

DOKUZ EYLÜL ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**SAYISAL MATRİS MEKANİĞİ İLE KEYFİ
POTANSİYELLERE GENİŞLETİLMİŞ KRONİG –
PENNEY MODELİ**

Serkan ÖZER

Ekim, 2018

İZMİR

**SAYISAL MATRİS MEKANİĞİ İLE KEYFİ
POTANSİYELLERE GENİŞLETİLMİŞ KRONİG –
PENNEY MODELİ**

Dokuz Eylül Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü

Yüksek Lisans Tezi

Fizik Anabilim Dalı

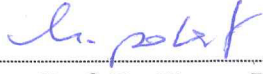
Serkan ÖZER

Ekim, 2018

İZMİR

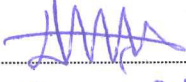
YÜKSEK LİSANS TEZİ SINAV SONUÇ FORMU

SERKAN ÖZER, tarafından PROF.DR. HAMZA POLAT yönetiminde hazırlanan “SAYISAL MATRİS MEKANİĞİ İLE KEYFİ POTANSİYELLERE GENİŞLETİLMİŞ KRONIG – PENNEY MODELİ” başlıklı tez tarafımızdan okunmuş, kapsamı ve niteliği açısından bir Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir.



Prof. Dr. Hamza POLAT

Yönetici



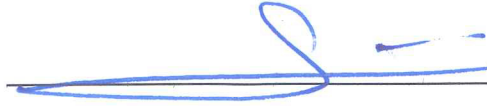
Doç. Dr. Zihni Akinci

Jüri Üyesi



Doç. Dr. Haydar Uney

Jüri Üyesi



Prof. Dr. Kadriye ERTEKİN

Müdür

Fen Bilimleri Enstitüsü

TEŞEKKÜR

Tezin yazılmasıyla ilgili beni yalnız bırakmayan sayın hocam Prof. Dr. Hamza POLAT’a,

Tezin hazırlanmasında çok yardım ve destekleri olan sayın hocam Doç. Dr. Ümit AKINCI’ya, en içten teşekkürlerimi belirtmek isterim.

Ayrıca, çok sevdiğim insanlar tanıdığım ve içinde yaşadığım Mutluköy Bakım Merkezi’ni buradan sevgiyle anmak isterim.

Serkan ÖZER

SAYISAL MATRİS MEKANİĞİ YOLUYLA KEYFİ POTANSİYELLERE GENİŞLETİLMİŞ KRONIG – PENNEY MODELİ

ÖZ

Kronig-Penney modeli fizik öğrencileri için periyodik potansiyelleri çalışmada hep başlangıç noktası olmuştur.

Bu çalışmada, önce Kronig Penney benzeri periyodik olmayan potansiyeller için Schrödinger (özdeğer) denkleminin çözümünün, matris köşegenleştirme yöntemi kullanılarak nasıl elde edileceği anlatılmıştır. Daha sonra Kronig Penney modeli ve Bloch teoremi tanıtılarak periyodik potansiyellerin çözümü tartışılmıştır. Son olarak, periyodik potansiyellerin çözümü matris köşegenleştirme esasına göre Fortran programı kullanılarak betimlenmiş ve sonuçlar grafik olarak gösterilmiştir.

Anahtar kelimeler: Bloch teoremi, Kronig-Penney

THE KRONIG – PENNEY MODEL EXTENDED TO ARBITRARY POTENTIALS VIA NUMERICAL MATRIX MECHANICS

ABSTRACT

Kronig-Penney model has always been a starting point to study periodic potentials for physics students.

In this study, The matrix diagonalization method to obtain the solution of Schrödinger (eigenvalue) equation for the non-periodic Kronnig Penney like potentials is explained. Then, by introducing Kronig Penney model and Bloch theorem the solution of the periodic potentials is discussed. Finally, the solutions of periodic potentials is described using matrix diagonalization method with Fortran and the results has been shown graphically.

Keywords: Bloch theorem, Kronig-Penney

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
YÜKSEK LİSANS TEZİ SINAV SONUÇ FORMU.....	ii
TEŞEKKÜR	iii
ÖZ	iv
ABSTRACT.....	v
ŞEKİLLER LİSTESİ.....	viii
BÖLÜM BİR – GİRİŞ	1
BÖLÜM İKİ – FORMÜLASYON.....	2
2.1 Sonsuz Kare Kuyu.....	2
2.2 Harmonik Osilatör	3
2.3 Periyodik Sınır Koşullarıyla Sonlu Kare Kuyu	4
2.4 Harmonik Osilatörün Periyodik Sınır Koşulları Altında Çözümü.....	4
2.4.1 Harmonik Osilatörün periyodik ve sonsuz kare kuyu bazlarında çözümlerinin karşılaştırması	5
2.5 Periyodik Potansiyeller.....	5
2.5.1 Bloch Teoremi	5
2.5.2 Kronig – Penney Modelinin Analitik Çözümü	6
BÖLÜM ÜÇ – SONUÇLAR VE DEĞERLENDİRME.....	7
3.1 Kronig – Penney Modeli için Matris Çözümü	7
3.2 Bazı Periyodik Potansiyeller için Örnek Çözümler	9
3.3 Değerlendirme	12
KAYNAKLAR.....	13

EKLER.....	14
Ek-1 Bilgisayar Programı	14



ŞEKİLLER LİSTESİ

Sayfa

Şekil 2.1 Tekrarlayan sonsuz kare kuyu, sonsuz kare kuyu ve sonsuz kare kuyu teorik çözüm için en yüksek uyarılmış durumlarda enerji özdeğeri	5
Şekil 3.1 $V_0=0$ için Kronig - Penney modeli çözümü.....	7
Şekil 3.2 $V_0=10$ ve $\rho=0.5$ için Kronig – Penney çözümü.....	8
Şekil 3.3 $V_0=10$ ve $\rho=0.8$ için Kronig – Penney çözümü.....	8
Şekil 3.4 Periyodik tekrarlayan harmonik osilatör için çözüm	10
Şekil 3.5 Periyodik tekrarlayan ters çevrilmiş harmonik osilatör için çözüm	11
Şekil 3.6 Periyodik tekrarlayan doğrusal değişen potansiyel için çözümü	11

BÖLÜM BİR

GİRİŞ

Kronig-Penney modeli, enerji bant aralıklarını periyodik katılar için açıklayan bir modeldir. Enerji bant aralıkları konusu metal ya da yalıtkan davranışlarını açıklamak için kullanılır.

Yöntem, Schrödinger denkleminin, dalga fonksiyonunun Fourier katsayılarıyla açılmasıyla birlikte kurulan özdeğer denkleminin çözümünden gelen izinli bant aralıklarının belirlenmesiyle olur. Bu yöntem için Bloch teoremi kullanılır. Temel fikir tek hücreli potansiyellerden başlar. Bloch teoremi kullanılarak çok hücreli sistem için tek hücre çözülür.

Basit bir metod olarak, tanımlanan bu periyodik fonksiyon birkaç kez tekrarlanarak, 10-12 olabilir, tasarlanan potansiyel Schrödinger denklemi aracılığıyla çözülür. Bu çözüm için matris köşegenleştirme yöntemiyle birlikte Bloch teoreminin kullanılması çözümü mümkün kılar. Ayrıca, bu yaklaşımla sonlu büyüklük etkileri oluşmamakta ve dalga vektörü sürekli olmaktadır. 3. Bölümde değişik potansiyeller incelenmiştir.

Bu çalışmada, genel anlamda Pavelich ve Marsiglio'nun kaynaklarda belirtilen 2015'te yayımlanan çalışmanın katkısı önemlidir. Ayrıca yazılan Fortran programlarında kaynaklarda belirtilen (Press ve diğer,2007) yayımından faydalanılmıştır. Fortran programı ile elde edilen veriler Origin (2015) programı ile grafiğe dönüştürülmüştür.

BÖLÜM İKİ

FORMÜLASYON

2.1 Sonsuz Kare Kuyu

Periyodik olarak kendini tekrar eden potansiyellerin enerji özdeğerleri, sonsuz kare kuyuya yerleştirilerek bulunabilir. Bu çözümler genellikle analitik olarak elde edilemez bunun için nümerik matris köşegenleştirme rutini yapılır. İlk olarak dalga fonksiyonu sonsuz kare kuyu bazında açılır: (Pavelich ve Marsiglio,2015)

$$|\Psi^{(0)}\rangle = \sum_1^\infty C_m |\Psi_m^{(0)}\rangle \quad (2.1)$$

$$\Psi_n^{(0)}(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) & 0 < x < a \\ 0 & \text{diğer.} \end{cases} \quad (2.2)$$

Burada, özdeğerleri, (Pavelich ve Marsiglio, 2015)

$$E_n^{(0)} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} = n^2 E_1^{(0)} \quad (2.3)$$

a:kuyu genişliği.

m_0 :elektronun kütlesi

$\hbar$:Planck Sabitinin 2π 'ye oranı.

n: Baş kuantum sayısını göstermektedir.

C_n bilinmeyen açılım katsayılarını göstermekte iken bu katsayılar köşegenleştirme problemi: (Pavelich ve Marsiglio,2015)

$$\sum_{m=1}^\infty H_{nm} C_m = E C_n \quad (2.4)$$

aracılığıyla belirlenebilirler. Burada,

$$H_{nm} = \langle \Psi_n^{(0)} | H_0 + V | \Psi_m^{(0)} \rangle = \delta_{mn} E_n^{(0)} + H_{nm}^V \quad (2.5)$$

$$H_{nm}^V = \langle \Psi_n^{(0)} | V | \Psi_m^{(0)} \rangle = \frac{2}{a} \int_0^a dx \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) V(x) \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \quad (2.6)$$

(2.4) no.lu denklemin her iki tarafı $E_1^{(0)}$ a bölünürse denklem boyutsuz formda yazılabilir:

$$h_{nm} = H_{nm} / E_1^{(0)} \quad (2.7)$$

$$e = E / E_1^{(0)} \quad (2.8)$$

tanımları yapılır ve sonuç olarak boyutsuz

$$\sum_{m=1}^{\infty} h_{nm} C_m = e C_n \quad (2.9)$$

eşitliği elde edilir.

2.2 Harmonik Osilatör

Sonlu kare kuyu bazında çözüm için

$$V_{HO}(x) = \frac{1}{2} m_0 \omega^2 \left(x - \frac{a}{2}\right)^2 \quad (0 < x < a) \quad (2.10)$$

(2.10) no.lu ifade (2.4) veya (2.9)'da yerine koyulup çözülürse

Şekil 2.1 grafiği sonuçları az bir yakınsama hatasıyla elde edilir.

2.3 Periyodik Sınır Koşullarıyla Sonlu Kare Kuyu

Burada dalga fonksiyonu periyodik olduğu için

$$\phi(x + a) = \phi(x) \quad \text{ise} \quad (2.11)$$

$$\phi(x) \sim e^{ikx}$$

Burada $k^2 = 2m_0E/\hbar^2$

(2.11)'e göre

$$ka = 2n\pi \quad (2.12)$$

n burada bir tamsayı.(n=..., -2, -1, 0, 1, 2...). Özdeğerler burada: (Pavelich ve Marsiglio, 2015)

$$E_n = 4 \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} = 4n^2 E_1^{(0)} \quad (2.13)$$

Ve ortonormal bazlar:

$$\phi_n^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \exp\left(i \frac{2\pi n}{a} x\right) \quad (2.14)$$

olur.

2.4 Harmonik Osilatörün Periyodik Sınır Koşulları Altında Çözümü

(Pavelich ve Marsiglio, 2015)

$$H_{nm}^V = \langle \phi_n^{(0)} | V | \phi_m^{(0)} \rangle = \frac{1}{a} \int_0^a dx e^{-i2\pi nx/a} \left(\frac{1}{2} m_0 \omega^2 \left(x - \frac{a}{2} \right)^2 \right) e^{i2\pi mx/a} \quad (2.15)$$

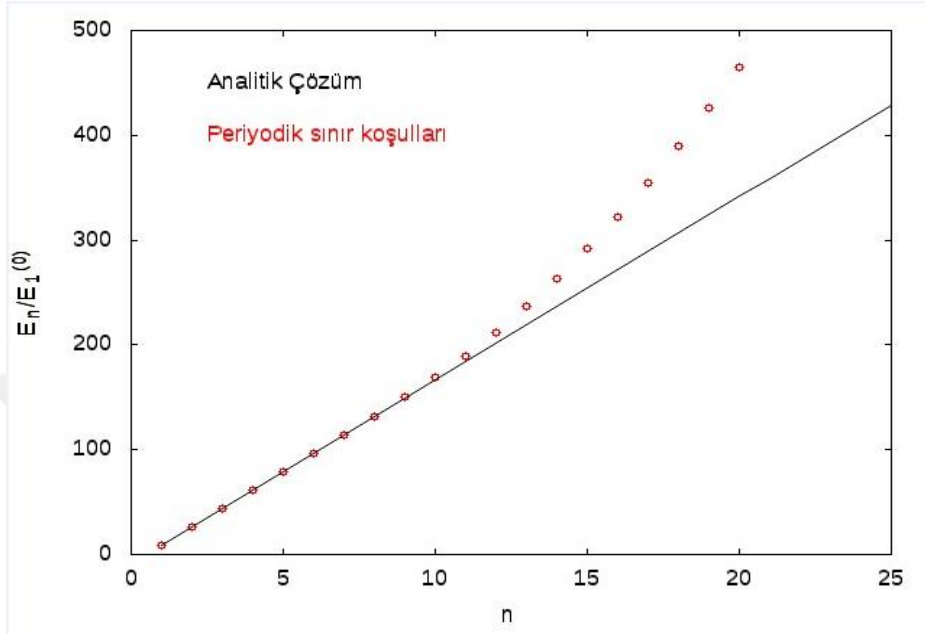
Bu denkleme kinetik enerji katkısı da ilave edilirse,

$$h_{nm} = \delta_{nm} \left[4n^2 + \frac{\pi^2 \gamma^2}{48} \right] + (1 - \delta_{nm}) \left[\frac{\gamma^2}{8} \frac{1}{(m-n)^2} \right] \quad (2.16)$$

elde edilir. Burada $\gamma = \frac{\hbar \omega}{E_1^{(0)}}$ dır.

Burada matris boyutunu belli noktada kesmek gerekir. Ve n sayısı burada $n = (0, 1, -1, 2, -2, 3, -3 \dots)$ ve n yeni tanımında $n^1 = (0, 1, 2, 3, 4, \dots)$ sırasında belirlenir. Örneğin $n^1=4$ $n=2$ ye karşılık gelir.

2.4.1 Harmonik Osilatörün periyodik ve sonsuz kare kuyu bazlarında çözümlerinin karşılaştırması



Şekil 2.1 Tekrarlayan sonsuz kare kuyu ile sonsuz kare kuyunun teorik çözüm için taban ve ilk 25 uyarılmış durumlarda enerji özdeğerleri. (Kırmızı yuvarlaklı değerler $n_{\max}=60$ için tekrarlayan sonsuz kare kuyu periyodik potansiyeli esas alan 60×60 matrisin çözümü ile elde edildi. Siyah çizgi ise sonsuz kare kuyu içindeki harmonik osilatör potansiyelinin analitik çözümünü ifade etmekte.)

Matrislerin çözümünde özdeğer denklemi fortran tabanlı hazır programlar kullanarak çözüldü.

2.5 Periyodik Potansiyeller

2.5.1 Bloch Teoremi

Bu teoreme göre periyodik bir dalga fonksiyonu bir düzlem dalgası ve potansiyelle aynı periyodikliğe sahip bir fonksiyonun çarpımı olarak yazılabilir. Yani, (Pavelich ve Marsiglio, 2015)

$$\psi(x + a) = e^{iKa} \psi(x) \quad (2.17)$$

olarak yazılabilir. Burada a birim hücre uzunluğu ve K $-\pi < Ka < \pi$ olarak ifade edilen dalga vektörü. K , her enerji aralığını betimleyen yeni bir kuantum sayısıdır. K burada sürekli değerler alır çünkü ele alınan potansiyel a periyoduyla sonsuza dek kendini tekrar etmektedir. Tekrarlamayan potansiyellerde her bir hücre için ayrı çözüm yapılmalıdır. Bloch teoremi, problemi bir hücre için çözüp K 'yı sürekli kılmamıza olanak sağlamaktadır.

2.5.2 Kronig Penny Modelinin Analitik Çözümü

Kronig Penney modeli, birbirini tekrarlayan eşit uzunluklu kuyu ve sonlu kare potansiyellerinin çözümünü kapsar. Bu yöntemle göre sınır şartı için Bloch teoremi kullanılır. Potansiyel: (Pavelich ve Marsiglio, 2015)

$$V(x) = V_0 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \Theta[x - (na + b)] \cdot \Theta[(n + 1)a - x] \quad (2.18)$$

Θ burada Heaviside adım fonksiyonu, birim hücrenin genişliği a ve iki Θ fonksiyonunun çarpımı bariyer içinde x 'in $na+b$ 'den büyük, $(n+1)a$ 'dan küçük olduğu yerler için 1'e eşit.

Schrödinger denklemini ve sınır şartlarını kullanarak elde edilen çözüm:

$$\cos(Ka) = \cos(k_1b) \cosh[K_2(a - b)] + \frac{K_2^2 - k_1^2}{2k_1K_2} \sin(k_1b) \sinh[K_2(a - b)] \quad (2.19)$$

Burada,

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_0E}{\hbar^2}} \quad \text{ve} \quad K_2 = \sqrt{\frac{2m_0(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad (2.20)$$

dir.

BÖLÜM ÜÇ

SONUÇLAR VE DEĞERLENDİRME

3.1 Kronig Penney Modeli için Matris Çözümü

Matris elemanlarının çözümünde Bloch durumu göz önüne alındığında, (Pavelich ve Marsiglio,2015)

$$ka = 2\pi n \rightarrow ka = 2\pi n + Ka$$

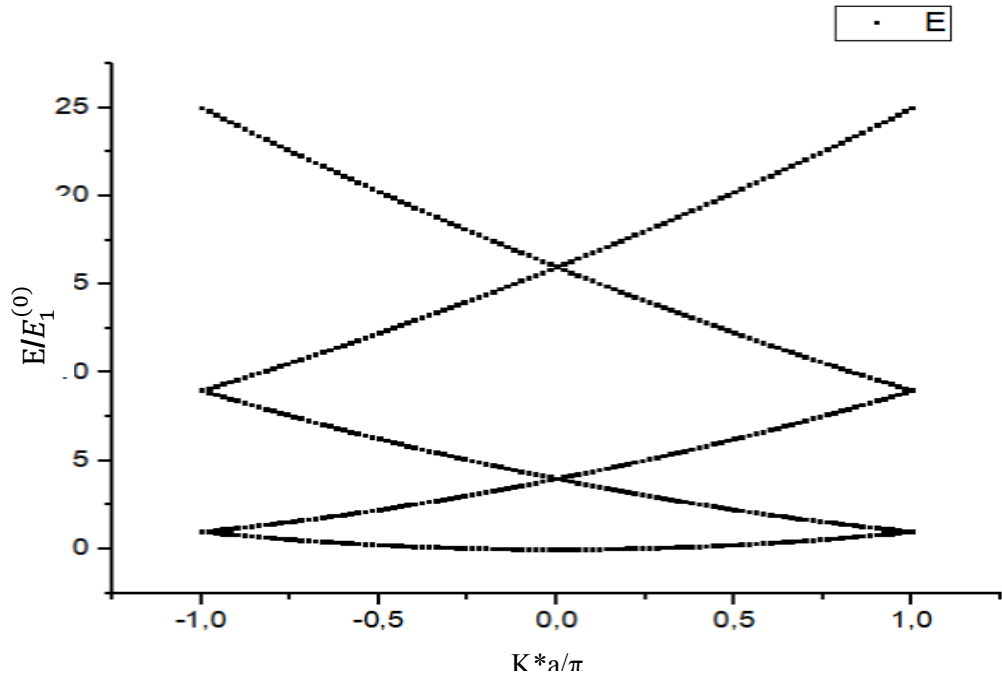
şeklinde denklem modifiye olur. Aynı şekilde (Pavelich ve Marsiglio,2015)

$$\phi_n^{(0)}(x) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{a}} \exp \left[i \frac{2\pi n + Ka}{a} x \right] = e^{iKx} \phi_n^{(0)}(x) \text{ 'e dönüşür.}$$

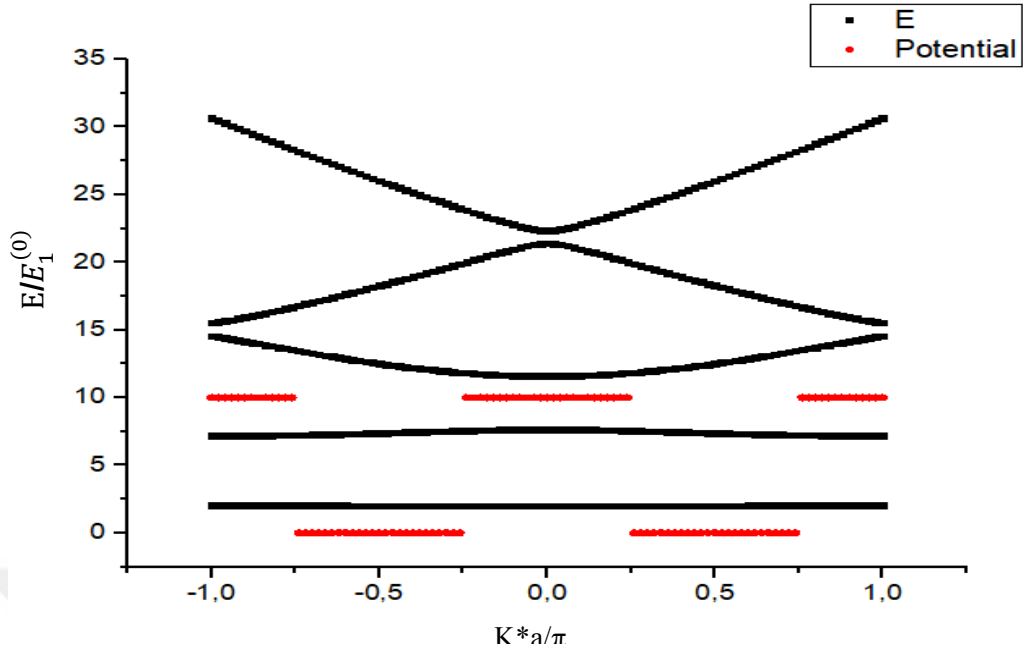
Tekrarlayan Kronig Penny potansiyeli için ilgili özdeğer denklemi matris elemanları: (Pavelich ve Marsiglio, 2015)

$$h_{nm} = \delta_{nm} \left[\left(2n + \frac{Ka}{\pi} \right)^2 + v_0(1 - \rho) \right] + (1 - \delta_{nm}) v_0 \frac{(-1)^{m-n+1} \sin[\pi(m-n)\rho]}{\pi(m-n)} \quad (3.1)$$

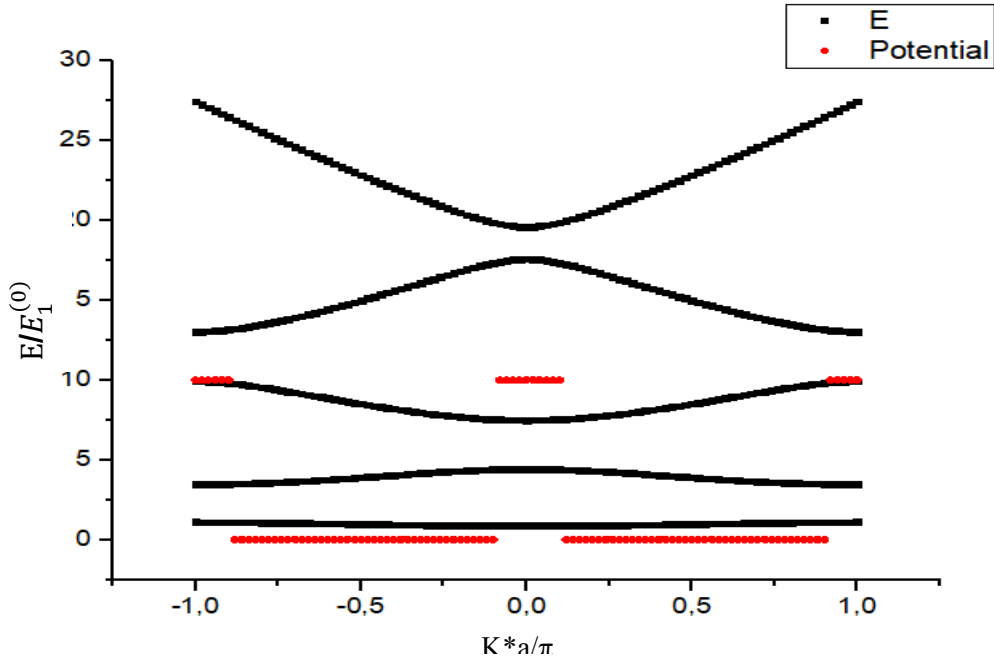
şeklindedir. Burada $\rho=b/a$ dır.



Şekil 3.1 $V_0=0$ için Kronig – Penney modeli çözümü ($-a$ ile a aralığı 100 parçaya bölünerek her bir değerdeki $V_0=0$ için 5×5 'lik özdeğer denkleminin çözümü 5 enerji özdeğeri ölçeklendirilmiş dalga sayısına bağlı olarak gösterilmekte.)



Şekil 3.2 $V_0=10$ ve $\rho=0.5$ için Kronig – Penney çözümü (Kronig - Penney modelinin $\rho=b/a=0.5$ için $-a$ ile a aralığının 100 parçaya bölünerek her bir parçada 5×5 lik özdeğer matris denkleminin çözümü ile siyah çizgiyle gösterilen enerji özdeğer grafiği elde edildi. Burada $a=1$. Not: Burada potansiyel çizimleri 2.18 denklemiyle elde edilen grafiğin $b+(a-b)/2$ kadar sola kaydırılmasıyla elde edildi.)



Şekil 3.3 $V_0=10$ ve $\rho=0.8$ için Kronig – Penney çözümü (Şekil 3.2 için yapılan işlem $\rho=b/a=0.8$ için burada tekrarlandı. Not: Burada potansiyel çizimleri 2.18 denklemiyle elde edilen grafiğin $b+(a-b)/2$ kadar sola kaydırılmasıyla elde edildi.)

3.2 Bazı periyodik potansiyeller için çözümler

Şekil 3.4'te harmonik osilatör potansiyeli, Şekil 3.5'te ters çevrilmiş harmonik osilatör potansiyeli, Şekil 3.6 doğrusal potansiyeller için $-a$ ile a aralığı 100 parçaya bölünmüş ve herbir parça için 5×5 'lik kare matrisi olan özdeğer denklemi çözülmüş ve bu enerji özdeğerleri siyah çizgilerle gösterilmiştir.

Şekil 3.5'te harmonik osilatör potansiyeli,

$$\begin{aligned} V(x) &= \frac{1}{2} * m_0 w^2 \left(x + \frac{a}{2}\right)^2 & -a < x < 0 \\ &= \frac{1}{2} * m_0 w^2 \left(x - \frac{a}{2}\right)^2 & 0 < x < a \end{aligned} \quad (3.2)$$

ve h_{nm} matris elemanları

$$h_{nm} = \delta_{nm} \left[\left(2n + \frac{Ka}{\pi}\right)^2 + \frac{\pi^2 \gamma^2}{48} \right] + (1 - \delta_{nm}) \frac{\gamma^2}{8} \frac{1}{(m-n)^2} \quad (3.3)$$

ile ifade ediliyor.

Şekil 3.6'da ters çevrilmiş harmonik osilatör potansiyeli,

$$\begin{aligned} V(x) &= -\frac{1}{2} * m_0 [(x + a)^2 + a^2/4] & -a < x < -a/2 \\ &= -\frac{1}{2} * m_0 w^2 [x^2 + \frac{a^2}{4}] & -a/2 < x < a/2 \\ &= -\frac{1}{2} * m_0 w^2 [(x - a)^2 + a^2/4] & a/2 < x < a \end{aligned} \quad (3.4)$$

ile ve özdeğer matris elemanları,

$$h_{nm} = \delta_{nm} \left[\left(2n + \frac{Ka}{\pi}\right)^2 + \frac{\pi^2 \gamma^2}{24} \right] - (1 - \delta_{nm}) \frac{\gamma^2 (-1)^{m-n}}{8 (m-n)^2} \quad (3.5)$$

İle hesaplanıyor.

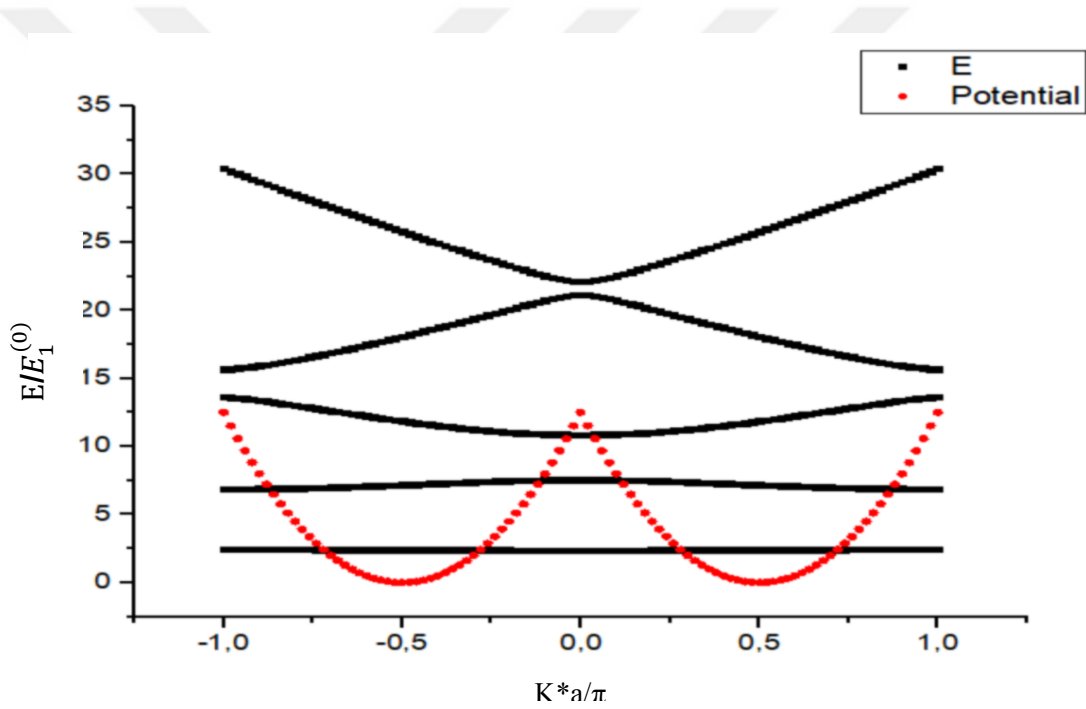
Şekil 3.7'de linear potansiyel,

$$\begin{aligned} V(x) &= A \left| \frac{2x}{a} + 1 \right| & x < 0 \\ &= A \left| -\frac{2x}{a} + 1 \right| & x > 0 \end{aligned} \quad (3.6)$$

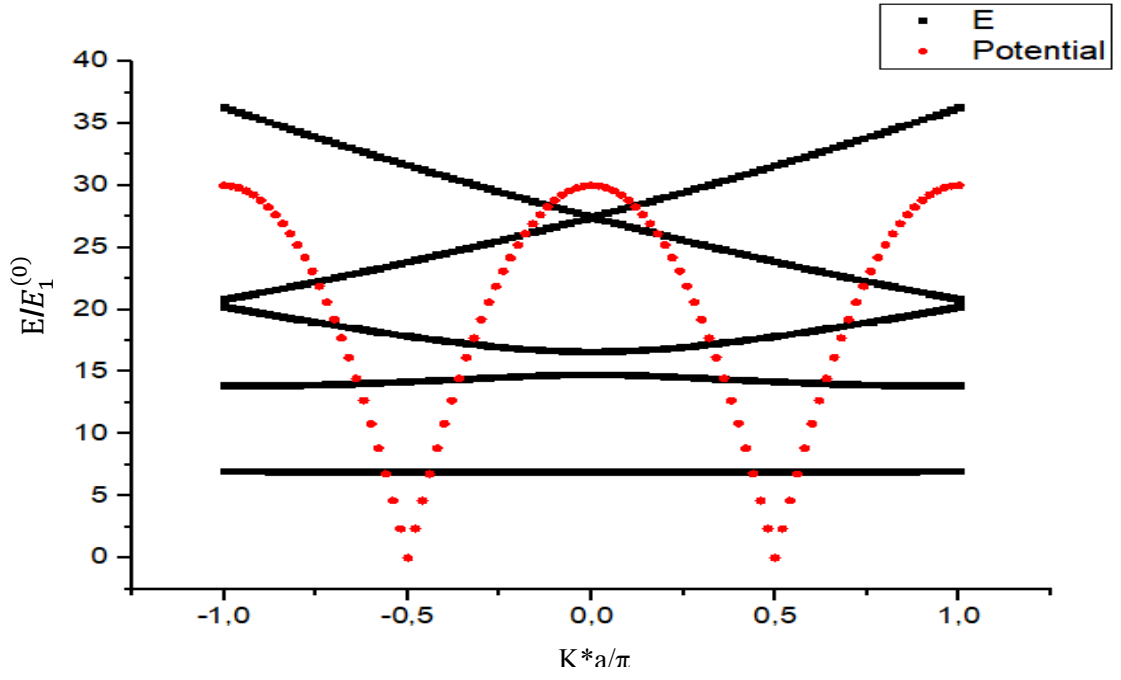
ile (burada A, linear potansiyelin $x=0$ da görülen en yüksek potansiyel değeridir) ve özdeğer matris elemanları,

$$h_{nm} = \delta_{nm} \left[\left(2n + \frac{Ka}{\pi} \right)^2 + \frac{A}{2} \right] - (1 - \delta_{nm}) \frac{A}{\pi^2} \frac{[1 - (-1)^{m-n}]}{(m-n)^2} \quad (3.7)$$

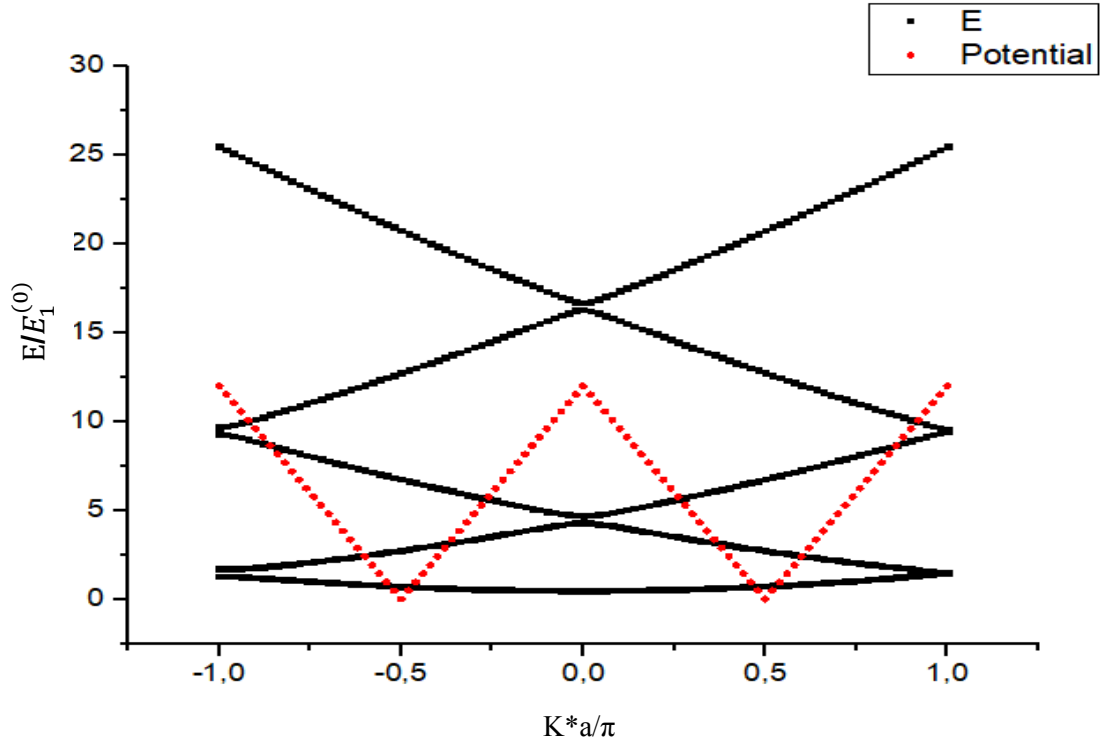
ile hesaplanıyor. Linear potansiyel için enerji özdeğerleri görece diğer potansiyellere göre birbirlerine daha yakın olduğu için elektronların bir seviyeden diğer seviyeye atlaması daha kolay olur, bu yüzden bu potansiyelle tanımlanan malzemenin daha metal karektere yakın olması beklenir.



Şekil 3.4 Periyodik tekrarlayan harmonik osilatör için çözüm (enerji özdeğer çözümleri siyah çizgilerle gösterilmiştir. Kırmızı çizgiler potansiyeli ifade etmektedir.)



Şekil 3.5 Periyodik tekrarlayan ters çevrilmiş harmonik osilatör için çözüm (Kırmızı ile gösterilen ters çevrilmiş harmonik potansiyel ve siyahla gösterilen enerji özdeğer çözümleri.)



Şekil 3.6 Periyodik tekrarlayan doğrusal değişen potansiyel için çözüm (Kırmızı çizgilerle gösterilen linear potansiyel ve onun siyah eğrilerle gösterilen özdeğer çözümleri.)

3.3 Değerlendirme

Kronig-Penney modeli ve diğer tekrarlayan potansiyel fonksiyonlarının, Schrödinger denkleminin öz değer problemi olarak, matris köşegenleştirme metoduyla kolaylıkla çözümü yapılabilir. Kronig-Penney modeli periyodik potansiyelleri çalışmada başlangıç olmasına rağmen, iletkenlerde elektron hol asimetresi gibi konuların incelenebilmesi için daha gerçekçi potansiyeller daha düzgün sonuçlar vermektedir. Anlatılan metodla her türlü periyodik potansiyel ve analitik olarak ifade edilmeyen potansiyeller de çözülebilmektedir.

Göz önüne alınan potansiyellerin çözümüyle bulunan enerji özdeğerlerinin bulunmasıyla belirlenen bant aralıkları, ne kadar az ise yani enerji özdeğerleri birbirine yakınsa ilgili potansiyel daha çok iletken yani metal karakteri anlatır, uzaklaştıkça malzemenin yalıtkan karektere yaklaşacağı anlaşılır.

KAYNAKLAR

Pavelich, R. L. ve Marsiglio, F. (2015) *The Kronig-Penney model extended to arbitrary potentials via numerical matrix mechanics*. Department of Physics, University of Alberta, Edmonton, Alberta, Canada T6G 2E1, 10 Temmuz 2018 <https://ecee.colorado.edu/~ecen5345/Resources/KronigPenneyModelExtended.pdf>

Press, W.H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W.T., Flannery, B.P., (2007). *Numerical Recipes in Fortran 90* (Third edition), Cambridge University Press, USA

EKLER

Ek -1 Bilgisayar Programı

($\rho=0.5$ için birim hücre $-a$, a aralığının 100 parçaya bölünmesiyle bulunan ve Şekil 3.2 için çalışan fortran programı)

```
program serkantez03

implicit none

integer m,n,k,maxm,nrot,j1,j2

real(8),allocatable,dimension(:,):: ozvektor, mm
real(8),allocatable,dimension(:)::enerji_gercek, ozdeger
real(8),allocatable,dimension(:,)::ozdeger2,enerji_gercek2

real(8)::a,w,e10,gmma,kutle,pi,hbar,b,v0,kk,ro,nprime,mprime,xx,p
otansiyel

!print*, 'a='
!read(*,*) a
!print*, 'count='
!read(*,*) count

!print*, 'matris boyutu'
!read(*,*) maxm

pi=4*atan(1.)

maxm=5

kutle=1.

w=1.

hbar=1./(2*pi)

a=10

b=5.

ro=b/a

e10=pi**2*hbar**2/(2*kutle*a**2)
```

```
v0=0
```

```
open(unit=3, file="data03a.txt", status="unknown")  
!open(unit=4, file="data4.txt", status="unknown")
```

```
allocate(MM(maxm,maxm))  
allocate(ozvektor(maxm,maxm))  
allocate(ozdeger(maxm))  
allocate(enerji_gercek(maxm))  
allocate(ozdeger2(maxm,9))  
allocate(enerji_gercek2(maxm,9))
```

```
do k=0,100  
  kk=-pi/a+0.02*pi/a*k  
  xx=-a+0.02*a*k  
  
  do 20 n=1,maxm  
    ! print*, n, 1.*(n-1)/2, int((n-1)/2)  
  
    if (n==1) then  
      nprime=0  
    else  
  
      if (1.*(n-1)/2==int((n-1)/2)) then  
        nprime=-(n-1)/2  
  
      else  
        nprime=n/2  
  
      endif  
  
    end if
```

```
end if
```

```
      do 10 m=1,maxm  
  
        if (m==1) then  
          mprime=0  
        else  
  
          if (1.*(m-1)/2==int((m-1)/2)) then  
            mprime=-(m-1)/2  
  
          else  
            mprime=m/2  
  
          endif  
  
        end if
```

```

end if

    if (m==n) then
        mm(m,n)=((2*nprime+kk*a/pi)**2+v0*(1-ro))
    else
        mm(m,n)=v0*(-1)**(mprime-nprime+1)/pi*sin(pi*(mprime-
nprime)*ro)/(mprime-nprime)
    end if

    10 continue

20 continue

call  jacobi(mm,maxm,maxm,ozdeger,ozvektor,nrot)

if (xx<=-3*a/4) then
potansiyel=10
elseif (xx<=-a/4) then
potansiyel=0
elseif (xx<=a/4) then
potansiyel=10
elseif (xx<=3*a/4) then
potansiyel=0
else
potansiyel=10
endif

do n=1,maxm
!enerji_gercek2(n,j1)=e10*(2*n+kk*a/pi)**2
!print*, n,ozdeger(n),enerji_gercek
! ozdeger2(n,j1)=ozdeger(n)
!write(3,*)n,enerji_gercek(n), ozdeger(n)
print*, n, ozdeger(n)
write(3,*) kk*a/pi, ozdeger(n)
end do
!print*, kk*a/pi,ozdeger(1)
!print*, j1, enerji_gercek2(1,j1)
!print*

end do

end program

```