

İkinci Virial Katsayısının Morse Potansiyeli ile Analitik Hesaplanması ve Nötral Soygaz Atomlarına Uygulanması

Bahtiyar Mehmetoğlu^{1*} and Hatun Cacın^{1,2+}

¹Gaziosmanpaşa Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü.

²Giresun Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü.

*Corresponding Author: bahtiyar.mehmetoglu@gop.edu.tr

+Speaker: hatuncacan@gmail.com;

Presentation/Paper Type: Oral / Full Paper

Abstract- The noble gas plasmas have significant importance due to their high ionization energies requiring high temperature plasma investigation of neutral atom interactions through an analytical calculation of the second virial coefficient (SVC) with preferably Morse potential. The results of the calculations are very important for further investigation of the thermodynamical properties of plasmas by using the Generalized Chemical Model which has significant importance for low density partially ionized plasmas. The SVC data are taken up to a specific temperature for every noble gas due to absence of neutral atoms in the plasma after that specific value of the temperature. Results are compared with another analytical method from the literature as well as numerical results. Although some small deviations are found between the two analytical calculations of the SVC for *B* and *Si* semiconductors, results for the noble gases *He*, *Ne*, *Ar*, *Kr* and *Xe* are exactly the same. The maximum percent error found to be % 0.0074 between analytical and numerical value for *He* gas at 21000 K for the noble gases, approving the success of the new analytical method. The reason for this specific low percent error for the noble gases might be due to the small potential well depth values for the noble gases which is one of the Morse parameters effecting the calculations.

Keywords- Noble Gas Plasmas, Second Virial Coefficient, Morse Potential

Özet- Soygazlar yüksek iyonlaşma enerjileri nedeniyle yüksek sıcaklıklarda bile nötral atom içerebilmekte ve bu nötral etkileşimlerin termodinamik özellikler açısından incelenebilmesi bu çalışmada Morse potansiyeli kullanılarak elde edilen ikinci virial katsayısı (İVK) analitik hesabı ile mümkün olabilmektedir. Elde edilen analitik sonuçlar hem gazlar hem de genelleştirilmiş kimyasal modellerle incelenen kısmi iyonize plazmaların nötral etkileşimlerindeki termodinamik hesaplamaların doğru ve kesin sonuçlarla elde edilmesinde çok önemlidir. Plazmalarda nötral etkileşimler için İVK değerlerinin belli bir maksimum sıcaklık değerine kadar alınması, daha yüksek sıcaklık değerlerinde nötral atomların bulunmamasından kaynaklanmaktadır. Her sıcaklık için elde edilen sonuçlar literatürden bulunan farklı bir analitik sonuçla ve ayrıca nümerik sonuçlarla mukayese edilmiştir. Soygazlar için karşılaştırılan iki analitik sonucun tamamıyla aynı değerler vermesi ve nümerik sonuç ile mukayese sonucu ise maksimum yüzde hata değeri % 0.0074 olarak *He* gazı için 21000 K sıcaklığında gözlenmiş ve sonuçlar elde edilen yeni analitik yöntemin doğruluğunu kanıtlamıştır.

Anahtar Kelimeler- İkinci virial katsayısı; Morse potansiyeli; plasma; yüksek sıcaklık gaz

1. Giriş

İdeal olmayan gazlar için hal denklemi yoğunluğa bağlı virial açılımı denklemiyle verilir [1]. İVK ise bu açılımda ideal durumdan sapma miktarını gösteren ilk terim olarak gazların ve kısmi iyonize plazmaların termodinamik özelliklerinin belirlenmesinde önemli rol oynar [2]. Soygazların termodinamik özellikleri hem deneysel hem de teorik birçok araştırmanın konusu olmuştur. Normal koşullarda dielektrik olan soygazlar, yüksek basınç altında yüksek iyonlaşma enerjileri düşürülerek minimum metalik iletkenlik durumuna ulaşabilirler [3]. Dielektrik-metal geçişi veya basınç iyonizasyonu olarak adlandırılan bu etki kısmi iyonize plazmalarda genelleştirilmiş kimyasal model kullanılarak araştırılır. Bu modelde ise özellikle nötral atom etkileşimlerinde İVK hesabı çok önemli bir yer tutar. İyonlaşma enerjisi düşük olan metal plazmalarda nötral etkileşimler gözardı edilebilirken [4], soygazlarda özellikle yüksek basınç altında atom-atom etkileşimleri önemli bir yer tutar [5].

Bu çalışmada dikkate alınan maximum sıcaklık değerleri I iyonlaşma enerjisini temsil etmek üzere bağlı durumların hala bulunabildiği $T < \frac{I}{10 k_B}$ ifadesiyle verilen sıcaklıklar için hesaplanmıştır (I değerleri NIST atomik spektra veritabanından alınmıştır) [6]. Belirlenen maksimum sıcaklıklar dikkate alınarak *He*, *Ne*, *Ar*, *Kr* ve *Xe* soygazları için Morse potansiyeli kullanılarak İVK

$$U(r) = D\{\exp[-2\alpha(r - r_e)] - 2\exp[-\alpha(r - r_e)]\}. \quad (4)$$

(4) eşitliğinde kendini gösteren Morse parametreleri Tablo. 1’de verilmiştir.

Table 1. Morse potansiyeli parametreleri [10].

	D/k_B K	r_e Å	α Å^{-1}
<i>He</i>	12.6	2.92	2.197
<i>Ne</i>	51.3	3.09	2.036
<i>Ar</i>	118.1	4.13	1.253
<i>Kr</i>	149.0	4.49	1.105
<i>Xe</i>	226.9	4.73	1.099

(3) ifadesini yeniden oluşturmak için Ref.[10]’da önerilen eşitlikler (5)’de verilmiş ve (3) ifadesi (6) eşitliğinde yeniden oluşturulmuştur.

$$p = D/(k_B T), b = \sqrt{p} \exp(\alpha \cdot r_e),$$

$$x = b \cdot \exp(-\alpha \cdot r) \quad (5)$$

$$B(T) = -\frac{4\pi N_A}{3\alpha^3} \int_b^0 (\sqrt{p} - x)(e^{-x^2 + 2x\sqrt{p}}) \left(\ln \frac{x}{b}\right)^3 dx. \quad (6)$$

(6) eşitliğinin analitik çözümü için üçüncü derece Binom açılımı ve (7) ifadesindeki eksponansiyel seri açılım formülü kullanılmıştır.

değerleri farklı sıcaklıklarda analitik olarak hesaplanmış ve sonuçlar hem farklı bir analitik hem de numerik İVK değerleriyle mukayese edilmiştir.

2. Tanımlar ve Hesaplamalar

Virial hal denklemi birim hacmin kuvvetleri şeklinde (1) denkleminde verilir [7].

$$\frac{pV}{RT} = Z = 1 + \frac{B(T)}{V} + \frac{C(T)}{V^2} + \dots, \quad (1)$$

Burada Z sıkıştırılabilirlik faktörü, $B(T)$ ise İVK olarak ifade edilir. İVK ise sıcaklığa ve $U(r)$ atomlar arası potansiyel fonksiyonuna bağlı olarak aşağıda verilir.

$$B(T) = -2\pi N_A \int_0^\infty [e^{-U(r)/k_B T} - 1] r^2 dr, \quad (2)$$

(2) ifadesinde N_A Avagadro sayısı ve k_B ise Boltzman sabitini gösterir. (2) ifadesine eşdeğer bir başka denklem (3) ifadesinde verilmiştir [8].

$$B(T) = -\frac{2\pi N_A}{3k_B T} \int_0^\infty \frac{dU(r)}{dr} e^{-U(r)/k_B T} r^3 dr. \quad (3)$$

(3) ifadesinde kullanılacak olan Morse potansiyeli (4)’de verilmiş olup üstel ilk terim Pauli etkileşim prensibi nedeniyle oluşan atomlar arası itme kuvvetini, ikinci üstel ifade ise çekici etkiyi temsil eder [9].

$$e^{\pm x} = \sum_{i=0}^{\infty} (\pm 1)^i \frac{x^i}{i!}. \quad (7)$$

Elde edilen analitik çözüm gama, tamamlanmamış gama, poligama ve Meijer’in G fonksiyonlarını ihtiva etmektedir [11].

3. Sonuç ve Değerlendirme

Bu çalışmadaki analitik çözüm bir uygulama ve karşılaştırma olarak Tablo.1’de verilen Morse potansiyeli parametreleri kullanılarak farklı sıcaklıklarda İVK değerleri *He*, *Ne*, *Ar*, *Kr* ve *Xe* soygazları için elde edilmiş ve bu değerler hem numerik hemde literatürden başka bir analitik çözüm (Ref.[10]) ile karşılaştırıldığında sonuçların bu çalışmadaki analitik çözümü doğrular nitelikte olduğu gözlemlenmiştir. İki analitik çözümün İVK değerleri tamamen aynı iken, numerik değerden en yüksek sapma yüzde hatası % 0.0074 değeri ile *He* gazında 21000 K değerinde gözlenmiştir. Bu küçük sapma değerleri elde edilen analitik yöntemin hem gazlar hemde plazmalarda termodinamik özelliklerin doğru hesaplanmasında çok önemli olan Morse potansiyeli kullanılarak İVK hesaplamalarının doğru ve güvenilir olduğunu göstermiştir.

Kaynaklar

- [1] I. G. Kaplan, Intermolecular Interactions: Physical picture, Computational Methods and Model Potentials, John Wiley & Sons, 2006.
- [2] D. A. McQuarrie, Statistical Mechanics, Harper & Row, 1976.
- [3] V. E. Fortov ark., JETP 97, 259 (2003).
- [4] E. M. Apfelbaum, Contr. Plasma Phys. 52, 41 (2012).
- [5] E. M. Apfelbaum, Contr. Plasma Phys. 51, 395 (2011).
- [6] W. Ebeling, V. E. Fortov ve V. Filinov. Quantum Statistics of Dense Gases and Nonideal Plasmas, Springer, 2017.
- [7] R. G. Kunz ve R. S. Kapner, J. Chem. Eng. Data. 14, 190 (1969).
- [8] P. Vargas, E. Muñoz ve L. Rodriguez, Physica A. 290, 92 (2001).
- [9] I. F. Al-Maaitah, Appl. Phys. Res. 10, 1 (2018).
- [10] A. Matsumoto, Z. Naturforsch. 42 a, 447 (1987).
- [11] I. S. Gradshteyn ve I. M. Ryzhik, Table of Integrals, Series and Products, Academic Press, London 1965.