

KATIHAL FİZİĞİ-1

BÖLÜM-1 KRİSTALDE KIRINIM

1)KATILARIN SINIFLANDIRILMASI: Modern katihal fiziği, göze katı olarak görünen bütün maddeleri incelemek yerine, yapılarında gözlenen simetri, daha kolay incelenebilme ortamı oluşturduğu için özellikle kristal özelliğe sahip olan maddeleri konu olarak alır. Kristal yapı gösteren katıları sınıflandırmanın en kolay ve basit yolu onları metaller ve melat olmayanlar diye ikiye ayırılmaktır. Metaller yüksek elektriksel iletkenliğe sahiptirler ve serbest elektronları vardır. Buna karşılık metal olmayan katılar (ametaller) yalıtkan özellik gösterirler ve sadece yörünge elektronları bulunur. Metalik olmayan kristal özellikli katılarda, katının oluşması sırasında atomların değerlilik elektronlarını özelliklerine göre üç grupta sınıflandırılabilirler. Bunlar; **iyonik kristaller, kovalen kristaller ve moleküler kristallerdir.** İyonik kristale iyi bir örnek NaCl kristalidir ve bu tür kristallerde katyonun değerlilik elektronları tümü ile anyona geçer, böylece katı zıt yüklü iyonların çekimi ile bağlanmış olur. İyonik kristaller, düşük elektrik ve ısı iletimine sahiptirler, erime noktaları yüksektir, kırılma ve renksizdirler.

Kovalent kristallerde değerlilik elektronları atomlar arasında paylaşılmıştır. Bunlar, yarı-iletken özelliğe sahip ve serttirler. Moleküler kristallerin değerlilik elektronları ne anyondan katyona geçer, ne de atomlar arasında paylaşılır, serbest atom veya moleküldeki durumlarını değiştirmezler. Bu tür kristaller, düşük elektrik ve ısı iletimi gösterirler, yumuşak ve alçak erime noktasına sahiptirler.

2)BİRİM ÖRGÜ HÜCRESİ:Kristal yapı belirli bir düzen içerisinde bir araya gelen atomların bu düzenlerini üç boyutta periyodik olarak devam ettirmeleri sonucu oluşur. Atomların ortaya çıkardığı düzeni bir nokta ile gösterecek olursak, üç boyutta oluşan kristal, noktalarla yapılmış bir kafes gibi düşünülebilir. İşte bu kafese örgü denir. Örgüde alınan bir noktadan çıkan üç boyutta a, b, c vektörlerinin kristal içerisinde belirlediği hacme **birim örgü hücresi** denir.

3)ÖRGÜ ÇEŞİTLERİ:Kristal içerisinde alınan herhangi bir nokta $r_{uvw}=ua+vb+wc$ ötelemesi ile belirlenebilir. Burada a, b, c kristalin referans eksenlerini oluşturan vektörler, u, v, w ise tamsayıdır. Bu vektörlerin uzunlukları ile aralarındaki açılar belirli bir kristalin özelliklerini ortaya koyarlar. Buna göre bir birinden farklı 14 değişik şekil ortaya çıkar. Bu 14 değişik örgü çeşidine **Bravais örgüleri** denir.

SİSTEM EKSENLER VE AÇILAR ÖRNEKLER

Triklinik	$a \neq b \neq c$; $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90$	K_2CrO_7
Monoklinik	$a \neq b \neq c$; $\alpha = \beta = 90 \neq \gamma$	$CaSO_4 \cdot 2H_2O$
Ortorombik	$a \neq b \neq c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90$	Ga, Fe_3C
Tetragonal	$a = b \neq c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90$	TiO_2
Kübik	$a = b = c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90$	Fe, NaCl, Cu, Au
Hegzagonal	$a_1 = a_2 = a_3 \neq c$; $\alpha = \beta = 90$ $\gamma = 120$ (veya $a_1 = b \neq c$)	Zn, Cd

Rombohedral $a = b = c$; $\alpha = \beta = \gamma \neq 90$ As, Sb, Bi

Bu yedi ayrı eksen sisteminde dağılmış olan 14 uzay örgüsünde her bir eksen sisteminde bir basit örgü vardır. Bu örgüler **Hermann-Mauguin** uluslararası gösterimiyle şöyledir;

SİSTEM UZAY ÖRGÜSÜ HERMANN-MAUGUİN SEMBOLÜ

Triklinik	basit	P
Monoklinik	basit	P
	taban merkezli	C
Ortorombik	Basit	P
	Taban merkezli	C
	Yüzey merkezli	F
	Hacim merkezli	I
Tetragonal	Basit	P

	Hacim merkezli	I
Hegzagonal	Basit	P (veya C)
Rombohedral	Basit	R
Kübik	Basit	P
	Yüzey merkezli	F
	Hacim merkezli	

4)MİLLER İNDİSLERİ:Kristallerde, kolaylık için, doğrultuları ve düzlemleri göstermek üzere bazı özel gösterimler kullanılır. Başlangıçtan herhangi bir uvw noktasına uzanan doğrultu [uvw] olarak gösterilebilir. Bu gösterimde , doğrultuyu belirlemeye yettiği için en küçük tamsayıları kullanmak adet olmuştur. Örneğin; [2,2,0] doğrultusunu belirleyen çizgi [1,1,0] dan geçer ve 2,2,0 yerine 1,1,0 tamsayıları kullanılır. Eksi indisler ise sayının üzerine çizgi çekerek belirlenir. Kristaldeki simetri dolayısı ile kristal içerisindeki pek çok doğrultu birbirine özdeştir. Bu özdeş doğrultuların takımı da <uvw> ile gösterilir. Örneğin kübik bir birim hücrenin kenarları <100> şeklinde gösterilebilir.

Her hangi bi başlangıç noktası vermeden, kristal içerisinde yüzeyleri veya düzlemleri belirleyen gösterim şekline **Miller indisleri** denmektedir. Bu indisler, düzlemlerin üç kristal eksenini kesişme noktaları belirlenerek bulunur ve kesişme noktalarının yeri, birim hücrenin ele alınan eksen için belirli olan uzunluğu indisle çarpılarak ortaya çıkar.

5)KRİSTAL YAPISI KUSURLARI: bir kristal içerisinde atomlar veya atom grupları tümü ile düzgün bir sıralanım içinde bulunmazlar. Kristallerdeki yapı bozukluklarının; kristalin sıcaklığı, dış basıncı, saflığı...vb nedenleri vardır. Kristallerdeki yapı bozuklukları; noktasal, çizgisel ve hacımsal olmak üzere üç şekilde sınıflandırılır.

a) Noktasal: atomların bulunması gereken yerde bulunmayışı veya fazladan bulunmasıdır. Kristalde bu oran; $n/N = S e^{-E_f} / kT$ olarak verilir. Burada; N:atom sayısı, n :atom başına boşluk sayısı, S:entropi , E_f :boşluk oluşumu için gerekli enerjidir.

b) Dislokasyon (çizgisel): bunlar örgü içerisinde oldukça uzun atomik boyutlarda ortaya çıkarlar. Oluşum özellikleri **Burgers vektörü** ile belirlenir. Burgens vektörü dislokasyon çizgisine dik ise **kenar tipi**, paralel ise **vida tipi** dislokasyon mevcuttur. Dislokasyonların ortaya çıktığı bölgeler yüksek enerji bölgeleridir. Dislokasyon enerjisi; $E = \mu b^2$ şeklindedir. Burada; E:dislokasyon enerjisi, μ :kristalin kesme modülü, b:burgers vektörüdür.

c)Hacımsal:kristallerde görülen hacımsal yapı kusurlarının en çok görülenleri **ikizlenmeler** (twining) ve **kayma türü** (slip) bozukluklardır. Kayma türünde kristalin iki bölümü kayma düzleminde birbirlerine göre atomik uzaklıklar düzeyinde kayar. İkizlenmelerde ise, kristalin bir miktar hacmi diğerine göre belirli bir açı altında döner.

6)BRAGG KANUNU: Kristallerde kırınım olayı Bragg kanunu ile fiziksel bir model oluşturur. Bir birine paralel olan atomik düzlemlere tek dalga boyulu X-ışınları gönderildiğinde ışınlar yansımaya uğrar. Gelen ışınla yansıyan ışın arasındaki yol farkı; $n\lambda = 2d \sin\theta$ şeklinde olur. Bu ilişkiye **Bragg Kanunu** denir. Burada; n:tamsayı , λ :dalga boyu, d:kristal düzlemleri arasındaki uzaklık, θ :gelen ışınla düzlem arasındaki açıdır.

7)BRİLLOUİN BÖLGELERİ: Kristal örgüde kırınım şartını sağlayan noktaların üzerinde bulunun ve yarıçapı karşıt örgü uzayında $S_0/k = S/\lambda$ olan küreye **Ewald küresi** denir. Bu kürede Bragg kanunu $(k^* + G^*)^2 = k^2$ şeklindedir. Burada; k:dalga vektörü, G:karşıt örgü vektörüdür. Öncelikle,yansımayı ortaya çıkaran en küçük k vektörlerinin büyüklükleri belirlenir.Başlangıç noktasından başlayıp bu çiggiler üzerinde biten bütün k vektörleri Bragg yansımasını verir. İşte bu çizgiler arasında kalan bölgelere de **Brillouin bölgeleri** denir. Brillouin bölgesi içerisinde hiçbir k vektörü brag yansıması vermez, yansıma bölge sınırında olur.

8)MOLEKÜLER BAĞLANMA:Bir kristali oluşturan atomların bağlanma biçimlerini belirleyen onların dış yörüngelerindeki elektronlarıdır. Basitçe bir asal gaz kristalinde atomları bir arada tutan **Van der Waals** etkileşmesi incelenerek kristallerde moleküler bağlanma hakkında bilgi edinilir.bunun için sabit bir noktada duran bir (+) yük ile bu yükün etrafında, x doğrultusunda, denge konumu etrafında titreşen (-) yükten oluşan iki eşlenik elektriksel salınıcı

düşünülp çözümlene yapılır. Bu durumda toplam enerji;
$$E = \frac{1}{2m}(P_1^2 + P_2^2) + \frac{e^2}{2\alpha}(x_1^2 + x_2^2) - \frac{2e^2 x_1 x_2}{R^3}$$

şeklinde olur. Burada x atomların denge konumundan ayrılma miktarı, P momentum, R atomlar (moleküler) arası uzaklık, α dipol polarma sabitidir. Bu bağıntıdan kuantum mekaniği kullanılarak enerji;

$$\epsilon = \frac{1}{2} h\nu \left(\sqrt{1 + \frac{2\alpha}{R^3}} + \sqrt{1 - \frac{2\alpha}{R^3}} \right)$$
 bulunur. Bu seriye açıldığında bağlanma enerjisi $\epsilon = h\nu(1 - \alpha^2/2R^6 + \dots)$ şeklinde

bulunur. Burada ϵ :bağlanma enerjisi, α :polarma sabiti, R:moleküller arası uzaklıktır. Buradaki ikinci terim **Van der Waals** bağlanmayı belirtmektedir.

9)KOVALENT BAĞLANMA:Atomların karşılıklı bir birlerinin elektronlarını **ortak** kullanmalarıyla oluşan bağa **kovalent bağ** denir. Bu bağ; H_2^+ iyonu ele alarak incelenebilir. Bunun incelemesi tamamen kuantum mekaniğeldir. İyonun toplam hamiltoniyeni yazılarak (çekirdeğin itme enerjisi ihmal edilir) çözümlene yapıldığında, bağ enerjisi

$E_{1,2} = E_0 - \frac{\int_{r_B}^2 \psi^2 d\delta \pm \int_{r_A}^2 \psi_A \psi_B d\delta}{1 \pm \int \psi_A \psi_B d\delta}$ şeklinde bulunur. Burada r_A ve r_B elektronun iki çekirdekten olan uzaklığı, ψ 'ler hidrojen atomunun dalga fonksiyonlarıdır.

BÖLÜM-2 ÖRGÜ DİNAMİĞİ

1)TEK ATOMLU ENİNE ÖRGÜ TİTREŞİMİ:Birim hücresinde bir tek atom olan bir kristalde n. atomun enine hareket denklemi $M(d^2/dt^2)U_n = \Sigma C(U_{n+m}-U_n)$ şeklindedir. Burada $U_n = U_0 e^{-i\omega t}$ alınarak alınırsa $-w^2 M = -\Sigma C(e^{imka}-1)$ bulunur. Buradan da w 'yı k 'ya bağlayan **dispersiyon bağıntısı** $w^2 = \frac{2}{M} \sum_{m \geq 0} C(1 - \cos mKa)$ olarak bulunur. Burada K :dalga vektörü, C :kuvvet sabiti, M :atomun kütlesi, m ise tamsayıdır. Katılar için w ; 10^2 ile 10^{14} Hz arasındadır.

2)İKİ ATOMLU ÖRGÜ TİTREŞİMİ:Birim hücresinde iki atom bulunan bir kristalde $2n$. ve $2n+1$. atomun enine hareket denklemleri $M_1(d^2/dt^2)U_{2n} = C(U_{2n+1}-2U_n+U_{2n-1})$ ve $M_2(d^2/dt^2)U_{2n+1} = C(U_{2n+2}-2U_{2n+1}+U_{2n})$ şeklindedir. $U_{2n} = U_1 e^{-i(\omega t + 2nKa)}$ ve $U_{2n+1} = U_2 e^{-i[\omega t + (2n+1)Ka]}$ alınır, dispersiyon bağıntısı

$w^2 = C\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right) \pm C\sqrt{\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right)^2 - 4\frac{\sin^2 Ka/2}{m_1 m_2}}$ şeklinde bulunur. Burada; a aynı cins atomlar arasındaki uzaklık, k dalga vektörü, m 'ler birim hücredeki atomların kütleleridir. Bu dağılım bağıntısında ω 'nın bir kökü **optik**,diğer kökü de **akustik** dalgaları temsil eder.

3)ÖRGÜ ISI SIĞASI: Isı sığası, sabit bir hacmin toplam enerjisinin sıcaklıkla değişimidir. Bir kristal için ısı sığası $C_v = T \sum (dS/dT)_v = (dE/dT)_v$ şeklindedir. Burada S :entropi, T :sıcaklık, E ise enerjidir.

4)PLANK DAĞILIMI: Bir salıncının ortalama uyarılmış kuantum sayısı $\langle n \rangle$ dir. Kristal örgüde T sıcaklığında parçacıkların planck dağılımı $\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}$ şeklindedir. Burada n ;ısısal denge durumunda ortalama fonon sayısıdır.

5)ISI SIĞASI DEBYE MODELİ: Debye, Einstein modelindeki kip frekans kavramını değiştirerek, ısı sığası ile ilgili yeni bir model ortaya koymuştur. Buna göre kip frekansı K fonon dalga vektörüne bağlı olup, tüm kipler için bir maksimum açıl frekans ortaya çıkarır. Bu durumda kristalin örgü enerjisi $E = \int_0^{\omega_m} \frac{\hbar\omega \cdot g(\omega) d\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}$ şeklinde olur.

Burada $g(\omega)$:durum yoğunluğu, T sıcaklık(K^0), E ise örgü enerjisidir. Kristal için örgü ısı sığası ise, $g(\omega) = (3\omega^2/2\pi^2 v_0^3)$ durumunda $C_v = \left[\frac{9NkT^4}{v\theta_D^3} \right]^{(\theta_D/T)} \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^4 e^x dx}{(e^x - 1)^2}$ şeklindedir. Burada $x = \hbar\omega/kT$ ve θ_D :Debye sıcaklığıdır. Debye yaklaşımı alçak sıcaklıklar için oldukça iyi sonuçlar vermektedir. Bu model alçak sıcaklıklarda bütün dielektrik katıların ısı sığalarının T^3 ile, amorf katıların ise T ile orantılı olarak değişir. Debye sıcaklığı ile de kristaldeki fonon durumları, ısısal ve elektriksel iletim hakkında bilgi edinilebilmektedir. Debye sıcaklığının üzerinde fononların dalga boyları küçük, altında ise büyüktür.

6)ISISAL İLETKENLİK:katılarda ısısal iletim fononların çarpışmaları sonucu olur. Çarpışan fononlar diğer fononlar, örgü bozuklukları ya da elektronlar tarafından saçılmaya uğrarlar. Kristallerde ısı iletimi, sitemde oluşan ısısal dengesizliğin bir yerden başka bir yere aktarılmasıdır. Bu dengesizlik bir dağılım gradyenti ortaya çıkarır. Bu durumda ısı akımı yoğunluğu $Q = -K(dT/dx)$ şeklindedir. Burada K ; ısısal iletim katsayısıdır. Gazlarda ısı iletimi genellikle gaz moleküllerinin çarpışmaları sonucu oluşur. Gazlar için ısısal iletkenlik ise ; $K = (Nk\lambda v)/2$ şeklindedir. Burada N :molekül sayısı, λ :ortalama serbest yol, v :hızıdır. Katılar için $T \gg \theta_D$ koşulunda ısı sığası (ısı iletim katsayısı) ise $K = (\text{sabit}) \frac{k\theta_D}{T}$ şeklindedir.

7)ISISAL GENLEŞME:Bir boyutta örgü potansiyeli harmonik olmayan terimlere $U(x) = Ax^2 - Bx^3 - Cx^4 \dots$ şeklinde bağlıdır. Burada A, B, C potansiyel genlikleridir. Yüksek sıcaklıklarda ortalama genleşme Boltzmann dağılımı

yardımıyla klasik olarak $\langle x \rangle = \frac{3BkT}{4A^2}$ şeklinde bulunur. Bu kuantum olarak alçak sıcaklıklarda $\langle x \rangle = \frac{3B\hbar\omega}{4A^2 e^{\hbar\omega/kT} - 1}$ şeklindedir. Genleşme katsayısı $\alpha = \frac{d\langle x \rangle}{dT}$ ifadesinden bulunur.

BÖLÜM-3 METALLERDE ELEKTRONLAR

1)METALLERDE ELEKTRİKSEL İLETKENLİK: Metallerde elektriksel iletkenlik elektron yoğunluğuna, ortalama serbest yola ve elektron bağıl hızına $\tau = \frac{ne^2\lambda}{2mV'_m}$ şeklinde bağlıdır. Burada V'_m :elektrik alanının elektron hızına katkısı (klasik), λ ortalama serbest yol, n elektron yoğunluğudur.

2)ISISAL İLETKENLİK(DRUDE MODELİ): Metallerde **serbest elektron** gazı ilk defa Drude tarafından geliştirilmiştir. Bu modelde , elektron gazını oluşturan her bir atomun, bir gaz hacminde n elektronun olmasını sağlayacak şekilde, bir veya daha fazla elektronu verdiği, ve herbir elektronun üç serbestlik derecesine sahip olduğu üzerine kurulmuştur. Drude modelinde ısısal iletkenlik için $K_e=(2\tau_m S^2 C_k)/3$ şeklindedir. Burada τ_m :ortalama serbest zaman, S:ortalama elektron hızı, C_k :elektron gazının ısı sığasıdır. Sabit hacimde ısı sığası ise $C_k=(3/2)nk$ şeklindedir. Isısal iletkenliğin elektriksel iletkenliğe oranına **Lorentz sayısı** denmektedir.

3)ELEKTRİKSEL İLETKENLİKTE LORENTZ MODELİ:Lorentz modeli metallerin elektriksel ve ısısal iletkenliği ile ilgilidir. Bu model temelde Drude modelini kabul eder, fakat elektron hızları için klasik **Maxwell-Boltzman hız dağılımını** göz önüne alır. Elektron gazındaki ötelemeler için de Boltzman taşıma denklemini kullanır.

Elektriksel iletkenlik için Lorentz modeli sıcaklığa da bağlı olup, $\sigma = \frac{4ne^2\lambda}{3(2\pi mkT)^{1/2}}$ şeklindedir (klasik). Lorentz

modeli ile drude modeli elektriksel iletkenliği arasında $(3\pi/8)^2$ kadar fark vardır. Bu modelde ısı sığası deneylerle gözlenenenden oldukça büyük çıkmaktadır. Çünkü o dönemde bilinmediğinden **elektronun spin etkisi** göz önüne alınmamıştır. Sonuç olarak klasik modeller elektriksel ve ısısal iletkenliği açıklamada yetersiz kalmaktadır. Bunlar kuantum mekaniği ile açıklanır.

4)FERMİ –DİRAC DAĞILIMI:Metallerde fononlar **Bose-Einstein istatistiğine**, elektronlar ise Fermi-Dirac istatistiğine uyarlar. Bir kip için uyarılabilecek fonon sayısında kısıtlama yokken, elektron sayısında vardır (Pauli dışarlama ilkesi). Fermiyonlar (buçuklu sipinli parçacıklar) için dağılım fonksiyonu $F(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/kT} + 1}$ şeklindedir. Bu bağıntı termodinamik denge halinde, T sıcaklığında E enerjili bir durumun doldurulma olasılığını belirtir. Burada; k: Boltzman sabiti, μ :kimyasal potansiyeldir.

5)FERMİ ENERJİSİ: N tane serbest elektronu bulunan bir sistemin taban durumunda doldurulmuş yörüngeleri k uzayında bir küre içerisinde gösterilebilmektedir. İşte bu kürenin yüzeyindeki enerjiye **Fermi enerjisi** denir. k uzayında

fermi küresinin fermi enerjisi $E_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2$ şeklindedir. Burada k_F , k uzayında fermi küresinin yarıçapı,m ise elektronun

kütlesidir. Fermi küresinin yarıçapı ise $K_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{1/3}$ şeklindedir. Burada; N:elektron sayısı, $V=L^3$ küpün

hacmidir. Durum yoğunluğu $D(E) = \frac{dN}{dE}$ den bulunur.

6)SERBEST ELEKTRON GAZININ ISI SİĞASI: Serbest elektron gazının ısı sığası fermi sıcaklığına $C_{ei} = \frac{1}{2} \pi^2 Nk \frac{T}{T_F}$ şeklinde bağlıdır. Burada T sıcaklık, N elektron sayısı, T_F ise fermi sıcaklığıdır. Metaller için toplam ısı sığası Debye ve Fermi sıcaklıklarının çok altındaki sıcaklıklarda $C = C_{ei} + C_{örgü} = AT + BT^3$ şeklindedir.

7)METALLERİN ELEKTRİKSEL ÖZDİRENCİ: Metallerin elektriksel direnci hem fonon direnci hem de örgü kusuru direncine bağlıdır. Buna göre direnç $\rho = \rho_{fonon} + \rho_{örgü}$ kusuru iki bileşenden oluşur. Burada $\rho = \frac{m}{ne^2\tau}$ şeklindedir.

Fermi gazının ısısal iletkenliği $K_{el} = \frac{\pi^2 n k^2 T \tau}{3m}$ şeklindedir. Elektriksel iletkenlik ile ısısal iletkenlik arasındaki ilişki

Wiedemann-Franz kanunu $\frac{K_{el}}{\sigma} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k}{e}\right)^2 T$ ile verilir.

8)HALL OLAYI: Bir iletkenin elektrik ve manyetik alan içerisinde elektriksel davranışı ile ilgilidir. Bir iletkende elektrik alandan dolayı bir doğrultuda toparlanacak şekilde sürüklenen elektronlar, iletkenin iki ucu arasında **Hall alanı** denilen bir alan oluşturur. İletken enine E_x elektrik alanı, boyuna B_z manyetik alanı içine konursa elektronların y yönünde sürüklenme hızı $V_y=0$ olur. Bu durumda $E_y = -eB\tau E_x/mc$ (cgs) olur. Bu durumda x doğrultusundaki akım yoğunluğu $J_x = \frac{ne^2 \tau E_x}{m}$ olur. Burada n taşıyıcı yoğunluğu, e elektronun yükü, çarpışma (durulma) zamanı, taşıyıcı kütlesidir. Hall direnci ise $R_H = -1/(nec)$ (cgs sisteminde) şeklindedir.

BÖLÜM-4 KATILARIN BAND TEORİSİ

1)BLOCH FONKSİYONLARI: 1928'de dış yörüngeden ayrılmış bir elektronun kristal içerisindeki potansiyelinin uzaya bağımlılığı **F.Bloch** tarafından verilmiştir. Periyodik kristal yapısı için Schrödinger denkleminin $\Psi_k(r)$ çözümünün gerekliliğine Bloch teoremi, bu fonksiyonlara da Bloch fonksiyonları denir. Bloch fonksiyonu; $\Psi_k(r) = U_k(r) e^{i \cdot k \cdot r}$ şeklinde olup, Schrödinger denkleminde dalga fonksiyonunun periyodik potansiyel için periyodik olduğunu öngörür.

2)KRONİG –PENNEY MODELİ: Bu model; bir boyutlu kare kuyuda, elektronun hareketini inceler.

$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + U(x) \Psi = E \Psi$ Schrödinger denkleminde, $U=0$ için $\Psi = A e^{i k x} + B e^{-i k x}$ şeklinde $K = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ ile,

$U=U_0$ için $\Psi = C e^{Qx} + D e^{-Qx}$ ve $Q = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$ sınır şartlarına uygun, kuyudaki elektronun Ψ_n dalga fonksiyonlarını belirler.

3)PERİYODİK POTANSİYELDE ELEKTRONUN DALGA DENKLEMİ: Örgü sabiti a olan çizgisel bir örgü içinde hareket eden elektronun örgü potansiyeli $U(x) = \sum_G U_G e^{i G x}$ ve dalga fonksiyonu $\Psi = \sum_k C(k) e^{i k x}$ şeklindedir. Burada G: herhangi bir karşıt örgü vektörü, k: elektron dalga vektörüdür.

Periyodik örgü için dalga denklemi özel formda $(\lambda_k - E) C(k) + \sum_G U_G C(k - G) = 0$ şeklindedir. Bu durumda katsayılar

determinantı $\begin{vmatrix} \lambda_k - E & U \\ U & \lambda_{k-G} - E \end{vmatrix} = 0$ olmalıdır. Burada $\lambda_k = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$, U: örgü potansiyel enerjisidir.

4)YARI İLETKENLERDE BOŞLUKLAR: Yarı iletkende değerlilik bandından iletim bandına uyarılan elektronlar değerlilik bandında boşluklar bırakır. Bu boşluklar (holler) elektrik ve manyetik alan içerisinde (+e) yüküne sahipmiş gibi davranır. Kristalde boşluğun hareket denklemi, elektrik ve manyetik alana $\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = e(\vec{E} + \frac{1}{c} \vec{v}_b \times \vec{B})$, (cgs) şeklinde bağlıdır.

5)ETKİN KÜTLE: Katılarda etkin kütle $\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}$ elektrik alan ve dalga vektörüne (sayısına) bağlıdır. Bu

bağıntıda E; enerji, m^* ; etkin kütedir. Etkin kütle katıların band yapısını belirlemede kullanılabilir. Yarı iletkenlerin etkin kütlesi siklotron rezonans deneyleri ile belirlenebilir. Bu durumda enerji

$E = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_2} + \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m_3}$ şeklindedir. Buradaki m^* 'ler etkin kütlelerin bileşenleridir.

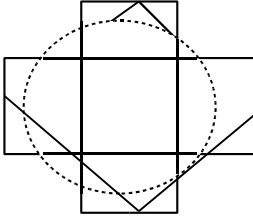
6)YARI İLETKENLERİN İLETİM BANDINDA ELEKTRON, DEĞERLİLİK BANDINDA BOŞLUK SAYISI: Yarı iletkenlerde özden taşıyıcı yoğunluğu, iletim bandındaki elektron yoğunluğu veya değerlilik bandındaki boşluk yoğunluğudur. İletim bandında bir elektronun enerjisi $E = E_g + (\hbar^2 k^2)/2m^*$ şeklindedir. Burada E_g : band aralığı enerjisi, k dalga sayısı (dalga vektörü), m^* elektronun etkin kütlesidir. Yarı iletkende elektron sayısı;

$n = 2 \left(\frac{m^* kT}{2\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2} e^{(\mu - E_g)/kT}$,boşluk sayısı ; $p = 2 \left(\frac{m_b kT}{2\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\mu/kT}$ şeklindedir. Burada; μ kimyasal potansiyel enerjisi, T ise sıcaklıktır.

7)YARI İLETKENLERDE ELEKTRİKSEL İLETKENLİK: Yarı iletkenlerde elektriksel iletkenlik $\rho = n e \mu_e + p e \mu_b$ şeklinde iki bileşenden oluşur. Elektronların hareketliliği $\mu_e = e \tau_e / m_e$,boşlukların hareketliliği $\mu_b = e \tau_b / m_b$ şeklindedir. Yarı iletkenin verici iyonizasyon enerjisi Bohr yaklaşımı ile $E_d = \frac{e^4 m^*}{2\epsilon^2 \hbar^2}$ (cgs) şeklindedir. Yarıiletkende alçak sıcaklık limitinde alıcıların olmadığı bir durumda iyanize olmuş elektron sayısı $n = (n_0 N_d)^{1/2} e^{-E_d/2kT}$ dir. N_d :vericilerin sayısı ise $n_0 = 2(m_e kT/2\pi \hbar^2)^{3/2}$ dir. Boşluk sayısı fazla ise yarı iletken P tipi, elektron sayısı fazla ise n tipidir.

8)SCHOTTKY ENGELİ:Değme durumuna gelen bir metal ile bir yarı iletkenin bandlarındaki elektron dağılımını inceler. Elektronlar için Poisson denklemi $\frac{d^2\Phi}{dx^2} = -\frac{4\pi Ne}{\epsilon}$ (cgs) şeklindedir. Burada N:verici sayısı , Φ :elektriksel potansiyel, ϵ :dielektrik sabitidir. Bu durumda Schottky engelinin kalınlığı $X_b = \left(\frac{\epsilon \Phi_0}{2\pi Ne} \right)^{1/2}$ (cgs) şeklinde olur.

9)BRİLLOUİN BÖLGELERİ VE FERMİ YÜZEYİ:Şekilde bir kare örgünün Brillouin bölgesi ve Fermi yüzeyi görülüyor.



Metallerde değerlilik elektronlarının örgü ile zayıf etkileşmeleri sonucu Fermi yüzeyleri Bozulmuş küre şeklindedir. Elektronun Fermi yüzeyi üzerinde yörüngesi üç tiptir,bunlar:

1)elektron,2)boşluk,3)açık yörüngelerdir. Açık yörüngelerin en büyük etkisi manyeto direnç üzerinedir. Basit bir kübik örgünün sıkı bağ yaklaşımında band enerjisi $E_k = E_0 - \alpha - 2\gamma (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$ şeklindedir.

10)DE HASS-VAN ALPEN OLAYI: Bu manyetik alana konan bir metalin ;manyetik alan şiddetiyle Fermi yüzeyinde elektronların yörünge alanları arasındaki ilişkiyi belirler. $S \left(\frac{1}{B_{n+1}} + \frac{1}{B_n} \right) = \frac{2\pi e}{\hbar c}$ ve $\Delta \left(\frac{1}{B} \right) = \frac{2\pi e}{\hbar c S}$ (cgs) .

Burada B manyetik alan, S ise k uzayında B'ye dik yörünge alanıdır. Metallerde manyetik bozulma $\hbar \omega_c E_f > E_g^2$ koşulunda oluşur.

Mehmet TAŞKAN

KAYNAK:

1) “**Katıhal Fizikine Giriş**”,Prf.Dr.Tahsin Nuri Durlu, Ankara üniversitesi yayınları-1992, 2.Baskı.

2)“**Atom ve Molekül Fizik**” Prf.Dr.Erol Aygün-Doç.Dr.D.Mehmet Zengin, Ankara Üniversitesi yayınları-1992