



YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Engemiş İki Değ. Met. Klorür Tuz. Yap. İnc.

Doktora Tezi

İDRİS GÜMÜŞ

102
41

15.000 TL

YILDIZ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

1186

ERGİMiŞ İKİ DEĞERLİKLİ METAL KLORÜR
TUZLARININ YAPISAL İNCELEMELERİ

DOKTORA TEZİ
İDRİS ADNAN GÜMÜŞ

İSTANBUL - 1988

YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
KÜTÜPHANE DOKÜMANTASYON
DAİRE BAŞKANLIĞI

Kot : R 210
41
Alındığı Yer : Fen Bilimleri Enst.
Tarih : 20.03.1992
Fatura :
Fiyatı : 15.000.-TL
Ayniyat No : 1/1
Kayıt No : 48231
UDC : 530
Ek :



YILDIZ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ



ÖNSÖZ

ÖZET

SUMMARY

BÖLÜM I

GİRİŞ

1

I.1

1.1

1

I.2

1.2

4

I.3

1.3

10

I.4

1.4

13

I.5

1.5

14

ERGİMİŞ İKİ DEĞERLİKLİ METAL KLORÜR
TUZLARININ YAPISAL İNCELEMELERİ

BÖLÜM II

II.1

17

II.1.1

II.1.1

17

II.1.2

II.1.2

22

BÖLÜM III

III.1

24

III.1.1

III.1.1

24

III.1.2

III.1.2

24

III.1.3

III.1.3

24

III.1.4

III.1.4

24

III.1.5

III.1.5

24

III.1.6

III.1.6

24

DOKTORA TEZİ

İDRİS ADNAN GÜMÜŞ

BÖLÜM IV

IV.1

25

EK 1

EK 1

25

KAYNAKLAR

ÖZGEÇMİŞ

İSTANBUL - 1988



İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ

ÖZET

SUMMARY

BÖLÜM I	: GİRİŞ	1
I.1	: Sıvı Hale Giriş	1
I.2	: Moleküler Dağılım Fonksiyonları	4
I.3	: Yuklu Akışkanların Yapısı	10
I.4	: Basit Modeller	13
I.5	: Mikroskopik Yapı. Dağılım Fonksiyonları ve Yapı Faktörleri	14
BÖLÜM II	: ÇOK BİLEŞENLİ PLAZMA İÇİN ORTALAMA KÜRESEL YAKLAŞIM (OKY)	19
II.1	: OKY'a Giriş ve Analitik Çözüm	19
II.2	: İki Bileşenli Plazmanın Yapısı	23
BÖLÜM III	: İKİ DEĞERLİKLİ METAL-İON KLORÜRLER	24
III.1	: İki Değerlikli Metal-ion Klorürlerin Deneysel İncelemeleri	24
III.2	: İki Değerlikli Metal-ion Klorürlerin OKY'daki Yapıları	30
III.3	: Baryum Klorür	30
III.4	: Çinko Klorür	33
III.5	: Kalsiyum Klorür	36
III.6	: Stronsiyum Klorür	39
BÖLÜM IV	: SONUÇLAR VE TARTIŞMA	42
EK 1	: HESAP EDİLEN $g_{KB}(r)$ FONKSİYONLARININ BİR ÖRNEĞİ	

KAYNAKLAR

ÖZGEÇMİŞ



ÖNSÖZ

ÖZET

Tezimin danışmanlığını üstlenen, çalışmanın sonuna kadar destek ve yardımcı olan Sayın Prof.Dr. Şevket Erk'e teşekkürü bir borç bilirim.

Çalışmanın her aşamasında öneri ve bilgilerinden yararlandığım Sayın Prof.Dr. K.Gediz Akdeniz'e çok teşekkür ederim.

Trieste'deki Milletlerarası Teorik Fizik Merkezi'nde çalışmalarımı sürdürmeme olanak sağlayan Sayın Prof.Dr. M.P. Tosi'ye teşekkür ederim.

Ayrıca, yardımlarını gördüğüm Yıldız Üniversitesi Fizik Bölümü elemanlarına teşekkür etmek isterim.

Nisan - 1988

İdris Adnan Gümüş



ÖZET

Bu çalışmada, iki değerlikli metal klorür tuzlarının $g(r)$ radyal dağılım fonksiyonları ortalama küresel yaklaşım altında bilgisayar yardımıyla hesap edildi. Bu tuzların ergime noktası civarındaki yapısal özellikleri araştırıldı. *also investigated.*

Teorik olarak hesaplanan bu yapısal özelliklerin deneysel olarak tayin edilen özellikler ile büyük ölçüde uyum içinde oldukları gösterildi.



SUMMARY

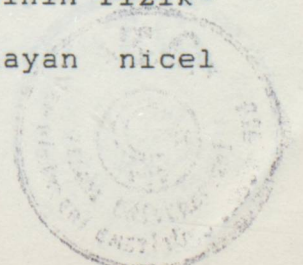
In this work, the $g(r)$ radial distribution functions of the Divalent Metal-Chloride Salts has been calculated by computer under the Mean Spherical Approximation. Near the melting point the structural properties of these salts has been also investigated.

It has been shown that these structural properties calculated theoretically are mostly in agree with experimental results.

kuramlar katı ve gaz BÖLÜM I ıbl geliştirilmiştir.
tır. (1.2.3.4.5.6.)

Katı ve sıvı fazlar kohezyon özelliği bakımından birbirlerine benzerler. Her ikisi de bir sınır yüzeyi korurlar. Ama sıvı GİRİŞ kuvvetleri tek başına moleküllerin öteleme hareketlerine engel olmaya yeter siddette değildir. Ayrıca katılar ve sıvılar aynı derecede sıkı istiflenseye sahiptirler. Yoğunlukları genel (I.1) SIVI HALE GİRİŞ

Molekül ölçeğinde bir sıvının yapısını gözönüne getirmek bir gazda var olan tam düzensizliği veya bir kristalde bulunan muntazam düzeni gözönüne getirmekten çok daha güçtür. Gazlarda, hiç olmazsa düşük yoğunluk koşulları altındaki ideal limitte, moleküler ortalama serbest yol moleküler çaplara kıyasla uzundur ve termal hareketten dolayı düzensizlik moleküllerarası kuvvetlerle kurulan düzene üstün gelir. Diğer taraftan, bir ideal kristalde titreşim genliği moleküler çapa kıyasla küçüktür ve düzen üstün gelir. İdeal gaz ve ideal kristal hallerini matematiksel olarak işleme almak nisbeten basittir. Fakat sıvılar düzenli ve düzensiz yapı arasında olan bir yapıyı korurlar. Bu özelliklerinden dolayı hem deneysel hem de kuramsal yöntemlerle sıvı yapının çözülmesine büyük bir gayret sarfedilmesine rağmen şimdiye kadar ne bir sıvı içindeki bir molekülün düzeninin fiziksel anlatımı ne de sıvı özelliklerini açıklayan nicel



kuramlar katı ve gaz hallerindeki gibi geliştirilememiştir. (1,2,3,4,5,6)

Katı ve sıvı fazlar kohezyon özelliği bakımından birbirlerine benzerler. Her ikisi de bir sınır yüzeyi korurlar. Ama sıvılarda kohezyon kuvvetleri tek başına moleküllerin öteleme hareketlerine engel olmaya yeter şiddette değildir. Ayrıca katılar ve sıvılar aynı derecede sıkı istiflenmeye sahiptirler. Yoğunlukları genel olarak % 15'den daha az farklıdır. Bizmut metal, rubidyum nitrat tuzu ve su gibi birkaç halde sıvı yapı daha sıkı istiflenmeye sahip olur.

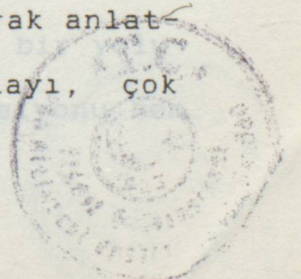
Sıvıların yapısını tartışmada iki temel problem vardır. Birincisi moleküler etkileşmenin doğasını anlama problemidir. Genel bir ifade ile küçük moleküllerarası mesafelerde kuvvetlerin itici oldukları ve büyük moleküllerarası mesafelerde çekici oldukları söylenebilirse de bu kuvvetlerin doğasının ayrıntılı olarak bilinmesi sıvı özelliklerinin anlaşılması için gereklidir. İkinci temel problem bir sistemin makroskopik özelliklerini mikroskopik özelliklerine ve özellikle bir çift yalıtılmış molekülün etkileşme şeklini anlatan potansiyel enerji fonksiyonuna bağlama problemidir.

Moleküllerarası potansiyel enerjinin moleküllerin hareketini kontrol etme derecesi kinetik enerjiye bağlıdır. Düşük sıcaklıklar halinde ortalama potansiyel enerji ortalama kinetik enerjiden daha büyüktür ve maddi ortam

düzenli bir katıdır. Seyreltilmiş gazlar tarafından sergilenen diğer halin özelliği ortalama potansiyel enerjiden çok daha büyük bir ortalama kinetik enerji ile belirlenir ve tam düzensizliktir. Bir sıvıda moleküller, yerel düzenin ve az miktarda sıkışabilirliğin olmasına kafi derecede birbirlerine yakındırlar, ama kinetik enerji de uzun menzilli düzene engel olmaya kafi derecede büyüktür.

Bir sıvıdaki düzenin derecesini gözönüne alırken X-ışın difraksiyon deneylerinin sonuçlarından faydalanmak gerekir.⁽⁵⁾ Tek-kristal katının X-ışın difraksiyon örneği simetrik şekilde yerleşmiş çok şiddetli noktalardan oluşur. Kristal tozlarının X-ışın difraksiyon örneklerinde, tozun iriliği azaldıkça difraksiyon maksimumlarının genişlediği ve dağıldığı, çok küçük iriliğe varıldığında maksimumların tamamen kayboldukları gözlenir. Bir sıvının yapısında hiçbir düzen olmasaydı X-ışınlarının maksimumsuz ve sürekli bir saçılmasını düzenli olduğu gibi zamandan bağımsız olan bir yapıya vermesi beklenmeliydi. Gerçekte, sıvıların X-ışın difraksiyon örneğinde birkaç maksimum ve minimum vardır ve bunlar bazı düzenli sıkı istiflenmiş yapılardakine karşılık gelen mesafelerde meydana çıkarlar. Bu gerçek, sıvıların muayyen derecede kısa menzilli düzene fakat hiçbir yapı veya düzene sahip değildiği uzun menzilli düzensizliğe sahip olduklarını gösteren bir delil olarak yorumlanır.

Sıvı halin yapısını nitel veya nicel olarak anlatmanın çok zor olduğu ortaya çıktığından dolayı, çok



farklı görüŖ noktalarıyla birkaç yöntem geliştirilmiŖtir. Zamandan bağımsız veya statik anlatım sadece termodinamik veya denge özelliklerini değıil aynı zamanda self difüzyon katsayısı ve viskozite katsayısı gibi kararlı hal transport katsayılarını temel olarak alır. Bu katsayılar molekül ölçeğinde uzun olan zamanlar ve mesafeler üzerinde ölçülürler ve değıerleri zamanla değıişmez. Dinamik anlatım, ölçülen değıerleri zaman ölçeğine veya gözlemin frekansına bağılı olan özellikleri temel olarak alır ve mesela ortalama olarak tipik bir molekülün çevresinin zamanla nasıl değıiŖtiğini anlatır.

Sıvıları tartışıırken mesafe ölçeğı kadar zaman ölçeğı de temel öneme sahiptir. Bazen sıvı halin katı ve gaz halinin özellikleri arasında ara özelliklere sahip olduğı söylenir. Bu ifade, özelliklerin gözönüne alınması halinde zaman işe karışıdırılırsa, çok doğırudur. Katılar düzenli olduğı gibi zamandan bağımsız olan bir yapıya sahiptirler. Kısa zamanlar için bir sıvı esnek özellikler bakımından bir katı gibi davranır ve kısa mesafeler için biraz düzenli yapıya sahiptir. Diğıer taraftan bir gaz, zaman veya mesafe ölçeğinin kısa olması mesele değıil, hiçbir yapı veya düzene sahip değıildir.

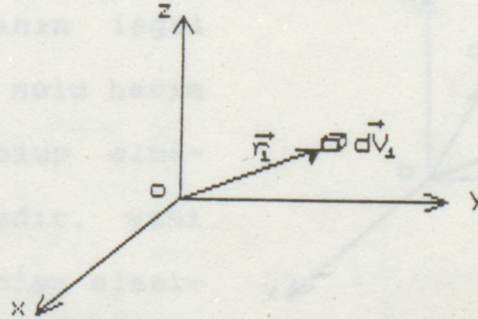
(I.2) MOLEKÜLER DAĞILIM FONKSİYONLARI

Sıvıların doğıasını ayrıntılı bir şekilde tartışımak için temsili bir molekülün çevresini anlatmanın bir yoluna sahip olmak gerekir. Moleküler dağılım fonksiyonu hem

uzay hem de zaman içinde dalgalanması giderilen bir molekül çevresinin gösterilişini temin eder. $p = 1, 2, 3$ olmak üzere $n^{(p)}$ ile gösterilen kullanışlı üç moleküler dağılım fonksiyonu vardır. 'e' Bunlar bir vektör diyagramı ile tanıtılır. Bir $d\vec{V}$ hacim elemanının konumu bir $\vec{r}$ vektörü ile anlatılır. Bir molekülü $\vec{r}_1$ ile belirtilen bir $d\vec{V}_1$ hacim elemanı içinde bulma olasılığı $n^{(1)}(\vec{r}_1)d\vec{V}_1$ dir [Şekil(I.2-1)]. Böyle tanımlanan $n^{(1)}(\vec{r}_1)$ veya kısaca $n^{(1)}$ 'e tekli dağılım fonksiyonu adı verilir. Olasılık sadece bir sayı olduğundan ve $d\vec{V}_1$ bir hacim olduğundan, $n^{(1)}$ hacmin tersi veya sayı yoğunluğu boyutuna sahiptir ve dengedeki izotrop bir akışkan içinde sıvıya ait ortalama sayı yoğunluğuna eşit olmalıdır:

$$n^{(1)}(\vec{r}_1) = n^{(1)} = \rho = \frac{N_A}{V_m} \quad (I.2-1)$$

N_A Avagadro sabiti ve V_m molar hacimdir. Diğer bir ifade ile, $n^{(1)}$ tekli dağılım fonksiyonu $\vec{r}_1$ 'den bağımsızdır.



Şekil (I.2-1)

$n^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ veya $n^{(2)}(r)$ veya kısaca $n^{(2)}$ ile göster-

rilen ikili dağılım fonksiyonunu tartışmak üzere aralarında $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = r$ mesafesi olan iki $d\vec{V}_1$ ve $d\vec{V}_2$ hacim elemanı gözönüne alınır [Şekil (I.2-2)]. Bu hacim elemanları içinde 1 ve 2 nolu moleküllerin aynı anda bulunma olasılığı $n^{(2)} d\vec{V}_1 d\vec{V}_2$ dir. Bu sayı sadece r mesafesinin bir fonksiyonudur ve hem $\vec{r}_1$ hem de $\vec{r}_2$ 'den bağımsızdır. Büyük r değerlerinde bire normalize olan boyutsuz bir ikili dağılım fonksiyonuna sahip olmak yarar sağlamaktadır ve onun için $g(r)$ çift dağılım fonksiyonu denklemini

$$n^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = n^{(1)}(\vec{r}_1) n^{(1)}(\vec{r}_2) g(r) \quad (I.2-2)$$

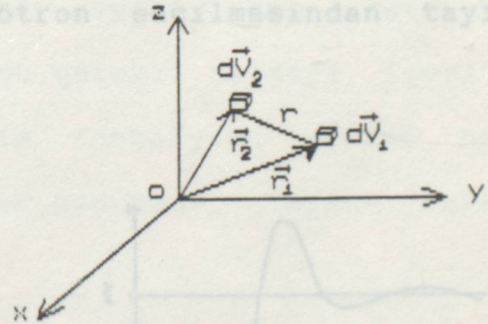
Bir akışkanda r sıfıra giderken $g(r)$ 'nin sıfıra ile tanımlanır. (I.2-1) denkleminde dolayı

$$n^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \rho^2 g(r)$$

ve $r \rightarrow \infty$ için $g(r) \rightarrow 1$ olur. $g(r)$ bir dizi maksimum ve minimumdan oluşur. $g(r) \rightarrow 1$ ise düzenlilik karşılık (I.2-3)

olur. Çünkü r büyük ise, 2 nolu hacim elemanının işgal olma olasılığı 1 nolu hacim elemanının işgal olup olmasından bağımsızdır, yani aynı anda işgal olma olasılığı tek tek işgal olma olasılıklarının çarpımıdır

ve iki molekül arasında hiçbir uzun menzilli düzen veya korelasyon yoktur.



Şekil (I.2-2)

len $g(r)$ çift dağılım fonksiyonu da mesafesi r içerisindeki

konsüllerinin ortalama sayısıdır ve özel bir r 'deki ortalama

$$g(r) = \frac{1}{\rho^2} \langle \rho(0) \rho(\vec{r}) \rangle \quad (I.2-4)$$

$g(r)$ 'den farklıdır. Koordinasyon sayısı

denklemleri ile tanımlanabilir. Çift dağılım fonksiyonu

orijindeki bir $\rho(0)$ değerine sahip yoğunluğun orijinden

olan $\vec{r}$ mesafesiyle nasıl değiştiğini anlatır. Yine

$|\vec{r}|=r \rightarrow \infty$ için $g(r) \rightarrow 1$ olduğu görülebilir. Çünkü orijindeki

ve büyük $\vec{r}$ mesafesindeki iki yerel yoğunluk istatistik

bakımdan bağımsızdır ve çarpımlarının ortalaması ρ^2

dir. Sekil(I.2-4)'deki

Bir akışkanda r sıfıra giderken $g(r)$ 'nin sıfıra

gittiği Sekil(I.2-3)'deki tipik bir çift dağılım

egrisinden görülebilir. Çünkü iki molekül, çaplarından (d)

daha yakın olamazlar. $g(r)$, bir dizi maksimum ve

minimumdan sonra, tamamen düzensizliğe karşılık gelen 1

değerine yaklaşır. $g(r)$ çift dağılım fonksiyonları

deneysel olarak X-ışını ve nötron saçılmasından tayin

edilmektedir. Çift dağılım fonksiyonu gerekli bilgiyi içerir.

$g(r)$ fonksiyonuna bağımlı fonksiyonu yerine bir

zen radyal dağılım fonksiyonu verilir. Toplam kore-

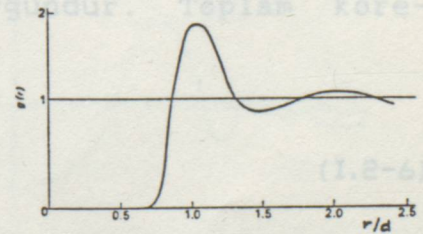
yonu adı verilir. $g(r)$ rad-

yal dağılım fonksiyonundan

bir n koordinasyon sayısının

değeri tayin edilebilir

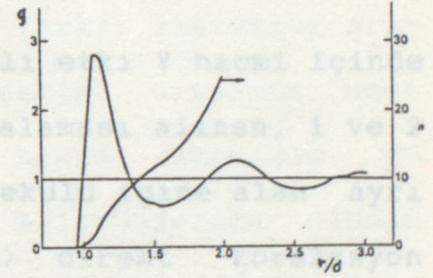
Sekil(I.2-4). Bu sayı veri-



len bir molekülün bir s radyal mesafesi içersindeki komşularının ortalama sayısıdır ve özel bir r'deki ortalama sayı olan ve büyük mesafelerde bire normalize olan $g(r)$ 'den farklıdır. Koordinasyon sayısı

$$n = 4\pi\rho \int_0^s r^2 g(r) dr \quad (I.2-5)$$

olarak tanımlanır. Birinci koordinasyon sayısı (etkin şekilde en yakın komşuların sayısı) Şekil(I.2-4)'deki birinci pik altındaki alanı değerlendirerek hesap edilebilir.



Şekil (I.2-4)

$g(r)$ çift dağılım fonksiyonu verilen bir molekülden bir r mesafedeki molekülleri bulma olasılığını anlatırsa da, verilen molekülün etrafındaki komşularının açısal dağılımı hakkında hiçbir şey söylemez. İşte bu noktada üçlü dağılım fonksiyonu gerekli bilgiyi içerir.

Genellikle çift dağılım fonksiyonu yerine bir korelasyon fonksiyonu kullanmak uygundur. Toplam korelasyon fonksiyonu $h(r)$

$$h(r) = g(r) - 1 \quad (I.2-6)$$

olarak tanımlanır ve bir tipik eğri Şekil(I.2-5b)'de gösterilir. $h(r)$ toplam korelasyon fonksiyonu 1 nolu

molekölün $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ mesafedeki 2 nolu molekül üzerindeki toplam etkisinin bir ölçüsüdür ve tanıma göre iki kısma ayrılabilir: 1 nolu molekülün 2 nolu molekül üzerindeki direkt etkisini anlatan bir direkt korelasyon fonksiyonu, $c(r)$ ve diğer moleküllerin etkisini anlatan dolaylı bir sistemler için genel bir terimdir. Fizik ve kimyanın bir kısmı. O zaman $c(r)$ direkt korelasyon fonksiyonu çok alanında, astrofizik ve plazma fizikinden elektrokim-

$$h(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = c(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \rho \int c(\vec{r}_1, \vec{r}_3) h(\vec{r}_2, \vec{r}_3) d\vec{r}_3 \quad (I.2-7)$$

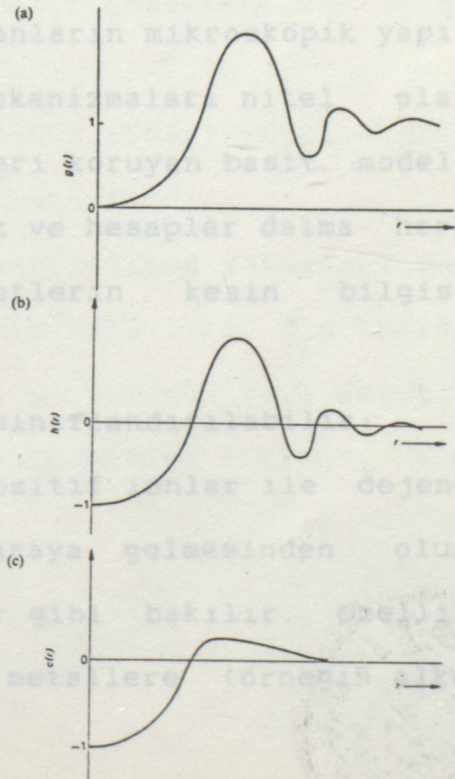
sistemlerle karşılaşılır. Butün bu farklı sistemler aradıkları ortak ilişki yüklü parçacıklar arasında uzun menzilli Coulomb etkileşimlerinin hakim olmasıdır. Bu 2 nolu molekülden başka L-2 tane molekülü içine alan ayrı etkilerin toplamıdır. $c(r)$ direkt korelasyon fonksiyonu $h(r)$ ' den çok daha kısa menzilde etki eder [Şekil (I.2-5c)] ve dolayısıyla daha sade şekilde moleküler potansiyel enerji fonksiyonu gibi moleküler özelliklere bağıntılıdır.

Bu yüklü akışkanların özellikleri istatistik mekanikten incelenir. Yüklü akışkanların mikroskopik yapı ve dinamiklerinde temel fiziksel mekanizmalar nasıl olarak anlamak için temel özelliklerini tanımlayan basit modeller tercih edilir. Teorik analiz ve hesaplar da bu halde mümkündür. Kuvvetlerin kesin bilgisine dayanır.

Yüklü akışkanlar şöyle sınıflandırılır:

- 1) Sıvı metaller. Bunlara, pozitif iyonlar ile dejenere iletken elektronlarının bir araya gelmesinden oluşan "soğuk" iki-bileşenli plazmalar gibi bakılır. Özellikle basit band yapıları sahip olan metallerde (örneğin alkali

Sekil (I.2 - 5)



(I.3) YÜKLÜ AKIŞKANLARIN YAPISI

"Yüklü akışkanlar" pozitif veya negatif ionlar ve kökler gibi yüklü parçacıkları, yüklü polimerleri ve serbest elektronları içine alan çok çeşitli gaz veya sıvı sistemler için genel bir isimdir. Fizik ve kimyanın bir çok alanında, astrofizik ve plazma fiziğinden elektrokimya ve kolloid bilimine kadar, yüklü parçacıklardan oluşan sistemlerle karşılaşılır. Bütün bu farklı sistemler arasındaki ortak ilişki yüklü parçacıklar arasında uzun menzilli Coulomb etkileşmelerinin hakim olmasıdır. Bu etkileşmeler, nötr atomlar veya moleküllerden oluşan akışkanlarda bulunmayan, muayyen sayıda belirleyici kolektif özelliği bu sistemlere kazandırır.

Bu yüklü akışkanların özellikleri istatistik mekaniğin çatısı içinde esas olarak mikroskopik görüş noktasından incelenir. Yüklü akışkanların mikroskopik yapı ve dinamiğinde temel fiziksel mekanizmaları nitel olarak anlamak için temel özellikleri koruyan basit modeller tercih edilir. Teorik analiz ve hesaplar daima her bir halde moleküllerarası kuvvetlerin kesin bilgisine dayanır. (4.7.8)

Yüklü akışkanlar şöyle sınıflandırılabilir:

1) Sıvı metaller. Bunlara, pozitif ionlar ile dejenere iletim elektronlarının biraraya gelmesinden oluşan "soğuk" iki-bileşenli plazmalar gibi bakılır. Özellikle basit band yapıları sahip olan metallere (örneğin alkali

metaller) ve alaşımlara böyle bakılır. Elektrik ve termik iletkenlikler karakter bakımından elektrondur.

2) Ergimış tuzlar. Zıt yüklü iki iyonik türden yapılabilen tuzlardır. Tuzlar kuvvetli Coulomb bağlanması ve buna karşılık olan yüksek ergime sıcaklığı ve iyonik iletkenlikle karakterize edilirler. Bazı kristalsi tuzlar, ergimış fazın tipik özelliği olan, çok yüksek iyonik iletkenlik gösterirler. Bu tuzlara aşırı iyonik iletkenler adı verilir. Gümüş iyodür en iyi bilinen örnektir.

3) Metal tuz çözeltileri . M-MX şeklindeki (M bir alkali metal ve X bir halojen) çözeltiler ilk iki sınıfın kombinasyonlarıdır.

4) İyonik çözeltiler. Bunlar polar moleküllerden bir çözücü ve zıt olarak yüklü iki iyon türünden bir çözünenden meydana gelirler. Her iki iyon türü aynı boyutta ve aynı mutlak yüklü ise, bir elektrolit çözelti söz konusu olur; örneğin, su içinde Na^+Cl^- .

5) Sıvı helyumun yüzeyindeki ve MOS cihazlardaki elektron tabakaları iki boyutlu yüklü akışkanlardır.

Yüklü akışkanın ν tür parçacıktan yapıldığı düşünülür. m_α ($1 \leq \alpha \leq \nu$) parçacıkların kütleleri, $Z_\alpha e$ taşıdıkları elektrik yükü ve $n_\alpha = \frac{N_\alpha}{V}$, α türünün sayı yoğunluğu (birim hacim başına parçacıkların sayısı) olsun. Elektriksel nötrlük

$$\sum_{\alpha=1}^{\nu} n_\alpha Z_\alpha = 0$$

(1.3-1)

olmasını gerektirir. Bütün yüklü akışkanlar için ortak bir karakteristik özellik ekranlama olayıdır; Yerel fazla yükten dolayı çevrede bulunan yüklerin yeniden düzenlenmesiyle elektriksel potansiyel büyük mesafelerde etkili şekilde azaltılır. Yeter derecede düşük yoğunluklar ve yüksek sıcaklıklar için (yani, zayıf etkileşme limitinde) bu mekanizma Debye ekranlama uzunluğu λ_D ile karakterize edilir; her iyonik türe

$$k_{D\alpha} = \left(\frac{4\pi n_\alpha z_\alpha^2 e^2}{\epsilon k_B T} \right)^{1/2} \quad (I.3-2)$$

ile verilen bir kısmı Debye dalga sayısı eşlik eder ve yüklü katı (d çaplı) küre modeli daha uygun olabilir. ekranlama uzunluğu

ikinci terim, nötr olan fona girebilir. Birkaç ion türünün

$$\lambda_D^2 = \sum_n k_{Dn}^{-2} \quad (I.3-3)$$

ile verilir. ϵ , içinde yüklerin hareket ettiği ortamın dielektrik sabitidir. Mikroskopik ölçekte ekranlama uzunluğundan başka a ortalama ion küre yarıçapı ve d iyonik çap diğer iki uzunluktur. $n = \sum n_\alpha$ toplam sayı yoğunluğu olmak üzere, a yarıçapı

$$a = \left(\frac{3}{4\pi n} \right)^{1/3} \quad (I.3-4)$$

olarak ve η istiflenme kesri ise

$$\eta = \frac{1}{6} \pi n d^3 \quad (I.3-5)$$

olarak tanımlanır. Bir başka uygun fiziksel parametre

$$\Gamma = \frac{Z^2 e^2}{a k_B T} \quad (I.3-6)$$

ile tanımlanır; burada Z ortalama iyonik değerliktir.

(I-4) BASİT MODELLER

Bir yüklü akışkanın en basit modeli "tek bileşenli plazma" adı verilen modeldir. Bu modelde, Ze yüklü ve m kütleli N sayıda nokta parçacıktan oluşan bir sistemin, zıt yük yoğunluğunun nötr hale getirdiği düzgün bir fon içine gömülü olduğu düşünülür. Bu modelin özellikle iki teşmili kullanışlıdır. Birincisinde, ionların sonlu boyutlarının etkileri önemli ise, düzgün bir fon içindeki yüklü katı (d çaplı) küre modeli daha uygun olabilir. İkinci teşmili, nötr olan fona gömülü birkaç ion türünün olması haline karşılık olur. İkili iyonik karışım modelinde ilgili iki değişken genellikle Γ ve $\chi_\alpha = \frac{n_\alpha}{n}$ ($\alpha=1,2$) konsantrasyonlarından biri olmak üzere seçilir.

İyonik sıvıların (ergimiş tuzlar veya elektrolitler) temel özelliklerini elinde tutan en basit model zıt olarak yüklü katı kürelerin ilkel modelidir. $Z_\alpha e$ ve d_α iki iyonik türün yükleri ve çapları olsun. Üç çift potansiyel

$$\Phi_{\alpha\beta}(r) = \begin{cases} \infty & r < d_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}(d_\alpha + d_\beta) \\ \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{a k_B T} & r > d_{\alpha\beta} \end{cases} \quad (I.4-1a)$$

$$(I.4-1b)$$

şeklindedir. Yasaklanmış iç bölge ($r < d_{\alpha\beta}$) kısa mesafelerde ionlar arasında etki eden çok şiddetli itici kuvvetlere sorumlu gösterilir; Coulomb etkileşmesi aynı tür ionlar için itici ve zıt yüklü ionlar için çekicidir.

Kısıtlı ilkel model, ionların eşit çaplara ($d_1 = d_2 = d$) ve zıt yüklere ($Z_1 = -Z_2$) sahip oldukları, ilkel modelin simetrik bir şeklidir. O zaman elektriksel nötrlük koşulundan (I.3-1), $n_1 = n_2$ olduğu görülür.

(I-5) MİKROSKOPİK YAPI. DAĞILIM FONKSİYONLARI VE YAPI FAKTÖRLERİ

n_α sayı yoğunluklarına ve $\chi_\alpha = \frac{n_\alpha}{n}$ konsantrasyonlarına sahip, ν sayıda parçacık türünden ($1 \leq \alpha \leq \nu$) yapıllı bir akışkan gözönüne alınır. Herbir türe

$$\rho_\alpha(\vec{r}, t) = \sum_{i=1}^{N_\alpha} \delta[\vec{r} - \vec{r}_{i\alpha}(t)] \quad (I.5-1)$$

mikroskopik yoğunluk ve

$$\rho_{r\alpha}(t) = \sum_{i=1}^{N_\alpha} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_{i\alpha}(t)} \quad (I.5-2)$$

Fourier bileşenleri eşlik ettiririz; burada $\vec{r}_{i\alpha}(t)$, t anında α türünden i nolu parçacığın kütle merkezinin yerini belirtir. Termodinamik dengedeki bir akışkanda statik korelasyonlarla ilgilenilir. Tek parçacıklı yoğunluklar, karşılık olan mikroskopik yoğunlukların istatistik ortalamaları olarak tanımlanırlar:

$$\rho_{\alpha}^{(1)}(\vec{r}) = \langle \rho_{\alpha}(\vec{r}) \rangle = N_{\alpha} \langle \delta[\vec{r} - \vec{r}_{1\alpha}(t)] \rangle \quad (I.5-3)$$

iki parçacıklı yoğunluk matrisi yoğunluk-yoğunluk korelasyon matrisi cinsinden

$$\begin{aligned} \rho_{\alpha\beta}^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}') &= \langle \rho_{\alpha}(\vec{r}) \rho_{\beta}(\vec{r}') \rangle - \rho_{\alpha}^{(1)}(\vec{r}) \delta_{\alpha\beta} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \\ &= \sum_i \sum_j' \langle \delta(\vec{r} - \vec{r}_{i\alpha}) \delta(\vec{r}' - \vec{r}_{j\beta}) \rangle \end{aligned} \quad (I.5-4)$$

olar; burada $\delta_{\alpha\beta}(\vec{r})$, küresel kabul edilen α ve β parçacıkları arasında $\vec{r}$ mesafesindeki çift potansiyeldir. $(i=j)$, $\alpha=\beta$ ise, ihmal edileceğini işaret eder.

Dönme ve öteleme bakımlarından değişmezlik için yani izotrop ve homojen bir akışkan halinde

$$\rho_{\alpha}^{(1)}(\vec{r}) = n_{\alpha}$$

$$\rho_{\alpha\beta}^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}') = n_{\alpha} n_{\beta} g_{\alpha\beta}(|\vec{r} - \vec{r}'|) \quad (I.5-5)$$

olar; burada $g_{\alpha\beta}$ çift dağılım fonksiyonlarıdır. Açık olarak $4\pi n_{\beta} g_{\alpha\beta}(r) r^2 dr$, α türü bir parçacıktan r mesafede (dr içine) yerleşmiş β türü parçacıkların ortalama sayısıdır. $r \rightarrow \infty$ için, bir akışkan içindeki iki parçacığın konumları tamamen korelasyonsuz olduğuna (uzun-menzil düzeni olmadığına) göre

$$\lim_{r \rightarrow \infty} g_{\alpha\beta}(r) = 1 \quad (I.5-6)$$

yazılır ve $r \rightarrow \infty$ limitinde sıfır olan $h_{\alpha\beta}(r)$ çift korelasyon fonksiyonları

$$h_{\alpha\beta}(r) = g_{\alpha\beta}(r) - 1 \quad (I.5-7)$$

ile tanımlanır.

Düşük yoğunluk (zayıf eşleşme) limitinde, sadece çifter çifter parçacık konumları korelasyonlu olduklarından

$$\lim_{n \rightarrow \infty} g_{\alpha\beta}(r) = \exp \left[- \frac{\Phi_{\alpha\beta}(r)}{k_B T} \right] \quad (I.5-8)$$

olur; burada $\Phi_{\alpha\beta}(r)$, küresel kabul edilen α ve β parçacık türleri arasındaki çift potansiyeldir.

İlgili iki korelasyon fonksiyon matrisi

$$S_{\alpha\beta}(r) = \delta_{\alpha\beta} \delta(\vec{r}) + n (x_\alpha x_\beta)^{1/2} h_{\alpha\beta}(r) \quad (I.5-9)$$

bağıntısı ile ve tersi

$$\sum_\gamma \left(\bar{S}_{\alpha\gamma}^{-1}(\vec{r}-\vec{r}'') S_{\gamma\beta}(\vec{r}''-\vec{r}') \right) d\vec{r}'' = \delta_{\alpha\beta} \delta(\vec{r}-\vec{r}') \quad (I.5-10)$$

bağıntısı ile tanımlanır.

Ters matris

$$\bar{S}_{\alpha\beta}^{-1}(r) = \delta_{\alpha\beta} \delta(\vec{r}) - n (x_\alpha x_\beta)^{1/2} c_{\alpha\beta}(r) \quad (I.5-11)$$

yoluyla $c_{\alpha\beta}(r)$ direkt korelasyon fonksiyonlarını tanımlar. $h_{\alpha\beta}(r)$ fonksiyonu $c_{\alpha\beta}(r)$ cinsinden Ornstein-Zernike bağıntıları ile ifade edilebilir:

$$h_{\alpha\beta} = c_{\alpha\beta}(r) + n \sum_\gamma x_\gamma c_{\alpha\beta} \otimes h_{\gamma\beta} \quad (I.5-12)$$

Burada $\otimes$ işareti konvolüsyon çarpımını işaret eder.

$$\hat{f}(k) = n \int e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} f(r) d^3r \quad (I.5-13)$$

Fourier dönüşümleri dahil edildiklerinde, Ornstein-Zernike bağıntıları k-uzayında basit bir şekil alır:

$$\hat{h}_{\alpha\beta}(k) = \hat{c}_{\alpha\beta}(k) + \sum_{\gamma} x_{\gamma} \hat{c}_{\alpha\gamma}(k) \hat{h}_{\gamma\beta}(k) \quad (I.5-14)$$

Kısmi yapı faktörlerinin

$$S_{\alpha\beta}(k) = \frac{1}{(N_{\alpha} N_{\beta})^{1/2}} \langle \rho_{k\alpha} \rho_{k\beta}^* \rangle \quad (I.5-15)$$

olarak tanımlanır. Bunlar üç yapı faktörünü tanımlamak kesin olarak $S_{\alpha\beta}(r)$ 'nin Fourier dönüşümleri oldukları için kullanılabilir: kolayca doğrulanır:

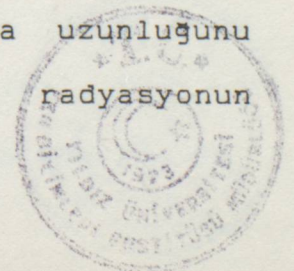
$$S_{\alpha\beta}(k) = \delta_{\alpha\beta} + (x_{\alpha} x_{\beta})^{1/2} \hat{h}_{\alpha\beta}(k) \quad (I.5-16a)$$

$$\hat{S}_{\alpha\beta}^{-1}(k) = \delta_{\alpha\beta} - (x_{\alpha} x_{\beta})^{1/2} \hat{c}_{\alpha\beta}(k) \quad (I.5-16b)$$

$S_{\alpha\beta}(k)$ kısmi yapı faktörlerine doğrudan doğruya radyasyon difraksiyon teknikleri ile lineer kombinasyonlardan erişilebilir:

$$I(\theta) \sim \sum_{\alpha} \sum_{\beta} f_{\alpha} f_{\beta} S_{\alpha\beta}(k) \quad (I.5-17)$$

burada f_{α} , α türünün atomik form faktörünü (X-ışın difraksiyonu) veya ortalama nükleer saçılma uzunluğunu (nötron difraksiyonu) gösterir ve $I(\theta)$, radyasyonun dalga boyu λ olmak üzere,



$$k = \frac{2\pi \sin \theta}{\lambda} \quad (I.5-18)$$

ile verilen saçılma açısında birim hacim başına saçılma şiddetidir.

iki iyonik tür ihtiva eden sistemler için toplam mikroskopik sayı yoğunluğu

$$\rho_N(\vec{r}, t) = \rho_1(\vec{r}, t) + \rho_2(\vec{r}, t) \quad (I.5-19)$$

ve yük yoğunluğu ergimis tuz halinde

$$\rho_Z(\vec{r}, t) = Z_1 \rho_1(\vec{r}, t) + Z_2 \rho_2(\vec{r}, t) \quad (I.5-20)$$

Yuklu katı kürelerden oluşan akışkan sistemleri olarak tanımlanır. Bunlar üç yapı faktörünü tanımlamak için kullanılabılır:

$$S_{NN}(k) = \frac{1}{N} \langle \rho_{KN} \rho_{KN}^* \rangle = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} (x_{\alpha} x_{\beta})^{1/2} S_{\alpha\beta}(k) \quad (I.5-21a)$$

$$S_{NZ}(k) = \frac{1}{N} \langle \rho_{KN} \rho_{KZ}^* \rangle = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} (x_{\alpha} x_{\beta})^{1/2} Z_{\beta} S_{\alpha\beta}(k) \quad (I.5-21b)$$

$$S_{ZZ}(k) = \frac{1}{N} \langle \rho_{KZ} \rho_{KZ}^* \rangle = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} (x_{\alpha} x_{\beta})^{1/2} Z_{\alpha} Z_{\beta} S_{\alpha\beta}(k) \quad (I.5-21c)$$

plazmanın özelliklerini tasvir etmede yararlı olduğu ve bilgisayar simülasyon sonuçları ile karşılaştırılabilir olduğu doğrulanmıştır.

Şimdi düzgün nötr olan bir fon içinde yuklu katı kürelerden oluşan çok-bileşenli bir akışkan için OKY'nin genel çözümünü taktik edeceğiz. Çözüm yöntemi Baxter'in faktörizasyon teoremine dayanır. Bu yöntem Oxford tarafından yuklu akışkanlara temsil edildi. Bu yöntem düzgün nötr olan bir fon içinde

BÖLÜM II

çaplarına, ρ yoğunluklarına ve Zie yüklerine sahip n -bileşenli katı küreler sistemini gözönüne alıyoruz. Fon, yegane işlevi toplam yük nötrlüğünü temin etmek üzere alınır. Toplam yük nötrlüğü koşulu budur:

ÇOK BİLEŞENLİ PLAZMA İÇİN ORTALAMA KÜRESEL YAKLAŞIM (OKY) (II.1-1)

OKY toplam korelasyon fonksiyonları $h_{ij}(r)$ ve direkt korelasyon fonksiyonları $c_{ij}(r)$ üzerine şu koşulları yükler:

(II-1) OKY 'A GİRİŞ VE ANALİTİK ÇÖZÜM (II.1-2a)

Yüklü katı kürelerden oluşan akışkan sistemleri geçmişte hem kendilerine özgü istatistik mekanik ilginçliği bakımından ve hem de fiziksel sistemleri temsil edebilmeleri bakımından yoğun şekilde incelenmiştir. Ayrıca nötr olan bir fon içinde yüklü katı kürelerden oluşan akışkanlar da incelenmiştir ve tek-bileşenli bir akışkan sistemi için ortalama küresel yaklaşımın (OKY) çözümü bilinir.⁽⁹⁾ Bu çözümün tek-bileşenli yoğun bir plazmanın özelliklerini tasvir etmede yararlı olduğu⁽¹⁰⁾ ve bilgisayar simülasyon sonuçları ile karşılaştırılabilir olduğu doğrulanmıştır.

Şimdi düzgün nötr olan bir fon içinde yüklü katı kürelerden oluşan çok-bileşenli bir akışkan için OKY 'nin genel çözümünü taktim edeceğiz.⁽¹¹⁾ Çözüm yöntemi Baxter'in faktörizasyon şemasına dayanır.⁽¹²⁾ Bu şema Blum tarafından yüklü akışkanlara teşmil edildi.⁽¹³⁾

ρ yoğunluklu düzgün nötr olan bir fona gömülü, di

çaplarına, ρ_i yoğunluklarına ve $Z_i e$ yüklerine sahip n-bileşenli katı küreler sistemini gözönüne alıyoruz. Fon, yegane işlevi toplam yük nötrlüğünü temin etmek üzere alınır. Toplam yük nötrlüğü koşulu şudur:

$$\rho = \sum_{i=1}^n \rho_i Z_i = 0 \quad (II.1-1)$$

OKY toplam korelasyon fonksiyonları $h_{ij}(r)$ ve direkt korelasyon fonksiyonları $c_{ij}(r)$ üzerine şu koşulları yükler:

$$h_{ij}(r) = -1 \quad (r < d_{ij}) \quad (II.1-2a)$$

$$c_{ij}(r) = -\frac{Z_i Z_j \beta e^2}{\epsilon_0 r} \quad (r > d_{ij}) \quad (II.1-2b)$$

Burada $d_{ij} = 1/2(d_i + d_j)$, $\beta = 1/k_B T$ ve ϵ_0 dielektrik sabitidir. (II.1-2a) koşulu katı küreler için kesindir, ama (II.1-2b) koşulu bir yaklaşımdır.

$$c_{ij}^0(r) = c_{ij}(r) + \frac{Z_i Z_j \beta e^2}{\epsilon_0 r} \quad (II.1-3)$$

fonksiyonunu ve Fourier dönüşümü $c_{ij}^0(k)$ 'yı tanımlayarak, düzensiz bir sistem için

$$I - R^{1/2} \left[C^0(k) - \frac{D}{k^2 + \mu^2} \right] R^{1/2} = Q(k) Q^T(-k) \quad (II.1-4)$$

olduğu ispat edilebilir; burada $R^{1/2}$, $c^0(k)$ ve D matrislerdir ve elemanları sırasıyla $\rho_i^{1/2} \delta_{ij}$, $c_{ij}^0(k)$ ve $Z_i Z_j \beta e^2 / \epsilon_0$, $Q(k)$ matrisinin elemanları ise, $\lambda_{ij} = 1/2(d_i - d_j)$ olmak üzere,

$$Q_{ij}(k) = \delta_{ij} + (\rho_i \rho_j)^{1/2} \left[-\int_{\lambda_{ij}}^{d_{ij}} dr Q_{ij}(r) e^{ikr} + A_{ij} \int_{d_{ij}}^{\infty} dr e^{(ik - \mu)r} \right] \quad (II.1-5)$$

$\mu \rightarrow 0$ limitinde (II.1-4) denklemi $Q_{ij}(k)$ faktör korelasyon fonksiyonlarını tanımlar. (II.1-12)

Blum'un işlem yolunu '13' izleyerek, o zaman

$$J_{ij}(r) = 2\pi \int_r^\infty dt t h_{ij}(t) \quad (II.1-6)$$

ile tanımlanan $J_{ij}(r)$ fonksiyonlarının (II.1-13)

$$J_{ij}(r) = Q_{ij}(r) + \frac{1}{2} A_{ij} + \sum_{l=1}^n \rho_l \left[\int_{\lambda_{jl}}^{d_{jl}} dt Q_{il}(t) J_{il}(|r-t|) + A_{il} \int_0^{d_{jl}-r} dt J_{il}(t) \right] \quad (II.1-7)$$

integral denklemlerinin çözümleri olduklarını buluruz; burada $A_{ij} = Z_i a_j$ şeklindedir. (II.1-2a) denklemi, (II.1-15)

$$J_{ij}(r) = 2\pi \int_r^\infty dt t h_{ij}(t) \quad (II.1-16)$$

olmak üzere, (II.1-17)

$$J_{ij}(r) = \pi r^2 + J_{ij} \quad (r < d_{ij}) \quad (II.1-8)$$

olduğunu işaret eder. (II.1-7) denklemindeki $J_{ij}(r)$ için (II.1-8) 'in kullanılması, $\rho=0$ olmak üzere, $Q_{ij}(r)$ 'nin üçüncü mertebeden bir polinom olduğunu verir. Cebirsel işlem yapıldıktan sonra, (II.1-9)

$$Q_{ij}(r) = \frac{\pi}{3} \rho a_j (r-d_{ij})^3 + \frac{1}{2} Q_{ij}''(r-d_{ij})^2 + Q_{ij}'(r-d_{ij}) - Z_i a_j \quad (II.1-9)$$

buluruz. Burada (II.1-19) 'a kadar denklemler $\rho=0$

$$a_j = \frac{\frac{\alpha^2}{2\Gamma} (Z_j^* - \frac{\pi}{2\Delta} d_j^2 p_n)}{1 + \Gamma d_j} \quad (II.1-10)$$

$$Q_{ij}' = \frac{2\pi}{\Delta} d_{ij} + \frac{\pi^2}{2\Delta^2} \xi_2 d_i d_j - \frac{2\Gamma^2}{\alpha^2} a_i a_j \quad (II.1-11)$$

ve

$$Q_{ij}'' = \frac{2\pi}{\Delta} \left(1 + \frac{\pi}{2\Delta} \xi_2 d_j + \frac{1}{2} P_n a_j \right) + \pi \rho d_i a_j \quad (\text{II.1-12})$$

Tek-bileşenli akışkan halinde (II.1-19) denklemi (II.1-10), (II.1-11) ve (II.1-12) ifadelerinde görünen büyüklükler:

$$Z_i^* = Z_i - \frac{\pi}{6} \rho d_i^3 \quad (\text{II.1-13})$$

$$P_n = \frac{1}{\Omega} \sum_{i=1}^n \frac{\rho_i Z_i^* d_i}{1 + \Gamma d_i} \quad (\text{II.1-14})$$

$$\Omega = 1 + \frac{\pi}{2\Delta} \sum_{i=1}^n \frac{\rho_i d_i^3}{1 + \Gamma d_i} \quad (\text{II.1-15})$$

$$\Delta = 1 - \frac{\pi}{6} \xi_3 \quad (\text{II.1-16})$$

$$\xi_m = \sum_{i=1}^n \rho_i d_i^m \quad (\text{II.1-17})$$

$$\alpha^2 = \frac{4\pi\beta e^2}{\epsilon_0} \quad (\text{II.1-18})$$

ve Γ parametresi

$$2\Gamma = \alpha \left[\sum_{i=1}^n \rho_i \left(\frac{Z_i^* - \frac{\pi}{2\Delta} d_i^2 P_n}{1 + \Gamma d_i} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (\text{II.1-19})$$

denklemi çözülerek elde edilecektir.

(II.1-9)' dan (II.1-19)'a kadar denklemler $\rho=0$ limitinde saf iyonik akışkan hali için Blum ve Høje'nin denklemlerine indirgenirler.⁽¹⁴⁾ Ayrıca, Γ parametresi için (II.1-19) denklemi, Z_i^* 'ın ve Z_i 'nin yerine konulmasıyla, şekil olarak Blum ve Høje'nin denklemine özdeştir. Z_i^* 'ın efektif değerlik anlamında olduğu

(II.1-13) denkleminde görülür. Efektif değerlik, Z_i değerlikten katı küre içinde bulunan fon yükü kadar azdır.

Tek-bileşenli akışkan halinde (II.1-19) denklemi ikinci mertebeden bir denklem olur ve bu denklemin fiziksel olarak kabul edilebilir kökü $\eta = \frac{\pi}{6} \xi_3$ ve $\kappa^2 = \eta^2 d^2$ cinsinden

$$\Gamma d = -\frac{1}{2} \frac{1+2\eta}{1-2\eta} \left[1 - \left(1 + 2\kappa \frac{(1-\eta)^3}{(1+2\eta)^2} \right)^{1/2} \right] \quad (\text{II.1-20})$$

olarak yazılabilir.

(II-2) İKİ BİLEŞENLİ PLAZMANIN YAPISI

Önceki kısımda $Z_i e$ yüklerine, ρ_i parçacık yoğunluklarına ve d_i çaplarına sahip, $\rho = \sum_i Z_i \rho_i$ yoğunluklu düzgün bir fon içine gömülü yüklü katı kürelerden oluşan çok-bileşenli bir akışkan için OKY 'ın kesin çözümünü gördük. Buna göre bu parametreler ve $a = [(4\pi/3) \sum_i \rho_i]^{-1/3}$ olmak üzere $\Gamma = e^2 / a k_B T$ sıcaklık parametresi çok-bileşenli akışkan sistemini tamamen karakterize ederler. ⁽¹⁵⁾

OKY 'ın iki-bileşenli plazmanın anlatımına uygulanması için özel ilgisi olan Q_{ij} katsayılarıdır ⁽¹⁵⁾, çünkü onlar temas halinde, yani $r=d_{ij}$ 'de $g_{ij}(r)$ çift korelasyon fonksiyonlarının değerlerini verirler. Bu fonksiyonlar plazmada kısa mesafelerde sürekli olarak sıfır olmalıdırlar. Her şekilde, nötron difraksiyonu yöntemi ile er-

gimis BaCl_2 , ZnCl_2 , CaCl_2 ve SrCl_2 değerlikli metal-ion klorürler için $g_{ij}(r)$ fonksiyonları deneysel olarak son en yolda ince-



BÖLÜM III

İKİ DEĞERLİKLİ METAL-İYON KİYÖRÖRLER

(III.1) İKİ DEĞERLİKLİ METAL-İYON KİYÖRÖRLERİN DENEYSEL İNCELEMELERİ

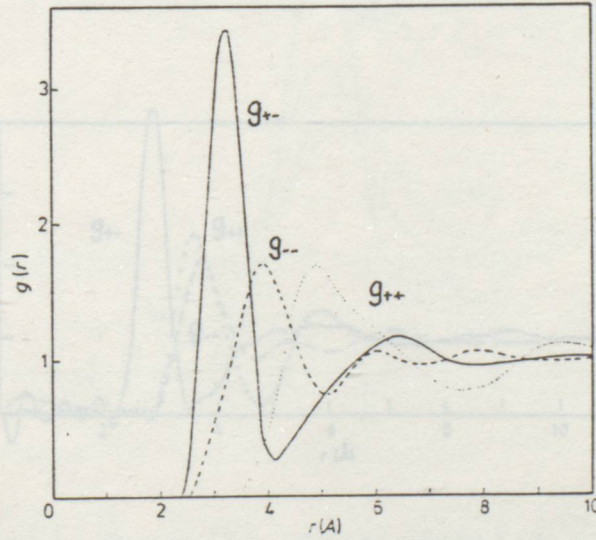
Edwards ve arkadaşları 1975 yılında ergimiş sodyum klorürün nötron difraksiyonu ile ayrıntılı yapısal analizini yaptılar.^{'16'} Aynı çalışmada Edwards ve arkadaşları bu deneysel verilerden faydalanarak katyon-katyon, anyon-anyon ve katyon-anyon radyal dağılım fonksiyonlarını ($g_{++}(r)$, $g_{--}(r)$ ve $g_{+-}(r)$) gözden geçirmişlerdir. Bu büyüklüklerin ölçülen değerlerinin, rijit-iyon potansiyellerin kabul edildiği komputer simülasyonu çalışmaları ve teorik modeller (OKY) ile uyum içinde oldukları görüldü. Bu sonuç 1976 yılında Mitchell ve arkadaşları^{'17'} tarafından yapılan ergimiş RbCl'ün yapısının deneysel incelemeleri ile de desteklenmiştir.

Benzer şekilde, nötron difraksiyonu yöntemi ile ergimiş $BaCl_2$ ^{'18'}, $ZnCl_2$ ^{'19'}, $CaCl_2$ ^{'20'}, ve $SrCl_2$ ^{'21'} gibi iki değerlikli metal-iyon klorürler için $g_{\alpha\beta}(r)$ radyal dağılım fonksiyonları deneysel olarak son on yılda incelenmiştir.

Bu sistemlerin sıcak katı fazdaki çok ilginç olan fiziksel davranışları donma civarında sıvı fazlarının yapısını inceleme için ilave motivasyon temin ederler. Bu fiziksel davranışlar BaCl_2 ve SrCl_2 'deki hızlı-ion iletiminden ZnCl_2 'deki cam halinin varlığına kadar değişir. Bu yönden bu çalışmaların önemi büyüktür. (22)

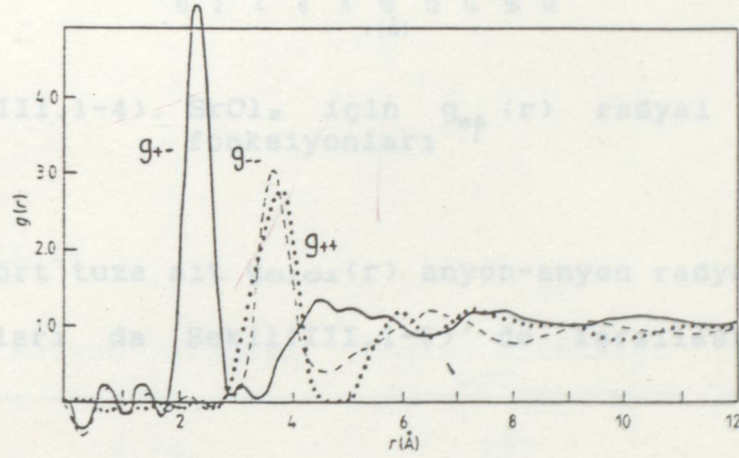
Bu ergimiş tuzların deneysel olarak elde edilmiş $g_{\alpha\beta}(r)$ radyal dağılım fonksiyonları Şekil(III.1-1), Şekil(III.1-2), Şekil(III.1-3) ve Şekil(III.1-4)' de gösterilmiştir.

Şekil(III.1-2). ZnCl_2 için $g_{\alpha\beta}(r)$ radyal dağılım fonksiyonları

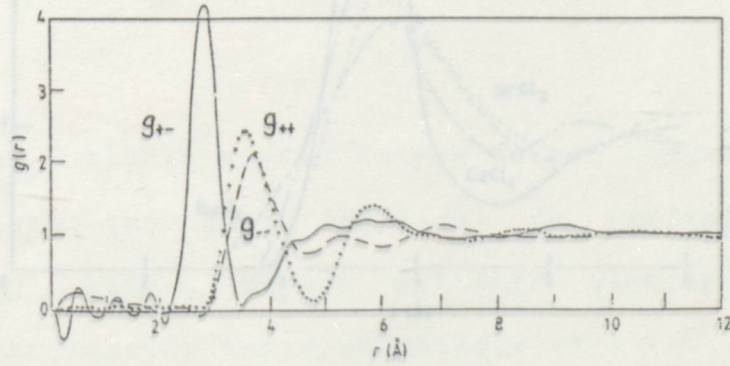


Şekil(III.1-3). CaCl_2 için $g_{\alpha\beta}(r)$ radyal dağılım fonksiyonları

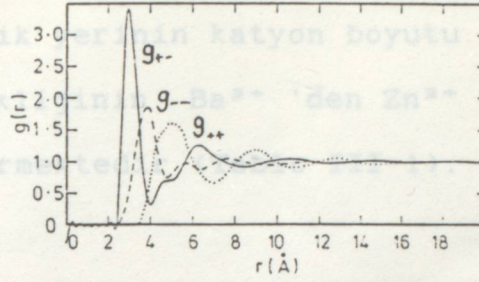
Şekil(III.1-1). BaCl_2 için $g_{\alpha\beta}(r)$ radyal dağılım fonksiyonları



Şekil(III.1-2). ZnCl_2 için $g_{\alpha\beta}(r)$ radyal dağılım fonksiyonları



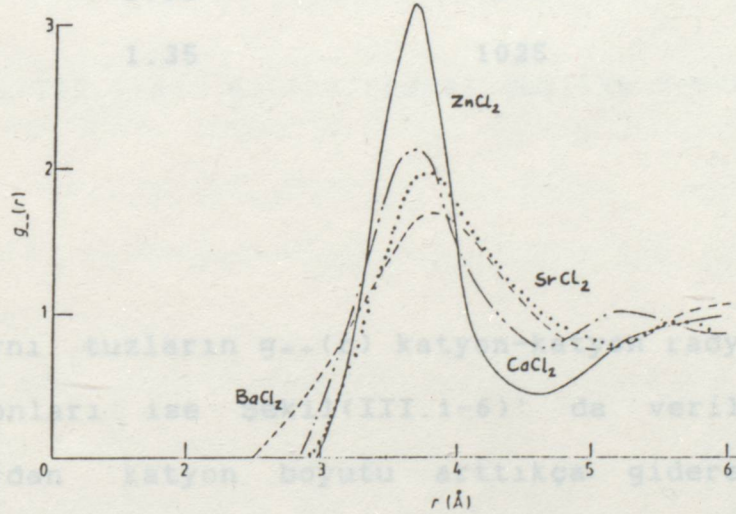
Şekil(III.1-3). CaCl_2 için $g_{\alpha\beta}(r)$ radyal dağılım fonksiyonları



Şekil(III.1-4). SrCl_2 için $g_{\alpha\beta}(r)$ radyal dağılım fonksiyonları

Bu dört tuza ait $g_{\text{ClOCl}}(r)$ anyon-anyon radyal dağılım fonksiyonları da Şekil(III.1-5)' de karşılaştırılmaktadır. (20)

	(Å)	(°)	(Å)
ZnCl_2	0.74	327	3.71
CaCl_2	0.99	820	3.73
SrCl_2	1.12	875	3.80
BaCl_2	1.35	1025	3.86



Şekil(III.1-5). $g_{\text{ClOCl}}(r)$ radyal dağılım fonksiyonları

Bu sonuçlar, pik yerinin kation boyutu ile az değiştiğini ve pik yüksekliğinin Ba^{2+} 'den Zn^{2+} 'ye gidildiğinde

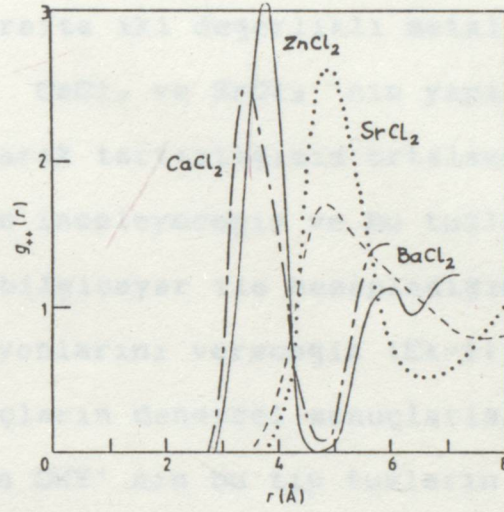
Bu sonuçlar, pik yerinin katyon boyutu ile az değiştiğini ve pik yüksekliğinin Ba^{2+} 'den Zn^{2+} 'ye gidildiğinde arttığını göstermektedir (Tablo III-1).

Tablo (III-1)

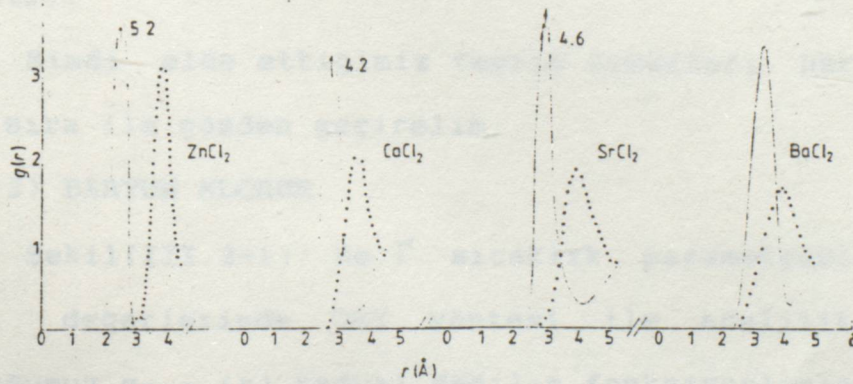
Tuz	Katyon yarıçapı (A)	Ergime sıcaklığı (C)	Pik yeri (A)
$ZnCl_2$	0.74	327	3.71
$CaCl_2$	0.99	820	3.73
$SrCl_2$	1.12	875	3.80
$BaCl_2$	1.35	1025	3.86

Aynı tuzların $g_{++}(r)$ katyon-katyon radyal dağılım fonksiyonları ise Şekil(III.1-6)' da verilmiştir. Bu sonuçlardan katyon boyutu arttıkça giderek daha az belirli koordinasyon tanımlanmaktadır.⁽²⁰⁾

Bu tuzların $g_{+-}(r)$ ve $g_{--}(r)$ radyal dağılım fonksiyonları incelendiğinde, Şekil(III.1-7), katyon boyutu arttıkça benzer ionun birinci koordinasyon kabuğu içine nüfuz etme meyli gözlenmektedir.⁽²⁰⁾



Şekil(III.1-6). $g_{++}(r)$ radyal dağılım fonksiyonları



Şekil(III.1-7). $g_{+-}(r)$ ve $g_{--}(r)$ radyal dağılım fonksiyonları



Şimdi bu deneysel sonuçların ortalama küresel yaklaşım altında yaptığımız analitik çalışma ile uygunluğunu gözden geçirelim.

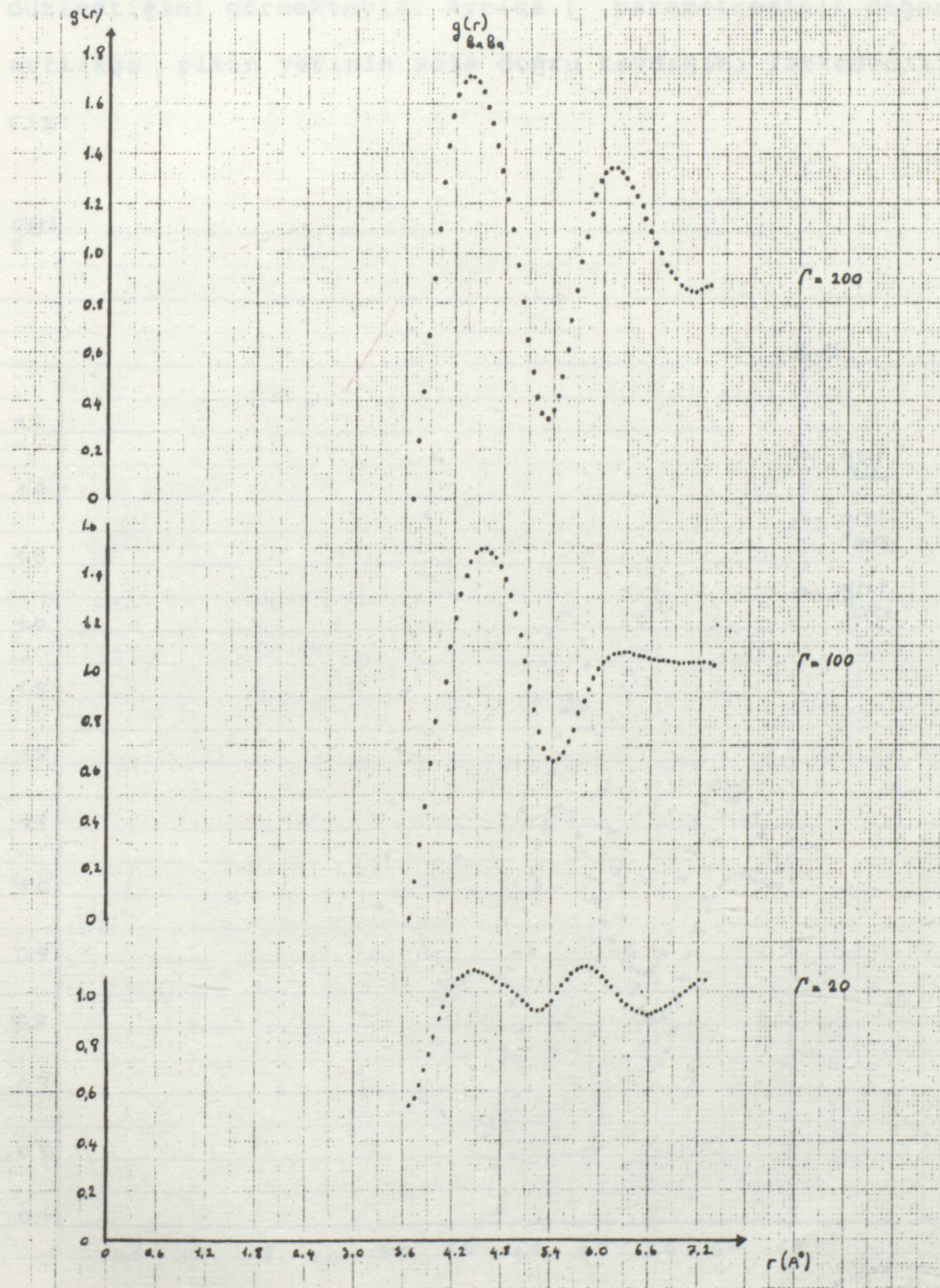
(III.2) İKİ DEĞERLİKLİ METAL-İON KLORÜRLERİN OKY'DAKİ YAPILARI

Bu paragrafta iki değerlikli metal-ion klorürlerden $BaCl_2$, $ZnCl_2$, $CaCl_2$ ve $SrCl_2$ 'nin yapılarını önceki bölümde geniş olarak tartıştığımız ortalama küresel yaklaşım modeli ile inceleyeceğiz ve bu tuzların bu yaklaşım çerçevesinde bilgisayar ile hesapladığımız $g_{\alpha\beta}(r)$ radyal dağılım fonksiyonlarını vereceğiz (Ek-1). Elde ettiğimiz bu teorik sonuçların deneysel sonuçlarla karşılaştırılması aynı zamanda OKY' nin bu tip tuzların yapısının anlaşılması için geçerli olduğunu gösterecektir. Bu da deneylerin yapılamadığı sıcaklıklarda bu tip tuzların yapısı ve davranışları hakkında bilgi sahibi olmamızı sağlayacaktır. Yani bu tuzların faz geçişleri, komplekslik bozulmaları ve kristalleşme özellikleri bir ölçüde anlaşılacaktır.

Şimdi elde ettiğimiz teorik sonuçları herbir tuz için sıra ile gözden geçirelim.

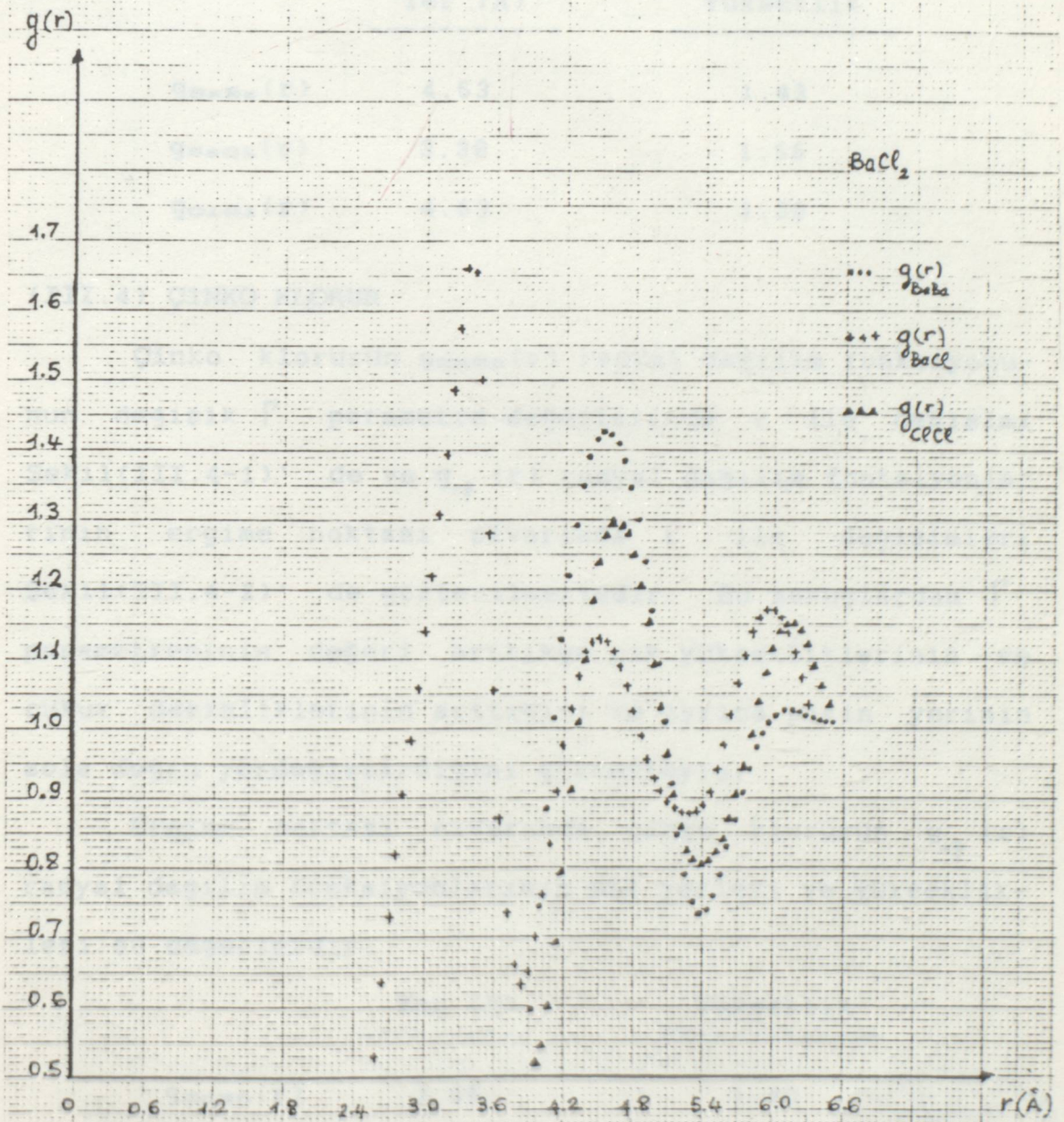
(III.3) BARYUM KLORÜR

Sekil(III.3-1)' de Γ sıcaklık parametresinin çeşitli değerlerinde OKY yöntemi ile analitik olarak bulduğumuz $g_{B-B}(r)$ radyal dağılım fonksiyonlarının r 'ye göre değişimi görülmektedir. Bu sekilden Γ parametresinin değeri azaldıkça $g_{B-B}(r)$ 'nin pik yüksekliklerinin



Şekil(III.3-1). $g_{B-B_A}(r)$ radyal dağılım fonksiyonu

ve çukur derinliklerinin azaldığını ve limitte tamamiyla düzleştğini görmekteyiz. Ayrıca Γ parametresinin değeri arttıkça pikin yerinin sola doğru kaydığını farkedebiliriz. Γ ve yükseklikleri ve değerlerdir.



Şekil(III.3-2). BaCl_2 için $g_{\alpha\beta}(r)$ radyal dağılım fonksiyonları

Baryum klorürün ergime noktası civarındaki $g_{\alpha\beta}(r)$ radyal dağılım fonksiyonlarının r 'ye göre değişimleri Şekil(III.3-2)' de verilmektedir. Bu fonksiyonların pik yerleri ve yükseklikleri şu değerlerdir:

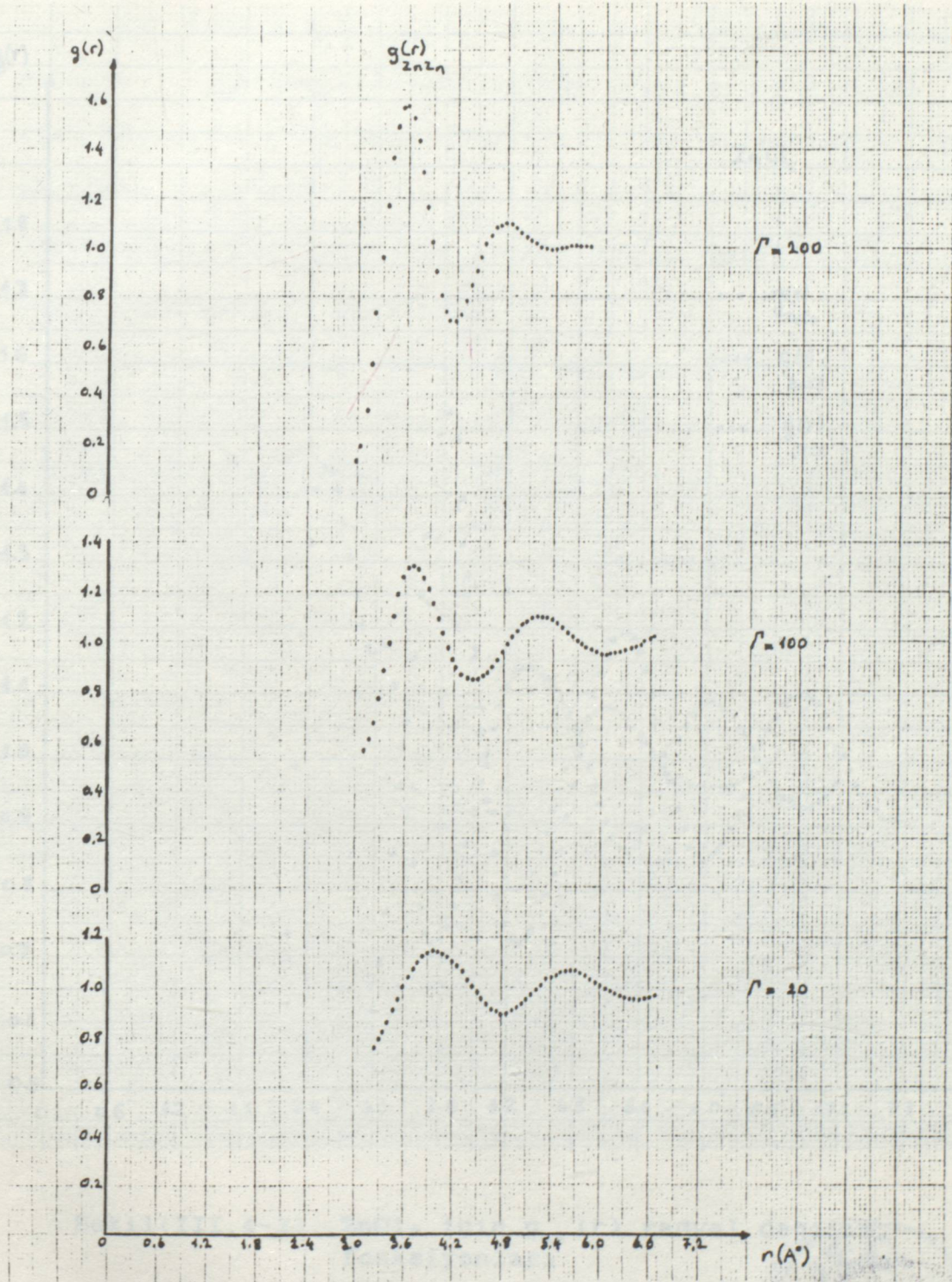
	Yer (A)	Yükseklik
	-----	-----
$g_{BaBa}(r)$	4.53	1.43
$g_{BaCl}(r)$	3.38	1.66
$g_{ClCl}(r)$	4.63	1.30

(III.4) ÇİNKO KLORÜR

Çinko klorürün $g_{znzn}(r)$ radyal dağılım fonksiyonunun değişik Γ parametre değerlerinde r ile değişimi Şekil(III.4-1)' de ve $g_{\alpha\beta}(r)$ radyal dağılım fonksiyonlarının ergime noktası civarında r ile değişimleri Şekil(III.4-2)' de gösterilmektedir. Bu sonuçlardan Γ parametresinin değeri arttıkça pik yüksekliklerinin ve çukur derinliklerinin arttığını ve ayrıca pikin yerinin sola doğru yerdeğiştirdiğini görmekteyiz.

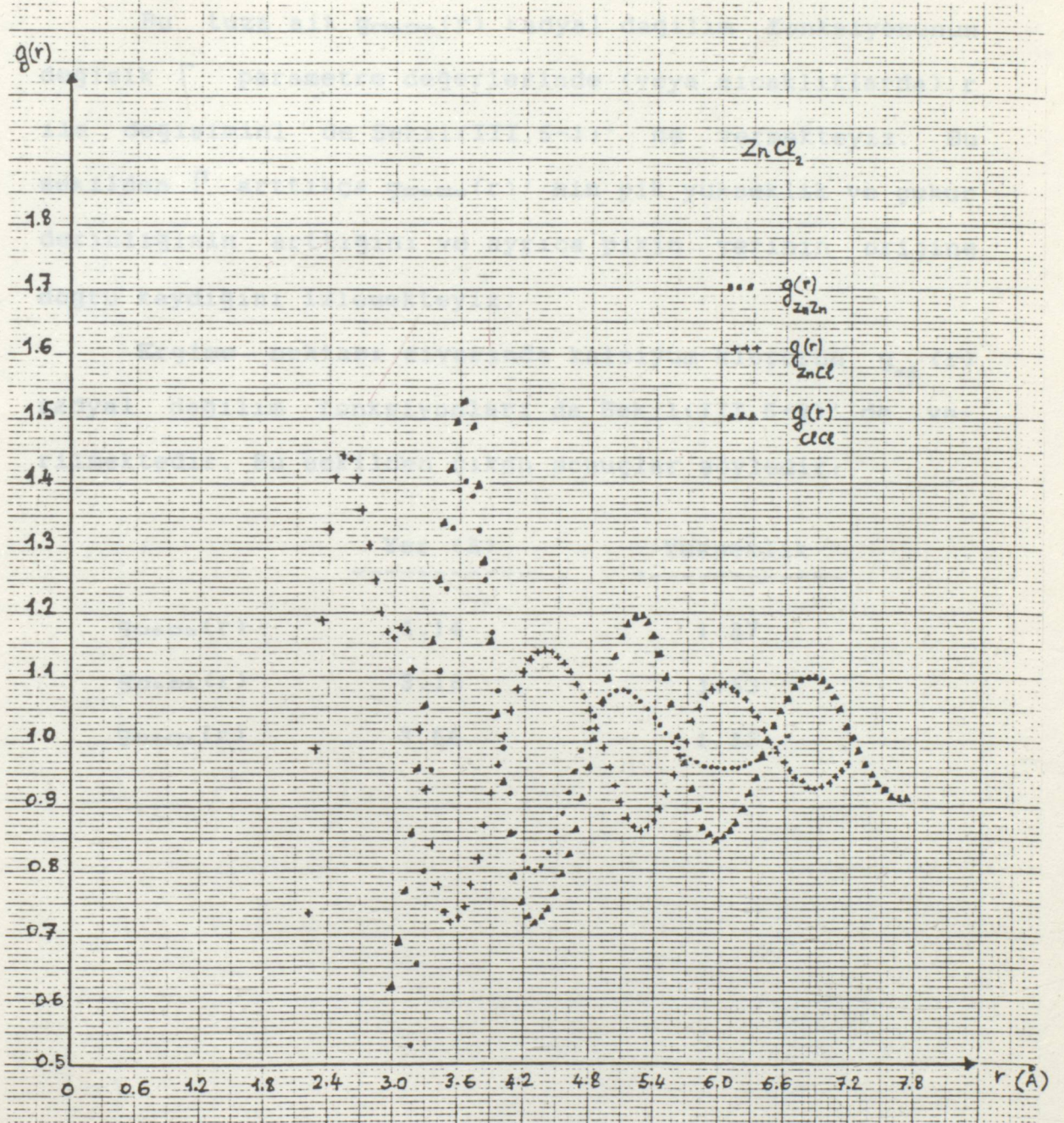
Ergime noktası civarında çinko klorürün $g_{\alpha\beta}(r)$ radyal dağılım fonksiyonlarının pik yerleri ve yükseklikleri şu değerlerdir:

	Yer (A)	Yükseklik
	-----	-----
$g_{znzn}(r)$	3.66	1.40
$g_{znCl}(r)$	2.52	1.45
$g_{ClCl}(r)$	3.66	1.53



Sekil(III.4-1). $g_{Zn^{2+}}(r)$ radyal dağılım fonksiyonu

(III.5) KALSİYUM KLORÜR



Sekil(III.4-2). ZnCl₂ için $g_{\alpha\beta}(r)$ radyal dağılım fonksiyonları



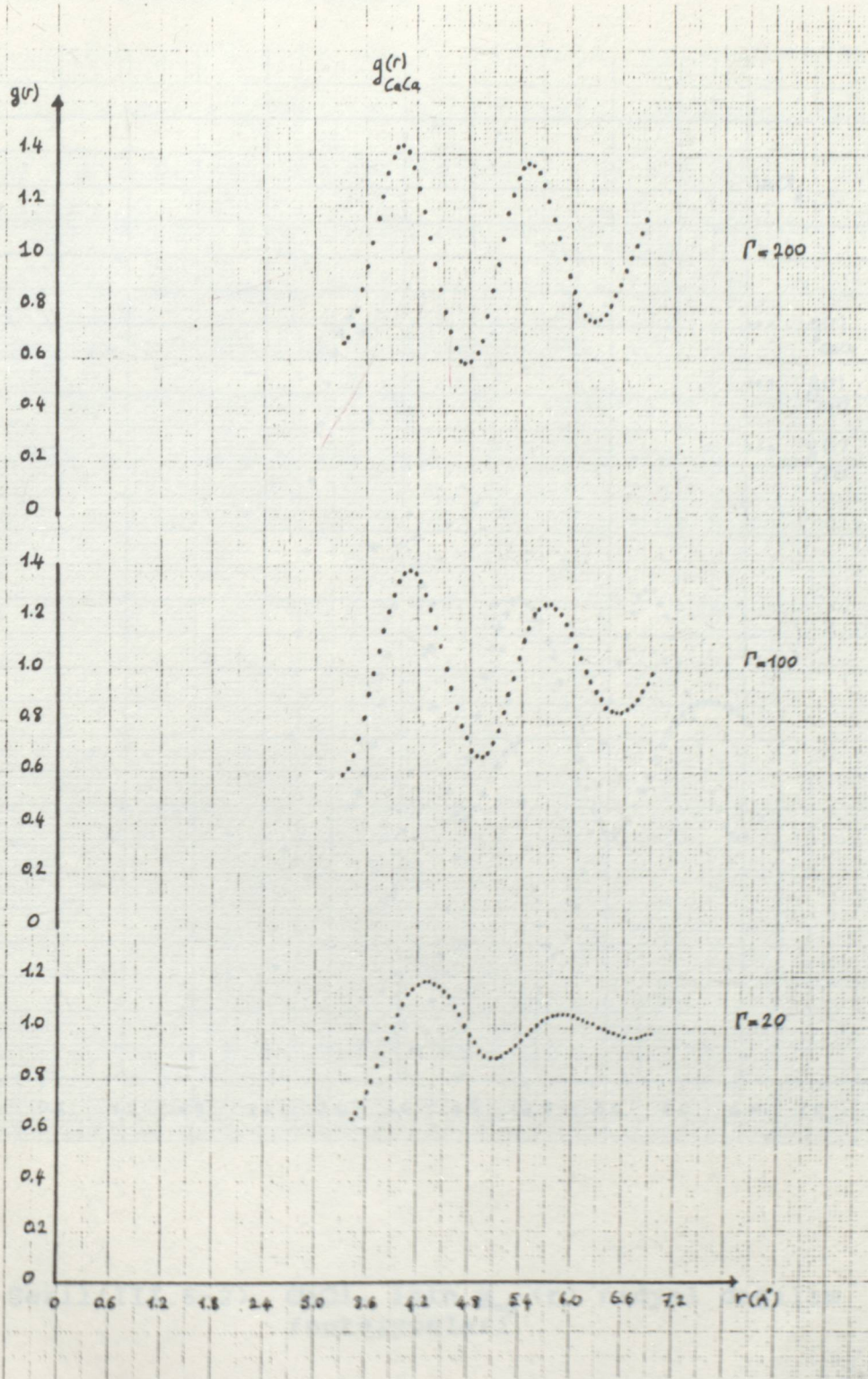
(III.5) KALSİYUM KLORÜR

Bu tuza ait $g_{O-O}(r)$ radyal dağılım fonksiyonunun değişik Γ parametre değerlerinde (veya sıcaklıklarda) r ile değişimini de Şekil(III.5-1)' de vermekteyiz. Bu sekilden Γ arttıkça $g_{O-O}(r)$ ' nin pik yükseklik ve çukur derinliğinin arttığını ve ayrıca pikin yerinin orijine doğru kaydığını izlemekteyiz.

Ergime noktası civarında kalsiyum klorürün $g_{\alpha\beta}(r)$ radyal dağılım fonksiyonları da Şekil(III.5-2)' de verilmektedir. Bu sekilden çıkan sonuçlar şöyledir:

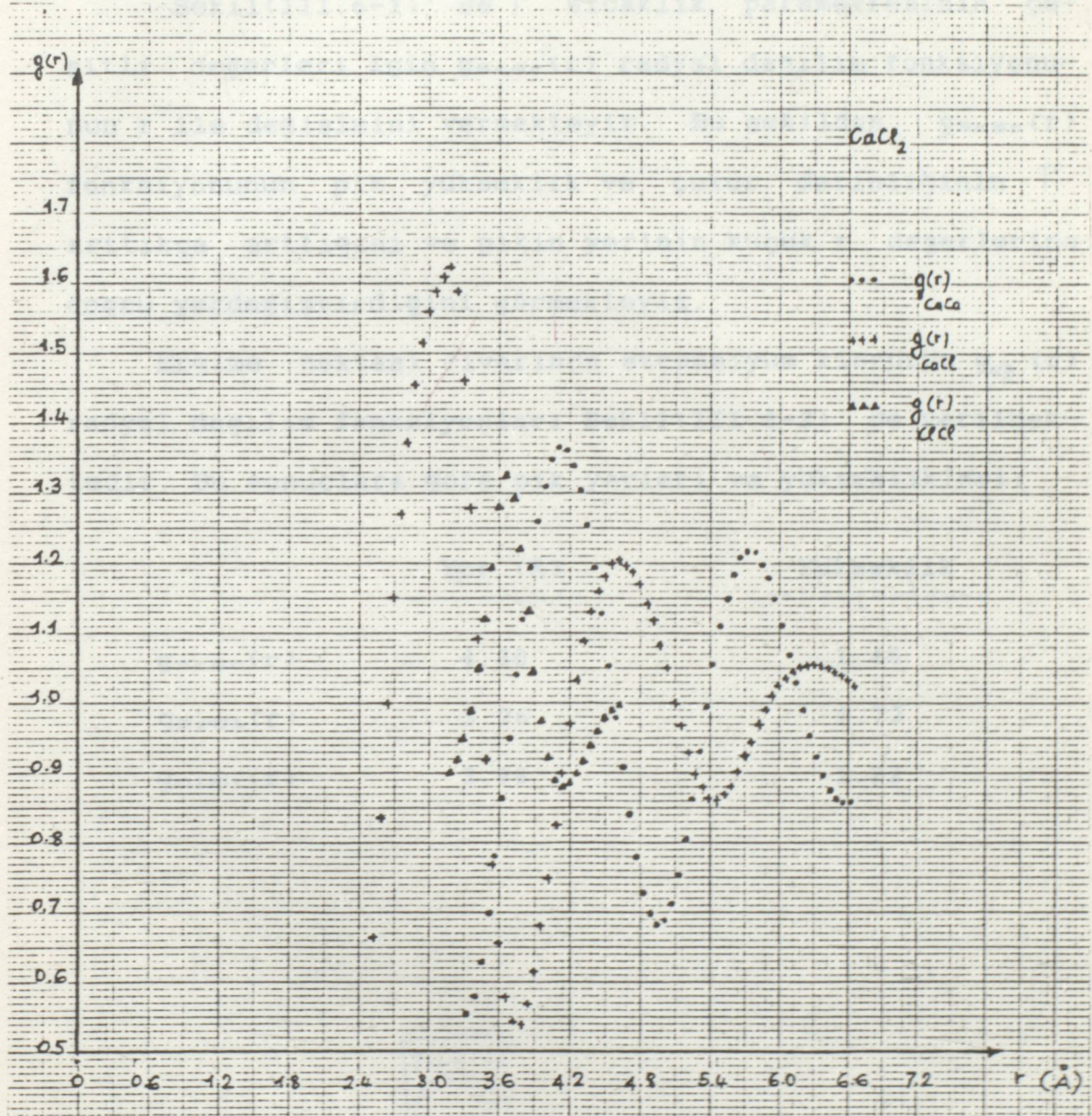
	Yer (A)	Yükseklik
	-----	-----
$g_{O-O}(r)$	4.14	1.37
$g_{O-Cl}(r)$	3.18	1.63
$g_{Cl-Cl}(r)$	3.66	1.33





Sekil(III.5-1), $g_{CaCa}(r)$ radyal dağılım fonksiyonu

(III.6) STRONSIYUM KLORÜR



Şekil(III.5-2). CaCl₂ için $g_{\alpha\beta}(r)$ radyal dağılım fonksiyonları



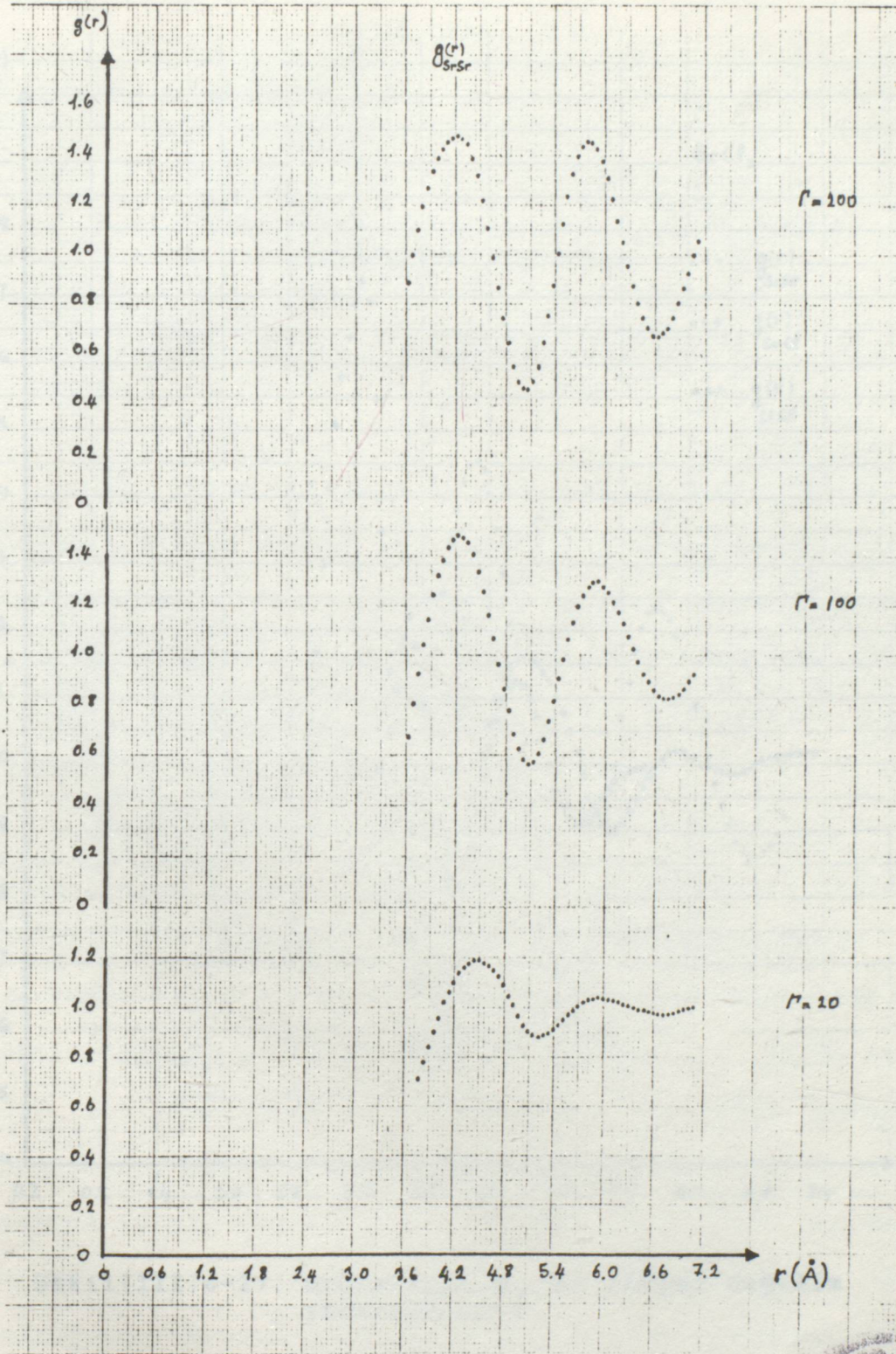
(III.6) STRONSIYUM KLORÜR

Şekil(III.6-1)' de Γ sıcaklık parametresinin çeşitli değerleri için $g_{SrSr}(r)$ radyal dağılım fonksiyonunun r ile değişimini vermekteyiz. Bu sekilden, $g_{SrSr}(r)$ fonksiyonunun pik yükseklik ve çukur derinliğinin Γ arttıkça arttığını ve pikin yerinin küçük r değerlerine doğru yerdeğiştirdiğini görmekteyiz.

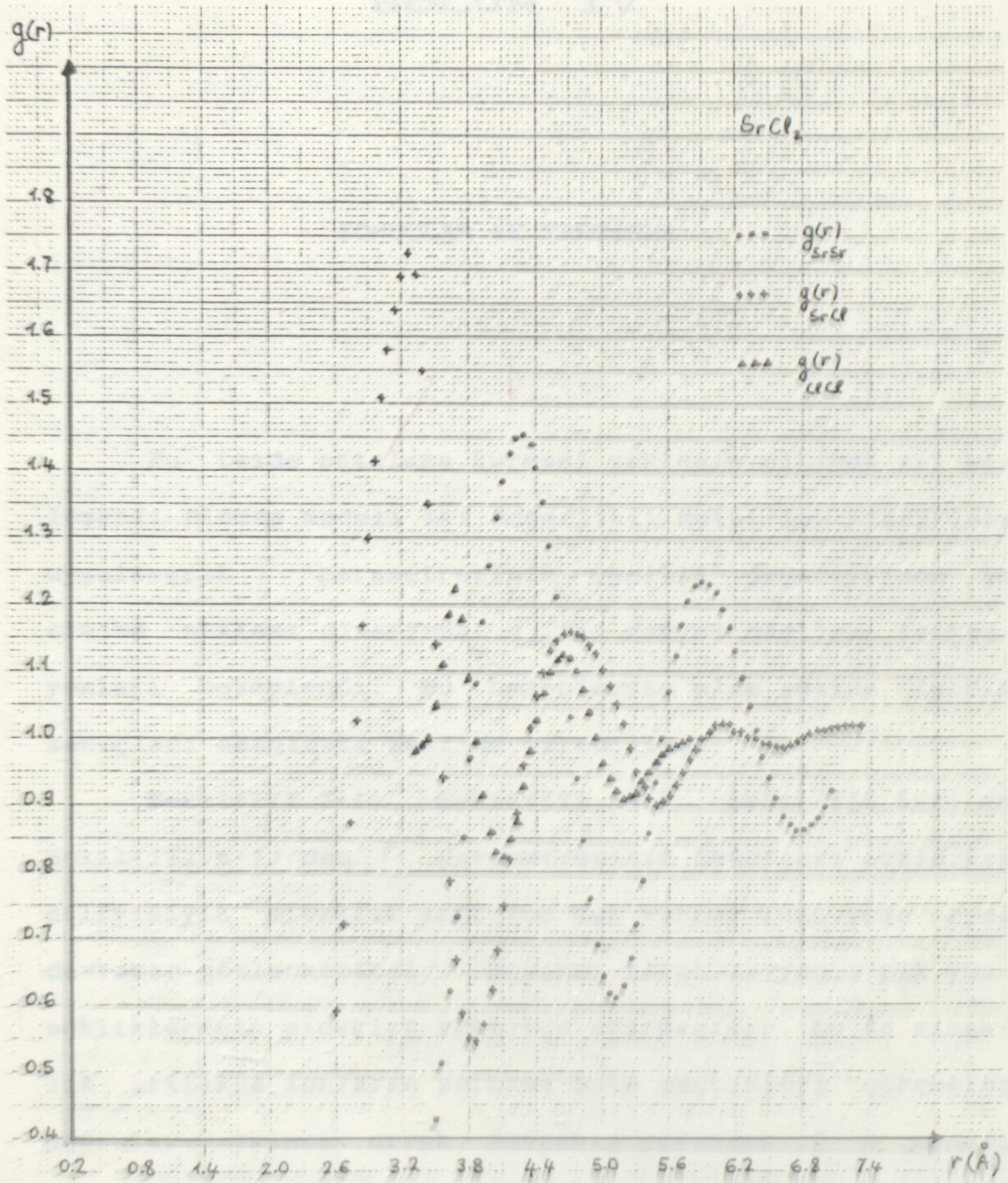
Ergime noktası civarında stronsiyum klorürün $g_{\alpha\beta}(r)$ radyal dağılım fonksiyonları Şekil(III.6-2)' de verilmektedir. Bu sonuçlara göre pik yerleri ve yükseklikleri:

	Yer (A)	Yükseklik
	-----	-----
$g_{SrSr}(r)$	4.30	1.45
$g_{SrOl}(r)$	3.26	1.72
$g_{OlOl}(r)$	3.68	1.22





Şekil(III.6-1). $g_{SrSr}(r)$ radyal dağılım fonksiyonu



Sekil(III.6-2). SrCl₂ için $g_{\alpha\beta}(r)$ radyal dağılım fonksiyonları

BÖLÜM IV

SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu tezde ortalama küresel yaklaşım altında iki bileşenli plazma modeli iki değerlikli metal-ion klorürlere uygulanarak Γ parametresinin çeşitli değerlerinde ve ergime noktası civarında $g_{\alpha\beta}(r)$ radyal dağılım fonksiyonları hesaplandı. Bu hesaplardan elde edilen teorik sonuçları aşağıdaki şekilde verebiliriz.

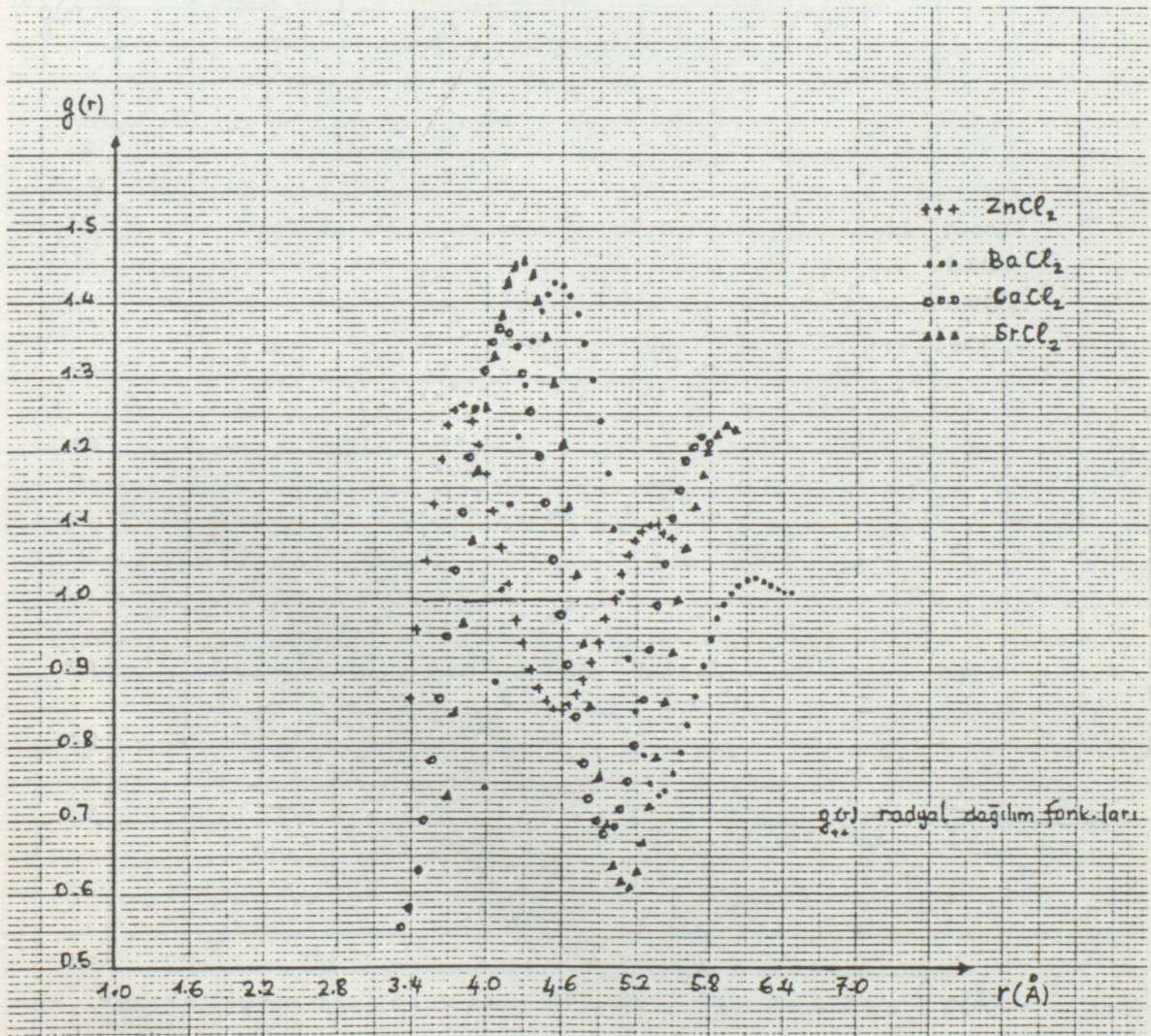
Şekil(III.3-1) , Şekil(III.4-1) , Şekil(III.5-1) ve Şekil(III.6-1)'den Γ parametresinin değerleri azaldıkça dolayısıyla sıcaklık arttıkça her klorür tuzu için aynı davranış gözlenmektedir. Birinci ortak davranış pik yüksekliklerinin sıcaklık arttıkça azalmasıdır. Bu da sıcaklık arttıkça ionların serbest hale geçtikleri gerçeğini doğrular. İkinci ortak davranış yaklaşık 10 Å menzilde radyal dağılım fonksiyonunun birkaç pik verdikten sonra düzleşmesidir. Bu bize kısa menzilde düzen olduğunu ve uzun menzilde düzensiz yapı olduğunu işaret eder. Bir başka ortak davranış, sıcaklık arttıkça pik yerinin r 'nin büyük değerlerine doğru biraz kaymasıdır.

Bu da bize iyonlararası mesafelerin arttığı bilgisini verir. Tüm bu sonuçlar, OKY altında hesaplanan ergimiş alkali metal halojenürler için elde edilenlerle uyum içindedir. (23)

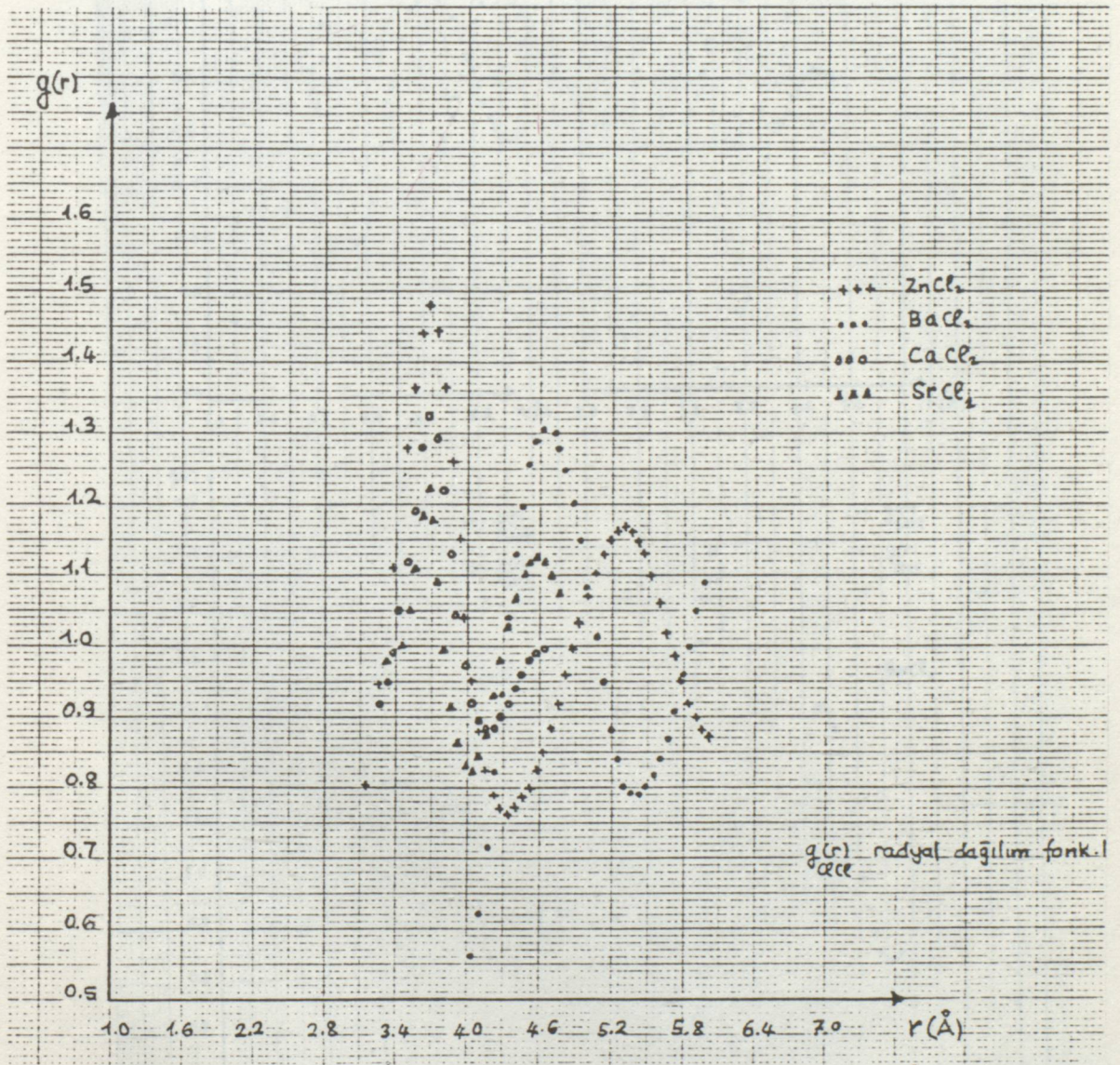
Bu dört tuzun ergime noktaları civarında hesapladığımız $g_{0101}(r)$ radyal dağılım fonksiyonlarını karşılaştırsak, Şekil(IV-1), baryum klorür hariç, pik yerinin katyon boyutu ile çok az değiştiğini ve pik yüksekliğinin Sr^{2+} , Ca^{2+} ve Zn^{2+} sırasında arttığını görürüz. Bu sonuçlar Zn^{2+} gibi küçük iyonların polarizleme gücü ile hasıl edilen Cl^{-} iyonlarının distorsiyonu kanıtlarımızdır veya daha basit şekilde iyon-boyut farklılığına eşlik eden bir istiflenme etkisimidir bugün için tam olarak belli değildir.

Yine ergime noktaları civarında bu dört tuz için hesapladığımız $g_{++}(r)$ katyon-katyon radyal dağılım fonksiyonlarını karşılaştırsak, Şekil(IV-2), Zn^{2+} 'den Ba^{2+} 'ya doğru katyon boyutu arttıkça pik genişliğinin az da olsa arttığını görürüz. Bundan katyon boyutu arttıkça giderek daha az belirli koordinasyon olduğu sonucunu çıkarırız.

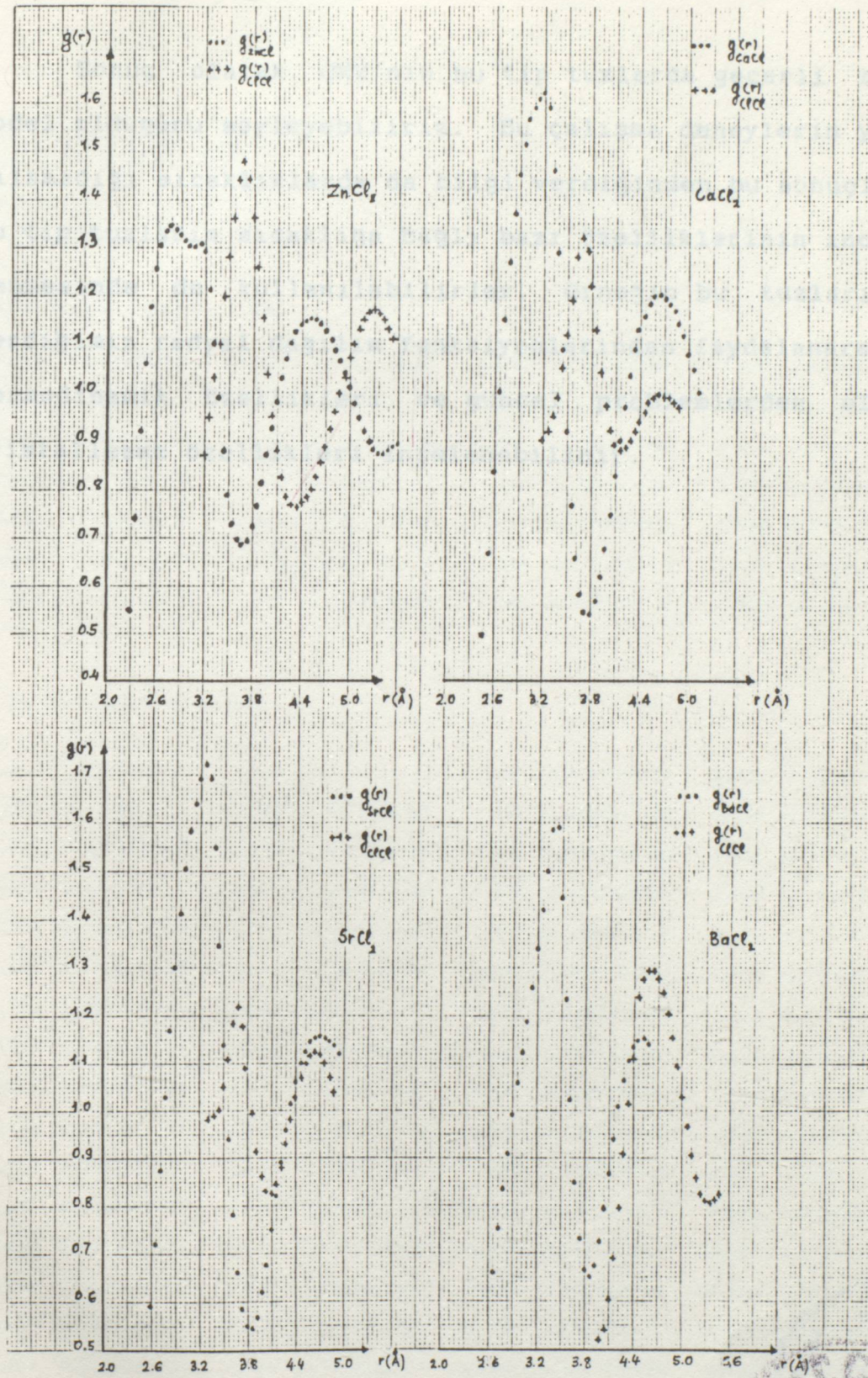
Bu kez herbir tuz için ergime noktası civarında hesapladığımız $g_{+-}(r)$ ve $g_{--}(r)$ radyal dağılım fonksiyonlarını karşılaştırsak, Şekil(IV-3), katyon boyutu arttıkça birinci koordinasyon kabuğu içine benzer iyonun nüfuz etme meylini görürüz. Fakat baryum klorür için bu böyle değildir.



Sekil(IV-1). $g_{0101}(r)$ radyal dağılım fonksiyonları

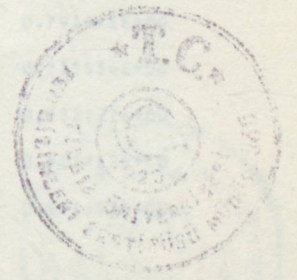


Şekil(IV-2). $g_{++}(r)$ radyal dağılım fonksiyonları



Şekil(IV-3). $g_{+-}(r)$ ve $g_{--}(r)$ radyal dağılım fonksiyonları

Sonuç olarak OKY'nin bu tip tuzlarda geçerli bir model olduğunu söyleyebiliriz. Bu çalışma deneylerin yapılamadığı sıcaklıklarda da bilgi verdiğinden bu sonuçlar bu tip tuzların sıcaklığa bağlı bazı özelliklerinin incelenmesinde de kullanılabilirler. Örneğin bu tuzların, verdiğimiz radyal dağılım fonksiyonlarından faydalanarak, termodinamik özellikleri ve güncel problemlerden olan kristalleşme özellikleri incelenebilir.



GAMA = 0.700000E+02
 XP(1) = 0.700000E+00
 XP(2) = 0.700000E+00
 G(1) = 0.740000E+00
 G(2) = 0.110000E+01
 Z(1) = 0.200000E+01
 Z(2) = 0.100000E+01
 R(1) = 0.232733E-01
 R(2) = 0.200500E+01
 GAMMA = 0.135599E+01 - .925278E+00

P-Y G11(S11) = 0.371670E+01
 G12(S12) = 0.457522E+01
 G21(S21) = 0.457522E+01
 G22(S22) = 0.592702E+01

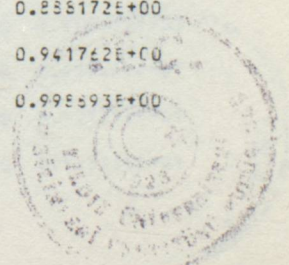
MSA G11(S11) = -0.620070E+01
 G12(S12) = 0.564532E+01
 G21(S21) = 0.564532E+01
 G22(S22) = 0.579038E+01

TEST GIJ(K) . DELTA= 0.030

0.740	-0.620070E+01	1.275	0.564532E+01	1.275	0.564532E+01	1.810	0.579038E+01
0.800	-0.467522E+01	1.335	0.460150E+01	1.335	0.460174E+01	1.870	0.461672E+01
0.860	-0.347004E+01	1.395	0.370124E+01	1.395	0.370167E+01	1.930	0.362110E+01
0.920	-0.251205E+01	1.455	0.293675E+01	1.455	0.293933E+01	1.990	0.279775E+01
0.980	-0.174437E+01	1.515	0.230442E+01	1.515	0.230507E+01	2.050	0.213221E+01
1.040	-0.112366E+01	1.575	0.178625E+01	1.575	0.178693E+01	2.110	0.161067E+01
1.100	-0.019696E+00	1.635	0.137125E+01	1.635	0.137196E+01	2.170	0.121375E+01

JUL 26 10:19 1967 r1 Page 2

1.160	-0.204297E+00	1.695	0.104623E+01	1.695	0.104696E+01	2.230	0.924149E+00
1.220	0.125225E+00	1.755	0.798552E+00	1.755	0.799204E+00	2.290	0.724599E+00
1.280	0.397533E+00	1.815	0.616113E+00	1.815	0.616716E+00	2.350	0.599025E+00
1.340	0.616366E+00	1.875	0.488046E+00	1.875	0.488595E+00	2.410	0.532918E+00
1.400	0.796257E+00	1.935	0.404543E+00	1.935	0.405080E+00	2.470	0.513500E+00
1.460	0.938267E+00	1.995	0.357204E+00	1.995	0.357635E+00	2.530	0.529799E+00
1.520	0.104491E+01	2.055	0.344479E+00	2.055	0.344866E+00	2.590	0.565119E+00
1.580	0.111193E+01	2.115	0.371630E+00	2.115	0.371944E+00	2.650	0.596649E+00
1.640	0.114948E+01	2.175	0.427239E+00	2.175	0.427463E+00	2.710	0.625027E+00
1.700	0.116678E+01	2.235	0.500654E+00	2.235	0.500788E+00	2.770	0.653128E+00
1.760	0.117080E+01	2.295	0.583802E+00	2.295	0.583847E+00	2.830	0.682821E+00
1.820	0.116681E+01	2.355	0.670725E+00	2.355	0.670696E+00	2.890	0.715553E+00
1.880	0.115877E+01	2.415	0.757208E+00	2.415	0.757114E+00	2.950	0.752196E+00
1.940	0.114964E+01	2.475	0.840385E+00	2.475	0.840264E+00	3.010	0.793158E+00
2.000	0.114163E+01	2.535	0.918510E+00	2.535	0.918367E+00	3.070	0.838536E+00
2.060	0.113631E+01	2.595	0.990651E+00	2.595	0.990495E+00	3.130	0.888172E+00
2.120	0.113400E+01	2.655	0.105651E+01	2.655	0.105636E+01	3.190	0.941762E+00
2.180	0.113784E+01	2.715	0.111628E+01	2.715	0.111615E+01	3.250	0.998593E+00



2.240	0.114536E+01	2.775	0.117044E+01	2.775	0.117033E+01	3.310	0.105913E+01
2.300	0.115705E+01	2.835	0.121974E+01	2.835	0.121966E+01	3.370	0.112200E+01
2.360	0.117740E+01	2.895	0.126512E+01	2.895	0.126508E+01	3.430	0.118699E+01
2.420	0.120070E+01	2.955	0.130762E+01	2.955	0.130762E+01	3.490	0.125356E+01
2.480	0.122603E+01	3.015	0.134832E+01	3.015	0.134835E+01	3.550	0.132125E+01
2.540	0.126091E+01	3.075	0.138624E+01	3.075	0.138831E+01	3.610	0.138966E+01
<i>W</i> 2.600	0.127130E+01	<i>W</i> 3.135	0.139754E+01	3.135	0.139746E+01	<i>W</i> 3.670	0.142052E+01
2.660	0.128317E+01	3.195	0.134634E+01	3.195	0.134619E+01	3.730	0.137729E+01
2.720	0.110442E+01	3.255	0.125819E+01	3.255	0.125801E+01	3.790	0.123954E+01
2.780	0.106151E+01	3.315	0.115409E+01	3.315	0.115393E+01	3.850	0.118301E+01
2.840	0.996696E+00	3.375	0.104928E+01	3.375	0.104916E+01	3.910	0.107580E+01
2.900	0.918593E+00	3.435	0.954132E+00	3.435	0.954071E+00	3.970	0.979690E+00
2.960	0.852843E+00	3.495	0.875011E+00	3.495	0.875008E+00	4.030	0.901445E+00
3.020	0.802630E+00	3.555	0.815146E+00	3.555	0.815195E+00	4.090	0.843965E+00
3.080	0.769289E+00	3.615	0.775397E+00	3.615	0.775489E+00	4.150	0.807331E+00
3.140	0.752747E+00	3.675	0.754890E+00	3.675	0.755013E+00	4.210	0.789707E+00
<i>W</i> 3.200	0.751929E+00	3.735	0.751614E+00	3.735	0.751757E+00	4.270	0.788043E+00
3.260	0.765127E+00	3.795	0.762863E+00	3.795	0.763018E+00	4.330	0.792665E+00
3.320	0.790223E+00	3.855	0.785587E+00	3.855	0.785745E+00	4.390	0.817698E+00

3.380	0.824790E+00	3.915	0.816694E+00	3.915	0.816836E+00	4.450	0.841658E+00
3.440	0.865957E+00	3.975	0.853245E+00	3.975	0.853371E+00	4.510	0.868133E+00
3.500	0.910677E+00	4.035	0.892624E+00	4.035	0.892733E+00	4.570	0.895709E+00
3.560	0.956051E+00	4.095	0.932604E+00	4.095	0.932679E+00	4.630	0.923534E+00
3.620	0.999546E+00	4.155	0.971333E+00	4.155	0.971381E+00	4.690	0.951106E+00
3.680	0.103911E+01	4.215	0.100737E+01	4.215	0.100739E+01	4.750	0.978041E+00
3.740	0.107322E+01	4.275	0.103963E+01	4.275	0.103964E+01	4.810	0.100397E+01
3.800	0.110085E+01	4.335	0.106735E+01	4.335	0.106734E+01	4.870	0.102852E+01
3.860	0.112143E+01	4.395	0.109004E+01	4.395	0.109001E+01	4.930	0.105117E+01
3.920	0.113482E+01	4.455	0.110741E+01	4.455	0.110736E+01	4.990	0.107140E+01
<i>W</i> 3.980	0.114119E+01	4.515	0.111934E+01	4.515	0.111928E+01	5.050	0.108864E+01
4.040	0.114094E+01	4.575	0.112586E+01	4.575	0.112562E+01	5.110	0.110227E+01
4.100	0.113467E+01	4.635	0.112708E+01	4.635	0.112703E+01	5.170	0.111169E+01
4.160	0.112304E+01	4.695	0.112311E+01	4.695	0.112306E+01	5.230	0.111632E+01
4.220	0.110679E+01	4.755	0.111415E+01	4.755	0.111409E+01	5.290	0.111565E+01
4.280	0.108659E+01	4.815	0.110034E+01	4.815	0.110033E+01	5.350	0.110921E+01
4.340	0.106306E+01	4.875	0.108187E+01	4.875	0.108185E+01	5.410	0.109661E+01
4.400	0.103671E+01	4.935	0.105886E+01	4.935	0.105882E+01	5.470	0.107753E+01
4.460	0.100851E+01	4.995	0.103202E+01	4.995	0.103200E+01	5.530	0.105265E+01

4.520	0.979903E+00	5.055	0.100313E+01	5.055	0.100311E+01	5.590	0.102386E+01
4.580	0.975121E+00	5.115	0.974571E+00	5.115	0.974566E+00	5.650	0.994087E+00
4.640	0.969900E+00	5.175	0.944717E+00	5.175	0.948726E+00	5.710	0.966211E+00
4.700	0.911351E+00	5.235	0.927470E+00	5.235	0.927497E+00	5.770	0.942545E+00
4.760	0.900037E+00	5.295	0.912168E+00	5.295	0.912183E+00	5.830	0.924717E+00
4.820	0.894643E+00	5.355	0.903466E+00	5.355	0.903504E+00	5.890	0.913515E+00
4.880	0.890204E+00	5.415	0.901403E+00	5.415	0.901447E+00	5.950	0.909001E+00
4.940	0.903522E+00	5.475	0.905465E+00	5.475	0.905526E+00	6.010	0.910640E+00
5.000	0.915936E+00	5.535	0.914779E+00	5.535	0.914858E+00	6.070	0.917489E+00
5.060	0.932245E+00	5.595	0.926233E+00	5.595	0.928275E+00	6.130	0.928366E+00
5.120	0.951195E+00	5.655	0.944523E+00	5.655	0.944576E+00	6.190	0.942012E+00
5.180	0.971384E+00	5.715	0.962432E+00	5.715	0.962472E+00	6.250	0.957210E+00
5.240	0.991670E+00	5.775	0.980749E+00	5.775	0.980800E+00	6.310	0.972954E+00
5.300	0.101087E+01	5.835	0.998470E+00	5.835	0.998494E+00	6.370	0.988386E+00
5.360	0.102798E+01	5.895	0.101473E+01	5.895	0.101473E+01	6.430	0.100286E+01
5.420	0.104231E+01	5.955	0.102688E+01	5.955	0.102688E+01	6.490	0.101593E+01
5.480	0.105338E+01	6.015	0.104045E+01	6.015	0.104043E+01	6.550	0.102722E+01
5.540	0.106067E+01	6.075	0.104914E+01	6.075	0.104913E+01	6.610	0.103649E+01

5.600	0.106467E+01	6.135	0.105485E+01	6.135	0.105482E+01	6.670	0.104357E+01
5.660	0.106496E+01	6.195	0.105755E+01	6.195	0.105751E+01	6.730	0.104837E+01
5.720	0.106198E+01	6.255	0.105736E+01	6.255	0.105733E+01	6.790	0.105082E+01
5.780	0.105615E+01	6.315	0.105450E+01	6.315	0.105447E+01	6.850	0.105093E+01
5.840	0.104792E+01	6.375	0.104925E+01	6.375	0.104924E+01	6.910	0.104876E+01
5.900	0.103796E+01	6.435	0.104201E+01	6.435	0.104198E+01	6.970	0.104443E+01
5.960	0.102670E+01	6.495	0.103315E+01	6.495	0.103313E+01	7.030	0.103815E+01
6.020	0.101479E+01	6.555	0.102311E+01	6.555	0.102309E+01	7.090	0.103022E+01
6.080	0.100280E+01	6.615	0.101237E+01	6.615	0.101235E+01	7.150	0.102094E+01
6.140	0.991241E+00	6.675	0.100140E+01	6.675	0.100139E+01	7.210	0.101079E+01
6.200	0.980665E+00	6.735	0.990728E+00	6.735	0.990743E+00	7.270	0.100024E+01
6.260	0.971512E+00	6.795	0.980878E+00	6.795	0.980879E+00	7.330	0.989901E+00
6.320	0.964176E+00	6.855	0.972328E+00	6.855	0.972354E+00	7.390	0.980389E+00
6.380	0.959001E+00	6.915	0.965577E+00	6.915	0.965606E+00	7.450	0.972274E+00
6.440	0.956248E+00	6.975	0.960975E+00	6.975	0.960994E+00	7.510	0.966073E+00
6.500	0.955943E+00	7.035	0.958725E+00	7.035	0.958751E+00	7.570	0.962167E+00
6.560	0.956033E+00	7.095	0.958924E+00	7.095	0.958955E+00	7.630	0.960684E+00
6.620	0.962328E+00	7.155	0.961448E+00	7.155	0.961476E+00	7.690	0.961633E+00
6.680	0.968476E+00	7.215	0.966022E+00	7.215	0.966062E+00	7.750	0.964789E+00

KAYNAKLAR

- 1 Egelstaff , P.A. ,
"An Introduction to the Liquid State", Ac.Press.
New York and London (1967).
- 2 Hill , T.L. ,
"Statistical Mechanics" , McGraw-Hill (1956).
- 3 March, N.H. and Tosi, M.P. ,
"Coulomb Liquids", Ac. Press. London (1984).
- 4 Hansen , J.P. and McDonald, I.R. ,
"Theory of Simple Liquids", Ac.Press. London (1976).
- 5 March , N.H. , Street , R.A. and Tosi, M.P. ,
"Amorphous Solids and the Liquid State",
Plenum press (1985).
- 6 Barton , A.F.M. ,
"The Dynamic Liquid State" , Longman (1974).
- 7 Rovere , M. and Tosi, M. P. ,
ICTP, Internal Rep. IC/86/37 (1986).
- 8 Parrinello, M. and Tosi, M.P. ,
Riv. Del. Nuovo Cim. 2 , 1 (1979) ;
Akdeniz, Z. ,
PhD. Thesis , University of Istanbul. (1982).
- 9 Palmer , R.G. and Weeks, J.D. ,
J.Chem. Phys. 58 , 4171 (1973) .
- 10 Gillan, M.J. ,
J. Phys. C, 7, L1 (1974).
- 11 Parrinello, M. and Tosi , M.P. ,
ICTP, Internal Rep. IC/79/30 (1979).



- 12 Baxter, R.J. ,
The Journal of Chem.Phys. 52 ,4559 (1970).
- 13 Blum, L. ,
Mol. Phys. 30 ,1529 (1975).
- 14 Blum, L. and Hoje, J.S. ,
The Journal of Phys. Chem. 81, (1977).
- 15 Senatore,G.,Rovere,M.,Parrinello,M.and Tosi, M.P. ,
Il Nuovo Cim. 56, 39 (1980) .
- 16 Edwards ,F.G. et. al. ,
J. Phys. C, 8 , 3483 (1975) .
- 17 Mitchell, E.W.J. et. al. ,
Phil. Mag. 34 , 721 (1976) .
- 18 Edwards,F.G.,Howe,R.A.,Enderby, J.E. and Page,D.I. ,
J.Phys.C, 11, 1053 (1978) .
- 19 Biggin, S. and Enderby, J.E. ,
J.Phys. C, 14 , 3129 (1981) .
- 20 Biggin, S. and Enderby, J.E. ,
J. Phys. C, 14 , 3577 (1981) .
- 21 McGreevy, R.L. and Mitchell, E.W.J. ,
J.Phys. C, 15 ,5537 (1982).
- 22 Pastore ,G. , Ballone , P. and Tosi ,M.P. ,
J.Phys. C, 19 , 487 (1986) .
- 23 Gürbüz ,H. ,
"Ergimiş Alkali-Metal Florür Tuzlarının Donma Krite-
rinin incelenmesi", TFD IX. Ulusal Fizik Kongresi
Bildirisi , Bursa (1987) .

ÖZGEÇMİŞ

İdris Adnan Gümüş 1.1.1948 yılında Burhaniye'de doğdu. İlk ve orta okulu Burhaniye'de, liseyi ise Edremit'te okudu. 1966 yılında girdiği İstanbul Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümünden 1971 yılında Fizik-Matematik lisans diploması aldı.

1971-1973 yılları arasında İ.D.M.M.Akademisi Galatasaray Kimya Mühendisliği Yüksek Okulunda Fizik asistanı olarak, 1974 yılında İstanbul Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümünde fizikçi olarak çalıştı. Mayıs 1974 ayında Yıldız Üniversitesinde asistan oldu. 1976 yılında Yeterlilik ve 1979 yılında Doçent ünvanlarını aldı. Halen Fizik Bölümü Başkan yardımcılığı ve Genel Fizik Anabilim Dalı Başkanlığı görevleri ile öğretim üyeliğini sürdürmektedir.



