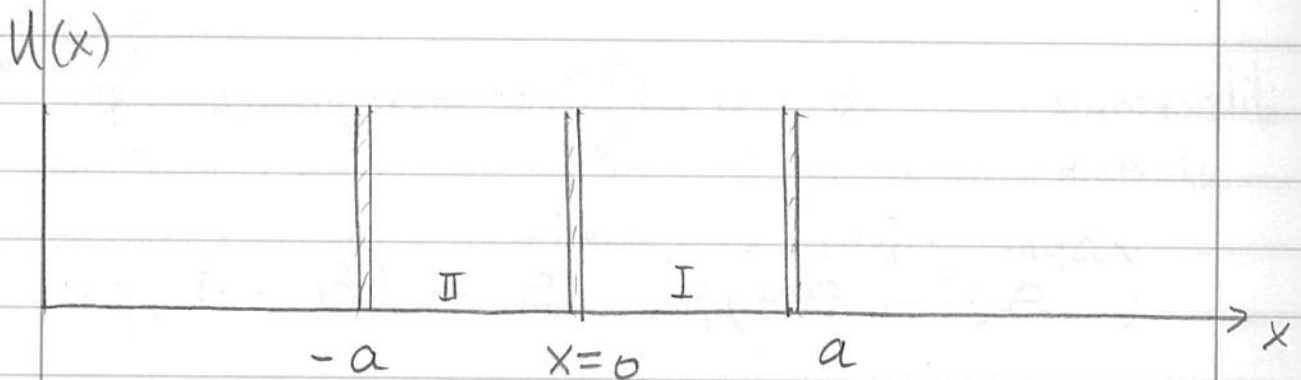


Elektronun Enerji Band Yapısı

Kronig-Penney Modeli

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi}{dx^2} + U(x) \phi(x) = E \phi(x)$$

$$U(x) = \sum_n \lambda \delta(x - na)$$



$$\psi_I(x) = A e^{iqx} + B e^{-iqx} \quad q = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$0 \leq x \leq a$

Bloch teoremi kullanılarak II numaralı bölgedeki çözüm bulunabilir:

$$\psi_{II}(x') = \psi_I(x-a) = e^{-ika} \psi_I(x) \quad -a \leq x' \leq 0$$

$x' = x - a$

$$\psi_{II}(x') = e^{-ika} (A e^{iqx} + B e^{-iqx})$$

$x=0$ noktasında dalga fonksiyonu sürekli fakat türevi süreksiz olacak

$$\psi_I(x) \Big|_{x=0} = \psi_{II}(x') \Big|_{x'=0} \quad [x'=0 \rightarrow x=0]$$

$$A+B = e^{-ika} (Ae^{iqa} + Be^{-iqa})$$

$$\psi'_I(x=0) - \psi'_{II}(x'=0) = \frac{2m\lambda}{\hbar^2} \psi_I(x=0) \quad \text{süreksizlik koşulu}$$

$$iq(A-B) - e^{-ika} iq(Ae^{iqa} - Be^{-iqa}) = \frac{2m\lambda}{\hbar^2} (A+B)$$

$$A(1 - e^{i(q-k)a}) + B(1 - e^{-i(q+k)a}) = 0$$

$$A\left(1 - e^{i(q-k)a} - \frac{2m\lambda}{iq\hbar^2}\right) + B\left(-1 + e^{-i(q+k)a} - \frac{2m\lambda}{iq\hbar^2}\right) = 0$$

$$\begin{pmatrix} \text{Katsayı} \\ \text{Det.} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0$$

$$\begin{bmatrix} 1 - e^{i(q-k)a} & 1 - e^{-i(q+k)a} \\ \left(1 - \frac{2m\lambda}{i\hbar^2} - e^{i(q-k)a}\right) & \left(-1 - \frac{2m\lambda}{i\hbar^2} + e^{-i(q+k)a}\right) \end{bmatrix}$$

$$= 0 \quad \text{olmalı}$$

$$\left(1 - e^{i(q-k)a}\right) \left(-1 - \frac{2m\lambda}{i\hbar^2} + e^{-i(q+k)a}\right)$$

$$- \left(1 - e^{-i(q+k)a}\right) \left(1 - \frac{2m\lambda}{i\hbar^2} - e^{i(q-k)a}\right) = 0$$

$$\cos ka = \cos qa + \frac{\lambda ma}{\hbar^2} \frac{\sin qa}{qa}$$

Özdeğer Denklemimin Çözümleri

Eğer $\lambda=0$ ise (serbest parçacık)

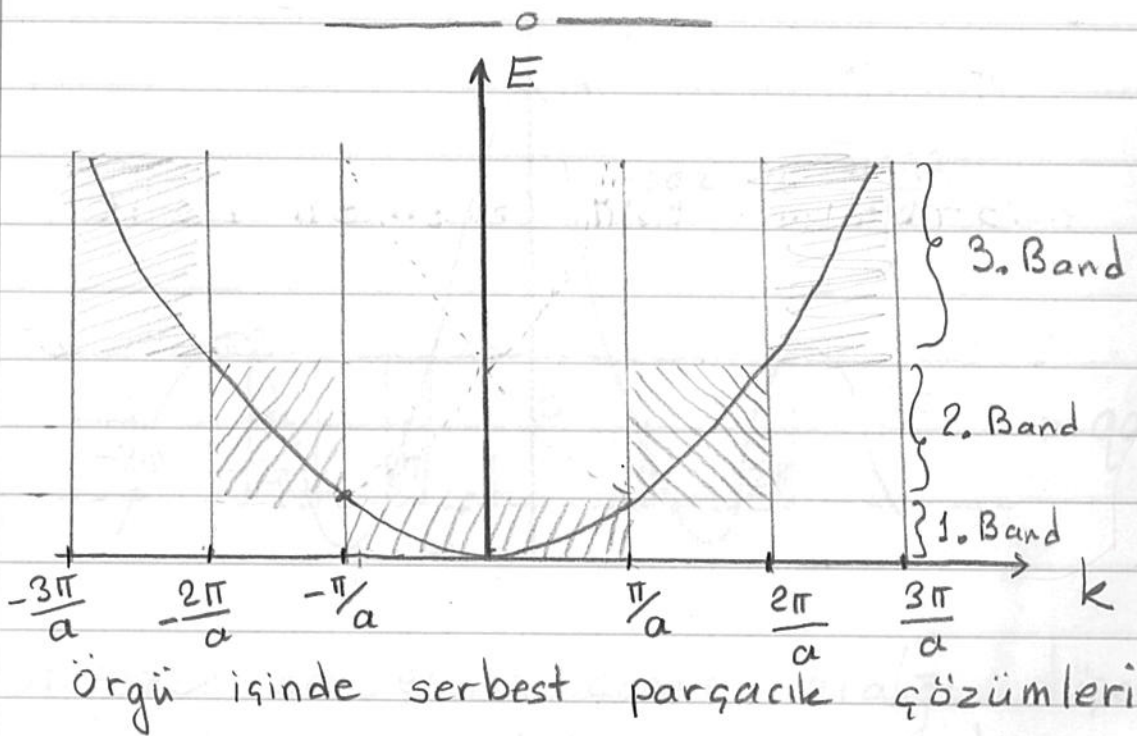
$$\cos ka = \cos qa \rightarrow k=q$$

$$q = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = k$$

$$2mE = \hbar^2 k^2$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

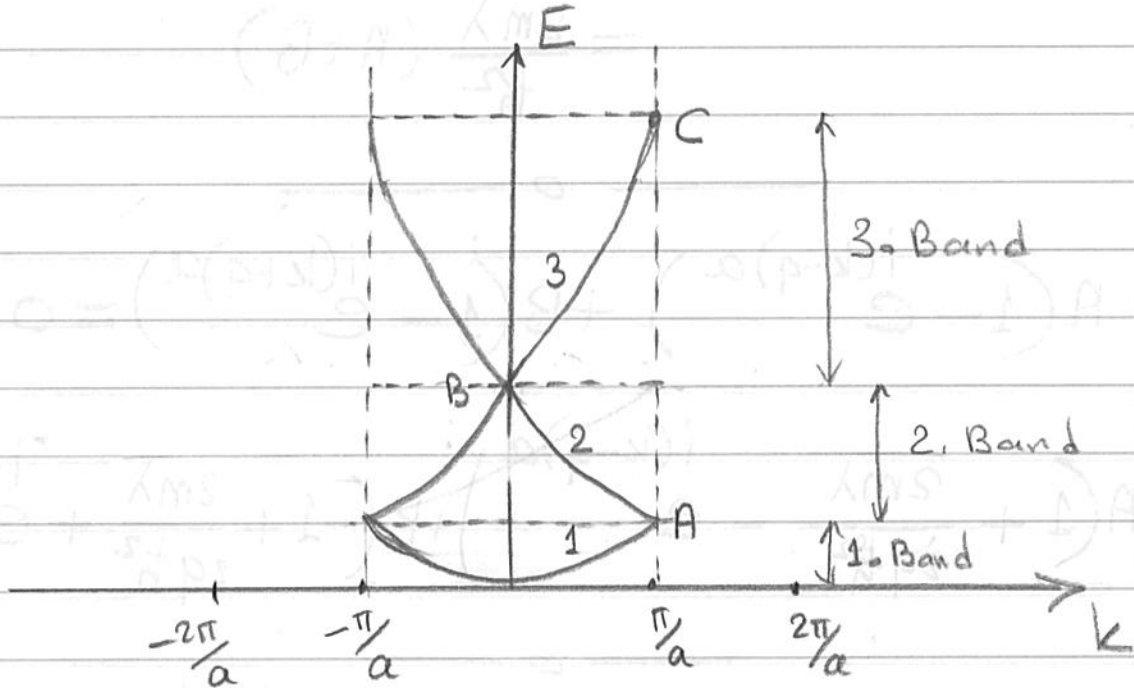
serbest
parçacık



Genişletilmiş bölge (Extended zone)

$$\cos x = \cos(x + 2\pi)$$

$$\cos x = \cos(x - 2\pi)$$



Daraltılmış bölge (Reduced zone)

A, B, C : Bantların kesiştiği noktalar

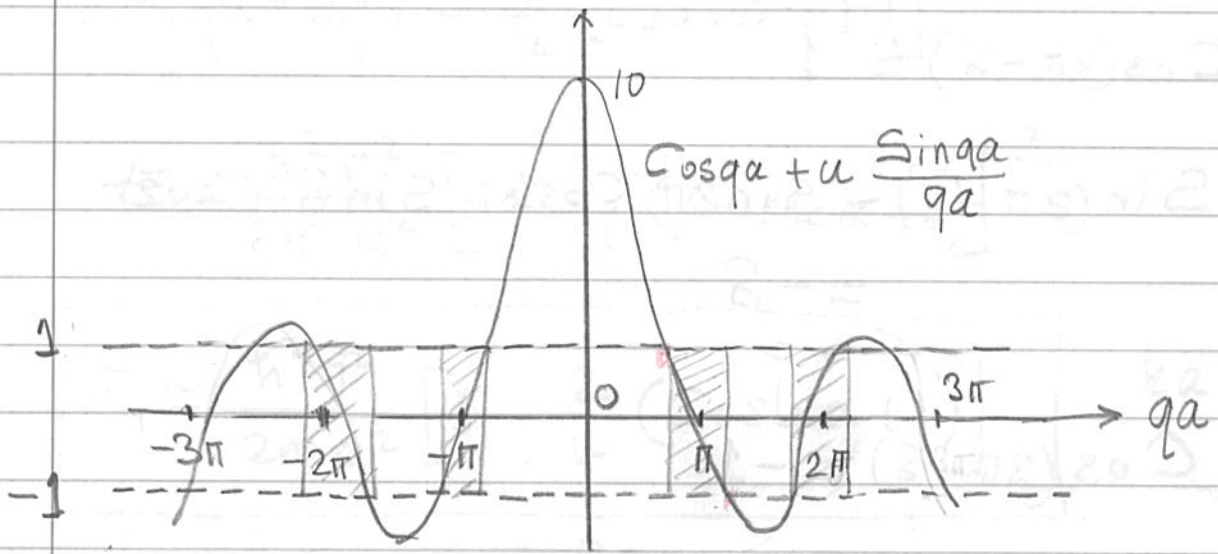
Kronig-Penney Modeli

Sıkı Bağlanma Durumu

$$\frac{\lambda ma}{\hbar^2} = u \gg 1 \text{ olsun}$$

$$\boxed{\cos ka = \cos qa + u \frac{\sin qa}{qa}} \quad u \gg 1$$

$u=10$ için özdeğer denkleminin çözümleri aşağıdaki grafik ile gösterilebilir.



Özdeğer denkleminin çözüm aralığı düşey eksen üzerinde $(-1, 1)$ aralığında olur. Taralı alanlar çözüm aralıklarını gösterir.

Grafikten görüldüğü gibi çözümler $qa = \pi - \delta$, $2\pi - \delta$, $3\pi - \delta$ noktaları civarındadır.

$$qa = \pi - \delta \quad \text{is in}$$

$$\cos ka = \cos qa + u \frac{\sin qa}{qa}$$

$$\cos ka = -1 + \frac{u}{\pi} \delta$$

$$\delta = (\cos ka + 1) \frac{\pi}{u}$$

$$qa = \pi - \delta \quad q = \sqrt{2mE}/\hbar$$

$$\frac{2mEa^2}{\hbar^2} = \left[\pi - \frac{\pi}{u} (\cos ka + 1) \right]^2$$

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \left[1 - \frac{1}{u} (\cos ka + 1) \right]^2$$

$$E_1 \sim \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \left[1 - \frac{2}{u} (\cos ka + 1) \right] \quad ka = 0$$

$$qa = 2\pi - \delta \quad \text{is in}$$

$$\cos ka = 1 - \frac{u}{2\pi} \delta$$

$$\delta = -\frac{2\pi}{u} (\cos ka - 1)$$

$$\delta = \frac{2\pi}{u} (1 - \cos ka)$$

$$\frac{2mEa^2}{\hbar^2} = (2\pi - \delta)^2$$

$$E_2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} 4 \left[1 - \frac{1}{u} (1 - \cos ka) \right]^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} 4 \left[1 - \frac{2}{u} (1 - \cos ka) \right]^2$$

$$\cos(a \pm b) = \cos a \cos b \mp \sin a \sin b$$

$$\sin(a \pm b) = \sin a \cos b \pm \cos a \sin b$$

$$\begin{aligned}\cos(\pi - \delta) &= \cos \pi \cos \delta + \sin \pi \sin \delta \\ &= -1\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\sin(\pi - \delta) &= \sin \pi \cos \delta - \sin \delta \cos \pi \\ &= \delta\end{aligned}$$

$$\cos(2\pi - \delta) = 1$$

$$\begin{aligned}\sin(2\pi - \delta) &= \sin 2\pi \cos \delta - \sin \delta \cos 2\pi \\ &= -\delta\end{aligned}$$

$$\cos(3\pi - \delta) = -1$$

$$\sin(3\pi - \delta) = \delta$$

$$E_2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} 4 \left[1 - \frac{2}{u} (1 - \cos ka) \right]$$

$$(ka = \pi, 2\pi)$$

$$qa = 3\pi - \delta \quad \text{is in}$$

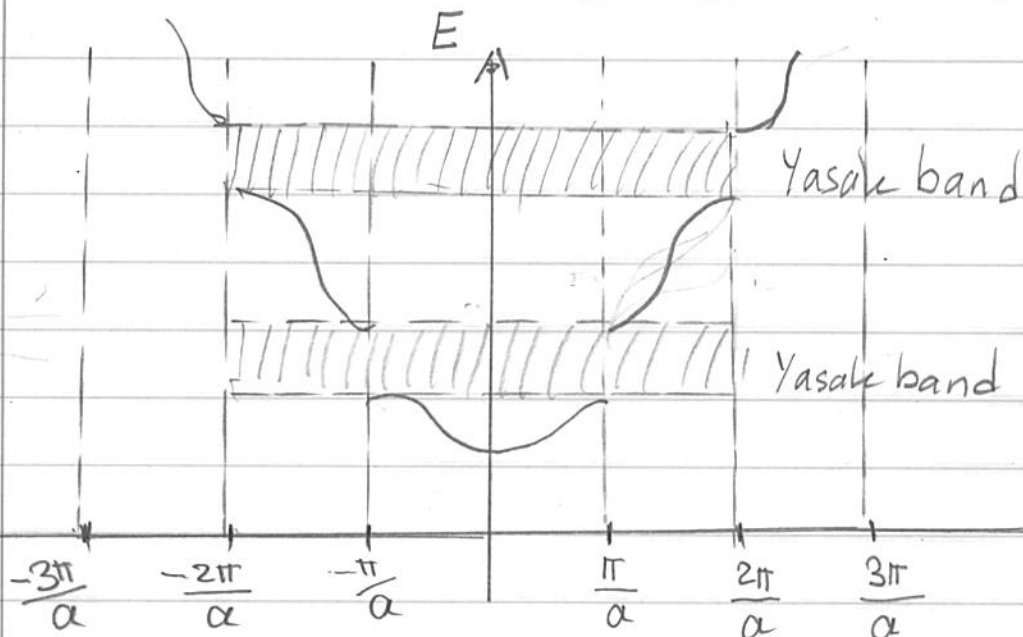
$$\cos ka = -1 + \frac{u}{3\pi} \delta$$

$$\delta = \frac{3\pi}{u} (\cos ka + 1)$$

$$\frac{2mEa^2}{\hbar^2} = 9\pi^2 \left[1 - \frac{1}{u} (\cos ka + 1) \right]^2$$

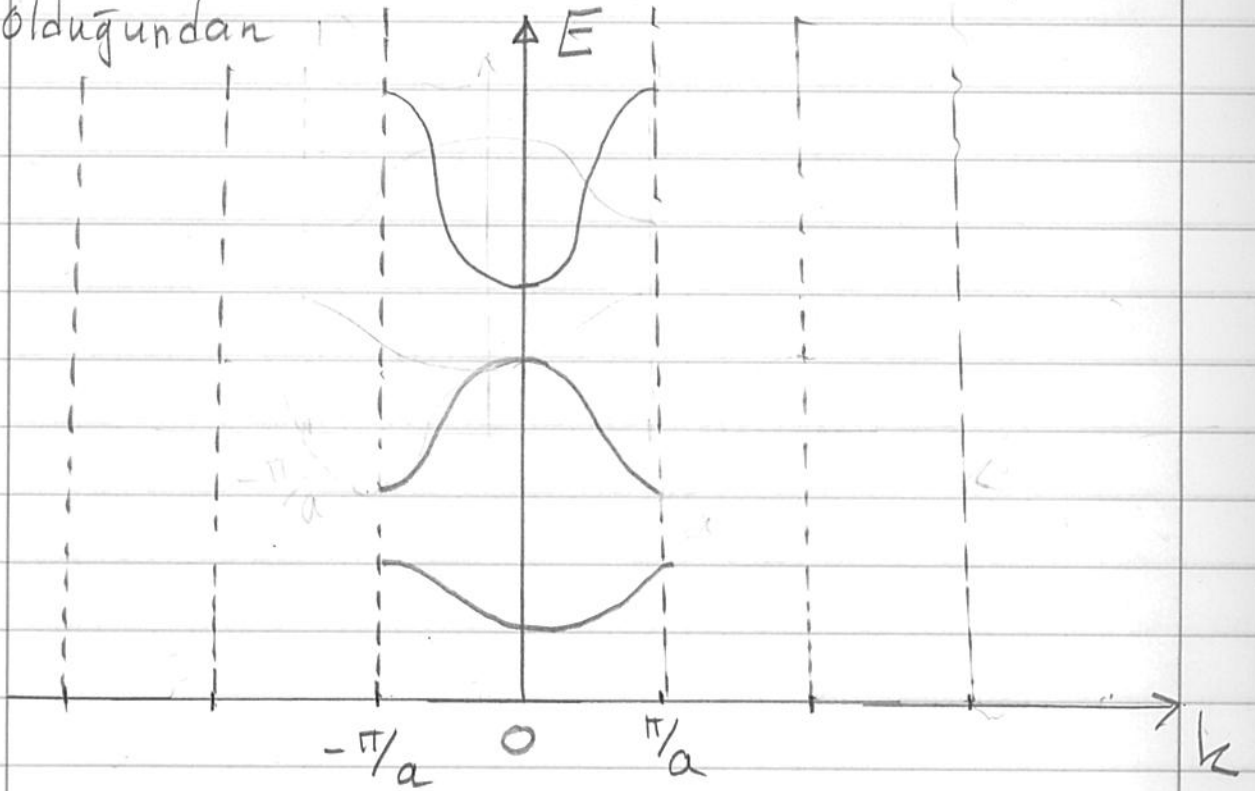
$$E_3 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} 9 \left[1 - \frac{2}{u} (\cos ka + 1) \right]$$

$$ka = (2\pi, 3\pi)$$



$$\cos ka = \cos (ka + 2\pi) = \cos (ka - 2\pi)$$

olduğundan



eğriler birinci Brillouin bölgesine n kadar kaydırılabilir. $(-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ aralığını daraltılmış k -uzayı adı verilir.