

BİR KRİSTALDE ELEKTRON DİNAMİĞİ

Derya ÇELİK

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Fizik Anabilim Dalı

1992

BİR KRİSTALDE ELEKTRON DİNAMIGI

Derya ÇELİK

Anadolu Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Lisansüstü Yönetmeliği Uyarınca
Fizik Anabilim Dalı
Katıhal Fiziği Bilim Dalında
YÜKSEK LİSANS TEZİ
Olarak Hazırlanmıştır.

Danışman: Prof. Dr. Muhsin ZOR

Şubat-1992

Derya Çelik'in YÜKSEK LİSANS tezi olarak hazırladığı
"BİR KRİSTALDE ELEKTRON DİNAMİĞİ"
başlıklı bu çalışma, jürimizce lisansüstü yönetmeliğinin ilgili
maddeleri uyarınca değerlendirilerek kabul edilmiştir.

11/02/1992

Üye : Prof. Dr. Muhsin Zor

Üye : Doç. Dr. Ünder Orhun

Üye : Doç. Dr. Ertuğrul Yörükoğulları

Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun 1.2. SUBAT 1992
gün ve 304-11.... sayılı kararıyla onaylanmıştır.

Enstitü Müdürü

Prof. Dr. Rüstem KAYA

ÖZET

Bir kristal, üç boyutlu uzayda periyodik olarak tekrarlanan bir desenin atomlarından meydana gelmiş bir katı olarak tarif edilebilir. Periyodik cetvele bakıldığında katıların önemli bir kısmını metaller oluşturmaktadır. Metallerin günlük yaşantımızda birçok kullanım alanları vardır. Örneğin, demirin otomobillerde, bakırın elektrik tellerinde, gümüş ve altının mücevher eşyalarında kullanılması gösterilebilir. Bunlar ve diğer metaller ilk çağlardan bugüne kadar teknoloji ve endüstri dünyasının gelişmesinde giderek artan önemli bir rol oynamaktadır, bunun gelecekte de böyle süreceği beklenmektedir.

Araştırmacılar, metallerin özellikleri hakkında bir hayli kuramsal ve deneysel bulgular ortaya koymuşlardır. Metallerin bu özellikleri, kristal içinde hareket edebilen serbest elektronların çok yüksek bir konsantrasyonun mevcut olduğu varsayılarak bulunmuştur. Böylece bu varsayıma dayanarak birçok teoriler geliştirilmiştir. Bunların bir çoğu kuantum teorisine dayanmaktadır.

Bu çalışmada, bir kristalde elektron dinamiği incelenmiştir. Bunun için, ilk önce kristal yapının anlamı üzerinde durulmuş ve yapıyı tanımlamada kullanılan temel kavramlardan bazıları tanıtılmıştır. Daha sonra, kristal şekillenmesinden sorumlu olan atomlar arası kuvvetler ve katılarda bant kavramı ele alınmıştır. Bunu takiben, metallerin özelliklerini açıklayan temel kuantum teorisi ve bu teorinin eksiklerini tamamlayan modeller incelenmiştir. Ayrıca, elektrik ve magnetik alanlarda da elektron dinamiği ele alınmıştır. Son olarak da, tamamen zıt görüşlerden yola çıkan, fakat aynı niteliksel sonuçlara yol açan serbest elektron ve sıkı bağlanma yaklaşımları anlatılmıştır.

SUMMARY

A crystal can be described as a solid consisted from atoms of a pattern repeating periodically in three-dimensional space. As it is seen from the Periodic Table, the solids formed are mainly metallic character. There are many fields in which metals are widely used. For example, iron is used in cars, copper in electrical apparatus, silver and gold as ornaments. These and other metals are playing an important role in industry and for the technological development.

Researchers have brought forward many theoretical and experimental discoveries about the properties of metals. Some of the properties based on the assumption of the existence of the highly concentrated free electrons in metals. These properties certainly found roots in the quantum theory of solids.

In this study, dynamics of electrons in a crystal is investigated. Therefore, at first the crystal structure is defined and some basic knowledge were given. Then the forces between atoms in the crystals and the energy bands in the solids were studied. Basic quantum theories and models followed. Beside these, electron dynamics in electrical and magnetic fields are also included. In the end, the free electron and tight binding approximations are taken separately, then it was shown that these lead to the almost the same results observed in solids.

TEŞEKKÜR

Bu çalışmayı, yüksek lisans tezi olarak veren, her türlü yardım ve desteğini hiçbir zaman esirgemiyen başta danışman hocam Sayın Prof. Dr. Muhsin ZOR'a; bilhassa tezin yazımında büyük emek ve gayret gösteren ağabeyim Cem ÇELİK'e minnet ve şükranlarımı sunarım.

Ayrıca; gerek tezin yazım tekniğinde ve gerekse hazırlanmasında yardım ve emeğini esirgemiyen arkadaşlarımdan Arş. Grv. Ali ÇETİN'e, Ercan UÇGUN'a, Erol TAŞAL'a ve Teknisyen Zülkarni DELİL'e teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	iv
SUMMARY	v
ŞEKİLLER DİZİNİ	x
ÇİZELGELER DİZİNİ	xiii
SİMGELER DİZİNİ	xiv
1. GİRİŞ	1
2. KRİSTAL YAPIYI TANIMLAMADA KULLANILAN BAZI TEMEL KAVRAMLAR	3
2.1. Uzay Örgüsü	3
2.2. İlkel ve Birim Hücre	4
2.2.1. Wigner-Seitz İlkel Hücresi	5
2.3. Örgü Simetrileri ve Simetri İşlemleri	6
2.3.1. Öteleme Simetrisi	6
2.3.2. Yansıma Simetrisi	6
2.3.3. Dönme Simetrisi	6
2.3.4. Tersinme Simetrisi	7
2.3.5. Bileşik Simetri İşlemleri	8
2.4. Nokta ve Uzay Grupları	8
2.5. Kristal Sistemleri	9
2.6. FCC ve BCC'de İlkel Hücreler	10
2.6.1. FCC'nin İlkel Hücresi	12
2.6.2. BCC'nin İlkel Hücresi	13

İÇİNDEKİLER (devam)

	<u>Sayfa</u>
2.7. Birim Hücreye Düşen Örgü Noktası Sayısı	13
2.8. Doğrultu ve Düzlem (Miller) İndisleri	14
2.8.1. Doğrultu İndisleri	14
2.8.2. Düzlem (Miller) İndisleri	15
2.9. Atom Büyüklükleri ve Koordinasyon Sayısı	15
2.10. Kristal Sistemlerinde Birim Hücre Elemanları, Düzlemler Arasındaki Açık ve Uzaklıklar	16
3. ATOMLAR ARASI KUVVETLER	18
4. SERBEST ELEKTRON MODELİ	20
4.1. Yaklaşık Serbest Elektron Modeli	25
4.1.1. Enerji Aralığının Kökeni	27
4.1.2. Enerji Aralığının Büyüklüğü	29
5. KATILARDA ENERJİ BANTLARI	31
5.1. Atomlar, Moleküller ve Katılardaki Enerji Spektrumları	31
5.2. Bloch Teoremi	34
5.3. Sonsuz Tek Boyutlu Bir Kristalin Kronig-Penney Modeli	41
5.4. Bloch Elektronunun Hızı	49

İÇİNDEKİLER (devam)

	<u>Sayfa</u>
5.5. Elektrik Alanda Elektron Dinamiği	54
5.6. Kristal Momentumu ve Etkin Kütle	57
5.6.1. Etkin Kütlenin Momentumu, Kristal Momentumu ve Fiziksel Orijini	66
5.7. İndirgenmiş Bölge Gösterimi, Elektronlar ve Holler	70
5.8. Serbest Elektron Yaklaşımı	76
5.9. Sıkı Bağlanma Yaklaşımı	86
5.10. Magnetik Alanda Elektron Dinamiği	97
5.10.1. Cyclotron Rezonansı	97
5.10.2. Hall Olayı	100
6. SONUÇ	105
KAYNAKLAR DİZİNİ	107

ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>Sekil</u>	<u>Sayfa</u>
2.1. Bravais örgü, baz ve kristal	3
2.2. Örgü ve öteleme vektörü	4
2.3. İlkel ve birim hücreler	5
2.4. Wigner-Seitz ilkel hücrenin oluşumu	5
2.5. Birim hücre	5
2.6. Yansıma simetri işlemleri	6
2.7. 3-katlı dönme ve yansıma simetrileri	7
2.8. Dönme eksenleri	7
2.9. Bir kübik kristalde tersinme simetrisi	8
2.10. z-doğrultusunda 2 ve 4 katlı vida eksenini	8
2.11. İki boyutlu uzayda 10 nokta grubu	9
2.12. İki boyutlu uzayda 5 Bravais örgüsü	10
2.13. 7 kristal sistemi	11
2.14. FCC'nin ilkel hücresi	12
2.15. BCC'nin ilkel hücresi	13
2.16. Kübik kristalde bazı doğrultular	14
3.1. Atomlar arası potansiyel enerji $V(R)$ 'ye karşı atomlar arası uzaklık R	18
4.1. Sommerfeld'in kabul ettiği kare potansiyel çukuru ...	20
4.2. --- Enerji düzeyleri ve — dalga fonksiyonları	23
4.3. Bir yalıtkan, metal, yarımetal ve yarıiletken için izin verilmiş enerji bantlarının çizeneysel elektron dolumu	24
4.4. (a) Serbest bir elektron için k dalgavektörüne karşı E enerjisinin gösterimi (b) Örgü sabiti a olan tek atomlu çizgisel bir örgüde elektron için dalgavektörüne karşı enerjinin gösterimi	26
4.5. (a) Çizgisel bir örgünün iyon korları alanında bir iletim elektronunun potansiyel enerji değişimi (b) Bu örgüde, $ \psi(-) ^2 \propto \sin^2 \pi x/a$; $ \psi(+) ^2 \propto \cos^2 \pi x/a$ ve ilerleyen bir dalga için ρ olasılık yoğunluğu dağılımı	28
5.1. (a) Atomdan (b) Moleküle ve (c) Katıya geçiş halinde lityumun enerji spektrumunun dönüşümü	31

ŞEKİLLER DİZİNİ (devam)

<u>Sekil</u>	<u>Sayfa</u>
5.2. Lityum kristalinde 2s ve 2p'nin enerji bantları şeklinde genişlemesi	34
5.3. Tamamen periyodik bir kristal örgü içinde potansiyelin şematik gösterimi	35
5.4. Periyodik örgülerde elektronların kuantum davranışının genel karakteristiklerini açıklamak için Kronig ve Penney tarafından kullanılmış ideal periyodik tam kare potansiyel	42
5.5. (5.36) ve (5.37) denklemlerinin sol taraflarındaki fonksiyonlara karşı enerjinin bir grafiği	46
5.6. (5.36) ve (5.37) denklemlerine göre k'nın bir fonksiyonu olarak çizilmiş E enerjisi	48
5.7. (a) Bir serbest elektronun (b) Bloch elektronunun hızı	50
5.8. Tek boyutlu bir örgüde (a) bant yapısı (b) Karşılık gelen elektron hızı	52
5.9. $\mathbf{v}(-\mathbf{k}) = -\mathbf{v}(\mathbf{k})$	54
5.10. (a) Sola doğru elektrik alan varken k uzayında elektronun hareketi (b) Karşılık gelen hız	55
5.11. (a) İndirgenmiş bölge şemasına göre (b) Tekrarlanmış bölge şemasına göre bir elektrik alan varken iki boyutlu örgüde elektronun hareketi	57
5.12. Enerji bandının eğriliği ve kütle arasındaki ters ilişki	63
5.13. (a) Bant yapısının (b) m^* etkin kütesinin k'ya göre değişimi	64
5.14. (a) m^* etkin kütesinin m_0 'dan küçük olmasına yol açan elektron uzaysal dağılımı (b) $m^* > m_0$ 'a yol açan dağılım	69
5.15. İndirgenmiş bölge gösterimine dönüştürülmüş Şekil (5.6.)'nin E'ye karşı k grafiğinin şematik gösterimi	71

ŞEKİLLER DİZİNİ (devam)

<u>Şekil</u>	<u>Sayfa</u>
5.16. -x yönü boyunca elektronu ivmelendirmek için yöneltilecek kuvvetlere bağlı olarak izinli bir bandın altına yakın bir elektron	73
5.17. (5.100) ve(5.109) denklemlerinden elde edildiği gibi serbest elektron yaklaşımı için E'ye karşı k bağıntısının şematik gösterimi	85
5.18. (a) Büyük uzaklıkta iki hidrojen atomu üzerindeki elektronların dalga fonksiyonları gösterimi (b) Yakın uzaklıkta taban durum dalga fonksiyonu (c) Uyarılmış durum dalga fonksiyonu	87
5.19. Sıkı bağlanma yaklaşımının hesaplamasında kullanılan vektör geometri	89
5.20. Sıkı bağlanma yaklaşımının hesaplamalarında kullanılan potansiyel fonksiyonları	90
5.21. İzole edilmiş atomlar kristal örgüye bağlandığı sırada kesikli atomik enerji seviyelerinin bantlara yarılmasının şematik gösterimi	95
5.22. (a) Cyclotron rezonansı (b) η absorpsiyon katsayısının ω ile değişimi	99
5.23. Hall alanı ve Hall olayının orijini	101

ÇİZELGELER DİZİNİ

<u>Çizelge</u>	<u>Sayfa</u>
2.1. Birim hücre hacimleri	17
2.2. (hkl) düzlemleri arasındaki uzaklıklar	17
5.1. R_H , Hall sabitleri	103

SİMGELER DİZİNİ

Simgeler	Acıklama
a_x, a_y, a_z	Herhangi bir kristaldeki birim hücrenin boyutları
$\mathbf{a}_x, \mathbf{a}_y, \mathbf{a}_z$	Birim hücrenin temel vektörleri
α	\mathbf{a}_x ile \mathbf{a}_y arasındaki doğrultman açısı
β	\mathbf{a}_y ile \mathbf{a}_z arasındaki doğrultman açısı
γ	\mathbf{a}_x ile \mathbf{a}_z arasındaki doğrultman açısı
V_H	Hacim
$\mathbf{a}_x', \mathbf{a}_y', \mathbf{a}_z'$	İlkel vektörler
$\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$	Birim vektörler
$\{w_1 w_2 w_3\}$	Doğrultu indisleri
(hkl)	Düzlem (Miller) indisleri
d	(hkl) düzlemleri arasındaki uzaklık
θ	(hkl) düzlemleri arasındaki açı
V	Kristal potansiyeli
F	Kuvvet
E_F	Fermi enerjisi
E	Enerji
L	Uzaklık
ϕ	İş fonksiyonu
h	Evrensel Planck sabiti
\hbar	$h/2\pi$
m	Kütle
ψ	Dalga fonksiyonu
E_k	Kinetik enerji
p	Momentum
k	Dalgavektörü
n_x, n_y, n_z	Kuantum sayıları
λ	Dalgaboyu
m^*	Etkin kütle
e	Elektron yükü
a	Örgü sabiti
ΔE	Yasak enerji aralığı
G	Ters örgü vektörü
ρ	Olasılık yoğunluğu
N	Katıdaki atomların sayısı

SİMGELER DİZİNİ (devam)

Simgeler	Acıklama
a_0	Bohr yarıçapı
u	a periyotlu periyodik bir fonksiyon
ζ	Açı
v	Hız
m_0	Serbest elektron kütlesi
ω	Dalga paketinin frekansı
J	Akım yoğunluğu
ϵ	Elektrik alan
t	Zaman
T_p	Periyot
τ	Çarpışma süresi
v_g	Dalga paketinin grup hızı
B	Magnetik alan
k_b	Boltzmann sabiti
T	Sıcaklık
$F_{dış}$	Kristale uygulanan dış kuvvet
p_c	Kristal momentumu
F_{toplam}	Elektron üzerine uygulanan toplam kuvvet
F_0	Elektron üzerine örgünün uyguladığı kuvvet
\bar{v}	Ortalama hız
n_0	Verilen bir banda ait olan birim hacim başına elektronların sayısı
q	Yük
c_n	Fourier açılım katsayısı
H	Hamiltoniyen
ϕ	Faz farkı
ϑ	Hacim elemanı
η	Absorbsiyon katsayısı
ω_c	Cyclotron frekansı
F_L	Lorentz kuvveti
F_H	Hall kuvveti
ϵ_H	Hall elektrik alanı
R_H	Hall sabiti

1.GİRİŞ

Bugün kullandığımız maddelerin çoğu katılar olup, bunlar çeşitli özelliklerine göre gruplandırılırlar. Katıların en önemli özelliklerinden biri onların AMORF veya KRİSTAL yapıda bulunmalarıdır. Bazı maddelerin atomları gelişigüzel dizilmiş olup, belirli bir düzene sahip değildirler. Bunlara amorf katılar denir. Gerçekte amorf bir katı ile bir sıvı arasında büyük bir fark yoktur. Amorf bir katıya aşırı soğumuş bir sıvı gözü ile bakılabilir.

Katıların kristal yapısı ise, maddeyi oluşturan atom, atom grupları ve moleküllerin o katıya özgü ve belirli bir düzende sıralanarak biraraya gelmesi ile oluşur. Fizikçiler; başlangıçta daha çok elmas, silisyum ve kayatuzu gibi karmaşık yapı göstermeyen kristallerle ilgilenmişlerdir. Biz burada, kristal yapıya sahip katıların inceleyeceğiz.

Kristal yapı gösteren katılarda atomların sıralanması uzun mesafelere kadar olabilir (yaklaşık 10^5 atomik uzaklık). Amorf maddelerde ise sıralanma, birkaç atomik uzaklıktadır.

Gerçekte, kristal yapıya sahip bir katı, bütünüyle tek tip bir sıralanmadan ibaret değildir. Bu katıda atomik sıralanmaların bulunduğu küçük bölgeler vardır. Bunlara kristal bölgecikleri (grain) denir. Bu bölgeciklerin büyüklükleri 0.001mm'den birkaç cm'ye kadar olabilir. Küçük bir bakır telde bu bölgeciklerden milyonlarcası vardır. Bu tip kristallere POLİKRIKİSTAL denir. Eğer katı cisim tümü ile aynı düzenlenmeye sahip veya tek bölgecikten oluşuyorsa, bu tip katıya da TEK-KRİSTAL denir.

Tabiatta pekçok doğal tek kristal vardır. Bunların başında; kuartz(SiO_2), kayatuzu($NaCl$), yakut(Ruby; $Al_2O_3+0.05 Cr$) ve elmas(C) gelir. Bugün laboratuvarlarda birçok alaşım ve bileşikler yapay olarak tek kristal haline getirilebilmektedir.

Tek kristal dendiğinde aklımıza tümüyle mükemmel bir şekilde dizilmiş atom veya atom grupları gelmemelidir. Çünkü kris-

tallerin içinde, boşluk, çizgi, yanlış yerleşme hataları vardır. Bu kusurları tamamiyle yok etmek mümkün değildir. Bir kristalin tek veya polikristal olduğu ve kalitesi çeşitli yöntemlerle incelenebilir. En çok kullanılan teknik, x-ışınları tekniğidir.

Derinliğine özelliğini anlayabildiğimiz katılar saf ve tek kristal yapıda olanlardır. Bu gerçeği gözönünde tutarak basit kristal yapılardan karmaşık yapılara doğru giderek kristal yapı incelenebilir.

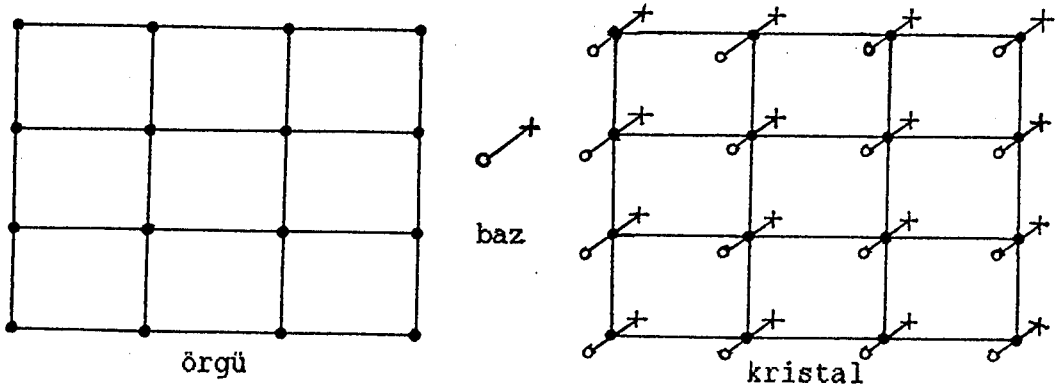
Bu çalışmada da, kristalde elektron dinamiğini incelemek amacı ile, ilk başta kristal yapının anlamı üzerinde durulmuş ve yapıyı tanımlamada kullanılan bazı temel matematiksel kavramlardan bahsedilmiştir. Daha sonra kristallerin bağlanmalarına neden olan atomlar arası kuvvetler ele alınmıştır. Bilindiği gibi, metaller ortak fiziksel özellikleriyle karakterize edilirler. Bu özelliklerin açıklanması, materyallerin mikroskopik yapısını anlamaya çalışan bir fizikçi için, metalleri pratik amaçlarla kullanmayı tasarlayan bir mühendis için önemlidir. Bu amaçla, metallerin özelliklerini açıklayan; temel kuantum teorilerinden biri olan, Sommerfeld'in serbest elektron teorisi incelenmiştir. Son olarak da, katılarda enerji bant kavramı ele alınmıştır.

2. KRİSTAL YAPIYI TANIMLAMADA KULLANILAN BAZI TEMEL KAVRAMLAR

2.1. Uzay Örgüsü

Katıhal fiziğinde bir kristal yapıyı daha iyi anlayabilmek için genellikle gerçek atomların kendi dizilişleri değil, onların yerine kristalin simetri özelliklerini taşıyan noktalar dizisi gözönüne alınır. Yani her bir atom veya atom kümesi uzayda bir nokta ile temsil edilir. Bu şekilde meydana gelen noktalar dizisine UZAY ÖRGÜSÜ veya BRAVAİS ÖRGÜSÜ adı verilir. Bir noktaya karşı gelen atom veya atom grubuna BAZ denir. Şekil (2.-1.)'de bir Bravais örgüsü ve kristal yapı görülmektedir. Bir bazdaki atom sayısı birden birkaç bine kadar değişebilir. Bazı organik moleküllerde bir örgü noktasında birkaç bin atom bulunabilir.

BRAVAİS ÖRGÜSÜ+BAZ=KRİSTAL



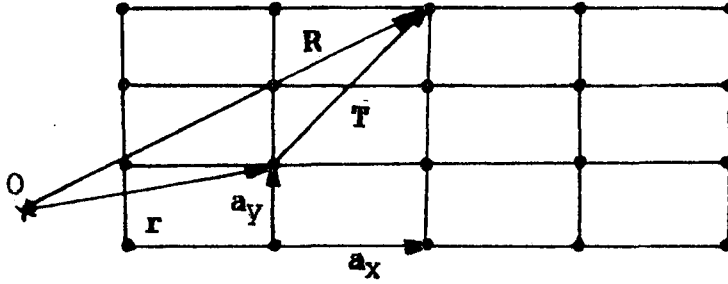
Şekil 2.1. Bravais örgü, baz ve kristal.

Tanım gereğince, kristal yapıda, atomların periyodik olarak dizilmelerinden dolayı, bir birim yapı veya birim hücre düşünmek ve bu birim hücrenin tekrarı ile tüm örgüyü elde etmek mümkün olacaktır. Buna göre a_x, a_y, a_z birim hücrenin temel vektörleri olmak üzere örgünün herhangi bir noktası,

$$R=r+(n_1a_x+n_2a_y+n_3a_z) \quad (2.1)$$

şeklinde olan R vektörünün uç noktası ile tanımlanabilir. Burada

n_1, n_2, n_3 tam sayılar olup, r herhangi bir örgü noktasının yer vektörüdür. (2.1) denkleminde görüleceği gibi parantez içindeki ifade bir öteleme vektörüdür. Yani bu vektör bizi bir örgü noktasından diğerine götürür. Bu durum Şekil (2.2.)'de gösterilmiştir.



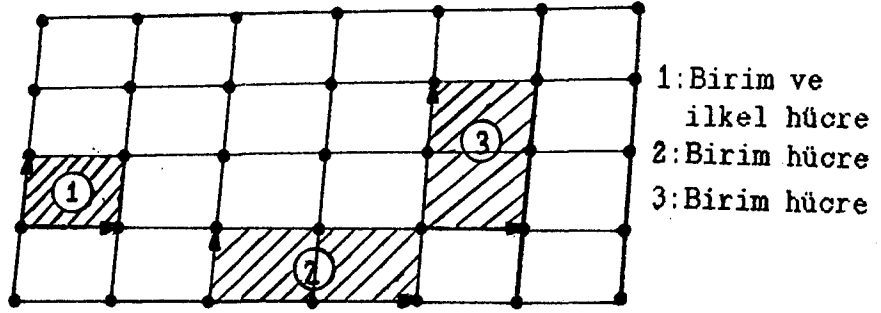
Şekil 2.2. Örgü ve öteleme vektörü.

Eğer koordinat başlangıcı olarak herhangi bir örgü noktası seçilirse, (2.1) denklemi, $R=T=(n_1a_x+n_2a_y+n_3a_z)$ şeklinde olur.

2.2. İlkel ve Birim Hücre

Örgüdeki herhangi bir nokta (2.1) denklemini sağlıyorsa ve r veya R 'nin bitim noktasından bakıldığında atomik düzenlenme aynı ise a_x, a_y, a_z vektörlerine İLCEL VEKTÖRLER ve bu vektörlerin belirlediği birim yapıya da İLCEL HÜCRE denir. İlkel hücre, tekrarı ile kristali oluşturan ve hacmi en küçük olan birim yapıdır. İlkel hücrenin yalnız köşelerinde örgü noktası bulunur. Bu nedenle her bir ilkel hücreye bir örgü noktası karşılık gelir.

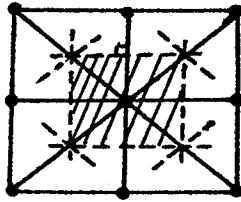
Bazan ilkel olmayan hücreyi birim hücre olarak seçmek daha yararlı olur. Bu nedenle, tekrarlandığında bütün kristali dolduran ve kristalin tüm simetri özelliklerini taşıyan bir birim yapı tanımlanır. Bu temel hücreye BİRİM HÜCRE denir. Birim hücrede birden fazla örgü noktası bulunabilir. Birim hücre ilkel hücre ile karşılaştırıldığında, ilkel hücrenin, en küçük hacimli birim hücre olduğu görülür (Şekil (2.3.)).



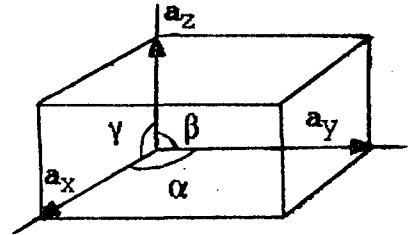
Şekil 2.3. İlkel ve birim hücreler.

2.2.1. Wigner-Seitz İlkel Hücresi

Bir ilkel hücre Şekil (2.4.)'de gösterildiği gibi seçilebilir. Bir örgü noktası bütün komşu noktaları ile birleştirilir ve bunların orta noktalarından normaller çizilir. Bu doğruların arasında kalan en küçük alanlı (taralı bölge) veya üç boyutlu uzayda en küçük hacimli hücre Wigner-Seitz ilkel (primitif) hücresidir.



Şekil 2.4. Wigner-Seitz ilkel hücresinin oluşumu.



Şekil 2.5. Birim hücre.

Üç boyutlu örgüde birim hücre a_x, a_y, a_z temel vektörleri ve α, β, γ doğrultman açıları ile tanımlanır. Birim hücrenin hacmi ise aşağıdaki şekilde verilir.

$$V_H = |\mathbf{a}_x \cdot (\mathbf{a}_y \times \mathbf{a}_z)| = \begin{vmatrix} a_{x1} & a_{x2} & a_{x3} \\ a_{y1} & a_{y2} & a_{y3} \\ a_{z1} & a_{z2} & a_{z3} \end{vmatrix}$$

2.3. Örgü Simetrileri ve Simetri İşlemleri

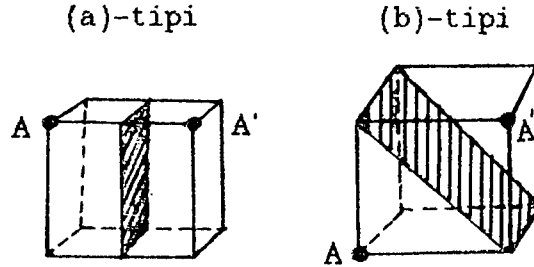
Her örgü öteleme simetrisine ek olarak dönme ve yansıma gibi daha birçok simetri özelliğine sahip olabilir. Şimdi bu simetri işlemlerini kısaca ele alalım.

2.3.1. Öteleme Simetrisi

Bu simetri işlemi, daha önce belirtildiği gibi öteleme vektörü ile yapılır.

2.3.2. Yansıma Simetrisi

Bir düzleme göre yapılan simetri işlemlerine yansıma simetrisi denir. Bu işlem, bir cismin bir düz aynadaki görüntüsü olayına benzer ve "m" harfi ile gösterilir. Bir kübün yansıma simetrisinden ikisi Şekil (2.6.)'da gösterilmiştir. A noktası yansıma işlemi ile A' oluyor. Kübik sistemde (a)-tipi 3 tane, (b)-tipi 6 tane yansıma düzlemi (ayna düzlemi) vardır.



Şekil 2.6. Yansıma simetri işlemleri.

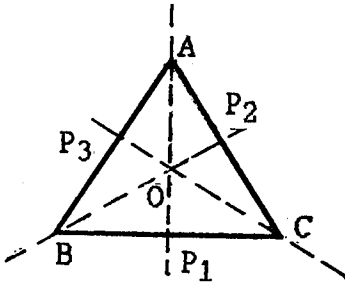
2.3.3. Dönme (veya Rotasyon) Simetrisi

Herhangi bir örgüde, bir örgü noktası bir eksen etrafında $2\pi/n$ 'lik açı kadar döndürüldüğünde örgünün diğer bir noktası ile çakışıyorsa, bu örgünün o dönme eksenine göre n-katlı dönme simetrisi vardır denir. n; 1,2,3,4,6 değerlerini alabilir. 5-

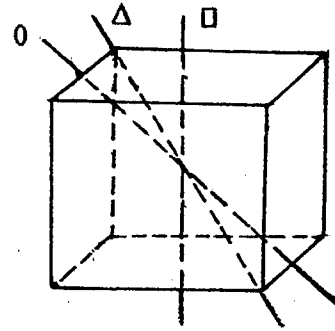
katlı ve 6'dan fazla katlı dönme simetrisi yoktur. Üçgen, dörtgen ve altıgenler yan yana bulunduğu uzayı doldurabildikleri halde beşgenler uzayı boşluk bırakmadan dolduramazlar.

n:	1	2	3	4	6
$2\pi/n$:	360°	180°	120°	90°	60°
Sembol:	•	○	△	□	⬡

Şekil (2.7.)'deki eşkenar üçgenin, O merkezinden geçen ve üçgen düzlemine dik eksen etrafında 3-katlı bir dönme simetrisi vardır. Ayrıca P_1, P_2, P_3 'e göre de yansıma simetrisi vardır. Şekil (2.7.)'den $A \xrightarrow{120^\circ} B \xrightarrow{120^\circ} C \xrightarrow{120^\circ} A$ ve $A \xrightarrow{m} B, B \xrightarrow{m} C, C \xrightarrow{m} A$ oluyor.



Şekil 2.7. 3-katlı dönme ve yansıma simetrisi.

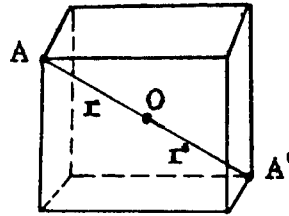


Şekil 2.8. Dönme eksenleri.

Bir kübik birim hücrenin rotasyon eksenleri Şekil (2.8.)'deki gibi gösterilebilir. Kübik sistemde 3 tane 4-katlı, 4 tane 3-katlı ve 6 tane 2-katlı dönme eksenleri vardır.

2.3.4. Tersinme (Inversion) Simetrisi

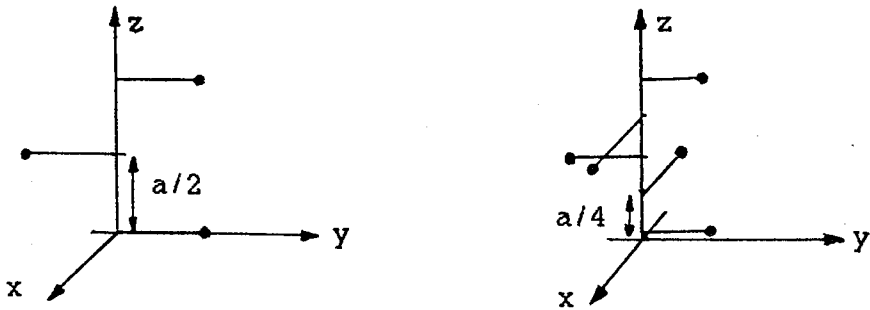
Tersinme 180° dönmeden sonra bu dönme eksenine dik bir düzleme göre yansıma işlemidir. Diğer bir deyişle, tersinme $r \rightarrow -r$ işlemidir. Bir örgünün, karşılıklı noktaları merkezden eşit uzaklıkta bulunursa, bu örgünün bir simetri merkezi vardır. Şekil (2.9.)'a göre, $OA=r, OA'=r', r=-r', r \rightarrow -r, A \rightarrow A'$ olur.



Şekil 2.9. Bir kübik kristalde tersinme simetrisi.

2.3.5. Bileşik Simetri İşlemleri

Dönme+Tersinme, kayma ve vida simetri işlemleri daha karışık işlemlerdir. Şekil (2.10.)'da z-doğrultusunda 2 ve 4 katlı vida eksenleri gösterilmektedir.



Şekil 2.10. z-doğrultusunda 2 ve 4 katlı vida eksenleri.

2.4. Nokta ve Uzay Grupları

Nokta grubu; bir noktaya göre nokta kümesini deyişmez bırakan yansıma ve dönme gibi simetri işlemlerinin tümüne denir. Simetri işlemlerinde bir nokta sabit tutulmaktadır.

Simetri işlemleri aşağıdaki gibi listelenebilir:

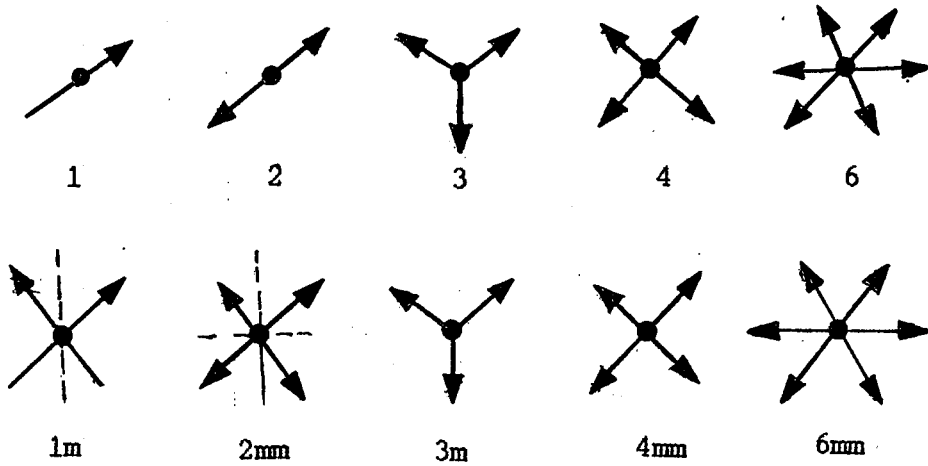
\bar{n} : n-katlı dönme (n=2, 3, 4, 6)

\bar{n} : dönme+tersinme

nm: dönme+yansıma (yansıma düzlemi dönme eksenine dik, Y_1)

n/m: dönme+yansıma(yansıma düzlemi dönme eksenine paralel, Y_2)
 nmm: dönme+ Y_1+Y_2
 n/mm: dönme+ Y_1+Y_2

İki boyutlu uzayda toplam 10 nokta grubu vardır. Bunlar Şekil (2.11.)'de gösterilmiştir. Buradaki ikinci m'ler kendiliğinden ortaya çıkan yansıma düzlemleridir. Örnek olarak $2mm$ 'yi alalım. Bu, 2-katlı dönme eksenine+buna dik ayna düzlemi+her ikisine dik ayna düzlemi.



Şekil 2.11. İki boyutlu uzayda 10 nokta grubu.

Bravais, bir düzlemde en çok 5 farklı yapıda Bravais örgüsünün olabileceğini göstermiştir. Bunlar Şekil (2.12.)'de çizilmiştir.

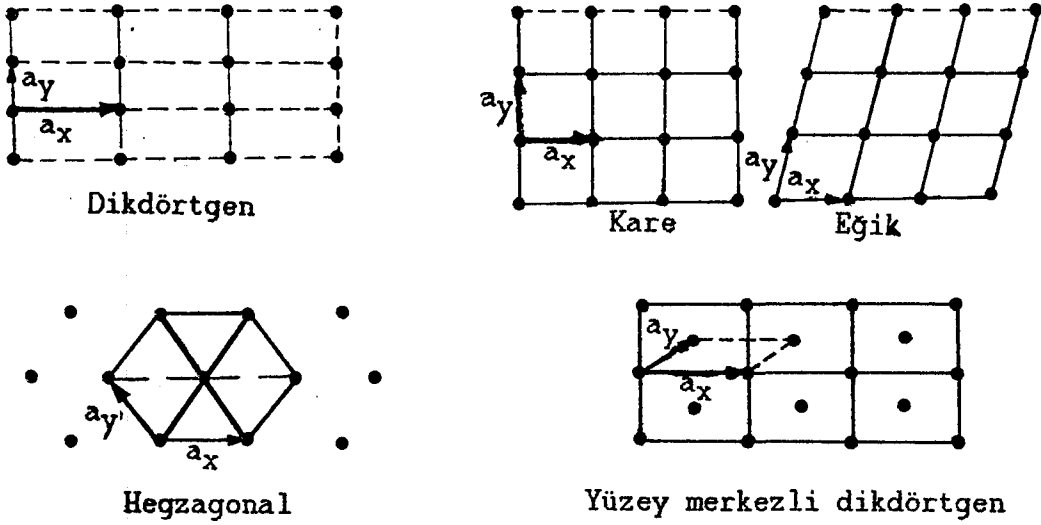
2.5. Kristal Sistemleri

A) Kübik sistem: Birbirine dik üç birim vektör, $a_x = a_y = a_z$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

B) Tetragonal sistem: İkisi eşit olan birbirine dik üç birim vektör, $a_x = a_y \neq a_z$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

C) Ortorombik sistem: Birbirine dik, fakat eşit olmayan üç birim vektör, $a_x \neq a_y \neq a_z$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

D) Rombohedral (Trigonal) sistem: Aralarındaki açılar birbi-



Şekil 2.12. İki boyutlu uzayda 5 Bravais örgüsü.

rine eşit üç birim vektör, $a_x = a_y = a_z$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

E)Hegzagonal sistem:Aralarındaki açı 120° olan iki eşit birim vektör ve üçüncüsü ilk ikisinin düzlemine dik, $a_x = a_y \neq a_z$, $\beta = \gamma = 90^\circ$, $\alpha = 120^\circ$.

F)Monoklinik sistem:Birbirine eşit olmayan üç birim vektör, eksenlerden iki tanesi birbirine dik değil, $a_x \neq a_y \neq a_z$, $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$.

G)Triklilik sistem:Birbirine eşit olmayan üç birim vektör, aralarındaki açılar farklı ve hiçbiri diğerine dik değil, $a_x \neq a_y \neq a_z$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$.

Yukarıda verdiğimiz bu kristal sistemleri Şekil (2.13.)'de ayrı ayrı gösterilmiştir.

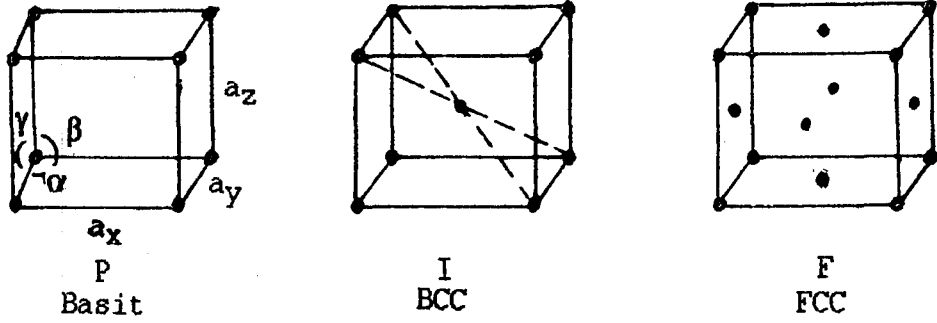
2.6.FCC ve BCC'de İlkel Hücreler

Yüzey merkezli kübik (face centred cubic:FCC) yapıda atomlar kübün köşelerinde ve yüzeylerinin ortalarında bulunurlar. Cu, Ag, Ni, Pt, Au, Ca, bu yapıya sahiptirler.

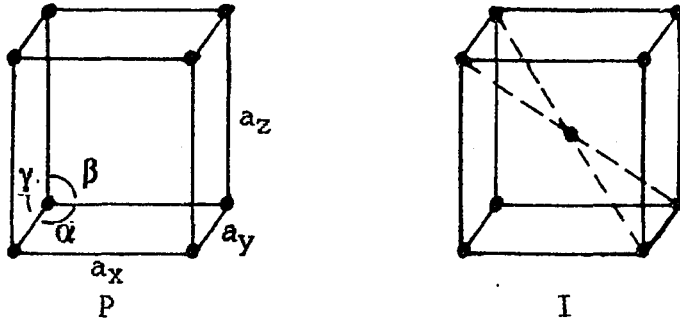
Cisim merkezli kübik (body centred cubic:BCC) yapıda kübün köşelerinde ve cisim merkezinde atomlar bulunur. BCC yapıya sahip kristaller; Fe, Cr, Mo, V, Na, K, Ba gibi kristallerdir.

Kristal sistemlerinde, ilkel hücrenin birim hücreden farklı olacağını belirtmiştik. Şimdi, yüzey merkezli kübik ve cisim merkezli kübik yapıya ait ilkel hücreleri görelim.

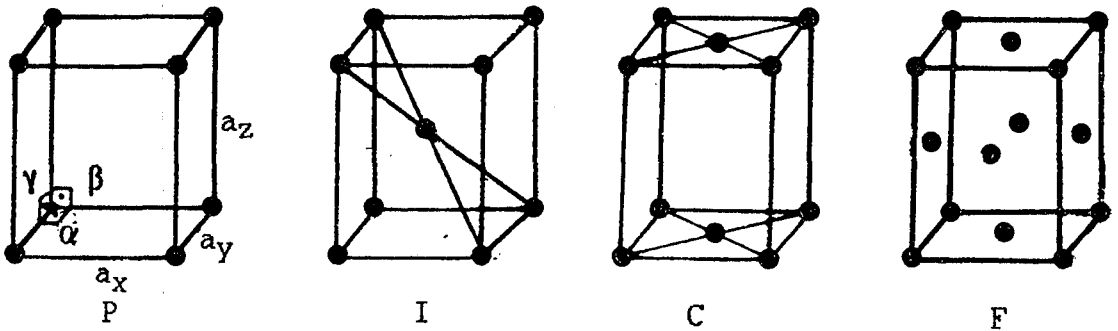
A)



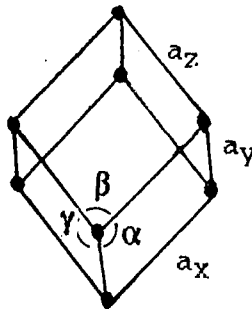
B)



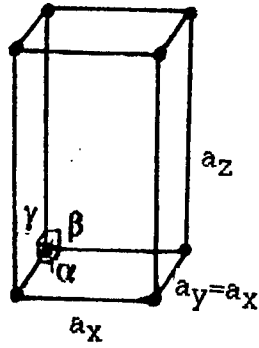
C)



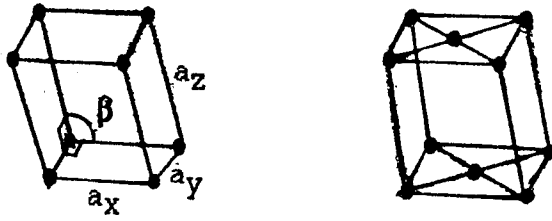
D)



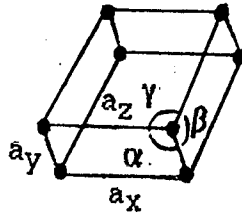
E)



F)

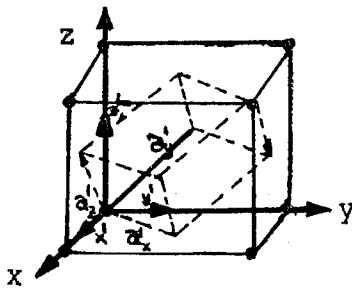


G)



Şekil 2.13. 7 kristal sistemi.

2.6.1. FCC'nin İlkel Hücresi



$$a'_x = (1/2)a_x(x+y)$$

$$a'_y = (1/2)a_x(y+z)$$

$$a'_z = (1/2)a_x(z+x)$$

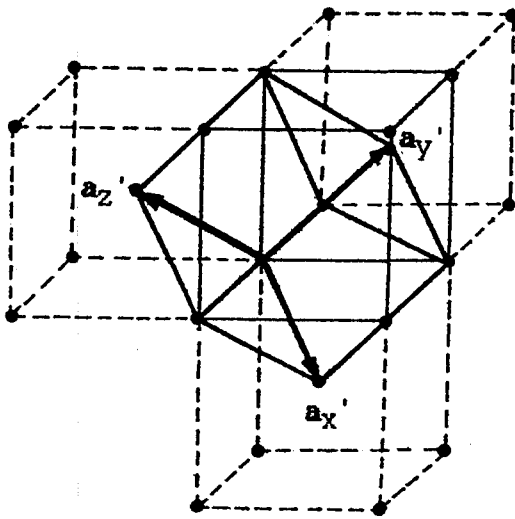
Şekil 2.14. FCC'nin ilkel hücresi.

O orjinine komşu yüzlerin orta noktalarını orijine birleş-

tiren vektörler ilkel vektörler olarak seçilir. İlkel hücrenin hacmi $V_H = |\mathbf{a}_x' \cdot (\mathbf{a}_y' \times \mathbf{a}_z')| = a_x^3/4$ 'tür. Burada \mathbf{x} , \mathbf{y} , \mathbf{z} vektörleri birim vektörlerdir.

2.6.2. BCC'nin İlkel Hücresi

Üç komşu kübün merkezlerini O orjinine birleştiren vektörler ilkel vektörlerdir. Hacim $V_H = |\mathbf{a}_x' \cdot (\mathbf{a}_y' \times \mathbf{a}_z')| = a_x^3/2$ olur.



$$\begin{aligned} \mathbf{a}_x' &= (1/2)a_x(\mathbf{x} + \mathbf{y} - \mathbf{z}) \\ \mathbf{a}_y' &= (1/2)a_x(-\mathbf{x} + \mathbf{y} + \mathbf{z}) \\ \mathbf{a}_z' &= (1/2)a_x(\mathbf{x} - \mathbf{y} + \mathbf{z}) \end{aligned}$$

Şekil 2.15. BCC'nin ilkel hücresi.

2.7. Birim Hücreye Düşen Örgü Noktası Sayısı

Birim hücreye düşen örgü noktası sayısı $N_d = N_i + (N_f/2) + (N_k/8)$ bağıntısı ile verilir. Burada; N_i , birim hücrenin içindeki örgü noktası sayısı, N_f , birim hücrenin yüzündeki örgü noktası sayısı ve N_k , birim hücrenin köşelerindeki örgü noktası sayısıdır. Yüzde bulunan bir nokta iki komşu birim hücre tarafından, köşede bulunan nokta ise 8 birim hücre tarafından paylaşılır. Basit kübik yapıda; $N_d = 0 + 0 + (8/8) = 1$, BCC yapıda; $N_d = 1 + 0 + (8/8) = 2$, FCC yapıda; $N_d = 0 + (6/2) + (8/8) = 4$ nokta vardır.

2.8. Doğrultu ve Düzlem (Miller) Indisleri

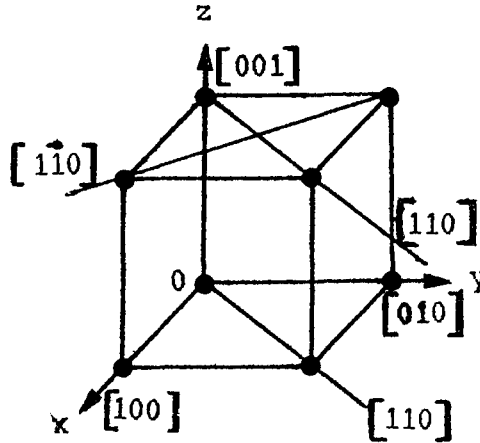
2.8.1. Doğrultu Indisleri

Bir örgü içindeki herhangi bir doğrunun doğrultusunu bulmak için, bu doğruya paralel orijinden geçen bir doğru çizilir. Bu doğru üzerinde bulunan bir noktanın koordinatlarından faydalanılır. Sözü edilen noktanın koordinatları (w_1, w_2, w_3) ise, $[w_1 w_2 w_3]$ doğrultu indisleri olur. $w_1 w_2 w_3$ tam sayılar değilse; w_1, w_2, w_3 arasındaki oran korunarak bu sayılar en küçük tam sayılara çevrilir. Birbirine paralel doğruların indisleri aynıdır. Negatif indisler rakamın üstüne bir çizgi çizerek yazılır ($[\bar{1}\bar{2}1]$ gibi).

Doğrultu indisleri, doğru üzerindeki iki $P_1(x_1, y_1, z_1)$ ve $P_2(x_2, y_2, z_2)$ noktalarının koordinatlarından faydalanarak da aşağıdaki gibi bulunabilir.

$$w_1 = x_2 - x_1 \quad , \quad w_2 = y_2 - y_1 \quad , \quad w_3 = z_2 - z_1$$

Birbirine bir simetri ile bağlı doğrultulara bir formun doğrultuları denir ve açılı parantezle gösterilir. $[111], [11\bar{1}], [1\bar{1}1]$ ve $[\bar{1}11]$ doğrultuları $\langle 111 \rangle$ ile gösterilir. Bir kübik kristalin bazı önemli doğrultuları Şekil (2.16.)'da verilmiştir.



Şekil 2.16. Kübik kristalde bazı doğrultular.

2.8.2. Düzlem (Miller) İndisleri

Kristal yapılarda, kristal eksenleri ile ilgili değişik düzlemlerden ve yönlerden söz etmek çoğu kez zorunludur. Alışılmış metot, onları Miller indis notasyonuna göre açıkça belirtmektir. Miller indisleri, birbirine paralel kristal yüzeylerinin sistematik olarak sınıflandırılması için kullanılır. Bu indisleri bulmak için, önce gözönüne alınan, kristal düzleminin temel kristal eksenlerini kestiği noktalar tespit edilir.

Bir düzlem, üç kristal ekseninde (bir birim hücrenin üç kenarı) düzlemin kesim noktalarının uzunlukları ile tanımlanır ve koordinatların başlangıç noktasından ölçülür. Kesim noktaları, üç eksen boyunca birim mesafelerde olan, birim hücrenin boyutlarına göre ifade edilir. Kesim noktalarının terslerinin aynı orana sahip olan en küçük üç tam sayıya indirgenmiş değerleri Miller indisleri olarak bilinir.

Başlangıç noktası herhangi bir örgü noktasında alındığı için, verilen bir düzlem için kesim noktalarının uzunlukları açıkça belirlenmez, fakat oranları sabittir. Herhangi bir başka paralel düzlem aynı indislere sahip olur, onun için Miller indislerinin belli bir grubu, paralel düzlemlerin bir grubunu tanımlar. Eğer bir düzlem, başlangıç noktasının negatif tarafında bir eksen keserse, uygun indis negatif olacaktır ve rakamın üstüne bir çizgi çizerek yazılır.

İndislerin bir grubu etrafındaki () şeklinde olan parantezler, paralel düzlemlerin tek bir grubunu ifade etmek için kullanılır.

Çoğu kez bir başkasına tamamen eşdeğer olan düzlemlerin bütün gruplarını toplu olarak belirtmek gerekir. Böylece simetrisinin çok yüksek bir derecesine sahip olan kübik sistemde, (110) düzlemi, (101), (011), ($\bar{1}\bar{1}0$), ($10\bar{1}$) ve ($01\bar{1}$)'e eşdeğerdir. Bir şeklin düzlemlerini veya düzlemlerin bu gibi gruplarını açıkça belirtmek için, indisler, { } şeklinde olan kıvrımlı köşeli parantezler içine konulur. Böylece {110}, yukarıda ifade edilmiş altı indisi içerecektir.

Sadece bütün indislerin işaretlerinin tersleri, başka bir paralel düzlemi gösterir. Böylece $(\bar{1}\bar{1}0)$, (110) 'a ve $(10\bar{1})$, $(\bar{1}01)$ 'e paraleldir.

Hegzagonal sistemlerde genellikle dörtlü Miller indisleri kullanılır. Bunlardan üçü taban düzlemindeki üç vektöre, dördüncü ise a_z -ekseni ile kesişme noktasının koordinatlarına karşı gelir. Indisler $(hkil)$ veya $(hk\bullet l)$ olarak gösterilir ve $h+k+i=0$ şartı sağlanır.

2.9. Atom Büyüklükleri ve Koordinasyon Sayısı

Bir atomu bilardo topu gibi kesin olarak sınırlamak, işi aşırı derecede basitleştirmek olur. Katılarda elektronlar birden fazla atomlarla kuvvetli etkileşim içinde bulunurlar. Atomlarla etkileşim içinde bulunan elektronlar, atom çekirdeği etrafındaki yörüngelerde yerleşmiş olan en dış yörünge elektronlarıdır. Bütün bunlara karşın, bir atomun büyüklüğü, kabaca, örgü parametrelerinden, atomları birbirine değen küreler olarak kabul ederek, hesaplanabilir.

Basit kübik yapıda atomlar küpün ayrıtları üzerinde, BCC'-de cisim köşegeni üzerinde, FCC'de yüz köşegeni üzerinde, birbirine temas ederler.

Bir atomun büyüklüğü KOORDİNASYON SAYISI ile doğru orantılıdır. Bu sayı kristal yapısına bağlıdır. Koordinasyon sayısı, verilen bir atomun en yakın komşu sayısıdır.

Kristal yapı:	BCC	FCC	HCP	Elmas
Koordinasyon sayısı:	8	12	12	4

BCC yapıdaki Fe, FCC yapıdaki Cu içine karıştırılırsa, Fe daha büyük bir atomik çapa sahip olur.

2.10. Kristal Sistemlerinde Birim Hücre Elemanları, Düzlemler Arasındaki Açılı ve Uzaklıklar

Bütün sistemler için gerekli bilgiler herhangi bir kristallografi kitabında bulunabilir. Bunlardan bazıları aşağıda verilmiştir.

(a) Birim hücre hacimleri Çizelge (2.1.)'de verilmiştir.

(b) (hkl) düzlemleri arasındaki uzaklıklar Çizelge (2.2.)'de verilmiştir.

(c) Kübik sistemlerde $(h_1k_1l_1)$ ve $(h_2k_2l_2)$ düzlemleri arasındaki açı aşağıdaki şekilde verilir.

$$\cos\theta = \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2}{[(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + l_2^2)]^{1/2}}$$

Çizelge 2.1. Birim Hücre Hacimleri:

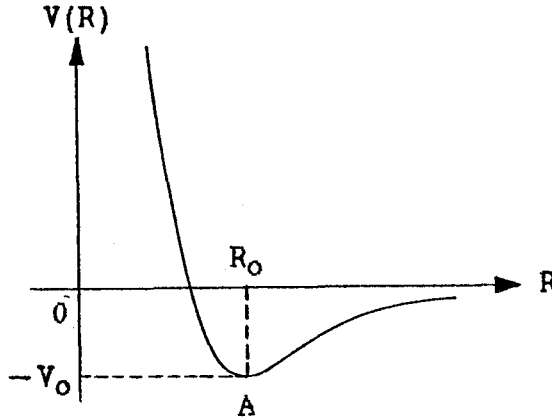
YAPI	HACİM
Kübik	a_x^3
Tetragonal	$a_x^2 a_z$
Hegzagonal	$(3)^{1/2} a_x^2 a_z / 2$
Ortorombik	$a_x a_y a_z$
Monoklinik	$a_x a_y a_z \cdot \sin\beta$
Trigonal	$a_x^3 (1 - 3\cos^2\alpha + 2\cos^3\alpha)^{1/2}$

Çizelge 2.2. (hkl) Düzlemleri Arasındaki Uzaklıklar:

YAPI	UZAKLIK
Kübik	$(1/d^2) = (h^2 + k^2 + l^2) / a_x^2$
Hegzagonal	$(1/d^2) = (4/3)(h^2 + hk + k^2) / a_x^2 + l^2 / a_z^2$
Tetragonal	$(1/d^2) = (h^2 + k^2) / a_x^2 + l^2 / a_z^2$
Ortorombik	$(1/d^2) = h^2 / a_x^2 + k^2 / a_y^2 + l^2 / a_z^2$

3. ATOMLAR ARASI KUVVETLER

Katılar kararlı yapılardır, yani NaCl kristali, Na ve Cl serbest atomları topluluğundan daha kararlıdır. Benzer şekilde bir Ge kristali, serbest Ge atomları topluluğundan daha kararlıdır. Ge atomları birbirine yaklaşırken Ge atomlarının birbirini çekmesi buna neden olur, yani çekiçi bir atomlar arası kuvvet, atomları bir arada tutar. Bu kristal şekillenmesinden sorumlu kuvvettir. Bu ise kristal enerjisinin, serbest atomların enerjisinden, serbest atomlar kümesinin bir kristal oluşturması için gereken enerji kadar düşük olduğu anlamına gelir. Bu enerji farkı kristal'in bağlanma enerjisi adını alır.



Şekil 3.1. Atomlar arası potansiyel enerji $V(R)$ '-ye karşı atomlar arası uzaklık R .

İki atom arasındaki etkileşmeyi temsil eden potansiyel enerji, atomlar arası uzaklıkla büyük ölçüde değişir. Şekil (3.1.)'de gösterilen bu çift potansiyeline ait tipik eğri, R_0 gibi bir uzaklıkta bir minimuma sahiptir. $R > R_0$ için potansiyel yavaşça artar, R yaklaşık sonsuz iken sifıra yaklaşır. $R < R_0$ için ise potansiyel hızla artar ve küçük yarıçapta sonsuza gider.

Sistemin, yani atom çiftinin, mümkün olan en düşük enerjiye sahip olma eğiliminden dolayı, denge konumunu temsil eden, A minimum noktasında sistem en kararlıdır. Denge konumunda atomlar arası uzaklık R_0 'dır ve bağlanma enerjisi $-V_0$ 'dir. $V_0 < 0$

olduğundan, sistemin enerjisi, iki atomun birbirinden sonsuz uzaklıkta (yani serbest atom) olması halindekinden düşük olması nedeniyle sistem kararlıdır.

Denge konumunda atomlar arası uzaklık R_0 'a ait tipik değer birkaç angstromdur. Böylece bu durumdaki kuvvetler, gerçekte, kısa menzillidir. Potansiyelin uzaklıkla zayıflaması o kadar hızlıdır ki, uzaklık diyelimki 10 veya 15 angstrom değerini aştığında, kuvvet ihmal edilebilir ve böylece atomlar serbest, yani birbirleriyle etkileşmeyen parçacıklar şeklinde düşünülebilir. Bu ise serbest atom modelinin ortalama atomlar arası uzaklığın çok büyük olduğu gazlarda neden geçerli olduğunu açıklamaktadır.

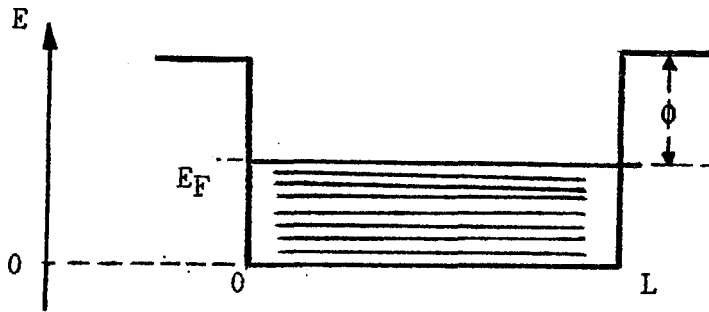
$F(R)$ kuvveti $V(R)$ potansiyelinden türetilebilir. Bilindiği gibi $F(R) = -\partial V(R)/\partial R$ 'dir. Yani, kuvvet potansiyel gradyentinin negatifidir. Bunu Şekil (3.1.)'deki eğriye uygularsak, uzaklığın R_0 'dan büyük değerleri için $F(R) < 0$ olduğunu görürüz. Bu ise, uzaklığın R_0 'dan büyük değerlerinde kuvvetin çekici, yani atomları çekerek bir arada tutma eğiliminde olduğu anlamına gelir. Diğer taraftan, uzaklığın R_0 'dan küçük değerleri için $F(R) > 0$ 'dır. Yani, uzaklığın R_0 'dan küçük değerleri için kuvvet iticidir ve atomları iterek birbirinden uzaklaştırma eğilimindedirler.

Bu tartışmadan şu sonuç ortaya çıkıyor, atomlar arası kuvvet iki parçadan meydana gelir: R_0 'dan büyük uzaklıklarda ağır basan çekici kuvvet ve R_0 'dan küçük uzaklıklarda ağır basan itici kuvvettir. Bu kuvvetler, R_0 denge noktasında birbirlerini tamamen yok ederler.

4.SERBEST ELEKTRON MODELİ

Periyodik oetvele bakıldığında katıların önemli bir kısmının metaller olduğu görülür. Metallerin çok iyi elektrik ve ısı ilettikleri uzun yıllardan beri bilinmektedir. Bu özelliği nedeniyle metallerin günlük yaşantımızda birçok kullanma alanı vardır. Araştırmacılar metallerin özellikleri hakkında bir hayli kuramsal ve denel bulguları ortaya koymuşlar ve bu özelliklerin nedenlerini genelde açıklayabilen teoriler geliştirmişlerdir. Bunların bir çoğu kuantum teorisine dayanmaktadır. Şimdi bu teorilerden Sommerfeld'in kuantum mekanik modelini (1928) ele alacağız.

Sommerfeld ilk kez kuantum mekaniğini metallere uygulamıştır. Sommerfeld bir metaldeki serbest elektronların Şekil (4.-1.)'de görüldüğü gibi bir kare potansiyel çukuru içerisinde bulunduğunu kabul etmiştir. Potansiyel çukuru içindeki elektronlar birbirleriyle etkileşmeden hareket edebilmekte ve E_F enerji düzeyine kadar olan bütün elektronik halleri doldurmaktadırlar. Bu E_F enerji düzeyine "Fermi Enerjisi" denir. Buna göre Fermi enerji düzeyi, bir metalde serbest elektronların, taban enerji düzeyinden itibaren tamamen doldurabildikleri en yüksek enerji seviyesi olarak tanımlanır. Fermi enerjisi metalin karakteristik bir büyüklüğüdür.



Şekil 4.1. Sommerfeld'in kabul ettiği kare potansiyel çukuru.

Şekil (4.1.)'deki ϕ , iş fonksiyonu olup metalden bir elektronu sökebilmek için gerekli en küçük enerji değerini gösterir.

Bu enerji fotoelektrik veya termoyonik ışımaya olaylarından yararlanarak hesaplanabilir.

Eğer potansiyel çukurunun tabanını sıfır enerji düzeyi olarak kabul edersek, çukurda bulunan elektronlar için $V(r)=0$ olacağı gözönüne alınarak Schrödinger denklemi,

$$(-\hbar^2/2m)\nabla^2\psi(r)=E\psi(r) \quad (4.1)$$

şeklinde yazılabilir. Bu deklemin tek boyutlu hal için genel çözümü,

$$\psi_k(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$$

dir. $\psi_k(x)$ dalga fonksiyonunun $\psi_k(x=0)=0$ ve $\psi_k(x=L)=0$ sınır şartlarını sağlaması için,

$$A=-B \text{ ve } kL=n\pi \quad (n=1,2,3,\dots)$$

olmalıdır. Buna göre (4.1) denkleminin çözümü,

$$\psi_n=A\sin(n\pi/L)x \quad (4.2)$$

olur. ψ_n dalga fonksiyonu normalize edilirse, yani elektronun 0 ile L arasında herhangi bir yerde bulunacağı gerçeği düşünülürse,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n \psi_n^* dx = \int_0^L (\psi_n)^2 dx = 1$$

olması için $A=(2/L)^{1/2}$ bulunur. Buna göre genel çözüm,

$$\psi_n=(2/L)^{1/2} \sin(n\pi/L)x \quad (4.3)$$

olur. Bu çözümden elektronların kararlı dalgalarla temsil edilebileceği ve davranışlarının ψ_n dalga fonksiyonu yardımı ile bulunabileceği görülür. Buna göre bir elektronun kinetik enerjisi,

$$E_k = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m$$

bağıntısı gözönüne alınarak,

$$E_n = (\hbar^2/2m) (n\pi/L)^2 = h^2 n^2 / (8mL^2) \quad (4.4)$$

bulunur. Bu bağıntıdan görüleceği gibi potansiyel çukuru içinde bulunan serbest elektronların enerjileri kuantalanmış olup n^2 ile orantılıdır. Kristal boyutları L olan bir metalin üç boyutlu hal için (4.1) denkleminin çözümü, yukarıdakine benzer şekilde işlemler yapılarak,

$$\Psi(\mathbf{r}) = (2/L)^{3/2} \text{sink}_x x \cdot \text{sink}_y y \cdot \text{sink}_z z \quad (4.5)$$

olduğu görülür. Burada $k_x = n_x \pi/L$, $k_y = n_y \pi/L$, $k_z = n_z \pi/L$ olup $n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$ tam sayılardır. Bu hal için elektronun kinetik enerjisi,

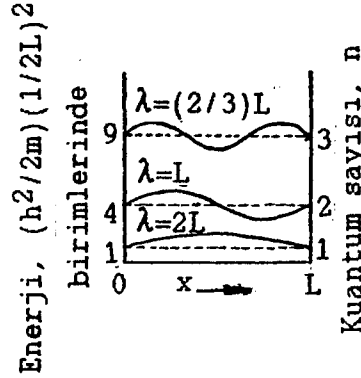
$$\begin{aligned} E_{n_x, n_y, n_z} &= [h^2 / (8mL^2)] (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \\ &= (\hbar^2/2m) (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \end{aligned} \quad (4.6)$$

olur. Buna göre her bir elektronun enerjisi üç kuantum numarası ile belirlenir. Yani bir enerji düzeyi üç kuantum sayısı ile tanımlanır.

(4.4) ve (4.6) bağıntılarına dikkatle incelenirse aynı enerji değerine sahip birden fazla dalga fonksiyonu veya elektronik hal bulunur. Bu kuantum hallerine dejenere haller denir. Örneğin $(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = 6$ sayısına karşılık gelen enerji değeri için $(n_x=1, n_y=1, n_z=2)$, $(n_x=2, n_y=1, n_z=1)$ ve $(n_x=1, n_y=2, n_z=1)$ kuantum halleri olmak üzere üç tane dalga çözümü, yani üç elektronik hal vardır. Diğer yandan her bir elektronun $\pm 1/2$ değerinde bir spin kuantum sayısına sahip olduğu veya her bir elektronik hale 2 elektronun yerleşebileceği düşünülürse, dejenere hal sayısı 6 olacaktır.

L uzunluğunda bir çizgiye kapatılmış m kütleli özgür bir

elektronun ilk üç enerji düzeyi ve dalga fonksiyonu Şekil (4.2.)' de gösterilmiştir. Enerji düzeyleri, dalga fonksiyonunda yarım dalgaboyu sayısını veren n kuantum sayısına göre işaretlenir. Dalgaboyları, dalga fonksiyonları üzerinde gösterilmiştir. Kuantum sayısı n olan düzeyin enerjisi $(h^2/2m)(n/2L)^2$ 'ye eşittir. Ayrıca $\lambda=2\pi/k=2L/n$ ile veriliyordu.



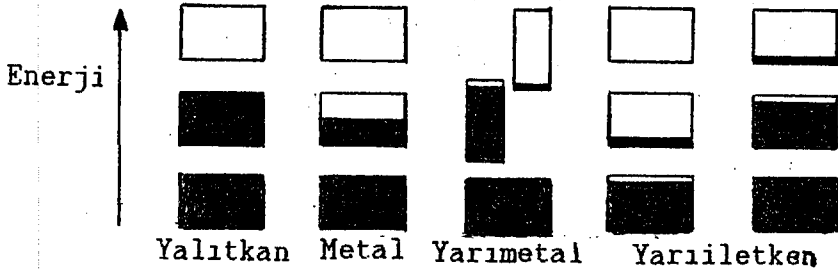
Şekil 4.2. --- Enerji düzeyleri ve
— Dalga fonksiyonları.
(Bağıl ölçek kullanılmıştır.)

Serbest elektron modelinde katılardaki elektronların hareketi üzerinde durduk. Kristal potansiyelinin gözönüne alınmaması nedeniyle bu model oldukça basitleştirilmiştir. Fakat, deneysel sonuçları niceliksel olarak açıklanmak istenirse, bu potansiyeli tamamen ihmal edemeyiz. Bu potansiyeli hesaba katmaksızın bazı etkileri açıklayamayız. Bundan dolayı, kristal potansiyelinin katıların elektronik özellikleri üzerine etkisi dikkate alınmalıdır.

Metallerin serbest elektron modeli ısı sıçasını, ısısal iletkenliği, elektriksel iletkenliği, magnetik alınganlığı ve metallerin elektrodinamiğini kolayca anlamamıza yardım etmiştir. Ancak bu model başka büyük sorularda bize yardımda başarısızdır: metal, yarımetal yarıiletken ve yalıtkanlar arasındaki ayırım; Hall katsayısının artı değerlerinin ortaya çıkışı; metaldeki iletim elektronlarının serbest atomlardaki değerlik elektronlarına ilişkisi ve birçok ayrıntılı taşıma özellikleri, özellikle magnetik alanda taşıma. Bu nedenle daha az basit bir kurama

gerek duyarız. Bu kuram, serbest elektron modelini geliştirerek, hemen her basit girişim için son derece yararlı olmuştur.

Katılar elektiriksel özelliklerine göre iletken, yalıtkan, yarıiletken ve yarımetal olarak ayrılırlar. Bunların oda sıcaklığındaki öz dirençleri, iyi bir iletken olan metaller için $\approx 10^{-6}$ ohm-cm, yalıtkanlar için $\approx 10^{14}$ 'den 10^{22} ohm-cm ve yarıiletkenler için 10^{-2} 'den 10^9 ohm-cm dolaylarındadır. Yarımetallerin öz direnç değerleri, metallerle yarıiletkenler arasındadır. Dikkat edilecek olursa öz dirençlerin, fizikte az görülen bir şekilde, büyük bir aralıkta değiştiği görülmektedir. Süperiletkenlerin öz direncinin, belirli bir sıcaklığın altında, sıfır olduğunu da dikkate alırsak, bu özelliğin ilginçliği daha da çarpıcı olur. (Işın, A., 1991, Modern Fizik, Anadolu Üniversitesi Açık Öğretim Fakültesi Yayınları.)



Şekil 4.3. Bir yalıtkan, metal, yarımetal ve yarıiletken için izin verilmiş enerji bantlarının çizeneksel elektron dolumu. Kutuların dikey uzantısı izin verilmiş enerji bölgelerini gösterir; taralı alanlar elektronlarla dolu bölgeleri gösterirler. Bir yarımetalde (bizmut gibi) mutlak sıfırda bir bant; hemen hemen dolu, diğer bant yaklaşık olarak boşdur. Bununla birlikte, saf bir yarıiletken (silisyum gibi) mutlak sıfırda bir yalıtkan olur. Görülen iki yarıiletkenden soldaki sonlu bir sıcaklıktadır ve taşıyıcılar ısıl olarak uyarılmıştır. Diğer yarıiletkenin, safsızlıklar nedeniyle elektronu eksiktir.

Her katı elektron içerir. Elektriksel iletkenlik için önemli olan soru elektronların uygulanan bir elektrik alanına nasıl tepki verecekleridir. Kristaldeki elektronların, içinde dalga şeklinde elektron yörüngelerinin hiç olmadığı enerji bölgeleri ile ayrılmış enerji bantları içinde düzenlenişi Şekil (4.3.)'de gösterilmiştir. Böyle yasak bölgelere enerji aralıkları ya da bant aralıkları denir ve bu, iletim elektron dalgaları ile kristalin iyon korlarının etkileşmesinin sonucudur. Eğer izin verilmiş enerji bantları ya dolu ya da boş ise bu kristal bir yalıtkan olarak davranır, çünkü o zaman bir elektrik alan içinde hiçbir elektron hareket edemez. Bir ya da daha çok bant kısmen, yüzde 10'dan 90'a diyelim, dolu ise bu kristal metal olarak davranır. Eğer bu bantlar, bir ya da iki pek az dolu ya da pek az boş bant dışında tümüyle dolu ise, bu kristal bir yarıiletken ya da yarımetal olur.

Yalıtkan ve iletkenler arasındaki ayırımı anlamak için katının periyodik örgüsünü hesaba katacak şekilde serbest elektron modelini genişletmemiz gerekir. Yasak bir bant aralığı olanağı, ortaya çıkan en önemli yeni özelliktir. Kristaldeki elektronların oldukça dikkate değer başka özelliklerine rastlayacağız. Örneğin, bu elektronlar uygulanan elektrik ya da magnetik alana etkin bir m^* kütlesi taşıyormuş gibi tepki verirler; bu kütle serbest elektron kütesinden daha büyük ya da daha küçük ya da eksi bile olabilir. Kristaldeki elektronlar $-e$ ya da $+e$ yükleri taşıyormuş gibi uygulanan alana tepki verirler ve işte burada Hall katsayısının eksi ve artı değerlerinin açıklaması yatmaktadır.

4.1. Yaklaşık Serbest Elektron Modeli

Serbest elektron modelinde izin verilmiş enerji değerleri sıfırdan sonsuza kadar sürekli bir şekilde dağılmışlardır. (4.6) denkleminde gördüğümüz gibi,

$$E_k = (\hbar^2 / 2m) (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

dir, burada L kenarlı bir küp üzerindeki periyodik sınır koşulları için,

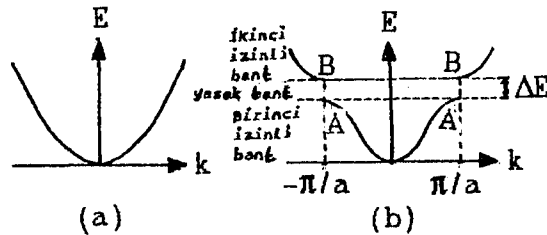
$$k_x, k_y, k_z = 0; \pm 2\pi/L; \pm 4\pi/L; \dots$$

dir. Serbest elektron dalga fonksiyonları,

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (4.7)$$

biçimindedir; bunlar ilerleyen dalgaları gösterir ve $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ momentumunu taşırlar.

Bir kristalin bant yapısı çoğu kez yaklaşık serbest elektron modeli ile betimlenir; bunun için bant elektronları iyon korlarının periyodik potansiyeli tarafından yalnız zayıfca te-dirgin edilmiş gibi ele alınır. Çoğu kez bant yapısı bu model üzerinde açıklanabilir; bunun uygulanmadığı bazı durumlar da vardır. Ancak bu model metaldeki elektronların davranışı hakkında hemen hemen bütün nitel soruları yanıtlar. Bu yaklaşımı, bir sonraki bölümde ayrıntılı olarak ele alacağız.



Şekil 4.4. (a) Serbest bir elektron için k dalgavektörüne karşı E enerjisinin gösterimi. (b) Örgü sabiti a olan tek atomlu çizgisel bir örgüde elektron için dalgavektörüne karşı enerjinin gösterimi. Görülen ΔE enerji aralığı $k = \pm\pi/a$ 'daki ilk Bragg yansımaya eşlik eder; n 'nin tam değerleri için $\pm n\pi/a$ 'da başka aralıklar bulunur.

Bragg yansımalarının kristalde dalga yayılmasının belirgin

bir özelliği olduğunu biliyoruz. Kristaldeki elektron dalgalarının Bragg yansımaları enerji aralığının nedenidir. Schrödinger denkleminin dalga şeklinde çözümlerinin olmadığı önemli enerji bölgeleri ortaya çıkar (Şekil (4.4.)). Bir katının iletken ya da yalıtkan olup olmasını belirlemede bu enerji aralıkları önemlidir. Fiziksel olarak enerji aralıklarının kökenini örgü sabiti a olan çizgisel bir katının basit probleminde açıklarız. Bant yapısının düşük enerjili kısımları nitel olarak Şekil (4.4.)'de, (a) tümüyle serbest elektronlar ve (b) yaklaşık serbest olan, ancak $k=\pm\pi/a$ 'da bir enerji aralığı bulunan elektronlar için gösterilmiştir.

Dalgavektörü \mathbf{k} olan bir dalganın kırınımı için $(\mathbf{k}+\mathbf{G})^2=k^2$ Bragg koşulu tek boyutta,

$$k=\pm(1/2)G=\pm n\pi/a \quad (4.8)$$

olur, burada $G=2\pi n/a$ bir ters örgü vektörü ve n bir tamsayıdır. İlk yansımalar ve ilk enerji aralığı $k=\pm\pi/a$ 'da olur. Diğer enerji aralıkları n tamsayısının diğer değerleri için olur. Çizgisel örgüdeki bir atomdan yansımış dalganın en yakın komşu bir atomdan yansımış dalgayla 2π 'lik evre farkı ile yapıcı olarak girişime uğramasından dolayı $k=\pm\pi/a$ 'daki yansıma ortaya çıkar. \mathbf{k} uzayında $-\pi/a$ ile π/a arasındaki bölge bu örgünün birinci Brillouin bölgesidir.

$k=\pm\pi/a$ 'da dalga fonksiyonları serbest elektron modelinin ilerleyen $e^{i\pi x/a}$ ve $e^{-i\pi x/a}$ dalgaları değildir. Bu özel k değerlerindeki çözümler sağa ve sola ilerleyen dalgalardan eşit olarak yapılmışlardır: bu çözümler duran dalgalardır. Önce akla yakın bir tartışma verelim. Bragg koşulu sağlandığında bir doğrultuda ilerleyen bir dalga Bragg yansımalarına uğrar ve ters yönde hareketine devam eder. Her bir ardışık Bragg yansıması hareket yönünü tekrar tersine çevirir. Zamandan bağımsız tek durum, duran dalgalarla oluşturulur. $e^{i\pi x/a}$ ve $e^{-i\pi x/a}$ ilerleyen dalgalarından iki farklı duran dalga oluşturabiliriz:

$$\begin{aligned}\psi(+)&=e^{i\pi x/a}+e^{-i\pi x/a}=2\cos(\pi x/a); \\ \psi(-)&=e^{i\pi x/a}-e^{-i\pi x/a}=2i\sin(\pi x/a)\end{aligned}\quad (4.9)$$

Bu duran dalgalar sağ ve sol yöne ilerleyen dalgaların her bir eşit kısımlarından yapılmıştır. x yerine $-x$ konulduğunda duran dalgaların işaret değiştirip değiştirmediğine göre bunlar (-) ya da (+) şeklinde işaretlenir.

4.1.1. Enerji Aralığının Kökeni

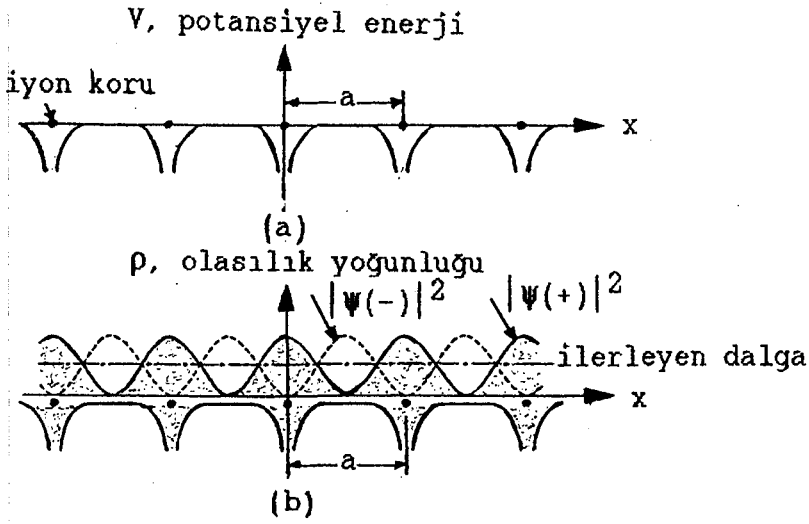
İki $\psi(+)$ ve $\psi(-)$ duran dalga, elektronları farklı bölgelere yığar ve bu yüzden; bu iki dalganın potansiyel enerjisinin değeri farklıdır. Bu enerji aralığının kökenidir. Bir parçacığın olasılık yoğunluğu $|\psi|^2$ 'dir. Bir e^{ikx} ilerleyen dalgası için, olasılık yoğunluğu sabit olacak şekilde $\rho=e^{-ikx}e^{ikx}=1$ elde ederiz. Düzlem dalgaların çizgisel bileşimi için olasılık yoğunluğu sabit değildir. (4.9) denklemindeki $\psi(+)$ duran dalgasını ele alalım; bunun için,

$$\rho(+)=|\psi(+)|^2 \propto \cos^2\pi x/a$$

elde ederiz. Bu potansiyelin en düşük olduğu $x=0, a, 2a, \dots$ da yerleşmiş artı iyonlar üzerine eksi yükleri yığar. Şekil (4.5.a.), tek-atomlu çizgisel örgünün artı iyon korları alanında bir iletim elektronunun elektrostatik potansiyel enerjisinin değişimini göstermektedir. Metalde her bir atom bir ya da daha fazla değerlik elektronunu iletim bandını oluşturması için terkettiğinden, bu iyon korları artı bir yük taşır. Artı bir iyonun alanında bir elektronun potansiyel enerjisi eksi, yani çekicidir. Şekil (4.5.b.)'de ise elektron yoğunluğu dağılımının $\psi(+)$, $\psi(-)$ duran dalgaları ve ilerleyen bir dalgaya göre taslağı çizilmiştir.

Duran $\psi(-)$ dalgası için,

$$\rho(-)=|\psi(-)|^2 \propto \sin^2\pi x/a$$



Şekil 4.5. (a) Çizgisel bir örgünün iyon kolları alanında, bir iletim elektronunun potansiyel enerji değişimi. (b) $|\psi(-)|^2 \propto \sin^2 \pi x/a$; $|\psi(+)|^2 \propto \cos^2 \pi x/a$ ve ilerleyen bir dalga için, bu örgüde ρ olasılık yoğunluğu dağılımı. $\psi(+)$ dalga fonksiyonu elektronik yükleri artı iyonların kolları üzerine yığar, dolayısıyla ilerleyen bir dalga tarafından görülen ortalama potansiyel enerji ile karşılaştırıldığında bunun potansiyel enerjisi düşer. $\psi(-)$ dalga fonksiyonu elektronik yükleri artı iyonlar arasındaki bölgeye yığar ve onları iyon kollarından uzaklaştırır; dolayısıyla ilerleyen bir dalga tarafından görülenle karşılaştırıldığında potansiyel enerji yükselir. Bu şekil, enerji aralığının kökenini anlamada esastır.

olasılık yoğunluğunu elde ederiz. Bu, elektronları iyon kolları arasında ortada, yani iyon kollarından uzakta yeğleyerek dağıtır. Bu üç yük dağılımı üzerinde potansiyel enerjinin ortalama değerleri hesaplanırsa, $\rho(+)$ 'nin potansiyel enerjisinin ilerleyen dalganınkinden daha düşük, oysa ki $\rho(-)$ 'nin enerjisinin ilerleyen dalganınkinden daha yüksek bulunacağını umarız. Eğer $\rho(-)$ ve $\rho(+)$ 'nin enerjileri ΔE kadar farklı ise, ΔE genişliğinde

bir enerji aralığı elde ederiz. Şekil (4.4.)'de A noktasındaki enerji aralığının tam altındaki dalga fonksiyonu $\Psi(+)$ ve B noktasındaki enerji aralığının tam üstündeki dalga fonksiyonu $\Psi(-)$ olacaktır.

4.1.2. Enerji Aralığının Büyüklüğü

Bölge sınırında dalga fonksiyonları birim uzunluğa boylandırılmış $\sqrt{2} \cos \pi x/a$ ve $\sqrt{2} \sin \pi x/a$ 'dır. Kristal potansiyelini $V(x)=V \cos(2\pi x/a)$ olarak yazarız. İki durum arasındaki birinci mertebeden enerji farkı,

$$\Delta E = 2V \int_0^1 (\cos 2\pi x/a)(\cos^2 \pi x/a - \sin^2 \pi x/a) dx$$

$$\Delta E = V \quad (4.10)$$

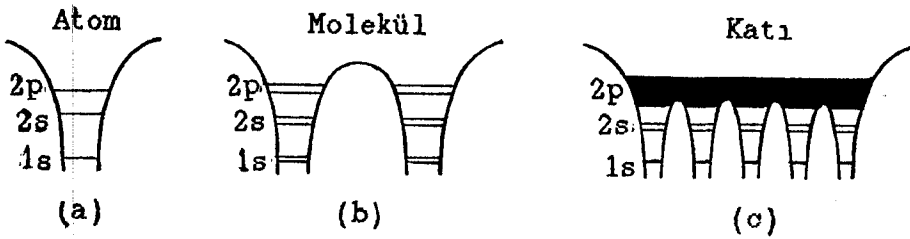
dir. Bu aralık kristal potansiyelinin Fourier bileşeninin genişliğine eşittir.

5.KATILARDA ENERJİ BANTLARI

5.1.Atomlar, Moleküller ve Katılardaki Enerji Spektrumları

Burada amacımız, kristal yapıları bir katıda hareket eden elektronun enerji spektrumunu niteliksel olarak tanımlamaktır. Bununla birlikte, bu amaca, serbest atomun spektrumunu ele alarak tartışmayı başlatmak ve atomlar bir katıyı oluşturacak şekilde bir araya gelirlerken bu spektrumun nasıl bir değişmeye uğradığını görmek yardım edecektir.

Somut bir örnek olarak lityumu ele alalım. Serbest haldeki lityum atomunu düşünelim. Elektron, Şekil (5.1.a.)'da gösterildiği gibi bir potansiyel kuyusunda hareket eder. Schrödinger denklemini çözdüğümüzde, gösterildiği gibi kesikli enerji düzeyleri serisini elde ederiz. Hidrojen atomu halindeki gibi, bu düzeyler $1s$, $2s$, $2p$ vb. şeklinde gösterilir. Lityum atomu, ikisi $1s$ kabuğunu (tamamen dolu) ve üçüncüsü ise $2s$ alt kabuğunu işgal eden üç elektron içerir.



Şekil 5.1. (a) Atomdan, (b) moleküle ve (c) katıya geçiş halinde lityumun enerji spektrumunun dönüşümü.

Şimdi lityum molekülünü (Li_2) oluşturacak şekilde iki lityum atomunun biraraya geldikleri durumu ele alalım. Elektron tarafından "görülen" potansiyel şimdi Şekil (5.1.b.)'de gösterilen çift kuyudur. Burada enerji spektrumu kesikli çiftler kümesinden oluşur. Atomik düzeylerin herbiri, yani $1s$, $2s$, $2p$ vb., birbirine oldukça yakın iki düzeye yarılar. Atomik ve moleküler düzeyler arasındaki aynı isimli birbirine yakın düzeylerin mevcut oluşu ilişkisinden dolayı, $1s, 2s, 2p$ vb.'den, herbiri iki alt düzeyden oluşmaları ile tanınan moleküler enerji düzeyleri şeklinde sözedebiliriz.

H_2^+ hidrojen molekülündeki işlemde, iki atomlu bir moleküldeki iki ve yalnız iki alt düzeye bir atomik düzeyin niçin yarıldığını görebiliriz. Temel olarak neden aşağıdaki gibidir: Li atomları birbirinden çok uzaktayken, bir atomun bir diğer atomdaki elektrona etkisi çok küçüktür ve bir tedirginlik şeklinde nitelenebilir. Bu yaklaşımda, 1s, 2s vb. tedirgin edilmiş düzeylerin herbiri çift hale gelecek şekilde dejenere olurlar. Çünkü, örneğin 1s düzeyindeki elektron atomların herbirinde bu düzeyi işgal edebilir ve iki atom olması halinde enerji böylece ikiye bölünerek dejenere olur. Diğer bir deyişle, bir elektronun herhangi bir zamanda hangi çekirdeğe ait olduğunu belirlemek çok güç olacaktır. Bu durum Şekil (5.1.b)'de her iki atoma yakın ikişer enerji düzeyi ile tasvir edilebilir. Sadece, atomlar arasındaki etkileşme tamamen ihmal edilirse bu dejenere olma hali geçerlidir. Bu etkileşme hesaba katıldığında, ikiye bölünme şeklindeki dejenere olma hali ortadan kalkar ve herbir düzey iki alt düzeye yarılr. Bu alt düzeylere karşılık gelen moleküler orbitaller, H_2^+ halindeki gibi, daima karşılık gelen atomik orbitallerin simetrik ve antisimetrik birleşimleri şeklinde alınrlar.

Herbir moleküler düzey, Pauli dışarlama ilkesine göre birbirine zıt spinli iki elektronu barındırabilir. Li_2 molekülü, dördü 1s moleküler çiftini diğer ikisi 2s çiftinin alt düzeyini işgal eden altı elektrona sahiptir.

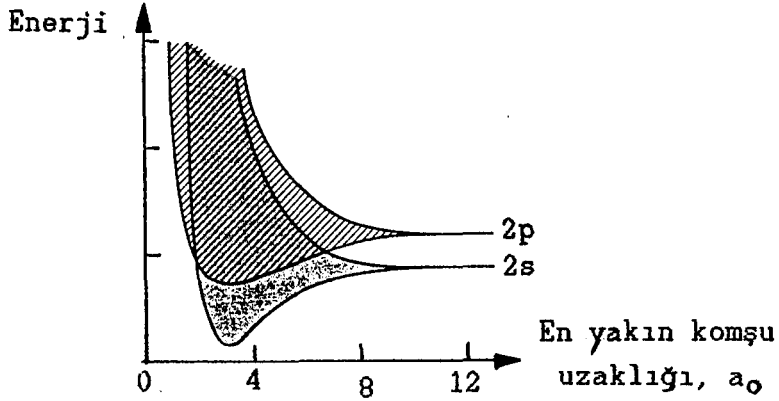
Bu tartışmaya göre, yarıma miktarı büyük bir şekilde moleküldeki iki atomun çekirdekleri arasındaki uzaklığa bağlıdır. İki çekirdek birbirine yaklaştıkça, tedirginlik çoğalır ve yarıma artar. Yarıma atomik orbitale de bağlıdır. 2p düzeyinin yarıması, 1s düzeyininkinden daha geniş olan 2s düzeyinin yarımasından geniştir. Sebebi şudur: Örneğin 1s orbitalinin yarıçapı çok küçüktür ve böylece orbital kendi çekirdeğine sıkı şekilde bağlıdır. Bu orbital tedirginlik nedeniyle büyük ölçüde etkilenmez. Daha büyük yarıçapları olan ve kendi çekirdeklerine zayıf bir şekilde bağlı olan 2s ve 2p orbitalleri için bu geçerli değildir. Genel olarak söylenirse, enerji yükseldikçe, yarıma büyür.

Yukarıdaki tartışmalar, keyfi sayıda atomdan oluşan çok atomlu Li molekülüne genelleştirilebilir. Böylece 3 atomlu molekülde, her bir atomik düzey, üçlüye yarılr, 4 atomlu molekülde dörütlüye yarılr ve böylece devam eder. Katı lityuma, böylece atomların sayısının giderek büyüyerek dev bir lityum molekülü oluşturduğu limit durum şeklinde bakılabilir. Enerji spektrumunun şekli ne olacaktır? Bunu yukarıdaki tartışmaya dayanarak cevaplayabiliriz: Atomik düzeylerin herbiri, katıdaki atomların sayısı N olmak üzere, birbirine oldukça yakın N tane alt düzeye yarılr. Fakat N çok büyük, yaklaşık 10^{23} , olduğundan alt düzeyler birbirine o kadar yaklaşırlarki; artık birbirinden ayırdedilemezler ve enerji bandı oluştururlar. Böylece $1s, 2s, 2p$ düzeyleri, Şekil (5.1.c.)'deki gibi sırasıyla $1s, 2s$ ve $2p$ bantlarına dönüşür.

Bantlardaki alt düzeylerin birbirine ne kadar yakın olduğunu göstermek için aşağıdaki sayısal örneği ele alalım. Varsayalım ki; bant genişliği 5 eV (tipik bir değer) olsun. Komşu iki düzey arasındaki enerji aralığı, böylece $5/10^{23} = 5 \times 10^{-23} \text{ eV}$ mertebesindedir. Bu oldukça küçük bir değer olduğundan, tek tek alt düzeyler birbirinden ayırdedilemezler ve böylece dağılımları sürekli bir enerji bandı şeklinde düşünülebilir.

Özet olarak, katıdaki spektrum enerji bantlarının kümesi şeklinde oluşur. Bu bantları ayıran boşluk bölgeleri enerji boşlukları, yani yasak enerji bölgeleri olup, elektronlar tarafından işgal edilemezler. Kesikli düzeyler kümesi şeklinde izinli enerjilerin bulunduğu bir atom veya moleküldekine ters bir durum ortaya çıkıyor. Kesikli düzeylerin bantlar şeklinde genişlemesi katının oldukça temel özelliklerinden biridir. Bant genişliği değişir, fakat genel olarak bant yükseldikçe, genişlik artar. Çünkü, moleküller halinden hatırlanacağı gibi, bir yüksek enerji hali büyük bir atomik yarıçapa ve böylece düzeyin ilk durumundan itibaren genişlemesine neden olan şiddetli bir tedirginliğe karşılık gelir. Ters durumda, alçak enerji durumları, tedirginlik tarafından daha az etkilenen sıkı bağlı orbitallere karşılık gelir.

Şekil (5.2.), a örgü sabitlerinin fonksiyonları olarak metalik lityumda çizilen 2s ve 2p'yi gösteriyor. Bant genişliklerinin, beklendiği gibi, a azalırken arttığını belirtelim. Çünkü atomlar arası uzaklık küçüldükçe tedirginlik artar. $a < 6a_0$ için 2s ve 2p bantları üstüste binmenin başladığı noktaya doğru genişler ve aralarındaki boşluk ise tamamen ihmal edilir.



Şekil 5.2. Lityum kristalinde 2s ve 2p'nin enerji bantları şeklinde genişlemesi (a_0 Bohr yarıçapı 0.53 \AA 'dır).

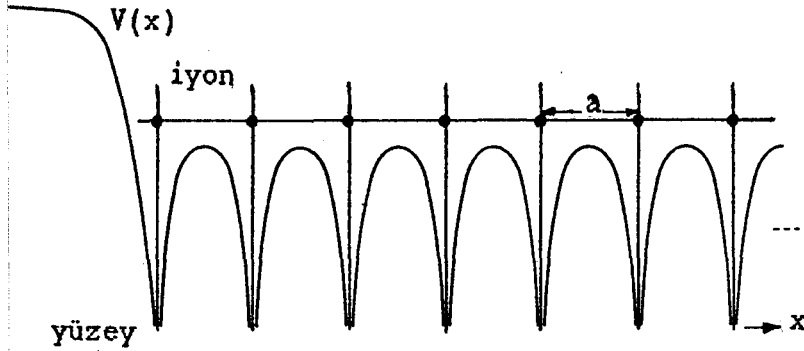
Kristal orbitalleri, yani bantlardaki elektronik durumları tanımlayan dalga fonksiyonları, atomlar etrafındaki yerleşik durumdaki atomik orbitallere benzemeyen şekilde, katıya genişletilir ve bu atomlardan üstel şekilde bozunmaya uğrayarak ortadan kalkarlar. Bu anlamda, katının dalga fonksiyonlarına yerleşik olmayan orbitaller şeklinde bakacağız. Bu orbitaller gerçekte katıda ilerleyen elektron dalgalarını tanımlarlar. Yerleşik olmama kavramı temel bir kavramdır ve katılardaki bütün elektronik taşınım fenomenleri, yani elektriksel iletimden sorumlu tutulur.

5.2. Bloch Teoremi

Sommerfeld modelinin eksikliklerini tamamlamak için Bloch, 1928 yılında ilk kez kristalin periyodik özelliğe sahip olduğunu düşünerek düzlem dalga çözümüne bir çarpan eklemiştir. Yani katıdaki iletkenlik elektronlarının dalga fonksiyonunun,

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

ile ifade edilebileceğini ortaya koymuştur. İşte bu denkleme "Bloch teoremi" denir. Şimdi Bloch dalga fonksiyonunu basitten giderek bulmaya çalışalım.



Şekil 5.3. Tamamen periyodik bir kristal örgü içinde potansiyelin şematik gösterimi. Yüzey potansiyel sınırı solda gösterilmiştir.

Kristal yapıları bir katıdaki elektronun davranışı uygun bir Schrödinger denklemi yardımıyla tanımlanır. Bu ise,

$$\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right) \Psi(x) = E \Psi(x) \right] \quad (5.1)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $V(x)$, elektron tarafından "görülen" kristal potansiyeli, $\Psi(x)$ ve E ise, sırasıyla bu elektronun hal fonksiyonu ve enerjisidir. $V(x)$ potansiyeli, diğer elektronlarla etkileşmenin yanında, katıdaki bütün atomlarla elektronun etkileşmesini de içerir. Bu noktada, $V(x)$ 'in periyodik olduğu şeklinde önemli bir gözlem yapıyoruz. Örgüdeki gibi, atomlar arası uzaklık a olmak üzere, bu potansiyel a periyodu ile değişsin. Yani $V(x) = V(x+na)$ olsun. Burada $n=0,1,2,\dots$ gibi tam sayılardır. Böylece elektron tarafından "görülen" kristal potansiyeli şematik olarak Şekil (5.3.)'de gösterilmektedir.

Elektrona etkileyen $V(x)$ kristal potansiyeli de iki parçadan oluşur: Örgüyü oluşturan iyon çekirdekleriyle elektronun etki-

leşmesi ve örgüde hareket eden diğer Bloch elektronlarıyla elektronun etkileşmesi. Böylece $V(x)$ 'i,

$$V(x)=V_i(x)+V_e(x)$$

toplamı şeklinde yazabiliriz. Burada sağdaki ilk terim iyonlarla, ikinci terim ise elektronlarla etkileşmeyi temsil ediyor.

Yukarıdaki bu açıklamaların ışığı altında Bloch teoremi, tamamen periyodik bir potansiyel için tek-elektron dalga fonksiyonlarının şekli ile ilgili matematiksel bir ifadedir. Şimdi,

$$(d^2\psi/dx^2)+f(x)\psi(x)=0 \quad (5.2)$$

şeklinde olan bir diferansiyel denklem gözönünde tutalım. Burada $f(x)$, a periyodu ile periyodik olarak verilmiş bir fonksiyondur, onun için,

$$f(x+a)=f(x) \quad (5.3)$$

ifadesini yazabiliriz. Eğer tek-boyutlu Schrödinger denklemi için $V(x)$ potansiyel fonksiyonu periyodikse, o zaman,

$$\nabla^2\psi(x,y,z)+(2m/\hbar^2)(E-V(x,y,z))\psi(x,y,z)=0$$

şeklinde olan Schrödinger denklemi, (5.2) denkleminin özel bir durumu olacaktır. (5.2) denklemi doğrusal ikinci-dereceden bir diferansiyel denklem olduğu için,

$$\psi(x)=Ag(x)+Bh(x) \quad (5.4)$$

denklemi ile verilen $g(x)$ ve $h(x)$ şeklinde iki bağımsız çözümü $(\nabla^2\psi(x,y,z)+(2m/\hbar^2)(E-V(x,y,z))\psi(x,y,z)=0$ denkleminde E enerjisinin herhangi bir verilmiş değeri için) vardır. Burada (5.4) denklemi (5.2) denkleminin en genel çözümünü gösterir. $f(x+a)=f(x)$ olduğu için, sadece $g(x)$ ve $h(x)$ değil, $g(x+a)$ ve $h(x+a)$ da (5.2) denkleminin uyar. Fakat (5.2) denkleminin herhangi bir çözümü, (5.4) denklemi şeklinde olan $g(x)$ ve $h(x)$ 'in doğrusal bir birleşimi gibi ifade edilebilmelidir. O zaman, özellikle,

$$\begin{aligned} g(x+a) &= q_1 g(x) + q_2 h(x) \\ h(x+a) &= q_3 g(x) + q_4 h(x) \end{aligned} \quad (5.5)$$

denklemini elde ederiz. Burada q_1, q_2, q_3 ve q_4 sabitlerdir. Öyleyse buradan,

$$\begin{aligned} \Psi(x+a) &= Ag(x+a) + Bh(x+a) \\ &= (q_1 A + q_3 B)g(x) + (q_2 A + q_4 B)h(x) \end{aligned} \quad (5.6)$$

denklemini yazabiliriz. Şimdi $\Psi(x+a)$, her zaman,

$$\Psi(x+a) = \delta \Psi(x) \quad (5.7)$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada δ , δ için uygun değeri seçmek şartıyla, bir sabittir. (5.6) ve (5.4) denklemlerini karşılaştırmakla, eğer (5.7) denklemine uyulmuş olunursa, o zaman,

$$\begin{aligned} (q_1 - \delta)A + q_3 B &= 0 \\ q_2 A + (q_4 - \delta)B &= 0 \end{aligned} \quad (5.8)$$

yazılabildiğini görürüz. Eğer,

$$\begin{vmatrix} q_1 - \delta & q_3 \\ q_2 & q_4 - \delta \end{vmatrix} = \delta^2 - (q_1 + q_4)\delta + (q_1 q_4 - q_2 q_3) = 0 \quad (5.9)$$

yazılırsa, ancak, A ve B için homojen denklemlerinin bu sistemi, $A=B=0$ 'dan başka çözümlere sahip olur. δ için bu ikinci dereceden denklemin çözümü, (5.7) denklemine de tam olarak uyduğu için δ 'nın iki olası değerini tayin etmeye yardım eder. O zaman, onları δ_1 ve δ_2 ile göstermekle,

$$\begin{aligned} \Psi(x+a) &= \delta_1 \Psi(x) \\ \Psi(x+a) &= \delta_2 \Psi(x) \end{aligned} \quad (5.10)$$

yazabiliriz. Eğer, şimdi,

$$\begin{aligned}\delta_1 &= e^{ik_1 a} \\ \delta_2 &= e^{ik_2 a}\end{aligned}\quad (5.11)$$

ile verildiği gibi k_1 ve k_2 tanımlarsak ve

$$\begin{aligned}u_{k_1}(x) &= e^{-ik_1 x} \psi(x) \\ u_{k_2}(x) &= e^{-ik_2 x} \psi(x)\end{aligned}\quad (5.12)$$

ile verildiği gibi $u_{k_1}(x)$ ve $u_{k_2}(x)$ tanımlarsak, o zaman, (5.12) (5.10) ve (5.11) denklemlerini kullanarak,

$$\begin{aligned}u_{k_1}(x+a) &= e^{-ik_1(x+a)} \psi(x+a) \\ &= e^{-ik_1(x+a)} \delta_1 \psi(x) \\ &= e^{-ik_1(x+a)} e^{ik_1 a} \psi(x) \\ &= e^{-ik_1 x} \psi(x) \\ &= u_{k_1}(x)\end{aligned}\quad (5.13)$$

elde edileceği açıktır. Böylece $u_{k_1}(x)$ fonksiyonu a periyodu ile periyodiktir; aynısının, benzer bir yol ile $u_{k_2}(x)$ için doğru olduğu bulunur. O zaman, (5.12) denklemine göre $\psi(x)$, daima,

$$\psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x) \quad (5.14)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $u_k(x)$, a periyotlu periyodik bir fonksiyondur ve k , yukarıda tayin edildiği gibi ya k_1 'i ya da k_2 'yi gösterir. Bu son denklem, Bloch teoremidir ve periyodik potansiyeller için tüm tek-elektron dalga fonksiyonları bu yol ile yazılabilir. Üç boyutlu Bloch teoremi için,

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (5.15)$$

geçerli olur. (5.14) ve (5.15) denklemlerindeki dalga fonksiyonları, açık olarak periyodikliği; kristal örgününki gibi olan bir fonksiyon ile ayarlı, \mathbf{k} dalgavektörü ile düzlem dalgaların şekline sahip olurlar.

Elektron \mathbf{k} vektörlü bir dalga gibi davrandığı için, $\lambda=2\pi/k$ de Broglie dalgaboyuna sahiptir ve böylece de Broglie bağıntısına göre $\mathbf{p}=\hbar\mathbf{k}$ momentumuna sahiptir. Bu vektörü, daha sonra, elektronun kristal momentumu olarak isimlendireceğiz.

Kuantum mekaniğinden bildiğimiz gibi, $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ olasılık yoğunluğudur ve fiziksel olarak ölçülebilir. Buna karşın, $\Psi(\mathbf{r})$ dalga fonksiyonunun kendisi fiziksel olarak ölçülemez. Buradan, (5.14) denklemindeki Bloch fonksiyonu, kristalin her birim hücrelerinde aynı $\Psi^*\Psi$ olasılık yoğunluğuna götüren Schrödinger denkleminin bir çözümünü yazmanın en genel yolu gibi düşünülebilir. (5.14) denkleminde, n 'inci birim hücrede, $u_{\mathbf{k}}$ 'nın periyodikliğinden dolayı,

$$\begin{aligned}\Psi(x+na) &= e^{ik(x+na)} u_{\mathbf{k}}(x+na) \\ &= e^{ik(x+na)} u_{\mathbf{k}}(x) \\ &= e^{ikna} \Psi(x)\end{aligned}\quad (5.16)$$

yazılabileceği açıktır. Aynı şekilde,

$$\Psi^*(x+na) = e^{-ikna} \Psi^*(x) \quad (5.17)$$

ve

$$\Psi^*(x+na) \Psi(x+na) = \Psi^*(x) \Psi(x) \quad (5.18)$$

yazılabileceği de açıktır. (5.15) denklemindeki 3-boyutlu dalga fonksiyonu da aynı tür davranış gösterir.

Tek boyutlu durumda sonsuz bir kristal için Schrödinger denklemine, belli bölgeler içinde E enerjili her bir değer için, kesin bir çözüm bulunabilir. Ayrıca (5.9) ve (5.11) denklemleri ile, E 'nin her bir bu gibi değerine uygun k 'nın iki değeri vardır. Bu bölgeler içinde, bu gibi bir sistem için, izinli enerji özdeğerleri süreklidir. Bununla birlikte, duruma uygun fiziksel sınır şartları yüzeylerde yerine getirildiğinde, kristal sonlu büyüklükteyse, o zaman, Schrödinger denklemine uygun çözümler ve sınır şartları, ancak, belli kesikli enerji özdeğerleri için bulunabilir. Her bir enerji özdeğerine uygun, k 'nın sadece iki

ilgili değeri bulunduğu için, k 'nın izinli değerlerinde de kesikli bir set oluşur. Buradaki durum, periyodik bir örgünün mekanik titreşimleri ile ilgili olarak karşılaşılan duruma çok benzerdir. Elbette, kristalde atomların sayısı çok büyük olduğu zaman E ile k 'nın izinli değerleri, hala kesikli olduğu halde, gerçekten hemen hemen aynı zamanda toplanırlar ve çoğu durumlarda, izinli değerlerin hemen hemen sürekli bantları gibi görülebilir. Aynı nitel davranış, üç-boyutlu kristaller için de bulunur. Bu durumda her bir enerji özdeğeri için k 'nın iki izinli değerinden daha çok olduğu hariç tutulmaktadır.

Örneğin, periyodik sınır şartları N atomlu tek-boyutlu bir kristalde verilirse (veya örgünün N atomlu kapalı bir halka şeklinde olduğu varsayılırsa) ve Ψ dalga fonksiyonu tek-değerli olursa, o zaman, ((5.16) denklemini kullanarak),

$$\Psi(x+Na) = e^{ikNa} \Psi(x) = \Psi(x) \quad (5.19)$$

ve

$$e^{ikNa} = 1$$

veya

$$e^{ika} = (1)^{1/N} = e^{2\pi in/N} \quad (n=0,1,2,\dots,N-1) \quad (5.20)$$

sahip olmalıyız. (5.20) denkleminin her iki tarafının logaritmasını alırsak ve k için çözersek, bu sınır şartları altında k 'ya uygun olası değerlerin,

$$k_n = 2\pi n / (Na) \quad (n=0,1,2,\dots,N) \quad (5.21)$$

ile verildiğini buluruz. Eğer N büyükse, (5.21) denklemi ile verildiği gibi k 'nın pek çok izinli değerleri olacaktır ve bu durumda k 'nın bu izinli değerleri, değerlerin hemen hemen sürekli bir bölgesini oluşturuyor gibi görülebilir. Elbette (5.21) denklemi ile izin verilmiş k 'nın N farklı değeri, enerjinin aynı değerine tekabül etmez. E 'nin her bir sabit değeri için, (5.11) denklemi ile verilen k 'nın sadece iki izinli değeri vardır.

Sonuç olarak Bloch dalga fonksiyonu ideal bir örgü için "tek-elektron" dalga fonksiyonudur. Buna göre, bu teorideki kabulleri şöyle sıralayabiliriz:

- (1) Örgü periyodu ideal ise elektronlar saçılmaya uğramaz.
- (2) Fononlar, diğer elektronlar ve örgü kusurlarının sebep olduğu saçılmalar perturbasyon olarak hesaba katılır.
- (3) "Çoklu elektron" problemi diğer bütün elektronların ortalama potansiyeli kullanılarak "tek-elektron" problemine indirgenmiştir.
- (4) Elektronlar arasındaki Coulomb etkileşmesi ihmal edilmiştir.

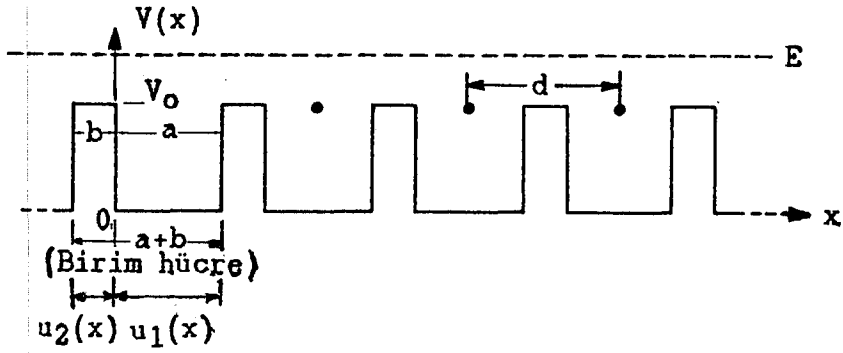
Bloch modeline bazan "kristal yörünge metodu" da denilmektedir. Bunun karşıtı olan modele de "Sıkı Bağlanma Modeli" denir. Bu modelde her bir elektronun belirli bir atom civarında yer aldığı kabul edilir. Bu modeli, sonraki bölümlerde daha ayrıntılı olarak ele alacağız.

5.3.Sonsuz Tek-Boyutlu Bir Kristalin Kronig-Penney Modeli

Şekil (5.4.)'de gösterilen sonsuz periyodik tek-boyutlu tam-kare potansiyel durumu için, Schrödinger denkleminin tam bir çözümüne ulaşmak olasıdır. Bu çözüm ilk defa olarak Kronig ile Penney tarafından araştırılmıştır. Gerçek atomik potansiyelin şekli tam olarak bilinmediğinden hesaplamaları kolaylaştırmak ve denel bulgulara uyum sağlayacak sonuçlara ulaşmak amacıyla Kronig-Penney, az çok idealleştirilmiş periyodik bir potansiyel için Şekil (5.4.)'de gösterilen modeli ele almışlardır. Bu model gerçeğe tam olarak uymamakla birlikte katılarda bant kavramının analitik olarak gösterilmesi yönünden iyi bir modeldir. Ayrıca, bu çözüm, periyodik örgülerde elektronların kuantum davranışının önemli karakteristik özelliklerinin çoğunu açıklamaya yardım ettiği için de çok faydalıdır. Bu model ile birleştirilmiş dalga fonksiyonları, Şekil (5.4.) ile verildiği gibi $V(x)$ periyodik potansiyelinde tek bir elektrona uygun olarak,

$$(d^2\psi/dx^2) + (2m/\hbar^2)(E-V(x))\psi(x) = 0 \quad (5.22)$$

şeklinde olan Schrödinger denklemini çözmekle tek-elektron yaklaşımı için hesaplanabilir. Önceki bölümden ötürü, dalga fonk-



Şekil 5.4. Periyodik örgülerde elektronların kuantum davranışının genel karakteristiklerini açıklamak için Kronig ve Penney tarafından kullanılmış ideal periyodik tam kare potansiyel.

siyonları Bloch şekline sahip olduğu için,

$$\Psi(x) = e^{ikx} u(x) \quad (5.23)$$

yazılabildiğini bekleyebiliriz. (5.22) denklemine (5.23) denklemini koymakla, $u(x)$ fonksiyonunun,

$$\left(\frac{d^2 u}{dx^2} + 2ik \frac{du}{dx} - (k^2 - k_1^2 + \frac{2mV(x)}{\hbar^2}) \right) u(x) = 0 \quad (5.24)$$

$$k_1 = (2mE/\hbar^2)^{1/2} \quad (5.25)$$

(5.24) denklemindeki gibi yerine getirildiği bulunur. Burada, elektronun potansiyel çukurundaki momentumu, $p_1 = \hbar k_1 = (2mE)^{1/2}$ ve $k_1 = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$ dir. O zaman, Şekil (5.4.)'deki potansiyel için,

$$\left(\frac{d^2 u_1}{dx^2} + 2ik \frac{du_1}{dx} - (k^2 - k_1^2) \right) u_1(x) = 0 \quad (5.26)$$

ve

$$\left(\frac{d^2 u_2}{dx^2} + 2ik \frac{du_2}{dx} - (k^2 - k_2^2) \right) u_2(x) = 0 \quad (5.27)$$

(5.26) ve (5.27) denklemleri yazılabilir. Burada, potansiyel çukurundaki çözüm olan $u_1(x)$, $(0 < x < a)$ aralığında ve potansiyel

engelindeki çözüm olan $u_2(x)$ ise, $(-b < x < 0)$ aralığında $u(x)$ 'in değerlerini gösterirler. Ayrıca k_2 ,

$$k_2 = (2m(E - V_0)/\hbar^2)^{1/2} \quad (5.28)$$

ile verilir ve elektronun potansiyel engelindeki momentumu ise, $p_2 = \hbar k_2 = (2m(E - V_0))^{1/2}$ 'dir. (5.26) ve (5.27) diferansiyel denklemleri,

$$u_1(x) = Ae^{i(k_1 - k)x} + Be^{-i(k_1 + k)x} \quad (0 < x < a) \quad (5.29)$$

$$u_2(x) = Ce^{i(k_2 - k)x} + De^{-i(k_2 + k)x} \quad (-b < x < 0) \quad (5.30)$$

şeklinde standart yöntemler ile kolayca çözülür. Burada A, B, C ve D keyfi sabitlerdir. Ayrıca, k_2 niceliğinin $0 < E < V_0$ için tamamen sanal bir nicelik olduğunu not edebiliriz.

(5.23) denkleminde e^{ikx} iyi davranışlı bir fonksiyon olduğu için, $x = a$ ve $x = -b$ 'de Ψ dalga fonksiyonu ve onun türevine uygun sürekliliğin gerekli şartı, $u(x)$ fonksiyonlarının da bu aynı şartları yerine getirmelerini ister. Bu sınır şartlarını uygulamakla (ve $u(x)$ örgünün periyodikliğine sahip olduğu için, $u_1(a) = u_2(-b)$ olduğunu anımsamakla), (5.31) denklemlerini buluruz.

$$\begin{aligned} A + B &= C + D \\ i(k_1 - k)A - i(k_1 + k)B &= i(k_2 - k)C - i(k_2 + k)D \\ Ae^{i(k_1 - k)a} + Be^{-i(k_1 + k)a} &= Ce^{-i(k_2 - k)b} + De^{i(k_2 + k)b} \\ i(k_1 - k)Ae^{i(k_1 - k)a} - i(k_1 + k)Be^{-i(k_1 + k)a} &= \\ &= i(k_2 - k)Ce^{-i(k_2 - k)b} - i(k_2 + k)De^{i(k_2 + k)b} \end{aligned} \quad (5.31)$$

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ k_1 - k & -(k_1 + k) & k_2 - k & -(k_2 + k) \\ e^{i(k_1 - k)a} & e^{-i(k_1 + k)a} & e^{-i(k_2 - k)b} & e^{i(k_2 + k)b} \\ (k_1 - k)e^{i(k_1 - k)a} & -(k_1 + k)e^{-i(k_1 + k)a} & (k_2 - k)e^{-i(k_2 - k)b} & -(k_2 + k)e^{i(k_2 + k)b} \end{vmatrix} = 0$$

$$(5.32)$$

Böylece A,B,C ve D sabitleri, bu niceliklerden oluşmuş dört eş-zamanlı lineer homojen denklemler grubunun çözümü gibi tayin edilebilir. Katsayılar determinantı sıfır olmadıkça, elbette, A=B=C=D=0'dan başka çözüm yoktur. Katsayılar determinantının (5.32) denklemi gibi olması gerekir. Determinantı açma, tamamen çok sıkıcı olmasına rağmen, gösterilebilir. Fakat (5.32) denkleminin açık-basit cebiri,

$$-\frac{(k_1^2+k_2^2)}{(2k_1k_2)}\sin k_1a.\sin k_2b + \cos k_1a.\cos k_2b = \cos k(a+b) \quad (5.33)$$

gibi ifade edilebilir. (5.28) denklemi ile tanımlandığı gibi k_2 , ($0 < E < V_0$) aralığında sanal olduğu için, enerjinin bu değerlerinde (5.33) denklemini biraz farklı bir şekilde ifade etmek en uygundur. Bu bölgede,

$$k_2 = ik_3 \quad (5.34)$$

ifadesini ele alarak ve $\cos ix = \cosh x$ ile $\sin ix = i \sinh x$ olduğunu not ederek, (5.33) denklemi,

$$\frac{(k_3^2 - k_1^2)}{(2k_1k_3)}\sinh k_3b \sin k_1a + \cosh k_3b \cos k_1a = \cos k(a+b) \quad (5.35)$$

gibi yazılabilir. Burada k_3 , ancak k_2 ($V_0 < E < \infty$) aralığında olduğu sırada, ($0 < E < V_0$) aralığında gerçek pozitif bir niceliktir. Böylece en uygun olarak, ($V_0 < E < \infty$) olduğu zaman (5.33) denklemini ve ($0 < E < V_0$) olduğu zaman (5.35) denklemini kullanabiliriz.

(5.23) denklemindeki dalga fonksiyonları, x ; $\pm\infty$ 'a yaklaştığı sırada, bütün dalga fonksiyonları gibi, iyi-davranışlı fonksiyonlar olmalıdır. $u(x)$, değerleri her birim hücrede aynı olan periyodik bir fonksiyon olduğu için, (5.23) denklemindeki e^{ikx} faktörü de bu koşullar altında iyi-davranışlı olmak şartıyla, güçlükler $u(x)$ 'in açıklamasından kaynaklanmaz. Fakat ancak k gerçekse, e^{ikx} , hem $+\infty$ hem de $-\infty$ 'da iyi-davranışlıdır, ki bununla e^{ikx} salınımlı olur. Eğer k sanalsa, e^{ikx} , ya $+\infty$ 'da ya da $-\infty$ 'da sonsuza ayrılır ve $\Psi(x)$ için son ifade bir dalga fonksiyo-

nu gibi uygun biçimde davranmaz. Bu nedenle k için gerçek değerler ile ancak (5.23) denklemi şeklinde olan fonksiyonları almamızdır. Yukarıdaki (5.33) ve (5.35) ifadeleri, sağ tarafta $\cos k(a+b)$ ve sol tarafta ise $K_1 \sin k_1 a + K_2 \cos k_1 a$ şeklinde olan bir fonksiyona sahip olurlar. Eğer enerjinin verilen bir değeri için bu denklemlerin sol tarafındaki fonksiyon $+1$ ve -1 arasındaki mesafede bir değere sahip olursa, o zaman $\cos k(a+b)$ için gerekli değer, $k(a+b)$ ifadesi için gerçek bir değer ile elde edilir. Diğer taraftan, eğer (5.33) denkleminin veya (5.35) denkleminin sol tarafındaki fonksiyonun değeri bu aralığın dışına düşerse, bu durum, $\cos k(a+b)$ 'nin $+1$ 'den daha büyük ya da -1 'den daha küçük olarak elde edildiğini ifade eder, ki burada $k(a+b)$ ifadesi sıfırdan başka sanal bir kısım ile kompleks bir sayı olması gerekir. Bu koşullar altında (5.23) denklemindeki çözümler sonsuzda gereği gibi davranmazlar ve sistemin dalga fonksiyonlarına uygun fiziksel koşula uymazlar. k 'nin bu gibi değerleri ile birleşmiş enerjiler elektrona tamamen yasaklanmış olur.

(5.33) ve (5.35) denklemlerinin sol taraflarını $K_3 \sin(k_1 a - \zeta)$ şeklinde yazmak olasıdır, burada $K_3 = (K_1^2 + K_2^2)^{1/2}$ ve $\tan \zeta = K_1/K_2$ 'dir. Bu yolla, (5.33) ve (5.35) denklemleri,

$$\{1 + [((k_1^2 - k_2^2)^2 / (4k_1^2 k_2^2)) \sin^2 k_2 b]\}^{1/2} \cos(k_1 a - \zeta) = \cos k(a+b) \quad (5.36)$$

$$\tan \zeta = -[(k_1^2 + k_2^2) / (2k_1 k_2)] \tan k_2 b \quad (V_0 < E < \infty)$$

ve

$$\{1 + [((k_1^2 + k_3^2)^2 / (4k_1^2 k_3^2)) \sinh^2 k_3 b]\}^{1/2} \cos(k_1 a - \zeta) = \cos k(a+b) \quad (5.37)$$

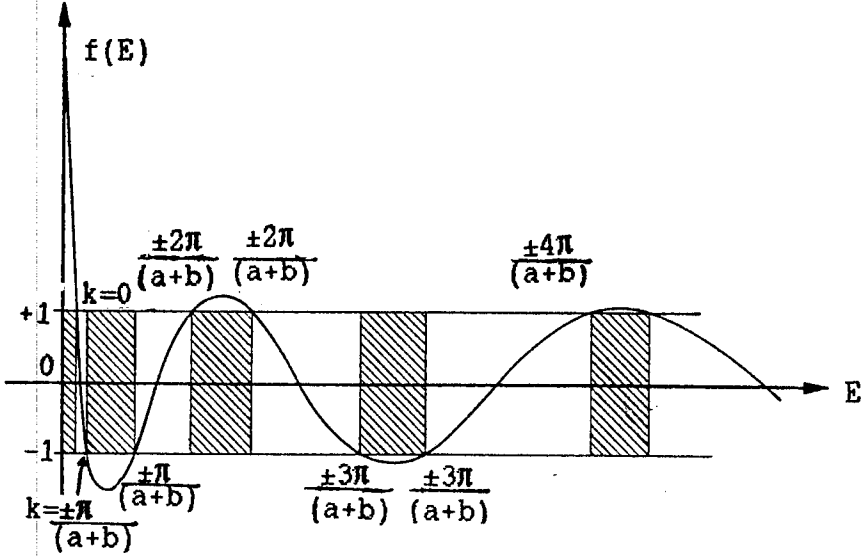
$$\tan \zeta = +[(k_1^2 + k_3^2) / (2k_1 k_3)] \tanh k_3 b \quad (0 < E < V_0)$$

gibi yazılabilir. Bu ifadelerden, her iki durumda sol tarafın, genliği her zaman birden daha büyük olan bir kosinüs fonksiyon zamanlarını modüle eden bir çarpan şekline sahip olduğu açıktır.

Bu modüle eden çarpanın değeri $k_1=0$ için gerçekten bir maksimum olur (burada $E=0$ için) ve büyük enerjilerin sınırında bire yaklaşır, burada $k_1 \approx k_2$ 'dir.

(5.36) ve (5.37) denklemleri arasındaki ilişkinin,

$$k_1^2 - k_2^2 = k_1^2 + k_3^2 = 2mV_0/\hbar^2 = \text{sabit} \quad (5.38)$$



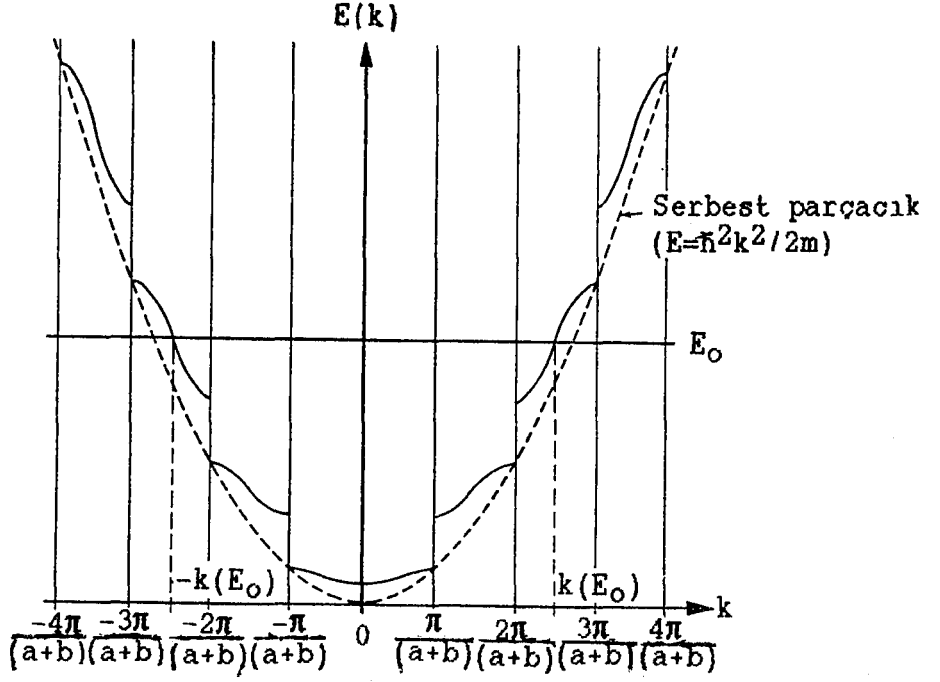
Şekil 5.5. (5.36) ve (5.37) denklemlerinin sol taraflarındaki fonksiyonlara karşı enerjinin bir grafiği. Taralı bölgeler, k 'nın değerinin kompleks olduğu yasak enerji bantlarını, taralı olmayan bölgeler, k 'nın gerçek değerlerine uygun izinli enerji bantlarını göstermektedirler.

gibi olduğu (5.25) ve (5.28) denklemlerinden görülebilir. (5.36) ve (5.37) denklemlerinin sol tarafları enerjinin bir fonksiyonu olarak çizildiği zaman, sonuçlar, Şekil (5.5.)'de açıklandığı gibidir. Bu şekilde (5.36) veya (5.37) denkleminin sol tarafı enerjinin bir fonksiyonu olarak çizilmiştir. Eğrinin ordinatı +1 ile -1 arasına düştüğü zaman, eğride, fiziksel olarak olası dalga fonksiyonlarına uygun k için gerçek bir değer bulunur. Bununla birlikte, bu sınırların dışında k , sıfır olmayan sanal bir kısım ile kompleks olmalıdır. k 'ya uygun bu gibi değerler hiçbir zaman fiziksel olarak iyi-davranışlı dalga fonk-

siyonlarına götüremezler. Bu nedenle, enerjinin uygun gelen aralıkları yasaklanmıştır ve bunlar taralı bölgeler olarak Şekil (5.5.)'de gösterilmiştir. Böylece izinli enerji özdeğerlerinden oluşmuş değişen bölgeler ve yasaklanmış bölgeler vardır. Bu bölgeler, genellikle, izinli ve yasak enerji bantları olarak da bilinir ve bu bantlarda izinli enerji değerlerinin gruplaması, en önemli olan bir gruplamadır ve periyodik örgülerde elektronların davranışının karakteristik özelliklerini verir. Şekil (5.5.)'de gösterilmiş bantlar gibi aynı nitel görünüşe sahip olan enerji bantlarının oluşumunda, potansiyel periyodik olmak şartıyla, potansiyelin ayrıntılı şeklinin önemi yoktur.

(5.36), (5.37), (5.25) ve (5.28) denklemlerini kullanarak, k 'nın bir fonksiyonu olarak E enerjisini gösteren bir eğri çizmek olasıdır. Sonuç, şematik olarak, Şekil (5.6.)'da verilmiştir. Yasak enerji bantları ve birkaç izinli bant içinde E 'ye karşı k ilişkisi, Şekil (5.5.)'de gösterilmiş şema ile uyum içinde verilmiştir. $\cos^{-1} k(a+b)$ tek değerli bir fonksiyon olmadığı için bu ayırma zorunlu olarak biraz keyfidir. Şekil (5.6.)'da, büyük enerjiler için $E(k)$ fonksiyonunun izinli bantlar içinde oldukça yakından $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ olan serbest-elektron bağıntısına yaklaştığı açıktır. Yani, Şekil (5.6.)'daki grafikte kesikli çizgi ile gösterilen eğri serbest elektronun enerji grafiğidir. Üstelik, şekilden, büyük enerjiler için izinli bantların çok geniş ve yasak bölgelerin oldukça dar olduğu anlaşılır. Ayrıca, Kronig-Penney modelinin verdiği enerji eğrisi serbest elektron enerji grafiği ile karşılaştırıldığında, bant merkezine yakın olan bölgelerde $E(k)$ eğrisinin serbest elektron eğrisine yakın olduğu, uçlarda ise farklı davranış gösterdiği görülür. Bununla birlikte, izinli bantların sınırlarında, yani, n bir tam sayı olmak üzere $k = \pm n\pi / (a+b)$ 'de eğrilerin eğimi zıt işaretli olmakta ve sıfıra yaklaşmaktadır. Bu sonuç, (5.36) ve (5.37) denklemlerinin doğrudan doğruya türevlerinin alınması ile ispat edilebilir. İşte $E(k)$ eğrisinin bu özelliği oldukça geneldir ve potansiyel fonksiyonunun tam matematiksel şeklinden bağımsız üç boyutlu durumda aynısı meydana getirilerek gösterilebilir. Diğer yandan Bragg yansıma şartı gözönüne alınırsa görülür ki; Brillouin sınırına karşılık gelen $\pm\pi / (a+b)$ değerleri için Bragg

yansıma şartı sağlanır. O halde Brillouin sınırına gelen bir dalga, Bragg yansımasına uğrar. Bu ise yasak bölgelerin varlığını doğrular.



Şekil 5.6. (5.36) ve (5.37) denklemlerine göre k 'nın bir fonksiyonu olarak çizilmiş E enerjisi.

Şekil (5.6.)'dan görüldüğü gibi bant sınırları $k = \pm n\pi/(a+b)$ değerlerine karşılık gelmekteydi. k 'nın $-\pi/(a+b)$ ile $+\pi/(a+b)$ değerleri arasında kalan bölgeye 1. Brillouin bölgesi (BB) denir. Bundan sonra gelen bölgelere de sırasıyla 2., 3., ... Brillouin bölgeleri denir. 1.B.B'deki k değerine $2\pi/(a+b)$ değeri eklenirse tüm enerjiler 1.B.B'sinde incelenebilir. Bu yolla elde edilen bant yapısına "indirgenmiş" bant denir. Bu durum daha sonraki bölümlerde ayrıntılı olarak incelenecektir.

k dalgavektörünün $-\pi/(a+b)$ ile $+\pi/(a+b)$ değerleri arasında değiştiğini farzedelim. Aynı cins lineer bir bölgede k 'nın,

$$k = 2\pi n/L = 2\pi n/(N(a+b))$$

değerlerini de alabileceğini daha önce görmüştük. Buna göre N atom sayısı olmak üzere,

$$k_{\text{mak.}} = \pi / (a+b) = 2\pi n_{\text{mak.}} / L \quad (n=0, 1, 2, 3, \dots)$$

$$n_{\text{mak.}} = L / (2(a+b)) = N/2$$

$$k_{\text{mak.}} = -\pi / (a+b) \text{ için ise } n_{\text{mak.}} = -N/2$$

bulunur. O halde k 'nın $-\pi/(a+b)$ ile $+\pi/(a+b)$ arasında alabileceği değerlerin toplam sayısı (elektronik hal sayısı), elektron spininin $\pm 1/2$ olduğu da dikkate alındığında $2N$ tane olacaktır. Eğer her atom kristale 1 tane elektron veriyorsa bant yarı dolu, 2 elektron veriyorsa tam dolu olacaktır. Buna göre atom başına 1 iletkenlik elektronu ihtiva eden katılar metal özelliği, 2 elektron ihtiva eden katılar ise yalıtkan özelliği göstermelidir. Ancak bazı katıların 2 elektron/atom ihtiva etmesine rağmen metalik özellik gösterdikleri gözlenmiştir. Bu oluşum ancak enerji bantlarının çakışması (overlapp) olayı ile açıklanabilir.

5.4. Bloch Elektronunun Hızı

Şimdi, katılardaki Bloch elektronunun hareketini inceleyelim. Ψ_k halindeki elektron kristalde, bu halin enerjisine doğrudan bağlı olan hızla hareket eder. İlk önce serbest parçacık halini ele alalım. p momentum olmak üzere, hız $v=p/m_0$ şeklinde verilir. $p=\hbar k$ olduğundan, serbest elektron için hız,

$$v = \hbar k / m_0 \quad (5.39)$$

şeklinde verilir, yani hız, Şekil (5.7.a.)'daki gibi, k dalga-vektörüne paralel ve orantılıdır.

Bir Bloch elektronu için, hız, k 'nın bir fonksiyonudur, fakat fonksiyonel ilişki (5.39) denklemindeki gibi basit değildir. Bu bağıntıyı türetmek için, dalga yayılmasına ait iyi bilinen formülleri kullanacağız. Yani, bir dalga paketinin grup hızı,

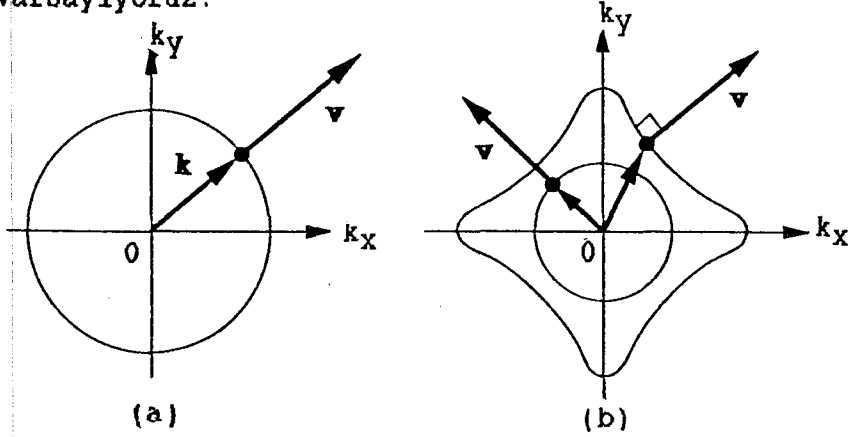
$$v = \nabla_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k}) \quad (5.40)$$

şeklindedir. Burada ω , dalga paketinin frekansı, k ise dalga-

vektörüdür. Bu denklemi kristaldeki elektron dalgasına uygulayarak ve $\omega=E/\hbar$ Einstein bağıntısını dikkate alarak, Bloch elektronunun hızını,

$$\mathbf{v}=(1/\hbar) \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) \quad (5.41)$$

şeklinde yazabiliriz. Yukarıdaki eşitlik, \mathbf{k} halindeki bir elektronun hızının, \mathbf{k} uzayındaki enerji gradyenti ile orantılı olduğunu göstermektedir. Burada valans bandıyla ilgilendiğimizi ve bu nedenle bant indisinin sınırlandığını ((5.41) denkleminin herhangi bir bantta geçerli olduğu türetiminden aşıkâr olmasına rağmen) varsayıyoruz.



Şekil 5.7. (a) Bir serbest elektronun, (b) Bloch elektronunun hızı.

Vektör analizinden iyi bilindiği gibi gradyent vektörünün kapalı eğriye dik olmasından ötürü, Şekil (5.7.b.)'de gösterildiği gibi, \mathbf{k} uzayındaki her bir noktada \mathbf{v} hızı, bu noktadan geçen enerji kapalı eğrisine diktir. Bu kapalı eğrilerin genelde küresel olmamalarından dolayı, serbest parçacık haline benzemeyen şekilde, hızın \mathbf{k} dalgavektörüne paralel olması gerekmediği sonucuna varırız.

Bununla birlikte, $E=\hbar^2 k^2/2m^*$ standart dispersiyon bağıntısının gerçekleşmesinin beklendiği, bölgenin merkezinin yakınında, (5.41) denklemi,

$$\mathbf{v}=\hbar\mathbf{k}/m^* \quad (5.42)$$

sonucunu verecektir. Bu denklem, m^* etkin kütle yerine m_0 yerleştirilmesinin dışında serbest parçacık ile ilgili (5.39) denklemiyle aynı formdadır. Kütledeki farkın dışında Bloch elektronunun birçok açıdan serbest elektron gibi davrandığını çoğu kez ifade etmemizden ötürü bu sonuç tabiki beklenmektedir. Şekil (5.7.b.)'de gösterildiği gibi, bölge merkezi yakınında v 'nin k 'ya paralel olduğu ve yarıçapsal şekilde dışa yöneldiği sonucuna ulaşılır. v ile k arasındaki bu basit bağıntının geçersiz olacağı ve (5.41) denklemindeki daha genel sonuca başvurulması gerekeceğinden bölge sınırları enerji kapalı eğrilerinin bozunmasıyla elde edilir.

Bunun yanında, bir elektron Ψ_k belirli halindeyken, yalnızca örgünün periyodik kalması koşuluyla, durumunu muhafaza edecektir. Böylece, bu halde kalmakta ısrar edildiği sürece, elektron, örgüden herhangi bir saçılmayla engellenmeksizin, kristalde aynı v hızıyla hareketine devam edecektir. Diğer bir deyişle, elektronun hızı sabittir. Örgünün yayılma hızı üzerine uygulayabileceği etki, $E(k)$ enerjisi vasıtasıyla (5.41) denkleminde içerilmektedir.

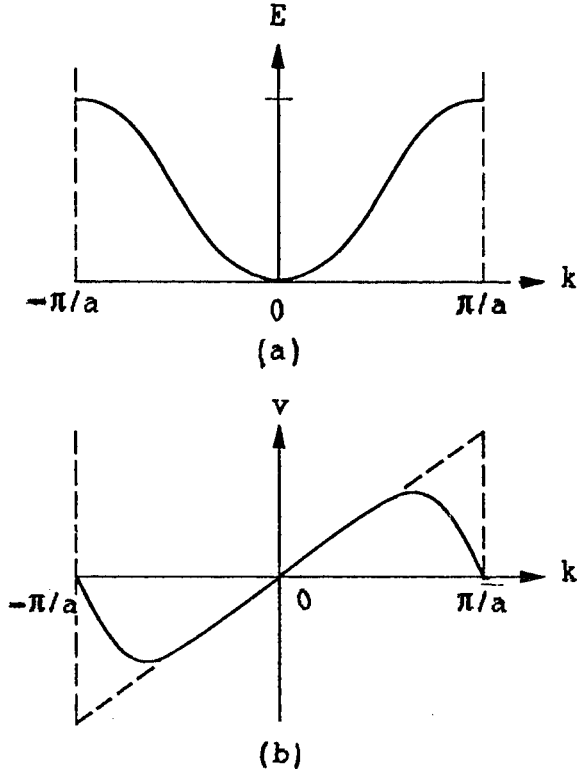
Örgünün periyodikliğinden sapmalar, tabiki, elektron saçılmasına ve de hızında değişmeye neden olur. Örneğin, titreşen bir örgüde hareket eden elektron, hız üzerine şiddetli bir etki uygulayacak şekilde, fononlarla çok sayıda çarpışma gerçekleştirilir. Bunun yanında, elektrik ya da magnetik dış alanlar, elektron hızında değişmeye yol açarlar. Bu etkileri daha sonra ele alacağız.

Şekil (5.8.a.) tipik bir tek boyutlu bant yapısını gösteriyor. Şekil (5.8.b.) ise bu durumda,

$$v = (1/\hbar) \partial E / \partial k \quad (5.43)$$

değerindeki hızı gösteriyor. Yani hız, enerji eğrisinin eğimiyle orantılıdır. k orijinden bölge kenarına değişirken hızın önce lineer şekilde arttığı, maksimuma ulaştıktan sonra, bölge kenarında sıfıra düştüğünü görüyoruz. Şimdi, yaklaşık serbest

elektron modeline dayanan bu davranışı ve özellikle bölge kenarı yakınındaki hızın görünürdeki normal dışı azalmalarını açıklayalım.



Şekil 5.8. Tek boyutlu bir örgüde (a) bant yapısı ve (b) karşılık gelen elektron hızı. (b)'deki kesikli eğri serbest elektron hızını temsil ediyor.

Bölge merkezi yakınında, elektron tek bir düzlem dalga $\Psi_k \sim e^{ikx}$ ile yeterince temsil edilebilir ve böylece (Şekil 5.8.b.)'deki lineer bölgeyi açıklar şekilde $v = \hbar k / m_0$ 'dır. Bununla birlikte, k artarken serbest dalganın örgü tarafından saçılması $k' = k - 2\pi/a$ dalgavektörlü sola ilerleyen ve sağa ilerleyen k dalgasıyla üstüste binen yeni bir dalgayı tanımlar. Böylece, elektron,

$$\Psi_k = e^{ikx} + f e^{-i[(2\pi/a) - k]x} \quad (5.44)$$

şeklinde olan bir dalga karışımıyla temsil edilir. Buradaki f katsayısı perturbasyon teorisinden yararlanarak bulunur. Kuan-

tum mekaniğine göre, bu dalğanın hızı,

$$v = (\hbar k / m_0) - |f|^2 (\hbar / m_0) ((2\pi/a) - k) \quad (5.45)$$

şeklinde verilir. Sağdaki ilk terim sağa doğru ilerleyen dalğanın, ikinci terim ise sola doğru ilerleyen dalğanın katkısıdır. Küçük k 'lar için f katsayısı küçüktür ve yukarıda belirtildiği gibi v , $\hbar k / m_0$ şeklinde verilir. Bununla birlikte, k artarken saçılan dalğanın katsayısı artar. Böylece (5.45) denklemindeki ikinci terim dikkate değer duruma gelir. İkinci terim negatif olduğundan ($k < 2\pi/a$) birinci terimi yok etmek eğilimindedir. Bölge sınırlarının yakınlarında, f katsayısı o kadar büyüktür ki; ortaya çıkan azalma, görüldüğü gibi, hızdaki net azalmayı oluşturacak şekilde, ilk terimdeki artıştan büyüktür.

Bölge sınırının kendisinde ($k = \pi/a$) saçılan dalga kuvvetli Bragg yansımalarının sonucu olarak gelen dalgaya eşit olacaktır, yani, (5.45) denkleminde yerleştirildiğinde, Şekil (5.8.b.) ile uyumlu olarak, $v = 0$ sonucunu verecek şekilde $f = 1$ 'dir. Böylece bölge kenarında elektron duran bir dalgayla temsil edilir.

Böylece yaklaşık serbest elektron modeline göre, v ve k arasında bölge sınırları yakınındaki bağıntının, serbest bir parçacık için elde edilenden çok farklı olduğu açıktır.

Şimdi tamamen dolu bir bandın elektrik akımı taşımadığını türetilim. Bunu oluşturmak için, (5.41) denklemine göre, $v(\mathbf{k})$ ve $v(-\mathbf{k})$ sırasıyla \mathbf{k} ve $-\mathbf{k}$ Bloch hallerindeki elektron hızları olmak üzere,

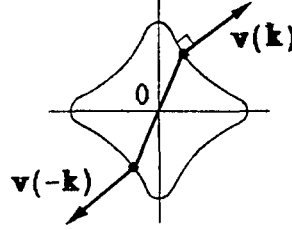
$$v(-\mathbf{k}) = -v(\mathbf{k}) \quad (5.46)$$

olduğunu belirtelim (Şekil (5.9.)). Bu denklem $E(-\mathbf{k}) = E(\mathbf{k})$ olduğu simetri bağıntısından çıkar. Banttaki tüm elektronlardan ileri gelen akım yoğunluğu,

$$\mathbf{J} = (1/V_H) (-e) \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v}(\mathbf{k}) \quad (5.47)$$

ile verilir. Burada V_H hacim, $-e$ elektron yükü olup, toplam ise

banttaki bütün halleri kapsayacak şekildedir. Fakat (5.46) denkleminin sonucu olarak bütün bant üzerinden toplamın sıfıra gittiği, yani $J=0$ olduğu görülüyor. Bu da elektronların hızlarınının ikiye ikiye birbirlerini yok ettiklerini ifade eder.



Şekil 5.9. $v(-k)=-v(k)$

5.5. Elektrik Alanda Elektron Dinamiği

Elektrik alan bir katıya uygulandığında, katıdaki elektronlar hızlanır. Elektronların hareketlerini \mathbf{k} uzayında çok kolay bir şekilde inceleyebiliriz. Bunun için \mathcal{E} elektrik alanının verilen bir kristale uygulandığını varsayalım. Sonuç olarak kristaldeki elektrona $\mathbf{F}=-e\mathcal{E}$ kuvveti uygulanır. Böylece elektronun enerjisi değişir. Elektron tarafından enerji absorblama hızı,

$$dE(\mathbf{k})/dt=-e \mathcal{E} \mathbf{v} \quad (5.48)$$

dir. Burada sağdaki terim hareketli nesne tarafından soğurulan güce ait ifadedir. $dE(\mathbf{k})/dt= \mathbf{V}_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) \cdot (d\mathbf{k}/dt)$ yazarsak, \mathbf{v} yerine (5.41) denklemini koyarsak ve daha sonra bunları (5.48) denkleminine yerleştirirsek, şaşırtıcı şekilde,

$$\hbar(d\mathbf{k}/dt)=-e \mathcal{E} =\mathbf{F} \quad (5.49)$$

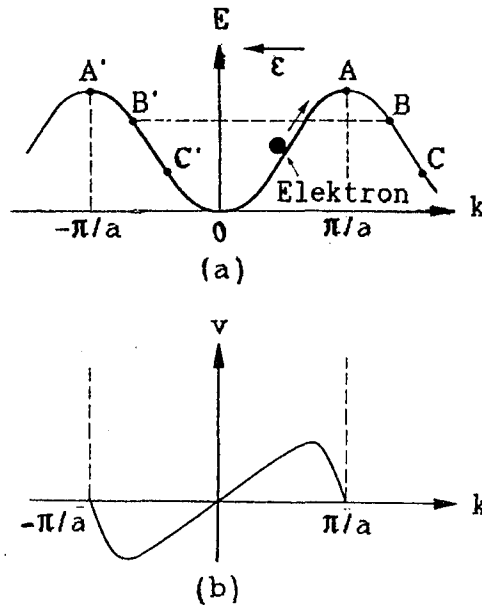
gibi basit bir bağıntı buluruz. Bu ifade göstermektedir ki, \mathbf{k}' 'nin değişme hızı \mathbf{F} elektriksel kuvvetiyle orantılıdır ve aynı doğrultudadır. Yani \mathcal{E} elektrik alanı ile ters yönlüdür (negatif yüklü elektronlardan dolayı). Bu bağıntı Bloch elektronlarının dinamiğinde oldukça önemlidir ve ivme teoremi olarak bilinir. $\hbar\mathbf{k}$ vektörünün Bloch elektronunun momentumuna benzer şekilde dav-

randığını belirtelim. Böylece (5.49) denklemi, Newton'un ikinci yasası olan, momentumun zamanla değişme hızının kuvvete eşit olduğunu verir.

Şimdi, tek boyutlu halle başlayarak ivme teoreminin sonuçlarını ele alalım. k dalgavektörünün zamanla düzgün olarak arttığını gösterecek şekilde (5.49) denklemi,

$$dk/dt = F/\hbar \quad (5.50)$$

gibi yazılabilir. Böylece, t artarken, Şekil (5.10.)'da gösterildiği gibi, elektron, k uzayında düzgün bir hızda enine salınarak ilerleyecektir. Tekrarlanan bölge şemasını kullanırsak, $k=0$ 'dan başlayarak, elektron örneğin bandın yukarısına, tepeye (A noktasına) ulaşınca kadar hareket edecek ve sonra BC eğrisi boyunca aşağıya inmeye başlayacaktır. İndirgenmiş bölge şemasını kullanırsak, elektron A 'da bölge kenarını geçtiğinde, hemen A' eşdeğer noktasında yeniden ortaya çıkacak ve sonra A'B'C' eğrisi boyunca inmeye devam edecektir. Öteleme simetrisi özelliğine göre iki şemadan birini kullanabileceğimizi ve B' ile C' noktalarının sırasıyla B ve C noktalarına eşdeğer olduğunu hatırlayalım.



Şekil 5.10. (a) Sola doğru elektrik alan varken k uzayında elektronun hareketi ve (b) karşılık gelen hız.

Elektrik alan varken elektronun k uzayında sabit bir hareket yaptığını ve asla durgun olmadığını belirtelim.

Bölge geçildikten sonra elektron hareketini tekrarladığından k uzayındaki hareketin indirgenmiş bölge şemasında periyodik olduğunu belirtelim. Hareketin periyodu (5.50) denkleminde,

$$T_p = 2\pi\hbar / Fa = 2\pi\hbar / e\hbar a \quad (5.51)$$

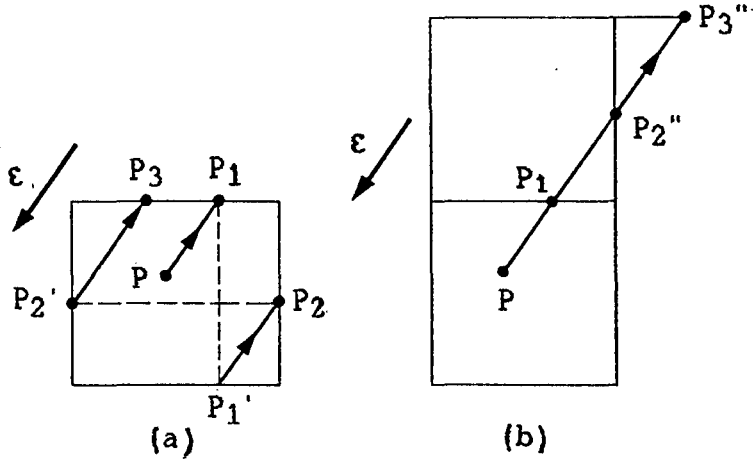
olarak bulunur. Şekil (5.10.b.), elektron k ekseninde ilerlerken hızını gösteriyor. Zaman ilerlerken $k=0$ 'dan hız artarak bir maksimuma ulaşır ve sonra bölge kenarında sifıra düşer. Sonra elektron aşağı doğru hareket ederek negatif hıza sahip olur ve bu böylece devam eder. Tartışmakta olduğumuz hız gerçel uzaydaki hız, yani bilinen fiziksel hızdır. Statik elektrik alan varken bir Bloch elektronu gerçel uzayda serbest elektrona hiç benzemeyen şekilde periyodik salınım hareketi yapar. Bu durum, kristaldeki elektron dinamiğinin şaşırtıcı sonuçlarından biridir.

Biraz önce yukarıda tanımladığımız salınım hareketi gözlenmemiştir ve nedenini anlamak zor değildir. (5.51) denklemindeki T_p periyodu, bilinen parametrelerin değerleriyle yaklaşık 10^{-5} s'dir. Oda sıcaklığında tipik bir elektronun çarpışma süresi $\tau=10^{-14}$ s ile karşılaştırılabilir. Böylece elektron bir devir süresince, yaklaşık 10^9 tane, çarpışma yapar. Sonuç olarak salınım hareketi tamamen ortadan kalkar.

Leo Esaki ve arkadaşları, a 'yı yaklaşık 50-100 Å olarak ve oldukça saf süper örgüleri büyüterek, periyodu T_p olan bir aygıt kurmaya uğraşmışlardır. Böyle bir Bloch osilatörü, bir osilatör veya yükseltici olarak kullanılabilir.

Şimdi, iki boyuttaki hali ele alalım (Şekil (5.11.)). F elektriksel kuvveti uygulandığında, elektron P gibi keyfi bir noktadan başlayarak, (5.49) denkleminde göre, 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 (5.11.a.)'da gös-

terildiği gibi bir yol meydana gelir. Bunun yerine 'tekrarlanmış bölge şemasını kullanırsak (Şekil (5.11.b.)), k uzayında elektronun yolu $PP_1P_2''P_3''$ doğrusu olur. P_2'' ' nün P_2 'ye ve P_3'' 'nün P_3 'e vb. eşdeğer olduğunu belirtelim. Bu, indirgenmiş bölge şemasının veya tekrarlanmış bölge şemasının, genişletilmiş bölge şemasından daha kullanışlı olduğunu ispatlayan bir durumdur.



Şekil 5.11. (a) İndirgenmiş bölge şemasına göre, (b) tekrarlanmış bölge şemasına göre bir elektrik alan varken iki boyutlu örgüde elektronun hareketi.

5.6. Kristal Momentumu ve Etkin Kütle

Eğer (5.14) denklemindeki $u_k(x)$ fonksiyonu bir sabitse, o zaman dalga fonksiyonu, momentumu $p = \hbar k$ olan tamamen serbest bir elektrona uygun $e^{i k x}$ şekline sahip olur, tamamen serbest bir elektronun enerjisi ise,

$$E = \hbar^2 k^2 / 2m \quad (5.52)$$

olur. Bu bağıntı Şekil (5.6.)'da kesikli eğri olarak gösterilmiştir. Gerçek E 'ye karşı k bağıntısı, E 'nin büyük değerleri için, (5.52) denklemindeki bağıntıya oldukça yakından uyar. Bu durum, k 'nın hareket ile ilgili bir sabit olduğu, $\hbar k$ 'ların momentum boyutlarında olduğu ve elektronun enerjisi arttığı için

(o civarda daha çok hemen hemen "serbest" olan parçacık) genelde k değerlerinin \hbar ile bölünmüş serbest parçacık momentumunun değerlerine yaklaştığı önceki bölümün sonuçlarından ve (5.14) denkleminde açıktır. Bu sonuçlarda; periyodik potansiyelin ne kadar ayrıntılı şeklinin alındığının önem ihtiva etmediği; bu bağıntıya bakarak kolaylıkla görülebilir. Bu nedenle kristal momentumu olarak $\hbar k$ 'yı vermek alışkanlık haline gelmiştir ve biraz sonra kristal momentumu ile ilgili olarak kristal örgüdeki elektronun dinamik davranışının, çoğu durumlar için, gerçek momentum ile ilgili olarak serbest bir parçacığın dinamik davranışına gerçekten benzediğini göreceğiz. Tamamen açık olarak gerçek momentum ve kristal momentumu arasındaki farkı elde etmek için, örgü potansiyelinin varlığından dolayı, bir elektronun gerçek ani momentumunun hiçbir şekilde hareket ile ilgili bir sabit olmadığını ve örneğin ortalama bir değer hariç, kuantum mekaniğinin metotları ile doğrudan doğruya hesaplanamadığını bilmeliyiz. Oysa, verilen bir enerji durumu için, kristal momentumu $\hbar k$, gerçekten verilen enerjiye sahip serbest bir parçacığın gerçek momentumu olduğu için tamamen iyi belirlenmiş sabit bir değerdir.

Metal içindeki serbest elektronların davranışının Schrödinger dalga denkleminin çözümünden elde edilen fonksiyonla tanımlanabileceğini, daha önce Sommerfeld'in ileri sürdüğü modelde görmüştük. Ancak dalga denkleminin çözümü elektronun,

$$\mathbf{p} = (\hbar\pi/L)(n_x\mathbf{x} + n_y\mathbf{y} + n_z\mathbf{z})$$

momentumuna sahip olması ile mümkündür. Diğer yandan Heisenberg belirsizlik ilkesine göre bir elektronunun yerini ve momentumunu aynı anda tam olarak belirlemek mümkün değildir. Buna göre Heisenberg belirsizlik ilkesi, $\Delta p_i \cdot \Delta x_i \geq \hbar$ ($i=x, y, z$), eşitsizliği ile verilir. Bu nedenle bir elektronun davranışını bir dalga paketi ile tanımlamak daha uygun olmaktadır. Böylece dalga paketinin momentumu daha belirgin olarak tanımlanabilir. Dalga paketi kavramını daha iyi anlayabilmek için birçok düzlem dalga gözönüne alınır. İşte bu dalgaların bileşiminden oluşan bu paketin hızına grup hızı denir. Grup hızı, dalganın maksimum genliğinin yayılma hızı olup,

$$v_g = d\omega/dk = (1/\hbar) dE/dk \quad (5.53)$$

ile verilir. Burada, E ve ω ; Planck bağıntısı olan $E = \hbar\omega$ ile birleştirilir. Genelde ise bir dalga paketinin grup hızı,

$$v = (1/\hbar) \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$$

şeklinde de yazılabilir. Serbest bir elektron için grup hızı, klasik hızı ile aynı olur. Ancak kristal içindeki bir elektron, ideal serbest bir elektron olarak düşünülemez. Genelde elektronun enerjisi k 'nin üstel bir fonksiyonudur.

Bant sınırlarının yakınında bulunan elektronlar Newton hareket kanunlarına uymazlar. Biraz önce serbest elektrona eşlik eden dalga paketi grup hızının, klasik elektron hızına eşit olduğunu söylemiştik. Ancak katı içindeki elektronlar periyodik potansiyelde hareket edeceklerinden grup hızları klasik hızlarından farklı olacaktır. Fakat bant ortalarında bu değer klasik değere yakındır. Bunu Şekil (5.8.)'den görmek mümkündür. Genelde birçok fiziksel olayda bandın üst veya altına yakın bulunan elektronlar dış alandan kolayca etkilenirler. Dolu bir banttaki elektronlara verilen bir enerji, ancak bandın üstüne yakın olan elektronları, ikinci bandın alt kısmına çıkarabilir. Böylece fiziksel etkinlikler bandın alt ve üstündeki enerji düzeylerinde bulunan elektronlarla olur. Bu nedenle, bandın alt ve üstündeki enerji düzeylerinde bulunan elektronların davranışı daha önemlidir.

Şimdi uygulanan bir elektrik alan etkisi altında kristalde bir elektronun hareketini gözönünde tutalım. Bu gibi bir durumda bir elektronun gözönüne getirilen hareketinde uygunluk için, k 'nin farklı değerlerine sahip olan, üstüste gelen çözümler ile dalga fonksiyonunu sınırlandıracağız. Eğer bu sınırlama yapılırsa, o zaman elektron "dalga paketi" ile birleşmiş grup hızı (5.53) denklemini gibi olur. Elektronun, bir dt zamanında bir dx mesafesi boyunca dv_g hızında bir artış kazanarak, bir dış elektrik alan \mathcal{E} 'de hareket ettiğini farzedelim. O zaman, (5.53) denklemini kullanarak,

$$\begin{aligned} dE &= (dE/dk) dk = -e \mathcal{E} dx = -e \mathcal{E} v_g dt \\ &= (-e \mathcal{E} / \hbar) (dE/dk) dt \end{aligned} \quad (5.54)$$

denkleminin geçerli olacağını görürüz. Bu denklemden,

$$dk = (-e \mathcal{E} / \hbar) dt \quad (5.55)$$

veya

$$\hbar (dk/dt) = dp/dt = -e \mathcal{E} = F \quad (5.56)$$

denklemlerini yazabiliriz. Şimdi burada kristal momentumunu göstermek için p sembolünü kullanırız. (5.56) denklemi, bize basit olarak, kristal momentum değişiminin zamana oranının $-e\mathcal{E}$ kuvvetine eşit olduğunu gösterir. Böylece (5.56) denklemi, periyodik bir örgüde elektronun kristal momentumunun, boşluktaki (hiçbir dış etkinin olmadığı boşluk) serbest bir elektronun gerçek momentumu olan $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ 'yi kullanarak, uygulanan bir alanın etkisi altında değiştiğini gösteren Newton yasasının benzeridir.

Yukarıda (5.55) denklemini dış kuvvet F cinsinden (5.56) denklemi olarak yazdık. Bu önemli bir bağıntıdır. Bir kristalde $\hbar (dk/dt)$ elektron üzerindeki dış kuvvete eşittir. Serbest uzayda $d(mv)/dt$ kuvvetine eşittir. Biz burada Newton'un ikinci hareket yasasını yıkmış değiliz. Kristal içindeki elektron dış kaynaklardan ve aynı zamanda kristal örgüden kuvvetlerle karşılaşır. Bu sonuç, magnetik alanın bant yapısını yıkacak kadar kuvvetli olmadığı normal koşullar altındaki bir magnetik alanda bir elektron üzerine etki eden Lorentz kuvvetine de uygulanır. Böylece sabit bir B magnetik alanında v grup hızlı bir elektronun hareket denklemi, (SI) birim sisteminde,

$$\hbar (d\mathbf{k}/dt) = e \mathbf{v} \times \mathbf{B}$$

dir. Burada sağ taraf elektron üzerindeki Lorentz kuvvetidir. Grup hızı $\hbar \mathbf{v} = \text{grad}_{\mathbf{k}} E$ bağıntısı ile, dalgavektörünün değişme oranı,

$$d\mathbf{k}/dt = (e/\hbar^2) \nabla_{\mathbf{k}} E \times \mathbf{B}$$

dir. Şimdi burada denklemin her iki yanı \mathbf{k} uzayındaki koordi-

natlara bağlanır.

Bu son denklemdeki vektörel çarpımdan bir magnetik alandaki bir elektronun \mathbf{k} uzayında E enerjisinin gradiyenti doğrultusuna dik bir doğrultuda hareket ettiğini görürüz, öyleki elektron sabit bir enerji yüzeyi üzerinde hareket eder. \mathbf{k} 'nın B üzerindeki k_B izdüşüm değeri keyfidir, ama hareket boyunca sabittir. \mathbf{k} uzayındaki hareket B doğrultusuna dik bir düzlem üzerindedir ve yörünge, bu düzlemle sabit enerji yüzeyinin arakesiti tarafından tanımlanır.

Serbest elektronlar için $E=(\hbar^2/2m)k^2$ enerji-dalgavektörü bağıntısına baktığımızda k^2 'nin katsayısının k 'ya karşı E'nin eğrilğini belirlediğini görürüz. Diğer bir deyişle, ters kütle, $1/m$, eğrilği belirler. Bir banttaki elektronlar için bölge sınırlarında bant aralıkları yakınında çok yüksek eğrilikli kısımlar olabilir, bunu bölge sınırı yakınındaki dalga denkleminin çözümlerinden görürüz.

Eğer (5.53) denkleminin zamana göre türevini alırsak, sonuç,

$$\begin{aligned} dv_g/dt &= (1/\hbar) [d(dE/dk)/dt] \\ &= (1/\hbar) (d^2E/dk^2) (dk/dt) \end{aligned} \quad (5.57)$$

gibi olur. Burada, (5.56) denklemini kullanarak, (5.57) denklemi,

$$dv_g/dt = (-e \mathcal{E} / \hbar^2) (d^2E/dk^2) = F/m^* \quad (5.58)$$

şeklinde yazılabilir. (5.58) denklemindeki etkin kütle m^* ,

$$m^* = \hbar^2 / (d^2E/dk^2) \quad (5.59)$$

ile verilir. (5.58) denklemi aslında Newton'un kuvvet denklemidir. $e\mathcal{E}$ kuvvetiyle ilgili olan orantılılık faktörü ve dv_g/dt ivmesi, elektronun etkin kütlesi olarak görülebilir. Böylece elektrik alandaki hareketle ilgilenildiği sürece Bloch elektronu, etkin kütlesi (5.59) denklemiyle verilen serbest elektron

gibi davranır. Eğer bir elektronun etkin kütlesi serbest elektron kütlesinden az ise, ne kristal daha hafifleşir ne de, kristal tüm olarak alındığında, Newton'un ikinci yasası değişir. Önemli nokta şudur ki, periyodik bir potansiyel içindeki bir elektron elektrik alan ya da magnetik alan içinde örgüye göre kütlesi sanki şimdi tanımladığımız etkin kütleyle eşitmiş gibi ivmelendirilir. Bununla birlikte, elektronun gerçek gravitasyonel kütle-sini doğrudan doğruya etkin kütle ile göstermek olmaz, burada önemli olan d^2E/dk^2 niceliğidir. Eğer elektron gerçekten serbest bir elektron ise, o zaman E ve k (5.52) denklemi ile ilişkili olur ve (5.59) denklemi $m^*=m'$ 'e indirgenir. Eğer enerji,

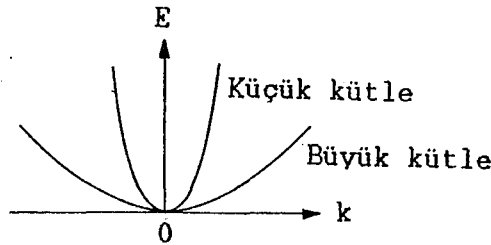
$$E=Z(k-k_0)^2 \quad (5.60)$$

şeklinde olan, k'nın parabolik bir fonksiyonu ise, o zaman etkin kütle $m^*=\hbar^2/2Z$ olan sabit değere sahip olur ve elektronun dinamik davranışı bu etkin kütle ile serbest bir parçacığın dinamik davranışı gibi aynı olacaktır. Eğer enerji k'nın parabolik bir fonksiyonu değilse, o zaman etkin kütle enerji ile değişecektir, dinamik davranış değişken kütleli bir parçacığın dinamik davranışı olacaktır ve durum çok daha karmaşık olacaktır. Herhangi bir durumda, ilk yaklaşım için, periyodik kristal potansiyelin tüm etkisi; etkin kütle ile serbest elektron kütle-sini değiştirmektedir.

Şanslı olarak, E ve k'yı bağlayan bağıntı, kristalde bir elektron için ulaşılabilen enerjiler aralığı boyunca her zaman parabolik veya hemen hemen paraboliktir. Şekil (5.6.)'dan E'ye karşı k eğrisinin; izinli enerji bantlarının alt ve üstünde şekil olarak her zaman parabolik olduğu açıktır. Bununla birlikte, sistemin elektronları diğer bölgelerde olduğu zaman bile, genel olarak önemli olan, bir parçacığın durulma zamanı mertebesinde olan bir sürede bir tek saçılma olayında veya saçılma olayları arasında kazanabildiği veya kaybedebildiği enerjinin ortalama miktarı mertebesinde olan bir enerji aralığı boyunca etkin kütle-nin aslında sabit olduğudur. Burada durulma zamanı ile çarpışmalar arasında geçen süre kastedilmektedir. Ayrıca enerjinin bu miktarı ise $k_B T$ mertebesinde-dir. Fakat $300^\circ K$ 'de, $k_B T$, sadece

0.025 eV kadar olur ve tipik kristalimsi maddeler için geçiş yöntemlerinde önemli bir rol oynayan bir bandın enerjisindeki toplam genişlik, genellikle 1 eV mertebesinde olan enerji miktarından çok daha büyüktür. O zaman, tek saçılma olaylarında veya art arda gelen saçılma olayları arasındaki mesafede bir elektron, genellikle, yaklaşık olarak parabolik gibi görünen E'ye karşı k eğrisinin kısa bir parçasına çoğu kez sınırlandırılacaktır.

Bir metalin serbest-elektron gösteriminin kanıtlanmış çok büyük bir genişlikte olduğu, bütün durumlarda serbest elektron kütlelerinin, (5.59) denklemine göre, E'ye karşı k eğrisinin şekline ait uygun bir etkin kütle ile değiştirildiği olan önemli düzeltmenin varlığı yukarıdaki ifadelerden açıktır. Böylece serbest-elektron teorisinin temeli üzerine Bölüm (4.)'te türetilmiş bütün sonuçların, elektron kütlelerini uygun etkin kütle ile değiştirmek şartıyla, doğru olduğu sonucuna varabiliriz. Ayrıca söz konusu olan maddeye göre etkin kütlelerin hareketi, uygun bir kristal potansiyel vermek için birleşen kristalin atomlarına bizzat uygun atomik dalga fonksiyonları ile kuantum mekaniksel olarak da hesaplanabilir. Böyle hesaplanmış değerler, deneysel olarak tayin edilmiş değerler ile genel olarak makul uyum içindedir. Çoğu metaller için etkin kütle yarım ve iki misli serbest-elektron kütleleri arasında yer alır, geçiş metallere birçoğu için etkin kütle çok daha yüksek olduğu halde, III-V türünde olan bazı yarıiletken bileşikler için etkin kütle çok daha düşük olabilir.



Şekil 5.12. Enerji bandının eğriliği ve kütle arasındaki ters ilişki.

m^* kütleleri bandın eğriliği ile ters orantılıdır. Eğrili-

ğın büyük olduğu yerde, yani d^2E/dk^2 'nin büyük olduğu yerde kütle küçüktür; küçük eğrilik büyük kütleyle neden olur (Şekil (5.12.)).

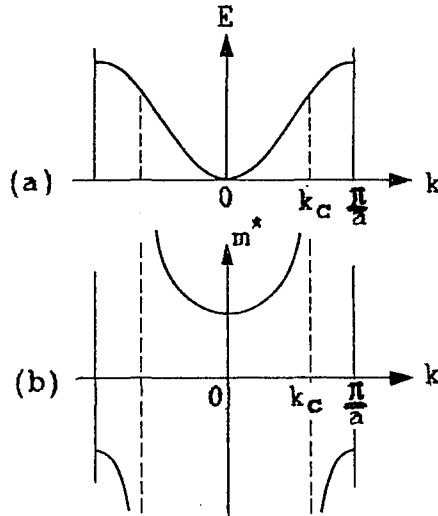
Şimdi (5.59) denklemindeki genel bağıntıyla yerdeğiştirmek suretiyle daha özel durumları ele alabileceğiz. Enerji k 'nın karesi ile orantılıysa,

$$E = Zk^2 \quad (5.61)$$

olup, burada Z sabittir. Böylece (5.59) denklemi,

$$m^* = \hbar^2 / 2Z \quad (5.62)$$

sonucunu verir. Bu $E = \hbar^2 k^2 / 2m^*$ standart formu olarak (5.61) denklemini yeniden yazmaya denktir. Şekil (5.13.a.) ve Şekil (5.13.b.) sırasıyla bant yapısı ve m^* etkin kütlelerinin değişimini gösteriyor. Burada m^* (5.59) denklemine göre hesaplanmıştır. Bandın tabanı civarında m^* etkin kütleleri pozitif bir sabittir. Çünkü (5.61) denklemindeki karesel bağıntı, bandın tabanı civarında gerçekleşir. Fakat k artarken m^* artık sabit değildir, sadece k 'nın fonksiyonudur. Çünkü (5.61) denklemindeki karesel bağıntı artık geçerli değildir.



Şekil 5.13. (a) Bant yapısının ve (b) m^* etkin kütlelerinin k 'ya göre değişimi.

Şekil (5.13.)'ten k_0 değişim noktasının ötesinde m^* kütlesi negatif olur. Çünkü bölge şimdi bandın tepesine yakındır ve negatif bir kütle beklenebilir.

Şekil (5.10.)'a göre $k > k_0$ için hızın azaldığını belirterek negatif kütle olduğunu, dinamik şekilde görülebilir. Böylece ivme negatiftir, yani negatif kütleye uygulanan kuvvete karşıt yöndedir. Bu ise şu anlama gelir: k-uzayının bu bölgesinde örgü, elektron üzerine öyle büyük bir geciktirme ya da frenleme kuvveti uygularki; bu kuvvet uygulanan kuvveti yener ve negatif bir ivme oluşturur.

Yukarıdaki sonuçlar üç boyuta genişletilebilir. İvme, şimdi,

$$a = dv/dt$$

dir. Bu ifadeyi kartezyen koordinatlarda yazarsak ve (5.41) ile (5.49) denklemlerini kullanırsak,

$$a_i = \sum_j (1/\hbar^2) (\partial^2 E / \partial k_i \partial k_j) F_j \quad (i, j = x, y, z)$$

buluruz. Bu ise bizi etkin kütle tanımına götürür:

$$(1/m^*)_{ij} = (1/\hbar^2) (\partial^2 E / \partial k_i \partial k_j) \quad (i, j = x, y, z) \quad (5.63)$$

Şimdi, etkin kütle dokuz bileşenli ikinci mertebeden bir tensördür. Dispersiyon bağıntısı (enerjinin bir minimuma, bir maksimuma veya bir dönüm noktasına sahip olduğu halde bu mümkündür),

$$E(\mathbf{k}) = (Z_1 k_x^2 + Z_2 k_y^2 + Z_3 k_z^2) \quad (5.64)$$

şeklinde yazılabildiğinde, (5.63) denklemini kullanırsak üç bileşenli bir etkin kütle elde edilir:

$$m_{xx}^* = \hbar^2 / 2Z_1, \quad m_{yy}^* = \hbar^2 / 2Z_2, \quad m_{zz}^* = \hbar^2 / 2Z_3$$

Bu durumda, elektronun kütlesi anizotropiktir ve dış kuvvetin

doğrultusuna bağlıdır. Kuvvet k_x -ekseni doğrultusunda, elektron m_{xx}^* kütlesine sahipmiş gibi davranır. k_y doğrultusundaki kuvvet ise m_{yy}^* kütlesine sahipmiş gibi davranır. Elipsoidal kapalı eğrilere karşılık gelen (5.64) denklemi türünde bir bağıntı, Si ve Ge gibi yarıiletkenlerde mevcuttur. Bu durumda, serbest elektron haline benzemeyen şekilde, genel olarak ivme uygulanan kuvvetle aynı doğrultuda değildir.

(5.64) denklemindeki Z_i 'lerin birinin negatif olması da mümkündür. Bu şu anlama gelir: Diğer doğrultularda pozitif kütleler sergilenirken, bu doğrultuya karşılık gelen kütle negatiftir. Bu yine, serbest elektron davranışından oldukça farklı bir davranış demektir.

Serbest elektrona benzer durumda Bloch elektronunu düşünmemiz halinde, etkin kütle kavramı çok yararlıdır. Bununla beraber Bloch elektronu, serbest elektronun özelliklerine hiç benzemeyen birçok özellik sergiler.

Eğer bir banttaki enerji k 'ya hafifçe bağlı ise, o zaman etkin kütle çok büyük olacaktır. Yani $m^*/m \gg 1$ 'dir. Çünkü d^2E/dk^2 çok küçüktür. İleride anlatılacak sıkı-bağlanma yaklaşımı dar bantların oluşumu hakkında bilgi verecektir. Eğer komşu atomlar üzerindeki dalga fonksiyonları çok az üstüste taşarsa, o zaman üstüne taşma tümlevi küçük olacaktır. Böylece bandın genişliği dar ve etkin kütle ise büyük olacaktır. İç ya da kor elektronlarının üstüne taşması küçüktür. Örneğin nadir toprak metallerinin 4f elektronları çok az üstüste taşar. Bu üstüne taşma tümlevi, bir elektronun bir iyondan diğerine kuantum sızma oranını belirler. Etkin kütle büyük olduğu zaman, elektron örgüdeki bir iyondan bitişik bir iyona yavaşça sızar.

5.6.1. Etkin Kütlelerin Momentumu, Kristal Momentumu ve Fiziksel Orijini

Çeşitli durumlarda, Ψ_k halindeki Bloch elektronunun sanki $\hbar k$ momentumuna sahipmiş gibi davrandığını söylemiştik. Temel olarak, bu ifadeyi destekleyen üç farklı neden vardır.

(a) $u_{\mathbf{k}}$ periyodik olduğundan $\lambda=2\pi/k$ dalgaboylu bir düzlem dalga gibi davranan şekilde, Bloch fonksiyonu,

$$\Psi_{\mathbf{k}}=e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}} \quad (5.65)$$

olarak verilir. De Broglie bağıntısıyla birleştirilerek, buradan $\hbar\mathbf{k}$ momentumuna varılabilir.

(b) Elektrik alan uygulandığında, dalgavektörü, zamanla,

$$d(\hbar\mathbf{k})/dt=\mathbf{F}_{dış} \quad (5.66)$$

şeklinde değişir. Bu ise $\hbar\mathbf{k}$ 'nin momentum gibi davrandığını gösterir. Burada $\mathbf{F}_{dış}$ kristale uygulanan dış kuvveti belirtmektedir.

(c) Bir Bloch elektronunu içeren çarpışmada, elektron $\hbar\mathbf{k}'$ -ya eşit momentumu verir.

Bu nedenler, momentumla $\hbar\mathbf{k}$ 'nin tanımlanması için yeteri kadar önemlidir. Bununla beraber gerçek şudur: $\hbar\mathbf{k}$, Bloch elektronunun gerçek momentumuna eşit değildir. Bu uyumu açıklamak için, $\hbar\mathbf{k}$ vektörünü \mathbf{p}_c ile gösterelim. Yani,

$$\mathbf{p}_c=\hbar\mathbf{k} \quad (5.67)$$

dir. Bunu "kristal momentumu" olarak isimlendireceğiz.

Elektronun gerçek momentumu \mathbf{p} , kuantum yöntemlerini kullanarak hesaplanabilir. Kuantum mekaniğine göre ortalama momentum,

$$\mathbf{p} = \langle \Psi_{\mathbf{k}} | -i\hbar\nabla | \Psi_{\mathbf{k}} \rangle \quad (5.68)$$

olarak verilir. Burada $-i\hbar\nabla$ momentum operatörü, $\Psi_{\mathbf{k}}$ Bloch fonksiyonudur. $\Psi_{\mathbf{k}}$ dalga fonksiyonunun özelliklerini kullanarak bu integral hesaplanırsa,

$$\mathbf{p} = m_0 \mathbf{v} \quad (5.69)$$

bulunur. Burada m_0 serbest elektron kütlesi, \mathbf{v} ise (5.41) denklemi ile verilen hızdır. Böylece elektronun gerçek momentumu, gerçek kütle m_0 ile gerçek hız \mathbf{v} 'nin çarpımına eşittir.

Geriye bakıldığında, başlangıçtaki gerçek momentumla \mathbf{p}_0 'nin belirlenmesinden şüphe edilebilir. (5.65) denklemdeki $u_{\mathbf{k}}$ fonksiyonu sabit olmadığından, $\Psi_{\mathbf{k}}$ Bloch fonksiyonu bir tam dalga değildir ve böylece $\hbar \mathbf{k}$ vektörü momentuma eşit değildir. Bunun gibi $\mathbf{p}_0 = \hbar \mathbf{k}$ gerçek momentumu ise, (5.66) denkleminin sağındaki kuvvet toplam kuvvet olmalıdır, dış kuvvete eşit olmamalıdır. Göreceğimiz gibi, örgü tarafından uygulanan kuvvet vardır, henüz bu kuvvetin \mathbf{p}_0 'ye etkisi görülmemektedir.

Yukarıdaki düşünceler, etkin kütlelerin fiziksel yorumunu vermek için, şimdi toparlanabilir. $\mathbf{p} = m_0 \mathbf{v}$ vektörü gerçek momentuma eşit olduğundan,

$$m_0 (dv/dt) = F_{\text{toplam}} = F_{\text{dış}} + F_{\text{ö}} \quad (5.70)$$

yazılabilir. Burada F_{toplam} ve $F_{\text{ö}}$, sırasıyla elektron üzerine uygulanan toplam kuvvet ve örgünün uyguladığı kuvvettir. Örgünün uyguladığı kuvvetle, kristal potansiyeliyle etkileşmesinin sonucu olarak, örgü tarafından elektrona uygulanan kuvveti kastediyoruz. (5.70) denkleminin sol tarafı, etkin kütle yardımıyla hemen tanımlanabilir, yani $a = dv/dt$ ve $m^* = \hbar^2 / (d^2E/dk^2)$ denklemlerine başvurarak görebileceğimiz gibi,

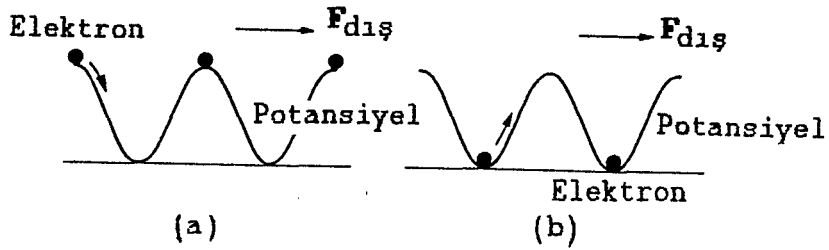
$$m_0 (dv/dt) = m_0 (F_{\text{dış}} / m^*) \quad (5.71)$$

dir. Bunu (5.70) denkleminde yerleştirip m^* 'ı,

$$m^* = m_0 (F_{\text{dış}} / (F_{\text{dış}} + F_{\text{ö}})) \quad (5.72)$$

olarak buluruz. Şimdi, m^* 'ın niçin m_0 serbest kütlelerinden farklı olduğunun nedeninin, $F_{\text{ö}}$ örgü kuvvetinin mevcut olmasından ileri geldiğini görürüz. $F_{\text{ö}}$ olmasaydı, etkin kütle gerçek kütleyle eşit olurdu.

m^* etkin kütlesi, örgü kuvvetine bağlı olarak m_0 'dan büyük ya da küçük ve hatta negatif olabilir. Şekil (5.14.a.)'da gösterildiği gibi, elektronun, kristal potansiyelinin tepesinin yakınında "dikildiğini" varsayalım. Dış kuvvet uygulanınca, elektron, potansiyel eğrisi boyunca "tepetaklak aşağı yuvarlanır". Sonuç olarak pozitif bir örgü kuvveti ortaya çıkar ve böylece (5.72) denkleminde göre $m^* < m_0$ olur. Burada örgü kuvveti dış kuvvete yardımcı olduğundan m^* , m_0 'dan küçüktür. Diğer taraftan, elektron, potansiyel eğrisinin tabanı yakınında bulunduğu anda (Şekil (5.14.b.)), $m^* > m_0$ olacak şekilde, örgü kuvveti dış kuvvete karşı yönde olma eğilimindedir. Potansiyel dalgası yeteri kadar dikse, F_0 , $F_{dış}$ 'tan büyüktür ve m^* negatif olacaktır.



Şekil 5.14. (a) m^* etkin kütlesinin m_0 'dan küçük olmasına yol açan elektron uzaysal dağılımı. (b) $m^* > m_0$ 'a yol açan dağılım.

(5.70) denkleminde görüldüğü gibi, F_0 örgü kuvvetinin, dış kuvvet tarafından indüklenen bir kuvvet olduğunu belirtelim. O halde $F_{dış}=0$ ise hız sabittir. (5.70) denkleminde göre de $F_0=0$ olur. Örgü de diğer elektrona $F_{dış}$ olmasa bile bir kuvvet uygulanır, fakat bu kuvvet Schrödinger denkleminin çözümünde ve dolaşımıyla Ψ_k halinin özelliklerinde hesaba katılmıştır. Böylece kuvvet Ψ_k dalgasını saçılmaya uğratmaz.

Bununla beraber, $p_0 = \hbar k$ kristal momentumu, henüz, oldukça yararlı bir niceliktir. Dış alanlardaki elektron dinamiği problemlerinde, kristal momentumu gerçek momentumdan daha kullanışlıdır. Çünkü hareket k uzayında, gerçel uzaydan daha kolay izlenir. O halde p_0 'yi kullanmaya devam edeceğiz. Karıştırmamak

için, bunu momentum olarak isimlendirecek ve c indisini kaldıracacağız.

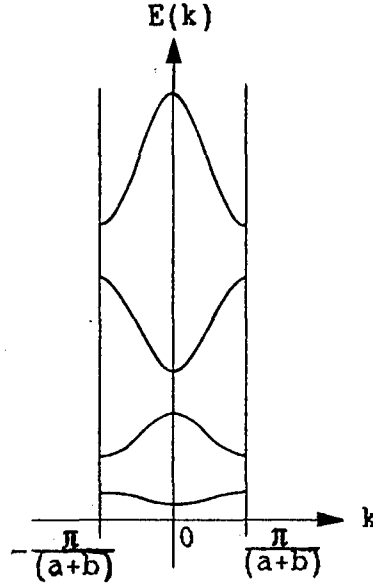
Diğer bir deyişle, m^* etkin kütlesi ve $\hbar k$ kristal momentumu, nasıl bir örgü kuvvetini dikkate almama hakkını en azından bize şekilsel olarak veren suni niceliklerdir. O halde burada biz sadece dış kuvvetle ilgileneceğiz. Örgü kuvveti; önceden bilinmediği, kolayca bulunmadığı ve dış kuvvet gibi uygulanmadığından, yukarıdaki nicelikler oldukça kullanışlıdır.

5.7. İndirgenmiş Bölge Gösterimi; Elektronlar ve Holler

Şekil (5.6.)'daki eğriye yol gösteren; her bir izinli enerji bandı içinde k 'ya uygun değerlerin belirlenen bölgeleri Şekil (5.5.)'de gösterilmiştir. Her bir bant içinde yerine getirilen tek koşul $-1 < \cos k(a+b) < +1$ olduğu için, her bir banda uygun k 'da, bu belirlenen değerlerin tek bir değer olmadığı açıktır. Şekil (5.5.)'de gösterilmiş ayırmanın avantajı, E 'ye karşı k eğrisinin serbest parçacık ile ilişkisi açıkça ortada olduğunda, Şekil (5.6.)'nin sözde genişletilmiş gösterimine götürdüğüdür. Bununla birlikte, n bir tamsayı olmak üzere, $2\pi n/(a+b)$ mesafesinde k -eksenine paralel sağa veya sola doğru; Şekil (5.6.)'da gösterilmiş eğri parçalarından herhangi birini aktarabiliriz. Bu gibi bir dönüşüm, değişmemiş $\cos k(a+b)$ değerinden ayrıldığı halde, yine de (5.36) ve (5.37) denklemlerine uyabiliriz.

Bütün farklı parçaların $-\pi/(a+b) \leq k \leq \pi/(a+b)$ aralığına uygun gelmesi için, $2\pi/(a+b)$ 'nin integral katları olan mesafelerden geçerek, k -eksenine paralel sağa veya sola doğru E 'ye karşı k eğrisinin değişik parçalarını aktararak, bu türde olan özel bir dönüşüm yapmak bazen çok faydalıdır. İşte enerjiye karşı yayılım sabiti ilişkisinin son gösterimine, yani bütün bantların birinci Brillouin bölgesinde çizilmesine indirgenmiş bölge gösterimi adı verilir. Şekil (5.6.)'daki eğrinin indirgenmiş bölge gösterimi ise Şekil (5.15.)'de gösterilmiştir. Her iki durumda Bloch dalga fonksiyonlarının, $k = n\pi/(a+b)$ noktalarında $n\lambda = 2d \sin\theta$

olan Bragg yansıma şartını sağladığını not edebiliriz. Bu durumlarda $\hbar^{-1}(dE/dk)$ olan grup hızı, hareketsiz bir elektronu gösteren duran bir dalgaya uygun olarak sıfırdır. O zaman elektron, bu şartlar altında, örgü potansiyeli ile bir iç kırınımına maruz kalıyor gibi görülebilir.



Şekil 5.15. İndirgenmiş bölge gösterimine dönüştürülmüş Şekil (5.6.)'nin E 'ye karşı k grafiğinin şematik gösterimi.

Bölüm (5.3.)'ün sonsuz olarak büyük kristalinde, izinli enerjiler, izinli bantlarda değerlerin sürekli bir bölgesini oluştururlar. Bununla birlikte, eğer kristal, sonlu büyüklüğe sahip olursa ve toplam N atom içerirse, kristalde her bir izinli enerji bandı içinde k 'nın, kristal momentumu içeren hemen hemen N farklı izinli öz-durumları (yani enerji değerleri) olduğunu (5.21) denkleminde gördük. Şekil (5.6.)'de verilen bir E_0 enerjisi için iki izinli kristal momentum değerlerinin $k(E_0)$ ve $-k(E_0)$ 'da olduğunu görmek kolaydır. Fiziksel olarak ilki, bir elektronun pozitif kristal momentumunun $k(E_0)$ ile sağa doğru hareket halinde olduğundaki bir durumu gösterir. Oysa ikincisi, bir elektronun eşit ve zıt kristal momentumu ile sola doğru hareket halinde olduğundaki bir durumu gösterir. Açık olarak e-

nerji, her iki durum için aynıdır. Burada elektron spininin etkisi, izole edilmiş atomik sistemlerdeki gibi sistemin tüm enerji seviyeleri ile birleştirilmiş çakışma faktörünü tamamen iki misli yapmaktadır. Çünkü her bir kuantum durumu, "spin yukarı" ile bir elektronu ve "spin aşağı" ile diğer bir elektronu veriyor gibi, ikiye ayrılmış olarak görülmelidir. Demek ki, elektron spininin etkisi dahil edildiği zaman, bu sistemin her bir izinli bandı içinde, hemen hemen $2N$ kuantum durumu olduğu sonucuna varmalıyız.

Mutlak sıfır sıcaklığında sistemin elektronları; mevcut durumların sayısı, enerjide mevcut durumların dağılışı ve kristalde elektronların sayısı ile tayin edilmiş en düşük durumdan verilen bir enerjiye kadar, Pauli dışarlama ilkesinde gerektiği gibi, durum başına bir elektron olarak bu durumları işgal edeceklerdir. Yani, Pauli dışarlama ilkesine göre, aynı kuantum durumunda birden fazla elektron bulunamaz. Buradaki enerji, elbette, sıfır sıcaklıkta kristalin Fermi enerjisidir. Tek-boyutlu bir kristalde izinli bantların bazısı tamamen dolu, bazısı tamamen boş olacaktır ve bazısı da kısmen dolu olabilir. İki ve üç boyutlu sistemlerde ise durum çok daha karmaşıktır. Bu örneklerde farklı izinli bantlar enerjide üstüste binebilir ve bir banttandan daha çoğu kısmen dolu olabilir. Eğer bir elektrik alan uygulanırsa, akıma boş bantlardan katkı gelmediği açıktır; bununla birlikte, akımın dolu bantlardan da ileri gelmediği aynı derecede doğrudur. Bu durumda, verilen bir banttandan ileri gelen akım yoğunluğu,

$$J = -n_0 e \bar{v} \quad (5.73)$$

ile gösterilir. Burada \bar{v} ; ortalama hızdır ve n_0 ; o banda ait olan birim hacim başına elektronların sayısıdır. (5.73) denklemindeki (-) işareti elektronun yükünden dolayı gelmektedir. Fakat \bar{v} ,

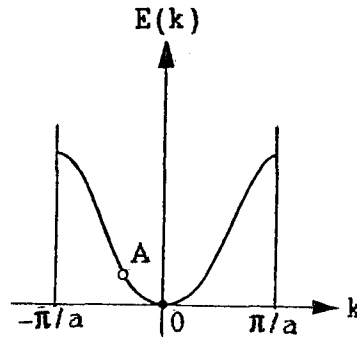
$$\bar{v} = [1/(n_0 V_H)] \sum_i v_i \quad (5.74)$$

ile ifade edilebilir. Burada toplama, maddenin V_H hacmi içinde

ferdi elektronlar tarafından oluşturulmuş tüm hızlar üzerine alınır. O zaman, (5.74) denklemini kullanarak, (5.73) denklemi yeniden,

$$J = (-e/V_H) \sum_i v_i \quad (5.75)$$

şeklinde yazılabilir. Bununla birlikte, (5.75) denklemindeki akım yoğunluğu, dolu bir bant üzerine toplandığı zaman, sıfırı vermelidir. Çünkü $E(k)$ eksenini etrafında, Şekil (5.6.)'daki veya Şekil (5.15.)'deki eğrilerin simetrisinden dolayı, pozitif eğimli olan bir noktaya uygun pozitif $\hbar^{-1}(\partial E/\partial k)$ hızının her bir durumu için $k' = -k$ 'da (negatif eğimli) eşit büyüklükte olan negatif bir hıza uygun bir durum vardır. Ancak, burada kısmen dolu olan bantların bir akım akışına katkıda bulunduğu sonucuna varmalıyız. Bu durum, kısmen dolu bir bantta, daha yüksek enerji ve momentuma sahip olan işgal edilmemiş durumlara her zaman aşamalı olarak uyarılan elektronlar olduğunu söyleyerek, fiziksel temeller üzerine yorumlanabilir. Oysa dolu bir bantta, Pauli dışarlama ilkesinden dolayı, bu aşamalı alan uyarma, tüm durumlar zaten işgal edildiği için hiçbir zaman meydana gelmez.



Şekil 5.16. $-x$ yönü boyunca elektronu ivmlendirmek için yöneltmiş kuvvetlere bağlı olarak, izinli bir bandın altına yakın bir elektron.

Aksi takdirde, işgal edilmemiş bir bantta hareketsiz tek bir elektron, Şekil (5.16.)'da gösterildiği gibi, termik uyarmanın yokluğunda; o bandın altında en düşük enerjili bir durumu işgal edecektir. Eğer şimdi bir \mathcal{E}_0 elektrik alanı kristal üzeri-

ne etkirse, elektron, bir $-e\mathcal{E}_0$ kuvvetine uğrayacaktır ve (5.56) denkleminde uygun olarak, $-x$ yönünde daha da yüksek bir momentum kazanarak, enerji ve (negatif) momentumu her zaman artan durumlardan geçerek aşamalı olarak uyarılacaktır. Bölüm (5.2.) ile Bölüm (5.6.)'nin teorilerindeki tahminlere uygun olarak bu süreç, elektronu, a 'nın örgü aralığı olduğu $x=-\pi/a$ 'da bantın üstüne ulaşmaya kadar sıra ile daha yüksek enerjilere uyarılmak maksadıyla devam eder. $x=\pi/a$ ve $x=-\pi/a$ noktaları eşdeğer olduğu için, elektron, $x=\pi/a$ 'da tekrar ortaya çıkar. Burada $k; \pi/a$ 'dan sıfıra gittiği için, eğrinin sağ parçası boyunca enerji azalır. Son olarak elektron başlangıç noktasına varır ve böylece bu süreç tekrarlanır. Bu koşullar altında elektronun hareketi salınımlı olur (Zener osilasyonu) ve bu hareketi sınırlayacak mekanizma yoktur. Böylece elektronun bu hareketi sonsuz olarak devam edecektir. Eğer potansiyel tamamen parabolikse, elektron, Şekil (5.16.)'da gösterilmiş şekle sahip olacak yerde sonsuz hız ve enerji kazanır. Her iki durumda, tamamen periyodik bir potansiyelde serbest bir elektronun hareketinin, bir elektronun hızını durduran veya gelişigüzel dağıtan bizzat örgünün varlığı ile birleştirilmiş saçılma mekanizmasının olmadığı yönde, örgü tarafından engellenmediği sonucuna varmalıyız.

Bununla birlikte, eğer örgünün kusursuz periyodikliğinden bir sapma varsa artık bu sonuç doğru olmaz. Bu durumda, bant içinde k 'nın başka bir değeri ile birleştirilmiş bir hale ani gelişigüzel bir geçişin birkaç olasılığı her zaman olacaktır. Ortalama olarak bu gelişigüzel geçişler elektronu $k=0$ 'a geri getirirler. Buradan, kusursuz periyodiklikten örgü potansiyelinin ayrılışı ile birleşmiş bir saçılma mekanizması var olduğu sonucuna varırız. Periyodiklikten sapma, örgünün, önemsiz bir periyodiklik başlatan termik titreşimleri incelendiğinde, mutlak sıfırdan daha yüksek bir sıcaklıkta olduğu gerçeğine neden olur. Burada önemsiz bir periyodiklik ile denge durumları periyodik örgü ile tam olarak uyan atomların bir an süren durumlarını kastediyoruz. Periyodiklikten sapmalara; örgü boşlukları, ara-örgü atomları, kaymalar ve kristal örgünün diğer yapısal kusurları kadar katkı atomlarının varlığı da neden olabilir. Bu etkiler; örgü saçılması, katkı saçılması ve kusur saçılması olayları ile

sonuçlanırlar.

Bu saçılma olayları pratikte her zaman meydana geldiğinden Zener osilasyon hareketini önlerler. Gerçekten bütün deneysel olarak gerçekleştirilebilir durumlarda ne olur? Bütün bu deneysel olarak gerçekleştirilebilir durumlarda, Şekil (5.16.)'daki O'dan başlayan bir elektronun, eğrinin parabolik alt bölümü boyunca küçük bir mesafe olan herhangi bir A noktasına varana kadar ivmelendirildiğidir. Bu aralıkta elektronun hareketi, (5.59) denklemi ile verildiği gibi, kütlesi m^* olan serbest bir elektronun hareketidir. A noktasında elektron O'ya orta geriye doğru gelerek saçılır ve ondan sonra devir tekrarlanır. O zaman elektronun hareketi; Ohm yasasına, termik iletkenliğe, termoelektrik etkiye ve tek farkı elektron kütlesinin her yerde etkin kütle ile değiştiği olan metallerin serbest-elektron teorisinin bütün diğer sonuçlarına götüren; hemen hemen serbest bir parçacığın hareketidir. Şekil (5.16.)'da E'ye karşı k eğrisi boyunca OA mesafesi açıklık kazandırmak için abartılmıştır ve pratikte ortaya çıkan çoğu durumlarda gerçekten çok daha küçük olur.

Elektronların nispeten küçük bir sayısını içeren bir bant için küçük bir voltaj tesir ettiği zaman elde edilen akım, banttaki bütün elektronlar üzerine toplanmış (5.75) denklemi ile çok basit olarak verilir. Hemen hemen boş bir bantta elektronlar, termik uyarmanın yokluğunda en düşük mevcut enerji durumlarını işgal ederler. Bu durum hemen hemen dolu bir bantta da doğrudur ve işgal edilmemiş durumlar bantın üstündedir. O zaman, neredeyse tamamen dolu bir bantta boş durumlar, ordinatı bir elektronun enerjisini gösterdiğinde, Şekil (5.15.)'in diyagramı gibi bir diyagramda yukarı doğru çekilirler. Bununla birlikte, eğer bant hemen hemen doluyorsa ve (denge durumunda bantın hemen hemen üstüne toplanan) sadece birkaç boş durum varsa, (5.75) denklemiindeki akım yoğunluğu,

$$\begin{aligned}
 J &= (-e/V_H) \sum_i v_i \\
 &= (-e/V_H) \left[\sum_j v_j - \sum_k v_k \right] \\
 &= (+e/V_H) \sum_k v_k
 \end{aligned}
 \tag{5.76}$$

şeklinde yazılarak başka bir yolla ifade edilir. Burada i üzerine toplam, elektronlar ile işgal edilmiş bütün hız durumları üzerine toplamı, j üzerine toplam, banttaki bütün hız durumları üzerine toplamı ve k üzerine toplam ise, bütün işgal edilmemiş hız durumları üzerine toplamı gösterirler. Daha önce (5.75) denklemi ile bağlantılı olarak gördüğümüz gibi, banttaki bütün durumlar üzerine alınmış j üzerine toplam sıfır olmalıdır. İşgal edilmemiş durumlar üzerine geri kalan toplam, pozitif yük taşıyıcılarının uygun bir sayısı ile ortaya çıkan bir akıma tekbül eder. Bir akım, elektronların gerçekten büyük bir sayıdan çok, pozitif parçacıklar gibi hareket eden boş elektronik durumların veya hollerin nispeten küçük bir sayısının hareketinden türediği için, hemen hemen dolu bir bantta da akım ifade etmek, gördüğümüz gibi, avantajlı ve olasıdır. Eğer elektron enerjisi bandının hemen hemen üstü olan boş enerji durumunu işgal ederse, o zaman h ile ilgili hız bir elektronun sahip olduğu hızdır. Fakat E 'ye karşı k bağıntısı aşağı doğru çukur olduğu için, d^2E/dk^2 değeri, (5.59) denkleminde dolayı negatif bir elektron etkin kütlesi veren negatif bir değerdir. Negatif etkin kütle ile bir parçacık uygulanan kuvvetin yönüne ters bir yönde bir ivme görür. Böylece negatif etkin kütle ile negatif bir parçacık, uygulanan alan gibi aynı yönde ivmelenecektir ve bu nedenle pozitif kütleli olan pozitif bir parçacık gibi aynı dinamik davranışı gösterir. Buradan, hemen hemen dolu bir banttaki durumu, hızları ve momentumları banttaki işgal edilmemiş elektronik durumlara uygun hızlar ve momentumlar olan, holler olarak bildiğimiz, pozitif kütleli pozitif parçacıkların nispeten küçük bir sayısını içeren durum gibi görebiliriz. Bazı materyallerde hollerin fiziksel doğası ve dinamik davranışı, en yakın komşu atomları bağlayan ve kristali bir arada tutan kohezyon kuvvetlerini sağlayan elektronik valans bağlarındaki kusurlara göre çok kolay olarak gözönüne getirilebilir. Magnetik alanın etkisini gözönüne aldığımızda ise, elektronlar ve holler, alışılmış $q(\mathbf{v} \times \mathbf{B})/c$ magnetik kuvvetinin etkisi altında, (5.59) denklemi ile verildiği gibi, m^* etkin kütleli negatif ve pozitif parçacıklar gibi hareket ederler.

5.8. Serbest Elektron Yaklaşımı

Yukarıdaki bölümlerde, Şekil (5.4.)'de gösterilen tam periyodik bir potansiyel modelin, Şekil (5.6.)'da gösterilen E 'ye karşı k bağıntısına ve izinli enerji bantlarının oluşumuna nasıl götürdüğünü gördük. Uygulanan kuvvet alanlarında ise elektronların dinamiği tamamen basit olarak anlatıldı ve burada $\hbar k$ niceliği "kristal momentumu" olarak alındı. Etkin kütlelerin serbest elektron kütlelerinin yerine geçtiği ve hemen hemen dolu bir bantta yük taşıyıcılarının pozitif holler gibi görüldüğü durumlar hariç, elektronik davranışın son gösterimi, serbest-elektron gösterimine tamamen benzerdi. Bu nitel sonuçların potansiyel fonksiyonu periyodik olmak şartıyla, potansiyel fonksiyonun açık şekilden bağımsız olduğunu vurguladık. Ayrıca Şekil (5.4.)'deki potansiyel fonksiyonu, Schrödinger denkleminin tam bir çözümüne izin verdiği için kabul edildi.

Gerçek kristallerde kullanılan potansiyel fonksiyonu, iyon çekirdeklerinden ve kristalin bütün diğer elektronlarından dolayı; bir elektronun gördüğü gerçek potansiyel ile ilgili olmalıdır. Bu problemin tam bir çözümü tek-elektron yaklaşımında bile olanaksızdır; bu nedenle ya serbest-elektron yaklaşımının ya da sıkı-bağlanma yaklaşımının görüş noktasından probleme yaklaşmak alışkanlık haline gelmiştir. Serbest-elektron yaklaşımı ya da sıkı-bağlanma yaklaşımından hangisi eldeki özel duruma en uygun gibi görülürse, problemde o yaklaşım seçilir.

Serbest-elektron yaklaşımında, elektronun toplam enerjisinin periyodik potansiyel enerjiden her zaman büyük olduğu varsayılır. Bu şartlar altında izinli bantlar geniş ve yasak enerji bölgeleri tamamen dar olacaktır. Bu koşullar, herhangi bir gerçek kristalde asla tamamen sağlanmaz, çünkü potansiyel, iyon çekirdeklerinde, her zaman $-\infty$ 'a gider. Fakat alkali metaller içeren birçok basit metallerde en dıştaki elektronlar için gerekli şartlar, kristal hacminin son derece büyük kısmında tamamen uygun olarak yerine getirilir.

Basitlik için tek-boyutlu bir kristal potansiyel modeli kabul ederek, Bölüm (5.3.)'den $k_2 = (2m(E - V_0)/\hbar^2)^{1/2} = ik_3$ olduğunu anımsayarak ve $V(x)$ periyodik potansiyelini,

$$[-2mV(x)/\hbar^2]=k_3f(x) \quad (5.77)$$

şeklinde yazarak, (5.22) denklemindeki Schrödinger denklemi,

$$(d^2\Psi/dx^2)+(k_0^2+k_3f(x))\Psi(x)=0 \quad (5.78)$$

olarak yazılabilir. Burada $f(x)$; örgünün periyodikliği ve k_0 ;

$$E=\hbar^2k_0^2/2m \quad (5.79)$$

eşitliğine uygun olarak E toplam enerjisi ile ilgili olur. $f(x)$, periyodik olduğu için,

$$f(x)=\sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{-2\pi i n x/a} \quad (5.80)$$

şeklinde olan bir Fourier serisi gibi ifade edilebilir. Bu denklemdeki c_n katsayısı ise,

$$c_n=(1/a) \int_0^a f(x) e^{2\pi i n x/a} dx \quad (5.81)$$

ile verilir. Burada a ; kristalin örgü sabitidir. (5.77) denkleminde c_n katsayılarının,

$$V_n=(-\hbar^2k_3/2m)c_n \quad (5.82)$$

denklemine uygun olarak bizzat periyodik potansiyelin Fourier açılım katsayıları ile ilgili olduğu açıktır. Burada V_n ; $V(x)$ 'in Fourier açılım katsayılarını verir.

Dalga fonksiyonları; $e^{ikx} u_k(x)$ Bloch şekline sahip olduğu ve $u_k(x)$; a periyotlu periyodik bir fonksiyon olduğu için bir Fourier serisi olarak ifade edilir. Sonuç olarak, $u_k(x)$ ve $\Psi(x)$,

$$u_k(x)=\sum_{n=-\infty}^{\infty} b_n e^{-2\pi i n x/a} \quad (5.83)$$

ve

$$\Psi(x)=e^{ikx} u_k(x)=e^{ikx} \sum_n b_n e^{-2\pi i n x/a} \quad (5.84)$$

şeklinde yazılabilir. Tamamen serbest elektronlar için $k_3=0$ 'dır ve buradan çözümler,

$$\Psi(x)=b_0 e^{ik_0 x} \quad (5.85)$$

şeklinde olan serbest-parçacık dalga fonksiyonları olur. Onun için genel durumda, $u_k(x) \rightarrow b_0$ ve $k \rightarrow k_0$ olduğu bu limitte, k_3 sıfıra yaklaştığı için, b_0 hariç bütün b_n 'lerin sıfıra yaklaştığını beklemeliyiz. Böylece k_3 'ün küçük değerleri için dalga fonksiyonu,

$$\Psi(x)=b_0 e^{ikx} + k_3 [e^{ikx} \sum_{n \neq 0} b_n e^{-2\pi i n x / a}] \quad (5.86)$$

şeklinde yaklaşık bir ifade olarak yazılabilir. Bu dalga fonksiyonunun,

$$u_k(x)=b_0 + k_3 \sum_{n \neq 0} b_n e^{-2\pi i n x / a} \quad (5.87)$$

denklemi ile Bloch şekline sahip olduğunu görmek kolaydır. Böylece (5.78) denklemindeki Schrödinger denkleminde (5.86) denklemini yerine koyarak,

$$b_0(k_0^2 - k^2) e^{ikx} + k_3 \sum_{n \neq 0} [(k_0^2 - k_n^2) b_n + b_0 c_n] e^{ik_n x} + k_3^2 \sum_{n \neq 0} \sum_{n' \neq 0} b_n \cdot c_{n'} e^{i[k - (2\pi n/a) - (2\pi n'/a)]x} = 0 \quad (5.88)$$

elde edilir. Burada k_n ,

$$k_n = k - (2\pi n/a) \quad (5.89)$$

ile verilir. $k_3 \rightarrow 0$ olduğu limitte çözüm ile ilgilendiğimiz için, birinci yaklaşım gibi (5.88) denklemindeki k_3^2 terimini ihmal edebiliriz. O zaman, bu denklemi başından sonuna kadar $e^{-ik_m x}$ ile çarparak ve $x=0$ 'dan $x=a$ 'ya kadar birim hücre üzerine integralini alarak,

$$b_0(k_0^2 - k^2) \int_0^a e^{2\pi i m x/a} dx + k_3 \sum_{n \neq 0} \{ [(k_0^2 - k_n^2) b_n + b_0 c_n] \int_0^a e^{2\pi i (m-n)x/a} dx \} = 0 \quad (5.90)$$

ifadesini buluruz. Eğer $m=0$ ise, ikinci integral, toplamdaki n 'nin bütün değerleri için sıfır olur. Buradan,

$$b_0(k_0^2 - k^2)a = 0 \quad \text{veya} \quad k = k_0 \quad (5.91)$$

elde ederiz. Oysa eğer $m \neq 0$ ise, ilk integral sıfır olur ve ikinci integral, $n=m$ olduğu durum hariç, sıfırı verir. Buradan,

$$k_3 [(k_0^2 - k_m^2) b_m + b_0 c_m] a = 0$$

veya

$$b_m = [b_0 c_m / (k_m^2 - k_0^2)] = [b_0 c_m / (k_m^2 - k^2)] \quad (5.92)$$

elde edilir. O zaman, (5.91) ve (5.79) denklemlerinden, E ve k arasındaki bağıntı, serbest bir parçacık için olan bağıntı gibi aynı olur. Son olarak, (5.86) denklemdeki b_n için, (5.92) denklemdeki değeri yerine koyarak, dalga fonksiyonu için,

$$\Psi(x) = b_0 e^{ikx} [1 + k_3 \sum_{n \neq 0} (c_n / (k^2 - k_n^2)) e^{-2\pi i n x/a}] \quad (5.93)$$

elde edilir.

Periyodik potansiyelden ileri gelen serbest-parçacık enerjisine birinci merteye düzeltme, (5.91) denklemine uygun olarak, sıfırdır. Bununla birlikte, ikinci merteye bir enerji düzeltmesi, (5.88) denklemdeki k_3^2 terimini alıkoyarak elde edilir. (5.88) denklemini e^{-ikx} ile çarparak ve $x=0$ 'dan $x=a$ 'ya kadar integralini alarak,

$$b_0(k_0^2 - k^2) + k_3 \sum_{n \neq 0} [(k_0^2 - k_n^2) b_n + b_0 c_n] \int_0^a e^{-2\pi i n x/a} dx + k_3^2 \sum_{n \neq 0} \sum_{n' \neq 0} b_n \cdot c_{n'} \int_0^a e^{-2\pi i (n+n')x/a} dx = 0 \quad (5.94)$$

ifadesi elde edilir. Yukarıdaki birinci integral n 'nin bütün

izinli deęerleri için sıfırdır, oysa ikinci integral, $n=-n'$ olmadıkça, sıfırdır. Böylece (5.94) denklemi,

$$b_0(k_0^2 - k^2)a + k_3^2 \sum_{n' \neq 0} b_{n'} c_{-n'} a = 0 \quad (5.95)$$

denklemine indirgenir. Eđer $f(x)$; (5.80) denklemine uygun olarak bir Fourier serisi gibi verilirse, o zaman, n yerine $-n$ 'i koyarak,

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_{-n} e^{2\pi i n x / a} \quad (5.96)$$

denklemini elde ederiz. Oysa, (5.80) denkleminin her iki tarafının kompleks eşleniğini alarak ve $f(x)$; gerçekte bir fonksiyon olduđu için, $f^*(x) = f(x)$ olduđunu not ederek, (5.96) denklemi,

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n^* e^{2\pi i n x / a} \quad (5.97)$$

şeklinde de yazılabilir. Verilen bir fonksiyonun gösterimi ile birleşmiş Fourier katsayıları tek olduđu için,

$$c_{-n} = c_n^* \quad (5.98)$$

eşitliğine sahip oluruz. b_n katsayıları için; (5.92) denklemindeki birinci yaklaşım ifadesini ve (5.98) bağıntısını kullanarak, (5.95) denklemi,

$$\begin{aligned} k_0^2 &= k^2 + k_3^2 \sum_{n \neq 0} [c_n^* c_n / (k^2 - k_n^2)] \\ &= k^2 + k_3^2 \sum_{n \neq 0} [c_n^* c_n / \{k^2 - (k - (2\pi n/a))^2\}] \end{aligned} \quad (5.99)$$

şeklinde yazılabilir. E ve V_n 'e göre bu sonucu ifade etmek için, (5.79) ve (5.82) denklemlerini kullanarak,

$$E = (\hbar^2 k^2 / 2m) + \sum_{n \neq 0} |V_n|^2 / \{ (\hbar^2 k^2 / 2m) - [(\hbar^2 / 2m) (k - (2\pi n/a))^2] \} \quad (5.100)$$

olduđunu göstermek kolaydır.

Bu çözümler, ancak k^2 ; k_n^2 değerlerinin çözümlerine yaklaşmamak şartıyla geçerlidir. Eğer n 'nin herhangi bir değeri için $k^2 = k_n^2$ ise, (5.93) denklemdeki toplama terimlerinden paydalarındaki $k^2 - k_n^2$ niceliklerinden biri (yani, n 'nin herhangi bir değeri için tekabül eden $k^2 - k_n^2$ niceliği) sıfıra yaklaşacaktır ve bu terim, k_3 'ün çok küçük olduğu olgusuna rağmen, oldukça büyük kalacaktır. Bu durumda, (5.86) denklemde varsayılan ifade, dalga fonksiyonu için iyi bir yaklaşım değildir ve başka bir şekil kullanılmalıdır. Eğer $k^2 = k_n^2$ ise, o zaman,

$$k = \pm k_n = \pm k + (2\pi n/a) \quad (5.101)$$

denklemini geçerli olacaktır. Üstteki işaret için bu denklem, herhangi bir durumda (5.93) denkleminden çıkarılan ve bu nedenle özel yararı olmayan, $n=0$ 'ı verir; alttaki işaret için ise bu denklem, n hem pozitif hem de negatif değerler aldığı için, bütün bant kenar noktalarını veren,

$$k = n\pi/a \quad (5.102)$$

değerini elde eder. Bu noktalar civarında k 'nin değerleri için ayrı bir işlemden yararlanmak zorunda kalacağız.

Şimdi $k_n = k - (2\pi n/a) \approx -n\pi/a$ 'dan, $k \approx n\pi/a$ olduğunu varsayalım. O zaman $k_n^2 = k^2$ ve b_n çok büyük olacaktır, onun için (5.93) denklemindeki $k_3 b_n$ niceliği, k_3 küçük olduğu halde bile, artık küçük olacaktır. Bu durumda, n 'inciye göre karşılaştırıldığında ihmal edildiği halde; (5.93) denkleminin toplamındaki diğer terimleri gözönünde tutan,

$$\begin{aligned} \psi(x) &= b_0 e^{ikx} + k_3 b_n e^{ikx} e^{-2\pi i n x/a} \\ &= b_0 e^{ikx} + k_3 b_n e^{ik_n x} \end{aligned} \quad (5.103)$$

şeklinde yaklaşık bir dalga fonksiyonu yazabiliriz. Bant kenarında $k_n = -k$ olduğu için, (5.103) denklemdeki dalga fonksiyonu, pozitif x -ekseni boyunca yayılan bir dalganın ve ters yönde ya-

yılan bir dalğanın üstüste gelmesidir; böylece bu dalga fonksiyonu, duran bir dalğanın karakterine sahip olur. Bu fiziksel durum, elektron dalga fonksiyonunun $k=\pm n\pi/a$ 'da Bragg yansımaya uğradığı görüşü ile uyum içindedir. Eğer (5.103) denklemindeki dalga fonksiyonu, (5.78) denklemindeki Schrödinger denkleminde yerine konursa, (5.80) denklemini kullanarak,

$$\begin{aligned} & b_0(k_0^2 - k^2)e^{ikx} + k_3 b_n(k_0^2 - k_n^2)e^{i(k - (2\pi n/a))x} + \\ & k_3 b_0 \sum_{n' \neq 0} c_{n'} e^{i(k - (2\pi n'/a))x} + \\ & k_3^2 b_n \sum_{\substack{n' \neq 0 \\ n' \neq 0}} c_{n'} e^{i(k - (2\pi n/a) - (2\pi n'/a))x} = 0 \end{aligned} \quad (5.104)$$

elde edilir. (5.104) denklemini başından sonuna kadar e^{-ikx} ile çarparak ve $x=0$ 'dan $x=a$ 'ya kadar integralini alarak, ikinci ve üçüncü terimlerin hiç katkıda bulunmadığı ve dördüncü terimden ise bir katkının, ancak $n'=-n$ olduğu zaman elde edildiği kolayca görürülür; o zaman bu işlemin son neticesi,

$$(k_0^2 - k^2)b_0 + k_3^2 c_n^* b_n = 0 \quad (5.105)$$

olarak bulunur. Aynı şekilde, (5.104) denklemini başından sonuna kadar $e^{-ik_n x} = e^{-i(k - (2\pi n/a))x}$ ile çarparak ve yukarıdaki gibi integralini alarak, sonuçta,

$$c_n b_0 + (k_0^2 - k_n^2)b_n = 0 \quad (5.106)$$

denklemini elde ederiz. Yukarıdaki bu iki denklem, b_0 ve b_n 'i belirleyen homojen denklemlerin bir grubu gibi görülebilir. Aslında, $b_0 = b_n = 0$ 'dan başka çözümler, sistemin determinantı ancak sıfır olursa, yani ancak,

$$\begin{vmatrix} k_0^2 - k^2 & k_3^2 c_n^* \\ c_n & k_0^2 - k_n^2 \end{vmatrix} = (k_0^2 - k^2)(k_0^2 - k_n^2) - k_3^2 c_n^* c_n = 0 \quad (5.107)$$

olursa bulunur. Bu denklem k_0^2 ile ikinci derecedendir ve so-

nuç olarak, alışılmış yolla,

$$k_0^2 = (1/2) [(k^2 + k_n^2) \pm \sqrt{(k^2 - k_n^2)^2 + 4k_3^2 c_n^* c_n}] \quad (5.108)$$

şeklinde çözülebilir. Buradan (5.79), (5.92), ve (5.89) denklemlerini kullanarak, $E(k)$,

$$E(k) = (\hbar^2/4m) [k^2 + (k - (2\pi n/a))^2 \pm \sqrt{\{k^2 - (k - (2\pi n/a))^2\}^2 + (4m|V_n|/\hbar^2)^2}] \quad (5.109)$$

gibi ifade edilebilir.

$k = k_n = n\pi/a$ 'daki bant kenarında ve bu noktalarda (5.109) denklemi,

$$E = E_n \pm |V_n| \quad (5.110)$$

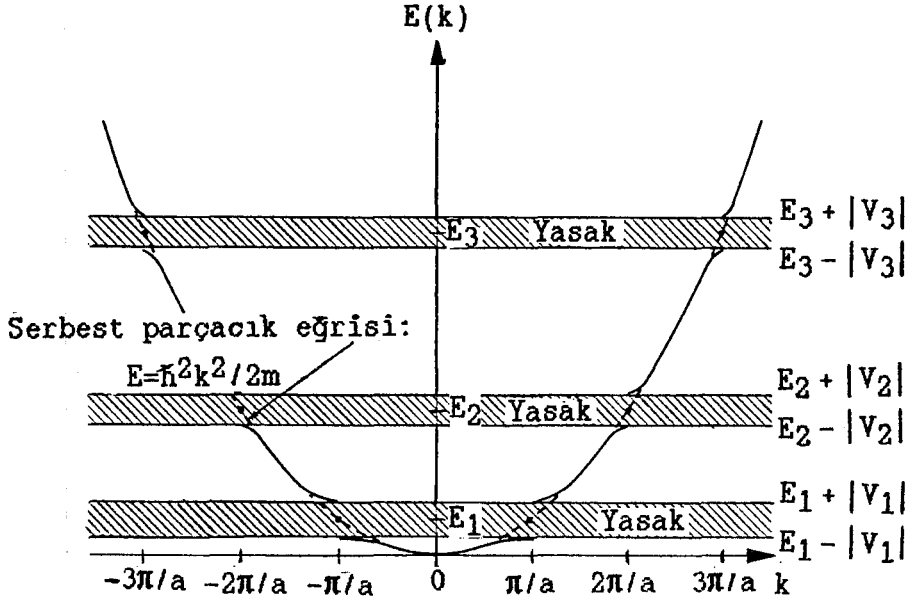
denklemine indirgenir. Burada E_n ,

$$E_n = (\hbar^2/2m) (n\pi/a)^2 \quad (5.111)$$

gibi verilen bant kenar noktaları ile birleşmiş serbest-parçacık enerjisini gösterir. Ayrıca, $k = n\pi/a$ değerlerinde elektronlar kırınımına uğrar.

Daha önceki bölümlerden, $k = \pm n\pi/a$ bant kenar noktalarında iç Bragg yansımalarının yer aldığını ve E 'ye karşı k eğrisine bir süreksizlik veya "enerji aralığı" eşlik ettiğini gördük. Bu noktalarda elektronun grup hızı gerçekten sıfırdır. Bu olgu, Bragg yansıması ile her zaman birleşen duran dalgalar için beklenir ve (5.109) denkleminden sağlanabilir. Bu nedenle, (5.110) denklemi, genişliği $2|V_n|$ olan bir enerji aralığı veya yasak bant anlamına geliyormuş gibi yorumlanacaktır. Burada V_n ; periyodik örgü potansiyelinin Fourier seri açılımındaki n 'inci Fou-

rier katsayısıdır. $n\pi/a$ 'dan büyüklük olarak daha büyük olan k değerleri için $E(k)$ 'nin, (5.110) denklemine göre verilen değerden daha büyük olduğunu ve (5.92) ile (5.100) denklemlerine yol gösteren işlemin yerinde olması için k^2 'nin; yeteri kadar küçük



Şekil 5.17. (5.100) ve (5.109) denklemlerinden elde edildiği gibi serbest elektron yaklaşımı için E 'ye karşı k bağıntısının şematik gösterimi. Elektronun E enerjisi V 'den büyük olduğu zaman serbest elektron yaklaşımı oluyor. Bant içinde elektron serbest olarak davranıyor. Tam bant sınırlarında elektron geçemeyince kırınım (iç Bragg yansımaya) uğruyor.

$k_3 b_n$ vermek maksadıyla yeterli bir miktar ile k_n^2 'den farklı olduğunda; (5.91) denklemi ile verilmiş serbest elektron değerine yaklaştığını bekleriz. Aynı şekilde, $n\pi/a$ 'dan büyüklük olarak daha küçük olan k değerleri için $E(k)$ 'nin, (5.110) denklemine göre verilen değerden daha küçük olduğu ve ayrıca k^2 ; yeterli bir miktar ile k_n^2 'den farklı olduğu zaman; daha önce elde edilen çözümlere yaklaştığı beklenmelidir. Bu koşullar, (5.109) denklemindeki artı işaret $k > n\pi/a$ için ve eksi işaret $k < n\pi/a$ için

seçilirse uyacaktır. Bant kenarına yakın bölgeler için (5.109) denklemindeki çözüm, bant kenarları arasındaki bölgeler için (5.91) denklemdeki çözüm veya (5.100) denklemdeki daha iyi ikinci yaklaşım, yukarıda tanımlandığı gibi seçilmiş olan işaretle gözönüne alınarak, Şekil (5.17.)'de açıklandığı gibi, E ve k arasında bir bağıntıya götürürler.

Bu şekilden, E'ye karşı k eğrilerinin bant kenar noktaları yakınında şekil olarak takriben parabolik olduğu açıktır. Etkin kütle, (5.109) denkleminin doğrudan doğruya türevini alarak, (5.59) denkleminde kurulabilir. Bu hesaplama çok karışıktır ve burada, (5.109) denklemine,

$$k = (n\pi/a) + k' \quad (5.112)$$

denklemini koyarak devam etmek az çok daha kolaydır. (5.112) denklemdeki k' ; π/a ile karşılaştırıldığında küçüktür. O zaman az bir cebirsel işlemde sonra, (5.109) denklemi, (5.112) denklemini kullanarak,

$$E(k) = (\hbar^2/2m) [(n\pi/a)^2 + k'^2 + (m\Delta E/\hbar^2) \sqrt{1 + 4k'^2 (n\pi/a)^2 (\hbar^2/m\Delta E)^2}] \quad (5.113)$$

şeklinde yazılabilir. Burada ΔE ,

$$\Delta E = 2|V_N| \quad (5.114)$$

şeklinde olup, $k = n\pi/a$ 'da yasak enerji bölgesinin genişliğini gösterir. Üstteki bandın altına yakın noktalar için k' çok küçüktür ve (5.113) denklemdeki kök, yaklaşık olarak,

$$E(k) = E_N + (1/2)\Delta E + (\hbar^2 k'^2/2m) [1 + (4E_N/\Delta E)] \quad (5.115)$$

denklemini vermek için binominal teoremine uygun olarak açılabilir. Burada E_N ; (5.111) denklemi ile verilir. $E(k)$ 'nin iki kez türevini alarak ve (5.59) denklemini kullanarak, etkin kütle,

$$\begin{aligned}
m^* &= \hbar^2 / (d^2E/dk^2) = \hbar^2 / (d^2E/dk'^2) \\
&= m / (1 + (4E_n / \Delta E))
\end{aligned}
\tag{5.116}$$

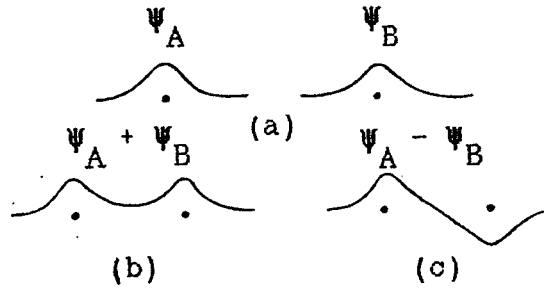
şeklinde olduğu kolaylıkla görülür. Daha aşağı bandın üstüne yakın holler için etkin kütlelerin, elektronlar için (5.116) denklemi ile verilen değer gibi aynı olduğu az çok benzer bir şekilde gösterilebilir.

5.9.Sıkı Bağlanma Yaklaşımı

Serbest-elektron yaklaşımında, elektronun potansiyel enerjisinin; elektronun toplam enerjisine göre karşılaştırıldığında küçük olduğu varsayıldı. Bu yaklaşıma, izinli ve yasak enerji bantları bulunan yaklaşık bir işlem olarak ulaşıldı. Burada yasak bantların genişliği, izinli bantların genişliği ile karşılaştırıldığında küçük olur. Sıkı bağlanma yaklaşımı ise zıt görüşten, yani elektronun potansiyel enerjisinin; toplam enerjinin hemen hemen tümünden sorumlu olduğu görüşünden doğar. Bu kez izinli enerji bantları yasak bantlara kıyasla dardır. Serbest elektron modelinde kristalin atomları, komşu atomlardaki elektronlar için dalga fonksiyonları büyük bir genişliğe kadar üstüste gelen birbirine çok yakın atomlar olarak varsayılırlar. Böylece komşu atomlar arasında kuvvetli bir etkileşim vardır ve ileri gelen kristalin izinli enerji durumları, kristali oluşturan ferdi atomların atomik dalga fonksiyonları ile az bir benzerlik taşır. Bununla birlikte, sıkı bağlanma yaklaşımı, kristalin atomları; komşu atomlar ile birleşmiş elektronlar için dalga fonksiyonları ancak küçük bir genişliğe kadar üstüste gelen çok çok ayrı atomlar olduğu varsayımı üzerine kurulur. Bu durumda komşu atomlar arasındaki etkileşim nispeten zayıf olacaktır ve bir bütün olarak kristalin dalga fonksiyonları ve izinli enerji seviyeleri, izole edilmiş atomların dalga fonksiyonları ve enerji seviyeleri ile yakından ilgili olacaktır. İki yaklaşımdan hangisi sorusu, herhangi bir verilen durum için doğrudur ve elbette, eldeki özel materyal üzerine bağlı olur. Bazı maddelerde serbest elektron yaklaşımı oldukça iyidir, oysa diğer maddeler için sıkı bağlanma yaklaşımı çok daha yakından doğrudur. Ayrıca,

her iki yaklaşımında çok iyi olmadığı ve iki aşırı olay olduğu kristaller de vardır.

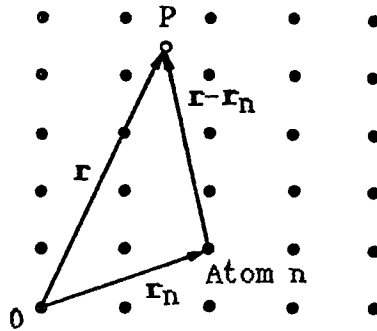
Şimdi izole edilmiş nötral atomlarla başlayalım ve bu atomlar bir kristal oluşturacak şekilde bir araya getirildiğinde bitişik atomların yük dağılımları üstüste taşarken atomik enerji düzeylerindeki değişimleri gözleyelim. Her bir elektronu 1s taban durumunda olan iki hidrojen atomunu ele alalım. İzole edilmiş atomlardaki Ψ_A, Ψ_B dalga fonksiyonları Şekil (5.18.a.)'da gösterilmiştir. Atomlar bir araya getirilirken ve dalga fonksiyonları üstüste taşarken iki $\Psi_A + \Psi_B$ birleşimini ele alırız. Herbir birleşim elektronları iki proton ile paylaşır, ancak $\Psi_A + \Psi_B$ durumundaki bir elektronun $\Psi_A - \Psi_B$ durumundakinden biraz daha az bir enerjisi olacaktır. Şekil (5.18.b.)'deki $\Psi_A + \Psi_B$ 'de elektron zamanının bir kısmını iki proton arasındaki orta bölgede harcar ve bu bölgede aynı zamanda her iki protonun çekici potansiyeli içindedir, buradan bağlanma enerjisi artar. Şekil (5.18.c.)'deki $\Psi_A - \Psi_B$ 'de olasılık yoğunluğu çekirdekler arasındaki orta bölgede kaybolur; fazladan bir bağlanma görülmez. İki atom biraraya gelince, ayrık tek atomun her bir düzeyi için ayrılmış iki enerji düzeyi oluşur. N atom varsa, ayrık tek atomun herbir yörüngesi için N yörünge oluşur.



Şekil 5.18. (a) Büyük uzaklıkta iki hidrojen atomu üzerindeki elektronların dalga fonksiyonları gösterimi. (b) Yakın uzaklıkta taban durum dalga fonksiyonu. (c) Uyarılmış durum dalga fonksiyonu.

Serbest atomlar biraraya getirilince, atom kolları ve elektron arasındaki Coulomb etkileşmesi enerji düzeylerini yarar ve onları bantlar şeklinde genişletir. Serbest atomun verilen kuantum sayısının her bir durumu kristalde bir enerjiler bandı şeklinde genişler. Bu bandın genişliği, komşu atomlar arasındaki üste taşma etkileşmesinin şiddetiyle orantılıdır. Serbest atomların p, d durumlarından ($l=1,2,\dots$) oluşan bantlar olacaktır. Serbest atomdaki dejenere olmuş durumlar farklı bantlar oluşturacaktır. Herbirinin, dalgavektörünün herhangi önemli erişimi boyunca herhangi diğer bir bant ile aynı enerjisi olmayacaktır. Bantlar, enerjiye göre Brillouin bölgesinde \mathbf{k} 'nın belli değerlerinde çakışabilir.

Sıkı bağlanma yaklaşımı, serbest atomların dalga fonksiyonundan yola çıkan bir yaklaşımdır. Bu yaklaşım atomların iç elektronları için oldukça iyidir, ama çoğu kez iletim elektronlarının kendilerinin iyi bir betimlemesi değildir. Bu, geçiş metallerinin d bantlarını ve elmas benzeri ve asal gaz kristallerinin değerlik bantlarını yaklaşık olarak betimlemede kullanılır.



Şekil 5.19. Sıkı bağlanma yaklaşımının hesaplamasında kullanılan vektör geometri.

Yukarıda, sıkı bağlanma yaklaşımında kristal dalga fonksiyonlarının, izole edilmiş atomların dalga fonksiyonları üzerine kurulduğunu söylemiştik. Eğer izole edilmiş bir atomla birleşmiş potansiyel fonksiyonu $V_0(\mathbf{r})$ ise, o zaman Schrödinger denkleminin çözümleri,

$$H_0\psi = \nabla^2\psi + (2m/\hbar^2)(E - V_0(\mathbf{r}))\psi = 0 \quad (5.117)$$

denklemindeki gibi, atomun elektronik dalga fonksiyonlarını temsil ederler. Taban durum dalga fonksiyonu Ψ_0 'ın dejenere olduğunu ve taban durum enerjisi E_0 'a uyduğunu varsayalım. Eğer bu tipin atomlarının büyük bir sayısı, taban-durum dalga fonksiyonunun büyük olduğu her bir ferdi atom etrafındaki bölgelerde potansiyel değerinin komşu atomların varlığına hemen hemen etki etmediği bu gibi bir yolla periyodik örgüye birleşirse, o zaman (her halde, bu son derece sımsıkı bağlı durumlar için) kristal dalga fonksiyonu, Şekil (5.19.)'da gösterildiği gibi bağlı olan \mathbf{r} ve \mathbf{r}_n vektörleri ile,

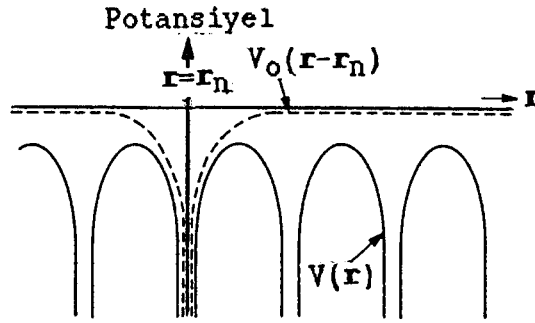
$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_n a_n \Psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) \quad (5.118)$$

şeklinde olan atomik dalga fonksiyonlarının bir lineer süperpozisyonu gibi yazılabilir. Burada P konumundaki dalga fonksiyonunu istiyoruz. Toplam, kolaylık için büyüklük olarak sonsuz olduğunu varsaydığımız kristalin bütün atomları üzerine alınmıştır. Kristalin bütün atomları eşdeğer olduğu için; bütün a_n katsayılarının mutlak değeri aynı olmalıdır. Bu nedenle bu katsayılar $a e^{i\phi_n}$ şeklinde ifade edilebilir, burada a ve ϕ_n gerçek niceliklerdir. Aynı sebepten, herhangi bir verilen kristal eksenini boyunca komşu atomların her bir çifti arasındaki ϕ faz farkı aynı olmalıdır, ancak bu ϕ faz farkı her üç eksen boyunca aynı olmak zorunda değildir. Bu durum, sabit bir \mathbf{k} vektörü ile $\phi_n = \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_n$ faz faktörünün seçimine götürür. Son olarak, eğer Ψ_0 fonksiyonları, bütün uzay üzerine alınan integrallerinin bir olduğu gibi, normalize edilirse ve eğer bu normalize etmeyi devam ettirmek istersek, $a=1$ almalıyız. O zaman, (5.118) denklemini,

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_n e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_n} \Psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) \quad (5.119)$$

şeklinde yazabiliriz. Görüldüğü gibi bu denklem, (5.15) denkleminde verildiği gibi bir Bloch fonksiyon şekline sahip olur.

Bu dalga fonksiyonları, Şekil (5.20.)'den görüldüğü gibi, periyodik potansiyel fonksiyon ile bütün kristal için Schrödinger denkleminin uyarlar, yani,



Şekil 5.20. Sıkı bağlanma yaklaşımının hesaplamalarında kullanılan potansiyel fonksiyonları.

$$H \Psi_{\mathbf{k}} = [(-\hbar^2/2m)\nabla^2 + V(\mathbf{r})] \Psi_{\mathbf{k}} = E \Psi_{\mathbf{k}} \quad (5.120)$$

olur. Burada H Hamiltoniyeni, parçacığın toplam enerjisini temsil eden kuantum operatörüdür. Böylece $H = (-\hbar^2/2m)\nabla^2 + V(\mathbf{r})$ 'dir. Burada sağdaki ilk terim kinetik enerjiyi, ikinci terim ise potansiyel enerjiyi temsil eder. Buna göre toplam Hamiltoniyen H ,

$$H = H_0 + H' \quad (5.121)$$

şeklinde iki kısmın toplamı olarak yazılabilir. Burada H_0 ve H' ,

$$H_0 = (-\hbar^2/2m)\nabla^2 + V_0(\mathbf{r}-\mathbf{r}_n) \quad (5.122)$$

$$H' = V(\mathbf{r}) - V_0(\mathbf{r}-\mathbf{r}_n) \quad (5.123)$$

ile verilirler. Ayrıca, (5.117) denkleminde $H_0 \Psi_0 = E_0 \Psi_0$ olduğu açıktır. Buradan, (5.119) denklemini kullanarak,

$$\begin{aligned} H_0 \Psi_{\mathbf{k}} &= \sum_n e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_n} H_0 \Psi_0(\mathbf{r}-\mathbf{r}_n) \\ &= E_0 \sum_n e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_n} \Psi_0(\mathbf{r}-\mathbf{r}_n) \\ &= E_0 \Psi_{\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (5.124)$$

denklemini yazabiliriz. Şimdi,

$$\begin{aligned}
\langle E \rangle = \langle H \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) e^{iEt/\hbar} H \Psi(x) e^{-iEt/\hbar} dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) H \Psi(x) dx \quad (5.125)
\end{aligned}$$

denklemine göre E enerjisi, Hamiltoniyen operatörünün beklenen değerini ele alarak ve (5.121) ile (5.124) denklemlerini kullanarak,

$$\begin{aligned}
E &= \frac{\int_{\vartheta} \Psi_{\mathbf{k}}^* (H_0 + H') \Psi_{\mathbf{k}} d\vartheta}{\int_{\vartheta} \Psi_{\mathbf{k}}^* \Psi_{\mathbf{k}} d\vartheta} \\
&= E_0 + \frac{\int_{\vartheta} \Psi_{\mathbf{k}}^* \sum_n e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_n} [V(\mathbf{r}) - V_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)] \Psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) d\vartheta}{\int_{\vartheta} \Psi_{\mathbf{k}}^* \Psi_{\mathbf{k}} d\vartheta} \quad (5.126)
\end{aligned}$$

şeklinde bulunabilir. Farklı örgü yerlerinde merkezlenmiş atomik dalga fonksiyonlarının küçük üstüste binmesini ihmal etmek şartıyla, Ψ_0 fonksiyonlarının normalizasyon özellikleri ve (5.119) denkleminin tanımı, $\int_{\vartheta} \Psi_{\mathbf{k}}^* \Psi_{\mathbf{k}} d\vartheta$ integralinin, kristaldeki atomların sayısı N'e eşit olmasını gerektirir. Bu olgudan yararlanarak ve (5.126) denkleminin payındaki $\Psi_{\mathbf{k}}^*$ için (5.119) denklemi ile verilen değeri yerine koyarak,

$$\begin{aligned}
E &= E_0 + (1/N) \sum_n \left\{ \sum_m e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m)} \int_{\vartheta} \Psi_0^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_m) [V(\mathbf{r}) - V_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)] \Psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) d\vartheta \right\} \\
&\quad (5.127)
\end{aligned}$$

denklemini elde ederiz. Bu denklemden, kristalin periyodikliğinden dolayı ve m'in bütün değerleri üzerine toplanmasından do-

layı, n üzerine toplamının her bir teriminin aynı değer verdiğini görmek zor değildir. O zaman, n üzerine toplamın değeri, sadece toplamının herhangi bir teriminin değerinin; (mesela, kolaylık için, $n=0$ 'a uygun değerinin); N olan toplamdaki terimlerin sayısıyla çarpımıdır. Şu halde, (5.127) denklemini,

$$E(\mathbf{k})=E_0+\sum_m e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_m} \int_{\mathcal{V}} \Psi_0^*(\mathbf{r}-\mathbf{r}_m) [V(\mathbf{r})-V_0(\mathbf{r})] \Psi_0(\mathbf{r}) d\mathcal{V} \quad (5.128)$$

şeklinde yazabiliriz. Burada toplam, kristalin bütün atomları üzerine alınmıştır. Bununla birlikte, toplamdaki terimlerin katkıları, r_m arttığı için çok hızlı olarak azalır. Çünkü, Ψ_0 dalga fonksiyonu, mesafe ile genellikle çok hızlı olarak azalmaktadır ve (5.128) denklemindeki integrallerin büyüklükleri, esasen r_m mesafeleri ile ayrılmış atomlar üzerinde merkezlenmiş iki dalga fonksiyonu arasında üstüste bindirilen miktar ile düzenlenmektedir. Bu nedenle, sadece en yakın komşu terimleri dikkate almak çoğu kez oldukça iyi bir yaklaşımdır. Buna göre, (5.128) denkleminde, en yakın komşu katkıların dışındaki bütün terimleri ihmal edeceğiz. Ayrıca Ψ_0 dalga fonksiyonlarının, küresel olarak simetrik olduğunu da varsayacağız. Bu koşullar altında; bütün en yakın komşu katkıları aynı olacaktır. İzole edilmiş atomdaki taban durum elektronik konfigürasyonunun p-durumlarına yayılması oldukça kolay olduğu halde, yukarıdaki işlemimiz, örneğin; alkali metallerde olduğu gibi, bir s-durumunun elektronik konfigürasyonuna sınırlanır.

$m=0$ durumu için, (5.128) denklemindeki integral,

$$\int_{\mathcal{V}} \Psi_0^*(\mathbf{r}) [V(\mathbf{r})-V_0(\mathbf{r})] \Psi_0(\mathbf{r}) d\mathcal{V} = -\mu_1 \quad (5.129)$$

şeklinde olur. Oysa en yakın komşu atomlar için bu integral,

$$\int_{\mathcal{V}} \Psi_0^*(\mathbf{r}-\mathbf{r}_m) [V(\mathbf{r})-V_0(\mathbf{r})] \Psi_0(\mathbf{r}) d\mathcal{V} = -\mu_2 \quad (5.130)$$

şeklinde olacaktır. Burada r_m , en yakın bir komşu atom ile başlangıç noktasındaki atomu birleştiren bir vektördür. $m=0$ 'da atom kendi başına kabul edilir. Üstüste gelen integrallerin gerçek hesaplaması oldukça zor ve sıkıcı olduğu için, $-\mu_1$ ve $-\mu_2$ olarak yukarıda tanımlanan bu niceliklere göre sonuçlarımızı ifade etmek daha kolaydır. Bu koşullar altında (5.128) denklemi,

$$E(\mathbf{k})=E_0-\mu_1-\mu_2\sum_m e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_m} \quad (5.131)$$

şeklinde yazılabilir. Burada toplama, sadece en yakın komşu atomlar üzerine alınmıştır. Basit kübik bir kristalin durumunda, r_m vektörünün bileşenleri,

$$\mathbf{r}_m=(\pm a,0,0) , (0,\pm a,0) , (0,0,\pm a) \quad (5.132)$$

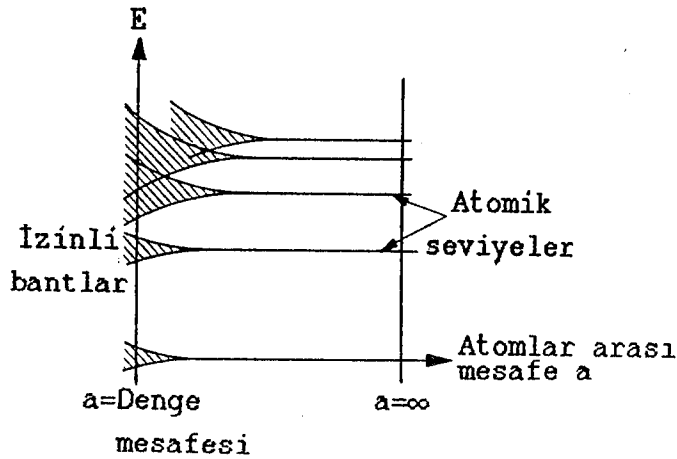
denklemi gibi ifade edilebilir. Burada a ; örgü sabitidir. 0 zaman (5.131) denklemi,

$$E(\mathbf{k})=E_0-\mu_1-2\mu_2(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) \quad (5.133)$$

şeklinde verilir. Bu denklemde $k_x=k_y=k_z=0$ olduğunda ancak kosinüslü terimlerin toplamı en büyük üç olur ve bu durumda enerji minimumdur. Bu denklemde, k_x , k_y ve k_z olan farklı değerlere uygun izinli enerji değerlerinin bir aralığı bulunduğu açıktır. Böylece izinli durumlar, serbest elektron yaklaşımında verildiği gibi hemen hemen aynı yolla, bir enerji bandı oluştururlar. (5.133) denklemdeki enerji, parantez içindeki terim $+3$ olduğunda minimum ve -3 olduğunda maksimum olur.

Enerjinin minimum değeri, (5.133) denklemine uygun olarak $k_x=k_y=k_z=0$ noktasında, yani \mathbf{k} -uzayında (k_x, k_y, k_z) ortogonal koordinatlar içeren bir grafiğin başlangıç noktasında olur. Maksimum değerler, koordinatları $(\pm\pi/a, \pm\pi/a, \pm\pi/a)$ olan \mathbf{k} uzayında bir küpün köşelerinde meydana gelir. Burada \mathbf{k} -uzayının koordinatları, sekiz köşe noktası meydana getirmek için alınmış olan üç koordinat arasındaki $+$ ve $-$ işaretlerin bütün permütasyonlarını içermektedir. Bu noktalarda yukarıdaki her bir kosinüs terimi -1

değerini alır. Maksimum enerji noktaları ile minimum enerji arasında enerji farkı, (5.133) denkleminde, $12\mu_2$ olur. Bu fark, izole edilmiş atomun ilgili s-durumuna uygun enerji bandının genişliğidir. Eğer en yakın komşu atomlar oldukça ayrıysalar, o zaman (5.130) denklemindeki integralde $\Psi_0(\mathbf{r})\Psi_0(\mathbf{r}-\mathbf{r}_m)$ çarpanı ile ifade edildiği gibi $\Psi_0(\mathbf{r})$ ve $\Psi_0(\mathbf{r}-\mathbf{r}_m)$ dalga fonksiyonlarının üstüste binmesi çok küçük olur. Çünkü bu integral, (5.130) denklemi ile verilen μ_2 değerini verir. Atomik mesafelerin büyük olduğu sınırdaki (yani, sıkı-bağlanma yaklaşımı hesaplamalarının gerçekten iyi olduğu sınırdaki) izinli enerji bantları dardır ve aralık sonsuz olduğu zaman, atomik s-durumu enerji seviyesine uygun olarak tek bir kesikli enerji değerine yaklaşır. Atomik mesafe ile bant genişliğinin bu değişimi, şematik olarak Şekil (5.21.)'de gösterilmiştir.



Şekil 5.21. İzole edilmiş atomlar kristal örgüye bağlandığı sırada kesikli atomik enerji seviyelerinin bantlara yarılmasının şematik gösterimi.

x-yönünde hareket eden bir elektron için $k_y=k_z=0$ 'dır. Eğer momentum, $k_x \ll \pi/a$ olduğunda yeterince küçükse, elektron enerji bandının altına yakın olacaktır. Bu şartlarda, $\cos k_x a$ terimini seri açarak, (5.133) denklemi,

$$E(k_x) = E_0 - \mu_1 - 2\mu_2 \left(3 - (k_x^2 a^2 / 2) \right) \quad (5.134)$$

ile verilir. Burada E'ye karşı k_x bağıntısının parabolik olduğu açıktır ve bu nedenle elektron, aslında serbest bir elektron gibi davranır. $\hbar k_x$ niceliği, her zaman olduğu gibi, bir kristal momentum vektörü olan $\mathbf{p}=\hbar\mathbf{k}$ 'nin x-bileşeni olarak yorumlanabilir. Buradan, etkin kütle,

$$m^* = \hbar^2 / (d^2E/dk_x^2) = \hbar^2 / (2\mu_2 a^2) \quad (5.135)$$

ile verilir. (5.133) denkleminin simetrisinden dolayı, küçük momentumlar için y- ve z- yönündeki hareket ile birleşmiş etkin kütle, (5.135) denklemiyle verilen etkin kütle ile aynı olduğu açıktır. Bu nedenle etkin kütle, yönden bağımsız veya izotropik olacaktır. Özellikle, kübik olmayan kristallerde her zaman böyle değildir. Etkin kütle, çoğu kez anizotropiktir ve bir tensör gibi görülmelidir. Buradan, (5.135) denkleminde de görüldüğü gibi, a örgü mesafesi arttığı sırada etkin kütle de azaldığı sonucu ortaya çıkar. Ayrıca tamamen tersi de doğrudur. Çünkü a arttığı sırada çakışma integrali μ_2 çok daha hızlı azaldığından, $\mu_2 a^2$ çarpımı, artan örgü mesafeleri ile hızlı olarak azalır. Buna göre, aşırı sıkı bağlanma sınırında, (5.135) denkleminde uygun olarak bir elektron çok "ağır" olur. Bu sonuç, elektronun bir atomdan başka bir atoma kolaylıkla transfer edilemeyeceği gerçeğini ifade eder.

Buraya kadar, her bir serbest atomun bir yörüngesini ele aldık ve bir $E(\mathbf{k})$ bandı elde ettik. Dejenere olmamış atomik düzeye karşı gelen bu banttaki yörüngelerin sayısı, N atom için $2N$ 'dir. Bunu şu şekilde gösterebiliriz: bildiğimiz gibi birinci Brillouin bölgesindeki \mathbf{k} 'nin değerleri bağımsız dalga fonksiyonlarını tanımlar. Basit kübik için $-\pi/a < k_x < \pi/a$ aralığı birinci Brillouin bölgesidir. Bu bölge hacmi $8\pi^3/a^3$ 'dür. \mathbf{k} -uzayı birim hacmi başına yörüngeler sayısı, her iki spin yönelmesini sayarak, $V_H/4\pi^3$ 'dür. Bu ikisinin çarpımından yörüngeler sayısı $2V_H/a^3$ 'dür. Burada V_H ; kristalin hacmi ve $1/a^3$; birim hacim başına atomlar sayısıdır. Böylece $2N$ yörünge olduğu görülür.

Sekiz en yakın komşusu olan "bcc" yapı için,

$$E(\mathbf{k})=E_0-\mu_1-8\mu_2[\cos(1/2)k_x a \cdot \cos(1/2)k_y a \cdot \cos(1/2)k_z a]$$

olur. Oniki en yakın komşusu olan "fcc" yapı için ise,

$$E(\mathbf{k})=E_0-\mu_1-4\mu_2[\cos(1/2)k_y a \cdot \cos(1/2)k_z a + \cos(1/2)k_z a \cdot \cos(1/2)k_x a + \cos(1/2)k_x a \cdot \cos(1/2)k_y a]$$

denklemini elde ederiz.

Sıkı-bağlanma yaklaşımının bu tartışmasında, bir atomik düzeyin katıdaki atomlar arasındaki etkileşmenin sonucu olarak bir banda nasıl genişlediğini gördük. Bu şekilde, herbir atomik düzey, kendisine karşılık gelen banda yol açar ve herbir bant, kaynaklandığı atomik düzeyin karakterini yansıtır.

Sonuçta, hem serbest-elektron yaklaşımı hem de sıkı-bağlanma yaklaşımının aynı niteliksel sonuçlara yol açtığı ve bu yaklaşımların tamamen zıt görüşlerden ortaya çıktığı görülmektedir. Her iki yaklaşımda ulaşılan temel sonuçlar şunlardır:

- (a) Enerji boşlukları bölge sınırında ortaya çıkar.
- (b) Bant tabanı yakınındaki elektron, pozitif etkin kütleli serbest bir parçacık gibi davranır.
- (c) Bant tepesi yakınındaki elektron, negatif etkin kütleli serbest bir parçacık gibi davranır.

5.10. Magnetik Alanda Elektron Dinamiği

Magnetik alanın metale uygulanması iletim elektronlarından doğan çeşitli ilginç etkilere yol açar. Cyclotron rezonansı ve Hall olayı, iletim elektronlarının özelliklerini araştırmada kullanacağımız etkilerden ikisidir.

5.10.1. Cyclotron Rezonansı

Serbest bir elektronun momentumu dalgavektörüne $m\mathbf{v}=\hbar\mathbf{k}$ ile bağlıydı. Bir \mathbf{E} elektrik ve \mathbf{B} magnetik alanında $(-e)$ yüklü bir elektron üzerindeki \mathbf{F} kuvveti $-e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$ 'dir. Bundan dolayı, Newton'un ikinci hareket yasası,

$$\mathbf{F}=m(d\mathbf{v}/dt)=\hbar(d\mathbf{k}/dt)=-e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (5.136)$$

olur.

Elektronlar; safsızlıklar, örgü eksiklikleri ve fononlar ile çarpışabilirler. Eğer çarpışma süresi τ ise, bu durumda, sabit bir \mathbf{E} elektrik alanında elektronun hızı,

$$\mathbf{v}=-e \mathbf{E} \tau/m \quad (5.137)$$

olur. Bu alanda birim hacim başına $q=-e$ yüklü n elektron varsa, elektrik akım yoğunluğu,

$$\mathbf{J}=nq\mathbf{v}=(ne^2\tau/m)\mathbf{E} \quad (5.138)$$

olur. Burada \mathbf{v} ortalama elektron hızıdır ve sürüklenme hızı olarak da adlandırılır.

Yukarıdaki bu iki ifadeye göre, bir \mathbf{F} kuvveti, çarpışmaların etkisi de gözönünde tutularak,

$$\hbar[(d/dt)+(1/\tau)]\mathbf{k}=\mathbf{F} \quad (5.139)$$

şeklinde yazılabilir. Serbest parçacık ivme terimi $\hbar(d\mathbf{k}/dt)$ 'dir ve çarpışmaların etkisi de $\hbar(\mathbf{k}/\tau)$ ile gösterilir. Burada τ çarpışma zamanıdır. Şimdi düzgün bir \mathbf{B} magnetik alanında dizgenin hareketini ele alalım. Bir elektron üzerindeki Lorentz kuvveti,

$$\mathbf{F}=-e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

ile veriliyordu. Eğer $m\mathbf{v}=\hbar\mathbf{k}$ ise, hareket denklemi,

$$m[(d/dt)+(1/\tau)]\mathbf{v}=-e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (5.140)$$

olur.

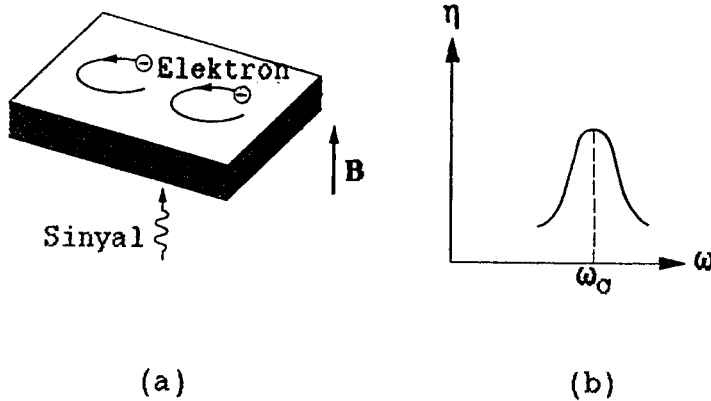
Durgun bir B magnetik alanı z -ekseni boyunca uzandığı zaman hareket denklemleri,

$$\begin{aligned} m\left[\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau}\right]v_x &= -e(\mathcal{E}_x + v_y B) \\ m\left[\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau}\right]v_y &= -e(\mathcal{E}_y - v_x B) \\ m\left[\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau}\right]v_z &= -e\mathcal{E}_z \end{aligned} \quad (5.141)$$

olur. Durgun bir elektrik alanındaki kararlı durumlarda zaman türevleri sıfırdır. Böylece,

$$\begin{aligned} v_x &= (-e\tau/m)\mathcal{E}_x - \omega_c \tau v_y \\ v_y &= (-e\tau/m)\mathcal{E}_y + \omega_c \tau v_x \\ v_z &= (-e\tau/m)\mathcal{E}_z \end{aligned} \quad (5.142)$$

olur. Burada $\omega_c = eB/m$ olan cyclotron (siklotron) frekansıdır.



Şekil 5.22. (a) Cyclotron hareketi ve (b) absorpsiyon katsayısı η 'nin ω ile değişimi.

Şekil (5.22.) cyclotron rezonansı olayını gösteriyor. Metalik dilime uygulanan magnetik alan, elektronların alana dik bir düzlemde saat yönünün tersi bir dönme şeklinde hareket etmelerine neden olur. Cyclotron frekansı olarak bilinen bu cyclotron hareketinin frekansı, yukarıda da belirtildiği gibi, $\omega_c = eB/m$

şeklinde veriliyordu. Serbest-elektron kütlelerinin değerini yerleştirirsek, $f_c = \omega_c / 2\pi = 2.8 B$ (GHz) buluruz. Burada B kilogauss cinsinden alınır. Böylece B=1 kilogauss için, cyclotron frekansı $f_c = 2.8$ (GHz), yani mikrodalga bölgesinde bulunur. Şekilde gösterildiği gibi, elektromagnetik sinyalin dilimden B'ye paralel doğrultuda geçtiğini varsayalım. Sinyalin elektrik alanı elektronlara etkiyecek ve sinyaldeki enerjinin bir kısmı soğuracaktır. Soğurma oranı,

$$\omega = \omega_c \quad (5.143)$$

olduğunda, yani sinyal frekansı cyclotron frekansına eşit iken en büyük değerde olacaktır. Bunun nedeni şudur: bu koşul gerçekleştiğinde, her bir elektron bir tam devir süresince dalgayla eş zamanlı hareket eder ve böylece soğurma devir boyunca sürer. O halde (5.143) denklemi cyclotron rezonans koşuludur. Diğer taraftan, (5.143) denklemi gerçekleşmediğinde, elektronun dalgadan enerji soğurduğu tam devrin bir kısmında elektron dalgayla aynı fazda olacaktır. Tam devrin kalan kısmında elektron dalgayla zıt fazda olup, dalgaya enerji geri verilecektir. Absorbsiyon eğrisinin şekli frekansın fonksiyonu olarak Şekil (5.22.-b.)'deki gibidir.

Absorbsiyon eğrisinin maksimumu farkedilebiliyorsa ve böylece cyclotron frekansı kesinlikle tanımlanıyorsa, $\omega_c \tau \gg 1$ koşulu gerçekleşmelidir. Bu ise, elektronun, tek bir çarpışma için geçen sürede birçok cyclotron devri yapabilmesi demektir. Bu koşul gerçekleşmezse, çarpışma süresi eğrisi, ω_c tek frekansının farkedilemeyeceği kadar geniş olacaktır. $\omega_c \tau$ 'yu mümkün olduğu kadar arttırmak için, yaklaşık 50 kilogauss'luk çok yüksek magnetik alanlar kullanarak ω_c arttırılır ve 10°K gibi düşük sıcaklıkta numune soğutulularak çarpışma süresi arttırılır.

Cyclotron rezonansı genel olarak metallerde ve yarıiletkenlerde elektron kütlelerinin ölçülmesinde kullanılır. Cyclotron frekansı, absorpsiyon eğrisinden tanımlanır ve bu değer etkin kütlelerin hesaplanması için $\omega_c = eB/m'$ 'de yerleştirilir. m'in ta-

nımlanmasındaki doğruluk, ω_0 ve B 'nin doğruluğuna bağlıdır. ω_0 oyootron frekansı, özellikle laser demeti kullanılırsa, oldukça doğru bir şekilde ölçülebilir ve böylece m ölçümünün doğruluğu sadece magnetik alanın ölçümünün doğruluğu ve numunenin homojenliği ile sınırlandırılır.

5.10.2.Hall Olayı

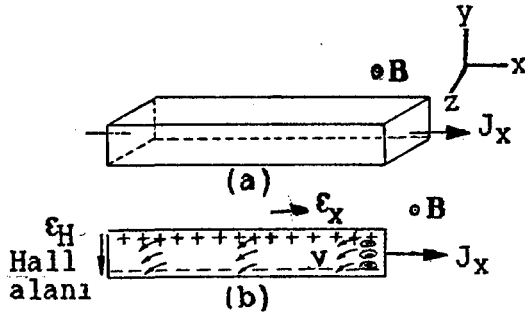
Katılarda pozitif boşluk hareketinin olduğunu gösteren olaylardan biri Hall olayıdır. Hall olayının temelini oluşturan fiziksel işlem Şekil (5.23.)'de gösterilmektedir. J_x elektrik akımının x-doğrultusunda çubukta aktığını ve B_z magnetik alanının z-doğrultusunda çubuğa dik uygulandığını varsayalım. Bunun hem J_x 'e hem de B_z 'ye dik, yani y-doğrultusunda ilave bir elektrik alana yol açacağını göstereceğiz.

Bunun nasıl olduğunu görmek için ilk olarak magnetik alan uygulanmadan önceki durumu ele alalım. İletim elektronlarının v hızıyla negatif x-doğrultusunda sürüklendiği pozitif x-doğrultusunda akan bir elektrik akımı vardır. Magnetik alan uygulandığında $F=e(\mathbf{v} \times \mathbf{B})$ Lorentz kuvveti, şekilde gösterildiği gibi elektronları aşağıya doğru saptıracaktır. Yani bu durumda x-doğrultusunda hareket eden elektronlar magnetik alan etkisiyle çubuğun yüzeyine doğru saparlar. Sonuç olarak elektronlar, net bir negatif yükün bulunduğu alt yüzeyde depolanacaktır. Aynı zamanda elektronların azalmasından dolayı üst yüzeyde de pozitif net yük ortaya çıkacaktır. Pozitif ve negatif yüzey yüklerinin bu birleşimi aşağıya doğru bir elektrik alan oluşturur, yani böylece alt ve üst yüzeyler arasında bir potansiyel farkı oluşur. Bu alana ise Hall alanı denir. Kısaca Hall alanı, bir iletkenin iki yüzü arasında gelişen bir elektrik alanıdır.

Şimdi bu Hall alanını hesaplayalım. İlk konumda yük birimini oluşturan F_L Lorentz kuvveti negatif y-doğrultusundadır ve değeri,

$$F_L = -ev_x B$$

$$(5.144)$$



Şekil 5.23. Hall alanı ve Hall olayının orjini.

Hall olayı için standart geometri: dikdörtgen kesitli çubuk şeklinde bir örnek (a)'daki gibi bir B magnetik alanına yerleştirilir. Uç elektrodları boyunca uygulanan bir E_x elektrik alanı çubuk boyunca bir J_x elektrik akım yoğunluğu akmasına neden olur. Elektrik alan uygulandıktan hemen sonra elektronların sürüklenme hızı (b)'de gösterildiği gibidir. Sapmaya magnetik alan neden olur. Hall kuvveti Lorentz kuvvetini dengeleyinceye kadar; çubukun bir yüzünde elektronlar birikir ve öteki yüzünde artı iyon fazlası oluşur.

olur. Şekle göre v_x sola doğru, yani negatif olduğu için (-) işareti gelir. Yüzey yüklerinin oluşturduğu alan Lorentz kuvvetine zıt yönde bir kuvvet oluşturur. Birikme işlemi Hall kuvveti Lorentz kuvvetini tamamen ortadan kaldırıncaya kadar sürer. Yani oluşan potansiyel farkı öyle bir değere yükselirki; daha fazla elektron yüzeye doğru sapamaz. Böylece bir denge oluşur. Kararlı halde elektrona etkiyen magnetik kuvvet, yüzeylerde oluşan elektriksel kuvvetle dengelenir, yani Hall kuvveti Lorentz kuvvetine eşit olur ($F_H = F_L$). Buna göre Hall elektrik alanı,

$$-e\epsilon_H = -ev_x B \quad \text{veya} \quad \epsilon_H = v_x B \quad (5.145)$$

şeklinde tanımlanır. Ölçülebilecek nicelikler cinsinden bu alanı tanımlamak yerinde olur. Bu amaçla v_x hızı, J_x akım yoğunluğu cinsinden tanımlanır. J_x akım yoğunluğu ise, (5.138) denklemine göre, $J_x = n(-e)v_x$ ile veriliyordu. Buna göre Hall alanı için,

$$\epsilon_H = v_x B = [J_x / (n(-e))] B = -(1/(ne)) J_x B \quad (5.146)$$

sonucu ortaya çıkar. Öyleyse Hall alanı hem akımla hem de magnetik alanla orantılıdır. Orantı sabiti, yani $\epsilon_H / J_x B$, Hall sabiti veya Hall katsayısı olarak adlandırılır ve R_H ile gösterilir. Buna göre R_H Hall sabiti,

$$R_H = -(1/(ne)) \quad (5.147)$$

ile verilir. Ayrıca ϵ_H Hall alanını, ω_C cyclotron frekansı cinsinden de yazabiliriz. Bunun için (5.138) denklemini kullanarak,

$$\begin{aligned} \epsilon_H &= -(1/(ne)) J_x B \\ &= -(1/(ne)) (ne^2 \tau \epsilon_x / m) B \\ &= -(eB/m) \tau \epsilon_x \\ &= -\omega_C \tau \epsilon_x \end{aligned} \quad (5.148)$$

elde ederiz.

(5.147) denklemi pratikte çok kullanışlı bir sonuçtur. R_H , n elektron yoğunluğuyla ters orantılı olduğundan, Hall alanı ölçülerek n tayin edilebilir. Tanımından da görülebileceği gibi, e artı olduğundan, serbest elektronlar için R_H eksidir. Gerçekte, elektron yoğunluğunun tanımlanmasında bu olay standart bir tekniktir ve bu teknik oldukça değerlidir. Çünkü n 'den başka R_H 'ın bağlı olduğu diğer nicelik olan elektron yükü $-e$ 'de oldukça doğrulukla bilinmesi gereken temel bir fiziksel sabittir. Hall olayı özellikle yarıiletkenlerde doğrudan doğruya yük taşıyıcılarının yoğunluğunu bulmak için kullanılır. Çoğunlukla ince bir iletken alınır ve Hall potansiyel farkı kısa kenarlar boyunca

ca ölçülür. Çizelge (5.1.), çeşitli bilinen metallerden bazılarının Hall sabitlerini veriyor.

Çizelge 5.1. R_H , Hall Sabitleri:

(Oda sıcaklığında volt-m/amper-gauss olarak.)

METAL	HALL SABİTLERİ $\times(10^{-10})$
Li	-1.70
Na	-2.50
Cu	-0.55
Ag	-0.84
Au	-0.72
Zn	+0.30
Cd	+0.60
Al	-0.30

Hall sabitinin diğer bir yararlı tarafı işaretinin akım taşıyıcılarının yükünün işaretine bağlı oluşudur. Böylece negatif yüklü elektronlar negatif Hall sabitine neden olurlar. Tersisi durumunda pozitif yüklü holler tarafından iletimden ortaya çıkan Hall sabiti pozitifdir. Böylece R_H 'ın işareti, özellikle yarıiletkenler halinde oldukça değerli bir bilgi olan taşıyıcıların işaretini belirtmektedir. Örneğin, Zn ve Cd'un Hall sabitleri bu elementlerde akımın holler tarafından taşındığını gösterecek şekilde pozitifdir.

Yukarıdaki analiz, magnetik alanın mevcut olması halinde, taşınım işleminin diğer bir ilginç görünüşünü sergilemektedir: x-doğrultusunda akan akımın kendisi alan tarafından etkilenmez. Böylece elektriksel direnç magnetik alandan bağımsızdır. Negatif yönde olsa bile, bu sonuç, beklenmemesi nedeniyle, ilginçtir. J_x 'i etkileme eğilimindeki, alana ait Lorentz kuvveti, elektronların numunenin içinde yatay olarak; alanı ortadan kaldıracak yönde akması suretiyle Hall kuvveti tarafından dengelenecektir.

6. SONUÇ

Bugün kullandığımız maddelerin çoğunu katılar oluşturmaktadır. Derinliğine özelliklerini anlayabildiğimiz katılar ise saf ve tek kristal yapıda olanlardır. Bu gerçeği gözönünde tutarak basit kristal yapılardan karmaşık yapılara doğru giderek kristal yapı incelenebilir.

Periyodik cetvele baktığımızda da katıların önemli bir kısmını metallerin oluşturduğunu görmekteyiz. Bu nedenle, metallerin günlük yaşantımızda birçok kullanım alanları vardır ve araştırmacılar; metallerin özellikleri hakkında birçok kuramsal ve deneysel bulgular ortaya koymuşlardır. Bu bulgularda ise, kristal içinde hareket edebilen serbest elektronların çok yüksek bir konsantrasyonunun mevcut olduğu varsayılmıştır ve bu varsayımaya dayanarak birçok teoriler geliştirilmiştir. Bunların bir çoğu ise kuantum teorisine dayanmaktadır.

Bu çalışmada da, kristalde elektron dinamiğini incelemek için ilk başta kristal yapının anlamı üzerinde durulmuş ve yapıyı tanımlamada kullanılan bazı temel matematiksel kavramlardan bahsedilmiştir. Daha sonra kristallerin bağlanmalarına neden olan atomlar arası kuvvetler ele alınmış ve sonuç olarak bu kuvvetlerin; çekici kuvvet ve itici kuvvet olmak üzere iki parçadan meydana geldiği görülmüştür. Bunu takiben, metallerin özelliklerini açıklayan ve temel kuantum teorilerinden biri olan Sommerfeld'in serbest elektron teorisi incelenmiştir. Bu teoride; katılardaki elektronların hareketini incelerken; kristal potansiyeli gözönüne alınmamıştır. Fakat, bazı etkileri ve deneysel sonuçları niceliksel olarak açıklamak istersek, bu potansiyeli tamamen ihmal edemeyeceğimiz ifade edilmiştir. Son bölümde ise, katılarda enerji bant kavramı ele alınmıştır. Bunun için, ilk önce atomlar bir katıyı oluşturacak şekilde bir araya gelirlerken serbest atomun spektrumunun nasıl bir değişmeye uğradığı gösterilmiştir. Ardından Sommerfeld'in kuantum teorisinin eksiklerini tamamlayan ve Bloch tarafından ileri sürülen Bloch teoremi anlatılmıştır. Daha sonra, katılarda bant kavramını analitik olarak gösteren Kronig-Penney modeli işlenmiştir. Bu mo-

del, gerçeğe tam olarak uymamakla birlikte, periyodik örgülerde elektronların kuantum davranışının önemli karakteristik özelliklerinin çoğunu açıklamaya yardım eder. Daha sonra, hem elektrik alanda hem de magnetik alanda elektron dinamiği ayrı ayrı ele alınmıştır. Ayrıca, kristal momentumu, etkin kütle ve etkin kütlelerin fiziksel orijini kavramları açıklanmıştır. Son olarak da, tamamen zıt görüşlerden yola çıkan, fakat aynı niteliksel sonuçlara yol açan, bir atomik düzeyin katıdaki atomlar arasındaki etkileşmelerin sonucu olarak bir banda nasıl genişlediğini gösteren serbest-elektron yaklaşımı ile sıkı-bağlanma yaklaşımı incelenmiştir. Bu yaklaşımlarda, her bir atomik düzeyin kendisine karşılık gelen banda yol açtığı ve her bir bandın kaynaklandığı atomik düzeyin karakterini yansıttığı görülmüştür.

KAYNAKLAR DİZİNİ

- Aygün, E., ve Zegin, M., 1990, Kuantum Fiziği, Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi, 235 s.
- Culity, B.D., 1966, X-Işınlarnının Difraksiyonu, (Çev. A. Sümer), İstanbul Teknik Üniversitesi Maden Fakültesi, 539 s.
- Erbil, H., 1990, Kuantum Fiziği (Cilt 2), Ege Üniversitesi Fen Fakültesi Yayınları, 270 s.
- Gündüz, E., 1988, Modern Fiziğe Giriş, Ege Üniversitesi Fen Fakültesi, 569 s.
- Kittel, C., Katıhal Fiziğine Giriş, (Çev. T. Altanhan ve M. Sağlam), Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi, 320 s.
- Landsberg, P.T., 1969, Solid State Theory Methods and Applications, John Wiley-Sons Ltd., 505 p.
- Mahan, B.C., 1983, Üniversite Kimyası (Cilt 2), (Çev. C. Şenvar ve E. Edgür), Hacettepe Üniversitesi Yayınları, 392 s.
- McKelvey, J.P., 1966, Solid State and Semiconductor Physics, The Pennsylvania State University, 499 p.
- Omar, M.A., 1974, Elementary Solid State Physics: Principles and Applications, Addison-Wesley Publishing Company, 656 p.
- Orhun, Ö. ve Özdaş, K., 1986, Uygulamalı Temel Fizik (Optik ve Modern Fizik), Anadolu Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Yayınları, 214 s.
- Özemre, A.Y., 1983, Çağdaş Fiziğe Giriş, İstanbul Üniversitesi Fen Fakültesi, 198 s.
- Pascoe, K.J., 1972, Properties of Materials for Electrical Engineers, John Wiley-Sons, 274 p.

KAYNAKLAR DİZİNİ (devam)

- Şenvar, C., 1982, Atom, Molekül ve Çekirdek (Cilt 5), Hacettepe Üniversitesi Yayınları, 658 s.
- Tekin, A., 1986, Malzemelerin Elektronik Özellikleri, İstanbul Teknik Üniversitesi Kimya-Metalurji Fakültesi, 182 s.
- Yalçın, C. ve Büget, N., 1981, Modern Fizik ve Atom Fiziği, Milli Eğitim Basımevi, 175 s.
- Ziman, J.M., 1972, Principles of the Theory of Solids, Cambridge at the University Press, 414 p.
- Zor, M., 1991, Modern Fizik, Anadolu Üniversitesi Açıköğretim Fakültesi Yayınları, 278 s.
- Zor, M., 1991, Atom ve Çekirdek Fiziği, Anadolu Üniversitesi Açıköğretim Fakültesi Yayınları, 323 s.