

**T.C.
YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**ZAMANA BAĞLI SALINIM YAPAN MANYETİK ALAN ETKİSİNDE BİR
BOYUTLU KİNETİK ISING MODELİ İÇİN KESİN DİNAMİK DENKLEM**

CEREN BAYINDIR

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI**

**DANIŞMAN
DOÇ. DR. TUNCER KAYA**

İSTANBUL, 2011

T.C.
YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**ZAMANA BAĞLI SALINIM YAPAN MANYETİK ALAN ETKİSİNDE BİR
BOYUTLU KİNETİK ISING MODELİ İÇİN KESİN DİNAMİK DENKLEM**

Ceren BAYINDIR tarafından hazırlanan tez çalışması 00.00.2011 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı'nda **YÜKSEK LİSANS TEZİ** olarak kabul edilmiştir.

Tez Danışmanı

Doç. Dr. Tuncer KAYA
Yıldız Teknik Üniversitesi

Jüri Üyeleri

Doç. Dr. Tuncer KAYA
Yıldız Teknik Üniversitesi

Prof. Dr. Hasan TATLIPINAR
Yıldız Teknik Üniversitesi

Prof. Dr. Sehban KARTAL
İstanbul Üniversitesi

ÖNSÖZ

Tez çalışmamda yardımlarını benden esirgemeyen tez danışmanı hocam Doç. Dr. Tuncer KAYA'ya teşekkürü bir borç bilirim.

Ayrıca hayatım boyunca bıkmadan usanmadan beni destekleyen aileme çok teşekkür ederim.

Aralık,2011

Ceren BAYINDIR

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
SİMGE LİSTESİ	v
KISALTMA LİSTESİ	vi
ŞEKİL LİSTESİ.....	vii
ÖZET	viii
ABSTRACT	ix
BÖLÜM 1	
GİRİŞ	1
1.1 Literatür Özeti.....	1
1.2 Tezin Amacı.....	3
1.3 Hipotez.....	4
BÖLÜM 2	
MONTE CARLO SİMÜLASYONU.....	5
2.1 Markov Zincirleri	5
2.2 Markov Zincirleri ve Master Denklemi	7
2.3 Landau Teorisi	9
2.4 Ising-Glauber Modeli	11
BÖLÜM 3	
EN YAKIN KOMŞU ISING ZİNCİRİNDE DİNAMİK DENKLEMLER	14
BÖLÜM 4	
SONUÇ VE ÖNERİLER	23
KAYNAKLAR.....	27
ÖZGEÇMİŞ.....	29

SİMGE LİSTESİ

ω	Açısal frekans
k_B	Boltzman sabiti
Z	Bölüşüm fonksiyonu
J	Değiş-tokuş etkileşim parametresi
τ	Durulma süresi
Ω	İndirgenmiş açısal frekans
T	İndirgenmiş sıcaklık
ξ	İndirgenmiş zaman
T_c	Kritik sıcaklık
$m(\xi)$	Manyetizasyon
M	Ortalama manyetizasyon
$h(t)$	Zamana bağlı salınım yapan dış manyetik alan

KISALTMA LİSTESİ

AFA Approximation Free Approach
CEMFT Correlated Effective Mean Field Theory

ŞEKİL LİSTESİ

	Sayfa
Şekil 3. 1 $m(\xi = 0) = 1, h_r = 0.5$ ve $\tau = 1$ durumunda $T=0.3, 0.5$ ve 0.8 indirgenmiş sıcaklık değerleri için manyetizasyonun grafiği	18
Şekil 3. 2 $m(\xi = 0) = 1, h_r = 0.5$ ve $\tau = 1$ durumunda indirgenmiş sıcaklığa göre ortalama manyetizasyonun grafiği	19
Şekil 3. 3 $m(\xi = 0) = 1, h_r = 0.8$ ve $\tau = 1$ durumunda indirgenmiş sıcaklığa göre ortalama manyetizasyonun grafiği	19
Şekil 3. 4 $m(\xi = 0) = 0, h_r = 0.5$ ve $\tau = 1$ durumunda indirgenmiş sıcaklığa göre ortalama manyetizasyonun grafiği	20
Şekil 4.1 $m(\xi = 0) = 0, h_r = 0.75$ ve $\tau = 1$ durumunda indirgenmiş sıcaklığa göre ortalama manyetizasyonun grafiği	24
Şekil 4.2 Farklı durulma süreleri için kesin dinamik sistemin kritik faz diyagramının grafiği.....	25

**ZAMANA BAĞLI SALINIM YAPAN MANYETİK ALAN ETKİSİNDE BİR
BOYUTLU KİNETİK ISING MODELİ İÇİN KESİN DİNAMİK DENKLEM**

Ceren BAYINDIR

Fizik Anabilim Dalı

Yüksek Lisans Tezi

Tez Danışmanı: Doç. Dr. Tuncer KAYA

Zamana bağlı salınım yapan manyetik alan etkisinde bir boyutlu kinetik Ising modelinin Glauber tipi dinamiği için kesin dinamik denklemleri tanımlandı. Tezin esas amacı kesin dinamik denklemler elde etmektir. Esasında bu kesin denklemler analitik iki spin korelasyon fonksiyonları kullanılarak iki farklı geçiş olasılığı koşulu kullanılarak elde edildi. Düzen parametresi veya ortalama manyetizasyon eğrileri, sistemin bazı parametreleri cinsinden elde edildi. (T, h_r) faz diyagramları bazı durulma zamanları τ değerleri için elde edildi, burada T indirgenmiş sıcaklık h_r ise dış manyetik alanın indirgenmiş genliğidir. Hesaplarımızda durulma zamanının artırılmasının ferromanyetik bölgeyi genişlettiğini gördük. Daha önemlisi çalışma sonucu yandaş (eşzamanlı, coexisting) ferromanyetik, paramanyetik, bölgelerin ve üçlükritik noktanın varlığını göremedik. Tabiki bu sonuç ortalama alan teorisinin öngörülerine tamamen aykırıdır. Fakat bazı Monte Carlo çalışmalarının sonucu bu tezdeki sonuçları desteklemektedir. Üçlükritik noktanın ve yandaş (eşzamanlı, coexisting) bölgelerin yanlış tahminleri, ortalama alan teorisinin önemli korelasyon terimlerini ihmal etmesinden kaynaklandığını söyleyebiliriz.

Anahtar Kelimeler: Glauber dinamiği, Monte Carlo çalışmaları

**EXACT DYNAMIC EQUATION FOR THE 1D KINETIC ISING MODEL UNDER A
TIME-DEPENDENT OSCILLATING MAGNETIC FIELD**

Ceren BAYINDIR

Department of Physics

MSc. Thesis

Advisor: Assoc. Prof. Dr. Tuncer KAYA

We investigate the dynamics of the Kinetic 1D ising model with Glauber type dynamics under an oscillating external magnetic field. In this thesis, our main motivation was to obtain an exact dynamic equation system. Indeed, an exact equation system was obtained with two different transition probability conditions together with an analytical expression of two point spin correlation function. The order parameter or the average magnetization curves were evaluated for some values of the system parameter. The phase diagrams in (T, h_r) plane, here T is the reduced temperature and h_r is the reduced amplitude of the external magnetic field, were obtained for some values of the relaxation time τ . We observed that the increasing relaxation time enlarges the Ferromagnetic region. More importantly, we have not obtained either the coexisting ferromagnetic paramagnetic region and the tricritical point. Of course, these predictions are totally against with the results obtained in mean field treatment. But, there are some Monte Carlo studies supporting the predictions of this thesis. We think that the wrong prediction of the existence of tricritical point and coexisting region in mean field picture is due to its omission of important correlation effect.

Key words: Glauber dynamics, Monte Carlo studies

1.1 Literatür Özeti

Tersinmez dinamik sistemler kritik nokta yakınında karmaşık ve ilginç kritik davranış gösterirler. Dinamik problemleri açıklamak için ilk ilkeye dayanan genel bir teori olmamasına rağmen, bu konuda Glauber [1] tarafından tamamlanan öncü çalışmadan beri büyük ilerlemeler kaydedildi. Glauber dinamiğine göre, düzen parametrelerinin zamanla gelişimi tek spin yönelimi mekanizması ile birlikte Markov süreci tarafından açıklanır. Bundan sonraki çalışmalar kritik dinamik çalışmaları konusunda yoğunlaştı.

Glauber dinamiğiyle kinetik Ising modeli yıllardan beri ilginç kritik davranışı nedeniyle yoğun çalışmaların konusu olmuştur. Kinetik Ising ile Glauber dinamiği modeli termal dalgalanmaların rastgele gürültünün kaynağını oluşturduğu kuple olmuş (çiftlenmiş) iki durumlu salınıcılar seti olarak düşünülebilir. Sistemin ısı rezervuarlarıyla etkileşimi zamanla spinin σ_i den $-\sigma_i$ ye rastgele bir şekilde çevrilmesine sebep olur. Diğer bir deyişle, sistem birim zamanda $1/\tau$ geçiş oranında gelişir. Spin takla (yönelim) oranı τ ve dış manyetik alanın frekansından kaynaklanan zaman ölçeklerinin rekabetinden dolayı sistem, uygulanan dış alandan geri kalır, değişen dinamik cevap gösterebilir. Değişen manyetik alan varlığında Ising sisteminin dinamik yanıt davranışı çoğunlukla iki method tarafından çalışılır. Birincisi ortalama alan yaklaşımı [2-5] ve ikincisi Monte Carlo simülasyon tekniğidir [6-9].

Kinetik Ising model için ortalama alan yaklaşımı ilk kez Tome ve Oliviera [2] tarafından kullanıldı. Çalışmalarında zamana bağlı ortalama manyetizasyon için hareketin ortalama alan dinamik denklemini elde ettiler. Değişken manyetik alanın tam çevrimi

üzerinden düzenli parametreyi zaman ortalamalı manyetizasyon olarak belirlenmesiyle alan şiddet ve sıcaklık değerine bağlı olarak düzenli ve düzensiz fazları ayıran faz sınırı meydana geldiğini rapor ettiler. Devamlı ve devamsız faz geçişlerinin doğasını ayıran üçlü kritik noktayı gözlemlediler ve yerini tespit ettiler. Bir sonraki ortalama alan çalışmasında bu gibi üçlü kritik nokta rapor edildi. [5] Bu noktada belirtmek gerekir ki ortalama alan teorisinin öngördüğü salınımlı dış alanın sıfır frekans limitinde oluşan geçiş dinamik olmayabilir [10]. Berkolaiko ve Grinfeld [11], Tome ve Oliviera tarafından kullanılan ortalama alan Suzuki-Kubo formunun üçlü kritik noktayı tahmin edebilmelerine rağmen ϕ^4 Landau serbest enerjisi tarafından türetilen eşdeğer formda bunun tahmin edilmediğini iddia ettiler. Kinetik Ising model çalışmalarında bu tutarsızlığın üstesinden gelmek için bilgisayar simülasyonu [12] en önemli araç oldu. Nümerik simülasyonların birçok türü arasında Monte Carlo metodunun [13] kinetik Ising modele uygulaması yaygın kullanılan teknik olarak ortaya çıkıyor. Standart Monte Carlo simülasyonunda kesin dinamik kurallara göre dinamik değişkenin güncellenmesiyle dinamik davranış sistemin tek kopyasını takip eden zaman evrimi tarafından incelenir.

Literatürde Kinetik Ising modeli çalışmasında [7] Monte Carlo simülasyonu dinamik düzen parametresinin istatistik dağılımını elde edilmiştir ve ölçülebilir büyüklüklü skala sonuçları sunulmuştur. Geçiş noktası yakınında histeresis halka bölgesi oldukça büyük olduğunu gözlemlenmiştir. Lo ve Pelcovits'in [14] Monte Carlo çalışması tam olarak faz sınırı göstermemiştir. Çalışmalarında değişken manyetik alanın sıfır frekans limitinde geçişin kaybolduğunu gördüler. Acharyya ve Chakrabarti'nin Monte Carlo çalışmalarında faz sınırı ve üçlü kritik nokta olduğunu öngördüler. Fakat kinetik Ising modelin son Monte Carlo çalışması [9] gösterdi ki; Acharyya'nın Monte Carlo çalışmalarındaki bulunduğu iddia edilen üçlü kritik nokta sonlu ölçüm etkisiydi ve sonsuz sistem limitinde üçlü kritik bulunmuyor. Bu tartışmalı sonuçlar sonlu sistem için kısıtla ilgili olan Monte Carlo simülasyonunun limit kısıtlamalarından kaynaklanmaktadır. Bu kısıtlama sonlu ölçüm etkileriyle uygun bir şekilde davranışın beklenmeyen sonuçlara yol neden olur [15].

Böylece, kinetik Ising modele adanmış birçok çalışmalara rağmen, yukarıda işaret edilen tartışmalı sonuçlardan dolayı onların dinamik geçiş karakteri ile ilgili güvenilir sonuç yoktur. Bu tartışmalı sonuçlar, tabi ki, özel çalışmada kullanılan yaklaşımlardan dolayıdır. Sonuç olarak, güvenilir sonucun değerlendirmesinde yaklaşımdan bağımsız (approximation free) yöntem önemlidir. Genel durumda bu kolay bir iş değildir fakat özel boyutlar için bu çözülebilir. Sonuç olarak, bu çalışmanın çerçevesinde dinamik denklemlerin değerlendirmesinde 2 boyut ve 3 boyuta göre daha az karmaşık olan 1 boyutlu kinetik Ising model bizim ana ilgilendiğimiz şey olacaktır. Bu tezde zamana bağlı salınım yapan manyetik alan etkisinde bir boyutlu kinetik Ising modeli için kesin dinamik denklemler çalışıldı.

Dengede olmayan Ising tipi sistemlerin yaygın şekilde çalışılmasının nedenleri bu tür sistemlerin, katyonların düzenlerinin anlaşılması, malzemelerin aşınması, ferromanyetik malzemeler, küçü hafızalı devre tasarımı, veri depolama, tek molekül ve tek zincir magnetleri, kuantum tünel magnetleri gibi teknolojik olayların anlaşılmasındaki öneminden dolayıdır.

Çoğu istatistiksel mekanik sistem açık bir şekilde çözülemez. İstatistik mekaniği, çözüm mevcut değilse bile genel ilişkiler ve prensiplerin (sıcaklık, entropi, serbest enerji, termodinamik ilişkiler) düzenlemesini sağlar. Gerçekçi sistemlerin çalışılması için istatistik mekaniğinin dışında iki temel araç vardır, bunlardan birincisi moleküler dinamik ve Monte Carlo simülasyon metotlarıdır. İkinci araç pertürbasyon teorisini kullanmaktır.

Bu tezde yaygın olarak bahsedilen ve dinamik sistemlerin incelenmesinde yaygın olarak kullanılan Markov Zinciri, master denklemi, Monte Carlo simülasyon yönteminin bazı temel kavramlarını gözden geçirmek faydalı olacaktır.

1.2 Tezin Amacı

Ortalama alan sonuçlarının doğruluğunu ve bir boyutlu sistem için dinamik denklemlerin doğrudan değerlendirilmesi ile simülasyon tahminlerini incelemektir.

1.3 Hipotez

Bir boyutta dinamik spin sistemlerinin sayısal dahi çözümlerinin olmaması spin dinamiğinin faz geçişlerini oldukça bulanık yapmaktadır. Bu nedenle bu tezde bir boyutlu dinamik Ising sistemi için kapalı bir denklem sistemi oluşturarak sayısal olarak tam çözümler elde etmeye çalıştık. Hipotez olarak da farklı iki ayrıntılı denge koşuluyla nümerik olarak kapalı bir denklem sistemi elde edebileceğimizi varsayıyoruz.

BÖLÜM 2

MONTE CARLO SİMÜLASYONU

2.1 Markov Zincirleri

Genel olarak Monte Carlo Markov zincirlerinin örnekleridir. Markov zincirleri ayrık ve sürekli sistemlerde rastgele yürüyüş ve diğer rastgele evrim yasalarını çalışmak için matematiksel dil sağlar. N sonlu işlemde oluşan $\{\alpha\}$ kümesinin oluşturduğu sistemlere bakalım. Bir Markov zincirindeki farklı yeni durumlara hareketin olasılıkları sadece mevcut duruma bağlıdır. Genelde, kendi geçmişinden bilgi almayan belleği olmayan sistemlere Markovian denir.

Örneğin, bir N durumlu Ising modelinde $S = \{s_i\}$ nin 2^N durumu vardır. Ising modeli için Markov zinciri her bir adımda mevcut S durumundan S' durumuna geçişte değişen $P_{S' \leftarrow S}$ olasılığı geçiş kuralına sahiptir. Isı banyosu algoritması için, en az bir spin dönüşü hariç S' ve S aynı olmadıkça $P_{S' \leftarrow S}$ sıfıra eşittir. Bu genel yolla birçok problem formüle edilebilir n adımda çeşitli α durumlarda olma olasılıkları bir $\rho_\alpha(n)$ vektörüyle düzenlenebilir. Sonra α' dan β' ya hareket için $P_{\beta\alpha}$ oranları, olasılık vektörü ρ' ya uygulandığında bir zamandan sonrakine taşıyan bir matris kurar.

Genel olarak, uzun zamandan sonra farklı durumlarda bulunma olasılığını anlamak isteniyor ise P matrisiyle tanımlanan algoritma hangi koşullar altında termal dengeyi

alacağı belirlenmelidir. Bunu anlamak için P' nin bazı özellikleri, onun özdeğerleri ve özvektörlerini anlamak gerekir. $P_{\beta\alpha}'$ nin genel olarak aşağıdaki özellikleri var olmalıdır.

Zaman evrimi için $n+1$ adımdaki olasılık vektörü;

$$\rho_{\beta}(n+1) = \sum_{\alpha} P_{\beta\alpha} \rho_{\alpha}(n), \quad \rho(n+1) = P \cdot \rho \text{ şeklinde olmalı} \quad (2.1)$$

Olasılığın pozitifliği için matris elemanları

$$0 \leq P_{\beta\alpha} \leq 1 \quad (2.2)$$

koşulunu sağlamalı.

Olasılığı korunması için α durumu için

$$\sum_{\beta} P_{\beta\alpha} = 1 \quad (2.3)$$

olmalıdır.

Genel olarak P simetrik değildir $P_{\beta\alpha} \neq P_{\alpha\beta}'$ dir. Bu son nokta büyük bir sürpriz değildir, yüksek enerjili durumdan düşüğüne gitmek, düşükten yükseğe gitmekten çok daha büyük bir olasılığa sahip olmalıdır. Ancak, bu asimetri, simetrik ve Hermitik matrisler için dikkatlice geliştirilmiş matematiksel sezgimiz ve çoğu geçiş matrisi $P_{\beta\alpha}$ geçerli olmayacak demektir. Özellikle, matrislerin köşegen hale getirilebileceği genelde varsayılmaz.

Markov zinciri ve onun asimetric matrisi P ile matematiksel özellikler kısaca şu şekilde özetlenebilir. P nin, her farklı özdeğer için en az bir sağ özvektör ve bir sol özvektör olmalıdır buna göre

$$P \cdot \rho^{\lambda} = \lambda \rho^{\lambda} \quad (2.4)$$

$$\sigma^{\lambda T} \cdot P = \lambda \sigma^{\lambda T} \quad (2.5)$$

Olmalıdır. Ancak dejenere özdeğerler için birden fazla özvektör olmayabilir ve sol ve sağ özvektörler genellikle birbirine eşit olmayacaktır. Markov zinciri uzun zamanda bir denge durumuna ρ^* ulaşırsa, bu durumda zaman evrimi P altında değişmemelidir.

Yani, $P \cdot \rho^* = \rho^*$ olmalıdır. Böylece denge olasılık yoğunluğu özdeğeri bir olan bir sağ özvektördür. Markov zinciri geçiş matrisi P 'nin böyle bir sağ özvektöre sahip olduğunu gösterebiliriz bunu matematiksel olarak kanıtlamak mümkündür.

Markov zincirlerinin birden fazla kararlı olasılık dağılımı olabilir. Sistemin bir süre sonra ayrılacağı, asla oraya dönmeyeceği geçici durumlar olabilir. Olasılık dağılımı, saate benzer çevrimsel olabilir. Bunların hepsi istatistik mekaniğinde denge durumlarını bulmak için yapılan araştırmalardaki engellerdir. Bu engeller genelde ergodik Markov zincirleri çalışılarak bertaraf edilebilir. Bir sonlu durum Markov zinciri eğer çevrime sahip değilse ve indirgenemez ise ergodiktir. Yani sonlu hareket adımları ile herhangi bir α durumundan diğer β durumu elde edilebilir. Buna göre Monte Carlo gibi bir bilgisayar algoritması Markoviansa (hafızaya sahip değilse), ergodikse (her yere ulaşabilir ve çevrimsiz ise) ve detaylı denge koşulunu sağlıyor ise, sonlu sayıda duruma sahip kesikli dinamik bir sistemin denge durumunda ρ^* a yakınsamasını garanti eder.

2.2 Markov Zincirleri ve Master Denklemi

Daha öncede belirtildiği gibi markov zincirleri Monte Carlo simülasyon yöntemi için merkezi önem taşır. Olası durumların sonlu seti $S_1, S_2, S_3, \dots$ ile birlikte bir sistem için ardışık olarak sırasıyla $t_1, t_2, t_3, \dots$ kesikli zamanlı bir stokastik süreç tanımlayalım ve t zamanında sistemi X_t durumu ile ifade edelim. Koşullu olasılık olan $X_{t_n} = S_{i_n}$ 'yi ele alacak olursak,

$$P(X_{t_n} = S_{i_n} | X_{t_{n-1}} = S_{i_{n-1}}, X_{t_{n-2}} = S_{i_{n-2}}, \dots, X_{t_1} = S_{i_1}) \quad (2.6)$$

Bu ifade göz önüne alındığında zaman ilerledikçe sistemin $X_{t_{n-1}}$ durumu, daha önce $S_{i_{n-1}}$ durumunda olduğunu vurgulayacak şekildedir. Koşullu olasılık aslında tüm durumlardan bağımsız fakat hemen önceki durum ile ilgili ise böyle bir sürece Markov süreci denir, yani $P = P(X_{t_n} = S_{i_n} | X_{t_{n-1}} = S_{i_{n-1}})$ ' dir. Markov süreçlerinin eş

serilerine $\{X_t\}$ Markov zinciri denir ve yukarıda belirtilen koşullu olasılık i durumundan j durumuna hareketinin geçiş olasılığı olarak yorumlanabilir.

$$W_{ij} = W(S_i \rightarrow S_j) = P(X_{t_n} = S_j | X_{t_{n-1}} = S_i) \quad (2.7)$$

Ayrıca her zaman olduğu gibi geçiş olasılıkları

$$W_{ij} \geq 0, \quad \sum_j W_{ij} = 1 \quad (2.8)$$

dir.

S_j durumunda sistem t_n zamanında iken $P(X_{t_n} = S_j)$ toplam olasılığı $P(X_{t_n} = S_j) = P(X_{t_n} = S_j | X_{t_{n-1}} = S_i) P(X_{t_{n-1}} = S_i) = W_{ij}(X_{t_{n-1}} = S_i)$ olarak düzenlenebilir.

Master denklemi t zamanıyla bu olasılığın değişimini inceler. (Zaman kesikli değerler yerine sürekli olarak ele alınır böylece $P(X_{t_n} = S_j) = P(S_j, t)$ yazılır.)

$$\frac{dP(S_j, t)}{dt} = - \sum_i W_{ji} P(S_j, t) + \sum_i W_{ij} P(S_i, t) \quad (2.9)$$

Bu denklem bir “süreklilik denklemi” olarak düşünülebilir, toplam olasılığın korunacağı gerçeğine göre (her zaman $\sum_i P(S_j, t) \equiv 1$) i olasılığındaki kayıplar, j olasılığına geçişlerdeki kazançlar gibi düşünülebilir. Terside geçerlidir. Kazanç ve kayıp süreçlerinin dengesini denklem (2.9) açıklar: olayların olasılıkları $S_j \rightarrow S_{i_1}, S_j \rightarrow S_{i_2}, S_j \rightarrow S_{i_3} \dots$ tümünü kapsadığı için , j durumundan ayrılan durumlar için toplam olasılık basitçe $\sum_i W_{ij} P(S_j, t)$ toplamıdır.

Açıkçası, denklem (2.9) Markov süreçlerinin temel özelliğini ortaya çıkarır: yani t zamanındaki durumun bilgisi tamamen gelecek zamanın evrimini belirler, sistemin geçmişine ait belleği yoktur. (t zamanından önceki zamanlardaki sistemin davranışının bilgisi gerekli değildir.) Bu özellik tabi ki oldukça özeldir ve sadece bazı gerçek sistemler aslında denklem (2.9) ile uyumlu fiziksel dinamiklere sahiptir. Fakat denklem (2.9)’ un temel anlamı Monte Carlo süreci örnekleme etkisi bir Markov süreci olarak

değerlendirilebilir olmasıdır, geçiş olasılıklarının belirli bir seçimiyle: detaylı denge prensibini bir denge olasılığıyla $P_{eq}(S_j)$ karşılamak gerekir.

$$W_{ji}P_{eq}(S_j) = W_{ij}P_{eq}(S_i) \quad (1.10)$$

Bu noktada Master denkleminin

$$dP_{eq}(S_j, t)/dt \equiv 0 \quad (2.11)$$

denge koşulunu verdiğine dikkat edelim, çünkü denklem (2.11), denklem (2.9)'daki kazanç ve kayıp terimlerinin tamamen geçersiz olduğunu garanti eder.

Son olarak, $\{S_i\}$ durumlarının setine kesikli olması yerine sürekli alınması kısıtlamasının önemli olmadığından belirtebiliriz.

2.3 Landau Teorisi

Genelde simülasyonlarda elde edilen sonuçların karşılaştırıldığı en basit teorilerden biri, Landau teorisi. Bu teorinin esası sistemin serbest enerjisinin faz geçişi civarında sistemin düzen parametresi cinsinden bir seri şeklinde yazılabileceğidir.

Faz geçişi yakınında d-boyutlu sistemin serbest enerjisi basit tek bileşenli düzen parametresi $m(x)$ cinsinden genişletilir.

$$F = F_0 + \int d^d x \left\{ \frac{1}{2} r m^2(x) + \frac{1}{4} u m^4(x) + \frac{1}{6} v m^6(x) - \frac{H}{k_B T} m(x) + \frac{1}{2d} [R \nabla m(x)]^2 + \dots \right\} \quad (2.12)$$

Burada $(k_B T)^{-1}$ faktörü F ve F_0 içine atılır ve r, u ve v katsayıları boyutsuzdur. R katsayısı modelin etkileşim oranı olarak yorumlanabilir. Taylor serileri formundaki bu denklemde simetri özelliği $H = 0$ için tüm tek üslü düzen terimlerini ortadan kaldırmak için kullanılır. Daha karmaşık sistemler için, ek terimler mümkün olabilir. Homojen bir sistemin en basit mümkün durumunda bu denklem şu şekildedir.

$$F = F_0 + V\left(\frac{1}{2}rm^2 + \frac{1}{4}um^4 + \frac{1}{6}vm^6 - mH/k_B T + \dots\right) \quad (2.13)$$

Dengede serbest enerji minimum olmalıdır ve eğer $u > 0$ ise üstteki denklemi kesebiliriz ve minimizasyon kriteri $\partial F / \partial m = 0$ olası üç çözümü verir.

$$m_1 = 0 \quad (2.14)$$

$$m_{2,3} = \pm \sqrt{-r/u} \quad (2.15)$$

T_c etrafında r' yi genişletmek ki $r = r'(T - T_c)$, $r < 0$ için (yani $T < T_c$)

$$m_{2,3} = \pm [(r'T_c/u)(1 - T/T_c)]^{1/2} \quad (2.16)$$

buluruz. Böylece, m_1 uzun mesafe düzeni olmadığı yerde T_c' nin üzerindeki çözüme ve $m_{2,3}$ $\beta = 1/2$ üsteli ile karakteristik üs yasası ile düzen parametresinin sıfıra gittiği yerde T_c' nin altındaki çözümlere uyar. Duyarlılığın benzer analizi $\gamma = 1$ ve $\delta = 3$ 'ü üretir. (Uygulamak için basit olsa da, birçok fiziksel sistemin davranışını açıklamada Landau teoremi doğru değildir. Sıvı-gaz kritik noktaları ve çoğu manyetik sistemler için $\beta = 1/2$ Landau değeri yerine $\beta \approx 1/3$ tür.) Üçlü noktanın meydana gelişi Landau teoreminden kolayca anlaşılabilir. m^4 ' teki terim negatif ise altıncı düzen parametresini devam ettirmek gerekli olur ve minimizasyon süreci beş çözüm verir:

$$m_1 = 0 \quad (2.17)$$

$$m_{2,3} = \pm \left[\frac{1}{2v} (-u + \sqrt{u^2 - 4rv}) \right]^{1/2} \quad (2.18)$$

$$m_{4,5} = \pm \left[\frac{1}{2v} (-u - \sqrt{u^2 - 4rv}) \right]^{1/2} \quad (2.19)$$

v pozitif ise, birden fazla çözüm vardır ve geçiş birinci düzendedir. $r = u = 0$ olduğunda böylece üçlü kritik nokta görülür ve bu analizden elde edilen üçlü kritik

üsteller $\alpha_t = \frac{1}{2}$, $\beta_t = \frac{1}{4}$, $\gamma_t = 1$, $\delta_t = 5$ şeklinde olur. Bu kritik üsteller kritik nokta için öngörülen değerlerden farklıdır.

2.4 Ising-Glauber Modeli

Ising modeli, basitliğinden, faz geçişlerini anlamadaki yararlılığından ve şaşırtıcı biçimde yaygın uygulamalarından dolayı, istatistik mekaniğinde en yaygın şekilde çalışılan modeldir. Klasik Ising modelinde, düzgün latisin noktalarında iki spin durumu bulunur. Spinler, $s(\mathbf{x})$: ± 1 , iki değerden birini alabilirler. Sistemin hamiltonyeni

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J s_i s_j \quad (2.20)$$

dir. Burada toplam bütün farklı en yakın komşu çiftleri $\langle i,j \rangle$ üzerindendir. Böylece komşu spinlerin bütün paralel çiftleri $-J$ ve bütün antiparalel çiftleri $+J$ enerji katkısı sağlar. J kuplaj (bağlantı) terimi pozitif ise etkileşmeler ferromanyetik olma eğilimindedir.

Ising modelin bütün termodinamik özellikleri $Z = \sum \exp(-\beta H)$ bölüşüm fonksiyonundan elde edilebilir. Burada toplam bütün spin konfigürasyonları üzerindendir ve $\beta = 1/T'$ dir. $J > 0$ için ve sıfır dış manyetik alanda, sıcaklık T kritik sıcaklık T_c' den küçük ve uzaysal boyut $d > 1$ olduğunda ferromanyetizma kendiliğinden ortaya çıkar. Bu sıralanan durumda, manyetizasyon sıfırdan farklıdır ve uzak spinler korelasyonludur. Sözü geçen T_c' den büyük sıcaklıklarda spinler konumsal olarak düzensizdir, +1 ve -1 durumlarında eşit sayılabırlar bu nedenle manyetizasyon sıfırdır. Dahası, spinler arasındaki uzaysal korelasyonlar eksponansiyel olarak bozulur.

Spin sisteminin bütün denge durumu özellikleri bölüşüm fonksiyonundan elde edilebilir. Ising modelin dengede olmayan özellikleri spin dinamiğinin doğasına bağlıdır. Spin dinamiğini formüle etmede serbest düşünülebilir, sadece detaylı denge koşulu tarafından kısıtlama vardır. Örneğin, spinler zamanda veya korele olmuş bloklarda değişebilir ve dinamik manyetizasyonu koruyabilir veya koruyamaz. Dengede olmayan istatistik fiziğinde dinamik kuralların bu tek olma eksikliği çoktur ve bu denge dışı

sistemlerin gelişimi için, denge durumu istatistik mekaniğindeki serbest enerji minimizasyonu gibi evrensel prensiplerin yokluğunu yansıtır.

Glauber 1963 te Ising modelini dengede olayan sistemlere genişleten bir model önerdi, Bu modele göre bir spin yönelimini rasgele alıncak olursa spin yönelimlerin değiştirmesi oranında sistemin enerjisi değişir. Bu durumda manyetizasyon genelde korunumlu değildir. Tek spin yöneliminin değişmesi sonucu üç türlü geçiş mümkündür, enerji artması, enerji azalması ve enerjinin korunduğu geçişler. Bu geçişler esnasında detaylı denge koşulu sağlanmalıdır[17]. Matematiksel olarak bu koşul,

$$P(\{s\})w(s \rightarrow s'_j) = P(\{s'_j\})w(s'_j \rightarrow s) \quad (2.21)$$

şeklinde ifade edilir. Bu ise daha önce belirtilen olasılık korunum denkleminin eşdeğeri.

Yukarıda verilen bilgilere göre bu tezde zamana bağlı değişen dış manyetik alanın varlığında 1 boyutlu kinetik Ising modelin Glauber dinamiğini yaklaşıklıkla bağımsız model ile çalışılacaktır. AFA (approximation free approach) yani yaklaşıklıkla bağımsız yaklaşım şu şekilde tanımlandı. İlk olarak, zamana bağlı ortalama manyetizasyonun $\langle \sigma_i \rangle$ zamanla gelişimi ve korelasyon $\langle \sigma_i \sigma_{i+1} \rangle$, burada σ_i , i'inci spin değişkeni gösterir, Suzuki-Kubo detaylı denge şartıyla değerlendirilir. Daha sonra, etkin ortalama alan yaklaşımı zarfında bu dinamik ilişkilerdeki görünen topluluk ortalaması değerlendirilir. Sonuç denklemler sadece $\langle \sigma_i \sigma_{i+1} \rangle$ ve $\langle \sigma_i \sigma_{i+2} \rangle$ gibi terimler içerir. İkisinden sonuncusu, Glauber detaylı denge şartıyla $\langle \sigma_i \rangle$ için dinamik denklemi değerlendiririz. Sonuç denklem sadece bir $\langle \sigma_i \sigma_{i+1} \rangle$ bilinmeyen terimi içerir. Bu son ilişkiyi kullanarak $\langle \sigma_i \sigma_{i+1} \rangle$ ve $\langle \sigma_i \sigma_{i+2} \rangle$ arasında bir ilişki elde ettik. Bu son ilişkiyi Suzuki-Kubo detaylı denge şartıyla elde edilen denklemlerde yerine koymak tam dinamik denklemlere sonuç verir.

Bu tezde Suzuki-Kubo detaylı denge şartıyla $\langle \sigma_i \rangle$ ve $\langle \sigma_i \sigma_{i+1} \rangle$ için dinamik denklemleri türetildi. Glauber detaylı denge şartıyla dinamik denklemin türetilmesi gösterildi. Son bölümde salınımın tam periyodu üzerinden $\langle \sigma_i \rangle$ 'nin zaman ortalaması olarak anlatılan

düzen parametresi için tam dinamik denklem için nümerik çözümün sonuçlarını sunulacaktır.

BÖLÜM 3

EN YAKIN KOMŞU ISING ZİNCİRİNDE DİNAMİK DENKLEMLER

Zamana bağlı dış manyetik alanın varlığında, en yakın komşu ferromanyetik değişim (değiş-tokuş) etkileşimini de içeren, $J > 0$, bir boyutlu Ising modeli düşünelim. Sistemin Hamiltonyen'i

$$H = J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - h(t) \sum_i \sigma_i \quad (3.1)$$

dir. Burada $\sigma_i = \pm 1$ değerlerini alan z doğrultusu boyunca spin bileşenidir ve $h(t)$

$$h(t) = h_0 \cos(\omega t) \quad (3.2)$$

ile verilen z doğrultusunda uygulanan değişken dış manyetik alandır. Sistem, tek spin Glauber dinamiğiyle verildiğinde, sistemin zamanla değişimi master denklemiyle açıklanır.

$$\frac{d}{dt} P(\{\sigma\}, t) = \sum_i \sum_{\hat{\sigma}_i} [-W_j(\sigma_j \rightarrow \hat{\sigma}_j, t) P(\{\sigma\}, t) + W_j(\sigma_j \rightarrow \hat{\sigma}_j, t) P(\{\sigma_{i \neq j}\}, \hat{\sigma}_j, t)] \quad (3.3)$$

burada $P(\{\sigma\}, t)$, t zamanında $(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$ durumunda bulunan spin sisteminin olasılığını veren olasılık dağılım fonksiyonudur ve $W_j(\sigma_j \rightarrow \hat{\sigma}_j, t)$ bir σ_j değerinden diğer olası $\hat{\sigma}_j$ değerine j'inci spin geçişleri olan birim zaman başına geçiş olasılığıdır. Denklem (2.3)'ün sağ tarafındaki ilk terim, spin durumunun, ilk σ_j değerinden olası son $\hat{\sigma}_j$ değerine geçişinden dolayı birim zaman başına $P(\{\sigma\}, t)$ olasılık dağılım fonksiyonunun

azalışını gösterir. Halbu ki, denklem (2.3)'ün sağ tarafındaki ikinci terim spin durumunun ilk $\hat{\sigma}_j$ değerinden son σ_j değerine geçişinden dolayı birim zaman başına olasılık dağılım fonksiyonunun artışı verir.

Açıkça, master denklemin çözümünün değerlendirmesinden önemli adım geçiş olasılığının tek determinantıdır. Fakat, geçiş olasılığı seçimi tek değildir, keyfilik barındırır. Diğer taraftan, seçilmiş geçiş olasılık ilişkisinin geçerliliğinin tek kriteri, onun detaylı denge şartını doğrulamaya bağlıdır.

Bu tezde, korelasyon etkileri kaybı olmadan bir dinamik denklem elde etmek için iki farklı geçiş olasılık ilişkisi kullanılacaktır. Birinci geçiş olasılık ilişkisi ilk olarak Glauber tarafından ortaya atılan olacaktır ve ikincisi Suzuki ve Kubo [18] örnek geçiş olasılık ilişkisi olacaktır. En yakın komşu spinlerine göre değişim etkileşim sınırı için birinci geçiş olasılık ilişkisi

$$W_j = \frac{1}{\tau} \left[1 - \frac{1}{2} \alpha \sigma_j (\sigma_{j-1} - \sigma_{j+1}) \right] (1 - \sigma_j \Gamma) \quad (3.4)$$

ile ifade edilebilir. Burada $\alpha = \tanh(2J\beta)$ ve $\Gamma = \tanh(h(t)\beta)$, $\beta = \frac{1}{kT}$ 'dir.

Ortalama manyetizasyon ilişkisi $\langle \sigma_j \rangle = \sum \sigma_j P(\sigma; t)$ ve master denklemini kullanarak ortalama manyetizasyonun zaman türevi

$$\tau = \frac{\partial}{\partial t} \langle \sigma_j \rangle = -\langle \sigma_j \rangle + \frac{1}{2} \alpha (\langle \sigma_{j-1} \rangle + \langle \sigma_{j+1} \rangle) + \Gamma \left(1 - \frac{1}{2} \alpha \right) (\langle \sigma_{j-1} \sigma_j \rangle + \langle \sigma_j \sigma_{j+1} \rangle) \quad (3.5)$$

olarak elde edilir.

Eğer iki konum korelasyonu $\langle \sigma_j \sigma_{j+1} \rangle$ tam olarak biliniyorsa korelasyon katkısı kaybı olmadan denklem tam olarak çözülebilir. Diğer bir deyişle, denklem (3.5), denklemin sağ tarafındaki bilinmeyen iki nokta korelasyon terimlerinden dolayı kısıtlı değildir. Bilinen ilişkilerle birlikte bütün korelasyon terimlerini muhafaza eden dinamik denklemleri değerlendirmeye çalışacağız. Bunu yapmak için, Suzuki ve Kubo tarafından önerilen geçiş olasılık ilişkisi kabul edilecektir. Bu yaklaşımda, T sıcaklığında, σ_j 'den $\hat{\sigma}_j$ 'ye her bir denenmiş spin yönelimi (taklası) geçiş aşağıdaki gibi kabul edildi,

$$W_j = \frac{1}{\tau} \frac{\exp [-\beta \Delta E(\sigma_j \rightarrow \hat{\sigma}_j)]}{\sum_{\hat{\sigma}_j} \exp [-\beta \Delta E(\sigma_j \rightarrow \hat{\sigma}_j)]} \quad (3.6)$$

Burada $\sum_{\hat{\sigma}_j}, \hat{\sigma}_j = \mp 1$ 'in iki olası değeri üzerinden toplamdır ve

$$\Delta E(\sigma_j \rightarrow \hat{\sigma}_j) = -(\hat{\sigma}_j - \sigma_j)(J \sum_{(j)} \sigma_j - h(t)) \quad (3.7)$$

Varsayılan yönelimden kaynaklanan sistemin enerjisindeki değişimi verir, burada $\sum_{(j)}$ toplamı bütün en yakın komşu çiftleri üzerinden yapılır.

$$W_j(1 \rightarrow -1) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp [-2\beta(J(\sigma_{j-1} + \sigma_{j+1}) + h(t))]}{\cos [2\beta(J(\sigma_{j-1} + \sigma_{j+1}) + h(t))]} \quad (3.8)$$

$$W_j(-1 \rightarrow 1) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp [2\beta(J(\sigma_{j-1} + \sigma_{j+1}) + h(t))]}{\cos [2\beta(J(\sigma_{j-1} + \sigma_{j+1}) + h(t))]} \quad (3.9)$$

Bu ilişkiler kullanılarak, ortalama manyetizasyon $\langle \sigma_j \rangle$ 'un türevi

$$\tau \frac{\partial}{\partial t} \langle \sigma_j \rangle = -\langle \sigma_j \rangle + \langle \tanh[2\beta(J(\sigma_{j-1} + \sigma_{j+1})h(t))] \rangle \quad (3.10)$$

Çalışmaların çoğunda, bu son denklem ortalama alan yaklaşımında çalışılır. Bu çalışmalardaki genel prosedür denklem (3.10)' un $\langle \tanh[2\beta(J(\sigma_{j-1} + \sigma_{j+1})h(t))] \rangle$ şeklinde olan son teriminde ortalama alan yaklaşımına başvurmaktır. Bunun anlamı denklem (3.10)'un son terimindeki bütün korelasyon etkilerini ihmal etmektir. Kolaylığına karşın, bu kabaca ortalama alan yaklaşımının periyodik olarak süren dinamik Ising modelin kapsamlı özelliğini yakaladığına inanılır. Fakat biz sezgisel olarak, denklem (3.10)'da korelasyon etkilerini ihmal etmenin, sistemin faz geçiş karakterinin yanlış yorumlanmasına yol açacağına inanıyoruz. Aslında, [9]'daki iki boyutlu kinetik Ising modelin dinamik Monte Carlo simülasyonu iddia ediyor ki; ortalama alan davranışlarının sonuçları sadece sonlu boyut etkileridir. Diğer taraftan, [7]'deki Monte Carlo simülasyonu sonucu ortalama alan tahminleri ile tamamen aynı fikirde olan benzer sonuçlar elde eder. Monte Carlo simülasyonu çalışmalarının sonuçlarının ortalama alnın sonuçlarından daha kesin olduğu düşünülebilir olmasına rağmen, bunların sonuçları, özellikle üçlü kritik nokta varlığında, tartışmalı konu olarak kalır.

Daha önce işaret edildiği gibi, bu çalışmanın amacı, ortalama alan sonuçlarının doğruluğunu ve bir boyutlu sistem için dinamik denklemlerin doğrudan değerlendirmesi ile simülasyon tahminlerini incelemektir. Bunu yapmak için, spinlerin korelasyon etkileri uygun şekilde düşünülmeli. Bir ilk adım olarak, [21]'de ilk önerilen ve denge Ising modellerine [19, 22-24] başarıyla uygulanan denklem (3.9)'daki son terimin değerlendirmesinde korelasyonlu etkin ortalama alan teorisini (correlated effective mean-field theory, CEMFT) öne süreceğiz. Aynı zamanda kinetik Ising modelde decoupling (ayrışım) yaklaşımına $\langle \sigma_i \sigma_j \dots \sigma_m \rangle = \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \dots \langle \sigma_m \rangle$ başvurulur, iki boyutlu ve üç boyutlu sistemler için [20]'de bu konu tartışılmıştır. Bu ise açık olarak, bağlaşım (coupling) yaklaşımı öngörülerıyla alakalı karışıklığa yol açan bazı önemli spin korelasyonlarını ihmal eder.

Efektif alan teorisi içerisinde, denklem (3.10)'da son terimdeki ifade içine diferansiyel operatör metodunu getirmek uygundur.

$$\langle \tanh [2\beta (J(\sigma_{j-1} + \sigma_{j+1}) + h(t))] \rangle = \langle \exp [2\beta (J(\sigma_{j-1} + \sigma_{j+1}) \nabla)] \tanh [\beta (x + h(t))] |_{x=0} \rangle \quad (3.11)$$

Burada ∇ , diferansiyel operatörü $\frac{dy}{dx}$ 'dir. $\sigma = \pm 1$ için Van der Waerden özdeşliğini kullanarak

$$\exp(c\sigma_j) = \cosh(c) + \sigma_j \sinh(c) \quad (3.12)$$

burada c skaler sabittir,

$$\langle \exp [2\beta (J(\sigma_{j-1} + \sigma_{j+1}) \nabla)] \tanh [\beta (x + h(t))] |_{x=0} \rangle = \frac{1}{4} [a_0 + 2a_1 \langle \sigma_j \rangle + a_2 \langle \sigma_{j-1} \sigma_{j+1} \rangle] \quad (3.13)$$

elde ederiz, burada basit bir ilişki $\langle \sigma_{j-1} \rangle = \langle \sigma_{j+1} \rangle = \langle \sigma_j \rangle$ kullandık. a_0, a_1 ve a_2 katsayıları sırasıyla

$$a_0 = \tanh \beta (4J + 2h(t)) + \tanh \beta (-4J + 2h(t)) + 2 \tanh 2\beta h(t) \quad (3.14)$$

$$a_1 = \tanh\left(\beta(4J + 2h(t))\right) - \tanh(\beta(-4J + 2h(t))) \quad (3.15)$$

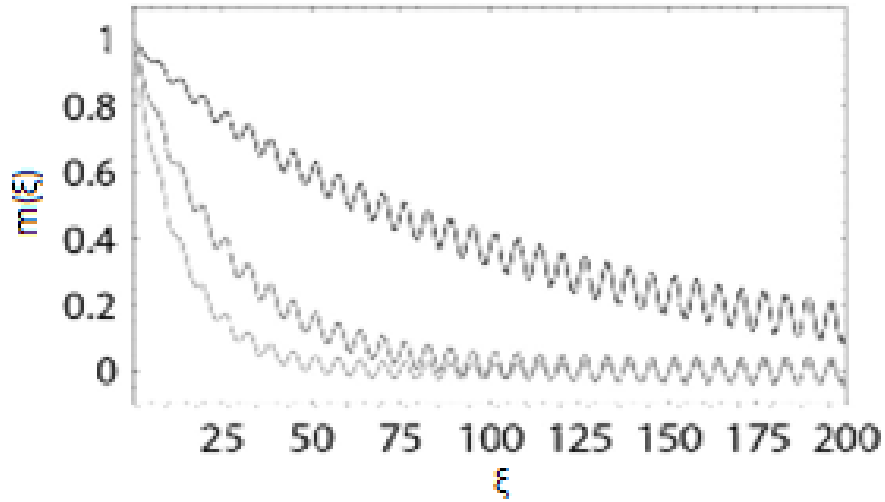
$$a_2 = \tanh \beta(4J + 2h(t)) + \tanh \beta(-4J + 2h(t)) - 2 \tanh 2\beta h(t) \quad (3.16)$$

Denklem (2.13)'teki ilişkiyi denklem (2.10)'da yerine yazmak, doğrudan

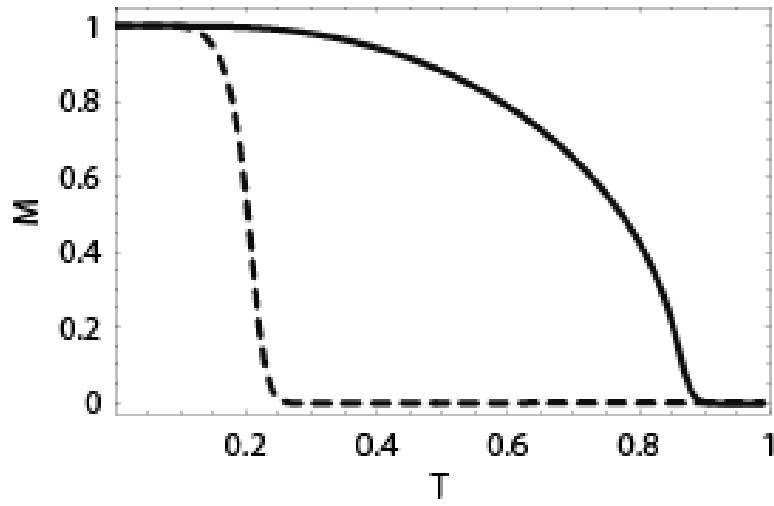
$$\tau \frac{\partial}{\partial t} \langle \sigma_j \rangle = - \langle \sigma_j \rangle + \frac{1}{4} [a_0 + 2a_1 \langle \sigma_j \rangle + a_2 \langle \sigma_{j-1} \sigma_{j+1} \rangle] \quad (3.17)$$

'i verir.

Açık bir şekilde birbirlerine eşit olan $\langle \sigma_{j-1} \sigma_j \rangle$ ve $\langle \sigma_j \sigma_{j+1} \rangle$ bilinmeyen terimler gibi $\langle \sigma_{j-1} \sigma_{j+1} \rangle$ bilinmeyen spin korelasyonları içerdiği için bu denklem kapalı değildir. Daha önce vurgulandığı gibi, tam olarak dinamik nicelikler elde etmek için kapalı denklemler bulmak çok önemlidir. Bu amaç için bir sonraki adım olarak, $\gamma_{j,j+1} = \langle \sigma_j \sigma_{j+1} \rangle = \sum_{\{\sigma\}} \sigma_j \sigma_{j+1} P(\{\sigma\}; t)$ iki nokta spin korelasyonunun zaman türevini değerlendireceğiz. Zaman türevinin değerlendirilmesinde master denklemini kullanmak [25],

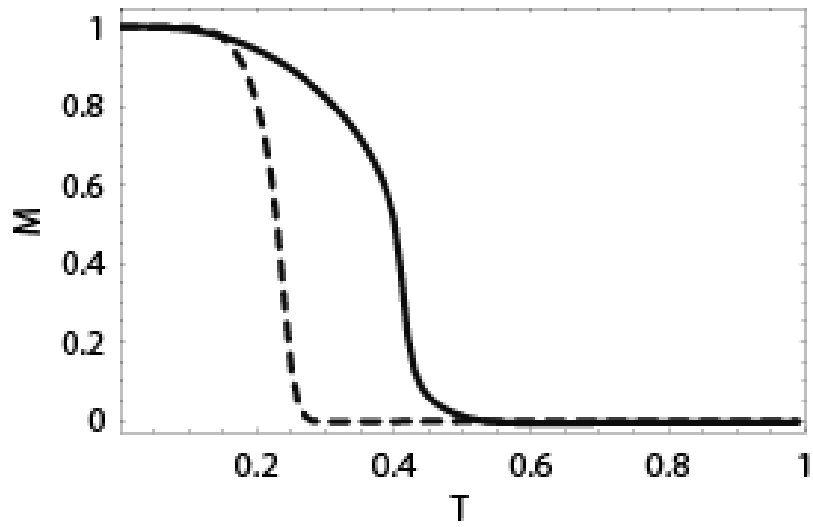


Şekil 3. 1 $m(\xi = 0) = 1$, $h_r = 0.5$ ve $\tau = 1$ durumunda $T=0.3, 0.5$ ve 0.8 indirgenmiş sıcaklık değerleri için manyetizasyonun grafiği.



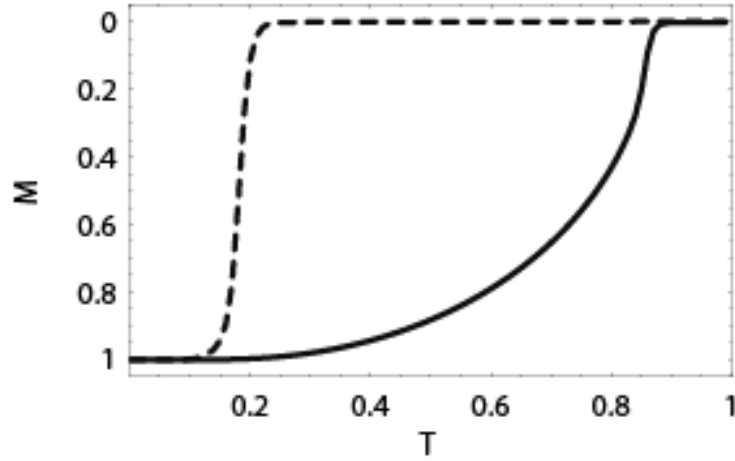
Şekil 3. 2 $m(\xi = 0) = 1, h_r = 0.5$ ve $\tau = 1$ durumunda indirgenmiş sıcaklığa göre ortalama manyetizasyonun grafiği.

Sürekli çizgi ortalama alan yaklaşımının sonucu iken kesikli çizgi bu tezde elde edilen kesin denklem sisteminin sonucudur.



Şekil 3. 3 $m(\xi = 0) = 1, h_r = 0.8$ ve $\tau = 1$ durumunda indirgenmiş sıcaklığa göre ortalama manyetizasyonun grafiği.

Sürekli çizgi ortalama alan yaklaşımının sonucu iken kesikli çizgi bu tezde elde edilen kesin denklem sisteminin sonucudur.



Şekil 3. 4 $m(\xi = 0) = 1, h_r = 0.5$ ve $\tau = 1$ durumunda indirgenmiş sıcaklığa göre ortalama manyetizasyonun grafiği.

Sürekli çizgi ortalama alan yaklaşımının sonucu iken kesikli çizgi bu tezde elde edilen kesin denklem sisteminin sonucudur.

$$\tau \frac{d\gamma_{j,j+1}}{dt} = -2\gamma_{j,j+1} + \sum_{\{\sigma\}} [\sigma_j \sum_{\hat{\sigma}_{j+1}} \hat{\sigma}_{j+1} W_{j+1}(\sigma_{j+1} + \hat{\sigma}_{j+1}) + \sigma_{j+1} \sum_{\hat{\sigma}_j} \hat{\sigma}_j W_j(\sigma_j + \hat{\sigma}_j)]$$

$$\tau P(\{\sigma\}; t) \quad (3.18)$$

'ye götürür. Denklem (3.8) ve (3.9)'daki ilişkiler son denklemde yerine yazılırsa,

$$\tau \frac{d\gamma_{j,j+1}}{dt} = -2\gamma_{j,j+1} + \sum_{\{\sigma\}} [\sigma_j \tanh 2\beta (J(\sigma_j + \sigma_{j+2}) + h(t)) + \sigma_{j+1} \tanh(2\beta (J(\sigma_{j-1} + \sigma_{j+1}) + h(t)))]$$

$$(3.19)$$

'ye götürür. Önceki gibi efektif alan yaklaşımına başvurmak denklem (3.19)'u

$$\tau \frac{d\gamma_{j,j+1}}{dt} = -2\gamma_{j,j+1} + \frac{1}{2} [a_1 + (a_0 + a_1 + a_2) \langle \sigma_j \rangle + a_1 \gamma_{j,j+2}]$$

$$(3.20)$$

haline getirir. Burada herhangi bir m tamsayısı için $\langle \sigma_j \rangle = \langle \sigma_m \rangle$ ve $\langle \sigma_j^2 \rangle = 1$ basit gerçeklerini kullandık. Denklem (3.5) ve denklem (3.17) eş denklemler olduğundan, $\gamma_{j,j+1}$ ve $\gamma_{j,j+2}$ arasında,

$$\gamma_{j,j+2} = \frac{1}{a_2} [(4\Gamma - a_0) + (4\alpha - 2a_1)\langle \sigma_j \rangle - 4\alpha\gamma_{j,j+1}] \quad (3.21)$$

gibi basit bir ilişki elde edilebilir. Şimdi, $\langle \sigma_{j-1}\sigma_{j+1} \rangle$ terimi eşiti $\langle \sigma_j\sigma_{j+2} \rangle = \gamma_{j,j+2}$ terimi ile yer değiştirirse ve denklem (3.21)'deki ilişki denklem (3.17)'de yerine yazılırsa, denklem (3.17)

$$\tau \frac{\partial}{\partial t} \langle \sigma_j \rangle = -\langle \sigma_j \rangle + [\Gamma + \alpha\langle \sigma_j \rangle - \alpha\gamma_{j,j+1}] \quad (3.22)$$

haline gelir. Denklem (3.21)'deki ilişkiyi denklem (3.20)'de yerine yazmak, denklem (3.20)'yi

$$\begin{aligned} \tau \frac{d\gamma_{j,j+1}}{dt} = & -2\gamma_{j,j+1} + \frac{1}{2} \left[a_1 \left(1 + \frac{1}{a_2} (4\Gamma - a_0) \right) \right. \\ & + \left((a_0 + a_2) + \frac{a_1}{a_2} (4\alpha - 2a_1) \right) \langle \sigma_j \rangle \\ & \left. - 4\alpha \frac{a_1}{a_2} \Gamma \gamma_{j,j+1} \right] \end{aligned} \quad (3.23)$$

haline getirir.

Denklemler sistemi olan denklem (3.22) ve denklem (3.23)'ün tüm terimleri tam olarak hesaplanabilir olduğundan artık kapalıdır. Sonuç olarak, bütün korelasyonları tam olarak bulunduran sistem elde ettik. Basitlik için, son iki denklemi izlenebilir parametrelerle

$$\Omega \frac{d}{d\xi} \langle \sigma_j \rangle = -\langle \sigma_j \rangle + [\Gamma + \alpha\langle \sigma_j \rangle - \alpha\gamma_{j,j+1}] \quad (3.24)$$

$$\Omega \frac{d\gamma_{jj+1}}{d\xi} = -2\gamma_{jj+1} + \frac{1}{2} \left[a_1 \left(1 + \frac{1}{a_2} (4\Gamma - a_0) \right) + \left((a_0 + a_2) + \frac{a_1}{a_2} (4\alpha - 2a_1) \right) \langle \sigma_j \rangle - 4 \frac{a_1}{a_2} \alpha \Gamma \gamma_{jj+1} \right] \quad (3.25)$$

şeklinde yazarız. Burada $\xi = \omega t$ ve $\Omega = \tau \omega$ 'dır. Aşağıdakilerde $\Omega = 2\pi$ 'yi yerleştireceğiz. α, Γ, a_0, a_1 ve a_2 katsayıları için yeni değişkenler $T = (4\beta J)^{-1}$ ve $h_r = h_0/(4J)$ öne sürmenin uygun olduğunu bulduk. Geleneksel olarak anlık manyetizasyon $m(\xi)$ tarafından ifade edildiğinden, ayrıca $\langle \sigma_j \rangle = m(\xi)$ notasyonunu kullanırız. Nümerik çözüm ve bu denklemler sisteminin tartışması bir sonraki bölümün konusu olacak. Bunu yaparken de, motivasyonumuzun temel bölümü dinamik düzen parametresinin özelliklerini araştırmak olacak yani bir periyottaki ortalama manyetizasyon.

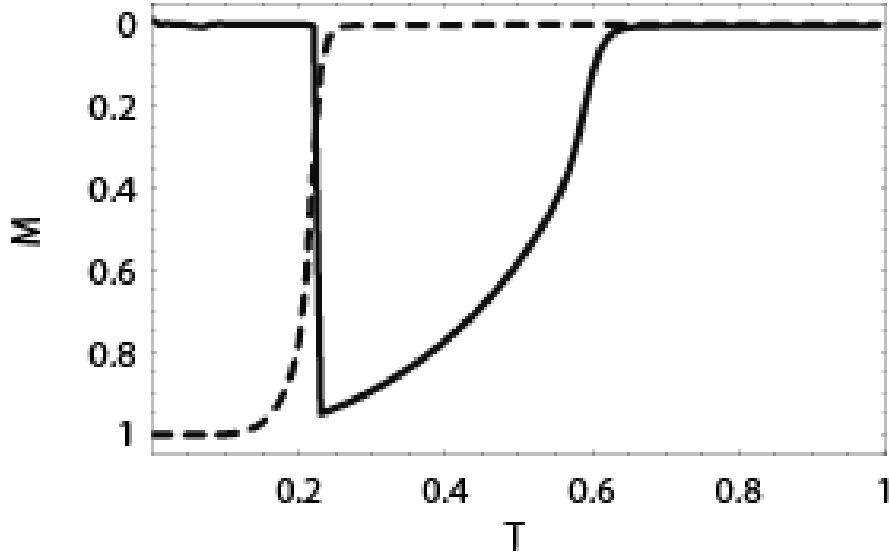
BÖLÜM 4

SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu bölümde kesin dinamik denklem sistemi çözümünü çalıştık ve bu duruma karşılık olan faz diyagramını verdik. Bu amaç için, T ve h_r parametreleri değiştirildiğinde denklem (3.24) ve denklem (3.25) ile verilen denklem sisteminin nümerik çözümünü çalışmamız gerekiyor. Şekil 3.1 çeşitli T değerleri ve $h_r = 0.5$ ve $\tau = 1$ için $m(\xi)$ 'nin çözümünü gösterir. Bu şekil ξ 'nin belirli bir yeterince büyük değerlerinden sonra $m(\xi)$ 'nin çözümlerinin ξ 'nin periyodik fonksiyonları olduğunu gösteriyor. Dinamik faz geçişi çalışmasında, anlık manyetizasyonun $m(\xi)$ özelliklerinden bahsetmek yerine

$$M = \frac{1}{2\pi} \int_{\xi_0}^{2\pi + \xi_0} m(\xi) d\xi \quad (4.1)$$

ile verilen, ξ periyodu üzerinden ortalama manyetizasyonu M 'i düşünmek daha uygundur. Burada ξ_0 düşük sıcaklık değeridir ayrıca $m(\xi)$, ξ 'nin periyodik fonksiyonudur. Çeşitli düşük dış alan büyüklüklerinin h_r değerleri için düşük sıcaklığın T fonksiyonu olarak M 'nin davranışı denklem (3.1)'den elde edilir ve sonuçların şekil 3.2, şekil 3.3, şekil 3.4, şekil 4.1'de grafiği çizilmiştir. Bu şekillerde, kesiksiz çizgiler ortalama alan davranışının sonuçlarına karşılık gelirken kesikli çizgiler bu çalışmada elde edilen tam denklemler sistemi tarafından elde edilen çözüm sonuçlarını gösterir. Şekil 3.2'de, $h_r = 0.5$



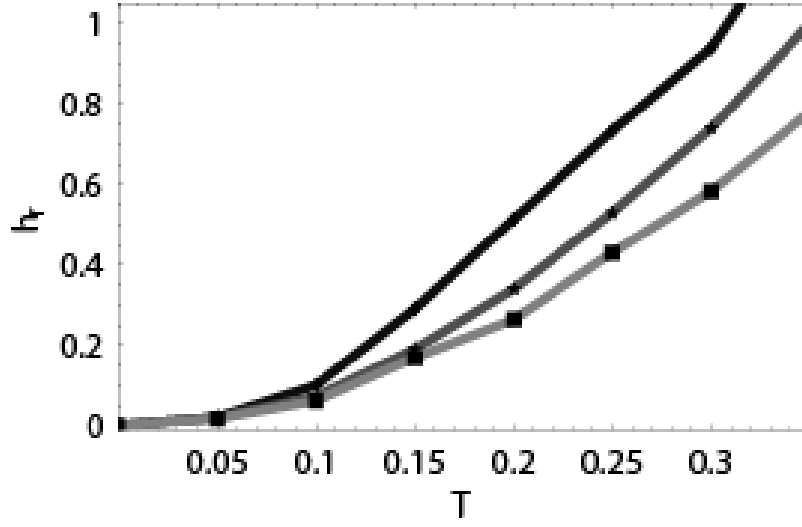
Şekil 4.1 $m(\xi = 0) = 1, h_r = 0.75$ ve $\tau = 1$ durumunda indirgenmiş sıcaklığa göre ortalama manyetizasyonun grafiği.

Sürekli çizgi ortalama alan yaklaşımının sonucu iken kesikli çizgi bu tezde elde edilen kesin denklem sisteminin sonucudur.

ve $\tau = 1$ için grafik çizilmiştir. İlk anlık manyetizasyon $\langle m(\xi = 0) \rangle = 1$ olarak kurulur. Bu tam davranıştan kritik düşük sıcaklık 0.23 civarında ortaya çıkarken ortalama alan davranışından kritik düşük sıcaklık 0.85 civarında ortaya çıkar. Tahminlerin oldukça farklı olmasına rağmen, her iki geçiş de ikinci tür faz geçişlerinin karakterine sahiptir.

Şekil 3.3, τ ve $\langle m(\xi = 0) \rangle$ 'nin aynı değerleri için fakat $h_r = 0.8$ için çizilmiştir. Bu şekilden tam sonuçların tahminleri ve kritik düşük sıcaklık için ortalama alan davranışı sırasıyla 0.27 ve 0.47'dir. Her iki çizimdeki geçişlerin karakteri şekil 3.2'nin sonuçları olduğu taktirde ikinci tür olarak yorumlanabilir.

Şekil 3.4, ilk değerlere ortalama manyetizasyonun bağımlılığını araştırmak yerine $m(\xi = 0) = 0$ 'a kurulan ilk koşullar için beklenen şekil 3.2'nin aynı parametreleri için çizilmiştir. Şekil 3.2 ve şekil 3.4'ün sonuçları karşılaştırıldığında şekil 3.2'deki ortalama manyetizasyon $M(T)$ eğrileri $-M(T)$ ilişkisi ile şekil 3.4'ün eğrilerine eşit olduğunu görmek kolaydır. Daha da önemlisi, her iki şekilden tahmini kritik düşük sıcaklıklar birbirine eşittir. Böylece, ilk koşullar tahmini kritik düşük sıcaklık değerlerine değişmez. Dahası, şekillerin geçiş karakteri ikinci türdür.



Şekil 4.2 Farklı durulma süreleri için kesin dinamik sistemin kritik faz diyagramının grafiği.

Şekil 4.1’te her iki çizimde ortalama manyetizasyon eğrilerinin sonuçlarını sunduk.

Burada parametreler Şekil 3.4’teki gibidir fakat $h_r = 0.75$ ’in değeri seçilmiştir. Ortalama alan davranışı ile ilgili olarak ortalama manyetizasyon eğrisi sırasıyla 0.22 ve 0.62 kritik düşük sıcaklıklar civarında hem birinci hem de ikinci düzen geçişleri olduğunu gösterir. Bu iyi bir üçlü kritik nokta belirtisi olarak yorumlanır. Ancak, tam davranışın ortalama manyetizasyon eğrisinin 0.23 düşük kritik sıcaklığı civarında sadece ikinci merteye geçişi vardır. Bu belirli parametreler için sadece ikinci merteye faz geçişi olması üçlü kritik noktanın yokluğu olarak da yorumlanır. Böylece, tam ve ortalama alan davranışları tahminleri oldukça şaşırtıcıdır, sadece kritik sıcaklık tahminlerinin farklı olması dolayısı ile değil ayrıca bu çizimlerin geçiş karakterleri de aynı değildir.

Geçiş karakterlerinin araştırması ile ilgili daha dikkatli olmak yerine (T, h_r) düzleminde faz diyagramlarını çalışmak gerekir. Bu amaç için Şekil 4.2’yi çizdik. Şekil 4.2’deki eğriler durulma zamanları $\tau = 0.5, 1$ ve 2 için ferromanyetik ve paramanyetik fazların faz sınırlarıdır. Şekil, geçiş zamanının değerleri arttırıldığında ferromanyetik bölgelerin büyüdüğünü gösterir. Daha da önemlisi, üçlü kritik nokta yokluğunun anlamı ferromanyetik ve paramanyetik fazların yandaş bölgesi yoktur. Bu son sonuç, yandaş(coexisting) alan ve üçlü kritik nokta varlığını öngördüğünden ortalama alan faz

diyagramının tahminine bütünüyle karşıdır. Önemli korelasyon terimlerinin atılmasından ötürü ortalama alan davranışının yanlış tahminlerini düşündük. Bir kere daha iki boyutta Monte Carlo çalışmaları tam davranışımızın tahminlerini desteklediğinden bahsetmek değerlidir, yani yandaş(coexisting) alan ve üçlü kritik nokta yokluğu. İki boyuttaki dalgalanmalar bir boyuttakinden daha etkili olduğu için, Monte Carlo çalışmalarının sonuçları bu çalışmada gelişen tam davranışın tahminlerini destekleyici olarak düşünülebilir.

Sonuç olarak, dış sinüzoidal salınımlı manyetik alan varlığında bir boyutlu kinetik Ising modelin dinamik karşılığını tartıştık. İki farklı detaylı denge koşulunu korelasyon ilişkisi ile birlikte kullanarak bütün terimlerin tam olarak sunulduğu bir denklem sistemi elde ettik. Geleneksel prosedürler izlenerek, sistem parametrelerinin belirli değerleri için ortalama manyetizasyon eğrilerini değerlendirdik. Birkaç durulma zamanları (relaxation times) değerleri için (T, h_r) 'de faz diyagramlarını da hesapladık. Sonuçlardan, üçlü kritik noktanın yokluğunu ve ayrıca yandaş (coexisting) ferromanyetik ve paramanyetik alanı elde ettik. Tabi ki, bu sonuçlar bütünüyle ortalama alan davranışının tahminlerine karşıdır. Ortalama alan resminde korelasyon etkilerinin yokluğundan dolayı bu çelişkileri yorumladık. Böylece Glauber dinamiği yaklaşımında, bir boyutlu kinetik Ising modeli sadece ikinci mertebeden faz geçişini sergiledi. Ortalama alan resminde birinci mertebe geçişinin öngörüsü sadece önemli korelasyon terimlerinin ihmal edilmesinden kaynaklanmaktadır.

- [1] Glauber, R.J., (1963). "Time-Dependent Statistics of the Ising Model", Journal of Mathematical Physics, 4, 294.
- [2] Tomé, T. ve de Oliveira, M. J., (1990). "Dynamic Phase Transition in the Kinetic Ising Model under a Time-Dependent Oscillating Field", Physical Review, A 41, 4251.
- [3] Zimmer, M. F., (1993). "Ising Model in an Oscillating Magnetic Field: Mean-Field Theory", Physical Review, E 47, 3950.
- [4] Buendía, G. M. ve Machado, E., (1998). "Kinetics of a Mixed Ising Ferrimagnetic System", Physical Review, E 58, 1260.
- [5] Acharyya, M. ve Chakrabarti, B. K., (2005). "Response of Ising Systems to Oscillating and Pulsed Fields: Hysteresis, Ac, and Pulse Susceptibility", Physical Review, B 52, 6550.
- [6] Acharyya, M., (1997). "Nonequilibrium Phase Transition in the Kinetic Ising Model: Critical Slowing Down and the Specific-Heat Singularity", Physical Review, E 56, 2407.
- [7] Acharyya, M., (1999). "Nonequilibrium Phase Transition in the Kinetic Ising Model: Existence of a Tricritical Point and Stochastic Resonance", Physical Review, E 59, 218.
- [8] Sides, S. W., Rikvold, P. A., ve Novotny, M.A., (1999). "Kinetic Ising Model in an Oscillating field: Avrami Theory for the Hysteretic Response and Finite-Size Scaling for the Dynamic Phase Transition", Physical Review E 59, 2710.
- [9] Korniss, G., Rikvold, P.A. ve Novotny, M.A., (2002). "Absence of First-Order Transition and Tricritical Point in the Dynamic Phase Diagram of a Spatially Extended Bistable System in an Oscillating Field", Physical Review, E 66, 056127.
- [10] Luse C. N., ve Zangwill, A., (1994). "Discontinuous Scaling of Hysteresis Losses", Physical Review, E 50, 224.
- [11] Berkolaiko, G. ve Grinfeld, M., (2007). "Type of Dynamic Phase Transition in Bistable Equation", Physical Review, E 76, 061110.

- [12] Gould, H. ve Tobochnik, J., (1996). An Introduction to Computer Simulation Methods, Second Edition, Addison-Wesley, Massachusetts.
- [13] Landau. D. P., ve Binder K. (2005). A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, Second Edition, Cambridge University Press, New York
- [14] Lo, W. S., ve Pelcovits, R.A., (1990). "Ising Model in a Time-Dependent Magnetic Field", Physical Review, A 41, 7471.
- [15] Anjos, A. S., Mariz, A. M., Nobre, F. D., ve Araujo, I. G., (2008). "Spin-1 Ising Model: Exact Damage-Spreading Relations and Numerical Simulations", Physical Review, E 78, 031105.
- [16] Sethna, J. P., (2007). Statistical Mechanics Entropy, Order Parameters, and Complexity, Clarendon Press, Oxford.
- [17] Krapivsky, P. L., Redner S., ve Ben-Naim E. (2010). A Kinetic View of Statistical Physics, Second Edition, Cambridge University Press, New York.
- [18] Suzuki, M. ve Kubo, R., J. (1968). Phys. Soc. Jap. 24, 51.
- [19] Honmura, R., (1984). "Correlated-Effective-Field Treatment of the Anisotropic Ising Ferromagnet: Thermodynamical Properties", Physical Review, B 30, 348.
- [20] Shi, X., Wei, G. ve Li, L., (2008). Phys. Lett. A 372, 5922.
- [21] Kaneyoshi, T., Fittipaldi, I.P., Honmura, R. ve Manebe, T., (1981). "New Correlated-Effective-Field Theory in the Ising Model", Physical Review, B 24, 481.
- [22] Sarmiento, E. F. ve Kaneyoshi T., (1993). "Phase Diagrams and Tricritical Behavior of a Diluted Spin-1 Transverse Ising Model in a Random Field", Physical Review, B 48, 3232.
- [23] Bobak, A. ve Jaščur, M., (2005). "Ferrimagnetism in Diluted Mixed Ising Spin System", Physical Review B, 51, 11533.
- [24] Yan, S. L. ve Yang, C. Z., (1998). "Effect of the Transverse Field on the Bond-Diluted Mixed Ising Spin System with Single-Ion Anisotropy", Physical Review, B 57, 3512.
- [25] Zhu, J. Y. ve Yang, Z. R., (1991). "Glauber Critical Dynamics: Exact solution of the Kinetic Gaussian Model", Physical Review, E 59, 1551.

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : Ceren BAYINDIR
Doğum Tarihi ve Yeri : 29.04.1985 Trabzon
Yabancı Dili : İngilizce
E-posta : cerenbayindir@yahoo.com

ÖĞRENİM DURUMU

Derece	Alan	Okul/Üniversite	Mezuniyet Yılı
Y. Lisans	Fizik	Yıldız Teknik Üniversitesi	-
Lisans	Fizik	Yıldız Teknik Üniversitesi	2009
Lise	Fen-Matematik	Trabzon Kanuni A.L.	2003

İŞ TECRÜBESİ

Yıl	Firma/Kurum	Görevi
2010	Sevinç Dershaneleri	Fen Bilgisi Öğretmeni

