

T.C.
İSTANBUL KÜLTÜR ÜNİVERSİTESİ
LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ

BİR,İKİ VE ÜÇ BOYUTLU HELYUM-4 (He-4) ATOMUNUN
TERMODİNAMİK ÖZELLİKLERİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Yousef Hussein Abed SHEHADEH

2000000382

Anabilim Dalı: Fizik

Program: Fizik

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Sevim AKYÜZ

HAZİRAN 2023

T.C. İSTANBUL KÜLTÜR ÜNİVERSİTESİ

LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ

**BİR, İKİ VE ÜÇ BOYUTLU HELYUM-4 (He-4) ATOMUNUN
TERMODİNAMİK ÖZELLİKLERİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Yousef Hussein Abed SHEHADEH

2000000382

Anabilim Dalı: Fizik

Program: Fizik

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Sevim AKYÜZ

Jüri Üyeleri: Prof. Dr. Ayşen ÖZEL

Doç. Dr. Sefa ÇELİK

HAZİRAN 2023

ÖNSÖZ

Çalışma sürecinde her türlü yol gösterici olan, olumlu tavrıyla beni cesaretlendiren, bilgi birikimiyle çalışmama farklı açılardan bakmamı sağlayan beraber çalışmaktan ve her zaman öğrencisi olmaktan gurur duyduğum değerli hocam Dr.Ayman Sandouqa, Ayrıca bu çalışmayı yapmama ilham olan ve mensubu olmaktan mutluluk ve gurur duyduğum, çalışmamda bana destek olan tüm bilgi ve birikimlerini benimle paylaşan, Prof.Dr.Sevim Akyüz'e teşekkür ederim .

Tezimi, Çabamı ve çalışmamı bana hayat, umut, tutku veren ve bana hayatta bilgelikle yükselmesi öğreten birine ederim: Sevgili babam: Hussein Abed Shehadeh, sevgili annem: zainab Mohamad Abu-Shairah, Hayatımda varlıklarını Allah'ın bana lütfettiği ve sıkılmadan Hep yanımda duranlar kardeşlerime: Mühendis. Odiy Shehadeh, Abdul Qadir Shehadeh , Ghalia Shehadeh.

Bilimsel araştırmasımda başarıya ulaşmamda yanımda hep duran kişine, sevgili eşim Habibah Abdulfatah Abu-Shairah, Son olarak bana yardımcı Arkadaşlara ve başarımda payı olan D.r.Jamil Issa / H. Hamza Al-Omari / Dr. Amjad Al-Ahmad teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ	I
İÇİNDEKİLER	II
SEMBOLLER:	III
TABLO LİSTESİ	IV
ŞEKİL LİSTESİ	V
ÖZET	VI
ABSTRACT	VII
1. 1	
1.1 Bir boyut	2
1.2 iki boyut	3
1.3 Üç boyut.....	3
2. 3	
2.1 ikinci virial katsayısı şu şekilde verilir:	4
2.2 Hesaplamalar ve sonuçlar.	5
2.2.1: Lennard-Jones potansiyeli:	5
2.2.2: Aziz potansiyeli	5
3. iki boyu	13
3.1 İkinci virial katsayı (B):	15
3.2 Hesaplamalar ve sonuçlar.	15
3.2.1 Beck potansiyeli:.....	15
3.2.2 Aziz potansiyeli	16
4. Üç boyut	25
4.1 İkinci virial katsayı (B):	26
4.2 Hesaplamalar ve sonuçlar.	27
4.2.1 Beck potansiyeli:.....	27
4.2.2 Basitleştirilmiş ab initio atomik potansiyel :	27
5. SONUÇ	36
6. KAYNAKLAR	37

SEMBOLLER:

T: Mutlak sıcaklık.

B: ikinci virial katsayı

B_{KL} : ikinci virial katsayısı (klasik)

B_{KU} : ikinci virial katsayısı (kuantum)

TABLO LİSTESİ

Tablo (1): Aziz potansiyelinin parametreleri	5
Tablo (2): İkinci virial katsayı hesabı	6
Tablo (3): İkinci virial katsayı hesaplamaları	7
Tablo (4): ($J/\text{\AA}$) Hesaplamasındaki Kuvvet	12
Tablo (5): Aziz potansiyelinin parametreleri	16
Tablo (6): Farklı sıcaklıklarda klasik virial katsayısı.	17
Tablo (7): Farklı sıcaklıklarda kuantum düzeltme virial katsayı.	18
Tablo (8): Farklı sıcaklıklardaki toplam ikinci virial katsayısı.	19
Tablo (9): Farklı sıcaklıklarda ve farklı yoğunluklarda Kuvvet Gerilimi	20
Tablo (10): Farklı sıcaklıklarda klasik virial katsayısı.	21
Tablo (11): Farklı sıcaklıklarda kuantum düzeltme virial katsayısı	22
Tablo (12): Farklı sıcaklıklarda toplam ikinci virial katsayısı.	23
Tablo (13): Farklı sıcaklıklarda ve farklı yoğunluklarda Kuvvet Gerilimi	24
Tablo (14): Farklı sıcaklıklarda klasik virial katsayısı.	28
Tablo (15): Farklı sıcaklıklarda kuantum düzeltme virial katsayısı.	29
Tablo (16): Farklı sıcaklıklardaki toplam ikinci virial katsayısı.	30
Tablo (17): Farklı sıcaklıklarda ve farklı yoğunluklarda basınç.	31
Tablo (18): Farklı sıcaklıklarda klasik virial katsayısı.	32
Tablo (19): Farklı sıcaklıklarda kuantum düzeltme virial katsayısı.	33
Tablo (20): Farklı sıcaklıklarda toplam ikinci virial katsayısı.	34
Tablo (21): Farklı sıcaklıklarda ve farklı yoğunluklarda basınç	35

ŞEKİL LİSTESİ

Şekil (1) Toplam İkinci virial katsayısı (B) ile sıcaklık (T) arasındaki ilişki	8
Şekil (2): İkinci virial kuantum düzeltmesi (B_q) ile sıcaklık (T) arasındaki ilişkisi	9
Şekil (3): Klasik İkinci virial katsayısının sıcaklık (T) ile ilişkisi.	10
Şekil (4): Toplam İkinci virial katsayısı (B) ile sıcaklık (T) arasındaki ilişkisi.	11
Şekil (5): Farklı doğrusal yoğunluklardaki moleküller (F) ile sıcaklık (T) arasındaki kuvvet arasındaki ilişkisi	13
Şekil (6): T [K] sıcaklıklarına karşı [T]'nin bir fonksiyonu olarak klasik virial katsayısı	17
Şekil (7): T [K] sıcaklıklarına karşı [T]'nin bir fonksiyonu olarak kuantum düzeltme virial katsayısı.	4
Şekil (8): T [K] sıcaklıklarına karşı [T]'nin bir fonksiyonu olarak ikinci virial katsayısı	4
Şekil (9): T[K] sıcaklıklarına karşı farklı yoğunluklarda Kuvvet Gerilimi,[N/m].	20
Şekil (10): T [K] sıcaklıklarına karşı [T]'nin bir fonksiyonu olarak klasik virial katsayısı.	21
Şekil (11): T [K] sıcaklıklarına karşı [T]'nin bir fonksiyonu olarak kuantum düzeltme virial katsayısı.	22
Şekil (12): T [K] sıcaklıklarına karşı [T]'nin bir fonksiyonu olarak ikinci virial katsayısı.	23
Şekil (13): T[K] sıcaklıklarına karşı farklı yoğunluklarda Kuvvet Gerilimi,[N/m].	24
Şekil (14): T [K] sıcaklıklarına karşı [T]'nin bir fonksiyonu olarak klasik virial katsayısı.	28
Şekil (15): T [K] sıcaklıklarına karşı [T]'nin bir fonksiyonu olarak kuantum düzeltme virial katsayısı.	29
Şekil (16): T [K] sıcaklıklarına karşı [T]'nin bir fonksiyonu olarak ikinci virial katsayısı.	30
Şekil (17): T[K] sıcaklıklarına karşı farklı yoğunluklardaki P[MPa] basıncı.	31
Şekil (18): T [K] sıcaklıklarına karşı [T]'nin bir fonksiyonu olarak klasik virial katsayısı.	32
Şekil (19): T [K] sıcaklıklarına karşı [T]'nin bir fonksiyonu olarak kuantum düzeltme virial katsayısı.	33
Şekil (20): Sıcaklıklara karşı [T]'nin bir fonksiyonu olarak ikinci virial katsayısı T [K].	34
Şekil (21): T[K] sıcaklıklarına karşı farklı yoğunluklardaki P[MPa] basıncı.	35

ÖZET

Bu tez kapsamında, aynı gaz molekülleri arasındaki etkileşimleri belirlemek için (${}^4\text{He}$) gazının termodinamik özellikleri, hal denkleminde (${}^4\text{He}$) için ikinci virial katsayıya, iki farklı, atomlar arası etkileşme potansiyeli uygulanarak incelenmiştir. Sonuç olarak, verilen bir sıcaklıkta klasik virial katsayısı ve kuantum düzeltme virial katsayısında temsil edilen birçok özellik hesaplanmıştır. İkinci virial katsayı için, farklı potansiyellerden türetilen basit bir yaklaşık analitik ifade türetilmiştir.



ABSTRACT

In this thesis, in order to determine interactions between the same gas molecules, the thermodynamic properties of (${}^4\text{He}_2$) gas have been investigated, using the equation of state, where two different interatomic interaction potentials for (${}^4\text{He}_2$) on the second virial coefficient were applied. As a result, many properties, represented in classical virial coefficient and quantum correction virial coefficient at a given temperature, were calculated. A simple approximate analytical expression for the second virial coefficient was derived from different potentials.



1. GİRİŞ

Fizikte, kimyada ve termodinamikte hal denklemi, hal değişkenleri arasındaki ilişkiyi gösteren termodinamik bir denklemdir. Basınç, hacim, sıcaklık ve iç enerji gibi belirli fiziksel koşullar altında maddenin durumunu tanımlayan hal denkleminde ikinci virial katsayı $B(T)$ olarak adlandırılan önemli bir değişken vardır. İkinci virial katsayısı, ideal gaz yasasına sistematik bir düzeltme sağladığı için gerçek bir gazın "ideal olmama" derecesini belirleyen önemli bir değişkendir. Bu katsayı atomlar arası potansiyellere oldukça duyarlıdır. İkinci virial katsayı, gerçek gazların termodinamik özelliklerinin belirlenmesinde de yararlıdır. Ek olarak, parçacıklar arası etkileşimin itici bileşeninin çekici bileşene oranının bir ölçüsü olarak işlev görür. Aynı durumlarda, kritik sıcaklığı tahmin etmek için de kullanılabilir. Bu tez çalışmasında farklı boyutlarda hal denklemini ve ikinci virial katsayıyı basitleştiren analitik bir ifadenin elde edilmesi hedeflenmiştir.

1.1 Bir boyut

1991 Yılında keşfedilen karbon nanotüpler, geleceğin en önemli malzemelerinden biridir. Geniş yelpazede üretimleri nedeni ile dünyanın her yerinde birçok şirketin ilgisini çeken bir aşamaya gelinmiştir. Dikkat çekici elektriksel, mekanik, optik, termal ve kimyasal özelliklere sahiptirler ve bu da onları birçok mühendislik uygulamaları için mükemmel bir "uyum" haline getirir [Frackowiak ve Beguin, 2002]. Karbon nanotüpler (CNT'ler) karbonun allotroplarıdır. Bir karbon nanotüp, çapı bir nanometre olan, silindire sarılmış tek atomlu kalın bir grafit tabakasıdır ve grafen olarak adlandırılır. Bu, boyunun yarıçapa oranı 10.000'i aştığı durumda nanoyapı olarak tanımlanır [Rafique, 2011].

Nanotüp adı boyutlarından türetilmiştir, çünkü bir nanotüpün çapı birkaç nanometre mertebesinde; insan saçının genişliğinden yaklaşık 50.000 kat daha incedir. Uzunlukları birkaç milimetreye kadar çıkarabilir. Nanotüplerin yapısı, fiziksel özellikleri, optik ve manyetik özellikleri hakkında geniş bilgi Harris'in 1999 yılında yayınladığı kitabında özetlenmiştir [P.J. Harris,1999]. Frackowiaka ve Beguin (2002) tarafından yapılan bir araştırmada nanotüplerin elektrokimyasal uygulamaları araştırılmış ve lityum piller, süper kapasitörler, hidrojen depolama gibi çeşitli sistemlerde karbon nanotüpler ve ilgili malzemeler kullanılarak elektrokimyasal enerji dönüşümü incelenmiştir.

Nanotüp yapıları malzemelerde soğurulan gazlar, bu ortamın doğası gereği, özel bir potansiyel ortamında bulunur. Bu onların yeterince düşük sıcaklıklarda tek boyutlu 1D gazlar gibi davranmasını sağlar, dolayısıyla nanotüp gazın etkin boyutsallığını azaltır. Bu nedenle, bir boyutlu gazdaki etkileşimleri incelemek için mükemmel bir fırsat sağlar [Sibel, 2003].

Bu tez çalışmamızda, Nanotüp içindeki helyum atomları arasındaki etkileşimleri inceledik.

1.2 iki boyut

Gazların nanotüp yapılı malzemelerinde adsorpsiyonu son zamanlarda önemli bir ilgi konusu olmuştur ve bu konuda birçok teorik ve deneysel çalışmalar yayınlanmıştır [Sibel,2003] Bu konuya olan ilgi, kısmen bu malzemelerin hidrojen depolaması için verimli gaz kapları olarak kullanılma olasılığından kaynaklanmaktadır . İlginin bir başka nedeni de nanotüp malzemelerinin gaz atomları ve molekülleri için çok özel potansiyel enerji ortamı oluşturmalarıdır [Sibel, 2003].

1.3 Üç boyut

Bir hacim kaplayan, sayı yoğunluğu n olan, N etkileşimli (${}^4\text{He}$) atomlarından oluşan bir sistemle ilgileneceğiz. Atom spinsiz bir bozondur. Mevcut sıcaklık aralığında, (${}^4\text{He}$) gazının özelliklerinin, özellikle alt uçtaki sıcaklığa duyarlı olması gerekir. [Smith, v.d. , 2005]

Bu çalışmada, (K) cinsinden farklı sıcaklıklarında (${}^4\text{He}$) gazının termodinamik özelliklerini ele almaktadır.

2. Bir Boyut

İlk kullanılan potansiyel Lennard-Jones potansiyelidir, daha sonra ikinci virial katsayısına uyan Aziz potansiyeli kullanılmış [Aziz, 1979] ve hal denklemi yazılmıştır.

İdeal gazı ele alalım. Bu sistemdeki atomların etkileşmediği göz önüne alınarak ideal gaz için hal denklemi $FL=NKBT$ olarak verilmiştir [Hutem, 2012]. Burada F moleküller arasındaki kuvvet, L nanotüpün uzunluğu, N ise molekül sayısı, K_B Boltzmann sabiti ve T mutlak sıcaklıktır. Bu denklem, gaz çok seyreltik olduğunda, dolayısıyla parçacıklar birbirinden çok uzakta olduğunda geçerlidir, böylece etkileşimin etkisi ihmal edilebilir. Gerçek sistemler için ideal gaz yasasından sapmalar deneysel olarak gözlemlenmiş ve sistemin parçacıkları arasındaki etkileşim dikkate alınarak yorumlanmıştır [Hutem, 2012]

Bir boyutlu sistemdeki hal denklemi şu şekilde verilir:

$$\frac{F}{K_B T} = n (1 + nB) \quad 1$$

Burada:

$$n = \frac{N}{L} \quad 2$$

ve

F : moleküllerin arası etkileşme.

KB : Boltzmann sabiti.

T : kelvin derecesile sıcaklıktır.

N : Angstrom (Å) uzunluğu başına düşen molekül sayısıdır.

B : ikinci virial katsayısı.

İkinci virial katsayı (B):

2.1 ikinci virial katsayısı şu şekilde verilir:

$$B = B_{kl} + B_{ku} \quad 3$$

Burada:

klasikli terim :

$$B_{kl} = \frac{\pi}{2} \int_0^{\infty} \left(1 - \text{Exp} \left(-\beta U(r) \right) \right) dr \quad 4$$

Ve kuantumlu terimi:

$$B_{ku} = \frac{\pi \hbar^2 \beta^3}{24 M_H} \int_0^{\infty} \left(\text{Exp} \left(-\beta U(r) \right) \right) \left(\frac{dU}{dr} \right)^2 dr \quad 5$$

2.2 Hesaplamalar ve sonuçlar

B(T)'nin sıcaklığa bağımlılığını ve etkileşim biçimine olan bağımlılığını tekrar saptamak için, belirli bir etkileşim potansiyellerine bakalım.

2.2.1: Lennard-Jones potansiyeli:

Lennard-Jones potansiyeli şu şekilde verilir:

$$U(r) = 4\varepsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right) \quad 6$$

Burada:

$$\sigma=2,56 \text{ ve } \varepsilon/kB=10,22 \text{ [5]}$$

2.2.2: Aziz potansiyeli:

Aziz potansiyeli şu şekilde verilir: [Aziz v.d., 1979; Aziz, 1979]

$$U(r) = \varepsilon \left(a \exp \left[-\alpha \left(\frac{r}{r_m} \right) + \beta \left(\frac{r}{r_m} \right)^2 \right] - \left(c_6 \left(\frac{r_m}{r} \right)^6 + c_8 \left(\frac{r_m}{r} \right)^8 + c_{10} \left(\frac{r_m}{r} \right)^{10} \right) F(r) \right) \quad 7$$

Burada:

$$F(r) = \exp \left[-\left(\frac{d \cdot r_m}{r} - 1 \right)^2 \right] \quad 8$$

$$r < d \cdot r_m$$

Tablo (1): Aziz potansiyelinin parametreleri

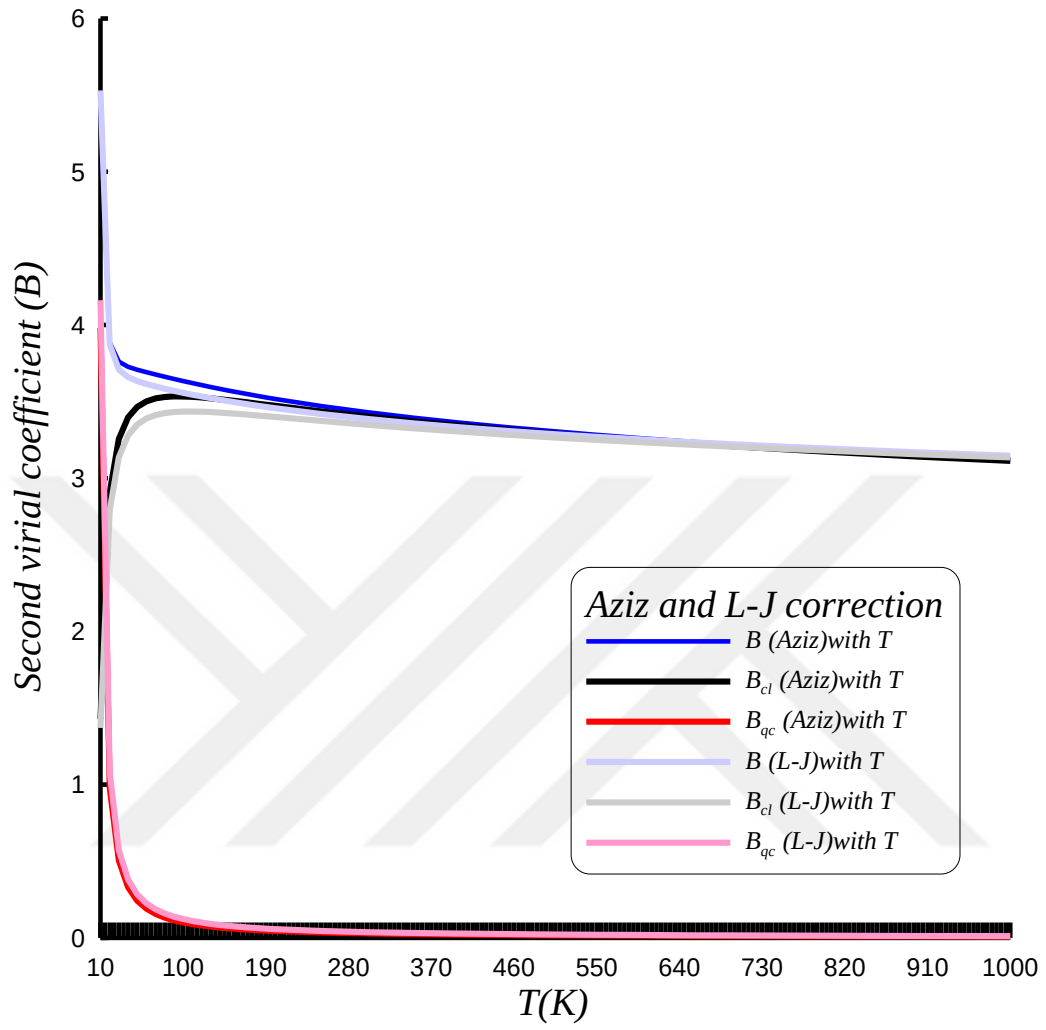
E	a	α	r_m	β	C_6	C_8	C_{10}	D
10.8	$5.54 \cdot 10^5$	13.35	2.98	0	1.373	0.425	0.178	1.24

Tablo (2): İkinci virial katsayı hesabı

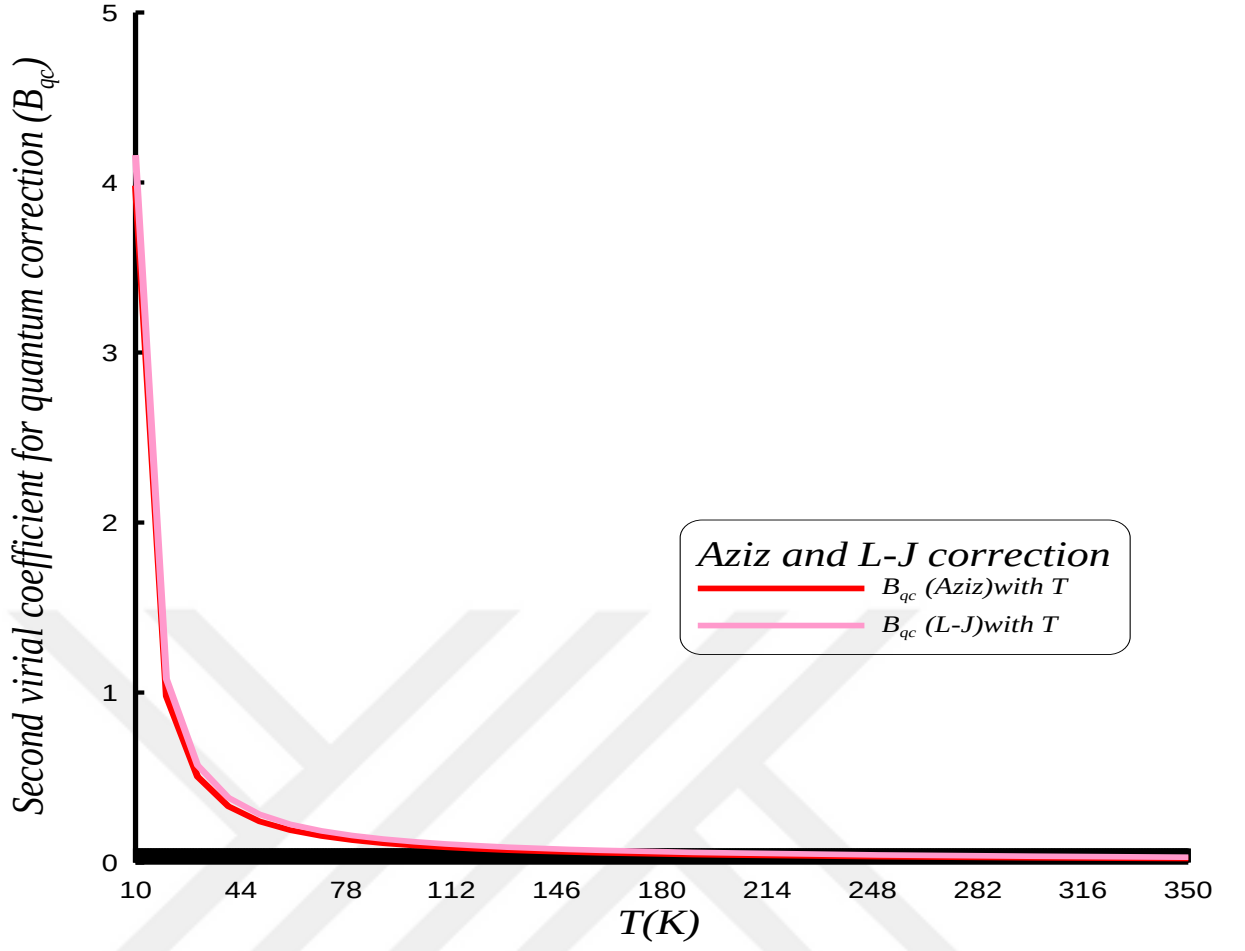
	L-J potential		Aziz potential	
T	B_{kl}	B_{ku}	B_{kl}	B_{ku}
10	1.3698	4.16162	1.42883	3.98148
20	2.79227	1.07983	2.90651	0.979576
30	3.13678	0.572269	3.25582	0.505474
40	3.27888	0.381378	3.3966	0.330861
50	3.3503	0.283838	3.4652	0.242894
60	3.38968	0.225276	3.50131	0.190648
70	3.41224	0.186438	3.52051	0.156304
80	3.42508	0.158885	3.53004	0.132121
90	3.43196	0.138363	3.53366	0.114227
100	3.43498	0.122505	3.53354	0.10048
110	3.43543	0.109895	3.531	0.0896063
120	3.43412	0.0996332	3.52678	0.0808003
130	3.43159	0.0911241	3.52145	0.0735304
140	3.42821	0.083956	3.51535	0.0674313
150	3.42421	0.0778364	3.50875	0.0622444
160	3.41979	0.0725519	3.5018	0.0577814
170	3.41508	0.0679431	3.49464	0.0539023
180	3.41015	0.0638886	3.48734	0.0505007
190	3.4051	0.0602942	3.47999	0.0474944
200	3.39996	0.0570861	3.47262	0.0448189
250	3.37412	0.045124	3.43649	0.0349165
300	3.34937	0.0373457	3.40262	0.0285519
350	3.32632	0.0318828	3.37137	0.0241254
400	3.30499	0.0278343	3.34257	0.0208728
450	3.28527	0.0247131	3.31598	0.018384
500	3.26699	0.0222328	3.29132	0.0164195
550	3.24998	0.0202137	3.26836	0.0148301
600	3.2341	0.0185377	3.2469	0.0135183
650	3.21922	0.017124	3.22675	0.0124175
700	3.20523	0.0159152	3.20777	0.0114807
750	3.19204	0.0148696	3.18984	0.0106741
800	3.17956	0.0139561	3.17285	0.00997233
850	3.16773	0.0131509	3.1567	0.00935631
900	3.15648	0.0124359	3.14132	0.00881129
0950	3.14577	0.0117965	3.12663	0.00832571
1000	3.13554	0.0112214	3.11259	0.00789038

Tablo (3): İkinci virial katsayı hesabı

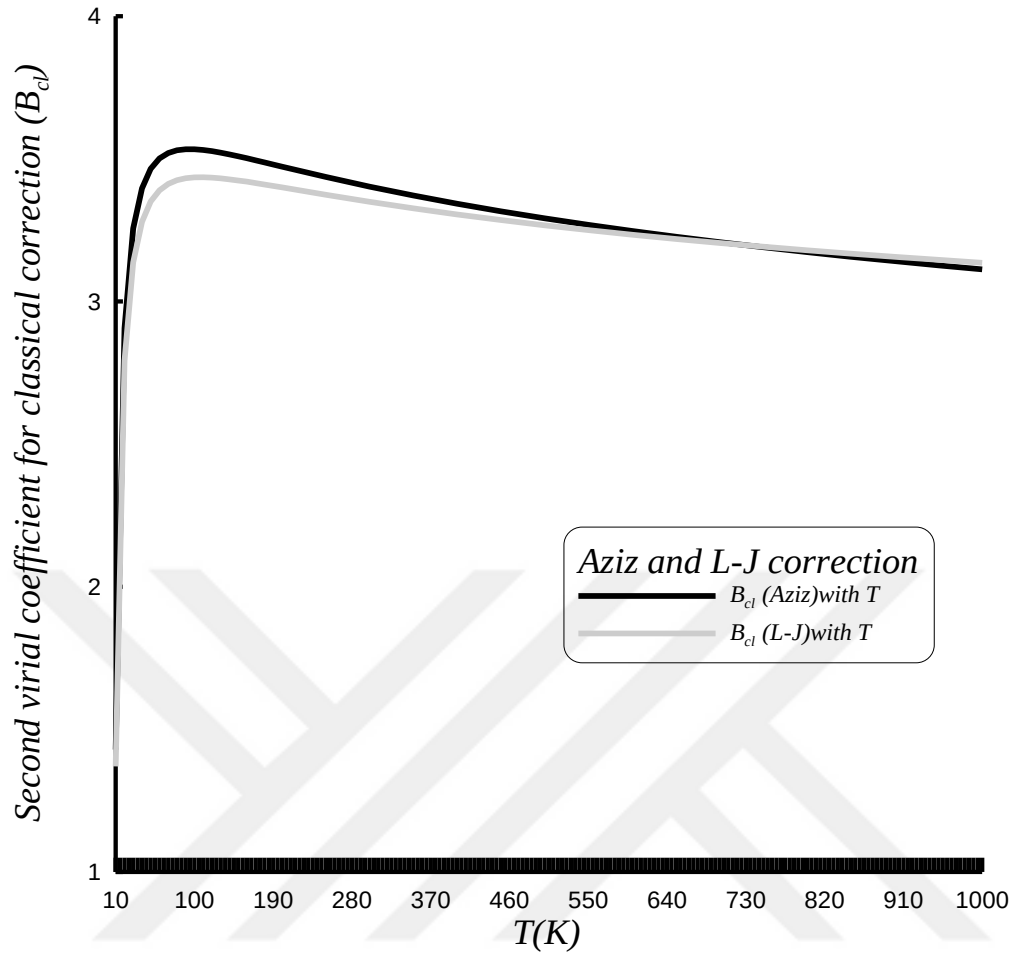
	L-J potential		Aziz potential			
T	B_{kl}	B_{ku}	B_{kl}	B_{ku}	B(L-J)	B(Aziz)
10	1.3698	4.16162	1.42883	3.98148	5.53142	5.41031
20	2.79227	1.07983	2.90651	0.979576	3.8721	3.886086
30	3.13678	0.572269	3.25582	0.505474	3.709049	3.761294
40	3.27888	0.381378	3.3966	0.330861	3.660258	3.727461
50	3.3503	0.283838	3.4652	0.242894	3.634138	3.708094
60	3.38968	0.225276	3.50131	0.190648	3.614956	3.691958
70	3.41224	0.186438	3.52051	0.156304	3.598678	3.676814
80	3.42508	0.158885	3.53004	0.132121	3.583965	3.662161
90	3.43196	0.138363	3.53366	0.114227	3.570323	3.647887
100	3.43498	0.122505	3.533357	0.10048	3.557485	3.633837
110	3.43543	0.109895	3.531	0.0896063	3.545325	3.620606
120	3.43412	0.0996332	3.52678	0.0808003	3.533753	3.60758
130	3.43159	0.0911241	3.52145	0.0735304	3.522714	3.59498
140	3.42821	0.083956	3.51535	0.0674313	3.512166	3.582781
150	3.42421	0.0778364	3.50875	0.0622444	3.502046	3.570994
160	3.41979	0.0725519	3.5018	0.0577814	3.492342	3.559581
170	3.41508	0.0679431	3.49464	0.0539023	3.483023	3.548542
180	3.41015	0.0638886	3.48734	0.0505007	3.474039	3.537841
190	3.4051	0.0602942	3.47999	0.0474944	3.465394	3.527484
200	3.39996	0.0570861	3.47262	0.0448189	3.457046	3.517439
250	3.37412	0.045124	3.43649	0.0349165	3.419244	3.471407
300	3.34937	0.0373457	3.40262	0.0285519	3.386716	3.431172
350	3.32632	0.0318828	3.37137	0.0241254	3.358203	3.395495
400	3.30499	0.0278343	3.34257	0.0208728	3.332824	3.363443
450	3.28527	0.0247131	3.31598	0.018384	3.309983	3.334364
500	3.26699	0.0222328	3.29132	0.0164195	3.289223	3.30774
550	3.24998	0.0202137	3.26836	0.0148301	3.270194	3.28319
600	3.2341	0.0185377	3.2469	0.0135183	3.252638	3.260418
650	3.21922	0.017124	3.22675	0.0124175	3.236344	3.239168
700	3.20523	0.0159152	3.20777	0.0114807	3.221145	3.219251
750	3.19204	0.0148696	3.18984	0.0106741	3.20691	3.200514
800	3.17956	0.0139561	3.17285	0.00997233	3.193516	3.182822
850	3.16773	0.0131509	3.1567	0.00935631	3.180881	3.166056
900	3.15648	0.0124359	3.14132	0.00881129	3.168916	3.150131
950	3.14577	0.0117965	3.12663	0.00832571	3.157567	3.134956
1000	3.13554	0.0112214	3.11259	0.00789038	3.146761	3.12048



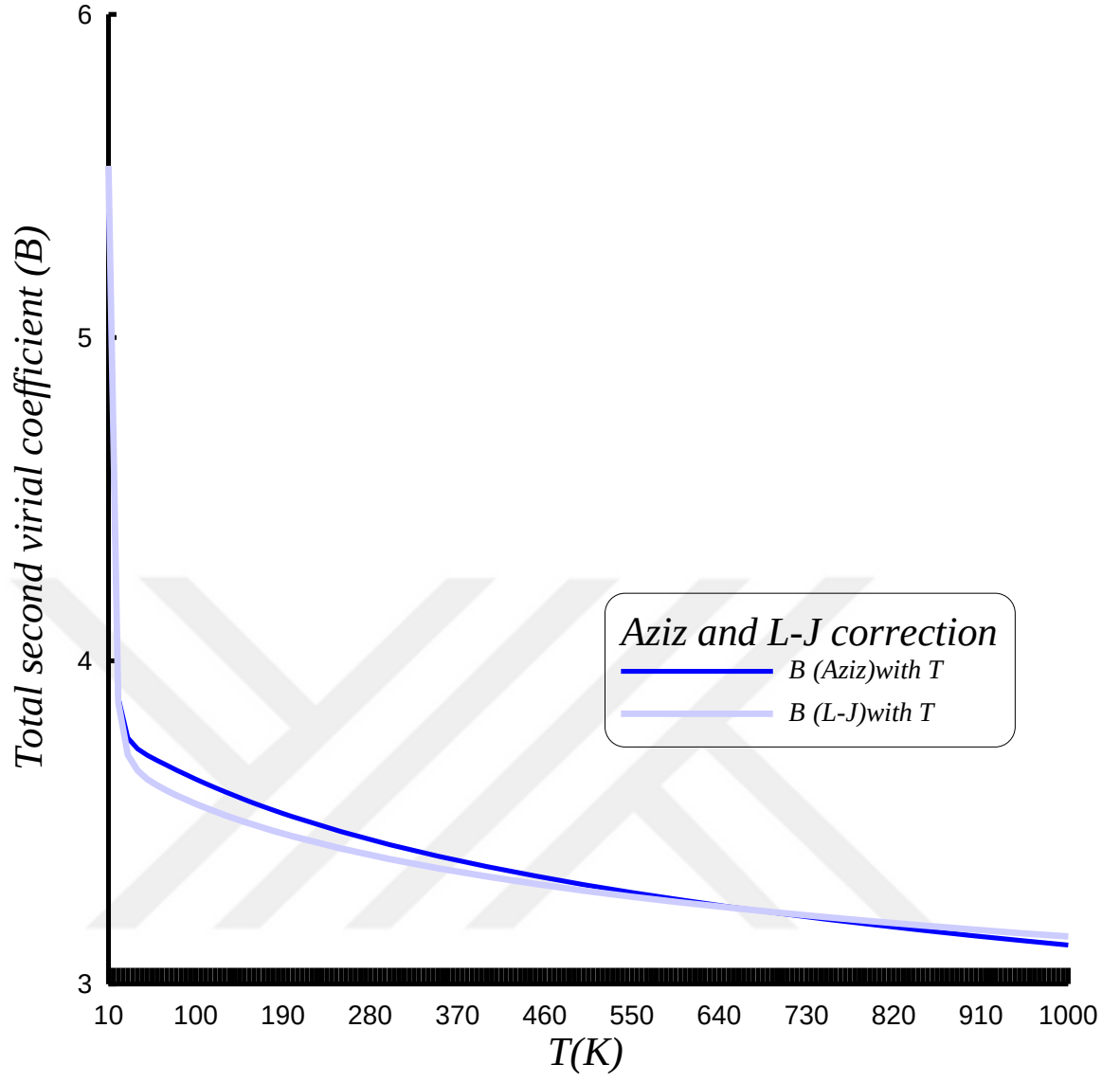
Şekil (1) Toplam İkinci virial katsayısı (B) ile sıcaklık (T) arasındaki ilişki



Şekil (2): İkinci virial kuantum düzeltmesi (B_{qc}) ile sıcaklık (T) arasındaki ilişkisi



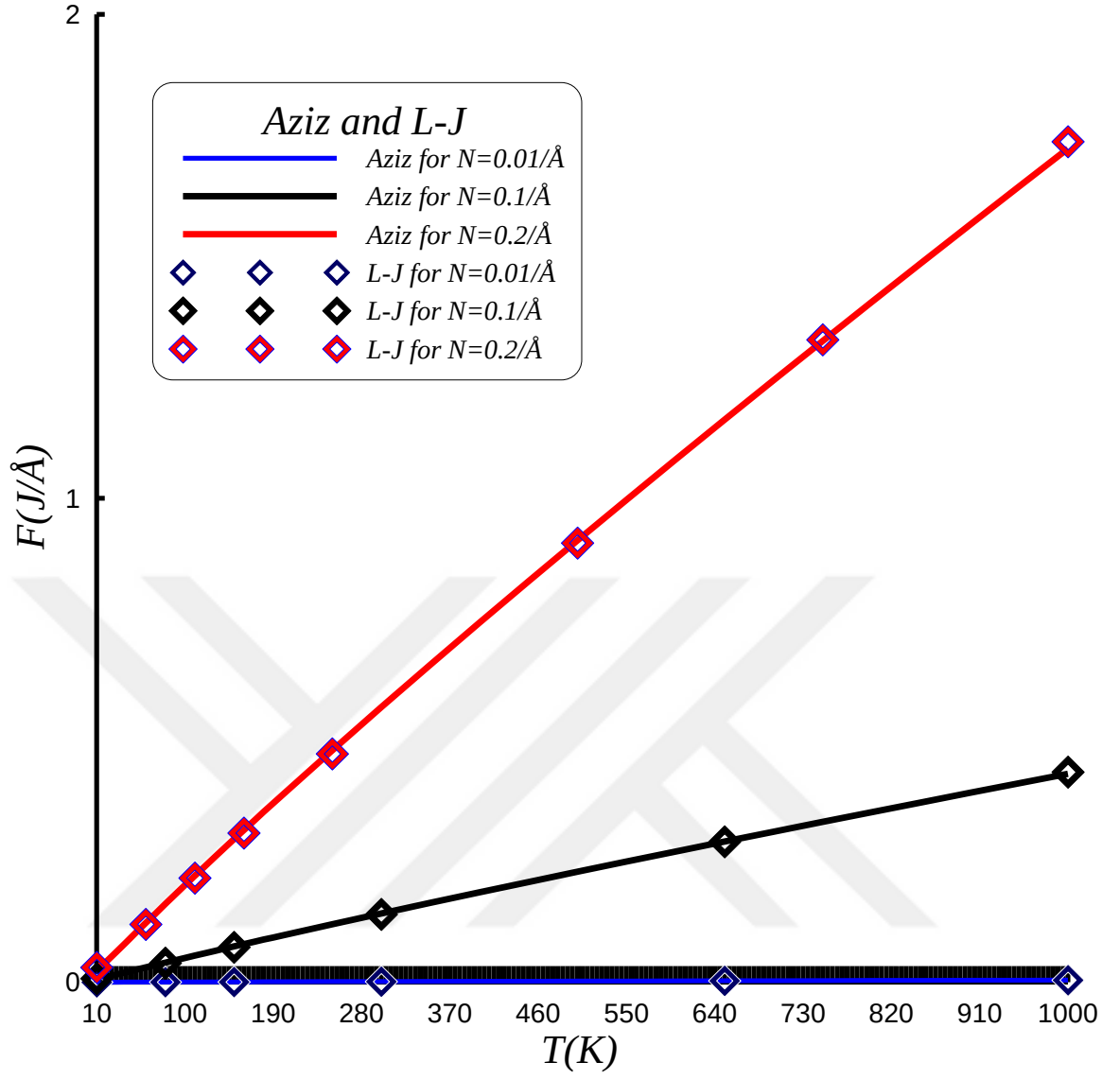
Şekil (3): Klasik İkinci virial katsayısının sıcaklık (T) ile ilişkisi.



Şekil (4): Toplam İkinci virial katsayısı (B) ile sıcaklık (T) arasındaki ilişkisi.

Tablo (4): ($J/\text{\AA}$) Hesaplamasındaki Kuvvet

	L-J potential			Aziz potential		
T	$n=0.01/\text{\AA}^{-1}$	$n=0.1/\text{\AA}^{-1}$	$n=0.2/\text{\AA}^{-1}$	$n=0.01/\text{\AA}^{-1}$	$n=0.1/\text{\AA}^{-1}$	$n=0.2/\text{\AA}^{-1}$
10	7.63336×10^{-5}	0.00763336	0.030533438	7.46623×10^{-5}	0.007466228	0.089864911
20	0.00010687	0.010686996	0.042747984	0.000107256	0.010725597	0.042902389
30	0.000153555	0.015355463	0.061421851	0.000155718	0.015571757	0.062287029
40	0.000202046	0.020204624	0.080818497	0.000205756	0.020575585	0.082302339
50	0.000250756	0.025075552	0.100302209	0.000255858	0.025585849	0.102343349
60	0.000299318	0.029931836	0.119727343	0.000305694	0.030569412	0.122277649
70	0.000347632	0.034763229	0.139052918	0.0003518	0.035518023	0.142072103
80	0.00039567	0.039566974	0.158267894	0.000404303	0.040430257	0.161721103
90	0.000443434	0.044343412	0.177373647	0.000453068	0.045306757	0.181227026
100	0.000490933	0.049093293	0.196373172	0.00050147	0.050146951	0.200587802
110	0.00053818	0.053818034	0.215272134	0.000549608	0.054960804	0.219843215
120	0.00058519	0.058518953	0.234075812	0.000597415	0.05974153	0.238966119
130	0.000631975	0.063197491	0.252789964	0.000644939	0.064493948	0.257975794
140	0.00067855	0.067855049	0.271420189	0.000692193	0.069219335	0.276877229
150	0.000724924	0.072492361	0.289969442	0.000739169	0.073919584	0.295678336
160	0.000771109	0.077110909	0.308443637	0.000785956	0.078595557	0.314382229
170	0.000817117	0.081711722	0.326846888	0.000832488	0.083248802	0.332995209
180	0.000862951	0.086295119	0.345180475	0.0008788	0.087879963	0.351519852
190	0.000908626	0.090562636	0.363450544	0.000924906	0.092490641	0.369962564
200	0.000954145	0.095414472	0.381657889	0.000970813	0.097081314	0.388325255
250	0.001179663	0.117963918	0.471855672	0.001197635	0.119763524	0.479054097
300	0.0014021	0.14021033	0.56084012	0.001420505	0.142050517	0.568202067
350	0.001622012	0.162201195	0.648804781	0.001640024	0.164002428	0.656009711
400	0.001839719	0.183971901	0.735887606	0.00185662	0.185662043	0.74264817
450	0.0020555	0.205549951	0.822199802	0.00207064	0.207064004	0.828256018
500	0.002269564	0.226956373	0.907825493	0.00228234	0.228234026	0.912936102
550	0.002482077	0.248207702	0.992830807	0.002491941	0.249194129	0.996776515
600	0.002693184	0.269318402	1.077273606	0.002699626	0.269962635	1.029850541
650	0.002903001	0.29030057	1.161200227	0.00290533	0.290553325	1.162213299
700	0.003111626	0.311162626	1.244650505	0.003109796	0.310979618	1.243918471
750	0.003319151	0.331915144	1.327660575	0.003312532	0.331253209	1.325012838
800	0.003525642	0.352564178	1.41025671	0.003513836	0.351383585	1.405534341
850	0.003731173	0.3711733	1.492469319	0.003713784	0.371378405	1.485513621
900	0.003935794	0.393579355	1.655827873	0.003912463	0.391246306	1.564985225
950	0.00413957	0.413956968	1.655827873	0.004109927	0.410992694	1.643970775
1000	0.004342531	0.434253073	1.737012293	0.004306263	0.430626293	1.72250517



Şekil (5): Farklı doğrusal yoğunluklardaki moleküller (F) ile sıcaklık (T) arasındaki kuvvet arasındaki ilişkisi

3. iki boyut

Buradaki amacımız, ikinci viral katsayıyı hesaplayarak ve ardından hâl denklemini çözmek bir slayt'ta (düzlemde) helyum sistemini basitleştirmektir.

Öncelikle "Beck" potansiyelini [Taylon ve Keller, 1971] kullanıp ikinci virial katsayıya uyan Aziz potansiyelini kullanacağız [Aziz et al,1978] . Ve hâl denklemini elde edeceğiz.

İdeal gaz sistemindeki atomların etkilenmediğini varsayalım. Bu sistem için hal denklemini $\tau A = N K_B T (1 + nB)$ ile verilir.

Bu durum, gaz çok Hafif ve parçacıklar birbirinden çok uzakta olduğu zaman geçerli olur. Dolayısıyla, etkileşimin etkisi ihmal edilebilir. Gerçek sistemlerde ideal gaz yasasından sapmalar deneysel olarak bulundu, sistemin parçacıkları arasındaki etkileşim dikkate alınarak yorumlanmıştır [Gatica, 2001].

Denesel sonuçlarla iyi bir uyumu anlaşıp ampirik bir hâl denklemini almak için birçok girişimde yapılmıştır.

Önemli bir terim, genel olarak iki boyutlu sistemde viral hâl denklemini olarak ifade edilen virial terimidir:

$$\tau A = N K_B T (1 + nB)$$

9

Burada:

A: slaydın (düzlemin) alanı

T: sıcaklık (K)

K_B : Boltzmann sabitidir

τ ; kuvvet gerilimidir

N :Avogadro sayısı N_A 'ya eşittir,

B(T): ikinci virial katsayıdır.

$$\frac{\tau}{K_B T} = n (1 + nB) \quad 10$$

Burada:

$$n = \frac{N}{A} \quad 11$$

Burada:

τ : kuvvet gerilimidir.

K_B : Boltzmann sabitidir

T: kelvin ile sıcaklık.

n : Angstrom ($\text{\AA}^{-2}$) uzunluğu başına düşen molekül sayısıdır.

B: ikinci virial katsayıdır.

3.1 İkinci virial katsayısı (B):

ikinci virial katsayısı şu şekilde verilir:

$$B = B_{KL} + B_{KU} \quad 12$$

Burada:

klasik terim :

$$B_{kl} = \frac{\pi}{2} \int_0^\infty \left(1 - \exp\left[-\frac{v(r)}{T}\right] r\right) (2r) dr \quad 13$$

Ve kuantum terimi:

$$B_{ku} = \frac{\pi \hbar^2}{24m} \beta^2 \pi r^2 \int_0^\infty \exp\left[-\frac{v(r)}{T}\right] (2r) \left(\frac{dv}{dr}\right)^2 dr \quad 14$$

3.2 Hesaplamalar ve sonuçlar.

B(T)'nin sıcaklığa bağımlılığını ve etkileşim biçimine olan bağımlılığını emin olmak için, belirli bir etkileşim potansiyellerine bakalım.

3.2.1 Beck potansiyeli:

Beck potansiyeli şu şekilde verilir:

$$V(r) = A e^{-r-r^6} - \frac{B}{(r^2 - a^2)^3} \left(1 + \frac{2.709 + 3a^2}{r^2 + a^2}\right) \quad 15$$

- A: Enerji ünite, A=398.7 ev
- B: Enerji – uzaklık ünite
- a: uzaklık ünite, a=0.675 Å
- alpha: 1/ uzaklık ünite, $\alpha = 4.390 \text{ Å}^{-1}$
- beta: 1/ uzaklık ünite, $\beta = 3.746 \times 10^{-4} \text{ Å}^{-6}$

3.2.2 Aziz potansiyeli

Aziz potansiyeli şu şekilde verilir: [Aziz v.d., 1978]

$$U(r) = \varepsilon (a \exp [-\alpha (\frac{r}{r_m}) + \beta (\frac{r}{r_m})^2] - (c_6 (\frac{r_m}{r})^6 + c_8 (\frac{r_m}{r})^8 + c_{10} (\frac{r_m}{r})^{10}) F(r)) \quad 16$$

Burada:

$$F(r) = \exp \left[- \left(\frac{d \cdot r_m}{r} - 1 \right)^2 \right] \quad 17$$

$r < d \cdot r_m$

Tablo (5): Aziz potansiyelinin parametreleri

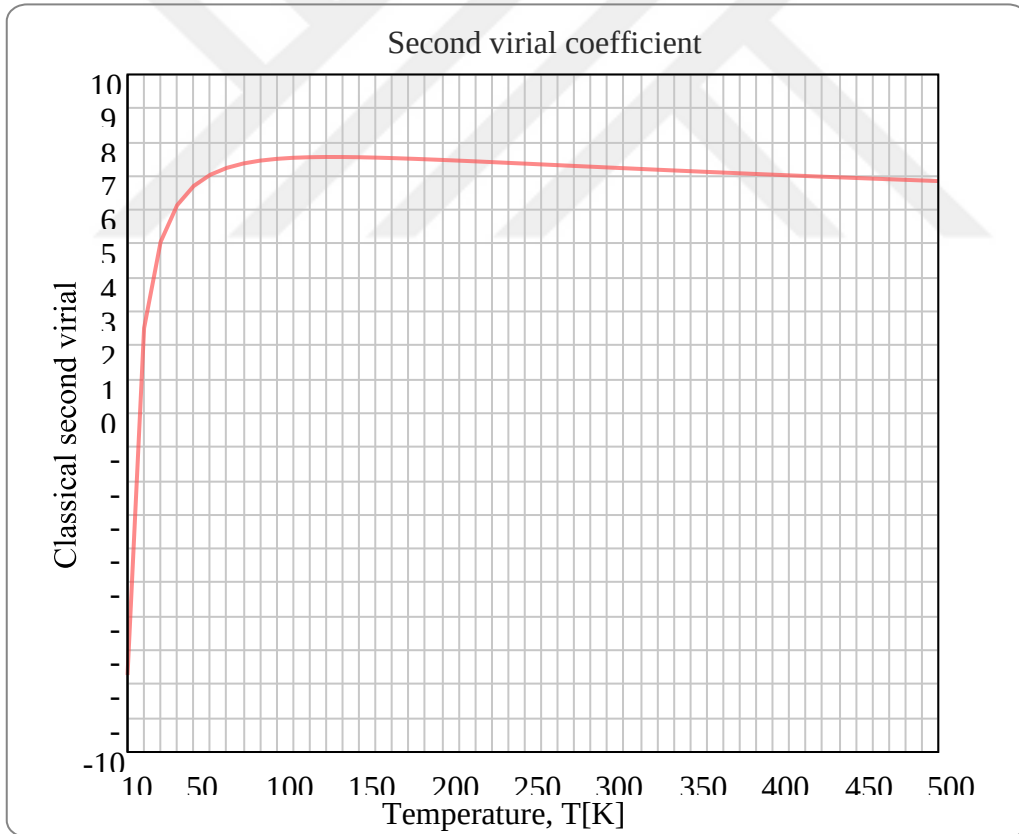
ε	A	α	r_m	β	C_6	C_8	C_{10}	D
10.8	$5.54 \cdot 10^5$	13.35	2.98	0	1.373	0.425	0.178	1.24

Hesaplamalar ve sonuçlar.

AZIZ potansiyel Hesaplamaları ve sonuçları

Tablo (6): Farklı sıcaklıklarda klasik virial katsayısı.

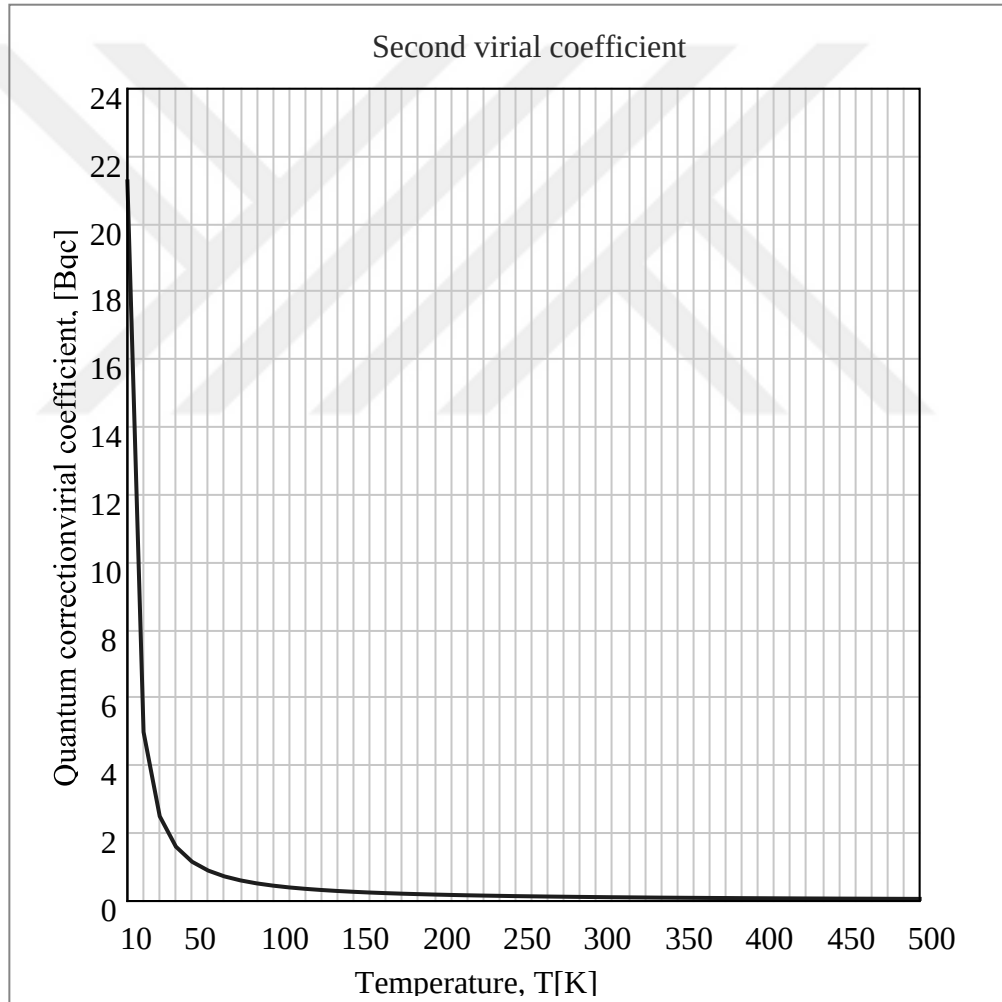
T[K]	B _{KL}
50	6.71005
100	7.50874
150	7.55697
200	7.47765
250	7.36883
300	7.25576
350	7.1462
400	7.04254
450	6.94528
500	6.85432



Şekil (6): T [K] sıcaklıklarına karşı [T]'nin bir fonksiyonu olarak klasik virial katsayısı

Tablo (7): Farklı sıcaklıklarda kuantum düzeltme virial katsayı.

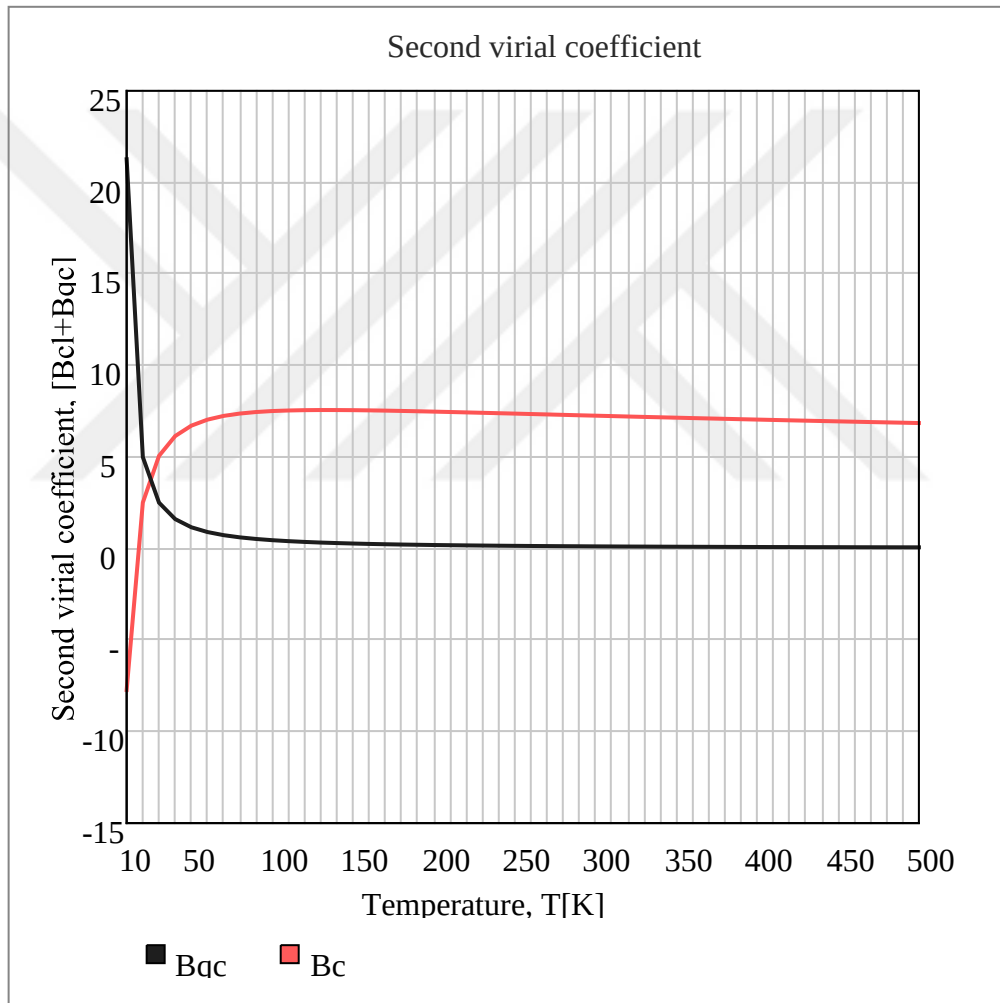
T[K]	B _{KU}
50	1.16101
100	0.45528
150	0.27263
200	0.191402
250	0.146101
300	0.117434
350	0.097761
400	0.083475
450	0.072657
500	0.064199



Şekil (1): T [K] sıcaklıklarına karşı [T]'nin bir fonksiyonu olarak kuantum düzeltme virial katsayısı.

Tablo (8): Farklı sıcaklıklardaki toplam ikinci virial katsayısı.

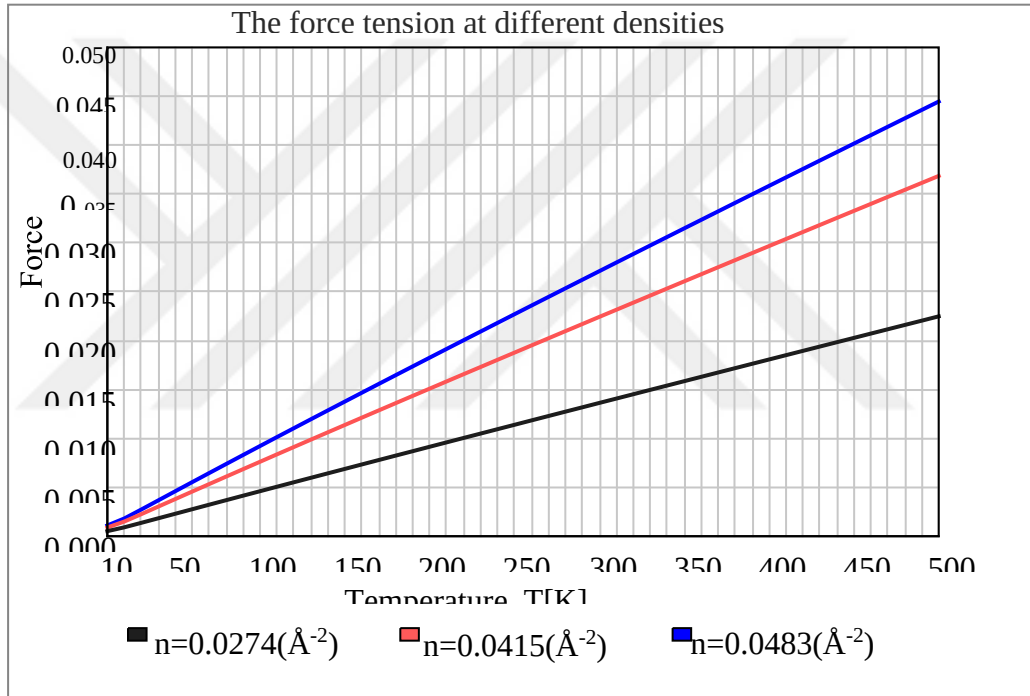
T[K]	B[T]
50	7.87106
100	7.964024
150	7.829607
200	7.669052
250	7.514931
300	7.373194
350	7.243962
400	7.126015
450	7.017938
500	6.91843



Şekil (2): T [K] sıcaklıklarına karşı [T]'nin bir fonksiyonu olarak ikinci virial katsayısı

Tablo (9): Farklı sıcaklıklarda ve farklı yoğunluklarda Kuvvet Gerilimi

T[K]	τ [N/m]		
	$n=0.0274\text{\AA}^{-2}$	$n=0.0415\text{\AA}^{-2}$	$n=0.0483\text{\AA}^{-2}$
50	0.002298	0.00379	0.00459
100	0.00460	0.00716	0.00922
150	0.00688	0.01138	0.01377
200	0.00915	0.01509	0.01826
250	0.011399	0.01878	0.02271
300	0.01363	0.02243	0.02711
350	0.01586	0.02607	0.03149
400	0.01807	0.02968	0.03583
450	0.02028	0.03327	0.04016
500	0.02248	0.03685	0.04446

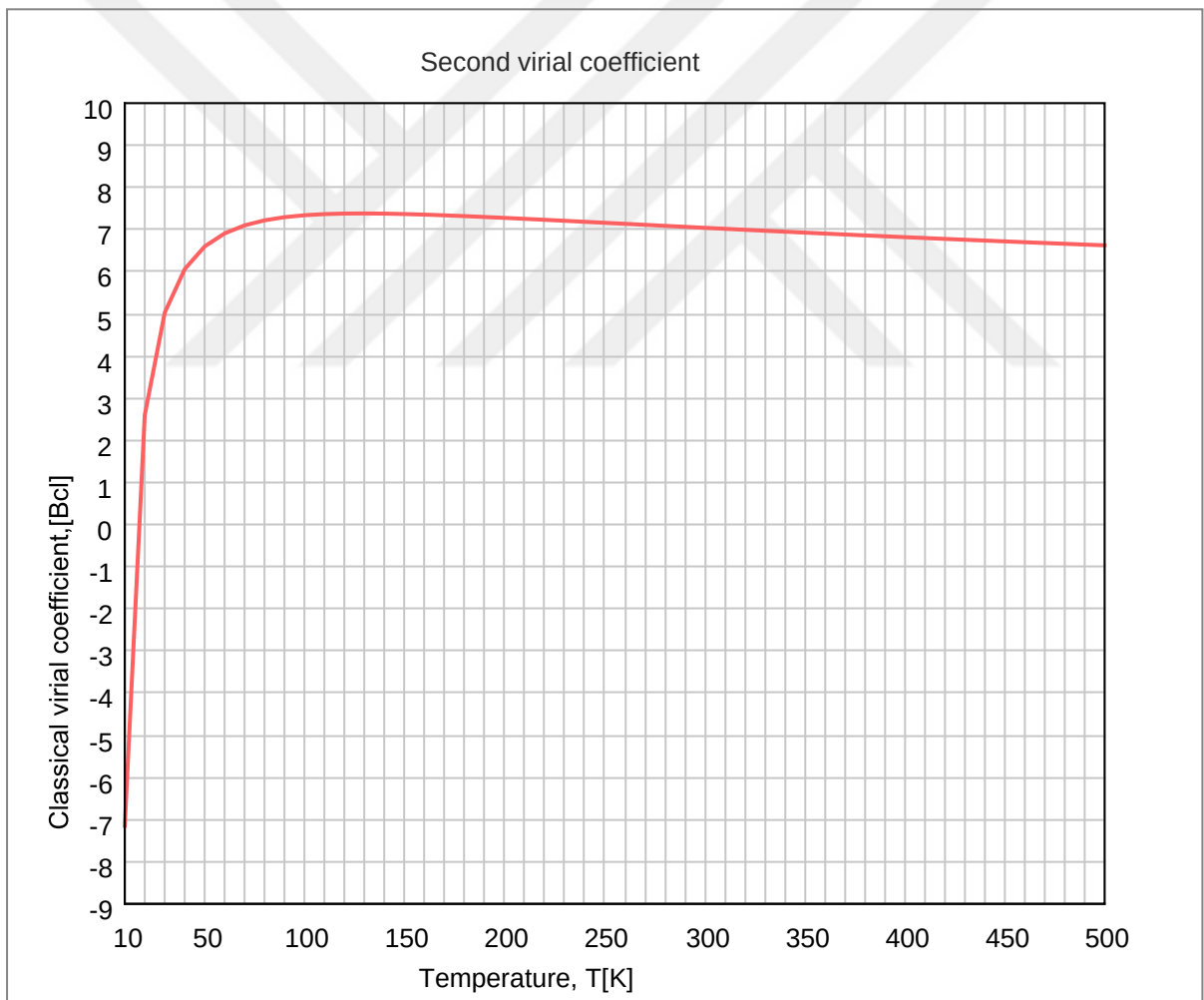


Şekil (9): T[K] sıcaklıklarına karşı farklı yoğunluklarda Kuvvet Gerilimi,[N/m].

Beck potansiyel sonuçlar

Tablo (10): Farklı sıcaklıklarda klasik virial katsayısı.

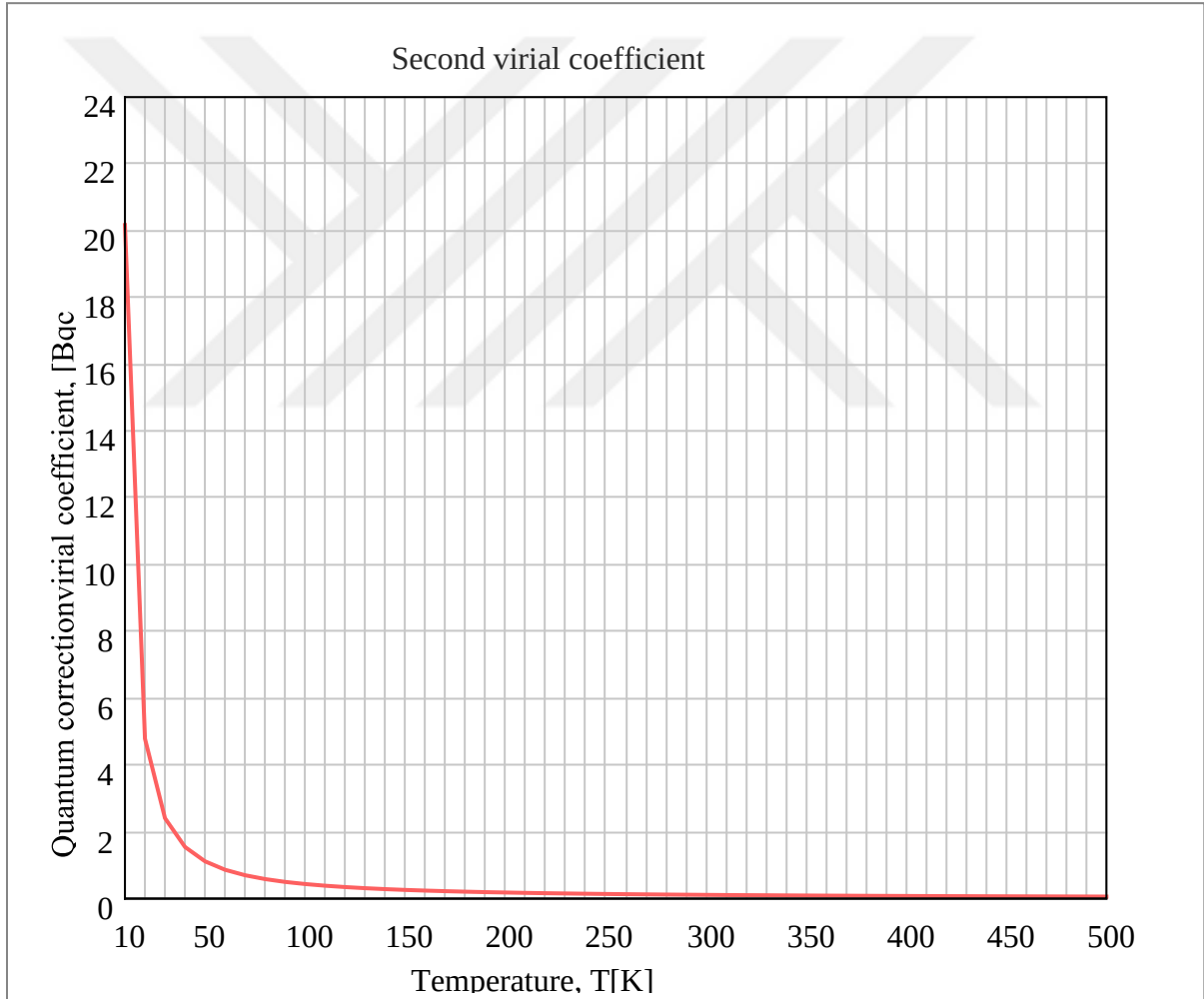
T[K]	B _{kl}
50	6.60093
100	7.34116
150	7.36833
200	7.27728
250	7.16063
300	7.04177
350	6.92767
400	6.82029
450	6.7199
500	6.62614



Şekil (10): T [K] sıcaklıklarına karşı [T]'nin bir fonksiyonu olarak klasik virial katsayısı.

Tablo (11): Farklı sıcaklıklarda kuantum düzeltme virial katsayısı

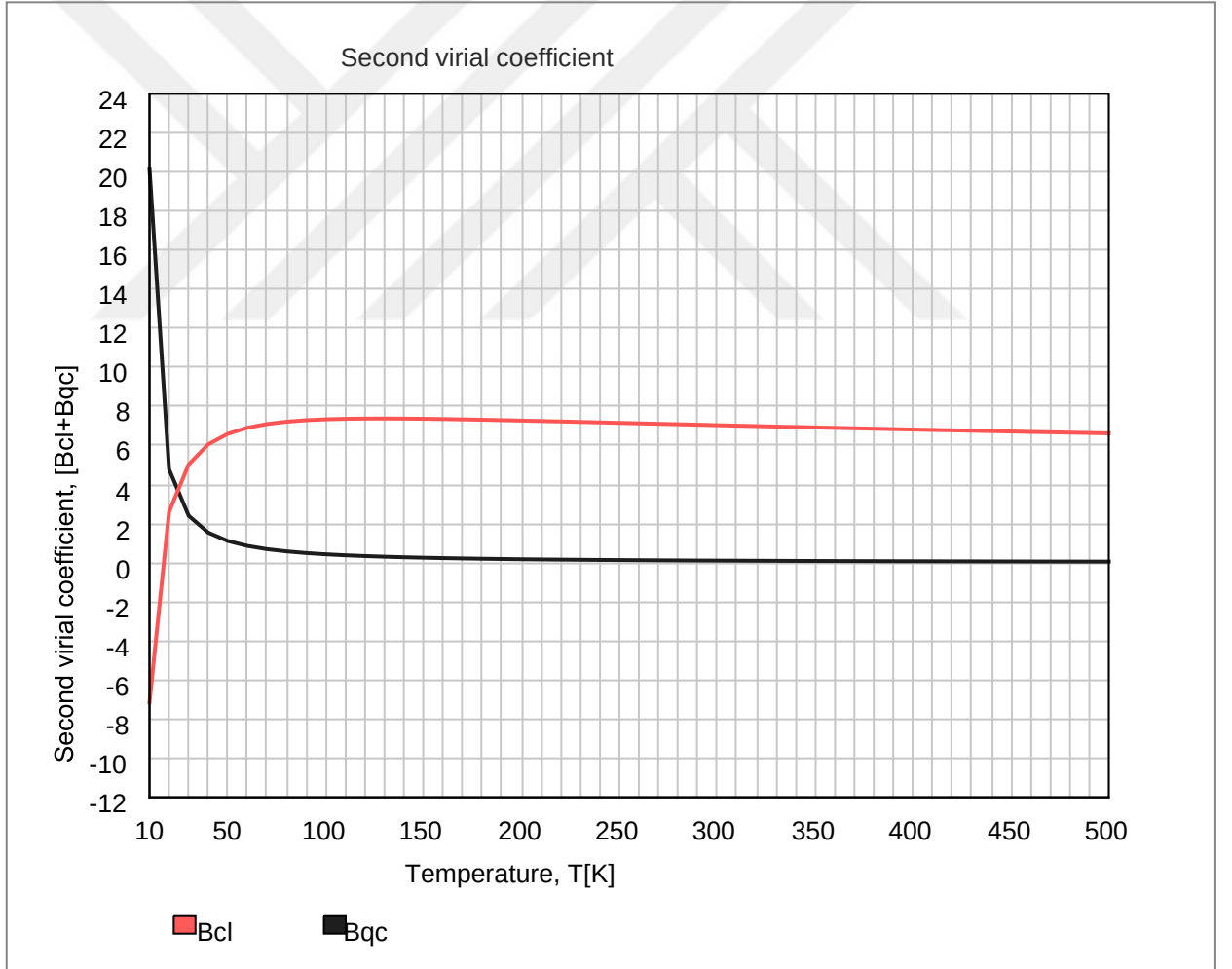
T[K]	B _{ku}
50	1.1161
100	0.436364
150	0.260524
200	0.182427
250	0.13893
300	0.11145
350	0.092622
400	0.0789599
450	0.0686263
500	0.060555



Şekil (11): T [K] sıcaklıklarına karşı [T]'nin bir fonksiyonu olarak kuantum düzeltme virial katsayısı.

Tablo (12): Farklı sıcaklıklarda toplam ikinci virial katsayısı.

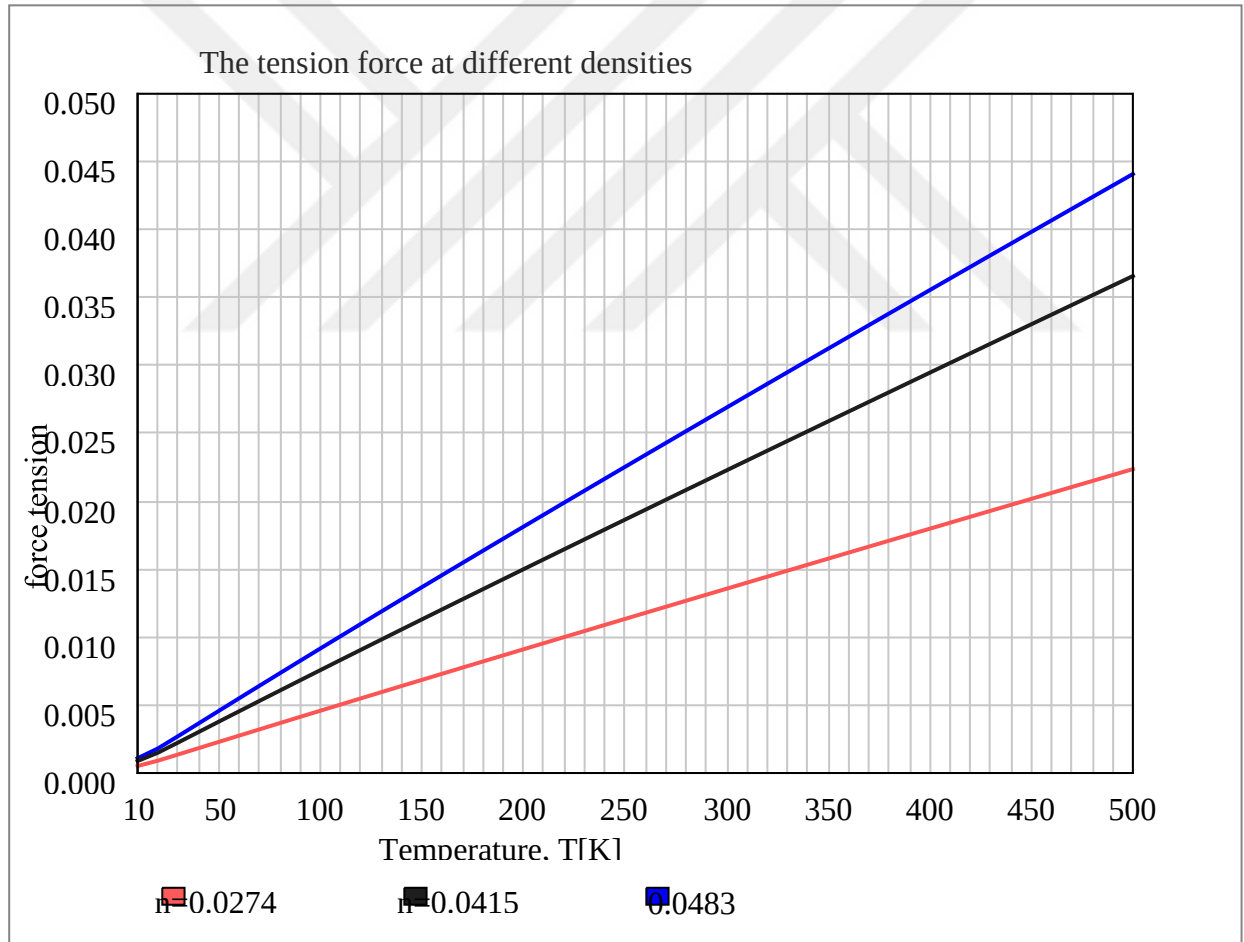
T[K]	B[T]
50	7.71703
100	7.77752
150	7.6288
200	7.45970
250	7.29956
300	7.15322
350	7.02029
400	6.89924
450	6.78852
500	6.68669



Şekil (12): T [K] sıcaklıklarına karşı [T]'nin bir fonksiyonu olarak ikinci virial katsayısı.

Tablo (13): Farklı sıcaklıklarda ve farklı yoğunluklarda Kuvvet Gerilimi

T[K]	τ [N/m]		
	$n=0.0274\text{\AA}^{-2}$	$n=0.0415\text{\AA}^{-2}$	$n=0.0483\text{\AA}^{-2}$
50	0.00229	0.00378	0.00457
100	0.00412	0.00682	0.00825
150	0.00685	0.01131	0.01368
200	0.00910	0.01499	0.01813
250	0.01134	0.01865	0.02253
300	0.01356	0.02228	0.02690
350	0.01577	0.02588	0.03123
400	0.01798	0.02946	0.03554
450	0.02061	0.03303	0.03982
500	0.02236	0.03658	0.04409



Şekil (13): T[K] sıcaklıklarına karşı farklı yoğunluklarda Kuvvet Gerilimi,[N/m].

4. Üç boyut

Termodinamikta (Üç boyutlu) hal denklemi en meşhur denklemi ($PV=NRT$), hacim (V) ile doldurulan n yoğunluklu (He^4_2) gaz için Etkileşen parçacıkların sayısı (N) olan bir sistemimiz olduğunu düşünlim [Perrot, Pierre (1998)]

Bu kısımda; klasik, kuantum limitlerinde ikinci virial katsayı $B(t)$ 'yi hesaplamak için farklı sıcaklık dereceleri ayarlıyacağız. İkinci virial katsayı $B(T)$, atomlar arası potansiyellere karşı çok hassastır. [Smith, v.d., 2005; Lieb, 1963; Lieb, 2002; Siber,2002; Teizer,1999; Teizer, 2000].

Hal denkleminde fiziksel eşitlik tarafından oluşturulan basıncı bulmak için

$$\frac{P}{K_B T} = n (1 + nB) \quad 18$$

Burada:

$$n = \frac{N}{V} \quad 19$$

ve

P: Basıncı.

K_B : Boltzmann sabitidir

T: kelvin cinsinden sıcaklıktır.

n : Angstrom ($\text{\AA}$) uzunluğu başına düşen molekül sayısıdır.

B: ikinci virial katsayıdır.

N: Parçacık sayısı.

V: Hacim.

R: evrensel gaz sabiti,

$R = 8,314472(15) [\text{J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}]$.

4.1 İkinci virial katsayı (B):

ikinci virial katsayısı şu şekilde verilir:

$$B = B_{kl} + B_{ku} \quad 20$$

Burada:

klasik terim :

$$B_{kl}(T) = -\frac{1}{2} \int_0^\infty (e^{-\beta V(r)} - 1) 4\pi r^2 dr \quad 21$$

Ve kuantum terimi:

$$B_{ku}(T) = \frac{\pi \hbar^2}{24 M_H} \beta^3 \int_0^\infty e^{(-\beta V(r))} (2r)^2 \left(\frac{dV}{dr}\right)^2 dr \quad 22$$

4.2 Hesaplamalar ve sonuçlar.

B(T)'nin sıcaklığa bağımlılığını ve etkileşim biçimine olan bağımlılığını emin olmak için, belirli bir etkileşim potansiyellerine bakalım.

4.2.1 Beck potansiyeli:

Beck potansiyeli şu şekilde verilir:

$$V(r) = Ae^{-\alpha r - \beta r^6} - \frac{B}{(r^2 + a^2)^3} \left(1 + \frac{2.709 + 3a^2}{r^2 + a^2} \right) \quad 23$$

Burada:

A: Enerji biriminde, A=398.7 ev

B: enerji-uzunluk ⁶ birim

a: Uzunluk biriminde, a=0.675 Å

- alpha: 1/distance units, $\alpha = 4.390 \text{ Å}^{-1}$
- beta: 1/distance⁶ units, $\beta = 3.746 \times 10^{-4} \text{ Å}^{-6}$

4.2.2 Basitleştirilmiş ab initio atomik potansiyel :

Basitleştirilmiş ab initio atomik potansiyel şu şekilde verilir:

$$V(r) = \frac{\left(\frac{a_0}{r}\right)e^{a_1 r} + a_2 e^{a_3 r} + a_4}{1 + a_5 r^6} \quad 24$$

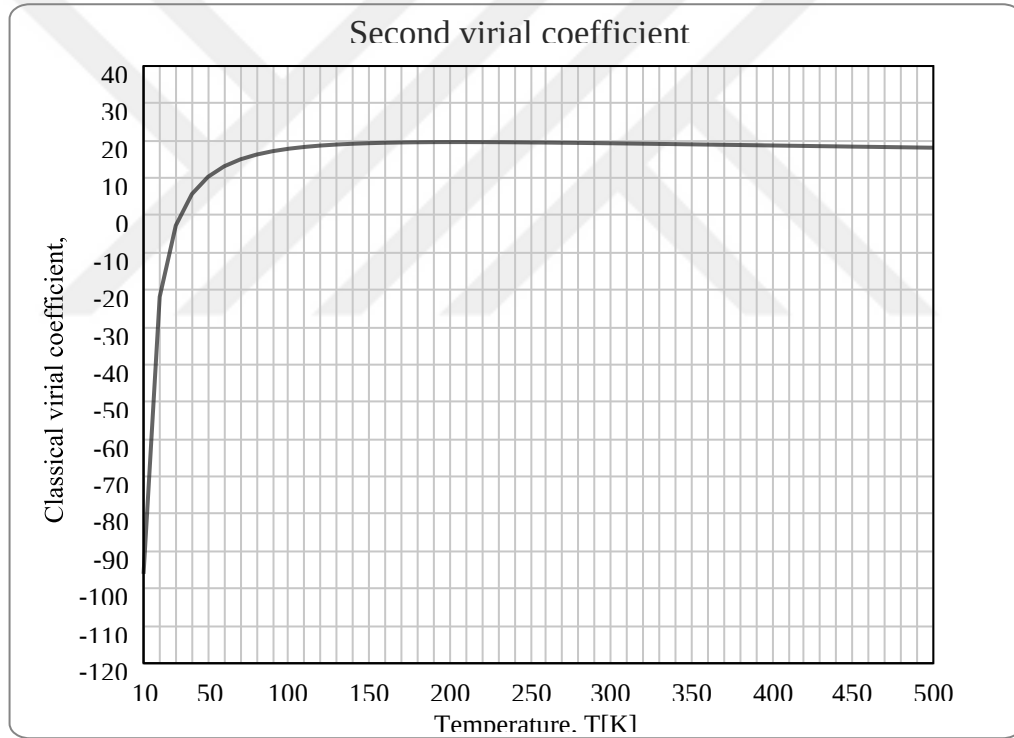
Burada:

- a₀: 81648.44026.
- a₁: -9.829947619.
- a₂: -6.482831445.
- a₃: -0.5073208921.
- a₄: -0.4906026951.
- a₅: 0.9921472732.

Ortaya çıkan basitleştirilmiş ab initio atomik potansiyel

Tablo (14): Farklı sıcaklıklarda klasik virial katsayısı.

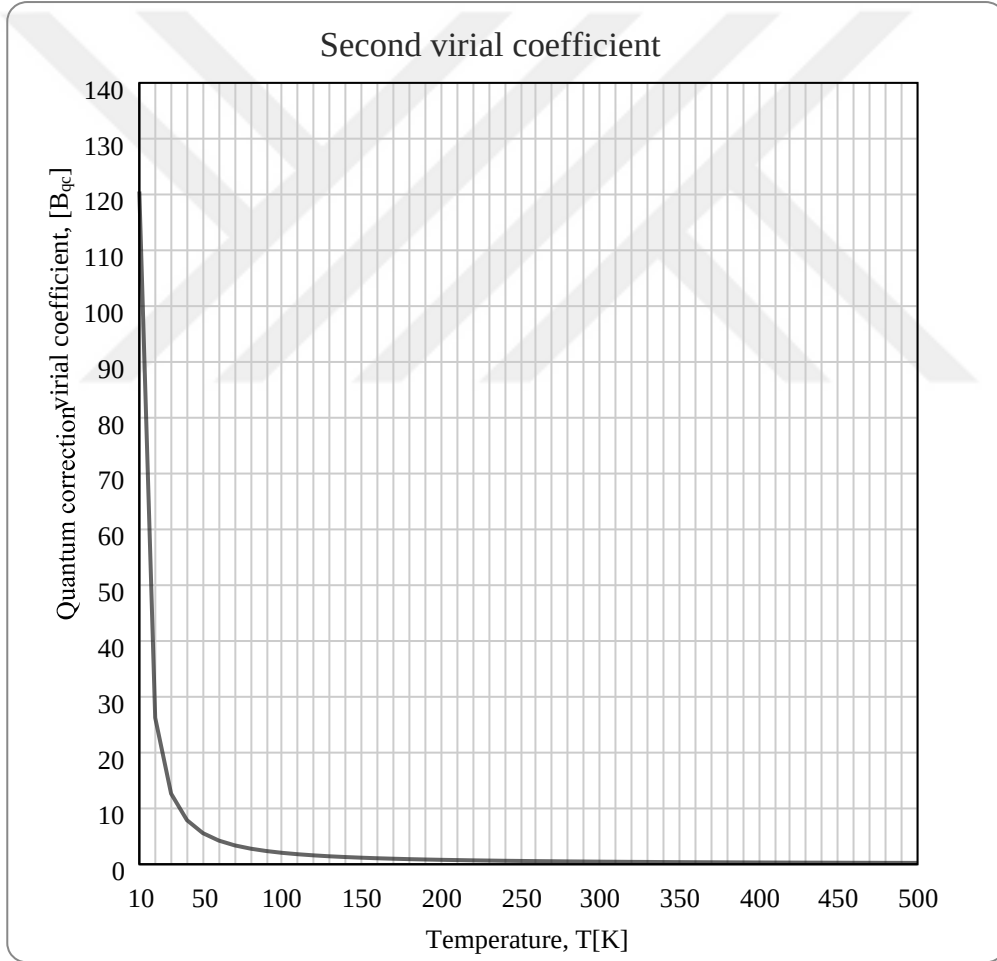
T[K]	B _{kl}
30	-2.72081
40	5.71352
50	10.3177
80	16.2692
90	17.18
100	17.8439
190	19.6093
200	19.6239
210	19.6248
500	18.121



Şekil (14): T [K] sıcaklıklarına karşı [T]'nin bir fonksiyonu olarak klasik virial katsayısı.

Tablo (15): Farklı sıcaklıklarda kuantum düzeltme virial katsayısı.

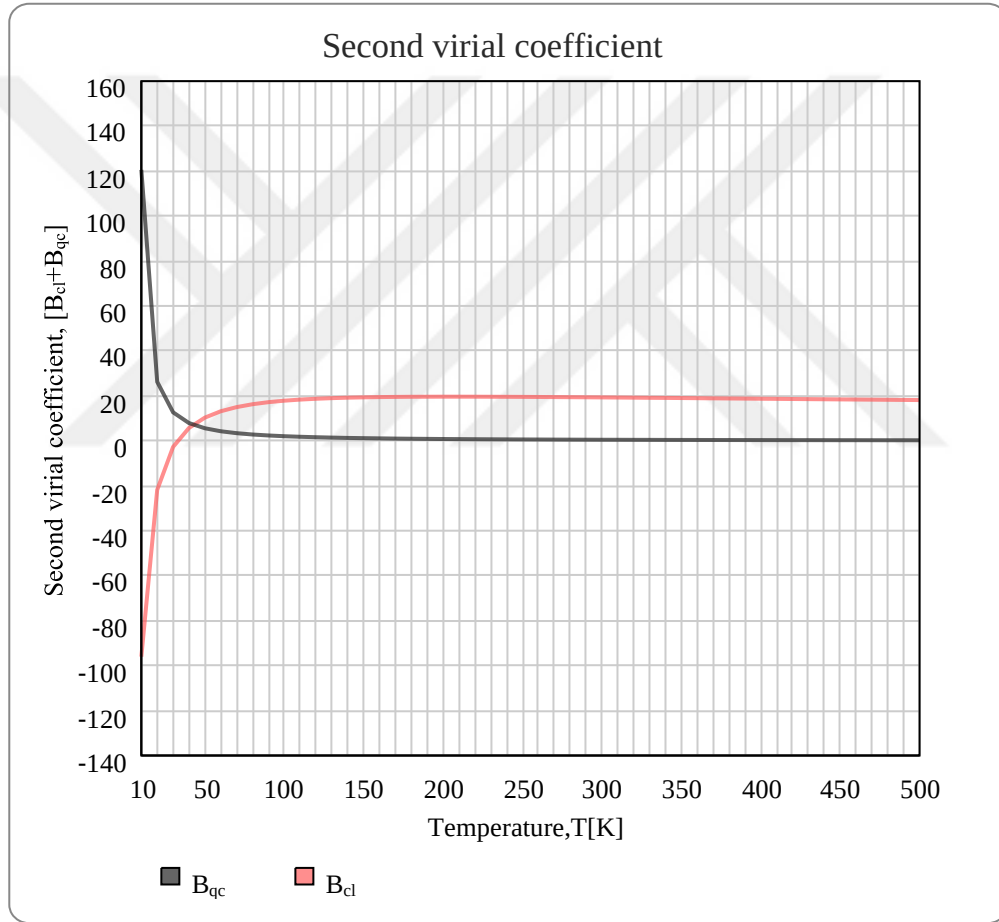
T[K]	B_{ku}
30	12.6585
40	7.89679
50	5.58247
80	2.79747
90	2.36775
100	2.04307
190	0.853707
200	0.797344
210	0.747307
500	0.240149



Şekil (15): T [K] sıcaklıklarına karşı [T]'nin bir fonksiyonu olarak kuantum düzeltme virial katsayısı.

Tablo (16): Farklı sıcaklıklardaki toplam ikinci virial katsayısı.

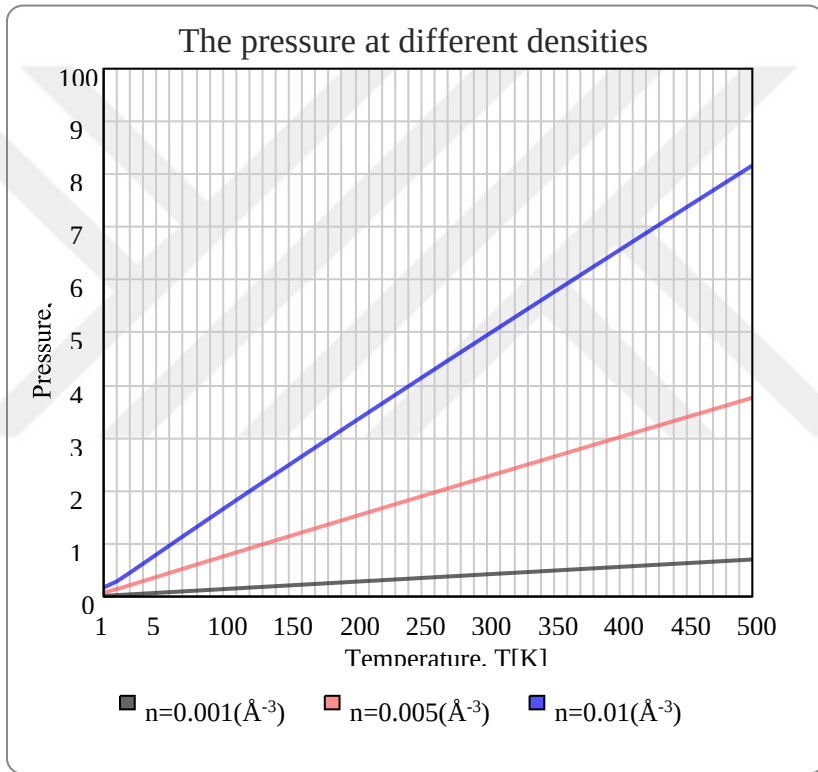
T[K]	B[T]
30	9.93769
40	13.61031
50	15.90017
80	19.06667
90	19.54775
100	19.88697
190	20.46301
200	20.42124
210	20.37211
500	18.36115



Şekil (16): T [K] sıcaklıklarına karşı [T]'nin bir fonksiyonu olarak ikinci virial katsayısı.

Tablo (17): Farklı sıcaklıklarda ve farklı yoğunluklarda basınç.

T[K]	P[MPa]		
	$n=0.001\text{\AA}^{-3}$	$n=0.005\text{\AA}^{-3}$	$n=0.01\text{\AA}^{-3}$
30	0.418114	2.172855	4.55142
40	0.559513	2.947822	6.271289
50	0.700971	3.724278	7.997112
80	1.12505	6.04624	13.14496
90	1.266278	6.816958	14.84783
100	1.407444	7.5861	16.5444
190	2.675654	14.45135	31.5854
200	2.816363	15.20907	33.23626
210	2.957038	15.96596	34.88384

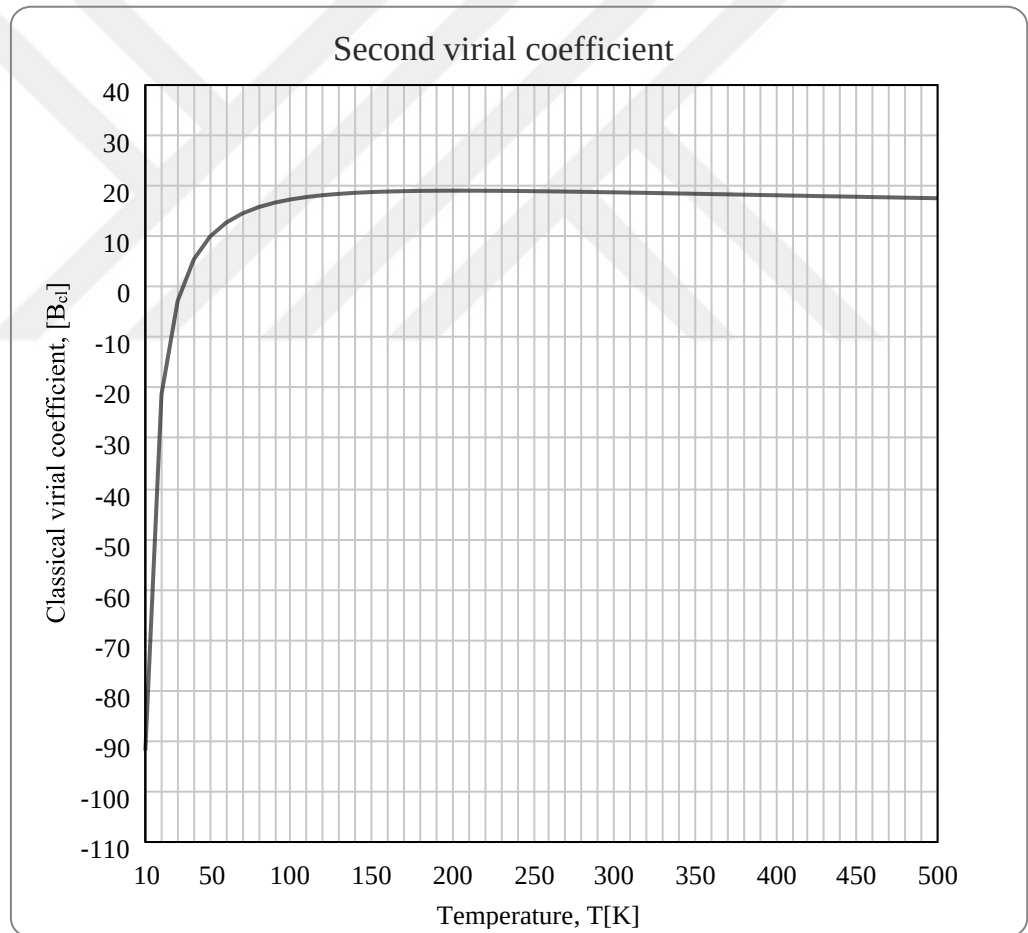


Şekil (17): T[K] sıcaklıklarına karşı farklı yoğunluklardaki P[MPa] basıncı.

Beck potansiyeli için sonuçlar

Tablo (18): Farklı sıcaklıklarda klasik virial katsayısı.

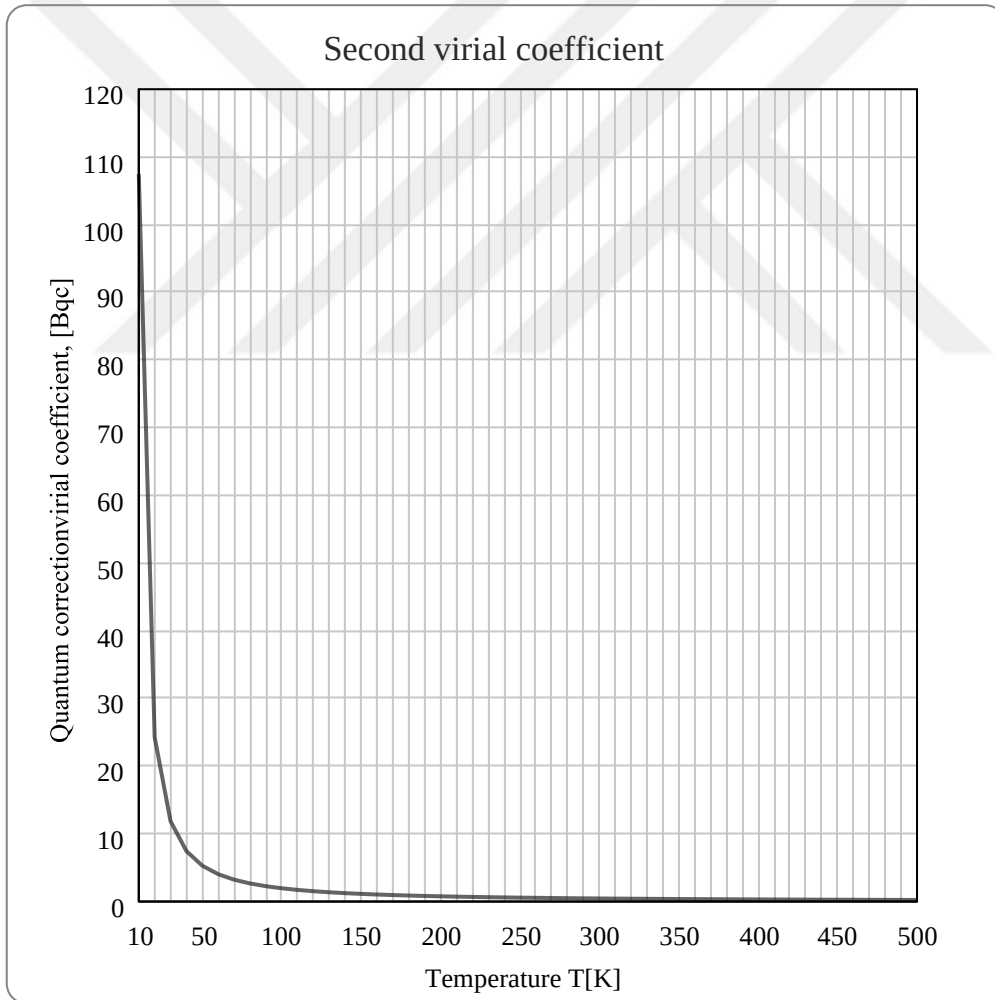
T[K]	B _{kl}
30	-2.76167
40	5.47018
50	9.97418
80	15.8012
90	16.692
100	17.3407
190	19.0528
200	19.0653
210	19.0645
500	17.5651



Şekil (18): T [K] sıcaklıklarına karşı [T]'nin bir fonksiyonu olarak klasik virial katsayısı.

Tablo (19): Farklı sıcaklıklarda kuantum düzeltme virial katsayısı.

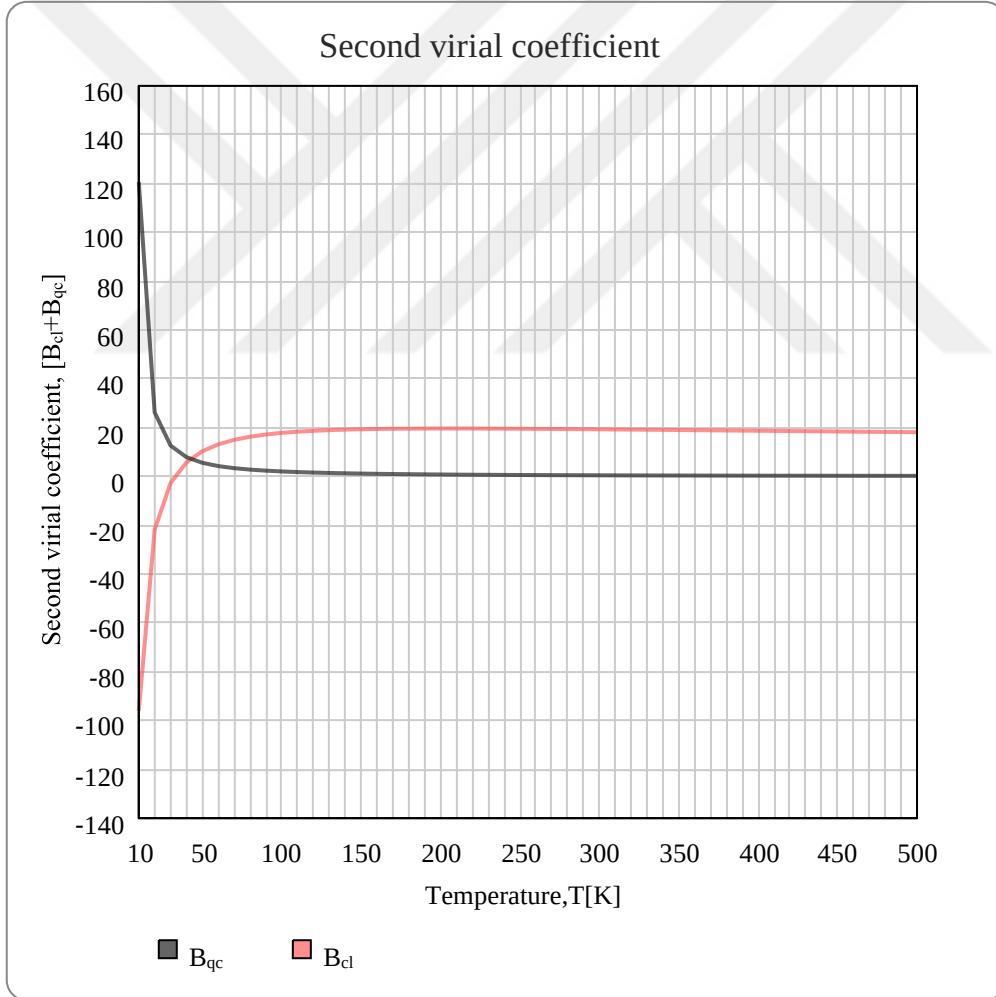
T[K]	B _{ku}
30	11.8621
40	7.45319
50	5.2934
80	2.67382
90	2.26697
100	1.95894
190	0.824697
200	0.770645
210	0.722621
500	0.23355



Şekil (19): T [K] sıcaklıklarına karşı [T]'nin bir fonksiyonu olarak kuantum düzeltme virial katsayısı.

Tablo (20): Farklı sıcaklıklarda toplam ikinci virial katsayısı.

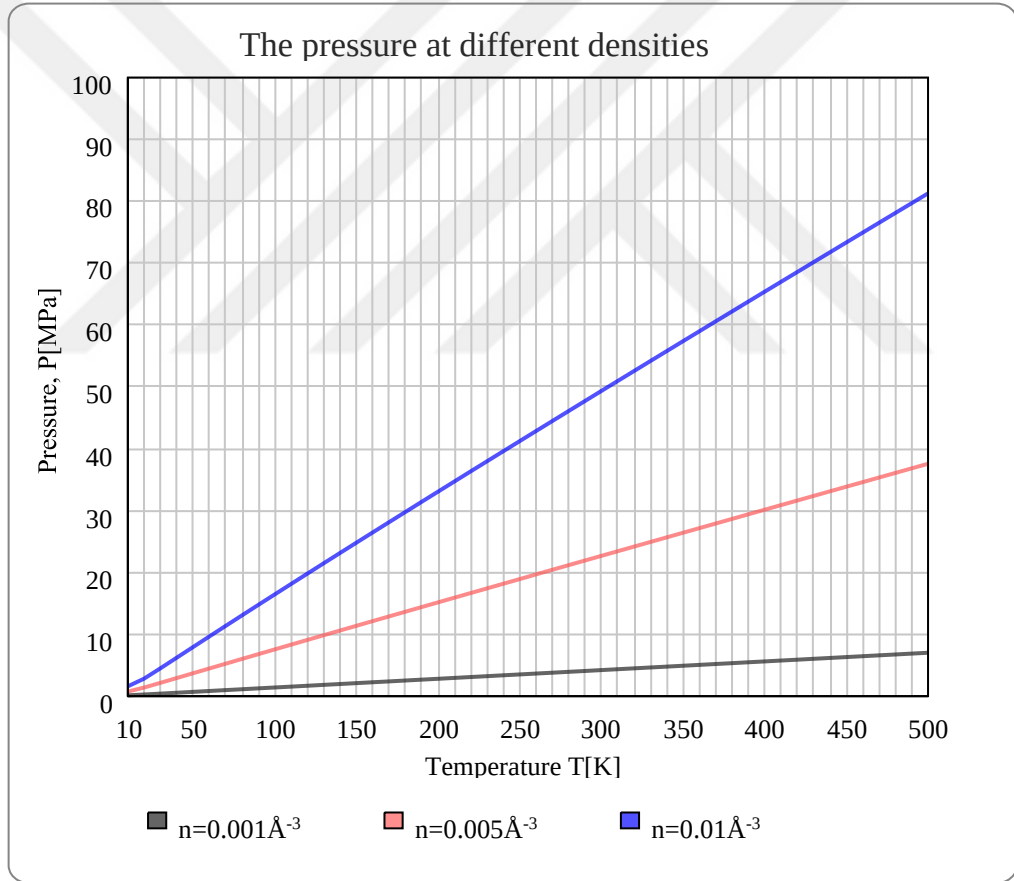
T[K]	B[T]
30	9.93769
40	13.61031
50	15.90017
80	19.06667
90	19.54775
100	19.88697
190	20.46301
200	20.42124
210	20.37211
500	18.36115



Şekil (20): Sıcaklıklara karşı $[T]$ 'nin bir fonksiyonu olarak ikinci virial katsayı T [K].

Tablo (21): Farklı sıcaklıklarda ve farklı yoğunluklarda basınç.

T[K]	P[MPa]		
	$n=0.001\text{\AA}^{-3}$	$n=0.005\text{\AA}^{-3}$	$n=0.01\text{\AA}^{-3}$
30	0.417768	2.164189	4.516758
40	0.559134	2.938343	6.23337
50	0.700535	3.713366	7.953463
80	1.124396	6.029911	13.07964
90	1.265547	6.798676	14.7747
100	1.406634	7.565838	16.46335
190	2.674119	14.41297	31.43188
200	2.814747	15.16868	33.07472
210	2.955343	15.92358	34.71431
500	7.022811	37.57027	81.28107



Şekil (21): T[K] sıcaklıklarına karşı farklı yoğunluklardaki P[MPa] basıncı.

5. SONUÇ

Çalışmamızda, ikinci virial katsayı için basit bir yaklaşık analitik ifade farklı potansiyellerden türetmiştir. Bu tez kapsamında, hâl denklemi için önemli olan ikinci virial katsayısını hesaplamak için farklı potansiyelleri; Lennard-Jones, Aziz ve Beak potansiyellerini kullandık. Aldığımız formül genel ve gerçek olarak gazların'a bazı termodinamik özelliklerini hesaplamak için kullanılır.

Bir,iki ve üç boyotlu (He) atomunun farklı sıcaklıklardaki bütün sonuçlarının boyutta farklı potensiyeller ile benzer olduğunu saptadık. Bu sonuçhesaplamalarımızın doğru olduğu anlamına geliyor. Bu çalışmada alındığı analitik ifadeyi hesaplamak için mathmatica uluslararası matematiksel yazılımı kullanıldı

6. KAYNAKLAR

Aziz R.A., Nain V.P.S, V.B., Phys. 70, 4330 (1978).

Aziz R.A., Nain V.P.S., Carley J.S., V.B., (1979), An improved potential for krypton, Molecular Physics, 38(1), 177- 190, 70, 4330.

Aziz R.A., Nain V.P.S., V.B., J. Chem. EK-R.A. Aziz (1978).

Frackowiak F., Beguin F., (2002) Electrochemical Storage of Energy in Carbon Nanotubes and Nanostructured Carbons. Carbon, 40, 1775-1787.

Gatica S. M., Bojan M. J., Stan G., V.B., Phys. **114**, 3765 (2001).

Harris P.J. (1999), “Carbon Nanotubes and Related Structures,” Cambridge University Press, Cambridge.

Hutem, A., (2012). Numerical evolution of second and third virial coefficients of some inter gases via classical expansion, Journal of Mathematical Chemistry., 165426:18.

Lieb E.H, Liniger W. (1963), Exact Analysis of an Interacting Bose Gas I: The General Solution and the Ground State, Phys. Rev. 130. 1605.

Lieb E.H (1963), Exact Analysis of an Interacting Bose Gas II: The Excitation Spectrum, Phys.130. 1616.

Perrot, P., (1998). A to Z of Thermodynamics. Oxford University Press.

Rafique, M., (2011), Production of Carbon Nanotubes by Different Routes a Review. Journal of Encapsulation and Adsorption Sciences. 29-34.

Smith J.M., et al, (2005), Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics (Seventh Edition ed.). McGraw Hill. ISBN 73, 0-07-310445-0.

Šiber A. (2002) Phonons and specific heat of linear dense phases of atoms physisorbed in the grooves of carbon nanotube bundles. Phys Rev B 66:235414.

Šiber A. (2002) Adsorption of He atoms in external grooves of single-wall carbon nanotube bundles. Phys Rev B 66:205406.

Taylor, W.L., Keller, J.M. (1971). Transport properties of helium using Beck's potential. Journal of Chemical Physics, 14(2), 647-653.

Teizer W., Hallock R.B., Dujardin E., Ebbesen T., (1999), Phys. Rev. Lett. 82, 5305.

Teizer W., Hallock R.B., Dujardin E., Ebbesen T., (2000), Phys. Rev. Lett. 84, 1844.