılmazdır. KSH sistemleri bu etkileşmelerden etkilendiği için iki boyutlu etkin hamiltoniyen içindeki yeni katkılar kıyı durumlarını değiştirecektir.

Bu çalışmanın ikinci bölümünde topolojik yalıtkanların, temelini oluşturan ve bazı fiziksel olayların anlatılmasında yardımcı olan TKH olayı ve KSH olaylarına değinilmiştir.

Üçüncü bölümde etkin hamiltoniyenin daha rahat anlaşılabilmesi için Dirac denklemine yer verilmiş ve bir, iki ve üç boyutlu Dirac-tipi denkleme nasıl geçiş yapıldığı incelenmiştir. Grafen için $k - K = 0$ civarında yaklaşım yapılarak Dirac-tipi denkleme geçiş yapılmıştır. Daha sonra modifiye Dirac-tipi denklemini tartışılmış Jackiw-Rebbi çözümleri örnek olarak verilmiştir.

Dördüncü bölümde ise $HgTe/CdTe$ hetero yapı için BHZ hamiltoniyeni dikkate alınarak malzemenin hem yığını için hem de kıyı durumları için çözümler yapılmıştır. Bu yapının enerji bant yapılarına ve spinörlerine bakılmıştır. Son olarak böyle kuantum durumlarının sınıflandırılmasında topolojik kuantum sayılarının nasıl kullanıldığı anlatılmıştır.

Beşinci bölümde ise, bu tezin başlığını da taşıyan, elektron ile alttaş kaynaklı yüzey optik fononlar arasındaki etkileşme hamiltoniyeni göz önüne alınmış BHZ hamiltoniyenine katkısı hesaplanmıştır. Alttaş fononlarının, $HgTe/CdTe$ sistemi üzerindeki etkileri tartışılmış hangi alttaşların helisel kıyı durumlarını desteklediği, hangilerinin desteklemediği belirtilmiştir.

2. KUANTUM HALL VE KUANTUM SPİN HALL OLAYI

Topolojik yalıtkanları daha iyi anlayabilmek için kuantum Hall olayının yakından incelenmesi gerekmektedir. Tam sayılı kuantum Hall (TKH) olayı ile kıyı durumları anlatılırken kuantum spin Hall (KSH) olayı ile hem kıyı hem de yüzey durumları anlatılabilir.

İlk olarak klasik Hall olayından kısaca bahsedilmelidir. Klasik Hall olayı iki boyutlu elektriksel iletme sahip bir malzemeye dışarıdan uygulanan manyetik alan sayesinde gözlemlenir. Malzeme, bir $x - y$ düzlemi üzerine yerleştirilirse ve x -doğrultusunda bir elektrik alan uygulanırsa bu durumda x -doğrultusunda bir akım meydana gelir. Eğer bu malzemeye z -doğrultusunda bir dış manyetik alan uygulanırsa, yapı üzerinde y -doğrultusunda da bir akım oluşur. Gözlemlenen bu olay Hall olayı olarak isimlendirilir ve y -doğrultusunda oluşan akım ise Hall akımı ismini alır. Hall akımı, uygulanan manyetik alan ile doğru orantılı olacak şekilde değişir fakat elektrik alan sayesinde oluşan akımda (x -yönünde) herhangi bir değişim gözlemlenmez. Hall olayı Dr. Edwin Hall tarafından (Hall 1879) keşfedilmiştir.

Kuantum Hall olayı klasik Hall olayından farklıdır ve aşağıdaki gibi farklı fiziksel özelliğe sahip şekilde kategorize edilmektedir.

- Tam sayılı kuantum Hall olayı
- Kuantum spin Hall olayı
- Kesirli sayılı kuantum Hall olayı
- Anormal kuantum Hall olayı

Kuantum Hall olayında doldurma faktörü olarak isimlendirilen bir nicelik vardır. Bu değer tam sayılı kuantum Hall olayı için $\nu = 1, 2, 3, \dots$ gibi tam sayı değerleri alırken, kesirli kuantum Hall olayında $\nu = 1/3, 2/3, 1/5, \dots$ gibi kesirli sayı değerleri alır. Bu kısımda sadece tam sayılı kuantum Hall olayı ve kuantum spin Hall olayına değinilecektir.

2.1 Tam Sayılı Kuantum Hall Olayı

Kıyı durumlarına sahip, Chern yalıtkanları TKH olayı ile anlatılır. TKH olayı (Von Klitzing 1980), von Klitzing tarafından 1980’de keşfedilmiştir. İki boyutlu bir malzemeye manyetik alan ve elektrik alan uygulanması ile ortaya çıkar, klasik Hall olayı ile benzerlik gösterir.

Hall direnci olarak da adlandırılan özdirencin ρ_{xy} bileşeni manyetik alanla birlikte lineer artış göstermek yerine basamaklar şeklinde artış gösterir. Özdirencin ρ_{xx} bileşeninin ise sabit bir değer yerine, ρ_{xy} ’nin basamakları atladığı noktalarda sonlu değerler alırken düzlüklerde sıfır olur. Schrödinger denkleminin çözümlerine ihtiyaç vardır. Schrödinger Denklemi;

$$\mathbf{H}\Psi(x, y) = E\Psi(x, y) \quad (2.1)$$

Dalga fonksiyonu;

$$\Psi(x, y) = \Phi_p(y)f(x) \quad (2.2)$$

şeklinde değişkenlere ayrılabilir. Bu durumda hamiltoniyen aşağıdaki gibidir:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m}(\vec{p} + q\vec{A})^2 - q\vec{E} \quad (2.3)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{B}; \quad \vec{B} = B\hat{z} \quad (2.4)$$

Aynı manyetik alanı veren farklı vektör potansiyeller dikkate alınabilir. Burada Landau ayarı tercih edilecektir:

$$\vec{A} = Bx\hat{y}$$

Ayar seçimi denklemi daha kolay çözmeye yardımcı olur.

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m} \left\{ (\mathbf{p}_x - qA_x)^2 + (\mathbf{p}_y - qA_y)^2 + (\mathbf{p}_z - qA_z)^2 \right\} - qE_x x \quad (2.5)$$

Parçacığın hareketinin z bileşeni olmadığı için $(\mathbf{p}_z - qA_z)^2$ kısmından katkı gelmez. Denklem (2.5)'te gerekli düzenlemeler yapıp hamiltoniyende yerine yazıldığında Schrödinger denklemi aşağıdaki hale gelir.

$$\left[\frac{1}{2m} \{ \mathbf{p}_x^2 + (\mathbf{p}_y - qBx)^2 \} - qE_x x \right] e^{-ik_y y} f(x) = E e^{-ik_y y} f(x) \quad (2.6)$$

Denklem (2.6)'da gereken ara işlemler ve düzenlemeler yapıp aşağıdaki gibi bir hamiltoniyen elde edilir.

$$\mathbf{H} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_B^2 (x - x_0)^2 - \frac{mE_x}{2B^2} - k l_B^2 e E_x; \quad x_0 = -k_y l_B^2 - \frac{eE_x}{m\omega_B^2} \quad (2.7)$$

Denklem (2.7)'de verilen x_0 elektronun denge konumu, $\omega_B = eB/em$ ve l_B manyetik uzunluktur. Elde edilen hamiltoniyen ise harmonik salıncı hamiltoniyenine oldukça benzer, tek fark x_0 'lık kadar bir ötelenme mevcut olmasıdır. Bu ötelenme ise sadece enerji düzeylerinde bir ötelenme meydana getirir.

$$E_n = \hbar \omega_B \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{mE_x}{2B^2} - k_y l_B^2 e E_x; \quad n = 0, 1, 2, 3 \dots \quad (2.8)$$

Buradaki enerji değerleri Landau düzeylerini gösterir, hem n -kuantum sayısı hem de k değerlerine bağlıdır. Yani, bir Landau düzeyini doldurmak için çok sayıda k değeri dikkate alınmalıdır. Dalga fonksiyonu ise Hermit polinomları ile anlatılır.

$$\Psi(x, y) = \frac{1}{\sqrt{L_y}} e^{-ik_y y} \left[\frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega_B}{\hbar \pi} \right)^{1/2} e^{-\frac{m\omega_B}{2\hbar}(x-x_0)^2} H_n \left\{ \sqrt{\frac{m\omega_B}{\hbar}} (x - x_0) \right\} \right] \quad (2.9)$$

Dalga fonksiyonu x -doğrultusunda $x = x_0$ çevresinde yerleşmiş, ancak y -doğrultusunda sürüklenmektedir.

2.1.1 Kuantumlanmış Hall iletkenliği

Kuantum Hall direncini belirleyebilmek için, akım ile elektrik alan arasındaki bağıntıdan yararlanılır. Kuantum mekaniği ilkeleri çerçevesinde akım yoğunluğu hesaplanırsa aşağıdaki sonuçlar elde edilir:

$$J_y = -\frac{e^2 E_x}{h} \nu, \nu = 1, 2, 3.. \quad (2.10)$$

$$\nu = \frac{n_0 \phi_0}{B}$$

$$\phi_0 = \frac{h}{e}$$

$$J_x = 0, \quad E_y = 0$$

Burada $\phi_0 = h/e$ akı kuantumu ve ν Landau düzeylerini doldurma çarpanıdır, n_0 ise ν tane Landau düzeyini doldurmak için gereken elektron yoğunluğudur. Akım yoğunluğunu aşağıdaki iletkenlik matrisinin tanımı ile karşılaştırsak,

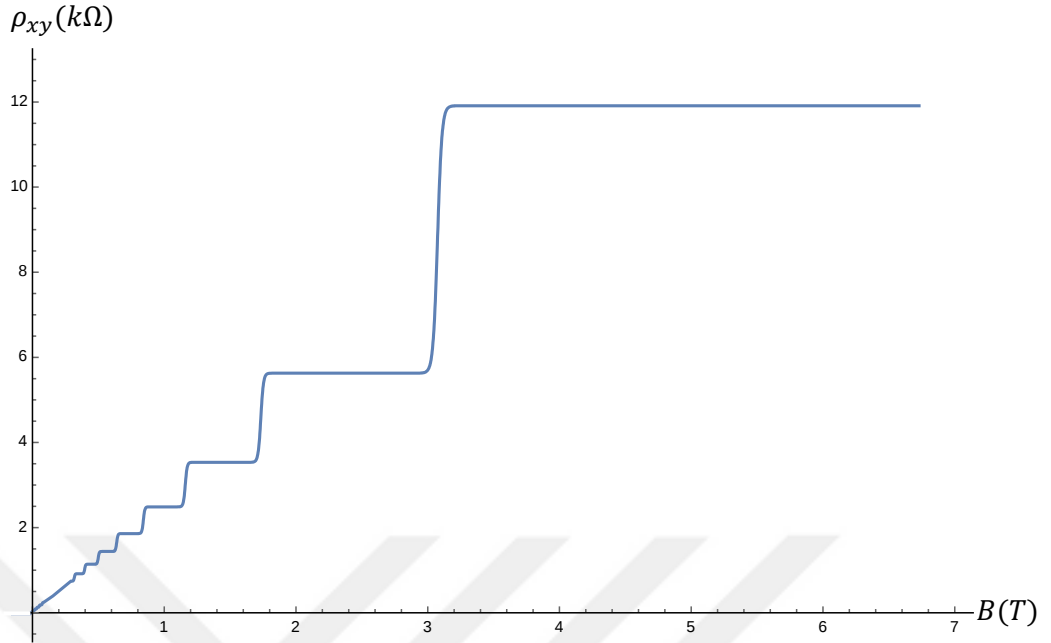
$$J_\mu = \sigma_{\mu\nu} E^\nu \quad (2.11)$$

iletkenlik veya özdirencin ifadeleri elde edilebilir.

$$\begin{pmatrix} J_x \\ J_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

$$\sigma_{xy} = \frac{1}{\rho_{xy}} = \frac{e^2}{h} \nu, \quad \sigma_{xx} = \frac{1}{\rho_{xx}} = 0 \quad (2.13)$$

Elde edilen özdirencin manyetik alana göre grafiği şekil 2.1’de verilmiştir.

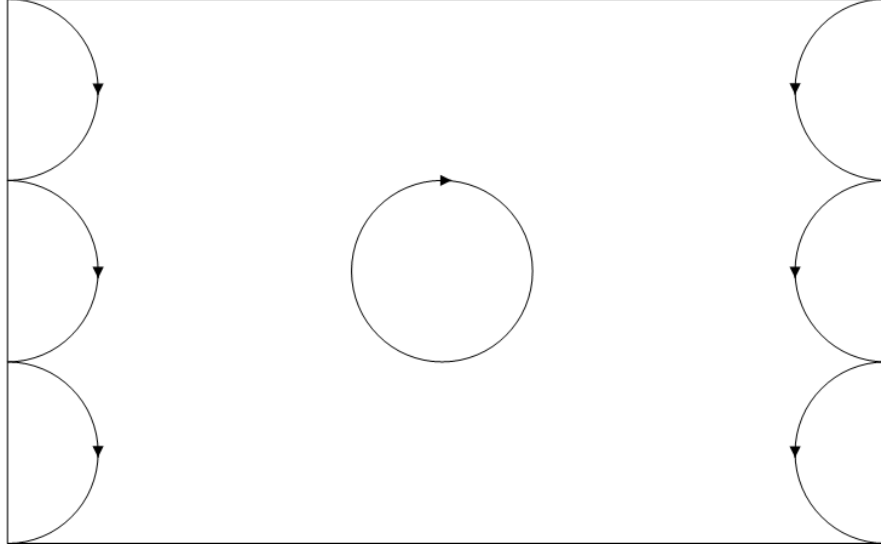


Şekil 2.1 Özdirencin ρ_{xy} bileşeninin manyetik alan değişimi karşısındaki davranışını göstermektedir.

Şekil 2.1’de görüldüğü gibi öz direncin xy -bileşeni (ρ_{xy}) klasik Hall olayının aksine doğrusal olarak değil basamaklar halinde artış gösterir. Buradan da görüldüğü gibi artık öz direnç kuantumlanmıştır. Landau düzeylerinin doluluk değeri ν değiştiğinde basamaklar artmakta ya da azalmaktadır. Buradaki kuantumlanmanın kaynağı akı kuantumuna bağlıdır.

2.1.2 Kıyı durumları

Manyetik alanın yeterince büyük olduğu durumlarda malzemenin yığınınında bulunan elektronlar belirli bir alana hapsedilir. Bu kısımlar yalıtkan gibi davranır. Fakat kıyılarda elektronlar çembersel yörüngelerini tamamlayamazlar. Bu sayede kıyılarda akım oluşur. Kıyı durumlarının tasviri şekil 2.2’de verilmektedir.



Şekil 2.2 Kıyı durumları

Şekil 2.2’de görüldüğü gibi iki boyutlu malzemenin sadece kenarlarında akım mevcuttur. Oluşan akımlar tek yönlüdür, akımın yönü uygulanan manyetik alanın yönüne bağlıdır. Bu akımlar, kiral akımları (Burstein vd. 2013) olarak isimlendirilir. Diğer yandan malzemenin yığını yalıtkan gibi davranır. Kıyılarında kiral akımların mevcut olduğu yığınının yalıtkan gibi davrandığı malzemeler, Chern yalıtkanları (Weng, Dai, ve Fang 2012) olarak adlandırılır. Kıyı durumlarının matematiksel kısımları topolojik yalıtkanlar bölümünde Dirac-tipi denklemlerin çözümleri kapsamında tekrar tartışılacaktır.

2.2 Kuantum Spin Hall Olayı

Buraya kadar manyetik alanla elektronun etkileşme Hamiltoniyeninde elektron spini katılmamıştır. Spin kuantum sayısı parçacığa özgü kuantum mekaniksel bir özelliktir. Klasik mekanikte tam karşılığı bulunmamaktadır. Elektronun spin kuantum sayısı $1/2$ olduğundan tanımlanan bir eksene göre yukarı ve aşağı olmak üzere iki spin durumu vardır. Pauli’nin dışarlama ilkesine göre, spin yönelimi farklı iki elektron aynı enerji düzeyinde bulunabilir.

Elektronların spini ile yörüngesel açısal momentum arasındaki etkileşme spin-yörünge (spin-orbit) etkileşmesi olarak isimlendirilir. Bu etkileşme teriminde spin yönelimi oluşan akımın yönünü etkiler. Zıt spin yönelimine sahip elektronlar birbirine zıt yönde hareket ederler. Bunlar helisel kıyı durumları olarak isimlendirilir. Kuantum spin Hall olayı, iki tane kuantum Hall olayının (iki tane kıyı durumu) birleştirilmesi gibi düşünülebilir. Net yük akımı sıfır olmasına karşın spin akımı ortaya çıkar. Ancak burada sözü edilen spin gerçek elektron spini olmayabilir, iki durumlu herhangi bir sistem olabilir. Spin iletiminin katsayısı $e/4\pi$ olarak elde edilir. KSH olayında dışarıdan uygulanan manyetik alan olmasına gerek yoktur.

Ayrıca kuantum spin Hall olayı üç boyutlu malzemelerde de görülmektedir. Kuantum spin Hall olayının gözlemlenebilmesi için spin-yörünge etkileşmesinin güçlü olması gerekir. Kuantum spin Hall olayı kıyı ve yüzey durumlarının oluşmasında temel rol oynadığı için topolojik yalıtkanların incelenmesinde oldukça önemlidir.

Spin-yörünge etkileşmesinin hamiltoniyeni aşağıdaki gibi verilmektedir.

$$\begin{aligned} H_{SY} &= -\frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \vec{\sigma} \cdot [(\vec{\nabla}V_0) \times \vec{p}] \\ &= \Lambda \vec{\sigma} \cdot \vec{L} \end{aligned} \quad (2.14)$$

σ Pauli spin matrisi, V_0 Coulomb potansiyeli, m_0 elektronun serbest kütlesi, L yörüngesel açısal momentum, Λ etkileşmenin büyüklüğü belirten katsayıdır. Matematiksel terimler gelecek bölümlerde Dirac-tipi denklem kullanılarak incelenecektir.

3. YOĞUN MADDE FİZİĞİNDE DİRAC-TİPİ DENKLEM

Dirac-tipi denklem topolojik yalıtkanları anlatmakta kilit rol oynar, denklemin çözümleri topolojik yalıtkanların enerji bant yapısını vermekle beraber denklem hem elektronları hem deşikleri anlatır. Dirac-tipi denkleme değinmeden önce Dirac denklemi daha yakından incelenecektir.

3.1 Dirac Denklemi

Görelî kuantum mekaniğinde, spin-1/2 parçacıklar (fermionlar) için yazılan ve tüm hız bölgelerinde geçerli olan dalga denklemidir. Dirac denklemi (Dirac 1928) elektron ve pozitrona ait dalga fonksiyonunu birlikte tasvir eder. Birinci mertebeden zaman ve uzaysal türevleri içerdiğinden görelî enerji ifadesi spin-1/2 özelliğini vermesi ancak bir matris denklemi olması ile mümkündür. Lorentz dönüşümleri altında değişmez kalır.

Dirac denkleminin topolojik yalıtkanlarla olan ilişkisi iki farklı şekildedir. Birincisi, Dirac denklemi spinî doğal olarak içerdiğinden düşük enerji sınırında spin-yörünge etkileşme terimini verir. İkincisi ise Dirac denkleminin matematiksel yapısı, kuantum spin Hall olayı için elde edilen etkin hamiltoniyen ile benzerdir. Ancak topolojik yalıtkan sistemlerinde her zaman gerçek spin söz konusu olmaz, iki durumlu diğer fiziksel sistemler de Dirac benzeri matematiksel biçime sahiptir.

Denklem aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$\gamma^\mu p_\mu \Psi(\vec{r}, t) = mc\Psi(\vec{r}, t) \quad (3.1)$$

Denklem (3.1)'de p_μ dörtmomentum, c ışık hızı, m parçacığın kütlesi, γ^μ Dirac matrisleridir. Bu nedenle dalga fonksiyonu 4-bileşenli bir sütun matrisi olarak tanımlanır. Dirac matrisleri bazen farklı gösterimlere sahip olabilir ve aşağıdaki gibi tanımlanabilir:

$$\gamma^\mu = (\gamma^0, \gamma_x, \gamma_y, \gamma_z) \quad (3.2)$$

$$\gamma^0 = \beta; \beta = \sigma_z \otimes \sigma_0 \quad (3.2a)$$

$$\gamma\gamma^0 = \alpha; \alpha_i = \sigma_x \otimes \sigma_i \quad (3.2b)$$

Burada (4×4) Dirac matrisleri (2×2) Pauli spin matrisleri cinsinden de verilmiştir. Dörtlü momentum işlemcisinin açık hali aşağıdaki gibi verilir.

$$\mathbf{p}_\mu = (\mathbf{p}_0, \vec{p}) \quad (3.3)$$

$$\mathbf{p}_0 = i\partial_t \quad (3.3a)$$

$$\vec{p} = -i\vec{\nabla} \quad (3.3b)$$

$\hbar = 1$ alınmıştır. Dalga fonksiyonu, zamana ve konuma bağlıdır. Bu yüzden dalga fonksiyonunu konuma ve zamana ait değişkenlere sahip iki ayrı fonksiyon şeklinde yazmak mümkündür. Dalga fonksiyonu aşağıdaki gibi yazılırsa,

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-iEt} \psi(\vec{r}) \quad (3.4)$$

$$[(i\gamma^0\partial_t + i\boldsymbol{\gamma}\cdot\nabla) - mc]e^{-iEt/\hbar} \psi(\vec{r}) = 0 \quad (3.5)$$

ve denklem (3.5), γ^0 ile çarpılıp gereken düzenlemeler yapıldığında denklem aşağıdaki hali alır:

$$(\boldsymbol{\beta}mc - i\hbar\boldsymbol{\alpha}\cdot\vec{\nabla})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (3.6)$$

$$\mathbf{H} = \boldsymbol{\beta}mc - i\hbar c\boldsymbol{\alpha}\cdot\vec{\nabla}$$

Bu şekilde denklem özdeğer denklemi haline getirilmiştir.

$$\mathbf{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (3.7)$$

$$\{\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_j\} = 2\delta_{ij} \quad (3.8)$$

$$\{\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\beta}\} = 0 \quad (3.9)$$

Denklem (3.8) ve (3.9)'da, $\boldsymbol{\alpha}_i$ ve $\boldsymbol{\beta}$ 'nin arasındaki anti-komütasyon¹ bağıntıları fermiyonlara özgü bir özelliktir.

Bir boyutta Dirac matrisleri $\boldsymbol{\alpha}_x = \boldsymbol{\sigma}_x$, $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\sigma}_z$; iki boyutta Dirac matrisleri $\boldsymbol{\alpha}_x = \boldsymbol{\sigma}_x$, $\boldsymbol{\alpha}_y = \boldsymbol{\sigma}_y$, $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\sigma}_z$ biçiminde alınabilir.

3.2 Dirac-Tipi Denklem

¹ Anti komütasyon bağıntısı: $\{\mathbf{a}, \mathbf{b}\} = \mathbf{ab} + \mathbf{ba}$

Yoğun madde fiziğinde ilk defa iki boyutlu yapı olan grafende karşımıza çıkan Dirac-tipi denklem farklı bir fiziksel içerikle gerçek spinle bağlantısız ve iki durumlu bir yapıyı anlatmak için kullanılmıştır.

Dirac denklemi, negatif ve pozitif enerji ile parçacık, antiparçacık içerir. Yoğun madde fiziğinde ise Dirac denklemi, pozitif ve negatif enerjili iletim ve valans bantlarını kapsar. Negatif ve pozitif enerji arasındaki fark ise iletim ve valans bandı arasındaki yasak enerji aralığı, Dirac denklemindeki kütleinin iki katına ($2m$) karşı gelir. Dirac-tipi denklemdaki parçacıklar, elektron ve deşiklerdir.

Dirac denklemi yoğun madde fiziğine uygulandığında, denklemden var olan bazı terimler farklılıklar gösterir, ışık hızı yerine fiziksel sistemin içerdiği hızlar gelebilir (Fermi hızı “ v_F ” gibi). İki boyutta Dirac-tipi hamiltoniyene aşağıdaki örnek verilebilir.

$$H = v\sigma_x p_x \pm v\sigma_y p_y + m(x)v^2\sigma_z \quad (3.10)$$

Burada Pauli spin matrisleri gerçek spini göstermez.

3.3 Grafende Dirac-Tipi Denklem

3.3.1 Grafen

Grafen; altıgen örgüye sahip (bal peteği örgüsü), karbon atomlarından meydana gelen iki boyutlu yapıdır. Birçok grafen katmanının üst üste gelmesiyle grafit oluşur. Kabaca kurşun kalem bir yüzeye sürtülüp, o yüzeyden bir bant yardımı ile iki boyutlu bir yapı olarak ayrılması sonucunda grafen elde edilir. Grafenin elde edilmesinde birçok yöntem vardır. Grafitin tabakalarına ayrılması, kimyasal buhar biriktirme, grafen oksitin indirgenmesi, epitaksiyel büyütme yöntemi bu yöntemlerden en önemli olanlarıdır.

Karbon atomları ametal olmasına rağmen, karbon atomlarından oluşan grafit elektriği ileten bir maddedir. Grafen yarıiletken malzemeler sınıfına girer. Grafen iki boyutlu bir malzeme olduğu için birim ağırlığa düşen alan miktarı çok büyüktür, bu yüzden hafif bir malzemedir. Ayrıca grafen sert, güçlü ve esnek bir yapıya sahiptir.

Çalışma yıllarının başlangıcı 1947’li yıllara kadar dayanır. Grafen ismi ilk olarak 1987 (Mouras vd. 1987) yılında kullanılmaya başlandı. 2004 yılına kadar malzemenin çok düşük sıcaklıklarda dahi dağılacağı düşünülüyordu bu yüzden üretiminin teorik olarak mümkün olmadığına dair bir görüş vardı. Fakat 2004 yılında Andre Geim ve Konstantin Novoselov (Novoselov vd. 2004) tarafından grafen izole edilmiştir. Andre Geim ve Konstantin Novoselov (Gerstner 2010) bu çalışmadan dolayı Nobel ödülü almışlardır.

Grafen, Klein paradoksu (Young ve Kim 2009), kütsüz Dirac fermiyonları (Novoselov vd. 2005), anormal kuantum Hall olayı (Y. Zhang vd. 2005) gibi birçok olayı gözlemlenmek için uygun bir laboratuvar ortamı olarak değerlendirilmiştir. Grafeni oluşturan karbon atomlarına ait elektron dizilimi aşağıdaki gibi verilmektedir:

$$C_6 = 1S^2 2S^2 2P^2$$

3.3.2 Grafene ait enerji bant yapısı

Grafene ait bant yapısını inceleyebilmek için enerji momentum dağılım bağıntısına ihtiyaç vardır. Bu bağıntı, Schrödinger denkleminde yararlanılarak aşağıdaki gibi bulunur.

$$E = \frac{1}{1 - S^2 g(\vec{k})} \left[E_0 + S t_{nn} g(\vec{k}) \pm (S E_0 + t_{nn}) \sqrt{g(\vec{k})} \right] \quad (3.11)$$

Burada $\vec{k}$ dalga vektörüdür. Enerji ifadesinde olan bazı terimlerin açık hali aşağıdaki gibidir.

$$g(\vec{k}) = 3 + 2\cos(\vec{k} \cdot \vec{a}_1) + 2\cos(\vec{k} \cdot \vec{a}_2) + 2\cos(\vec{k} \cdot (\vec{a}_1 - \vec{a}_2)) \quad (3.12)$$

$\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ ile verilen grafene ait örgü uzayındaki baz vektörlerdir. Denklem (3.12)’de bir takım yaklaşıklar yapılarak, $S \cong 0$ alınabilir.

$$E = E_0 + \lambda t_{nn} \sqrt{g(\vec{k})}; \quad \lambda = \pm 1 \quad (3.13)$$

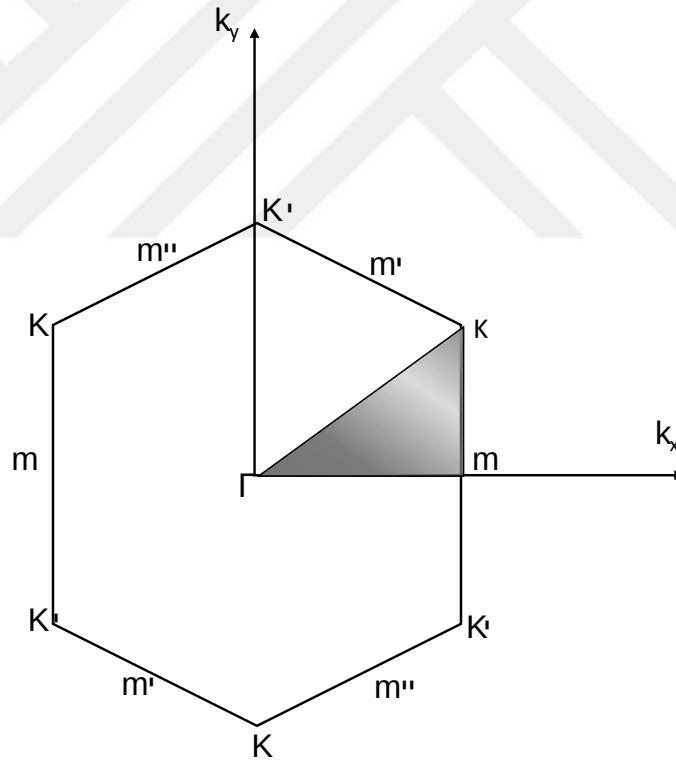
Ters örgü uzayında grafene ait Brillouin bölgesi şekil 3.1’de verilmiştir. Şekildeki taralı bölge yüksek simetri bölgesidir, bu bölge ile Brillouin bölgesinin tamamı doldurulabilir. Brillouin bölgesi yüksek simetri bölgesinden daha küçük bir bölgeye ayrılamaz.

$$\Gamma = (0,0) \quad (3.14a)$$

$$\mathbf{M} = \frac{2\pi}{3a}(1,0) \quad (3.14b)$$

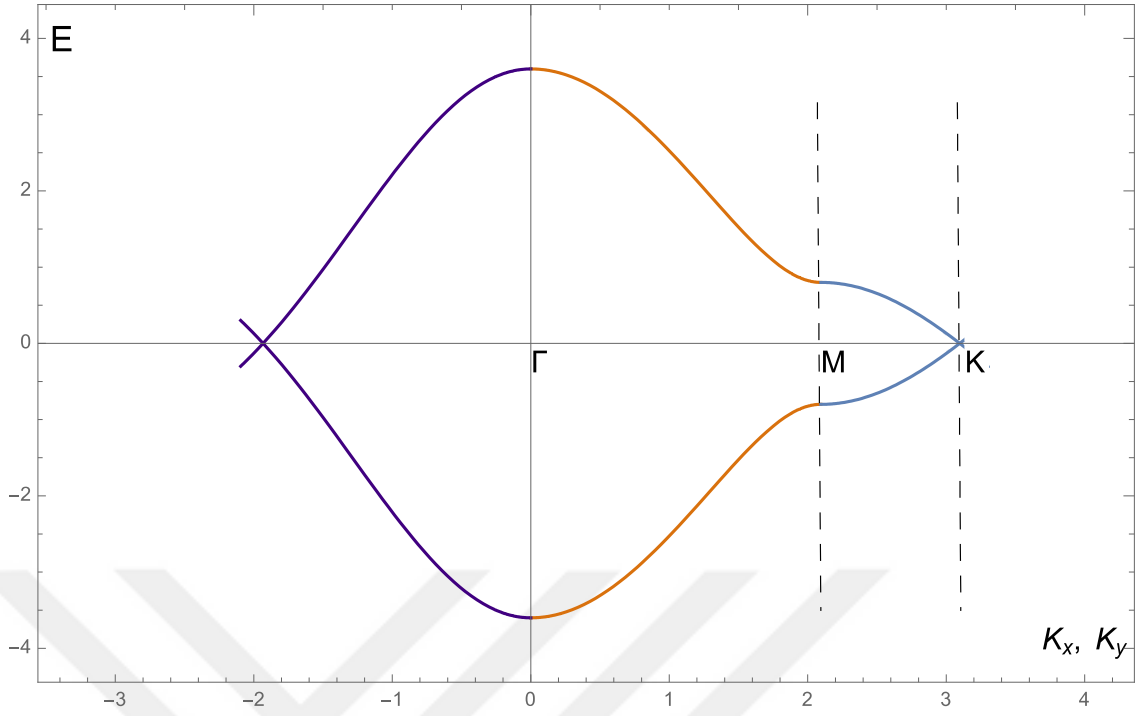
$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{3a}\left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}\right) \quad (3.14c)$$

$$\mathbf{K}' = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}(0,1) \quad (3.14d)$$



Şekil 3.1 Ters örgü uzayında yüksek simetri bölgesi

$\mathbf{K}$ ve $\mathbf{K}'$ noktaları Dirac noktaları olarak adlandırılır. Bu noktalar valans bandı ile iletkenlik bandının birleştiği yerlerdir. Denklem (3.14)’den yararlanılarak enerji momentum grafiği aşağıdaki gibi çizilebilir.



Şekil 3.2 Grafene ait enerji bant yapısının iki boyuttaki hali.

Şekil 3.2’de, k_x ve k_y aynı eksen üzerinde gösterilmiştir. Γ noktasından M noktasına giderken sadece k_x ’de değişim vardır fakat k_y sabit kalır. M noktasından K noktasına giderken ise k_y ’de değişim vardır, k_x değişmez. Bunun yanında K noktasından Γ noktasına giderken hem k_x ’de hem de k_y ’de değişim vardır. K noktasında valans bandı ve iletim bandı birbirine değeri. Bu noktalar oldukça önemli noktalardır ve Dirac noktaları olarak isimlendirilirler. Diğer noktalarda ise valans ve iletim bandı arasında yasak enerji aralığı vardır.

K ve K' noktalarına ait enerji grafikleri ayrı ayrı çizildiğinde aynı grafik elde edilir fakat örgü içerisinde bu iki nokta aynı nokta değildir. Bu noktaların dalga fonksiyonları ayrıdır. Her iki noktanın, enerjileri aynı fakat dalga fonksiyonları farklı olduğu için bu noktalarda dejenerelik vardır.

3.3.3 K noktaları civarında enerji ifadesi ve Dirac-tipi denkleme geiş

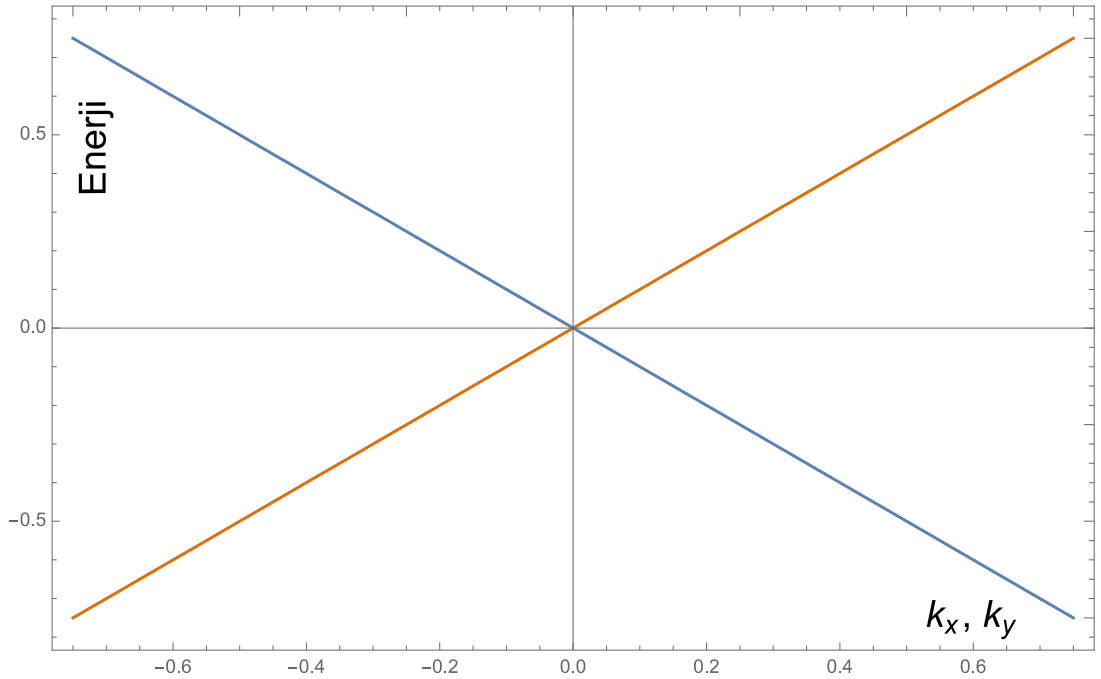
Grafene ait enerji ifadesi, eęer Dirac noktaları civarında Taylor serisine aılırsa, Dirac-tipi denkleme geiş yapılır. Taylor serisi ařaęıda verilmiřtir.

$$f(x) = (x - x_0)^0 f(x_0) + (x - x_0)^1 \frac{df(x)}{dx} \Big|_{x_0} + (x - x_0)^2 \frac{d^2 f(x)}{dx^2} \Big|_{x_0} + \dots \quad (3.15)$$

Denklem (3.13) ifadesinin $\vec{k} = \mathbf{K} + \vec{q}$ civarındaki Taylor serisine aılmış hali ařaęıdaki gibidir. Burada $\vec{q}$ ile gsterilen ifade $\mathbf{K}$ noktası civarındaki ok kk byklęe sahip momentum vektrdr.

$$E_q = \lambda \frac{3}{2} t_{nn} a |\vec{q}| \quad (3.16)$$

Valans bandındaki $T = 0$ Kelvin sıcaklıęında dolu olan en yksek enerjiye Fermi enerjisi denir. Grafende $T = 0$ K’de incelenen rnek iin Fermi enerjisi, $E_F = 0$ ’dır. $\mathbf{K}$ noktası civarına daha yakından bakıldıęında enerji momentum grafięi ařaęıdaki hale gelir.



řekil 3.3 $\mathbf{K}$ noktası civarı enerji bant yapısı

Şekil 3.3'te rahatlıkla görüldüğü gibi $\mathbf{K}$ noktası yakınlarında lineer bir yapı mevcuttur. İletim bandı ile valans bandı birbirine değmektedir.

Eğer grafen konusunda $\vec{q} = 0$ çevresinde çalışma yapılacaksa bu bölgede yeniden bir hamiltoniyen tanımlanarak ve özdeğer denklemi oluşturarak çözümler aramak farklı bakış açısı ortaya çıkartır. Yaklaşımlar kapsamında aşağıdaki adımlar takip edilirse,

$$g(\mathbf{k}) = \sqrt{\gamma^*(\vec{k})\gamma(\vec{k})} ; \gamma(\vec{k}) = 1 + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_2}$$

$\mathbf{K}' = -\mathbf{K}$, $\gamma_{\mathbf{K}\mathbf{K}'} = 0 = \gamma_{\mathbf{K}\mathbf{K}'}^*$ ise $\mathbf{K} + \vec{q}$ ve $\mathbf{K}' + \vec{q}'$, $\gamma(k)$ ifadesinde yerine yazıldığında aşağıdaki sonuçlar bulunur.

$$\gamma_{\mathbf{K}+\mathbf{q}} = -\frac{3a}{2}(q_x + iq_y) \quad (3.17a)$$

$$\gamma_{\mathbf{K}'+\mathbf{q}'} = \frac{3a}{2}(q_x - iq_y) \quad (3.17b)$$

Bu tanımlamaları hamiltoniyenin yerine yazdığımızda $\mathbf{K} + \vec{q}$ ve $\mathbf{K}' + \vec{q}'$ için ayrı ayrı incelemeler yapılır.

$$H\varphi = E\varphi \quad (3.18)$$

$\mathbf{K}$ noktası civarındaki etkin hamiltoniyen ifadesi ve dalga fonksiyonu,

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} 0 & \gamma^* \\ \gamma & 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}$$

şeklindedir. Fermi hızı aşağıdaki gibi verilir.

$$v_F = \frac{3a}{2}\lambda t_{nn}$$

$\mathbf{K} + \vec{q}$ için denklem (3.18),

$$\begin{pmatrix} 0 & -\frac{3a}{2}t_{nn}(q_x - iq_y) \\ -\frac{3a}{2}t_{nn}(q_x + iq_y) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = E_q \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (3.19a)$$

$$-\hbar v_F(q_x \sigma_x + q_y \sigma_y) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = E_q \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (3.19b)$$

şeklindedir.

$\mathbf{K}' + \vec{q}$ için denklem (3.18),

$$\begin{pmatrix} 0 & \frac{3a}{2}t_{nn}(q_x + iq_y) \\ \frac{3a}{2}t_{nn}(q_x - iq_y) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = E_q \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (3.20a)$$

$$\hbar v_F(q_x \sigma_x + q_y \sigma_y) \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} = E_q \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} \quad (3.20b)$$

şeklindedir. σ_x ve σ_y Pauli spin matrislerinin x ve y bileşenleridir. Denklem (3.19b) ve (3.20b) birlikte yazılırsa aşağıdaki gibi olur.

$$[\hbar v_F \sigma_z \otimes \vec{q} \cdot \boldsymbol{\sigma}] |\Psi_k\rangle = E_q |\Psi_k\rangle \quad (3.21)$$

Denklem (3.21) ile verilen grafen için Dirac-tipi denklemdir. $\boldsymbol{\sigma}$: Pauli spin matrisidir. Denklem (3.21) (4×4) matris biçimi ile Dirac denkleminin matematiksel yapısına benzer. Işık hızı yerine grafen için tanımlanmış Fermi hızı bulunmaktadır. Denklem (3.21) Dirac-tipi denklemde Pauli spin matrisinin z -bileşeni çarpanından dolayı bu denklem blok köşegendir. Bu ancak kütesiz Dirac denklemi (Weyl denklemi) için geçerlidir ve her blok ayrı ayrı özdeğer denklemi şeklinde yazılıp çözülebilir. Buradan açıkça görüldüğü gibi grafen için yazılan bu denklem kütesiz Dirac-tipi denklem olarak algılanabilir.

Grafende fermi enerjisindeki elektronların kinetik enerjileri $E_G = \pm v_F |\vec{p}|$ Dirac dispersiyonu ile verildiği efektif bir “Lorentz invariant” bir teori ile betimlenir (Kotov vd. 2012). Ancak, çok cisim etkileşimleri düşünüldüğünde şu sonuçlara ulaşmak mümkündür:

Öncelikle, v_F Fermi-Dirac hızı c ışık hızına kıyasla çok küçük olduğu için, Coulomb etkileşmesi anlık olacaktır ve dolayısı ile Dirac dispersiyon Lorentz invaryanlığını kıracaktır. Fermi düzeyi Dirac noktasında olduğu zaman, Coulomb etkileşmesi perdelenemez ve uzun menzillidir. Hem iki ve hem de üç boyutta elektronların v_F hızını logaritmik olarak arttırır. Bu durumda v_F 'nin düşük enerji limitinde ıraksadığı sonucuna varılabilir, ancak elektromanyetik alana bağlaşımı, sözde-relativistik etki, bunu yakınsatır. Bu da düşük enerjide “Lorentz invaryanslığının” ortaya çıkışına bir örnek olarak verilebilir. (Chadha ve Nielsen 1983)

İkinci olarak kinetik enerjinin Coulomb enerjisine oranı $\alpha = E_C/E_G = e^2/\epsilon_0\hbar v_F$ kuantum elektrodinamiğinde (KED) incelenirse $\alpha_{KED} = 1/137$ olur, ancak grafende $\alpha = 1$ civarındadır (Kandemir ve Mogulkoc 2010). Ancak yine de renormalizasyon grubu (RG) analizi yapılabilir (Castro Neto vd. 2009). Son olarak elektronlar, ister Galilean ister Lorentz invaryant bir sistem olsun, L boyutlu bir bölgeye kısıtlandıklarında, enerji düzeyleri kuantumlanır. Galile invaryant bir sistemde ardışık enerji düzeyleri arasında $1/L^2$ ile orantılı bir aralık oluşurken Lorentz invaryant grafende bu $\Delta E_G \propto 1/L$ ile orantılıdır. Coulomb etkileşmesi enerji skalasında bu mertebede olduğundan, bu tür etkiler nanoskopik ya da mezoskopik grafen numunelerde daha şiddetli olacağı anlamını gelir. Tüm bunlara rağmen, Coulomb etkileşmesi Lorentz invaryanlığını kırsa dahi tek tabaka grafende zayıf kuplaj rejiminde (dielektrik ortama gömülü grafen örnekler için) efektif düşük enerji teorisi halen Lorentz invaryanttır (Kotov vd. 2012).

Dahası, $v_F \sim c/300$ Fermi-Dirac hızına sahip kütsüz Dirac-Weyl fermiyonlarının relativistik fiziğini taklit eden bu düşük enerji taşıyıcılarının Hamiltoniyeni “Lorentz kovaryant” yapması fotoemiyon deneylerinde Dirackonisini değmeden ölçümüne (Basov vd. 2014), Landau düzeylerinin (Sadowski vd. 2006) ve Klein tünellemesinin (Katsnelson vd. 2006) gözlemlenmesine yol açmıştır. Grafenin kütleli ve kütsüz invaryantı için bakınız (Sári, vd. 2015; Lukose, vd. 2007; Baroni 2010)

Bazı fiziksel açıklamalar için helicity operatörü tanımlanır. Helicity operatörü, spinin çizgisel momentuma izdüşümü ile elde edilir.

$$\boldsymbol{\eta}_q = \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{q}}{|\vec{q}|} ; \quad (3.22)$$

Sıfır kütle durumunda helicity operatörü ile hamiltoniyen sıra değiştirir. Bu yüzden ortak özvektörelere sahiptirler. Helicity operatörünün özdeğerleri aşağıda verilmiştir.

$$\eta = \pm 1 \quad (3.23)$$

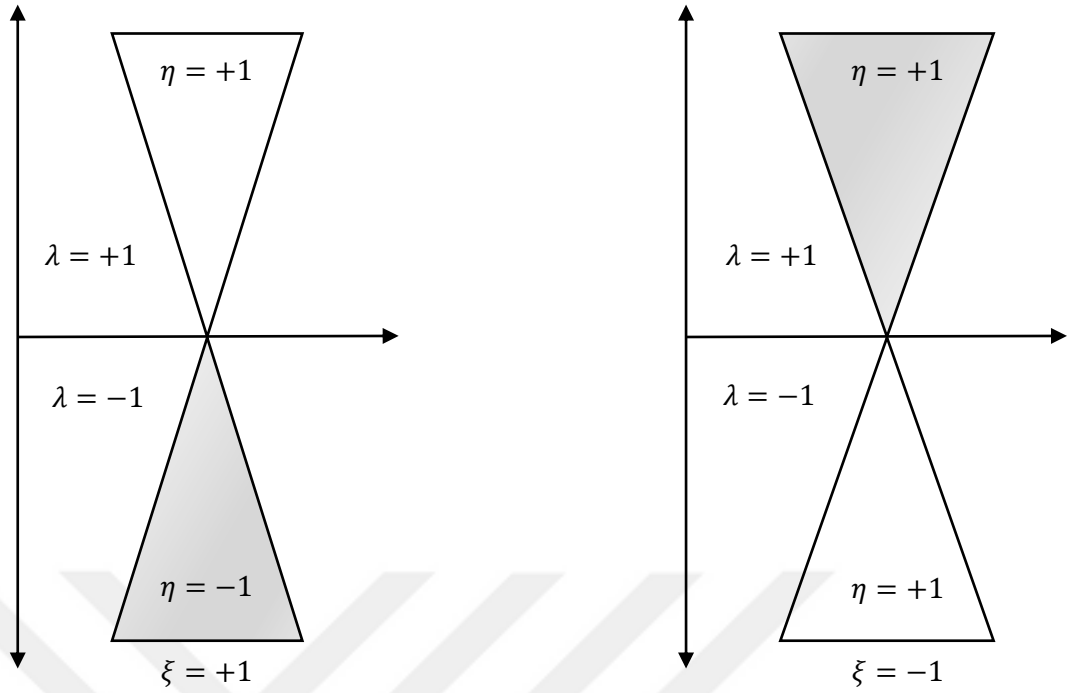
$$\boldsymbol{\eta}_q |\Psi\rangle = \eta |\Psi\rangle , \quad |\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm e^{i\varphi_k} \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

Burada $|\Psi\rangle$ dalga fonksiyonun “+”lı olanına sağlak, “-”li olanına ise solak özvektör denir.

$$\xi \hbar \partial_F |\vec{q}| \boldsymbol{\eta}_q |\Psi\rangle = E_q |\Psi\rangle \quad (3.25)$$

Denklem (3.15)’de ile verilen E_q enerjisinin açık hali denklem (3.25)’de yerine yazılıp, gereken ara işlemler yapıldığında:

$$\lambda = \eta \xi \quad (3.26)$$



Şekil 3.4 $\lambda = \eta\xi$ indislerinin şematik gösterimi. Birinci şekil $\mathbf{K}$ noktası ikinci şekil $\mathbf{K}'$ noktası için tanımlanır. Yatay eksen momentum, dikey eksen enerjiyi gösterir.

Denklem (3.26)'da verilen; λ Band indisi, ξ $\mathbf{K}, \mathbf{K}'$ noktaları indisleri ve η helicity indisidir. Bu indislerin daha rahat anlaşılabilmesi için şekil 3.4 incelenmelidir. Dalga fonksiyonları λ , η ve ξ indislerine bağlı olarak bulunursa dejenere durumlar ortaya çıkacaktır. Bu tezde bu konuda fazla ayrıntıya yer verilmeyecektir.

Grafende karbon atomları A grubu ve B grubu olmak üzere ikiye ayrılır. $\eta = +1$ ise elektronlar A atomları çevresinde, $\eta = -1$ ise elektronlar B atomları çevresinde kutuplanmışlardır. Grafendeki spin-yörünge etkileşmesi zayıf olduğu için kıyı durumları oluşmaz.

3.4 Modifiye Dirac-Tipi Denklem

Topolojik yalıtkanlarda kıyı ve yüzey durumları iki farklı topolojik özelliğe sahip bölgelerin ara kesitlerine karşı gelir. Bu nedenle Dirac-tipi denklemin içerdiği parametreler (hız, kütle) üzerinde değişiklik (simetri dönüşümü olabilir) yapıldığında

denklemin topolojik özelliğinde farklılık beklenmelidir. Ancak denklemin var olan terimleri ile bu farklılık mümkün değildir. Bu beklentiyi sağlamak amacıyla hamiltoniyene $-B\mathbf{p}^2$ ile verilen karesel bir terim yerleştirilir ve denklem modifiye Dirac-tipi denklemi olarak isimlendirilir.

$$\mathbf{H} = v\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\alpha} + (mv^2 - B\mathbf{p}^2)\boldsymbol{\beta} \quad (3.27)$$

Denklem (3.27)'te m kütle, $\mathbf{p}$ momentumdur. B ile tanımlanan niceliğin boyutu kütle'nin tersi boyutuna eşittir. Farklı uzaysal bölgelerde m değeri pozitif ve negatif değer alabilir. $mB > 0$ ve $mB < 0$ olduğu bölgelerde Modifiye Dirac-tipi denklem topolojik olarak birbirinden farklı olur. Modifiye Dirac-tipi denklem topolojik yalıtkanlarda özellikle kıyı durum çözümlerinin elde edilmesinde önemli rol oynar.

3.4.1 Bir boyutta modifiye Dirac denklemi

Bir boyutta modifiye Dirac denkleminin biçimi Dirac matrislerinin önceki kesimlerde bir boyut için verilen bileşenleri kullanarak yazılabilir:

$$\mathbf{h}(x) = v\mathbf{p}_x \boldsymbol{\alpha}_x + (mv^2 - B\mathbf{p}_x^2)\boldsymbol{\beta} \quad (3.28)$$

$$\boldsymbol{\alpha}_i = \boldsymbol{\sigma}_x \otimes \boldsymbol{\sigma}_i, \quad \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\sigma}_z \otimes \boldsymbol{\sigma}_0$$

$$\mathbf{p}_x = -i\hbar\partial_x, \quad \mathbf{p}_x^2 = -\hbar^2\partial_x^2$$

Örnek olarak x -doğrultusunda yarı-sonsuz uzay geometrisine sahip $x \geq 0$ bölgesinde tanımlı bir sistem gözönüne alalım ve $x = 0$ ve $x = +\infty$ sınır noktalarında sıfıra giden çözümler için sınır koşulları olsun. Modifiye Dirac denkleminin özdeğer denklemi formuna getirerek çözümlerini bu sistem için araştıralım.

$$\mathbf{h}(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (3.29)$$

Burada iki tür fiziksel çözümden söz edebiliriz; x -yönünde tanımlı bir momentuma sahip ilerleyen düzlem dalga çözümleri ve $x = 0$ bölgesinde yerleşmiş bağlı durum çözümleri. Topolojik yönden daha ilginç olan çözüm bağlı durum çözümleridir. Bu nedenle bağlı durumları veren koşulları incelemek topolojik yalıtkanların temelidir. $x \rightarrow \infty$ sıfıra giden en basit çözüm üstel azalan fonksiyondur.

$$\Psi(x) = e^{-\lambda x} \mathcal{U} \quad (3.30)$$

Ancak çözüm fonksiyonu 4-bileşenli bir sütun matrisi olduğundan çözümün uzaydan bağımsız matris kısmı $\mathcal{U}$ sütun matrisi olarak çarpan şeklinde verilmiş olup buna spinör adı verilir. Bu çözüm özdeğer denkleminde yerine konulduğunda karakteristik denklemin λ değerleri hesaplanacak, daha sonra enerji ifadesi, en son ise spinörleri bulunacaktır.

$$[v i \hbar \lambda \alpha_x + (m v^2 + B (\hbar \lambda)^2) \beta] \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ U_4 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ U_4 \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

Denklem (3.31)'de α_x ve β yerine yazılıp matris çarpımları yapıldıktan sonra, U_1 ile U_4 , U_2 ile U_3 kendi aralarında bağımlı çıkar. Bu bağımlılıklar

$$(\hbar^2 \lambda^2 B + m v^2 - E) U_1 + i \hbar \lambda v U_4 = 0 \quad (3.32a)$$

$$(\hbar^2 \lambda^2 B + m v^2 - E) U_2 + i \hbar \lambda v U_3 = 0 \quad (3.32b)$$

$$i \hbar \lambda v U_2 - (\hbar^2 \lambda^2 B + m v^2 + E) U_3 = 0 \quad (3.32c)$$

$$i \hbar \lambda v U_1 - (\hbar^2 \lambda^2 B + m v^2 + E) U_4 = 0 \quad (3.32d)$$

gibidir. Buradan elde edilecek bağlı durum çözümleri $E = 0$ özdeğerine sahip ise topolojik süperiletken yapılarda sıfır enerjili Majorana bağlı durumlarına karşı gelecektir. Bu nedenle sıfır özdeğerli çözümleri aramak oldukça ilginç olacaktır. Katsayı determinantı sıfıra eşitlenerek elde edilen λ^2 değerleri aşağıdaki gibidir.

$$\lambda^2 = \frac{v^2}{2 \hbar^2 B^2} [(1 - 2mB) \pm \sqrt{1 - 4mB}] \quad (3.33)$$

$$\lambda_{\pm} = \frac{v}{2 \hbar B} [1 \pm \sqrt{1 - 4mB}] \quad (3.34)$$

$$\lambda_+ + \lambda_- = \frac{v}{\hbar B}, \quad \lambda_+ \lambda_- = \frac{m v^2}{B \hbar^2} \quad (3.35)$$

Dalga fonksiyonun sınır koşullarını sağlayabilmesi için λ çözümleri pozitif olmak zorundadır. Buna bağımlı olarak her iki λ çözümünün çarpımına karşı geldiği için

$mB > 0$ olmalıdır. Ayrıca $v/\hbar B$ katsayısı da pozitif olmalıdır, bu yüzden bu terimin işareti B 'nin işaretine bağlıdır. Yani,

$$\frac{v}{\hbar B} \rightarrow \frac{v \operatorname{sgn}(B)}{\hbar B} \quad (3.36)$$

$$\operatorname{sgn}(B) = \begin{cases} B > 0; +1 \\ B < 0; -1 \end{cases} \quad (3.37)$$

şeklinde yazılabilir. Bu durumda dalga fonksiyonunun $x = 0$ sınırındaki koşulu sağlaması için denklem (3.30) aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\Psi(x) = C(e^{-\lambda_+ x} - B e^{-\lambda_- x})\mathcal{U} \quad (3.38)$$

Burada, C normalizasyon katsayısıdır.

Daha önce belirtildiği gibi $mB > 0$ ve $mB < 0$ koşulları farklı topolojik özelliğe karşı gelir. $mB < 0$ durumu topolojik açıdan $B = 0$ olan durumla aynıdır. $mB > 0$ durumunda ayrıca reel λ kökleri elde etmek için $4mB < 1$ olması gerekmektedir. $m \rightarrow 0$ durumu incelenirse λ_- ifadesi sıfıra gider. Eğer $B \rightarrow 0$ olursa λ_+ ifadesi sıfıra gider. Bu iki durumda dalga fonksiyonu için $x = 0$ 'daki sınır koşulu sağlanamaz ve bağlı durum oluşmaz. Bu iki inceleme sonucunda B ve m ifadelerinin 0 olamayacağı gözükmemektedir.

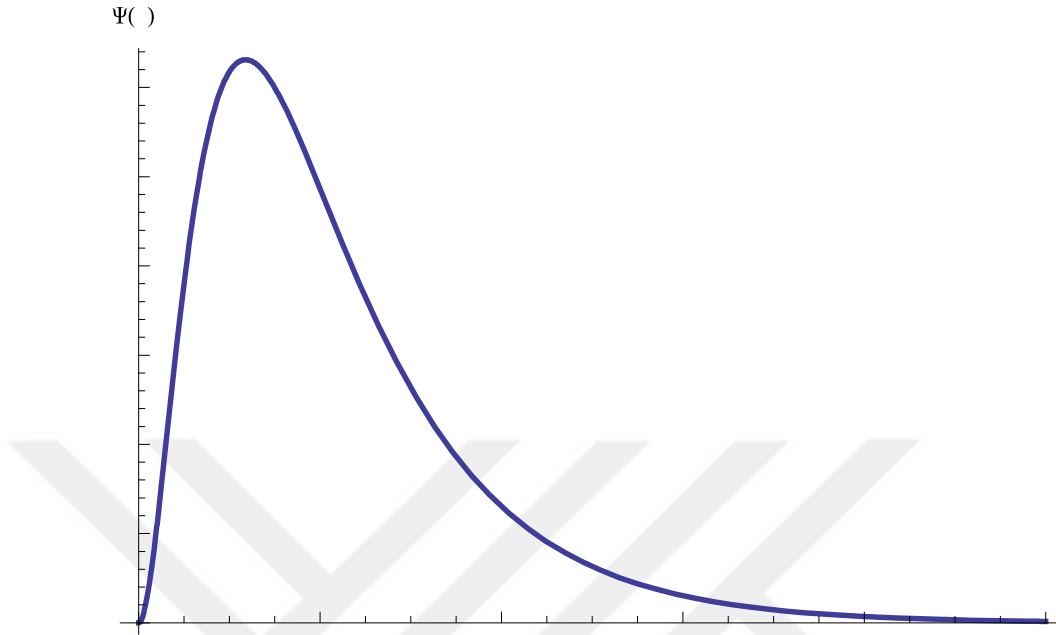
$\lambda_{\pm}$ ve sıfır enerji özdeğeri denklem (3.32) grubunda yerlerine konularak $\mathcal{U}$ spinör bileşenleri elde edilir. Kolaylık için $\lambda_+ = \lambda_1$ ve $\lambda_- = \lambda_2$ olarak tanımlarsak.

$$\Psi_1(x) = \frac{C}{\sqrt{2}}(e^{-\lambda_1 x} - e^{-\lambda_2 x}) \begin{pmatrix} \operatorname{sgn}(B) \\ 0 \\ 0 \\ i \end{pmatrix} \quad (3.39a)$$

$$\Psi_2(x) = \frac{C}{\sqrt{2}}(e^{-\lambda_1 x} - e^{-\lambda_2 x}) \begin{pmatrix} 0 \\ \operatorname{sgn}(B) \\ i \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.39b)$$

Bu iki çözüm iki ve üç boyutlu modifiye Dirac denkleminin kıyı ve yüzey durumlarına ait çözümlerini bulmak için baz vektörleri olarak kullanıldığından topolojik yalıtkanlar kuramında önemli yer tutar. Dalga fonksiyonunun modül karesinin x-ekseni boyunca

grafiği çizilirse parçacığın bulunma olasılığının davranışını görmüş oluruz (şekil 3.5). Yani çözüm x 'in başlangıç noktası çevresinde yoğunlaşmıştır.



Şekil 3.5 Bir boyutlu modifiye Dirac denklemi bağlı durum dalga fonksiyonunun karesi.

3.4.2 İki boyutta modifiye Dirac denklemi: Helisel kıyı durumları

Modifiye Dirac-tipi denklemin hamiltoniyeni aşağıdaki gibidir.

$$h(x, y) = v(\mathbf{p}_x \boldsymbol{\alpha}_x + \mathbf{p}_y \boldsymbol{\alpha}_y) + [mv^2 - B(\mathbf{p}_x^2 + \mathbf{p}_y^2)]\beta \quad (3.40)$$

$x = 0$ 'da sınırı olan yarı sonsuz bir düzlemde ($x \geq 0$, $-\infty < y < \infty$) özdeğer denkleminde yine özel çözümler arayalım. Bu çözümler x -doğrultusu boyunca üstel azalan, yani $x = 0$ yakınında bağlı durum fakat y -doğrultusunda $\hbar k_y$ momentumu ile ilerleyen dalga şeklinde olsun. Bu tür çözümler bir boyutlu çözümlerden çok farklı değildir.

$$h(x, y)\Psi(x, y) = E\Psi(x, y) \quad (3.41)$$

$$\Psi(x, y) = e^{-\lambda x} e^{ik_y y} \mathcal{U} \quad (3.42)$$

$$\Psi_1(x, y) = \frac{C}{\sqrt{2}} (e^{-\lambda_1 x} - e^{-\lambda_2 x}) \begin{pmatrix} \text{sgn}(B) \\ 0 \\ 0 \\ i \end{pmatrix} e^{ik_y y} \quad (3.43a)$$

$$\Psi_2(x, y) = \frac{C}{\sqrt{2}} (e^{-\lambda_1 x} - e^{-\lambda_2 x}) \begin{pmatrix} 0 \\ \text{sgn}(B) \\ i \\ 0 \end{pmatrix} e^{ik_y y} \quad (3.43b)$$

İki boyutta katsayı determinantından gelen $\lambda_{\pm}$ kökleri bir boyutlu durumdan çok az farklıdır.

$$\lambda_{1,2} = \lambda_{\pm} = \frac{v}{2\hbar|B|} \left[1 \pm \sqrt{1 - 4mB + \frac{4E^2 B^2}{v^4}} \right] \quad (3.44)$$

$x \approx 0$ civarında ve y -ekseni boyunca bağlı durum için dağınım bağıntısı,

$$E_{\pm} = \pm v \hbar k_y \quad (3.45)$$

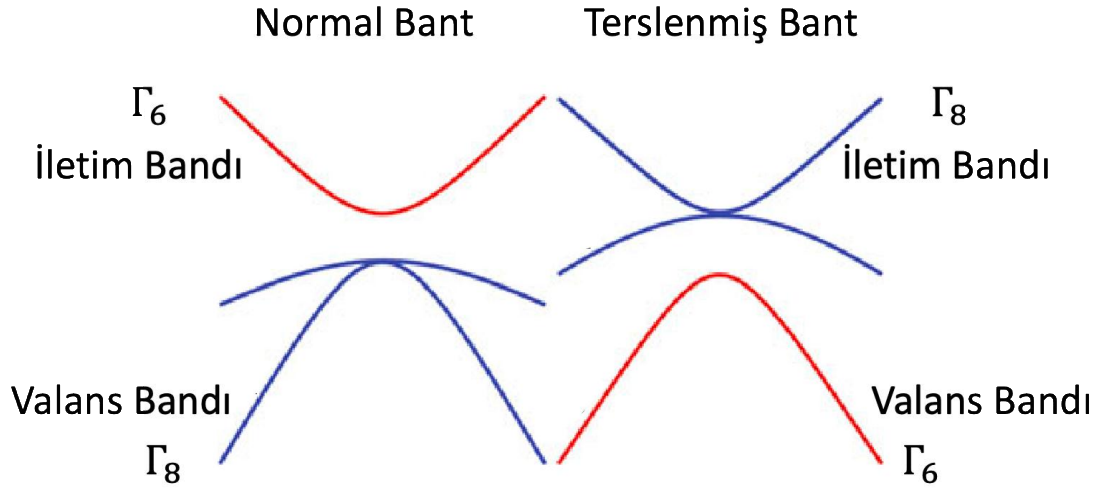
olarak elde edilir. Enerji büyüklüğü aynı olmasına rağmen pozitif ve negatif elektron hızları $\pm v$ içeren iki durum (iki çözüm) ortaya çıkmıştır. Bu çözümlere helisel kıyı durumları adı verilir.

4. TOPOLOJİK YALITKANLARDA KIYI DURUMLARI

İki boyutlu topolojik yalıtkanların sadece kenarlarında iletim olması ile oluşan durumlar kıyı durumları olarak isimlendirilir. Spin Hall olayı ile oluşan kıyı durumları helisel kıyı durumlarıdır. Önceki bölümde grafende spin-yörünge etkileşmesinin zayıf olmasından dolayı kıyı durumlarını gözlemlemek için uygun olmayacağından bahsedilmişti. Ağır elementlerin spin-yörünge etkileşmeleri daha güçlü olduğu için Bernevig, Hughes ve Zhang (Bernevig vd. 2006) *HgTe* ve *CdTe* bileşikleri ile oluşturulan kuantum kuyusunu deney için önermişlerdir. Önceki bölümde modifiye Dirac denkleminin iki boyutlu çözümlerinin kıyı durumlarını da verdiğiinden kısaca bahsedilmişti. Bu bölümde ise Bernevig, Hughes, ve Zhang tarafından ortaya atılan BHZ hamiltoniyeni (Bernevig vd. 2006) kullanılarak kıyı durumları daha detaylı incelenecektir. Bu hamiltoniyen modifiye Dirac denklemindeki hamiltoniyenine oldukça benzerlik göstermektedir.

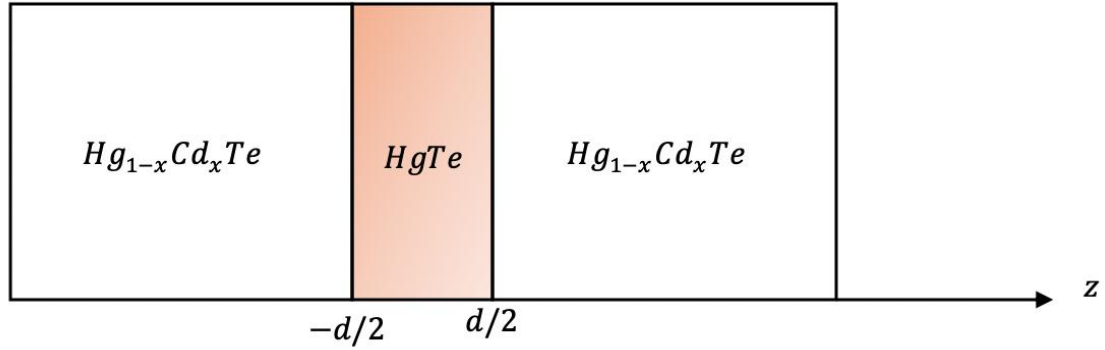
4.1 İki Boyutlu *CdTe/HgTe/CdTe* Kuantum Kuyusu

HgTe ve *CdTe*'de birim hücre başına 8 elektron düşmektedir. *HgTe* ve *CdTe*'in bant yapıları Γ noktaları civarında 6-bantlı Kane modeli ile açıklanmaktadır. Her ikisinde de Γ_6 , Γ_7 ve Γ_8 bantları bulunmaktadır. Hesaplamalar yapılırken, Γ_7 bandı Γ_6 ve Γ_8 bantlarından ayırık olduğu için hesaba katılmaz. *CdTe* normal bant yapısına sahiptir, yani Γ_6 daha yüksek enerjiye sahipken Γ_8 bandı daha düşük enerjiye sahiptir. *HgTe* ise terslenmiş bant yapısına sahiptir, Γ_8 bandı daha yüksek enerjiye sahipken Γ_6 bandı daha düşük enerjiye sahiptir. *HgTe* ve *CdTe*'e ait bant yapısı şekil 4.1'de verilmiştir.



Şekil 4.1 *CdTe* (sol) ve *HgTe* (sağ) ait bant yapısı. (S. Shen, Shan, ve Lu 2011)

Şekil 4.1’de görüldüğü gibi normal bant yapısındaki Γ_6 valans bandıdır, terslenmiş bant yapısında iletim bandıdır. Normal bant yapısında bulunan Γ_8 iletim bandıdır, terslenmiş bant yapısında ise valans bandıdır. Burada *HgTe* güçlü spin-yörünge etkileşmesine sahiptir. Bu özelliği terslenmiş bant yapısını oluşturmuştur. *CdTe* ve *HgTe* kullanılarak yapılan iki boyutlu kuantum kuyusu şematik olarak şekil 4.2’de gösterilmektedir.



Şekil 4.2 *CdTe* ve *HgTe* kuantum kuyusu yapısı

HgTe’nin kalınlığı, $d_c = 6,3 \text{ nm}$ kritik kalınlığı geçtiği zaman *HgTe* yapısı baskın olduğundan topolojik faz geçişi ile topolojik yalıtkan olur eğer kalınlık bu değerin altında ise *CdTe* bant yapısı baskın olur ve normal yalıtkan olarak kalır.

İki boyutlu topolojik yalıtkanların bant yapıları BHZ hamiltoniyeni olarak da bilinen etkin hamiltoniyen ile anlatılır ve Schrödinger denkleminde başlayıp $k \cdot p$ pertürbasyon yöntemi ile elde edilir.

$$\mathbf{H}_{BHZ}(k_x, k_y) = \begin{pmatrix} \mathbf{h}_\uparrow(\vec{k}) & 0 \\ 0 & \mathbf{h}_\downarrow(\vec{k}) \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

$$\mathbf{h}_\uparrow(\vec{k}) = \epsilon_k \mathbf{I}_2 + d^i(\vec{k}) \boldsymbol{\sigma}^i$$

$\mathbf{h}_\uparrow(\vec{k})$ 'nin içeriğinde bulunan niceliklerin açık ifadeleri aşağıda verilmektedir.

$$\epsilon_k = C - D(k_x^2 + k_y^2)$$

$$d^i(\vec{k}) \boldsymbol{\sigma}^i = A(k_x \boldsymbol{\sigma}_x + k_y \boldsymbol{\sigma}_y) + [M - B(k_x^2 + k_y^2)] \boldsymbol{\sigma}_z$$

$$B_+ = B + D, \quad B_- = B - D$$

Burada A, B, C, D ve M ifadeleri malzemeye bağlı parametrelerdir. Bu parametreler kuantum kuyusunun kalınlığına ve malzemeye göre değişiklik gösterir. M 'nin işareti kuantum kuyusunun kalınlığına bağlıdır. ϵ_k ile B 'nin sıfır olmadığı durumlarda M yasak enerji aralığını kapatamıyorsa, malzeme tamamen yalıtkan gibi davranır. M 'nin negatif değerinden pozitif değerine doğru topolojik faz geçişi olur. Fakat M 'nin işareti tek başına sistemin topolojik durumunu belirleyemez. Kuantum spin Hall olayının gözlemlenebilmesi için $MB > 0$ olması gerekmektedir. $MB > 0$ koşulunda $d > d_c$ olur ve malzeme topolojik yalıtkan gibi davranır.

Zaman Tersinme Simetrisi

Hamiltoniyenin gerçel olması, $\mathbf{H} = \mathbf{H}^*$, aslında zaman tersinme simetrisi (TRS)'nin bir sonucudur. Schrödinger denklemin düşünüldüğünde, TRS bir $\mathcal{T} = \mathbf{K}$ ($\mathbf{K}$ kompleks eşlenik alma işlemcisi) şeklindedir. Ancak spin göz önüne alındığında örneğin spin-1/2 – Dirac denklemi, bu anti-üniter bir dönüşümdür ve zamanın, momentumun, spinin işaretini değiştirir. Ve işlemci;

$$\mathcal{T} = i\sigma_y \mathbf{K}, \quad \mathcal{T}^2 = -1 \quad (4.2)$$

ile verilir ki $\mathbf{H}(-\vec{k}) = \sigma_y \mathbf{H}^*(\vec{k}) \sigma_y$ ya da $\mathbf{H}(\vec{k}) = \sigma_y \mathbf{H}^*(-\vec{k}) \sigma_y$ olsun. Topolojik yalıtkanlar ve topolojik süperiletkenler maddenin topolojik olarak aşık ar durumlarına adyabatik olarak bağı olmayan durumlar olup, Althand-Ziranbouer simetrileri (Altland ve Zirnbauer 1997), TRS, parçacık-deşik simetrisini (PHS) ve bunların komütasyonları ile karakterize edilir. Bunlar teorik olarak öngörölmüş (Kane ve Mele 2005b) deneysel olarak keşfedilmiştir (Konig vd. 2007). CPT teoremi Lorentz invaryant alan teorilerinde geçerli olup, $CPT = 1$ daima korunmadığını söyler. Örneğin Lorentz invaryant CP simetrik alan teorisi TRS'ne sahip olduğunu, ya da TRS simetrisi varsa CP'nin korunduğunu söyler ki bu TRS'nin "CPT-eşdeğer" partneridir (Hsieh, vd. 2014).

Eğer zaman tersinme simetrisi altında sistem değişmez kalıyorsa, yani $\mathcal{T} \mathbf{H} \mathcal{T}^{-1} = \mathbf{H}$ ise

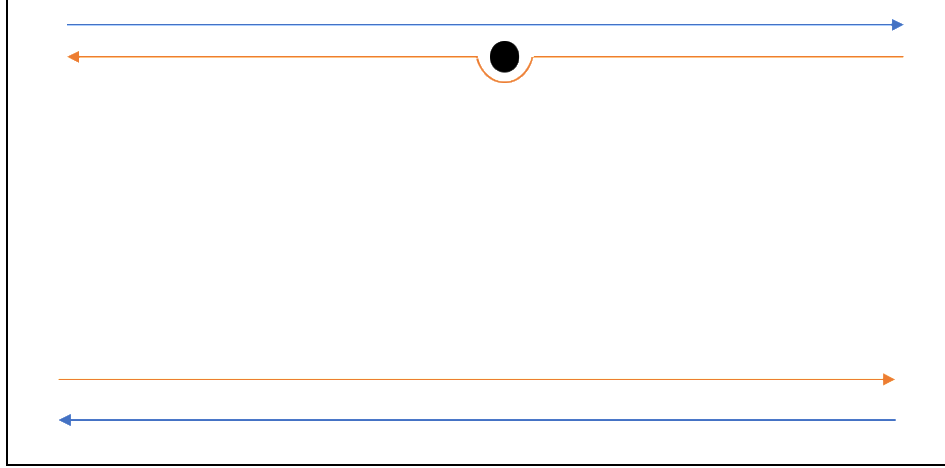
$$\mathbf{H} \psi = E \psi \quad (4.3)$$

$$\mathbf{H}(\mathcal{T} \psi) = E(\mathcal{T} \psi) \quad (4.4)$$

olur. Eğer $\mathcal{T}^2 = -1$ ise $\mathcal{T} \psi$ dalga fonksiyonu ve ψ fonksiyonu birbirinden farklıdır (aynı olursa $\mathcal{T}^2 = 1$ olur) ve aynı enerji özdeğerine sahiptir. Bu iki çözüme **Kramers çiftleri** adı verilir. Tüm enerji seviyeleri çift katlı dejeneredir. Bu olay Kramers teoremi olarak isimlendirilir. Daha açık bir gösterimle yazıldığında Kramers çiftlerinin spin ve momentumlarının zıt yönlü olduğu anlaşılır:

$$\mathcal{T} \psi_{k,\sigma} = \psi'_{-k,-\sigma} \quad (4.5)$$

BHZ hamiltoniyeni blok köşegendir, her blok $(\mathbf{h}_\uparrow(\vec{k})$ ve $\mathbf{h}_\downarrow(\vec{k}))$ birbirinin zaman tersinme eşleniğidir. Bu nedenle tüm hamiltoniyen (4×4) zaman tersinme simetrisine sahiptir. Alt ve üst blokların özfonksiyonları Kramers çifti oluşturur, momentum ve spinleri ters yöndedir. Bu özfonksiyonlar bağı durum kıyı çözümlerine karşı gelirse, zaman tersinme simetrisi bozulmadığı sürece kıyı durumları korunacaktır. Korunum nedeniyle kıyı durumları safsızlıklarda meydana gelen saçılmalardan etkilenmeyecektir. Saçılmaların tasviri şekil 4.3'te verilmiştir.



Şekil 4.3 Safsızlıklarda meydana gelen saçılmaya karşı kıyı durumlarının korunması

Sonraki kesimlerde BHZ hamiltoniyeni ile özdeğer denklemi çözümleri ayrıntılı olarak hesaplanacaktır.

4.2 Yarı Uzay Geometrisinde Yığın Çözümleri

Yarı uzay geometrisinde $-\infty < x < \infty$, $y \geq 0$ çözümler önerilirken $y = 0$ sınırında dalga fonksiyonunun sıfır olması beklenir. Üst blok için dalga fonksiyonu aşağıdaki gibi önerilir,

$$\Psi_{\uparrow}(x, y) = C e^{ik_x x} (e^{i k_y y} - e^{-i k_y y}) \mathcal{U}_{\uparrow} \quad (4.6)$$

burada $\mathcal{U}_{\uparrow}$ 2-bileşenli spinördür.

$$\mathcal{U}_{\uparrow} = \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

Önerilen bu çözüm, yukarıda yazılı BHZ modifiye Dirac denkleminde (özdeğer denkleminde) yerleştirip katsayı determinantını sadece üst blok için yazarak enerjiyi bulalım,

$$\mathbf{h}_{\uparrow}(\vec{k}) \Psi_{\uparrow}(x, y) = E \Psi_{\uparrow}(x, y) \quad (4.8)$$

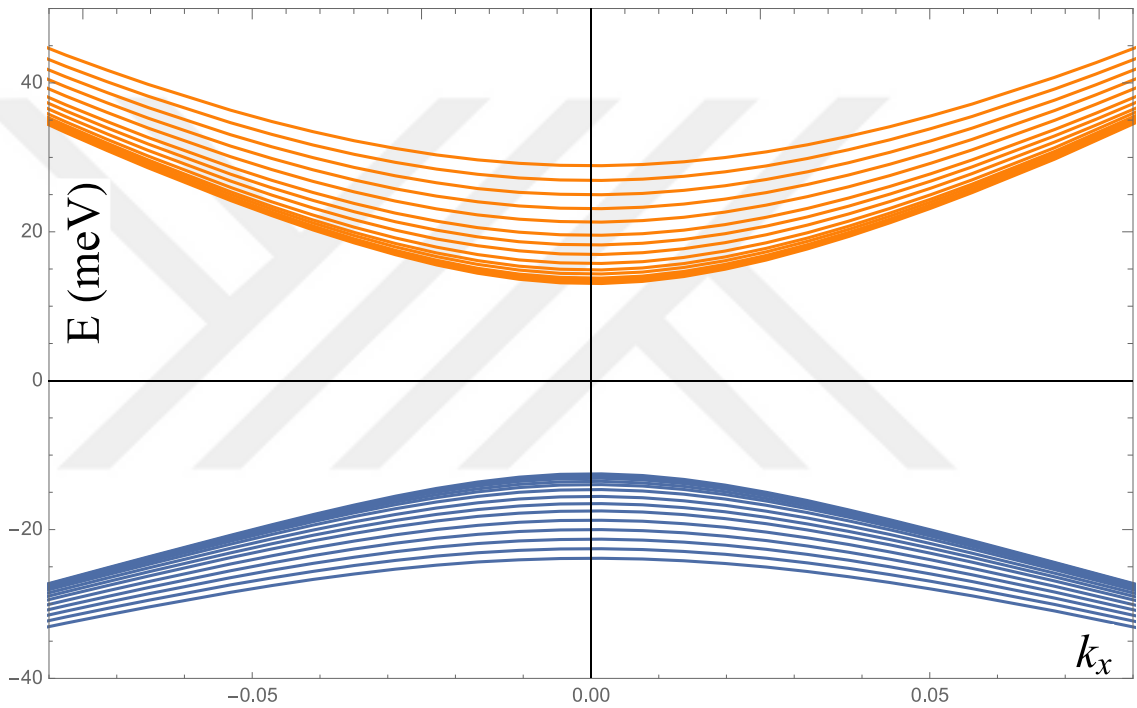
$$\det \begin{pmatrix} M - B_+ k^2 - E & A(k_x + i k_y) \\ A(k_x - i k_y) & -M + B_- k^2 - E \end{pmatrix} = 0 \quad (4.9)$$

$$E_+ = -Dk^2 + [(M - Bk^2)^2 + (Ak)^2]^{1/2} \quad (4.10)$$

$$E_- = -Dk^2 - [(M - Bk^2)^2 + (Ak)^2]^{1/2} \quad (4.11)$$

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2$$

Alt bloktan elde edilen katsayı determinanı üst blokun determinanı ile aynıdır. k_y değerlerini parametre gibi kullanarak $d > d_c$ için enerjinin k_x bağımlılığı şekil 4.1’de çizilmiştir.



Şekil 4.4 *CdTe* ve *HgTe* iki boyut kuantum kuyusunun yüzey kısmına ait enerji bant yapısı. Burada $2M$ değerinde yasak enerji bant aralığı olduğunda yapı yalıtkandır. Grafikte k_y parametre olarak alınmış olup her eğri farklı bir k_y değerine karşı gelmektedir.

Şekilde kullanılan katsayılar, $A = 364,5 \text{ meV} \cdot \text{nm}$, $B = -686 \text{ meV} \cdot \text{nm}^2$, $C = 0$, $M = -10 \text{ meV}$ ve $D = -512 \text{ meV} \cdot \text{nm}^2$ şeklinde alınmıştır. Görüldüğü gibi valans ve iletkenlik bantları arasındaki yasak enerji bant aralığı $2M$ olur ve iki boyutlu yüzey, normal yalıtkan olarak değerlendirilir.

4.3 Yarı Uzay Geometrisinde Helisel Kıyı Çözümleri

Bu kısımda BHZ hamiltoniyeni kullanarak oluşturulan özdeğer denkleminin $y = 0$ sınırında bağlı durum koşullarını $\Psi(y = 0) = \Psi(y = \infty) = 0$ sağlayan çözümler aranacaktır. Burada k_x korunumlu momentum olarak alınarak aşağıdaki sınama çözümü önerilecektir:

$$\Psi_{\uparrow}(x, y) = C e^{ik_x x} e^{-\lambda y} U_{\uparrow} \quad (4.12)$$

Hamiltoniyen blok-köşegen olduğundan sadece matrisin üst bloktaki bileşenini kullanmak işlemleri kısıltacaktır. Önce katsayı determinantından λ parametresi çözülür,

$$\mathbf{h}_{\uparrow}(\vec{k}) \Psi_{\uparrow}(x, y) = E \Psi_{\uparrow}(x, y) \quad (4.13)$$

$$\begin{pmatrix} (M - B_+(k_x^2 - \partial_y^2) - E) & A(k_x - i\partial_y) \\ A(k_x + i\partial_y) & -M + B_-(k_x^2 - \partial_y^2) - E \end{pmatrix} \Psi_{\uparrow}(x, y) = 0 \quad (4.14)$$

$$\lambda_{1,2}^2 = k_x^2 + F \pm Z \quad (4.15)$$

$$Z^2 = F^2 + \frac{E_{\uparrow}^2 - M^2}{B_+ B_-} \quad (4.16)$$

$$F = \frac{[A^2 - 2(MB + ED)]}{2B_+ B_-} \quad (4.17)$$

$y = 0$ noktasındaki sınır koşulunun sağlanması için y -doğrultusundaki çözümün yapısı, $(e^{-\lambda_1 y} - e^{-\lambda_2 y})$ ve $\lambda_1 > 0, \lambda_2 > 0$

şeklinde olmalıdır. λ ifadelerinin A, B, D, M katsayılarına bağımlılığından yola çıkarak yukardaki dalga fonksiyonu çözümlerine izin veren ilişkilerin ortaya çıkarılması gerekir. Bunun için λ_1 ve λ_2 ifadelerini özdeğer denkleminde yerine koyarak yine katsayı determinantı yöntemiyle enerjiyi k_x cinsinden elde edelim,

$$E = M - B_+ \lambda_1 \lambda_2 - B_+ (\lambda_1 + \lambda_2) k_x - B_+ k_x^2 \quad (4.18)$$

katsayılar arasındaki ilişkiler $k_x = 0$ alarak daha kolay elde edilir.

$$E = M - B_+ \lambda_1 \lambda_2 \quad (4.19)$$

$$E = M - B_+ \left[\frac{(M - E)(M + E)}{B_+ B_-} \right] \quad (4.20)$$

Bu eşitlikten enerjiyi çekersek,

$$E = -\frac{DM}{B} \quad (4.21)$$

elde edilir. Enerjinin bu değeri kullanarak,

$$\lambda_1 \lambda_2 = \frac{M}{B} > 0$$

$$\lambda_1 + \lambda_2 = \sqrt{\frac{A^2}{B_+ B_-}} > 0$$

A, B, D, M katsayılarının ön koşulları ortaya çıkar. Bu sonuçlarla birlikte enerjinin k_x değişkenine göre davranışını veren yaklaşık bir dağılım bağıntısını bulmak için enerjinin k_x cinsinden seri açılımını kullanabiliriz.

$$E(k_x) = E(k_x = 0) + k_x \frac{dE}{dk_x} + O(k_x^2) \quad (4.22)$$

$$\frac{dE}{dk_x} = -\frac{A}{B} \sqrt{B_+ B_-}$$

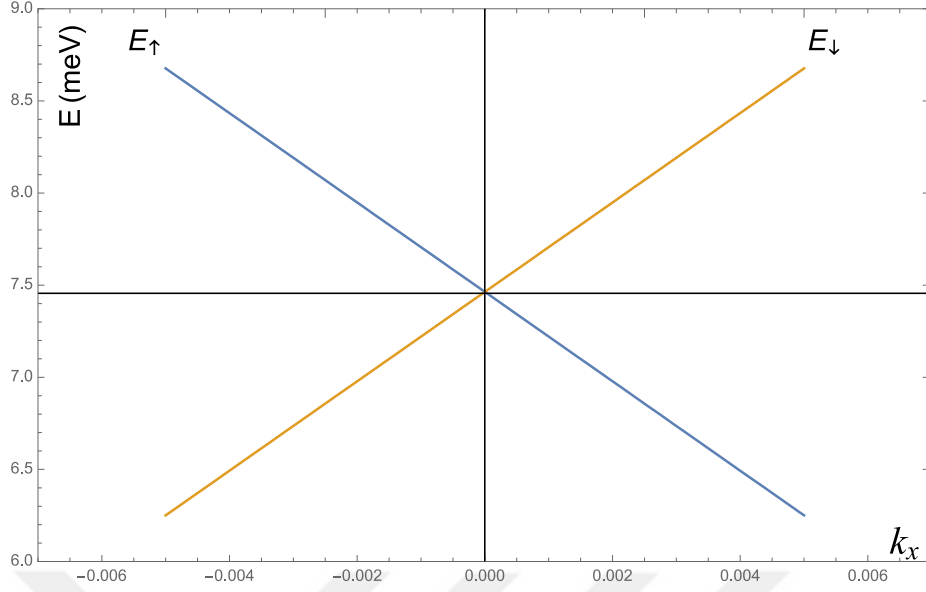
Buraya kadar sadece hamiltoniyen matrisinin üst bloktaki çözümleri dikkate alınmıştı. Enerji ifadesinde bunu belirten yukarı-ok tekrar yerine konulacaktır,

$$E_{\uparrow}(k_x) = -\frac{DM}{B} - \frac{A}{B} \sqrt{B_+ B_-} k_x + O(k_x^2) \quad (4.23)$$

hamiltoniyen matrisinin alt bloktaki denklemlerinden gelen çözümler de tamamen benzer olacaktır.

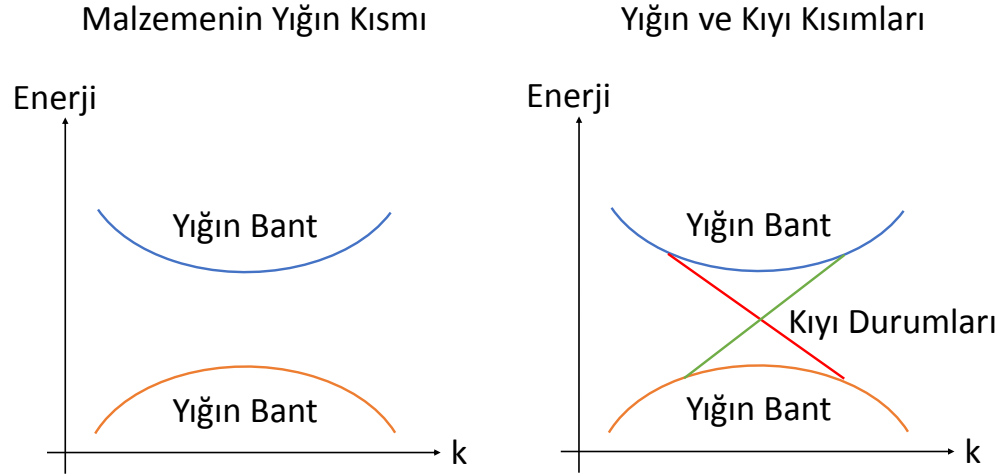
$$E_{\downarrow}(k_x) = -\frac{DM}{B} + \frac{A}{B} \sqrt{B_+ B_-} k_x + O(k_x^2) \quad (4.24)$$

Literatürdeki biçimde yazmak için $B = \text{sgn}(B) \sqrt{B^2}$ eşitliği kullanılabilir çünkü B negatif olabilir. Elde edilen kıyı durumlarına **helisel kıyı durumları** adı verilir ve enerji momentum grafiği aşağıdaki şekil 4.5'te verilmiştir. İki bant arasında enerji aralığının olmaması kıyıda sistemin iletken olarak davrandığını göstermektedir.



Şekil 4.5 $CdTe/HgTe$ kuantum kuyusunun helisel kıyı durumlarının enerji bant yapısı. Burada iletkenlik ve değerlik bantları arasında enerji aralığı (gap) yoktur.

$A = 364,5 \text{ meV} \cdot \text{nm}$, $B = -686 \text{ meV} \cdot \text{nm}^2$, $M = -10 \text{ meV}$, $D = -512 \text{ meV} \cdot \text{nm}^2$ ve $C = 0$ şeklinde alınmıştır. Fakat burada önemli nokta zıt yönlü elektron akımının oluşması nedeniyle iletim elektrik akımından değil spin akımından meydana gelmesidir. Buradaki spin gerçek spin olmayabilir.



Şekil 4.6 Topolojik yalıtkanların enerji bant yapısının şematik gösterimi.

Bölüm 4.2'de malzemenin yığını için enerji ifadesi bulunmuştu. Bulunan enerji ifadesinin grafiğine bakıldığında malzemenin yığın kısmının yalıtkan gibi davrandığı

gösterilmişti. Bölüm 4.3'te ise malzemenin kıyılarına bakıldığında spin akımlarından dolayı iletken gibi davrandığı gösterilmişti. Şekil 4.6'da ilk olarak malzemenin yığın bant yapısının şematik gösterimine yer verilmiştir. Görüldüğü gibi yığında (yüzey) bulunan yasak enerji bant aralığı kıyılarda kapanarak helisel kıyı durumları oluşmaktadır.

4.3.1 Etkin elektron hızı

Grup hızı tanımı kullanarak elektronların hangi yöne ve hangi hızla hareket ettiği çıkarılabilir. Grup hızı,

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk_x} \quad (4.25)$$

şeklindedir. $E_{\uparrow}$ için etkin grup hızı aşağıdaki gibidir.

$$v_{\uparrow} = -\frac{\hbar A}{B} \sqrt{B_+ B_-} \quad (4.26)$$

$E_{\downarrow}$ için etkin grup hızı,

$$v_{\downarrow} = \frac{\hbar A}{B} \sqrt{B_+ B_-} \quad (4.27)$$

şeklinde elde edilir. Spin-yukarı ve spin-aşağı durumlar için kıyılardaki hızların büyüklükleri eşit fakat yönleri terstir.

4.4 Topolojik Kuantum Sayıları

Topoloji, sürekli değişimler altında geometrik yapıların özellikleri ile ilgilenir. Bu sürekli değişimler; bükme, çekme olabilir fakat kesme koparma olamaz. Toroid ve kahve fincanının topolojileri aynıdır. Bükme çekme gibi sürekli değişimlerle toroidden kahve fincanına dönüşüm yapılabilir. Fakat küre ve toroidin topolojileri aynı değildir. Çünkü küreden toroide dönüşüm yapmak için kesme, koparma gibi süreksiz bir değişim yapmak gerekir.

Gauss-Bonnet teoremine göre bazı geometrik niceliklerin (örneğin eğrilik) yüzey integrali, bir tam tamsayı tanımlar. Tanımlanan bu tamsayı topolojik değişmez olarak isimlendirilir.

$$\frac{1}{2\pi} \int_S K \cdot d\mathbf{a} = 2(1 - g) \quad (4.28)$$

K :eğrilik, g :genus'dur. Genus bir tam sayıdır ve kabaca geometrik nesnenin delik sayısını gösterir. Örneğin kürenin genus'u 0'dır. Toroidin ise 1'dir.

Gauss-Bonnet teoremi katıhal fiziğine uygulandığında K eğriliği yerine Berry eğriliği gelir.

$$\frac{1}{2\pi} \int_S \mathbf{F}(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{k} = n; \quad \mathbf{F}(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}(\mathbf{k}), \quad d\mathbf{k} = \text{vektörel yüzey elemanı.} \quad (4.29)$$

burada $\mathbf{A}(\mathbf{k})$: Berry vektör potansiyeli (Berry bağlantısı), $\mathbf{F}(\mathbf{k})$: Berry eğriliği ve n :Chern sayısıdır. BHZ hamiltoniyeni gözönüne alındığında Chern sayısı MB 'nin işaretine bağlıdır:

$$n_{\pm} = \pm \frac{[Sgn(M) + Sgn(B)]}{2} \quad (4.30)$$

Yukarda $n_{\pm}$ birbiriyle zıt yönlerdeki her bir elektrona ait Chern sayılarıdır. Eğer $MB < 0$ olursa Chern sayısı sıfırdır, $MB > 0$ ise $n_{\pm} = \pm 1$ elde edilir ve **helisel kıyı durumları** oluşur. $n_{\pm} = 0$ ise kıyı durum çözümleri yoktur, $HgTe/CdTe$ kuantum kuyusu normal yalıtkan olur. $MB > 0$ için helisel kıyı durum çözümlerinin varlığı çözüm arama aşamasında tartışılmıştı. $MB > 0$ olabilmesi için kuantum kuyusunun $HgTe$ kalınlığı $d > d_c$ olmalıdır. Eğer $d < d_c$ ise $MB < 0$ olacağından $d = d_c$ noktası topolojik faz geçiş bölgesidir.

Sadece tek yönde bir kıyı durumu varsa bir tane n değeri vardır. Bu duruma en bilinen örnek kuantum Hall olayıdır. Eğer $n = 1$ ise kıyılarda iletken ve $n = 0$ ise yüzeyde yalıtkan gibi davranacaktır. Bu kıyı durumuna “**kiral kıyı durumu**” adı verilir.

Topolojik açıdan $n = 0$ ve $n = 1$ birbirinden farklıdır. Topolojileri farklı iki bölgenin arakesitinde kıyı durumları oluşur.

5. TOPOLOJİK YALITKANLARDA ELEKTRON FONON ETKİLEŞMESİ

Bu bölümde iki boyutlu topolojik yalıtkanlarda elektron yüzey optik (YO) fonon arasındaki etkileşme incelenecektir.

İki boyutlu malzemeleri üretebilmek için bir alttaş üzerine büyütme yapılması gerekmektedir. İki boyutlu malzemede bulunan taşıyıcılar (elektronlar) ile alttaşta bulunan YO fononlar arasında bir etkileşme olur. Bu etkileşme sonucunda, iki boyutlu malzemenin enerji dağılımı bağıntısında bir takım değişiklikler olması beklenir. Buradan yola çıkarak elektronlar ve alttaşın kaynaklı YO fononları arasındaki etkileşme hamiltoniyeni göz önüne alınarak BHZ hamiltoniyenine katkısı incelenecektir. Kullanılacak alttaşın farklılaşması ile KSH sisteminde farklılıklar gözlemlenmesi beklenmektedir.

5.1 Örgü Titreşimleri ve Fononlar

Örgü içerisinde bulunan iyonlar denge konumları çevresinde titreşim hareketi yaparlar. Kristal içindeki tüm iyonlar bu hareketi birlikte (collective) yaptıkları zaman önemlidir. Bu ortak titreşim kuantum mekaniği veya klasik fizik ilkeleriyle incelenebilir. Ortak titreşim frekansı hem klasik (Newton yasası) hem de kuantum mekaniksel olarak bulunabilir ve sonuçlar aynı çıkar. Ancak titreşim genliği kuantum mekaniksel olarak bulunabilir ve kuantumlanmış olan genliktir. Kuantumlanmış olan ortak titreşimler fonon (Madelung 1996) olarak isimlendirilir. Fononlar bozon olarak davranış gösterir (fotonlara benzer) ve elektronlarla etkileşirken bozon-fermiyon etkileşmesi olarak değerlendirilir. Elektron enerjileri elektronvolt mertebesinde olmasına rağmen fonon enerjileri milielektronvolt mertebesinde dir. Fononların malzemelerin özelliklerine oda sıcaklığındaki katkıları dışında en önemli etkileşmesi düşük sıcaklıklardadır. Düşük sıcaklıklardaki süperiletkenlik elektron-fonon etkileşmesi vasıtasıyla gerçekleşir. Optik ve akustik fonon olarak çeşitleri mevcuttur.

Kristal yüzeyinde oluşan örgü titreşimleri yüzey fononları olarak isimlendirilir. Yığın fononlarından farklıdırlar. Yığında bulunan titreşimler devamlılığı vardır fakat yüzeyde

bulunan titreşimlerin devamlılığı yoktur. Ancak bir alttaşın üzerinde büyütülen iki boyutlu malzemeler alttaşın yüzey fononlarından etkilenebilir.

5.2 İki Boyutlu Topolojik Yalıtkanlarda Elektron ve Yüzey Optik Fonon Etkileşme Hamiltoniyeni

Polar bir alttaş üzerine yerleştirilmiş bir KSH sisteminin taşıyıcılarının alttaş kaynaklı yüzey fononlarıyla etkileşmesi kaçınılmaz etkiler ortaya çıkaracaktır. Bu etki tek parçacık özelliklerinde değişiklik oluşturabileceği gibi çok parçacık (many body) parametrelerinde de kendini gösterebilir. Burada fononların tek elektronla etkileşme hamiltoniyeni göz önüne alınacaktır.

Bu bölümde KSH sistemlerinin tipik modeli olan BHZ hamiltoniyenine fonon ve elektron fonon etkileşme terimleri eklenerek, özdeğer denklemi biçimine getirilip bir önceki bölümde olduğu gibi enerji dağılım bağıntısı ve dalga fonksiyonları elde edilecektir. Çözümler hem normal yalıtkan hem de topolojik yalıtkan (helisel kıyı durumları) olarak iki ayrı rejimde olacaktır. Tek elektronla YO fonon etkileşme hamiltoniyeni aşağıda tanımlanmıştır.

$$\mathcal{H}_{YO}(\vec{k}) = \sigma_0 \left[\sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{YO} \mathbf{b}_{\vec{q}}^\dagger \mathbf{b}_{\vec{q}} + \sum_{\vec{q}} (M_{\vec{q}} e^{(i\vec{q} \cdot \vec{r})} \mathbf{b}_{\vec{q}} + H.C.) \right] \quad (5.1)$$

Köşeli parantez içindeki ilk terim serbest fonon hamiltoniyeni ikincisi elektron-fonon etkileşme terimidir. $\mathbf{b}_{\vec{q}}^\dagger$ ve $\mathbf{b}_{\vec{q}}$ $\vec{q}$ -dalga vektörüne sahip fonon için yaratıcı ve yokedicilerdir, $M_{\vec{q}}$ etkileşme genliği, ω_{YO} : yüzey fononlarının frekansı ve $H.C.$ ile belirtilen $M_{\vec{q}} e^{(i\vec{q} \cdot \vec{r})} \mathbf{b}_{\vec{q}}$ ifadesinin kompleks eşleniğidir. Etkileşme genliği aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$M_{\vec{q}} = i\sqrt{g} \frac{e^{-qz}}{\sqrt{q}}; \quad g = 2\pi\hbar\omega_{\vec{q}}e^2\beta/S$$

$$\beta = (\epsilon_0 - \epsilon_\infty)/(\epsilon_0 + 1)(\epsilon_\infty + 1).$$

$M_{\vec{q}}$ genliğinde z , topolojik yalıtkan içindeki elektronun alttaşın yüzeyine olan uzaklığı, ϵ_0 ve ϵ_∞ alttaş için alçak ve yüksek frekansta dielektrik sabiti, S yüzeyin alanını tanımlar.

Elektron-fonon etkileşme terimlerini BHZ Hamiltoniyenine eklemek için 4×4 'lük birim matris kullanılmıştır.

$s, s' = \pm 1$, $|ks\rangle$ kıyı durumlarının helisitesi, $U_{ij}(q)$ zorlanma (strain) $(\partial_i U_i + \partial_j U_j)/2$ tensörünün bileşenlerinin lineer kombinasyonun integre edilmiş zorlanma alanı, A_{ij} zorlanma tensörünün 4×4 matrisler ile kontraksiyonu olmak üzere, ve α elektron-fonon etkileşme sabiti olmak üzere, elektron-fonon etkileşme matrisi $\mathbf{M}_{ss'}(\vec{q}) = \alpha \sum_{i,j} \langle \vec{k} + \vec{q}, s | A_{ij} U_{ij}(q) | k, s' \rangle$ ile verilir. 4×4 , A_{ij} matrisleri (orbital $\otimes$ spin uzayı tarafından çevrilmiş uzayda tanımlı) elektron ve fononların dalga vektörlerinin küçük “little” grubunun operasyonları altında invaryant olmalıdır.

Topolojik yalıtkanlarda kıyı durumları Γ noktası civarında olduklarından dolayı, kıyı durumlarının little grubu, fononlar gibi örgünün uzay grubudur. Bu tip topolojik yalıtkanlarda uzay grubu, $\mathcal{J}$ uzay inversiyonu ve $\mathcal{T}$ zaman tersineme olmak üzere, $G = \{\mathcal{C}_6, \mathcal{J}, \mathcal{T}\}$ 'dur.

Yörünge $\otimes$ spin uzayını τ ve σ Pauli spin matrisleri ile gösterirsek, Dirac matrisleri $\gamma_0 = i1 \otimes \tau_z$, $\gamma_i = \sigma_i \otimes \tau_z$ ($i = 1, 2, 3$) olur. Özdeşlik matrisi 1 ve $\gamma_5 = \gamma_0 \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 = -1 \otimes \tau_y$ matrisinin yanı sıra dört adet $\gamma_0 \gamma_5 = 1 \otimes \tau_x$, $\gamma_i \gamma_5 = -i \sigma_i \otimes \tau_z$ matris ve $\sum_{\mu\nu} (i/2) [\gamma_\mu, \gamma_\nu]$ ile tanımlı altı adet $\sum_{0i} -\sigma_i \otimes \tau_z$ ve $\sum_{ij} = \epsilon_{ijk} \sigma_k \otimes 1$ ($i < j$) matrisleri de vardır. bu toplam onbeş adet matris ve 1 birim matris çizelge 5.1'de verilen 4×4 'lük matrislerin uzayında bir baz oluşturur:

Çizelge 5.1 4×4 'lük matrislerin uzayındaki bazlar. Y , C_6 ya da $\mathcal{T}$ simetri operasyonları altında korunan matrisleri etiketler.

Matris	C_6	$\mathcal{T}$	Matris	C_6	$\mathcal{T}$
1	Y	Y	$i\gamma_2\gamma_5$		
γ_0	Y	Y	$i\gamma_3\gamma_5$	Y	
γ_1			$i\sum_{01}$		Y
γ_2			$i\sum_{02}$		Y
γ_3	Y		$i\sum_{03}$	Y	Y
γ_5	Y		$i\sum_{12}$	Y	
$\gamma_0\gamma_5$	Y	Y	$i\sum_{13}$		
$i\gamma_1\gamma_5$			$i\sum_{23}$		

Bu çizelgeden, zaman tersinmesini koruyan yedi tane 2. Mertebe tensöre yol açan dört adet sabit vektörü çıkarmak mümkündür ki bunlar çizelge 5.2’de verilmiştir.

Çizelge 5.2 Zaman tersinme ve parite değişmez elektron-fonon etkileşmesini inşaa etmek için kullanılacak matrisler

	TR	I
$a = (\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)$	-1	-1
$b = \sum_{23}, \sum_{31}, \sum_{12}$	-1	+1
$p = i\sum_{01}, i\sum_{02}, i\sum_{03}$	+1	-1
$b' = (i\gamma_1\gamma_5, i\gamma_2\gamma_5, i\gamma_3\gamma_5)$	-1	+1

İnversiyon simetrisini bozanların dışındaki tensörler:

$$a_i a_j = (\sigma_i \otimes \tau_x)(\sigma_j \otimes \tau_x) = \delta_{ij} 1 \otimes 1 + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k \otimes 1$$

$$b_i b_j = (\sigma_i \otimes 1)(\sigma_j \otimes \tau_z) = \delta_{ij} 1 \otimes \tau_z + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k \otimes \tau_z$$

olarak yazılabilir.

Bilineer antisimetrik kısımlar, bu matrislerin her birinin simetrik gerilme tensörü ile kontraksiyonu sonucu birbirini götürceklerinden $M_{ij} = \delta_{ij} \otimes 1$ kalır. Yani, 4×4 'lük yörünge $\otimes$ spin uzayı göz önüne alındığında, elektron-fonon etkileşmesi tüm simetri operasyonları ile sıra değiştirecek şekilde özdeşlik matrisi ile orantılı olmalıdır.

Bu sonuç Dirac elektronlarının helisitesinden diagonal olan bir elektron-fonon bağlaşım matrisine yol açar.

BHZ Hamiltoniyenine elektron-fonon etkileşmesi Hamiltoniyeni eklendiğinde:

$$\mathcal{H}(\vec{k}) = \mathcal{H}_{BHZ}(\vec{k}) + \mathcal{H}_{YO}(\vec{k}) I_4 \quad (5.2)$$

şeklindedir. BHZ hamiltoniyeninin aşağıdaki şekli önceki bölümde tanımlanmıştı.

$$\mathcal{H}_{BHZ}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} \mathbf{h}_\uparrow(\vec{k}) & 0 \\ 0 & \mathbf{h}_\downarrow(\vec{k}) \end{pmatrix} \quad (5.3)$$

$$\mathbf{h}_\uparrow(\vec{k}) = \epsilon_k \mathbf{I}_2 + d^i(\vec{k}) \sigma^i \quad (5.4)$$

$$\epsilon_k = C - D(k_x^2 + k_y^2) \quad (5.5)$$

$$d^i(\vec{k}) \sigma^i = A(k_x \sigma_x + k_y \sigma_y) + [M - B(k_x^2 + k_y^2)] \sigma_z \quad (5.6)$$

A , B , C , D ve M malzemeye ve kuantum kuyusunun geometrisine bağlı parametrelerdir.

Elektron YO fonon etkileşmesi hamiltoniyeni BHZ hamiltoniyenine eklenmesi sonucunda elde edilen hamiltoniyen köşegen değildir. Çözümlerin yapılabilmesi için ilk olarak bu hamiltoniyen Lee-Low-Pines varyasyonel dönüşümleri çerçevesinde

köşegenleştirilecektir. Bunun için iki farklı dönüşüm uygulanır. İlk üniter dönüşüm matrisi aşağıdaki gibidir.

$$U_1 = \exp \left[-i \sum_{\vec{q}} \hbar \vec{q} \mathbf{b}_{\vec{q}}^\dagger \mathbf{b}_{\vec{q}} \cdot \vec{r} \right] \quad (5.7)$$

$\vec{r}$ 2-boyutlu düzlemde elektronun koordinatıdır. Dönüşüm işlemi,

$$\overline{\mathcal{H}}(\vec{k}) = U_1^{-1} \mathcal{H}(\vec{k}) U_1 \quad (5.8)$$

gerçekleştirilirken aşağıdaki adımlar kullanılır.

$$U_1^{-1} \mathbf{b}_{\vec{q}} U_1 = \mathbf{b}_{\vec{q}} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} \quad (5.9)$$

$$U_1^{-1} p_i U_1 = p_i - \sum_{\vec{q}} \hbar q_i \mathbf{b}_{\vec{q}}^\dagger \mathbf{b}_{\vec{q}} \quad , \quad p_i = p_x, p_y \quad (5.10)$$

Dönüşmüş hamiltoniyen BHZ ve fonon terimleri olarak iki ayrı kısımda yazılabilir.

$$\begin{aligned} \overline{H}_{BHZ}(\vec{k}) = & \left[C - D \left(\vec{k} - \sum_{\vec{q}} \vec{q} \mathbf{b}_{\vec{q}}^\dagger \mathbf{b}_{\vec{q}} \right)^2 \right] I_2 + \left[M - B \left(\vec{k} - \sum_{\vec{q}} \vec{q} \mathbf{b}_{\vec{q}}^\dagger \mathbf{b}_{\vec{q}} \right)^2 \right] \sigma_z \\ & + A \vec{\sigma} \cdot \left[\vec{k} - \sum_{\vec{q}} \vec{q} \mathbf{b}_{\vec{q}}^\dagger \mathbf{b}_{\vec{q}} \right] \end{aligned} \quad (5.11)$$

$$\overline{H}_{YO}(\vec{k}) = \left[\sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{YO} \mathbf{b}_{\vec{q}}^\dagger \mathbf{b}_{\vec{q}} + \sum_{\vec{q}} (M_{\vec{q}} \mathbf{b}_{\vec{q}} + H. C.) \right] I_2 \quad (5.12)$$

Elektron-fonon etkileşme terimindeki çizgisel $\mathbf{b}_{\vec{q}}$ işlemcisinden dolayı hamiltoniyen halen köşegen değildir ve ikinci bir dönüşüme ihtiyaç vardır. İkinci üniter dönüşüm matrisi,

$$\mathbf{U}_2 = \exp \left[\sum_{\vec{q}} (f_{\vec{q}} \mathbf{b}_{\vec{q}}^\dagger - f_{\vec{q}}^* \mathbf{b}_{\vec{q}}) \right] \quad (5.13)$$

fonon koordinatlarını $f_{\vec{q}}$ kadar kaydırır. Burada $f_{\vec{q}}$ varyasyon yöntemiyle belirlenecektir.

$$\mathbf{U}_2^{-1} \mathbf{b}_{\vec{q}} \mathbf{U}_2 = \mathbf{b}_{\vec{q}} + f_{\vec{q}} \quad (5.14)$$

$\overline{\mathcal{H}}(\vec{k})$ hamiltoniyenine $\mathbf{U}_2$ dönüşüm matrisi uygulanırsa dönüşmüş hamiltoniyen üç ayrı grupta incelenebilir.

$$\widetilde{\mathcal{H}}(\vec{k}) = \mathbf{U}_2^{-1} \overline{\mathcal{H}}(\vec{k}) \mathbf{U}_2 = \mathbf{H}^{(0)} + \mathbf{H}^{(1)} + \mathbf{H}^{(2)} \quad (5.15)$$

İkinci dönüşümden sonra hamiltoniyen üzerine sağdan ve soldan fonon vakum durumları uygulanır. Çünkü burada söz konusu olan ara durum fononlarıdır, ilk ve son durumda fonon olmadığından $\mathbf{b}_{\vec{q}}|0\rangle_{PH} = 0$ eşitliği aşağıdaki sonuçlara götürür.

$$\langle 0 | \mathbf{b}_{\vec{q}}^\dagger \mathbf{b}_{\vec{q}} | 0 \rangle_{PH} = 0, \quad \langle 0 | \mathbf{b}_{\vec{q}}^\dagger \mathbf{b}_{\vec{q}} \mathbf{b}_{\vec{q}} | 0 \rangle_{PH} = 0 \quad (5.16)$$

Bu ifadeler dikkate alınır,

$$\langle 0 | \mathbf{H}^{(1)} + \mathbf{H}^{(2)} | 0 \rangle_{PH} = 0 \quad (5.17)$$

elde edilir. Geriye kalan $\langle 0 | \mathbf{H}^{(0)} | 0 \rangle_{PH}$ teriminin köşegen ve köşegen dışındaki elemanları aşağıdaki sonuçları verir. ($\mathbf{H}^{(1)}$ ve $\mathbf{H}^{(2)}$ 'nin açık halleri EK1'de verilmiştir.)

$$\langle 0 | \widetilde{\mathcal{H}}(\vec{k}) | 0 \rangle_{PH} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{11}^{(0)}(\vec{k}) & \mathbf{H}_{12}^{(0)}(\vec{k}) \\ \mathbf{H}_{21}^{(0)}(\vec{k}) & \mathbf{H}_{22}^{(0)}(\vec{k}) \end{pmatrix} \quad (5.18)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{11}^{(0)}(\vec{k}) = C + M - (B + D) & \left[k^2 + \sum_{\vec{q}} q^2 |f_{\vec{q}}|^2 - 2\vec{k} \cdot \sum_{\vec{q}} \vec{q} |f_{\vec{q}}|^2 + \left(\sum_{\vec{q}} \vec{q} |f_{\vec{q}}|^2 \right)^2 \right] \\ & + \sum_{\vec{q}} \left[\hbar\omega |f_{\vec{q}}|^2 + M_{\vec{q}}(z) f_{\vec{q}} + (M_{\vec{q}}(z) f_{\vec{q}})^* \right] \end{aligned} \quad (5.19a)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{22}^{(0)}(\vec{k}) = C - M + (B - D) & \left[k^2 + \sum_q q^2 |f_{\vec{q}}|^2 - 2\vec{k} \cdot \sum_q \vec{q} |f_{\vec{q}}|^2 + \left(\sum_q \vec{q} |f_{\vec{q}}|^2 \right)^2 \right] \\ & + \sum_q \left[\hbar\omega |f_{\vec{q}}|^2 + M_{\vec{q}}(z) f_{\vec{q}} + (M_{\vec{q}}(z) f_{\vec{q}})^* \right] \end{aligned} \quad (5.19b)$$

$$\mathbf{H}_{12}^{(0)}(\vec{k}) = A \left(k_+ - \sum_q q_+ |f_{\vec{q}}|^2 \right) \quad (5.19c)$$

$$\mathbf{H}_{21}^{(0)}(\vec{k}) = A \left(k_- - \sum_q q_- |f_{\vec{q}}|^2 \right) \quad (5.19d)$$

$k_{\pm} = k_x \pm ik_y$, $q_{\pm} = q_x \pm iq_y$ şeklindedir. Bundan sonra $\langle 0 | \mathbf{H}^{(0)} | 0 \rangle_{PH}$ ifadesinde $f_{\vec{q}}$ ve $f_{\vec{q}}^*$ parametrelerini bulmak için varyasyon yöntemi uygulanırsa,

$$f_{\vec{q}} = \frac{M_{\vec{q}}^*(z)}{\hbar\omega + |B_+| [q^2 - 2\vec{k} \cdot \vec{q} (1 - \eta)]} \quad (5.20)$$

elde edilir. Bu ifade sistemin enerjisini minimum yapacaktır. Ancak aşağıdaki integral ifadesinden η değeri bulunmalıdır.

$$\eta k_i = \frac{1}{4\pi} \hbar\omega e^2 \beta \int d^2 \vec{q} \frac{e^{-2qz}}{q |f_{\vec{q}}|^2} q_i \quad (5.21)$$

Bu integral küçük $\vec{k}$ değerleri (yavaş elektron yaklaşımı) için analitik olarak hesaplanabilir ve η için,

$$\eta = \frac{\alpha}{1 + \alpha} \quad (5.22)$$

$$\eta = \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \alpha_0 G_{1,3}^{3,1} \left(\bar{z}^2 |_{0,1/2,3/2}^{-1/2} \right) \quad (5.23)$$

elde edilir. Burada $\alpha_0 = e^2 \beta / \sqrt{\hbar\omega |B_+|}$ olarak tanımlıdır ve α parametresi konuma bağımlı elektron-yüzey optik fonon etkileşme katsayısı şeklinde yorumlanabilir. $G_{1,3}^{3,1}$ ise Meijer G-fonksiyonlarıdır. Katsayılar da yeniden bir düzenleme yapılırsa etkin

hamiltoniyeenin yeni biçimi eskisi ile yapısal olarak aynı görünümde olmasına rağmen katsayılar eski katsayılar cinsinden yazıldığında fonon giydirilmiş (FG) BHZ hamiltoniyeeni elde edilmiş olur.

$$\langle 0 | \widetilde{\mathcal{H}}(\vec{k}) | 0 \rangle_{PH} = \mathbf{H}_{FG}(\vec{k}) \quad (5.24)$$

$$\mathbf{H}_{FG}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} M_{FG} - (B_{FG} + D_{FG})\vec{k}^2 & A_{FG}\vec{k}_+ \\ A_{FG}\vec{k}_- & -M_{FG} + (B_{FG} - D_{FG})\vec{k}^2 \end{pmatrix} \quad (5.25)$$

Fonon giydirilmiş katsayılar aşağıdaki gibi tanımlanmıştır.

$$A_{FG} = A(1 - \eta) \quad (5.26a)$$

$$B_{FG} = \left[B - \frac{1}{2}(D^{01} + D^{02}) \right] (1 - \eta)^2 \quad (5.26b)$$

$$C_{FG} = \left[C - \frac{1}{2}(C^{01} + C^{02}) \right] \quad (5.26c)$$

$$D_{FG} = \left[D - \frac{1}{2}(D^{01} - D^{02}) \right] (1 - \eta)^2 \quad (5.26d)$$

$$M_{FG} = \left[M - \frac{1}{2}(C^{01} - C^{02}) \right] \quad (5.26e)$$

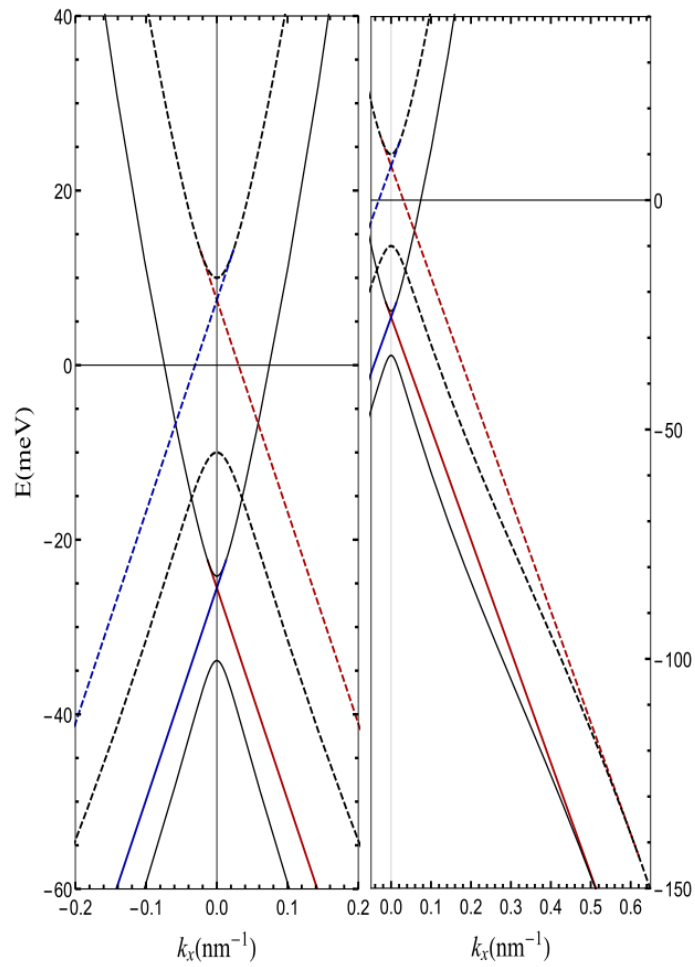
Tanımlardaki C^{0i} ve D^{0i} ifadelerinin açık biçimleri EK 2’de verilmiştir.

5.3 Fonon Giydirilmiş Helisel Kıyı Durumları

Fonon giydirilmiş BHZ etkin hamiltoniyeeni elde edildikten sonra önceki topolojik yalıtkanlar bölümünde hesaplanan yığın ve helisel kıyı durumlarının enerji dağıtım bağıntıları tamamen geçerli olmasına karşın katsayıların içeriklerinde farklılık gelecektir. Bu nedenle aynı çözüm adımları burada tekrarlanmayacak sadece nümerik sonuçlar grafikler üzerinde yorumlanacaktır. Farklılıkları değerlendirebilmek için alttaş olarak kullanılan malzemelerin parametrelerine ihtiyaç olacaktır. Bazı alttaşlara ait bilgiler çizelge 5.1’de verilmektedir.

Çizelge 5.3 Farklı alttaşlara ait parametreler. (Fischetti vd. 2001; De Paula vd. 1998)

	HfO_2	$h - BN$	$CdTe$	SiC
ϵ_0	22,00	5,10	10,23	9,70
ϵ_ω	5,03	4,10	7,21	6,50
$\omega_{YO,1}$	19,42	195,00	18,96	116,00
$\omega_{YO,2}$	52,87	101,00	20,80	167,58
β	0,12	0,03	0,03	0,04



Şekil 5.1 (Sağ taraftaki) Fonon giydirilmiş hamiltoniyenden elde edilen yığın ve kıyı durumlarına ait enerji grafikleri. Düz çizgiler elektron-fonon etkileşmesinin var olduğu sistem. Kesikli çizgiler ise ihmal edildiği sistem. (Sol taraf) Sağdaki grafiğin daha yakın halidir, kıyı durumlarının ne tarafa kaydığını gösterir. (Kandemir, B. S. Ve Atağ, S. 2019)

Farklı alttaşlar için enerji momentum grafiklerinde değişimler oluşmaktadır. Şekil 5.1’de görüldüğü gibi kullanılan alttaşa bağlı olarak kıyı ve yığındaki enerji momentum dağılımı değişmektedir ve kıyı durumlarının ne tarafa doğru kaydığı gösterilmiştir.

Enerji dağılımından ziyade bu etkinin helisel kıyı durumlarında oluşturduğu değişim çok daha önemlidir. Çünkü bazı alttaşlar kıyı durumlarının oluşmasını engellemektedir. BHZ modelinde kıyı durumlarının (veya topolojik yalıtkan) oluşmasındaki iki kritik parametre aşağıda tartışılacaktır.

I. Derinlik katsayısı (penetration depth length): Bir önceki bölümde kıyı durumlar için dalga fonksiyonu çözümleri,

$$\Psi_{\uparrow}(x, y) = C e^{ik_x x} (e^{-\lambda_1 y} - e^{-\lambda_2 y}) U_{\uparrow} \quad (5.27)$$

ve $\lambda_1 > \lambda_2 > 0$ olmak üzere verilmişti. Kıyı çözümlerinin yığın içerisine girme derinliğinin ölçüsü $\ell = 1/\lambda_2$ tanımlanabilir ve ℓ uzunluğunun kısa olması kıyı durumlarının niteliği açısından gereklidir. Burada derinlik katsayısının tersi olan λ_2 parametresinin k_x dalga vektörüne göre davranışını incelemek daha kolaydır. Kıyı durum enerjisi yerine konulduğunda $\lambda_2(k_x)$ fonksiyonu bulunur.

$$\lambda_2 = \frac{1}{\sqrt{B_+ B_-}} \left[\frac{|A|}{2} - \sqrt{Z_k} \right] \quad (5.28)$$

$$Z_k = \left(\frac{A^2}{4} - \frac{M}{B} B_+ B_- \right) - \frac{D|A|\sqrt{B_+ B_-}}{B} k_x + B_+ B_- k_x^2 \quad (5.29)$$

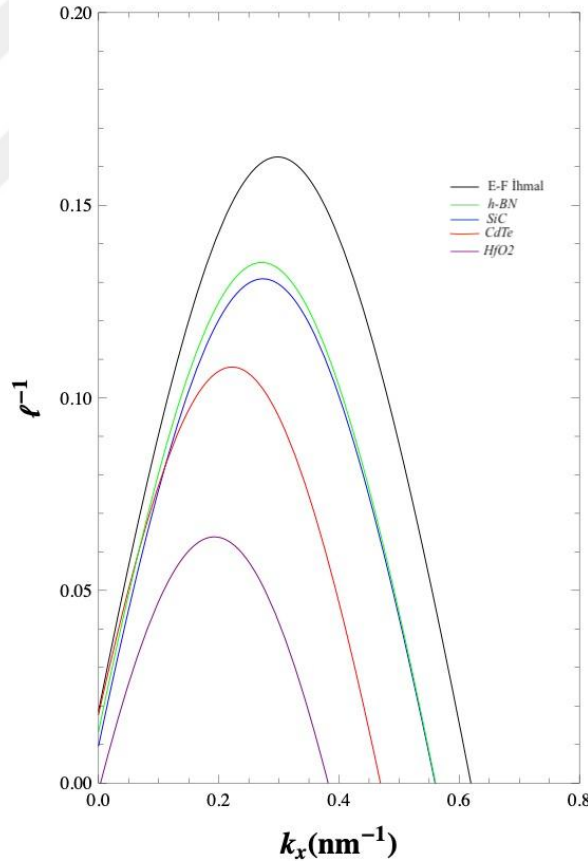
Burada λ_2 ifadesini sıfır yapan k_x değerleri ise kıyı durumlarının yığın enerji eğrisini kestiği noktaları verir.

$$k_x^{\pm} = \left(\frac{DN}{B} \right) \left[1 \pm \sqrt{1 + \frac{BM}{D^2 N^2}} \right], \quad N = \frac{A}{2\sqrt{B_+ B_-}} \quad (5.30)$$

ℓ_{min} değeri λ_2 ’nin maksimum değerine karşı geldiğinden, $d\lambda_2/dk_x = 0$ maksimum koşulunu kullanarak,

$$(\ell_{min})^{-1} = \frac{ND}{2B} \sqrt{1 + \frac{MB}{D^2N^2}} = \frac{(k_x^+ + k_x^-)}{2} \quad (5.31)$$

şeklinde bulunur. Alttaş kaynaklı elektron-fonon etkileşmesi ihmal edildiğinde $\ell_{min} \approx 6,2 \text{ nm}$ elde edilir. Alttaş fonon katkısı dikkate alındığında ℓ_{min} uzunluğu büyümeye başlar. Bu büyüme, D parametresindeki değişimden dolayı iletkenlik bandı ile valans bandı arasındaki asimetrik yapıdan kaynaklanır. Farklı alttaşlar için şekil 5.2’de ℓ^{-1} katsayısının k_x bağımlılığı çizilmiştir. Grafikteki maksimum noktalar her bir alttaş için ℓ_{min} değerine karşı gelmektedir. Şekil 5.1’deki eğrilerin $z = 0,3 \text{ nm}$ için alttaş sıralaması aşağıdan yukarı doğru; HfO_2 , $CdTe$, SiC , $h - BN$ ve en yüksek maksimum ise alttaş etkisinin ihmal edildiği durumdur. ℓ_{min} değeri en küçük olan alttaşlar SiC ve $h - BN$ helisel kıyı durumlarının gözlenmesi için en uygun olanlardır.

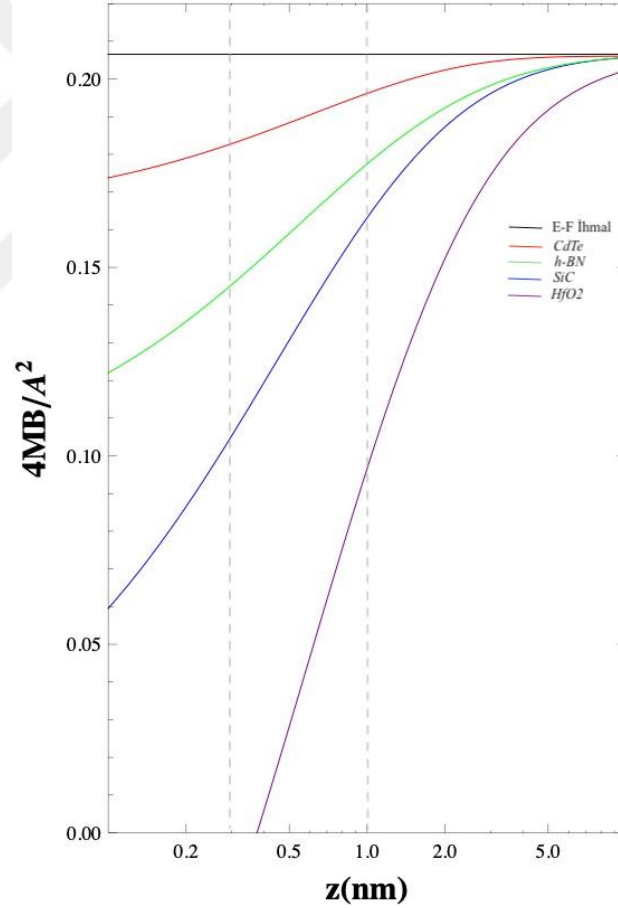


Şekil 5.2 $z = 0,3 \text{ nm}$ için farklı alttaşların kıyı durumlarının derinlik katsayılarının tersinin (λ_2) davranışı. Eğriler aşağıdan yukarı doğru; HfO_2 , $CdTe$, SiC , $h - BN$ şeklinde sıralanır. En üst eğri alttaş etkisinin olmadığı durumdur. Düşey eksenin birimi ($1/\text{nm}$) ile verilir.

II. Topolojik yalıtkan çözüm bölgesini tanımlayan malzemenin parametrelerinin sağlanması gereken ön koşul $M < 0$ olmak üzere,

$$A^2/4B^2 \geq M/B \geq 0 \text{ veya } 1 \geq 4MB/A^2 \geq 0$$

ifadesi ile verilir. Yüzey optik fonon etkileşmesinin ihmal edildiği durumda $HgTe$ kuantum kuyusu için $4MB/A^2 = 0,207$ değerini alır. Alttaş fonon katkısı dikkate alındığında bu parametre küçülmeye başlar. Bu küçülmenin sıfıra yakın olması kıyı durumlarının gözlenmesini imkansız kılar. Deneysel olarak en uygun z uzunluğu $0,3 - 1,0 \text{ nm}$ bölgesindedir. Alttaş etkisi $4MB/A^2$ ifadesini z bağımlı yapar. Farklı alttaşlar için bu kriterin z -bağımlı davranışı şekil 5.3'te verilmiştir.



Şekil 5.3 $4MB/A^2$ kriterinin z -fonksiyonu olarak, değişik alttaşlar için davranışı. Sağdan-sola eğrilerin sırası HfO_2 , SiC , $h-BN$, $CdTe$ ile verilir. En üst yatay çizgi alttaş etkisinin olmadığı durumdur (Kandemir, Atağ 2019).

Şekil 5.3'te en üstteki yatay çizgi alttaş etkisinin olmadığı z -bağımsız durumu gösterir. Diğer eğriler sağdan-sola doğru HfO_2 , SiC , $h - BN$, $CdTe$ olarak sıralanmıştır. En uygun alttaşlar en üsttekiler olan $CdTe$ ve $h - BN$ olabilir. Özellikle HfO_2 kullanıldığında helisel kıyı durumlarının gözlemlenmesi mümkün olmayacaktır. Ayrıca $z = 0,3 \text{ nm}$ 'de HfO_2 alttaş etkisi M değeri pozitif yapmaktadır.



6. SONUÇ

Topolojik yalıtkanlar, oldukça ilgi çekici fiziksel özelliklere sahip olması sebebiyle yoğun madde fiziğinin son yıllardaki en popüler konularından birisidir. Önümüzdeki yıllarda teknolojik uygulamaların (özellikle kuantum bilgisayarların), önemli bir kısmında yer alma potansiyeli yüksektir.

Bu çalışmada iki boyutlu topolojik yalıtkanların oluşturulmasında kullanılan alttaşın, KSH sisteminde elektron-fonon etkileşmesi vasıtasıyla yarattığı değişimler ve hangi alttaşlar için helisel kıyı durumlarının ortaya çıkabileceği ile hangilerinde bunun mümkün olmadığı analitik olarak gösterilmiştir.

Kuantum Hall olayı ile anlatılan sistemler iki ana çerçevede incelenir. İlki kıyı durumları ikincisi ise yüzey durumlarıdır. Kıyı durumları TKH olayı ve KSH olayı ile anlatılabilir. Yüzey durumları ise KSH olayı ile anlatılır. Kabaca KSH olayı iki adet TKH olayının (iki adet kıyı durumunun) birleşimi gibi düşünülebilir. TKH olayı ile oluşan kıyı durumları kiral kıyı durumları olarak isimlendirilirken KSH olayı ile oluşan kıyı durumları helisel kıyı durumları olarak isimlendirilir. Kiral kıyı durumlarının oluşabilmesi için dışarıdan bir manyetik alana gereksinim vardır. Uygulanan manyetik alan ise zaman tersinme simetrisini kırar. Helisel kıyı durumlarının oluşması için dışarıdan bir manyetik alana ihtiyaç yoktur. Elektronun yörüngesi ile spini arasında meydana gelen güçlü spin-yörünge etkileşmesi ile oluşur. Spin-yörünge etkileşmesi, spinin her iki durumunu içerdiği için zaman tersinme simetrisi bozulmaz ve helisel kıyı durumları korunur. Dirac denkleminin düşük enerji limitinde, spin-yörünge etkileşmesi kendini açık bir şekilde gösterir. Bu sebepten dolayı KSH sistemlerinin anlatılmasında Dirac-tipi denklemden yararlanılır.

İki boyutta helisel kıyı durumları için, spin-yörünge etkileşmesinin güçlü olduğu ağır elementlere bakılması düşünülmüş ve $HgTe/CdTe$ hetero yapısında helisel kıyı durumları gözlemlenmiştir. Matematiksel model olarak, $k \cdot p$ yaklaşımı ile elde edilen (modifiye Dirac-tipi) BHZ Hamiltoniyeni kullanılmıştır. Bu hamiltoniyen zaman tersinme simetrisine sahiptir. İki boyutta özdeğer denklemlerinden iki farklı topolojik faz için iki farklı çözüm takımı elde edilmiştir. Bu çözümlerin farklılığı $HgTe/CdTe$

kuantum kuyu parametrelerinin ve geometrik yapısının sağladığı koşullardan ortaya çıkmaktadır. Özellikle helisel kıyı durumları için bu kriterler $M > 0$ ve $1 \geq 4MB/A^2 \geq 0$ son derece önemlidir.

İki boyutlu malzemelerin üretimi bir alttaş üzerine olacak şekilde yapılır. Alttaşa ait YO fononlar ile malzemenin elektronları arasında bir etkileşme kaçınılmazdır. Bu etkileşimin incelenmesi için BHZ hamiltoniyenine elektron YO fonon hamiltoniyeni eklenmiş ve Lee-Low-Pines dönüşümleri ile köşegenleştirme yapılarak “fonon giydirilmiş BHZ hamiltoniyeni” analitik olarak elde edilmiştir. Burada BHZ hamiltoniyenin görünümü aynı fakat malzeme bağımlı katsayılarının içeriği biraz değişmiştir. Söz konusu katsayılar (A, B, C, D, M) alttaşın dielektrik özelliklerine, YO fonon frekansına ve alttaş ile kuantum kuyusu arasındaki z-uzaklığına bağımlılık kazanmıştır. $HgTe/CdTe$ kuantum kuyusu Al_2O_3, HfO_2 gibi alttaşlar kullanıldığında kıyı durumlarını gözlemek için kriterleri $z = 0,3 - 1 \text{ nm}$ aralığında sağlamak mümkün değildir. Ancak $SiC, h - BN, CdTe$ gibi yapılar uygun alttaşlar arasında sayılabilir.

KAYNAKLAR

- Altland, Alexander, ve Martin R. Zirnbauer. 1997. Nonstandars sysmetry classes in mesoscopic normal-superconducting hybrid structure”. Physical Review B 90 (2), 1142–61.
- Asb.th J., Jonos K., Oroszleny L, ve Pelyi A. 2015. A short course on topological insulators: Band-structure topology and edge states in one and two dimensions.
- Avron, J. E., Osadchy, D. ve Seiler, R. 2003. A topological look at the quantum Hall effect. Physics Today 56(8), 38–42.
- Avron, J. E., Seiler, R. ve Simon, B. 1983. Homotopy and quantization in condensed matter physics. Physical Review Letters 51(1), 51–53.
- Baroni, Sam E. 2010. Peacemaking in international conflict: Methods and techniques. Peace & Change 35 (3), 531–33.
- Basov, D. N., M. M. Fogler, A. Lanzara, Feng Wang, ve Yuanbo Zhang. 2014. Colloquium: Graphene spectroscopy. Reviews of Modern Physics 86 (3), 959–94.
- Bernevig, B. A., Hughes, T. L. ve Zhang, S. C. 2006. Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum Wells. Science 314(5806), 1757–1761.
- Bernevig, B. A. ve Zhang, S. C. 2006. Quantum spin hall effect. Physical Review Letters 96(10), 1-4
- Brune, C., Wiedmann, S., Qi, X. L., Molenkamp, L. W., Roth, A., Buhmann, H., Konig, M. ve Zhang, S. C. 2007. Quantum spin Hall insulator state in HgTe quantum wells. Science 318 (5851), 766-770.
- Burstein, E., Macdonald, A. H. ve Stiles, P. J. 2013. Topological insulators.
- Chadha, S., Nielsen H. B. 1983. Lorentz invariance as a low energy phenomenon. Nuclear Physics B 217 (1), 125-144.
- Checkelsky, J. G., Li, L. ve Ong, N. P. 2008. Zero-energy state in graphene in a high magnetic field. Physical Review Letters 100(20), 2–5.
- Chen, X., Liu Z. X., ve Wen, X. G. 2011. Two-dimensional symmetry-protected topological orders and their protected gapless edge excitations. Physical Review B 84(23), 33–35.
- Chen, Y. L., Analytis, J. G., Chu, J. H., Liu, Z. K., Mo, S. K., Qi, X. L., Zhang, H. J., Lu, P. H., Dai, X., Fang, Z., Zhang, S. C., Fisher, I. R., Hussain, Z., ve Shen, Z. X. 2009. Experimental realization of a three-dimensional topological insulator, Bi₂Te₃. Science 325(178), 178–81.

- De Paula, A. M., Barbosa, L. C., Cruz, C. H. B., Alves, OP. L., Sanjurjo, J. A. ve Cesar, C. L. 1998. Quantum confinement effects on the optical phonons of CdTe quantum dots. *Superlattices and microstructures* 23(5), 1103–1106.
- Dirac, P. A. M. 1928. The quantum theory of the electron. *Proc. R. Soc. A* 117(1927), 610–624.
- Fischetti, M. V., Neumayer, D. A. ve Cartier, E. A. 2001. Effective electron mobility in Si inversion layers in metal-oxide-semiconductor systems with a high- κ insulator: The role of remote phonon scattering. *Journal of Applied Physics* 90(9), 4587–4608.
- Franz, M., Molenkamp, L. 2013. Contemporary concepts of condensed matter science: topological insulators. Willey, Amerika.
- Fu, Liang. 2009. Theory of topological insulators. Doktora Tezi, Pensilvanya Üniversitesi, Fizik ve Astronomi Bölümü, Amerika.
- Fu, L. ve Kane, C. L. 2007. Topological insulators with inversion symmetry. *Physical Review B* 76(045302), 1–17.
- Fuchs, J. N. ve Goerbig, M. O. 2008. Introduction to the physical properties of graphene. Ders notu.
- Geim, A. K. ve Novoselov, K. S. 2007. The rise of graphene. *Nature Materials* 6, 183–191.
- Gerstner, Ed. 2010. Nobel Prize 2010: Andre Geim & Konstantin Novoselov. *Nature Physics* 6(11), 836–836.
- Giraud, S. ve Egger, R. 2011. Electron-phonon scattering in topological insulators. *Physical Review B* 83(245322), 1–5.
- Goerbig, M. O. 2011. Electronic properties of graphene in a strong magnetic field. *Reviews of Modern Physics* 83(4), 1193–1243.
- Jackiw, R. ve Rebbi, C. 1976. Solitons with fermion number. *Physical Review D* 13(12), 3398–3409.
- Haldane, F. D. M. 1988. Model for a quantum Hall effect without Landau levels: Condensed-matter realization of the ‘Parity Anomaly’. *Physical Review Letters* 61(18), 2015–2018.
- Hall, E. H. 1879. On a new action of the magnet on electric current. *American Journal of Mathematics* 2(3), 287–292.

- Halperin, B. I. 1982. Quantized Hall conductance, current-carrying edge states, and the existence of extended states in a two-dimensional disordered potential. *Physical Review B* 25(4), 2185–2190.
- Hasan, M. Z. ve Kane, C. L.. 2010. Colloquium: Topological insulators. *Reviews of Modern Physics* 82(4), 3045–3067.
- Hsieh, D., Qian, D. , Wray, L., Xia, Y., Hor, Y. S., Cava, R. J. ve Hasan, M. Z. 2008. A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase. *Nature* 452(970), 1–16.
- Huber, S. The integer quantum Hall effect II. Ders Notu.
- Jaszczak, J. A., Stormer, H. L., ve Kim, P. 2006. Landau-level splitting in graphene in high magnetic fields. *Physical Review Letters* 96(136806), 1–4.
- Kandemir, B. S. ve Atağ S. 2019. Substrate-Limited helical edge states. *Physical Review B* 100 (24508), 1-9.
- Kandemir, B. S., ve Mogulkoc, A. 2010. Boundaries of subcritical Coulomb impurity region in gapped graphene. *European Physical Journal B* 74 (4), 535–41.
- Kane, C. L. ve Mele, E. J. 2005a. Quantum spin Hall effect in graphene. *Physical Review Letters* 95(226801), 0–3.
- Kane, C. L. ve Mele, E. J. 2005b. Z₂ topological order and the quantum spin Hall effect. *Physical Review Letters* 95(146802), 1–4.
- Katsnelson, M.I, Novoselov, K. S., Geim, A. K. 2006. Chiral tunneling and the Klein paradox in graphene. *Nature Physics*, 2, 620-625.
- Kim, J. V. 2014. Solid-state physics: Siphoning spins. *Nature* 511(7510), 418–419.
- Kirtschig, F.. 2017. Topological k . p Hamiltonians and their applications to uniaxially strained mercury telluride. Yüksek Lisans Tezi, Dresden Teknik Üniversitesi, Fizik Anabilim Dalı, Almanya.
- Klitzing, K Von. 1995. The quantized Hall effect”. Nobel Dersleri, sayı 3.
- Konig, M., C. Brune, S. Wiedmann, X.-L. Qi, L. W. Molenkamp, A. Roth, H. Buhmann, ve S.-C. Zhang. 2007. Quantum spin Hall insulator state in hgte quantum wells. *Science* 318.
- Kotov, Valeri N., Bruno Uchoa, Vitor M. Pereira, F. Guinea, ve A. H. Castro Neto. 2012. Electron-electron interactions in graphene: Current status and perspectives. *Reviews of Modern Physics* 84 (3), 1067–1125.
- Lakhotia, H. 2012. Landau level problem and quantum Hall effect. Ders notu.
- Leggett, A. J. 2010. Graphene: Electronic band structure and Dirac fermions. Ders notu.

- Lopatin, A.. 2007. Graphene a new electronic material. Ders notu.
- Lowrance, Andrew. 2019. Topological insulators and applications to quantum computing. *Journal of Young Inverstigators*, 31(1), 1–2.
- Lukose, Vinu, R. Shankar, ve G. Baskaran. 2007. Novel electric field effects on landau levels in graphene. *Physical Review Letters* 98 (11), 1–4.
- MacDonald, A. H. 1991. The quantum Hall effect. Springer, 195–217.
- Madelung, O. 1996. Introduction to solid state theory. 3'üncü baskı. Spiringer.
- Marcel Franz, Laurens Molenkamp. 2013. Contemporary concepts of condensed matter science: Topological insulators. Elsevier.
- Mellnik, A. R., Lee, J. S., Richardella, A., Grap, J. L., Mintun, P. J., Fischer, M. H., Moore, J. E. 2010a. The birth of topological insulators. *Nature* 464, 194–198.
- Moore, J. E. 2010b. Topological insulators : Magnetoelectric and disorder effects. 1–46 Ders notu.
- Moore, J. E. ve Balents, L.. 2007. Topological invariants of time-reversal-invariant band structures. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 75(12), 3–6.
- Mouras, S., Hamm, A., Djurado, D. ve Cousseins, J. C. 1967. Synthesis of first stage graphite intercalation compounds with fluorides. *Revue de Chimie Min.rale* 24(5), 572–582.
- Murakami, S. 2011a. Quantum spin Hall systems and topological insulators. *New Journal of Physics* 13(105007), 1–6.
- Murakami, S. 2011b. Two-dimensional topological insulators and their edge states. *Journal of Physics: Conference Series* 302(012019), 1–6.
- Murakami, S., Nagaosa, N. ve Zhang, S. C. 2004. Spin Hall insulator. *Physical Review Letters* 93(15), 1–4.
- Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S.V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S.V., Grigorieva, I. V. ve Firsov, A. A. 2004. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science* 306(5696), 666–69.
- Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Katsnelson, M. I, Grigorieva, I. V., Dubonos, S. V. ve Firsov, A. A. 2005. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. *Nature* 438(7065), 197–200.
- Novoselov, K. S., Geim, A. K., Guinea, F., Peres, N. M. R., ve Neto, A. H. C. 2009. The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics* 81(1), 109–62.

- Ogburn, R. W. ve Preskill, J. 1999. Topological quantum computation. Bilgisayar bilimleri ders notu 1509, 341–356.
- Orlita, M., Escoffier, W., Plochocka, P., Raquet, B. ve Zeitler, U. 2013. Graphene in high magnetic fields. *Comptes Rendus Physique* 14(1), 78–93.
- Ortmann, F., Roche, S. ve Valenzuela, S. O. 2015. Topological insulators fundamentals and perspectives. Wiley, 432, Almanya.
- Paula, A. M. De, L. C. Barbosa, C. H.B. Cruz, O. L. Alves, J. A. Sanjurjo, ve C. L. Cesar. 1998. Quantum confinement effects on the optical phonons of CdTe quantum dots. *Superlattices and Microstructures* 23 (5), 1103–6.
- Pollmann, F., Berg, E., Turner, A. M., ve Oshikawa, M. 2012. Symmetry protection of topological phases in one-dimensional quantum spin systems. *Physical Review B* 85(7), 1–9.
- Qi, X. L. ve Zhang, S. C. 2010. The quantum spin Hall effect and topological insulators. *Physics Today* 63(1), 33–38.
- Rachel, S. 2018. Interacting topological insulators: A review. *Reports on Progress in Physics* 81(116501), 1–34.
- Sadowski, M. L., G. Martinez, M. Potemski, C. Berger, ve W. A. De Heer. 2006. Landau level spectroscopy of ultrathin graphite layers. *Physical Review Letters* 97 (26), 1–4.
- Sak, J. (1972). Theory of surface polarons. *Physical Review B* 6(10), 3981-3986.
- Sári, Judit, Mark O. Goerbig, ve Csaba Toke. 2015. Magneto-optics of quasirelativistic electrons in graphene with an inplane electric field and in tilted Dirac cones in α -(BEDT TTF)₂ I3. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 92 (3), 1–7.
- Sanchez-Yamagishi, J. D., LeRoy, B. J., Cormode, D., Taniguchi, T., Jarillo-Herrero, P., Watanabe, K., Yankowitz, M., Jacquod, P., ve Xue, J. 2012. Emergence of superlattice Dirac points in graphene on hexagonal boron nitride. *Nature Physics* 8(5), 382–86.
- Shen, S. Q., Shan, W. Y. ve 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. Springer.
- Slager, R. J. 2017. The translational side of topological band insulators. *Journal of Physics and Chemistry of Solids* (January), 1–15.

- Stormer, H. L. ve Tsui, D. C. 1986. The quantized Hall effect. *Reviews of Modern Physics* 58(3), 519–531.
- Thouless, D. J., Kohmoto, M., Nightinglr, M. P. ve Nijs, M. den. 1982. Quantized Hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Physical Review Letters* 49, (6) 405–408.
- Vaezi, A., Manchon, A. Kim, E. -A., Samath, N. ve Ralph, D. C. 2014. Spintransfer torque generated by a topological insulator. *Nature* 511(7510), 449–451.
- Valla, T., Z., Pan, H., Gardner, D., Lee, Y. S., ve Chu, S. 2012. Photoemission spectroscopy of magnetic and nonmagnetic impurities on the surface of the topological insulator. *Physical Review Letters* 108(11), 117601.
- Von Klitzing, K. 1995. The quantized Hall effect. Nobel Lectures, Bölüm 3.
- Watson, G., Niu, Q., Thouless, D. J. ve Wu, Y. S. 1985. Hall conductance as a topological invariant. *Physical Review B* 31(6), 3372–3377.
- Weng, H., Dai, X. ve Fang, Z. 2012. Introduction to topological insulators. *Asia Pacific Physics Newsletter* 01(01), 31–36.
- Witting, S. 2014. Quantum Hall effect. Ders notu.
- Xia, Y., Wray, L., Qian, D., Hsieh, D., Pal, A., Lin, H., Bansil, A., Grauer, D., Hor, Y. S., Cava, R. J. ve Hasan, M. Z. 2008. Electrons on the surface of Bi₂Se₃ form a topologically-ordered two dimensional gas with a non-trivial Berry's phase. *2078(2008)*, 398–402.
- Xiao, D., Yao, W. ve Niu, Q. 2007. Valley-contrasting physics in graphene: Magnetic moment and topological transport. *Physical Review Letters* 99(236809), 1–4.
- Xuetao, Z., Santos, L., Howard, C., Sankar, R., Chou, F. C., Chamon, C., ve El-Batanouny, M. 2012. Electron-phonon coupling on the Surface of the Topological Insulator Bi₂Se₃ Determined from Surface-Phonon Dispersion Measurements. *Physical Review Letters* 108(185501), 1-5.
- Yao, Xi. C., Wang, T. X., Chen, H. Z., Gao, W. B., Fowler, A. G., Raussendorf, R., Chen, Z. B., Liu, N. L., Lu, C. Y., Deng, Y. J., Chen, Y. A. ve Pan, J. W. 2012. Experimental demonstration of topological error correction. *Nature* 482(7386), 489–494.
- Yazdani, L. ve Roushan, P. 2011. Topological insulators. Ders notu. (February), 32–36.
- Young, A. F. ve Philip K. 2009. Quantum interference and Klein tunnelling in graphene heterojunctions. *Nature Physics* 5(3), 222–226.

- Zhang, Y., Jiang, Z., Small, J. P., Purewal, M. S., Tan, Y. W., Fazlollahi, M., Chudow, Zhang, F., Kane, C. L. ve Mele, E. J. 2012. Surface states of topological insulators. *Physical Review B* 86(8), 1-5.
- Zhang, H., Liu, C. X., Qi, X. L., Dai, X., Fang, Z. ve Zhang, S. C. 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(6), 438–42.
- Zhang, D., Lou, W., Miao, M., Zhang, S. C., ve Chang, K. 2013. Interface-induced topological insulator transition in GaAs/Ge/GaAs quantum wells. *Physical Review Letters* 111(156402), 1–5.
- Zhang, S. C., Lu, H. Z. ve Shen, S. Q. 2015. Edge states and integer quantum Hall effect in topological insulator thin films. *Scientific Reports* 5(13277), 1–10.
- Zhang, Y., Tan, Y. W., Stormer, H. L., ve Kim, P. 2005. Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene. *Nature* 438(7065), 201–204.

EKLER

EK 1 $H^{(1)}$ VE $H^{(2)}$ Hamiltoniyenlerin Açık Hali

EK 2 $A_{FG}, B_{FG}, C_{FG}, D_{FG}, M_{FG}$ Parametreleri İçerisindeki İfadeler



EK 1 $H^{(1)}$ VE $H^{(2)}$ Hamiltoniyenlerin Açık Hali

$$H_{11}^{(1)} = \sum_q \left\{ [M_{\vec{q}}^*(z) + \Omega^- f_{\vec{q}}] \mathbf{b}_{\vec{q}}^\dagger + H.C. \right\} \quad (EK1.1)$$

$$H_{22}^{(1)} = \sum_q \left\{ [M_{\vec{q}}^*(z) + \Omega^+ f_{\vec{q}}] \mathbf{b}_{\vec{q}}^\dagger + H.C. \right\} \quad (EK1.2)$$

$$H_{12}^{(1)} = -A \sum_q q_+ (\mathbf{b}_{\vec{q}}^\dagger f_{\vec{q}} + \mathbf{b}_{\vec{q}} f_{\vec{q}}^*) \quad (EK1.3)$$

$$H_{12}^{(1)} = -A \sum_q q_- (\mathbf{b}_{\vec{q}}^\dagger f_{\vec{q}} + \mathbf{b}_{\vec{q}} f_{\vec{q}}^*) \quad (EK1.4)$$

$$\begin{aligned} H_{11}^{(2)} = \sum_q \left[\Omega^- \mathbf{b}_{\vec{q}} \mathbf{b}_{\vec{q}}^\dagger - (B + D) f_{\vec{q}} \vec{q} \cdot \sum_{q'} \vec{q}' f_{\vec{q}'}^* \mathbf{b}_{\vec{q}'}^\dagger \mathbf{b}_{\vec{q}'} \right] - (B \\ + D) \sum_q \sum_{q'} \vec{q} \\ \cdot \vec{q}' \left\{ \mathbf{b}_{\vec{q}}^\dagger \mathbf{b}_{\vec{q}'}^\dagger \mathbf{b}_{\vec{q}} \mathbf{b}_{\vec{q}'} + \left[f_{\vec{q}} f_{\vec{q}'} \mathbf{b}_{\vec{q}}^\dagger \mathbf{b}_{\vec{q}'}^\dagger + 2 f_{\vec{q}} \mathbf{b}_{\vec{q}}^\dagger \mathbf{b}_{\vec{q}'}^\dagger \mathbf{b}_{\vec{q}} + H.C. \right] \right\} \end{aligned} \quad (EK1.5)$$

$$\begin{aligned} H_{22}^{(2)} = \sum_q \left[\Omega^+ \mathbf{b}_{\vec{q}} \mathbf{b}_{\vec{q}}^\dagger + (B - D) f_{\vec{q}} \vec{q} \cdot \sum_{q'} \vec{q}' f_{\vec{q}'}^* \mathbf{b}_{\vec{q}'}^\dagger \mathbf{b}_{\vec{q}'} \right] + (B \\ - D) \sum_q \sum_{q'} \vec{q} \\ \cdot \vec{q}' \left\{ \mathbf{b}_{\vec{q}}^\dagger \mathbf{b}_{\vec{q}'}^\dagger \mathbf{b}_{\vec{q}} \mathbf{b}_{\vec{q}'} + \left[f_{\vec{q}} f_{\vec{q}'} \mathbf{b}_{\vec{q}}^\dagger \mathbf{b}_{\vec{q}'}^\dagger + 2 f_{\vec{q}} \mathbf{b}_{\vec{q}}^\dagger \mathbf{b}_{\vec{q}'}^\dagger \mathbf{b}_{\vec{q}} + H.C. \right] \right\} \end{aligned} \quad (EK1.6)$$

$$H_{12}^{(2)} = -A \sum_q q_+ \mathbf{b}_{\vec{q}}^\dagger \mathbf{b}_{\vec{q}} \quad (EK1.7)$$

$$H_{21}^{(2)} = -A \sum_q q_- \mathbf{b}_{\vec{q}}^\dagger \mathbf{b}_{\vec{q}} \quad (EK1.8)$$

EK 2 $A_{FG}, B_{FG}, C_{FG}, D_{FG}, M_{FG}$ Parametreleri İçerisindeki İfadeler

$$C^{01} = \frac{1}{2} \alpha_0 \hbar \omega \left\{ Ci(2\bar{z}) Sin(2\bar{z}) + \frac{1}{2} Cos(2\bar{z}) [\pi - 2Si(2\bar{z})] \right\} \quad (EK2.1)$$

$$C^{02} = C^{01} + \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \alpha_0 \hbar \omega (1 + \xi) G_{1,3}^{3,1} \left(\bar{z}^2 \middle| \begin{matrix} -\frac{1}{2} \\ 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \end{matrix} \right) \quad (EK2.2)$$

$$D^{01} = \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \alpha_0 |B_+| G_{1,3}^{3,1} \left(\bar{z}^2 \middle| \begin{matrix} -\frac{1}{2} \\ 0, \frac{1}{2}, \frac{3}{2} \end{matrix} \right) \quad (EK2.3)$$

$$D^{02} = (2 + 3\xi) D_1^{02} - D_2^{02} \quad (EK2.4)$$

$$D_1^{02} = \frac{1}{12\sqrt{\pi}} \alpha_0 |B_+| G_{1,3}^{3,1} \left(\bar{z}^2 \middle| \begin{matrix} -\frac{3}{2} \\ 0, \frac{1}{2}, \frac{3}{2} \end{matrix} \right) \quad (EK2.5)$$

$$D_2^{02} = \frac{1}{12\sqrt{\pi}} \alpha_0 |B_+| G_{1,3}^{3,1} \left(\bar{z}^2 \middle| \begin{matrix} -\frac{1}{2} \\ 0, \frac{1}{2}, \frac{5}{2} \end{matrix} \right) \quad (EK2.6)$$

$$Ci(z) = \int_{-z}^{\infty} dz \, Cos(z)/z \quad (EK2.7)$$

$$Si(z) = \int_{-z}^{\infty} dz \, Sin(z)/z \quad (EK2.8)$$

$$\xi = \frac{|B_-|}{|B_+|} \quad (EK2.9)$$

$G_{p,q}^{m,n} \left(z \middle| \begin{matrix} a_1, a_2, \dots, a_n \\ b_1, b_2, \dots, b_n \end{matrix} \right)$ Meijer G-Fonksiyonudur.

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Pınar ORUÇ

Doğum Yeri. : Bursa

Doğum Tarihi: 22.02.1992

Medeni Hali. : Bekar

Yabancı Dili. : İngilizce

Eğitim Durum

Lise. : Bursa Çelebi Mehmet Lisesi (2010)

Lisans : Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü (2017)

Yüksek Lisans: Ankara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı (2020)

Çalıştığı Kurum

Gazi Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü – Araştırma Görevlisi (Nisan 2019-)

Yayınlar

(SCI) Kapsamında

B. S. KANDEMİR, **P. ORUÇ** Effects of the Substrate on the Formation of Helical Edge States in a Quantum Spin-Hall System with Finite Size (yayınlanacak)

Projeler

“Grafende Topolojik Yalıtkanlara-Dirac Materyalleri: Elektron-Fonon Etkileşimleri, Dikroizm ve Analog Gravite.” TUBITAK, no:115F421, Görevi: bursiyer.