103986

KATILARDA ELEKTRON DİNAMİĞİ

Mustafa AKARSU

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Fizik Anabilim Dalı

1997

103988

ULU

KATILARDA ELEKTRON DİNAMİĞİ

MUSTAFA AKARSU

Osmangazi Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Lisansüstü Yönetmeliği Uyarınca

Fizik Anabilim Dalı

Katıhal Fiziği Bilim Dalında

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Olarak Hazırlanmıştır.

Danışman: Yrd. Doç. Dr. Şadan KORKMAZ

Mustafa AKARSU 'nun YÜKSEK LİSANS tezi olarak hazırladığı

" KATILARDA ELEKTRON DİNAMİĞİ "

başlıklı bu çalışma, jürimizce lisansüstü yönetmeliğinin ilgili maddeleri uyarınca değerlendirilerek kabul edilmiştir.

03/02/1997

Üye : Yrd. Doç. Dr. Şadan Korkmaz

Üye : Yrd. Doç. Dr. Ömer Özbaş

Üye : Yrd. Doç. Dr. Salih Köse

Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu 'nun 03-02-1997 gün ve 97-2134 sayılı kararıyla onaylanmıştır.

Prof. M. Selami KILIÇKAYA

Enstitü Müdürü

İÇİNDEKİLER

Sayfa No

ÖZET iii
SUMMARY iv
TEŞEKKÜR v
ŞEKİLLER DİZİNİ vi
SİMGELER DİZİNİ vii
1. ELEKTRİK VE MANYETİK ALANLARDA ELEKTRON DİNAMİĞİ 1
1.1 Elektrik Alanda Elektron Dinamiği 1
1.3 Elektrik İletkenliği ve Ohm Yasası 4
1.4 Manyetik Alanda Hareket 6
1.5 Siklotron Frekansı 7
1.6 Hall Olayı 8
2. SERBEST ELEKTRON MODELİ 11
2.1 Serbest Elektron Fermi Gazı 11
2.2 Tek Boyutta Enerji Düzeyleri 12
2.3 Üç Boyutta Serbest Elektron Modeli 15
3. ENERJİ BANTLARI 20
3.1 Yarı Serbest Elektron Modeli 21
3.2 Enerji Aralığının Kaynağı 23
3.3 Bloch Teoremi 25
3.4 Kronig-Penney Modeli 30
3.5 Etkin Kütle 37
3.6 Hemen Hemen Serbest Elektron Modeli 39
3.7 Sıkı Bağ Elektron Yaklaşımı 43
3.8 İki ve Üç Boyutlu Örgülerde Elektron Dinamiği;
Sabit Enerji Yüzeyleri ve Brillouin Bölgeleri 50
4. SONUÇ 61
KAYNAKLAR 62

ÖZET

Bu çalışmada katılarda elektron dinamiği incelenmiştir. Serbest elektronların elektrik ve manyetik alanlardaki davranışları incelenerek, siklotron frekansı ve Hall olayının metalik özellikleri tanımlamada nasıl kullanıldığı açıklanmıştır. Bunu takiben metallerin bir çok özelliklerini açıklayabilen serbest elektron modeli kullanılarak katılardaki elektronların hareketi üzerinde durulmuştur. Kristal potansiyelinin ihmal edilmesi dolayısıyla bu model basitleştirilerek incelenmiştir. Daha sonra elektronların hareketi kristal potansiyeli içinde incelenerek katılarda enerji bandlarının oluşumu açıklanmıştır. Enerji bandlarını hesaplamada kullanılan sıkı bağ elektron yaklaşımının sonuçlarından hareketle kübik kristal yapılarda, iki ve üç-boyutta Brillouin bölgeleri ve Fermi yüzeyleri incelenmiştir.

SUMMARY

In this thesis, the dynamics of electron in solids is reviewed. The behaviours of free electrons in the electric and magnetic fields are presented. The cyclotron frcquency and Hall effect are discussed to explain of metallic properties. Then, via the free electron model which can explain many properties of metals, the behaviour of electrons in solids is presented. Because of negligence of crystal potential, this model is simply reviewed. The formation of energy-bands in solids are explained to determine the behaviour of electrons within crystal potential. In cubic crystal structures, two and three dimensional Brillouin zones and Fermi surfaces are investigated via the conclusions of tight-binding approximations which is used in energy-bands calculation.

TEŞEKKÜR

Tez çalışmam boyunca beni yönlendiren, yardım ve emeğini esirgemeyen değerli hocam Yrd. Doç. Dr. Şadan KORKMAZ 'a teşekkür etmeyi bir borç bilirim.

Ayrıca rahatlatıcı sohbetleri ve değerli önerileriyle manevi desteğini esirgemeyen Yrd.Doç.Dr. Ömer ÖZBAŞ 'a ve tezin her aşamasında yardımlarını esirgemeyen arkadaşım Arş. Gör. Abdullah ALĞIN 'a çok teşekkür ederim.

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil		Sayfa No
1.1	Elektrik alanda, k uzayındaki bir elektronun hareketi .	2
1.2	Elektrik alanda iki boyutlu örgülerde elektronun hareketi	3
1.3	Elektrik alan etkisindeki Fermi küresi	4
1.4	Siklotron rezonansı için geometrik gösterim	7
1.5	Hall olayının standart düzeneği	9
2.1	Tek boyutta enerji seviyeleri gösterimi	12
2.2	Fermi küresi	18
3.1	Enerji band diyagramında elektron doluluk oranları gösterimi	20
3.2	Serbest elektronda E enerjisinin k dalga vektörü ile değişimi	22
3.3	İlerleyen dalganın olasılık yoğunluğu	24
3.4	Kronig-Penney periyodik kare potansiyeli	30
3.5	(3.36) ve (3.38) denklemlerinin sol taraflarının enerjiye karşılık değişimi	35
3.6	(3.36) ve (3.38) denklemlerine göre k 'nın bir fonksiyonu olarak çizilmiş E enerjisi	36
3.7	Etkin kütlenin şematik gösterimi ve grup hızı	38
3.8	Serbest elektron yaklaşımı için E 'ye karşı k bağıntısının şematik gösterimi	43
3.9	Sıkı bağ yaklaşımında kullanılan vektör geometrisi	44
3.10	Sıkı bağ yaklaşımının hesaplamalarında kullanılan potansiyel fonksiyonları	45
3.11	Atomların kristal örgüye bağlandıklarında ,atomik enerji seviyelerinin bandlara dönüşümünün şematik gösterimi	49
3.12	Fermi yüzeylerinin basit kübik yapı için oluşumu	53
3.13	İki boyutta kare örgü için Brillouin bölgelerinde sabit enerji halkaları	56
3.14	İki boyutta kare örgü için Brillouin bölgelerinin oluşumu ve ilk beş bölge	57
3.15	Brillouin bölgelerinin şekillenimi a) basit kübik b) fcc için	59

SİMGELER DİZİNİ

Simge	Açıklama
e	Elektron yükü
$\vec{\varepsilon}$	Elektrik alan
$\vec{B}$	Manyetik alan
$\vec{F}$	Kuvvet
$\vec{v}$	hız
$\vec{v}_g$	Dalganın grup hızı
$\vec{\nabla}$	Gradyent operatörü
E	Enerji
m	kütle
m_e	Elektronun kütlesi
m*	Etkin kütle
$\vec{k}$	Dalga vektörü
h	Evrensel Planck sabiti
$\hbar$	$h/2\pi$
p	Momentum
a	Örgü sabiti
T	Periyot
τ	Ortalama serbest zaman
j	Akım yoğunluğu
l	Ortalama serbest yol
v_f	Fermi yüzeyindeki hız
σ	Elektriksel öz iletkenlik katsayısı
q	Yük
ρ	Olasılık yoğunluğu
n	Elektron sayısı
ω	Dalga paketinin frekansı

Simge	Açıklama
ω_c	Siklotron frekansı
ε_h	Hall alanı
R_h	Hall katsayısı
N	Atom sayısı
λ	Dalga boyu
n	Kuantum sayısı
ε_n	n kuantum sayılı durumun enerjisi
H	Hamiltoniyen operatörü
ψ	Dalga fonksiyonu
G	Ters örgü vektörü
E_g	Yasak enerji aralığı
V	Periyodik potansiyel
u	a periyotlu fonksiyon
a	ivme

1. ELEKTRİK VE MANYETİK ALANLARDA ELEKTRON DİNAMİĞİ.

1.1 Elektrik Alanda Elektron Dinamiği

Katıya bir elektrik alan uygulandığında , katıdaki elektronlar üzerinde bir kuvvet oluşur ve hızları değişir. Momentum uzayında bir kristale $\vec{\varepsilon}$ elektrik alanı uygulandığında, kristaldeki bir elektrona $\vec{F} = -e\vec{\varepsilon}$ kuvveti etkir. Elektrik alandan dolayı etkiyen bu kuvvet elektronun enerjisini değiştirir. Elektronun enerji absorblama hızı;

$$\frac{dE(\vec{k})}{dt} = -e\vec{\varepsilon}\vec{v} \qquad (1.1)$$

olur . Bu eşitliğin sağındaki terim elektron tarafından soğurulan gücü ifade eder.

$$\frac{dE(\vec{k})}{dt} = \vec{\nabla}_k E(\vec{k}).\frac{d\vec{k}}{dt}$$

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar}\vec{\nabla}_k E(\vec{k})$$

yazılarak eşit.(1.1) bağıntısında yerine konulursa;

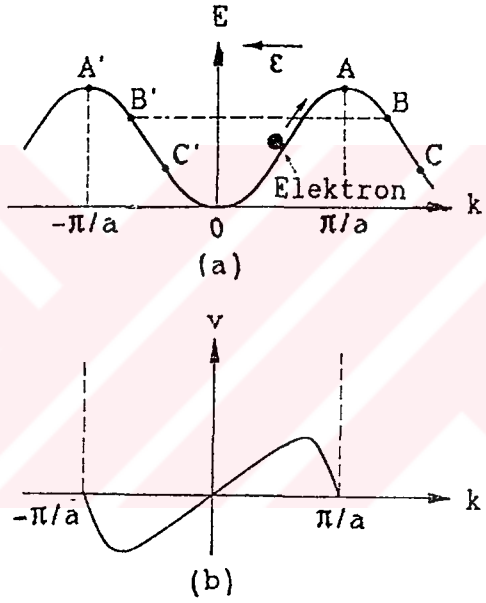
$$\hbar\frac{d\vec{k}}{dt} = -e\vec{\varepsilon} = \vec{F} \qquad (1.2)$$

eşit. (1.2) denklemi bulunur. Bu ifade göstermektedir ki $\vec{k}$ 'nın değişme hızı $\vec{F}$ elektriksel kuvveti ile orantılı ve aynı yönlüdür. Serbest bir elektronun momentumu $m\vec{v} = \hbar\vec{k}$ bağıntısı ile dalga vektörüne bağlıdır. Böylece eşit.(1.2) denklemi Newton'un ikinci yasası olan , momentumun zamanla değişme hızının kuvvete eşit olduğunu verir. Bu bağıntı aynı zamanda ivme teoremi olarak bilinir.

Tek boyutta ivme teoreminin sonuçlarını incelenirse, $\vec{k}$ dalga vektörünün zamanla düzgün olarak arttığını gösterecek şekilde eşit.(1.2) denklemi;

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{\vec{F}}{\hbar} \qquad (1.3)$$

biçiminde yazılabilir. Böylece t artarken, Şekil 1.1-a 'da gösterildiği gibi; elektron k uzayında düzgün bir hızla enine salınarak ilerleyecektir. Tekrarlanan bölge şemasını kullanarak, k=0 dan başlayarak, elektron bandın yukarısına, tepeye (A noktasına) ulaşıncaya kadar hareket edecek ve sonra BC eğrisi boyunca aşağıya inmeye başlayacaktır. İndirgenmiş bölge şemasını kullanarak, elektron A 'da bölge kenarını geçtiğinde, hemen A' eşdeğer noktasında yeniden ortaya çıkacak ve sonra A'B'C' eğrisi boyunca inmeye devam edecektir.



Şekil 1.1-a) Sola doğru elektrik alan varken k uzayında elektronun hareketi b) karşılık gelen hız.

Öteleme simetrisi özelliğine göre iki şemadan biri kullanılabilir ve B' ile C' noktaları sırasıyla B ve C noktalarına eşdeğerdir. Elektrik alandaki bir elektron k-uzayında sabit bir hareket yapar ; yani durgun değildir.

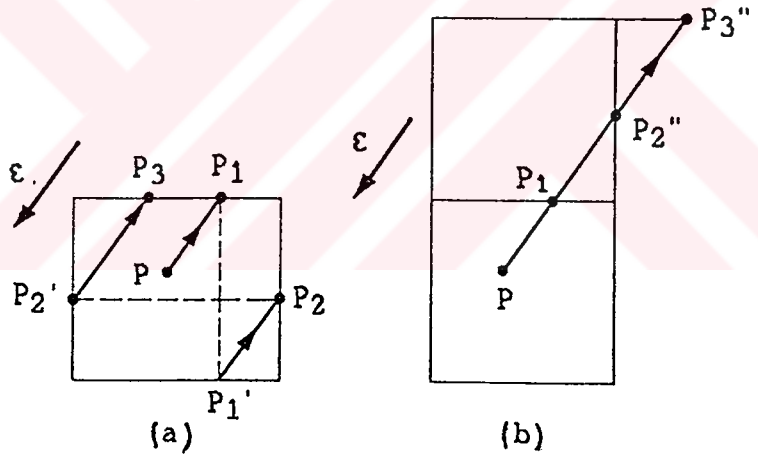
Şekil 1.1-b elektron k- ekseninde ilerlerken hızını gösterir. Zaman ilerlerken k=0 'dan hız artarak bir maksimuma ulaşır ve sonra bölge kenarında sıfıra düşer. Sonra elektron aşağı doğru hareket ederek negatif hıza sahip olur ve bu periyodik olarak devam eder. Burada incelediğimiz hız gerçek uzaydaki hız, yani bilinen fiziksel hızdır. Statik

elektrik alan varken bir elektron gerçek uzayda serbest elektrona hiç benzemeyen şekilde periyodik salınım hareketi yapar.

Bölge geçildikten sonra elektron, hareketini tekrarladığından k-uzayındaki hareketi; indirgenmiş bölge şemasında periyodiktir. Hareketin periyodu eşit (1.3) bağıntısından ;

$$T = \frac{2\pi\hbar}{Fa} = \frac{2\pi\hbar}{e\varepsilon a} \qquad (1.4)$$

olarak bulunur. Eşit. (1.4) bağıntısındaki T periyodu, bilinen parametrelerin değerleriyle yaklaşık olarak 10^{-5} sn 'dir. Oda sıcaklığındaki tipik bir elektronun ortalama çarpışma süresi $\tau = 10^{-14}$ sn ile karşılaştırılabilir. Böylece elektron bir devir süresince, yaklaşık 10^{9} tane çarpışma yapar. Sonuç olarak salınım hareketi tamamen ortadan kalkar.



Şekil 1.2 Elektrik alanda iki boyutlu örgüde elektronun hareketi
a) İndirgenmiş bölge şemasına, b) Tekrarlanmış bölge şemasına göre

Kristal üzerine iki boyutta elektrik alan uygulandığında şekil 1.2-a 'da P gibi keyfi bir noktadan başlayarak, $\vec{k}$-uzayındaki bir doğru üzerinde hareket eder. P_1 noktasında bölge kenarına ulaşırken, P_1' de yeniden ortaya çıkar. P_2 ye doğru harekete devam eder. P_2' de yeniden ortaya çıkar. Şekil 1.2-a 'da görüldüğü gibi bir yol meydana gelir. Tekrarlanmış bölge şemasında şekil 1.2-b 'de $\vec{k}$-uzayında elektronun yolu $PP_1P_2"P_3"$ doğrusu olur (Omar.M.A.1975).

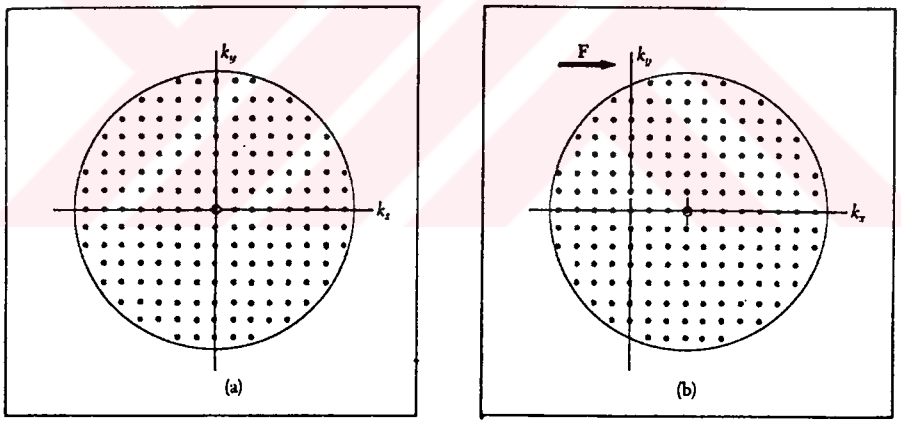
1.2 Elektrik İletkenliği ve Ohm Yasası

Bir dış elektrik ve manyetik alanında -e yüklü elektrona etkiyen kuvvet $-e(\vec{\varepsilon}+\vec{v}\times\vec{B})$ olur ve Newton'un ikinci hareket yasası yazılabilir;

$$\vec{F} = m\frac{d\vec{v}}{dt} = \hbar\frac{d\vec{k}}{dt} = -e(\vec{\varepsilon}+\vec{v}\times\vec{B}) \qquad (1.5)$$

Saçılma olmadığı durumda $\vec{k}$-uzayındaki Fermi küresi (şekil 1.3-b) uygulanan elektrik alanın etkisiyle düzgün bir şekilde ötelenir. B = 0 kabul edilerek bu denklemin integrali alınırsa

$$\vec{k}(t)-\vec{k}(o) = -e\vec{\varepsilon}t/\hbar \qquad (1.6)$$



Şekil 1.3 Elektrik alan etkisinde Fermi küresi a)t=0 anında b) t anında Fermi küresi $\delta\vec{k}$ kadar ötelenir.

bulunur. Elektrik alan, $\vec{k}$ uzayında merkezi orjinde olan bir Fermi küresini dolduran elektron gazına t=0 anında uygulanırsa, daha sonraki bir t anında kürenin öteleneceği yeni merkezi;

$$\delta\vec{k} = -\frac{e\vec{\varepsilon}t}{\hbar} \qquad (1.7)$$

kadar yer değiştirmiş olacaktır.

Elektron katkıları, örgü kusurları ve fononlarla çarpışması sonucu , yer değiştiren kürenin elektrik alanda dengede olması sağlanabilir. İki çarpışma arasındaki zaman τ ise, Fermi küresinin yer değiştirmesi eşit. (1.7)' de $t = \tau$ alınarak bulunur. Hızdaki artış ise $\vec{v} = -\frac{e\vec{\varepsilon}\tau}{m}$ dir. Sabit $\vec{\varepsilon}$ elektrik alanında birim hacımda n tane $q = -e$ yüklü elektron varsa, elektrik akım yoğunluğu;

$$\vec{j} = nq\vec{v} = \frac{ne^2\tau\vec{\varepsilon}}{m} \qquad (1.8)$$

olur. Bu Ohm yasasıdır.

σ elektrik öz iletkenlik katsayısı $\vec{j} = \sigma\vec{\varepsilon}$ bağıntısıyla tanımlanırsa;

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} \qquad (1.9)$$

olur. Taşınan yükün, ne yük yoğunluğuyla orantılı olması beklenir; e/m çarpanı ivmeden gelir, çünkü bir elektrik alanda ivme e yüküyle doğru, m kütlesiyle ters orantılıdır. τ zamanını, elektrik alanın iki çarpışma arasında yük taşıyıcıya (elektrona) etki edebildiği zaman aralığıdır.

Son derece saf bakır kristallerinin sıvı helyum sıcaklığındaki elektrik öz iletkenliği ölçümlerinde, oda sıcaklığındaki değerin 10^5 katı büyük değerler elde edilmiştir. Bir iletkenlik elektronunun ortalama serbest yolu;

$$l = v_f\tau \qquad (1.10)$$

olarak tanımlanır. Burada v_f Fermi yüzeyindeki elektron hızı alınır çünkü tüm saçılmalar Fermi yüzeyi civarındaki elektronlarda olur. Çok saf metallerin sıvı helyum sıcaklığında ortalama serbest yollarının 10 cm kadar olduğu ölçülmüştür (S.Gezci.1991).

1.3 Manyetik Alanda Hareket

Eşitlik (1.5) ve (1.7) denklemleri birlikte ele alındığında, bir $\vec{F}$ dış kuvveti ve çarpışmalardan ileri gelen bir sürtünme kuvveti etkisi altında, elektronların Fermi küresinin $\delta\vec{k}$ yer değiştirmesi için hareket denklemi yazılabilir.

$$\hbar\left(\frac{d}{dt}+\frac{1}{\tau}\right)\delta\vec{k}=\vec{F} \tag{1.11}$$

Düzgün bir $\vec{B}$ manyetik alanında sistemin hareketi incelenirse, bir elektron üzerine etki eden Lorentz kuvveti,

$$\vec{F}=-e(\vec{\varepsilon}+\vec{v}\times\vec{B}) \tag{1.12}$$

dir. $m\delta\vec{v}=\hbar\delta\vec{k}$ alınırsa, hareket denklemi;

$$m\left(\frac{d}{dt}+\frac{1}{\tau}\right)\delta\vec{v}=-e(\vec{\varepsilon}+\delta\vec{v}\times\vec{B}) \tag{1.13}$$

olur. Statik manyetik alan z ekseni yönünde olursa, bu durumda hareket denkleminin bileşenleri;

$$m\left(\frac{d}{dt}+\frac{1}{\tau}\right)v_x=-e(\varepsilon_x+Bv_y)$$

$$m\left(\frac{d}{dt}+\frac{1}{\tau}\right)v_y=-e(\varepsilon_y-Bv_x)$$

$$m\left(\frac{d}{dt}+\frac{1}{\tau}\right)v_z=-e\varepsilon_z \tag{1.14}$$

olur. Bir elektrik alanda kararlı durum oluştuğunda zamana göre türevler sıfır olur ve buradan sürüklenme hızı bileşenleri.

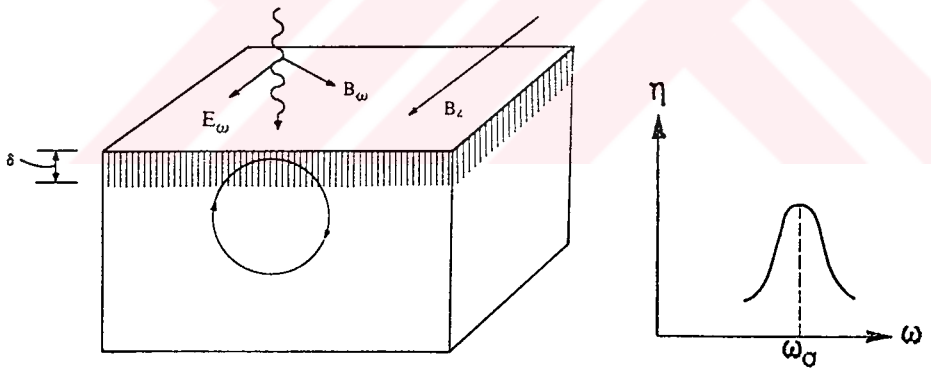
$$v_x = -\frac{e\tau}{m}\varepsilon_x - \omega_c \tau v_y$$

$$v_y = -\frac{e\tau}{m}\varepsilon_y + \omega_c \tau v_x$$

$$v_z = -\frac{e\tau}{m}\varepsilon_z \qquad (1.15)$$

Olarak bulunur (C. Kittel 1976).

1.4 Siklotron Rezonansı



Şekil 1.4 : Bir metalik kristalde siklotron rezonansının gözlenebilmesi için Azbel-Kaner geometrisi ve absorsiyon katsayısı η 'nün ω ile değişimi.

Metalik dilime uygulanan manyetik alan, elektronların alana dik bir düzlemde şekildeki gibi hareketlerine neden olur. Siklotron hareketi olarak bilinen bu hareketin frekansı, $\omega_c = eB/m^*$ ile verilir ve buna siklotron frekansı denir. Elektron için;

$$f_c = \frac{\omega_c}{2\pi} = \frac{eB}{2\pi m} = 2{,}8\,B \text{ (Gauss)}$$

bulunur. Radyo frekans elektrik alanının dilimde, $\vec{B}$ manyetik alanına parelel doğrultuda geçtiğini kabul edelim. Radyo frekans elektrik alanı elektronlara etkiyecek ve elektronlar enerji kazanacaktır. Elektronların enerji soğurma oranı;

$$\omega = \omega_c$$

olduğunda, yani radyo frekans elektrik alanının frekansı siklotron frekansına eşit iken maksimum enerji soğurulur. Bu koşul gerçekleştiğinde, her bir elektron bir tam devir süresince dalgayla eş zamanlı hareket eder ve böylece soğurma devir boyunca devam eder. $\omega = \omega_c$ eşitliği siklotron rezonans koşuludur. Bu koşul gerçekleştiğinde, elektronun dalgadan enerji soğurduğu tam devrin bir kısmında elektron dalgayla zıt fazda olup, dalgaya enerjiyi geri verecektir.

Siklotron frekansı kesin olarak biliniyorsa , $\omega_c\tau >> 1$ koşulu gerçekleşmelidir, bu da elektronun, tek bir çarpışma için geçen sürede bir çok siklotron devri yapabilmesi demektir.

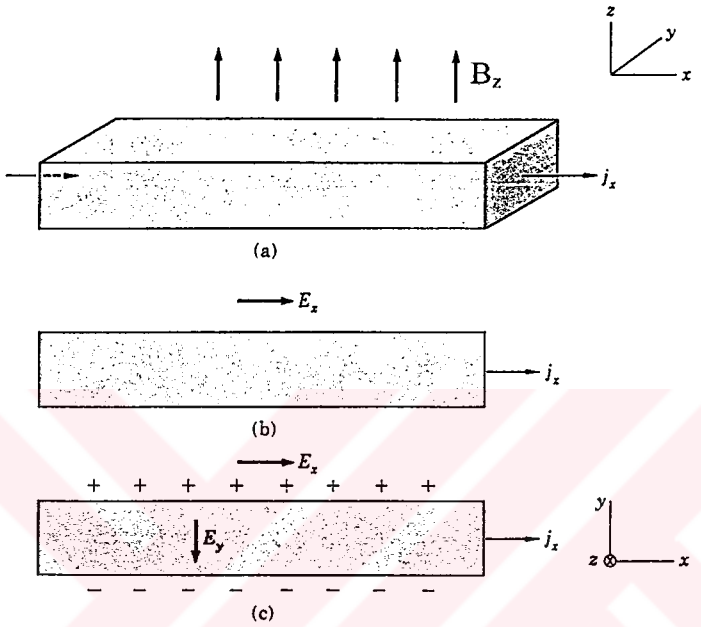
Siklotron rezonansı genellikle metallerde ve yarı iletkenlerde elektron etkin kütlesinin ölçülmesinde kullanılır. Siklotron frekansı tayin edilip, $\omega_c = eB/m^*$ bağıntısında yerleştirilerek m_e^* etkin kütlesi belirlenir (Omar M.A.1975).

1.5 Hall Olayı

İletkende j_x elektrik akımının x- doğrultusunda aktığını ve B_z manyetik alanının z-doğrultusunda iletkene dik uygulandığında, bu hem j_x'e hem de B_z 'ye dik yani y-doğrultusunda ilave bir elektrik alana neden olur .

Manyetik alan uygulanmadan önceki durumda, iletim elektronlarının $\vec{v}$ hızı ile negatif x-doğrultusunda sürüklenmesinden dolayı pozitif x-doğrultusunda akan bir

elektrik akımı vardır. Manyetik alan uygulandığında $\vec{F} = e(\vec{v} \times \vec{B})$ Lorentz kuvveti, şekilde gösterildiği gibi elektronları aşağıya doğru saptırır ve elektronlar alt yüzeyde birikir. Aynı zamanda elektronların alt yüzeyde birikmesinden dolayı, üst yüzeyde de pozitif net yük ortaya çıkar. Pozitif ve negatif yüzey yüklerinin bu bileşimi aşağı doğru bir elektrik alan oluşturur. Bu alana Hall alanı denir.



Şekil 1.5 Hall olayının standart düzeneği: Dikdörtgen kesitli bir çubuk B_z manyetik ve E_x elektrik alanına (a) daki gibi konulmuştur. Elektrik alan uygulandıktan hemen sonra negatif yüklü elektronların sürüklenme hızı (b) de gösterilmiştir. c) Yük birikmesinden doğan E_h elektrik (Hall) alanı.

Yük birikimine neden olan F_m manyetik kuvvet negatif y-doğrultusundadır ve

$$F_m = ev_xB \qquad (1.16)$$

büyüklüğündedir. Yüzey yüklerinin oluşturduğu alan, Lorentz kuvvetine zıt yönde bir kuvvet oluşturur. Yüklerin yüzeyde birikmesi; Hall kuvveti Lorentz kuvvetini tamamen ortadan kaldırıncaya kadar sürer. Kararlı halde $F_l = F_h$ olur.

$$E_h = v_xB$$

şeklinde Hall alanı tanımlanır. Bu akım yoğunluğu $j_x = -nev_x$ cinsinden yazılırsa;

$$E_h = -\frac{1}{ne} j_x B \qquad (1.17)$$

olur. Hall alanı akım yoğunluğu ve manyetik alana oranlanırsa $E_h / J_x.B$ oranı Hall sabiti adını alır ve R_h ile gösterilir.

$$R_h = -\frac{1}{ne}$$

Hall alanı ölçülerek taşıyıcı konsantrasyonu n belirlenebilir.

Hall sabitinin işareti akım taşıyıcılarının işaretine bağlıdır. Yani elektronlar negatif Hall sabitine, boşluklar (pozitif yüklü) pozitif Hall sabitine neden olur.

Tek değerlikli metaller için deneysel olarak gözlenen ve teorik olarak hesaplanan Hall sabitleri oldukça uyumludur. Fakat tek değerlikli metallere karşıt olarak berilyum, kadmiyum ve tungsten'deki Hall katsayısı pozitiftir, bu elektronlar için bir sorun yaratmaktadır. Çünkü pozitif Hall katsayısı pozitif yüklü taşıyıcıların hareketini belirlemektedir. Böylece serbest elektron teorisinde çözülemeyen bu problem enerji band teorisinin gelişmesiyle açıklık kazanmıştır. Enerji band teorisine göre, tepe noktası yakınında boş bir seviye yoksa dolu elektron enerji bandı bir pozitif yükle donatılmış gibi davranır. Bu karakter pozitif Hall sabitine neden olur (Omar M.A.1975-C.Kittel 1976).

2. SERBEST ELEKTRON MODELİ

2.1 Serbest Elektron Fermi Gazı

Metallerin bir çok önemli fiziksel özellikleri serbest elektron modeliyle açıklanabilir. Bu modele göre yapıyı oluşturan atomların zayıf bağlı elektronları metalin hacmi içinde serbestçe hareket ederler. Atomların değerlik elektronları metal içinde elektrik iletimine neden olur ve bunlara iletim elektronları denir. Serbest elektron modelinde iletim elektronlarıyla iyon korları arasındaki kuvvetler daima ihmal edilir ve bütün hesaplar iletim elektronlarının numune içinde her yere serbestçe hareket ediyormuş gibi yapılır. Toplam enerji kinetik enerji olarak ifade edilir ve potansiyel enerji daima ihmal edilir.

Basit bir metalde iletim elektronları yapıyı oluşturan atomların değerlik elektronlarından oluşur. Basit metaller (lityum, sodyum, potasyum, sezyum ve rubidyum) ve bazende (bakır,gümüş, ve altın) asal metallerdir. Bir sodyum atomunda değerlik elektronu 3s durumundadır. Sodyum metalinde ise bu elektron kristal boyunca gezinen bir iletim elektronu olur. N tane atom içeren tek değerlikli bir kristalde N tane iletim elektronu ve N tane pozitif iyon koru bulunmaktadır. N^+ iyon korunun on tane elektronu, bu serbest iyondaki 1s,2s,2p durumlarını doldurur.

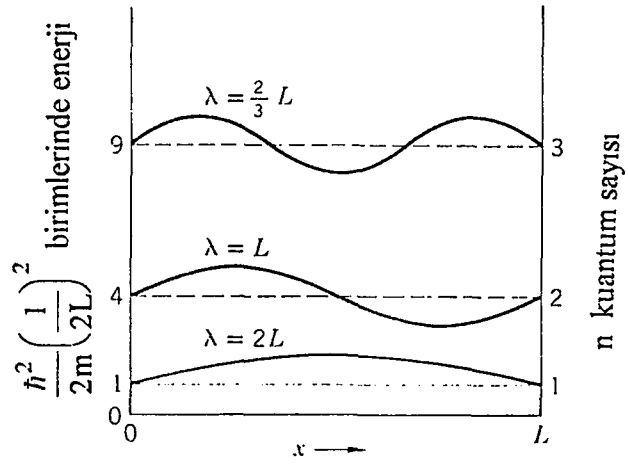
Metalik özelliklerin serbest elektronların hareketi cinsinden yorumu kuantum mekaniğinin keşfinden çok önce geliştirilmiştir. Klasik teorinin bir çok göze çarpan başarısı ve bir çok dikkate değer başarısızlığı vardır. Klasik teorinin başarısı elektrik alan ile elektrik akımını birbirine bağlayan Ohm kanununu içermesidir ve elektriksel iletkenlik ile ısı iletkenliği arasındaki bağıntıların türetilmesini de sağlar. Klasik teori iletim elektronlarının ısı sığasını ve manyetik geçirgenliği açıklamada tamamen yetersiz kalır. Klasik teori kullanıldığında, uzun elektronik ortalama serbest yolların ortaya çıkması gibi tam olarak anlaşılamayan bir çok zorluklar vardır. Yapılan bir çok deneyden anlaşılmıştır ki metal içindeki iletim elektronları diğer iletim elektronlarıyla veya iyon korlarıyla çarpışmalardan etkilenmeksizin bir çok atomik mesafeleri kat ederek bir doğru yol

boyunca serbestçe hareket etmektedir. Çok saf bir numunede ortalama serbest yol 10^8 ve 10^{10} atomlar arası uzaklığa (1 cm den büyük) eşittir, buda atomların bilinen yüzey üzerindeki dağılımından çok daha büyüktür. Yoğunlaşmış maddenin niçin iletim elektronlarını çok geçirdiği sorulabilir. Buna göre iletim elektronları bir gazın etkileşmeyen parçacıkları gibi rol oynar.

Bu soruya yanıt iki şekilde verilebilir a-) Bir iletim elektronu periyodik bir örgü üzerinde iyon korları tarafından saptırılamaz. Çünkü bir periyodik yapı içinde madde dalgaları serbestçe yayılırlar. b-) Bir iletim elektronu diğer iletim elektronlarını seyrekte olsa saçılmaya uğratır. Bu özellik Pauli dışarlama prensibinin bir sonucudur. Serbest elektron Fermi gazı olarak, Pauli prensibine uyan serbest veya elektronları etkileşmeyen bir gaz göz önüne alınmaktadır (S.Gezci 1991).

2.2 Tek Boyuttaki Enerji Seviyeleri

Burada ilk olarak kuantum teorisi ve Pauli prensibi göz önüne alınarak tek boyutta bir serbest elektron gazının davranışı incelenecektir.



Şekil 2.1. L uzunlukta bir doğru üzerine hapsedilmiş m kütleli bir elektronun ilk üç enerji düzeyi ve dalga fonksiyonları Enerji düzeylerini adlandırmakta kullanılan n kuantum sayısı, dalga fonksiyonundaki yarım dalgaboyu sayısını verir. Dalgaboyları her dalga fonksiyonu üzerinde gösterilmiştir.

Şekil 2.1 deki gibi kütlesi m olan bir elektron sonsuz engellerle L uzunlukta bir bölgeye kapatılsın. Bu elektronun $\psi_n(x)$ dalga fonksiyonu $H\psi = \varepsilon\psi$ Schrödinger denklemi ile tarif edilebilir. Burada potansiyel enerji ihmal edilmiştir ve $H = p^2 / 2m$ olup, $\vec{p}$ momentumdur. Kuantum mekaniğine göre $\vec{p}$ momentumu $-i\hbar\frac{d}{dx}$ operatörü ile temsil edilir ve Schrödinger denkleminde yerleştirilirse;

$$H\psi_n = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n}{dx^2} = \varepsilon_n\psi_n \qquad (2.1)$$

eşit.(2.1) bağıntısı elde edilir. Burada ε_n n 'inci yörüngedeki elektronun enerjisidir.

Sınır şartları

$$\psi_n(0) = 0 \;\; ; \;\; \psi_n(L) = 0$$

olup , bölgenin sonsuzdaki sonsuz potansiyel enerji engelinin zorlandığı durumdur. Sınır şartları ancak sinüs şeklindeki bir dalga fonksiyonun 0 ve L arasındaki yarım dalga uzunluğunun bir n tam sayı ile belirlenmesi durumunda sağlanır.

$$\psi_n \propto \sin(\frac{2\pi}{\lambda}x) \qquad ; \frac{1}{2}n\lambda_n = L$$

ve böylece

$$\psi_n = A\sin(\frac{n\pi}{L}x) \qquad (2.2)$$

olur. Burada A bir sabittir. Bu dalga fonksiyonu Schrödinger denkleminin bir çözümüdür. Dalga fonksiyonunun türevleri hesaplanarak,

$$\frac{d\psi_n}{dx} = A(\frac{n\pi}{L})\cos(\frac{n\pi}{L}x) \;\; ; \;\; \frac{d^2\psi_n}{dx^2} = -A(\frac{n\pi}{L})^2.\sin(\frac{n\pi}{L}x)$$

$$H\psi_n = \varepsilon_n\psi_n = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n}{dx^2}$$

ifadesinde yazılırsa ;

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m}(\frac{n\pi}{L})^2 \qquad (2.3)$$

Bu ifade bir doğru ile sınırlanmış serbest elektron için kuantum sayısı n olan enerjinin kare fonksiyonunu göstermektedir.

Doğru üzerinde (tek boyutta) herhangi bir noktada elektronun bulunma olasılığından A sabitini bulmak mümkündür. Çünkü $\psi^*(x)\psi(x)dx$; ifadesi elektronların doğru parçası üzerinde x ile dx arasında bulunma olasılığı olduğundan,

$$\int_0^L \psi^*(x)\psi(x)dx = 1 \qquad (2.4)$$

dir. Olasılık doğru üzerindeki her noktadaki elektronu belirler. Böylece dalga fonksiyonunu normal duruma getirmek için $\sin^2$ integrali L ile 1/2L sınır değerleri arasında alınırsa normal durumdaki dalga fonksiyonu;

$$\psi_n(x) = \int_L^{L/2} |\psi_n|^2 \, dx = (\frac{2}{L})^{1/2} \sin(\frac{n\pi x}{L}) \qquad (2.5)$$

olur. N elektron bir doğru üzerinde yerleştirmek istenirse, Pauli dışarlama ilkesi olan " herhangi iki elektronun bütün kuantum sayıları eşdeğer olamaz" ifadesini uygulamak gereklidir. Yani her bir yörünge (kuantum bölgesi) en fazla bir elektron tarafından doldurulur. Bu durum atomlara moleküllere veya katılardaki elektronlara uygulanır. Bir katının iletim elektron yörüngesi içindeki bir elektronun kuantum sayıları n ve m_s dir. Eşit.(2.5) deki dalga fonksiyonunda, n tam sayı ile verilen bir elektronun spininin +z veya -z doğrultusunda olabilecek iki durumu vardır. Böylece kuantum sayısı n ve m_s durumunda n herhangi bir pozitif tam sayı ise spin yönüne göre $m_s = 1/2$ dir. Her bir

enerji seviyesi kuantum sayısı n ile işaretlenen bir spin yukarı diğer spin aşağı doğru olmak üzere iki elektrona yer verir. Eğer sekiz elektron varsa sistemin temel durumda n=1,2,3,4 üncü seviyeler dolu ve n 'nin bundan yüksek değerleri boştur. Farklı enerji seviyeleri farklı enerji değerleri ile tarif edilir. Fakat birden fazla yörüngeler aynı enerjiye sahip olabilir. Aynı enerjideki yörüngelere kuantum mekaniğinde dejenere veya yozlaşmış enerji seviyeleri denir.

n_f elektron yörüngelerinin en üst dolu enerji seviyesini göstersin , bu durumda seviyeleri dipten (n=1 den) itibaren doldurmaya başlanırsa ve bütün N tane elektronu yerleştirinceye kadar daha yüksek seviyeleri elektronlarla doldurmaya devam edilirse N in çift sayı olması durumunda

$$2n_f = N$$

şartı gerçekleşir. Böylece en üst dolu seviyeyi n 'in değeri olan n_f belirler. $n = n_f$ durumunda mümkün olan enerji seviyesine ε_f Fermi enerjisi denir, ve temel durumda en üst dolu düzeyin enerjisi olarak tanımlanır (S.Gezci 1991).

$$\varepsilon_f = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_f \pi}{L}\right)^2 \qquad (2.6)$$

2.3 Üç Boyutta Serbest Elektron Modeli.

Üç boyuttaki serbest parçacık schrödinger denklemi;

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(\vec{r}) = \varepsilon_n \psi_k(\vec{r}) \qquad (2.7)$$

şeklindedir. Elektronlar L kenarlı bir küp içine kapatılırsa, dalga fonksiyonları için,

$$\psi_n(x) = \int_0^{L/2} |\psi_n|^2 \, dx = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \qquad (2.8)$$

ifadesinde normal durumdaki dalga fonksiyonundan yararlanarak;

$$\psi(\vec{r}) = \left(\frac{8}{L^3}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n_x\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n_y\pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{n_z\pi z}{L}\right) \qquad (2.9)$$

eşit.(2.9) elde edilir.

Bu ifade duran bir dalgayı belirler; $(8/L^3)^{1/2}$ çarpanı kübün $V = L^3$ hacmi üzerinde normalleştirme durumundaki düzeltmeyi verir.

$$\frac{8}{L^3}\int_V dxdydz \mathrm{Sin}^2\left(\frac{n_x\pi x}{L}\right)\mathrm{Sin}^2\left(\frac{n_y\pi y}{L}\right)\mathrm{Sin}^2\left(\frac{n_z\pi z}{L}\right) = 1 \qquad (2.10)$$

Dalga fonksiyonun x,y,z içinde periyodik olduğu ve periyodunun L olduğu kabul edilirse, dalga fonksiyonun periyodik olma koşulu,

$$\psi(x+L,y,z) = \psi(x,y,z) \qquad (2.11)$$

olur, y ve z koordinatları içinde benzer şekilde yazılabilir.

Dalga fonksiyonunu sağlayan eşit.(2.7) deki serbest parçacık Schrödinger denklemi, $V = L^3$ üzerindeki normalleştirme koşulu ve eşit.(2.11) periyodik olma koşulu dalga fonksiyonunun düzlem dalga biçiminde olduğunu belirler. İlerleyen düzlem dalga,

$$\psi_k(\vec{r}) = \left(\frac{1}{V}\right)^{1/2} e^{i\vec{k}.\vec{r}} \qquad (2.12)$$

biçimindedir. $\vec{k}$ dalga vektörünün bileşenleri;

$$k_x = 0 \; ; \; \pm\frac{2\pi}{L} \; ; \; \pm\frac{4\pi}{L} \; ; \; \ldots\ldots \qquad (2.13)$$

koşulunu gerçeklesin, benzer olarak k_y ve k_z için aynı durum geçerlidir. Yani $\vec{k}$ nın her bileşeni $2\pi n / L$ biçimindedir. n; pozitif veya negatif tamsayılardır.Spin doğrultusu için m_s kuantum sayısı ile birlikte $\vec{k}$ nın bileşenleri problemin kuantum sayılarıdır. k_x' in bu değeri nin periyodik olma koşulunu sağladığını görürüz. Çünkü;

$$e^{(ik_x(x+L))} = e^{(i2\pi n(x+L)/L)} = e^{((i2\pi nx)/L)}e^{i2\pi n}$$

$$= e^{((i2\pi nx)/L)} = e^{(ik_x x)} \qquad (2.14)$$

normalleştirme koşulu ilerleyen düzlem dalga eşit.(2.11) fonksiyonunu sağlar. Çünkü,

$$\frac{1}{V}\int_V e^{i\vec{k}\vec{r}}e^{-i\vec{k}\vec{r}}dxdydz = 1 \qquad (2.15)$$

dir. İlerleyen düzlem dalga (2.11) fonksiyonu eşit.(2.7) ifadesindeki Schrödinger denklemine yerleştirirsek $\vec{k}$ dalga vektörlü yörüngenin mümkün olan ε_k enerjisi ,

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \qquad (2.16)$$

belirlenmiş olur. Burada $\varepsilon_k = 0$ için k=0 değerini alır. Dalga vektörünün büyüklüğü, λ dalga boyuna bağlı olup,

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \qquad (2.17)$$

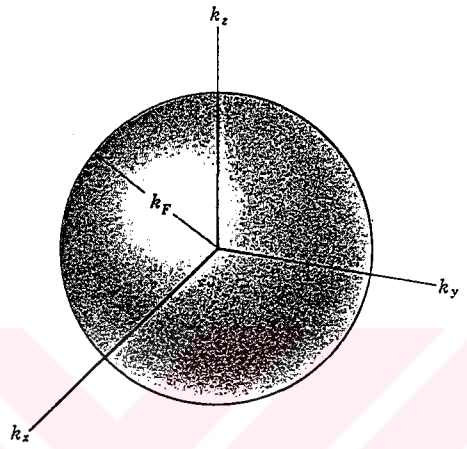
dır. Çizgisel momentum $\vec{p}$ kuantum mekaniğinde $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ operatörü ile temsil edilir. Böylece eşit.(2.11) deki ilerleyen düzlem dalga fonksiyonu,

$$p\psi_k(\vec{r}) = -i\hbar\vec{\nabla}\psi_k(\vec{r})\vec{r} \qquad (2.18)$$

şeklinde olur. Böylece düzlem dalga ψ_k çizgisel momentumunun mümkün olan $\hbar\vec{k}$ öz değerleri ile belirlenen bir öz fonksiyondur. k yörüngesindeki parçacık hızı,

$$m\vec{v} = \hbar\vec{k} \qquad \Rightarrow \quad \vec{v} = \frac{\hbar\vec{k}}{m} \tag{2.19}$$

olur. N serbest elektronlu bir sistemin temel durumda doldurulmuş yörüngeleri, k uzayında bir kürenin içindeki noktalar olarak gösterilebilir. Bu kürenin yüzeyindeki enerji Fermi enerjisidir ve bu Fermi yüzeyindeki dalga vektörleri Şekil 2.2.deki gibi bir k_f büyüklüğüne sahiptir.



Şekil 2.2 : N sayıda serbest elektron sisteminin taban durumunda; dolu yörüngeler k_f yarıçaplı bir küreyi doldururlar. k_f dalga vektörlü bir elektronun enerjisi $\varepsilon_f = \hbar^2 k_f^2 / 2m$ olur.

Temel durumda N serbest elektronlu bir sistemin işgal edilmiş yörüngeleri k_f yarıçaplı bir küreyi doldurmaktadır. Bu kürenin yüzeyi üzerinde $\vec{k}_f$ dalga vektörüne sahip bir elektronun enerjisi,

$$\varepsilon_f = \frac{\hbar^2}{2m} k_f^2 \tag{2.20}$$

olarak bulunur. Eşit.(2.13) deki dalga vektörü bileşenlerinin kullanılması nedeniyle k uzayının $(2\pi / L)^3$ hacim elamanı içinde tek bir izin verilmiş dalga vektörü olduğu görülür. Dalga vektörü k_x, k_y, k_z kuantum sayılarının belirlediği bir farklı üçlüyü belirler. Böylece $4\pi k^3_f / 3$ hacmindeki kürede toplam izin verilmiş yörüngelerin sayısı,

$$2\frac{4\pi k^3_f / 3}{(2\pi / L)^3} = \frac{V}{3\pi^2} k_f^3 = N \tag{2.21}$$

olarak bulunur. Denklemin başındaki "2" çarpanı k 'nın her bir izin verilmiş değeri için spin kuantum sayısı m_s in iki izin verilmiş değerinden gelir. Buradan "N" elektron sayısına eşit sayıda yörüngeleri oluşturulabilir. O halde,

$$k_f = \left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{1/3} \tag{2.22}$$

ifadesi kütleye bağlı olmayıp yalnız parçacık sayısına bağlı olmaktadır. k_f nin bu değerlerini eşit.(2.20) ifadesinde yazılırsa ;

$$\varepsilon_f = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{2/3} \tag{2.23}$$

elde edilir. Bu ifade Fermi enerjisini N/V elektron yoğunluğuna ve m kütlesine bağlı olarak verir. Fermi yüzeyindeki elektronun hızı ise,

$$v_f = \frac{\hbar k_f}{m} = \left(\frac{\hbar}{m}\right)\left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{1/3} \tag{2.24}$$

olarak elde edilir. Üç boyutta geçerli olan birim enerji aralığı başına yörünge sayısı olarak bilinen $D(\varepsilon)$ elektronlarının enerji yoğunluğu,

$$N = \frac{V}{3\pi^2}\left(\frac{2m\varepsilon_f}{\hbar^2}\right)^{3/2} \tag{2.25}$$

$$D(\varepsilon) = \frac{dN}{d\varepsilon_f} = \frac{V}{3\pi^2}\frac{3}{2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}(\varepsilon_f)^{1/2} \tag{2.26}$$

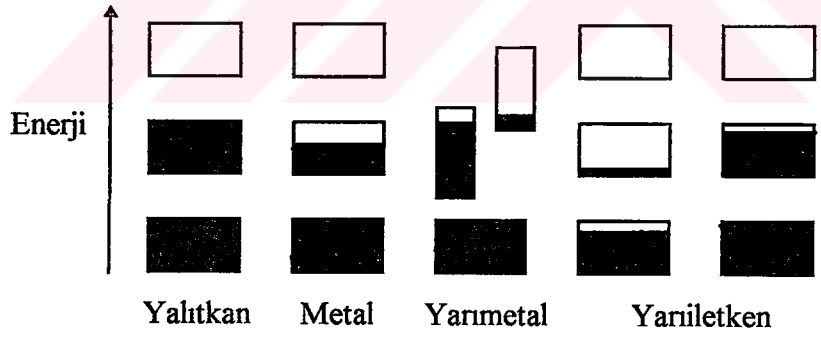
olarak bulunur.

Fermi enerjisi civarında birim enerji aralığındaki yörünge sayısı , toplam iletkenlik elektronu sayısının Fermi enerjisine oranı olur (C.Kittel 1976).

3. ENERJİ BANTLARI

Serbest elektron modeli metallerin pek çok özelliği hakkında bilgi vermekle beraber, metallerle yarı iletkenler veya yalıtkanlar arasındaki farklılıkları, metallerdeki iletim elektronları ile serbest atomların valans elektronları arasındaki ilişkiyi, Hall katsayısının bazı metaller için pozitif değerler alabilmesini ve bir çok taşıma özelliklerini açıklayamamaktadır. Bunun için daha ayrıntılı bir modelin geliştirilmesine gerek duyulmuş ve serbest elektron modeli ile açıklanamayan pek çok olay band teorisi ile açıklanmaya çalışılmıştır.

Her katı madde elektronlar içerir. Elektrik iletkenliği açısından önemli olan konu uygulanan bir elektrik alanda elektronların nasıl davrandığıdır. Kristaldeki elektronlar, yörüngelerin bulunmadığı enerji bölgeleriyle ayrılmış enerji bandları içinde yer alırlar. Enerji aralıkları veya band aralıkları denilen bu yasak bölgeler iletkenlik elektron dalgalarının kristal iyonları ile etkileşmeleri sonucu oluşur (Şekil 3.1).



Şekil 3.1 : Yalıtkan, metal,yarımetal ve yariiletkenlerde izinli enerji bandlarındaki elektron doluluk şeması. Dikdörtgenlerin dikey uzunlukları izinli enerji bölgelerini gösterir. Koyu alanlar elektronların doldurduğu kısımlardır.

İzinli enerji bandları tamamen dolu veya tamamen boş ise kristal, bir yalıtkan gibi davranır; çünkü elektronlar bir elektrik alanda hareket edemezler. Bir veya daha çok band yarı dolu ise kristal bir metal gibi davranır. Bir veya daha çok band zayıf oranlarda dolu veya boş ise kristal bir yarı metal veya yarı iletken olur (C.Kittel 1976).

İletken ve yarı iletkenler arasındaki farkı anlamak için, serbest elektron modelini genişletmek ve kristaldeki periyodik örgü yapısını hesaba katmak gerekir. Bu yeni durumda ortaya çıkan en önemli özellik, band aralıklarının oluşabileceği kavramıdır.

3.1 Yarı Serbest Elektron Modeli

Serbest elektron modelinde, elektronun alabileceği enerji değerleri;

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2}{2m}(k^2{}_x + k^2{}_y + k^2{}_z) \qquad (3.1)$$

şeklinde, sürekli bir dağılıma sahiptir.

Bir kenarı L uzunlukta bir kübün periyodik sınır koşulları için dalga sayıları,

$$k_x, k_y, k_z = 0 \; ; \pm\frac{2\pi}{L}; \pm\frac{4\pi}{L}; \; .... \; .. \qquad (3.2)$$

olur. Serbest elektron dalga fonksiyonları ise,

$$\psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k}.\vec{r}} \qquad (3.3)$$

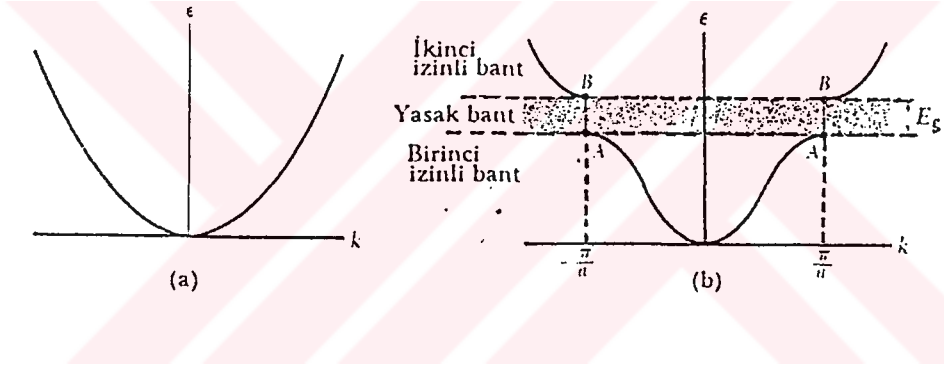
şeklinde $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ momentumuna sahip ilerleyen dalga yapısındadır. Yaklaşık serbest elektron modelinde bir kristalin band yapısı, band elektronları ile periyodik potansiyelleri arasındaki zayıf etkileşme ile açıklanabilir. Bu model metallerde elektron davranışları hakkında hemen hemen bütün soruları yanıtlamaktadır.

Enerji bandlarının oluşmasını basit olarak açıklayabilmek için , örgü sabiti a olan doğrusal kristal problemine bakalım. Band yapısının alt bölgesi Şekil 3.2-a 'da tamamen serbest elektronlar için, Şekil 3.2- b 'de yarı serbest fakat $k = \pm\pi / a$ değerinde

bir enerji aralığı olan elektronlar için gösterilmiştir. $\vec{k}$ dalga sayılı bir dalganın kırınımı için $(\vec{k}+\vec{G})^2 = k^2$ Bragg koşulu tek boyutta yazılırsa,

$$k = \pm\frac{1}{2}G = \pm\frac{n\pi}{a} \qquad (3.4)$$

olur. Burada $G = 2\pi n/a$ ters örgü vektörü ve n bir tamsayıdır. İlk yansıma ve ilk enerji aralığı $k = \pm\pi/a$ da oluşur. $\vec{k}$ uzayında $-\pi/a$ ile $+\pi/a$ arasındaki bölgeye bu örgünün birinci Brillouin bölgesi denir. n tam sayısının diğer değerleri için başka enerji aralıkları oluşur.



Şekil 3.2-a) Serbest elektronda ε enerjisinin k dalga vektörü ile değişimi. (b) örgü sabiti a olan tek atomlu doğrusal örgüde elektron enerjisinin dalga vektörü ile değişimi. E_g enerji aralığı $k=\pm\pi/a$ daki birinci Bragg yansımasıyla ilişkilidir diğer enerji aralıkları $\pm n\pi/a$ değerlerinde oluşur.

$k = \pm\pi/a$ değerlerindeki dalga fonksiyonları $e^{i\pi x/a}$ veya $e^{-i\pi x/a}$ şeklinde ilerleyen serbest elektron dalgası şeklinde değildir. Bu özel k değerlerinde dalga fonksiyonları sağa veya sola ilerleyen eşit miktarda bileşenlerden oluşur. $k = \pm\pi/a$ Bragg koşulu sağlandığı zaman, sağa ilerleyen bir dalga Bragg etkisiyle sola, sola ilerleyen dalga ise sağ yöne yansır. Ardışık her Bragg yansıması dalganın ilerleme yönünü tersine çevirir. Ne sağa ilerleyebilen nede sola ilerleyebilen durağan bir dalga oluşur.

Elektronun zaman içinde kararlı durumu durağan dalgalarla temsil edilir. $e^{\pm i\pi x/a}$ gibi iki dalga kullanarak durağan iki dalga oluşturulabilir:

$$\psi(+) = e^{i\pi x/a} + e^{-i\pi x/a} = 2\cos\frac{\pi x}{a}$$

$$\psi(-) = e^{i\pi x/a} - e^{-i\pi x/a} = 2i\sin\frac{\pi x}{a} \qquad (3.5)$$

Durağan dalgalar, $x \to -x$ yapıldığında işaret değiştirme özelliklerine göre (+) veya (-) ile gösterilmişlerdir. Her ikiside eşit miktarda sağa veya sola ilerleyen bileşenlere sahiptirler (C.Kittel 1976).

3.2 Enerji Aralığının Kaynağı

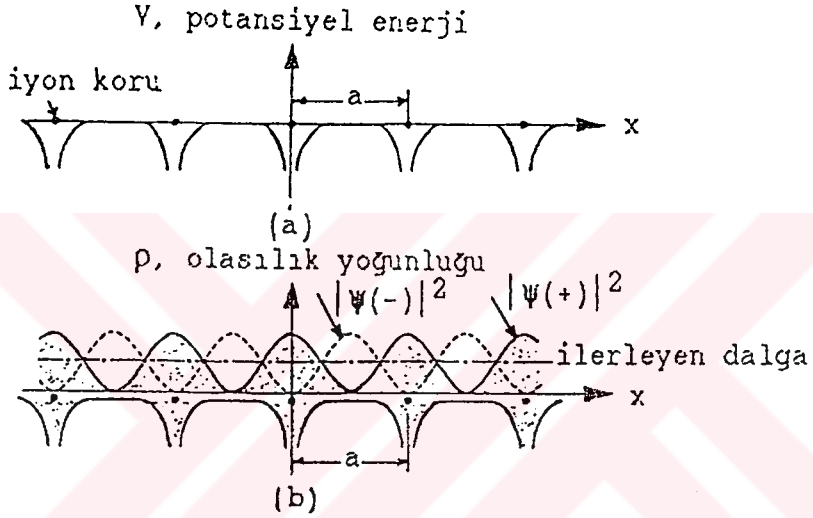
Durağan $\psi(+)$ ve $\psi(-)$ dalgaları elektronların farklı bölgelerde yığılmalarına yol açar ve dolayısıyla, iki dalga farklı potansiyele sahiptirler. Enerji aralığının kaynağı budur (C.Kittel 1976). Bir parçacığın olasılık yoğunluğu $\rho = \psi^*\psi = |\psi|^2$ ile verilir. İlerleyen dalga için $\rho = e^{ikx}e^{-ikx} = 1$ olacağından yük yoğunluğu düzgün dağılmış olur. Düzlem dalgaların lineer toplamında yük yoğunluğu düzgün olmaz. Örneğin $\psi(+)$ durağan dalgası için,

$$\rho(+) = |\psi(+)|^2 \approx \mathrm{Cos}^2\frac{\pi x}{a} \qquad (3.6)$$

olur. Şekil 3.3 ' de görüldüğü gibi elektron yığılması x= 0, a, 2a,... noktalarındaki iyonlar üzerinde oluşur ve buralarda potansiyel enerji en düşük değerdedir.

Şekil 3.3-a 'da pozitif iyon merkezlerinin oluşturduğu alanda iletkenlik elektronlarının elektrostatik potansiyel enerji değişimi görülmektedir. İyon merkezleri net pozitif yük taşırlar çünkü bir metalde atomların valans elektronları serbest hale geçip iletkenlik bandını oluştururlar.

Pozitif bir iyonun oluşturduğu alanda bir elektronun potansiyel enerjisi negatif olacağından elektron iyon etkileşmesi çekicidir.



Şekil 3.3-a) Doğrusal bir örgüdeki iyon merkezlerinin etkisi altındaki bir iletkenlik elektronunun potansiyel enerjisi (b) $|\psi(-)|^2 \propto \sin^2 \pi x/a$, $|\psi(+)|^2 \propto \cos^2 \pi x/a$ ve ilerleyen bir dalga için örgüdeki ρ olasılık yoğunluğu.

Diğer durağan dalga $\psi(-)$ için olasılık yoğunluğu,

$$\rho(-) = |\psi(-)|^2 \approx \mathrm{Sin}^2 \frac{\pi x}{a} \qquad (3.7)$$

olur ve elektronlar iyon merkezinden uzakta bulunurlar. Şekil 3.3-b 'de $\psi(+), \psi(-)$ durağan dalgaları ve ilerleyen bir dalga için elektron yoğunlukları gösterilmiştir.

Bu üç yük dağılımı için potansiyel enerjinin ortalama veya beklenen değerini hesapladığımızda, $\rho(+)$ nın ilerleyen dalganınkinden daha küçük , $\rho(-)$ nin ise ilerleyen dalganınkinden daha büyük olduğunu buluyoruz. $\rho(-)$ ve $\rho(+)$ dağılımlarının enerjileri

arasındaki fark E_g ise , genişliği E_g olan bir enerji aralığı oluşur. Şekil 3.2-b 'de enerji aralığının hemen altındaki A noktasında dalga fonksiyonu $\psi(+)$, hemen üstündeki B noktasında ise $\psi(-)$ olur (C. Kittel 1976).

3.3 Bloch Teoremi

Bloch teoremi; mükemmel periyodik potansiyel içinde hareket eden elektronunun, dalga fonksiyonunun alacağı şekli veren matematiksel bir bağıntıdır. Bir boyutlu periyodik potansiyel içinde bulunan bir elektronun hareket denklemi Schrödinger denklemidir ve bu aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\{E-V(x)\}\psi=0 \qquad (3.8)$$

Burada V(x) örgü periyodu ile periyodik olan kristal potansiyelidir. Eğer periyot a ise $V(x)=V(x+a)$ yazılabilir. Eşit (3.8) denklemi ikinci derece bir denklem olduğu için bağımsız iki çözümü olmalıdır. Bunlar f(x) ve g(x) ile gösterilirse; periyodiklik şartından f(x)=f(x+a) ve g(x)=g(x+a) şeklinde yazılabilir. Bunlarında birer çözüm olması gerekir , bu durumda denklemin dört çözümü olur; halbuki denklemin iki kökü olmalıydı . O halde g(x+a) ile f(x+a) ; f(x) ve g(x)' in lineer bileşimi ile elde edilebilirler. Dolayısıyla;

$$f(x+a)=\alpha_1 f(x)+\alpha_2 g(x)$$

$$g(x+a)=\beta_1 f(x)+\beta_2 g(x) \qquad (3.9)$$

yazılabilir. Burada α ve β katsayıları enerjinin gerçek fonksiyonlarıdır. Yine bir genel çözüm olarak ;

$$\psi(x)=Af(x)+Bg(x) \qquad (3.10)$$

biçiminde yazılabilir. Yine periyodiklik şartından $\psi(x+a)'$ da yine bir genel çözümdür. Buna göre:

$$\psi(x+a) = Af(x+a) + Bg(x+a)$$

$$= A\{\alpha_1 f(x) + \alpha_2 g(x)\} + B\{\beta_1 f(x) + \beta_2 g(x)\} = Q\psi(x)$$

$$= \{A\alpha_1 + B\beta_1\}f(x) + \{A\alpha_2 + B\beta_2\}g(x) = Q\psi(x) \qquad (3.11)$$

olur. Bu eşitlik,

$$A\alpha_1 + B\beta_1 = QA$$

$$A\alpha_2 + B\beta_2 = QB \qquad (3.12)$$

biçiminde yazılıp (burada Q bir sabittir) A ve B 'ye göre düzenlenirse;

$$(\alpha_1 - Q)A + \beta_1 B = 0$$

$$\alpha_2 A + (\beta_2 - Q)B = 0 \qquad (3.13)$$

denklemleri elde edilir. Bu denklemler A ve B ye göre lineer iki denklemdir. Denklemlerin ortak ve sıfırdan farklı çözümlerinin olması için katsayılar determinantı sıfıra eşit olmalıdır;

$$\begin{vmatrix} \alpha_1 - Q & \beta_1 \\ \alpha_2 & \beta_2 - Q \end{vmatrix} = 0 \qquad (3.14)$$

bu determinantın çözümünden Q bulunur. Buradan da $\psi(x+a) = Q\psi(x)$ eşitliğinden ψ bulunur.

$$(\alpha_1 - Q)(\beta_2 - Q) - \alpha_2\beta_1 = 0$$

$$Q^2 - (\alpha_1 + \beta_2)Q + (\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2) = 0 \qquad (3.15)$$

Dalga fonksiyonu ψ ise $\psi(x+a) = Q\psi(x)$ şeklinde idi. $\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2 = C$, olarak alınırsa C köklerin çarpımını gösterir. Burada $\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2 = 1$ dir, bunun gerçekten "1" olduğu gösterilebilir;

f(x) ve g(x) denklemin çözümleri olduğuna göre denklemde yerine yazılırsa denklem sağlanmalıdır.

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi = 0$$

Schrödinger denkleminde;

$$\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x)) = K$$

olarak alınırsa ; eşit.(3.8) denklemi;

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + K\psi = 0 \qquad (3.16)$$

olur. Burada K ; kristalin periyodu ile periyodik olarak değişen bir fonksiyondur.

$$f''(x)+Kf(x)=0 \qquad .....(a)$$

$$g''(x)+Kg(x)=0 \qquad .....(b)$$

(a) eşitliği g(x) ile ve (b) eşitliği f(x) ile çarpılırsa,

$$f''(x)g(x)+Kf(x)g(x)=0 \quad ....(c)$$

$$g''(x)f(x)+Kg(x)f(x)=0 \quad ....(d)$$

olarak bulunur. (c) 'den (d) çıkartılırsa ;

$$f''(x)g(x) - g''(x)f(x)=0$$

elde edilir. Bu eşitlik integre edildiğinde;

$$f'(x)g(x) - g'(x)f(x)=W$$

sabiti elde edilir. Bu ifade determinant biçiminde yazıldığında,

$$W=\begin{vmatrix} f(x+a) & g(x+a) \\ f'(x+a) & g'(x+a) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \alpha_1 f(x)+\alpha_2 g(x) & \beta_1 f(x)+\beta_2 g(x) \\ \alpha_1 f'(x)+\alpha_2 g'(x) & \beta_1 f'(x)+\beta_2 g'(x) \end{vmatrix}$$

$$W=\begin{vmatrix} f(x) & g(x) \\ f'(x) & g'(x) \end{vmatrix}\begin{vmatrix} \alpha_1 & \beta_1 \\ \alpha_2 & \beta_2 \end{vmatrix} \Rightarrow \begin{vmatrix} \alpha_1 & \beta_1 \\ \alpha_2 & \beta_2 \end{vmatrix} = 1$$

olmalıdır, böylece $\alpha_1\beta_2 - \alpha_2\beta_1 = 1$ olur. Bu eşitliğin "1" olduğu görüldükten sonra eşit.(3.15) denklemi tekrar incelendiğinde,

$$Q^2 - (\alpha_1 + \beta_1)Q + 1 = 0$$

$$Q_{1,2} = \frac{(\alpha_1 + \beta_2) \pm \sqrt{(\alpha_1 + \beta_2)^2 - 4}}{2}$$

olarak Q değerleri bulunur, bulunan kökler irdelendiğinde şu sonuçlara varılır:

1-) α ve β enerjinin fonksiyonlarıydı $(\alpha_1 + \beta_2)^2 < 4$ olduğunda enerji için belli bir bölge vardır ki bu bölgede Q_1 , Q_2 sanaldır ve çarpımları; $Q_1.Q_2 = 1$ olmalıdır. Buradan anlaşılırki iki kök birbirinin karmal eşleniği olmalıdır. Buna göre $Q_1 = e^{ika}$ $Q_2 = e^{-ika}$ yazılabilir. Eşit.(3.11) 'e göre,

$$\psi_1(x+a) = e^{ika}\psi_1(x)$$

$$\psi_2(x+a) = e^{-ika}\psi_2(x) \qquad (3.17)$$

yazılır. Periyodiklik şartından, genel çözümde yerine yazılarak bu iki fonksiyon bulunur. Bu eşitlikleri sağlayan ψ_1 ve ψ_2 fonksiyonları tanımlanabilir, şöyle ki

$$\psi_1(x+a) = e^{ik(a+x)}V(x+a) = e^{ika}e^{ikx}V(x) \qquad (3.18)$$

yazılabilir. Yine periyodiklik şartından $e^{ika} = 1$ olmalıdır. Buna göre,

$$\psi_1(x) = e^{ikx}V_1(x) \tag{3.19}$$

benzer şekilde,

$$\psi_2(x) = e^{-ikx}V_2(x) \tag{3.20}$$

olarak bulunur. Bu fonksiyonlar elektronu temsil eden dalga fonksiyonlarıdır.

2-) $(\alpha_1 + \beta_2)^2 > 4$ olduğunda:

Bu durumda kökler gerçeldir; kökler $Q_1 = e^{\mu a}$, $Q_2 = e^{-\mu a}$ şeklindedir.

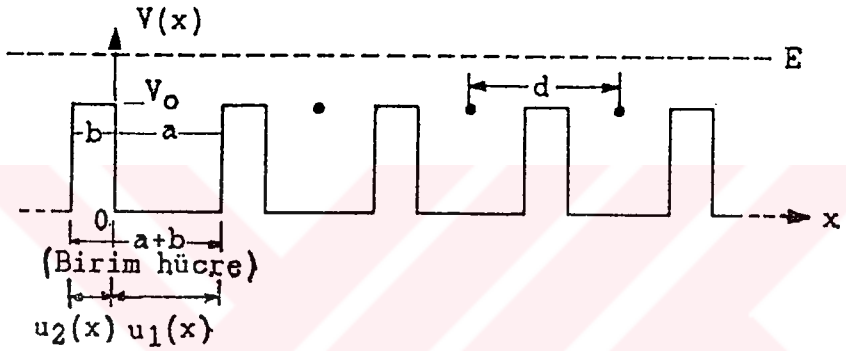
Buna göre $\psi(x+a) = e^{\pm\mu a}\psi(x)$ şeklinde elde edilir. Bulunan bu çözüm matematiksel olarak doğrudur , fakat fiziksel olarak kabul edilemez. Çünkü bu çözüm fiziksel olarak sınırlandırılmamıştır. $x \to \infty$ giderken dalga boyuda ∞ 'a gider. $x \to -\infty$ giderken dalga boyuda $-\infty$ gider. Ayrıca çözümleri; sürekli, sonlu ve kareleri integre edilebilir olmalıdır.

O halde elektronu tanımlayan dalga fonksiyonu $\psi(x) = e^{\pm ikx}V(x)$ olur. Burada şuna dikkat edilmelidir. $\psi(x) = e^{\pm\mu x}$ çözüm olmadığına göre enerjinin fonksiyonu olan $(\alpha_1 + \beta_2)^2 > 4$ durumuda çözüm değildir. Burada enerjinin bazı değerleri alabilmesi yanında bazı değerleride alamadığı görülmektedir. Bu da enerjinin izinli ve yasak enerji bantlarına ayrıldığını gösterir.

Örgünün periyodu ile periyodik olan potansiyelde incelemeler yapılarak, örgünün potansiyeli hakkında bilgi elde edilebilir. Bu durum ilk önce Kronig-Penney tarafından ele alınmıştır. Bu model gerçeği yansıtmasa da enerji hallerinin bantlara dönüştüğünü gösteren modeldir (Mckelvey 1966).

3.4 Kronig Penney Modeli

Enerji bandlarının analitik olarak anlaşılmasında Kronig-Penney yaklaşımı basit bir model teşkil etmektedir. Bu model ile kuantum mekaniğinde belirtilen yasak ve müsade edilmiş enerji bandları matematiksel olarak ortaya çıkar.



Şekil 3.4 : Periyodik örgülerde elektronların kuantum davranışlarının genel karekteristiklerini açıklamak için Kroning-Penney tarafından kullanılan periyodik kare potansiyel.

Periyodik potansiyel içinde elektrona eşlik eden dalga fonksiyonu Bloch tipinde bir fonksiyondur. Şekil 3.4 'de görüldüğü gibi V(x) potansiyeli $V\{x+(a+b)\}$ şeklindedir. Böylece elektronun hareketini tanımlayan Schrödinger denklemi;

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\{E-V(x)\}\psi(x)=0 \qquad (3.21)$$

olarak yazılabilir. Bu denklemin çözümünden dalga fonksiyonu, $\psi(x)=e^{ikx}U(x)$ şeklinde Bloch fonksiyonu olur. $\psi(x)$'in ikinci türevi aşağıdaki gibidir;

$$\frac{d\psi}{dx}=\frac{d}{dx}\left(e^{ikx}U(x)\right)=ike^{ikx}U(x)+e^{ikx}\frac{dU(x)}{dx}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \left[\left(-k^2U(x) + 2ik\frac{dU(x)}{dx} + \frac{d^2U(x)}{dx}\right)e^{ikx}\right] \qquad (3.22)$$

elde edilen türevler Schrödinger denkleminde yerine yazılırsa;

$$(U''+2ikU'-k^2U)e^{ikx} - \left(\frac{2m}{\hbar^2}(V-E)e^{ikx}U\right) = 0$$

$$U''+2ikU'-\left(k^2 - \frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2m}{\hbar^2}V(x)\right)U = 0 \qquad (3.23)$$

denklemleri elde edilir. Şekildeki gibi potansiyel içinde hareket eden elektronun durumu incelerse iki hareket denklemi yazılır, bunlar;

$V(o) = 0$; $(0< x <a)$ için ;

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0 \qquad (3.24)$$

$V(x)=V_0$; $(-b< x <0)$ için ;

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi = 0 \qquad (3.25)$$

olarak yazılır. Eşit.(3.23) denklemine benzetmek için ; $\alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $\beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)$ olarak alınıp Bloch fonksiyonunun türevleri denklemlerde yerine yazılırsa eşit.(3.24) ve (3.25) denklemleri ,

$$\frac{d^2U_1}{dx^2} + 2ik\frac{dU_1}{dx} - (k^2 - \alpha^2)U_1 = 0 \qquad (0< x <a) \qquad (3.26)$$

$$\frac{d^2U_2}{dx^2} + 2ik\frac{dU_2}{dx} - (k^2 - \beta^2)U_2 = 0 \qquad (-b< x <0) \qquad (3.27)$$

olarak bulunur. Bu denklemler U 'ya göre ikinci derece denklemlerdir. Bunların çözümleri;

$$U_1(x) = Ae^{i(\alpha-k)x} + Be^{-i(\alpha+k)x} \qquad (0< x <a) \qquad (3.28)$$

$$U_2(x) = Ce^{i(\beta-k)x} + De^{-i(\beta+k)x} \qquad (-b<x<0) \qquad (3.29)$$

şeklindedir. Herhangi bir genel çözüm bunların çizgisel toplamı olacaktır. Eğer çözümleri denklemlerde yerine yazılırsa A,B,C,D 'ye göre denklemler elde edilir. Diğer taraftan bu fonksiyonlar sınır şartlarına bağlıdır.

süreklilik şartına göre;

$$U_1(o) = U_2(o) \quad \text{ve} \quad \left(\frac{dU_1}{dx}\right)_{x=0} = \left(\frac{dU_2}{dx}\right)_{x=0} \qquad (3.30)$$

ve periyodiklik şartına göre;

$$U_1(a) = U_2(-b) \quad \text{ve} \quad \left(\frac{dU_1(x)}{dx}\right)_{x=a} = \left(\frac{dU_2(x)}{dx}\right)_{x=-b} \qquad (3.31)$$

olmalıdır. Bu şartlar gerçekleştiğinde A,B,C,D bilinmeyenlerine göre birinci dereceden dört lineer homojen denklem elde edilir bu denklemler;

A+B-C-D=0

$$i(\alpha-k)A - i(\alpha+k)B - i(\beta-k)C + i(\beta+k)D = 0$$

$$e^{i(\alpha-k)a}A + e^{-i(\alpha+k)a}B - e^{-i(\beta-k)b}C - e^{i(\beta+k)b}D = 0 \qquad (3.32)$$

$$i(\alpha-k)e^{i(\alpha-k)a}A - i(\alpha+k)e^{-i(\alpha+k)a}B - i(\beta-k)e^{-i(\beta-k)b}C + i(\beta+k)e^{i(\beta+k)b}D = 0$$

şeklindedir. Bu denklem sisteminin A=B=C=D=0 ' dan başka (aşikar) çözümü olması için katsayılar determinantı sıfır olmalıdır. Buna göre;

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ \alpha - k & -(\alpha + k) & -(\beta - k) & (\beta + k) \\ e^{i(\alpha-k)a} & e^{-i(\alpha+k)a} & -e^{-i(\beta-k)b} & -e^{i(\beta+k)b} \\ (\alpha - k)e^{i(\alpha-k)a} & -(\alpha + k)e^{-i(\alpha+k)a} & -(\beta - k)e^{-i(\beta-k)b} & (\beta + k)e^{i(\beta+k)b} \end{vmatrix} = 0 \quad (3.33)$$

bu determinant açılırsa;

$$-\frac{\alpha^2 + \beta^2}{2\alpha\beta} \mathrm{Sin}\alpha a \mathrm{Sin}\beta b + \mathrm{Cos}\alpha a \mathrm{Cos}\beta b = \mathrm{Cosk}(a + b) \qquad (3.34)$$

elde edilir. Bu enerji değeri $0 < E < V_0$ ise $\beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)$ ifadesine göre B sanaldır. $(B = \sqrt{\beta^2})$ Buna göre $B^2 = i^2\gamma^2$ olarak ifade edilebilir. Burada $\gamma = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E_0)$ şeklindedir. Buna göre $\beta = i\gamma$ olur. Bu duruma göre eşit.(3.34) denklemi yeniden yazalırsa;

$$\frac{\gamma^2 - \alpha^2}{2i\alpha\gamma} \mathrm{Sin}\alpha a \mathrm{Sin}i\gamma b + \mathrm{Cos}\alpha a \mathrm{Cos}i\gamma b = \mathrm{Cosk}(a + b)$$

Cosix=Coshx Sinix=isinhx

$$\frac{\gamma^2 - \alpha^2}{2\alpha\gamma} \frac{1}{i} i\mathrm{Sinh}\gamma b \mathrm{Sin}\alpha a + \mathrm{Cos}\alpha a \mathrm{Cosh}\gamma b = \mathrm{Cosk}(a + b) \qquad (3.35)$$

elde edilir. Bu eşitlikte enerji ile k arasında nasıl bir bağıntı olduğunu görmek oldukça güçtür. γ ve α enerjinin fonksiyonlarıydı, enerjinin k ile nasıl değiştiğini görebilmek için bazı basitleştirmeler yapılırsa;

burada γ ; β, $(V_0 < E < \infty)$ aralığında olduğunda , $(0 < E < V_0)$ aralığında bulunan pozitif bir niceliktir. Böylece $(V_0 < E < \infty)$ olduğunda (3.34) denklemi ve $(0 < E < V_0)$ olduğu zaman (3.35) denklemi kullanılır. Bloch tipindeki dalga foksiyonları $x = \pm\infty$ 'a yaklaşırken (benzer bütün dalga fonksiyonları içinde) iyi huylu

fonksiyonlar olmalıdır. U(x) periyodik olduğundan her birim hücrede değeri aynıdır. Bloch dalga fonksiyonundaki e^{ikx} terimi iyi huylu bir fonksiyon ise bir güçlük olmaz. Fakat e^{ikx} şayet k reel ise $+\infty$ ve $-\infty$ da iyi huyludur, bundan dolayı e^{ikx} salınımlıdır. Eğer k sanal ise e^{ikx}, $+\infty$ ve $-\infty$ da sonsuza ıraksar, ve $\psi(x)$ dalga fonksiyonu olamaz. Bu nedenle k için gerçek değerli Bloch tipinde fonksiyonlar $\left[\psi(x) = e^{ikx}U(x)\right]$ kabul edilir. Yukarıda eşit.(3.34) ve (3.35) denklemlerinin sol tarafları Cosk(a+b) 'ye eşit olan $k_1 Sin\alpha a + k_2 Cos\alpha a$ şeklinde bir fonksiyona eşit olmalıdır. Sol taraf; sağ tarafın Cosk(a+b) ye eşit olmasından dolayı ± 1 aralığında değişir. α ve β enerjinin fonksiyonlarıydı , bu sebebten dolayı eşit. (3.34) ve (3.35) denklemlerinde sağ taraftan dolayı sol taraflarıda aynı değerler arasında sınırlanmalıdır. Böylece bazı enerji değerleri mevcut olurken bazıları mevcut olamaz. Eşit.(3.34)ve (3.35) denklemlerinin sol tarafları $K_3 Sin(\alpha a - \delta) = Cosk(a+b)$ şeklinde yazılırsa; burada $K_3 = (K_1^2 + K_2^2)^{1/2}$, $\delta = \dfrac{K_1}{K_2}$ olur. Bu şekilde eşit.(3.34) ve (3.35) denklemleri;

$$\left[1 + \frac{(\alpha^2 - \beta^2)^2}{4\alpha^2\beta^2} Sin^2\beta b\right]^{1/2} Cos(\alpha a - \delta) = Cosk(a+b) \qquad (3.36)$$

olarak elde edilir. Burada;

$$tg\delta = -\frac{\alpha^2 + \beta^2}{2\alpha\beta} tg\beta b \quad ; \quad (V_0 < E < \infty) \qquad (3.37)$$

şeklindedir. Benzer biçimde,

$$\left[1 + \frac{(\alpha^2 + \gamma^2)^2}{4\alpha^2\gamma^2} Sinh^2\gamma b\right]^{1/2} Cos(\alpha a - \delta) = Cosk(a+b) \qquad (3.38)$$

olarak bulunur. Burada ise;

$$tg\delta = \frac{\alpha + \gamma^2}{2\alpha\gamma} tgh\gamma b \qquad ; (0 < E < V_o) \qquad (3.39)$$

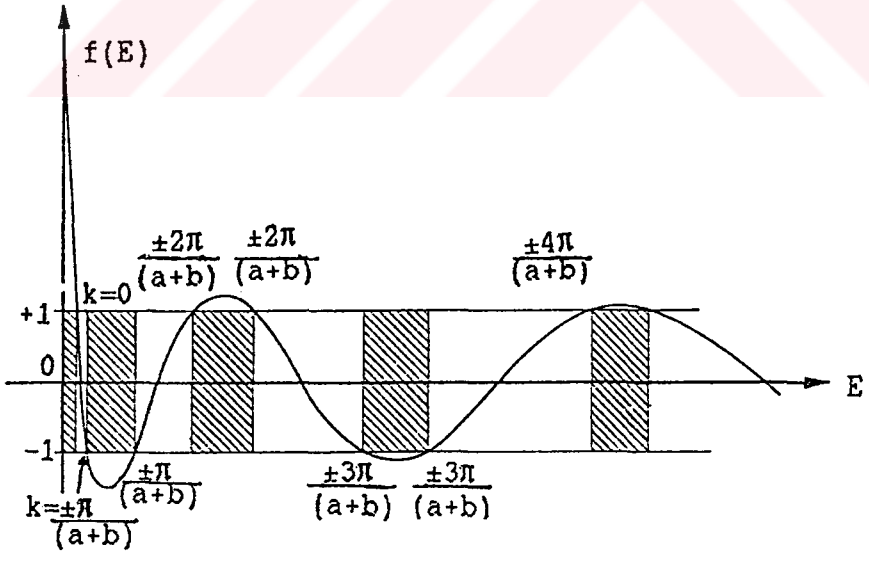
şeklindedir.

Bu ifadelerden anlaşılırki her iki haldede sol tarafin genliği her zaman birden daha büyük olan kosinüs fonksiyonunun zamanlarını modüle eden bir çarpan şeklindedir. Bu çarpanın değeri $\alpha = 0$ için bir maksimum olur. (Burada E=0 için) ve $\alpha \cong \beta$ olduğunda büyük enerji limitinde bire yaklaşır.

Eşit.(3.36) ve (3.38) denklemleri arasındaki ilişkinin

$$\alpha^2 - \beta^2 = \alpha^2 + \gamma^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} = \text{sabit} \qquad (3.40)$$

biçiminde olduğu α ve β eşitliklerinden görülebilir. Eşit.(3.36) ve (3.38) denklemlerinin sol tarafları enerjinin bir fonksiyonu olarak şekil 3.5 'de çizilmiştir.

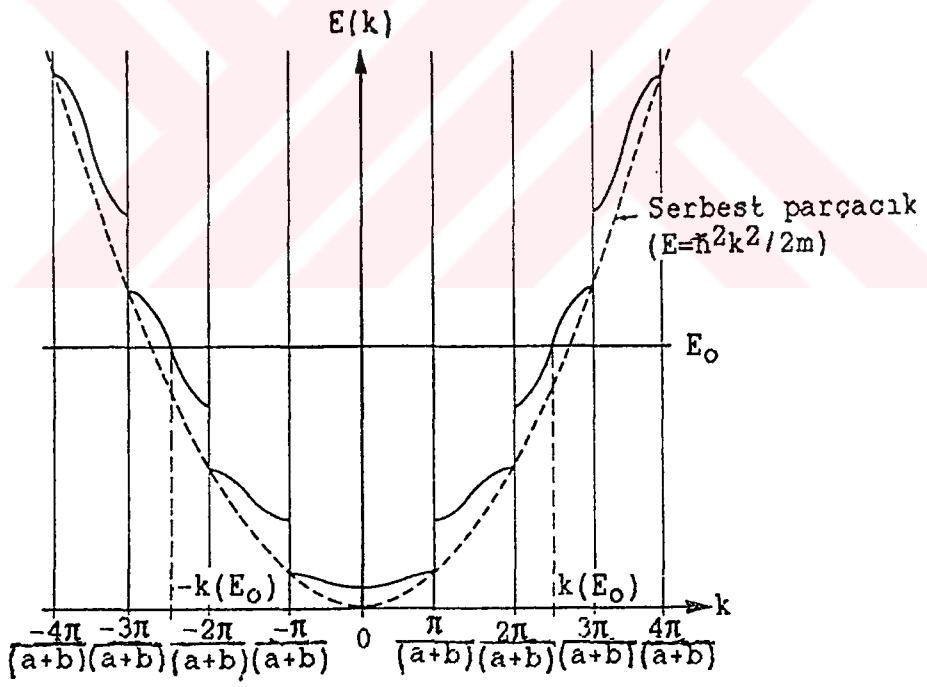


Şekil 3.5 : (3.36) ve (3.38) denklemlerinin soltaraflarındaki fonksiyonlara karşı enerjinin bir grafiği. Taralı bölgeler, k 'nın değerinin kompleks olduğu yasak enerji bandlarını, taralı olmayan bölgeler, k 'nın gerçek değerlerine karşılık gelen izinli enerji bandlarını göstermektedir.

Eğrinin ordinatı +1 ve -1 arasında değiştiği zaman eğride fiziksel olarak mümkün dalga fonksiyonlarına karşılık gelen k için gerçek bir değer mevcuttur. Bu sonuçlar dışında k nın sanal kısmı sıfir olmayan kompleks bir değerdir. k 'nın bu değerleri hiç bir zaman fiziksel olarak iyi huylu fonksiyonlar vermez. Böylece yasak enerji aralıkları meydana gelmiş olur.

Eşit.(3.36) , (3.38) ve α,β değerleri kullanılarak , k'nın bir fonksiyonu olarak E enerjisini gösteren bir eğri çizmek mümkündür. Sonuç şematik olarak şekil 3.6 'da gösterilmiştir.

Yasak enerji bantları ve çeşitli izinli bantlar içinde k'ya karşı E bağıntısı şekil 3.5 'deki şemaya uygun olarak ayrılmıştır.



Şekil 3.6 : Eşit. (3.36) ve (3.38) denklemlerine göre k 'nın bir fonksiyonu olarak çizilmiş E enerjisi.

Büyük enerjiler için E(x) fonksiyonu elektronun serbest enerjisi $E=\hbar^2k^2/2m$ değerine yaklaşır. E(x) eğrisi izinli bantların kenarında sıfir eğime sahiptir. Bu sonuç eşit.(3.36) ve (3.38) denklemlerinden elde edilir (McKelvey 1966).

3.5 Etkin Kütle

Bir elektronun gerçek uzaydaki hızı dalganın grup hızı yani;

$$v_g(k) = \frac{dw}{dk} = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk} = \frac{1}{\hbar}\nabla_k E \tag{3.41}$$

olarak alınır. Bu hız E-k eğrisine teğet ve bundan dolayı k-uzayında k=0 noktasından geçen enerji yüzeyine normaldir. Gerçek uzaydaki sabit bir grup hızı k-uzayında sadece bir nokta ile gösterilir. Elektronun gerçek uzaydaki ani hızı ve momentumu , periyodik potansiyelden dolayı sabit değildir. Bundan dolayı momentum hareketin bir sabiti olmamakta ve kuantum mekaniğinde bunun sadece ortalama değeri hesaplanabilmektedir. $\hbar k$ kristal momentumu ise , aşağıda görüleceği gibi , hareketin bir sabitidir. Enerjinin uygulanan bir kuvvet etkisindeki değişme hızı, v_g doğrultusundaki bir kuvvet için,

$$\frac{dE}{dt} = Fv_g \tag{3.42}$$

olur ve

$$\frac{dE}{dt} = \frac{F}{\hbar}\frac{dE}{dk} \Rightarrow \hbar\frac{dk}{dt} = F \tag{3.43}$$

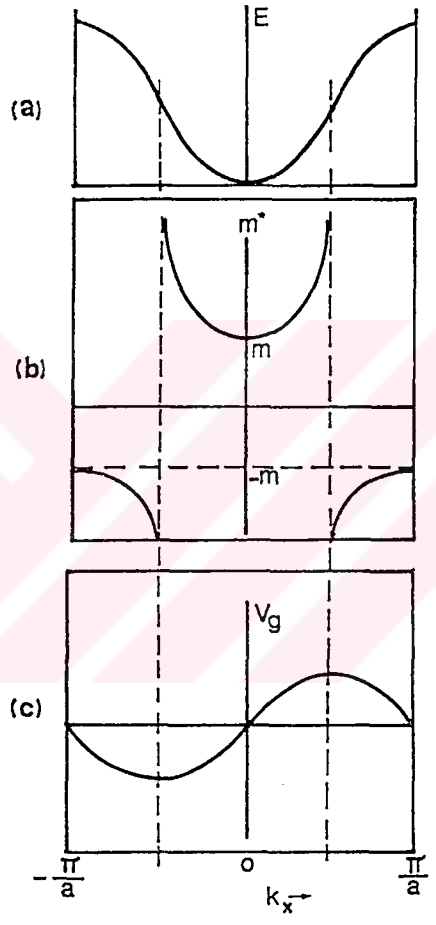
elde edilir. Buna göre, $\hbar k$ kristal momentumu Newton kanuna uymakta ve vakumdaki bir elektronun momentumunun özelliğini göstermektedir, ivme ise, serbest elektronun kütlesi yerine, etkin kütleden bulunur. Daha açık bir anlamda etkin kütle kristal potansiyeli ve bir dış kuvvetin etkisi altındaki bir elektrona Newton kanununun uygulanmasını sağlayan bir büyüklüktür,

$$a = \frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{\hbar}\frac{d}{dt}\left(\frac{dE}{dk}\right) = \frac{1}{\hbar}\frac{d^2E}{dk^2}\frac{dk}{dt} = \frac{F}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2} \tag{3.44}$$

elde edilir. Etkin kütle;

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2} \tag{3.45}$$

olarak bulunur.



Şekil 3.7 : Serbest elektron modeline uyan bir-boyutlu bir metal. (a) enerji bandı, (b) etkin kütle, (c) grup hızı. Kesikli düşey çizgiler dispersiyon eğrisinin dönüm noktalarından geçmektedir.

Serbest elektronlar için enerji-dalga vektörü bağıntısına bakarsak, k^2 'nin katsayısı E(k) eğrisinin yarıçapını belirler, etkin kütlenin büyüklüğü ve işareti bu bu eğrinin şekli ile belirlenir.

Bir bandın tabanı yakınındaki eğrilik pozitif olduğundan m* pozitif ve bandı üst kısmında eğrilik negatif olduğundan m* da negatif dir. Negatif etkin kütle; bandın üst kısmındaki bir elektronun elektrik alanı etkisinde pozitif yüklü bir parçacık gibi ivme kazanması şeklinde açıklanır.

Elektron serbest parçacık olarak alındığı zaman

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow \frac{d^2E}{dk^2} = \frac{\hbar^2}{m} \qquad (3.46)$$

olacağından, m=m* elde edilir. O halde Fermi yüzeyi küresel olduğu zaman etkin kütle serbest elektron kütlesine eşit olur (E.E.Anderson 1981).

3.6 Hemen Hemen Serbest Elektron Modeli

Serbest elektron yaklaşımında elektronun toplam enerjisini periyodik potansiyel enerji ile karşılaştırıldığında, elektronun toplam enerjisinin daima büyük olduğu kabul edilir. Bu kabuller altında izinli bantlar geniş ve yasak enerji bantları oldukça dar olacaktır. Bu şartlar gerçek bir kristalde hiç bir zaman gerçekleşmez. Çünkü potansiyel iyon korlarında $-\infty$ 'a gider. Fakat bir çok basit metalde mesala alkalilerde en dış elektron için şartlar sağlanır.

Yaklaşık serbest elektron Schrödinger denklemi $H\psi = E\psi$ şeklinde yazılabilir. Elektron potansiyel tarafından çok az bir şekilde etkilendiği için $H = H^0 + H'$ şeklindedir. Burada H^0 serbest parçacık hamiltonu H' ise tedirginlik Hamiltoniyedir. Enerjinin öz değeri E;

$$E = \frac{\int \psi^* H \psi d\tau}{\int \psi^* \psi d\tau} = \frac{\int \psi^* H^0 \psi d\tau}{\int \psi^* \psi d\tau} + \frac{\int \psi^* H' \psi d\tau}{\int \psi^* \psi d\tau} \qquad (3.47)$$

$E=E^0+E'$ şeklinde elde edilir. E^0 Enerji hali iki kat dejenere ve ψ_1 - ψ_2 bu enerjiye karşılık gelen dalga fonksiyonları olsun. Bu durumda E^0 enerji hali iki ayrı dalga fonksiyonu ile tanımlanır.

$H^0\psi_1 = E^0\psi_1$ ve $H^0\psi_2 = E^0\psi_2$ şeklinde yazılır. E^0 hali için bir genel fonksiyon tanımlanırsa, bu fonksiyon $\psi(x) = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ şeklinde dalga fonksiyonlarının çizgisel bileşimi olarak yazılabilir. Serbest elektronun bir potansiyelle çok az miktarda tedirgin edildiği düşünülürse, bu tedirginlik dalga fonksiyonu üzerine etki etmez. O halde tedirgin edilmiş sistemin schrödinger denklemi;

$$\left(H^0+H'\right)\left(c_1\psi_1+c_2\psi_2\right)=\left(E^0+E'\right)\left(c_1\psi_1+c_2\psi_2\right) \qquad (3.48)$$

olarak ifade edilir. Serbest parçacık Schrödinger denklemi dikkate alınarak bu denklem

$$\left(H'-E'\right)\left(C_1\psi_1+C_2\psi_2\right)=0 \qquad (3.49)$$

olarak indirgenir. Eşit.(3.49) denklemi ψ_1 ve ψ_2 ile ayrı ayrı soldan çarpılıp uzay boyunca integrali alınırsa;

$$\int \psi_1^* \left(H'-E'\right)\left(C_1\psi_1+C_2\psi_2\right)d\tau = 0 \qquad (a)$$

$$\int \psi_2^* \left(H'-E'\right)\left(C_1\psi_1+C_2\psi_2\right)d\tau = 0 \qquad (b)$$

(a) ve (b) denklemleri H_{ij} nin matris elamanları olarak açılarak indirgenebilir.

$$c_1H_{11}'+c_2H_{12}'-E'c_1\int \psi_1^*\psi_1 d\tau - E'c_2\int \psi_1^*\psi_2 d\tau = 0 \qquad (c)$$

$$c_1H_{21}'+c_2H_{22}'-E'c_1\int \psi_2^*\psi_1 d\tau - E'c_2\int \psi_2^*\psi_2 d\tau = 0 \qquad (d)$$

ψ_1 ve ψ_2 fonksiyonları uygunluk için ortagonal ve normalize olarak alınırsa eşit.(c) ve (d) denklemleri;

$$c_1(H_{11}'-E')+c_2H_{12}'=0 \qquad (e)$$

$$c_2(H_{22}'-E')+c_1H_{21}=0 \qquad (f)$$

olur. Eşit.(e) ve (f) denklemlerinin $c_1=c_2=0$ dan başka çözümlerinin olması için katsayılar determinantı sıfir olmalıdır.

$$\begin{vmatrix} (H_{11}'-E') & H_{12}' \\ H_{21}' & (H_{22}'-E') \end{vmatrix} = 0 \qquad (3.50)$$

Bu determinant açıldığında E' 'ye göre ikinci dereceden denklem elde edilir. E' nün iki farklı kökü olacaktır, diğer bir deyişle pertürbasyon iki farklı seviye içerisine iki katlı dejenere pertürbe olmamış seviyeye yarılacaktır (diğer taraftan eşit.(3.50) $H_{11}'=H_{22}'$ ve $H_{12}'=0$ olduğunda iki eşit köke sahip olmalıdır).

Potansiyel V(x) potansiyelidir ve kristalin periyodu ile periyodik olan bir potansiyeldir. V(x) in yeteri kadar küçük genliğe sahip olduğu ve serbest elektron gazı için küçük bir tedirginlik oluşturduğu kabul edilerek işleme alınır. Uygunluk için;

$$\psi_k(x) = \left(\frac{1}{L}\right)^{1/2} e^{ikx} \qquad (3.51)$$

olarak alınır. ψ_k ve ψ_{-k} dejenere olup her ikiside pertürbe olmamış eşit.(3.52) enerjisine karşılık geldiği dikkate alınarak pertürbe olmamış fonksiyon için eşit.(3.51) alınır.

$$\varepsilon^0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad (3.52)$$

Fonksiyonlar ortanormaldir öyleki eşit.(3.50) determinantı için eşit.(3.53) determinantı yazılabilir.

$$\begin{vmatrix} V_{kk}-\varepsilon' & V_{k(-k)} \\ V_{(-k)k} & V_{(-k)(-k)}-\varepsilon' \end{vmatrix} = 0 \qquad (3.53)$$

Burada matris elemanları aşağıdaki gibidir.

$$V_{kk} = V_{(-k)(-k)} = \frac{1}{L}\int_0^1 V(x)dx$$

$$V_{k(-k)} = \frac{1}{L}\int_0^L e^{-2ikx}V(x)dx$$

$$V_{(-k)k} = \frac{1}{L}\int_0^L e^{2ikx}V(x)dx \qquad (3.54)$$

Burada V_{kk} bir hal üzerindeki ortalama değerdir, ve uygunluk için ortalamanın sıfir olduğu değer enerji olarak seçebilir ($V_{kk}=V_{(-k)(-k)}=0$).

Eşit.(3.52) denklemi basitleştirilerek;

$$\varepsilon'_{12}=V_{k(-k)}V_{(-k)k}$$

$$=V_{k(-k)}V_{k(-k)}^*$$

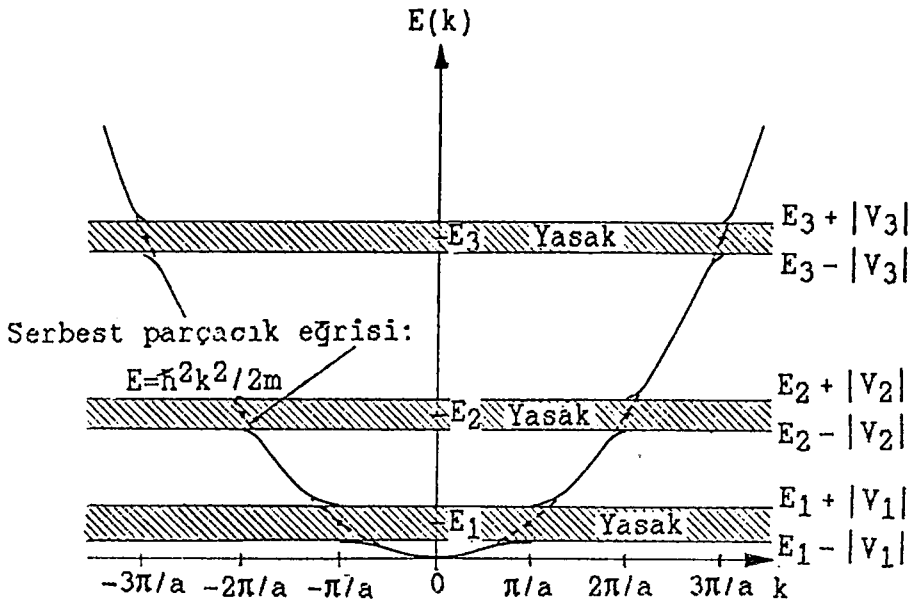
$$=\left|V_{k(-k)}\right|^2 \qquad (3.55)$$

olarak bulunur. $k=\pi n/a$ ($n=0$, ±1 ,±2 ....) olmadıkça $V_{k(-k)}=0$ dır. Diğer bir ifade ile birinci mertebeden pertürbasyon teorisi; küçük periyodik potansiyel V(x), $k=\pi n/a$ durumu haricinde ikikatlı dejenere seviyeye yarılmayacaktır, düşüncesini ortaya koyacaktır.

Pertürbe olmuş iki enerji seviyesi durumunda;

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \pm \left|V_n\right| \qquad (3.56)$$

olacaktır. Böylece enerji seviyeleri arasında $E_g=2\left|V_n\right|$ kadarlık bir yasak enerji aralığı ortaya çıkar.



Şekil 3.8 :Serbest elektron yaklaşımı için E 'ye karşı k bağıntısının şematik gösterimi.

Grafikte hemen hemen serbest elektron modeline göre enerji seviyelerinin bantlar halinde olduğu görülmektedir. Bu çizime genişletilmiş bölge çizimi adı verilir. Aslında enerjinin bütün değerleri k-uzayında periyodik sürekli fonksiyonlar oluşturur. Bu sebeble bütün enerji değerleri birinci Brilloun bölgesinde toplanabilir (Stıddard 1975).

3.7 Sıkı Bağ Elektron Yaklaşımı.

Hemen hemen serbest elektron modelinde elektronun potansiyel enerjisi toplam enerji yanında çok küçük kabul edilmiştir, bu kabul izinli ve yasak enerji bandlarının yaklaşımına götürür. Yasak enerji bandlarının genişliği izinli bandlara göre dardır. Sıkı bağ yaklaşımı konuyu tamamen zıt bir görüşle ele almaktadır. Elektronun potansiyel enerjisi toplam enerjinin hemen hemen tamamı olarak hesaba katılmaktadır. Yaklaşık serbest elektron modelinde kristal atomları birbirine çok yakın olmaktadır. Öyleki komşu atomlarda elektron için dalga fonksiyonu üst üste gelmektedir (çakışmaktadır). Böylece

atomlar arasında kuvvetli bir etkileşme mevcuttur. Sıkı bağ yaklaşımı atomlar arasındaki mesafenin yalnızca elektronlar için dalga fonksiyonunu az bir miktar üst üste gelecek şekilde bir temel üzerine oturtulmuştur. Komşu atomlar arasındaki etkileşmeler zayıftır ve bir bütün olarak kristalin izinli enerji bandlarındaki dalga fonksiyonları izole edilmiş atomların enerji seviyeleri ve dalga fonksiyonlarına dayandırılacaktır. Bu yaklaşımlardan hangisinin doğru olduğuna karar vermek kullanılan maddeye bağlıdır.

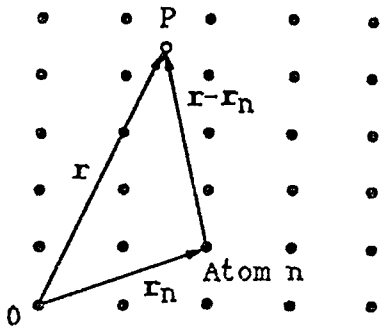
İzole edilmiş bir atom için potansiyel enerji $V_0(r)$ ise atomun elektronik dalga fonksiyonu

$$H_0\psi(r) = \nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\big(E - V_0(r)\big)\psi(r) = 0 \qquad (3.57)$$

Şeklindeki Schrödinger denkleminden elde edilir. Temel dalga fonksiyonu ψ_0 ve temel enerji seviyesi E_0 olsun. Eğer çok sayıda atomun periyodik örgü ile temel durum dalga fonksiyonu her bir atom için büyük ve komşu atomlar tarafından etkilenmeyecek şekilde gerçekleştirilirse, o zaman kristal dalga fonksiyonu atomik dalga fonksiyonlarının lineer olarak üst üste gelmesi şeklinde yazılabilir. Buna göre;

$$\psi(r) = \sum_n a_n\psi_0(r) \qquad (3.58)$$

şeklinde yazılabilen dalga fonksiyonunda r ve r_n vektörleri şekil 3.9 da görülmektedir. Burada toplam, bütün atomlar için alınmıştır.a_n normalizasyon katsayısı bütün atomlar için aynı mutlak değere sahip olduğuna göre$(ae^{-i\phi_n})$ exponansiyel olarak ifade etmek mümkündür.



Şekil 3.9 : Sıkı bağ yaklaşımının hesaplamasında kullanılan vektör geometrisi.

Aynı sebepten dolayı her bir komşu atom arasındaki faz farkı aynı olmalıdır. Bu da faz faktörünün $\phi_n = kr_n$ şeklinde yazılmasını sağlar. ψ_0 fonksiyonu normalize edilirse ve normalizasyon korunmak istenirse a=1 alınır. O zaman eşit.(3.58) denklemi

$$\psi_k(r) = \sum_n e^{ikr_n}\psi_0(r - r_n) \tag{3.59}$$

şeklinde yazılabilir. Bu dalga fonksiyonları şekil (3.10) dan görüldüğü gibi periyodik potansiyel fonksiyon ile bütün kristal için Schrödinger denkleminini sağlar. Yani;

$$H_k\psi_k = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)\psi_k = E\psi_k \tag{3.60}$$

olmalıdır. Schrödinger denkleminde toplam Hamilton iki parçanın toplamı olarak yazılabilir.

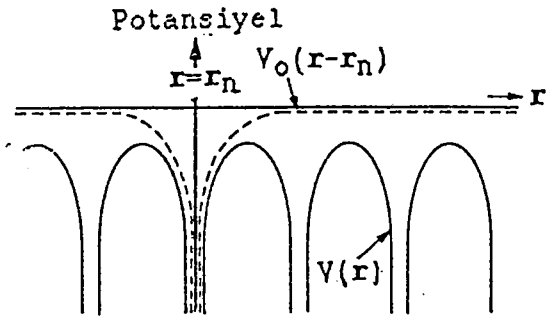
$$H = H_0 + H'$$

Burada;

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_0(r - r_n) \tag{3.61}$$

$$H' = V(r) - V_0(r - r_n) \tag{3.62}$$

şeklindedir.



Şekil 3.10 : Sıkı bağ yaklaşımının hesaplamalarında kullanılan potansiyel fonksiyonları.

Eşit.(3.57) denkleminden $H_0\psi_0 = E_0\psi_0$ olduğu aşikar ve eşit. (3.60) denkleminden

$$H_0\psi_k = \sum_n e^{ikr_n} H_0\psi_0(r - r_n) = E_0 \sum_n e^{ikr_n}\psi_0(r - r_n) = E_0\psi_k \qquad (3.63)$$

elde edilir. Kuantum mekaniğinden E nin beklenen değeri;

$$\langle E\rangle = \langle H\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) e^{iEt/\hbar} H\psi(x) e^{-iEt/\hbar} dx$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) H\psi(x) dx \qquad (3.64)$$

eşit.(3.64) olarak elde edilir. Eşit.(3.63) ve (3.64) den;

$$E = \frac{\int_v \psi^*_k (H_0 + H')\psi_k dv}{\int_v \psi^*_k \psi_k dv} =$$

$$= E_0 + \frac{\int_v \psi^*_k \sum_n e^{ikr_n}\left[V(r) - V_0(r - r_n)\right]\psi_0(r - r_n) dv}{\int_v \psi^*_k \psi_k dv} \qquad (3.65)$$

ifadesi elde edilir.

$$\int_v \psi^*_k \psi_k dv = N \qquad (3.66)$$

(N kristaldeki atom sayısı) eşit.(3.59) denkleminden ψ_k değeri eşit.(3.65) denkleminde yerine yazılırsa;

$$E = E_0 + \frac{1}{N}\sum_n \left\{ \sum_m e^{ik(r_n - r_m)} \int_v \psi_0^*(r - r_m)\left(V(r) - V_0(r - r_n)\psi_0(r - r_n)dv \right\} \right. \quad (3.67)$$

elde edilir. Periyodiklik şartından m ve n için yapılan toplamlar aynı değerleri verecektir. Buna göre (3.67) denklemi basitleştirilerek (n=0) için ;

$$E_{(k)} = E_0 + \sum_m e^{-ikr_m} \int_v \psi_0^*(r - r_m)\left[V(r) - V_0(r)\right]\psi_o(r)dv \quad (3.68)$$

Yazılabilir. Toplam, kristalin bütün atomları için alınmıştır. ψ_0 dalga fonksiyonu uzaklıkla hızla düşmektedir ve eşit.(3.68) integralinin büyüklüğü r_m mesafesiyle birbirinden ayrılan atomların orta noktasında iki dalga fonksiyonunun çakışma miktarıyla idare edildiğine göre integral içindeki terimlerin toplama katkısı r_m 'nin artmasıyla hızla düşmektedir. Dolayısıyla en yakın komşuları göz önüne almak iyi bir yaklaşım olur. Ayrıca ψ_0 dalga fonksiyonu küresel olarak simetrik kabul edilirse, bu şartlar altında en yakın komşuların katkısı aynı olacaktır. Eşit.(3.68) integrali m=0 için;

$$\int_v \psi^*(r)\left[V(r) - V_0(r)\right]\psi_0(r)dv = -\alpha \quad (3.69)$$

m=1 şeklini alır ve en yakın komşu atomlar için;

$$\int_v \psi_0^*(r - r_m)\left[V(r) - V_0(r)\right]\psi_0(r)dv = -\beta \quad (3.70)$$

Burada $\vec{r}_m$ orijindeki atomu en yakın komşu atoma birleştiren vektördür. Çakışma integrallerinin hesaplaması zor olacağından eşit.(3.68) integrali;

$$E(k) = E_0 - \alpha - \beta\sum_m e^{-i\vec{k}.\vec{r}_m} \quad (3.71)$$

Eşit.(3.71) deki gibi yazılabilir.

Görülüyor ki normalde E_0 olan enerji değeri bir α sayısı kadar aşağı düşmekte ve üçüncü terim kadarda genişlemektedir. Burada herhangi bir atom başta ele alındığı için toplam sadece r_m boyunca alındı.

Bu yaklaşım basit kübik yapıya uygulanırsa ; önce r_m vektörü belirlenir.

$$r_m = (\pm a,0,0),(0,\pm a,0),(0,0,\pm a)$$

Eşit.(3.71) denkleminde yerine konulursa;

$$E(k) = E_0 - \alpha - \beta\left(e^{ik_x a} + e^{-ik_x a} + e^{ik_y a} + e^{-ik_y a} + e^{ik_z a} + e^{-ik_z a}\right)$$

olarak bulunur, buda;

$$E(k) = E_0 - \alpha - 2\beta\left(\mathrm{Cos}k_x a + \mathrm{Cos}k_y a + \mathrm{Cos}k_z a\right) \qquad (3.72)$$

olarak yazılabilir. Coska terimleri k 'ya göre ± 1 arasında değişim gösterir. $k_x=k_y=k_z=0$ olduğunda "1" değerini alırlar ve bu durumda enerji minimumdur. k-uzayında (k_x,k_y,k_z) ortagonal koordinatlarda bu orijindedir. Maksimum değerler k-uzayında koordinatları $(\pm\frac{\pi}{a},\pm\frac{\pi}{a},\pm\frac{\pi}{a})$ olan bir kübün köşelerindedir.

Coska=1 değerleri için : $E_1(k)=(E_0-\alpha)-6\beta$ alt sınır

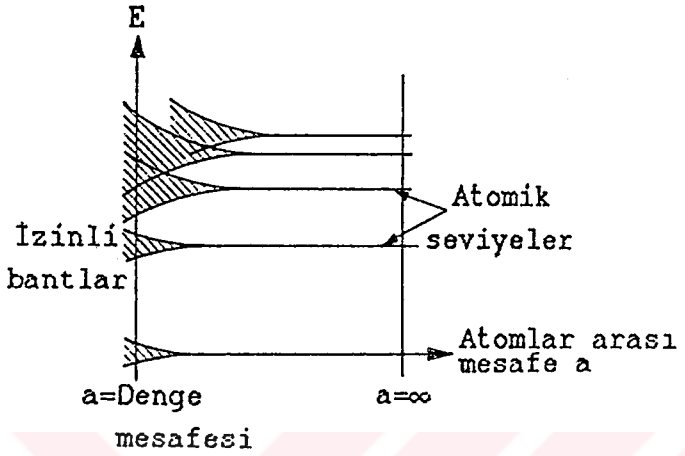
Coska=-1 değerleri için : $E_2(k)=(E_0-\alpha)+6\beta$ üst sınır

Maksimum ve minimum enerji değerleri arasındaki fark $E_2(k)-E_1(k)= 12\beta$ 'dır ve bu izinli enerji bandının genişliğidir.

Band aralığı β 'nın bir fonksiyonudur , β ne kadar büyükse band aralığıda o kadar büyüktür. β dalga fonksiyonlarının çakışan kısımlarını belirlediği için dalga fonksiyonlarının çakışan kısmı ne kadar büyük ise band aralığı o kadar büyük olacaktır.

Sıkı bağ yaklaşımının başlangıcında komşu atomlar arasındaki etkileşmelerin çok zayıf olduğunu ve dalga fonksiyonunun sadece elektronlar için çok az üst üste gelecek

şekilde yerleştiği düşünülmüştü, buna göre atomik mesafelerin büyük olduğu sınırda izinli enerji bandları dardır. Atomlar arsı mesafe sonsuza yaklaştıkça atomik enerji seviyesine uygun olarak tek bir kesikli enerji değerine yaklaşır. Atomik mesafe ile band genişliğinin değişimi şematik olarak şekil 3.11' de gösterilmiştir.



Şekil 3.11 : Atomların kristal örgüye bağlandığında atomik enerji seviyelerinin bandlara dönüşümünün şematik gösterimi.

x-doğrultusunda hareket eden bir elektron için $k_y=k_z=0$ dır. Eğer momentum, $k_x \ll a$ olduğunda yeterince küçük ise, elektron enerji bandının tabanına yakın olacaktır. Eşit.(3.72) denkleminde $\cos k_x a$ seriye açılarak;

$$E(k_x) = E_0 - \alpha - 2\beta\left(3 - \frac{k_x^2 a^2}{2}\right) \qquad (3.73)$$

ifadesi elde edilir. Bu eşitlikte E,k ilişkisi serbest bir elektrondaki gibi paraboliktir. $\hbar k_x$, kristal momentumunun x bileşeni olarak alındığında etkin kütle ;

$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2\varepsilon / dk^2} = \frac{\hbar^2}{2\beta a^2} \qquad (3.74)$$

olarak elde edilir. a örgü mesafesi arttıkça etkin kütle azalır çünkü a arttıkça çakışma integrali β çok daha hızlı azalır. Buna göre aşırı sıkı bağlanma sınırında bir elektron çok ağır olur , buda elektronun bir atomdan başka bir atoma geçemeyeceğini belirtir (Mckelvey 1966).

3.8. İki ve Üç-Boyutlu Örgülerde Elektron Dinamiği : Sabit Enerji Yüzeyleri ve Brillouin Bölgeleri.

Bu bölümde basit kübik yapılar için sıkı bağlanma yaklaşımının uygulanabildiği genel prensiplerin bir açıklaması olarak iki ve üç boyutlu periyodik örgülerdeki elektron davranışı incelenecektir. Bölüm (3.5) den biliyoruz ki bir elektronun grup hızı için;

$$\vec{v}_g = \frac{1}{\hbar}\vec{\nabla}_k E \tag{3.75}$$

yazılabilir. Burada $\vec{\nabla}_k$, k-uzayında ortagonal (k_x,k_y,k_z) koordinatlarda gradyent operatörüdür. Buradan,

$$\frac{d\vec{v}_g}{dt} = \frac{1}{\hbar}\frac{d}{dt}\vec{\nabla}_k E \tag{3.76}$$

eşit.(3.76) bağıntısı yazılır. Eğer $\vec{A}$ bileşenleri k_x ,k_y ,k_z olan bir vektör ise; A_α (α=x,y,z)

$$\frac{dA_\alpha}{dt} = \frac{\partial A_\alpha}{\partial k_x}\frac{dk_x}{dt} + \frac{dA_\alpha}{\partial k_y}\frac{dk_y}{dt} + \frac{\partial A_\alpha}{\partial k_z}\frac{dk_z}{dt} = (\vec{\nabla}_k A_\alpha)\frac{dk}{dt} \tag{3.77}$$

bağıntısı sağlanmalıdır. Dolayısıyla dA/dt vektörü; $\vec{\nabla}_k\vec{A}$ tensörü ve dk/dt vektörünün skaler çarpımı olarak ifade edilir;

$$\frac{dA}{dt} = (\vec{\nabla}_k\vec{A})\frac{dk}{dt} \tag{3.78}$$

buradan tensörün her bileşeni eşit.(3.77) denkleminin formuna yol açan bir çarpandır,eşit(3.2) denklemine bu formül uygulanıp, k=p/$\hbar$ konularak;

$$\frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{\hbar^2}\nabla_k(\nabla_k E)\frac{dp}{dt} \tag{3.79}$$

bulunur. Bu denklem; $dv_g/dt=F/m^*$ Newton kuvvet denklemidir. Bununla beraber etkin kütlenin tersi eşit.(3.80) biçiminde bir tensördür,

$$\left(\frac{1}{m^*}\right) = \frac{1}{\hbar^2}\nabla_k(\nabla_k E) \tag{3.80}$$

bu tensörün elamanları eşit.(3.81) deki gibi bulunur.

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{\alpha\beta} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} \tag{3.81}$$

Buradan ters etkin kütle tensörünün eşit.(3.82) biçiminde simetrik olduğu görülebilir.

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{\beta\alpha} = \left(\frac{1}{m^*}\right)_{\alpha\beta} \tag{3.82}$$

Etkin kütle genelde bir tensör olarak düşünülür, çünkü E(k) bağıntısının eğrisi k-uzayında her doğrultuda aynı değildir, böylece her doğrultuda farklı bir etkin kütle bulunabilir.

Bölüm (3.7) deki eşitlik (3.72) denkleminde; basit kübik kristaller için $ka<<1$dir. Eşit.(3.72) denklemi;

$$E(k) = \varepsilon_0 - \alpha - 6\beta a^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \tag{3.83}$$

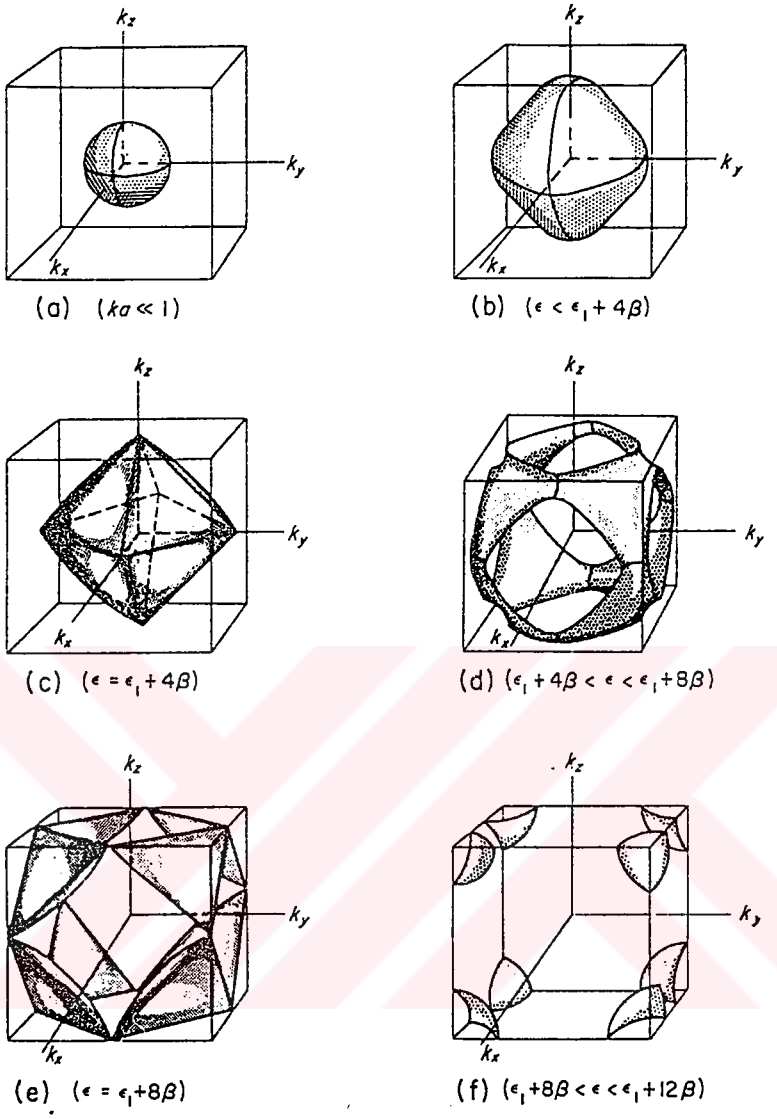
olarak yazılabilir. Buradan etkin kütle tensörünün bütün diyagonal olmayan elamanlarının sıfir olduğu görülebilir ve diyagonal elamanlarının her biri $\hbar^2 / 2\beta a^2$ ye eşittir.

Bölüm (3.7) de incelenen sıkı bağlanma yaklaşımına göre basit kübik yapı için k-uzayında sabit enerji yüzeyini araştıralım. Bu yüzeylerin denklemi parametrik bir sabit

olarak düşünülmüş E(k) ya (3.72) 'deki gibi bağlıdır. Buna göre; E 'nin minimum değerinin $k_x=k_y=k_z=0$ ' da bulunduğu belirtilmişti, burada tüm Kosinüs terimleri 1 'değerini alır. Bu minimumdan biraz daha büyük E değerleri için Kosinüsler 1'e yakın olmalıdır ve böylece k_xa, k_ya, k_za argumenleri hepsi çok küçük olmalıdır. Bu durumda (3.72) denklemi (3.83) olarak yazılmış forma indirgenir, buda (3.84) bağıntısında olduğu gibi yazılabilir.

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{E(k)}{\beta a^2} - \frac{E_0 + \alpha + \beta}{\beta a^2} = \text{sabit} \qquad (3.84)$$

Bu k-uzayında bir kürenin denklemidir. Sabit enerji yüzeylerinin küresel formu , k-uzayının bu bölgesinde elektronların serbest elektronlar gibi davrandığını gösterir. E 'nin değeri arttıkça küresel sabit enerji yüzeyinin çapı artar, yüzey üzerindeki noktalarda k nın bileşenlerinin değerleri artar ve artık $ka << 1$ yaklaşımı geçerliliğini yitirir, ve sabit enerji yüzeylerini çizmek için daha genel bir denklem olan (3.72) bağıntısı kullanılır. E arttıkça bulunan sabit enerji yüzeyleri şekil 3.12 'de açıklanmıştır. E 'nin artması ile küre genişler , bozuluma uğrar (3.12-b'deki gibi) ve $E = E_1 + 4\beta$ için (E_1 minumum noktada E nin değeridir veya $E_0 - \alpha - 6\beta$) şekil 3.12-c 'de gösterilen yarı-oktahedral şekil kabul edilir. Bu noktada sabit enerji yüzeyi $2\pi/a$ kenarı ile sınırlanmış kübe ulaşır, daha sonra E arttıkça yüzey şekil 3.12-d 'de gösterilen bir şekle benzer kabul edilir ve $E = E_1 + 8\beta$ olduğunda şekil 3.12- e' de gösterilmiş biçimi alır, bu noktada yüzey sekiz tabakaya yarılır, bu tabakaların her biri , E ; $E_1 + 12\beta$ bandı için maksimum değerine yaklaştıkça küpün köşesine yaklaşır. Bu sekiz kol E 'nin bu maksimum değerine yaklaştığı limitte bir kürenin yaklaşık olarak oktanta benzer şeklidir. Bu örnekte sabit enerji yüzeyi daima kübik simetriye sahiptir. Sabit enerji yüzeyi ile k_xk_y düzleminin ara kesitleri şekil 3.13 de gösterilmiştir. Bu eğriler ayrıca atomlar arası uzaklığı 'a' olan kare örgünün iki boyutlu kristali için sabit enerji eğrileridir. Eşitlik (3.72) den görülebilir ki band içindeki tüm haller E_1 ve $E_1+12\beta$ arasında bir enerjiye sahiptirler ve bu enerji aralığı için mümkün olan tüm haller $\left(\pm\frac{\pi}{a},\pm\frac{\pi}{a},\pm\frac{\pi}{a}\right)$ arasında bulunan (k_x,k_y,k_z) nin değerleri ile temsil edilmiştir.



Şekil 3.12 : En yakın komşu etleşmeleri yaklaşımında küresel simetrik dalga fonksiyonu ile basit kübik kristal için Fermi yüzeylerinin oluşumu.

Eğer bu enerji bandına ait elektronların belli bir sayısı varsa ve sıcaklık mutlak sıfırda ise elektronik enerji hallerinin hepsi Pauli dışarlama ilkesi ile uyuşarak belli bir Fermi enerjisine kadar doldurulmuş olacaktır. Dolayısıyla elektron dağılımı k-uzayında sabit enerji yüzeyi ile kuşatılmış olan sabit bir hacim içinde bulunacaktır, E_f Fermi enerjisi yüzeydeki enerji değeridir. Serbest elektronlar için Fermi yüzeyi bir küredir. Periyodik kristal potansiyeli içindeki elektronlar için, Fermi yüzeyinde eğer band yaklaşık boş veya hemen hemen dolu ise yaklaşım olmakla beraber küresel olabilir. Mutlak sıfırdan yüksek sıcaklıklarda bazı elektronlar E_f den daha yüksek enerjilerde Fermi yüzeyinden dışarda

bulunan hallere uyarılacaktır ve Fermi yüzeyi içinde bir kaç işgal edilmiş hal oluşacaktır. Boş ve dolu haller arasındaki geçiş artık daha belirgin olmayacaktır, bununla beraber eğer sıcaklık Fermi sıcaklığı ile kıyaslandığında küçük ise geçiş bölgesi hayli kalın olacak ve fermi yüzeyi tasvirinin esas geçerliliği bozulmuş olacaktır.

k-uzayı içinde bir kübün hacmini kuşatan yüzey üzerindeki noktalarda yapılan incelemeler yalnızca k_xk_y düzleminde yapılsın. Bu düzlemdeki çözümler iki boyutlu kare kristal örgü ile ilişkilidir. Şekil 3.13 da gösterilmiş kare bölgenin üst kenarında (veya altındaki) bir nokta düşünülsün; böyle bir noktanın k_y koordinatı; k_x koordinatı k_{x0} denilen herhangi bir değere sahip olurken π / a dır. Buradan elektronun dalga boyu λ;

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi}{\sqrt{k_{xo}{}^2 + \pi^2 / a^2}} \tag{3.85}$$

ile verilir. x eksenine paralel kristal düzlemlerine geliş açısı θ 'nın sinüsü;

$$\mathrm{Sin}\theta = \frac{k_y}{\sqrt{k_x{}^2 + k_y{}^2}} = \frac{\pi / a}{\sqrt{k_{x0}{}^2 + \pi^2 / a^2}} \tag{3.86}$$

olur. Burada n=1 için sınırın bu bölgesi üzerindeki noktalarda elektronun dalga boyu ile Bragg koşulu sağlanır. Aynı şekilde Bragg koşulu (y eksenine paralel düzlemlerin bir serisine bakış açısı ile) kare sınırının sağ (veya sol) kenarı üzerindeki noktalarda sağlanır. Bir dalga olarak düşünülen elektronun momentum vektörü , bu kare örgünün sınırına dokunduğunda örgü ile içten kırınıma uğrar. Taban durumundan daha yüksek enerjili hallerden doğan daha yüksek bandlarla işgal edilmiş k-uzayının bölgelerinin sınırları, daha yüksek Bragg yansımaları mertebesinde (n>1) sınırlar boyunca yönelimle belirlenir. Şekil 3.11 da gösterildiği gibi bandlar arasında daima bir enerji aralığı vardır; örneğin her zaman $k_x=\pm\pi / a$,$k_y=\pm\pi/a$ doğruları ile kuşatılmış kare örgünün kenarı boydan boya geçilebilir, sonra iç Bragg yansımasına eşlik eden enerjide bir süreksizlik oluşabilir. Bölgenin iç tarafi en düşük enerji bandlarına ait toplamını içerir.

Bragg yansıma koşulu ters örgü için;

$$2\vec{k}.\vec{G} + G^2 = 2(k_xG + k_yG + k_zG) + G_x^2 + G_y^2 + G_z^2 = 0 \qquad (3.87)$$

biçiminde yazılabilir, burada $\vec{k}$ ilerleme vektörüdür ve $G/2\pi$ orijinden ters örgünün her noktasına çizilen bir vektördür. Örgü mesafesi a olan noktaların iki boyutlu bir örgüsü için ters örgü 1/a mesafeli bir kare örgüdür. Eğer orijin basitlik için bir latis noktası alınırsa $\vec{G}$ vektörü;

$$\vec{G}_{\mu\upsilon} = \frac{2\pi}{a}(\mu i_x + \upsilon i_y) \qquad (3.88)$$

olur. Burada μ ve ν tam sayılardır ve i_x ve i_y , k_x ve k_y doğrultusundaki birim vektörlerdir. $\vec{G}$ vektörü için eşit.(3.88) kullanarak eşit (3.85) denklemi ;

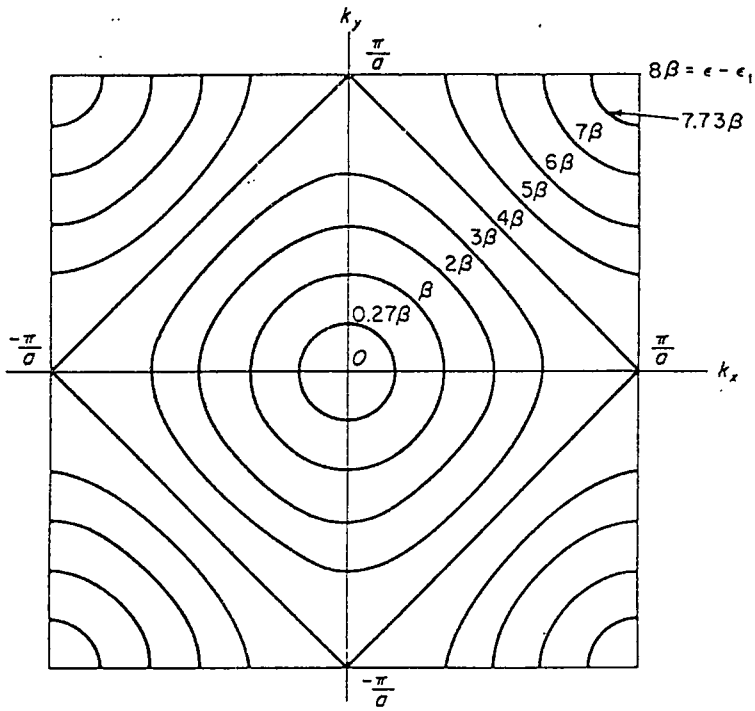
$$\mu k_x + \upsilon k_y = -\frac{\pi}{a}(\mu^2 + \upsilon^2) \qquad (3.89)$$

olarak yazılabilir. Bu denklem eşitlik k_x ve k_y düzleminde düz doğruların bir ailesini teşkil eder. Bunların k_x ve k_y arakesitleri ;

$$k_{x\ \text{arakesiti}} : -\frac{\pi}{a}\frac{\mu^2 + \upsilon^2}{\mu}$$

$$k_{y\ \text{arakesiti}} : -\frac{\pi}{a}\frac{\mu^2 + \upsilon^2}{\upsilon} \qquad (3.90)$$

olur. Bu doğruların her biri bir Bragg yansımasının olduğu yol boyunca bir sınır temsil eder ve farklı enerji bandlarına ait haller arasında yine bu sınırı teşkil edebilir. Eğer (3.89) denkleminde $\mu=0$, $\nu=\pm1$ ve $\mu=\pm1$, $\nu=0$ alınırsa $k_x=\pm\pi/a$ ve $k_y=\pm\pi/a$ olan dört doğru bulunur ve bunlar şekil 3.13 de gösterilen bölgeyi sınırlandırır.

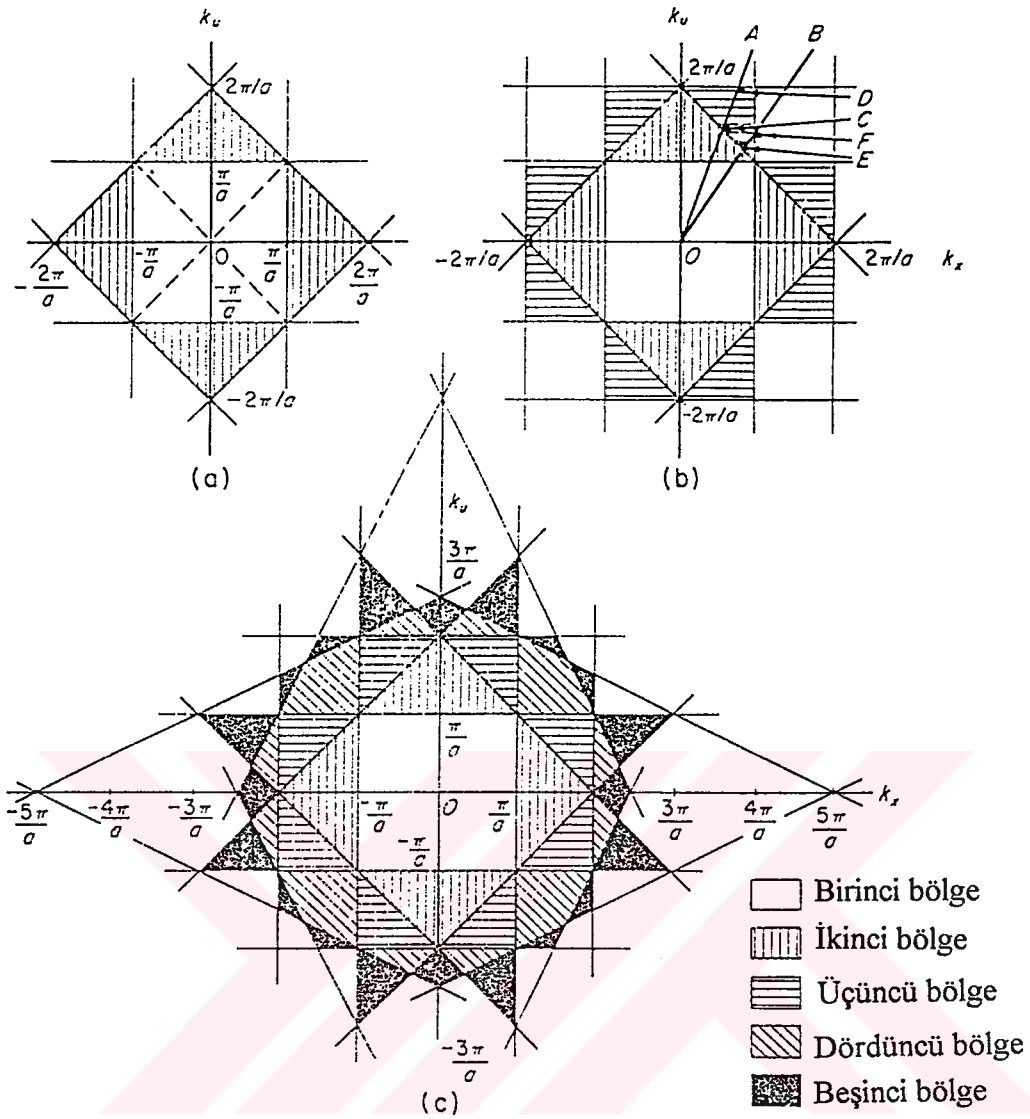


Şekil 3.13 : Küresel simetrik dalga fonksiyonları ve yalnızca en yakın komşu etkileşmelerini kullanıldığında, iki boyutlu kare örgü için Brillouin bölgesinde sabit enerji halkaları.

Bu bölgenin içi kristalin en düşük enerji bandındaki tüm halleri içerir. k-uzayının bu bölgesi birinci Brillouin bölgesi olarak adlandırılır. Eğer $\mu=\pm1$, $\nu=\pm1$ alınırsa $k_x \pm k_y = 2\pi/a$ ve $k_x \pm k_y = -2\pi/a$ olan dört doğru bulunur. Bu dört doğru şekil 3.14-a da çizilmiştir. Bu sınırlar üzerinde Bragg koşulu n=2 yansıma mertebesi ile sağlanır. Birinci Brillouin bölgesi ve dört arakesen doğrusu arasındaki kuşatılmış bölge ikinci enerji bandındaki tüm halleri içerir. Bu bölge ikinci Brillouin bölgesi olarak adlandırılır,birinci bölge ile aynı alana sahiptir ve bu bölgenin dört ayrı parçası Şekil.3.14-a 'da kesikli çizgilerle gösterildiği gibi birinci bölgeye taşınabilir. Daha açık bir şekilde;

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}U(\vec{r}) = e^{i(k_x x+k_y y+k_z z)}U(\vec{r}) \qquad (3.91)$$

Schrödinger denklemini ve tüm uygun sınır koşullarını sağlayan bir sistemin dalga fonksiyonu ise ve eğer;



Şekil 3.14 : İki boyutlu kare örgü için Brillouin bölgelerinin oluşumu. (a) birinci ve ikinci bölgeler, (b) üçüncü bölge, c) ilk beş bölgenin oluşumu.

$$\vec{k}' = \vec{k} - i_x\left(\frac{2n_x\pi}{a}\right) - i_y\left(\frac{2n_y\pi}{a}\right) - i_z\left(\frac{2n_z\pi}{a}\right) \qquad (3.92)$$

olarak tanımlanırsa (i_x ,i_y ,i_z ;k_x ,k_y ,k_z doğrultusunda birim vektörler ve n_x ,n_y ,n_z tamsayılardır.)aynı dalga fonksiyonu;

$$\psi(x) = e^{i\vec{k}'.\vec{r}}\left[e^{2n_x\pi x/a}e^{2n_y\pi y/a}e^{2n_z\pi z/a}U(\vec{r})\right] = e^{i\vec{k}'.\vec{r}}U(\vec{r}) \qquad (3.93)$$

olarak ifade edilebilir. Burada U(r) örgünün periyodikliğine sahip periyodik bir fonksiyondur. Böylece dalga fonksiyonu k' nın veya dönüşüm dalga vektörü k' nün terimlerinde Bloch tipinde yazılabilir. Eşitlik (3.92) bağıntısı;

$$\vec{k}' = \vec{k} - \vec{G} \qquad (3.94)$$

biçiminde yazılabilir. Burada $G/2\pi$ ters örgünün iki noktasını birleştiren bir vektördür. Eşitlik (3.92) veya (3.94) dönüşümleri indirgenmiş bölge gösterimine dönüştürmek için kullanılır.

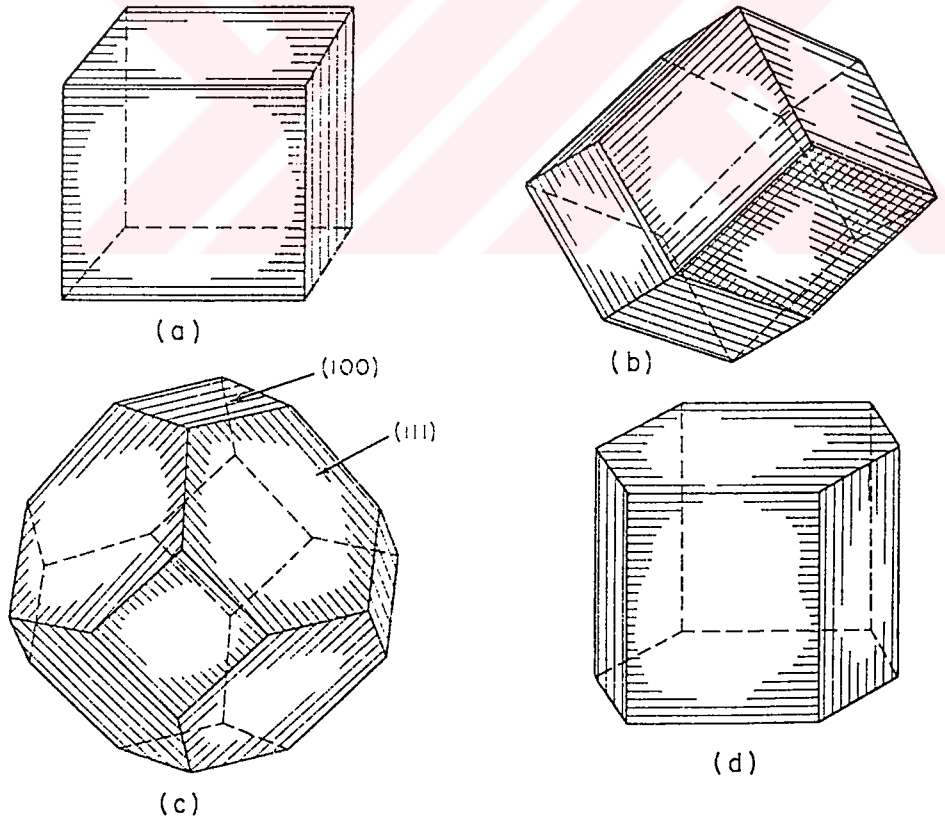
Daha yüksek bölgeler, birinci ve ikinci bölgenin oluşturulmasındaki yöntemin takip edilmesi ile oluşturulabilir. Eşitlik (3.89) bağıntısında $\mu=0$, $\nu=\pm2$ veya $\mu=\pm2$, $\nu=0$ alırsak, dört doğru $k_x=\pm2\pi/a$,$k_y=\pm2\pi/a$ Şekil 3.14-b de gösterildiği gibi bulunur. Bragg yansıması gene bu doğrular boyunca oluşur; başlangıç olarak ikinci bölge dışında üçüncü Brillouin bölgesi bu dört doğru ile kuşatılarak oluşturulur. Bu bölge birinci veya ikinci bölgelerden daha büyüktür fakat bu doğru değildir, Brillouin bölgelerinin her biri k-uzayında aynı alanı kuşatmalıdır. Gerçekte bu bölge içerisinde oluşan ilave Bragg yansıması vardır ve sınırlarda oluşup üçüncü, dördüncü, beşinci ve altıncı bölgelere bu uzayı böler. Herhangi bir bölge için kriter basitçe, orijinden başlayıp Bragg yansıma doğrularının herhangi bir arakesitinden geçmeyen genel bir radyal yol boyunca geçilebilen bölgedir. Böylece OA doğrusu boyunca orijinden ilerleyip C de üçüncü bölgeye girip ve D de üçüncü bölgeden ayrılıp dördüncü bölgeye girilir. Bununla beraber OB boyunca ilerlenirken E de üçüncü bölgeye girip ve F de üçüncü bölgeden ayrılıp' ki bu $k_x=\pm\pi/a$ bulunur. Böylece üçüncü bölge Şekil 3.14-b de gösterilmiş sekiz üçgen parçayla gösterilir. Bu sekiz parça eşitlik (3.92) 'ye uygun ötelemelere göre birinci bölge içine bir kareyi oluşturacak biçimde taşınabilir. Dördüncü bölgenin sınırları $\mu=\pm1$, $\nu=\pm2$, ve $\mu=\pm2$, $\nu=\pm1$ için doğrularla oluşturulmuştur. Sekiz doğrunun bir ailesi (örneğin $k_x\pm2k_x=-5\pi/a$) Şekil 3.14-c de gösterildiği gibi bulunmuştur. Hesaplama metodu diğer bölgeleride bulmak için genişletilebilir. Bu yöntemle Brillouin bölgelerinin sınırlarının oluşturulmasında genellikle; büyüklükleri mümkün olduğunca küçük $\vec{G}$ vektörleri ile başlamak, daha sonra bitişik en küçük $\vec{G}$ vektörlerinin serisi ile devam etmek avantajlıdır. Bragg yansıma koşulu normale gelen duran dalgaların oluşumunu ifade eder,

grup hızı ve buradan E'nin gradyenti herhangi bir Brillouin bölgesi sınırının normalinde sıfır olmalıdır (n, sınıra normal bir birim vektör);

$$\left(\frac{\partial\omega}{\partial k}\right)_{\perp sınır} = \vec{n}.\vec{\nabla}_k\omega = \frac{1}{\hbar}\vec{n}.\vec{\nabla}_k E = 0 \qquad (3.95)$$

buda bir bölge sınırında eşitlik (3.95) demektir, Kronig-Penny potansiyel modeli, serbest elektron yaklaşımı ve sıkı bağ yaklaşımının sonuçlarından bu genel sonucu doğrulamak mümkündür.

Bu sonuç üç boyutlu örgülere de genişletilebilir. Bu durumda Brillouin bölgeleri Bragg koşulunun sağlandığı düzlemler boyunca k-uzayının üç boyutlu bölgeleridir. Bu düzlem sınırlarının denklemleri iki boyutlu durumlarla aynı şekilde eşit.(3.87) denkleminden bulunmuştur. Yine her bölge eşit hacimlidir ve daha yüksek bölgelerin ayrılmış parçaları eşit.(3.94) ile verilen dönüşümün uygulanmasıyla birinci bölgenin benzeri olarak oluşturulabilir.



Şekil 3.15 : a) Basit kübik örgü için, b) Cisim merkezli kübik örgü için, c) Yüzey merkezli kübik örgü ve d) Hexzagonal örgü için birinci Brillouin bölgelerinin şekillenimi.

Basit kübik yapı için birinci Brillouin bölgesi , $2\pi/a$ kenarlı bir kübtür. Yüzey merkezli; cisim merkezli ve hexzagonal yapı için birinci Brillouin bölgesinin biçimi Şekil 3.15 de gösterilmiştir. bcc örgü için bölge, k-uzayında tüm yüzeyleri $\{110\}$ düzlemleri olan bir rhombicdodecahedron 'dur. fcc örgü için bölge $\{100\}$ve $\{111\}$ yönelimlerine sahip 14 yüzlü bir polyhedron 'dur. Bütün hallerdeki Fermi yüzeyi kristal örgünün simetri özellikleri ile ilişkili Brillouin bölgesinin bütün simetri özelliklerine sahip olmalıdır (McKelvey 1966).

4. SONUÇ:

Katıhal fiziğinin başlıca ilgi alanı kristaller ve bu kristallerdeki elektronlardır. Bu çalışmada katılardaki elektronların davranışları elektrik ve manyetik alanlarda incelenerek, elktronun hareket denklemleri, elektrik iletkenliği ve Ohm yasası açıklandı. Serbest elektronların hareketine manyetik alanın etkileri; Hall olayı sonuçları ve siklotron rezonansının metalik özelliklerin belirlenmesinde kullanılması incelendi.

Metallerin bir çok özelliklerini açıklayan serbest elektron modeli iki ve üç boyutta incelenerek Fermi enerjisi tanımlandı. Serbest elektron modeli genişletilerek, kristaldeki elektronlara periyodik kristal potansiyelinin etkileri 'de hesaba katılarak enerji bandlarının oluşumu açıklandı. Katılarda band kavramını analitik olarak gösteren Kronig-Penney modeli incelendi. Bir elektrik veya manyetik alanda elektronların etkin kütlelerinin, serbest bir elektronun kütlesinden daha küçük, daha büyük veya negatif olabileceği görüldü. Yine uygulanan bir elektromanyetik bir alanda elektronların negatif +e veya -e yüklere sahipmiş gibi davrandıkları ve Hall katsayısının negatif veya pozitif değerler alabileceği görüldü.

Yarı serbest elektron modeli incelenerek enerji bandlarının oluşumu ve enerji aralığının kaynağı kuantum mekaniksel olarak incelendi.

Hemen hemen serbest elektron modeli ve sıkı bağlanmış elektron yaklaşımı ayrı ayrı incelenerek, tamamen zıt görüşlerden hareket eden bu iki modelin aynı niteliksel sonuçlara yol açtığı görüldü. Son olarak sıkı bağ elektron yaklaşımının sonuçlarından hareketle yasak ve izinli enerji bandları sınırlarında elektron dalgalarının Bragg yansımaları incelenerek iki ve üç boyutta Brillouin bölgeleri ve Fermi yüzeylerinin oluşumu incelendi.

KAYNAKLAR.

Ashcroft, N.W. and Mermin, N.D. 1976, Solid state physics, Philadelphia Saunders College, p.826.

Anderson, E.E.,Katıhal Fiziğine Giriş, Türkçe çev. Dr.Selma Karaali, (Bornova 1981)

Blakemore, J.S.,1985, Solid state physics, 2 nd ed., Cambridge: cambridge University Press, p.506.

Callaway, J., 1964, Energy Band Theory, Academic Press, 326p.

Çelik, D., 1992, Bir Kristalde Elektron Dinamiği, Yüksek lisans Tezi 108sf.

Ghassan, F.S.A,1984, Electronic Structure of Type-I Superlattices. A Master's Thesıs in Physics. Middle East Technical University.

Kittel, C., Introduction to Solid State Physics, 1976, John Wıley Sons, 587p.

McKelvey, J.P., Solid State and Semiconductor Physics 1966., 499p

Omar, M.A., Elemantary Solid State Physics, Addison-Wesley Publishing Company in Philppiens (1975)

Gezci, S., Katıhal Fiziği, 1991, İstanbul Teknik Üniversitesi Matbası.

Stiddard, M.H.B.,The Elementary Language of Solid State Physics, Academic Press 1975,188p.