



YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Percus-Yevick Denk. Tek. Boy. Anal. Çözümü

Yüksek Lisans Tezi

ARZU ÇİLLİ

10
66

Fig.

YILDIZ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

1211

PERCUS-YEVICK DENKLEMİNİN TEK BOYUTTA
ANALİTİK ÇÖZÜMÜ

YÜKSEK LİSANS TEZİ
ARZU ÇİLLİ

İSTANBUL 1992

YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
KÜTÜPHANE VE DOKÜMANTASYON
DAİRE BAŞKANLIĞI

Yer No (DDC): R 210
66

Kayıt No : 946
Geldiği Yer : Fen Bilimleri Enst.
Tarih : 11.06.2001
Fiyat : 30.000 TL.
Fatura No : x
Ayniyat No : 1/11
Ek :

YILDIZ ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ

ÖZET

SUMMARY

BÖLÜM I : GİRİŞ

I-1 : Maddenin Halleri

1- PERCUS-YEVICK DENKLEMİNİN TEK BOYUTTA

I-3 : Sıvı Halleri

ANALİTİK ÇÖZÜMÜ

BÖLÜM II : PERCUS-YEVICK KATILIMLI MODELİ

II-1 : Kütletel Olmay. Etkilemeler ve Einstein-

Sarnike Denklemleri

II-2 : Katı-Kütle Potansiyeli ve Percus-Yevick

Denklemleri

BÖLÜM III : PERCUS-YEVICK KATILIMLI MODELİN ANALİTİK ÇÖZÜMÜ

III-1: Tek Boyutlu Percus-Yevick Denkleminin Analitik

Karaktarı

YÜKSEK LİSANS TEZİ

III-2: $g(x)$ Fonksiyonunun Analitik Çözümü ve Sıvı

Acılaşma Potansiyelleri İndirgenmesi

BÖLÜM IV : SONUÇLAR VE TARTIŞMA

KAYNAKLAR

İSTANBUL 1992

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ

ÖZET

SUMMARY

BÖLÜM I : GİRİŞ

I-1 : Maddenin Halleri 1

I-2 : Sıvı Hal 2

I-3 : Sıvı Metallerin Genel Özellikleri 3

BÖLÜM II : PERCUS-YEVICK KATI-KÜRE MODELİ 6

II-1 : Kristal Olmayan Malzemeler ve Ornstein-Zernike Bağıntısı 6

II-2 : Katı-Küre Potansiyeli ve Percus-Yevick Denklemi 8

BÖLÜM III : PERCUS-YEVICK DENKLEMİNİN ANALİTİK ÇÖZÜMÜ 10

III-1: Tek Boyutlu İntegral Denkleminin Analitik Karakteri 10

III-2: $g(x)$ Fonksiyonunun Çıkarılması ve Sonlu Aralıktaki Denklemlere İndirgeme 22

BÖLÜM IV : SONUÇLAR VE TARTIŞMA 30

KAYNAKLAR

ÖNSÖZ

Yüksek lisans çalışmamda, sağladığı imkanlar dolayısıyla dekanımız Prof.Dr.Şevket ERK'e teşekkürü borç bilirim.

Tezimin danışmanlığını üstlenen hocam sayın Doç.Dr.Seyfeddin KARAGÖZLÜ'ye teşekkür ederim.

Çalışmamın her aşamasında beni yönlendiren, bilgisinden yararlandığım, bölüm başkanımız hocam sayın Prof.Dr.İdris GÜMÜŞ'e çok teşekkür ederim.

Ayrıca tez çalışmamda beni destekleyen bölümdeki tüm arkadaşlara teşekkür ederim.

ÖZET

Bu çalışmada, Percus-Yevick yaklaşık integral denkleminin çözümü Laplace dönüşümü yardımı ile tek boyutta analitik olarak incelendi.

Percus-Yevick denklemi, katı bir çubuk ve kısa menzilli bir kuyruktan ibaret olan çift potansiyelli bir sistem için ele alındı. Kısa menzilli kuyruğun yokluğunda ve varlığında doğrudan korelasyon fonksiyonunun önemi incelendi.

Sıfır olmayan kuyruk durumunda çift dağılım fonksiyonu tamamen çıkarılarak, doğrudan korelasyon fonksiyonu için denklemdeki integrasyon aralığının tek başına kuyruk potansiyelinin aralığına indirgenebildiği gösterildi.

BÖLÜM I

GİRİŞ

(1.1) MADDEİN HALLERİ

SUMMARY

Maddenin fiziksel halleri üç sınıfa ayrılabilir. Yani, bütün

In this work, the solution of the Percus-Yevick approximate integral equation has been analytically examined in one dimension by means of Laplace transform.

Percus-Yevick equation has been treated for the class of pair potentials consisting of a hard rod and a short-range tail. The importance of the direct correlation function was examined in the absence and the presence of the short-range tail.

In the case of nonzero tail, the pair distribution function has been eliminated completely, and it was shown that the interval of integration in the equation for the direct correlation function could be reduced to the range of the tail potential alone.

Bu çalışmada, Percus-Yevick yaklaşım integral denkleminin bir boyutta Laplace dönüşümü ile analitik olarak çözümü incelenmiştir. Deneyim, bir katı çubuk ve bir kısa menzilli kuyruklu potansiyel sınıfı için yapılmıştır. Doğrudan ilişki fonksiyonunun önemi, kısa menzilli kuyruklu potansiyelin varlığı ve yokluğu için ayrı ayrı incelenmiştir. Ayrıca, sıfır olmayan kuyruklu potansiyel için, çift dağılım fonksiyonu tamamen ortadan kaldırılmış ve doğrudan ilişki fonksiyonu için integralin sınırlarının sadece kuyruklu potansiyelin menziline indirilebileceği gösterilmiştir.

Ayrıca, sıfır olmayan kuyruklu potansiyel için, çift dağılım fonksiyonu tamamen ortadan kaldırılmış ve doğrudan ilişki fonksiyonu için integralin sınırlarının sadece kuyruklu potansiyelin menziline indirilebileceği gösterilmiştir.

BÖLÜM I

GİRİŞ

(I.1) MADDENİN HALLERİ

(I.2) SIVI HAL

Maddenin fiziksel halleri üç sınıfa ayrılabilir. Yani, bütün elementler ve kimyasal bileşenler sıcaklık ve basınç şartlarına bağlı olarak doğada katı, sıvı ve gaz formunda bulunurlar. 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 örgünün 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.

Amorf hal termodinamik bakımdan kararsız ise de, deneysel zaman ölçeğimiz içersinde oda sıcaklığındaki özelliklerde hiçbir değişme bulunamaz. [4]

(I.2) SIVI HAL

Maddenin üç halinden biri olan sıvı madde düzenli ve düzensiz yapı arasında olan bir yapıyı sergiler. Bu özelliğinden dolayı, hem deneysel hem de kuramsal yöntemlerle sıvı yapının çözülmesine büyük bir gayret sarfedilmesine rağmen, şimdiye kadar sıvı yapıda atomların dağılım düzeninin anlatımı katı ve gaz hallerdeki gibi geliştirilmemiştir. [1,2,3,4,5,6,7]

Sıvıların yapıları, X-ışın ve nötron difraksiyon deneylerinin sonucunda incelenebilmektedir. Kristal katının X-ışın difraksiyon örneği simetrik olarak keskin piklerden ibarettir. Gaz durumu için, X-ışın difraksiyon örnekleri maksimum olmayan sürekli bir saçılma şiddetini gösterir. Bu durum, düşük yoğunlukta bir gazdaki atomik yerleşimin düzensizliği ile açıklanabilir. [6]

Sıvıların X-ışın difraksiyon örneğinde bir kaç maksimum ve minimum vardır ve bunlar bazı düzenli sıkı istiflenmiş yapılar-dakine karşılık gelen mesafelerde meydana çıkarlar. Bu durum, sıvıların bir dereceye kadar kısa menzilli düzene fakat uzun menzilli düzensizliğe sahip olduklarını gösterir.

Sıvıları incelerken moleküllerarası ölçek kadar zaman ölçeği de temel öneme sahiptir. Bazen sıvı halin katı ve gaz halinin özellikleri arasında ara özelliklere sahip olduğu söylenir. Bu değişmeyen bir yapıya sahip olduğunda kristallik olacaktır.

ifade, özelliklerin gözönüne alınması halinde zaman işe karıştırılırsa doğru olacaktır. Katılar düzenli olduğu kadar zamandan bağımsız olan bir yapıya da sahiptirler. Kısa zaman aralıkları için bir sıvı esnek özellikler bakımından bir katı gibi davranır ve kısa mesafeler için biraz düzenli yapıya sahiptir.

Amorf katı adı verilen ve erimiş maddeden soğutma ile elde edilebilen özel bir hal vardır. Sıvıların yapıları da amorf katıların yapılarına benzer. Amorf katı sıvı halin atomik konfigürasyonunu sağlar. ^[4]

Sıvı halde metallerin, alaşımların, oksidlerin ve tuzların değişik özelliklerinin anlaşılması için artan bir gereksinim vardır. Çünkü bunların bazı metalurjik işlemlerde önemli rolleri vardır. Bu sebeplerden dolayı, güncel ilgi kristal olmayan sistemlere (hem sıvı hem de amorf hallere) çekilmiştir. ^[5]

(1.3) SIVI METALLERİN GENEL ÖZELLİKLERİ

Sıvı metallerin ve alaşımlarının fiziksel özellikleri atmosfer basıncının normal şartları altında incelenerek bilimsel ve teknolojik olarak ifade edilebilir.

Sıvı halin karakteristik özelliklerini düşünmek için ilk önce onun yapısını katı ve gaz durumların yapısı ile karşılaştırmak gerekecektir.

İdeal bir katıda ki veya bir kristaldeki atomlar örgü noktalarında düzenli olarak dizilmişlerdir. Atomların bu düzenli yerleşimi uzun menzilli ve üç boyutludur. İdeal bir katı değişmeyen bir yapıya sahip olduğunda kristali olacaktır.

İdeal bir gazda her bir atom hacim içinde serbest olarak geiş yapabilir. Bu basit modeller gerek katılar ve gazlar iin faydalı sonulara yol gsterir. (rneėin, Spesifik ısı iin Einstein's forml, Brillouin blgesi ve Boyle-Charles Kanunu).

Sıvı ve gaz fazlarındaki molekller yer deėiřtirmede serbesttirler. (Sıvı ve gaz fazlarındaki molekller yer deėiřtirmede serbesttirler. (Sıvı ve gaz fazlarındaki molekller yer deėiřtirmede serbesttirler. (Sıvı ve gaz fazlarındaki molekller yer deėiřtirmede serbesttirler.

Sıvıları katıların zellikleri ile karřılařtırdıėımızda, sıvıların viskozitelerinin ok dřk fakat difzlemelerinin ok yksek olduėunu grrz.

Sıvı haldeki bir atom dalgalanmalar boyunca evresindeki atomlara g edebilir. Eėer sıvı haldeki bir atomun herhangi bir anını dřnrsek, bu atom onu evreleyen atomlarla karřılıklı olarak etkileēecektir. [7] Yani, sıvı hal katı gaz hallerinin zellikleri arasında kalan zellikleri gstermektedir.

Katı madde dřk sıcaklıklarda, gazlar yksek sıcaklıklarda ve sıvılar orta sıcaklık deėerlerinde bulunurlar. Bir sıvı bir katıya benzeyecek, fakat bir gaza daha ok benzeyecektir.

Sıvıların ve katıların yoėunlukları da benzerdir. Her ikisi de ortalama atomlararası mesafelere ve benzer sayı yoėunluklarına sahiptir.

Sıvıların ve katıların kohezyon zellikleri de benzerdir.

Sıvıdan gaza doėru sreksiz bir deėiřme yoktur. Diėer bir deėiřle, sıvı ve gaz kritik nokta da uzun sreli olarak ayırd edilemez, nk bunlar srekli yapıya sahip deėildir. Bir sıvı yoėun bir gaz olarak dřnlebilir. Gazlar ve sıvılar akıřkanlar olarak kabul edilir.

Sıvı metallerin fiziksel özelliklerinin en önemlilerinden birisi buharlaşma entalpisidir. Bir sıvının entalpisi bir katının entalpisinden daha büyüktür. Buharlaşma entalpisi bir sıvı metalin kohezyon enerjisinin doğrudan ölçümüdür. Sıvı metallerin diğer fiziksel özellikleri (örn; yüzey gerilimi, termal genleşme, sıkışabilirlik ve ses hızı) buharlaşma entalpileri ile ilişkilidir.

Gazlar tanımlanırken bir ideal gazın varlığından bahsedilir. Fakat sıvı halin tanımlanması zor olduğundan ideal sıvı mevcut değildir. Buna rağmen son zamanlarda sıvı metallerin bazı özellikleri basit bir modelle başarı ile açıklanabilmektedir ki bu modelde atomlar katı ve hareketsiz küreler olarak ifade edilirler, yani katı-küre modeli. ^[7]

Kristal olmayan sıvıların yapıları verilen sıcaklık ve basınçta parçacıklar arasındaki etkileşmeye dayalı kuramlar ile hesap edilebilir. Bu durum için, çift potansiyel ve çift dağılım fonksiyonunun bilinmesi gereklidir.

Çift dağılım fonksiyonu sıvıların modern teorisi için önemli bir yer teşkil eder. Denge durumundaki sıvıların özellikleri ve yapıları en iyi olarak bu fonksiyon ile tanımlanabilir. Çift dağılım fonksiyonu r 'nin büyüklüğüne bağlıdır. Çift sıvılar genellikle izotropik olduğundan r 'nin yönüne bağlı değildir.

Genellikle çift dağılım fonksiyonu yerine, bir korelasyon fonksiyonu kullanmak uygundur.

Toplam korelasyon fonksiyonu $h(r)$,

$$h(r) = g(r) - 1 \quad (II-1.1)$$

olarak tanımlanır. Burada $g(r)$ çift fonksiyondur. $h(r)$ toplam korelasyon fonksiyonu referans atomunun $r = |\vec{r} - \vec{r}'|$ mesafedeki diğer

BÖLÜM II

PERCUS-YEVICK KATI-KÜRE MODELİ

(II-1) KRİSTAL OLMAYAN MALZEMELER VE ORNSTEIN-ZERNİKE BAĞINTISI

Kristal olmayan malzemeler sıvı ve amorf olarak iki grup altında toplanabilir. Sıvı yapıda metaller, alaşımlar, 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]

Kristal olmayan sistemlerin yapısı verilen sıcaklık ve basınçta parçacıklar arasındaki etkileşmeye dayalı kuramlar ile hesap edilirler. Bu durum için, çift potansiyel ve çift dağılım fonksiyonunun bilinmesi gereklidir. ^[1,4,5]

Çift dağılım fonksiyonu sıvıların modern teorisi için önemli bir yer teşkil eder. Denge durumundaki sıvıların özellikleri ve yapıları en iyi olarak bu fonksiyon ile tanımlanabilir. Çift dağılım fonksiyonu r 'nin büyüklüğüne bağlıdır. Gerçek sıvılar genellikle izotropik olduğundan r 'nin yönüne bağlı değildir. ^[7]

Genellikle çift dağılım fonksiyonu yerine, bir korelasyon fonksiyonu kullanmak uygundur.

Toplam korelasyon fonksiyonu $h(r)$,

$$h(r) = g(r) - 1 \quad (II-1.1)$$

olarak tanımlanır. Burada $g(r)$ çift fonksiyondur. $h(r)$ toplam korelasyon fonksiyonu referans atomunun $r = |\vec{r} - \vec{r}'|$ mesafedeki diğer

atom üzerindeki toplam etkisinin bir ölçüsüdür.

$h(r)$ fonksiyonu tanımına göre iki kısma ayrılabilir; referans atomunun diğer atom üzerindeki doğrudan etkisini anlatan doğrudan korelasyon fonksiyonu $C(r)$ ve diğer atomların etkisini anlatan doğrudan olmayan kısım.

Doğrudan olmayan kısım bir konvolüsyon olarak tanımlanıyor ve Ornstein-Zernike bağıntısı

$$h(r) = c(r) + \rho_0 \int c(|\vec{r} - \vec{r}'|) h(r') d\vec{r}'. \quad (\text{II-1.2})$$

ile veriliyor, burada ρ_0 parçacık sayı yoğunluğudur.

$C(r)$ doğrudan korelasyon fonksiyonu için grup açılımından, yaklaşık

$$C(r) = g(r) [1 - \exp(\phi(r)/k_B T)] \quad (\text{II-1.3})$$

Percus-Yevick denklemi elde edilir. Percus-Yevick denkleminde iki boyutlu Ornstein-Zernike bağıntısı kullanılır.

(II-1.3) bağıntısında, T sıcaklık, $\phi(r)$ çift potansiyel ve k_B Boltzmann sabitidir.

Sonuç olarak, Percus-Yevick integral denklemi Ornstein-Zernike tarafından ortaya çıkarılan $C(r)$ doğrudan korelasyon fonksiyonu ile katı küre potansiyeli için kesin olarak çözülmüştür. [12,13,14]

(II.2) KATI KÜRE POTANSİYELİ VE PERCUS-YEVICK DENKLEMİ

Kristal olmayan sistemlerin yapısının $[g(r)$ ve $S(k)]$ X-ışın difraksiyon deneyleri ile belirlenebilmesinin yanı sıra, bu sistemlerin yapısını anlamak için çeşitli yaklaşık denklemler önerilmiştir. [1,4,5,6]

Bunlar Born-Green denklemi, Percus-Yevick denklemi ve Hypernetted-Chain denklemi olarak bilinirler. Bu yaklaşık teoriler kristal olmayan sistemlerin yapısını tartışmak için yararlı bir yöntem sağlarlar.

Burada Percus-Yevick denklemi tartışılacaktır. Grup açılımının diagramsal analizinde, Percus-Yevick denklemine Hypernetted-Chain denklemine alınan terimlerden daha az terim alınmış olmasına karşılık, Percus-Yevick denkleminin kısa menzilli kuvvetlerinin hakim olduğu sistemler için daha iyi sonuçlar verdiği bilinir. Bu üstünlük açık olarak katı-küre potansiyeline sahip olan yapı modelinde görünür.

Wertheim ve Thiele tarafından gösterildiği gibi, Percus-Yevick denklemi katı-küre potansiyeli için kesin olarak çözülebilir ve çift dağılım fonksiyonunun veya yapı faktörünün analitik ifadesi elde edilebilir. [12,14]

Sıvı metallerin yapısı için Percus-Yevick denkleminin katı-küre çözümü ilk defa Ashcroft ve Lekner tarafından tartışılmıştır. [15]

Percus-Yevick katı-küre modeli, sıvı metal ve alaşımların yapısının ve deneysel yapı faktörünün temel görünüşünü verdiği kabul edilir. Sıvı metallerin yapı faktörlerinin tayini hala

devam etmekte olan bir çalışmadır. Ve bu yüzden Percus-Yevick katı-küre modeli kristal olmayan malzemelerin yapısal incelenmesinde önemli bir yer tutar.

Daha önceki bölümde açıkladığımız gibi; doğrudan korelasyon fonksiyonu için,

$$C(r) = g(r) \{1 - \exp[\phi(r)/k_B T]\}$$

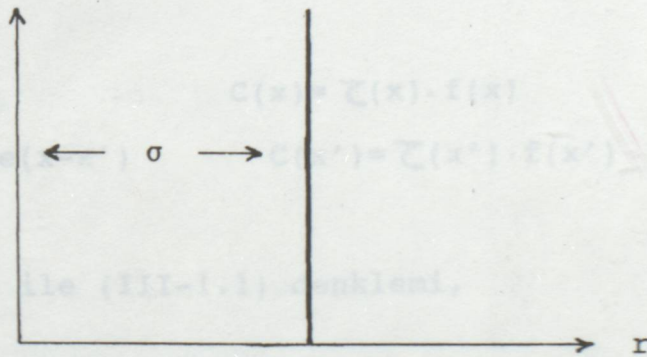
şeklindeki yaklaşık denklem Percus-Yevick denklemi olarak bilinir. Burada $\phi(r)$ çift potansiyel, T sıcaklık ve k_B Boltzmann sabitidir.

Katı küre potansiyeli,

$$\phi(r) = \begin{cases} \infty & r \leq \sigma \\ 0 & r > \sigma \end{cases}$$

şeklinde tanımlanır ve Şekil (II-1)'de gösterildiği gibidir.

$\phi(r)$



Şekil (II-1)

Katı küre potansiyelinde, σ katı-küre çapı ve r atomlar arasındaki mesafedir.



BÖLÜM III

PERCUS-YEVICK DENKLEMİNİN ANALİTİK ÇÖZÜMÜ

(III-1) TEK BOYUTLU İNTEGRAL DENKLEMİNİN ANALİTİK KARAKTERİ

Tek boyutta $V(x)$ potansiyelli birbirini çeken çiftli parçacıkların oluşturdukları bir sistem için PY denklemi

$$\mathcal{Z}(x) = 1 - \rho \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{Z}(x') f(x') dx' + \rho \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{Z}(x') f(x') \mathcal{Z}(x-x') e(x-x') dx' \quad (\text{III-1.1})$$

Burada $e(x) \equiv \exp[-\beta V(x)]$, $f(x) = e(x) - 1$, ρ yoğunluk ve $\beta = (kT)^{-1}$ dir.

Ornstein ve Zernike'in $C(x)$ doğrudan korelasyon fonksiyonu ve $g(x)$ çift dağılım fonksiyonu Percus-Yevick yaklaşımında $\mathcal{Z}(x)$ ile ilişkilidir:

$$g(x) = \mathcal{Z}(x) \cdot e(x) \quad C(x) = \mathcal{Z}(x) \cdot f(x) \quad (\text{III-1.2})$$

$$g(x-x') = \mathcal{Z}(x-x') \cdot e(x-x') \quad C(x') = \mathcal{Z}(x') \cdot f(x')$$

Bu ifadeler yardımı ile (III-1.1) denklemi,

$$\mathcal{Z}(x) = 1 - \rho \int_{-\infty}^{\infty} C(x') dx' + \rho \int_{-\infty}^{\infty} C(x') g(x-x') dx' \quad (\text{III-1.3})$$

şeklini alır.

$V(x) = V_H + V_T$ durumunda;

V_H katı-çubuk potansiyeli,

$V_H = 0$ ($|x| > 1$), $V_H = \infty$ ($|x| < 1$)

ile verilir.

V_T kuyruk potansiyeli $|x| > 1+a$ için $V_T = 0$ oluyor. Burada 1 katı çubuğun boyudur, $1+a$ mesafesi çubuktan a kadar uzaktaki mesafedir. x uzaklığı ise $1 < x < 1+a$ şeklindedir.

(III-1.1) ifadesinin tek taraflı Laplace dönüşümünü alalım.

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} e^{-sx} \mathcal{Z}(x) dx &= \int_0^{\infty} 1 \cdot e^{-sx} dx - \rho \int_0^{\infty} e^{-sx} \left[\int_{-\infty}^{\infty} C(x') dx' \right] dx \\ &+ \rho \int_0^{\infty} e^{-sx} \left[\int_{-\infty}^{\infty} C(x') g(x-x') dx' \right] dx \quad (\text{III-1.4}) \end{aligned}$$

Burada

$$I_1 = \int_0^{\infty} e^{-sx} \mathcal{Z}(x) dx$$

$$I_2 = \int_0^{\infty} 1 \cdot e^{-sx} dx \quad (\text{III-1.5})$$

$$I_3 = - \rho \int_0^{\infty} e^{-sx} \left[\int_{-\infty}^{\infty} C(x') dx' \right] dx$$

$$I_4 = \rho \int_0^{\infty} e^{-sx} \left[\int_{-\infty}^{\infty} C(x') g(x-x') dx' \right] dx$$

şeklindedir.

İlk önce I_1 ifadesini ele alalım.

0'dan ∞ 'a olan integral yolunu 0'dan $1+a$ 'ya ve 1'den ∞ 'a olacak şekilde bölelim. [11]

$$I_1 = \int_0^{1+a} e^{-sx} \mathcal{Z}(x) dx + \int_1^{\infty} e^{-sx} \mathcal{Z}(x) dx \quad (\text{III-1.6})$$

(III-1.2) bağıntılarını kullanarak

$$I_1 = - \int_0^{l+a} C(x) e^{-sx} dx + \int_l^{\infty} g(x) e^{-sx} dx \quad (\text{III-1.7})$$

şeklini alır.

I_1 denkleminin 1.terimine $F(s)$, 2.terimine $G(s)$ diyelim, böylece

$$I_1 = F(s) + G(s)$$

şeklinde olur.

I_2 ifadesi,

$$I_2 = \int_0^{\infty} 1 \cdot e^{-sx} dx = \frac{1}{s} \quad (\text{III-1.8})$$

şeklindedir.

$$I_3 = - \rho \int_0^{\infty} e^{-sx} \int_{-\infty}^{\infty} C(x') dx' dx \quad (\text{III-1.9})$$

ifadesi,

İntegral denklemlerin Laplace dönüşümü ile çözümünden

$$I_3 = - \rho \int_{-\infty}^{\infty} e^{-sx} \int_0^{\infty} C(x') dx' dx \quad (\text{III-1.10})$$

şeklinde yazılabilir.

Böylece,

$$I_3 = - \rho \int_{-\infty}^{\infty} e^{-sx} \left[\int_0^{l+a} C(x') dx' + \int_l^{\infty} C(x') dx' \right] dx \quad (\text{III-1.11})$$

$$I_3 = - \rho \int_{-\infty}^{\infty} e^{-sx} \int_0^{l+a} C(x') dx' dx \quad (\text{III-1.12})$$

şeklini alır.

$$\int_0^{l+a} C(x') dx' = -\frac{K}{2} \quad \text{diyelim.}$$

$$I_3 = -\rho \left(-\frac{K}{2}\right) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-sx} dx \quad (\text{III-1.13})$$

$$I_3 = \frac{K\rho}{2} \cdot 2 \int_0^{\infty} e^{-sx} dx = \frac{K\rho}{s} \quad (\text{III-1.14})$$

şeklinde bulunacaktır.

$$I_4 = \rho \int_0^{\infty} e^{-sx} \left[\int_{-\infty}^{\infty} C(x') g(x-x') dx' \right] dx \quad (\text{III-1.15})$$

İntegral denklemini çözmek için Laplace dönüşümünün Konvolüsyon teoremini kullanacağız.

Konvolüsyon tanımı:

$$\mathcal{L}\{f * g\} = F(s)G(s) = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^R e^{-st} dt \int_0^t f(\tau) g(t-\tau) d\tau \quad (\text{III-1.16})$$

şeklindedir.

0 ve $+\infty$ aralığındaki Laplace integrali sağ yarı düzlemde, $-\infty$ ve 0 aralığındaki Laplace integrali ise sol yarı düzlemde yakınsaktır. ^[8] Bu özellikten yararlanarak,

$$\int_{-\infty}^0 e^{-st} f(t) dt = \int_0^{\infty} e^{st} f(-t) dt \quad (\text{III-1.17})$$

$$\int_0^{\infty} e^{st} f(-t) dt = F(-s) \quad (\text{III-1.18})$$

$$\int_{-\infty}^0 e^{-st} f(t) dt = F(s) \quad (\text{III-1.19})$$

integrallerini yazabiliriz.

Konvolüsyon tanımını C ve g fonksiyonlarına uygulayalım.

$$\mathcal{L}\{C * g\} = \lim_{L \rightarrow \infty} \int_0^L e^{-sx} dx \int_0^x C(x') g(x-x') dx' = F(s)G(s) \quad (\text{III-1.20})$$

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^L e^{-sx} dx \left[\int_x^0 C(x') g(x-x') dx' + \int_{L+x}^{L+x} C(x') g(x-x') dx' \right] \quad (\text{III-1.21})$$

$$= \lim_{L \rightarrow 0} \int_{-\infty}^L e^{-sx} dx \int_x^0 C(x') g(x-x') dx' - \lim_{L \rightarrow 0} \int_{-\infty}^L e^{-sx} dx \int_{L+x}^{L+x} C(x') g(x-x') dx' \quad (\text{III-1.21})$$

$$= - \int_{-\infty}^0 e^{-sx} dx \int_x^0 C(x') g(x-x') dx' - \int_{-\infty}^0 e^{-sx} dx \int_{L+x}^{L+x} C(x') g(x-x') dx' \quad (\text{III-1.22})$$

$$= -F(s)G(s) - \int_{-\infty}^0 e^{-sx} dx \int_{L+x}^{L+x} C(x') g(x-x') dx' \quad (\text{III-1.23})$$

$$\int_{L+x}^{L+x} C(x') g(x-x') dx' = -y(x) \quad (\text{III-1.24})$$

diyelim. (III-1.23) ifadesi,

$$= -F(s)G(s) + \int_{-\infty}^0 e^{-sx} y(x) dx \quad (\text{III-1.25})$$

$$= -F(s)G(s) + \int_{-\infty}^a e^{-sx} y(x) dx + \int_a^0 e^{-sx} y(x) dx \quad (\text{III-1.25})$$

şeklini alır.

$$y(x) \equiv - \int_{L+x}^{L+x} C(x') g(x-x') dx' \quad (0 < x < a) \quad (\text{III-1.26})$$

$$y(x) \equiv 0 \quad (x < 0 \text{ ve } x > a)$$

şartlarını kullanırsak; $\int_{-\infty}^a e^{-sx} y(x) dx = 0$ olur.

Böylece, (III-1.25) ifadesi,

$$= -F(s)G(s) - \int_0^a e^{-sx} y(x) dx \quad (\text{III-1.27})$$

şeklinde olur.

$$\int_0^a e^{-sx} y(x) dx = Y(s) \quad (\text{III-1.28})$$

diyelim.

$l \rightarrow 0$ 'a gittiğinde konvolüsyon teoremine göre I_4 integralinin I.kısım;

$$= -F(s)G(s) - Y(s) \quad (\text{III-1.29})$$

şeklinde elde edilir.

$l \rightarrow \infty$ 'a gittiğinde II.kısım;

$$\begin{aligned} & \lim_{l \rightarrow \infty} \int_0^l e^{sx} dx \left[\int_x^0 C(x') g(x-x') dx' + \int_{l+x}^{l+x} C(x') g(x-x') dx' \right] \quad (\text{III-1.30}) \\ & = \lim_{l \rightarrow \infty} \int_0^l e^{sx} dx \int_x^0 C(x') g(x-x') dx' + \lim_{l \rightarrow \infty} \int_0^l e^{sx} dx \int_{l+x}^{l+x} C(x') g(x-x') dx' \end{aligned}$$

(III-1.26) şartları ve (III-1.28) ifadesi kullanılarak (III-1.30) ifadesi,

$$= - \int_0^{\infty} e^{sx} dx \int_0^x C(x') g(x-x') dx' - \int_0^{\infty} e^{sx} dx \int_{l+x}^{l+x} C(x') g(x-x') dx' \quad (\text{III-1.31})$$

$$= -F(-s)G(s) + \int_0^{\infty} e^{sx} y(-x) dx \quad (\text{III-1.32})$$

$$= -F(-s)G(s) + \int_0^a e^{sx} y(-x) dx + \int_a^{\infty} e^{sx} \cdot 0 dx \quad (\text{III-1.33})$$

$$= -F(-s)G(s) + Y(-s) \quad (\text{III-1.34})$$

şeklinde elde edilir.

I_4 genel ifadesi I. ve II. kısımların toplamından ibaret olacaktır.

$$I_4 = \rho [-F(s)G(s) - Y(s) - F(-s)G(s) + Y(-s)] \quad (\text{III-1.35})$$

$$I_4 = -\rho [F(s) + F(-s)]G(s) - \rho Y(s) + \rho Y(-s) \quad (\text{III-1.36})$$

şeklinde elde edilebilir. $I_1 = I_2 + I_3 + I_4$ olduğundan,

$$F(s) + G(s) = 1/s + K \rho /s - \rho [F(s) + F(-s)]G(s) - \rho Y(s) + \rho Y(-s) \quad (\text{III-1.37})$$

$$F(s) + G(s) = (1 + \rho K)/s - \rho [F(s) + F(-s)]G(s) - \rho Y(s) + \rho Y(-s) \quad (\text{III-1.38})$$

dir.

Bu ifadeden $G(s)$ için bir çözüm elde edilir;

$$G(s) + \rho F(s)G(s) + \rho F(-s)G(s) = (1 + \rho K)/s - F(s) - \rho Y(s) + \rho Y(-s) \quad (\text{III-1.39})$$

$$G(s)[1 + \rho F(s) + \rho F(-s)] = (1 + \rho K)/s - F(s) - \rho Y(s) + \rho Y(-s) \quad (\text{III-1.40})$$

$$G(s) = \frac{(1 + \rho K)/s - F(s) - \rho Y(s) + \rho Y(-s)}{1 + \rho F(s) + \rho F(-s)} \quad (\text{III-1.41})$$

$1 + \rho K \equiv Q^2$ koyarsak,

$$G(s) = \frac{Q^2 s^{-1} - F(s) - \rho Y(s) + \rho Y(-s)}{1 + \rho F(s) + \rho F(-s)} \quad (\text{III-1.42})$$

olarak elde ederiz.

$C(x)$ ve $g(x)$ fonksiyonlarının her yerde sonlu olduğunu farzedelim. Böylece $F(s)$ ve $Y(s)$ sonlu bir aralık üzerinden Laplace dönüşümü olan, s 'e bağlı tam fonksiyonlardır. Tam fonksiyonlar sonsuz dışında her yerde yakınsaktır. Yani tam fonksiyonlar,

sonlu düzlemde yakınsak tam serilerle gösterilebilen fonksiyonlardır.^[9]

$G(s)$ fonksiyonu ise sonsuz aralık üzerinden bir Laplace dönüşümüdür. Ve sağ yarı düzlemde (RHP) düzenlidir. $G(s)$ fonksiyonu, sol yarı düzlemde (LHP) ise, sağ yarı düzlemdeki $G(s)$ fonksiyonunun analitik uzanımı ile tanımlanır. ^[11]

Analitik uzanım kavramını şöyle tanımlayabiliriz; D_1 ve D_2 gibi ortak parçaları olan iki bölge düşünelim. $f_1(z)$, D_1 de $f_2(z)$, D_2 de tek değerli ve holomorf iki fonksiyon olsun. (Holomorf: Bir D bölgesinin her noktasında türevi olan $f(z)$ fonksiyonuna bu bölgede "holomorf" adı verilir.)

Eğer $f_1(z)$ ve $f_2(z)$, bu iki bölgenin Δ ortak parçasında eşit ise, $f_2(z)$, $f_1(z)$ 'nin D_1 dışına analitik uzanımıdır denir.

Şu halde, bir $f(z)$ fonksiyonunun D_1 bölgesinde holomorf olan bir $f_1(z)$ elemanı verildiğinde, analitik uzanım ile, eğer varsa, fonksiyonunun diğer elemanları bundan elde edilebilir. ^[9]

$$G(s) = \frac{Q^2 s^{-1} - F(s) - \rho Y(s) + \rho Y(-s)}{1 + \rho F(s) + \rho F(-s)} \quad (\text{III-1.43})$$

ifadesinde $s \rightarrow -s$ konarak,

$$G(-s) = \frac{-Q^2 s^{-1} - F(-s) - \rho Y(-s) + \rho Y(s)}{1 + \rho F(-s) + \rho F(s)} \quad (\text{III-1.44})$$

olduğu ortaya çıkar ve iki denklem birbirine oranlanırsa,

$$G(s)[1 + \rho F(s) + \rho F(-s)] = Q^2 s^{-1} - F(s) - \rho Y(s) + \rho Y(-s) \quad (\text{III-1.45})$$

$$G(-s)[1 + \rho F(-s) + \rho F(s)] = -Q^2 s^{-1} - F(-s) - \rho Y(-s) + \rho Y(s)$$

$$G(s)[1 + \rho F(s) + \rho F(-s)] = \frac{Q^2 s^{-1} - F(s) - \rho Y(s) + \rho Y(-s)}{1 + \rho F(s) + \rho F(-s)}$$

$$G(-s)[1 + \rho F(-s) + \rho F(s)] = \frac{-Q^2 s^{-1} - F(-s) - \rho Y(-s) + \rho Y(s)}{1 + \rho F(-s) + \rho F(s)} \quad (\text{III-1.46})$$

elde edilir. Buradan,

$$G(s)[Q^2 s^{-1} + F(-s) + \rho Y(-s) - \rho Y(s)] = G(-s)[-Q^2 s^{-1} + F(s) + \rho Y(s) - \rho Y(-s)] \quad (\text{III-1.47})$$

dir. $G(s)[Q^2 s^{-1} + F(-s) - \rho Y(s) + \rho Y(-s)]$ ifadesi s 'in bir fonksiyonudur.

$$G(s) \left[\frac{Q^2}{s} + F(-s) - \rho Y(s) + \rho Y(-s) \right] \quad (\text{III-1.48})$$

ifadesine göre,

$G(s)$, s^{-1} kısmı ile $s=0$ 'da basit bir kutba sahiptir. Bu nedenle, $s^2 G(s)[Q^2 s^{-1} + F(-s) - \rho Y(s) + \rho Y(-s)]$ miktarı da orijinde ve sağ yarı düzlemde düzenlidir, çünkü her iki faktörde sağ yarı düzlemde (RHP) düzenlidir.

Bu fonksiyon s 'in bir fonksiyonu olduğundan, sol yarı düzlemde de (LHP) düzenlidir ve böylece s 'in bir tam fonksiyonudur.

Sol yarı düzlemde limit sonsuza gittiğinde;

$F(s)$ fonksiyonunun integral sınırları 0'dan $1+a$ 'ya kadar arttığından $F(s)$ 'in artma oranı,

$$0[s^{-1} \exp(-1-a)s] \quad (\text{III-1.49})$$

$Y(s)$ fonksiyonunun integral sınırları 0'dan a 'ya kadar artacağından $Y(s)$ 'in artma oranı,

$$0[s^{-1} \exp(-as)] \quad (\text{III-1.50})$$

Sol yarı düzlemde limit sonsuza gittiğinde $G(s)$ fonksiyonunun s^{-1} 'e gittiğini (III-1.42) ifadesi ile buluruz.

$s^2 G(s) [Q^2 s^{-1} + F(-s) - \rho Y(s) + \rho Y(-s)]$ ifadesinin $Y(s)$ fonksiyonu için artma oranı;

$O[s \exp(-as)]$ olacaktır.

$H(s)$ olarak yeni bir fonksiyon tanımlayalım,

$$H(s) = s^2 G(s) [Q^2 s^{-1} + F(-s) - \rho Y(s) + \rho Y(-s)] - s^2 [Y(s) + Y(-s)]$$

(III-1.48)

Bu fonksiyon s 'nin bir çift tam fonksiyonudur.

(III-1.42) ifadesini bu fonksiyonda yerine yazalım,

$$H(s) = s^2 [1 + \rho F(s) + \rho F(-s)]^{-1} \cdot \{Q^4 s^{-2} + Q^2 s^{-1} \cdot [F(-s) - F(s) - 2\rho Y(s) + 2\rho Y(-s)] - F(s) \cdot F(-s) - 2\rho F(s)Y(-s) - 2\rho F(-s)Y(s) - Y(s) - Y(-s) + \rho^2 [Y(s) - Y(-s)]^2\}$$

(III-1.49)

Sol yarı düzlemde, en büyük artma oranı olan terim $F(s)$ olacaktır. Bu terimde,

$$O[s^{-1} \exp(-1-a)s] \text{ dir.}$$

Sol yarı düzlemde sonsuza gidildiğinde (III-1.1) ifadesinden yararlanarak

$$F(-s) = -\zeta(0)s^{-1} + O(s^2)$$

$$Y(-s) = -y(0)s^{-1} + O(s^2)$$

(III-1.50)

$$\zeta(0) = Q^2 - 2\rho y(0)$$

kullanılacaktır.

Sol yarı düzlemde yarıçap boyunca sonsuza gittiğimizde $H(s) = O(1)$ buluruz. $H(s)$ fonksiyonu çift olduğundan, sağ yarı düzlemde de $H(s) = O(1)$ olacaktır. Fakat Liouville's teoremine göre sonlu bir tam fonksiyon sabit olabiliyordu.

$s=1$ alındığında, diğer terimler sabit kabul edilerek

(III-1.48) ifadesi

$$H = Q^2 \text{ olarak bulunur.}$$

$$H(s) = s^2 G(s) [Q^2/s + F(-s) - \rho Y(s) + \rho Y(-s)] - s^2 [Y(s) + Y(-s)]$$

$$(III-1.58) \text{ ifadesini koordinat uzayına döndürürsek} \quad (III-1.51)$$

$$\text{Kuyruksuz katı çubuklar için } Y = H(s) + s^2 [Y(s) + Y(-s)]$$

$$G(s) [Q^2/s + F(-s) - \rho Y(s) + \rho Y(-s)] = \frac{\quad}{s^2} \quad (III-1.52)$$

$$F(s) + G(s) = Q^2(1/s - \rho/s^2) - \rho F(s)G(s) + \rho \quad (III-1.54)$$

$$H(s) = Q^2 \text{ alınarak,}$$

$$G(s) [Q^2/s + F(-s) - \rho Y(s) + \rho Y(-s)] = Q^2/s^2 + Y(s) + Y(-s) \text{ için safar olan}$$

$$\text{fonksiyonların Laplace dönüşümüdür.} \quad (III-1.53)$$

ifadesi elde edilir. $1/s - \rho/s^2$ terimi $Y(s)$ 'in Laplace

Bu durumda, çarpanlarına ayrılmanın en yakın komşu tipi bir kuyruk için sağlandığını yazabiliriz.

$a > 1$ durumu için, (III-1.49) ifadesinin payındaki baskın terim $Y^2(s)$ dir. $C(x) = C(x) = Q^2(1 - \rho x)$ $(III-1.50)$

Sol yarı düzlemde sonsuza gidildiğinde, $Y^2(s)$ 'in artma oranı

$$0[s^{-2} \exp(-2as)] \text{ olacaktır.} \quad (III-1.51)$$

Ve $H(s)$ 'in artma oranı $0(1)$ den farklı olarak,

$$0[s^{-1} \exp(-a+1)s] \text{ olacaktır.}$$

(III-1.38) ve (III-1.53) ifadelerini birleştirelim;

$$F(s) + G(s) = Q^2/s - \rho F(s)G(s) - \rho F(-s)G(s) - \rho Y(s) + \rho Y(-s) \quad (III-1.54)$$

(III-1.53) ifadesinden $Y(-s)$ için bir ifade çıkaralım,

$$G(s) [Q^2/s + F(-s) - \rho Y(s) + \rho Y(-s)] - Q^2/s^2 - Y(s) = Y(-s) \quad (III-1.55)$$

bu ifadeyi (III-1.38) denkleminde yerine yazalım,

$$F(s) + G(s) = Q^2/s - \rho F(s)G(s) - \rho F(-s)G(s) + \rho [G(s) [Q^2/s + F(-s) - \rho Y(s) + \rho Y(-s)] - Q^2/s^2 - Y(s)] - \rho Y(s) \quad (III-1.56)$$

$$F(s) + G(s) = Q^2/s - \rho Q^2/s^2 - \rho F(s)G(s) + \rho G(s)Q^2/s - \rho^2 G(s)Y(s) + \rho^2 Y(-s)G(s) - 2\rho Y(s) \quad (III-1.57)$$

$$F(s) + G(s) = Q^2(1/s - \rho/s^2) - 2\rho Y(s) + \rho^2 Y(-s)G(s) - \rho^2 Y(s)G(s) - \rho F(s)G(s) + \rho Q^2 G(s)/s \quad (III-1.58)$$

ifadesini elde ederiz.

(III-1.58) ifadesini koordinat uzayına dönüştürürsek;

Kuyruksuz katı çubuklar için $Y=0$ olur.

Bu durumda (III-1.58) ifadesi,

$$F(s)+G(s)=Q^2(1/s- \rho /s^2)- \rho F(s)G(s)+ \rho Q^2G(s)/s \quad (\text{III-1.59})$$

şeklini alır.

$G(s)$, $\rho F(s)G(s)$ ve $\rho Q^2s^{-1}G(s)$ ifadeleri $x<1$ için sıfır olan fonksiyonların Laplace dönüşümüdür.

$x<1$ için $Q^2(1/s- \rho /s^2)$ terimi $Q^2(1- \rho x)$ 'in Laplace dönüşümüdür.

Böylece, $x<1$ için

$$C(x)=-\mathcal{Z}(x) \quad \text{şartı kullanılarak} \quad (\text{III-2.1})$$

$$\mathcal{Z}(x)=-C(x)=Q^2(1- \rho x) \quad (\text{III-1.60})$$

ifadesi elde edilir.

$$\mathcal{Z}(0)=1+2 \rho \int_0^L \mathcal{Z}(x)dx \quad (\text{III-1.61})$$

ifadesinde (III-1.60) şartı ve

$\mathcal{Z}(0)=Q^2$ kullanılarak,

$$Q^2=1+2 \rho \int_0^L Q^2(1- \rho x)dx \quad (\text{III-1.62})$$

$$Q^2=1+2 \rho \left[Q^2x- \rho Q^2x^2/2 \right]_0^L =1+2 \rho \left[Q^2L- \rho Q^2L^2/2 \right] \quad (\text{III-1.63})$$

$$Q^2=1+2 \rho LQ^2- \rho^2 Q^2L^2 \Rightarrow Q^2-2 \rho LQ^2+ \rho^2 Q^2L^2=1$$

$$Q^2(1-2 \rho L+ \rho^2 L^2)=1 \quad (\text{III-1.64})$$

$$Q^2=1+ \rho Q^2(2L- \rho L^2)=(1- \rho L)^{-2} \quad (\text{III-1.65})$$

elde edilir.

Bu yöntemde, Percus-Yevick denklemi basit bir metodla katı çubuklar için çözülür. ^[11]

(III-2) $g(x)$ FONKSİYONUNUN ÇIKARILMASI VE SONLU ARALIKTAKİ

DENKLEMLERE İNDİRGEME

Burada sıfır olmayan kuyruk durumunu düşünelim.

(III-1.58) denkleminin sağ tarafı dört çeşit terim içermektedir.

$Q^2(s^{-1} - \rho s^{-2})$ terimi $Q^2(1 - \rho x)$ 'in Laplace dönüşümüdür. (III-2.4)

$-2 \rho Y(s)$ terimi $-2 \rho y(x)$ 'in Laplace dönüşümüdür, bu ifade $0 < x < a$ için sıfır değildir.

$-\rho^2 Y(-s)G(s)$ terimi $x < 1-a$ için sıfır olan bir fonksiyonun Laplace dönüşümüdür. Kalan terimlerin hepsi $x < 1$ için sıfır olan fonksiyonların Laplace dönüşümleridir.

$C(x)$ doğrudan korelasyon fonksiyonunu,

$$-C(x) = -C_0(x) - 2 \rho y(x) + p(x-1) + q(x-1) \quad (\text{III-2.1})$$

şeklinde tanımlarız.

$$\text{Burada, } (0 < x < 1) \text{ için } -C_0(x) = Q^2(1 - \rho x)$$

$$x > 1 \text{ için } -C_0(x) = 0 \quad (\text{III-2.2})$$

$$x < -a \text{ ve } x > 0 \text{ için } p(x) = 0$$

$$x < 0 \text{ ve } x > a \text{ için } q(x) = 0$$

dir.

Buradaki $p(x-1)$ fonksiyonu,

$$p(x-1) = \rho^2 \int_{-a}^{x-1} y(-x') g(x-x') dx' \quad (\text{III-2.3})$$

şeklinde verilir.

(III-1.58) denklemi $\rho^2 Y(-s)G(s)$ teriminin ters Laplace dönüşümünde $x > 1+a$ için $g(x)$ 'i içerdiğinden $q(x-1)$ için denklemi ihmal ederiz.

$x > 1+a$ için $g(x)$ 'i çıkarmak isteyelim ve tek başına $C(x)$ için bir denklem elde etmek isteyelim. Bunun için (III-1.38) ve (III-1.53) denklemlerine geri dönmek gerekecektir.

$$X(s) = [F(s) + 2 \rho Y(s) - Q^2 s^{-1} + \rho Q^2 s^{-2}]$$

$$Z(s) = Q^2 s^{-2} + Y(s) + Y(-s) \quad (\text{III-2.4})$$

denklemleri tanımlanır.

(III-1.38) ve (III-1.53) denklemlerini $X(s)$, $Z(s)$ ve $X(-s)$ ifadelerine göre birleştirdiğimizde

$$[X(s) - \rho Z(s)][X(-s) - \rho Z(s)] = -Z(s)[1 + \rho X(s) + \rho X(-s) - 2 \rho^2 Z(s)] \quad (\text{III-2.5})$$

veya

$$\begin{aligned} X(s)X(-s) - \rho X(s)Z(s) - \rho Z(s)X(-s) + \rho^2 Z^2(s) \\ = -Z(s) - \rho Z(s)X(s) - \rho Z(s)X(-s) + 2 \rho^2 Z^2(s) \end{aligned} \quad (\text{III-2.6})$$

$$X(s)X(-s) + \rho^2 Z^2(s) = -Z(s) + 2 \rho^2 Z^2(s) \quad (\text{III-2.7})$$

$$X(s)X(-s) = -Z(s) + \rho^2 Z^2(s) \quad (\text{III-2.8})$$

olacaktır.

Şimdi,

$$X(s) = e^{-sl} \mu(s) v(s) \quad (\text{III-2.9})$$

$$Z(s) = -\mu(s) \mu(-s) \quad (\text{III-2.10})$$

$$v(s) v(-s) = \rho^2 \mu(s) \mu(-s) + 1 \quad (\text{III-2.11})$$

ifadelerini tanımlayalım.

$G(s)$ ifadesini yukarıda verilen cinsinden yazmaya çalışalım.

$$G(s) \cdot [Q^2/s + F(-s) - \rho Y(s) + \rho Y(-s)] = Q^2 s^{-2} + Y(s) + Y(-s) \quad (\text{III-2.12})$$

$$G(s) \cdot [Q^2 s^{-1} + F(-s) - \rho Y(s) + \rho Y(-s)] = Z(s) \quad (\text{III-2.13})$$

$$X(-s) = F(-s) + 2 \rho Y(-s) + Q^2 s^{-1} + \rho Q^2 s^{-2} \quad (\text{III-2.14})$$

$$X(-s) - 2 \rho Y(-s) - \rho Q^2 s^{-2} = F(-s) + Q^2 s^{-1} \quad (\text{III-2.15})$$

$$G(s) \cdot [X(-s) - 2 \rho Y(-s) - \rho Q^2 s^{-2} - \rho Y(s) + \rho Y(-s)] = Z(s) \quad (\text{III-2.16})$$

$$G(s) \cdot [X(-s) - \rho [Y(-s) + Y(s) + Q^2 s^{-2}]] = Z(s) \quad (\text{III-2.17})$$

ve (III-2.4) denklemini kullanılırsa,

$$G(s) [X(-s) - \rho Z(s)] = Z(s) \quad (\text{III-2.18})$$

$$G(s) = \frac{Z(s)}{X(-s) - \rho Z(s)} \quad (\text{III-2.19})$$

şeklinde olur.

Bu ifadede,

$$\begin{aligned} X(s) &= e^{-sl} \mu(s) v(s) \\ X(-s) &= e^{sl} \mu(-s) v(-s) \\ Z(s) &= -\mu(s) \mu(-s) \end{aligned} \quad (\text{III-2.20})$$

bağıntılarını koyarsak,

$$G(s) = \frac{-\mu(s)}{e^{sl} v(-s) + \rho \mu(s)} \quad (\text{III-2.21})$$

şeklinde elde ederiz.

$X(s) = \mu(s) v(s) \exp(-sl)$ ifadesinin çarpanlarına ayrılmasında $Z(s)$ 'in de kökleri olan $X(s)$ 'nin tüm kökleri $\mu(s)$ içinde ortaya çıkar, $X(s)$ ve $\rho Z(s) - 1$ 'in genel kökleri $v(s)$ içinde ortaya çıkar.

Şimdiye kadar $\mu(s)$ ve $v(s)$ eksponansiyel faktörsüz olarak elde edilebiliyordu. $\mu(s)$, $\exp \phi(s)$ ile $v(s)$, $\exp[-\phi(s)]$ ile çarpılıyor. ($\phi(s)$ s 'nin bir tek fonksiyonudur.)

Elde edilen denklem önceki denklemlerin herhangi birindeki etkiye sahip olmayacaktır. Buradaki faktör bir tam fonksiyon olarak seçilebilir. O zaman $\mu(s)$ ve $v(s)$ $s=0$ daki basit kutup hariç diğerleri için düzenli olacaktır.

$X(s)$ deki $\rho Q^2 s^{-2}$ ve $Z(s)$ deki $Q^2 s^{-2}$ kutupları, $\mu(s)$ deki $Q s^{-1}$ ve $v(s)$ deki $\rho Q s^{-1}$ kutupları ifade eder.

$$\mu(s) = Q/s + M(s), \quad v(s) = \rho Q/s - 1 + N(s) \quad (\text{III-2.22})$$

tanımlayalım. Burada $M(s)$ ve $N(s)$ tam fonksiyonlardır.

$\mu(s)$ ve $v(s)$ ifadelerinden çıkan açık terimler sadece $\mu(s)$ ve $v(s)$ 'in katı-çubuk değerleridir. Gerçek Q değeri ile Q 'nun katı-çubuk değeri yer değiştirecektir.

(III-2.22) ifadelerini (III.2.9), (III-2.10), (III-2.11) ve (III-2.21) denklemlerinde yerine koyalım;

Daha önceden $C(x)$ için tanımlanan (III-2.1) ifadesini kullanalım,

$l=0$ alınırsa, (III-2.1) ifadesi

$$-C(x) = Q^2(1 - \rho x) - 2\rho y(x) + p(x) + q(x) \quad (\text{III-2.23})$$

şeklini alır.

Bu ifadeye Laplace dönüşümünü uygulayalım.

$$-\int_0^a C(x) e^{-sx} dx = Q^2(s^{-1} - \rho s^{-2}) - 2\rho Y(s) + \int_{-a}^0 p(x) e^{-sx} dx + \int_0^a q(x) e^{-sx} dx \quad (\text{III-2.24})$$

$$\int_{-a}^0 p(x) e^{-sx} dx = P(s)$$

$$\int_0^a q(x) e^{-sx} dx = \Pi(s) \quad (\text{III-2.25})$$

diyelim ve

$$-\int_0^a C(x) e^{-sx} dx = F(s) \text{ olduğundan denklemini yeniden düzenleyelim.}$$

$$F(s) = Q^2(s^{-1} - \rho s^{-2}) - 2\rho Y(s) + P(s) + \Pi(s) \quad (\text{III-2.26})$$

olur.

$X(s) = F(s) + 2\rho Y(s) - Q^2 s^{-1} + \rho Q^2 s^{-2}$ ifadesinde $F(s)$ 'i yerine yazalım.

$$X(s) = P(s) + \Pi(s) = e^{-sl} \mu(s) v(s) \quad (\text{III-2.27})$$

$$l=0 \text{ için } X(s) = P(s) + \Pi(s) = \mu(s) v(s) \quad (\text{III-2.28})$$

bulunur. (III-2.22) bağıntıları kullanılarak

$$P(s) + \Pi(s) = [Q/s + M(s)][\rho Q/s - l + N(s)] \quad (\text{III-2.29})$$

$$M(s)N(s) + Q/s[N(s) + \rho M(s)] - M(s) = Q/s[1 - \rho Q/s] + P(s) + \Pi(s)$$

$$= Q/s - \rho Q^2/s^2 + Q^2/s - Q^2/s + P(s) + \Pi(s)$$

$$= Q/s - Q^2/s + Q^2/s[1 - \rho/s] + P(s) + \Pi(s)$$

$$= Q/s[1 - Q(1 - \rho l)] + P(s) + \Pi(s)$$

$$M(s)N(s) + Q/s[N(s) + \rho M(s)] - M(s) = Q/s[1 - Q(1 - \rho l)] + P(s) + \Pi(s)$$

$$(\text{III-2.30})$$

ifadesi elde edilir.

$\mu(s)$ ve $v(s)$ ifadelerini (III-2.11) denkleminde yerine yazalım.

$$[\rho Q/s - l + N(s)] \cdot [-\rho Q/s - l + N(-s)]$$

$$= \rho^2 [Q/s + M(s)] \cdot [-Q/s + M(-s)] + 1 \quad (\text{III-2.31})$$

$$N(s)N(-s) + \rho Q/s[N(-s) - N(s)] - N(-s) - N(s)$$

$$= \rho^2 \{M(s)M(-s) + Q/s[M(-s) - M(s)]\} \quad (\text{III-2.32})$$

(III-2.4) ve (III-2.20) denklemleri arasındaki ilişki kullanılarak,

$$Q^2 s^{-2} + Y(s) + Y(-s) = -\mu(s) \mu(-s) \quad (\text{III-2.33})$$

$$Q^2 s^{-2} + Y(s) + Y(-s) = -[Q/s + M(s)] \cdot [-Q/s + M(-s)] \quad (\text{III-2.34})$$

$$Y(s) + Y(-s) = Q/s[M(s) - M(-s)] - M(s)M(-s) \quad (\text{III-2.35})$$

$$-[Y(s) + Y(-s)] = M(s)M(-s) + Q/s[M(-s) - M(s)] \quad (\text{III-2.36})$$

$$N(s)N(-s) + \rho Q/s[N(-s) - N(s)] - N(-s) - N(s)$$

$$= \rho^2 \{M(s)M(-s) + Q/s[M(-s) - M(s)]\}$$

$$= -\rho^2 [Y(s) + Y(-s)] \quad (\text{III-2.37})$$

ifadesi elde edilir.

(III-2.22) denklemleri (III-2.21) ifadesinde yerine konulursa,

$$p(-x) = Q \int_x^a n(-x') dx' + \int_x^a m(x'-x) n(-x') dx' \quad (\text{III-2.40})$$

$$q(x) = -m(x) - \rho Q \int_x^a m(x') dx' + \int_x^a m(x') n(x-x') dx' \quad (\text{III-2.41})$$

$$1 - Q(1 - \rho) = \rho \int_0^a m(x') dx' + \int_0^a n(-x') dx' \quad (\text{III-2.42})$$

ifadeleri elde edilir.

(III-2.37) ifadesinin ters Laplace dönüşümü alınır;sa;

$$\begin{aligned} & \int_x^a n(-x') n(x-x') dx' + \rho Q \int_x^a n(-x') dx' - n(-x) \\ &= \rho^2 \left[\int_x^a m(x') m(x'-x) dx' + Q \int_x^a m(x') dx' \right] \\ &= -\rho^2 y(x) \end{aligned} \quad (\text{III-2.43})$$

ifadesi ortaya çıkar.

$\gamma(x) = g(x+1)$ tanımlanarak, $0 < x < a$ aralığı için;

(III-2.39) ifadesinin ters Laplace dönüşümü alınır;sa,

$$-\gamma(x) - \rho Q \int_0^x \gamma(x') dx' + \int_0^x \gamma(x') n(x'-x) dx' = -Q - m(x) \quad (\text{III-2.44})$$

ifadesini elde ederiz.

(III-2.41), (III-2.43) ve (III-2.44) denklemleri üçlü olarak birleştirilmiş kuadratik integral denklemlerinin kapalı bir takımını oluşturur. Bu integral denklemleri Q parametre değeri ile ilgili olan (III-2.42) yardımcı denklemi ile $m(x)$, $n(x)$ ve $q(x)$ değerleri içindir.

($\gamma(x)$ değeri,

$$-\gamma(x) f_T(x+1) = q(x) e_T(x+1) \text{ ifadesi ile}$$

$q(x)$ 'a bağlı oluyor.)

$$G(s)\{e^{sl} v(-s) + \rho \mu(s)\} = -\mu(s) \quad (\text{III-2.38})$$

$$G(s)\{e^{sl}[-\rho Q/s - l + N(-s)] + \rho [Q/s + M(s)]\} = -Q/s - M(s) \quad (\text{III-2.39})$$

elde edilecektir. (III-2.30) ifadesinin sağ tarafı $x > a$ için $Q[1 - Q(1 - \rho l)]$ sabit değerine sahip olan bir fonksiyonun Laplace dönüşümüdür. (III-2.30)'nin sol tarafının ters Laplace dönüşümü de, eğer $M(s)$ ve $N(s)$ $m(x)$ ve $n(x)$ fonksiyonlarının Laplace dönüşümü ise bu formda olabilecektir. Fonksiyonlardan biri $-a < x < 0$ aralığının dışında ortadan kaybolacağından diğeri $0 < x < a$ aralığı hariç diğer aralıklarda sıfır olacaktır.

Benzer olarak, (III-2.37) ifadesinin sağ tarafı $x > a$ için sıfır olan bir fonksiyonun Laplace dönüşümüdür ve (III-2.37)'nin sol tarafı eğer $m(x)$ ve $n(x)$ fonksiyonları $-a < x < 0$ ve $0 < x < a$ aralıklarıyla sınırlanıyorsa otomatik olarak Laplace dönüşümü davranışına sahip olacaklardır.

(III-2.30) ve (III-2.37) ifadelerinin sağladığı iki alternatif arasındaki doğru seçim, yeni elde edilen $y(x)$, $p(x)$, $q(x)$ ve $g(x)$ arasındaki,

$$y(x) = \int_{x+l}^{a+l} q(x') g(x-x') dx'$$

$$p(x-l) = \rho^2 \int_{-a}^{x-l} y(-x') g(x-x') dx'$$

bağıntıları ile her bir seçimin uygunluğunu test ederek bulabiliriz.

Doğru seçimin, $0 < x < a$ ile sınırlı $m(x)$ ve $-a < x < 0$ ile sınırlı $n(x)$ olduğu meydana çıkacaktır.

(III-2.30) ifadesinin ters Laplace dönüşümü alınır;

Böylece çift dağılım fonksiyonu tamamen çıkarılmıştır ve doğrudan korelasyon fonksiyonu için denklemdaki integrasyon aralığı tek başına kuyruk potansiyelinin aralığına indirgenbilir.

Bu indirgemenin karakteristik bir özelliği, sıkışabilirliğin karekökünün bir parametre olarak ortaya çıktığını gösterir. Oysaki, sıkışabilirlik kendi başına orijinal Percus-Yevick denkleminde ortaya çıkar. ^[11]

İstatistik Mekanik'te çift dağılım fonksiyonu için ileri sürülen çeşitli yaklaşık integral denklemlerinden biri olan Percus-Yevick denkleminin Laplace dönüşümü yardımı ile tek boyuttaki çözümünü incelenmiştir.

Burada kullanılan metod da Percus-Yevick denkleminin ayrıntılı bir çalışması ortaya çıkmıştır. Kullanılan metod, Laplace dönüşümü yapılmış Percus-Yevick denklemi için kompleks değişkenli fonksiyonların bazı temel teorilerinin uygulamalarında ibarettir. Buradaki çalışmada potansiyel kuyruğunun sonlu olabileceği veya sadece integre edilebilir singularitelere sahip olabileceği fakat ekli halde keyfi olabileceği farzedilmiştir. Böyle bir özelliğe sahip potansiyel kuyruk ile katı bir çubuktan ibaret olan sistemler için, Percus-Yevick denklemi çarpanlarına ayrılır ve çift dağılım fonksiyonunu çıkarmak için kullanılır. Böylece tek başına doğrudan korelasyon fonksiyonu için bir denklem ortaya çıkar.

Sıfır kuyruk durumunda, katı çubuk için çözüm basit bir şekilde elde edilir. Sıfır olmayan kuyruk durumunda, $C(x)$ doğrudan korelasyon fonksiyonu için denklem algebratik hesaplamalara uygun olan bir form içinde ifade edilebilir.

BÖLÜM IV

SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmada, Klasik İstatistik Mekanik'te çift dağılım fonksiyonu için ileri sürülen çeşitli yaklaşık integral denklemlerinden biri olan Percus-Yevick denkleminin Laplace dönüşümü yardımı ile tek boyuttaki çözümü incelenmiştir.

Burada kullanılan metod da Percus-Yevick denkleminin ayrıntılı bir çalışması ortaya çıkmıştır. Kullanılan metod, Laplace dönüşümü yapılmış Percus-Yevick denklemi için kompleks değişkenli fonksiyonların bazı temel teorilerinin uygulamalarından ibarettir. Buradaki çalışmada potansiyel kuyruğunun sonlu olabileceği veya sadece integre edilebilir singülaritelere sahip olabileceği fakat aksi halde keyfi olabileceği farzedilmiştir. Böyle bir özelliğe sahip potansiyel kuyruk ile katı bir çubuktan ibaret olan sistemler için, Percus-Yevick denklemi çarpanlarına ayrılır ve çift dağılım fonksiyonunu çıkarmak için kullanılır. Böylece tek başına doğrudan korelasyon fonksiyonu için bir denklem ortaya çıkar.

Sıfır kuyruk durumunda, katı çubuk için çözüm basit bir şekilde elde edilir. Sıfır olmayan kuyruk durumunda, $C(x)$ doğrudan korelasyon fonksiyonu için denklem nümerik hesaplamalara uygun olan bir form içinde ifade edilebilir.

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 (1968).
- 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",
McGraw-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- Von der Pol, B. and H.Bremner,
"Operational Calculus Based on the Two-sided Laplace Integral"
Cambridge University Press, New York (1955).
- 9- Necdet San,
"Kompleks Fonksiyonlar Teorisi",
Ege Üniversitesi Fen Fakültesi Baskı İşleri,
İzmir, (1979).
- 10- Butkov, Eugene
"Mathematical Physics",
Addison-Wesley Publishing Company, (1973).
- 11- Wertheim, M.S.,
Journal of Mathematical Physics,
5, 643 (1963).
- 12- Wertheim, M.S.,
Physical Review Letters,
10, 321 (1963).
- 13- Thompson N.E., and Freasier B.C.,
Molecular Physics,
41, 127 (1980).
- 14- Thiele, E.,
The Journal of Chemical Physics,
39, 474 (1963).
- 15- Ashcroft, N.W. and Lecner, J.,
Physical Review,
145, 83 (1966).



