KATIHAL FİZİĞİ 2-FİZ 410

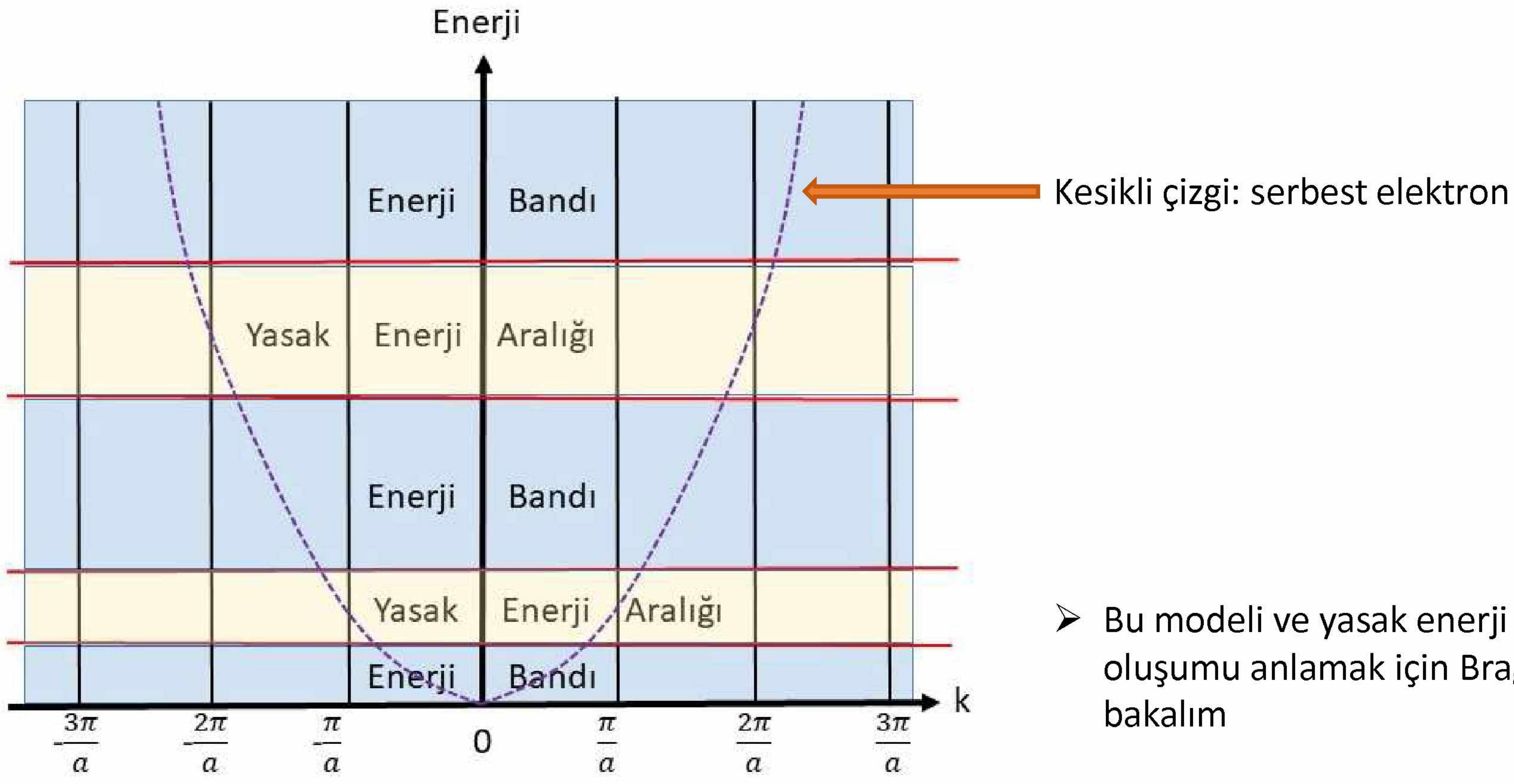
Ankara Üniversitesi, Fen Fakültesi
Fizik Bölümü

YARI SERBEST ELEKTRON MODELİ
2. hafta

Yarı Serbest Elektron Modeli (Hemen hemen serbest elektron modeli)

- Serbest elektron modelinde izinli enerji değerleri süreklidir yani sıfırdan sonsuza kadar sürekli olarak dağılmışlardır.
- Bir katı içinde kristal potansiyeli yeterince küçükse, elektron katı içinde serbest bir parçacık gibi davrandığı kabul edilerek bu yeni model geliştirilmiştir.

Yarı Serbest Elektron Modeli



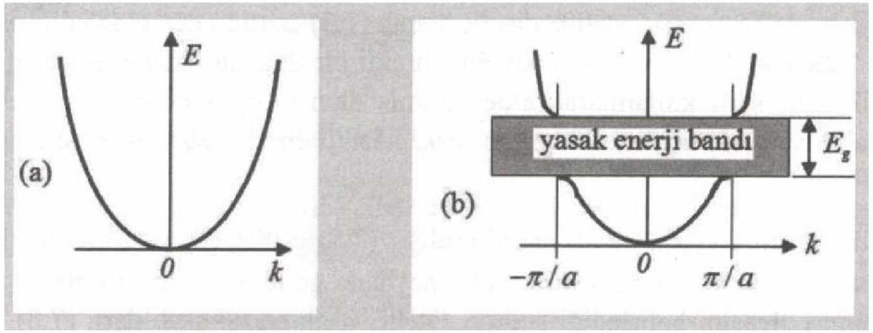
- Bu modeli ve yasak enerji bandının oluşumu anlamak için Bragg yasasına bakalım

Bragg Yasası

- $n\lambda = 2d\ sin\theta$
- $2\vec{k}.\vec{G} = \left|\vec{G}\right|^2$ Brillouin kırınım şartı
- $\left|\vec{k}\right| = (\frac{1}{2})\left|\vec{G}\right|$
- $\left|\vec{G}\right| = n(\frac{2\pi}{a})$ olduğundan $k = \mp\frac{G}{2} =$

$$\mp n\frac{\pi}{a}$$

Yarı Serbest Elektron Modeli



- a) Serbest elektron modeline bağlı olarak elde edilmiş ve enerjinin süreklilik gösterdiği model
- b) sınır şartları kullanıldığı zaman elde edilen grafik, yasak enerji bandı oluşuyor, Bragg kanunu'na göre ilk yansıma ve ilk yasak enerji aralığı $k = \mp\frac{\pi}{a}$ görülür

(Şekiller Kaynak [3]' den alınmıştır.)

Yarı Serbest Elektron Modeli

- $\varphi(0) = e^{ikx}$ basit düzlem dalga için olasılık yoğunluğu

- $\rho(0) = |\varphi(0)|^2 = e^{-ikx}e^{ikx} = 1$

    - Bu ifade uzayı her yerinde serbest parçacığa rastlama olasılığının aynı olduğunu gösterir.

Yarı Serbest Elektron Modeli

- $\varphi(+)$ duran dalgası için olasılık yoğunluğu
  - $\rho(+) = |\varphi(+)|^2 \approx cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)$
- $\varphi(-)$ duran dalgası için olasılık yoğunluğu
  - $\rho(-) = |\varphi(-)|^2 \approx sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)$

Sonuç olarak; $\rho(+)$ ve $\rho(-)$ olasılık yoğunluklarına karşı gelen enerjiler arasında bir yasak enerji aralığı bulunmaktadır.

Yarı Serbest Elektron Modeli

- Bir boyutlu örgüde periyodik kristal potansiyeli;

  - $V(x) = V\cos(\frac{2\pi x}{a})$ ise

YARI SERBEST ELEKTRON MODELİ

  - $E_g = 2V\frac{1}{a}\int_0^a dx\cos(\frac{2\pi x}{a})\left[cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) - sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right] = V$

- Düzlem dalga yaklaşımı kısmen doğrudur.
- Periyodik kristal potansiyelinin de hesaplara katılması zorunluluğu Bloch fonksiyonlarının kullanımını gerektirir.

Kaynaklar

1. ‘Katıhal Fiziğine Giriş’, Charles Kittel, (Çeviri: Gülsen Önengüt, Demir Önengüt), 8. baskı, Palme 2014
2. ‘Katıhal Fiziği’, Doç. Dr. Şakir Aydoğan, 1. baskı, Nobel Yayın Dağıtım, 2011
3. ‘Katıhal Fiziği’, Prof. Dr. Mustafa Dikici, 3. baskı, Seçkin Yayıncılık, 1993
4. ‘Katıhal Fiziğine Giriş’, Prof. Dr. Tahsin Nuri Durlu, 2. baskı