

**ERGİMİŞ NADİR TOPRAK METALLERİNİN
TERMODİNAMİKSEL VE YAPISAL ÖZELLİKLERİNİN
İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Canan AKAR

(5099510047)

Tezin Enstitüye Verildiği Tarih : 26 Haziran 2002

Tezin Savunulduğu Tarih : 29 Mayıs 2002

Tez Danışmanı :

Prof.Dr. Sami GEZCİ

Diğer Jüri Üyeleri

Prof.Dr. Turgay ARMAGAN (İ.Ü.)

Prof.Dr. Nurfer GÜNGÖR

**T.C. YÜKSEKÖĞRETİM KURULU
DOKÜMANTASYON MERKEZİ**

MAYIS 2002

126784

ÖNSÖZ

Yüksek Lisans Tez çalışmamın gerçekleştirilmesinde beni yönlendiren, gerekli ilgi ve desteği gösteren değerli hocam Sayın Prof. Dr. Sami GEZCİ' ye teşekkürlerimi sunarım

Yine çalışmamın başlangıcından sonuçlanmasına kadar her aşamasında değerli yardım ve bilgilerinden faydalanıp, teşvik ve desteğini gördüğüm Sayın Prof.Dr. Turgay ARMAĞAN'a teşekkür ederim.

Son olarak bu tez çalışması esnasında maddi ve manevi her türlü yardımlarıyla bana destek olan sevgili aileme ve eşim Erdoğan AKAR' a çok teşekkür ederim.

CananAKAR

MAYIS 2002

İÇİNDEKİLER

KISALTMALAR	iv
TABLO LİSTESİ	v
ŞEKİL LİSTESİ	vi
SEMBOL LİSTESİ	vii
ÖZET	viii
SUMMARY	ix
1. GİRİŞ	1
1.1.Giriş	1
2.ATOMLAR ARASI POTANSİYELLER	4
2.1. Pseudopotansiyel Metodlar	5
2.1.1. Heine ve Aberenkov'un model potansiyeli	6
2.1.2. Optimize model potansiyel	7
2.1.3. Boş kabuk modeli	8
2.1.4. Diğer metodlar	8
2.2. BHS Form Faktör Hesabı	8
2.3. Perdelenme	13
3.YAPI FAKTÖRÜ VE EŞSİCAKLIK SIKIŞTIRILABİLİRLİK KATSAYISI	18
3.1. $S_0(q)$ Referans Yapı Faktörü Hesabı	18
3.2. Eşsıcaklık Sıkıştırılabilirlik Katsayısı Hesabı	23
4.ERGİME NOKTASI CİVARINDA SEÇİLEN METALLERİN YAPI FAKTÖRLERİ	26
4.1. Lantan	28
4.2. Seryum	28
4.3. Praseodimyum	28
4.4. Neodyum	31
5. SONUÇLAR VE TARTIŞMA	34
KAYNAKLAR	37
EKLER	39
Ek-A	39
Ek-B	41
Ek-C	45
ÖZGEÇMİŞ	

KISALTMALAR

KK	: Katı Küre
TBP	: Tek Bileşenli Plazma
OKY	: Ortalama Küresel Yaklaşıklık
YKK	: Yüklü Katı Küre
RFY	: Rastgele Faz Yaklaşımı
EİP	: Elektron İyon Plazma Modeli
BHS	: Bachelet Hamann Schluter
BKM	: Boş Kabuk Modeli
ODD	: Ortogonolize Düzlem Dalga
EPM	: Empirical Pseudopotansiyel



TABLO LİSTESİ

Sayfa No

Tablo 4.1	Nadir toprak metallerinin bazı fiziksel ve kimyasal özellikleri	26
Tablo 4.2	Nadir toprak metallerinin statik yapı faktörü ve eşsıcaklık sabitinin hesabında kullandığımız temel parametreler.....	27
Tablo 5.1	Hesaplanan pikle deneysel elde edilen pikin karşılaştırması.....	35
Tablo 5.2	Uygulamasını yaptığımız saf metaller için iyonik karşı eşsıcaklık sıkıştırılabilirlik katsayısı değerleri	36
Tablo B.1	Lantan saf metali için pseudopotansiyel parametreler	42
Tablo B.2	Seryum saf metali için pseudopotansiyel parametreler	43
Tablo B.3	Prometyum saf metali için pseudopotansiyel parametreler	44
Tablo B.4	Neodyum saf metali için pseudopotansiyel parametreler	45

ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa No

Şekil 2.1	Heine Aberenkov'un Model Potansiyeli.....	6
Şekil 2.2	Shaw'ın Optimize Model Potansiyeli.....	7
Şekil 4.1	Lantanın $S(q)$ Yapı Faktörünün q ya Göre Değişimi.....	29
Şekil 4.2	Lantanın $S(q)$ Yapı Faktörünün q/q_m ye Göre Değişimi	30
Şekil 4.3	Atom Numarası 57 İle 60 Arasında Değişen Metallerin TBP Modeline Göre $S(q)$ Yapı Faktörünün q/q_m ye Göre Değişimi	32
Şekil 4.4	Atom Numarası 57 İle 60 Arasında Değişen Metallerin TBP Modeline Göre $S(q)$ Yapı Faktörünün q/q_m ye Göre Değişimi	33
Şekil C.1	Seryumun $S(q)$ Yapı Faktörünün q ya Göre Değişimi.....	46
Şekil C.2	Seryumun $S(q)$ Yapı Faktörünün q/q_m ye Göre Değişimi	47
Şekil C.3	Prometyum $S(q)$ Yapı Faktörünün q ya Göre Değişimi	48
Şekil C.4	Prometyumun $S(q)$ Yapı Faktörünün q/q_m ye Göre Değişimi	49
Şekil C.5	Neodyumun $S(q)$ Yapı Faktörünün q ya Göre Değişimi	50
Şekil C.6	Prometyumun $S(q)$ Yapı Faktörünün q/q_m ye Göre Değişimi	51
Şekil C.7	La ve Ce Metallerinin TBP Modeline Göre $S(q)$ Yapı Faktörünün q/q_m ye Göre Değişimi	52
Şekil C.8	La ve Ce Metallerinin Deneysel Verilere Göre $S(q)$ Yapı Faktörünün q/q_m ye Göre Değişimi	53
Şekil C.9	Pr ve Nd Metallerinin TBP Modeline Göre $S(q)$ Yapı Faktörünün q/q_m ye Göre Değişimi	54
Şekil C.10	Pr ve Nd Metallerinin Deneysel Verilere Göre $S(q)$ Yapı Faktörünün q/q_m ye Göre Değişimi	55

SEMBOL LİSTESİ

$V(r)$	: Atomlar Arası Potansiyel
$V_d(r)$	: Direkt Etkileşme Potansiyeli
$V_{ind}(r)$	: İndirekt Etkileşme Potansiyel
V_ℓ^{so}	: Açısal Momentuma Bağlı Spin Orbit Etkileşmelerinden oluşan potansiyel
$\hat{V}_\ell^{ion}(r)$	: Açısal Momentuma Bağlı İyonlar Arası Potansiyel
$\hat{V}_{core}(r)$	: Core Potansiyeli
$V_{sc}(q)$	: Fourier Uzayında Aindirekt Etkileşme Terimi
E_p	: Potansiyel Enerji
$F_N(q)$	: Normalize Edilmiş Enerji Ve Dalga Sayısına Bağlı Fonksiyon
$w_q^0(k)$	: Form Faktör
$G(q)$	: Bölgesel Alan Düzeltme Fonksiyonu
$\epsilon(q)$	: Dielektrik Fonksiyonu
$\chi_{scr}(q)$	: Yanıt Fonksiyonu
χ_T	: İzotermal Sıkıştırılabilirlik Katsayısı
K	: Gelen Dalga Vektörü
Q	: Transfer Olan Dalga Vektörü
R_M	: Model Potansiyel Modeline Göre Yarıçap
$R_{M\ell}$	: Açısal Momentuma Dayandırılan Yarıçap
$A_\ell(E)$	: Potansiyel Kuyusu Derinliği
$w_b(r)$	: Model Potansiyel
Ω_0	: Atomik Hacim
P_ℓ	: Legendre Polinomu
j_ℓ	: Bessel Fonksiyonu
$f(y)$	: Linhard Fonksiyonu
r_s	: Wigner Seitz Yarıçapı
$S(q)$	: Statik Yapı Faktörü
$S_0(q)$	: Referans Yapı Faktörü
$h(r)$	: Toplam Korelasyon Fonksiyonu
$c(r)$	: Doğrudan Korelasyon Fonksiyonu
$Q(q)$	: Korelasyon Faktörü Baxter Matrisi
η	: Paketleme Yoğunluğu
k_β	: Boltzmann Sabiti
σ	: Katı Küre Çapı

ÖZET

Bu tez çalışmasında Ergimiş nadir toprak metallerinin yapısal ve termodinamiksel özelliklerinin anlaşılması için, iletken elektronlar tarafından perdelenen her bir iyon arasındaki indirekt etkileşme ile iyon çekirdekleri arasındaki direkt Coulomb etkileşmesinin toplamı olarak yazılabilen Bachelet Hamann ve Schuluter' in birinci pseudopotansiyel prensibinden türetilen yeni bir etkin çift potansiyel kullanıldı.

Ergimiş metallerin makroskopik yapısına bağlı olan fiziksel özelliklerinin saptanmasında önemli bir rolü olan $S(q)$ statik yapı faktörü hesabı elektron iyon arasındaki etkileşmelerin zayıf olduğu varsayılarak her bir iyonun etrafındaki elektronların oluşturduğu lineer perdelenme ile etkin iyon-iyon potansiyel modelinin kullanıldığı ve kullanılan modelin Rastgele Faz Yaklaşımı çerçevesinde Elektron İyon Plazma modeline genişletilmesidir. Ayrıca statik yapı faktörü hesabı için gerekli olan referans yapı faktörü yüklü katı kürelerden oluştuğu farz edilen nötr bir sıvıda Tek Bileşenli Plazma modeli göz önüne alınarak hesaplanmıştır. $S(q)$ statik yapı faktörünün uzun dalga boyu limitindeki ifadesinden elde edilen eşsıcaklık sıkıştırılabilirlik katsayısının çekirdek yarıçapına bağlı olarak değiştiği görülmüştür.

4f gurubuna dahil atom numarası 57 ile 60 arasında değişen Lantan (La), Seryum (Se) Praseodimyum (Pr) ve Neodyum(Nd) ergimiş nadir toprak metalleri için perdelenme etkisiyle oluşan pseudopotansiyel hesaplanarak $S(q)$ statik yapı faktörünün q Fourier uzayına bağlı değişimi 1024 veri üzerinden çizilmiş ve hesaplanan değerlerle literatürden elde edilen deneysel sonuçların % 3-10 farklılıkla uyumlu olduğu görülmüştür. Ayrıca bu metaller için χ_T eşsıcaklık sıkıştırılabilirlik sabiti hesaplanarak eşsıcaklık sıkıştırılabilirlik sabiti Waseda'nın tahmini verileri ile karşılaştırılmıştır.

1. GİRİŞ

Sıvı geiř ve nadir toprak metalleri gibi basit olmayan sıvı metal sistemlerinin yapısal ve termodinamik zelliklerinin anlařılması iin yapılan arařtırmalar, son yıllarda literatrde nemli bir yer tutmaktadır. [1,6] Daha nceleri ergime noktası civarında basit metallerin yapısal zelliklerinin belirlenmesi iin ileri srlen kuramsal yntemler, periyodik sistemin f elementleri olarak bilinen nadir toprak metallerinin yapılarının karmařıklıęı nedeniyle kolaylıkla uygulanamamaktadır. Y.Waseda ve S.Ueno' nun ermiř nadir toprak metalleri zerine yapmıř olduęu bir arařtırmada adı geen metallerin Al gibi basit metaller iersinde ele alınabileceęi [7] ve aynı zamanda daha sonra yapılan bir arařtırmada gz nnde tutulabilecek bir lekte, sıvı alkali metallere benzediklerini gstermiřlerdir. [8-9] Bu gzlemler, nadir toprak metallerinin zelliklerinin basit bir řekilde aıklanması olanaęını da srpriz bir biimde ortaya koymaktadır. Dięer taraftan Wills ve Harrison' un geiř ve nadir toprak metallerinin band yapılarının anlařılmasında yapmıř olduęu yaklařımlarla, sıvı hal hesapları iin olduka basit ve yararlı olan etkin ift potansiyelinin bir ifadesini gerekleřtirilmiřtir. [10,11,12]

Ergimiř metallerinin yapısal zelliklerinin hesaplanmasında, Katı Kre (KK), Tek Bileřenli Plazma (TBP) ve Ortalama Kresel Yaklařık (OKY) iersinde Ykl Katı Kre (YKK) modellerine dayanan pertrbasyon yntemleri genellikle bařarılı olmasına raęmen, ergimiř nadir toprak metallerindeki iyonlar arası karřılıklı etkileřmelerinin kendine zg yapısının aıklanmasında genellikle yeterli olamamaktadır. Bunun nedeni, nadir toprak metallerinin doldurulmamıř 4f bandına sahip olmalarıdır. Dolayısıyla daha nce syledięimiz gibi bu metaller aęır ve ok karmařık bir yapı iersinde bulunurlar. řimdiye kadar, ergimiř nadir toprak metallerinin sıvı yapısının ve termodinamik zelliklerinin hesaplanmasında nemli bir rol oynayan iyonlar arasındaki etkileřmelerin belirlenmesi iin birok modeller TBP ile baęlantısı olan Boř Kabuk (Empty Core) Pseudopotansiyelinin [14] kullanıldıęı basit metal kuramı, nadir toprak metallerinin sıvı yapısının hesaplanmasında doęrudan doęruya uygulanmıřtır.

Saf ergimiş metallerin, elektronik özelliklerinin hesaplanmasında; ilgi çekici bir teknik olarak kullanılan pseudopotansiyel (veya model potansiyel) kuramı, iyon çekirdekleri arasındaki direkt Coulomb etkileşmesi ile her bir iyonu perdeleyen iletken elektronlar arasındaki indirekt etkileşmenin toplamı olarak yazılabilen iyonlar arasındaki potansiyelin atomik birimlerde

$$V(r) = \frac{Z^2}{r} \left[1 - \frac{2}{\pi} \int_0^\infty F_N(q) \frac{\sin qr}{q} dq \right] \quad (1.1)$$

biçiminde hesaplanmaktadır. Burada Z , etkin değerlik ve $F_N(q)$ değiş-tokuş ve korelasyon etkilerini kapsayan normalize edilmiş enerji-dalga sayısı karakteristiğidir;

$$F_N(q) = \left(\frac{q^2}{4\pi Z \rho_i} \right) (w_q^0(k))^2 \frac{1}{1 - G(q)} \left(1 - \frac{1}{\epsilon(q)} \right) \quad (1.2)$$

(1.2) denkleminde ρ_i iyonik sayı yoğunluğu, $w_q^0(k)$ biçim faktörü, $\epsilon(q)$ dielektrik fonksiyonu, ve $G(q)$ bölgesel alan düzeltme fonksiyonudur. k ve q gelen ve transfer olan dalga vektörüdür.

Ergimiş nadir toprak metaller için $S(q)$ yapı faktörünün pseudopotansiyel hesaplarına dayandırılan modele göre kurulan elektron ve iyon arasındaki karşılıklı etkileşmelerin zayıf olduğu varsayılarak her bir iyonun lineer perdelenmesi sayesinde etkin iyon- iyon potansiyelini oluşturuyoruz. Bu modelin Rastgele Faz Yaklaşıklığı (RFY) çerçevesinde Elektron-İyon Plazma (EİP) modeline genişletilmesi. $S(q)$ yapı faktörü [15-17]

$$S(q) = \frac{S_0(q)}{1 + \beta \rho V_{sc}(q) S_0(q)} \quad (1.3)$$

denklemini ile verilmektedir. Burada $S_0(q)$, TBP nin yapı faktörü, $\beta (1/kT)$, $k =$ Boltzman sabiti, ve $T =$ Ergime sıcaklığı, sıcaklık katsayısı ve $V_{sc}(q)$ toplam etkin potansiyel yani nadir toprak metaller için d ve f bandı elektron etkileşmelerini içeren indirekt etkileşme terimi olmak üzere;

$$V_{sc}(q) = -\left(\frac{4\pi\pi}{q^2}\right) F_N(q) \quad (1.4)$$

ile tanımlanmıştır.

Bu çalışmadaki amacımız; 4f Lanthanit gurubu olarak bilinen nadir toprak metallerinin yapısal ve termodinamiksel özelliklerinin anlaşılmasında statik yapı faktörünün şimdiye kadar 4f metaller için uygulanmamış BHS pseudopotansiyel modeli ve diğer modeller kullanarak hesaplanmasıdır. Bu çalışma aşağıdaki biçimde düzenlenmiştir.

II. bölümde ergime noktası civarındaki nadir toprak metallerin yapısal özelliklerinin belirlenmesi için kullanılan etkin çift potansiyel modelini vereceğiz.

III. bölümde, ele aldığımız model potansiyel kuramından hareket ederek $S(q)$ yapı faktörü yardımıyla χ_T eşsıcaklık sıkıştırılabilirlik katsayısının analitik ifadesini çıkaracağız.

IV. bölümde ise bundan önceki bölümlerde elde edilen kuramsal çözümleri, literatürde elde edilen verilerle karşılaştırması içersinde ergime noktaları civarında nadir toprak metallerinden Lantan (La), Seryum (Ce), Praseodimyum (Pb) ve Neodimyum (Nd) metalleri için yaptığımız sayısal hesaplamaları sırasıyla sunuyoruz. Son bölümde ise elde ettiğimiz sonuçların tartışmasını yapıyoruz.

2. ATOMLAR ARASI POTANSİYELLER

Atomlar arası potansiyel, iyon çekirdekleri arasındaki direkt Coulomb etkileşmesi ile her bir iyonu perdeleyen iletken elektronların oluşturduğu indirekt etkileşmenin toplamı olarak yazılabilir.

Atomlar arası potansiyel = Direkt (Coulomb) etkileşme + İndirekt etkileşme

$$V(r) = V_d(r) + V_{ind}(r) \quad (2.1)$$

Direkt etkileşme terimi olan Coulomb potansiyeli, aşağıda verilen elektrostatik enerji formülünden;

$$E_p = \frac{1}{2} \sum \frac{(Ze)^2}{|r_i - r_j|} \quad (2.2)$$

$$V_d(r) = \frac{(Ze)^2}{r} \quad (2.3)$$

elde edilir. İndirekt etkileşme, pseudopotansiyel form faktörü ile değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşme terimlerine bağlıdır.

Saf metaller ve sıvı alaşımların atomlar arası potansiyelinin hesabında pseudopotansiyel teori kullanılır. Atomlar arası potansiyelin gerçek uzayda, normalize dalga sayısı ve atomik birimde ifadesi aşağıdaki gibi verilmektedir. [16]

$$V(r) = \frac{Z^2}{r} \left[1 - \frac{2}{\pi} \int_0^\infty F_N(q) \frac{\sin qr}{q} dq \right] \quad (2.4)$$

Burada Z etkin valans değeri, $F_N(q)$ ise değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşme terimleri ile pseudopotansiyel biçim faktörünü içeren bir fonksiyondur.

$$F_N(q) = \left(\frac{q^2}{4\pi Z\rho} \right) \left(w_q^0(K) \right)^2 \frac{1}{1-G(q)} \left(1 - \frac{1}{\epsilon(q)} \right) \quad (2.5)$$

(2.5) denkleminde, $w_q^0(K)$ pseudopotansiyel form faktör ve $\epsilon(q)$, değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşme terimlerinin dielektrik fonksiyonu, $G(q)$ bölgesel alan düzeltme fonksiyonudur.

Bu tez çalışmasında atomlar arası potansiyel $V(r)$ 'ın ve nadir toprak metallere La, Ce, Pr ve Nd nin yapısal ve termodinamik özelliklerinin hesabı için, $w_q^0(K)$ form faktörü, Bachelet, Hamann ve Schlüter (BHS) pseudopotansiyeli [17], $\epsilon(q)$ dielektrik fonksiyonu ise Thomas-Fermi lineer perdeleme teorisi [18,19] kullanılarak yapılmıştır. Ayrıca Ichimaru-Utsumi [20] tarafından önerilen $G(q)$ bölgesel alan düzeltme fonksiyonundan $\epsilon(q)$ dielektrik fonksiyonu hesabında da faydalanılmıştır. Şimdi bu konular üzerinde duralım.

2.1 Pseudopotansiyel Metodlar

Basit metallerin, davranışı, valans elektronları ve metal iyonları arasındaki etkileşmeler çok küçük olduğu için serbest elektron sistemine benzer. İletkenlik iyonları dalga fonksiyonları genelde iyon merkezlerinden uzakta düzgün ama iyonlar civarında karmaşık bir düğüm yapısına sahiptir. İyon merkezinden uzakta iletkenlik elektronuna etkiyen enerji zayıftır. Coulomb potansiyeli diğer iletkenlik elektronların perdeleme etkisiyle zayıf kalır ve dış bölgedeki enerjiyi serbest elektronların enerjisi gibi $\epsilon(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$ yazabiliriz. Fakat aynı elektronları iyon merkezi civarında düzlem dalga gibi davranmadıkları için bu şekilde inceleyemeyiz. Bu özellik iç bölgedeki gerçek potansiyel yerine, dış bölgede aynı dalga fonksiyonunu veren etkin bir potansiyel enerji kullanılabileceği düşüncesini getirir. Bu koşulu sağlayan etkin potansiyel pseudopotansiyeldir.

Bir metaldeki elektron-iyon etkileşmesinin oluşturduğu net efektif potansiyelin belirlenmesinde pseudopotansiyel yaklaşımı önemlidir. Dışında Coulomb potansiyeli

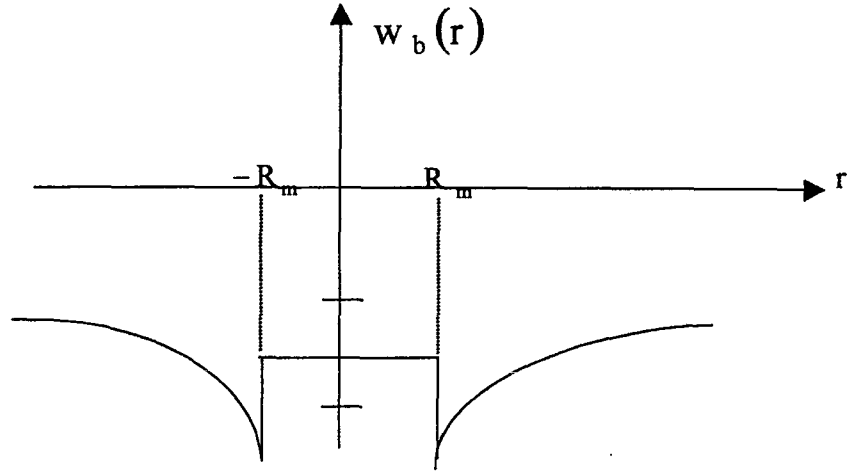
ile ayrılan ve model alınan bir yarıçap içindeki yoğun bir fazdaki iyonun pseudopotansiyel formu analitik biçimde belirlenebilir. Bu yaklaşımdan faydalanarak sıvının çeşitli özelliklerini tartışmak mümkün olmaktadır. Bu nedenle pseudopotansiyelin temel metotlarını inceleyebiliriz.

2.1.1 Heine ve Abarenkov 'un model potansiyeli

Heine ve Aberenkov 1964 yılında model potansiyeli ℓ açısai momentum olmak üzere R_M yarıçapını içine alan kare kuyu potansiyeli formunda almışlardır. [18] Bu kuyunun derinliği enerjiye ve ℓ açısai momentuma bağıli olarak $A_\ell(E)$ biçiminde ifade edilmektedir. $\ell > 2$ olan tüm deęerleri için $A_\ell = A_2$ alınır. A_ℓ burada ℓ ' ye bağıli normalizasyon sabitidir.

$$w_b(r) = \begin{cases} -\sum A_\ell(E)P_\ell & \text{için } r < R_M \\ -Z|e|^2/r & \text{için } r > R_M \end{cases} \quad (2.1.1)$$

Burada P_ℓ projection operatördür. Bu model potansiyel bölgesel deęildir ve enerjiye bağılidir. Kuyu derinliği A_ℓ ve Fermi enerjisinde yani $r = R_M$ noktasında potansiyel $w_b(r) = -Z|e|^2/R_M$ olmaktadır. Tam bu noktada ‘‘Şekil 2.1’’ de görüldüğü gibi ufak bir süreksizlik söz konusudur.



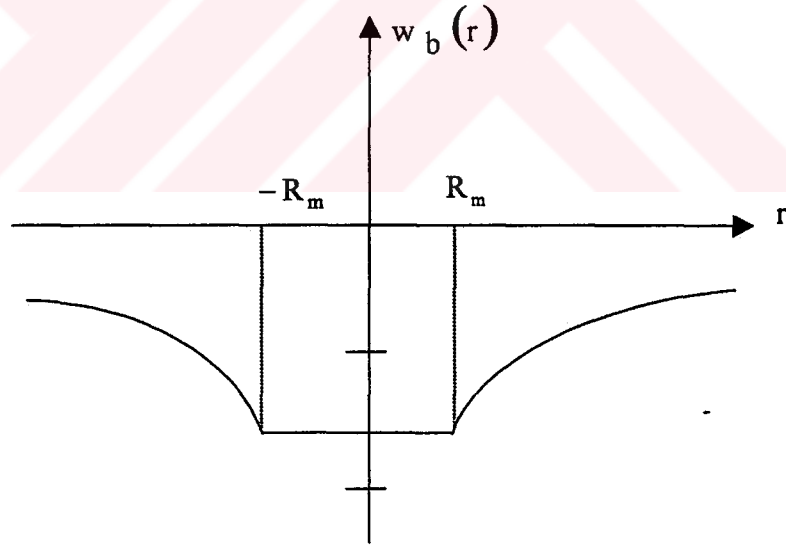
Şekil 2.1. Heine ve Aberenkov un model potansiyeli (a.u.)

2.1.2 Optimize model potansiyel

Shaw 1968 de, Animalu ve Heine' in model alınan R_M yarıçapına göre belirledikleri A_ℓ değerlerini düzenleyerek model potansiyelde kullanılan R_M yarıçapını ℓ ye bağlı olarak yeniden aşağıdaki biçimde ifade etmiştir.[18]

$$R_{M\ell} = \frac{Z|e^2|}{A_\ell|E|} \quad (2.1.2)$$

Böylece Shaw, “Şekil 2.2” de görüldüğü gibi $r = R_M$ noktasındaki süreksizliği ortadan kaldırmıştır. Kabuk (core) potansiyelini yalnızca $\ell \leq \ell_0$ için modelledi. Burada ℓ_0 maksimum açısal momentum sayısıdır. $\ell > \ell_0$ için kabuk potansiyeli çok küçük bir değerdedir. Appapillai ve Williams ise 1973 de optimize model potansiyeli; lokal olmayacak ve efektif kütle ile değiş-tokuş ve korelasyon etkilerini içerecek şekilde geliştirmişlerdir.



Şekil 2.2. Shaw ın optimize model potansiyeli (a.u.)

2.1.3 Boş kabuk modeli

Eğer Heine ve Aberenkov' un model potansiyelinde R_M kabuk yarıçapına eşit seçilirse A_r sıfıra yaklaşır. Böylece Ashcroft' un boş kabuk modeline ulaşılır.

$$V_b(r) = \begin{cases} 0 & , \quad r < R_c \\ -\frac{Ze^2}{r} & , \quad r > R_c \end{cases} \quad (2.1.3)$$

Burada R_c boş core yarıçapıdır. Temelde boş kabuk potansiyeli bölgesel bir potansiyeldir. Çünkü; $r < R_c$ bölgesinde gerçek potansiyel ihmal edilmiştir. (2.1.3) denkleminin Fourier transformu alınarak $V(q) = -(4\pi Z^2/q^2) \cos qr_c$ değeri bulunur. Bu değer Thomas-Fermi yaklaşımı kullanılarak $\epsilon(q)$ ya bölünürse perdelenmiş pseudopotansiyel elde edilir

2.1.4. Diğer metotlar

Yukarda bahsedilen model potansiyeller dışında gerçek potansiyelden daha zayıf pseudopotansiyel içeren Shredinger denklemi ile sonuca gidilen Ortogonal Düzlem Dalga (ODD) metodu, kristallerin optik yansıma ve soğurma ölçümleri kullanılarak teorik hesaplamada kullanılan Empirical Pseudopotansiyel (EPM) ve son zamanlarda atomik dalga fonksiyonundan türetilen Temel İlke (ab initio) modelleri mevcuttur.

2.2 BHS Form Faktör Hesabı

Model (Pseudo) potansiyel, lokal değil ve parametreleri enerjiye bağlı iken Bachelet, Haman ve Schluter' in pseudopotansiyeli enerjiden bağımsızdır. Sıvı metallerin ve alaşımların elektronik özelliklerinin hesabının başlangıç noktası, pseudopotansiyel form faktörün hesabıdır.

Heine, Abarenkov, Animalu ve Shaw pseudopotansiyeli, saf, geçiş ve nadir toprak metalleri için iyi tanımlanamıyordu. Fakat Bachelet, Haman ve Schluter' in pseudopotansiyeli enerjiden bağımsız olması sebebiyle periyodik tabloda Hidrojenden Plutonyuma kadar geniş bir alanda geçerli oldu. [17]

B.H.S.'nin iyon pseudopotansiyeli ℓ , açısal momentum ve V_ℓ^{so} , spin-orbit etkileşmelerinden kaynaklanan potansiyel olmak üzere aşağıdaki gibi verilir. Bu

yaklaşımında ℓ_0 , ℓ den daha büyük değerdedir. Bu tez çalışmasında atomlar arası potansiyel hesaplanırken spin-orbit etkileşmelerinden kaynaklanan $\hat{V}_\ell^{\text{so}}(\mathbf{r})$ potansiyeli ihmal edilmiştir.

$$\hat{V}_{\text{ps}}^{\text{ion}} = \sum_{\ell_0} |\ell\rangle [\hat{V}_\ell^{\text{ion}}(\mathbf{r}) + \hat{V}_\ell^{\text{so}}(\mathbf{r}) \cdot \vec{L} \cdot \vec{S}] \langle \ell| \quad (2.2.1)$$

$$\hat{V}_\ell^{\text{ion}}(\mathbf{r}) = \hat{V}_{\text{core}}(\mathbf{r}) + \Delta \hat{V}_\ell^{\text{ion}}(\mathbf{r}) \quad (2.2.2)$$

Burada; $\hat{V}_{\text{core}}(\mathbf{r})$, ℓ açısal momentumundan bağımsız Coulomb potansiyeline bağlı iken $\Delta \hat{V}_\ell^{\text{ion}}(\mathbf{r})$ ise ℓ açısal momentumuna bağlı kısa erişimli pseudopotansiyelden elde edilir. Bu potansiyeller aşağıdaki gibi verilmektedir.

$$\hat{V}_{\text{core}}(\mathbf{r}) = -\frac{Z_v}{r} \left[\sum_{i=1}^2 C_i^{\text{core}} \text{erf}(\alpha_i^{\text{core}} \cdot r) \right] \quad (2.2.3)$$

$$\Delta \hat{V}_\ell^{\text{ion}}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^3 [A_i + r^2 A_{i+3}] \exp(-\alpha_i \cdot r^2) \quad (2.2.4)$$

Bu tez çalışmasında nadir toprak metallere lanthanit gurubuna dahil uygulamasını yaptığımız f metalleri için c_i^{core} , α_i^{core} , ve Z_v değerleri Ek-B de gösterilmiştir. BHS form faktörü de (2.2.5) eşitliği ile verilmektedir.

$$W_q^0(\mathbf{K}) = N \langle \mathbf{K} + \mathbf{q} | \hat{V}_{\text{ps}}^{\text{ion}} | \mathbf{K} \rangle \quad (2.2.5)$$

N : iyon sayısı

K : Fermi küresine gelen düzlem dalga vektörü

q : Fermi küresinden yansıyan dalga vektörü

Form faktörü aşağıdaki formda alınırsa [17], bölgesel kısım $V(\mathbf{q})$ da (2.2.7) denklemi ile verilir.

$$W_q^0(K) = V(q) + f(K, q) \quad (2.2.6)$$

$$V(q) = -\frac{4\pi Z_v}{\Omega_0 q^2} \sum_{i=0}^2 C_i^{\text{core}} \exp\left[\frac{-q^2}{4\alpha_i^{\text{core}}}\right] + \frac{\pi^{3/2}}{\Omega_0} \sum_{i=1}^3 \frac{\exp\left(\frac{-q^2}{4\alpha_i(\ell_0)}\right)}{\alpha_i^{3/2}(\ell_0)} \times \left[A_i(\ell_0) + \frac{A_{i+3}(\ell_0)}{2\alpha_i(\ell_0)} \left(3 - \frac{q^2}{2\alpha_i(\ell_0)} \right) \right] \quad (2.2.7)$$

elde edilir. Burada, Ω_0 ; atomik hacim, Z_v ; valans bandı elektron sayısıdır. $\ell = \ell_0$ için A_i ve α_i değerleri $A_i(\ell_0)$, $\alpha_i(\ell_0)$ alınır. Biçim faktörün bölgesel olmayan kısmı olan $f(K, q)$ K ya bağlı olduğu için daha karmaşıktır. $f(K, q)$;

$$f(K, q) = \frac{4\pi}{\Omega_0} \sum_{\ell=0}^{\ell_0-1} (2\ell+1) P_\ell(\cos\theta) \cdot \int_0^\infty r^2 dr j_\ell(Kr) j_\ell(K'r) (\Delta \hat{V}_\ell^{\text{ion}}(r) - \Delta \hat{V}_{\ell_0}^{\text{ion}}(r)) \quad (2.2.8)$$

ile verilir. Burada, j_ℓ ; Bessel fonksiyonu P_ℓ ; K ve $K' = K + q$ arasındaki θ açısına bağlı Legendre polinomudur.

Bu tez çalışması f metalleri için olduğundan $f(K, q)$ denkleminde f bandı için $\ell_0 = 3$ alarak $f(K, q)$ denklemi;

$$f(K, q) = \frac{4\pi}{\Omega_0} \sum_{\ell=0}^2 (2\ell+1) P_\ell(\cos\theta) \int_0^\infty r^2 dr j_\ell(Kr) j_\ell(K'r) (\Delta \hat{V}_\ell^{\text{ion}}(r) - \Delta \hat{V}_3^{\text{ion}}(r)) \quad (2.2.9)$$

şeklinde düzenlenir. s,p,d,f bandı metaller için $\ell_0 = 0,1,2,3$ değerleri genelleştirilirse

Legendre polinomları

$$P_0 = 1 \quad (2.2.10)$$

$$P_1(\cos\theta) = \cos\theta \quad (2.2.11)$$

$$P_2(\cos \theta) = \frac{1}{2}(3\cos^2 \theta - 1) \quad (2.2.12)$$

$$P_3(\cos \theta) = -\frac{1}{48}\{1 - 3\cos^2 \theta + 2\cos^3 \theta + \cos^4 \theta - \cos^6 \theta\} \quad (2.2.13)$$

değerlerini alır. Burada $(\cos \theta)$ yerine referans [21] de verildiği gibi

$$\cos \theta = 1 - \frac{q^2}{2q_F^2} \quad (2.2.14)$$

alırız. $f(K, q)$ denkleminde $\Delta V_{\ell}^{\text{ion}}$ ve $\Delta V_{\ell_0}^{\text{ion}}$ terimleri yerlerine yazılırsa iki tip integral ortaya çıkar.

$$I_{\ell}(K, K') = \int_0^{\infty} r^2 j_{\ell}(Kr) j_{\ell}(K'r) \exp(-\alpha_i r^2) dr \quad (2.2.15)$$

$$J_{\ell}(K, K') = \int_0^{\infty} r^2 j_{\ell}(Kr) j_{\ell}(K'r) \exp(-\alpha_i r^2) dr \quad (2.2.16)$$

entegraller de kullanılan $\ell_0 = 0, 1, 2, 3$ Bessel fonksiyonları;

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x} \quad (2.2.17)$$

$$j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x} \quad (2.2.18)$$

$$j_2(x) = (3x^{-3} - x^{-1})\sin x - 3x^{-2} \cos x \quad (2.2.19)$$

$$j_3(x) = 5x^{-1}j_2(x) - j_1(x) \quad (2.2.20)$$

değerlerini alır. Entegrallerin sonuçları;

$$X = e^{\left(\frac{-(K + K')^2}{4\alpha_i} \right)} \quad (2.2.21)$$

$$Y = e^{\left(\frac{-(K - K')^2}{4\alpha_i} \right)} \quad (2.2.22)$$

dönüşümleri yapılarak Ek A da verilmektedir. Bu dönüşümlerde görülen K ve K' değerleri yerine

$$q \leq 2k_f \quad \text{olduğunda} \quad K = K_f$$

$$q \geq 2k_f \quad \text{olduğunda} \quad |K + q| = K_f$$

$$\text{veya} \quad |K + q| = q - K_f$$

ifadeleri yazılır. B.H.S Form faktör, hem $V(q)$ hem de $f(K, q)$ da ki $\Delta V_{\ell}^{\text{ion}}$ ve $\Delta V_{\ell_0}^{\text{ion}}$ değerleri bulunurken bölgesel olmayan ve kısa erişimli bu potansiyeller nonlinear least square tarafından fit edilir. Fitting fonksiyonunun lineer olmayan bağımlılığı A matrisi ile verilmiştir. [22] A_i ve A_{i+3} değerlerinin bilinmesi gerekmektedir. $i = 1, 2, 3$ alınıyordu. $\ell = 0, 1, 2$ için A (6,1) lik bir matristir.

$$A_i = -\sum_{j=1}^6 C_j \Phi_{ij}^{-1} \quad (2.2.23)$$

Orthogonal matris C_j değerleri Ek B' de verilmiştir. $\phi_{ij} = (6,6)$ matrisini ise;

$$\Phi_{ij} = \begin{cases} 0 & i \succ j \\ \left[S_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} \Phi_{ki}^2 \right]^{1/2} & i = j \\ \frac{\left[S_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} \Phi_{ki} \Phi_{kj} \right]}{\Phi_{ii}} & i \prec j \end{cases} \quad (2.2.24)$$

referans [23] de olduğu gibi ifade edilir. Burada ki $S_{ij}(6,6)$ matrisinin tanımı, α_i bozulma sabiti ile değişen $\phi_i(r)$ terimine bağlı olarak verilmektedir.

$$S_{ij} = \int_0^{\infty} r^2 \phi_i(r) \phi_j(r) dr \quad (2.2.25)$$

$$\phi_i(r) = \begin{cases} e^{-\alpha_i r^2} & i = 1, 2, 3 \\ r^2 e^{-\alpha_i r^2} & i = 4, 5, 6 \end{cases} \quad (2.2.26)$$

Buraya kadar B.H.S. pseudopotansiyel form faktörü hesabını inceledik.

2.3. Perdelenme

Metallerin fiziksel özelliklerinin büyük bir bölümü serbest elektron modeliyle açıklanabilir. Bu modele göre atomların valans elektronları kristal ortamında iletkenlik elektronlarına dönüşür ve metal içinde serbestçe hareket edebilirler.

Pozitif yüklü parçacık düzenli olmayan elektron gazı içinde yerleşmiş olsun. Pozitif yük çekimi ile kendi etrafında, elektronik yük birikimi oluşturur. Bu pozitif yük, etrafında oluşan elektron bulutu ile perdelenme etkisine sahip olur. Pozitif yükün yalnız başına yarattığı potansiyel V_{ext} ise Poisson denklemi;

$$-\nabla^2 V^{ext}(r) = 4\pi e \rho^{ext}(r) \quad (2.3.1)$$

Burada, $e\rho^{ext}$ parçacığın yük yoğunluğudur. Parçacığın potansiyeline ek olarak parçacığın meydana getirdiği perdelenme bulutu tarafından üretilen toplam potansiyel,

$$-\nabla^2 V^{ext}(r) = 4\pi e \rho^{ext}(r) = 4\pi [e\rho^{ind}(r) - e\rho^{scr}(r)] \quad (2.3.2)$$

$-e\rho^{scr}$ elektron gazının yük yoğunluğu olmak üzere V ve $V_{ext}(r)$ arasındaki ilişkiyi

$$V^{ext}(r) = \int d^3r' \epsilon(|r - r'|) V(r') \quad (2.3.3)$$

(2.3.3) denklemiyle ifade edebiliriz.[19] Fourier dönüşümü uygulandıktan sonra.

$$V(q) = V^{ext} [(q) \epsilon(q)]^{-1} \quad (2.3.4)$$

denklemine dönüşür. $\epsilon(q)$; q ya bağlı metalin dielektrik sabiti adını alır. (2.3.4) denklemi, dış potansiyelin Fourier elemanlarının ürettiği etkiye perdelenmenin sahip olduğunu gösterir.

$$-e\rho^{scr}(q) = \chi_{scr}(q)V(q) \quad (2.3.5)$$

$$q^2 V^{ext}(q) = 4\pi e\rho^{ext}(q) \quad (2.3.6)$$

$$q^2 V(q) = 4\pi e\rho(q) \quad (2.3.7)$$

Bu denklemlerin birleşimi ile

$$V(q) = \frac{V^{ext}(q)}{1 - \frac{4\pi}{q^2} \chi_{scr}(q)} \quad (2.3.8)$$

Bu sonucu (2.3.4) denklemi ile karşılaştırırsak sonuçta aradığımız $\epsilon(q)$ sıvı elektronların statik dielektrik fonksiyonuna ulaşırız.

$$\epsilon(q) = 1 - \frac{4\pi}{q^2} \chi_{scr}(q) \quad (2.3.9)$$

(2.3.9) denkleminde kullanılan tepki fonksiyonu χ_{scr} ;

$$\chi_{scr}(q) = \frac{\chi_0(q)}{1 + v(q)G(q)\chi_0(q)} \quad (2.3.10)$$

Burada $\chi_0(q)$ durgun tepki fonksiyonu ve $v(q)$ ise ($e = 1$ olmak üzere)

$$v(q) = \frac{4\pi e^2}{q^2} \quad (2.3.11)$$

$$\chi_0(q) = \frac{q_f}{\pi^2} f\left(\frac{q}{2q_F}\right) \quad (2.3.12)$$

f Linhard fonksiyonudur.[23]

$$f(y) = \frac{1}{2} + \frac{1}{4y} (1 - y^2) \ln \left| \frac{y+1}{y-1} \right| \quad (2.3.13)$$

olarak veriliyor. $G(q)$ Ichimaru ve Utsumi tarafından önerilen lokal alan düzeltmesidir.

$$G(q) = AQ^4 + BQ^2 + C + \left[AQ^4 + \left(B + \frac{8}{3} \right) Q^2 - C \right] \times \frac{4 - Q^2}{4Q} \ln \left| \frac{2+Q}{2-Q} \right| \quad (2.3.14)$$

Burada Q yerine; $Q = \frac{q}{q_f}$ yazarız. q_f Fermi dalga sayısıdır. A, B ve C parametreleri ise aşağıda verilmiştir. [20]

$$A = 0.029 \quad (2.3.15.1)$$

$$B = \frac{9}{16} \gamma_0 - \frac{3}{64} [1 - g(0)] - \frac{16}{15} A \quad (2.3.15.2)$$

ve

$$C = -\frac{3}{4} \gamma_0 + \frac{9}{16} [1 - g(0)] - \frac{16}{5} A \quad (2.3.15.3)$$

A, B ve C parametrelerinde ki γ_0 değeri elektron başına karşılıklı etkileşme enerjisi $E_C(r_s)$ ile birleştirilen bir katsayıdır

$$\gamma_0 = \frac{1}{4} - \frac{\pi\alpha}{24} r_s^5 \frac{d}{dr_s} \left[r_s^{-2} \frac{d}{dr_s} E_C(r_s) \right] \quad (2.3.16)$$

(2.3.16) denkleminde geçen $\alpha = 4/9\pi$ değerine eşittir. r_s ise n elektronlu sistemde Wigner-Seitz elektron yarıçapı olup,

$$r_s = \left(\frac{3}{4\pi n} \right)^{1/3} \frac{me^2}{\hbar^2} \quad (2.3.17)$$

denklemini ile bulunur. (2.3.16) denkleminde geçen karşılıklı etkileşme enerjisinin r_s ' e göre türevi $\sqrt{r_s}$ yerine x ($\sqrt{r_s} = x$) yazılarak aşağıdaki gibi ifade edilmiştir.

$$r_s \frac{dE_C(r_s)}{dr_s} = b_0 \frac{1 + b_1 x}{1 + b_1 x + b_2 x^2 + b_3 x^3} \quad (2.3.18)$$

Burada; $b_0 = 0.0621814$, $b_1 = 9.81379$, $b_2 = 2.82224$ ve $b_3 = 0.735411$ dir. Ichimaru ve Utsumi' nin ifade ettiği gibi $G(q)$ 'nun kısa dalga boyundaki davranışı radyal dağılım fonksiyonu $g(r)$ ile aşağıdaki gibi ilişkilendirilmiştir.(20)

$$\lim_{q \rightarrow \infty} G(q) = 1 - g(0) \quad (2.3.19)$$

$$g(0) = \frac{1}{8} \left[\frac{z}{I_1(z)} \right]^2 \quad (2.3.20)$$

Burada $I_1(z)$ birinci dereceden Modifiye Bessel fonksiyonu ve $z \equiv 4(\alpha r_s / \pi)^{1/2}$ dir. Bu denklemler birleştirilerek dielektrik perdelenme fonksiyonuna ulaşılır.

Buraya kadar Ichimaru ve Utsumi tarafından önerilen $G(q)$ bölgesel alan düzeltme fonksiyonunu ve iyonların etrafında perdelenme etkisi yaratan elektron bulutunun iletkenlik elektronları gibi davrandığını düşünerek serbest elektron modelini uygulayarak $\epsilon(q)$ dielektrik perdelenme fonksiyonu ulaştık. Bulduğumuz bu analitik çözümleri ve daha önce incelediğimiz BHS biçim faktörünü $w_q^0(K)$ (2.5) denkleminde yerine koyarak $F_N(q)$ fonksiyonunu elde ediyoruz.

(2.1) denkleminin Fourier uzayında ifadesi iyon çekirdekleri arası direkt etkileşme terimi $V_{ii}(q)$ ve bu iyonları perdeleyen elektron bulutunun oluşturduğu indirekt etkileşme terimi $V_{sc}(q)$ olmak üzere ve atomlar arası potansiyel yani etkin çift potansiyel $V_{eff}(q)$ olmak üzere (2.3.21) denklemi ile verilebilir.

$$V_{eff}(q) = V_{ii}(q) + V_{sc}(q) \quad (2.3.21)$$

Bu tez çalışmasında nadir toprak metallerinin termodinamiksel ve yapısal özelliklerinin anlaşılmasında $S(q)$ yapı faktörünün bulunabilmesi için $V_{sc}(q)$ fonksiyonunu bulmamız gerekiyordu. $F_N(q)$ fonksiyonu yardımıyla q Fourier uzayındaki $V_{sc}(q)$ ifadesine ulaştık. Bundan sonraki bölümde yine $S(q)$ yapı faktörü için gerekli olan $S_0(q)$ referans yapı faktörünü inceleyeceğiz.

3. YAPI FAKTÖRÜ VE EŞSİCAKLIK SIKIŞTIRILABİLİRLİK SABİTİ

3.1 $S_0(q)$ Referans Yapı Faktörü Hesabı

Bir sıvının karakterize en önemli özelliği statik yapı faktörü $S(q)$ dur. Ergimiş metallerin makroskopik yapısına bağlı olan fiziksel özelliklerinin saptanması ile bu konuda yapılan deneysel ve kuramsal çalışmaların ortak amacı $S(q)$ yapı faktörünün hesaplanmasıdır.

Bu çalışmada, ergimiş nadir torak metallerin statik yapı faktörü $S(q)$ hesabında rastgele faz yaklaşımı (RPY) gibi düşük dereceden titreşim teorisine dayanan elektron-iyon plazma (EİP) modelini kullanıyoruz. Bu modele göre statik yapı faktörü (3.1.1) denklemi ile verilmektedir. [24-26]

$$S(q) = \frac{S_0(q)}{1 + \beta \rho V_{sc}(q) S_0(q)} \quad (3.1.1)$$

Burada $S_0(q)$ referans yapı faktörü, $V_{sc}(q)$ nadir toprak metalleri için d ve f bandı elektron etkileşmelerini içeren indirekt etkileşme terimi [24] ve β termal sabittir. (3.4) denkleminin Fourier transformu alınarak $V_{sc}(q)$ (3.1.2) denklemi elde edilir.

$$V_{sc}(q) = - \left(\frac{4\pi Z}{q^2} \right) F_N(q) \quad (3.1.2)$$

Burada Z etkin valans değeri ve $F_N(q)$ ise değiş-tokuş terimleri ve karşılıklı etkileşme terimleri ile BHS form faktörü içeren fonksiyondur. $S_0(q)$ referans yapı faktörü hesabında ise tek bileşenli plazma modeli (TBP) kullanılıyor. Bu modele göre tek bileşenli plazma, tamamen nötr bir ortamdır ve birbirlerine eşit nokta yükleri kapsayan bir akışkandır. [27]. TBP metodu erime noktası civarında ki alkali metaller için başarılı sonuçlar vermiştir. [26]

Ornstein-Zernike denkleminin tek bileşenli plazmada ki formu aşağıda gösterildiği gibidir. [28]

$$h(r) = c(r) + \rho \int c(|\vec{r} - \vec{r}'|) h(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (3.1.3)$$

Burada, $h(r)$, toplam korelasyon fonksiyonu ve $c(r)$, doğrudan korelasyon fonksiyonudur. (3.1.3) denkleminin her iki tarafında harmanlama teoremi kullanarak Fourier dönüşümü alınırsa;

$$\tilde{h}(q) = \tilde{c}(q) + \rho \tilde{c}(q) \tilde{h}(q) \quad (3.1.4)$$

ifadesi bulunur. Burada,

$$\tilde{h}(q) = \int h(r) \exp[-iqr] d^3r \quad (3.1.5)$$

$$\tilde{c}(q) = \int c(r) \exp[-iqr] d^3r \quad (3.1.6)$$

formunda ifade edilebilir. (3.1.4) denklemini tekrar yazarsak, aşağıdaki eşitliği elde ederiz.

$$[1 + \rho \tilde{h}(q)][1 - \rho \tilde{c}(q)] = 1 \quad (3.1.7)$$

Toplam korelasyon fonksiyonunun Fourier dönüşümü aşağıdaki şekilde ifade edilmiş olur.

$$\tilde{h}(q) = \frac{\tilde{c}(q)}{1 - \rho \tilde{c}(q)} \quad (3.1.8)$$

Yüklü katı kürelerden oluşmuş nötr sıvının $S_0(q)$, referans yapı faktörü, M.Parniello ve M.P.Tosi' nin çok bileşenli plazma için Ortalama Küresel Yaklaşıklık çözümünü içeren makalesinden [29] tek bileşenli plazma için analitik olarak elde edilebilir.

σ_i çaplı, $Z_i e$ yüklü n bileşenli plazmayı düşünürsek. toplam yük yoğunluğu;

$$\rho = \sum_{i=1}^N \rho_i Z_i \quad (3.1.9)$$

iken tek bileşenli plazmada ortam tamamen nötr olması sebebiyle . toplam yük yoğunluğu $\rho = 0$ olur. Burada ρ_i , birim hacimdeki iyon sayısıdır.

$S_0(q)$, referans yapı faktörü aşağıda verilmiştir.[29,30]

$$S_0(q) = [Q(q)Q(-q)]^{-1} \quad (3.1.10)$$

şeklinde tanımlanmaktadır. Burada $Q(q)$ korelasyon faktörü olan Baxter matrisidir ve referans [29] da çok bileşenli plazma için aşağıdaki gibi tanımlanmıştır.

$$Q_{ij}(q) = \delta_{ij} + (\rho_i \rho_j)^{1/2} \left[- \int_{\lambda_{ij}}^{\sigma_{ij}} dr Q_{ij}(r) e^{iqr} + A_{ij} \int_{\sigma_{ij}}^{\infty} dr e^{(iq-\mu) \cdot r} \right] \quad (3.1.11)$$

Burada integrallerin sınır koşulları olan σ_{ij} ve λ_{ij} ifadelerini tek bileşenli plazma için $\sigma_{ii} = \sigma$ ve $\lambda_{ii} = 0$ tanımlayabiliriz. Ayrıca limit durumunda kimyasal potansiyel enerji $\mu \rightarrow 0$ olarak belirlenir. Ayrıca δ_{ij} , Kronecker deltasıdır ve

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad (3.1.12)$$

dir. Tek bileşenli plazma için $i = j$ dir ve $\delta_{ii} = 1$ olur. Bu durumda (3.1.11) denklemi tek bileşenli plazma için yeniden düzenlenirse;

$$Q(q) = 1 + \rho \left[- \int_0^{\sigma} Q(r) e^{iqr} dr + A \int_{\sigma}^{\infty} e^{iqr} dr \right] \quad (3.1.13)$$

ifadesi elde edilir. Burada $A = Z\alpha$ ve $Q(r)$ ise referans [29] da ifade edildiği gibi a nın tanımını (3.1.17) denklemi ile verilmektedir.

$$Q(r) = \frac{1}{3} \pi \rho a (r - \sigma)^3 + \frac{1}{2} Q''(r - \sigma)^2 + Q'(r - \sigma) - Z\alpha \quad (3.1.14)$$

dır. (3.1.14) üçüncü dereceden bir polinomdur. (3.1.14) denklemi (3.1.13) denkleminde yerine konup bir takım analitik işlemlerden sonra $Q(q)$ aşağıdaki formda yazabiliriz.

$$Q(q) = 1 - \rho \left\{ \frac{A}{iq} + Q' \varphi_1(q) + Q'' \varphi_2(q) + \pi \rho A \varphi_3(q) \right\} \quad (3.1.15)$$

Korelasyon faktörü $Q(q)$ nun içindeki fonksiyonlar sırasıyla,

$$\varphi_1(q) = \frac{1}{(iq)^2} (1 + iq\sigma - e^{iq\sigma}) \quad (3.1.16)$$

$$\varphi_2(q) = \frac{1}{-(iq)^3} \left(1 + iq\sigma + \frac{1}{2} (iq\sigma)^2 - e^{iq\sigma} \right) \quad (3.1.17)$$

$$\varphi_3(q) = 2 \left(\frac{1}{iq} \right)^4 \left[1 + iq\sigma + \frac{1}{2} (iq\sigma)^2 + \frac{1}{6} (iq\sigma)^3 - e^{iq\sigma} \right] \quad (3.1.18)$$

olarak tanımlanmıştır. (3.1.15) denkleminde geçen $A = Z\alpha$ ifadesindeki a değeri,

$$a = \frac{\alpha^2}{2\gamma} \frac{Z^* - (\pi/2\Delta)\sigma^2 P_n}{1 + \gamma\sigma} \quad (3.1.19)$$

dır. Burada geçen ifadeler sırasıyla;

$$Z^* = Z - \eta = Z - \frac{1}{6} \pi \rho \sigma^3 \quad (3.1.20)$$

Burada η paketleme veya istifleme yoğunluğudur ve (3.1.21) denklemi ile ifade edilir. σ ise efektif katı küre çapıdır. Furukawa [31] σ' yı yaklaşık olarak ergimiş metaller için $r_1/1.145$ olarak tanımlamaktadır. Burada r_1 deneysel verilerden belirlenen atomlar arası en yakın mesafedir. Furukawa' nın bu yaklaşımı basit ergimiş metaller için oldukça iyi bir yaklaşımdır. Ergimiş metallerin yapı faktörünün maksimumdaki değerinden faydalanarak r_1 değerleri elde edilmiştir. “Tablo 4.3” de bu değerler bizim uyguladığımız f metalleri için verilmiştir.

$$\eta = \frac{1}{6} \pi \rho \sigma^3 \quad (3.1.21)$$

$$\alpha^2 = \frac{4\pi\beta e^2}{\epsilon_0} \quad (3.1.22)$$

Boltzmann sabiti k_β ve sıcaklık T olmak üzere termal sabit $\beta = 1/k_\beta T$ olmaktadır.

$$\Delta = 1 - \frac{1}{6} \pi \xi_3 \quad (3.1.23)$$

$$\xi_3 = \rho \sigma^3 \quad (3.1.24)$$

dır. Tek bileşenli plazma için;

$$P_1 = \Omega^{-1} \left[\frac{\rho Z^* \sigma}{1 + \gamma \sigma} \right] \quad (3.1.25)$$

tanımlanmaktadır ve M. Parniello ve M.P.Tosi tarafından verilen aşağıdaki ifadeler

tek bileşenli plazma için düzenlenmiştir.

$$\Omega = 1 + \frac{\pi}{2\Delta} \left[\frac{\rho \sigma^2}{1 + \gamma \sigma} \right] \quad (3.1.26)$$

Yukarıdaki denklemlerde kullanılan γ parametresi, bilinmeyen ayrılma sabiti olarak adlandırılır.

$$\gamma\sigma = -\frac{1}{2} \frac{1+2\eta}{1-\eta} \left\{ 1 - \left[1 + 2\kappa \frac{(1-\eta)^3}{(1+2\eta)^2} \right]^{1/2} \right\} \quad (3.1.27)$$

$$2\gamma = \alpha\rho^{1/2} \left[\frac{Z^* - (\pi/2\Delta)\sigma^2 P_1}{1 + \gamma\sigma} \right] \quad (3.1.28)$$

(3.1.27) denkleminde verilen $\kappa = \rho Z \lambda^2 \sigma^2$ dır ve bu ifadede geçen $\lambda^2 = 4\pi e^2 \beta$ olarak verilir. Referans [29] da verilen Q' ve Q'' ifadelerini yine tek bileşenli plazma için aşağıda ki forma getirdik.

$$Q' = \frac{2\pi\pi}{(1-\eta)^2} \left(1 + \frac{1}{2}\eta \right) - \frac{2\gamma^2 a^2}{\alpha^2} \quad (3.1.29)$$

$$Q'' = \frac{2\pi(1+2\eta)}{(1-\eta)^2} \cdot \frac{2\pi\pi\gamma\sigma\rho^2}{\alpha^2(1-\eta)} \quad (3.1.30)$$

Bu ifadeler yerlerine yazılarak $Q(q)$ ve $Q(-q)$ elde edilir ve $S_0(q) = [Q(q)Q(-q)]^{-1}$ referans yapı faktörü bulunur. Bulunan (3.1.11) ve (3.1.2) denklemleri (3.1.1) denkleminde yerine konarak statik yapı faktörü $S(q)$ ya ulaşılır.

3.2.Eşsıcaklık Sıkıştırılabilirlik Katsayısı Hesabı

Kısa menzilli karşılıklı iyonik etkileşmelerde bulunan tek bileşenli bir sıvıda $S(q)$ yapı faktörü ve $g(r)$ yoğunluk fonksiyonu birbirine bağlıdır. $S(q)$ yapı faktörü ile $g(r)$ yoğunluk fonksiyonu arasında (3.2.1) denkleminde ifade edildiği gibi bir ilişki vardır.

$$S(q) = 1 + \rho \int [g(r) - 1] \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (3.2.1)$$

Burada ρ , atomik sayı yoğunluğu ve $\varphi = \varphi' - \varphi_0$ olarak ifade edilir. φ' ve φ gelen ve yansıyan dalga vektörleri ise $\varphi = \varphi' - \varphi_0$ saçılan x ışınlarının konum vektörüdür. $\exp(-i\varphi \cdot r)$ ise r pozisyonundan saçılan x ışınlarının faz faktörüdür. (3.2.1) denkleminin 0 dan sonsuza kadar Fourier integrali alınırsa deneysel verilerde ki $q_{\min}$ dan daha yüksek ve $q_{\max}$ dan daha düşük bir değer arasında limite ulaşır. $q \rightarrow 0$ a giderken $S(q)$ yapı faktörü termodinamik büyüklüklere bağlanmaktadır.[31]

$$\lim_{q \rightarrow 0} S(q) = S(0) = \rho \chi_T k_B T \quad (3.2.2)$$

Burada k_B Boltzmann sabiti χ_T belirlenen bir sıcaklıkta izotermal sıkıştırılabilirliktir. Burada eşsıcaklık sıkıştırılabilirlik katsayısı

$$\chi_T = \frac{S(0)}{\rho k_B T} \quad (3.2.3)$$

denklemi ile verilir. Das, Bari ve Joarder Rastgele faz yaklaşımında elektron iyon plazması altında uzun dalga boyu limitinde $q \rightarrow 0$ giderken $S(0)$ ifadesi referans [32] de aşağıdaki gibi verilmiştir.

$$S(0) = \frac{\Omega}{(4\pi a_0 \Gamma)} \left[r_c^2 - \frac{(\alpha - 1)\sigma^2}{(12\eta^{2/3} \Gamma)} + \frac{\pi}{4k_f} - \frac{f_0}{k_f^2} \right] \quad (3.2.4)$$

Burada Ω atomik hacim r_c kabuk yarıçapı ve Γ plazma parametresidir. Plazma parametresi denklem (3.2.5) de verilmektedir.

$$\Gamma = \frac{(Ze^2)}{(a_0 k_B T)} \quad (3.2.5)$$

(3.2.4) denkleminde geçen a_0 parçacıklar arası ayrılmanın ortalamasıdır ve ρ iyonik sayı yoğunluğu olmak üzere $a_0 = (3/4\pi\rho)^{1/3}$ olarak ifade edilir. Ayrıca referans [30] da verildiği gibi $f_0 = 0.25 + 0.153/4\pi k_F$ olarak tanımlıdır.

Bu ifadeler (3.2.4) denkleminde yerine konulup (3.2.3) denkleminde verilen eşsıcaklık sıkıştırılabilirlik katsayısına ulaşılır.

Dördüncü bölümde literatürden elde ettiğimiz tabloları ve diğer sabitleri kullanarak yaptığımız bu analitik hesaplamaların uygulamasını nadir toprak metali lanthanit sınıfından seçtiğimiz dört metal için inceleyeceğiz.



-

4. ERGİME NOKTASI CİVARINDA SEÇİLEN METALLERİN STATİK YAPI FAKTÖRLERİ

Sıvı geçiş ve nadir toprak metalleri gibi basit olmayan sıvı metal sistemlerinin yapısal ve termodinamik özelliklerinin anlaşılması için yapılan araştırmalar, son yıllarda literatürde önemli bir yer tutmaktadır. Bu sebeple $S(q)$ yapı faktörü ve χ_T eşsıcaklık sıkıştırılabilirlik katsayısının hesaplanan sonuçları atom numarası 57 ile 60 arasında değişen Lantan, Seryum, Praseodimyum ve Neodyum nadir toprak metalleri için uygulanarak literatürdeki deneysel sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Bu metallerin temel özellikleri “Tablo 4.1” de verilmektedir.

Tablo 4.1 Nadir toprak metallerinin bazı fiziksel ve kimyasal özellikleri

SEMBOL	ATOM NUMARASI	ATOM AĞIRLIĞI	KONFIGÜRASYON	ERİME NOKTASI (K ⁰)
La	57	138.906	5d ¹ 6s ²	920
Ce	58	140.115	4f ² 5d ⁰ 6s ²	795
Pr	59	140.908	4f ³ 5d ⁰ 6s ²	935
Nd	60	144.24	4f ⁴ 5d ⁰ 6s ²	1024

Ergime sıcaklığı civarındaki nadir toprak metallerinin termodinamiksel ve yapısal özelliklerinin anlaşılması için $S(q)$ yapı faktörünün bilinmesi gerekmektedir. Bu sebeple her bir iyonu perdeleyen iletken elektronların oluşturduğu indirekt etkileşme sonucu oluşan potansiyel $V_{sc}(q)$ nun Fermi uzayındaki (q ya bağlı) ifadesini II. bölümde incelemiştik. Bu potansiyel $F_N(q)$ fonksiyonuna bağlıdır. Dolayısıyla

$F_N(q)$ fonksiyonunu hesabının başlangıcı $W_q^0(K)$ BHS form faktör hesabıdır. (2.2.7) denklemleriyle verilen $W_q^0(K)$ nın lokal kısmı olan açısal momentuma bağlı iyon potansiyelinin hesaplanabilmesi için α_i^{core} , c_i^{core} , Z_v ve ℓ açısal momentumuna bağlı c_i değerlerinin bilinmesi gerekmektedir. Bu değerler sırasıyla “Tablo B.1”, “Tablo B.2”, “Tablo B.3” ve “Tablo B.4” de verilmiştir.

III. bölümde (3.1.1) denklemleriyle verilen $S(q)$ statik yapı faktörüne ulaşmak için $V_{sc}(q)$ ile birlikte TBP modeliyle hesaplanabilen referans yapı faktörü $S_0(q)$ nın bilinmesi gerekmektedir. $S(q)$ statik yapı faktörü η paketleme yoğunluğuna bağlı olarak değişmektedir. Bu sebeple her metale ait ρ iyonik sayı yoğunluğunu ve iyonlar arası en yakın mesafeyi r_1 i bilmemize gerek vardır. Bu değerler “Tablo 4.2” de verilmektedir.

Tablo 4.2 Nadir toprak metallerinin statik yapı faktörü ve eşsıcaklık sıkıştırılabilirlik sabitinin hesabında kullandığımız temel parametreler

Saf Metal	Sıcaklık (°K)	Yoğunluk (gr/cm ³)	Atomik Sayı Yoğunluğu (1/cm ³)	r_1 (cm)
La	1243	5.96	0.0258	3.55
Ce	1143	6.67	0.0268	3.50
Pr	1223	6.61	0.0283	3.45
Nd	1323	6.92	0.0289	3.45

(4.2) tablosundaki değerler kullanılarak KK modeline dayandırılan σ katı küre çapı ve η paketleme yoğunluğu hesaplanabilir. Ayrıca (3.2.3) ifadesinde anlaşıldığı gibi eşsıcaklık sıkıştırılabilirlik katsayısı χ_T uzun dalga boyu limitinde ($q \rightarrow 0$) $S(0)$ için hesaplanabilmektedir.

Şimdi erime noktası civarındaki seçtiğimiz nadir toprak metalleri için TBP modeline göre hesaplanan statik yapı faktörünü ve eşsıcaklık sıkıştırılabilirlik katsayısı ile

buna bağılı parametrelerin sonuçlarını inceleyeceğiz ve bunları literatürden [31] elde edilen x ışınları yöntemi ile yapılan deneylerin sonuçları ile karşılaştıracakız Bu sonuçlar “Tablo 5.1” de verilmektedir. .

4.1 Lantan

İlk incelediğimiz nadir toprak elementi Lantandır. Bu metalin Fukawa’ nın yaptığı deneysel sonuçlardan [31] elde edilen $g(r)$ radyal dağılım fonksiyonunun ilk pikin maksimum değerine karşılık gelen iki atom arasındaki en yakın mesafe olarak elde edilen $r_1 = 3.55$ olarak alınmış ve buna bağılı olarak efektif katı küre çapı olarak $\sigma = 3.1004$ ve paketleme yoğunluğu $\eta = 0.4026$ değeri elde edilmiştir. Lantanın statik yapı faktörü $S(q)$ nun yaptığımız hesaplamalara göre Fourier uzayında ve atomik birimlere göre değişimi “Şekil 4.1” de verilmektedir. “Şekil 4.1” deki grafiğinden elde ettiğimiz eğrinin birinci pikinin maksimumuna karşılık gelen q değerine q_m diyerek q/q_m oranına göre çizilen grafiğin deneysel sonuçlardan elde edilen grafiklerle karşılaştırması “Şekil 4.2” de verilmiştir.

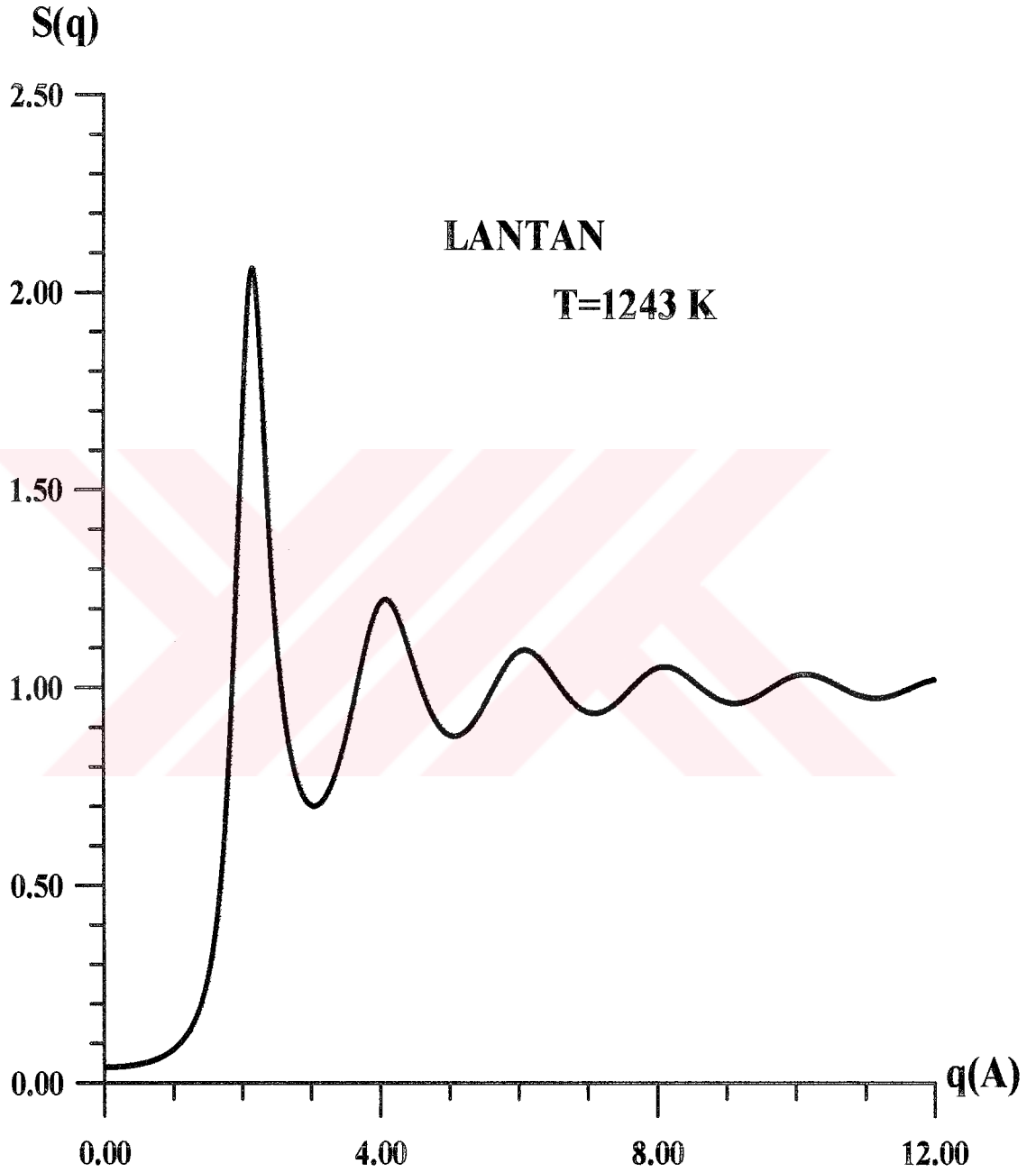
4.2 Seryum

q/q_m

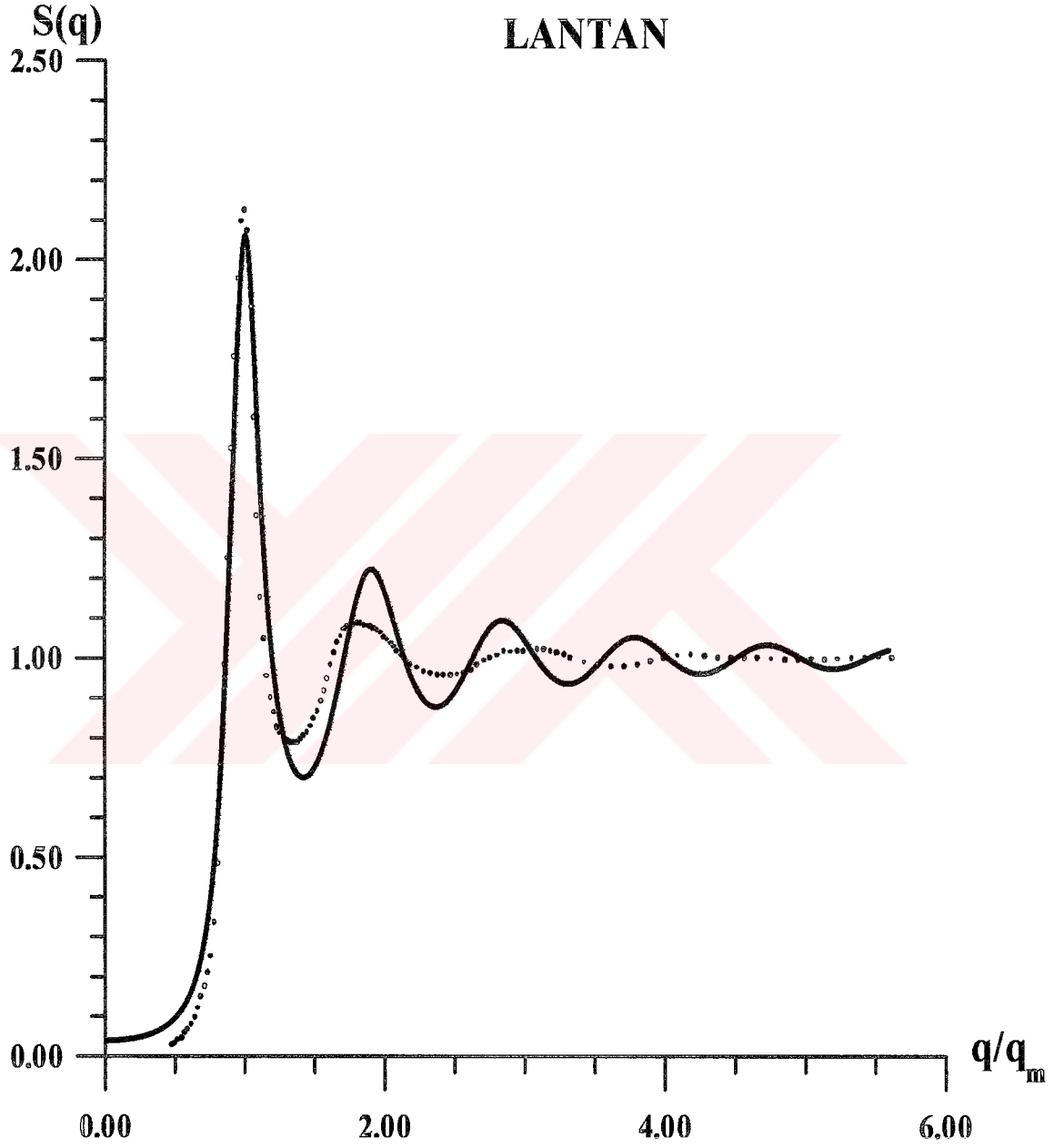
Radyal dağılım fonksiyonundan elde edilen $r_1 = 3.50$ dır ve buna bağılı olarak efektif katı küre çapı olarak $\sigma = 3.0567$ ve paketleme yoğunluğu $\eta = 0.4008$ değeri elde edilmiştir. Seryumun statik yapı faktörü $S(q)$ nun q ya göre değişimi “Şekil C.1” de verilmektedir “Şekil C.2” de ise q/q_m oranına göre çizilen $S(q)$ grafiğinin deneysel sonuçlardan elde edilen grafiklerle karşılaştırması verilmiştir.

4.3 Praseodimyum

Praseodimyum metalinin radyal dağılım fonksiyonundan elde edilen $r_1 = 3.45$ dır ve buna bağılı olarak efektif katı küre çapı olarak $\sigma = 3.0131$ ve paketleme yoğunluğu. $\eta = 0.4053$ değeri elde edilmiştir. Seryumun statik yapı faktörü $S(q)$ nun q ya göre değişimi “Şekil C.3” de verilmektedir. “Şekil C.4” de ise q/q_m oranına göre çizilen $S(q)$ grafiğinin deneysel sonuçlardan elde edilen grafiklerle karşılaştırması verilmiştir.



Şekil (4.1) $T = 1243$ °K Lantanın $S(q)$ yapı faktörünün q ya göre değişimi



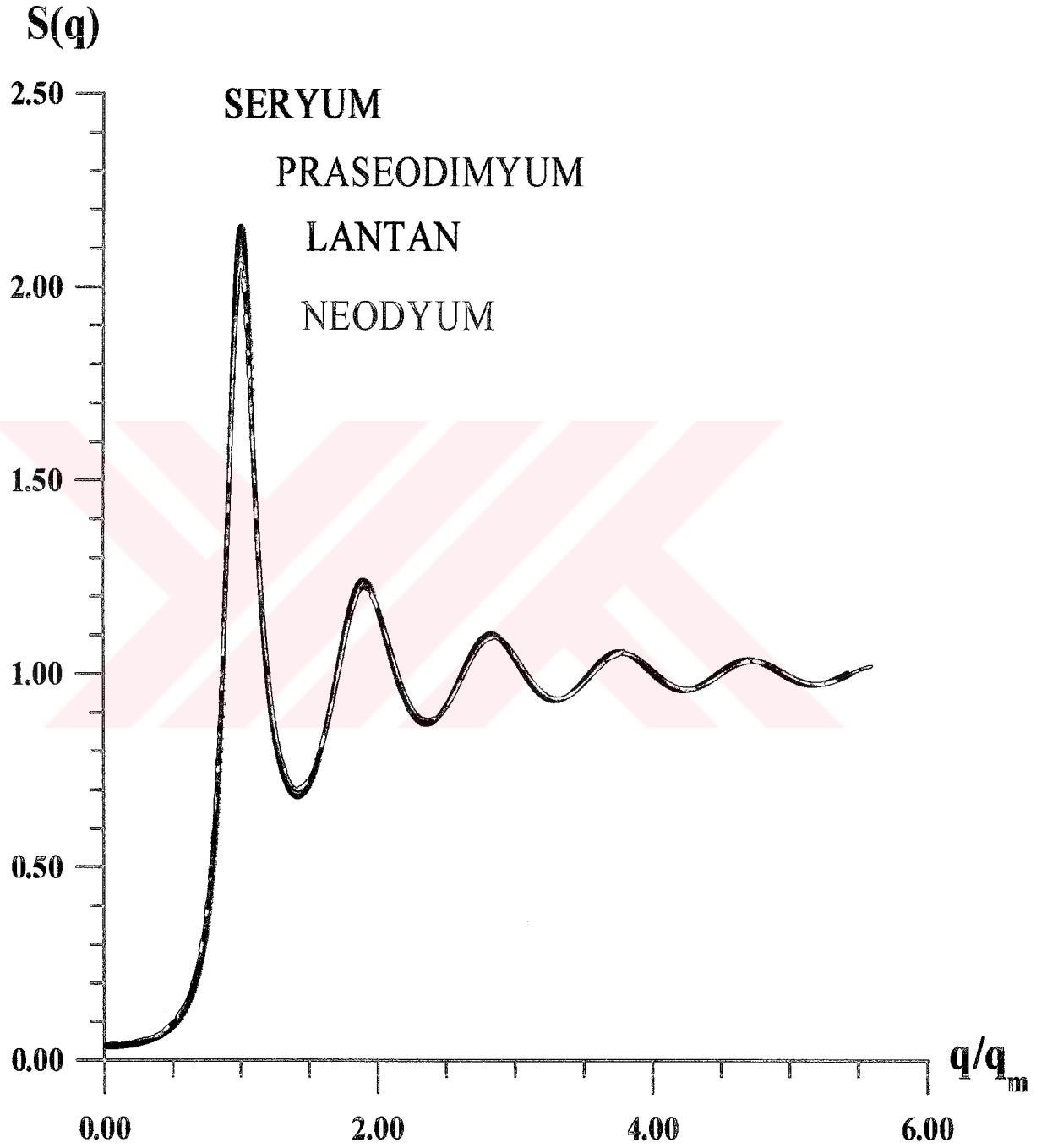
Şekil (4.2) $T = 1243$ °K Lantanın $S(q)$ yapı faktörünün q/q_m e göre değişimi. Kalın çizgi TBP modeline göre, noktalı çizgi ise deneysel verilerden elde edilen statik yapı faktörüdür.

4.4 Neodyum

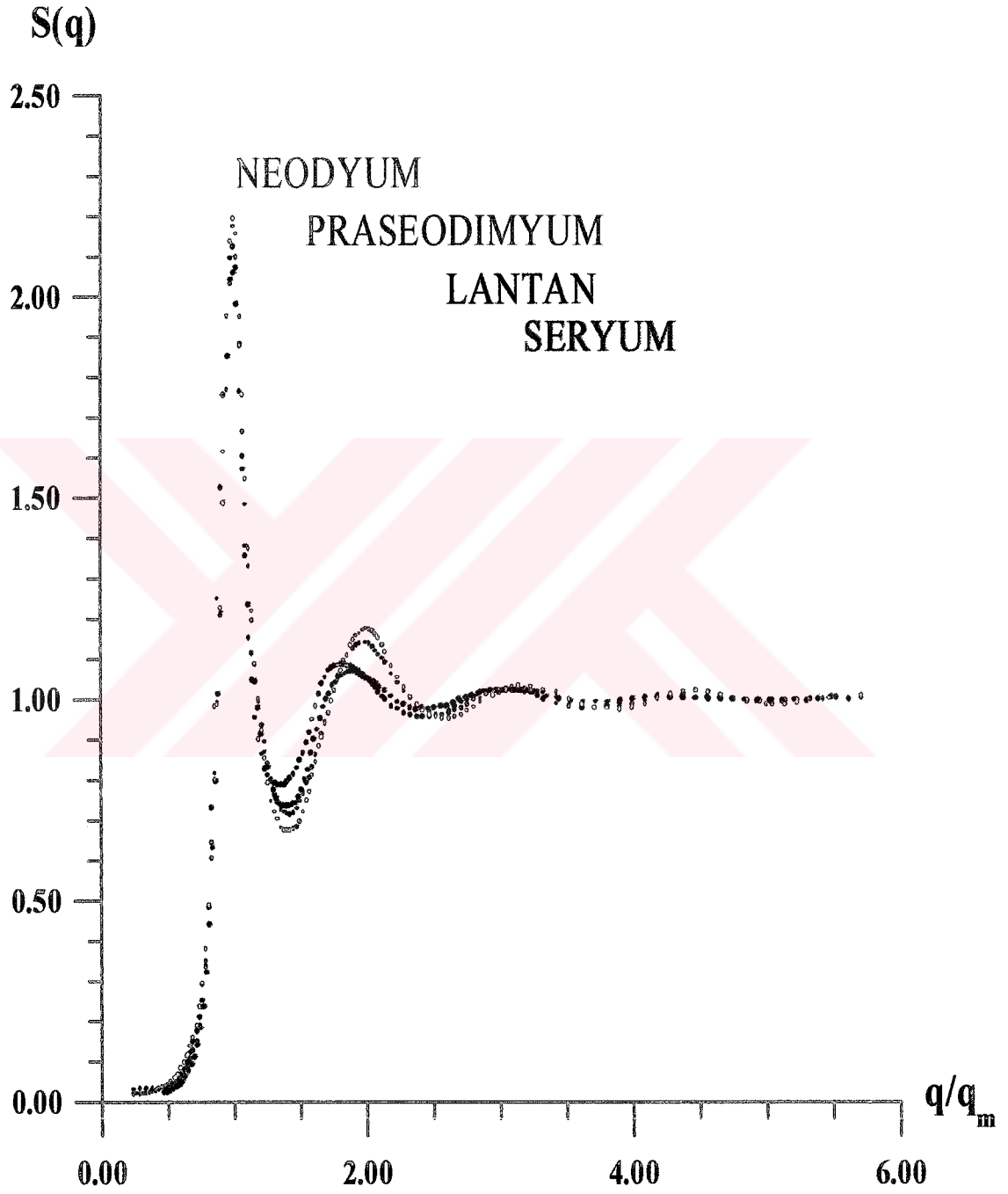
Neodyum metalinin radyal dağılım fonksiyonundan elde edilen $r_1 = 3.45$ dır ve buna bağlı olarak efektif katı küre çapı olarak $\sigma = 3.0131$ ve paketleme yoğunluğu $\eta = 0.4139$ değeri elde edilmiştir. Seryumun statik yapı faktörü $S(q)$ nun q ya göre değişimi “Şekil C.5” de verilmektedir. “Şekil C.6” de ise q/q_m oranına göre çizilen $S(q)$ grafiğinin deneysel sonuçlardan elde edilen grafiklerle karşılaştırması verilmiştir.

Bu dört metal kendi arasında deneysel değerlerle karşılaştırıldıktan sonra atom numaraları artarda gelen Lantan ile Seryumun “Şekil C.7” de TBP modeline göre ve “Şekil C.8” de ise deneysel verilere çizilen grafiği verilmiştir. Buna paralel olarak Prometyum ve neodyum metalleri içinde sırasıyla (C.9) ve (C.10) şekilleri verilmektedir.

Bu grafiklerin haricinde tüm metallerin bir arada gösterildiği yine TBP modeline ve deneysel verilere göre çizilen grafikler “Şekil 4.3” ve “Şekil 4.4” de verilmektedir. Grafikler incelendiğinde deneysel eğrilerle hesaplanan eğrilerin tam bir uyum içersinde olduğu görülmektedir.



Şekil (4.3) Atom numarası 57 ile 60 arasında değişen metallerin TBP modeline göre $S(q)$ yapı faktörünün q/q_m e göre değişimi.



Şekil (4.4) Atom numarası 57 ile 60 arasında değişen metallerin deneysel verilere göre $S(q)$ yapı faktörünün q/q_m e göre değişimi.

5. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu bölümde nadir toprak metallere La, Ce, Pr ve Nd nin ergime noktası civarında hesaplanan eşsıcaklık sıkıştırılabilirlik katsayısının r_c ye bağlı sayısal değerleri ile $S(q)$ yapı faktörünün birinci pikinin maksimum değerleri verilmektedir. (2.2.3) ve (2.2.4) denklemi referans [22] de verilen pseudopotansiyel parametrelerini içermektedir. Denklem (1.3) e göre hesaplanan $S(q)$ yapı faktörünün ergimiş La, Ce, Pr ve Nd için referans [31] de verilen metallere deneysel sonuçlara göre karşılaştırmasının yapıldığı grafikler “Şekil 4.2”, “Şekil 4.3” ve “Şekil 4.4” ile Ek-C de verilmektedir.

Seçilen pseudopotansiyel modelin ergimiş metallere yapısal bilgilerinden direkt olarak etkilendiği açıktır. Özellikle yapı faktörü piklerinin yeri ve yükseklikleri seçilen modelle doğrudan doğruya ilgilidir. Bu yüzden uygun olmayan potansiyel seçimi eğrilerde farklılığa sebep olmaktadır. Hesaplanan yapı faktörünün ilk pikinin deneysel verilere göre çizilen eğrinin yüksekliğindeki farklılık her bir sistem için %3 ile 7 arasında değişmektedir tablo (5.1) de piklerin maksimum değerleri gösterilmektedir. Ayrıca “Şekil (4.2)”, “Şekil (C.2)”, “Şekil (C.4)” ve “Şekil (C.6)” incelendiğinde referans [31] de bahsedildiği gibi metallere atom numarası büyüdükçe ikinci pikten itibaren teorik elde edilen pikin deneysel pikle daha uyumlu bir biçimde hızlı olarak sönümlendiği görülmektedir.

İkinci pik ise deneysel verilere göre sağa yada sola kaymaktadır. Bu kaymanın sebebi açık değildir. Fakat bu durumun sebebi seçilen potansiyelin şeklinin tam olarak gerçek potansiyeli vermemesiyle alakalı olabilir. Diğer taraftan eğrilerdeki bu farklılık deneysel verilerin elde edildiği faz ile bizim seçtiğimiz modele göre hesaplanan yapı faktörünün fazının aynı olmamasından kaynaklanabilir.

Tablo 5.1 Hesaplanan pikle deneysel elde edilen pikin karşılaştırılması

Saf Metal	TBP Modeline Göre Çizilen $S_0(q)$ Eğrisinin Birinci Pikinin Maksimumu	Deneysel Verilere Göre Çizilen $S_0(q)$ Eğrisinin Birinci Pikinin Maksimumu
La	2.061	2.123
Ce	2.156	2.058
Pr	2.074	2.174
Nd	2.038	2.195

“Tablo 5.1” den görüldüğü gibi TBP modeline göre çizilen $S(q)$ eğrisinin deneysel veriler dayanarak çizilen $S(q)$ eğrisi ile birinci piklerin maksimumundaki fark %3 ile 7 arasında değişmektedir. Değişim yüzdesindeki bu değer deneysel verilerle seçtiğimiz modele göre çizilen eğrinin birbiri ile uyumlu olduğunu göstermektedir.

Denklem (3.2.3) e göre hesapladığımız eşsıcaklık sıkıştırılabilirlik katsayısı χ_T , II. Bölümde hesaplamasını yaptığımız BHS pseudopotansiyeline göre referans [32] de verilen iyonik kabuk yarıçapı r_C değerleri alınarak hesaplanmıştır. Ayrıca karşılaştırma yapabilmek amacıyla hibretleşmiş sıkı bağlı serbest elektron modeline göre referans[33] de verilen r_C değerleriyle de eşsıcaklık sıkıştırılabilirlik katsayısı hesaplanmıştır. “Tablo 5.2” de Bu iki modelin iyonik kabuk yarıçapları alınarak hesaplanan eşsıcaklık sıkıştırılabilirlik katsayısı değerleri son olarak referans [34] de verilen Waseda’ nın tahmini değerleri ile karşılaştırılmıştır.

Tablo 5.2 Uygulamasını yaptığımız saf metaller için iyonik kabuk yarıçapına karşı eşsıcaklık sıkıştırılabilirlik katsayısı değerleri

Metal	R_c (a.b)		χ_T $[\text{cm}^2/\text{dyn}].10^{-12}$		
	Hachiya ve Yasuhiko [33]	Phillips ve Kleinman [32]	[33] Hesaplanan	[32] Hesaplanan	Waseda [34]
La	2.21	1.99	2.95 0	4.288	4.29
Ce	2.21	1.93	2.830	4.618	4.64
Pr	1.93	1.87	4.597	5.242	5.23
Nd	1.93	2.09	4.599	3.415	3.41

“Tablo 5.2” den görüldüğü gibi, farklı referanslarda verilen r_c yarıçaplarının değerleri için yapılan hesaplamalarda, eşsıcaklık sıkıştırılabilirlik katsayılarında belirgin bir biçimde sapma görülmektedir. Bunun nedeni, pseudopotansiyelin, r_c yarıçaplarına sıkı bir biçimde bağımlı olmasından kaynaklanmaktadır. Yani, referans [33] de kullanılan pseudopotansiyel modeli hibretleşmiş sıkı bağlı serbest elektron modeline iken, referans [32] de alınan r_c değeri ise bizim hesabını yaptığımız BHS pseudopotansiyelidir. Buradan da anlaşıldığı gibi χ_T katsayıları, şiddetle r_c lere bağımlıdır.

KAYNAKLAR

- [1] Hausleiter, C. ve Hafner, J 1988. Soft Reference System in Thermodynamic Variational Calculations. II. Liquid Transition Metals, *J.Phys.F*, **18**, 1025
- [2] Regnaut, C., 1989. Analysis of The Liquid Structure of 3d Transition Metals From The Wills-Harrison Model, *Z.Phys.B*, **76**, 179
- [3] Aryasetiawan, F., Silbert, M. ve Stott, M.J 1986. Structure and Thermodynamics Properties of Liquid Transition Metals, *J.Phys.F*, **16**, 1419
- [4] Bari, A. Das, T. ve Joarder, R.N., 1991. *J.Non Crys.Solid*, **136**, 173
- [5] Bhuiyan, G.M., Silbert, W ve Stott, M.J., 1996. Structure And Thermodynamics Properties of Liquid Transition Metals An Embedded-Atom Method Approach, *Phys.Rew.B*, **53**, 636
- [6] Cevizci, C. Hekimoğlu, M.D. Öcal M. ve Armağan, T, 2000. Investigation of The Static Properties in Liquid V, Nb and Ta, *Bulgarian J.Phys.* **27**, Suppl.2, 125
- [7] Waseda, Y. ve Ueno, S., 1987. *Sci.Rep.Res.Inst.Tohoku Univ.*, **34A**, 15
- [8] Matsuda, N., Mori, H. , Hoshino, K. ve Watabe, M., 1991 *J.Phys: Condens Matter*, **3**, 827
- [9] Bari, A., Pal P. ve Joarder, R.N., 1994. *Pramana, India* **42**, 395
- [10] Wills, J.M ve Harrison, W.A., 1983. Interionic Interactions in Transition Metals, *Phys.Rew.B*, **28**, 4363
- [11] Harrison, W.A., 1983. Electronic Structure of f-Shell Metals, *Phys.Rew.B*, **28**, 550
- [12] Harrison, W.A., 1984. Localization in f Shell Metals, *Phys.Rew.B*, **29**, 2917
- [13] Tamaki, S. ve Waseda, Y. 1976. Application of Hard Sphere Model to Thermodynamics Properties of Liquids, *J.Phys.F*, **6**, L89
- [14] Singh, H.B., 1983. Structure And Thermodynamics of The Classical One Component Plasma, *J.Stat.Phys.*, **33**, 371
- [15] Egelstaff, P.A., 1967. An Introduction to the Liquid State, Academic Press, London,
- [16] Koubaa, N. ve Gasser J.G, 1990. Interatomic Potentials of Alloys Obtained From Non Local Model Potentials III *J.Non Crys.Solid*, **117/118**, 316
- [17] Koubaa, N. ve Gasser, J.G., 1990. Analytical Screened Form Factor Obtained From Bachelet ,Hamann And Schluter Pseudopotential I, *J.Non Crys.Solid*, **117/118**, 308
- [18] Shimoji, M., 1977 Liquid metals, Academic Press London, Chapter 4,
- [19] Alonso, J.A ve March, N.H., 1989. Electrons in metals and alloys, Academic Press London, Chapter 4

- [20] Ichimaru S., ve Utsumi, K., 1981. Analytic Expression For Dielectric screening Function Of strongly Coupled Electron Liquids at Metallic And Lower Density *Phys.Rev.B*, **24-12**, 7385
- [21] Animalu, A.O.E., 1973. Electronic Structure of Transition Metals I. Quantum Defects And Model Potential *Phys.Rev.B*, **8/8**, 3542
- [22] Bachelet, G.B., Hamann, D.R. ve Shlüter, M., 1982 Pseudopotentials That Work –From H to P *Phys.Rev.B.*, **26/8**, 4199
- [23] Mouloupoulos, K., 2000 *J.Phys: Condens Matter* **12**, 1285
- [24] Bretonnet, J.L Bhuiyan, G.M. ve Silbert, M., 1992. Gibbs-Bogoliubov Variational Calculations For The Liquid Structure of 3d Transition Metals *J.Phys.Condens. Matter* **4**, 5359
- [25] Karmakar, A.K ve Joarder, R.N., 1998. Effective Pair Potential-Thermodynamic Calculation of 4f Liquid Metals *Phys.Stat.Sol.*, **207**, 19
- [26] Singh, H.B. ve Holz, A., 1983. Structure Factor of Liquid Alkali Metals *Phys.Rev.B.*, **28-2**, 1108
- [27] Armağan, T., 1986 Ergimiş Metal Bromür Tuzlarının Fiziksel Özellikleri, *Doktora Tezi*, İstanbul Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, İstanbul
- [28] March, N.H. The Liquid State, United Kingdom
- [29] Parrinello, M. ve Tosi, M.P., 1979. Analytic Solution of The Mean Spherical Approximation For A Multi Component Plasma, *Chemical Physics Letters* **64**, 3
- [30] Armağan, T. ve Öcal, M., 2000. Liquid Selenium As Electron –İon Plasma, *Balkan Phys. Letters*, **8**, 47
- [31] Waseda, Y., 1980 The Structure of Non-Crystalline Materials, Mc Graw-Hill, inc. U.S.A,
- [32] Das, T., Bari, A. ve Joarder, R.N., 1988. Compressibility & the Equation of State of Liquid Alkali Metals as Elektron-İon Plasmas, *Indian Journal of Pure Applied Physics*, **27**, 37
- [33] Hachiya, K. ve Yasuhiko, I., 1999. Interatomic Potentials For Rare-Earth Metals, *J.Phys.:Condens. Matter*, **11**, 6543
- [34] Waseda, Y., 2002. Özel İletişim

EK-A

(2.2.15) ve (2.2.16) denklemlerinin analitik çözümleri için X ve Y dönüşümleri yapılarak $\ell = 0, 1$ ve 2 değerleri için aşağıda ki formda yazılabilir.

$$X = e^{\left(\frac{-(K + K')^2}{4\alpha_i} \right)} \quad (A.1)$$

$$Y = e^{\left(\frac{-(K - K')^2}{4\alpha_i} \right)} \quad (A.2)$$

$\ell = 0$ için:

$$I_0(K, K') = \frac{1}{4KK'} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i}} (Y - X) \quad (A.3)$$

$$J_0(K, K') = \frac{1}{16KK'} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i^5}} \{ [2\alpha_i - (K - K')^2] Y - [2\alpha_i - (K + K')^2] X \} \quad (A.4)$$

$\ell = 1$ için:

$$I_1(K, K') = \frac{1}{4KK'} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i}} (Y + X) - \frac{1}{2K^2 K'^2} \sqrt{\pi \alpha_i} (Y - X) \quad (A.5)$$

$$J_1(K, K') = \frac{1}{4K^2 K'^2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i}} (Y - X) + \frac{1}{16KK'} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i^5}} \{ [2\alpha_i - (K + K')^2] X - [2\alpha_i - (K - K')^2] Y \}$$

$$- \frac{1}{8KK'^2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i^3}} [(K + K')X + (K' - K)Y] - \frac{1}{8K^2 K'} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i^3}} [(K + K')X + (K - K')Y] \quad (A.6)$$

EK A

$\ell = 2$ için:

$$I_2(K, K') = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i}} (Y - X) \left(\frac{1}{KK'} + \frac{12\alpha_i^2}{K^3 K'^3} \right) - \frac{3}{2K^2 K'^2} \sqrt{\pi \alpha_i} (Y + X) \quad (A.7)$$

$$\begin{aligned} J_2(K, K') = & \frac{3}{4KK'} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i}} (Y - X) \left(\frac{6\alpha_i}{K^2 K'^2} + \frac{1}{K^2} + \frac{1}{K'^2} \right) + \frac{9}{4K^2 K'^2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i}} (Y + X) \\ & + \frac{3}{8KK'^2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i^3}} [(K + K')X - (K' - K)Y] + \frac{3}{8K^2 K'} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i^3}} [(K + K')X - (K - K')Y] \\ & + \frac{1}{16KK'\alpha_i^2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_i^5}} \{ [2\alpha_i - (K - K')^2]Y + [2\alpha_i - (K + K')^2]X \} \end{aligned} \quad (A.8)$$

Tablo B.1 Lantan saf metali için pseudopotansiyel parametreler

Atom	Z_a	Z_v	L	α_1	α_2	α_3	c_1	c_2	c_3	c_4	c_5	c_6
LANTAN	57	11	Core	5.00	2.00		3.2494	-2.2492				
			0	2.56	2.79	3.40	-	0.0617	0.0545	0.2446	-0.0025	-0.0350
			1	2.55	3.03	3.81	-	0.4797	-0.1510	0.1225	0.0262	-0.0149
			2	1.50	2.79	3.32	-8.3844	-1.8837	-0.3217	0.0580	0.0317	0.0179
			3	4.64	9.39	30.90	5.0661	3.1425	-0.7802	0.4424	-0.5445	0.1727

Tablo B.2 Seryum saf metali için pseudopotansiyel parametreler

Atom	Z_a	Z_v	L	α_1	α_2	α_3	c_1	c_2	c_3	c_4	c_5	c_6
SERYUM	58	12	Core	5.32	2.13		3.0538	-2.0538				
			0	2.95	3.31	3.97	-	0.5418	0.0545	0.2446	-0.0025	-0.0350
			1	2.66	3.16	3.95	-	0.4195	-0.1510	0.1225	0.0262	-0.0149
			2	1.59	2.92	3.40	-8.5474	-1.9114	-0.3217	0.0580	0.0317	0.0179
			3	5.44	11.16	38.88	5.5065	3.1187	-0.7802	0.4424	-0.5445	0.1727
							11.2263					
							10.2554					

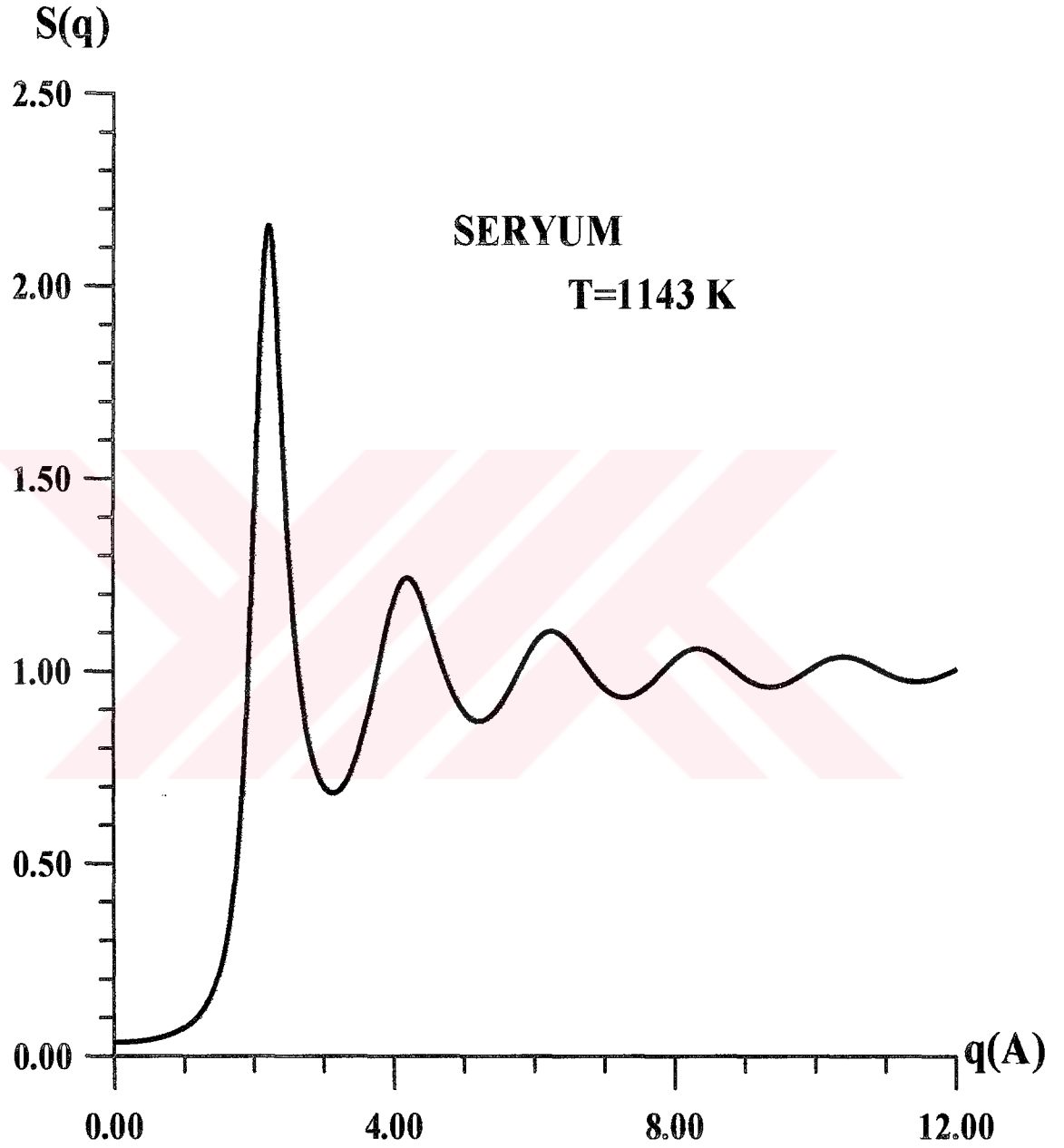
Tablo B.3 Prometyum saf metali için pseudopotansiyel parametreler

Atom	Z_a	Z_v	L	α_1	α_2	α_3	c_1	c_2	c_3	c_4	c_5	c_6
PROMETYUM	59	13	Core	5.53	2.21		2.8422	-1.8422				
			0	2.95	3.45	4.30	-	0.2599	0.0406	0.2377	0.0132	-0.0307
			1	2.79	3.28	4.05	-	0.4690	-0.1388	0.1338	0.0305	-0.0182
			2	0.83	1.27	3.92	-7.3276	-4.5230	-1.9614	-0.0697	0.0353	0.0202
			3	5.48	12.47	36.99	5.7790	3.5755	-0.8505	0.03427	-0.4913	0.0987
							11.2831					
							10.2961					

Tablo B.4 Neodyum saf metali için pseudopotansiyel parametreler

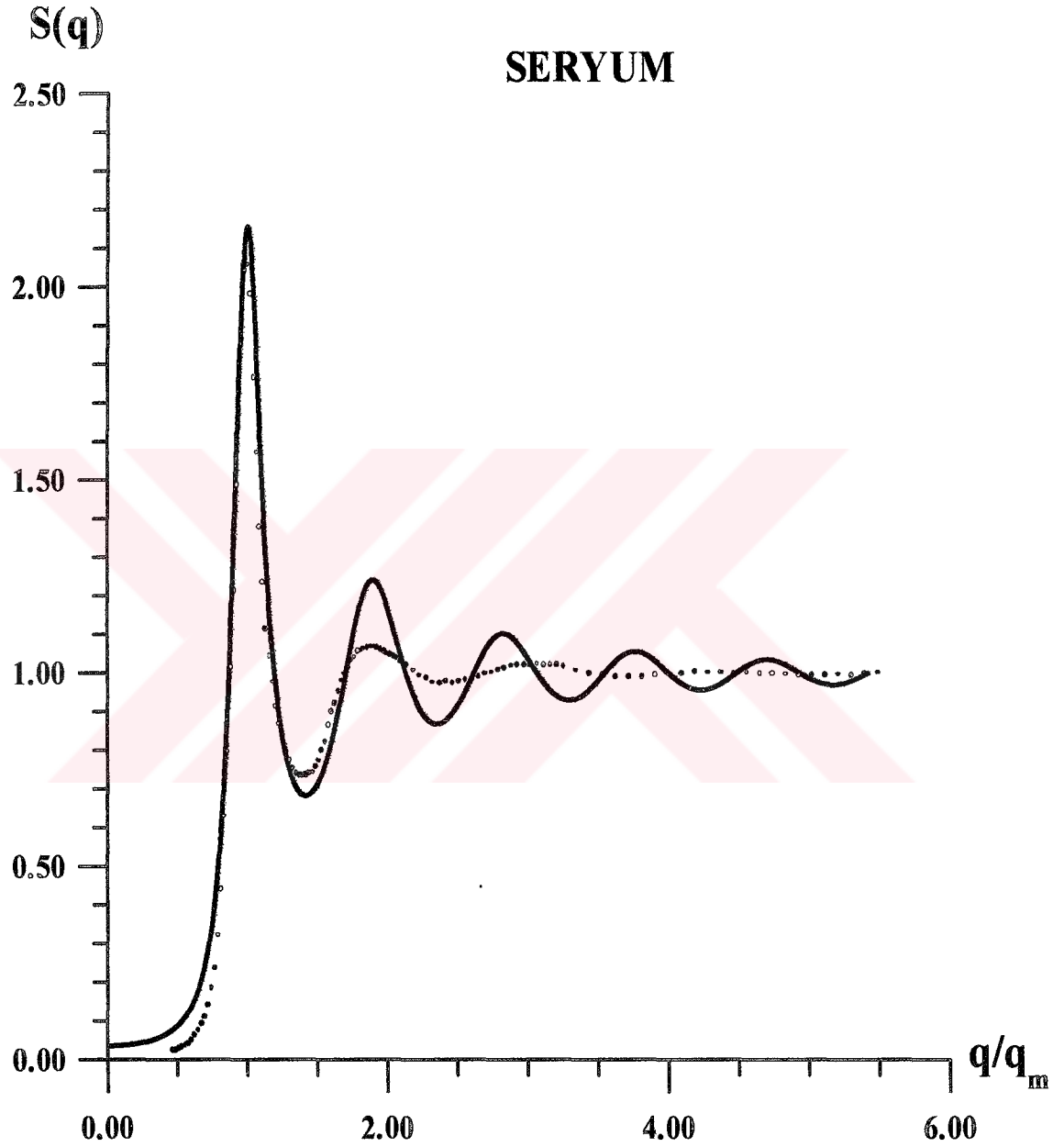
Atom	Z_a	Z_v	L	α_1	α_2	α_3	c_1	c_2	c_3	c_4	c_5	c_6
NEODYUM	60	14	Core	5.69	2.28		2.6639	-1.6639				
			0	3.07	3.62	4.52	-11.281	0.2837	0.0442	0.2418	0.0171	-0.0362
			1	2.85	3.39	4.25	10.3011	0.3799	-0.1090	0.1422	0.0351	-0.0236
			2	0.96	1.20	3.92	-7.6071	-4.0643	-2.0017	-0.0662	-0.0387	-0.0086
			3	5.67	13.03	39.55	5.9335	3.6380	-0.8933	0.3147	-0.6081	0.2074

EK C



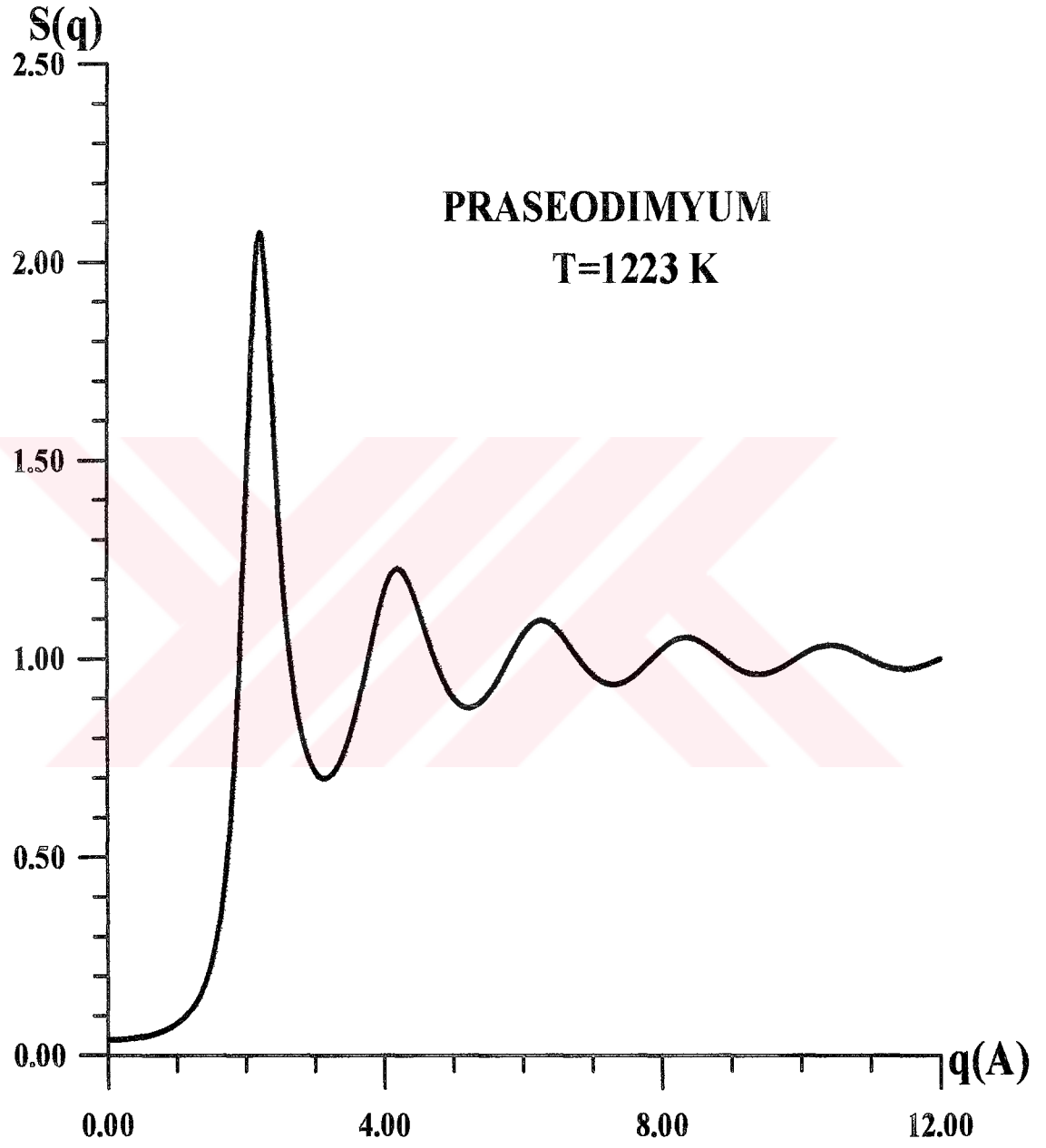
Şekil (C.1) T = 1143 °K Seryumun S(q) yapı faktörünün q ya göre değişimi.

T.C. YÜKSEKÖĞRETİM KURULU
DOKÜMANTASYON MERKEZİ

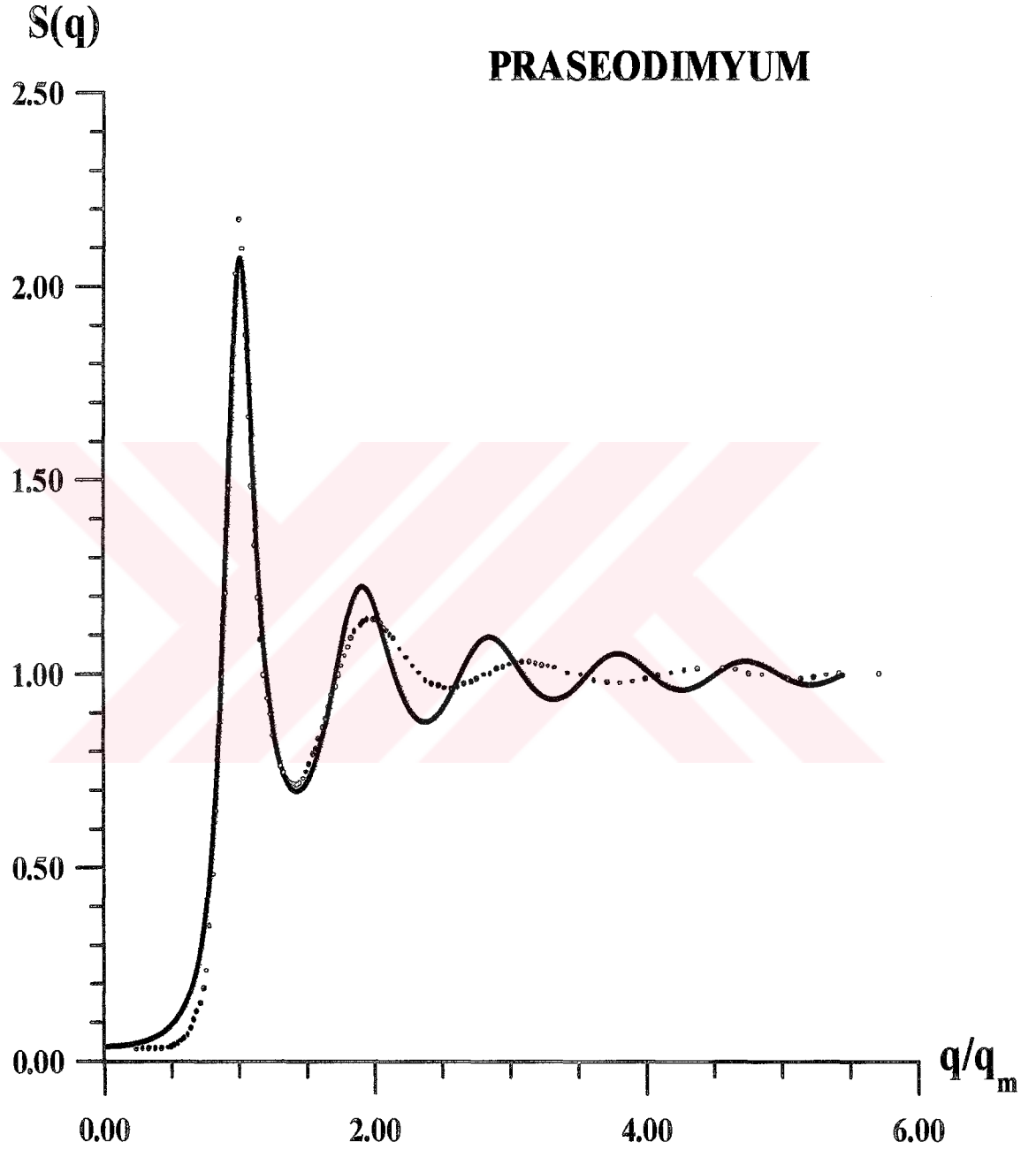


Şekil (C.2) $T = 1143 \text{ }^{\circ}\text{K}$ Seryumun $S(q)$ yapı faktörünün q/q_m ye göre değişimi. Kalın çizgi TBP modeline göre, noktalı çizgi ise deneysel verilerden elde edilen statik yapı faktörüdür.

EK C

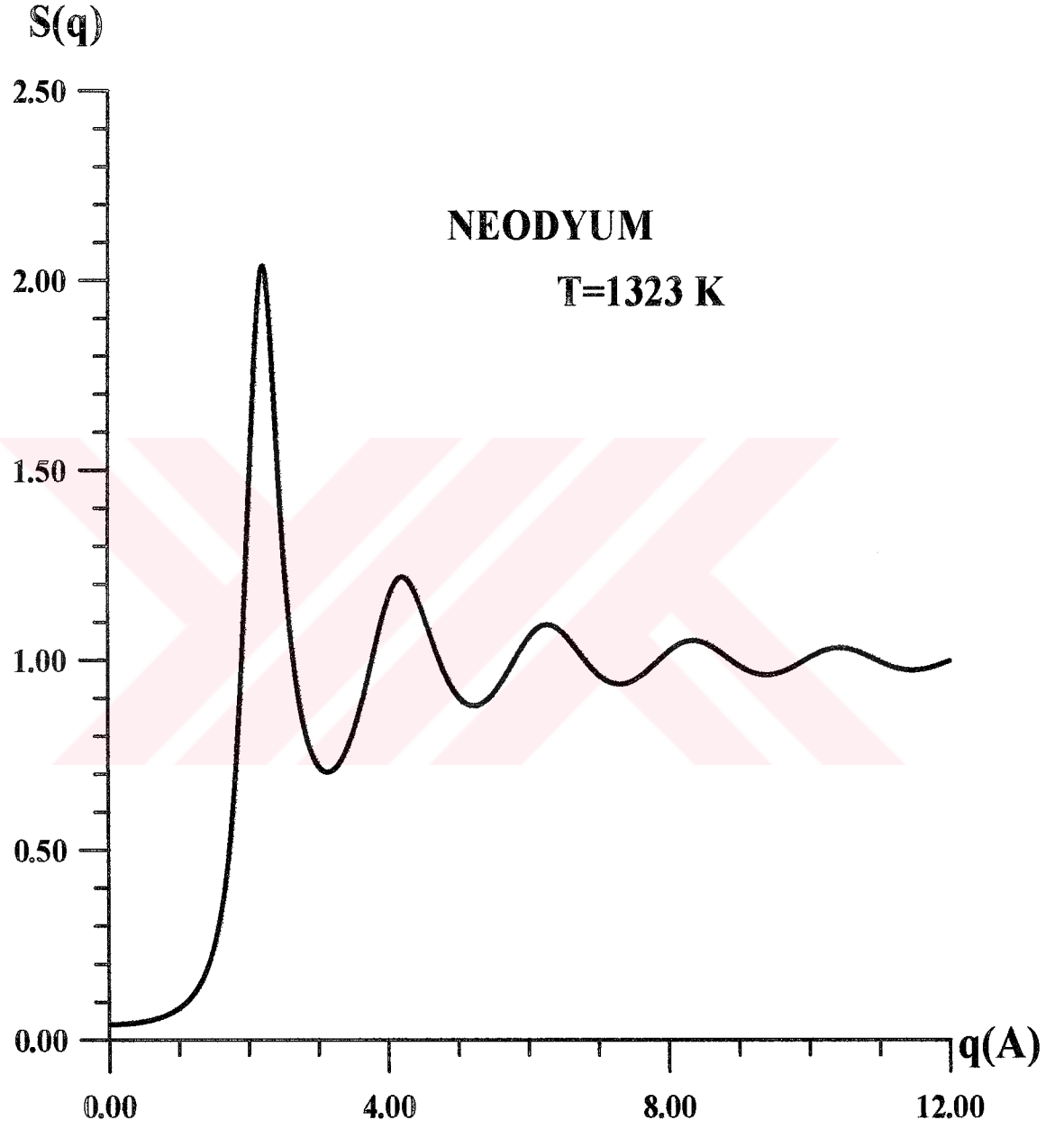


Şekil (C.1) T = 1223 °K Prometyumun S(q) yapı faktörünün q ya göre değişimi.

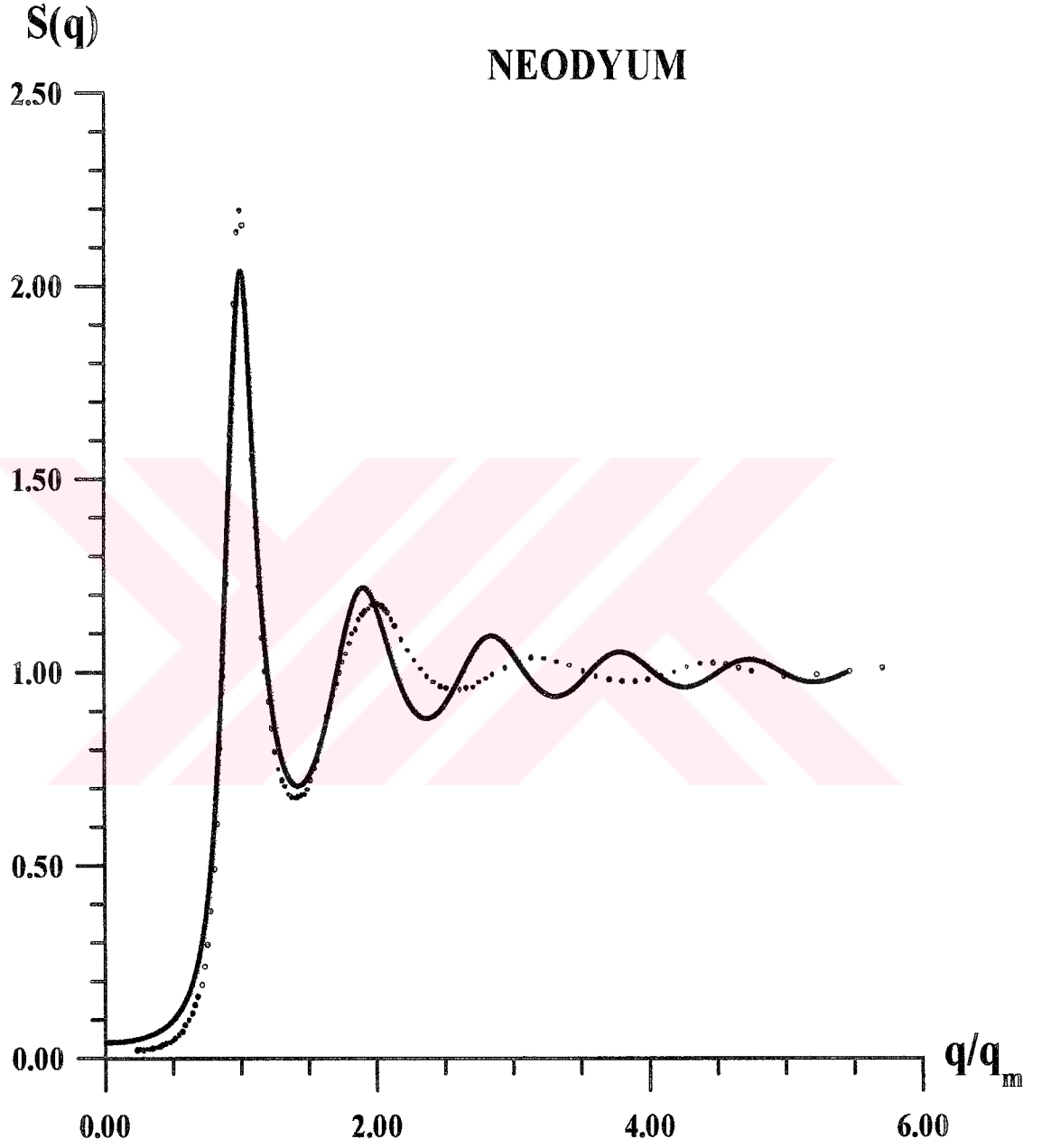


Şekil (C.4) $T = 1223 \text{ }^{\circ}\text{K}$ Prometyumun $S(q)$ yapı faktörünün q/q_m ye göre değişimi. Kalın çizgi TBP modeline göre, noktalı çizgi ise deneysel verilerden elde edilen statik yapı faktörüdür.

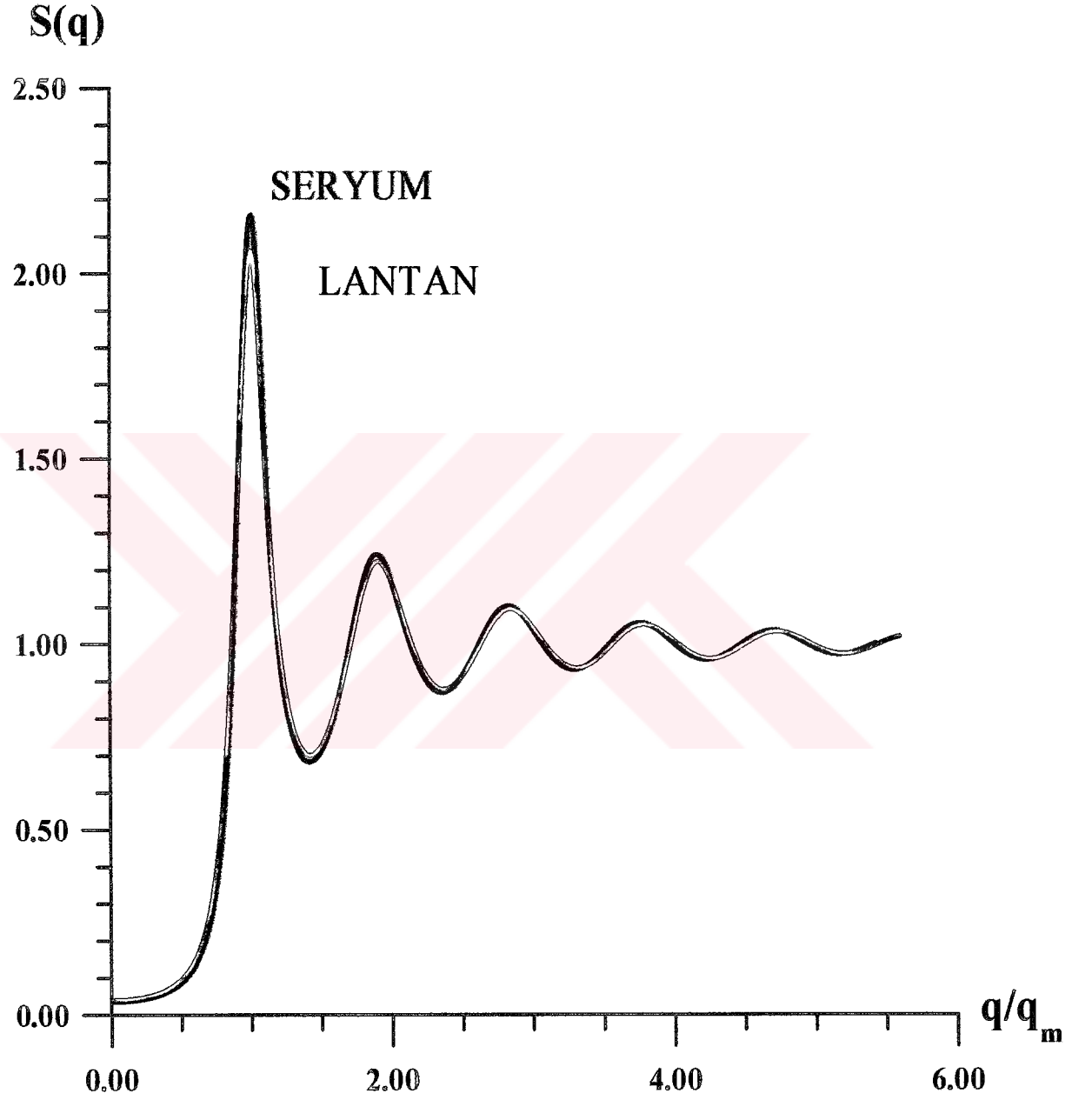
EK C



Şekil (C.5) $T = 1323 \text{ }^{\circ}\text{K}$ Neodyyumun $S(q)$ yapı faktörünün q ya göre değişimi.

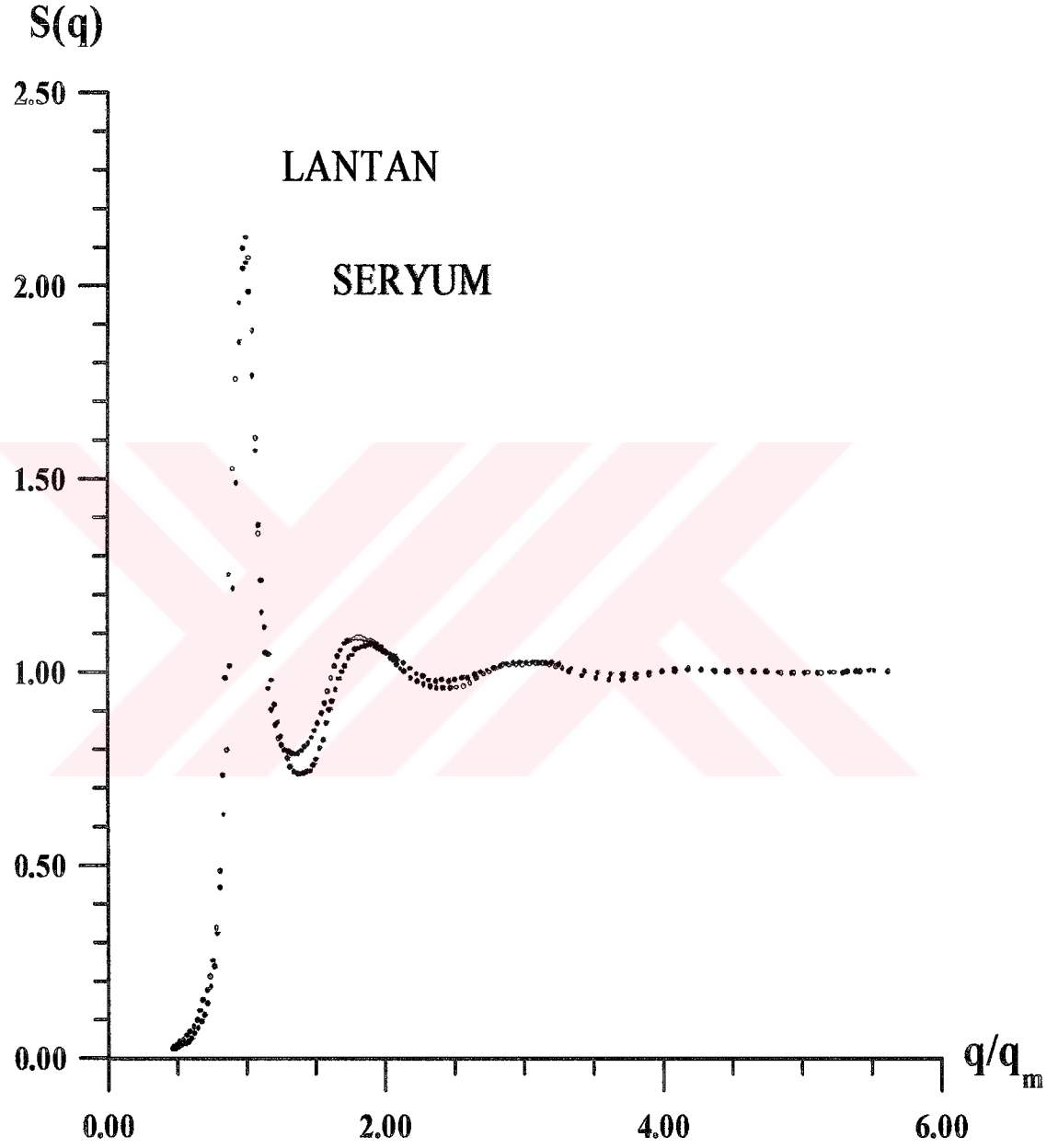


Şekil (C.6) $T = 1323 \text{ }^{\circ}\text{K}$ Prometyumun $S(q)$ yapı faktörünün q/q_m ye göre değişimi. Kalın çizgi TBP modeline göre, noktalı çizgi ise deneysel verilerden elde edilen statik yapı faktörüdür.

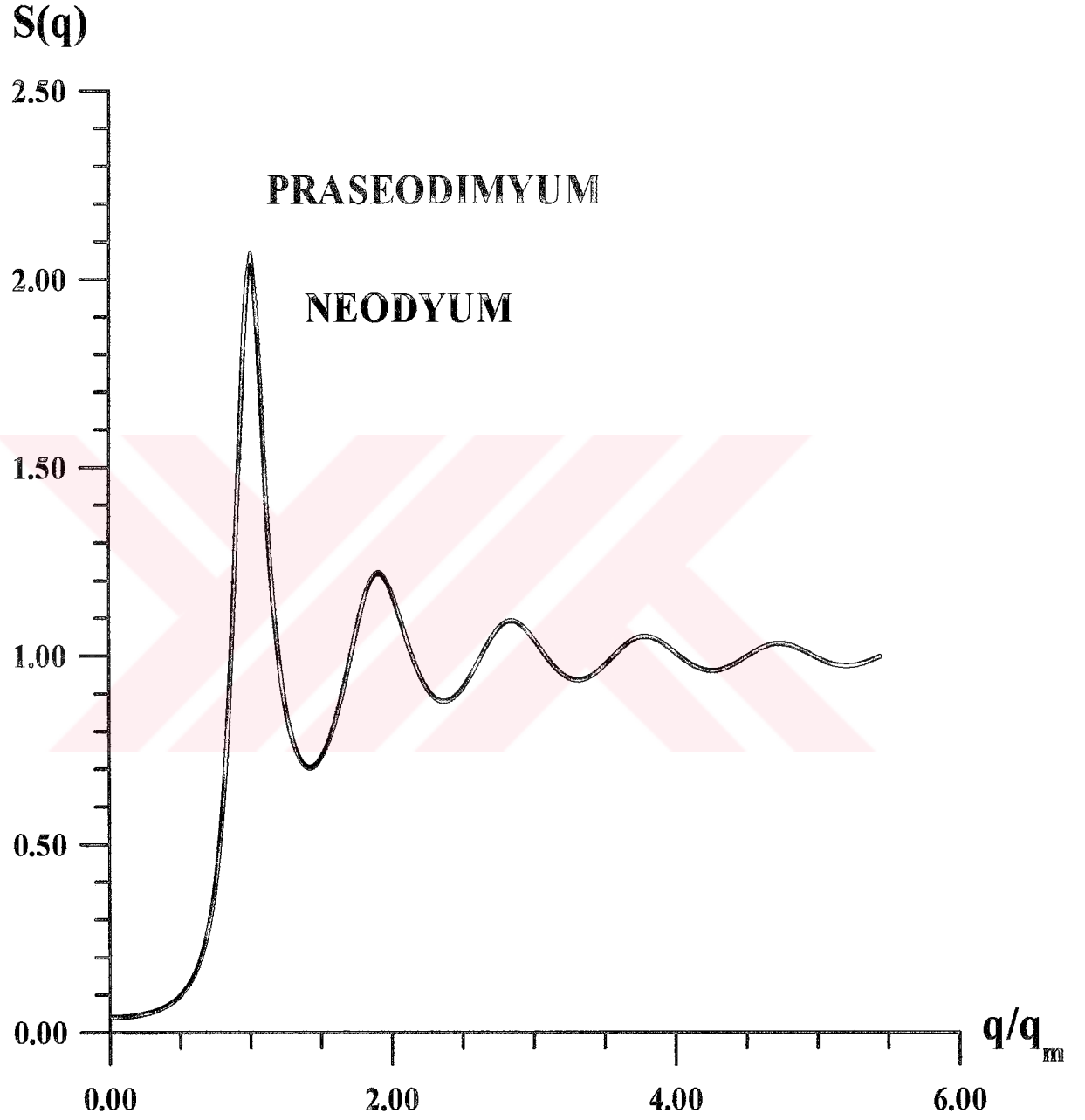


Şekil (C.7) Atom numaraları sırasıyla artarda gelen La ve Ce metallerinin TBP modeline göre $S(q)$ yapı faktörünün q/q_m ye göre değişimi.

EK C

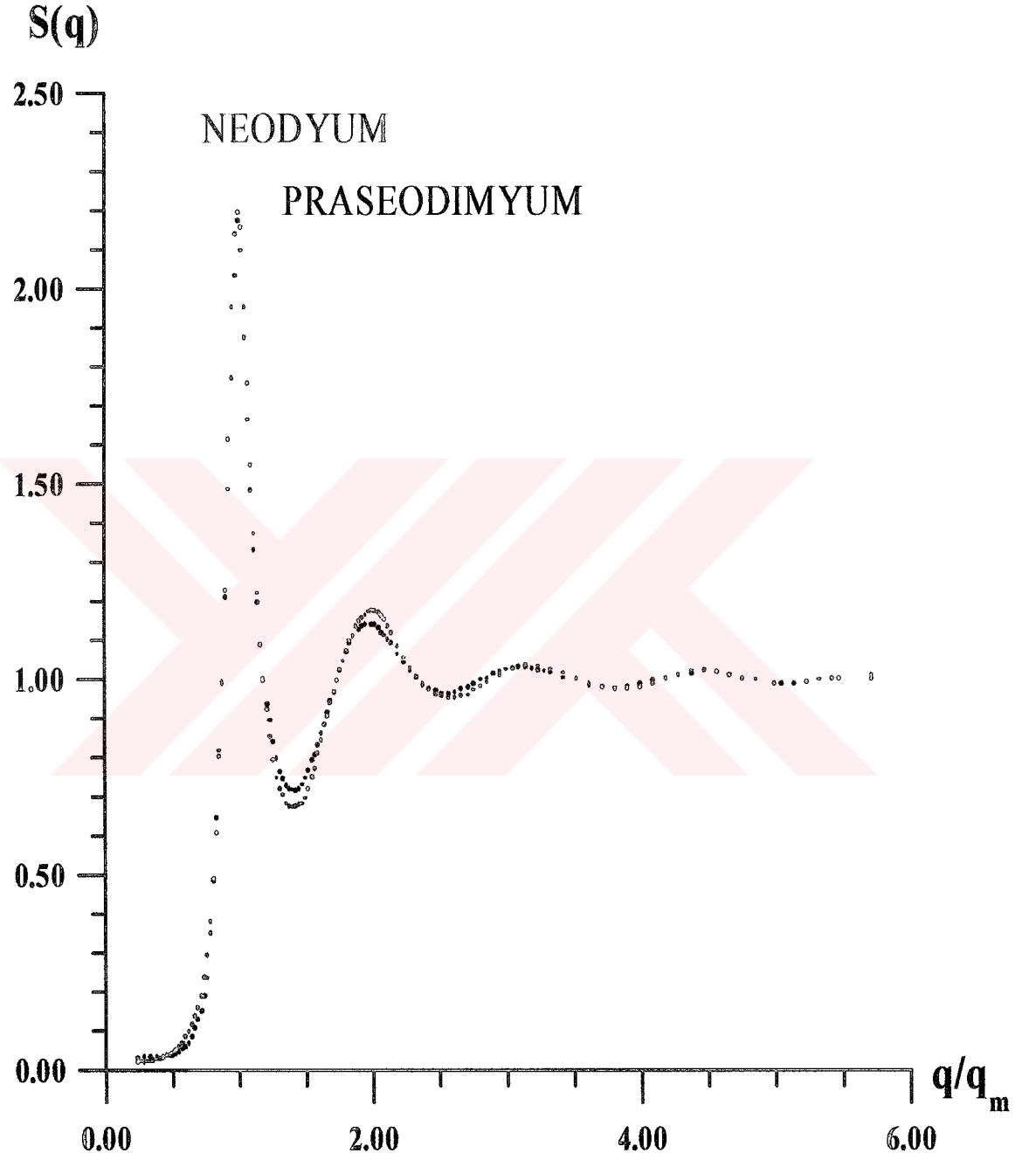


Şekil (C.8.) La ve Ce metallerinin deneysel verilere göre $S(q)$ yapı faktörünün q/q_m ye göre değişimi.



Şekil (C.9) Pr ve Nd metallerinin TBP modeline göre $S(q)$ yapı faktörünün q/q_m ye göre değişimi.

EK C



Şekil (C.10) Pr ve Nd metallerinin deneysel verilere göre $S(q)$ yapı faktörünün q/q_m ye göre değişimi.

ÖZGEÇMİŞ

1972 yılında İstanbul' da doğdu. İlk, orta ve lise öğrenimini İstanbul' da tamamladı. 1995 yılında İstanbul Teknik Üniversitesi Fizik Mühendisliği bölümünü bitirdi. 1997 yılında Hava Kuvvetleri Komutanlığı'nda Teğmen rütbesi ile göreve başladı. Halen Hava Harp Okulu Dekanlığı Fen Bilimleri Bölümünde Üsteğmen rütbesi ile fizik öğretmeni olarak görev yapmaktadır.

Investigation Of The Static Properties in Liquid V, Nb ve Ta adlı makalesi 2000 yılında Bulgarian J.Phys.27, Suppl.2, 125 de yayınlanmıştır.

T.C. YÜKSEKÖĞRETİM KURULU
DOKÜMANTASYON MERKEZİ