

YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

KARIŞIK ISING SPİN SİSTEMLERİNİN
KİNETİĞİ

Fizikçi Melek YAVUZ

F.B.E. Fizik Anabilim Dalı Fizik Programında
Hazırlanan

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Tez Danışmanı : Yrd. Doç. Dr. Tuncer KAYA (YTÜ)

İSTANBUL, 2009

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
SİMGE LİSTESİ	iii
KISALTMA LİSTESİ.....	iv
ŞEKİL LİSTESİ.....	v
ÖNSÖZ	vii
ÖZET	viii
ABSTRACT	ix
1 GİRİŞ	1
2 GLAUBER DİNAMİĞİ.....	3
2.1 Tek Spinli Model	3
2.2 Birden Çok Spinden Oluşan Sistem	5
3 SPİN-1 BLUME-CAPEL MODELİN KİNETİĞİ	9
4 SPİN-1/2 VE SPİN-1 KARIŞIK ISING MODELİN KİNETİĞİ.....	23
4.1 $w_j(\sigma_j)$ nin Hesaplanması	24
4.2 $w_i(S_i \rightarrow S'_i)$ nün Hesaplanması.....	25
5 RASTGELE DEĞERDEKİ DIŞ MANYETİK ALANLA ÇÖZÜLEN BLUME CAPEL MODELİN KİNETİĞİ	34
6 SONUÇLAR	42
KAYNAKLAR.....	43
ÖZGEÇMİŞ.....	45

SİMGE LİSTESİ

D	Kristal alan etkileşimi yada tek iyon anizotropisi
d	İndirgenmiş kristal alan etkileşimi
H	Zamana bağlı salınım yapan dış manyetik alan
H_0	Sabit dış manyetik alan
h	İndirgenmiş dış manyetik alan
J	Değiş-tokuş etkileşim parametresi
k_B	Boltzman sabiti
M	Ortalama manyetizasyon
m	Manyetizasyon
Q	Toplam manyetizasyon
T	İndirgenmiş sıcaklık
w	Açısal frekans
Z	Koordinat sayısı
τ	Durulma (rölaksasyon) süresi
α	Durulma süresinin tersi
Ω	İndirgenmiş açısal frekans
ξ	İndirgenmiş zaman
χ_n	Dış manyetik alanın rastgele kısmı

KISALTMA LİSTESİ

BC	Blume Capel Model
DPT	Dinamik faz geiş noktası
F	Ferromanyetik faz
h_t	1. türden faz geiş dış manyetik alanı
P	Paramanyetik faz
P+F	İki fazın bir arada bulunduğu bölge (coexistence bölge)
T_c	2. türden faz geiş sıcaklığı
T_t	1. türden faz geiş sıcaklığı

ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa

Şekil 3.1	Manyetizasyonun zamanla değişim grafiği	16
Şekil 3.2a	$d=-0.25, h=0.5, T=0.75$ iken manyetizasyonun zamanla değişim grafiği.....	16
Şekil 3.2b	$d=-0.25, h=0.2, T=0.5$ iken manyetizasyonun zamanla değişim grafiği	16k
Şekil 3.2c	$d=-0.25, h=0.75, T=0.1$ iken manyetizasyonun zamanla değişim grafiği.....	17
Şekil 3.3a	$d=-0.25, h=0.8, \Omega/2\pi =1$ iken indirgenmiş sıcaklığın fonksiyonu olarak ortalama manyetizasyon	17
Şekil 3.3b	$d=-0.25, h=0.25, \Omega/2\pi =1$ iken indirgenmiş sıcaklığın fonksiyonu olarak ortalama manyetizasyon	17
Şekil 3.3c	$d=-0.25, h=0.01, \Omega/2\pi =1$ iken indirgenmiş sıcaklığın fonksiyonu olarak ortalama manyetizasyon	18
Şekil 3.3d	$d=-0.25, h=0.01, \Omega/2\pi =1$ iken indirgenmiş sıcaklığın fonksiyonu olarak ortalama manyetizasyon	18
Şekil 3.3e	$d=-0.25, h=0.85, \Omega/2\pi =1$ iken indirgenmiş sıcaklığın fonksiyonu olarak ortalama manyetizasyon	18
Şekil 3.3f	$d=0.25, h=0.5, \Omega/2\pi =1$ iken indirgenmiş sıcaklığın fonksiyonu olarak ortalama manyetizasyon	18
Şekil 3.4	İndirgenmiş dış manyetik alanın fonksiyonu olarak ortalama manyetizasyon ...	19
Şekil 3.5	Statik h değerleri için T ve h nin fonksiyonu olarak ortalama manyetizasyon....	20
Şekil 3.6a	$d=0.25$ iken Blume Capel modelin (T,h) düzleminde faz diyagramı	21
Şekil 3.6b	$d=-0.25$ iken Blume Capel modelin (T,h) düzleminde faz diyagramı.....	21
Şekil 3.6c	$d=-0.525$ iken Blume Capel modelin (T,h) düzleminde faz diyagramı.....	21
Şekil 3.6d	$d=-1$ iken Blume Capel modelin (T,h) düzleminde faz diyagramı.....	21
Şekil 3.7	$\Omega/2\pi =0.5$ iken (T,h) düzleminde faz diyagramı.....	22
Şekil 3.8	$\Omega/2\pi =0.1$ iken (T,h) düzleminde faz diyagramı.....	22
Şekil 4.1	$T=0.05, h=0.5, \Omega=2\pi, d=0.1$ iken farklı başlangıç koşullarında toplam manyetizasyonun zamanla değişimi.....	30
Şekil 4.2a	$d=0.1$ ve $h=0.56$ iken ortalama manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklığa bağlı değişimi	31
Şekil 4.2b	$d=0.1$ ve $h=0.4$ iken ortalama manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklığa bağlı değişimi	31

Şekil 4.2c	$d=0.1$ ve $h=0.46$ iken ortalama manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklığa bağlı değişimi	31
Şekil 4.2d	$d=0.1$ ve $h=0.46$ iken ortalama manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklığa bağlı değişimi	31
Şekil 4.3	$d=0.1$ iken $(T-h)$ düzleminde faz diyagramı	32
Şekil 4.4	$d=-0.0075$ iken (T,h) düzleminde faz diyagramı	33
Şekil 5.1	H nin zamanla değişimi	34
Şekil 5.2a	$d=-0.25$, $h_0=0.2$, $m(0)=1$ iken rastgele değerli manyetizasyonun zamana göre değişimi	35
Şekil 5.2b	$d=-0.25$, $h_0=0.2$, $m(0)=0$ iken rastgele değerli manyetizasyonun zamana göre değişimi	35
Şekil 5.2c	$d=-0.25$, $h_0=0.5$, $m(0)=1$ iken rastgele değerli manyetizasyonun zamana göre değişimi	36
Şekil 5.2d	$d=-0.25$, $h_0=0.5$, $m(0)=1$ iken rastgele değerli manyetizasyonun zamana göre değişimi	36
Şekil 5.2e	$d=-0.25$, $h_0=0.5$, $m(0)=0$ iken rastgele değerli manyetizasyonun zamana göre değişimi	36
Şekil 5.3	$d=0.25$, $h_0=0.85$, $m(0)=1$ iken ve düzensizlik yokken ortalama manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklıkla değişimi	37
Şekil 5.4	$d=0.25$, $h_0=0.85$, $m(0)=1$ ve dış manyetik alanın rastgele kısmı $[-0.05,0.05]$ iken ortalama manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklıkla değişimi	38
Şekil 5.5	$d=0.25$, $h_0=0.85$, $m(0)=1$ ve dış manyetik alanın rastgele kısmı $[-0.2,0.2]$ iken ortalama manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklıkla değişimi	38
Şekil 5.6	$d=0.25$, $h_0=0.4$, $m(0)=1$ ve dış manyetik alanda gürültü yokken ortalama manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklıkla değişimi	39
Şekil 5.7	$d=0.25$, $h_0=0.4$, $m(0)=1$ ve dış manyetik alanın rastgele kısmı $[-0.1,0.1]$ iken ortalama manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklıkla değişimi	39
Şekil 5.8	$d=0.25$, $h_0=0.4$, $m(0)=1$ ve dış manyetik alanın rastgele kısmı $[-0.2,0.2]$ iken ortalama manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklıkla değişimi	40
Şekil 5.9	$d=-0.25$, $h_0=0.2$, $m(0)=0$ iken ortalama manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklıkla değişim grafiği	40
Şekil 5.10	$d=-0.25$, $h_0=0.2$, $m(0)=0$ ve manyetizasyonun rastgele kısmı $[-0.05,0.05]$ iken ortalama manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklıkla değişim grafiği	41
Şekil 5.11	$d=-0.25$, $h_0=0.2$, $m(0)=0$ ve manyetizasyonun rastgele kısmı $[-0.1,0.1]$ iken ortalama manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklıkla değişim grafiği	41

ÖNSÖZ

Tezim süresince yardımlarını esirgemeyen tez danışmanı hocam Yrd. Doç. Dr. Tuncer KAYA'ya teşekkürlerimi bir borç bilirim.

Ayrıca her zaman yaptıklarımın arkasında duran ve beni destekleyen aileme de teşekkür ederim.

KARIŞIK ISING SPİN SİSTEMLERİNİN KİNETİĞİ

Melek YAVUZ

Fizik, Yüksek Lisans Tezi

Spin sistemlerinin statik davranışları fiziksel olarak birçok durum için çok iyi açıklanmakla birlikte, dinamik spin sistemlerinin zaman içindeki evrimi halen açık bir problemdir. Dinamik spin sistemlerinin temel bir teorisi olmamakla birlikte, Glauber tarafından yapılan tek spin değişimli model bu tür sistemlerin analizinde kuramsal modeli oluşturmaktadır. Bu modele göre birim zaman içinde durulma süresinin tersi oranında geçiş yapan spinlerin olasılıklarının zaman içindeki dönüşümü master denklem olarak anılan bir diferansiyel denklemle anlatılmıştır ve bu dönüşümün ayrıntılı denge şartı (detailed balance principle) denilen şarta bağlı olarak korunduğu söylenmiştir.

Bu tezde daha öncede incelenen spin-1 Blume Capel model ve spin-1/2 ve spin-1 den oluşan Ising modelin salınımlı dış manyetik alanda ortalama alan yaklaşımı ile Glauber tipi dinamik kullanarak zaman içindeki dönüşümü incelenmiştir. Bu modellerde oluşan manyetizasyon ve ortalama manyetizasyonu zaman, indirgenmiş sıcaklık, indirgenmiş dış manyetik alan ve indirgenmiş kristal alan etkileşimi gibi parametrelere bağlı olarak hesaplayıp oluşan 1. ve 2. türden faz geçişlerini ve bu geçişlere bağlı olarak oluşan dinamik faz geçiş noktalarını bularak faz diyagramları çizilmiştir.

Oluşan faz geçişlerinin yukarıda da bahsettiğimiz parametreler kadar durulma süresi ile açılal frekansın çarpımı olarak tanımladığımız parametrenin de 1. türden ve 2. türden faz geçişlerinin belirlenmesinde önemli rol oynadığı görülmüştür. Bu parametreyi azalttığımızda çizdiğimiz faz diyagramlarında değişim olduğu fark edilmiştir.

Elde ettiğimiz verileri de kullanarak salınımlı dış manyetik alanın rastgele değişen değerler alan (yani gürültülü) yapıda olduğunu düşünerek daha önce incelediğimiz spin-1 Blume Capel modelinde oluşan 1. türden ve 2. türden faz geçişlerinde bir değişiklik olup olmadığı incelenmiştir ve rastgele değerler almayan spin-1 Blume Capel modelle karşılaştırılmıştır. Elde ettiğimiz sonuçlara göre gürültüyü artırarak ve başlangıç koşullarını değiştirerek faz geçişlerini değiştirebildiğimiz ve hatta birden fazla faz geçişi elde ettiğimiz görülmüştür.

Anahtar Kelimeler: Glauber dinamiği, Blume Capel model, karışık Ising model, rastgele değerli dış manyetik alan

KINETICS OF MIXED ISING SPIN SYSTEMS

Melek YAVUZ

Physics, M.S. Thesis

The static behavior of spin systems have been studied extensively and have very good explanation of the physical systems. However, the time evolution of the dynamic spin systems is still an open problem. Although there is no basic theory of dynamic spin systems, the single-spin-flip model introduced by Glauber is starting point in the treatment of the dynamic spin problems. According to Glauber dynamic, the time evolution of the probability distribution of the dynamic spin system is described a master equation. The probability per unit time is also assumed to be equal to the inverse of the relaxation time.

In the realm of this thesis, we have studied within a mean- field approach the stationary states of the kinetic spin-1 Blume Capel model and a mixed Ising model which have spin-1/2 and spin-1 that studied previously by others authors within the Glauber dynamic in the presence of a time-dependent oscillating external magnetic field. Especially, the time dependence of magnetization and the behavior of the average magnetization as a function of the reduced temperature and the reduced external magnetic field are considered. The dynamic phase transition points are obtained and the phase diagrams of the systems are presented.

As well as the frequency dependence of the phase transitions are also studied. It was obtained that, when the frequency decrease, dynamic phase diagrams change considerable.

We have also considered the time evolution of the stationary states of the BC model under presence of a random oscillating external magnetic field. The effects of randomness on the time dependence of the magnetization and the behavior of the average magnetization as the function of the reduced temperature and the reduced external magnetic field are calculated. The obtained results have been compared to the results of the BC model under absence of random oscillating external magnetic field.

Keywords: Glauber dynamic, Blume Capel model, mixed Ising model, random external magnetic field.

1. GİRİŞ

Ferromanyetizmanın oluşum sebeplerini kuantum mekaniksel özelliklerle istatistiksel yaklaşımlar getirerek inceleyen modele Ising model denir (Huang,1963). Statik Ising model spinlerin yalnız z-yönündeki bileşenlerini göz önüne alarak oluşturulmuş klasik bir modeldir. Sistemin Hamiltonyeni H , aşağıdaki ifadeyle verilir.

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + H \sum_i S_i \quad (1.1)$$

Burada J en yakın spinler arasındaki değiş-tokuş etkileşim parametresi ve H ise sisteme uygulanan dış manyetik alandır. J ve H nin zamandan bağımsız olması durumunda, bu sistem denge istatistik mekaniği kuramlarıyla incelenir. Bu parametrelerden birinin zamana bağlı olması durumunda, sistemin denge durumundan uzaklaşması nedeniyle sistemin incelenmesi ancak dengede olmayan istatistik mekanikle mümkündür [1].

Zamanla evinimi açık olmayan Ising model gibi sistemlerin dinamiğinin anlaşılması için 1960 lardan günümüze değişik teoriler ortaya atılmış yeni modeller oluşturulmuştur. Ising modelin zamana bağlı dönüşümünden oluşan dinamiğinin bulunması için ilk kuram Glauber tarafından ortaya atılmıştır. Glauber, tek-spin değişimli kinetik Ising modelin denge durumuna doğru durulmasını (rölaksasyonu) tanımlamıştır (Privman, 1997). Bu modelde spinin işaret değişimi keyfi olduğu için manyetizasyonu da korunmaz [1]. Daha sonra Kawasaki, kinetik Ising model için manyetizasyon korunumunda durulma süreçlerinin çalışılmasının gerekli olduğunu öngörmüştür. Diğer korunum yasaları Kadanoff ve Swift tarafından sunulmuş ve böylelikle kinetik Ising model çok ilgi gösterilen bir model olmuştur (Privman, 1997).

Renormalizasyon grup tekniklerinin bulunması ve bununla birlikte kritik üstlerin belirlenmesi ile kinetik Ising modelin değeri daha iyi anlaşılmıştır. Çünkü kinetik Ising model, analitik (seriler-expansion) ve nümerik olarak çözülmesi kolay bir model olduğu için bu tekniklerle kritik üsleri belirlemek ve evrenselliği kontrol etmekte kolaylaşmıştır (Privman, 1997).

1980 lerde kinetik Ising modelin yeni durumlarıyla ilgilenilmeye başlanılmıştır. Sistemin denge durumunun kritik faz geçişleri çözüldükten sonra dengede olmayan durumdaki faz geçişleriyle ilgilenilmiştir. Dengede olmayan durum için temel bir teori olmadığından bu problem geleneksel tariflerle anlaşılmaya çalışılmıştır. Bunlardan birisi belirleyici bir denklem kurmak ve çözümün stabilitesi üzerinde çalışmaktır. Dengede olmayan bu durumu tanımlamak için sisteme bir gürültü eklenerek dalgalanmanın (flaktasyon) etkisi bulunur. Buna alternatif olarak ve daha mikroskopik bir yaklaşımla kinetik Ising modelin dengede

olmayan durumu spinlerin dış manyetik alanla değiştirilmesi ve çeşitli ısı banyolarıyla farklı sıcaklıklarda etkileşimli olduğu düşünülerek de çözülebilir (Privman, 1997).

Bir boyutlu kinetik Ising modelin dengede olmayan tutarlı durumu ilk olarak Hill tarafından etkileşimli enzim molekülleri ile ilişki kurularak çalışılmıştır. Daha sonra kinetik Ising model, hareketli latis gaza uydurularak çalışılmıştır (Privman, 1997).

Kinetik Ising modelin dinamiği üzerindeki çalışmalar bu modele benzeyen diğer sistemler üzerinde de çalışılmaya başlanmıştır. Zamanla evinimi açık olmayan böyle sistemlerin dinamiğini çözmek için dinamik Monte Carlo simülasyonu, renormalizasyon grubu hesapları da kullanılmıştır. Özellikle gerçek uzay renormalizasyon grubu tekniği de bazı sistemlerde Achiam (1983) ve Achiam ve Kosterlitz (1978) tarafından kullanılmıştır. Bu metod tek boyutlu Blume-Emery-Griffiths modelin dinamiğini bulurken de kullanılmıştır (Achiam,1985).

Bu tezde de, kinetik Ising model gibi sistemleri çözmek için ortalama alan yaklaşımıyla Glauber tipi stochastic dinamik kullanılmıştır. İlk önce Ising modele benzer spin-1 Blume Capel modelin ve spin-1/2 ve spin-1 den oluşan karışık Ising modelin kinetiği incelenmiş daha sonra rastgele dış manyetik alandaki durumlarına bakılmıştır. İlk önce Glauber'in Ising modelin kinetiğini anlamak için getirdiği yaklaşımı inceleyeceğiz.

2. GLAUBER DİNAMIĞI

Glauber, istatistik mekanikte dengede olmayan durumlar formüle edilemediğinden bu durumu düzenlemek için Ising modeli zamanın fonksiyonu olarak yazmayı tasarlamıştır. Kesin olarak zamana bağlı sonuç bulmak için modeli keyfi şekilde sıralanmış N tane parçacıktan olduğu farz edilmiştir (Glauber,1963).

Modelin stochastic olduğu düşünülür (Glauber, 1963). Bunun anlamı sistemin rastgele değerler almasıdır. Bu rastgelelikte sistemin, beklenmeyen dış etkilere maruz kaldığını gösterir (Plischke ve Bergersen, 2005). N tane yeri belirli parçacığın spinleri zamanın stochastic fonksiyonu olarak belirlenir $[\sigma_j(t), (j = 1, \dots, N)]$. Bu spinlerin değeri ∓ 1 ile sınırlıdır ve geçiş bu değerler arasında rastgele olur (Glauber,1963). Bu geçişler oluşarak sistem dengeye gelmeye çalışır. Dengeye gelirken ki durumu tanımlamak için de dalgalanma (fluktasyon) olması gerekir. Bu duruma alternatif olarak spine dış manyetik alan uygulanıp çeşitli sıcaklıktaki ısı banyolarıyla etkileşimli olduğu düşünülebilir. Isı banyoları, sistemi belirli bir sıcaklıkta dengeye getirebilmek için spinleri değiştirip düzenler (Privman, 1997).

Bununla birlikte her spinin geçiş olasılığı ısı banyosunun etkisi kadar komşu spinlerin anlık değerlerine de bağlı olduğu farz edilir. Bunun sebebi komşu spinler arasındaki korelasyondur. Birim zamanda bütün N spin sistemle ilgilenmek için spinlerin geçiş olasılıkları boyunca çift olması gerekir (Glauber, 1963). Belirli bir oranda bir mikro durumdan diğer duruma geçişe uğrayan sistem geçmiş durumlarından çok sistemin şimdiki durumuna bağlıdır. Bu sürece de Markov süreci adı verilir [2]. Spin fonksiyonları, sürekli zaman değişkeni ile rastgele farklı değişkenler N nin söz edilen Markov süreciyle düzenlenir. Neyse ki spinlerin çift olması karışık bir işlem olmadığından olasılıkları gösteren diferansiyel denklem kolay olabilir (Glauber, 1963). Geçişleri gösteren bu denklemde master denklem (master equation) olarak adlandırılır (Plischke ve Bergersen, 2005).

2.1 Tek Spinli Model

Tek bir parçacığın spini $\sigma = 1$ ve $\sigma = -1$ değerleri arasında rastgele fakat bizim bildiğimiz bir oranda değişsin. Manyetik alanın olmadığını ve bunun yüzünden oluşacak bir değer seçimi olmadığı ($\sigma = \mp 1$) farz edildiğinde bu parçacığın birim zaman içinde bir durumdan diğerine geçiş yapma oranı $\alpha/2$ olarak yazılırsa, $P(\sigma, t)$ olasılığı spinin t zamanında σ değerini alması aşağıdaki denkleme uyar (Glauber, 1963). Geçiş oranı iki eşit değerden biri olacağından yarı yarıya değişir.

$$\alpha = 1/\tau \quad (\tau : \text{rölaksasyon süresi})$$

$$\frac{d}{dt}P(\sigma, t) = -\frac{1}{2}\alpha P(\sigma, t) + \frac{1}{2}\alpha P(-\sigma, t) \quad (2.1.1)$$

Bu denklemin, bu değerleri alması normalizasyon şartı ile korunur. Normalizasyon şartına göre iki değer oluşma olasılığı bire eşit olmalıdır. Normalizasyon şartı;

$$P(1, t) + P(-1, t) = 1 \quad (2.1.2)$$

ile verilir.

(2.1.1) ve (2.1.2) eşitlikleri tek bir denklemde toplanıp bilinmeyen bir fonksiyonla yazılabilir.

$$q(t) = P(1, t) - P(-1, t) = \sum_{\sigma=\pm 1} \sigma P(\sigma, t) \quad (2.1.3)$$

Bu fonksiyonun zaman bağlı spinin beklenen değeri olduğu kolayca görülür.

$$q(t) = \langle \sigma(t) \rangle \quad (2.1.4)$$

Bu ortalama spinin zamanla değişimi aşağıdaki denkleme uyar.

$$\frac{d}{dt}q(t) = \frac{d}{dt}[P(1, t) - P(-1, t)] \quad (2.1.5)$$

$$= -\frac{1}{2}\alpha P(1, t) + \frac{1}{2}\alpha P(-1, t) + \frac{1}{2}\alpha P(-1, t) - \frac{1}{2}\alpha P(1, t)$$

$$\frac{d}{dt}q(t) = -\alpha q(t) \quad (2.1.6)$$

(2.1.6) eşitliğini çözdüğümüzde sonuç olarak ortalama spin değerinin $1/\alpha$ durulma (rölaksasyon) zamanına bağlı olarak exponansiyel şekilde azaldığı görülür (2.1.7). Bu da spinin zamanla dengeye geldiğini gösterir.

$$q(t) = q(0)e^{-\alpha t} \quad (2.1.7)$$

(2.1.2) ve (2.1.3) eşitlikleri birleştirilerek spinin olasılığı, beklenen değer cinsinden yazılabilir.

$$q(t) = 1 - P(-1, t) - P(-1, t) = 1 - 2P(-1, t)$$

$$P(-1, t) = \frac{1}{2}(1 - q(t)) \quad (2.1.8)$$

Genel olarak bir spinin olasılığının,

$$P(\sigma, t) = \frac{1}{2}[1 + \sigma q(t)] \quad (2.1.9)$$

ya bağı olarak değiştiği görülebilir.

2.2 Birden Çok Spinden Oluşan Sistem

Tek spinli sistemde olduğu gibi her bir spinin, rastgele spinin yönünü çeviren ısı banyosu ile ilişkili olduğunu düşünöceğiz. N parçacığın kapalı çember şeklinde dizildiğini farzedelim. Bu modelle Ising model arasındaki dinamik benzerlik çemberdeki her spinin tamamıyla bağımsız stochastic fonksiyon olmamasından kaynaklandığı farzedilir. Bunun sebebi tek bir parçacığın spininin σ_j ($j = 1, \dots, N$) eğilimi onun komşu spinleriyle korelasyon halinde olmasıdır. Bu spinin $\sigma = \pm 1$ durumları arasında geçiş olasılığı uygun bir şekilde diğer parçacıkların anlık spin değerlerine bağı olduğu farzedilir. Böyle bir model oluştururken bir çember düşünüp 2^N tane olasılık fonksiyon seti düşünmeliyiz (Glauber, 1963).

Tek spinli sistemde olduğu gibi geçiş oranı, durulma zamanı boyunca (birim zamanda) bütün geçiş değerlerinin içinde bir değerin oranı olarak yazılır. Birim zamanda diğer spinler anlık olarak yerinde değişime uğramazken j. spinin değerinin σ_i den $-\sigma_i$ ye değişme oranı **geçiş olasılığı** olarak tanımlanır. $P(\sigma_1, \dots, \sigma_N; t)$ nin zaman içindeki değişimi,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P(\sigma_1, \dots, \sigma_N; t) = & - \left[\sum_i w_i(\sigma_i) \right] P(\sigma_1, \dots, \sigma_N; t) \\ & + \sum_i w_i(-\sigma_i) P(\sigma_1, \dots, -\sigma_i, \dots, \sigma_N; t) \end{aligned} \quad (2.2.1)$$

olarak yazılabilir (Glauber, 1963). σ_i spini değışerek $\sigma_1, \dots, \sigma_N$ spin konfigürasyonunu bozarken spin değışimi $\sigma_1, \dots, -\sigma_i, \dots, \sigma_N$ konfigürasyonu yaratır. Bu yüzden denklemin sağ tarafının ilk kısmı eksi iken diğer tarafı kazancı tarif ettiğı için artıdır. Bu denklem **master denklem** olarak anılır [3].

Biraz önce bahsettiğimiz gibi $w_i(\sigma_i)$ geçiş olasılığı, spin σ_i değerinde iken komşu spin değerlerine bağı seçilebilir. Her spinin eğilimini en yakın komşularına paralel yapmak için $w_i(\sigma_i)$ yi,

$$w_i(\sigma_i) = \frac{1}{2} \alpha \left[1 - \frac{1}{2} \gamma \sigma_i (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) \right] \quad (2.2.2)$$

olarak seçebiliriz.

Buradan $w_i(\sigma_i)$ nin üç olası değerini bulabiliriz. Eğer en yakın komşular birbirine paralelse

ve σ_i ile aynı yöndeysse $\left(\uparrow \overset{\sigma_i}{\uparrow} \uparrow \right)$ geçiş olasılığı $\frac{1}{2}\alpha(1-\gamma)$, σ_i ile farklı yöndeysse $\left(\downarrow \overset{\sigma_i}{\uparrow} \downarrow \right)$ $\frac{1}{2}\alpha(1+\gamma)$ olur. Eğer en yakın komşular birbirine antiparalelse $\left(\uparrow \overset{\sigma_i}{\uparrow} \downarrow \right)$ geçiş olasılığı $\frac{1}{2}\alpha$ değerini alır. Burada γ pozitif ise ferromanyetik durum, negatif ise antiferromanyetik durum oluşur [1].

Geçiş olasılıklarında oluşan α parametresi bütün geçişlerde olan zaman ölçeğini kolayca tanımlar. Bununla birlikte γ parametresi hizaya gelme süresinde spinlerin eğilimlerini tanımlar ve Ising modeldeki J (değiş- tokuş etkileşim parametresi) gibi bizim modelimizin denge durumunu belirler. İki modeldeki benzerlikleri görmek için lineer Ising modelin Hamiltonyeni;

$$H = -J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} \quad (2.2.3)$$

olarak yazılabilir. Ising modeli T sıcaklığında dengeye getirdiğimizde j . spinin σ_i değerinin $-\sigma_i$ olma olasılığı Boltzman faktörüne uyar. $P(-\sigma_i)$ ve $P(\sigma_i)$ olasılıklarının oranı j . spinin iki durumuna eşittir.

$$\frac{P(-\sigma_i)}{P(\sigma_i)} = \frac{\exp[(-J/kT)\sigma_i(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1})]}{\exp[(J/kT)\sigma_i(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1})]} \quad (2.2.4)$$

Eğer σ_i den başka spinlerin yerinde sabit durduğunu farzederek stochastic model dengeye ulaştığında dinamiklerle korunması gerekir. Bunun anlamı Boltzman dağılımı için $\frac{dP}{dt} = 0$ olması yada

$$0 = - \left[\sum_i w_i(\sigma_i) \right] P(\sigma_1, \dots, \sigma_N; t) + \sum_i w_i(-\sigma_i) P(\sigma_1, \dots, -\sigma_i, \dots, \sigma_N; t) \quad (2.2.5)$$

olması demektir. Başka bir deyişle aşağıdaki gibi yazılabilir ve buna **ayrıntılı denge şartı** (detailed balance) denir [4].

$$\frac{P(-\sigma_i)}{P(\sigma_i)} = \frac{w_i(\sigma_i)}{w_i(-\sigma_i)} \quad (2.2.6)$$

(2.2.2) eşitliğindeki geçiş olasılığı kullanarak ayrıntılı denge şartı aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\frac{P(-\sigma_i)}{P(\sigma_i)} = \frac{1 - \frac{1}{2} \gamma \sigma_i (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1})}{1 + \frac{1}{2} \gamma \sigma_i (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1})} \quad (2.2.7)$$

(2.2.4) denklemindeki exponensiyel, hiperbolik fonksiyonlar cinsinden şu şekilde yazılabilir.

$$\begin{aligned} \exp\left[\pm (J/kT) \sigma_i (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1})\right] &= \cosh\left[\frac{J}{kT} (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1})\right] \pm \sigma_i \sinh\left[\frac{J}{kT} (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1})\right] \\ &= \cosh\left[\frac{J}{kT} (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1})\right] \times \left\{1 \mp \frac{1}{2} \sigma_i (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) \tanh \frac{2J}{kT}\right\} \end{aligned}$$

Bu exponensiyelin sonucunu (2.2.4) denkleminde tekrar yazarak (2.2.4) ile (2.2.7) eşitliklerini karşılaştırsak γ yi,

$$\gamma = \tanh(2J/kT)$$

olarak bulabiliriz.

Master denklemde tanımlanan $P(\sigma_1, \dots, \sigma_N; t)$ olasılığı sistemin bütün bilgilerini içerdiğinden bazen bu bilgi pratikte fazla gerekli değildir. Sistem hakkında bilgi almak için belirli durumdaki spinin yada spin çiftinin olasılıklarını bilmek yada alternatif olarak sadece spinin beklenen değerini ve spin çiftinin ortalama değerini bilmek yeterlidir.

Stochastic fonksiyonu dikkate alarak σ_i nin beklenen değeri olan $q_i(t)$ yi yazabiliriz.

$$\begin{aligned} q_i(t) &= \langle \sigma_i(t) \rangle \\ &= \sum_{\{\sigma\}} \sigma_i P(\sigma_1, \dots, \sigma_N; t) \end{aligned} \quad (2.2.8)$$

$\sigma_i(t) \sigma_k(t)$ çarpımının beklenen değeri ise,

$$\begin{aligned} r_{i,k}(t) &= \langle \sigma_i(t) \sigma_k(t) \rangle \\ &= \sum_{\{\sigma\}} \sigma_i \sigma_k P(\sigma_1, \dots, \sigma_N; t) \end{aligned} \quad (2.2.9)$$

olur.

σ_i ve σ_i' ü j. spinin iki olası farklı değeri olmak üzere $\frac{1}{2}(1 + \sigma_i \sigma_i')$ fonksiyonu $\sigma_i = \sigma_i'$ için bire, $-\sigma_i = \sigma_i'$ için sıfıra eşittir.

Bu bilgiler kullanılarak $P(\sigma_1, \dots, \sigma_N; t)$ olasılığı bütün spinlerin toplamı üzerinden yazılabilir.

$$P(\sigma_1, \dots, \sigma_N; t) = \frac{1}{2^N} \times \sum_{\{\sigma'\}} (1 + \sigma_1 \sigma'_1) \dots (1 + \sigma_N \sigma'_N) P(\sigma'_1, \dots, \sigma'_N; t) \quad (2.2.10)$$

Bu çarpımı bütün sisteme genişletirsek;

$$P(\sigma_1, \dots, \sigma_N; t) = \frac{1}{2^N} \left[1 + \sum_i \sigma_i q_i(t) + \sum_{i \neq k} \sigma_i \sigma_k r_{i,k}(t) + \dots \right] \quad (2.2.11)$$

oluşur.

Master denklemi daha düzenli bir şekilde yazarsak aşağıdaki denklemi elde ederiz.

$$\frac{d}{dt} P(\sigma_1, \dots, \sigma_N; t) = - \sum_m \sigma_m \sum_{\sigma'_m} \sigma'_m w_m(\sigma'_m) P(\sigma_1, \dots, \sigma'_m, \dots, \sigma_N; t) \quad (2.2.12)$$

İki tarafı σ_k ile çarparsak spinin ortalama değeri üzerinden master denklem,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} q_k(t) &= -2 \sum \sigma_k w_k(\sigma_k) P(\sigma_1, \dots, \sigma_N; t) \\ &= -2 \langle \sigma_k(t) w_k[\sigma_k(t)] \rangle \end{aligned} \quad (2.2.13)$$

olarak yazılabilir (Glauber, 1963).

Böylece Ising modelin verilen bir spin konfigürasyonunun zaman içinde nasıl ilerlediğini doğru bir şekilde modelleyerek “termal denge konfigürasyonun dinamik ile korunduğunu” gördük. Bu durum temel termodinamik varsayımlarının yansımasıdır: Boltzman faktörü ile verilen sistemin durumları üzerinde bir statik olasılık dağılımı vardır (Bu durum dilute gazın entropisinin yükselmesine benzer)(Privman, 1997). Markov sürecinin belirttiği geçişleri master denklemle (master equation) yazarak ve ayrıntılı denge prensibini kullanarak geçiş yapan ve ters yönde geçiş yapan spinlerin oranını bulabileceğimizi gördük. Bu da dengede olmayan durumda Ising modelde durumun nasıl tanımlandığını gösterir.

Şimdi değişik sistemlerde ortalama alan yaklaşımıyla Glauber tipi dinamikle neler yapılabildiğini görebiliriz. Diğer bölümlerde spin-1 BC modelin ve spin-1/2 ve spin-1 den oluşan karışık spinli Ising modelin kinetiğini inceleyeceğiz.

3. SPİN-1 BLUME CAPEL MODELİN KİNETİĞİ

Kristal alan etkileşimli yada tek iyon anizotropik spin-1 Ising model, Blume-Capel (BC) model olarak adlandırılır. Bundan yaklaşık kırk yıl önce Blume ve Capel birbirinden bağımsız olarak çalışarak bu modeli oluşturmuşlardır. Çeşitli fiziksel sistemlerin (çok bileşkenli sıvılar, manyetik sistemler gibi) çoklu kritik olgularını anlamakta önemli rol oynar. Bu yüzden teorik çalışmaların konusunu oluşturan bir modeldir (Blume, Capel,1966).

Burada daha önceden bahsettiğimiz Glauber tipi stochastic modeli kullanarak ortalama alan yaklaşımıyla zamana bağlı dış manyetik alan varlığında kinetik spin-1 Blume Capel modelin denge durumuna giderken ki kinetiğini inceleyeceğiz. Manyetizasyonun zamana bağımlılığını ve ortalama manyetizasyonun davranışını araştıracağız ve dinamik faz geçiş noktalarını elde edip sistemin faz diyagramını (T-h) düzleminde sunacağız.

Spin-1 Blume Capel (BC) modelin Hamiltonyeni;

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - D \sum_i S_i^2 - H \sum_i S_i \quad (3.1)$$

dir. S_i , $\pm 1,0$ değerlerini alır. Her bir örgü noktası i ile gösterilir ve $\langle ij \rangle$ ile gösterilen en yakın komşu çiftleri üzerinden toplam yapılır. Burada,

J : Değiş-tokuş etkileşim parametresi

D : Kristal alan etkileşimi yada tek iyon anizotropisi

H : Zamana bağlı salınım yapan dış manyetik alan

olarak tanımlanır.

Dış manyetik alan (H),

$$H(t) = H_0 \cos (wt) \quad (3.2)$$

olarak verilir. H_0 , sabit bir büyüklük, $w = 2\pi\nu$ ise salınımlı alanın açısal frekansıdır (Keskin, Canko vd Temizer, 2005).

Sistemin daha önce bahsettiğimiz gibi mutlak sıcaklıkta ısı banyolarıyla etkileşimli olduğunu düşünüyoruz. Glauber dinamiğine uygun olarak sistemin zaman içinde ilerlediğini biliyoruz ve bu ilerleyiş birim zamanda $1/\tau$ geçiş sıklığında oluşur. Buradan sistemin zaman içindeki dönüşümünü gösteren master denklem;

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}P(S_1, S_2, \dots, S_N; t) = & - \sum_i \left[\sum_{S_i \neq S'_i} w_i(S_i \rightarrow S'_i) \right] \times P(S_1, S_2, \dots, S_i, \dots, S_N; t) \\ & + \sum_i \left[\sum_{S_i \neq S'_i} w_i(S'_i \rightarrow S_i) \times P(S_1, S_2, \dots, S'_i, \dots, S_N; t) \right] \end{aligned} \quad (3.3)$$

dır. Bu denklemdeki,

$P(S_1, S_2, \dots, S_i, \dots, S_N; t)$; t zamanında S-spin konfigürasyonuna sahip sistemin olasılığı

$w_i(S_i \rightarrow S'_i)$; birim zamanda i. spinin değerinin S_i den S'_i ne değişme olasılığı

olarak tanımlanır. Sistemdeki spinlerin ısı banyolarıyla etkileşimi spinlerin değerini değiştirir ve bu değişim rastgeledir (stochastic). Bu değişimin rastgele olmasından dolayı da manyetizasyon korunmaz. Birim zamanda her bir spinin değerinin S_i den S'_i ne değişim olasılığı, her bir spinin detaylı denge şartına (detailed balance condition) uygun olarak dengeye varmasını ve bütün sistemin dengesini zorlamasını sağlar.

$$\frac{w_i(S_i \rightarrow S'_i)}{w_i(S'_i \rightarrow S_i)} = \frac{P(S_1, S_2, \dots, S'_i, \dots, S_N)}{P(S_1, S_2, \dots, S_i, \dots, S_N)} \quad (\text{detaylı denge şartı}) \quad (3.4)$$

Olasılık dağılımı Boltzman dağılımına bağlı olduğundan olasılık,

$$P = \frac{e^{-\beta E_i}}{\sum_i e^{-\beta E_i}} \Rightarrow E_i \text{ enerjisi hangi ağırlıkta bulunur.}$$

olarak yazılabilir (Karaoğlu, 2003).

Geçiş olasılığı da S_i nin S'_i ne değişmesiyle oluşacak enerjinin bütün durumlardaki oluşma olasılığı olarak tanımlanabilir. Glauber'e göre geçiş olasılığı birim zamanda $1/\tau$ oranında olacağından S_i den S'_i ne geçiş olasılığı,

$$w_i(S_i \rightarrow S'_i) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp[-\beta \Delta E(S_i \rightarrow S'_i)]}{\sum_{S'_i} \exp[-\beta \Delta E(S_i \rightarrow S'_i)]} \quad (3.5)$$

olarak yazılabilir. Bu denklemde $\beta = 1/k_B T$ ve k_B , Boltzman sabitidir.

S_i nin üç farklı değeri vardır ($\pm 1, 0$). S_i değerli spinin S'_i ne değişmesiyle oluşacak enerji farkı;

$$\Delta E(S_i \rightarrow S'_i) = -(S'_i - S_i)(J \sum_j S_j + H) - (S'^2_i - S^2_i)D \quad (3.6)$$

olarak verilir.

S_i nin belirli deęerleri iin geiř olasılıklarını bulabiliriz.

- $S_i = 1$ ve $S_i' = 0$ deęeri iin;

$$w_i(1 \rightarrow 0) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp[-\beta \Delta E''(1 \rightarrow 0)]}{\exp[-\beta \Delta E''(1 \rightarrow 0)] + \exp[-\beta \Delta E''(1 \rightarrow -1)] + \exp[-\beta \Delta E''(1 \rightarrow 1)]} \quad (3.7)$$

$$= \frac{1}{\tau} \frac{\exp\left[-\beta(J \sum_j S_j + H) - \beta D\right]}{\exp\left[-\beta(J \sum_j S_j + H) - \beta D\right] + \exp\left[-2\beta(J \sum_j S_j + H)\right] + \exp[0]}$$

$a = (J \sum_j S_j + H)$ olarak alırsak;

$$w_i(1 \rightarrow 0) = \frac{1}{\tau} \frac{e^{-\beta a} e^{-\beta D}}{e^{-\beta a} e^{-\beta D} + e^{-2\beta a} + 1} = \frac{1}{\tau} \frac{e^{-\beta D}}{e^{-\beta a} + e^{\beta a} + e^{-\beta D}}$$

$\cosh \beta a = \frac{e^{-\beta a} + e^{\beta a}}{2}$ baęıntısını kullanarak;

$S_i = 1$ ve $S_i' = 0$ deęeri iin geiř olasılığını,

$$w_i(1 \rightarrow 0) = \frac{1}{\tau} \frac{e^{-\beta D}}{2 \cosh \beta a + e^{-\beta D}} \quad (3.8)$$

olarak bulabiliriz.

- $S_i = -1$ ve $S_i' = 0$ deęeri iin;

$$w_i(-1 \rightarrow 0) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp[-\beta \Delta E''(-1 \rightarrow 0)]}{\exp[-\beta \Delta E''(-1 \rightarrow 0)] + \exp[-\beta \Delta E''(-1 \rightarrow -1)] + \exp[-\beta \Delta E''(-1 \rightarrow 1)]} \quad (3.9)$$

$$= \frac{1}{\tau} \frac{\exp\left[\beta(J \sum_j S_j + H) - \beta D\right]}{\exp\left[\beta(J \sum_j S_j + H) - \beta D\right] + \exp[0] + \exp\left[2\beta(J \sum_j S_j + H)\right]}$$

$$= \frac{e^{-\beta D}}{e^{-\beta D} + e^{-\beta a} + e^{\beta a}}$$

$S_i = -1$ ve $S_i' = 0$ deęeri iin geiř olasılığını,

$$w_i(-1 \rightarrow 0) = \frac{1}{\tau} \frac{e^{-\beta D}}{2 \cosh \beta a + e^{-\beta D}} \quad (3.10)$$

olarak bulabiliriz.

- $S_i = 1$ ve $S_i' = -1$ değeri için;

$$\begin{aligned} w_i(1 \rightarrow -1) &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp[-\beta \Delta E''(1 \rightarrow -1)]}{\exp[-\beta \Delta E''(1 \rightarrow -1)] + \exp[-\beta \Delta E''(1 \rightarrow 0)] + \exp[-\beta \Delta E''(1 \rightarrow 1)]} \\ &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp\left[-2\beta(J \sum_j S_j + H)\right]}{\exp\left[-\beta(J \sum_j S_j + H) - \beta D\right] + \exp[0] + \exp\left[-2\beta(J \sum_j S_j + H)\right]} \\ &= \frac{1}{\tau} \frac{e^{-2\beta a}}{e^{-\beta a} e^{-\beta D} + e^{-2\beta a} + 1} = \frac{1}{\tau} \frac{e^{-2\beta a}}{e^{-\beta a} (e^{-\beta D} + e^{-\beta a} + e^{\beta a})} \end{aligned} \quad (3.11)$$

$S_i = 1$ ve $S_i' = -1$ değeri için geçiş olasılığını,

$$w_i(1 \rightarrow -1) = \frac{1}{\tau} \frac{e^{-\beta a}}{2 \cosh \beta a + e^{-\beta D}} \quad (3.12)$$

olarak bulabiliriz.

- $S_i = 0$ ve $S_i' = 1$ değeri için;

$$\begin{aligned} w_i(0 \rightarrow 1) &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp[-\beta \Delta E''(0 \rightarrow 1)]}{\exp[-\beta \Delta E''(0 \rightarrow 1)] + \exp[-\beta \Delta E''(0 \rightarrow 0)] + \exp[-\beta \Delta E''(0 \rightarrow -1)]} \\ &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp\left[\beta(J \sum_j S_j + H) + \beta D\right]}{\exp\left[\beta(J \sum_j S_j + H) + \beta D\right] + \exp[0] + \exp\left[-\beta(J \sum_j S_j + H) + \beta D\right]} \\ &= \frac{1}{\tau} \frac{e^{\beta D} e^{\beta a}}{e^{\beta D} (e^{\beta a} + e^{-\beta a} + e^{-\beta D})} \end{aligned} \quad (3.13)$$

$S_i = 0$ ve $S_i' = 1$ değeri için değişim olasılığı,

$$w_i(1 \rightarrow -1) = \frac{1}{\tau} \frac{e^{\beta a}}{2 \cosh \beta a + e^{-\beta D}} \quad (3.14)$$

olarak yazılabilir.

- $S_i = 0$ ve $S_i' = -1$ değeri için;

$$\begin{aligned}
 w_i(0 \rightarrow -1) &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp[-\beta \Delta E''(0 \rightarrow -1)]}{\exp[-\beta \Delta E''(0 \rightarrow 1)] + \exp[-\beta \Delta E''(0 \rightarrow 0)] + \exp[-\beta \Delta E''(0 \rightarrow -1)]} \quad (3.15) \\
 &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp\left[-\beta(J \sum_j S_j + H) + \beta D\right]}{\exp\left[\beta(J \sum_j S_j + H) + \beta D\right] + \exp[0] + \exp\left[-\beta(J \sum_j S_j + H) + \beta D\right]} \\
 &= \frac{1}{\tau} \frac{e^{\beta D} e^{-\beta a}}{e^{\beta D} (e^{\beta a} + e^{-\beta a} + e^{-\beta D})}
 \end{aligned}$$

$S_i = 0$ ve $S_i' = -1$ değeri için değişim olasılığı,

$$w_i(0 \rightarrow -1) = \frac{1}{\tau} \frac{e^{-\beta a}}{2 \cosh \beta a + e^{-\beta D}} \quad (3.16)$$

olarak yazılabilir.

- $S_i = -1$ ve $S_i' = 1$ değeri için;

$$\begin{aligned}
 w_i(-1 \rightarrow 1) &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp[-\beta \Delta E''(-1 \rightarrow 1)]}{\exp[-\beta \Delta E''(-1 \rightarrow 1)] + \exp[-\beta \Delta E''(-1 \rightarrow 0)] + \exp[-\beta \Delta E''(-1 \rightarrow -1)]} \quad (3.17) \\
 &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp\left[2\beta(J \sum_j S_j + H)\right]}{\exp\left[2\beta(J \sum_j S_j + H)\right] + \exp[0] + \exp\left[\beta(J \sum_j S_j + H) - \beta D\right]} \\
 &= \frac{1}{\tau} \frac{e^{2\beta a}}{e^{\beta a} (e^{\beta a} + e^{-\beta a} + e^{-\beta D})}
 \end{aligned}$$

$S_i = -1$ ve $S_i' = 1$ değeri için değişim olasılığı,

$$w_i(-1 \rightarrow 1) = \frac{1}{\tau} \frac{e^{\beta a}}{2 \cosh \beta a + e^{-\beta D}} \quad (3.18)$$

olarak yazılabilir.

Hesaplardan da görüldüğü üzere geçiş olasılığı $w_i(1 \rightarrow 0) = w_i(-1 \rightarrow 0)$ na eşittir. Diğer geçiş

olasılıklarına da baktığımızda;

$$\begin{aligned}
& w_i(1 \rightarrow 0) = w_i(-1 \rightarrow 0) \\
& \diamond w_i(1 \rightarrow -1) = w_i(0 \rightarrow -1) \\
& w_i(0 \rightarrow 1) = w_i(-1 \rightarrow 1)
\end{aligned} \tag{3.19}$$

eşitliklerinin oluştuğunu görebiliriz.

Geçiş olasılıklarından da görüleceği gibi $w_i(S_i \rightarrow S'_i)$ değişim olasılığı, S_i değerinden bağımsızdır. Bu yüzden değişim olasılığı $w_i(S_i \rightarrow S'_i) = w_i(S'_i)$ olarak yazılabilir. Yeniden ana denkleme dönersek değişim olasılığının yeni haliyle şu şekilde yazılabilir.

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} P(S_1, S_2, \dots, S_N; t) = & - \sum_i \left(\sum_{S'_i \neq S_i} w_i(S'_i) \right) P(S_1, S_2, \dots, S_i, \dots, S_N; t) \\
& + \sum_i w_i(S_i) \left(\sum_{S'_i \neq S_i} P(S_1, S_2, \dots, S'_i, \dots, S_N; t) \right)
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Master denklemin her iki tarafını S_K ile çarparak ortalama alırsak;

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} S_K P(S_1, S_2, \dots, S_N; t) = & - [w_i(0) + w_i(1) + w_i(-1)] \sum_i S_K P(S_1, S_2, \dots, S_N; t) \\
& + \sum_i [1.w_i(0) - 1.w_i(0) + 0.w_i(1) - 1.w_i(1) + 1.w_i(-1) + 0.w_i(-1)] \\
& P(S_1, S_2, \dots, S'_i, \dots, S_N; t) \\
= & - \left[\frac{\exp(-\beta D) + \exp(-\beta a) + \exp(\beta a)}{2 \cosh \beta a + \exp(-\beta D)} \right] \sum_K S_K P(S_1, \dots, S_N; t) + \\
& \sum_K \left[\frac{\exp(\beta a) + \exp(-\beta a)}{2 \cosh \beta a + e^{-\beta D}} \right] P(S_1, \dots, S', \dots, S_N; t)
\end{aligned}$$

$$\tau \frac{d}{dt} \langle S_K \rangle = -\langle S_K \rangle + \left\langle \frac{2 \sinh \beta (J \sum_j S_j + H)}{2 \cosh \beta (J \sum_j S_j + H) + \exp(-\beta D)} \right\rangle \tag{3.21}$$

yada ortalama alan yaklaşımıyla;

$$\tau \frac{d}{dt} \langle S \rangle = -\langle S \rangle + \frac{2 \sinh \beta [JZ \langle S \rangle + H_o \cos wt]}{2 \cosh \beta [JZ \langle S \rangle + H_o \cos wt] + \exp(-\beta D)} \tag{3.22}$$

olarak yazılabilir.

Buradaki Z, koordinat sayıdır. (3.22) eşitliğini başka bir formda yazabiliriz. Bu denklemdeki

spinin ortalama değeri, manyetizasyon olarak adlandırıldığından $\langle S \rangle = m$ olarak yazılabilir (Huang, 1987).

Diğer değişkenleri,

$$m = \langle S \rangle \quad \Omega = \pi w \quad \xi = wt \quad T = \frac{1}{\beta JZ} \quad h = \frac{H_o}{JZ} \quad \Omega = 2\pi \quad d = \frac{D}{ZJ}$$

parametreleriyle değiştirirsek master denklem;

$$\frac{\Omega}{w} \frac{d}{d\xi} m = -m + \frac{2 \sinh [(1/T)m] + 2 \sinh \left[\frac{1}{TJZ} . hJZ \cos \xi \right]}{2 \cosh [(1/T)m] + 2 \cosh \left(\frac{1}{TJZ} . hJZ \cos \xi \right) \exp(-\beta dZJ)} \quad (3.23)$$

Düzenlenmiş şekliyle;

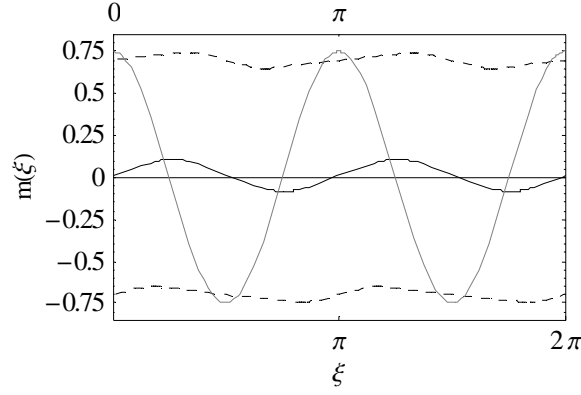
$$\Omega \frac{d}{d\xi} m = -m + \frac{\sinh [(1/T)(m + h \cos \xi)]}{\cosh [(1/T)(m + h \cos \xi)] + \frac{1}{2} \exp(-d/T)} \quad (3.24)$$

halini alır.

Sistemin bu diferansiyel denkleme bağlı olarak dönüştüğünü bulduk. Bu diferansiyel denklemi nümerik olarak çözerek dinamik faz geçiş noktalarını (DPT) bulup faz diyagramlarını çizebiliriz. Bunun içinde indirgenmiş kristal alan sabiti (d), indirgenmiş sıcaklık (T) ve indirgenmiş dış manyetik alan değişirken ki çözümlerle çalışmalıyız. Manyetizasyonun d, T, h değişirken ki çözümü 2π periyotlu zamanın (ξ) periyodik fonksiyonu olacaktır ve aşağıdaki şarta uymalıdır (Tome, Oliveira, 1989).

$$m(\xi + \pi) = -m(\xi) \quad (3.25)$$

(3.25) eşitliğine uyan sonuçlar simetrik çözümlerdir ve bu paramanyetik çözüme uygundur. Eğer çözümler (3.25) eşitliğine uymazsa simetrik olmayan çözüm oluşur ve bu ferromanyetik çözüm olarak adlandırılır (Şekil 3.1).

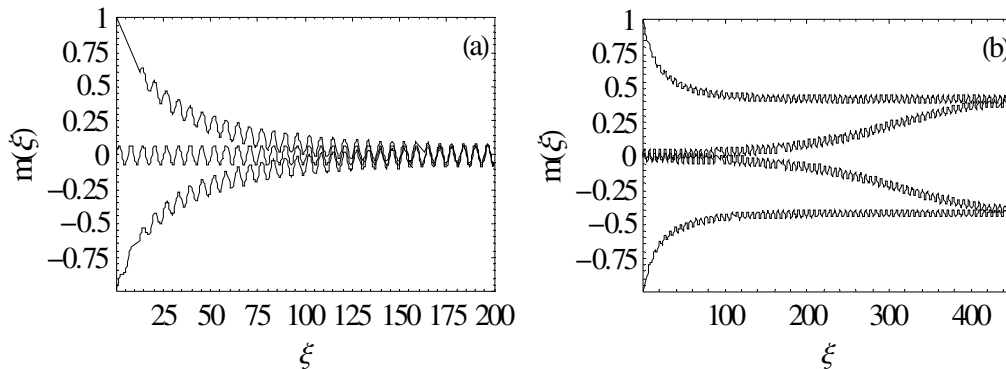


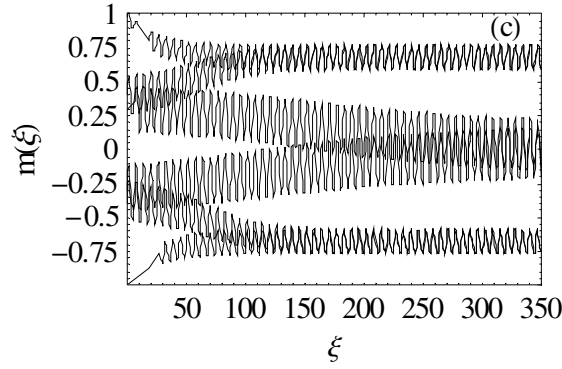
Şekil 3.1 $d=-0.25$, $h=0.75$, $T=0.1$ iken manyetizasyonun zamanla değişim grafiği. Düz çizgi simetrik yani paramanyetik çözümle uyumludur. İki kesikli çizgi de simetrik olmayan (ferromanyetik) çözümle uyumludur. Mavi çizgi salınlı dış manyetik alandır ($h \cos \xi$)(Keskin, Cankö vd Temizer, 2005).

Şekil 3.1 e baktığımızda paramanyetik çözüm, simetrik olarak manyetizasyonun $[m(\xi)]$ sıfıra inen değerlerinde salınım yapar ve bu salınım mavi ile gösterilen dış manyetik alanla ($h \cos \xi$) uyumlu şekilde hareket eder. Ferromanyetik çözüm ise simetrik değildir ve dış manyetik alana ($h \cos \xi$) bağlı olmadan manyetizasyonun sıfırdan farklı bir değerlerinde hareket eder.

Verilen parametrelerle ve değişik başlangıç koşullarıyla (3.24) master denklemini nümerik olarak çözdüğümüzde üç değişik çözüm, paramanyetik, ferromanyetik ve ikisinin birarada bulunduğu (coexistence) çözümler oluşur (Şekil 3.2).

Şekil 3.2 (a) da manyetizasyon $[m(\xi)]$ bir süre sonunda sıfır değeri etrafında salınarak simetrik sonuçlar oluşturur. Şekil 3.2 (b) de manyetizasyon $[m(\xi)]$ bir süre sonunda sıfırdan farklı simetrik olmayan sonuçlar verir. Şekil 3.2 (c) de manyetizasyon $[m(\xi)]$ belirli bir süre sonunda hem sıfıra giden hem de sıfırdan başka değerler alan yani hem simetrik hem de simetrik olmayan çözümler bir arada bulunur. Bütün bu sonuçlar başlangıç şartlarına bağlı olarak değişir.





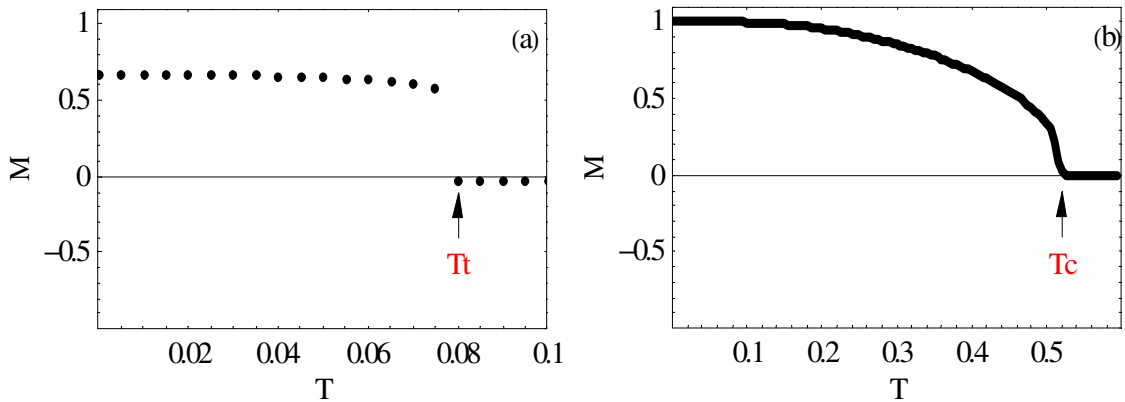
Şekil 3.2 Manyetizasyonun (m) zamanla (ξ) değişimi a) $d=-0.25$, $h=0.5$, $T=0.75$ iken paramanyetik özellik gösterir. b) $d=-0.25$, $h=0.2$, $T=0.5$ iken ferromanyetik fazda c) $d=-0.25$, $h=0.75$, $T=0.1$ iken iki faz birarada olur (Keskin, Canko vd Temizer, 2005).

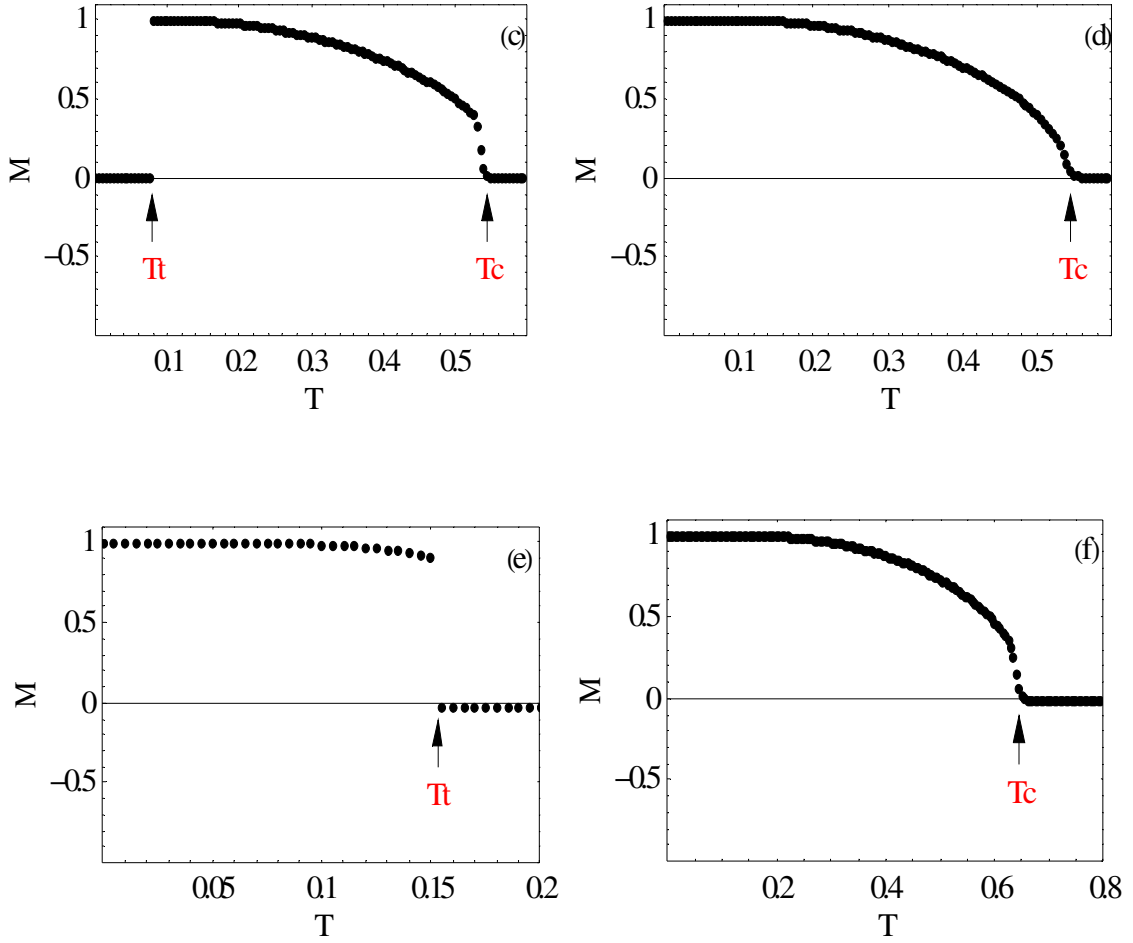
Manyetizasyonun zamana bağlı olarak çözülmesi hangi fazların oluştuğunu görmemizde yardımcı olur. Fakat bu fazlar arasındaki sınırları ve faz geçişlerini görmemiz için yeterli değildir. Bölgeler arasındaki sınırları görmek için faz diyagramını çizmek gerekir. Bu yüzden de indirgenmiş sıcaklık (T) ve indirgenmiş dış manyetik alan (h) değişirken ki ortalama manyetizasyona bakmak gerekir. Ortalama manyetizasyonu,

$$M = \frac{1}{2\pi} \int_{\varepsilon_0}^{\varepsilon_0+2\pi} m(\xi) d\xi \quad (3.26)$$

belirli bir süre geçtikten sonraki bir periyottaki toplam manyetizasyon olarak yazabiliriz.

İndirgenmiş sıcaklığın fonksiyonu olarak, farklı indirgenmiş dış manyetik alan (h) ve indirgenmiş sıcaklık (T) değerlerinde nümerik olarak ortalama manyetizasyonu çözdüğümüzde Şekil 3.3 oluşur.





Şekil 3.3 İndirgenmiş sıcaklığın fonksiyonu olarak ortalama manyetizasyon (M). (a) da 1.türden faz geçişi olur. $d=-0.25$, $h=0.8$, $\Omega/2\pi=1$ iken T_t (1. türden faz geçiş sıcaklığı) 0.08 dir. (b) 2. türden faz geçişi olur. $d=-0.25$, $h=0.25$, $\Omega/2\pi=1$ iken T_c (2. türden faz sıcaklığı) 0.54 dir. (c) İki başarılı faz geçişi görülür. $d=-0.25$, $h=0.01$, $\Omega/2\pi=1$ iken T_t (1. türden faz geçiş sıcaklığı) 0.079 ve T_c (2. türden faz sıcaklığı) 0.545 dir. Burada başlangıç koşulu $m[0]=0$ dir. (d) Başlangıç koşulu $m[0]=1$ iken ise sadece 2. türden faz geçişi oluşur. $d=-0.25$, $h=0.01$, $\Omega/2\pi=1$ iken T_c (2. türden faz geçiş sıcaklığı) 0.545 dir. (e) $d=0.25$, $h=0.85$, $\Omega/2\pi=1$ iken T_t (1. türden faz geçiş sıcaklığı) 0.153 dir. (f) $d=0.25$, $h=0.5$, $\Omega/2\pi=1$ iken T_c (2. türden faz geçiş sıcaklığı) 0.645 dir.

Şekil 3.3 de de görüldüğü gibi ortalama manyetizasyon sürekli yada süreksiz bir şekilde sıfıra iner. Bunlar faz geçişlerini tanımlar. Ortalama manyetizasyonun süreksiz bir şekilde sıfıra inmesi ile 1. türden bir faz geçişi oluşur. Birinci türden faz geçişinde paramanyetik ve ferromanyetik faz bir arada bulunur. Eğer ortalama manyetizasyon sürekli bir şekilde sıfır değerine iniyorsa 2. türden faz geçişi oluşur. Artık bu durumda iki fazın bir arada bulunma durumu ortadan kalkar. Birinci türden faz geçişinin bittiği ikinci türden faz geçişinin başladığı noktaya da kritik nokta denir (Domb, Green vd, 1972).

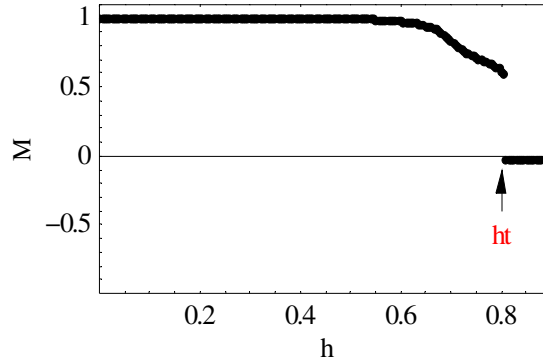
Şekil 3.3 (a) da $d=-0.25$, $h=0.8$, $\Omega/2\pi=1$ iken 1.türden faz geçişi görülmektedir. Burada geçiş keskin bir şekilde belirli bir ortalama manyetizasyon değerinden sıfır değerine düşer. Sıfıra düşüş noktası birinci türden geçiş noktasıdır ve T_t birinci türden faz geçiş sıcaklığıdır. Şekil

3.3 (b) de $d=-0.25$, $h=0.25$, $\Omega/2\pi=1$ iken 2. türden faz geçişi oluşur. Buradaki geçiş süreklidir. Şekilde gösterilen T_c ise ikinci türden faz geçiş sıcaklığıdır.

Faz geçişlerini oluşurken başlangıç koşulları da diğer değişim parametreleri kadar (h , d , T gibi) önemli rol oynar. Şekil 3.3 (c) ve Şekil 3 (d) de $d=-0.25$, $h=0.01$, $\Omega/2\pi=1$ iken başlangıç koşulları ilkinde $m[0]=0$ iken ikinci şekilde $m[0]=1$ dir. Şekil 3.3 (c) de $m[0]=0$ iken iki tane (1. türden ve 2. türden) başarılı geçişin olduğu görülür. Ama başlangıç koşulu değiştiğinde sadece 2. türden faz geçişinin olduğu görülür.

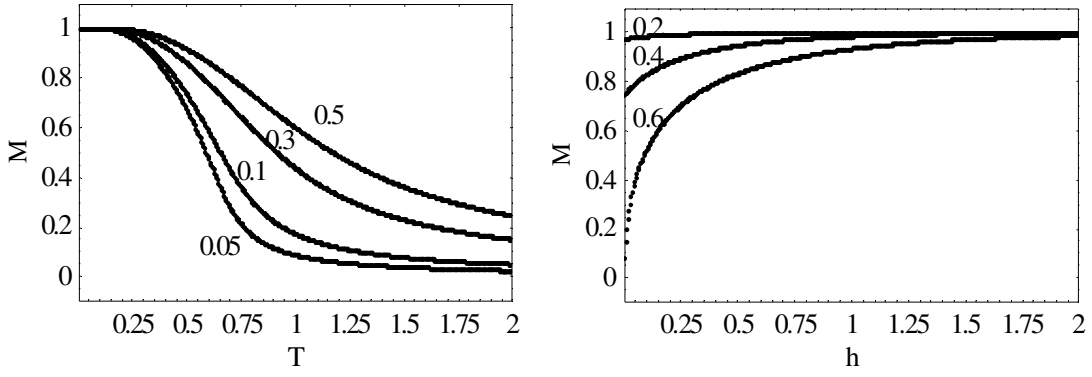
Farklı indirgenmiş kristal alan etkileşimleri “ d ” de de faz geçişleri görülür. Şekil 3.3 (e) de $d=0.25$, $h=0.85$, $\Omega/2\pi=1$ iken 1. türden faz geçişi, Şekil 3.3 (f) de ise $d=0.25$, $h=0.5$, $\Omega/2\pi=1$ iken 2. türden faz geçişi görülür. Bu farklı indirgenmiş alan etkileşimleri farklı faz diyagramları elde edilmesine neden olur.

Aynı kritik sıcaklıklara, dış manyetik alana bağlı ortalama manyetizasyonu çizerekte ulaşabiliriz. Şekil 3.4 da dış manyetik alana bağlı ortalama manyetizasyonu çizdiğimizde $d = -0.25$, $T=0.08$ iken 1. türden faz geçişinin indirgenmiş dış manyetik alan $h=0.8$ değerinde olduğu görülür.



Şekil 3.4 İndirgenmiş dış manyetik alanın fonksiyonu olarak ortalama manyetizasyon. $d=-0.25$, $T=0.08$ iken $h_t=0.8$ olur.

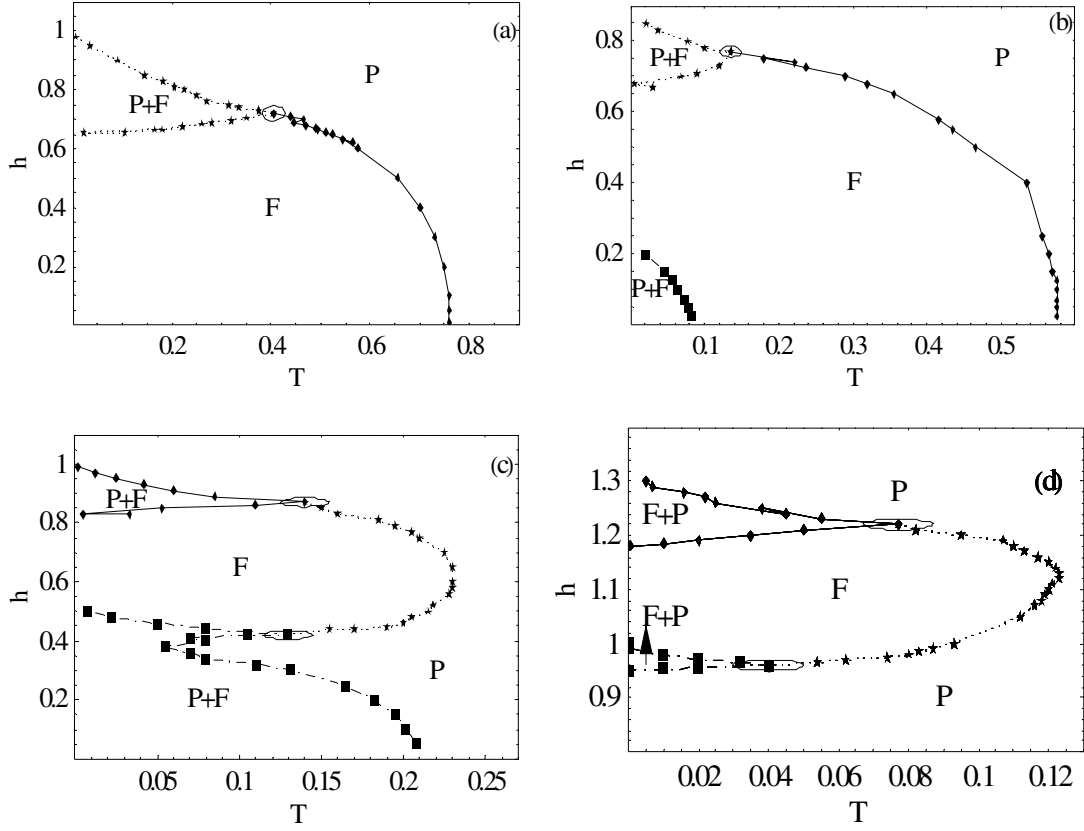
Eğer statik h değeri alırsak (zamana bağlı sinüzoidal olarak değişmediğini düşünerek), ortalama manyetizasyonu indirgenmiş sıcaklığın (T) yada indirgenmiş dış manyetik alanın (h) fonksiyonu olarak çizdiğimizde ne 1. türden ne de 2. türden bir faz geçişi göremeyiz (Şekil 3.5). Bu yüzden h yi zamana bağlı salınım yapan bir dış manyetik alan olarak almamız gerekir.



Şekil 3.5 Statik h değerleri için T ve h nin fonksiyonu olarak ortalama manyetizasyon. Statik h değerinde faz geçişi görülmez.

Farklı değerlerde elde ettiğimiz faz geçişlerini kullanarak sistemin faz diyagramını (T, h) düzleminde çizebiliriz. İndirgenmiş kristal alan etkileşimi (d) nin pozitif değerleri için yüksek indirgenmiş yüksek sıcaklık (T) ve yüksek indirgenmiş dış manyetik alanda (h) paramanyetik, düşük indirgenmiş sıcaklık ve düşük indirgenmiş dış manyetik alanda ferromanyetik faz elde edilir. Bu iki faz 2. türden faz geçiş çizgisi ile ayrılır. Düşük indirgenmiş sıcaklıkta (T) ve indirgenmiş dış manyetik alanın (h) çeşitli değerlerinde paramanyetik faz (P) ve ferromanyetik faz (F) birarada bulunur. Bu bölgeye iki fazın bir arada bulunduğu bölge [coexistence bölge ($P+F$)] denir. Bir arada bulunan bölgeyi ($P+F$), paramanyetik bölge (P) ve ferromanyetik bölgeden (F) ayıran sınırlar 1. türden faz geçiş çizgisi olarak adlandırılır. Sistem iki 1. türden faz geçiş çizgisi ile tek 2. türden faz geçiş çizgisinin birleştiği noktada tek bir dinamik trikritik nokta bulundurur (Şekil 3.6 (a)).

İndirgenmiş kristal alan etkileşimi (d) nin değerini negatif yaptığımızda düşük indirgenmiş sıcaklık (T) ve düşük indirgenmiş dış manyetik alan (h) da yeni bir iki fazın bir arada bulunduğu bölge (coexistence bölge) ($P+F$) oluşur. Bu bölge 1. türden faz geçiş çizgisiyle ferromanyetik bölgeden (F) ayrılır. Faz diyagramının üst kısmı d nin pozitif değerinde olduğu gibi kalır (Şekil 3.6 (b)). İndirgenmiş kristal alan (d) değerini daha düşük negatif bir değer aldığımızda ise düşük indirgenmiş sıcaklık ve düşük indirgenmiş dış manyetik alanda oluşan iki fazın bir arada bulunduğu bölge genişler ve iki tane dinamik trikritik nokta oluşur (Şekil 3.6 (c)). İndirgenmiş kristal alan etkileşimi (d) değerini daha düşürdüğümüzde iki fazın bir arada bulunduğu bölge daralır ve paramanyetik bölge genişler (Şekil 3.6 (d)).



Şekil 3.6 Blume Capel modelin (T, h) düzlemindeki faz diyagramı. Ferromanyetik (F), Paramanyetik (P) ve coexistence bölgeler gösterilmiştir. (a) $d=0.25$ iken kesikli çizgi 1. türden faz geçiş çizgisi, düz çizgi 2. türden faz geçiş çizgisidir. (b) $d=-0.25$ iken kesikli çizgiler 1. türden faz geçiş çizgisi, düz çizgi 2. türden faz geçiş çizgisidir. (c) $d=-0.525$ iken düz çizgi ve kare noktalar olan kesikli çizgi 1. türden faz geçiş çizgisi, noktalarla gösterilen kesikli çizgi 2. türden faz geçiş çizgisidir. (d) $d=-1$ iken düz çizgi ve kare noktalar olan kesikli çizgi 1. türden faz geçiş çizgisi, noktalarla gösterilen kesikli çizgi 2. türden faz geçiş çizgisidir.

Çeşitli d değerleri için faz diyagramları bulmaya devam edersek;

i) $d > 0$ iken düşük sıcaklık ve yüksek dış manyetik alanda coexistence bölge oluşur (Şekil 3.6 (a)).

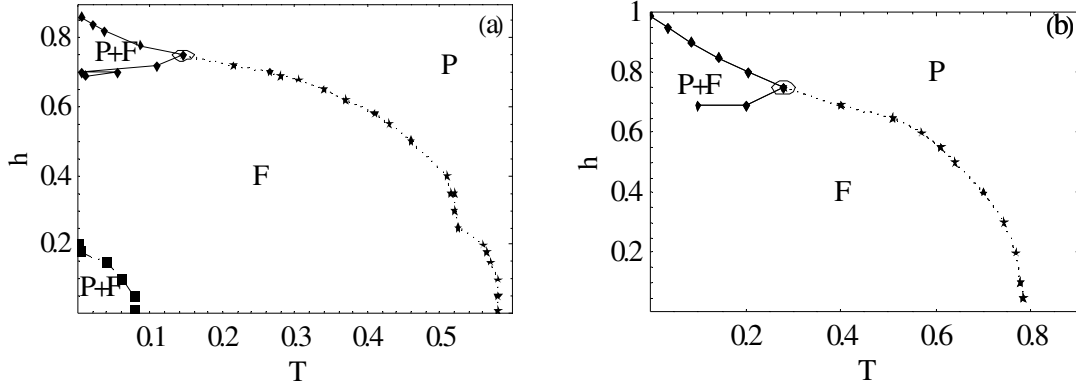
ii) $-0.4654 \leq d \leq -0.0104$ için düşük T ve h değerleri için yeni bir coexistence bölge oluşur. Bu bölge 1. türden faz geçiş çizgisiyle ayrılır (Şekil 3.6 (b)).

iii) $-0.4654 \leq d \leq -0.5543$ için Şekil 3.6 (b) de görülen oluşan P+F bölgesi genişler ve iki tane dinamik trikritik nokta oluşur (Şekil 3.6 (c)).

iv) $d < -0.9891$ için ise Şekil 3.6 (c) de oluşan P+F bölgesi daralır. Paramanyetik bölge genişler (Şekil 3.6 (d)) (Keskin, Canko, Temizer, 2005).

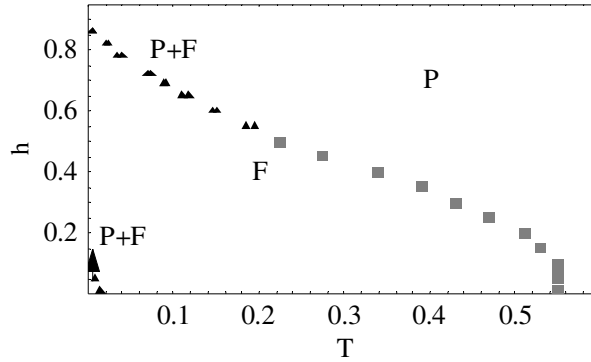
Şimdiye kadar $\Omega/2\pi = 1$ alarak faz diyagramlarını çizdik. Ω yi 2π den küçük bir değer

aldığımızda değişik sonuçlar elde ederiz. $\Omega = \pi$ iken $d=0.25$ olarak aldığımızda yada $d = -0.25$ aldığımızda ortalama manyetizasyonu çizerken bulduğumuz kritik sıcaklık değerlerinde ve buna bağlı olarak çizilen faz diyagramlarında bir değişiklik olmaz (Şekil 3.7).



Şekil 3.7 $\Omega/2\pi = 0.5$ iken (T, h) düzleminde faz diyagramı. a) $d = -0.25$ b) $d = 0.25$ Faz diyagramında $\Omega/2\pi = 1$ iken çizilen faz diyagramlarından farklı olmaz.

Fakat Ω yi daha küçük bir değer alırsak ve d yi sıfıra daha yakın negatif bir değer olursa o zaman faz diyagramında değişiklik oluşur. $d = -0.1$ ve $\Omega/2\pi = 0.1$ alırsak coexistence bölgeler (P+F) de büyük bir daralmanın olduğu görülür (Şekil 3.8).



Şekil 3.8 $\Omega/2\pi = 0.1$ iken (T, h) düzleminde faz diyagramı. $d = -0.1$ iken coexistence bölgelerde büyük bir daralma olur. Üçgen noktalarla gösterilenler 1. türden faz geçişine, kare noktalar ise 2. tür faz geçişine uyar.

4. SPİN 1/2 ve SPİN 1 KARIŞIK ISING MODELİN KİNETİĞİ

Glauber dinamiğini kullanarak kinetiğini anlamaya çalışacağımız başka bir modelde spin-1/2 ve spin-1 karışık Ising modelidir. İlk olarak $\pm 1/2$ ve $\pm 1,0$ alt latistlerinden oluşan kübik yapıli bir sisteme salınım yapan bir dış manyetik alan varlığında Glauber dinamiği uyguladığımızı varsayıyoruz. Burada indirgenmiş sıcaklık ve indirgenmiş dış manyetik alan azalırken zamana bağıli manyetizasyon ve ortalama manyetizasyonu incelerken dinamik faz geçiş noktalarını ve faz diyagramını bulmaya çalışacağız (Buendia, Machado,1998).

Bu sistemin Hamiltonyeni;

$$H = -J \sum_{NN} S_j \sigma_j - D \sum_i S_i^2 - H \left(\sum_i S_i + \sum_j \sigma_j \right) \quad (4.1)$$

dir.

S_j , $\pm 1,0$ deęerlerini ve en yakın komşusu σ_j , $\pm 1/2$ deęerlerini alır. $\sum_{NN}$ bütün en yakın komşu çiftleri üzerinden toplamdır.

J : Deęiş-tokuş etkileşim parametresi

D : Kristal alan etkileşimi yada tek iyon anizotropisi

H : Zamana bağıli salınım yapan dış manyetik alan

$$H(t) = H_o \cos(\omega t)$$

olarak verilir.

Sistem Glauber tipi stochastic dinamięe göre birim zaman başına $1/\tau$ oranında geçişlerle ilerler.

$P'(\sigma_1, \dots, \sigma_N; t)$: S spinleri yerinden ayrılırken $\bar{\sigma}$ spin konfigürasyonuna sahip sistemin olasılığı

$P''(S_1, \dots, S_N; t)$: $\bar{\sigma}$ spinleri yerinden ayrılırken S spin konfigürasyonuna sahip sistemin olasılığı

Buradan j. $\bar{\sigma}$ spininin birim zamanda $\bar{\sigma}_j$ den - $\bar{\sigma}_j$ ye deęişme olasılığı $w_j(\sigma_j)$ ve i. S spininin birim zamanda S_j den S_j' ne deęişme olasılığı $w_i(S_i \rightarrow S_i')$ hesaplanabilir.

4.1 $w_j(\sigma_j)$ nin Hesaplanması

$P'(\sigma_1, \dots, \sigma_N; t)$ nin zaman içindeki değişimini veren master denklem;

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P'(\sigma_1, \dots, \sigma_N; t) = & - \left(\sum_j w_j(\sigma_j) \right) P'(\sigma_1, \dots, \sigma_j, \dots, \sigma_N; t) \\ & + \sum_j w_j(-\sigma_j) P'(\sigma_1, \dots, \sigma_j, \dots, \sigma_N; t) \end{aligned} \quad (4.1.1)$$

dır.

Olasılık dağılımı Boltzman dağılımına bağlı olduğundan dengede,

$$P'(\sigma_1, \dots, \sigma_N) = \frac{e^{-H/kT}}{Z} = e^{-\beta \left[-J \sigma_j \sum_i S_i - D \sum S_i^2 - H \left(\sum_i S_i + \sigma_j \right) \right]} \quad (4.1.2)$$

$$P'(\sigma_1, \dots, -\sigma_j, \dots, \sigma_N) = \frac{e^{-H'/kT}}{Z} = e^{-\beta \left[J \sigma_j \sum_i S_i - D \sum S_i^2 - H \left(\sum_i S_i - \sigma_j \right) \right]} \quad (4.1.3)$$

olarak yazılabilir.

Detailed Balance (ayrıntılı denge şartı);

$$\frac{P'(\sigma_1, \dots, -\sigma_j, \dots, \sigma_N)}{P'(\sigma_1, \dots, \sigma_j, \dots, \sigma_N)} = \frac{w(\sigma_j)}{w(-\sigma_j)} \quad (4.1.4)$$

dır.

Buna göre geçiş olasılıklarının oranı,

$$\frac{w(\sigma_j)}{w(-\sigma_j)} = e^{-2\beta \sigma_j \left[J \sum_i S_i + H \right]} \quad (4.1.5)$$

dır.

Daha farklı bir yazımla geçiş olasılıklarının oranı,

$$\frac{w(\sigma_j)}{w(-\sigma_j)} = \frac{e^{-\beta \sigma_j \left[J \sum_i S_i + H \right]}}{e^{\beta \sigma_j \left[J \sum_i S_i + H \right]}} \quad (4.1.6)$$

haline gelir.

Bu denklem hiberbolik fonksiyonlar cinsinden şu şekilde dönüştürülebilir.

$$\frac{w(\sigma_j)}{w(-\sigma_j)} = \frac{1 - \tanh \left[\beta \sigma_j \left(J \sum_i S_i + H \right) \right]}{1 + \tanh \left[\beta \sigma_j \left(J \sum_i S_i + H \right) \right]} \quad (4.1.7)$$

Sistemimizi kurarken σ_j ve S_i alt latislerinden oluşan bir yapı düşünmüştük. Dağılım olasılığını da düşünürken S_i yi sabit tutup σ_j nin - σ_j ye dönüştüğünü varsaymıştık. Yani σ_j nin en yakın komşularıyla ilişkisi yoktur. Buna dayanarak Glauber in bulduğu yapıya dönersek geçiş olasılığını;

$$w(\sigma_j) = \frac{1}{2\tau} \left[1 - \tanh \sigma_j \beta \left(J \sum_i S_i + H \right) \right]$$

olarak vermiştir.

Benzerlikten faydanılarak σ_j nin geçiş olasılığı;

$$w(\sigma_j) = \frac{1}{2\tau} \left\{ 1 - \tanh \left[\frac{1}{2} \beta \left(J \sum_i S_i + H \right) \right] \right\} \quad (4.1.8)$$

olur.

Glauber e dayanarak master denklemini daha düzenli yazabiliriz.

$$\frac{d}{dt} q_j(t) = -2 \sum_j \sigma_j w(\sigma_j) P'(\sigma_1, \dots, \sigma_N; t) \quad (4.1.9)$$

Bulduğumuz değerleri yerine yazarsak;

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \sigma_j \rangle &= -2 \sum_j \left[\frac{\sigma_j}{2\tau} - \frac{\sigma_j}{2\tau} \tanh \left[\frac{1}{2} \beta \left(J \sum_i S_i + H \right) \right] \right] P'(\sigma_1, \dots, \sigma_N; t) \\ \tau \frac{d}{dt} \langle \sigma_j \rangle &= -\langle \sigma_j \rangle + \left\langle \frac{1}{2} \tanh \left[\frac{1}{2} \beta \left(J \sum_i S_i + H \right) \right] \right\rangle \end{aligned} \quad (4.1.10)$$

zaman içindeki dönüşümü belirleyen diferansiyel denklem elde edilir.

4.2 $w_i(S_i \rightarrow S'_i)$ nün Hesaplanması

Yine benzer bir yolla $P''(S_1, \dots, S_N; t)$ nün zamana bağlı değişimi yazılabilir.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P''(S_1, \dots, S_N; t) = & - \sum_i \left(\sum_{S_i \neq S_i'} w_i(S_i \rightarrow S_i') \right) P''(S_1, \dots, S_N; t) \\ & + \sum_i \left(\sum_{S_i \neq S_i} w_i(S_i \rightarrow S_i') \right) P''(S_1, \dots, S_N; t) \end{aligned} \quad (4.2.1)$$

Birim zamanda S_i nin S_i' ne deęişme olasılığı;

$$w(S_i \rightarrow S_i') = \frac{1}{\tau} \frac{\exp[-\beta \Delta E''(S_i \rightarrow S_i')]}{\sum_{S_i} \exp[-\beta \Delta E''(S_i \rightarrow S_i')]} \quad (4.2.2)$$

dır.

S_i' nün üç olası deęeri vardır $(\pm 1, 0)$ ve spin deęiştğinde sistemin enerjisi de deęiřir. Enerji deęiřimi de (4.1) eřitlięi kullanılarak,

$$\Delta E''(S_i \rightarrow S_i') = -(S_i' - S_i)(J \sum_j \sigma_j + H) - (S_i'^2 - S_i^2)D \quad (4.2.3)$$

řeklinde yazılabilir.

S_i nin deęerlerini yerine koyup deęiřme olasılıęını hesaplırsak;

○ $S_i = 1 \quad S_i' = 0$ için;

$$w_i(1 \rightarrow 0) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp[-\beta \Delta E''(1 \rightarrow 0)]}{\exp[-\beta \Delta E''(1 \rightarrow 0)] + \exp[-\beta \Delta E''(1 \rightarrow -1)] + \exp[-\beta \Delta E''(1 \rightarrow 1)]}$$

$a = \beta(J \sum_j \sigma_j + H)$ olarak alırsak;

$$w_i(1 \rightarrow 0) = \frac{1}{\tau} \frac{e^{-a} e^{-\beta D}}{e^{-a} e^{-\beta D} + e^{-2a} + 1} = \frac{1}{\tau} \frac{e^{-\beta D}}{e^{-a} + e^a + e^{-\beta D}}$$

$\cosh a = \frac{e^{-a} + e^a}{2}$ baęıntısını kullanarak;

$S_i = 1 \quad S_i' = 0$ için deęiřim olasılıęı,

$$w_i(1 \rightarrow 0) = \frac{1}{\tau} \frac{e^{-\beta D}}{2 \cosh a + e^{-\beta D}} \quad (4.2.4)$$

olarak yazılabilir.

- $S_i = 1 \quad S_i' = -1$ için değişim olasılığı,

$$\begin{aligned}
 w_i(1 \rightarrow -1) &= \frac{1}{\tau \exp[-\beta \Delta E''(-1 \rightarrow 0)] + \exp[-\beta \Delta E''(-1 \rightarrow 1)] + \exp[-\beta \Delta E''(-1 \rightarrow 1)]} \\
 &= \frac{1}{\tau e^a (e^{-\beta D} + e^a + e^{-a})} \\
 &= \frac{1}{\tau 2 \cosh a + e^{-\beta D}}
 \end{aligned} \tag{4.2.5}$$

olarak yazılabilir.

- $S_i = 0 \quad S_i' = 1$ için değişim olasılığı,

$$\begin{aligned}
 w_i(0 \rightarrow 1) &= \frac{1}{\tau \exp[-\beta \Delta E''(0 \rightarrow 1)] + \exp[-\beta \Delta E''(0 \rightarrow -1)] + \exp[-\beta \Delta E''(0 \rightarrow 0)]} \\
 &= \frac{1}{\tau e^{\beta D} (e^a + e^{-a} + e^{-\beta D})} \\
 &= \frac{1}{\tau 2 \cosh a + e^{-\beta D}}
 \end{aligned} \tag{4.2.6}$$

olarak yazılabilir.

Bütün değişim olasılıklarını bulduk ve bazılarının birbirleriyle aynı değere sahip olduğunu gördük.

$$\begin{aligned}
 w_i(1 \rightarrow 0) &= w_i(-1 \rightarrow 0) \\
 \diamond w_i(1 \rightarrow -1) &= w_i(0 \rightarrow -1) \\
 w_i(0 \rightarrow 1) &= w_i(-1 \rightarrow 1)
 \end{aligned} \tag{4.2.7}$$

Bulduğumuz değerlerden de görüldüğü gibi $w_i(S_i \rightarrow S_i')$, S_i ye bağımlı değildir. Bu durumda master denklem (master equation) yeni düzenlemeyle,

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} P''(S_1, \dots, S_N; t) &= - \sum_i \left(\sum_{S_i \neq S_i'} w_i(S_i') \right) P''(S_1, \dots, S_N; t) \\
 &\quad + \sum_i w_i(S_i) \left(\sum_{S_i \neq S_i'} P''(S_1, \dots, S_i', \dots, S_N; t) \right)
 \end{aligned} \tag{4.2.8}$$

olur.

İki tarafı S_K ile çarparsak;

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle S_K \rangle = & -[w_i(0) + w_i(-1) + w_i(1)] S_K P''(S_1, \dots, S_N; t) + \\ & [1.w_i(0) - 1.w_i(0) + 1.w_i(-1) + 0.w_i(-1) + 0.w_i(1) - 1.w_i(1)] \\ & P''(S_1, \dots, S_i', \dots, S_N; t) \end{aligned} \quad (4.2.9)$$

$$\begin{aligned} = & - \left[\frac{\exp(-\beta D) + \exp(-a) + \exp(a)}{2 \cosh a + \exp(-\beta D)} \right] S_K P''(S_1, \dots, S_N; t) \\ & + \left[\frac{\exp(a) + \exp(-a)}{2 \cosh a + e^{-\beta D}} \right] P''(S_1, \dots, S_N; t) \end{aligned} \quad (4.2.10)$$

bütün toplamalar üzerinden;

$$\tau \frac{d}{dt} \langle S_K \rangle = -\langle S_K \rangle + \left\langle \frac{2 \sinh \beta (J \sum_j \sigma_j + H)}{2 \cosh \beta (J \sum_j \sigma_j + H) + \exp(-\beta D)} \right\rangle \quad (4.2.11)$$

olarak yazılabilir.

Ortalama alan yaklaşımıyla;

$$\tau \frac{d}{dt} \langle S \rangle = -\langle S \rangle + \frac{2 \sinh \beta [JZ \langle \sigma \rangle + H_o \cos wt]}{2 \cosh \beta [JZ \langle \sigma \rangle + H_o \cos wt] + \exp(-\beta D)} \quad (4.2.12)$$

ikinci diferansiyel denklemi elde etmiş oluruz.

(4.1.10) ve (4.2.12) denklemlerini düzenleyebiliriz:

$$m_1 = \langle S \rangle \quad m_2 = \langle \sigma \rangle \quad \Omega = \tau w \quad \xi = wt \quad T = \frac{1}{\beta JZ} \quad h = \frac{H_o}{JZ} \quad d = \frac{D}{JZ}$$

parametrelerini kullanırsak,

(4.2.12) eşitliği için master denklem;

$$\begin{aligned} \frac{\Omega}{w} \frac{d}{d\xi} m_1 = & -m_1 + \frac{2 \sinh(1/T) m_2 + 2 \sinh(\frac{1}{TJZ} hJZ \cos \xi)}{2 \cosh(1/T) m_2 + 2 \cosh(\frac{1}{TJZ} hJZ \cos \xi) + \exp(-\beta dJZ)} \\ \Omega \frac{d}{d\xi} m_1 = & -m_1 + \frac{2 \sinh(1/T) m_2 + 2 \sinh(\frac{1}{T} h \cos \xi)}{2 \cosh(1/T) m_2 + 2 \cosh(\frac{1}{T} h \cos \xi) + \exp(-d/T)} \end{aligned} \quad (4.2.13)$$

haline dönüşür.

(4.1.10) eşitliği için master denklem;

$$\frac{\Omega}{w} w \frac{d}{d\xi} m_2 = -m_2 + \frac{1}{2} \tanh \frac{1}{2} \beta \left[\frac{1}{T} m_1 + \frac{1}{TJZ} hJZ \cos \xi \right]$$

$$\Omega \frac{d}{d\xi} m_2 = -m_2 + \frac{1}{2} \tanh \frac{1}{2T} (m_1 + h \cos \xi) \quad (4.2.14)$$

haline gelir.

Dinamik faz geçiş (DPT) noktalarını ve faz diyagramlarını bulmaya çalışalım. Bunun için (4.2.13) ve (4.2.14) dinamik denklemlerinin denge çözümlerini, T, D, h parametreleri değişirken bulmalıyız.

Sistemin çözümleri m_1 ve m_2 nin başlangıç koşullarına bağlıdır. Toplam manyetizasyonu $Q = m_1 + m_2$ olarak gösterirsek (4.2.13) ve (4.2.14) diferansiyel denklemlerini analitik olarak çözebiliriz.

Analitik Çözüm:

$D \gg 1$ olduğunu kabul edersek;

$$\Omega \left[\frac{d}{d\xi} (m_1 + m_2) \right] = -(m_1 + m_2) + \tanh \frac{1}{T} (m_2 + h \cos \xi) + \frac{1}{2} \tanh \frac{1}{2T} (m_1 + h \cos \xi) \quad (4.2.15)$$

$\frac{\cos \xi}{T} \gg 1$ ve $T \ll 1$ ise ;

$$\Omega \left[\frac{d}{d\xi} (m_1 + m_2) \right] = -(m_1 + m_2) + \frac{3}{2}$$

$$\Omega \left[\frac{dQ}{-Q + 3/2} \right] = d\xi$$

$$\ln(-Q + 3/2) = -\frac{\xi}{\Omega}$$

$$-Q + 3/2 = e^{-\xi/\Omega}$$

$$Q = \frac{3}{2} - e^{-\xi/\Omega} + C \quad (4.2.16)$$

$\xi = 0$ iken ;

Başlangıç koşulunu sıfır aldığımızda toplam manyetizasyonu,

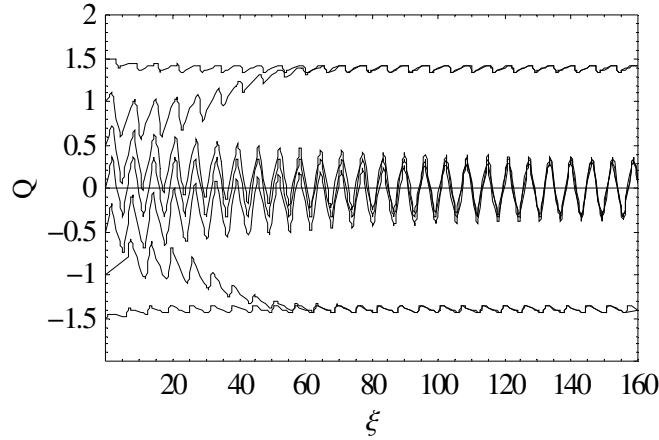
$$Q(0) = 3/2 \quad (4.2.17)$$

olarak elde ederiz.

Nümerik çözüm:

Bu durumu, diferansiyel denklemleri değişik başlangıç koşulları altında nümerik olarak çözdüğümüzde de görebiliriz.(Şekil 4.1).

$$\begin{aligned}
 m_1(\xi = 0) &= 1 & m_2(\xi = 0) &= 0 \\
 m_1(\xi = 0) &= -1 & m_2(\xi = 0) &= 0 \\
 m_1(\xi = 0) &= 0 & m_2(\xi = 0) &= 0 \\
 m_1(\xi = 0) &= 1 & m_2(\xi = 0) &= 0.5 \\
 m_1(\xi = 0) &= -1 & m_2(\xi = 0) &= -0.5 \\
 m_1(\xi = 0) &= 0.5 & m_2(\xi = 0) &= 0 \\
 m_1(\xi = 0) &= -0.5 & m_2(\xi = 0) &= 0
 \end{aligned} \quad (4.2.18)$$



Şekil 4.1 $T=0.05$, $h=0.5$, $\Omega=2\pi$, $d=0.1$ iken farklı başlangıç koşullarında toplam manyetizasyonun zamanla değişimi (Buendia, Machado, 1998).

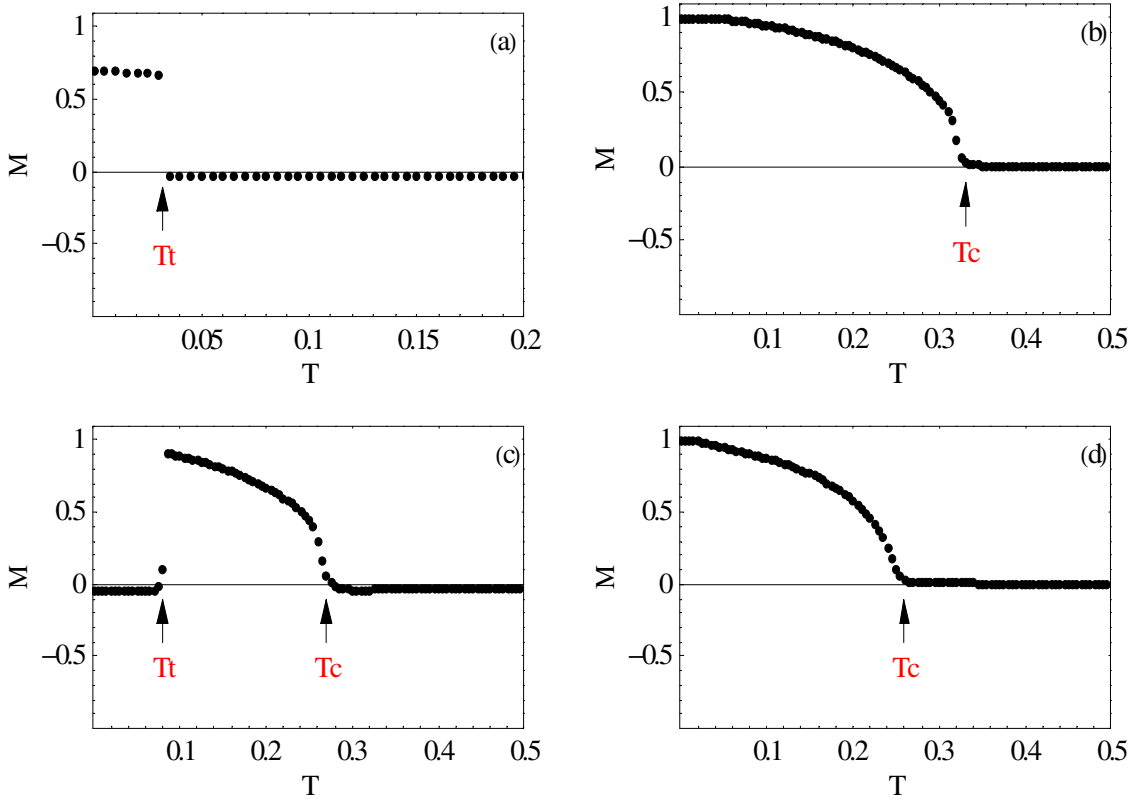
Şekil 4.1 de görüldüğü gibi sistem, denge durumuna gelene kadar çabuk geçen bir bölümden sonra aynı çözümü vermektedir. Toplam manyetizasyonun çözümü 2π periyotlu zamanın (ξ) periyodik fonksiyonu olacaktır ve aşağıdaki şarta uymalıdır.

$$Q(\xi + \pi) = -Q(\xi) \quad (4.2.19)$$

Eğer çözüm bu denkleme uyuyorsa bu durum simetrik çözüm olarak adlandırılır ve buna paramanyetik çözümde denir. Burada manyetizasyon sıfır değerinde salınım yapar ve bu dış manyetik alanla uyumludur. Eğer çözüm bu denkleme uymuyorsa simetrik olmayan çözüm yani ferromanyetik çözüm oluşur. Bu durumda manyetizasyon dış manyetik alanı takip etmez ve artık sıfır değerinin dışındaki değerlerde salınım yapar. Şekil 4.1 de de bu durum görülmektedir. Şekil 4.1 de paramanyetik, ferromanyetik çözüm görülse de bu durumlar arasındaki sınırlar ve geçişler görülmemektedir. Bölgeler arasındaki sınırları görmek için dinamik faz geçiş noktalarını (DPT) hesaplamak ve sistemin faz geçiş diyagramını oluşturmak gerekir. DPT yi elde ederken de sıcaklık ve dış manyetik alan değişirken ki ortalama manyetizasyona bakmak gerekir. Ortalama manyetizasyon,

$$M = \frac{1}{2\pi} \int_{\varepsilon_o}^{\varepsilon_o + 2\pi} Q(\xi) d\xi \quad (4.2.20)$$

olarak verilir.

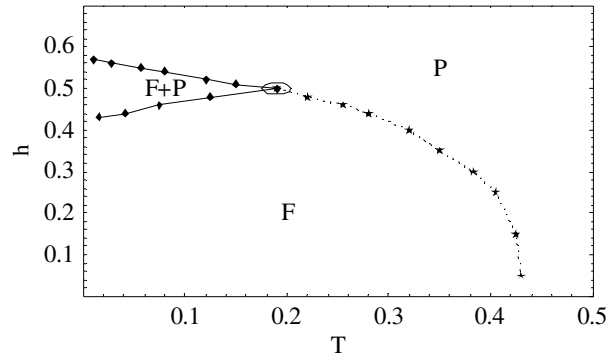


Şekil 4.2 Ortalama manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklığa bağlı değişimi. T_t ve T_c sırasıyla 1. türden ve 2. türden faz geçiş sıcaklığıdır. (a) $d=0.1$ ve $h=0.56$ iken 1.türden faz geçişi oluşur. Burada $T_t = 0.032$ olarak bulunur. (b) $d=0.1$ ve $h=0.4$ iken 2. türden faz geçiştir. $T_c = 0.33$ dir. (c) $d=0.1$ ve $h=0.46$ iken ikinci türden geçiş olur. $T_c = 0.26$ dir. (d) $d=0.1$, $h=0.46$ iken 2. türden faz geçişi olur. 2. tür faz geçiş sıcaklığı $T_c = 0.26$ dir.

Toplam manyetizasyon ($Q(\xi)$) alana bağılı olarak değişir ve ortalama manyetizasyon (M) sıfır değeri alırsa paramanyetik durum, $Q(\xi)$ alana bağılı olarak hareket etmezse ve ortalama manyetizasyon sıfırdan farklı değerler alırsa ferromanyetik durum oluşur. Dinamik faz geçişleri, paramanyetik ve ferromanyetik durumun arasındaki sınırlara ve faz diyagramının bölgelerine bağlıdır. Bu faz geçişleri iki değişik şekilde olur. Bunlar birinci ve ikinci tür faz geçişidir. Birinci tür faz geçişinde iki faz bir arada bulunur ve geçişlerde yoğunlukta süreksizlik oluşur. M düzen parametresi süreksizdir ve keskin bir şekilde sıfır olmayan bir değerden sıfıra iner. İkinci tür faz geçişinde ise iki fazın bir arada olması durumu biter. M parametresi sürekli bir şekilde sıfıra iner ve bunun birinci türevi süreksizdir. 1.tür faz geçişinin bittiği 2. tür faz geçişinin başladığı nokta kritik noktadır (Şekil 4.2).

Şekil 4.2 de zaman bağılı ortalama manyetizasyon çizilmiştir. Şekil 4.2 (a) da $d = 0.1$ ve $h=0.56$ iken T artarken M değeri süreksiz bir şekilde sıfıra gider ve 1. türden faz geçişi $T_t = 0.032$ sıcaklığında oluşur. Şekil 4.2 (b) de $d=0.1$ ve $h=0.4$ iken T artarken M değeri sürekli bir şekilde sıfıra iner ve 2. türden faz geçişi oluşur. 2. türden faz geçiş sıcaklığı $T_c = 0.32$ olur. Şekil 4.2.(c) de başlangıç koşulu $m_1 = 0$ ve $m_2 = 0$ iken iki başarılı geçiş aynı anda olur. $T_t = 0.08$ sıcaklığında 1. türden faz geçişi oluşmuştur. Burada iki faz birarada $F+P$ bulunur (coexistence). $T_c = 0.26$ sıcaklığında 2. türden faz geçişi oluşmuştur. Şekil 4.2 (d) de $m_1 = 1$ ve $m_2 = 0$ iken sadece 2. türden faz geçişi oluşur.

Elde ettiğimiz verilere dayanarak sistemin faz diyagramını (T, h) düzleminde çizebiliriz. d , pozitif ve büyük bir değerde iken yüksek sıcaklıkta paramanyetik çözüm, alçak sıcaklıkta ferromanyetik çözüm elde edilir. Bir tane coexistence (birarada) bölge oluşur (Şekil 4.3).

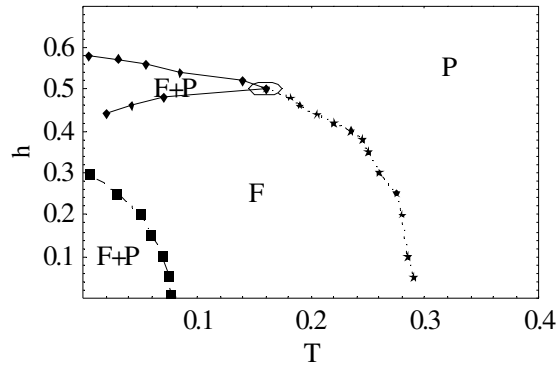


Şekil 4.3 $d=0.1$ iken ($T-h$) düzleminde faz diyagramı. (P) Paramanyetik durumu, (F) ferromanyetik durumu, (P+F) iki fazın birarada bulunduğu durumu gösterir. Büyük çember ile gösterilen nokta dinamik trikritik noktadır. Kesikli çizgi ile gösterilen bölüm 2. türden faz geçişi, düz çizgi ise 1. türden faz geçişini gösterir.

Ferromanyetik bölgeden paramanyetik bölgeye geçiş ($F \rightarrow P$) çizgisi kritik çizgidir ve burada

devamlı bir geiş olur (2. t rden geiş). D ş k indirgenmiř sıcaklık ve indirgenmiř dıř manyetik alanın y ksek deęerlerinde ikiye ayrılan kritik izgi vardır ve bu izgiler s reksizdir. Bu iki izgi arasında iki faz birarada bulunur (F+P). İki 1. t rden faz geişinin 2. t rden faz geiři ile birleřtięi nokta ise dinamik faz geiř noktasıdır.

d , negatif bir deęerde olmaya bařlarsa ($-2.03760 \leq D \leq -0.11825$) d ř k sıcaklıklarda coexistence (iki fazın bir arada bulunduęu) b lge daha oluřur. d nin negatif deęeri iin faz diyagramı řekil 4.4 te g sterilmiřtir. D ř k sıcaklık ve dıř manyetik alanda m_1 alt latisi sıfır civarında salınım yaparken m_2 alt latisi dıř alandan baęımsız hareket eder ve b ylelikle bu b l mde ferromanyetik ve paramanyetik durum birarada bulunur.



řekil 4.4 $d = -0.0075$ iken (T, h) d zleminde faz diyagramı.  ember ile g sterilen nokta dinamik trikritik noktadır. D ř k T sıcaklıęında yeni bir kritik izgi oluřur.

$D \leq -2.03760$ olduęunda faz diyagramı olduka deęiřir. h nin d ř k deęerlerinde paramanyetik b lge geniřler ve D nin sıfıra yakın negatif deęerlerinde oluřan ikinci coexistence b lge daralır ve ikinci bir dinamik trikritik nokta oluřur (Buend a, Machado, 1998).

5. RASTGELE DEĞERDEKİ DIŞ MANYETİK ALANLA ÇÖZÜLEN BLUME CAPELİN KİNETİĞİ

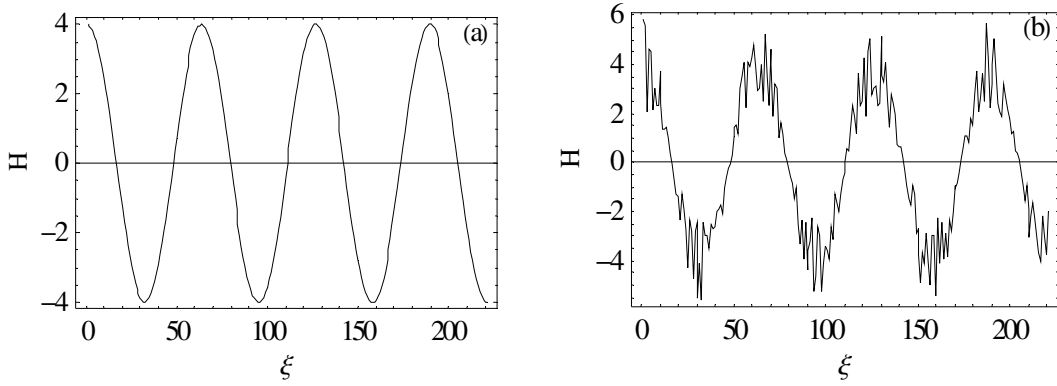
Daha önce bahsettiğimiz modellerde faz geçişini görmek için dış manyetik alanın zamana bağlı salınım yaptığını göz önüne almıştık. Dış manyetik alan bir sabit ile zamana bağlı kosinüs eğrisinin çarpımı olarak yazabilir.

$$H(t) = H_0 \cos(\xi) \quad \xi = \omega t \quad (5.1)$$

Eğer H_0 değerinin sabit olmayan rastgele değerlerle değiştiğini düşünersek dış manyetik alanda bir düzensizlik oluşur (Şekil 5.1). Rastgele dış manyetik alanı aşağıdaki şekilde yazılabilir.

$$H = (H_o + \chi_n) \cos \omega t \quad (5.2)$$

Burada H_o sabit bir değer, χ_n ise dış manyetik alanın rastgele kısmını oluşturur. Bu rastgelelik $[-r, r]$ aralığında her bir zaman adımında eşit olasılıkla oluşur. r ise rastgeleliğin sınırlarını belirler.



Şekil 5.1 H nin zamanla değişimi. (a) Dış manyetik alan zamana bağlı kosinüs eğrisi çizer. (b) Sabit değeri rastgele değerler vererek değiştirdiğimizde kosinüs eğrisinde düzensizlik oluşur.

Şekil 5.1 de de görüldüğü gibi H_0 a 4 değerini verip dış manyetik alanı çizdiğimizde olağan bir kosinüs eğrisi elde ederiz. H_0 değerini $[-2,2]$ arasındaki değerlerde rastgele değiştirdiğimizde kosinüs eğrisinde bir düzensizlik oluşur. Bu düzensizlik dış manyetik alandaki gürültü (noise) olarak adlandırılır.

Rastgele değerdeki dış manyetik alanı, spin-1 Blume-Capel (BC) modele uygulayarak bu rastgeleliğin modelin zamana bağlı manyetizasyonuna ve ortalama manyetizasyona nasıl

etkidiği bulunabilir.

Spin-1 değerli BC modelin Hamiltonyeni;

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - D \sum_i S_i^2 - H \sum_i S_i \quad (5.3)$$

idi. Glauber dinamiğini bu modele uygulayarak sistemin kinetiğini bulmuştuk ve (3.24) eşitliğini elde etmiştik. Rastgeleliğin etkisindeki master denklem şu şekilde olur.

$$\tau \frac{d}{dt} \langle S \rangle = -\langle S \rangle + \frac{2 \sinh \beta [JZ \langle S \rangle + (H_o + \chi_n) \cos wt]}{2 \cosh \beta [JZ \langle S \rangle + (H_o + \chi_n) \cos wt] + \exp(-\beta D)} \quad (5.4)$$

(5.4) eşitliğini,

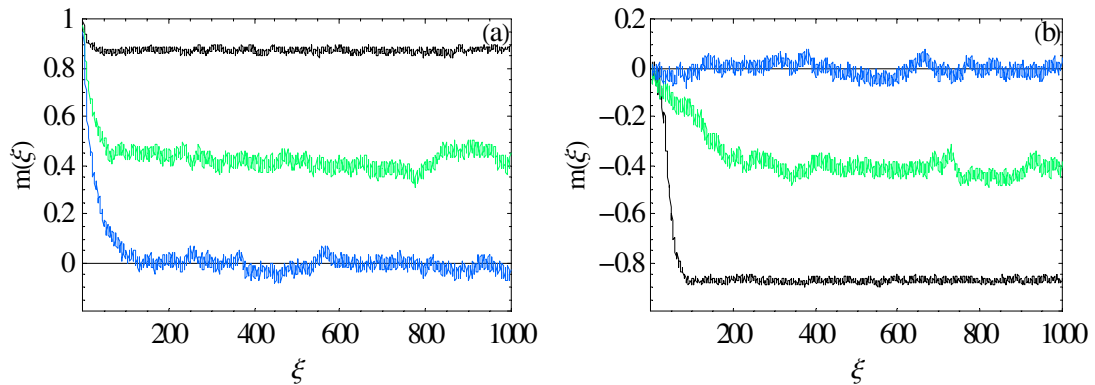
$$m = \langle S \rangle \quad \Omega = \tau \omega \quad \xi = wt \quad T = \frac{1}{\beta JZ} \quad h_o + \chi_r = \frac{(H_o + \chi_n)}{JZ} \quad \Omega = 2\pi \quad d = \frac{D}{ZJ} \text{ değerleri ile}$$

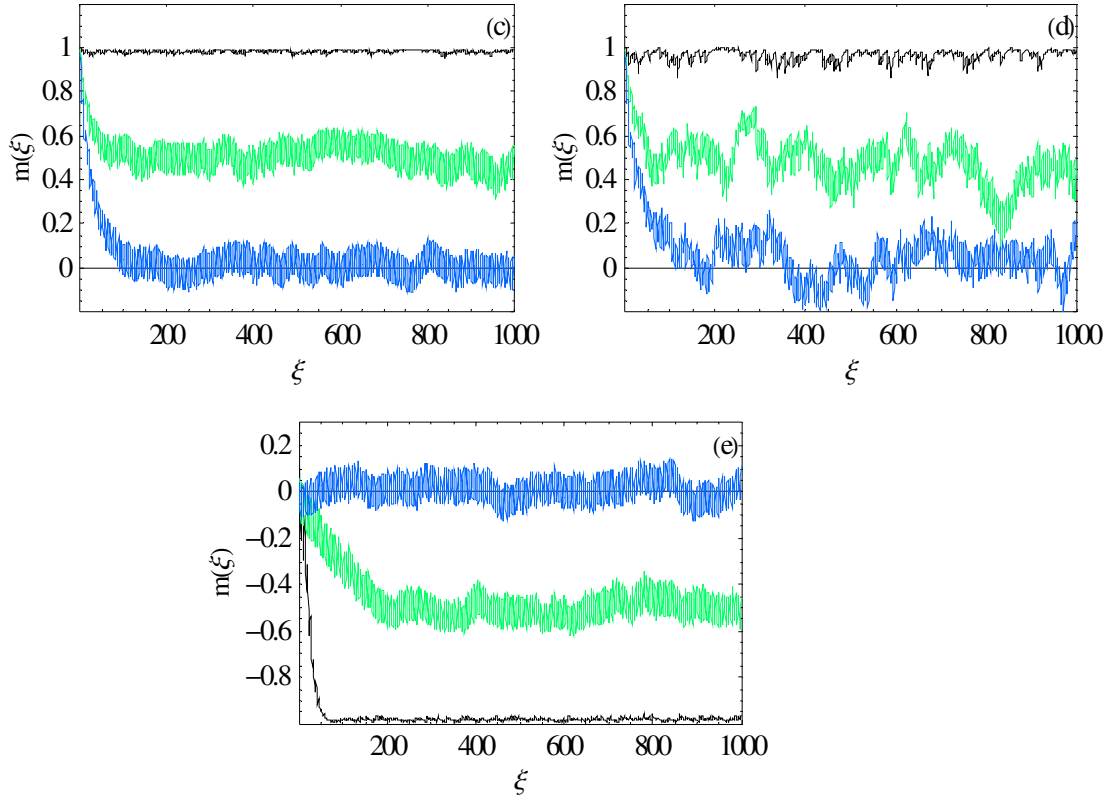
sadeleştirebiliriz. Bu durumda denklem,

$$\Omega \frac{d}{d\xi} m = -m + \frac{\sinh [(1/T)(m + (h_o + \chi_r) \cos \xi)]}{\cosh [(1/T)(m + (h_o + \chi_r) \cos \xi)] + \frac{1}{2} \exp(-d/T)} \quad (5.5)$$

şekline dönüşür.

Bu denklemi parametrelere bazı limit değerler vererek nümerik olarak çözdüğümüzde manyetizasyonun zamana bağlı değişimi bulunabilir (Şekil 5.2).





Şekil 5.2 $d=-0.25$ iken rastgele değerli manyetizasyonun zamana göre değişimi. (a) $h_0=0.2$, başlangıç koşulu $m(0)=1$ ve dış manyetik alanın rastgele kısmı $[-0.1,0.1]$ aralığındadır. Buna göre siyah eğri $T=0.3$, yeşil eğri $T=0.5$ ve mavi eğri $T=0.7$ iken manyetizasyonun zamana göre değişimini gösterir. (b) $h_0=0.2$, $m(0)=0$, $[-0.1,0.1]$ iken siyah eğri ($T=0.3$), yeşil eğri ($T=0.5$), mavi eğri ($T=0.7$) manyetizasyonun değişimini gösterir. (c) $h_0=0.5$, $m(0)=1$, $[-0.1,0.1]$ iken siyah eğri ($T=0.1$), yeşil eğri ($T=0.4$), mavi eğri ($T=0.6$) manyetizasyonun değişimini gösterir. (d) $h_0=0.5$, $m(0)=1$, $[-0.3,0.3]$ iken siyah eğri ($T=0.1$), yeşil eğri ($T=0.4$), mavi eğri ($T=0.6$) manyetizasyonun değişimini gösterir. (e) $h_0=0.5$, $m(0)=0$, $[-0.1,0.1]$ iken siyah eğri ($T=0.1$), yeşil eğri ($T=0.4$), mavi eğri ($T=0.6$) manyetizasyonun değişimini gösterir.

Şekil 5.2 (a) yı ve Şekil 5.2 (b) yi daha önceden çizdiğimiz Şekil 3.2 (b) ile karşılaştırdığımızda farklı başlangıç koşullarıyla çizdiğimiz Şekil 5.2 (a) ve Şekil 5.2 (b) deki yeşil eğrilerin, Şekil 3.2 (a) daki rastgele değişimin olmadığı değerden pek fazla bir farkı olmadığı, çok az bir sapma olduğu görülür. Fakat rastgeleliği arttırdığımızda bu sapmada artış olur.

Şekil 5.2 (a) ve (b) de görüldüğü gibi d ve h değerleri aynı fakat başlangıç koşulları farklı iken birbirinden farklı manyetizasyonun zamanla değişim eğrileri elde ederiz. Şekil 5.2 (c) ve (d) de h ve T değerleri ve başlangıç koşulları aynı iken dış manyetik alanın rastgele kısmını $[-0.1,0.1]$ den $[-0.3,0.3]$ e genişlettiğimizde daha fazla değişim elde ederiz. Şekil 5.2 (e) de de bu eğrilerin başlangıç koşullarına göre değiştiğini görebiliriz.

Daha önceden de bildiğimiz gibi (5.1) eşitliğinin dış manyetik alanın rastgele değişiminin olmadığı kısmında denklem, 2π periyodunda $m(\xi + \pi) = -m(\xi)$ ye göre simetrik olarak değişir.

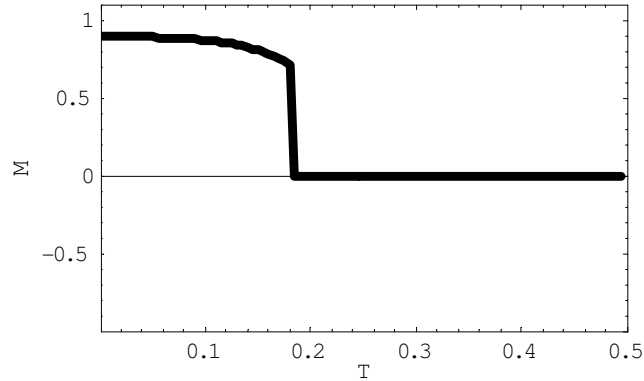
Fakat dış manyetik alanda gürültü olduğunda bu simetrik durum pek geçerli değildir. Bu bozulma faz geçişinde rol oynayan parametrelerinin dış manyetik alanın rastgele kısmından etkilendiğini gösterir.

Manyetizasyonun zamana bağlı olarak gürültülü bir şekilde salınım yaptığını hesaba katarak, başka bir düzen parametresi olan ortalama dış manyetik alanı hesaplanabilir. Ortalama manyetizasyonu,

$$M = \frac{1}{2\pi} \int_{\varepsilon_0}^{\varepsilon_0+2\pi} m(\xi) d\xi \quad (5.6)$$

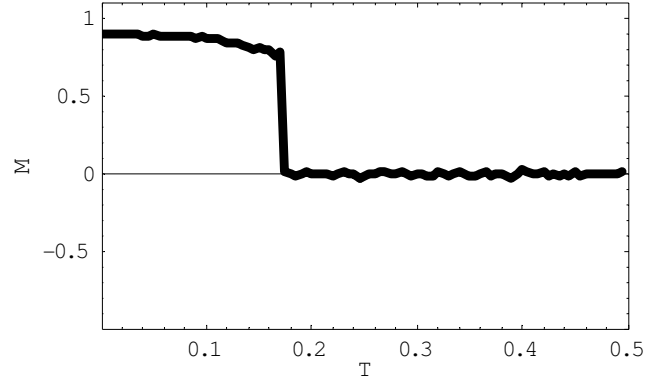
denkleminde uyararak çözerek, dış manyetik alandaki gürültünün faz geçişi üzerindeki etkisini görülebilir.

Kinetik spin-1 Blume-Capel modelinde $d=0.25$, $h_0=0.85$, $m(0)=1$ değerleri ile ve dış manyetik alanda gürültü olmadığında çözersek, $T_t \approx 0.17$ kritik sıcaklığında birinci türden faz geçişi oluşur (Şekil 5.3).



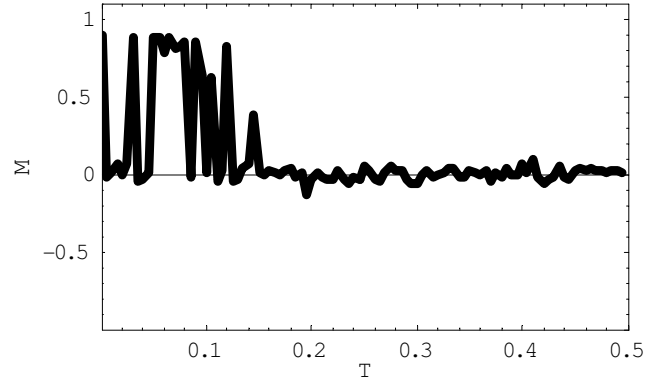
Şekil 5.3 $d=0.25$, $h_0=0.85$, $m(0)=1$ iken ve düzensizlik yokken ortalama manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklıkla değişimi. $T_t \approx 0.17$ sıcaklığında 1. türden faz geçişi gösterir.

$d=0.25$, $h_0=0.85$, $m(0)=1$ iken dış manyetik alana $[-0.05, 0.05]$ gibi çok düşük bir aralıkta gürültü verildiğinde kritik sıcaklık civarındaki değişim fazla olmadığı ve aynı kritik sıcaklık etrafında bir faz geçiş noktası elde edildiği görülür. (Şekil 5.4).



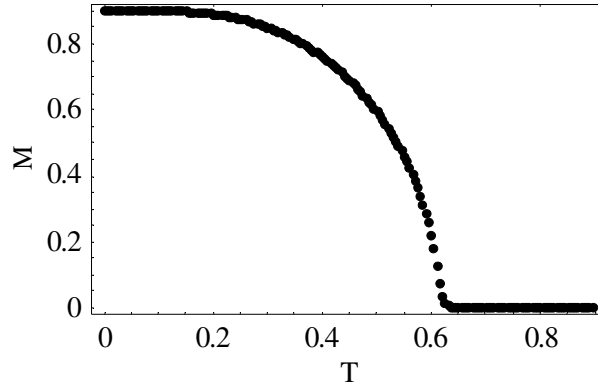
Şekil 5.4 $d=0.25$, $h_0=0.85$, $m(0)=1$ ve dış manyetik alanın rastgele kısmı $[-0.05, 0.05]$ iken ortalama manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklıkla değişimi. $T_t \approx 0.17$ sıcaklığında hala 1. türden faz geçişi gösterir.

Fakat dış manyetik alandaki gürültüyü $[-0.2, 0.2]$ ye çıkardığımızda artık Şekil 5.3 teki eğriden çok farklı bir eğri elde edilir ve bu şekilden farklı olarak farklı noktalarda birden çok faz geçişi görülür (Şekil 5.5).



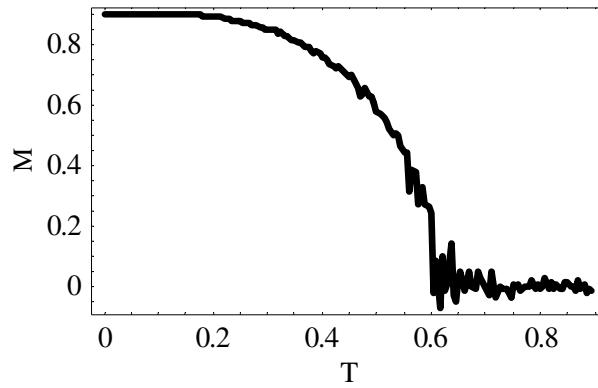
Şekil 5.5 $d=0.25$, $h_0=0.85$, $m(0)=1$ ve dış manyetik alanın rastgele kısmı $[-0.2, 0.2]$ iken ortalama manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklıkla değişimi. Burada keskin geçişler oluşur.

(5.6) eşitliğini $d=0.25$, $h_0=0.4$, $m(0)=1$ iken dış manyetik alanda hiçbir gürültü yokken nümerik olarak çözüp ortalama manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklıkla değişim grafiğini çizildiğinde ise sürekli olarak sıfıra inen bir eğri elde edilir. Bu eğride bize iki fazın aynı anda bulunduğu 2. türden faz geçişi oluştuğunu gösterir. Bu durumda 2. türden faz geçiş sıcaklığı $T_c \approx 0.63$ dır (Şekil 5.6).



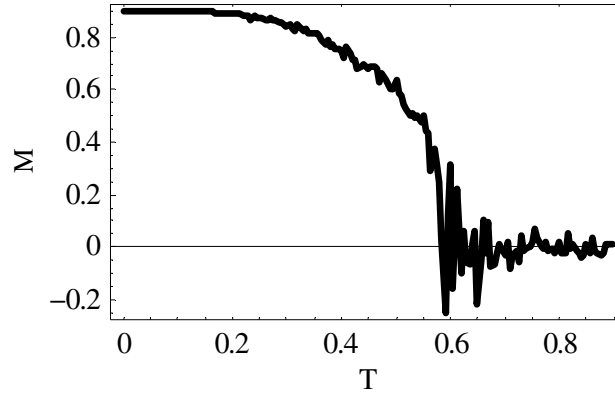
Şekil 5.6 $d=0.25$, $h_o=0.4$, $m(0)=1$ ve dış manyetik alanda gürültü yokken ortalama manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklıkla değişimi. Bu durumda $T_c \approx 0.63$ civarında 2.türden faz geçişi oluşur.

$d=0.25$, $h_o=0.4$, $m(0)=1$ iken dış manyetik alana $[-0.1, 0.1]$ gibi küçük bir aralıkta gürültü verdiğimizde kritik sıcaklık civarında fazlalaşan bir salınım oluşur. Fakat bu salınım, kritik noktadaki faz geçişini fazla etkilemez (Şekil 5.7).



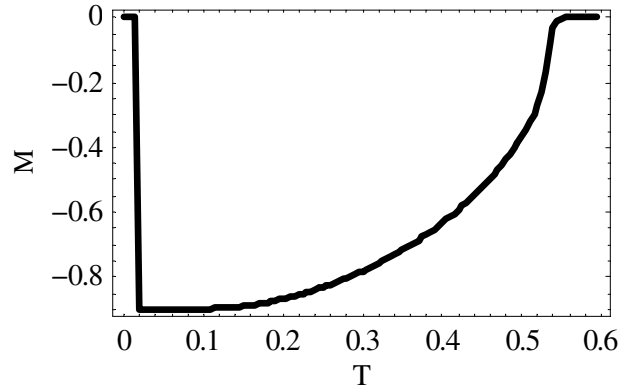
Şekil 5.7 $d=0.25$, $h_o=0.4$, $m(0)=1$ ve dış manyetik alanın rastgele kısmı $[-0.1, 0.1]$ iken ortalama manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklıkla değişimi. Hala kritik sıcaklık civarında faz geçişi görülür.

$d=0.25$, $h_o=0.4$, $m(0)=1$ iken dış manyetik alandaki gürültüyü $[-0.2, 0.2]$ ye çıkardığımızda 2. türden faz geçiş sıcaklık noktasındaki değişim daha fazla olmasına rağmen çizim formunda geçişi değiştirecek büyük bir değişiklik görülmez (Şekil 5.8).



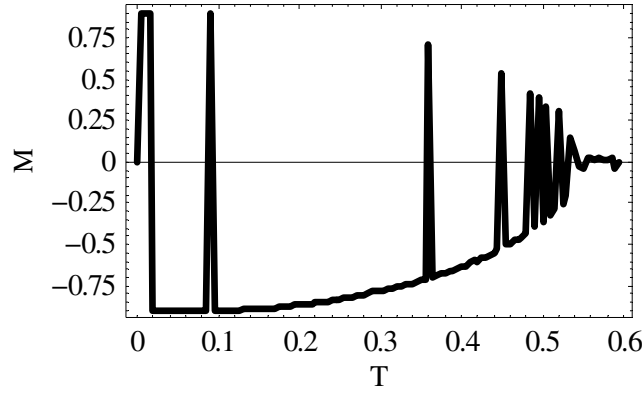
Şekil 5.8 $d=0.25$, $h_0=0.4$, $m(0)=1$ ve dış manyetik alanın rastgele kısmı $[-0.2,0.2]$ iken ortalama manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklıkla değişimi. Kritik nokta civarında fazla salınım oluyor.

$d=-0.25$, $h_0=0.2$, $m(0)=0$ iken kinetik spin-1 BC modeli çözdüğümüzde hem 1.türden bir faz geçişi hem de 2. türden bir faz geçişi oluşur. Dış manyetik alanda gürültü yokken ki ortalama manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklıkla değişim grafiği Şekil 5.9 deki gibidir. Burada 1. türden faz geçiş sıcaklığı $T_i \approx 0.02$ ve 2. türden faz geçiş sıcaklığı $T_c \approx 0.54$ dır.



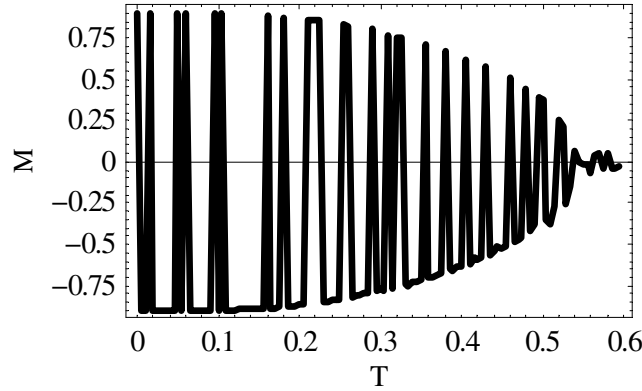
Şekil 5.9 $d=-0.25$, $h_0=0.2$, $m(0)=0$ iken ortalama manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklıkla değişim grafiği. $T_i \approx 0.02$ ve $T_c \approx 0.54$ sırasıyla 1. türden faz geçiş ve 2. türden faz geçiş noktalarıdır.

$d=-0.25$, $h_0=0.2$, $m(0)=0$ iken dış manyetik alana $[-0.05,0.05]$ gibi küçük bir aralıkta gürültü verdiğimizde ortalama manyetizasyonda $(-0.8,0.8)$ değerleri arasında değişen keskin geçişler oluşur ve bu geçişler özellikle 2. türden faz geçişinin olduğu bölgede güçlenir (Şekil 5.10).



Şekil 5.10 $d=-0.25$, $h_o=0.2$, $m(0)=0$ ve manyetizasyonun rastgele kısmı $[-0.05,0.05]$ iken ortalama manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklıkla değişim grafiği. Şekilde keskin geçişler oluşur.

$d=-0.25$, $h_o=0.2$, $m(0)=0$ iken dış manyetik alandaki gürültüyü nispeten arttırdığımızda $[-0.1,0.1]$ ortalama manyetizasyondaki geçişler özellikle 2.türden faz geçişine kadar daha fazlalaşır (Şekil 5.11).



Şekil 5.11 $d=-0.25$, $h_o=0.2$, $m(0)=0$ ve manyetizasyonun rastgele kısmı $[-0.1,0.1]$ iken ortalama manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklıkla değişim grafiği. Şekildeki pikler fazlalaşır.

Çizdiğimiz eğrilerden de görüldüğü gibi dış manyetik alandaki gürültüyü arttırdığımızda özellikle 1.tür faz geçişleri olduğu durumlarda faz geçişlerinin birden fazla olduğu görülür. Bu duruma etkili olan diğer bir özellikte başlangıç koşullarıdır. Başlangıç koşulları değiştiğinde geçiş noktalarında salınım fazlalaşır.

Ayrıca bu konu IJMP B ye gönderilmiştir ve İstanbul İstatistik Fizik günlerinde bildiri olarak sunulacaktır.

6. SONUÇLAR

Glauber tipi dinamik kullanılarak ortalama alan yaklaşımıyla kinetiği çözülen spin-1 Blume Capel model ve spin-1/2 ve spin-1 den oluşan karışık Ising modelin faz durumlarının başlangıç koşullarına, sıcaklık, dış manyetik alan, kristal alan etkileşimi gibi parametrelere bağlı olarak değiştiğini gördük. Düzen parametresi olarak ortalama manyetizasyonu tanımlayarak faz diyagramları çizdik. Ayrıca indirgenmiş açısal frekansın değişiminin de faz diyagramları üzerinde etkili olduğunu bulduk.

Dış manyetik alana rastgele değerler vererek spin-1 Blume Capel'in kinetiğini tekrar incelediğimizde başlangıç koşulları değiştiğinde farklı eğrilerin oluştuğunu ve rastgeleliğin aralığını arttırdığımızda düzensizliğin fazlaştığını gördük.

Rastgeleliğin aralığını arttırdığımızda 2. türden faz geçiş eğrilerinin formunun çok fazla değişmediğini fakat 1. türden faz geçiş eğrilerinin değiştiğini ve keskin geçişlerin oluştuğunu gördük.

KAYNAKLAR

- Achiam,Y., (1983), "The Critical-Dynamics and Real-Space Renormalization-Group", Physica A, 120:279
- Achiam,Y. ve Kosterlitz, J.M., (1978), "Real-Space Renormalization Group for Critical Dynamics", Physics Review Letters, 41:128
- Achiam,Y., (1985), "Critical Dynamics of the Ising Model on Fractal Geometries", Physics Review B, 31:260
- Blume, M., (1966), "Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in UO_2 , Physical Review, 141: 517
- Buendia, G.M.ve Machado, E., (1998), "Kinetics of a Mixed Ising Ferrimagnetic System", Physical Review E, 58:1260
- Capel, H. W., (1966), "On the Possibility of First-Order Phase Transitions in Ising Systems of Triplet Ions with Zero-Field Splitting", Physica, 32:966
- Domb C., Green, M., Lebowitz J., (1972), "Phase Transtions and Critical Phenomena", Academic Pres Eds.
- Glauber, R.J., (1963), "Time Dependent Statics of the Ising model", Journal of Mathematical Physics, 4:294
- Huang, K., (1963), "Statistical Mechanics", John Wiley and Sons
- Karaoğlu, B., (2003), "İstatistik Mekanîge Giriş", Seyir Yayıncılık
- Keskin, M.,Canko, O.ve Temizer Ü., (2005), "Dynamic Phase Transition in the Kinetic Spin-1 Blume Capel Model Under a Time –Dependent Oscillating External Field", 74:011110
- Plischke, M.ve Bergersen B., (2005), "Equilibrium Statistical Physics", Hackensack, NJ: World Scientific
- Privman ,V., (1997), "Nonequilibrium Statistical Mechanics in One Dimension", Cambridge University Press
- Tome, 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

İNTERNET KAYNAKLARI

- [1] <http://socrates.berkeley.edu/~jemoore/p212/phys212ln14.pdf>
- [2] http://en.wikipedia.org/wiki/Markov_process
- [3] [http:// webphysics.davidson.edu/Projects/AnAntonelli/node.html](http://webphysics.davidson.edu/Projects/AnAntonelli/node.html)
- [4] [http://en.wikipedia.org/wiki/Detailed balance](http://en.wikipedia.org/wiki/Detailed_balance)

ÖZGEÇMİŞ

Doğum tarihi	26.06.1983	
Doğum yeri	İstanbul	
Lise	1997-2000	Kemal Hasoğlu Lisesi
Lisans	2001-2006	Yıldız Üniversitesi Fen Edebiyat Fak. Fizik Lisans Bölümü
Yüksek Lisans	2006-Devam Ediyor	Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Yüksek Lisans
Çalıştığı kurum(lar)		
	2002-2003	Erdemsoft

