



YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Percus-Yoçlek Katı Küre Mod. ile İlişimi Kar. Yap. Fak. Hs.

Yüksek Lisans Tezi

BİRTAN KAVANOZ

YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
KÜTÜPHANE DOKÜMANTASYON
DAİRE BAŞKANLIĞI

R 210

30

Kot

Alındığı Yer

Fen Bilimleri Endt.

Tarih

19.03.1992

Fatura

-

Fiyatı

15.000.-TL

Ayniyat No

1/1

Kayıt No

48220

UDC

530

Ek



YILDIZ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

TEŞEKKÜR

ÖZET

SUMMARY

BÖLÜM I : GİRİŞ 1

1.1 : Maddenin Halleri 1

1.2 : Kristal Olguların Hallerleri 2

BÖLÜM II : YAPI FAKTÖRLERİ 9

BÖLÜM III : İKİLİ SIVI KARIŞIMLARIN YAPISI 12

PERCUS-YEVICK KATI KÜRE MODELİ İLE

İKİLİ SIVI KARIŞIMLARIN YAPI FAKTÖRLERİNİN

HESAPLANMASI

III.9 : Percus-Yevick Katı Küre Modeli

Yapi Faktörleri 31

BÖLÜM IV : SONUÇLAR VE TARTIŞMA 34

Ek : Hervey Edilen S_{ij} İki Küreli Yapi

Faktörleri

KAYNAKLAR

YÜKSEK LİSANS TEZİ

H. BİRTAN KAVANOZ



İSTANBUL 1989

İÇİNDEKİLER

TEŞEKKUR

ÖZET

SUMMARY

BÖLÜM I : GİRİŞ 1

I.1 : Maddenin Halleri 1

I.2 : Kristal Olmayan Malzemeler 2

BÖLÜM II : YAPI FAKTÖRLERİ 9

BÖLÜM III : İKİLİ SIVI KARIŞIMLARIN YAPISI 14

III.1: Kısmi Yapı Faktörleri 14

III.2: Çeşitli Haller için Hesaplanan Kısmi

Yapı Faktörleri 19

III.3: Fe-Si Sıvı Karışımı için Kısmi

Yapı Faktörleri 31

BÖLÜM IV : SONUÇLAR ve TARTIŞMA 34

EK : Hesap Edilen $S_{1j}(y)$ Kısmi Yapı
Faktörleri

KAYNAKLAR

TEŞEKKÜR

Bu çalışmamda, sağladığı eğitim ve teknik imkanlar dolayısıyla dekanımız sayın Prof.Dr. Şevket ERK'e teşekkür etti bir borç bilirim.

Tezimin danışmanlığını üstlenen, çalışmamın her aşamasında beni yönlendiren, öneri ve bilgilerinden yararlandığım bölüm başkanımız hocam sayın Prof.Dr. İdris GUMUŞ'e çok teşekkür ederim.

Ayrıca, çalışmamda beni destekleyen ve yardımlarını gördüğüm tüm arkadaşlara teşekkür ederim.

ÖZET

Bu çalışmada, Percus-Yevick katı küre modelinin ikili sistem için analitik çözümlerinin iki bileşenli sıvı karışımların yapısını anlatabileceği ve üç kısmi yapı faktörünün η , α ve x parametreleri cinsinden nümerik olarak hesaplanabildiği incelendi.

Değişik haller için hesaplanan kısmi yapı faktörleri tartışıldı. Fe-Si karışımı için hesaplanan yapı faktörleri deneysel verilerle karşılaştırıldı.

BÖLÜM I

GİRİŞ

(1.1) MADDEİN HALLERİ

Maddenin fiziksel halleri üç sınıfa ayrılabilir: katı,

sıvı ve gaz. Öndokun **SUMMARY** sonuna kadar gaz

halinin kuramında ve yirminci yüzyıl içerisinde katı

In this work, it has been studied that analytic solutions of Percus-Yevick Hard-Sphere Model for binary system can be describe the structure of two-component liquid mixtures and three partial structure factors can be computed in term of η , α , and x parameters.

It has been discussed partial structure factors computed for different cases. Structure factors computed for Fe-Si mixture are compared with experimental data.

kurulmasına katkı sağlar. Sıvı halde atom dağılımı katı

hale nazaran daha düzensizdir ve gaz halindeki atom

dağılımına göre yakın mesafelerde düzenlidir. Bu sık

olmayan ara durum, sıvı halin yapısını temsil edecek

modelin kurulmasını engeller ve bu nedenle sıvı hal

kuramı, gaz ve katı hal kuramlarına göre yavaş gelişme

kaydetmektedir. (1, 2, 3, 4, 5, 6, 7)

Arrica, smert veya samsı hal diye adlandırılan bir

BÖLÜM I

GİRİŞ

(I.1) MADDENİN HALLERİ

Maddenin fiziksel halleri üç sınıfa ayrılabilir; katı, sıvı ve gaz. Ondokuzuncu yüzyılın sonuna kadar gaz halinin kuramında ve yirminci yüzyıl içerisinde katı halin kuramında büyük gelişmeler elde edilmiştir. Gaz ve katı hale karşın, sıvı halin kuramı yavaş aşamalar yapmış gibi görünmektedir. Bunun başlıca sebepleri şunlardır:

Gaz halinde atomlar rastgele dağılırlar ve atomların hareketi tamamen düzensizdir. Diğer taraftan katı halde atomlar üç boyutlu örgütün belli noktalarında titreşirler. Atomların dağılımındaki bu iki zıt durum, bu iki hale ait yapıyı tanımlamak üzere basit modellerin kurulmasına katkı sağlar. Sıvı halde atom dağılımı katı hale nazaran daha düzensizdir ve gaz halindeki atom dağılımına göre yakın mesafelerde düzenlidir. Bu açık olmayan ara durum, sıvı halin yapısını temsil edecek modelin kurulmasını engeller ve bu nedenle sıvı hal kuramı, gaz ve katı hal kuramlarına göre yavaş gelişme kaydetmektedir. [1,2,3,4,5,6,7]

Ayrıca, amorf veya camsı hal diye adlandırılan bir

özel hal vardır. Bu hal genel olarak erimiş maddeyi hızlı soğutma ile elde edilir ve sıvı halinkine çok yakın bir atom dağılımına sahiptir.

(1.2) KRİSTAL OLMAYAN MALZEMELER

Kristal olmayan malzemeler sıvı ve amorf olarak iki grup altında toplanabilir. Sıvı yapıda metaller, alaşımları, oksidler, tuzlar ve kompleksleri; amorf yapıda metalik camlar ve amorf yarı iletkenler örnek olarak sıralanabilir. Amorf yapı katı olmasına karşın atom dağılımı yönünden sıvı hale çok yakındır. Bu malzemelerin değişik fiziksel özelliklerine ait problemlere deneysel ve kuramsal olarak büyük gayretler sarfedilmektedir. [5]

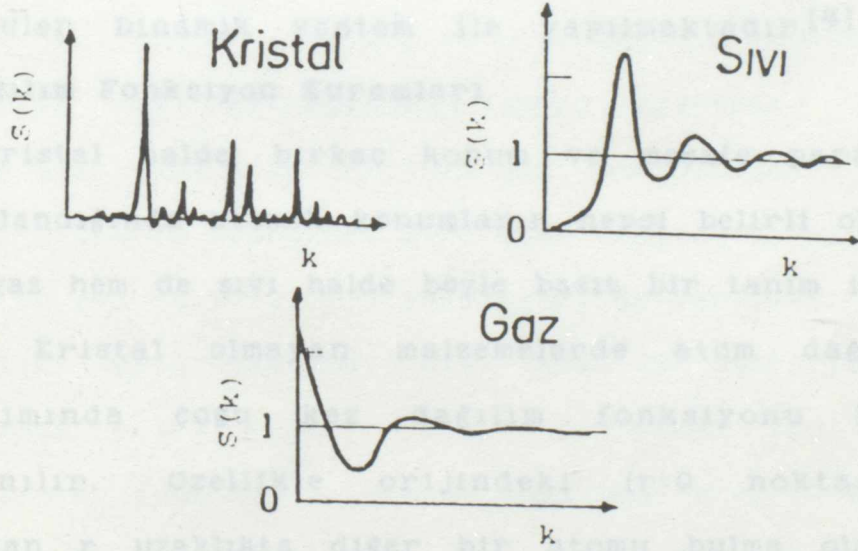
Bu problemlerin nicel tartışması için yapı hakkındaki bilgiler temel teşkil etmektedir ve bundan sonra fiziksel özelliklere ait problemleri çözmek mümkün olabilecektir. Bu nedenle ilk önce yapılması gereken malzemenin yapısı hakkında bilgi edinmektir.

Kristal olmayan malzemelerin yapısı aşağıdaki yöntemlerle incelenmektedir.

a)-Deneysel Yöntemler

Sıvı alaşımların yapıları hakkındaki deneysel bilgiler X-ışınları veya nötron kırınım teknikleri ile elde edilirler. [6] Tek çeşit atomlardan meydana gelen bir gaz için saçılan ışın yoğunluğu eğrisinin hemen hemen şekilsiz olması atomların yerleri arasında hiçbir

ilişkinin olmadığını gösterir. Kristal yapıda bir katı için saçılan ışın yoğunluğu son derece keskin pikler gösterir. Bu durum kristal yapı içerisinde atom yerleri arasında bulunan bağıntıyı açıklar. Sıvılara gelince, tek atomlu bir sıvıdan elde edilen saçılma yoğunluğu eğrisi, katı faz ve gaz fazı arasında yer alır. Pik yükseklikleri ve yerleri ne gaz fazındaki gibi düzensiz ne de katı fazdaki gibi keskindir. Buradaki saçılma yoğunluğu denilen $S(k)$ büyüklüğü yapı faktörüne karşılık gelir ve ikili sıvı alaşımlar için $S_{1j}(k)$ ($i,j=1,2$) şeklinde verilir ve $\vec{k}$ dalga vektörü olmak üzere kısmi yapı faktörleri diye adlandırılır. Katı, sıvı ve gaz hali için karakteristik $S(k)$ yapı faktörleri Şekil(I-1)'de verilmiştir.[5]



Şekil(I-1)

Sıvı hale örnek verilen $S(k)$ eğrisinde görülen ilk pik kısa menzilde atom yerleri arasında var olan düzenliliği gösterir. Dalga vektörünün büyük değerleri için $S(k)$

asimtotik olarak birim büyüklüğe yaklaşır.

b)-Bilgisayar Simülasyon Yöntemleri

Son zamanlarda büyük hafızalı ve çok hızlı bilgisayarların yardımıyla nümerik model simülasyonu kurmak ve bu sonuçları amorf katıların ve sıvıların yapısına ilişkin deneylerle karşılaştırmak mümkün olmuştur. Sıvı yapıyı incelemek için oldukça yeni olan bu yönteme çoğu kez bilgisayar deneyleri adı verilir. Her ne kadar bilgisayar simülasyon yöntemler sınırlı sayıda parçacık (birkaç yüz veya bin) gibi böyle bazı kısıtlamaları ve sınır koşulu içerirlerse de, bilgisayar deneyleri iyi tanımlanmış model için oldukça uygun verileri sağlarlar. Sıvı yapı için bilgisayar deneyleri Monte Carlo yöntemi ve Moleküler Dinamik yöntem ile yapılmaktadır.^[4]

c)-Dağılım Fonksiyon Kuramları

Kristal halde, birkaç konum ve mesafe parametresi tanımlandığında atomik konumların hepsi belirli olur. Ama hem gaz hem de sıvı halde böyle basit bir tanım imkansızdır. Kristal olmayan malzemelerde atom dağılımının anlatımında çoğu kez dağılım fonksiyonu kavramı kullanılır. Özellikle orijindeki ($r=0$ noktasındaki) atomdan r uzaklıkta diğer bir atomu bulma olasılığına karşılık olan $g(r)$ çift dağılım fonksiyonu kullanılır. $\rho_0=N/V$ ortalama sayı yoğunluklu bir sistemde orijindeki bir atomdan r mesafede bir başka atomu bulma olasılığı $\rho_0 g(r)$ 'ye karşılık gelir. $g(r)$ ile verilen bilgi sadece

tek boyutludur ama kristal olmayan sistemler hakkında nicel bilgi verir. Erime durumunda çift dağılım fonksiyonu $g(r)$ ile tanımlandığında, $\rho_0 g(r)$ olasılığı giderek r 'nin büyük değerlerinde ρ_0 ortalama sayı yoğunluğuna yaklaşır, çünkü atomların konumuna ait korelasyonu mesafe arttıkça azalır. Bu durum,

$$\lim_{r \rightarrow \infty} g(r) = 1 \quad (I-1)$$

bağıntısı ile ifade edilir.

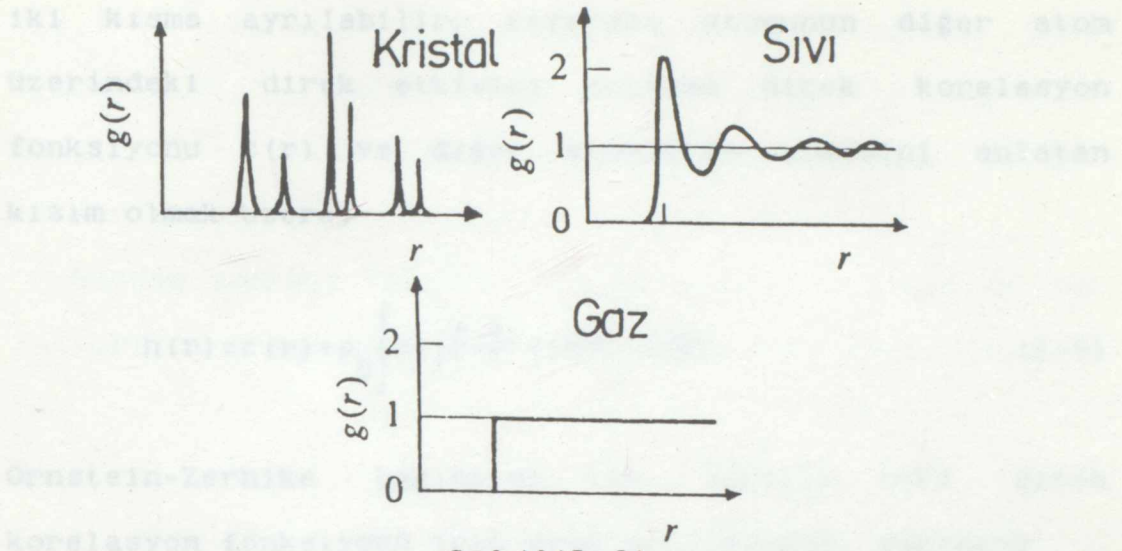
Diğer taraftan, atomlar çift potansiyeldeki itmeden dolayı atom çekirdek çapı içine karşılıklı olarak yaklaşamazlar ve onun için

$$\lim_{r \rightarrow 0} g(r) = 0 \quad (I-2)$$

olur. Bu düşüncelerden $g(r)$ çift dağılım fonksiyonu ρ_0 ortalama sayı yoğunluğundan sapmayı gösterir. Tabii ki böyle bir sapma atom çekirdek çapı yakınındaki r değerlerinde nisbeten büyüktür. $g(r)$ için şematik diyagram katı sıvı ve gaz halleri için Şekil(I-2)'de verilir.

$S(k)$ yapı faktörü, çift dağılım fonksiyonu $g(r)$ hakkında bilgi verir. $g(r)$ ise belli bir atomdan uzaklığın fonksiyonu olarak ortalama atom yoğunluğunu verir. Bu iki önemli fonksiyon, çift dağılım fonksiyonu $g(r)$ ikili sıvı alaşımlar için $g_{1j}(r)$ şeklinde olmak üzere, matematiksel bir ifade ile birbirlerine bağlıdırlar:

$$g_{1j}(r) = 1 + \frac{1}{2\pi^2 \rho_0 r} \int_0^\infty k [S_{1j}(k) - 1] \sin(kr) dk \quad (I-3)$$



Şekil(I-2)

Kristal olmayan sistemlerin yapısı [$g(r)$ veya $S(k)$], verilen sıcaklık ve basınçta parçacıklar arasındaki etkileşmeye dayalı kuramlar ile hesap edilirler. Bu amaç için çift potansiyel ve çift dağılım fonksiyonu arasında aşağıdaki yaklaşık denklemler önerilmiştir:[1,4,5]

- 1- Born-Green denklemi,
- 2- Percus-Yevick denklemi,
- 3- Hypernetted-Chain denklemi.

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

$$h(r)=g(r)-1 \quad (I-4)$$

olarak tanımlanır. $h(r)$ toplam korelasyon fonksiyonu referans atomunun $r=|\vec{r}-\vec{r}'|$ mesafedeki diğer atom üzerindeki toplam etkisinin bir ölçüsüdür ve tanıma göre

iki kısma ayrılabilir; referans atomunun diğer atom üzerindeki direk etkisini anlatan direk korelasyon fonksiyonu $c(r)$ ve diğer atomların etkisini anlatan kısım olmak üzere,

$$h(r) = c(r) + \rho \int_0 c(|\vec{r} - \vec{r}'|) h(r') d\vec{r}' \quad (I-5)$$

Ornstein-Zernike bağıntısı ile verilir. $c(r)$ direk korelasyon fonksiyonu için grup açılımından, yaklaşık

$$c(r) = g(r) [1 - \exp(\phi(r)/k_B T)] \quad (I-6)$$

Percus-Yevick denklemi, (I-5) Ornstein-Zernike denkleminde yerine konulursa,

$$g(r) \exp[\phi(r)/k_B T] = 1 + \rho \int_0 [g(r') - 1] [1 - \exp(\phi(|\vec{r} - \vec{r}'|)/k_B T)] g(|\vec{r} - \vec{r}'|) d\vec{r}' \quad (I-7)$$

Percus-Yevick denklemi elde edilir. Burada T sıcaklık, $\phi(r)$ çift potansiyel ve k_B Boltzmann sabitidir.

(I-7) Percus-Yevick integral denklemi katı küre potansiyeli için kesin olarak çözülmüştür [8,9] ve çift dağılım fonksiyonu veya yapı faktörüne ait analitik ifade elde edilmiştir. Percus-Yevick integral denkleminin katı küre çözümü sıvı metallerin yapısı için tartışılmıştır. [10] Percus-Yevick katı küre modelinin iki bileşenli sisteme genişletilmesi Lebowitz tarafından başarılmış-

tır. [11] Lebowitz'ın çözümleri Ashcroft-Langreth tarafından ikili sıvı karışımların yapısına uygulanmıştır. [12] ikili sıvı karışımların yapısı III. Bölümde tekrar gözden geçirilecektir.

Bundan sonraki bölümde, difraksiyon deneyleriyle yapı faktörleri arasındaki temel ilişkiler tartışılacaktır. Bu ilişkiler, özellikle, X-ışın difraksiyonu kristal olmayan malzemelerin yapısal çözümlemesinde en bilinen ve önemli yöntemdir. Sıvılar için X-ışın difraksiyonunun ilk defa kullanılması 1916'da Debye tarafından tartışılmıştır. Sıvı içinde iki atom ve bunların sağdıkları X-ışınlarının birbirleri ile girişim yaptığı gözönüne alınırsa, iki atomun bağlı konumuna bağlı olan difraksiyon siddetleri ortaya çıkar.

Gelen ve saçılan X-ışınlarının dalga vektörleri sırası ile $\vec{k}_0$ ve $\vec{k}$ ise, $\vec{r}$ konumunda saçılan X-ışınlarının faz faktörü $\exp(-i(\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{r})$ ile ifade edilir.

Buna ek olarak,

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad |\vec{k} - \vec{k}_0| = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta \quad (11-1)$$

bağantısı elde edilir. Burada θ , saçılma açısının yarısıdır ve λ gelen X-ışınlarının dalga boyudur.

Saçılan X-ışınlarının genliği,

$$A(\vec{k}) = \int_V \exp(-i(\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{r}) \rho(\vec{r}) d\vec{r} \quad (11-2)$$

ile verilir; burada $f_j(\vec{k})$, $\vec{r}$ konumundaki j numaralı atoma ait atomik saçılma faktörüdür. Buna göre koherent saçılan X ışınlarının

BÖLÜM II

YAPI FAKTÖRLERİ

Maddenin yapısı tayininde X-ışınları ve nötronlar kullanılır. Özellikle, X-ışın difraksiyonu kristal olmayan malzemelerin yapısal çözümlemesinde en bilinen ve önemli yöntemidir. Sıvılar için X-ışın difraksiyonunun ilk defa kullanılışı 1915'de Debye tarafından tartışılmıştır. Sıvı içinde iki atom ve bunların saçtıkları X-ışınlarının birbirleri ile girişim yaptığı gözönüne alınırsa, iki atomun bağıl konumuna bağlı olan difraksiyon şiddetleri ortaya çıkar.

Gelen ve saçılan X-ışınlarının dalga vektörleri sırası ile $\vec{k}_0$ ve $\vec{k}'$ ise, $\vec{r}$ konumunda saçılan X-ışınlarının faz faktörü $\exp[-i(\vec{k}' - \vec{k}_0) \cdot \vec{r}]$ ile ifade edilir.

Buna ek olarak,

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} |\vec{k}' - \vec{k}_0| = \frac{4\pi}{\lambda} \sin\theta \quad (\text{II-1})$$

bağıntısı elde edilir; burada θ , saçılma açısının yarısıdır ve λ gelen X-ışınlarının dalga boyudur.

Saçılan X-ışınlarının genliği,

$$A(\vec{k}) = \sum_j f_j(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_j) \quad (\text{II-2})$$



ile verilir; burada $f_j(\vec{k})$, $\vec{r}$ konumundaki j numaralı atoma ait atomik saçılma faktörüdür. Buna göre koherent saçılan X ışınlarının şiddeti

$$I_{koh}(\vec{k}) = \langle A^*(\vec{k}) A(\vec{k}) \rangle = \langle |A(\vec{k})|^2 \rangle \\ = \langle \sum_1 \sum_j f_1(\vec{k}) f_j(\vec{k}) \exp[-i\vec{k}(\vec{r}_1 - \vec{r}_j)] \rangle \quad (II-3)$$

bağıntısı ile verilir; burada $\langle \rangle$ sembolleri istatistik ortalamayı gösterir.

Kristal halde, atomların $(\vec{r}_1 - \vec{r}_j)$ bağıl konumu sabit bir değere sahiptir ve onun için k büyüklüğü resiprokal şebekeye karşılıktır. Bu resiprokal şebekenin özellikleri kendi kristal yapısı ile (FCC ve BCC gibi) belirlenir. Bu nedenle, kristal nümune için $I_{koh}(\vec{k})$ birkaç keskin ve müstakıl pik gösterir. Kristal olmayan nümunelerde, bu düzen kaybolduğuna göre (II-3) denkleminde toplam, hem sıvı hem de amorf haller için konuma ait korelasyonun bütün doğrultular üzerinden ortalama değeri ile ifade edilebilir. Buna ilave olarak, sıvılar ve amorf katılar gibi kristal olmayan sistemler için, küresel simetriden dolayı $f(\vec{k})$ atomik saçılma faktörü ve $I_{koh}(\vec{k})$ şiddeti sadece $\vec{k}$ nın $|\vec{k}|$ mutlak değerine bağlıdır.

İki bileşenli bir sistem için saçılan X-ışınlarının genliği,

$$A(k) = f_1(k) \sum_{i=1}^{N_1} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}_{1i}) + f_2(k) \sum_{j=1}^{N_2} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}_{2j}) \quad (II-4)$$

şeklinde yazılabilir; burada $N_1 + N_2 = N$ bir V hacmindeki atomların toplam sayısı, N_1 ve N_2 ise sırasıyla 1 ve 2 atomlarının sayısıdır. Bu nedenle, atom konsantrasyonları $C_1 = N_1/N$ ve $C_2 = N_2/N$ ile verilir. Koherent saçılma şiddeti, (II-3) ve (II-4) denklemleri kullanılarak,

$$I_{\text{koh}}(k) = f_1^2(k) \left\langle \left| \sum_{i=1}^{N_1} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}_{1i}) \right|^2 \right\rangle +$$

$$f_2^2(k) \left\langle \left| \sum_{j=1}^{N_2} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}_{2j}) \right|^2 \right\rangle +$$

$$2f_1(k)f_2(k) \left\langle \sum_{i=1}^{N_1} \sum_{j=1}^{N_2} \exp[-i\vec{k} \cdot (\vec{r}_{1i} - \vec{r}_{2j})] \right\rangle \quad (\text{II-5})$$

şeklinde ifade edilebilir. Buradaki terimler sırasıyla 1-1, 2-2 ve 1-2 atom çiftlerinin kısmi yapı faktörlerine karşılık gelir. Ama, kısmi yapı faktörlerinin tanımları tek değildir. Literatürde, ikili bir alaşımın yapısını karakterize etmek için bu kısmi büyüklüklere ait farklı denklemler kullanılmaktadır. Ayrıca onlar arasında lineer bağıntılar vardır. [5]

$S_{1j}(k)$ kısmi yapı faktörleri Ashcroft-Langreth tarafından şu şekilde tanımlanmıştır:

$$S_{1j}(k) = (N_1 N_j)^{-1/2} \left\langle \sum_{n,m} \exp[i\vec{k} \cdot (\vec{r}_n - \vec{r}_m)] \right\rangle - (N_1 N_j)^{1/2} \delta_{k,0} \quad (\text{II-6})$$

Burada $(N_1 N_j)^{1/2} \delta_{k,0}$ terimi $k=0$ daki şiddete karşılıktır ve sadece $k=0$ yakınındaki çok dar bir bölgede fiziksel

öneme sahip olduğundan, çoğu zaman pratik hesaplarda ihmal edilebilir. (II-6) denklemi (II-5) denklemi ile birleştirildiğinde koherent saçılma şiddeti için şu ifade bulunabilir:

$$I^{koh}(k) = N \sum_i \sum_j (C_i C_j)^{1/2} f_i(k) f_j(k) S_{ij}(k) \quad (II-7)$$

$$= N_1 f_1^2(k) S_{11}(k) + N_2 f_2^2(k) S_{22}(k) + 2(N_1 N_2)^{1/2} f_1(k) f_2(k) S_{12}(k)$$

Atom başına saçılma şiddeti ise,

$$I^{koh}(k) = \sum_i \sum_j (C_i C_j)^{1/2} f_i(k) f_j(k) S_{ij}(k) \quad (II-8)$$

ile ifade edilir. k nın büyük değerlerinde atomlar, X ışınlarını birbirlerinden bağımsız olarak saçtıklarından dolayı

$$I^{koh}(k \rightarrow \infty) = C_1 f_1^2(k) + C_2 f_2^2(k) = \langle f^2(k) \rangle \quad (II-9)$$

$$S_{ij}(k) \rightarrow \delta_{ij}$$

bağıntıları kullanarak, $S_{AL}(k)$ Ashcroft - Langreth toplam yapı faktörü

$$S_{AL}(k) = \frac{I^{koh}(k)}{\langle f^2(k) \rangle} \quad (II-10)$$

$$S_{AL}(k) = \sum_i \sum_j (C_i C_j)^{1/2} \frac{f_i(k) f_j(k)}{\langle f^2(k) \rangle} S_{ij}(k) \quad (II-11)$$

şeklinde ifade edilebilir.

$g_{ij}(r)$ çift dağılım fonksiyonu orijindeki i atomundan r radyal mesafede bulunan j tipinden atomların ortalama

dağılımı ve ρ_0 atomların ortalama sayı yoğunluğu olmak üzere $S_{1j}(k)$ kısmi yapı faktörünün

$$S_{1j}(k) = 1 + \frac{4\pi\rho}{k} \int_0^\infty r [g_{1j}(r) - 1] \sin(kr) dr \quad (\text{II-12})$$

genelleştirilmiş denklemlerle tanımlandığı bilinir.

Özet olarak, sıvı haldeki nümunenin ölçülen difraksiyon şiddet verilerinden kısmi yapı faktörleri çıkarılabilir veya teorik olarak çift dağılım fonksiyonunun tayin edilmesinden kısmi yapı faktörleri hesap edilebilir.

Gelecek bölümde, çift dağılım fonksiyonu ile çift potansiyel arasındaki yaklaşık bağıntıyı veren Percus-Yevick denklemlerinden tayin edilen direk korelasyon fonksiyonunun elemanter fonksiyonlar cinsinden hesaplanabildikleri ve direk korelasyon fonksiyonlarının Fourier dönüşümlerinden de kısmi yapı faktörlerinin hesaplanabildikleri gözden geçirilecektir. Ayrıca, genel olarak ikili karışımların çok çeşitli halleri için hesaplanan kısmi yapı faktörleri verilecektir.

BÖLÜM III

İKİLİ SIVI KARIŞIMLARININ YAPISI

(III.1) KİSMİ YAPI FAKTORLERİ

Sıvı karışımlarda sistemin yapısı α , x ve η değişkenleri ile tamamen tanımlanabilir. Öncelikle, keyfi olarak karışımın ikinci bileşeni daha büyük σ_2 katı küre çapına sahip olmak üzere seçilir ve α katı küre çap oranı olarak tanımlanır:

$$\alpha = \frac{\sigma_1}{\sigma_2} \quad 0 < \alpha < 1 \quad (\text{III-1})$$

V hacminde σ_1 çaplı N_1 tane katı küre ve σ_2 çaplı N_2 tane katı küre varsa, x konsantrasyon oranı, daha büyük çaplı kürelerin konsantrasyonu olmak üzere tanımlanır; yani

$$x = \frac{N_2}{N_1 + N_2} = \frac{n_2}{n_1 + n_2} = \frac{n_2}{n} \quad (\text{III-2})$$

burada n_1 ve n_2 sayı yoğunluklarını temsil ederler ve n toplam sayı yoğunluğudur. η , karışım için toplam istiflenme yoğunluğuna eşit alınır.

$$\eta = \frac{\text{katı kürelerin işgal ettiği hacim}}{\text{toplam hacim}} = \eta_1 + \eta_2$$

burada $\eta_1 = (\pi/6)n_1\sigma_1^3$, $i=1,2$. O zaman şu bağıntılar çıkar:

$$\eta_1 = \left[\frac{(1-x)\alpha^3}{x + (1-x)\alpha^3} \right] \quad , \quad \eta_2 = \left[\frac{x}{x + (1-x)\alpha^3} \right] \quad (\text{III-3})$$

α , η ve x değişkenleri tam olarak sistemi belirtirler ve aşağıda listelenen değişik korelasyon fonksiyonlarındaki katsayılar bu değişkenler cinsinden ifade edilebilirler. Fourier dönüşümleri için bir dalga sayısı uzay değişkenine gerek duyulur: $y = k\sigma_2$ seçilir, o zaman bütün diğer k uzay değişkenleri buna göre ölçeklenirler; örnek olarak, $k\sigma_1 = y\sigma_1/\sigma_2 = \alpha y$.

Katı küreler karışımı için Lebowitz tarafından verilen çözümler şunlardır: [1]

$$\begin{aligned} -C_{11}(r) &= a_1 + b_1 r + dr^3, & r < \sigma_1 \\ -C_{22}(r) &= a_2 + b_2 r + dr^3, & r < \sigma_2 \\ -C_{12}(r) &= a_1, & r < \lambda \\ &= a_1 + (bR^2 + 4dR^3 + dR^4)/r, & \lambda < r < (\sigma_1 + \sigma_2)/2 \end{aligned} \quad (\text{III-4})$$

Burada $\lambda = (\sigma_2 - \sigma_1)/2$ ve $R = r - \lambda$ dir. a_1 , b_1 , b ve d katsayıları basit ama uzun ifadelerle verilen fonksiyonlardır. Ornstein-Zernike sıkışabilirlik bağıntısından türetilen

$$B\rho = \frac{\{(\eta_1 + \alpha^3 \eta_2)(1 + \eta + \eta^2) - 3\eta_1 \eta_2 (1 - \alpha)^2 [1 + \eta_1 + \alpha(1 + \eta_2)]\}}{(1 - \eta)^{-3}} \quad (\text{III-5})$$

olmak üzere, a_1 ve a_2 katsayıları

$$a_1 = \frac{\partial}{\partial \eta} (B\rho) \quad a_2 = \alpha^3 \frac{\partial}{\partial \eta} (B\rho)$$

Şimdi aşağıdaki üç fonksiyon

$$\begin{aligned} g_{11} &= \left[\left(1 + \frac{1}{2}\eta\right) + \frac{3}{2}\eta_2(\alpha-1) \right] (1-\eta)^{-2} \\ g_{22} &= \left[\left(1 + \frac{1}{2}\eta\right) + \frac{3}{2}\eta_1(\alpha^{-1}-1) \right] (1-\eta)^{-2} \\ g_{12} &= \left[\left(1 + \frac{1}{2}\eta\right) + \frac{3}{2}(1-\alpha)(\eta_1-\eta_2)/(1+\alpha) \right] (1-\eta)^{-2} \end{aligned} \quad (\text{III-6})$$

cinsinden, b_1, b_2, b ve d katsayıları

$$\begin{aligned} b_1 &= -\frac{6}{\sigma_1} [\eta_1 g_{11}^2 + \frac{1}{4}\eta_2(1+\alpha)^2 \alpha g_{12}^2] = \frac{\beta_1}{\sigma_1} \\ b_2 &= -\frac{6}{\sigma_2} [\eta_2 g_{22}^2 + \frac{1}{4}\eta_1 \alpha^{-3}(1+\alpha)^2 \alpha g_{12}^2] = \frac{\beta_2}{\sigma_2} \\ b &= -\frac{3}{\sigma_2} (1+\alpha) [\alpha^{-2}\eta_1 g_{11} + \eta_2 g_{22}] g_{12} = \frac{\beta_{12}}{\sigma_2} \\ d &= \sigma_1^{-3} [\eta_1 a_1 + \alpha^3 \eta_2 a_2] = \gamma_1 \sigma_1^{-3} \end{aligned} \quad (\text{III-7})$$

ile verilir.

(III-4) denklemlerinden, derhal yapı faktörlerinin tanımında gerekli olan $-n_1 C_{11}(y)$, $-n_2 C_{22}(y)$ ve $(n_1 n_2)^{1/2} C_{12}(y)$ Fourier dönüşümleri yazılabilir. (III-4) denkleminde, $y_1 = k\sigma_1$ yazarak,

$$\begin{aligned} -n_1 C_{11}(y) &= \frac{24\eta_1}{\alpha^3 y^3} \left\{ a_1 (\sin \alpha y - \alpha y \cos \alpha y) + \frac{\beta_1}{\alpha y} [2\alpha y \sin \alpha y - (\alpha^2 y^2 - 2) \right. \\ &\quad \left. \cos \alpha y - 2] + \frac{\gamma_1}{\alpha^3 y^3} [(4\alpha^3 y^3 - 24\alpha y) \sin \alpha y - (\alpha^4 y^4 - 12\alpha^2 y^2 + 24) \right. \\ &\quad \left. \cos \alpha y + 24] \right\} , \end{aligned}$$

$$-n_2 C_{22}(y) = \frac{24\eta_2}{y^3} \{a_1(\sin y - y \cos y) + \frac{\beta_2}{y} [2y \sin y - (y^2 - 2) \cos y - 2] \\ + \frac{\alpha^{-3} y_1}{y^3} [(4y^3 - 24y) \sin y - (y^4 - 12y^2 + 24) \cos y + 24]\} ,$$

$$-(n_1 n_2)^{\frac{1}{2}} C_{12}(y) = \frac{\eta x^{\frac{1}{2}} (1-x)^{\frac{1}{2}}}{x + (1-x) \alpha^3} a_1 \frac{\sin y_\lambda - y_\lambda \cos y_\lambda}{y_\lambda^3}$$

$$+ 24\eta \frac{x^{\frac{1}{2}} (1-x)^{\frac{1}{2}} \alpha^3}{x + (1-x) \alpha^3} \frac{\sin y_\lambda}{y_1^4} \{ \beta_{12} [2y_1 \cos y_1 + (y_1^2 - 2) \sin y_1]$$

$$+ \frac{y_{12}}{y_1} [(3y_1^2 - 6) \cos y_1 + (y_1^3 - 6y_1) \sin y_1 + 6]$$

$$+ \frac{y_1}{y_1^2} [(4y_1^3 - 24y_1) \cos y_1 + (y_1^4 - 12y_1^2 + 24) \sin y_1] \}$$

$$+ \frac{\cos y_\lambda}{y_1^4} \{ \beta_{12} [2y_1 \sin y_1 - (y_1^2 - 2) \cos y_1 - 2]$$

$$+ \frac{y_{12}}{y_1} [(3y_1^2 - 6) \sin y_1 - (y_1^3 - 6y_1) \cos y_1]$$

$$+ \frac{y_1}{y_1^2} [(4y_1^3 - 4y_1) \sin y_1 - (y_1^4 - 12y_1^2 + 24) \cos y_1 + 24] \}$$

$$+ \frac{a_1}{y_1} \{ \cos y_\lambda \left(\frac{\sin y_1 - y_1 \cos y_1}{y_1^2} + \frac{1-\alpha}{2\alpha} \frac{1-\cos y_1}{y_1} \right)$$

$$+ \sin y_{\lambda} \left(\frac{\cos y_1 + y_1 \sin y_1 - 1}{y_1^2} + \frac{1 - \alpha}{2\alpha} \frac{\sin y_1}{y_1} \right) \}]$$

Yukarıdaki ifadelerde,

$$y_{\lambda} = \frac{1 - \sigma}{2}, \quad y_{12} = a_1 \eta_1 + a_2 \eta_2 \frac{(1 - \sigma)^2}{\sigma}$$

olarak verilir.

$$S_{1j}(k) = (N_1 N_j)^{-1/2} \langle \sum_{n,m} \exp[i\vec{k}(\vec{r}_n - \vec{r}_m)] \rangle = (N_1 N_j)^{1/2} \delta_{\vec{k},0} \quad (\text{III-8})$$

olmak üzere

$$\tilde{S}_{1j} = S_{1j}(y) - 1 \quad (\text{III-9})$$

tanımlanırsa, o zaman direk korelasyon fonksiyonunun tanımı derhal, $C_{12} = C_{21}$ olduğundan,

$$n_1^{-1} \tilde{S}_{11}(y) = C_{11}(y) + \tilde{S}_{11}(y) + (n_1/n_2)^{1/2} \tilde{S}_{12}(y) C_{12}(y),$$

$$\frac{1}{(n_1 n_2)^{1/2}} \tilde{S}_{12}(y) = C_{12}(y) + \tilde{S}_{11}(y) C_{12}(y) + (n_1/n_2)^{1/2} \tilde{S}_{12}(y) C_{22}(y),$$

$$\frac{1}{(n_1 n_2)^{1/2}} \tilde{S}_{12}(y) = C_{12}(y) + (n_1 n_2)^{1/2} \tilde{S}_{12}(y) C_{11}(y) + \tilde{S}_{22}(y) C_{12}(y),$$

$$\frac{1}{n_2} \tilde{S}_{22}(y) = C_{22}(y) + (n_1/n_2)^{1/2} \tilde{S}_{12}(y) C_{11}(y) + \tilde{S}_{22}(y) C_{22}(y).$$

(III-10)

(III-9) un kullanılmasıyla, $S_{1j}(y)$ yapı faktörleri için çözümler (III-10) denklemlerinden bulunabilirler:

$$S_{11}(y) = \left[1 - n_1 C_{11}(y) - \frac{n_1 n_2 C_{12}^2(y)}{1 - n_2 C_{22}(y)} \right]^{-1} \quad (III-11)$$

$$S_{22}(y) = \left[1 - n_2 C_{22}(y) - \frac{n_1 n_2 C_{12}^2(y)}{1 - n_1 C_{11}(y)} \right]^{-1}$$

$$S_{12}(y) = (n_1 n_2)^{1/2} C_{12}(y) \{ [1 - n_1 C_{11}(y)] [1 - n_2 C_{22}(y)] - n_1 n_2 C_{12}^2(y) \}^{-1}$$

Özet olarak, ikili sıvı karışım için Lebowitz tarafından verilen $C_{1j}(r)$ direk korelasyon fonksiyonlarının $C_{1j}(k)$ Fourier dönüştürmelerinden doğrudan doğruya η istiflenme yoğunluğunun, α katı küre çap oranının ve x konsantrasyon oranının fonksiyonu olan $S_{1j}(k)$ kısmi yapı faktörleri hesap edilebilir.

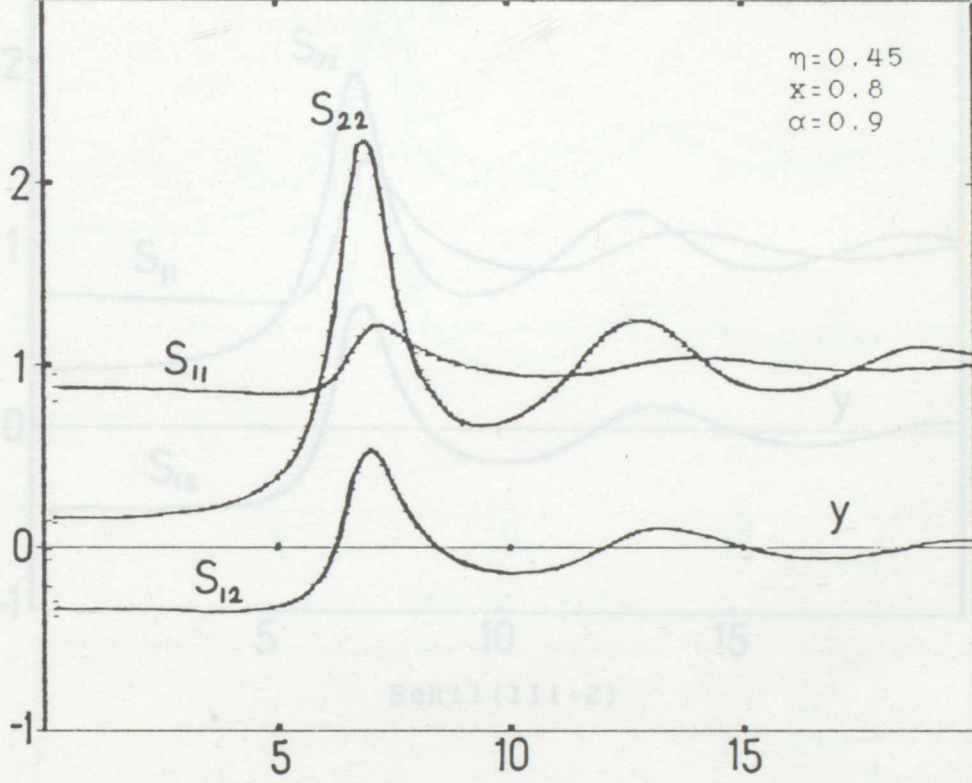
(III.2) ÇEŞİTLİ HALLER İÇİN HESAPLANAN KISMİ YAPI FAKTÖRLERİ

Önceki kısımda verilen bağıntılar kullanılarak, kısmi yapı faktörleri η 'nin 0.40, 0.41, ..., 0.50 değerleri, x 'in 0.1, 0.2, ..., 0.9 değerleri ve α 'nın 0.5, 0.6, ..., 0.9 değerlerinin üçlü kombinasyonlarının her biri için bilgisayar yardımıyla hesap edildi.

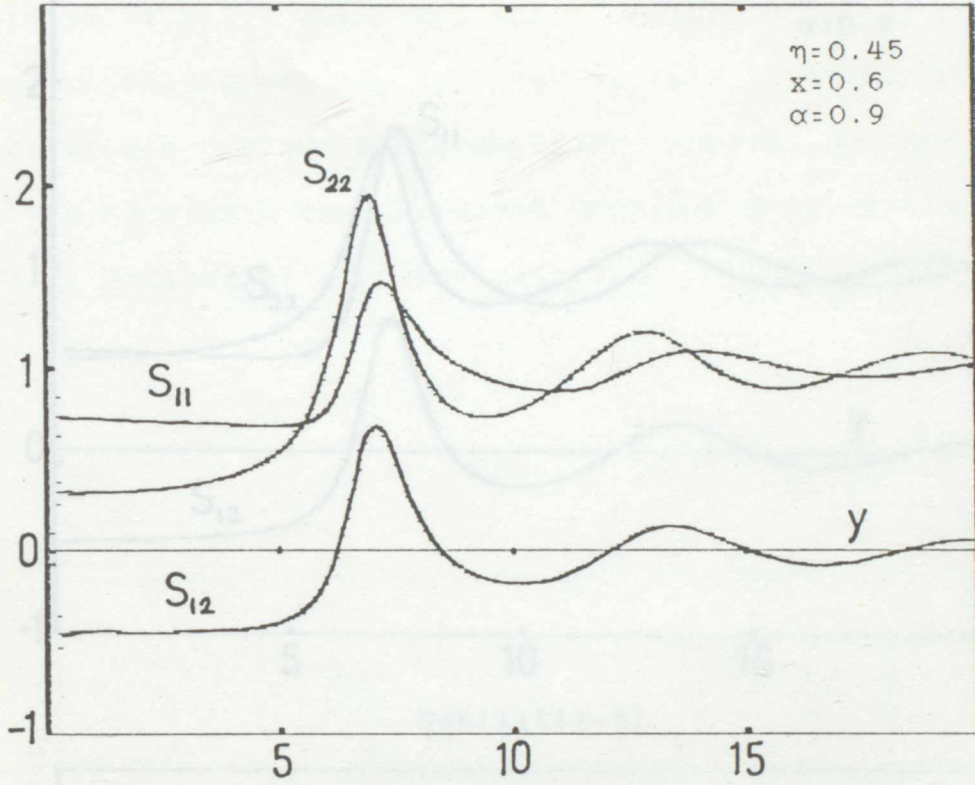
Üçlü kombinasyonların sadece $\eta=0.45$ olanları Tablo-1 de gösterildi. Bu tabloda y değerleri birinci piklerin yerlerini ve S_{1j} 'ler de birinci piklerin yüksekliklerini ifade ederler.

Aşağıda verilen grafiklerde sıvı karışımların yapısı en genel biçimde karakterize edilir.

Şekil(III-1) den Şekil(III-4)'a kadar olan eğriler $\eta=0.45$, $\alpha=0.9$ için $S_{11}(y)$, $S_{22}(y)$ ve $S_{12}(y)$ kısmi yapı faktörlerinin konsantrasyonla değişimini gösterirler.



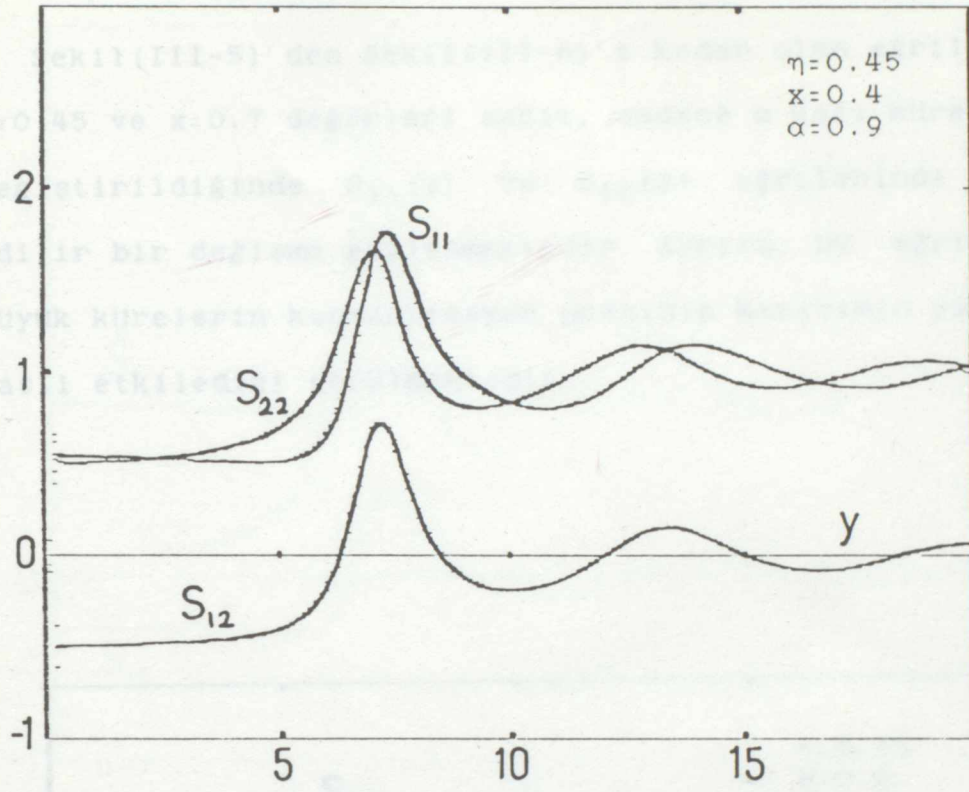
Şekil(III-1)'den görüldüğü gibi $x=0.8$ olduğunda karışımın büyük bileşenine ait $S_{22}(y)$ kısmi yapı faktörünün birinci pik yüksekliği, $S_{11}(y)$ ve $S_{12}(y)$ kısmi yapı faktörlerine göre daha yüksek ve nettir. Bunun nedeni ise karışımın büyük bileşeninin küçük bileşene nazaran V toplam hacim içindeki çokluğudur. Böyle olunca değiştirilen bileşenin konsantrasyonuyla doğru orantılı olarak, o bileşene ait kısmi yapı faktörünün pikinde değişme beklenmesi doğaldır.



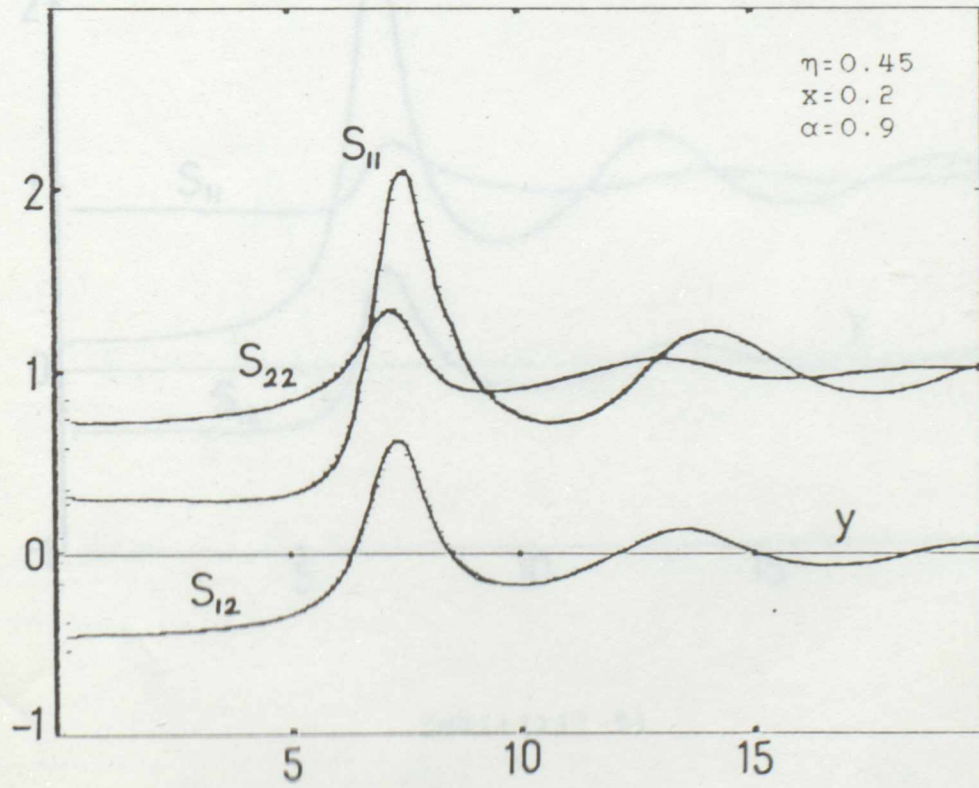
Şekil(III-2)

Şekil(III-2)'de aynı η ve α değerinde büyük kürelerin konsantrasyonu düşürüldüğünde, şekilde görüldüğü gibi $S_{22}(y)$ piki azalıp, $S_{11}(y)$ piki biraz yükselmiştir.

Şekil(III-3) ve Şekil(III-4) yine aynı η ve α değerlerinde büyük kürelerin konsantrasyonunun azalışının $S_{11}(y)$, $S_{22}(y)$ ve $S_{12}(y)$ kısmi yapı faktörleri üzerinde yukarıda belirtilen etkiyi devam ettirdiği gözlenir.

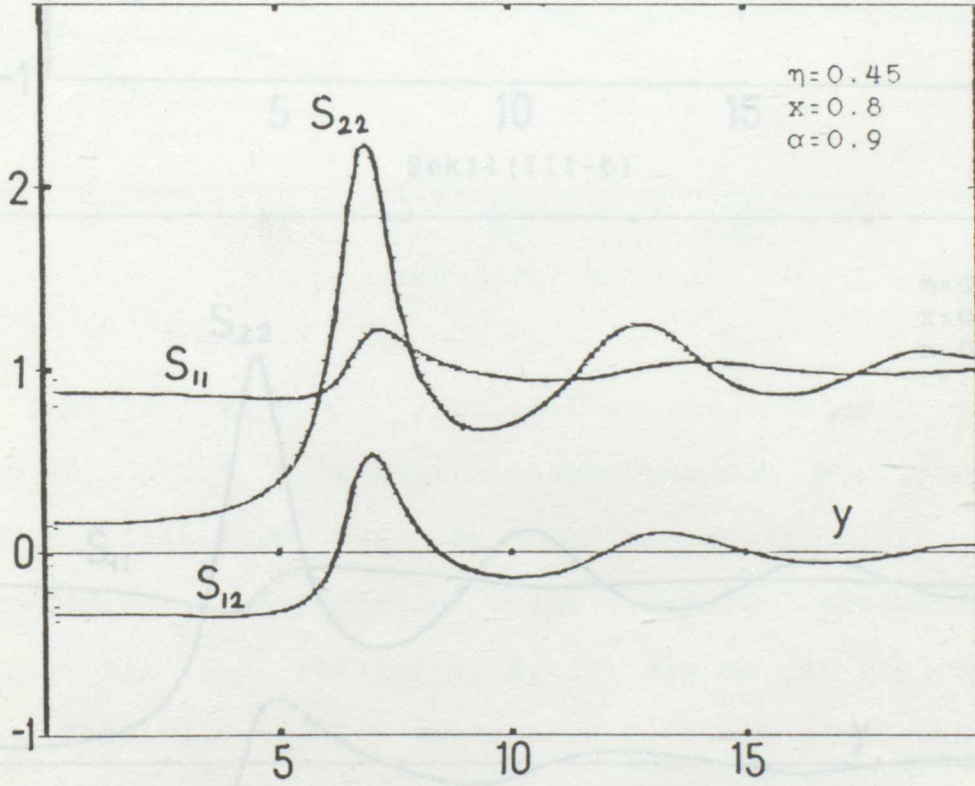


Şekil (III-3)

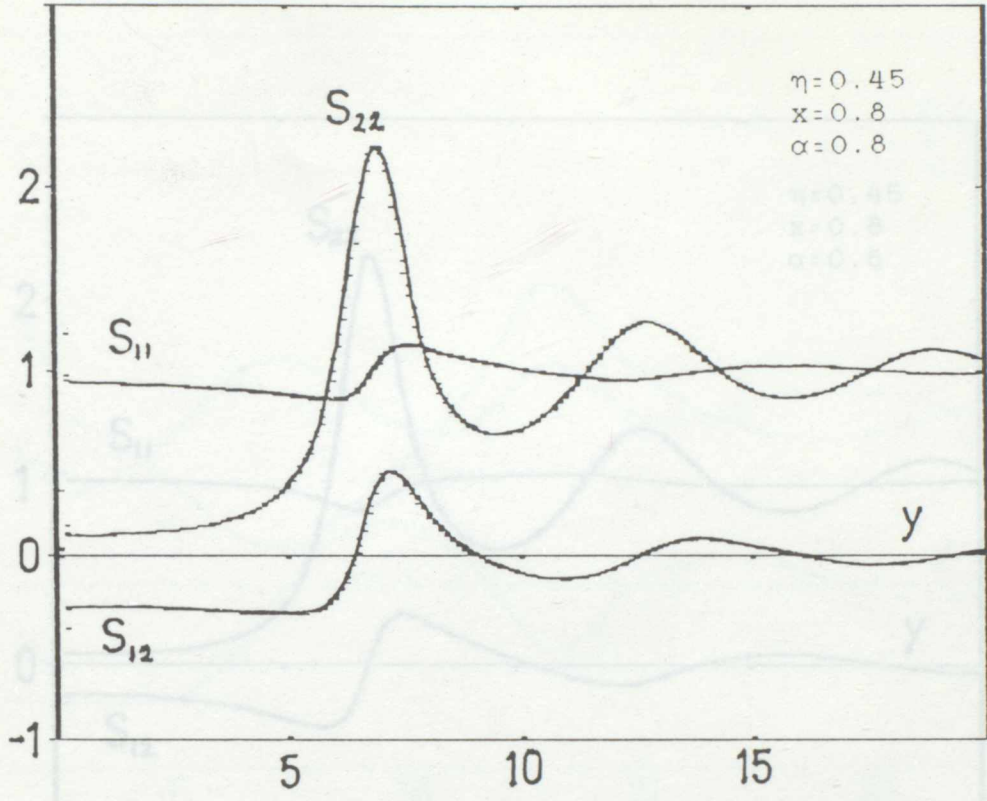


Şekil (III-4)

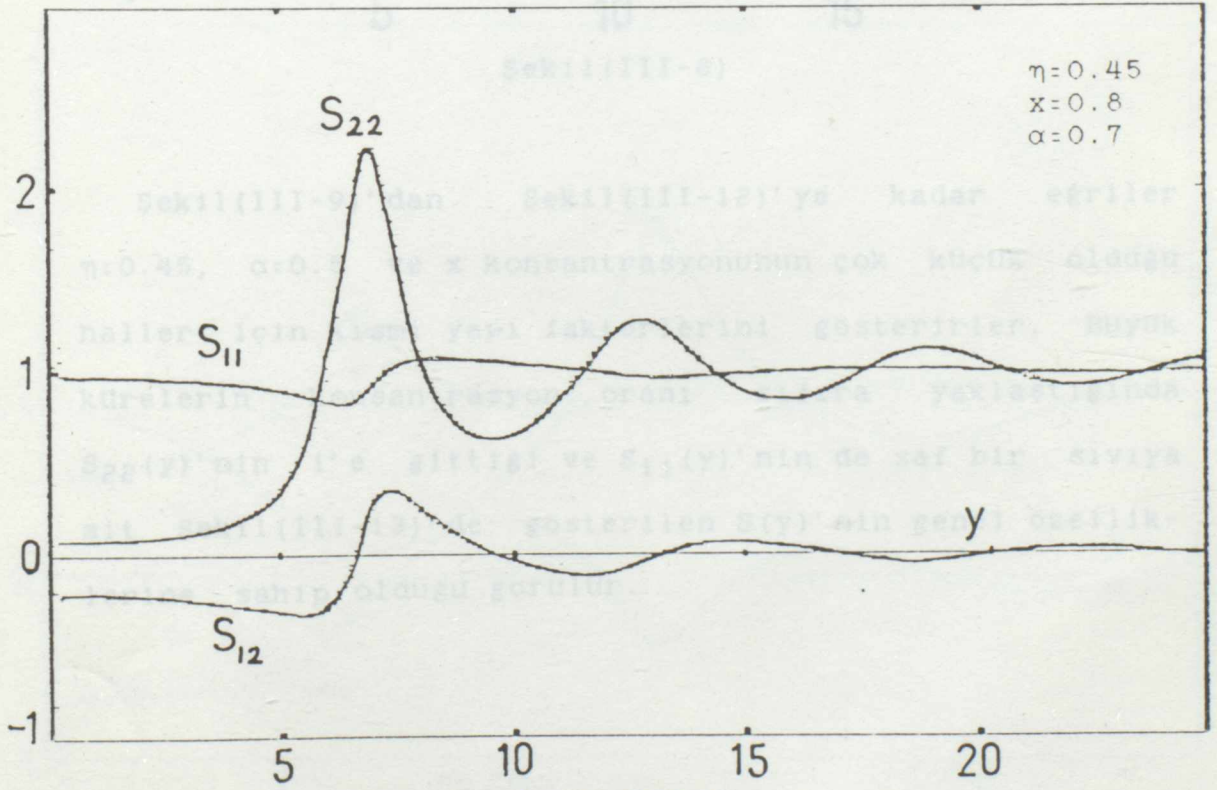
Şekil(III-5)'den Şekil(III-8)'e kadar olan eğriler ise $\eta=0.45$ ve $x=0.7$ değerleri sabit, sadece α katı küre oranı değiştirildiğinde $S_{11}(y)$ ve $S_{12}(y)$ eğrilerinde fark edilir bir değişme gözlenmektedir. Ayrıca, bu eğrilerden büyük kürelerin konsantrasyon oranının karışımın yapısını nasıl etkilediği görülmektedir.



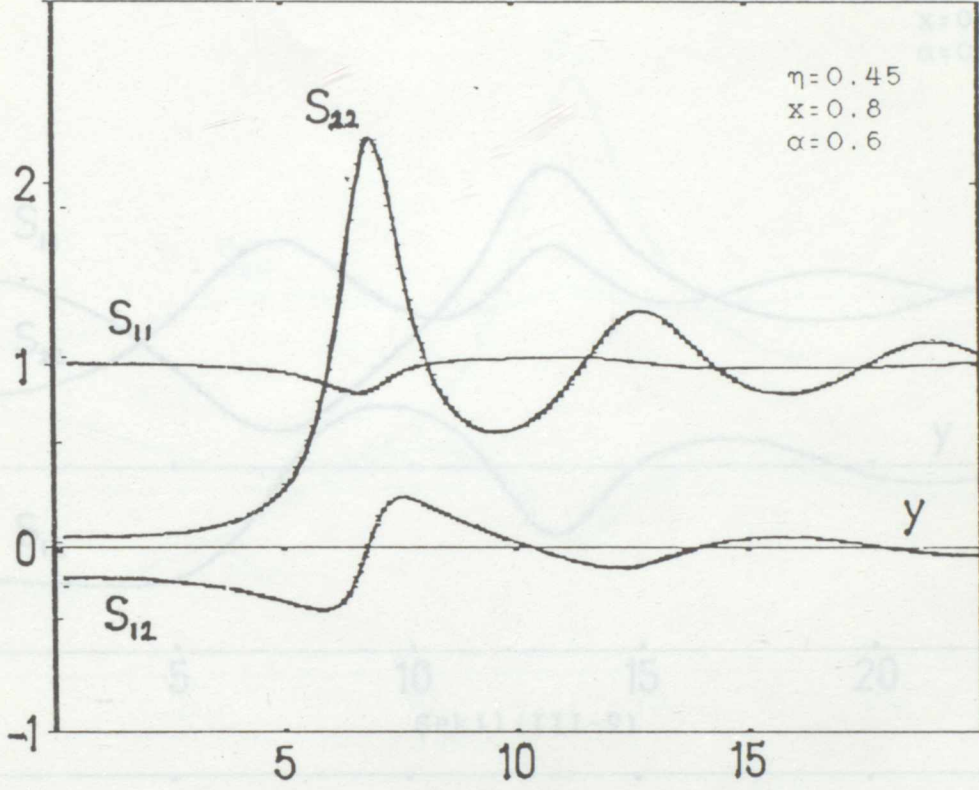
Şekil(III-5)



Şekil (III-6)

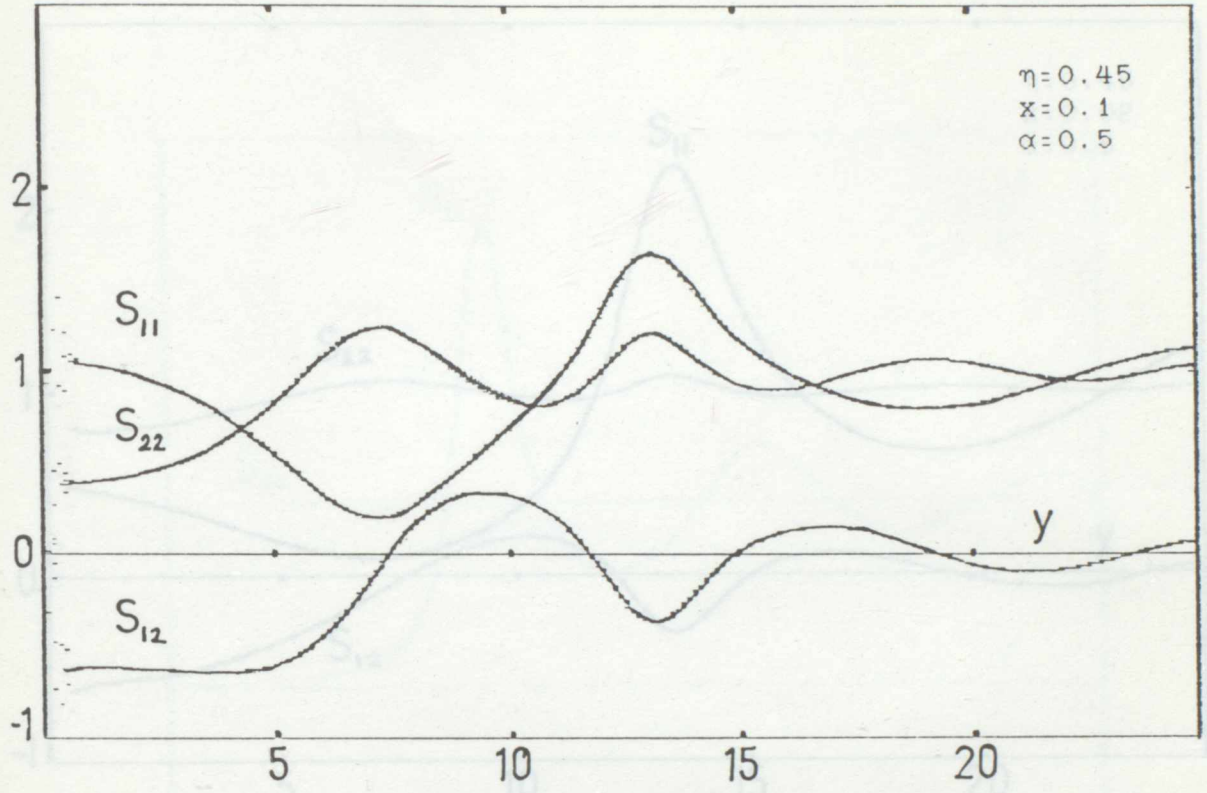


Şekil (III-7)

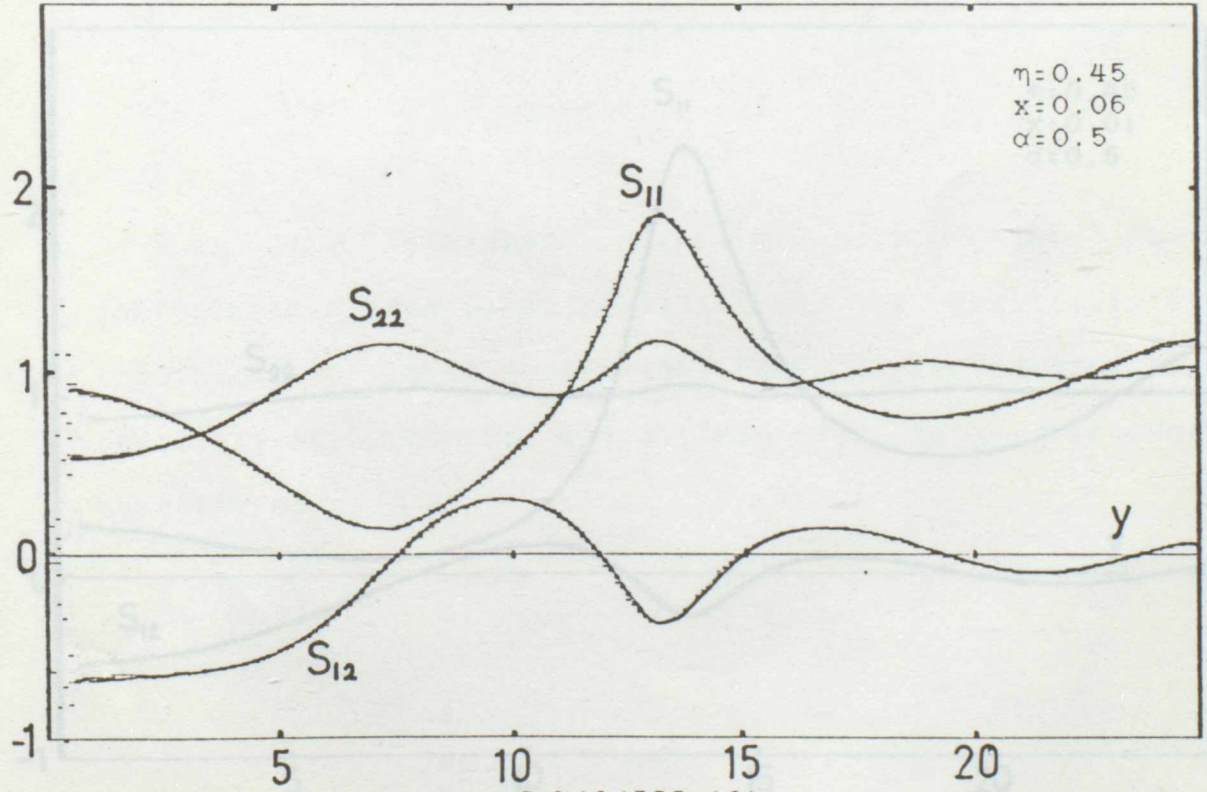


Şekil(III-8)

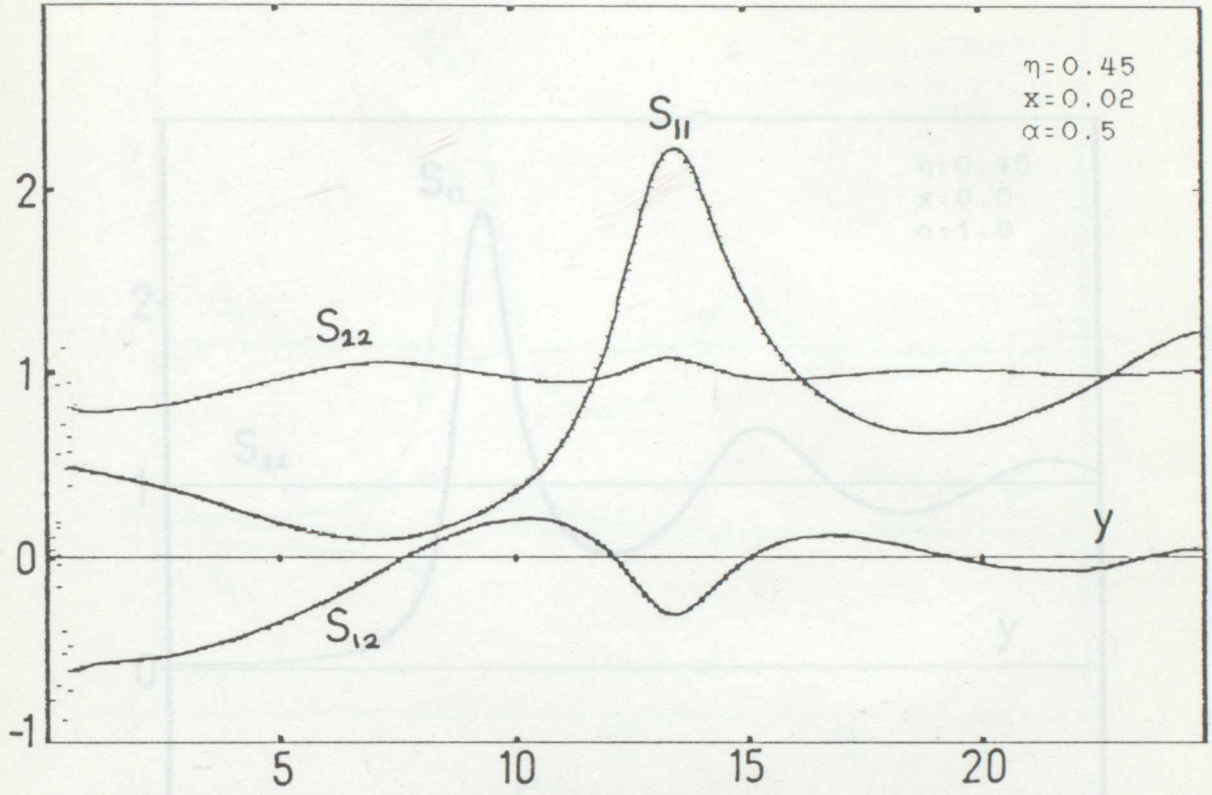
Şekil(III-9)'dan Şekil(III-12)'ye kadar eğriler $\eta=0.45$, $\alpha=0.5$ ve x konsantrasyonunun çok küçük olduğu haller için kısmi yapı faktörlerini gösterirler. Büyük kürelerin konsantrasyon oranı sıfıra yaklaştığında $S_{22}(y)$ 'nin 1'e gittiği ve $S_{11}(y)$ 'nin de saf bir sıvıya ait Şekil(III-13)'de gösterilen $S(y)$ 'nin genel özelliklerine sahip olduğu görülür.



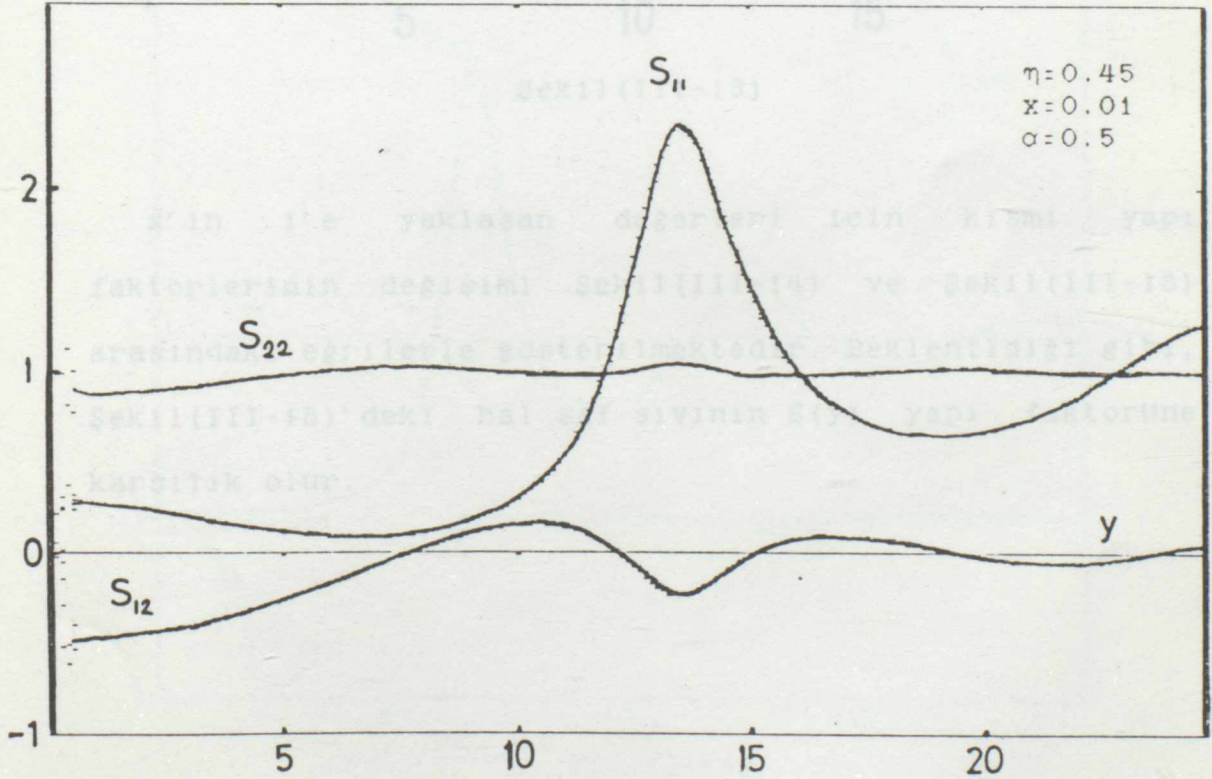
Şekil (III-9)



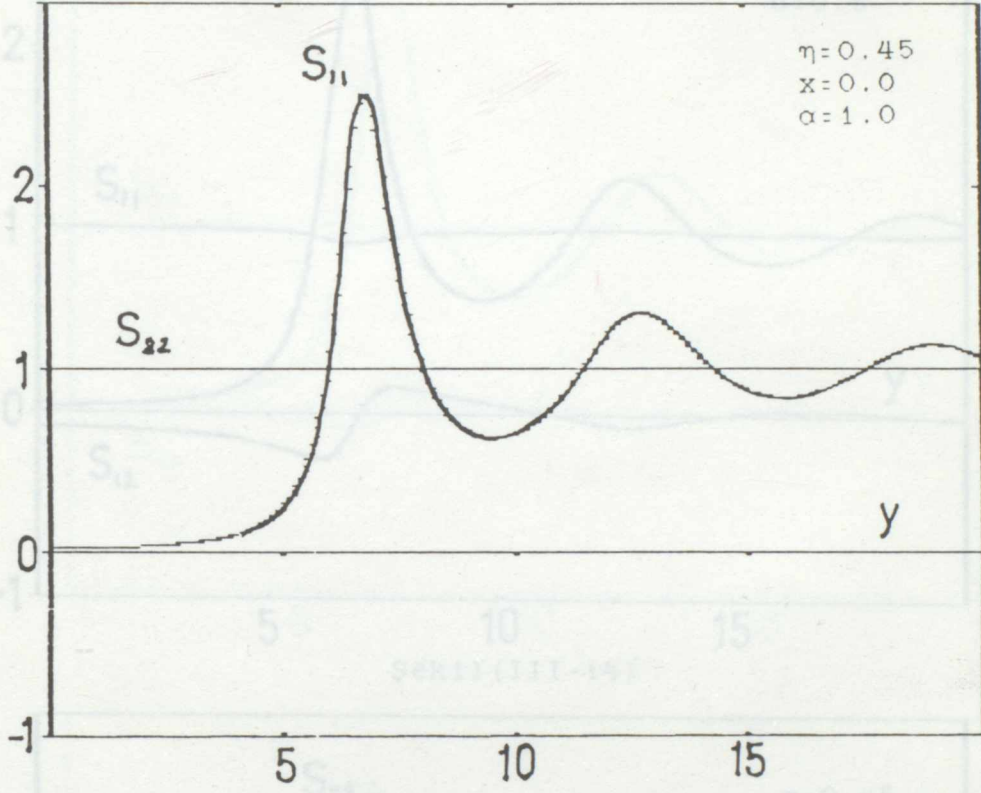
Şekil (III-10)



Şekil (III-11)

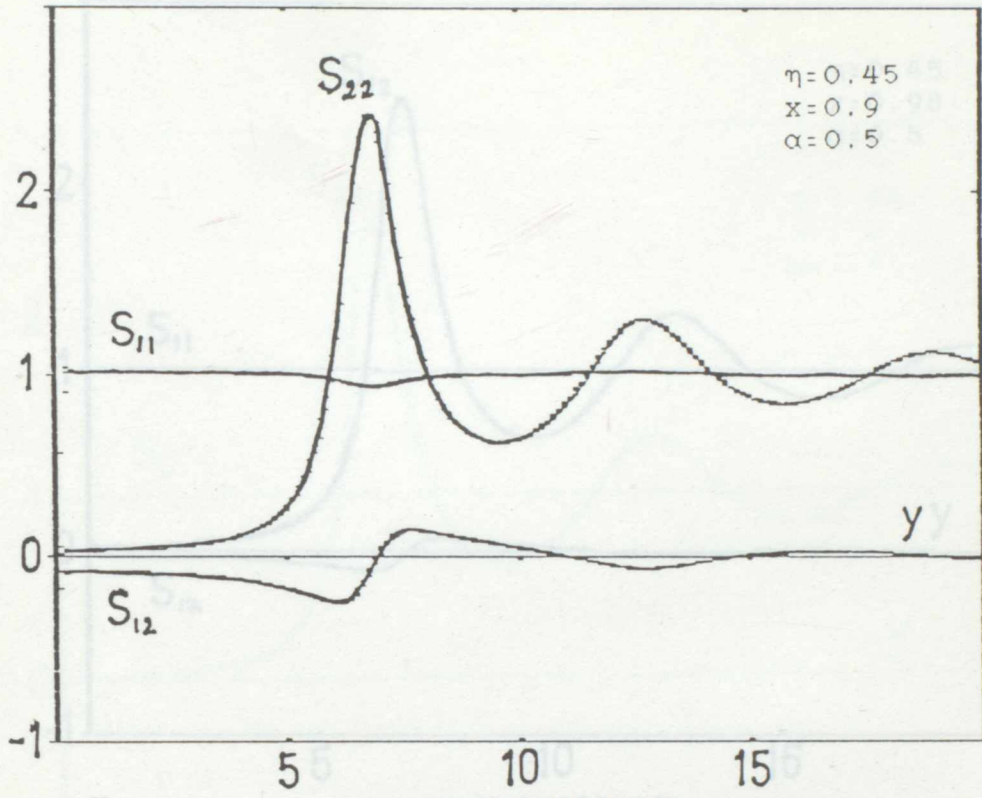


Şekil (III-12)

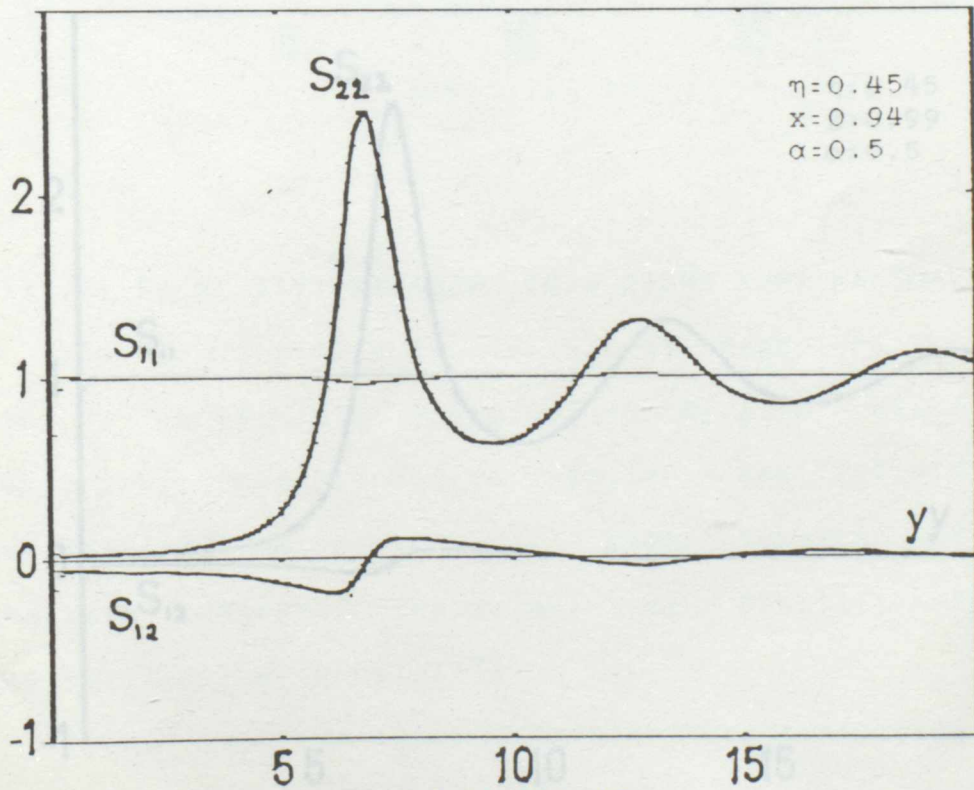


Şekil (III-13)

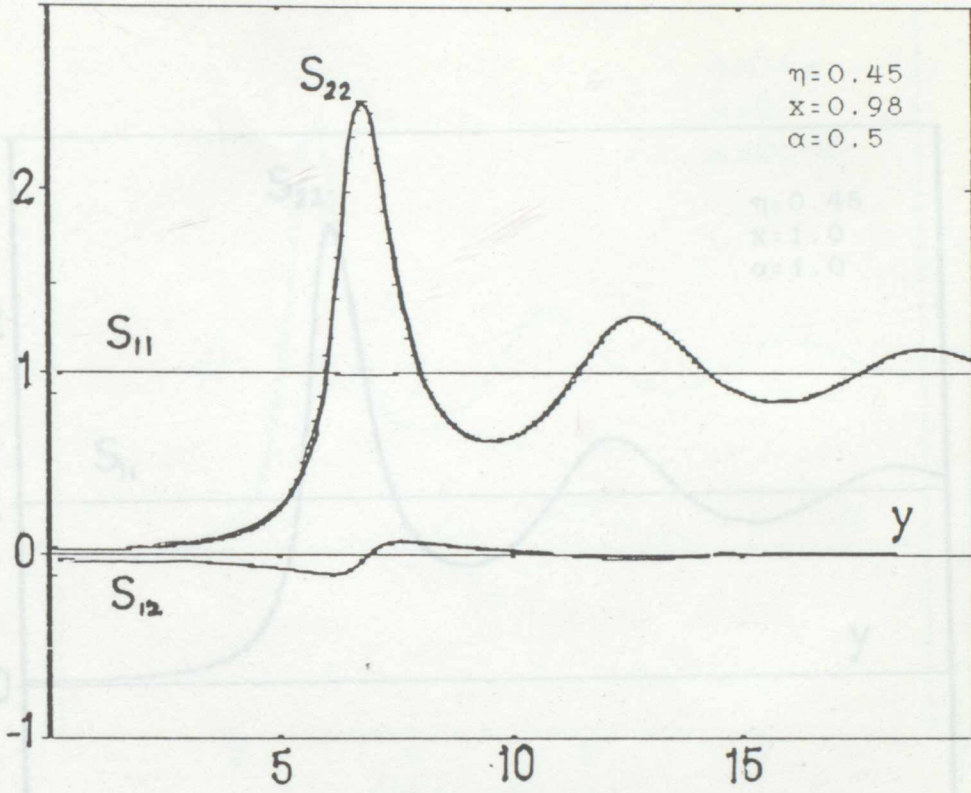
x 'in 1'e yaklaşan değerleri için kısmi yapı faktörlerinin değişimi Şekil(III-14) ve Şekil(III-18) arasındaki eğrilerle gösterilmektedir. Beklenildiği gibi, Şekil(III-18)'deki hal saf sıvının $S(y)$ yapı faktörüne karşılık olur.



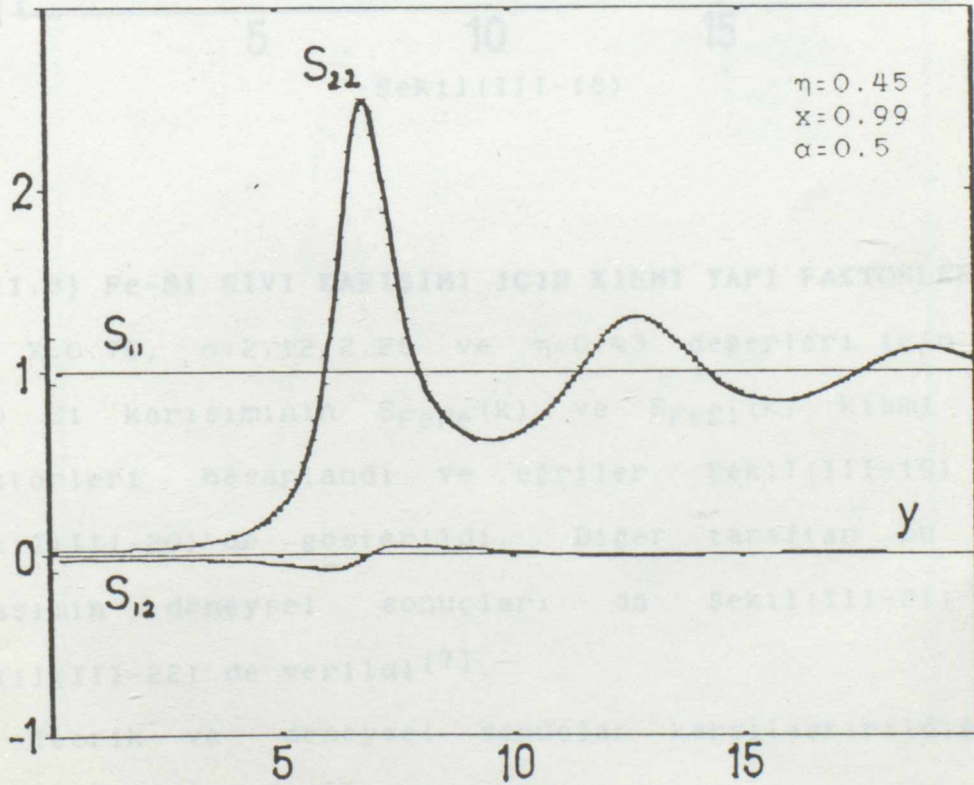
Şekil (III-14)



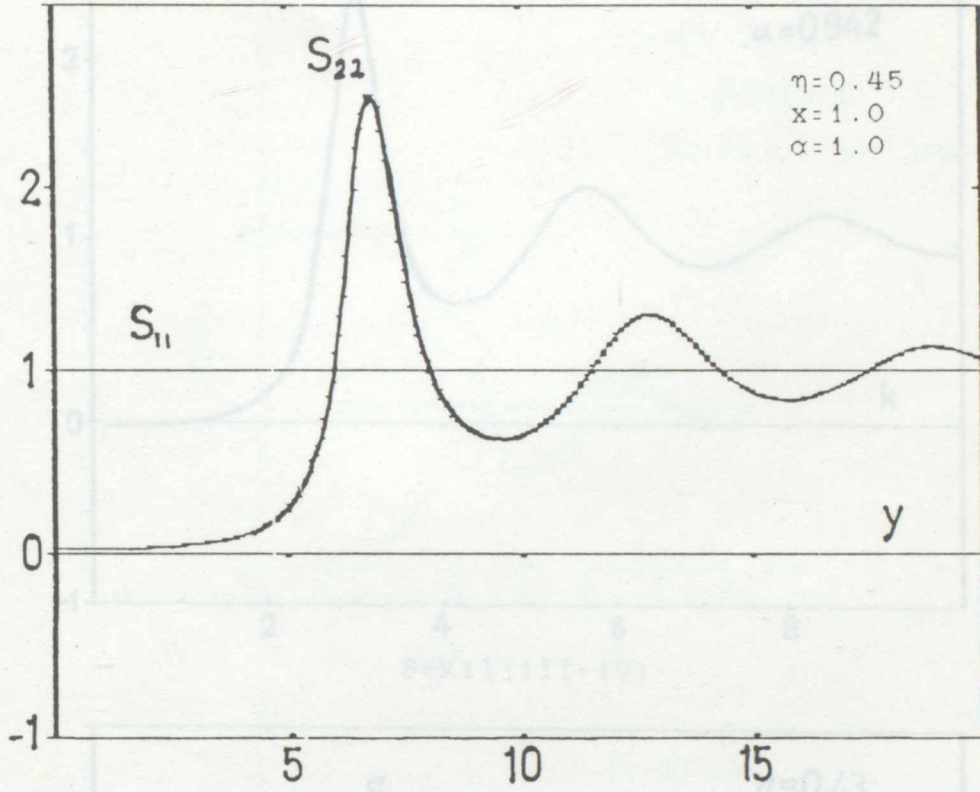
Şekil (III-15)



Şekil (III-16)



Şekil (III-17)

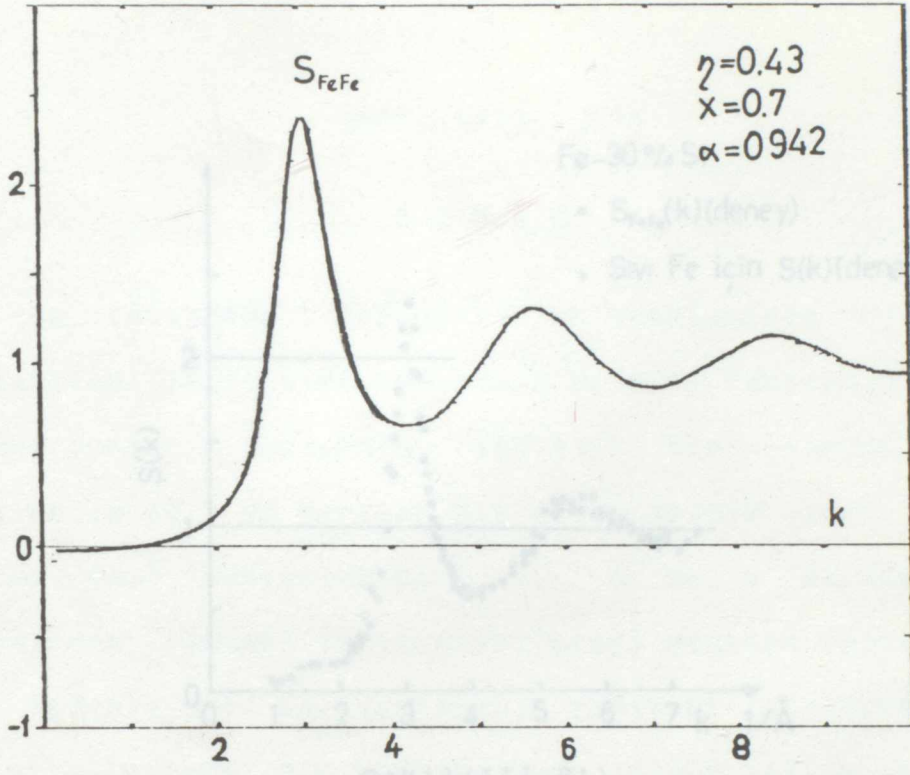


Şekil(III-18)

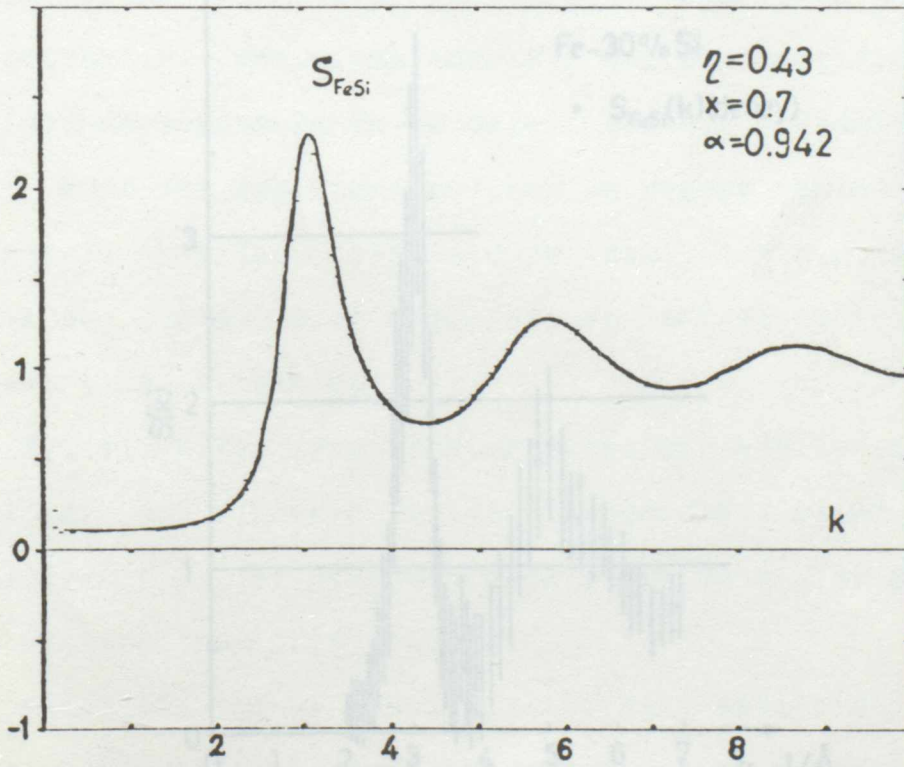
(III.3) Fe-Si SIVI KARIŞIMI İÇİN KİSMİ YAPI FAKTÖRLERİ

$X=0.70$, $\alpha=2.12/2.25$ ve $\eta=0.43$ değerleri için Fe-%30 Si karışımının $S_{FeFe}(k)$ ve $S_{FeSi}(k)$ kısmi yapı faktörleri hesaplandı ve eğriler Şekil(III-19) ve Şekil(III-20)'de gösterildi. Diğer taraftan bu sıvı alaşımın deneysel sonuçları da Şekil(III-21) ve Şekil(III-22)'de verildi [7].

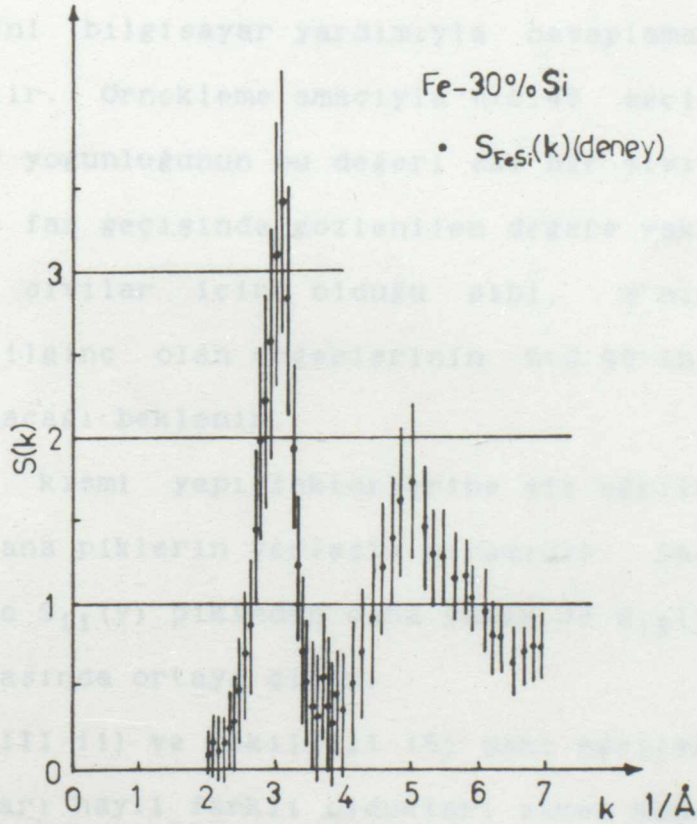
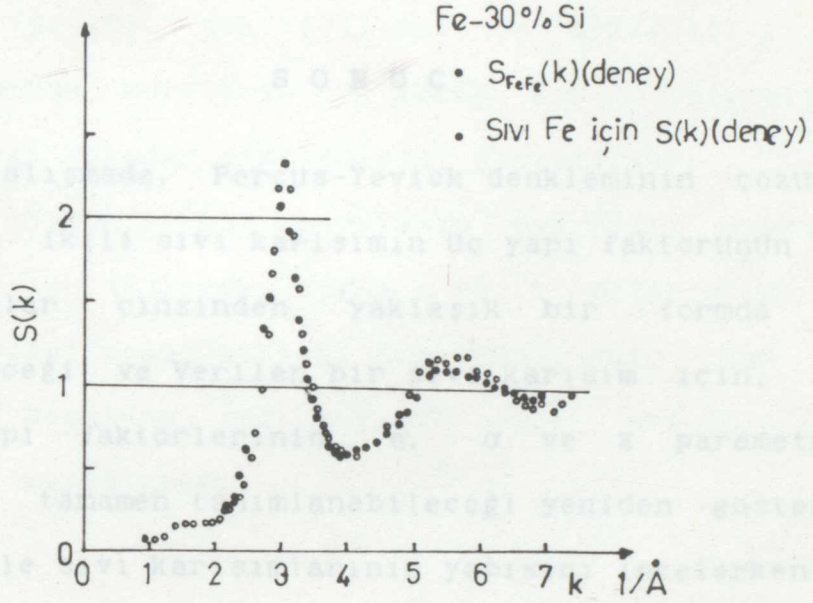
Teorik ve deneysel sonuçlar karşılaştırıldığında büyük ölçüde uyum gözlenir.



Şekil (III-19)



Şekil (III-20)



BÖLÜM IV

S O N U Ç

Bu çalışmada, Percus-Yevick denkleminin çözümünden çıkarılan ikili sıvı karışımın üç yapı faktörünün basit fonksiyonlar cinsinden yaklaşık bir formda ifade edilebileceği ve Verilen bir sıvı karışım için, $S_{1j}(y)$ kısmi yapı faktörlerinin η , α ve x parametreleri cinsinden tamamen tanımlanabileceği yeniden gösterildi. Bu nedenle sıvı karışımlarının yapısını incelerken η , α ve x ' in herhangi bir kombinasyonu için $S_{1j}(y)$ kısmi yapı faktörlerini bilgisayar yardımıyla hesaplamak doğru bir iş olacaktır. Örnekleme amacıyla $\eta=0.45$ seçildi; çünkü istiflenme yoğunluğunun bu değeri saf bir sıvıdaki klasik katı-küre faz geçişinde gözlenilen değere yakındır. Tek bileşenli sıvılar için olduğu gibi, η 'nin fiziksel bakımdan ilginç olan değerlerinin $\eta=0.45$ 'in civarında ortaya çıkacağı beklenir.

$S_{1j}(y)$ kısmi yapı faktörlerine ait eğrilerin genel özelliği ana piklerin yerleşim sırasındır. Daima $S_{22}(y)$ pik $y=0$ 'a $S_{11}(y)$ pikinden daha yakın ve $S_{12}(y)$ pik bu iki pik arasında ortaya çıkar.

Şekil(III-11) ve Şekil(III-16)'daki eğrilerden, katı-küre çapları hayli farklı oldukları zaman konsantrasyonu

büyük olan bileşene ait yapı faktörünün çok şiddetli olduğu görülmüştür.

Şekil(III-10), Şekil(III-11) ve Şekil(III-12)'deki eğriler büyük kürelerin çok küçük konsantrasyonlarının bile saflığı ne kadar etkilediğini gösterirler.

Sonuç olarak, bu sonuçların ayrıntılı uygulaması gerçek ikili sıvılara uygun η ve α değerlerine dair ampirik bilgilerin kıtlığı ile engellenir. Tam erime noktaları üzerinde saf sıvılar ($\alpha=1$) $\eta=0.45$ 'e yakın değerleri sergilerler.

$\eta=0.45$ ve $\alpha=0.8$ için 1. grupta yer ve yükseklikleri							$\eta=0.47$ ve $\alpha=0.8$ için 1. grupta yer ve yükseklikleri						
β	γ	S_{11}	β	S_{22}	γ	S_{33}	β	γ	S_{11}	β	S_{22}	γ	S_{33}
0.8	7.6	1.159	7	2.312	7.3	0.586	0.8	7.6	1.151	7	2.303	7.3	0.585
0.7	7.3	1.236	7	2.140	7.3	0.573	0.7	7.3	1.232	7.3	2.137	7.3	0.580
0.6	7.2	1.332	7.1	2.065	7.4	0.561	0.6	7.2	1.324	7.1	2.061	7.4	0.576
0.5	7.5	1.442	7.2	1.987	7.5	0.543	0.5	7.5	1.415	7.2	1.976	7.5	0.567
0.4	8	1.572	7.3	1.887	7.6	0.525	0.4	8	1.507	7.3	1.974	7.6	0.564
0.3	8.1	1.732	7.4	1.768	7.7	0.501	0.3	8.1	1.697	7.4	1.958	7.6	0.562
0.2	8.2	1.934	7.5	1.633	7.8	0.467	0.2	8.2	1.905	7.5	1.932	7.7	0.548
0.1	8.4	2.214	7.7	1.489	8	0.517	0.1	8.4	2.209	7.7	1.919	8.1	0.532

E K

$\eta=0.44$ $\alpha=0.8$ için 1.pikin yer ve yükseklikleri

x	y	S ₁₁	y	S ₂₂	y	S ₁₂
0.8	7.5	1.132	6.9	2.147	7.2	0.421
0.7	7.6	1.208	6.9	2.015	7.2	0.498
0.6	7.7	1.293	7	1.886	7.3	0.551
0.5	7.8	1.391	7.1	1.752	7.4	0.585
0.4	7.9	1.506	7.2	1.614	7.5	0.600
0.3	8	1.645	7.3	1.473	7.6	0.593
0.2	8.2	1.822	7.4	1.326	7.8	0.555
0.1	8.3	2.060	7.5	1.169	7.9	0.456

$\eta=0.45$ $\alpha=0.8$ için 1.pikin yer ve yükseklikleri

x	y	S ₁₁	y	S ₂₂	y	S ₁₂
0.8	7.5	1.140	6.9	2.229	7.2	0.453
0.7	7.6	1.221	7	2.086	7.3	0.532
0.6	7.7	1.312	7	1.939	7.3	0.586
0.5	7.8	1.416	7.1	1.798	7.4	0.621
0.4	7.9	1.537	7.2	1.651	7.5	0.636
0.3	8.1	1.687	7.3	1.500	7.7	0.631
0.2	8.2	1.878	7.3	1.334	7.8	0.591
0.1	8.4	2.133	7.6	1.179	8	0.486

$\eta=0.46$ $\alpha=0.8$ için 1.pikin yer ve yükseklikleri

x	y	S ₁₁	y	S ₂₂	y	S ₁₂
0.8	7.6	1.150	7	2.312	7.2	0.486
0.7	7.7	1.236	7	2.160	7.3	0.571
0.6	7.7	1.332	7.1	2.005	7.4	0.628
0.5	7.9	1.442	7.2	1.847	7.5	0.663
0.4	8	1.572	7.3	1.689	7.6	0.679
0.3	8.1	1.732	7.4	1.528	7.7	0.671
0.2	8.2	1.934	7.5	1.363	7.9	0.627
0.1	8.4	2.216	7.7	1.189	8	0.517

$\eta=0.47$ $\alpha=0.8$ için 1.pikin yer ve yükseklikleri

x	y	S ₁₁	y	S ₂₂	y	S ₁₂
0.8	7.6	1.161	7	2.413	7.2	0.519
0.7	7.7	1.252	7.1	2.237	7.3	0.610
0.6	7.8	1.354	7.1	2.067	7.4	0.670
0.5	7.9	1.471	7.2	1.900	7.5	0.707
0.4	8	1.609	7.3	1.730	7.6	0.721
0.3	8.1	1.777	7.4	1.558	7.8	0.712
0.2	8.3	1.998	7.6	1.382	7.9	0.668
0.1	8.4	2.299	7.7	1.199	8.1	0.552

$\eta=0.44$ $\alpha=0.9$ için 1.pikin yer ve yükseklikleri

x	y	S ₁₁	y	S ₂₂	y	S ₁₂
0.8	7.1	1.211	6.9	2.144	7	0.502
0.7	7.2	1.324	6.9	2.022	7	0.587
0.6	7.2	1.446	6.9	1.888	7.1	0.639
0.5	7.2	1.571	7	1.753	7.1	0.670
0.4	7.3	1.711	7	1.614	7.2	0.671
0.3	7.4	1.857	7.1	1.470	7.2	0.648
0.2	7.4	2.023	7.1	1.321	7.3	0.582
0.1	7.5	2.200	7.2	1.165	7.3	0.453

 $\eta=0.45$ $\alpha=0.9$ için 1.pikin yer ve yükseklikleri

x	y	S ₁₁	y	S ₂₂	y	S ₁₂
0.8	7.1	1.227	6.9	2.238	7	0.540
0.7	7.2	1.350	6.9	2.096	7.1	0.628
0.6	7.2	1.478	7	1.953	7.1	0.690
0.5	7.3	1.617	7	1.808	7.1	0.717
0.4	7.3	1.763	7.1	1.657	7.2	0.724
0.3	7.4	1.925	7.1	1.504	7.3	0.692
0.2	7.4	2.095	7.2	1.344	7.3	0.627
0.1	7.5	2.295	7.2	1.176	7.4	0.487

 $\eta=0.46$ $\alpha=0.9$ için 1.pikin yer ve yükseklikleri

x	y	S ₁₁	y	S ₂₂	y	S ₁₂
0.8	7.2	1.245	6.9	2.330	7	0.580
0.7	7.2	1.377	7	2.178	7.1	0.680
0.6	7.3	1.514	7	2.025	7.1	0.740
0.5	7.3	1.664	7.1	1.865	7.2	0.774
0.4	7.4	1.821	7.1	1.707	7.2	0.775
0.3	7.4	1.994	7.2	1.539	7.3	0.748
0.2	7.5	2.184	7.2	1.369	7.4	0.670
0.1	7.5	2.388	7.3	1.189	7.4	0.524

 $\eta=0.47$ $\alpha=0.9$ için 1.pikin yer ve yükseklikleri

x	y	S ₁₁	y	S ₂₂	y	S ₁₂
0.8	7.2	1.264	7	2.431	7.1	0.628
0.7	7.2	1.404	7	2.270	7.1	0.732
0.6	7.3	1.556	7.1	2.097	7.2	0.797
0.5	7.3	1.711	7.1	1.933	7.2	0.832
0.4	7.4	1.886	7.2	1.755	7.3	0.835
0.3	7.5	2.068	7.2	1.580	7.3	0.802
0.2	7.5	2.275	7.3	1.395	7.4	0.725
0.1	7.6	2.504	7.3	1.203	7.5	0.562

KAYNAKLAR

- [1] Egelstaff, P.A.,
"An Introduction to the Liquid State"
Ac.Press. New York and London (1967).
- [2] March, N.H.,
"Liquid Metals", Pergamon Press, Oxford (1967).
- [3] March, N.H. and Tosi, M.P.,
"Atomic Dynamics in Liquids", Macmillan Press (1976).
- [4] Hansen, J.P. and McDonald, I.R.,
"Theory of Simple Liquids" Ac.Press London (1976).
- [5] Waseda, Y.,
"The Structure of Non-Crystalline Materials",
Mc Graw-Hill Inc (1980).
- [6] March, N.H., Street, R.A. and Tosi, M.P.,
"Amorphous Solids and the Liquid State",
Plenum Press (1985).
- [7] Iida, T. and Guthrie, R.I.L.,
"The Physical Properties of Liquid Metals",
Clarendon Press. Oxford (1988).
- [8] Wertheim, M.S., Physical Review Letters,
10, 321 (1963).
- [9] Thiele, E., The Journal of Chemical Physics,
39, 474 (1963).
- [10] Ashcroft, N.M. and Lecker, J.,
Phys.Rev. 145, 83 (1966).

[11] Lebowitz, J.L. Phys.Rev. 133, A895 (1964).

[12] Ashcroft, N.W. and Langreth, D.C.,
Phys.Rev. 156, 685 (1967).



