

**T.C.
ADNAN MENDERES ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI
FİZ-YL-2011-0001**

**ÇİFT YAKLAŞIMI İLE ISING MODELİNİN
TERMODİNAMİK ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ**

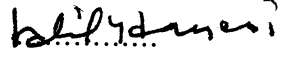

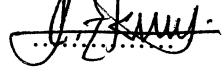
Ümit BAYAN

**DANIŞMAN
Prof. Dr. Cesur EKİZ**

AYDIN-2011

T.C.
ADNAN MENDERES ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRLÜĞÜNE
AYDIN

Fizik Ana Bilim Dalı Yüksek Lisans Programı öğrencisi Ümit BAYAN tarafından hazırlanan çift yaklaşımı ile Ising modelinin termodinamik özelliklerinin incelenmesi başlıklı tez, 07-06-2011 tarihinde yapılan savunma sonucunda aşağıda isimleri bulunan jüri üyelerince kabul edilmiştir.

Unvanı Adı Soyadı	Kurumu	İmzası
Başkan: Prof. Dr. Halil YARANERİ	Adnan Menderes Üniv	
Üye : Prof. Dr. Hamza POLAT	Dokuz Eylül Üniv	
Üye : Prof. Dr. Cesur EKİZ	Adnan Menderes Üniv.	

Jüri üyeleri tarafından kabul edilen bu Yüksek Lisans tezi, Enstitü Yönetim Kurulunun.....sayılı kararıyla.....tarihinde onaylanmıştır.

Prof. Dr. Cengiz ÖZARSLAN
Enstitü Müdürü

Account of the
... ..

T.C.
ADNAN MENDERES ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRLÜĞÜ'NE

Bu tezde sunulan tüm bilgi ve sonuçların, bilimsel yöntemlerle yürütülen gerçek deney ve gözlemler çerçevesinde tarafımdan elde edildiğini, çalışmada bana ait olmayan tüm veri, düşünce, sonuç ve bilgilere bilimsel etik kuralların gereği olarak eksiksiz şekilde uygun atıf yaptığımı ve kaynak göstererek belirttiğimi beyan ederim.

.../.../2011

İmza

Ümit BAYAN



ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

ÇİFT YAKLAŞIMI İLE ISING MODELİNİN TERMODİNAMİK ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

Ümit BAYAN

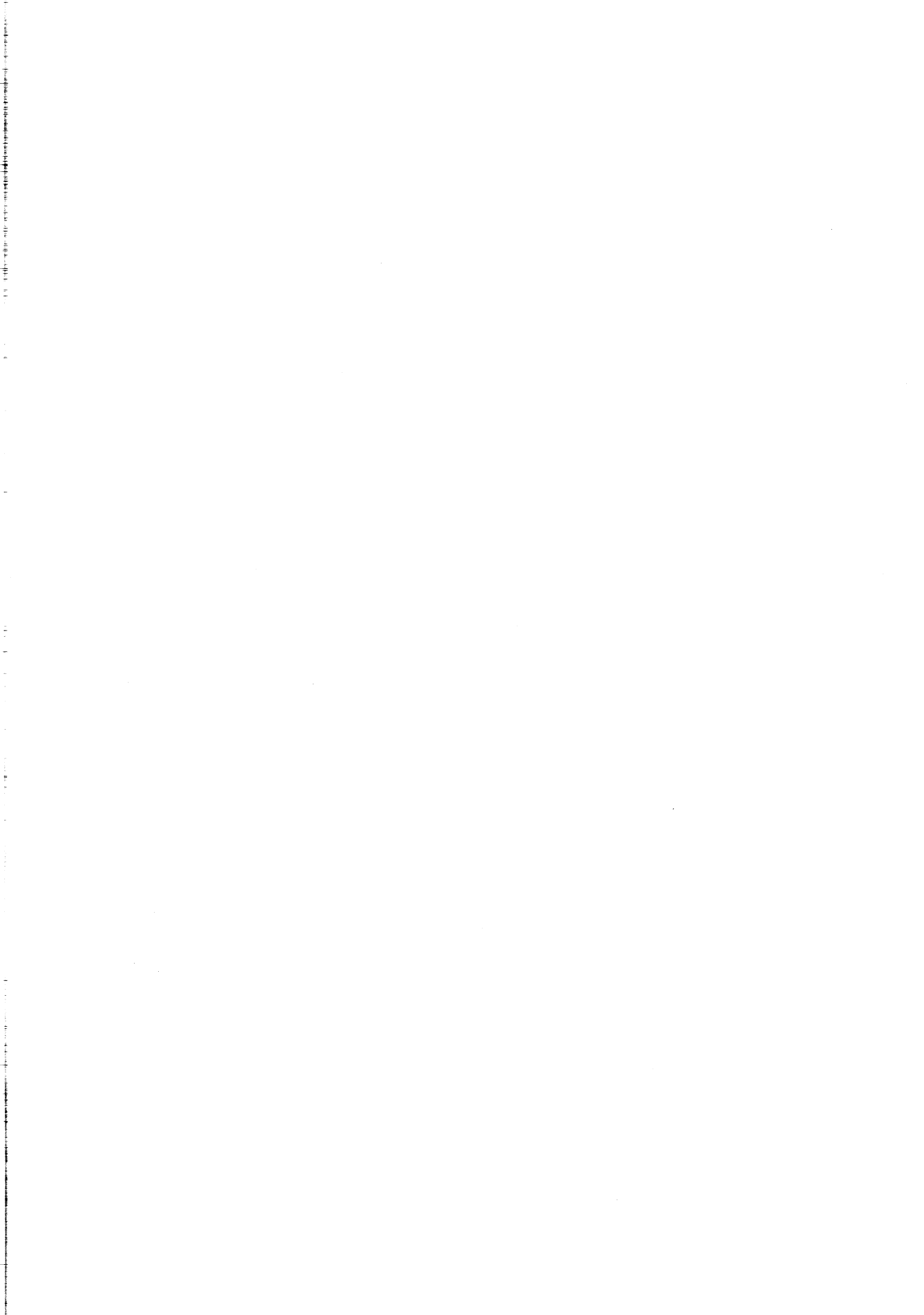
Adnan Menderes Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Cesur EKİZ

Bu çalışmada, anisotropi etkileşmeli spin-1 Blume-Capel modeli manyetik alan varlığında kümesel değişim metodunun çift yaklaşımı kullanılarak incelendi. Bu amaçla, ilk önce çift yaklaşımı tanımlandı ve spin-1/2 Ising modeline uygulandı. Daha sonra aynı metot bilineer ve tek-iyon anisotropi etkileşmeli spin-1 Ising modeli için uygulandı. Mıknatıslanma, kuadrupol momenti, korelasyon fonksiyonu, entropi, iç enerji ve serbest enerji analitik olarak elde edildi. Düzen parametreleri, korelasyon fonksiyonu, entropi, iç enerji ve serbest enerjinin termal değişimleri sıcaklığın ve koordinasyon sayısının fonksiyonu olarak grafiksel olarak çizildi. Son olarak hem en düşük dereceli yaklaşımın hem de çift yaklaşımının sonuçları birbirleri ile karşılaştırıldı.

2011, 60 sayfa

Anahtar Sözcükler: Çift yaklaşımı; Kümesel değişim metodu; Termodinamik özellikler; Ising modeli



ABSTRACT

M.Sc.Thesis

**INVESTIGATION OF THERMODYNAMIC PROPERTIES OF THE
ISING MODEL WITH PAIR APPROXIMATION OF CLUSTER
VARIATIONAL METHOD**

Ümit BAYAN

Adnan Menderes University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Physics

Supervisor: Prof. Dr. Cesur EKİZ

In this study, spin-1 Blume Capel model with anisotropy interaction have been investigated using pair approximation of cluster variational method in the presence of external magnetic field. For that purpose, firstly the pair approximation has been described and applied to spin-1/2 Ising model. Afterwards, the same method has been performed for spin-1 Ising model with bilinear and single-ion anisotropy interactions. The magnetization, quadrupole moment, correlation function, entropy, internal energy and free energy has been obtained by using analytical calculations. The thermal variations of order parameters, correlation function, entropy, internal energy, free energy is plotted graphically as a function of temperature and coordination numbers. Finally, both results of lowest and pair approximation have been compared with each other.

2011, 60 pages**Key Words:** Pair approximation; Cluster variation method; Thermodynamic properties; Ising model

ÖNSÖZ

Bana tez çalışma konusunu veren ve çalışmalarımda en büyük desteği kendisinden gördüğüm, değerli görüşleri ile bana yön veren, çalışmalarım süresince ilgi ve yardımlarını esirgemeyen saygıdeğer hocam ve tez danışmanım Prof.Dr.Cesur EKİZ'e teşekkürlerimi ve saygılarımı sunarım. Eğitim dönemim boyunca her zaman bana yardımcı olan bölümümüzün diğer değerli öğretim üyelerine teşekkürlerimi sunarım. Ve son olarak eğitim hayatım boyunca bana her türlü maddi ve manevi desteklerini esirgemeyen kıymetli aileme şükranlarımı sunarım.



İÇİNDEKİLER

KABUL VE ONAY SAYFASI	iii
BİLİMSEL ETİK BİLDİRİM SAYFASI	iv
ÖZET	v
ABSTRACT	vi
ÖNSÖZ	vii
ŞEKİLLER DİZİNİ	viii
ÇİZELGELER DİZİNİ	xix
1. GİRİŞ	1
2. KURAMSAL TEMELLER	9
3. MATERYAL VE YÖNTEM	12
3.1 Materyal	12
3.2 Yöntem	13
3. 2. 1 Kümesel Değişim Metodunun Çift Yaklaşımının Morita	
Versiyonu ile Spin-1/2 Ising Modeline Uygulanması	15
3.2.1.1 Nokta yaklaşımı için yoğunluk matris elemanları	17
3.2.1.2 Çift yaklaşımı için yoğunluk matris elemanları	17
3.2.2. Kümesel Değişim Metodunun Çift Yaklaşımının Kikuchi	
Versiyonu ile Spin-1/2 Ising Modeline Uygulanması	22
3.2.3. Kümesel Değişim Metodunun Çift Yaklaşımının Spin-1/2 Ising	
Modeline Uygulanması İle Elde Edilen Parametrelerin Termal	
Değişimleri	27
4. BULGULAR VE TARTIŞMA	33
4. 1. Kümesel Değişim Metodunun Nokta Yaklaşımının BC Modele	
Uygulanması	33

4.2. Kümesel Değişim Metodunun Çift Yaklaşımının Spin 1	
Blume-Capel Modeline Uygulanması.....	37
4.3. Spin 1 Blume Capel Modeli için Çift yaklaşımı ile elde edilen	
Parametrelerin Termal Değişimleri.....	42
5. SONUÇ.....	54
KAYNAKLAR.....	57
ÖZGEÇMİŞ.....	60

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 1.1. Kritik manyetik alan ve kritik sıcaklıkta süper iletken faz geçişi.....	2
Şekil 1.2. Süper Akışkan faz diyagramı.....	3
Şekil 1.3. Suyun faz diyagramı.....	4
Şekil 1.4. Sıcaklığın fonksiyonu olarak mıknatıslanma.....	4
Şekil 1.5. İki boyutlu Ising modeli.....	7
Şekil 2.1. İki boyutlu bir örgüde seçilen dördü, üçlü ve ikili alt kümeler.....	10
Şekil 3.1. Spin 1/2 sisteminin çift yaklaşımı kullanılarak bulunan mıknatıslanmasının farklı dış manyetik alan değerleri için sıcaklıkla değişimi.....	29
Şekil 3.2. Spin 1/2 sisteminin çift yaklaşımı kullanılarak bulunan korelasyon parametresi teriminin farklı dış manyetik alanlar için sıcaklıkla değişimi.....	29
Şekil 3.3. Spin 1/2 sisteminin çift yaklaşımı kullanılarak bulunan iç enerji ifadesinin farklı dış manyetik alan değerleri için sıcaklıkla değişimi	30
Şekil 3.4. Spin 1/2 sisteminin çift yaklaşımı kullanılarak bulunan entropi ifadesinin farklı dış manyetik alan değerleri için sıcaklıkla değişimi	30
Şekil 3.5. Spin 1/2 sisteminin çift yaklaşımı kullanılarak bulunan serbest enerji ifadesinin farklı dış manyetik alanlar için sıcaklıkla değişimi	31

- Şekil 3.6. Spin 1/2 sisteminin çift yaklaşımı kullanılarak bulunan manyetik alınganlık ifadesinin farklı dış manyetik alanlar için sıcaklıkla değişimi31
- Şekil 3.7. Dış manyetik alan yokluğunda ($h = 0$) değişik koordinasyon sayıları için mıknatıslanmanın sıcaklıkla olan değişimi. (farklı koordinasyon sayıları için ikinci dereceden faz geçişi sıcaklıkları).....32
- Şekil 4.1. Koordinasyon sayısı 4 olduğunda ($\gamma = 4$) sıfır dış manyetik alanda tek-iyon anizotropi teriminin (D/J) farklı pozitif değerleri için dış alan yokluğunda ($h = 0$) mıknatıslanma ve kuadrupol momentinin sıcaklıkla olan değişimi.....43
- Şekil 4.2. $\gamma = 4$ ve (D/J) farklı negatif değerleri için dış alan yokluğunda ($h = 0$) mıknatıslanma ve kuadrupol momentinin sıcaklıkla olan değişimleri.....44
- Şekil 4.3. $\gamma = 4$ ve (D/J) farklı pozitif değerleri için dış alan yokluğunda korelasyon parametresinin sıcaklıkla değişimi.....44
- Şekil 4.4. Koordinasyon sayısı 4 olduğu durumda dış alan yokluğunda iç enerjinin farklı çiftlenim (D/J) sabiti değerleri için sıcaklıkla değişimi.....45
- Şekil 4.5. Koordinasyon sayısı 4 olduğunda ($\gamma = 4$) sıfır dış manyetik alanda tek-iyon anizotropi teriminin farklı pozitif değerleri için entropinin sıcaklıkla olan değişimi.....45
- Şekil 4.6. $\gamma = 4$ ve (D/J) = 1 değerleri için farklı dış manyetik alanlarda mıknatıslanmanın sıcaklıkla değişimi47
- Şekil 4.7. $\gamma = 4$ ve (D/J) = 1 değerleri için farklı dış manyetik alanlarda korelasyon parametresinin sıcaklıkla değişimi.....47
- Şekil 4.8. $\gamma = 4$ ve (D/J) = 1 değerleri için farklı dış manyetik alanlarda entropinin sıcaklıkla değişimi48

- Şekil 4.9. $\gamma = 4$ ve $(D/J) = 1$ değerleri için farklı dış manyetik alanlarda iç enerjinin sıcaklıkla değişimi.....48
- Şekil 4.10. $\gamma = 4$ ve $(D/J) = 1$ değerleri için farklı dış manyetik alanlarda serbest enerjinin sıcaklıkla değişimi49
- Şekil 4.11. $(D/J) = 1$ ve dış manyetik alanın sıfır olduğu durumda farklı koordinasyon sayıları için mıknatıslanmanın sıcaklıkla değişimi (üç boyutlu uzayda koordinasyon sayısının “6” değeri Basit kübik örgüye, “8” değeri cisim merkezli örgüye, “12” değeri de Hegzagonal örgü ve Yüzey merkezli kübik örgüye karşılık gelir.).....51
- Şekil 4.12. $(D/J) = 1$ ve dış manyetik alanın sıfır olduğu durumda farklı koordinasyon sayıları için korelasyon parametresinin sıcaklıkla değişimi.....51
- Şekil 4.13. $(D/J) = 1$ ve dış manyetik alanın sıfır olduğu durumda farklı koordinasyon sayıları için iç enerjinin sıcaklıkla değişimi.....52
- Şekil 4.14. $(D/J) = 1$ ve dış manyetik alanın sıfır olduğu durumda farklı koordinasyon sayıları için entropinin sıcaklıkla değişimi.....52
- Şekil 4.15. $(D/J) = 1$ ve dış manyetik alanın sıfır olduğu durumda farklı koordinasyon sayıları için serbest enerjinin sıcaklıkla değişimi53
- Şekil 4.16. Sıfır dış alanda $D/J = 1$ durumunda kümesel değişim metodunun nokta yaklaşımı ile elde edilen mıknatıslanma ile çift yaklaşımı ile elde edilen mıknatıslanmaların sıcaklıkla değişimi.....53

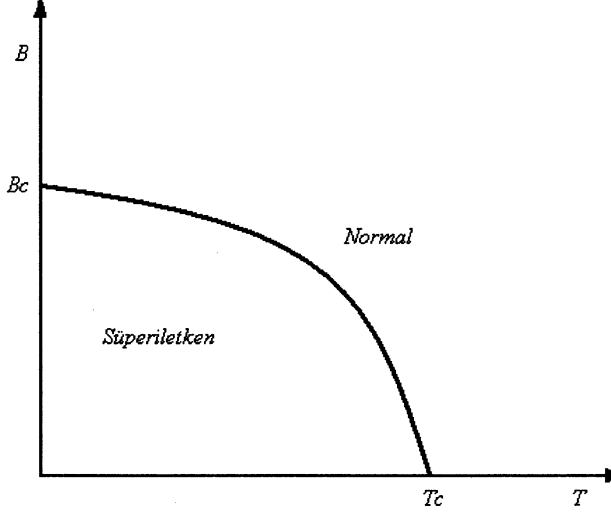
ÇİZELGELER DİZİNİ

Tablo 1.1 : kritik üslerin değerlerinin çeşitli metotlarla bulunan ve deneysel değerlerinin karşılaştırmalı tablosu.....	6
---	---

1. GİRİŞ

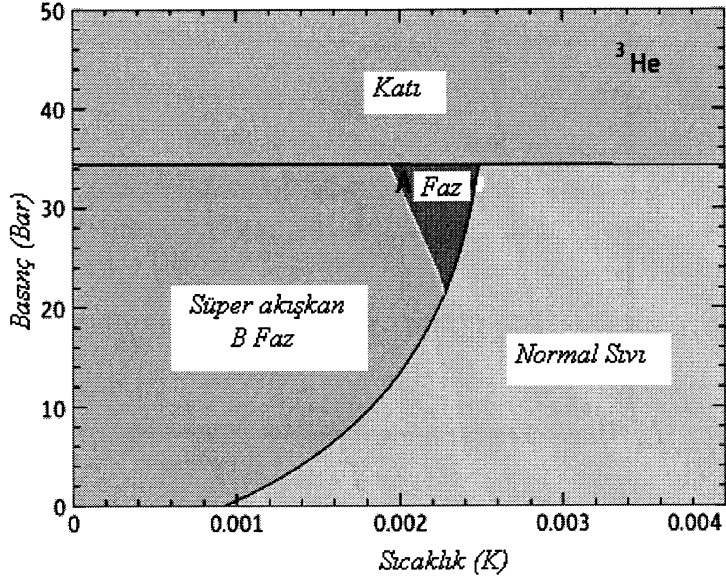
Fiziksel olayların meydana geliş şekillerini incelemek için bazı özelliklerinden faydalanılmaktadır. Bu olayların fiziksel, kimyasal, manyetik, termodinamik v.b. gibi özellikleri o yapı hakkında bize bazı bilgiler vermektedir. Fiziksel kooperatif olayların termodinamik davranışları, örneğin akışkan konsantrasyonu, gazların soğurulması, ikili veya üçlü sıvı ve gaz karışımlarının faz dönüşümleri, ikili alaşımlardaki düzenli-düzensiz faz geçişleri, sıvıların donması, manyetik faz geçişleri, spin-1/2 Ising veya iki durumlu sistemler kullanılarak açıklanabilmektedir. Yukarıda belirtilen faz dönüşümleri iki durum ve tek bir düzen parametresiyle karakterize edilirler. Bu tek parametreye bağlı olarak sistemin hangi fazda olacağı ve hangi koşulda (genellikle sıcaklık kastedilir) diğer faza geçeceği bulunabilir. Fazlar maddelerin belli özelliklerine göre sınıflandırılmasıyla oluşmuşlardır ve her bir faz kendine özgü belli özellikler sergiler. Örneğin bir magnet için, ferromanyetik fazda net bir mıknatıslanma tanımlıdır. Fakat paramanyetik fazda mıknatıslanma sıfırdır. Doğadaki sistemler belli özellikleri temel alınarak sınıflandırılıp aynı evrensellik kümesi içine alınabilirler. Bu amaçla sistemlerin çeşitli karakteristik özellikleri kullanılır (Semet, 2011). Örneğin, maddeler kendilerini oluşturan atom veya moleküller arasındaki uzaklık ve etkileşmelerinin şiddeti göz önüne alınarak katı-sıvı-gaz olarak sınıflandırılabilirler. Yine katılar, atom veya atom gruplarının (örgü noktalarının) diziliş yapılarına göre kristal veya amorf yapıli katılar olarak sınıflandırılırlar. Benzer şekilde maddeler manyetik durumlarına göre, ferromanyetik, ferrimanyetik, antiferromanyetik, paramanyetik ve diamanyetik şeklinde sınıflandırılabilirler. İşte yukarıda sözü edilen sınıfların her birine faz (durum) denir. Uygun şartlar altında, bu fazlar arasında geçişler olur. Buna da faz dönüşümü denir. Örneğin katı fazda bulunan bir miktar buz uygun şartlarda sıvı faza geçer. Her sistemin bulunduğu fazı bildiren ve sistemin karakteristiğine bağlı olan matematiksel fonksiyonlar vardır. Bunlara düzen parametresi denir. Örneğin *ferroelektrikler* için *elektrik dipol momenti*, iki durumlu manyetik sistemler için *manyetizasyon (mıknatıslanma)* bir düzen parametresidir. Bununla birlikte bu parametrelerle ilişkili olan diğer fonksiyonlarda düzen parametresi olarak alınabilirler. Örneğin mıknatıslanma bir düzen parametresidir, ama alınganlık mıknatıslanma ile türev ilişkili olduğundan alınganlıkta bir sistemin fazı hakkında bilgi verir.

Faz dönüşümleri, sistemin diğer termodinamik nicelikleri (P , V , $vb...$) sabit tutulduğunda belli bir sıcaklıkta gerçekleşir. Bu sıcaklığa kritik sıcaklık denmektedir. Ayrıca faz geçiş sıcaklığı civarında sistemde ilginç özellikler ortaya çıkar, örneğin sistemin bazı termodinamik fonksiyonları sıfırsar, ayrıca sistemi oluşturan parçacıklar arasında sonsuz erimli bir korelasyon oluşur. Yani sistemin en uzak noktasındaki iki parçacık birbirini görebilir. Aşağıdaki şekillerde faz geçişlerine bazı örnekler gösterilmiştir.



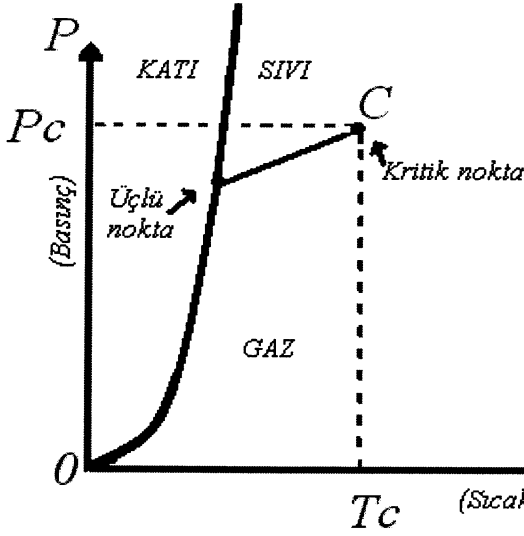
Şekil 1.1: Kritik manyetik alan ve sıcaklıkta süper iletken faz geçişi.

Şekil 1.1, kritik manyetik alan ve kritik sıcaklıkta süper iletken faz geçişini göstermektedir. Sistem belli bir kritik manyetik alan B_c ve kritik sıcaklık T_c değerlerinin altında, süper iletken fazda iken bu değerlerin üzerindeki değerler için normal fazdadır.



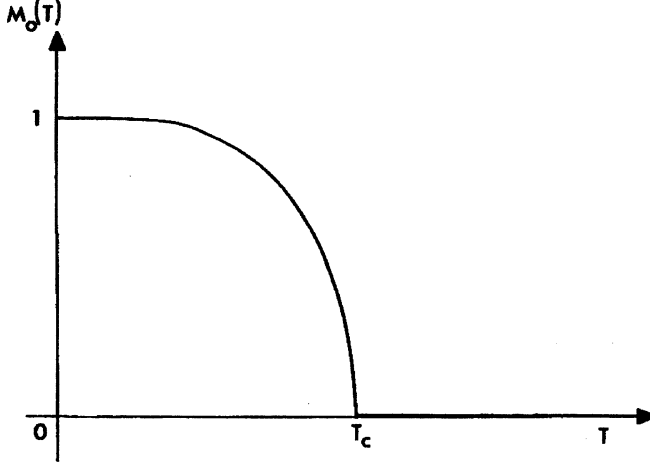
Şekil 1.2 : Süper akışkan faz diyagramı.

Şekil 1.2 ise, bir süper akışkana ait faz diyagramıdır. Şekilden de görülebileceği gibi belli bir basınç değerinin üzerinde sistem katı fazdadır. Basınç düşürülürken, yüksek sıcaklıklarda normal sıvı fazda iken, sıcaklık düştükçe önce *A* faza, sonra da süper akışkan *B* faza geçer.



Şekil 1.3 : Suyun faz diyagramı.

Diğer bir örnek olarak Şekil 1.3 'de çok iyi bilinen suyun fazları, kritik ve üçlü nokta açık bir şekilde görülmektedir.



Şekil 1.4 : Bir manyetik madde için sıcaklığın fonksiyonu olarak mıknatıslanma.

Şekil 1.4, bir magnet için *ferromanyetik-paramanyetik* faz geçişini göstermektedir. Manyetik sistem, kritik sıcaklığın altındaki değerlerde *ferromanyetik* fazda iken, kritik sıcaklığın üzerindeki değerler için *paramanyetik* faza geçmiştir. Tüm bu şekillerde göze çarpan ilk şey bir kritik sıcaklık değeri ve bu değerde sistemin faz-

dönüşümü göstermesidir. Faz geçişleri birinci dereceden faz geçişi ve ikinci dereceden faz geçişi olmak üzere ikiye ayrılır. İki fazın Gibbs veya Helmholtz serbest enerjilerinin kritik sıcaklıkta birbirine eşit yani sürekli, ancak sıcaklığa yada basınca göre türevlerinin süreksiz olduğu faz geçişlerine birinci dereceden faz geçişi denir.

İkinci dereceden faz geçişinde ise kritik nokta da serbest enerjinin sıcaklığa göre türevi tanımlı yani süreklidir. Yukarıdaki Şekil 1.4, ikinci dereceden bir faz geçişine örnek gösterilebilir. İkinci dereceden faz geçişlerine sürekli faz geçişi denmesinin sebebi budur. Faz geçişleri ve uygulamaları istatistik fiziğin en yoğun çalışılan konularındandır. Manyetik sistemlerin termodinamiği ve faz geçişleri için sıklıkla kullanılan sistem Ising modelidir. Bu model ilk olarak Lenz tarafından 1920 yılında ferromanyetik maddelerin (demir, nikel v.b.) faz dönüşümlerinin açıklanabilmesi amacıyla doktora öğrencisi Ising'e tez konusu olarak verilmiş ve Ising (1925) tarafından bir boyutta çözümü yapılmıştır. Ising, tezinde manyetik momentlerin bir zincir üzerindeki özel dizilimini incelemiştir. Bu dizilimde momentlerin özel olarak sadece aşağı ve yukarı yönelimlere sahip olduğu ve sadece en yakın komşuları ile çiftler halinde etkileştiği varsayıldı. Ising, modelin tek boyuttaki çözümünü yaparak tek boyutta sıfırdan farklı sıcaklıklarda faz dönüşümünün olmadığını göstermiştir. Ortaya çıkan bu sonuç neticesinde ilk önceleri modele olan ilgi azalmıştır. Ancak daha sonraki yıllarda Heisenberg modelinin geliştirilmesi ve Onsager tarafından modelin iki boyuttaki ve sıfır manyetik alanda tam çözümünün yapılması, modele olan ilgiyi artırmıştır. İlk önceleri Lenz-Ising modeli olarak anılan model daha sonraları Ising modeli olarak adlandırılmıştır. 1941 yılında Kramers ve Wannier dış manyetik alan yokluğunda kare örgü için kritik sıcaklık değerini veren bir ifade buldu (Kramers ve Wannier, 1941). 1944 yılında Onsager, Helmholtz serbest enerjisini kullanarak Kramers ve Wannier tarafından bulunan kritik sıcaklık değerinin doğruluğunu açık bir şekilde gösterdi (Onsager, 1944). 1960 yılında Domb, iki boyutta bal peteği ve üçgen örgü için tam çözümü buldu (Domb, 1960).

Modelin basit olmasına rağmen üzerinde yoğun şekilde çalışılır olmasının sebepleri arasında, gerçekte de bu modelle örtüşen sistemler olmasının yani sıra evrensellik kavramı ile çok daha farklı sistemlerin de böylesine basit bir modelle açıklanabilmesi gösterilmektedir. Kritik sıcaklık ve civarında sistemin ve sistemi oluşturan parçacıkların davranışlarının incelenmesi sırasında, kritik üsler kavramı ortaya çıkar. Kritik üsler, sıcaklığın kritik sıcaklığa gittiği durumda sistemin düzen

parametrelerinin davranışını anlatır. Aynı evrensellik sınıfına ait sistemlerin termodinamik fonksiyonlarının, faz geçişi yakınında ya da sırasında aynı davranışı gösterdikleri kritik üsleri de aynıdır. Bu duruma örnek olarak *süperakışkan* fazdan normal faza geçiş olayı, sistemle aynı evrensellik sınıfında bulunan daha basit bir sistemin açıklanmasıyla mümkün olabilmektedir. Aşağıda bu kritik üsler ve tanımları gösterilmiştir:

$$\begin{aligned}
 m &\propto |t|^\beta \\
 \chi &\propto |t|^{-\gamma} \\
 m &\propto H^{\frac{1}{\delta}} \\
 C &\propto |t|^{-\alpha}
 \end{aligned}
 \tag{1.1}$$

Burada m mıknatıslanma, χ alınganlık, H manyetik alan, T mutlak sıcaklık ve t ise, T_c kritik sıcaklık olmak üzere $t = \frac{T - T_c}{T}$ şeklinde tanımlanan indirgenmiş sıcaklıktır. Buradaki $\beta, \delta, \gamma, \alpha$ kritik üsler olarak adlandırılırlar ve bu sayılar sıcaklıktan bağımsızdır. Tablo 1.1 de bu üslerin çeşitli modeller kullanılarak elde edilen değerleri ile deneysel değerleri verilmiştir.

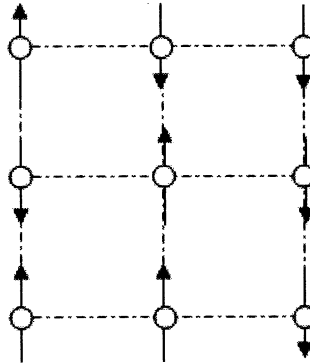
Kritik üs	Deneysel	MFT	Ising-2	Ising -3	Heis - 3
α	0 - 0.14	0	0	0.12	-0.14
β	0.32 - 0.34	1/2	1/8	0.31	0.3
γ	1.3 - 1.4	1	7/4	1.25	1.4
δ	4 - 5	3	15	5	-

Tablo 1.1 : Denklem (1.1) de tanımlanan kritik üslerin çeşitli metotlarla bulunan değerleri ile deneysel değerleri. Burada, MFT ortalama alan teorisi, Ising - 2 iki boyutlu Ising modeli, Ising - 3 üç boyutlu Ising modeli ve Heis - 3 de üç boyutlu klasik Heisenberg modelini ifade eder.

Ising sistemlerinin en basiti, spin-1/2 Ising modelidir. Spinler bir dış manyetik alanda (h) aşağıda verilen *Hamiltonyene* göre etkileşirler:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i . \quad (1.2)$$

Burada J , bilineer etkileşme parametresidir. J 'nin pozitif olması durumu (ferromanyetik durum) spinlerin aynı yönde olmasını sağlarken, negatif olması, antiparalel yönelmeye yani antiferromanyetik duruma karşılık gelmektedir. Diğer taraftan $J = 0$ durumu bir paramanyete karşılık gelmektedir ve bu durumda spinlerin yönelimine sadece manyetik alan etkide bulunur, spinler arası etkileşme yoktur ve böylece faz dönüşümü meydana gelmez. Model, iki durumlu ve tek düzen parametrelili (yoğunluk, konsantrasyon, kristalografik düzen parametresi, manyetizasyon, elektriksel polarizasyon v.b) bir sistem olup yukarıda bahsettiğimiz bir çok fiziksel kooperatif olayın termodinamik davranışlarını açıklamaktadır. Yukarıda da ifade edildiği gibi Ising, problemi çözerken basit bir model geliştirmiştir: Her bir örgü noktası spin, manyetik moment (mıknatıs) diye adlandırılır ve her bir spin manyetik momentinin pozitif (yukarı) veya negatif (aşağı) şekilde iki yönelmesi vardır. Diğer bir ifadeyle, her bir örgü noktasındaki spinlerden bazıları yukarı yönelir, bunlar spin yukarı diye ve bazıları ise aşağıya yönelir, bunlar da spin aşağı diye adlandırılır.



Şekil 1.5 : İki boyutlu Ising modeli. Örgü noktaları üzerindeki oklar, yukarı ve aşağı spin durumlarını gösterir.

Yukarıdaki çalışmalarda anlatılanlara ek olarak çoğu fiziksel sistemler iki durum ve tek bir düzen parametresiyle tanımlanamazlar. Bu tür fiziksel sistemlerin incelenmesi için en az üç durum ve iki düzen parametrelili modeller gereklidir.

Böyle modellerden en iyi bilinen ve yaygın olarak kullanılanlardan birisi de spin-1 Ising modelidir. Spin-1 Ising modeli, sistemi tanımlayan Hamiltonyendeki etkileşme parametrelerine göre farklı olarak adlandırılmaktadır. En genel etkileşmeli spin-1 Ising modeli, Blume-Emery-Griffiths (BEG) modeli olarak adlandırılır ve aşağıdaki *Hamiltonyen* ile tanımlanır:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - K \sum_{\langle ij \rangle} s_i^2 s_j^2 + D \sum_i s_i^2 - L \sum_{\langle ij \rangle} (s_i^2 s_j + s_i s_j^2) - h \sum_i s_i. \quad (1.3)$$

Burada J , bilineer etkileşme parametresini, K , bikuadratik etkileşme parametresini, D anizotropiyi, L üçüncü dereceden manyetik pertürbasyonu, h ise dış manyetik alanı göstermektedir. Spin-1 Ising modelinin, BEG modeli olarak adlandırılarak kullanılması ilk olarak Blume, Emery ve Griffiths (1971) tarafından $^3\text{He} - ^4\text{He}$ karışımlarının termodinamik davranışlarını incelemek için yapmış oldukları öncü çalışma sonrasında başlamıştır. Böylece model ile, pek çok fiziksel kooperatif olaydaki termodinamik davranışlar farklı metotlar kullanılarak incelenmiştir. Örneğin basit ve ikili sıvıların yoğunlaşması ve katılaşması, ikili ve üçlü akışkanlardaki kritik noktaların incelenmesi, mikroemülsiyonlar, re-entrant olaylar, donma, manyetik düzenlilik, düzenli ve düzensiz geçişler, ikili ve üçlü akışkanların incelenmesi, yarı kararlı ve kararsız durumlar gibi birçok fiziksel kooperatif olayın termodinamik özelliklerinin açıklanması bu model kullanılarak yapılmaktadır. Diğer taraftan, Denklem (1.3) ile verilen Hamiltonyende $K=0$ olarak alınırsa, o zaman model, Blume-Capel modeli olarak adlandırılır ki bu model de ilk olarak Blume (1966) ve Capel (1966a, 1966b, 1967a, 1967b) tarafından, birbirinden bağımsız olarak geliştirilmiştir.

Bu modelin üç boyutta tam çözümleri henüz yapılmamıştır. Üç boyutta tam sonuçlar olmamasına rağmen bir ve iki boyutta tam çözümler ve değişik yaklaşım metotları ile yaklaşık çözümleri mevcuttur. Ising modelinin dengeli durum davranışının incelenmesinde kapalı form yaklaşım metodları olarak adlandırılan (Bragg-Williams yaklaşımı, ortalama (moleküler) alan teorisi, Bethe-Peierls yaklaşımı, sabit-çiftlenim yaklaşımı, kümesel değişim metodu v.b.), Monte-Carlo metodu, transfer matris metodu, renormalizasyon grup metodu, etkin alan teorisi, seriye açma metodu, lineer zincir yaklaşımı sayılabilir.

Bu tezde bir dış alan varlığında J ve D etkileşmeli spin-1 Ising yani Blume Capel modelinin manyetik ve termodinamik özellikleri kümesel değişim metodunun çift yaklaşımı kullanılarak incelenecektir. Ayrıca spin-1 Ising modeli için, ortalama alan yaklaşımıyla aynı sonucu veren, en düşük dereceli kümesel değişim metodu kullanılarak elde edilecek olan sonuçlarla çift yaklaşımının verdiği sonuçlar birlikte sunulacak, böylece söz konusu iki yaklaşım arasında karşılaştırmalarda yapılabilecektir.

2. KURAMSAL TEMELLER

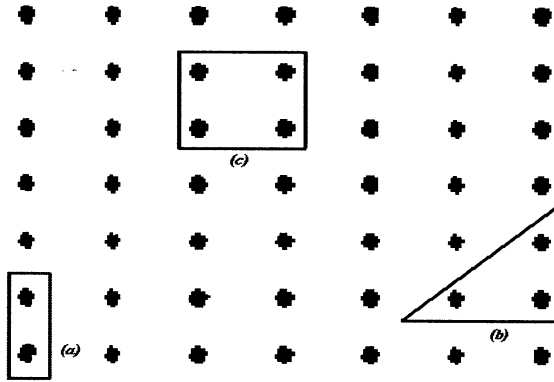
Önceki bölümde de bahsedildiği gibi, denklem (1.3) deki K ve L parametrelerinin sıfır alınmasıyla Blume-Capel modelini tanımlayan Hamiltonyen elde edilir. Bu Hamiltonyen çeşitli yöntemler kullanılarak çözülmüş ve manyetik sistemler için zengin faz diyagramları elde edilmiştir. Bu model özellikle fcc Bravais örgüye sahip kristallerin faz geçişi özelliklerini anlamak için yoğunlukla kullanılmıştır. Bu amaçla, Saul, Wortis ve Stauffer (1974) yüksek ve düşük sıcaklıklarda seriye açma metodunu kullanarak fcc Blume-Capel ferromanyetiğinin üçlü kritik nokta davranışını incelemişlerdir. Yine yüzey merkezli kübik (fcc) Blume-Capel sisteminin termodinamik davranışı Monte-Carlo yöntemi kullanılarak Jain ve Landau (1980) tarafından çalışılmıştır. Plascak, Moreira ve saBarreto (1993) bu modelin ortalama alan teorisiyle çözümlerini incelemiştir. Wie ve Barry (1978) bu modeli kümesel değişim metodunun çift yaklaşımıyla çözmüş fcc yapı için sayısal çözümleri yapıp özellikle termal ortalamalar için kapsamlı veriler elde etmişlerdir.

Bu tezde, aşağıdaki *Hamiltonyenle* tanımlanan, spin-1 Blume-Capel modelinin manyetik ve termal özellikleri incelenecektir:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - D \sum_i s_i^2 - h \sum_i s_i. \quad (2.1)$$

Yukarıda da bahsedildiği gibi bu *Hamiltonyeni* çözmek için farklı birçok yöntem (Ortalama alan yaklaşımı, Etkin alan teorisi, vb) kullanılmıştır. Bu tezde yöntem olarak kümesel değişim metodunun çift yaklaşımı kullanılacaktır. Kümesel değişim metodu Kikuchi ve çalışma grubu tarafından 1951 yılında tanımlanıp, 1951 ile 1953 yılları arasında geliştirilmiştir (Kikuchi, 1951, 1953). Bu yaklaşım

yönteminde yapılacak ilk iş küme veya öbek (cluster) adı verilen ve zayıf etkileşen parçacıklar topluluğunu tanımlamaktır. Eğer seçilen kümede sadece bir tane parçacık (spin) varsa buna nokta yaklaşımı, iki spin varsa buna çift yaklaşımı, üç spin seçilirse üçgen yaklaşımı denir. Seçilen spin sayısı 3'ün üzerinde olursa buna da yüksek dereceden kümesel değişim metodu denir. Kümede seçilen spin sayısı arttıkça sonuçlar daha da hassaslaşır. Ancak bunun yanında hesaplamalar oldukça zorlaşır. Her ne kadar seçilen spin sayısı arttıkça sonuçlar daha da iyileşse de, kümede seçilen parçacıkların sayısı incelenen sistemin topolojisine (spin sistemleri için kristal örgü) uygun olmalıdır. Aksi takdirde sonuçlar hassaslaşacağına daha da gerçek değerlerinden uzaklaşır. Bir örnek vermek gerekir ise; iki boyutlu bir kare örgü için çift yaklaşımıyla yapılan hesaplar nokta yaklaşımından bulunan sonuçlardan daha hassas olur. Ama küme de üç spin seçilerek yapılan hesaplamalar çift yaklaşımından daha iyi sonuç vermeyeceği gibi daha da kötü sonuç verir. Çünkü seçilen küme, örgünün topolojisiyle uyumlu değildir. Yani tüm örgünün gösterdiği özellikle simetri özelliklerini göstermez. Bunun yerine kümede dört spin alınarak yapılan hesaplamalar ise çift yaklaşımından da iyi sonuçlar vermektedir. Bu durum aşağıda gösterilmiştir.



Şekil 2.1 : Kare örgüde seçilen ikili (a), üçlü (b) ve dörtlü (c) spin alt kümeleri.

Kümesel değişim metodunun çift yaklaşımı kullanılarak özellikle spin-1/2 Ising modeli üzerine son yıllarda çalışmalar yapılmıştır. Balcerzak (2001) bu metotla spin-1/2 Ising sisteminin kritik konsantrasyon hesaplamalarını yapmıştır. Balcerzak ve Tucker (2004) kümesel değişim metodunun çift yaklaşımını kullanarak RKKY etkileşmeli spin-1 Blume-Capel modelini incelemişlerdir. Ve

yine Balcerzak (2003) çift yaklaşımını kullanarak spin-1/2 modelinin tam bir termodinamik tanımlamasını yapmıştır. Bu tez konusunun seçiminde yukarıdaki son yayın yol gösterici olmuştur. Bu yöntemin spin-1 Blume-Capel (BC) modeline dış alan varlığında uygulanması bu tez kapsamında ilk kez çalışılmıştır. Böylece hem spin-1 Blume-Capel modeli için mıknatıslanma, korelasyon fonksiyonu ve diğer termodinamik ve manyetik özellikler çift yaklaşımı ile bulunması hem de çift yaklaşımının iki durumdan büyük durumlara sahip spin sistemleri için bir uygulaması incelenecektir.

3. MATERYAL VE YÖNTEM

3.1 Materyal

Modelin *Hamiltonyeni*;

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - D \sum_i s_i^2 - h \sum_i s_i, \quad (3.1.1)$$

şeklinde tanımlanır. Burada J bilineer etkileşme terimidir. Ve esasen en yakın komşu spin çiftleri arasındaki etkileşmenin şiddetini gösterir. D ise anizotropi terimi olup, kristal alanı olarak da adlandırılır. h ise sisteme uygulanan dış manyetik alandır. Ve aksi belirtilmedikçe bu alan z - eksenini boyunca uygulanan alan şiddetini gösterir. İlk toplam en yakın komşu çiftler üzerinden alınırken diğer iki toplam tek tek tüm örgü noktaları üzerinden alınır. Bu model üç durumlu ve iki düzen parametrelidir. Ancak burada çift yaklaşımı kullanılacağından $\langle s_i s_j \rangle = c$ şeklinde verilen korelasyon parametresi de bir düzen parametresi olacak ve böylece sistemimizde üç düzen parametresi var olacaktır. Bunlar, *magnatislanma* (m), *kuadrupol moment* (q) ve *korelasyon parametresi* (c) dir.

Ortalama alan teorisi (Bragg-Williams yaklaşımı) kullanılarak yapılan çözümlerde, $\langle s_i s_j \rangle = \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle$ alındığından ve spinler özdeş parçacıklar olduğundan, $\langle s_i s_j \rangle = m^2 \approx c$ olarak alınır. Ve hesaplamalar bu değer kullanılarak yapılır. Bu nedenle ortalama alan yaklaşımında iki düzen parametresi (m, q) olur. Modelde iki düzen parametresi olduğu için iki düzen parametresi ile tanımlanan ve modelle aynı evrensellik sınıfı içinde olan pek çok kooperatif olayın açıklanmasında kullanılmaktadır. Burada spin değişkenleri üç duruma sahiptir ve bunlar +1, -1, 0 dir.

3.2 Yöntem

Çalışmada yöntem olarak kümesel değişim metodunun çift yaklaşımı kullanılacaktır. Bu metot 1951 yılında Kikuchi tarafından önerilmiş ve çalışma grubu ile birlikte yine kendisi tarafından geliştirilmiştir (1967, 1977). Kümesel değişim metodu Ising modelini çözme yöntemlerinden biri olan kapalı form yaklaşımlarının genelleştirilmiş hali, ayrıca en önemlisi ve kullanılır olanıdır. Ayrıca kümesel değişim metodunun zamana bağlı durumlara genelleştirilebilmesi ve birçok fiziksel problemin çözümünde iyi sonuçlar vermesi metodu önemli kılmaktadır. Örneğin, donma, manyetik düzenlilik, faz dönüşümleri, düzenli-düzensiz geçişler v.s. gibi birçok fiziksel kooperatif olayın incelenmesinde iyi sonuçlar verir. Kümesel değişim metodu, uzun mesafe düzen parametresi üzerine bina edilen Bragg-Williams metodu (1934, 1935) ile, uzun menzil düzen parametresiyle birlikte kısa menzil düzen parametresi üzerine kurulan Bethe metodunun (1935) geliştirilmiş şeklidir.

Genel olarak kümesel değişim metodunun fiziksel modellere uygulanmasında aşağıdaki sıra takip edilir:

1. İlk önce küme adı verilen ve zayıf etkileşen sistemler topluluğu tanımlanır.
2. Alınan kümenin şekillenimi iç değişkenler cinsinden yazılır.
3. Şekillenim ve iç enerji yardımıyla entropi ve serbest enerji ifadesi tanımlanır. Daha sonra da serbest enerji ifadesi minimize edilerek denge durumu özellikleri bulunmuş olur. Buna ilave olarak dinamik davranışlar bilinen yöntemlerle kolaylıkla bulunup zamana bağlı sonuçlarda elde edilir. Ayrıca termodinamik değişkenler arasındaki kısmi türev ilişkileri kullanılarak da diğer nicelikler elde edilebilir.

Kümesel değişim metodunun, fiziksel modellerin incelenmesinde tercih edilmesinin nedenleri arasında şunlar sayılabilir.

1. Verilen bir kristal örgüde temel kümesel büyüklük olarak nokta seçildiğinde, metot en düşük dereceli kümesel değişim metodu olarak adlandırılır ki ortalama alan veya Bragg-Williams yaklaşımıyla, temel kümesel büyüklük en yakın komşu çiftler seçildiğinde, Bethe yaklaşımıyla aynı sonucu verdiği için, her iki yaklaşımı da içine almasıdır.

2. Temel kümesel büyüklük üçgen veya kare ağ seçilirse, metot yüksek dereceli kümesel değişim metodu olarak adlandırılır ki ağırlık faktörünü bulmak çok zor, fakat hesaplamalar daha hassastır.

3. İç değişkenler uygun bir şekilde tanımlandıktan sonra, termodinamik değişkenlerin bu iç değişkenlere bağlı olarak elde edilmesi kümesel değişim metoduyla daha kolay olmaktadır.

4. Kümesel değişim metodunun zamana bağlı durumlara genelleştirilebilmesi ve donma, manyetik düzenlilik, faz geçişleri, düzenli-düzensiz geçişler gibi birçok fiziksel kooperatif olayın incelenmesinde iyi sonuçlar vermesinden dolayı, kapalı form yaklaşımlarının en önemlilerinden birisidir.

Kümesel değişim metodunun daha iyi anlaşılabilmesi için spin-1/2 Ising modeline uygulanması izleyen bölümde verilecektir. Bu metot uygulanırken en önemli hususlardan birisi iç değişkenlerin nasıl seçilmesi gerektiğidir. Çünkü iç değişkenler uygun bir şekilde seçildiğinde entropi, iç enerji ve dolayısı ile serbest enerji kolaylıkla elde edilebilir. Ve bundan sonra geriye sadece matematiksel işlemlerde aranan büyüklüklerin bulunması kalır. İç değişkenleri tanımlamada genel kılavuz yol ise; hiçbir yaklaşım yapmaksızın sistemin iç enerjisini ve entropisini elde edebilecek şekilde parametreleri seçmektir. Bu parametrelere iç değişkenler denir. (daha sonra görüleceği üzere bu parametreler sistemin yoğunluk matris elemanları yani olasılıklarıdır.) Kümesel değişim metodunda entropinin tanımlanması, seçilen yaklaşım derecesi ile ilgilidir. Fakat genel olarak şu tanımlı yapabiliriz. Çift yaklaşımında lokal entropiler (yani noktaların ve spin çiftlerinin) σ_i ve σ_{ij} olmak üzere toplam entropi, bu lokal entropilerin kümülan bir serisi olarak açılabilir. Yani;

$$S = \sum_i \delta_i + \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{ij} + \sum_{\langle i,j,k \rangle} \delta_{ijk} + \dots \quad (3.2.1)$$

Burada, $\delta_i, \delta_{ij}, \dots$ şu şekilde tanımlanır.

$$\begin{aligned} \sigma_i &= \delta_i, \\ \sigma_{ij} &= \delta_i + \delta_j + \delta_{ij}, \\ \sigma_{ijk} &= \delta_i + \delta_j + \delta_k + \delta_{ij} + \delta_{ik} + \delta_{jk} + \delta_{ijk} \\ &\vdots \end{aligned} \quad (3.2.2)$$

Denklem (3.2.2) deki σ_{ijk} ifadesi üç spin içeren kümenin (cluster) lokal entropisini göstermektedir. Böylece bir kıyaslama yaparak denk. (3.2.1) ve (3.2.2) yardımıyla daha yüksek dereceden kümesel değişim metotları için lokal entropiler ve onların toplam entropiye katkıları hesaplanabilir. Örneğin sadece ikinci dereceden katılara kadar olan katılar hesaplanırsa toplam entropi,

$$S \approx \sum_i \sigma_i, \quad (3.2.3)$$

şeklinde sadece örgü noktalarından gelen katılarla oluşur. Bu ise çok iyi bilinen ortalama alan yaklaşımıdır. Eğer spin çiftlerinin oluşturduğu alt kümede dikkate alınırsa, bu taktirde çift yaklaşımı için entropi;

$$S \cong \sum_i \sigma_i + \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_{ij} - \sigma_i - \sigma_j) \quad (3.2.4)$$

şeklinde olur. Kümesel değişim metodunun Kikuchi ve Morita olmak üzere iki versiyonu vardır. Bu iki versiyon arasında esas olarak hiçbir fark yoktur. Tek fark kullanılan notasyondur. Bundan sonraki kısımda *spin 1/2 Ising* modelinin çift yaklaşımının hem *Morita* hem de *Kikuchi* versiyonları ile verilmiştir.

3. 2. 1 Kümesel Değişim Metodunun Çift Yaklaşımının Morita Versiyonu ile Spin-1/2 Ising Modeline Uygulanması

Basit bir örnek olarak kümesel değişim metodunu tek boyutta Ising modeline uygulayarak inceleyelim. Bu model basit bir kabule dayanır. Bu kabulde, örgü diye adlandırılan N tane sabit noktanın dizilmesiyle meydana gelen tek boyutlu bir örgü sistemi düşünülür. Her bir örgü noktasındaki spin manyetik momenti diye adlandırılan küçük bir mıknatıs ya + veya – doğrultuda olduğu kabul edilir. Başka bir deyişle yukarı yönelen spinler \uparrow veya + ile gösterilir ve spin yukarı, aşağı yönelen spinler \downarrow veya – ile gösterilir ve spin aşağı diye adlandırılır.

Şimdi örnek olarak, kümesel değişim metodunun çift yaklaşımını Morita versiyonunu kullanarak, spin-1/2 Ising modeline uygulayarak kritik sıcaklığı (T_c) bulalım. Bunun için önce serbest enerji ifadesi elde edilecektir. Serbest enerjiyi

elde etmek için de iç değişkenler tanımlanacak, sonra serbest enerji bu iç değişkenlere göre minimize edilecektir. Söz konusu iç değişkenler yaklaşım yapmaksızın sistemin entropisi ve iç enerji ifadelerini veren değişkenlerdir. Bunun için önce küme diye adlandırılan topluluk tanımlanır. Sonra kümenin şekillenimi, iç değişkenler cinsinden elde edilir ve daha sonrada serbest enerji bulunur.

Sistemin *Hamiltonyeni*,

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i, \quad (3.2.1.1)$$

Burada J bilineer etkileşme terimi ve h dış manyetik alandır. s_i i . örgü noktasına ait olan spin değişkenidir ve öz değerleri $+1/2$ ve $-1/2$ dir. Yukarıda da bahsedildiği gibi denge durumu özellikleri için serbest enerji elde edilmelidir. Bu amaçla serbest enerji için,

$$G = E - TS \quad (3.2.1.2)$$

ifadesi kullanılacaktır. Burada E iç enerji olup, $E = \langle H \rangle$ ifadesi ile tanımlanır:

$$\langle H \rangle = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \langle s_i s_j \rangle - h \sum_i \langle s_i \rangle. \quad (3.2.1.3)$$

Toplam mıknatıslanma her bir örgü noktasındaki spinin mıknatıslanmaların toplamı olacağından, N tane örgü noktası için toplam mıknatıslanma;

$M = N \langle s \rangle = Nm$ olur. Ayrıca en yakın komşu spin-spin korelasyon fonksiyonu da $c = \langle s_j s_j \rangle$ ile verilir. Sistem toplam N tane örgü noktasına sahiptir. Ayrıca z

koordinasyon sayısı olmak üzere, ilk toplam $\frac{Nz}{2}$ ile çarpılmalıdır. Bu ifadeyi ikiye

bölmemizin nedeni tüm örgü söz konusu olduğunda i . noktanın iki kez sayılmasını engellemektir. Sonuç olarak Denk. (3.2.1.3) aşağıdaki gibi olur:

$$E = -\frac{Nz}{2} Jc - Nhm. \quad (3.2.1.4)$$

Şimdi sıra entropiyi bulmaktır. Fakat bunun için bize konfirügasyonlar gerekmektedir. Bunun için indirgenmiş matris elemanlarını tanımlanmalıdır.

3.2.1.1) Nokta yaklaşımı için yoğunluk matris elemanları

ρ_i , i . örgü noktasına ait yoğunluk matris elemanı olmak üzere:

$$\rho_i = \frac{1}{2} + 2ms_i, \quad (3.2.1.5)$$

ifadesi ile tanımlanır. Burada s_i , i . noktadaki spin değişkenidir. Ve $i = 1, 2$ olmak üzere $s_1 \rightarrow +(1/2)$ ve $s_2 \rightarrow -(1/2)$ değerlerini alır. Böylece nokta yaklaşımına karşılık gelen yoğunluk matris elemanları;

$$\rho_1 = \frac{1}{2} + m \text{ ve } \rho_2 = \frac{1}{2} - m, \quad (3.2.1.6)$$

olarak elde edilirler. Görüldüğü gibi iç değişkenler tanımlanmış ve düzen parametreleri iç değişkenler cinsinden elde edilmiştir.

3.2.1.2) Çift yaklaşımı için yoğunluk matris elemanları

ρ_{ij} , örgünün i . ve j . noktalarının oluşturduğu spin çiftinin yoğunluk matris elemanları olmak üzere,

$$\rho_{ij} = \frac{1}{4} + ms_i + ms_j + 4cs_i s_j, \quad (3.2.1.7)$$

İfadesi ile tanımlanır. Burada s_i ve s_j spin değişkenleri olup, $i, j = 1, 2$ ayrıca $s_1 \rightarrow +(1/2)$ ve $s_2 \rightarrow -(1/2)$ değerlerini alır. Sonuç olarak matris elemanları;

$$\rho_{11} = \frac{1}{4} + m + c, \rho_{12} = \frac{1}{4} - c,$$

$$\rho_{21} = \frac{1}{4} - c \text{ ve } \rho_{22} = \frac{1}{4} - m + c \quad (3.2.1.8)$$

olarak elde edilirler. Yukarıdan da anlaşılacağı üzere i ve j 'nin yer değiştirmesiyle yoğunluk matris elemanın değeri değişmez. Yani $\rho_{ij} = \rho_{ji}$ dir. Böylece $\rho_{12} = \rho_{21}$

olduğu anlaşılır. Bu yoğunluk matris elemanları normalizasyon koşuluna da uyarlar. Yani,

$$\text{Tr}_i \rho_i = 1 \text{ ve } \text{Tr}_{ij} \rho_{ij} = 1 \quad (3.2.1.9)$$

olur. Burada “Tr” matrisin izini ifade eder. Şimdi bu yoğunluk matris elemanları kullanılarak, örgü noktalarının ve spin çiftlerinin entropisi hesaplanabilir. Noktalar için;

$$\sigma_i = -k \langle \rho_i \ln \rho_i \rangle = -k \text{Tr}_i (\rho_i \ln \rho_i) \quad (3.2.1.10)$$

yazılır burada k , Boltzmann sabitidir. Denk. (3.2.1.6) Denk. (3.2.1.10) de yerine yazılmak sureti ile entropi,

$$\sigma_i = -k \left[\left(\frac{1}{2} + m \right) \ln \left(\frac{1}{2} + m \right) + \left(\frac{1}{2} - m \right) \ln \left(\frac{1}{2} - m \right) \right], \quad (3.2.1.11)$$

şeklinde elde edilir. Benzer şekilde spin çiftleri için entropi;

$$\sigma_{ij} = -k \langle \rho_{ij} \ln \rho_{ij} \rangle = -k \text{Tr}_{ij} (\rho_{ij} \ln \rho_{ij}), \quad (3.2.1.12)$$

ifadesi ile verilir. Şimdi de Denk. (3.2.1.8) yukarıda yerine yazılırsa, spin çiftleri için entropi;

$$\sigma_{ij} = -k \left[\left(\frac{1}{4} + m + c \right) \ln \left(\frac{1}{4} + m + c \right) + 2 \left(\frac{1}{4} - c \right) \ln \left(\frac{1}{4} - c \right) + \left(\frac{1}{4} - m + c \right) \ln \left(\frac{1}{4} - m + c \right) \right], \quad (3.2.1.13)$$

şeklinde elde edilir. Toplam entropi, $S = N\sigma$ olmak üzere serbest enerji şu şekli alır:

$$\frac{G}{N} = -\frac{zJ}{2} c - hm - T\sigma. \quad (3.2.1.14)$$

Denk. (3.2.2) ile de tanımlandığı üzere çift yaklaşımında hem örgü noktalarından hem de spin çiftlerinden spin başına toplam entropiye gelen katkı,

$$\sigma = \frac{z}{2}\sigma_{ij} - (z-1)\sigma_i, \quad (3.2.1.15)$$

bağıntısı ile verilir. Şimdi Denk. (3.2.1.14), (3.2.1.13) ve (3.2.1.11), Denk. (3.2.1.15) de kullanılarak serbest enerji düzen parametreleri cinsinden,

$$\begin{aligned} \frac{G}{N} = & -\frac{z}{2}Jc - hm + kT\left\{\frac{z}{2}\left[\left(\frac{1}{4} + m + c\right)\ln\left(\frac{1}{4} + m + c\right)\right. \right. \\ & \left. \left. + 2\left(\frac{1}{4} - c\right)\ln\left(\frac{1}{4} - c\right) + \left(\frac{1}{4} - m + c\right)\ln\left(\frac{1}{4} - m + c\right)\right] \right. \\ & \left. - (z-1)\left[\left(\frac{1}{2} + m\right)\ln\left(\frac{1}{2} + m\right) + \left(\frac{1}{2} - m\right)\ln\left(\frac{1}{2} - m\right)\right]\right\}, \quad (3.2.1.16) \end{aligned}$$

formunda elde edilir. Burada iki düzen parametresi vardır. Bunlar yukarıda da pek çok kere değinilen mıknatıslanma (m) ve korelasyon fonksiyonu (c) dur. Sistem dengede olduğunda serbest enerjinin düzen parametrelerine göre kısmi türevi sıfır olur. Bunlar sistemin denge şartlarıdır. Ve bu şartlar kullanılarak denge durumu özellikleri elde edilebilir.

Sistem denge durumunda

$$\frac{\partial G}{\partial m} = 0 \text{ ve } \frac{\partial G}{\partial c} = 0,$$

bağıntıları ile ifade edilir. Serbest enerjinin düzen parametresine göre (m) kısmi türevi alındığında aşağıdaki ifade elde edilir:

$$e^{2h\beta/z} = \frac{\left(\frac{\frac{1}{4} + m + c}{\frac{1}{4} - m + c} \right)^{\frac{2(z-1)}{z}}}{\left(\frac{\frac{1}{2} + m}{\frac{1}{2} - m} \right)} \quad (3.2.1.17)$$

Benzer şekilde ikinci türev hesaplanır ve gerekli işlemler yapılırsa,

$$e^{J\beta} = \frac{\left(\frac{\frac{1}{4} + m + c}{\frac{1}{4} - m + c} \right) \left(\frac{\frac{1}{4} - m + c}{\frac{1}{4} - c} \right)^2}{\left(\frac{1}{4} - c \right)^2} \quad (3.2.1.18)$$

ifadesi elde edilir. Şimdi Denk. (3.2.1.18) ve Denk. (3.2.1.17)'e bölünür ve ilerletilirse aşağıdaki ifade elde edilir.

$$e^{(J\beta/2) - h\beta/z} = \frac{\frac{1}{4} - m + c}{\frac{1}{4} - c} \left(\frac{\frac{1}{2} + m}{\frac{1}{2} - m} \right)^{1-1/z} \quad (3.2.1.19)$$

Bu aşamada Denk. (3.2.1.17) ile Denk. (3.2.1.18) taraf tarafa çarpılır ve gerekli düzenlemeler yapılırsa,

$$e^{(J\beta/2) + h\beta/z} = \left(\frac{\frac{1}{4} + m + c}{\frac{1}{4} - c} \right) \left(\frac{\frac{1}{2} - m}{\frac{1}{2} + m} \right)^{1-\frac{1}{z}} \quad (3.2.1.20)$$

ifadesi elde edilir.

Şimdi korelasyon fonksiyonunu bulmak için bu iki denklem taraf tarafa toplanır,

$$c = \frac{1}{8} \left\{ \frac{e^{\frac{\beta h}{z} \left(\frac{1}{2} + m \right)^{1-1/z}} + e^{-\frac{\beta h}{z} \left(\frac{1}{2} - m \right)^{1-1/z}} - 2e^{-\frac{\beta J}{2}}}{e^{\frac{\beta h}{z} \left(\frac{1}{2} + m \right)^{1-1/z}} + e^{-\frac{\beta h}{z} \left(\frac{1}{2} - m \right)^{1-1/z}} + 2e^{-\frac{\beta J}{2}}} \right\}, \quad (3.2.1.21)$$

formunda elde edilir. Elde edilen bu denklem, biraz işlem ile ilerletilir ve farklı bir tanımlama yapılır ise aşağıda verilen formda yazılabilir:

$$c = \frac{1 \cosh \alpha - e^{-\beta J/2}}{4 \cosh \alpha + e^{-\beta J/2}}. \quad (3.2.1.22)$$

Burada, $r = kT \ln \left(\frac{1}{2} + m \right)$, $\alpha = \frac{\beta}{z} [(z-1)r + h]$ tanımlamaları kullanılmıştır.

Mıknatıslanmayı bulmak için ise, yukarıda korelasyon fonksiyonunu bulmak için kullandığımız iki denklemi taraf tarafa çıkartırız. Böylece aşağıdaki ifadeyi elde ederiz:

$$\frac{1}{\frac{1}{4} - c} \left(\frac{1}{4} + m + c - \frac{1}{4} + m - c \right) = e^{\frac{\beta J}{2}} \left\{ e^{\frac{\beta h}{z} \left(\frac{1}{2} + m \right)^{1-1/z}} - e^{-\frac{\beta h}{z} \left(\frac{1}{2} - m \right)^{1-1/z}} \right\}$$

Yukarıdaki tanımlama kullanılmak sureti ile de mıknatıslanma,

$$m = \frac{1}{2} \frac{\sinh \alpha}{\cosh \alpha + e^{-\beta J/2}}. \quad (3.2.1.23)$$

olarak bulunur. Sonuç olarak çift yaklaşımı Morita versiyonu kullanılarak spin-1/2 Ising modeline uygulanmış ve düzen parametreleri bulunmuştur. Diğer özellikler örneğin manyetik alınganlık ve ısı sığası ise türev ilişkileri ile belirlenebilir.

$$\chi = -\frac{1}{N} \left(\frac{\partial^2 G}{\partial h^2} \right)_T = \left(\frac{\partial m}{\partial h} \right)_T.$$

$$C_h = -\frac{T}{N} \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \right)_h = T \left(\frac{\partial \sigma}{\partial T} \right)_h.$$

Sonuç olarak, iç enerji (E), entropi (σ), serbest enerji (G), mıknatıslanma (m), korelasyon fonksiyonu (c), ısı sığası (c_h) ve alınganlık (χ) bulunur. Böylece sistemin tam bir manyetik ve termodinamik tasviri verilmiş olur.

İkinci dereceden faz geçişi için, $T \rightarrow T_c$, $m \rightarrow 0$ olur bu limit değeri kullanılırsa, kritik sıcaklık için;

$$\frac{kT_c}{J} = \frac{1}{2 \ln(z/(z-2))}. \quad (3.2.1.24)$$

ifadesi bulunur.

3. 2. 2 Kümesel Değişim Metodunun Çift Yaklaşımının Kikuchi Versiyonu ile Spin-1/2 Ising Modeline Uygulanması

Burada yine bir önceki bölümde verilen Hamiltonyen ile işe başlayacağız. Sistemdeki N tane spinden, N_1 tanesi yukarıya doğru, N_2 tanesi de aşağı doğru yönelmiş olsunlar. Sistemde parçacık sayısı değişmeyeceğinden (yani zaman içinde yeni spinler oluşmayıp var olanlarda yok olmayacağından); $N = N_1 + N_2$ olur. Burada her bir terim toplam spin sayısına bölünerek de olasılıkların normalizasyon koşulu elde edilmiş olunur. Bu ifade bir genellemeyle şöyle verilir:

$$\sum_{i=1}^2 \frac{N_i}{N} = \sum_{i=1}^2 x_i = 1. \quad (3.2.2.1)$$

Burada $i = 1, 2$ değerlerini alır. Buradan da anlaşılacağı üzere x_i , bir spinin i durumunda bulunma olasılığıdır. Bu ifade i halin kesirsel değeri olarak da adlandırılır. (Burada ki x_i 'lerin bir önceki bölümde tanımlanan nokta yaklaşımı için yoğunluk matris elemanları olan, ρ_i 'ler ile aynı olduğu görülmektedir.)

Şimdi nokta yaklaşımını kullanarak mıknatıslanmayı $m = \langle s_i \rangle = \frac{\sum_{i=1}^2 s_i x_i}{\sum_{i=1}^2 x_i}$ ifadesi ile

bulabiliriz. Sonuç olarak mıknatıslanma, $m = \langle s_i \rangle = \sum_{i=1}^2 s_i x_i = s_1 x_1 + s_2 x_2$ olarak ifade edilir.

Burada spin değişkenleri, $s_1 \rightarrow +(1/2)$, $s_2 \rightarrow -(1/2)$ değerlerini alırlar. Böylece mıknatıslanma için aşağıdaki değer elde edilir.

$$m = \frac{1}{2}(x_1 - x_2). \quad (3.2.2.2)$$

Şimdi çift yaklaşımı için mıknatıslanma ve diğer manyetik özellikleri elde etmeye çalışalım. Bu amaçla önce en yakın komşu i ve j konumlarında bulunan spin çifti kümesinin "ij" durumunu alma olasılığını yani, y_{ij} 'leri tanımlarız. Bu ifade de normalizasyon koşuluna uyacaktır. Yani:

$$\sum_{i,j=1}^2 y_{ij} = 1. \quad (3.2.2.3)$$

Böylece mıknatıslanma da çift yaklaşımı ile,

$$m = \sum_{i,j=1}^2 s_i y_{ij} = s_1 y_{11} + s_1 y_{12} + s_2 y_{21} + s_2 y_{22}, \quad (3.2.2.4)$$

şeklinde tanımlanır. $y_{ij} = y_{ji}$ olduğu dikkate alınarak ve yukarıdaki spin değişkenlerinin değeri kullanılarak mıknatıslanma için bulunan sonuç,

$$m = \frac{1}{2}(y_{11} - y_{22}), \quad (3.2.2.5) \text{ olarak}$$

elde edilir. (Not: Burada tanımlanan y_{ij} 'ler ile Morita versiyonundaki ρ_{ij} 'ler aynı

büyüklüğü temsil ederler.) Ayrıca bu nokta değişkenleri ile çift değişkenleri arasında aşağıda verildiği üzere bir bağıntı da mevcuttur:

$$x_i = \sum_{i,j} y_{ij} . \quad (3.2.2.6)$$

Yukarıdakilere benzer bir şekilde korelasyon fonksiyonu çift yaklaşımında,

$$c = \langle s_i s_j \rangle = \sum_{i,j=1}^2 y_{ij} (s_i s_j), \quad (3.2.2.7)$$

şeklinde tanımlanır ve

$$c = \frac{1}{4} (y_{11} + y_{22} - 2y_{12}), \quad (3.2.2.8)$$

olarak elde edilir.

Şimdi Kikuchi versiyonunda ağırlık faktörü nasıl tanımlandığını bulmamız gereklidir. Bu amaçla, elimizde L tane sistemden meydana gelmiş N tane topluluk olsun. Buradaki toplulukta noktaların toplam şekillenimi şöyledir.

$$\{Nokta\}_L = \prod_{i=1}^2 (x_i L)! \quad (3.2.2.9)$$

Benzer şekilde çiftler için de;

$$\{Çift\}_L = \prod_{i,j=1}^2 (y_{ij} L)! \quad (3.2.2.10)$$

olur. Böylece bu L tane sistemden meydana gelen N tane topluluğu teşkil etmenin toplam yollarının sayısı, $2\omega = \gamma$ ve γ örgü koordinasyon sayısı olmak üzere aşağıdaki gibidir:

$$\Omega = \left[\frac{\{Nokta\}_L^{2\omega-1}}{(L!)^{\omega-1} \{Çift\}_L^\omega} \right]^N . \quad (3.2.2.11)$$

Sonuçta Boltzmann entropisi aşağıdaki gibi bulunur:

$$S = \frac{k}{L} \ln(\Omega) = \frac{kN}{L} \ln \left[\frac{\left[\prod_{i=1}^2 (x_i L)! \right]^{2\omega-1}}{(L!)^{\omega-1} \left[\prod_{i,j=1}^2 (y_{ij} L)! \right]^{\omega}} \right]. \quad (3.2.2.12)$$

Bu ifade düzenlenerek tıpkı Morita versiyonun da olduğu gibi entropi,

$$S = kN \left[(\gamma - 1) \sum_i x_i \ln x_i - \frac{\gamma}{2} \sum_{ij} y_{ij} \ln y_{ij} \right], \quad (3.2.2.13)$$

şeklinde bulunur. Burada k , Boltzmann sabitidir.

Şimdi bu çiftler için iç değişkenleri daha açık tanımlamak adına sistemin serbest enerjisini elde edip denge şartlarını uygularsak;

$$\Phi = \frac{\beta F}{N} = \frac{\gamma\beta}{2} \sum_{ij} \varepsilon_{ij} y_{ij} - (\gamma - 1) \sum_i x_i \ln x_i + \frac{\gamma}{2} \sum_{ij} y_{ij} \ln y_{ij} + \beta\lambda \left(1 - \sum_{i,j} y_{ij} \right)$$

örgü noktası başına serbest enerji ifadesini elde ederiz. Burada $\beta = (kT)^{-1}$ dir. Ayrıca, λ normalizasyon şartının sağlanması için kullanılan bir parametre olup, *Lagrange çarpanı* olarak adlandırılır. Sistem dengede olduğunda $\frac{\partial \Phi}{\partial y_{ij}} = 0$ olacaktır. Böylece aşağıdaki tanım takımı elde edilir.

$$e_{ij} = (x_i x_j)^\alpha \exp(-\beta \varepsilon_{ij}), \quad \alpha = \frac{\gamma - 1}{\gamma} \quad (3.2.2.14)$$

$$Z = \sum_{ij} e_{ij} = e_{11} + 2e_{12} + e_{22}. \quad (3.2.2.15)$$

Burada Z bölüşüm fonksiyonudur ve y_{ij}

$$y_{ij} = \frac{e_{ij}}{Z}, \quad (3.2.2.16)$$

ifadesi ile tanımlanır. Çift yaklaşımında *enerji*;

$$\varepsilon_{ij} = -J(s_i s_j) - h(s_i + s_j), \quad (3.2.2.17)$$

ifadesi ile verilir. Burada spin değişkenlerinin aldığı değerler göz önünde bulundurularak bir “*ij*” şekilleniminin enerjisi için şu değerler bulunur.

$$\varepsilon_{11} = -\frac{J}{4} - h = -\left(\frac{J}{4} + h\right), \quad (3.2.2.18)$$

$$\varepsilon_{12} = \varepsilon_{21} = \frac{J}{4}, \quad (3.2.2.19)$$

$$\varepsilon_{22} = -\frac{J}{4} + h. \quad (3.2.2.20)$$

İç enerji;

$$\beta E = \frac{\gamma N}{2} \sum_{ij} \varepsilon_{ij} y_{ij} \quad (3.2.2.21)$$

ifadesi ile tanımlanır. *Serbest enerji* ifadesi ise,

$$F = E - TS \quad (3.2.2.22)$$

bağıntısı ile verilir. Böylece, yukarıda bulunan sonuçları kısaca özetleyecek olursak; nokta yaklaşımı için tanımlanan iç değişkenler kullanılarak e_{ij} ifadeleri elde edilir. Bulunan bu e_{ij} ifadelerinin yardımıyla da bölüşüm fonksiyonu hesaplanır. Bölüşüm fonksiyonu ve e_{ij} ifadeleri kullanılarak çift yaklaşımı için iç değişkenler (yoğunluk matris elemanları) elde edilir. Elde edilen bu iç değişkenler (y_{ij}) kullanılarak mıknatıslanma ve korelasyon parametresi bulunur. Çünkü hem mıknatıslanma hem de korelasyon parametresi çift yaklaşımındaki iç değişkenlerin fonksiyonudur. Mıknatıslanmanın bulunmasıyla da dış alana göre kısmi türevi hesaplanarak manyetik alınganlık elde edilir. Öte yandan yine iç değişkenlerin bilinmesi ile Denk. (3.2.2.21) uyarınca sistemin iç enerjisi bulunabilir. İç enerji hesaplandıktan sonra ise sıcaklığa göre kısmi türevi ile ısı sığası elde edilebilir.

Hem nokta hem de çift yaklaşımına ait yoğunluk matris elemanları (iç değişkenler) bilindiğine göre sistemin entropisini de Denk. (3.2.2.13) ile hesaplanır. Hem entropi hem de iç enerji bilindiğine göre bu iki fonksiyon kullanılarak sistemin serbest enerjisi hesaplanabilir.

Sonuç olarak sisteme ait tüm manyetik ve termodinamik nicelikler elde edilmiş olunur.

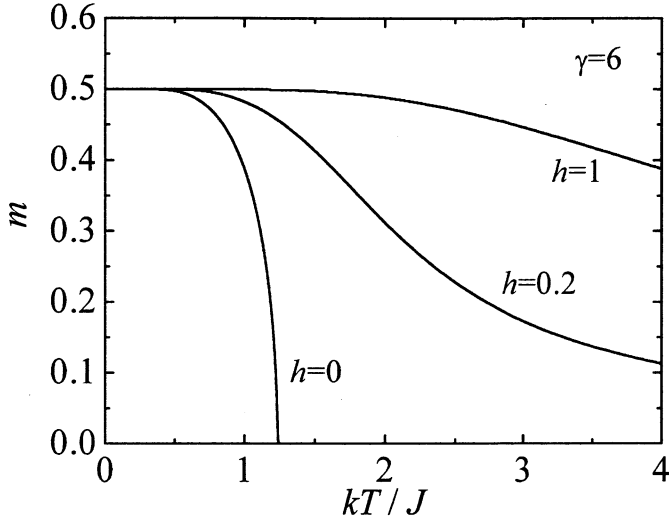
3. 2. 3. Kümesel Değişim Metodunun Çift Yaklaşımının Spin-1/2 Ising Modeline Uygulanması İle Elde Edilen Parametrelerin Termal Değişimleri

Şekil 3.1'de dış manyetik alanın farklı değerlerine karşılık koordinasyon sayısının, $\gamma = 6$ (basit kübik örgü) değeri için mıknatıslanma, sıcaklığın fonksiyonu olarak gösterilmektedir. Dış manyetik alan yokluğunda mıknatıslanma eğrisi ikinci dereceden faz geçişine uğramaktadır. Böylece sistemde biri kritik sıcaklığın üzerinde paramanyetik durumda diğeri de kritik sıcaklığın altında ferromanyetik durumda iki manyetik faz görülmektedir. Dış alanın sıfırdan farklı durumlarında ise mıknatıslanma hiçbir zaman sıfır olmamaktadır. Yani dış alan varlığında faz geçişi gözlenmemektedir. Şekil 3.2 de ise, korelasyon fonksiyonun sıcaklıkla değişimi farklı dış manyetik alanlar ve basit kübik örgü için verilmiştir. Şekil 3.2'den görüldüğü gibi dış alan sıfır olsa bile korelasyon parametresi sıfır olmaz. Fakat dış manyetik alanın yokluğunda korelasyon parametresi sıcaklığın artışı ile hızla azalmakta, belli bir değerde kritik sıcaklıkta keskin bir dönüş sergilemektedir. Artan manyetik alanlar ise korelasyon parametresinin daha yumuşak tarzda azalmasına yol açmaktadır. Diğer taraftan Şekil 3.3, farklı manyetik alanlar için yine basit kübik örgü durumunda iç enerjinin sıcaklıkla değişimini göstermektedir. Sıcaklığın artmasıyla iç enerjide minimum bir değerden başlayarak artar. Sisteme uygulanan dış alan artıkça iç enerjinin minimum değeri azalır.

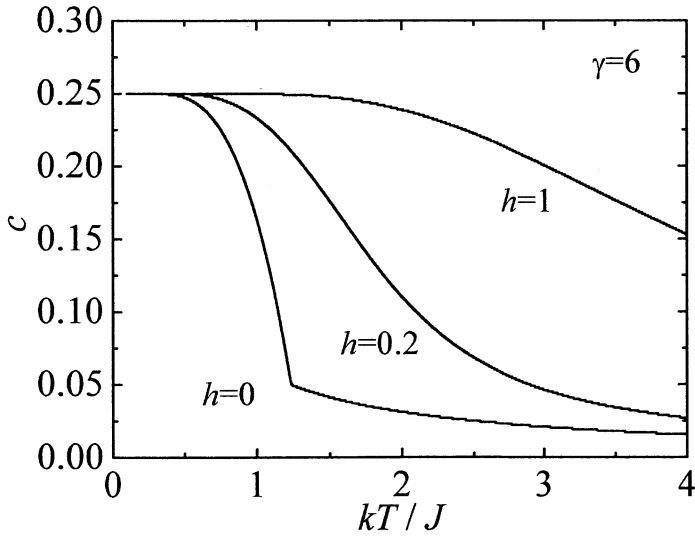
Sistemin manyetik ve termal özelliklerinin incelenmesinde diğer önemli bir parametre entropidir. Şekil 3.4 'de gösterilen grafikte, entropinin sıcaklığa bağılılığı farklı dış alanlar için verilmiştir. Sıcaklığın artmasıyla entropi artar. Ancak belli bir sıcaklık değerinden sonra artışı yavaşlayarak olur. Özellikle dış alanın sıfır olduğu eğriye bakıldığında, belli bir sıcaklık değerine kadar entropi

hızla artmış fakat daha sonra bu artışı ilk duruma göre oldukça yavaşlamıştır. Şekil 3.5 'de sistemin serbest enerjisinin sıcaklığa bağlılığı görülmektedir. Uygulanan dış alan değeri arttıkça serbest enerjinin maksimumu azalmaktadır. Bu değişim koordinasyon sayısının altı olduğu durum için verilmiştir. Bu ise basit kübik örgüye karşılık gelmektedir. Spin-1/2 Ising modelinin denge özelliklerinin incelenmesinde diğer önemli bir büyüklük manyetik alınganlıktır. Manyetik alınganlığın üç farklı dış manyetik alan için sıcaklıkla değişimi Şekil 3.6 'da görülmektedir. Dış alan yokluğunda manyetik alınganlık, faz dönüşümü sıcaklığı yakınlarında asimtotik olarak sonsuza gider bunun sebebi ise faz dönüşümü sıcaklığı civarında spinler arası var olan sonsuz erimli korelasyondur.

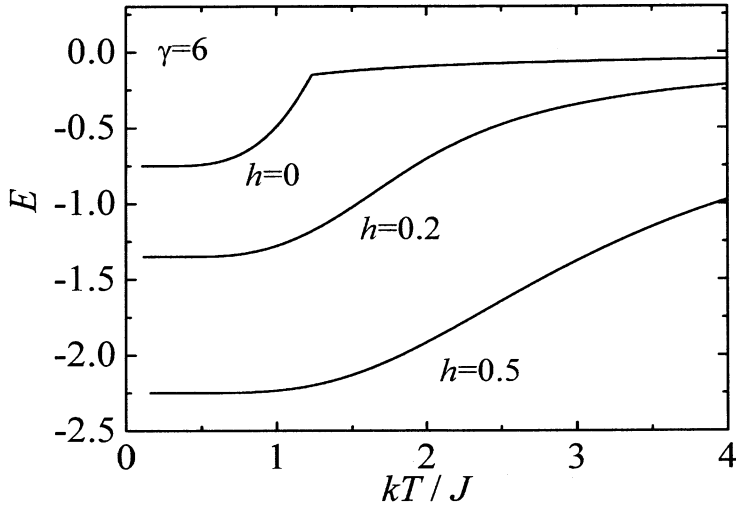
Modelin kritik davranışının örgü koordinasyon sayısının değişimine göre nasıl olacağını incelenmesi önemlidir. Şekil 3.7 'de dış alan yokluğunda farklı örgü tiplerine karşılık gelen koordinasyon sayıları için miktatsızlanmanın dış alana bağlılığı görülmektedir. Şekilden koordinasyon sayısı arttıkça kritik sıcaklığında arttığı anlaşılmaktadır.



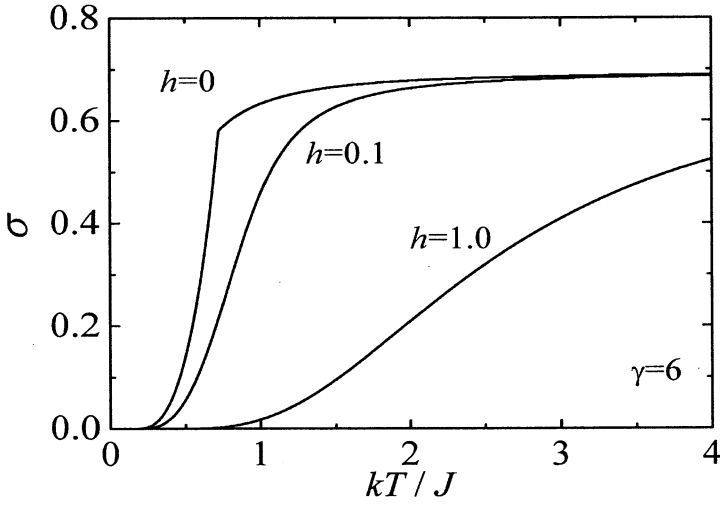
Şekil 3.1 Dış manyetik alanın $h = 0, 0.2$ ve 1 değerleri ve basit kübik örgü için mıknatıslamanın sıcaklıkla değişimi. (Dış manyetik alanın sıfır değeri için ikincidereceden faz dönüşümü oluşmaktadır.)



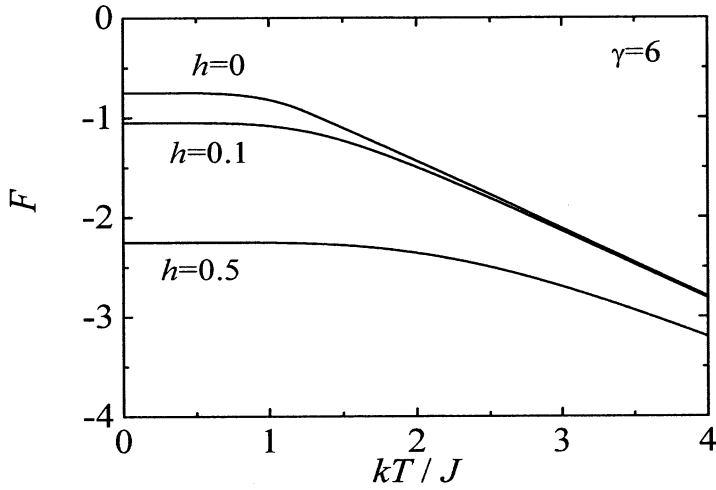
Şekil 3.2 : Dış manyetik alanın $h = 0, 0.2$ ve 1 değerleri ve basit kübik örgü için korelasyon parametresinin sıcaklıkla değişimi



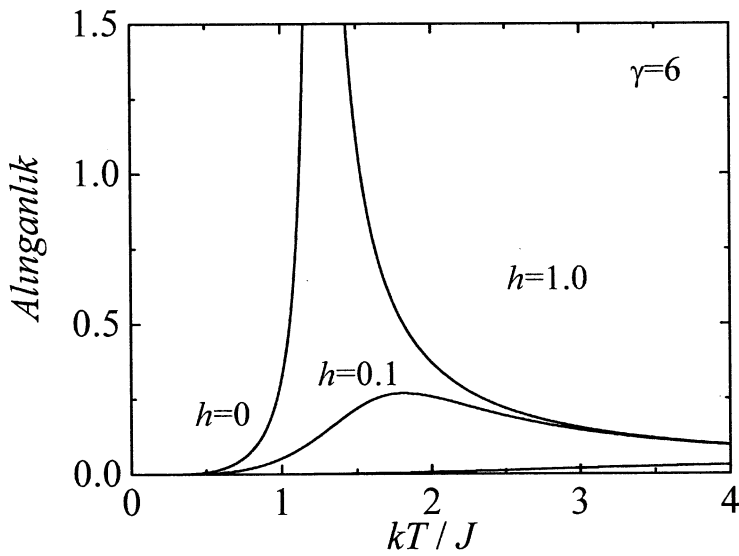
Şekil 3.3 Dış manyetik alanın $h = 0, 0.2$ ve 0.5 değerleri ve basit kübik örgü için iç enerjinin sıcaklık ile değişimi.



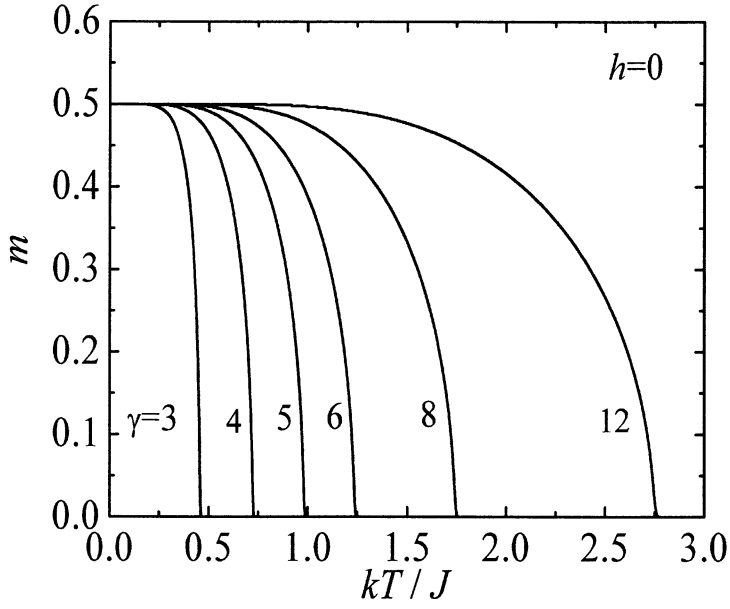
Şekil 3.4 Dış manyetik alanın $h = 0, 0.1$ ve 1 değerleri için entropinin sıcaklıkla değişimi.



Şekil 3.5 Dış manyetik alanın $h = 0, 0.2$ ve 0.5 değerleri için serbest enerjinin sıcaklıkla değişimi



Şekil 3.6 Dış manyetik alanın $h = 0, 0.1$ ve 1 değerleri için manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi.



Şekil 3.7 : Farklı koordinasyon sayıları için mıknatıslanmanın sıcaklıkla değişimi (üç boyutlu uzayda koordinasyon sayısının “6” değeri basit kübik örgüye, “8” değeri cisim merkezli örgüye ve “12” değeri de hegzagonal örgü ve yüzey merkezli kübik örgüye karşılık gelir.)

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

4. 1. Kümesel Değişim Metodunun Nokta Yaklaşımının Spin-1 Blume-Capel Modeline Uygulanması

Bu tezdeki amaçlardan birisi, *çift yaklaşımını* $s > 1/2$ olan bir *Hamiltonyene* dış alan varlığında uygulamaktır. Diğer bir amaç ise söz konusu aynı *Hamiltonyen* için hem *Nokta yaklaşımının* Hem de *Çift yaklaşımın* verdiği sonuçların karşılaştırılması olacaktır. Böylelikle her iki yaklaşım için elde edilen sonuçların hassasiyetleri üzerine tartışmalar yapılabilecektir.

Bu amaçla, bu kısımda Nokta yaklaşımının dış alan varlığında J ve D etkileşmeli *Blume-Capel Hamiltonyenine* uygulanması verilecektir. Modelin *Hamiltonyeni*;

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - D \sum_i s_i^2 - h \sum_i s_i \quad (4.1.1)$$

olarak verilir.

İç değişkenler tanımlanırsa; $\sum_{i=1}^3 x_i = 1$, spin değişkenleri $-1, 0, +1$ olmak üzere üç farklı değer alır. Böylece *mıknatıslanma*;

$$m = \langle s \rangle = \frac{\sum_{i=1}^3 s_i x_i}{\sum_{i=1}^3 x_i} = s_1 x_1 + s_2 x_2 + s_3 x_3, \quad (4.1.2)$$

şeklinde elde edilir. Spin değişkenleri için $s_1 \rightarrow +1, s_2 \rightarrow 0, s_3 \rightarrow -1$ olduğu dikkate alınırsa *mıknatıslanma* için: $m = x_1 - x_3$ elde edilir. Benzer yolla *kuadropol moment* (q) de aşağıdaki gibi bulunur:

$$q = \langle s^2 \rangle = \frac{\sum_{i=1}^3 s_i^2 x_i}{\sum_{i=1}^3 x_i} = (s_1)^2 x_1 + (s_2)^2 x_2 + (s_3)^2 x_3. \quad (4.1.3)$$

Böylece *mıknatıslanma* ve *kuadropol moment* için aşağıdaki ifadeler yazılabilir:

$$\begin{aligned}
m &= x_1 - x_3, \\
q &= x_1 + x_3.
\end{aligned}
\tag{4.1.4}$$

Şimdi yukarıda ifade ile *normalizasyon* koşulu birlikte düşünüldüğünde indirgenmiş yoğunluk matris elemanları yani iç değişkenler düzen parametreleri cinsinden aşağıdaki gibi elde edilir:

$$x_1 = \frac{1}{2}(q + m), \quad x_2 = 1 - q, \quad x_3 = \frac{1}{2}(q - m).
\tag{4.1.5}$$

Sistemin *entropisi*, *Boltzmann entropisi* ile verilir ve *iç değişkenler* cinsinden;

$$S = -kN \sum_{i=1}^3 x_i \ln(x_i)
\tag{4.1.6}$$

ifadesi ile tanımlanır. Burada k , *Boltzmann* sabiti ve N , toplam örgü noktası sayısıdır. *İç enerji Hamiltonyenin* ortalamasıdır. Böylece sistemin spin başına serbest enerjisi şöyle olur:

$$\Phi = -\frac{F}{N} = \frac{J}{2} m^2 + Dq + hm - kT \sum_{i=1}^3 x_i \ln(x_i) + \lambda \left(1 - \sum_{i=1}^3 x_i \right).
\tag{4.1.7}$$

Burada F tüm sisteme ait *serbest enerji*, Φ ise spin başına *serbest enerjidir*. λ *normalizasyonu* sağlamak amacıyla kullanılan bir katsayı olup *Lagrange çarpanı* adı verilir. Sistem dengede ise serbest enerjinin iç değişkenlere göre kısmi türevi sıfır olur böylece;

$$\begin{aligned}
\Phi &= -\frac{F}{N} = \frac{J}{2} (x_1 - x_3)^2 + D(x_1 + x_3) + h(x_1 - x_3) \\
&\quad - kT \sum_{i=1}^3 x_i \ln(x_i) + \lambda \left(1 - \sum_{i=1}^3 x_i \right)
\end{aligned}
\tag{4.1.8}$$

Bu eşitlik ve $\frac{\partial \Phi}{\partial x_i} = 0$ denge şartı kullanılarak denge durumu özellikleri elde edilir.

Türev işleminden sonra şu eşitlik elde edilir.

$$-\frac{\beta}{N} \frac{\partial E}{\partial x_i} - \ln(x_i) - 1 - \lambda = 0 \text{ olur.}$$

Burada $\beta = (kT)^{-1}$ dir. k , Boltzmann sabiti ve T mutlak sıcaklıktır. Bu ifade düzenlenerek iç değişkenler için aşağıdaki ifade bulunur:

$$x_i = e^{-\frac{\beta}{N} \frac{\partial E}{\partial x_i}} e^{-(1+\lambda)} \quad (4.1.9)$$

$e_i = e^{-\frac{\beta}{N} \frac{\partial E}{\partial x_i}}$ tanımı yapılarak ve x_i 'lerin normalizasyon koşulu göz önüne alınarak sistemin Bölüşüm fonksiyonu da aşağıdaki gibi bulunmuş olur:

$$Z = \sum_{i=1}^3 e_i = \exp(1 + \lambda). \quad (4.1.10)$$

Buna göre de iç değişkenler;

$$x_i = \frac{e_i}{Z}, \quad (4.1.11) \text{ şeklinde}$$

verilir. Şimdi yapılması gereken e_i ifadelerinin belirlenmesidir. Yukarıda verilen iç enerji ve e_i 'nin tanımı kullanılarak, e_i ($i=1,2,3$) ifadeleri,

$$\begin{aligned} e_1 &= e^{\beta(Jm+D+h)}, \\ e_2 &= e^0 = 1, \\ e_3 &= e^{-\beta(Jm-D+h)}, \end{aligned} \quad (4.1.12)$$

olarak elde edilir.

Şimdi Denk. (4.1.4) ile verilen mıknatıslanma ifadesi ve yukarıda ki denklemler birlikte kullanılarak mıknatıslanma,

$$m = x_1 - x_3 = \frac{1}{Z} (e_1 - e_3) \quad (4.1.13)$$

şeklinde yazılır. Denk. (4.1.10) 'dan ve Bölüşüm fonksiyonunun tanımından yararlanılarak,

$m = \frac{2e^{\beta D} \sinh(\beta(Jm + h))}{1 + 2e^{\beta D} \cosh(\beta(Jm + h))}$ olarak elde edilir. Burada pay ve payda $e^{-\beta D}$ ile çarpılırsa mıknatıslanma son halini alır:

$$m = \frac{2\sinh(\beta(Jm + h))}{e^{-\beta D} + 2\cosh(\beta(Jm + h))}. \quad (4.1.14)$$

Burada hemen dikkat çeken bir husus şudur ki; eğer sistemden anistropi kaldırılırsa ($D = 0$ ve $e_2 = 0$), yukarıdaki mıknatıslanma ifadesi " $m = \tanh(\beta(Jm + h))$ " halini alır. Bu ise çok iyi bilinen spin 1/2 Ising modeli için Ortalama alan yaklaşımının verdiği mıknatıslanma sonucudur.

Kuadrupol momentini bulmak içinde yine aynı yol izlenirse sonuçta şu denkleme varılır:

$$q = \frac{2\cosh(\beta(Jm + h))}{e^{-\beta D} + 2\cosh(\beta(Jm + h))}. \quad (4.1.15)$$

Manyetik alınganlık, mıknatıslanmanın dış alana göre kısmi türeviyle $\left(\chi = \frac{\partial m}{\partial h}\right)$ belirlenir. Bu işlem yapıldığında alınganlık için aşağıdaki değer bulunur:

$$\chi = \frac{2\beta}{2 + e^{-\beta D} \cosh(\beta(Jm + h)) - 2\beta J}. \quad (4.1.16)$$

Yine diğer termodinamik fonksiyonlar olan iç enerji, entropi ve serbest enerji yukarıda da verildiği gibi iç değişkenlerin fonksiyonudur. İç değişkenler kullanılarak, hem Denk. (4.1.12) ve Denk. (4.1.13) hem de yukarıda değinilen fonksiyonlar nümerik analizdeki kök bulma yöntemlerinden (İterasyon metodu, Newton-Raphson yöntemi, İnversiyal yarılama metodu, vs.) biri kullanılarak çözümler ve her birine ait sıcaklıkla değişim grafikleri elde edilebilir.

4. 2 Kümesel Değişim Metodunun Çift Yaklaşımının Spin-1 Blume Capel Modeline Uygulanması

Sistemin Hamiltonyeni bir önceki bölümde de verildiği şekliyle şöyledir:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - D \sum_i s_i^2 - h \sum_i s_i. \quad (4.2.1)$$

Nokta yaklaşımı için iç değişkenler x_1, x_2, x_3 olarak tanımlanır. Bu ifadeler normalizasyon şartına uymaktadırlar. Yani:

$$\sum_{i=1}^3 x_i = 1. \quad (4.2.2)$$

Düzen parametreleri olan mıknatıslanma ve kuadrupol moment iç değişkenler cinsinden bir önceki bölümde Denk. (4.1.5) olarak bulunmuştur. Bu ifade ve normalizasyon şartı kullanılarak, düzen parametreleri cinsinden iç değişkenler şu şekilde bulunur:

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{1}{2}(q + m), \\ x_2 &= 1 - q, \\ x_3 &= \frac{1}{2}(q - m). \end{aligned} \quad (4.2.3)$$

Çift yaklaşımında ise bir "ij" şekillenimine karşılık gelen yoğunluk matris elemanları y_{ij} ile gösterilsinler. Burada $i, j=1,2,3$ değerlerini alır. Böylece dokuz tane yoğunluk matris elemanı yazılır. Fakat simetriden dolayı "ij" şekillenimi ile "ji" şekillenimi özdeş olur. Bu nedenle de $y_{ij} = y_{ji}$ yazılır. Böylece dokuz olan yoğunluk matris elemanlarının sayısı altıya indirgenir. Bu yoğunluk matris elemanları normalizasyon koşuluna uyacağından, $\sum_{i,j=1}^3 y_{ij} = 1$, normalizasyon şartı yazılır. Yani tüm olasılıkların toplamı bire eşit olmalıdır.

Şimdi çift yaklaşımı kullanılarak mıknatıslanma için termal ortalama hesaplanabilir. Yani:

$$m = \langle s \rangle = \frac{\sum_{i,j=1}^3 y_{ij}(s_i)}{\sum_{i,j=1}^3 y_{ij}}. \quad (4.2.4)$$

Burada $s_1 \rightarrow +1$, $s_2 \rightarrow 0$, $s_3 \rightarrow -1$ değerleriyle birlikte yukarıdaki paydanın normalizasyon koşulu olduğu dikkate alınarak miktatsızlanma için,

$$m = y_{11} + y_{12} - y_{23} - y_{33} \quad (4.2.5)$$

ifadesi elde edilir. Korelasyon parametresi ise;

$$c = \langle ss \rangle = \frac{\sum_{i,j=1}^3 y_{ij}(s_i s_j)}{\sum_{i,j=1}^3 y_{ij}}, \quad (4.2.6)$$

ifadesini baz alarak,

$$c = y_{11} + y_{33} - 2y_{13}, \quad (4.2.7)$$

şeklinde elde edilir.

Kuadrupol momenti için benzer hesaplamalar kullanılarak;

$$q = \langle s^2 \rangle = \frac{\sum_{i,j=1}^3 y_{ij}(s_i^2)}{\sum_{i,j=1}^3 y_{ij}}, \quad (4.2.8)$$

$$q = y_{11} + y_{12} + 2y_{13} + y_{23} + y_{33} \quad (4.2.9)$$

bağıntısı elde edilir.

Bir diğer termal değişken $\langle ss^2 \rangle$ ise şu şekilde bulunur:

$$\langle ss^2 \rangle = \frac{\sum_{i,j=1}^3 y_{ij} (s_i s_j^2)}{\sum_{i,j=1}^3 y_{ij}}, \quad (4.2.10)$$

$$\langle ss^2 \rangle = y_{11} - y_{33}. \quad (4.2.11)$$

Son olarak $\langle s^2 s^2 \rangle$ ise yukarıdakilere benzer olarak aşağıdaki gibi verilir:

$$\langle s^2 s^2 \rangle = \frac{\sum_{i,j=1}^3 y_{ij} (s_i^2 s_j^2)}{\sum_{i,j=1}^3 y_{ij}}, \quad (4.2.12)$$

$$\langle s^2 s^2 \rangle = y_{11} + 2y_{13} + y_{33}. \quad (4.2.13)$$

Çift yaklaşımı için bir "ij" şekilleniminin enerjisi:

$$\varepsilon_{ij} = -J(s_i s_j) - D(s_i^2 + s_j^2) - h(s_i + s_j) \quad (4.2.14)$$

ifadesi ile tanımlanır.

Bu ifade ve spin değişkenlerinin değeri kullanılırsa enerji öz değerleri için şu ifadeler bulunur:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{11} &= -J - 2D - 2h, \\ \varepsilon_{12} = \varepsilon_{21} &= -J - D - h, \\ \varepsilon_{13} = \varepsilon_{31} &= J - 2D, \\ \varepsilon_{22} &= 0, \\ \varepsilon_{23} = \varepsilon_{32} &= -D + h, \\ \varepsilon_{33} &= -J - 2D + 2h, \end{aligned} \quad (4.2.15)$$

Sistemin bölüşüm fonksiyonu aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$Z = \sum_{i,j=1}^3 e_{ij} = e_{11} + e_{22} + e_{33} + 2(e_{12} + e_{13} + e_{23})$$

$$e_{ij} = (x_i x_j)^\alpha e^{-\beta \varepsilon_{ij}}. \quad (4.2.16)$$

Burada γ koordinasyon sayısı olmak üzere $\alpha = \frac{\gamma-1}{\gamma}$ şeklinde tanımlanır.

$\beta = (kT)^{-1}$ tanımı ile verilir. Burada k , Boltzmann sabiti ve T ise mutlak sıcaklıktır. Çift yaklaşımı için yoğunluk matris elemanları ise şu şekilde tanımlanır:

$$y_{ij} = \frac{e_{ij}}{Z} = \frac{(x_i x_j)^\alpha e^{-\beta \varepsilon_{ij}}}{Z}. \quad (4.2.17)$$

Şimdi “ e_{ij} ” değerleri, Denk. (4.2.8) kullanılarak açıkça bulunabilir. Buna göre:

$$\begin{aligned} e_{11} &= (x_1 x_1)^\alpha e^{\beta(J+2D+2h)} \\ e_{12} = e_{21} &= (x_1 x_2)^\alpha e^{\beta(J+D+h)} \\ e_{13} = e_{31} &= (x_1 x_3)^\alpha e^{-\beta(J-2D)} \\ e_{22} &= (x_2 x_2)^\alpha \\ e_{23} = e_{32} &= (x_2 x_3)^\alpha e^{-\beta(D-h)} \\ e_{33} &= (x_3 x_3)^\alpha e^{-\beta(2h-2D-J)} \end{aligned} \quad (4.2.18)$$

ifadeleri elde edilir. Yukarıda ki değerler ile yoğunluk matris elemanları da açıkça belirlenebilir. Böylelikle manyetik parametreleri veren denklemler nümerik olarak çözümlenerek, bu ifadelerin sıcaklık ile değişimleri elde edilmiş olur.

Sistemin iç enerjisi Hamiltonyenin ortalaması olarak verilir. Buna göre:

$$E = \langle H \rangle = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \langle s_i s_j \rangle - D \sum_i \langle s_i^2 \rangle - h \sum_i \langle s_i \rangle,$$

$$E = -\frac{N\gamma Jc}{2} - NDq - Nhm. \quad (4.2.19)$$

Spin başına iç enerji, “ $\varepsilon = \frac{E}{N}$ ” oranı ile tanımlandığından, spin başına iç enerji;

$$\varepsilon = -\frac{\gamma Jc}{2} - Dq - hm, \quad (4.2.20)$$

bağıntısı ile verilir. Burada m , q ve c bilindiğinden iç enerjide hesaplanmış olur. Ayrıca ortalama değer tanımı kullanılarak:

$$\varepsilon = \frac{E}{N} = \frac{\gamma}{2} \sum_{i,j=1}^3 y_{ij} \varepsilon_{ij}. \quad (4.2.21)$$

denklemleri ile iç enerji belirlenebilir. Sistemin entropisi için ise çift yaklaşımı için bulunan entropi ifadesi (Denk. (3.2.2.6)) kullanılır. Buna göre entropi:

$$\begin{aligned} \sigma = \frac{S}{N} &= k \left[(\gamma - 1) \sum_{i=1}^3 x_i \ln x_i - \frac{\gamma}{2} \sum_{i,j=1}^3 y_{ij} \ln y_{ij} \right], \\ \sigma &= k \{ (\gamma - 1) \cdot [x_1 \ln x_1 + x_2 \ln x_2 + x_3 \ln x_3] \\ &- \frac{\gamma}{2} [[y_{11} \ln y_{11} + y_{22} \ln y_{22} + y_{33} \ln y_{33}] \\ &+ 2[y_{12} \ln y_{12} + y_{13} \ln y_{13} + y_{23} \ln y_{23}]] \} \end{aligned} \quad (4.2.22)$$

İncelenen spin-1 BC modelinin serbest enerjisi ise denklem (4.2.21) ve (4.2.22) 'nin kullanılması ile aşağıdaki gibi elde edilir.

$$f = \frac{F}{N} = \varepsilon - T\sigma. \quad (4.2.23)$$

Yani yoğunluk matris elemanları kullanılarak verilen spin başına entropi ve spin başına iç enerji fonksiyonlarıyla tek bir örgü noktası için serbest enerji elde edilmiş olunur. Bu serbest enerji ifadesi sistemin diğer termodinamik büyüklüklerinin bulunması için kullanılabilir.

4.3 Kümesel Değişim Metodunun Çift Yaklaşımının Spin-1 Blume-Capel Modeline Uygulanması ile Elde Edilen Parametrelerin Termal Değişimleri

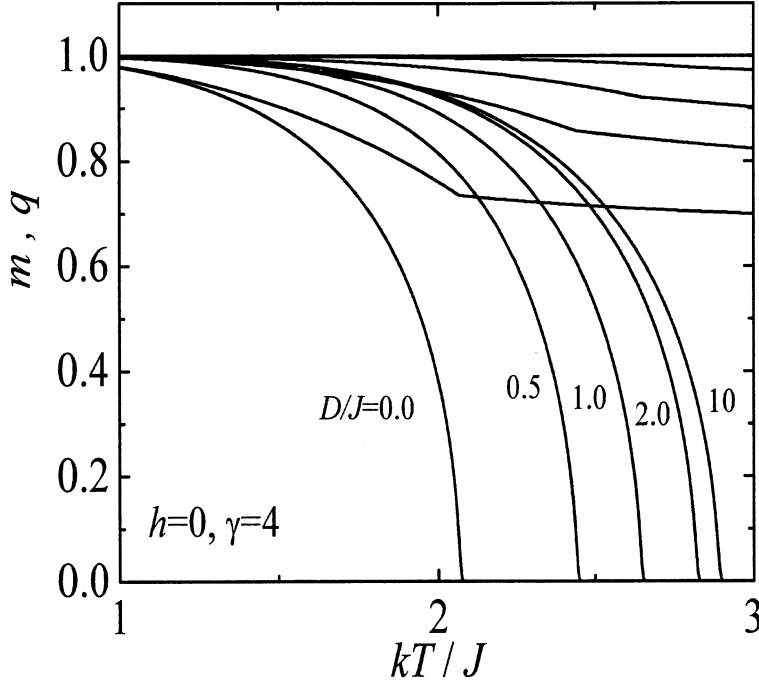
Şekil 4.1 de mıknatıslanma ve kuadrupol momentin sıcaklıkla değişimleri, kare örgü için ($\gamma = 4$) dış manyetik alan yokluğunda gösterilmiştir. Mıknatıslanma eğrileri kritik sıcaklıklarda sıfır olurken kuadrupol moment sıfır olmaz. Ayrıca çiftlenim sabitinin değeri arttıkça kritik sıcaklık değerinin de arttığı şekilden görülmektedir. Verilen tüm pozitif anizotropiler için sistem ikinci dereceden yani sürekli faz dönüşümüne uğramaktadır. Artan anizotropiler ise faz dönüşüm sıcaklığını artırmaktadır. Diğer taraftan azalan anizotropilerin modelin kritik davranışı üzerine etkisini incelemek önemlidir. Şekil 4.2 de mıknatıslanma ve kuadrupol momentinin dış alan yoklunda bu kez çiftlenim sabiti negatif değerler aldığıında değişimi gösterilmektedir. D/J oranı negatif olarak azaldıkça kuadrupol momentinin değeri de azalır. Yine şekilden açıkça görüldüğü gibi model, herhangi bir faz dönüşümüne sahip değildir. Sıcaklığın artışı ile mıknatıslanma daima sıfır olmakta, kuadrupolar momentte yavaş bir tarzda artmaktadır.

Modelin özelliklerinin incelenmesinde diğer bir nicelik ise korelasyon parametresidir. Şekil 4.3 de korelasyon parametresinin $h = 0$ olduğunda farklı D/J oranları için değişimi verilmiştir. Korelasyon parametresi de tıpkı kuadrupol momenti gibi dış alan yokluğunda sıfır değerini almaz. Fakat fonksiyon bir sıcaklık değerinden sonra azalma karakterinde değişim gösterir. Bu değişimin görüldüğü sıcaklık çiftlenim sabitinin artmasıyla artar. Yine şekil 4.3 den farklı D/J oranına karşılık gelen korelasyon fonksiyonlarının düşük sıcaklıklarda birbirlerine yaklaşık eşit olduğu görülür.

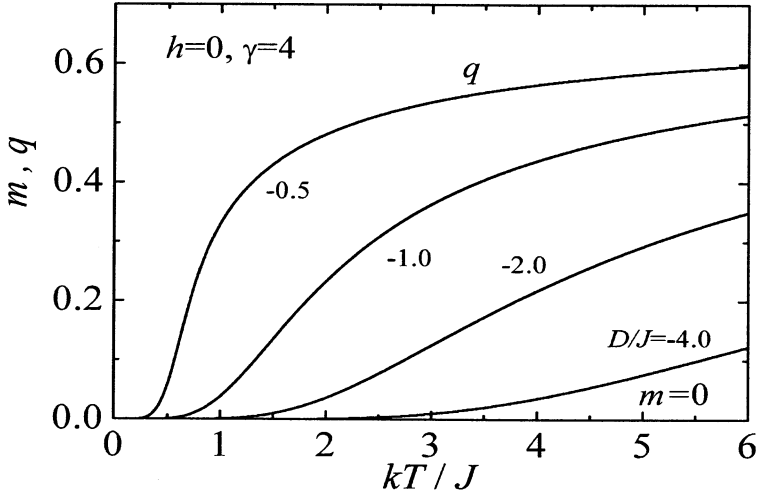
Şekil 4.4 iç enerjinin sıcaklıkla değişimini sıfır dış alan ve farklı çiftlenme sabitleri için gösterir. Sıcaklıkla birlikte iç enerji minimum değerinden başlayarak artar. D/J oranı büyüdükçe iç enerjinin minimum değerinin azaldığı şekilden görülür.

Şekil 4.5 $h = 0$ için değişik çiftlenim sabiti değerleri için sıcaklığın fonksiyonu olarak entropiyi göstermektedir. Entropi belli bir sıcaklık değerine kadar hızla artarken daha sonra artışı ilk duruma göre oldukça azalır. Bu karakteristik davranış farklı D/J oranları içinde gözlemlenir. Sıcaklığın artmasıyla sistemde düzen kaybolmaya başlar. Yüksek sıcaklık değerleri için sistem düzensiz halde (fazda)

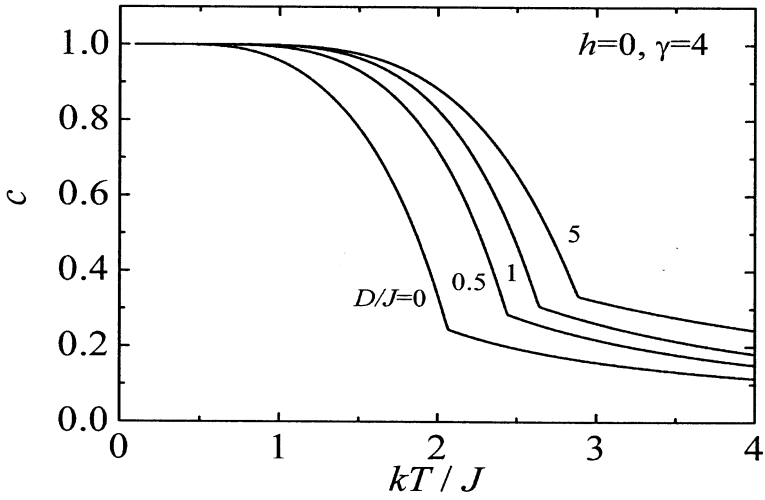
olacağından bu noktadan sonra entropide meydana gelen değişimler azalacaktır. Yine şekil 4.5 den D/J arttıkça entropinin küçülme eğiliminde olduğu görülür.



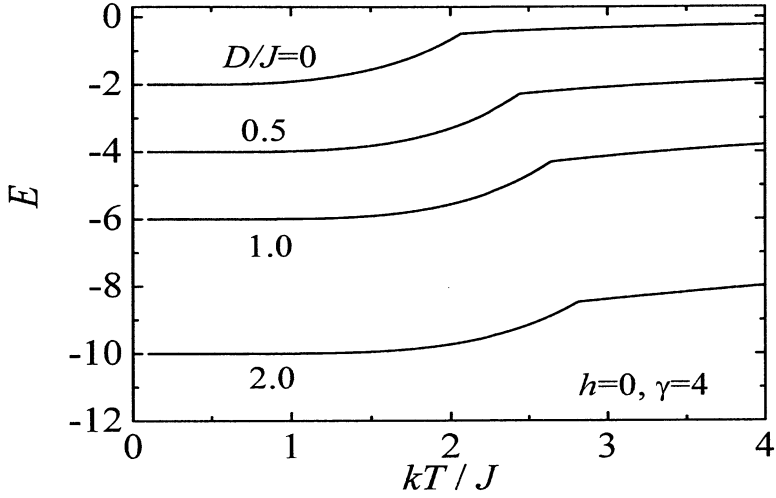
Şekil 4.1 : Koordinasyon sayı 4 olduğunda ($\gamma = 4$) sıfır dış manyetik alanda tek-iyon anizotropisinin farklı pozitif değerleri için mıknatıslanma ve kuadropol momentinin sıcaklıkla olan değişimi



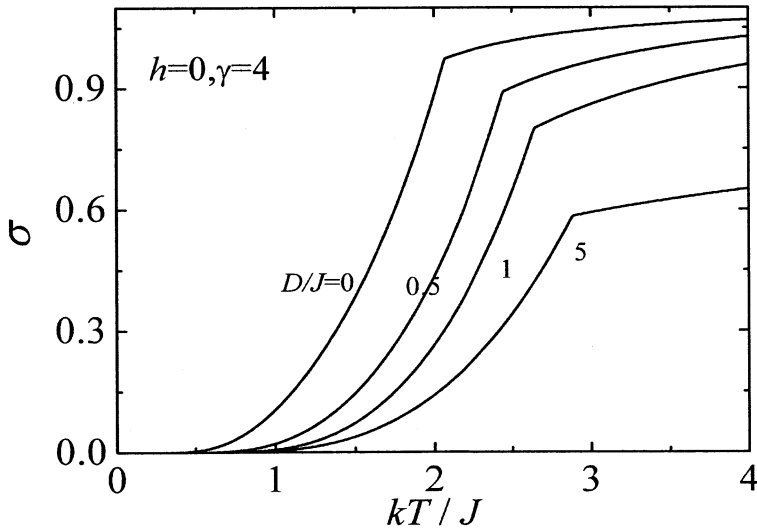
Şekil 4.2 : Koordinasyon sayısı 4 olduğunda ($\gamma = 4$) sıfır dış manyetik alanda tek-iyon anizotropi teriminin farklı negatif değerleri için mıknatıslanma ve kuadrupol momentinin sıcaklıkla olan değişimi



Şekil 4.3 : Koordinasyon sayısı 4 olduğunda ($\gamma = 4$) sıfır dış manyetik alanda tek-iyon anizotropi teriminin farklı pozitif değerleri için korelasyon parametresinin sıcaklıkla olan değişimi

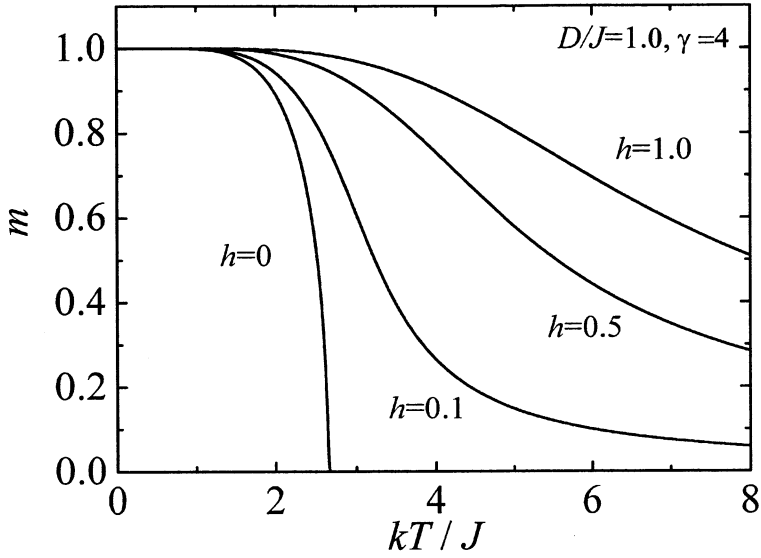


Şekil 4.4 : Koordinasyon sayısı 4 olduğunda ($\gamma = 4$) sıfır dış manyetik alanda tek-iyon anizotropi teriminin farklı pozitif değerleri için iç enerjinin sıcaklıkla olan değişim

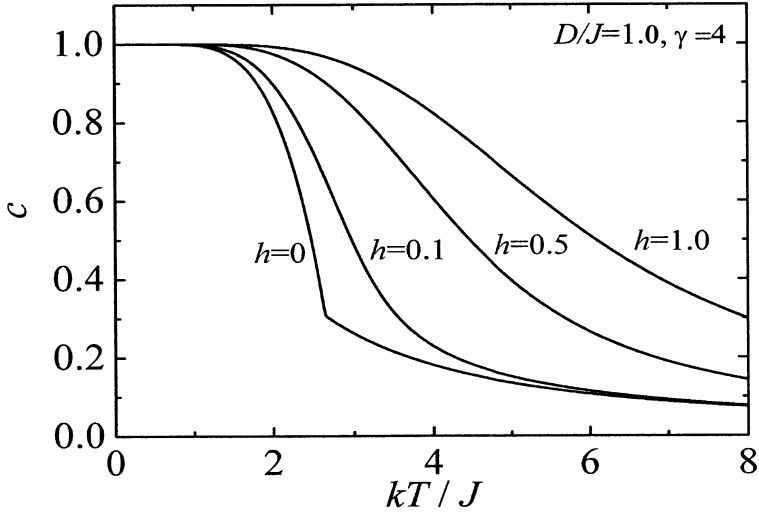


Şekil 4.5 : Koordinasyon sayısı 4 olduğunda ($\gamma = 4$) sıfır dış manyetik alanda tek-iyon anizotropi teriminin farklı pozitif değerleri için entropinin sıcaklıkla olan değişim

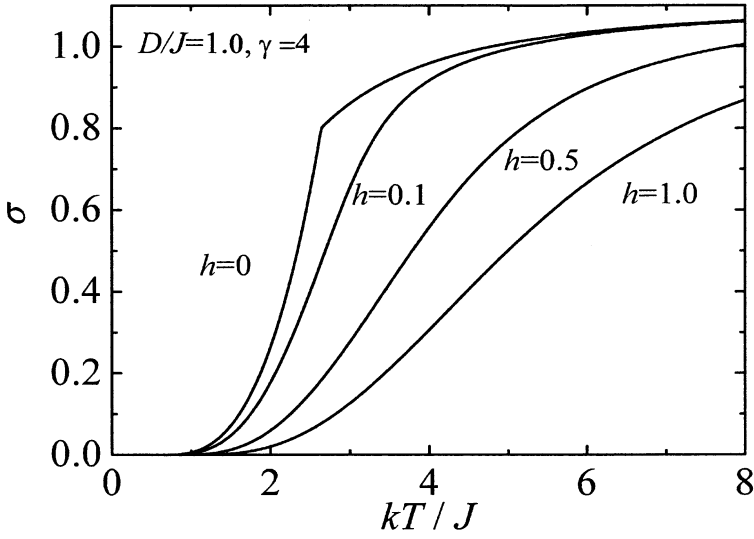
Dış manyetik alanın modelin manyetik özellikleri üzerine etkisi büyüktür. Şekil 4.6, $D/J = 1$ için mıknatıslanmanın sıcaklıkla değişimini farklı dış alan değerleri için göstermektedir. Dış alanın sıfır olduğu durumda sistemde faz dönüşümü olduğu grafikten görülmektedir. Öte yandan dış alanın sıfırdan farklı değerleri için mıknatıslanma sıfır olmamakta yani faz dönüşümü oluşmamaktadır. $h = 0$ olduğu durumda mıknatıslanmanın sıfır olduğu sıcaklık değeri D ve J etkileşmeli spin-1 Ising modelinin çift yaklaşımıyla bulunan kritik sıcaklık değeridir. Diğer taraftan, Şekil 4.7 korelasyon teriminin farklı dış manyetik alanlar için sıcaklıkla değişimini gösterir. Dış alan olmadığı durumda fonksiyonun belli bir sıcaklıkta keskin bir davranış farklılığı gösterdiği şekilden görülmektedir. Sıfırdan farklı dış alanlar için bu keskin geçişin yok olduğu grafikten anlaşılır. Diğer taraftan dış alan ister sıfır olsun ister sıfırdan farklı korelasyon fonksiyonu sıfır olmaz. Grafikten, ancak sıcaklığın sonsuz limiti için korelasyon fonksiyonunun sıfıra gideceği görülmektedir. Entropinin sıcaklıkla değişimini veren şekil 4.8 de ise entropi için ön görülen davranışın sergilendiği anlaşılmaktadır. Yine entropi belli bir sıcaklık değerine kadar hızla artar. Fakat o değerden sonra sıcaklıkla yavaşça artar. Yine dış manyetik alanın sıfır olduğu durumda entropi fonksiyonunda görülen keskin geçiş diğer dış alan değerleri için görülmez. Şekil 4.9 da iç enerjinin sıcaklıkla değişimi, sıcaklık arttıkça önce hızla iç enerji artacak şekildedir. Fakat yüksek sıcaklıklarda bu artış hızının yavaşladığı grafikten görülür. Serbest enerjinin maksimum değerinin ise dış alan arttıkça azaldığı görülmektedir. Yüksek sıcaklıklarda serbest enerji negatif olarak artma eğilimindedir.



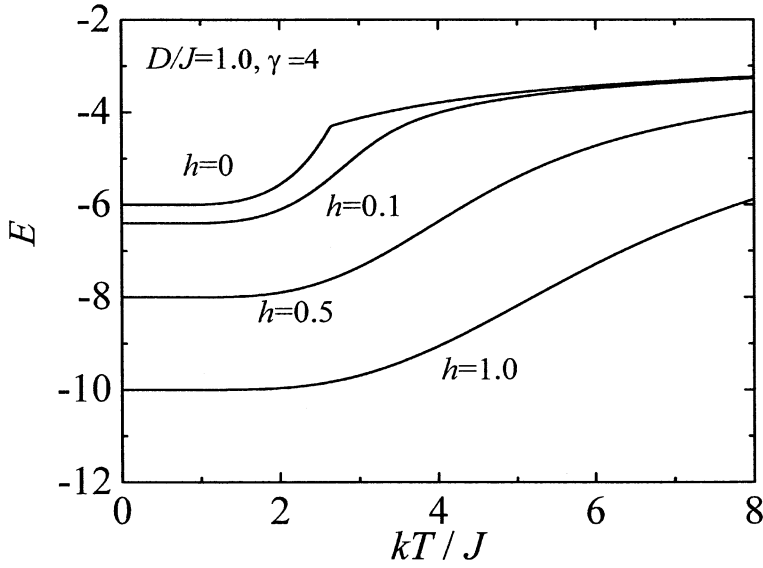
Şekil 4.6 : $\gamma = 4$ (koordinasyonu sayısının dört olması, iki boyutta kare örgüyü temsil eder) ve $(D/J)=1$ değerleri için farklı dış manyetik alanlarda mıknatıslanmanın sıcaklıkla değişimi



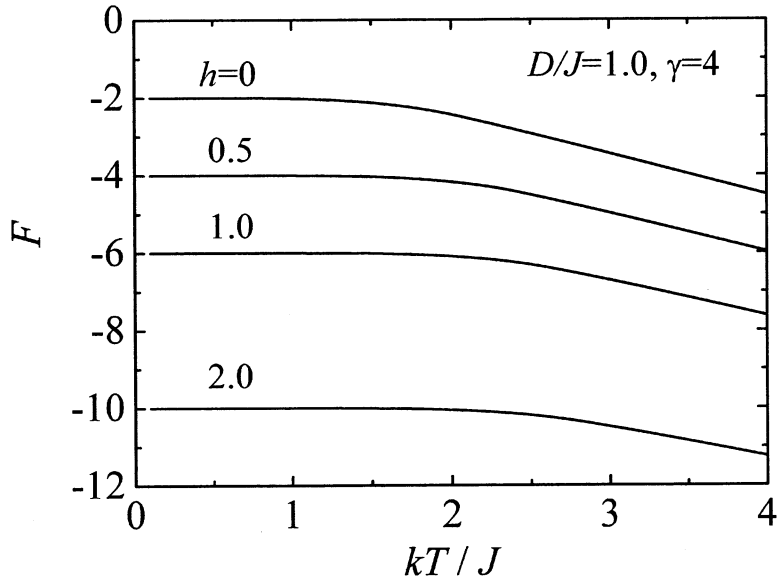
Şekil 4.7 : $\gamma = 4$ ve $(D/J)=1$ değerleri için farklı dış manyetik alanlarda korelasyon parametresinin sıcaklıkla değişimi



Şekil 4.8 : $\gamma = 4$ ve $(D/J)=1$ değerleri için farklı dış manyetik alanlarda entropinin sıcaklıkla değişimi

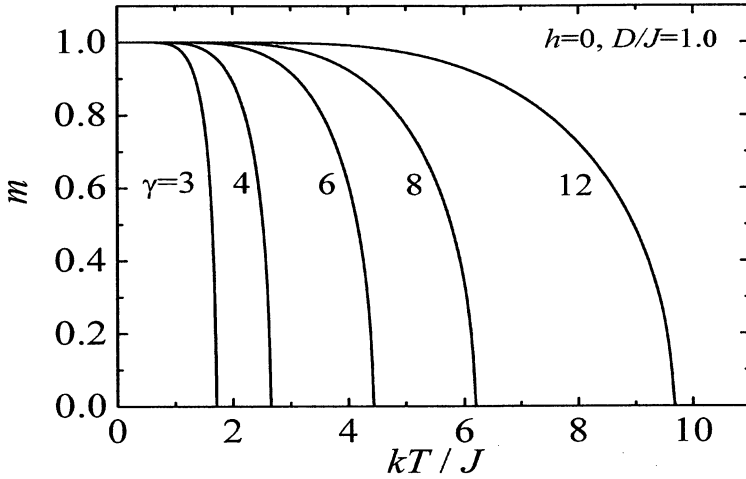


Şekil 4.9 : $\gamma = 4$ ve $(D/J)=1$ değerleri için farklı dış manyetik alanlarda iç enerjinin sıcaklıkla değişimi.

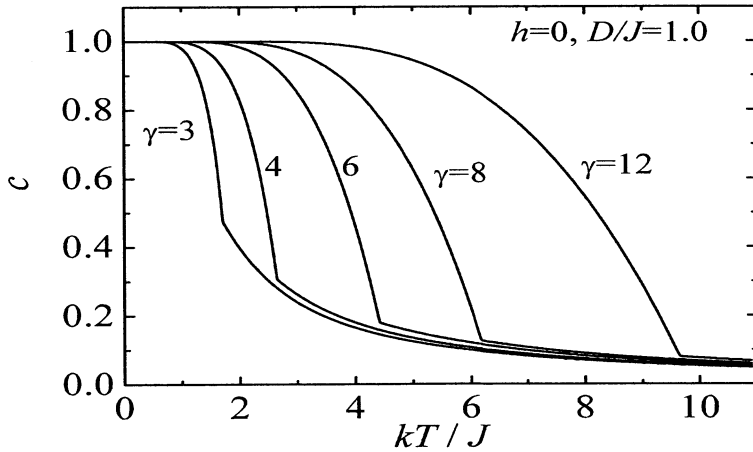


Şekil 4.10 : $\gamma = 4$ ve $(D/J) = 1$ değerleri için farklı dış manyetik alanlarda serbest enerjinin sıcaklıkla değişimi.

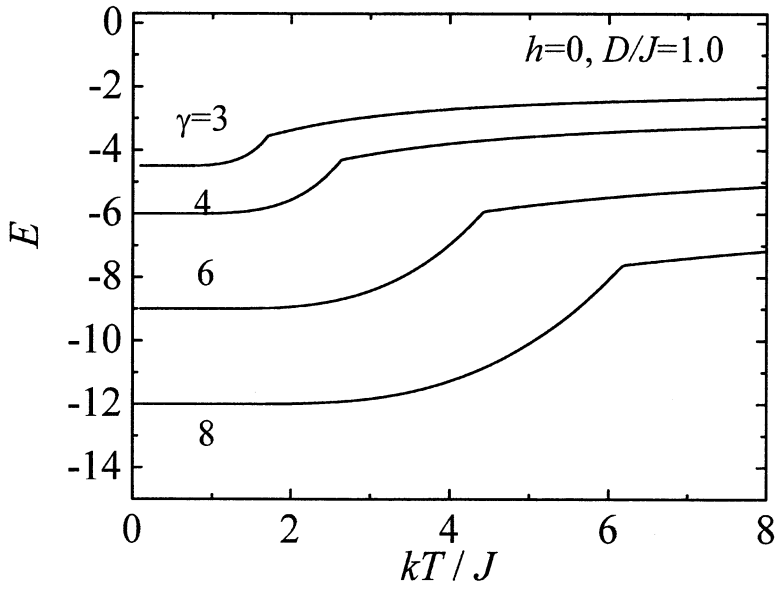
Şekil 4.11 ile şekil 4.16 arasında gösterilen grafikler $D/J = 1$ ve $h = 0$ değerleri için elde edilen fiziksel niceliklerin farklı koordinasyon sayıları için sıcaklıkla değişimini göstermektedir. Şekil 4.11 de mıknatıslanmanın $\gamma = 3, 4, 6, 8, 12$ değerleri için sıcaklıkla değişimini verir. Her bir mıknatıslanma değeri ikinci dereceden faz dönüşümü geçirir. Faz geçiş sıcaklığının, koordinasyon sayısının artmasıyla arttığı şekilden görülmektedir. Korelasyon fonksiyonunun ise belli bir sıcaklığa kadar hızla azalan, bu sıcaklık değerinden sonra ise sıcaklığın artmasıyla yavaşça azaldığı şekil 4.12 den görülebilir. Yine şekilden, yüksek sıcaklık limiti durumunda farklı koordinasyon sayılarına karşılık gelen korelasyon terimlerinin birbirine yaklaştığı söylenebilir. Öte taraftan düşük sıcaklık değerlerinde de farklı koordinasyonlar için korelasyon teriminin aynı doyum değerine eşit olduğu görülür. Şekil 4.13 den de anlaşılacağı gibi iç enerji belli bir sıcaklık değerinde keskin bir davranış farklılığı gösterir. Koordinasyon sayısının artmasıyla iç enerjinin minimum değeri azalır. Şekil 4.14 dış alan yokluğunda entropinin değişimini göstermektedir. Yine daha önce de değinildiği gibi belli bir sıcaklık değerine kadar entropi hızla artarken, bu değerden sonra artışındaki hız yavaşlar. Yüksek sıcaklıklarda ise sıcaklıkla çok yavaş değişir. Koordinasyon sayısı büyüdükçe entropi fonksiyonunun davranış değiştirdiği sıcaklık değerinde büyüdüğü şekilden görülebilmektedir. Şekil 4.15 deki serbest enerjinin değişimi ise daha önce bahsedildiği gibi, sıcaklığın artmasıyla birlikte azalmaktadır. Koordinasyon sayısı arttıkça serbest enerjinin maksimum değeri azalır. Son şekil olan şekil 4.16 da ise hem çift yaklaşımı hem de nokta yaklaşımı için bulunan mıknatıslanma değerlerini gösterir. Şekilde anlaşılacağı gibi her iki yaklaşımın verdiği kritik sıcaklık değerleri farklıdır.



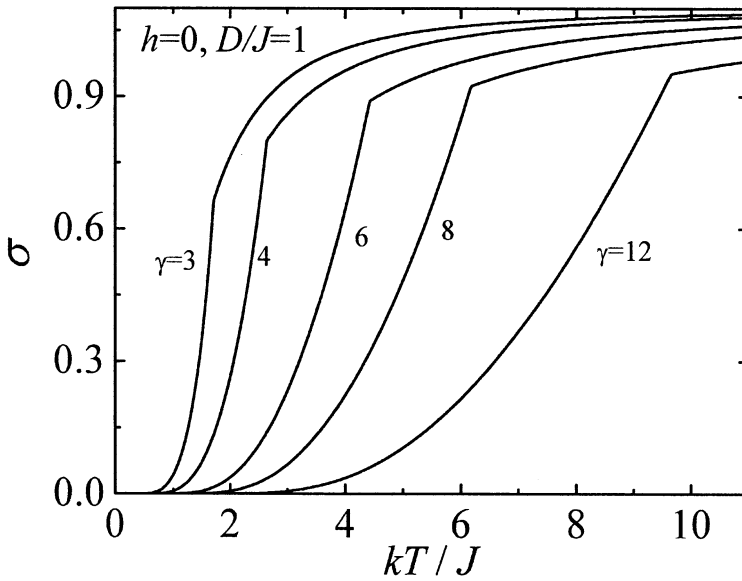
Şekil 4.11 : $(D/J)=1$ ve dış manyetik alanın sıfır olduğu durumda farklı koordinasyon sayıları için mıknatıslanmanın sıcaklıkla değişimi (üç boyutlu uzayda koordinasyon sayısının “6” değeri Basit kübik örgüye, “8” değeri cisim merkezli örgüye, “12” değeri de Hegzagonal örgü ve Yüzey merkezli kübik örgüye karşılık gelir.)



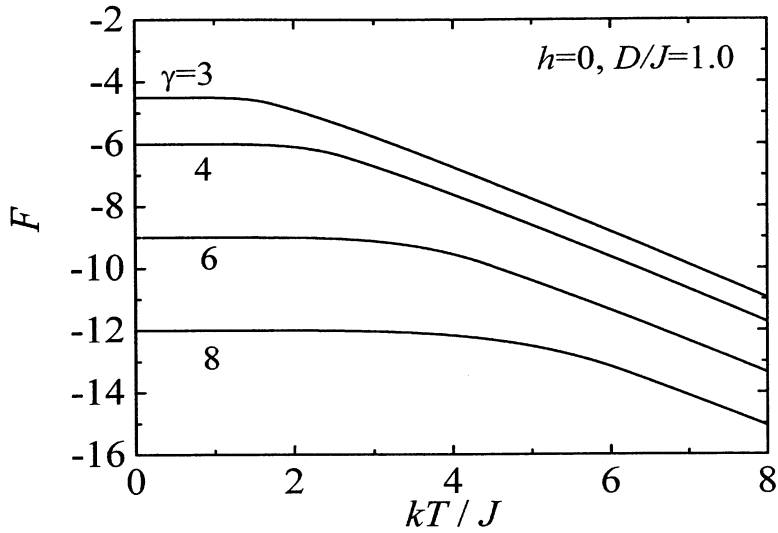
Şekil 4.12 : $(D/J)=1$ ve dış manyetik alanın sıfır olduğu durumda farklı koordinasyon sayıları için korelasyon parametresinin sıcaklıkla değişimi



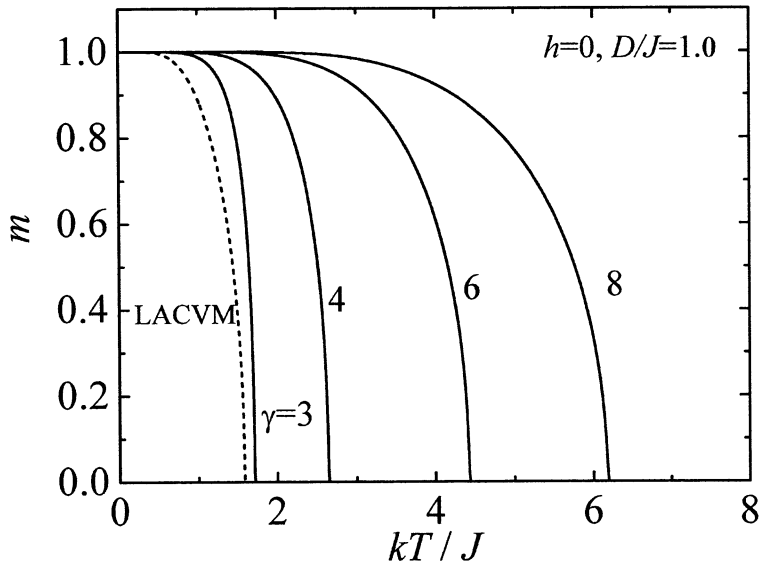
Şekil 4.13 : $(D/J)=1$ ve dış manyetik alanın sıfır olduğu durumda farklı koordinasyon sayıları için iç enerjinin sıcaklıkla değişimi



Şekil 4.14 : $(D/J)=1$ ve dış manyetik alanın sıfır olduğu durumda farklı koordinasyon sayıları için entropinin sıcaklıkla değişimi



Şekil 4.15 : $(D/J)=1$ ve dış manyetik alanın sıfır olduğu durumda farklı koordinasyon sayıları için serbest enerjinin sıcaklıkla değişimi



Şekil 4.16 : Sıfır dış alanda çifflenim sabitinin bir olduğu durumda kümesel deęişim metodunun nokta yaklaşımı ile elde edilen mıknatıslanma ile çift yaklaşımı ile elde edilen mıknatıslanmaların sıcaklıkla deęişimi. (Kesikli çizgi nokta yaklaşımı yada en düşük dereceli kümesel deęişim metodu için bulunan mıknatıslanama eğrisidir.)

5. SONUÇ

Bu tez çalışmasında, kümesel değişim metodunun çift yaklaşımı kullanılarak Ising modelinin termodinamik özellikleri incelendi. Kümesel değişim metodu 1957 yılında Kikuchi tarafından tanımlanmış ve Kikuchi ve çalışma arkadaşları tarafından geliştirilmiştir (Kikuchi, 1951, 1952, 1967, 1977). Kümesel değişim metodunun çift yaklaşımı önce spin-1/2 Ising modeline dış alan varlığında uygulanarak termodinamik özellikler ve düzen parametrelerinin sıcaklığa bağlı fonksiyonları elde edildi. Bulunan bu öz bağıllık denklem sistemi nümerik olarak çözüldü. Dış alan yokluğunda mıknatıslanmanın sürekli faz dönüşümüne uğradığı görüldü. Çift yaklaşımı ile bulunan mıknatıslanmaya ait ikinci dereceden faz geçiş sıcaklığının hem kümesel değişim metodunun nokta yaklaşımına karşılık gelen ortalama alan yaklaşımıyla bulunan değerden hem de etkin alan teorisi ile bulunan değerden daha hassas olduğu görüldü. Öte yandan spin-1/2 Ising sistemi ortalama alan yaklaşımı ile incelenirken, sadece tek düzen parametresi (m) tanımlanıyordu. Bu çalışmada ise mıknatıslanmaya (m) ek olarak birde korelasyon terimi (c) düzen parametresi olarak tanımlanmıştır.

Dördüncü bölümde ise J ve D etkileşmeli spin-1 Ising Hamiltonyeni, ki Blume Capel modeli olarak da bilinir, dış alan varlığında çift yaklaşımı ile kapsamlıca incelendi. Bu tezde çoğunluklu olarak çiftlenim sabitinin sıfırdan büyük olduğu durumlar göz önüne alınmıştır. Öte yandan çift yaklaşımı ile nokta yaklaşımı arasındaki farkı ortaya koyabilmek adına, bu bölümde yukarıda sözü edilen spin-1 Ising modelinin nokta yaklaşımı ile çözümleri yapıldı. Nokta yaklaşımında mıknatıslanma ve kuadrupol momenti için ifadeler açıkça elde edildi. (Denk. (4.1.14) ve Denk. (4.1.15)) iç enerji, entropi ve serbest enerji iç değişkenler cinsinden tanımlanan yoğunluk matris elemanlarının kullanılmasıyla kolaylıkla elde edilebilir. Daha sonra aynı *Hamiltonyene* çift yaklaşımı uygulandı.

Bir “ ij ” şekilleniminin enerji değerleri, yani $|ij\rangle$ durumuna karşılık gelen enerji öz değerleri bulundu. Bu enerjiler ve nokta değişkenleri kullanılarak “ ij ” halinin ağırlık faktörü ve olasılığı hesaplandı. Bu olasılıklar kullanılarak *Mıknatıslanma*, *korelasyon terimi*, *kuadrupol moment* gibi manyetik özelliklerin yanı sıra sistemin önemli termodinamik fonksiyonları olan *iç enerji*, *entropi* ve *serbest enerji* yoğunluk matris elemanları cinsinden elde edildi. Bunlara ilave olarak “ ss^2 ” ve “ s^2s^2 ” ifadelerinin termal ortalamaları teorik olarak bulundu. Elde edilen

fonksiyonlar nümerik olarak çözümlenerek farklı koşullarda (farklı dış alan değerleri ve koordinasyon sayıları) sıcaklıkla değişimleri için kapsamlı grafikler elde edildi.

Dış alan yokluğunda mıknatıslanmanın ikinci dereceden faz geçişine uğradığı gözlemlendi. Ayrıca çiftlenim sabitinin pozitif olarak artan değerleri için faz geçişi sıcaklığının (kritik sıcaklık yada Curie sıcaklığı) arttığı görüldü. Koordinasyon sayısı dört olduğunda, çiftlenim sabitinin sıfır değeri için grafikten görülen faz geçiş sıcaklığı ikinin biraz üzerinde, çiftlenim sabitinin bir değeri içinse 2.68 civarında bir değerdedir. Korelasyon parametresi ise dış alan yokluğunda, sıcaklığın artmayla sifira yaklaşmakta fakat sıfır olmamaktadır. Benzer şekilde dış manyetik alan değeri sıfırken iç enerji ve entropi tipik davranışlarını sergilerler. Şekil 4.6 dan, $h = 0$, $(D/J) = 1.0$ ve $\gamma = 4$ değeri için mıknatıslanmanın faz geçişi sıcaklığı için $T_c \approx 2.66$ değeri okunabilir. Şekil 1.14 de koordinasyon sayısının değeri arttıkça aynı çiftlenim sabiti için kritik sıcaklığın arttığı görülür. Bu durum birim hücrede bulunan spinlerin çokluğuyla açıklanabilir. Örneğin koordinasyon sayısı 12 olan hegzagonal örgüde birim hücredeki spin sayısı, koordinasyon sayısı 6 olan basit kübik örgünün birim hücresindeki spin sayısından fazladır. Bu nedenle hegzagonal örgünün mıknatıslanmasının sıcaklık etkisiyle sifira inmesi, basit kübik örgüye göre daha büyük sıcaklıklarda gerçekleşecektir. Benzer durumlar korelasyon terimi, iç enerji, entropi ve serbest enerji içinde geçerlidir. Şekil 4.16 ise tezin amaçlarından biri olan kümesel değişim metodunun en düşük dereceli yaklaşımı (nokta yaklaşımı)'nın verdiği mıknatıslanma ile çift yaklaşımının verdiği mıknatıslanma eğrilerini göstermektedir. Şekilde, kesikli çizgilerle en düşük dereceli kümesel değişim metodunun verdiği eğri, düz çizgilerle ise çift yaklaşımının verdiği eğriler çizilmiştir. Çift yaklaşımından bulunan kritik sıcaklık ile nokta yaklaşımından bulunan kritik sıcaklık değerleri birbirinden farklıdır. Bu fark iki yaklaşım arasındaki hassasiyeti ortaya koymaktadır. Nokta yaklaşımında spin-spin korelasyonları ihmal edilmiştir. Fakat çift yaklaşımı bu etkileşmeyi de hesaba katar. Böylece mıknatıslanma için daha hassas sonuçlar bulmak mümkün olur.

Sonuç olarak bu tez çalışması kapsamında kümesel değişim metodunun çift yaklaşımı ele alınmış ve yöntemin farklı spin durumlarındaki ($s = 1/2$ ve $s = 1$) Ising modellerine uygulaması yapılmıştır. Ayrıca J , D etkileşmeli spin-1 Ising sistemi için en düşük dereceli kümesel değişim metodu için de çözümler yapılmış ve çift yaklaşımıyla karşılaştırılmıştır. Son olarak spin-1 *hamiltonyeni* ne dış manyetik alanı eklenmiş yani dış alanın sıfırdan farklı olduğu durumlar dikkate

alınmıştır. J ve D etkileşmeli spin-1 sistemi dış alan varlığında çift yaklaşımıyla ilk kez bu tez kapsamında incelenmiştir.

KAYNAKLAR

- Balcerzak T., 2003 Thermodynamics of the Ising Model in Pair Approximation. **Physica A**, 317: 213-226
- Balcerzak, T., 2001 Cluster Variational Method for Critical Concentration Calculations of Site-Dilute Ising Model. **J. Magn. Magn. Mater.** 223: 309-314
- Balcerzak, T., Tucker, J. W., 2004 The Spin 1 Blume Capel Model with RKKY Interactions. **J. Magn. Magn. Mater.** 278: 87-95
- Baxter R. J., Exactly Solved Models in Statistical Mechanics, 1984. Academic Press Limited, London. Chapter 1.
- Bethe, H.A. 1935. Statistical theory of super lattices. **Proc. Roy. Soc. London A**, 150: 552-561
- Blume, M., Emery, V. J., Griffiths, R. B. 1971. Ising Model for the λ Transition and Phase Separation in $He^3 - He^4$ Mixtures. **Phys. Rev. A**, 4: 1071-1077.
- Blume, M. 1966. Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in UO_2 , **Phys. Rev.**, 141: 517-524
- Bragg, W.L. and Williams, E.J. 1934. The Effect of Thermal Agitation on Atomic Arrangement in Alloys. **Proc. Roy. Soc. A**, 145: 699.
- Bragg, W.L. and Williams, E.J. 1935. The Effect of Thermal Agitation on Atomic Arrangement in Alloys II. **Proc. Roy. Soc.**, A: 540.
- Capel, H. W. 1966a. On the Possibility of First-Order Phase Transitions in Ising Systems of Triplet Ions with Zero-Field Splitting. **Physica**, 32: 966-988.
- Capel, H. W. 1966b. Phase transition in spin-one system. **Phys. Lett.**, 23: 327-328.
- Capel, H. W. 1967a. On the possibility of first-order phase transitions in Ising system of triplet ions with zero-field splitting. **Physica**, 33: 295-331.
- Capel, H. W. 1967b. On the Possibility of First-Order Phase Transitions in Ising Systems of Triplet Ions with Zero-Field Splitting. **Physica**, 37: 423-441.
- Chen, H. H. Levy, P. M. 1973. Dipole and Quadrupole Phase Transitions in Spin-1 Models, **Phys. Rev. B**, 7: 4267-4284.

- Domb C. 1960. On the Theory of Cooperative Phenomena, **Adv. Phys.**, 9:149-361
- Erdinc A, Keskin M., Equilibrium and Nonequilibrium Behavior of the Spin-1 Ising Model in the Quadrupolar Phase. **Physica A**, 307: 453-468
- Grigelionis, G., Rosengren, A. 1994. Study of the Blume-Emery-Griffiths Model on the Triangular Lattice by the Cluster Variation Method, **Physica A**, 208:287-299.
- Heisenberg, W. 1928. Zur Theorie des Ferromagnetismus. **Z. Physik**, 49: 619-636.
- Huang, K. Statistical Mechanics, 1963. J. Wiley Sons. Inc., New York. Chapters 10-16.
- Ising, E. 1925. **Z. Physik**, 31: 253-8.
- Jain A. K., Landau L. P. 1980. Monte Carlo Study of the fcc Blume-Capel Model. **Phys. Rev. B**, 22: 445-452
- Morita T. 1957. Cluster Variational Method. **J. Phys. Soc. Jpn.** 12: 753
- Keskin M, Erdinc A., Multicritical Phase Diagrams of the Blume-Emery-Griffiths Model with Repulsive Biquadratic Coupling Including Metastable Phases: the Pair Approximation and Path Probability Method with Pair Distribution. **J. Magn. Magn. Mater.** 283: 392-408
- Kikuchi, R. 1967. The Cluster-variation method. **J. De Physique**, 7: 307-313.
- Kikuchi, R., Brush, S. G. 1967. Improvement of the Cluster Variation Method, **J. Chem. Phys.** 47: 195-203.
- Kikuchi R, Brush S G, 1977. Improvement of the Cluster-variation method. **J. Chem. Phys.**, 47: 195-203.
- Kikuchi, R. Irreversible Cooperative Phenomena, **Annals of Physics** 10:127-141, 1960
- Kikuchi, R. 1951. A theory of cooperative phenomena. **Phys. Rev. B**, 81:988-1002.
- Kramers H. A., Wannier G. H. 1941 Statistics of the Two-Dimensional Ferromagnet. **Phys. Rev.** 60: 252-262.
- Onsager, L., 1944. Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition. **Phys. Rev.**, 65: 117-149.

- Plascak J. A., Moreira J. G., SáBarreto F.C. 1993. Mean field solution of the general spin Blume-Capel model. **Physics Letter A**, 173: 360-364
- Saul D. M., Michael Wortis, Stauffer D. 1974. Tricritical behavior of the Blume-Capel Model. **Phys. Rev. B**, 9: 4964-4980
- Semet D. 2009. Bir Dış Alan Varlığında İki Katmanlı Ising Modelinin Manyetik Özelliklerinin İncelenmesi. Adnan Menderes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Yüksek Lisans Tezi, 64 s., Aydın
- Shankar, R. 1986. Solvable case of a spin-1 model in a magnetic field. **Phys. Lett. A** 117: 365-366.
- Stanley H. E., Introduction to Phase Transition and Critical Phenomena. 1971. Oxford University Press. Chapters 3, 4
- Wang, Y. L., Lee, F., Kimel, J. D., 1987. Phase Diagrams of the Spin-1 Ising Blume-Emery Griffiths Model: Monte-Carlo Simulations. **Phys. Rev. B** 36: 8945-8947.
- Wai Man Ng., Jeremiah H. Barry., 1978. Cluster-Variational Method Applied in the Pair Approximation to the $S = 1$ Ising Ferromagnet Having additional Single-Ion-Type Uniaxial Anisotropy. **Phys. Rev. B** 17: 3675-2683

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : Ümit BAYAN
Doğum Yeri ve Tarihi : AYDIN 22.02.1985

EĞİTİM DURUMU

Lisans Öğrenimi : Celal Bayar Üniversitesi
Yüksek Lisans Öğrenimi : Adnan Menderes Üniversitesi
Bildiği Yabancı Diller : İngilizce

BİLİMSEL FAALİYETLERİ

- a) Yayınlar
 - SCI
 - Diğer
- b) Bildiriler
 - Uluslararası
 - Ulusal
- c) Katıldığı Projeler

İŞ DENEYİMİ

Çalıştığı Kurumlar ve Yıl : -

İLETİŞİM

E-posta Adresi : umitbayan@gmail.com
Tarih : 24.04.2011