

**1-10⁴ K ARASINDAKİ DÜŞÜK YOĞUNLUKLU ³He, ⁴He, EŞDEĞER
KARIŞIMININ TERMOFİZİK ÖZELLİKLERİNİN VE İKİNCİ VİRİAL
DEĞERLERİNİN HESAPLANMASI**

Alaiddin YILMAZ

Zonguldak Karaelmas Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalında

Doktora Tezi

Olarak Hazırlanmıştır

ZONGULDAK

Haziran 2006

KABUL:

Alaiddin YILMAZ tarafından hazırlanan “ $1-10^4$ K ARASINDAKİ DÜŞÜK YOĞUNLUKLU ^3He , ^4He , EŞDEĞER KARIŞIMININ TERMOFİZİK ÖZELLİKLERİNİN VE İKİNCİ VİRİAL DEĞERLERİNİN HESAPLANMASI” başlıklı bu çalışma jürimiz tarafından değerlendirilerek, ZKÜ Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında Doktora tezi olarak oy birliğiyle kabul edilmiştir. 19/06/2006

Başkan : Prof.Dr. Etem KIŞIOĞLU (ZKÜ)



Üye : Prof.Dr. Dilek D.PAKTAŞ (ZKÜ)



Üye : Prof.Dr. Meral HOŞCAN (KOÜ)



Üye : Prof.Dr. Mustafa TAN (GÜ)



Üye : Prof.Dr. Hasan AKBAŞ (TÜ)



ONAY:

Yukarıdaki imzaların, adı geçen öğretim üyelerine ait olduğunu onaylarım. 18/07/2006



Prof. Dr. İhsan TOROĞLU
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

ÖZET

Doktora Tezi

1-10⁴ K ARASINDAKİ DÜŞÜK YOĞUNLUKLU ³He, ⁴He, EŞDEĞER KARIŞIMININ TERMOFİZİK ÖZELLİKLERİNİN VE İKİNCİ VİRİAL DEĞERLERİNİN HESAPLANMASI

Alaiddin YILMAZ

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Etem KİŞİOĞLU

Haziran 2006, 93 Sayfa

Soğutma endüstrisinde, magnetohitrodinamik güç sistemlerinde, bazı tip yarıiletkenlerin üretiminde, elektriksel güç üretme sistemlerinde ve itme gücüyle çalışan yakıt sistemlerinde kullanılan akışkanlardan bazıları ozon tahrip edici olduklarından (kloroflorokarbon ve türevleri) kullanım için elverişli değildir. Bunlardan bazıları da moleküler yapıları nedeniyle ozon tahrip edici olmadıklarından çevre kirliliği açısından kullanıma daha elverişlidirler. Bu nedenle ozon tahrip edici gazların yerine, günümüzde yukarıda bahsedilen teknolojik ve bilimsel çalışmalarda soğutucu ve itici akışkanlardan olan ³He, ⁴He veya bunların eşdeğer karışımlarının kullanılması çalışmaları başlatılmıştır. Bu çalışmalar doğrultusunda varılan bazı sonuçlara göre ³He, ⁴He veya bunların eşdeğer karışımlarının çok düşük sıcaklık aralığında kullanılabileceği gibi, yüksek sıcaklık (10⁴ K gibi) aralığında da kullanılabileceği araştırmacılarca belirtilmiştir.

Günümüzde, ³He, ⁴He veya bunların eşdeğer karışımlarının teknolojik ve bilimsel araştırmalarda kullanılabilmeleri için, termofiziksel özelliklerinin duyarlı ve belirsizliği en

ÖZET(devam ediyor)

az olacak şekilde belirlenmesi gerekir. Bu nedenle, bu akışkanların termofiziksel özelliklerin belirlenmesinde kullanılan kuantum mekaniksel $\Omega^{(n,s)}$ çarpışma integrali bağıntısının ve termodinamik fonksiyonların hesaplanmasında kullanılan kuantum mekaniksel ikinci virial $B(T)$ bağıntısının da duyarlı olarak belirlenmesi gerekmektedir. Bu yapılan çalışmalarda ^3He , ^4He ve bunların eşdeğer karışımlarından oluşan akışkanların $1-10^4$ K arasındaki termofiziksel özelliklerinin ve termodinamik fonksiyonlarının doğru ve belirsizliklerinin en az olacak şekilde bulunması ve hesaplanmasını amaçlamaktadır.

Yapılan bu çalışmada, akışkanların termofiziksel özelliklerinin hesaplanmasında kullanılan $\Omega^{(n,s)}(T)$ çarpışma integrali bağıntısının elde edilmesi için iki yöntem kullanılmıştır. Birinci yöntem, yalnızca düşük yoğunluklu ^4He için, klasik kuantum mekaniksel $\Omega^{(n,s)}(T)$ çarpışma integrali bağıntısı kullanılarak yapılan hesaplama yöntemidir. Bu hesaplamalar sonucunda $1-10^4$ K sıcaklık aralığı için teorik $\Omega^{(n,s)}(T)$ çarpışma integrali değerleri elde edilmiştir. İkinci yöntem ise, ^4He , ^3He ve eşdeğer karışımlarından oluşan her bir akışkan için sonuçları deneysel sonuçlara da uyan $1-10^4$ K sıcaklık aralığında, duyarlı ve belirsizliği en az olan, ayrı ayrı çarpışma integralleri önerilerek yapılan hesaplama yöntemidir. Bu hesaplama yönteminde, sıcaklığın bir fonksiyonu olarak önerilen duyarlı ve belirsizliği en az olan çarpışma integralleri, literatürde deneysel ve standart olarak kabul edilen *ab initio* hesapsal verilere fit edilerek belirlenmiştir. Yapılan bu her iki hesaplama sonucunda $1-10^4$ K sıcaklık aralığında düşük yoğunluktaki ele alınan her akışkan ve eş karışımları için önerilen $\Omega^{(n,s)}(T)$ çarpışma integrali bağıntısı kullanılarak, viskozite $\eta(T)$, termal iletkenlik $\lambda(T)$ ve kütle difüzyon katsayısı $D(T)$ teorik değerleri elde edilmiştir.

Bu çalışmada, ^3He , ^4He ve eşdeğer karışımlarına ait ve termodinamiksel fonksiyonlardan olan, iç enerji değişimi (ΔU), entalpi değişimi (ΔH), entropi değişimi (ΔS), sabit hacimdeki ısı kapasitesi (ΔC_v), sabit basınçtaki ısı kapasitesi (ΔC_p), Joule-Thomson katsayısı (μ) ve akışkan içindeki ses Hızı (c) nın hesaplanabilmesinde kullanılan, $1-10^4$ K kadar geçerli olan ve incelenen akışkanın her biri için ayrı ayrı olacak şekilde $B(T)$ ikinci virial terimi bağıntıları önerilmiştir. Ayrıca $B(T)$ ikinci virial bağıntıları önerilirken, bu bağıntıların sıcaklığın bir fonksiyonu olduğu fiziksel olgusu göz önüne alınmış ve buna göre, ^4He , ^3He

ÖZET(devam ediyor)

ve eşdeğer karışımları için sıcaklığın analitik fonksiyonu olan dört değişik tipte ikinci virial terimi önerilmiştir.

Sonuç olarak, çizelgelerden de görüleceği üzere önerilen termofizik yarı hesapsal ifadeler, literatürdeki pek çok önerilen yarı hesapsal ifadelerin katsayılarından daha az katsayılı olmasıyla birlikte daha hassas sonuçlar elde edilmiştir. Önerilen bu ifadelerin hassasiyeti yanında, literatürdeki pek çok önerilen ifadeden daha kullanışlı ve anlaşılır olması bakımından önemlidir.

Anahtar Sözcükler: İkinci virial katsayıları, hal denklemi, Termofizik, Termodinamik, akışkanlarda ses hızı, Helyum, viskozite, ısı iletkenliği, kütle difüzyon katsayısı.

Bilim Kodu: 4040301

ABSTRACT

Ph.D. Thesis

DETERMINATION OF THE THERMOPHYSICAL PROPERTIES AND THE SECOND VIRIAL COEFFICIENT OF LOW DENSITY ^3He , ^4He AND THEIR EQUIVALENT MIXTURE IN $1\text{-}10^4$ K TEMPERATURE RANGE

Alaiddin YILMAZ

**Zonguldak Karaelmas University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Physic**

Thesis Advisor: Prof. Dr. Etem KİŞİOĞLU

June 2006, 93 pages

Due to severe harm to ozone, some of the fluids are not convenient for using them in refrigerator industry, magnetohydrodynamic power systems, some kind of semi-conductors production, electrical power supplies, and also in fuel systems operated by repulsive forces. Whereas some of them, which are not harmful to ozone due their molecular structures, and therefore, are more eligible for usages in terms of environmental concern. So recently, researches on using the fluids of ^3He , ^4He and their equivalent mixture have been begun for the systems mentioned above instead of those destroying the ozone. However, ^3He , ^4He and their equivalent mixture are used at extremely low temperatures in some areas, and also at high temperatures ($1\text{-}10^4$ K) in some other areas.

Nowadays, thermophysical properties of ^3He , ^4He and their equivalent mixture must be determined as accurately with the lowest uncertainties. In this respect, both the equation of quantum mechanical $\Omega^{(n,s)}(T)$ collision integral for the determination of the thermophysical

ABSTRACT (continued)

properties and the quantum mechanical $B(T)$ second virial equation for the calculation of thermodynamic functions should be known at first. Therefore, the goal of this study is to determine and calculate the thermophysical properties and thermodynamic functions of ^3He , ^4He and their equivalent mixture at $1-10^4$ K, as accurately with the lowest uncertainties.

In this study, two methods have been employed to obtain the collision integral, $\Omega^{(n,s)}(T)$ which used for calculation of thermophysical properties of fluids. The first method is employed the equation of the classical quantum mechanical collision integral $\Omega^{(n,s)}(T)$ for only low density ^4He . As a result of this calculation, the theoretical results were obtained by using the equation of collision integral $\Omega^{(n,s)}(T)$ in $1-10^4$ K range. On the other hand, a new collision integral have been proposed which in employed as a second method, to calculate the collision integral $\Omega^{(n,s)}(T)$ for ^4He , ^3He and the equivalent mixture in $1-10^4$ K range. The viscosity $\eta(T)$, thermal conductivity $\lambda(T)$ and mass diffusion coefficient $D(T)$ of fluids were calculated using the proposed equation for $\Omega^{(n,s)}(T)$. In order to determine the uncertainties of the results obtained from the proposed equation of collision integral, the results were compared with those obtained by *ab initio* and with experimental values belonging to low density ^4He , ^3He and their equivalent mixture as accepted standards in the literature.

In this study, second virial coefficient $B(T)$ for each fluid has been proposed to calculate the thermodynamic functions such as Gibbs energy (ΔU), enthalpy (ΔH), entropy (ΔS), heat capacity at constant volume (ΔC_v) and at constant pressure (ΔC_p), Joule-Thomson coefficient (μ), and sound velocity in fluids(c). Hence, four different types of second virial equations $B(T)$ as analytical functions of temperatures have been proposed for each fluids and the equivalent mixture.

As shown in the diagrams, the proposed thermophysical semi-empirical calculation terms have smaller coefficients in comparison to those found in many proposed semi-empirical terms in the literature. Therefore, the more sensitive results were obtained. It is also important that these proposed terms are comparatively not only more sensitive but also easily understandable.

ABSTRACT (continued)

Key Words: Second virial coefficients, equation of state, Thermophysics, Thermodynamic, sound velocity in fluids, Helium, viscosity, thermal conductivity, mass diffusion coefficient.

Science Code: 4040301

TEŞEKKÜR

Bu tezin hazırlanmasında, gereken düzeltmelerin yapılmasında, yönlendirici önerilerde bulunmada ve derlenmesinde büyük yardımları olan tez hocam Prof. Dr. Etem KİŞİOĞLU, tez düzeltimi ve yol gösterici önerilerde bulunan tez komisyonu üyelerinden Prof. Dr. Dilek Dadaylı PAKTAŞ, Prof.Dr. Meral HOŞCAN, Prof.Dr. Mustafa TAN, Prof.Dr. Hasan AKBAŞ, literatür taramasında ve makale çevirisinde yardımlarını esirgemeyen Doç. Dr. Abdurrahman ŞENGÜL, tezin şekilsel yapılandırılmasında ve düzenlenmesinde yardımlarını esirgemiyen Yrd.Doç.Dr. Meral ERYÜREK, doktora çalışmama destek veren ve teşvik eden tüm ZKÜ Fen Edebiyat Fakültesi meslektaşlarıma ve çalışmalarımda bana manevi destek veren eşim Nilgün YILMAZ'a teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
KABUL.....	ii
ÖZET.....	iii
ABSTRACT.....	vi
TEŞEKKÜR.....	ix
İÇİNDEKİLER.....	x
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	xiv
ÇİZELGELER DİZİNİ.....	xvi
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ.....	xviii
 BÖLÜM 1 GİRİŞ.....	 1
1.1 AMAÇ.....	1
1.2 HELYUM'A AİT TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİN VE İKİNCİ VİRİAL TERİMİNİN HESAPLANMASI YÖNTEMLERİ.....	5
1.3 TEMEL BAĞINTILAR VE TANIMLAMALAR.....	7
1.3.1 $\phi(r)$ Potansiyel Enerji Fonksiyonları ve $\Omega_{ij}^{(n,s)}$ Çarpışma İntegrali....	7
1.3.2 İkinci Virial Terimi Bağıntısı $B(T)$	9
1.3.3 Transport (Aktarım) Özellikler.....	13
1.3.3.1 Viskozite η (Momentum Aktarımı), Klasik ve Kuantum Mekaniksel Yaklaşım.....	14
1.3.3.2 Isı İletkenliği λ (Enerji Aktarımı), Klasik ve Kuantum Mekaniksel Yaklaşım.....	16
1.3.3.3 Kütle Difüzyon Katsayısı D (Kütle Aktarımı), Klasik ve Kuantum Mekaniksel Yaklaşım	17

İÇİNDEKİLER (devam ediyor)

	Sayfa
BÖLÜM 2 TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİN DAHA KAPSAMLI OLARAK KUANTUM MEKANİKSEL HESAPLANMASI.....	19
2.1 KUANTUM MEKANİKSEL YAKLAŞIM.....	19
2.1.1 Çarpışma İntegrali $\Omega_{ij}^{(n,s)}$	21
2.1.2 Kuantum Tesir Kesiti İntegrali $Q_k^{(n)}(g)$	22
BÖLÜM 3 ^4He ^3He AKIŞKANLARININ VE EŞ KARIŞIMLARINA AİT İKİNCİ VİRİAL BAĞINTILARI VE TERMOFİZİK ÖZELLİKLERİNİN HESAPLANMASI YÖNTEMİ.....	24
3.1 HESAPLANMA YÖNTEMİ.....	25
3.1.1 $Q_k^{(n)}$ Kuantum Tesir Kesiti İntegralinin Hesaplanması.....	25
3.1.2 $\Omega^{(n,s)}$ Çarpışma İntegralinin Hesaplanması.....	26
3.2 TERMOFİZİK ÖZELLİKLERİN HESAPLANMASI.....	26
3.2.1 İkinci Virial B(T) Teriminin Hesaplanması.....	26
3.2.2 Viskozite $\eta(T)$ nin Hesaplanması.....	27
3.2.3 Isı İletkenliği $\lambda(T)$ nin Hesaplanması.....	27
3.2.4 Difüzyon $D(T)$ nin Hesaplanması.....	28
BÖLÜM 4 ^4He ^3He AKIŞKANLARININ VE EŞ KARIŞIMLARINA AİT İKİNCİ VİRİAL BAĞINTILARININ HESAPLANMASI.....	29
4.1 ^4He AKIŞKANI İÇİN ÖNERİLEN İKİNCİ VİRİAL BAĞINTISI VE KATSAYILARININ HESAPLANMASI.....	30
4.2 ^3He AKIŞKANI İÇİN ÖNERİLEN İKİNCİ VİRİAL BAĞINTISI VE KATSAYILARININ HESAPLANMASI.....	33
4.3 ^4He , ^3He AKIŞKANLARININ EŞ KARIŞIMLARI İÇİN ÖNERİLEN İKİNCİ VİRİAL BAĞINTISI VE KATSAYILARININ HESAPLANMASI.....	35

BÖLÜM 5	^4He , ^3He AKIŞKANLARI VE EŞ KARIŞIMLARINA AİT TERMOFİZİK ÖZELLİKLERİN HESAPLANMASI.....	38
5.1	^4He , ^3He AKIŞKANLARI VE EŞ KARIŞIMLARINA AİT VİSKOZİTE (MOMENTUM AKTARIMI) BAĞINTISI DEĞERLERİNİN HESAPLANMASI.....	39
5.1.1	^4He Akışkanına Ait Viskozite(η) Bağıntısı Değerlerinin Hesaplanması.....	39
5.1.2	^3He Akışkanına Ait Viskozite (η) Bağıntısı Değerlerinin Hesaplanması.....	42
5.1.3	^4He ve ^3He Akışkanlarının Eş Karışımlarına Ait Viskozite (η) Bağıntısı Değerlerinin Hesaplanması.....	44
5.2	^4He ve ^3He AKIŞKANINA AİT ISI İLETKENLİĞİ (ENERJİ AKTARIMI) BAĞINTISI DEĞERLERİNİN HESAPLANMASI.....	47
5.2.1	^4He Akışkanına Ait Isı İletkenliği(λ) Bağıntısı Değerlerinin Hesaplanması.....	47
5.2.2	^3He Akışkanına Ait Isı İletkenliği(λ) Bağıntısı Değerlerinin Hesaplanması	50
5.2.3	^4He ve ^3He Akışkanlarının Eş Karışımlarına Ait Isı İletkenliği (λ) Bağıntısı Değerlerinin Hesaplanması.....	52
5.3	^4He ve ^3He AKIŞKANLARINA AİT DİFÜZYON (KÜTLE AKTARIMI) BAĞINTISI DEĞERLERİNİN HESAPLANMASI.....	54
5.3.1	^4He Akışkanına Ait Kütle Difüzyon(D) Bağıntısı Değerlerinin Hesaplanması.....	54
5.3.2	^3He Akışkanına Ait Kütle Difüzyon(D) Bağıntısı Değerlerinin Hesaplanması.....	56
BÖLÜM 6	^4He VE ^3He AKIŞKANI İÇİN AKIŞKAN İÇİNDEKİ SES HIZI BAĞINTISININ HESAPLANMASI.....	59

İÇİNDEKİLER (devam ediyor)

	<u>Sayfa</u>
6.1 AKIŞKANLARDAKİ SES HIZININ, İKİNCİ VİRİAL BAĞINTISI KULLANILARAK BULUNMASI.....	60
6.1.1 ^4He Akışkanı İçin Ses hızı Bağıntısı kullanılarak, Akışkan İçindeki Ses Hızlarının Hesaplanması.....	61
6.1.2 ^3He Akışkanı İçin Ses hızı Bağıntısı kullanılarak, Akışkan İçindeki Ses Hızlarının Hesaplanması.....	63
 BÖLÜM 7 SONUÇ.....	 65
 KAYNAKLAR.....	 67
 EK AÇIKLAMALAR A.....	 70
 ÖZGEÇMİŞ.....	 93

ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>No</u>		<u>Sayfa</u>
1.1	^4He için hesaplanmış ve deneysel viskozite verilerinin karşılaştırılması. (a) Deneysel. (b) Klasik teoriye göre katı küre yapı için hesaplanmış. (c) Kuantum teorisine göre katı küre için hesaplanmış (Uehling). (d) kuantum teorisine göre Slater potansiyeli için hesaplanmış viskoziteler [7].....	15
4.1	^4He ait <i>ab initio</i> [1], deneysel [5] ve önerilen ikinci virial bağıntısı değerlerinin birlikteli grafik karşılaştırması.....	32
4.2	^4He ait <i>ab initio</i> [1], deneysel [5] ve önerilen ikinci virial bağıntılarının ayrık grafik gösterimi.....	32
4.3	^3He ait hesapsal <i>ab initio</i> [1] ve önerilen ikinci virial bağıntısı değerlerinin grafik karşılaştırması.....	34
4.4	^3He ait hesapsal <i>ab initio</i> [1] ve önerilen ikinci virial bağıntısı değerlerinin ayrık grafik karşılaştırması.....	35
4.5	$^4\text{He}+^3\text{He}$ ait hesapsal <i>ab initio</i> [1] ve önerilen ikinci virial bağıntısı değerlerinin grafik karşılaştırması.....	37
4.6	$^4\text{He}+^3\text{He}$ ait hesapsal <i>ab initio</i> [1] ve önerilen ikinci virial bağıntısı değerlerinin ayrık grafik karşılaştırması.....	37
5.1	^4He ait hesapsal <i>ab initio</i> [1] ve önerilen viskozite (η) bağıntıları değerlerinin grafik karşılaştırması.....	41
5.2	^4He ait hesapsal <i>ab initio</i> [1] ve önerilen viskozite (η) bağıntısı değerlerinin ayrık grafik karşılaştırması.....	42
5.3	^3He ait hesapsal <i>ab initio</i> [1] ve önerilen viskozite (η) bağıntıları değerlerinin grafik karşılaştırması.....	44
5.4	$^4\text{He}+^3\text{He}$ ait hesapsal <i>ab initio</i> [1] ve önerilen viskozite (η) bağıntıları değerlerinin grafik karşılaştırması.....	46
5.5	^4He ait hesapsal <i>ab initio</i> [1] ve önerilen Isı İletkenliği (λ) bağıntıları değerlerinin grafik karşılaştırması.....	49

ŞEKİLLER DİZİNİ (devam ediyor)

<u>No</u>		<u>Sayfa</u>
5.6	^3He ait hesapsal <i>ab initio</i> [1] ve önerilen Isı İletkenliği (λ) bağıntıları değerlerinin grafik karşılaştırması.....	51
5.7	$^4\text{He}+^3\text{He}$ ait hesapsal <i>ab initio</i> [1] ve önerilen Isı İletkenliği (λ) bağıntıları değerlerinin grafik karşılaştırması.....	53
5.8	^4He ait hesapsal <i>ab initio</i> [1] ve önerilen kütle difüzyon (D) bağıntıları değerlerinin grafik karşılaştırması.....	56
5.9	^3He ait hesapsal <i>ab initio</i> [1] ve önerilen kütle difüzyon (D) bağıntıları değerlerinin grafik karşılaştırması.....	58

ÇİZELGELER DİZİNİ

<u>No</u>	<u>Sayfa</u>
4.1 ^4He akışkanı için önerilen ikinci virial bağıntısı sabitleri	31
4.2 ^3He akışkanı için önerilen ikinci virial bağıntısı sabitleri.....	34
4.3 ^4He ve ^3He eş karışımları için önerilen ikinci virial bağıntısı sabitleri.....	36
5.1 ^4He için önerilen viskozite $\eta(T)$ bağıntısı sabitleri.....	41
5.2 ^3He için önerilen viskozite $\eta(T)$ bağıntısı sabitleri.....	43
5.3 $^4\text{He}+^3\text{He}$ eş karışımları için önerilen viskozite $\eta(T)$ bağıntısı sabitleri.....	46
5.4 ^4He akışkanı için önerilen ısı iletkenliği $\lambda(T)$ bağıntısı sabitleri.....	49
5.5 ^3He akışkanı için önerilen ısı iletkenliği $\lambda(T)$ bağıntısı sabitleri.....	51
5.6 $^4\text{He}+^3\text{He}$ akışkanlarının eş karışımları için önerilen ısı iletkenliği $\lambda(T)$ bağıntısı sabitleri.....	53
5.7 ^4He akışkanı için önerilen kütle difüzyon katsayısı $D(T)$ bağıntısı sabitleri.....	55
5.8 ^3He akışkanı için önerilen kütle difüzyon katsayısı $D(T)$ bağıntısı sabitleri.....	57
6.1 ^4He akışkanı içindeki sıcaklığa bağlı ve $\cong 15$ Atm. sabit basınçtaki hesaplanmış ses hızları ve literatür değerlerinin karşılaştırılması	61
6.2 ^3He akışkanı içindeki sıcaklığa bağlı ve $\cong 15$ Atm. Sabit basınçtaki hesaplanmış ses hızları	63
A.1 ^4He için önerilen ikinci virial (B) bağıntısının hesaplanan değerlerinin literatür değeriyle karşılaştırılması ve toplam ortalama sapmalar.....	71
A.2 ^3He için önerilen ikinci virial(B) bağıntısının hesaplanan değerlerinin literatür değeriyle karşılaştırılması ve toplam ortalama yüzde sapmalar.....	73
A.3 $^4\text{He}+^3\text{He}$ eş karışımları için önerilen ikinci virial(B) bağıntısının hesaplanan değerlerinin literatür değeriyle karşılaştırılması ve toplam ortalama yüzde sapmalar.....	75

ÇİZELGELER DİZİNİ (devam ediyor)

A.4	^4He için önerilen viskozite(η) bağıntısının sıcaklığa göre hesaplanan değerlerinin literatür değeriyle karşılaştırılması ve toplam ortalama yüzde sapmalar.....	77
A.5	^3He için önerilen viskozite(η) bağıntısının sıcaklığa göre hesaplanan değerlerinin literatür değeriyle karşılaştırılması ve toplam ortalama yüzde sapmalar.....	79
A.6	$^4\text{He}+^3\text{He}$ için önerilen viskozite(η) bağıntısının sıcaklığa göre hesaplanan değerlerinin literatür değeriyle karşılaştırılması ve yüzde sapmalar.....	81
A.7	^4He için önerilen Isı İletkenliği(λ) bağıntısının sıcaklığa göre hesaplanan değerlerinin literatür değeriyle karşılaştırılması ve yüzde sapmalar.....	83
A.8	^3He için önerilen Isı İletkenliği(λ) bağıntısının sıcaklığa göre hesaplanan değerlerinin literatür değeriyle karşılaştırılması ve yüzde sapmalar.....	85
A.9	$^4\text{He}+^3\text{He}$ için önerilen Isı İletkenliği(λ) bağıntısının sıcaklığa göre hesaplanan değerlerinin literatür değeriyle karşılaştırılması ve yüzde sapmalar.....	87
A.10	^4He için önerilen Difüzyon(D) bağıntısının sıcaklığa göre hesaplanan değerlerinin literatür değeriyle karşılaştırılması ve yüzde sapmalar.....	89
A.11	^3He için önerilen Difüzyon(D) bağıntısının sıcaklığa göre hesaplanan değerlerinin literatür değeriyle karşılaştırılması ve yüzde sapmalar.....	91

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

p	:	basınç (Pa)
p_c	:	kritik basınç
T	:	sıcaklık (kelvin)
T_c	:	kritik sıcaklık
T^*	:	indirgenmiş sıcaklık
T_B	:	boyle sıcaklığı
T_{ij}	:	Joule-Thomson inversiyon sıcaklığı
V	:	hacim (m^3)
V_c	:	kritik hacim
V^*	:	indirgenmiş hacim
ρ	:	yoğunluk (kg/m^3)
ρ_c	:	kritik yoğunluk
b_0	:	co-volume
C_p	:	sabit basınçtaki ısı kapasitesi
C_v	:	sabit hacimdeki ısı kapasitesi
γ	:	ısı kapasitesi orantı sabiti
k	:	boltzman sabiti
ε	:	moleküler bağlanma enerjisi
σ	:	küresel çarpışma çapı
$\hbar$	:	indirgenmiş planck sabiti
R	:	evrensel gaz sabiti
K	:	kelvin sıcaklık birimi
Z	:	sıkıştırılabilirlik sabiti
N	:	Avagadro sayısı
M	:	herhangi bir gaz için molekül ağırlığı (kg)
μ_J	:	Joule-Thomson İnversiyon katsayısı
μ	:	indirgenmiş kütle

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ (devam ediyor)

B	:	ikinci virial
B^*	:	indirgenmiş ikinci virial
B_1	:	ikinci virial'in 1. türevi
B_2	:	ikinci virial'in 2. türevi
C	:	üçüncü virial
C^*	:	indirgenmiş üçüncü virial
D	:	dördüncü virial
$\phi(r)$	:	moleküller arası potansiyel enerji fonksiyonu
$B^*(T^*)$	:	indirgenmiş sıcaklığa göre indirgenmiş ikinci virial
U	:	iç enerji
S	:	entalpi
c	:	ses hızı (m/s)
c_H	:	hesaplanmış ses hızı
c_D	:	denel ses hızı
$H_1, H_2, \dots$	:	birimsiz çeşitli parametreler
$n_1, n_2, \dots$	:	birimsiz çeşitli parametreler
$m_1, m_2, \dots$	:	birimsiz çeşitli parametreler
$b^{(j)}$	:	Gamma fonksiyonunu da içeren virial sabiti
$b_l^{(h)}$	:	modifiye cluster integral
l	:	molekül konumu
β_l	:	cluster integralinin değişik kombinasyonlarının ifadesi
C_{2n}	:	dispersiyon katsayıları
$f_{2n}(r)$	:	tüm r ler üzerinden uygulanan dipol-dipol terimleri etkileşiminin görelî gecikme katsayı fonksiyonu.
$\Omega^{(n,s)}$	:	çarpışma integrali
$Q^{(n)}$	:	kuantum tesir kesiti
$\eta(T)$	:	sıcaklığın fonksiyonu olarak viskozite
$\lambda(T)$	:	sıcaklığın fonksiyonu olarak ısı iletkenliği
$D(T)$	:	sıcaklığın fonksiyonu olarak difüzyon
χ	:	çarpışan moleküllerin sapma açısı
E	:	görelî etkileşme enerjisi

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ (devam ediyor)

g	:	molekölün başlangıç göreli hızı
$\Omega_{4\text{He}}^{(n,s)}$	:	^4He akışkanı için çarpışma integrali
$\Omega_{3\text{He}}^{(n,s)}$	:	^3He akışkanı için çarpışma integrali
$\Omega_{4\text{He}+^3\text{He}}^{(n,s)}$	:	eş karışım akışkan için çarpışma integrali
ΔU	:	iç enerji değişimi
ΔS	:	entropi değişimi
ΔH	:	entalpi değişimi
TOYS	:	toplam ortalama yüzde sapma
$\phi_{00}(\mathbf{r})$	:	potansiyel enerji fonksiyonu
QMC	:	Quantum Monte Carlo, potansiyel enerji fonksiyonu
CCSD	:	Coupled–Cluster Single Double Triple, potansiyel enerji fonksiyonu
SAPT	:	symmetry-adapted perturbation theory, potansiyel enerji fonksiyonu
VVVVR:	:	non relativistik <i>ab initio</i> potansiyeli
HFD–B2:	:	Hartree-Fock dispersiyon-B2
HFD-ID:	:	Hartree-Fock dispersiyon-ID
MNSQ	:	Lead square fit paket programı

BÖLÜM 1

GİRİŞ

1.1 AMAÇ

Soğutma endüstrisinde, magnetohitrodinamik güç sistemlerinde, bazı tip yarıiletkenlerin üretiminde, elektriksel güç üretme sistemlerinde ve itme gücüyle çalışan yakıt sistemlerinde kullanılan akışkanlardan bazıları ozon tahrip edici olduklarından (kloroflorokarbon ve türevleri) kullanım için elverişli değildir. Bunlardan bazıları da moleküler yapıları nedeniyle ozon tahrip edici olmadıklarından çevre kirliliği açısından kullanıma daha elverişlidirler. Bu nedenle ozon tahrip edici gazların yerine, günümüzde yukarıda bahsedilen teknolojik ve bilimsel çalışmalarda soğutucu ve itici akışkanlardan olan ^4He , ^3He veya bunların eşdeğer karışımlarının kullanılması çalışmaları başlatılmıştır [1, 2]. Bu çalışmalar doğrultusunda varılan bazı sonuçlara göre ^4He , ^3He veya bunların eşdeğer karışımlarının çok düşük sıcaklık aralığında kullanılabileceği gibi, yüksek sıcaklık (10^4 K) aralığında da kullanılabileceği araştırmacılarca belirtilmiştir [1].

^4He , ^3He veya bunların eşdeğer karışımlarının termofiziksel (viskozite $\eta(T)$, termal iletkenlik $\lambda(T)$ ve kütle difüzyon katsayısı $D(T)$ gibi) özelliklerin belirlenmesinde kullanılan kuantum mekaniksel $\Omega^{(n,s)}$ çarpışma integrali bağıntısının ve termodinamik fonksiyonların hesaplanmasında kullanılan kuantum mekaniksel ikinci virial $B(T)$ bağıntısının düşük ve yüksek sıcaklık aralıklarında duyarlı ve belirsizliği en az olacak şekilde belirlenmesi, aynı zamanda bu sıcaklık aralıklarındaki davranışının da en iyi şekilde bilinmesi, bu akışkanların teknolojik ve bilimsel araştırmalarda kullanılabilmeleri bakımından önem arz etmektedir [1-6]. Bu nedenle, yapılan bu çalışmalarda, düşük yoğunluklu ^4He , ^3He ve bunların eşdeğer karışımlarından oluşan akışkanların $1-10^4$ K arasında ve bir atmosfer basınçta (101.325 kPa), termofiziksel özelliklerinin ve termodinamik fonksiyonlarının doğru ve belirsizlikleri en az olacak şekilde bulunması ve hesaplanması amaçlanmıştır.

Termofiziksel niceliklerin büyüklüklerinin bulunmasına ilişkin hesaplamaların yapılabilmesi için, ^4He ve ^3He akışkanlarının her birine ait moleküller arası etkileşim potansiyel enerji fonksiyonlarının duyarlı olarak bilinmesi gerekmektedir. İstenilen geniş sıcaklık aralıklarında termofiziksel niceliklerin günümüz deney teknolojilerinin yetersizliği nedeniyle bulunması mümkün olmadığından, bu niceliklerin hesaplanmasında kuantum mekaniksel yöntemin kullanılması tam ve güvenilir bir yaklaşım sağlamaktadır.

Yapılan bu çalışmada, akışkanların $\eta(T)$ viskozluk, $\lambda(T)$ ısı iletkenliği ve $D(T)$ difüzyon gibi termofiziksel özelliklerinin hesaplanmasında kullanılan $\Omega^{(n,s)}(T)$ çarpışma integrali bağıntısının elde edilmesi amaçlanmış ve bu işlem için iki yöntem kullanılmıştır. Birinci yöntem, düşük yoğunluklu ^4He ait $\Omega^{(n,s)}_{^4\text{He}}(T)$ çarpışma integralinin hesaplanmasında, klasik kuantum mekaniksel $\Omega^{(n,s)}(T)$ çarpışma integrali bağıntısı kullanılarak yapılan hesaplama yöntemidir. İkinci yöntem ise, ^4He , ^3He ve eşdeğer karışımlarından oluşan akışkanlar için sonuçları deneysel ve *ab initio* hesapsal sonuçlara da uyan duyarlı ve belirsizliği en az olan, ayrı ayrı çarpışma integralleri önererek yapılan hesaplama yöntemidir.

Birinci hesaplama yönteminde, $\Omega^{(n,s)}(T)$ bağıntısı içinde olan ve sıcaklığın çeşitli değerlerine bağlı yaklaşık 2000 çarpışma göreli kinetik enerjilerine (relative kinetic energy of the collision, $E = \frac{1}{4}mg^2$) karşılık gelen ve Hurly tarafından sağlanan kuantum tesir kesiti $Q^{(n)}(E)$ nin sayısal değerleri kullanılmıştır [1].

İkinci hesaplama yönteminde, sıcaklığın bir fonksiyonu olarak önerilen çarpışma integralleri literatürdeki deneysel ve *ab initio* hesapsal verilere fit edilmiştir. Bu least squares (en küçük kareler) fit yöntemiyle çarpışma integrallerinin katsayıları belirlenmiş ve Powel's minimizasyon yöntemi kullanılarak en duyarlı ve belirsizliği en az olan çarpışma integralleri bağıntıları seçilmiştir. Yapılan bu her iki hesaplamalar sonucunda $1-10^4$ K sıcaklık aralığı için önerilen $\Omega^{(n,s)}(T)$ bağıntısının teorik değerleri elde edilmiştir.

Bu çalışmada, sıcaklığın fonksiyonu olan ve kuantum mekanik davranışları da içeren $\Omega^{(n,s)}_{^4\text{He}}$, $\Omega^{(n,s)}_{^3\text{He}}$ ve $\Omega^{(n,s)}_{^4\text{He}+^3\text{He}}$ bağıntılarının her biri sıcaklığın analitik fonksiyonu olan keyfi sabitli farklı sayısal bağıntılar olacak şekilde önerilmiştir. Önerilen bu bağıntılara ait fiziksel anlamlı sabitlerin (ϵ/k potansiyel enerji kuyusu derinliği, ϕ moleküller arası

potansiyel enerji fonksiyonu, σ moleküler çarpışma çapı gibi) sayısal değerleri, diğer araştırmacılar tarafından, kuantum mekaniksel etkileşmeler de kullanılarak elde edilmiş ve η (viskozite), λ (ısı iletkenliği), D (kütle difüzyon katsayısı) değerlerinin hesaplanmasına olanak sağlamıştır. [1, 2, 5-7].

Bu çalışmada, iki değişik yöntemle elde edilerek önerilen yarı teorik $\Omega_{4\text{He}}^{(n,s)}$, $\Omega_{3\text{He}}^{(n,s)}$ ve $\Omega_{4\text{He}+3\text{He}}^{(n,s)}$ bağıntılarının geçerliliğinin ve belirsizliklerinin sınırlarının kontrolü (% ortalama sapma ve Powel's minimizasyonu) önce klasik sınırlar içinde geçerli olan Lennard-Jones(6-12) ve Maitland-Smith $n(\bar{r})-6$ potansiyel enerji fonksiyonlarının kullanımıyla elde edilen ve sıcaklığa göre değişen $\Omega^{(n,s)}(T)$ çarpışma integrali değerleriyle karşılaştırılarak yapılmıştır [6-8]. Daha sonra, bu karşılaştırmalar, kuantum mekaniksel etkileşimleri de içeren Hurly ve arkadaşları, Janzen ve arkadaşları, Aziz ve arkadaşları, Boyd ve arkadaşları [1-6] nin termofiziksel özelliklere ait verileri kullanılarak da yapılmıştır.

4He 3He ve eşdeğer karışımları için Hurly ve arkadaşları, Janzen ve arkadaşları, Aziz ve arkadaşları, Boyd ve arkadaşları tarafından, ayrı ayrı önerilen $\Omega^{(n,s)}$ çarpışma integrali bağıntıları kullanılarak elde edilen seyreltik gaz viskoziteleri $\eta(T)$, kütle difüzyon katsayıları $D(T)$ ve termal iletkenlik $\lambda(T)$ 'ye ait hesaplanan değerlerin, bu fiziksel nicelikleri ölçmek için yapılacak olan deney aletlerinin kalibrasyonunda kullanılabileceği ifade edilmektedir [1, 2].

Hurly, Janzen, Aziz, Boyd ve arkadaşları tarafından önerilen $\Omega^{(n,s)}(T)$ çarpışma integrali bağıntıları, bu araştırmacılar tarafından bir atmosfer basınçtaki (101.325 kPa) 4He , 3He ve eşdeğer karışımının düşük yoğunluklara ait termofiziksel özelliklerinden; seyreltik gaz viskoziteleri $\eta(T)$, kütle Difüzyon $D(T)$ katsayıları ve termal iletkenlik $\lambda(T)$ değerlerinin $1-10^4$ K sıcaklık aralığındaki hesaplamalarında kullanılmıştır. Yapılan çalışmada, önerilen çarpışma integrali bağıntılarından elde edilen sonuçların belirsizliklerinin saptanması için, literatürde bir standart olarak kabul edilen, konuya ilişkin ölçümleri yapacak aletlerin kalibrasyonunda kullanılacak nitelikte olan ve aynı zamanda kuantum mekaniksel yapıdaki davranışları da içeren *ab initio* hesaplanan değerleri ve düşük yoğunluktaki He'a ait en geçerli deneysel veriler kullanılmıştır [1-3, 7-10].

Bu çalışmada, aynı zamanda, ^4He , ^3He eşdeğer karışımlarına ait ve termodinamiksel fonksiyonlardan olan, iç enerji değişimi (ΔU), entalpi değişimi (ΔH), entropi değişimi (ΔS), sabit hacimdeki ısı kapasitesi (ΔC_v), sabit basınçtaki ısı kapasitesi (ΔC_p), Joule-Thomson katsayısı (μ) ve akışkan içindeki ses hızı (c) nın [7, 8] hesaplanabilmesinde kullanılan, $1-10^4$ K sıcaklık aralığında geçerli olan (iki molekül arasındaki kuantum mekaniksel etkileri de veren) ve incelenen akışkanın her biri için ayrı ayrı olacak şekilde ikinci virial terimi bağıntıları $B(T)$ önerilmiştir. Ayrıca ikinci virial bağıntıları $B(T)$ önerilirken (yarı teorik ve hesapsal fizik yöntem kullanmak amacıyla), bu bağıntıların sıcaklığın bir fonksiyonu olduğu fiziksel olgusu göz önüne alınmıştır. Buna göre, ^4He ve ^3He için sıcaklığın analitik fonksiyonu olan dört değişik tipte ikinci virial terimi ve ^4He - ^3He eşdeğer karışımı için de dört değişik tipte ikinci virial terimi önerilmiştir. ^4He , ^3He ve ^4He - ^3He eşdeğer karışımları için önerilen ikinci virial terimi bağıntılarının sabitlerinin nümerik değerleri, *ab initio* hesaplamalarıyla elde edilen [1, 3, 4] ve deneysel verilere ait değerler [2, 5] kullanılarak Least Squares Parameter Estimation (fit yöntemi) yöntemiyle bulunmuştur.

Sonuç olarak, bu çalışmada ^4He , ^3He ve $^4\text{He}+^3\text{He}$ eşdeğer karışımlarına ait ikinci virial terimi bağıntıları ve çarpışma integrali bağıntılarının en geçerli olanları, Toplam Ortalama Yüzde Sapma (TOYS) ve Powel's minimizasyon [11] yöntemi (belirsizliği en az olan) ile belirlenmiştir. En geçerli olan ikinci virial terimi bağıntıları ve çarpışma integrali bağıntıları kullanılarak 101.325 kPa daki ^3He , ^4He ve ^3He - ^4He eş karışımlarının $1-10^4$ K sıcaklık aralığındaki ikinci virial değerleri, çarpışma integrali değerleri ve bunların birinci türev değerleri hesaplanmıştır.

Tüm sonuçlar, literatürde bulunan *ab initio* ve denel verilerle karşılaştırılarak yüzde hata hesaplamaları yapılmış ve elde edilen sonuçların literatür sonuçlarıyla oldukça iyi bir uyum içerisinde oldukları görülmüştür [1, 4, 12]. Ayrıca, önerilen bu ifadelerin hassasiyeti yanında, literatürdeki pek çok önerilen ifadeden daha kullanışlı ve anlaşılır olması bakımından önemli olduğu belirlenmiştir.

1.2 HELYUM'A AİT TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİN VE İKİNCİ VİRİAL TERİMİNİN HESAPLANMASI YÖNTEMLERİ

Normal koşullarda kuantum mekaniksel davranışlarda bulunan akışkanların termofiziksel özelliklerin hesaplanmasında genelde, istenilen amaca uygun olarak üç yöntem kullanılabilir. Termofiziksel özelliklerin hesaplanmasında geçerli olarak kullanılan yöntemlerden birincisindeki hesaplamalar, çok uzun zaman alan ve maliyeti yüksek olan (*ab initio* hesaplamaları ve klasik hesaplama yöntemleri gibi) işlemler içerir.

Birinci hesaplama yönteminde, termofiziksel özellikli temel bağıntıları elde etmek için, kuantum mekaniksel davranışları içinde barındıran *ab initio* hesaplamaları ve He-He etkileşmelerini tanımlayan, iki molekül arası uzaklık olan r nin geniş değerlerine bağlı $\phi(r)$ moleküller arası potansiyel enerji fonksiyonu ve bu potansiyelin limit yapısı kullanılır [1, 3-6, 13].

İkinci hesaplama yöntemi, gazların kinetik teorisini ve kuantum-istatistik mekaniğin standart bağıntıları kullanılarak, $\phi(r)$ moleküller arası potansiyel enerji fonksiyonundan hareketle, düşük yoğunluktaki ^3He ve ^4He ün termofiziksel özelliklerini hesaplamayı amaçlar.

Termofiziksel ve termodinamik özelliklerin ve ikinci virial bağıntısının incelenmesinde ve hesaplanmasında kullanılan iki yöntemde de, moleküller arası potansiyel enerji fonksiyonunun seçimi önemlidir. İncelenecek olan akışkanın moleküler yapısına ve bu moleküllerin seçilecek sıcaklık aralığındaki davranışlarına (klasik ve kuantum mekaniksel) göre 1903 den bu yana onlarca potansiyel enerji fonksiyonu $\phi(r)$ tipleri pek çok araştırmacı tarafından teklif edilmiştir [1, 3, 4, 7, 8, 13-19]. ^3He ve ^4He normal koşullarda (oda sıcaklığı ve 1 atmosfer basınçta) kuantum mekaniksel davranışlar gösterdiğinden bunlara ait öngörülen potansiyel enerji fonksiyonları, moleküllerin her tür davranışlarını içerecek şekilde geniş kapsamlı olmalıdır. Bu tip potansiyel enerji fonksiyonları ile istenilen termofiziksel ve termodinamik özelliklerin hesaplanabilmesi de ancak *ab initio* hesaplama yöntemiyle yapılabilmektedir. Eğer uygun bir $\phi(r)$ potansiyeli seçilebilirse ele alınan akışkana ait $B(T)$, $\eta(T)$, $\lambda(T)$ ve $D(T)$ niceliklerinin hesaplanmasına ilişkin bağıntılar elde edilebilmektedir. Elde edilen bu bağıntılarla, istenilen fiziksel niceliklerin sayısal büyüklükleri sıcaklığın fonksiyonu olarak belirsizlikleri en az olacak şekilde

hesaplanabilmektedir. $B(T)$, $\eta(T)$, $\lambda(T)$ ve $D(T)$ niceliklerinin sayısal büyüklükleri *ab initio* yöntemiyle hesaplanırsa bile bu hesaplama programlarının çok pahalı ve çok zaman alıcı olduğu bilinmektedir. Bu nedenle aynı duyarlılığa ve belirsizliğe sahip ve kullanılması daha kolay bağıntılara, endüstri, teknoloji ve bazı bilimsel araştırmalarda gerek duyulmaktadır. Böylesi durumlarda *ab initio* hesaplamalarına ait fiziksel niceliklerin sayısal değerleri bir kontrol sistemi olarak kullanılır. Ayrıca, bu tip kullanışlı bağıntılar, yine fizik yasaları kullanılarak da elde edilebilmektedir [6-9, 13].

^3He , ^4He ve eşdeğer karışımlarının termofiziksel ve termodinamik özelliklerinden olan her birine ait $B(T)$ ikinci virial terimlerinin, düşük yoğunluktaki $\eta(T)$ gaz viskozitelerinin, düşük yoğunluktaki $\lambda(T)$ gaz ısı iletkenliklerinin ve düşük yoğunluktaki $D(T)$ gaz difüzyon katsayılarının hesaplanabilmesi için, önce ele alınan akışkana ait uygun $\phi(r)$ potansiyel tipleri seçilir. Daha sonra, seçilen $\phi(r)$ potansiyel tipleri kullanılarak sıcaklığa bağlı kinetik teori ve istatistik mekanik ifadelerinden hareketle her akışkana ait çeşitli yarı teorik ve sıcaklığın analitik bir fonksiyonu olan $\Omega^{(n,s)}(T)$ çarpışma integrali bağıntıları oluşturulur.

Bulunan bu $\Omega^{(n,s)}(T)$ çarpışma integralleri içinden her akışkan için en geçerli (daha önceden her akışkana ait kuantum mekaniksel davranışları da içeren verilerle ve aynı zamanda matematiksel yöntemlerle karşılaştırarak belirsizliği en az) olanlar seçilir. Seçilen bu fiziksel anlamlı $\Omega^{(n,s)}(T)$ bağıntıları kullanılarak, kuantum mekaniksel davranışlarda da bulunan ^4He , ^3He ve bunların eşdeğer karışımlarının düşük yoğunluklar için $1-10^4$ K sıcaklık aralığında, $D(T)$ kütle difüzyon katsayısı, $\lambda(T)$ termal iletkenlik, $\eta(T)$ viskozite ve $B(T)$ ikinci virial katsayısı değerleri hesaplanır.

İstenilen termofiziksel ve termodinamik özelliklerin ^4He , ^3He ve $^4\text{He}+^3\text{He}$ eş karışımları için hesaplanabilmesinde kullanılan ikinci yöntem, bazen de bazı araştırmacılar tarafından incelenecek akışkanlara ait *ab initio* hesaplamalarıyla yine bu akışkanlara ait $Q^{(n)}$ kuantum tesir kesiti değerleri ele alınarak, $\Omega^{(n,s)}$ çarpışma integralini veren ifadeler elde etmeyi amaçlar. Böylece her akışkana ait elde edilen bu $\Omega^{(n,s)}$ bağıntılar kullanılarak ele alınan akışkanlara ve termofiziksel bağıntılarla istenilen sıcaklığa ait $D(T)$ kütle difüzyon katsayısı, $\lambda(T)$ termal iletkenlik, $\eta(T)$ viskozite hesaplamaları yapılabilmektedir [1, 3, 5, 7, 8].

Kullanılan üçüncü ve güvenilir diğer bir yöntem de ilk iki yöntemdeki hesaplanan verileri ve varsa deneysel verileri de kullanan, yarı teorik ve hesapsal fizik yöntemidir. Bu yöntem örneğin, kuantum mekaniksel davranışlarda bulunan akışkana ait deney teknolojisinin yetersizliği nedeniyle ölçülemeyen fiziksel niceliklerin dolaylı olarak elde edilmesinde kullanılmaktadır.

Burada ilk iki yöntemle elde edilmiş fiziksel niceliklere ilişkin değerler veya bunların dolaylı yolla deney ölçümlerinden elde edilmiş değerleri kullanılmaktadır. Yine bu üçüncü tip yöntemde, incelenecek $\Omega^{(n,s)}(T)$, $D(T)$, $\lambda(T)$ ve $\eta(T)$ niceliklerine ait bağıntıların oluşturulmasında, bu fiziksel niceliklerin sıcaklığın analitik bir fonksiyonu olduğu fiziksel gerçeğinden hareket edilmekte ve aynı zamanda her iki yöntemle elde edilen değerlerle aynı duyarlılıkta sonuçlara ulaşılmaktadır [1, 3, 5].

Bu yöntemle elde edilen $B(T)$, $\Omega^{(n,s)}(T)$, $D(T)$, $\lambda(T)$ ve $\eta(T)$ gibi fiziksel niceliklere ait bağıntılar, ilk yöntemle göre elde edilenlerden daha kullanışlı olmaktadır. İlk iki yöntemle elde edilen bağıntılar fazla terimli olmasına karşın, önerilen bağıntılardaki terimlerin sayısı oldukça az (10-15) olmaktadır. Bu yöntemle göre hesaplanan fiziksel niceliklerle, diğer iki yöntemle göre yapılan hesaplamalar arasındaki belirsizlik toplam ortalama %0.1 mertebesinde. Ayrıca ilk iki yöntemle ait *ab initio* hesaplama yöntemlerinde kullanılan programlar ve deneysel setler oldukça pahalı ve elde edilmeleri bilhassa ^4He ve ^3He için oldukça zordur. Bu gün için pek çok fizik dalında bu yöntem (yarı teorik bazlı hesapsal fizik yöntem) kullanılmaktadır [2, 10, 15, 16]. Deney teknolojisinin yetersiz kaldığı fiziksel niceliklerin sayısal olarak elde edilmesinde şu anda en geçerli olan bir yöntem de, yarı teorik bazlı hesapsal fizik yöntemiyle elde edilen sayısal fiziksel niceliklerin deneysel sonuçlarla örtüşmesi nedeniyle sanki deney sonuçları gibi kullanılmasıdır.

1.3 TEMEL BAĞINTILAR VE TANIMLAMALAR

1.3.1 $\phi(r)$ Potansiyel Enerji Fonksiyonları ve $\Omega^{(n,s)}$ Çarpışma İntegrali

Öncelikle herhangi bir akışkana ait termodinamik özelliklerden olan, (η) viskozite, (λ) termal iletkenlik ve (D) termal difüzyon bağıntılarının elde edilebilmesi için öncelikle bu termodinamik bağıntıların içinde fiziksel nicelik olarak bulunan $\Omega^{(n,s)}$ çarpışma (collision)

integrali bağıntısının, ilgilenilen sıcaklık değerlerine karşılık gelen değerlerinin elde edilmesi gerekmektedir. Çarpışma integrali bağıntısı,

$$\Omega^{(n,s)}(T) = \left\{ (s+1)! T^{(s+2)} \right\}^{-1} \times \int_0^{\infty} Q^{(n)}(E) e^{-E/T} E^{(s+1)} dE \quad (1.1)$$

dır. Burada, s kuantum sayısı, T Kelvin olarak sıcaklık, $Q^{(n)}$ kuantum tesir kesiti ve sistemin toplam enerjisi $E = \frac{1}{2} \mu c^2 + \mu g^2 \frac{b^2}{r^2} + U(r)$ eşitliğiyle tanımlanır. Burada, μ indirgenmiş kütle, $\mathbf{c} = d\mathbf{r}/dt$, $\mathbf{g}$ başlangıçtaki göreceli hız $\{\mathbf{c}(t=0)\}$, $\mathbf{r}$ vektörü kütle merkezinin koordinat merkezine olan uzaklığı ve b etkileşme (impact) parametresidir. Bu enerji ifadesinin ilk terimi parçacığın kinetik enerjisi ve son iki terimi de genellikle bir grup halinde etkin (effective) potansiyel enerji $V(L,r)$ olarak isimlendirilir [7, 8].

Öncelikle, termodinamik özelliklerden olan iç enerji (U), entalpi (H), entropi (S), sabit hacimli ısı kapasitesi (C_v), sabit basınçta ısı kapasitesi (C_p), Joule-Thomson katsayısı (μ_J) ve ses hızı (c) bağıntılarının elde edilmesinde de kullanılan akışkana ait uygun bir moleküller arası potansiyel fonksiyonu seçilerek işe başlanır. İncelenecek akışkana ait uygun bir potansiyel enerji fonksiyonu $\phi(r)$ seçiminden sonra, bu potansiyel enerji fonksiyonu kullanılarak istenilen özellikler hesaplanabilir [7, 8]. Bu çalışmada ele alınan ^4He , ^3He , bunların eş karışımları ve diğer bazı akışkanlar için son yıllarda araştırmacılar tarafından *ab initio* hesaplamalarında geliştirilmiş değişik moleküller arası potansiyel enerji fonksiyonları kullanılmıştır [1, 3, 4, 13-19].

Geliştirilmiş potansiyel enerji fonksiyonları, moleküllerin yapısına ve iki molekül arasındaki uzaklığa göre seçilen fonksiyonlara terimler eklemek veya çıkarmak suretiyle elde edilen fonksiyonlar olup farklılık gösterirler. Potansiyel enerji fonksiyonları, genellikle molekül tiplerine ve erimlerine göre farklılık gösterirler. Uzun erim ($r \geq 8$ bohr), kısa erim ($r \leq 3$ bohr) ve orta erim ($3 \geq r \geq 8$ bohr) potansiyel enerji fonksiyonlarına (1 bohr=0.052917721 nm) örnek, uzun erim için Hurly ve arkadaşları [1] nin kullandığı $\phi_{00}(r)$ potansiyel enerji fonksiyonu, kısa erim için Ceperley ve Partridge [17] nin Quantum Monte Carlo (QMC) yönteminde kullandığı potansiyel enerji fonksiyonu ve orta erim için Bovenkamp ve van Duijneveldt [15] ve ayrıca van Mourik ve Dunning [18] in Coupled-Cluster Single Double Triple (CCSD(T)) yönteminde ve Korona [20] nin

Symmetry-adapted perturbation theory (SAPT) yönteminde kullandığı potansiyel enerji fonksiyonları tipleridir. Bunlardan Hurly ve arkadaşları'nın önerdiği potansiyel enerji fonksiyonu.

$$\varphi_{00}(r) = \begin{cases} \varphi_{itm}(r) + \varphi_{çek}(r), & 0.3 \leq r/\text{bohr} < \infty \\ \varphi_{itm}(0.3\text{bohr}) + \varphi_{çek}(0.3\text{bohr}), & 0 \leq r/\text{bohr} < 0.3 \end{cases} \quad (1.2)$$

$$\varphi_{itm}(r) = A \exp(a_1 r + a_2 r^2 + a_{-1} r^{-1} + a_{-2} r^{-2}),$$

$$\varphi_{çek}(r) = -\sum_{n=3}^8 \frac{f_{2n}(r) C_{2n}}{r^{2n}} \left[1 - \left(\sum_{k=0}^{2n} \frac{(\delta r)^k}{k!} \right) \exp(-\delta r) \right]$$

Biçimindedir. Burada C_{2n} dispersion katsayılarını, $(a_{-2}, a_{-1}, a_1, a_2 \text{ ve } \delta)$ çeşitli parametreleri göstermekte olup, $f_{2n}(r)$ faktörü $n=3$ olmak üzere, tüm r ler üzerinden uygulanan dipol-dipol terimleri etkileşiminin görelî gecikmesini ifade eden bir fonksiyondur. Bu faktör oldukça geniş bir r aralığında r^{-6} dan r^{-7} ye kadar dipol-dipol teriminin davranışının değişimini ifade eder ve Jamieson ve arkadaşlarının [19] çalışmasından alınmıştır.

^4He , ^3He ve eş karışımları normal koşullarda (açık hava basıncı ve oda sıcaklığı) da kuantum mekaniksel davranışlar göstermektedir. Bu nedenle bunlara ait kullanılacak moleküller arası potansiyel enerji fonksiyonlarının da klasik yapıdan ayrı olan ve kuantum mekaniksel etkileşimleri de kapsayacak şekilde geliştirilmiş olması gerekmektedir. Bu tip potansiyel enerji fonksiyonları, modern potansiyel enerji fonksiyonları olarak isimlendirilmektedir. Bu tip fonksiyonlardan ^3He ve ^4He için kullanılanlardan bazıları IBM potansiyeli(LM-2, LM-2A), Hartree-Fock dispersion (HFD-B2, HFD-ID) potansiyeli, Utrecht potansiyeli, non relativistic *ab initio* (VVVVR) potansiyeli ve φ_{SAPT} potansiyeli gibi potansiyellerdir [1, 3, 4].

1.3.2. İkinci Virial Terimi Bağıntısı B(T)

İkinci virial bağıntısı, gazlara ait termodinamiksel özelliklerin ve gaz içindeki ses hızının duyarlı olarak hesaplanmasında önemli bir rol oynamaktadır [1, 2, 6, 9]. Kuantum

mekaniksel davranışların olmadığı, çalışılan sıcaklık sınırları içinde akışkanlar için B(T) ikinci virial terimi,

$$B(T) = -\frac{2\pi N}{3kT} \int_0^\infty r^3 \frac{d\phi(r)}{dr} e^{-\phi(r)/kT} dr \quad (1.3)$$

dir. Burada, N Avagatro sayısı, k Boltzmann sabiti, T Kelvin cinsinden sıcaklık, r etkileşen iki molekül arası mesafe ve $\phi(r)$ ilgilenilen akışkan için seçilen kuantum mekaniksel davranışları içermeyen moleküller arası potansiyel enerji fonksiyonudur. [7, 8]. (1.3) bağıntısının türetilmesinde önemli bir yeri olan Z sıkışabilirlik ifadesi ise,

$$Z = 1 + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{A_n(T)}{V^{n-1}} \quad (1.4)$$

$$Z = \frac{pV}{RT} = 1 + \frac{B(T)}{V} + \frac{C(T)}{V^2} + \frac{D(T)}{V^3} + \dots \quad (1.5)$$

dir. Burada, p basınç, V hacim, T sıcaklık, R evrensel gaz sabiti, B(T) ikinci virial, C(T) üçüncü virial ve D(T) dördüncü virial ifadelerini göstermektedir [6-8, 21].

Oda sıcaklığında bile kuantum mekaniksel davranışlar gösteren ^4He ve ^3He ait ikinci virial terimi, içinde klasik ve kuantum mekaniksel davranışları da barındıracak şekilde üç ayrı terimin toplamı şeklinde ele alınmaktadır.

İki molekül arasındaki etkileşimi veren kuantum mekaniksel ikinci virial terimi, kuantum mekaniksel fonksiyona bağlıdır. Enerji seviyeleri, bu fonksiyon iki parçacıklı Schrödinger dalga denkleminde kullanılmaktadır. İki molekülün etkileşimi iki yolla incelenebilmektedir. Bunlardan birincisi, potansiyel çukurundaki iki molekülü ele alarak ve bunların çarpışmalarını inceleyerek çözüme gitmek, ikinci yol, iki moleküle ait fonksiyona, çift molekülün faz kaymalarını ve dalga denklemini ekleyerek çözüme ulaşma yoludur (ikinci virial terimi yöntemi). Buna göre, ikinci yol olarak ifade edilen ve bir akışkana ait kuantum mekaniksel davranışları da içeren ikinci virial bağıntısı aşağıdaki gibi üç terimin toplamı olarak verilir [7].

$$B(T) = \pm N 2^{-5/2} \lambda^3 - N 2^{+3/2} \lambda^3 \sum_{\ell} (2\ell + 1) \sum_n e^{-E_{n\ell}^-/kT} \\ - N 2^{+3/2} \lambda^3 \sum_{\ell} (2\ell + 1) \int e^{\hbar^2 \kappa^2 / 2\mu kT} \left[\frac{1}{\pi} \frac{d\eta_{\ell}(\kappa)}{d\kappa} \right] d\kappa \quad (1.6)$$

Burada birinci terim $B^0(T)$ gazın ideal halini gösteren terim olup, moleküllerin birbirlerine göre değerler alır ve ilk durumda çekme halinde pozitif (basıncın azalması) ve itme halinde negatif (basıncın artması) gazın nasıl davrandığını gösterir. İkinci terimin katkısı, çift moleküllerin yapısına bağlı olarak basıncın nasıl azaltıldığını gösterir. κ (bulk viskozite) üzerinden integrali alınan üçüncü terim de gazdaki tekli molekül çarpışmalarının ideal olmayan sonuçlardan gelen katkıyı gösterir. Bağntı (1.6) da (-) terim Bose-Einstein (BE) ve (+) terim de Fermi-Dirac (FD) istatistiğini belirtir. Ayrıca, η_l pozitif enerji için radyal dalga fonksiyonunun çözümünden elde edilen faz kaymalarını, $E = p^2/2\mu = \hbar^2 \kappa^2/2\mu$, μ indirgenmiş kütle olmak üzere sistemin görelî kinetik enerjisini, $\lambda = \sqrt{\hbar/\mu kT}$ termal dalga boyunu, N Avagadro sayısını, $\hbar = h/2\pi$ indirgenmiş Planck sabitini n ve ℓ kuantum sayılarını göstermektedir. Ayrıca, ℓ kuantum sayısı çift ise BE, tek ise FD istatistiği kullanılır. (1.6) ifadesi yalnızca spini sıfır olan moleküller için geçerlidir. Spini s ile tanımlanan moleküller için ise aşağıdaki istatistiksel toplamlar üzerinden değerlendirme yapılır [7, 8].

$$B_{BE}^{(s)} = \left[\frac{s+1}{2s+1} \right] B_{BE}^{(0)} + \left[\frac{s}{2s+1} \right] B_{FD}^{(0)} \quad (1.7.a)$$

$$B_{FD}^{(s)} = \left[\frac{s+1}{2s+1} \right] B_{FD}^{(0)} + \left[\frac{s}{2s+1} \right] B_{BE}^{(0)} \quad (1.7.b)$$

Buradaki $B^{(0)}$ değerlerinin tümü (1.6) ifadesinde olduğu gibi sıfır spin için hesaplanmıştır. Nükleonları tek sayı ve spini de $1/2$ olan ${}^3\text{He}$ için $B_{FD}^{(s)}$ ifadesi geçerlidir. (1.7.a) ve (1.7.b) ifadeleri saf ${}^4\text{He}$ ve ${}^3\text{He}$ için ağırlıklaştırılmış toplamalar, ℓ nin tek ve çift değerleri üzerinden alınarak kullanılır.

(1.6), (1.7.a) ve (1.7.b) bağntılarının geliştirilmiş bir potansiyel fonksiyonu seçilerek, kuantum mekaniksel davranışlarda bulunan bir akışkana ait ikinci virial teriminin hesaplanması için *ab initio* hesaplama yöntemi kullanılmaktadır. Bu tip hesaplamalar hem çok zaman almakta hem de maliyeti yüksek olmaktadır. Ayrıca, buradan elde edilen bağntılar çok fazla terimlidir ve yüksek matematiksel işlemler gerektirmektedir.

Kuantum mekaniksel ikinci virial bağıntılarının hesaplanabilmesine ilişkin *ab initio* hesaplama yöntemli bilgisayar programlarının geliştirilmişleri oldukça pahalı ve stratejik önemleri nedeniyle elde edilmeleri kolay olmamaktadır. Bu programların geliştirilmemiş olanlarıyla amaca uygun yapılmaya çalışılan hesaplamaların duyarlılıkları tartışma götürebilir niteliktedir. Ayrıca, buradan elde edilen ikinci virial terimleri sıcaklığa göre oldukça fazla terimli olduklarından bunların pratik kullanırlılığı yoktur. Bu nedenle, hesapsal fizik yöntemleri kullanılarak, yarı teorik yaklaşımlarla da ele alınan akışkanlara ait kuantum mekaniksel ikinci virial terimleri daha az terimli (10-15) ve belirsizliği de *ab initio* hesaplamalarıyla uyumlu olacak şekilde elde edilebilir.

İkinci virial değerlerinin yarı teorik ve hesapsal fizik yöntemiyle hesaplanmasında, çeşitli yöntemlerle (deneysel ve farklı potansiyeller) sıcaklığın fonksiyonu olarak elde edilmiş güvenilir ikinci virial değerleri kullanılır. Yarı teorik yöntemlere göre kuantum mekaniksel ikinci virial teriminin aynı zamanda sıcaklığın da bir fonksiyonu olmasından dolayı,

$$B(T)=f(T) \quad (1.8)$$

genel bağıntısından yararlanılarak ve ilgilenilen akışkana uygun potansiyel fonksiyonu da kullanılarak, her bir akışkan için farklı tipte pek çok ikinci virial bağıntısı önerilmektedir [1, 2, 7-9].

Çeşitli akışkanlar üzerinde araştırmalar yapan araştırmacılar ve bu araştırmacılar tarafından çeşitli deneysel yöntemlerle sıcaklığın fonksiyonu olarak elde edilmiş kuantum mekaniksel ikinci virial değerleri kullanılarak, önerilen ikinci virial bağıntılarının her birine ait keyfi sabitlerin sayısal değerleri, kuantum mekaniksel *ab initio* hesapsal yöntemleriyle veya çeşitli fit yöntemiyle tayin edilebilmektedir.

Sonuç olarak, sıcaklığın polinomal bir fonksiyonu olarak seçilen analitik tipli fonksiyonlardan ikinci virial bağıntısı her bir sıcaklık değeri için hesaplanır, aynı sıcaklıklar için deneysel olarak elde edilmiş kuantum mekaniksel ikinci virial değerleriyle karşılaştırılır. Elde edilen ve akışkanın kuantum mekaniksel davranışlarını da içeren bu ikinci virial bağıntısıyla, akışkandaki ses hızı (c), Boyle Sıcaklığı T_B [$B(T_B)=0$], Joule-Thomson sıcaklığı T_i , Joule-Thomson katsayısı μ_j , Joule-Thomson inversiyon sıcaklığı T_{ij} , Isı iletkenlik faktörü (α_T) ve aynı zamanda termodinamik fonksiyonlar da, belirsizliği en az ve duyarlılığı en fazla olacak şekilde hesaplanabilmektedir.

1.3.3. Transport (Aktarım) Özellikler

Aynı tip moleküllerden oluşan (saf) akışkanların transport (aktarım) katsayılarından olan η viskozluk katsayısı (momentum aktarımı), λ ısı iletkenliği (enerji aktarımı) ve D kütle difüzyon katsayısı (kütle aktarımı) bağıntılarının duyarlı olarak elde edilmesi bilimsel, teknolojik ve endüstriyel amaçlar için önemlidir. Bu nedenle bu katsayılarla ait bağıntılar elde edilirken, akışkanı oluşturan molekül biçimi, yapısı ve akışkanın klasik veya kuantum mekaniksel davranışlarda bulunduğu hallerini belirleyen, T sıcaklık, ρ yoğunluk ve p basınç koşullarının göz önüne alınması gereklidir. Örneğin, ^4He ve izotopu ^3He normal koşullarda (oda sıcaklığı ve 1 atmosfer basınçta) bile kuantum mekaniksel davranışlar göstermektedir. Ayrıca pek çok akışkan Ar , He , H_2 , N_2 ... katı küresel yapıdadır [7]. Bu nedenle ve kolaylığı yönünden akışkanın transport özellikleri belirlenirken katı küresel yapılu akışkanların incelenmesi ön plandadır. Diğer yapıdaki moleküler akışkanların transport özellikleri belirlenirken, katı küre transport özellikler belirli katsayılarla çarpılarak veya ilaveler yapılarak bulunur. Küresel transport özelliklere birinci dereceden yaklaşım adı verilmektedir. Ayrıca, η , λ , D gibi termofizik özelliklerin k inci dereceden yaklaşımları η_k , λ_k ve D_k şeklinde gösterilir [7, 8].

Transport özelliklerin elde edilmesinde kullanılan (1.1) bağıntısı, akışkanın bulunduğu haller (p , T , ρ), yapısı ve biçimi göz önüne alınarak kullanılmalıdır. Çarpışma integrali $\Omega^{(n,s)}$ ve tesir kesiti $Q^{(n)}$ bağıntıları kuantum mekaniksel davranışlar için farklı, klasik davranışlar için farklı formlarda tanımlanmaktadır.

Örneğin, saf katı küre yapılu akışkanlara ait tesir kesiti $Q^{(n)}$ ve çarpışma integrali $\Omega^{(n,s)}$ bağıntısı,

$$[Q^{(n)}]_{\text{katı küre}} = \left[1 - \frac{1}{2} \frac{1 + (-1)^n}{1 + n} \right] \pi \sigma^2 \quad (1.9)$$

$$[\Omega^{(n,s)}]_{\text{katı küre}} = \sqrt{\frac{kT}{2\pi\mu}} \frac{(s+1)!}{2} [Q^{(n)}]_{\text{katı küre}} \quad (1.10)$$

olarak verilmektedir. Katı küresel saf akışkanlara ait transport özelliklerin kuantum mekaniksel davranışlarını da içerecek şekilde hesaplanabilmesi için,

$$Q_k^{(n)} = 2\pi \int_0^\infty (1 - \cos^n \chi) b db \quad (1.11.a)$$

olarak verilen klasik bağıntının kuantum mekaniksel olarak ifade edilebilmesi için $2\pi b db$ klasik parametreleri yerine bunlara karşılık gelen kuantum mekaniksel $2\pi \sigma(\cos \chi) \sin \chi d\chi$ parametreleri konulmalıdır. Bu durumda kuantum mekaniksel tesir kesiti integrali $Q^{(n)}$,

$$Q_k^{(n)} = 2\pi \int_0^\infty (1 - \cos^n \chi) \sigma(\cos \chi) \sin \chi d\chi \quad (1.11.b)$$

olarak verilir. Buna göre, $\Omega_{ij}^{(n,s)}$ çarpışma integrali de kuantum mekaniksel olarak;

$$\Omega_{ij}^{(n,s)} = \sqrt{\frac{2\pi kT}{\mu_{ij}}} \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-\gamma_{ij}^2} \gamma_{ij}^{2s+3} (1 - \cos^n \chi) \sigma(\cos \chi) \sin \chi d\chi d\gamma_{ij} \quad (1.12)$$

biçiminde verilir. Burada, $\sigma(\cos \chi)$ asimptotik faz kayması, μ_{ij} çarpışan i ve j moleküllerinin indirgenmiş kütlesi ve $\gamma_{ij} = \sqrt{\frac{\mu_{ij}}{2kT}} \bar{g}_{ij}$ çarpışan moleküllerin başlangıçtaki indirgenmiş görelî hızı [7, 8, 22].

1.3.3.1 Viskozite η (Momentum Aktarımı), Klasik ve Kuantum Mekaniksel Yaklaşım

Klasik yaklaşımla, akışkanların transport katsayılarından biri olan viskozite katsayısı bağıntısı, bunların kuantum mekaniksel davranışlar sınırına ve orta yoğunluklara kadar, küresel yapıli saf akışkanlar için birincil yaklaşım şekliyle η_1 aşağıdaki gibi verilmektedir. [7, 8, 10, 23].

$$[\eta]_1 = \frac{5}{16} \left(\frac{\sqrt{\pi m k T}}{\pi \sigma^2 \Omega^{(2,2)*}} \right) \quad (1.13.a)$$

Burada, m ilgilenilen akışkanın kütlesi, k Boltzmann sabiti, T Kelvin olarak sıcaklık, σ moleküler çap ve $\Omega^{(2,2)}$ çarpışma integralidir. Daha yüksek dereceden yaklaşımlı viskozite katsayısı,

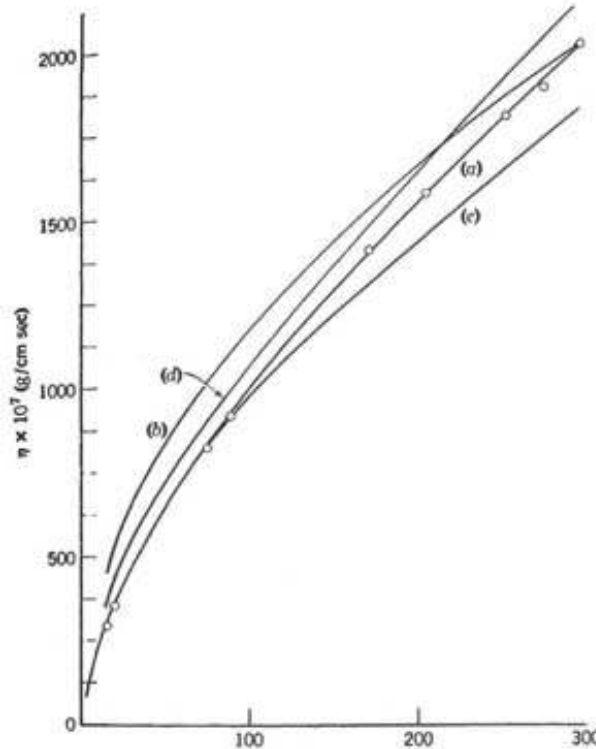
$$[\eta]_2 = [\eta]_1 f_\eta^{(k)} \quad (1.13.b)$$

dır. Burada k yaklaşım derecesidir. $f_\eta^{(k)}$ sıcaklıkla oldukça yavaş değişen fonksiyonlardır. $f_\eta^{(k)}$ nın elde edilmesinde Chapman, Cowling, Kihara [7, 8] yaklaşım yöntemleri kullanılmaktadır. ^4He ait viskozite ile ilgili hesaplamaların denel ve teorik karşılaştırılması Şekil 1.1 de verilmiştir.

Kuantum mekaniksel yaklaşımları da içeren akışkana ait viskozluk katsayısı, ikinci dereceden teorik olarak aşağıdaki bağıntıyla verilmektedir [7, 8].

$$[\eta]_2 = \frac{5kT}{8\Omega^{(2,2)}} f_\eta^2 \left[1 \pm n \frac{h^3}{(2\pi mkT)^{3/2}} (\delta_\eta^{(1)} + \delta_\eta^{(2)}) \right] \quad (1.14)$$

Burada, artı (+) işareti Bose-Einstein, eksi işareti (-) Fermi-Dirac istatistiğini gösterir. $f_\eta^{(2)}$ ve $\Omega^{(2,2)}$ niceliklerinin tesir kesitine bağlı olarak kuantum mekaniksel hesaplamaları yapılmalıdır.



Şekil 1.1 ^4He için hesaplanmış ve deneysel viskozite verilerinin karşılaştırılması. (a) Deneysel. (b) Klasik teoriye göre katı küre yapı için hesaplanmış. (c) Kuantum teorisine göre katı küre için hesaplanmış (Uehling). (d) kuantum teorisine göre Slater potansiyeli için hesaplanmış viskoziteler [7].

Bu hesaplamada, itici potansiyelin 12. mertebeden (Lennard-Jones (6-12)) kuvveti için T nin mutlak sıfıra yaklaşımı yapıldığında $f_{\eta}^{(2)}=1.016$ olduğu görülür ki bu kuantumsal düzeltme yalnızca, oldukça düşük sıcaklıklarda fark edilebilir. (1.14) ifadesinde yer alan $\delta_{\eta}^{(1)}$ niceliği,

$$\delta_{\eta}^{(1)} = 2^{-7/2} \left[4 - \frac{128}{3^{3/2}} \frac{\Gamma^{(2,2)}}{\Omega^{(2,2)}} \right] \quad (1.15)$$

olarak verilir. İkinci mertebeden yaklaşımı gösteren $\delta_{\eta}^{(2)}$ niceliği, $\delta_{\eta}^{(1)}$ niceliğine göre oldukça küçük olması nedeniyle genellikle hesaplamalara katılmaz. Bu niceliğin içinde görülen $\Gamma^{(2,2)}$ niceliği ise $\sqrt{2\pi\mu/kT} \Omega^{(n,s)} = \int_0^{\infty} e^{-\gamma^2} \gamma^{2s+3} Q^{(n)} d\gamma$ integralinin hesaplanması yöntemi ile benzerlik gösterir. [7].

1.3.3.2 Isı İletkenliği λ (Enerji Aktarımı), Klasik ve Kuantum Mekaniksel Yaklaşım

Saf akışkanlara ait birinci dereceden klasik yaklaşımla, orta yoğunluk bölgeleri için verilen termal iletkenlik katsayısı bağıntısı,

$$[\lambda]_1 = \frac{25}{32} \left(\frac{\sqrt{\pi m k T}}{\pi \sigma^2 \Omega^{(2,2)*}} \right) \left(\frac{c_v}{m} \right) \quad (1.16.a)$$

olarak verilir [7, 8]. Burada m ilgilenilen akışkanın kütlesi, k Boltzmann sabiti, T Kelvin olarak sıcaklık, σ moleküler çap, c_v sabit hacimde ısı kapasitesi ve $\Omega^{(2,2)}$ çarpışma integralidir. Viskozitedeki gibi benzer şekilde kuantum düzeltmesi yapıldığında, k'inci yaklaşım derecesindeki bu katsayı bağıntısı,

$$[\lambda]_k = [\lambda]_1 f_{\lambda}^k = \frac{15}{4} \frac{[\eta]_k R}{M} \frac{f_{\lambda}^k}{f_{\eta}^k} \quad (1.16.b)$$

ile verilir [7, 8]. Burada f_{λ}^k ve f_{η}^k birbirinden farklı olmalarına rağmen sıcaklıkla oldukça yavaş değişen fonksiyonlardır, R genel gaz sabiti, M akışkanın molekül ağırlığı ve $[\eta]_k$ k'inci dereceden viskozite katsayısıdır.

Eğer, ısı iletkenliği katsayısı bağıntısının kuantum mekaniksel davranışları da içermesi istenirse, ele alınan saf akışkana ait ikinci dereceden ısı iletkenliği katsayısı bağıntısı, kuantum mekaniksel nicelikleri de içeren yaklaşımı aşağıdaki gibi verilir [7, 8].

$$[\lambda]_2 = \frac{25c_v kT}{16\Omega^{(2,2)}} f_{\lambda}^{(2)} \left[1 \pm n \frac{h^3}{(2\pi mkT)^{3/2}} (\delta_{\lambda}^{(1)} + \delta_{\lambda}^{(2)}) \right] \quad (1.17)$$

İfadede yer alan artı (+) işaret Bose-Einstein, eksi(-) işareti de Fermi-Dirac istatistiğini gösterir. (1.17) bağıntısı içerisindeki $\delta_{\lambda}^{(1)}$ niceliği ise;

$$\delta_{\lambda}^{(1)} = 2^{-7/2} \left[7 - \frac{128}{3^{3/2}} \frac{\Gamma^{(2,3)} + 6\Gamma^{(2,2)}}{9\Omega^{(2,2)}} \right] \quad (1.18)$$

olarak verilir. İkinci dereceden yaklaşımı gösteren $\delta_{\lambda}^{(2)}$ niceliği, $\delta_{\lambda}^{(1)}$ niceliğine göre oldukça küçük olması nedeniyle genellikle hesaplamalara katılmaz. Ayrıca, (1.18) bağıntısında görülen $\Gamma^{(2,2)}$ ve $\Gamma^{(2,3)}$ nicelikleri ise; $\sqrt{2\pi\mu/kT} \Omega^{(n,s)} = \int_0^{\infty} e^{-\gamma^2} \gamma^{2s+3} Q^{(n)} d\gamma$ integralinin hesaplanması yöntemi ile benzerlik gösterir [7].

1.3.3.3 Kütle Difüzyon Katsayısı D (Kütle Aktarımı), Klasik ve Kuantum Mekaniksel Yaklaşım

Transport katsayılarından, saf akışkanlara ait birinci dereceden yaklaşımla kuantum mekaniksel davranışlar dışında ve orta yoğunluk bölgeleri için verilen klasik kütle difüzyon (kütle aktarımı) katsayısı bağıntısı,

$$[D]_I = \frac{3}{8} \left(\frac{\sqrt{\pi mkT}}{\pi \sigma^2 \Omega^{(1,1)*}} \right) \left(\frac{1}{\rho} \right) = \frac{3}{16} \frac{\sqrt{2\pi k^3 T^3 / \mu}}{p \pi \sigma^2 \Omega^{(1,1)*}} \quad (1.19a)$$

ile verilmektedir. Burada ρ yoğunluk, $\Omega^{(1,1)}$ çarpışma integralinin birinci dereceden yaklaşım değeridir. k 'inci dereceden yaklaşımla, kütle difüzyon katsayısı

$$[D]_k = [D]_I f_D^{(k)} \quad (1.19b)$$

bağıntısıyla verilir. Burada, $f_D^{(k)}$ moleküler ağırlığın bir fonksiyondur. Aynı zamanda, kütle difüzyon katsayısı kuantum mekaniksel olarak, (1.14) ve (1.17) bağıntılarının veriliş biçimiyle benzer bir bağıntıyla verilebilir [7, 8].

Bu bölümde, transport özelliklere ait hesaplamalarda kullanılan fiziksel niceliklerin klasik ve kuantum mekaniksel yapılarıyla ilgili teorik bilgi kısmen verilmiş oldu. İlerdeki bölümlerde, transport özelliklerin kuantum mekaniksel etkileri ve hesaplanmaları daha detaylı olarak ele alınacak, oda sıcaklığı ve normal atmosfer basıncında bile kuantum mekaniksel davranışlar gösteren ^4He , ^3He ve bunların eş karışımları ile ilgili hesaplamalar yapılacaktır.

BÖLÜM 2

TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİN DAHA KAPSAMLI OLARAK KUANTUM MEKANİKSEL HESAPLANMASI

2.1 KUANTUM MEKANİKSEL YAKLAŞIM

^4He ve ^3He gibi normal koşullarda bile kuantum mekaniksel davranışlar gösteren akışkanların termofizik özelliklerinin *ab initio* hesaplamalarının yapılabilmesi için, $\Omega^{(n,s)}$ kuantum mekaniksel çarpışma integrali ve $Q_k^{(n)}$ kuantum mekaniksel tesir kesitinin bu etkileşimleri ifade edecek şekilde ele alınması gerekmektedir. Bu nedenle bu bölümde, $\Omega^{(n,s)}$ kuantum mekaniksel çarpışma integrali ve $Q_k^{(n)}$ kuantum mekaniksel tesir kesiti detaylı olarak ele alınmıştır.

(1.14) ve (1.17) bağıntılarından da görüldüğü gibi akışkana ait η viskozluk, λ ısı iletimi ve D kütle difüzyon katsayısının hesaplanabilmesi için kuantum mekaniksel $\Omega^{(n,s)}$ çarpışma integrali bağıntısının belirsizliği en az olacak şekilde elde edilmesi gerekmektedir. $\Omega^{(n,s)}$ çarpışma integrali elde edildikten sonra istenilen sıcaklık aralığında (1.14) ve (1.17) bağıntılarının değişik yapıları elde edilebilir.

Genel anlamalı $\Omega^{(n,s)}$ çarpışma integrali bağıntısı, sıcaklığın bir fonksiyonu olarak indirgenmiş yapıda aşağıdaki gibi yazılabilir [1, 7, 8].

$$\Omega^{(n,s)*}(T^*) = \{(s+1)! T^{*(s+2)}\}^{-1} \times \int_0^\infty Q_k^{(n)*}(E^*) e^{-E^*/T^*} E^{*(s+1)} dE^* \quad (2.1)$$

Bu eşitliğin kuantum mekaniksel olarak değerlendirilebilmesi için indirgenmiş tesir kesiti integrali $Q_k^{(n)*}$ nin de kuantum mekaniksel olarak ele alınması gerekmektedir. İndirgenmiş kuantum mekaniksel tesir kesiti $Q_k^{(n)*}$ akışkanın moleküllerinin etkileşmesine ait her bir E

enerji değeri bölgesi için hesaplanması zorunludur. Burada üst indis yıldız (*) enerji ve sıcaklığın her ikisinin de $\phi(r)$ kuyu potansiyeli ile ölçeklendirildiğini gösterir. Buna göre, $Q_k^{(n)*}$ ifadesinin de $\phi(r)$ nin minimumuna yerleşmiş r_m yarıçaplı bir katı küre için $Q_k^{(n)}$ değeriyle ölçeklendirildiğini göstermektedir [1]. Kuantum mekaniksel viskozite, ısı iletkenliği ve kütle difüzyon katsayısı bağıntılarının hesaplanabilmesi için, bağıntılardan da görüleceği gibi sıcaklığın bir fonksiyonu olarak $\Omega^{(n,s)*}(T^*)$ çarpışma integralinin hesaplanması gerekmektedir.

Önce, transport katsayılarının ve ikinci virial bağıntılarının bulunması için kuantum mekaniksel etkileri de içeren bir çarpışma integrali bağıntısı elde edilir. Hesaplamalar için kullanılacak ve aynı zamanda sıcaklığın da analitik bir fonksiyonu olan $\Omega^{(n,s)*}(T^*)$ çarpışma integrali bağıntısı, kuantum mekaniksel etkilerin başladığı sınıra kadar Lennard-Jones (6-12) ve Maitland-Smith ($n(\bar{r})-6$) moleküler potansiyel enerji fonksiyonları kullanılarak veya kuantum mekaniksel davranışlara ait transport özellikler kullanılarak dolaylı yoldan elde edilebilir [1, 6-8].

Sıcaklığın da bir fonksiyonu olan genel $\Omega^{(n,s)}$ çarpışma integrali, analitik olarak aşağıda verilmiştir. Bu bir genel hal olup $\Omega^{(n,s)}$ analitik fonksiyonu, sıcaklığın bir fonksiyonu olarak viskozluk, termal iletkenlik ve difüzyon için sırasıyla $\Omega_\eta^{(2,2)}(T)$, $\Omega_\lambda^{(2,2)}(T)$ ve $\Omega_D^{(1,1)}(T)$ şeklinde gösterilir ve transport katsayılarının hesaplamalarında, ele alınacak akışkana ve termofizik özelliklere bağlı olarak fiziksel nicelikli çeşitli yapılarda önerilebilir [1, 7, 8].

$$\Omega^{(n,s)}(T) = f(T) \quad (2.2)$$

Burada, T Kelvin olarak sıcaklık ve $f(T)$ ilgilenilen transport özellik için en uygun yapıdaki sıcaklığa bağlı bir fonksiyondur. Bu fonksiyon seçimi yapıldıktan sonra $\Omega_\eta^{(2,2)}(T)$, $\Omega_\lambda^{(2,2)}(T)$ ve $\Omega_D^{(1,1)}(T)$ çarpışma integralleri hesaplanarak (η) viskozite bağıntısı, (λ) ısı iletkenliği, (D) difüzyon katsayısı ve ısı difüzyon faktörü (α_T) gibi bağıntılar hesaplanabilir [1, 7, 8, 24, 25].

2.1.1 Çarpışma İntegrali $\Omega_{ij}^{(n,s)}$

Transport katsayılarının hesaplanabilmesi için $\Omega^{(n,s)}$ bağıntısının belirsizliği en az olacak şekilde elde edilmesi gerekir. Bu amaçla, hesaplamalarda kullanılacak bazı parametrelerin bilinmesi gerekmektedir. Bilinmesi gereken bu parametrelerden en önemlisi, çarpışan molekülün sapma (deflection) açısı bağıntısıdır. Teorik olarak, genel kapsamlı bu hesaplamalar için potansiyel enerji fonksiyonu $\phi(r)$ ye bağlı, çarpışan iki atomun veya molekülün kütle merkezinden sapma açısı,

$$\chi(b, g) = \pi - 2b \int_{r_m}^{\infty} \frac{dr/r^2}{\sqrt{1 - (\phi(r)/\frac{1}{2}\mu g^2) - (b^2/r^2)}} \quad (2.3)$$

bağıntısıyla bulunabilmektedir. Burada $\phi(r)$, küresel simetriye sahip herhangi bir etkileşme potansiyeli, r_m zamana bağlı bir fonksiyon olan moleküller arası mesafe, b etkileşme parametresi, μ indirgenmiş kütle, g indirgenmiş kütle başına çarpışan moleküllerin göreceli hızıdır.

Katı küre (hard-core) yapılı moleküller için χ sapma açısının analitik tanımlamasını yapmak daha kolaydır, fakat (2.3) ifadesinin sayısal olarak çözülebilmesi için g ve b değerlerinin akışkanın davranışına göre (klasik ve kuantumsal) belirlenmesi gerekir. (2.3) bağıntısı sayısal olarak belirlendikten sonra $\Omega^{(n,s)}(T)$ çarpışma integralinin sayısal değerlendirilmesi yapılabilir. Genel anlamda i ve j tipindeki moleküller arası çarpışmalar için $\Omega^{(n,s)}$ çarpışma integrali,

$$\Omega_{ij}^{(n,s)} = \sqrt{\frac{2\pi kT}{\mu_{ij}}} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-\gamma_{ij}^2} \gamma_{ij}^{2s+3} (1 - \cos^n \chi) b db d\gamma_{ij} \quad (2.4)$$

şeklinde ifade edilir. Burada μ_{ij} çarpışan i ve j moleküllerinin indirgenmiş kütlesi, $\gamma_{ij} = \sqrt{\frac{\mu_{ij}}{2kT}} \bar{g}_{ij}$ çarpışan moleküllerin başlangıçtaki indirgenmiş göreceli hızı χ kütle çekim merkezli koordinat sisteminden saçılmış moleküllerin açısı b çarpışma parametresidir.

Transport katsayılarından olan η (viskozite), λ (ısı iletkenliği) ve D (kütle difüzyon katsayısı) bağıntılarının tanımlanabilmesi ve hesaplanabilmesi için çarpışmaların

dinamiğinin iyi bilinmesi gerekmektedir. Bu nedenle, öncelikle çarpışma integralinin ele alınması gerekmektedir. Farklı iki molekülün $\Omega_{ij}^{(n,s)}$ çarpışma integralinin değerlendirilebilmesi için b çarpışma parametresi ve g_{ij} başlangıç görelî hızın bir fonksiyonu olarak χ saçılma açısının bilinmesi gerekmektedir. Bu eşitlikte, $\phi(r)$ etkileşme potansiyel enerjisi açıkça görülmektedir. Böylece, etkileşme potansiyeli verildiğinde $\Omega^{(n,s)}$ çarpışma integrali ve dolayısıyla transport katsayıları hesaplanabilir [7, 8].

$\Omega^{(n,s)}$ çarpışma integrali, saçılma açısı ve çarpışma parametresi cinsinden hesaplanabildiği gibi $Q_k^{(n)}(g)$ tesir kesiti integralini içerecek biçimde de hesaplanabilir. Bu tür hesaplama yöntemi, çarpışan moleküllerin tesir kesitlerinin bilindiği bazı durumlarda kolaylık sağlamaktadır.

2.1.2. Kuantum Tesir Kesiti İntegrali $Q_k^{(n)}(g)$

Eğer Akışkana ait $\Omega^{(n,s)}$ çarpışma integrali $Q^{(n)}$ tesir kesiti integraline bağlı olarak hesaplanacaksa bunun için öncelikle akışkana ait $Q^{(n)}$ tesir kesit integralinin bilinmesi gerekmektedir. Klasik olarak tesir kesiti integrali;

$$Q^{(n)}(g) = 2\pi \int_0^\infty (1 - \cos^n \chi) b db \quad (2.5)$$

şeklinde verilmektedir. Burada, b etkileşme parametresi, g indirgenmiş kütle başına çarpışan moleküllerin görelî hızı ve χ çarpışan molekülün kütle çekim merkezinden sapma açısıdır. (2.5) ifadesi (2.4) de yerine iletilirse klasik çarpışma integrali, tesir kesiti integrali cinsinden;

$$\Omega^{(n,s)}(T) = \sqrt{\frac{kT}{2\pi\mu}} \int_0^\infty e^{-\gamma^2} \gamma^{2s+3} Q^{(n)}(g) d\gamma \quad (2.6)$$

olarak elde edilir. (2.5) ifadesi klasik tesir kesit integrali olup, bu bağıntının kuantum mekaniksel yapısı kesim 1.3.3 de de belirtildiği gibi;

$$Q_k^{(n)}(g) = 2\pi \int_0^\infty (1 - \cos^n \chi) \sigma(\cos \chi) \sin \chi d\chi \quad (2.7)$$

biçimindedir. Burada, klasik $Q^{(n)}$ ifadesinde bulunan $2\pi b db$ klasik parametreler yerine bunlara karşılık gelen kuantum mekaniksel $2\pi\sigma(\cos\chi)\sin\chi d\chi$ parametreleri konulmuştur [7, 8, 22]. Bu durumda çarpışma integrali kuantum mekaniksel olarak;

$$\Omega_{ij}^{(n,s)} = \sqrt{\frac{2\pi kT}{\mu_{ij}}} \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-\gamma_{ij}^2} \gamma_{ij}^{2s+3} (1 - \cos^n \chi) \sigma(\cos\chi) \sin\chi d\chi d\gamma_{ij} \quad (2.8)$$

şeklinde yazılabilir. Buradaki $\sigma(\cos\chi)$, asimptotik faz kayması olarak isimlendirilen niceliğin terimleri olarak tanımlanır [7, 8].

Sonuç olarak, hem klasik ve hem de kuantum mekaniksel $\Omega^{(n,s)}$ çarpışma integrali,

$$\sqrt{2\pi\mu/kT} \Omega^{(n,s)} = \int_0^\infty e^{-\gamma^2} \gamma^{2s+3} Q^{(n)} d\gamma \quad (2.9)$$

ifadesinin yorumlanmasından elde edilmektedir. Klasik teoriye göre, $\gamma^2 = \mu g^2 / 2kT$ ve kuantum teorisine göre $\gamma^2 = \hbar^2 \kappa^2 / 2\mu kT$ olarak alınmaktadır. Burada, μ indirgenmiş kütle, g molekülün başlangıçtaki görelî hızı, κ bulk hızı ve $\hbar$, $h/2\pi$ olarak Planck sabitidir.

BÖLÜM 3

^4He ^3He AKIŞKANLARININ İKİNCİ VİRİAL BAĞINTILARININ VE TERMOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİN HESAPLANMASI YÖNTEMİ

Kuantum mekaniksel davranışların öne çıktığı deney sistemlerinde ve deney teknolojisinin yetersiz kaldığı fiziksel niceliklere ait değerlerin bulunmasında, yarı teorik ve hesapsal fizik yöntemleri, çözümde önemli ve geçerli olmaktadır. Hatta bu yöntemle elde edilecek değerlerle istenilen fiziksel nicelikleri ölçmek için kullanılacak aletlerin kalibrasyonunun yapılabileceği belirtilmektedir [1, 2, 5]. Ele alınan akışkana ait transport özelliklerin (η , λ , D), termodinamik fonksiyonların (entropi, entalpi, ısı kapasitesi, akışkandaki ses hızı, Joule-Thomson katsayısı, vb.) ve ikinci virial $B(T)$ nin hesaplanabilmesine ilişkin uygulamalardan bahsedilmiştir. Günümüzde sayısal fizik yöntemleri oldukça gelişmiş durumdadır. Deney teknolojisinin yetersiz kaldığı hallerde yarı teorik yaklaşım ve sayısal fizik yöntemleri kullanılarak incelenecek konuyu çözümlemek, verdikleri sonuçların güvenilirliği ve pratikliği yönünden daha çok tercih edilir durumdadır. Ayrıca, buradan elde edilen çözüm sonuçları diğer dolaylı ölçüm yöntemlerine göre elde edilenlerle, fiziksel anlam ve duyarlılık bakımından da uyum içindedir.

Özellikle kuantum mekaniksel davranışlarda bulunan bir akışkana ait η , λ , D , $B(T)$ ve termodinamik fonksiyonların hesaplanmasında, yarı teorik yöntem ve sayısal fizik yöntemleri, konuya ilişkin çalışmalarda araştırmacıya güven, zaman ve doğru sonuçlara ulaşma kolaylığı sağlamaktadır. Bu tür çalışmalar ilk bakışta, önerilen fiziksel anlamlı bağıntılardan yola çıkarak sağlanan verilerin kullanılması sonucunda istenilen fiziksel niceliğe ait bağıntıların ve bu bağıntılardaki sabitlerin belirlenmesi şeklinde bir görüntü verebilir. Esasında işin içine girildiğinde, uzun ve titiz çalışmaların gerekliliği gözlenir. Günümüzde gelişmiş hesapsal fizik yöntemler kullanarak yapılan bu tür çalışmalar, deney aletleriyle ölçüm almak ve bu ölçümlerle sonuca varmaktan farklı değildir. Günümüzdeki bu tür çalışmalar, deney teknolojisinin yetersiz olduğu araştırmalara ait bilimsel disiplinlerin de kaçınılmazı olmaktadır.

3.1 HESAPLAMA YÖNTEMİ

Yarı teorik ve hesapsal yöntem kullanılarak elde edilecek olan ikinci virial bağıntısı, bu bağıntının sıcaklığa göre davranışı ve transport katsayısı bağıntıları kinetik teoriye, kuantum mekanik teoriye ve istatistik fizik yasalarına uymalıdır. Ayrıca yarı teorik ve hesapsal yöntemlerle elde edilecek bu ifadeler kullanılarak hesaplanacak olan değerler, *ab initio* hesaplama yöntemi ile sağlanan verilerin kullanılmasıyla elde edilen ikinci virial ve transport katsayıları değerleriyle ve akıllıca seçilecek olan denel değerlerle kabul edilebilir bir belirsizlik (standart ve ortalama yüzde sapma) içinde olmalıdır. Ancak bu şekilde bulunan yarı teorik fiziksel bağıntılar, bilimsel alanlarda, teknolojik ve endüstriyel araştırmalarda kullanılabilir.

3.1.1 $Q_k^{(n)}$ Kuantum Tesir Kesiti İntegralinin Hesaplanması

Kuantum tesir kesiti, etkileşen atomların simetrisine bağlı olarak faz kaymalarının toplamalarını gerektiren bir fonksiyondur. $Q_k^{(n)}$ kuantum tesir kesitlerinin birbirlerinden bağımsız olarak n nin tek ve çift değerleri üzerinden toplamaları;

$$Q_{\text{tek}}^1 = \frac{4\pi}{k} \sum_{n=1,3,5,\dots}^{\infty} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_{\ell} \quad (3.1)$$

$$Q_{\text{çift}}^1 = \frac{4\pi}{k} \sum_{n=0,2,4,\dots}^{\infty} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_{\ell}$$

olacağından ağırlıklı toplamalar hesaplanabilir. $Q_k^{(n)}$ kuantum tesir kesitini Bose-Einstein (BE) veya Fermi-Dirac (FD) istatistiği için değerlendirmek gerektiğinde toplamalar (1.7a) ve (1.7b) de gösterildiği gibi spin-bağımlı bölüm olarak ağırlıklaştırılır. Benzer olarak, ikinci virial ifadesi için (3.1) ifadesindeki toplamalar $n = \infty$ 'a genişletilir. Toplama işlemi, tesir kesitinin 10^{-8} den daha küçük olması durumuna kadar altı faz ve daha fazlası durumlar için değiştirilir. $n=6$ moment değerine kadar olan transport özellikleri için yüksek mertebeden yaklaşımlarda tesir kesitlerini hesaplamak için çarpışma integrali veya omega integrali kullanmak gerekir [1, 7, 8, 22].

3.1.2 $\Omega^{(n,s)}$ Çarpışma İntegralinin Hesaplanması

Genel anlamda indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak, indirgenmiş çarpışma integrali bağıntısı aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$\Omega^{(n,s)}(T^*) = \left\{ (s+1)! T^{*(s+2)} \right\}^{-1} \times \int_0^\infty Q^{(n)*}(E^*) e^{E^*/T^*} E^{*(s+1)} dE^* \quad (3.2)$$

Burada, enerji ve sıcaklığın üst indisi (*), $\phi(r)$ moleküller arası potansiyel enerji fonksiyonunun kuyu-derinliği tarafından ölçeklendirilir ve $Q^{(n)*}$, $\phi(r)$ moleküller arası potansiyel enerji fonksiyonunun minimumuna yerleşmiş r_m yarıçaplı katı kürenin $Q^{(n)}$ değeriyle ölçeklendirilir. (3.2) ifadesinin değerlendirilebilmesi için kuantum tesir kesitinin her enerji değeri için hesaplanması gerekliliği Bölüm 2 de belirtilmiştir.

Öncelikle her bir akışkan için ikinci virial bağıntıları ve transport katsayılarının hesaplanabilmesi için kuantum mekaniksel etkileri de içeren bir çarpışma integrali bağıntısı elde edilmelidir. Hesaplamalarda kullanılacak, sıcaklığın da analitik bir fonksiyonu olan $\Omega^{(n,s)}(T)$ çarpışma integrali katsayısı bağıntısı, kuantum mekaniksel etkilerin başladığı sınıra kadar Lennard-Jones (6-12) ve Maitland-Smith $n(\bar{r})-6$ moleküler potansiyel enerji fonksiyonları ve kuantum mekaniksel davranışlara ait transport özellikler kullanılarak [1, 6-8] dolaylı olarak elde edilir. Sıcaklığın da bir fonksiyonu olan $\Omega^{(n,s)}(T)$ çarpışma integralinin genel yapısı, analitik fonksiyon olarak (2.2) de verilmiştir. Genel olan $\Omega^{(n,s)}(T)$ analitik fonksiyonu, viskozluk, termal iletkenlik ve difüzyon için sırasıyla $\Omega_\eta^{(n,s)}(T)$, $\Omega_\lambda^{(n,s)}(T)$ ve $\Omega_D^{(n,s)}(T)$ şeklinde gösterilir ve transport katsayılarının hesaplanmalarında kullanılır [7, 8].

3.2 TERMOFİZİK ÖZELLİKLERİN HESAPLANMASI

3.2.1 İkinci Virial B(T) Teriminin Hesaplanması

Bilindiği gibi ikinci virial terimi sıcaklığın bir fonksiyonudur. Bu nedenle ikinci virial terimi, kuantum mekaniksel etkileri de karşılayacak biçimde ve genel anlamda aşağıdaki gibi verilir [2, 6-9, 21].

$$B(T)=f(T) \quad (3.3)$$

Sıcaklığın kapalı bir fonksiyonu olan ikinci virial ifadesi polinomal olarak yazılabilir ve ele alınan akışkana uygun bir bağıntı olarak önerilebilir. Bu önerilen bağıntının katsayıları ise *ab initio* ve denel veriler kullanılarak Least Squares Parameter Estimation fit metoduyla elde edilebilir. Yine bu önerilen bağıntılardan en duyarlı ve en az belirsizlikli olanı bulunabilir. Belirsizliği en az olarak elde edilen $B(T)$ ikinci virial ile, akışkana ait termodinamik özellikler ve akışkan içindeki ses hızı duyarlı olarak hesaplanabilir.

3.2.2 Viskozitenin $\eta(T)$ Hesaplanması

Ele alınan akışkana ait viskozite bağıntısında yer alan $\Omega_{\eta}^{(n,s)}(T)$ viskozite çarpışma integrali sıcaklığın bir fonksiyonudur. Bu nedenle, viskozite bağıntısında sıcaklığın lineer veya üstel bir fonksiyonudur. Aynı zamanda, viskozite bağıntısı indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olan $\Omega_{\eta}^{*(2,2)}(T^*)$ çarpışma integralinin de bir fonksiyonudur. Buna göre viskozite katsayısı kuantum mekaniksel etkileri de barındıracak şekilde aşağıdaki gibi verilir [5, 7, 8, 23].

$$[\eta]_2 = x_{\eta} \frac{\sqrt{T}}{\Omega_{\eta}^{*(2,2)}(T^*)} \quad (3.4)$$

Burada, $x_{\eta} = \frac{5}{16} \sqrt{\frac{mk}{\pi}} \frac{f_{\eta}^2}{\sigma^2}$ (σ küresel molekülün çapı, m küresel molekülün kütlesi, k Boltzmann sabiti ve f_{η}^2 sıcaklığın bir fonksiyonu olarak çok yavaş değişen bir parametre) ve $\Omega_{\eta}^{*(2,2)}$ niceliği fiziksel öneme sahip, herhangi bir moleküler modelin idealize edilmiş katı küre yapıdan sapmasını gösteren çarpışma integralidir.

3.2.3 Isı İletkenliğinin $\lambda(T)$ Hesaplanması

İlgili akışkana ait ısı (termal) iletkenlik için ele alınan $\Omega_{\lambda}^{(n,s)}(T)$ çarpışma integrali ele alınarak, sıcaklığın bir fonksiyonu olan kuantum mekaniksel ısı iletkenlik bağıntısı, aşağıdaki gibi verilir [5, 7, 8, 16].

$$[\lambda]_2 = x_{\lambda} \frac{\sqrt{T}}{\Omega_{\lambda}^{*(2,2)}(T^*)} \quad (3.5)$$

Burada, $x_\lambda = \frac{25}{32} c_v \sqrt{\frac{k}{\pi m}} \frac{f_\lambda^2}{\sigma^2}$, ($W m^{-1} K^{-3/2}$), (σ küresel molekülün çapı, m küresel molekülün kütlesi, k Boltzmann sabiti ve f_η^2 , sıcaklığın bir fonksiyonu olarak çok yavaş değişen bir parametre), $\Omega^{*(2,2)}$ niceliği fiziksel öneme sahip, herhangi bir moleküler modelin idealize edilmiş katı küre yapıdan sapmasını gösteren çarpışma integralidir.

Eş karışımlar için ısı iletkenliği (3.5) bağıntısı biçiminde olmakla birlikte, viskozitenin hesaplanması kısmında ifade edildiği gibi, moleküler çarpışma çapı σ eş karışım için $\sigma_{ij} = \frac{1}{2}(\sigma_i + \sigma_j)$ ifadesinden yararlanılarak hesaplanır ve aynı şekilde m kütlesi yerine $\mu_{12} = \frac{2m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ indirgenmiş kütle alınarak bağıntılara iletilir ve hesaplamalar buna göre yapılır.

3.2.4 Kütle Difüzyon Katsayısı $D(T)$ 'nin Hesaplanması

$\Omega_D^{(n,s)}(T)$ difüzyon çarpışma integrali ifadesi, literatürdeki difüzyon verilerini kullanarak [1, 5, 10, 24] hesaplanabilir. Sıcaklığın bir üstel fonksiyonu olan ve buna göre lineer veya üstel analitik bir fonksiyon olarak önerilen $\Omega^{*(1,1)}(T^*)$ çarpışma integrali [7, 8] cinsinden difüzyon katsayıları aşağıdaki bağıntıdan hesaplanabilir.

$$[D]_l = x_D \frac{\sqrt{T^3}}{\Omega_D^{*(1,1)}(T^*)} \quad (3.6)$$

Burada, $x_D = \frac{3}{16} \sqrt{\frac{2k^3}{\pi M}} \frac{f_d^2}{p\sigma^2}$ ($m^2 s^{-1} K^{-3/2}$), (σ küresel molekülün çapı, M küresel molekülün molekül ağırlığı, p atmosferik basınç) ve $\Omega^{*(1,1)}(T^*)$ birinci mertebeden fiziksel öneme sahip, herhangi bir moleküler modelin idealize edilmiş katı küre yapıdan sapmasını gösteren çarpışma integralidir.

Eş karışımlar için kütle difüzyon katsayısının hesabında da viskozite ve ısı iletkenliği hesaplamalarında uygulanan yöntem uygulanır.

BÖLÜM 4

^4He ^3He AKIŞKANLARI VE EŞ KARIŞIMLARINA AİT İKİNCİ VİRİAL BAĞINTILARININ HESAPLANMASI

Bilindiği gibi, akışkanların termodinamik özelliklerinin belirlenebilmesi için o akışkanı en iyi tanımlayan bir hal denkleminin oluşturulması ve bu hal denkleminde hareketle ele alınan akışkanın molekülleri arasındaki etkileşmeyi en iyi tanımlayan kuvvet sabitlerinin belirlenmesi gerekmektedir. Bu amaçla, günümüzdeki çalışmalarda ele alınan akışkanların düşük ve yüksek sıcaklık aralıklarındaki kuantum mekaniksel davranışları da tanımlayan en uygun potansiyel enerji fonksiyonunun seçilmesi gerekmektedir [1-8, 13, 14, 17-21].

Günümüz araştırmacılarının akışkanlar üzerine yapmış oldukları çalışmalarda kullanılan en güncel yöntem *ab initio* potansiyel fonksiyonu yöntemi, quantum Monte Carlo (QMC) correlated coupled cluster (CCSD(T)) ve symmetry-adapted perturbation (SAPT) gibi hesaplama yöntemleridir. Bu yöntemler sayısal veya yarı sayısal yöntem olup ilgilenilen akışkana en uygun olanı hesaplama yöntemi olarak seçilmektedir. Bu ve benzeri yöntemlere göre önerilen ifadelerden sağlanan ikinci virial ifadeleri ve bunların hesaplanmaları sonucunda sağlanan sayısal değerler, hassas laboratuvar aletleriyle sağlanan deneysel değerlerle karşılaştırılarak standart sapma ve toplam ortalama yüzde sapma hesapları yapılmaktadır [1-5, 15-20, 26]. Yeterince hassas olan bu değerler, termodinamik özelliklerin (entropi, entalpi, akışkan içindeki ses hızı vb.) hesaplanmasında güvenilir bir şekilde kullanılmaktadır.

Bu çalışmada ilk olarak, ^3He , ^4He akışkanları ve eş karışımlarının her biri için termo-fizik özelliklerinden biri olan ve kuantum mekaniksel özellikleri de kapsayacak şekilde, yarı teorik ikinci virial bağıntıları önerilmiştir. Önerilen bu bağıntılardan hareketle elde edilen değerler, literatürdeki deneysel değerlerle karşılaştırılmış ve ayrıca (χ) Powel's minimizasyonu [11] ve toplam ortalama yüzde hata (TOYS) hesapları da yapılarak çizelgelerde gösterilmiştir.

4.1 ⁴He AKIŞKANI İÇİN ÖNERİLEN İKİNCİ VİRİAL BAĞINTISI VE KATSAYILARININ HESAPLANMASI

⁴He akışkanı için önerilecek olan ikinci virial ifadesinin kuantum mekaniksel davranışlarını da kapsayacak şekilde sıcaklığın analitik bir fonksiyonu olarak bir kaç aşağıdaki bağıntılarla verilmektedir.

$$B_1(T) = A_1 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_1} + A_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_2} + \dots + A_k \left(\frac{T}{K} \right)^{n_n} \quad (4.1)$$

$$B_2(T) = A_1 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_1} + A_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_2} + \dots + A_k \exp \left(H \left(\frac{T}{K} \right)^{\pm m_1} + H_1 \left(\frac{T}{K} \right)^{\pm m_2} + \dots + H_n \left(\frac{T}{K} \right)^{\pm m_n} \right) \quad (4.2)$$

$$B_3(T) = A_1 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_1} + A_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_2} + \dots + A_k \left(\frac{T}{K} \right)^{n_n} \exp \left(H \left(\frac{T}{K} \right)^{\pm m_1} + H_1 \left(\frac{T}{K} \right)^{\pm m_2} + \dots + H_n \left(\frac{T}{K} \right)^{\pm m_n} \right) \quad (4.3)$$

Burada $B_l(T)$ ikinci virial ($l=1,2,3$), T Kelvin olarak sıcaklık, K Kelvin birimi, A , A_1 , $A_2 \dots A_k$, katsayıları ikinci virial terimi biriminde (m^3/mol), $n=1,2,3 \dots$ ve $n_1, n_2, \dots m_1, m_2, \dots, H, H_1, H_2, \dots$ birimsiz sayısal katsayılardır. Ayrıca, sıcaklık T/K olarak alındığından bu terim de birimsizdir.

Önerilen bu ifadelerden, ortalama yüzde sapmalara ait sabitlerin değerleri Çizelge 4.1 de gösterilmiştir. Çizelge 4.1 den de görüleceği gibi en az ortalama yüzde sapması olan (4.2) bağıntısı hesaplamalarda kullanılmıştır.

Hesaplamalar sonucunda elde edilen değerler, literatürdeki diğer araştırmacılar tarafından elde edilen değerlerle karşılaştırmalı olarak Çizelge A.1 de verilmiştir. Hesaplamalar sonucunda, deneysel değerlerden sapmalar sırasıyla, toplam ortalama yüzde sapma, toplam standart yüzde sapma ve Powel's (χ) minimizasyonu sırasıyla, 0.0517, 0.1284, 0.045

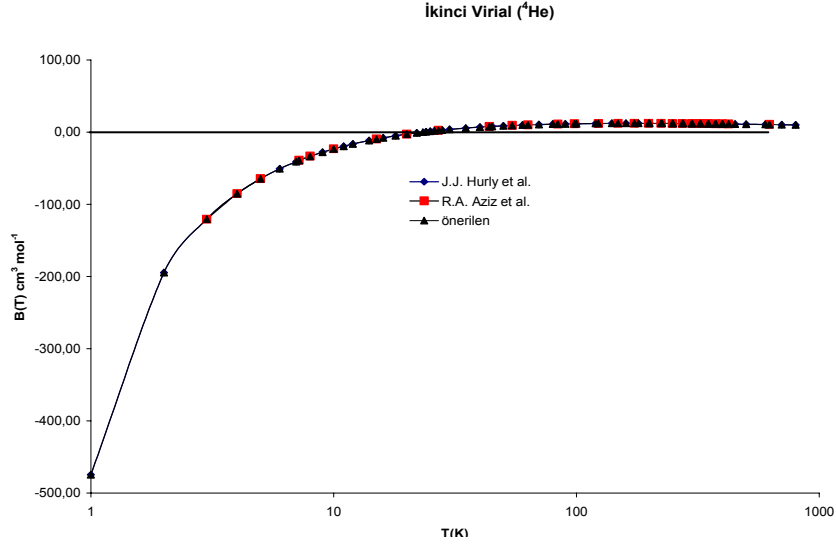
olarak hesaplanmıştır. Deneysellikten sapmanın en yüksek olduğu sıcaklık $T=24$ K de %0.823 dür. ^4He için Boyle sıcaklığı ($B(T_B)=0$), $T_B \cong 23.3$ K civarında bulunmuştur.

$$B(T)_{^4\text{He}} = 0.2522\left(\frac{T}{K}\right)^{0.3436} - 27.6953\left(\frac{T}{K}\right)^{0.0401} - 2838.4123\left(\frac{T}{K}\right)^{-0.3301} + \\ 2808.6376\left(\frac{T}{K}\right)^{-0.3219} - 100.8754\left(\frac{T}{K}\right)^{-3.0071} - 346.4012\left(\frac{T}{K}\right)^{-1.0015} + \\ 30.0452 \exp\left(-2.042 * 10^{-6} \left(\frac{T}{K}\right)\right) \quad (4.4)$$

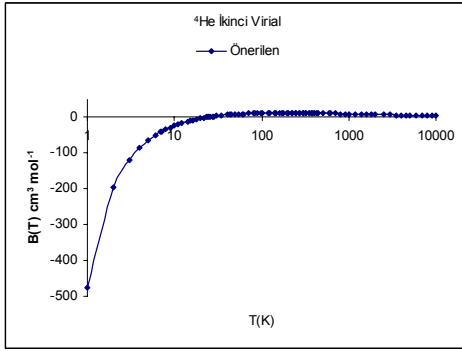
(4.4) bağıntısının katsayıları ve yine çalışmada önerilen fakat yüzde sapmaları (4.4) bağıntısından fazla olan ifadelerin katsayıları da karşılaştırma yapmak amacıyla Çizelge 4.1 de birlikte gösterilmiştir. Önerilen ve yüzde hatası en az olan ikinci virial bağıntısının hesapsal *ab initio* değerlerine göre karşılaştırmalı olarak Şekil 4.1 ve Şekil 4.2 de gösterilmiştir.

Çizelge 4.1 ^4He akışkanı için önerilen ikinci virial bağıntısı sabitleri.

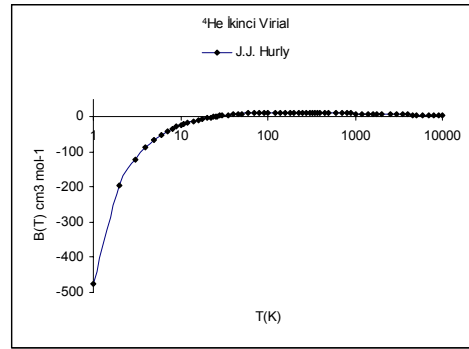
SABİTLER	(4.1) Tipi İfade TOYS % 0.1346	(4.2) Tipi İfade TOYS % 0.0517	(4.3) Tipi İfade TOYS % 0.0721
A_1	-245.7993	0.2522	0.0169
A_2	-5.1581	-27.6953	-227.8062
A_3	-255.0830	-2838.4123	-120.1493
A_4	-91.3063	2808.6376	-241.4989
A_5	122.8975	-100.8754	156.4199
A_6	*	-346.4012	*
A_7	*	30.0452	*
H	*	2.042E-6	*
H_1	*	*	1.5694E-5
H_2	*	*	-0.5982
H_3	*	*	0.9059
n_1	-1.1541	0.3462	0.8106
n_2	-0.0233	0.0401	-0.7705
n_3	-0.5837	-0.3301	0.0300
n_4	-3.1128	-0.3219	-1.2626
n_5	-0.2738	-3.0071	*
n_6	*	-1.0015	*



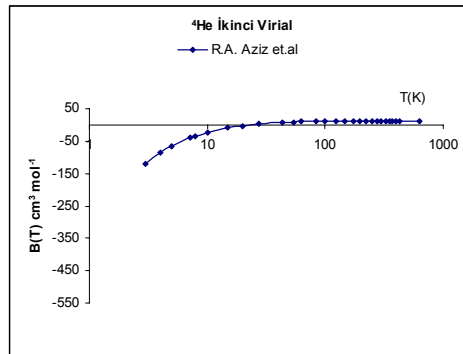
Şekil 4.1 ^4He ait *ab initio* [1], deneysel [5] ve önerilen ikinci virial bağıntısı değerlerinin birlikteli grafik karşılaştırması.



(a) ^4He ait önerilen ikinci virial değerleri grafiği.



(b) ^4He ait hesapsal *ab initio* [1] ikinci virial değerleri grafiği.



(c) ^4He ait denel [5] ikinci virial değerleri grafiği.

Şekil 4.2 ^4He ait *ab initio* [1], deneysel [5] ve önerilen ikinci virial bağıntılarının ayrıık grafik gösterimi.

4.2 ^3He AKIŞKANI İÇİN ÖNERİLEN İKİNCİ VİRİAL BAĞINTISI VE KATSAYILARININ HESAPLANMASI

^3He akışkanı için önerilecek olan ikinci virial ifadesinin, ^4He de olduğu gibi kuantum mekaniksel davranışlarını da kapsamı gerektiği göz önünde bulundurularak sıcaklığın bir fonksiyonu olan (4.1), (4.2) ve (4.3) bağıntıları önerilebilir. (4.1), (4.2) ve (4.3) bağıntılarının ^3He için elde edilen katsayıları ve denel değerlerden sapmaları Çizelge 4.2 de verilmiştir. Önerilen bu ifadeler sıcaklığın bir fonksiyonu olup bunların içinden ortalama yüzde sapmaları en az olan, ^3He akışkanı için yapılan en küçük kareler yöntemi (Least Squares) fit işlemlerinde deneysel sonuçlara en uygun sonuçları veren ve belirsizliği en az olan (4.2) bağıntısının olduğu görülmüştür. Buna göre (4.2) ifadesi,

$$B(T)_{^3\text{He}} = A_1 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_1} + A_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_2} + A_3 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_3} + A_4 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_4} + A_5 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_5} + A_6 \exp \left(-H \left(\frac{T}{K} \right) \right) \quad (4.5)$$

olarak yazılabilir.

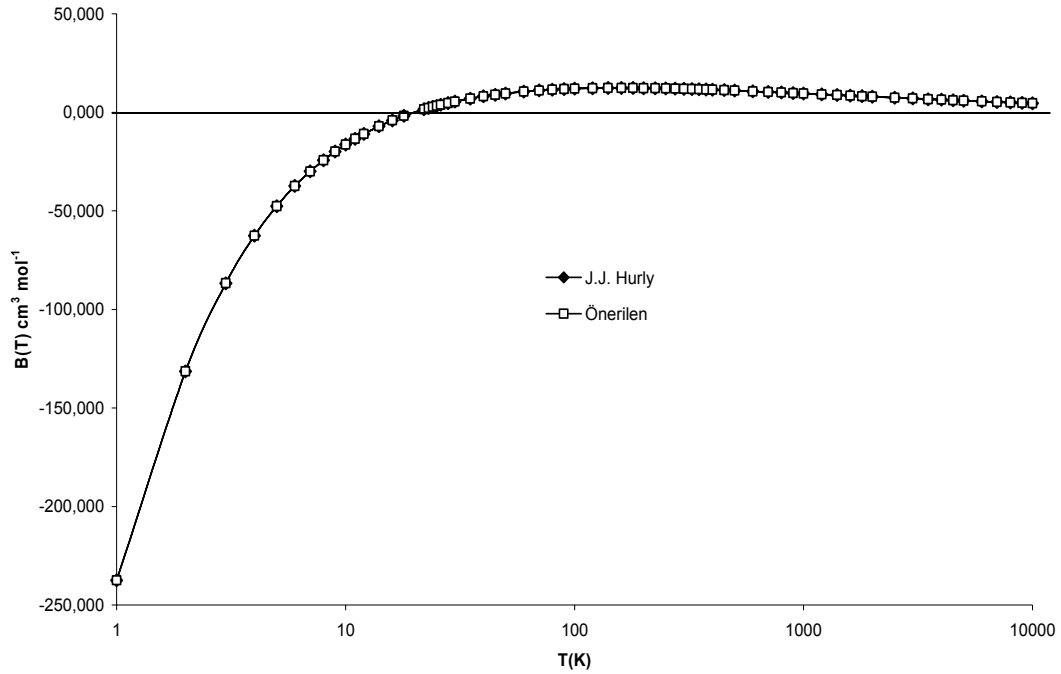
Hesaplamalar sonucunda elde edilen değerler, literatürdeki diğer araştırmacılar tarafından elde edilen değerlerle karşılaştırmalı olarak Çizelge A.2 de ve ilgili grafik gösterimi Şekil 4.3 ve Şekil 4.4 de verilmiştir. Hesaplamalar sonucunda, deneysel değerlerden sapmalar sırasıyla, Toplam Ortalama Yüzde Sapma 0.0871, Toplam Standart Yüzde Sapma 0.146 ve Powel's(χ) minimizasyonu 0.0988 olarak hesaplanmıştır.

Deneysellikten sapmanın en yüksek olduğu sıcaklık $T=18\text{ K}$ de %0.707 dir. ^3He için Boyle sıcaklığı ($B(T_B)=0$), $T_B \cong 19.96\text{ K}$ civarında bulunmuştur. (4.5) ifadesinin katsayıları, Least Squares-fit yöntemine göre deneysel verilere fit edilerek Çizelge 4.2 de gösterilen değerler elde edilmiştir.

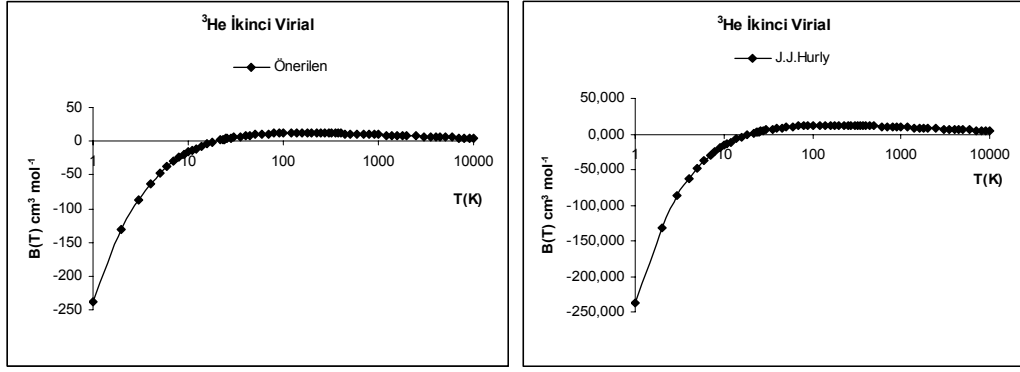
Çizelge 4.2 ^3He akışkanı için önerilen ikinci virial bağıntısı sabitleri.

SABİTLER	(4.1) Tipi İfade TOYS % 0.229	(4.2) Tipi İfade TOYS % 0.0871	(4.3) Tipi İfade TOYS % 0.294
A_1	31.9984	-274.3203	-0.00218
A_2	174.4102	-0.0003	234.3821
A_3	-183.3881	80.5388	-189.3104
A_4	-22.4755	1783.7838	-308.9145
A_5	-238.0472	-1819.8733	1.1930
A_6	*	-7.6309	*
H	*	3.6712E-5	*
H_1	*	*	0.00128
H_2	*	*	-6.0376
H_3	*	*	2.9416
n1	-3.1603	-0.6863	0.62247
n2	-0.2624	0.9428	-0.1176
n3	-1.0204	-0.2052	-0.1021
n4	-0.1058	-1.9655	-0.8207
n5	-0.4925	-1.9228	*

İkinci Virial (^3He)



Şekil 4.3 ^3He ait hesapsal *ab initio* [1] ve önerilen ikinci virial bağıntısı değerlerinin grafik karşılaştırması.



(a) ^3He ait önerilen ikinci virial değerleri grafiği

(b) ^3He ait hesapsal *ab initio* [1] ikinci virial değerleri grafiği

Şekil 4.4 ^3He ait hesapsal *ab initio* [1] ve önerilen ikinci virial bağıntısı değerlerinin grafik karşılaştırması.

4.3 ^4He , ^3He AKIŞKANLARININ EŞ KARIŞIMLARI İÇİN ÖNERİLEN İKİNCİ VİRİAL BAĞINTISI VE KATSAYILARININ HESAPLANMASI

^4He ve ^3He akışkanlarının eşdeğer karışımları için önerilecek olan ikinci virial ifadesinin aynı ^4He de olduğu gibi kuantum mekaniksel davranışlarını da kapsamı gerektiği göz önünde bulundurularak sıcaklığın bir fonksiyonu olan (4.1), (4.2) ve (4.3) bağıntıları önerilebilir. Bu bağıntılarının ^4He ve ^3He akışkanlarının eşdeğer karışımları için elde edilen katsayıları ve denel değerlerden sapmaları Çizelge 4.3 de verilmiştir. Önerilen bu ifadeler sıcaklığın bir fonksiyonu olup bunların içinden ortalama yüzde sapmaları en az olan, ^4He ve ^3He akışkanlarının eşdeğer karışımları için yapılan Least Squares-fit işlemlerinde deneysel sonuçlara en uygun sonuçları veren ve belirsizliği en az olan (4.2) ifadesinin olduğu görülmüştür. (4.2) ifadesi ^3He ve ^4He akışkanlarının eşdeğer karışımlarına göre,

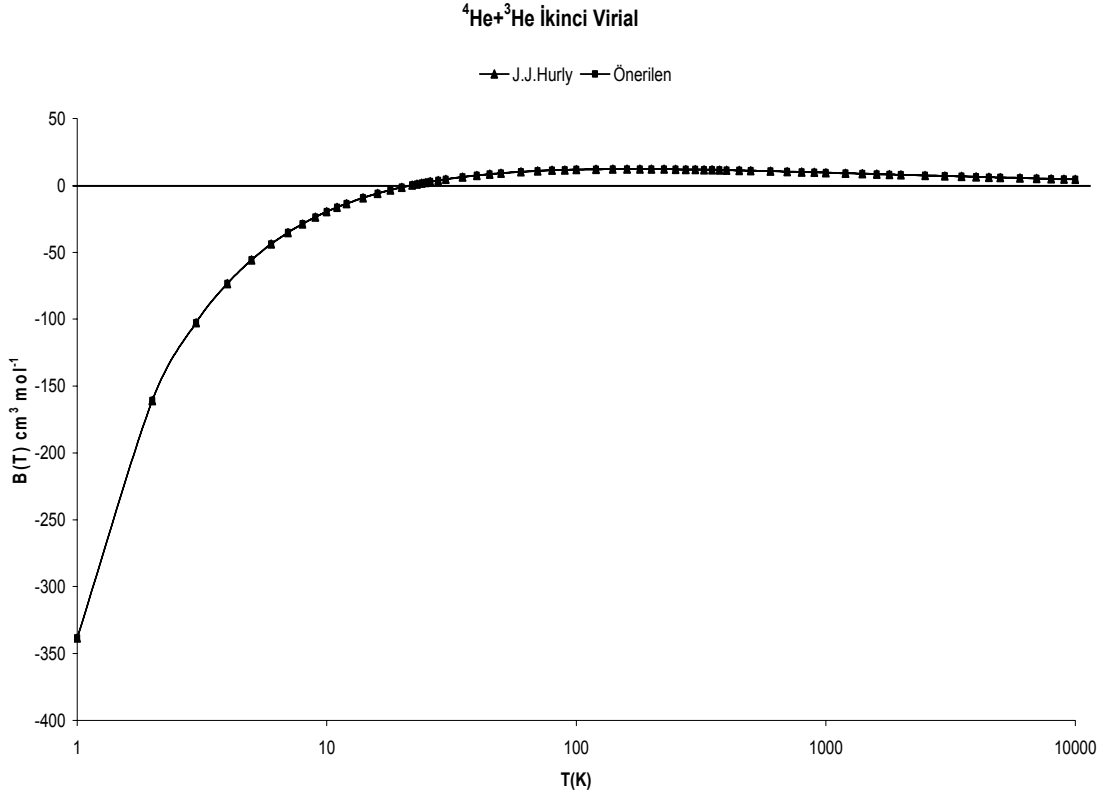
$$B_3(T)_{4+3\text{He}} = A_1 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_1} + A_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_2} + A_3 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_3} + A_4 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_4} + A_5 \exp \left(-H_1 \left(\frac{T}{K} \right) - H_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{-2} - H_3 \left(\frac{T}{K} \right)^{-3} \right) \quad (4.6)$$

olarak yazılabilir.

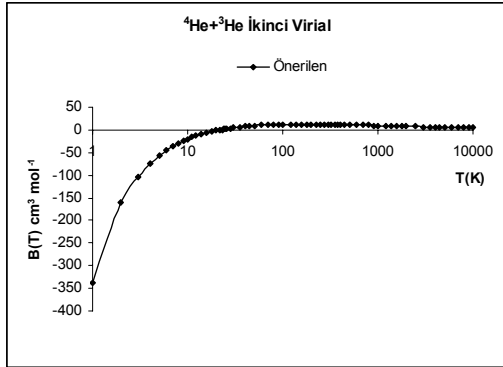
Çizelge 4.3 ^4He ve ^3He eş karışımları için önerilen ikinci virial bağıntısı sabitleri.

SABİTLER	(4.1) Tipi İfade TOYS % 0.0484	(4.2) Tipi İfade TOYS % 0.005347	(4.3) Tipi İfade TOYS % 0.00764
A	*	-1.562526	0.073085
A ₁	233.006800	-144.929772	-12.946051
A ₂	-124.383250	-5332.697720	-162.317042
A ₃	-2105.343120	-276.418904	-158489.210200
A ₄	1947.892740	5423.512080	158595.222800
A ₅	-289.630840	*	-269.282532
H	*	0.000000	0.000531
H ₁	*	6.329657E-6	*
H ₂	*	-3.266949	*
H ₃	*	1.643139	*
n ₁	-0.086835	-1.315795	-2.148473
n ₂	-1.437473	-0.177095	-1.230457
n ₃	-0.117662	-0.648848	-0.189046
n ₄	-0.125590	-0.178232	-0.189097
n ₅	-0.691183	*	-0.606068

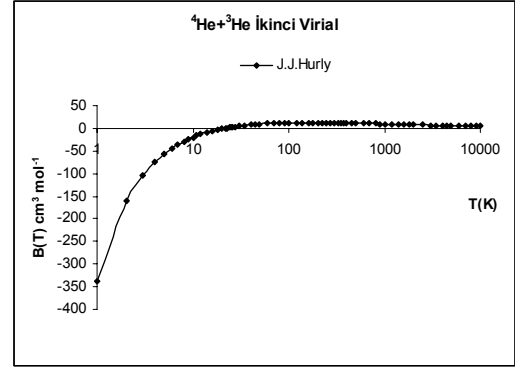
Hesaplamalar sonucunda elde edilen değerler, literatürdeki diğer araştırmacılar tarafından elde edilen değerlerle karşılaştırmalı olarak Çizelge A.3 da verilmiştir. Hesaplamalar sonucunda, deneysel değerlerden sapmalar sırasıyla, toplam ortalama yüzde sapma 0.005347, toplam standart yüzde sapma 0.012 ve Powel's(χ) minimizasyonu $3,12 \times 10^{-3}$ olarak hesaplanmıştır. Deneysellikten sapmanın en yüksek olduğu sıcaklık $T=22$ K de %0.085 dir. ^3He için Boyle sıcaklığı ($B(T_B)=0$), $T_B \cong 21.64$ K ve inversiyon sıcaklığı $T_I=22.6$ K civarında bulunmuştur. (4.6) ifadesinin katsayıları, Least Squares-fit yöntemine göre deneysel verilere fit edilmiş ve Çizelge 4.3 de gösterilen değerler elde edilmiştir. Elde edilen bu değerlere göre çizilen ikinci virial grafikleri, Şekil 4.5 ve Şekil 4.6 da gösterilmiştir.



Şekil 4.5 $^4\text{He}+^3\text{He}$ ait hesapsal *ab initio* [1] ve önerilen ikinci virial bağıntısı değerlerinin grafik karşılaştırması.



(a) $^4\text{He}+^3\text{He}$ ait önerilen ikinci virial değerleri grafiği.



(b) $^4\text{He}+^3\text{He}$ ait hesapsal *ab initio* [1] ikinci virial değerleri grafiği.

Şekil 4.6 $^4\text{He}+^3\text{He}$ ait hesapsal *ab initio* [1] ve önerilen ikinci virial bağıntısı değerlerinin grafik karşılaştırması.

BÖLÜM 5

⁴He, ³He AKIŞKANLARI VE EŞ KARIŞIMLARINA AİT TERMOFİZİK ÖZELLİKLERİN HESAPLANMASI

Akışkanların termofizik özelliklerinden olan ve aktarım (Transport) katsayıları olarak isimlendirilen, (η) viskozite (Momentum aktarımı), (λ) termal iletkenlik (Enerji aktarımı) ve (D) difüzyon (Kütle aktarımı) katsayılarının hesaplanması işlemleri için öncelikle yapılması gereken, bu katsayıların içinde barındırdığı ve kuantum mekaniksel katkıları da içeren (3.2) çarpışma integrali $\Omega^{(n,s)}$ nın tam ve hassas olarak hesaplanması gerekmektedir. Bölüm 3 de belirtildiği gibi, özellikle normal koşullarda bile kuantum mekaniksel davranışlarda bulunan bir akışkana ait termofizik η , λ ve D katsayılarının hesaplanmasında, yarı teorik yöntem ve sayısal fizik yöntemleri, konuya ilişkin çalışmalarda araştırmacıya güven, zaman ve doğru sonuçlara ulaşma kolaylığı sağlamaktadır.

Bu çalışmada da pek çok araştırmacının kullandığı fiziksel anlamlı denklem önerme yöntemlerden hareketle, deneysel sonuçlara en uygun olabilecek ve bu fiziksel büyüklüklerin sıcaklığın bir fonksiyonu olmasından yararlanılarak fiziksel anlam içerecek polinom şeklinde bağıntılar önerilmiştir. Termofizik özelliklerin hesaplanmasında önem arz eden $\Omega^{(n,s)}$ çarpışma integralinin, hassas ve deneysel verileri en iyi sağlayacak polinomal yapıda seçilmesi ve katsayılarının da aynı duyarlılığı sağlayacak değerlerde olmaları gerekmektedir. Bu nedenle, bu çalışmada, pek çok fiziksel anlamlı polinomal bağıntı önerilmiş ve bu bağıntılardan en çok kullanılabilir olanlarından bazıları aşağıdaki gibi verilmiştir.

$$\Omega^{*(n,s)}(T^*) = A T^{*n} (A_1 T^{*n1} + A_2 T^{*n2}) \quad (5.1)$$

$$\Omega^{*(n,s)}(T^*) = A_1 T^{*n1} + A_2 T^{*n2} + A_3 T^{*n3} + \dots \quad (5.2)$$

$$\Omega^{*(n,s)}(T^*) = A_1 T^{*n1} + A_2 T^{*n2} + A_3 T^{*n3} + \dots + A_k e^{(H_1 T + H_2 T^{-2} + H_3 T^{-3} + \dots + H_m T^{-n})} \quad (5.3)$$

$$\Omega^{*(n,s)}(T^*) = A_1 T^{*n1} + A_2 T^{*n2} + A_3 T^{*n3} + \dots + A_k T^{*nn} e^{(H_1 T + H_2 T^{-2} + H_3 T^{-3} + \dots + H_m T^{-n})} \quad (5.4)$$

Burada, T^* indirgenmiş sıcaklıktır, $A, A_1, A_2, A_3, \dots, n=1, 2, 3 \dots$ ve $n_1, n_2, n_3 \dots \Omega^{(n,s)}$ integralinin boyutsuz katsayılarıdır. Önerilen bu bağıntıların ele alınan akışkana ait katsayı değerleri, *ab initio* ve deneysel veriler kullanılarak Least Squares Parameter Estimation fit metoduyla bulunabilir.

Sonuç olarak, yukarıda verilen bağıntının katsayıları fit hesaplama yöntemiyle elde edilmiş ve deneysel değerlerle uyumluluğu çeşitli hata hesaplama yöntemleriyle test edilmiştir. Yapılan hata hesaplamaları sonucunda önerilen ifadelerin içerisinde ele alınan akışkan için en uygun olanı işleme konularak, değerler tablolarda literatürdeki deneysel ve hesapsal verilerle karşılaştırmalı olarak verilmiştir.

5.1 $^4\text{He}, ^3\text{He}$ AKIŞKANLARI VE EŞ KARIŞIMLARINA AİT VİSKOZİTE (MOMENTUM AKTARIMI) BAĞINTISI DEĞERLERİNİN HESAPLANMASI

Bir akışkanın termofizik özelliklerinden olan (η) viskozite (momentum aktarımı) bağıntısının bulunması ve değerlerinin buradan hesaplanabilmesi için öncelikle ele alınan akışkana ait bazı fiziksel özelliklerin ($\varepsilon/k, \sigma, m$, gibi) ve katsayıların bilinmesi gerekmektedir. Burada ele alınacak olan ^4He ve ^3He akışkanına ait bu fiziksel özellikli bağıntının önerilebilmesi için ele alınan akışkana ait gerekli fiziksel sabitler ve veriler, Hurly ve arkadaşlarının [1] 2000 yılına ait makalesinden alınmıştır. Katsayılar ise, önerilen bağıntının literatürde bulunan deneysel ve hesapsal değerlere fit yapılmak suretiyle elde edilmiştir [1, 10, 23].

5.1.1 ^4He Akışkanına Ait Viskozite (η) Bağıntısı Değerlerinin Hesaplanması

^4He ait termofizik özelliklerden olan ve önerilecek bir viskozite bağıntısından yararlanılarak viskozite değerlerinin $1-10^4$ K sıcaklık aralığında hesaplanabilmesi için duyarlı ve fiziksel anlamlı bir bağıntının bilinmesi gerekmektedir [1, 7, 8, 12, 16, 23].

Bu çalışmanın temelindeki esas, ^4He ait viskozite bağıntısının hem sıcaklığın ve hem de $\Omega^{(n,s)}$ çarpışma integralinin bir fonksiyonu olmasıdır. Bu nedenle, birinci adım olarak ^4He ait viskozite hesaplamasında kullanılabilecek, fiziksel anlamlı bağıntılar aşağıdaki gibi önerilmiştir.

$$[\eta]_2 = x_\eta \frac{\sqrt{T}}{\Omega_\eta^{*(2,2)}(T^*)} = x_\eta \sqrt{T} \left[{}^\eta A_1 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_1} + {}^\eta A_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_2} + \dots \right]^{-1} \quad (5.5)$$

$$[\eta]_2 = x_\eta \frac{\sqrt{T}}{\Omega_\eta^{*(2,2)}(T^*)} = x_\eta \sqrt{T} \left[{}^\eta A_1 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_1} + {}^\eta A_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_2} + \dots \right. \\ \left. + {}^\eta A_k \exp \left({}^\eta H_1 \left(\frac{T}{K} \right) + {}^\eta H_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{-2} + \dots \right. \right. \\ \left. \left. {}^\eta H_3 \left(\frac{T}{K} \right)^{-3} + \dots + {}^\eta H_m \left(\frac{T}{K} \right)^{-n} \right) \right]^{-1} \quad (5.6)$$

Burada, $x_\eta = \frac{5}{16} \sqrt{\frac{mk}{\pi}} \frac{f_\eta^2}{\sigma^2}$ (Pa s K^{-1/2}), (σ küresel molekülün çapı, m küresel molekülün kütlesi,

k Boltzmann sabiti) ve $\Omega^{*(2,2)}$ niceliği fiziksel öneme sahip, herhangi bir moleküler modelin idealize edilmiş katı küre yapıdan sapmasını gösteren çarpışma integrali, ${}^\eta A_1, {}^\eta A_2, \dots, {}^\eta A_k, {}^\eta H_m, n=1, 2, 3, \dots$ ve $n_1, n_2, \dots$ birimsiz katsayılardır

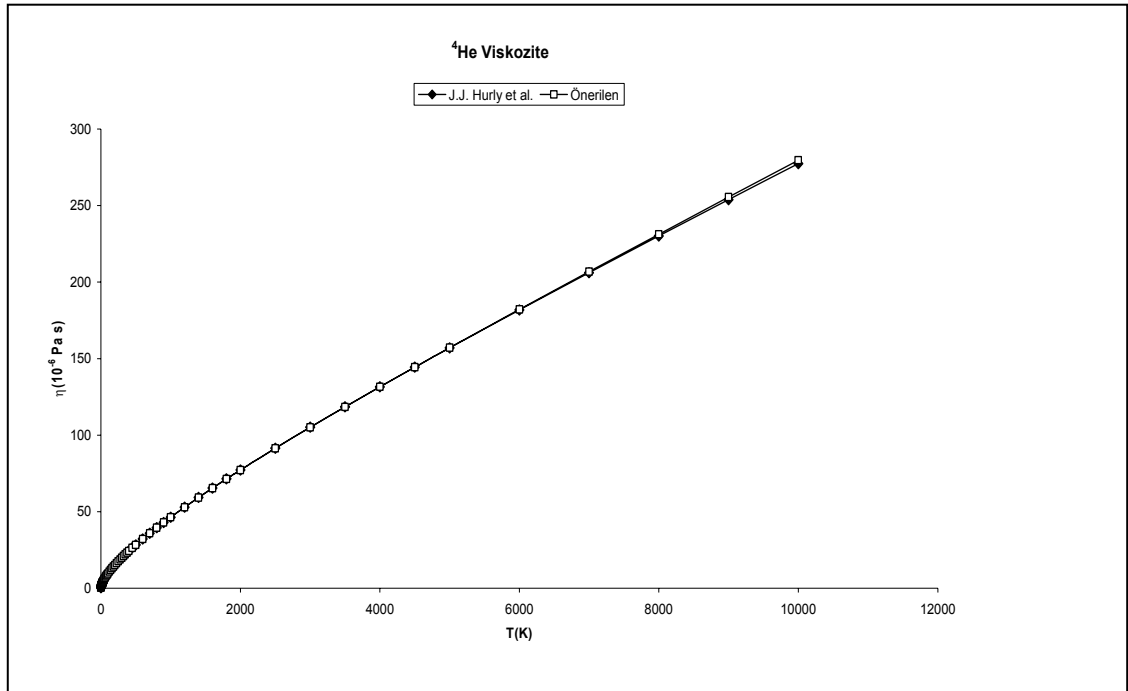
İkinci adım olarak, (5.5) ve (5.6) bağıntılarındaki (5.2) ve (5.3) viskozite çarpışma integrali bağıntılarının katsayıları hesapsal *ab initio* ve denel veriler [1, 10, 23] kullanılarak Least Squares-fit yöntemiyle elde edilmiştir. Elde edilen bu katsayılar $\Omega^{*(2,2)}$ çarpışma integralinde kullanılarak $\Omega_\eta^{*(2,2)}$ viskozite çarpışma integrali elde edilmiş ve viskozite değerleri, 1-10⁴ K sıcaklık aralığında önerilen (5.5) ve (5.6) bağıntıları için ayrı ayrı hesaplanmıştır. Önerilen bu ifadeler sıcaklığın bir fonksiyonu olup, yapılan hesaplamalar sonucu elde edilen değerler *ab initio* ve denel değerlerle karşılaştırılmış ve en uygun sonuçları veren (5.6) bağıntısının en geçerli bağıntı olduğu görülmüştür.

Hesaplama sonuçları, literatürdeki sonuçlarla karşılaştırmalı olarak Çizelge A.4 de verilmiştir. Elde edilen bu sonuçların deneysel değerlerden sapmaları sırasıyla, toplam ortalama yüzde sapma (TOYS) 0.066, toplam standart yüzde sapma (TSYS) 0.154 ve Powel's(χ) minimizasyonu 3.128 olarak hesaplanmıştır. Deneysellikten sapmanın en yüksek olduğu sıcaklık T=10000 K de %0.83 dür. (5.6) bağıntısının katsayıları, Least Squares-fit yöntemine göre deneysel verilere fit edilmiş ve Çizelge 5.1 de gösterilen değerler elde edilmiştir.

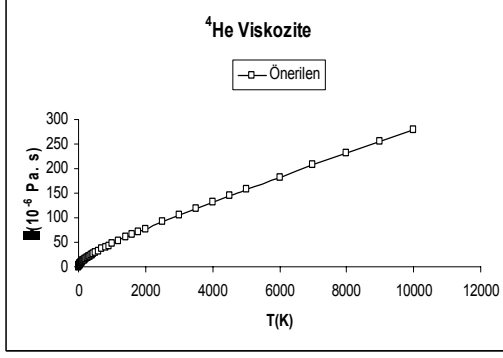
Çizelge 5.1 ^4He için önerilen viskozite $\eta(T)$ bağıntısı sabitleri.

SABİTLER	(5.5) Tipi İfade TOYS % 2.512	(5.6) Tipi İfade TOYS % 0.066
A_1	0.380061	-3.797046
A_2	-11709.373100	5.044363
A_3	-0.058286	-0.144327
A_4	30.614869	13.216050
A_5	15436.328500	-12.258325
A_6	-3755.553350	6.894515
H_1	*	-1.000000
H_2	*	-2.210789
n_1	0.146254	-0,274264
n_2	-1.410570	-0.193414
n_3	0.334984	0.068659
n_4	-0.799731	-1.621376
n_5	-1.392720	-1.775209
n_6	-1.333914	*

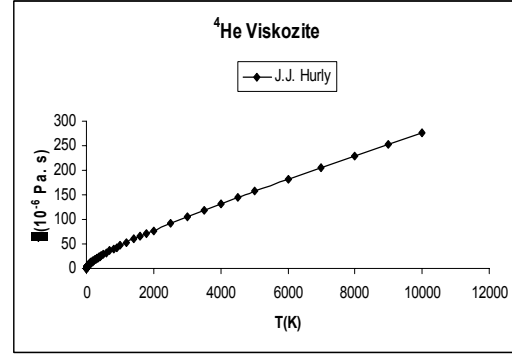
Elde edilen bu değerlere göre sıcaklığın fonksiyonu olarak hesaplanan viskozite bağıntısı değerleri *ab initio* verileriyle birlikte Şekil 5.1 ve Şekil 5.2 de karşılaştırmalı grafik olarak gösterilmiştir.



Şekil 5.1 ^4He ait hesapsal *ab initio* [1] ve önerilen viskozite (η) bağıntıları değerlerinin grafik karşılaştırması.



(a) ^4He ait önerilen viskozite değerleri grafiği.



(b) ^4He ait hesapsal *ab initio* [1] viskozite değerleri grafiği.

Şekil 5.2 ^4He ait hesapsal *ab initio* [1] ve önerilen viskozite bağıntısı değerlerinin grafik karşılaştırması.

5.1.2 ^3He Akışkanına Ait Viskozite (η) Bağıntısı Değerlerinin Hesaplanması

^3He ait termofizik özelliklerin hesaplanması amacıyla ^4He akışkanında olduğu gibi önerilecek bir viskozite bağıntısından yararlanılarak viskozite değerlerinin $1-10^4$ K sıcaklık aralığındaki hesaplamaları duyarlı ve fiziksel anlamlı olacak şekilde hesaplanabilir [1, 7, 8, 12, 16].

Benzer olarak, ^4He akışkanında olduğu gibi, ^3He ait viskozite bağıntısının da hem sıcaklığın ve hem de çarpışma integralinin bir fonksiyonu olması gerektiğidir. Bu nedenle, birinci adımda ^3He ait viskozite hesaplamasında kullanılabilecek fiziksel anlamlı bağıntılar aşağıdaki gibi önerilmiştir.

$$[\eta]_2 = x_\eta \frac{\sqrt{T}}{\Omega_\eta^{*(2,2)}(T^*)} = x_\eta \sqrt{T} \left[{}^\eta A_1 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_1} + {}^\eta A_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_2} + \dots \right]^{-1} \quad (5.7)$$

$$[\eta]_2 = x_\eta \frac{\sqrt{T}}{\Omega_\eta^{*(2,2)}(T^*)} = x_\eta \sqrt{T} \left[{}^\eta A_1 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_1} + {}^\eta A_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_2} + \dots + {}^\eta A_k \left(\frac{T}{K} \right)^{n_n} \exp \left({}^\eta H_1 \left(\frac{T}{K} \right) + {}^\eta H_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{-2} + {}^\eta H_3 \left(\frac{T}{K} \right)^{-3} + \dots + {}^\eta H_m \left(\frac{T}{K} \right)^{-n} \right) \right]^{-1} \quad (5.8)$$

Burada, $x_\eta = \frac{5}{16} \sqrt{\frac{mk}{\pi}} \frac{f_\eta^2}{\sigma^2}$ (Pa s K^{-1/2}), (σ küresel molekülün çapı, m küresel molekülün kütlesi, k Boltzmann sabiti) ve $\Omega_\eta^{*(2,2)}$ niceliği fiziksel öneme sahip, herhangi bir moleküler modelin idealize edilmiş katı küre yapıdan sapmasını gösteren çarpışma integrali, ${}^n A_1, {}^n A_2, \dots, {}^n A_k, {}^n H_m$ $n=1, 2, 3, \dots$ ve $n_1, n_2, \dots$ birimsiz katsayılarıdır

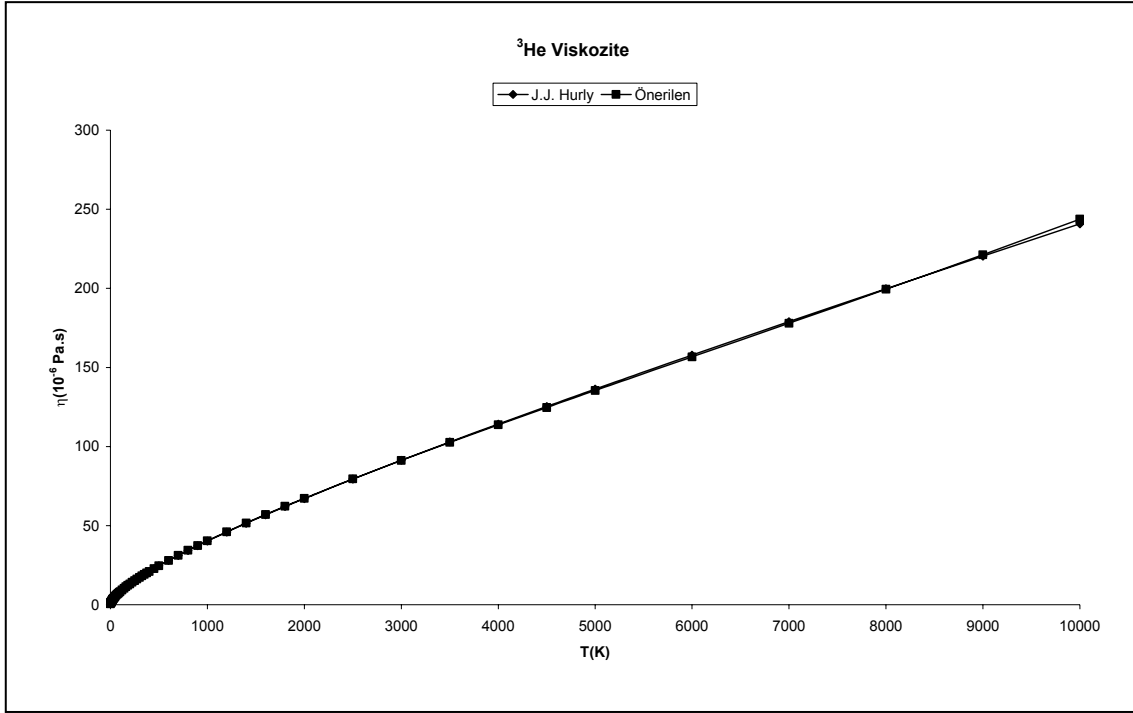
İkinci adım olarak, (5.7) ve (5.8) bağıntılarındaki (5.2) ve (5.4) viskozite çarpışma integrali bağıntılarının katsayıları hesapsal *ab initio* ve denel veriler [1, 10, 16, 23] kullanılarak Least Squares-fit yöntemiyle elde edilmiştir. Elde edilen bu katsayılar $\Omega^{*(2,2)}$ çarpışma integralinde kullanılarak $\Omega_\eta^{*(2,2)}$ viskozite çarpışma integrali elde edilmiş ve viskozite değerleri 1-10⁴ K sıcaklık aralığında önerilen (5.7) ve (5.8) bağıntıları için ayrı ayrı hesaplanmıştır. Sıcaklığın bir fonksiyonu olan önerilen bu bağıntılar, yapılan hesaplamalar sonucu elde edilen değerler, *ab initio* ve denel değerlerle karşılaştırılmış ve en uygun sonuçları veren (5.8) bağıntısının en geçerli bağıntı olduğu görülmüştür.

Çizelge 5.2 ³He için önerilen viskozite $\eta(T)$ bağıntısı sabitleri.

SABİTLER	(5.7) Tipi İfade TOYS %5.892	(5.8) Tipi İfade TOYS %0.207
A ₁	-244974.2002	-791.29646
A ₂	-45649.1806	706.35554
A ₃	63304.6650	167.34946
A ₄	-1890.2416	630.87707
A ₅	2715.6866	-5.94538
A ₆	226494.4809	-713.93303
A ₇	*	21.22635
H ₁	*	-1.00
n1	-0.442085	-1.32418
n2	-0.522548	-1.56958
n3	-0.403212	0.27665
n4	-0.305547	0.30179
n5	-0.646030	0.37316
n6	-0.465585	-1.57735
n7	*	-1.21541

Hesaplama sonuçları, literatürdeki sonuçlarla karşılaştırmalı olarak Çizelge A.5 de verilmiştir. Elde edilen bu sonuçların deneysel değerlerden sapmaları sırasıyla, toplam

ortalama yüzde sapma (TOYS) 0.207, toplam standart yüzde sapma (TSYS) 0.288 ve Powel's(χ) minimizasyonu 3.756 olarak hesaplanmıştır. Deneysellikten sapmanın en yüksek olduğu sıcaklık $T=10000$ K de %1.23 dür. (5.8) bağıntısının katsayıları, Least Squares-fit yöntemine göre deneysel verilere fit edilmiş ve Çizelge 5.2 de gösterilen değerler elde edilmiştir. ^3He akışkanına ait önerilen viskozite bağıntısının hesaplanan değerleri ile hesapsal *ab initio* verileri Şekil 5.3 de grafiksel olarak verilmiştir.



Şekil 5.3 ^3He ait hesapsal *ab initio* [1] ve önerilen viskozite (η) bağıntıları değerlerinin grafik karşılaştırması.

5.1.3 ^4He ve ^3He Akışkanlarının Eş Karışımlarına Ait Viskozite (η) Bağıntısı Değerlerinin Hesaplanması

$^4\text{He}+^3\text{He}$ eş karışım akışkanının $1-10^4$ K sıcaklık aralığında termofizik özelliklerinin hesaplanabilmesi amacıyla ^4He ve ^3He için önerilen bağıntılar, karışımları için de önerilebilir. Karışımlar için önerilen viskozite bağıntısından yararlanılarak, viskozite değerlerinin hesaplamaları, duyarlı ve fiziksel anlamlı olacak şekilde hesaplanabilir [1, 7, 8, 24].

^4He ve ^3He akışkanlarına benzer olarak, $^4\text{He}+^3\text{He}$ eş karışımdan oluşan akışkanın da hem sıcaklığın ve hem de çarpışma integralinin bir fonksiyonu olması gerektirir. Bu nedenle, eş karışıma ait viskozite hesaplamasında kullanılabilecek, fiziksel anlamlı bağıntılar aşağıdaki gibi önerilmiştir.

$$[\eta_{12}]_2 = x_{\eta_{12}} \frac{\sqrt{T}}{\Omega_{\eta_{12}}^{*(2,2)}(T^*)} = x_{\eta_{12}} \sqrt{T} \left[{}^{\eta_{12}}A_1 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_1} + {}^{\eta_{12}}A_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_2} + \dots \right]^{-1} \quad (5.9)$$

$$[\eta_{12}]_2 = x_{\eta_{12}} \frac{\sqrt{T}}{\Omega_{\eta}^{*(2,2)}(T^*)} = x_{\eta} \sqrt{T} \left[{}^{\eta_{12}}A_1 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_1} + {}^{\eta_{12}}A_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_2} + \dots \right. \\ \left. + {}^{\eta_{12}}A_k \exp \left({}^{\eta_{12}}H_1 \left(\frac{T}{K} \right) + {}^{\eta_{12}}H_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{-2} + \dots \right. \right. \\ \left. \left. {}^{\eta_{12}}H_3 \left(\frac{T}{K} \right)^{-3} + \dots + {}^{\eta_{12}}H_m \left(\frac{T}{K} \right)^{-n} \right) \right]^{-1} \quad (5.10)$$

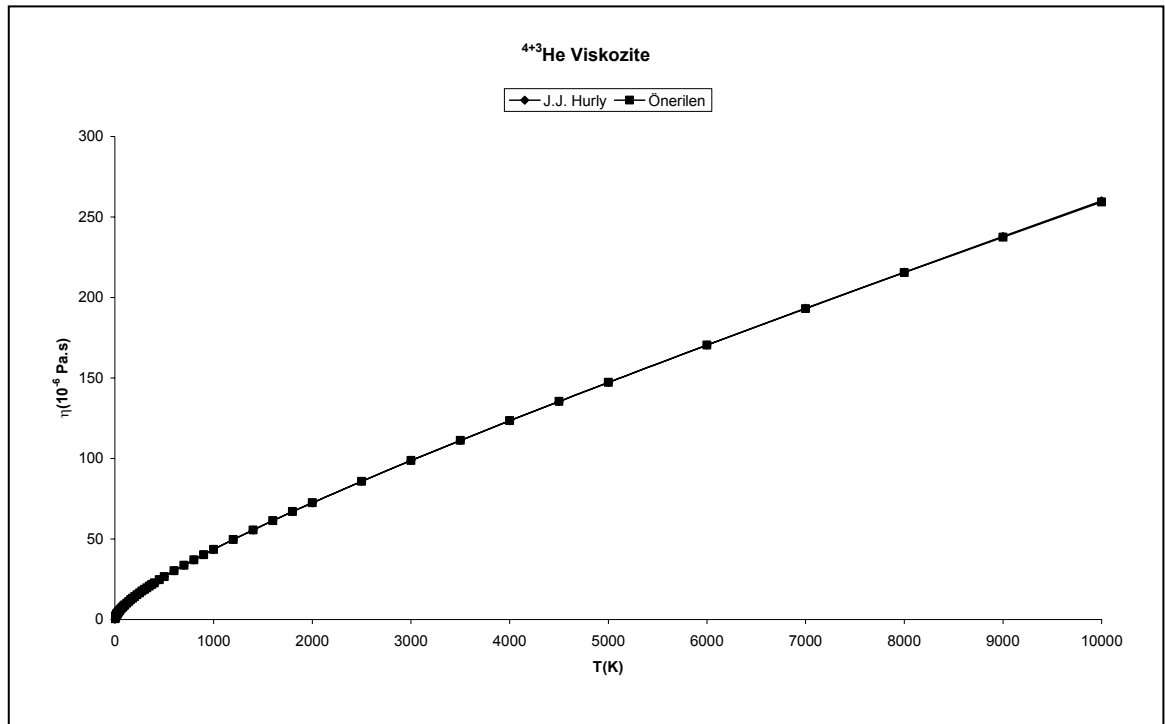
Burada, $x_{\eta_{12}} = \frac{5}{16} \sqrt{\frac{2k(m_1 m_2)/(m_1 + m_2)}{\pi}} \frac{1}{\sigma_{12}^2} (\text{Pa s K}^{-1/2})$, (σ küresel molekülün çapı, m_1 birinci küresel molekülün kütlesi m_2 ikinci küresel molekülün kütlesi, k Boltzmann sabiti) ve $\Omega_{\eta}^{*(2,2)}$ niceliği fiziksel öneme sahip, herhangi bir moleküler modelin idealize edilmiş katı küre yapıdan sapmasını gösteren çarpışma integrali, ${}^{\eta_{12}}A_1, {}^{\eta_{12}}A_2, \dots, {}^{\eta_{12}}A_k, {}^{\eta_{12}}H_n$ $n=1, 2, \dots$ ve $n_1, n_2, \dots$ birimsiz katsayılarıdır. Karışımlarla ilgili hesaplamada en geçerli ve deneysel değerlerden en az sapma gösteren (5.9) bağıntısı kullanılmıştır.

Deneysellikten sapmanın en yüksek olduğu sıcaklık $T=10000 \text{ K}$ de %0.28 dür. (5.10) bağıntısının katsayıları, Least Squares-fit yöntemine göre deneysel verilere fit edilmiş ve Çizelge 5.3 de gösterilen değerler elde edilmiştir. Elde edilen bu değerlerin *ab initio* değerleriyle karşılaştırmalı grafik gösterimi de Şekil 5.4 de gösterilmiştir.

Hesaplama sonuçları, literatürdeki sonuçlarla karşılaştırmalı olarak Çizelge A.6 da verilmiştir. Elde edilen bu sonuçların deneysel değerlerden sapmaları sırasıyla, toplam ortalama yüzde sapma (TOYS) 0.058, toplam standart yüzde sapma (TSYS) 0.07 ve Powel's(χ) minimizasyonu 0.995 olarak hesaplanmıştır.

Çizelge 5.3 $^4\text{He}+^3\text{He}$ eş karışımları için önerilen viskozite $\eta(T)$ bağıntısı sabitleri.

SABİTLER	(5.9) Tipi İfade TOYS %0.481	(5.10) Tipi İfade TOYS %0.058
A ₁	-24.57779	-5.50807
A ₂	0.31946	-0.37056
A ₃	-0.27061	16.38294
A ₄	0.57914	0.35777
A ₅	25.69137	26.87202
A ₆	*	-36.37531
A ₇	*	1.04051
H ₁	*	-1.00000
n1	0.01140	-1.00559
n2	-0.22215	-0.00227
n3	-5.36691	-0.68009
n4	-1.27695	-0.03458
n5	0.00747	-0.34601
n6		-0.42011



Şekil 5.4 $^4\text{He}+^3\text{He}$ ait hesapsal *ab initio* [1] ve önerilen viskozite (η) bağıntıları değerlerinin grafik karşılaştırması.

5.2 ^4He ve ^3He AKIŞKANINA AİT ISI İLETKENLİĞİ (ENERJİ AKTARIMI) BAĞINTISI DEĞERLERİNİN HESAPLANMASI

Bir akışkanın termofizik özelliklerinden olan (λ) ısı iletkenliği bağıntısının bulunması için öncelikle viskozite hesabında olduğu gibi ele alınan akışkana ait bazı fiziksel özelliklerin ($\varepsilon/k, \sigma, m$ vb.) ve katsayıların bilinmesi gerekmektedir. Bu çalışmada ele alınan ^4He ve ^3He akışkanlarına ait bağıntının önerilebilmesi için bazı termofiziksel özelliklere gerek duyulmaktadır. Bu termofiziksel özelliklerle ilgili değerler Hurly ve arkadaşları 2000 makalesinden alınmıştır [1]. Önerilen bağıntının katsayıları ise literatürdeki hesapsal *ab initio* değerlere fit yapılmak suretiyle elde edilmiştir.

5.2.1 ^4He Akışkanına Ait Isı İletkenliği (λ) Bağıntısı Değerlerinin Hesaplanması

^4He ait termofizik özelliklerden olan ve önerilecek bir ısı iletkenliği bağıntısından yararlanılarak ısı iletkenliği değerlerinin $1-10^4$ K sıcaklık aralığında hesaplanabilmesi için duyarlı ve fiziksel anlamlı bir potansiyel ifadesinin ve buna bağlı bir ısı iletkenlik bağıntısının bilinmesi gerekmektedir [1, 7, 8, 12, 16].

^4He ait ısı iletkenliği bağıntısı sıcaklığın ve çarpışma integralinin bir fonksiyonu olması nedeniyle, birinci adım olarak ^4He ait ısı iletkenliği hesaplamasında kullanılabilecek fiziksel anlamlı ikinci mertebeden bağıntılar aşağıdaki gibi önerilmiştir.

$$[\lambda]_2 = x_\lambda \frac{\sqrt{T}}{\Omega_\lambda^{*(2,2)}(T^*)} = x_\lambda \sqrt{T} \left[{}^\lambda A_1 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_1} + {}^\lambda A_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_2} + \dots \right]^{-1} \quad (5.11)$$

$$[\lambda]_2 = x_\lambda \frac{\sqrt{T}}{\Omega_\eta^{*(2,2)}(T^*)} = x_\lambda \sqrt{T} \left[{}^\lambda A_1 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_1} + {}^\lambda A_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_2} + \dots + {}^\lambda A_k \left(\frac{T}{K} \right)^{n_n} \exp \left({}^\lambda H_1 \left(\frac{T}{K} \right) + {}^\lambda H_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{-2} + {}^\lambda H_3 \left(\frac{T}{K} \right)^{-3} + \dots + {}^\lambda H_m \left(\frac{T}{K} \right)^{-n} \right) \right]^{-1} \quad (5.12)$$

Burada, λ ısı iletkenlik, $x_\lambda = \frac{25}{32} c_v \sqrt{\frac{k}{\pi m_4}} \frac{f_\lambda^2}{\sigma^2}$, ($W m^{-1} K^{-3/2}$), (σ küresel molekülün çapı, m küresel molekülün kütlesi, k Boltzmann sabiti ve c_v sabit hacimde ısı kapasitesi), K Kelvin sıcaklık birimi, $\Omega_\lambda^{*(2,2)}$ niceliği fiziksel öneme sahip, herhangi bir moleküler modelin idealize edilmiş katı küre yapıdan sapmasını gösteren çarpışma integrali, ${}^\lambda A_1, {}^\lambda A_2, \dots, {}^\lambda A_k, {}^\lambda H_m, n=1,2,3\dots$ ve $n_1, n_2\dots$ birimsiz ısı iletkenlik için katsayılarıdır.

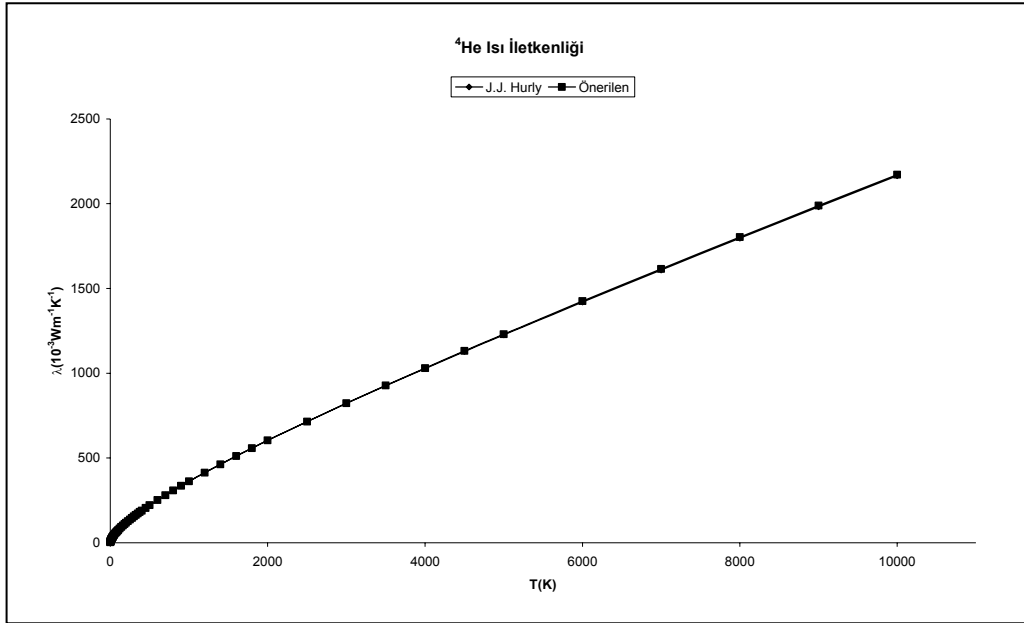
İkinci adım olarak, (5.11) ve (5.12) bağıntılarındaki (5.4) ısı iletkenliği çarpışma integrali $\Omega_\lambda^{*(2,2)}$ nin katsayıları, hesapsal *ab initio* verileri [1] kullanılarak Least Squares-fit yöntemiyle elde edilmiştir. Elde edilen bu katsayılar eşitlik (5.4) çarpışma integralinde kullanılarak $\Omega_\lambda^{*(2,2)}$ ısı iletkenlik çarpışma integrali elde edilmiştir. Bu elde edilen değerler (5.11) ve (5.12) ısı iletkenlik bağıntılarında kullanılarak, ısı iletkenlik değerleri her iki bağıntı için $1-10^4$ K sıcaklık aralığında ayrı ayrı hesaplanmıştır. Önerilen bu ifadeler sıcaklığın bir fonksiyonu olup, yapılan hesaplamalar sonucu elde edilen değerler *ab initio* değerleriyle karşılaştırılmış ve en uygun sonuçları veren (5.12) bağıntısı en geçerli bağıntı olarak seçilmiştir.

Hesaplama sonuçları, literatürdeki sonuçlarla karşılaştırmalı olarak Çizelge A.7 de verilmiştir. Elde edilen bu sonuçların hesapsal *ab initio* değerlerden sapmaları sırasıyla, toplam ortalama yüzde sapma (TOYS) 0.0688, toplam standart yüzde sapma (TSYS) 0.128 ve Powel's(χ) minimizasyonu 16.18 olarak hesaplanmıştır. Deneysellikten sapmanın en yüksek olduğu sıcaklık $T=7000$ K de %0.40 dır. (5.12) bağıntısının katsayıları, Least Squares-fit yöntemine göre deneysel verilere fit edilmiş ve Çizelge 5.4 de gösterilen değerler elde edilmiştir.

Elde edilen bu değerler, ısı iletkenliği bağıntısında kullanılarak sıcaklığa karşılık veriler elde edilmiş ve *ab initio* hesapsal değerleriyle karşılaştırmalı olarak Şekil 5.5 de grafiksel olarak da gösterilmiştir.

Çizelge 5.4 ^4He akışkanı için önerilen ısı iletkenliği $\lambda(T)$ bağıntısı sabitleri.

SABİTLER	(5.11) Tipi İfade TOYS %16.958	(5.12) Tipi İfade TOYS %0.0688
A_1	-3.702245	1.4128×10^{-5}
A_2	0.503264	-0.000208
A_3	0.007618	0.001567
A_4	-0.350055	0.002568
A_5	-0.158992	-0.001649
A_6	0.000464	0.002464
H_1	*	-1.000000
H_2	*	4.235905
H_3	*	-9.295487
n_1	0.503813	0.344587
n_2	-1.520505	0.164058
n_3	-0.609044	-0.061922
n_4	-1619986	-1.534978
n_5	-1.299054	-3.055289
n_6	0.025726	0.435355



Şekil 5.5 ^4He ait hesapsal *ab initio* [1] ve önerilen ısı iletkenliği (λ) bağıntıları değerlerinin grafik karşılaştırması.

5.2.2 ³He Akışkanına Ait Isı İletkenliği (λ) Bağıntısı Değerlerinin Hesaplanması

³He ait termofizik özelliklerden olan ve önerilecek bir ısı iletkenliği bağıntısından yararlanılarak ısı iletkenliği değerlerinin 1-10⁴ K sıcaklık aralığında hesaplanabilmesi için duyarlı ve fiziksel anlamlı bir bağıntının bilinmesi gerekmektedir [1, 7, 8, 16].

³He ait ısı iletkenliği bağıntısının hem sıcaklığın ve hem de çarpışma integralinin bir fonksiyonu olması nedeniyle, birinci adım olarak ³He ait ısı iletkenliği hesaplamasında kullanılabilecek, fiziksel anlamlı ikinci mertebeden bağıntılar aşağıdaki gibi önerilmiştir.

$$[\lambda]_2 = x_\lambda \frac{\sqrt{T}}{\Omega_\lambda^{*(2,2)}(T^*)} = x_\lambda \sqrt{T} \left[{}^\lambda A_1 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_1} + {}^\lambda A_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_2} + \dots + {}^\lambda A_n \left(\frac{T}{K} \right)^{n_n} \right]^{-1} \quad (5.13)$$

$$[\lambda]_2 = x_\lambda \frac{\sqrt{T}}{\Omega_\eta^{*(2,2)}(T^*)} = x_\lambda \sqrt{T} \left[{}^\lambda A_1 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_1} + {}^\lambda A_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_2} + \dots + {}^\lambda A_k \left(\frac{T}{K} \right)^{n_n} \exp \left({}^\lambda H_1 \left(\frac{T}{K} \right) + {}^\lambda H_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{-2} + {}^\lambda H_3 \left(\frac{T}{K} \right)^{-3} + \dots + {}^\lambda H_m \left(\frac{T}{K} \right)^{-n} \right) \right]^{-1} \quad (5.14)$$

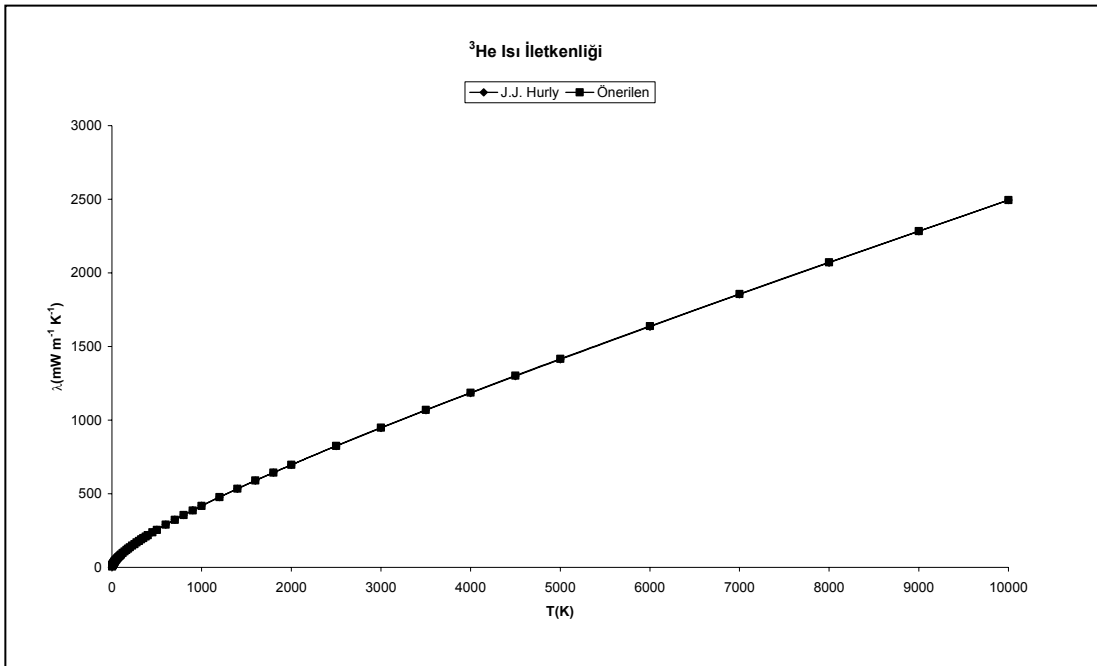
Burada, λ ısı iletkenliği, $x_\lambda = \frac{25}{32} c_v \sqrt{\frac{k}{\pi m_3}} \frac{f_\lambda^2}{\sigma^2}$, ($W \ m^{-1} \ K^{-3/2}$), (σ küresel molekülün çapı, m küresel molekülün kütlesi, k Boltzmann sabiti ve c_v sabit hacimde ısı kapasitesi), K Kelvin sıcaklık birimi, $\Omega_\lambda^{*(2,2)}$ niceliği fiziksel öneme sahip, herhangi bir moleküler modelin idealize edilmiş katı küre yapıdan sapmasını gösteren çarpışma integrali, ${}^\lambda A_1, {}^\lambda A_2, \dots, {}^\lambda A_n$, ${}^\lambda H_m$, $n=1,2,3,\dots$ ve $n_1, n_2, \dots$ birimsiz ısı iletkenliği için katsayılarıdır.

Hesaplama sonuçları, literatürdeki sonuçlarla karşılaştırmalı olarak Çizelge A.8 de verilmiştir. Deneysellikten sapmanın en yüksek olduğu sıcaklık $T=4 \ K$ de %0.63 dür. Hata oranı en düşük olan (5.14) bağıntısının katsayıları, Least Squares-fit yöntemine göre deneysel verilere fit edilmiş ve Çizelge 5.5 de gösterilen değerler elde edilmiştir.

Elde edilen bu sonuçların deneysel değerlerden sapmaları sırasıyla, toplam ortalama yüzde sapma (TOYS) 0.154, toplam standart yüzde sapma (TSYS) 0.186 ve Powel's(χ) minimizasyonu 7.12 olarak hesaplanmıştır. Grafiksel karşılaştırma Şekil 5.6 da verilmiştir.

Çizelge 5.5 ^3He akışkanı için önerilen ısı iletkenliği $\lambda(T)$ bağıntısı sabitleri.

SABİTLER	(5.13) Tipi İfade TOYS %5.844	(5.14) Tipi İfade TOYS %0.154
A_1	-1.552147	-0.001456
A_2	11.935523	-1.518090
A_3	0.729851	0.003696
A_4	-11.176095	-9.169648
A_5	-0.003214	10.676372
A_6	0.067307	*
H_1	*	0.002517
H_2	*	-0.001548
n_1	-0.468379	-0.051622
n_2	-0.569356	-1.168156
n_3	-0.722116	-0.122836
n_4	-0.591412	-1.106198
n_5	0.000632	-1.114229
n_6	-0.226523	*



Şekil 5.6 ^3He ait hesapsal *ab initio* [1] ve önerilen ısı iletkenliği (λ) bağıntıları değerlerinin grafik karşılaştırması.

5.2.3 ^4He ve ^3He Akışkanlarının Eş Karışımlarına Ait Isı İletkenliği (λ) Bağıntısı Değerlerinin Hesaplanması

$^4\text{He}+^3\text{He}$ eş karım akışkanının 1-10⁴ K sıcaklık aralığında termofizik özelliklerinin hesaplanabilmesi amacıyla ^4He ve ^3He için önerilen bağıntılar, karışımları için de önerilebilir. Karışımlar için önerilen ısı iletkenliği bağıntısından yararlanılarak, ısı iletkenliği değerlerinin hesaplamaları, duyarlı ve fiziksel anlamlı olacak şekilde yapılabilir [1, 7, 8, 12, 16].

^4He ve ^3He akışkanlarına benzer olarak, $^4\text{He}+^3\text{He}$ eş karışımdan oluşan akışkanın da hem sıcaklığın ve hem de çarpışma integralinin bir fonksiyonu olması gerektirir. Bu nedenle, birinci adımda eş karışıma ait ısı iletkenliği hesaplamasında kullanılabilecek, fiziksel anlamlı bağıntılar aşağıdaki gibi önerilmiştir.

$$[\lambda]_2 = x_\lambda \frac{\sqrt{T}}{\Omega_\lambda^{*(2,2)}(T^*)} = x_\lambda \sqrt{T} \left[{}^\lambda A_1 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_1} + {}^\lambda A_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_2} + \dots + {}^\lambda A_n \left(\frac{T}{K} \right)^{n_n} \right]^{-1} \quad (5.15)$$

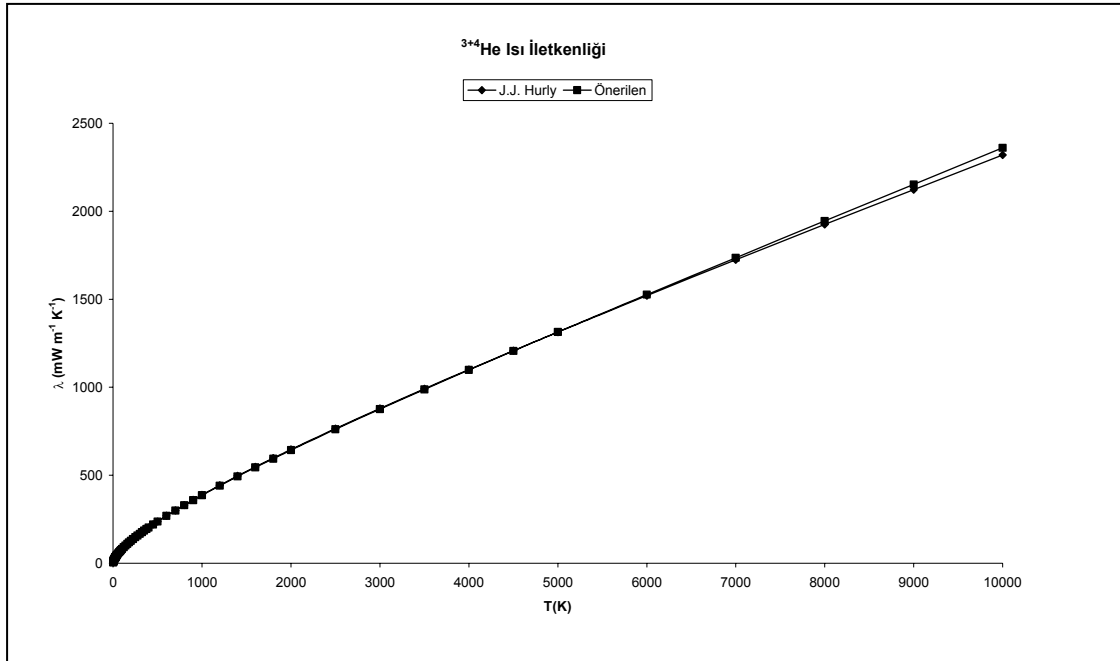
$$[\lambda]_2 = x_\lambda \frac{\sqrt{T}}{\Omega_\eta^{*(2,2)}(T^*)} = x_\lambda \sqrt{T} \left[{}^\lambda A_1 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_1} + {}^\lambda A_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_2} + \dots + {}^\lambda A_k \left(\frac{T}{K} \right)^{n_n} \exp \left({}^\lambda H_1 \left(\frac{T}{K} \right) + {}^\lambda H_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{-2} + {}^\lambda H_3 \left(\frac{T}{K} \right)^{-3} + \dots + {}^\lambda H_m \left(\frac{T}{K} \right)^{-n} \right) \right]^{-1} \quad (5.16)$$

Burada, λ ısı iletkenlik, $x_\lambda = \frac{25}{32} c_v \sqrt{\frac{k}{\pi M}} \frac{f_\lambda^2}{\sigma^2}$, ($W \ m^{-1} \ K^{-3/2}$), (σ küresel molekülün çapı, M küresel molekülün, moleküler ağırlığı, k Boltzmann sabiti ve c_v sabit hacimde ısı kapasitesi), K Kelvin sıcaklık birimi, $\Omega_\lambda^{*(2,2)}$ niceliği fiziksel öneme sahip, herhangi bir moleküler modelin idealize edilmiş katı küre yapıdan sapmasını gösteren çarpışma integrali, ${}^\lambda A_1, {}^\lambda A_2, \dots, {}^\lambda A_n, {}^\lambda H_n$, $n=1,2,\dots$ ve $n_1, n_2,\dots$ birimsiz ısı iletkenlik için katsayılarıdır. Deneysellikten sapmanın en yüksek olduğu sıcaklık $T=10000 \ K$ de %1.76 dir. Hata oranı en düşük olan (5.16) bağıntısının katsayıları, deneysel verilere fit edilmiş ve Çizelge 5.6 da gösterilen değerler elde edilmiştir. Hesapsal *ab initio* ve önerilen ısı iletkenliği bağıntısı verileri Şekil 5.7 de grafiksel karşılaştırmayla verilmiştir.

Çizelge 5.6 $^4\text{He}+^3\text{He}$ akışkanlarının eş karışımları için önerilen ısı iletkenliği $\lambda(T)$ bağıntısı sabitleri.

SABİTLER	(5.15) Tipi İfade TOYS %0.712	(5.16) Tipi İfade TOYS %0.255
A_1	-3.772104	-15900.61380
A_2	1.956909	14806.21350
A_3	-0.032566	-3.35002
A_4	3.589590	1099.49882
A_5	24.574673	2100.33039
A_6	*	*
H_1	-1.000000	-1.00000
H_2	-7.901551	-21.35445
H_3	0.815915	-7.92702
n_1	-0.296211	-0.23988
n_2	-0.444283	-0.24076
n_3	0.227003	-0.07004
n_4	-0.171145	-0.22750
n_5	-3.209532	-6.10099

Hesaplama sonuçları, literatürdeki sonuçlarla karşılaştırmalı olarak Çizelge A.9 da verilmiştir. Elde edilen bu sonuçların hesapsal *ab initio* değerlerinden sapmaları sırasıyla, toplam ortalama yüzde sapma (TOYS) 0.255, toplam standart yüzde sapma (TSYS) 0.393 ve Powel's(χ) minimizasyonu 56.56 olarak hesaplanmıştır.



Şekil 5.7 $^4\text{He}+^3\text{He}$ ait hesapsal *ab initio* [1] ve önerilen ısı iletkenliği (λ) bağıntılarının grafik karşılaştırması.

5.3 ^4He ve ^3He AKIŞKANLARINA AİT KÜTLE DİFÜZYON KATSAYISI (KÜTLE AKTARIMI) BAĞINTISI DEĞERLERİNİN HESAPLANMASI

Akışkanların termofizik özelliklerinden olan kütle difüzyon katsayısı D (Enerji aktarımı) bağıntısının bulunması için, öncelikle viskozite ve ısı iletkenliği hesabında olduğu gibi ele alınan akışkana ait bazı fiziksel özelliklerin ($\varepsilon/k, \sigma, m$ vb.) ve katsayıların bilinmesi gerekmektedir. Burada ele alınacak olan ^4He ve ^3He akışkanlarına ait difüzyon bağıntılarının önerilebilmesi için diğer akışkanlarda da gerek duyulan bazı termofiziksel özellikler bilinmelidir. Bu termofizik özellikler, literatürden ve konuyla ilgili kaynaklardan sağlanmıştır. Ayrıca, önerilen bağıntının katsayıları da literatürdeki deneysel ve hesapsal değerlere fit yapılmak suretiyle elde edilmiştir [1, 7, 8, 24].

5.3.1 ^4He Akışkanına Ait Kütle Difüzyon Katsayısı (D) Bağıntısı Değerlerinin Hesaplanması

^4He ait kütle difüzyon katsayısının hesaplanmasında, $\Omega_D^{(n,s)}(T)$ difüzyon çarpışma integrali bağıntısının ilk adım olarak hesaplanması gerekmektedir. Bu hesaplamanın yapılabilmesi için de kütle difüzyon katsayısının literatür verilerinden [1, 24] yararlanılmıştır.

Sıcaklığın üstel bir fonksiyonu olan ve buna göre lineer veya üstel analitik bir fonksiyon olarak önerilen (5.3) $\Omega^{*(1,1)}(T^*)$ çarpışma integrali bağıntısı cinsinden, difüzyon katsayısı aşağıdaki bağıntılar yardımıyla hesaplanır.

$$[D]_2 = x_D \frac{\sqrt{T}}{\Omega_D^{*(1,1)}(T^*)} = x_D \sqrt{T} \left[{}^D A_1 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_1} + {}^D A_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_2} + \dots + {}^D A_k \exp \left({}^D H_1 \left(\frac{T}{K} \right) + {}^D H_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{-2} + {}^D H_3 \left(\frac{T}{K} \right)^{-3} + \dots + {}^D H_m \left(\frac{T}{K} \right)^{-n} \right) \right]^{-1} \quad (5.17)$$

Burada, D difüzyon, $x_D = \frac{3}{16} \sqrt{\frac{2k^3}{\pi M}} \frac{f_d^2}{p\sigma^2} (\text{m}^2 \text{ s}^{-1} \text{ K}^{-3/2})$, (σ küresel molekülün çapı, M küresel molekülün molekül ağırlığı, p atmosferik basınç) ve $\Omega^{*(1,1)}(T^*)$ birinci mertebeden fiziksel

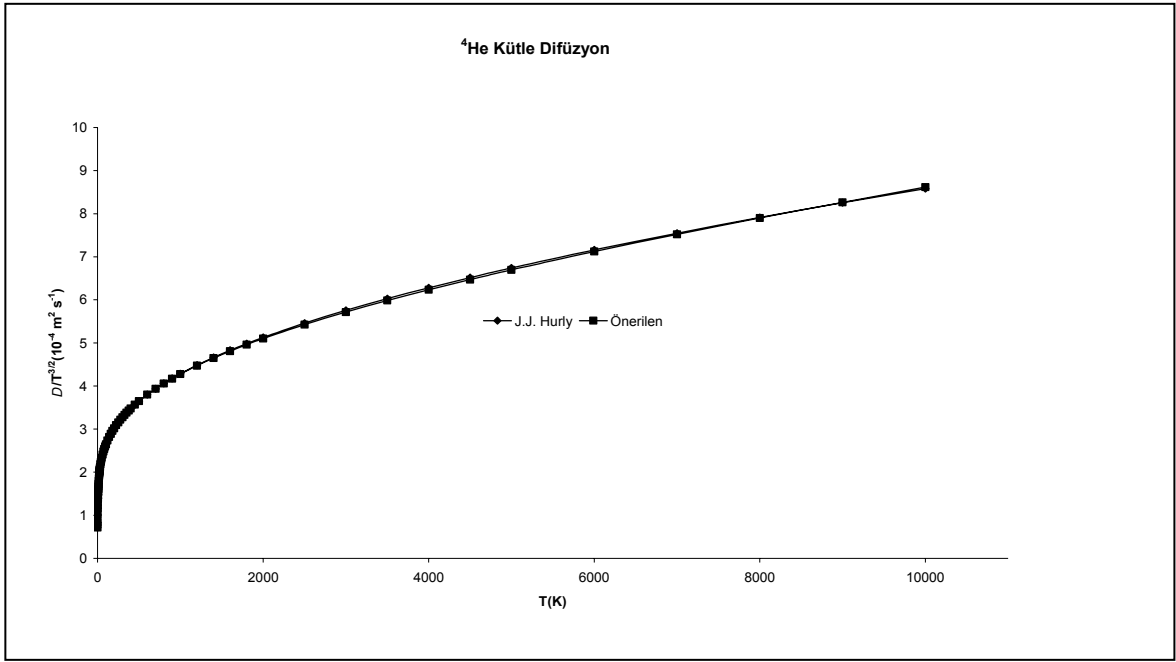
öneme sahip, herhangi bir moleküler modelin idealize edilmiş katı küre yapıdan sapmasını gösteren çarpışma integrali, ${}^D A_1, {}^D A_2, \dots, {}^D A_n, {}^D H_m, n=1, 2, \dots$ ve $n_1, n_2, \dots$ birimsiz difüzyon için katsayılarıdır.

Hesaplama sonuçları, literatürdeki sonuçlarla karşılaştırmalı olarak Çizelge A.10 da verilmiştir. Elde edilen bu sonuçların hesapsal ve deneysel değerlerden sapmaları sırasıyla, toplam ortalama yüzde sapma (TOYS) %0.151, toplam standart yüzde sapma (TSYS) %0.259 ve Powel's(χ) minimizasyonu 5.12 olarak hesaplanmıştır. Deneysellikten sapmanın en yüksek olduğu sıcaklık $T=4000$ K de %0.718 dir. (5.17) bağıntısının katsayıları, Least Squares-fit yöntemine göre deneysel verilere fit edilmiş ve Çizelge 5.7 de gösterilen değerler elde edilmiştir.

Çizelge 5.7 ${}^4\text{He}$ akışkanı için önerilen kütle difüzyon $D(T)$ bağıntısı sabitleri.

SABİTLER	(5.17) Tipi İfade TOYS %0.151
A_1	2.563492
A_2	-1.492101
A_3	-4.773392
A_4	-0.012332
A_5	4.754076
A_6	1.460321
H_1	-1.000000
H_2	-13.132754
H_3	28.166799
H_4	-13.944478
n_1	-0.214389
n_2	-0.423834
n_3	-2.792831
n_4	0.234409
n_5	-1.452180

Elde edilen sonuçlar (5.17) bağıntısında yerine konularak, sıcaklığa göre kütle difüzyon hesaplamaları yapılmış ve elde edilen değerler, hesapsal *ab initio* değerleriyle grafiksel karşılaştırmalı olarak Şekil 5.8 de gösterilmiştir.



Şekil 5.8 ^4He ait hesapsal *ab initio* [1] ve önerilen kütle difüzyon (D) bağıntıları değerlerinin grafik karşılaştırması.

5.3.2 ^3He Akışkanına Ait Kütle Difüzyon Katsayısı (D) Bağıntısı Değerlerinin Hesaplanması

^3He ait kütle difüzyon katsayısının hesaplanmasında, ^4He akışkanında olduğu gibi, $\Omega_D^{(n,s)}(T)$ difüzyon çarpışma integrali bağıntısının ilk adım olarak hesaplanması gerekmektedir. Bu hesaplamanın yapılabilmesi için de ^4He akışkanının izotopu olan ^3He akışkanına ait bazı sabitlerin (M , σ ve f gibi) bilinmesi gerekmektedir. Ayrıca, kütle difüzyon katsayısının önerilen $\Omega_D^{(n,s)}(T)$ çarpışma integrali bağıntısının katsayılarının hesaplanabilmesi için de literatürdeki hesapsal ve deneysel verilerinden yararlanılmıştır [1, 5, 10, 24].

Sıcaklığın üstel bir fonksiyonu olan ve buna göre lineer veya üstel analitik bir fonksiyon olarak önerilen (5.4) $\Omega^{*(1,1)}(T^*)$ çarpışma integrali bağıntısı cinsinden, ^3He ait difüzyon katsayısı aşağıdaki bağıntılar yardımıyla hesaplanır.

$$[D]_2 = x_D \frac{\sqrt{T}}{\Omega_D^{*(1,1)}(T^*)} = x_D \sqrt{T} \left[{}^D A_1 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_1} + {}^D A_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{n_2} + \dots \right. \\ \left. + {}^D A_k \left(\frac{T}{K} \right)^{n_k} \exp \left({}^D H_1 \left(\frac{T}{K} \right) + {}^D H_2 \left(\frac{T}{K} \right)^{-2} + \dots + {}^D H_m \left(\frac{T}{K} \right)^{-m} \right) \right]^{-1} \quad (5.18)$$

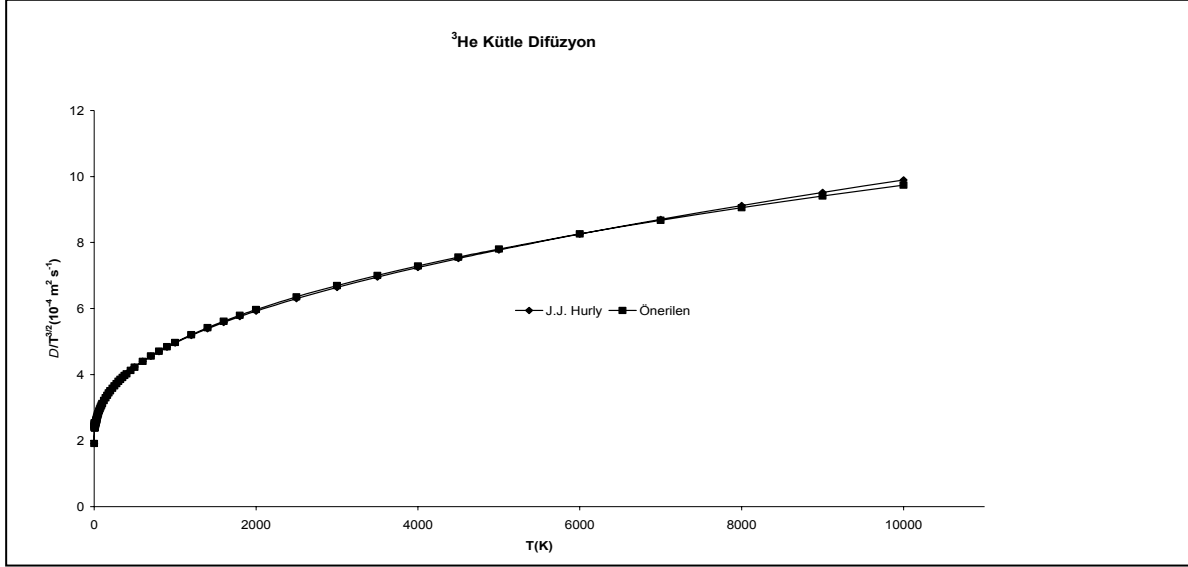
Burada, D difüzyon, $x_D = \frac{3}{16} \sqrt{\frac{2k^3}{\pi M}} \frac{f_d^2}{p\sigma^2} (\text{m}^2 \text{ s}^{-1} \text{ K}^{-3/2})$, (σ küresel molekülün çapı, M küresel molekülün molekül ağırlığı, p atmosferik basınç) ve $\Omega_D^{*(1,1)}(T^*)$ birinci mertebeden fiziksel öneme sahip, herhangi bir moleküler modelin idealize edilmiş katı küre yapıdan sapmasını gösteren çarpışma integrali, ${}^D A_1, {}^D A_2, \dots, {}^D A_k, {}^D H_m$, $n=1, 2, 3, \dots$ ve $n_1, n_2, \dots$ birimsiz difüzyon için katsayılarıdır.

Deneyellikten sapmanın en yüksek olduğu sıcaklık $T=10000 \text{ K}$ de %1.55 dir. (5.18) bağıntısının katsayıları, Least Squares-fit yöntemine göre deneysel verilere fit edilmiş ve Çizelge 5.8 de gösterilen değerler elde edilmiştir.

Çizelge 5.8 ${}^3\text{He}$ akışkanı için önerilen kütle difüzyon $D(T)$ bağıntısı sabitleri.

SABİTLER	(5.18) Tipi İfade TOYS %0.3622
A_1	350898.998500
A_2	-581828.471500
A_3	232399.786900
A_4	-1471.044420
A_5	2177.719830
H_1	-1.000000
H_2	-6.265394
H_3	-14.731229
H_4	2.276031
H_5	12.659541
n_1	-0.640361
n_2	-0.636799
n_3	-0.631957
n_4	-0.723434
n_5	-5.461955

Hesaplama sonuçları, literatürdeki sonuçlarla karşılaştırmalı olarak Çizelge A.11 de verilmiştir. Elde edilen bu sonuçların deneysel değerlerden sapmaları sırasıyla, toplam ortalama yüzde sapma (TOYS) 0.362, toplam standart yüzde sapma (TSYS) 0.448 ve Powel's(χ) minimizasyonu 18,79 olarak hesaplanmıştır. Önerilen kütle difüzyon bağıntısı değerleri ile literatür değerleri karşılaştırmalı olarak Şekil 5.9 da gösterilmiştir.



Şekil 5.9 ³He ait hesapsal *ab initio* [1] ve önerilen kütle difüzyon (D) bağıntıları değerlerinin grafik karşılaştırması.

BÖLÜM 6

^4He VE ^3He AKIŞKANI İÇİN AKIŞKAN İÇİNDEKİ SES HIZI BAĞINTISININ HESAPLANMASI

Son yıllarda, bilimsel ve teknolojik araştırmalarda organik ve inorganik akışkanların termofizik özelliklerinin bilinmesi önem kazanmıştı. Magnetohidrodinamik güç sistemlerinde, bazı tip yarıiletkenlerin üretiminde, elektriksel güç üretme sistemlerinde, kimyasal üretim sistemlerinde, termoakustik soğutucuların planlanmasında ve yüksek teknolojik uygulamalarda, alçak sıcaklıktaki akışkanların termofiziksel özelliklerinin ve termodinamik fonksiyonlarının duyarlı olarak bilinmesi gerekmektedir. Bu amaçla akışkanların termodinamik fonksiyonlarının elde edilebilmesi için, termofizik özelliklerinin hassas bir şekilde hesaplanabilmesi, akışkanlara ait ve sıcaklığın bir fonksiyonu olan ikinci virial bağıntısının kuantum mekaniksel düzeltmeyi de içerecek bir şekilde hesap edilmiş olması gerekmektedir [1, 2, 6, 9, 21, 26-28].

Moleküler kuvvet sabitlerinin bulunması ve akışkanların termofizik ve termodinamik fonksiyonlarının hassas bir biçimde bulunması için, öncelikle akışkanların kuantum mekaniksel hesaplamalarının hassas bir şekilde yapılması gerekmektedir. Bu hassasiyet gözetilerek literatürle ve deneysel verilerle uyum sağlayan pek çok bağıntı önerilebilir [9, 25-28]. Önerilen bu bağıntılarla yapılan termodinamik ve termofizik özelliklere ait hesaplamaların, deneysel verilerle oldukça iyi uyum içinde olmaları gerekmektedir. Ayrıca, bu akışkanların her biri için önerilen bağıntıların, farklı sıcaklık, farklı basınç ve yoğunluklar için de hassas yaklaşımlar vermeleri gerekmektedir.

Çalışmanın bu aşamasında, yukarıda belirtilen hassasiyette, kuantum mekaniksel özellikli, deneysel ve hesapsal değerlerle uyum içerisinde olan bölüm dördte elde edilen ikinci virial bağıntısı değerleri kullanılarak, termodinamik özelliklerden olan akışkan içindeki ses hızlarının hesaplanması işlemleri ^4He ve ^3He akışkanları için yapılmıştır.

6.1 AKIŞKANLARDAKİ SES HIZININ, İKİNCİ VİRİAL BAĞINTISI KULLANILARAK BULUNMASI

Ses hızının basınç, hacim ve sıcaklığa göre değişimi en genel anlamda aşağıdaki gibi verilmektedir [7, 8].

$$c_0^2 = -\frac{\gamma^0 V}{M} \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T \quad (6.1)$$

$$c_0^2 = \frac{\gamma^0 RT}{M} \left\{ 1 + \frac{1}{V} \left[2B + 2(\gamma^0 - 1)T \frac{dB}{dT} + \frac{(\gamma^0 - 1)^2}{\gamma^0} T^2 \frac{d^2 B}{dT^2} \right] + \dots \right\} \quad (6.2)$$

$$c_0^2 = \frac{\gamma^0 RT}{M} \left\{ 1 + \frac{1}{V^*} \left[2B^* + 2(\gamma^0 - 1)T B_1^* + \frac{(\gamma^0 - 1)^2}{\gamma^0} T^2 B_2^* \right] + \dots \right\} \quad (6.3)$$

Burada $\gamma^0 = C_p^0 / C_v^0$, $V^* = V/b_0$ ve $T^* = kT/\varepsilon$ dur.

Akışkana ait fiziksel sabitler (V , M , p , ρ gibi) ve molekül üzerine etkiyen kuvvet olarak isimlendirilen ikinci virial bağıntısı bilinirse, bu sabitler ve bağıntı ile akışkan içindeki ses hızı basınç ve sıcaklık değişimine göre hesaplanabilir. Eğer yoğunluğun $\rho=2.5\rho_c$ değerine kadar ve geniş bir sıcaklık aralığı içinde geçerli bir hal denklemi varsa ses hızının duyarlı olarak hesaplanabilmesi mümkün olmaktadır.

Ses hızı hesaplamasında kullanılacak olan bağıntı,

$$c_0^2 = \frac{\gamma^0 RT}{M} \left\{ 1 + \frac{1}{V} \left[2B + 2(\gamma^0 - 1)T \frac{dB}{dT} + \frac{(\gamma^0 - 1)^2}{\gamma^0} T^2 \frac{d^2 B}{dT^2} \right] + \dots \right\} \quad (6.4)$$

dir. Burada $\gamma^0 = C_p^0 / C_v^0$ sabit basınçtaki ısı kapasitesinin sabit hacimdeki ısı kapasitesine oranı olup pek çok mono atomik akışkan için 5/3 oranına sahiptir. (6.4) bağıntısının içinde yer alan ve Bölüm 4 de ele alınan, alan akışkana ait ikinci virial ve türevleri ve yine bu akışkanlara ait pVT değerlerini ses hızı bağıntısında kullanarak, ^4He ve ^3He akışkanları içindeki basınç ve sıcaklık değişimlerine bağlı olarak ses hızları hesaplanabilir.

6.1.1 ^4He Akışkanını İçin Ses Hızı Bağıntısı Kullanılarak, Akışkan İçindeki Ses Hızlarının Hesaplanması

^4He akışkanına ait sıcaklığa bağlı ikinci virial değerleri, birinci ve ikinci dereceden türev değerlerinin kullanılmasıyla, farklı basınç ve farklı sıcaklık değerlerine göre hesaplanmış akışkan içindeki ses hızları Çizelge 6.1 de verilmiştir.

Çizelge 6.1 ^4He akışkanını içindeki sıcaklığa bağlı ve $\cong 15$ Atm. sabit basınçtaki hesaplanmış ses hızları ve literatür değerlerinin karşılaştırılması.

Sıcaklık (Kelvin) T(K)	Önerilen B(cm ³ mol ⁻¹)	¹ J.J. Hurly dB/dT (cm ³ mol ⁻¹ K ⁻¹)	Önerilen dB/dT (cm ³ mol ⁻¹ K ⁻¹)	¹ J.J. Hurly d ² B/dT ² (cm ³ mol ⁻¹ K ⁻²)	Önerilen d ² B/dT ² (cm ³ mol ⁻¹ K ⁻²)	² J.J. Hurly c(ses H.) m s ⁻¹	Önerilen 2. Viriale göre c(ses H.) m s ⁻¹
1	-474,449	664,861	679,509	-1771,941	-1934,106		589,403
2	-194,635	116,448	116,130	-135,022	-133,393		363,919
3	-120,555	47,499	47,565	-33,568	-33,665		268,819
4	-85,341	26,103	26,100	-13,372	-13,411		204,570
5	-64,549	16,578	16,560	-6,706	-6,707		150,037
6	-50,768	11,477	11,464	-3,849	-3,842		92,526
7	-40,947	8,419	8,413	-2,415	-2,409		48,450
8	-33,588	6,440	6,439	-1,615	-1,612		106,614
9	-27,868	5,084	5,085	-1,134	-1,132		138,311
10	-23,294	4,114	4,117	-8,27E-01	-8,26E-01		161,294
11	-19,555	3,397	3,400	-6,22E-01	-6,21E-01		179,622
12	-16,441	2,850	2,854	-4,79E-01	-4,79E-01		195,025
14	-11,559	2,087	2,090	-3,02E-01	-3,02E-01		220,350
16	-7,910	1,591	1,593	-2,03E-01	-2,03E-01		241,118
18	-5,086	1,251	1,252	-1,43E-01	-1,43E-01		259,036
20	-2,839	1,007	1,008	-1,04E-01	-1,04E-01		275,004
22	-1,013	8,27E-01	8,27E-01	-7,81E-02	-7,83E-02		289,552
23	-0,223	7,54E-01	7,54E-01	-6,84E-02	-6,85E-02		296,403
24	0,498	6,90E-01	6,90E-01	-6,02E-02	-6,03E-02		303,016
25	1,159	6,33E-01	6,33E-01	-5,32E-02	-5,33E-02		309,415
26	1,766	5,83E-01	5,83E-01	-4,73E-02	-4,74E-02		315,622
28	2,844	4,98E-01	4,98E-01	-3,78E-02	-3,79E-02		327,530
30	3,770	4,30E-01	4,30E-01	-3,07E-02	-3,08E-02		338,856
35	5,590	3,08E-01	3,07E-01	-1,93E-02	-1,93E-02		365,147
40	6,919	2,29E-01	2,29E-01	-1,28E-02	-1,28E-02		389,214
45	7,921	1,76E-01	1,75E-01	-8,94E-03	-8,93E-03		411,596
50	8,698	1,38E-01	1,37E-01	-6,46E-03	-6,45E-03		432,640
60	9,804	8,86E-02	8,84E-02	-3,66E-03	-3,65E-03		471,598
70	10,534	5,98E-02	5,97E-02	-2,25E-03	-2,24E-03		507,327
80	11,034	4,16E-02	4,15E-02	-1,47E-03	-1,46E-03		540,564
90	11,385	2,95E-02	2,95E-02	-9,98E-04	-9,93E-04		571,793
100	11,636	2,11E-02	2,11E-02	-7,03E-04	-7,00E-04		601,352
120	11,943	1,07E-02	1,08E-02	-3,78E-04	-3,76E-04		656,410
140	12,095	4,92E-03	4,99E-03	-2,18E-04	-2,18E-04		707,139
160	12,157	1,50E-03	1,57E-03	-1,32E-04	-1,32E-04		754,440
180	12,165	-6,18E-04	-5,43E-04	-8,32E-05	-8,35E-05		798,935
200	12,139	-1,96E-03	-1,89E-03	-5,34E-05	-5,37E-05		841,074
225	12,077	-2,99E-03	-2,93E-03	-3,10E-05	-3,14E-05	890,674	890,950
250	11,994	-3,59E-03	-3,54E-03	-1,78E-05	-1,82E-05	938,097	938,180
275	11,901	-3,93E-03	-3,88E-03	-9,74E-06	-1,01E-05	982,985	983,147

ÇİZELGE 6.1 (devam ediyor)

Sıcaklık (Kelvin) T(K)	Önerilen B(cm ³ mol ⁻¹)	¹ J.J. Hurly dB/dT (cm ³ mol ⁻¹ K ⁻¹)	Önerilen dB/dT (cm ³ mol ⁻¹ K ⁻¹)	¹ J.J. Hurly d ² B/dT ² (cm ³ mol ⁻¹ K ⁻²)	Önerilen d ² B/dT ² (cm ³ mol ⁻¹ K ⁻²)	² J.J. Hurly c(ses H.) m s ⁻¹	Önerilen 2. Viriale göre c(ses H.) m s ⁻¹
300	11,800	-4,10E-03	-4,07E-03	-4,69E-06	-5,01E-06	1025,584	1026,149
325	11,697	-4,18E-03	-4,15E-03	-1,46E-06	-1,75E-06		1067,424
350	11,593	-4,19E-03	-4,16E-03	6,15E-07	3,68E-07	1106,812	1107,165
375	11,489	-4,15E-03	-4,14E-03	1,95E-06	1,74E-06		1145,532
400	11,386	-4,09E-03	-4,08E-03	2,81E-06	2,62E-06	1182,215	1182,658
450	11,185	-3,93E-03	-3,92E-03	3,66E-06	3,52E-06		1253,624
500	10,994	-3,74E-03	-3,74E-03	3,88E-06	3,79E-06		1320,793
600	10,639	-3,36E-03	-3,36E-03	3,66E-06	3,62E-06		1445,821
700	10,321	-3,01E-03	-3,02E-03	3,19E-06	3,17E-06		1560,889
800	10,034	-2,72E-03	-2,73E-03	2,72E-06	2,72E-06		1668,055
900	9,775	-2,47E-03	-2,48E-03	2,32E-06	2,32E-06		1768,751
1000	9,538	-2,25E-03	-2,26E-03	1,99E-06	1,99E-06		1864,026
1200	9,123	-1,91E-03	-1,92E-03	1,48E-06	1,50E-06		2041,298
1400	8,768	-1,65E-03	-1,65E-03	1,14E-06	1,15E-06		2204,380
1600	8,460	-1,44E-03	-1,45E-03	9,01E-07	9,12E-07		2356,214
1800	8,187	-1,28E-03	-1,28E-03	7,27E-07	7,37E-07		2498,849
2000	7,945	-1,15E-03	-1,15E-03	5,97E-07	6,05E-07		2633,779
2500	7,435	-9,08E-04	-9,06E-04	3,90E-07	3,95E-07		2944,193
3000	7,024	-7,45E-04	-7,41E-04	2,73E-07	2,75E-07		3224,884
3500	6,683	-6,28E-04	-6,24E-04	2,00E-07	2,01E-07		3483,040
4000	6,393	-5,41E-04	-5,36E-04	1,53E-07	1,52E-07		3723,347
4500	6,141	-4,73E-04	-4,69E-04	1,20E-07	1,19E-07		3949,064
5000	5,920	-4,19E-04	-4,16E-04	9,68E-08	9,49E-08		4162,563
6000	5,544	-3,39E-04	-3,38E-04	6,62E-08	6,38E-08		4559,678
7000	5,235	-2,83E-04	-2,84E-04	4,79E-08	4,53E-08		4924,881
8000	4,973	-2,41E-04	-2,45E-04	3,61E-08	3,35E-08		5264,817
9000	4,747	-2,09E-04	-2,16E-04	2,81E-08	2,55E-08		5584,101
10000	4,548	-1,84E-04	-1,93E-04	2,24E-08	2,00E-08		5886,093

1. Hurly ve Moldover dan alınmıştır [1]

2. Hurly, Schmidt, Boyes ve Moldover dan alınmıştır [2].

6.1.2 ^3He Akışkanı İçin Ses Hızı Bağıntısı Kullanılarak, Akışkan İçindeki Ses Hızlarının Hesaplanması

^4He akışkanına ait sıcaklığa bağlı ikinci virial değerlerinin kullanılmasıyla, farklı basınç ve farklı sıcaklık değerlerine göre hesaplanmış akışkan içindeki ses hızları Çizelge 6.2 de verilmiştir.

Çizelge 6.2 ^3He akışkanı içindeki sıcaklığa bağlı ve ≈ 15 Atm. sabit basınçtaki hesaplanmış ses hızları ve literatür değerlerinin karşılaştırılması.

Sıcaklık (Kelvin) T(K)	$^1\text{J.J. Hurly}$ $B(\text{cm}^3\text{mol}^{-1})$	Önerilen $B(\text{cm}^3\text{mol}^{-1})$	$^1\text{J.J. Hurly}$ dB/dT $(\text{cm}^3\text{mol}^{-1}\text{K}^{-1})$	Önerilen dB/dT $(\text{cm}^3\text{mol}^{-1}\text{K}^{-1})$	Önerilen d^2B/dT^2 $(\text{cm}^3\text{mol}^{-1}\text{K}^{-2})$	Önerilen 2. Viriale göre $c(\text{ses H.}) \text{ m s}^{-1}$
1	-237,503	-237,502	174,583	174,913	-237,798	500,955
2	-131,470	-131,493	63,444	63,928	-53,844	341,066
3	-86,736	-86,671	31,410	31,336	-18,956	253,842
4	-62,616	-62,620	18,504	18,456	-8,588	186,163
5	-47,616	-47,646	12,159	12,150	-4,580	120,167
6	-37,392	-37,422	8,599	8,605	-2,724	28,066
7	-29,972	-29,992	6,405	6,415	-1,751	114,385
8	-24,336	-24,347	4,958	4,968	-1,192	153,331
9	-19,909	-19,911	3,953	3,960	-8,486E-01	180,751
10	-16,338	-16,334	3,226	3,231	-6,257E-01	202,322
11	-13,397	-13,389	2,682	2,685	-4,747E-01	220,314
12	-10,933	-10,921	2,264	2,267	-3,688E-01	235,889
14	-7,038	-7,024	1,675	1,675	-2,356E-01	262,255
16	-4,101	-4,087	1,287	1,287	-1,597E-01	284,457
18	-1,811	-1,798	1,018	1,017	-1,132E-01	303,950
20	0,022	0,032	8,242E-01	8,231E-01	-8,314E-02	321,536
22	1,519	1,527	6,795E-01	6,784E-01	-6,285E-02	337,702
23	2,168	2,175	6,206E-01	6,195E-01	-5,515E-02	345,356
24	2,762	2,768	5,688E-01	5,676E-01	-4,866E-02	352,764
25	3,308	3,313	5,229E-01	5,218E-01	-4,314E-02	359,952
26	3,810	3,814	4,822E-01	4,811E-01	-3,842E-02	366,939
28	4,703	4,704	4,132E-01	4,122E-01	-3,086E-02	380,383
30	5,471	5,471	3,573E-01	3,564E-01	-2,515E-02	393,211
35	6,987	6,984	2,568E-01	2,562E-01	-1,589E-02	423,111
40	8,097	8,091	1,915E-01	1,910E-01	-1,064E-02	450,595
45	8,936	8,928	1,467E-01	1,464E-01	-7,451E-03	476,224
50	9,586	9,576	1,148E-01	1,146E-01	-5,405E-03	500,365
60	10,509	10,498	7,365E-02	7,361E-02	-3,080E-03	545,134
70	11,114	11,103	4,929E-02	4,932E-02	-1,899E-03	586,254
80	11,524	11,514	3,384E-02	3,392E-02	-1,240E-03	624,541
90	11,808	11,798	2,355E-02	2,365E-02	-8,454E-04	660,536
100	12,005	11,997	1,642E-02	1,653E-02	-5,960E-04	694,620
120	12,237	12,231	7,620E-03	7,731E-03	-3,192E-04	758,129
140	12,336	12,332	2,752E-03	2,853E-03	-1,834E-04	816,665
160	12,360	12,358	-1,030E-04	-1,518E-05	-1,104E-04	871,255
180	12,339	12,339	-1,842E-03	-1,767E-03	-6,843E-05	922,613
200	12,291	12,292	-2,924E-03	-2,861E-03	-4,304E-05	971,257

ÇİZELGE 6.2 (devam ediyor)

Sıcaklık (Kelvin) T(K)	¹ J.J. Hurly B(cm ³ mol ⁻¹)	Önerilen B(cm ³ mol ⁻¹)	¹ J.J. Hurly dB/dT (cm ³ mol ⁻¹ K ⁻¹)	Önerilen dB/dT (cm ³ mol ⁻¹ K ⁻¹)	Önerilen d ² B/dT ² (cm ³ mol ⁻¹ K ⁻²)	Önerilen 2. Viriale göre c(ses H.) m s ⁻¹
225	12,206	12,209	-3,728E-03	-3,679E-03	-2,407E-05	1028,835
250	12,107	12,111	-4,168E-03	-4,130E-03	-1,297E-05	1083,361
275	12,000	12,004	-4,392E-03	-4,363E-03	-6,246E-06	1135,277
300	11,889	11,894	-4,485E-03	-4,463E-03	-2,087E-06	1184,926
325	11,776	11,782	-4,495E-03	-4,480E-03	5,195E-07	1232,582
350	11,664	11,670	-4,455E-03	-4,445E-03	2,158E-06	1278,467
375	11,554	11,560	-4,383E-03	-4,377E-03	3,178E-06	1322,766
400	11,445	11,451	-4,291E-03	-4,289E-03	3,797E-06	1365,633
450	11,236	11,242	-4,080E-03	-4,083E-03	4,327E-06	1447,575
500	11,038	11,043	-3,857E-03	-3,865E-03	4,369E-06	1525,132
600	10,673	10,678	-3,434E-03	-3,447E-03	3,935E-06	1669,498
700	10,349	10,352	-3,068E-03	-3,082E-03	3,362E-06	1802,365
800	10,058	10,060	-2,758E-03	-2,772E-03	2,841E-06	1926,107
900	9,796	9,796	-2,496E-03	-2,511E-03	2,406E-06	2042,381
1000	9,557	9,556	-2,275E-03	-2,288E-03	2,052E-06	2152,393
1200	9,139	9,136	-1,923E-03	-1,934E-03	1,527E-06	2357,089
1400	8,782	8,777	-1,658E-03	-1,666E-03	1,173E-06	2545,398
1600	8,472	8,466	-1,452E-03	-1,458E-03	9,243E-07	2720,721
1800	8,199	8,191	-1,288E-03	-1,292E-03	7,449E-07	2885,422
2000	7,955	7,947	-1,155E-03	-1,157E-03	6,116E-07	3041,225
2500	7,443	7,434	-9,112E-04	-9,098E-04	3,982E-07	3399,660
3000	7,031	7,024	-7,471E-04	-7,435E-04	2,774E-07	3723,775
3500	6,688	6,683	-6,296E-04	-6,248E-04	2,029E-07	4021,867
4000	6,396	6,394	-5,417E-04	-5,365E-04	1,538E-07	4299,351
4500	6,143	6,143	-4,737E-04	-4,685E-04	1,199E-07	4559,986
5000	5,920	5,923	-4,196E-04	-4,150E-04	9,553E-08	4806,514
6000	5,543	5,550	-3,393E-04	-3,368E-04	6,377E-08	5265,063
7000	5,234	5,241	-2,829E-04	-2,833E-04	4,469E-08	5686,763
8000	4,973	4,978	-2,412E-04	-2,452E-04	3,242E-08	6079,286
9000	4,748	4,747	-2,093E-04	-2,172E-04	2,411E-08	6447,961
10000	4,552	4,541	-1,842E-04	-1,961E-04	1,826E-08	6796,669

1. Hurly ve Moldover dan alınmıştır [1]

Not: literatürden ³He ait ses hızı verileri sağlanamadığından karşılaştırmalı olarak tabloda yer verilememiştir.

BÖLÜM 7

SONUÇ

Atmosferin ozon tabakasına zarar veren ve güneşin ultraviyole ışınlarının insan sağlığını tehdit etmeye başlamasıyla birlikte dünya ülkelerinin (168 ülke) pek çoğu Montreal protokolünü imzalamış ve bu konudaki çalışmalara hız verilmişlerdir. Bu amaçla ozon tahrip edici gazların termodinamik ve termofizik özelliklerinin hesaplanması ve ölçülebilmesi için 1989 yılında NIST (National Institute of Standards and Technology.) de de yoğun bir çalışma başlatılmış ve buna bağlı olarak Kloroflorokarbonların (CFC) yerini alabilecek ve ozona zarar vermeyecek olan akışkanlar konusundaki çalışmalara hız verilmiştir.

Bu çalışmada, ozona zarar vermeyen akışkanlardan olan ^4He , ^3He ve karışımlarının termodinamik ve termofizik özelliklerinin belirlenmesi amacıyla bazı kullanışlı ve hassas değerler verebilecek bağıntılar önerilmiş, bu önerilen bağıntılar literatürdeki hesapsal *ab initio* ve deneysel verilerle karşılaştırılmıştır. Bu karşılaştırmalar sonucunda, termofiziksel özelliklerden olan ikinci virial (B), viskozite (η), ısı iletkenliği (λ) ve kütle difüzyon katsayısı (D) bağıntılarının sonuçlarının literatür değerleriyle iyi bir uyum içerisinde oldukları görülmüştür. Ayrıca, termodinamik özelliklerden olan akışkan içindeki ses hızı hesaplamaları, önerilen ikinci virial değerleri kullanılarak yapılmış, literatür değerleriyle de karşılaştırılarak sonuçlar test edilmiş ve literatür değerleriyle birlikte çizelgelerde gösterilmiştir.

Termofizik özelliklerden olan ikinci virial terimi iki molekül arasındaki etkileşimleri verdiğinden bu terimlerinin duyarlı olarak bilinmesi gereklidir. Ayrıca, akışkana ait denel virial ve *ab initio* verileri de kullanılarak moleküllere ait $\varepsilon/k(\text{K})$, $\sigma(\text{\AA})$, ve $b_0(\text{cm}^3/\text{mol})$ değerleri çeşitli moleüller için (polar, apolar, hidrokarbon,...) ekstrapolasyon yapılarak hesaplanabileceği görülmüştür.

Bu alıřmada, termofizik baęıntılar sıcaklıęın fonksiyonu olarak nerilmiř ve $1-10^4$ K sıcaklık aralıęındaki hesaplamaları yapılmıřtır. nerilen bu termofizik baęıntılarının deneysel ve *ab initio* verilerliyle uyuřumu yanında, aynı zamanda *ab initio* hesaplamalarında kullanılan baęıntılarının katsayılarından daha az katsayıya sahip olmalarına raęmen, literatürdeki deneysel ve hesapsal verilerle aynı hassasiyeti vermeleri bakımından daha kullanıřlıdırlar.

Sonu olarak, yapılan bu alıřmada elde edilen termofizik baęıntılar, duyarlı ve belirsizlikleri ok az olmaları nedeniyle, incelenecek olan fiziksel nicelięe ait (entropi, entalpi, akıřkan iindeki ses hızı, Joule-Thomson İnvrsiyon sıcaklıęı gibi) verileri belirleyen denel l aletlerinin kalibrasyonunda, bilimsel arařtırmalarda, teknolojiye ve endüstride gvenle kullanılabilirliklerine kanaat getirilmiřtir.

KAYNAKLAR

- [1] **Hurly, J.J. and Moldover, M. R.** (2000) Ab Initio Values of the Thermophysical Properties of Helium as Standards. *National Institute of Standards and Technology*, Vol.105, No 5 pp. 667-688.
- [2] **Hurly, J.J., Schmidt, J.W., Boys, S.J. and Moldover, M.R.** (1997) Virial Equation of State of Helium, Xenon, and Helium-Xenon Mixtures from Speed-of-Sound and Burnett $P\rho T$ Measurements. *International Journal of Thermophysics*, vol.18 No.3 pp. 579-633.
- [3] **Jansen, A.R. and Aziz, R.A.** (1997) An accurate potential energy curve for helium based on *ab initio* calculations. *Journal of Chemical Physics*. Vol.107, No.3, pp. 914-919.
- [4] **Aziz, R. A. and Slaman, M. J.** (1991) An Examination of *ab initio* Results for The Helium Potential Energy Curve. *Journal of Chemical Physics*, Vol. 94, No. 12, pp. 8047-8053
- [5] **Aziz, R. A. and Janzen, A. R.** (1995) *Ab initio* Calculation for Helium: A Standard for Transport Property Measurements. *Physical Review Letters*, Vol.74, No 9, pp. 1586-1589.
- [6] **Boyd, M. E.** (1971) Quantum Corrections to the Second Virial Coefficient for the Lennard-Jones (m-6) Potential. *Journal of research of the National Bureau of Standards- A. Physics and Chemistry*, Vol. 75A, No. 1, pp. 57-76.
- [7] **Hirschfelder, J.O., Curtiss, C.F., Bird, R.B.** (1964) *Molecular Theory of Gases and Liquids*. John Wiley & Sons, Inc. p. 147, 151-158, 188, 162-165, 230-232, 237, 409, 410, 420-423, 484, 525-540, 674-679.
- [8] **Maitland, G.C., Maurice, R. E., Smith, B. and Wakeham, W.A.** (1987) *Inter Molecular Forces*. Oxford University Press. p. 32-35, 99-102, 106, 121-124, 154, 170-172, 269-276, 269-299, 324-335, 342, 355-357.
- [9] **Boschi-Filho, H. and Butters, C.C.,** (1997) Second Virial Coefficient For Real Gases at High Temperature. http://xxx.lanl.gov/PS_cache/cond-mat/pdf/9701/9701185
- [10] **Kestin, J., Khalifa, H.E. and Wakeham, W.A.** (1978) The viscosity and diffusion coefficients of the binary mixtures of Xenon with the other noble gases. *Physica*, Vol. 90A, pp. 215-228.
- [11] **Press, W.H., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T., and Flannery, B.P.** (1992) *Numerical Recipes in Fortran Second Edition*, Cambridge University Press.

KAYNAKLAR (devam ediyor)

- [12] **Gillis, K.A.** (1994) Thermodynamic Properties of Two Gaseous Halogenated Ethers from Speed-of-Sound Measurements: Difluoromethoxy Difluoromethane and 2-Difluoromethoxy-1,1,1-Trifluoroethane. *International Journal of Thermo-physics*, Vol.15 No.5 pp. 821-823.
- [13] **Anderson, J.B., Traynor, C.A. and Boghosian, B.M.** (1993) An Exact Quantum Monte Carlo Calculation of the Helium-Helium Intermolecular Potential. *J.Chem. Phys.*, Vol. 99, No. 1, pp. 345-351.
- [14] **Kişioğlu, E.** (1979) *Polar ve Apolar Gazlara ait Kuvvet Sabitlerinin Bulunması ile Potansiyel Fonksiyonlarının Hesaplanması*. Yıldız Üniversitesi Fizik Bölümü Doçentlik Tezi.
- [15] **Van de Bovenkamp, J. and van Duijneveldt, F.B.** (1999) MRCI calculation on the helium dimer employing an interaction optimized basis set. *Journal of Chemical Physics*, Vol.110, No. 23, pp. 11141-11151.
- [16] **Viehland, L.A., Janzen, A.R. and Aziz, R.A.** (1995) High approximation to the transport properties of pure atomic gases. *Journal of Chemical Physics*, Vol. 102, No. 13, pp. 5444-5450.
- [17] **Ceberley, D.M. and Patridge, H.** (1986) The He₂ potential at small distances. *Journal of Chemical Physics*, Vol. 84 No. 2. pp. 918
- [18] **Tanja, van M. and Dunning, T.H. Jr.** (1999) A new *ab initio* potential energy curve for the helium dimer. *Journal of Chemical Physics*, Vol. 111 No. 20, pp.9248-9258.
- [19] **Jamieson, J.M., Drake, G.W.F. and Dalgarno, A.** (1995) Retarded dipole-dipole dispersion interaction potential for helium. *Physical Review A*, Vol. 51, No. 4, pp. 3358-3361
- [20] **Korona T., Williams, H.L., Bukowski,R., Jeziorski, B. and Szalewicz, K.** (1997) Helium dimer potential from symmetry-adapted perturbation theory calculation using large Gaussian geminal and orbital basis set. *Journal of Chemical Physics*, Vol. 106, No. 12, pp. 5109-5121.
- [21] **Yılmaz, A.** (2002) *He ve Xe'nun Termodinamik Özelliklerinin Belirlenmesi İçin Önerilen Gerçek Gaz Hal Denklemi ve İkinci Virial Bağıntısı*, Zonguldak Karaelmas Üniversitesi Fizik Bölümü, Yüksek Lisans Tez Çalışması.
- [22] **Meeks, F.R., Cleland, T.J., Hutchinson, K.E. and Taylor, W.L.** (1994) On The Quantum Cross Sections in Dilute Gases. *Journal of Chemical Physics*, Vol. 100 No. 5, pp. 3813-3820.

- [23] **Clarke, A.G. and Smith, E.B.** (1969) Low-Temperature Viscosities and Intermolecular Forces of Simple Gases. *Journal of Chemical Physics*, Vol. 51, No. 9, pp. 4156-4161
- [24] **Liner, J.C. and Weissman, S.** (1972) Determination of the Temperature Dependence of Gaseous Diffusion Coefficient Using Gas Chromatographic Apparatus. *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 56, No 5, pp. 2288-2290.
- [25] **Taylor, W. L. and Weissman, S.** (1971) Thermal Diffusion Factors for the ^4He - ^3He System. *Journal of Chemical Physics*, Vol. 53, No. 8, pp. 4000-4002
- [26] **Kihara, T.** (1953) Virial Coefficients and Models of Molecules in Gases. *Review of Modern Physics*, Vol. 25, No. 4, pp. 831-843.
- [27] **Kell, G.S., McLaurin, G.E. and Whalley, E.** (1978) Second virial coefficient of helium from 0 to 500 °C by the two-temperature gas-expansion method. *Journal of Chemical Physics*, Vol. 68, No. 5, pp. 2199-2205.
- [28] **Gammon, B.E.** (1976) The velocity of sound with derived state properties in helium at -175 to 150 °C with pressure to 150 atm. *Journal of Chemical Physics*, Vol. 64, No. 6, pp. 2556-2568.

EK AÇIKLAMALAR A

ÇİZELGELER

Çizelge A.1 ^4He için önerilen ikinci virial (B) bağıntısının hesaplanan değerlerinin literatür değeriyle karşılaştırılması ve toplam ortalama sapmalar.

Sıcaklık (Kelvin) T (K)	¹ İkinci Virial B (cm ³ mol ⁻¹)	² İkinci Virial B (cm ³ mol ⁻¹)	³ İkinci Virial B (cm ³ mol ⁻¹)	% Sapma	Std. sapma	⁴ Powel's
1	-474,449		-472,449	0,422	4,000E+00	4,000E+00
2	-194,640		-194,631	0,005	7,672E-05	7,672E-05
3	-120,530	-120,522	-120,555	0,021	6,116E-04	6,116E-04
4	-85,360	-85,200	-85,341	0,023	3,787E-04	3,787E-04
5	-64,566	-64,316	-64,549	0,027	3,054E-04	3,054E-04
6	-50,774		-50,768	0,012	3,485E-05	3,485E-05
7	-40,944		-40,947	0,008	9,573E-06	9,573E-06
8	-33,581	-33,283	-33,588	0,022	5,308E-05	5,308E-05
9	-27,859		-27,868	0,032	7,923E-05	7,923E-05
10	-23,285	-23,020	-23,294	0,039	8,279E-05	8,279E-05
11	-19,547		-19,555	0,039	5,787E-05	5,787E-05
12	-16,435		-16,441	0,039	4,110E-05	4,110E-05
14	-11,556		-11,559	0,025	8,429E-06	8,429E-06
15		-9,435	-9,611			
16	-7,910		-7,910	0,005	1,293E-07	1,293E-07
18	-5,088		-5,086	0,040	4,237E-06	4,237E-06
20	-2,842	-2,723	-2,839	0,100	8,003E-06	8,003E-06
22	-1,017		-1,013	0,409	1,729E-05	1,729E-05
24	0,494		0,498	0,823	1,654E-05	1,654E-05
25	1,155		1,159	0,338	1,525E-05	1,525E-05
26	1,762		1,766	0,249	1,924E-05	1,924E-05
27		2,412	2,326			
28	2,840		2,844	0,149	1,781E-05	1,781E-05
30	3,766		3,770	0,101	1,459E-05	1,459E-05
35	5,587		5,590	0,056	9,673E-06	9,673E-06
40	6,917		6,919	0,023	2,576E-06	2,576E-06
43,794		7,800	7,703			
45	7,921		7,921	0,005	1,329E-07	1,329E-07
50	8,698		8,698	0,001	6,277E-09	6,277E-09
54,358		9,280	9,240			
60	9,806		9,804	0,020	3,865E-06	3,865E-06
63,15		10,010	10,066			
70	10,537		10,534	0,032	1,120E-05	1,120E-05
80	11,038		11,034	0,038	1,761E-05	1,761E-05
83,804		11,130	11,182			
90	11,389		11,385	0,033	1,424E-05	1,424E-05
98,15		11,522	11,595			
100	11,640		11,636	0,037	1,835E-05	1,835E-05
120	11,947		11,943	0,030	1,311E-05	1,311E-05
123,15		11,984	11,975			
140	12,098		12,095	0,025	8,803E-06	8,803E-06
148,15		12,174	12,129			
160	12,160		12,157	0,023	8,128E-06	8,128E-06
173,15		12,228	12,167			
180	12,167		12,165	0,016	3,732E-06	3,732E-06
198,15		12,209	12,142			
200	12,140		12,139	0,008	1,015E-06	1,015E-06
223,15		12,148	12,082			
225	12,077		12,077	0,002	8,620E-08	8,620E-08
248,15		12,065	12,001			
250	11,994		11,994	0,004	1,910E-07	1,910E-07

ÇİZELGE A.1 (devam ediyor)

Sıcaklık (Kelvin) T (K)	¹ İkinci Virial B (cm ³ mol ⁻¹)	² İkinci Virial B (cm ³ mol ⁻¹)	³ İkinci Virial B (cm ³ mol ⁻¹)	% Sapma	Std. sapma	⁴ Powel's
273,15		11,968	11,908			
275	11,900		11,901	0,005	4,161E-07	4,161E-07
298,15		11,863	11,808			
300	11,799		11,800	0,013	2,221E-06	2,221E-06
323,15		11,756	11,705			
325	11,695		11,697	0,019	4,868E-06	4,868E-06
348,15		11,647	11,601			
350	11,591		11,593	0,016	3,451E-06	3,451E-06
373,15		11,539	11,496			
375	11,486		11,489	0,024	7,709E-06	7,709E-06
398,15		11,433	11,393			
400	11,383		11,386	0,025	7,977E-06	7,977E-06
423,15		11,329	11,292			
450	11,183		11,185	0,021	5,351E-06	5,351E-06
500	10,991		10,994	0,024	7,058E-06	7,058E-06
600	10,637		10,639	0,018	3,831E-06	3,831E-06
623,15		10,610	10,562			
700	10,319		10,321	0,015	2,253E-06	2,253E-06
800	10,033		10,034	0,009	7,595E-07	7,595E-07
900	9,774		9,775	0,005	2,621E-07	2,621E-07
1000	9,538		9,538	0,005	1,872E-07	1,872E-07
1200	9,124		9,123	0,007	4,017E-07	4,017E-07
1400	8,770		8,768	0,018	2,490E-06	2,490E-06
1600	8,462		8,460	0,027	5,240E-06	5,240E-06
1800	8,190		8,187	0,031	6,425E-06	6,425E-06
2000	7,947		7,945	0,030	5,695E-06	5,695E-06
2500	7,437		7,435	0,033	5,888E-06	5,888E-06
3000	7,026		7,024	0,024	2,817E-06	2,817E-06
3500	6,684		6,683	0,009	3,886E-07	3,886E-07
4000	6,393		6,393	0,001	8,897E-09	8,897E-09
4500	6,141		6,141	0,005	8,597E-08	8,597E-08
5000	5,918		5,920	0,027	2,574E-06	2,574E-06
6000	5,542		5,544	0,040	4,865E-06	4,865E-06
7000	5,232		5,235	0,059	9,377E-06	9,377E-06
8000	4,972		4,973	0,026	1,704E-06	1,704E-06
9000	4,747		4,747	0,002	1,072E-08	1,072E-08
10000	4,551		4,548	0,072	1,075E-05	1,075E-05
9000	4,747		4,747	0,002	1,072E-08	1,072E-08

1.Kaynaklar [1], 2. Kaynaklar [5] 3. Önerilen İkinci virial, 4.Kaynaklar [11].

Çizelge A.2 ^3He için önerilen ikinci virial(B) bağıntısının hesaplanan değerlerinin literatür değeriyle karşılaştırılması ve toplam ortalama yüzde sapmalar.

Sıcaklık (Kelvin) T (K)	¹ İkinci Virial B (cm ³ mol ⁻¹)	² İkinci Virial B (cm ³ mol ⁻¹)	% Sapma	Std. Sapma	³ Powel's
1	-237,503	-237,5019	4,454E-04	1,119E-06	1,119E-06
2	-131,470	-131,4932	1,765E-02	5,387E-04	5,387E-04
3	-86,736	-86,6711	7,482E-02	4,211E-03	4,211E-03
4	-62,616	-62,6201	6,506E-03	1,660E-05	1,660E-05
5	-47,616	-47,6461	6,330E-02	9,085E-04	9,085E-04
6	-37,392	-37,4217	7,945E-02	8,825E-04	8,825E-04
7	-29,972	-29,9920	6,681E-02	4,010E-04	4,010E-04
8	-24,336	-24,3468	4,429E-02	1,162E-04	1,162E-04
9	-19,909	-19,9112	1,113E-02	4,907E-06	4,907E-06
10	-16,338	-16,3341	2,383E-02	1,516E-05	1,516E-05
11	-13,397	-13,3886	6,285E-02	7,089E-05	7,089E-05
12	-10,933	-10,9215	1,054E-01	1,328E-04	1,328E-04
14	-7,038	-7,0237	2,038E-01	2,057E-04	2,057E-04
16	-4,101	-4,0868	3,463E-01	2,017E-04	2,017E-04
18	-1,811	-1,7982	7,072E-01	1,640E-04	1,640E-04
22	1,519	1,5270	5,256E-01	6,375E-05	6,375E-05
23	2,168	2,1753	3,345E-01	5,258E-05	5,258E-05
24	2,762	2,7683	2,268E-01	3,925E-05	3,925E-05
25	3,308	3,3125	1,373E-01	2,063E-05	2,063E-05
26	3,810	3,8136	9,485E-02	1,306E-05	1,306E-05
28	4,703	4,7044	2,956E-02	1,932E-06	1,932E-06
30	5,471	5,4711	2,132E-03	1,360E-08	1,360E-08
35	6,987	6,9835	4,974E-02	1,208E-05	1,208E-05
40	8,097	8,0907	7,811E-02	4,000E-05	4,000E-05
45	8,936	8,9277	9,342E-02	6,969E-05	6,969E-05
50	9,586	9,5760	1,042E-01	9,969E-05	9,969E-05
60	10,509	10,4981	1,041E-01	1,196E-04	1,196E-04
70	11,114	11,1030	9,931E-02	1,218E-04	1,218E-04
80	11,524	11,5137	8,925E-02	1,058E-04	1,058E-04
90	11,808	11,7983	8,213E-02	9,404E-05	9,404E-05
100	12,005	11,9972	6,532E-02	6,150E-05	6,150E-05
120	12,237	12,2307	5,159E-02	3,986E-05	3,986E-05
140	12,336	12,3320	3,215E-02	1,573E-05	1,573E-05
160	12,360	12,3580	1,625E-02	4,034E-06	4,034E-06
180	12,339	12,3388	1,799E-03	4,925E-08	4,925E-08
200	12,291	12,2917	5,303E-03	4,248E-07	4,248E-07
225	12,206	12,2089	2,393E-02	8,530E-06	8,530E-06
250	12,107	12,1107	3,092E-02	1,401E-05	1,401E-05
275	12,000	12,0042	3,532E-02	1,796E-05	1,796E-05
300	11,889	11,8937	3,951E-02	2,206E-05	2,206E-05
325	11,776	11,7818	4,901E-02	3,331E-05	3,331E-05
350	11,664	11,6701	5,248E-02	3,747E-05	3,747E-05
375	11,554	11,5598	5,009E-02	3,350E-05	3,350E-05
400	11,445	11,4514	5,609E-02	4,122E-05	4,122E-05
450	11,236	11,2420	5,329E-02	3,585E-05	3,585E-05

ÇİZELGE A.2 (devam ediyor)

Sıcaklık (Kelvin) T (K)	¹ İkinci Virial B (cm ³ mol ⁻¹)	² İkinci Virial B (cm ³ mol ⁻¹)	%Sapma	Std. Sapma	³ Powel's
500	11,038	11,0433	4,779E-02	2,783E-05	2,783E-05
600	10,673	10,6781	4,761E-02	2,582E-05	2,582E-05
700	10,349	10,3521	3,039E-02	9,894E-06	9,894E-06
800	10,058	10,0599	1,866E-02	3,523E-06	3,523E-06
900	9,796	9,7961	9,475E-04	8,614E-09	8,614E-09
1000	9,557	9,5564	5,861E-03	3,137E-07	3,137E-07
1200	9,139	9,1360	3,333E-02	9,276E-06	9,276E-06
1400	8,782	8,7771	5,549E-02	2,375E-05	2,375E-05
1600	8,472	8,4656	7,609E-02	4,155E-05	4,155E-05
1800	8,199	8,1912	9,538E-02	6,116E-05	6,116E-05
2000	7,955	7,9468	1,037E-01	6,800E-05	6,800E-05
2500	7,443	7,4345	1,143E-01	7,236E-05	7,236E-05
3000	7,031	7,0237	1,045E-01	5,401E-05	5,401E-05
3500	6,688	6,6831	7,320E-02	2,397E-05	2,397E-05
4000	6,396	6,3938	3,445E-02	4,856E-06	4,856E-06
4500	6,143	6,1432	4,057E-03	6,212E-08	6,212E-08
5000	5,920	5,9229	4,849E-02	8,242E-06	8,242E-06
6000	5,543	5,5496	1,191E-01	4,358E-05	4,358E-05
7000	5,234	5,2411	1,362E-01	5,085E-05	5,085E-05
8000	4,973	4,9779	9,873E-02	2,411E-05	2,411E-05
9000	4,748	4,7474	1,188E-02	3,181E-07	3,181E-07
10000	4,552	4,5413	2,356E-01	1,150E-04	1,150E-04

1. Kaynaklar [1], 2. Önerilen İkinci virial, 3. Kaynaklar [11].

Çizelge A.3 $^4\text{He}+^3\text{He}$ eş karışımları için önerilen ikinci virial(B) bağıntısının hesaplanan değerlerinin literatür değeriyle karşılaştırılması ve toplam ortalama yüzde sapmalar.

Sıcaklık (Kelvin) T (K)	¹ İkinci Virial B (cm ³ mol ⁻¹)	² İkinci Virial B (cm ³ mol ⁻¹)	% Sapma	Std. Sapma	³ Powel's
1	-338,460	-338,4600	7,745E-07	6,872E-12	6,87E-12
2	-160,849	-160,8491	4,681E-05	5,668E-09	5,67E-09
3	-102,590	-102,5895	5,084E-04	2,720E-07	2,72E-07
4	-73,329	-73,3294	4,863E-04	1,272E-07	1,27E-07
5	-55,638	-55,6388	1,442E-03	6,433E-07	6,43E-07
6	-43,756	-43,7560	5,471E-05	5,731E-10	5,73E-10
7	-35,212	-35,2116	1,195E-03	1,772E-07	1,77E-07
8	-28,767	-28,7669	3,151E-04	8,216E-09	8,22E-09
9	-23,731	-23,7309	3,537E-04	7,046E-09	7,05E-09
10	-19,687	-19,6869	4,324E-04	7,247E-09	7,25E-09
11	-16,369	-16,3684	3,604E-03	3,481E-07	3,48E-07
12	-13,597	-13,5969	1,090E-03	2,196E-08	2,20E-08
14	-9,233	-9,2328	2,060E-03	3,616E-08	3,62E-08
16	-5,957	-5,9568	4,071E-03	5,881E-08	5,88E-08
18	-3,411	-3,4112	4,538E-03	2,396E-08	2,40E-08
20	-1,380	-1,3798	1,315E-02	3,292E-08	3,29E-08
22	0,276	0,2758	8,543E-02	5,560E-08	5,56E-08
23	0,993	0,9929	7,595E-03	5,687E-09	5,69E-09
24	1,649	1,6485	3,074E-02	2,569E-07	2,57E-07
25	2,250	2,2498	9,318E-03	4,396E-08	4,40E-08
26	2,803	2,8030	8,854E-04	6,159E-10	6,16E-10
28	3,786	3,7858	6,397E-03	5,865E-08	5,87E-08
30	4,631	4,6309	3,107E-03	2,071E-08	2,07E-08
35	6,296	6,2959	2,044E-03	1,657E-08	1,66E-08
40	7,514	7,5133	9,130E-03	4,707E-07	4,71E-07
45	8,433	8,4332	1,969E-03	2,757E-08	2,76E-08
50	9,146	9,1457	3,101E-03	8,042E-08	8,04E-08
60	10,160	10,1599	8,730E-04	7,867E-09	7,87E-09
70	10,827	10,8270	2,730E-04	8,738E-10	8,74E-10
80	11,282	11,2821	8,540E-04	9,282E-09	9,28E-09
90	11,599	11,5995	4,661E-03	2,923E-07	2,92E-07
100	11,823	11,8235	4,558E-03	2,904E-07	2,90E-07
120	12,092	12,0926	5,219E-03	3,983E-07	3,98E-07
140	12,217	12,2176	4,983E-03	3,707E-07	3,71E-07
160	12,260	12,2602	1,773E-03	4,723E-08	4,72E-08
180	12,253	12,2533	2,326E-03	8,121E-08	8,12E-08
200	12,215	12,2156	4,544E-03	3,081E-07	3,08E-07
225	12,142	12,1419	1,233E-03	2,240E-08	2,24E-08
250	12,051	12,0507	2,900E-03	1,221E-07	1,22E-07
275	11,950	11,9497	2,350E-03	7,887E-08	7,89E-08
300	11,844	11,8438	2,055E-03	5,921E-08	5,92E-08
325	11,736	11,7357	2,715E-03	1,015E-07	1,02E-07
350	11,628	11,6273	5,727E-03	4,434E-07	4,43E-07
375	11,520	11,5199	1,011E-03	1,356E-08	1,36E-08

ÇİZELGE A.3 (devam ediyor)

Sıcaklık (Kelvin) T (K)	¹ İkinci Virial B (cm ³ mol ⁻¹)	² İkinci Virial B (cm ³ mol ⁻¹)	% Sapma	Std. Sapma	³ Powel's
400	11,414	11,4141	6,057E-04	4,780E-09	4,78E-09
450	11,209	11,2090	2,140E-05	5,754E-12	5,75E-12
500	11,014	11,0139	5,492E-04	3,659E-09	3,66E-09
600	10,655	10,6547	3,282E-03	1,223E-07	1,22E-07
700	10,334	10,3334	5,687E-03	3,454E-07	3,45E-07
800	10,045	10,0450	4,033E-04	1,641E-09	1,64E-09
900	9,785	9,7846	4,470E-03	1,913E-07	1,91E-07
1000	9,548	9,5477	2,626E-03	6,287E-08	6,29E-08
1200	9,132	9,1318	1,721E-03	2,471E-08	2,47E-08
1400	8,776	8,7764	5,047E-03	1,961E-07	1,96E-07
1600	8,467	8,4674	4,706E-03	1,588E-07	1,59E-07
1800	8,194	8,1948	1,012E-02	6,879E-07	6,88E-07
2000	7,951	7,9516	7,781E-03	3,827E-07	3,83E-07
2500	7,440	7,4405	6,164E-03	2,103E-07	2,10E-07
3000	7,029	7,0288	2,310E-03	2,636E-08	2,64E-08
3500	6,686	6,6864	6,294E-03	1,771E-07	1,77E-07
4000	6,395	6,3947	4,756E-03	9,251E-08	9,25E-08
4500	6,142	6,1416	6,832E-03	1,761E-07	1,76E-07
5000	5,919	5,9188	3,792E-03	5,038E-08	5,04E-08
6000	5,542	5,5419	1,487E-03	6,795E-09	6,79E-09
7000	5,233	5,2325	9,472E-03	2,457E-07	2,46E-07
8000	4,972	4,9717	5,095E-03	6,417E-08	6,42E-08
9000	4,748	4,7476	8,143E-03	1,495E-07	1,49E-07
10000	4,551	4,5520	2,110E-02	9,220E-07	9,22E-07

1.Kaynaklar [1], 2. Önerilen İkinci virial, 3.Kaynaklar [11].

Çizelge A.4 ^4He için önerilen viskozite(η) bağıntısının sıcaklığa göre hesaplanan değerlerinin literatür değeriyle karşılaştırılması ve toplam ortalama yüzde sapmalar.

Sıcaklık (Kelvin) T(K)	¹ Viskozite η (10^{-6} Pa. s.)	² Viskozite η (10^{-6} Pa. s.)	% Sapma	Std. Sapma	³ Powel's
1	0,3279	0,3279	7,36E-06	5,42E-15	5,83E-16
2	0,4573	0,4573	9,97E-05	9,94E-13	2,08E-13
3	0,7123	0,7123	3,35E-03	1,12E-09	5,68E-10
4	0,9815	0,9813	2,17E-02	4,72E-08	4,55E-08
5	1,2220	1,2226	4,60E-02	2,12E-07	3,17E-07
6	1,4330	1,4328	1,49E-02	2,21E-08	4,55E-08
7	1,6200	1,6198	1,09E-02	1,18E-08	3,10E-08
8	1,7910	1,7909	6,39E-03	4,09E-09	1,31E-08
9	1,9510	1,9506	1,94E-02	3,78E-08	1,44E-07
10	2,1020	2,1018	8,82E-03	7,78E-09	3,44E-08
11	2,2460	2,2462	8,04E-03	6,47E-09	3,26E-08
12	2,3850	2,3848	6,44E-03	4,14E-09	2,36E-08
14	2,6480	2,6481	3,37E-03	1,14E-09	7,97E-09
16	2,8950	2,8960	3,47E-02	1,21E-07	1,01E-06
18	3,1310	3,1315	1,69E-02	2,86E-08	2,81E-07
20	3,3560	3,3568	2,26E-02	5,09E-08	5,74E-07
22	3,5730	3,5733	7,15E-03	5,11E-09	6,53E-08
23	3,6780	3,6786	1,68E-02	2,83E-08	3,83E-07
24	3,7820	3,7822	6,07E-03	3,68E-09	5,27E-08
25	3,8840	3,8842	5,16E-03	2,66E-09	4,01E-08
26	3,9850	3,9846	9,26E-03	8,58E-09	1,36E-07
28	4,1810	4,1812	5,37E-03	2,89E-09	5,04E-08
30	4,3730	4,3726	8,31E-03	6,91E-09	1,32E-07
35	4,8330	4,8317	2,67E-02	7,15E-08	1,67E-06
40	5,2690	5,2676	2,66E-02	7,06E-08	1,96E-06
45	5,6860	5,6846	2,53E-02	6,40E-08	2,07E-06
50	6,0870	6,0857	2,20E-02	4,84E-08	1,79E-06
60	6,8510	6,8490	2,97E-02	8,83E-08	4,15E-06
70	7,5720	7,5705	1,92E-02	3,67E-08	2,11E-06
80	8,2600	8,2589	1,35E-02	1,83E-08	1,25E-06
90	8,9200	8,9198	1,74E-03	3,04E-10	2,42E-08
100	9,5580	9,5577	2,85E-03	8,12E-10	7,42E-08
120	10,7750	10,7765	1,42E-02	2,02E-08	2,35E-06
140	11,9320	11,9339	1,55E-02	2,42E-08	3,44E-06
160	13,0390	13,0419	2,22E-02	4,92E-08	8,36E-06
180	14,1050	14,1092	2,97E-02	8,83E-08	1,76E-05
200	15,1370	15,1420	3,32E-02	1,10E-07	2,53E-05
225	16,3860	16,3918	3,54E-02	1,25E-07	3,36E-05
250	17,5960	17,6022	3,55E-02	1,26E-07	3,90E-05
275	18,7720	18,7788	3,64E-02	1,33E-07	4,67E-05
300	19,9190	19,9258	3,42E-02	1,17E-07	4,65E-05
325	21,0400	21,0466	3,15E-02	9,93E-08	4,39E-05
350	22,1380	22,1441	2,74E-02	7,48E-08	3,67E-05
375	23,2150	23,2204	2,34E-02	5,45E-08	2,94E-05
400	24,2720	24,2777	2,34E-02	5,48E-08	3,23E-05
450	26,3380	26,3413	1,26E-02	1,59E-08	1,10E-05

ÇİZELGE A.4 (devam ediyor)

Sıcaklık (Kelvin) T(K)	¹ Viskozite η (10^{-6} Pa. s.)	² Viskozite η (10^{-6} Pa. s.)	% Sapma	Std. Sapma	³ Powel's
500	28,3440	28,3457	6,11E-03	3,74E-09	3E-06
600	32,2110	32,2081	9,15E-03	8,38E-09	8,69E-06
700	35,9220	35,9121	2,77E-02	7,65E-08	9,88E-05
800	39,5060	39,4892	4,24E-02	1,80E-07	0,000281
900	42,9860	42,9618	5,64E-02	3,18E-07	0,000587
1000	46,3780	46,3460	6,89E-02	4,75E-07	0,001021
1200	52,9460	52,8973	9,21E-02	8,47E-07	0,002376
1400	59,2800	59,2150	1,10E-01	1,20E-06	0,00422
1600	65,4270	65,3473	1,22E-01	1,48E-06	0,006357
1800	71,4210	71,3277	1,31E-01	1,71E-06	0,008697
2000	77,2860	77,1814	1,35E-01	1,83E-06	0,01095
2500	91,4990	91,3755	1,35E-01	1,82E-06	0,015252
3000	105,2160	105,0908	1,19E-01	1,42E-06	0,015686
3500	118,5600	118,4522	9,09E-02	8,26E-07	0,011615
4000	131,6120	131,5427	5,26E-02	2,77E-07	0,004796
4500	144,4290	144,4206	5,81E-03	3,37E-09	7,04E-05
5000	157,0540	157,1288	4,76E-02	2,27E-07	0,005588
6000	181,8470	182,1597	1,72E-01	2,96E-06	0,097804
7000	206,1730	206,8239	3,16E-01	9,97E-06	0,423734
8000	230,1540	231,2461	4,75E-01	2,25E-05	1,19266
9000	253,8730	255,5141	6,46E-01	4,18E-05	2,693333
10000	277,3930	279,6932	8,29E-01	6,88E-05	5,29081

1.Kaynaklar [1], 2. Önerilen İkinci virial, 3.Kaynaklar [11].

Çizelge A.5 ^3He için önerilen viskozite(η) bağıntısının sıcaklığa göre hesaplanan değerlerinin literatür değeriyle karşılaştırılması ve toplam ortalama yüzde sapmalar.

Sıcaklık (Kelvin) T(K)	¹ Viskozite η (10^{-6} Pa. s.)	² Viskozite η (10^{-6} Pa. s.)	% Sapma	Std. Sapma	³ Powel's
1	0,55610	0,55618	0,0142	2,02E-08	6,24E-09
2	0,98500	0,98522	0,0228	5,20E-08	5,05E-08
3	1,16500	1,16567	0,0578	3,34E-07	4,53E-07
4	1,26100	1,25899	0,1592	2,53E-06	4,03E-06
5	1,35500	1,35645	0,1073	1,15E-06	2,11E-06
6	1,46100	1,46452	0,2411	5,81E-06	1,24E-05
7	1,57600	1,57890	0,1841	3,39E-06	8,42E-06
8	1,69500	1,69583	0,0489	2,39E-07	6,88E-07
9	1,81400	1,81296	0,0571	3,26E-07	1,07E-06
10	1,93100	1,92898	0,1047	1,10E-06	4,09E-06
11	2,04700	2,04317	0,1871	3,50E-06	1,47E-05
12	2,15900	2,15520	0,1760	3,10E-06	1,44E-05
14	2,37700	2,37237	0,1947	3,79E-06	2,14E-05
16	2,58400	2,58055	0,1337	1,79E-06	1,19E-05
18	2,78300	2,78042	0,0928	8,62E-07	6,67E-06
20	2,97400	2,97281	0,0401	1,60E-07	1,42E-06
22	3,15800	3,15851	0,0162	2,63E-08	2,62E-07
23	3,24800	3,24908	0,0332	1,10E-07	1,17E-06
24	3,33600	3,33823	0,0669	4,47E-07	4,98E-06
25	3,42300	3,42604	0,0889	7,90E-07	9,26E-06
26	3,50900	3,51258	0,1021	1,04E-06	1,28E-05
28	3,67700	3,68209	0,1385	1,92E-06	2,59E-05
30	3,84100	3,84722	0,1621	2,63E-06	3,87E-05
35	4,23500	4,24336	0,1975	3,90E-06	6,99E-05
40	4,61000	4,61938	0,2035	4,14E-06	8,80E-05
45	4,96900	4,97884	0,1980	3,92E-06	9,68E-05
50	5,31400	5,32437	0,1952	3,81E-06	1,08E-04
60	5,97300	5,98133	0,1394	1,94E-06	6,93E-05
70	6,59600	6,60182	0,0882	7,78E-07	3,38E-05
80	7,19000	7,19342	0,0476	2,27E-07	1,17E-05
90	7,76200	7,76141	0,0076	5,78E-09	3,49E-07
100	8,31300	8,30961	0,0408	1,67E-07	1,15E-05
120	9,36700	9,35753	0,1012	1,02E-06	8,98E-05
140	10,36900	10,35354	0,1491	2,22E-06	2,39E-04
160	11,32800	11,30826	0,1742	3,04E-06	3,90E-04
180	12,25300	12,22907	0,1953	3,81E-06	5,73E-04
200	13,14800	13,12131	0,2030	4,12E-06	7,12E-04
225	14,23100	14,20251	0,2002	4,01E-06	8,11E-04
250	15,28000	15,25132	0,1877	3,52E-06	8,22E-04
275	16,30100	16,27226	0,1763	3,11E-06	8,26E-04
300	17,29600	17,26886	0,1569	2,46E-06	7,37E-04
325	18,26800	18,24391	0,1319	1,74E-06	5,80E-04
350	19,22000	19,19971	0,1056	1,11E-06	4,12E-04
375	20,15500	20,13813	0,0837	7,01E-07	2,85E-04

ÇİZELGE A.5 (devam ediyor)

Sıcaklık (Kelvin) T(K)	¹ Viskozite η (10^{-6} Pa. s.)	² Viskozite η (10^{-6} Pa. s.)	% Sapma	Std. Sapma	³ Powel's
400	21,07300	21,06076	0,0581	3,37E-07	1,50E-04
450	22,86500	22,86383	0,0051	2,63E-09	1,38E-06
500	24,60600	24,61755	0,0469	2,20E-07	1,33E-04
600	27,96200	28,00188	0,1426	2,03E-06	1,59E-03
700	31,18300	31,25155	0,2198	4,83E-06	4,70E-03
800	34,29400	34,39162	0,2847	8,10E-06	9,53E-03
900	37,31400	37,43981	0,3372	1,14E-05	1,58E-02
1000	40,25900	40,40925	0,3732	1,39E-05	2,26E-02
1200	45,95900	46,15026	0,4162	1,73E-05	3,66E-02
1400	51,45700	51,67368	0,4211	1,77E-05	4,69E-02
1600	56,79300	57,01956	0,3989	1,59E-05	5,13E-02
1800	61,99600	62,21692	0,3563	1,27E-05	4,88E-02
2000	67,08700	67,28780	0,2993	8,96E-06	4,03E-02
2500	79,42400	79,51762	0,1179	1,39E-06	8,77E-03
3000	91,33100	91,25375	0,0846	7,15E-07	5,97E-03
3500	102,91300	102,62656	0,2783	7,75E-06	8,20E-02
4000	114,24300	113,73013	0,4489	2,02E-05	2,63E-01
4500	125,36900	124,63666	0,5841	3,41E-05	5,36E-01
5000	136,32800	135,40416	0,6777	4,59E-05	8,53E-01
6000	157,84900	156,70829	0,7227	5,22E-05	1,30E+00
7000	178,96500	177,95709	0,5632	3,17E-05	1,02E+00
8000	199,78100	199,40354	0,1889	3,57E-06	1,42E-01
9000	220,37000	221,26759	0,4073	1,66E-05	8,06E-01
10000	240,78600	243,75305	1,2322	1,52E-04	8,80E+00

1. Kaynaklar [1], 2. Önerilen Viskozite bağıntısı değerleri, 3. Kaynaklar [11].

Çizelge A.6 $^4\text{He}+^3\text{He}$ için önerilen viskozite(η) bağıntısının sıcaklığa göre hesaplanan değerlerinin literatür değeriyle karşılaştırılması ve yüzde sapmalar.

Sıcaklık (Kelvin) T(K)	¹ Viskozite η (10^{-6} Pa. s.)	² Viskozite η (10^{-6} Pa. s.)	% Sapma	Std. Sapma	³ Powel's
1	0,4147	0,4147	0,0008	7,20E-11	1,24E-11
2	0,6555	0,6557	0,0258	6,65E-08	2,86E-08
3	0,8884	0,8878	0,0714	5,10E-07	4,03E-07
4	1,0930	1,0929	0,0092	8,55E-09	1,02E-08
5	1,2760	1,2762	0,0137	1,88E-08	3,06E-08
6	1,4430	1,4439	0,0599	3,59E-07	7,47E-07
7	1,5990	1,6003	0,0804	6,46E-07	1,65E-06
8	1,7470	1,7481	0,0641	4,10E-07	1,25E-06
9	1,8890	1,8891	0,0029	8,18E-10	2,92E-09
10	2,0240	2,0242	0,0108	1,17E-08	4,80E-08
11	2,1550	2,1544	0,0268	7,18E-08	3,33E-07
12	2,2810	2,2803	0,0316	9,99E-08	5,20E-07
14	2,5220	2,5208	0,0470	2,21E-07	1,40E-06
16	2,7510	2,7488	0,0801	6,41E-07	4,85E-06
18	2,9680	2,9663	0,0556	3,10E-07	2,73E-06
20	3,1770	3,1751	0,0612	3,74E-07	3,77E-06
22	3,3770	3,3761	0,0253	6,38E-08	7,27E-07
23	3,4750	3,4741	0,0246	6,05E-08	7,30E-07
24	3,5710	3,5706	0,0116	1,34E-08	1,71E-07
25	3,6660	3,6656	0,0120	1,44E-08	1,93E-07
26	3,7600	3,7592	0,0225	5,08E-08	7,18E-07
28	3,9420	3,9425	0,0123	1,51E-08	2,35E-07
30	4,1210	4,1211	0,0028	7,68E-10	1,30E-08
35	4,5480	4,5499	0,0413	1,71E-07	3,53E-06
40	4,9550	4,9573	0,0456	2,08E-07	5,12E-06
45	5,3440	5,3471	0,0571	3,26E-07	9,32E-06
50	5,7180	5,7220	0,0706	4,99E-07	1,63E-05
60	6,4310	6,4356	0,0711	5,05E-07	2,09E-05
70	7,1050	7,1099	0,0696	4,85E-07	2,45E-05
80	7,7480	7,7531	0,0657	4,32E-07	2,59E-05
90	8,3660	8,3705	0,0542	2,94E-07	2,06E-05
100	8,9630	8,9663	0,0372	1,38E-07	1,11E-05
120	10,1020	10,1046	0,0258	6,63E-08	6,77E-06
140	11,1850	11,1854	0,0039	1,50E-09	1,88E-07
160	12,2210	12,2203	0,0054	2,87E-09	4,29E-07
180	13,2200	13,2174	0,0197	3,89E-08	6,80E-06
200	14,1870	14,1825	0,0319	1,02E-07	2,05E-05
225	15,3570	15,3506	0,0416	1,73E-07	4,09E-05
250	16,4900	16,4824	0,0460	2,12E-07	5,76E-05
275	17,5920	17,5830	0,0514	2,64E-07	8,18E-05
300	18,6670	18,6562	0,0577	3,33E-07	1,16E-04
325	19,7170	19,7054	0,0589	3,47E-07	1,35E-04
350	20,7460	20,7330	0,0625	3,91E-07	1,68E-04
375	21,7550	21,7413	0,0629	3,96E-07	1,87E-04
400	22,7460	22,7320	0,0614	3,77E-07	1,95E-04

ÇİZELGE A.6 (devam ediyor)

Sıcaklık (Kelvin) T(K)	¹ Viskozite η (10^{-6} Pa. s.)	² Viskozite η (10^{-6} Pa. s.)	% Sapma	Std. Sapma	³ Powel's
450	24,6810	24,6667	0,0579	3,36E-07	2,05E-04
500	26,5620	26,5470	0,0566	3,20E-07	2,26E-04
600	30,1860	30,1729	0,0435	1,90E-07	1,73E-04
700	33,6640	33,6532	0,0322	1,04E-07	1,18E-04
800	37,0230	37,0166	0,0173	3,00E-08	4,11E-05
900	40,2850	40,2834	0,0040	1,58E-09	2,56E-06
1000	43,4650	43,4685	0,0081	6,52E-09	1,23E-05
1200	49,6210	49,6367	0,0317	1,00E-07	2,47E-04
1400	55,5580	55,5868	0,0518	2,68E-07	8,28E-04
1600	61,3200	61,3622	0,0688	4,73E-07	1,78E-03
1800	66,9380	66,9935	0,0830	6,88E-07	3,08E-03
2000	72,4360	72,5035	0,0932	8,69E-07	4,56E-03
2500	85,7590	85,8520	0,1084	1,18E-06	8,65E-03
3000	98,6170	98,7271	0,1116	1,25E-06	1,21E-02
3500	111,1260	111,2427	0,1051	1,10E-06	1,36E-02
4000	123,3610	123,4745	0,0920	8,47E-07	1,29E-02
4500	135,3760	135,4757	0,0737	5,43E-07	9,94E-03
5000	147,2110	147,2855	0,0506	2,56E-07	5,56E-03
6000	170,4510	170,4445	0,0038	1,43E-09	4,17E-05
7000	193,2550	193,1240	0,0678	4,60E-07	1,72E-02
8000	215,7340	215,4379	0,1373	1,88E-06	8,77E-02
9000	237,9690	237,4665	0,2112	4,46E-06	2,52E-01
10000	260,0160	259,2690	0,2873	8,25E-06	5,58E-01

1. Kaynaklar [1], 2. Önerilen Viskozite bağıntısı değerleri, 3. Kaynaklar [11].

Çizelge A.7 ^4He için önerilen Isı İletkenliği(λ) bağıntısının sıcaklığa göre hesaplanan değerlerinin literatür değeriyle karşılaştırılması ve yüzde sapmalar.

Sıcaklık (Kelvin) T(K)	¹ Isı İletkenliği λ (mW m ⁻¹ K ⁻¹)	² Isı İletkenliği λ (mW m ⁻¹ K ⁻¹)	% Sapma	Std.Sap	³ Powel's
1	2,624	2,6240	0,000246	6,07E-12	4,18E-11
2	3,581	3,5810	0,001346	1,81E-10	2,32E-09
3	5,560	5,5599	0,001526	2,33E-10	7,20E-09
4	7,658	7,6583	0,003503	1,23E-09	7,20E-08
5	9,537	9,5365	0,004791	2,30E-09	2,09E-07
6	11,180	11,1816	0,014686	2,16E-08	2,70E-06
7	12,650	12,6511	0,008450	7,14E-09	1,14E-06
8	14,000	13,9963	0,026325	6,93E-08	1,36E-05
9	15,250	15,2517	0,011324	1,28E-08	2,98E-06
10	16,440	16,4388	0,007247	5,25E-09	1,42E-06
11	17,570	17,5713	0,007197	5,18E-09	1,60E-06
12	18,660	18,6583	0,009085	8,25E-09	2,87E-06
14	20,720	20,7209	0,004110	1,69E-09	7,25E-07
16	22,660	22,6628	0,012523	1,57E-08	8,05E-06
18	24,510	24,5078	0,008933	7,98E-09	4,79E-06
20	26,270	26,2724	0,009036	8,16E-09	5,63E-06
22	27,970	27,9688	0,004211	1,77E-09	1,39E-06
23	28,800	28,7945	0,018986	3,60E-08	2,99E-05
24	29,610	29,6066	0,011579	1,34E-08	1,18E-05
25	30,410	30,4058	0,013785	1,90E-08	1,76E-05
26	31,200	31,1930	0,022371	5,00E-08	4,87E-05
28	32,740	32,7341	0,017990	3,24E-08	3,47E-05
30	34,240	34,2347	0,015489	2,40E-08	2,81E-05
35	37,840	37,8339	0,016207	2,63E-08	3,76E-05
40	41,260	41,2513	0,021041	4,43E-08	7,54E-05
45	44,530	44,5201	0,022304	4,97E-08	9,86E-05
50	47,670	47,6640	0,012554	1,58E-08	3,58E-05
60	53,650	53,6454	0,008574	7,35E-09	2,12E-05
70	59,290	59,2976	0,012754	1,63E-08	5,72E-05
80	64,680	64,6870	0,010898	1,19E-08	4,97E-05
90	69,846	69,8602	0,020353	4,14E-08	2,02E-04
100	74,833	74,8509	0,023985	5,75E-08	3,22E-04
120	84,360	84,3823	0,026391	6,97E-08	4,96E-04
140	93,405	93,4280	0,024648	6,08E-08	5,30E-04
160	102,063	102,0850	0,021518	4,63E-08	4,82E-04
180	110,403	110,4209	0,016221	2,63E-08	3,21E-04
200	118,474	118,4857	0,009857	9,72E-09	1,36E-04
225	128,241	128,2422	0,000972	9,44E-11	1,55E-06
250	137,701	137,6904	0,007714	5,95E-09	1,13E-04
275	146,897	146,8732	0,016205	2,63E-08	5,67E-04
300	155,863	155,8245	0,024719	6,11E-08	1,48E-03
325	164,625	164,5713	0,032638	1,07E-07	2,89E-03
350	173,205	173,1357	0,040024	1,60E-07	4,81E-03
375	181,621	181,5360	0,046792	2,19E-07	7,22E-03
400	189,889	189,7877	0,053350	2,85E-07	1,03E-02

ÇİZELGE A.7 (devam ediyor)

Sıcaklık (Kelvin) T(K)	¹ Isı İletkenliği λ (mW m ⁻¹ K ⁻¹)	² Isı İletkenliği λ (mW m ⁻¹ K ⁻¹)	% Sapma	Std.Sap	³ Powel's
450	206,028	205,8956	0,064244	4,13E-07	1,75E-02
500	221,707	221,5442	0,073417	5,39E-07	2,65E-02
600	251,926	251,7076	0,086687	7,51E-07	4,77E-02
700	280,913	280,6489	0,094016	8,84E-07	6,98E-02
800	308,912	308,6134	0,096674	9,35E-07	8,92E-02
900	336,095	335,7734	0,095674	9,15E-07	1,03E-01
1000	362,590	362,2560	0,092117	8,49E-07	1,12E-01
1200	413,878	413,5539	0,078300	6,13E-07	1,05E-01
1400	463,334	463,0618	0,058755	3,45E-07	7,41E-02
1600	511,329	511,1454	0,035908	1,29E-07	3,37E-02
1800	558,122	558,0615	0,010847	1,18E-08	3,66E-03
2000	603,905	603,9983	0,015456	2,39E-08	8,71E-03
2500	714,835	715,4206	0,081927	6,71E-07	3,43E-01
3000	821,876	823,0713	0,145437	2,12E-06	1,43E+00
3500	925,992	927,8728	0,203114	4,13E-06	3,54E+00
4000	1027,819	1030,4282	0,253855	6,44E-06	6,81E+00
4500	1127,805	1131,1562	0,297142	8,83E-06	1,12E+01
5000	1226,279	1230,3610	0,332874	1,11E-05	1,67E+01
6000	1419,639	1425,0625	0,382035	1,46E-05	2,94E+01
7000	1609,339	1615,8185	0,402622	1,62E-05	4,20E+01
8000	1796,322	1803,4501	0,396814	1,57E-05	5,08E+01
9000	1981,249	1988,5125	0,366614	1,34E-05	5,28E+01
10000	2164,607	2171,3977	0,313717	9,84E-06	4,61E+01

1. Kaynaklar [1], 2. Önerilen Isı İletkenliği bağıntısı değerleri, 3. Kaynaklar [11].

Çizelge A.8 ^3He için önerilen ısı iletkenliği (λ) bağıntısının sıcaklığa göre hesaplanan değerlerinin literatür değeriyle karşılaştırılması ve yüzde sapmalar.

Sıcaklık (Kelvin) T(K)	1 Isı İletkenliği λ (mW m $^{-1}$ K $^{-1}$)	2 Isı İletkenliği λ (mW m $^{-1}$ K $^{-1}$)	% Sapma	Std.Sap	3 Powel's
1	5,756	5,756	0,001832	3,35E-10	1,11E-08
2	10,259	10,255	0,036847	1,36E-07	1,43E-05
3	12,258	12,301	0,347050	1,20E-05	1,81E-03
4	13,294	13,210	0,634723	4,03E-05	7,12E-03
5	14,249	14,226	0,160122	2,56E-06	5,21E-04
6	15,310	15,353	0,279235	7,80E-06	1,83E-03
7	16,466	16,532	0,403567	1,63E-05	4,42E-03
8	17,671	17,730	0,333783	1,11E-05	3,48E-03
9	18,890	18,926	0,190637	3,63E-06	1,30E-03
10	20,102	20,110	0,040573	1,65E-07	6,65E-05
11	21,295	21,277	0,084718	7,18E-07	3,25E-04
12	22,463	22,424	0,174868	3,06E-06	1,54E-03
14	24,720	24,653	0,269043	7,24E-06	4,42E-03
16	26,876	26,799	0,285883	8,17E-06	5,90E-03
18	28,939	28,866	0,252524	6,38E-06	5,34E-03
20	30,923	30,860	0,202312	4,09E-06	3,91E-03
22	32,837	32,789	0,144887	2,10E-06	2,26E-03
23	33,770	33,731	0,114579	1,31E-06	1,50E-03
24	34,688	34,659	0,083353	6,95E-07	8,36E-04
25	35,593	35,573	0,054960	3,02E-07	3,83E-04
26	36,486	36,475	0,030162	9,10E-08	1,21E-04
28	38,234	38,242	0,021099	4,45E-08	6,51E-05
30	39,939	39,965	0,064155	4,12E-07	6,57E-04
35	44,033	44,100	0,152250	2,32E-06	4,49E-03
40	47,928	48,028	0,207951	4,32E-06	9,93E-03
45	51,658	51,783	0,241817	5,85E-06	1,56E-02
50	55,249	55,393	0,259803	6,75E-06	2,06E-02
60	62,088	62,253	0,265989	7,08E-06	2,73E-02
70	68,559	68,729	0,247841	6,14E-06	2,89E-02
80	74,735	74,899	0,219213	4,81E-06	2,68E-02
90	80,667	80,818	0,187302	3,51E-06	2,28E-02
100	86,394	86,527	0,153946	2,37E-06	1,77E-02
120	97,341	97,429	0,090152	8,13E-07	7,70E-03
140	107,704	107,777	0,067954	4,62E-07	5,36E-03
160	117,698	117,685	0,010978	1,21E-08	1,67E-04
180	127,293	127,231	0,048873	2,39E-07	3,87E-03
200	136,581	136,471	0,080219	6,44E-07	1,20E-02
225	147,821	147,658	0,110192	1,21E-06	2,65E-02
250	158,711	158,499	0,133527	1,78E-06	4,49E-02
275	169,298	169,043	0,150667	2,27E-06	6,51E-02
300	179,621	179,328	0,163375	2,67E-06	8,61E-02
325	189,710	189,383	0,172261	2,97E-06	1,07E-01
350	199,590	199,235	0,178093	3,17E-06	1,26E-01
375	209,283	208,902	0,182066	3,31E-06	1,45E-01
400	218,804	218,403	0,183453	3,37E-06	1,61E-01

ÇİZELGE A.8 (devam ediyor)

Sıcaklık (Kelvin) T(K)	¹ Isı İletkenliği λ (mW m ⁻¹ K ⁻¹)	² Isı İletkenliği λ (mW m ⁻¹ K ⁻¹)	% Sapma	Std.Sap	³ Powel's
450	237,392	236,960	0,182135	3,79E-05	2,14E+00
500	255,451	255,000	0,176705	3,99E-05	2,60E+00
600	290,258	289,799	0,158075	4,03E-05	3,40E+00
700	323,649	323,213	0,134818	3,76E-05	3,94E+00
800	355,903	355,512	0,109761	3,30E-05	4,18E+00
900	387,217	386,890	0,084414	2,74E-05	4,10E+00
1000	417,739	417,488	0,060190	2,15E-05	3,75E+00
1200	476,824	476,751	0,015350	1,06E-05	2,42E+00
1400	533,800	533,926	0,023581	3,02E-06	8,61E-01
1600	589,092	589,427	0,056909	1,58E-08	5,48E-03
1800	643,000	643,548	0,085190	2,38E-06	9,85E-01
2000	695,745	696,504	0,109076	1,06E-05	5,11E+00
2500	823,544	824,802	0,152741	5,76E-05	3,91E+01
3000	946,864	948,560	0,179124	1,43E-04	1,28E+02
3500	1066,813	1068,875	0,193304	2,67E-04	3,04E+02
4000	1184,125	1186,476	0,198576	4,30E-04	6,02E+02
4500	1299,316	1301,879	0,197224	6,29E-04	1,06E+03
5000	1412,766	1415,462	0,190829	8,66E-04	1,73E+03
6000	1635,532	1638,272	0,167553	1,45E-03	3,87E+03
7000	1854,081	1856,582	0,134895	2,17E-03	7,47E+03
8000	2069,499	2071,501	0,096758	3,05E-03	1,30E+04
9000	2282,550	2283,813	0,055328	4,06E-03	2,12E+04
10000	2493,792	2494,093	0,012079	5,23E-03	3,25E+04

1. Kaynaklar [1], 2. Önerilen Isı İletkenliği bağıntısı değerleri, 3. Kaynaklar [11].

Çizelge A.9 $^4\text{He}+^3\text{He}$ için önerilen Isı İletkenliği(λ) bağıntısının sıcaklığa göre hesaplanan değerlerinin literatür değeriyle karşılaştırılması ve yüzde sapmalar.

Sıcaklık (Kelvin) T(K)	¹ Isı İletkenliği λ (mW m ⁻¹ K ⁻¹)	² Isı İletkenliği λ (mW m ⁻¹ K ⁻¹)	% Sapma	Std.Sap	³ Powel's
1	3,802	3,801	0,014600	2,13E-08	3,08E-07
2	5,986	5,986	0,004654	2,17E-09	7,76E-08
3	8,082	8,082	0,004032	1,63E-09	1,06E-07
4	9,896	9,897	0,012406	1,54E-08	1,51E-06
5	11,490	11,497	0,056787	3,22E-07	4,26E-05
6	12,952	12,969	0,127459	1,62E-06	2,73E-04
7	14,325	14,349	0,168937	2,85E-06	5,86E-04
8	15,639	15,658	0,119079	1,42E-06	3,47E-04
9	16,894	16,906	0,072977	5,33E-07	1,52E-04
10	18,101	18,104	0,019045	3,63E-08	1,19E-05
11	19,265	19,259	0,031467	9,90E-08	3,67E-05
12	20,391	20,375	0,077152	5,95E-07	2,48E-04
14	22,541	22,510	0,136541	1,86E-06	9,47E-04
16	24,578	24,536	0,170983	2,92E-06	1,77E-03
18	26,519	26,471	0,179695	3,23E-06	2,27E-03
20	28,381	28,330	0,178924	3,20E-06	2,58E-03
22	30,174	30,123	0,168372	2,83E-06	2,58E-03
23	31,047	30,998	0,158980	2,53E-06	2,44E-03
24	31,906	31,859	0,148585	2,21E-06	2,25E-03
25	32,753	32,707	0,140946	1,99E-06	2,13E-03
26	33,587	33,543	0,130753	1,71E-06	1,93E-03
28	35,220	35,182	0,107541	1,16E-06	1,43E-03
30	36,811	36,780	0,083564	6,98E-07	9,46E-04
35	40,631	40,620	0,026809	7,19E-08	1,19E-04
40	44,260	44,273	0,028389	8,06E-08	1,58E-04
45	47,734	47,770	0,075573	5,71E-07	1,30E-03
50	51,077	51,137	0,116566	1,36E-06	3,54E-03
60	57,442	57,545	0,179807	3,23E-06	1,07E-02
70	63,460	63,604	0,226241	5,12E-06	2,06E-02
80	69,202	69,381	0,258223	6,67E-06	3,19E-02
90	74,717	74,925	0,278913	7,78E-06	4,34E-02
100	80,039	80,274	0,293049	8,59E-06	5,50E-02
120	90,212	90,484	0,301218	9,07E-06	7,38E-02
140	99,873	100,168	0,295847	8,75E-06	8,73E-02
160	109,125	109,432	0,281108	7,90E-06	9,41E-02
180	118,039	118,347	0,260726	6,80E-06	9,47E-02
200	126,667	126,967	0,237106	5,62E-06	9,02E-02
225	137,109	137,391	0,205458	4,22E-06	7,94E-02
250	147,224	147,479	0,173179	3,00E-06	6,50E-02
275	157,059	157,279	0,140032	1,96E-06	4,84E-02
300	166,649	166,827	0,107002	1,14E-06	3,18E-02
325	176,022	176,154	0,074727	5,58E-07	1,73E-02
350	185,200	185,282	0,044072	1,94E-07	6,66E-03
375	194,204	194,232	0,014170	2,01E-08	7,57E-04

ÇİZELGE A.9 (devam ediyor)

Sıcaklık (Kelvin) T(K)	¹ Isı İletkenliği λ (mW m ⁻¹ K ⁻¹)	² Isı İletkenliği λ (mW m ⁻¹ K ⁻¹)	% Sapma	Std.Sap	³ Powel's
400	203,050	203,020	0,014775	2,18E-08	9,00E-04
450	220,320	220,168	0,069082	4,77E-07	2,32E-02
500	237,099	236,817	0,118802	1,41E-06	7,93E-02
600	269,441	268,888	0,205294	4,21E-06	3,06E-01
700	300,470	299,636	0,277469	7,70E-06	6,95E-01
800	330,444	329,330	0,337014	1,14E-05	1,24E+00
900	359,549	358,158	0,386758	1,50E-05	1,93E+00
1000	387,918	386,259	0,427637	1,83E-05	2,75E+00
1200	442,843	440,678	0,488815	2,39E-05	4,69E+00
1400	495,813	493,195	0,527965	2,79E-05	6,85E+00
1600	547,223	544,211	0,550343	3,03E-05	9,07E+00
1800	597,352	594,009	0,559679	3,13E-05	1,12E+01
2000	646,403	642,795	0,558200	3,12E-05	1,30E+01
2500	765,270	761,290	0,520114	2,71E-05	1,58E+01
3000	879,990	876,063	0,446272	1,99E-05	1,54E+01
3500	991,593	988,143	0,347891	1,21E-05	1,19E+01
4000	1100,756	1098,210	0,231334	5,35E-06	6,48E+00
4500	1207,960	1206,737	0,101217	1,02E-06	1,49E+00
5000	1313,554	1314,076	0,039734	1,58E-07	2,72E-01
6000	1520,927	1526,191	0,346078	1,20E-05	2,77E+01
7000	1724,410	1736,079	0,676674	4,58E-05	1,36E+02
8000	1925,011	1944,749	1,025322	1,05E-04	3,90E+02
9000	2123,436	2152,912	1,388138	1,93E-04	8,69E+02
10000	2320,201	2361,098	1,762632	3,11E-04	1,67E+03

1. Kaynaklar [1], 2. Önerilen Isı İletkenliği bağıntısı değerleri, 3. Kaynaklar [11].

Çizelge A.10 ^4He için önerilen Difüzyon(D) bağıntısının sıcaklığa göre hesaplanan değerlerinin literatür değeriyle karşılaştırılması ve yüzde sapmalar.

Sıcaklık (Kelvin) T (K)	¹ Kütle Difüzyon D ($10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$)	² Kütle Difüzyon D ($10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$)	% Sapma	Std.Sap	³ Powel's
1	7,154E-05	7,1540E-05	0,000001	3,85E-17	1,97E-25
2	2,345E-04	2,3450E-04	0,000155	2,39E-12	1,32E-19
3	5,228E-04	5,2278E-04	0,002921	8,53E-10	2,33E-16
4	9,328E-04	9,3285E-04	0,005886	3,46E-09	3,01E-15
5	1,446E-03	1,4463E-03	0,018880	3,56E-08	7,45E-14
6	2,050E-03	2,0496E-03	0,020539	4,22E-08	1,77E-13
7	2,735E-03	2,7342E-03	0,027614	7,63E-08	5,70E-13
8	3,495E-03	3,4946E-03	0,012653	1,60E-08	1,96E-13
9	4,326E-03	4,3263E-03	0,006156	3,79E-09	7,09E-14
10	5,226E-03	5,2260E-03	0,000891	7,94E-11	2,17E-15
11	6,190E-03	6,1908E-03	0,012277	1,51E-08	5,78E-13
12	7,217E-03	7,2182E-03	0,017254	2,98E-08	1,55E-12
14	9,451E-03	9,4531E-03	0,022060	4,87E-08	4,35E-12
16	1,191E-02	1,1917E-02	0,054930	3,02E-07	4,28E-11
18	1,459E-02	1,4598E-02	0,052387	2,74E-07	5,84E-11
20	1,749E-02	1,7487E-02	0,014532	2,11E-08	6,46E-12
22	2,058E-02	2,0579E-02	0,007177	5,15E-09	2,18E-12
23	2,220E-02	2,2197E-02	0,011279	1,27E-08	6,27E-12
24	2,387E-02	2,3864E-02	0,023206	5,39E-08	3,07E-11
25	2,558E-02	2,5579E-02	0,004892	2,39E-09	1,57E-12
26	2,734E-02	2,7340E-02	0,000981	9,62E-11	7,19E-14
28	3,101E-02	3,0999E-02	0,034005	1,16E-07	1,11E-10
30	3,485E-02	3,4839E-02	0,030760	9,46E-08	1,15E-10
35	4,522E-02	4,5202E-02	0,039816	1,59E-07	3,24E-10
40	5,664E-02	5,6615E-02	0,044756	2,00E-07	6,43E-10
45	6,907E-02	6,9035E-02	0,050891	2,59E-07	1,24E-09
50	8,246E-02	8,2427E-02	0,039803	1,58E-07	1,08E-09
60	1,120E-01	1,1201E-01	0,010068	1,01E-08	1,27E-10
70	1,452E-01	1,4517E-01	0,021973	4,83E-08	1,02E-09
80	1,818E-01	1,8174E-01	0,032599	1,06E-07	3,51E-09
90	2,216E-01	2,2160E-01	0,000389	1,51E-11	7,42E-13
100	2,646E-01	2,6464E-01	0,015393	2,37E-08	1,66E-09
120	3,597E-01	3,5990E-01	0,056288	3,17E-07	4,10E-08
140	4,666E-01	4,6692E-01	0,067976	4,62E-07	1,01E-07
160	5,847E-01	5,8520E-01	0,086081	7,41E-07	2,53E-07
180	7,137E-01	7,1437E-01	0,093404	8,72E-07	4,44E-07
200	8,532E-01	8,5408E-01	0,102672	1,05E-06	7,67E-07
225	1,042	1,043	0,106987	1,14E-06	1,24E-06
250	1,246	1,248	0,137778	1,90E-06	2,95E-06
275	1,466	1,467	0,100644	1,01E-06	2,18E-06
300	1,700	1,702	0,119873	1,44E-06	4,15E-06
325	1,949	1,951	0,107394	1,15E-06	4,38E-06
350	2,212	2,214	0,106910	1,14E-06	5,59E-06
375	2,489	2,492	0,104664	1,10E-06	6,79E-06
400	2,780	2,783	0,093152	8,68E-07	6,71E-06

ÇİZELGE A.10 (devam ediyor)

Sıcaklık (Kelvin) T (K)	¹ Kütle Difüzyon $D (10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1})$	² Kütle Difüzyon $D (10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1})$	% Sapma	Std.Sap	³ Powel's
450	3,403	3,405	0,058577	3,43E-07	3,97E-06
500	4,078	4,080	0,052457	2,75E-07	4,58E-06
600	5,584	5,584	0,001358	1,84E-10	5,75E-09
700	7,290	7,286	0,055756	3,11E-07	1,65E-05
800	9,189	9,180	0,098814	9,76E-07	8,24E-05
900	11,278	11,261	0,152233	2,32E-06	2,95E-04
1000	13,551	13,524	0,195595	3,83E-06	7,03E-04
1200	18,639	18,587	0,281564	7,93E-06	2,75E-03
1400	24,430	24,343	0,354612	1,26E-05	7,51E-03
1600	30,909	30,778	0,424370	1,80E-05	1,72E-02
1800	38,060	37,876	0,482372	2,33E-05	3,37E-02
2000	45,872	45,628	0,531303	2,82E-05	5,94E-02
2500	68,240	67,812	0,627068	3,93E-05	1,83E-01
3000	94,577	93,927	0,686961	4,72E-05	4,22E-01
3500	124,803	123,910	0,715282	5,12E-05	7,97E-01
4000	158,862	157,721	0,718024	5,16E-05	1,30E+00
4500	196,713	195,337	0,699536	4,89E-05	1,89E+00
5000	238,324	236,746	0,662329	4,39E-05	2,49E+00
6000	332,735	330,939	0,539892	2,91E-05	3,23E+00
7000	441,969	440,357	0,364635	1,33E-05	2,60E+00
8000	565,960	565,137	0,145452	2,12E-06	6,78E-01
9000	704,683	705,468	0,111372	1,24E-06	6,16E-01
10000	858,143	861,585	0,401124	1,61E-05	1,18E+01

1. Kaynaklar [1], 2. Önerilen Kütle Difüzyon bağıntısı değerleri, 3. Kaynaklar [11].

Çizelge A.11 ^3He için önerilen Difüzyon(D) bağıntısının sıcaklığa göre hesaplanan değerlerinin literatür değeriyle karşılaştırılması ve yüzde sapmalar.

Sıcaklık (Kelvin) T (K)	$^1\text{Kütle Difüzyon}$ $D (10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1})$	$^2\text{Kütle Difüzyon}$ $D (10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1})$	% Sapma	Std.Sap	$^3\text{Powel's}$
1	1,910E-04	1,910E-04	0,020566	4,23E-08	1,54E-15
2	6,913E-04	6,904E-04	0,134330	1,80E-06	8,62E-13
3	1,312E-03	1,316E-03	0,321759	1,04E-05	1,78E-11
4	1,980E-03	1,992E-03	0,611699	3,74E-05	1,47E-10
5	2,715E-03	2,708E-03	0,246000	6,05E-06	4,46E-11
6	3,531E-03	3,514E-03	0,492515	2,43E-05	3,02E-10
7	4,431E-03	4,410E-03	0,472286	2,23E-05	4,38E-10
8	5,413E-03	5,393E-03	0,374413	1,40E-05	4,11E-10
9	6,475E-03	6,457E-03	0,281828	7,94E-06	3,33E-10
10	7,612E-03	7,598E-03	0,182310	3,32E-06	1,93E-10
11	8,822E-03	8,814E-03	0,095987	9,21E-07	7,17E-11
12	1,010E-02	1,010E-02	0,001839	3,38E-10	3,45E-14
14	1,287E-02	1,288E-02	0,061602	3,79E-07	6,29E-11
16	1,589E-02	1,592E-02	0,160218	2,57E-06	6,48E-10
18	1,916E-02	1,920E-02	0,209610	4,39E-06	1,61E-09
20	2,266E-02	2,272E-02	0,272227	7,41E-06	3,81E-09
22	2,639E-02	2,647E-02	0,308218	9,50E-06	6,62E-09
23	2,834E-02	2,843E-02	0,315262	9,94E-06	7,98E-09
24	3,035E-02	3,044E-02	0,302054	9,12E-06	8,40E-09
25	3,240E-02	3,251E-02	0,331921	1,10E-05	1,16E-08
26	3,451E-02	3,463E-02	0,336775	1,13E-05	1,35E-08
28	3,889E-02	3,902E-02	0,332451	1,11E-05	1,67E-08
30	4,348E-02	4,362E-02	0,312377	9,76E-06	1,84E-08
35	5,580E-02	5,597E-02	0,302114	9,13E-06	2,84E-08
40	6,933E-02	6,951E-02	0,253262	6,41E-06	3,08E-08
45	8,400E-02	8,418E-02	0,212403	4,51E-06	3,18E-08
50	9,978E-02	9,995E-02	0,167356	2,80E-06	2,79E-08
60	1,345E-01	1,346E-01	0,104309	1,09E-06	1,97E-08
70	1,734E-01	1,734E-01	0,020433	4,17E-08	1,26E-09
80	2,161E-01	2,159E-01	0,070505	4,97E-07	2,32E-08
90	2,627E-01	2,623E-01	0,171269	2,93E-06	2,02E-07
100	3,128E-01	3,122E-01	0,205960	4,24E-06	4,15E-07
120	4,236E-01	4,224E-01	0,284523	8,10E-06	1,45E-06
140	5,479E-01	5,460E-01	0,343651	1,18E-05	3,55E-06
160	6,852E-01	6,825E-01	0,391936	1,54E-05	7,21E-06
180	8,349E-01	8,315E-01	0,410528	1,69E-05	1,17E-05
200	9,968E-01	9,925E-01	0,426915	1,82E-05	1,81E-05
225	1,216	1,210	0,454595	2,07E-05	3,06E-05
250	1,452	1,446	0,387613	1,50E-05	3,17E-05
275	1,707	1,700	0,420646	1,77E-05	5,16E-05
300	1,978	1,970	0,381880	1,46E-05	5,71E-05
325	2,266	2,258	0,356252	1,27E-05	6,52E-05
350	2,571	2,562	0,351119	1,23E-05	8,15E-05
375	2,891	2,882	0,300164	9,01E-06	7,53E-05
400	3,228	3,219	0,286867	8,23E-06	8,57E-05

ÇİZELGE A.11 (devam ediyor)

Sıcaklık (Kelvin) T (K)	¹ Kütle Difüzyon $D (10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1})$	² Kütle Difüzyon $D (10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1})$	% Sapma	Std.Sap	³ Powel's
450	3,948	3,939	0,229573	5,27E-06	8,21E-05
500	4,729	4,721	0,168354	2,83E-06	6,34E-05
600	6,469	6,466	0,047964	2,30E-07	9,63E-06
700	8,439	8,445	0,067190	4,51E-07	3,22E-05
800	10,633	10,650	0,164511	2,71E-06	3,06E-04
900	13,044	13,078	0,258517	6,68E-06	1,14E-03
1000	15,669	15,722	0,335671	1,13E-05	2,77E-03
1200	21,541	21,643	0,475529	2,26E-05	1,05E-02
1400	28,225	28,389	0,580578	3,37E-05	2,69E-02
1600	35,699	35,936	0,664676	4,42E-05	5,63E-02
1800	43,949	44,268	0,725527	5,26E-05	1,02E-01
2000	52,961	53,369	0,769525	5,92E-05	1,66E-01
2500	78,760	79,404	0,817512	6,68E-05	4,15E-01
3000	109,131	110,005	0,800836	6,41E-05	7,64E-01
3500	143,985	145,046	0,737205	5,43E-05	1,13E+00
4000	183,256	184,428	0,639648	4,09E-05	1,37E+00
4500	226,896	228,067	0,516246	2,67E-05	1,37E+00
5000	274,868	275,894	0,373181	1,39E-05	1,05E+00
6000	383,707	383,874	0,043419	1,89E-07	2,78E-02
7000	509,625	507,964	0,325856	1,06E-05	2,76E+00
8000	652,548	647,843	0,721031	5,20E-05	2,21E+01
9000	812,447	803,242	1,133018	1,28E-04	8,47E+01
10000	989,327	973,934	1,555891	2,42E-04	2,37E+02

1. Kaynaklar [1], 2. Önerilen Kütle Difüzyon bağıntısı değerleri, 3. Kaynaklar [11].

ÖZGEÇMİŞ

1959 yılında Trabzon Maçka'da doğdu; İlkokulu İstanbul ve Maçka'da Ortaokulu Maçka ve İstanbul'da Lise'yi İstanbul'da okudu; Üniversite eğitime 1980-1981 yılında Hacettepe Üniversitesi Fizik Mühendisliği Bölümü İngilizce Hazırlık sınıfında başladı; 1985-1986 yılında yatay geçiş ile Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Mühendisliği Bölümüne kayıt yaptırdı ve 1990-1991 yılında mezun oldu; 1994 yılında Zonguldak Karaelmas Üniversitesi Devrek Fen Edebiyat Fakültesinde Araştırma Görevlisi olarak göreve başladı. 1998 yılında Öğretim Görevlisi olarak aynı kuruma atandı. Halen bu kurumda görev yapmaktadır.

Adres: Zonguldak Karaelmas Üniversitesi
Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü
67100 ZONGULDAK

Tel: (0372) 257 4010/1384
Faks: (0372) 257 41 81
E-posta: alaaddin_yilmaz@hotmail.com