

154491

**YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**ERGİMİŞ NADİR TOPRAK METALLERİNİN
ELEKTRONİK TRANSPORT VE YAPISAL
ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ**

Fizikçi Umut ATASEVER

**FBE Fizik Anabilim Dalında
Hazırlanan**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Tez Danışmanı : Prof. Dr. Seyfeddin KARAGÖZLÜ

Prof. Dr. Seyfeddin Karagözlü

Doç. Dr. Handan Gürbüz

Prof. Dr. Turgay Armağan (i.ü.)

İSTANBUL, 2004

Y.
Gül
Z. Arın

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
SİMGE LİSTESİ.....	iv
KISALTMA LİSTESİ.....	vi
ŞEKİL LİSTESİ.....	vii
ÇİZELGE LİSTESİ	viii
ÖNSÖZ	ix
ÖZET	x
ABSTRACT.....	xi
1. GİRİŞ	1
2. İYONLAR ARASI POTANSİYELLER.....	3
2.1 Pseudopotansiyel Kavramı.....	5
2.2 Bachelet – Hamann – Schlüter Form Faktörü	6
2.3 Perdelenme	11
3. YAPI FAKTÖRÜ ve ELEKTRONİK TRANSPORT ÖZELLİKLERİ.....	20
3.1 Yapı Faktörü Bilgisi	20
3.1.1 Tek Bileşenli Plazma Modeli Altında O-Z Denklemi	21
3.1.2 Tek Bileşenli Plazma İçin Ortalama Küresel Yaklaşım.....	22
3.2 Elektronik Transport Özellikleri.....	25
3.2.1 Elektriksel İletkenlik İçin Ziman Formülü.....	26
4. ERGİME NOKTASI CİVARINDA SEÇİLEN METALLERİN STATİK YAPI FAKTÖRLERİ ve REZİSTİVİTELERİ	28
4.1 Lantan	30
4.2 Seryum	31
4.3 Praseodimyum	32
4.4 Neodimyum	33
4.5 Europyum	34
4.6 Terbiyum	35
4.7 Ergimiş Nadir Toprak Metallerinin Rezistivite Değerleri	36

5. SONUÇLAR ve TARTIŞMA	37
KAYNAKLAR.....	38
EKLER.....	40
EK 1.....	41
ÖZGEÇMİŞ.....	42



SİMGE LİSTESİ

A_i	Fitting katsayıları
$c(r)$	Direkt korelasyon fonksiyonu
C_i^{core}	Uygulanan f metalleri için lineer katsayılar
$F_N(q)$	Normalize edilmiş enerji ve dalga sayısına bağlı fonksiyon
$f(y)$	Linhard fonksiyonu
$G(q)$	Bölgesel alan düzeltme fonksiyonu
$g(r)$	Çift dağılım fonksiyonu
$h(r)$	Toplam korelasyon fonksiyonu
$I_1(z)$	Birinci mertebeden modifiye bessel fonksiyonu
j_ℓ	Bessel fonksiyonu
K	Gelen dalga vektörü
k_B	Boltzmann sabiti
k_F	Fermi dalga sayısı
N	İyonların sayısı
n	Sayı yoğunluğu
$N_{FE}(E_F)$	Serbest elektronlar için Fermi enerjisine bağlı durum yoğunluğu
P_ℓ	Legendre polinomu
q	Geçen dalga vektörü
$Q(q)$	Korelasyon faktörü Baxter matrisi
r_s	Wigner-Seitz elektron yarıçapı
$S(q)$	Statik yapı faktörü
$S_0(q)$	Referans yapı faktörü (Tek Bileşenli Plazmanın yapı faktörü)
T	Sıcaklık
$V(r)$	Atomlar arası potansiyel
$V_{sc}(q)$	Fourier uzayında dolaylı etkileşim terimi
$V_d(r)$	Direkt etkileşme potansiyeli
$V_{ind}(r)$	Dolaylı etkileşme potansiyeli
$\hat{V}_{ps}^{ion}$	BHS iyonik pseudopotansiyel
$\hat{V}_\ell^{ion}(r)$	Açısal momentuma bağlı iyonlar arası potansiyel
$\hat{V}_\ell^{so}(r)$	Açısal momentuma bağlı spin orbit etkileşmelerinden oluşan potansiyel
$\hat{V}_{core}(r)$	Kor potansiyeli
$V_{ii}(q)$	Fourier uzayında iyon çekirdekleri arası direkt etkileşme terimi
$V_{eff}(q)$	Fourier uzayında etkin çift potansiyel
V_F	Fermi hızı (Fermi küresi yüzeyinde bir elektron hızı)
$w_q^0(K)$	BHS form faktörü (Bachelet – Hamann – Schlüter pseudopotansiyeli)
Z	Etkin valans değeri
Z_v	Valans yükleri (valans bandı elektron sayısı)
$\epsilon(q)$	Thomas Fermi lineer perdelenme teorisinin kullanıldığı dielektrik fonksiyon
β	Sıcaklık katsayısı (Termal sabit)
ℓ	Açısal momentum
α_i^{core}	Uygulanan f metalleri için bozulma sabitleri
Ω_0	Atomik hacim
Ω	Katı açısı
$\chi_{scr}(q)$	Yanıt fonksiyonu
$\chi_0(q)$	Linhard etkileşimsiz statik yanıt fonksiyonu

σ	Katı küre çapı
σ_e	Elektriksel iletkenlik
μ	Kimyasal potansiyel enerji
δ_{ij}	Kronecker deltası
Γ	Bilinmeyen ayrılma sabiti
τ	Gevşeme süresi
ρ_L	Bir metalin rezistivitesi (özdirenç)
ρ_i	İyonik sayı yoğunluğu
η	Paketleme yoğunluğu



KISALTMA LİSTESİ

BHS	Bachelet Hamann Schlüter
BKP	Boş Kabuk Pseudopotansiyel
EİP	Elektron İyon Plazma
KK	Katı Küre
OKY	Ortalama Küresel Yaklaşıklık
O-Z	Ornstein – Zernike
RFY	Rastgele Faz Yaklaşımı
TBP	Tek Bileşenli Plazma
YKK	Yüklü Katı Küre



ŞEKİL LİSTESİ

	Sayfa
Şekil 4.1	Lantanın $S(q)$ yapı faktörünün q ya göre değişimi30
Şekil 4.2	Seryumun $S(q)$ yapı faktörünün q ya göre değişimi31
Şekil 4.3	Praseodimyumun $S(q)$ yapı faktörünün q ya göre değişimi32
Şekil 4.4	Neodimyumun $S(q)$ yapı faktörünün q ya göre değişimi33
Şekil 4.5	Europyumun $S(q)$ yapı faktörünün q ya göre değişimi34
Şekil 4.6	Terbiyumun $S(q)$ yapı faktörünün q ya göre değişimi35
Şekil 4.7	La, Ce, Pr, Nd ve Eu için hesaplanan rezistivite değerleriyle, deneysel sonuçlarının karşılaştırması36

ÇİZELGE LİSTESİ

Sayfa

Çizelge 2.1	Lantan saf metali için pseudopotansiyel parametreler.....	14
Çizelge 2.2	Seryum saf metali için pseudopotansiyel parametreler	15
Çizelge 2.3	Praseodimyum saf metali için pseudopotansiyel parametreler.....	16
Çizelge 2.4	Neodimyum saf metali için pseudopotansiyel parametreler.....	17
Çizelge 2.5	Europyum saf metali için pseudopotansiyel parametreler.....	18
Çizelge 2.6	Terbiyum saf metali için pseudopotansiyel parametreler.....	19
Çizelge 4.1	Nadir toprak metallerinin bazı fiziksel ve kimyasal özellikleri	28
Çizelge 4.2	Nadir toprak metallerinin statik yapı faktörü hesabında kullanılan parametreler	29



ÖNSÖZ

Yüksek Lisans Tez çalışmamın gerçekleştirilmesinde beni yönlendiren, gerekli ilgi ve desteği gösteren değerli hocam Sayın Prof. Dr. Seyfeddin Karagözlü'ye teşekkürü bir borç bilirim.

Tezimin her aşamasında vaktini ve manevi desteğini hiçbir zaman esirgemediği bilgi, tecrübe ve önerileriyle yol gösterip yönlendiren, bilgilenmemi sağlayan kıymetli hocam Sayın Prof. Dr. Turgay Armağan'a minnettarlığımı bildirir, çok teşekkür ederim.

Tezim süresince tüm zorluklara katlanarak, maddi ve manevi her türlü yardımlarıyla daima bana destek olan , güvenen sevgili annem Zeynep Atasever'e ve babam İrfan Atasever'e en içten dileklerimle teşekkür ederim.

Son olarak bu tez çalışması esnasında benden yardımlarını esirgemeyen ve beni yalnız bırakmayan arkadaşlarım Arş. Gör. Ayben Karasu'ya ve Yasemin Budama Battal'a sonsuz teşekkürlerimi sunarım.



ÖZET

Bu tezde, Tek Bileşenli Plazma (TBP) modeli altında Ortalama Küresel Yaklaşıklık (OKY) içinde Ornstein-Zernike (O-Z) denkleminin analitik çözümü kullanılarak ergime noktası civarında nadir toprak metallerin yapısı incelenmiştir. Ayrıca $S(q)$ statik yapı faktörü hesabında Rastgele Faz Yaklaşımı (RFY) gibi düşük mertebeden pertürbasyon teorisinde Elektron-İyon Plazma (EİP) modeli kullanılmıştır.

Lantan, Seryum, Praseodimyum, Neodimyum, Europyum ve Terbiyum ergimiş nadir toprak metallerine Bachelet-Hamann-Schlüter (BHS) model potansiyelini uygulayarak ele aldığımız 4f metalleri için $S(q)$ statik yapı faktörlerinin q Fourier uzayına bağlı değişimlerinin deneysel sonuçlarla genellikle uyumlu olduğu görülmüştür.

Bunun dışında ele aldığımız ergimiş nadir toprak metalleri için Ziman formülüyle rezistivite değerlerini hesapladık. Hesaplanan bu değerlerin de deneysel sonuçlarla genellikle uyumlu olduğu görülmüştür.

Anahtar Kelimeler: Tek Bileşenli Plazma, Rastgele Faz Yaklaşımı, rezistivite.



ABSTRACT

In this thesis, assuming that all liquid ions are consist of hard spheres the Ornstein-Zernike equation is solved via the Mean Spherical Approximation under the One- Component Plasma model and the structure of rare earth metals near melting points are studied. In calculation of the static structure factor, $S(q)$, for liquid rare earth metals, we use the realistic Electron-Ion Plasma model in the low order perturbation theory such as Random Phase Approximation.

Bachelet-Hamann-Schlüter pseudopotential applied to liquid rare earth metals such as La, Ce, Pr, Nd, Eu and Tb, for this 4f metals $S(q)$ static structure factors versus variation of q Fourier space are plotted for 1024 datas and compared with the experimental results. Comparison demonstrate that our results are generally in good agreement with the experimental results.

In addition, for these liquid rare earth metals resistivity values are calculated by using the Ziman equation and compared with experimental results. We see that these results also are generally in agreement with the experimental results.

Keywords: One Component Plasma, Random Phase Approximation, resistivity.



1. GİRİŞ

Ergime noktası civarında KK, TBP, YKK.....gibi çeşitli modellere dayandırılan basit metallerin yapısal özellik hesaplamaları oldukça başarılı olmuştur. Son yıllarda da, sıvı geçiş ve nadir toprak metalleri gibi basit olmayan sıvı metal sistemlerin yapı ve özelliklerini anlamak için katı küreye dayandırılan pertürbasyon modelleri kullanılarak çalışmalar yapılmıştır. Ancak bu çalışmalar periyodik cetvelin f elementleri olarak bilinen nadir toprak metallerine kolaylıkla uygulanamamaktadır. Şöyle ki, yapılmış olan aynı tür hesaplamalar, nadir toprak metallerinin iyonlar arası etkileşmelerinin özel doğasını tasvir edemediği anlaşılmıştır. s-d karması ile birlikte 4f bandlarının dolmamış olması sebebiyle basit ve geçiş metallerinin aksine nadir toprak metalleri ağır ve karmaşık metalik sistemlerdir diyebiliriz. Bir girişimde, geçiş metallerindeki benzerlikten yola çıkılarak, dolmamış 4f bandları için, geçiş metallerinde kullanılan hesap genişletilmiş ve nadir toprak metallerine uygun pseudopotansiyel formalizm oluşturulmuştur. Son zamanlardaki bir girişimde de, ergimiş nadir toprak metalleri için sıvı yapı hesaplamalarına, basit metal teorisini doğrudan uygulamak için Tek Bileşenli Plazma ile Boş Kabuk Pseudopotansiyel bileşimi kullanılmıştır.

Ergimiş metallerin makroskopik yapısına bağlı fiziksel özelliklerinin saptanmasında önemli bir role sahip $S(q)$ statik yapı faktörü hesabı için elektron-iyon arasındaki etkileşmelerin zayıf olduğu varsayılarak her bir iyonun etrafındaki elektronların oluşturduğu lineer perdelenme ile etkin iyon-iyon potansiyel modeli kullanılmıştır. Kullanılan model Rastgele Faz Yaklaşımı çerçevesinde Elektron-İyon Plazma modeline genişletilmiştir. Ayrıca statik yapı faktörü hesabı için gerekli olan referans yapı faktörü yüklü katı kürelerden oluştuğu farz edilen nötr bir sıvıda Tek Bileşenli Plazma modeli göz önüne alınarak hesaplanmıştır.

2. bölümde, ergime noktası civarındaki nadir toprak metallerinin yapısal özelliklerinin belirlenmesi için gerekli olan etkin çift potansiyel modelini vereceğiz. Ayrıca iyonlar arası doğrudan Coulomb etkisi ile dolaylı iyon perdelenmesinden söz edeceğiz.

3. bölümde TBP modeli altında Ortalama Küresel Yaklaşıklıkta O-Z denkleminin analitik bir çözümü kullanılarak nadir toprak metallerinin yapısı incelenmiştir. Ele aldığımız model potansiyel kuramından hareket ederek $S(q)$ yapı faktörü yardımıyla Ziman formülünün analitik ifadesini çıkaracağız.

4. bölümde, bundan önceki bölümlerde elde edilen kuramsal çözümleri, literatürde elde edilen verilerle karşılaştırması içerisinde ergime noktaları civarında nadir toprak metallereinden La, Ce, Pr, Nd, Eu ve Tb metalleri için yaptığımız çalışmaları sırasıyla sunuyoruz.

Son bölümde ise elde ettiğimiz sonuçların tartışmasını yapıyoruz.



2. İYONLAR ARASI POTANSİYELLER

Homojen elektron gazının ortamı, bu gaz içerisindeki elektronlar arasında yalnızca Coulomb etkileşmelerinin olduğu bir ortamdır. Bölgesel olarak çok kuvvetli etkileşmeler söz konusudur. Coulomb etkileşmelerinden kaynaklanan spinleri farklı olan elektronlar arasındaki etkileşme korelasyon enerjisidir. Spinleri aynı olan elektronlar arasındaki etkileşme takas (değiş-tokuş) enerjisidir. Homojen elektron gazı yani jellium modelinde toplam yük “0” dır. Biz buna “tek boyutlu plazma modeli” diyoruz. Plazma modelinde yük nötrlüğü korunuyor.

İyonlar arası etkileşme, iyon çekirdekleri 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

$$V(r) = \frac{Z^2}{r} \left[1 - \frac{2}{\pi} \int_0^\infty F_N(q) \frac{\sin qr}{q} dq \right] \quad (2.1)$$

Burada Z etkin değerlik (valans), $F_N(q)$ ise normalize edilmiş enerji ve dalga sayısına bağlı fonksiyondur. (Bretonnet vd., 1992; Bretonnet ve Jakse, 1994) $F_N(q)$ aynı zamanda takas ve korelasyon etkilerini de içerir. $V(r)$ 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. Dolaylı etkileşme, pseudopotansiyel form faktörü ile takas ve karşılıklı etkileşme terimlerine bağlıdır.

$$F_N(q) = \left(\frac{q^2}{4\pi\rho_i Z} \right)^2 (w_q^0(K))^2 \left[\frac{1}{1-G(q)} \right] \left[1 - \frac{1}{\varepsilon(q)} \right] \quad (2.2)$$

Elektron gazının dielektrik fonksiyonu $\varepsilon(q)$, bölgesel alan düzeltmesi $G(q)$ ve pseudopotansiyel form faktör $w(q)$ sayesinde diyebiliriz ki $F_N(q)$ sadece saçılma momentum uzayı olan q uzayına bağlıdır. (Bretonnet ve Jakse, 1994) $w_q^0(K)$ Bachelet, Hamann ve Schlüter’in birinci pseudopotansiyel prensibinden hesaplanan form faktörüdür. Yapı faktöründe takas ve korelasyon etkilerini çalışmak için bölgesel alan düzeltmesini kullanmalıyız.

Göz önüne alınacak problem, verilen bir iyon yük dağılımı ile hasıl edilen dış alan içinde etkileşen bir elektron gazı problemidir. Elektron-iyon model potansiyelinin zayıf olduğu

kabul edildiğinden dolayı, dış alanın etkisi lineer yanıt kuramına göre işleme alınabilir. Elektron gazının iyon yük dağılımı ile polarizasyonu dış alanın perdelenmesine ve bu nedenle iyonlar arasında yeni etkin bir etkileşmeye yol açar. $V_{eff}(q)$ etkin iyon-iyon potansiyeli, çıplak iyon-iyon etkileşmesi ve elektron indüklemeye katkısının toplamıdır.

$$V_{eff}(q) = V_{ii}(q) + V_{sc}(q) \quad (2.3)$$

$V_{eff}(q)$ nin ters Fourier dönüşümü $V(r)$ etkin iyon-iyon potansiyelidir.

$$V_{sc}(q) = -\left(\frac{4\pi Z^2}{q^2}\right) F_N(q) \quad (2.4)$$

ile gösterilir. (Bretonnet vd., 1992)

Sıvı metallerde elektronik özellikleri hesaplayabilmek için Ziman formülünün iskeletini oluşturan model potansiyel metodu, ilginç bir teknik olarak kanıtlanmıştır. (Koubaa ve Gasser, 1990) Model potansiyellerin ilk ilkesi bölgesel olmamasıdır. Ayrıca parametreleri enerjiye bağlıdır. Oysa BHS model potansiyeli enerjiden bağımsızdır. Bu çalışmada form faktörünü analitik olarak hesaplayabilmek için form faktörüne karşılık gelen BHS potansiyelini kullanıyoruz.

Pseudopotansiyel metodu, sıvı metal ve alaşımların elektronik özelliklerini hesaplayabilmek için yararlı ve ilginç bir teknik olarak görülmüştür. Düzlem dalgalar arasında model potansiyelin matris elemanı olarak verilen pseudopotansiyel form faktörü, bu özellikleri araştırabilmek için temel başlangıç noktasıdır. Pseudopotansiyel teorisi her bir iyonik kısımdaki derin kor potansiyelinin zayıf pseudopotansiyel tarafından yer değiştirilmesini içerir (ve bir pseudo dalga tarafından uygun gelen dalga fonksiyonunun değiştirilmesini içerir). Böylelikle Schrödinger denkleminin öz değerleri korunur. Pseudopotansiyel teorisinde iki yaklaşım kullanılmıştır. Birincisi, model potansiyelin parametreleri bir anlamda, atomik spektroskopik deneysel datalarla denkleştirilmiş; Heine, Abarenkov, Animalu, Shaw, Harrison, So, Moore ve Wang tarafından geliştirilmiştir. Teorinin basitleştirilmesi ile ödenen bedel; parametrelerin enerjiye bağlı olmalarına izin verilmesi ve model potansiyelin bölgesel olmaması ile ifade edilmiştir. İkinci yaklaşımda model potansiyel, kor hallerine karşı gelen dalga fonksiyonlarının ortogonalizasyonu vasıtasıyla elde edilen pseudopotansiyeldir. Bu metod sıvı metaller için Hafner tarafından ortaya konulup Austin, Heine, Sham tarafından geliştirilmiştir.

Daha önce model potansiyellerinin ilk ilkesinin bölgesel olmadığını ve parametrelerinin enerjiye bağlı olduğunu söylemiştik. Çünkü alaşımlarda etkin kütle, Fermi enerji core

kayması... gibi parametreler enerjiye bağılı olduğundan hesaplamalarda enerjiyi işin içine katmalıyız. (Koubaa vd., 1990) Son zamanlarda Bachelet, Hamann ve Schlüter, bu düzeltmeleri yapma gereğinden kurtulmak için yeni bir aile olan enerjiden bağımsız pseudopotansiyel modelleri ortaya koymuşlardır. Bu model analitik fonksiyonlarla uyumlu ve transfer edilebilirdir. Enerjiden bağımsız olan parametreler, bu değerleri alaşım için transfer etmeye izin verir. Dahası Bachelet, Hamann ve Schlüter model potansiyellerinin tüm periyodik cetvel (Hidrojenden, Plutonyuma kadar) için geliştirilebildiğini iddia ettiler. Oysa Heine-Aberonkov-Animalu-Shaw tarafından oluşturulan model potansiyel aileleri geçiş metalleri ve nadir toprak metalleri için iyi tanımlanamıyordu. Halbuki BHS bu metallere de uygulanabilmektedir.

2.1 Pseudopotansiyel Kavramı

Sıvı metaller iyon korları (iyon iç kabukları) ve iletim elektronlarından oluşan sistemlerdir. İyon korları genel olarak metalin toplam hacminin %10 undan az kısmını işgal ederler ve bundan dolayı iyon koru yarıçapı ekseriya ortalama iyonlar arası mesafenin sadece küçük bir kesridir. Serbest elektron sistemi tasvirinde iletken elektronların sıvı metal içinde sadece iyonlarla seyrek şekilde etkileşerek az veya çok serbest olarak hareket ettikleri kabul edilir. Elektronların ortalama serbest yolu tipik olarak komşu iyonlar arası mesafeden 10 ila 100 defa daha büyüktür. En kaba yaklaşımda etkileşmeler tümü ile ihmal edilir ve elektronlar işgal edilen en yüksek seviyenin enerjisi (Fermi enerjisi) E_F ile karakterize edilen bir ideal Fermi gazı gibi işleme alınırlar. Fermi enerjisi,

$$E_F = \frac{|\vec{P}_F|^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 \rho_e)^{2/3} \quad (2.5)$$

$\rho_e = Ne/V = ZN/V = Z\rho_i$ olduğunu düşünürsek,

ρ_i = iyonik sayı yoğunluğu

ρ_e = iletim elektronlarının sayı yoğunluğu

m_e = elektron kütlesi

$\vec{P}_F$ = Fermi momentumu

İletim elektronlarının dalga fonksiyonları genelde iyon merkezlerinden uzakta düzgün ama iyonlar civarında karmaşık bir düğüm yapısına sahiptir. Yani iletim elektronları iyonların düzensiz tertibi altında hareket ederler.

Sıvı metallerin büyük bağlanma enerjileri elektronlar ve iyonlar arasındaki Coulomb etkileşmelerinden kaynaklanır. Elektron-iyon etkileşmesinin hesabı için en basit modelde, iletim elektronlarının pozitif iyonlarla temin edilen düzgün bir fon içinde hareket ettikleri kabul edilir. İyon merkezinden uzakta iletkenlik elektronuna etkiyen enerji zayıftır. Coulomb potansiyeli diğer iletkenlik elektronların perdeleme etkisiyle zayıf kalır ve dış bölgedeki enerjiyi yukarıda belirttiğimiz gibi serbest elektronların enerjisi (E_F) olarak 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. Yani iyonlar arası etkileşimin elektron aracılığı kısmını elde etmek için mevcut profil, elektron-iyon potansiyeline iletim elektronlarının lineer yanıt vermesine dayandırılır, ama bu sadece iyonların elektronları zayıf şekilde saçtığı ve elektron-iyon potansiyelinin pseudo (model) potansiyel ile tasvir edilebildiği sistemlerde geçerlidir. Bir metaldeki elektron-iyon etkileşmesinin oluşturduğu net etkin potansiyelin belirlenmesinde pseudopotansiyel yaklaşımı önemlidir diyebiliriz.

Model potansiyel hiçbir bağlı hale sahip değildir, ama gerçek elektron-iyon potansiyeli gibi aynı valans enerji spektrumunu ve iç kabuk yarıçapındaki aynı faz kaymalarını temin eder. Dışında Coulomb potansiyeli ile ayrılan ve model alınan bir yarıçap içindeki yoğun bir fazdaki iyonun pseudopotansiyel formu analitik biçimde belirlenebilir. Bu yaklaşım, kısa menzilli itici kısım ve uzun menzilli titreşici bir kısımdan oluşan etkin iyonlar arası çiftli potansiyel verir. Bu etkin çiftli potansiyel bilgisinden sıvı metalin yapısal ve fiziksel özelliklerini tartışmak mümkündür.

2.2 Bachelet – Hamann – Schlüter Form Faktörü

Pratikte benimsenen işlem yolu, model potansiyel için kabul edilen bölgesel bir fonksiyon formunu elektron-iyon çarpışmalarına duyarlı olan büyüklüklere dair deneysel verilere uydurarak parametrelili yapmaktır. Bu yolla elde edilen model potansiyeller genellikle pertürbasyon hesabını haklı göstermek için yeterince zayıftırlar.

BHS iyonik pseudopotansiyel:

$$\hat{V}_{ps}^{ion} = \sum_{\ell_0} \left| \ell > \left[\hat{V}_{\ell}^{ion}(r) + \hat{V}_{\ell}^{so}(r) \vec{L} \cdot \vec{S} \right] < \ell \right| \quad (2.6)$$

ℓ açısal momentum ve $\hat{V}_{\ell}^{so}$ spin-orbit etkileşmelerini tanımlayan potansiyeldir. $\hat{V}_{\ell}^{ion}(r)$ yi biz (Bachelet vd., 1982), ℓ den bağımsız uzun menzilli Coulomb kısmı ve ℓ ye bağlı kısa menzilli pseudopotansiyel kısım olarak ayrıştırabiliriz.

$$\hat{V}_{\ell}^{ion}(r) = \hat{V}_{core}(r) + \Delta \hat{V}_{\ell}^{ion}(r) \quad (2.7)$$

Burada,

$$\hat{V}_{core}(r) = -\frac{Z_v}{r} \left[\sum_{i=1}^2 C_i^{core} \text{erf}(\alpha_i^{core} r) \right] \quad (2.8)$$

Kor potansiyeli, Gaussyen tipi etkin kor yüklerinden kaynaklanmış olarak düşünülür. Bu yüzden $r \rightarrow 0$ için sonlu bir değere düzgün olarak yaklaşır. Kalan potansiyellerin $\Delta \hat{V}_{\ell}^{ion}(r)$ ve $\hat{V}_{\ell}^{so}(r)$ ikisi de Gaussyen tipi fonksiyonlara genişletilir. Ancak bu tez çalışmasında iyonlar arası potansiyel hesaplanırken spin-orbit etkileşmelerinden kaynaklanan $\hat{V}_{\ell}^{so}(r)$ potansiyeli ihmal edilmiştir.

$$\Delta \hat{V}_{\ell}^{ion}(r) = \sum_{i=1}^3 [A_i + r^2 A_{i+3}] \exp(-\alpha_i r^2) \quad (2.9)$$

Bu tez çalışmasında nadir toprak metallere uygulamasını yaptığımız f metalleri için C_i^{core} (lineer katsayıları), α_i^{core} (bozulma sabitleri) bölüm sonundaki Çizelge 2.1, Çizelge 2.2, Çizelge 2.3, Çizelge 2.4, Çizelge 2.5 ve Çizelge 2.6 da; Z_v (valans yükleri) değerleri de Çizelge 4.1 de gösterilmiştir. (Bachelet vd., 1982) BHS form faktörünün ifadesi,

$$w_q^0(K) = N < K + q \left| \hat{V}_{ps}^{ion}(r) \right| K > \quad (2.10)$$

şeklindedir.

N= iyonların sayısı

K= gelen dalga vektörü

q= geçen dalga vektörü

Form faktör için biz BHS ile sözü edilen Heine-Abarenkov-Animalu yaklaşımını kullanırız.

Bu modelde tüm ℓ ler için, $\ell > \ell_0$, ℓ_0 a karşılık gelen pseudopotansiyel alınarak oluşur.

Form faktörü aşağıdaki formda alınırsa (Koubaa ve Gasser, 1990), lokal kısım $V(q)$ da (2.12) denklemi ile verilir.

$$w_q^0(K) = V(q) + f(K, q) \quad (2.11)$$

$$V(q) = -\frac{4\pi Z_v}{\Omega_0 q^2} \sum_{i=0}^2 C_i^{core} \exp\left[\frac{-q^2}{4\alpha_i^{core}}\right] + \frac{\pi^{3/2}}{\Omega_0} \sum_{i=1}^3 \frac{\exp\left(\frac{-q^2}{4\alpha_i \ell_0}\right)}{\alpha_i^{3/2}(\ell_0)} \left[A_i(\ell_0) + \frac{A_{i+3}(\ell_0)}{2\alpha_i(\ell_0)} \left(3 - \frac{q^2}{2\alpha_i(\ell_0)} \right) \right] \quad (2.12)$$

Ω_0 = atomik hacim

Z_v = valans bandı elektron sayısı

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

Form faktörün nonlokal kısmı olan $f(K, q)$, K ya bağlı olduğundan dolayı daha karmaşıktır.

$$f(K, q) = \frac{4\pi}{\Omega_0} \sum_{\ell=0}^{\ell_0-1} (2\ell+1) P_\ell(\cos\theta) \int_0^\infty r^2 dr j_\ell(Kr) j_\ell(K'r) (\Delta \hat{V}_\ell^{ion}(r) - \Delta \hat{V}_{\ell_0}^{ion}(r)) \quad (2.13)$$

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

Bu tez çalışması f metalleri için olduğundan $f(K, q)$ denkleminde f bandı için $\ell_0=3$ alarak $f(K, q)$ denklemi;

$$f(K, q) = \frac{4\pi}{\Omega_0} \sum_{\ell=0}^2 (2\ell+1) P_\ell(\cos\theta) \int_0^\infty r^2 dr j_\ell(Kr) j_\ell(K'r) (\Delta \hat{V}_\ell^{ion}(r) - \Delta \hat{V}_3^{ion}(r)) \quad (2.14)$$

şeklinde yazılabilir.

s,p,d,f bandı metaller için $\ell_0 = 0,1,2,3$ değerlerine genişletilirse Legendre polinomları :

$$P_0 = 1$$

$$P_1(\cos\theta) = \cos\theta$$

$$P_2(\cos\theta) = \frac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1) \quad (2.15)$$

$$P_3(\cos\theta) = -\frac{1}{48}(1 - 3\cos^2\theta + 2\cos^3\theta + \cos^4\theta - \cos^6\theta)$$

değerlerini alır. Burada $(\cos\theta)$ yerine Animalu'nun (1973) çalışmasında verildiği gibi

$$\cos \theta = 1 - \frac{q^2}{2k_f^2} \quad (2.16)$$

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

$$I_{\ell}(K, K') = \int_0^{\infty} r^2 j_{\ell}(Kr) j_{\ell}(Kr') \exp(-\alpha_i r^2) dr \quad (2.17)$$

$$J_{\ell}(K, K') = \int_0^{\infty} r^4 j_{\ell}(Kr) j_{\ell}(Kr') \exp(-\alpha_i r^2) dr \quad (2.18)$$

İntegrallerin sonuçları

$$X = e^{\left(\frac{-(K+K')^2}{4\alpha_i} \right)} \quad \text{ve} \quad Y = e^{\left(\frac{-(K-K')^2}{4\alpha_i} \right)} \quad \text{dönüşümleri yapılarak Ek 1 de}$$

verilmektedir. Bu dönüşümlerde K ve $K' = K_f = K + q$ nün paralel olmaması için

$q \leq 2K_f$ için $K = K_f$; $q > 2K_f$ için $|K + q| = K_f$ veya $|K + q| = q - K_f$ ifadeleri yazılır.

Hata fonksiyonu, Gaussyen ve r^2 Gaussyen fonksiyonlarının seçimi, doğrudan fit (eğrileri fonksiyonla özdeşleştirmek) edilmiş biçimi kullanılıp, hesaplama tekniklerinin bir sayısının maksimum halde ortaya koyulmasıyla yapılır. (Bachelet, Hamann ve Schlüter, 1982) Düzlem dalga matris elemanları analitik olarak hesaplanabilir. Fitting yönteminin başlangıç noktası kor parametreleridir.

Fitting fonksiyonlarının lineer bağımlılığı (2.9) denklemindeki A_i fitting katsayılarının birkaçı için büyük değerlere götürebilir. Bu problemi çözmede bir ortonormal temel grubu için $i=1,6$ C_i katsayıları takımını denklem (2.9) içinde kullanabilmek amacıyla A_i, A_{i+3} $i=1,3$ katsayılarına dönüştürürüz.

$$C_i = -\sum_{\ell=1}^6 A_{\ell} Q_{\ell} \quad (2.19)$$

burada dik matris

$$Q_{i\ell} = \begin{cases} 0 & i > \ell \text{ için} \\ \left[\delta_{i\ell} - \sum_{k=1}^{i-1} Q_{ki}^2 \right]^{1/2} & i = \ell \text{ için} \\ \frac{\left[\delta_{i\ell} - \sum_{k=1}^{i-1} Q_{ki} Q_{k\ell} \right]}{Q_{ii}} & i < \ell \text{ için} \end{cases} \quad (2.20)$$

üst üste düşmüş matris ise

$$\delta_{i\ell} = \int_0^{\infty} r^2 \Phi_i(r) \Phi_\ell(r) dr \quad (2.21)$$

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

C_i yi daha da açarak gösterirsek,

$$C_i = -[A_1 Q_{i1} + A_2 Q_{i2} + A_3 Q_{i3} + A_4 Q_{i4} + A_5 Q_{i5} + A_6 Q_{i6}]$$

$$\begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \\ C_5 \\ C_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_{11} & \dots & Q_{16} \\ Q_{21} & \dots & Q_{26} \\ Q_{31} & \dots & Q_{36} \\ Q_{41} & \dots & Q_{46} \\ Q_{51} & \dots & Q_{56} \\ Q_{61} & \dots & Q_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \\ A_5 \\ A_6 \end{bmatrix}$$

Burada açıktır ki, $Q_{i\ell}$ lerin tersini alıp C katsayılarıyla çarparsak A katsayılarını bulabiliriz.

Kapalı formda,

$$A_i = -\sum_{\ell=1}^6 C_\ell Q_{i\ell}^{-1} \quad (2.22)$$

şeklinde gösterebiliriz.

2.3 Perdelenme

Metal içindeki elektron-iyon etkileşimleri, pertürbasyon teorisinin kullanıldığı bir net etkin potansiyel veya model potansiyel cinsinden ifade edilir.

Basit metallerde kor elektronlarının dağılımı, serbest atomdaki gibi aynıdır. Ve iletken elektronları, atomların s ve p atomik orbitallerindeki valans elektronlarından doğar.

Metallerin fiziksel özelliklerinin büyük bir bölümü serbest elektron modeliyle açıklanabilir. Bu modele göre atomların valans elektronları iletkenlik elektronlarına dönüşür ve metal içinde serbestçe hareket edebilirler.

Pozitif yüklü parçacık düzenli olmayan elektron gazı içine yerleşmiş olsun. Pozitif yük çekimi ile kendi etrafında, elektronik yük birikimi oluşur. Bu pozitif yük, etrafında oluşan elektron bulutu ile perdelenme etkisine sahip olur.

Yanıt fonksiyonları, elektriksel alanlara veya elektriksel potansiyellere benzer dış pertürbasyonların etkisi altında fiziksel bir sistemin davranışını karakterize ederler. Dış kaynaklar tarafından oluşturulan bir dış alan, herhangi bir sisteme etki ettiği zaman, sistemin göstermiş olduğu yanıt, etki eden dış alan ile beraber yeni bir alanı oluşturmasıdır. Oluşan toplam alana sistemde bulunan tüm tanecikler yanıt verirler. (Armağan, 1986)

Sistemde iyonlarla birlikte elektronlar olduğundan elektron-iyon potansiyelinin perdelenmesi gerekir. Buna göre perdelenmiş dielektrik fonksiyon

$$\varepsilon(q) = 1 - \frac{4\pi}{q^2} \chi_{scr}(q) \quad (2.23)$$

burada $\chi_{scr}(q)$ yanıt fonksiyonudur.

$$\chi_{scr}(q) = \frac{\chi_0(q)}{1 + (4\pi/q^2)\chi_0(q)G(q)} \quad (2.24)$$

burada $\chi_0(q)$ Linhard etkileşimsiz statik yanıt fonksiyonudur.

$$\chi_0(q) = \frac{k_F}{\pi^2} f\left(\frac{q}{2k_F}\right) \quad (2.25)$$

f ile gösterilen Linhard fonksiyonudur.

$$f(y) = \frac{1}{2} + \frac{1}{4y}(1-y^2) \ln \left| \frac{y+1}{y-1} \right| \quad (2.26)$$

olarak veriliyor. (Moulopoulos, 2000) Bölgesel alan düzeltmesi $G(q)$, etkileşen elektronlar arasındaki değiş-tokuş ve korelasyonu hesaba alır. Bu fonksiyon için önerilen birçok ifade vardır. Bu tezde, Ichimaru ve Utsumi (1981) tarafından önerilen,

$$G(q) = Aq^4 + Bq^2 + C + \left[Aq^4 + \left(B + \frac{8}{3}A \right) q^2 - C \right] \times \frac{4-q^2}{4q} \ln \left| \frac{2+q}{2-q} \right| \quad (2.27)$$

bölgesel alan düzeltme fonksiyonu kullanılmıştır, burada Q yerine $Q=q/k_F$ yazarız. k_F Fermi dalga sayısıdır. A, B ve C parametreleri,

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

$$\begin{aligned} B &= \frac{9}{16}\gamma_0 - \frac{3}{64}[1 - g(0)] - \frac{16}{15}A \\ C &= -\frac{3}{4}\gamma_0 + \frac{9}{16}[1 - g(0)] - \frac{16}{15}A \end{aligned} \quad (2.28)$$

A, B, C parametrelerindeki γ_0 değeri elektron başına karşılıklı etkileşme enerjisi $E_c(r_s)$ ile birleştiren bir katsayıdır.

$$\gamma_0 = \frac{1}{4} - \frac{\pi\alpha}{24} r_s^5 \frac{d}{dr_s} \left[r_s^{-2} \frac{d}{dr_s} E_c(r_s) \right] \quad (2.29)$$

burada $\alpha = \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{1/3}$ değerindedir. r_s ise Wigner-Seitz elektron yarıçapı olup

$$r_s = \left(\frac{3}{4\pi n} \right)^{1/3} \frac{me^2}{\hbar^2} \quad n = \text{sayı yoğunluğu}$$

denklemleri ile bulunur. (Ichimaru ve Utsumi, 1981)

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

burada $b_0 = 0.0621814$, $b_1 = 9.81379$, $b_2 = 2.82224$ ve $b_3 = 0.736411$ dir.

$G(q)$ nun kısa dalga boyundaki davranışı çift dağılım fonksiyonu $g(r)$ ile aşağıdaki gibi ilişkilendirilmiştir. (Ichimaru ve Utsumi, 1981)

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

$$g(0) = \frac{1}{8} \left[\frac{z}{I_1(z)} \right]^2, \quad z \equiv 4(\alpha r_s / \pi)^{1/2}$$

burada $I_1(z)$ birinci mertebeden Modifiye Bessel fonksiyonudur. Bu denklemler birleştirilerek dielektrik perdelenme fonksiyonuna ulaşılır.

Buraya kadar Ichimaru ve Utsumi tarafından önerilen $G(q)$ bölgesel alan düzeltme fonksiyonunu ve Sarkar modelinde öngörülen iyonların etrafında perdelenme etkisi yaratan elektron bulutunun iletkenlik elektronları gibi davrandığını düşünüp serbest elektron modelini uygulayarak $\varepsilon(q)$ dielektrik perdelenme fonksiyonuna ulaştık. (Sarkar vd., 1998) Bulduğumuz bu analitik çözümleri ve daha önce incelediğimiz BHS biçim faktörünü ($w_q^0(K)$), $F_N(q)$ denkleminde yerine koyarak $F_N(q)$ fonksiyonunu elde ederiz.

$V(r) = V_d(r) + V_{ind}(r)$ denkleminin Fourier uzayında ifadesi, iyon çekirdekleri arası direkt etkileşme terimi $V_{ii}(q)$ ve bu iyonları perdeleyen elektron bulutunun oluşturduğu indirekt etkileşme terimi $V_{sc}(q)$ olmak üzere, atomlar arası potansiyel yani etkin çift potansiyel $V_{eff}(q) = V_{ii}(q) + V_{sc}(q)$ dir.

Bu tez çalışmasında nadir toprak metallerinin yapısal özelliklerinin anlaşılmasında $S(q)$ yapı faktörünün bulunabilmesi için $V_{sc}(q)$ fonksiyonunu bulmamız gerekiyordu. $F_N(q)$ fonksiyonu yardımıyla q Fourier uzayındaki $V_{sc}(q)$ ifadesine ulaştık.

Çizelge 2.1 Lantan için pseudopotansiyel parametreler

LANTAN					
L	core	0	1	2	3
α_1	5.00	2.56	2.55	1.50	4.64
α_2	2.00	2.79	3.03	2.79	9.39
α_3		3.40	3.81	3.32	30.90
c_1	3.2494	-10.6839	-10.0938	-8.3844	5.0661
c_2	-2.2494	0.0617	0.4797	-1.8837	3.1425
c_3		0.0545	-0.1510	-0.3217	-0.7802
c_4		0.2446	0.1225	0.0580	0.4424
c_5		-0.0025	0.0262	0.0317	-0.5445
c_6		-0.0350	-0.0149	0.0179	0.1727

Çizelge 2.2 Seryum için pseudopotansiyel parametreler

SERYUM					
L	core	0	1	2	3
α_1	5.32	2.95	2.66	1.59	5.44
α_2	2.13	3.31	3.16	2.92	11.16
α_3		3.97	3.95	3.40	38.88
c_1	3.0538	-11.2263	-10.2554	-8.5475	5.5065
c_2	-2.0538	0.5418	0.4195	-1.9114	3.1187
c_3		0.0074	-0.1454	-0.3301	-0.9227
c_4		0.2271	0.1292	0.0719	0.3404
c_5		0.0132	0.0305	0.0353	-0.4913
c_6		-0.0307	-0.0182	0.0202	0.0987

Çizelge 2.3 Praseodimyum için pseudopotansiyel parametreler

PRASEODİMYUM					
L	core	0	1	2	3
α_1	5.53	2.95	2.79	0.83	5.48
α_2	2.21	3.45	3.28	1.27	12.47
α_3		4.30	4.05	3.92	36.99
c_1	2.8422	-11.2831	-10.2961	-7.3276	5.7790
c_2	-1.8422	0.2599	0.4690	-4.5230	3.5755
c_3		0.0406	-0.1388	-1.9614	-0.8505
c_4		0.2377	0.1338	-0.0697	0.3427
c_5		0.0103	0.0338	-0.0213	-0.6118
c_6		-0.0342	-0.0204	-0.0179	0.2323

Çizelge 2.4 Neodimyum için pseudopotansiyel parametreler

NEODİMYUM					
L	core	0	1	2	3
α_1	5.69	3.07	2.85	0.96	5.67
α_2	2.28	3.62	3.39	1.20	13.03
α_3		4.52	4.25	3.92	39.55
c_1	2.6639	-11.2815	-10.3011	-7.6071	5.9335
c_2	-1.6639	0.2837	0.3799	-4.0643	3.6380
c_3		0.0442	-0.1090	-2.0017	-0.8933
c_4		0.2418	0.1422	-0.0662	0.3147
c_5		0.0171	0.0351	-0.0387	-0.6081
c_6		-0.0362	-0.0236	-0.0086	0.2074

Çizelge 2.5 Europyum için pseudopotansiyel parametreler

EUROPYUM					
L	core	0	1	2	3
α_1	6.24	3.21	2.95	0.91	7.15
α_2	2.50	4.09	3.63	1.58	16.06
α_3		5.57	4.86	3.92	65.19
c_1	2.2886	-11.2950	-10.3464	-7.2842	6.8341
c_2	-1.2886	-0.1543	-0.0883	-4.9156	3.6642
c_3		0.1098	-0.0251	-1.8075	-1.0629
c_4		0.2707	0.1764	0.0301	0.1867
c_5		0.0230	0.0249	-0.1176	-0.5247
c_6		-0.0448	-0.0323	0.0220	0.0133

Çizelge 2.6 Terbiyum için pseudopotansiyel parametreler

TERBİYUM					
L	core	0	1	2	3
α_1	7.15	4.01	3.78	0.89	8.09
α_2	2.86	4.85	4.86	1.13	19.92
α_3		6.06	5.79	4.80	63.65
c_1	2.2267	-12.1597	-11.0516	-7.3381	6.9653
c_2	-1.2267	0.5455	0.7319	-5.1014	3.8278
c_3		-0.0178	-0.2260	-3.1648	-1.1642
c_4		0.2425	0.1016	-0.2815	0.1398
c_5		0.0331	0.0552	-0.0193	-0.5686
c_6		-0.0375	-0.0174	-0.0042	0.0998

3. YAPI FAKTÖRÜ ve ELEKTRONİK TRANSPORT ÖZELLİKLERİ

3.1 Yapı Faktörü Bilgisi

Sıvı hal fiziği çalışmalarının ortak amacı, ergimiş tuzların, metallerin ve alaşımların $S(q)$ yapı faktörlerinin saptanmasına dayanır. Bir sistem için $S(q)$ yapı bilgisi, sistemin fiziksel özelliklerini hesaplamak için bilmemiz gerekli bilginin tümüdür.

Bir sistemin yapı bilgisini elde etmek için kullanılan yaklaşımlardan biri yarı analitiktir ve ikiye ayrılır. $V(r)$ çiftli potansiyel ile $g(r)$ çift dağılım fonksiyonu arasında ilişki kuran, integro-diferansiyel denklemlere dayanır. En sık kullanılan örnekler Percus-Yevick denklemleri, Hypernetted Chain denklemleri ve Ortalama Küresel Yaklaşıklık'tır. Diğerleri ise doğru çözümlerinin bilinmesinden dolayı, referans sistemlerine göre pertürbasyon kuramına dayanır. Gerçek bir sıvının özellikleri, katı küre modeli referans sistemi olarak seçilerek pertürbasyon teorisine göre hesaplanabilmektedir. Bizim kullandığımız da pertürbasyon teorisidir. Şöyle ki statik yapı faktörü hesabında, gerekli olan referans yapı faktörü için çözümü bilinen bir referans sistemine yani burada tek bileşenli plazmaya dayandırılmıştır. Ayrıca ergimiş nadir toprak metallerinin $S(q)$ statik yapı faktörü için de Rastgele Faz Yaklaşımı gibi düşük mertebeden pertürbasyon teorisine dayanan Elektron-İyon Plazma modeline dayandırılmıştır. (Chaturvedi vd., 1981) Böylelikle genişleyen statik yapı faktörü hesabı,

$$S(q) = \frac{S_0(q)}{1 + \beta \rho V_{sc}(q) S_0(q)} \quad (3.1)$$

şeklinde olur. (March ve Tosi, 1983; Singh ve Holz, 1983; Naito vd., 1990) Burada $S_0(q)$ referans yapı faktörü, $V_{sc}(q)$ nadir toprak metalleri için d ve f bandı elektron etkileşmelerini içeren indirekt etkileşme terimi ve β termal sabittir.

$$V_{sc}(q) = - \left(\frac{4\pi Z^2}{q^2} \right) F_N(q) \quad (2.4)$$

Z etkin valans değeri ve $F_N(q)$ değiş-tokuş terimleri ve karşılıklı etkileşme terimleri ile BHS form faktörünü içeren fonksiyondur. $S_0(q)$ referans yapı faktörü hesabında ise tek bileşenli plazma modeli kullanılmıştır. Bu modele göre tek bileşenli plazma tamamen nötr bir ortamdır ve birbirlerine eşit nokta yükleri kapsayan bir akışkandır.

3.1.1 Tek Bileşenli Plazma Modeli Altında O-Z Denklemi

$h(r)$ toplam korelasyon fonksiyonu referans atomun $r = |\vec{r} - \vec{r}'|$ mesafedeki diğer atom üzerindeki toplam etkisinin bir ölçüsüdür. Ve bu $h(r)$ fonksiyonu iki kısma ayrılabilir. Referans atomun diğer atom üzerindeki doğrudan etkisini anlatan direkt korelasyon fonksiyonu $c(r)$ ve diğer atomların etkisini anlatan indirekt kısımdır.

$$h(r) = c(r) + \rho \int c(|\vec{r} - \vec{r}'|) h(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (3.2)$$

ile verilir. Bu bağıntı Ornstein-Zernike bağıntısı olarak bilinir. Bu bağıntının Fourier dönüşümü alındığında

$$S_0(q) - 1 = \rho c_0(q) S_0(q) \quad (3.3)$$

basit cebirsel şekline dönüşür. $h(r)$ toplam korelasyon fonksiyonu ve $c(r)$ direkt korelasyon fonksiyonunun Fourier dönüşümleri

$$h(q) = \int h(r) \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{r}) d\vec{r} \quad (3.4)$$

$$c(q) = \int c(r) \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{r}) d\vec{r} \quad (3.5)$$

denklemleri olmak üzere O-Z denkleminin her iki tarafının Fourier dönüşümü alınarak

$$h(q) = c(q) + \rho c(q) h(q) \quad (3.6)$$

elde edilir. Bu denklem de tekrar

$$[1 + \rho h(q)][1 - \rho c(q)] = 1 \quad (3.7)$$

şeklinde yazılabilir. Bu bağıntı ile

$$h(r) = g(r) - 1 \quad (3.8)$$

ve

$$S(q) = 1 + \rho \int [g(r) - 1] \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{r}) d\vec{r} \quad (3.9)$$

olarak tanımlanan statik yapı faktörü birleştirildiğinde

$$S_0(q) = \frac{1}{1 - \rho c_0(q)} \quad (3.10)$$

bulunur. Bu denklem referans sistemin statik yapı faktörü $S_0(q)$ nün direkt korelasyon fonksiyonunun Fourier dönüşümüyle arasındaki ilişkiyi verir. (Singh ve Holz, 1983)

Standart pseudopotansiyel yaklaşımın temelinde elektron-iyon çifti arasındaki farz edilen zayıf etkiyi, iyonik harekette elektronlara cevap veren etki olarak hesaba katılmalıdır. Lineer perdelenmiş yaklaşım içinde verilen bir sıvı metalin statik yapı faktörü yukarıda verilmiş olan (3.1) denklemdir.

Yüklü katı kürelerden oluşmuş nötr sıvının $S_0(q)$ referans yapı faktörü Parrinello ve Tosi'nin (1979) çok bileşenli plazma için Ortalama Küresel Yaklaşıklık çözümünü içeren makalesinden tek bileşenli plazma için analitik olarak elde edilebilir.

3.1.2 Tek Bileşenli Plazma için Ortalama Küresel Yaklaşım

Sıvı hal fiziğinin kuramsal kesimindeki çalışmalar, ergimiş metal veya metal tuzlarının tamamıyla iyonlarına ayrıldığı yani iyonik sıvılar olarak üniform bir yük nötralleşmesi altında çeşitli fiziksel modeller çerçevesinde analitik olarak incelenmesine dayanır.

Debye ve Hückel tarafından gerçekleştirilen çalışma, iyonik sıvıların yapılarının anlaşılmasında kuramsal olarak atılan ilk adımdır. Bu çalışmaya göre çözeltinin tüm iyonları noktasal yüklerden oluşmakta ve ortak bir iyon etrafında oluşan ortalama elektrostatik potansiyel yardımıyla çözeltinin yapı faktörleri saptanabilmektedir. (Karagözlü, 1986)

Daha sonraları Mayer, yüklü akışkanı, nötr parçacıklardan oluşan bir gerçek gaz modeli olarak varsaymış ve bu varsayım altında matematiksel olarak yeni pertürbatif açılımlar elde etmiştir. Tek bileşenli plazma modeline göre ortam tamamıyla nötralize olmuş ve istatistik mekaniğin tüm yasalarına uyan birbirlerine eşit nokta yükleri kapsayan bir akışkandır. Nötr bir ortamda yüklü katı küre akışkanları incelenir ve ortalama küresel yaklaşımın çözümü tek bileşenli sistem için bulunabilmektedir. Bu çözümün yoğun tek bileşenli plazmanın özelliklerini tanımlamada yararlı olduğu kanıtlanmıştır. Ve bilgisayar simülasyon sonuçlarıyla uyumludur. (Parrinello ve Tosi, 1979)

Burada üniform nötr bir ortamda yüklü katı küre akışkanının keyfi bir çoklu bileşeni için ortalama küresel yaklaşımın genel çözüm hesabı sunulmuştur. Ortalama küresel yaklaşımın çözüm metodu, Blum tarafından genişletilmiş yüklü küreler olarak Baxter'ın projesine dayanır.

ρ yoğunluklu üniform nötr bir ortamda gömülmüş ρ_i yoğunluklu, $z_i e$ yüklü ve σ_i çaplı katı kürelerin n bileşenli bir sistemini göz önüne alalım. Bu modelde nötralleşme koşulu

$$\rho = \sum_{i=1}^n \rho_i z_i \quad (3.11)$$

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. Parrinello ve Tosi'nin (1979) makalesinde iki bileşenli plazma için $\rho \neq 0$ alınmıştır.

ρ_i = birim hacimdeki iyon sayısı

$S_0(q)$, referans yapı faktörü aşağıda verilmiştir. (Armağan ve Öcal, 2000)

$$S_0(q) = [Q(q)Q(-q)]^{-1} \quad (3.12)$$

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

$$Q_{ij}(q) = \delta_{ij} + (\rho_i \rho_j)^{1/2} \left[- \int_{\lambda_{ij}}^{\sigma_{ij}} dr Q_{ij}(r) e^{iqr} + A_{ij} \int_{\sigma_{ij}}^{\infty} dr e^{(iq-\mu)r} \right] \quad (3.13)$$

Burada integrallerin sınır koşulları olan σ_{ij} ve λ_{ij} ifadelerini tek bileşenli plazma için $i=j$

olmak kaydıyla $\lambda_{ij} = \frac{1}{2}(\sigma_i - \sigma_j) = 0$, $\sigma_{ij} = \frac{1}{2}(\sigma_i + \sigma_j) = \sigma$ şeklinde tanımlayabiliriz.

Ayrıca limit durumunda kimyasal potansiyel enerji $\mu \rightarrow 0$ olarak belirlenir. Burada δ_{ij} Kronecker deltasıdır.

(3.13) denkleminde $(\rho_i \rho_j)^{1/2} = \rho$ olarak alınabilir. Böylelikle (3.13) denklemi tek bileşenli plazma için tekrar düzenlenirse

$$Q(q) = 1 + \rho \left[- \int_0^{\sigma} Q(r) e^{iqr} dr + A \int_{\sigma}^{\infty} e^{iqr} dr \right] \quad (3.14)$$

halini alır. Burada $A=za$ ve $Q(r)$ ifadesi iyonik halde 3. dereceden bir polinomdur. (Parrinello ve Tosi, 1979)

$$Q(r) = \frac{1}{3} \pi \rho a (r - \sigma)^3 + \frac{1}{2} Q''(r - \sigma)^2 + Q'(r - \sigma) - za \quad (3.15)$$

(3.15) denklemini (3.14) de yerine koyarsak,

$$Q(q) = 1 + \rho \left\{ - \frac{1}{3} \pi \rho a \int_0^{\sigma} (r - \sigma)^3 e^{iqr} dr - 0.5 Q'' \int_0^{\sigma} (r - \sigma)^2 e^{iqr} dr - Q' \int_0^{\sigma} (r - \sigma) e^{iqr} dr + za \int_0^{\infty} e^{iqr} dr \right\}$$

$$Q(q) = 1 + \rho \left\{ - \frac{1}{3} \pi \rho a \phi_3(q) - 0.5 Q'' \phi_2(q) - Q' \phi_1(q) + za \phi_0(q) \right\} \quad (3.16)$$

$Q(q)$ korelasyon faktörünün içindeki fonksiyonlar sırasıyla;

$$\varphi_0 = -\frac{1}{iq}$$

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

$$\varphi_2 = \frac{1}{-(iq)^3} [2 - 2e^{iq\sigma} + (iq\sigma)^2 + 2\sigma iq]$$

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

$$Q(q) = 1 - \rho \left[\left(\frac{A}{iq} \right) + Q' \varphi_1(q) + 0.5Q'' \varphi_2(q) + \frac{1}{3}\pi\rho a \varphi_3(q) \right] \quad (3.17)$$

(3.16) denkleminde φ_0 sonucu da eklendiğinde (3.17) denklemi elde edildi. Ve bu denklemde $A=za$ ifadesindeki a değeri

$$a = \frac{\alpha^2}{2\Gamma} \frac{z^* - (\pi/2\Delta)\sigma^2 P_n}{1 + \Gamma\sigma} \quad (3.18)$$

burada geçen ifadeler sırasıyla

$$z^* = z - \eta = z - \frac{1}{6}\pi\rho\sigma^3 \quad (3.19)$$

$$\eta = \frac{1}{6}\pi\rho\sigma^3 \quad (3.20)$$

$$\alpha^2 = \frac{4\pi\beta e^2}{\varepsilon_0} \quad (3.21)$$

k_B Boltzmann sabiti ve sıcaklık T olmak üzere termal sabit $\beta = 1/k_B T$ dir.

$$\Delta = 1 - \frac{1}{6}\pi\zeta_3 \quad (3.22)$$

$$\zeta_3 = \rho\sigma^3 \quad (3.23)$$

Parrinello ve Tosi (1979) tarafından verilen aşağıdaki ifadeler tek bileşenli plazma için düzenlenmiştir.

$$\Omega = 1 + \frac{\pi}{2\Delta} \left[\frac{\rho\sigma^3}{1+\Gamma\sigma} \right] = 1 + \frac{3\eta}{(1+\Gamma\sigma)\Delta} = \frac{(1+\Gamma\sigma)\Delta + 3\eta}{(1+\Gamma\sigma)\Delta} \quad (3.24)$$

$$P_1 = \Omega^{-1} \left[\frac{z\rho\sigma}{1+\Gamma\sigma} \right] = \frac{1}{\Omega} \left(\frac{z\rho\sigma}{1+\Gamma\sigma} \right) = \frac{z\rho\sigma\Delta}{3\eta + (1+\Gamma\sigma)\Delta} \quad (3.25)$$

Blum, n- bileşenli bir akışkanın özelliklerinin, yukarıdaki denklemlerde yer alan bir Γ parametresi ile hesap edilebileceğini yapmış olduğu çözümle göstermiştir ve bu parametre Blum parametresi veya bilinmeyen ayrılma sabiti olarak adlandırılır. Aşağıdaki ifadeyi tek bileşenli plazma için yazdığımızda,

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

$$\Gamma\sigma = -\frac{1}{2} \frac{1+2\eta}{1-\eta} \left\{ 1 - \left[1 + 2\kappa \frac{(1-\eta)^3}{(1+2\eta)^2} \right]^{1/2} \right\} \quad (3.26)$$

elde edilir.

(3.26) denkleminde verilen $\kappa = \alpha\rho^{1/2}z\sigma$ dır. Parrinello ve Tosi'nin (1979) makalesinde verilen Q' ve Q'' ifadelerini yine tek bileşenli plazma için aşağıdaki forma getirdik.

$$Q' = 2\pi\sigma \frac{1+0.5\eta}{(1-\eta)^2} - \frac{2\Gamma^2 A^2}{\lambda^2} \quad (3.27)$$

$$Q'' = 2\pi \frac{1+2\eta}{(1-\eta)^2} - \frac{2\pi\Gamma\rho_1 A^2}{\lambda^2(1-\eta)} \quad (3.28)$$

ifadelerinde geçen $\lambda^2 = 4\pi e^2 \beta$ olarak verilir. Bu ifadeler yerlerine yazılarak $Q(q)$ ve $Q(-q)$ elde edilir. $S_0(q) = [Q(q)Q(-q)]^{-1}$ referans yapı faktörü bulunur. Bulunan (3.13) ve (2.4) denklemleri $S(q) = \frac{S_0(q)}{1 + \beta\rho V_{sc}(q)S_0(q)}$ denkleminde yerine koyarak statik yapı faktörü $S(q)$ ya ulaşılır.

3.2 Elektronik Transport Özellikleri

Bu bölümde sıvı metallerin elektronik transport özellikleri ile ilgileneceğiz. İlk olarak elektron transport için Ziman formülünün (1961) fiziksel prensiplerini tanımlayıp, sonra da bunları gerçek sıvı metallere uygulayacağız. Doğru yapı faktörü ve uygun

pseudopotansiyellerin kullanımı ile sıvı metallerin tahmini olarak rezistiviteleri için makul değerler bulunabilir.

Normal şartlar altında, her ne kadar basit sıvı metaller için önemli olmasa da bu formül için önerilen bazı düzeltmeler tanımlanmıştır. Çıkarımdaki farklılık bir yana, güçlü iyonik potansiyellerle Ziman formülü, sıvı metallere resmi olarak uygulanabilir. Ziman formülü açıkça sıvı alaşımlara genişletilebilir. Çeşitli sıvı alaşımların rezistivitesi, bu formalizm bakımından tartışılmıştır. (Shimoji, 1977)

3.2.1 Elektriksel İletkenlik İçin Ziman Formülü

Sıvı metallerin elektriksel iletkenliği, aynı zamanda Ziman (1961) modeli bakımından da hesaplanabilir. Bir sıvı metalde iletken elektronları, uygun pseudopotansiyeller ile iyonlar tarafından saçılmış ve serbest elektron gazı formunda varsayılmıştır. Bu saçılma, 1. mertebeden zamana bağlı pertürbasyon teorisi ile hesaplanabilir. Geçiş oranı, $\Psi_{\vec{k}}^{(0)} = |\vec{k} >$ ilk halden, $\Psi_{\vec{k}+\vec{q}}^{(0)} = |\vec{k} + \vec{q} >$ son hale $N_{FE}(E_F)$ Fermi enerjisine bağlı hal yoğunluğu ile Fermi seviyesinde verilmiştir.

$$P(\theta) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \vec{k} + \vec{q} | W | \vec{k} > \right|^2 \frac{1}{2} N_{FE}(E_F) \quad (3.29)$$

burada θ , $\vec{k}$ ve $\vec{k} + \vec{q}$ arasındaki açı, $\frac{1}{2}$ elektron spin bilgisinden doğar. Saçılmada elektron spinini değişmez. Ve $\left| \langle \vec{k} + \vec{q} | W | \vec{k} > \right|^2$ faktörü aşağıda verildiği gibi ayrıştırılır. (Harrison, 1966; Shimoji, 1977)

Matris eleman formu

$$\left| \langle \vec{k} + \vec{q} | W | \vec{k} > \right|^2 = N^{-1} S(q) \left| \langle \vec{k} + \vec{q} | w | \vec{k} > \right|^2 \quad (3.30)$$

$N_{FE}(E_F)$ = serbest elektronlar için durum yoğunluğu

σ_e elektriksel iletkenlik olmak üzere ifadesi,

$$\sigma_e = \frac{1}{3} |e|^2 V_F^2 \tau N_{FE}(E_F) \quad (3.31)$$

dir. Burada V_F Fermi hızı veya Fermi yüzeyinde bir elektron hızı (Fermi küresi yüzeyi) ve τ ise gevşeme süresidir.

$$\frac{1}{\tau} = \int (1 - \cos \theta) (P(\theta) / 4\pi) d\Omega \quad (3.32)$$

Ω = katı açısı

(3.29), (3.30), (3.31), (3.32), (3.33) ve farz edilen serbest elektron dağılımı kullanımıyla, sıvı bir metalin rezistivitesi ($\rho_L = 1/\sigma_e$) için bir ifade elde ederiz.

$$N_{FE}(E_F) = \frac{mk_F}{\pi^2 \hbar^2} \quad (3.33)$$

$$\rho_L = \frac{3\pi}{\hbar |e|^2} \frac{1}{V_F^2} \frac{V}{N} \int_0^1 \left| \langle \vec{k} + \vec{q} | w | \vec{k} \rangle \right|^2 S(q) 4 \left(\frac{q}{2k_F} \right)^3 d \left(\frac{q}{2k_F} \right) \quad (3.34)$$

bu ifade Ziman formülü olarak bilinir. Bu form için gevşeme süresi

$$\frac{1}{\tau_Z} = \frac{V}{N} \left(\frac{mk_F}{\pi \hbar^3} \right) \int_0^1 \left| \langle \vec{k} + \vec{q} | w | \vec{k} \rangle \right|^2 S(q) 4 \left(\frac{q}{2k_F} \right)^3 d \left(\frac{q}{2k_F} \right) \quad (3.35)$$

Henüz pseudopotansiyel kuramı saptanmamışken 1952 de Gerstenkorn tarafından ve 1948 de Bhatia ve Krishnan tarafından da benzer denklemler birbirlerinden bağımsız olarak ilk kez çıkartılmıştır.

(3.34) de ifade edilen Ziman formülünü aşağıdaki formda da yazabiliriz.

$$\rho_L = \frac{3\pi m^2 \Omega_0}{4e^2 \hbar^3 k_F^6} \int_0^{2k_F} S(q) |w(\vec{k}, \vec{q})|^2 q^3 dq$$

Bu bağıntı kullanılarak elektriksel rezistivitenin hesaplanabileceği Ziman tarafından gösterilmiştir. Rezistivitenin iki temel özelliğe sahip olduğunu görebiliriz. Birincisi, iletken elektronlar tarafından perdelenen Fermi yüzeyindeki ($k=k_F$) model potansiyel form faktörü olan $w(q)$ ve ikincisi statik yapı faktörü $S(q)$ dur. Ω_0 atomik hacim ve k_F Fermi dalga vektörü olarak sırası ile gösterilmişlerdir.

e elektron yükü, $V_F = \frac{\hbar k_F}{m}$ Fermi hızı, $k_F = \left(\frac{3\pi^2 Z}{\Omega_0} \right)^{1/3}$ Fermi dalga vektörü, $\Omega_0 = \frac{V}{N}$

atomik hacim ve $\vec{k}$ elektron dalga vektörü, $\vec{q}$ ise fonon dalga vektörüdür. $w(\vec{k}, \vec{q})$ perdelenmiş pseudopotansiyel matris elemanıdır. (Sarita vd., 1989)

4. ERGİME NOKTASI CİVARINDA SEÇİLEN METALLERİN STATİK YAPI FAKTÖRLERİ VE REZİSTİVİTELERİ

S(q) yapı faktörü ve rezistivitelerin hesaplanan sonuçları Lantan, Seryum, Praseodimyum, Neodimyum, Europyum ve Terbiyum nadir toprak metalleri için uygulanarak literatürdeki deneysel sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Bu metallerin temel özellikleri aşağıdaki çizelgede verilmektedir.

Çizelge 4.1 Nadir toprak metallerinin bazı fiziksel ve kimyasal özellikleri

SEMBOL	ATOM NUMARASI	VALANS YÜKLERİ (Z _v)	ATOM AĞIRLIĞI
La	57	11	138.91
Ce	58	12	140.12
Pr	59	13	140.907
Nd	60	14	144.24
Eu	63	17	151.96
Tb	65	19	158.924

Ergime sıcaklığı civarındaki nadir toprak metallerinin yapısı ve elektronik transport özelliklerinin anlaşılması için S(q) yapı faktörünün bilinmesi gerekmektedir. Bu sebeple her bir iyonu perdeleyen iletken elektronların oluşturduğu indirekt etkileşme sonucu oluşan

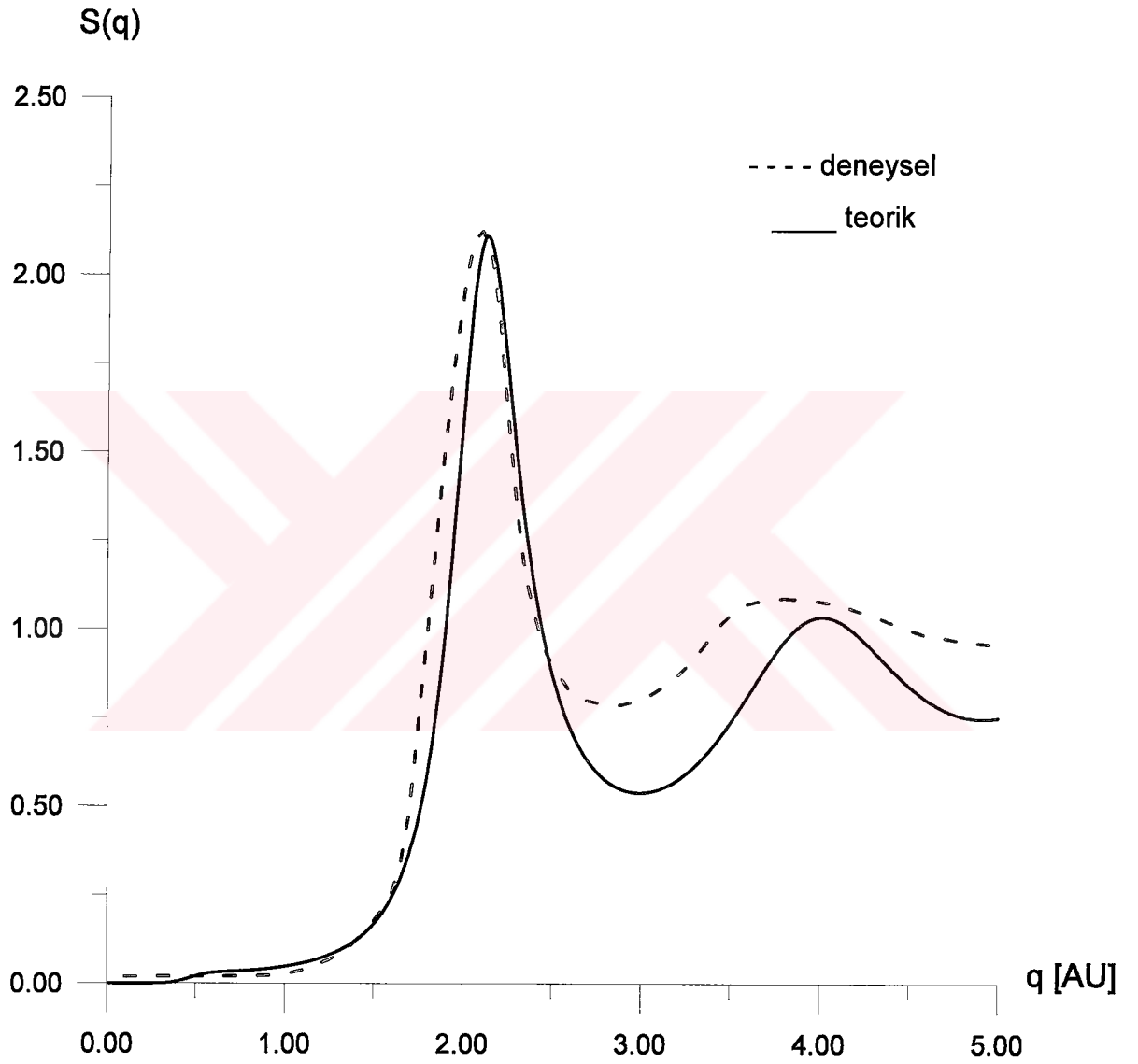
potansiyel $V_{sc}(q)$ nun Fermi uzayındaki ifadesini 2. bölümde incelemiştik. Bu potansiyel $F_N(q)$ fonksiyonuna bağlıdır. Dolayısıyla $F_N(q)$ fonksiyonu hesabının başlangıcı $w_q^0(K)$ BHS form faktör hesabıdır.

3. bölümde (3.1) denklemleri verilen $S(q)$ statik yapı faktörüne ulaşmak için $V_{sc}(q)$ ile birlikte TBP modeliyle hesaplanabilen referans yapı faktörü $S_0(q)$ nun bilinmesi gerekmektedir. $S(q)$ statik yapı faktörü η paketleme yoğunluğuna bağlı olarak değişmektedir. (Karmakar ve Joarder, 1998) Bu sebeple her metale ait iyonik ρ_i iyonik sayı yoğunluğunu ve σ katı küre çapını bilmemiz gerekir.

Çizelge 4.2 Nadir toprak metallerinin statik yapı faktörü hesabında kullanılan parametreler

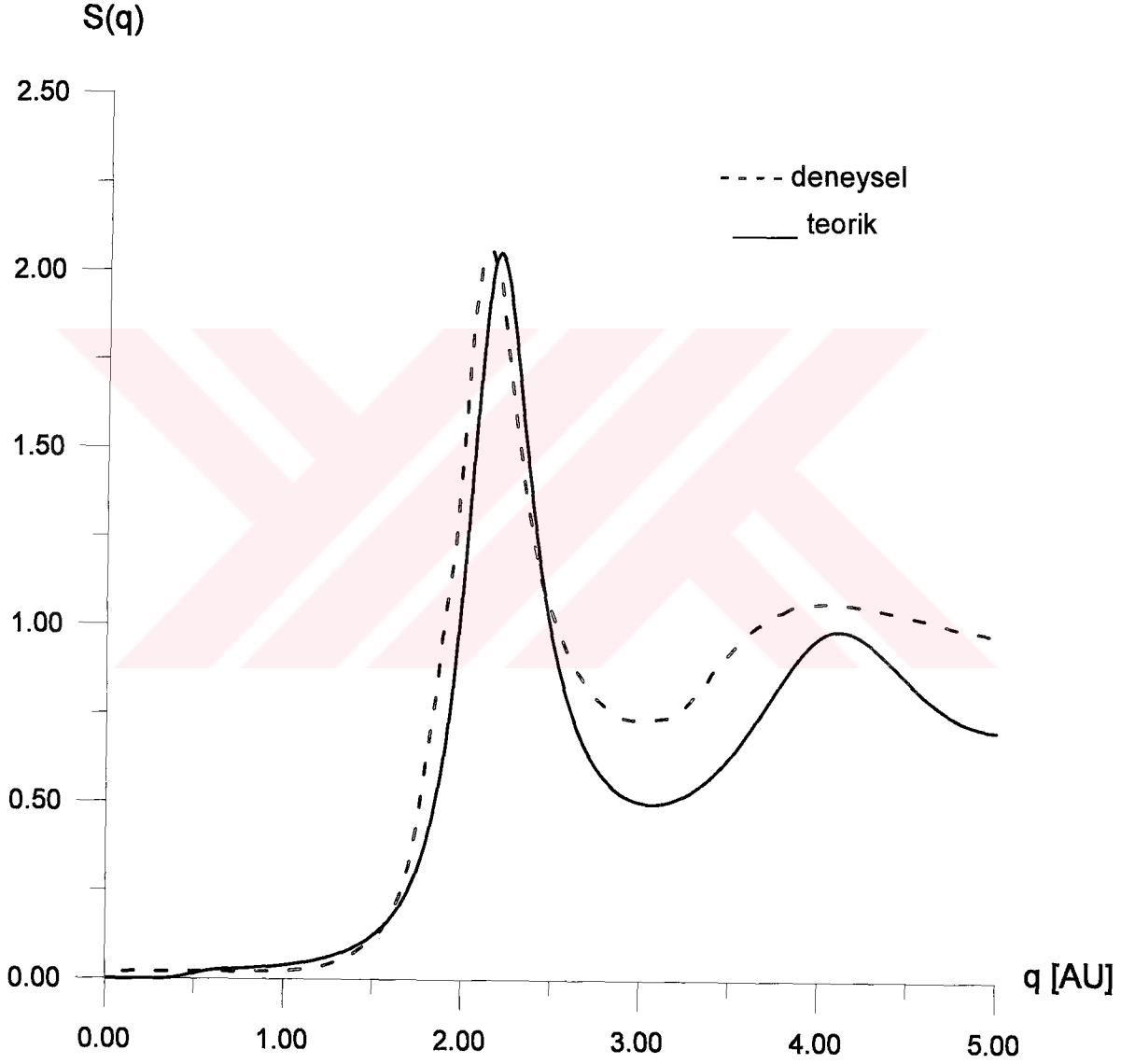
NADİR TOPRAK SAF METAL SEMBOLÜ	SICAKLIK ($^{\circ}\text{K}$)	İYONİK SAYI YOĞUNLUĞU ($1/^{\circ}\text{A}^3$)	KATI KÜRE ÇAPI ($^{\circ}\text{A}$)
La	1243	0.0258	3.19
Ce	1143	0.0287	3.12
Pr	1223	0.0283	3.15
Nd	1323	0.0289	3.14
Eu	1103	0.0183	3.41
Tb	1653	0.0274	3.16

4.1 LANTAN



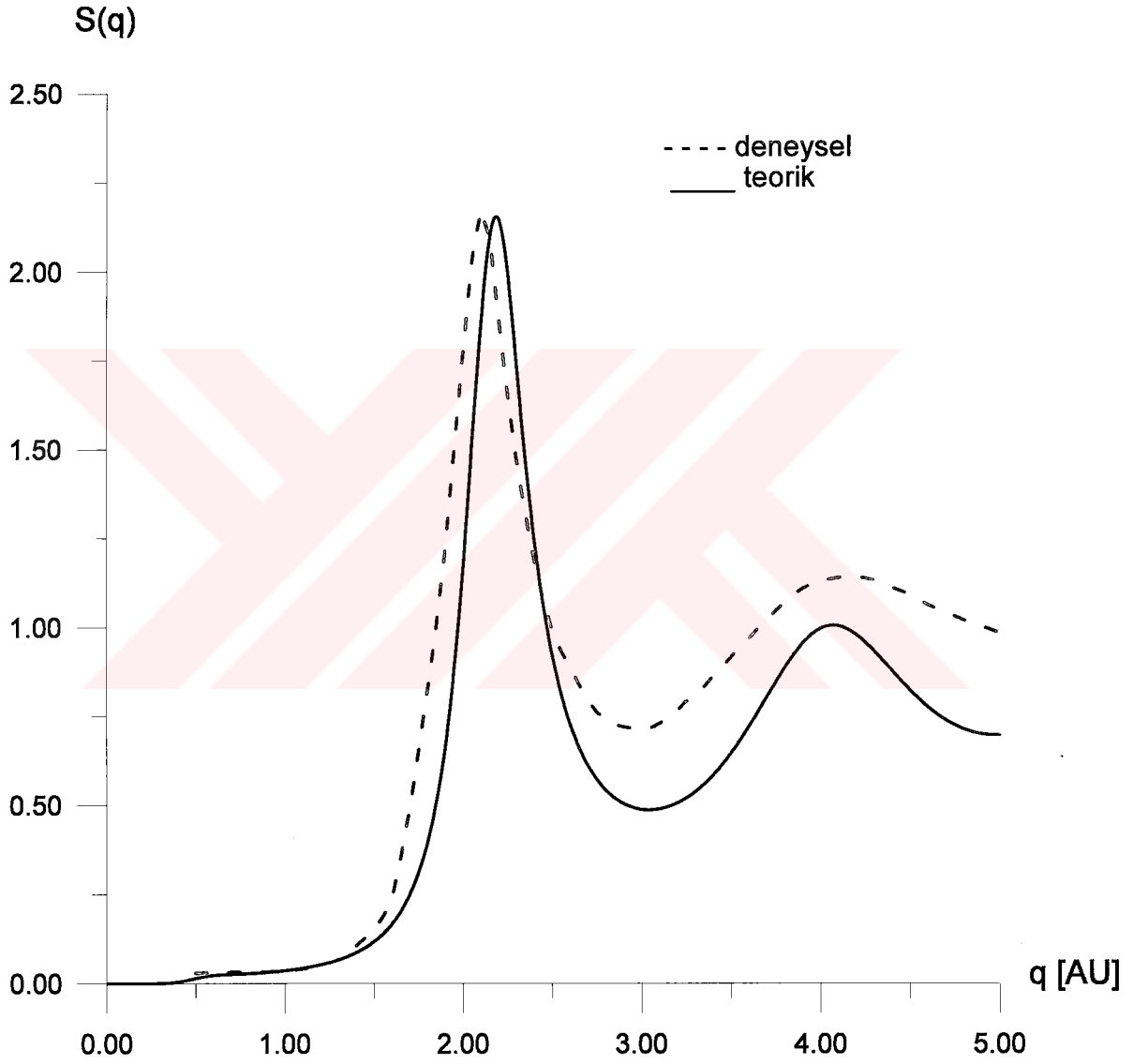
Şekil 4.1 $T=1243 \text{ }^{\circ}\text{K}$ de Lantanın $S(q)$ yapı faktörünün q ya göre değişimi. Düz çizgi TBP modeline göre, kesikli çizgi ise deneysel verilerden (Waseda, 1980) elde edilen statik yapı faktörüdür.

4.2 SERYUM



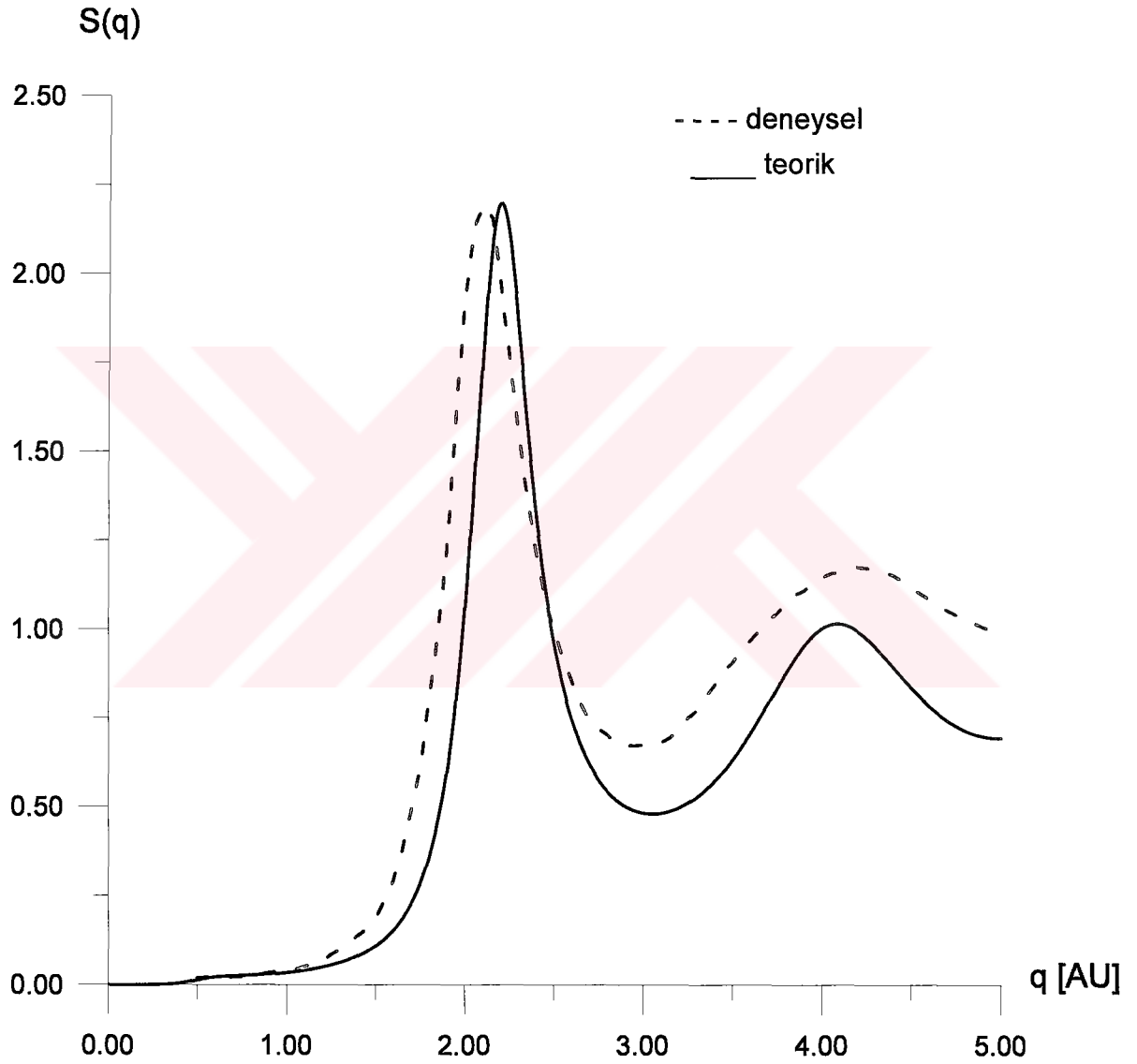
Şekil 4.2 $T = 1143 \text{ }^{\circ}\text{K}$ de Seryumun $S(q)$ yapı faktörünün q ya göre değişimi. Düz çizgi TBP modeline göre, kesikli çizgi ise deneysel verilerden (Waseda, 1980) elde edilen statik yapı faktörüdür.

4.3 PRASEODİMYUM



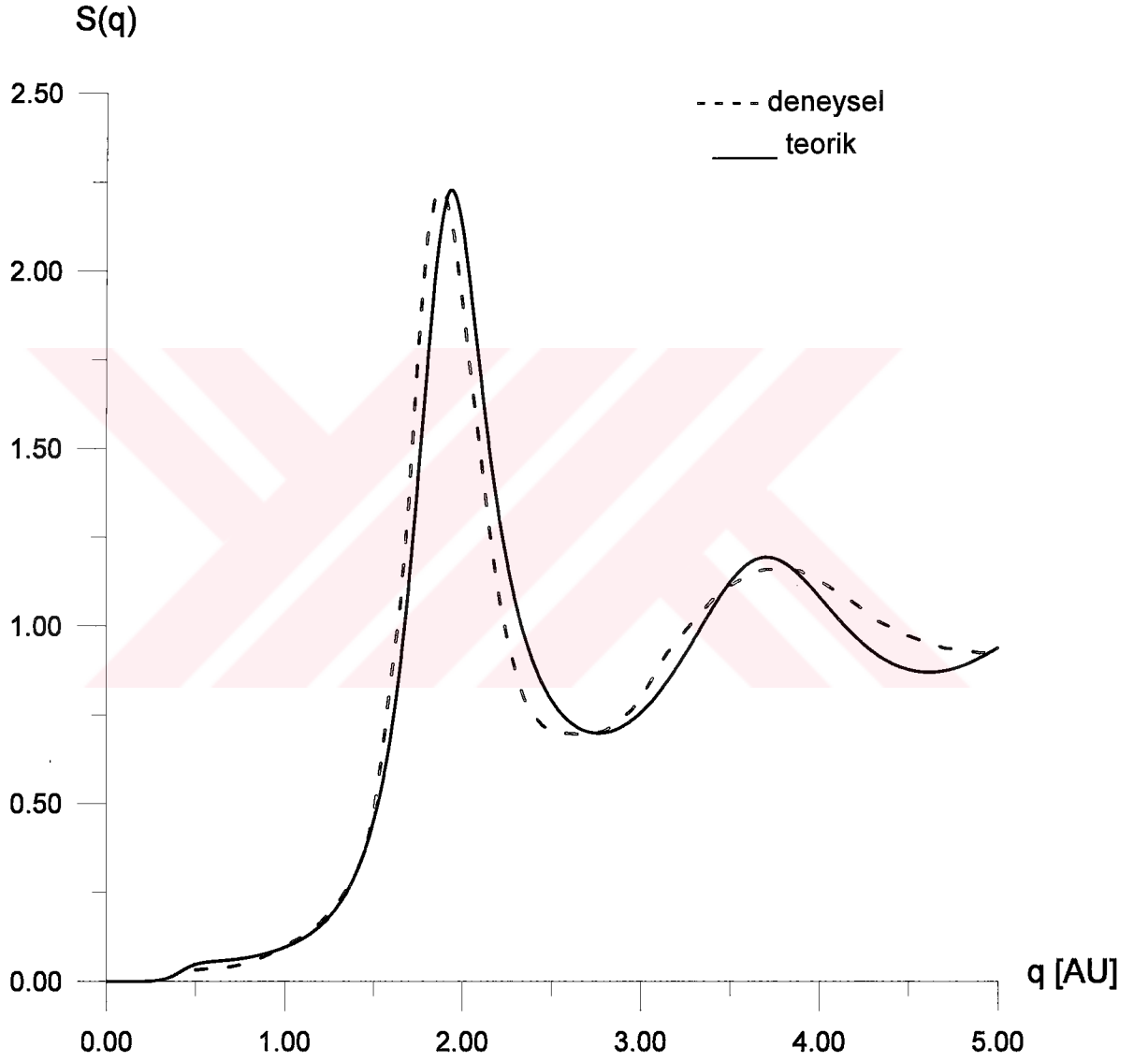
Şekil 4.3 $T=1223 \text{ }^{\circ}\text{K}$ de Praseodimyumun $S(q)$ yapı faktörünün q ya göre değişimi. Düz çizgi TBP modeline göre, kesikli çizgi ise deneysel verilerden (Waseda, 1980) elde edilen statik yapı faktörüdür.

4.4 NEODİMYUM



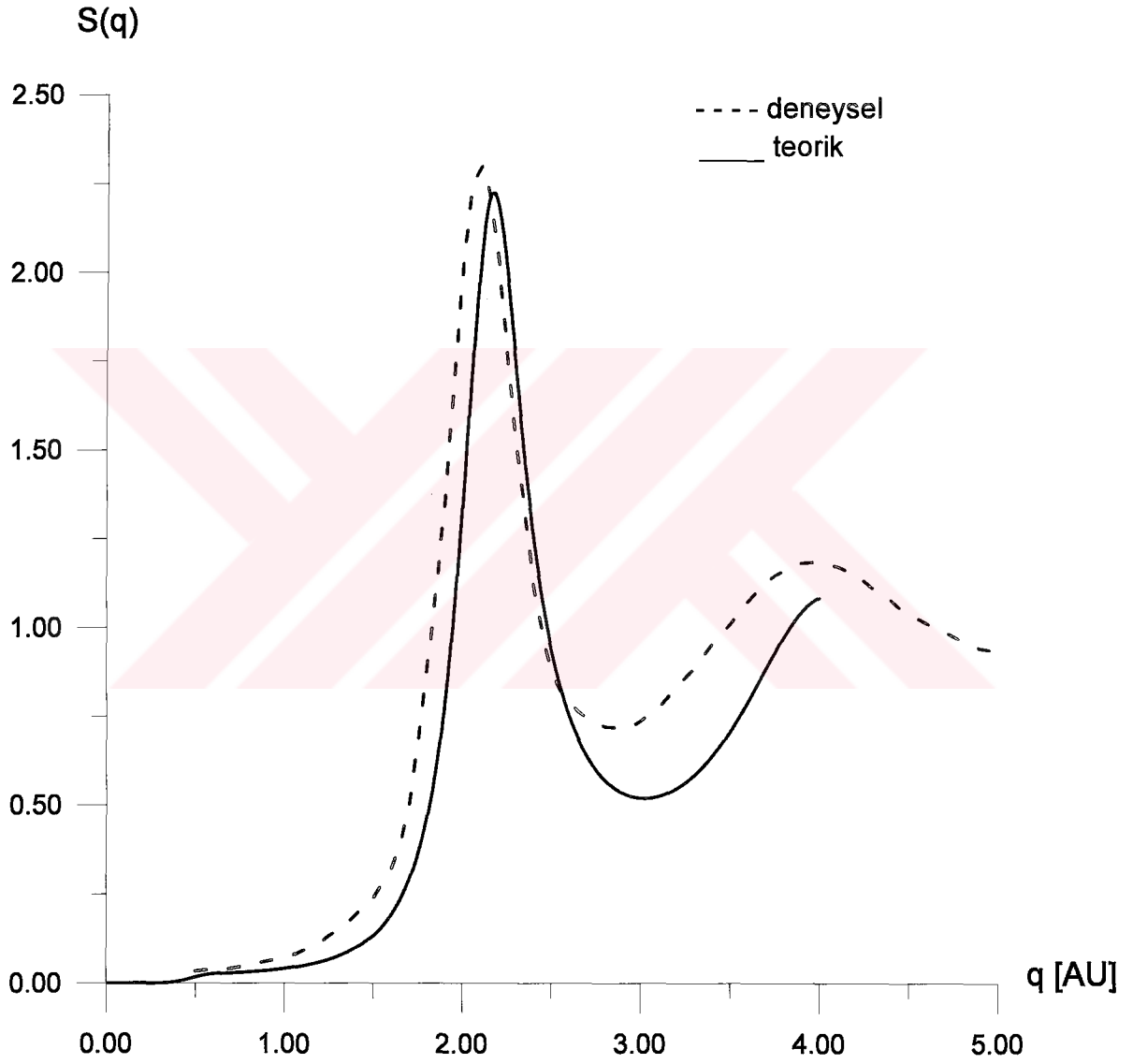
Şekil 4.4 $T=1323 \text{ }^{\circ}\text{K}$ de Neodimyumun $S(q)$ yapı faktörünün q ya göre değişimi. Düz çizgi TBP modeline göre, kesikli çizgi ise deneysel verilerden (Waseda, 1980) elde edilen statik yapı faktörüdür.

4.5 EUROPYUM



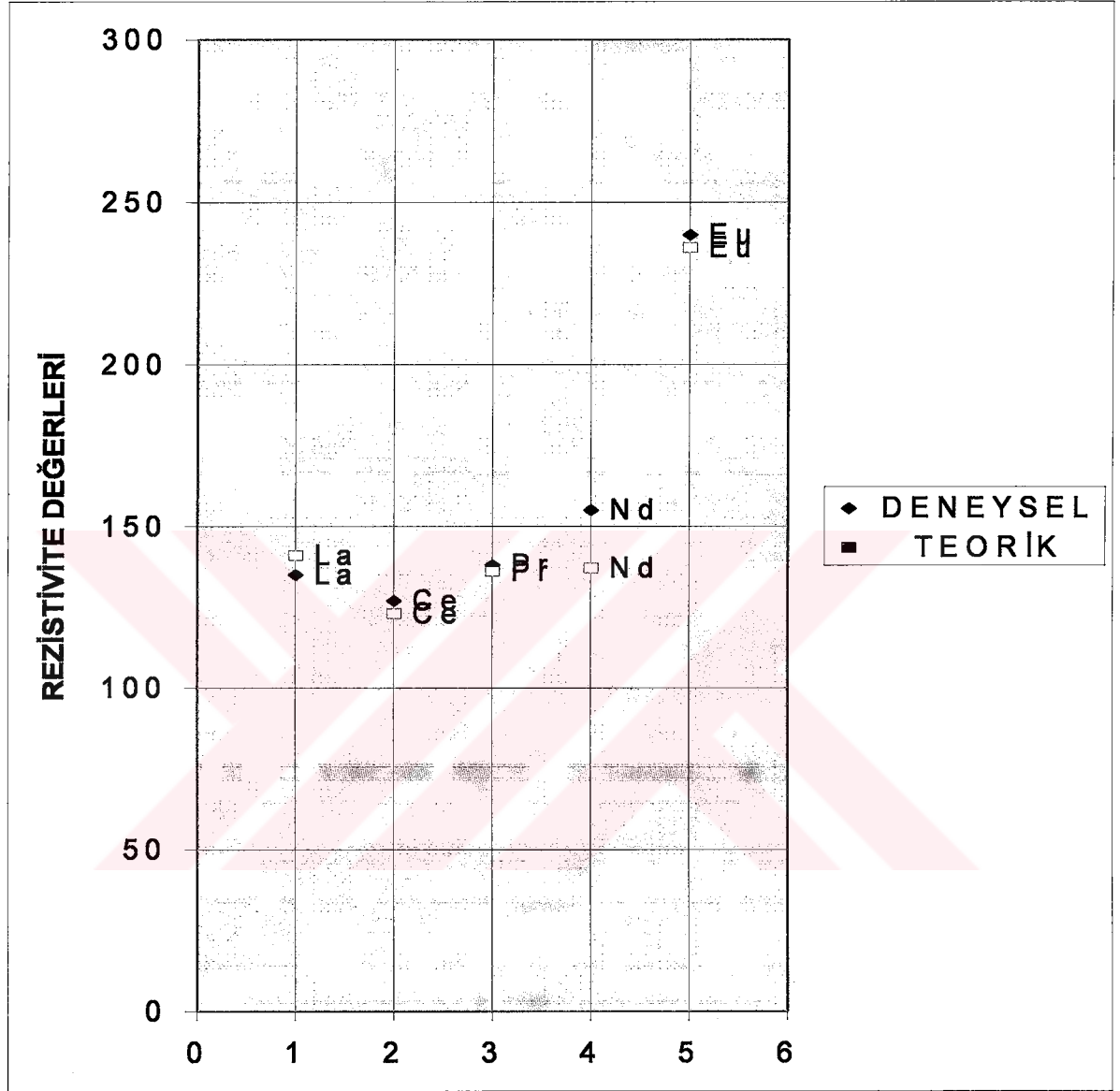
Şekil 4.5 $T=1103$ K de Europyumun $S(q)$ yapı faktörünün q ya göre değişimi. Düz çizgi TBP modeline göre, kesikli çizgi ise deneysel verilerden (Waseda, 1980) elde edilen statik yapı faktörüdür.

4.6 TERBİYUM



Şekil 4.6 $T=1653$ K de Terbiyumun $S(q)$ yapı faktörünün q ya göre değişimi. Düz çizgi TBP modeline göre, kesikli çizgi ise deneysel verilerden (Waseda, 1980) elde edilen statik yapı faktörüdür.

4.7 ERGİMİŞ NADİR TOPRAK METALLERİNİN REZİSTİVİTE DEĞERLERİ



Şekil 4.7 La, Ce, Pr, Nd ve Eu ergimiş nadir toprak metallerinin hesapladığımız rezistivite değerlerinin, deneysel sonuçlarla karşılaştırması. (Güntherodt vd., 1974) Burada rezistivite birimi $\mu\Omega.cm$ dir.

5. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmada, ele alınan nadir toprak metalllerinden La, Ce, Pr, Nd, Eu ve Tb un ergime noktası civarında TBP modeli altında OKY içinde O-Z denkleminin analitik çözümü ve BHS pseudopotansiyeli kullanılarak yapı faktörleri ve rezistiviteleri hesaplanmıştır.

Şekil 4.1, Şekil 4.2, Şekil 4.3, Şekil 4.4, Şekil 4.5 ve Şekil 4.6 da ele alınan sıvı metaller için hesapladığımız ve Waseda'nın deneysel yapı faktörleri $S(q)$ görülmektedir. Grafiklerdeki hesapladığımız ilk pikler deneysel sonuçlardaki ilk piklerle uyumludur. Fakat diğer pikler uyumlu değildir. Bu farklılığın nedeni olarak kullandığımız BHS pseudopotansiyelinin, daha karmaşık elektronik yapıya sahip olan sıvı nadir toprak metaller için gerçek potansiyeli vermediğini söyleyebiliriz.

Ergimiş nadir toprak metalllerinden La, Ce, Pr, Nd ve Eu için rezistivite sonuçları Shimoji, Güntherodt, Hauser ve Künzi'nin deneysel sonuçlarıyla karşılaştırılmıştır. Hesaplanan sonuçlar genellikle uyumludur. Daha tam hesaplamalar, şüphesiz daha iyi bir pseudopotansiyel veya daha iyi bir perdeleme fonksiyonu yaklaşımını kullanmakla mümkündür.

KAYNAKLAR

Animalu, A.O.E., (1973), "Electronic Structure of Transition Metals. I. Quantum Defects and Model Potential", Physical Review B8:3542-3554.

Armağan, T., (1986), Ergimiş Metal Bromür Tuzlarının Fiziksel Özellikleri, Doktora Tezi, İstanbul Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, İstanbul.

Armağan, T. ve Öcal, M., (2000), "Liquid Selenium As Electron-Ion Plasma", Balkan Physics Letters, 8:41-47.

Bachelet, G.B., Hamann, D.R. ve Schlüter, M., (1982), "Pseudopotentials that work: From H to Pu", Physical Review B26:4199-4228.

Bretonnett, J.L., Bhuiyan, G.M. ve Silbert, M., (1992), "Gibbs-Bogoliubov variational scheme calculations for the liquid structure of 3d transition metals", J.Phys.:Condens. Matter 4:5359-5370.

Bretonnet, J.L. ve Jakse, N., (1994), "Use of integral-equation theory in determining the structure and thermodynamics of liquid alkali metals", Physical Review B50:2880-2888.

Chaturvedi, D.K., Rovere, M., Senatore, G. ve Tosi, M.P., (1981), "Liquid Alkali Metals and Alloys As Electron-Ion Plasmas", Physical 11B:11-23.

Güntherodt, H.J., Hauser, E. ve Künzi, H.U., (1974), "The Electrical Resistivity of Rare Earth Metals at High Temperatures and in the Liquid State" Physics Letters 50A:313-314.

Harrison, W.A., (1966), Pseudopotentials in the Theory of Metals, Benjamin, New York.

Ichimaru, S. ve Utsumi, K., (1981), "Analytic expression for the dielectric screening function of strongly coupled electron liquids at metallic and lower densities", Physical Review B24: 7385-7388.

Karagözlü, S., (1986), Ergimiş Alkali Metal Bromür Karışımlarının Termodinamik Özellikleri, Doktora Tezi, Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, İstanbul.

Karmakar, A.K. ve Joarder, R.N., (1998), "Effective Pair Potential-Variational Thermodynamic Calculation of 4f Liquid Metals", Phys. Stat. Sol.(b) 207:19-31.

Koubaa, N., Anno, L., ve Gasser, J.G., (1990), "Electronic Properties of Liquid Gallium-Germanium Alloys Interpreted with Bachelet, Hamann and Schlüter Pseudopotential II", Journal of Non-Crystalline Solids 117/118:312-315.

Koubaa, N. ve Gasser, J.G., (1990), "Analytical Screened Form Factor Obtained From Bachelet, Hamann and Schlüter Pseudopotential I", Journal of Non-Crystalline Solids 117/118:308-311.

- March, N.H. ve Tosi, M.P., (1983), Coulomb Liquids, Academic Press, London.
- Moulopoulos, K., (2000), "Bound-state transition: an analytical model", J.Phys.:Condens. Matter 12:1285-1296.
- Naito, S., Yokoyama, I., Waseda, Y., (1990), "Thermal Pressure Coefficients of Liquid Alkali Metals: One-Component Plasma Model", Journal of Non-Crystalline Solids 117/118:579-582.
- Parrinello, M. ve Tosi, M.P., (1979), "Analytic Solution of the Mean Spherical Approximation for A Multi-Componenet Plasma", Chemical Physics Letters 64: 579-581.
- Sarita S., Srivastava, P.L. ve Singh, R.N., (1989), "Temperature-dependent structure and electrical transport in liquid metals", J.Phys.:Condens. Matter1:1695-1705.
- 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", Modern Physics Letters B12:639-648.
- Shimoji, M., (1977), Liquid Metals, Academic Press, New York.
- Singh, H.B. ve Holz, A., (1983), "Structure factor of liquid alkali metals", Physical Review A28:1108-1113.
- Waseda, Y., (1980), The Structure of Non-Crystalline Materials, McGraw-Hill, New York.

EKLER

Ek 1 (2.17) ve (2.18) denklemlerinin analitik çözümleri



EK 1

(2.17) ve (2.18) denklemlerinin analitik çözümleri için X ve Y dönüşümleri yapılarak $\ell = 0,1,2$ değerleri aşağıdaki formda yazılabilir.

$$X = \exp\left(\frac{-(K+K')^2}{4\alpha_l}\right) \quad Y = \exp\left(\frac{-(K-K')^2}{4\alpha_l}\right)$$

$\ell = 0$ için :

$$I_0(K, K') = \frac{1}{4KK'} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_l}} (Y - X)$$

$$J_0(K, K') = \frac{1}{16KK'} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_l^5}} \{ [2\alpha_l - (K - K')^2] Y - [2\alpha_l - (K + K')^2] X \}$$

$\ell = 1$ için :

$$I_1(K, K') = \frac{1}{4KK'} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_l}} (Y + X) - \frac{1}{2K^2 K'^2} \sqrt{\pi \alpha_l} (Y - X)$$

$$J_1(K, K') = \frac{1}{4K^2 K'^2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_l}} (Y - X) + \frac{1}{16KK'} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_l^5}} \{ [2\alpha_l - (K + K')^2] X + [2\alpha_l - (K - K')^2] Y \} \\ - \frac{1}{8KK'^2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_l^3}} [(K + K')X + (K' - K)Y] - \frac{1}{8K^2 K'} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_l^3}} [(K + K')X + (K - K')Y]$$

$\ell = 2$ için :

$$I_2(K, K') = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_l}} (Y - X) \left(\frac{1}{KK'} + \frac{12\alpha_l^2}{K^3 K'^3} \right) - \frac{3}{2K^2 K'^2} \sqrt{\pi \alpha_l} (Y + X)$$

$$J_2(K, K') = \frac{3}{4KK'} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_l}} (X - Y) \left(\frac{6\alpha_l}{K^2 K'^2} + \frac{1}{K^2} + \frac{1}{K'^2} \right) + \frac{9}{4K^2 K'^2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_l}} (Y + X) \\ + \frac{3}{8KK'^2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_l^3}} [(K + K')X - (K' - K)Y] + \frac{3}{8K^2 K'} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_l^3}} [(K + K')X + (K' - K)Y] \\ + \frac{1}{16KK'\alpha_l^2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_l}} \{ [2\alpha_l - (K - K')^2] Y - [2\alpha_l - (K + K')^2] X \}$$

ÖZGEÇMİŞ

Doğum tarihi	05.12.1975	
Doğum yeri	İstanbul	
Lise	1989-1992	Eyüp Otakçılar Lisesi
Lisans	1995-2001	İstanbul Üniversitesi Fen Fak. Fizik Bölümü
Yüksek Lisans	2002-2004	Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Yüksek Lisans Programı

