

T.C.
GEBZE TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ

**ALKALİ HEKZABORÜRLERLE LANTANİT HEKZABORÜRLERİN
KENDİ ARALARINDA YAPACAĞI FARKLI SİTOKİYOMETRİLİ
BİLEŞİKLERİN TOPOLOJİK ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ**

ATACAN TUNAY KÖKSAL

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

DANIŞMAN: PROF. DR. SAVAŞ BERBER

TEMMUZ 2025

T.C.
GEBZE TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ

**ALKALİ HEKZABORÜRLERLE LANTANİT HEKZABORÜRLERİN
KENDİ ARALARINDA YAPACAĞI FARKLI SİTOKİYOMETRİLİ
BİLEŞİKLERİN TOPOLOJİK ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ**

ATACAN TUNAY KÖKSAL

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

DANIŞMAN: PROF. DR. SAVAŞ BERBER

TEMMUZ 2025

T.R.
GEBZE TECHNICAL UNIVERSITY
GRADUATE SCHOOL

**INVESTIGATION OF TOPOLOGICAL PROPERTIES OF COMPOUNDS
WITH DIFFERENT CYTOCHIOMETRY FORMATIONS BETWEEN
ALKALINE HEXABORIDES AND LANTHANIDE HEXABORIDES**

ATACAN TUNAY KÖKSAL

A THESIS OF MASTER OF SCIENCE
DEPARTMENT OF PHYSICS

ADVISOR: PROF. DR. SAVAŞ BERBER

JULY 2025



YÜKSEK LİSANS JÜRİ ONAY FORMU

GTÜ Lisansüstü Eğitim Enstitüsü Yönetim Kurulunun 14/07/2025 tarih ve 2025/39 sayılı kararıyla oluşturulan jüri tarafından 25/07/2025 tarihinde tez savunma sınavı yapılan Atacan Tunay KÖKSAL'ın tez çalışması Fizik Anabilim Dalında YÜKSEK LİSANS tezi olarak kabul edilmiştir.

JÜRİ

ÜYE

(TEZ DANIŞMANI) : Prof. Dr. Savaş BERBER

ÜYE

: Prof. Dr. Kemal ÖZDOĞAN

ÜYE

: Doç Dr. Eda GOLDENBERG

ONAY

Gebze Teknik Üniversitesi Lisansüstü Eğitim Enstitüsü Yönetim Kurulunun
...../...../..... tarih ve/..... sayılı kararı.

İMZA/MÜHÜR



Bu çalışmayı Köksal ailesine ithaf ediyorum.

ÖZET

Topolojik malzemeler keşfedilmesinden bu yana yaklaşık yirmi yıl geçmiş olmasına rağmen teknoloji ve endüstride çok büyük rol oynamıştır. Kuantum bilgisayarlarının mantık kapıları, süperiletken kuantum girişim cihazlarının Josephson eklemeleri, ısınmayan transistör tasarımları, termoelektrik malzemeler gibi birçok alanda rağbet görmüştür. Bilhassa kuantum bilgisayarları için gerekli topolojik kuantum bitleri birçok gelişmiş ve gelişmekte olan ülkelerin üniversiteler, araştırma kurumları ve özel şirketlerinde çalışılmaktadır. Bu malzemelerin topolojik özellikleri teorik olarak DFT (yoğunluk fonksiyoneli teorisi) ile önceden tahmin edilebilmekte olup bugüne kadar yapılan hesaplamalarda çoğu kez önceden yapılan hesaplamalar ile topolojik öngörülen malzemelerin daha sonra deneysel olarak da topolojik olduğu gösterilmiştir.

Bu çalışmada Hall etkileri (Normal Hall Etkisi, Anormal Hall Etkisi, Kuantum Hall Etkisi, Kuantum Spin Hall Etkisi, Kuantum Hall Etkisi ve Kuantum Anormal Hall Etkisi) incelendi. DFT'nin (yoğunluk fonksiyonel teorisi) temellerinden bahsedildi. Topolojik alan teorisi ve topolojik band teorisinden bahsedildi. Topolojik Alan Teorisi ile Topolojik Band Teorisinin eşdeğer olduğu özel durumdan bahsedildi. Zaman tersinme simetrisi, kristal simetrisi ve spin yörünge etkileşiminden bahsedildi. Topolojik malzemeler sınıflandırıldı. İlk deneysel topolojik malzemelerden bahsedildi ve topolojik malzemeler sınıflandırıldı. Topolojik Kondo yalıtkanı olan SmB_6 bileşiğinin özellikleri incelendi.

Quantum Espresso paket programı tanıtıldı. Bu paket program ile çalışacağımız pseudopotansiyel belirlendi. Kondo etkisi incelendi. Bir Topolojik Kondo yalıtkanı olan SmB_6 bileşiği incelendi. Buna ek olarak alkali hekzaborürler (CaB_6 , SrB_6 , BaB_6) ile bazı lantanit hekzaborürlerin (LaB_6 , CeB_6 , PrB_6 , NdB_6 ve SmB_6) topolojik özellikleri belirlendi. Bu bileşiklerin kendi aralarında oluşturacağı farklı stokiyometreye sahip olan bileşiklerin daha önce çalışılmamış olan topolojik özellikleri ilk prensip hesaplamaları ile teorik olarak çalışıldı ve birçok bileşikte kristal simetrisine dayalı topolojik özellik gözlemlendi.

Anahtar Kelimeler: Topolojik Malzeme, Hall Etkileri, Spin Yörünge Etkileşimi, Hekzaborür, Topolojik Kondo Yalıtkanı, Kristal Simetrisi

ABSTRACT

Although it has been nearly twenty years since the discovery of topological materials, they have played a major role in technology and industry. They have been in demand in many areas such as logic gates of quantum computers, Josephson junctions of superconducting quantum interference devices, heat-free transistor designs, and thermoelectric materials. In particular, topological quantum bits required for quantum computers are being studied in universities, research institutions, and private companies in many developed and developing countries. The topological properties of these materials can be predicted theoretically with DFT (Density Functional Theory), and in the calculations made so far, materials that are predicted to be topological with the calculations made in advance have often been shown to be topological experimentally.

In this study, Hall effects (Normal Hall Effect, Anomalous Hall Effect, Quantum Hall Effect, Quantum Spin Hall Effect, Quantum Hall Effect and Quantum Anomalous Hall Effect) were examined. The foundations of DFT (Density Functional Theory) were mentioned. Topological field theory and topological band theory were mentioned. The special case where Topological Field Theory and Topological Band Theory are equivalent was mentioned. Time reversal symmetry, crystal symmetry and spin orbit interaction were mentioned. Topological materials were classified. The first experimental topological insulators were mentioned and topological materials were classified. The properties of the SmB_6 compound, which is a topological Kondo insulator, were examined.

Quantum Espresso package program was introduced. The pseudopotential we will work with has been determined with this package program. Kondo effect was examined. SmB_6 compound, which is a topological Kondo insulator, was examined. In addition, the topological properties of alkali hexaborides (CaB_6 , SrB_6 , BaB_6) and lanthanide hexaborides (LaB_6 , CeB_6 , PrB_6 , NdB_6 and SmB_6) were determined. The previously unstudied topological properties of these compounds with different stoichiometries were studied theoretically with first-principles calculations, and topological properties based on crystal symmetry were observed in many compounds.

Keywords: Topological Material, Hall Effects, Spin Orbit Interaction, Hexaboride, Topological Kondo Insulator, Crystal Symmetry

TEŞEKKÜR

Bu tez çalışması süresince desteğini esirgemeyen Prof. Dr. Savaş BERBER’e sonsuz teşekkür ediyorum. Ayrıca Yıldız Teknik Üniversitesi’nde yüksek lisans sürecinde bana yol gösteren ve daima çalışmamı teşvik eden Prof. Dr. Kemal ÖZDOĞAN’a da sonsuz teşekkür ediyorum.

Hesaplamalarımızda TÜBİTAK-TRUBA ULAKBİM altyapısına ait süperbilgisayarları kullanmamıza izin verdiği için TÜBİTAK-TRUBA’ya çok teşekkür ediyoruz.



İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	vi
ABSTRACT	vii
TEŞEKKÜR	viii
İÇİNDEKİLER	ix
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	xi
ŞEKİLLER DİZİNİ	xii
TABLolar DİZİNİ	xiv
1. GİRİŞ	1
2. TOPOLOJİ VE FİZİK	2
2.1 Hall Etkileri	2
2.1.1 Normal ve Anormal Hall Etkisi	2
2.1.2 Kuantum Hall Etkisi	3
2.1.3 Spin Hall Etkisi	4
2.1.4 Kuantum Spin Hall Etkisi	5
2.1.5 Kuantum Anormal Hall Etkisi	6
2.2 Topolojik Alan Teorisi (TFT)	9
2.2.1 (2+1) Boyutta Chern-Simons Yalıtkanı	9
2.2.2 (4+1) Boyutta Chern-Simons Yalıtkanı	10
2.3 Topolojik Band Teorisi (TBT)	13
2.4 Topolojik Alan Teorisinden Topolojik Band Teorisine İndirgeme	15
2.5 Z_2 İndeksi İçin Genel Bir Formül	16
2.6 Kristal Nokta Grup Simetrisi	19
3. TOPOLOJİK MALZEMELER	21
3.1 İlk Deneysel Topolojik Malzemeler	21
3.2 Topolojik Malzemelerin Sınıflandırılması	23
3.3 Kondo Etkisi ve Topolojik Kondo Yalıtkanı	23
3.4 Topolojik Kristalin Yalıtkan (TCI)	25
4. YOĞUNLUK FONKSİYONEL TEORİSİ VE QUANTUM ESPRESSO	26
4.1 Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT)	26
4.2 Quantum Espresso	26
4.2.1 Schrödinger Dalga Denklemi Sayısal Çözümleri	26

4.2.2 Quantum Espresso Hesaplama Parametreleri	29
4.3 Malzemenin Topolojik Karakterinin Analizi	29
5. SONUÇLAR VE TARTIŞMA	33
5.1 Sonuçlar	31
5.1.1 Tekli Hekzaborürler	32
5.1.2 Katkılı Hekzaborürler	41
5.2 Tartışma	57
KAYNAKLAR	59
ÖZGEÇMİŞ	65
TEZ METNİNDEN TÜRETİLEN YAYINLAR/SUNUMLAR	66



SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

1D	: One dimensional
2D	: Two dimensional
3D	: Three dimensional
4D	: Four dimensional
CS	: Chern-Simons
DFT	: Density Functional Theory
ESPRESSO	: O pen S ource P ackage for R esearch in E lectronic S tructure, Simulation and O ptimization
GGA	: General Gradient Approximation
IS	: Inversion Symmetry
PBE	: Perdew-Burke-Ernzerhof
QHE	: Quantum Hall Effect
QSHE	: Quantum Spin Hall Effect
SG	: Space Group
TBT	: Topological Band Theory
TCI	: Topological Crystalline Insulator
TFT	: Topological Field Theory
TKI	: Topological Kondo Insulator
TKNN	: Thouless, Komoto, Nightingale, Nijs
TRS	: Time Reversal Symmetry
TRIM	: Time Reversal Invariant Momenta

ŞEKİLLER DİZİNİ

	<u>Sayfa</u>
Şekil 2.1: Hall Etkisinin şematik gösterimi	2
Şekil 2.2: Kuantum Hall Etkisi Temsili Gösterim	3
Şekil 2.3: Kuantum Spin Hall Etkisi deneysel ölçümler	4
Şekil 2.4: Spin Hall Etkisi deneysel ölçümler	4
Şekil 2.5: Spin Hall Etkisi polarizasyon ölçümleri	5
Şekil 2.6: CdTe/HgTe kuantum kuyusunun temsili enerji-momentum grafiği	5
Şekil 2.7: Kuantum Hall Etkisinin gözlenmesi için oluşturulan temsili düzenek	6
Şekil 2.8: CdTe/HgTe/CdTe kuantum kuyularının band yapıları temsili gösterim	6
Şekil 2.9: Kuantum Anormal Hall Etkisine dair ölçümlere ait grafikler	7
Şekil 2.10: Kuantum Anormal Hall Etkisine dair band yapısı analizi grafikleri	7
Şekil 2.11: Kuantum Anormal Hall Etkisine dair deneysel ölçümler	8
Şekil 2.12: Kuantum Anormal Hall Etkisine dair ölçümlere ait grafikler	8
Şekil 2.13: Chern-Simons terimleri Feynman Diyagramları	12
Şekil 3.1: CdTe/HgTe/CdTe kuantum kuyusuna ait ölçümler	21
Şekil 3.2: Bi _{0.9} Sb _{0.1} bileşiğine ait ARPES görüntüsü	22
Şekil 3.3: Bi ₂ Te ₂ Se bileşiğine ait sıcaklığa bağlı ölçüm grafikleri	22
Şekil 3.4: SmB ₆ bileşiğine ait sıcaklığa karşı direnç grafiği	24
Şekil 3.5: SmB ₆ bileşiğine ait kristal yapı ve ARPES ölçüm görüntüleri	24
Şekil 3.6: FCC yapını Brillouin bölgeleri ve Dirac noktaları	25
Şekil 5.1: Basit kübik (SC) yapının Brillouin bölgeleri	31
Şekil 5.2: CaB ₆ bileşiğine ait kristal yapılar	32
Şekil 5.3: CaB ₆ bileşiğine ait band grafiği	32
Şekil 5.4: SrB ₆ bileşiğine ait grafikler	33
Şekil 5.5: BaB ₆ bileşiğine ait grafikler	34
Şekil 5.6: LaB ₆ bileşiğine ait grafikler	35
Şekil 5.7: CeB ₆ bileşiğine ait grafikler	36
Şekil 5.8: PrB ₆ bileşiğine ait grafikler	37
Şekil 5.9: NdB ₆ bileşiğine ait grafikler	38
Şekil 5.10: SmB ₆ bileşiğine ait kristal yapılar	38
Şekil 5.11: SmB ₆ bileşiğine ait band grafikleri	39
Şekil 5.12: La _{0.50} Sr _{0.50} B ₆ bileşiğine ait grafikler	43

Şekil 5.13: $\text{La}_{0.75}\text{Ba}_{0.25}\text{B}_6$ bileşiğine ait grafikler	44
Şekil 5.14: $\text{Sr}_{0.75}\text{Ce}_{0.25}\text{B}_6$ bileşiğine ait grafikler	46
Şekil 5.15: $\text{Ce}_{0.50}\text{Ba}_{0.50}\text{B}_6$ bileşiğine ait grafikler	47
Şekil 5.16: $\text{Ca}_{0.75}\text{Pr}_{0.25}\text{B}_6$ bileşiğine ait grafikler	49
Şekil 5.17: $\text{Pr}_{0.75}\text{Ba}_{0.25}\text{B}_6$ bileşiğine ait grafikler	50
Şekil 5.18: $\text{Nd}_{0.75}\text{Ca}_{0.25}\text{B}_6$ bileşiğine ait kristal yapı	51
Şekil 5.19: $\text{Nd}_{0.75}\text{Ca}_{0.25}\text{B}_6$ bileşiğine ait grafikler	52
Şekil 5.20: $\text{Nd}_{0.75}\text{Sr}_{0.25}\text{B}_6$ bileşiğine ait grafikler	53
Şekil 5.21: $\text{Sm}_{0.50}\text{Ca}_{0.50}\text{B}_6$ bileşiğine ait grafikler	55
Şekil 5.22: $\text{Sr}_{0.75}\text{Sm}_{0.25}\text{B}_6$ bileşiğine ait grafikler	56



TABLÖLAR DİZİNİ

	<u>Sayfa</u>
Tablo 2.1: İki boyutta topolojik fazlar ve nokta grup simetrileri	19
Tablo 2.2: Üç boyutta topolojik fazlar ve nokta grup simetrileri	20
Tablo 3.1: Topolojik malzemelerin sınıflandırılması	23
Tablo 4.1: Quantum Espresso hesaplama parametreleri	29
Tablo 5.1: Basit kübik yapının Brillouin bölgesindeki yüksek simetri noktalarının 31 ters örgü uzayındaki koordinatları	
Tablo 5.2: Tekli hekzaborürlerle yapılan hesaplamalar sonucu elde edilen yüksek simetri noktaları parite değerleri	40
Tablo 5.3: Tekli hekzaborürler Fermi enerjileri ve manyetizasyon değerleri	40
Tablo 5.4: Tekli hekzaborürler ile yapılan hesaplamalarda her elementten gelen manyetik moment değerleri	41
Tablo 5.5: LaB ₆ bileşiğinin CaB ₆ , SrB ₆ ve BaB ₆ ile yaptığı farklı stokiyometrilik bileşiklerde elde edilen Fermi enerjileri ve manyetizasyon değerleri	42
Tablo 5.6: LaB ₆ bileşiğinin CaB ₆ , SrB ₆ ve BaB ₆ ile yaptığı farklı stokiyometrilik bileşiklerde elde edilen parite değerleri	42
Tablo 5.7: CeB ₆ bileşiğinin CaB ₆ , SrB ₆ ve BaB ₆ ile yaptığı farklı stokiyometrilik bileşiklerde elde edilen Fermi enerjileri ve manyetizasyon değerleri	45
Tablo 5.8: CeB ₆ bileşiğinin CaB ₆ , SrB ₆ ve BaB ₆ ile yaptığı farklı stokiyometrilik bileşiklerde elde edilen parite değerleri	45
Tablo 5.9: PrB ₆ bileşiğinin CaB ₆ , SrB ₆ ve BaB ₆ ile yaptığı farklı stokiyometrilik bileşiklerde elde edilen Fermi enerjileri ve manyetizasyon değerleri	48
Tablo 5.10: PrB ₆ bileşiğinin CaB ₆ , SrB ₆ ve BaB ₆ ile yaptığı farklı stokiyometrilik bileşiklerde elde edilen parite değerleri	48
Tablo 5.11: NdB ₆ bileşiğinin CaB ₆ ve SrB ₆ ile yaptığı farklı stokiyometrilik bileşiklerde elde edilen Fermi enerjileri ve manyetizasyon değerleri	51
Tablo 5.12: NdB ₆ bileşiğinin CaB ₆ ve SrB ₆ ile yaptığı farklı stokiyometrilik bileşiklerde elde edilen parite değerleri	51
Tablo 5.13: SmB ₆ bileşiğinin CaB ₆ ve SrB ₆ ile yaptığı farklı stokiyometrilik bileşiklerde elde edilen Fermi enerjileri ve manyetizasyon değerleri	54
Tablo 5.14: SmB ₆ bileşiğinin CaB ₆ ve SrB ₆ ile yaptığı farklı stokiyometrilik bileşiklerde elde edilen parite değerleri	54

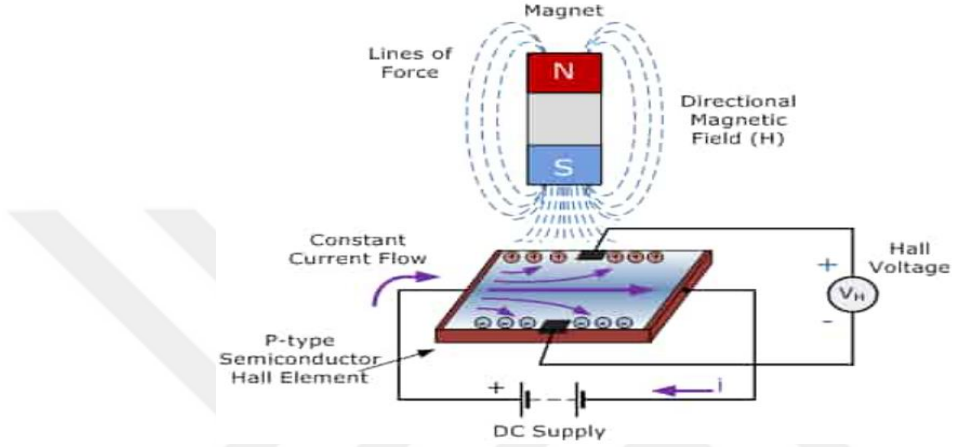
1. GİRİŞ

Topoloji matematiğin bir alt alanı olup şekiller kopmadan veya bölünmeden biçim değiştirdiğinde sabit kalan özellikleri ile ilgilenir. Fizik ile ilişkisi yoğun madde fiziğindeki keşiflerle gelişmiştir. Klasik fizikte maddenin katı, sıvı ve gaz olmak üzere üç hali bulunmaktadır. Kuantum dünyasına girdiğimizde ise maddenin çok daha gizemli fazları karşımıza çıkar. Bunlar süperiletkenler, yük yoğunluk dalgaları, Bose-Einstein yoğunlaşmaları, ferromanyetikler ve antiferromanyetikler, spin camı ve daha birçoklarıdır. Tüm bu fazlar simetri kırılması ile izah edilirler. Örneğin tamamen manyetize olmuş bir ferromanyetikte dönme simetrisi kırılır ve spinler kuzeye yönelecek şekilde dizilirler. Landau faz geçişleri teorisi simetri kırılma durumlarının nasıl izah edileceğine dair fenomenolojik temel sağlar. Bu teoriye göre yüksek sıcaklıkta bir simetrik faz düşük sıcaklıkta bir simetrik faza geçiş yaparsa daha az simetrikli durum oluşur, simetri kırılma durumuna geçer. Bu teori düzen parametresinde serbest enerjinin genişlemesinin ihtimali gibi birçok öncüle sahiptir. Bir faz geçisi kapandığında düzen parametresi küçük olduğu için bu mümkün olabilir. Geçiş, düzen parametresindeki ikinci, üçüncü veya daha yüksek dereceden serbest enerji genişleme katsayılarının kayıplarına bağlı olarak birinci, ikinci veya daha yüksek dereceden olabilir. Ancak esas sınırlama Landau faz geçişleri teorisinin yerel düzen parametresine bağlı olmasıdır. Son kırk yılda bu sınırlamanın dışında yerel olmayan düzene sahip kuantum sistemleri keşfedilmiştir. Bu sistemler topolojik düzene sahiptir. Örneğin kesirli kuantum Hall durumu topolojik düzene sahiptir **[Bernenig & Hughes, 2013]**. Bu kapsamda tüm Hall etkileri incelenecektir.

2. TOPOLOJİ VE FİZİK

2.1 Hall Etkileri

2.1.1 Normal ve Anormal Hall Etkileri



Şekil 2.1: Hall Etkisinin şematik gösterimi

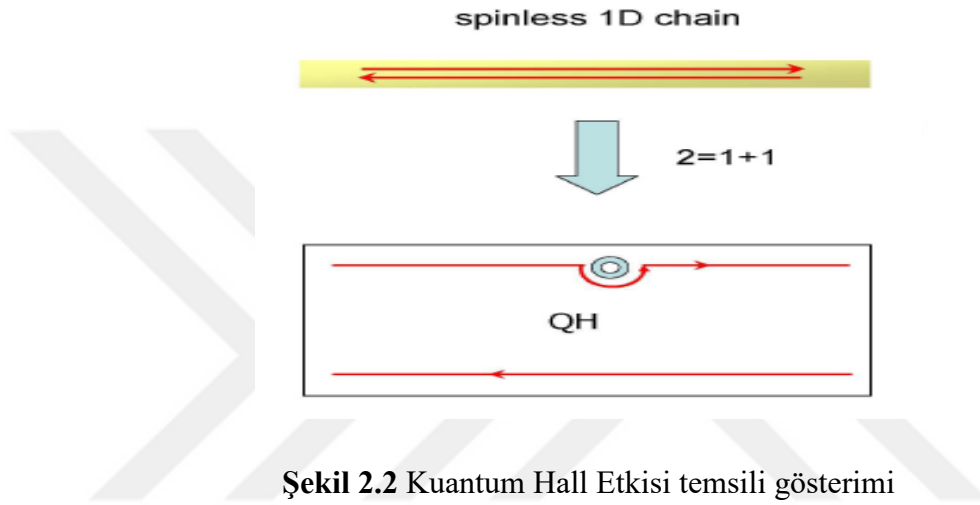
Manyetik alan içinde ($B>0$) bulunan ve üzerinden akım geçen bir iletken boyunca gerilim oluşması olayına Hall etkisi denir. 1879'da Edwin Hall tarafından keşfedilmiştir. Gerilimin doğrultusu iletkenden geçen akımın ve manyetik alanın yönüne diktir [Chang & Liu, 2023]. Taşıyıcı yükler elektronlar ise Hall direnci negatif olur ve bu durum Normal Hall etkisi ile adlandırılır. Taşıyıcı yükler deşikler ise Hall direnci pozitif değerli olur ve bu durum Anormal Hall etkisi ile adlandırılır. Hall voltajı (2.1) ve Hall direnci (2.2) ile elde edilir.

$$V_H = \frac{IB}{ne} \quad (2.1)$$

$$R_H = \frac{E_y}{j_x B} = \frac{V_H}{IB} = -\frac{1}{ne} \quad (2.2)$$

2.1.2 Kuantum Hall Etkisi

Kuantum Hall etkisi bir yarı iletkendeki 2 boyutlu elektron gazına güçlü bir manyetik alan uygulandığında ortaya çıkar. Elektronlar düşük sıcaklık ve yüksek manyetik alanda yarıiletkenin kenarları boyunca ilerlerler. Kuantum Hall durumu topolojik olarak güçlüdür. Kuantum Hall etkisi 1980 yılında Klaus von Klitzing ve ekibi tarafından gözlenmiştir [Klitzing, Dorda & Pepper, 1980].



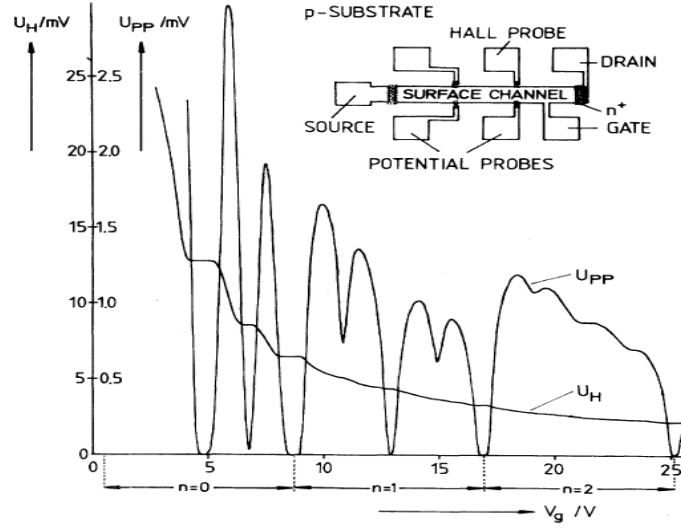
Şekil 2.2 Kuantum Hall Etkisi temsili gösterimi

Deney bir MOSFET devrede, $T=1.5$ K sıcaklıkta, $B=18$ T şiddetindeki manyetik alan içinde, $I=1.5 \mu A$ kaynak akımı ile yapılmıştır. U_{PP} potansiyel sondalar arası gerilim, U_H Hall gerilimi, n Landau düzeyini temsil etmektedir.

$$R_H = \frac{h}{e^2} \quad (2.3)$$

Tüm ölçümlerdeki ortalama değer $R_H = 6453.22 \pm 0.10 \Omega$ olarak bulunmuş olup farklı Landau seviyelerindeki enerji aralıkları da orantısal bir değişiklik göstermiştir. $n=0$ ve $n=1$ arası $R_H=3226.62 \pm 0.10 \Omega$, $n=1$ ile $n=2$ arası $R_H=12906.5 \pm 1.0 \Omega$ olarak ölçülmüştür. Bu ölçümlerde Hall etkisinin kuantize (2.4) olduğu gösterilmiştir.

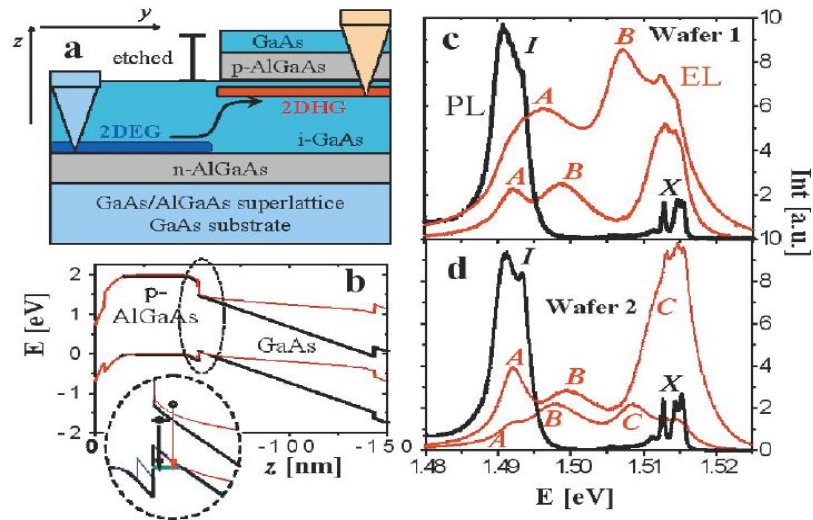
$$\sigma_H = n \frac{e^2}{h} \quad (2.4)$$



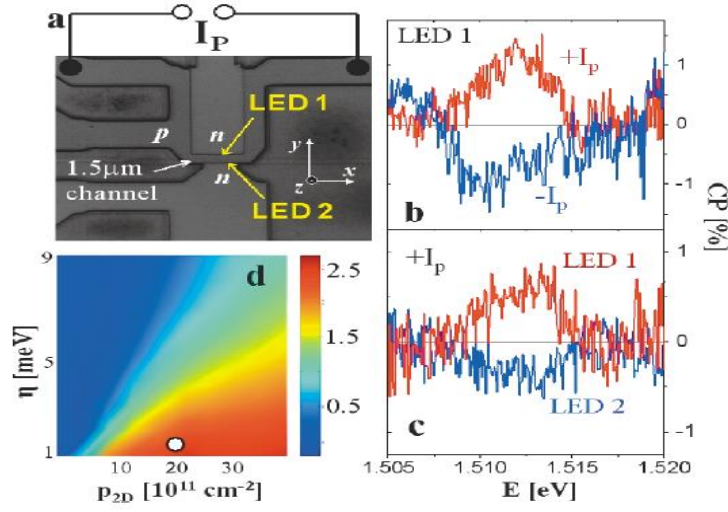
Şekil 2.3: Kuantum Hall Etkisi deneysel ölçümler [Klitzing, Dorda & Pepper, 1980]

2.1.3 Spin Hall Etkisi

Bir yarı iletkendeki elektrik akımı, elektronların saçılmasındaki spin-yörünge etkileri nedeniyle bulunduğu malzemenin yüzeyine yakın ince bir tabakada spin yönelimini indükler. Akıma paralel zayıf bir manyetik alan bu yönelimi bozar. Bu olaya spin Hall etkisi denir. Bu etkiye dair ilk çalışmalar Dyakonov, Perel [Dyakonov & Perel, 1971] ve Hirsch [Hirsch, 1999] tarafından yapılmış olup ilk olarak Wunderlich vd. [Wunderlich, Kaestner, Sinova & Jungwirth, 2005] tarafından gözlenmiştir.



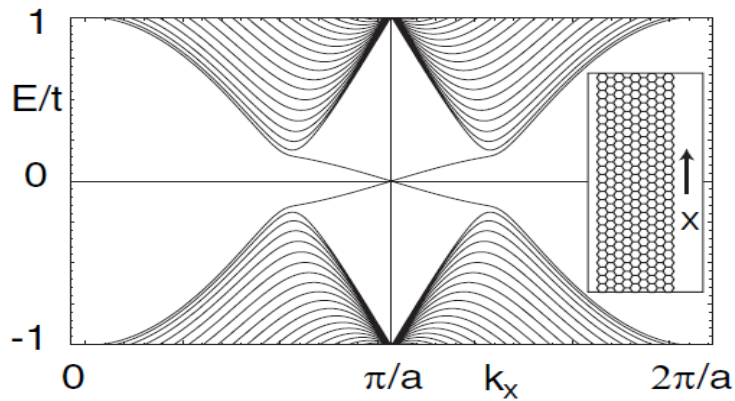
Şekil 2.4: Spin Hall etkisi deneysel ölçümler [Wunderlich, Kaestner, Sinova & Jungwirth, 2005]



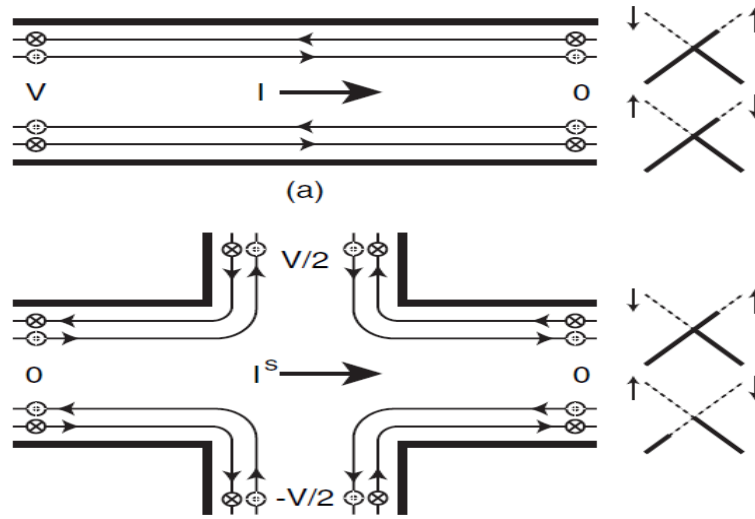
Şekil 2.5: Spin Hall Etkisi spin polarizasyon ölçümleri [Wunderlich, Kaestner, Sinova & Jungwirth, 2005]

2.1.4 Kuantum Spin Hall Etkisi

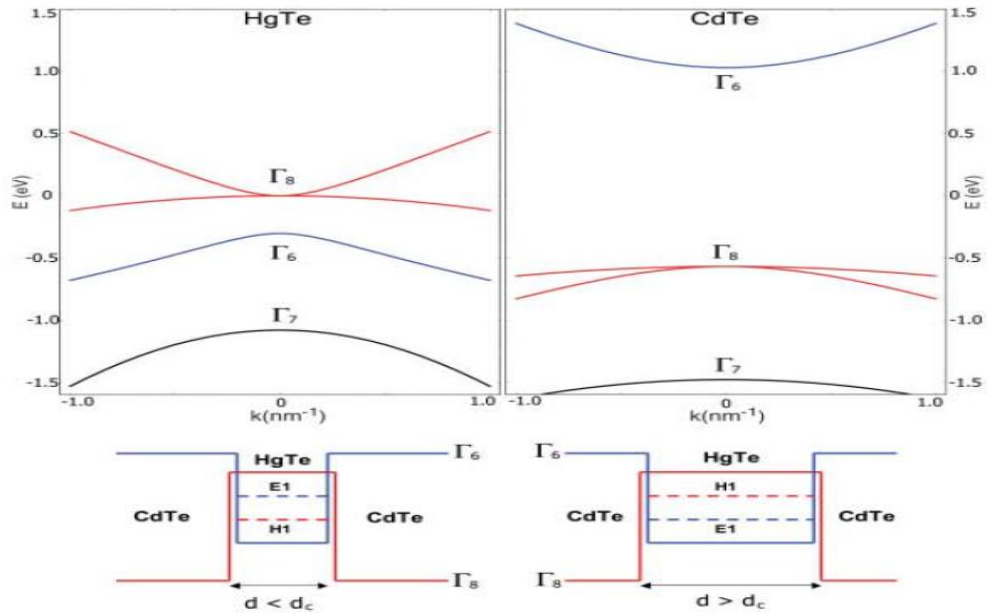
Kuantum Hall etkisi bir yarıiletkendeki iki boyutlu elektron gazına güçlü bir manyetik alan uygulandığında ortaya çıkar. Elektronlar düşük sıcaklık ve yüksek manyetik alanda yarıiletkenin kenarları boyunca ilerlerler. Kuantum Hall durumu topolojik olarak güçlüdür. Bu etki teorik olarak ilk defa Bernevig vd. [Bernevig, Hughes & Zhang, 2006] tarafından 2006 yılından tahmin edilmiş olup 2007 yılında da König vd. [König et. al., 2007] tarafından HgTe kuantum kuyularında deneysel olarak gözlenmiştir.



Şekil 2.6: Kuantum Hall Etkisine gösteren CdTe/HgTe kuantum kuyusunun temsili enerji momentum grafiği [Bernevig, Hughes & Zhang, 2006]



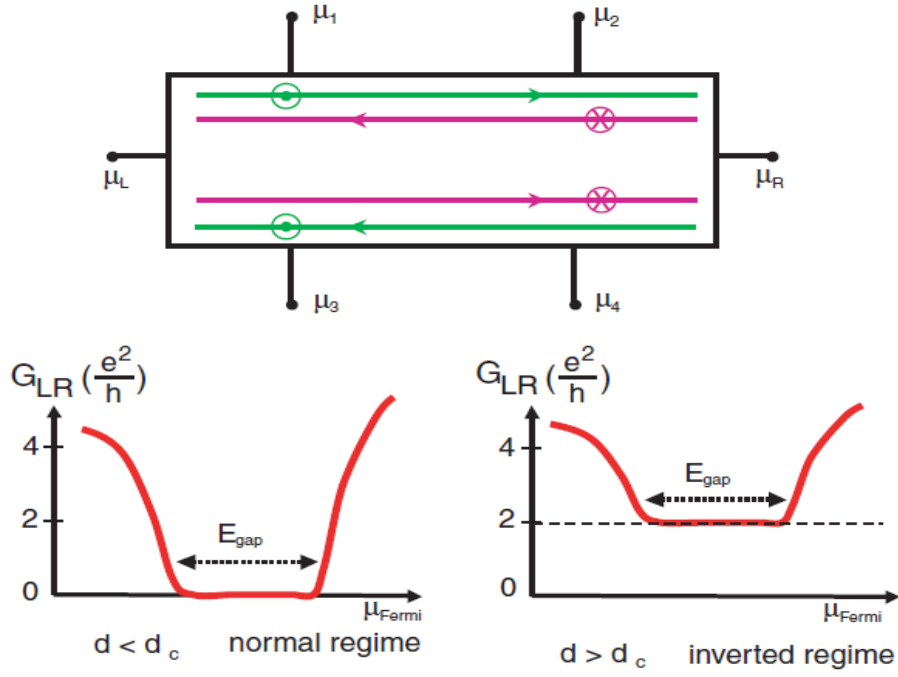
Şekil 2.7: Kuantum Hall etkisinin gözlenmesi için oluşturulan deneysel düzenek temsili gösterim [Konig et. al., 2007]



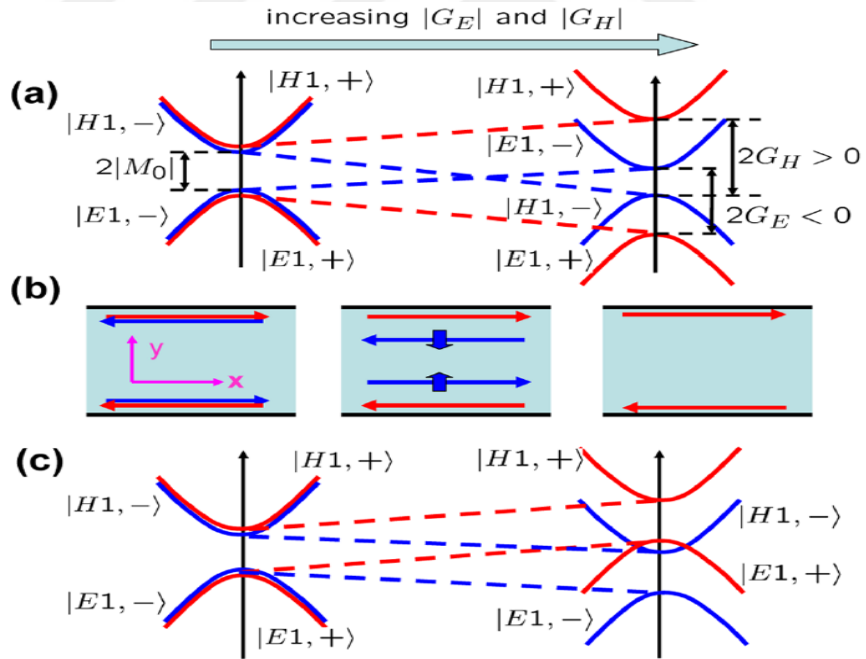
Şekil 2.8: CdTe/HgTe/CdTe kuantum kuyularının band yapısının temsili gösterimi [Kane & Mele, 2005]

2.1.5 Kuantum Anormal Hall Etkisi

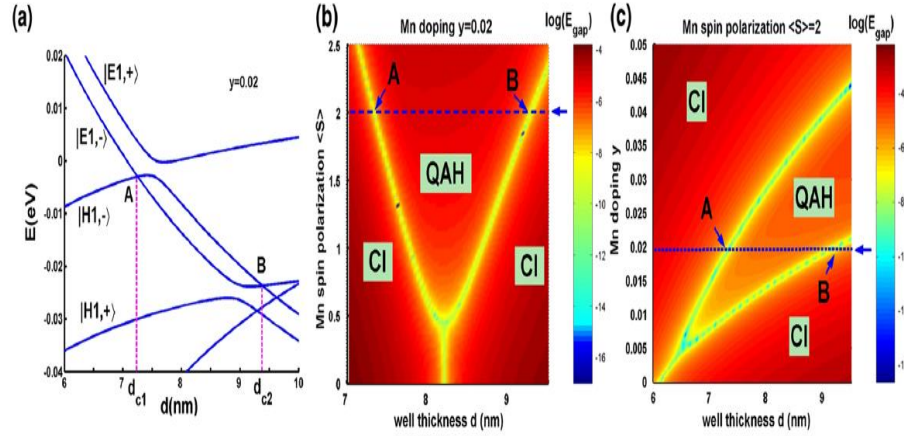
Kuantum anormal Hall etkisi dış manyetik alanın yokluğunda Hall etkisinin topolojik olarak kuantize olması ile meydana gelir. Teorik olarak daha evvel izah edilmesine rağmen bu olay 2008 yılında Liu vd. [Liu, Qi, Dai, Fang & Zhang, 2008] tarafından Hg_{1-y}Mn_yTe ($y=0.02$) bileşiğinde gözlenmiştir.



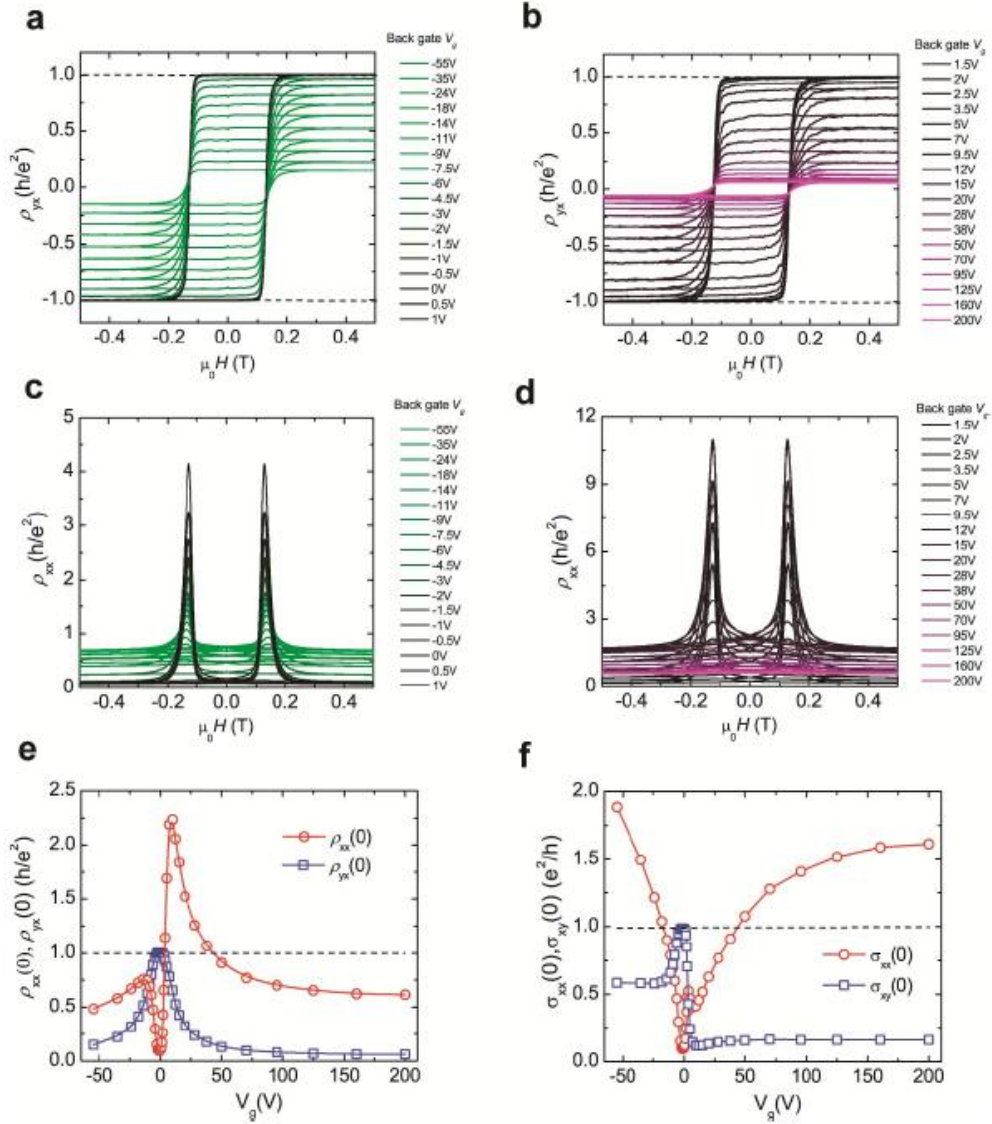
Şekil 2.9: Kuantum Anormal Hall etkisine dair ölçümlere ait grafikler [Liu et. al., 2008]



Şekil 2.10: Kuantum Anormal Hall Etkisine dair enerji band yapısı analizi grafikleri [Liu et. al., 2008]



Şekil 2.11: Kuantum Anormal Hall Etkisine dair deneysel ölçümler [Liu et. al., 2008]



Şekil 2.12: Kuantum Hall Etkisine ait (a),(b),(c) ve (d) manyetik alana karşılık öz direnç ölçümleri, (e) potansiyel farka karşılık öz direnç ölçümleri (f) iletkenliğe karşılık potansiyel fark ölçümleri [Chang et al., 2013]

2.2 Topolojik Alan Teorisi

Düzensizliğin olduğu etkileşimli sistemlerde geçerlidir [Qi & Zhang, 2011]. Topolojik Alan teorisi (TFT) bir yoğun madde sisteminin düşük enerji özellikleriyle doğrudan ilgilidir. Bu durumda, mikroskopik Hamiltonyen'in ayrıntıları önemli değildir ve sistemin gerekli fiziksel özellikleri bir düşük enerji etkili alan teorisi açısından elde edilebilir. Geleneksel simetri kırılması durumları için düşük enerji etkili alan teorisi tamamen düzen parametresi, simetri ve boyutsallık tarafından belirlenir [Anderson, 1984]. Kuantum maddenin topolojik durumları benzer şekilde düşük enerji etkili alan teorisi ile tanımlanır. Bu durumda etkili olan alan teorisi genellikle topolojik durumun evrensel topolojik özelliklerini tanımlayan topolojik terimleri içerir. Topolojik terimin katsayısı genel olarak sistemin düzen parametresi olarak tanımlanabilir. En başarılı örneği Kuantum Hall Etkisidir [Zhang, 1992].

2.2.1 (2+1) Boyutta Chern-Simons Yalıtkanı

Kuantum Hall durumu maddenin geleneksel Landau paradigmasına girmeyen bir topolojik durumdur. Kuantum Hall durumunun uzun mesafe ve düşük enerji özellikleri genellikle etkin topolojik alan teorisi ile açıklanır [Wang, Qi & Zhang, 2010].

$$S_{eff} = \frac{C_1}{4\pi} \int d^2 x \int dt A_\mu \epsilon^{\mu\nu\tau} \partial_\nu A_\tau \quad (2.5)$$

C_1 burada TKNN (Thouless, Komoto, Nightingale, Nijs) invariantı [Thouless, Kohmoto, Nightingale & den Nijs, 1982] olup Kubo [Kubo, 1957] formülü ile elde edilir.

$$C_1 = \frac{\pi}{3} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} Tr[\epsilon^{\mu\nu\rho} G \partial_\mu G^{-1} G \partial_\nu G^{-1} G \partial_\rho G^{-1}] \quad (2.6)$$

$G(k) \equiv G(\mathbf{k}, \omega)$ tamamıyla etkileşimli yalıtkanın sanal zaman tek parçacık Green fonksiyonudur. Burada $\mu, \nu, \rho = 0, 1, 2 = t, x, y$, ile ifade edilir.

$\pi_3 = (GL(n, \mathbb{C})) \cong \mathbb{Z}$ üçüncü homotopi grubu olup $n \geq 3$ bandların sayısıdır.

Etkileşimsiz limitte C_1 tek bir Feynman diyagramı ile hesaplanabilir [Golterman, Jansen & Kaplan, 1993] ve bunun sonucunda C_1 (2.6)'da verildiği gibi elde edilir.

Fakat G ile etkileşimsiz Green fonksiyonu G_0 ifadesi yer değiştirir. Frekans integrali açıkça uygulanarak Berry eğriliğinin integrali olarak ifade edilen TKNN invariantı elde edilir.

$$C_1 = \frac{1}{2\pi} \int dk_x \int dk_y f_{xy}(\mathbf{k}) \in \mathbb{Z} \quad (2.7)$$

$$f_{xy}(\mathbf{k}) = \frac{\partial a_y(\mathbf{k})}{\partial k_x} - \frac{\partial a_x(\mathbf{k})}{\partial k_y} \quad \text{ve} \quad a_i(\mathbf{k}) = -i \sum_{\alpha \in occ} \langle \alpha \mathbf{k} | \frac{\partial}{\partial k_i} | \alpha \mathbf{k} \rangle, i = x, y$$

şeklindedir.

TR altında $A \rightarrow A, \mathbf{A} \rightarrow -\mathbf{A}$ dönüşümleri gerçekleşir. Buradan (2.6)'daki (2+1) boyutlu Chern-Simons (CS) alan denklemin zaman-tersinme (TR) simetrisini kırdığı görülür. Kuantum Hall (QH) sisteminin tüm düşük enerji tepkisi bu Topolojik Alan Teorisinden (TFT)'den türetilir. Örneğin (2.6)'daki etkin Lagranjiyandan A_μ 'ye bağlı olarak akım elde edilebilir.

$$j_\mu = \frac{C_1}{2\pi} \epsilon^{\mu\nu\tau} \partial_\nu A_\tau \quad (2.8)$$

Bu akımın uzaysal bileşeni j_μ ile verilir.

$$j_\mu = \frac{C_1}{2\pi} \epsilon^{\mu\nu\tau} \partial_\nu A_\tau \quad (2.9)$$

Uzaysal bileşen ise j_0 ile verilir.

$$j_0 = \frac{C_1}{2\pi} \epsilon^{ij} \partial_i A_j = \frac{C_1}{2\pi} B \quad (2.10)$$

Bu tam olarak bir elektrik alanının enine bir akımı indüklediğini ve bir manyetik alanın yük birikimini indüklediğini ima eden Hall iletkenliği $\sigma_H = C_1/(2\pi)$ olan bir Kuantum Hall tepkisidir. Bu nedenle tüm Kuantum Hall durumlarının topolojik tepkisi kesinlikle düşük enerji Topolojik Alan Teorisi (TFT) (2.5) denkleminin içindedir.

2.2.2 (4+1) Boyutta Chern-Simons Yalıtkanı

Kuantum Hall etkisinin Topolojik Alan Teorisi (TFT) yalnızca evrensel düşük enerji fiziğini içermez, zaman tersinmeli (TR) simetri kırılmalı Kuantum Hall durumunu zaman tersinmeli (TR) değişmez (invariant) topolojik durumlara genelleştirmek için

de bir yol gösterir. Chern-Simons (CS) alan teorisi tüm tek boyutlu uzay-zamanlara genelleştirilebilir [Nakahara, 2018]. Bu gözlemle birlikte Zhang ve Hu TR invariant olan ve (4+1) boyutta tanımlanan Quantum Hall yalıtkan durumunun bir genellemesini keşfetmeye yöneldiler [Zhang & Hu, 2001]. Bu, tüm düşük boyutlu durumların türetildiği temel TR invariant yalıtkan durumudur ve Topolojik Alan Teorisi tarafından tanımlanır [Bernevig, Chern, Hu, Toumbas & Zhang, 2002].

$$S_{eff} = \frac{C_2}{24\pi^2} \int d^4x dt \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma\tau} A_\mu \partial_\nu A_\rho \partial_\sigma A_\tau \quad (2.11)$$

TR simetrisi altında $A \rightarrow A, \mathbf{A} \rightarrow -\mathbf{A}$ dönüşümleri gerçekleşir. Bu terim açık bir şekilde topolojik invarianttır. Genel olarak C_2 katsayısı etkileşimli bir sistemin Green fonksiyonu cinsinden ifade edilir [Wang, Qi & Zhang, 2010].

$$C_2 \equiv \frac{\pi^2}{15} \int \frac{d^5k}{(2\pi)^5} Tr[\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma\tau} G \partial_\mu G^{-1} G \partial_\nu G^{-1} G \partial_\rho G^{-1} G \partial_\sigma G^{-1} G \partial_\tau G^{-1}] \quad (2.12)$$

$$\pi_5 = (GL(n, \mathbb{C})) \cong \mathbb{Z} \quad (2.13)$$

Etkileşimsiz bir sistem için C_2 tek bir Feynman diyagramından (Şekil 2.13a) hesaplanabilir ve (2.12)'de verilen C_2 elde edilir. Frekans üzerinden integrasyon ikinci Chern sayısını verir.

$$C_2 = \frac{1}{32\pi^2} \int d^4k \epsilon^{ijkl} Tr[f_{ij} f_{kl}] \quad (2.14)$$

Burada $f_{ij}^{\alpha\beta} = \partial_i a_j^{\alpha\beta} - \partial_j a_i^{\alpha\beta} + i[a_i, a_j]^{\alpha\beta}$ ve $a_i^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = -i \langle \alpha, \mathbf{k} | \frac{\partial}{\partial k_i} | \beta, \mathbf{k} \rangle$ ve $i, j, k, l = 1, 2, 3, 4 \equiv x, y, z, w$ şeklindedir.

C_2 sayısı (2+1) boyuttaki Chern-Simons (CS) sayısına benzer biçimde homotopi grubunu etiketler.

(2+1) boyuttaki durumun aksine Chern-Simons (CS) terimi (4+1) boyutta topolojik olmayan Maxwell teriminden daha az ilgilidir. (2+1) boyuttaki Kuantum Hall durumuna benzer biçimde (4+1) boyuttaki Chern-Simons (CS) yalıtkanlarının fiziksel tepkisi j_μ ile verilir.

$$j_\mu = \frac{C_2}{2\pi^2} \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma\tau} \partial_\nu A_\rho \partial_\sigma A_\tau \quad (2.15)$$

Bu harici A^μ alanına doğrusal olmayan bir tepkidir. Bu tepkinin daha iyi anlaşılması için özel bir alan konfigürasyonu düşünelim.

$$A_x = 0, A_y = B_z \chi, A_z = -E_z t, A_w = A_t = 0 \quad (2.16)$$

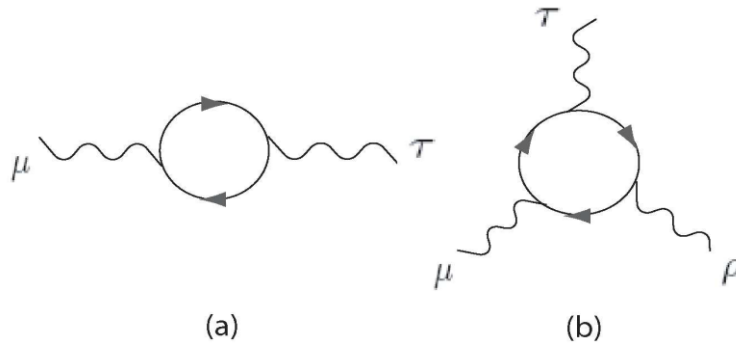
Burada x, y, z, w uzaysal koordinatlar t ise zaman koordinatıdır. Alan kuvvetlerinin kaybolmayan bileşenleri yalnızca $F_{xy} = B_z$ ve $F_{zt} = -E_z$ 'dir. Denklem (1.16)'ya göre bu alan konfigürasyonu j_w akımını indükler.

$$j_w = \frac{C_2}{4\pi^2} B_z E_z \quad (2.17)$$

Bu denklemin xy düzlemi üzerinden integrali alındığında (1.19) elde edilir.

$$\int dx dy j_w = \frac{C_2}{4\pi^2} \int (dx dy B_z) E_z \equiv \frac{C_2 N_{xy}}{2\pi} E_z \quad (2.18)$$

Burada $N_{xy} = \int dx dy B_z / 2\pi$ ifadesi xy düzlemi boyunca akı kuantasıdır ve bu değer daima bir tamsayı olarak kuantizedir. Bu tam olarak önceki kısımlarda bahsedilen Kuantum Hall etkisinin 4D'ye genelleştirilmesidir [Wang, Qi & Zhang, 2010].



Şekil 2.13 (a) (2+1) boyutta Chern-Simons terimi için Feynman diyagramı **(b)** (4+1) boyutta Chern-Simans terimi için Feynman diyagramı

2.3 Topolojik Band Teorisi

Topolojik Band Teorisi yalnızca düzensizliğin olduğu etkileşimsiz sistemlerde geçerlidir [Sheng, Weng, Sheng & Haldane, 2006]. Buna rağmen yeni 3 boyutta topolojik malzemeler keşfetmek için genellikle bu teori kullanılır. Genel band yapısı için Z_2 invariantlarını geliştirmek oldukça zor bir problemdir. Günümüze kadar birkaç yöntem geliştirilmiştir. Birincisi spin Chern sayılarıdır [Fukui & Hatsugai, 2007; Fukui & Hatsugai, 2007a; Fukui & Hatsugai, 2007b]. İkincisi Bloch dalga fonksiyonlarından geliştirilen topolojik invariantlardır [Fu & Kane, 2006; Kane & Mele, 2005a; Kane & Mele, 2005b; Moore & Balents, 2007; Roy, 2009]. Üçüncüsü ise Brillouin bölgesinde TRIM'de tek parçacık durumlarından hesaplanan ayrık indislerdir [Fu, Kane & Mele, 2007]. Bu tez çalışmasının hesaplama kısmında son yöntem kullanıldığı için bunun üzerinde durulacaktır.

Bu yaklaşımdaki temel nicelik, TR eşlenik momentumu $\mathbf{k}$ ve $-\mathbf{k}$ olan durumlar arasındaki TR operatörünün T matris elemanıdır [Fu & Kane, 2006].

$$B_{\alpha\beta} = \langle -\mathbf{k}, \alpha | T | \mathbf{k}, \beta \rangle \quad (2.19)$$

$B_{\alpha\beta}$, TR eşlenik momentumunda Bloch durumları arasında bir matris elemanı olarak tanımlandığından, bu niceliğin TR değişmez topolojik yalıtkanların bant topolojisi hakkında bazı bilgiler içermesi beklenir. TRIM Γ_i 'de $B(k = \Gamma_i)$ antisimetriktir. Dolayısıyla δ_i , (2.20) ile tanımlanabilir.

$$\delta_i = \frac{\det[B(\Gamma_i)]}{Pf[B(\Gamma_i)]} \quad (2.20)$$

Burada Pf terimi antisimetrik matrisin Pfaffian'ıdır [Levin, Halperin & Rosenow, 2007]. $Pf[B(\Gamma_i)] = \det[B(\Gamma_i)]$ olduğu için $\delta_i = \pm 1$ olacaktır. δ_i tanımındaki belirsizliği önlemek için dalga fonksiyonlarının Brillouin Bölgesi'nde sürekli olarak seçilmesine dikkat edilmelidir. Bir boyutta yalnızca iki tane TRIM vardır ve TR polarizasyonu δ_i 'nin bir sonucu olarak tanımlanabilir.

$$\pi = (-1)^{P_\theta} = \delta_1 \delta_2 \quad (2.21)$$

Denklem (2.21) yük polarizasyonuna bir Z_2 benzetmesini göstermektedir **[King-Smith & Vanderbilt, 1993; Resta, 1994; Thouless, 1983; Zak, 1989]**.

Yük polarizasyonu ile TR polarizasyonu arasındaki başka bir benzetme, TR invariant topolojik yalıtkanları için Z_2 invariantının biçimini önerir. θ açısal parametresi 0'dan 2π 'ye ayarlanırsa, böyle bir döngüden sonra yük polarizasyonundaki P değişimi (k, θ) uzayındaki birinci Chern sayısı C_1 olarak ifade edilir. Aslında, θ bir momentum olarak kabul edilirse, aynı C_1 TKNN invariantını verecektir. P 'ye benzetilerek, (2+1) boyutta topolojik yalıtkanlar için Z_2 değişmezi (2.22) ile tanımlanabilir.

$$(-1)^{\nu_{2D}} = (-1)^{P_\theta(k_2=0) - P_\theta(k_2=\pi)} \quad (2.22)$$

Burada $P_\theta(k_2) = \delta_1 \delta_2$, $\delta_1, k_1 = 0$ veya π 'de tanımlıdır, k_2 ise bir parameter olarak kabul edilir. Denklem (2.21) ifadesi (2.23)'e genişletilebilir.

$$(-1)^{\nu_{2D}} = \prod_{i=1}^4 \delta_i \quad (2.23)$$

Burada $i = 1, 2, 3, 4$, iki boyutlu Brillouin bölgesinde dört adet TRIM noktasıdır. $(-1)^{\nu_{2D}} = +1$ ifadesi sıradan yalıtkanı ima ederken $(-1)^{\nu_{2D}} = -1$ ifadesi ise topolojik yalıtkanı ima eder.

Üç boyutlu topolojik yalıtkanlara geldiğimizde şu nokta üzerinde durulması lazım: Topolojik Alan Teorisi (TFT) prosedürünün 'boyutsal indirgemesine' karşın Topolojik Band Teorisi'nin (TBT) doğal yolu "boyutsal yükseltgeme"dir. Bu boyutsal yükselişten 3D (güçlü) topolojik invariant doğal olarak Fu-Kane formülü (denklem 1.22) ile elde edilir **[Fu & Kane, 2007; Fu et al. 2007]**.

$$(-1)^{\nu_k} = \prod_{i=1}^8 \delta_i \quad (2.24)$$

Güçlü invarianta ek olarak, F_i 'nin aynı düzlemde yer aldığı herhangi dört δ_i 'nin çarpımının da ayar değişmezi olduğu ve bant yapısını karakterize eden topolojik değişmezleri tanımladığı gösterilmiştir **[Fu & Kane, 2007]**. Bu gerçek, zayıf topolojik değişmezler olarak bilinen 3 boyutlu üç ek invariantın tanımına öncülük eder. Bu Z_2 invariantları ν_k elemanları ile 3 boyutlu bir vektör (2.25) olarak düzenlenebilir **[Fu et al. 2007a; Fu et al. 2007b; Moore & Balents, 2007; Roy, 2009]**.

$$(-1)^{v_k} = \prod_{n_k=1; n_{j \neq k}=0,1} \delta_{i=(n_1 n_2 n_3)} \quad (2.25)$$

Z_2 invariantlarını tanımlamak için kullanılan $v_1 v_2 v_3$ bir örgü denklemi ile ifade edilebilir (2.26).

$$\mathbf{G}_v = v_1 \mathbf{b}_1 + v_2 \mathbf{b}_2 + v_3 \mathbf{b}_3 \quad (2.26)$$

2.4 Topolojik Alan Teorisinden Topolojik Band Teorisine İndirgeme

Tersinme simetrisine sahip yalıtkanlar için birkaç yüksek simetri noktasındaki parite tamamıyla topolojik karakteri belirler. Bu Topolojik Band Teorisi'nin başarılı bir teori olduğunu gösterir. Son yıllarda yapılan bir çalışmayla [Wang, Qi & Zhang, 2010] etkileşimsiz limitte Topolojik Band Teorisi (TBT) ile Topolojik Alan Teorisi'nin (TFT) karşılıklı olarak topolojik karakteri tayin etmede aynı sonucu verdiği gösterilmiştir. Bunun için 3 boyutlu Z_2 topolojik yalıtkanlarına boyutsal indirgemedede kullanılan iki denklem ile başlanır.

$$P_3 \equiv \frac{\theta}{2} = \int_0^1 du \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} Tr \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} [G \partial_\mu G^{-1} G \partial_\nu G^{-1} G \partial_\rho G^{-1} G \partial_\sigma G^{-1} G \partial_u G^{-1}] \quad (2.27)$$

$$P_3 = \frac{1}{16\pi^2} = \int d^3 k \epsilon^{ijk} Tr \left\{ \left[f_{ik}(\mathbf{k}) - \frac{2}{3} i a_i(\mathbf{k}) a_j(\mathbf{k}) \right] \right\} \quad (2.28)$$

Bazı topolojik argümanlarla, P_3 için bu ifadenin, Brillouin bölgesindeki üç toruslu T_3 'ten $SU(2)$ grup manifolduna kadar belirli bir haritanın f mertebesini verdiği gösterilmiştir [Dubrovin, Fomenko & Novikov, 1985]. Bu bilgiden yola çıkarak (2.29) elde edilir.

$$2P_3(mod 2) = \frac{1}{24\pi^2} \int d^3 k \epsilon^{ijk} Tr [(B \partial_i B^\dagger)(B \partial_j B^\dagger)(B \partial_k B^\dagger)] (mod 2) \quad (2.29)$$

TR simetrisi nedeniyle, görüntü noktası $SU(2)$ 'deki iki antisimetrik matristen biri olarak seçildiğinde (örneğin $i\sigma_y$), sekiz TRIM dışındaki bu noktalarda ilginç bir "çift yok oluşu" elde edilir. Nihai sonuç tam olarak TBT'deki Z_2 değişmezini verir. TBT ve TFT arasındaki ilişki (2.30) ile verilir [Wang et. al. 2010].

$$(-1)^{2P_3} = (-1)^{v_{3D}} \quad (2.30)$$

2.5 Z₂ İndeksi İçin Genel Formül

Topolojik yalıtkan malzemeleri teorik olarak tahmin etmek için Fu ve Kane tarafından basitleştirilmiş bir Z₂ indeks formülü geliştirilmiştir [Fu & Kane, 2007]. Bu formülün elde edilmesi matematiksel olarak çok fazla ara işlem gerektirmektedir. Buna rağmen band hesaplamalarının sonuçlarının analizinde en sık kullanılan yöntemdir [Ando, 2013]. Hesaplama ayrıntıları aşağıda verilmiştir.

Uzay tersinme operatörü Π olarak tanımlansın.

$$\Pi|x, \sigma \rangle = |-x, \sigma \rangle \quad (2.31)$$

Bu denklemde $\mathbf{x}$ uzaysal koordinatı σ da spini ifade eder.

$$\Pi^2 = 1 \quad (2.32)$$

Bu ifadede Π operatörünün özdeğerinin ± 1 olduğu görülür. Bu ifadede Π operatörü dalga fonksiyonunun momentum temsilinde $\Pi|\mathbf{k}, \sigma \rangle = |-\mathbf{k}, \sigma \rangle$ ifadesini sağlar. Böylece Hamiltonyen $H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma, \sigma'} |-\mathbf{k}, \sigma \rangle H_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{k}) \langle -\mathbf{k}, \sigma' |$ aşağıdaki (2.33) ifadesine dönüşür.

$$\Pi H \Pi^{-1} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma, \sigma'} |-\mathbf{k}, \sigma \rangle H_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{k}) \langle -\mathbf{k}, \sigma' | \quad (2.33)$$

$$= \sum_{\mathbf{k}, \sigma, \sigma'} |\mathbf{k}, \sigma \rangle H_{\sigma, \sigma'}(-\mathbf{k}) \langle \mathbf{k}, \sigma' |$$

Hamiltonyen H , $H(-\mathbf{k}) = H(\mathbf{k})$ ifadesini sağlıyorsa (2.34)'ü de sağlar ve böylece sistem tersinme simetrisi ile korunur.

$$\Pi H \Pi^{-1} = H \quad (2.34)$$

Buradaki amaç Π 'nin özdeğerlerini (parite) kullanarak Z₂ invariantını açıklamaktır.

U(2) Berry bağıntı matrisi $\mathbf{a}_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ (2.35)'te ve iz ifadesi $\text{tr}[\mathbf{a}(\mathbf{k})]$ (2.36)'da verilmiştir.

$$\mathbf{a}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = -i \langle u_{\alpha,k} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{\beta,k} \rangle \quad (2.35)$$

$$\text{tr}[\mathbf{a}(\mathbf{k})] = \text{tr}[\mathbf{a}(-\mathbf{k})] + i \text{tr}[w^\dagger(\mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{k}} w(\mathbf{k})] \quad (2.36)$$

Bu iz ifadesini $\mathbf{a}^c(\mathbf{k})$ olarak ve $\mathbf{a}^c$ 'nin Berry eğriliği olan (2.37) ile tanımlayalım.

$$F(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{a}^c(\mathbf{k}) \quad (2.37)$$

İki simetri, zaman tersinme simetrisi (TRS) ve tersinme simetrisi (IS) $F(\mathbf{k})$ 'yı aşağıdaki özelliklerin olmasını sağlar [Haldane, 2004].

$$(TRS) \rightarrow F(-\mathbf{k}) = -F(\mathbf{k}) \quad (2.38)$$

$$(IS) \rightarrow F(-\mathbf{k}) = +F(\mathbf{k}) \quad (2.39)$$

Böylece herhangi bir $\mathbf{k}$ değeri için Berry eğriliği $F(\mathbf{k}) = 0$ olur, bu sayede daima $\mathbf{a}^c(\mathbf{k}) = 0$ ifadesini sağlayan bir ayar seçeriz.

Herhangi bir $\mathbf{k}$ değeri için $\mathbf{a}^c(\mathbf{k}) = 0$ ifadesini sağlayacak bir ayar seçmek için (2.40)'taki gibi bir matrisi göz önüne almalıyız.

$$v_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \langle u_{\alpha,k} | \Pi \Theta | u_{\beta,k} \rangle \quad (2.40)$$

v -matrisi antisimetrik ($v_{\alpha\beta} = -v_{\beta\alpha}$) ve birimsel ($\sum_{\beta} v_{\alpha\beta} v_{\gamma\beta}^* = \delta_{\alpha\gamma}$) bir matristir. Üstelik $\mathbf{a}^c(\mathbf{k})$ 'ya (2.41) ile bağlıdır.

$$\frac{i}{2} \text{tr}[v^\dagger \nabla_{\mathbf{k}} v] = \mathbf{a}^c(\mathbf{k}) \quad (2.41)$$

$\text{tr}[v^\dagger \nabla_{\mathbf{k}} v] = \nabla_{\mathbf{k}} \text{tr}[\log v] = \nabla_{\mathbf{k}} \log(\det[v])$ olduğundan dolayı (2.42) ifadesi elde edilir.

$$\mathbf{a}^c(\mathbf{k}) = \frac{i \nabla_{\mathbf{k}}}{2} \log(\det[v(\mathbf{k})]) = i \nabla_{\mathbf{k}} \log Pf[v(\mathbf{k})] \quad (2.42)$$

Denklem (2.42) yani $\mathbf{a}^c(\mathbf{k}) = 0$ ifadesini sağlamak için $Pf[v(\mathbf{k})] = 1$ olmasını sağlayacak şekilde $|u_{\alpha,k}\rangle$ fazı seçmek zorundayız.

Şimdi inversiyon simetrik bir sistemin w -matrisini hesaplayalım. Zaman tersinmeli değişmez momentum (TRIM) Λ_i 'deki α bandı için Π 'nin özdeğeri $\xi_\alpha(\Lambda_i) = \pm 1$ olsun. Yani $\Pi|u_\alpha(\Lambda_i)\rangle = \xi_\alpha(\Lambda_i)|u_\alpha(\Lambda_i)\rangle$.

$$\begin{aligned} w_{\alpha\beta}(\Lambda_i) &= \langle u_\alpha(-\Lambda_i) | \Pi \Pi \Theta | u_\beta(\Lambda_i) \rangle \\ &= \xi_\alpha(\Lambda_i) \langle u_\alpha(\Lambda_i) | \Pi \Theta | u_\beta(\Lambda_i) \rangle \\ &= \xi_\alpha(\Lambda_i) v_{\alpha\beta}(\Lambda_i) \end{aligned} \quad (2.43)$$

$w_{\alpha\beta}$ ve $w_{\beta\alpha}$ antisimetrik olduğu için, $w_{\alpha\beta} = -w_{\beta\alpha} \neq 0$ iken $\xi_\alpha = \xi_\beta$ 'dir. Böyle sıfır olmayan bir $w_{\alpha\beta}$ matrisi α ve β bandları bir Kramers çifti formu oluşturduğunda elde edilir. Bundan dolayı eğer α ve β bandları toplam $2N$ banddaki n . Kramers çifti ise $\xi_\alpha = \xi_\beta \equiv \xi_{2n}$ ifadesini yazabiliriz.

$$Pf[w(\Lambda_i)] = Pf[v(v_i)] \prod_{n=1}^N \xi_{2n}(\Lambda_i) \quad (2.44)$$

$Pf[w(\Lambda_i)] = 1$ olacak şekilde bir ayarlama seçtiğimiz için sonuçta (2.45)'i elde ederiz.

$$\delta(\Lambda_i) = \frac{Pf[w(\Lambda_i)]}{\sqrt{\det[w(\Lambda_i)]}} = \prod_{n=1}^N \xi_{2n}(\Lambda_i) \quad (2.45)$$

Bu ifade Λ_i TRIM'lerdeki ξ_{2n} parite özdeğerleriyle Z_2 invaryantının kolayca hesaplanabileceği anlamına gelmektedir.

2 boyutta $2N$ banda sahip IS ve TRS korunumlu bir sistem için Z_2 invaryantı aşağıdaki denklemlerle bulunur.

$$(-1)^\nu = \prod_{i=1}^4 \delta(\Lambda_i) = \prod_{i=1}^4 \prod_{n=1}^N \xi_{2n}(\Lambda_i) \quad (2.46)$$

Bu denklem aday topolojik malzemeleri teorik olarak tahmin etmek için *ab initio* temelli band hesaplamalarında çok sık kullanılmaktadır.

2.6 Kristal Nokta Grup Simetrisi

İki ve üç boyutta olmak üzere iki çeşit nokta grup simetrisi mevcuttur. İncelenecek malzeme iki boyutlu ise Tablo (2.1)'e göre, üçü boyutlu ise de Tablo (2.2)'ye göre yüksek simetri noktalarının parite değerlerine bakılır [Dresselhaus, M, Dresselhaus, G. & Jorio, 2007].

Tablo 2.1: İki boyutta topolojik fazlar. Γ_i altında verilen harfler yüksek simetri olup Wpg altında gösterilenler nokta grubudur [Slager, Mesaros, Juričić, & Zaanen, 2013].

Bravais Lattice (PG)	WpG	Γ_i	δ_i	Index(Phase)
Square (D_4)	p4mm p4gm p4	(Γ, M, X, Y)	$(-1, 1, 1, 1)$	T-p4mm (Γ)
			$(1, -1, 1, 1)$	t-P4 (M)
			$(1, 1, -1, -1)$	P4 (X-Y-valley)
Rectangular (D_2)	p2mm p2mg p2gg pm, pg	(Γ, M, X, Y)	$(-1, 1, 1, 1)$	T-p2mm (Γ)
			$(1, -1, 1, 1)$	T-p2m _M (M)
			$(1, 1, -1, 1)$	T-p2m _X (X)
			$(1, 1, 1, -1)$	T-p2m _Y (Y)
Rhombic (D_2)	c2mm cm	$(\Gamma, M_0, M_{-1}, M_1)$	$(-1, 1, 1, 1)$	T-c2mm (Γ)
			$(1, -1, 1, 1)$	T-c2m (M_0)
			$(1, 1, -1, -1)$	c2m (M-valley)
Oblique (C_2)	p2 p1	$(\Gamma, M_0, M_{-1}, M_1)$	$(-1, 1, 1, 1)$	T-p2 (Γ)
			$(1, -1, 1, 1)$	T-p2 _{M₀} (M_0)
			$(1, 1, -1, 1)$	T-p2 _{M₋₁} (M_{-1})
			$(1, 1, 1, -1)$	T-p2 _{M₁} (M_1)
Hexagonal (hexagonal- D_6)	p6mm p6	$(\Gamma, M_0, M_{-1}, M_1, K_{-}, K_{+})$	$(-1, 1, 1, 1, 1, 1)$	T-p6mm (Γ)
			$(1, -1, -1, -1, 1, 1)$	T-p6 (M)
			$(1, 1, 1, 1, -1, -1)$	p6 (K-valley)
Hexagonal (rhombohedral- D_3)	p3m1 p31m p3	$(\Gamma, M_0, M_{-1}, M_1)$	$(-1, 1, 1, 1)$	T-p3m1 (Γ)

Tablo 2.2: Üç boyutta bazı topolojik fazlar. Γ_i altında verilen harfler yüksek simetri noktaları olup SG altında gösterilenler uzay grubudur [Slager et. al., 2013]

Bravais Lattice	PGS	SG	Γ_i	δ_i	Index(Phase)
Primitive Cubic	O_h	$pm\bar{3}m$ $pn\bar{3}n$ $pn\bar{3}m$ $pm\bar{3}n$	(Γ, R, X, M)	$(-1, 1, 1, 1)$	T- $pm\bar{3}m$ (Γ)
				$(1, -1, 1, 1)$	T- $p3(4)_R$ (R)
				$(1, 1, -1, 1)$	T- $p3(4)_X$ (XYZ)
				$(1, 1, 1, -1)$	T- $p3(4)_M$ ($MX'Y'$)
Hexagonal	C_{6v}	$p6mm$ $p6cc$ $p6_3cm$ $p6_3mc$	(Γ, M, A, L, K, H)	$(-1, 1, 1, 1, 1, 1)$	T- $p6mm$ (Γ)
				$(1, -1, 1, 1, 1, 1)$	T- $p6_M$ (M)
				$(1, 1, -1, 1, 1, 1)$	T- $p6_A$ (A)
				$(1, 1, 1, -1, 1, 1)$	T- $p6_L$ (L)
				$(-1, 1, 1, 1, 1, -1)$	T- $p6_{\Gamma H}$ (ΓH)
				$(1, -1, 1, 1, 1, -1)$	T- $p6_{HM}$ (MH)
				$(1, 1, -1, 1, -1, 1)$	T- $p6_{KA}$ (KA)
				$(1, 1, 1, -1, -1, 1)$	T- $p6_{LK}$ (LK)
				$(1, 1, 1, 1, -1, 1)$	$p6_K$ (K-valley)
				$(1, 1, 1, 1, 1, -1)$	$p6_H$ (H-valley)
Face Centered Cubic	O_h	$fm\bar{3}m$ $fm\bar{3}c$ $fd\bar{3}m$ $fd\bar{3}c$	(Γ, X, L, U, W)	$(-1, 1, 1, 1, 1)$	T- $fm\bar{3}m$ (Γ)
				$(1, -1, 1, 1, 1)$	T- $f3(4)$ (X)
				$(1, 1, -1, 1, 1)$	$f3(4)$ (L-valley)
				$(1, 1, 1, -1, 1)$	$f43_U$ (U-valley)
				$(1, 1, 1, 1, -1)$	$f43_W$ (W-valley)
Rhombohedral	D_{3d}	$r\bar{3}m$ $r\bar{3}c$	$(\Gamma, L, F, Z, P, K, B)$	$(-1, 1, 1, 1, 1, 1, 1)$	T- $r\bar{3}_M$ (Γ)
				$(1, -1, 1, 1, 1, 1, 1)$	T- $r\bar{3}_L$ (L)
				$(1, 1, -1, 1, 1, 1, 1)$	T- $r\bar{3}_F$ (F)
				$(1, 1, 1, -1, 1, 1, 1)$	T- $r\bar{3}_Z$ (Z)
				$(1, 1, 1, 1, -1, 1, 1)$	$r\bar{3}_P$ (P-valley)
				$(1, 1, 1, 1, 1, -1, 1)$	$r\bar{3}_K$ (K-valley)
				$(1, 1, 1, 1, 1, 1, -1)$	$r\bar{3}_B$ (B-valley)

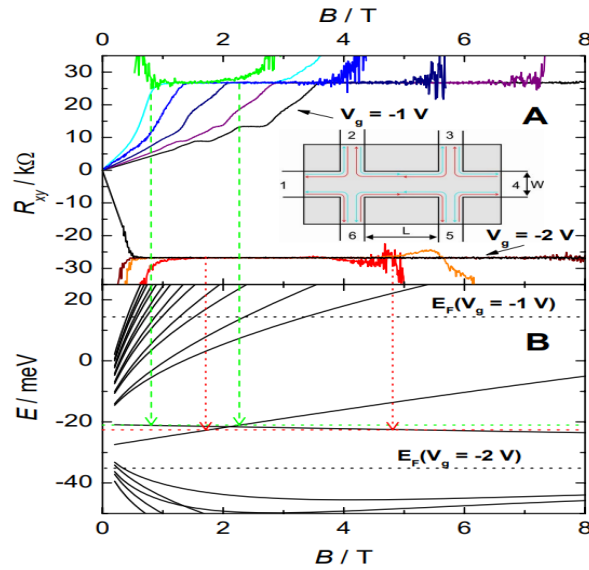
Z_2 indeksi hesaplanırken her malzemenin uzay grubu göz önünde bulundurulmak zorundadır. Bu tez kapsamında çalışılan tüm bileşiklerin kristal yapısı Bravais örgü yapısında basit kübik olup $pm\bar{3}m$ uzay grubuna sahiptir [Setyawan & Curtarolo, 2011].

3. TOPOLOJİK MALZEMELER

Topolojik malzemelerin ilk keşfinden bu yana yirmi yıla yakın bir zaman geçmiş olmasına karşın teorik olarak binlerce topolojik olmaya aday malzeme keşfedilmiştir. Bunların büyük bir kısmı yapılan deneyler sonucu elenmiş bir kısmının da deneysel olarak topolojik özellikte olduğu teyit edilmiştir. Bu tez çalışmasında ilk prensip hesaplamaları kullanıldığı için tüm malzemeler incelenmeyecek olup ilk keşfedilen malzemelerden birkaçı incelenecektir. Bu malzemeler; ilk zaman tersinme simetrisi 2 boyutlu topolojik yalıtkan CdTe/HgTe/CdTe kuantum kuyusu, ilk 3 boyutlu topolojik yalıtkan $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$, katı yalıtkan (geniş band aralıklı) özellikli 3 boyutlu topolojik yalıtkan $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ 'dir.

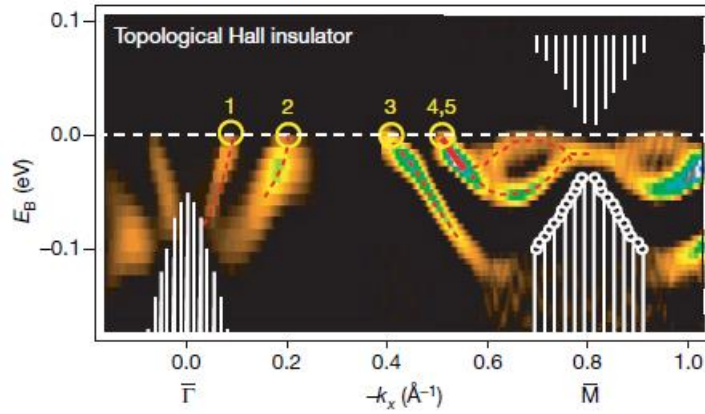
3.1 İlk Deneysel Topolojik Malzemeler

Literatürdeki ilk deneysel topolojik malzeme 2 boyutlu CdTe/HgTe/CdTe kuantum kuyusudur. Malzemenin band aralığı 10 meV'den daha küçük olup katı yalıtkan özelliğe ve yüksek mobiliteye sahiptir [Konig, Wiedmann, Brune, Roth, Buhmann, Molenkamp & Zhang, 2007]. Bu malzeme Bernevig vd. tarafından teorik olarak önceden tahmin edilmişti [Bernevig, Hughes & Zhang, 2006].



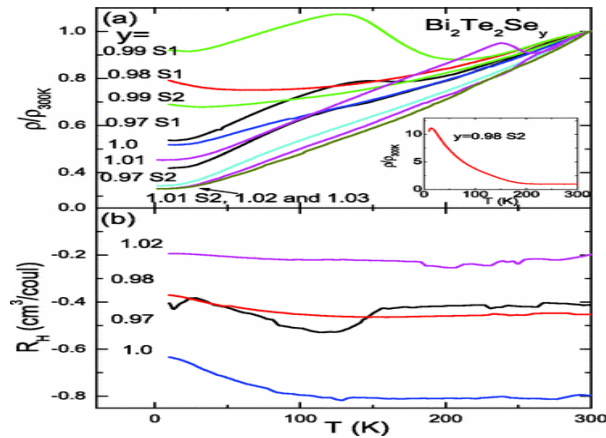
Şekil 3.1: (A) $(W \cdot L) = (600 \cdot 200) \mu\text{m}^2$ yüzey alanına sahip CdTe/HgTe/CdTe kuantum kuyusuna ait Kuantum Spin Hall Etkisi ile ilgili ölçümler gözlenmektedir. (B) 6.5 nm genişliğindeki CdTe/HgTe kuantum kuyusuna ait Landau seviyesi görülmektedir [Konig et. al., 2007].

Literatürdeki ilk 3 boyutlu topolojik malzeme $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ ($x=0.09;0.23$) bileşiğidir. Bu bileşik karmaşık yüzey durumlarına sahiptir, Fu, Kane & Mele [Fu, Kane & Mele, 2007] tarafından teorik olarak tahmin edilmiş olup Nishide vd. [Nishide, Taskin, Takeichi, Okuda, Kakizaki, Hirahara, ... & Matsuda, 2010] tarafından topolojik özellik gözlenmiştir. Malzemenin $x=0.1$ stokiyometrisindeki Dirac noktaları da Hsieh vd. [Hsieh, Qian, Wray, Xia, Hor, Cava & Hasan, 2008] tarafından gözlenmiştir (Şekil 3.2).



Şekil 3.2: $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$ bileşiğinin ARPES görüntüsü. Numaralı yerler tek numaralı Dirac noktalarını belirtmektedir.

Literatürdeki ilk katı yalıtkan davranışlı (geniş band aralıklı) malzeme $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ 'dir [Xiong, Petersen, Qu, Hor, Cava, & Ong, 2012]. Şekil 3.3'te Se'nin farklı stokiyometrilere karşılık akım uygulandığında elde direnç ve öz direnç değerleri verilmiştir.



Şekil 3.3: Se'nin farklı stokiyometrilere $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ bileşiğine ait (a) Direnç-Sıcaklık ve (b) Öz direnç-Sıcaklık grafiği. Grafiklerde sıcaklıkla birlikte öz direncin arttığı gözlenmiştir.

3.2 Topolojik Malzemelerin Sınıflandırılması

Topolojik malzemeler beş farklı sınıfta incelenebilir. Bunlar 2D Topolojik Yalıtkanlar, 3D Topolojik Yalıtkanlar, Topolojik Kondo Yalıtkanı, Topolojik Yarımetal ve Topolojik Kristalin yalıtkanıdır. Bu malzemelere ait özellikler Tablo (3.1)'de özetlenmiştir.

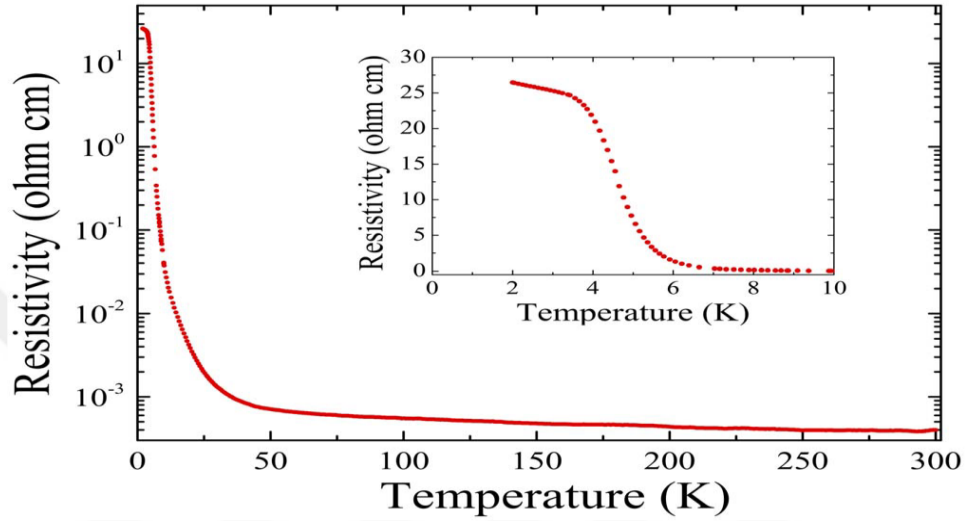
Tablo 3.1: Topolojik malzemelerin sınıflandırılması

Malzeme sınıfı	Boyut	Teorik Model	Yaygın Simetri	En iyi örnek
2D topolojik yalıtkan	2	BHZ (Bernevig-Hughes-Zhang)	TRS	CdTe/HgTe/CdTe kuantum kuyusu
3D topolojik yalıtkan	3	Fu-Kane-Mele	TRS ve IS	$\text{Bi}_{(1-x)}\text{Sb}_x$ ($x=0.09;0.23$)
Topolojik Kondo Yalıtkanı	3	Kondo Yalıtkanı	Kristal nokta grup simetrisi	SmB_6
Topolojik Yarımetal	3	Weyl yarımetal	TRS ve IS	$\text{Bi}_{14}\text{Rh}_3\text{I}_9$
Topolojik Kristalin Yalıtkan	3	Kesin bilinen model yok.	Kristal nokta grup simetrisi	$\text{Pb}_{(1-x)}\text{Sn}_x\text{Te}$ ($x\approx 0.25$)

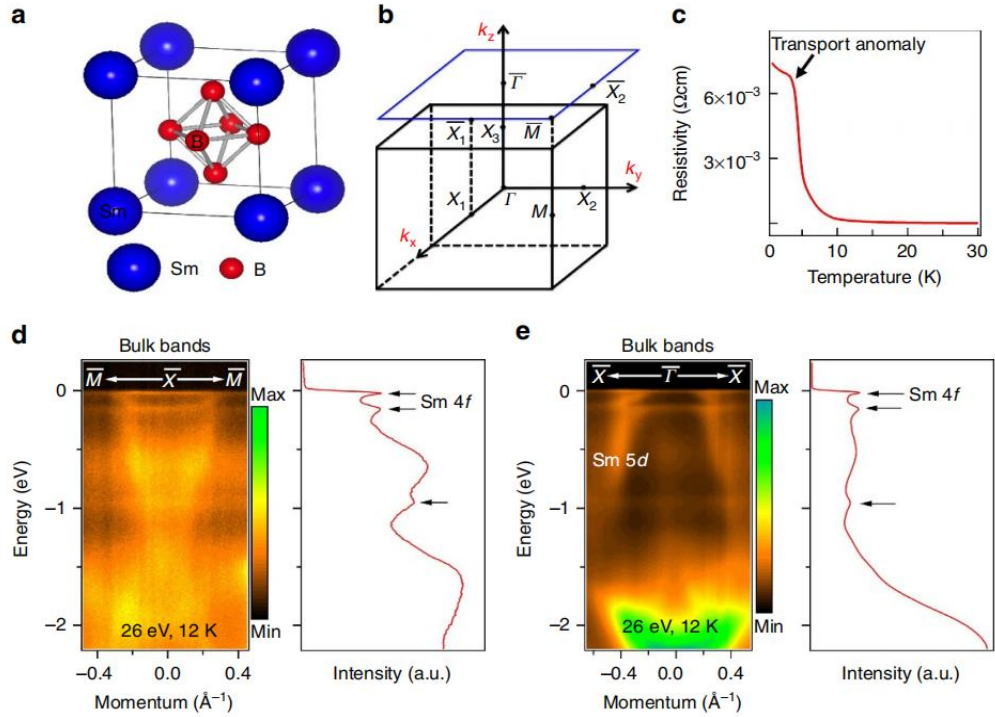
3.3 Kondo Etkisi ve Topolojik Kondo Yalıtkanı

Kondo etkisi ilk defa Jun Kondo tarafından izah edilmiştir [Kondo, 1964]. Bu etkiye sahip malzeme başlangıçta oda sıcaklığında normal metalik özelliğe sahiptir. Sıcaklık düştükçe malzemenin direnci artmakta ve belli bir sıcaklığın altından direnci sabitlenmektedir (bak. Şekil-1). SmB_6 bileşiğinde ise bu etki ilk defa Allen vd. tarafından gözlenmiş olup [Allen, Batlogg & Wachter, 1979] Dzero vd. [Dzero, Sun, Galitski & Coleman, 2010] tarafından SmB_6 bileşiğinin topolojik özelliğe sahip olabileceği teorik olarak izah edilmiştir. SmB_6 bileşiğinde güçlü spin yörünge

etkileşimi mevcuttur. Bileşikteki f elektronları tek pariteye sahip olup bu elektronlar valans bandının içine geçmekte ve Z_2 indeksi negatif olmakta yani malzeme topolojik özelliğe sahip olmaktadır [Dzero et. al, 2010]. Daha sonran yapılan bir çalışmayla SmB_6 bileşiğinin topolojik yüzey durumlarına sahip olduğu (Şekil-3.5) gösterilmiştir [Xu et. al., 2013].



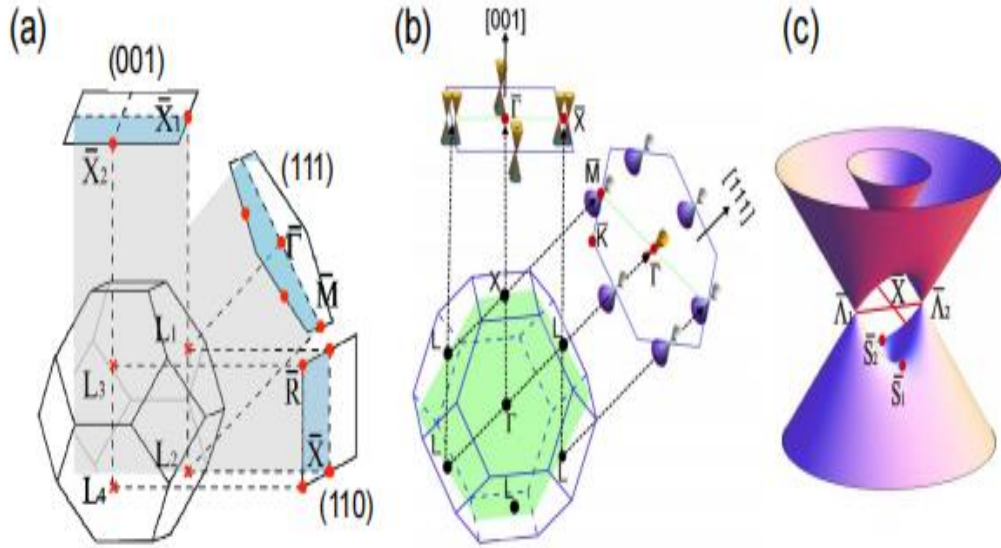
Şekil 3.4: SmB_6 bileşiğine ait sıcaklığa bağlı direnç grafiği [Hatnean, Lees, Paul & Balakrishnan, 2013]



Şekil-3.5: SmB_6 bileşiği a) Kristal yapısı b) Üç boyutta Brillouin bölgeleri c) Direnç sıcaklık grafiği d) ve e) ARPES ölçümleri [Neupane et. al., 2013]

3.4 Topolojik Kristalin Yalıtkan

Topolojik malzemelerin dışı iletken içi yalıtkan olup enerji-band grafiği analizi yapıldığında büyük çoğunluğunun yarıiletkenlere benzer band aralığına sahip olduğu gözlenir. Ayrıca bu malzemelerde zaman tersinme simetrisi vardır [Fu, Kane & Mele, 2007]. Topolojik Kristalin yalıtkanlarda ise zaman tersinme simetrisi (TRS) yerine kristal simetrisi vardır [Fu, 2011]. Bu malzemelerin enerji-band grafiği analizi yapıldığında ise band aralığı olmadığı ve enerji-band yapısının (Şekil 3.6) tıpkı normal metalleri gibi olduğu gözlenir [Hsieh, Lin, Liu, Duan, Bansil & Fu, 2012].



Şekil-3.6: a) Yüzey merkezli kübik yapının (FCC) yapının Brillouin bölgeleri b) Aynı yapının Dirac noktalarının görüldüğü yüzeyler c) Yüzey merkezli kübik yapıda (FCC) Dirac noktaları [Liu, Duan & Fu, 2013]

4. YOĞUNLUK FONKSİYONEL TEORİSİ VE QUANTUM ESPRESSO

4.1 Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT)

Yoğunluk fonksiyonel teorisi çok elektronlu atomların Schrödinger dalga denklemi çözümlerini bulmak için geliştirilmiş bir tekniktir [Harbola & Banerjee, 2003]. Teori ilk olarak Thomas ve Fermi [March, 1983] tarafından ortaya atılmış olup Kohn ve Sham [Kohn & Sham, 1965] ile Hohenberg ve Kohn [Görling, 1999] tarafından çok elektronlu atomlara uygulanabilecek şekilde geliştirilmiştir. Bu çalışmada Quantum Espresso paket programı ile yapılan hesaplamalarda Kohn-Sham yaklaşımı kullanılmıştır.

4.2 Quantum Espresso

Quantum Espresso (open source package for research in electronic structure, simulation, and optimization) nano ölçekte elektronik yapı hesaplamaları ve malzeme modellemeleri için geliştirilmiştir [Giannozzi et al., 2009; Giannozzi et. al., 2017]. Hesaplamaların temeli yoğunluk fonksiyonel teorisine dayalı olup Schrödinger dalga denklemi çözümlerine düzlem dalga ve pseudopotansiyellerle [Dal Corso, 2014] ulaşılmaktadır.

4.2.1 Schrödinger Dalga Denklemi Sayısal Çözümleri

Çok elektronlu atomların (N tane) Schrödinger dalga denklemi (4.1) ile verilir.

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^N V(\mathbf{r}_i) + \sum_{i=1}^N \sum_{j<i} U(\mathbf{r}_i \mathbf{r}_j) \right] \Psi = E \Psi \quad (4.1)$$

Bu denklemde soldan birinci terim kinetik enerjiyi, soldan ikinci terim elektron-elektron etkileşmelerini ve soldan üçüncü terim ise dış potansiyel enerjiyi temsil etmektedir. Denklemdaki elektron-elektron etkileşmelerinin varlığı bu denklemin çok cisim problemi olduğunu belirtir. Bu problemin çözümü için elektron yoğunluğu kavramı göz önüne alınır ve bu yoğunluk bireysel dalga fonksiyonları cinsinden yazılır.

$$n(\mathbf{r}) = 2 \sum_i \Psi_i^*(\mathbf{r}) \Psi_i(\mathbf{r}) \quad (4.2)$$

Bu yoğunluktan fonksiyonele geçiş yapılması Birinci Hohenberg-Kohn teoremi [Görling, 1999] ile mümkün olur. Teorem şudur [Steckel, J. A. & Sholl, D., 2009]: “Schrödinger Denkleminde elde edilen taban-durum enerjisi elektron yoğunluğunun tek bir fonksiyoneldir.” “Fonksiyonel” bir fonksiyonun alınıp o fonksiyondan sayı tanımlama işlemidir.

Birinci Hohenberg-Kohn teoremi taban-durum dalga fonksiyonu ve taban-durum elektron yoğunluğu arasında bire-bir haritalama olduğunu ifade eder. Fonksiyonelin kendisini bulmak için ise ikinci Hohenberg-Kohn Teoremi kullanılır: “Toplam fonksiyonelin enerjisini minimize eden elektron yoğunluğu, Schrödinger denkleminin tam çözümüne karşılık gelen doğru elektron yoğunluğudur.” İfadedeki “doğru” fonksiyonel formu çok elektronlu atomlar için Schrödinger dalga denkleminin yaklaşık çözümlerine ulaştıracaktır.

$$E[\{\Psi_i\}] = E_{bilinen}[\{\Psi_i\}] + E_{xc}[\{\Psi_i\}] \quad (4.3)$$

$$E_{bilinen}[\{\Psi_i\}] = -\frac{\hbar^2}{m} \sum_i \int \Psi_i^* \nabla^2 \Psi_i d^3r + \int V(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) d^3r \quad (4.4)$$

$$+ \frac{e^2}{2} \iint \frac{n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r d^3r' + E_{iyon}$$

Denklem (4.4)’te sağdaki terimler sırasıyla, elektronların kinetik enerjileri, elektronlar ve çekirdekler arasındaki Coulomb etkileşimleri, elektron çiftleri arasındaki Coulomb etkileşimleri ve çekirdek çiftleri arasındaki Coulomb etkileşimleridir. $E_{xc}[\{\Psi_i\}]$ ise “değiş tokuş korelasyon fonksiyoneli” olup “bilinen” terimlerin içermediği diğer bütün kuantum mekaniksel etkileşimleri kapsar. Toplam enerji fonksiyonelinin minimum enerji çözümleri Kohn-Sham yaklaşımı ile çözülür: “Elektron yoğunluğunun bulunması için tek-elektron denklemleriyle oluşturulan denklem setinin çözülmesi gerekir.” Kohn-Sham denklemleri oluşturulur.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r}) + V_{xc}(\mathbf{r}) \right] \Psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \Psi_i(\mathbf{r}) \quad (4.5)$$

Denklemin sol tarafında $V(\mathbf{r})$, $V_H(\mathbf{r})$ ve $V_{XC}(\mathbf{r})$ olmak üzere üç tane potansiyel terimi vardır. $V(\mathbf{r})$ terimi elektron ve atomik çekirdekler topluluğu arasındaki etkileşmeyi tanımlar. $V_H(\mathbf{r})$ terimi Hartree potansiyelidir ve (4.5) ile tanımlanır.

$$V_H(\mathbf{r}) = e^2 \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' \quad (4.6)$$

$V_{XC}(\mathbf{r})$, tek-elektron denklemlerine yapılan değiş-tokuş ve korelasyon katkılarını tanımlar. Değiş tokuş-korelasyon enerjisinin “fonksiyonel türevi” olarak tanımlanabilir:

$$V_{XC}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{XC}(\mathbf{r})}{\delta n(\mathbf{r})} \quad (4.7)$$

Kohn-Sham denklemlerini çözmek için Hartree potansiyelini tanımlamamız ve Hartree potansiyelini tanımlamak için de elektron yoğunluğunu bilmemiz gerekir. Elektron yoğunluğunu bulabilmek için tek-elektron dalga fonksiyonlarını bilmeliyiz ve onları bilmek için de Kohn-Sham tek-elektron dalga fonksiyonlarını bilmeliyiz ve onları bilmek için de Kohn-Sham Denklemlerini çözmeliyiz. Bu döngüyü kırıp yaklaşık çözüme ulaşmak için aşağıdaki gibi bir iteratif yol ele alınır.

1. Bir başlangıç, deneme elektron yoğunluğu tanımlayın, $n(\mathbf{r})$.
2. Tek-parçacık dalga-fonksiyonlarını, $\Psi_i(\mathbf{r})$, bulmak için bu deneme elektron yoğunluğu kullanılarak tanımlanan Kohn-Sham denklemlerini çözün.
3. Adım-2'den elde edilen Kohn-Sham tek-parçacık dalga-fonksiyonları ile tanımlanan elektron yoğunluğunu hesaplayın, $n_{KS}(\mathbf{r}) = 2 \sum \Psi_i^*(\mathbf{r})\Psi_i(\mathbf{r})$.
4. Hesaplanan elektron yoğunluğunu, $n_{KS}(\mathbf{r})$, Kohn-Sham denklemlerini çözmek için kullanılan elektron yoğunluğu $n(\mathbf{r})$ ile karşılaştırın. Eğer her iki yoğunluk aynı ise, o zaman bu taban-durum elektron yoğunluğudur ve toplam enerjiyi hesaplamak için kullanılabilir. Eğer iki yoğunluk birbirinden farklı ise, o zaman, deneme elektron yoğunluğu bir şekilde güncellenmelidir. Bu durumda, süreç 2. adımdan tekrar başlar ve her iki yoğunluk aynı olana kadar iteratif olarak devam eder.

Quantum Espresso paket programı bu iteratif işlemleri sayısal olarak gerçekleştirmekte ve bu program yardımı ile çok elektronlu Schrödinger dalga denkleminin sayısal çözümleri elde edilmektedir. Bu çözümler ile atomik ölçekte

istenilen malzemenin istenilen özelliği programın hesaplama sınırları içerisinde tayin edilebilmektedir.

4.2.2 Quantum Espresso Hesaplama Parametreleri

Bu çalışmada Genel Gradyant Yaklaşımı (GGA) temelli rel-PBE.kjpaw ve PBE.kjpaw pseudopotansiyelleri [Perdew, Burke & Ernzerhof, 1998; Kresse & Joubert, 1999] kullanılmıştır. Hesaplamalarda lantanit hekzaborürlerin f elektronları etkileşmeye dâhil olduğu için Hubbard [Hubbard, 1967; Himmetoglu, Floris, De Gironcoli & Cococcioni, 2014] enerjileri de hesaplama dâhil edildi. Quantum Espresso programında hesaplama yapılacak elementlerin parametreleri Tablo (4.1)'dir.

Tablo 4.1: Quantum Espresso programında hesaplama yapılacak malzemelere ait parametreler

Element	Kütle Numarası (g)	İlkel Hücre Örgü Parametresi (Å)	Hubbard_(U) (eV)	Hubbard_(J) (eV)
B	10.811	-----	-----	-----
Ca	40.078	4.150000	-----	-----
Sr	87.620	4.200000	-----	-----
Ba	137.327	4.280000	-----	-----
La	138.905	4.165000	-----	-----
Ce	140.116	4.110000	4.30	0.50
Pr	140.908	4.150000	4.80	0.60
Nd	144.242	4.140000	4.80	0.60
Pm	145.229	4.165000	4.30	0.80
Sm	150.36	4.120000	4.00	0.60

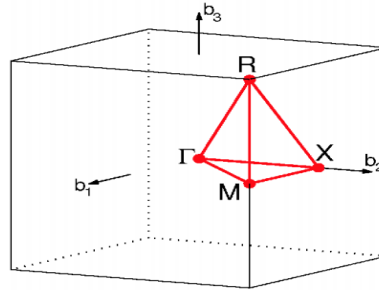
4.3 Malzemenin Topolojik Karakterinin Analizi

Kristal nokta grup simetrisine göre kristal yapıya sahip bir bileşiğin topolojik özelliğe sahip olup olmadığının matematiksel bir yöntemi mevcuttur. Bu yöntem Fu-Kane formülü olarak bilinir. Bunun için ilk önce Kısım 2.6'da belirtilen tablolara göre hangi uzay grubuna ait olduğu belirlenir. Bu uzay grubundaki yüksek simetri noktaları tespit edilir. Bu simetri noktalarındaki Fermi enerjisinin altındaki işaretlerin çarpımına bakılır. Öneğin bu çalışmadaki malzemelerin hepsinin yüksek simetri noktaları Γ , X, M, Γ ve R'dir. Uzay grubu $pm\bar{3}m$ olduğundan indekste Γ belirtildiği için Γ ifadesinin parite değeri iki defa diğerlerinin parite değerlerini ise bir defa çarpılır. Sonuç (-) ise malzeme topolojik özellikte (+) ise sıradan özelliktedir. Nokta grup simetrisi matematikteki grup teorisinin bir uygulamasıdır [Dresselhaus, M., Dresselhaus, G. & Jorio, 2007].

5. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

5.1 Sonuçlar

TÜBİTAK-TRUBA süper bilgisayarlarında Quantum Espresso 6.7.0 paket programı ile CaB_6 , SrB_6 , BaB_6 , LaB_6 , CeB_6 , PrB_6 , NdB_6 , PmB_6 ve SmB_6 bileşiklerinin kristal yapıları oluşturuldu. Bu bileşiklerin hepsi basit kübik yapıya ve $\text{pm}\bar{3}\text{m}$ uzay grubuna sahiptir. Bu bileşikler kendi aralarında farklı stokiyo-metrilerle birleştirildi ve kristal yapıları oluşturuldu. Her bir bileşik için üç ayrı hesap yapıldı. Bu hesaplar scf (self consistent field), band (enerji-momentum grafiği için) ve bands (band symmetry) hesaplarıdır. Scf hesabı ile Fermi enerjileri, band hesabı ile dalga fonksiyonları ve bands hesabı ile de simetri analizinden pariteler bulundu. Scf ve band hesabında kesilim enerjisi bileşiğin optimum kesilim enerjisi değerine göre 70-120 Rydberg (5.14-8.82 eV), band sayısı 400, birinci Brillouin bölgesindeki (Şekil 5.1) yüksek simetri noktaları (bak. Tablo 5.1) belirlendi.



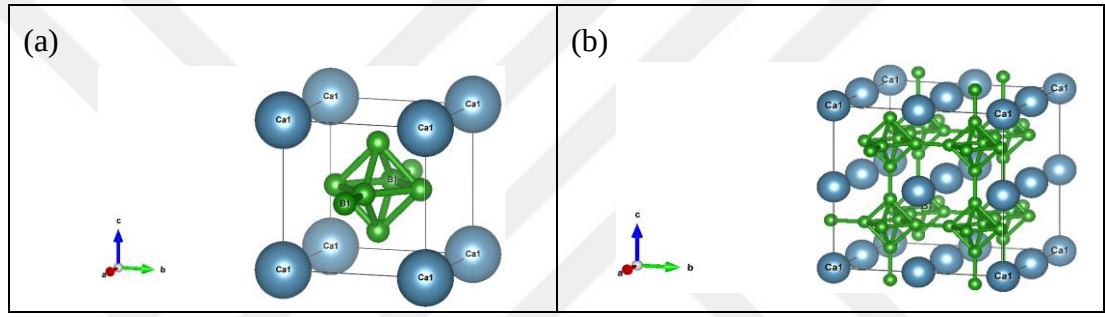
Şekil 5.1: Basit kübik yapının ters örgü uzayı Brillouin bölgeleri.

Tablo 5.1: Basit kübik yapının Brillouin bölgesindeki yüksek simetri noktalarının ters örgü uzayında koordinatları

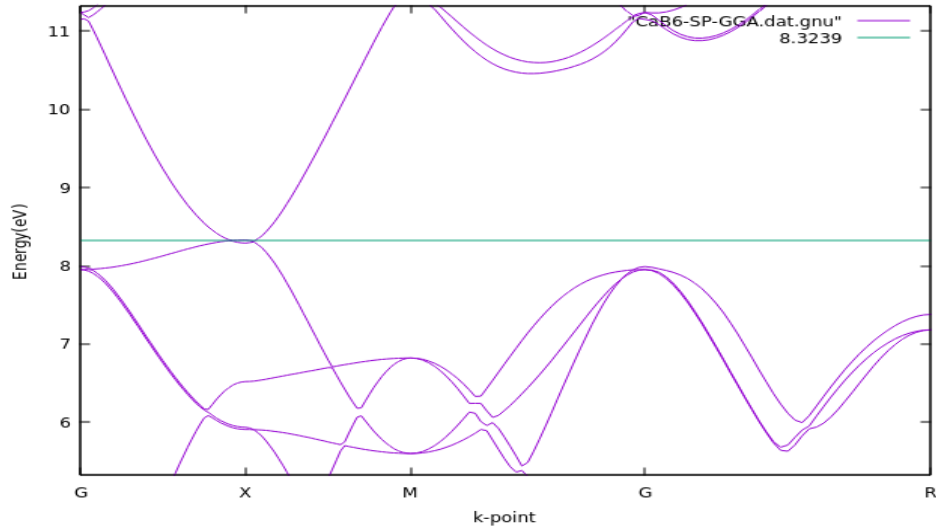
Bravais No	Sembol	Koordinat
1	Γ	(0.0000 0.0000 0.0000)
	X	(0.0000 0.5000 0.0000)
	M	(0.5000 0.5000 0.0000)
	Γ	(0.0000 0.0000 0.0000)
	R	(0.5000 0.5000 0.5000)

5.1.1 Tekli Hekzaborürler

Tekli hekzaborürlere ait nokta grup simetrileri ve hesaplamalar sonucu elde edilen parite değerleri Tablo (5.2)'de verilmiştir. Bu bileşikler zaman tersinme simetrisine sahip olmadığı halde bazıları topolojik özelliğe sahiptir. Topolojik Kondo yalıtkanı olan SmB_6 bileşiği de nokta grup simetrisine göre topolojik özelliğe sahiptir. Band grafiklerinde dikey eksen enerjiyi, yatay eksen ters örgü uzayında momentumu, grafiklerin ortasındaki yatay düz çizgi ise Fermi seviyesini temsil etmektedir. Grafiklerin yatay eksenindeki harfler yüksek simetri noktalarının olduğu koordinatlardır.

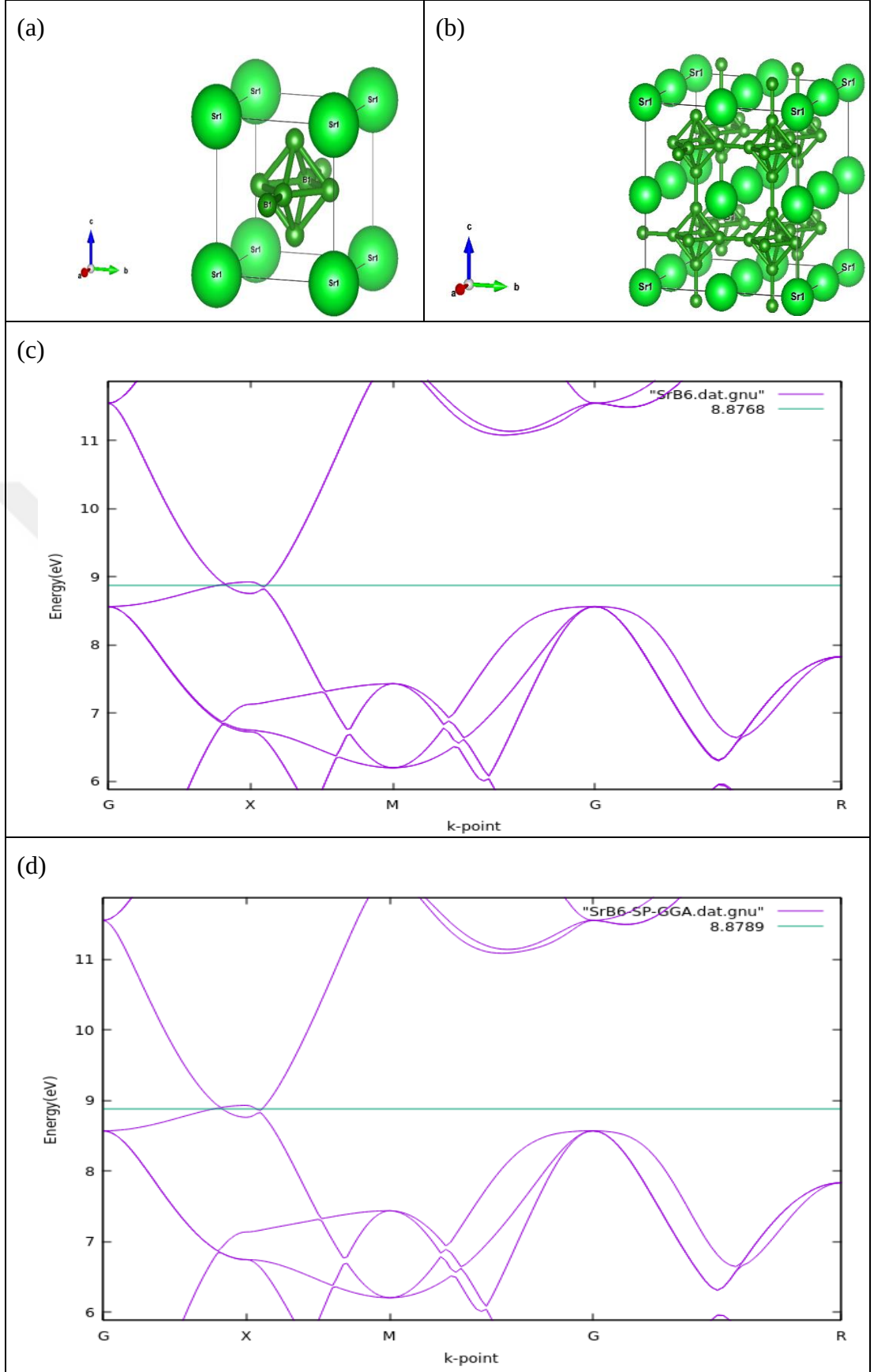


Şekil 5.2: CaB_6 bileşiğine ait (a) İlkel birim hücre (b) Süper hücre

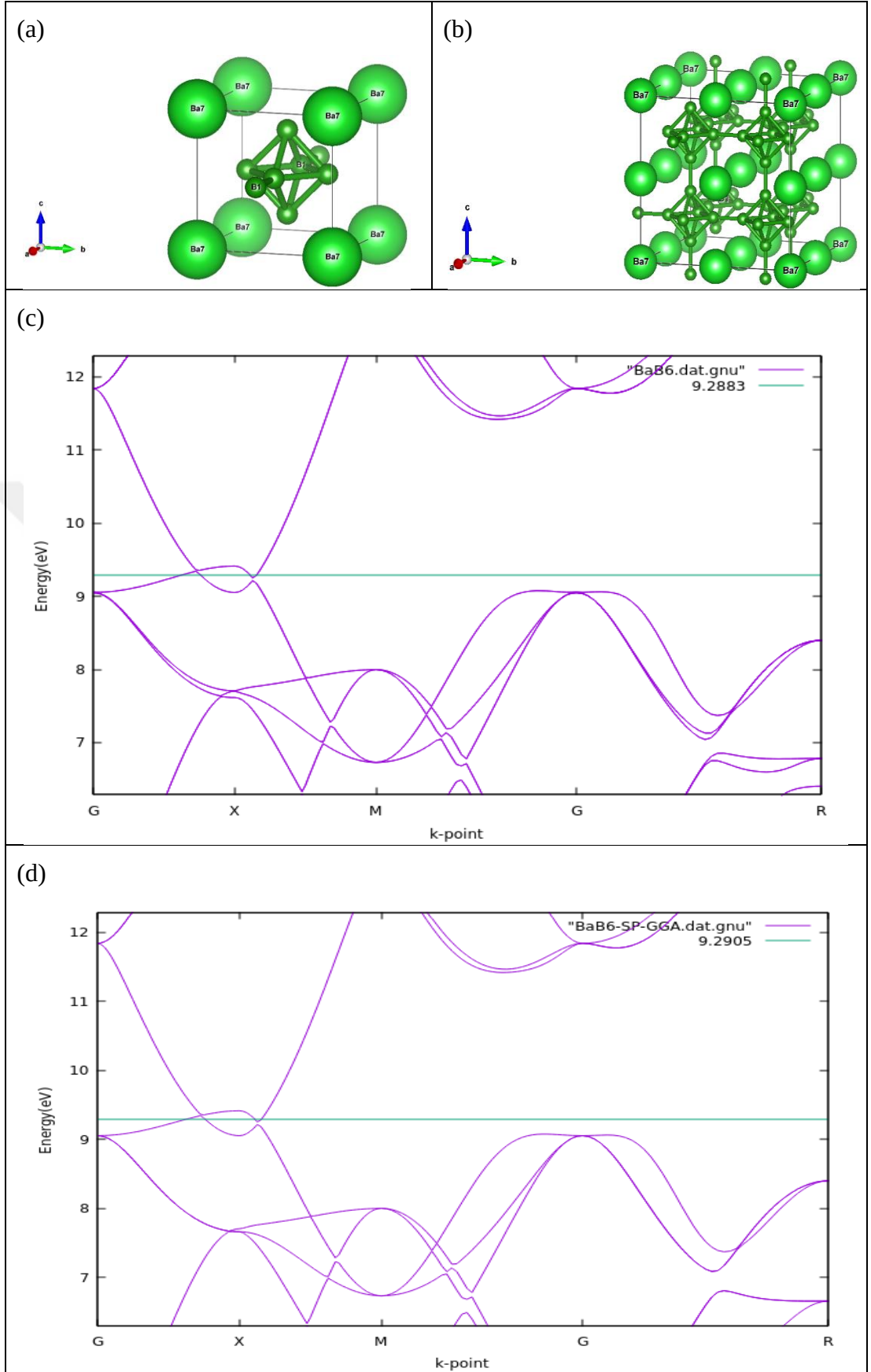


Şekil 5.3: CaB_6 bileşiğine ait spin polarizasyonlu band grafiği

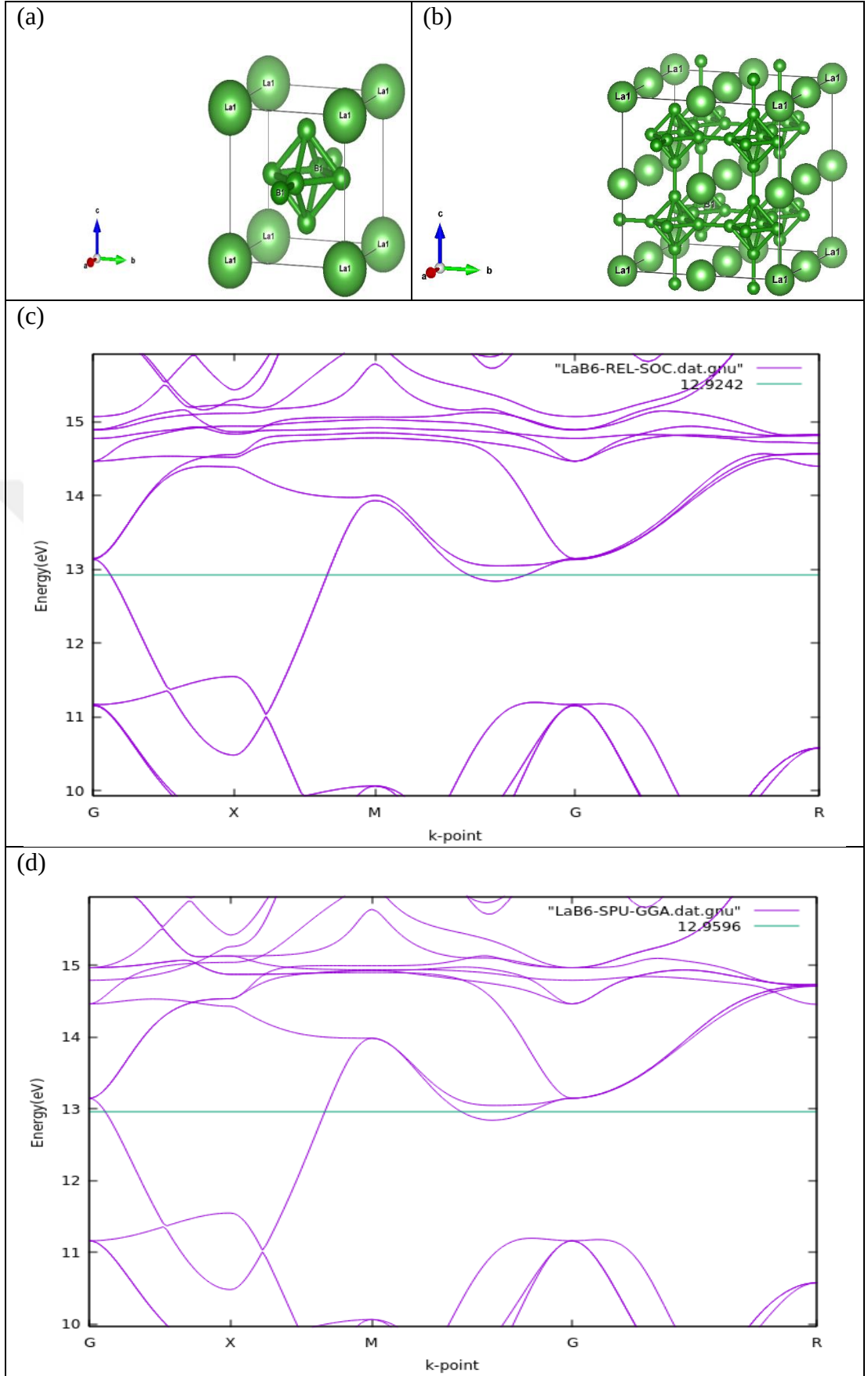
CaB_6 bileşiğinde eşlenmemiş elektronlar olmadığı için toplam manyetizasyon sıfırdır. Bu nedenler spin polarize band grafiğinde yukarı ve aşağı spinli bandlar ayrılmamıştır.



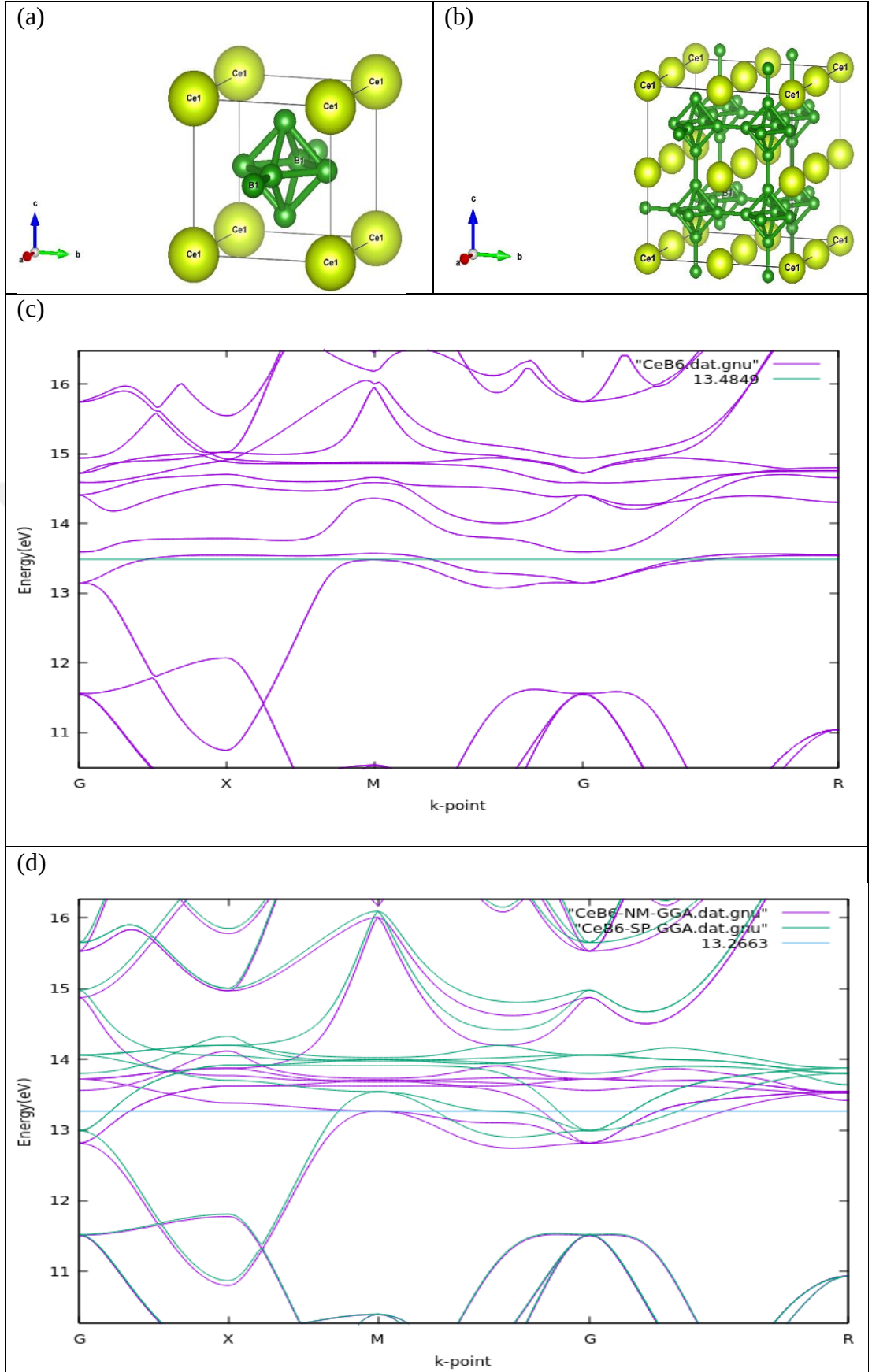
Şekil 5.4: SrB_6 bileşiğine ait (a) İlkel birim hücre (b) Süper hücre (c) Relativite etkili band grafiği (d) Spin polarizasyonlu band grafiği



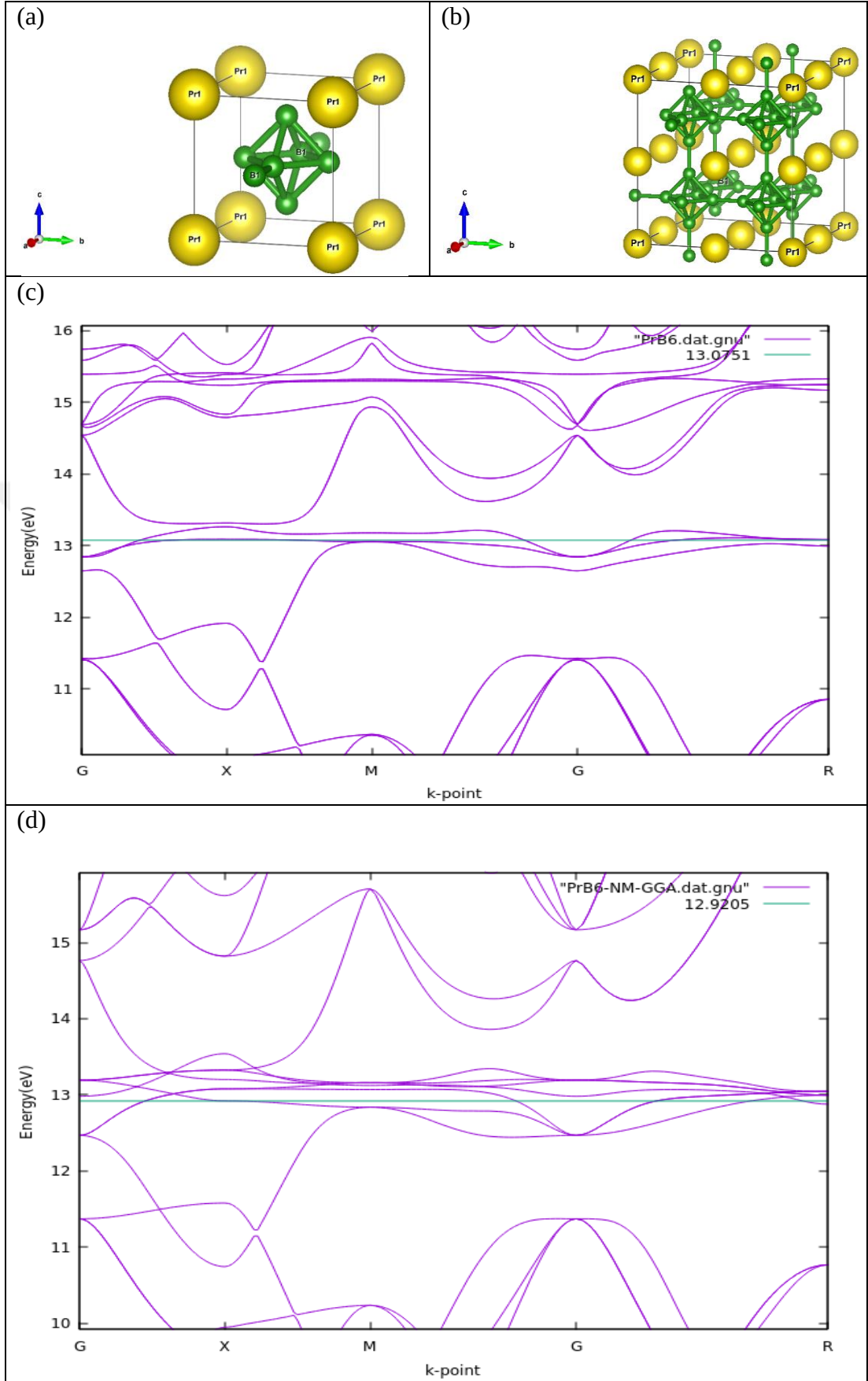
Şekil 5.5: BaB_6 bileşiğine ait (a) İlkel birim hücre (b) Süper hücre (c) Relativite etkili band grafiği (d) Spin polarizasyonlu band grafiği



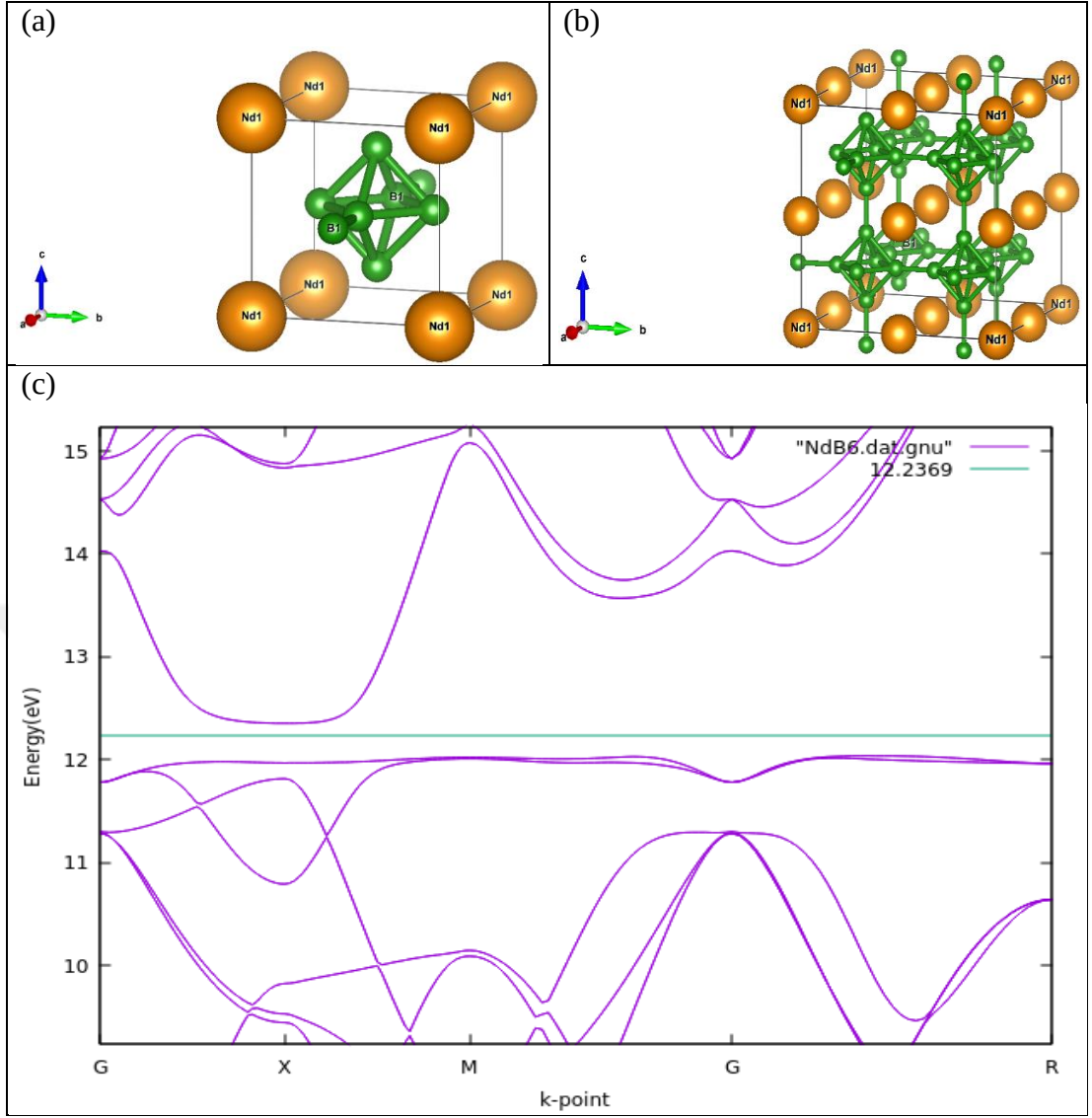
Şekil 5.6: LaB₆ bileşiğine ait (a) İlkel birim hücre (b) Süper hücre (c) Relativite etkili band grafiği (d) Spin polarizasyonlu band grafiği



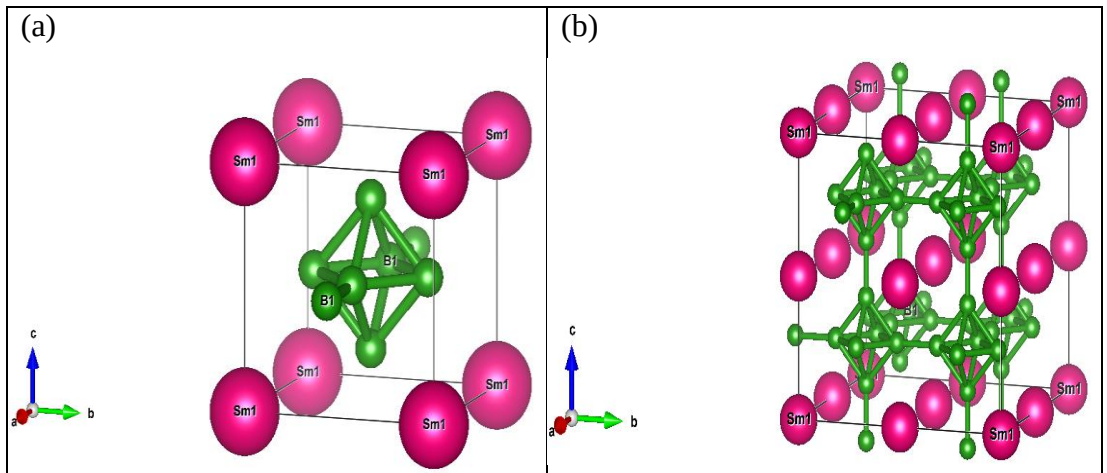
Şekil 5.7: CeB₆ bileşiğine ait (a) İlkel birim hücre (b) Süper hücre (c) Relativite etkili band grafiği (d) Spin polarizasyonlu band grafiği



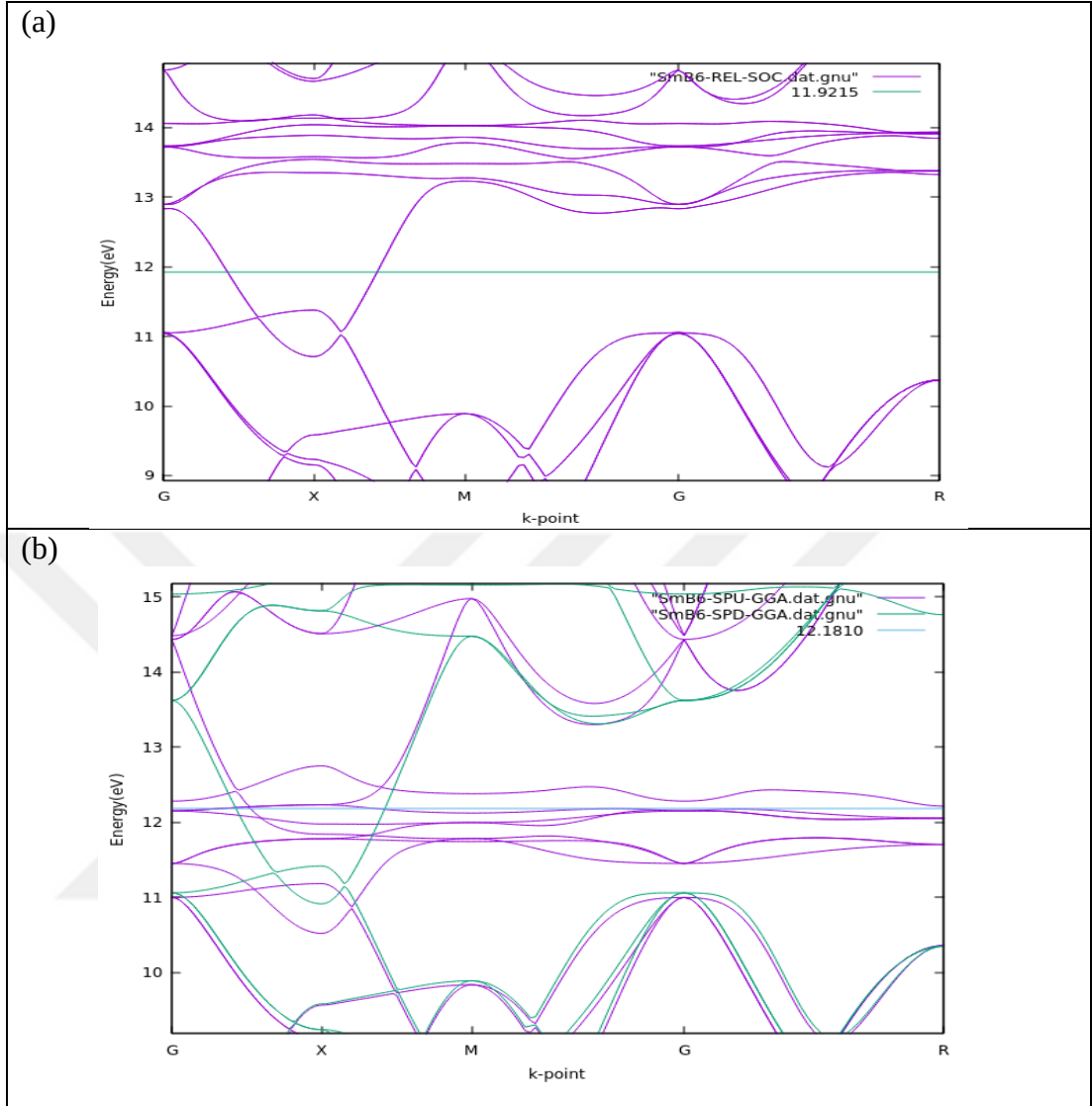
Şekil 5.8: PrB_6 bileşiğine ait (a) İlkel birim hücre (b) Süper hücre (c) Relativite etkili band grafiği (d) Spin polarizasyonlu band grafiği



Şekil 5.9: NdB₆ bileşiğine ait (a) İlkel birim hücre (b) Süper hücre (c) Relativite etkili band grafiği



Şekil 5.10: SmB₆ bileşiğine ait (a) İlkel birim hücre (b) Süper hücre



Şekil 5.11: SmB₆ bileşiğine ait (a) İlkel birim hücre (b) Süper hücre (c) Relativite etkili band grafiği (d) Spin polarizasyonlu band grafiği

Alkali ve lantanit hekzaborürler ile yapılan hesaplamalarda band yapıları incelendiğinde NdB₆ hariç diğerleri metalik özelliğe sahiptir. NdB₆ bileşiğinin band yapısında Fermi seviyesi boyunca hiç band olmayıp bir yarıiletkeninkine benzeyen band yapısına sahiptir. PrB₆ ve NdB₆ bileşiklerinde düz band (flat band) gözlenmektedir. CaB₆, SrB₆, BaB₆, LaB₆ ve PrB₆ bileşiklerinde manyetizma yoktur. CeB₆'da zayıf manyetik, NdB₆ ve SmB₆'da ise manyetik etkilerin olduğu band yapılarından gözlenebilmektedir. Bazı bileşiklerin non-manyetik ve manyetik hesapları teknik nedenlerden dolayı gerçekleştirilememiştir.

Tablo 5.2: Tekli hekzaborürlerle yapılan hesaplamalar sonucu elde edilen yüksek simetri noktaları parite değerleri

Bileşik	Uzay Grubu	Γ	X	M	Γ	R	Parite	Karakter
CaB ₆	pm $\bar{3}$ m	(+)	(+)	(+)	(+)	(-)	(-)	Topolojik
SrB ₆	pm $\bar{3}$ m	(+)	(+)	(+)	(+)	(-)	(-)	Topolojik
BaB ₆	pm $\bar{3}$ m	(+)	(+)	(+)	(+)	(-)	(-)	Topolojik
LaB ₆	pm $\bar{3}$ m	(+)	(-)	(+)	(+)	(-)	(+)	Sıradan
CeB ₆	pm $\bar{3}$ m	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	Topolojik
PrB ₆	pm $\bar{3}$ m	(+)	(-)	(+)	(+)	(+)	(-)	Topolojik
NdB ₆	pm $\bar{3}$ m	(-)	(+)	(+)	(-)	(+)	(+)	Sıradan
PmB ₆	pm $\bar{3}$ m	(+)	(+)	(-)	(+)	(-)	(+)	Sıradan
SmB ₆	pm $\bar{3}$ m	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	Topolojik

Tablo 5.3: Tekli hekzaborürler ile yapılan hesaplamalarda elde edilen Fermi enerjileri ve toplam manyetizasyon değerleri

Bileşik	Fermi Enerjisi (Relativistik) (eV)	Fermi Enerjisi (Non-Manyetik) (eV)	Fermi Enerjisi (Manyetik) (eV)	Toplam Manyetizasyon (μ_B /hücre)
CaB ₆	8.3552	8.3239	8.3239	0.00
SrB ₆	8.8768	8.8789	8.8789	0.00
BaB ₆	9.2883	9.2905	9.2905	0.00
LaB ₆	12.9242	12.9596	12.9596	0.00
CeB ₆	13.4849	13.2663	13.2452	0.70
PrB ₆	13.0751	12.9205	12.8705	0.00
NdB ₆	12.2369	12.4678	12.3321	3.65
PmB ₆	12.1799	12.4700	12.4380	4.64
SmB ₆	11.9215	12.1810	12.2551	5.73

Tablo 5.4: Tekli hekzaborürler ile yapılan hesaplamalarda her elementten gelen manyetik moment değerleri

Bileşik	Element	Manyetik Moment (μ_B /Hücre)	Element	Manyetik Moment (μ_B /Hücre)
CaB ₆	Ca	0.0000	B	0.0000
SrB ₆	Sr	0.0000	B	0.0000
BaB ₆	Ba	0.0000	B	0.0000
LaB ₆	La	0.0000	B	0.0000
CeB ₆	Ce	0.6035	B	0.0003
PrB ₆	Pr	0.0000	B	0.0000
NdB ₆	Nd	3.3318	B	-0.0043
PmB ₆	Pm	4.4511	B	-0.0024
SmB ₆	Sm	5.5672	B	-0.0041

5.1.2 Katkılı Hekzaborürler

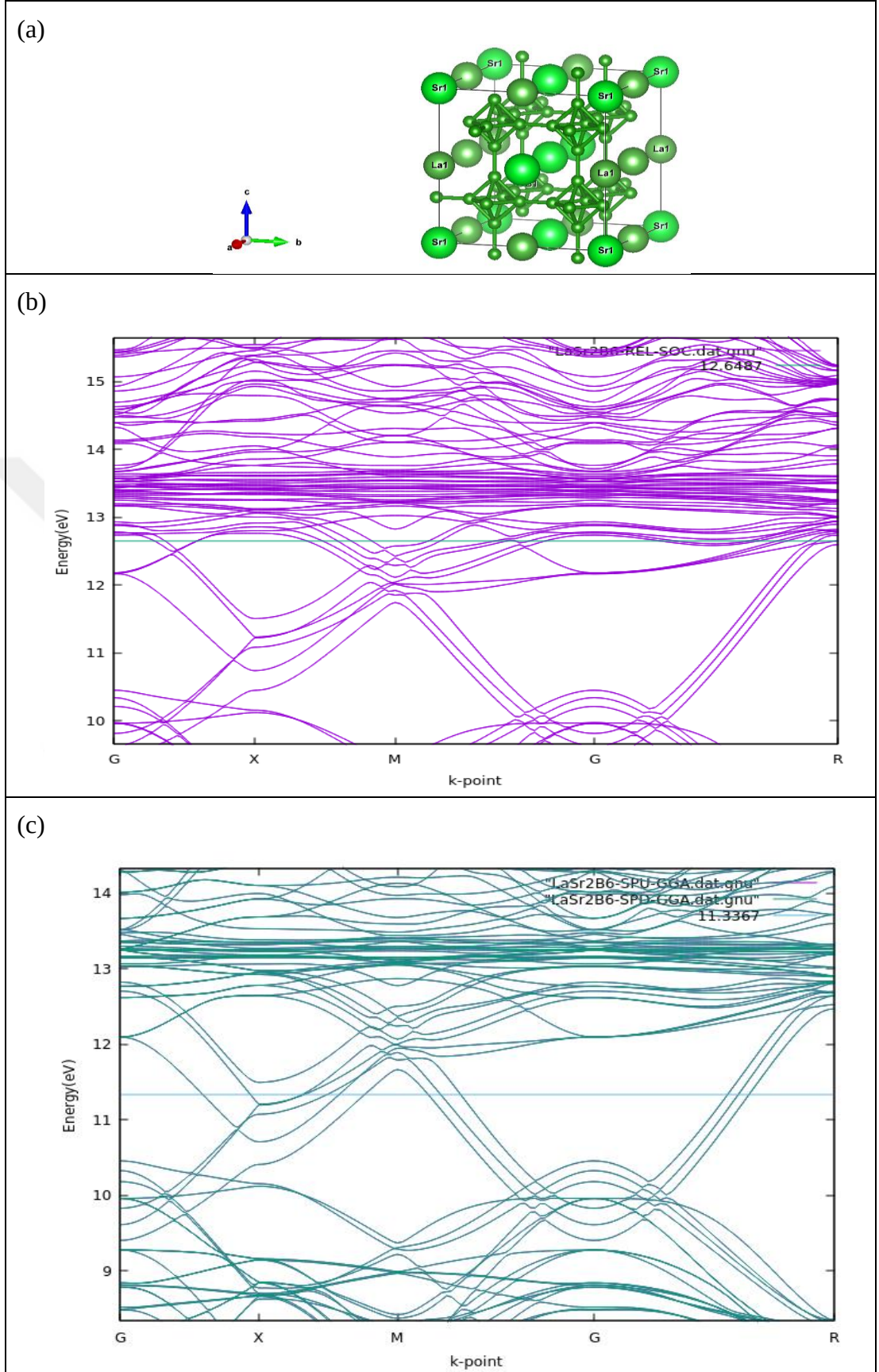
Bu çalışmada lantanit serisindeki LaB₆, CeB₆, PrB₆, NdB₆ ve SmB₆ hekzaborürleri ile alkali serisindeki CaB₆, SrB₆ ve BaB₆ hekzaborürleri katkılanarak çoklu hekzaborürler elde edilmiştir. Bu katkılar şunlardır: Bir lantanit hekzaborüre karşılık bir alkali hekzaborür seçildi. Elde edilen ikili hekzaborür üç farklı stokiometride eşleştirildi. Birinci stokiometri; 0.75 lantanit hekzaborür ile 0.25 alkali hekzaborür. İkinci stokiometri; 0.50 lantanit hekzaborür ile 0.50 alkali hekzaborür. Üçüncü stokiometri 0.25 lantanit hekzaborür ile 0.75 alkali hekzaborür. Bu katkılar sonucu birçok bileşikte nokta grup simetrisine dayalı topolojik özellik gözlenmiştir. Bu gözleme ek olarak topolojik özellik gösteren bileşiklerin bir kısmında da yüksek manyetizasyon değerleri gözlenmiştir. Bu değerler spin polarize band grafiklerindeki spin yukarı ve spin aşağı bandlara bakılarak anlaşılabilir. Aşağıdaki tablo ve grafikler bu katkılanan hekzaborürler ile yapılan hesaplama sonucunda elde edilmiştir.

Tablo 5.5: LaB₆ bileşiğinin CaB₆, SrB₆ ve BaB₆ ile yaptığı farklı stokiometrilili bileşiklerde elde edilen Fermi enerjileri ve manyetizasyon değerleri

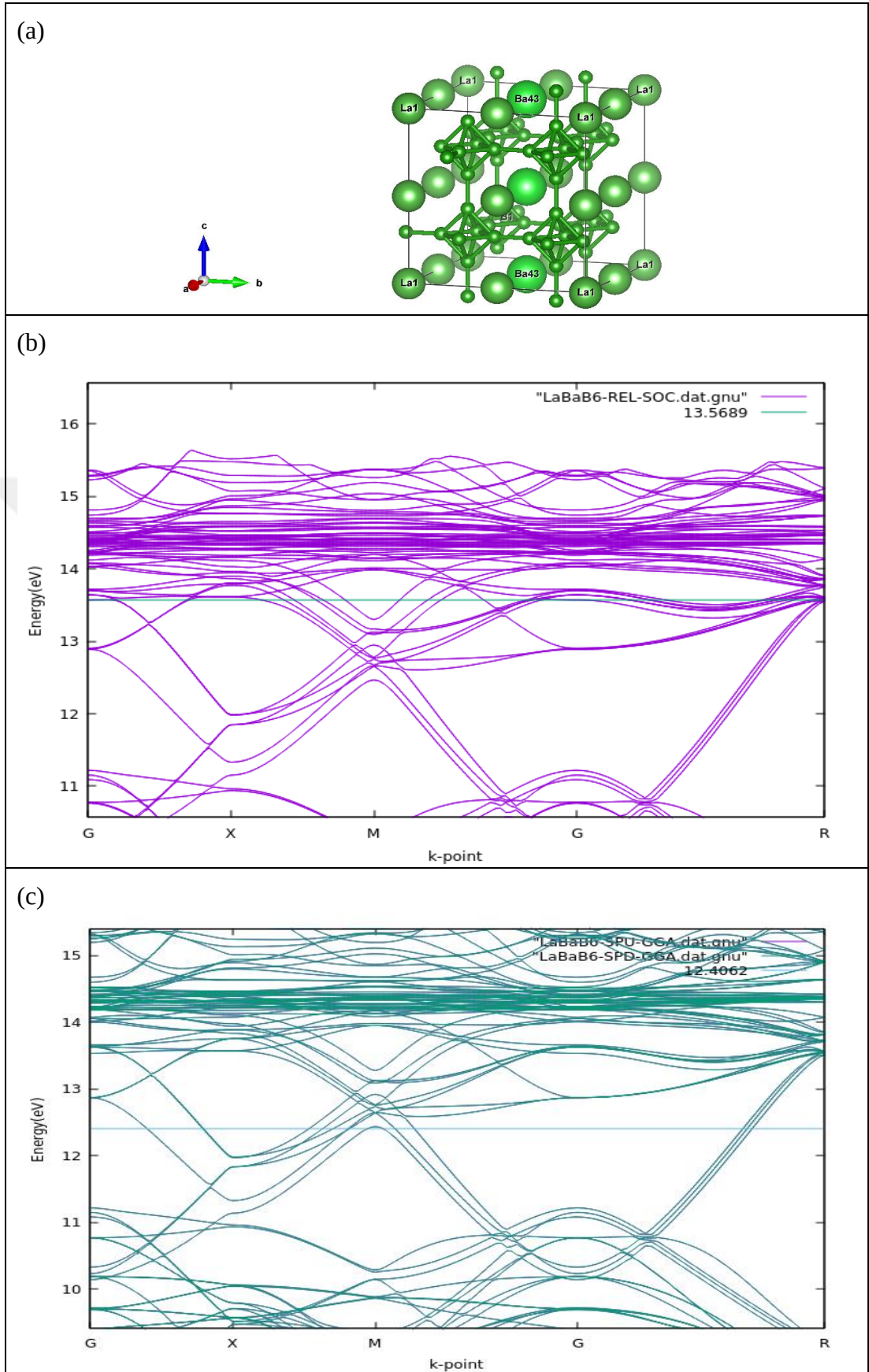
Bileşik	Fermi Enerjisi (Relativistik) (eV)	Fermi Enerjisi (Non-Manyetik) (eV)	Fermi Enerjisi (Manyetik) (eV)	Toplam Manyetizasyon (μ_B /hücre)
La _{0.75} Ca _{0.25} B ₆	13.0287	12.8272	12.8273	0.00
La _{0.50} Ca _{0.50} B ₆	13.0263	11.9098	11.9100	0.00
Ca _{0.75} La _{0.25} B ₆	11.5165	9.8747	9.8747	0.00
La _{0.75} Sr _{0.25} B ₆	13.2646	12.1387	12.1388	0.00
La _{0.50} Sr _{0.50} B ₆	12.6487	11.3367	11.3367	0.00
Sr _{0.75} La _{0.25} B ₆	11.7418	10.1507	10.1505	0.00
La _{0.75} Ba _{0.25} B ₆	13.5689	12.4062	12.3836	0.00
La _{0.50} Ba _{0.50} B ₆	13.2403	11.5575	11.5574	0.00
Ba _{0.75} La _{0.25} B ₆	11.82687	10.2438	10.2438	0.00

Tablo 5.6: LaB₆ bileşiğinin CaB₆, SrB₆ ve BaB₆ ile yaptığı farklı stokiometrilili bileşiklerde elde edilen parite değerleri

Bileşik	Uzay grubu	Γ	X	M	Γ	R	Parite	Karakter
La _{0.75} Ca _{0.25} B ₆	$pm\bar{3}m$	(-)	(-)	(+)	(-)	(-)	(+)	Sıradan
La _{0.50} Ca _{0.50} B ₆	$pm\bar{3}m$	(?)	(?)	(?)	(?)	(?)	(?)	Belirsiz
Ca_{0.75}La_{0.25}B₆	$pm\bar{3}m$	(+)	(-)	(+)	(+)	(+)	(+)	Topolojik
La _{0.75} Sr _{0.25} B ₆	$pm\bar{3}m$	(+)	(-)	(+)	(+)	(-)	(+)	Sıradan
La _{0.50} Sr _{0.50} B ₆	$pm\bar{3}m$	(-)	(-)	(+)	(-)	(-)	(+)	Sıradan
Sr _{0.75} La _{0.25} B ₆	$pm\bar{3}m$	(-)	(-)	(+)	(-)	(-)	(+)	Sıradan
La_{0.75}Ba_{0.25}B₆	$pm\bar{3}m$	(+)	(-)	(+)	(+)	(+)	(-)	Topolojik
La _{0.50} Ba _{0.50} B ₆	$pm\bar{3}m$	(-)	(-)	(+)	(-)	(-)	(+)	Sıradan
Ba_{0.75}La_{0.25}B₆	$pm\bar{3}m$	(-)	(-)	(+)	(-)	(+)	(-)	Topolojik



Şekil 5.12: $\text{La}_{0.50}\text{Sr}_{0.50}\text{B}_6$ bileşiğine ait (a) Kristal süper hücre (b) Relativite etkili band grafiği (c) Spin polarizasyonlu band grafiği



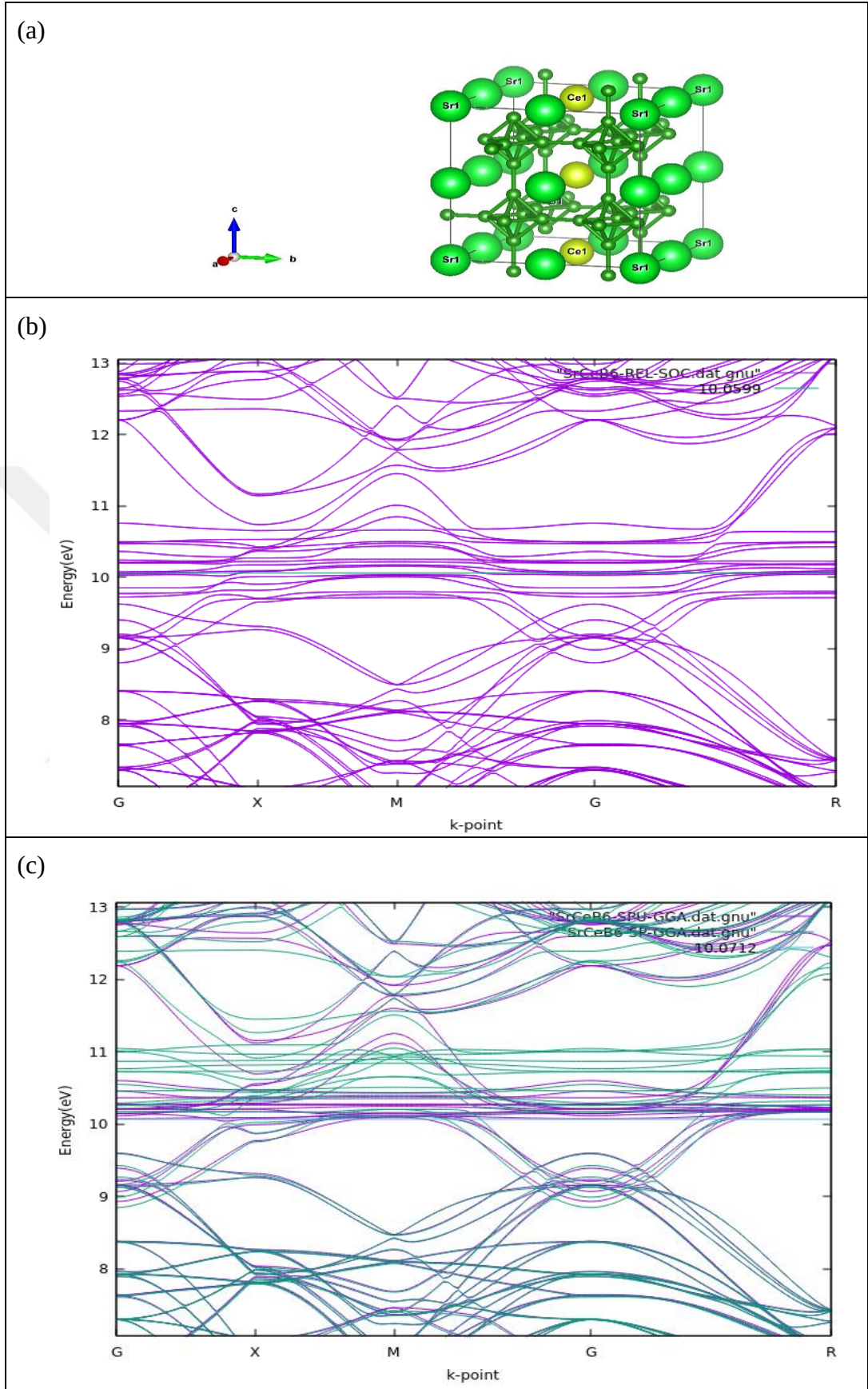
Şekil 5.13: $\text{La}_{0.75}\text{Ba}_{0.25}\text{B}_6$ bileşiğine ait (a) Kristal süper hücre (b) Relativite etkili band grafiği (c) Spin polarizasyonlu band grafiği

Tablo 5.7: CeB₆ bileşiğinin CaB₆, SrB₆ ve BaB₆ ile yaptığı farklı stokiometrilili bileşiklerde elde edilen Fermi enerjileri ve manyetizasyon değerleri

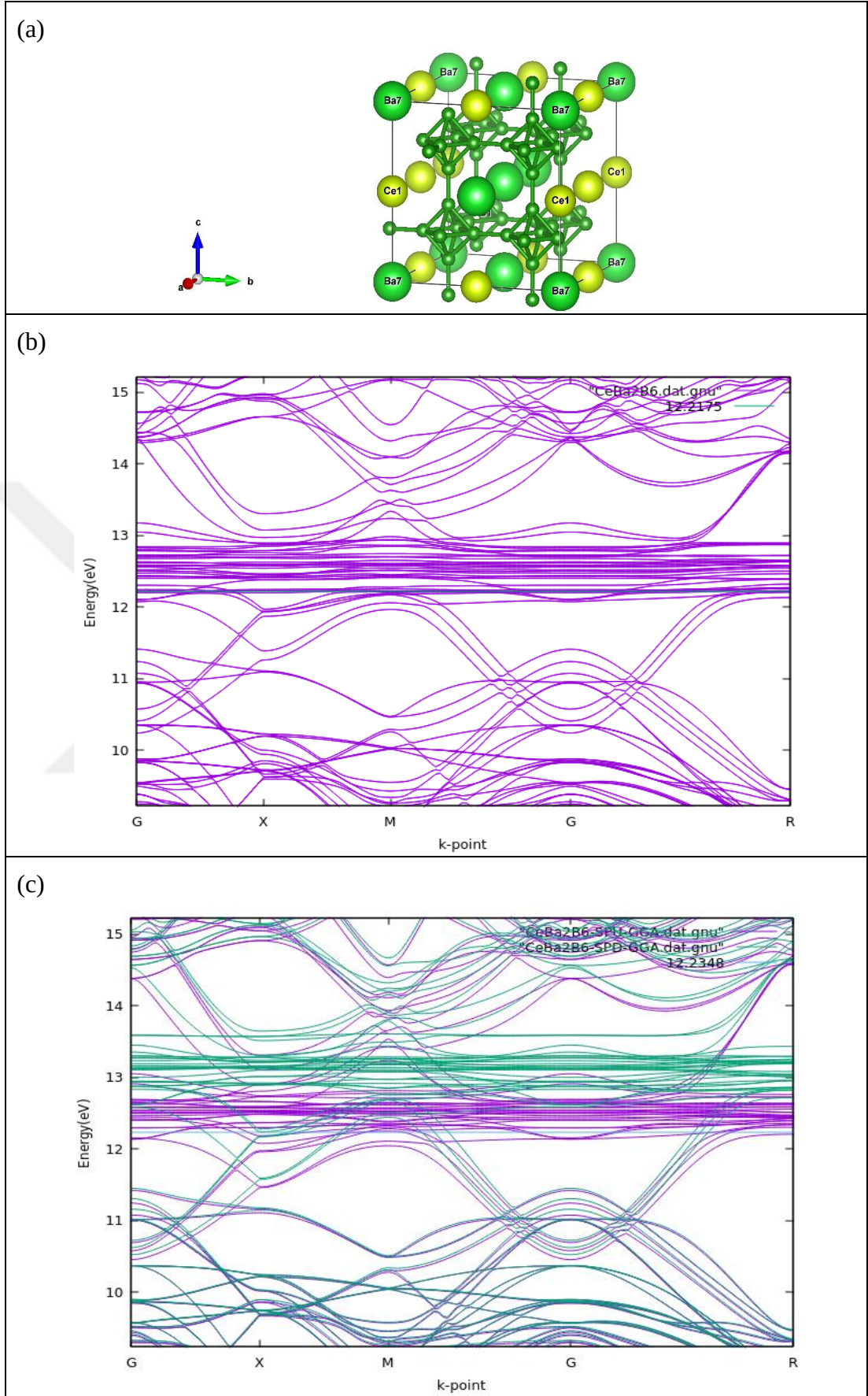
Bileşik	Fermi Enerjisi (Relativistik) (eV)	Fermi Enerjisi (Non-Manyetik) (eV)	Fermi Enerjisi (Manyetik) (eV)	Toplam Manyetizasyon (μ _B /hücre)
Ce _{0.75} Ca _{0.25} B ₆	12.2719	12.2157	12.2240	5.34
Ce _{0.50} Ca _{0.50} B ₆	11.1932	11.9995	11.1992	2.23
Ca _{0.75} Ce _{0.25} B ₆	9.7855	10.1128	10.1100	0.83
Ce _{0.75} Sr _{0.25} B ₆	12.4770	12.4575	12.4713	6.39
Ce _{0.50} Sr _{0.50} B ₆	11.6555	11.6724	11.6822	4.41
Sr _{0.75} Ce _{0.25} B ₆	10.1180	10.0712	10.0720	0.92
Ce _{0.75} Ba _{0.25} B ₆	12.7462	12.7519	12.7386	4.17
Ce _{0.50} Ba _{0.50} B ₆	12.2175	12.2348	12.2243	4.23
Ba _{0.75} Ce _{0.25} B ₆	10.1386	10.1787	10.1750	-2.40

Tablo 5.8: CeB₆ bileşiğinin CaB₆, SrB₆ ve BaB₆ ile yaptığı farklı stokiometrilili bileşiklerde elde edilen parite değerleri

Bileşik	Uzay grubu	Γ	X	M	Γ	R	Parite	Karakter
Ce _{0.75} Ca _{0.25} B ₆	pm $\bar{3}$ m	(+)	(+)	(-)	(+)	(-)	(+)	Sıradan
Ce _{0.50} Ca _{0.50} B ₆	pm $\bar{3}$ m	(-)	(?)	(-)	(-)	(+)	(?)	Belirsiz
Ca _{0.75} Ce _{0.25} B ₆	pm $\bar{3}$ m	(+)	(-)	(+)	(+)	(-)	(+)	Sıradan
Ce _{0.75} Sr _{0.25} B ₆	pm $\bar{3}$ m	(-)	(+)	(-)	(-)	(-)	(+)	Sıradan
Ce _{0.50} Sr _{0.50} B ₆	pm $\bar{3}$ m	(-)	(?)	(+)	(-)	(-)	(?)	Belirsiz
Sr_{0.75}Ce_{0.25}B₆	pm$\bar{3}$m	(+)	(-)	(+)	(+)	(+)	(-)	Topolojik
Ce_{0.75}Ba_{0.25}B₆	pm$\bar{3}$m	(-)	(+)	(+)	(-)	(-)	(-)	Topolojik
Ce_{0.50}Ba_{0.50}B₆	pm$\bar{3}$m	(+)	(-)	(-)	(+)	(+)	(-)	Topolojik
Ba _{0.75} Ce _{0.25} B ₆	pm $\bar{3}$ m	(-)	(-)	(-)	(-)	(+)	(-)	Sıradan



Şekil 5.14: $\text{Sr}_{0.75}\text{Ce}_{0.25}\text{B}_6$ bileşiğine ait (a) Süper hücre (b) Relativite etkili band grafiği (c) Spin polarizasyonlu band grafiği



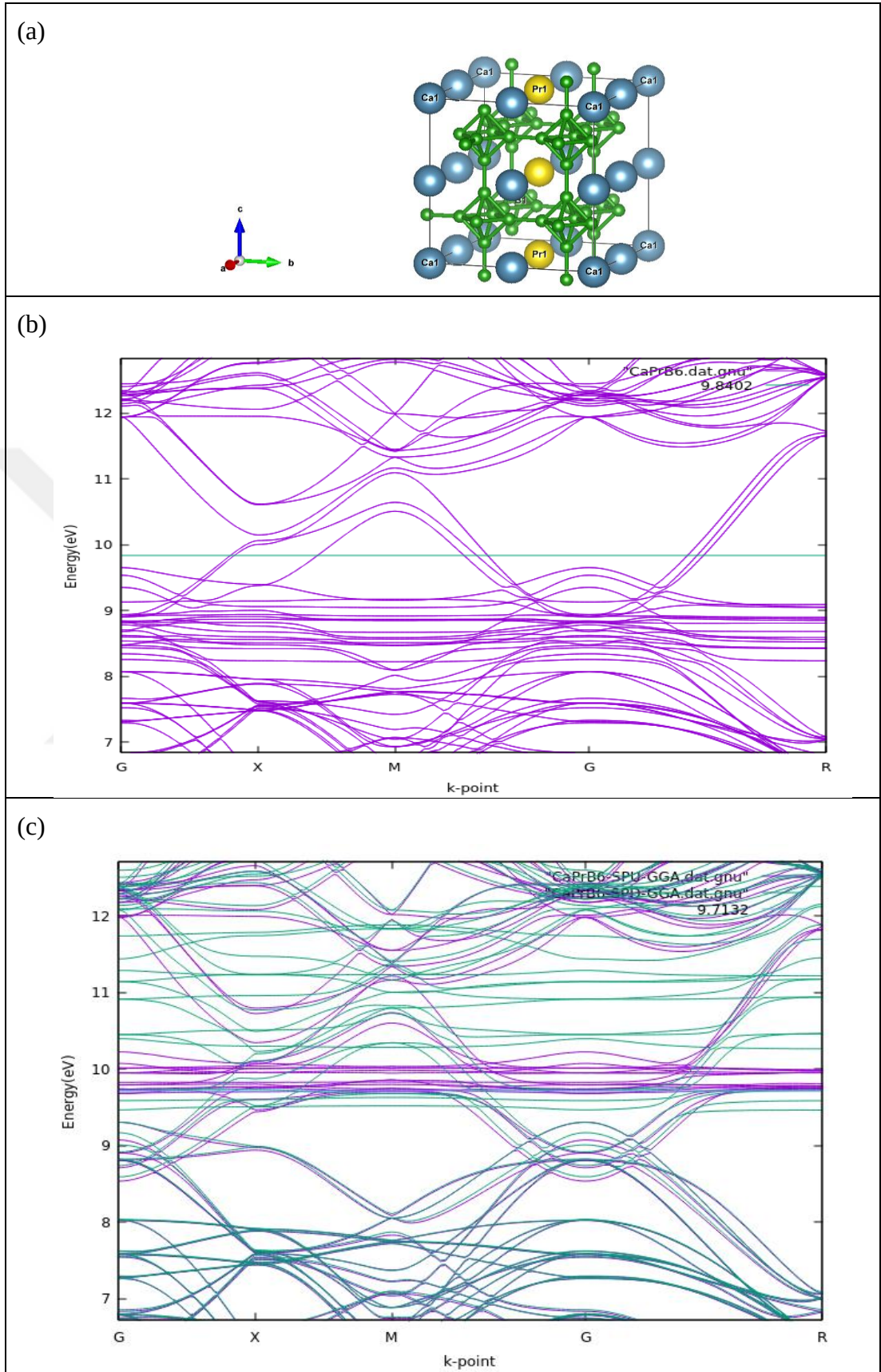
Şekil 5.15: $\text{Ce}_{0.50}\text{Ba}_{0.50}\text{B}_6$ bileşiğine ait (a) Süper hücre (b) Relativite etkili band grafiği (c) Spin polarizasyonlu band grafiği

Tablo 5.9: PrB₆ bileşiğinin CaB₆, SrB₆ ve BaB₆ ile yaptığı farklı stokiometrilik bileşiklerde elde edilen Fermi enerjileri ve manyetizasyon değerleri

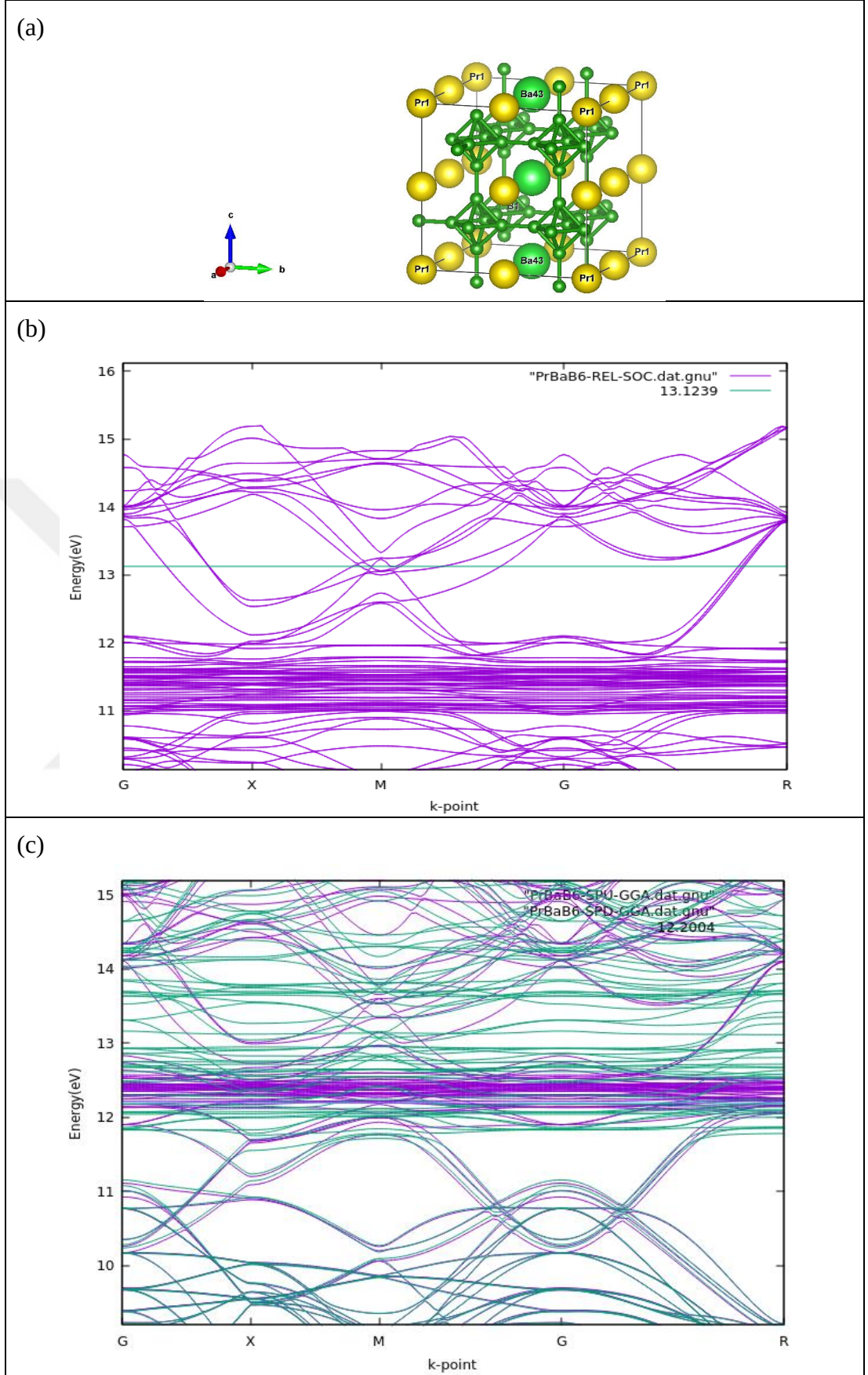
Bileşik	Fermi Enerjisi (Relativistik) (eV)	Fermi Enerjisi (Non-Manyetik) (eV)	Fermi Enerjisi (Manyetik) (eV)	Toplam Manyetizasyon (μ_B /hücre)
Pr _{0.75} Ca _{0.25} B ₆	12.0911	11.6312	11.6392	-4.70
Pr _{0.50} Ca _{0.50} B ₆	11.0112	11.6312	11.6392	-4.70
Ca _{0.75} Pr _{0.25} B ₆	9.8402	10.6647	10.6881	-4.72
Pr _{0.75} Sr _{0.25} B ₆	12.3165	11.8676	11.8917	-0.30
Pr _{0.50} Sr _{0.50} B ₆	12.3165	11.2191	11.1600	4.60
Sr _{0.75} Pr _{0.25} B ₆	11.4673	9.9729	10.0285	0.00
Pr _{0.75} Ba _{0.25} B ₆	12.8592	12.2004	12.1380	-4.61
Pr _{0.50} Ba _{0.50} B ₆	12.0086	11.6820	11.6620	2.17
Ba _{0.75} Pr _{0.25} B ₆	10.2190	10.1050	10.0962	0.54

Tablo 5.10: PrB₆ bileşiğinin CaB₆, SrB₆ ve BaB₆ ile yaptığı farklı stokiometrilik bileşiklerde elde edilen parite değerleri

Bileşik	Uzay grubu	Γ	X	M	Γ	R	Parite	Karakter
Pr _{0.75} Ca _{0.25} B ₆	$pm\bar{3}m$	(+)	(+)	(+)	(+)	(+)	(+)	Sıradan
Pr _{0.50} Ca _{0.50} B ₆	$pm\bar{3}m$	(?)	(+)	(?)	(?)	(?)	(?)	Belirsiz
Ca_{0.75}Pr_{0.25}B₆	$pm\bar{3}m$	(+)	(-)	(+)	(+)	(+)	(-)	Topolojik
Pr_{0.75}Sr_{0.25}B₆	$pm\bar{3}m$	(+)	(-)	(+)	(+)	(+)	(-)	Topolojik
Pr_{0.50}Sr_{0.50}B₆	$pm\bar{3}m$	(+)	(-)	(+)	(+)	(+)	(-)	Topolojik
Sr_{0.75}Pr_{0.25}B₆	$pm\bar{3}m$	(+)	(-)	(+)	(+)	(+)	(-)	Topolojik
Pr_{0.75}Ba_{0.25}B₆	$pm\bar{3}m$	(+)	(-)	(+)	(+)	(+)	(-)	Topolojik
Pr_{0.50}Ba_{0.50}B₆	$pm\bar{3}m$	(+)	(-)	(+)	(+)	(+)	(-)	Topolojik
Ba_{0.75}Pr_{0.25}B₆	$pm\bar{3}m$	(-)	(-)	(+)	(-)	(+)	(-)	Topolojik



Şekil 5.16: $\text{Ca}_{0.75}\text{Pr}_{0.25}\text{B}_6$ bileşiğine ait (a) Süper hücre (b) Relativite etkili band grafiği (c) Spin polarizasyonlu band grafiği



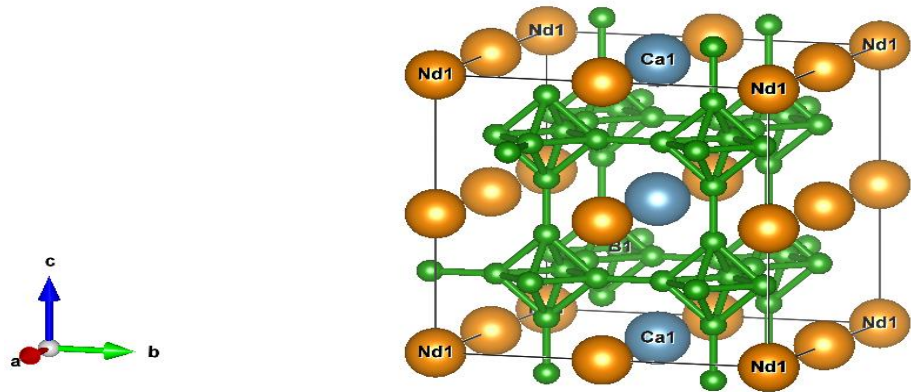
Şekil 5.17: $\text{Pr}_{0.75}\text{Ba}_{0.25}\text{B}_6$ bileşiğine ait (a) Süper hücre (b) Relativite etkili band grafiği (c) Spin polarizasyonlu band grafiği

Tablo 5.11: NdB_6 bileşiğinin CaB_6 ve SrB_6 ile yaptığı farklı stokiyometrilili bileşiklerde elde edilen Fermi enerjileri ve manyetizasyon değerleri

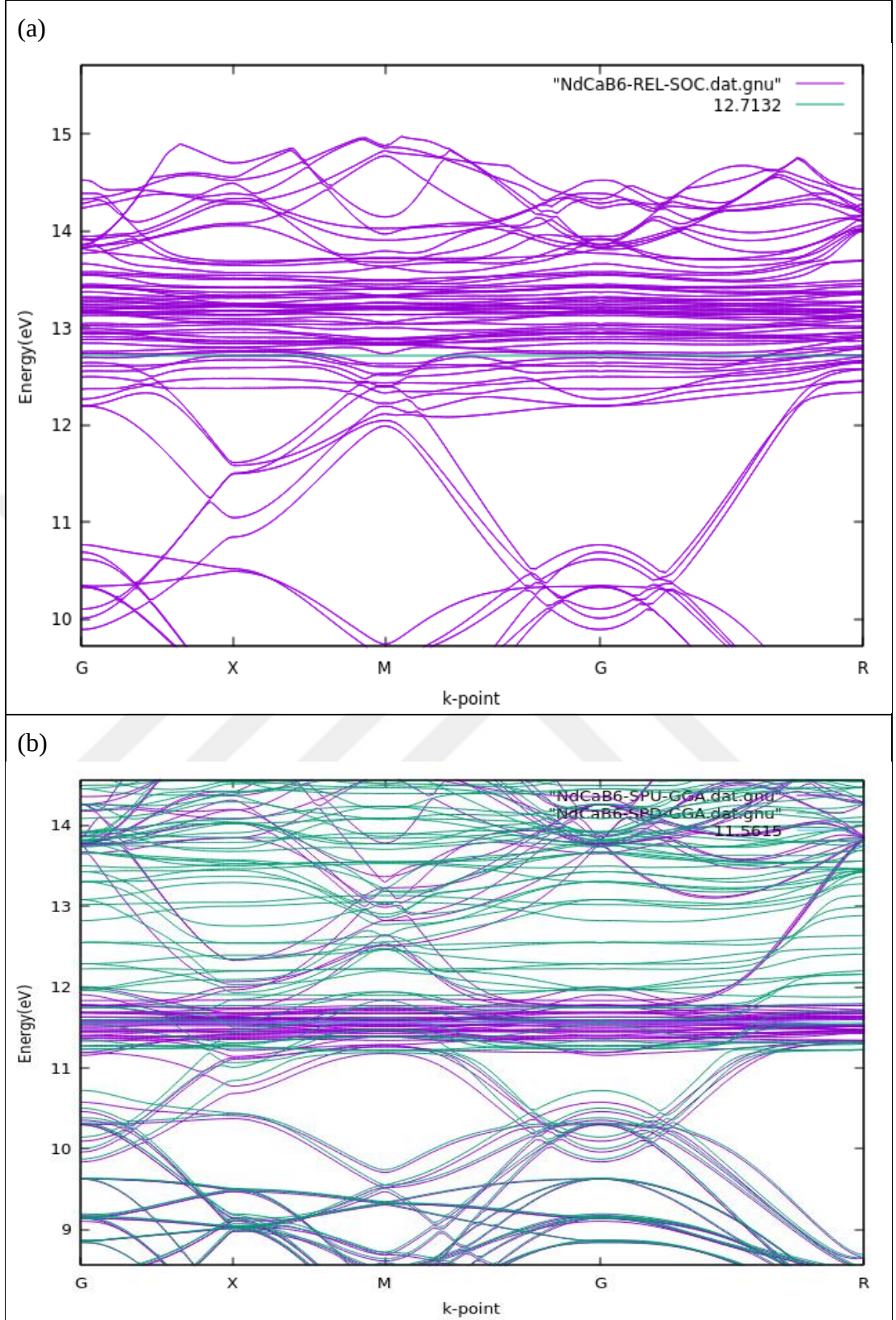
Bileşik	Fermi Enerjisi (Relativistik) (eV)	Fermi Enerjisi (Non-Manyetik) (eV)	Fermi Enerjisi (Manyetik) (eV)	Toplam Manyetizasyon (μ_B /hücre)
$\text{Nd}_{0.75}\text{Ca}_{0.25}\text{B}_6$	11.4250	11.5615	11.5856	3.30
$\text{Nd}_{0.50}\text{Ca}_{0.50}\text{B}_6$	10.3561	10.6333	10.7048	13.80
$\text{Ca}_{0.75}\text{Nd}_{0.25}\text{B}_6$	9.4045	9.6826	9.5925	-0.03
$\text{Nd}_{0.75}\text{Sr}_{0.25}\text{B}_6$	11.5487	11.7980	11.8663	20.80
$\text{Nd}_{0.50}\text{Sr}_{0.50}\text{B}_6$	10.8569	11.1005	11.1204	10.61

Tablo 5.12: NdB_6 bileşiğinin CaB_6 ve SrB_6 ile yaptığı farklı stokiyometrilili bileşiklerde elde edilen parite değerleri

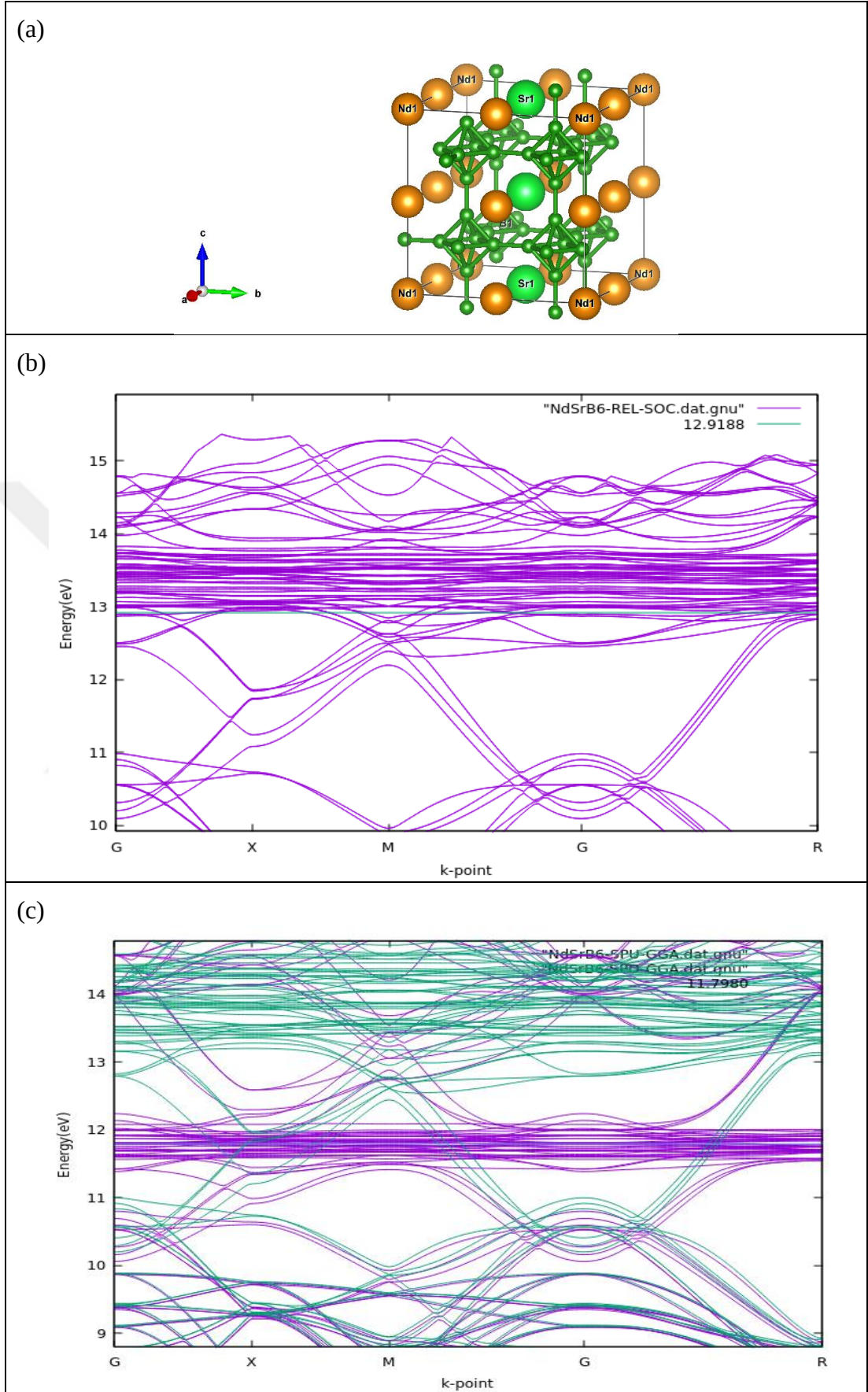
Bileşik	Uzay grubu	Γ	X	M	Γ	R	Parite	Karakter
$\text{Nd}_{0.75}\text{Ca}_{0.25}\text{B}_6$	$\text{pm}\bar{3}\text{m}$	(+)	(+)	(+)	(+)	(-)	(-)	Topolojik
$\text{Nd}_{0.50}\text{Ca}_{0.50}\text{B}_6$	$\text{pm}\bar{3}\text{m}$	(+)	(+)	(-)	(+)	(-)	(-)	Sıradan
$\text{Ca}_{0.75}\text{Nd}_{0.25}\text{B}_6$	$\text{pm}\bar{3}\text{m}$	(+)	(+)	(+)	(+)	(-)	(-)	Sıradan
$\text{Nd}_{0.75}\text{Sr}_{0.25}\text{B}_6$	$\text{pm}\bar{3}\text{m}$	(+)	(+)	(+)	(+)	(-)	(-)	Topolojik
$\text{Nd}_{0.50}\text{Sr}_{0.50}\text{B}_6$	$\text{pm}\bar{3}\text{m}$	(-)	(-)	(-)	(-)	(+)	(+)	Sıradan



Şekil 5.18: $\text{Nd}_{0.75}\text{Ca}_{0.25}\text{B}_6$ bileşiğine ait süper hücre



Şekil 5.19: $\text{Nd}_{0.75}\text{Ca}_{0.25}\text{B}_6$ bileşiğine ait (a) Süper hücre (b) Relativite etkili band grafiği (c) Spin polarizasyonlu band grafiği



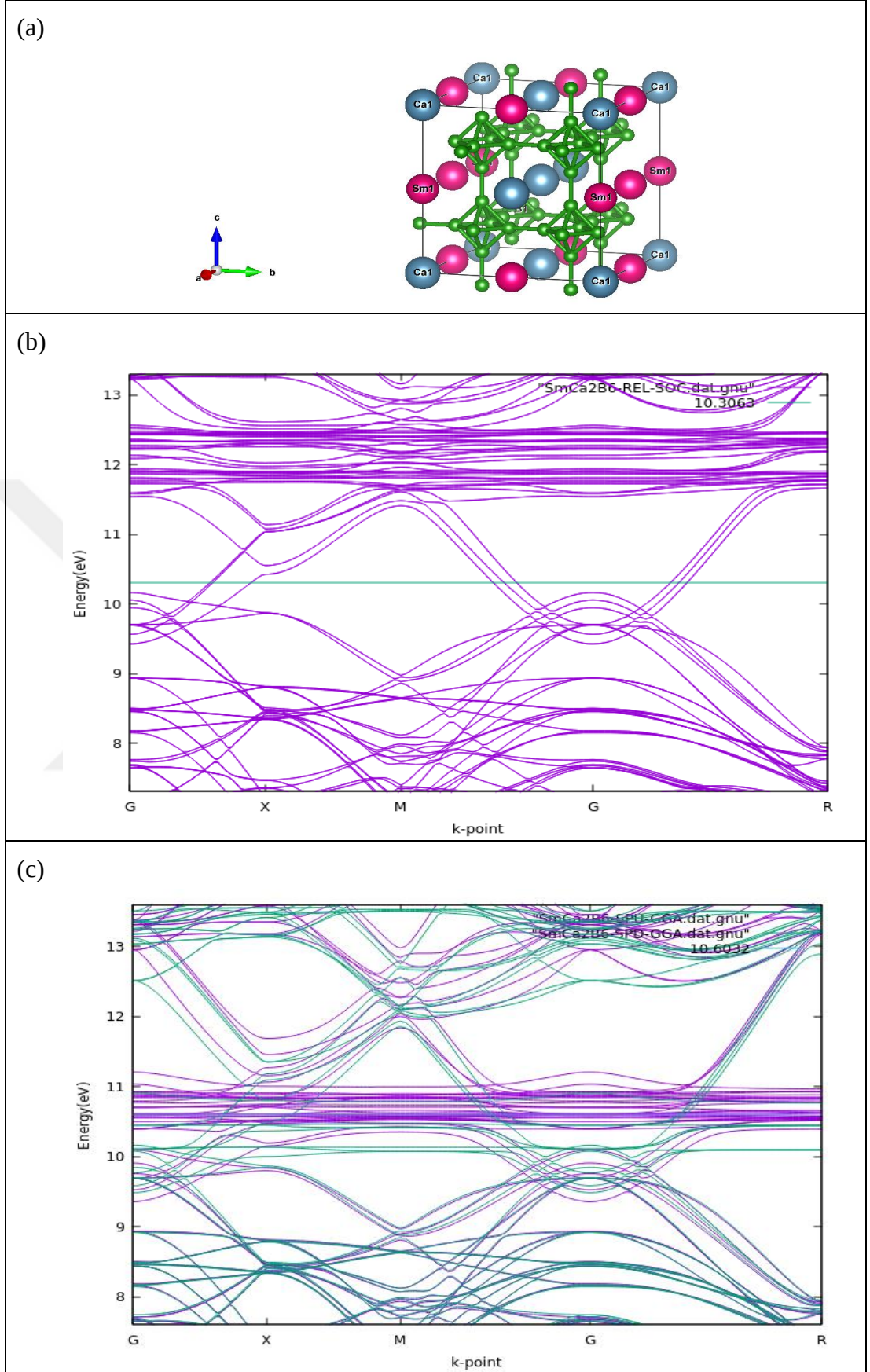
Şekil 5.20: $\text{Nd}_{0.75}\text{Sr}_{0.25}\text{B}_6$ bileşiğine ait (a) Süper hücre (b) Relativite etkili band grafiği (c) Spin polarizasyonlu band grafiği

Tablo 5.13: SmB₆ bileşiğinin CaB₆ ve SrB₆ ile yaptığı farklı stokiometrilili bileşiklerde elde edilen Fermi enerjileri ve manyetizasyon değerleri

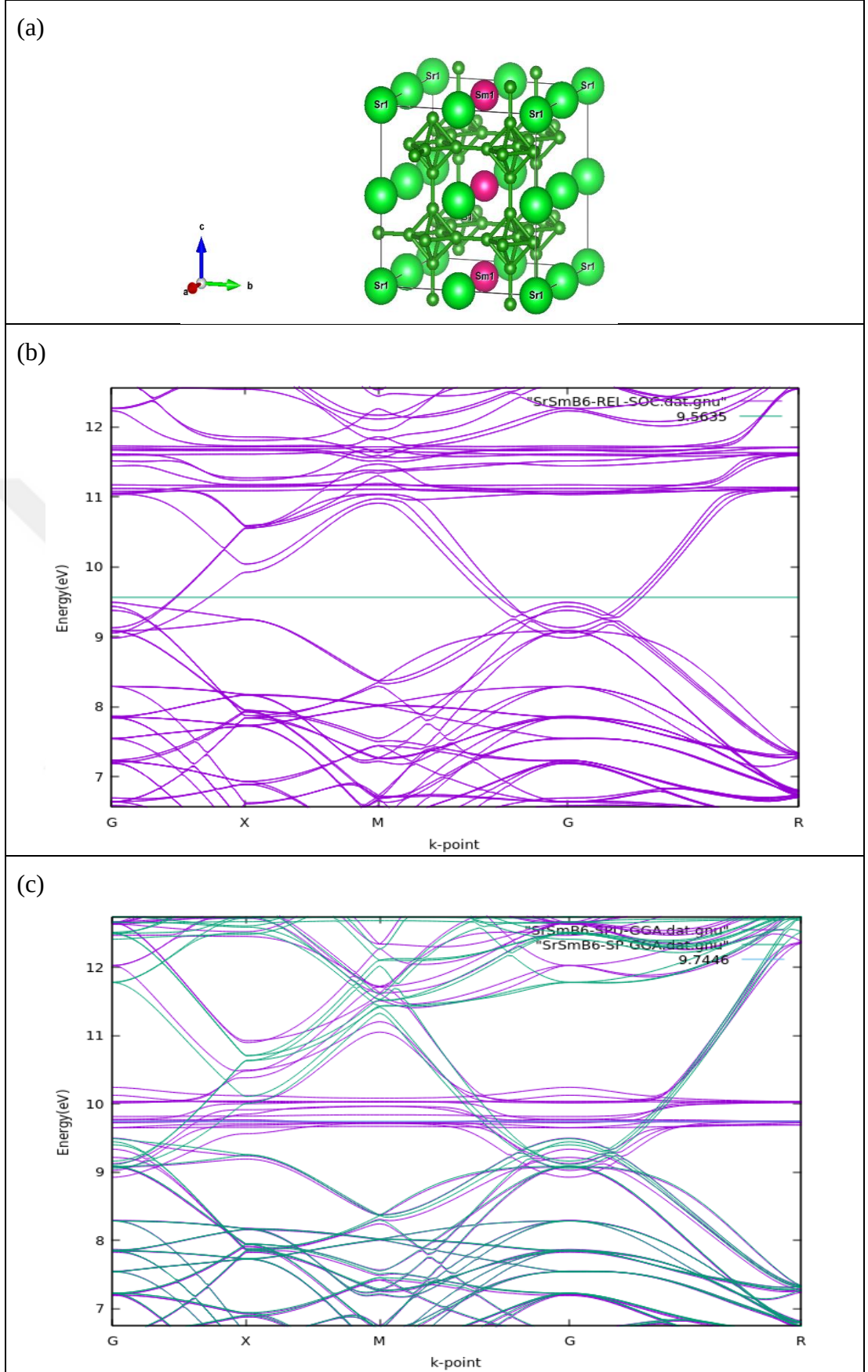
Bileşik	Fermi Enerjisi (Relativistik) (eV)	Fermi Enerjisi (Non- Manyetik) (eV)	Fermi Enerjisi (Manyetik) (eV)	Toplam Manyetizasyon (μ _B /hücre)
Sm _{0.50} Ca _{0.50} B ₆	10.2402	10.6032	10.5107	11.44
Sm _{0.75} Sr _{0.25} B ₆	11.2714	11.7157	11.5840	0.00
Sr _{0.75} Sm _{0.25} B ₆	9.5651	9.7446	9.7052	11.48
Sm _{0.50} Ba _{0.50} B ₆	11.2677	11.6286	11.5389	-22.76
Ba _{0.75} Sm _{0.25} B ₆	9.6937	9.8638	9.7705	0.05

Tablo 5.14: SmB₆ bileşiğinin CaB₆ ve SrB₆ ile yaptığı farklı stokiometrilili bileşiklerde elde edilen parite değerleri

Bileşik	Uzay grubu	Γ	X	M	Γ	R	Parite	Karakter
Sm _{0.50} Ca _{0.50} B ₆	pm $\bar{3}$ m	(+)	(-)	(-)	(+)	(-)	(-)	Topolojik
Sm _{0.75} Sr _{0.25} B ₆	pm $\bar{3}$ m	(+)	(+)	(+)	(+)	(-)	(-)	Topolojik
Sr _{0.75} Sm _{0.25} B ₆	pm $\bar{3}$ m	(+)	(+)	(+)	(+)	(-)	(-)	Topolojik
Sm _{0.50} Ba _{0.50} B ₆	pm $\bar{3}$ m	(-)	(-)	(+)	(-)	(+)	(-)	Topolojik
Ba _{0.75} Sm _{0.25} B ₆	pm $\bar{3}$ m	(+)	(+)	(+)	(+)	(-)	(-)	Topolojik



Şekil 5.21: $\text{Sm}_{0.50}\text{Ca}_{0.50}\text{B}_6$ bileşiğine ait (a) Süper hücre (b) Relativite etkili band grafiği (c) Spin polarizasyonlu band grafiği



Şekil 5.22: $\text{Sr}_{0.75}\text{Sm}_{0.25}\text{B}_6$ bileşiğine ait (a) Süper hücre (b) Relativite etkili band grafiği (c) Spin polarizasyonlu band grafiği

Kristal yapıları ve band yapıları verilen bileşiklerde bir takım sıradışı özellikler bulunmaktadır. Özellikle lantanit ağırlıklı bileşiklerin çoğunda Fermi seviyesinin üstünde veya altından uzun sık bantlar gözlenmektedir. Bu bantlar düz bantlardır. Eğer Fermi seviyesini kesen hiç band olmasaydı teknoloji uygulamaları için önemli düz band yarıiletken malzemelerimiz olurdu. Bileşiklerin çoğunda gama notasının solunda ve sağında hepsinde bariz olmasa da simetrik biçimde uzanan bantlar bulunmaktadır. Bu yapılar Dirac konilerini andırmaktadır. Nokta grup simetrisine göre bu kadar çok topolojik özellikli malzeme bulmamız muhtemelen bu yapılardan kaynaklanmaktadır. Band yapılarının bu kadar yoğun ve keskin olması f elektronlarının etkileşimlere dâhil olmasından kaynaklı olduğunu düşünüyoruz.

5.2 Tartışma

Topolojik malzemeler 21. Yüzyılın en önemli araştırma alanlarından biri olarak kabul edilmektedir. Yaptığımız bu çalışmanın da topolojik malzemeler konusunda literatürde yer alacağını ummaktayız. Bu tez kapsamında toplamda 37 adet farklı sitokiyometrilik hegzaborür incelendi. 19 adet hegzaborürde topolojik özellik gözlemlendi. Topolojik özellik gözlenen hegzaborürlerin ortak özelliği birinin veya her ikisinin tek hegzaborür formunda topolojik olmasıdır. Bu topolojik özellik önceden yaptığımız tekli hegzaborür hesaplamalarına göre olan topolojik özelliktir. Bu da hesaplamalarımızın kendi içinde tutarlı olduğunu göstermektedir. Daha iyi sonuçlar elde etmek bu hesaplamalar meta-GGA, hibrid ve double-hibrid fonksiyonelleri ile yapılmalıdır. Hipotetik olarak bulduğumuz 19 adet topolojik kristalin yalıtkan bileşiğin deneysel olarak ayrı ayrı sentezlenmesi ve ARPES ölçümlerinin yapılması gerekmektedir. Deneysel çalışmalar sonucu topolojik olmaya aday malzemelerimizin hiçbirinin gerçekte topolojik olmama ihtimali de vardır. Literatürde önceden topolojik malzeme olmaya aday çok sayıda bileşiğin deneysel olarak topolojik malzeme olmadığı durumlar mevcuttur. Ancak topolojik özellik yerine başka egzotik özellikler saklı olabilir. Yakın zamanda yapılan bir çalışmada teorik olarak topolojik özelliğe sahip olan bir malzeme deneyleri yapıldığında topolojik değil de süperiletken özelliğe sahip olduğu gözlemlenmiştir. Belki de topolojik yalıtkan ararken Bose-Einstein yoğunlaşmasını sağlayacak bir bileşik, spin camı, manyetik yarıiletken hatta topolojik süperiletken bulmuşuzdur da haberimiz yoktur. Bu tez çalışmasında elde ettiğimiz bilgiler deneysel fizikçilerin ilgisini çekecek ve bu fizikçiler katkılı hegzaborürler ile

deney yapmaya çok istekli olacaklardır. Yakın zamanda olmasa bile gelecekte katkılı hekzaborürler üzerine deneyler yapılacak ve gizemli özellikleri açığa çıkacaktır.



KAYNAKLAR

Allen, J. W., Batlogg, B., Wachter, P., (1979). Large low-temperature Hall effect and resistivity in mixed-valent SmB₆. *Physical Review B*, 20 (12), 4807.

Anderson, P. W., (1984). Basic notions of condensed matter physics. *Frontiers in physics*, (55), 49.

Bernevig, A. Hughes, T. L., (2013). “Topological Insulators and Topological Superconductors”, 1st Edition, Princeton University Press.

Bernevig, B. A., Chern, C. H., Hu, J. P., Toumbas, N., Zhang, S. C., (2002). Effective field theory description of the higher dimensional quantum Hall liquid. *Annals of Physics*, 300 (2), 185-207.

Bernevig, B. A., Hughes, T. L., Zhang, S. C., (2006). Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells. *Science*, 314 (5806), 1757-1761.

Chang, C. Z., Liu, C. X., MacDonald, A. H., (2023). Colloquium: Quantum anomalous hall effect. *Reviews of Modern Physics*, 95 (1), 011002.

Chang, C. Z., Zhang, J., Feng, X., Shen, J., Zhang, Z., Guo, M., ... Xue, Q. K., (2013). Experimental observation of the quantum anomalous Hall effect in a magnetic topological insulator. *Science*, 340 (6129), 167-170.

Dal Corso, A., (2014). Pseudopotentials periodic table: From H to Pu. *Computational Materials Science*, 95, 337-350.

Dresselhaus, M. S., Dresselhaus, G., Jorio, A., (2007). *Group theory: application to the physics of condensed matter*, p. 48-49, 1st Edition, Springer Science & Business Media.

Dubrovin, B. A., Fomenko, A. T., Novikov, S. P., (2012). “Modern geometry—methods and applications: Part II: The geometry and topology of manifolds (Vol. 104)”, 1st Edition, Springer Science & Business Media.

Dyakonov, M. I., Perel, V. I., (1971). Current-induced spin orientation of electrons in semiconductors. *Physics Letters A*, 35 (6), 459-460.

Dzero, M., Sun, K., Galitski, V., Coleman, P., (2010). Topological Kondo insulators. *Physical review letters*, 104 (10), 106408.

Fu, L., Kane, C. L., (2006). Time reversal polarization and a Z₂ adiabatic spin pump. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 74 (19), 195312.

Fu, L., Kane, C. L., (2007). Topological insulators with inversion symmetry. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 76 (4), 045302.

Fu, L., Kane, C. L., Mele, E. J., (2007). Topological insulators in three dimensions. *Physical review letters*, 98 (10), 106803.

Fukui, T., Hatsugai, Y., (2007). Topological aspects of the quantum spin-Hall effect in graphene: Z₂ topological order and spin Chern number. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 75 (12), 121403.

Giannozzi, P., Andreussi, O., Brumme, T., Bunau, O., Nardelli, M. B., Calandra, M., ... Baroni, S., (2017). Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO. *Journal of physics: Condensed matter*, 29 (46), 465901.

Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., ... Wentzcovitch, R. M., (2009). QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of physics: Condensed matter*, 21 (39), 395502.

Golterman, M. F., Jansen, K., Kaplan, D. B., (1993). Chern-Simons currents and chiral fermions on the lattice. *Physics Letters B*, 301 (2-3), 219-223.

Görling, A., (1999). Density-functional theory beyond the Hohenberg-Kohn theorem. *Physical Review A*, 59 (5), 3359.

Harbola, M. K., Banerjee, A., (2003). Many-electron problem in terms of the density: From Thomas–Fermi to modern density-functional theory. *Journal of Theoretical and Computational Chemistry*, 2 (02), 301-322.

Hatnean, M. C., Lees, M. R., Paul, D. M., Balakrishnan, G., (2013). Large, high quality single-crystals of the new Topological Kondo Insulator, SmB₆. *Scientific reports*, 3 (1), 3071.

Himmetoglu, B., Floris, A., De Gironcoli, S., Cococcioni, M., (2014). Hubbard-corrected DFT energy functionals: The LDA+ U description of correlated systems. *International Journal of Quantum Chemistry*, 114 (1), 14-49.

Hirsch, J. E., (1999). Spin hall effect. *Physical review letters*, 83(9), 1834.

Hsieh, D., Qian, D., Wray, L., Xia, Y., Hor, Y. S., Cava, R. J., Hasan, M. Z., (2008). A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase. *Nature*, 452 (7190), 970-974.

Hubbard, J., (1967). The approximate calculation of electronic band structure. *Proceedings of the Physical Society*, 92 (4), 921.

Kane, C. L., Mele, E. J., (2005). Quantum spin Hall effect in graphene. *Physical review letters*, 95 (22), 226801.

Kane, C. L., Mele, E. J., (2005). Z₂ topological order and the quantum spin Hall effect. *Physical review letters*, 95 (14), 146802.

King-Smith, R. D., Vanderbilt, D., (1993). Theory of polarization of crystalline solids. *Physical Review B*, 47 (3), 1651.

Klitzing, K. V., Dorda, G., Pepper, M., (1980). New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance. *Physical review letters*, 45 (6), 494.

Kohn, W., Sham, L. J., (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical review*, 140 (4A), A1133.

Kondo, J., (1964). Resistance minimum in dilute magnetic alloys. *Progress of theoretical physics*, 32 (1), 37-49.

Konig, M., Wiedmann, S., Brune, C., Roth, A., Buhmann, H., Molenkamp, L. W., ... Zhang, S. C., (2007). Quantum spin Hall insulator state in HgTe quantum wells. *Science*, 318 (5851), 766-770.

Kresse, G., Joubert, D., (1999). From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method. *Physical review b*, 59 (3), 1758.

Kubo, R., (1957). Statistical-mechanical theory of irreversible processes. I. General theory and simple applications to magnetic and conduction problems. *Journal of the physical society of Japan*, 12 (6), 570-586.

Levin, M., Halperin, B. I., Rosenow, B., (2007). Particle-hole symmetry and the Pfaffian state. *Physical review letters*, 99, (23), 236806.

Liu, C. X., Qi, X. L., Dai, X., Fang, Z., Zhang, S. C., (2008). Quantum anomalous Hall effect in $\text{Hg}_{1-y}\text{Mn}_y\text{Te}$ quantum wells. *Physical review letters*, 101 (14), 146802.

Liu, J., Duan, W., Fu, L., (2013). Two types of surface states in topological crystalline insulators. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 88 (24), 241303.

March, N. H., (1983). “Origins—The Thomas-Fermi Theory. In *Theory of the Inhomogeneous Electron Gas*”, 1st Edition, pp. 1-77, Boston, MA: Springer US.

Moore, J. E., Balents, L., (2007). Topological invariants of time-reversal-invariant band structures. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 75 (12), 121306.

Nakahara, M., (2018), “Geometry, topology and physics”, 1st Edition, CRC press.

Neupane, M., Alidoust, N., Xu, S., Kondo, T., Ishida, Y., Kim, D. J., ... Hasan, M. Z., (2013). Surface electronic structure of the topological Kondo-insulator candidate correlated electron system SmB_6 . *Nature communications*, 4 (1), 2991.

Nishide, A., Taskin, A. A., Takeichi, Y., Okuda, T., Kakizaki, A., Hirahara, T., ... Matsuda, I., (2010). Direct mapping of the spin-filtered surface bands of a three-dimensional quantum spin Hall insulator. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 81 (4), 041309.

Perdew, J. P., Burke, K., Ernzerhof, M. J., (1998). Perdew, burke, and ernzerhof reply. *Physical Review Letters*, 80 (4), 891.

Prodan, E., (2009). Robustness of the spin-Chern number. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 80 (12), 125327.

Resta, R., (1994). Macroscopic polarization in crystalline dielectrics: the geometric phase approach. *Reviews of modern physics*, 66 (3), 899.

Roy, R., (2009). Topological phases and the quantum spin Hall effect in three dimensions. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 79 (19), 195322.

Roy, R., (2009). Z₂ classification of quantum spin Hall systems: An approach using time-reversal invariance. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 79 (19), 195321.

Setyawan, W., Curtarolo, S., (2010). High-throughput electronic band structure calculations: Challenges and tools. *Computational materials science*, 49 (2), 299-312.

Setyawan, W., Curtarolo, S. *AFLOWLIB: Ab-initio electronic structure library database*, 2011.

Sheng, D. N., Weng, Z. Y., Sheng, L., Haldane, F. D., (2006). Quantum spin-Hall effect and topologically invariant Chern numbers. *Physical review letters*, 97 (3), 036808.

Slager, R. J., Mesaros, A., Juričić, V., Zaanen, J., (2013). The space group classification of topological band-insulators. *Nature Physics*, 9 (2), 98-102.

Steckel, J. A., Sholl, D., (2009), “Density Functional Theory”, 1st Edition, A *John Wiley & Sons, Inc., Publication*, Wiley, 11-12.

Thouless D. J., M. Kohmoto, M. P. Nightingale, & M. den Nijs, (1982), *Phys. Rev. Lett.*, 49, 405.

Thouless, D. J., (1983). Quantization of particle transport. *Physical Review B*, 27 (10), 6083.

Wang, Z., Qi, X. L., Zhang, S. C., (2010). Equivalent topological invariants of topological insulators. *New journal of physics*, 12 (6), 065007.

Wunderlich, J., Kaestner, B., Sinova, J., Jungwirth, T., (2005). Experimental Observation of the Spin-Hall Effect in a Two-Dimensional Spin-Orbit Coupled Semiconductor System. *Physical review letters*, 94 (4), 047204.

Xiong, J., Petersen, A. C., Qu, D., Hor, Y. S., Cava, R. J., Ong, N. P., (2012). Quantum oscillations in a topological insulator Bi₂Te₂Se with large bulk resistivity (6Ωcm). *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 44 (5), 917-920.

Xu, N., Shi, X., Biswas, P. K., Matt, C. E., Dhaka, R. S., Huang, Y., ... Shi, M., (2013). Surface and bulk electronic structure of the strongly correlated system SmB₆ and implications for a topological Kondo insulator. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 88 (12), 121102.

Zak, J., (1989). Berry's phase for energy bands in solids. *Physical review letters*, 62 (23), 2747.

Zhang, S. C., (1992). The Chern–Simons–Landau–Ginzburg theory of the fractional quantum Hall effect. *International Journal of Modern Physics B*, 6 (01), 25-58.

Zhang, S. C., Hu, J., (2001). A four-dimensional generalization of the quantum Hall effect. *Science*, 294 (5543), 823-828.

ÖZGEÇMİŞ

Atacan Tunay KÖKSAL lisans eğitimini Yıldız Teknik Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünde 2012-2019 yılları arasında tamamlamıştır. Yüksek Lisans Eğitimine 2022 yılında Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Bölümünde başlamış olup 2024 yılında Gebze Teknik Üniversitesi Lisansüstü Eğitim Enstitüsü Fizik Bölümüne geçiş yapmıştır. 16 Şubat 2024 tarihi itibarıyla Gebze Teknik Üniversitesi Temel Bilimler Fakültesi Fizik Bölümü Atom ve Molekül Fiziği Anabilim Dalında araştırma görevlisi olarak görev yapmaktadır.



TEZDEN ÜRETİLEN YAYINLAR/SUNUMLAR

Köksal A. T., Berber S., Özdoğan K, (2025), “Investigation of topological properties of compounds with different stoichiometry between alkali hexaborides and lanthanide hexaborides using first principle calculations”, 13th International May 19 Innovative Scientific approaches Congress, 126-127, Samsun, Türkiye, 19-20 Mayıs 2025.

