

Bloch-Gruneisen Fonksiyonu ile Bazı Katıların Elektriksel Özdirencinin Sıcaklığa Göre Değişiminin Analitik İncelenmesi

Mustafa Karakaya^{1,*}, İskender Askeroğlu²

¹ Süleyman Demirel Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, 32260, Çünür, Isparta

² Gaziosmanpaşa Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, 60150, Tokat

*Yazışılan yazar e-posta: mkarakayafizik@hotmail.com

Alınış: 5 Kasım 2012, Kabul: 19 Aralık 2012

Özet: Bu çalışmada, binomial açılım teoremi kullanılarak Bloch-Gruneisen fonksiyonunun analitik ifadeleri ile bazı katıların özdirencinin sıcaklığa bağlılığı incelendi. Bu yöntemde, metallerin elektriksel özdirencine elektron-fonon etkileşim katkısı dikkate alındı. Bu sebeple, özdirencin sıcaklığa göre değişmesinin Bloch-Gruneisen fonksiyonları ile analizine yer verildi. Genelleştirilmiş Bloch-Gruneisen fonksiyonu için elde edilen analitik bağıntılar doğrultusunda Mathematica programlama dilinde program oluşturuldu. Kalay metal ve Sn katkılı indiyum oksit bileşiği için farklı sıcaklıklarda özdirenç değerleri hesaplandı. Kullanılan metodun geçerliliği, bu katılara uygulamalarıyla birlikte test edildi.

Anahtar kelimeler: Bloch-Gruneisen teorisi, elektron-fonon etkileşmesi, elektriksel özdirenç.

The Analytical Investigation of Temperature Dependence of Electrical Resistivity Using Bloch-Gruneisen Function for Some Solids

Abstract: In this study, the temperature dependence of resistivity of some solids were investigated with the analytical expressions of Bloch-Gruneisen function using binomial expansion theorem. The contributions of electron-phonon interaction to the electrical resistivity of metals have taken into account in this method. Therefore, the analysis of change in resistivity with temperature was performed with the Bloch-Gruneisen functions. Programs in the system Mathematica were constructed in accordance with the analytical equations obtained for the generalized Bloch-Gruneisen function. Resistivity values at the different temperatures were calculated for tin metal and Sn-doped indium oxide compound. Reliability of the using method is tested by applications to these solids.

Key words: Bloch-Gruneisen theory, electron-phonon interaction, electrical resistivity.

1. Giriş

Elektron-fonon etkileşiminin katkısı dikkate alınarak birçok metalin elektriksel özdirencinin analitik hesaplanması Bloch-Gruneisen (BG) teorisiyle verilmiştir [1]. Genelleştirilmiş BG fonksiyonlarının çözümü için çeşitli araştırmacılar tarafından kullanılan yöntemler, m 'nin tamsayı değerlerinde metallerin özdirencinin sıcaklığa bağlılığını belirlemeye imkân vermiştir [2–6]. Genelleştirilmiş BG fonksiyonunun hesaplanması için önemli yöntemlerden biri $m = 5$ değerinde seri açılımı kullanılarak verilmiştir [7]. Son yıllarda yapılan çalışmalarda, tam sayı ve kesirli sayı derecelerinde Bloch-Gruneisen fonksiyonu için bir takım seriler türetilmiştir [8]. Kamalak ve Raychaudhuri (2012), metal nano yapıların sıcaklığa bağlı (3–300 K) elektriksel özdirenci üzerine yaptığı deneysel çalışmada, özdirenç örgü katkısı için BG fonksiyonu ile verileri analiz etmiştir [9]. Çalışmamızda, özdirencin sıcaklığa bağlılığını veren genel ifadesi BG fonksiyonu ile ifade edilmiştir. Genelleştirilmiş BG

fonksiyonlarının hesaplanmasında, tamamlanmamış gamma fonksiyonunun uygun formülleri seçilmiştir. Çalışmada, m 'nin kesirli ve tamsayı değerleri için genelleştirilmiş BG fonksiyonundan elde edilmiş analitik bağıntının [10] kalay metali ve Sn-katkılı indiyum oksit bileşiği için uygulamaları yapılmıştır.

2. Materyal ve Metot

Bu çalışmada, genelleştirilmiş BG fonksiyonu için elde edilen analitik bağıntılar doğrultusunda Mathematica programlama dilinde program oluşturulmuştur. Özdirencin BG fonksiyonu ile ifadesi aşağıdaki gibi verilmiştir [1];

$$\rho(T) = \left(\frac{c}{\theta_D}\right) \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^m J_m\left(\frac{T}{\theta_D}\right) \quad (1)$$

Burada $J_m\left(\frac{T}{\theta_D}\right)$ BG fonksiyonu olup aşağıdaki gibi tanımlanır;

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

Eşitlik (1)'de c bir sabit, θ_D metalin Debye sıcaklığı, T mutlak sıcaklıktır ve m ise tam ve kesirli değerler alır.

$$\left[(e^x - 1)(1 - e^{-x})\right]^{-1} = e^{-x} [1 - e^{-x}]^{-2} \quad (3)$$

bağıntısını kullanarak, Eşitlik (2) aşağıdaki şekilde tekrar yazılabilir;

$$J_m\left(\frac{T}{\theta_D}\right) = \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^m e^{-x}}{(1 - e^{-x})^2} dx \quad (4)$$

BG fonksiyonunun analitik ifadesini elde etmek amacıyla kompleks ve reel bir n için binomial açılım teoremi kullanılmıştır [11]. ($|x| > |y|$)

$$(x \pm y)^n = \sum_{m=0}^{\infty} (\pm 1)^m F_m(n) x^{n-m} y^m \quad (5)$$

Burada $F_0(n) = 1$ ve

$$F_m(n) = \begin{cases} n!/[m!(n-m)!], & n \text{ tamsayı ise} \\ \frac{(-1)^m \Gamma(m-n)}{m! \Gamma(-n)}, & n \text{ kesirli ise} \end{cases} \quad (6)$$

$m < 0$ için $F_m(n)$ binomial katsayısı sıfırdır. (6) eşitliğinde $\Gamma(\sigma)$ gamma fonksiyonlarıdır [12]:

$$\Gamma(\sigma) = \int_0^{\infty} t^{\sigma-1} e^{-t} dt \quad (7)$$

Çalışma [10]'da (5) eşitliği (4)'de yerine yazılarak genelleştirilmiş BG fonksiyonları için aşağıdaki gibi basit yapıda formül elde edilmiştir;

$$J_m\left(\frac{T}{\theta_D}\right) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^N (-1)^i F_i(-2) \frac{\gamma(m+1, (i+1)\theta_D/T)}{(i+1)^{m+1}} \quad (8)$$

Burada N , toplamın üst limitidir. $\gamma(\alpha, x)$, Tamamlanmamış Gamma Fonksiyonlarıdır;

$$\gamma(\alpha, x) = \int_0^x t^{\alpha-1} e^{-t} dt \quad (9)$$

Literatürde genelleştirilmiş BG fonksiyonun hesaplaması için etkili metotlardan biri $m=5$ için Deutsch (1987) tarafından verilmiştir [7];

$$J_5\left(\frac{T}{\theta_D}\right) = 120\zeta(5) - \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^N \exp(-ky) \left[y^5 + 5y^4/k + 20y^3/k^2 + 60y^2/k^3 + 120y/k^4 + 120/k^5 \right] \quad (10)$$

Burada $y = \frac{\theta_D}{T}$ ve $\zeta(x)$ ise aşağıdaki gibi tanımlanan Riemann zeta fonksiyonudur [7];

$$\zeta(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^N k^{-x} \quad (11)$$

Sonuçta öz direnç için genel ifadesini aşağıdaki gibi yazabiliriz;

$$\rho(T) = \rho_0 + (m-1)\rho'\theta_D \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^m J_m\left(\frac{T}{\theta_D}\right) \quad (12)$$

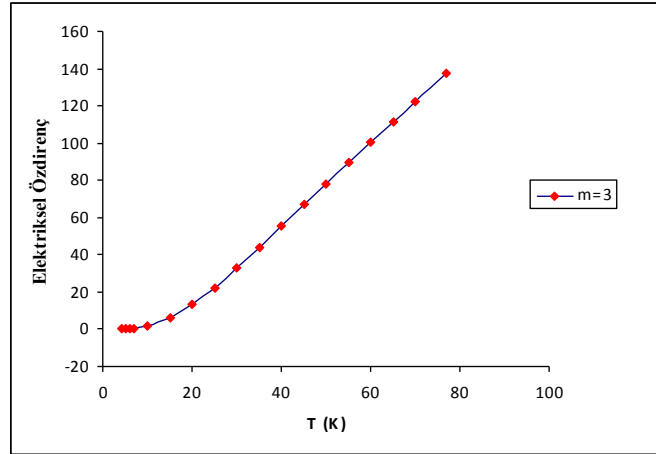
Burada ρ_0 artık direnç, ρ' ise öz direncin sıcaklık katsayısıdır [10].

3. Bulgular

Çalışmamızda Eşitlik (12) kullanılarak, kalayın elektriksel öz dirençlerinin sıcaklıkla değişim grafiği, $\theta_D=125K$, $\rho' = 1,99 \mu\Omega cm K^{-1}$, $\rho_0 = 11,18 \times 10^{-4} \mu\Omega cm$ değerlerinde [13] hesaplanmıştır. $m=3$ alınarak kalayın sıcaklığa bağlı elektriksel öz direnç ($\rho(T)$) değerleri Tablo 1' de verilmiştir. Ayrıca kalay için sıcaklığa bağlı olarak elektriksel öz direnç değişmesi Şekil 1'de görülmektedir.

Tablo 1. Kalay için BG formülüne göre $\rho(T)$ hesaplama sonuçları

Sıcaklık (K)	m=3 için $\rho(T)$ ($\mu\Omega cm$)
4,2	0,1372269
5	0,2307587
6	0,3979360
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	89,4063556
60	100,5722094
65	111,6308981
70	122,5883233
77	137,7748998



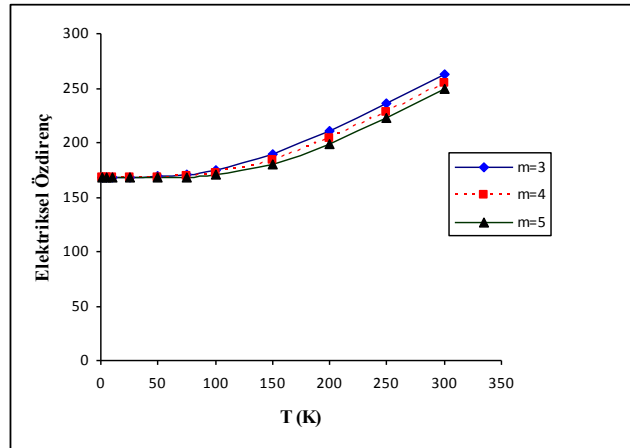
Şekil 1. Kalayın elektriksel öz direnç (ρ ($\mu\Omega cm$)) değerlerinin sıcaklıkla değişimi

Yine Sn-katkılı saydam indiyum oksit tabakalarının elektriksel öz dirençlerinin sıcaklığa göre değişim grafiği, parametrelerin $\theta_D=984 K$, $\rho' = 0,4669 \mu\Omega cm K^{-1}$, $\rho_0 = 168$

$\mu\Omega cm$ değerlerinde [14], eşitlik (12) kullanılarak çizilmiştir. Tablo 2’de ise $m = 3, 4, 5$ tamsayı değerleri için $\rho(T)$ öz direncinin hesaplanma sonuçları verilmiştir.

Tablo 2. Sn-katkılı indiyum oksit için Eşitlik (12)’nin kullanımı ile $\rho(T)$ 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



Şekil 2. Sn-katkılı indiyum oksit için sıcaklıkla değişen elektriksel öz direnç ($\rho (\mu\Omega cm)$)

4. Tartışma ve Sonuç

Çalışmamızda, binomial açılım teoremini kullanarak genelleştirilmiş Bloch-Gruneisen fonksiyonu için çalışma [10]’da verilen analitik formüller kullanılarak kalay ve Sn-katkılı indiyum oksit tabakasının öz direncinin sıcaklığa göre değişimi incelenmiştir. Mathematica programlama dilinde program oluşturulmuş ve kalay, indiyum oksit kristallerinin öz dirençlerinin farklı sıcaklıklar için hesaplama sonuçları Tablo 1 ve 2’de verilmiştir. $m= 3,4,5$ tamsayı değerlerinde Tablo 2’ de Sn-katkılı indiyum oksit için, 300 K derecesine kadar, Tablo 1’de ise kalay için (12) formülünün hesaplama sonuçlarına yer verilmiştir. Şekil 1 ve 2’ de $\rho(T)$ öz direncinin sıcaklığa göre değişimi, uygulanan yöntemin doğruluğunu göstermektedir. Karamargin ve ark. (1972) tarafından yapılan çalışmada, saf kalay numuneleri için 10 K’nin üstündeki her derecede elektriksel

özdirenç değeri baskın kalmaktadır [13]. Tablo 1 ve Şekil 1’de görüldüğü gibi kalay için BG formülüne göre $\rho(T)$ hesaplamalarımızda da benzer yorum yapılabilir. Sonuç olarak m ’nin tamsayı değerleri ile katıların özdirencinin hesaplanması için bu çalışmada uygulanan algoritmanın yararlı bir yöntem olabileceği görülmüştür.

Kaynaklar

- [1] Gruneisen E., 1933. The Temperature Dependence of the Electrical Resistance of Pure Metals, *Annalen der Physik (Leipzig)*, 16: 530.
- [2] Pinski F.J., Allen P.B., Butler W.H., 1981. Calculated electrical and thermal resistivities of Nb and Pd, *Physical Review*, B23(10): 5080-5096.
- [3] Igasaki Y., Mitsunashi H., 1980. The effects of substrate bias on the structural and electrical properties of TiN films prepared by reactive r.f. sputtering, *Thin Solid Films*, 70(1): 17-25.
- [4] Igasaki Y., Mitsunashi H., 1983. Origin of negative temperature coefficient of resistivity in polycrystalline Ti□N films, *Journal of Applied Physics*, 54(2): 836-840.
- [5] Igasaki Y., Mitsunashi H., 1987. Polynomial expression of the bloch-grüneisen integral - application to an analysis of the resistivity-temperature variation of metals, *Physica Status Solidi A*, 99(2): K111-K115.
- [6] White G.K., Woods S.B., 1959. Electrical and Thermal Resistivity of the Transition Elements at Low Temperatures, *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 251(995): 273-302.
- [7] Deutsch M., 1987. An accurate analytic representation for the Bloch-Gruneisen integral, *Journal of Physics A*, 20(13): L811.
- [8] Cvijovic D., 2011. The Bloch–Gruneisen Function of arbitrary order and its series representations, *Theoretical and Mathematical Physics*, 166(1): 37–42.
- [9] Kamalakar M.V, Raychaudhuri A.K, 2012. Modification in electrical transport with a change in geometry from a nanowire to a nanotube of copper: effect of the extra surface, *New Journal of Physics*, 14(2012), 043032: 13pp.
- [10] Mamedov B.A., Askerov I.M., 2007. A new algorithm for accurate evaluation of the generalized Bloch–Gruneisen function and its applications to MgB2 superconductor, *Physics Letters A*, 362: 324-326.
- [11] Guseinov I.I., Mamedov B.A., 2002. Evaluation of overlap integrals with integer and noninteger n Slater-type orbitals using auxiliary functions, *Journal of Molecular Modeling*, 8: 272-276.
- [12] Gradshteyn I.S., Ryzhik I.M., 2007. Tables of Integrals, Series and Products, *Academic Press*, New York, p. 1171.
- [13] Karamargin M.C., Reynolds C.A., Lipschultz F.P., Klemens P.G., 1972. Thermal and Electrical Conductivity of Pure Tin from 4.5 to 77 °K, *Physical Review B*, 5(8): 2856-2863.
- [14] Li Z.Q., Lin J.J., 2004. Electrical resistivities and thermopowers of transparent Sn-doped indium oxide films, *Journal of Applied Physics*, 96(10): 5918-5920.

İskender Askeroğlu e-posta: iskender.askeroglu@gop.edu.tr