BAZI SIVI METALLERİN ELEKTRONİK TAŞINIM ÖZELLİKLERİ

Belgin ÇETİN

Yüksek Lisans Tezi

Fizik Anabilim Dalı

Ağustos 2005

ELECTRONIC TRANSPORT PROPERTIES OF SOME LIQUID METALS

Belgin ÇETİN

M. Sc. Thesis

Physics Department

August 2005

BAZI SIVI METALLERİN
ELEKTRONİK TAŞINIM ÖZELLİKLERİ

BELGİN ÇETİN

Osmangazi Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstütüsü
Lisansüstü Yönetmeliği Uyarınca
Fizik Anabilim Dalı
Katıhal Fiziği Bilim Dalında
YÜKSEK LİSANS TEZİ
Olarak Hazırlanmıştır.

Danışman : Yrd. Doç. Dr. Şadan KORKMAZ

Ağustos 2005

Belgin ÇETİN' in YÜKSEK LİSANS tezi olarak hazırladığı "Bazı Sıvı Metallerin Elektronik Taşınım Özellikleri" başlıklı bu çalışma, jürimizce lisansüstü yönetmeliğinin ilgili maddeleri uyarınca değerlendirilerek kabul edilmiştir.

Üye : Yrd. Doç Dr. Şadan KORKMAZ

Üye : Prof. M.Selami KILIÇKAYA

Üye : Yr. Doç Dr. Ömer ÖZBAŞ

Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun ..... tarih ve ..... sayılı kararıyla onaylanmıştır.

Prof. Dr. Abdurrahman KARAMANCIOĞLU

Enstitü Müdürü

ÖZET

Sıvı metal ve alaşımların elektronik taşınım özelliklerinden olan elektriksel özdirenç deneysel olarak belirlenebilmektedir. Ancak bu deneyler yüksek sıcaklıklarda yapıldığından ölçümlerde bir takım güçlükler meydana gelmektedir. Bu nedenle teorik olarak sıvı metallerin ve alaşımların özdirencinin hesabı daha da önemli olmaktadır.

Bu çalışmada bazı sıvı metallerin özdirenci Yerel Heine-Abarenkov sanki potansiyeli (form faktörü) ve deneysel yapı faktörleri kullanılarak üç farklı formülasyonla hesaplanmıştır. Bunlar Ziman, Düzeltimiş Ziman (Ferraz-March) ve lineer tepki teorisi olarak bilinen Kubo formülleridir. Bu üç formülle hesaplanan basit sıvı metallerin özdirençleri birbirleriyle ve deneysel değerlerle karşılaştırılmıştır. Hesaplanan özdirenç değerlerinin karşılaştırılması sonucu deneysel değerlere genel olarak en yakın değerlerin Kubo formülüyle olduğu, Düzeltilmiş Ziman ile elde edilen değerlerin ise Ziman formülünden hesaplanan değerlere göre deneysel değerlere daha yakın olduğu görülmüştür.

Bu çalışmada her üç formülasyonun dayandıkları teoriler ve kullandıkları parametreler ile sonuçlarının ilişkisi araştırılmaya çalışılmıştır.

ANAHTAR KELİMELER : Model potansiyeli,sıvı metal ve alaşımlar, yapı faktörü,özdirenç.

SUMMARY

Electrical resistivity caused by electronic transport properties of liquid metal and alloys can be determined as experimentation. However, as these experiments are conducted in high temperatures, some difficulties arise in the process of measurement. Therefore, the theoretical calculation of the resistivity of liquid metals and alloys becomes more important.

In this study, resistivity of some liquid metals were calculated by using Local Heine Abarenkov pseudopotantial (form factor) and experimental structure factors. Calculation consist of three different methods which are Ziman, corrected Ziman (Ferraz-March) and Kubo, known as linear response theory. Resistivity of simple liquid metals calculated by these three formulas were compared with each other and their experimental results. As a result, resistivity calculation based on Kubo formula provided closest experimental value tesult with respect to the calculation due to Ziman and corrected Ziman methods.

In this study, the theories and parameters that these formulations based on and as well as their results were investigated.

KEY WORDS: Model potantial, liquid metal and alloys, structure factors, resistivity.

TEŞEKKÜR

Araştırma boyunca, bana yardımcı olup yol gösteren, yapıcı eleştirileriyle beni yönlendiren danışman hocam Sayın Yrd. Doç. Dr. Şadan KORKMAZ 'a ve değerli zamanını bana ayıran Sayın Dr.S. Deniz KORKMAZ 'a teşekkürü bir borç bilirim.

Bu çalışma sırasında benden her türlü yardım ve desteklerini esirgemeyen annem Sayın Hatice Çetin'e ve babam Sayın Tahsin Çetin'e teşekkür ederim.

Belgin Çetin
Eskişehir, Eylül 2005

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET v

SUMMARY.....vi

TEŞEKKÜR.....vii

İÇİNDEKİLER.....viii

ŞEKİLLER DİZİNİ.....x

ÇİZELGELER DİZİNİ.....xi

SİMGELER DİZİNİ xi

1. GİRİŞ.....1

2.SIVI METALLERİN TERMODİNAMİK ÖZELLİKLERİ.....4

2.1. Giriş..... 4

2.2. Sıvı Metallerin Termodinamik Özellikleri..... 4

2.3. Sıvı Alaşımların Termodinamik Özellikleri..... 7

3. SANKİ-POTANSİYEL YÖNTEM 10

3.1. Giriş..... 10

3.2. Dikleştirilmiş Düzlem Dalga Yöntemi (OPW) 12

3.3. Sanki-Potansiyel Formülasyonu..... 15

3.4. Sanki-Potansiyelin Seçimi..... 19

3.4.1. Ashcroft'un Boş Küre Potansiyeli (EC) 21

3.4.2. Yerel Heine Abarenkov Potansiyeli (LHA) 21

3.5. Sanki-Potansiyelin Ayrıştırılması.....23

3.6. Perdeleme.....25

4. SIVI METAL VE ALAŞIMLARDA YAPI ÖZELLİKLERİ..... 29

İÇİNDEKİLER (Devam)

Sayfa

4.1. Sıvı Metallerin Yapı Faktörü..... 29

4.2 Sıvı Metal Alaşımlarının Yapı Faktörü.....34

5. SIVI METALLERİN ELEKTRONİK TAŞINIM ÖZELLİKLERİ.....39

5.1. Giriş.....39

5.2. Sıvı Metal ve Alaşımların Özdirencinin Hesabı.....39

5.2.1. Sıvı Metal ve Alaşımlar için Ziman İfadesi.....39

5.2.2. Sıvı Metal ve Alaşımlar için Düzeltilmiş Ziman İfadesi 41

5.2.3. Sıvı Metal ve Alaşımlar için Kubo İfadesi.....43

6. SIVI METALLERİN ÖZDİRENCİNİN HESAPLANMASI 50

6.1. Sıvı Metaller İçin Form Faktörü..... 50

6.2. Sıvı Metaller İçin Yapı Faktörü..... 57

6.3. Sıvı Metaller İçin Özdirenç..... 62

SONUÇ VE TARTIŞMA..... 64

KAYNAKLAR DİZİNİ.....67

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil **Sayfa**

6.1. 463 ^{o}K'de saf Li sıvı metali form faktörü.....52
6.2. 373 ^{o}K'de saf Na sıvı metali form faktörü.....53
6.3. 373 ^{o}K'de saf K sıvı metali form faktörü.....54
6.4. 373 ^{o}K'de saf Rb sıvı metali form faktörü.....55
6.5. 373 ^{o}K'de saf Cs sıvı metali form faktörü..... 56
6.6. 373 ^{o}K 'de Li sıvı metalin yapı faktörü.....57
6.7. 373 ^{o}K 'de Na sıvı metalin yapı faktörü.....58
6.8. 373 ^{o}K'de K sıvı metalin yapı faktörü.....59
6.9. 373 ^{o}K'de Rb sıvı metalin yapı faktörü..... 60
6.10. 373 ^{o}K'de Cs sıvı metalin yapı faktörü.....61

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge **Sayfa**

6.1. Sıvı metaller için giriş parametreleri.....50

6.2. Sıvı metallerin Kubo özdirenç denkleminde kullanılan βE_F ve I_1, I_2 integral ifadelerinin sayısal değerleri.....63

6.3. Sıvı metallerin ℓ ortalama serbest yol, ρ_Z Ziman ve ρ_{DZ} Düzeltilmiş – Ziman ve ρ_K Kubo özdirençleri ile deneysel değerleri.....63

SİMGELER DİZİNİ

Simge	Açıklama
OPW	:Dikleştirilmiş düzlem dalga
$a_{ij}(q)$	: Faber – Ziman kısmi yapı faktörü
c_i	: i-tipi atomun konsantrasyonu
C_p	: Isı kapasitesi
C_r	: Direkt korelasyon fonksiyonu
$d(q)$	: Atomik saçılma faktörü
E_α	: Kor enerjisi
E_{bs}	: Band yapı enerjisi
E_{eg}	: Serbest elektron katkısı
E_F	: Fermi enerjisi
E_{ft}	: 1. basamak pertürbasyon enerjisi
E_k	: İletim-band durumu enerjisi
E_m	: İyon – iyon etkileşmasi
E_{sp}	: 2. basamak pertürbasyon enerjisi
E_T	: Serbest elektron enerjisi
F	: Helmholtz serbestlik enerjisi
$F_{i,j}(q)$	: Normalize olmuş dalga sayı karakteristiği
$f(r,\alpha)$	: Konum ve kor indeksi α'ya bağlı keyfi bir fonksiyon
$f(R)$	: Direkt korelasyon fonksiyonu
$f(q)$	: Linhard fonksiyonu
$g(r)$	: Çift dağılım fonksiyonu
$G(p)$	: Elektron korelasyon fonksiyonu

$h(r)$: Toplam korelasyon fonksiyonu

H : Hamiltonyen

SİMGELER DİZİNİ (Devam)

Simge	Açıklama
$I(q)$	: Işınım şiddeti
K	: Kinetik enerji operatörü
k_B	: Boltzmann sabiti
k_F	: Fermi enerjisi
K	: Kinetik enerji
λ	: Ortalama serbest yol
m	: Etkin kütle
m_A	: Atomik kütle
n	: Yoğunluk
N	: Toplam atom sayısı
$N_{FE}(E_F)$	: Durum yoğunluğu
N_k	: Normalizasyon katsayısı
P	: İzdüşüm operatörü
r_c	: Boş küre çapı
r_m	: Model yarıçapı
r_s	: Elektronik yarıçap
$S(q)$	: Statik yapı faktörü
$S_{ij}(q)$	: Ashroft – Langreth kısmi yapı faktörü
S_c	: Küçük düzeltme terimi
S_{gaz}	: İdeal gaz terimi
S_η	: Paketleme yoğunluğu
S_σ	: Düzeltme terimi

$s(q)$: Yapı genliği

T : Sıcaklık

SİMGELER DİZİNİ (Devam)

Simge	Açıklama
$U(r_{12})$	: Ortalama gücün potansiyeli
V_F	: Fermi hızı
$V(r)$	: Elektronun gördüğü Hartree potansiyeli
$V(q)$	: Form faktörü (Sanki potansiyel)
$w(r)$	: Elektronun gördüğü iyonik potansiyel
W	: Faber tarafından tanımlanan sanki potansiyel
α_r	: Kuvvet-kuvvet korelasyon fonksiyonu
α_r'	: Kuvvet-kuvvet korelasyon fonksiyonunun birinci türevi
α_r''	: Kuvvet-kuvvet korelasyon fonksiyonunun ikinci türevi
μ	: Mobilite
σ	: Katı küre çapı
φ_k	: Sanki-dalga fonksiyonu
ψ_α	: Kor durumu dalga fonksiyonu
ψ_k	: İletim-band durumu dalga fonksiyonu
Z	: Elektronik valans
$\varepsilon(q)$	: Hartree dielektrik fonksiyonu
$\varepsilon^*(q)$	: Değiştirilmiş Hartree dielektrik fonksiyonu
η	: Paketleme yoğunluğu
ρ	: Özdirenç
$\vert\ \rangle$	: Düzlem dalga durumları

1.GİRİŞ

Metal ve metal alaşımları günümüz teknolojisinde yaygın olarak kullanılmaktadır. Bir çok sıvı metal ve alaşımlarının fiziksel özellikleri deneysel olarak hesaplanabilmektedir. Ancak bu deneyler yüksek sıcaklıklarda yapıldığından ölçümlerde bir takım güçlükler meydana gelmektedir. Bazı sıvı metallerin sıvı haldeki fiziksel özelliklerini bilmek, katı halleri içinde yararlı olmaktadır. Bu nedenle metaller hakkında teorik bilgiye sahip olmanın teknolojik önemi daha da artmaktadır. Teorik bilgiyle deneysel bilgilerin karşılaştırılabilmesi için sıvı metal ve alaşımlarının yapıları ve fiziksel özellikleri hakkında deneysel bilgilerin sağlanmış olması gerekmektedir. Bu deneysel bilgilerde özdirenç, termoelektrik güç, metal iletkenliği vs. yer almaktadır.

Metal ve alaşımları hakkındaki deneysel verileri kullanışlı hale getirmek için sıvı metalleri kristal durumundaki elektronik yapılarına göre ayırmak yararlı olacaktır. Basit metaller (Na, Al, Zn, Pb, K, Rb, Hg) serbest elektron bant yapısına soy metaller (Cu, Ag, Au) dar ve Fermi enerji seviyesinin altında yer alan dolu d-bantlarına sahiptir. Geçiş metalleri (Fe, Ni) Fermi seviyesinde dolu olmayan d-bantlarına sahiptir. Nadir toprak metaller sıkı bağlı d-bantları ile birlikte sınırlandırılmış f-durumlarına sahiptir. Alkali topraklar (Ca, Sr, Ba,) Fermi seviyesi üzerinde doldurulmamış d-bantlarına sahiptir. s ve d bantları arasında hibritleşme nedeniyle alkali toprak metallerin basit ve geçiş metalleri arasında olduğu varsayılabilir.

Sıvı fazdaki bir atomun yapısı incelendiğinde, katı fazdaki bir atom gibi davranarak kendisini çevreleyen atomlarla etkileşir ve bir an da gaz fazındaki atom gibi davranabilir ve serbestçe hareket etmeye başlar. Bu nedenle metal ve alaşımlarının sıvı hallerinde, katı ve gaz

arasındaki özellikleri göstermeleri beklenir. Ancak düşük sıcaklıkta madde katı halde iken yüksek sıcaklıklarda gaz ve ara değerde sıvı olduğundan dolayı bazı özellikleri katıya benzerken, bazı özellikleri de gaza daha çok benzer.

Burada temel problem, sıvı metal veya alaşımlarının yapısının belirlenmesidir. Deneysel olarak kristal katıların yapısını belirlemede x-ışınları kırınım desenlerinden yararlanılırken, sıvı metal veya alaşımlarının yapısı da x-ışınları veya nötron kırınımı ile elde edilen statik yapı faktörü ile incelenmektedir. Sıvı metal ve alaşımlarının statik yapı faktörünün belirlenmesi ile birçok fiziksel özelliğin teorik olarak incelenme imkanı elde edilir. Bu nedenle, teorik incelemelerde sıvıhal fiziğinde çiftler korelasyonu ve onun Fourier transformu olan statik yapı faktörünün tanımlanması gerekir. Her dört fazda (kristal, amorf, sıvı ve gaz) da deneysel olarak kullanılan materyalin en temel ve en iyi belirlenebilen özelliklerinden olan statik yapı faktörü nötron veya x-ışınları difraksiyonu ile belirlenebilmektedir.

Teorik olarak, sıvı metal ve alaşımlara ait fiziksel özelliklerin belirlenebilmesi için model potansiyel tanımlanarak söz konusu sıvı metal için kurulmalıdır. Model potansiyel ile bir atomun uzayda herhangi bir noktada bulunma olasılığını veren radyal dağılım fonksiyonu arasında ilişki mevcuttur. Hangi model potansiyel kullanılırsa kullanılsın Ornstein-Zernike denklemini sağlamalıdır. Eğer model potansiyel Ornstein- Zernike denklemini sağlıyorsa buradan radyal dağılım fonksiyonunun ters Fourier transformu olan statik yapı faktörü tanımlanabilir. Ancak kristal yapılı materyaller için kurulan tek bir model potansiyelden materyalin fiziksel özellikleri belirlenebilirken, aynı materyalin sıvı fazı için bütün fiziksel özelliklerini veren tek bir model potansiyel teori olmadığı gibi maddenin fiziksel özelliklerini elde ettiğimiz statik yapı faktörünü veren de tek bir yaklaşım yoktur. Bu nedenle halen sıvı metallerde yaklaşım yöntemleri geliştirilmektedir. Genelde iki temel yaklaşım kullanılmaktadır. Bunlar Bilgisayar Benzetim Yöntemleri ve Yarı Analitik Yöntemlerdir.

Bizim çalışmamızda ilk olarak bu teorilerden yola çıkılarak, giriş parametrelerini oluşturan katı küre yarıçapının elde edilmesiyle; bu teoriler sıvı metal ve alaşımların termodinamik ve taşınım özeliklerinin elde edilmesinde kullanıldı. Bununla birlikte bu bölümde sıvı metal ve alaşımlarının termodinamik özellikleri de incelenmiştir. Ayrıca bu bölümde serbest enerji altında basınç, entropi ve entalpi gibi nicelikler ifade edilmiştir.

Burada seçilen referans sisteminde sanki- potansiyel (pseudopotansiyel) yöntem ile Gibbs – Bogoliubov eşitsizliği arasındaki bağıntı gösterilmiştir.

Bölüm 3'de sanki-potansiyel yöntemi incelenmiştir. Yapılan çalışmalarda sanki-potansiyel modelleri; metallerin elektronik ve atomik yapılarının tahmin ve yorumu kullanılarak kendine uygun bir sanki-potansiyel elde edilmesiyle geliştirildi. Daha sonraki çalışmalarda sıvı fazlarda ve basit metallerin farklı özellikleri hesaplanarak elde edilen sonuçlar arasında fark ortaya çıkmasıyla model sanki-potansiyel teorisi geliştirildi.

Bölüm 4 'te sıvı metal ve alaşımların yapı ile ilgili özellikleri ele alınmıştır. Bu bölümde ilk olarak sıvıhal fiziğinin temel yaklaşımları incelenmiştir. Bu yaklaşımları ele alarak sıvı metal ve alaşımların statik yapı faktörü $S(q)$, çiftler korelasyonu $g(r)$, direkt korelasyon fonksiyonu $C(r)$ ve toplam korelasyon fonksiyonu olan $h(r)$ gibi yapıya bağlı niceliklerin tanımları ve iyonlar arasındaki $\Phi(r)$ etkin potansiyel ile arasındaki ilişki verilmiştir.

Sıvı metal ve alaşımların elektronik taşınım özelliklerinden olan elektriksel özdirenç Bölüm 5 'te incelenmiştir. Sıvı metallerin özdirencinin hesabında Ziman formülü kullanılmaktadır. Ancak yapılan birçok çalışmalarda Ziman formülü ile elde edilen özdirenç değerleri deneysel sonuçlarla uyuşum içinde olmadığı gözlenmiştir.Bu değerlerin deneyle uyuşum içinde olmaması nedeniyle birçok araştırmacı Ziman formülüne düzeltme terimi ilave etmiştir. Bu çalışmada düzeltme terimini içeren Ferraz ve March tarafından önerilen ortalama serbest yol ifadesini kullanarak özdirenç değerleri hesaplanıldı. Bununla birlikte Ziman formülünün yetersiz kaldığı noktaları ortaya koymak amacıyla literatürde lineer tepki teorisi olarak bilinen Kubo formülünden türetilen alternatif bir formül ile özdirenç değerleri hesaplandı. Son olarak sıvı metal ve alaşımların özdirencinin hesaplanmasında kullanılan Ziman ve Kubo ifadeleri karşılaştırıldı.

Yapılan bu incelemeler sonucunda sıvı metal ve alaşımlar için elde edilen etkin iyonlar arası potansiyeli buna bağlı olan form faktörü, kısmi yapı faktörleri ve özdirenç değerleri Bölüm 6 'da çizilen eğriler üzerinde tartışmalar ile bulunan sonuçların deneysel eğriler ve değerlerle karşılaştırması ve tartışması ele alınmıştır.

2.SIVI METALLERİN TERMODİNAMİK ÖZELLİKLERİ

2.1.Giriş

Sıvı metallerin teorik incelenmesinin temeli sanki-potansiyel teoriye dayanır. Sanki-potansiyel teoride sıvı metal ve alaşımların enerjisi, yapı faktörü ve sanki-potansiyel terimlerine bağlı olarak ifade edilir. Diğer bir deyişle katı küre modeli kullanılarak termodinamik özelliklerden yararlanılarak sıvı metallerin yapısı incelenir. Katı küre modelinde sıvı metalin yüksek sıcaklıktaki termodinamik özellikleri Gibbs- Bogoliubov eşitsizliği temel alınarak elde edilir.

Metalik sistemin elektronik yapısının belirlenmesinde kullanılan termodinamik potansiyeli iki terime bağlıdır (Singh ve diğerleri, 2001). Bu iki terimde elektronik etkileşme yolu ile birbirine bağlıdır. Bunlardan birincisi hacme bağlı olan terim; bu terim yapıdan bağımsız terimleri düzeltme enerjisi ile Hatree- Fock direkt terimin birleşmesinden oluşur. İkinci terim ise yapıya bağlıdır. Bu terim elektronik etkileşmelerin korelasyon fonksiyonu için yerel olan değişim yolu ile bant yapı enerjisinin elektron iyon sanki-potansiyelin saçılması ile oluşur. Bu terim elektron gazının tanımından erime sıcaklığı ve bu sıcaklığın üzerindeki sıvı metallerin özelliklerinden yararlanılarak elde edilir.

2.2.Sıvı Metallerin Termodinamik Özellikleri

Sıvı metallerin önemli termodinamik potansiyellerinden biri Helmholtz Serbestlik Enerjisidir. Helmholtz Serbestlik Enerjisi F ile, iç enerji E ile gösterilirse,

$$F = E - TS \tag{2.1}$$

şeklinde ifade edilebilir. Bu ifade sabit sıcaklık ve hacim altında

$$\left(\frac{\partial F}{\partial \sigma}\right)_{\Omega,T} = 0 \qquad (2.2)$$

olarak ifade edilir. Elektron gazının, düşük sıcaklıkta, özgül ısı katkısından dolayı elde edilen sıvı metallerin entropisi

$$S = S_{gaz} + S_{\eta} + S_c \qquad (2.3)$$

olarak ifade edilir. Burada S_{gaz} ideal gaz terimi, S_{η} paketleme yoğunluk terimi ve S_C küçük düzeltme terimi olarak tanımlanır ve

$$S_{gaz} = \frac{5}{2}k_B + k_B \lambda n\left[\Omega_o\left(\frac{2\pi k_B T}{\eta^2}\right)^{3/2}\right] \qquad (2.4)$$

$$S_{\eta} = k_B \eta(3\eta - 4)(1-\eta) \qquad (2.5)$$

$$S_c = Zk_B^2 T\left(\frac{\pi\Omega_o}{3Z}\right)^{3/2} \qquad (2.6)$$

şeklinde ifade edilir. Buradaki Ω_0 atomik hacim, m atomik kütle ve Z elektronik valansı ifade eder. η paketleme yoğunluğu olup,

$$\eta = \frac{\pi\sigma^3}{6\Omega_0} \qquad (2.7)$$

şeklinde verilir ve σ katı küre çapıdır. Burada entropinin hesaplanmasında paketleme yoğunluğu veya katı küre çapının, sıcaklığa bağlı olduğu kanıtlanması dikkate alınarak belirlenir. Bu da katı küre sistemin pertürbasyon ile termodinamik özellikleri arasındaki uygun bağları kanıtlayan Gibbs- Bogoliubov eşitsizliği ile sağlanır (Singh ve diğerleri, 2001).

Katı küre modeline göre basit metallerde oluşan iç enerji

$$E = E_{eg} + E_{ft} + E_{sp} + E_m \tag{2.8}$$

olarak yazılır. Burada E_{eg} serbest elektron katkısı, E_{ft} elektron – iyon etkileşmesinden dolayı 1. basamak petürbasyon enerjisi, E_{sp} elektron – iyon etkileşmesinden dolayı 2.basamak pertürbasyon enerjisi ve E_m iyon- iyon etkileşmesi olarak tanımlanır ve bunlar sırasıyla

$$E_{eg} = Z\left[\frac{3}{5}k_F^2 - \frac{3}{4\pi}k_F^2 - 0.0474 - 0.0155\ln k_F - \frac{1}{2}\left(\frac{\pi k_B}{k_f}\right)^2\right]T^2 \tag{2.9}$$

$$E_{fp} = \lambda im_{q\to 0}\left(V(q) + \frac{4\pi Z}{q^2}\right)\frac{Z}{\Omega_o} \tag{2.10}$$

$$E_{sp} = \frac{1}{16\pi^3}\int_0^\infty [V(q)]^2 S(q)\left[\frac{1}{\varepsilon^*(q)} - 1\right]q^4 dq \tag{2.11}$$

$$E_m = \frac{3}{2}k_B T + \frac{Z^2}{\pi}\int_0^\infty [S(q) - 1]dq \tag{2.12}$$

olarak ifade edilir. Buradaki $V(q)$ form faktörü, $S(q)$ yapı faktörü ve k_B Boltzmann sabiti olarak tanımlanır ve k_F Fermi dalga vektörü olup

$$k_F = \left[\frac{3\pi^2 Z}{\Omega_o}\right]^{1/3} \tag{2.13}$$

şeklinde ifade edilir. Bant yapı enerji teriminden hesaplanan değiştirilmiş Hartree dielektrik fonksiyonu olan $\varepsilon^*(q)$ ifadesi

$$\varepsilon^*(q) = 1 + \frac{yf(q)}{1 - yf(q)G(q)} \tag{2.14}$$

$$y = \frac{4k_F}{\pi q^2} \qquad \text{ve} \qquad f(q) = \frac{1}{2} + \left[\frac{(q/2k_F)^2 - 1}{4(q/2k_F)}\right]\lambda n\left|\frac{1-(q/2k_F)}{1+(q/2k_F)}\right| \tag{2.15}$$

olarak ifade edilir. Burada $G(q)$ elektronların korelasyonu için rasgele faz yaklaşım dielektrik fonksiyonun düzeltme terimi, $f(q)$ Linhard fonksiyonudur.

2.3.Sıvı Alaşımların Termodinamik Özellikleri

Basit sıvı metaller için kullanılan tüm yöntemler sıvı metal alaşımları içinde kullanılmaktadır. Fakat basit sıvı metaller için termodinamik özellikler serbestlik enerjisinin minimize olmuş durumu baz alınarak hesaplanır. Oysa ki sıvı alaşımlar için yük taşınımı yerel elektronik potansiyel olarak veya Fermi enerjisindeki farklılıklar göz önüne alınarak hesaplanır. Bu nedenle farklı atomlar arasındaki enerjiyi açıklamada bu enerjideki değişimler göz önüne alınarak türetilir (Güler, 2004).

İkili alaşımlar için entropi ifadesi;

$$S = S_{gaz} + S_c + S_\eta + S_\sigma \tag{2.16}$$

olarak ifade edilir. Burada

$$S_{gaz} = k_B \lambda n \left[\frac{e}{n} \left(\frac{emk_B T}{2\pi h} \right)^{3/2} \right] \tag{2.17}$$

$$S_c = -k_B (c_1 \lambda n c_1 + c_2 \lambda c_2) \tag{2.18}$$

$$S_\eta = k_B \left[\lambda n(1-\eta) + \frac{3}{2} \left(1 - \frac{1}{(1-\eta^2)} \right) \right] \tag{2.19}$$

$$S_\sigma = k_B \left[\frac{\pi c_1 c_2 n (\sigma_1 - \sigma_2)^2 \left[12(\sigma_1 - \sigma_2) - \pi n (c_1 \sigma_1^4 + c_2 \sigma_2^4) \right]}{24(1-\eta)} \right] \tag{2.20}$$

olarak ifade edilir. Burada S_σ düzeltme terimi, c_1 ve c_2 birinci ve ikinci tür atomun konsantrasyonu, n atomik sayı yoğunluğu olup, $n = n_1 + n_2$ olarak ifade edilir. Burada n_1 ve n_2 birinci ve ikinci atomun atomik sayı yoğunluğudur, σ_1 ve σ_2 birinci ve ikinci atomun katı küre yarıçapı, η paketleme yoğunluğu olup, $\eta_i = \dfrac{\pi c_i \sigma_i^3}{6\Omega_o}$ ve $\Omega_o = c_1\Omega_1 + c_2\Omega_2$ toplam hacimdir.

İkili sıvı alaşımlarda oluşan E iç enerji ifadesi

$$E = E_{eg} + E_{ft} + E_{sp} + E_m \tag{2.21}$$

olarak ifade edilir. Burada

$$E_{eg} = \left[\frac{3}{10} k_B^2 - \frac{3}{4\pi} k_F - 0.0474 - 0.0155 \lambda n k_F - \frac{1}{2} \left(\frac{\pi k_B}{k_F} \right) T^2 \right] \overline{Z} \tag{2.22}$$

$$E_{fp} = \lambda \underset{q \to 0}{im} \overline{Z} n \left(\sum_i c_i V_i(q) + \frac{4\pi \overline{Z}}{q^2} \right) \tag{2.23}$$

$$E_{sp} = \frac{1}{16\pi^3} \int_0^\infty q^4 dq \sum_{i,j} V_i(q) V_j(q) (c_1 c_2)^{1/2} S_{i,j}(q) \left(\frac{1}{\varepsilon^*} - 1 \right) \tag{2.24}$$

$$E_m = \frac{1}{\pi} \sum_{i,j} Z_i Z_j (c_i c_j)^{1/2} \int_0^\infty \left(S_{i,j}(q) - \delta_{i,j} \right) dq \tag{2.25}$$

olarak ifade edilir ve k_F Fermi dalga vektörü olup

$$k_F = (3\pi^2 \overline{Z} n)^{1/3} \tag{2.26}$$

olarak tanımlanır. $\overline{Z}n$ ortalama valans elektron yoğunluğu olup, $\overline{Z}n = Z_1 n_1 + Z_2 n_2$ ve $\overline{Z} = Z_1 + Z_2$ olarak yazılır. $\varepsilon^*(q)$ değiştirilmiş Hartree dielektrik fonksiyonu

$$\varepsilon^*(q) = 1 + (1 - G(p))(\varepsilon(q) - 1) \tag{2.27}$$

olarak tanımlanır. Burada $\varepsilon(q)$ Hartree dielektrik fonksiyonudur. $G(p)$ elektron korelasyon fonksiyonu Hubbart ve Sham tarafından yapılan çalışmalarda (Hubbart, 1957; Sham , 1965)

$$G(p) = \frac{1}{2}\left(\frac{q^2}{q^2 + \gamma k_F}\right) \tag{2.28}$$

olarak elde edilmiştir ve burada $\gamma = \frac{2k_F}{k_F + 0.153}$ olarak tanımlanmaktadır.

3.SANKİ-POTANSİYEL YÖNTEM

3.1. Giriş

Metallerin elektronik yapısı teorisinde, kullanışlı kavramlardan biri de sanki potansiyel yöntemidir (Phillips ve Kleinman,1959). Prensipte basit bir fikir gibi görünmesine karşın, bu teori tam anlamıyla kesin olarak doğrulanamamıştır (Cohen ve Heine,1961). Her iyonun bağlı olduğu alan için iletim elektronlarının serbest davrandıkları söylenebilir. İyon korlarının içindeki elektrostatik terim, kor durum- larında hızlı osilasyon yapmayan gerçek dalga fonksiyonlarının olduğu bölgede, hızlı osilasyonlarla ilişkili olan büyük kinetik enerji değerlerinde ihmal edebilir, bu nedenle gerçek etki; sanki-potansiyel dalga fonksiyonuna etkiyen, zayıf sanki- potansiyelden gelmektedir. Bütün elektronik durumlarında $V(q)$ fonksiyonu sanki- potansiyeli (form faktörü) temsil etmektedir (Ham,1960).

Sanki-potansiyel bir anlamda, sanki-dalga fonksiyonlarının doğru biçimde verilmesiyle ve pertürbasyon serilerinin yakınsamasıyla en iyi şekilde kullanılabilir. Saf metaller için ilk yöntem Harrison tarafından geliştirilmiştir. Sanki-potansiyel yöntemin başlangıç noktası olarak bir kor elektron durumları ele alınır. Buradaki kor atomların dağılımı serbest atomdakine benzetilebilir. Atomun s ve p orbitallerinde değerlik elektronlarından iletkenlik elektronlarına doğru bir artış olur. Bu da elektron-iyon etkileşmesinin tanımlanması ile tek elektronun toplam potansiyel enerjisinden türetilir (Harrison,1966). Daha sonra bu yöntem; çok değerlikli (Hafner ve Schmuch, 1974, Hafner ve Eschrig 1975, Hafner 1975) ve tek değerlikli (Hafner, 1976) metallerin elektronik özelliklerinin belirlenmesinde kullanılmak için birleştirilmiştir.

Sanki-potansiyel yöntemin kabul ettiği üç temel fiziksel yaklaşım vardır. Bu yaklaşımlar bir dereceye kadar geliştirilebilir. Fakat birini diğerine tercih etmek mümkün değildir.

Basitçe ilk temel yaklaşım,kendi içinde tutarlı alan yaklaşımıdır. Bu yaklaşım elektronlar arasındaki etkileşmenin, ortalama bir potansiyel ile değiştirilmesi anlamına gelir. Bu potansiyel elektronlar tarafından işgal edilmiş durumlara bağlıdır ve bu durumlar ise potansiyele bağlıdır; dolayısıyla potansiyeli kendi içinde tutarlı olacak şekilde hesaplamak zorunda kalınmaktadır. Sonuçta elektronlar arasındaki önemli etkileşme; Coulomb itmesidir, fakat bu itme üç ayrı katkıya bölünerek incelenebilir. Birincisi Hartree potansiyelidir; bu, elektron dağılımının zaman ortalaması hesabı ile elde edilir ve daha sonra karşı gelen potansiyeli belirlemek için Poisson denklemi kullanılır. İkincisi; Pauli prensibinden dolayı bir elektronun gördüğü potansiyel için düzeltmedir. Eğer bir elektron r durumunda bir spine sahipse, başka bir elektron bu noktada aynı spinli bulunamaz; basitçe bu dalga fonksiyonlarının antisimetrikliği olarak tanımlanabilir. Etkin olarak; bu elektron dağılımında bir hol (hole) ve değiş-tokuş etkileşmesine neden olacaktır. Üçüncü katkı ise; elektronların birbirleriyle ilişkili hareketinin neden olduğu korelasyon enerjisidir (Harrison,1965).

İkinci temel yaklaşım ise elektron enerji düzeylerinin, kor ve iletim bant durumlarına ayrıştırılmasıdır ve buradaki kabul; kor durumlarının yerel ve küçük olduğudur. Bu durumlar dolu d kabukları içermediği sürece, son kabukları dolu asal gaz kabukları arasındaki tüm durumları iletim bandı olarak adlandırılır. Bu durumda dolu d kabukları, kor düzeyleri olarak ele alınır. Bütün en düşük düzeyler kor seviyeleridir. Küçük kor yaklaşımı üç farklı şekilde kullanılır. Burada yapılan varsayım; yakın komşuluktaki korların üst üste gelmediğidir. Böylece Coulomb itmesi dışında iyonlar arasında direkt etkileşme olmayacaktır. İkinci olarak; iletim elektronları ve komşu iyonların, kor potansiyeli üzerine olan değişimi ihmal edilecektir. Bu yaklaşım alkali ve çok değerlikli metallerde iyi sonuç vermektedir. Geçiş metallerinde, bu durumlar çok büyüktür ve kullanılan çerçevede bu durumlar henüz iletim band durumu olarak incelenemez. Böylece; küçük kor yaklaşımının incelenebilen metaller için belirgin hatalar ortaya koymamasına rağmen, sadece belli metallerle sınırlandırılmış olması da önemlidir (Harrison,1965).

Üçüncü ana yaklaşım; iletim bant durumlarının hesaplanmasında pertürbasyon teorisini kullanmaktadır. Burada dikleştirilmiş (ortogonalleştirilmiş) düzlem dalgası

formülasyonuna dayanan sanki-potansiyel yöntemi kullanılacaktır. Pertürbasyon açılımındaki gerçeklik, bulunan küçük değerli matris elemanlarıyla desteklenmiştir. Hesaplamalarla elde edilen enerjideki ve yük yoğunluğundaki değerler oldukça küçüktür ve bunların pertürbasyonunda ele alınış tarzı son derece mantıklıdır.

3.2.Dikleştirilmiş Düzlem Dalga Yöntemi (OPW)

Şu andaki var olan tartışmalar için, kristaldeki enerji durumlarını ele almak yeterli olacaktır. Özenerji durumlarında olmayan elektronların davranışlarının, zamana nasıl bağlı olduğu incelenecektir. Öncelikle Hartree yöntemiyle zamana bağlı Schrödinger denklemi yazılacaktır. $V(r)$, her elektronun gördüğü Hartree potansiyeli olmak üzere her enerji özfonksiyonu;

$$H\Psi_i = \left(K + V(r)\right)\Psi_i = E\Psi_i \tag{3.1}$$

denklemini sağlamalıdır. Burada $K = \dfrac{-\eta^2\nabla^2}{2m}$ kinetik enerji ve E_i'de i. durum enerjisidir. Daha sonra kor ve iletim bant durumları ele alınmaktadır. Kor durumları için α indisini,iletim bandı durumları için k indisi kullanılacaktır.

İkinci varsayıma göre; kor durumları izole edilmiş iyon durumundaki gibidir, fakat E_α enerjileri farklıdır;

$$\left(K + V(r)\right)\Psi_\alpha = E_\alpha\Psi_\alpha \tag{3.2}$$

α alt indisi aynı zamanda iyonun bulunduğu konumdaki, enerji ve açısal kuantum sayılarını belirtmektedir.

Kor durumları bilindiği için buradaki esas problem, iletim bant durumlarının elde edilmesidir. $V(r)$ potansiyelinin bulunabilmesi için doğru olarak belirlenmiş özdeğer

problemine sahip olmak gerekir. Böyle bir problemde takip edilecek yöntemlerden biri, metali büyük sayıda hücrelere bölmek, her hücre için diferansiyel denklemi çözmek ve hücreden hücreye olan bu çözümleri birleştirmektir. Her hücresel yöntem için, terimleri pertürbasyon yaklaşımında formüle etmek mümkündür. Bu yöntem (Harrison, 1958) kristalin kusursuz olmaması nedeniyle hücre seçiminde belirsizlik yüzünden sıkıntılar yaratmaktadır.

Daha verimli bir yaklaşım; dalga fonksiyonunu düzlem dalgalar durumlarının tam seti olarak seriye açmaktır. Bu durum, Schrödinger denklemine uygulandığında; açılım katsayılarına göre lineer eşzamanlı denklemler elde edilir. Bu şekilde çözülecek olan diferansiyel denklem köşegenleştirilmiş matris problemi olacaktır.

Karşılaşılacak zorluklardan birisi, dalga fonksiyonu açılımı için, düzlem dalgaların seçimidir. Dalga fonksiyonun tanımının doğru olarak verilebilmesi için çok fazla sayıda düzlem dalgaya ihtiyaç vardır ve bunların çoğu birbirleriyle karşılaştırılabilir sayılar içermesi gerekmektedir. Bu yüzden matris çözümü zor hale gelmektedir.

Herring problemi basitleştirmek için kor dalga fonksiyonlarının kullanımını önermiştir (Herring, 1940). İletim band durumlarının, kor durumlarına dik olduğunu kaydetmiştir, bu nedenle; kor durumlarına dik olan düzlem dalgalarda bir açılım yapılabilmektedir. Bu, düzlem dalgalarda aranılan bazı durumların özelliklerini verecek olan ipuçlarının ortaya koyacaktır.

Dalga sayısı k olmak üzere dikleştirilmiş düzlem dalga (OPW);

$$OPW_k = e^{ikr} - \Sigma_\alpha \Psi_\alpha(r) \int \Psi_\alpha^*(r') e^{ikr'} d\tau' \tag{3.3}$$

şeklinde yazılabilir.

Düzlem dalgaları Ω hacmi içinde normalize etmek mümkündür. Sonuçta dikleştirilmiş düzlem dalgalar;

$$OPW_k = |k\rangle - \Sigma_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|k\rangle \tag{3.4}$$

şeklini alır. Burada bra fonksiyonu $\langle\alpha| = |\alpha\rangle^*$ ve ket ise integral fonksiyonuyla temsil edilebilir;

$$\langle\alpha|k\rangle = \Omega^{-1/2}\int \Psi_\alpha^*(r)e^{ikr}d\tau \tag{3.5}$$

Bu durum, Pick ve Sarma (Pick ve Sarma, 1964) tarafından tanımlanan izdüşüm operatörü ile kısaltılabilir;

$$P = \sum\nolimits_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| \tag{3.6}$$

Burada P, herhangi bir fonksiyonu kor durumları üzerine izdüşürür. İzdüşüm operatörünün terimleri kullanılarak dikleştirilmiş düzlem dalgalar

$$OPW_k = (1-P)|k\rangle \tag{3.7}$$

şeklinde ele alınır.

Burada, iletim-band durumları OPW'nin genel lineer kombinasyonu ile

$$\Psi_k = \Sigma_q a_q(k)(1-P)|k+q\rangle \tag{3.8}$$

şeklinde seriye açılır. Seriye açılımındaki $q=0$ 'lı terim başat olacaktır. Bununla beraber açılım bu noktada sınırlanmamaktadır. (3.8) denklemi, (3.1) denkleminde yerine yazılırsa

$$\Sigma_q a_q(k)H(1-P)|k+q\rangle = E_k\Sigma_q a_q(k)(1-P)|k+q\rangle \tag{3.9}$$

denklemi elde edilir. Bu denklem $\langle k+q'|$ ile soldan çarpılır ve $HP = \Sigma_\alpha|\alpha\rangle\langle\alpha|$ özdeşliği kullanılarak;

$$a_{q'}(k)\frac{\eta^2}{2m}|k+q'|^2 + \sum\nolimits_q a_q(k)\left[\langle k+q'|V|k+q\rangle - \Sigma_\alpha E_\alpha\langle k+q'|\alpha\rangle\langle\alpha|k+q\rangle\right]$$

$$= \left\lfloor a_{q'}(k) - \Sigma_q a_q(k) \langle k+q' | P | k+q \rangle \right\rfloor E_k \tag{3.10}$$

formu elde edilir.

3.3.Sanki-Potansiyel Formülasyonu

Phillips ve Kleinman (Phillips ve Kleinman, 1959) (3.9) denklemindeki izdüşüm operatörlerini içeren bütün terimlerin

$$K\varphi_k + W\varphi_k = E_k\varphi_k \tag{3.11}$$

formunu elde edebilmek için sol tarafa toplanması gerektiğini belirtmiştir . Burada W sanki potansiyeldir ve aşağıdaki şekilde tanımlanmaktadır;

$$W = V(r) + \Sigma_\alpha (E_k - E_\alpha) |\alpha\rangle\langle\alpha| = V(r) + (E_k - H)P \tag{3.12}$$

ve φ_k ise;

$$\varphi_k = \sum\nolimits_q a_q(k) |k+q\rangle \tag{3.13}$$

şeklinde tanımlanan sanki-dalga fonksiyonudur. (3.8) denklemine göre; gerçek dalga fonksiyonu sanki-dalga fonksiyonuna aşağıdaki şekilde bağlıdır.

$$\Psi_k = (1-P)\varphi_k \tag{3.14}$$

Dikleştirmenin etkisi sanki-potansiyele katkı olarak görülür. Phillips ve Kleinman; burada operatör olarak görünen dikleştirilmiş terimin etkisinin itici olduğunu ve bu terimin kuvvetli çekici potansiyel $V(r)$'yi yok edeceğine dikkat çekmişlerdir. $(E_k - H)P$'nin yalnızca potansiyel olduğu yaklaşımında bulunmuşlar ve terimi sadece tek konum fonksiyonuna sahip olduğundan yerel sanki-potansiyel olarak adlandırmış-

lardır. Sanki-potansiyele bağlı olarak özdeğer problemini çözerek kendi içinde sürekli olarak elde etmişlerdir. $E_k = \int \varphi_k^*(K+W)\varphi_k d\tau / \int \Psi_k \varphi_k d\tau$ yazılarak; W'nın lineer olmayan integral operatörü olduğu görülebilir.

Bunlara ilave olarak, sanki potansiyeldeki bir başka özellikte Cohen ve Heine (Cohen ve Heine, 1961) ve Bassani ve Celi (Bassani ve Celli, 1961) tarafından ileri sürülmüştür. Eğer kor dalga fonksiyonlarının herhangi bir lineer kombinasyonu sanki-dalga fonksiyonuna eklenirse, (3.11) denklemindeki çözümler değişmeyip aynı özellikte kalacaktır. Ayrıca (3.14) denkleminde yerine konunca, doğru dalga fonksiyonu bulunacaktır. Ancak (3.11) denkleminin çözümü tek değildir. Bu tek olmama OPW- 'nin dikleştirilememesinden kaynaklanmaktadır. Austin, Heine ve Sham (Austin, Heine ve Sham, 1962)'da bu konu ile ilgili özel çalışmalar yapmışlar ve W'yı aşağıdaki lineer sanki-potansiyel ile değiştirmişlerdir. Böylece

$$W\varphi = V(r)\varphi(r) + \Sigma_\alpha \Psi_\alpha(r)\big((r,\alpha),\varphi(r)\big) \tag{3.15}$$

şeklinde elde edilmiştir. Burada; $f(r,\alpha)$ konuma ve kor indeksi α'ya bağlı keyfi bir fonksiyon ve (3.11) aynı E_k özdeğerine karşı gelen çözümler olacaktır.

E' özdeğer ile, χ özfonksiyon ile gösterilirse

$$H\chi + \Sigma_\alpha \Psi_\alpha\big(f(r,\alpha),\chi\big) = E'\chi \tag{3.16}$$

elde edilir. Sol taraf Ψ_k ile çarpılırsa, böylece sol taraf doğru iletim bant dalga fonksiyonuyla Ψ_k^* ile çarpılmaktadır. Burada $H\Psi_k = E_k\Psi_k$'dır ve bütün hacim üzerinden integral alınır. Böylece aşağıdaki ifade elde edilir.

$$(\Psi_k,\chi)E_k = (\Psi_k,\chi)E' \tag{3.17}$$

Eğer E''ya dik değilse; aynı özenerjiye sahip olacaktır yani; $E' = E_k$'ya eşit olacaktır. Ayrıca χ bütün farklı enerjili iletim bant durumlarına dik olacak ve dejenere

durumların uygun lineer kombinasyonu alınmasıyla, $f(\kappa,\alpha)$ bütün iletim bant durumlarından yalnızca birine dik olacaktır.

İletim bant durumları ve kor durumları birlikte tam set oluşturur, ancak genel- de χ, tek bir iletim bant durumunun ve kor durumlarının lineer kombinasyonu olmalıdır.

$$\chi_k = \Psi_k + \Sigma_\alpha b_\alpha(k)\Psi_\alpha \tag{3.18}$$

Z 'nın değerini elde etmek için, (3.16) bağıntısı ile kor dalga fonksiyonu Ψ_β'nın iç çarpımı alınır.

$$b_\beta(k)E_\beta + (f(r,\beta),\chi_k) = E_k b_\beta(k) \tag{3.19}$$

Uygun bir şekilde, $|k\rangle$ düzlem dalgalar cinsinden $f(r,\alpha)$ 'nın genel Fourier açılımı

$$f(r,\alpha) = \Sigma_\kappa f^*(\kappa,\alpha)\langle k|\alpha\rangle|\kappa\rangle \tag{3.20}$$

şeklindedir. Gerekli işlemler yapılarak;

$$b_\beta(k)(E_k - E_\beta) = \Sigma_\alpha f(\kappa,\beta)a_\alpha(k)\langle\beta|\kappa\rangle \tag{3.21}$$

elde edilir.

Eğer $f(\kappa,\beta),\kappa$ 'dan bağımsız olarak alınırsa; (3.21) denkleminin sağ tarafı $f(\beta)b_\beta(k)$ basit formuna indirgenecektir. Buradan ya $f(\beta) = E_k - E_\beta$ ve $b_\beta(k)$ sabiti için genel çözüm yada $f(\beta)$ ve $b_\beta(k)$ 'nun tüm değerlerinin mevcut olmadığı çözüm elde edilmektedir.

Bir başka deyişle, eğer $f(\kappa,\beta),\kappa$ 'ya bağlı ise (3.21) denkleminin sağ tarafı $b_\beta(k)$ 'ya göre homojen olmayacaktır. Sanki-potansiyel operatörü, onun düzlem dalgalar üzerindeki sonuçlarından gidilecek tanımlanacaktır. (3.15) ve (3.20) denklemleri birleştirilerek

$$W\left|\kappa\right\rangle = V\left|\kappa\right\rangle + \Sigma_\alpha f(\kappa,\alpha)\left\langle\alpha\middle|\kappa\right\rangle\left|\alpha\right\rangle \tag{3.22}$$

denklemi elde edilir. Bu gösterim Austin, Heine ve Sham (Austin, Heine ve Sham, 1962) tarafından verilen, genel sanki-potansiyel tanımıdır. $f(\kappa,\alpha),\kappa$ 'nın genel bir fonksiyonu olabilir. Eğer gerçekten κ'nın fonksiyonu ise, tek sanki-dalga fonksiyonuna yol açacaktır. Herhangi bir durumda (3.11) sanki-potansiyel denkleminin, bu sanki-potansiyel kullanılarak elde edilen gerçek çözümü gerçek bir özdeğer verecektir.

Sanki potansiyelin seçimini tartışmaya başlamadan önce, tüm çözümlerin iletim bant durumlarından ziyade kor durumlarına karşı gelen çözümler olduğuna dikkat edilmelidir. Örneğin χ çözümü, kor dalga fonksiyonuna eşittir. İletim bant durumları için olan (3.17) denkleminde; $E' = E_k$ yer değiştirmesi yapılırsa, bu denklem bütün E′'ler için ($(\Psi_k,\chi) = 0$ için) tamamen sağlanmış olur. Özdeğeri elde etmek için (3.19) denklemini ele almak gerekir. Bu denklem Ψ_α ile çarpılırsa;

$$E' - E_\alpha = \left(f(r,\alpha),\Psi_\alpha\right) \tag{3.23}$$

denklemine karşılık gelir.

OPW denkleminden elde edilen sanki potansiyel-formunu veren (3.12) denkleminin, her durum için farklı olduğuna dikkat edilmelidir. Bu denklem yol gösterici olarak düşünülmüştür. Bu özellik kullanılan lineer sanki- potansiyel için de geçerlidir. İkinci olarak; bütün sanki dalga fonksiyonlarının (3.11) sanki-potansiyel denklemi ile (3.12) sanki-potansiyel formunu sağlayacağına dikkat edilmelidir. (3.12) bağıntısı sanki-potansiyel operatör formunu tam anlamıyla taşımaktadır. Yalnızca; tam sanki-potansiyel fonksiyonuna uygulandığı zamanki sonuçları vermekte ama konum içeren genel fonksiyonla beraber sanki-potansiyel formunun sonucunu vermektedir. (3.22) denklemi; bir başka deyişle eğer $f(\kappa,\alpha)$ belirlenmişse, sanki-potansiyelin kesin tam tanımını vermektedir. Tam formu belirlenirken (3.12) denklemi ile tanımlanan sanki-potansiyel denklemini sağlayan bir çok mümkün sanki-dalga fonksiyonları arasından elde edilen doğru sanki-dalga fonksiyonunu belirtmek gerekir.

3.4.Sanki-Potansiyelin Seçimi

(3.22) denkleminde tanımlanan sanki-potansiyel ifadesi seçiminde oldukça büyük bir serbestlik bulunmaktadır. Daha önceden belirtildiği gibi, eğer sanki-potansiyel denklemi tam olarak çözülürse, bütün seçimler doğru özdeğerlere yol açmalıdır. Fakat burada W ikinci mertebeye kadar çözülmektedir.

Sanki-potansiyeli en verimli şekilde kullanabilmek için Cohen ve Heine (Cohen ve Heine, 1961) tarafından ortaya konan yöntem kullanıldığında sanki-potansiyel yapısı $\int|\nabla\varphi|^2 d\tau / \int|\varphi|^2 d\tau$ şeklinde minimize edilerek verilebilir. Bunun da, aşağıdaki şekilde verilen sanki-potansiyele yol açtığı bulunur.

$$W = V + \Sigma_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| \left(-\frac{\eta^2\nabla^2}{2m} + \langle k|W|k\rangle - E_\alpha \right) \tag{3.24}$$

Burada $|k\rangle$ sıfırıncı dereceden düzlem dalga durumudur. $|k\rangle$ 'nın bu önemi lineer olmayan bir operatör oluşturmaktan ziyade başlangıç durumunda sanki-potansiyele bağlılığıdır. Hesaplanmak istenilen her durum için; (3.24) denklemi iyi tanımlı ve belirgin bir lineer operatör vermektedir.

Eğer sanki-potansiyel, Austin,Heine ve Sham'ın seçtiği (3.22) denklemi şeklinde tanımlanırsa; $f(\kappa,\alpha)$'nın ρ 'ya bağımlılığı $-\frac{\eta^2\nabla^2}{2m}$ ile ortaya konulmaktadır ve böylece tek sanki-dalga fonksiyonu elde edilir. (3.24) denkleminden yararlanılarak sıfır durumuna W operatörü uygulanırsa

$$W|k\rangle = V|k\rangle + \Sigma_\alpha |\alpha\rangle \left(-\frac{\eta^2\nabla^2}{2m} + \langle k|W|k\rangle - E_\alpha \right) \langle\alpha|k\rangle \tag{3.25}$$

sonucu elde edilir.

Yapılan işlemler sırasında, sıfırıncı dereceden dalga fonksiyonu seçildiği için, bu dalga fonksiyonunun, gerçek sanki-dalga fonksiyonuna olabildiğince yakın çıkması beklenebilir. W, gerçek sanki-potansiyel üzerine uygulandığında, $V + (E_k - H)P$ kere

gerçek sanki-potansiyel dalga fonksiyonunu vermelidir. Bu anlamda, sanki-dalga fonksiyonuna karşı gelen Harrison (Harrison, 1966) tarafından tanımlanan sanki-potansiyel, herhangi bir sanki-potansiyel ile kullanılarak sıfırıncı derece düzlem dalgaya yaklaşacaktır. Diğer taraftan; bu seçimler arasındaki sonuçlar fazla değişmemiştir, böylece o önemli bir nokta olmayabilir. Farklı incelemelerde E_α 'ya farklı yaklaşımlar yapılabilmektedir.

Eğer sanki-potansiyel denklemi kesin olarak çözülseydi veya metalin bazı özellikleri kesin olarak hesaplanabilseydi, özel sanki-potansiyeller cinsinden yanıt; Schrödinger denkleminin kesin çözümünü verecek ve sanki-potansiyel seçiminden bağımsız olacaktır.

İlgili sanki-potansiyelin seçimindeki en basit ve kullanışlı model potansiyel, Ashcroft tarafından önerilen boş küre potansiyelidir.

3.4.1.Ashcroft'un Boş Küre Potansiyeli (EC)

En basit elektron iyon potansiyeli modelidir. Ashcroft'un elektron – iyon potansiyeli boş kürenin yarıçapı olan R_C parametresi ile tanımlanır (Ashcroft, 1966). İyon küre yarı çapı dışında potansiyeli Coulomb potansiyeli ile verilir. Böylece Ashcroft boş küre potansiyeli;

$$V_{iyon}(r) = \begin{cases} 0 & , r < R_c \\ -\dfrac{Ze^2}{r} & , r > R_c \end{cases} \tag{3.26}$$

şeklinde tanımlanır. Burada R_C boş küre çapı ve Z elektronik değerliktir.Ashcroft boş küre potansiyelinin Fourier transformu alındığında form faktörü

$$V_{iyon}(q) = -\frac{4\pi Ze^2}{\Omega q^2} M(q) \tag{3.27}$$

olarak elde edilmektedir. Burada ,

$$M(q) = \cos(qR_C) \tag{3.28}$$

ile verilir.

3.4.2.Yerel Heine Abarenkov Potansiyeli (LHA)

İkinci yaklaşım Yerel Heine-Abarenkov potansiyel modelidir (Heine ve Abarenkov, 1964). Bu yöntem OPW yöntemine dayanmaz, fakat kuantum-defect yönteminin geliştirilmiş halidir. Bu özelliklerin hesaplanmasında kullanılan matris elemanları Heine-Abarenkov sanki-potansiyelindeki matris elemanlarında kullanılmaktadır. Her ne kadar; farklılığın büyük bir kısmı E_α'nın hesabındaki hatalardan kaynaklanmasa da günümüzde gerçekliğini koruyan sonuçlarla Heine-Abarenkov'un modeli hala daha kesin ve diğer sonuçlar bunlardan daha iyi değildir. Ayrıca şu anda formüle edildiği gibi, etkin Heine-Abarenkov potansiyelinin düzgün olmaması nedeniyle enerji toplandığı zaman, dalga sayısı üzerinden yapılan toplamlarda yavaş bir yakınsamaya yol açmasıdır . Bu potansiyel , r_M içinde kare kuyu şeklini alır;ve r_M büyüklüğünde bir süreksizliğe sahiptir.

$$V_{iyon}(r) = \begin{cases} -\dfrac{AZe^2}{r_M} & , r < r_M \\ -\dfrac{Ze^2}{r} & , r > r_M \end{cases} \tag{3.29}$$

Yerel Heine-Abarenkov potansiyeli, Ashcroft boş küre potansiyelinin genelleştirilmiş halidir. A sıfıra eşit olduğunda, Yerel Heine-Abarenkov potansiyeli Ashcroft boş küre potansiyeline indirgenir (Yazar,2002). Yerel Heine-Abarenkov potansiyelinin Fourier transformu alındığında form faktörü,

$$V_{iyon}(q) = -\frac{4\pi Ze^2}{\Omega q^2} M(q) \tag{3.30}$$

olarak elde edilmektedir. Burada

$$M(q) = (1-A)\cos(qr_M) + \frac{A}{(qr_M)}\sin(qr_M) \tag{3.31}$$

ile verilir.

Özet olarak; OPW'ye dayanan sanki-potansiyel çerçevesi içinde, optimize edilmiş sanki-potansiyelin kullanılmasının sonucu oluşan ilave zorluklar garanti olarak ortaya çıkar. Heine-Abarenkov'un modeli daha kesin sonuç veriyor gibi gözükmesine rağmen tam olarak açık değildir. Doğal olarak bu yöntemin atomik özelliklerin hesabı için geliştirilmesi gerekmektedir.

3.5.Sanki-Potansiyelin Ayrıştırılması

Sanki-potansiyelin bir başka önemli özelliği, yapılacak olan analizlerde gerekli olacak, tek tek iyonik sanki-potansiyelin ayrıştırılmasıdır. Harrison (Harrison, 1966) tarafından ele alınan genel lineer sanki-potansiyel aşağıdaki şekilde verilir;

$$W|\kappa\rangle = V|\kappa\rangle + \Sigma_\alpha f(\kappa,\alpha)|\alpha\rangle\langle\alpha|\kappa\rangle \tag{3.32}$$

V potansiyeli kor potansiyelini içerir, bu ilgili tek tek iyonların potansiyellerin toplamı olarak yazılabilir ve bunlar küresel simetriktir.

$$V_{iyon} = \Sigma_j v_{iyon}\left(\left|r - r_j\right|\right) \tag{3.33}$$

j indisi iyonu belirler. İyonların perdelenmesi, W'de birinci dereceye kadar içerecek ve bu yüzden her bir iyonun perdelenmesi ilave edilebilir ve (3.33) ifadesinde olduğu gibi küresel simetrik olacaktır. Sonuçta (3.32) denklemi ile verilen sanki-potansiyeldeki kor durumları aşağıdaki şekilde yazılabilir;

$$|\alpha\rangle = \Psi_t(r - r_j) \tag{3.34}$$

Burada α indisi j ve t indis çiftine ayrılmıştır. j indis yine mevcut iyonu göstermektedir; t indisi ise aynı iyondaki kor durumları için enerji ve açısal momentum sayısını göstermektedir. Bu nedenle sadece t indisi vasıtasıyla α'ya bağlı olan $f(\kappa,\alpha)$'ya gereksinim duyulmaktadır. Böylece sanki-potansiyelin iyon konumuna bağlılığının $r - r_j$ aracılığıyla olduğu sonucu çıkarılır. Çünkü; r sanki potansiyeldeki hep $r - r_j$ formundadır ve bu yüzden sanki-potansiyel,

$$W = \Sigma_j w(r - r_j) \tag{3.35}$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada w aşağıdaki şekildedir.

$$\begin{aligned} w(r - r_j)|\kappa\rangle &= v(r - r_j)e^{i\kappa r} / \Omega^{1/2} \\ &+ \Sigma_t f(\kappa,t)\Psi_t(r - r_{j)} \int d\tau \Psi_t^*(r' - r_j)e^{i\kappa r} / \Omega^{1/2} \end{aligned} \tag{3.36}$$

İyonların üzerine merkezlenmiş tek tek sanki-potansiyellerin toplamına olan bu ayrışma, sanki-potansiyelin diagonal olmayan matris elemanlarının incelenmesinin temelini oluşturacaktır. Daha sonra iyon konumlarına bağlı olmayan yaklaşımla; sanki-potansiyelin içinde bulunan E_α ve $f(\kappa,\alpha)$'nın α'ya bağımlılığı t vasıtasıyla olacaktır. Sanki-potansiyelin (3.35) denklemi biçiminde seçmek her zaman mümkündür.

Tek tek iyonik $w(r - r_j)$ potansiyellerinin birbirleriyle üst üste gelebileceğine dikkat etmek gerekir. Gerçekte, iyonların Coulomb alanı sınırsız olarak büyüdüğü ve tam olarak belirlenemediği için onların üst üste geleceği bilinmektedir.

$w(r)$'nin tercih edilmeyen yön anlamında, küresel simetrik olduğunu ayrıca not etmek gerekir. v(r) potansiyeli küresel simetriktir ve tek tek iyonik durumlar açısal bağımlı olmasına rağmen, bütün kor durumları üzerinden alınan toplamın sonucu açısal bağımlı olmayacaktır. (3.36) ifadesindeki sanki-potansiyelde verilen potansiyel teriminin matris

elemanı; dalga sayılarının sağ ve sol taraftaki durumlarına, bu dalga sayıları arasındaki fark aracılığı ile bağlıdır. Potansiyel teriminin matris elemanı

$$\langle k+q|v(r-r_i)|k\rangle = (1/\Omega)\int e^{-i(k+q)r} v(r-r_i) e^{ikr} d\tau$$

$$(1/\Omega)\int e^{-iqr} v(r-r_i) d\tau \qquad (3.37)$$

şeklinde elde edilir. κ'nın yeterli büyük değerleri için $\int \Psi_t^*(r) e^{ikr} d\tau$ integralinin sıfıra gideceğine dikkat etmek gerekir. Dalga sayısının q'ya göre değişimine bağlı olarak, (3.36) ifadesinde sanki-potansiyelin ikinci terimindeki matris elemanına katkı olarak; sağ taraftaki dalga sayısı yeterince küçük alınabilir. Matris elemanlarının sağ ve sol taraftaki dalga sayılarına bağımlılığı w operatörünün doğasını yansıtmaktadır. Bu operatör (3.37) ifadesindeki $v(r)$'nin matris elemanlarına bağlılığı $v(r)$ ve exp(ikr) değişimiyle azaltılabilir. Çünkü $v(r)$ skalerdir ama bunu $v(r)$ operatör olduğu zaman yapmak mümkün değildir (Harrison,1966).

3.6.Perdeleme

Sistemde iyonlarla birlikte elektronların varlıkları da hesaba katılmalıdır. Saçılmanın lineer tepki teorisi Pinas ve Nazieres (Pinas ve Nazieres, 1958) tarafından formüle edilmiştir. Dielektrik fonksiyonu $\varepsilon(q)$, zayıf potansiyel $V_{iyon}(q)$ ile

$$V(q) = \frac{V_{iyon}(q)}{\varepsilon(q)} \qquad (3.38)$$

denklemiyle bağlıdır.

$\varepsilon(q)$'nun genelleştirilmiş yerel-alan düzeltme terimi $G(q)$'yu içeren formu

$$\varepsilon(q) = 1 + (1 - G(q))\left(\frac{4\pi Z e^2}{\Omega q^2}\frac{3}{2E_F}\right)F_0(x) \qquad (3.39)$$

şeklindedir (Singwi ve Tosi, 1981). Burada $x = \frac{q}{2k_F}$ ve $F_0(x)$ genel Linhard fonksiyonudur.

$$F_0(x) = \frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln\left|\frac{1+x}{1-x}\right| \tag{3.40}$$

Yerel-alan düzeltme terimi $G(q)$ etkileşen elektronlar arasındaki değiş-tokuş ve korelasyon olarak düşünülmektedir. Bu fonksiyon içi bir çok form oluşturulmuştur. Bazıları, Hubbart (Hubbart, 1957) formu ,

$$G_H(q) = \frac{q^2}{2(q^2 + {k_F}^2)} \tag{3.41}$$

Geldart ve Vosko (Geldart ve Vosko, 1966) tarafından düzeltilmiş formu ,

$$G_{GV}(q) = \frac{q^2}{2(q^2 + \xi {k_F}^2)} \tag{3.42}$$

şeklindedir. Burada

$$\xi = \frac{2}{(1 + 0.153(\alpha r s / \pi))}, \tag{3.43}$$

$$\alpha = \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{1/3} \tag{3.44}$$

ve r_S etkin elektron uzaklığıdır.

Vashista-Singwi (Vashista ve Singwi,1981) formu ,

$$G_{VS}(q) = A\left[1 - \exp(-Bx^2)\right] \tag{3.45}$$

dir. Burada A ve B r_S'e bağlı sabitlerdir.

Burada önemli nokta Coulomb etkileşmesi ifadesindeki $\frac{4\pi e^2}{q^2}$ terimi yerine $\frac{4\pi e^2}{q^2}$ (1 - G(q)) geldiğidir. $q \to 0$ iken $G(q) \to 0$ olduğundan değiş-tokuş ve

korelasyon düzeltmesi yoktur. $q \to \infty$ iken $G(q) \to 1/2$ olduğundan değiş-tokuş etkileşmesi iptal edildiğinde kısa dalga boyunda Coulomb etkileşmesi yarı değerini alır.

İkinci dereceden pertürbasyon teorisi tarafından verilen metallerde iyonlar arasındaki etkin çift potansiyeli formülü

$$V(r) = \frac{Ze^2}{r} - \frac{2(Ze)^2}{\pi} \int F_N(q) \frac{\sin qr}{qr} dq \tag{3.46}$$

dur (Harrison, 1980). Burada birinci kısım doğrudan iki pozitif yüklü iyonlar arasındaki Coulomb etkileşmesi ve ikinci kısım elektronlar tarafından oluşturulan dolaylı çekimdir.

$$F_N(q) = \left[V_{iyon}(q) \Big/ \left(-4\pi Ze^2 \Big/ \Omega q^2 \right) \right]^2 \chi(q) \tag{3.47}$$

normalize edilmiş enerji dalga sayısı karakteristiğidir; ve burada

$$\chi(q) = 1 - \frac{1}{\varepsilon(q)} \tag{3.48}$$

polarizibilite fonksiyonudur.

Bu noktada $G(q)$ yerel-alan düzeltme teriminin uygun formunu seçebilmek önemli olmaktadır. Burada $V(r)$ çift potansiyelindeki yerel alan düzeltme terimi $G(q)$'nun olası farklı yaklaşımları tanımlandı (Jacucci ve Taylor, 1981). Ancak dejenere elektron gazının dielektrik fonksiyonunda yer alan $G(q)$'nun elektron gazının sıkıştırılabilirliği, elektron-elektron çift korelasyon fonksiyonu gibi elektrona bağlı durumları sağlamak zorunda olması bu yaklaşımlarda dikkate alınmadı. Tüm bu yaklaşımlar yüzeysel olarak incelendiğinde ve bir yada birkaç gereklilik yok edildiğinde Ichimaru ve Utsimi (Ichimaru ve Utsimi, 1981) dielektrik fonksiyonunda yerel alan düzeltme terimi $G(q)$

$$G(q) = 16Ay^4 + 4By^2 + C + \left[16Ay^4 + (B + 8A/3)4y^2 - C \right]$$

$$\frac{1-y^2}{2y}\ln\left|\frac{1+y}{1-y}\right| \tag{3.49}$$

şeklini almalıdır. Burada $2y = q/2k_F$

$$A = 0.029 \qquad (0 \le r_S \le 15)$$

$$B = \frac{9}{16}\gamma_0 - \frac{3}{64}\left[1 - g(0)\right] - \frac{16}{15}A$$

$$C = -\frac{3}{4}\gamma_0 + \frac{9}{16}\left[1 - g(0)\right] - \frac{16}{15}A$$

$$g(0) = \frac{1}{8}\left[\frac{Z}{I_1(Z)}\right]^2$$

$$Z = 4(\alpha r_S/\pi)^{1/2} \qquad \alpha = (4/q\pi)^{1/3} \tag{3.50}$$

$I_1(Z)$ birinci dereceden düzeltilmiş Bessel fonksiyonudur; ve

$$\gamma_0 = \frac{1}{4} - \frac{\pi\alpha}{24}r_S{}^2\left[\frac{dF}{dS} - \frac{3F}{r_S}\right]$$

$$F = \frac{b_0(1+b_1x)}{\left(1+b_1x+b_2x^2+b_3x^3\right)} \tag{3.51}$$

$x = \sqrt{r_s}$ ve $b_0 = 0.0621814,\ b_1 = 9.81379,\ b_2 = 2.82224,\ b_3 = 0.736411$ şeklindedir.

4. SIVI METAL VE ALAŞIMLARDA YAPI ÖZELLİKLERİ

4.1.Sıvı Metallerin Yapı Faktörü

Çift etkileşimden sıvı metallerin yapı ve termodinamik özelliklerinin belirlenmesi, sıvıların teorisinde hala devam eden bir problemdir. Bu işlemlerin iki geleneksel yolu bulunmaktadır. Bu yaklaşımlardan biri olan integral denklemli yaklaşım korelasyon fonksiyonunun diyagram haline getirilmesiyle başlamıştır. İntegral denklemli yaklaşımların temel problemi $g(r)$ çift dağılım fonsiyonu ile $V(r)$ çift potansiyeli arasındaki ilişkiyi kurmaktır. Bu yaklaşımlardan en çok bilineni Born-Green denklemidir (Born ve Green, 1946).

$$V(r) = -\ln k_B T g(r) + k_B T \; n\int E(|\rho - \rho'|)[g(\rho' - 1)]d^3\rho' \tag{4.1}$$

olarak elde edilir. Bu ifade, Born ve Green'in sıvılar teorisinde başlangıç noktası olmuştur (Born ve Green, 1946). Burada n ortalama sayı yoğunluğudur. r'' büyük değerleri için, $g(r'')$ kısmi dağılım fonksiyonu bire doğru gider ve

$$E(r) = \int_r^\infty \frac{g(r'')}{k_B T} \frac{\partial V(r'')}{\partial r''} dr'' \tag{4.2}$$

ifadesinin asimptotik formu çok büyük ara bölgeler için $-V(r)/k_BT$ ifadesi dikkate alınarak hesaplanır.

Sıvı metallerin diğer bir yaklaşım teorisi Ornstein-Zernike tarafından tanımlanan direkt korelasyon fonksiyonudur. Bu yaklaşımda başlangıç noktası $C(r)$ direkt korelasyon fonksiyonu ile kurulur. Toplam korelasyon fonksiyonu ise;

$$h(r) = g(r) - 1 = C(r) + n\int C(|r - r'|)h(r')dr \tag{4.3}$$

olarak tanımlanır. Burada n ortalama sayı yoğunluğudur.

Toplam korelasyon fonksiyonu $h(r)$, iki kısımdan oluşmaktadır. Bunlardan birincisi $C(r)$ ile ifade edilen merkezi moleküle doğrudan bağlı olan direkt korelasyon terimi, ikinci terimde yakın komşuluktaki diğer moleküller tarafından oluşturulan dolaylı olarak merkezdeki moleküle bağlı olan kısımdır (Jint ve diğerleri,1997).

Sıvı hal teoremlerinde direkt korelasyon fonksiyonu için iki kullanışlı yaklaşım bulunmaktadır. Bunlardan birincisi Hypernetted Chain (HNC) yaklaşımıdır. Hypernetted Chain denklemi;

$$C_{HNC}(r) = h(r) - \ln g(r) - \Phi(r)/k_BT \tag{4.4}$$

(Van Leeuven ve diğerleri, 1959) şeklindedir. İkinci yaklaşım olan Percus-Yevick denklemi;

$$C_{PY}(r) = g(r)\left[1 - \exp\left[\frac{V(r)}{k_BT}\right]\right] \tag{4.5}$$

şeklindedir.

Parçacıkların ikili etkileşmelerini inceleyen en olası ve basit model katı küre modelidir. Katı küre modelinde model potansiyel

$$V(r) = +\infty, \qquad r < \sigma$$
$$V(r) = 0, \qquad r > \sigma \tag{4.6}$$

dur. Bu model etkin kısa mesafe itici etkileşmelerde kullanışlı bir yaklaşımdır. Bir iyon diğer bir iyona katı küre çapı kadar yaklaşabilir. Bu yaklaşıma göre bir çok sıvı metalin termodinamik özellikleri iyi sonuçlar verecek şekilde belirlenebilir.

Katı küre modeli için direkt korelasyon fonksiyonunu katı küre çapı içindeki r değerleri için polinomsal olarak çözümlenmiştir. Katı küre çapının dışında $C(r)$ sıfırdır. Bu yüzden direkt korelasyon fonksiyonu

$$C(r)\begin{cases} = A_0 + A_1\left(\dfrac{r}{\sigma}\right) + A_3\left(\dfrac{r}{\sigma}\right)^3, & , r < \sigma \\ = 0, & , r > \sigma \end{cases} \tag{4.7}$$

olarak tanımlanır (Thiele ve Wertheim, 1963). Burada σ katı küre çapıdır.

Eğer $\eta = \left(\pi/6\right)^3 n\sigma$ paketleme kesri olarak alınırsa

$$A_0 = -\frac{(1+2\eta)^2}{(1-\eta)^4}$$
$$A_1 = \frac{6\eta(1+\eta/2)^2}{(1-\eta)^4} \tag{4.8}$$
$$A_3 = \frac{(-\eta/2)(1+2\eta)^2}{(1-\eta)^4}$$

ile ifade edilir. Burada η paketleme yoğunluğudur. Direkt korelasyon fonksiyonunun Fourier transformu alınırsa;

$$C(q) = \int C(r)\exp(-i\vec{q}.\vec{r})dr^3 \tag{4.9}$$

olarak tanımlanır ve denklem (4.7)'de $C(r)$ ifadesini yerine konulduğunda

$$C(q) = -4\pi\sigma^3 \int_0^1 q^2 \frac{\sin qr}{qr}(A_0 + A_1(r\sigma) + A_3(r\sigma)^3)dr \qquad (4.10)$$

şeklinde ifade elde edilir.

Monokramatik x-ışınları dalga boyları λ olmak üzere her bir atomdan saçılan ışnların kovalent genliği elektron ve atom arasındaki atomik saçılma faktörünün artışından atomun yerleşimi ile ilgili bilgiler elde edilir.

r'de yerleşik bulunan saçılan atomun faz faktörü $\exp\left[i\left(\vec{k}-\vec{k}'\right)\vec{r}_j\right]$dir. $\vec{k}$ ve $\vec{k}'$ dalga vektörleri sırasıyla gelen ve saçılan dalga vektörleridir. Saçılan dalganın genliği gösterilirken sıvı metaldeki atomların ortalama bir bölgede yerleştikleri varsayılır. Sonuç olarak x-ışınlarının saçılması ile oluşan ışınım şiddeti;

$$I(q) = f^2 q\left\langle \sum_{i,j} \exp\left[i\vec{q}.(\vec{r}_j - \vec{r}_i)\right]\right\rangle \qquad (4.11)$$

şeklinde ifade edilir. Burada $f(q)$ atomik saçılma faktörü ve θ saçılma açısıdır ve

$$q = \frac{4\pi}{\lambda}\sin\theta \qquad (4.12)$$

olarak verilir.

Kristal yapıdan kristalize olmuş bir atomda $(r_j - r_i)$ görelik konumda sabittir; ve bu da q'da özelliğin karşılıklı örgü içinde olduğunu gösterir. Bu sebeple basit kristalde I ışınım şiddeti sürekli keskin ve farklı pikler olmasına sebep olur. Kristal olmayan bir metalde sıvı alaşımlar için $(r_j - r_i)$ ifadesinin ortalama değeri alınır.

Buradan da

$$\frac{I(q)}{Ny^2(q)} = N^{-1}\left\langle \sum_{i,j} \exp\left[i\vec{q}.(\vec{r}_j - \vec{r}_i)\right]\right\rangle \qquad (4.13)$$

Çift korelasyon fonksiyonu kullanılarak

$$N^{-1}\left\langle \sum_{i,j} \exp[i\vec{q}.(\vec{r}_j - \vec{r}_i)] \right\rangle = 1 + n\int g(r)\exp(-i\vec{q}.\vec{r})dr \qquad (4.14)$$

elde edilir (Shimoji, 1977). İlk terimde i=j alınırsa $g(r)=1$ olur ve integral sonucu sıfıra yaklaşır. Bu da q=0'da en yakın değer alınarak elde edilir. Böylece saçılan ışın demeti üzerinde girişim etkisi çok fazla olur. Bu değer deneysel aralıktaki saçılma açısını belirlemede çok önemlidir.

Sıvıların yapı özelliklerini açıklamada diğer bir yöntem, bir sıvı metalin orjinindeki atomun r uzağında herhangi bir atomun bulunma olasılığını veren $g(r)$ çift korelasyon fonksiyonu

$$g(r) = 1 + \frac{\Omega_0}{2\pi^2 N}\int_0^\infty (S(q)-1)\frac{\sin qr}{qr}q^2 dq \qquad (4.15)$$

şeklinde bulunmaktadır.

Bu ifadenin Fourier transformu statik yapı faktörüne eşit olur ve

$$S(q) = 1 + \frac{4\pi N}{\Omega_0}\int_0^\infty (g(r)-1)\frac{\sin qr}{qr}r^2 d^3 r \qquad (4.16)$$

şeklindedir. Burada q sonsuza doğru meyilli olduğunda $\sin qr$ faktörü çok çabuk osilasyon yapar, ve osilasyonların genlikleri q faktörü yüzünden azalır. Bu da $g(r)$'nin singülaritesinin (tekilliğinin) olmaması durumunda, $S(q)$'nun büyük q değerleri için bire doğru gittiğini gösterir. Böylece q=0 değeri için

$$S(0) = nk_B T\chi_T = \frac{(1-\eta)^4}{(1+2\eta)^2} \qquad (4.17)$$

şeklinde yazılabilir. Burada χ_T izotermal sıkıştırılabilirlik katsayısı, η paketleme kesridir.

4.2.Sıvı Metal Alaşımlarının Yapı Faktörü

Sıvı metal alaşımlarının yapı faktörlerine kısmi yapı faktörleri adı verilmektedir. Sıvı metal alaşımlarının kısmi yapı faktörlerini belirlemede de katı küre yaklaşımı kullanılır. Ancak çok az sayıdaki sıvı metallerin alaşımları için doğru ölçümler alınabilmektedir. Diğer sıvı metallerin alaşımlarının bir takım metalik özellikleri veya termodinamik özelliklerinden dolayı yerel düzenleri oldukça değişkenlik gösterdiğinden ölçümler hassas olarak yapılamamaktadır. Bir sıvı metalin yapısında elektron-elektron, elektron-iyon ve iyon-iyon yapı faktörleri sıvı metali iki bileşenli akışkan kabulüyle türetilmektedir.

İkili alaşımlar için x- ışınların genliği

$$I(q) = d_1(q)\sum_{i=1}^{N_1}\exp(-iqr_{1,i}) + d_2(q)\sum_{j=1}^{N_2}\exp(-iqr_{2,j}) \tag{4.18}$$

şeklinde ifade edilir. Burada Ω_0 hacminde atomların toplam sayısı N_1 ve N_2 birinci ve ikinci atomların sayısıdır. Sıvı alaşımlarda oluşan konsantrasyon $c_1 = \frac{N_1}{N}$ ve $c_2 = \frac{N_2}{N}$ şeklindedir.

Böylece oluşan saçılma şiddeti

$$\begin{aligned} I(q) = {} & d_1^{\,2}(q)\left\langle \left| \sum_{i=1}^{N_1}\exp(-iqr_{1,i}) \right|^2 \right\rangle + d_2^{\,2}(q)\left\langle \left| \sum_{j=1}^{N_2}\exp(-iqr_{2,j}) \right|^2 \right\rangle \\ & 2d_1(q)d_2(q)\left\langle \sum_{i=1}^{N_1}\sum_{j=1}^{N_2}\exp\{-iq(r_{1,i}-r_{2,j})\} \right\rangle \end{aligned} \tag{4.19}$$

olarak ifade edilir. (4.19) denkleminde üç terim kendi atom çiftlerinin kısmi yapı faktörlerine uyumludur. Bununla birlikte, ikili alaşımlar için kısmi yapı faktörleri tanımı tek değildir.

Sıvı hal fiziğinin temel denklemi olan $g(r)$ çift korelasyon fonksiyonu ikili alaşımlar için

$$g_{ij}(r) = h_{ij}(r) + 1 = 1 + \frac{1}{2\pi^2 (n_1 n_2)^{1/2}} \int_0^\infty q^2 (a_{ij}(q) - 1) \exp(-iqr) dr \tag{4.20}$$

olarak tanımlanır. Burada $a_{ij}(q)$ Faber-Ziman kısmi yapı faktörüdür (Faber ve Ziman,1965). Sıvı alaşımlar için Ornstein-Zernike denklemi

$$h_{ij}(r) = C_{ij}(r) + \sum_{k=1}^{\infty} n_k \int_0^\infty C(|r - r'|) h_{k,j}(r) d^3 r \tag{4.21}$$

olarak ifade edilir. Burada i ve j terimleri birinci ve ikinci atomu, (4.21) denkleminde ikinci terim alaşımdaki tüm atomlardan geçerek i ve j arasındaki korelasyonu tanımlar ve n_k , k tipi iyonun sayı yoğunluğunu ifade eder. Denklem (4.21)'nin q momentumu uzayında alınırsa

$$h_{ij}(q) = C_{ij}(q) + \sum_{k=1}^{\infty} n_k C_{i,k}(q) h_{k,j}(q) \tag{4.22}$$

şeklinde ifade edilir.

Bir çok denklem için iyon-iyon etkileşme potansiyelinden korelasyon fonksiyonuna bağlı yaklaşımlar yazılabilir. Bunlardan biri olan basit iyon-iyon etkileşme potansiyellerinde Percus-Yevick denkleminin kullanımı uygundur. İkili sıvı alaşımlar için bu denklem

$$C_{ij}(r) = (1 - \exp \frac{V_{ij}(r)}{k_B T}) g_{ij}(r) \tag{4.23}$$

şeklinde tanımlanır. Burada $C_{ij}(r)$ alaşımlar için direkt korelasyon fonksiyonudur. Katı küre modeline göre $C_{ij}(r)$ ifadesi

$$C_{ij}(r)\begin{cases} = a_{ij} + b_{ij}(r\sigma_2) + c_{ij}(r\sigma_3)^3, & , r < \sigma_2 \\ = 0, & , r > \sigma_2 \end{cases} \tag{4.24}$$

olarak ifade edilir. Burada σ_2 büyük katı küre çapıdır ve buradaki a_{ij}, b_{ij} ve c_{ij} ifadeleri sırasıyla

$$\begin{aligned} a_{ij} &= -\frac{(1+2\eta_{ij})^2}{(1-\eta_{ij})^4} \\ b_{ij} &= \frac{6\eta_{ij}(1+\eta_{ij}/2)^2}{(1-\eta_{ij})^4} \\ c_{ij} &= \frac{(-\eta_{ij}/2)+(1+2\eta_{ij})^2}{(1-\eta_{ij})^4} \end{aligned} \tag{4.25}$$

olarak tanımlanır. Buradaki toplam paketleme yoğunluğu η_{ij} ifadesi

$$\eta_{ij} = \eta_i + \eta_j = \frac{\pi c_i \sigma_i^{\,3}}{6\Omega_0} + \frac{\pi c_j \sigma_j^{\,3}}{6\Omega_0} \tag{4.26}$$

olarak ifade edilir. Denklem (4.24)'ün Fourier transformu alındığında

$$C_{ij}(q) = \int C_{ij}(r)\exp(-i\vec{q}.\vec{r})d^3r \tag{4.27}$$

şeklinde tanımlanır.

Buradan da elde edilen statik yapı faktörü;

$$S_{ij}(q) = \delta_{ij} + (\eta_i\eta_j)^{1/2}\int (g_{ij}(r)-1)\exp(-i\vec{q}.\vec{r})d^3r \tag{4.28}$$

şeklinde ifade edilir.

Katı küre modeline göre Ashcroft-Langreth kısmi yapı faktörleri

$$S_{11}(y) = \frac{[1-\eta_1 C_{22}(y)]}{D(y)}$$
$$S_{22}(y) = \frac{[1-\eta_2 C_{11}(y)]}{D(y)} \qquad (4.29)$$
$$S_{12}(y) = \frac{(n_1 n_2)^{1/2} C_{12}(y)}{D(y)}$$

$$D(y) = [1-n_1 C_{11}(y)]\ [1+n_2 C_{22}(y)] - n_1 n_2 C_{12}{}^2(y) \qquad (4.30)$$

şeklinde ifade edilmiştir (Ashcroft ve Langreth, 1967). Burada $y = q\sigma_2$, α_R katı küre çaplarının oranı ve c konsantrasyon olmak üzere

$$\alpha_R = \sigma_1 / \sigma_2 \qquad 0 \le \alpha_R \le 1 \qquad (4.31)$$

$$c = n_2 / n_1 + n_2 \qquad (4.32)$$

ile ifade edilir. Denklem (4.31)'de direkt korelasyon fonksiyonu η, α_R ve c olan üç parametreye bağlıdır.

Faber-Ziman tarafından geliştirilen kısmi yapı faktörleri

$$a_{11}(y) = \frac{[S_{11}(y)-c_2]}{c_1}$$
$$a_{22}(y) = \frac{[S_{22}(y)-c_1]}{c_2} \qquad (4.33)$$
$$a_{12}(y) = \left[\frac{S_{12}(y)}{(c_1 c_2)^{1/2}}\right] + 1$$

şeklinde ifade edilir (Faber ve Ziman, 1965). Denklemdeki c_1 ve c_2 birinci ve ikinci atomun konsantrasyonu olup $c_1 + c_2 = 1$' e eşit olur.

5.SIVI METALLERİN ELEKTRONİK TAŞINIM ÖZELLİKLERİ

5.1. Giriş

Birçok metalin sıvı haldeki elektriksel dirençleri, katı haldeki elektriksel dirençlerinden 2 - 3 kat daha büyüktür. Bu, sıvı metallerin iyonlarının, kristal katı maddelerin düzenli yapılarına göre daha düzensiz yerleşmelerinden kaynaklanmaktadır. Çünkü elektronlar, düzensiz bir yapıda olan sıvılarda hareket ederken, elektronların ortalama serbest yolu kısalır ve bu da elektriksel iletkenliğin azalmasına yani elektriksel direncin artmasına neden olur.

5.2.Sıvı Metal ve Alaşımların Özdirencinin Hesabı

Sıvı metallerin özdirençlerinin hesaplanmasında kullanılan yöntemlerden biri Ziman (Ziman, 1961) ifadesidir. Sıvı metallerde özdirenç elektron – iyon etkileşimi için, pseudopotansiyel teori ve Boltzmann denklemini ele alarak Ziman tarafından formüle edilmiştir.

5.2.1.Sıvı Metal ve Alaşımlar İçin Ziman İfadesi

Zamana bağlı pertürbasyon teorisinde geçiş oranı $N_{FE}(E_F)$ durum yoğunluğu ile Fermi yüzeyinde $\Psi_k = |k\rangle$ ilk durumdan son duruma elde edilen denklem;

$$P(\Theta) = \frac{2\pi}{\eta} \left| \langle k+q | V(q) | k \rangle \right|^2 \frac{1}{2} N_{FE}(E_F) \qquad (5.1)$$

şeklinde ifade edilir. Burada θ, k ve $k+q$ arasındaki açıdır, $\frac{1}{2}$ faktörü olması nedeniyle bu elektron spin olayından yük saçılması olmayacağı gözlenir. Denklem (5.1)'deki

$$\left|\left\langle k+q\left|V(q)\right|k\right\rangle\right|^2 = N^{-1}S(q)\left|\left\langle k+q\left|V(q)\right|k\right\rangle\right|^2 \tag{5.2}$$

şeklinde ifade edilir. Boltzmann denkleminden yararlanılarak elde edilen σ_e elektriksel iletkenlik

$$\sigma_e = \frac{1}{3}e^2 V_F{}^2 \tau N_{FE}(E_F) \tag{5.3}$$

olarak tanımlanır. Buradaki V_F Fermi yüzeyindeki bir elektronun hızı ve τ yavaşlatma zamanı

$$\tau = \int (1-\cos\theta) P \Theta 4\pi d\xi \tag{5.4}$$

olarak verilir. Böylece metallerin özdirencinin hesabında kullanılan ve literatürde yaygın olarak bilinen Ziman (Ziman, 1961) ifadesi

$$\rho = \frac{1}{\sigma_e} = \frac{3\pi m^2 \Omega_0}{4e^2 \eta^3 k_F{}^6} \int_0^\infty S(q)V^2(q)q^3\Theta(2k_F - q)dq \tag{5.5}$$

şeklinde verilir. Buradaki Θ fonksiyonu;

$$\Theta(2k_F - q) = \begin{cases} 1 & q \le 2k_F \\ 0 & q \rangle 2k_F \end{cases} \tag{5.6}$$

şeklindedir. Burada S(q) statik yapı faktörü,V(q) form faktörü, Ω_0: atomik hacim ve k_F: Fermi dalga vektörüdür. Θ ise birim adım fonksiyonu olup Fermi yüzeyine uygun olarak $2k_F$'de q integrasyonunu tanımlar. Denklem (5.5)'de m, e ve η atomik birimde 1 alınır.

Ziman ifadesi özdirenç hesabında çok yaygın olarak kullanılmasına rağmen yetersiz kaldığı noktalarının olduğu ifade edilmektedir.

Sıvı metaller için özdirencin hesaplanmasında kullanılan Ziman ifadesi sıvı metal alaşımlar için Faber-Ziman (Faber ve Ziman, 1965) tarafından geliştirilerek

$$\rho = \frac{3\pi m^2 \Omega_0}{4e^2 \eta^3 k_F{}^6} \int_0^{\infty} q^3 \left(c_1 S_{11}(q) \left| V_{12}(q) \right|^2 + c_2 S_{22}(q) \left| V_{22}(q) \right|^2 \right.$$

$$\left. 2(c_1 c_2)^{1/2} S_{12}(q) \left| V_{12}(q) \right|^2 \right) \Theta(2k_F - q) dq \qquad (5.7)$$

şeklinde ifade edilmiştir. Burada c_1 ve c_2 sırasıyla birinci ve ikinci bileşiğin konsantrasyonu, $V_{ij}(q)$ i ve j tipi atomları içeren alaşımın form faktörü ve $S_{ij}(q)$ klasik akışkanlarda, radyal dağılım fonksiyonu için Percus –Yevick denkleminin katı küre modeline göre rastgele dağıtılmış farklı çaplara ait katı kürenin karışımını tanımlayan kısmi yapı faktörüdür (Ashcroft ve Langreth, 1967).

5.2.2.Sıvı Metal ve Alaşımları İçin Düzeltilmiş Ziman İfadesi

Basit metaller için Ziman ifadesi deneysel değerlerle uygun teorik sonuçlar vermesine rağmen diğer metallerde uygun sonuçlar vermemektedir. Ziman teorisi güçlü elektron-iyon etkileşimli sistemlerin uygulamalarında çoklu elektron saçılmaları nedeniyle güçlükler gösterir. Teorik direnç formülasyonun da elektronların sonlu ortalama serbest yola sahip oldukları hesaba katılmalıdır. Sonlu ortalama serbest yol ifadesini içeren ilk ifade Ferraz-March (Ferraz ve March, 1979) tarafından geliştirilmiştir. Ziman yaklaşımının birinci düzenlemesi olan Ferraz-March yaklaşımı sınırlı olsa da başarılı sonuçlar vermektedir. Morgan ve diğerleri (Morgan, Howson ve Soub, 1985; Morgan, Gilbert ve Hickey, 1985 ve Posturel ve Morgan 1987) tarafından $2k_F$ saçılmalar için geliştirilen teori büyük dirençli metaller için çok başarılı sonuçlar vermektedir. Diğer bir deyişle Ziman teorisinde integral sınırları $q=2k_F$ değerine kadar alınır. Bu integral sınırlarının $2k_F$'ye kadar alınması demek, saçılmaya gelen katkıların, dalga vektörleri Fermi küresi yüzeyinde olan elektronlardan geldiğini kabul etmek demektir. Fakat sonlu bir T sıcaklığında, bazı elektronlar Fermi yüzeyinin dışına çıkarlar ve bu durumda Fermi küresi tam dolu olmaz. Ziman denkleminde integral sınırları 0'dan $2k_F$ 'e kadar sınırlamakta ve bu elektronlardan gelen katkıları göz önüne alınmamaktadır. Diğer bir deyişle (5.5) ve (5.7) denklemlerinde ifade edildiği gibi tam

olarak keskin değildir. Ziman denklemin genelleştirme çalışması Ferraz- March (Ferraz ve March, 1979) tarafından yapılmıştır. Elde edilen özdirenç denklemi;

$$\rho = \frac{3\pi m^2 \Omega_0}{4e^2 \eta^3 k_F{}^6} \int_0^\infty S(q) V^2(q) q^3 \Gamma(q, k_F, \lambda) dq \tag{5.8}$$

şeklinde ifade edilir. Burada $\Gamma(q, k_F, \lambda)$ fonksiyonu

$$\Gamma(q, k_F, \lambda) = \frac{2}{\pi}\left[\tan^{-1}(ql) - \frac{1}{2}\tan^{-1}\left(\frac{2q\lambda}{1 + 4(k_F)^2 - (q\lambda)^2} \right) \right.$$
$$\left. - \frac{\pi}{2}\Theta\left(q - \left(\frac{1}{\lambda^2} + 4k_F{}^2 \right)^{1/2} \right) \right] \tag{5.9}$$

olarak elde edilmiştir. Ortalama serbest yol olan λ kendi içinde tutarlı olarak belirlenebilmektedir. İlk olarak denklem(5.1)'i kullanarak $\lambda = \infty$ için direnç hesaplanır.

$$\rho = \frac{\eta k_F}{ne^2 \lambda} \tag{5.10}$$

Drude bağıntısından λ ortalama serbest yol ifadesi elde edilir. Düzeltilmiş Ziman ifadesinde de S(q) yapı faktörü ve V(q) form faktörüne ihtiyaç duyulur.

Sıvı ikili alaşımlar, özellikle bileşik biçimli alaşımlar konsantrasyonunun fonksiyonu olarak bazı anormallikler göstermektedir. Bileşik biçimli konsantrasyonlar- da direnç keskin olarak yükselir. Eğer elektronik ortalama serbest yol ile atomlar arası uzaklık eşit olarak alınırsa direncin Ioffe-Regel (Mott ve Davis, 1978) limitini aştığı gözlenir. Aynı zamanda direncin sıcaklığa bağlı türevi $d\rho/dT$ negatif değerde olur.

Sıvı alaşımlar için Ferraz –March ifadesi denklem (5.7)'deki $\Theta(2k_F - q)$ ifadesi yerine $\Gamma(q, k_F, \lambda)$ ifadesi getirilerek genişletilir (Khajil, 1988).

5.2.3.Sıvı Metal ve Alaşımlar İçin Kubo İfadesi

Bununla birlikte Ziman formülünün yetersiz kaldığı noktaları ortaya koymak amacıyla literatürde lineer tepki teorisi olarak bilinen Kubo formülünden türetilen alternatif bir formül ile özdirenç değeri hesaplanmaktadır. Kubo ifadesi temel olarak yarıiletkenler için geliştirilmiştir. Daha sonra bu ifade sıvı metaller için geliştirilmiştir. Kubo ifadesinden başlayarak , ağırlık faktörlerini kapsayan $\alpha_r^{'}$ ve $\alpha_r^{''}$ integrallerinin hesaplanmasıyla şu formül türetilmiştir (Ünal,Altanhan ve Alkan,1992).

$$\mu = \frac{1}{2} eN \frac{\alpha_r^{''}}{(\alpha_r^{'})^2} \frac{1}{3} \tag{5.11}$$

Bu formül mobilite denklemi olarak bilinmektedir. Mobilite denklemi (5.11) ifadesinde α_r,

$$\Delta E' = E_{k+q} - E_k \tag{5.12}$$

olmak üzere;

$$\alpha_r(\omega) = \pi\eta \sum_{k,k',q,q'} \frac{\delta(\eta\omega - \Delta E')}{\Delta E'} \left\langle f_{k'}^{(1)} f_k^{(1)} - f_k^{(1)} f_{k'}^{(1)} \right\rangle \tag{5.13}$$

şeklinde tanımlanmıştır. $f_k^{(1)}$ ise;

$$f_k^{(1)}(q) = -jq_x s(q) V(q) a_{k+q}^{+} a_k \tag{5.14}$$

formundadır. Burada $s(q)$ yapı genliği, $V(q)$ form faktörü, a_{k+q}^{+} ve a_k sırasıyla k+q ve k vektörlerine sahip olan taşıyıcıların yaratma ve yok etme operatörleridir. Spinden gelen katkının 2 olduğunu düşünerek ve sıfırıncı dereceden eşitliklerin ortalaması yaklaşımı ile;

$$\alpha_r(\omega) = 2\pi \sum_{k,q} \eta {q_x}^2 |s(q)|^2 V^2(q) \frac{(n_k - n_{k+q})}{\Delta E'} \delta(\eta\omega - \Delta E') \qquad (5.15)$$

ifadesi elde edilir. Toplamdaki parantez içindeki ifade $\eta\omega \to 0$ ise

$$\alpha_r(\omega) = -\frac{2\pi}{3} \sum_{k,q} \eta q^2 |s(q)|^2 V^2(q) n_k' \delta(\eta\omega - \Delta E') \qquad (5.16)$$

ifadesini elde etmek için (5.15) denklemindeki ${q_x}^2$ ifadesi ile $(\frac{q^2}{3})$ ifadesi yer değiştirmiştir. Buradan $\alpha_r'(0)$ ve $\alpha_r''(0)$ ifadeleri,

$$\alpha_r' = \frac{2\pi}{3} \sum_{k,q} \eta^2 q^2 |s(q)|^2 V^2(q) n k' \delta'(\Delta E') \qquad (5.17)$$

$$\alpha_r'' = -\frac{2\pi}{3} \sum_{k,q} \eta^3 q^2 |s(q)|^2 V^2(q) n k' \delta''(\Delta E') \qquad (5.18)$$

şeklinde elde edilir.

Eğer k ve q vektörleri arasındaki açıya θ denir ve $\cos\theta = \nu$ olarak adlandırılırsa $\Delta E'$ ifadesi;

$$\Delta E' = E(k+q) - E(k) = \frac{\eta^2 k q \nu}{m} + \frac{h^2 q^2}{2m} \qquad (5.19)$$

şeklinde elde edilir.

$\Delta E' = 0$ olma şartı ν'nun $-1 \le \nu \le 0$ bölgesinde sınırlamakla sağlanabilir. Böylece $\delta'(\Delta E')$ Jakobiyen ifadesi;

$$\delta'(\Delta E') = \delta'(\frac{\eta^2 kq\nu}{m} + \frac{h^2 q^2}{2m}) \tag{5.20}$$

halini alır. $\delta'(\Delta E')$ ifadesi;

$$\delta'\{f(x)\} = \frac{1}{\{f'(x_0)\}^2}\left\{\delta'(x - x_0) + \frac{f'(x_0)}{f''(x_0)}\delta(x - x_0)\right\} \tag{5.21}$$

özdeşliği kullanılarak basit köklerine ayrılabilir. (5.20) özdeşliğindeki parantez içindeki $(\frac{\eta^2 kq\nu}{m} + \frac{h^2 q^2}{2m})$ ifadesi $f(\nu)$ olarak adlandırılır ve bu ifade sıfıra eşitlenirse, bu ifadenin basit kökü $\nu_0 = -\frac{\eta q}{2\eta k}$ şeklinde elde edilir. (5.21) özdeşliğinde $f'(\nu_0)$ bulunan ve $f''(\nu_0)$ ifadeleri $f(\nu_0)$ ifadesinin birinci ve ikinci türevleridir.

(5.21) özdeşliği kullanılarak $\nu_0 = -\frac{\eta q}{2\eta k}$ kök olmak üzere $f'(\nu_0)$ ve $f''(\nu_0)$ ifadeleriyle $f(\nu_0)$ ifadesinin değerleri yerine yazıldığında

$$\delta'(\Delta E') = \frac{m^2}{\eta^2 k^2 \eta^2 q^2}\delta'(\nu + \frac{hq}{2\eta k}) \tag{5.22}$$

şeklinde elde edilir.

İntegrasyon sırası takip edilir, gerekli dönüşümler, işlemler ve sadeleştirmeler yapılırsa α_r' ifadesi;

$$\alpha_r' = \frac{2\pi}{3}\frac{Vm^2}{4\pi^2}\sum_{k,q}\frac{n_k'}{\eta^2 k^2}\int_0^\infty d(\eta q)\eta^2 q^2 |s(q)|^2 V^2(q)$$

$$\times\left[\delta\left(\frac{\eta q}{2\eta k}\right)-\delta\left(-1+\frac{\eta q}{2\eta k}\right)\right] \tag{5.23}$$

biçiminde elde edilir.

(5.23) denkleminde $Q=\frac{\eta q}{\eta k_F}$ birim özdeşliği kullanılarak, ayrıca Ω_b birim hücre hacmi ve V toplam hücre hacmi olmak üzere S(q) statik yapı faktörü, s(q) yapı genliği arasındaki ilişkiyi belirten

$$\left|s(Q)\right|^2=\frac{\Omega_b}{V}S(Q) \tag{5.24}$$

bağıntısını hatırlayarak, $\alpha_r^{'}$ ifadesi

$$I_1=\int_0^\infty dQ\,Q^3S(Q)V^2(Q)\frac{e^{\beta E_F(Q^2/4)-\beta E_F}}{\left\{e^{\beta E_F(Q^2/4)-\beta E_F}+1\right\}^2} \tag{5.25}$$

olmak üzere;

$$\alpha_r^{'}=\frac{V\beta m^2{k_F}^4\Omega_b}{24\pi^3\eta^2}I_1 \tag{5.26}$$

şeklinde elde edilir.

$\alpha_r^{''}$ ifadesini hesaplamak için benzer işlemler yapılarak,

$$\delta''\{f(x)\}=\frac{1}{\{f'(x_0)\}^2}\left\{\delta''(x-x_0)+\frac{3f''(x_0)}{f'(x_0)}\delta(x-x_0)\right\}$$
$$+7\frac{\{f''(x_0)\}^2-f''(x_0)f'(x_0)}{\{f'(x_0)\}^2}\delta(x-x_0) \tag{5.27}$$

özdeşliği ile,

$$g(x)\delta'(x) = g(0)\delta'(x) + g'(0)\delta(x) \tag{5.28}$$

ve

$$x\delta'(x) = -\delta(x) \tag{5.29}$$

bağıntıları kullanılarak;

$$I_2 = \frac{1}{\beta E_F}\int_0^{\infty} dQ\, Q^3 S(Q)V^2(Q)\frac{e^{\beta E_F(Q^2/4)-\beta E_F}}{\left\{e^{\beta E_F(Q^2/4)-\beta E_F}+1\right\}^2} + \frac{2}{\beta E_F}\int_0^{\infty} dQ\, Q^2 S(Q)V(Q)V'(Q)\frac{e^{\beta E_F(Q^2/4)-\beta E_F}}{\left\{e^{\beta E_F(Q^2/4)-\beta E_F}+1\right\}^2} \tag{5.30}$$

olmak üzere α_r'' ifadesi;

$$\alpha_r'' = \frac{V\beta^2 m^2 {k_F}^4 \Omega_b}{24\pi^3\eta} I_2 \tag{5.31}$$

şeklinde elde edilir (Dağıstanlı,2000).

(5.17) ve (5.18) kuvvet-kuvvet korelasyon fonksiyonları ifadelerinde, $S(q)V^2(q)$ ifadesinin alaşımlar için;

$$\begin{aligned}&|V_1(q)|^2\left[c_1c_2 + {c_1}^2 S_{11}(q)\right] + \left[V_2(q)\right]^2\left[c_1c_2 + {c_2}^2 S_{22}(q)\right] \\ &+ 2V_1(q)V_2(q)c_1c_2\left[S_{12}(q)-1\right]\end{aligned} \tag{5.32}$$

ifadesiyle yer değiştirmesiyle, sıvı metaller için tanımlanan, (5.17) ve (5.18) ifadeleri

$$\alpha_r' = \frac{2\pi}{3}\sum_{k,q}\eta^2 q^2 \Big(|V_1(q)|^2\left[c_1c_2 + {c_1}^2 S_{11}(q)\right] + \left[V_2(q)\right]^2\left[c_1c_2 + {c_2}^2 S_{22}(q)\right] + 2V_1(q)V_2(q)c_1c_2\left[S_{12}(q)-1\right]\Big) nk'\delta'(\Delta E') \tag{5.33}$$

$$\alpha_r'' = -\frac{2\pi}{3}\sum_{k,q}\eta^3 q^2\Big(|V_1(q)|^2\left[c_1c_2 + c_1{}^2 S_{11}(q)\right] + \left[V_2(q)\right]^2\left[c_1c_2 + c_2{}^2 S_{22}(q)\right]$$

$$+ 2V_1(q)V_2(q)c_1c_2\left[S_{12}(q)-1\right]\Big)nk'\delta''(\Delta E') \qquad (5.34)$$

formlarına dönüşür. Böylece (5.25) ve (5.30) ifadelerinde yer alan alaşımlar için I_1;

$$I_1 = c_1\int_0^\infty dQ.Q^3 S_{22}(Q).V_2{}^2(Q)\frac{e^{\beta E_F}\left(\frac{Q^2}{4}-1\right)}{\left(e^{\beta E_F''\left(Q^2/4-1\right)}+1\right)^2}$$

$$+ 2\left[c_1c_2\right]^{1/2}\int_0^\infty dQ.Q^3.S_{12}(Q).V_2(Q).V_1(Q)\frac{e^{\beta E_F}\left(Q^2/4-1\right)}{\left(e^{\beta E_F\left(Q^2/4-1\right)}+1\right)^2}$$

$$+ c_2\int_0^\infty dQ.Q^3.S_{11}(Q).V_1{}^2(Q)\frac{e^{\beta E_F}\left(Q^2/4-1\right)}{\left(e^{\beta E_F\left(Q^2/4-1\right)}+1\right)^2} \qquad (5.35)$$

aynı şekilde I_2 ifadeside;

$$I_2 = \frac{c_1}{\beta E_F}\left\{\int_0^{\infty} dQ.Q.S_{22}(Q){V_2}^2(Q)\frac{e^{\beta E_F}\left(Q^2/4-1\right)}{\left(e^{\beta E_F\left(Q^2/4-1\right)}+1\right)^2}\right.$$

$$\left.+2\int_0^{\infty} dQ.Q^2 S_{22}(Q).V_2(Q)V_2'(Q)\frac{e^{\beta E_F}\left(Q^2/4-1\right)}{\left(e^{\beta E_F\left(Q^2/4-1\right)}+1\right)^2}\right\}$$

$$+\frac{(c_1c_2)^{1/2}}{\beta E_F}\left\{\int_0^{\infty} dQ.Q.S_{12}(Q)V_2(Q)V_1(Q)\frac{e^{\beta E_F}\left(Q^2/4-1\right)}{\left(e^{\beta E_F\left(Q^2/4-1\right)}+1\right)^2}\right.$$

$$+\int_0^{\infty} dQ.Q^2.S_{12}(Q)V_1(Q)V_2'(Q)\frac{e^{\beta E_F}\left(Q^2/4-1\right)}{\left(e^{\beta E_F\left(Q^2/4-1\right)}+1\right)^2}$$

$$\left.+\int_0^{\infty} dQ.Q^2 S_{12}(Q).V_1'(Q)V_2(Q)\frac{e^{\beta E_F}\left(Q^2/4-1\right)}{\left(e^{\beta E_F\left(Q^2/4-1\right)}+1\right)^2}\right\} \qquad (5.36)$$

şeklinde elde edilir. (5.26) ve (5.31) ifadelerinden yararlanılarak metal ve alaşımlar için direnç;

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{ne\mu} \;\Rightarrow\; \rho = \frac{6V(\alpha_r')^2}{e^2N^2\alpha_r''} \qquad (5.37)$$

şeklinde hesaplanır (Ünal, Alkan,1993).

6. SIVI METALLERİN ÖZDİRENCİNİN HESAPLANMASI

6.1.Sıvı Metaller İçin Form Faktörü

Sıvı metallerin ergime sıcaklıkları yüksek olduğundan, bu metallerin fiziksel özelliklerinin belirlenmesi için özel deney şartları gerekmektedir. Bu nedenle de bu metallerin fiziksel özelliklerinin teorik olarak hesaplanması önem taşımaktadır. Sıvı metallerin teorik olarak belirlenmesinin başlangıç noktasında uygun iyonlar arası etkileşme model potansiyelinin kurulması gerekmektedir.

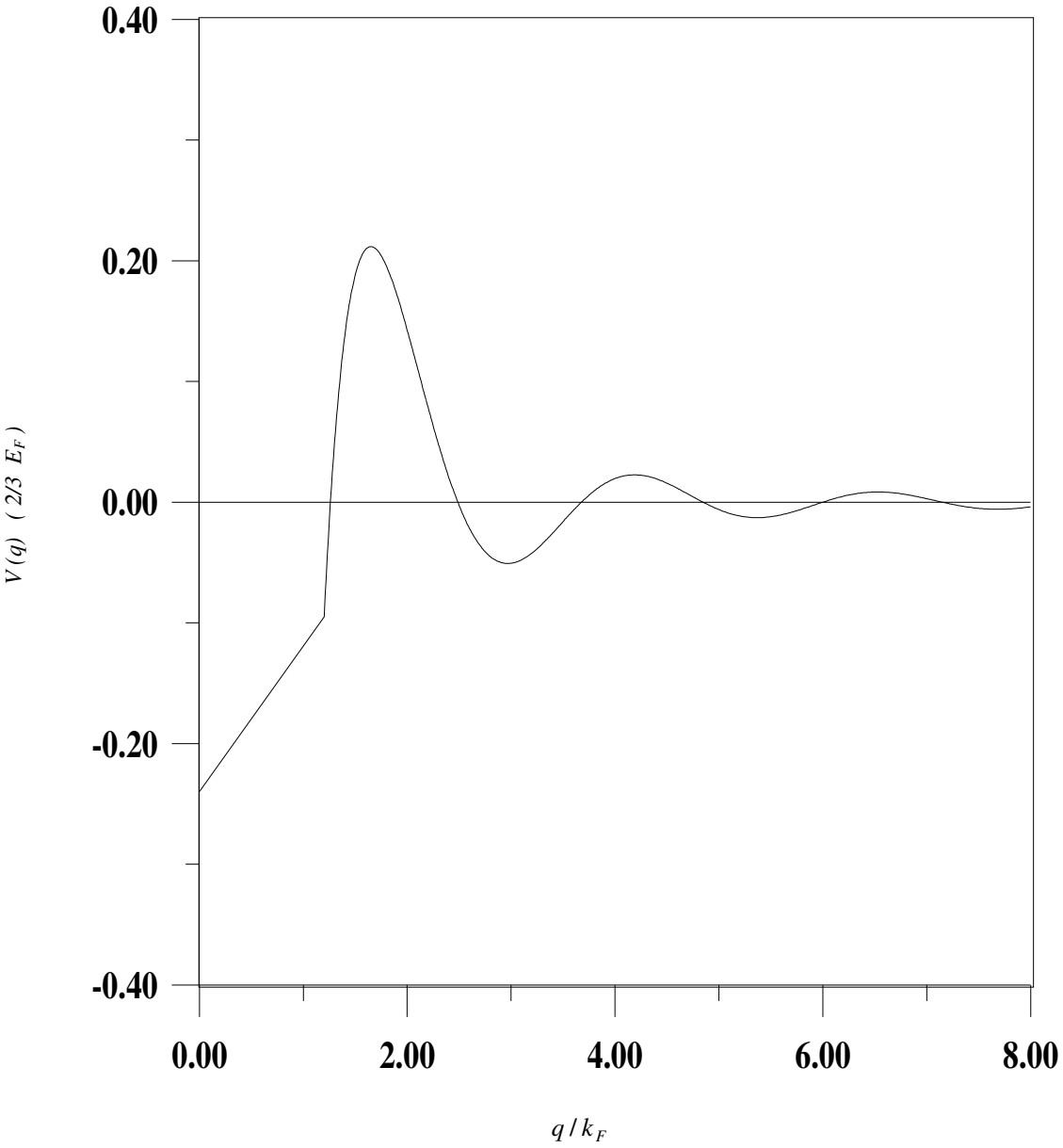
İyonlar arası etkileşme potansiyelinin Fourier transformu alındığında sıvı metaller için sanki potansiyel (form faktörü) elde edilmektedir. Bu çalışmada basit sıvı metallerin özdirençlerinin belirlenmesinde kullanılan form faktörünü Yerel Heine-Abarenkov model potansiyeliyle hesapladık.

Basit sıvı metallerin form faktörlerinin belirlenmesinde bir takım deneysel ölçümlere dayalı parametreler kullanılmaktadır. Bu parametreler Çizelge 6.1'de verilmiştir. Verilen atomik hacimler için Wang-Lai (Wang-Lai,1980) ve Jint ve diğerleri (Jint ve diğerleri, 1997) tarafından hesaplanan sonuçlar sunulmuştur. Ayrıca A_l değerleri Gschneider (Gschneider,1964) ve R_m değerleri Animalu ve Heine (Animalu ve Heine,1965) tarafından verilen parametre değerleridir.

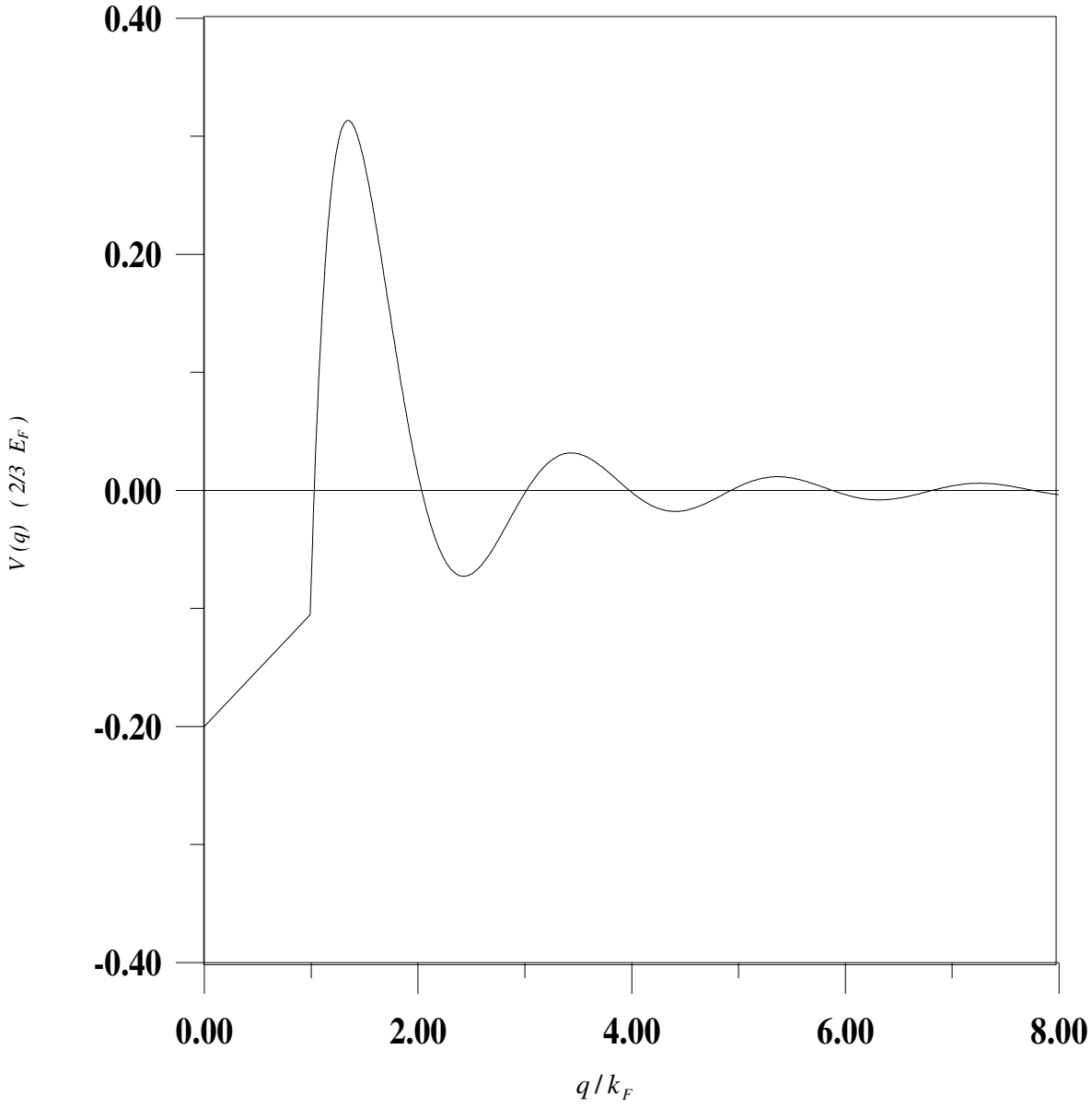
Çizelge 6.1. Sıvı metaller için giriş parametreleri

Metal	T(°K)	A_l	R_m	$\Omega_o\,(au^3)$	$\rho\,(A^{o-3})$	$r_s\,(au)$
Li	463	1.131	2.8	152	0.0442	3.27
Na	373	1.111	3.4	277	0.0243	4.04
K	373	1.072	4.2	534	0.0126	5.03
Rb	373	1.055	4.4	640	0.0105	5.34
Cs	373	1.044	4.8	854	0.0079	5.89

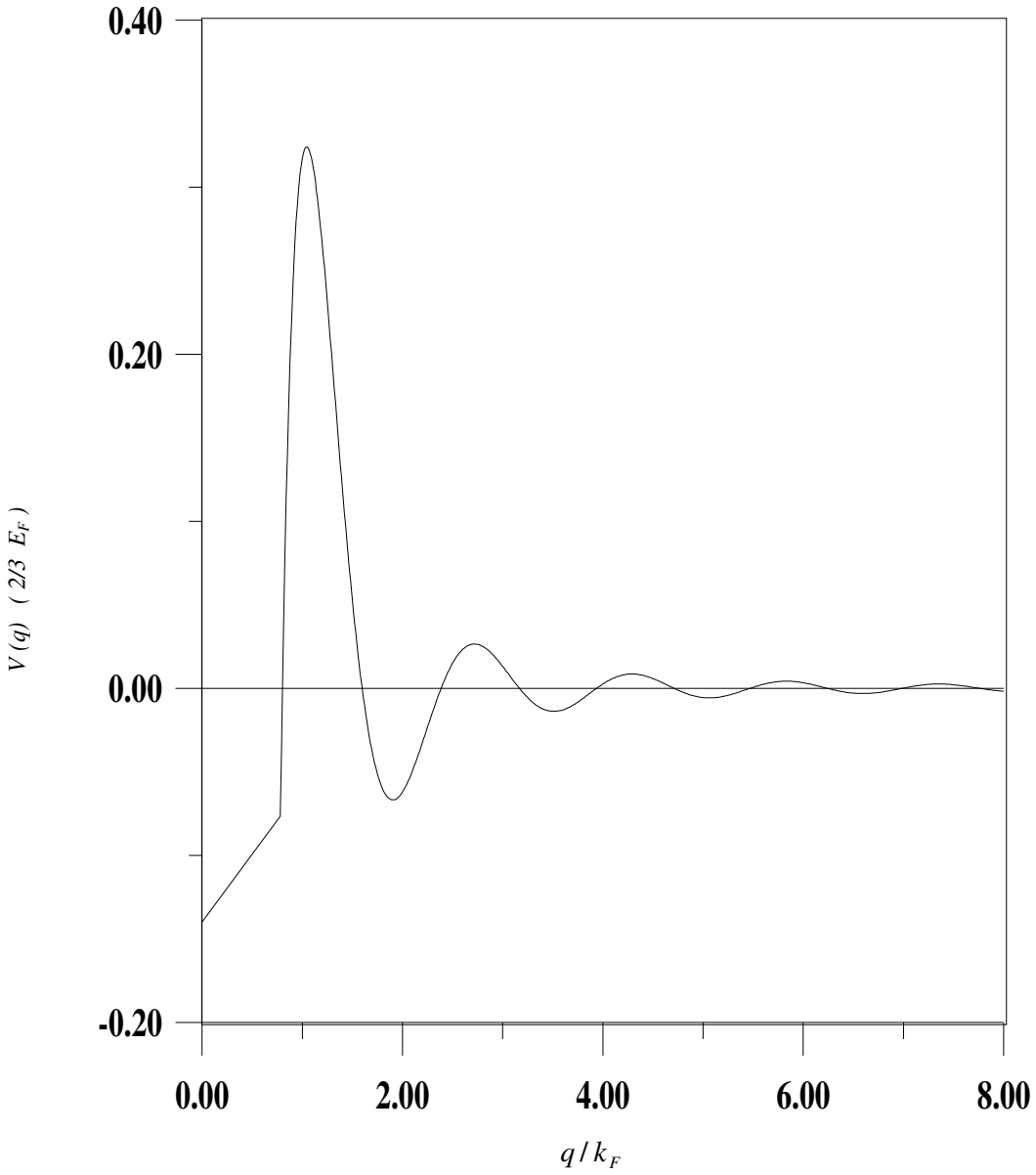
Çizelge 6.1'deki parametreleri kullanarak elde edilen sıvı Li metali için $\frac{2}{3}E_F$ ölçeğinde form faktörü eğrisinin q/k_F 'e göre değişimi Şekil 6.1'de, sıvı Na metali için Şekil 6.2'de, sıvı K metali için Şekil 6.3'de, sıvı Rb metali için Şekil 6.4'de ve sıvı Cs metali için Şekil 6.5'de gösterilmektedir. Çizilen form faktörü eğrileri karşılaştırıldığında çizdiğimiz Li, Na, K, ve Rb form faktörünün ana pikinin Khajil tarafından çizilen form faktörü eğrisinden daha büyük olduğu; Cs metalinin ise aynı değerde olduğu gözlenmiştir. Şekillerden görüldüğü gibi form faktörlerinin maksimum değerleri sıvı metallerin periyodik cetveldeki yerlerine uygun düşmektedir.



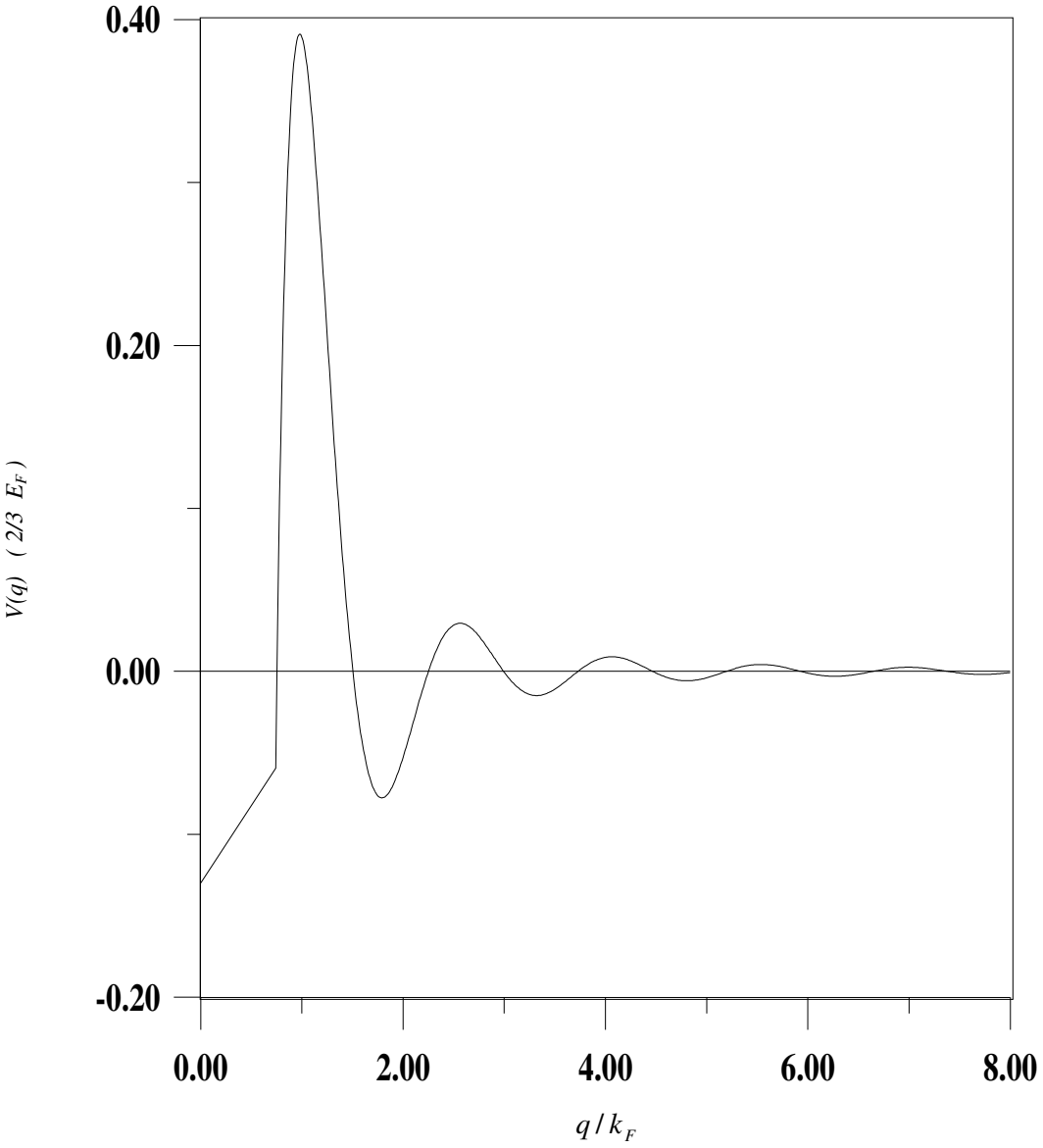
Şekil 6.1. 463 ^{o}K'de saf Li sıvı metali form faktörü



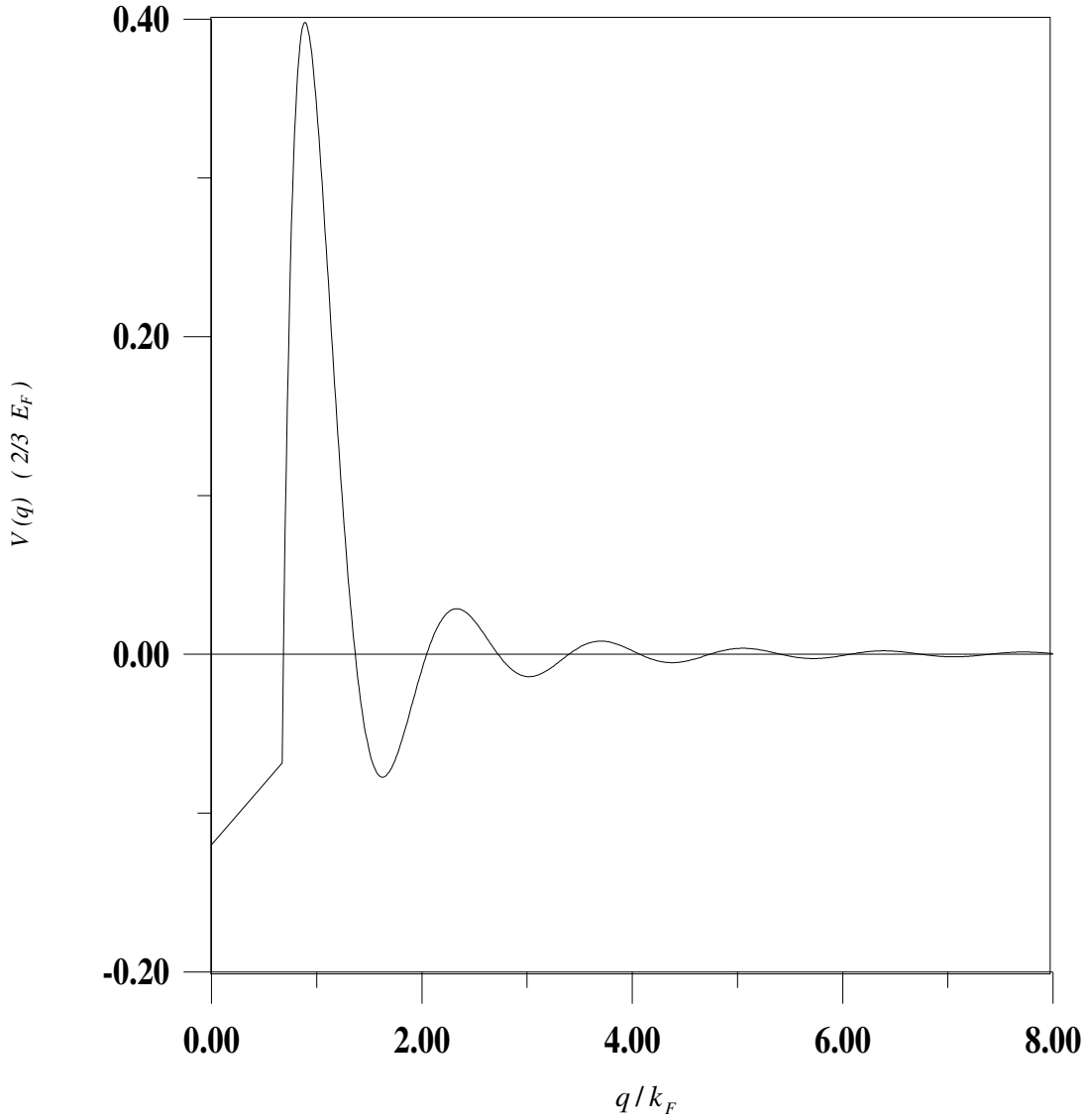
Şekil 6.2. 373 ^{o}K'de saf Na sıvı metali form faktörü



Şekil 6.3. 373 ^{o}K'de saf K sıvı metali form faktörü



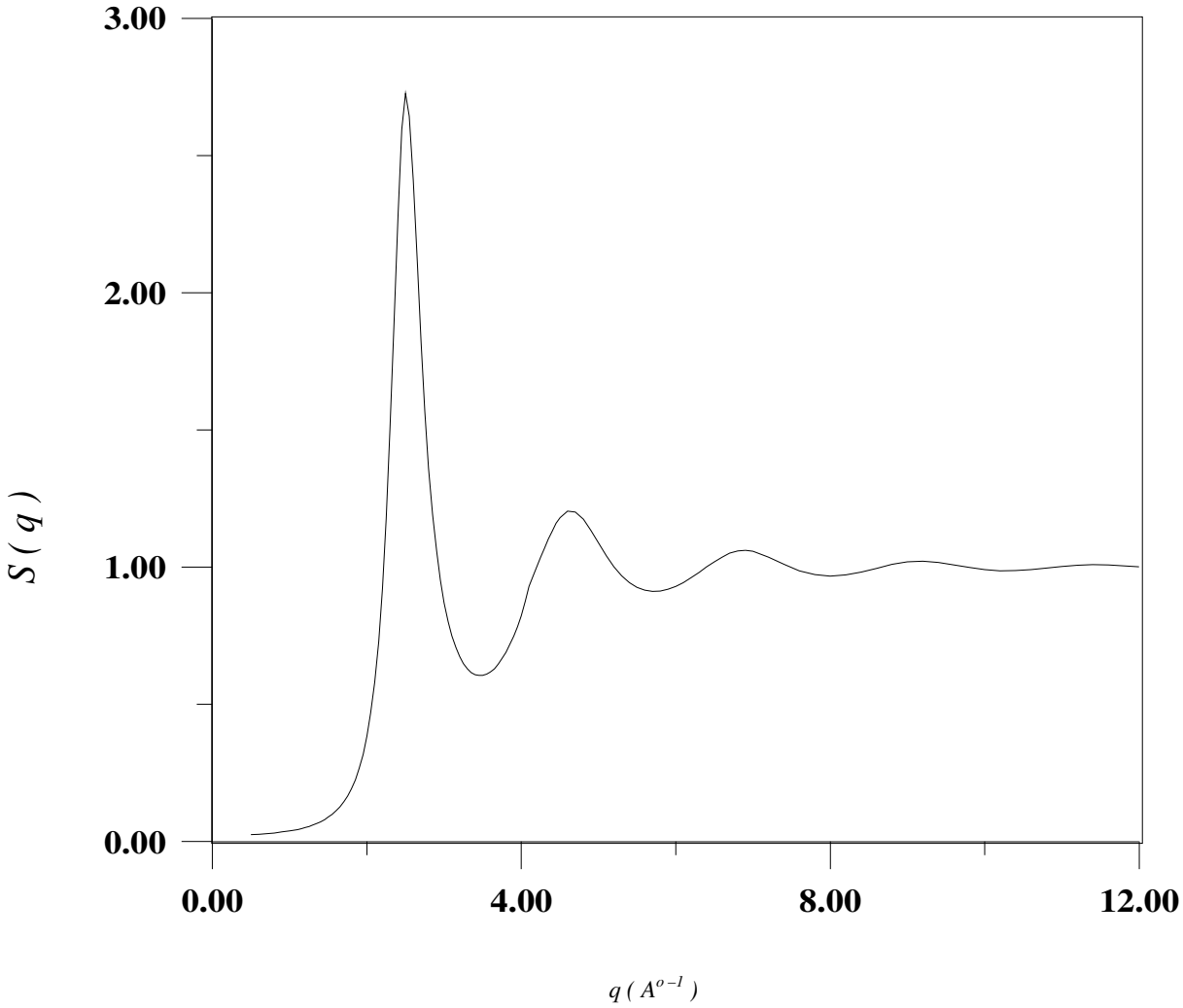
Şekil 6.4. 373 ^{o}K'de saf Rb sıvı metali form faktörü



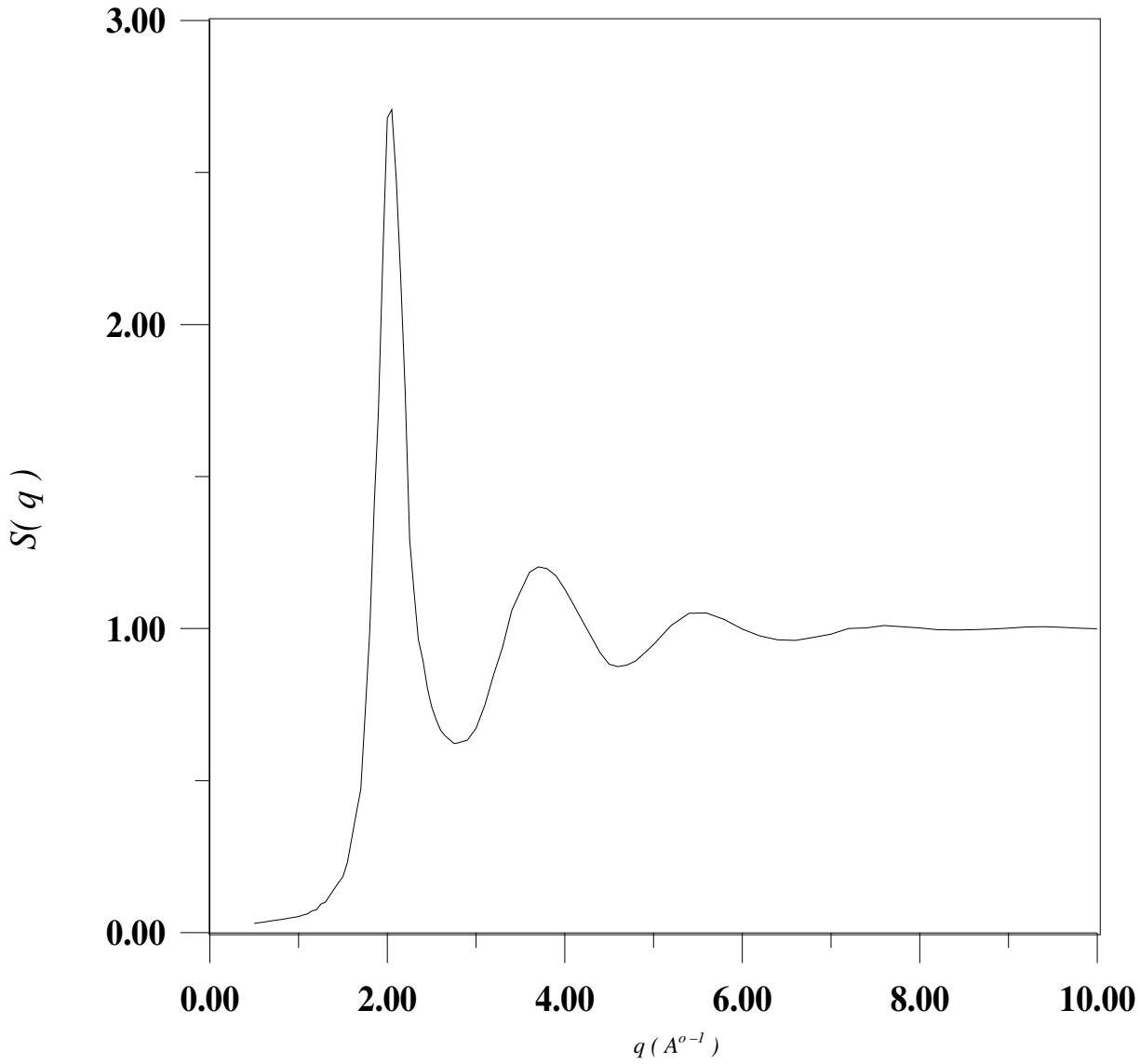
Şekil 6.5. 373 ^{o}K'de saf Cs sıvı metali form faktörü

6.2. Yapı Faktörü

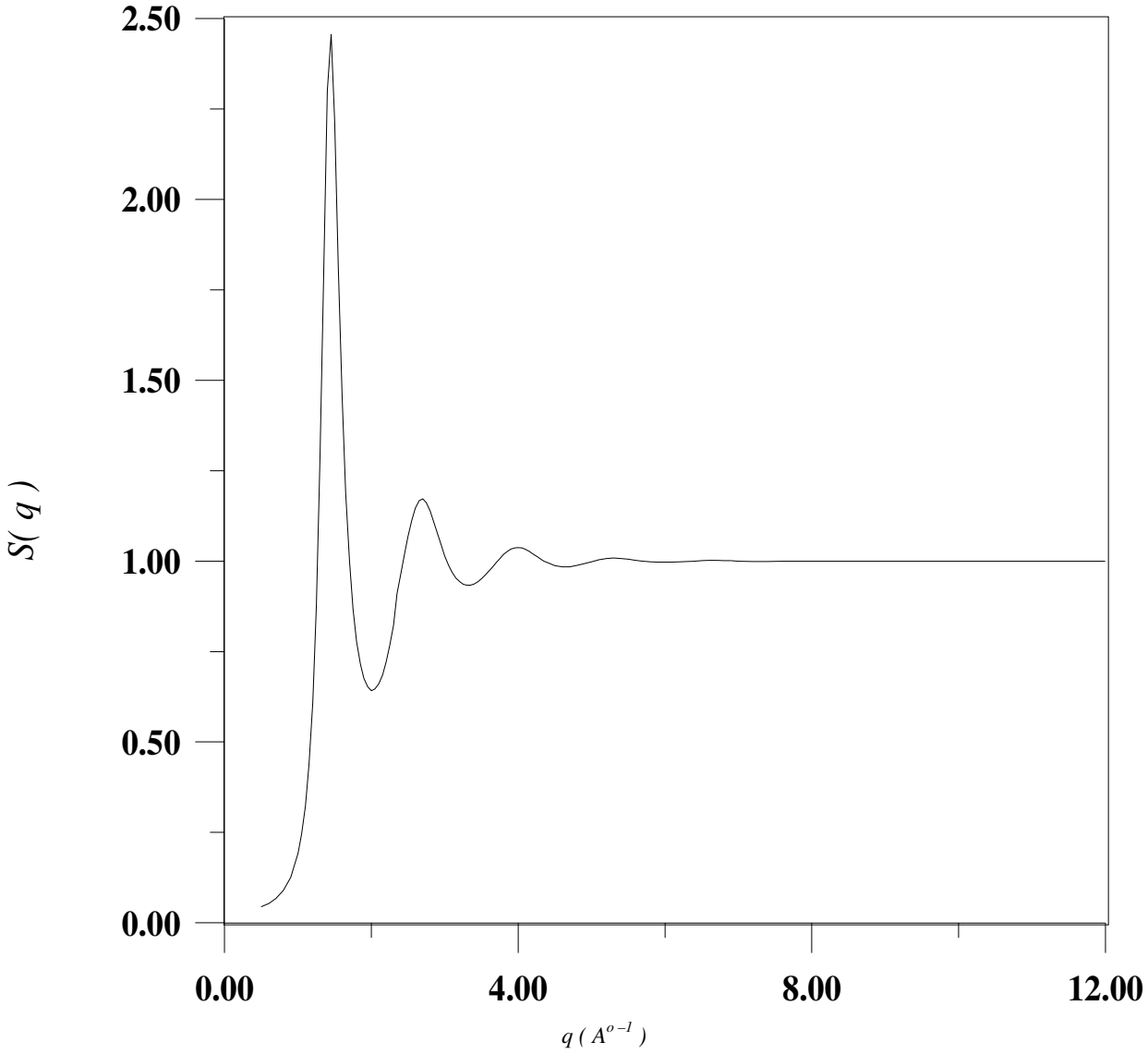
Bu bölümde özdirencin hesaplanmasında kullandığımız Li, Na ,K, Rb ve Cs sıvı metallerinin deneysel yapı faktörü eğrileri yer almaktadır (Waseda, 1980). Şekil 6.6'da sıvı Li metalinin, Şekil 6.7'da sıvı Na metalinin, Şekil 6.8'de sıvı K metalinin, Şekil 6.9'da sıvı Rb metalinin, Şekil 6.10'da sıvı Cs metalinin yapı faktörü eğrileri çizilmiştir.



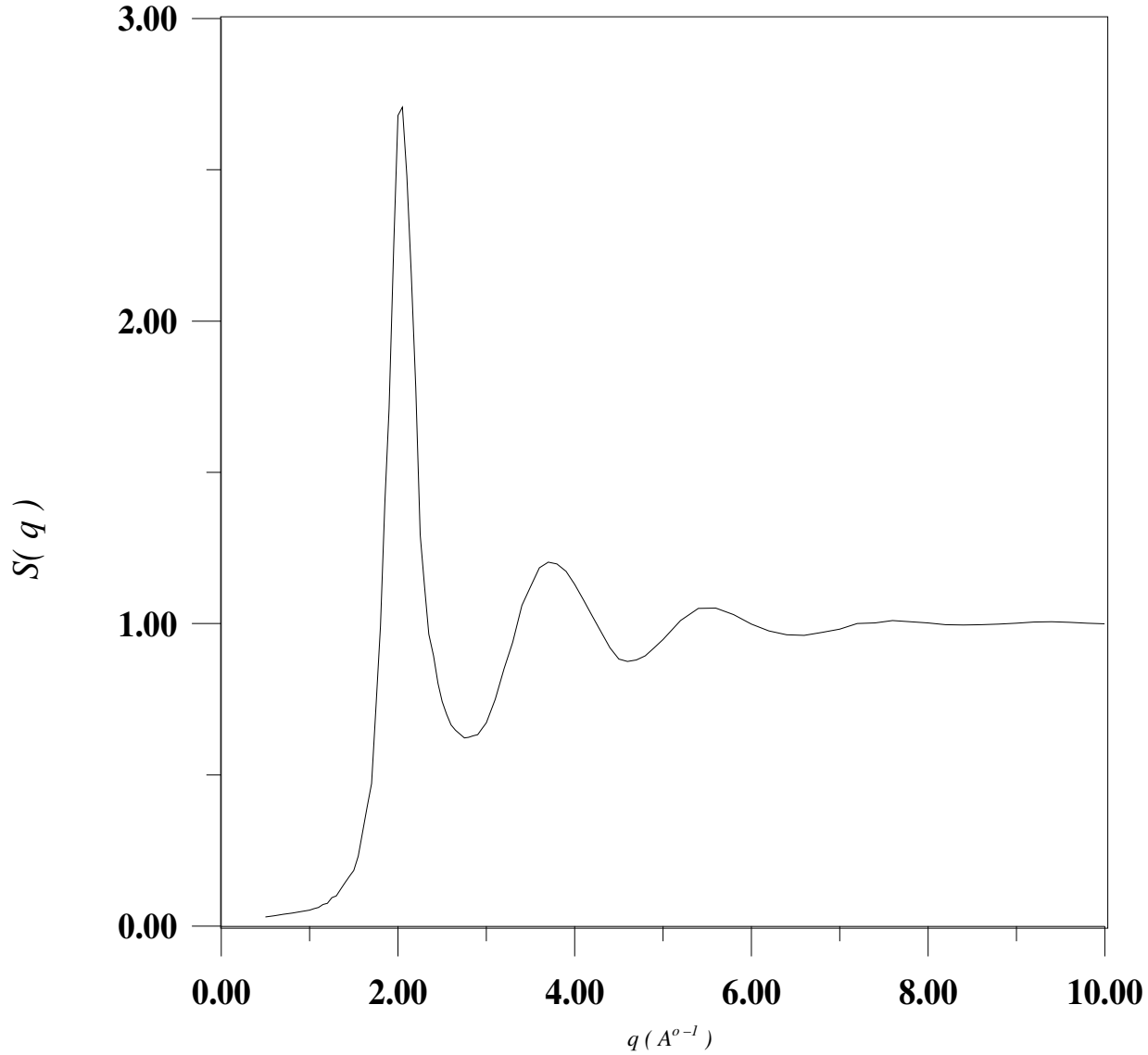
Şekil 6.6. 463 ^{o}K'de sıvı Li metali için deneysel yapı faktörü (Waseda,1980)



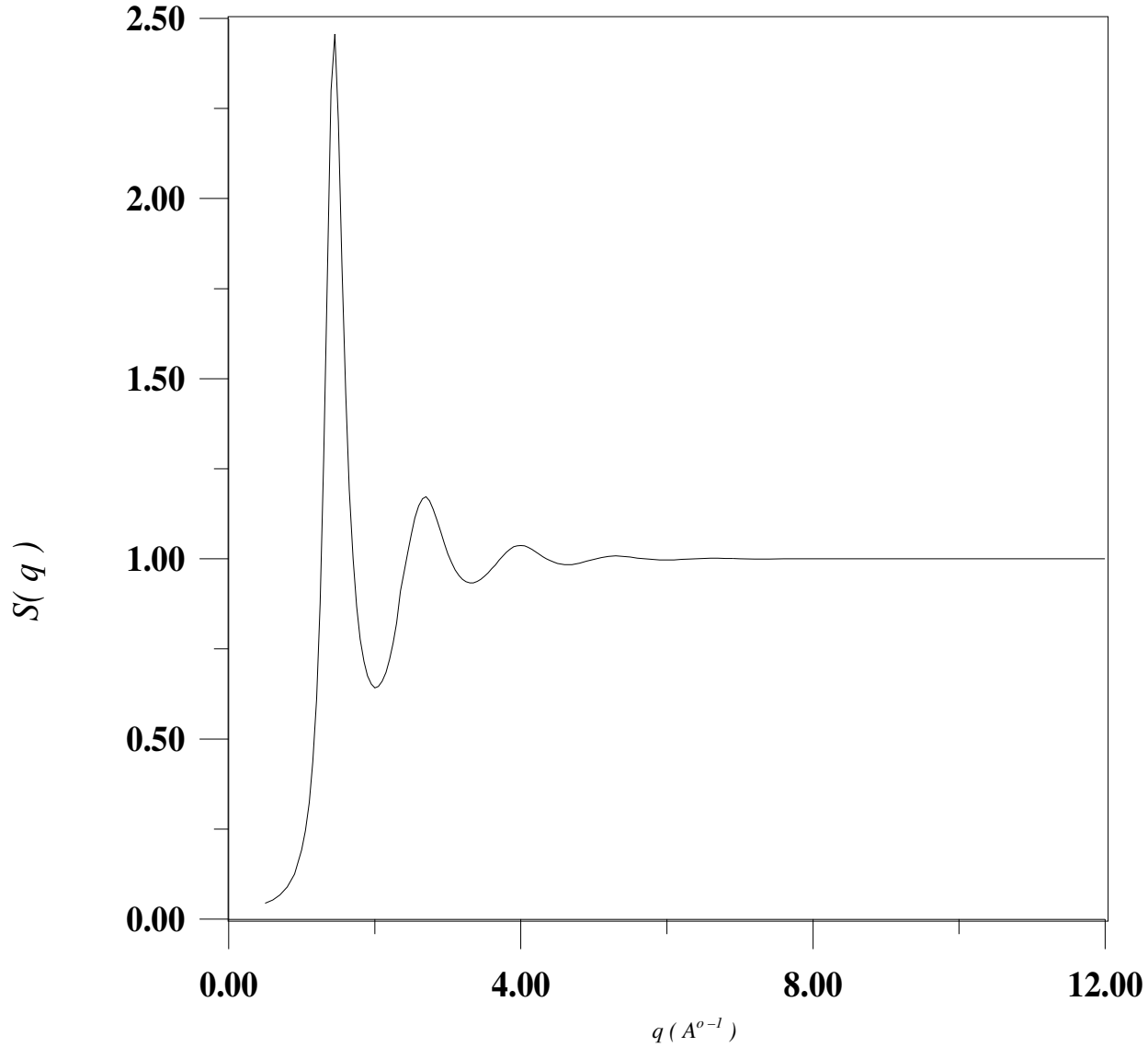
Şekil 6.7. 373 ^{o}K'de sıvı Na metali için deneysel yapı faktörü (Waseda,1980)



Şekil 6.8. 373 ^{o}K'de sıvı K metali için deneysel yapı faktörü (Waseda,1980)



Şekil 6.9. 373 ^{o}K'de sıvı Rb metali için deneysel yapı faktörü (Waseda,1980)



Şekil 6.10. 373 ^{o}K'de sıvı Cs metali için deneysel yapı faktörü (Waseda,1980)

6.3.Özdirenç Hesabı

Sıvı metallerin özdirenci Ziman formülünde denklem (5.5), düzeltilmiş Ziman formülünde denklem (5.7) ve Kubo formülünde denklem (5.37) kullanılarak hesaplanmıştır. Bu özdirenç formüllerinin her birinde Yerel Heine- Abarenkov model potansiyeliyle hesaplanan sanki-potansiyel (form faktörü) ve Waseda (Waseda,1980) tarafından elde edilen deneysel S(q) yapı faktörleri kullanılmıştır.

Bu çalışmada Li, Na, K, Rb, ve Cs sıvı metallerinin; Ziman, düzeltilmiş Ziman ve Kubo formülleri kullanılarak elde edilen özdirenç sonuçları irdelenmiştir.

Sıvı metaller için özdirenç hesabında Ziman (Ziman,1961) formülü yaygın olarak kullanılmaktadır. Bu formülden elde edilen özdirenç değerleri bölüm 5'te de belirtildiği gibi deneysel değerlerle iyi uyuşmamaktadır. Bu nedenle λortalama serbest yol ifadesinin ilave terim olarak eklendiği Ferraz-March (Ferraz-March, 1979) tarafından geliştirilen düzeltilmiş Ziman formülü kullanılarak elde edilen özdirenç değerleri deneysel özdirenç değerleri ile karşılaştırılmıştır. Elde edilen özdirenç değerlerinin deneysel değerlerle daha iyi uyum içinde olduğu görülmüştür (Khajil, 1988). Deneysel değerlerle karşılaştırmalı olarak Ziman ve düzeltilmiş Ziman özdirenç değerleri Çizelge 6.3'de yer almaktadır.

Sıvı metallerin özdirencini hesaplanmasında kullanılan ve literatürde lineer tepki teorisi olarak bilinen Kubo (Ünal, Alkan,1993) özdirenç formülüyle Ziman formülü karşılaştırılmıştır. Ziman formülüne alternatif olarak geliştirilen Kubo formülüyle elde edilen değerlerin deneysel değerlerle uyum içinde olduğu gözlenmiştir. Elde edilen özdirenç değerleri Çizelge 6.3'de gösterilmektedir.

Kubo özdirenç formülünün hesaplanmasında kullanılan ve bölüm 5'te belirtilen ifade edilen I_1, I_2 ve βE_F'nin değerleri sıvı Li, Na, K, Rb ve Cs metalleri için Çizelge 6.2'de gösterilmektedir.

Çizelge 6.2. Sıvı metallerin Kubo özdirenç denkleminde kullanılan βE_F ve I_1, I_2 integral ifadelerinin sayısal değerleri.

Metal	T (°K)	βE_F	I_1	I_2
Li	463	116	2.53×10^{-5}	2.80×10^{-7}
Na	373	57	2.25×10^{-6}	3.98×10^{-8}
K	373	58	1.57×10^{-6}	2.69×10^{-8}
Rb	373	49	2.58×10^{-6}	4.87×10^{-8}
Cs	373	117	1.31×10^{-6}	1.22×10^{-8}

Çizelge 6.3'e bakıldığında Li, Na, K, Rb ve Cs sıvı metallerinin Ziman formülünü kullanarak hesaplanan özdirenç değerlerinin deneysel değerlerle iyi uyuşmadığı; aynı metaller için λ ortalama serbest yol ek terimin ilave edildiği düzeltilmiş Ziman formülüyle hesaplanan özdirenç değerlerinin ise deneysel değerlere yaklaştığı gözlenmiştir. Li, Na, K, Rb ve Cs sıvı metallerinin Kubo formülü kullanılarak hesaplanan özdirenç değerleri ise deneysel değerlerle çok daha uyumludur.

Çizelge 6.3. Sıvı metallerin ℓ ortalama serbest yol, ρ_Z Ziman ve ρ_{DZ} Düzeltilmiş-Ziman ve ρ_K Kubo özdirençleri ile deneysel değerleri

Metal	T (°K)	$\lambda(au)$	$\rho_Z(\mu\Omega.cm)$	$\rho_{DZ}(\mu\Omega.cm)$	$\rho_K(\mu\Omega.cm)$	ρ(exp.)
Li	463	84	23.39	24.75	23.91	24.0
Na	373	375	7.65	8.59	9.53	9.6
K	373	378	11.20	11.69	12.71	13.0
Rb	373	210	21.40	22.30	21.60	22.0
Cs	373	161	33.45	35.23	35.90	36.0

SONUÇ VE TARTIŞMA

Sıvı metal ve alaşımların özdirencinin hesabında temel olarak iki formülasyon kullanılmaktadır. Bunlar Ziman ve Kubo formülasyonlarıdır. Her iki yaklaşımda da sıvı metal alaşımlarının özdirencinin hesabında iyonlar arası etkileşme potansiyelini temsil eden sanki potansiyel (form faktörü) ve statik yapı faktörü kullanılmaktadır.

Sıvı metal ve alaşımların özdirenç hesabında klasik formülasyon Ziman (Ziman, 1961) formülüdür (alaşımlar için Faber-Ziman formülü). Yapılan çalışmalarda Ziman formülünün bir takım yetersizlikleri görülerek Ferraz-March (Ferraz, March, 1979) tarafından $2k_F$'in dışındaki elektronların etkileşimlerinin de özdirence katkılarının göz önüne alan Ziman formülü geliştirilmiştir. Daha sonraki yıllarda sıvı metal ve alaşımların özdirenç hesabında literatürde lineer tepki teorisi olarak bilinen Kubo formülü Ünal ve diğerleri (Ünal, Altanhan, ve Alkan, 1992) tarafından geliştirilerek kullanılmıştır.

Bu çalışmada basit sıvı metallerin özdirençleri her üç formülasyonda kullanılarak hesaplanmıştır. Sıvı metallerin iyonlar arası etkileşme potansiyeli hesabında bir çok sanki potansiyel modeli kullanılmaktadır. Bizim yaptığımız çalışmada yerel Heine-Abarenkov model potansiyeli kullanılmıştır.

Ayrıca bu çalışmada sıvı metallerin özdirenç hesabında Waseda (Waseda,1980) tarafından verilen deneysel yapı faktörleri kullanılmıştır. Elde edilen basit sıvı metallerin özdirenç değerleri deneysel ve diğer teorik hesaplamalarla kıyaslanmıştır.

Ziman formülü kullanılarak elde edilen özdirenç değerleri deneysel değerlerle kıyaslandığında nispeten yakın değerler olmakla birlikte, bu değerlerin deneysel değerlerle tam olarak uyuştuğu söylenemez. Ziman formülünde Ashcroft boş kor (küre) model potansiyeli ve Percus-Yevick yaklaşımıyla elde ettiği yapı faktörlerini kullanarak Khajil (Khajil,1988) tarafından hesaplanan özdirenç değerleriyle kıyaslandığında elde ettiğimiz

özdirenç değerlerinin her beş metalde de deneysel değerlerle daha yakın değerler olduğu görülmüştür. Ziman formülüyle özdirenç hesabında elde ettiğimiz özdirenç değerlerinin Khajil tarafından hesaplanan değerlerden daha iyi çıkmasının sebebi; kullanılan model potansiyelden kaynaklanabileceği gibi yapı faktöründen de kaynaklanabileceği düşünülmektedir.

Düzeltilmiş Ziman olarak da bilinen Ferraz-March tarafından Ziman formülüne l ortalama serbest yol düzeltme teriminin ilave edildiği formül kullanılarak hesaplanan özdirenç değerleri tam olmamakla beraber deneysel değerlere daha yakın değerler vermiştir. Düzeltilmiş Ziman formülünde Ashcroft boş kor model potansiyeli ve Percus-Yevick yaklaşımıyla elde ettiği yapı faktörlerini kullanarak Khajil (Khajil,1988) tarafından hesaplanan özdirenç değerleriyle kıyaslandığında düzeltme terimi getirilerek hesaplanan özdirenç değerleri deneysel değerlerle tam olarak uyuşmaktadır. Düzeltilmiş Ziman formülüyle özdirenç hesabında Khajil tarafından hesaplanan özdirenç değerlerinin elde ettiğimiz özdirenç değerlerinden daha iyi çıkmasının sebebi; seçilen model potansiyelden kaynaklanabileceği düşünülmektedir.

Özdirencin sıcaklıkla değişiminin ve $2k_F$'in dışındaki elektronların etkileşimlerinin özdirence katkılarını göz önüne almadığından dolayı Ziman formülüne alternatif olarak geliştirilen ve literatürde lineer tepki teorisi olarak bilinen Kubo özdirenç formülü kullanılarak hesaplanan özdirenç değerleri deneysel değerlerle çok daha fazla uyuşmaktadır. Kubo formülünde Yerel Heine-Abarenkov model potansiyeli ve Percus-Yevick yaklaşımıyla elde ettiği yapı faktörlerini kullanarak; sıvı Na ve K metalleri için Dağıstanlı (Dağıstanlı,2000) tarafından, sıvı Rb metali için Alkan ve diğerleri (Alkan, Karabulut ve Ünal, 2002) tarafından hesaplanan özdirenç değerleriyle kıyaslandığında elde ettiğimiz özdirenç değerlerinin üç metalde de deneysel değerlerle daha uyumlu olduğu görülmüştür. Kubo formülüyle elde ettiğimiz özdirenç değerlerinin Dağıstanlı; Alkan ve diğerleri tarafından hesaplanan değerlerden daha uyumlu çıkmasının sebebi ancak kullanılan yapı faktöründen kaynaklanabileceği düşünülmektedir. Zira yapılan çalışmalarda aynı model potansiyel kullanılmıştır.

Elde ettiğimiz sonuçlara göre; Ziman formülüyle elde edilen özdirenç değerlerinin deneysel değerlere daha az uyumlu, $2k_F$'in dışındaki elektronların etkileşimlerinin göz önüne

alındığı düzeltilmiş Ziman formülüyle elde edilen özdirenç değerlerinin deneysel değerlere biraz daha uyumlu, hem $2k_F$'in dışındaki elektronların etkileşimlerinin göz önüne alındığı hem de özdirencin sıcaklığa doğrudan bağlı olduğu Kubo formülüyle elde edilen özdirenç değerlerinin ise deneysel değerlere çok daha uyumlu olduğu görülmüştür.

Hesaplanan özdirenç değerlerinin deneysel değerlerden bir miktarda olsa sapmaları seçilen model potansiyelden kaynaklanabileceği düşünülmektedir. Bu nedenle farklı model potansiyellerden hareketle özdirenç değerlerinin hesaplanarak deneysel değerlerle karşılaştırılmasının uygun olacağını düşünmekteyiz. Özdirenç hesabında deneysel yapı faktörlerinin kullanmış olmakla beraber sıvı metallerin statik yapı faktörleri teorik olarak da belirlenmelidir.

Ayrıca basit sıvı metallerin özdirencinin hesabında kullandığımız farklı özdirenç formüllerinin basit sıvı metallerinin alaşımlarına ve sıvı geçiş metalleri ve alaşımlarına da uygulanabileceğini düşünmekteyiz

KAYNAKLAR DİZİNİ

Alkan,B., Karabulut, R. ve Ünal, B., 2002, Acta Physica Polonica A,102, 385-400

Ashcroft, N. W. , 1966, Phys.Lett., 23, 48; J.Phys.C.2,232

Ashcroft, N. W. ve Langreth, D. C.,1967, Phys. Review, 156, 685

Ashroft, N. W. ve Langreth, D. C., 1967b, Phys. Review, 159, 500-510

Austine, B. J., Heine, V. ve Sham L. J., 1962, Phys.Review, 127, 276-282

Bassani, F. ve Celi, V., 1961, J.Phys.Chem. Solids, 20,64-75

Born, M. ve Green, H. S., 1946, Proc.Roy. Soc. A., 188, 10

Cohen, M.H. ve Heine, V., 1961, Phys. Rev. 122,1821

Dağıstanlı, H., 2000, Sıvı Metallerde ve Alaşımlarda Elektriksel Özdirencin Korrelasyon Fonksiyonu Yöntemiyle Hesaplanması, Yüksek Lisans Tezi, Ankara Üni., Ankara

Faber, T.E., 1972, An Indroduction to The Theory of Liquid Metalls, Cambridge University Press., London, 587

Faber, T. E. ve Ziman, J. M., 1965, Phyl. Mag., 11, 53

Ferraz, A. ve March, N. H., 1979, Phys. Chem. Liquid, 8, 271

Geldart, D.J.W. ve Vosko, S.H., 1966, Con. J. Phys., 44, 2137

Gschneider, K.,1964, Solid State Physics,Academic, New York

Güler, Ş., 2004 Bazı Sıvı Metallerin Elektronik Taşınım Özellikleri, Yüksek Lisans Tezi, OGU, Eskişehir

Hafner, J., 1976, J. Phys. F: Metal Phys., 6, 1243, 57

Hafner, J., 1977, Phys. Rev. A16, 651, 64

Hafner, J. ve Schmuch, P., 1974, Phys. Rev., B9, 4138

Harrison, W. A., 1958, Phys. Review, 110, 14-25

Harrison, W. A., 1965, Pseudopotantial in the Theory of Metals, Benjamin, New York, 335

Heine, V. ve Abarenkov, I., 1964, Phil. Mag., 9, 451, 65

Herring, C., 1940, Phys. Review, 57, 1169-1177

Hubbart, J., 1957, Proc. R. Soc., A240, 539, A243,356

Ichimaru, S. ve Utsumi, K., 1981, Phys. Rev. B24, 7385

KAYNAKLAR EK – 1

Jacucci, G. ve Taylor, R. ,1981, J. Phys. F11, 787

Jint K. Lut, Z. H., Hut, Z. Q. ve Liut,H. B., 1997, J.Phys: Condens. Matter 9, 1393, 1406

Khajil, T.M.A., 1988, The Transport and Termodynamical Properties of Liquid Metals, A Doctor of Philosophy Thesis in Physisc, METU, Ankara

March, N. H., 1968, Liquid Metals Academic Press, London, 391

Mott, N.F. ve Davis, E. A, 1979, Electronic Processes in Non- Ctystalline Materials, Oxford, Press.

Nozieres, P. ve Pines, D., 1958, Phys. Rev., 111, 442

Phillips, J.C. ve Kleinman, K., 1959, Phys. Rev. ,116,287,880

Pick, R. ve Sarma, G., 1964, Phys. Review ,135, A1363-A1371

Sham, L. J., 1965, Proc.R. Soc., A283, 33

Shimoji, M.,1977, Liquid Metals, Academic Press., London, 391

Singh [a] , R. N., R. P. Jaju [b] , R. P. ve Ali [a.*] , I., 2001, Physica, B 229, 108, 119

Singwi, K. S., Sjölander, A., Tosi M. P. ve Land, R. H., 1970, Phys.Rev., B1, 1044, 53

Thiele, E., 1963, J.Chem. Phys., 39, 474

Ünal, B., Altanhan, T. ve Alkan, B., 1992, Progree of Theoretical Physics, 88, 485-502

Ünal, B. ve Alkan, B., 1993, J. Phys. Soc. Japan, 67, 2425-2430

Van Leeuven, J.M. ve Groeneveld, J. ve de Boer, J., 1959, Physica, Vol 25,792

Vashishta, P. ve Singwi, K. S., 1972, Phys. Rev., B6, 875, 87

Wang, S. and Lai, S. K., 1980, J. Phys. F: Metal Phys. 10, 2717, 37

Waseda, Y., 1980, The Strucutre of Non Crystalline Meterials, Mc. Graw Hill, New York, 326

Wertheim, M.S., 1963, Phys. Review, 10, 321

Yazar, Ü. Ü. N., 2002, Bazı Sıvı Geçiş Metal ve Alaşımlarının Yapısı ve Atomik Taşımın Özellikleri, Yüksek Lisans Tezi, OGÜ, Eskişehir

Ziman, J. M., 1961, Phil.Mag., b,1013

Ziman, J. M., 1967, Proc. Phys. Soc., 91,701