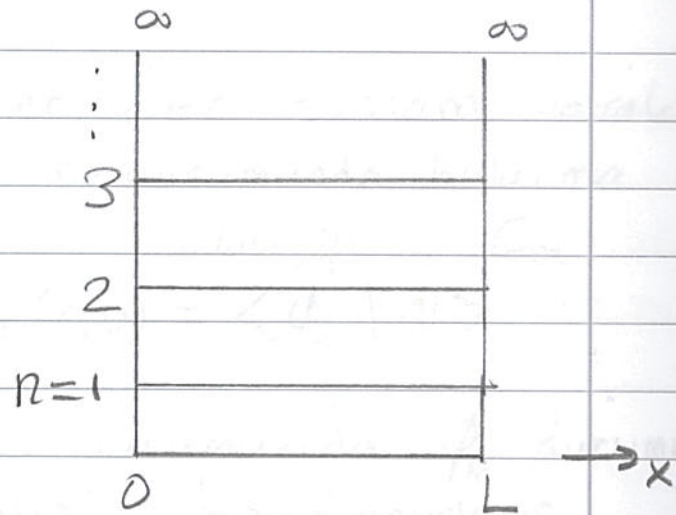


# Kuantum Durumları Arasında Geçiş Olasılıkları

$$H\phi_n = E_n \phi_n$$

$$\phi_n = A \sin kx$$

$$k = \frac{n\pi}{L}$$



$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}$$

$$\int_0^L \phi_m^*(x) \phi_n(x) dx = \delta_{nm} \quad \text{dik durumlar (Boylandırılmış)}$$

$$\int_0^L dx \phi_m^*(x) H \phi_n(x) = E_n \int_0^L \phi_m^*(x) \phi_n(x) dx$$

$$= E_n \delta_{nm} \quad \text{(dik durumlar için)}$$

Dik fonksiyonlar için iki farklı durum arasında geçiş olasılığı sıfırdır

$$\int_0^L \phi_2^*(x) \phi_3(x) dx = 0$$

Kuantum kuyusu içinde bulunan bir elektronun bulunabileceği durumlar:

$$\psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \phi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

dik durumlar üzerinden toplam olarak verilir. Elektronun  $m$ -durumunda bulunma

$$C_m = \int dx \phi_m^*(x) \psi(x,0) = \langle \phi_m | \psi \rangle \quad \text{olasılığı } C_m$$

katsayısı yani  $\psi$  durumunda  $\phi_m$  durumu geçiş olasılık genliği ile tanımlanır.

( $|C_m|^2$  olasılık) olarak tanımlanabilir)

Böyle bir durumda  $|C_m|^2$  geçiş olasılığı sıfırdan farklı olabilir.

$$H\psi = E\psi$$

## Sıkı Bağlanma Yöntemi ile Elektronun Enerji Band Yapısı (Tight Binding Model)

Bu modele göre örgü potansiyeli oldukça kuvvetlidir. Elektron örgü noktasındaki atomun çevresinde uzunca bir süre kalır, daha sonra diğer örgü noktalarına sızar

Bağımsız bir atoma ait elektronun dalga fonksiyonu ve enerjisi

$$H_0 \phi = E_0 \phi \quad H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0(x)$$

denklemini çözülerek elde edilir.

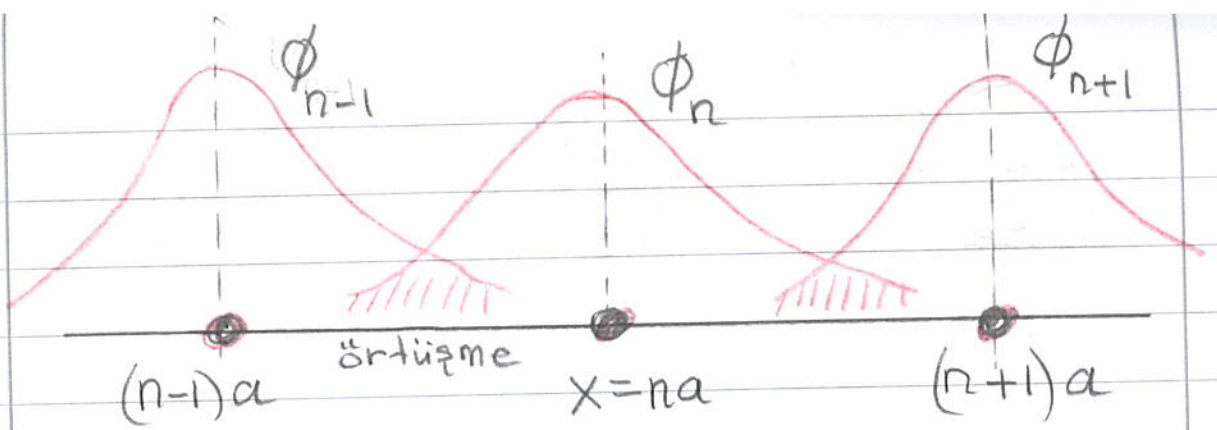
Tüm örgü göz önüne alındığında tek elektrona ait Hamiltonian ve denklemin

$$H\psi = E\psi$$

$$H = H_0 + \sum_i V_i = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0(x) \right] + \sum_i^N V(x - R_i)$$

N: Örgü noktası sayısı

i-toplamı  $V_0$  hariç tüm örgü noktaları üzerinden



$\phi_n, \phi_{n-1}, \phi_{n+1}$  atoma ait dalga fonksiyonları

- I.) Eğer örgü periyodik değilse örgünün dalga fonksiyonu atoma ait dalga fonksiyonlarının çizgisel toplamı olarak yazılabilir:

$$\psi = \sum_{i=1}^N C_i \phi(x - R_i)$$

- II.) Eğer örgü periyodik ise Bloch teoremi kullanılarak aynı işlem yapılır:

$$\psi_k = \sum_{i=1}^N e^{ikR_i} \phi(x - R_i) \quad \left[ \begin{array}{l} \text{Birim} \\ \text{Hücrede} \\ 1 \text{ Atom} \end{array} \right]$$

$$\psi_k = \sum_{i=1}^N e^{ikR_i} (C_1 \phi_1(x - R_i) + C_2 \phi_2(x - R_i)) \quad \left[ \begin{array}{l} \text{Birim hücrede} \\ 2 \text{ Atom} \end{array} \right]$$

Birim hücrede tek atom durumunda  $\psi_k$  gözüm önerisini Schrödinger denkleminde yerine koyalım.

$$H\psi_k = E_k \psi_k$$

$$\int dx \psi_k^* H \psi_k = E_k \int \psi_k^* \psi_k dx \quad [\text{Yöntem-I}]$$

$$\langle \psi_k | H | \psi_k \rangle = E_k \langle \psi_k | \psi_k \rangle \quad \text{Dirac Gösterimi}$$

$$\sum_{i,j} e^{ik(R_i - R_j)} \langle \phi(x - R_j) | H | \phi(x - R_i) \rangle$$

$$= E_k \sum_{i,j} e^{ik(R_i - R_j)} \langle \phi(x - R_j) | \phi(x - R_i) \rangle$$

$$x - R_j = x' \quad dx = dx'$$

$$x = x' + R_j$$

$$\sum_i \left( \sum_j e^{ik(R_i - R_j)} \langle \phi(x') | H | \phi(x' - (R_i - R_j)) \rangle \right)$$

$$= E_k \sum_{i,j} e^{ik(R_i - R_j)} \langle \phi(x') | \phi(x' - (R_i - R_j)) \rangle$$

$$R_i - R_j = R_e$$

Periyodik potansiyel için  $H(x') = H(x)$

$$\sum_i^N \left[ \sum_e^N e^{ikR_e} \langle \phi(x_i) | H(x_i) | \phi(x_i - R_e) \rangle \right]$$

$$= E_k \sum_i \left[ \sum_e e^{ikR_e} \langle \phi(x_i) | \phi(x_i - R_e) \rangle \right]$$

$$\xrightarrow{x_i \rightarrow x} N \left[ \sum_e e^{ikR_e} \langle \phi(x) | H | \phi(x - R_e) \rangle \right]$$

$$= E_k N \left[ \sum_e e^{ikR_e} \langle \phi(x) | \phi(x - R_e) \rangle \right]$$

$$\sum_e e^{ikR_e} \left[ \langle \phi(x) | H | \phi(x - R_e) \rangle - E_k \langle \phi(x) | \phi(x - R_e) \rangle \right]$$

Sıkı bağlanma yönteminde en yakın komşu yaklaşımı oldukça yararlıdır.

$$R_e \rightarrow 0, a, -a$$

$$x - R_e \rightarrow x, x - a, x + a$$

$$\langle \phi(x) | H | \phi(x) \rangle + e^{ika} \langle \phi(x) | H | \phi(x - a) \rangle$$

$$+ e^{-ika} \langle \phi(x) | H | \phi(x + a) \rangle$$

$$= E_k \left[ \langle \phi(x) | \phi(x) \rangle + e^{ika} \langle \phi(x) | \phi(x - a) \rangle \right.$$

$$\left. + e^{-ika} \langle \phi(x) | \phi(x + a) \rangle \right]$$

$$\langle \phi(x) | H_0 + V(x-a) + V(x+a) | \phi(x) \rangle \approx E_0$$

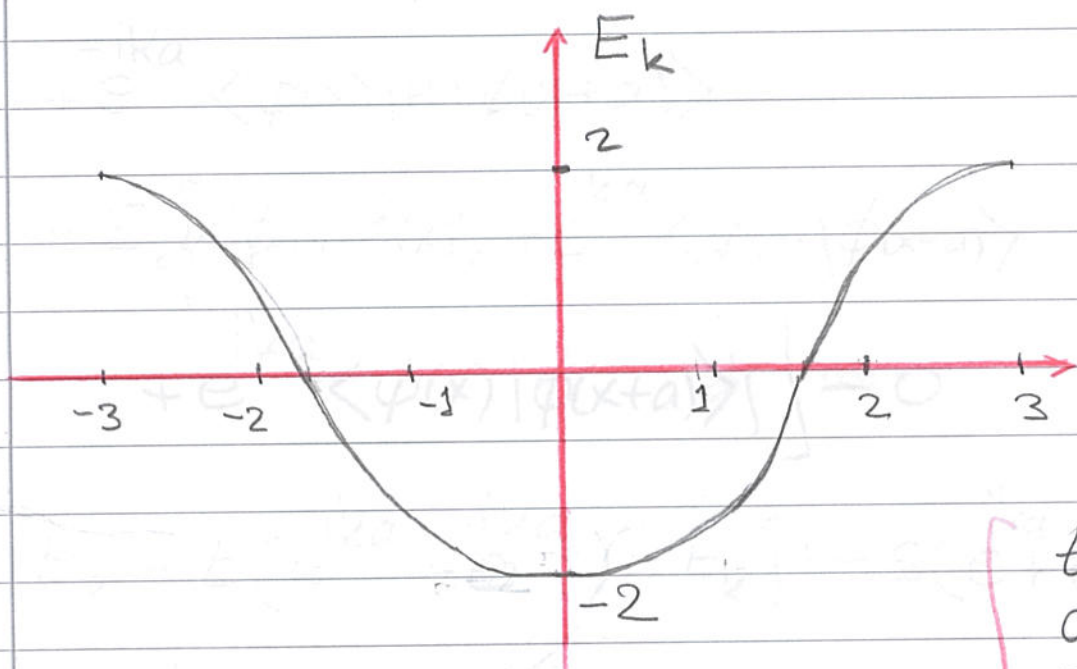
$$\langle \phi(x) | V(x-a) | \phi(x) \rangle = \langle \phi(x) | V(x+a) | \phi(x) \rangle \approx 0$$

$$\langle \phi(x) | H | \phi(x-a) \rangle = \langle \phi(x) | H | \phi(x+a) \rangle = -t$$

$$\langle \phi(x) | \phi(x-a) \rangle = \langle \phi(x) | \phi(x+a) \rangle = s$$

$$E_0 - t(e^{ika} + e^{-ika}) = E_k(1 + s[e^{ika} + e^{-ika}])$$

$$E_k = \frac{E_0 - 2t \cos ka}{1 + 2s \cos ka}$$



$$\begin{aligned} t &= 1 \\ a &= 1 \\ E_0 &= 0 \end{aligned}$$

$$s \ll 1$$

## Yöntem-II

$$H\psi_k = E_k \psi_k$$

$$\psi_k = \sum_i e^{ikR_i} \phi(x-R_i)$$

$$\int dx \phi^*(x) H \psi_k = E_k \int dx \phi^*(x) \psi_k$$

$\psi_k \rightarrow \phi(x)$  geniş olasılık genliği

$$\sum_i e^{ikR_i} [\langle \phi(x) | H | \phi(x-R_i) \rangle - E_k \langle \phi(x) | \phi(x-R_i) \rangle]$$

$$\left[ \langle \phi(x) | H | \phi(x) \rangle + e^{ika} \langle \phi(x) | H | \phi(x-a) \rangle \right. \\ \left. + e^{-ika} \langle \phi(x) | H | \phi(x+a) \rangle \right.$$

$$\left. - E_k \left\{ \langle \phi(x) | \phi(x) \rangle + e^{ika} \langle \phi(x) | \phi(x-a) \rangle \right. \right. \\ \left. \left. + e^{-ika} \langle \phi(x) | \phi(x+a) \rangle \right\} \right] = 0$$

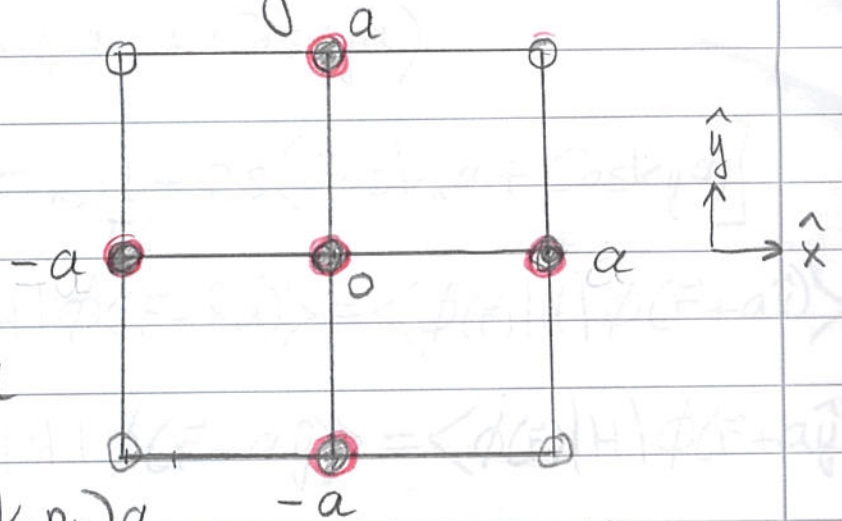
$$E_0 - t(e^{ika} + e^{-ika}) = E_k \{1 + s(e^{ika} + e^{-ika})\}$$

$$E_k = \frac{E_0 - 2t \cos ka}{1 + 2s \cos ka}$$

$$s \ll 1$$

## 2B - Kare örgü

"En yakın komşu etkileşmesi"



$$\vec{R} = (n_x \hat{x} + n_y \hat{y}) a$$

$$\vec{k} \cdot \vec{R}_{\vec{n}} = (k_x n_x + k_y n_y) a$$

$$H \psi_k = E_k \psi_k$$

$$\psi_k(\vec{r}) = \sum_{\vec{n}} e^{i \vec{k} \cdot \vec{R}_{\vec{n}}} \phi(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{n}})$$

$$\langle \phi(\vec{r}) | H | \psi_k \rangle = E_k \langle \phi(\vec{r}) | \psi_k \rangle \quad \vec{n} = (n_x, n_y)$$

$$\sum_{\vec{n}} e^{i \vec{k} \cdot \vec{R}_{\vec{n}}} \left[ \langle \phi(\vec{r}) | H | \phi(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{n}}) \rangle - E_k \langle \phi(\vec{r}) | \phi(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{n}}) \rangle \right] =$$

$$\begin{aligned} & \langle \phi(\vec{r}) | H | \phi(\vec{r}) \rangle + e^{i k_x a} \langle \phi(\vec{r}) | H | \phi(\vec{r} - a \hat{x}) \rangle \\ & + e^{-i k_x a} \langle \phi(\vec{r}) | H | \phi(\vec{r} + a \hat{x}) \rangle + e^{i k_y a} \langle \phi(\vec{r}) | H | \phi(\vec{r} - a \hat{y}) \rangle \\ & + e^{-i k_y a} \langle \phi(\vec{r}) | H | \phi(\vec{r} + a \hat{y}) \rangle \\ & = E_k \left[ \langle \phi(\vec{r}) | \phi(\vec{r}) \rangle + e^{i k_x a} \langle \phi(\vec{r}) | \phi(\vec{r} - a \hat{x}) \rangle \right. \\ & + e^{-i k_x a} \langle \phi(\vec{r}) | \phi(\vec{r} + a \hat{x}) \rangle + e^{i k_y a} \langle \phi(\vec{r}) | \phi(\vec{r} - a \hat{y}) \rangle \\ & \left. + e^{-i k_y a} \langle \phi(\vec{r}) | \phi(\vec{r} + a \hat{y}) \rangle \right] \end{aligned}$$

$$E_0 - 2t(\cos k_x a + \cos k_y a)$$

$$= E_k [1 + 2s(\cos k_x a + \cos k_y a)]$$

$$t = \langle \phi(\vec{r}) | H | \phi(\vec{r} - a\hat{x}) \rangle = \langle \phi(\vec{r}) | H | \phi(\vec{r} + a\hat{x}) \rangle$$

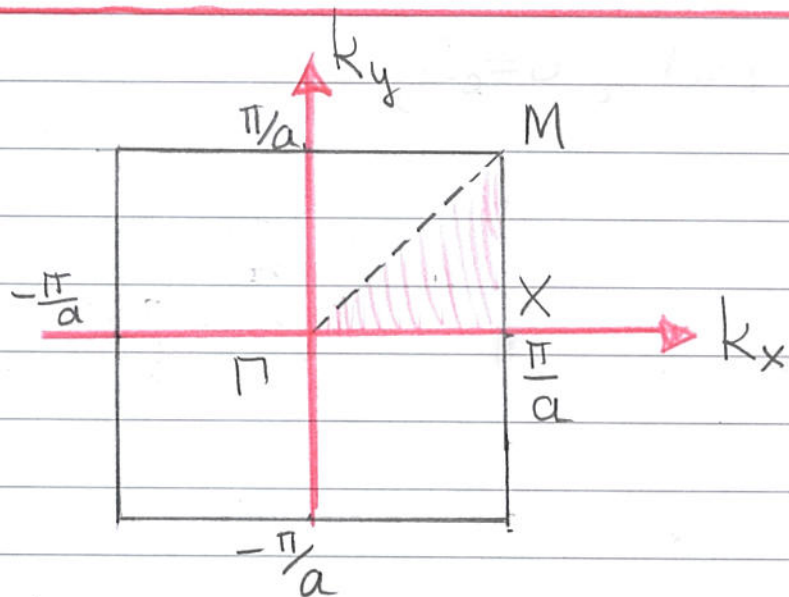
$$= \langle \phi(\vec{r}) | H | \phi(\vec{r} - a\hat{y}) \rangle = \langle \phi(\vec{r}) | H | \phi(\vec{r} + a\hat{y}) \rangle$$

$$s = \langle \phi(\vec{r}) | \phi(\vec{r} - a\hat{x}) \rangle = \langle \phi(\vec{r}) | \phi(\vec{r} + a\hat{x}) \rangle$$

$$= \langle \phi(\vec{r}) | \phi(\vec{r} - a\hat{y}) \rangle = \langle \phi(\vec{r}) | \phi(\vec{r} + a\hat{y}) \rangle$$

$$E_k = \frac{E_0 - 2t(\cos k_x a + \cos k_y a)}{1 + 2s(\cos k_x a + \cos k_y a)}$$

$$s \ll 1$$

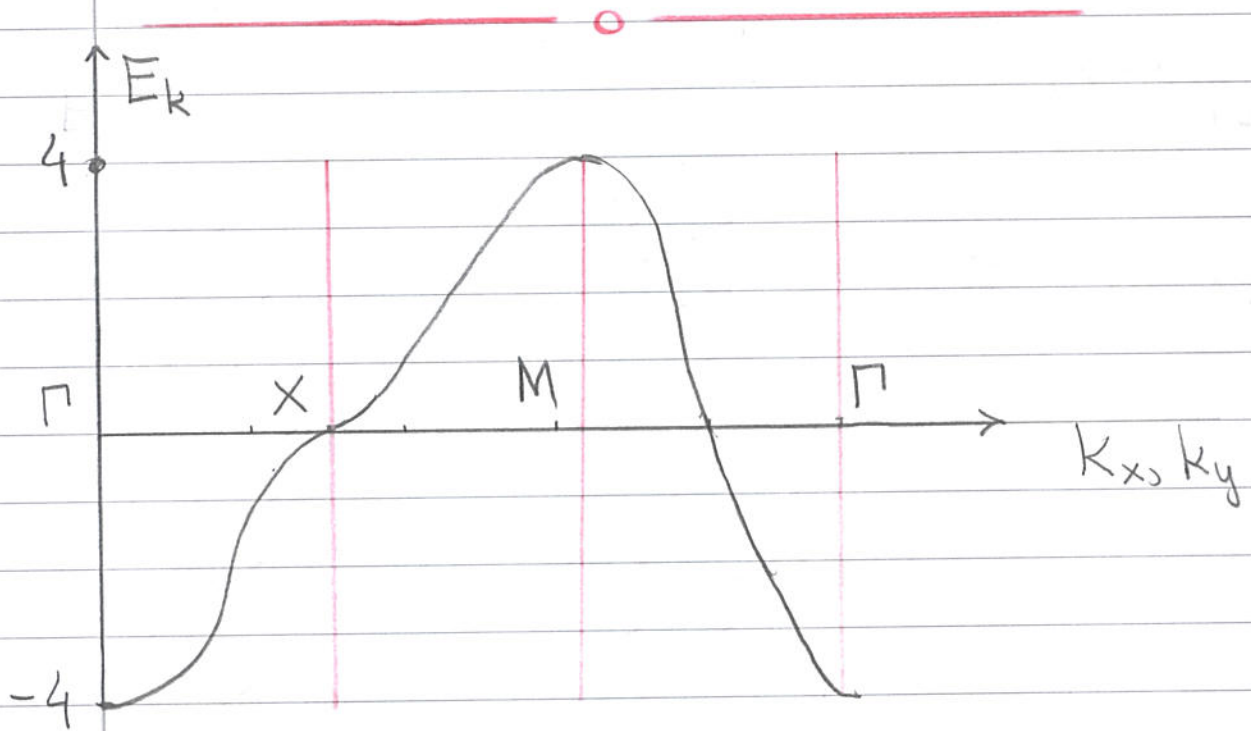


Kare örgüde Brillouin Bölgesi

3B

Kübik örgü

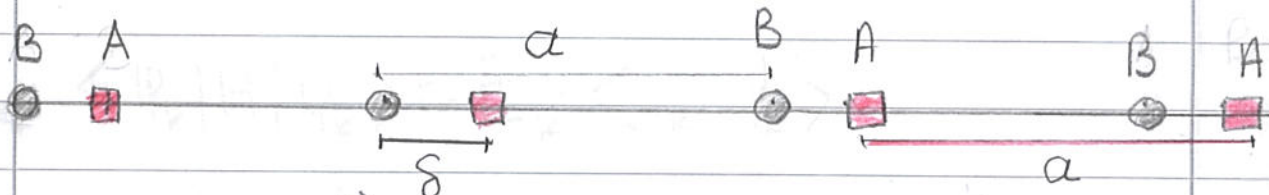
$$E_k = \frac{E_0 - 2t(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)}{1 + 2s(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)}$$



Kare örgüde enerji band yapısı

$$[E_0=0, t=1, a=1]$$

## Birim Hücrede 2-Atom



$$\psi_A = \sum_i e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \phi_A(\vec{r} - \vec{R}_i) \quad \text{Bloch Dalgası}$$

$$\psi_B = \sum_i e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \phi_B(\vec{r} - (\vec{\delta} + \vec{R}_i)) \quad \text{Bloch D.}$$

$$V = \sum_i V_A(\vec{r} - \vec{R}_i) + \sum_i V_B(\vec{r} - (\vec{\delta} + \vec{R}_i))$$

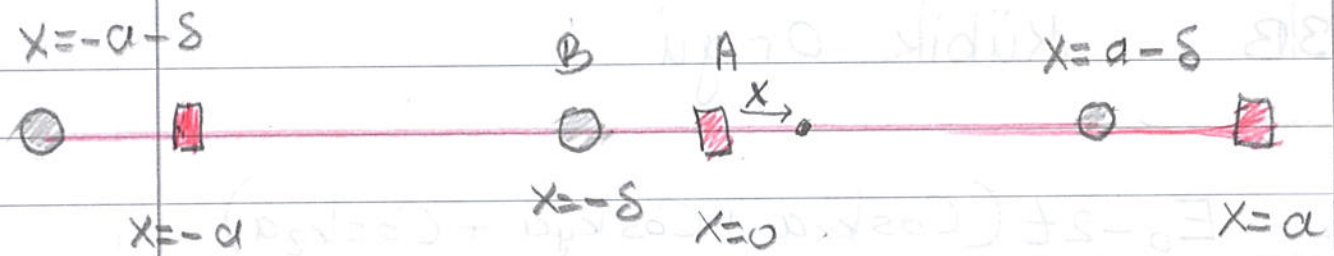
$$V_A(\vec{r}) = V_A(\vec{r} - \vec{R}_i), \quad V_B(\vec{r}) = V_B(\vec{r} - (\vec{\delta} + \vec{R}_i))$$

Böyle bir örgüde bir atomdan başlayarak diğer atomlara örgü vektörü  $\vec{R}$  ile ulaşmak mümkün değildir. Atomlar A ve B olarak iki gruba ayrılırsa A atomlarından başlayarak B atomları  $\vec{R} + \vec{\delta}$  ile ulaşılır. Enerji hesaplanırken bu durum dikkate alınmalıdır.

Elektronun, tüm örgünün etkisi ile, dalga fonksiyonu

$$\psi_k(\vec{r}) = b_1 \psi_A + b_2 \psi_B$$

Aynı hücre için toplam olarak alınabilir.



$$\phi_B [\phi_B(x - \delta) - \phi_A(x)] \rightarrow$$

Yakın

$$[\phi(x - a) - \phi_B(x - \delta)]$$

Komşuluklar

$$[\phi_A(x) - \phi_B(x + a - \delta)]$$

$$H\psi_k = E_k \psi_k$$

$$\langle \psi_k | H | \psi_k \rangle = E_k \langle \psi_k | \psi_k \rangle$$

$$\langle (b_1 \psi_A + b_2 \psi_B) | (H - E_k) | b_1 \psi_A + b_2 \psi_B \rangle = 0$$

$$\begin{pmatrix} b_1 & b_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_{11} - E_k S_{11} & H_{12} - E_k S_{12} \\ H_{21} - E_k S_{21} & H_{22} - E_k S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = 0$$

$b_1$  ve  $b_2$  katsayılarının bulunabilmesi için

$$\det \begin{bmatrix} H_{11} - E_k S_{11} & H_{12} - E_k S_{12} \\ H_{21} - E_k S_{21} & H_{22} - E_k S_{22} \end{bmatrix} = 0$$

olmalıdır.

$$H_{11} = \langle \psi_A | H | \psi_A \rangle \quad H_{22} = \langle \psi_B | H | \psi_B \rangle$$

$$H_{12} = \langle \psi_A | H | \psi_B \rangle \quad H_{21} = \langle \psi_B | H | \psi_A \rangle$$

$$S_{11} = \langle \psi_A | \psi_A \rangle \quad S_{22} = \langle \psi_B | \psi_B \rangle$$

$$S_{12} = \langle \psi_A | \psi_B \rangle \quad S_{21} = \langle \psi_B | \psi_A \rangle$$

$$H_{11} = \sum_{i,j}^N e^{ik(R_i - R_j)} \langle \phi_A(x - R_j) | H | \phi_A(x - R_i) \rangle$$

$$= N \sum_m e^{ikR_m} \langle \phi_A(x) | H | \phi_A(x - R_m) \rangle$$

$$H_{22} = \sum_{i,j} e^{ik(R_i - R_j)} \langle \phi_B(x - (\delta + R_j)) | H | \phi_B(x - (\delta + R_i)) \rangle$$

$$= N \sum_m e^{ikR_m} \langle \phi_B(x - \delta) | H | \phi_B(x - (\delta + R_m)) \rangle$$

$$H_{12} = \sum_{i,j} e^{ik(R_i - R_j)} \langle \phi_A(x - R_j) | H | \phi_B(x - (\delta + R_i)) \rangle$$

$$= N \sum_m e^{ikR_m} \langle \phi_A(x) | H | \phi_B(x - (\delta + R_m)) \rangle$$

$$H_{21} = \sum_{i,j} e^{ik(R_i - R_j)} \langle \phi_B(x - (\delta + R_j)) | H | \phi_A(x - R_i) \rangle$$

$$= N \sum_m e^{ikR_m} \langle \phi_B(x - \delta) | H | \phi_A(x - R_m) \rangle$$

$$\begin{aligned}
 S_{11} &= N \sum_m e^{ikR_m} \langle \phi_A(x) | \phi_A(x - R_m) \rangle \\
 &= N (1 + \langle \phi_A(x) | \phi_A(x - a) \rangle + \langle \phi_A(x) | \phi_A(x + a) \rangle + \dots) \\
 &= N (1 + i h m a)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 S_{22} &= N \sum_m e^{ikR_m} \langle \phi_B(x - \delta) | \phi_B(x - (\delta + R_m)) \rangle \\
 &= N (1 + i h m a)
 \end{aligned}$$

$$S_{12} = N \sum_m e^{ikR_m} \langle \phi_A(x) | \phi_B(x - (\delta + R_m)) \rangle$$

$$= N (\langle \phi_A(x) | \phi_B(x - \delta) \rangle + i h m a)$$

$$= N (S_{AB} + i h m a)$$

$$S_{21} = N \sum_m e^{ikR_m} \langle \phi_B(x - \delta) | \phi_A(x - R_m) \rangle$$

$$= N (S_{BA} + i h m a)$$

$$S_{AB} = S_{BA}$$

$$H_{11} = N [E_A + t_1 (e^{ika} + e^{-ika}) + \dots]$$

$$H_{22} = N [E_B + t_2 (e^{ika} + e^{-ika}) + \dots]$$

$$t_1 = \langle \phi_A(x) | H | \phi_A(x-a) \rangle = \langle \phi_A(x) | H | \phi_A(x+a) \rangle$$

$$t_2 = \langle \phi_B(x-s) | H | \phi_B(x-(s+a)) \rangle$$

$$= \langle \phi_B(x-s) | H | \phi_B(x-(s-a)) \rangle$$

$$E_A = \langle \phi_A(x) | H | \phi_A(x) \rangle \quad E_B = \langle \phi_B(x-s) | H | \phi_B(x-s) \rangle$$

$$H_{12} = N [h_0 + h_1 e^{ika} + h_1 e^{-ika}]$$

$$H_{21} = N [h_0 + h_1 e^{ika} + h_1 e^{-ika}]$$

$$h_0 = \langle \phi_A(x) | H | \phi_B(x-s) \rangle = \langle \phi_B(x-s) | H | \phi_A(x) \rangle$$

$$h_1 = \langle \phi_A(x) | H | \phi_B(x-(s-a)) \rangle$$

$$= \langle \phi_B(x-s) | H | \phi_A(x-a) \rangle$$

$S_{AB} \rightarrow 0$   $t_1 \rightarrow 0$   $t_2 \rightarrow 0$  ihmal edilsin  
(En yakın komşu etkileşmesi)

$$\det \begin{bmatrix} H_{11} - E_k & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} - E_k \end{bmatrix} = 0$$

$$(H_{11} - E_k)(H_{22} - E_k) = H_{21} H_{12}$$

$$H_{11} H_{22} - E_k (H_{11} + H_{22}) + E_k^2 - H_{21} H_{12} = 0$$

$$E_k^2 - E_k (H_{11} + H_{22}) + H_{11} H_{22} - H_{12} H_{21} = 0$$

$$E_k = \frac{1}{2} \left[ (H_{11} + H_{22}) \pm \sqrt{(H_{11} + H_{22})^2 - 4(H_{11} H_{22} - H_{12} H_{21})} \right]$$

$$H_{11} = E_A \quad H_{22} = E_B$$

$$E_k = \frac{1}{2} \left[ E_A + E_B \pm \sqrt{(E_A - E_B)^2 + 4 H_{12} H_{21}} \right]$$

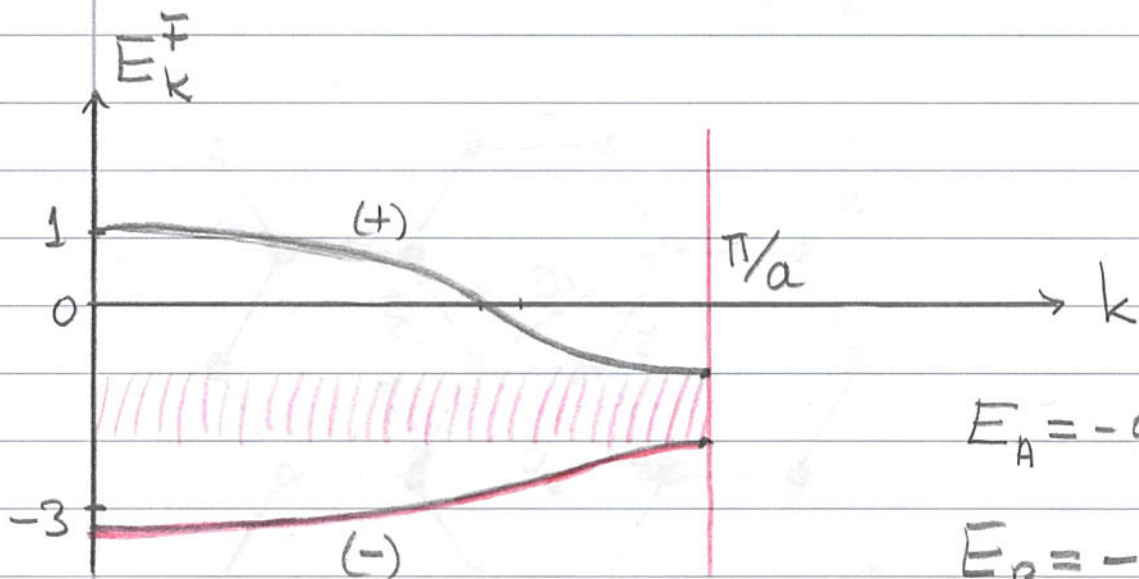
$$\begin{aligned} H_{12} H_{21} &= (h_0 + h_1 e^{ika}) (h_0 + h_1 e^{-ika}) \\ &= h_0^2 + 2h_0 h_1 \cos ka + h_1^2 \end{aligned}$$

$$h_0 \approx h_1$$

$$E_k = \frac{1}{2} \left[ E_B + E_A \mp \sqrt{(E_A - E_B)^2 + 8h_0^2 (1 + \cos ka)} \right]$$

Eğer  $E_A \approx E_B$  ise

$$E_k = E_0 \mp \sqrt{2h_0^2 (1 + \cos ka)}$$



$$E_A = -0.6$$

$$E_B = -1.5$$

$$a = 1$$

$$h_0 = 1$$