

Gaz transportunda kuantum ölçek etkileri

Zehir Fatih ÖZTÜRK*, Altuğ ŞİŞMAN

İTÜ Enerji Enstitüsü, Enerji Bilim ve Teknoloji Programı, 34469, Ayazağa, İstanbul

Özet

Yarıiletken teknolojilerinde kullanılan mikro fabrikasyon tekniklerinin gelişimi, yeni fiziksel etkilerin gözlemlendiği sensörler, tıbbi cihazlar, güç üreten mikro makineler, ısı değiştiricileri, pompalar, valfler, mikro-nano pipetler ve mikro iticilerin üretilmesini de günümüzde mümkün kılmıştır. Nano sistemlerde termodinamik denge durumunda dahi yoğunluk dağılımı homojen olmamakta ve sınırlarda yoğunluğun azalarak sıfır değerine ulaştığı bir sınır tabaka oluşmaktadır. Sınır tabaka kalınlığı Planck sabiti ile orantılı olduğundan kuantum sınır tabakası olarak adlandırılır. Kuantum sınır tabakası nedeniyle gaz parçacıkları geometrik hacimden daha küçük olan etkin bir hacmi doldururlar. Kuantum sınır tabakasının kalınlığı ısı de Broglie dalga boyu mertebesinde ve sınırlar ile parçacıklar arasındaki uzaktan etkileşme sebebiyle parçacıklar sınırları ısı de Broglie dalga boyu mesafesinde hissediler. Bundan dolayı, parçacıkların dalga karakterleri nedeniyle etkilendikleri potansiyel, tanecik karakterine sahip parçacıkların etkilendiği klasik potansiyelden farklıdır. Bu nedenle potansiyel, klasik potansiyele etkin kuantum potansiyel olarak adlandırılan bir başka potansiyelin eklenmesiyle temsil edilir. Bu çalışmada; dikdörtgen geometriler için relaksasyon zamanı yaklaşımı altında Maxwellian gazların transport katsayıları kuantum ölçek etkisi altında incelenmiştir. Parçacık-parçacık ve parçacık-duvar çarpışmaları sonucu meydana gelen transport süreçler ayrı ayrı incelenerek iletim, difüzyon ve termal iletkenlik katsayıları 3 boyutlu dikdörtgen geometriler için çıkarılmıştır. Transport katsayıların, kuantum ölçek etkileri nedeniyle, transport ortamının ölçek ve geometrisine bağlı olduğu görülmüştür. Ayrıca, evrensel bir yasa olan Wiedemann-Franz yasasının nano ölçekte kuantum ölçek etkileri nedeniyle evrenselliğini kaybettiği bulunmuştur.

Anahtar Kelimeler: Kuantum ölçek etkisi, nano gaz transportu, kuantum potansiyel.

*Yazışmaların yapılacağı yazar: Zehir Fatih ÖZTÜRK. ozturkzeh@itu.edu.tr; Tel: (212) 285 38 98.

Bu makale, birinci yazar tarafından İTÜ Enerji Enstitüsü, Enerji Bilim ve Teknoloji Programı'nda tamamlanmış olan "Nano gaz transportunda kuantum ölçek etkileri" adlı doktora tezinden hazırlanmıştır. Makale metni 14.12.2007 tarihinde dergiye ulaşmış, 25.02.2008 tarihinde basım kararı alınmıştır. Makale ile ilgili tartışmalar 31.01.2010 tarihine kadar dergiye gönderilmelidir.

Quantum size effects on gas transport

Extended abstract

Fabrication of micro and nano electromechanical systems have led to the possibility of small scale devices such as, sensors, actuators, biomedical devices, pumps, propulsion system and micro engines for power generation based on new physical effects. Therefore, it is important to understand the influence of new effects on transport properties of gases confined in small scale structures. In nano scale, quantum mechanical effects become important and the transport models based on the concepts of the classical mechanics must be modified by considering the quantum mechanical concepts.

In nano-scale, even at thermodynamic equilibrium, density distribution is not uniform and there is a boundary layer near to the boundaries where the density goes to zero. This layer is called quantum boundary layer since the thickness of the layer is proportional to the Planck's constant. Due to quantum boundary layer, gas particles fill an effective volume which is less than the geometric one. Due to wave characteristics of particles, there is a non-local repulsive interaction between boundaries and particles. Therefore particles tend to accumulate in the inner part of the domain and it causes a higher local density than the classical one for the interior regions. Thickness of this boundary layer is in the order of thermal de Broglie wavelength of the particles and it defines a characteristic length scale. Therefore, quantum size effects appear when the size of the domain becomes comparable with the thickness of the boundary layer. Due to non-local interaction between boundaries and particles, particles feel the boundaries when the distance is in the order of thermal de Broglie wave length. Thus, the potential acting on the wave-like particles is different than the potential acting on the particle-like ones. The true potential can be represented by adding an effective quantum potential to the classical one. In an effective potential approach, one replaces the quantum distribution function by a classical distribution function with a modified potential. Thus, all the quantum effects on local density are modeled through the effective quantum potential.

Transport behavior of gases confined in nano scale is considerably different than that in macro scale, due to different kinds of size effects. Classic scaling approaches generally assumes that physical con-

stants and material properties remain independent of the scale. However, this assumption breaks down when the wave character of gas particles is considered or the length scale of the system approaches to the characteristic length scale of the mechanism that controls the property of interest. When the dimension of the system becomes very small in one direction, then the component of the wave vector of the particle in this direction becomes strongly quantized.

Consequently, in nano scale, it is important to examine the quantum size effects on transport coefficients

In this study, conductivity, diffusion and thermal conductivity coefficients of a Maxwellian gas are derived by considering the quantum size effects and the Boltzmann transport equation under the relaxation time approximation for 3D rectangular geometry. The particle-particle and particle-boundary collisions based transport processes are examined individually. In the case of particle-boundary collisions dominated transport regime, it is shown that quantum size effects are stronger in comparison with those in particle-particle collisions dominated one.

It is seen that quantum potential gradient can be a driving force for the transport processes. In a domain filled by a Maxwellian gas under a temperature gradient, the temperature dependence of quantum potential causes quantum potential gradient as a secondary driving force and these driving forces may cause a new type of convection which can be called quantum convection.

Consequently, it is shown that conductivity; diffusion and thermal conductivity coefficients depend on size and geometry of the transport domain due to quantum size effects. Therefore, shape and size of the domain become additional control parameters on the transport processes. Because of these control parameters, new transport processes can be defined and new micro and nano engines can be designed by using the quantum size effects. Furthermore, it is shown that the universal Wiedemann-Franz law, which is the ratio of the thermal conductivity to the electrical conductivity, loses its universality in nano scale due to quantum size effects.

Keywords: *Quantum size effects, nano gas transport, quantum potential.*

Giriş

Feynman (1992)'ın mikro ve nano boyutlarda yapılabilecek cihazların önemini vurguladığı 1959 yılındaki konuşmasıyla başlayan süreç, mikroelektronik teknolojisinin gelişimi ile 1980'lerde elektronik ve kontrol mühendisliğinin birçok dalına yayılmıştır. Yarıiletken teknolojilerinde kullanılan mikro fabrikasyon tekniklerinin gelişimi, güç üreten mikro makineler, ısı değiştiricileri, pompalar, valfler, mikro-nano pipetler ve mikro iticiler gibi küçük boyutlu sistemlerin üretimini mümkün kılmıştır (Gravesen vd., 1993; Mehra vd., 2000; Ho ve Tai, 1998).

Mikro ve nano ölçekte; küçülen sistem boyutlarıyla birlikte, başta yüzey etkilerinin rolünün artması olmak üzere birçok değişimin sonucu makro ölçekteki davranışlardan oldukça farklı davranışlar ortaya çıkar (Chen, 2005; Tien vd., 1998). Bu yeni davranışların ortaya çıkmasına neden olan etkiler genelde ölçek etkileri olarak adlandırılır. Ölçek etkileri, klasik ve kuantum ölçek etkileri olmak üzere iki grupta ele alınabilir. Sistemin boyutları, parçacıkların kendi aralarındaki çarpışmalarına ilişkin ortalama serbest yol ile karşılaştırılabilir olduğunda klasik ölçek etkileri transport sürecinde değişime yol açar. Diğer yandan, sistemin boyutları parçacıkların ortalama de Broglie dalga boyu ile karşılaştırılabilir olduğunda ise kuantum ölçek etkileri transport üzerinde belirgin bir değişim yaratır. Özellikle yarıiletken ve metallerde elektron transportu üzerine ölçek etkileri yoğun olarak incelenmiş ve incelenmeye de devam etmektedir (Jalochowski ve Bauer, 1988; Trivedi ve Ashcroft, 1988; Tesanovic vd., 1986; Tsuchia ve Ravaioli, 2001). Öte yandan mikro ve nano gaz transportu üzerinde ölçek etkileri deneysel zorluklar nedeniyle genellikle hesaplamalı olarak çalışılmaktadır.

Sonuç olarak, transport ortamının boyutları küçüldükçe ölçek etkilerinin sonucu olarak transport süreci makro ölçeğe göre önemli derecede farklılaşmaktadır.

Kuantum sınır tabakası ve etkin kuantum potansiyel

Termodinamik denge halindeki bir sistemde herhangi bir dış potansiyel yoksa, gazların yoğun-

luk dağılımı homojen olarak ele alınır. Öte yandan nano ölçekli bir sistemde, termodinamik denge durumunda dahi yerel yoğunluğun sınırlara yaklaştıkça azalarak sifira gittiği bir sınır tabakanın olduğu ortaya konulmuş ve bu tabaka kuantum sınır tabakası olarak adlandırılmıştır. Bu tabaka nedeniyle parçacıklar, sistemin geometrik hacminden daha küçük olan etkin bir hacmi doldurmaktadır. Bunun sonucu olarak da yoğunluk, geometrik hacmi esas alan klasik yoğunluktan daha büyük olmakta ve etkin (efektif) yoğunluk olarak tanımlanmaktadır (Sisman vd., 2007). Sistemin yoğunluğunda meydana gelen değişimin sistemin transport özelliklerini de değiştirmesi kaçınılmaz bir sonuçtur.

Kuantum sınır tabakasının varlığı, sınırların kuantum potansiyel şeklinde temsil edilmesine rağmen parçacıkların bu potansiyeli, dalga karakterleri nedeniyle tanecik karakterine sahip klasik parçacıklardan farklı olarak sınıra temas ettiklerinde değil, ısıl de Broglie dalga boyu mesafesinden itibaren görmeye başladıklarını göstermektedir. Böylece parçacıkların dalga karakterleri nedeniyle gördükleri potansiyel, klasik potansiyelden farklı olmaktadır. Bu nedenle potansiyel, klasik potansiyelle bir kuantum potansiyel terimi eklenerek temsil edilebilmektedir. Diğer bir deyişle kuantum potansiyel, parçacıkların dalga karakteri nedeniyle yerel yoğunluk üzerinde oluşan farklılıkları bir potansiyel düzeltmeyle temsil etmektedir. Daha önemlisi bu potansiyel düzeltmeyi göz önüne almak koşuluyla parçacıkları tanecik karakterine sahip klasik parçacıklar olarak ele almak mümkün olabilmektedir. Ayrıca yerel yoğunluk üzerinde kuantum ölçek etkilerinin sonuçları, parçacıklarla sınırlar arasında itici etkin bir kuantum potansiyelin tanımlanması ile daha kolay açıklanabilmektedir.

Kuantum sınır tabakası ısıl de Broglie dalga boyu mertebesinde olup karakteristik bir uzunluk tanımlanmaktadır. Bu nedenle sistem boyutları kuantum sınır tabakası ile karşılaştırılabilir olduğunda kuantum ölçek etkileri belirgin hale gelir.

Asal gazlar için yüksek sıcaklık veya düşük yoğunluk koşullarında ideal ve Maxwellian gaz

yaklaşımı kullanılabilir. Kuantum olasılık yoğunluğunu göz önüne alarak Maxwellian gaz için denge dağılım fonksiyonu,

$$f_0 = \exp(\mu_0/k_b T) \exp(-\varepsilon_w/k_b T) |\psi_w(\mathbf{x})|^2 \quad (1)$$

şeklinde yazılabilir. Burada; ε_w ve ψ_w terimleri sırasıyla w kuantum durumundaki parçacığın enerjisi ve özfonksiyonunu temsil etmekte olup μ_0 global kimyasal potansiyel, k_b Boltzmann sabiti ve T ise sıcaklıktır. (1) denklemi kullanılarak yerel parçacık yoğunluğu,

$$n(\mathbf{x}) = \exp(\mu_0/k_b T) \sum_w \exp(-\varepsilon_w/k_b T) |\psi_w(\mathbf{x})|^2 \quad (2)$$

olarak hesaplanabilir. Etkin kuantum potansiyel, φ_q , yardımıyla (2) denklemi özdeş biçimde ve klasik olasılık yoğunluğu kullanılarak,

$$n(\mathbf{x}) = \exp(\mu_0/k_b T) \frac{\exp(-\varphi_q/k_b T)}{V} \sum_w \exp(-\varepsilon_w/k_b T) \quad (3)$$

şeklinde klasik bir formda gösterilebilir. Burada, V parçacıkların tutuklandığı ortamın toplam hacmini göstermektedir. (2) ve (3) denklemleri kullanılarak $\exp(-\varphi_q/k_b T)$ terimi,

$$\exp[-\varphi_q(\mathbf{x})/k_b T] = \frac{\sum_w \exp(-\varepsilon_w/k_b T) |\psi_w(\mathbf{x})|^2}{\frac{1}{V} \sum_w \exp(-\varepsilon_w/k_b T)} \quad (4)$$

olarak ifade edilebilir. Bu ifade, kuantum olasılık yoğunluğunun ortalama değerinin klasik olasılık yoğunluğuna göre normalize edilmiş değerini vermektedir. (2) denkleminin hacim integrali,

$$N = \exp(\mu_0/k_b T) \sum_w \exp(-\varepsilon_w/k_b T) = \exp(\mu_0/k_b T) \zeta \quad (5)$$

eşitliğini verir. Burada; N toplam parçacık sayısı, ζ tek parçacık bölüşüm fonksiyonudur. (3) ve (5) denklemleri kullanılarak yoğunluk dağılımı,

$$n(\mathbf{x}) = n_{cl} \exp(-\varphi_q/k_b T) \quad (6)$$

şeklinde elde edilir. Burada, n_{cl} klasik yoğunluk olup $n_{cl} = N/V$ şeklindedir. (6) denkleminde de görüldüğü gibi, yerel yoğunluk bilindiğinde etkin kuantum potansiyel kolayca bulunabilir.

Verilen bir \mathbf{x} konumundaki tüm parçacıklara aynı kuantum potansiyelin etkidiği varsayılarak denge dağılım fonksiyonu,

$$f_0 = \exp(\mu_0/k_b T) \frac{\exp[-\varphi_q(\mathbf{x})/k_b T]}{V} \exp(-\varepsilon_w/k_b T) \quad (7)$$

olarak yazılabilir. Yerel kimyasal potansiyel $\mu(\mathbf{x})$; global kimyasal potansiyel μ , ve kuantum potansiyel cinsinden,

$$\mu(\mathbf{x}) = \mu_0 - \varphi_q(\mathbf{x}) \quad (8)$$

eşitliği ile tanımlanarak (7) denklemi,

$$f_0 = \frac{\exp[\mu(\mathbf{x})/k_b T]}{V} \exp(-\varepsilon_w/k_b T) \quad (9)$$

şeklinde yeniden yazılabilir. Kuantum potansiyel kavramı termodinamik denge durumunda oluşan homojen olmayan yoğunluk dağılımına da bir açıklama getirmeyi kolaylaştırmaktadır. Buna göre yoğunluk dağılımında sistem sınırlarına yaklaştıkça artan düşüş kuantum potansiyel gradyanından kaynaklanmakta ve termodinamik denge durumunda kuantum potansiyel gradyanı kimyasal potansiyel gradyanı ile dengelenmektedir. Bunun sonucu olarak denge durumunda homojen olmayan bir yoğunluk dağılımı oluşmaktadır.

Ölçek etkilerinin bir diğer kökeni Heisenberg belirsizlik ilkesi nedeniyle sonlu bir ortamda tutuklanan parçacığın hız bileşenlerinden herhangi birinin sıfır değerini alamamasıdır. Bu çerçevede, parçacığın hız bileşenlerinin en küçük değerinin ortamın boyutuyla ters orantılı olması da kuantum ölçek etkisine sebep olmaktadır. Bu nedenle, kuantum durumları veya hızlar üzerinden yapılan toplamlarda sıfır değeri dışarılanır. Topamlarda sıfır değerinin dışarılanması nedeniyle süreklilik yaklaşımında yapıldığı gibi toplamlar sadece integraller ile yer

değiştirilemez ancak Poisson toplam formülü gibi bağıntılardan yararlanarak hesaplanırlar. $g(i) = g(-i)$ simetrik fonksiyonu için Poisson toplam formülü,

$$\sum_{i=-\infty}^{\infty} g(i) = \int_{-\infty}^{\infty} g(i) di - g(0) + 2 \sum_{s=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cos(2\pi si) g(i) di \quad (10)$$

şeklinde verilir. Toplam üzerindeki üs işareti toplam işleminde sıfır değerinin dışarılandığını ($i \neq 0$) göstermektedir.

Sonuç olarak; transport katsayıları üzerinde kuantum ölçek etkileri etkin potansiyel ve Poisson toplam formülü kullanılarak hesaplanabilir.

Relaksasyon zamanı yaklaşımı altında denge dışı dağılım fonksiyonu

Dağılım fonksiyonu Boltzmann transport denkleminin çözümlerinden elde edilir. Ancak Boltzmann transport denklemi genellikle lineer olmadığından çözümü güçtür. Öte yandan gaz yoğunluğunun çok yüksek olmadığı durumlarda relaksasyon zamanı yaklaşımı kullanılarak denge dışı dağılım fonksiyonu,

$$f = f_0 - \tau(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \frac{df_0}{dt} \quad (11)$$

şeklinde verilir. Burada; $\tau(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ konuma ve momentuma bağlı relaksasyon zamanıdır. (9) denklemi (11) denkleminde yerleştirilerek denge dışı dağılım fonksiyonu,

$$f = f_0 + \tau \frac{v_{w,r}}{k_b T} \frac{\exp(\mu/k_b T)}{V} \exp(-\varepsilon_w/k_b T) (F_r^\mu + F_r^\varphi + w F_r^T) \quad (12)$$

olarak elde edilir. Burada; $v_{w,r}$ w kuantum durumundaki parçacığın r transport yönündeki hız bileşeni, F_r^μ , F_r^φ ve F_r^T sırasıyla kimyasal potansiyel, dış potansiyel ve sıcaklık gradyanları nedeniyle oluşan sürücü kuvvetleri göstermektedir.

Relaksasyon zamanını ortalama serbest zamana eşit kabul ederek; ortalama serbest yol ve hız

cinsinden, $\tau = l/|\mathbf{v}|$ şeklinde ifade edilir. Ortalama serbest zaman parçacık-parçacık çarpışmalarına ait ortalama serbest yol (l_0) ve geometrik ortalama serbest yol (L_g) cinsinden Mathiessen kuralı kullanılarak,

$$\frac{1}{l} = \frac{1}{l_0} + \frac{1}{L_g} \quad (13)$$

şeklinde tanımlanabilir. Parçacık-parçacık çarpışmalarına ait ortalama serbest yol; n yoğunluk, \mathbf{v} parçacık hızı, σ parçacıkların mikroskopik tesir kesiti olmak üzere

$$l_0 = \frac{1}{n\sigma} = \frac{1}{n\sigma_0|\mathbf{v}|^s} \quad (14)$$

eşitliğiyle tanımlanır. Burada $\sigma = \sigma_0|\mathbf{v}|^s$ olup σ_0 birimi s 'e göre değişen tesir kesiti sabitidir. Boyutları L_1, L_2 ve L_3 olan dikdörtgen geometri için geometrik ortalama serbest yol ise,

$$\frac{1}{L_g} = \frac{1}{L_1} + \frac{1}{L_2} + \frac{1}{L_3} \quad (15)$$

olarak verilir. Bu çalışmada düşük Knudsen sayısına sahip transport koşulları incelenmektedir. Bu koşullarda, parçacık-parçacık çarpışmalarının ($l_0 \ll L_g$) ve parçacık-duvar çarpışmalarının ($l_0 \gg L_g$) baskın olduğu iki asimptotik durum incelenebilir. Parçacık-parçacık çarpışmalarının baskın olduğu transport rejimi için elde edilen ifadelerden parçacık-duvar çarpışmalarının baskın olduğu transport rejimine ait ifadelere, katı küre (hard sphere) modeline karşılık gelen $s=0$ durumu için $\sigma_0=1/nL_g$ dönüşümü yapılarak geçilebilir.

(3) ve (8) eşitlikleri yardımıyla $\exp(\mu/k_b T)/V = n/\zeta$ ifadesi elde edilir ve bu ifade (12) eşitliğinde kullanılırsa, $s=0$ için denge dışı dağılım fonksiyonu,

$$f = f_0 + \frac{1}{k_b T \sigma_0 |\mathbf{v}_w|} \frac{\exp(-\varepsilon_w/k_b T)}{\zeta} \left(F_r^{\varphi T} + \frac{\varepsilon_w}{k_b T} F_r^T \right) \quad (16)$$

olarak elde edilir. Burada; $F_r^{\Phi T} = F_r^\mu + F_r^\nu - \frac{\mu}{k_b T} F_r^T$ şeklinde tanımlanır.

Akılar ve transport katsayıları

A özelliğine ait r yönündeki akı ifadesi,

$$J_r^A = \sum_v \Pi_A v_r f \quad (17)$$

şeklinde verilir. Burada; f denge dışı dağılım fonksiyonu olup toplamlar parçacığın bağımsız tüm olası hız bileşenleri üzerinden yapılır. Π_A parçacık başına transport edilen büyüklük olup,

$$\Pi_A = C_A (v_r)^a |v|^b \quad a, b = 0, 1, 2, \dots \quad (18)$$

olarak tanımlanır. Burada; (C_A, a, b) üçlüsü parçacık, momentum ve enerji akısı için sırasıyla $(1, 0, 0)$, $(m, 1, 0)$, $(m/2, 0, 2)$ değerlerini alır.

Çalışmada parçacık, enerji ve ısı akıları ve bu akılara ait transport katsayıları türetilmiştir. Herbir akı, denge ve denge dışı akıların toplamı olarak yazılabilir. Parçacık, enerji ve ısı akılarının denge akılarının içeren kısımlarının transporta katkısı sıfırdır. Bu yüzden, (16) ve (18) denklemi (17) denkleminde kullanılarak, A özelliğine ait r yönündeki akı,

$$J_r^A = \frac{C_A}{k_b T \sigma_0} \left(\frac{2k_b T}{m} \right)^{\frac{b+1}{2}} \frac{1}{\zeta} (g_{0,b} F_r^{\Phi T} + g_{0,b+2} F_r^T) \quad (19)$$

olarak ifade edilir. Burada; $g_{0,b}$ terimi boyutsuz olarak,

$$g_{0,b} = \frac{m}{2k_b T} \sum_w \frac{v_{w,r}^2}{(\varepsilon_w/k_b T)^{\frac{1-b}{2}}} \exp(-\varepsilon_w/k_b T) \quad (20)$$

şeklinde tanımlanır. $\Pi_A = 1$ alınarak $(C_A = 1, a = 0, b = 0)$ parçacık akısı,

$$J_r^N = \frac{2}{\sigma_0} \frac{1}{\sqrt{2mk_b T}} \frac{1}{\zeta} \left[g_{0,0} F_r^\Phi + \left(g_{0,2} - \frac{\mu}{k_b T} g_{0,0} \right) F_r^T \right] \quad (21)$$

eşitliğiyle elde edilir. $\Pi_A = mv^2/2$ alınarak $(C_A = m/2, a = 0, b = 2)$ ise enerji akısı,

$$J_r^U = k_b T \frac{g_{0,2}}{g_{0,0}} J_r^N + \frac{1}{\sigma_0} \sqrt{\frac{2k_b T}{m}} \frac{1}{\zeta} \left(g_{0,4} - \frac{(g_{0,2})^2}{g_{0,0}} \right) F_r^T \quad (22)$$

olarak bulunur. Akış hızının ses hızından düşük olduğu durumlarda ısı akısı ifadesi enerji ve parçacık akıları cinsinden,

$$J_r^Q \cong J_r^U - h_{rr} J_r^N \quad (23)$$

eşitliğiyle verilebilir. Burada; h_{rr} parçacık başına entalpi değerini göstermekte olup stres tensörünün rr bileşenini içermektedir. Kuantum ölçek etkileri nedeniyle basınç izotropik olmadığından entalpi tensörel bir büyüklük olmaktadır (Sisman ve Müller, 2004).

Akı ifadeleri kullanılarak iletkenlik, difüzyon ve ısı iletim katsayıları; $g_{0,b}$ ve ζ fonksiyonlarına bağlı olarak sırasıyla,

$$D^\varphi = D^\mu = \frac{J_r^N}{F_r^\varphi} = \frac{J_r^N}{F_r^\mu} = \frac{2}{\sigma_0} \frac{1}{\sqrt{2mk_b T}} \frac{g_{0,0}}{\zeta} \quad (24)$$

$$D^n = \frac{J_r^N}{(\partial n / \partial \mu)_T F_r^\mu} = \frac{2}{\sigma_0 n} \frac{k_b T}{\sqrt{2mk_b T}} \frac{g_{0,0}}{\zeta} \quad (25)$$

$$\kappa^T = k_b \left(\frac{J_r^Q}{F_r^T} \right)_{J_r^N=0} = \frac{2k_b^2 T}{\sigma_0} \frac{1}{\sqrt{2mk_b T}} \frac{1}{\zeta} \left(g_{0,4} - \frac{g_{0,2}^2}{g_{0,0}} \right) \quad (26)$$

şeklinde ifade edilir.

Dikdörtgen geometrilerde transport katsayıların hesaplanması

Kuantum ölçek etkileri dikkate alınarak (24)-(26) denklemlerinde verilen transport katsayılarının hesaplanabilmesi için (5) ve (20) eşitliğinde verilen toplamların (10) eşitliğinde verilen Poisson toplam formülü ile hassas bir şekilde hesaplanması gerekmektedir. (5) ve (20) eşitliğindeki toplamlar kuantum durumları üzerinden yapılmaktadır. Parçacıkların hız ve enerji özdeğerleri, durağan Schrödinger denkleminin çözümünden elde edilir. Schrödinger denklemini-

nin analitik olarak çözülebilmesi için geometri ve sınır şartlarının bilinmesi gerekmekte olup, dikdörtgen geometriler için analitik çözüm bilinmektedir. Transport yönü x_1 olduğunda $g_{0,b}$ ve ζ fonksiyonlarının analitik ifadeleri sırasıyla,

$$g_{0,b} = \frac{2\pi}{3\alpha_1\alpha_2\alpha_3} \Gamma\left(\frac{4+b}{2}\right) \left[1 - \frac{3}{4} \frac{\Gamma\left(\frac{3+b}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{4+b}{2}\right)} (\alpha_2 + \alpha_3) \right] \quad (27)$$

$$\zeta = \frac{\pi^{3/2}}{\alpha_1\alpha_2\alpha_3} \left(1 - \frac{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3}{\sqrt{\pi}} \right) \quad (28)$$

olarak elde edilir. Bu ifadelerde, Γ terimi Gama fonksiyonu, $\alpha_1 = L_c/L_1$, $\alpha_2 = L_c/L_2$, $\alpha_3 = L_c/L_3$, L_c en olası de Broglie dalga boyunun yarısı olup, m kütle, h Planck sabiti ve T sıcaklık olmak üzere $L_c = h/\sqrt{8mk_bT}$ şeklinde tanımlanmaktadır. (27) ve (28) eşitlikleri kullanılarak (24)-(26) eşitlikleriyle verilen iletkenlik, difüzyon ve ısı iletim katsayıları sırasıyla,

$$D^o = \frac{4}{3\sigma_0} \frac{1}{\sqrt{2\pi mk_bT}} \left[1 - \left(\frac{3\sqrt{\pi}}{8} - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \right) (\alpha_2 + \alpha_3) \right] \quad (29)$$

$$D^n = \frac{4}{3\sigma_0} \frac{k_bT}{\sqrt{2\pi mk_bT}} \frac{1}{n} \left[1 - \left(\frac{3\sqrt{\pi}}{8} - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \right) (\alpha_2 + \alpha_3) \right] \quad (30)$$

$$\kappa^T = \frac{8}{3\sigma_0} \frac{k_b^2T}{\sqrt{2\pi mk_bT}} \left[1 - \left(\frac{21\sqrt{\pi}}{64} - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \right) (\alpha_2 + \alpha_3) + \frac{\alpha_1}{\sqrt{\pi}} \right] \quad (31)$$

olarak elde edilir. Transport ortamının transportun doğrultusu olan x_1 yönünde açık olması (sınırlandırılmamış olması) durumunda Neumann sınır koşulunun gereği olarak (31) eşitliğinde verilen ısı iletim katsayısında, α_1 'in değerinin sıfır alınması gerektiğine dikkat edilmelidir. (29)-(31) ifadelerinden anlaşılacağı gibi transport katsayıları kuantum ölçek etkileri nedeniyle özellikle nano ölçekte transport ortamının geometri ve ölçeğine bağımlı hale gelmektedir. Bir diğer deyişle, nano ölçekte, şekil ve ölçek transport sürecini kontrol eden yeni kontrol değişkenleri olarak ortaya çıkmaktadır. Isı iletim katsayısının iletkenliğe oranı olarak tanımlanan ve evrensel bir yasa olan Wiedemann-Franz oranı,

$$WF = k_b^2T \left[1 + \frac{3\sqrt{\pi}}{64} (\alpha_2 + \alpha_3) \right] \quad (32)$$

eşitliğiyle elde edilir. Burada, iletkenlik açık kanalda ($\alpha_1 = 0$) tanımlanabildiği için ısı iletim katsayısında da $\alpha_1 = 0$ değeri göz önüne alınmıştır. (32) eşitliğinden görüldüğü gibi, nano sistemlerde transport katsayıları kuantum ölçek etkisi altında hesaplandığında Wiedemann-Franz oranı da ölçek bağımlı olmakta ve evrenselliğini yitirmektedir.

Sonuçlar

Çalışmanın temel sonuçları aşağıdaki gibi özetlenebilir.

- Kuantum ölçek etkileri altında, parçacık-parçacık ve parçacık-duvar çarpışmalarına ait transport rejimlerinde, relaksasyon zamanı altında ele alınarak iletim, difüzyon ve ısı iletim katsayıları türetilmiştir.
- Kuantum potansiyel gradyanının transport için ayrı bir sürücü kuvvet olabileceği anlaşılmaktadır.
- Transport katsayılarının kuantum ölçek etkileri nedeniyle transport domeninin ölçek ve geometrisine bağlı olduğu görülmüştür. Böylece domenin şekli ve ölçeği transport süreçleri üzerinde ilave bir kontrol parametresi olmaktadır.
- Evrensel bir yasa olan Wiedemann-Franz yasasının kuantum ölçek etkileri nedeniyle nano ölçekte evrenselliğini kaybettiği görülmüştür.

Kaynaklar

- Chen, G., (2005). *Nanoscale energy transport and conversion*, Oxford University Pres, New York.
- Feynman, R.P., (1992). There is plenty of rooms at the bottom, *Journal of Micromechanical Systems*, **1**, 60-66.
- Gravesen, P., Branebjerg, J. ve Jensen, O.S., (1993). Microfluidics: A review, *Journal of Micromechanics and Microengineering*, **3**, 168-182.
- Ho, C.M. ve Tai, Y.C., (1998). Micro-Electro-Mechanical Systems (MEMS) and fluid flows, *Annual Review of Fluid Mechanics*, **30**, 579-612.
- Jalochowski, M. ve Bauer, E., (1988). Quantum size and surface effects in the electrical resistivity and

- high-energy electron reflectivity of ultrathin lead films, *Physical Reviews*, **38**, 5272-5280.
- Mehra, A., Zhang, X., Ayon, A., Waitz, I., Schmidt, M. ve Spadaccini, C., (2000). A six-wafer combustion system for a silicon micro gas turbine engine, *Journal of Microelectro-mechanical Systems*, **9**, 517-527.
- Sisman, A., (2004). Surface dependency in thermodynamics of ideal gases, *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **37**, 11353-11361.
- Sisman, A. ve Müller, I., (2004). The Casimir-like size effects in ideal gases, *Physics Letters A*, **320**, 360-366.
- Sisman, A., Ozturk, Z.F. ve Firat, C. (2007). Quantum boundary layer: A non uniform density distribution of an ideal gas in thermodynamic equilibrium, *Physics Letters A*, **367**, 16-20.
- Tesanovic, Z., Jaric, M.V. ve Maekawa, S., (1986). Quantum transport and surface scattering, *Physical Review Letters*, **57**, 2760-2763.
- Tien, C., Majumdar, A. ve Gerner, F.M., (1998). *Microscale energy transport*, Taylor & Francis, Washington.
- Trivedi, N. ve Ashcroft, N.W., (1988). Quantum size effects in transport properties of metallic films, *Physical Review B*, **38**, 12298-12309.
- Tsuchia, H. ve Ravaioli, U., (2001). Particle Monte Carlo simulation of quantum phenomena in semiconductor nanostructures, *Journal of Applied Physics*, **89**, 4023-4029.