



**T.C.**  
**GAZİOSMANPAŞA ÜNİVERSİTESİ**  
**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**  
**FİZİK ANABİLİM DALI**

**BAZI KATILARIN ELEKTRİKSEL ÖZDİRENCİNİN SICAKLIĞA  
GÖRE DEĞİŞİMİNİN BLOCH-GRUNEISEN FONKSİYONU KULLANILARAK  
ANALİTİK İNCELENMESİ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**Danışman : Prof. Dr. İskender ASKEROĞLU**

**Hazırlayan : Mustafa KARAKAYA**

**2007 - TOKAT**

**T.C.**  
**GAZİOSMANPAŞA ÜNİVERSİTESİ**  
**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**  
**FİZİK ANABİLİM DALI**

**BAZI KATILARIN ELEKTRİKSEL ÖZDİRENCİNİN SICAKLIĞA  
GÖRE DEĞİŞİMİNİN BLOCH-GRUNEISEN FONKSİYONU KULLANILARAK  
ANALİTİK İNCELENMESİ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**Danışman : Prof. Dr. İskender ASKEROĞLU**

**Hazırlayan : Mustafa KARAKAYA**

**2007 – TOKAT**

T.C.  
GAZİOSMANPAŞA ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**BAZI KATILARIN ELEKTRİKSEL ÖZDİRENCİNİN SICAKLIĞA  
GÖRE DEĞİŞİMİNİN BLOCH-GRUNEISEN FONKSİYONU KULLANILARAK  
ANALİTİK İNCELENMESİ**

**Mustafa KARAKAYA**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

Bu tez, 11 /09 / 2007 tarihinde aşağıda belirtilen jüri tarafından oybirliği ile kabul edilmiştir.

Ünvanı Adı Soyadı

İmza

Başkan : Prof. Dr. İskender ASKEROĞLU

Üye : Yrd. Doç. Dr. Uğur KÖLEMEN

Üye : Yrd. Doç. Dr. Naim ÇAĞMAN

**ONAY:**

Bu tez, .... / .... / 2007 tarih ve ..... sayılı Enstitü Yönetim Kurulu tarafından belirlenen jüri üyelerince kabul edilmiştir.

.../ .../ 2007

Enstitü Müdürü

**ÖZET****BAZI KATILARIN ELEKTRİKSEL ÖZDİRENCİNİN SICAKLIĞA  
GÖRE DEĞİŞİMİNİN BLOCH-GRUNEISEN FONKSİYONU KULLANILARAK  
ANALİTİK İNCELENMESİ****Mustafa KARAKAYA****Gaziosmanpaşa Üniversitesi  
Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı****Yüksek Lisans Tezi****2007, 58 Sayfa****Danışman: Prof. Dr. İskender ASKEROĞLU****Jüri: Prof. Dr. İskender ASKEROĞLU****Jüri: Yrd. Doç. Dr. Uğur KÖLEMEN****Jüri: Yrd. Doç. Dr. Naim ÇAĞMAN**

Bu çalışmada, binomial açılım teoremi kullanılarak farklı sıcaklık değerleri için Bloch-Gruneisen fonksiyonunun analitik ifadeleri elde edildi. Bu analitik bağıntılar bazı metallerin ve süperiletkenlerin öz direncinin sıcaklığa bağlılığını incelemek için faydalıdır. Kullanılan yöntem, metallerin elektriksel öz direncine elektron-fonon etkileşim katkısının etkili bir şekilde uyumluluğunu sağlamaktadır. Bu sebeple, çalışmamızda elektron-fonon etkileşimine ve Bloch-Gruneisen fonksiyonlarının analizine yer verildi. Genelleştirilmiş Bloch-Gruneisen fonksiyonu için elde edilen analitik bağıntılar doğrultusunda mathematica programlama dilinde program oluşturuldu. Bazı süperiletkenler için farklı sıcaklıklarda değişen öz direnç değerleri sunuldu. Kullanılan metodun geçerliliği, süperiletkenlere uygulamalarıyla birlikte test edildi.

**Anahtar Kelimeler:** Bloch-Gruneisen teorisi, Elektron-fonon etkileşmesi, Elektriksel öz direnç

**ABSTRACT****THE ANALYTICAL EVALUATION of TEMPERATURE DEPENDENCE of  
ELECTRICAL RESISTIVITY for SOME SOLIDS USING BLOCH-GRUNEISEN  
FUNCTION****Mustafa KARAKAYA****Gaziosmanpasa University  
Gradute School of Natural and Applied Science  
Department of Physics Science****Masters Thesis  
2007, 58 pages****Supervisor: Prof. Dr. İskender ASKEROĞLU****Jury: Prof. Dr. İskender ASKEROĞLU****Jury: Yrd. Doç. Dr. Uğur KÖLEMEN****Jury: Yrd. Doç. Dr. Naim ÇAĞMAN**

In this study, some analytical expressions of Bloch-Gruneisen function were obtain for different temperature values using binomial expansion theorem. These analytical relations are useful for the temperature dependence of resistivity of superconductors and some metals. The used procedure provides active application of contribution of electron-phonon interaction to the electrical resistivity of metals. Therefore, electron-phonon interaction and analysis of Bloch-Gruneisen functions were mentioned in this study. Programs in the system Mathematica have been constructed to calculate the obtained analytical relations for the generalized Bloch-Gruneisen functions. Resistivity values at the different temperatures were presented for some superconductors. Reliability of the using method is tested by applications to superconductors.

**Keywords:** Bloch-Gruneisen theory, Electron-phonon interaction, Electrical resistivity

**TEŐEKKÜR**

Yüksek lisans çalışmalarımnda bilgi ve tecrübelerini benimle paylaşan, karşılaştığım bütün problem ve zorluklarda her türlü olumlu yönlendirmeleriyle yardımlarını esirgemeyen değerli danışman hocam sayın Prof. Dr. İskender ASKEROĞLU' na ve değerli hocam sayın Prof. Dr. Bahtiyar MEMETOĞLU' na en içten teşekkürlerimi sunarım.

Yüksek lisans eğitimim boyunca katkılarından dolayı bütün fizik bölümü hocalarıma teşekkür ederim. Tez çalışmalarımın her aşamasında desteklerini esirgemeyen değerli arkadaşlarım Arş. Gör. Erhan ESER, Hüseyin KOÇ, Arş. Gör. Necati BAŐMAN ve Ali BAL' a teşekkürü bir borç bilirim. Ayrıca hayatımın her safhasında maddi ve manevi desteklerini, tüm yardımlarını eksik etmeyen aileme sonsuz teşekkür ediyorum.

Mustafa KARAKAYA

## İÇİNDEKİLER

	Sayfa No
ÖZET .....	i
ABSTRACT .....	ii
TEŞEKKÜR .....	iii
İÇİNDEKİLER .....	iv
ŞEKİLLER LİSTESİ .....	vi
ÇİZELGELER LİSTESİ .....	vii
SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ .....	viii
1. GİRİŞ VE LİTERATÜR ÖZETİ .....	1
2. ELEKTRON – FONON ETKİLEŞMESİ .....	6
2.1 Optiksel – Fonon Sınırlamasının İlk Modelleri .....	10
2.1.1 Dielektrik – Süreklilik ( DC ) Modeli .....	10
2.1.2 Hidrodinamik ( HD ) Model .....	12
2.2 Elektronlarla Hacim Fononlarının Etkileşimi .....	13
2.3 Elektron – Fonon Saçılmaları .....	15
2.3.1 Relaksasyon Zamanı .....	17
3. BLOCH– GRUNEİSEN FONKSİYONU .....	20
3.1 BG Fonksiyonunun Analizi .....	20
3.2 BG Fonksiyonunun Hesaplama Yöntemleri .....	23
4. BG FONKSİYONUNU KULLANARAK METALLERİN VE SÜPER İLETKENLERİN ÖZDİRENCİNİN SICAKLIĞA BAĞLILIĞININ İNCELENMESİ .....	37
4.1 Saf Kalayın 4,5' ten 77 <sup>0</sup> K' ye Elektriksel İletkenliği .....	37

4.2	Kalay Katkılı Saydam İndiyum Oksit Tabakalarının Elektriksel Özdirençleri	39
4.3	$YNi_2B_2C$ Tek Kristalinde, Özdirenç ve Elektron – Fonon Çiftlenmesi	40
4.4	$Fe_2TiAl$ 'de Özdirençin Sıcaklığa Bağlılığı	42
4.5	$MgB_2$ Süperiletkeninin İletim Özellikleri	44
5.	MATERYAL VE METOT	46
6.	TARTIŞMA VE SONUÇ	52
	KAYNAKLAR	55
	ÖZGEÇMİŞ	

## ŞEKİLLER LİSTESİ

### Şekil

2.1. Bir polaronun oluşumu	7
2.2. LO (longitudinally polarized) örnekleri. (a) Hidrodinamik model; (b) dielektrik-süreklilik modeli	11
4.1. İki saf kalay numunesi için elektriksel özdirenç sıcaklıkla değişimi	38
4.2. 125 nm ve 240 nm kalınlığındaki kalay katkılı saydam indiyum oksit numuneler için sıcaklık ve özdirenç değerleri	40
4.3. $YNi_2B_2C$ tek kristali için sıcaklığa bağlı özdirenç değerleri	42
4.4. $Fe_2TiAl$ , $Fe_3Al$ ve saf $Cu$ için Debye sıcaklık derecesiyle normalize edilmiş, $T/\theta_D$ sıcaklık fonksiyonuyla elektriksel özdirenç arasındaki ilişki	43
4.5. $MgB_2$ ' nin elektriksel özdirenç sıcaklığa bağlılığı	45
5.1. $MgB_2$ için sıcaklığa göre elektriksel özdirenç değişim grafiği	50
5.2. Kalay katkılı saydam indiyum oksit tabakalarının elektriksel özdirençleri	50
5.3. Kalay numunesinin elektriksel özdirenç değerlerinin sıcaklıkla değişimi	51

## ÇİZELGELER LİSTESİ

### Çizelge

2.1. İletkenlik bandındaki elektronlar için $\alpha$ polaron çiftlenim sabitleri, $m_{pol}^*$ kütleleri ve $m^*$ bant kütleleri	8
3.1. $f_{mk}$ katsayı değerleri	31
3.2. $g_{mk}$ katsayı değerleri	33
3.3. $g_{mk}$ katsayı değerleri (2. bölüm)	34
3.4. $J_5(x)$ için sayısal değerler	34
3.5. $K_3(x)$ için sayısal değerler	34
4.1. Saf kalay örneklerinin $T = 4,2 K$ ve suyun donma noktasında artık öz direnç değerleri	37
6.1. $MgB_2$ süperiletkeni için denklem (5.12)' nin hesaplama sonuçları	52
6.2. İndiyum oksit için denklem (5.12)' nin hesaplama sonuçları	53
6.3. Kalay numunesi için denklem (5.12)' nin hesaplama sonuçları	53

## SİMGELER VE KISALTMALAR

### Simgeler

$\rho(T)$ :	Sıcaklığa bağlı özdirenç
$\rho_0$ :	Artık özdirenç
$\theta_D$ :	Debye sıcaklığı
$m^*$ :	Etkin kütle
$\omega(q)$ :	Fonon frekansı
$\alpha$ :	Polaron çiftlenim sabiti
$\hbar$ :	Planck sabiti
$c_s$ :	Ses hızı
$\rho$ :	Kütle yoğunluğu
$E_f, E_i$ :	Son ve başlangıç enerjileri
$N_f$ :	Son durum sayısı

### Kısaltmalar

BG :	Block-Gruneisen model
RRR :	Artık özdirenç aralığı
DC :	Dielektrik – Süreklilik Model
EM :	Elektromanyetik
HD :	Hidrodinamik Model

## 1. GİRİŞ VE LİTERATÜR ÖZETLERİ

Birçok metallerin elektriksel özdirencinin elektron-fonon etkileşimine katkısının sayısal formülasyonu Bloch-Gruneisen (BG) teorisiyle verilmiştir (Gruneisen, 1933). Genelleştirilmiş BG fonksiyonlarının çözümü için çeşitli araştırmacılar tarafından kullanılan yöntemler,  $m$ 'nin tamsayı değerlerinde metallerin özdirencinin sıcaklığa bağlılığı için farklı hesaplama şekilleriyle sonuçlanmaktadır (Pinski, 1981; White, 1959).

Elektriksel özdirencin sıcaklığa bağlılığında Elektron – fonon etkileşmesinin etkileri gözlenmektedir. Elektronlar fononlar tarafından saçılım yaparlar. Sıcaklık yükseldikçe daha çok saçılma gözlenmektedir. Elektron – fonon etkileşmesinin etkilerinden bir diğeri de, elektronun iyon merkezlerini sürüklemesiyle elektron kütleindeki görünür artmadır.

Bloch-Gruneisen teorisi binomial açılım teorisiyle çözümlenebilmektedir. Genelleştirilmiş BG fonksiyonu bu problemlerin hesaplanmasında önemli rol oynamaktadır. Özellikle süperiletkenlerin özdirencinin sıcaklığa bağlılığını incelemek amacıyla genelleştirilmiş BG fonksiyonu için elde edilecek analitik bağıntı önemlidir.

Elektron-fonon saçılım mekanizmasını göstererek özdirencin sıcaklığa bağlılığı,

$$\rho(T) = \rho_0 + A \left( \frac{T}{\Theta} \right)^m \int_0^{\Theta/T} \frac{x^m dx}{(1 - e^{-x})(e^x - 1)} \quad (1.1)$$

şekliyle Bloch-Gruneisen formülü olarak verilmektedir (Wang et al., 2002). Burada,  $\rho_0$  artık özdirenç,  $A$  bir sabit,  $\Theta$  Debye sıcaklık derecesidir.

Süperiletkenlerin normal durum özdirencinin sıcaklığa bağılılığı da elektron-fonon modeli (BG modeli) çerçevesinde analiz edilmiştir. Genelleştirilmiş BG fonksiyonlarının analizinde, tamamlanmamış gamma fonksiyonunun hesaplanması için uygun formüllerin seçimi çok önemlidir.

Talapatra et al. (2005) tarafından yapılan çalışmada  $MgB_2$  süperiletkeninin normal durum özdirencinin sıcaklığa bağılılığı, özdirencin elektron-fonon modeli (BG modeli) içinde, teorik olarak analiz edilmiştir.

Genelleştirilmiş BG fonksiyonunun hesaplanması için önemli yöntemlerden biri de  $m=5$  değerinde seri açılımı kullanılarak verilmiştir. Metallerin elektriksel özdirenci için elektron-fonon etkileşim katkısını tanımlayan Bloch-Gruneisen integralinin analitik bir gösterimi sunulmuştur. Deutsch (1987) tarafından verilen analitik ifade,  $k$  terimleri kısaltılmış sonsuz seriler şeklindedir.  $\theta$ , Debye sıcaklığı olmak üzere analitik ifadenin yaklaşımı,  $T \leq \theta/4$  için ( $k=1$ ) tek bir terimde %1'den daha az ve tüm  $T \leq 10\theta$  için  $k=20$ 'de % 0,1'den daha az göreceli hatalar gözlenmiştir.

Paszkowski (1999) tarafından yapılan çalışmada Bloch-Gruneisen integralleri, analitik dönüşümleri ve bu integral değerlerinin sayısal hesaplamalarını sağlayan bazı ifadeler verilmiştir.

Saf kalay numunesinin elektriksel iletkenlikleri ve bu numunelerin  $T=4,2$  K derecesinde ve suyun donma noktasında artık özdirenç değerleri Karamargin et al. (1972) tarafından verilmiştir. İki saf numunenin elektriksel özdirenç değeri  $125$  °K' lik bir Debye sıcaklık derecesiyle artık özdirençle, geniş bir aralıkta Bloch-Gruneisen ifadesine uygun bulunmaktadır (Karamargin, 1972).

Shen et al. (2003) tarafından yapılan çalışmada  $MgB_2$  süperiletkeni için özdirencin sıcaklığa bağılılığı  $460$  K sıcaklık derecesine kadar incelenmiştir. Elektriksel özdirencin sıcaklığa bağılılığının  $270$  K' nin üzerinde lineer olduğu gözlenmiş ve  $40$  K' den  $450$  K' e

kadar sıcaklık aralığı için Debye sıcaklığı  $\theta_D = 1200$  K ile Bloch-Gruneisen ifadesine uygunluğu üzerine çalışma yapılmıştır.

$MgB_2$  süperiletkenlerinin taşıma özellikleriyle ilgili Poddar et al. (2003) tarafından yapılan çalışmalarda, Polikristal  $MgB_2$  numuneleri üzerinde elektriksel özdirencin sonuçları sunulmuştur. Sonuçların analizinden,  $E_F = 0,8$  eV Fermi enerjisi ve iletim özelliklerinden hesaplanan  $\lambda_{tr}$ , elektron- fonon çiftlenme katsayısı hesaplanmıştır.

BG kanunu ve Debye kanunu arasındaki farklılığın kaynağını bulmak amacıyla ideal metaller için bir özdirenç istatistik modeli gösterilmiştir. Bu modelde sistem bütün fononların eşit momentum (ortalama momentum) değerlerine sahip olduğu herhangi bir fonon sistemi olarak dikkate alınmaktadır. Bu ideal metalin elektriksel özdirenci, doğrudan fonon konsantrasyonu ve fonon ortalama momentumunun karesiyle doğru orantılı olduğu belirtilmektedir. Modelde metalin elektriksel özdirencinin çok düşük sıcaklıklarda  $T^5$  ile, yüksek sıcaklıklarda  $T$  ile doğru orantılı olduğu gözlenmiştir. Bu durum Bloch-Gruneisen kanunlarına da uygundur. Çok düşük sıcaklıklarda bir katının ısı kapasitesinin sadece fonon yoğunluğuyla (konsantrasyon) orantılı olduğunu gösteren teorik analizler ortaya çıkarılmıştır. Bu nedenle elektriksel özdirencine, fonon ortalama momentumunun karesinin katkısı, BG kanunu ile Debye kanunu arasında  $T^2$  farklılığına neden olmuştur (Wang et al., 2004).

Dreshler et al. (2000) tarafından yapılan çalışmada,  $YNi_2B_2C$  de özdirenç ölçümlerinin, güçlü elektron-fonon etkileşim teorisi tahminleri ile tamamen uyum içinde olduğu gösterilmiştir. Daha önce elde edilmiş teorik sonuçlar ile uyumlu bir taşıma elektron-fonon çiftlenmesi sabit değeri elde edilmiştir.

Mevcut  $(Fe_{1-x}Ti_x)_3Al$  alaşımlarında Kato (2000) tarafından yapılan çalışmalarda Debye sıcaklığından daha küçük sıcaklıkta büyük bir pozitif  $d\rho/dT$  gözlemlenmiştir. Sıcaklık fonksiyonu olarak üç temsili sistem  $Fe_2TiAl$ ,  $Fe_3Al$  ve saf Cu elementinin elektriksel özdirenç verileri elde edilmiştir. Sonuçlar Debye sıcaklıklarına göre normalize

edilmiştir. Elde edilen  $\rho(T)$  verileri, sıcaklığa bağımlı elektron-fonon katkısını temsil etmektedir ve bilinen Bloch – Gruneisen kanunu ile analiz edilmiştir.

Bharathi et al. (2002) tarafından yapılan çalışmada 0,3' e kadar  $x$  değerleri için  $MgB_{2-x}C_x$  dizisinde B' nin C ile yer değişikliği gösterilmiştir. Elektriksel özdirenç ölçümleri örneklerde incelenmiştir. Kafes parametresinde karbon hacmiyle ortaya çıkan değişikliklerle sonuçlanan karbon çözünürlüğü, karbonun  $MgB_2$  kafesinden  $x = 0,30'$  a kadar değiştiğini göstermektedir. Sıfır özdirençle ve diyamagnetik sinyalin başlamasıyla ölçülen süperiletken iletim ısısı  $T_c$ , hacim fonksiyonunun şiddetli biçimde  $x = 0,30'$  a kadar artışıyla sistematik bir düşüş göstermektedir. Bu çalışmada normal durumda özdirençin sıcaklığa bağlılığının, incelenen tüm karbon dizgileri için Bloch-Gruneisen formülüne uygunluğu tespit edilmiştir.

Varshney and Kaurav (2004), yaptığı çalışmada  $La_{1-x}Ca_x MnO_3$  kalsiyum titanat manganitlerinin  $x=0,33$  ile sıcaklığa bağlı özdirenci, klasik elektron-fonon özdirenç modeli, yani Bloch-Gruneisen modeli çerçevesinde teorik olarak analiz edilmiştir. Yüksek frekanslı optik fononlar ( $W_{op}$ ) gibi doğal akustik (düşük frekanslı) fononlar ( $W_{ac}$ ) içinde özdirenç katkıları hesaplanmıştır.

Tek kristal  $K_3C_{60}$  süper iletkeninin sıcaklığa bağlı normal durum özdirenci, özdirençin elektron-fonon modeli (Bloch-Gruneisen Modeli) iskeletiyle Varshney and Kaurav (2004) tarafından teorik olarak analiz edilmiştir. Büyük miktarda kirliliğin, saf  $C_{60}'$  a alkali metal eklenmesinden kaynaklandığı düşünülerek, sıfır sıcaklık derecesiyle sınırlandırılmış özdirenç hesaplanmıştır. Doğal moleküller arası fonon ( $W_{er}$ )' dan ve moleküller içi ( $W_{ra}$ )' den dolayı özdirenç katkıları bir sonraki basamak olarak hesaplanmıştır. Moleküller arası fononların katkısıyla karşılaştırıldığında, moleküller içi fonon özdirenç 260 K' nin üzerinde nisbeten büyük bir katkı sağlamaktadır.

Li and Lin (2004) tarafından yapılan çalışmada kalay katkılı saydam indiyum oksit tabakalarının elektrik özdirençlerinin sistematik olarak ölçümleri verilmiştir. Özdirençler

25 K° nin altında zayıf lokalizasyon ve elektron-elektron etkileşimine bağlı olarak düşen ısıyla logaritmik olarak artarken, 25 K° ve 300 K° arasında Bloch-Gruneisen kuralına uygunluğu verilmiştir.

Binomial açılım teoremi kullanılarak geniş sıcaklık aralığı için Debye sıcaklık derecesiyle genelleştirilmiş Bloch-Gruneisen fonksiyonunun güvenilir analitik yöntemleri Mamedov and Askerov (2007) tarafından sunulmuştur. Bu çalışmada,  $m$  parametrelerinin tamsayı ve kesirli sayı değerleri için Bloch-Gruneisen fonksiyonunun hesaplamalarına olanak sağlayan ifadeler verilmiştir. Önerilen yöntemler, metallerin elektriksel özdirencine elektron-fonon etkileşiminin katkısına etkili uyum sağlamaktadır. Metodun geçerliliği, kullanımıyla birlikte bazı süperiletkenler için test edilmiştir. Sonuç olarak sayısal hesaplamalarla ilgili karşılaştırma, metodun doğruluğunu göstermektedir.

## 2. ELEKTRON – FONON ETKİLEŞMESİ

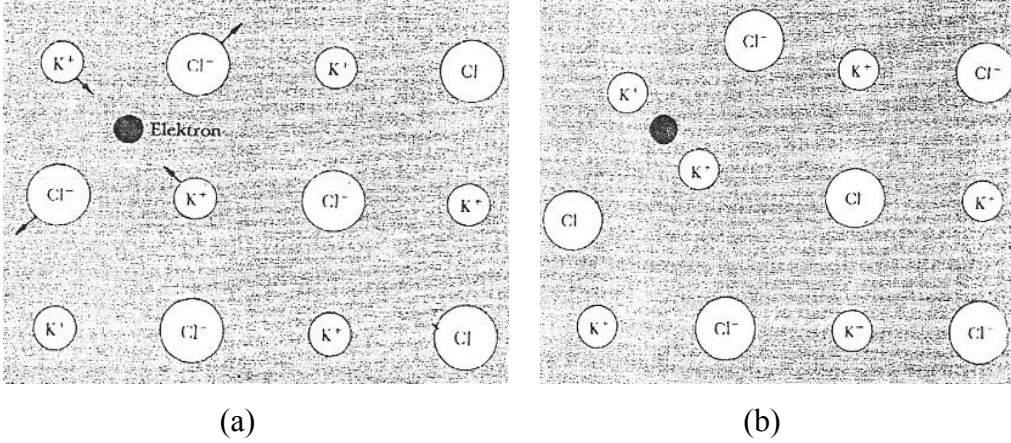
Elektriksel öz direncin sıcaklığa bağlılığında Elektron – fonon etkileşmesinin etkileri gözlenmektedir. Elektronlar fononlar tarafından saçılım yaparlar. Sıcaklık yükseldikçe daha çok saçılma gözlenmektedir.

Elektron – fonon etkileşmesinin bir etkisi de, elektronun iyon merkezlerini sürüklemesiyle, elektron kütleindeki görünür artmadır. Bir yalıtkanda elektron ile elektronun oluşturduğu gerilme alanı *polaron* olarak adlandırılır. İyonlarla elektronlar arasındaki Coulomb etkileşmesi sebebiyle bu etki, iyonik kristallerde daha fazladır. Bunun yanında kovalent kristallerde, nötr atomların elektronlarla zayıf etkileşmeleri olduğundan, etki de küçük olur.

Elektron – örgü etkileşmesinin şiddeti, ( boyutsuz bağlanma ) çiftlenim sabiti  $\alpha$  ile ölçülür;

$$\frac{1}{2}\alpha = \frac{\text{deformasyon enerjisi}}{\hbar\omega_L} \quad (2.1)$$

Burada  $\omega_L$ , boyuna optik fononların dalga vektörü frekansıdır.  $\frac{1}{2}\alpha$  ise, bir kristalde yavaş hareketli elektronu çevreleyen fonon sayısı gibi düşünülebilir.



**Şekil 2.1.** Bir polaronun oluşumu, (a) KCl iyonik kristalinin rijit örgüsünde bir elektron yer almaktadır. Bu elektronun yakınındaki iyonlara uyguladığı kuvvetler gösterilmektedir. (b) Aynı elektron elastik veya deforme edilebilen bir örgüde gösterilmiştir (Kittel, 1986).

Şekil 2.1’de iyonların yer değiştirmesi elektronun etkin kütlelerini artırmaktadır. KCl bileşiğinde kütle, rijit bir örgüdeki bant teorisi sonucuna göre 2,5 kat artar. Kovalent kristallerde elektronun atomlara uyguladığı kuvvet iyonik kristallerdeki elektronlara göre daha zayıftır. Yani kovalent kristallerde polaron deformasyonu daha az gözlenmektedir.

Çeşitli deneyler ve teoriden elde edilen  $\alpha$  değerleri Tablo 2.1 de verilmiştir,  $\alpha$  değerleri iyonik kristallerde büyük, kovalent kristallerde küçük değerlerdedir. Polaronun etkin kütleleri  $m_{pol}^*$ , siklotron rezonans deneylerinden elde edilmiştir.  $m_{pol}^*$  değerinden faydalanarak bant etkin kütleleri  $m^*$  hesaplanmıştır. Tablodaki son sütunda verilen  $m_{pol}^*/m^*$  değerleri, örgüdeki deformasyonun bant kütlelerini hangi oranda artırdığının bir ölçüsüdür.

**Tablo 2.1.** İletkenlik bandındaki elektronlar için  $\alpha$  polaron çiftlenim sabitleri,  $m_{pol}^*$  kütleleri ve  $m^*$  bant kütleleri (Kittel, 1986).

Kristal	KCl	KBr	AgCl	AgBr	ZnO	PbS	InSb	GaAs
$\alpha$	3.97	3.52	2.00	1.69	0.85	0.16	0.014	0.06
$m_{pol}^*$	1.25	0.93	0.51	0.33	—	—	0.014	—
$m^*$	0.50	0.43	0.35	0.24	—	—	0.014	—
$m_{pol}^*/m^*$	2.5	2.2	1.5	1.4	—	—	1.0	—

Polaronun etkin kütlesi  $m_{pol}^*$  ile deforme olmamış örgüdeki etkin bant kütlesi  $m^*$  arasındaki ilişki;

$$m_{pol}^* \cong m^* \left( \frac{1 - 0.0008\alpha^2}{1 - \frac{1}{6}\alpha + 0.0034\alpha^2} \right) \quad (2.2)$$

ile verilir ve  $\alpha \ll 1$  için yaklaşık değeri  $m^* \left( 1 + \frac{1}{6}\alpha \right)$  olarak hesaplanmaktadır. Çiftlenim sabiti daima pozitif olduğundan polaron kütlesi, bant kütesinden daha büyük değerdedir.

Büyük polarondaki elektron bir bant içinde hareket eder ve kütesindeki artış az miktardadır. Küçük polaronda ise elektron çok büyük bir zaman diliminde bir iyon etrafında yakalanmış durumundadır. Yüksek sıcaklık değerlerinde elektron, bir örgü noktasından diğer örgü noktasına atlayarak gezer. Alçak sıcaklıklarda ise elektron, etkin kütlesi büyük bir banttaymış gibi, kristal içinde yavaş bir tünelleme olayı ile dolaşır.

Elektronlar ve boşluklar örgü deformasyonunda asimetriden dolayı bir bölgede yakalanabilirler. Bu durumun gerçekleşme olasılığı, bant kıyısının katlı ve kristalin polar olduğu (örneğin, alkali halojen veya gümüş halojen) kristallerde, yani parçacığın örgüyle kuvvetli bir çiftlenime girdiği durumlarda yüksektir. Valans bant kıyısının katlı olma olasılığı iletkenlik bandından daha yüksektir, bu nedenle boşlukların bir bölgede yakalanması elektronlara oranla daha yüksek olur. Tüm alkali ve gümüş halojenlerde boşluklar yakalanmaya uğramaktadır.

İyonik katıların oda sıcaklığındaki öz iletkenlikleri iyonların kristal içindeki hareketlerine kıyasla küçük değerdedir [ $< 10^{-6} (ohm-cm)^{-1}$ ]. Ancak, 20 °C civarında öz iletkenliği  $0.2(ohm-cm)^{-1}$  olan bazı bileşikler gözlenmiştir. Bu bileşikler  $M\text{Ag}_4\text{I}_5$  yapısında olup M ile gösterilen kısım K, Rb veya  $\text{NH}_4$  dir.  $\text{Ag}^+$  iyonları eşdeğer örgü noktalarının az bir kısmını doldururlar (Kittel, 1986; Karaoğlu, 1996).

Mesoskopik katmanlı yarı iletken yapıların ortaya çıkışı, elektron ve fononların bir katmana hapsedilmesinin ve bu hapsedilmenin bunların karşılıklı etkileşimlerinden nasıl etkilendiğinin basit analitik bir tanımına ihtiyaç doğurmuştur.

Farklı özelliklerde ayırıcı bir yüzey materyaller olduğunda, homojen hacim kristalleri içindeki elektronlar, fononlar vs. genellikle davranışları bozulur. Hacim solüsyonlarını böyle bir ara yüzde, basit fiziksel olarak mantıklı bağlantı kuralları dahilinde düzeltme çabaları her zaman geçerli değildir.

Bu kuralların ne derece kullanışlı olduğu, ilgili hareket denklemlerinin çözümlerini içeren yaklaşımların değerlendirilmesiyle mümkündür. İki tip yaklaşım vardır. Biri, mikroskobik bant yapısı ve kafes dinamiğini nümerik olarak hesaplamak, diğeri ise ara yüzdeki uzun dalga eksidasyonlarının bir mikroskobik modelini kullanmaktadır.

Özellikle ikincisi, uygulanabilir fizik konseptleri üretmek için uygundur. Örnekler elastik dalgalar için Kunin (1982)'in quasi – süreklilik yaklaşımı, elektronlar için Burt

(1988)'ün zarf fonksiyon (envelope – function) metodu ve elektromanyetik dalgalar ve eksitonlar için Chen ve Nelson (1993)'in dalga – vektör uzay (wavevector – space) modeli'dir (Haroon et al., 1997).

## 2.1. Optiksel – Fonon Sınırlamasının İlk Modelleri

Sınırlamanın etkileri Raman'ın  $GaAs/Ga_xAl_{1-x}$  sisteminde bölge merkez modları üzerindeki çalışmalarında gösterilmiştir. Bu çalışma Klein (1986), Cardona (1989;1990) ve Menendez (1989) tarafından tekrar gözden geçirilmiştir. Tipik dalga vektör aralığı,  $k$  sırasıyla  $10^4$ 'ten  $10^5 \text{ cm}^{-1}$ 'e dağılan şekilde Raman tarafından gözlenmiştir.  $k$  gözlenen fonon frekansıdır.  $GaAs/AlAs$  sisteminde,  $k = n\pi/a_0(m + \gamma)$ 'dir. Burada,  $n$  sıfırdan büyük bir tamsayı,  $a_0$   $GaAs$ 'nin düzleme dik yönde tek katmanlı kalınlığı,  $m$   $GaAs$  katmanındaki tek katmanlı sayısı,  $\gamma$  beklenen  $k = n\pi/a_0m$  bağıntısına bir düzeltmedir.  $Al$  iyonlarıyla uyuşan etkili ara yüzler  $GaAs$ 'e yakın olduğunda  $\gamma = 1$  bulunmuştur.

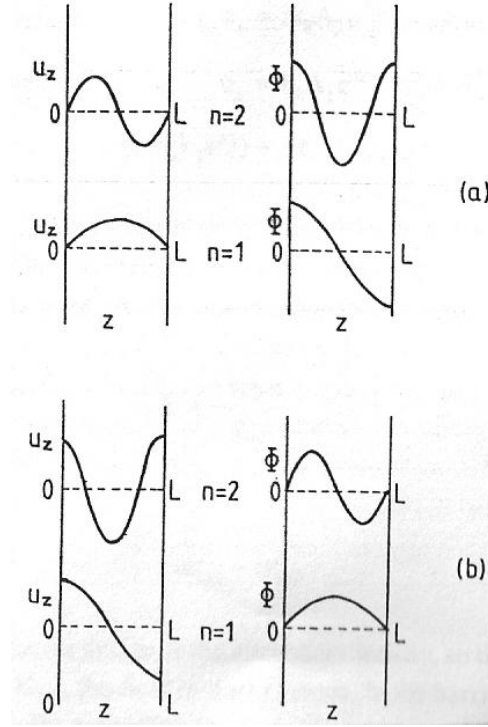
Bu şemadaki modlar arasına düşen frekanslar, genellikle Fuchs ve Kliewer (1965) tarafından iyonik kalın bir dilim için tarif edilen birinci tip arayüz şekilleridir. Raman deneyleri, bu yüzden optik osilasyon şekli sınırlandırılmasının varlığını ve diğer frekansların varlığını arayüz modları olarak doğrulamaktadır.

### 2.1.1. Dielektrik – Süreklilik ( DC ) Modeli

Fonon sınırlamasının süreklilik modeli arayışı, katmanlı materyallerde elektron – fonon etkileşimini tanımlama ihtiyacından doğmuştur.

Özellikle uzunlamasına polarize (LO) içerenlerde, oda sıcaklığındaki kitle malzemesinde çok güçlüdür.

İlk yaklaşımlar Fuchs ve Kliwer'in dielektrik – süreklilik (DC) modelini kullanmıştır (Lassnig, 1984 ; Riddoch ve Ridley, 1985; ve Sawaki,1986). Burada elektromanyetik (EM) sınır koşulu kullanılmıştır ve LO şekilleri, sıfır geçirgenlikli bir skaler potansiyele sahiptir. Bu yüzden EM sınırlı durumları (elektrik alanının düzlem içi bileşen sürekliliği ve elektrik yer değiştirmesinin dik bileşen sürekliliği) ara yüzde potansiyel kaybolma anlamına gelir. Bu şart sadece arayüzlerde katmanlara dik yönde relatif iyonik yer değiştirme olan  $u_z$  antinodlarında LO titreşim modelleriyle sağlanabilir. Katmanın orta düzlemi ile ilgili potansiyel, simetrik ve antisimetrik olarak sınıflandırılabilir.



**Şekil 2.2.** LO (longitudinally polarized) örnekleri. (a) Hidrodinamik model; (b) dielektrik-süreklilik modeli.  $u_z$  hapsedilme yönü boyunca optik sapma ve  $\phi$  skaler potansiyel

$$\begin{aligned}
 \phi &\propto u_r = k_n A_L e^{ik_n r} \cos k_L z \\
 u_z &= ik_L A_L e^{ik_n r} \sin k_L z \\
 k_L a &= (2n-1)\pi
 \end{aligned}
 \tag{2.3.a}$$

Simetrik

$$\begin{aligned}
& \phi \propto u_r = ik_{||} A_L e^{ik_{||} r} \sin k_L z \\
\text{Antisimetrik} \quad & u_z = k_L A_L e^{ik_{||} r} \cos k_L z \\
& k_L a = 2n\pi
\end{aligned} \tag{2.3.b}$$

Burada kartezyen eksenine göre,  $z$  eksenine katman düzlemine göre normaldir,  $r$  düzlemde bir pozisyon vektörü,  $k_L$  ve  $k_{||}$  uyumlu dalga vektör bileşenleridir. Katman  $-a/2 \leq z \leq a/2$  aralığındadır.  $A_L$  faktörü  $(k_{||}^2 + k_L^2)^{-1/2}$  ile sabit orantılıdır. Fröhlich etkileşiminin  $\phi \propto k^{-1}$  karakteristik özelliği, potansiyel  $\phi$ 'nin dalga vektöre bağımlılığı,  $k_L$ 'nin kuantizasyonu sonucu, ince katmanlardaki sınırlamalarıyla azalacak elektron etkileşimi kuvvetidir.

### 2.1.2. Hidrodinamik ( HD ) Model

DC modeli, LO şekillerinin ve gecikmesiz arayüz polaritonlarının sınırlamasının basit bir tanımını sağlamaktadır (Wendler et al., 1987; 1988; Mori and Ando, 1989). Ne yazık ki, DC modeli Raman dağılma deneylerinde görüldüğü gibi yanlış şekil örneklerini öngörür. Teorinin karşı çıkılan yönü şudur ki; model kesinlikle mekanik sınırlamaları dikkate almaz ve optik modeller için, mekanik enerji, EM enerjisinden çok daha büyük olduğu için göz ardı edilemez.

DC modeli *Ge/Si* gibi non-polar bir sisteme uygulanamaz. Buna rağmen DC modeli bazı durumlarda akla yatkın dağılım oranları sağlamaktadır. DC modeline bir alternatif, sıvıdaki akustik dalgalar yani yer değiştirme ve basıncın devamı için kullanılan EM sınırlı durumlarını mekanik durumlar ile değiştiren Babiker (1986) tarafından sunulmuştur. Hidrodinamik (HD) modeli basıncı tanımlamak için gerekli olan önemli dağılım tanımını içermektedir. Büyük frekans uyumsuzluğu olan sistemlerde HD durumları arayüzde  $u_z = 0$  'a azalır ve şu sonuçlar çıkar;

$$\begin{aligned}
\phi &\propto u_r = k_L A_L e^{ik_L r} \cos k_L z \\
u_z &= ik_L A_L e^{ik_L r} \sin k_L z \\
k_L a &= 2n\pi
\end{aligned} \tag{2.4.a}$$

$$\begin{aligned}
\phi &\propto u_r = ik_L A_L e^{ik_L r} \sin k_L z \\
u_z &= k_L A_L e^{ik_L r} \cos k_L z \\
k_L a &= (2n-1)\pi
\end{aligned} \tag{2.4.b}$$

Bu modlar, DC modların aksine eşitliklere sahiptir. Bunun bir sonucu olarak DC modeliyle öngörülen oranlardan farklı şekilde dağılan elektronların oranıdır (Ridley, 1989).

## 2.2. Elektronlarla Hacim Fononlarının Etkileşimi

Çok katmanlı yarı iletkenlerde elektron-fonon dağılımının ilk hesaplamaları, akustik modları ve optik şekillerin sınırlandırmasını göz ardı etmiş ve fonon spektrumu ile sınırlı elektronlar kullanılmıştır.

Hacim spektrum kullanılarak elde edilmiş bütün dağılım oranları, fonon sınırlandırması hesaba katılarak yapılanlarla hemen hemen aynıdır (Rucher, 1991). Gerçek oran, büyük genişlik için *GaAs* hacim modlar kullanılarak elde edilen değer ile küçük genişlik için *AlAs* hacim modları kullanılarak elde edilen değerler arasında değişir. Bu yüzden, fonon sınırlandırmasının etkisini değerlendirmek için oranları bir hacim spektrum kullanılarak incelemek gereklidir.

Bir elektron ve fonon arasındaki etkileşimin zayıf olduğunu varsayarsak, böylece Fermi altın kuralında somutlaştırılan 1. sıradaki pertürbasyon teorisi ile dağılım oranı verilir.

$$W(k) = \frac{2\pi}{\hbar} \int |M(k', k)|^2 \delta(E_f - E_i) dN_f \tag{2.5}$$

Burada  $M(k',k)$  ,  $|k\rangle$  ve  $|k'\rangle$  elektron durumlarıyla bağlantılı matris elamanı;  $E_f$  ,  $E_i$  son ve başlangıç enerjileri;  $N_f$  son durum sayısıdır.

Sadece bir fonon sürecinin izin verildiği elektron – fonon etkileşiminde, bağıntı aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$W(k) = \int W(k',k) \delta[E(k') - E(k) \pm \hbar\omega(q)] dk' \quad (2.6)$$

Burada;

$$W(k',k) = \sum_q \frac{C^2(q) |I(k',k,q)|^2 [n(\omega) + 1/2 \pm 1/2]}{8\pi^2 \rho \omega(q)} \quad (2.7)$$

olarak yazılabilir.  $C(q)$  kavrama katsayısı,  $n(\omega)$  fonon sayısı,  $\rho$  akustik fonon etkileşiminde kütle yoğunluğu ve optik fononlar için azaltılmış kütle yoğunluğu,  $\omega(q)$  fonon frekansı ve emisyon için üst işaret, soğurma için alt işaret,  $I(k',k,q)$  aşağıdaki şekil için overlap integralidir.

$$I(k',k,q) = I(k',k) G(k',k,q) \quad (2.8)$$

Burada,  $u_k(r)$  elektron dalga fonksiyonunun hücre periyodik parçası olarak birim hücre üzerindeki integraldir.

$$I(k',k) = \int u_{k'}^*(r) u_k(r) dr_0 \quad (2.9)$$

### 2.3. Elektron – Fonon Saçılmaları

Fononlar kristal örgüsünde deformasyona sebep olurlar ve yerel bant yapısını değiştirirler. Elektron-fonon etkileşmelerinin önemli etkileri aşağıdaki gibi sıralanabilir.

- 1- Elektronlar bir  $\vec{k}$  durumundan diğer bir  $\vec{k}'$  durumuna saçılır ve böylece elektrik iletkenliği oluşmaktadır.
- 2- Saçılma olayında fononlar soğrulabilir.
- 3- Elektron bir kristal deformasyonunu birlikte taşır ve etkin kütlesi de artmaktadır.
- 4- Bir elektronun oluşturduğu kristal deformasyonu ikinci bir elektronu etkilemektedir. Böylece süperiletkenlik teorisindeki elektron-elektron etkileşmesi gerçekleşmektedir.

Deformasyon potansiyeli yaklaşıklığında elektronun  $\varepsilon(\vec{k})$  enerjisi, kristal genişmesi veya hacim değişme oranı denilen  $\Delta(\vec{k})$  ile çiftlenim yapar ve

$$\varepsilon(\vec{k}, \vec{r}) = \varepsilon_0(\vec{k}) + C\Delta(\vec{r}) \quad (2.10)$$

şekliyle yazılabilir. Burada C bir sabittir. Bu yaklaşım uzun fonon dalga boyu ve düşük elektron yoğunluklarında küresel bant kıyıları  $\varepsilon_0(\vec{k})$  için iyi sonuç vermektedir. Kristal genişmesi, fonon operatörleri  $\alpha_{\vec{k}}, \alpha_{\vec{k}}^+$  cinsinden aşağıdaki biçimde yazılabilir;

$$\Delta(\vec{r}) = i \sum_q \left( \frac{\hbar}{2M\omega_q} \right)^{1/2} |\vec{q}| \left[ \alpha_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}} - \alpha_{\vec{q}}^+ e^{-i\vec{q}\vec{r}} \right] \quad (2.11)$$

Burada,  $M$  kristal kütesidir. Bu sonuç,  $k \ll 1$  limitinde ( $q_s - q_{s-1}$ ) oluşturularak da elde edilebilir.

Saçılmanın Born yaklaşıklığında,  $C\Delta(\vec{r})$ 'nin tek-elektron Bloch durumları  $|\vec{k}\rangle$  ve  $|\vec{k}'\rangle$  arasındaki matris elemanları ile hesap yapılır. Burada  $|\vec{k}\rangle = \exp(i\vec{k}\cdot\vec{r})u_{\vec{k}}$ 'dir. Dalga alanı temsilinde matris elemanı,

$$\begin{aligned} H' &= \int d\vec{r} \psi^\dagger(\vec{r}) C\Delta(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}', \vec{k}} c_{\vec{k}'}^+ c_{\vec{k}} \langle \vec{k}' | C\Delta | \vec{k} \rangle \\ &= iC \sum_{\vec{k}', \vec{k}} c_{\vec{k}'}^+ c_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sqrt{\frac{\hbar q^2}{2M\omega_{\vec{q}}}} \left[ a_{\vec{q}} \int d\vec{r} u_{\vec{k}'}^* u_{\vec{k}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}'+\vec{q})\cdot\vec{r}} - a_{\vec{q}}^+ \int d\vec{r} u_{\vec{k}'}^* u_{\vec{k}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}'-\vec{q})\cdot\vec{r}} \right] \end{aligned} \quad (2.12)$$

olur. Burada  $c_{\vec{k}}^+, c_{\vec{k}}$  fermiyon yaratma ve yok etme operatörleri olup

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} \phi(\vec{k}) = \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.13)$$

olur.  $u_{\vec{k}}^* u_{\vec{k}}$  çarpımı Bloch fonksiyonlarının periyodik kısımlarını içerdiğinden kendisi de periyodik olur. Buna göre, Denklem (2.12)'deki integrallerin sıfırdan farklı olabilmesi için

$$\vec{k} - \vec{k}' \pm \vec{q} = \begin{cases} 0 \\ \text{ters örgü vektörü} \end{cases} \quad (2.13a)$$

Biçiminde olmalıdır. Düşük sıcaklıklardaki yarı iletkenlerde enerji korunumu açısından sadece 0 seçeneği (N etkileri) vardır.

Burada sadece N etkisini inceleyelim ve yaklaşık olarak  $\int d\vec{r} u_{\vec{k}}^* u_{\vec{k}} \approx 1$  alalım. Buna göre, aşağıdaki şekliyle deformasyon potansiyeli denilen pertürbasyon yazılabilir;

$$H' = iC \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \left( \hbar / 2M \omega_{\vec{q}} \right)^{1/2} |\vec{q}| \left[ a_{\vec{q}} c_{\vec{k}+\vec{q}}^+ c_{\vec{k}}^- - a_{\vec{q}}^+ c_{\vec{k}-\vec{q}}^+ c_{\vec{k}}^- \right] \quad (2.14)$$

### 2.3. 1. Relaksiyon Zamanı

Elektron-fonon etkileşmesi gerçekleştiğinde dalga vektörü  $\vec{k}$ , sadece elektron göz önüne alındığında bir hareket sabiti değildir; ancak elektron ve fonon dalga vektörleri toplamı korunumlu olmaktadır.

Aşağıda  $\vec{k}$  dalga vektörlü bir elektronun, birim zamanda  $\vec{q}$  dalga vektörlü bir fonon üretme olasılığı  $\omega$  eşitliği verilmiştir. Fonon durumunun başlangıçtaki doluluk sayısı  $n_{\vec{q}}$  ise, zamandan bağımsız pertürbasyon teorisine göre;

$$\omega(\vec{k} - \vec{q}; n_{\vec{q}} + 1 | \vec{k}; n_{\vec{q}}) = (2\pi/\hbar) \left| \langle \vec{k} - \vec{q}; n_{\vec{q}} + 1 | H' | \vec{k}; n_{\vec{q}} \rangle \right|^2 \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \hbar\omega_{\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}-\vec{q}}) \quad (2.15)$$

yazılır. Burada,

$$\left| \langle \vec{k} - \vec{q}; n_{\vec{q}} + 1 | H' | \vec{k}; n_{\vec{q}} \rangle \right|^2 = (C^2 \hbar q / 2M c_s) (n_{\vec{q}} + 1) \quad (2.16)$$

eşitliği yazılabilir. Mutlak sıfırda  $n_{\vec{q}} = 0$  olan bir fonon sistemi içindeki elektronun toplam saçılma oranı;

$$W = \frac{C^2}{4\pi\rho c_s} \int_{-1}^1 d(\cos\theta_{\vec{q}}) \int_0^{q_m} dq q^3 \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \hbar\omega_{\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}-\vec{q}}) \quad (2.17)$$

olur. Burada  $\rho$  kütle yoğunluğudur. Delta fonksiyonunun argümanı ise şöyle yazılabilir;

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} (2\vec{k} \cdot \vec{q} - q^2) - \hbar c_s q = \frac{\hbar^2}{2m^*} (2\vec{k} \cdot \vec{q} - q^2 - qq_c) \quad (2.18)$$

Burada  $q_c = 2m^*c_s$  olup  $c_s$  ses hızını gösterir. Delta fonksiyonunun argümanının sıfır olduğu minimum  $k$  değeri  $k_{\min} = \frac{1}{2}(q + q_c)$ 'dir.  $q = 0$  olduğunda bu değer  $k_{\min} = \frac{1}{2}q_c = m^*c_s/\hbar$  olur. Bu  $k$  değerinde elektronun grup hızı  $v_g = k_{\min}/m^*$  ses hızına eşit olmaktadır. O halde, kristaldeki elektronların fonon üretebilmesi için elektron grup hızının akustik hızdan büyük olması gerekmektedir. Bu koşul, hızlı elektronların kristalde foton üretebilmesi için gerekli Cerenkov eşik hızına benzer durumdadır. Fononlar için elektron eşik enerjisi  $\frac{1}{2}m^*c_s^2 \sim 10^{-27} \cdot 10^{11} \sim 10^{-16} \text{ erg} \sim 1K$  olarak ifade edilir. Mutlak sıfırda, bu eşik enerjisinin altındaki bir elektron, yüksek dereceden elektron-fonon etkileşmeleri olsa bile, kristal içinde yavaşlamadan hareket eder. Bu durum, fononlar için harmonik yaklaşıklık kullanıldığından dolayı böyledir.  $k \gg q_c$  eşitsizliğinde denklem (2.18)'deki  $qq_c$  terimi ihmal edilebilir ve denklem (2.17)'deki integral,

$$\int_{-1}^1 d\mu \int dq q^3 (2m^*/\hbar^2 q) \delta(2k\mu - q) = (8m^*/\hbar^2) \int_0^1 d\mu k^2 \mu^2 = 8m^*k^2/3\hbar^2 \quad (2.19)$$

biçiminde yazılabilir. Buradan fonon üretim oranı;

$$W(\text{üretim}) = \frac{2C^2 m^* k^2}{3\pi \rho c_s \hbar^2} \quad (2.20)$$

elektron enerjisi  $\varepsilon_k$  ile doğru bulunur.  $\vec{k}$  vektörüyle  $\theta$  açı yapan bir doğrultuda bir fonon üretildiğinde, elektronun ilk yönündeki dalga vektörü bileşenindeki azalma  $q \cos \theta$  olacaktır.  $k_z$  bileşenindeki kayıp oranı, üretim oranı integralinde fazladan bir  $(q/k) \cos \theta$  faktörü kullanılarak hesaplanabilir. Buna göre, denklem (2.19) yerine,

$$(2m^*/\hbar^2 k) \int_0^1 d\mu 8k^3 \mu^4 = 16m^* k^2 / 5\hbar^2 \quad (2.21)$$

yazılır. O halde  $k_z$  'nin azalma oranı,

$$W(k_z) = 4C^2 m^* k^2 / 5\pi \rho c_s \hbar^2 \quad (2.22)$$

olarak yazılabilir. Bu büyüklük elektrik özdirenç hesaplarında kullanılır.

Yukarıdaki sonuçlar mutlak sıfırda geçerlidir.  $k_B T \gg \hbar c_s k$  olan sıcaklık bölgesinde toplam fonon üretim oranı hesaplanırsa

$$W(\text{üretim}) = \frac{C^2 m^* k k_B T}{\pi \rho c_s^2 \hbar^3} \quad (2.23)$$

sonucuna ulaşılır. Çok düşük olmayan sıcaklıklarda termal dengede olan elektronlar için  $k_B T \gg \hbar c_s k$  koşulu, ortalama  $k$  değeriyle sağlanabilir.  $C = 10^{-12} \text{ erg}$ ,  $m^* = 10^{-27} \text{ g}$ ,  $c_s = 3 \times 10^5 \text{ cm/s}$  ve  $\rho = 5 \text{ gm/cm}^3$  alınırsa  $W \approx 10^{12} \text{ s}^{-1}$  bulunur. Aynı sayısal değerlerle mutlak sıfırdaki denklem (2.22) hesaplanırsa  $W \approx 5 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$  bulunur (Kittel, 1986; Karaoğlu, 1996).

### 3. BLOCH – GRUNEISEN FONKSİYONU

Elektron – fonon etkileşim katkısını metallerin elektriksel özdirenci için Bloch–Gruneisen integrali ifade eder. Bloch–Gruneisen integralinin analitik gösterimi sonsuz serilerin şeklini alır.

#### 3.1. BG Fonksiyonunun Analizi

Birçok metalin elektriksel özdirençlerine elektron – fonon etkileşiminin katkısı Bloch – Gruneisen kanunları olarak verilir (Gruneisen, 1933).

$$\rho_i = (c/\theta)(T/\theta)^5 \int_0^{\theta/T} z^5 \left[ (e^z - 1)(1 - e^{-z}) \right]^{-1} dz \quad (3.1)$$

Burada;

$c$ : Sabit

$\theta$ : Metalin Debye Sıcaklığı

$T$ : Mutlak Sıcaklık

Basit atomlu metallerin özdirencinin sıcaklığa bağlılığı, çok değerlikli bazı geçiş metalleri kadar bu kanuna uymaktadır (White and Woods, 1959). Denklem (3.1) kullanılarak alınan verilerden  $c$  ve  $\theta$ 'nın elde edilmesini kolaylaştırır.

$\log\left(\frac{\theta}{T}\right)$ 'de 9. dereceden bir polinom şeklindeki yaklaşım, Igasaki ve Mitsuhashi (1987) tarafından ileri sürülmüştür. Denklem (3.1)'de sonsuz serilerin terimlerinde analitik gösterimler bulunmaktadır. Bu seriler, tüm sıcaklıklarda geçerlidir ve terimin küçük bir sayı değeri için yüksek oranda doğru sonuçlar elde edilmektedir.

$$\left[ (e^z - 1)(1 - e^{-z}) \right]^{-1} = e^{-z} \left[ 1 - e^{-z} \right]^{-2} = X(1 - X)^{-2} \quad (3.2)$$

olarak verilen eşitlikte tüm sonlu sıcaklık değerleri için  $X = e^{-z} < 1$ 'dir.

Bu şartlarda, serilerin genişlemesini denklem (3.1)'in yerine koyarak sağlayabiliriz (Gradshteyn and Ryzhik 1980).

$$X(1-X)^{-2} = \sum_{k=1}^{\infty} kX^k \quad (3.3)$$

ve

$$I(\theta/T) = \int_0^{\theta/T} z^5 [(e^z - 1)(1 - e^{-z})]^{-1} dz = \sum_{k=1}^{\infty} k \int_0^{\theta/T} z^5 e^{-kz} dz \quad (3.4)$$

eşitlikleri elde edilir.

$$I(\theta/T) = 120\zeta(5) - \sum_{k=1}^{\infty} \exp(-ky) \quad (3.5)$$

$$\times \left[ y^5 + (5/k)y^4 + (20/k^2)y^3 + (60/k^3)y^2 + (120/k^4)y + 120/k^5 \right]$$

Burada,  $\zeta(p) = \sum_{k=1}^{\infty} k^{-p}$ , Riemann zeta fonksiyonu ve  $y = \theta/T$ 'dir.

Denklem (3.5)'de kullanılan yaklaşık değerlerin uygunluğunu hesaplamak için ulaşılan sonuçlarda duyarlılık  $T \sim \theta/4$ 'e kadar %1'den daha iyi değerdedir.

Karşılaştırma sonucu, 9. dereceden polinom yaklaşımı,  $T \approx \theta/6$ 'nın altında tek terimli serilerde,  $\theta/6 < T < 10\theta$  aralığında %1,5 sapmayla, alt duyarlılıkları getirir.  $T \approx 10\theta$ 'da duyarlılık  $\sim \%5$ 'tir.

Sonuçta;

$$[(e^z + 1)(1 - e^{-z})] = 4 \sinh^2(z/2)$$

bağıntısını kullanarak,

$$I(\theta/T) = \int_0^{\theta/2} z^5 [(e^z + 1)(1 - e^{-z})] dz = 16 \int_0^{\theta/2T} z^5 \sinh^{-2} z dz \quad (3.6)$$

$$I(\theta/T) = -0.5 y^5 \coth(y/2) + 80 \int_0^{\theta/2T} z^4 \coth z dz \quad (3.7)$$

eşitliği elde edilir. Buraya  $y = \theta/T$  'dir.  $z$ ' nin kuvvetlerinde  $\coth z$  açılımı, kuvvet serilerinin gösterimini kazandırır. Diğer bir açılım,

$$\coth z = z^{-1} + 2 \sum_{k=1}^{\infty} z [z^2 + \pi k]^2 ]^{-1} \quad (3.8)$$

olarak yazılabilir.

Sonuç olarak, küçük sayı değerleri için denklem (3.5)'deki serilerin tam olarak denklem (3.1)'deki integrale uygunluğu gözlenmiştir.

Terimlerin belirli sayı değerleri, minimal  $(\theta/T)$ 'e bağlı verilen duyarlılığı elde etmeyi gerektirir. Ancak  $T \sim \theta$ 'e kadar sıcaklık değerleri için 15'ten daha az terimler, deneysel verilere net olarak yaklaştırır (Deutsch, 1987).

### 3.2. BG Fonksiyonunun Hesaplama Yöntemleri

Bloch – Grüneisen İntegralleri;

$$J_n(x) = \int_0^x \frac{t^n e^t}{(e^t - 1)^2} dt, \quad x \geq 0; \quad n = 2, 3, \dots \quad (3.9)$$

(Deutsch, 1987).

$$K(x) = \int_0^x \frac{t^n e^t}{e^{2t} - 1} dt, \quad x \geq 0; \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.10)$$

formülüyle tanımlanır (Durczewski and Ausloos, 1985).

İntegrallerin her iki çeşidi de Deutsch'un sonuçlarının basit genelleştirmeleridir. İntegrallerin her ikisi için bütün  $n$  değerlerinde iki analitik ifade verilmiştir. Birinci ifade  $x$ 'in küçük değerleri, diğeri de büyük değerleri içindir.

#### 3.2.1. $x$ ' in Küçük Değerleri

$J_5(x)$  integrali,  $x$ 'de bir kuvvet serisinde genişletilebilir (Deutsch, 1987).

Teorem 3.2.1.1.

Eğer  $x < 2\pi$  ise,

$$J_n(x) = - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2k-1)B_{2k}}{(2k+n-1)(2k)!} x^{2k+n-1} \quad (3.11)$$

Eğer  $x < \pi$  ise,

$$K_n(x) = -\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2^{2k-1} - 1)B_{2k}}{(2k+n)(2k)!} x^{2k+n} \quad (3.12)$$

olarak yazılabilir.

İspat;

$m$ 'nin ( $m = 1, 2, \dots$ ) basamaklarında Bernoulli polinomları şu formülle tanımlanır;

$$\frac{t^m e^{xt}}{(e^t - 1)^m} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k^{(m)}(x)}{k!} t^k, \quad |t| < 2\pi \quad (3.13)$$

Böylece,

$$J_n(x) = \int_0^x \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k^{(2)}(1)}{k!} t^{k+n-2} dt = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k^{(2)}(1)}{(k+n-1)k!} x^{k+n-1} \quad (3.14)$$

$B_k^{(m+1)}(1) = (1 - k/m)B_k^{(m)}$  olduğu için,  $B_k^{(m)} = B_k^{(m)}(0)$ ,  $m$  basamaklı Bernoulli çok terimlidir.

$$J_n(x) = -\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(k-1)B_k}{(k+n-1)(k)!} x^{k+n-1} \quad (3.15)$$

Burada,  $B_k = B_k^1$  Bernoulli çok terimlidir. Bu,  $B_3 = B_5 = \dots = 0$  için denklem (3.11)'i verir.

Aynı zamanda denklem (3.13)'den;

$$\frac{te^t}{e^{2t}-1} = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k(1/2)}{k!} (2t)^k, \quad |t| < \pi \quad (3.16)$$

elde edilir. Burada  $B_k(x) = B_k^{(1)}(x)$  Bernoulli çok terimlidir. Ayrıca,

$$B_k\left(\frac{1}{2}\right) = -\frac{2^{k-1}-1}{2^{k-1}} B_k \quad (3.17)$$

olarak verilir.

Yukarıdaki dönüşümden sonra denklem (3.12) elde edilir. Bernoulli çok terimlerinin asimtotik özellikleri, elde edilen seri terimlerinin iyi bir tahminine götürür.

$$B_{2k} \sim (-1)^{k+1} \frac{2(2k)!}{(2\pi)^{2k}}, \quad k \rightarrow \infty \quad (3.18)$$

Böylece,  $x \leq \pi$  için,

$$\left| \frac{(2k-1)B_{2k}}{(2k+n-1)(2k)!} x^{2k+n-1} \right| \leq \frac{2\pi^{n-1}}{4^k}, \quad (3.19)$$

eşitsizliği yazılır. Denklem (3.12) serileri benzer şekildedir ve aşağıdaki gibi yazılır;

$x \leq \frac{\pi}{2}$  için,

$$\left| \frac{(2^{2k-1}-1)B_{2k}}{(2k+n)(2k)!} x^{2k+n} \right| \leq \frac{\pi^n}{4^k k}, \quad (3.20)$$

Bu yüzden  $10^{-10}$  u aşmayan mutlak hatalarla elde edilen arařtırmalarda sırasıyla  $k \leq 20$  ve  $k \leq 18$  için denklem (3.11) ve denklem (3.12) seri terimlerin uygulanması yeterlidir. ( $x$  için  $J_5(x)$  ve  $K_5(x)$  deęerleri)

### 3.2.2. $x$ ' in Büyük Deęerleri

Büyük  $x$  deęerleri için denklem (3.11) ve (3.12) serileri ıraksaktır. Bu durum Pochhammer sembolü,

$$(a)_m = a(a+1)\dots(a+m-1) \quad (m = 0, 1, \dots) \quad (3.21)$$

ve ařaęıdaki formülle tanımlanan Riemann zeta fonksiyonunu içermektedir.

$$\zeta(s) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^s}, \quad \Re s > 1 \quad (3.22)$$

$K_n$  için benzer bir ifade řu fonksiyonu içerir.

$$\lambda(s) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{(2k-1)^s}, \quad \Re s > 1 \quad (3.23)$$

(Abramowitz and Stegun, 1964).

Açıkça,

$$\lambda(s) = (1 - 2^{-s}) \zeta(s). \quad (3.24)$$

řeklinde de yazılabilir.

**Teorem 3.2.2.1.**

Her  $x \geq 0$  için

$$J_n(x) = n! \zeta(n) - \sum_{k=1}^{\infty} \left[ \sum_{j=0}^n \frac{(j+1)_{n-j}}{k^{n-j}} x^j \right] e^{-kx}, \quad (3.25)$$

$$K_n(x) = n! \lambda(n+1) - \sum_{k=1}^{\infty} \left[ \sum_{j=0}^n \frac{(j+1)_{n-j}}{(2k-1)^{n-j+1}} x^j \right] e^{-(2k-1)x} \quad (3.26)$$

**İspat:**

$$\frac{p}{(1-p)^2} = \sum_{k=1}^{\infty} kp^k, |p| < 1. \quad (3.27)$$

$$J_n(x) = \sum_{k=1}^{\infty} k E_{nk}(x) dx \quad (3.28)$$

anlamına gelir. Burada,

$$E_{n,k}(x) = \int_0^x t^n e^{-kt} dt = \frac{n!}{k^{n+1}} - \left[ \sum_{j=0}^n \frac{(j+1)_{n-j}}{k^{n-j+1}} x^j \right] e^{-kx} \quad (3.29)$$

değeri elde edilir (Gradshteyn and Ryzhik 1980). Basit temel cebirden sonra denklem (3.25) elde edilir. Denklem (3.26)'nın ispatında,

$$K_n(x) = \sum_{k=1}^{\infty} E_{n,2k-1}(x) \quad (3.30)$$

açık formülü kullanılır.

$x \approx 0$  için denklem (3.25) ve (3.26) serileri iki soruna sahiptir. Bu seriler yakınsaktır, belli bir noktada birleşir ve tam olarak  $J_n(x)$  ve  $K_n(x)$  değerlerini vermez.

Gerçekten bu integraller küçük değerlere ( $J_n(x) \sim x^{n-1}/n-1, x \rightarrow 0$ ) sahip olmasına rağmen, söz konusu formülün sağ kısmı pozitif sabit bir terim ( $n!\zeta(n)$ ) denklem (3.25)'i içerir.

Ancak, denklem (3.25) ve (3.26) serileri oldukça karışık olduğu için (Örnek,  $n = 5$ 'te) hesaplamalardaki güçlüğü azaltmak amacıyla bazı değişiklikler faydalıdır. Bloch-Gruneisen integralleri, polilogaritma tarafından sonlu, sınırlı bir şekilde aşağıdaki gibi ifade edilebilir (Bateman and Erdelyi, 1953);

$$F(z, m) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^m}, |z| < 1 \quad m = 0, 1; |z| \leq 1 \quad m = 2, 3, \dots \quad (3.31)$$

Benzer bir fonksiyon aynı zamanda  $Li_m(z)$  şeklinde gösterilebilir. Bu fonksiyon,

$$G(z, m) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{(2k-1)^m}, |z| < 1 \quad m = 0, 1; |z| \leq 1 \quad m = 2, 3, \dots \quad (3.32)$$

şeklinde verilir.

### **Sonuç 3.2.2.2.**

Her  $x \geq 0$  için

$$J_n(x) = n!\zeta(n) - \sum_{j=0}^n (j+1)_{n-j} x^j F(e^{-x}, n-j), \quad (3.33)$$

$$K_n(x) = n! \lambda(n+1) - e^x \sum_{j=0}^n (j+1)_{n-j} x^j G(e^{-2x}, n-j+1). \quad (3.34)$$

F, G fonksiyonları sadece  $m=0,1$  için temel fonksiyonlar ile aşağıdaki şekilde ifade edilebilir;

$$F(z,0) = G(z,0) = \frac{z}{1-z}, \quad F(z,1) = -\log(1-z), \quad G(z,1) = \sqrt{z} \log \frac{1+\sqrt{z}}{1-\sqrt{z}}.$$

$m > 1$  değerleri için  $F(z,m)$  ve  $G(z,m)$  denklem (3.31) ve (3.32) serilerinden doğrudan hesaplanabilir. Ancak  $y = -\log(1-z)$  değişkenindeki bir güç serisinde bunların her birini yeniden şekillendirmek daha mantıklıdır. Katsayılar, orijinal serilerin sonlu lineer kombinasyonlarıdır.  $z = 1 - e^{-y} = y - \frac{1}{2}y^2 + \dots$

$$F(z,m) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{f_{mk}}{k!} y^k, \quad G(z,m) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{g_{mk}}{k!} y^k. \quad (3.35)$$

Bu kuvvet serileri  $|y| < 2\pi$  olmak şartıyla yakınsaktır ve  $|y| < \pi$  içinde oldukça güçlü yakınsaktır. Denklem (3.33)'te  $F(z,m)$  için serileri kullanmak, eğer  $x > 0,0442$  ise  $z = e^{-x}$ , (yani  $x = -\log(1 - e^{-y})$ ) ve  $y < \pi$  eşitsizliği olumlu bir durumdur.

Denklem (3.34)'de de  $x = -\frac{1}{2} \log(1 - e^{-y})$  ve  $G(z,m)$  için yeni seriler,  $x > 0,0221$  olmak şartıyla kullanışlıdır. Önceki bilgilerden doğrudan doğruya  $F(z,0) = G(z,0) = e^y - 1$  'dir. Burada bütün  $k$  'lar için  $f_{0k} = g_{0k} = 1$  'dir.

$F(z,1) = y$  'dir. Burada  $k > 1$  için  $f_{11} = 1$   $f_{1k} = 0$  'dır. Diğer  $f_{mk}$  ve  $g_{mk}$ , aşağıda ispatlanan formül ile tekrarlı bir şekilde hesaplanabilmektedir.

**Teorem 3.2.2.3.**

$m, k = 1, 2, \dots$  için;

$$f_{m-1,k} = \sum_{j=1}^k \binom{k}{j-1} f_{m,j} \quad (3.36)$$

$$g_{m-1,k} = 2 \sum_{j=1}^k \binom{k}{j-1} g_{m,j} - g_{m,k} \quad (3.37)$$

**İspat:**

$$F(z, m-1) = z(d/dz)F(z, m)$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{f_{m-1,k}}{k!} y^k = z \sum_{k=1}^{\infty} \frac{f_{m,k}}{(k-1)!} y^{k-1} \frac{dy}{dz}$$

$$= (e^y - 1) \sum_{k=1}^{\infty} \frac{f_{m,k}}{(k-1)!} y^{k-1} = \left( \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i!} y^i \right) \sum_{k=1}^{\infty} \frac{f_{m,k}}{(k-1)!} y^{k-1} \quad (3.38)$$

Sağ kısımdaki iki seriyi çarparak  $y^k$ 'nin katsayılarını karşılaştırmakla denklem (3.36) elde edilmiştir. Denklem (3.37)'nin başlangıç noktası biraz daha karışık formüldür.

$$G(z, m-1) = 2z \frac{d}{dz} G(z, m) - G(z, m) \quad (3.39)$$

Bilinen özdeşlikle  $m = 2$  için denklem (3.36)'nın karşılaştırmasıyla,

$$\sum_{j=0}^{k-1} \binom{k}{j} B_j = 0 \quad (3.39a)$$

ve  $f_{2,k} = B_{k-1}$  elde edilir (Korn, 1961). Böylece,

$$f_{3,k} = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k \binom{k}{j} B_{j-1} B_{k-j}, \quad (3.39b)$$

$$f_{3,2l} = \frac{1}{2l} \left[ \binom{2l}{2} B_1 B_{2l-2} + \binom{2l}{2l-1} B_{2l-2} B_1 \right] = -\frac{1}{4} (2l+1) B_{2l-2} \quad (3.40)$$

elde edilir.

**Tablo 3.1.**  $f_{m,k}$  katsayı değerleri

$k$	$f_{3,k}$	$f_{4,k}$	$f_{5,k}$
1	1	1	1
2	$-\frac{3}{4}$	$-\frac{7}{8}$	$-\frac{15}{16}$
3	$\frac{17}{36}$	$\frac{151}{216}$	$\frac{1085}{1296}$
4	$-\frac{5}{24}$	$-\frac{137}{288}$	$-\frac{2375}{3456}$
5	$\frac{7}{450}$	$\frac{12493}{34000}$	$\frac{1567541}{3240000}$
6	$\frac{7}{120}$	$-\frac{161}{7200}$	$-\frac{105707}{432000}$
7	$-\frac{38}{2205}$	$-\frac{291703}{3704400}$	$\frac{35635723}{1555848000}$
8	$-\frac{3}{56}$	$\frac{1207}{35280}$	$\frac{1905199}{19756800}$
9	$\frac{11}{350}$	$\frac{659921}{7938000}$	$-\frac{231609829}{5000940000}$
10	$\frac{11}{120}$	$-\frac{1331}{16800}$	$-\frac{455543}{3969000}$
11	$-\frac{3263}{38115}$	$-\frac{12129947}{78262800}$	$\frac{1280051188949}{9762501672000}$
12	$-\frac{65}{264}$	$\frac{79547}{304920}$	$\frac{2570318231}{11269843200}$
13	$\frac{13399637}{40990950}$	$\frac{2134239258113}{4923832914000}$	$-\frac{111658959584626733}{221794053611130000}$
14	$\frac{691}{728}$	$-\frac{764775667}{655855200}$	$-\frac{24857996101241}{39390663312000}$

Tablo 3.1,  $m = 3, 4, 5$  için  $f_{m,k}$  katsayılarını içermektedir. Bu sonuç denklem (3.36)'dan ileri gelen tekrarlamalı formülün yardımıyla hesaplanmıştır.

$$f_{m,k} = \frac{1}{k} \left[ f_{m-1,k} - \sum_{j=1}^{k-1} \binom{k}{j-1} f_{m,j} \right], \quad k = 1, 2, \dots \quad (3.41)$$

Bernoulli çok terimliliği bilgileriyle birlikte tablo bize,  $n = 2, 3, 4, 5$  için  $J_n(x)$  integrallerini hesaplamamıza olanak sağlamıştır. Benzer şekilde tekrarlamalı formül;

$$g_{m,k} = \frac{1}{2k-1} \left[ g_{m-1,k} - 2 \sum_{j=1}^{k-1} \binom{k}{j-1} g_{m,j} \right], \quad k = 1, 2, \dots \quad (3.42)$$

şeklinde ifadesiyle  $m \leq 4$  için  $g_{m,k}$  katsayıları Tablo 3.2 ve 3.3'de hesaplanmıştır. Bunlarda bize  $n = 1, 2, 3$  için  $K_n(x)$  integrallerini hesaplamaya olanak sağlamıştır. Aşağıdaki verilen  $f_{m,k}$  ve  $g_{m,k}$  katsayıları Mathematica programı kullanılarak hesaplanmıştır (Paszowski, 1999).

Denklem (3.11) ve (3.33)'ün doğruluğunu kanıtlamak için  $J_5(x)$ 'in bazı değerleri hesaplanmıştır. İlk formülden kuvvet serileri ve  $F(z, m)$ ,  $m = 2, \dots, 5$ , için denklem (3.35)'den kuvvet serileri sırasıyla  $k \leq 20$  ve  $k \leq 14$  kadarında ilk terimleri kısaltılmıştır.  $F(z, 0)$  ve  $F(z, 1)$  için tam ifadeler kullanılmıştır.

Tablo 3.2.  $g_{m,k}$  katsayı değerleri

$k$	$g_{1,k}$	$g_{2,k}$
1	1	1
2	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{7}{9}$
3	$\frac{1}{5}$	$\frac{43}{75}$
4	$-\frac{11}{105}$	$-\frac{4351}{11025}$
5	$\frac{1}{21}$	$\frac{331}{1323}$
6	$-\frac{5}{231}$	$-\frac{13001}{88935}$
7	$\frac{29}{2145}$	$\frac{7985141}{96621525}$
8	$-\frac{19}{2145}$	$-\frac{538339}{10735725}$
9	$\frac{3}{2431}$	$\frac{59088347}{1861574715}$
10	$\frac{2813}{969969}$	$-\frac{64389651371}{4704199304805}$
11	$\frac{2179}{440895}$	$-\frac{619807807}{6414817233825}$
12	$-\frac{117227}{10140585}$	$-\frac{3169015454503}{377048701854825}$
13	$-\frac{301}{22287}$	$\frac{1075384677379}{37290530952675}$
14	$\frac{899}{22287}$	$\frac{44801146139}{4143392328075}$

**Tablo 3.3.**  $g_{m,k}$  katsayı değerleri (2. bölüm)

$k$	$g_{3,k}$	$g_{4,k}$
1	1	1
2	$-\frac{25}{27}$	$-\frac{79}{81}$
3	$\frac{929}{1125}$	$\frac{15787}{16875}$
4	$-\frac{809771}{1157625}$	$-\frac{106328191}{121350625}$
5	$\frac{230789}{416745}$	$\frac{103439347}{131274675}$
6	$-\frac{373293559}{924479325}$	$-\frac{2159070535387}{3203320861125}$
7	$\frac{1179314318069}{4352316593625}$	$\frac{105834806634032621}{196050100959838125}$
8	$-\frac{252809137913}{1450772197875}$	$-\frac{26320182092402897}{65350033653279375}$
9	$\frac{166426520058187}{1425528761631975}$	$\frac{312418984126721220227}{1091620032151109335875}$
10	$-\frac{1806653173772749339}{22814637477412005225}$	$-\frac{22691264838256696986075491}{110647455496639226480440125}$
11	$\frac{3544493726417486851}{93332607862140021375}$	$\frac{201433431458285277791844257}{1357946044731481415896310625}$
12	$-\frac{1958127506513876650009}{378525946619552546689875}$	$-\frac{10857295782258425951784462367669}{126669659701234163635279820536875}$
13	$\frac{271092146136126224477}{8913483829345821350625}$	$\frac{2447722134763166781571421407579}{104398071182335849149955896046875}$
14	$-\frac{1721746745418376872583}{20798128935140249818125}$	$-\frac{5077021329779528073916405765189}{104398071182335849149955896046875}$

**Tablo 3.4.**  $J_5(x)$  için sayısal değerler

0.5	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0	3.5	4.0	4.5	5.0	5.5	6.0	6.5	7.0	7.5
7	9	12	17	20	13d	10d	6d	4d	2d	1d	0d	0d	0d	0d
-	14	12	10	9	9	7	6	5	5	5	4	4	4	4

**Tablo 3.5.**  $K_3(x)$  için sayısal değerler

0.5	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0	3.5	4.0	4.5	5.0	5.5	6.0	6.5	7.0	7.5
8	13	14d	7d	4d	2d	0d	0d	0d	0d	0d	0d	0d	0d	0d
14	10	8	7	6	5	5	4	4	3	3	3	3	3	2

Tablo 3.4,  $x$ 'in ilk sıra deęerlerini içermektedir. İkinci sıra, denklem (3.11)'de kullanılan dięer en büyük  $k$  deęerini veya  $k \leq 20$  için bu serilerin tamamının toplamlarıyla elde edilen çoklu rakamları ( $d$  ile devam eden) içermektedir. Üçüncü sıra denklem (3.33) ve (3.35) ile ilgilidir.

Tablo 3.5,  $K_3(x)$  integralleriyle ilgili olarak aynı yöntemle yapılandırılmıştır. Tablo 3.4 ve 3.5 arasındaki bazı niceliksel ayrımlar, Denklem (3.11), (3.12) ve (3.35)'de kuvvet serilerinin farklı yakınsama alanlarından ileri gelmektedir.

#### **Teorem 3.2.2.4.**

Eđer  $x = \log(1 - e^{-y})$  ve  $|y| < 2\pi$  ise,

$$x = -\log y + \frac{1}{2}y - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{B_{2k}}{2k(2k)!} y^{2k} \quad (3.43)$$

#### **İspat :**

$$x = -\log y + L(y)$$

Burada,  $L(y) = -\log \frac{1 - e^{-y}}{y}$ ,  $L'(y) = \frac{1}{y} - \frac{1}{e^{-y} - 1}$  eşitlikleriyle,  $m = 1$  ve  $x = 0$

için denklem (3.13)'ü kullanarak,  $x = 0$   $|y| < 2\pi$  için aşağıdaki eşitlięi elde ederiz.

$$\frac{1}{e^y - 1} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k}{k!} y^{k-1} \quad (3.44)$$

$L'(y)$ 'nin integralini almak bize denklem (3.43)'ü verir.

Denklem (3.43),  $\log y$ 'nin kuvvetlerinde sonlu toplamı düzenlemeye olanak sağlamaktadır.

Aşağıdaki formül bu dönüşümler vasıtasıyla elde edilen en temel formüldür.

$$J_2(x) = \frac{1}{3}\pi^2 - \left[ \begin{array}{l} \left( 2y + \frac{1}{2}y^2 + \frac{2}{9}y^3 + \frac{1}{12}y^4 + \frac{109}{4800}y^5 + \frac{3}{640}y^6 + \frac{3961}{5080320}y^7 + \dots \right) \\ - \left( 2y + y^2 + \frac{5}{12}y^3 + \frac{1}{8}y^4 + \frac{41}{1440}y^5 + \frac{1}{192}y^6 + \frac{29}{36288}y^7 + \dots \right) \log y \\ + (e^y - 1)(\log y)^2 \end{array} \right]$$

(3.45)

Bütün  $J_n(x)$  ve  $K_n(x)$  integralleri, benzer bir usülde ifade edilmektedir (Paszkowski, 1999).

#### 4. BG FONKSİYONUNU KULLANARAK METALLERİN VE SÜPER İLETKENLERİN ÖZDİRENCİNİN SICAKLIĞA BAĞLILIĞININ İNCELENMESİ

##### 4.1. Saf Kalayın 4,5' ten 77<sup>0</sup>K' ye Elektriksel İletkenliği

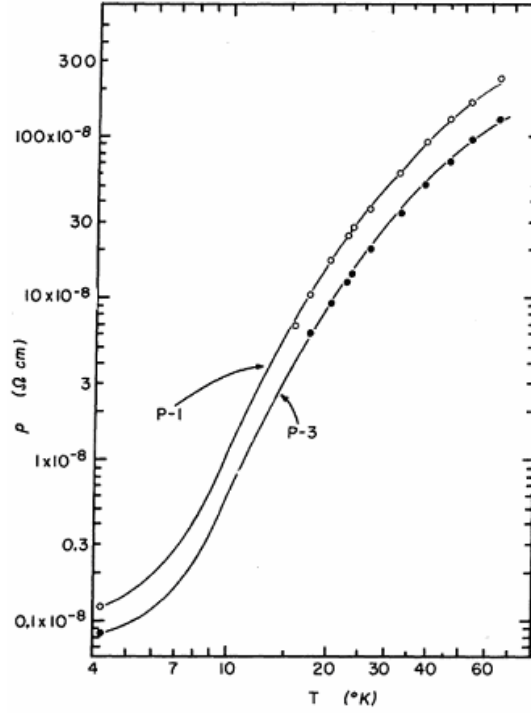
Karamargin et al. (1972) tarafından yapılan çalışmada kalay numunelerinin elektriksel özdirenç değeri, 125 K' lik Debye sıcaklığı ve artık özdirenç ile geniş bir seri üzerindeki Bloch – Gruneisen ifadesinde uygunluğu tespit edilmiştir. Her iki numune için 4,2 K' de ölçülen elektriksel özdirenç ve diğer artık özdirenç yaklaşık 8 K' nin altında baskın olacağı tahmin edilmiştir. 10 K' nin üstündeki her derecede ideal özdirenç baskın kalmaktadır. Sıcaklık derecesine bağlılığı göstermek için toplam özdirenç Bloch – Gruneisen bağıntısına uyduğu kabul edilmektedir.

$$\rho = A + B(T/\theta)^5 \int_0^{\theta/T} \left[ x^5 e^x (e^x - 1)^{-2} dx \right] \quad (4.1)$$

Burada  $A$ , artık özdirenci göstermektedir.  $B$ , bir sabit,  $\theta_D$  Debye sıcaklık derecesidir.

**Tablo 4.1.** P-3 ve P-1 saf kalay örneklerinin  $T = 4,2 K$  ve suyun donma noktasında artık özdirenç değerleri (Karamargin et al., 1972)

Örnekler	Sıcaklık <sup>0</sup> K	Özdirenç $\Omega cm$
P-3	4.2	$(8.6 \pm 0.5) \times 10^{-10}$
P-1	4.2	$(12.4 \pm 0.5) \times 10^{-10}$
P-3	273	$(9.395 \pm 0.056) \times 10^{-6}$
P-1	273	$(13.905 \pm 0.83) \times 10^{-6}$



**Şekil 4.1.** İki saf kalay numunesi için elektriksel özdirencin sıcaklıkla değişimi. Ölçülen değerler P-1 için açık halkalar, P-3 için kapalı halkalar olarak gösterilmiştir (Karamargin et al., 1972)

Yapılan çalışmada  $\theta = 125$  K değeri her iki örnek için 60 K'ye kadar iyi bir uyum gösterdiği sonucuna varılmıştır. 120 K ve 130 K' nin test değerleri ise daha düşük bir uyum sergilemektedir.

Denklem (4.1)'i kullanarak  $\rho_i(T_1)$ 'den  $\theta$  değeri elde edilebilir.

$$\rho_i(T_1)/\rho_i(T_2) = 497,6(T_1)^5 / (\theta^4 T_2) \quad (4.2)$$

$T_2$  için 273 K ve  $T_1$  için 4.2 K alınarak ( yani,  $\rho_i(273)=9,40\times 10^{-6}\Omega cm$  ve  $\rho_i(4,2)=1,0\times 10^{-10}\Omega cm$ ),  $\theta = 123$  K değeri elde edilebilir (Karamargin et al., 1972).

#### 4.2. Kalay Katkılı Saydam İndiyum Oksit Tabakalarının Elektriksel Özdirençleri

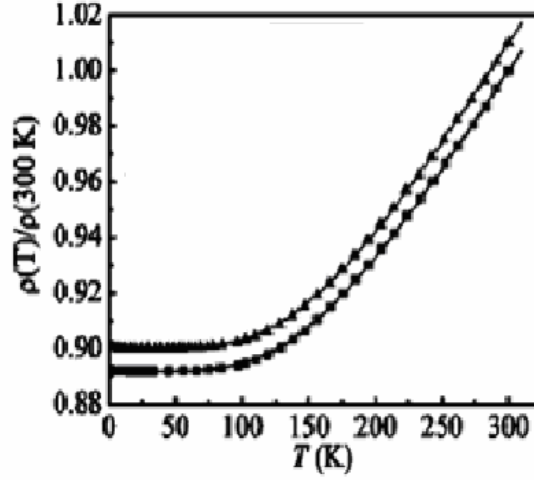
Kalay katkılı saydam indiyum oksit tabakalarının elektriksel özdirençleri 25 K' nin altında elektron – elektron etkileşim etkilerine bağlı olarak düşen sıcaklık dereceleriyle logaritmik olarak artmaktadır. 25 K ve 300 K arasında özdirenç değerlerinin Bloch-Grüneisen kuralına uyduğu gözlenmiştir.

Şekil 4.2,  $\rho(T)/\rho(300K)$  normalize edilmiş özdirençlerini 300 K' den sıvı helyum derecelerine kadar 125-nm ve 240 nm kalınlığındaki indiyum oksit tabakaları için sıcaklığın bir fonksiyonu olarak göstermektedir. Sıcaklık derecesi azaldıkça özdirençlerde azalmaktadır. Ölçülen özdirenç değerleri Bloch-Grüneisen formülüyle tanımlanabilmektedir.

$$\rho = \rho_0 + \beta T \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^4 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^5}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})} dx \quad (4.3)$$

Burada,  $\rho_0$  artık özdirenç,  $\beta$  sıcaklık sabiti,  $\theta_D$  Debye sıcaklık derecesidir.

Şekil 4.2'de Kalay katkılı saydam indiyum oksit tabakalarında deneysel bilginin BG kuralıyla uyumlu bulunabileceğini göstermektedir. 25 K' den 300 K' ye kadar bu tabakalardaki artık özdirençlerin belirgin miktarlarının varlığını öne sürmektedir. Büyük miktarda artık özdirenç, tabakadaki yüksek seviyedeki düzensizliğin varlığını göstermektedir (Li and Lin., 2004).



**Şekil 4.2.** 125 nm ve 240 nm kalınlığındaki kalay katkılı saydam indiyum oksit numuneler için sıcaklık ve özdirenç değerleri (Li and Lin., 2004)

### 4.3. $YNi_2B_2C$ Tek Kristalinde, Özdirenç ve Elektron – Fonon Çiftlenmesi

$YNi_2B_2C$  süperiletken bor karbür intermetalik bileşiklerindedir. Deneysel ve teorik sonuçların çoğu bu maddelerin BCS – Eliashberg göreneksel süper iletkenlik özelliklerini destekler biçimdedir (Drechsler et al., 1999).

$YNi_2B_2C$ 'nin kritik alanının bazı kendine özgü özellikleri, Migdal – Eliashberg teorisinde iki bant olduğu varsayılarak açıklanmıştır (Shulga et al., 1998).

Bu çalışmada Drechsler et al. (2000),  $YNi_2B_2C$  de özdirenç ölçümlerinin, güçlü elektron-fonon etkileşim teorisi tahminleri ile tamamen uyum içinde olduğunu göstermiştir. Daha önce elde edilmiş teorik sonuçlar ile uyumlu bir taşıma elektron-fonon çiftlenmesi sabit değeri elde edilmiştir.

$T_c = 15,5$  K ile  $YNi_2B_2C$  tekli kristal'inin özdirenci, sıcaklık fonksiyonu olarak ölçülmüştür. Şekil 4.3,  $YNi_2B_2C$  kristallerinden birinin özdirenci  $\rho(T)$  'yi göstermektedir. Yapılan bu çalışmada 4,2 K ve 300 K arasında çok sayıda özdirenç değeri elde edilmiş ve şekilde sadece birkaç nokta bahsedilmiştir. Yapılan çalışmalarda özdirenç, lineer bir yüksek sıcaklık bölümü ( $d\rho/dT = 0.12\mu\Omega cm/K$ ) ve küçük bir artık özdirenç değeri  $\rho(0) = 3\mu\Omega cm$  ile Bloch-Gruneisen (BG) modeline uygunluk sağlamıştır (Fisher et al., 1997). Değişik  $YNi_2B_2C$  numunelerinde de oldukça benzer sonuçlar elde edilmiştir.

Normal bir Fermi-likit (sıvı) metalde Matthiessen kuralına göre özdirenç için;  
 $\rho(T) = \rho_0 + \rho_{ph}(T)$  bağıntısı yazılabilir.

Burada  $\rho_0$  ve  $\rho_{ph}(T)$ , sırasıyla artık ve fonon özdirençleridir. Bloch-Gruneisen teorisinin temel yapısında  $\rho_{ph}(T)$  'nin yüksek sıcaklık derecesi kısmı lineer bir yapıyla temsil edilmektedir.

$$\rho_{ph}(T) = (2\pi\varepsilon_0 k_B / \hbar\omega_p^2) \lambda_r T \quad (4.4)$$

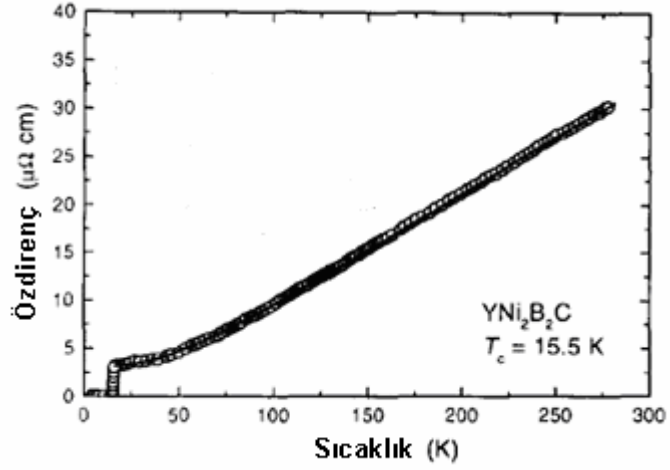
Burada  $\lambda_r T = 2 \int_0^\infty [\alpha_r^2 F(\Omega) / \Omega] d\Omega$  taşıma elektron-fonon (e-p) çiftlenme sabitidir.  $\omega_p$ , plazma frekansı ve  $\alpha_r^2 F(\Omega)$  ise transport elektron-fonon (e-p) spektral fonksiyonudur. Şekil 4.3'de ( $T > 100 K$ ) özdirencin lineer parçasından ve  $\hbar\omega_p = 4,25 eV$  plazma enerjisi deneysel değerinden transport çiftlenme sabiti  $\lambda_r = 0,53$  çıkarılmıştır (Widder et al., 1995).

Bloch-Gruneisen teorisine göre:

$$\rho_{ph}(T) = (4\pi\varepsilon_0 k_B / \hbar\omega_p^2) \int_0^{\Omega_{max}} [\alpha_r^2 F(\Omega) / \Omega] \cdot [\hbar\Omega / 2k_B T \sinh(\hbar\Omega / 2k_B T)]^2 d\Omega \quad (4.5)$$

bağıntısı yazılabilir.

Şekil 4.3’de gösterildiği gibi uyumluluk sonuçları son derece iyidir. Teorik Bloch-Gruneisen eğrisi deneysel  $\rho(T)$  sonuçlarıyla uyumludur.

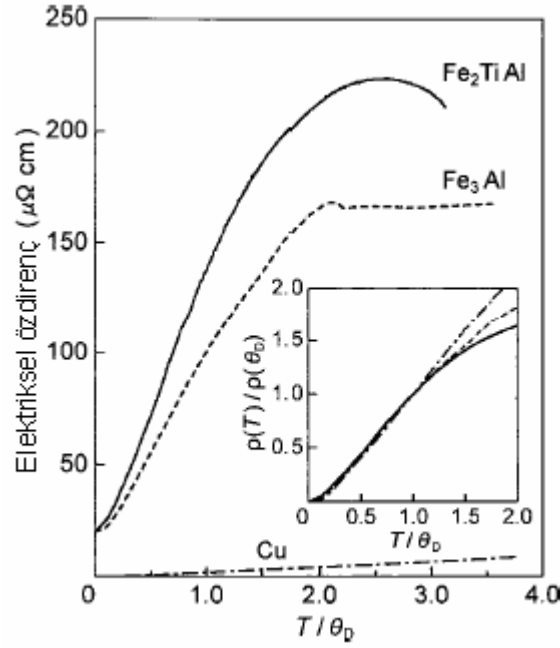


Şekil 4.3.  $YNi_2B_2C$  tek kristali için sıcaklığa bağlı özdirenç değerleri (Gonnelli et al., 2000)

#### 4.4. $Fe_2TiAl$ ’de Özdirençin Sıcaklığa Bağlılığı

Mevcut  $(Fe_{1-x}Ti_x)_3Al$  alaşımlarında üç temsili sistem  $Fe_2TiAl$ ,  $Fe_3Al$  ve saf Cu elementinin elektriksel özdirenç verileri Şekil 4.4’de yer almaktadır. Bu durum Debye sıcaklıklarına göre normalize edilmiştir.  $Fe_2TiAl$  ve  $Fe_3Al$  için  $d\rho/dT$  değeri kesik çizgiyle gösterilen Cu değerinden daha büyüktür.

Elde edilen  $\rho(T)$  verileri sıcaklığa bağımlı, elektron-fonon (contribution) katkısını temsil etmektedir ve bilinen Bloch – Gruneisen kanunu ile analiz edilebilir (Ziman, 1960).



**Şekil 4.4.**  $Fe_2TiAl$ ,  $Fe_3Al$  ve saf  $Cu$  için Debye sıcaklık derecesiyle normalize edilmiş,  $T/\theta_D$  sıcaklık fonksiyonuyla elektriksel özdirenç arasındaki ilişki

$T \leq \theta_D$  sıcaklık aralığındaki bütün eğriler birbiriyle oldukça uyumludur. Burada,  $Fe_2TiAl$  ve  $Fe_3Al$  için  $T > \theta_D$  aralığındaki veriler, doygunluk etkisine bağlı olarak  $Cu$  için gözlenen lineer bağlılıktan aşağı doğru güçlü bir sapma göstermektedir.  $T \leq \theta_D$  aralığındaki özdirenç elektron-fonon katkısı aslında alaşım sistemleriyle benzerlik göstermektedir. Bu çalışmada hem ferromagnetik  $Fe_3Al$  ve hem de paramagnetik  $Fe_2TiAl$  için Bloch-Gruneisen kanunun uyumluluğu sonucuna ulaşılmıştır (Kato, 2000).

#### 4.5. $MgB_2$ Süperiletkeninin İletim Özellikleri

Katılmış  $MgB_2$  polikristal örneğinde ( $\rho$ ) öz direncin (T) sıcaklık derecesine karşı çeşitliliği Şekil 4.5'de gösterilmiştir.  $\rho$ , numunenin metalik karakterinin sıcaklığın düşüşüyle lineer olarak azalmakta ve sonuçta 40 K civarında  $T_c=39$  K ile sıfıra düşmektedir.

Aynı  $T_c$  derecesiyle benzer numunelerde artık öz direnç aralığının RRR:  $\rho(297K)/\rho(40K)$  olduğu gözlenmiştir (Poddar et al., 2003). Bu aralık değerlerindeki büyük farklılık hem taneciklerin artık öz direncine, hem de tanecikler arasındaki bağların direncine bağlıdır. Aşağıda verilen eşitliklerde  $\rho(T)$  dataları Bloch-Gruneisen (BG) formülüyle uyumlu hale getirilmiştir (Kong et al., 2001).

$$\rho(T) = \rho_0 + (m-1)\rho'\theta\left(\frac{T}{\theta}\right)J_m\left(\frac{T}{\theta}\right) \quad (4.6)$$

Burada,

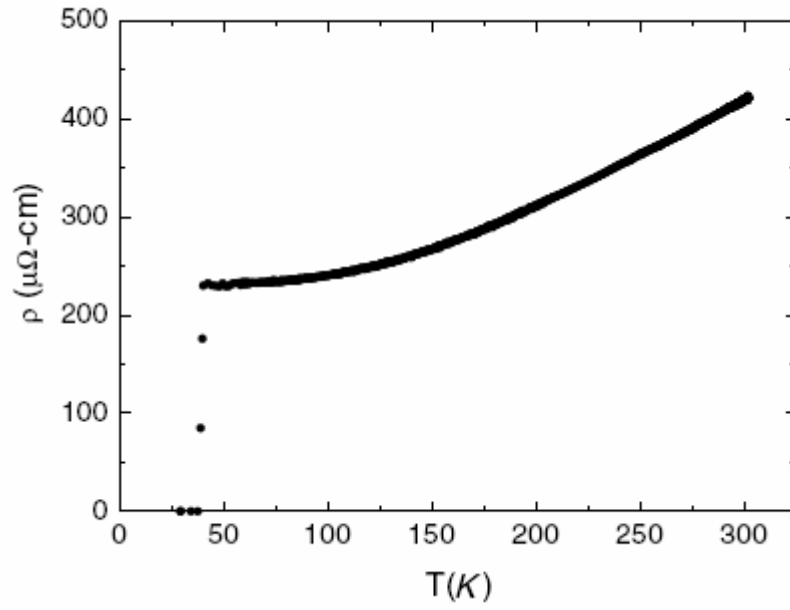
$$J_m\left(\frac{T}{\theta}\right) = \int_0^{\theta/T} \frac{x^m e^x}{(e^x - 1)^2} dx \quad (4.7)$$

olarak yazılabilir.

Burada,  $\rho_0$  taneciklerin artık öz direncinin toplamı ve tanecikler arasındaki bağların direncidir.  $\theta$  Debye derecesi ve  $\rho'$  aşağıdaki şekliyle açıklanabilen, öz direncin sıcaklık katsayısıdır. Öz direncin sıcaklık katsayısı,

$$\rho' = \frac{6\pi k_B \lambda_{tr}}{\hbar e^2 2N(0) \langle v_F^2 \rangle} \quad (4.8)$$

eşitliği ile ifade edilir. Burada,  $N(0)$  Fermi derecesindeki durum yoğunluğudur.  $\langle v_F^2 \rangle$ , Fermi yüzeyindeki ortalama elektron hızıdır. Şekil 4.5'deki eğri, denklem (4.6)'nın  $m = 3$  için deneysel  $\rho(T)$  datasına yeterince uyumlu olduğunu göstermektedir. Uyumlu parametreler,  $\rho_0 = 228,2 \mu\Omega cm$ ,  $\theta = 1016 K$  ve  $\rho' = 0,9 \mu\Omega cm K^{-1}$ 'dir (Poddar et al., 2003).



Şekil 4.5.  $MgB_2$ 'nin elektriksel öz direncinin sıcaklığa bağlılığı (Poddar et al., 2003)

## 5. MATERYAL VE METOT

Çalışmamızda, özdirencin sıcaklığa bağlılığının genel ifadesinden yararlanarak genelleştirilmiş bir BG fonksiyonu elde edilmiştir. Genelleştirilmiş BG fonksiyonlarının hesaplanmasında, tamamlanmamış gamma fonksiyonunun uygun formülleri seçilmiştir. Genelleştirilmiş BG fonksiyonunun hesaplanması için önemli yöntemlerden biri  $m = 5$  değerinde seri açılımı kullanılarak verilmiştir (Deutsch 1987).

Bloch-Gruneisen teorisi binomial ayrılış teorisiyle çözümlenebilmektedir. Binomial açılım teoremini kullanarak geniş sıcaklık değerleri için Debye sıcaklık derecesiyle Bloch-Gruneisen fonksiyonunun analitik yöntemleri elde edilmiştir. Genelleştirilmiş BG fonksiyonu için elde edilen analitik bağıntılar doğrultusunda Mathematica programlama dilinde program oluşturulmuştur.

Kullanılan bu yöntemler metallerin elektriksel özdirencinin, elektron-fonon etkileşiminin katkısına etkili uyumunu sağlamaktadır. Süper iletkenlerin normal durum özdirencinin sıcaklığa bağlılığı özdirencin elektron-fonon modeli (BG modeli) çalışmaları içinde teorik olarak analiz edilmiştir. (Talapatra, 2005; Poddar, 2003)

Çalışmada amaç  $m'$  nin tamsayı değerleri için genelleştirilmiş BG fonksiyonunun birleştirilmiş analitik bağıntısını elde etmektir. Bu analitik bağıntı süper iletkenlerin özdirencinin sıcaklığa bağlılığını incelemek için kullanışlıdır ve teorik fizikte çeşitli alanlarda da kullanılmaktadır (Varshney, 2004; Bharathi, 2002). Metodun geçerliliği, uygulamalarıyla birlikte bazı süper iletkenler için test edilmiştir.

BG fonksiyonu Gruneisen (1933) tarafından aşağıdaki şekliyle tanımlanmıştır;

$$\rho(T) = \left( \frac{c}{\theta_D} \right) \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^m J_m \left( \frac{T}{\theta_D} \right) \quad (5.1)$$

$$J_m\left(\frac{T}{\theta_D}\right) = \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^m}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})} dx \quad (5.2)$$

Burada  $c$  bir sabit,  $\theta_D$  metalin Debye sıcaklığı,  $T$  ise mutlak sıcaklıktır.  $m$  tam ve kesirli değerler alır.

$$\left[(e^x - 1)(1 - e^{-x})\right]^{-1} = e^{-x} [1 - e^{-x}]^{-2} \quad (5.3)$$

bağıntısını kullanarak denklem (5.2) aşağıdaki şekilde tekrar yazılabilir.

$$J_m\left(\frac{T}{\theta_D}\right) = \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^m e^{-x}}{(1 - e^{-x})^2} dx \quad (5.4)$$

Denklem (5.4)'de geliştirilmiş BG fonksiyonunun ifadesini elde etmek amacıyla aşağıda  $|x| > |y|$  ve kompleks bir  $n$  için binomial açılım teoremi kullanılmıştır (Guseinov (2002);

$$(x \pm y)^n = \sum_{m=0}^{\infty} (\pm 1)^m F_m(n) x^{n-m} y^m \quad (5.5)$$

Burada,  $F_0(n) = 1$  ve

$$F_m(n) = \begin{cases} n!/[m!(n-m)!], & n \text{ tamsayı ise} \\ \frac{(-1)^m \Gamma(m-n)}{m! \Gamma(-n)}, & n \text{ kesirli ise} \end{cases} \quad (5.6)$$

$m < 0$  için denklem (5.6)'daki  $F_m(n)$  binomial katsayısı sıfırdır ve pozitif  $n$  tam sayı terimleri ile negatif faktöriyeler toplama katkı sağlamaz (Gradshteyn, 1980).

Denklem (5.6)'da  $\Gamma(\sigma)$  değerleri Gradshteyn (1980) tarafından tanımlanan gamma fonksiyonları olarak bilinir;

$$\Gamma(\sigma) = \int_0^{\infty} t^{\sigma-1} e^{-t} dt \quad (5.7)$$

Denklem (5.4) içine denklem (5.5) bağıntısını katarak genelleştirilmiş BG fonksiyonları için aşağıdaki gibi basit yapıda formüller elde edilebilir (Mamedov and Askerov, 2007).

$$J_m\left(\frac{T}{\theta_D}\right) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^N (-1)^i F_i(-2) \frac{\gamma(m+1, (i+1)\theta_D/T)}{(i+1)^{m+1}} \quad (5.8)$$

Burada  $N$ , toplamın üst limitidir.  $\gamma(\alpha, x)$  Gradshteyn(1980) tarafından tanımlanan tamamlanmamış (incomplete) gamma fonksiyonu olarak bilinir;

$$\gamma(\alpha, x) = \int_0^x t^{\alpha-1} e^{-t} dt \quad (5.9)$$

Genelleştirilmiş BG fonksiyonu hesaplaması için etkili metotlardan biri  $m=5$  için serilerin ifadesini kullanarak Deutsch (1987) tarafından sunulmuştur;

$$J_5\left(\frac{T}{\theta_D}\right) = 120\zeta(5) - \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^N \exp(-ky) \left[ y^5 + 5y^4/k + 20y^3/k^2 + 60y^2/k^3 + 120y/k^4 + 120/k^5 \right] \quad (5.10)$$

Burada  $y = \frac{\theta_D}{T}$  ve  $\zeta(x)$  ise aşağıdaki gibi tanımlanan Riemann zeta fonksiyonudur

(Mamedov and Askerov, 2007);

$$\zeta(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^N k^{-x} \quad (5.11)$$

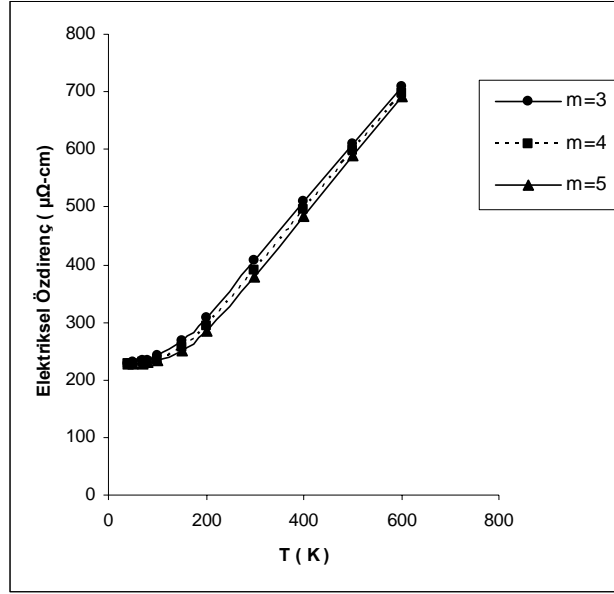
Sonuçta BG formülü;

$$\rho(T) = \rho_0 + (m-1) \rho' \theta_D \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^m J_m \left( \frac{T}{\theta_D} \right) \quad (5.12)$$

olarak yazılabilir. Burada  $\rho_0$  artık direnç,  $\rho'$  ise özdirencin sıcaklık katsayısıdır

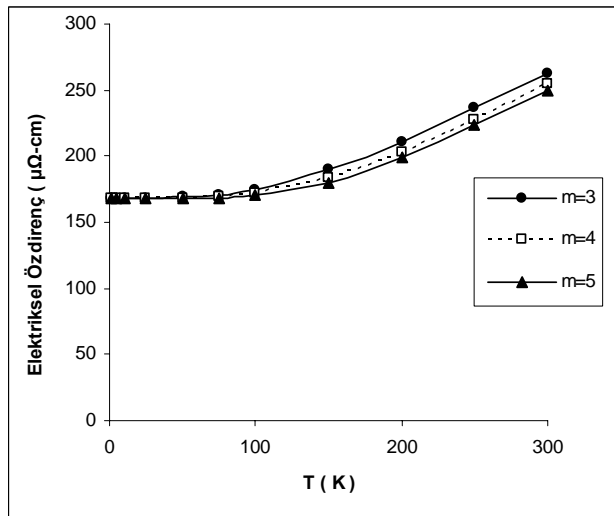
(Mamedov and Askerov, 2007).

$MgB_2$  süperiletkeni için  $\theta_D = 1016$  K,  $\rho' = 0,9 \mu\Omega cm K^{-1}$ ,  $\rho_0 = 228,2 \mu\Omega cm$  uygun parametreleri ve  $m$ ' nin tamsayı değerlerinde denklem (5.12) kullanılarak  $\rho(T)$  özdirencin sıcaklıkla değişim grafiği elde edilmiştir.  $m$ ' nin tamsayı değerleri için elde edilen BG fonksiyonu ifadesi kullanarak polikristal  $MgB_2$  örneğinin T sıcaklık değerine karşı ( $\rho$ ) özdirencin değişimi grafiği çizilmiştir. Şekil 5.1,  $m$ ' nin çeşitli tamsayı değerleri için sıcaklıkla özdirenç değişimini göstermektedir. Şekil 5.1'de  $m=3,4,5$  sayı değerlerinde sıcaklık derecesi 40 ile 600 K arasında  $\rho(T)$  özdirenç değerleri bulunmaktadır.



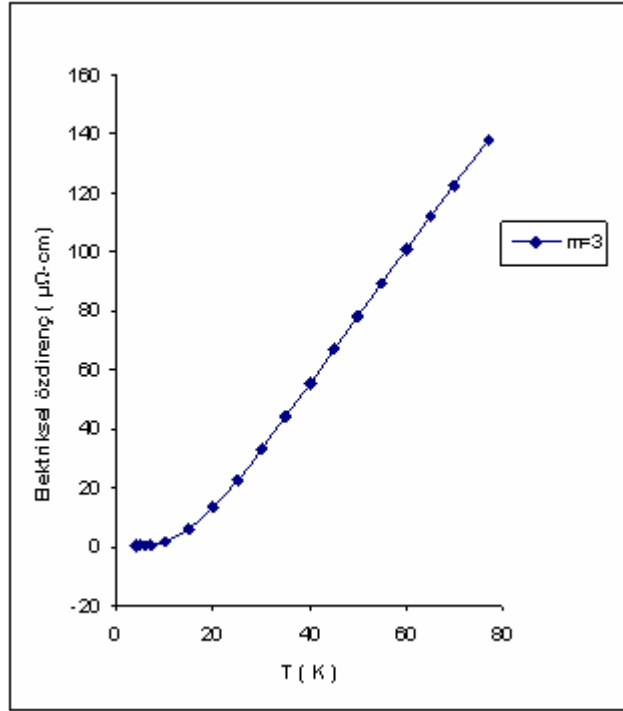
Şekil 5.1.  $MgB_2$  için sıcaklığa göre elektriksel özdirençin değişim grafiği

Kalay katkılı saydam indiyum oksit tabakalarının elektriksel özdirençlerinin sıcaklıkla değişim grafiği,  $\theta_D = 984$  K,  $\rho' = 0,4669 \mu\Omega cm K^{-1}$ ,  $\rho_0 = 168 \mu\Omega cm$  değerlerinde denklem (5.12) kullanılarak elde edilmiştir.



Şekil 5.2. Kalay katkılı saydam indiyum oksit tabakalarının elektriksel özdirençleri

Yine denklem (5.12) kullanılarak, Kalay numunenin elektriksel özdirençlerinin sıcaklıkla değişim grafiği,  $\theta_D = 125\text{K}$ ,  $\rho' = 1,99 \mu\Omega\text{cmK}^{-1}$ ,  $\rho_0 = 11,18 \times 10^{-4} \mu\Omega\text{cm}$  değerlerinde elde edilmiştir.



**Şekil 5.3.** Kalay numunenin elektriksel özdirenç değerlerinin sıcaklıkla değişimi

## 6. SONUÇ VE TARTIŞMA

Çalışmamızda metallerin elektriksel özdirenci için elektron-fonon etkileşim katkısını tanımlayan Bloch-Gruneisen integralinin analitik bir gösterimi verilmiştir. Süper iletkenlerin normal durum özdirencinin sıcaklığa bağlılığı elektron-fonon modeli (BG modeli) çerçevesinde analiz edilmiştir. Ayrıca elektriksel özdirencin sıcaklığa bağlılığında elektron – fonon etkileşmesinin etkileri gözlenmektedir. Çalışmamızda elektron – fonon etkileşmesine de yer verilmiştir.

Çalışmamızda binomial açılım teoremini kullanarak geniş sıcaklık değerleri için Debye sıcaklık derecesiyle genelleştirilmiş Bloch-Gruneisen fonksiyonunun güvenilir analitik yöntemleri elde edilmiştir. Elde edilen genelleştirilmiş BG fonksiyonunun analitik yöntemlerin doğruluğunu gösteren sayısal sonuçlar bulunmuştur. Mathematica programlama dilinde program oluşturulmuş ve genelleştirilmiş BG fonksiyonu için hesaplama sonuçları Tablo 6.1, 6.2, 6.3’de gösterilmiştir. Bu çalışmadaki algoritma bize,  $m$ ’ nin tamsayı değerleri için genelleştirilmiş BG fonksiyonlarının hesaplaması için yararlı bir çalışma olabileceğini göstermiştir.

**Tablo 6.1.**  $MgB_2$  süperiletkeni için denklem (5.12)’ nin hesaplama sonuçları

Sıcaklık(K)	m=3 için $\rho(T) (\mu\Omega cm)$	m=4 için $\rho(T) (\mu\Omega cm)$	m=5 için $\rho(T) (\mu\Omega cm)$
40	229,0048982	228,3711948	228,2430483
50	229,7720636	228,6179512	228,3313662
70	232,5126265	229,803792	228,5266758
80	234,6320633	230,9273837	229,5602302
100	240,680372	234,7243817	232,15554
150	267,310361	255,9596962	249,9387473
200	307,4578128	292,8629722	284,3854774
300	405,7814735	389,9336894	380,0311684
400	508,8551214	494,3365166	485,0109387
500	610,2617091	597,4363638	589,0888338
600	709,3610673	698,0676671	690,6514854

**Tablo 6.2.** İndiyum oksit için denklem (5.12)' nin hesaplama sonuçları

Sıcaklık(K)	m=3 için $\rho(T) (\mu\Omega cm)$	m=4 için $\rho(T) (\mu\Omega cm)$	m=5 için $\rho(T) (\mu\Omega cm)$
1	168,0000069	168,0000000	168,0000000
5	168,0008733	168,0000239	168,0000007
10	168,0069869	168,0003835	168,0000248
25	168,1091713	168,0149843	168,0002432
50	168,8733675	168,2397442	168,0778025
75	170,9452828	169,209883	168,5852098
100	174,919438	171,7210464	170,3136765
150	189,4641788	183,5215742	180,3307508
200	210,9734495	203,4785859	199,0911777
250	236,1252632	228,1098627	223,2069193
300	262,6925868	254,7320002	249,7386954

**Tablo 6.3.** Kalay numunesi için denklem (5.12)' nin hesaplama sonuçları

Sıcaklık(K)	m=3 için $\rho(T) (\mu\Omega cm)$
4,2	0,1372269
5	0,2307587
6	0,397936
7	0,6312418
10	1,8358681
15	6,0271779
20	13,1032325
25	22,3463524
30	32,8548255
35	43,9824099
40	55,3528807
45	66,7686708
50	78,1337923
55	89,40635557
60	100,5722094
65	111,6308981
70	122,5883233
77	137,7748998

Çalışmamızda açıkça görüldü ki, bu formül integral parametrelerinin keyfi değerleri için bize önemli derecede doğruluk kazandırmıştır.  $m$ 'nin tamsayı değerleri için elde edilen BG fonksiyonu ifadesi kullanarak polikristal  $MgB_2$  örneğinin T sıcaklık değerine karşı ( $\rho$ ) özdirenç değişimi grafiği çizilmiştir. Şekil 5.1,  $m$ 'nin çeşitli tamsayı değerleri için sıcaklıkla özdirenç değişimini göstermektedir. Şekil 5.1'de  $m=3,4,5$  sayı değerlerinde sıcaklık derecesi 40 ile 600 K arasında  $\rho(T)$  özdirenç değerleri bulunmaktadır. Denklem (5.12)'yi kullanarak  $m$ 'nin 3-5 aralığında tamsayı değerleri için deneysel  $\rho(T)$  verileriyle çizilen eğrinin uyumlu olduğu gözlenmiştir.

Tablo 6.2' de İndiyum oksit için  $m=3,4,5$  tamsayı değerlerinde, 300 K derecesine kadar denklem (5.12)'nin hesaplama sonuçlarına yer verilmiştir. Şekil 5.2' de  $\rho(T)$  verileriyle oluşturulan eğri de elde edilen genelleştirilmiş BG fonksiyonunun analitik ifadesinin doğruluğunu göstermektedir.

Tablo 6.3' de kalay numunesi için denklem (5.12)'nin hesaplama sonuçları verilmiştir. Denklem (5.12)'den elde edilen sayısal sonuçlar, şekil 5.3'deki eğriye ulaşmamızı sağlamıştır. Kalay numunesinin elektriksel özdirenç değeri, 125 K'lik Debye sıcaklığı ve artık özdirenç ile geniş bir sıcaklık değer aralığında Bloch – Grüneisen ifadesinde uygunluğu tespit edilmiştir.

**KAYNAKLAR**

**ASHCROFT, N.W., 2004.** Phys. Rev. Let., 92, 187002-1.

**BANNOV, N., ARISTOV, V., MITIN, V., 1995.** Solid State Commun., 93, 483.

**BHARATHI, A., BALASELV, S.J., KALAVATHI, S.I., REDDY, G.L.N., SANKAR, V., HARIHARAN, Y., RADHAKRISHNAN, T.S., 2002.** Physica C, 370, 211.

**BI, Y., TAN, H., JING, Q., ZHAO, G., 2003.** Chinese J. High Pres. Phys., 17, 1.

**BI, Y., TAN, H., JING, F., 2002.** J. Phys. Condens. Mat. 14 44 SPEC ISS., 10849.

**DEUTSCH, M., 1987.** J. Phys. A, 20, L811.

**DUNN, K.J., BUNDY, F.P., 1980.** J. Appl. Phys., 51, 3246.

**GONNELLI, R.S., STEPANOV, V.A., MORELLO, A., UMMARINO, G.A., BEHR, G., GRAW, G., SHULGA, S.V., DRECHSLER, S.L., 2000.** Physica C, 341-348, 1957.

**GRADSHTEYN, I.S., RYZHIK, I.M., 1980.** Tables of Integrals, Series and Products, New York.

**GUSEINOV, I.I., MAMEDOV, B.A., 2002.** J. Mol. Model., 8, 272.

**GUSEINOV, I.I., MAMEDOV, B.A., 2004.** Appl. Math. Comput., 161, 285.

**GUSEINOV, I.I., MAMEDOV, B.A., 2002.** J. Theor. Comput. Chem., 1, 17.

**GUSEINOV, I.I., MAMEDOV, B.A., 2004.** J. Math. Chem., 36, 346.

**GRUNEISEN, E., 1933.** Ann. Phys. Lpz., 16, 530.

**HAROON, A., PEPPER, M., BROERS, A., 1997.** Electrons and phonons in  
Semiconductor Multilayers. Cambridge University Press, Cambridge.

**IGASAKI, Y., MITSUHASHI, H., 1980.** Thin Solid Films, 70, 17.

**IGASAKI, Y., MITSUHASHI, H., 1983.** J. Appl. Phys., 54, 836.

**IGASAKI, Y., MITSUHASHI, H., 1987.** Phys. Status Solids A, 99, K111.

**KARAMARGIN, M.C., REYNOLDS, C.A., LIPSCHULTZ, F.P., KLEMENS, P.G.,  
1972.** Phys. Rev. B, 5, 2856.

**KARAOĞLU, B., 1996.** Katıhal Fiziğine Giriş. Bilgitek Yayıncılık, İstanbul.

**KARPUS, V., LEHMANN, D., 1997.** Semicond. Sci. Tech., 12, 781.

**KATO, M., NISHINO, Y., MIZUTANI, U., WATANABE, Y., ASANO, S., 2000.** J.  
Phys. Condens. Math., 12, 9153.

**KITTEL, C., 1986.** Introduction to Solid State Physics. 6th edition, John Wiley & Sons,  
Inc.

**KONG, Y., DOLGOV, O.V., JEPSEN, O., ANDERSON, O.K., 2001.** Phys. Rev. B, 64,  
020501(R)

**KONG, W.M.T., POLAN, J.S., ROSE, K., 1977.** J. Appl. Phys., 48, 5170.

**LI, Z.Q., LIN, J.J., 2004.** J. Appl. Phys., 96, 5918.

**MAMEDOV, B.A., ASKEROV, I.M., 2007.** Phys. Lett. A, 362, 324.

**MAZOV, L.S., 2004.** Phys. Rev. B, 70, 054501-1.

**PASZKOWSKI, S., 1999.** Numerical Algorithms, 20, 369-378.

**PETER, P.J., 1984.** Solid State Commun., 51, 607.

**PINSKI, F.J., ALLEN, P.B., BUTLER, W.H., 1981.** Phys. Rev. B, 23, 5080.

**PODDAR, A., BANDYOPADHYAY, B., MANDAL, P., BHATTACHARYA, D.,  
CHOUNDHURY, P., SINHA, U., GHOSH, B., 2003.** Physica C, 390, 191.

**PRESS, W.H., FLANNERY, A.S., TEUKOLSKY, S.A., VETTERLIG, W.T., 1989.**  
Numerical Recipes. Cambridge University Press, Cambridge.

**SHEN, J.Q., FANG, M.H., ZHENG, Y., WANG, H.T., LU, Y., XU, Z.A., 2003.** Physica  
C, 386, 663.

**TALAPATRA, A., BANDYOPADHYAY, S.K., SEN, P., BARAT, P., 2005.** Solid State  
Commun., 134, 385.

**VARSHNEY, D., KAURAV, N., 2004.** Eur. Phys. J. B., 40, 129.

**VARSHNEY, D., DUBE, A., SINGH, R.K., 2004.** Supercond. Sci. Tech., 17, 1231.

**WANG, J.F., ZHANG, C.J., HU, J.F., 2004.** Canad. J. Phys., 82, 585.

**WANG, Z.H., GAO, J., FANG, J., QIU, L., DING, J.L., CHEN, S.Y., YAO, X.X., 2002.** Physica C, 382, 373.

**WHITE, G.K., WOODS, S.B., 1959.** Phil. Trans. R. Soc. A, 251, 273.

**ZAKHLENIUK, N.A., BENNETT, C.R., BABIKER, M., RIDLEY, B.K., 1999.** Appl. Phys. Lett., 75, 1565.

**ZHENG, L., DAS SARMA, S., 1999.** Solid State Commun., 104, 629.

## **ÖZGEÇMİŞ**

1978 yılında, Konya Beyşehir ilçesinin Bademli köyünde doğdu. İlköğretimi Beyşehir’de, lise öğrenimini ise Aksaray Anadolu Öğretmen Lisesi’nde tamamladı. Ardından 2000 yılında Marmara Üniversitesi Atatürk Eğitim Fakültesi, Fizik Eğitimi bölümünden mezun oldu. Bir dönem özel öğretim kurumlarında ve Tokat’ta resmi okullarda öğretmenlik görevini sürdürdü. Halen Konya’da Fizik Öğretmeni olarak görevine devam etmektedir.