



İSTANBUL ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

YÜKSEK LİSANS

**SIVI YARI İLETKENLERİN YAPISAL VE ELEKTRONİK
TRANSPORT ÖZELLİKLERİ**

Fizikçi Sevilay UÇAR
Fizik Anabilim Dalı
Genel Fizik Programı

Danışman
Prof.Dr. Turgay ARMAĞAN

Haziran, 2007

İSTANBUL

ÖNSÖZ

Öncelikle Lisans ve Yüksek Lisans öğrenimim sırasında ve tez çalışmalarım boyunca gösterdiği her türlü destek ve yardımdan dolayı beni yönlendiren, gerekli ilgi ve desteği gösteren değerli hocam Sayın Prof. Dr. Turgay ARMAĞAN' a teşekkürlerimi sunarım.

Yine çalışmamın her aşamasında değerli yardım ve bilgilerinden faydalanıp, teşvik ve desteğini gördüğüm değerli hocam Yrd. Doç. Dr. Zeynep Çiçek ÖNEM' e teşekkür ederim.

Bu tez çalışması boyunca yardımlarını ve desteklerini esirgemeyen arkadaşlarım sevgili Sinem Han BAL, Melek ULUTÜRK, Umut CAN, Araş. Gör. G. Çiğdem YALÇIN ve Umut ALTIN' a yanımda oldukları ve arkadaşlıkları için çok teşekkür ederim.

Son olarak, hayatım boyunca bana gösterdikleri özveri, sabır ve desteklerinden dolayı canım annem Vahide UÇAR' a, babam Tahir UÇAR'a, ablam Serap UÇAR ve kardeşim Kubilay UÇAR' a sonsuz teşekkür ederim.

Haziran,2007

Sevilay UÇAR

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ	i
İÇİNDEKİLER	ii
ŞEKİL LİSTESİ	iii
TABLO LİSTESİ	iv
SEMBOL LİSTESİ	v
ÖZET	vi
SUMMARY	vii
1. GİRİŞ	1
2. GENEL KISIMLAR	3
2.1. Ergimiş Silisyumun Fiziksel Ve Kimyasal Özellikleri	3
2.2. Yüklü Katı Küre Yaklaşımı ile Sıvı Yarı İletken Metallerin Yapı Faktörlerinin Belirlenmesi.....	8
2.2.1. Palmer- Weeks Yöntemi.....	8
2.2.2. Parrinello Yöntemi.....	12
2.3. Dielektrik Fonksiyonu ve Statik Bölgesel Alan Faktörü.....	15
2.3.1. Utsumi-Ichimarü Modeli.....	18
2.3.2. Sarkar modeli.....	19
2.3.3. OB-VS ve OB-IU Modeli.....	21
3. MALZEME VE YÖNTEM.....	24
3.1. İyonlar Arası Potansiyeller.....	24
3.2. Pseudo Potansiyeller Yöntemler.....	26
3.1.1. Heine – Abarenkov Model Potansiyeli.....	27
3.1.2. Ashcroft Model Potansiyeli.....	28
3.1.3. Jivani-Gajjar-Jani Model Potansiyeli.....	28
3.1.4. Bachalet, Hamann Ve Schlüter (BHS) Model Potansiyeli.....	30
3.3. Sıvı Yarı İletkenlerin Transport Özellikleri.....	35
3.1. Elektriksel Öz direnç.....	35
3.2. Termoelektrik Güç.....	36
4. BULGULAR.....	38

5. TARTIŞMA VE SONUÇLAR.....	45
KAYNAKLAR.....	49
EKLER.....	52
Ek A.....	52
Ek B.....	53
ÖZGEÇMİŞ.....	54

TABLO LİSTESİ

Tablo 2.1	: OB-VS ifadesi içinde $1 \leq r_s \leq 3$ ve $3 \leq r_s \leq 5$ aralığında $D_n(r_s)$ 'in değerleri.....	23
Tablo 2.2	: OB-IU ifadesinde $1 \leq r_s \leq 5$ aralığında $D_n(r_s)$ 'in değerleri.....	23
Tablo 3.1	: Ergimiş silisyum için (3.3.4) denklemi ile hesaplanan faz kaymaları...	36
Tablo 5.1	: Sıvı geçiş metalleri için kendi erime noktası civarında hesaplanan elektriksel dirençlerin deneysel sonuçla karşılaştırılması.....	46
Tablo 5.2	: η paketleme kesrinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması.....	46
Tablo B	: Silisyum saf metali için pseudopotansiyel parametreler.....	54

ŞEKİL LİSTESİ

Şekil 2.1	: Elmasın kristal yapısı	4
Şekil 2.3.1	: Silisyum için $G(q)$ fonksiyonunun üç modele göre çizimi.....	22
Şekil 3.1	: Drude Modeline göre yüksüz atomun yapısı potansiyeli	25
Şekil 3.2	: Heine ve Abarenkov un model	26
Şekil 4.1	: Sarkar Modeline göre $F_N(q)$ fonksiyonu.....	39
Şekil 4.2	: OB-VS Modeline göre $F_N(q)$ fonksiyonu.....	40
Şekil 4.3	:OB-IU Modeline göre $F_N(q)$ fonksiyonu.....	41
Şekil 4.4	:T=1733 ⁰ K Jivani-Gajjar-Jani Modeline göre potansiyelin çizimi.....	42
Şekil 4.5	: T=1733 ⁰ K Jivani-Gajjar-Jani Modeline $S(q)$ yapı sabitinin q ya göre değişimi	43
Şekil 4.6	: T=1733 ⁰ K BHS Modeline $S(q)$ yapı sabitinin q ya göre değişimi ...	44

SEMBOL LİSTESİ

σ	:	Katı Küre Çapı
$C_0(x)$	:	Direkt Korelasyon Fonksiyonu
ρ_i	:	Sistemin İyonik Sayısal Yoğunluğunu
η	:	Paketleme Kesri
γ	:	İyon-İyon Kuplaj Şiddeti
k_β	:	Boltzmann Sabiti
ϵ_0	:	Sistemin Dielektrik Sabiti
$S_0(q)$	:	Referans Yapı Faktörü
$S(q)$	:	Statik Yapı Faktörü
$\tilde{u}_{sc}(q)$	:	Fourier Uzayında indirekt Etkileşme Terimi
$F_N(q)$	:	Normalize Edilmiş Enerji Dalga Sayısına Bağlı Fonksiyon
$h(r)$	:	Toplam Korelasyon Fonksiyonu
$c(r)$	:	Doğrudan Korelasyon Fonksiyonu
$Q(q)$	:	Korelasyon Faktörü olan Baxter Matrisi
Γ	:	Plazma Parametresi
$\epsilon_H(q)$	:	Durgun Hatree Dielektrik Fonksiyonu
$g(r)$	:	Radyal Dağılım Fonksiyonu
r_s	:	Wigner-Seitz Yarıçapı
$E_{xc}(\rho_e)$	:	Takas-Korelasyon Enerjisi
$G(q)$	:	Bölgesel Alan Düzeltme Fonksiyonu
$\chi(q)$	:	Statik Yoğunluk-Yoğunluk Tepki Fonksiyonu
q_F	:	Fermi Dalga Vektörü
$I_1(z)$	:	Birinci Dereceden Modifiye Bessel Fonksiyonu
$Z(\eta)$	:	Linhard Fonksiyonu
$D_n(r_s)$	:	Açılım Yoğunluğuna Bağlı Katsayılar
$V(r)$	:	Atomlar Arası Potansiyel
$V_d(r)$	:	Direkt Etkileşme Potansiyeli
$V_{ind}(r)$	:	Dolaylı Etkileşme Potansiyel
V_l^{so}	:	Açısal Momentuma Bağlı Spin Orbit Etkileşmelerinden Kaynaklanan Potansiyel
$\hat{V}_l^{ion}(r)$	:	Açısal Momentuma Bağlı İyonlar Arası Potansiyel
$\hat{V}_{core}(r)$	:	Kor Potansiyeli
$w_q^0(k)$	:	Form Faktör
K	:	Gelen Dalga Vektörü
q	:	Transfer Olan Dalga Vektörü

Ω_0	:	Atomik Hacim
$w_b(r)$	:	Model Potansiyel
R_M	:	Model Potansiyel Modeline Göre Yarıçap
R_c	:	Boş Kor Yarıçapı
$A_l(E)$	:	Potansiyel Kuyusu Derinliği
P_l	:	Legendre Polinomu
j_l	:	Bessel Fonksiyonu
α_i	:	Bozulma Sabiti
$N_{FE}(E_F)$	:	Serbest Elektronlar İçin Durum Yoğunluğu
V_F	:	Fermi Hızı
$w(\vec{q})$	:	Perdelenmiş Model Potansiyel Matris Elemanı
$\rho(E)$	:	Elektriksel Özdirenç
Q	:	Termoelektrik Güç

ÖZET

Bu çalışmada, ergime noktası yakınlarında, silisyumun yapısal, elektriksel öz direnci ve termoelektrik güç gibi taşıma özelliklerinin üzerinde farklı Model (Pseudo) potansiyellerinin uygulanması araştırılmıştır. Bir yarı iletken olarak sıvı Si hesaplanan durgun yapı faktörü, Palmer ve Weeks tarafından ortalama küresel yaklaşımında kesin olarak çözülerek, geri planda tek biçimde bulunan elektronlardan oluşan yüklü katı küre akışkanına uyum sağlanarak elde edilmişlerdir. Ayrıca, genişletilmiş Ziman kuramını kullanarak sıvı silisyumun ρ , elektriksel iletkenliği ve Q , termoelektrik gücü olarak bilinen elektronik taşıma özellikleri üzerinde kesin yeni hesaplamalarımız gösterilmiştir.

Hesaplamalarımızın sonuçları, literatürde elde edilen deneysel verilerle karşılaştırıldığı zaman oldukça iyi bulunmuşlardır ve tartışılmıştır.

SUMMARY

In this work, the applications of the different pseudo (or model) potentials to study of the structural and transport properties such as electrical resistivity and thermoelectric power for silicon near the melting point are investigated. Calculated static structure factor of liquid Si as the semiconductor is obtained by adopting charged hard sphere reference fluid in a uniform background of electrons solving exactly in a mean special approximation by Palmer and Weeks. It has been also presented our new accurate calculations on the electronic transport properties namely the electrical resistivity ρ , and the thermoelectrical power Q of liquid Si by using the widely used extended Ziman theory.

The results of our calculations are found to be fairly good when compared to the available experimental data in literature and discussed.

1. GİRİŞ

Son yıllarda, literatürde üzerinde önemle araştırılan konulardan bir tanesinde, sıvı yarı iletken metalleri gibi basit olmayan metal sistemlerinin yapısal özellikleri, buna bağlı olarak tezimizin özgün kısmı olan ve metalimizde temel bir rol oynayan, elektriksel özdirenç, termo elektrik güç (veya termo güç) gibi elektronik taşıma özelliklerinin gerek deneysel gerekse de kuramsal olarak saptanmasıdır.

Ergimiş metallerinin yapısal özelliklerinin, örneğin $g(r)$ radyal dağılım ve $S(q)$ yapı sabitinin hesaplanmasında, yararlanılan kuramsal yöntemlerin bir tanesi olan, Katı Küre referans sistemine dayanan termodinamik pertürbasyon (veya tedirgeme) kuramları genellikle başarılı olmasına rağmen, ergimiş yarı iletkenlerde, elektron-elektron, elektron-iyon ve iyon-iyon arasındaki karşılıklı etkileşimleri ifade eden etkin çift potansiyellerinin kendine özgü yapısının açıklanmasında çoğunlukla başarılı olamamaktadır. Bunun nedeni, yarı iletken metallerinin doldurulmamış 3d bandına sahip olmalarıdır. Yarı iletken metallerde, iyonlar arasındaki kuvvetlerin, ikinci mertebeden pseudo potansiyel (model potansiyel) kuramı sayesinde,

$$u(r) = \frac{1}{8\pi^3} \int \frac{4\pi Z_i^2}{q^2} [1 - F_N(q)] e^{i\vec{q}\vec{r}} dq$$

Değişmez biçimi altında gösterimlenen bir çift potansiyel yardımı ile $S(q)$ yapı faktörleri, ortalama küresel yaklaşıklık kullanılarak hesaplanmıştır. Tezimizin her yerinde atomik birimler, yani $e=\hbar=m_e=1$ kullanılmıştır. Bu denklemdeki $F_N(q)$ normalize edilmiş enerji dalga sayısı karakteristiği olarak adlandırılmak üzere

$$F_N(q) = \left(\frac{q^2}{4\pi Z\rho} \right) \left(w_q^0(K) \right)^2 \left[\frac{1}{1-G(q)} \right] \left[1 - \frac{1}{\varepsilon(q)} \right]$$

denklemini tanımlanmıştır.

Son denklemde yer alan $w(q)$ fonksiyonu model potansiyel olarak bilinmekte iken bu potansiyel genellikle iki ana kısma ayrılır. i) enerjiye bağımlı pseudo potansiyel, ii) enerjiden bağımsız pseudo potansiyel. Enerjiye bağımlı model potansiyel olarak, Heine-Abarenkov, Ascroft (boş kor modeli) ve Jivani-Gajjar-Jani modeli verilirken, enerjiden bağımsız potansiyel olarak Bachalet-Hamann ve Schlüter model potansiyelini kullandık. Dielektrik perdelemenin hesabında ise kullandığımız bölgesel alan düzeltme fonksiyonu $G(q)$ için, Ortiz ve Ballone'nin Monte Carlo benzetişim yöntemi yardımıyla geliştirdiği modeller ile Sarkar ve arkadaşlarının geliştirdiği modeli kullandık.

Böylece, ergimiş yarı iletkenlerin taşıma özelliklerinin bulunmasında ilgi çekici bir teknik olarak Ziman'ın genişletilmiş formülü içerisinde daha önceden elde etmiş olduğumuz pseudo potansiyelleri kullanarak hesapladık.

Bu çalışmanın planı aşağıdaki gibi düzenlenmiştir;

II. bölümde, silisyum yarı iletken metalinin fiziksel ve kimyasal özellikleri, ergime noktası civarındaki yarı iletken metallerin, ele aldığımız model potansiyel kuramından hareket ederek $S(q)$ yapı faktörü ile statik bölgesel alan faktörünün belirlenmesi ve kullanılan modelleri hakkında ayrıntılı bilgi verilmektedir.

III. bölümde, ergime noktası civarındaki yarı iletken metallerin yapısal özelliklerinin belirlenmesi için kullanılan etkin çift potansiyel modelini ve pseudopotansiyel yöntemler gösterilmektedir. Ayrıca, ele aldığımız model potansiyel kuramından hareketle $S(q)$ yapı faktörü ve Ziman'ın genişletilmiş formülü kullanılarak yarı iletken metallerin taşıma özellikleri çıkarılmıştır.

IV. bölümde ise bundan önceki bölümlerde elde edilen kuramsal çözümleri, literatürde elde edilen verilerle karşılaştırması içerisinde ergime noktaları civarında yarı iletken metallerinden Silisyum (Si) metali için yaptığımız sayısal hesaplamaları sırasıyla sunuyoruz.

Son bölümde ise, literatürde rastlanmış olduğumuz deneysel ve kuramsal sonuçlar ile daha önceki bölümlerde yapmış olduğumuz sonuçları karşılaştırılıp, tartışmasını yapıyoruz.

2. GENEL KISIMLAR

2.1 ERGİMİŞ SİLİSYUMUN FİZİKSEL VE KİMYASAL ÖZELLİKLERİ

Yeryüzünde en çok bulunan elementlerden bir tanesi olan silisyum, yarı iletken özelliğe sahip oluşu ve doğada çok bulunması nedeniyle, transistör, diyot ve hafızalarda kullanılabilmesi açısından pratik oluşundan dolayı, entegre devrelerin ve bilgisayarların silisyum teknolojisi üzerine inşa edilmesini sağlamıştır. Bugün, " Silikon Vadisi" denilen dev bir endüstrinin adını koymuştur.

Özellikleri

Sembolü Si'dir. Ametal karakterli kimyasal bir elementtir. Periyodik tabloda IV A grubunda yer alır. Atom numarası 14, atom ağırlığı 28,086 g/mol. olup kristal haldeyken siyahtan griye değişen renge sahip sert ve kırılğan bir yapıdadır. Katı halde iken yoğunluğu $2,33 \text{ g/cm}^3$ 'dir. Silisyum 1410°C ' de erir ve 2355°C ' de kaynar. Elektrik iletme özelliği zayıf olup, ısıyla genleşme derecesi de azdır. Silisyumun birçok fiziksel ve kimyasal özelliği karbonunkine; yapısı elmasinkine benzer. Elektronik gösterilimi $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$ şeklinde olup bileşiklerinde 4^+ değerlikli olabilir. Kimyasal yönden aktif bir element değildir.

Bulunuşu ve elde edilişi

Tarihsel olarak, 1826 senesinde ilk defa İsveçli kimyager Jakop Berzelius tarafından element olarak ve yıldız ve meteorlarda genellikle çok sık bulunan silisyum, dünya kabuğunun yüzde 27,6'sını kaplamaktadır. Dünyada bulunan elementler içinde oksijenden sonra ikinci sırayı alır. Biyolojik olarak, hayvan iskeletlerinde, bitki dokularında ve denizlerde yaşayan iki atomlu hücrelerinin duvar yapılarında bulunur. Normal olarak doğada serbest halde bulunmaz. Fakat hemen hemen bütün kayalarda, kum, kil ve topraklarda ya silis (SiO_2) hâlinde veya oksijen ve alüminyum, magnezyum, kalsiyum, demir, sodyum, potasyum gibi başka elementlerle oluşturduğu silikatlar halinde bulunur.

Bileşikleri

Silisik asit: Silisyumun önemli bileşiklerinden biridir. Kimyasal formülü $\text{Si}(\text{OH})_4$ olup, moleküllerin birbirleriyle kolayca kondenzasyon tepkimesine girmesi neticesinde, su

açığa çıkar ve zincir yapısında polimerler veya üç boyutlu örgüler oluşturur. Silisik asit, alkoller veya silisyum tetraklorür ile meydana getirdiği esterleri kararlı sıvılar olmakla beraber; ısıyla bozunmazlar, ısı transfer vasıtası olarak, hidrolik sıvıları ve yağlayıcı olarak kullanılırlar.

Silisyum doğada siliksat asidi ($mSiO_2.nH_2O$) ve tuzları halinde bulunur. Yerkabuğunun yaklaşık %25,7 si bu elementten oluşur. Silisyum dioksit (SiO_2) doğada kum ve kuartz şeklinde bulunur. Silisyumun iki tane allotropu vardır. Bunlardan birincisi saf kristal silisyumdur. Saydam olmayan koyu gri renkli, parlak sert ve kırılkan olup örgü yapısı elmasa benzer. Diğeri ise amorf silisyumdur. Koyu kahve renkli olup tane büyüklüğü nedeni ile kristal silisyumdan ayırt edilebilir. Kolay reaksiyon verir. Saf olarak silisyum eldesi, silisyum oksidin kok kömürü (grafit) ile elektrikli fırında indirgenmesi sonucunda gerçekleşir. Gerekenden daha fazla karbon kullanılırsa silisyum karbür (SiC) oluşur.

Kullanılma alanları

Silisyum, elektriksel olarak yarı iletken oluşu nedeniyle, bor, galyum, fosfor ve arsenik ile doyurularak transistör, diyot ve diğer yarı iletkenlerin imalinde kullanılır. Bu yüzden zayıf akım alanında önemi çok büyüktür. Metalürjide indirgeyici, çelik, pirinç ve bronz üretiminde alaşım elemanı olarak yararlanılmaktadır. % 15 silisyum içeren çelik alaşımı, aside dayanıklı kapların imalinde kullanılmaktadır. Endüstriyel önemi çok büyük olan silikonlar; silisyum, oksijen, karbon ve hidrojenden sentetik olarak üretilen organosilisyum oksitlerdir. Yüksek sıcaklıklara dayanıklı ve asal olduklarından yağlayıcılarda, hidrolik sıvılarda, su geçirmeyen malzemelerde, vernik ve emayelerde kullanılırlar.

Bu yarı iletkenin kullanım alanları şöyle sıralanabilir:

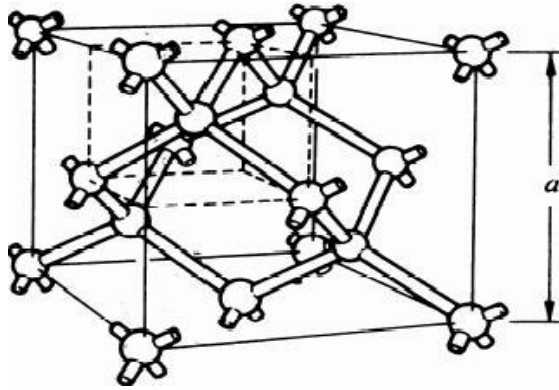
- Tıpta silikon yapımında,
- Beton, tuğla ve çimento yapımında,
- Çeliğin bileşimine katılarak,
- Polimerik bir yapıya sahip oldukları için kaydırıcı yağ olarak,

- Çok saf silisyum bor, galyum, fosfor ve arsenikle güçlendirilerek yarı iletken özelliğinden dolayı transistörlerde, güneş gözeleri gibi birçok elektronik endüstrisinde.

Kristal Yapısı

Yarı iletkenler, oldukça farklı kimyasal ve fiziksel özelliklere sahip çok sayıda maddeyi içine alırlar. Bu maddeler, elementleri periyodik cetveldeki konumuna bağlı olarak, benzer davranışlı gruplara ayrılırlar. En iyi bilinen yarı iletkenler; periyodik cetvelin IV sütunundaki C (elmas), Si, Ge ve alfa-Sn'nin oluşturduğu yarı iletkenlerdir. Burada band yapısı ve özellikleri ile Si yarı iletkeninin temel parametreleri verildi. Yarı iletkenlerin iletim özellikleri, enerji band yapılarına ve kristal yapılarına sıkıca bağlıdır.

Bu nedenle öncelikle II-IV grup yarı iletkenlerden olan silisyumun kristal yapıları, Şekil 2.1'de gösterildiği gibi bütünüyle elmasın kristal yapısına benzerdir. Silisyum atomunda, K kabuğunda 2, L kabuğunda 8, M kabuğunda 4 elektron olmak üzere toplam 14 elektrona sahiptir. Elektronik ilgili anlatımlarda silisyumun sadece en son yörüngesindeki dört elektron gözönünde bulundurulur.



Şekil 2.1. Elmasın kristal yapısı

Kristal yapıya sahip olmayan maddelerin elektronları kendi atom çekirdeği etrafında döner. Ancak silisyum gibi kristal yapıya sahip maddelerin son yörünge (değerlik) elektronları, komşu atomların her bir değerlik elektronlarıyla adeta bağlanmış gibi birlikte dönerler. Bunlara “ortak değerlik çiftleri “ denir. Komşu atomlar arasındaki ortak değerlik bağları, atomlar arasında bir çekme kuvveti yaratır. Ancak komşu atom

çekirdeklerindeki artı (+) yükler arasındaki itme kuvvetleri, bu çekim gücüne karşı koyar. Bu sayede kristal madde içinde elektriksel denge kurulur.

Silisyum kristaline, Al, Ga, In gibi 3 değerlik elektronlu bir katkı maddesi ilave edildiğinde bunların atomları kafes (örgü) sistemde bir yer alarak kovalent bağ oluşturacaktır. Kovalent bağda her bir atom bir elektronu en yakın komşuyla paylaşarak kuvvetli bir bağ oluşturur.

Silisyum kristaline beş değerlik elektronlu P, As gibi katkı maddelerinden biri ilave edilirse bunların atomları etrafındaki silisyum atomları ile kovalent bağ oluştururlar. 5 değerlik elektronlu arseniğin ancak dört elektronu, komşu silisyum atomlarıyla kovalent bağ oluşturmaktadır. Beşinci elektron ise çekirdeğin pozitif çekme kuvvetinin etkisi altında zayıf olarak atoma bağlı kalmaktadır. Bu elektron en ufak bir enerji etkisi halinde serbest hale geçebilir [1].

Band Yapısı

Katıların band yapısı genelde Schrödinger denkleminin çözümüyle elde edilir. Band yapısı birinci Brillouin bölgesinde E elektron enerjisinin, k dalga vektörünün bir fonksiyonu olacak şekilde çizilen bir grafik ile saptanmaktadır. Yarı iletkenler için en çok kullanılan yöntemler; Dik düzlem dalga yöntemi Allen [2], gerçek olmayan potansiyel yöntemi Phillips [3] tarafından ayrıntılı olarak verilmektedir.

Bir katı maddenin değerlik bandı ya tamamen elektronlarla doludur ya da banda elektron yerleşebilecek çok az sayıda boşluk vardır. Değerlik banda bir elektronun yerleşebileceği bu boşluklara deşik (hole) denir. Herhangi bir uyarma ile yasak enerji aralığını aşarak değerlik bandından, iletkenlik bandına geçen elektronun yerinde bir deşik kalır. Bu deşik değerlik bandındaki başka bir elektronla doldurulursa, o elektronun yerinde yeni bir deşik oluşur. Bu durumda değerlik bandında bir elektronun bir deşiği dolduracak şekilde yer değiştirmesi, sanki elektron yerine deşik hareket ediyormuş gibi düşünebiliriz. Böylece değerlik bandaki elektron yer değişimleri, deşik hareketi olarak kabul edilir. Buna göre; bir katıda elektriksel öz direnç, iletkenlik bandında elektronlarla, değerlik bandında deşiklerle sağlanır.

Kristal örgünün periyodikliği nedeniyle bir yarı iletken, izinli ve yasaklanmış enerji bölgelerine sahiptir. Yasak enerji aralığı yarı iletkenlerin birçok özelliğini tanımlamakta kullanılan önemli bir parametredir. İzinli enerji bölgeleri yasak bandın altında ve üstünde yerleşir. Yasak bandın altında kalan ve bağlı elektronların oluşturduğu enerji bölgesi değerlik bandı ve üstünde kalan serbest elektronların oluşturduğu enerji bölgesi iletkenlik bandı olarak adlandırılır.

Yarı iletken metallerin çoğunluğunun yasak enerji aralığı, genellikle ~ 0.1 eV ile 1 eV arasında olmasına karşın, silisyumun yasak enerji aralığı 1.2 eV' a kadar yükselmektedir. Dolayısıyla, bu düşük enerji aralığı, tamamen dolu olan değerlik bandından elektronların, sıcaklıkla uyarılmasıyla boş iletkenlik bandına geçebilecekleri anlamına gelir.

Band yapısı kristal simetrisinin temel bir fonksiyonudur. Γ , X , ve L Brillouin bölgelerindeki önemli simetri noktalarıdır. Band yapılarının en belirleyici özelliği değerlik ve iletkenlik bandlarının konumudur. Eğer Brillouin bölgesinde, değerlik bandının tepesi ve iletkenlik bandının tabanı aynı noktada oluşursa (Γ) yarı iletken direkt yarı iletken, aynı noktada oluşmazsa indirekt yarı iletken olarak adlandırılır. Bu nedenle Brillouin bölgesinin merkezindeki Γ noktası direkt yarı iletkenler için en önemli noktadır. Düşük alan iletimi hesaplamalarında genellikle değerlik bandının tepesi ile iletkenlik bandı tabanının göz önüne alınması yeterli olmaktadır. Ancak Si yarı iletkeni indirekt bir yarı iletkenidir. Dolayısıyla iletkenlik bandının en düşük minimumu (Γ noktasında) ile değerlik bandı maksimumu aynı doğrultuda değildir. Bu noktalar yarı iletkenin gözlenebilir özelliklerinin belirlenmesinde etkin bir rol üstlenmektedir. Bunun yanı sıra X ve L noktaları düşük alan iletim hesaplamalarında önemsiz bir rol üstlenmelerine rağmen yüksek basınç ve yüksek sıcaklıklara bağlı yüksek alan elektron iletim hesaplarında önemli rol oynamaktadırlar.

2.2 YÜKLÜ KATI KÜRE YAKLAŞIMI YARDIMI İLE SIVI YARI-İLETKEN METALLERİN YAPI FAKTÖRLERİNİN BELİRLENMESİ

Ters bir uzayda tanecik korelasyonlarının ölçümü olarak tanımlanan $S(q)$ yapı faktörü, sıvı hal içerisinde bulunan bir maddenin çeşitli elektronik, magnetik, istatistik ve dinamik özelliklerinin araştırılmasında kullanılan önemli bir fiziksel (istatistiksel) büyüklüktür. Yüklü katı küre modeli (YKKM), sıvı haldeki metallerin yapı faktörünün elde edilmesinde çok yararlı bir model olmaktadır. Elektron tek bir biçimde geri planda olduğu (Tek Bileşenli Plazma) yüklü katı kürelerden oluşan böyle bir sistem, ortalama küresel yaklaşıklık (OKY) içerisinde birçok yazarlar tarafından kesin olarak çözülmüştür [4]. Bunların en önemlileri; 1- Palmer-Weeks, 2- Parrinello'nun ortaya koyduğu çözüm yöntemleridir.

2.2.1 Palmer- Weeks Yöntemi

YKKM' ne göre, referans sistem, elektronların tek biçimli bir temelinde, Coulombik olarak karşılıklı etkileşmelerde bulunan pozitif olarak yüklü nokta yüklerinden oluşmaktadır. Bu model içerisinde, σ , yüklü katı kürelerin etkin yarıçapı olarak tanımlanmak üzere üzere, $x = r/\sigma$ parametresi ile $C_0(x)$ direkt korelasyon fonksiyonu;

$$C_0(x) = \begin{cases} A + Bx + Cx^2 + Dx^3 + Ex^5 & x < 1 \\ -\frac{\gamma}{x} & x > 1 \end{cases} \quad (2.2.1)$$

olarak hesaplanmaktadır. (2.2.1) eşitliğindeki katsayılar, uygun boyutsuz değişkenlerin terimlerinde yazılabilir ,

$$\eta = \frac{\pi}{6} \rho_i \sigma^3 \quad , \quad \gamma = \beta \frac{Z_i^2}{\epsilon_0 \sigma} \quad , \quad \kappa = (24\eta\gamma)^{1/2} \quad (2.2.2)$$

dır. (2.2.2) denkleminde, ρ_i ve T sırasıyla sistemin iyonik sayısal yoğunluğunu ve sıcaklığını gösterimlenmesi altında; η , paketleme kesrini, γ , iyon-iyon kuplaj şiddetini,

κ , Debye-Hückel ters perdelenme uzunluğunu, ayrıca $\beta = (k_B T)^{-1}$ eş sıcaklık katsayısını ve ε_0 , sistemin statik dielektrik sabitini vermektedir. SI birim sisteminde ε_0 doğrudan doğruya 1 olarak alınmaktadır. (2.2.1) denkleminde verilen katsayılar;

$$A = \frac{(1+2\eta)^2}{(1-\eta)^4} + \frac{Q^2}{4(1-\eta)^2} - \frac{(1+\eta) Q\kappa}{12\eta} - \frac{(5+\eta^2)}{60\eta} \quad (2.2.3a)$$

$$B = 6\eta M^2, \quad C = \kappa^2 / 6 \quad (2.2.3b)$$

$$D = \frac{1}{2}\eta(A + \kappa^2 U) \quad (2.2.3c)$$

ve

$$E = \eta\kappa^2 / 60 \quad (2.2.3d)$$

olur. Burada,

$$Q = \frac{1+2\eta}{1-\eta} \left[1 - \left(1 + \frac{2(1-\eta)^3 \kappa}{(1+2\eta)^2} \right)^{1/2} \right] \quad (2.2.4.a)$$

$$M = \frac{Q^2}{24\eta} - \frac{1+\eta/2}{(1-\eta)^2} \quad (2.2.4.b)$$

ve

$$U = -\frac{(1+\eta-\eta^2/5)}{12\eta} - \frac{(1-\eta)Q}{12\eta\kappa} \quad (2.2.4.c)$$

olarak verilmektedir.

Referans sisteminin $S_0(q)$ statik yapı faktörü kendi $C_0(q)$, direkt korelasyon fonksiyonu yardımıyla,

$$S_0(q) = \frac{1}{1 - \rho_i C_0(q)} \quad (2.2.5)$$

bağıntısı ile tanımlanır. q, σ^{-1} in birimlerinde ifade edilmek üzere, (2.2.1) eşitliğinin Fourier dönüşümü,

$$\begin{aligned} nC_0(q) = \frac{24\eta}{q^6} \{ & Aq^3 (\sin q - q \cos q) \\ & + Bq^2 [2q \sin q - (q^2 - 2) \cos q - 2] \\ & + Cq [(3q^2 - 6) \sin q - (q^2 - 6) q \cos q] \\ & + D [(4q^2 - 24) q \sin q - (q^4 - 12q^2 + 24) \cos q + 24] \\ & + E [6(q^4 - 20q^2 + 120) q \sin q - (q^6 - 30q^4 + 360q - 720) \cos q \\ & - 720] / q^2 - \gamma q^4 \cos q \} \end{aligned} \quad (2.2.6)$$

şeklinde tanımlanır [5].

3. bölümde içeriğini ayrıntılı olarak anlatacağımız statik yapı faktörü için pseudo (model) potansiyel hesaplamaları homojen bir elektron gazı tarafından her bir iyonun doğrusal perdelenmesi sayesinde etkin bir iyon-iyon potansiyelinin inşasına gereksinim duyulmaktadır. Kuramın bu aşamasında yapılan temel varsayım, elektron-iyon arasındaki kuplajın zayıf olduğu ve farklı iyonlar arasındaki perdeleme bulutları birbirleri ile hiçbir zaman için kesişmemesidir. Bu varsayımın güncel olarak genişletilmesinde ulaşılan en son sonuç, sıvı metalin yapısının doğrudan doğruya homojen bir elektron gazı tarafından iyonik bir plazmanın lineer olarak perdelenmiş olduğunun elde edildiği bir elektron-iyon plazma yaklaşımına eşdeğer olduğunu ortaya koymaktadır [6,7,8]. Bu ise,

$$S(q) = \frac{S_0(q)}{1 + \rho_i \tilde{u}_{sc}(q) S_0(q)} \quad (2.2.7)$$

Burada $S_0(q)$ katı bir nötralleşme üzerinde tek bileşenli bir klasik plazmanın (TBP) yapı faktörüdür ve

$$\tilde{u}_{sc}(q) = -\left(4\pi Z_s^2 / q^2\right) F_N(q) \quad (2.2.8)$$

Etkin iyon-iyon potansiyeline, elektronik perdelenmenin katkısı için elde edilen karşılıklı etkileşme potansiyelini vermektedir. Aynı zamanda, perdelenmiş biçim faktörü olarak bilinen $F_N(q)$ enerji dalga sayısı fonksiyonunun tanımı 3. bölümde (3.5) denklemiyle verilmektedir.

Ornstein-Zernike denkleminin tek bileşenli plazmada ki formu aşağıda gösterildiği gibidir [9].

$$h(r) = c(r) + \rho \int c(|\vec{r} - \vec{r}'|) h(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (2.2.9)$$

Burada, $h(r)$, toplam korelasyon fonksiyonu ve $c(r)$, doğrudan korelasyon fonksiyonudur. (2.2.9) denkleminin her iki tarafında harmanlama teoremi kullanarak Fourier dönüşümü alınırsa;

$$\tilde{h}(q) = \tilde{c}(q) + \rho \tilde{c}(q) \tilde{h}(q) \quad (2.2.10)$$

ifadesi bulunur. Burada

$$\tilde{h}(q) = \int h(r) \exp[-iqr] d^3r \quad (2.2.11)$$

$$\tilde{c}(q) = \int c(r) \exp[-iqr] d^3r \quad (2.2.12)$$

formunda ifade edilebilir. (2.2.10) denklemini tekrar yazarsak, aşağıdaki eşitliği elde ederiz.

$$\left[1 + \rho \tilde{h}(q)\right] \left[1 - \rho \tilde{c}(q)\right] = 1 \quad (2.2.13)$$

Toplam korelasyon fonksiyonunun Fourier dönüşümü aşağıdaki şekilde ifade edilmiş olur.

$$\tilde{h}(q) = \frac{\tilde{c}(q)}{1 - \rho \tilde{c}(q)} \quad (2.2.14)$$

2.2.2 Parrinello-Tosi Yöntemi

Palmer-Weeks yöntemine benzer biçimde yüklü, katı kürelerden oluşmuş nötr sıvının $S_0(q)$, referans yapı faktörü, M. Parrinello ve M.P. Tosi tarafından analitik olarak elde edilmiş olan yöntemin açıklamasını bu bölümde anlatacağız [10].

σ_i çaplı, $Z_i e$ yüklü n bileşenli plazmayı düşünürsek, toplam yük yoğunluğu;

$$\rho = \sum_{i=1}^N \rho_i Z_i \quad (2.2.15)$$

iken tek bileşenli plazmada ortam tamamen nötr olması sebebiyle, toplam yük yoğunluğu $\rho = 0$ olur. Denge halinde tek bileşenli plazma için $\rho \rightarrow 0$ düşünüyoruz.

ρ_i = birim hacimdeki iyon sayısı

$S_0(q)$, referans yapı faktörü aşağıda verilmiştir [11,12].

$$S_0(q) = [Q(q)Q(-q)]^{-1} \quad (2.2.16)$$

şeklinde tanımlanmaktadır. Burada $Q(q)$ korelasyon faktörü olan Baxter matrisidir. Parrinello ve Tosi çalışmalarında çok bileşenli plazmayı aşağıdaki gibi tanımlanmıştır.

$$Q_{ij}(q) = \delta_{ij} + (\rho_i \rho_j)^{1/2} \left[- \int_{\lambda_{ij}}^{\sigma_{ij}} dr Q_{ij}(r) e^{iqr} + A_{ij} \int_{\sigma_{ij}}^{\infty} dr e^{i(iq-\mu).r} \right] \quad (2.2.17)$$

Burada integralin sınır koşulu olan $\sigma_{ij} = \frac{1}{2}(\sigma_i + \sigma_j)$ ve $\lambda_{ij} = \frac{1}{2}(\sigma_i - \sigma_j)$ ifadelerini tek bileşenli plazma için $\sigma_{ii} = \sigma$ ve $\lambda_{ii} = 0$ şeklinde tanımlayabiliriz. Ayrıca limit durumunda kimyasal potansiyel enerji $\mu \rightarrow 0$ olarak belirlenir. δ_{ij} , Kronecker deltası olmak üzere aşağıdaki şekilde tanımlanabilir.

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad (2.2.18)$$

Tek bileşenli plazma için $i = j$ 'dir ve $\delta_{ij} = 1$ olur. Bu durumda (2.2.17) denklemi tek bileşenli plazma için yeniden düzenlenirse;

$$Q(q) = 1 + \rho \left[-\int_0^\sigma Q(r) e^{iqr} dr + A \int_\sigma^\infty e^{iqr} dr \right] \quad (2.2.19)$$

ifadesi elde edilir. Burada $A=Z_i a$ ve $Q(r)$ ise referans [11] de ifade edildiği gibi iyonik halde üçüncü dereceden bir polinomdur ve a 'nın tanımı (2.2.25) denklemi ile verilmektedir.

$$Q(r) = \frac{1}{3} \pi \rho a (r - \sigma)^3 + \frac{1}{2} Q''(r - \sigma)^2 + Q'(r - \sigma) - Z_i a \quad (2.2.20)$$

(2.2.19) denklemi (2.2.20) denkleminde yerine konup bir takım analitik işlemlerden sonra $Q(q)$ 'yi aşağıdaki formda yazabiliriz.

$$Q(q) = 1 - \rho \left\{ \frac{A}{iq} + Q' \varphi_1(q) + Q'' \varphi_2(q) + \pi \rho A \varphi_3(q) \right\} \quad (2.2.21)$$

Korelasyon faktörü $Q(q)$ nun içindeki fonksiyonlar sırasıyla;

$$\varphi_1(q) = \frac{1}{(iq)^2} (1 + iq\sigma - e^{iq\sigma}) \quad (2.2.22)$$

$$\varphi_2(q) = \frac{1}{-(iq)^3} \left(1 + iq\sigma + \frac{1}{2} (iq\sigma)^2 - e^{iq\sigma} \right) \quad (2.2.23)$$

$$\varphi_3(q) = 2 \left(\frac{1}{iq} \right)^4 \left[1 + iq\sigma + \frac{1}{2} (iq\sigma)^2 + \frac{1}{6} (iq\sigma)^3 - e^{iq\sigma} \right] \quad (2.2.24)$$

olarak tanımlanmıştır. (2.2.21) denklemine geçen $A = Z_i a$ ifadesindeki a değeri,

$$a = \frac{\alpha^2}{2\Gamma} \frac{Z^* - (\pi/2\Delta) \sigma^2 P_n}{1 + \Gamma \sigma} \quad (2.2.25)$$

dır. Burada geçen ifadeler sırasıyla;

$$Z^* = Z_i - \eta = Z_i - \frac{1}{6} \pi \rho \sigma^3 \quad (2.2.26)$$

Burada η paketleme kesri veya istifleme yoğunluğudur ve (2.2.2) denklemine verilmiştir.

$$\alpha^2 = \frac{4\pi\beta e^2}{\epsilon_0} \quad (2.2.27)$$

'dir. σ ise etkin iyon katı küre çapıdır.

$$\Delta = 1 - \frac{1}{6}\pi\zeta_3 \quad (2.2.28)$$

$$\zeta_3 = \rho\sigma^3 \quad (2.2.29)$$

Tek bileşenli plazma için;

$$P_1 = \Omega^{-1} \left[\frac{\rho Z^* \sigma}{1 + \Gamma \sigma} \right] = \frac{1}{\Omega} \left(\frac{z \rho \sigma}{1 + \Gamma \sigma} \right) = \frac{z \rho \sigma \Delta}{3\eta + (1 + \Gamma \sigma) \Delta} \quad (2.2.30)$$

tanımlanmaktadır ve M. Parrinello ve M.P. Tosi tarafından verilen aşağıdaki ifadeler tek bileşenli plazma için düzenlenmiştir,

$$\Omega = 1 + \frac{\pi}{2\Delta} \left[\frac{\rho \sigma^3}{1 + \Gamma \sigma} \right] = 1 + \frac{3\eta}{(1 + \Gamma \sigma) \Delta} = \frac{(1 + \Gamma \sigma) \Delta + 3\eta}{(1 + \Gamma \sigma) \Delta} \quad (2.2.31)$$

Blum, n- bileşenli bir akışkanın özelliklerinin, yukarıdaki denklemlerde kullanılan Γ plazma parametresi ile hesaplanabileceğini yapmış olduğu çözümle göstermiş ve bu parametre,

$$\Gamma \sigma = -\frac{1}{2} \frac{1 + 2\eta}{1 - \eta} \left\{ 1 - \left[1 + 2\kappa \frac{(1 - \eta)^3}{(1 + 2\eta)^2} \right]^{1/2} \right\} \quad (2.2.32)$$

$$2\Gamma = \alpha \rho^{1/2} \left[\frac{Z^* - (\pi/2\Delta) \sigma^2 P_1}{1 + \Gamma \sigma} \right] \quad (2.2.33)$$

Blum parametresi veya bilinmeyen ayrılma sabiti olarak bilinen parametre ile birleştirilmiştir. (2.2.32) denkleminde verilen $\kappa = \rho Z_i \lambda^2 \sigma^2$ 'dır ve bu ifadede geçen $\lambda^2 = 4\pi e^2 \beta$ olarak verilir. Referans [10] da verilen Q' ve Q'' ifadelerini yine tek bileşenli plazma için aşağıdaki forma getirdik:

$$Q' = \frac{2\pi\sigma}{1-\eta} + \frac{\pi^2}{2(1-\eta)^2} \rho\sigma^4 - \frac{2\Gamma^2 a^2}{\alpha^2} \quad (2.2.34)$$

$$Q'' = \frac{2\pi}{1-\eta} + \frac{\pi^2}{(1-\eta)^2} \rho\sigma^3 + \frac{\pi}{1-\eta} P_1 a + \pi\rho\sigma a \quad (2.2.35)$$

Bulunan bu ifadeleri (2.2.21) denkleminde yerine yazarsak $Q(q)$ ve $Q(-q)$ elde edilir. $Q(q)$ bulunduktan sonra (2.2.16) denklemiyle $S_0(q)$ referans yapı faktörüne bulunur. Bulunan (2.2.17) ve (2.2.19) denklemleri $S(q)$ denkleminde yerine konarak $S(q)$ yapı faktörüne ulaşılır.

2.3. DİELEKTRİK FONKSİYONU VE STATİK BÖLGESEL ALAN FAKTÖRÜ

İyonik hareket üzerinde sorumlu olan elektronların etkisi, standart bir pseudopotansiyele dayanan değerlik elektronları ve iyonlar arasındaki zayıf bir etkileşmenin varsayılmasıyla ele alınmıştır. Doğrusal bir perdeleme yaklaşıklığı ile beraber sıvı bir metalin yapı sabiti benzer şekilde verilmektedir ki, (2.2.7) denkleminde eşdeğer bir biçimde elde edilmiştir [4]. $F_N(q)$ fonksiyonun içeriğinde yer alan modifiye edilmiş $\varepsilon(q)$ dielektrik fonksiyonu,

$$\varepsilon_H(q) = 1 + \frac{me^2}{2\pi h^2 q_F Y^2} \left[1 + \frac{(1-Y^2)}{2Y} \ln \left| \frac{1+Y}{1-Y} \right| \right] \quad (2.3.1)$$

denklemini ile gösterilen $\varepsilon_H(q)$, durgun Hatree dielektrik fonksiyonu ile saptanmaktadır;

$$\varepsilon(q) = 1 + [1 - f(q)] [\varepsilon_H(q) - 1] \quad (2.3.2)$$

Ve $f(q)$, iletken elektronların korelasyon ve takas hareketleri için korelasyon faktörü olarak tanımlanmaktadır. (2.3.1) denkleminde yer alan, m , iyonik kütle, h Planck sabiti, q_F Fermi dalga vektörü, e elektronik yük ve $Y = q/2q_F$ 'dir. Dielektrik perdelemedeki iletken elektronlar arasındaki takas ve korelasyonu birleştirmek için

kullanılmış olan $f(q)$ bölgesel alan korelasyon fonksiyonu, farklı yazarlar tarafından verilmiştir [4,13].

Radyal dağılım fonksiyonu için tanım referans (14,15) te verilmiştir;

$$g(r) = 1 + \left(\frac{1}{2\pi\rho r} \right) \int_0^\infty q \{S(q) - 1\} \sin(qr) dq \quad (2.3.3)$$

Radyal dağılım fonksiyonunu kullanarak en yakın komşu atomların r_l atomlar arası mesafesini elde ederiz. Atomlar arası mesafe r_l , $g(r)$ kıvrımının maksimum pikine karşılık gelir.

Tek biçimli (uniform) nötralleştirilmiş temel içinde elektronların bir ideal sistemi olan elektron gazı veya Jelyum, $\rho_e = 3/(4\pi r_s^3)$ (r_s ; atomik birimde Wigner-Seitz Elektron Yarıçapı) ortalama elektron yoğunluğu parametresi yardımı ile karakterize edilir ve Elektron Korelasyon'u olarak adlandırılan olayların açıklanmasında kullanılan önemli bir modeldir. Tanım olarak, Elektron Korelasyon terimi, kesin bir fiziksel sistem ile bağımsız tanecik modeli (yani kendiliğinden oluşan alan veya Hatree-Fock Yaklaşımı) arasındaki farkların tümünü yansıtan bir nitelik olarak verilmektedir ve Yarı-Tanecikleri, Perdelemeyi, Yoğunluk kaymalarını ve paramagnetik bir Fermi sıvısından feromagnetik bir Wigner kristaline faz geçişini kapsamaktadır [16]. Tüm pratik Yoğunluk Fonksiyonel hesaplamaları [17], homojen bir elektron gazının özellikleri teriminde, homojen olmayan çok elektronlu sistemlerin, $E_{xc}(\rho_e)$, Takas-Korelasyon enerjisinin saptanmasında yoğunlaşmıştır. Elektron gazı vasıtası ile bir dış yükün doğrusal perdelemesi probleminde ortaya çıkan takas ve korelasyon etkilerinin uygun bir ölçümü olan $G(q)$ (daha önce $f(q)$ olarak göstermiş olduğumuz), Statik bölgesel alan faktörü olarak bilinir ve $V_c(q) = 4\pi/q^2$ Coulomb etkileşmesi olmak üzere $f_{xc}(q)$ takas-korelasyon faktörü ile tanımlanır;

$$f_{xc}(q) = -V_c(q)G(q) \quad (2.3.7)$$

Gerçek bir uzayda E_{xc} ve f_{xc} doğrudan doğruya,

$$f_{xc}(|r-r'|) = \left[\frac{\delta^2 E_{xc}[\rho_e]}{\delta \rho_e(\vec{r}) \delta \rho_e(\vec{r}')} \right]_{\rho_e=\rho_0} \quad (2.3.8)$$

bağıntısı ile verilmektedir [18].

Statik bölgesel alan faktörü $G(q)$, $\chi(q)$ statik yoğunluk-yoğunluk yanıt fonksiyonuna bağımlı olarak hesaplanabilir. Takas- korelasyon faktörü $f_{xc}(q)$ tarafından sağlanmakta olan takas ve korelasyon etkilerinin direkt olarak ölçümü, $\chi(q)$ yanıt fonksiyonunda bir sapmaya yol açar. Yani;

$$\chi_0(q) = -\frac{1}{\pi^2 q} \int_0^\infty n^0(q) p \ln \left| \frac{q+2p}{q-2p} \right| dp \quad (2.3.9)$$

karşılıklı etkileşme halinde olmayan p momentum dağılımına sahip Lindhard yanıt fonksiyonu olmak üzere,

$$-f_{xc}(q) = \frac{1}{\chi(q)} - \frac{1}{\chi_0(q)} + V_c(q) \quad (2.3.10)$$

olur. (2.3.9) denkleminde,

$$n^0(q) = \begin{cases} 1 & q \leq q_F \\ 0 & q > q_F \end{cases} \quad (2.3.11)$$

dır [19,20]. Burada, $q_F = (3\pi^2 \rho_e)^{1/3}$ Fermi dalga vektörü olarak tanımlanmaktadır. Dış bir yük etrafında lineer bir perdeleme söz konusu olduğunda, dielektrik fonksiyonunun,

$$\frac{1}{\epsilon(q)} = 1 + V_c(q) \chi(q) \quad (2.3.12)$$

kesin tanımından hareketle (2.3.7) ve (2.3.10) denklemleri göz önünde tutularsa, statik dielektrik fonksiyonu bağıntısı elde edilir [21].

$$\varepsilon(q) = 1 - \frac{V_c(q) \chi_0(q)}{1 + V_c(q) G(q) \chi_0(q)} \quad (2.3.13)$$

Elektron gazının tanımlanması, sıvı metallerin özelliklerinin önceden tahmin edilmesinde yararlı olduğu, daha önceden birçok biçimde gösterilmiştir [22].

Elektrostatik etkiler, (2.3.9) denklemiyle gösterilen Lindhard yanıt fonksiyonu sayesinde, perdelenme formalizmi ile belirlenirken takas ve korelasyon etkileri de, sıvı metallerin yapısının ve termodinamiğinin belirlenmesinde temel olarak ortaya çıkan $G(q)$ bölgesel alan faktörü sayesinde göz önüne alınmaktadır [23]. Bundan dolayı, $G(q)$ sıvı metallerin yapısının belirlenmesinde, önemli bir büyüklüktür. Statik bölgesel alan faktörünü hesaplamak için birçok farklı modeller önerilmiştir. Bunlardan bazıları; 1- Utsumi-Ichimarü (IU) Modeli, 2- Sarkar Modeli, 3- OB-IU ve OB-VS Modeli'dir.

2.3.1. Utsumi-Ichimarü Modeli

Utsumi-Ichimarü (IU) tarafından önerilen statik bölgesel alan faktörü,

$$G_{IU}(q) = A \left(\frac{q}{q_F} \right)^4 + B \left(\frac{q}{q_F} \right)^2 + C \left[A \left(\frac{q}{q_F} \right)^4 + \left(B + \frac{8}{3} A \right) \left(\frac{q}{q_F} \right)^2 - C \right] \times \frac{4q_F^2 - q^2}{4q_F q} \ln \left| \frac{2q_F + q}{2q_F - q} \right| \quad (2.3.1.1)$$

biçiminde verilmektedir[24]. Burada, q_F Fermi dalga sayısıdır ve kullanılan parametreler;

$$A = 0.029 \quad (0 \leq r_s \leq 15)$$

$$B = \frac{9}{16} \gamma_0 - \frac{3}{64} [1 - g(0)] - \frac{16}{15} A \quad (2.3.1.2)$$

$$C = -\frac{3}{4} \gamma_0 + \frac{9}{16} [1 - g(0)] - \frac{16}{5} A$$

ile verilmektedir. A ,B ve C parametrelerinde ki γ_0 değeri elektron başına karşılıklı etkileşme enerjisi $E_c(r_s)$ ile birleştirilen bir katsayıdır,

$$\gamma_0 = \frac{1}{4} - \frac{\pi\alpha}{24} r_s^5 \frac{d}{dr_s} \left[r_s^{-2} \frac{d}{dr_s} E_c(r_s) \right] \quad (2.3.1.3)$$

(2.3.1.3) denkleminde geçen $\alpha = \left(4/9\pi\right)^{1/3}$ değerine eşittir. (2.3.1.3) denkleminde geçen karşılıklı etkileşme enerjisinin r_s ' e göre türevi $\sqrt{r_s}$ yerine x yazılarak aşağıdaki gibi ifade edilmiştir.

$$r_s \frac{dE_c(r_s)}{dr_s} = b_0 \frac{1 + b_1 x}{1 + b_1 x + b_2 x^2 + b_3 x^3} \quad (x \equiv \sqrt{r_s}) \quad (2.3.1.4)$$

Burada $b_0 = 0.0621814$, $b_1 = 9.81379$, $b_2 = 2.82224$ ve $b_3 = 0.736411$ ' dir. Ichimaru ve Utsumi' nin ifade ettiği gibi $G(q)$ 'nun kısa dalga boyundaki davranışı radyal dağılım fonksiyonu $g(r)$ ile aşağıdaki gibi ilişkilendirilmiştir [25,26].

$$\lim_{q \rightarrow \infty} G(q) = 1 - g(0) \quad (2.3.1.5)$$

$$g(0) = \frac{1}{8} \left[\frac{z}{I_1(z)} \right]^2 \quad (2.3.1.6)$$

Burada $I_1(z)$ birinci dereceden Modifiye Bessel fonksiyonu ve $z \equiv 4(\alpha r_s/\pi)^{1/2}$ dir.

2.3.2. Sarkar Modeli

Sarkar ve arkadaşları tarafından önerilen, bir elektron gazının dielektrik perdelenme kuramında ortaya çıkan $G_{SAR}(q)$, statik bölgesel alan faktörü, üç parametrelili bir ifade yardımı ile

$$G_{SAR}(q) = A \left\{ 1 - \left[1 + B \left(\frac{q}{q_F} \right)^4 \right] \exp \left[-C \left(\frac{q}{q_F} \right)^2 \right] \right\} \quad (2.3.2.1)$$

biçimde verilmektedir [27]. Burada kullanılan A ve C katsayıları, $G_{SAR}(q)$ 'nin

$$\lim_{q \rightarrow 0} G(q) = \gamma_0 \left(\frac{q}{q_F} \right)^2 \quad (2.3.2.2)$$

ve

$$\lim_{q \rightarrow 0} G_{SAR} = 1 - g(0) \quad (2.3.2.3)$$

iki limit davranışı ile $[\gamma_0, (2.3.1.3)$ denklemi ile ve $g(0), (2.3.1.6)$ denklemi ile verilmiştir.] ve B ise,

$$B(r_s) = a + br_s + cr_s \log_e r_s + d \log_e \frac{r}{r_s^2} + \frac{e}{r_s^2} \quad (2.3.2.4)$$

$$\left(\begin{array}{ll} a = 0.0301412, & b = -0.00847224176, \\ c = 0.0016291083, & d = -0.2386599 \\ ve & e = -0.27960609 \end{array} \right)$$

ile saptanmıştır. Ayrıca, Ceperley ve Alder'in [28], Kuantum Monte Carlo hesaplamalarından, korelasyon enerjisi için,

$$E_c^{SAR}(r_s) = \frac{1 + a_0 r_s + a_1 r_s^2 + a_2 r_s^3 + a_3 r_s^4}{b_0 + b_1 r_s + b_2 r_s^2 + b_3 r_s^3 + b_4 r_s^4 + b_5 r_s^5} mRyd \quad (2.3.2.5)$$

bulunmuştur. Bu denklemde kullanılan katsayılar,

$$\begin{array}{ll} a_0 = 0.24837857 & a_1 = 0.00611973 \\ a_2 = 0.00069664 & a_3 = 3.63367823 \cdot 10^{-6} \\ b_0 = 0.00450109 & b_1 = 0.00540115 \\ b_2 = 0.00035051 & b_3 = 0.00002577 \\ b_4 = 9.88887829 \cdot 10^{-7} & b_5 = 5.1105284 \cdot 10^{-9} \end{array}$$

olarak verilmiştir.

2.3.3 OB-IU ve OB-VS Modeli

Bir elektron gazında Takas ve Korelasyon etkilerini açıklayan bölgesel alan düzeltme fonksiyonunun saptanması, fiziğin temel problemlerinden bir tanesidir [29]. Hareket denkleminin veya diyagramdaki tekniklere dayanan çeşitli kuramlar sayesinde, önemli bir nicelik olan, $G(q)$, durgun bölgesel alan fonksiyonunun çeşitli biçimlerine ulaşılmıştır. Kuantum Monte Carlo benzetişim yöntemi, elektron sisteminin araştırılmasında ilgi çeken bir araçtır. Ortiz ve Ballone [30] (OB) varyasyonel Monte Carlo (VMC) ve difüzyon Monte Carlo (DMC) yöntemlerini kullanarak bütün hesapları gerçekleştirmişlerdir.

Hareketin denklemi biçimselliği içerisinde, Singwi ve arkadaşları [31] (STLS), $S_e(q)$ durgun elektron yapı faktörünün bir fonksiyoneli olarak $G(q)$ 'yu elde etmişlerdir.

Bretonnet ve Boulahbak [32], bu fonksiyoneli ve OB Monte Carlo sonuçlarını kullanarak $G(q)$ için, yarı analitik bir ifadeyi elde etmişlerdir. Kendi orijinal yazısında ve sıvı metallere uygulamalarında, matematiksel bir yaklaşım kullanmışlar ve $G(q)$ 'da yer alan spin paralel ($\uparrow\uparrow$) ve ($\downarrow\downarrow$) katkısını ihmal etmişlerdir.

Hellal ve arkadaşları [29], Vashista-Singwi [33] (VS) ve Utsumi-Ichimarü [34] (IU) tarafından önerilen orijinal formalizmindeki gelişmeleri dikkate alarak yeni bir $G(q)$ bölgesel alan fonksiyonunu sayısal olarak hesaplamışlardır.

OB Monte Carlo verilerinden STLS şeması içerisinde ortaya çıkarılan durgun bölgesel alan fonksiyonunun (OB-STLS) ifadeleri [referans 29 içindeki (9) veya (10) denk.] çok karışıktır ve OB-VS veya OB-IU [referans 29 içindeki (17) ve (27) denk.] şemaları ile $G(q)$ fonksiyonları sayısal olarak elde edilmiştir. Bundan dolayı metalik yoğunluklar için ve q menzilinün değişmesi içerisinde kesin bir şekilde tekrar üretilen çok basit bir analitik ifade verilmiştir. Bu ifade;

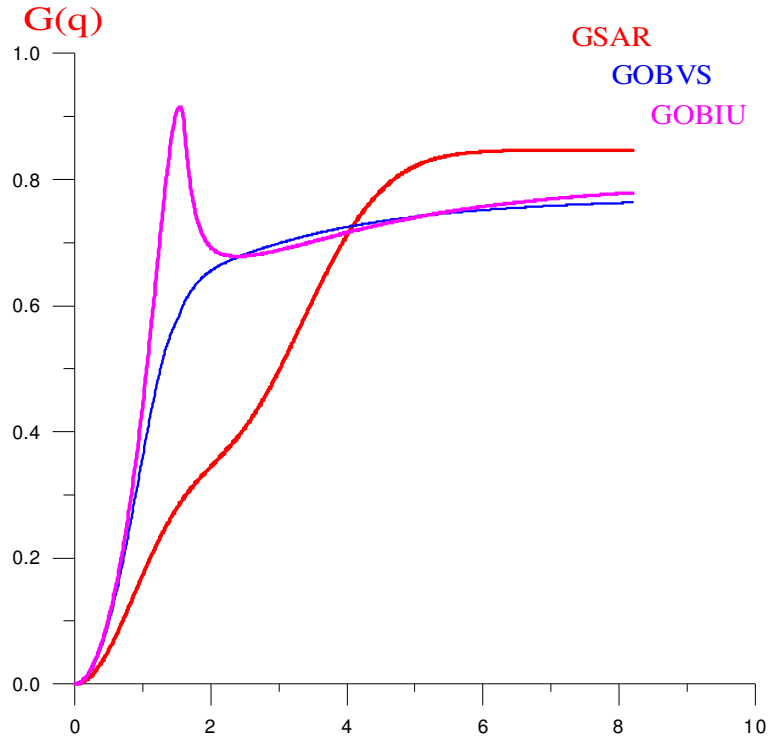
$$Z(\eta) = \frac{1}{2} + \frac{4-\eta^2}{8\eta} \ln \left| \frac{2+\eta}{2-\eta} \right|, \quad \eta = \frac{q}{q_F} \quad (2.3.3.1)$$

$Z(\eta)$ bilinen Lindhard fonksiyonunun terimlerinde $G(q)$ için aşağıdaki denklem elde edilmiştir;

$$G(q) = [1 - Z(\eta)] \times \sum_n D_n(r_s) Z(\eta)^n \quad (2.3.3.2)$$

Burada; $D_n(r_s)$ açılım yoğunluğuna bağlı katsayılardır ve (2.3.3.2) denkleminin sağ tarafındaki $[1 - Z(\eta)]$ ise η 'nın sıfır olduğu yerde $G(q)=0$ koşulunu sağlamak için konulmuştur. Bu denklem içerisinde gösterilen n indeksi pozitif olarak varsayılmıştır.

(2.3.3.2) denkleminde tanımlanan $D_n(r_s)$ kesin fitting parametreleri OB-VS durumu için Tablo 2.1 de ve OB-IU durumu için Tablo 2.2 de gösterilmiştir. Ergime noktası civarındaki Silisyum yarı iletkeninin grafiği şekil 2.3.1 de, üç model için çizilmiştir.



Şekil 2.3.1 : Silisyum için $G(q)$ fonksiyonunun üç modele göre çizimi

Tablo 2.1: OB-VS ifadesi içinde $1 \leq r_s \leq 3$ ve $3 \leq r_s \leq 5$ aralığında $D_n(r_s)$ 'in değerleri

$1 \leq r_s \leq 3$
$D_0(r_s)=0.59334+0.10489r_s-0.00491r_s^2+1.74007 \times 10^{-4}r_s^3-8.95027 \times 10^{-5}r_s^4$
$D_1(r_s)=-0.32951-0.21230r_s+0.00965r_s^2+130.44007 \times 10^{-4}r_s^3-145.95027 \times 10^{-5}r_s^4$
$D_2(r_s)=5.30593+1.31679r_s+0.21208r_s^2+1684.25993 \times 10^{-4}r_s^3+1560.04973 \times 10^{-5}r_s^4$
$D_3(r_s)=-15.07056-3.26070r_s-1.37773r_s^2+7830.94007 \times 10^{-4}r_s^3-7529.95027 \times 10^{-5}r_s^4$
$D_4(r_s)=22.02554+4.48947r_s+2.61918r_s^2-13727.75993 \times 10^{-4}r_s^3+13490.04973 \times 10^{-5}r_s^4$
$D_5(r_s)=-9.81589-2.40712r_s-1.47717r_s^2+7868.54007 \times 10^{-4}r_s^3-8063.95027 \times 10^{-5}r_s^4$
$3 \leq r_s \leq 5$
$D_0(r_s)=0.64995+0.09479r_s-0.01191r_s^2+16.30000 \times 10^{-4}r_s^3-0.12052 \times 10^{-3}r_s^4$
$D_1(r_s)=3.29115-2.55653r_s+0.43412r_s^2+6.94645 \times 10^{-4}r_s^3-2.39052 \times 10^{-3}r_s^4$
$D_2(r_s)=224.77987+21.24814r_s-3.78282r_s^2+747.24645 \times 10^{-4}r_s^3+11.70948 \times 10^{-3}r_s^4$
$D_3(r_s)=116.18740-88.97349r_s+15.72466r_s^2-3562.35355 \times 10^{-4}r_s^3-41.95052 \times 10^{-3}r_s^4$
$D_4(r_s)=-211.65547+156.15424r_s-27.61189r_s^2+7240.34645 \times 10^{-4}r_s^3+63.13948 \times 10^{-3}r_s^4$
$D_5(r_s)=136.96029-97.22916r_s+17.26022r_s^2-4878.05355 \times 10^{-4}r_s^3-38.08052 \times 10^{-3}r_s^4$

Tablo 2.2: OB-IU ifadesi içinde $1 \leq r_s \leq 5$ aralığında $D_n(r_s)$ 'in değerleri

$1 \leq r_s \leq 5$
$D_0(r_s)=0.57353+0.15100r_s-0.01472r_s^2-0.510009 \times 10^{-3}r_s^3+1.17066 \times 10^{-4}r_s^4$
$D_1(r_s)=-0.28578-0.78691r_s-0.12015r_s^2+71.52999 \times 10^{-3}r_s^3-69.12934 \times 10^{-4}r_s^4$
$D_2(r_s)=12.50176+3.83749r_s+1.11258r_s^2-554.48001 \times 10^{-3}r_s^3+531.37066 \times 10^{-4}r_s^4$
$D_3(r_s)=-61.25749-11.63239r_s-4.21829r_s^2+2035.03999 \times 10^{-3}r_s^3-1952.62934 \times 10^{-4}r_s^4$
$D_4(r_s)=167.31876+20.85378r_s+7.66303r_s^2-3744.64001 \times 10^{-3}r_s^3+3608.57066 \times 10^{-4}r_s^4$
$D_5(r_s)=-186.10675-18.83851r_s-6.79233r_s^2+3367.47999 \times 10^{-3}r_s^3-3256.52934 \times 10^{-4}r_s^4$
$D_6(r_s)=70.45671+6.56586r_s+2.34771r_s^2-1173.68001 \times 10^{-3}r_s^3+1137.67066 \times 10^{-4}r_s^4$

3. MALZEME VE YÖNTEM

Bu bölümde öncelikle durgun yapı faktörün hesaplanmasında gerekli olan potansiyelleri sırasıyla açıklayacağız ve sıvı yarı iletkenlerin transport özelliklerinden elektriksel öz direnci ve termoelektrik güç hakkında bilgi vericeğiz.

3.1 İYONLAR ARASI POTANSİYELLER

Homojen bir elektron gaz ortamı, bu gaz içerisindeki elektronlar arasında Coulomb etkileşmesinin olduğu bir ortam olarak tanımlanmaktadır. Bölgesel olarak çok kuvvetli etkileşmeler söz konusudur. Coulomb etkileşmesinden kaynaklanan spinleri farklı olan elektronlar arasındaki karşılıklı etkileşme korelasyon enerjisidir. Spinleri aynı olan elektronlar arasındaki etkileşme takas enerjisidir. Homojen elektron gazı yani jelyum modelinde toplam yük sıfırdır. Biz buna “tek boyutlu plazma modeli” diyoruz. Plazma modelinde yük nötrlüğü korunur.

İyonlar arası potansiyel, iyon tanecikleri arasındaki direkt Coulomb etkileşmesi ile her bir iyonu perdeleyen iletken elektronların oluşturduğu dolaylı etkileşmenin toplamı olarak yazılabilir.

İyonlar arası potansiyel = Direkt (Coulomb) etkileşme + Dolaylı etkileşme

$$V(r) = V_d(r) + V_{ind}(r) \quad (3.1)$$

Direkt etkileşme terimi olan Coulomb potansiyeli, aşağıda verilen elektrostatik enerji formülünden;

$$V_d(r) = \frac{(Ze)^2}{r} \quad (3.2)$$

elde edilir. Dolaylı etkileşme, pseudopotansiyel form faktörü ile değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşme terimlerine bağlıdır.

Saf metaller ve sıvı alaşımların atomlar arası potansiyelinin hesabında pseudopotansiyel kuramı kullanılır. İyonlar arası potansiyelin gerçek uzayda, normalize dalga sayısı ve atomik birimde ifadesi aşağıdaki gibi verilmektedir [35].

$$V_{ii}(r) = \frac{Z^2}{r} \left[1 - \frac{2}{\pi} \int_0^\infty F_N(q) \frac{\sin qr}{q} dq \right] \quad (3.3)$$

Burada Z etkin valans değeri, $F_N(q)$ ise normalize edilmiş enerji dalga sayısına bağlı fonksiyondur. $F_N(q)$ aynı zamanda değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşme terimleri ile pseudopotansiyel biçim faktörünü içeren bir fonksiyondur. (3.3) denklemi ile verilen iyonlar arası etkin çiftli potansiyel bir iyon ile ikinci iyon ve r uzaklıktaki perdeleme elektron bulutu arasındaki elektrostatik etkileşmeyi temsil eder. Birinci terim doğrudan iyon-iyon Coulomb itmesidir ve ikinci terim dolaylı çekici iyon perdeleme bulutu etkileşmesidir.

$$F_N(q) = \left(\frac{q^2}{4\pi Z\rho} \right) \left(w_q^0(K) \right)^2 \left[\frac{1}{1-G(q)} \right] \left[1 - \frac{1}{\varepsilon(q)} \right] \quad (3.4)$$

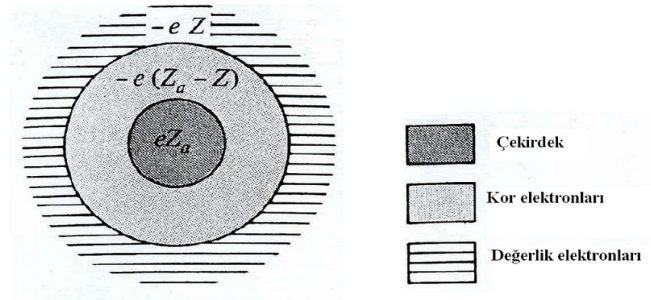
(3.4) denkleminde, $w_q^0(K)$ pseudo potansiyel form faktör ve $\varepsilon(q)$, değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşme terimlerinin dielektrik fonksiyonu, $G(q)$ bölgesel alan düzeltme fonksiyonu sayesinde diyebiliriz ki $F_N(q)$ sadece saçılma momentum uzayı olan q uzayına bağlıdır.

Bu tez çalışmasında atomlar arası potansiyel $V_{ii}(r)$ 'ın ve yarı iletken metallere Silisyumun yapısal ve termodinamik özelliklerinin hesabı için, $w_q^0(K)$ form faktörü, Bachelet, Hamann ve Schlüter (BHS) pseudopotansiyeli [36], $\varepsilon(q)$ dielektrik fonksiyonu ise Thomas-Fermi lineer perdeleme teorisi [22,37] kullanılarak yapılmıştır. Ayrıca çeşitli yazarlar tarafından önerilen [24,27] $G(q)$ bölgesel alan düzeltme fonksiyonundan, $\varepsilon(q)$ dielektrik fonksiyonu hesabında da faydalanılmıştır. Şimdi bu konular üzerinde sırasıyla duralım:

3.2 PSEUDOPOTANSİYEL YÖNTEMLER

Basit metallerin davranışı, değerlik elektronları ve metal iyonları arasındaki etkileşmeler çok küçük olduğu için serbest elektron sistemine benzer. İletkenlik iyonları dalga fonksiyonları genelde iyon merkezlerinden uzakta düzgün ama iyonlar civarında karmaşık bir düğüm yapısına sahiptir. İyon merkezinden uzakta, iletkenlik elektronuna etkiyen enerji zayıftır. Coulomb potansiyeli diğer iletkenlik elektronların perdeleme etkisiyle zayıf kalır ve dış bölgedeki enerjiyi serbest elektronların enerjisi gibi $\varepsilon(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$ yazabiliriz. Fakat aynı elektronları iyon merkezi civarında düzlem dalga gibi davranmadıkları için bu şekilde inceleyemeyiz. Bu özellik iç bölgedeki gerçek potansiyel yerine, dış bölgede aynı dalga fonksiyonunu veren etkin bir potansiyel enerji kullanılabileceği düşüncesini getirir. Bu koşulu sağlayan etkin potansiyel pseudopotansiyeldir.

Bir metaldeki elektron-iyon etkileşmesinin oluşturduğu net etkin potansiyelin belirlenmesinde (model) pseudopotansiyel yaklaşımı çok önemlidir. Drude modeline göre bir metalin yapısı şematik olarak aşağıdaki şekilde gösterilmiştir [38].



Şekil 3.1: Drude Modeline göre yüksüz atomun yapısı

Kor (öz) elektronları dışında Coulomb potansiyeli ile ayrılan ve model alınan bir kor yarıçapı içindeki yoğun bir fazda iyonun pseudopotansiyel formu analitik biçimde belirlenebilir. Bu yaklaşımdan faydalanarak sıvının çeşitli özelliklerini tartışmak

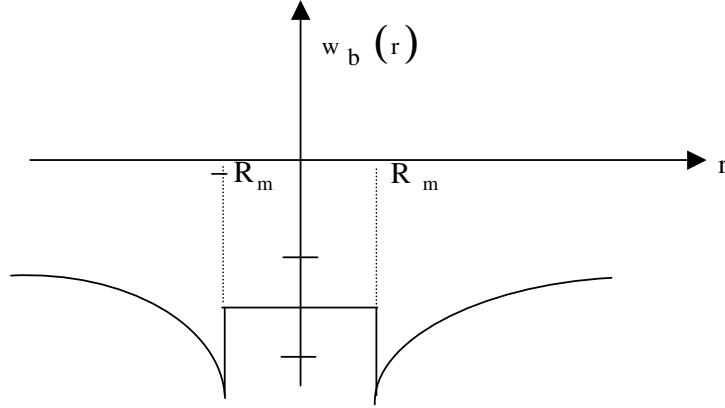
mümkün olmaktadır. Sıvı metallerde elektronik özellikleri hesaplayabilmek için Ziman formülünün iskeletini oluşturan model potansiyel yöntemi, ilginç bir teknik olarak kanıtlanmıştır [36]. Model potansiyellerin ilk ilkesi bölgesel olmamasıdır. Ayrıca parametreleri enerjiye bağlıdır. Çünkü alaşımlarda etkin kütle, Fermi enerjisi, kore kayması... gibi parametreler enerjiye bağlı olduğundan hesaplamalarda enerjiyi göz önünde tutmalıyız. Bachelet, Hamann ve Schlüter, bu düzeltmeleri yapma gereğinden kurtulmak için yeni bir aile olan enerjiden bağımsız pseudopotansiyel modelleri ortaya koymuşlardır.

3.2.1 Heine ve Abarenkov ‘un Model Potansiyeli

Heine ve Abarenkov 1964 yılında model potansiyeli ℓ açısall momentum olmak üzere R_M yarıçapını içine alan kare kuyu potansiyeli formunda almışlardır [37]. Bu kuyunun derinliği enerjiye ve ℓ açısall momentuma bağlı olarak $A_\ell(E)$ biçiminde ifade edilmektedir. $\ell > 2$ olan tüm değerleri için $A_\ell = A_2$ alınır. A_ℓ burada ℓ ' ye bağlı normalizasyon sabitidir.

$$w_b(r) = \begin{cases} -\sum A_\ell(E) P_\ell & \text{için } r < R_M \\ -\frac{Z|e|^2}{r} & \text{için } r > R_M \end{cases} \quad (3.2.1.1)$$

Burada, P_ℓ izdüşümü operatörüdür. Bu model potansiyel bölgesel değildir ve enerjiye bağlıdır. Kuyu derinliği A_ℓ ve Fermi enerjisinde yani $r = R_M$ noktasında potansiyel $w_b(r) = -Z|e|^2/R_M$ olmaktadır. Tam bu noktada, şekil (3.1) de görüldüğü gibi ufak bir süreksizlik söz konusudur.



Şekil 3.2: Heine ve Abarenkov'un model potansiyeli

3.2.2 Ashcroft Model Potansiyeli

Eğer Heine ve Abarenkov' un model potansiyelinde R_M kor yarıçapına eşit seçilirse A_ℓ sifıra yaklaşır. Böylece Ashcroft' un boş kor modeline ulaşırız.

$$V_b(r) = \begin{cases} 0 & r < R_c \\ -\frac{Ze^2}{r} & r > R_c \end{cases} \quad (3.2.2.1)$$

Burada R_c boş kor yarıçapıdır. Temelde boş kor potansiyeli bölgesel potansiyeldir. Çünkü; $r < R_c$ bölgesinde gerçek potansiyel ihmal edilmiştir. (3.2.2.1) denkleminin Fourier transformu alınarak

$$V(q) = -\frac{4\pi Ze^2}{q^2} \cos(qR_c) \quad (3.2.2.2)$$

değeri bulunur. Bu değer Thomas-Fermi yaklaşımı kullanılarak $\epsilon(q)$ ya bölünürse perdelenmiş pseudopotansiyel elde edilir

3.2.3 Jivani-Gajjar-Jani Model Potansiyeli

Jivani ve arkadaşları, elektron-iyon etkileşmesiyle tanımlanan bir model potansiyeli silisyum yarı iletkeni için göstermişlerdir. Bu model potansiyel tek parametrelidir, r -uzayında sürekli ve kor bölgesinde zayıf, kor bölgesi dışında Coulombiktir. Potansiyelin

parametreleri basıncın sıfır olduğu ortamda, denge şartı olarak belirlenmiştir. Toplam enerji, silisyumun hacim katsayısı ve konumunun denkleminde kovalent düzeltme terimini içeren pseudopotansiyeye bağlı olan yüksek mertebeden pertürbasyon teorisi kullanılarak hesaplanmışlardır.

Pseudopotansiyel formalizmine dayanan ikinci mertebeden pertürbasyon teorisi basit metallere, onların alaşımlarına, camlara ve bileşiklere uygulanabilir [39]. Bununla beraber, ikinci mertebeden pertürbasyon teorisi kovalent kristaller için kovalent bağlanma karakterlerinden dolayı başarısızdır. Böyle zorluklar kovalent bağlanma etkisi ile ilgili olarak yüksek mertebeden terimleri hesabın içine katarak pseudopotansiyelin terimlerinde pertürbasyon teorisinin uzantısıyla değişir. Soma [40], Ashcroft Model potansiyelini kullanarak, IV grup yarı iletkenlerin toplam enerji ve hacim katsayıları hesaplarında bu yüksek mertebeden pertürbasyon teorisini kullanmıştır. Alışılmış R_c potansiyel parametresine ek olarak, ayarlanabilir ek parametre R_c' birinci mertebeden pertürbasyon teorisi içinde minimum enerji şartını sağlama almak için Soma tarafından eklenmiştir. Buradan yola çıkarak, Jivani ve arkadaşları genişletilmiş pertürbasyon kuramını kullanarak saf Si ve Ge yarı iletkenlerinin hacim katsayısını ve toplam enerjiyi inceleyerek, kendilerinin tek parametrelili model potansiyellerinin [41] uygulamalarını genişletmişlerdir.

r - uzayında model potansiyellerinin analitik formu aşağıdaki gibidir;

$$W(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{R_c} \left[\frac{3r}{2R_c} - \frac{r^2}{2R_c^2} \right] & r < R_c \\ -\frac{Ze^2}{r} & r \geq R_c \end{cases} \quad (3.2.3.1)$$

Burada Z iyonların değerlik sayısı, e elektronik yük ve R_c model potansiyel parametresidir. R_c potansiyel parametresi, sıfır basınç şartı kullanılarak hesaplanır. Bu model potansiyelinin momentum uzayındaki gösterimi;

$$W_b(q) = -\frac{12\pi Z}{\Omega q^3 R_c} \left[\frac{\sin(qR_c)}{2} + \frac{\sin(qR_c)}{(qR_c)^2} - \frac{1}{qR_c} \right] \quad (3.2.3.2)$$

şeklinde bulunur. q , dalga vektörüdür.

3.2.4 BACHELET-HAMANN- SCHLÜTER (BHS) MODEL POTANSİYELİ

Bachelet, Haman ve Schluter, model (pseudo) potansiyelleri, bölgesel olarak almayıp yalnız ve yalnız potansiyel parametrelerini enerjiden bağımsız olarak seçmişlerdir. Sıvı metallerin ve alaşımların elektronik özelliklerinin hesabının başlangıç noktası, pseudopotansiyel form faktörün hesabıdır.

Heine, Abarenkov, Animalu ve Shaw pseudopotansiyeli, yalnız saf, geçiş ve nadir toprak metalleri için iyi tanımlanmasına karşın, BHS pseudopotansiyeli enerjiden bağımsız olması sebebiyle periyodik tabloda Hidrojenden Plutonyuma kadar geniş bir alanda geçerli oldu [36].

BHS'nin iyon pseudopotansiyeli ℓ , açısal momentum ve $\hat{V}_\ell^{so}$, spin-yörünge etkileşmelerinden kaynaklanan potansiyel olmak üzere aşağıdaki gibi verilir. Bu yaklaşımda ℓ_0 , ℓ den daha büyük değerdedir. Bu tez çalışmasında atomlar arası potansiyel hesaplanırken spin-yörünge etkileşmelerinden kaynaklanan $\hat{V}_\ell^{so}(r)$ potansiyeli ihmal edilmiştir.

$$\hat{V}_{ps}^{ion} = \sum_{\ell_0} |\ell\rangle \left[\hat{V}_\ell^{ion}(r) + \hat{V}_\ell^{so}(r) \cdot \vec{L} \vec{S} \right] \langle \ell| \quad (3.2.4.1)$$

$\hat{V}_\ell^{ion}(r)$ yi biz, ℓ den bağımsız uzun menzilli Coulomb kısmı ve ℓ ye bağlı kısa menzilli pseudopotansiyel kısmı olarak ayırabiliriz.

$$\hat{V}_\ell^{ion}(r) = \hat{V}_{core}(r) + \Delta \hat{V}_\ell^{ion}(r) \quad (3.2.4.2)$$

Burada; $\hat{V}_{core}(r)$, ℓ açısal momentumundan bağımsız Coulomb potansiyeline bağlı iken $\Delta \hat{V}_\ell^{ion}(r)$ ise ℓ açısal momentumuna bağlı kısa erişimli pseudopotansiyelden elde edilir. Kor potansiyeli, Gaussyen tipi etkin kor yüklerinden kaynaklanmış olarak düşünülür. Bu yüzden $r \rightarrow 0$ için sonlu bir değere düzgün olarak yaklaşır. $\Delta \hat{V}_\ell^{ion}(r)$ ise Gaussyen tipi fonksiyonlara genişletilir. Bu potansiyeller aşağıdaki gibi verilmektedir.

$$\hat{V}_{core}(r) = -\frac{Z_v}{r} \left[\sum_{i=1}^2 C_i^{core} \text{erf}(\alpha_i^{core} \cdot r) \right] \quad (3.2.4.3)$$

$$\Delta \hat{V}_\ell^{ion}(r) = \sum_{i=1}^3 \left[A_i + r^2 A_{i+3} \right] \exp(-\alpha_i \cdot r^2) \quad (3.2.4.4)$$

Bu tez çalışmasında yarı iletken metallere Silisyum metali için c_i^{core} (lineer katsayıları), α_i^{core} (bozulma sabitleri) ve Z_v (değerlik yükleri) değerleri Ek-B de gösterilmiştir. BHS form faktörü de (3.2.4.5) eşitliği ile verilmektedir.

$$W_q^0(K) = N \left\langle \vec{K} + \vec{q} \left| \hat{V}_{ps}^{ion} \right| \vec{K} \right\rangle \quad (3.2.4.5)$$

N : iyon sayısı

K : Fermi küresine gelen düzlem dalga vektörü

q : Fermi küresinden yansıyan dalga vektörü

Form faktörü aşağıdaki formda alınırsa [36], bölgesel kısım $V(q)$ 'da (3.2.4.7) denklemi ile verilir.

$$W_q^0(K) = V(q) + f(K, q) \quad (3.2.4.6)$$

$$\begin{aligned} V(q) = & -\frac{4\pi Z_v}{\Omega_0 q^2} \sum_{i=0}^2 C_i^{core} \exp \left[\frac{-q^2}{4\alpha_i^{core}} \right] \\ & + \frac{\pi^{3/2}}{\Omega_0} \sum_{i=1}^3 \frac{\exp \left(\frac{-q^2}{4\alpha_i(\ell_0)} \right)}{\alpha_i^{3/2}(\ell_0)} \times \left[A_i(\ell_0) + \frac{A_{i+3}(\ell_0)}{2\alpha_i(\ell_0)} \left(3 - \frac{q^2}{2\alpha_i(\ell_0)} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.2.4.7)$$

Ω_0 = atomik hacim

Z_v = değerlik bandı elektron sayısı

$\ell = \ell_0$ için A_i ve α_i değerleri $A_i(\ell_0)$, $\alpha_i(\ell_0)$ olarak alınır.

Biçim faktörün bölgesel olmayan kısmı olan $f(K, q)$ K 'ya bağlı olduğu için daha karmaşıktır.

$$\begin{aligned} f(K, q) = & \frac{4\pi}{\Omega_0} \sum_{\ell=0}^{\ell_0-1} (2\ell+1) P_\ell(\cos \vartheta) \\ & \times \int_0^\infty r^2 dr j_\ell(Kr) j_\ell(K'r) \left(\Delta \hat{V}_\ell^{ion}(r) - \Delta \hat{V}_{\ell_0}^{ion}(r) \right) \end{aligned} \quad (3.2.4.8)$$

ile verilir. Burada, j_ℓ ; Bessel fonksiyonu P_ℓ ; K ve $K' = K + q$ arasındaki ϑ açısına bağlı Legendre polinomudur.

Bu tez çalışması d metalleri için olduğundan $f(K, q)$ denkleminde d bandı için $\ell_0 = 2$ alarak $f(K, q)$ denklemi;

$$f(K, q) = \frac{4\pi}{\Omega_0} \sum_{\ell=0}^{\ell_0-1} (2\ell+1) P_\ell(\cos \vartheta) \times \int_0^\infty r^2 dr j_\ell(Kr) j_\ell(K'r) (\Delta \widehat{V}_\ell^{\text{ion}}(r) - \Delta \widehat{V}_2^{\text{ion}}(r)) \quad (3.2.4.9)$$

şeklinde düzenlenir. s,p,d bandı metaller için $\ell_0 = 0, 1, 2$ değerleri genelleştirilirse Legendre polinomları

$$P_0 = 1 \quad (3.2.4.10)$$

$$P_1(\cos \vartheta) = \cos \vartheta \quad (3.2.4.11)$$

$$P_2(\cos \vartheta) = \frac{1}{2} (3 \cos^2 \vartheta - 1) \quad (3.2.4.12)$$

değerlerini alır. Burada $(\cos \vartheta)$ yerine referans [42] de verildiği gibi

$$\cos \vartheta = 1 - \frac{q^2}{2q_F^2} \quad (3.2.4.13)$$

alırız. $f(K, q)$ denkleminde $\Delta V_\ell^{\text{ion}}$ ve $\Delta V_{\ell_0}^{\text{ion}}$ terimleri yerlerine yazılırsa iki tip integral ortaya çıkar.

$$I_\ell(K, K') = \int_0^\infty r^2 j_\ell(Kr) j_\ell(K'r) \exp(-\alpha_i r^2) dr \quad (3.2.4.14)$$

$$J_\ell(K, K') = \int_0^\infty r^4 j_\ell(Kr) j_\ell(K'r) \exp(-\alpha_i r^2) dr \quad (3.2.4.15)$$

(3.2.4.14 ve 15) denklemlerinde kullanılan $j_\ell(x)$ Bessel fonksiyonları $\ell_0 = 0, 1$ ve 2 değerleri için;

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x} \quad (3.2.4.16)$$

$$j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x} \quad (3.2.4.17)$$

$$j_2(x) = (3x^{-3} - x^{-1})\sin x - 3x^{-2}\cos x \quad (3.2.4.18)$$

verilmektedir. (3.2.4.14 ve 15) denklemlerinin analitik hesaplamaları,

$$X = e^{\left(\frac{-(K+K')^2}{4\alpha_i} \right)} \quad (3.2.4.19)$$

$$Y = e^{\left(\frac{-(K-K')^2}{4\alpha_i} \right)} \quad (3.2.4.20)$$

dönüşümleri yapılarak Ek A da verilmektedir. Bu dönüşümlerde görülen K ve K' değerleri yerine

$$q \leq 2q_f \quad \text{olduğunda} \quad \vec{K} = \vec{K}_f$$

$$q > q_f \quad \text{olduğunda} \quad \left| \vec{K} + \vec{q} \right| = \vec{K}_f \quad \text{veya} \quad \left| \vec{K} + \vec{q} \right| = \vec{q} - \vec{K}_f$$

ifadeleri yazılır. B.H.S form faktör, hem $V(q)$ hem de $f(K,q)$ da ki $\Delta V_{\ell}^{\text{ion}}$ ve $\Delta V_{\ell_0}^{\text{ion}}$ değerleri bulunurken bölgesel olmayan ve kısa erişimli bu potansiyeller lineer olmayan en küçük kareler yöntemi tarafından fit edilir (eğrileri fonksiyonla özleştirilir). Fitting fonksiyonunun lineer olmayan bağımlılığı A matrisi ile verilmiştir [43]. $i = 1,2,3$ alınıyordu. $\ell_0 = 0,1$ ve 2 için A $(6,1)$ 'lik bir matristir.

$$A_i = -\sum_{j=1}^6 C_j \Phi_{ij}^{-1} \quad (3.2.4.21)$$

Dik matris C_j değerleri Ek B' de verilmiştir. $\phi_{ij} = (6,6)$ matrisini ise

$$\Phi_{ij} = \begin{cases} 0 & i > j \\ \left[S_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} \Phi_{ki}^2 \right]^{1/2} & i = j \\ \left[\frac{S_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} \Phi_{ki} \Phi_{kj}}{\Phi_{ii}} \right] & i < j \end{cases} \quad (3.2.4.22)$$

Ref. [44]' te olduğu gibi ifade edilir. Burada ki $S_{ij}(6,6)$ matrisinin tanımı, α_i bozulma sabiti ile değişen $\phi_i(r)$ terimine bağlı olarak verilmektedir.

$$S_{ij} = \int_0^\infty r^2 \phi_i(r) \phi_j(r) dr \quad (3.2.4.23)$$

$$\phi_i(r) = \begin{cases} e^{-\alpha_i r^2} & i = 1, 2, 3 \\ r^2 e^{-\alpha_i r^2} & i = 4, 5, 6 \end{cases} \quad (3.2.4.24)$$

3.3. SIVI YARI İLETKENLERİN TRANSPORT ÖZELLİKLERİ

Son yıllarda, basit olmayan sıvı metallerin elektriksel özdirenci ve termoelektrik güç üzerine, Evans ve arkadaşları [45] tarafından verilen t-matris yaklaşıklığı kullanılarak yapılan hesaplamaların çoğunluğu yayınlanmıştır [46, 47]. Bu bölümde tezimin özgün kısmı olan elektriksel özdirenç ve termoelektrik güç hakkında kuramsal çalışmaları sırasıyla vereceğiz.

3.3.1. Elektriksek Özdirenç

Evans ve arkadaşlarının [45] yapmış oldukları yaklaşımda, Ziman'ın [48] ortaya koyduğu çalışmanın genişletilmiş bir biçiminde, elektriksel özdirenç;

$$\rho(E) = \frac{3\pi m_e^2 \Omega_0}{4e^2 \hbar^3 q_F^6} \int_0^{q_F} q^3 dq |T|^2 \quad (3.3.1)$$

olarak tanımlanmaktadır. Burada, T ,

$$|T|^2 = S(q) |t(q, E)|^2 \quad (3.3.2)$$

olarak verilmektedir ve $\Omega_0 = \frac{V}{N}$ atomik hacimdir. (3.3.1) denkleminde, tezimizin her bölümünde olduğu gibi atomik birim sistemi kullanılmıştır, yani, $e = \hbar = m_e = 1$ 'dir. $|T|^2$, iyonların doğasını belirleyen $S(q)$ statik yapı faktörü ve elektron-iyon karşılıklı etkileşmesini ifade eden t-matris biçim faktörü ile çarpımından oluşmaktadır. $t(q)$ matrisi, bir sıvıda tekil bir muffin-tin potansiyeli etkisinde, bir q_F halinden, bir diğer q_F haline geçişi esnasında bir elektron saçılmasını göstermektedir ve aşağıdaki bağıntı ile verilmektedir.

$$t(q, E) = -\frac{2\pi}{m\sqrt{3mE\Omega_0}} \sum_l (2l+1) \sin\eta_l(E) \cdot \exp(i\eta_l(E)) P_l(\cos\theta) \quad (3.3.3)$$

Sıvı metaller içerisinde oluşan saçılım, örneğin elektronların akısı, bir saçılma merkezi üzerine gelmektedir ve sonlu bir doğrultu üzerinde saçılan elektronların sayısının bilinmesi önemlidir. Bu problemin genellikle faz analizi kullanılarak tartışılması uygundur [49]. Birçok amaçlar için, pertürbe edilmiş potansiyel altında kaç tane

elektronik dalga fonksiyonunun davranışının üzerindeki ayrıntılı bilgiler gerekli değildir. Bu tamamen faz kaymaları tarafından saptanmıştır. Burada, faz kaymaları normal olarak (3.3.3) denkleminde tanımlanan η_0, η_1, η_2 ile gösterilmektedir. l .inci kısmi dalğanın η_l faz kayması bir $w(y)$ model potansiyel ile bağlanarak (3.3.4) denklemi ile verilmektedir.

$$\eta_l = \frac{q_F \Omega_0}{4\pi} \int_0^2 W(y) y P_l(\cos \vartheta) dy \quad (3.3.4)$$

burada, $y = q/2 q_F$, $\cos \vartheta = 1 - \frac{q^2}{2q_F^2}$ ve $P_l(\cos \vartheta)$ Legendre polinomudur.

Yukarıdaki (3.3.4) denklemi kullanılarak η_0, η_1, η_2 faz kayması sırasıyla s, p ve d bileşenleri için kullanılmıştır ve tablo 3.1'de ergimiş silisyum için bulunan değerler gösterilmiştir.

TABLO 3.1 : Ergimiş silisyum için (3.3.4) denklemi ile hesaplanan faz kaymaları

Metal	η_0	η_1	η_2
Si	-2.179	0.713	0.052

3.3.1. Termoelektrik Güç

Belirli bir sıcaklıkta termoelektrik güç aşağıdaki şekilde yazılabilir;

$$Q = -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3|e|E_F} \xi \quad (3.3.9)$$

Burada boyutsuz parametre;

$$\xi = -\frac{q_F}{2} \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial k} \Big|_{k=q_F} \quad (3.3.10)$$

Eğer $\Gamma(q) = |w(q)|^2 S(q)$ olarak tanımlanırsa,

$$q = \frac{4q_F C \Gamma(2q_F)}{\rho} \quad (3.3.11)$$

$$C = \frac{3\pi m^2 \Omega_0}{4e^2 \hbar^3 q_F^6} \quad (3.3.12)$$

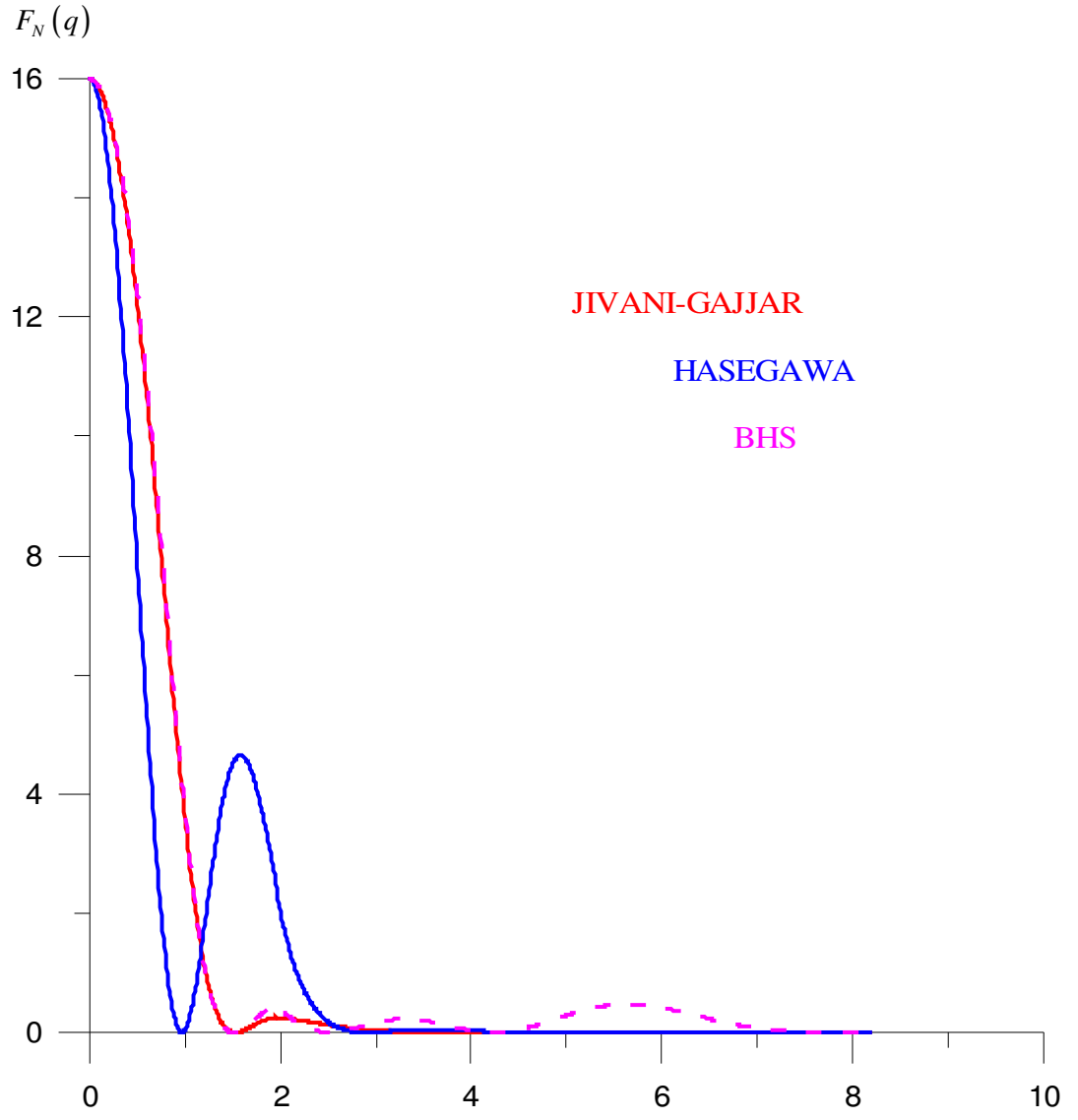
ve

$$r = \frac{q_F C \int_0^{2q_F} q^3 \frac{\partial \Gamma}{\partial k} dq}{\rho} \quad (3.3.13)$$

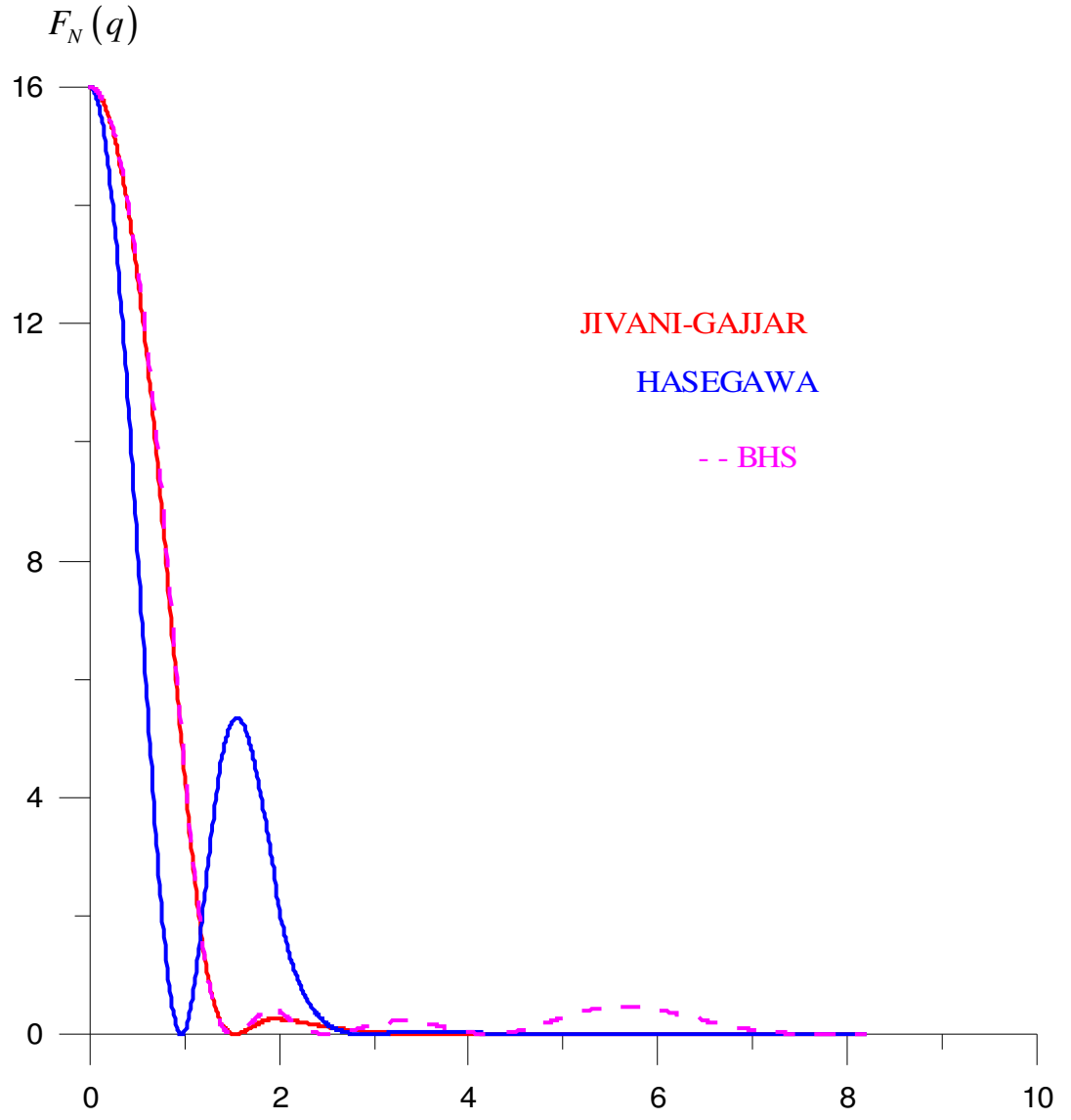
ile $\xi = 3 - 2q - \frac{r}{2}$ şeklinde yazılabilir [50]. Burada 3 serbest elektron katkısı, $2q$ pseudopotansiyel terimi (elektiriksel dirençliliğin integralinin üst limitinin elde edilmesinden gelir) ve $r/2$ enerjiden bağımsız model potansiyel için sıfıra eşit olan enerjiye bağlı terimdir.

4. BULGULAR

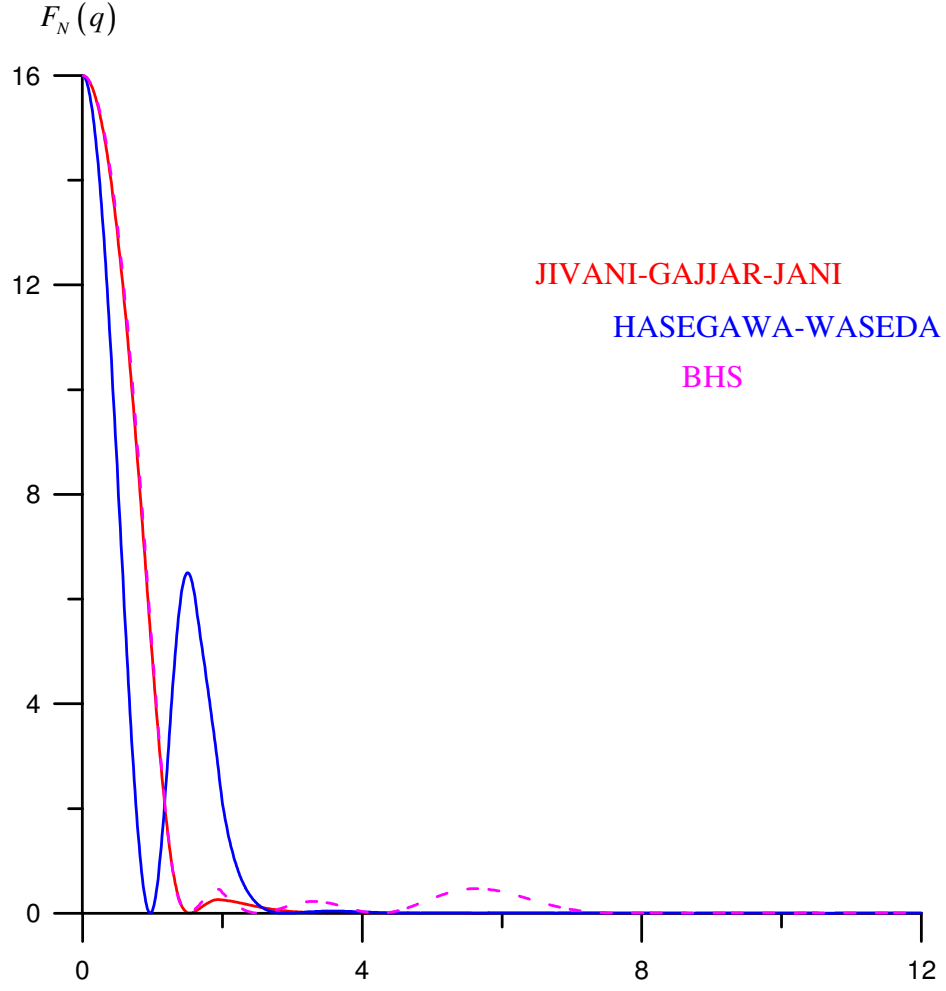
Ergime sıcaklığı civarında incelediğimiz Silisyum metalinin ele alınan üç potansiyele (Jivani, Hasegawa ve BHS potansiyelleri) göre $F_N(q)$ normalize edilmiş enerji dalga sayısı karakteriği fonksiyonunun Sarkar, OB-VS ve OB-IU modellerine göre elde edilen sonuçları şekil (4.1), (4.2) ve (4.3)'te verilmiştir. Kullanılan model potansiyelin (Jivani-Gajjar), $T=1733 \text{ } ^0K$ de değişimi şekil (4.4) te verilmiştir. Silisyumun statik yapı faktörü $S(q)$ nun yaptığımız hesaplamalara göre Fourier uzayında ve atomik birimlere göre değişimi ve Waseda'nın deneysel sonuçlarıyla karşılaştırılması, şekil (4.5) ve (4.6)' da verilmektedir.



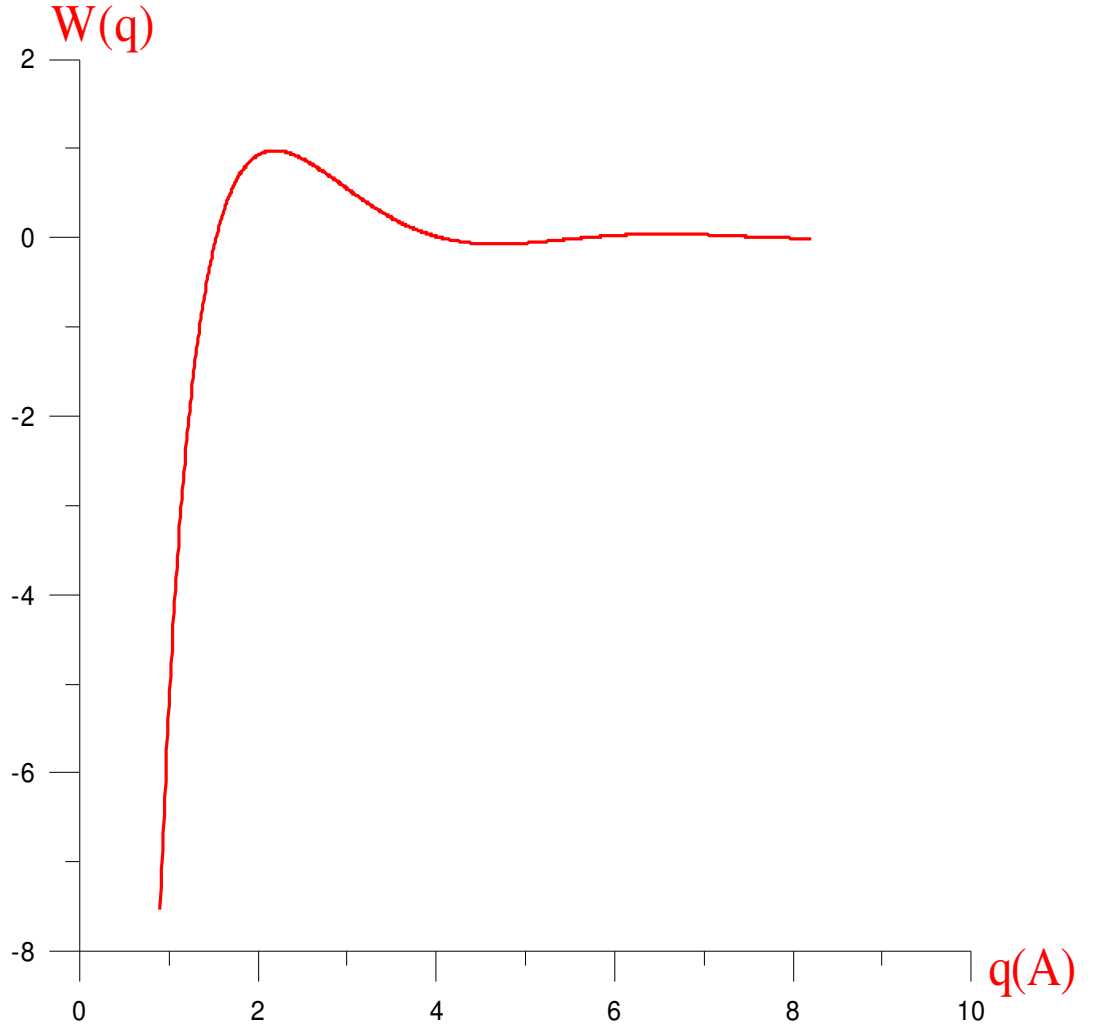
Şekil 4.1: Sarkar Modeline göre $F_N(q)$ normalize edilmiş enerji dalga sayısı karakteriği fonksiyonu



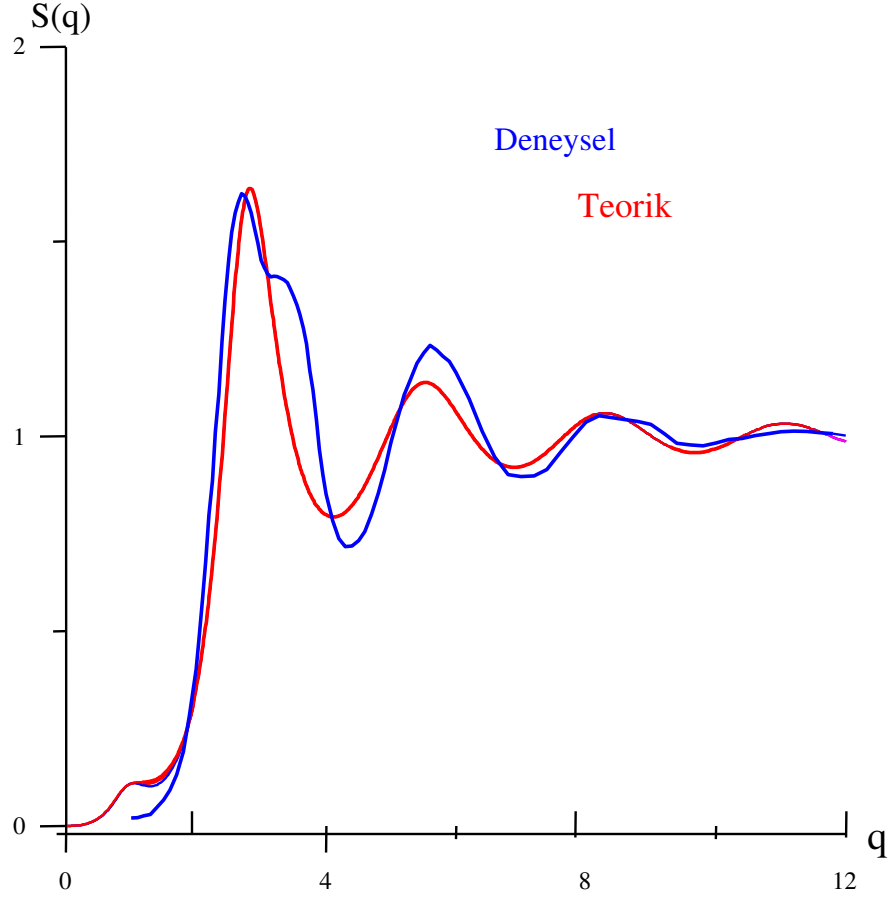
Şekil 4.2: OB-VS Modeline göre $F_N(q)$ normalize edilmiş enerji dalga sayısı karakteriği fonksiyonu



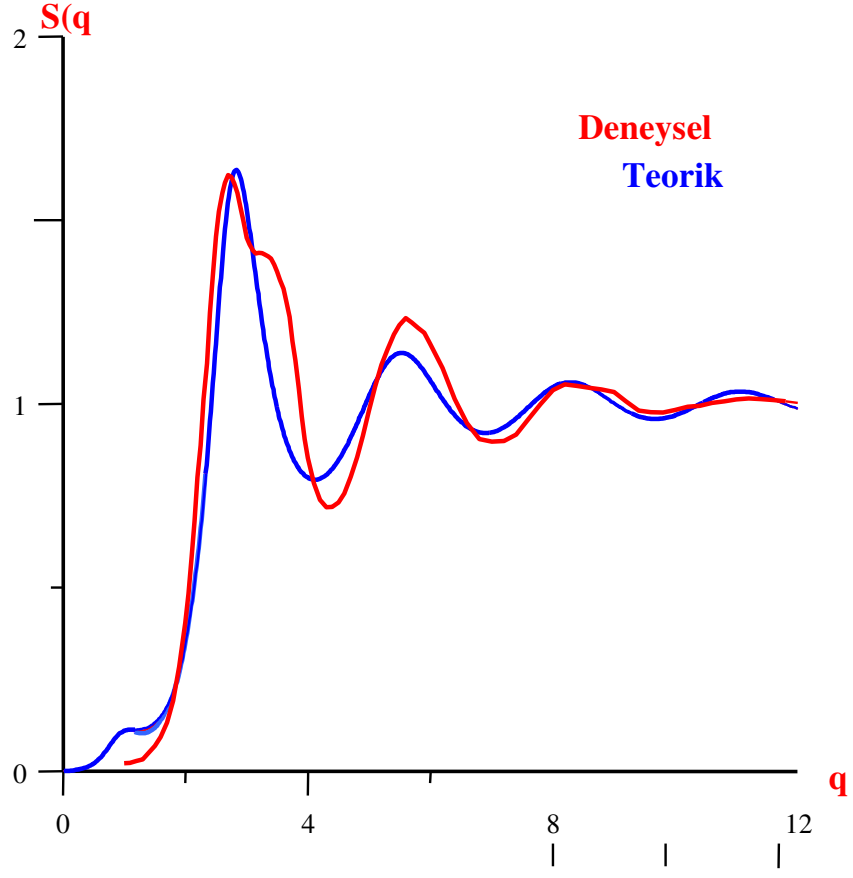
Şekil 4.3: OB-IU Modeline göre $F_N(q)$ normalize edilmiş enerji dalga sayısı karakteriği fonksiyonu



Şekil 4.4: $T=1733^{\circ}\text{K}$ Jivani-Gajjar-Jani Modeline potansiyelin değişimi



Şekil 4.5: $T=1733\text{ }^{\circ}\text{K}$ Jivani-Gajjar-Jani Modeline $S(q)$ yapı sabitinin q ya göre değişimi



Şekil 4.6: $T=1733$ K BHS Modeline $S(q)$ yapı sabitinin q ya göre değişimi

5. TARTIŞMA VE SONUÇ

Üzerinde birçok deneysel ve kuramsal araştırmaların ele alındığı ergimiş Silisyum, olağan olmayan fiziksel özelliklerden birçoğuna sahiptir. Daha önceki bölümlerde vurguladığımız gibi, Kristal halinde bulunan silisyum, daima bir elmas yapısına sahip bir yarı iletkendir. Ergime esnasında, kendisi bazı yapısal değişmelere gitmektedir, örneğin, yoğunluğun ve elektriksel direncinin artması, metalik bir davranış karakterinin bulunması gibi.

Metalik yapısına rağmen, sıvı silisyumun davranışı herhangi bir basit sıvı metalden daha karışıktır. Sıvı basit metallerin yapısı genellikle, katı kürelerden oluşmuş bir akışkaninkine benzerdir. Diğer taraftan, literatürde, x-ışınları kırınımı tarafından sıvının koordinasyon sayısı olarak tanımlanan değeri, birçok basit metal ile karşılaştırıldığında oldukça düşük olmasından başka, sıvı silisyumun deneysel yapı faktörü [51], birinci pikin artan q-bölgesinde bir hörgüce sahiptir ki bu özellik şekil 4.5 ve 4.6'dan görüldüğü gibi bir katı küre modelinde elde edilememektedir. Bu farkın nedeni, sıvı durumda iken üzerinde söz konusu olan kovalent bağlanmanın ortaya koyduğu özelliklerden kaynaklanmaktadır [1]. Metalik ve kovalent arasındaki karşılıklı etkileşme, sıvı silisyumu dolayısıyla sıvı germanyumu özel bir ilgi odağı haline getirmiştir.

Sıvı yarı iletkenlerin özellikleri, diğer taraftan teknolojik bir bakış açısından önem kazanmaktadır. Birçok yarı iletkenlerde, sıvının transport (taşıma) katsayıları, ergimiş olanlardan daha büyüktür. Örneğin katı halde iken silisyumun deneysel elektriksel öz direnci $78 \mu\Omega \cdot cm$ iken, sıvı halde ise deneysel değeri olarak bulunmaktadır. Bunun nedenini, deneysel olarak ayırık saptamak şu ana kadar mümkün olmamıştır.

Kuramsal taraftan ise, sıvı silisyum üzerinde yapılan araştırmalar, bu konu üzerinde çalışanları, kovalent katkıları içeren yani deneysel potansiyelleri dolayısıyla çeşitli

pseudo potansiyel modelleri kullanarak nedenlerini ayrıntılı olarak araştırmaya gitmişlerdir.

Daha öncede belirttiğimiz gibi, kor elektronlarının karşılıklı etkileşmelerini iyi bir biçimde açıklayan model potansiyeller genellikle iki kısımdan oluşmaktadır; 1- Enerjiye bağlı (Jivani ve arkadaşlarının modeli), 2- Enerjiye bağlı olmayan (BHS modeli). Bu modelleri kullanarak ve genişletilmiş Ziman formülü ile yapılan araştırmalardan elde edilen sonuçlar yapılmış olan deneysel bir araştırma ile aşağıdaki tabloda tekrar karşılaştırılmıştır;

Tablo 5.1: Sıvı geçiş metalleri için kendi erime noktası civarında hesaplanan elektriksel dirençlerin deneysel sonuçla karşılaştırılması

Metal	Sıcaklık ($^{\circ}K$)	Jivani-Gajjar modeli ($\mu\Omega.cm$)	BHS modeli ($\mu\Omega.cm$)	Deneysel sonuç ($\mu\Omega.cm$)
Silisyum	1733	83.05	81.9	78

Tablodan görüldüğü gibi enerjiden bağımsız olan BHS modelinden elde edilen sonuç, Jivani ve arkadaşlarının modelinden elde edilen sayısal sonucundan daha küçük olduğu ve deneysel sonuca daha yakın olduğu saptanmıştır. Diğer taraftan saptamış olduğumuz önemli bir bulguda, elektriksel özdirenci, η' 'nın yani paketleme kesrinin değişimine şiddetle bağlıdır ve sonuçları tablo 5.2'de gösterilmiştir.

Tablo 5.2: η paketleme kesrinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

η	Elektriksel Özdirenci	Deneysel sonuç
0,30	83,05	78
0,35	72	78

Görüldüğü gibi, η' 'nın yani paketleme kesrinin değeri deneysel değerden daha azdır. Bu konuda ileride yapılacak önemli bir araştırmada özdirencin, niçin η 'nın seçimine

duyarlı bir biçimde davranış gösterdiği. Benzer biçimde olan diğer bir durum, termoelektrik gücün hesabında da söz konusudur.

Diğer taraftan, genişletilmiş Ziman formülünden görüldüğü gibi, özdirencin ve dolayısıyla termoelektrik gücün kuramsal değerinin saptanması, $S(q)$ yapı sabitinde iyi bir şekilde saptanması ile eşdeğerdeki yapmış olduğumuz seçimlerde (Jivani, BHS modelleri) elde ettiğimiz yapı faktörlerinin deneysel sonuçlarla q ya göre karşılaştırılması daha önce şekil (4.5) ve (4.6) da gösterilmiştir. Bu grafiklerden görüldüğü gibi, her ne kadar bir hörgücün görülmemesine karşın birinci piklerinin birbirleri ile çok iyi uyum sağladıkları, ikinci ve diğer piklerinde deneysel sonuçlarla karşılaştırıldığında sönümlenmediği görülmektedir. Bunun nedeni, kullandığımız modelde halen şiddetli etkileşmenin devam ettiği, yani tamamiyle taneciklerin kısa bir aralık içerisinde serbest kalmadığı, diğer bir söyleyişle uzun menzilli olan Coulomb kuvvetlerinin tanecikler üzerinde etkisinin sürdüğü anlamına gelmektedir.

Ayrıca, bu tezin akışı içerisinde sonuçlara etki edebilecek bazı yenilikler yapmış olduğumuzu belirtebiliriz; 1. yenilik olarak, kullanmış olduğumuz yoğunluk giriş bilgisayar programı parametrelerinin, en küçük kareler yöntemini kullanarak deneysel parametralardan elde ettik [2]. Böylece bu parametreler için herhangi bir sayısal uyarlama yapmadan daha gerçekçi sonuçlara ulaştık. 2. yenilik olarak Bölgesel alan korelasyon fonksiyonları için Ortiz ve Ballone'nin yapmış olduğu Kuantum Monte Carlo hesaplarından yararlandık. 3. yenilik olarakta, özdirencin ve termoelektrik gücün hesaplanmasında t-matris yöntemi olarak bilinen, genişletilmiş Ziman formülünü uyguladık.

Son olarakta bu hesapların gerçekleştirilmesi için kurulan kurmuş olduğumuz bilgisayar programının çok kısa bir özetini vereceğiz;

PROGRAM ÖZETİ

Programın başlığı : Erime noktasında ergimiş Silisyum için SMAIN

Katolog kimliği : SMMNEW

Programın elde edilebileceği kişi: Bu tezin yazarı

Anahtar kelimeler: En küçük kareler yöntemi kullanılması ile sıvı yoğunluk hesaplamaları, Pseudopotansiyeller, Normalize edilmiş enerji dalga sayısı karakteristikleri, bölgesel alan korelasyonu, Elektriksel özdirenç, termoelektrik güç gibi atomik taşıma özellikleri ve Yapı faktörü hesaplamaları.

Program Dili : FORTRAN 77

KAYNAKLAR

- [1] GLAZOV, V.M., CHIZHEVSKAYA, S.N., ve GLAGOLEVA, S.N., 1969, Liquid Semiconductor, *Plenum Press*, New York, Chapter 2-3.
- [2] ALLEN L.C., 1955, Interpolation schema for energy band in solids, *Phys. Rev.* 98 (4), 993–996.
- [3] PHILIPS, J.C., 1968, Dielectric definition of electronegativity, *Phys. Rev. Lett.* 20, 550–582.
- [4] THAKOR, P.B., GAJJAR, P.N. ve JANI, A.R., 2002, Structural study of liquid rare earth metals from charged hard sphere reference fluid, *Condens. Matter Phys.*, 5, 493.
- [5] SINGH, H.B. ve HOLZ, A., 1983, Structure Factor of Liquid Alkali Metals *Phys. Rev. B.*, 28-2, 1108
- [6] HAUSLEITNER, C., HAFNER, J., 1988, Soft-sphere reference system in thermodynamic variational calculations. II liquid transition metals, *J Phys F: Mat. Phys.*, 18, 1025.
- [7] BRETONNET, J.L., ve DEROUICHE, A., 1991, Variational thermodynamic calculations for liquid transition metals, *Phys. Rev. B*, 43, 8924.
- [8] UCAR, S. ve ARMAGAN, T., 2007, Application of liquid metal compressibility theory to the liquid rare earth metals, *JOAM*, 9, 148.
- [9] MARCH, N.H., 2002, The Liquid State, United Kingdom.
- [10] PARRINELLO, M. ve TOSI, M.P., 1979, Analytic solution of the mean spherical approximation for a multi component plasma, *Chem. Phys. Lett.*, 64, 3.
- [11] CEVİZCİ, C. HEKİMOĞLU, M.D. ÖCAL M. ve ARMAĞAN, T., 2000, Investigation of the static properties in liquid V, Nb and Ta, *Bulgarian J. Phys.* 27, Suppl.2, 125.
- [12] HEINE, V. ve ABARENKOV, I., 1964, A new method for the electronic structure of metals, *Phil. Mag.*, 9, 459.

- [13] TAYLOR, R.A., 1978, A simple, useful analytical form of the static electron gas dielectric function, *J. Phys. F: Metal Phys.*, 8, 1699.
- [14] GOPAL RAO R.V., BANDYOPADHYAY U., 1991, Structural studies of some rare earth metals through palmer-weeks charged hard sphere model approximation, *Indian J. Phys.*, 65A, 286.
- [15] THAKOR, P.B., JOSHI TEJAL, R., THAKORE, B.Y., GAJJAR, P.N. ve JANI, A.R., 1999, Structure factor and radial distribution function of alkali metals by charged hard sphere model, *Solid State Physics Universities Press*, Indian, 42, 281.
- [16] ZIESCHE, P., 2002, Momentum distribution of the uniform electron gas and its proper parametrization, *Phys. Status Solidi (b)*, 232, 231.
- [17] GROSS, E.K.U. ve DREIZLER, R.M., 1993, Density functional theory, *Nato ASI series B*, 337.
- [18] MORONI, S., CEPERLEY, D.M. ve SENATORE, G., 1995, Static response and local field factor of the electron gas, *Phys. Rev. Lett.*, 75, 689.
- [19] SINGWI, K.S. ve TOSI, M.P., 1981, Solid state physics, Edited by H.Ehrenreich, F. Seitz and D. Turnbull, *Academic Press*.
- [20] SENATORE, G., MORONI, S. ve CEPERLEY, D.M., 1996, Local field factor and effective potentials in liquid metals, *J. Non-Cryst. Solids*, 205-207, 851.
- [21] SENATORE, G. ve MARCH, N.H., 1964, Recent progress in the field of electron correlation, *Rev. Mod. Phys.*, 66, 445.
- [22] ALONSO, J.A. ve MARCH, N.H., 1989, Electrons in metal and alloys, *Academic Press*. London, Chapter 4.
- [23] WAX, J.F. ve BRETONNET, J.L., 1999, Influence of the asymptotic behaviour of $G(q)$ on the structure of simple liquid metals, *J. Non-Cryst. Solids*, 250-252, 30.
- [24] ICHIMARU S. ve UTSUMI, K., 1981, Analytic expression for dielectric screening function of strongly coupled electron liquids at metallic and lower density *Phys.Rev.B*, 24-12, 7385.
- [25] KIMBALL, J.C., 1973, Short-range correlation and electron-gas response function, *Phys.Rev.A*, 7, 1648.
- [26] YASUHARA, H., 1972, Short-range correlation in electron gas, *Solidi State Commun.*, 11, 1481.

- [27] SARKAR, A., SEN, D., HALDAR, S. ve ROY, D., 1998, Static local field factor for dielectric screening function of electron gas at metallic and lower densities, *Mod. Phys. Lett.*, 12,639
- [28] CEPERLEY, D.M. ve ALDER, B.J., 1980, Ground state of the electron gas by a stochastic method, *Phys. Rev. Lett.*, 45, 566.
- [29] HELLAL, S., GASSER, J.G. ve ISSOLAH, A., 2003, Static local-field correction from Monte Carlo studies of the homogenous electron gas, *Phys. Rev. B*, 68, 094204.
- [30] ORTIZ, G. ve BALLONE, P., 1994, Correlation energy, structure factor, radial distribution function, and momentum distribution of the spin-polarized uniform electron gas, *Phys. Rev. B*, 50, 1391; 1994, Erratum: Correlation energy, structure factor, radial distribution function, and momentum distribution of the spin-polarized uniform electron gas, *Phys. Rev. B*, 50, 1391.
- [31] SINGWI, K.S., TOSI, M.P., LAND, R.H. ve SJÖLANDER, A., 1968, Electron Correlations at Metallic Densities, *Phys. Rev.* 176, 589.
- [32] BRETONNET, J.L. ve BOULAHBAK, M., 1996, Semianalytical form for the local-field correction, *Phys. Rev. B*, 53, 6859.
- [33] VASHISTA, P. ve SINGWI, K.S., 1972, Electron Correlations at Metallic Densities. V, *Phys. Rev. B*, 6, 875.
- [34] ICHIMARU S. ve UTSUMI, K., 1980, Dielectric formulation of strongly coupled electron liquids at metallic densities. II. Exchange effects and static properties, *Phys. Rev. B*, 22, 5203.
- [35] KOUBAA, N. ve GASSER J.G., 1990, Interatomic potentials of alloys obtained from non local model potentials III, *J.Non Cryst.Solid*, 117/118, 316
- [36] KOUBAA, N. ve GASSER, J.G., 1990, Analytical screened form factor obtained from bachelet, hamann and schluter pseudopotential I, *J.Non Cryst. Solid*, 117/118, 308
- [37] SHIMOJI, M., 1977, Liquid metals, *Academic Press*, London, Chapter 4.
- [38] ASHCROFT, N.W. ve MERMIN, N.D., 1976, Solid state physics, *Saunders College Press*, United State of America, Chapter 1.

- [39] JIVANI, A.R., GAJJAR, P.N. ve JANI, A.R., 2002, Total energy, equation of states and bulk modulus of Si and Ge, *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*, 5, 243.
- [40] SOMA, T. 1978, Local Heine-Abarenkov model potential for covalent crystals, *Phys. Stat. Sol. (b)*, 86,263
- [41] PATEL, V.N., PATEL, M.H., THAKORE, B.Y., GAJJAR, P.N. ve JANI, A.R., 1999, On the application of pseudo-alloy-atom model to the lithium based binary alkali alloys, *Solid State Phys.*, 42 C, 283
- [42] ANIMALU, A.O.E., 1973, Electronic structure of transition metals i. quantum defects and model potential, *Phys.Rew.B*, 8/8, 3542
- [43] BACHELET, G.B., HAMANN, D.R. ve SHLÜTER, M., 1982, Pseudopotentials that work: From H to Pu, *Phys.Rew.B.*, 26, 4199
- [44] MOULOPOULOS, K., 2000, Bound-state transition: an analytical model, *J.Phys: Condens Matter*, 12, 1285
- [45] EVANS, R., GREENWOOD, D.A ve LLOYD, P., 1971, Calculations of the transport properties of liquid transition metals, *Phys. Lett.*,35A,57.
- [46] DREIRACH,O., EVANS, R., GÜNTHERODT, H.J VE KÜNZI, H-U, 1972, A simple muffin tin model for the electrical resistivity of liquid noble and transition metals and their alloys, *J. Phys. F: Metal Phys.*,2, 709.
- [47] BARIA, J.K., 2004, Unified study of electrical resistivity of simple and non-simple liquid metals, *Brazilian Journal of Physics*, 34,3b.
- [48] ZIMAN, J.M., 1961, A theory of the electrical properties of liquid metals.I: The Monovalent Metals, *Phil. Mag.* 6, 1013
- [49] FABER, T.E., 1972, *Introduction to the Theory of Liquid Metals*, Cambridge University Press, Cambridge, England, p. 326.
- [50] ZIMAN, J.M., 1963, Electron and phonons, *Oxford University Press*, New York.
- [51] Waseda, Y., 1980, *The Structure of Non-Crystalline Materials*, Mc Graw- Hill, inc. U.S.A.

EK-A

(2.2.15) ve (2.2.16) denklemlerinin analitik çözümleri için X ve Y dönüşümleri yapılarak $\ell = 0, 1$ ve 2 değerleri için aşağıda ki formda yazılabilir.

$$X = e^{\left(\frac{-(K+K')^2}{4\alpha_i} \right)} \quad (\text{A.1})$$

$$Y = e^{\left(\frac{-(K-K')^2}{4\alpha_i} \right)} \quad (\text{A.2})$$

$\ell = 0$ için:

$$I_0(K, K') = \frac{1}{4KK'} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i}} (Y - X) \quad (\text{A.3})$$

$$J_0(K, K') := \frac{1}{16KK'} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i^5}} \left\{ \left[2\alpha_i - (K-K')^2 \right] Y - \left[2\alpha_i - (K+K')^2 \right] X \right\} \quad (\text{A.4})$$

$\ell = 1$ için:

$$I_1(K, K') = \frac{1}{4KK'} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i}} (Y + X) - \frac{1}{2K^2 K'^2} \sqrt{\pi \alpha_i} (Y - X) \quad (\text{A.5})$$

$$\begin{aligned} J_1(K, K') = & \frac{1}{4K^2 K'^2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i}} (Y - X) + \frac{1}{16KK'} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i^5}} \left\{ \left[2\alpha_i - (K+K')^2 \right] X - \left[2\alpha_i - (K-K')^2 \right] Y \right\} \\ & - \frac{1}{8KK^2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i^3}} \left[(K+K')X + (K'-K)Y \right] - \frac{1}{8K^2 K'} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i^3}} \left[(K+K')X + (K-K')Y \right] \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Tablo B: Silisyum saf metali için pseudopotansiyel parametreler

Atom	Z_a	Z_v	L	α_1	α_2	α_3	c_1	c_2	c_3	c_4	c_5	c_6
SİLİSYUM	14	4	Core	2.16	0.86		1.6054	-0.6054				
			0	2.48	2.81	3.09	-3.0575	0.8096	0.0012	0.0511	-0.0217	-0.0128
			1	1.24	1.60	2.12	-1.7966	-0.0986	0.0424	0.0284	-0.0030	-0.0039
			2	1.89	2.22	2.48	-0.1817	-0.5634	-0.0944	-0.2168	0.0215	-0.0588

ÖZGEÇMİŞ

10.05.1981 yılında İstanbul’da doğan Sevilay UÇAR, İlk, orta ve lise öğrenimini İstanbul’ da tamamladı. 1999 yılında başladığı İstanbul Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümünde Lisans eğitimini 2004 yılında bitirdi. Halen, 2004 yılında İstanbul Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Bölümü Genel Fizik Anabilim Dalı’nda başladığı Yüksek Lisans eğitimini sürdürmektedir. “Application of liquid metal compressibility theory to the liquid rare earth metals” adlı makalesi 2007 yılında JOAM, 9, 148 ‘de yayınlanmıştır.