

YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

İKİ VE ÜÇ BOYUTTA SPİN $\frac{1}{2}$ ISING MODELİ İÇİN
ORTALAMA ALAN YAKLAŞIMI

MÜMTAZ MURAT ARIK

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	iv
KISALTMA LİSTESİ.....	v
ŞEKİL LİSTESİ.....	vi
ÇİZELGE LİSTESİ	vii
ÖNSÖZ	viii
ÖZET	ix
ABSTRACT	x
1. GİRİŞ	1
2. MANYETİZMA.....	4
2.1 Atomların Manyetik Momentleri.....	4
2.2 Miknatıslanma Vektörü.....	5
2.3 Alınganlık.....	6
2.4 Atomik Alınganlık	6
2.4.1 Alınganlığın Termodinamik Formülü ve Manyetizasyonun Deneysel Olarak Bulunması	7
2.4.2 Atomik Alınganlığın Formülü.....	8
2.4.3 Larmour Diamanyetizması: Bütün Kabukları Dolu Yalıtkanların Alınganlığı.....	10
2.4.4 Elektronların Dizilim Kuralları	11
2.4.4.1 Hund Kuralları ile d ve f Kabuğunun Doldurulması	11
2.4.5 Von Vleck Paramanyetizması: Yarım Dolu Kabuktan Bir Elektron Eksik İyonlar İçeren Yalıtkanların Alınganlığı	12
2.4.6 Curie Paramanyetizması: Bütün İyonları J Açısal Momentuma Sahip Sistemin Manyetizasyonu.....	13
2.4.7 Pauli Paramanyetizması: İletim Elektron Spinlerinin Alınganlığa Katkısı	15
2.4.8 Landau Diamanyetizması: İletim Elektron Yörüngelerinin Alınganlığa Katkısı..	18
3. ISING MODEL	19
3.1 Ising Modelin Tanımı	19
3.2 Ising Modelinde Hamiltonyen ve Bölüşüm Fonksiyonu	20
3.3 Ising Modelinde Bölüşüm Fonksiyonunun Hesaplanması.....	21
4. ISING MODELİN KESİN ÇÖZÜMLERİ.....	24
4.1 Bir Boyutlu Ising Modelin Kesin Çözümü	24
4.1.1 Dış Manyetik Alan Yokluğunda Bir Boyutlu Ising Modelde Bölüşüm Fonksiyonu24	
4.1.2 Dış Manyetik Alan Varlığında Bir Boyutlu Ising Modelin Çözümü	25
4.2 İki Boyutta Dış Manyetik Alan Olmaması Durumunda Kesin Çözüm : Onsager Çözümü	29
5. KRİTİK ÜSTELLER.....	32

5.1	Kritik Üstelerin Tanımlanması.....	32
5.2	Manyetik Sistemler İçin Kullanılan Kritik Üsteller.....	32
5.2.1	δ Üsteli	32
5.2.2	β Üsteli	33
5.2.3	α Üsteli	33
5.2.4	γ Üsteli	33
5.3	Kritik Üsteller Arasındaki İlişkiler	33
6.	ORTALAMA ALAN TEORİLERİ.....	36
6.1	Ortalama Alan Teorisinde Kritik Üsteller.....	39
6.2	Bragg – Williams Metodu.....	41
6.3	Bethe – Peierls Metodu.....	51
7.	İNDİRGENMİŞ TRANSFER MATRİS METODU	61
7.1	2 Boyutta İndirgenmiş Transfer Matris Metodu.....	61
7.1.1	2 Boyutta Transfer Matris Metodunda Kritik Üstelerin İncelenmesi.....	68
7.2	3 Boyutta İndirgenmiş Transfer Matris Metodu.....	71
7.2.1	3 Boyutta Transfer Matris Metodunda Kritik Üstelerin İncelenmesi.....	76
8.	ISING MODELİNDE YENİ KORELASYONLU ETKİN ALAN TEORİSİ.....	78
9.	KORELASYONLU İNDİRGENMİŞ TRANSFER MATRİS METODU	86
10.	SONUÇLAR	94
	KAYNAKLAR.....	97
	ÖZGEÇMİŞ.....	99

SİMGE LİSTESİ

A	Helmholtz serbest enerjisi
C	Isı kapasitesi
D	Diferansiyel operatörü
g	Lande g-faktörü
g_o	Elektronik g-faktörü
h	Dış manyetik alan
H	Hamiltonyen
H	İndirgenmiş dış manyetik alan
$\vec{H}$	Manyetik alan şiddeti
J	Değiş-tokuş etkileşim parametresi
K	İndirgenmiş değiş-tokuş etkileşim parametresi
k_B	Boltzman sabiti
L	Uzun mesafe düzeni
$\vec{M}$	Mıknatıslanma vektörü
M	Manyetizasyon
p	Etkin Bohr magnetonu
q	Normalizasyon faktörü
Q	Bölüşüm fonksiyonu
U	İç enerji
γ	En yakın komşu sayısı
λ	Korelasyon parametresi
μ_0	Boş uzayın geçirgenliği
μ_m	Manyetik geçirgenlik
σ	Kısa mesafe düzeni
$\langle \sigma \rangle$	Ortalama spin manyetizasyonu
χ	Alınganlık

KISALTMA LİSTESİ

T_c Kritik sıcaklık

ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa

Şekil 3.1 Hat çizgileri (Huang, 1987)	22
Şekil 4.1 Bir boyutlu Ising modelinde sistemin topolojisi (Huang, 1987).....	25
Şekil 4.2 Bir boyutlu Ising modelde manyetizasyonun dış alanla değişimi (Huang, 1987)	28
Şekil 4.3 Onsager latisi (Huang, 1987).....	29
Şekil 6.1 Ortalama alan teorisinde dış manyetik alanın sıfıra gitmesi durumu, $h \rightarrow 0$	38
Şekil 6.2 Ortalama alan teorisinde $\beta J > 1$ durumunda serbest enerjinin değişimi.....	39
Şekil 6.3 Ortalama alan teorisinde $\beta J < 1$ durumunda serbest enerjinin değişimi.....	39
Şekil 6.4 Dış manyetik alan yokken $\bar{L}$ 'nin değişimi (Huang, 1987).....	47
Şekil 6.5 Bragg - Williams yaklaşım metodunda doğal manyetizasyon (Huang, 1987)	48
Şekil 6.6 Bragg - Williams yaklaşım metodunda ısı kapasitesi (Huang, 1987).....	51
Şekil 6.7 Bethe – Peirls yaklaşım metodunda komşu latisler (Huang, 1987)	52
Şekil 6.8 Bethe – Peirls yaklaşım metodunun çözümü (Huang, 1987)	57
Şekil 6.9 Bragg – Williams ve Bethe – Peierls yaklaşım metodunda ısı kapasitesi (Huang, 1987).....	60
Şekil 7.1 2 boyutta transfer matris metodunda manyetizasyonun davranışı.....	68
Şekil 7.2 2 boyutta transfer matris metodunda kritik nokta civarında manyetizasyonun davranışı.....	70
Şekil 7.3 3 boyutta transfer matris metodunda manyetizasyonun davranışı.....	76
Şekil 7.4 3 boyutta transfer matris metodunda kritik nokta civarında manyetizasyonun davranışı.....	76
Şekil 9.1 2 boyutta korelasyonlu transfer matris metodunda manyetizasyonun davranışı	93
Şekil 9.2 2 boyutta korelasyonlu transfer matris metodunda kritik nokta civarında manyetizasyonun davranışı.....	93

ÇİZELGE LİSTESİ

Çizelge 2.1 d ve f kabuklarının doldurulması (Huang, 1987)	12
Çizelge 10.1 K _c 'lerin karşılaştırılması	95

ÖNSÖZ

Bu güzel çalışmayı tez danışmanım Tuncer Kaya ile beraber yapmaktan gurur duyuyorum. Tezimi hazırlarken ve yazarken akademik hayatım boyunca bana gerekli olacak bir çok şeyi saygı değer hocam Tuncer Kaya'dan öğrendim.

Tez konusu olarak seçtiğimiz Ising model çok eski bir konu olmasına rağmen bugün dahi analitik olarak çözülememiştir. Bu çalışmada eski araştırmacıların bulduğu yaklaşık çözümlere alternatif çözümler getirilmiştir.

Yüksek lisans eğitimim süresince burs aldığım TÜBİTAK'a desteklerinden dolayı teşekkür ederim. Ayrıca bir vefa borcu olarak beni destekleyen ülkeme, ileride emeklerini karşılıksız bırakmayacağıma söz veririm.

İlk başta, beni tez öğrencisi olarak kabul eden sayın hocam Tuncer Kaya'ya şükranlarımı sunarım. Ayrıca lisans ve yüksek lisans eğitimim boyunca üzerimdeki emeklerini hiçbir zaman ödeyemeyeceğim Yıldız Teknik Üniversitesi fizik bölümü ve matematik mühendisliği bölümü hocalarıma teşekkürü borç bilirim. Son olarak hayatım boyunca yanımda olan canım aileme canı gönülden teşekkür ederim.

İKİ VE ÜÇ BOYUTTA SPİN ½ ISING MODELİ İÇİN ORTALAMA ALAN YAKLAŞIMI

Mümtaz Murat ARIK
Fizik, Yüksek Lisans Tezi

Ernst Ising, doktora tezinde hocası Wilhelm Lenz tarafından önerilen manyetik faz geçişi problemini inceleyerek kendi adı ile anılan Ising modeli kurdu. Ising model istatistik mekaniğin üzerinde en fazla çalışılan konularından birisidir. Ising model istatistiksel mekanikte faz geçişini matematiksel olarak gösteren bir model olması yönüyle önemlidir. Ising, 1 boyutta sadece mutlak sıcaklıkta manyetik faz geçişinin olduğunu gösterdi.

1944 yılında L. Onsager, Ising modelin 2 boyutta kare latis için dış manyetik alan yokluğunda kesin çözümünü bulmuştur. Sonraki yıllarda, 2 boyutta dış manyetik alan yokluğunda üçgen ve bal peteği örgü latisleri için kesin çözüm bulunmuştur. Bunların dışında başka kesin çözüm yoktur.

Kesin çözüm olmaması nedeniyle Ising model çok çalışılan konulardan biridir. Ising modelin çözümünde ortalama alan teorileri sıklıkla kullanılır. Bu tezde ortalama alan teorilerinden Bragg – Williams ve Bethe – Peierls yaklaşım metotları detaylı bir şekilde çözülmüştür.

Sonraki bölümde kritik üsteller tanıtıldıktan sonra ortalama alan teorisindeki kritik üsteller anlatılmıştır.

Bu tezde ortalama alan teorisi kullanılarak yeni geliştirilen indirgenmiş transfer matris metodu 2 ve 3 boyutta detaylı bir şekilde çözümlenmiştir. İndirgenmiş transfer matris metodunun tahmin ettiği kritik sıcaklık değerleri bugüne kadar geliştirilen ortalama alan teorilerine göre çok daha iyi sonuç vermektedir. Daha sonra sistemin kritik üstelleri bulunmuştur.

8. bölümde 1981 yılında yapılan korelasyonlu etkin alan teorisi anlatılmıştır. Bu teorideki korelasyon fonksiyonunun indirgenmiş transfer matris metodunda kullanılması ile daha iyi sonuç alınabileceği düşüncesinden yola çıkılarak, korelasyonlu indirgenmiş transfer matris metodu geliştirilmiştir. Bu metodun tahmin ettiği kritik sıcaklık değeri 2 boyutlu sistemler için indirgenmiş transfer matris metodunun tahmin ettiği kritik sıcaklık değerinden daha iyidir.

Anahtar Kelimeler: Ising model; Ortalama alan; Çok parçacıklı korelasyon fonksiyonu; Transfer matrisi; Kritik sıcaklık

JÜRİ :

1. Yrd. Doç. Dr. Tuncer KAYA
2. Prof. Dr. Kubilay KUTLU
3. Doç. Dr. Nazmi POSTACIOĞLU

Kabul Tarihi: 14.05.2009

Sayfa Sayısı: 109

EFFECTIVE FIELD THEORY FOR SPIN $\frac{1}{2}$ ISING MODEL IN TWO AND THREE DIMENSIONS

Mümtaz Murat ARIK

Physics, M.S. Thesis

Ernst Ising, in his doctoral thesis studied magnetic phase transitions problem which was suggested by his teacher, Wilhelm Lenz. He established Ising model. Ising model is the most studied subject in the statistical mechanics. Because it is one of the models that show the phase transition mathematically. In 1925, he proved that there is phase transition only at 0 Kelvin at none magnetic field.

The exact solution in 2D in the absence of external field was obtained by L. Onsager. Afterwards exact solutions for the critical coupling strenght for honeycomb and triangular lattices were obtained. There are no exact solutions except this solutions.

Because of no exact solutions for higher dimensions, Ising model is one of the most studied subjects. Mean field theory is often used in the solution of Ising model. In this thesis Bragg – Williams and Bethe – Peierls methods are solved in details. This methods use mean field theory.

After we introduce critical exponents, then we find critical exponents in the mean field theory.

In this thesis using mean field theory, we introduce reduced transfer matrix method in 2D and 3D which is recently discovered. The critical coupling strenghts which are predicted by this method in 2D and in 3D, very close the exact solution and well accepted value respectively. Afterwards critical exponents of the system are invented.

In the 8. chapter, we introduce correlated effective field theory which was proposed in 1981. The idea using correlated function which was used in the last mentioned theory for obtain a better critical coupling strenght we improved reduced transfer matrix method. And we have developed a new method, correlated reduced transfer matrix method. This method predicts a better value than reduced transfer matrix method in 2D.

Keywords: Ising model; Mean field; Many-body correlated function; Transfer matrix; Critical coupling strenght

JÜRİ :

1. Yrd. Doç. Dr. Tuncer KAYA
2. Prof. Dr. Kubilay KUTLU
3. Doç. Dr. Nazmi POSTACIOĞLU

Kabul Tarihi: 14.05.2009

Sayfa Sayısı: 109

1. GİRİŞ

Hikayeye göre manyetizma adı Manisa ilimizden gelmektedir. M.Ö. 600’lü yıllarda Manisa ilimiz Magnesia olarak biliniyordu. Doğal mıknatıs taşı, Yunanlılar tarafından, ilk olarak Manisa bölgesinde keşfedilmiştir.

Manyetizma insanlar tarafından merak edilen, üzerinde araştırmalar yapılan ve çok fazla uygulama alanı olan bir konudur. Bugün biliyoruz ki malzemelerin dış manyetik alandaki manyetik özellikleri farklıdır. Bazı malzemeler kuvvetli manyetik özellik gösterirken bazıları da zayıf manyetik özellik gösteririr. Bazı malzemeler dış manyetik alan tarafından çekilirken bazıları da dış manyetik alan tarafından itilirler. Malzemelerin manyetik özellikleri malzemedeki atomların çeşidine ve atomların malzeme içindeki dizilimine bağlıdır.

Bazı malzemeler belirli bir sıcaklık aralığında doğal manyetizasyona sahip olurlar. Belirli bir sıcaklıktan sonra da malzeme doğal manyetizasyonunu kaybeder. Bu sıcaklığa kritik sıcaklık veya Curie sıcaklığı denir.

1925 yılında Ernst Ising, ferromanyetizmayı bir boyutta açıklayan Ising modeli kurdu (Ising, 1925). Daha sonraki yıllarda bu model 2 ve 3 boyuta genişletilip 2 boyutta kritik sıcaklık için matematiksel olarak tam değer bulundu. Ayrıca bu modelin çözümü için birçok yaklaşım metodu geliştirildi. Bu tezde bu yaklaşım metotlarından bazıları anlatıldıktan sonra yeni geliştirilen indirgenmiş transfer matris metodu anlatılmıştır.

Ising modelin tarihçesini ana hatları ile aşağıdaki gibi verebiliriz.

Ernst Ising doktora tezinde hocası Wilhelm Lenz tarafından önerilen manyetik faz geçişi problemini inceledi ve kendi adı ile anılan modeli kurdu (Ising, 1925). Tezinde, manyetik momentlerin bir zincir üzerindeki özel dizilimini araştırdı. Bu dizilimde momentlerin özel olarak sadece aşağı ve yukarı yönelimlere sahip olduğu ve sadece en yakın komşuları ile çiftler halinde etkileştiği varsayıldı. Ising, 1 boyutta sadece 0 sıcaklıkta manyetik faz geçişinin olduğunu gösterdi (Ising, 1925).

1941 yılında Hendrik Kramers ve Gregory Wannier dış manyetik alan olmaması durumunda kare latis için kritik sıcaklık değerini veren bir ifade buldu (Kramers ve Wannier, 1941). 1944 yılında Lars Onsager, Helmholtz serbest enerjisini hesaplayarak Kramers ve Wannier tarafından bulunan kritik sıcaklık değerinin doğruluğunu açık bir şekilde gösterdi (Onsager, 1944).

1960 yılında Cyril Domb tarafından Ising modelin 2 boyutta bal peteği ve üçgen latis için kesin çözümü bulundu (Domb, 1960).

1972 yılında seri açılım metodu geliştirildi (Sykes vd., 1972). Ayrıca renormalizasyon grup teorileri de aynı yıllarda geliştirildi (Wilson, 1971; Fisher, 1974; Kadanoff vd., 1967; Kadanoff ve Maris, 1978).

Ising modelin çözümünde en çok kullanılan yaklaşımların içinde ortalama alan teorileride vardır. Ortalama alan yaklaşımı, 1907 yılında Weiss tarafından geliştirilmiştir (Weiss, 1907). 1935 yılında geliştirilen Bragg-Williams (Bragg vd., 1935) ve Bethe-Peiers (Bethe, 1935; Peierls, 1936) metotları ortalama alan yaklaşımını kullanan diğer metotlardır. Bu iki ortalama alan metodunun eksiklikleri vardır. Bunun sebebi bu metotların korelasyon etkilerini tam olarak hesaba katmamış olmalarıdır. Korelasyon etkilerini de içine alan birçok ortalama alan metodu geliştirilmiştir.

H.B. Callen 1963 yılında tam spin korelasyon fonksiyonunu bulmuştur (Callen, 1963).

1974 yılında M.E. Lines, etkin (ortalama) alan teorisi içine çok parçacıklı statik spin korelasyonunu katarak, korelasyonlu etkin alan teorisini geliştirmiştir (Lines, 1944). Bunun için fazladan bir terim kullanmıştır. Bu teori manyetik sistemlerdeki bir çok probleme uygulanmıştır (Suzuki vd., 1977).

T. Kaneyoshi ve diğerleri 1981 yılında korelasyonlu etkin alan teorisini geliştirmiştir (Kaneyoshi vd., 1981). Teorilerinde, Honmura ve Kaneyoshi'nin geliştirdiği diferansiyel operatör tekniğini (Honmura ve Kaneyoshi, 1978), tam spin korelasyon fonksiyonunu ve çok parçacıklı korelasyon fonksiyonunu kullanmışlardır. Buldukları sonuç Bethe-Peierls'in bulduğu sonuç ile aynıdır. Teorileri birçok probleme uygulanmıştır (Taggrat, 1944; Honmura, 1984).

2000 yılında Wysin ve Kaplan öz uyumlu korelasyonlu etkin alan teorisini bulmuşlardır (Wysin ve Kaplan, 2000). Buldukları sonuç Bethe-Peierls-Weiss sonucu ile aynıdır.

Bu tezde, yeni bir ortalama alan yaklaşımı tanıtılmıştır. Bu yaklaşımın adı indirgenmiş transfer matris yaklaşımıdır. Bu metotta Hamiltonyendeki bazı serbest spinler, spin başına ortalama manyetizasyon ile değiştirilir. Bu işlem, kısa ve uzun erişimli etkileşimleri ve dalgalanmaları hesaba katmak için yapılır. Bulunan bölüşüm fonksiyonu transfer matris yöntemi ile çözülür. Bu yaklaşımda kritik sıcaklık uygun bir hata payı ile tahmin edilir.

Çok parçacıklı korelasyon fonksiyonu kullanılarak indirgenmiş transfer matris yaklaşımı daha

da geliştirilmiştir. Geliştirilen bu metodun adı korelasyonlu indirgenmiş transfer matris yaklaşımıdır. Bu metotta, indirgenmiş transfer matris yaklaşımından farklı olarak bazı serbest spinler çok parçacıklı korelasyon fonksiyonu (Kaneyoshi vd., 1981) ile yer değiştirilir. Korelasyonlu indirgenmiş transfer matris yaklaşımında, indirgenmiş transfer matris metoduna göre daha iyi bir sonuç elde edilmiştir.

2. MANYETİZMA

2.1 Atomların Manyetik Momentleri

Tek elektronlu bir atom ele alalım. Klasik olarak elektronun r yarıçaplı dairesel bir yörüngede hareket ettiği kabul edilir. Elektronun manyetik momenti şu şekilde hesaplanır:

$2\pi r$ 'lik çevreyi elektron τ sürede dolarsın. Burada τ periyottur. v elektronun hızı ise periyod $\tau = 2\pi r/v$ 'dir. Atomun çevresinde oluşan I akımı:

$$I = -\frac{e}{\tau} = -\frac{ev}{2\pi r}. \quad (2.1.1)$$

Akım ilmeğinin manyetik moment formülü $\vec{\mu} = I \vec{A}$ kullanılırsa elektronun manyetik momenti

$$\vec{\mu} = I \vec{A} = \left(-\frac{ev}{2\pi r} \right) \pi r^2 = -\frac{1}{2} evr \quad (2.1.2)$$

olarak bulunur. Burada $\vec{A}$, alan vektörüdür. Yörüngesel açısal momentum $\vec{L} = m_e \vec{v} \times \vec{r}$ formülü kullanılırsa elektronun yörüngesel manyetik momenti

$$\vec{\mu} = I \vec{A} = \left(-\frac{e}{2m_e} \right) \vec{L} \quad (2.1.3)$$

olarak bulunur. Burada m_e , elektronun kütlesidir.

Elektronun yörüngesel açısal momentumu ile yörüngesel manyetik momenti birbirine zıttır ve ikisi de yörünge düzlemine diktir. $\vec{L}$, kuantum mekaniğine göre kesiklidir ve her zaman Planck sabiti h 'ın tam katlarıdır. Elektronun yörüngesel manyetik momenti $\vec{L} = \hbar \vec{l}$ kullanılırsa, elektronun yörüngesel manyetik momenti:

$$\vec{\mu} = \frac{e\hbar}{2m_e} \vec{l}. \quad (2.1.4)$$

Manyetik moment için doğal birim Bohr magnetonu μ_B

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9.27 \times 10^{-24} \text{ J/T} \quad (2.1.5)$$

olarak tanımlanır. Ayrıca elektron kendi iç özelliğinden dolayı spin açısal momente sahiptir.

Elektronun spin açısai momentumu $\vec{S} = \hbar \vec{s}$ ile verilir. Elektronun spin açısai momentumundan kaynaklanan spin manyetik momenti

$$\vec{\mu} = -g_0 \mu_B \vec{s} , \quad (2.1.6)$$

burada elektronik g-faktörü g_0 :

$$g_0 = 2 \left[1 + \frac{\alpha}{2\pi} + O(\alpha^2) \right] = 2.0023. \quad (2.1.7)$$

Bizim için $g_0 = 2$ yeterlidir.

Bir atomun toplam manyetik momenti spin ve yörüngesel manyetik momentlerinin vektörel toplamı ile bulunur. Toplam manyetik dipol moment:

$$\vec{\mu} = -\mu_B (\vec{L} + g_0 \vec{S}), \quad (2.1.8)$$

burada $\vec{L} = \sum \hbar \vec{l}$ ve $\vec{S} = \sum \hbar \vec{s}$ dır.

Proton ve nötronun da spin manyetik momentleri mevcuttur. Kütleleri elektronun 1000 katı olduğu için spin manyetik momentleri ihmal edilebilir (Hook J.R, Hall H.E, 1999).

2.2 Mıknatıslanma Vektörü

Malzemelerin manyetik durumu mıknatıslanma vektörü ($\vec{M}$) ile incelenir. Manyetik malzemeler dış manyetik alanla etkileşmeye girer ve ekstra manyetik alan oluşturlar. Dış manyetik alan $\vec{B}_0$ olsun. Malzeme içinde oluşan ekstra manyetik alan $\vec{B}_m = \mu_0 \vec{M}$ ise madde içindeki toplam manyetik alan

$$\vec{B} = \vec{B}_0 + \vec{B}_m = \vec{B}_0 + \mu_0 \vec{M} , \quad (2.2.1)$$

ve $\vec{H}$ manyetik alan şiddeti

$$\vec{H} = \frac{\vec{B}_0}{\mu_0} \quad (2.2.2)$$

şeklinde tanımlanır. Buradan $\vec{H}$ ile $\vec{M}$ niceliklerinin aynı birime sahip olduğu açıkça görülür. $\vec{B}$ manyetik akı yoğunluğu, $\vec{M}$ ise birim hacimdeki manyetik moment olup, $\vec{M}$ 'nin birimi $\text{Agm}^2 / \text{m}^3$ veya A / m'dir (Serway R.A., Beichner R.J., 2002).

2.3 Alınganlık

Manyetik malzemeler başlıca 3 grupta incelenir (Serway R.A., Beichner R.J., 2002). Ferromanyetizma, paramanyetizma ve diamanyetizma. Paramanyetik ve diamanyetik malzemelerin mıknatıslanma vektörü $\vec{M}$

$$\vec{M} = \chi \vec{H} , \quad (2.3.1)$$

manyetik alan şiddeti $\vec{H}$ ile orantılıdır. Burada χ , manyetik alınganlıktır ve boyutsuz bir büyüklüktür. Eğer madde paramanyetik ise χ pozitifdir ve $\vec{H}$ ile $\vec{M}$ aynı yönelime sahiptir. Eğer madde diamanyetik ise χ negatiftir ve $\vec{H}$ ve $\vec{M}$ zıt yönelime sahiptir. (2.3.1) eşitliği (2.2.1) denkleminde yerine konursa

$$\vec{B} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M}) = \mu_0 (\vec{H} + \chi \vec{H}) = \mu_0 \vec{H} (1 + \chi) , \quad (2.3.2)$$

burada

$$\vec{B} = \mu_m \vec{H} . \quad (2.3.3)$$

Burada μ_m ifadesine manyetik geçirgenlik denir. μ_0 ifadesi ise boş uzayın geçirgenliğidir. Diamanyetik ve paramanyetik maddelerin manyetik geçirgenlikleri için,

Paramanyetik $\mu_m > \mu_0$

Diamanyetik $\mu_m < \mu_0$

ilişkilerini yazabiliriz.

Ferromanyetizmada alınganlık diğer manyetik maddelere göre yaklaşık 1000 kat daha büyüktür. Ferromanyetizmada $\vec{H}$ ile $\vec{M}$ arasında lineer bir ilişki yazmak mümkün değildir. Çünkü maddenin mıknatıslanması maddenin geçmişine de bağlıdır (Serway R.A., Beichner R.J., 2002).

2.4 Atomik Alınganlık

Yukarıda paramanyetizma ve diamanyetizma hakkında giriş niteliğinde bilgi verildi. Eğer bir malzemenin alınganlığını hesaplamak istersek istatistik ve kuantum mekaniğinden yararlanırsak. Yapılan hesaplamaların sonucu başlıca şu 5 başlık altında incelenir (Mermin N.D., Ashcroft N.W.,1976).

1. Larmour Diamanyetizması: Atom yörünge şekillerinin uygulanan manyetik alanla değişmesi sonucu oluşur.
2. Von Vleck Paramanyetizması: Yarım dolu kabuktan bir elektron eksik iyonların toplam açısal momentlerinin uygulanan manyetik alanla yönelmesi sonucu oluşur.
3. Curie Paramanyetizması: Kabukları kısmen dolu iyonların toplam açısal momentlerinin uygulanan manyetik alanla yönelmesi sonucu oluşur.
4. Pauli Paramanyetizması: Serbest elektron spinlerinin uygulanan manyetik alanla yönelmesi sonucu oluşur.
5. Landau Diamanyetizması: Serbest elektronların uygulanan manyetik alanı engelleyecek şekilde malzemede oluşturdıkları akımdan ileri gelir.

2.4.1 Alınganlığın Termodinamik Formülü ve Manyetizasyonun Deneysel Olarak Bulunması

İstatistiksel fizikten yararlanarak manyetizasyon için bir formül yazabiliriz. Kanonik kümede bölüşüm fonksiyonu Q

$$Q = \sum_n e^{-\beta E_n}, \quad (2.4.1.1)$$

Helmholtz serbest enerjisi

$$A = -k_B T \ln Q \quad (2.4.1.2)$$

olarak verilir.

Ayrıca Helmholtz serbest enerjisi aşağıdaki şekilde de yazılır:

$$A = E - TS, \quad (2.4.1.3)$$

burada E enerji, T sıcaklık ve S entropidir. Serbest enerjinin h dış manyetik alanla değişimi manyetizasyonu verir,

$$M = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial A}{\partial h} \right)_T. \quad (2.4.1.4)$$

Buradan hesaplanan alınganlık:

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial h} = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial^2 A}{\partial h^2} \right)_T. \quad (2.4.1.5)$$

Manyetizasyonunu ölçmek istediğimiz malzemeyi homojen olmayan bir manyetik alana koyduktan sonra alanı yavaşça değiştiririz ve örnek üzerine etki eden kuvveti ölçersek serbest enerjideki değişim:

$$dA = A(h(x+dx)) - A(h(x)) \quad (2.4.1.6)$$

$$dA = \frac{\partial A}{\partial h} \frac{\partial h}{\partial x} dx = -VM \frac{\partial h}{\partial x} dx. \quad (2.4.1.7)$$

Alan tarafından örneğin birim hacmine uygulanan kuvvet:

$$f = -\frac{1}{V} \frac{\partial A}{\partial x} = M \frac{\partial h}{\partial x}. \quad (2.4.1.8)$$

Kuvvet ölçülerek manyetizasyon bulunur (Mermin N.D., Ashcroft N.W.,1976).

2.4.2 Atomik Alınganlığın Formülü

(2.4.1.3) ve (2.4.1.4) denklemlerini birleştirirsek manyetizasyon:

$$M = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial}{\partial h} (E - TS) \right)_T. \quad (2.4.2.1)$$

Eğer $T = 0$ alınırsa manyetizasyon

$$M = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial E}{\partial h} \right)_T \quad (2.4.2.2)$$

bulunur. Yapmamız gereken dış manyetik alana konan örneğin enerjisindeki değişimi bulmaktır (Mermin N.D., Ashcroft N.W.,1976). Sabit dış manyetik alanda iyonlardaki elektronların hareketlerinden ileri gelen kinetik enerjileri vardır. Toplam kinetik enerji

$T_0 = \sum \frac{p_i}{2m}$ 'dir. Ayrıca manyetik alanda bulunmalarından dolayı ek bir momentumları daha

vardır. Bu durumda elektronların momentumları

$$\vec{p}_i \rightarrow \vec{p}_i + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}_i), \quad (2.4.2.3)$$

burada $\vec{A}$ vektör potansiyeli

$$\vec{A} = -\frac{1}{2} \vec{r} \times \vec{h}, \quad (2.4.2.4)$$

burada $\vec{h}$ düzgün dış manyetik alandır. Ayrıca elektron spinlerinin alan ile etkileşmesinden

ileri gelen Hamiltonyendeki deęişim:

$$\Delta H = g_0 \mu_B \hbar S_z \left(S_z = \sum_i s_z^i \right). \quad (2.4.2.5)$$

Toplam kinetik enerji

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2m} \sum_i \left[p_i + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i) \right]^2 = \frac{1}{2m} \sum_i \left[p_i - \frac{e}{2c} \mathbf{r}_i \times \hbar \right]^2 \\ T &= \frac{1}{2m} \sum_i \left[p_i^2 - 2 p_i \cdot \left(\frac{e}{2c} \mathbf{r}_i \times \hbar \right) + \left(\frac{e}{2c} \mathbf{r}_i \times \hbar \right)^2 \right] \\ T &= \frac{1}{2m} \sum p_i^2 - \frac{1}{2m} \sum_i 2 p_i \cdot \left(\frac{e}{2c} \mathbf{r}_i \times \hbar \right) + \frac{1}{2m} \sum \left(\frac{e}{2c} \mathbf{r}_i \times \hbar \right)^2 \\ T &= T_0 + \frac{e}{2mc} \sum_i \mathbf{r}_i \times p_i \cdot \hbar + \frac{e^2}{8mc^2} \sum (\mathbf{r}_i \times \hbar)^2 \\ T &= T_0 + \frac{e\hbar}{2mc} \mathbf{L} \cdot \mathbf{h} + \frac{e^2}{8mc^2} \hbar^2 \sum (x_i^2 + y_i^2), \end{aligned} \quad (2.4.2.6)$$

burada L toplam yörüngesel açısal momentumdur:

$$\hbar \mathbf{L} = \sum_i \mathbf{r}_i \times p_i. \quad (2.4.2.7)$$

Hamiltonyendeki toplam deęişim:

$$\Delta H = \mu_B \left(\mathbf{L} + g_0 \mathbf{S} \right) \cdot \mathbf{h} + \frac{e^2}{8mc^2} \hbar^2 \sum (x_i^2 + y_i^2). \quad (2.4.2.8)$$

Bulduğumuz bu enerji kayması atomik enerji kaymalarına kıyasla çok küçüktür, bu yüzden pertürbasyon teorisini kullanacağız. Pertürbasyon teorisinde enerji

$$E_n \rightarrow E_n + \Delta E_n, \quad (2.4.2.9)$$

daha açık bir ifade ile

$$\Delta E_n = \langle n | \Delta H | n \rangle + \sum_{n \neq n'} \frac{|\langle n | \Delta H | n' \rangle|^2}{E_n - E_{n'}}. \quad (2.4.2.10)$$

Bulduğumuz Hamiltonyeni yerine koyarsak

$$\Delta E_n = \mu_B \hbar \cdot \langle n | \vec{L} + g_0 \vec{S} | n \rangle + \sum_{n \neq n'} \frac{|\mu_B \hbar \cdot \langle n | (\vec{L} + g_0 \vec{S}) | n' \rangle|^2}{E_n - E_{n'}} + \frac{e^2}{8mc^2} \hbar^2 \langle n | \sum_i (x_i^2 + y_i^2) | n \rangle \quad (2.4.2.11)$$

bulunur. Bulunan bu formül bağımsız atom, iyon ve moleküllerin temel alınganlık teorisidir. Bu formülü özel durumlara uygulayarak sonuçlarına bakalım. (2.4.2.11) denkleminde ilk terim

$$\mu_B \hbar \cdot \langle n | \vec{L} + g_0 \vec{S} | n \rangle = O(\mu_B \hbar) : \frac{e\hbar}{mc} h : \hbar\omega_c, \quad (2.4.2.12)$$

büyük alanlarda baskın terimdir. Bu terim, dış alan $\dot{h}$, 10^4 Gauss olduğu zaman bile 10^{-4} eV mertebesinde ve çok küçüktür. Son terimi incelersek

$$\frac{e^2}{8mc^2} \hbar^2 \langle n | \sum_i (x_i^2 + y_i^2) | n \rangle = O\left[\left(\frac{e\hbar}{mc}\right)^2 ma_0^2\right] \approx \hbar\omega_c \left(\frac{\hbar\omega_c}{e^2/a_0}\right), \quad (2.4.2.13)$$

burada e^2/a_0 , 27 eV civarındadır. Bu terim 10^4 Gauss mertebesinde birinci terimden 10^{-5} kat daha küçüktür.

2.4.3 Larmour Diamanyetizması: Bütün Kabukları Dolu Yalıtkanların Alınganlığı

Bütün kabukları dolu atomların taban durumunda toplam spin açısal moment ve yörüngesel açısal moment yoktur.

$$J|0\rangle = L|0\rangle = S|0\rangle = 0 \quad (2.4.3.1)$$

Bu eşitliğin sonucunu (2.4.2.11) denkleminde uygularsak elimizde sadece 3. terim kalır. Taban durumunda enerji farkı

$$\Delta E_0 = \frac{e^2}{8mc^2} \hbar^2 \langle 0 | \sum_i (x_i^2 + y_i^2) | 0 \rangle \quad (2.4.3.2)$$

ile verilir.

$r_i^2 = x_i^2 + y_i^2 + z_i^2$ eşitliği kullanılırsa taban durumunda enerji farkı

$$\Delta E_0 = \frac{e^2}{12mc^2} \hbar^2 \langle 0 | \sum_i r_i^2 | 0 \rangle. \quad (2.4.3.3)$$

N tane taban durumunda iyondan oluşan katının alınganlığı

$$\chi = N \frac{\partial M}{\partial h} = -\frac{N}{V} \left(\frac{\partial^2 A}{\partial h^2} \right)_T = -\frac{N}{V} \left(\frac{\partial^2 \Delta E_0}{\partial h^2} \right)_T = -\frac{N}{V} \frac{e^2}{6mc^2} \langle 0 | \sum_i r_i^2 | 0 \rangle \quad (2.4.3.4)$$

ile verilir. Eksi işareti momentlerin alanla zıt yönelmesinden ileri gelir. Bu ifade katı soy gazların alinganlığını doğru şekilde verir. Larmour Diamanyetizması olarak bilinen bu ifade 10^{-5} mertebesinde dir.

Eğer kabuklar tam dolmamış ise işler biraz daha karışıktır. Atom fiziğindeki bilgilerimizi kullanarak atomların elektronik dağılımına göre hesap yapmalıyız. Atom içindeki elektronlar minimum enerjiyi sağlayacak şekilde dizilirler. Bu dizilimin belli kuralları vardır.

2.4.4 Elektronların Dizilim Kuralları

Toplam spin açısal momentum S, toplam yörüngesel açısal momentum L, ve toplam açısal momentum J'dir.

1. Russel – Sounders kuralı: Güzel bir yaklaşım olarak aşağıdaki eşitlik geçerlidir.

$$J = L + S \quad (2.4.4.1)$$

2. 1. Hund kuralı: n elektron $2(2l+1)$ duruma, Pauli dışarlama ilkesi gereği minimum enerji, maximum toplam spin S olacak şekilde yerleşir.
3. 2. Hund kuralı: L maksimum olmalıdır.
4. 3. Hund kuralı: n, elektron sayısı olmak üzere,

$$\begin{aligned} J &= |L - S| & n < 2l + 1 \\ J &= |L + S| & n \geq 2l + 1 \end{aligned} \quad (2.4.4.2)$$

Bu kuralları uygulamak kolaydır.

Spektroskopide toplam açısal momentum L değerlerinin herbiri harflerle adlandırılır.

$$\begin{array}{cccccccc} L = & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ X = & S & P & D & F & G & H & I \end{array} \quad (2.4.4.3)$$

2.4.4.1 Hund Kuralları ile d ve f Kabuğunun Doldurulması

d kabuğu için $l = 2$ 'dir. $l_z = \{-2, -1, 0, 1, 2\}$ değerlerini alabilir. Her l_z değeri maksimum 2 elektron alabilir. d kabuğunun alabileceği elektron sayısı en fazla 10'dur.

f kabuğu için $l = 3$ 'dir. $l_z = \{-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3\}$ değerlerini alabilir. Her l_z değeri maksimum 2 elektron alabilir. f kabuğunun alabileceği elektron sayısı en fazla 14'dur.

Aşağıda Çizelge 2.1’de Hund kurallarına göre elektronların sayılarına bağlı olarak d ve f kabuğuna nasıl yerleştirildiği verilmiştir.

Çizelge 2.1 d ve f kabuklarının doldurulması (Huang, 1987)

<i>d</i> -shell (<i>l</i> = 2)											
<i>n</i>	<i>l_z</i> = 2,	1,	0,	-1,	-2	<i>S</i>	<i>L</i> = Σ <i>l_z</i>	<i>J</i>	SYMBOL		
1	↓					1/2	2	3/2	² D _{3/2}		
2	↓	↓				1	3	2	³ F ₂		
3	↓	↓	↓			3/2	3	3/2	⁴ F _{3/2}		
4	↓	↓	↓	↓		2	2	0	⁵ D ₀		
5	↓	↓	↓	↓	↓	5/2	0	5/2	⁶ S _{5/2}		
6	↑↑	↑	↑	↑	↑	2	2	4	⁵ D ₄		
7	↑↑	↑↑	↑	↑	↑	3/2	3	9/2	⁴ F _{9/2}		
8	↑↑	↑↑	↑↑	↑	↑	1	3	4	³ F ₄		
9	↑↑	↑↑	↑↑	↑↑	↑	1/2	2	5/2	² D _{5/2}		
10	↑↑	↑↑	↑↑	↑↑	↑↑	0	0	0	¹ S ₀		
<i>f</i> -shell (<i>l</i> = 3)											
<i>n</i>	<i>l_z</i> = 3,	2,	1,	0,	-1,	-2,	-3	<i>S</i>	<i>L</i> = Σ <i>l_z</i>	<i>J</i>	
1	↓							1/2	3	5/2	² F _{5/2}
2	↓	↓						1	5	4	³ H ₄
3	↓	↓	↓					3/2	6	9/2	⁴ I _{9/2}
4	↓	↓	↓	↓				2	6	4	⁵ I ₄
5	↓	↓	↓	↓	↓			5/2	5	5/2	⁶ H _{5/2}
6	↓	↓	↓	↓	↓	↓		3	3	0	⁷ F ₀
7	↓	↓	↓	↓	↓	↓	↓	7/2	0	7/2	⁸ S _{7/2}
8	↑↑	↑	↑	↑	↑	↑	↑	3	3	6	⁷ F ₆
9	↑↑	↑↑	↑	↑	↑	↑	↑	5/2	5	15/2	⁶ H _{15/2}
10	↑↑	↑↑	↑↑	↑	↑	↑	↑	2	6	8	⁵ I ₈
11	↑↑	↑↑	↑↑	↑↑	↑	↑	↑	3/2	6	15/2	⁴ I _{15/2}
12	↑↑	↑↑	↑↑	↑↑	↑↑	↑	↑	1	5	6	³ H ₆
13	↑↑	↑↑	↑↑	↑↑	↑↑	↑↑	↑	1/2	3	7/2	² F _{7/2}
14	↑↑	↑↑	↑↑	↑↑	↑↑	↑↑	↑↑	0	0	0	¹ S ₀

↑ = spin ½; ↓ = spin -½.

*↑ = spin ½; ↓ = spin -½.

2.4.5 Von Vleck Paramanyetizması: Yarım Dolu Kabuktan Bir Elektron Eksik İyonlar İçeren Yalıtkanların Alınganlığı

Eğer yarım dolu kabuktan bir elektron eksik ise taban durumu katlı değildir. Bu durumda (2.4.2.11) denklemindeki lineer terim kaybolur ve denklem şu hali alır:

$$\Delta E_0 = \frac{e^2}{8mc^2} h^2 \langle 0 | \sum_i (x_i^2 + y_i^2) | 0 \rangle - \sum_n \frac{\left| \mu_B \mathbf{h} \cdot \langle 0 | \left(\mathbf{L} + g_0 \mathbf{S} \right) | n \rangle \right|^2}{E_n - E_0}. \quad (2.4.5.1)$$

Alınanlık formülü

$$\chi = -\frac{N}{V} \frac{\partial^2 E_0}{\partial h^2}, \quad (2.4.5.2)$$

kullanılırsa alınanlık:

$$\chi = -\frac{N}{V} \left[\frac{e^2}{4mc^2} \langle 0 | \sum_i (x_i^2 + y_i^2) | 0 \rangle - 2\mu_B^2 \sum_n \frac{|\langle 0 | (\vec{L} + g_0 \vec{S}) | n \rangle|^2}{E_n - E_0} \right]. \quad (2.4.5.3)$$

Burada ilk terim Larmour diamanyetik alınanlıktır. 2. Terim ilk terimin ters işaretlisidir. Bu terim alanla aynı yöndeki momentleri gösterir. Bu olay paramanyetizma olarak bilinir. Bu paramanyetizma Von Vleck Paramanyetizması olarak adlandırılır (Ashcroft, Mermin 1976).

Bir elektron noksanlı yarım dolmuş kabuklu iyonlarda alınanlığı Larmour diamanyetizması ile Von Vleck Paramanyetizması belirler.

2.4.6 Curie Paramanyetizması: Bütün İyonları J Açısal Momentuma Sahip Sistemin Manyetizasyonu

Eğer $J = 0$ değil ise ilk terim kaybolmaz ve baskın terim haline gelir. Bu durumda taban durumu $(2J+1)$ kat katlıdır. Bu durumda $2J+1$ boyutlu matris

$$\langle JLSJ_z | (L_z + g_0 S_z) | JLSJ_z' \rangle, \quad (2.4.6.1)$$

burada

$$J_z, J_z' = -J, \mathbf{K} J. \quad (2.4.6.2)$$

Bu problem Wigner – Eckart tarafından bir teoremle çözülmüştür. Bu teoriye göre verilen J değerine bağlı olarak

$$\langle JLSJ_z | (L_z + g_0 S_z) | JLSJ_z' \rangle = g(JLS) \langle JLSJ_z | J | JLSJ_z' \rangle. \quad (2.4.6.3)$$

Bu sonucun önemli bir özelliği $g(JLS)$ sabiti J_z, J_z' değerlerine bağlı değildir. J_z 'nin matris elemanları

$$\langle JLSJ_z | J_z | JLSJ_z' \rangle = J_z \delta_{J_z, J_z'}, \quad (2.4.6.4)$$

$$\langle JLSJ_z | (L_z + g_0 S_z) | JLSJ_z' \rangle = g(JLS) J_z \delta_{J_z, J_z'}, \quad (2.4.6.5)$$

Burada Lande g-faktörü g(JLS)

$$g(JLS) = \frac{1}{2}(g_0 + 1) - \frac{1}{2}(g_0 - 1) \frac{L(L+1) - S(S+1)}{J(J+1)}, \quad (2.4.6.6)$$

ve buradaki elektronik g-faktörü g_0 yerine 2 alınırsa Lande g-faktörü g(JLS)

$$g(JLS) = \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \frac{S(S+1) - L(L+1)}{J(J+1)} \quad (2.4.6.7)$$

bulunur. (2.4.6.3) denklemi şu şekilde de yazılır:

$$\langle JLSJ_z | (L_z + g_0 S_z) | JLSJ_z' \rangle = \langle JLSJ_z | g(JLS) J | JLSJ_z' \rangle, \quad (2.4.6.8)$$

buradan da aşağıdaki eşitlik yazılır:

$$L_z + g_0 S_z = g(JLS) J. \quad (2.4.6.9)$$

Dış manyetik alan yokken taban durumu katlı olduğundan alınganlık, taban durumu enerjisi serbest enerjiye eşitlenerek bulunamaz. Dış manyetik alan sıfıra gittikçe (2J+1) durumlarının yarılmaları $k_B T$ ile karşılaştırıldığında küçük kalır. Bu durumda alınganlığı elde etmek için ekstra istatistiksel mekanik gerekir (Ashcroft, Mermin 1976).

Sadece en düşük 2J+1 durumları uygun olasılıkla uyarılmış ise serbest enerjiyi

$$e^{-\beta A} = \sum_{J_z=-J}^J e^{-\beta \gamma h J_z}, \quad (2.4.6.10)$$

eşitliğinden bulabiliriz. Burada

$$\gamma = g(JLS) \mu_B \quad (2.4.6.11)$$

dir. (2.4.6.10)'deki geometrik serinin toplamı:

$$e^{-\beta A} = \frac{e^{\beta \gamma h (J+1/2)} - e^{-\beta \gamma h (J+1/2)}}{e^{\beta \gamma \frac{h}{2}} - e^{-\beta \gamma \frac{h}{2}}}. \quad (2.4.6.12)$$

V hacmindeki N tane iyonun manyetizasyonu

$$M = -\frac{N}{V} \frac{\partial A}{\partial h} = \frac{N}{V} \gamma J B_J(\beta \gamma J h), \quad (2.4.6.13)$$

burada Brilyon fonksiyonu $B_J(x)$:

$$B_J(x) = \frac{2J+1}{2J} \coth \frac{2J+1}{2J} x - \frac{1}{2J} \coth \frac{1}{2J} x. \quad (2.4.6.14)$$

$\gamma H = k_B T$ olduğu durumda küçük x değerleri için seri açılımı yapılırsa

$$\coth x \approx \frac{1}{x} + \frac{1}{3} x + O(x^3). \quad (2.4.6.15)$$

Buradan bulunan Brilyon fonksiyonu $B_J(x)$:

$$B_J(x) = \frac{J+1}{3J} x + O(x^3). \quad (2.4.6.16)$$

Bu değeri denklemde yerine koyarsak hesaplanan alınganlık:

$$\chi = \frac{N}{V} \frac{(g\mu_B)^2}{3} \frac{J(J+1)}{k_B T} \quad k_B T \gg g\mu_B H. \quad (2.4.6.17)$$

Bu denklemde dikkat edilirse alınganlık sıcaklıkla ters orantılıdır. Bu kanunun adı Curie kanunudur (Ashcroft, Mermin 1976).

Nadir toprak elementlerinden tam dolu olmayan f kabuklarına sahip yalıtkanların Curie kanununa uyduğu bulunmuştur (Ashcroft, Mermin 1976).

Bulunan (2.4.6.8) denklemini aşağıdaki gibi tekrar yazalım

$$\chi = \frac{1}{3} \frac{N}{V} \frac{\mu_B^2 p^2}{k_B T}, \quad (2.4.6.18)$$

burada etkin Bohr magnetonu p :

$$p = g(JLS) [J(J+1)]^{1/2}. \quad (2.4.6.19)$$

2.4.7 Pauli Paramanyetizması: İletim Elektron Spinlerinin Alınganlığa Katkısı

İletim elektronlarından bahsettiğimize göre söz konusu olan malzemeler metallerdir. Metallerde, iletim elektronları iyonlardakiler gibi yerelleşmemiştir.

İletim elektronlarının alınganlığa katkısını serbest elektron modeli ile çözebiliriz. Fakat bu çözüm biraz karmaşıktır. Çünkü elektronun orbital hareketi uygulanan manyetik alana tepki gösterir. Eğer orbital hareketini yok sayarsak yolumuza daha basit olarak devam ederiz (Ashcroft, Mermin 1976).

Dış manyetik alan yokken elektronlar rastgele yönelirler. Dış manyetik alan uygulandığında elektronların bir kısmı alana paralel bir kısmı alana zıt yönelir. Alanla aynı yönelenlerin enerjisi $-\mu_B h$, zıt yönelenlerin enerjisi $\mu_B h$ olur. Dolayısı ile tercih edilen durum alana paralel durumdur. Alana paralel elektronların birim hacimdeki sayısına n_+ , diğerlerine n_- diyelim. Manyetizasyon

$$M = -\mu_B (n_+ - n_-) \quad (2.4.7.1)$$

ile verilir. Elektronun spini alana paralel ise μ_B/V , spini alana anti paralel ise manyetizasyona $-\mu_B/V$ katkı yapar.

Elektronların uygulanan manyetik alanla sadece dipol manyetik momentleri ile etkileştiklerinin düşünüyoruz. Serbest elektronların en düşük enerji halini tercih edip dış manyetik alanla aynı yönde yönelmesi beklenir. Diğer yandan elektronlar Pauli prensibine uymak zorundadır. Peki o zaman elektronların ne kadarı alanla aynı yönde yönelir?

Bu durumda elektronik durum yoğunluğuna bakmak gerekir. ϵ ile $\epsilon+d\epsilon$ enerji aralığında birim hacimdeki belirli spindeki elektron sayısı dış alan sıfır olduğunda

$$g_m(\epsilon) = \frac{1}{2} g(\epsilon) \quad (2.4.7.2)$$

ile verilir. Burada $g(\epsilon)$ elektronların her zamanki durum yoğunluğudur.

Dış alan varlığında elektronların durum yoğunlukları değişir. Alana paralel elektronların enerjileri $\mu_B h$ kadar azalırken anti paralel yönelenlerin enerjileri $\mu_B h$ kadar artar bu durumda durum yoğunlukları:

$$g_+(\epsilon) = \frac{1}{2} g(\epsilon - \mu_B h), \quad (2.4.7.3)$$

$$g_-(\epsilon) = \frac{1}{2} g(\epsilon + \mu_B h). \quad (2.4.7.4)$$

Birim hacimdeki elektron sayısı

$$n_m = \int g_m(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon, \quad (2.4.7.5)$$

burada Fermi fonksiyonu $f(\epsilon)$:

$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1}. \quad (2.4.7.6)$$

Birim hacimdeki toplam elektron sayısı:

$$n = n_+ + n_- . \quad (2.4.7.7)$$

$g(\epsilon)$ durum yoğunluğunun önemli bir kısmı Fermi enerjisi civarındadır. $\mu_B h$, $10^{-4} \epsilon_F$ mertebesinde. Böylece aşağıdaki eşitliği yazabiliriz:

$$g_m(\epsilon) = \frac{1}{2} g(\epsilon) m \mu_B h = \frac{1}{2} g(\epsilon) m \frac{1}{2} \mu_B h g'(\epsilon) . \quad (2.4.7.8)$$

Bu eşitliği (2.4.7.5) ile birleştirirsek

$$n_m = \frac{1}{2} \int g(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon m \frac{1}{2} \mu_B h \int \frac{\partial g(\epsilon)}{\partial \epsilon} f(\epsilon) d\epsilon . \quad (2.4.7.9)$$

Dış alan yokken birim hacimdeki elektron sayısı:

$$n = \int g(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon . \quad (2.4.7.10)$$

(2.4.7.1) ile (2.4.7.9) denklemi birleştirilirse manyetizasyon:

$$M = \mu_B^2 h \int g'(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon . \quad (2.4.7.11)$$

Bu eşitliği aşağıdaki gibi de yazabiliriz:

$$M = \mu_B^2 h \int g(\epsilon) \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right) d\epsilon . \quad (2.4.7.12)$$

Sıfır Kelvinde aşağıdaki eşitlik geçerlidir

$$-\frac{\partial f}{\partial \epsilon} = \delta(\epsilon - \epsilon_F) . \quad (2.4.7.13)$$

Bulunan manyetizasyon:

$$M = \mu_B^2 h g(\epsilon_F) . \quad (2.4.7.14)$$

Buradan da alınganlık

$$\chi = \mu_B^2 g(\epsilon_F) \quad (2.4.7.15)$$

bulunur. Bulunan bu alınganlık Pauli paramanyetik alınganlığı olarak bilinir. Curie kanunundan farklı olarak bu kanun sıcaklıktan bağımsızdır.

Serbest elektronların durum yoğunluklarının aşağıdaki gibi verildiğini de biliyoruz (Aschroft, Mermin 1976):

$$g(\epsilon_F) = \frac{mk_F}{\hbar^2 \pi^2}. \quad (2.4.7.16)$$

Bunu yerine koyarsak bulunan alınganlık:

$$\chi = \left(\frac{\alpha}{2\pi} \right) (\alpha_0 k_F). \quad (2.4.7.17)$$

Serbest elektronların spinlerinden ileri gelen Pauli paramanyetizması alınganlığın küçük bir kesrini oluşturur.

2.4.8 Landau Diamanyetizması: İletim Elektron Yörüngelerinin Alınganlığa Katkısı

İletim elektronları alınganlığa iki türlü katkı sağlar. Birincisi spinlerinden dolayı ileri gelen Pauli paramanyetizması ki yukarıda anlatıldı, ikincisi yörüngelerinden ileri gelen diamanyetizmadır.

Lenz yasası gereği dış manyetik alan başka bir manyetik alan doğurur. Bu sebeble serbest elektronlar metalde dış manyetik alanı engelleyecek şekilde yörüngesel hareket yaparlar. Böylece içeride dış alandan farklı olarak manyetik alan doğar. Bu diamanyetizma Landau diamanyetizması olarak bilinir. Landau diamanyetizması, Pauli paramanyetizmasının -1/3 katına eşittir. Çözüm çok karmaşık olduğu için sadece sonuç verilmiştir (Ashcroft, Mermin 1976).

$$\chi_{Landau} = -\frac{1}{3} \chi_{Pauli} \quad (2.4.8.1)$$

3. ISING MODEL

3.1 Ising Modelin Tanımı

İstatistik mekaniğin en fazla çalışılan konularından biri de Ising modelidir. Ernst Ising doktora tezinde hocası Wilhelm Lenz tarafından önerilen manyetik faz geçişi problemini inceleyerek kendi adı ile anılan modeli kurdu (Ising, 1925). Tezinde, manyetik momentlerin bir zincir üzerindeki özel dizilimini araştırdı. Bu dizilimde momentlerin özel olarak sadece aşağı ve yukarı yönelimlere sahip olduğu ve en yakın komşuları ile çiftler halinde etkileştiği varsayılmıştır. 1925 yılında Ising, 1 boyutta sadece mutlak sıcaklıkta manyetik faz geçişinin olduğunu göstermiştir.

Elimizde n boyutlu N tane sabit noktaya sahip bir latisimiz olsun. Her latis noktasının bir spin değeri vardır. Her spin (σ), “-1,+1” değerlerinden birine sahip olabilir. Bu spinleri “aşağı-yukarı” ya da “- ,+“ gibi düşünebiliriz. N tane spinden oluşan sistemin anlık konfigürasyonu $\{\sigma_i\}$ ile verilir (Huang, 1987).

Ising modelinde her spin komşusundan bağımsız olarak bir spin değerine sahiptir. Gerçekte sistemdeki bütün spinler birbirleri ile etkileşirler ve sistemdeki spinler komşu spin yönünde yönelme eğilimindedirler.

Bir latiste çok fazla sayıda atom vardır. Bu yüzden rahatlıkla istatistik fiziği kullanabiliriz. Latisi kanonik sistem olarak inceleriz. Bu yüzden sistemin enerji konfigürasyonlarını bilmemiz gerekir. Spinler en yakın komşu spinleri ile etkileşir. En yakın komşuların sayısı koordinasyon sayısıdır. İki spin arasında etkileşme parametresi J 'dir. Sistemin geometrisine göre etkileşme sabiti J , her sistem için farklı değerler alabilir. Sistemin geometrisi en yakın komşuların sayısı ve etkileşme sabiti ile Ising modelinde yerini almış olur.

Sistemi kanonik toplulukla inceleyeceğimizden bölüşüm fonksiyonunu bulmamız gerekir. Bölüşüm fonksiyonunu bulmamız için de sistemin enerjisini bulmamız gerekir.

Bundan sonraki bölümlerde görüleceği üzere tek amacımız bu bölüşüm fonksiyonunu hesaplamaktır. Spinler birbiri ile etkileştiklerinden bölüşüm fonksiyonunu hesaplamak kolay değildir. Tek boyutta kesin çözüm Ising tarafından bulunmuştur (Ising E. 1925). İki boyutta kesin çözüm dış manyetik alan yokken Onsager tarafından bulunmuştur (Onsager L. 1944).

Ising modelin en önemli özelliği istatistik fizikte faz geçişini matematiksel olarak

göstermesidir.

3.2 Ising Modelinde Hamiltonyen ve Bölüşüm Fonksiyonu

Ising modelinde Hamiltonyenin nasıl bulunduğunu anlamak için sistemi ilk önce iki boyutlu olarak düşünelim ve sonra işlemlere başlayalım. h dış manyetik alan olmak üzere sistemin Hamiltonyeni

$$H\{\sigma_i\} = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (3.2.1)$$

ile verilir. Burada $\langle ij \rangle$ en yakın komşular üzerinden toplamdır. $\langle ij \rangle$ ve $\langle ji \rangle$ arasında bir fark yoktur. $\langle ij \rangle$, en yakın komşular üzerinden toplam $\gamma N/2$ tane terim içerir. γ , en yakın komşu sayısıdır. J_{ij} sistemin topolojisine göre değişebilir. Sistemi izotropik kabul edersek $J_{ij} = J$ olur. Bu durumda Hamiltonyen:

$$H\{\sigma_i\} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^N \sigma_i. \quad (3.2.2)$$

Ferromanyetizmada $J > 0$, antiferromanyetizmada $J < 0$ olur. $J = 0$ ise spinler etkileşmiyor demektir. Bölüşüm fonksiyonu

$$Q(h, T) = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \sum_{\sigma_3} \dots \sum_{\sigma_N} e^{-\beta H\{\sigma_i\}}, \quad (3.2.3)$$

burada β Boltzman sabitidir. Bütün σ_i değerleri ± 1 değerlerini birbirinden bağımsız olarak alır. Bütün durumları düşündüğümüz zaman sistem 2^N tane değişik durumda bulunabilir. Daha önce bahsettiğimiz gibi sistemin davranışını çözmek için tek yapmamız gereken bu bölüşüm fonksiyonunu çözmektir. Ama görüldüğü gibi toplamlar iç içedir ve enerjide çarpım vardır. Bu yüzden bölüşüm fonksiyonunu analitik olarak çözmek her zaman kolay değildir. Bölüşüm fonksiyonunu çözmek için değişik metotlar geliştirilmiştir.

Bölüşüm fonksiyonunu bulduk diyelim. Sonra ne yapılacak? Bundan sonrası için termodinamikten bildiğimiz denklemleri kullanarak termodinamik büyüklükleri bulup, sistem hakkında bilgi sahibi olmaya çalışacağız. Termodinamik büyüklükler Helmholtz serbest enerjisinden elde edilir. Helmholtz serbest enerjisi

$$A(h, T) = -k_B T \log Q(h, T) \quad (3.2.4)$$

ile verilir. Termodinamik fonksiyonlardan iç enerji

$$U(h, T) = -k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{A}{k_B T} \right), \quad (3.2.5)$$

ısı kapasitesi

$$C(h, T) = \frac{\partial U}{\partial T}, \quad (3.2.6)$$

manyetizasyon

$$M(h, T) = -\frac{\partial}{\partial h} \left(\frac{A}{k_B T} \right), \quad (3.2.7)$$

burada $\langle \rangle$, topluluk ortalamasıdır. $M(0, T)$ doğal manyetizasyondur. Eğer doğal manyetizasyon sıfır değilse sistem ferromanyetiktir.

3.3 Ising Modelinde Bölüşüm Fonksiyonunun Hesaplanması

(3.2.1) denklemindeki enerji katlıdır. Bölüşüm fonksiyonunu çözmek için şöyle bir yol izlenir. Sistemin aşağı ve yukarı yönlü spin sayıları kullanılarak bölüşüm fonksiyonu yeniden yazılır. Bu bulunan bölüşüm fonksiyonu yaklaşık yöntemlerle çözülür.

Bu bölümde ileride göreceğimiz gerekli olan tanımlamaları yaptıktan sonra bölüşüm fonksiyonunun yeniden yazılıp çözülmesi takip eden bölümlere bırakılmıştır.

Sistemin herhangi bir anında

N_+ = yukarı yönlü spinlerin toplam sayısı,

N_- = aşağı yönlü spinlerin toplam sayısı,

N = toplam spin sayısıdır.

Buradan çok açık bir şekilde $N_- = N - N_+$ olduğu görülür.

İki komşu spin birlikte ele alındığında 3 değişik durumda olabilir. (+ +), (- -) ya da (+ -). (+ -) ile (- +) nın birbirinden farkı yoktur. Bunların sayısını da tanımlarsak

N_{++} = (+ +) olan çiftlerin sayısı,

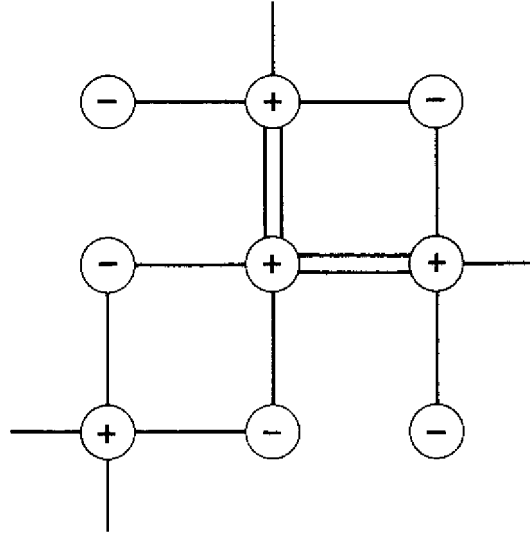
N_{--} = (- -) olan çiftlerin sayısı,

N_{+-} = (+ -) olan çiftlerin sayısıdır.

Yukarıda yaptığımız bütün bu tanımlamalar birbirinden bağımsız değildir. Bütün bu

tanımlamaları birbirine göre yazıp hepsini aynı değişkenler cinsinden bulacağız. En sonunda da bulduğlarımızı kullanarak Hamiltonyeni bu değişkenler cinsinden yazacağız. Bu Hamiltonyenle yazdığımız bölüşüm fonksiyonu da iç içe toplamdan kurtulmuş olur ve daha basit bir matematikle çözülebilir (Huang, 1987).

Tanımladığımız değişkenleri birbiri cinsinden yazabilmek için aşağıdaki yol izlenir. Bütün yukarı spinli latis noktalarından en yakın komşularına birer çizgi çizelim. Bu işlemi tamamladığımızda bütün latis üzerinde iki komşu yukarı spin arasında 2 çizgi, iki komşu aşağı spin arasında 0 çizgi ve zıt spinli iki komşu arasında 1 çizgi oluşur. Elimizde aşağıdaki gibi bir şekil oluşur:



Şekil 3.1 Hat çizgileri (Huang, 1987)

Bu işlemden sonra yukarıda tanımladığımız değişkenleri birbiri cinsinden yazabiliriz. γ , en yakın komşu sayısıdır. Toplam hat çizgisi sayısı γN_+ :

$$\gamma N_+ = 2N_{++} + N_{+-}. \quad (3.3.1)$$

Bu eşitlik simetriktir. Yani aynı işlemi aşağı spinler için de yaparsak bu durumda:

$$\gamma N_- = 2N_{--} + N_{-+}. \quad (3.3.2)$$

Bu iki denklemi ve toplam spin sayısı N 'yi kullanarak aşağıdaki eşitlikler elde edilir:

$$N_{+-} = \gamma N_+ - 2N_{++},$$

$$N_{--} = \frac{\gamma N_- - N_{-+}}{2},$$

$$N_{--} = \frac{\gamma}{2}(N - N_+) - \frac{1}{2}(\gamma N_+ - 2N_{++}),$$

$$N_{--} = \frac{\gamma}{2}N - \frac{\gamma}{2}N_+ - \frac{\gamma}{2}N_+ + N_{++},$$

$$N_{--} = \frac{\gamma}{2}N - \gamma N_+ + N_{++}. \quad (3.3.3)$$

Hamiltonyen içindeki ilk toplam terim:

$$\sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j = N_{++} + N_{--} - N_{+-}$$

$$\sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j = N_{++} + \frac{\gamma N}{2} - \gamma N_+ + N_{++} - \gamma N_+ + 2N_{++}$$

$$\sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j = 4N_{++} + \frac{\gamma N}{2} - 2\gamma N_+. \quad (3.3.4)$$

Hamiltonyendeki ikinci terim:

$$\sum_{i=1}^N \sigma_i = N_+ - N_- = N_+ - (N - N_+) = 2N_+ - N. \quad (3.3.5)$$

Buradan Hamiltonyen

$$H_i(N_+, N_{++}) = -\epsilon \left(4N_{++} + \frac{\gamma N}{2} - 2\gamma N_+ \right) - h(2N_+ - N)$$

$$H_i(N_+, N_{++}) = -4JN_{++} - \left(\frac{\gamma \epsilon}{2} - h \right) N + 2(\epsilon \gamma - h) N_+ \quad (3.3.6)$$

şeklinde bulunur. Bölüşüm fonksiyonu

$$Q_i(N_+, N_{++}) = e^{\beta N(\gamma J/2 - h)} \sum_{N_+=0}^N e^{-2\beta(\epsilon \gamma - h)N_+} \sum_{N_{++}}' g(N_+, N_{++}) e^{4\beta J N_{++}}, \quad (3.3.7)$$

buradaki $g(N_+, N_{++})$ terimi düzeltme terimidir. N_{++} , toplam spin sayısı N 'nin içinde bulunduğundan N_{++} üzerinden toplam alırken bu terimi kullanmak gerekir. Bölüşüm fonksiyonu sadece N_+ ve N_{++} terimlerine bağlıdır ve toplamın çözümü basittir (Huang, 1987).

4. ISING MODELİN KESİN ÇÖZÜMLERİ

Ising modelin 1 boyutta tam çözümü ve 2 boyutta dış alan yokken kare latis, üçgen latis ve bal peteği için tam çözümü vardır. Diğer durumlarda yaklaşık metodlar ve simülasyonlar dışında kesin çözüm yoktur.

4.1 Bir Boyutlu Ising Modelin Kesin Çözümü

Bir boyutlu Ising modelin kesin çözümü 1925 yılında Ernest Ising tarafından doktora tezinde çözülmüştür (Ising E., 1925).

4.1.1 Dış Manyetik Alan Yokluğunda Bir Boyutlu Ising Modelde Bölüşüm Fonksiyonu

Spinler birbirinden bağımsız olarak $\sigma_i = \pm 1$ değerlerini alabilir. Kanonik kümede bölüşüm fonksiyonu:

$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H\{\sigma_i\}}. \quad (4.1.1.1)$$

Bölüşüm fonksiyonu bütün konfigürasyonlar üzerinden toplamdır:

$$\sum_{\{\sigma_i\}} = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \sum_{\sigma_3} \dots \sum_{\sigma_N} . \quad (4.1.1.2)$$

Yukarı spinleri +1, aşağı spinleri -1 düşündüğümüz zaman Hamiltonyen bütün spinlerin toplamıdır. Hamiltonyen:

$$\mathbf{H}\{\boldsymbol{\sigma}_i\} = \sum_i \boldsymbol{\sigma}_i = \boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2 \mathbf{L} \boldsymbol{\sigma}_N. \quad (4.1.1.3)$$

Bir boyutta N tane spin vardır.

$\overset{+}{1} \overset{+}{4} \overset{+}{4} \bar{4} \cancel{4} 2 \overset{+}{4} \overset{+}{4} \overset{+}{4} \bar{4} \cancel{4}$
toplum N tane spin var

Toplamda 2^N değişik konfigürasyon vardır.

Bölüşüm fonksiyonu:

$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta \sum_i \sigma_i} = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \sum_{\sigma_3} \mathbf{L} \sum_{\sigma_N} e^{-\beta(\sigma_1 + \sigma_2 + \dots + \sigma_N)}. \quad (4.1.1.4)$$

Spinlerin yönelimi birbirinden bağımsız olduğu için bölüşüm fonksiyonunu aşağıdaki gibi yazarız:

$$Q = \sum_{\sigma_1} e^{-\beta\sigma_1} \sum_{\sigma_2} e^{-\beta\sigma_2} \sum_{\sigma_3} e^{-\beta\sigma_3} \mathbf{L} \sum_N e^{-\beta\sigma_N}. \quad (4.1.1.5)$$

Her σ değerinin 2 durumu vardır. 1 ya da -1. Bu durumda bölüşüm fonksiyonu:

$$Q = (e^\beta + e^{-\beta})(e^\beta + e^{-\beta})(e^\beta + e^{-\beta}) \mathbf{L} (e^\beta + e^{-\beta}). \quad (4.1.1.6)$$

Toplam N spin olduğundan N üssü alınır ve bölüşüm fonksiyonu

$$Q = (e^\beta + e^{-\beta})^N = (2 \cosh \beta)^N = 2^N \cosh^N \beta \quad (4.1.1.7)$$

bulunur. (4.1.1.7) sonucu 1 boyutta Ising modelde dış alan olmaması durumunda bölüşüm fonksiyonunu verir.

4.1.2 Dış Manyetik Alan Varlığında Bir Boyutlu Ising Modelin Çözümü

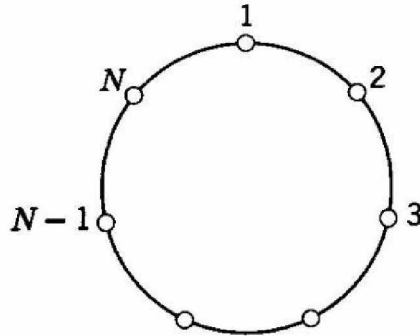
Bir boyutlu Ising model zincir şeklinde N tane spinden oluşur. Her spin iki komşusu ve dış manyetik alanla etkileşir. h, dış manyetik alan olmak üzere $\{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\}$ konfigürasyonlu sistemin Hamiltoniyeni:

$$H = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - h \sum_{i=1}^N \sigma_i. \quad (4.1.2.1)$$

Bu sistemde periyodikliği sağlamak için şu sınır koşulunun varlığını kabul ediyoruz:

$$\sigma_{N+1} = \sigma_1. \quad (4.1.2.2)$$

Bu durumda sistemin topolojisi çember halini alır.



Şekil 4.1 Bir boyutlu Ising modelinde sistemin topolojisi (Huang, 1987)

Bölüşüm fonksiyonu

$$Q(h, T) = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \sum_{\sigma_N} \exp \left[\beta \sum_{i=1}^N (J \sigma_i \sigma_{i+1} + h \sigma_i) \right], \quad (4.1.2.3)$$

burada her σ_i birbirinden bağımsız olarak m değerlerini alır. Q bölüşüm fonksiyonunu çözmek için transfer matris metodu kullanılır. Bölüşüm fonksiyonu şu şekilde yazılabilir:

$$Q(h, T) = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \sum_{\sigma_N} \exp \left[\beta \sum_{i=1}^N \left(J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{1}{2} h (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right) \right]. \quad (4.1.2.4)$$

Bölüşüm fonksiyonunu çözmek için kullanacağımız 2×2 'lik P matrisini tanımlayalım. P matrisinin elemanları aşağıdaki eşitlikten bulunur:

$$\langle \sigma | P | \sigma' \rangle = e^{\beta [J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{1}{2} h (\sigma_i + \sigma_{i+1})]}. \quad (4.1.2.5)$$

σ ve σ' birbirinden bağımsız olarak m değerlerini alır.

$$\begin{aligned} \langle +1 | P | +1 \rangle &= e^{\beta(J+h)} \\ \langle -1 | P | -1 \rangle &= e^{\beta(J-h)} \\ \langle +1 | P | -1 \rangle &= e^{-\beta J} \\ \langle -1 | P | +1 \rangle &= e^{-\beta J} \end{aligned} \quad (4.1.2.6)$$

P matrisi:

$$\begin{pmatrix} \langle +1 | P | +1 \rangle & \langle -1 | P | -1 \rangle \\ \langle +1 | P | -1 \rangle & \langle -1 | P | +1 \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+h)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-h)} \end{pmatrix}. \quad (4.1.2.7)$$

Bölüşüm fonksiyonunu bulduğumuz P matrisi cinsinden tekrar yazalım:

$$Q = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \sum_{\sigma_N} \langle \sigma_1 | P | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | P | \sigma_3 \rangle \dots \langle \sigma_N | P | \sigma_{N+1} \rangle. \quad (4.1.2.8)$$

Sınır şartlarını uyguladıktan sonra bölüşüm fonksiyonu

$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} \langle \sigma_1 | P^N | \sigma_1 \rangle = \text{Tr} P^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N,$$

sadece P matrisinin özdeğerlerine bağlı olarak bulunur. Bulunan özdeğerler:

$$\lambda_{1,2} = e^{\beta J} \left\{ \cosh(\beta h) \pm \sqrt{\sinh^2(\beta h) - e^{-4\beta J}} \right\}. \quad (4.1.2.9)$$

Termodinamik limitlerde çalışacağımız için $N \rightarrow \infty$ durumunu incelersek

$$Q = \lambda_1^N + \lambda_2^N$$

$$\frac{1}{N} \log Q = \frac{1}{N} \log (\lambda_1^N + \lambda_2^N)$$

$$\frac{1}{N} \log Q = \frac{1}{N} \log \left\{ \left[1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right] \lambda_1^N \right\}$$

$$\frac{1}{N} \log Q = \log \lambda_1 + \frac{1}{N} \log \left\{ \left[1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right] \right\} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \log \lambda_1. \quad (4.1.2.10)$$

Buradan bütün h'lar için $\lambda_1 > \lambda_2$ bulunur. Bölüşüm fonksiyonu şu hali alır:

$$Q = \lambda_1^N + \lambda_2^N \approx \lambda_1^N. \quad (4.1.2.11)$$

Bulduğumuz bu yaklaşımı kullanırsak bulunan bölüşüm fonksiyonu:

$$Q = e^{\beta J N} \left[\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) - e^{-4\beta J}} \right]^N. \quad (4.1.2.12)$$

Her bir spin için Helmholtz serbest enerjisi:

$$\frac{1}{N} A(h, T) = -\frac{1}{N} k_B T \log Q(h, T)$$

$$\frac{1}{N} A(H, T) = -\frac{1}{N} k_B T \log \left(e^{\beta J} \left\{ \cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) - e^{-4\beta J}} \right\} \right)^N$$

$$\frac{1}{N} A(h, T) = -\frac{1}{N} k_B T N \log e^{\beta J} - N k_B T \log \left(\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) - e^{-4\beta J}} \right)$$

$$\frac{1}{N} A(h, T) = -J - k_B T N \log \left(\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) - e^{-4\beta J}} \right). \quad (4.1.2.13)$$

Ortalama spin manyetizasyonu:

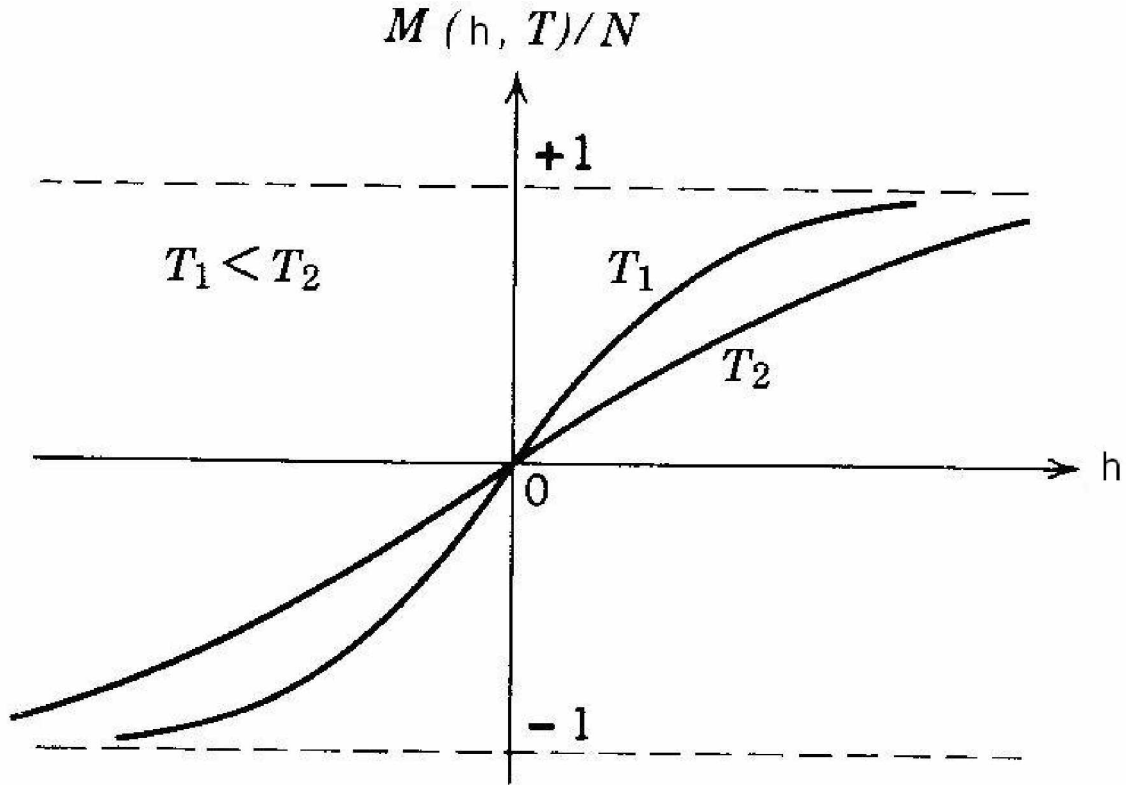
$$\frac{1}{N} M(h, T) = -\frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial h} \left(\frac{A}{k_B T} \right)$$

$$\frac{1}{N} M(h, T) = -\frac{\partial}{\partial h} \left(-J\beta - \log \left(\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) - e^{-4\beta J}} \right) \right)$$

$$\frac{1}{N} M(h, T) = \frac{\sinh(\beta h) + \frac{2 \sinh(\beta h) \cosh(\beta h) \beta}{2 \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}}}{\left(\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}} \right)}$$

$$\frac{1}{N} M(h, T) = \frac{\sinh(\beta h)}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}}. \quad (4.1.2.14)$$

Aşağıdaki grafikte spin başına manyetizasyonun dış manyetik alan h ile değişimi gözüküyor.



Şekil 4.2 Bir boyutlu Ising modelde manyetizasyonun dış alanla değişimi (Huang, 1987)

$T > 0$ olduğu zaman ortalama manyetizasyon

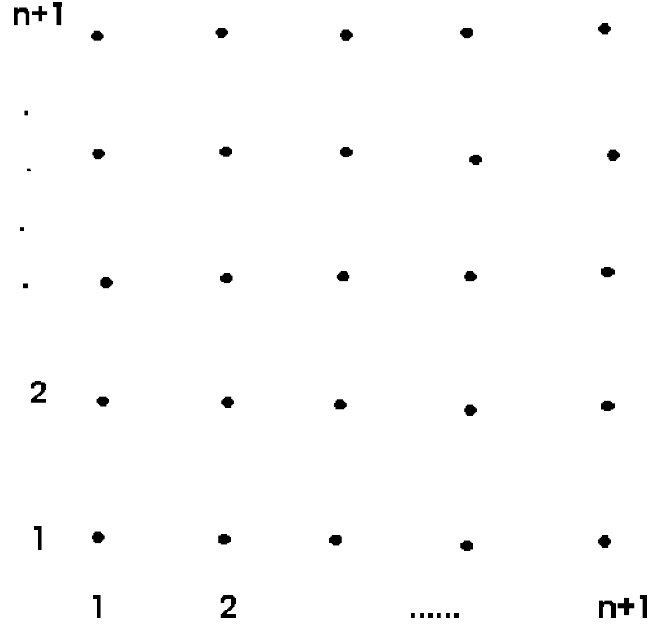
$$\frac{1}{N} M(0, T) = 0. \quad (4.1.2.15)$$

Grafikten görüldüğü gibi 1 boyutlu Ising modelde $T > 0$ durumunda doğal manyetizasyon yoktur. $T = 0$ için Ising modelde faz geçişi vardır.

4.2 İki Boyutta Dış Manyetik Alan Olmaması Durumunda Kesin Çözüm : Onsager Çözümü

2 boyutta kesin çözüm Lars Onsager tarafından çözülmüştür (Onsager L., 1944).

Onsager latisi bir matris gibi düşünüp bütün satır ve sütunlarına aşağıdaki gibi numara vermiştir:



Şekil 4.3 Onsager latisi (Huang, 1987)

Hamiltonyen:

$$H\{\sigma_i\} = -\sum_{\langle i,j \rangle} J(\sigma_{i,j}\sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j}\sigma_{i,j+1}) - \sum_{i,j} h\sigma_{i,j} . \quad (4.2.1)$$

Her latisin noktasının ayrı bir indisi vardır. Hamiltonyeni yeniden yazarsak

$$H\{\sigma_i\} = \sum_{\langle i,j \rangle} [E(\mu_j, \mu_{j+1}) + E(\mu_j)], \quad (4.2.2)$$

burada

$$E(\mu_j, \mu_{j+1}) = -\sum_{i=1}^n \sigma_{ij}\sigma_{ik} ,$$

$$E(\mu_j) = -J \sum_{i=1}^n \sigma_{ij}\sigma_{i+1,j} - h \sum_{i,j} \sigma_{i,j} , \quad (4.2.3)$$

μ_j ise

$$\mu_j = \{\sigma_{1j}, \mathbf{L}, \sigma_{nj}\} \quad (4.2.4)$$

belirli bir sütundaki spin takımını belirtiyor.

P transfer matrisi aşağıdaki gibi tanımlanır

$$\langle \mu_j | P | \mu_j \rangle = e^{-\beta [E(\mu_j, \mu_{j+1}) + E(\mu_j)]}. \quad (4.2.5)$$

P transfer matrisi $2^n \times 2^n$ lik bir matristir. Bölüşüm fonksiyonu:

$$Q = \text{Tr} (P^n). \quad (4.2.6)$$

Daha önce bir boyutta yaptığımız gibi en büyük özdeğer alınır. Burada çok fazla matematiksel işlem vardır. Çözüm Huang'ın istatistik kitabında 20 sayfada verilmiştir (Huang, 1987). Ara işlemlere girmeden $h = 0$ için en genel çözüm

$$g(T) = -k_B T [2 \cosh(2\beta J)] - \frac{k_B T}{2\pi} \int_0^\pi d\phi \ln \frac{1}{2} (1 + \sqrt{1 - K^2 \sin^2 \phi}) \quad (4.2.7)$$

şeklinde verilir. Burada

$$K = \frac{2}{\cosh(2\beta J) \coth(2\beta J)}. \quad (4.2.8)$$

Spin başına hesaplanan enerji:

$$\varepsilon(T) = -2J \tanh(2\beta J) + \frac{K}{2\pi} \frac{dK}{d\beta} \int_0^\pi d\phi \frac{\sin^2 \phi}{Q(1+Q)}, \quad (4.2.9)$$

burada

$$Q = \sqrt{1 - K^2 \sin^2 \phi}. \quad (4.2.10)$$

Manyetizasyon:

$$M = \left\{ 1 - [\sinh(2\beta J)]^{-4} \right\}^{1/8}. \quad (4.2.11)$$

Manyetizasyon kritik sıcaklığın yukarısında sıfırdır. Kritik sıcaklık eşitliği:

$$2 \tanh^2 [2\beta J] = 2 \tanh^2 \frac{2J}{k_B T_c} = 1. \quad (4.2.12)$$

Onsager çözümü için K_c değeri:

$$K_c = \frac{J}{k_B T_c} = 0.4406868. \quad (4.2.13)$$

Isıkapasitesi:

$$\frac{C(t)}{k_B} = \frac{2}{\pi} \left(\frac{2J}{k_B T_c} \right)^2 \left[-\ln \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) + \ln \left(\frac{k_B T_c}{2J} \right) - \left(1 + \frac{\pi}{4} \right) \right]. \quad (4.2.14)$$

Onsager çözümünden hesaplanan kritik üsteller

$$\alpha = 0, \beta = \frac{1}{8}, \gamma = \frac{7}{4} \quad (4.2.15)$$

şeklinde verilir.

5. KRİTİK ÜSTELLER

Faz geçişi belirli sabit bir sıcaklıkta olur ve bu sıcaklıkta sistemdeki bütün parçacıkların erişimi sonsuzdur. Faz geçişi sırasında bazı termodinamik büyüklükler analitik süreksizlik ve tekilliklere sahiptir. Bunun sebebi uzun ve kısa erişimli etkileşmelerdir. Dolayısı ile kritik sıcaklık anındaki fiziği incelemek matematiksel olarak çok zordur. Fakat parçacıklar arasındaki etkileşmeleri basitleştirerek basit modeller yapılabilir. Bu modeller kritik nokta civarında sistemin davranışını üstel fonksiyonları kullanarak inceler. Bu üsteller termodinamik fonksiyonların seri açılımı ile elde edilir.

Kritik nokta civarında sistemin davranışını tanımlayan üstel fonksiyonların üstellerine kritik üsteller denir (Akgöbek G., Yıldırım E. Ö., Güleç A., Akın E., Atav Ü., 2003).

5.1 Kritik Üstellerin Tanımlanması

Termodinamik fonksiyonları seriye açabilmek için ilk önce ε 'nu tanımlamalıyız,

$$\varepsilon = \frac{T - T_c}{T_c}. \quad (5.1.1)$$

ε 'nu kullanarak seri açılım yapabiliriz. İlgili fonksiyon kritik nokta civarında

$$f(\varepsilon) = A\varepsilon^\lambda (1 + B\varepsilon^y + \mathbf{L}) \quad (5.1.2)$$

şeklinde seriye açılır. Burada A, B, λ sabitler olup $y > 0$ 'dır. Kritik sıcaklığa sağdan ve soldan yaklaşırken ε sıfıra gider ve $f(\varepsilon)$ süreksiz ve tekil olur. Kritik üstel

$$\lambda = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln f(\varepsilon)}{\ln \varepsilon} \quad (5.1.3)$$

şeklinde tanımlanır.

5.2 Manyetik Sistemler İçin Kullanılan Kritik Üsteller

5.2.1 δ Üsteli

m_0 ortalama manyetizasyon, $h_0^c = k_B T / m_0$, B_δ bir sabit ve $M(T, h)$ manyetizasyon olmak üzere

$$\frac{h}{h_c^0} = B_\delta \left| \frac{M_h(T_c)}{M(0)} \right|^\delta, \quad (5.2.1.1)$$

denklemleri ile δ üsteli tanımlanır. δ üsteli kritik izoterm boyunca manyetizasyonun manyetik alanla değişimini tanımlar.

5.2.2 β Üsteli

B_β bir sabit olmak üzere

$$\frac{M_0(T)}{M_0(0)} = B_\beta (-\epsilon)^\beta, \quad (5.2.2.1)$$

denklemleri ile β manyetizasyon üsteli tanımlanır. β üsteli, dış manyetik alan mevcut değil iken manyetizasyonun kritik noktadaki değerine nasıl yaklaştığını tanımlar.

5.2.3 α Üsteli

Dış manyetik alan sıfır olduğunda ($h = 0$) kritik nokta civarında sistemin ısı kapasitesi

$$C = \begin{cases} B_{\alpha'} (-\epsilon)^{-\alpha'}, & T < T_c \\ B_\alpha (+\epsilon)^{-\alpha}, & T > T_c \end{cases}, \quad (5.2.3.1)$$

denklemleri ile verilir. Burada $B_{\alpha'}$ ve B_α sabitlerdir. α ve α' üstelleri kritik nokta civarında ısı kapasitesi hakkında bilgi verir.

5.2.4 γ Üsteli

Kritik nokta civarında sistemin manyetik alınganlığı:

$$\frac{\chi_T}{\chi_T^0} = \begin{cases} B_{\gamma'} (-\epsilon)^{-\gamma'}, & T < T_c \\ B_\gamma (+\epsilon)^{-\gamma}, & T > T_c \end{cases}. \quad (5.2.4.1)$$

Burada $B_{\gamma'}$ ve B_γ sabitlerdir ve χ_T^0 niceliği kritik sıcaklıkta etkileşmeyen manyetik alınganlık değeridir. γ üsteli kritik nokta civarında manyetik alınganlık hakkında bilgi verir.

5.3 Kritik Üsteller Arasındaki İlişkiler

Yukarıda tanımlanan 4 üstel birbirinden tamamen bağımsız değildir ve aralarında bazı eşitsizlikler mevcuttur.

Isı kapasitesi için aşağıdaki eşitliği yazabiliriz:

$$C_h - C_M = -T \left(\frac{\partial h}{\partial M} \right)_M \left(\frac{\partial M}{\partial T} \right)_h = T \chi^{-1} \left\{ \left(\frac{\partial M}{\partial T} \right)_h \right\}^2. \quad (5.3.1)$$

Burada her zaman $C_M \geq 0$ eşitliğini yazabiliriz. $h \rightarrow 0$ ve $T \rightarrow T_c$ limitinde aşağıdaki eşitsizliği yazabiliriz:

$$(T_c - T)^{2-(\alpha' + 2\beta + \gamma')} \geq DT_c. \quad (5.3.2)$$

$T - T_c$ ifadesi yeteri kadar küçük seçilebileceğinden $(\alpha' + 2\beta + \gamma') < 2$ geçerli olamaz. Bu sebeble

$$(\alpha' + 2\beta + \gamma') \geq 2 \quad (5.3.3)$$

eşitsizliği geçerlidir. Bu eşitsizliğe Rushbrook eşitsizliği denir.

Aynı yolla Helmholtz serbest enerjisini kullanarak Griffiths eşitsizliği

$$\alpha' + \beta (\delta + 1) \geq 2 \quad (5.3.4)$$

elde edilir. Yukarıda 4 tane kritik üsteli tanımladık. Bazı sistemler birbirinden tamamen farklı olsa da aynı kritik üstellere sahiptir. Bu sistemler aynı evrensellik kümesi içindedir. Eğer aynı evrensellik kümesi içinde olduğunu bildiğimiz iki sistem varsa bunlardan birinin kritik üstellerini biliyorsak öteki sistem hakkında da bilgiye sahibiz demektir.

Kritik üstellerin birbirinden bağımsız olmadığını söyledik. Dört kritik üstelden eğer birbirinden bağımsız iki kritik üstel biliniyorsa diğerleri de bulunur. Evrensel küme ise sadece iki parametre tarafından karakterize edilir.

1. Sistemin boyutu: d
2. Düzen parametresinin derecesi: n

Düzen parametresi aşağıdaki gibi tanımlanır.

Sistemin hamiltonyeni H, G grubu altındaki bütün dönüşümlerde değişmez olsun. Eğer iki faz G dönüşümü altında değişken olan $\langle \phi \rangle$ termodinamik ortalaması ile ayırt edilebiliyorsa, $\langle \phi \rangle$ düzen parametresi olarak adlandırılır.

Ising model için Hamiltonyen aşağıdaki gibi verilsin:

$$H_0 = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j . \quad (5.3.5)$$

H_0 , grup Z_2 altında değişmezdir. $Z_2 = (1,-1)$. Spin dönüşümleri

$$\sigma_i \rightarrow \sigma_i \quad \text{ve} \quad \sigma_i \rightarrow -\sigma_i$$

Kolayca görülebileceği gibi Z_2 grubunda H_0 , 2 dönüşüm altında aynı kalır. Manyetizasyon

$$M = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N \sigma_i \right\rangle \quad (5.3.6)$$

şeklinde tanımlanır ve $T < T_c$ için değişkendir. Tüm spinlerin tam düzenli durumunda spinlerin yön değişimi altında manyetizasyon da işaret değiştirir. M , Ising modeli için düzen parametresidir ve skaler olup boyutu birdir.

Ising model, Ising evrensel kümesini tanımlar. Bu kümenin parametreleri 3 boyutta $d = 3$ ve $n = 1$ dir.

Akışkan sistemler ve ortalama alan teorisi aynı üstellere sahiptir ve aynı evrensel kümeye aittirler.

Gerçek manyetik sistemlerde manyetik momentler 3 boyutlu uzayda herhangi bir yönelime sahip olabilirler. Gerçek manyetik sistem $d = 3$ ve $n = 3$ evrensel kümesine aittir.

6. ORTALAMA ALAN TEORİLERİ

Ortalama alan teorisinde spinlerin her birinin ayrı ayrı hesaplanması yerine hepsinin ortaklaşa oluşturduğu manyetizasyon hesaplanır.

Ising modelinde Hamiltonyen

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i, \quad (6.1)$$

bölüşüm fonksiyonu

$$Q(N, h, T) = \sum_{\sigma_i} \sum_{\sigma_2} \dots \sum_{\sigma_N} e^{\beta \left[\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \sigma_i \right]} \quad (6.2)$$

ile verilir. Ortalama alan teorisinde manyetizasyon:

$$M = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N \sigma_i \right\rangle. \quad (6.3)$$

Bu ifadeyi Ising modeline aşağıdaki gibi uygulanır:

$$\begin{aligned} \sigma_i \sigma_j &= (\sigma_i - M + M)(\sigma_j - M + M) \\ \sigma_i \sigma_j &= (\sigma_i - M)(\sigma_j - M) + M(\sigma_i - M) + M(\sigma_j - M) + M^2. \end{aligned} \quad (6.4)$$

İlk terim sistemdeki dalgalanmaları verir. Ortalama alan teorisi bu terimi ihmal eder. Eğer bu terimi ihmal edersek Hamiltonyendeki spin etkileşimleri aşağıdaki şekli alır:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j &\approx \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \left[M^2 + M(\sigma_i + \sigma_j - 2M) \right] \\ \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j &= \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \left[M^2 + M(\sigma_i + \sigma_j) - 2M^2 \right] \\ \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j &= \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \left[M(\sigma_i + \sigma_j) - M^2 \right]. \end{aligned} \quad (6.5)$$

Sistemdeki etkileşimleri izotropik alırsak J_{ij} terimlerinin hepsi eşit olur. J_{ij} terimi i yada j den sadece birine bağlı olmuş olur. $\sum_j J_{ij} \equiv \bar{J}z$ şeklinde yazabiliriz. z koordinasyon sayısıdır. z sistemin geometrisine göre değişen sabit bir sayıdır. $\bar{J}z = J$ olacak şekilde tekrar tanımlama yaparız. Son olarak aşağıdaki eşitliği yazabiliriz

$$\frac{1}{2} \sum_i J = \frac{1}{2} NJ ,$$

burada N toplam spin sayısıdır. Hamiltonyendeki spin – spin etkileşme terimini tekrar yazalım:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \left[M(\sigma_i + \sigma_j) - M^2 \right] &= \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} M(\sigma_i + \sigma_j) - \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} M^2 \\ \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \left[M(\sigma_i + \sigma_j) - M^2 \right] &= JM \sum_i \sigma_i - \frac{1}{2} M^2 JN . \end{aligned} \quad (6.6)$$

Hamiltonyen

$$\begin{aligned} H &= -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i = -JM \sum_i \sigma_i + \frac{1}{2} M^2 JN - h \sum_i \sigma_i \\ H &= -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i = +\frac{1}{2} M^2 JN - (JM + h) \sum_i \sigma_i , \end{aligned} \quad (6.7)$$

bölüşüm fonksiyonu

$$\begin{aligned} Q(N, h, T) &= e^{-\beta NJM^2/2} \sum_{\sigma_i} \sum_{\sigma_2} \dots \sum_{\sigma_N} e^{\beta(J+Mh) \sum_i \sigma_i} \\ Q(N, h, T) &= e^{-\beta NJM^2/2} \left(\sum_{\sigma=\pm 1} e^{\beta(J+Mh)\sigma} \right)^N \\ Q(N, h, T) &= e^{-\beta NJM^2/2} \left[2 \cos \beta (J + Mh) \right]^N , \end{aligned} \quad (6.8)$$

spin başına serbest enerji

$$\begin{aligned} A(h, T) &= -\frac{1}{N} k_B T \ln Q \\ A(h, T) &= \frac{1}{2} JM^2 - k_B T \ln \left[2 \cos \beta (JM + h) \right] , \end{aligned} \quad (6.9)$$

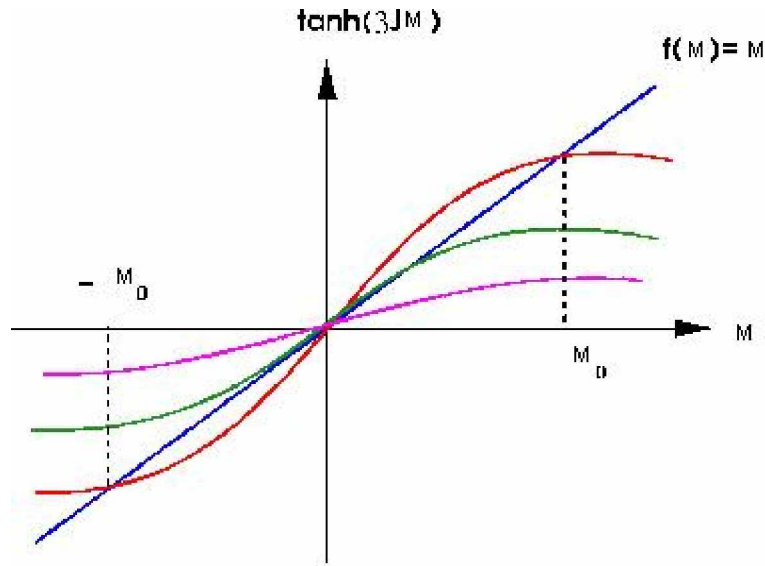
spin başına manyetizasyon

$$M = - \left(\frac{\partial A}{\partial h} \right)_h = \tanh \beta (JM + h) , \quad (6.10)$$

ayrı ayrı hesaplanmış olur. Dış manyetik alanın sıfırda limiti alınırsa bulunan manyetizasyon:

$$M = \tanh(\beta JM) \quad h \rightarrow 0. \quad (6.11)$$

Bu denklemin nümerik çözümü Şekil 6.1 de verilmiştir.



Şekil 6.1 Ortalama alan teorisinde dış manyetik alanın sıfıra gitmesi durumu, $h \rightarrow 0$

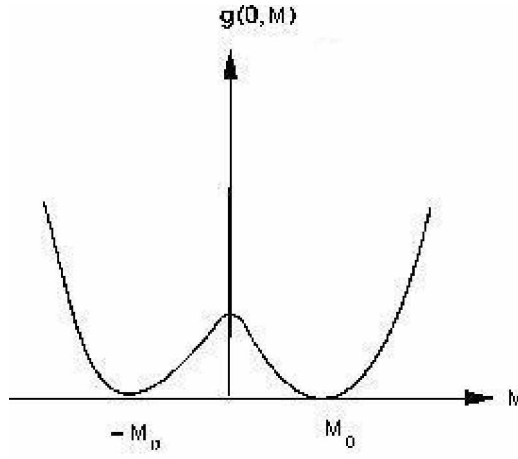
$\beta J > 1$ için denklemin 3 çözümü vardır. $M = 0, M = \pm M_0$. Ortalama alan teorisi $\beta J > 1$ için $h = 0$ durumunda doğal manyetizasyonu öngörür. $\beta J < 1$ durumu için $h = 0$ durumunda doğal manyetizasyon yoktur. $\beta J = 1$ durumu için 3 çözüm tek çözüm olur. Böylece $\beta J = 1$ durumu kritik sıcaklığı tanımlar. Kritik sıcaklık denklemi:

$$\frac{J}{k_B T_c} = 1. \quad (6.12)$$

Spin başına ortalama serbest enerjiyi $h = 0$ 'da, $M = 0$ civarında genişleterek yazarsak

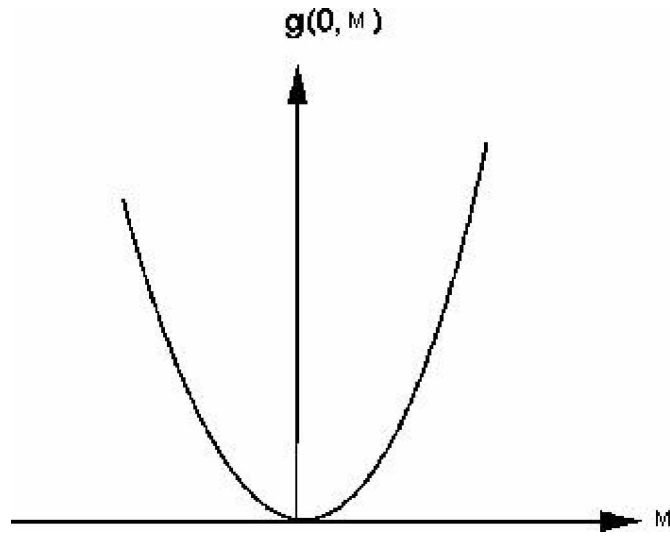
$$A(0, M) = \text{sabit} + J(1 - \beta J)M^2 + cM^4, \quad (6.13)$$

burada c sabittir. $\beta J > 1$ durumu için son terimin işareti eksidir. Serbest enerjinin M 'ye göre değişim grafiği Şekil 6.2 de verilmiştir.



Şekil 6.2 Ortalama alan teorisinde $\beta J > 1$ durumunda serbest enerjinin değişimi

Görüldüğü gibi 2 tane minimum enerji vardır. Kritik sıcaklığın altında spinlerin büyük bir bölümü belli bir düzene sahiptir. Kritik sıcaklığın altında manyetik faz düzenli faz olarak anılır. $\beta J < 1$ durumunda quadratik terimin işareti artıdır ve serbest enerji grafiği Şekil 6.3'te verilmiştir.



Şekil 6.3 Ortalama alan teorisinde $\beta J < 1$ durumunda serbest enerjinin değişimi

Görüldüğü gibi minimum enerji $M = 0$ 'dadır. Yani doğal manyetizasyon yoktur.

6.1 Ortalama Alan Teorisinde Kritik Üsteller

Kritik β üssü (6.13) denkleminde elde edilebilir. $T < T_c$ için manyetizasyon, enerji denkleminin ekstremumlarında 0'a eşittir. Yani

$$\frac{\partial A}{\partial M} \Big|_{M=M_0} = 0 . \quad (6.1.1)$$

Bu da bize aşağıdaki denklemi verir

$$\frac{2J}{T}(T - T_c)M_0 + 4cM_0^3 = 0 , \quad (6.1.2)$$

buradan

$$M_0 : (T_c - T)^{1/2} , \quad (6.1.3)$$

kritik üs $\beta = \frac{1}{2}$ bulunur.

Manyetizasyon denkleminde dış manyetik alanı sıfır yaptığımız zaman δ üssü elde edilir.

$$M = \tanh \beta (JM + h)$$

$$\beta (JM + h) = \tanh^{-1} M$$

$$h = k_B T \tanh^{-1} M - JM$$

$$h \approx k_B T \left[M + \frac{M^3}{3} + \mathbf{L} \right] - JM$$

$$h = Mk_B (T - T_c) + \frac{k_B T}{3} M^3 . \quad (6.1.4)$$

Kritik sıcaklık civarında

$$h : M^3 , \quad (6.1.5)$$

kritik üs $\delta = 3$ bulunur.

Kritik üs α 'yı bulmak için dış manyetik alanı sıfır alarak ısı kapasitesi denklemini kullanmalıyız. $T > T_c$ için $M = 0$ ve

$$A = -k_B T \ln 2 , \quad (6.1.6)$$

ısı kapasitesi

$$C = -T \left(\frac{\partial^2 A}{\partial T^2} \right) = 0 . \quad (6.1.7)$$

Buradan açıkça α 'nın sıfır olduğu gözüküyor. $T < T_c$ için kritik sıcaklığa soldan yaklaştığımızda C farklı bir değere yakınsar ama $|T - T_c|$ ifadesine bağımlılık yine aynıdır. α yine sıfır bulunur.

Alınganlık:

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial h} = \frac{1}{\partial h / \partial M}. \quad (6.1.8)$$

$m = 0$ civarında h için şu ifadeyi elde etmiştik

$$h = Mk_B (T - T_c) + \frac{k_B T}{3} M^3,$$

buradan $\partial h / \partial M$ bulunur.

$$\frac{\partial h}{\partial M} = k_B (T - T_c) + k_B T M^2. \quad (6.1.9)$$

Kritik sıcaklık civarında $M \rightarrow 0$ olduğundan alınganlık ifadesi için bulunan değer

$$\chi : |T - T_c|^{-1}, \quad (6.1.10)$$

buradan kritik üs $\gamma = 1$ bulunur.

Ortalama alan teorisi için bulunan kritik üsteller sırası ile

$$\alpha = 0, \beta = \frac{1}{2}, \gamma = 1, \delta = 3.$$

Bulunan üsteller Van der Waals teorisinin akışkan sistemler için tahmin ettiği üsteller ile aynıdır. Birbirinden tamamen ayrı sistemlerin aynı üstellere sahip olması evrensellik ilkesinin bir sonucudur. Evrensellik ilkesi fiziğin birçok konusunda karşımıza çıkar.

Aynı evrensel kümede olan sistemler kritik sıcaklık civarında aynı davranışları sergiler.

6.2 Bragg – Williams Metodu

Ortalama alan teorilerinden biri de Bragg-Williams Metodur (Huang, 1987). Ising modelinde bölüşüm fonksiyonunu N_+ ve N_{++} 'a sayılarına bağlı olarak yazmıştık. Böyle yapmakla latis örgüsü bir bütün olarak ele alınmış spinlerin nasıl dağıldığı göz önünde tutulmamıştı. Latis noktalarındaki spinler komşuları ile etkileşirler. Elektromanyetik kuvvet $1/r^2$ ile azaldığından uzak komşular arasındaki etkileşme 2. belki de 3. komşu spinden sonra gittikçe azalmaktadır.

Diğer yandan paramanyetik fazdan ferromanyetik faza geçerken 2. tür faz geçişi çok kesin bir sıcaklıkta vuku bulmaktadır. Bu anda sistemdeki en uç noktadaki iki spin birbirleri ile haberleşmektedir diyebiliriz (Richard, 2005). Bu haberleşme sadece faz geçişi anında olmak zorunda değildir. Bunu uzun mesafe düzeni olarak adlandırabiliriz. Yakın komşular arasındaki düzen de kısa mesafe düzeni olarak bilinir. N_+/N uzun mesafe düzeni, $N_{++}/(\gamma N/2)$ kısa mesafe düzeni olarak adlandırılır. Latis sisteminde bütün spinler yukarı olacak şekilde düzenlenirse uzun mesafe düzeni maksimumdur. Bragg – Williams metodu için aşağıdaki tanımlamaları yapabiliriz. Uzun mesafe düzeni “ L ”, kısa mesafe düzeni “ σ ” için

$$\frac{N_+}{N} \equiv \frac{1}{2}(L+1) \quad (-1 \leq L \leq +1), \quad (6.2.1)$$

$$\frac{N_{++}}{\gamma N/2} \equiv \frac{1}{2}(\sigma+1) \quad (-1 \leq \sigma \leq +1), \quad (6.2.2)$$

eşitlikleri yazılabilir. Burada γ en yakın komşu sayısıdır. Dikkat edilirse kısa mesafe düzeni “ σ ” ve uzun mesafe düzeni “L”, N_+ ve N_{++} cinsinden yazılmıştır. N_+ ve N_{++} ‘yı bu denklemlerden çekeriz

$$N_+ \equiv \frac{N}{2}(L+1), \quad (6.2.3)$$

$$2N_{++} \equiv \frac{\gamma N}{2}(\sigma+1). \quad (6.2.4)$$

Şimdi $\sum \sigma_i \sigma_j$ ve $\sum_{i=1}^N \sigma_i$, yı σ ve L cinsinden yazalım.

$$\begin{aligned} \sum \sigma_i \sigma_j &= \gamma N (\sigma + 1) - \gamma N (L + 1) + \frac{\gamma N}{2} \\ \sum \sigma_i \sigma_j &= \frac{\gamma N}{2} (2\sigma + 2 - 2L - 2 + 1) \\ \sum \sigma_i \sigma_j &= \frac{\gamma N}{2} (2\sigma - 2L + 1) \end{aligned} \quad (6.2.5)$$

$$\sum_{i=1}^N \sigma_i = N_+ - N_- = 2N_+ - N$$

$$\sum_{i=1}^N \sigma_i = N(L+1) - N = NL + N - N = NL$$

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i = L \quad (6.2.6)$$

Burada şu sonuca vardık, L parçacık başına manyetizasyona eşittir.

Uzun ve kısa mesafe düzeni cinsinden Hamiltonyen

$$H(L, \sigma) = -\frac{J\gamma N}{2}(2\sigma - 2L + 1) - hNL, \quad (6.2.7)$$

ve spin başına enerji

$$\frac{1}{N} H(L, \sigma) = -\frac{J\gamma}{2}(2\sigma - 2L + 1) - hL \quad (6.2.8)$$

ile verilir. Bragg – Williams yaklaşım metodu şunu öngörür: Tek bağımsız parametrenin kalması için kısa mesafe düzeninin tek bağımsız uzun mesafe düzeni olarak yeniden yazılması gerekir. Bu matematiksel olarak şöyle ifade edilir:

$$\frac{N_{++}}{\gamma N/2} \approx \left(\frac{N_+}{N} \right)^2. \quad (6.2.9)$$

Bu yaklaşım kullanılarak (6.2.3) ve (6.2.4) yeniden yazılır:

$$\frac{1}{2}(\sigma + 1) \approx \left(\frac{L+1}{2} \right)^2, \quad (6.2.10)$$

$$(\sigma + 1) \approx \frac{(L+1)^2}{2}. \quad (6.2.11)$$

(6.2.11) yaklaşıklığı şu hali alır:

$$\sigma \approx \frac{1}{2}(L+1)^2 - 1. \quad (6.2.12)$$

Bulduğumuz sonucu spin başına enerji denkleminde yerine koyarız:

$$\frac{1}{N} H(L) \approx \frac{1}{2} J\gamma \left[2 \left(\frac{1}{2}(L+1)^2 - 1 \right) - 2L + 1 \right] - hL$$

$$\frac{1}{N} H(L) \approx -\frac{1}{2} J\gamma (L^2 + 2L + 1 - 2 - 2L + 1) - hL$$

$$\frac{1}{N} H(L) \approx -\frac{1}{2} J\gamma L^2 - hL \quad (6.2.13)$$

L'ye bağılı bulduğumuz Hamiltonyeni bölüşüm fonksiyonunda yerine koyarız:

$$Q(h, T) = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{\beta N \left[\left(J\gamma L^2 / 2 \right) + hL \right]}. \quad (6.2.14)$$

Toplam, spinler üzerinden olsa da eşitlik sadece L' ye bağılıdır. Bunun için aynı L' yi paylaşan $\{\sigma_i\}$ kümelerinin sayısı bulunmalıdır. $\frac{N_+}{N} \equiv \frac{1}{2}(L+1)$ Denklemine göre L, N_+ sayısı ile

belirlenebilir. Kombinasyonla N içinden kaç farklı şekilde N_+ seçilebileceği belirlenir.

Kombinasyon $C(N, N_+)$:

$$C(N, N_+) = \frac{N!}{N_+! (N - N_+)!}. \quad (6.2.15)$$

Bölüşüm fonksiyonu:

$$Q(h, T) = \sum_{L=-1}^{L=+1} g(N_+, N_{++}) e^{\beta N \left(\frac{1}{2} J\gamma L^2 + hL \right)}$$

$$Q(h, T) = \sum_{L=-1}^{L=+1} \frac{N!}{N_+! (N - N_+)!} e^{\beta N \left(\frac{1}{2} J\gamma L^2 + hL \right)}. \quad (6.2.16)$$

Burada $(N - N_+)$:

$$N - N_+ = N - \frac{N}{2}(L+1) = \frac{N}{2}(1-L). \quad (6.2.17)$$

Buradan bulunan bölüşüm fonksiyonu:

$$Q(h, T) = \sum_{-1}^{+1} \frac{N!}{\left[\frac{N}{2}(L+1) \right]! \left[\frac{N}{2}(1-L) \right]!} e^{\beta N \left(\frac{1}{2} h\gamma L^2 + hL \right)}. \quad (6.2.18)$$

$N \rightarrow \infty$ 'a giderken Q' nun logaritması büyük terimlerin logaritmasına eşit olur. Stirling yaklaşımını kullanarak bunu gösterelim.

$$(N \text{ çok büyükse}) \quad \ln N! = N - \ln N - N$$

$$\begin{aligned}
\ln Q(h, T) &= \ln \frac{N!}{\left[\frac{N}{2}(L+1)\right]! \left[\frac{N}{2}(1-L)\right]!} + \ln e^{\beta N \left(\frac{1}{2} J \gamma L^2 + h L\right)} \\
\ln Q(h, T) &= \beta N \left(\frac{1}{2} J \gamma L^2 + h L\right) + \ln N! - \ln \left[\frac{1}{2} N(1+L)\right]! - \ln \left[\frac{N}{2}(1-L)\right]! \\
\ln Q(h, T) &= \beta N \left(\frac{1}{2} J \gamma L^2 + h L\right) + N \ln N - N - \frac{N}{2}(1+L) \ln \left[\frac{N}{2}(1+L)\right] \\
&\quad + \frac{N}{2}(1+L) - \frac{N}{2}(1-L) \ln \left[\frac{N}{2}(1-L)\right] + \frac{N}{2}(1-L) \\
\frac{1}{N} \ln Q(h, T) &= \beta \left(\frac{1}{2} J \gamma L^2 + h L\right) + \ln N - 1 - \frac{1}{2}(1+L) \ln \left[\frac{N}{2}(1+L)\right] + \frac{1}{2}(1+L) \\
&\quad - \frac{1}{2}(1-L) \ln \left[\frac{N}{2}(1-L)\right] + \frac{1}{2}(1-L) \\
\frac{1}{N} \ln Q(h, T) &= \beta \left(\frac{1}{2} J \gamma L^2 + h L\right) - \frac{(1+L)}{2} \ln \left[\frac{(1+L)}{2}\right] - \frac{(1-L)}{2} \ln \left[\frac{(1-L)}{2}\right]. \tag{6.2.19}
\end{aligned}$$

Bu denklemi maksimize eden L değeri $\bar{L}$ ile gösterilir. L' nin maksimum değerini bulmak için bölüşüm fonksiyonunun uzun mesafe parametresine göre birinci türevini alıp sıfıra eşitlememiz gerekir. (6.2.19) denklemini yeniden yazalım:

$$\frac{1}{N} \ln Q(h, T) = \beta \left(\frac{1}{2} J \gamma \bar{L}^2 + h \bar{L}\right) - \frac{1+\bar{L}}{2} \ln \frac{1+\bar{L}}{2} - \frac{1-\bar{L}}{2} \ln \frac{1-\bar{L}}{2}. \tag{6.2.20}$$

Türev sıfıra eşitlenir.

$$\frac{1}{N} \frac{dQ}{dL} = 0$$

$$\frac{1}{N} \frac{dQ}{dL} = \frac{\beta \epsilon \gamma}{2} 2\bar{L} + \beta h - \left[\frac{1}{2} \ln \frac{1+\bar{L}}{2} + \frac{1/2}{(1+\bar{L})/2} \frac{1+\bar{L}}{2} \right] - \left[-\frac{1}{2} \ln \frac{1-\bar{L}}{2} + \frac{-1/2}{(1-\bar{L})/2} \frac{1-\bar{L}}{2} \right]$$

$$\frac{1}{N} \frac{dQ}{dL} = \beta \epsilon \gamma \bar{L} + \beta h - \frac{1}{2} \ln \frac{1+\bar{L}}{2} - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \ln \frac{1-\bar{L}}{2} + \frac{1}{2}$$

$$\frac{1}{N} \frac{dQ}{dL} = \beta \epsilon \gamma \bar{L} + \beta h - \frac{1}{2} \left[\ln \frac{1+\bar{L}}{2} - \ln \frac{1-\bar{L}}{2} \right]$$

$$\frac{1}{N} \frac{dQ}{dL} = \beta \epsilon \gamma \bar{L} + \beta h - \frac{1}{2} \ln \left[\frac{1+\bar{L}}{2} \frac{2}{1-\bar{L}} \right] = 0$$

Buradan elde edilen sonuç:

$$\ln \frac{1+\bar{L}}{1-\bar{L}} = 2\beta h + 2\beta \epsilon \gamma \bar{L}. \quad (6.2.21)$$

$\tanh^{-1} x = \text{arc tanh } x = \frac{1}{2} \ln \frac{1+x}{1-x}$ eşitliğinden yararlanırsak

$$\tanh^{-1} \bar{L} = \text{arc tanh } \bar{L} = \frac{h}{k_B T} + \frac{\gamma J \bar{L}}{k_B T}$$

$$\bar{L} = \tanh \bar{L} = \left(\frac{h}{k_B T} + \frac{\gamma J \bar{L}}{k_B T} \right) \quad (6.2.22)$$

bulunur. Bu denklemden $\bar{L}$ nümerik olarak bulunur. (6.2.18)'daki bölüşüm fonksiyonu sadece $\bar{L}$ 'ye bağlıdır. Böylece bölüşüm fonksiyonu bulunmuş olur. Bölüşüm fonksiyonundan diğer termodinamik büyüklüklere rahatça geçilebilir.

Spin başına Helmholtz serbest enerjisi:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} A(h, T) &= -\frac{1}{2} \gamma J \bar{L}^2 - h \bar{L} + k_B T \frac{1+\bar{L}}{2} \ln \frac{1+\bar{L}}{2} + \frac{k_B T}{2} (1-\bar{L}) \ln \frac{1-\bar{L}}{2} \\ \frac{1}{N} A(h, T) &= -\frac{1}{2} J \gamma \bar{L}^2 - h \bar{L} + \frac{k_B T}{2} \left[(1+\bar{L}) \ln \frac{1+\bar{L}}{2} + (1-\bar{L}) \ln \frac{1-\bar{L}}{2} \right] \\ \frac{1}{N} A(h, T) &= -\frac{1}{2} J \gamma \bar{L}^2 - h \bar{L} + \frac{k_B T}{2} \left[\ln \frac{(1+\bar{L})(1-\bar{L})}{4} + \bar{L} \ln \left(\frac{1+\bar{L}}{2} \frac{2}{1-\bar{L}} \right) \right] \\ \frac{1}{N} A(h, T) &= -\frac{1}{2} J \gamma \bar{L}^2 - h \bar{L} + \frac{k_B T}{2} \left[\ln \frac{1-\bar{L}^2}{4} + \bar{L} \ln \left(\frac{1+\bar{L}}{1-\bar{L}} \right) \right]. \end{aligned}$$

Yukarıda bulduğumuz (6.2.21) sonucunu kullanırsak spin başına Helmholtz serbest enerjisi:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} A(h, T) &= -\frac{1}{2} J \gamma \bar{L}^2 + \frac{k_B T}{2} \ln \frac{(1-\bar{L}^2)}{4} - h \bar{L} + \frac{k_B T}{2} \bar{L} \left(\frac{2h}{k_B T} + \frac{2J \gamma \bar{L}}{k_B T} \right) \\ \frac{1}{N} A(h, T) &= -\frac{1}{2} J \gamma \bar{L}^2 + \frac{k_B T}{2} \ln \frac{(1-\bar{L}^2)}{4} - h \bar{L} + h \bar{L} + J \gamma \bar{L}^2 \end{aligned}$$

$$\frac{1}{N} A(h, T) = -\frac{1}{2} \gamma J \bar{L}^2 + \frac{k_B T}{2} \ln \frac{1 - \bar{L}^2}{4}. \quad (6.2.23)$$

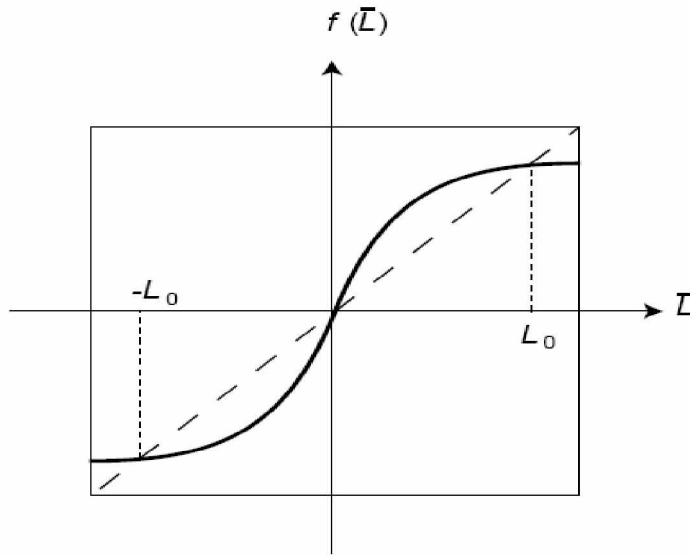
Dış manyetik alan olmaması durumunda ($h=0$):

$$\bar{L} = \tanh \left(\frac{J \gamma \bar{L}}{k_B T} \right). \quad (6.2.24)$$

Bu denklem de nümerik olarak çözülebilir. Çözüm Şekil 6.4'de gösterilmiştir. Çözüm:

$$\bar{L} = 0 \quad \left(\frac{\gamma J}{k_B T} < 1 \right), \quad (6.2.25)$$

$$\bar{L} = \begin{cases} L_0 \\ 0 \\ -L_0 \end{cases} \quad \left(\frac{\gamma J}{k_B T} > 1 \right). \quad (6.2.26)$$



Şekil 6.4 Dış manyetik alan yokken $\bar{L}$ 'nin değişimi (Huang, 1987)

$\gamma J/k_B T > 1$ durumunda $\bar{L} = 0$ sonucu kabul edilemez. Çünkü bölüşüm fonksiyonunda $\bar{L} = 0$ koyduğumuz zaman maksimum yerine minimum değer bulunur. T_c , kritik sıcaklık şöyle tanımlanır:

$$\frac{J \gamma}{k_B T_c} = 1. \quad (6.2.27)$$

Ayrıca ileride kullanacağımız için K_c kritik değerini tanımlayalım:

$$K_c = \frac{J}{k_B T_c} . \quad (6.2.28)$$

Bragg-Williams metodunun bulduğu K_c değeri (6.2.27) denkleminde çekilirse

$$K_c = \frac{J}{k_B T} = \frac{1}{\gamma} \quad (6.2.29)$$

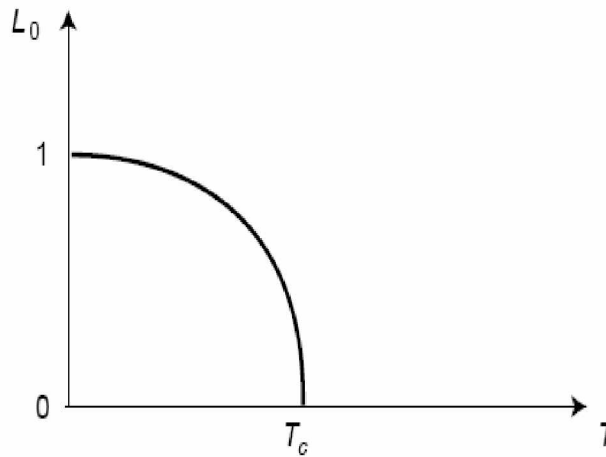
bulunur. γ değeri sistemden sisteme değişir. 2 boyutta kare latis için $\gamma = 4$ alınırsa Bragg-Williams metodunun tahmin ettiği K_c değeri 0.25 bulunur.

Kritik sıcaklığın üstünde doğal manyetizasyon yoktur. Kritik sıcaklık paramanyetik ile ferromanyetik faz arasındaki geçiş sıcaklığıdır. Aşağıdaki tanımlamayı yapabiliriz:

$$\bar{L} = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ \pm L_0 & T < T_c \end{cases} . \quad (6.2.30)$$

L_0 , (6.2.24) denkleminin sıfırdan büyük köküdür. $\bar{L}$, parçacık başına manyetizasyon olduğundan $T < T_c$ için sistemin ferromanyetik olduğu, $T > T_c$ için doğal manyetizasyonun olmadığı anlaşılır. Sistem $T > T_c$ durumunda paramanyetikdir. T_c , sistemin Curie sıcaklığıdır. $\bar{L} = \pm L_0$ durumu dış manyetik alanın olmaması durumunda yukarı ve aşağı spinler arasında fark olmamasından ileri gelir. Katlılığın serbest enerjiye bir katkısı yoktur.

Manyetizasyon 0 Kelvin’de maksimum değerindedir. Sıcaklık arttıkça titreşim enerjisinden gelen etkilerle manyetizasyonun değeri azalır. Bu durum Şekil 6.5’de gösterilmiştir.



Şekil 6.5 Bragg - Williams yaklaşım metodunda doğal manyetizasyon (Huang, 1987)

L_0 nümerik olarak hesaplanmaktadır. Ama $T = 0$ ve $T = T_c$ durumlarında bazı yaklaşımlar

kullanılır. Bu yaklaşımlar:

$$L_0 \approx \begin{cases} 1 - 2e^{-2T_c/T} & T \gg T_c \\ \sqrt{3(1-T/T_c)} & 0 < 1-T/T_c \ll 1 \end{cases} \quad (6.2.31)$$

Bu iki yaklaşımı kullanarak termodinamik fonksiyonları yazabiliriz. Parçacık başına Helmholtz serbest enerjisi:

$$\frac{1}{N} A(0, T) = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ \frac{J\gamma}{2} L_0^2 + \frac{k_B T}{2} \ln \frac{1-L_0^2}{4} & T < T_c \end{cases}, \quad (6.2.32)$$

parçacık başına manyetizasyon:

$$\frac{1}{N} M(0, T) = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ L_0 & T < T_c \end{cases}, \quad (6.2.33)$$

parçacık başına iç enerji:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} U(h, T) &= -k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{A}{k_B T} \right) \\ \frac{1}{N} U(h, T) &= k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{J\gamma}{2k_B T} \overline{L^2} + \frac{1}{2} \ln \frac{1-\overline{L^2}}{4} \right) \\ \frac{1}{N} U(h, T) &= k_B T^2 \frac{J\gamma}{2k} \overline{L^2} \left(\frac{-1}{T^2} \right) \\ \frac{1}{N} U(h, T) &= -\frac{J\gamma}{2} \overline{L^2} \\ \frac{1}{N} U(0, T) &= \begin{cases} 0 & T > T_c \\ -\frac{J\gamma}{2} L_0^2 & T < T_c \end{cases}, \end{aligned} \quad (6.2.34)$$

parçacık başına ısı kapasitesi:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} C(h, T) &= \frac{\partial U}{\partial T} \\ \frac{1}{N} C(h, T) &= -\frac{J\gamma}{2} \frac{d\overline{L^2}}{dT} \end{aligned}$$

$$\frac{1}{Nk_B} C(0, T) = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ -\frac{J\gamma}{2} \frac{dL_0^2}{dT} & T < T_c \end{cases} . \quad (6.2.35)$$

Burada L_0^2 , (6.2.31) denkleminde çekilir.

$$L_0 \approx \sqrt{3 \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)} \quad \Rightarrow \quad L_0^2 = 3 - \frac{3T}{T_c} .$$

Bulunan bu değeri (6.2.35) denkleminde yerine konur

$$\frac{1}{N} C(h, T) = -\frac{J\gamma}{2} \frac{d}{dT} \left[3 - \frac{3T}{T_c} \right]$$

$$\frac{1}{N} C(h, T) = -\frac{J\gamma}{2} \left(-\frac{3}{T_c} \right)$$

$$\frac{1}{N} C(h, T) = \frac{3}{2} \frac{J\gamma}{T_c} ,$$

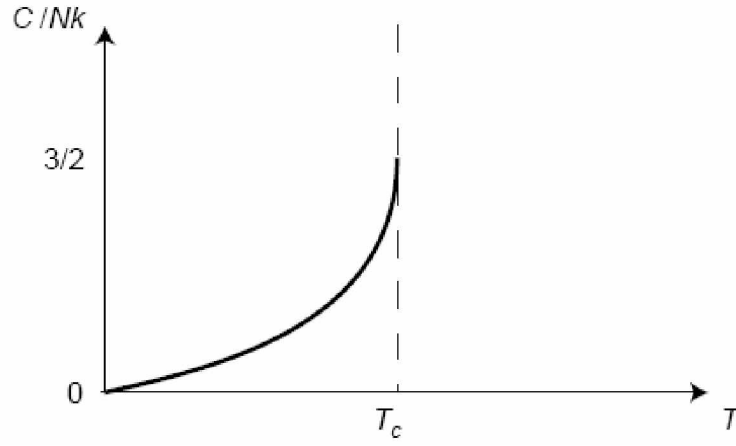
burada

$k_B T_c = J\gamma$ olduğu biliniyor. Isı kapasitesi:

$$\frac{1}{N} C(h, T) = \frac{3}{2} \frac{k_B T_c}{T_c}$$

$$\frac{1}{Nk_B} C(h, T) = \frac{3}{2} . \quad (6.2.36)$$

Şekil 6.6'da Bragg-Williams metodu ile bulunan ısı kapasitesi gözüküyor.



Şekil 6.6 Bragg - Williams yaklaşım metoduunda ısı kapasitesi (Huang, 1987)

Şekil 6.6'de görüldüğü gibi kritik sıcaklık T_c 'nin üstünde ısı kapasitesi kaybolur. Bu durum Bragg – Williams metodunda $T > T_c$ bölgesinde uzun ve kısa mesafe düzeninin kaybolmasından ileri gelir.

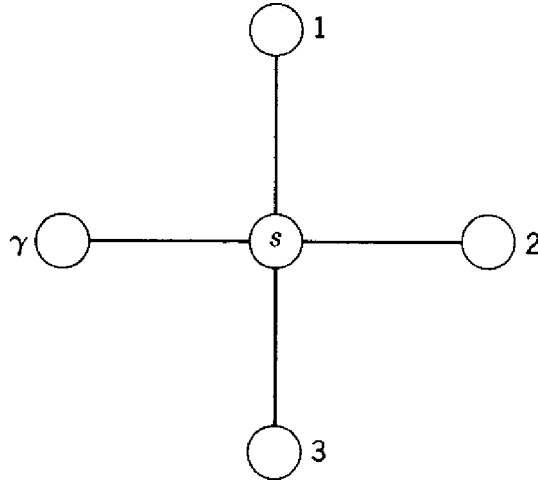
6.3 Bethe – Peierls Metodu

Bethe – Peierls metodu Bragg - Williams metoduna göre daha iyi bir ortalama alan teorisidir (Huang, 1987).

Bragg – Williams metodunda varsayım $N_{++}/((1/2)\gamma N) = (N_+/N)^2$ eşitliği ile verilmişti. Bu eşitlik spinler arasında yerel korelasyonu hesaba katmıyordu. Bethe – Peierls ise daha iyi bir yaklaşım öne sürdü (Bethe, 1935; Peierls, 1936).

Bragg – Williams metodunun işleyişini anlatalım. Bu metotta N_{++} ve N_+ arasında kesin bir ilişki bulunur. Bunun için de bütün latis yerine belli bir latis noktası ve bunun γ tane en yakın komşusuna bakılır.

Dış manyetik alanın olmaması durumunu göz önüne alalım ($h = 0$). Hesaplamalara başlamak için γ tane en yakın komşusu olan, spin durumu s ile verilen bir latis noktası ele alalım (Şekil 6.7).



Şekil 6.7 Bethe – Peirls yaklaşım metodunda komşu latisler (Huang, 1987)

$P(s,n)$, bize spin durumu s olan latis noktasının komşularından n tanesinin spin yukarı olma olasılığını verir. Eğer $s=+1$ ise $P(s,n)$, içinde n tane $(++)$ ve $(\gamma-n)$ tane $(+-)$ çiftin olduğu alt latis hakkında bilgi verir. Eğer $s=-1$ ise $P(s,n)$, içinde n tane $(-+)$ ve $(\gamma-n)$ tane $(--)$ çiftin olduğu alt latis hakkında bilgi verir. Bir latis noktasını ele alalım. Bu noktanın n tane $+$ komşusu olsun ya da n tane $-$ komşusu olsun. Bu n tane $+$ ya da $-$ değerli spini γ tane noktaya $\binom{\gamma}{n}$ kombinasyonu kadar farklı şekilde yerleştirebiliriz. Şimdi $P(+1,n)$ ve $P(-1,n)$ için bir ifade yazmaya çalışalım.

$$P(+1,n) = \frac{1}{q} \binom{\gamma}{n} e^{\beta J(2n-\gamma)} z^n \quad (6.3.1)$$

$$P(-1,n) = \frac{1}{q} \binom{\gamma}{n} e^{\beta J(\gamma-2n)} z^n \quad (6.3.2)$$

Burada q normalizasyon faktörüdür. z ise latisin geri kalanı tarafından gösterilen arka plan etkisidir. z ve fugacity arasındaki benzerlikten dolayı bu metod quasi –chemical metod olarak da anılır. q' yu belirlemek için olasılığın temel aksiyomunu kullanırız. Bütün olasılıkların toplamı

$$\sum_{n=0}^{\gamma} [P(+1,n) + P(-1,n)] = 1, \quad (6.3.3)$$

birdir.

$$\begin{aligned}
q \sum_{n=0}^{\gamma} [P(+1, n) + P(+1, n)] &= \sum_{n=0}^{\gamma} \binom{\gamma}{n} \left[e^{\beta J(2n-\gamma)} z^n + e^{\beta J(\gamma-2n)} z^n \right] \\
q &= \sum_{n=0}^{\gamma} \binom{\gamma}{n} (ze^{\beta J})^n (e^{-\beta J})^{\gamma-n} + \sum_{n=0}^{\gamma} \binom{\gamma}{n} (ze^{-\beta J})^n (e^{\beta J})^{\gamma-n} \\
q &= (ze^{\beta J} + e^{-\beta J})^{\gamma} + (ze^{-\beta J} + e^{\beta J})^{\gamma}
\end{aligned} \tag{6.3.4}$$

Böylece q bulunur. Yukarıda P(+1,n) için yaptığımız tanımlamadan sonra L ve σ için bir denklik yazabiliriz.

$$\frac{1+L}{2} \equiv \frac{N_+}{N} = \sum_{n=0}^{\gamma} P(+1, n) = \frac{1}{q} \sum_{n=0}^{\gamma} \binom{\gamma}{n} e^{\beta J(2n-\gamma)} z^n = \frac{1}{q} (ze^{\beta J} + e^{-\beta J})^{\gamma} \tag{6.3.5}$$

$$\frac{1+\sigma}{2} = \frac{N_{++}}{1/2\gamma N} = \frac{1}{\gamma} \sum_{n=0}^{\gamma} nP(+1, n) \tag{6.3.6}$$

(6.3.6) denklemini aşağıdaki gibi çözeriz:

$$\sum_{n=0}^{\gamma} P(+1, n) = \frac{1}{q} \sum_{n=0}^{\gamma} \binom{\gamma}{n} e^{\beta J(2n-\gamma)} z^n = \frac{1}{q} (ze^{\beta J} + e^{-\beta J})^{\gamma} \tag{6.3.7}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\sum_{n=0}^{\gamma} P(+1, n) \right) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{q} \sum_{n=0}^{\gamma} \binom{\gamma}{n} e^{\beta J(2n-\gamma)} z^n \right) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{q} (ze^{\beta J} + e^{-\beta J})^{\gamma} \right) \tag{6.3.8}$$

$$\frac{1}{q} \sum_{n=0}^{\gamma} \binom{\gamma}{n} e^{\beta J(2n-\gamma)} n z^{n-1} = \frac{\gamma}{q} (ze^{\beta J} + e^{-\beta J})^{\gamma-1} e^{\beta J} \tag{6.3.9}$$

$$\sum_{n=0}^{\gamma} nP(+1, n) = \frac{\gamma}{q} (ze^{\beta J} + e^{-\beta J})^{\gamma-1} e^{\beta J}. \tag{6.3.10}$$

Sonuç olarak

$$\frac{1+\sigma}{2} = \frac{N_{++}}{1/2\gamma N} = \frac{1}{\gamma} \sum_{n=0}^{\gamma} nP(+1, n) = \frac{\gamma}{q} (ze^{\beta J} + e^{-\beta J})^{\gamma-1} e^{\beta J} \tag{6.3.11}$$

bulunur. Bu denklemler bize σ ve L'yi tek değişken z cinsinden yazma olanağı verir. Latisin enerjisi σ ve L'ye bağlı olduğundan, (6.3.5) ve (6.3.11)'in bütün latis boyunca geçerli olduğunu kabul edersek enerjiyi sadece z'ye bağlı olarak elde ederiz. Böylece bölüşüm fonksiyonunu hesaplayabiliriz.

Manyetizasyonu basit bir yolla bölüşüm fonksiyonunu hesaplamadan elde edebiliriz. Şimdi

bunu nasıl yaptığımızı görelim. İlk olarak şu tanımlayacağımız eşitliklerin ne manaya geldiğini görelim.

$\sum_{n=0}^{\gamma} P(+1, n)$, merkezde yukarı spin bulma olasılığı,

$\sum_{n=0}^{\gamma} \frac{n}{\gamma} [P(+1, n) + P(-1, n)]$, komşuların arasında yukarı spin bulma olasılığıdır.

Her latıs noktası birbirinden bağımsız gibi düşünülürse her hangi iki noktada spinlerin yukarı olma olasılığı eşit olmalıdır. Bu sebeple bu denklemler birbirine eşit olmalıdır.

$$\sum_{n=0}^{\gamma} P(+1, n) = \sum_{n=0}^{\gamma} \frac{n}{\gamma} [P(+1, n) + P(-1, n)] \quad (6.3.12)$$

Bu eşitliğin sağ tarafının neye eşit olduğunu daha önce görmüştük (6.3.7). Şimdi sol tarafı (6.3.1) ve (6.3.2) denklemlerini kullanarak hesaplayalım.

$$\sum_{n=0}^{\gamma} \frac{n}{\gamma} [P(+1, n) + P(-1, n)] = \frac{1}{\gamma} \frac{z}{q} \frac{\partial}{\partial z} \left((ze^{\beta J} + e^{-\beta J})^{\gamma} + (ze^{-\beta J} + e^{\beta J})^{\gamma} \right) \quad (6.3.13)$$

$$\sum_{n=0}^{\gamma} \frac{n}{\gamma} [P(+1, n) + P(-1, n)] = \frac{1}{\gamma} \frac{z}{q} \left[\gamma (ze^{\beta J} + e^{-\beta J})^{\gamma-1} e^{\beta J} + \gamma (ze^{-\beta J} + e^{\beta J})^{\gamma-1} e^{-\beta J} \right] \quad (6.3.14)$$

Sağ taraf bulunduğundan sonra eşitlik yazılır.

$$(ze^{\beta J} + e^{-\beta J})^{\gamma} = z \left[(ze^{\beta J} + e^{-\beta J})^{\gamma-1} e^{\beta J} + (ze^{-\beta J} + e^{\beta J})^{\gamma-1} e^{-\beta J} \right] \quad (6.3.15)$$

Bu denklemden z çözülür.

$$\frac{(ze^{\beta J} + e^{-\beta J})^{\gamma}}{(ze^{\beta J} + e^{-\beta J})^{\gamma-1}} = \frac{z \left[(ze^{\beta J} + e^{-\beta J})^{\gamma-1} e^{\beta J} + (ze^{-\beta J} + e^{\beta J})^{\gamma-1} e^{-\beta J} \right]}{(ze^{\beta J} + e^{-\beta J})^{\gamma-1}} \quad (6.3.16)$$

$$ze^{\beta J} + e^{-\beta J} = ze^{\beta J} + \left(\frac{(ze^{-\beta J} + e^{\beta J})^{\gamma-1}}{(ze^{\beta J} + e^{-\beta J})^{\gamma-1}} \right) ze^{-\beta J} \quad (6.3.17)$$

$$e^{-\beta J} = \left(\frac{ze^{-\beta J} + e^{\beta J}}{ze^{\beta J} + e^{-\beta J}} \right)^{\gamma-1} ze^{-\beta J} \quad (6.3.18)$$

Sonuç olarak z bulunur.

$$z = \left(\frac{1 + ze^{2\beta J}}{z + e^{2\beta J}} \right)^{\gamma-1} \quad (6.3.19)$$

Bu denklemi nümerik olarak çözebiliriz. Daha sonra, yukarıda σ ve L için yazdığımız (6.3.5) ve (6.3.11) eşitliklerinden σ ve L 'yi çekeriz. Bu denklemlerde tek bilinmeyen z 'dir. Nümerik olarak bulduğumuz z 'yi yerine koyduğumuz zaman problem çözülmüş olur.

(6.3.5) denklemden L çekilir.

$$L = \frac{2}{q} (e^{-\beta J} + ze^{\beta J})^{\gamma} - 1 \quad (6.3.20)$$

$$L = \frac{2(e^{-\beta J} + ze^{\beta J})^{\gamma}}{(e^{-\beta J} + ze^{\beta J})^{\gamma} + (e^{\beta J} + ze^{-\beta J})^{\gamma}} - 1 \quad (6.3.21)$$

$$L = \frac{2}{\left(\frac{e^{\beta J} + ze^{-\beta J}}{e^{-\beta J} + ze^{\beta J}} \right)^{\gamma} + 1} - 1 \quad (6.3.22)$$

$$L = \frac{2}{\left(\frac{e^{2\beta J} + z}{1 + ze^{2\beta J}} \right)^{\gamma} + 1} - 1 \quad (6.3.23)$$

Bu denklemdeki parantezli ifade için (6.3.19) denklemini kullanarak bir ifade bulmaya çalışalım.

$$z = \left(\frac{1 + ze^{2\beta J}}{z + e^{2\beta J}} \right)^{\gamma-1}$$

$$z^{1/(\gamma-1)} = \left(\frac{1 + ze^{2\beta J}}{z + e^{2\beta J}} \right) \quad (6.3.24)$$

$$z^{-1/(\gamma-1)} = \left(\frac{z + e^{2\beta J}}{1 + ze^{2\beta J}} \right) \quad (6.3.25)$$

$$z^{-\gamma/(\gamma-1)} = \left(\frac{z + e^{2\beta J}}{1 + ze^{2\beta J}} \right)^{\gamma} \quad (6.3.26)$$

(6.3.26) eşitliğinde aşağıdaki ifadeyi

$$x = \frac{\gamma}{\gamma - 1} \quad (6.3.27)$$

kullanırsak bulunan ifade

$$z^{-x} = \left(\frac{z + e^{2\beta J}}{1 + ze^{2\beta J}} \right)^\gamma. \quad (6.3.28)$$

Bulduğumuz (6.3.28) eşitliğini (6.3.23) denkleminde yerine yazarsak L için aşağıdaki basit ifade elde edilmiş olur,

$$L = \frac{2}{z^{-x} + 1} - 1 = \frac{2 - z^{-x} + 1}{z^{-x} + 1} = \frac{1 - \frac{1}{z^x}}{1 + \frac{1}{z^x}} = \frac{z^x - 1}{z^x + 1}. \quad (6.3.29)$$

Aynı şekilde σ 'yı buluruz. İlk önce (6.3.11) denkleminde σ çekilir

$$\sigma = \frac{2z}{q} e^{\beta J} \left(e^{-\beta J} + ze^{\beta J} \right)^{\gamma-1} - 1,$$

burada q için bulunan ifade yerine konur.

$$\sigma = \frac{2ze^{\beta J} \left(e^{-\beta J} + ze^{\beta J} \right)^{\gamma-1}}{\left(e^{-\beta J} + ze^{\beta J} \right)^\gamma + \left(e^{\beta J} + ze^{-\beta J} \right)^\gamma} - 1$$

$$\sigma = \frac{2ze^{\beta J}}{\frac{\left(e^{-\beta J} + ze^{\beta J} \right)^\gamma + \left(e^{\beta J} + ze^{-\beta J} \right)^\gamma}{\left(e^{-\beta J} + ze^{\beta J} \right)^{\gamma-1}}} - 1$$

$$\sigma = \frac{2ze^{\beta J}}{e^{-\beta J} + ze^{\beta J} + \left(e^{\beta J} + ze^{-\beta J} \right) \left(\frac{e^{\beta J} + ze^{-\beta J}}{e^{-\beta J} + ze^{\beta J}} \right)^{\gamma-1}} - 1$$

$$\sigma = \frac{2ze^{\beta J}}{e^{-\beta J} + ze^{\beta J} + \left(e^{\beta J} + ze^{-\beta J} \right) \left(\frac{e^{2\beta J} + z}{1 + ze^{2\beta J}} \right)^{\gamma-1}} - 1$$

$$\sigma = \frac{2z}{e^{-2\beta J} + z + \left(1 + ze^{-2\beta J} \right) z^{-1}} - 1$$

$$\sigma = \frac{2z^2}{ze^{-2\beta J} + z^2 + (1 + ze^{-2\beta J})} - 1$$

Sonuç olarak, σ için bulunan ifade

$$\sigma = \frac{2z^2}{(1 + ze^{-2\beta J})(1 + z^{-x})} - 1. \quad (6.3.30)$$

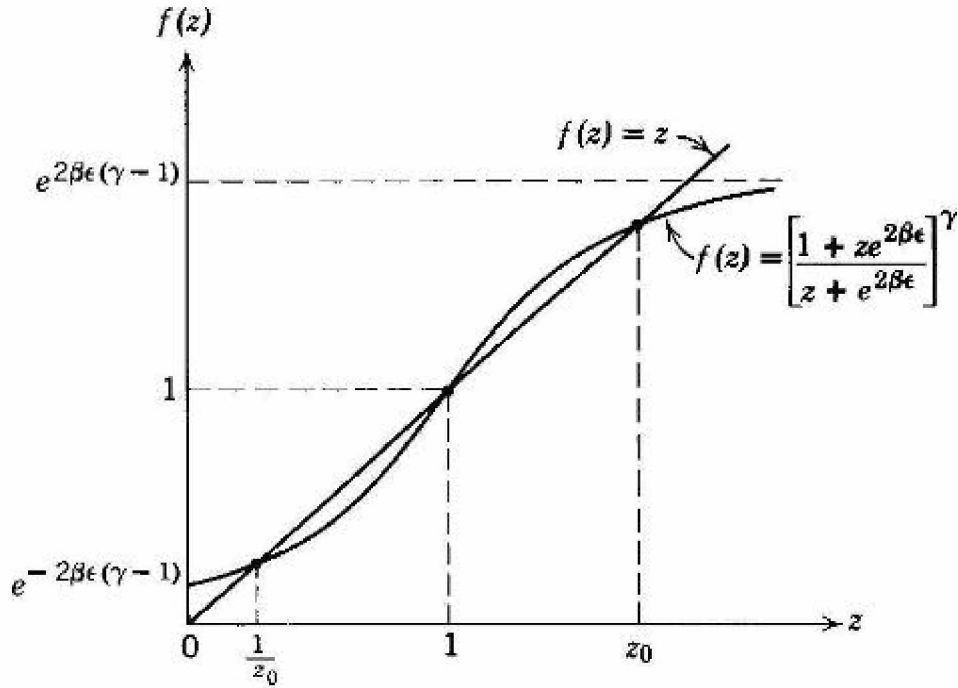
Ising latisinin dış manyetik alan olmaması durumunda iç enerjisi:

$$\frac{1}{N}U(0,T) = -\frac{1}{2}\gamma J(2\sigma - 2L + 1). \quad (6.3.31)$$

(6.3.19) bulduğumuz z denklemini nümerik olarak çözersek denklemin sonuçları hakkında şunları söyleyebiliriz:

- $z = 1$, her zaman çözümdür,
- z denklemin çözümü ise $1/z$ de denklemin çözümüdür,
- z ve $1/z$ yer değiştirmek sureti ile L ile $-L$ de yer değiştirmiş olur,
- $z = 1$, $L = 0$ 'a; $z = \infty$ ise $L = 1$ 'e karşılık gelir.

z 'nin çözümü şekil 6.8'te verilmiştir.



Şekil 6.8 Bethe – Peirls yaklaşım metodunun çözümü (Huang, 1987)

Şimdi z için bulduğumuz bu grafiği inceleyelim.

$$z = \left(\frac{1 + ze^{2\beta J}}{z + e^{2\beta J}} \right)^{\gamma-1}$$

Eğimi bulmak için sağ tarafın z 'ye göre türevini alalım.

$$c = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1 + ze^{2\beta J}}{z + e^{2\beta J}} \right)^{\gamma-1} \quad (6.3.32)$$

$$c = (\gamma - 1) \left(\frac{1 + ze^{2\beta J}}{z + e^{2\beta J}} \right)^{\gamma-2} \frac{e^{2\beta J} (z + e^{2\beta J}) - (1 + ze^{2\beta J})}{(z + e^{2\beta J})} \quad (6.3.33)$$

$z = 1$ 'de türevin değeri, yani eğim:

$$c = (\gamma - 1) \frac{(e^{4\beta J} - 1)}{(1 + e^{2\beta J})^2}. \quad (6.3.34)$$

Şekil 6.8'deki grafiğe bakıp yorum yaparsak

$c < 1$ ise tek çözüm $z = 1$ ' dir.

Eğer $c > 1$ ise grafikten görüldüğü gibi üç tane çözüm vardır. $z = 1$, $z = z_0$ ve $z = 1 / z_0$ dir. Bu üç çözümden $z = 1$ 'in Bragg-Williams metodundan bildiğimiz üzere fiziksel anlamı yoktur. Bu yüzden alınmaz. $1 / z_0$ sonucu ise yeni bir sonuç değil sadece z_0 sonucunun spinlerinin hepsinin yön değiştirmesi ile oluşan simetrik durumdur. Bu yüzden göz önünde tutulmaz.

(6.3.34) denklemini kullanarak T_c kritik sıcaklığı tanımlayalım.

$$(\gamma - 1) \frac{e^{4J/k_B T_c}}{\left(1 + e^{2J/k_B T_c}\right)^2} = 1 \quad (6.3.35)$$

$$(\gamma - 1) e^{4J/k_B T_c} = 1 + 2e^{2J/k_B T_c} + e^{4J/k_B T_c} \quad (6.3.36)$$

$$(\gamma - 2) e^{4J/k_B T_c} = 1 + 2e^{2J/k_B T_c} \quad (6.3.37)$$

$$\ln(\gamma - 2) + \frac{4J}{k_B T_c} = \ln 2 + \frac{2J}{k_B T_c} \quad (6.3.38)$$

$$k_B T_c = \frac{2J}{\ln\left(\frac{\gamma}{\gamma-2}\right)} \quad (6.3.39)$$

Bethe – Peierl metodunda K_c için bulunan değer:

$$K_c = \frac{J}{k_B T_c} = \frac{1}{2} \ln\left(\frac{\gamma}{\gamma-2}\right). \quad (6.3.40)$$

2 boyutta kare latis için $\gamma = 4$ alınırsa bulunan kritik sıcaklık değeri:

$$K_c = 0.346. \quad (6.3.41)$$

Kritik sıcaklığın üstünde, $T > T_c$ için aşağıdaki değerleri elde ederiz:

$$z = 1, \quad (6.3.42)$$

uzun mesafe düzeni

$$L = \frac{z^x - 1}{z^x + 1} = 0, \quad (6.3.43)$$

kısa mesafe düzeni

$$\sigma = \frac{1}{2(1 + e^{-2\beta J})}. \quad (6.3.44)$$

kritik sıcaklığın altında $T < T_c$ için aşağıdaki değerleri elde ederiz:

$$z > 1, \quad (6.3.45)$$

uzun mesafe düzeni

$$L = \frac{z^x - 1}{z^x + 1} > 0. \quad (6.3.46)$$

Kritik sıcaklığın altında görüldüğü gibi doğal manyetizasyon vardır.

Termodinamik fonksiyonlardan ısı kapasitesi aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$\frac{1}{Nk_B} C(0, T) = \frac{1}{Nk_B} \frac{d}{dT} U(0, T) = \frac{1}{Nk_B} \frac{d}{dT} \left(-\frac{1}{2} J\gamma (2\sigma - 2L + 1) \right) \quad (6.3.47)$$

$$\frac{1}{Nk_B} C(0, T) = -\frac{J\gamma}{Nk_B} \left(\frac{d\sigma}{dT} - \frac{dL}{dT} \right). \quad (6.3.48)$$

Burada görüldüğü gibi bulduğumuz ısı kapasitesi sonucu Bragg –William sonucundan farklı

olarak $T > T_c$ için de sonuç vermektedir.

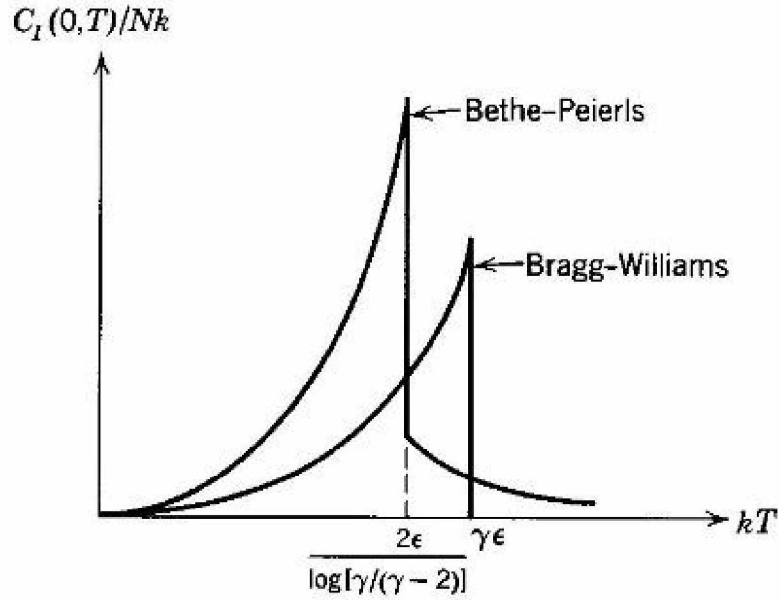
$T > T_c$ için ısı kapasitesi:

$$\frac{C}{Nk_B}(0, T) = -\frac{J\gamma}{Nk_B} \left(\frac{d}{dT} 2(1 + e^{-2\beta J})^{-1} - \frac{d}{dT} 0 \right) \quad (6.3.49)$$

$$\frac{1}{Nk_B} C(0, T) = -\frac{J\gamma}{Nk_B} \left((1 + e^{-2\beta J})^{-2} \frac{2J}{k_B T^2} e^{-2\beta J} \right) \quad (6.3.50)$$

$$\frac{1}{Nk_B} C(0, T) = \frac{2J^2\gamma}{N(k_B T)^2} \frac{e^{-2\beta J}}{(1 + e^{-2\beta J})}. \quad (6.3.51)$$

Şekil 6.9'da hem Bragg-Williams hem de Bethe-Peierl metotları için ısı kapasitesinin grafiği verilmiştir.



Şekil 6.9 Bragg – Williams ve Bethe – Peierls yaklaşım metodunda ısı kapasitesi (Huang, 1987)

7. İNDİRGENMİŞ TRANSFER MATRİS METODU

7.1 2 Boyutta İndirgenmiş Transfer Matris Metodu

Kanonik bölüşüm fonksiyonu:

$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H\{\sigma_i\}}, \quad (7.1.1)$$

iki boyutta Hamiltonyen:

$$H\{\sigma_i\} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J \sigma_{i,j} (\sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j+1}) - \sum_{i,j} h \sigma_{i,j}, \quad (7.1.2)$$

burada i,j'ler N*N kare latis örgüsünde örgü noktalarının yeridir. $\sigma_{i,j+1}$ terimini, ortalama spin manyetizasyon terimi $\langle \sigma \rangle$ ile yer değiştirelim. Bu durumda Hamiltonyen

$$\begin{aligned} H\{\sigma_i\} &= - \sum_{\langle i,j \rangle} J \sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} - \sum_{\langle i,j \rangle} J \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1} - \sum_{i,j} h \sigma_{i,j} \\ H\{\sigma_i\} &= - \sum_{\langle i,j \rangle} J \sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} - \sum_{\langle i,j \rangle} J \sigma_{i,j} \langle \sigma \rangle - \sum_{i,j} h \sigma_{i,j} \\ H\{\sigma_i\} &= - \sum_{\langle i,j \rangle} J \sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} - \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_{i,j} (J \langle \sigma \rangle + h) \end{aligned} \quad (7.1.3)$$

şeklini alır. Bu eşitliği aşağıdaki gibi yazabiliriz:

$$H\{\sigma_i\} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J \sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} - \sum_{i,j} \frac{1}{2} (\sigma_{i,j} + \sigma_{i+1,j}) (J \langle \sigma \rangle + h), \quad (7.1.4)$$

Bulduğumuz bu Hamiltonyen ifadesini bölüşüm fonksiyonunda yerine koyarız.

$$\begin{aligned} Q &= \sum_{\{\sigma_i\}} \exp[-\beta H\{\sigma_i\}] \\ Q &= \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[\sum_{\langle i,j \rangle} \beta J \sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} + \sum_{i,j} \frac{1}{2} (\sigma_{i,j} + \sigma_{i+1,j}) (J \beta \langle \sigma \rangle + h \beta) \right] \end{aligned} \quad (7.1.5)$$

Bu ifadede $K = \beta J$ ve $H = \beta h$ terimlerini yerine koyup (7.1.5) denklemini yeniden yazalım.

$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[\sum_{\langle i,j \rangle} K \sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} + \sum_{i,j} \frac{1}{2} (\sigma_{i,j} + \sigma_{i+1,j}) (K \langle \sigma \rangle + H) \right] \quad (7.1.6)$$

Şimdi bu ifadeyi çözebilmek için 2*2 boyutlu bir P matrisi tanımlayalım. P matrisinin elemanlarını aşağıdaki eşitlikten bulabiliriz:

$$\langle \sigma_{i,j} | P | \sigma_{i+1,j} \rangle = e^{K\sigma_{i,j}\sigma_{i+1,j} + 1/2(H+K\langle \sigma \rangle)(\sigma_{i,j} + \sigma_{i+1,j})}. \quad (7.1.7)$$

$$\begin{aligned} \langle +1 | P | +1 \rangle &= e^{K+(H+K\langle \sigma \rangle)} \\ \langle -1 | P | -1 \rangle &= e^{K-(H+K\langle \sigma \rangle)} \\ \langle +1 | P | -1 \rangle &= e^{-K} \\ \langle -1 | P | +1 \rangle &= e^{-K} \end{aligned} \quad (7.1.8)$$

Böylece P matrisi aşağıdaki gibi bulunur:

$$\begin{pmatrix} \langle +1 | P | +1 \rangle & \langle -1 | P | +1 \rangle \\ \langle +1 | P | -1 \rangle & \langle -1 | P | -1 \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{K(1+\langle \sigma \rangle)+H} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K(1-\langle \sigma \rangle)-H} \end{pmatrix}. \quad (7.1.9)$$

Bölüşüm fonksiyonunu aşağıdaki gibi düzenleyebiliriz:

$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} \left\{ \exp \left(K\sigma_{i,j}\sigma_{i+1,j} + \frac{1}{2}(\sigma_{i,j} + \sigma_{i+1,j})(K\langle \sigma \rangle + H) \right) \right. \\ \left. \mathbf{L} \mathbf{L} \exp \left(K\sigma_{i,j}\sigma_{i+1,j} + \frac{1}{2}(\sigma_{i,j} + \sigma_{i+1,j})(K\langle \sigma \rangle + H) \right) \right\}. \quad (7.1.10)$$

P matrisini bölüşüm fonksiyonunun içine koyarız:

$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} \langle \sigma_1 | P | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | P | \sigma_3 \rangle \langle \sigma_3 | P | \sigma_4 \rangle \mathbf{L} \mathbf{L} \langle \sigma_{N^2} | P | \sigma_{N^2+1} \rangle. \quad (7.1.11)$$

Sınır şartları $\sigma_{N^2+1} = \sigma_1$ kabul edilirse bölüşüm fonksiyonu

$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} \langle \sigma_1 | P^{N^2} | \sigma_1 \rangle = \text{Tr} P^{(N^2)} = \lambda_1^{N^2} + \lambda_2^{N^2} \quad (7.1.12)$$

halini alır. Burada λ_1 ve λ_2 , P matrisinin özdeğerleridir. Q bölüşüm fonksiyonunu bulmak için tek yapmamız gereken bu özdeğerleri bulup yerine koymaktır.

P matrisinin özdeğerlerini bulmak için aşağıdaki determinant sıfıra eşitlenir:

$$\begin{vmatrix} e^{K(1+\langle \sigma \rangle)+H} - \lambda & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K(1-\langle \sigma \rangle)-H} - \lambda \end{vmatrix} = 0. \quad (7.1.13)$$

$$[e^{K+K\langle \sigma \rangle+H} - \lambda][e^{K-K\langle \sigma \rangle-H} - \lambda] - e^{-2K} = 0$$

$$e^{K+K\langle \sigma \rangle+H+K-K\langle \sigma \rangle-H} - \lambda[e^{K+K\langle \sigma \rangle+H} + e^{K-K\langle \sigma \rangle-H}] + \lambda^2 - e^{-2K} = 0$$

$$\lambda^2 - \lambda \left[e^{K+K<\sigma>+H} + e^{K-K<\sigma>-H} \right] + e^{2K} - e^{-2K} = 0 \quad (7.1.14)$$

(7.1.13) denkleminin kökleri bize özdeğerleri verir.

$$\lambda_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

$$\lambda_{1,2} = \frac{\left[e^{K+K<\sigma>+H} + e^{K-K<\sigma>-H} \right] \pm \sqrt{\left(e^{K+K<\sigma>+H} + e^{K-K<\sigma>-H} \right)^2 - 4(e^{2K} - e^{-2K})}}{2}$$

$$\lambda_{1,2} = e^K \frac{e^{K<\sigma>+H} + e^{-K<\sigma>-H}}{2} \pm \frac{\sqrt{e^{2K+2K<\sigma>+2H} + e^{2K-2K<\sigma>-2H} + 2e^{2K} - 4e^{2K} + 4e^{-2K}}}{2}$$

$$\lambda_{1,2} = e^K \frac{e^{K<\sigma>+H} + e^{-K<\sigma>-H}}{2} \pm e^K \frac{\sqrt{e^{2K<\sigma>+2H} + e^{-2K<\sigma>-2H} + 2 - 4 + 4e^{-4K}}}{2}$$

$$\lambda_{1,2} = e^K \frac{e^{K<\sigma>+H} + e^{-K<\sigma>-H}}{2} \pm e^K \frac{\sqrt{e^{2K<\sigma>+2H} + e^{-2K<\sigma>-2H} - 2 + 4e^{-4K}}}{2}$$

$$\lambda_{1,2} = e^K \frac{e^{K<\sigma>+H} + e^{-K<\sigma>-H}}{2} \pm e^K \sqrt{\frac{e^{2K<\sigma>+2H} + e^{-2K<\sigma>-2H} - 2}{4} + e^{-4K}} \quad (7.1.15)$$

Bulunan özdeğerleri daha basit bir ifade ile yazmak için aşağıdaki özdeşlikler kullanılır.

$$\sinh x = \frac{e^x - e^{-x}}{2} \quad \cosh x = \frac{e^x + e^{-x}}{2} \quad \sinh^2 x = \frac{e^{2x} - e^{-2x} - 2}{4} \quad (7.1.16)$$

P matrisinin özdeğerleri:

$$\lambda_{1,2} = e^K \left\{ \cosh(K<\sigma>+H) \pm \sqrt{\sinh^2(K<\sigma>+H) - e^{-4K}} \right\}. \quad (7.1.17)$$

Termodinamik limitlerde çalışacağımız için $N^2 \rightarrow \infty$ limitine bakılır.

$N^2 \rightarrow \infty$ limitinde $\lambda_1^{N^2} \neq \lambda_2^{N^2}$ olduğu görülür. Bu durumda bölüşüm fonksiyonu:

$$Q = \lambda_1^{N^2} + \lambda_2^{N^2} \approx \lambda_1^{N^2}. \quad (7.1.18)$$

Özdeğerler yerine konursa bulunan bölüşüm fonksiyonu:

$$Q = e^{KN^2} \left[\cosh(K<\sigma>+H) + \sqrt{\sinh^2(K<\sigma>+H) - e^{-4K}} \right]^{N^2}. \quad (7.1.19)$$

Böylece Q bölüşüm fonksiyonu K, <σ> ve H değişkenlerine bağlı olarak bulunmuş olur.

Spin başına manyetizasyon Helmholtz serbest enerji formalizminde aşağıdaki gibi verilir.

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{N^2} \frac{\partial \ln Q}{\partial H} \quad (7.1.20)$$

$$\ln Q = KN^2 \ln e + N^2 \ln \left[\cosh(K \langle \sigma \rangle + H) + \sqrt{\sinh^2(K \langle \sigma \rangle + H) - e^{-4K}} \right]$$

$$\frac{\partial \ln Q}{\partial H} = N^2 \frac{\frac{\partial}{\partial H} \cosh(K \langle \sigma \rangle + H) + \frac{\partial}{\partial H} \sqrt{\sinh^2(K \langle \sigma \rangle + H) - e^{-4K}}}{\cosh(K \langle \sigma \rangle + H) + \sqrt{\sinh^2(K \langle \sigma \rangle + H) - e^{-4K}}}$$

$$\frac{\partial \ln Q}{\partial H} = N^2 \frac{\frac{\partial}{\partial H} (K \langle \sigma \rangle + H) \sinh(K \langle \sigma \rangle + H) + \frac{2 \sinh(K \langle \sigma \rangle + H) \cosh(K \langle \sigma \rangle + H) \left(1 + K \frac{\partial}{\partial H} \langle \sigma \rangle\right)}{2 \sqrt{\sinh^2(K \langle \sigma \rangle + H) - e^{-4K}}}}{\cosh(K \langle \sigma \rangle + H) + \sqrt{\sinh^2(K \langle \sigma \rangle + H) - e^{-4K}}}$$

$$\frac{\partial \ln Q}{\partial H} = N^2 \frac{\left(1 + K \frac{\partial}{\partial H} \langle \sigma \rangle\right) \sinh(K \langle \sigma \rangle + H) + \frac{\sinh(K \langle \sigma \rangle + H) \cosh(K \langle \sigma \rangle + H) \left(1 + K \frac{\partial}{\partial H} \langle \sigma \rangle\right)}{\sqrt{\sinh^2(K \langle \sigma \rangle + H) - e^{-4K}}}}{\cosh(K \langle \sigma \rangle + H) + \sqrt{\sinh^2(K \langle \sigma \rangle + H) - e^{-4K}}}$$

$$\frac{\partial \ln Q}{\partial H} = N^2 \frac{\left(1 + K \frac{\partial}{\partial H} \langle \sigma \rangle\right) \sinh(K \langle \sigma \rangle + H) \left[\sqrt{\sinh^2(K \langle \sigma \rangle + H) - e^{-4K}} + \cosh(K \langle \sigma \rangle + H) \right]}{\sqrt{\sinh^2(K \langle \sigma \rangle + H) - e^{-4K}} \cosh(K \langle \sigma \rangle + H) + \sqrt{\sinh^2(K \langle \sigma \rangle + H) - e^{-4K}}}$$

$$\frac{\partial \ln Q}{\partial H} = N^2 \frac{\left(1 + K \frac{\partial}{\partial H} \langle \sigma \rangle\right) \sinh(K \langle \sigma \rangle + H)}{\sqrt{\sinh^2(K \langle \sigma \rangle + H) - e^{-4K}}} \quad (7.1.21)$$

Buradan bulunan ortalama spin manyetizasyonu:

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{N^2} \frac{\partial \ln Q}{\partial H} = \frac{\left(1 + K \frac{\partial}{\partial H} \langle \sigma \rangle\right) \sinh(K \langle \sigma \rangle + H)}{\sqrt{\sinh^2(K \langle \sigma \rangle + H) - e^{-4K}}}. \quad (7.1.22)$$

Bu eşitliği $\frac{\partial \langle \sigma \rangle}{\partial H}$ teriminden dolayı analitik olarak çözmek kolay değildir. Fakat bu terim

için yaklaşık bir çözüm bulunursa manyetizasyonu hesaplamak mümkün olur. Bu amaçla 2 boyutlu Ising Hamiltonyeninde $\sigma_{i,j+1}$ ve $\sigma_{i+1,j}$ terimlerinin her ikisini birden ortalama spin manyetizasyonu ile değiştirmek uygundur. İlk başta yazdığımız Hamiltonyen

$$H\{\sigma_i\} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J \sigma_{i,j} (\sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j+1}) - \sum_{i,j} h \sigma_{i,j},$$

yer deđiřtirme iřleminden sonra ařađıdaki hali alır:

$$H\{\sigma_i\} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J \sigma_{i,j} 2 \langle \sigma \rangle - \sum_{i,j} h \sigma_{i,j}. \quad (7.1.23)$$

Bu ifadeyi de ařađıdaki gibi yazabiliriz:

$$H\{\sigma_i\} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J \sigma_{i,j} 2 \langle \sigma \rangle - \frac{1}{2} \sum_{i,j} h (\sigma_{i,j} + \sigma_{i+1,j}). \quad (7.1.24)$$

Bulduđumuz Hamiltonyeni bölüřüm fonksiyonunda yerine koyarız.

$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[\sum_{\langle i,j \rangle} \beta J 2 \sigma_{i,j} \langle \sigma \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i,j} h \beta (\sigma_{i,j} + \sigma_{i+1,j}) \right] \quad (7.1.25)$$

$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[\sum_{\langle i,j \rangle} K 2 \sigma_{i,j} \langle \sigma \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i,j} H (\sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j}) \right] \quad (7.1.26)$$

Bölüřüm fonksiyonunu çözmek için transfer matris metodu kullanılır. P matrisinin elemanları

$$\langle \sigma_{i,j} | P | \sigma_{i+1,j} \rangle = e^{2K \sigma_{i,j} \langle \sigma \rangle + 1/2 H (\sigma_{i,j} + \sigma_{i+1,j})}, \quad (7.1.27)$$

eřitliđinden bulunur. P transfer matrisinin elemanları

$$\begin{aligned} \langle +1 | P | +1 \rangle &= e^{2K \langle \sigma \rangle + H} \\ \langle -1 | P | -1 \rangle &= e^{-2K \langle \sigma \rangle - H} \\ \langle +1 | P | -1 \rangle &= e^{2K \langle \sigma \rangle} \\ \langle -1 | P | +1 \rangle &= e^{-2K \langle \sigma \rangle} \end{aligned} \quad (7.1.28)$$

matriste yerine konursa P transfer matrisi:

$$\begin{pmatrix} \langle +1 | P | +1 \rangle & \langle -1 | P | -1 \rangle \\ \langle +1 | P | -1 \rangle & \langle -1 | P | +1 \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{2K \langle \sigma \rangle + H} & e^{-2K \langle \sigma \rangle} \\ e^{2K \langle \sigma \rangle} & e^{-2K \langle \sigma \rangle - H} \end{pmatrix}. \quad (7.1.29)$$

P matrisinin özdeđerleri ařađıdaki determinanttan bulunur.

$$\begin{vmatrix} e^{2K \langle \sigma \rangle + H} - \lambda & e^{-2K \langle \sigma \rangle} \\ e^{2K \langle \sigma \rangle} & e^{-2K \langle \sigma \rangle - H} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (7.1.30)$$

$$(e^{2K \langle \sigma \rangle + H} - \lambda)(e^{-2K \langle \sigma \rangle - H} - \lambda) - e^{2K \langle \sigma \rangle - 2K \langle \sigma \rangle} = 0$$

$$e^{2K<\sigma>+H-2K<\sigma>-H} - \lambda \left(e^{2K<\sigma>+H} + e^{-2K<\sigma>-H} \right) + \lambda^2 - 1 = 0$$

$$\lambda^2 - \lambda \left(e^{2K<\sigma>+H} + e^{-2K<\sigma>-H} \right) = 0 \quad (7.1.31)$$

(7.1.31) denkleminde bulunan özdeğerler:

$$\lambda_1 = e^{2K<\sigma>+H} + e^{-2K<\sigma>-H}, \quad \lambda_2 = 0. \quad (7.1.32)$$

λ_1 özdeğerini aşağıdaki gibi yazabiliriz:

$$\lambda_1 = 2 \cosh(2K <\sigma> + H). \quad (7.1.33)$$

Daha önce yaptığımız gibi bölüşüm fonksiyonu, P matrisi cinsinden yazılır.

$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} <\sigma_1|P|\sigma_2><\sigma_2|P|\sigma_3><\sigma_3|P|\sigma_4>\dots<\sigma_{N^2}|P|\sigma_{N^2+1}> \quad (7.1.34)$$

Sınır şartları $\sigma_{N^2+1} = \sigma_1$ kabul edilirse bölüşüm fonksiyonu:

$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} <\sigma_1|P^{N^2}|\sigma_1> = \text{Tr} P^{(N^2)} = \lambda_1^{N^2} + \lambda_2^{N^2}. \quad (7.1.35)$$

λ_1 özdeğeri yerine konursa bulunan bölüşüm fonksiyonu:

$$Q = \left(2 \cosh(2K <\sigma> + H) \right)^{N^2}. \quad (7.1.36)$$

$\frac{\partial <\sigma>}{\partial H}$ ifadesini bulmak için ilk önce $<\sigma>$ ortalama spin manyetizasyonu bulalım.

$$<\sigma> = \frac{1}{N^2} \frac{\partial \ln Q}{\partial H}$$

$$\ln Q = N^2 \ln(2 \cosh(2K <\sigma> + H))$$

$$<\sigma> = \frac{1}{N^2} \frac{\partial \ln Q}{\partial H} = \frac{2 \sinh(2K <\sigma> + H) \left(1 + 2K \frac{\partial <\sigma>}{\partial H} \right)}{2 \cosh(2K <\sigma> + H)}$$

Bulunan manyetizasyon:

$$<\sigma> = \tanh(2K <\sigma> + H) \left(1 + 2K \frac{\partial <\sigma>}{\partial H} \right). \quad (7.1.37)$$

Buradan $\frac{\partial <\sigma>}{\partial H}$ ifadesi çekilirse

$$\frac{\partial \langle \sigma \rangle}{\partial H} = \left(\frac{\langle \sigma \rangle}{\tanh(2K \langle \sigma \rangle + H)} - 1 \right) \frac{1}{2K} \quad (7.1.38)$$

bulunur. Bulunan bu ifade daha önce bulunan denklem (7.1.22)'de yerine konur.

$$\langle \sigma \rangle = \frac{\left(1 + K \frac{\partial \langle \sigma \rangle}{\partial H} \right) \sinh(K \langle \sigma \rangle + H)}{\sqrt{\sinh^2(K \langle \sigma \rangle + H) + e^{-4K}}} \quad (7.1.39)$$

$$\langle \sigma \rangle = \frac{\left(1 + K \left(\frac{\langle \sigma \rangle}{\tanh(2K \langle \sigma \rangle + H)} - 1 \right) \frac{1}{2K} \right) \sinh(K \langle \sigma \rangle + H)}{\sqrt{\sinh^2(K \langle \sigma \rangle + H) + e^{-4K}}} \quad (7.1.40)$$

İki boyutta indirgenmiş transfer matris metodu ile bulunan manyetizasyon ifadesi:

$$\langle \sigma \rangle = \frac{\left(1 + \left(\frac{\langle \sigma \rangle}{2 \tanh(2K \langle \sigma \rangle + H)} - \frac{1}{2} \right) \right) \sinh(K \langle \sigma \rangle + H)}{\sqrt{\sinh^2(K \langle \sigma \rangle + H) + e^{-4K}}} \quad (7.1.41)$$

H = 0 için denklemi yeniden düzenlersek aşağıdaki ifade elde edilir:

$$\langle \sigma \rangle = \frac{\left(\frac{1}{2} + \frac{\langle \sigma \rangle}{2 \tanh(2K \langle \sigma \rangle)} \right) \sinh(K \langle \sigma \rangle)}{\sqrt{\sinh^2(K \langle \sigma \rangle) + e^{-4K}}} . \quad (7.1.42)$$

Bu denklemin analitik çözümü olmadığından denklem Matlab programı ile nümerik olarak çözüldü. Matlabta yazılan kod:

```
for i=1:1000 cevap(i)=0;end
```

```
K=0.001:0.001:1.0;
```

```
sigma=0.001:0.001:1.100;
```

```
for i=1:1000
```

```
    for j=1:1100
```

```
        v=[sinh(K(i)*sigma(j))*(1/2+sigma(j)/(2*tanh(2*K(i)*sigma(j))))]/[[(sinh(K(i)*sigma(j))*sin
        h(K(i)*sigma(j))+exp(-4*K(i)))]^(0.5)];
```

```
        if abs(v-sigma(j))<0.0003
```

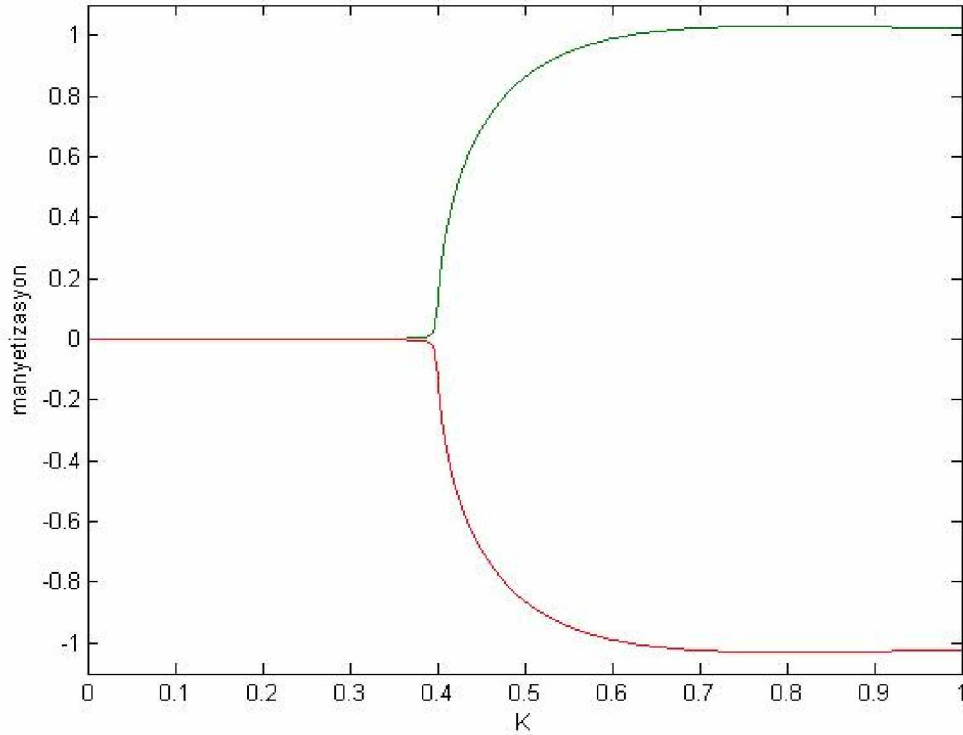
```
cevap(i)=sigma(j);
```

```
end
```

```
end
```

```
end.
```

Sonuçlar Şekil 7.1’de gösterilmiştir.



Şekil 7.1 2 boyutta transfer matris metodunda manyetizasyonun davranışı

Şekil 7.1’den açıkça görülüyor ki sistem faz geçişine sahip. 2 boyutta indirgenmiş matris metodu ile bulunan kritik sıcaklık değeri $K_c = 0.399$ ’dir. Bu değer L. Onsager’in bulduğu gerçek değerden % 9.3 farklıdır (Kaya T. ve Arık M.M., 2009).

7.1.1 2 Boyutta Transfer Matris Metodunda Kritik Üstellerin İncelenmesi

İki boyutta kritik üstelleri bulmak için kritik nokta civarında nümerik hesap daha hassas bir şekilde yapıldı. Şekil 7.1’deki grafikte kritik noktanın tam olarak gözükmemesinin sebebi Matlabta yapılan nümerik hesapta hata payının ve aralıkların büyük alınmasıdır. Bunun sebebi ise işlemci hızının yeterli gelmemesidir. Daha kesin bir sonuç almak için aralıkları küçülttüğümüz zaman bilgisayardaki işlem zamanı çok uzamaktadır. Bu sebeble kritik nokta

civarında ki ufak bir bölgede daha hassas hesap yapılmıştır. Böylece kritik noktanın tam değerine çok daha yakın bir sonuç elde edilir. 2 boyutta kritik sıcaklığın şekil 7.1’de $K = 0.4$ civarında olduğu gözüküyor. Bu yüzden $K = 0.391$ ile $K = 0.410$ arası Matlabta tekrar grafik olarak incelendi. Bulunan değerlerden kritik üstel β hesaplandı.

Matlabta yazılan kod:

```
K=0.391:0.001:0.410;
```

```
sigma=0.0001:0.0001:0.5;
```

```
for i=1:20 cevap(i)=0; end
```

```
for i=1:20
```

```
    for j=1:5000
```

```
        v=[sinh(K(i)*sigma(j))*(1/2+sigma(j)/(2*tanh(2*K(i)*sigma(j)))))/[[(sinh(K(i)*sigma(j))*sin  
h(K(i)*sigma(j))+exp(-4*K(i)))]^(0.5)];
```

```
        if abs(v-sigma(j))<0.000003
```

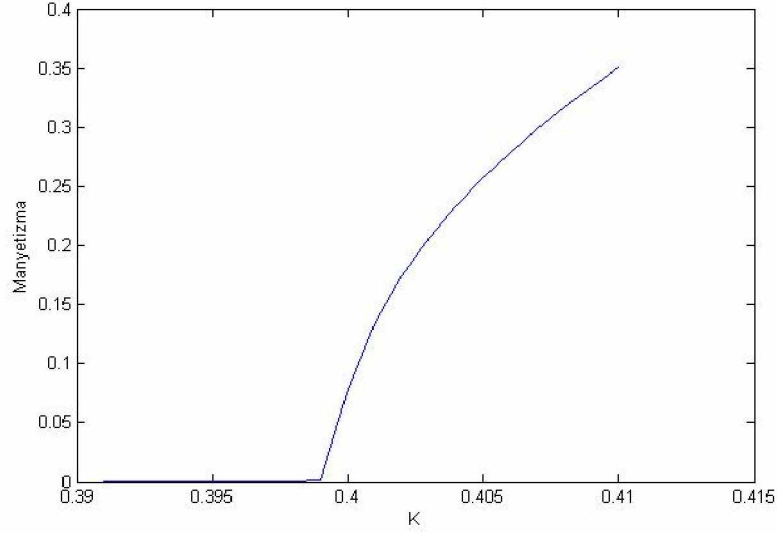
```
            cevap(i)=sigma(j);
```

```
        end
```

```
    end
```

```
end.
```

Şekil 7.2’de Matlab ile çizilen 2 boyutta kritik nokta civarında manyetizasyonun davranışı grafik olarak verilmiştir.



Şekil 7.2 2 boyutta transfer matris metodunda kritik nokta civarında manyetizasyonun davranışı

Şekil 7.2’den çok açık bir şekilde anlaşıyor ki, 2 boyutta transfer matris metodunun kritik nokta için tahmin ettiği değer $K_c=0.399$ ’dir.

Kritik nokta civarında kritik üstelleri kullanarak sistem hakkında bilgi sahibi oluruz. Şekil 7.2’den gözüktüğü gibi sadece kritik noktadan yukarıdaki değerlerde sistem hakkında bilgi sahibi olabiliriz. Kritik noktadan daha düşük değerlerde sistem manyetizasyonu daima 0’a eşit olduğundan burada kritik üsteller yoktur. Aradığımız kritik üsteli aşağıdaki formül ile buluruz:

$$\frac{M_0(K)}{M_0(0)} = B_\beta (\epsilon)^\beta, \quad (7.1.1.1)$$

burada $M_0(0)$, mutlak sıcaklıktaki manyetizasyondur, yani 1’e eşittir. $M_0(K)$, indirgenmiş sıcaklıktaki manyetizasyon, B_β bir sabit, $\epsilon = K - K_c$, ve β manyetizasyon üstelidir. β manyetizasyon üstelini bulmak için (7.1.1.1) denklemini aşağıdaki gibi tekrar yazalım:

$$\ln M_0(K) = \ln B_\beta + \beta \ln \epsilon. \quad (7.1.1.2)$$

Bu denklemde 2 tane bilinmeyen vardır. B_β ve β . Bu iki tane bilinmeyeni bulmak için 2 tane denklem yazmak gerekir. Bunun için kritik noktaya en yakın 2 noktayı kullanırız. Buradan elde edilen değerler kritik nokta civarında tam sonuç verir. Ayrıca kritik noktaya çok yakın değerlerde bulduğum fonksiyona belirli bir hata payı aralığında uyar. Çünkü bulmak

istediğimiz denklem kritik nokta civarında manyetizasyonun davranış biçimine uyar. Her iki davranış da üstel artış gösterir. İlk 2 değerden elde edilen denklemler:

$$\ln 0,0782 = \ln B_\beta + \beta \ln 0.001 \quad K_c = 0.400 , \quad (7.1.1.3)$$

$$\ln 0,1355 = \ln B_\beta + \beta \ln 0.002 \quad K_c = 0.401 . \quad (7.1.1.4)$$

Bu iki denklemden bulunan sonuçlar:

$$B_\beta = 18,7224811 \text{ ve } \beta = 0,79305234 \text{ 'dür.}$$

7.2 3 Boyutta İndirgenmiş Transfer Matris Metodu

3 boyutta Ising modelde Hamiltonyen:

$$H\{\sigma_i\} = - \sum_{\langle i,j,k \rangle} J \sigma_{i,j,k} (\sigma_{i+1,j,k} + \sigma_{i,j+1,k} + \sigma_{i,j,k+1}) - \sum_{i,j,k} h \sigma_{i,j,k} . \quad (7.2.1)$$

Burada i,j ve k, N*N*N sisteminin latis noktalarıdır. $\sigma_{i,j+1,k}$ ve $\sigma_{i,j,k+1}$ spinlerini, $\langle \sigma \rangle$ ortalama spin manyetizasyonu ile yer değiştirirsek yeni Hamiltonyen:

$$H\{\sigma_i\} = - \sum_{\langle i,j,k \rangle} J \sigma_{i,j,k} (\sigma_{i+1,j,k} + 2 \langle \sigma \rangle) - \sum_{i,j,k} h \sigma_{i,j,k} \quad (7.2.2)$$

$$H\{\sigma_i\} = - \sum_{\langle i,j,k \rangle} J \sigma_{i,j,k} \sigma_{i+1,j,k} - \sum_{i,j,k} \sigma_{i,j,k} (h + 2J \langle \sigma \rangle) . \quad (7.2.3)$$

Hamiltonyeni aşağıdaki gibi yeniden düzenleyebiliriz:

$$H\{\sigma_i\} = - \sum_{\langle i,j,k \rangle} J \sigma_{i,j,k} \sigma_{i+1,j,k} - \sum_{i,j,k} \frac{1}{2} (h + 2J \langle \sigma \rangle) (\sigma_{i,j,k} + \sigma_{i+1,j,k}) . \quad (7.2.4)$$

Bulduğumuz bu ifadeyi bölüşüm fonksiyonunda yerine koyarsak

$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[\sum_{\langle i,j,k \rangle} \beta J \sigma_{i,j,k} \sigma_{i+1,j,k} + \sum_{i,j,k} \frac{1}{2} (h\beta + 2J\beta \langle \sigma \rangle) (\sigma_{i,j,k} + \sigma_{i+1,j,k}) \right] ,$$

buradan

$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[\sum_{\langle i,j,k \rangle} K \sigma_{i,j,k} \sigma_{i+1,j,k} + \sum_{i,j,k} \frac{1}{2} (H + 2K \langle \sigma \rangle) (\sigma_{i,j,k} + \sigma_{i+1,j,k}) \right] \quad (7.2.5)$$

bölüşüm fonksiyonunu elde edilir. Bölüşüm fonksiyonunu çözmek için transfer matris metodunu kullanacağız. P transfer matrisinin elemanları:

$$\langle \sigma_{i,j,k} | P | \sigma_{i+1,j,k} \rangle = e^{K\sigma_{i,j,k}\sigma_{i+1,j,k} + 1/2(H+2K\langle \sigma \rangle)(\sigma_{i,j,k} + \sigma_{i+1,j,k})}, \quad (7.2.6)$$

eşitliği kullanılırsa

$$\begin{aligned} \langle +1 | P | +1 \rangle &= e^{K+(H+2K\langle \sigma \rangle)} \\ \langle -1 | P | -1 \rangle &= e^{K-(H+2K\langle \sigma \rangle)} \\ \langle +1 | P | -1 \rangle &= e^{-K} \\ \langle -1 | P | +1 \rangle &= e^{-K} \end{aligned}, \quad (7.2.7)$$

olarak bulunur. Böylece P matrisi aşağıdaki gibi bulunur:

$$\begin{pmatrix} \langle +1 | P | +1 \rangle & \langle -1 | P | +1 \rangle \\ \langle +1 | P | -1 \rangle & \langle -1 | P | -1 \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{K(1+2\langle \sigma \rangle)+H} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K(1-2\langle \sigma \rangle)-H} \end{pmatrix}. \quad (7.2.8)$$

P matrisinin özdeğerlerini bulalım.

$$\begin{vmatrix} e^{K(1+2\langle \sigma \rangle)+H} - \lambda & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K(1-2\langle \sigma \rangle)-H} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (7.2.9)$$

$$(e^{K(1+2\langle \sigma \rangle)+H} - \lambda)(e^{K(1-2\langle \sigma \rangle)-H} - \lambda) - e^{-2K} = 0$$

$$\lambda^2 - \lambda(e^{K(1+2\langle \sigma \rangle)+H} + e^{K(1-2\langle \sigma \rangle)-H}) + e^{K(1+2\langle \sigma \rangle)+H+K(1-2\langle \sigma \rangle)-H} - e^{-2K} = 0$$

$$\lambda^2 - \lambda(e^{K(1+2\langle \sigma \rangle)+H} + e^{K(1-2\langle \sigma \rangle)-H}) + e^{2K} - e^{-2K} = 0 \quad (7.2.10)$$

(7.2.10) denkleminin kökleri:

$$\lambda_{1,2} = \frac{e^{K(1+2\langle \sigma \rangle)+H} + e^{K(1-2\langle \sigma \rangle)-H}}{2} \mp \sqrt{\frac{(e^{K(1+2\langle \sigma \rangle)+H} + e^{K(1-2\langle \sigma \rangle)-H})^2 - 4e^{2K} + 4e^{-2K}}{4}}$$

$$\lambda_{1,2} = \frac{e^{K(1+2\langle \sigma \rangle)+H} + e^{K(1-2\langle \sigma \rangle)-H}}{2} \mp \sqrt{\frac{(e^{K(1+2\langle \sigma \rangle)+H} + e^{K(1-2\langle \sigma \rangle)-H})^2 - 4e^{2K} + 4e^{-2K}}{4}}$$

$$\lambda_{1,2} = e^K \frac{e^{2K\langle \sigma \rangle+H} + e^{-2K\langle \sigma \rangle-H}}{2} \mp \sqrt{\frac{e^{2K(1+2\langle \sigma \rangle)+2H} + e^{2K(1-2\langle \sigma \rangle)-2H} + 2e^{2K} - 4e^{2K} + 4e^{-2K}}{4}}$$

$$\lambda_{1,2} = e^K \frac{e^{2K\langle \sigma \rangle+H} + e^{-2K\langle \sigma \rangle-H}}{2} \mp e^K \sqrt{\frac{e^{4K\langle \sigma \rangle+2H} + e^{-4K\langle \sigma \rangle-2H} - 2}{4} + e^{-4K}},$$

Buradan da P matrisinin özdeğerleri aşağıdaki gibi bulunur.

$$\lambda_{1,2} = e^K \left\{ \cosh(2K \langle \sigma \rangle + H) \mp \sqrt{\sinh^2(2K \langle \sigma \rangle + H) + e^{-4K}} \right\}. \quad (7.2.11)$$

Bulduğumuz bu özdeğerleri kullanarak çok kolay bir şekilde Q bölüşüm fonksiyonunu çözebiliriz. Daha önceden bulduğumuz sonucu hatırlayalım:

$$Q = \lambda_1^{N^2} + \lambda_2^{N^2} \cong \lambda_1^{N^2}. \quad (7.2.12)$$

Bulunan bölüşüm fonksiyonu:

$$Q = e^{KN^3} \left[\cosh(2K \langle \sigma \rangle + H) + \sqrt{\sinh^2(2K \langle \sigma \rangle + H) + e^{-4K}} \right]^{N^3}. \quad (7.2.13)$$

Bölüşüm fonksiyonundan hesaplanan ortalama spin manyetizasyonu:

$$\begin{aligned} \langle \sigma \rangle &= \frac{1}{N^3} \frac{\partial \ln Q}{\partial H} \\ \frac{\partial \ln Q}{\partial H} &= \frac{\partial}{\partial H} \left\{ KN^3 + N^3 \ln \left[\cosh(2K \langle \sigma \rangle + H) + \sqrt{\sinh^2(2K \langle \sigma \rangle + H) + e^{-4K}} \right] \right\} \\ \frac{\partial \ln Q}{\partial H} &= N^3 \frac{\frac{\partial}{\partial H} \cosh(2K \langle \sigma \rangle + H) + \frac{\partial}{\partial H} \sqrt{\sinh^2(2K \langle \sigma \rangle + H) + e^{-4K}}}{\cosh(2K \langle \sigma \rangle + H) + \sqrt{\sinh^2(2K \langle \sigma \rangle + H) + e^{-4K}}} \\ \frac{\partial \ln Q}{\partial H} &= N^3 \frac{\sinh(2K \langle \sigma \rangle + H) \left(1 + 2K \frac{\partial \langle \sigma \rangle}{\partial H} \right) + \frac{2 \sinh(2K \langle \sigma \rangle + H) \cosh(2K \langle \sigma \rangle + H)}{2 \sqrt{\sinh^2(2K \langle \sigma \rangle + H) + e^{-4K}}} \left(1 + 2K \frac{\partial \langle \sigma \rangle}{\partial H} \right)}{\cosh(2K \langle \sigma \rangle + H) + \sqrt{\sinh^2(2K \langle \sigma \rangle + H) + e^{-4K}}} \end{aligned}$$

3 boyutta bulunan manyetizasyon:

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{N^3} \frac{\partial \ln Q}{\partial H} = \frac{\sinh(2K \langle \sigma \rangle + H) \left(1 + 2K \frac{\partial \langle \sigma \rangle}{\partial H} \right)}{\sqrt{\sinh^2(2K \langle \sigma \rangle + H) + e^{-4K}}}. \quad (7.2.14)$$

Bu denklemi çözebilmek için $\frac{\partial \langle \sigma \rangle}{\partial H}$ terimini çözmek gerekir. Bunun için 2 boyutlu Ising modelini çözerken kullandığımız tekniği burada tekrar kullanacağız. Bunun için $\sigma_{i,j,k}$, $\sigma_{i,j+1,k}$, $\sigma_{i,j,k+1}$ terimleri ortalama spin manyetizasyonu ile yer değiştirilir. Yaptığımız bu değişimden sonra yeni Hamiltonyen bulunur. Bulunan yeni Hamiltonyen ile oluşturulan yeni bölüşüm fonksiyonu çözülür. Bulunan bölüşüm fonksiyonundan ortalama spin manyetizasyonu

bulunur ve son olarak bulunan bu ifadeden $\frac{\partial \langle \sigma \rangle}{\partial H}$ ifadesi çekilir. Yeni Hamiltonyen

$$H\{\sigma_i\} = - \sum_{\langle i,j,k \rangle} J \sigma_{i,j,k} 3 \langle \sigma \rangle - \sum_{i,j,k} h \frac{1}{2} (\sigma_{i,j,k} + \sigma_{i+1,j,k}), \quad (7.2.15)$$

buradan elde edilen bölüşüm fonksiyonu:

$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[\sum_{\langle i,j,k \rangle} K \sigma_{i,j,k} 3 \langle \sigma \rangle + \sum_{i,j,k} H \frac{1}{2} (\sigma_{i,j,k} + \sigma_{i+1,j,k}) \right]. \quad (7.2.16)$$

Bulunan bu bölüşüm fonksiyonu transfer matris metodu ile çözülür.

$$\langle \sigma_{i,j,k} | P | \sigma_{i+1,j,k} \rangle = e^{3K \sigma_{i,j} \langle \sigma \rangle + 1/2 H (\sigma_{i,j} + \sigma_{i+1,j})}$$

P transfer matrisinin elemanları

$$\begin{aligned} \langle +1 | P | +1 \rangle &= e^{3K \langle \sigma \rangle + H} \\ \langle -1 | P | -1 \rangle &= e^{-3K \langle \sigma \rangle - H} \\ \langle +1 | P | -1 \rangle &= e^{3K \langle \sigma \rangle} \\ \langle -1 | P | +1 \rangle &= e^{-3K \langle \sigma \rangle} \end{aligned}, \quad (7.2.17)$$

matriste yerine konursa P transfer matrisi:

$$\begin{pmatrix} \langle +1 | P | +1 \rangle & \langle -1 | P | +1 \rangle \\ \langle +1 | P | -1 \rangle & \langle -1 | P | -1 \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{3K \langle \sigma \rangle + H} & e^{-3K \langle \sigma \rangle} \\ e^{3K \langle \sigma \rangle} & e^{-3K \langle \sigma \rangle - H} \end{pmatrix}. \quad (7.2.18)$$

Buradan özdeğerler bulunur.

$$\begin{vmatrix} e^{3K \langle \sigma \rangle + H} - \lambda & e^{-3K \langle \sigma \rangle} \\ e^{3K \langle \sigma \rangle} & e^{-3K \langle \sigma \rangle - H} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (7.2.19)$$

$$\begin{aligned} (e^{3K \langle \sigma \rangle + H} - \lambda)(e^{-3K \langle \sigma \rangle - H} - \lambda) - e^{3K \langle \sigma \rangle} e^{-3K \langle \sigma \rangle} &= 0 \\ \lambda^2 - \lambda(e^{3K \langle \sigma \rangle + H} + e^{-3K \langle \sigma \rangle - H}) + 1 - 1 &= 0 \end{aligned} \quad (7.2.20)$$

P matrisinin özdeğerleri:

$$\lambda_1 = 0 \quad \text{ve} \quad \lambda_2 = e^{3K \langle \sigma \rangle + H} + e^{-3K \langle \sigma \rangle - H} = 2 \cosh(3K \langle \sigma \rangle + H). \quad (7.2.21)$$

Aşağıdaki denkliği hatırlayalım.

$$Q = \lambda_1^{N^2} + \lambda_2^{N^2} \cong \lambda_1^{N^2}$$

Buradan 3 boyutta bulunan bölüşüm fonksiyonu:

$$Q = \left[2 \cosh(3K \langle \sigma \rangle + H) \right]^{N^3}. \quad (7.2.22)$$

Bulunan bölüşüm fonksiyonundan ortalama spin manyetizasyonu bulunur.

$$\begin{aligned} \langle \sigma \rangle &= \frac{1}{N^3} \frac{\partial \ln Q}{\partial H} \\ \langle \sigma \rangle &= \frac{1}{N^3} \frac{\partial \ln Q}{\partial H} = \frac{2 \sinh(3K \langle \sigma \rangle + H) \left(1 + 3K \frac{\partial \langle \sigma \rangle}{\partial H} \right)}{2 \cosh(3K \langle \sigma \rangle + H)} \end{aligned}$$

Bulunan ortalama spin manyetizasyonu:

$$\langle \sigma \rangle = \tanh(3K \langle \sigma \rangle + H) \left(1 + 3K \frac{\partial \langle \sigma \rangle}{\partial H} \right). \quad (7.2.23)$$

(7.2.23) denkleminde $\frac{\partial \langle \sigma \rangle}{\partial H}$ çekilir.

$$\frac{\partial \langle \sigma \rangle}{\partial H} = \frac{\langle \sigma \rangle}{3K \tanh(3K \langle \sigma \rangle + H)} - \frac{1}{3K} \quad (7.2.24)$$

(7.2.24) denkleminde bulduğumuz ifadeyi (7.2.14) denkleminde yerine koyarız

$$\langle \sigma \rangle = \frac{\sinh(2K \langle \sigma \rangle + H) \left(1 + 2K \left(\frac{\langle \sigma \rangle}{3K \tanh(3K \langle \sigma \rangle + H)} - \frac{1}{3K} \right) \right)}{\sqrt{\sinh^2(2K \langle \sigma \rangle + H) - e^{-4K}}},$$

buradan 3 boyutta transfer matris metodu ile bulunan ortalama spin manyetizasyonu:

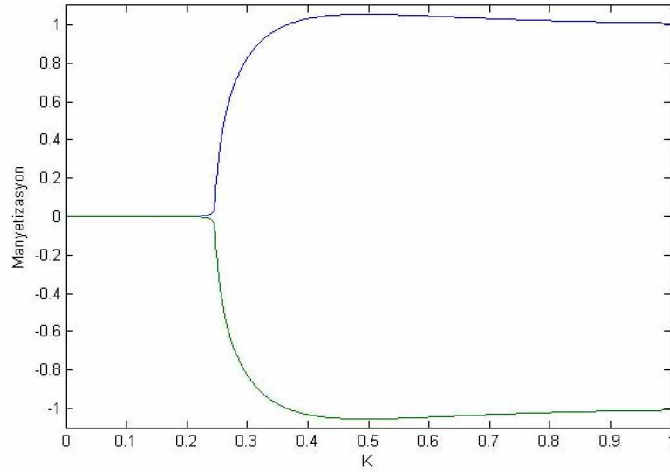
$$\langle \sigma \rangle = \frac{\sinh(2K \langle \sigma \rangle + H) \left(\frac{1}{3} + \frac{2 \langle \sigma \rangle}{3 \tanh(3 \langle \sigma \rangle + H)} \right)}{\sqrt{\sinh^2(2K \langle \sigma \rangle + H) - e^{-4K}}}. \quad (7.2.25)$$

Eğer $H = 0$ ise manyetizasyon

$$\langle \sigma \rangle = \frac{\sinh(2K \langle \sigma \rangle) \left(\frac{1}{3} + \frac{2 \langle \sigma \rangle}{3 \tanh(3 \langle \sigma \rangle)} \right)}{\sqrt{\sinh^2(2K \langle \sigma \rangle) - e^{-4K}}} \quad (7.2.26)$$

bulunur. Bu denklem Matlab programında nümerik olarak çözüldü. Çözüm Şekil 7.3'de

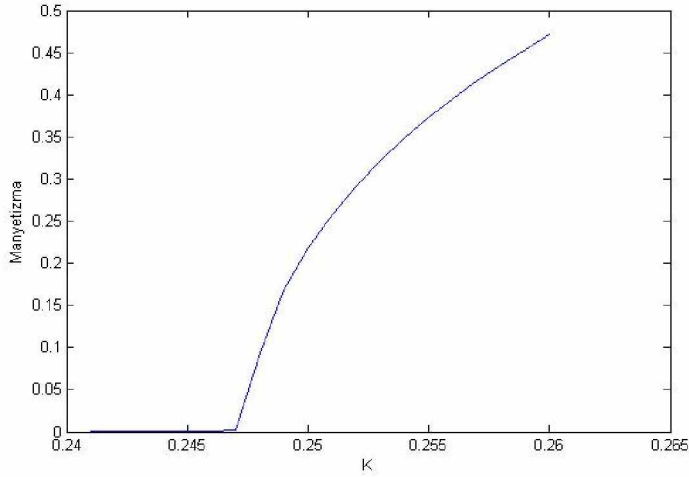
verilmiştir (Kaya T. ve Arık M.M., 2009).



Şekil 7.3 3 boyutta transfer matris metodunda manyetizasyonun davranışı

7.2.1 3 Boyutta Transfer Matris Metodunda Kritik Üstellerin İncelenmesi

Şekil 7.3'teki grafiğe baktığımız zaman kritik sıcaklığın $K = 0.250$ civarında olduğu görülür. Bu sebeble $K = 0.241$ ve $K = 0.260$ arasındaki bölgede Matlab ile daha hassas hesap yapıldı. Şekil 7.4'teki grafikte kritik sıcaklık civarında manyetizasyonun davranışı gözüküyor.



Şekil 7.4 3 boyutta transfer matris metodunda kritik nokta civarında manyetizasyonun davranışı

Buradan açıkça $K_c=0.247$ olduğu gözüküyor. Bu değer kabul edilen simülasyon değerinden sadece % 10 farklıdır.

Bu grafikteki veriler ve aşağıdaki denklem

$$\frac{M_0(K)}{M_0(0)} = B_\beta (\epsilon)^\beta , \quad (7.2.1.1)$$

kullanılarak kritik üstel β hesaplanır. β manyetizasyon üstelini bulmak için (7.2.1.1) denklemini aşağıdaki gibi tekrar yazalım:

$$\ln M_0(K) = \ln B_\beta + \beta \ln \epsilon . \quad (7.1.1.2)$$

Bu denklemdeki 2 bilinmeyeni bulmak için 2 tane denklem yazmak gerekir. Bunun için kritik noktaya en yakın 2 noktanın verileri kullanılarak aşağıdaki 2 denklem yazılır:

$$\ln 0,0938 = \ln B_\beta + \beta \ln 0.001 \quad K_c = 0.248 , \quad (7.1.1.3)$$

$$\ln 0,1683 = \ln B_\beta + \beta \ln 0.002 \quad K_c = 0.249 . \quad (7.1.1.4)$$

Bu iki denklemden bulunan sonuçlar

$B_\beta = 31,79280807$ ve $\beta = 0,84337535$ 'dır.

8. ISING MODELİNDE YENİ KORELASYONLU ETKİN ALAN TEORİSİ

T. Kaneyoshi, I. P. Fittipaldi, R. Honmura ve T. Manabe 1981 yılında yayınladıkları makalede etkin alan teorisini, H. B. Callen'in 1963 yılında yayınladığı (Callen, 1963) korelasyon ilişkisini kullanarak geliştirdiler. Geliştirdikleri metotta farklı bir yaklaşımla Bethe- Peierls sonucuna ulaştılar (T. Kaneyoshi, I. P. Fittipaldi, R. Honmura ve T. Manabe 1981).

N tane özdeş spinden oluşan ($\sigma_i = \pm 1$) bir latis ele alalım. Hamiltonyen

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (8.1)$$

ile verilir. Burada J_{ij} etkileşme parametresidir.

H. B. Callen'in 1963'te bulduğu spin korelasyonu

$$\langle \sigma_i \rangle = \langle \tanh(\beta E_i) \rangle, \quad (8.2)$$

burada

$$E_i = \sum_j J_{ij} \sigma_j, \quad (8.3)$$

ve

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr} A e^{-\beta H}}{\text{Tr} e^{-\beta H}}, \quad (8.4)$$

topluluk ortalamasıdır. T. Kaneyoshi ve R. Honmura operatör yöntemini geliştirmişlerdir (Honmura R., Kaneyoshi T. 1979; Kaneyoshi, 1978). Operatör yöntemi için aşağıdaki eşitliği kullanmışlardır:

$$f(x + \alpha) = e^{-\alpha D} f(x). \quad (8.5)$$

Burada D, diferansiyel operatörüdür. (8.2) eşitliği yeniden aşağıdaki gibi yazılır:

$$\langle \sigma_i \rangle = \left\langle \tanh \left(\sum_j \beta J_{ij} \sigma_j \right) \right\rangle, \quad (8.6)$$

burada $t_{ij} = \beta J_{ij}$ eşitliği kullanılırsa

$$\langle \sigma_i \rangle = \left\langle \tanh \left(\sum_j t_{ij} \sigma_j \right) \right\rangle. \quad (8.7)$$

$\tanh \left(\sum_j t_{ij} \sigma_j \right)$ fonksiyonuna operatör yöntemini uygularsak, $x=0$, $f(x) = \tanh x$ ve $\alpha = \sum_j t_{ij} \mu_j$ olur. (8.7) denklemi:

$$\langle \sigma_i \rangle = \left\langle e^{\sum_j t_{ij} \sigma_j D} \right\rangle \tanh x|_{x=0}. \quad (8.8)$$

Bu denklem tekrardan aşağıdaki gibi yazılır:

$$\langle \sigma_i \rangle = \left\langle e^{t_{i1} \sigma_1 D} e^{t_{i2} \sigma_2 D} \dots e^{t_{in} \sigma_n D} \right\rangle \tanh x|_{x=0},$$

burada $e^{D\sigma} = \cosh Dt + \sigma \sinh Dt$, eşitliği kullanılırsa

$$\langle \sigma_i \rangle = \left\langle \prod_j [\cosh Dt_{ij} + \sigma_j \sinh Dt_{ij}] \right\rangle \tanh x|_{x=0}. \quad (8.9)$$

Latisi kare düşünürsek ve sadece en yakın komşuları göz önüne alırsak $j=4$ olur ve $t = \beta J$ alınır

$$\langle \sigma_i \rangle = \left\langle [\cosh Dt + \sigma_1 \sinh Dt] [\cosh Dt + \sigma_2 \sinh Dt] [\cosh Dt + \sigma_3 \sinh Dt] [\cosh Dt + \sigma_4 \sinh Dt] \right\rangle \tanh x|_{x=0} \quad (8.10)$$

$$\langle \sigma_i \rangle = \left\langle [\cosh^2 Dt + \cosh Dt \sinh Dt (\sigma_1 + \sigma_2) + \sigma_1 \sigma_2 \sinh^2 Dt] [\cosh^2 Dt + \cosh Dt \sinh Dt (\sigma_3 + \sigma_4) + \sigma_3 \sigma_4 \sinh^2 Dt] \right\rangle \tanh x|_{x=0} \quad (8.11)$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i \rangle = & \left\langle \cosh^4 Dt + \cosh^3 Dt \sinh Dt (\sigma_3 + \sigma_4) + \cosh^2 Dt \sinh^2 Dt \sigma_3 \sigma_4 \right. \\ & \cosh^3 Dt \sinh Dt (\sigma_1 + \sigma_2) + \cosh^2 Dt \sinh^2 Dt (\sigma_1 + \sigma_2) (\sigma_3 + \sigma_4) \\ & \cosh Dt \sinh^3 Dt (\sigma_1 + \sigma_2) \sigma_3 \sigma_4 + \cosh^2 Dt \sinh^2 Dt \sigma_1 \sigma_2 \\ & \left. \cosh Dt \sinh^3 Dt \sigma_1 \sigma_2 (\sigma_3 + \sigma_4) + \sinh^4 Dt \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \right\rangle \tanh x|_{x=0} \end{aligned} \quad (8.12)$$

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_i \rangle = & \left\langle \cosh^4 Dt + \cosh^3 Dt \sinh Dt (\sigma_3 + \sigma_4) \right. \\
& \cosh^2 Dt \sinh^2 Dt \sigma_3 \sigma_4 + \cosh^3 Dt \sinh (\sigma_1 + \sigma_2) \\
& \cosh^2 Dt \sinh^2 Dt (\sigma_1 \sigma_3 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_1 \sigma_4 + \sigma_2 \sigma_4) \\
& \cosh Dt \sinh^3 Dt (\sigma_1 \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4) + \cosh^2 Dt \sinh^2 Dt \sigma_1 \sigma_2 \\
& \cosh Dt \sinh^3 Dt (\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_1 \sigma_2 \sigma_4) \\
& \left. \sinh^4 Dt \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \right\rangle \tanh x \Big|_{x=0}
\end{aligned} \tag{8.13}$$

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_i \rangle = & \left\langle \cosh^4 Dt + \cosh^3 Dt \sinh Dt [\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4] \right. \\
& \cosh^2 Dt \sinh^2 Dt (\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_1 \sigma_3 + \sigma_1 \sigma_4 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_2 \sigma_4 + \sigma_3 \sigma_4) \\
& \cosh Dt \sinh^3 Dt [\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_1 \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_1 \sigma_2 \sigma_4] \\
& \left. \sinh^4 Dt \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \right\rangle \tanh x \Big|_{x=0}
\end{aligned} \tag{8.14}$$

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_i \rangle = & \cosh^4 Dt \tanh x \Big|_{x=0} + \cosh^3 Dt \sinh Dt \langle \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4 \rangle \tanh x \Big|_{x=0} \\
& \cosh^2 Dt \sinh^2 Dt \langle \sigma_1 \sigma_2 + \sigma_1 \sigma_3 + \sigma_1 \sigma_4 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_2 \sigma_4 + \sigma_3 \sigma_4 \rangle \tanh x \Big|_{x=0}, \\
& \cosh Dt \sinh^3 Dt \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_1 \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_1 \sigma_2 \sigma_4 \rangle \tanh x \Big|_{x=0}, \\
& \sinh^4 Dt \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \rangle \tanh x \Big|_{x=0}
\end{aligned} \tag{8.15}$$

çok uzun bir ifade elde edilir. Bu denklemi çözmek için ilk önce aşağıdaki eşitliği göz önüne alalım:

$$\begin{aligned}
\sinh^2 Dt \tanh x \Big|_{x=0} &= \frac{1}{4} (e^{Dt} - e^{-Dt})^2 \tanh x \Big|_{x=0} \\
\sinh^2 Dt \tanh x \Big|_{x=0} &= \frac{1}{4} (e^{2Dt} + e^{-2Dt} - 2) \tanh x \Big|_{x=0} \\
\sinh^2 Dt \tanh x \Big|_{x=0} &= \frac{1}{4} (\tanh(2t) + \tanh(-2t)) - \frac{2}{4} \tanh x \Big|_{x=0} \\
\sinh^2 Dt \tanh x \Big|_{x=0} &= \frac{1}{4} (\tanh(2t) - \tanh(2t)) - \frac{2}{4} 0 = 0.
\end{aligned} \tag{8.16}$$

Bu eşitlik kullanılarak aşağıdaki eşitliklerin sıfır olduğu kolayca görülür.

$$\begin{aligned}
\cosh^4 Dt \tanh x \Big|_{x=0} &= 0 \\
\cosh^2 Dt \sinh^2 Dt \tanh x \Big|_{x=0} &= 0 \\
\sinh^4 Dt \tanh x \Big|_{x=0} &= 0
\end{aligned} \tag{8.17}$$

Böylece (8.15) denklemi son olarak şu hali alır:

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{\cosh^3 Dt \sinh Dt \langle \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4 \rangle \tanh x|_{x=0}}{\cosh Dt \sinh^3 Dt \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_1 \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_1 \sigma_2 \sigma_4 \rangle \tanh x|_{x=0}} \quad (8.18)$$

$$\langle \sigma_i \rangle = K_1 \sum_{\delta=1}^4 \langle \sigma_{i+\delta} \rangle + \frac{K_2}{6} \sum_{\delta_1} \sum_{\delta_2 \neq \delta_1} \sum_{\delta_3 \neq \delta_1, \delta_2} \langle \sigma_{i+\delta_1} \sigma_{i+\delta_2} \sigma_{i+\delta_3} \rangle. \quad (8.19)$$

Burada

$$K_1 = \cosh^3 Dt \sinh Dt \tanh x|_{x=0}, \quad (8.20)$$

$$K_2 = \cosh Dt \sinh^3 Dt \tanh x|_{x=0}. \quad (8.21)$$

K_1 ve K_2 'yi tekrar yazarsak

$$K_1 = \cosh^3 Dt \sinh Dt \tanh x|_{x=0}$$

$$K_1 = \frac{1}{16} [e^{Dt} + e^{-Dt}]^3 [e^{Dt} - e^{-Dt}] \tanh x|_{x=0}$$

$$K_1 = \frac{1}{16} [e^{2Dt} + e^{-2Dt} + 2] [e^{2Dt} - e^{-2Dt}] \tanh x|_{x=0}$$

$$K_1 = \frac{1}{16} [e^{4Dt} + 1 + 2e^{2Dt} - 1 - e^{-4Dt} + -2e^{-2Dt}] \tanh x|_{x=0}$$

$$K_1 = \frac{1}{16} [\tanh 4t - \tanh(-4t) + \tanh 2t - 2 \tanh(-2t)]$$

Buradan bulunan K_1 :

$$K_1 = \frac{1}{8} [\tanh 4t + 2 \tanh 2t], \quad (8.22)$$

K_2 :

$$K_2 = \frac{1}{8} [\tanh 4t - 2 \tanh 2t]. \quad (8.23)$$

λ , sıcaklığa bağlı statik korelasyon parametresi olmak üzere çok parçacıklı korelasyon fonksiyonu aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$\sigma_{i+\delta} = \langle \sigma_{i+\delta} \rangle + \lambda (\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle). \quad (8.24)$$

Ferromanyetik sistem için her zaman $\langle \sigma \rangle = \langle \sigma_i \rangle$ yazabiliriz. Böylece (8.24) şu hali alır.

$$\sigma_{i+\delta} = \langle \sigma \rangle + \lambda (\sigma_i - \langle \sigma \rangle) \quad (8.25)$$

(8.25)'teki korelasyon fonksiyonunu (8.19) denkleminde yerine koyalım.

$$\langle \sigma \rangle = K_1 4 \langle \sigma \rangle + 4K_2 \left\langle \left(\langle \sigma \rangle + \lambda (\sigma_i - \langle \sigma \rangle) \right) \left(\langle \sigma \rangle + \lambda (\sigma_i - \langle \sigma \rangle) \right) \left(\langle \sigma \rangle + \lambda (\sigma_i - \langle \sigma \rangle) \right) \right\rangle \quad (8.26)$$

$$\langle \sigma \rangle = 4K_1 \langle \sigma \rangle + 4K_2 \left\langle \langle \sigma \rangle^3 + 3\langle \sigma \rangle^2 \lambda (\sigma_i - \langle \sigma \rangle) + 3\langle \sigma \rangle \lambda^2 (\sigma_i - \langle \sigma \rangle)^2 + \lambda^3 (\sigma_i - \langle \sigma \rangle)^3 \right\rangle \quad (8.27)$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma \rangle &= 4K_1 \langle \sigma \rangle \\ &+ 4K_2 \left[\langle \sigma \rangle^3 + 3\langle \sigma \rangle^2 \lambda \langle (\sigma_i - \langle \sigma \rangle) \rangle + 3\langle \sigma \rangle \lambda^2 \langle (\sigma_i - \langle \sigma \rangle)^2 \rangle + \lambda^3 \langle (\sigma_i - \langle \sigma \rangle)^3 \rangle \right] \end{aligned} \quad (8.28)$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma \rangle &= 4K_1 \langle \sigma \rangle + 4K_2 \left[\langle \sigma \rangle^3 + 3\langle \sigma \rangle^2 \lambda (\langle \sigma_i \rangle - \langle \sigma \rangle) + 3\langle \sigma \rangle \lambda^2 (\langle \sigma_i^2 \rangle - \langle \sigma \rangle^2) \right] \\ &+ 4K_2 \lambda^3 (\langle \sigma_i \rangle - 3\langle \sigma \rangle + 3\langle \sigma \rangle^3 - \langle \sigma \rangle^3) \end{aligned} \quad (8.29)$$

$$\langle \sigma \rangle = 4K_1 \langle \sigma \rangle + 4K_2 \left[\langle \sigma \rangle^3 + 3\langle \sigma \rangle \lambda^2 (1 - \langle \sigma \rangle^2) + \lambda^3 (-2\langle \sigma \rangle + 2\langle \sigma \rangle^3) \right] \quad (8.30)$$

$$\langle \sigma \rangle = [4K_1 + 12K_2 \lambda^2 - 8K_2 \lambda^3] \langle \sigma \rangle + [4K_2 (1 - 3\lambda^2 + 2\lambda^3)] \langle \sigma \rangle^3 \quad (8.31)$$

$$\langle \sigma \rangle = A \langle \sigma \rangle + B \langle \sigma \rangle^3, \quad (8.32)$$

burada A ve B

$$A = 4K_1 + 12K_2 \lambda^2 - 8K_2 \lambda^3, \quad (8.33)$$

$$B = 4K_2 (1 - 3\lambda^2 + 2\lambda^3). \quad (8.34)$$

Buradan manyetizasyonu aşağıdaki gibi yazabiliriz:

$$\langle \sigma \rangle = \left[\frac{1-A}{B} \right]^{1/2}. \quad (8.35)$$

(8.35) eşitliğinden rahatça kritik sıcaklığı tanımlayabiliriz.

$\langle \sigma \rangle = 0$ ise $A = 1$ olur.

$$1 = A(T_c) = 4K_1(T_c) + 12K_2(T_c) \lambda_c^2 - 8K_2(T_c) \lambda_c^3 \quad (8.36)$$

Burada 3 tane bilinmeyen vardır. Bunlar, $K_1(T_c), K_2(T_c)$ ve λ_c 'dir. Bir başka Callen eşitliğinden faydalanarak başka bir denklem elde ederiz. Bulunacak olan bu son denklem ile ilk denklem (8.36)'dan Sylvester determinant metodu ile λ_c elenir. $K_1(T_c)$ ve $K_2(T_c)$ aynı değişkene bağlı olduğundan determinant sıfıra eşitlenir ve T_c bulunur. Bulunan T_c değerini ilk iki denklemden herhangi birine koymak sureti ile λ_c elde edilir.

Diğer Callen eşitliği:

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+\delta} \rangle = \langle \sigma_{i+\delta} \tanh(\beta E_i) \rangle \quad (8.37)$$

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+\delta} \rangle = \langle \sigma_{i+\delta} e^{D\beta E_i} \rangle \tanh x|_{x=0}. \quad (8.38)$$

Bu eşitliği komşu latişler üzerinden yazarsak (8.38) eşitliği:

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+\delta} \rangle = \langle \sigma_{i+\delta} e^{D\sum t_{ij}\sigma_j} \rangle \tanh x|_{x=0} \quad (8.39)$$

$$\langle \sigma_{i+\delta} \sigma_i \rangle = \left\langle \sigma_{i+\delta} \prod_j [\cosh Dt_{ij} + \sigma_j \sinh Dt_{ij}] \right\rangle \tanh x|_{x=0}. \quad (8.40)$$

Bu eşitliğin (8.9) denkleminde tek farkı $\mu_{i+\delta}$ çarpanıdır.

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i \sigma_{i+1} \rangle &= K_1 \langle \sigma_{i+\delta_1} \sigma_{i+\delta_1} + \sigma_{i+\delta_1} \sigma_{i+\delta_2} + \sigma_{i+\delta_1} \sigma_{i+\delta_3} + \sigma_{i+\delta_1} \sigma_{i+\delta_4} \rangle \\ &+ K_2 \langle \sigma_{i+\delta_1} \sigma_{i+\delta_1} \sigma_{i+\delta_2} \sigma_{i+\delta_3} + \sigma_{i+\delta_1} \sigma_{i+\delta_2} \sigma_{i+\delta_3} \sigma_{i+\delta_4} + \sigma_{i+\delta_1} \sigma_{i+\delta_3} \sigma_{i+\delta_4} \sigma_{i+\delta_1} + \sigma_{i+\delta_1} \sigma_{i+\delta_4} \sigma_{i+\delta_1} \sigma_{i+\delta_2} \rangle \end{aligned} \quad (8.41)$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i \sigma_{i+1} \rangle &= K_1 + K_1 \langle \sigma_{i+\delta_1} \sigma_{i+\delta_2} + \sigma_{i+\delta_1} \sigma_{i+\delta_3} + \sigma_{i+\delta_1} \sigma_{i+\delta_4} \rangle \\ &+ K_2 \langle \sigma_{i+\delta_2} \sigma_{i+\delta_3} + \sigma_{i+\delta_3} \sigma_{i+\delta_4} + \sigma_{i+\delta_4} \sigma_{i+\delta_2} \rangle + K_2 \langle \sigma_{i+\delta_1} \sigma_{i+\delta_2} \sigma_{i+\delta_3} \sigma_{i+\delta_4} \rangle \end{aligned} \quad (8.42)$$

$\sigma_{i+\delta} = \langle \sigma \rangle + \lambda (\sigma_i - \langle \sigma \rangle)$ eşitliğini tekrar kullanırsak (8.42) eşitliği:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i (\langle \sigma \rangle + \lambda (\sigma_i - \langle \sigma \rangle)) \rangle &= K_1 + 3K_1 \langle (\langle \sigma \rangle + \lambda (\sigma_i - \langle \sigma \rangle))^2 \rangle \\ &+ 3K_2 \langle (\langle \sigma \rangle + \lambda (\sigma_i - \langle \sigma \rangle))^2 \rangle + K_2 \langle (\langle \sigma \rangle + \lambda (\sigma_i - \langle \sigma \rangle))^4 \rangle \end{aligned} \quad (8.43)$$

Son olarak aşağıdaki eşitlik elde edilir:

$$\begin{aligned}
\langle \sigma \rangle^2 + \lambda (1 - \langle \sigma \rangle^2) &= K_1 + 3(K_1 + K_2) \langle \sigma \rangle^2 + K_2 \langle \sigma \rangle^4 \\
&+ 3(K_1 + K_2 + 2K_2 \langle \sigma \rangle^2) (1 - \langle \sigma \rangle^2) \lambda^2 \\
&- 8K_2 \langle \sigma \rangle^2 (1 - \langle \sigma \rangle^2) \lambda^3 \\
&+ K_2 (1 + 3 \langle \sigma \rangle^2) (1 - \langle \sigma \rangle^2) \lambda^4
\end{aligned} \tag{8.44}$$

Kritik sıcaklığı bulmak için $\langle \sigma \rangle = 0$ alınırsa

$$\lambda_c = K_1(T_c) + 3(K_1(T_c) + K_2(T_c))\lambda^2 + K_2(T_c)\lambda^4 \tag{8.45}$$

elde edilir.

(8.36) ve (8.45) denklemlerini tekrar aşağıdaki gibi yazalım:

$$8K_2(T_c)\lambda_c^3 - 12K_2(T_c)\lambda_c^2 - 4K_1(T_c) + 1 = 0, \tag{8.46}$$

$$K_2(T_c)\lambda_c^4 + 3(K_1(T_c) + K_2(T_c))\lambda_c^2 - \lambda_c + K_1(T_c) = 0, \tag{8.47}$$

burada

$$K_1(T_c) = \frac{1}{8} \left[\tanh\left(\frac{4J}{k_B T_c}\right) - 2 \tanh\left(\frac{2J}{k_B T_c}\right) \right], \tag{8.48}$$

$$K_2(T_c) = \frac{1}{8} \left[\tanh\left(\frac{4J}{k_B T_c}\right) - 2 \tanh\left(\frac{2J}{k_B T_c}\right) \right]. \tag{8.49}$$

Eğer (8.46) ve (8.47) denklemlerini Sylvester determinantına yerleştirir ve determinanı sıfıra eşitlersek λ_c elimine edilmiş olur ve buradan T_c için bir değer bulunur. Sylvester determinanı:

$$\begin{vmatrix}
K_2 & 0 & 3(K_1 + K_2) & -1 & K_1 & 0 & 0 \\
0 & K_2 & 0 & 3(K_1 + K_2) & -1 & K_1 & 0 \\
0 & 0 & K_2 & 0 & 3(K_1 + K_2) & -1 & K_1 \\
8K_2 & -12K_2 & 0 & -4K_1 + 1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 8K_2 & -12K_2 & 0 & -4K_1 + 1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 8K_2 & -12K_2 & 0 & -4K_1 + 1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 8K_2 & -12K_2 & 0 & -4K_1 + 1
\end{vmatrix} = 0. \tag{8.50}$$

Buradan T_c için bulunan ifade:

$$\frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln 2}. \tag{8.51}$$

Bu ifadeyi (8.46) denkleminde yerine koyarsak bulunan ifade:

$$8\frac{1}{8}\left[\tanh\left(\frac{4J}{k_B T_c}\right)-2\tanh\left(\frac{2J}{k_B T_c}\right)\right]\lambda_c^3-12\frac{1}{8}\left[\tanh\left(\frac{4J}{k_B T_c}\right)-2\tanh\left(\frac{2J}{k_B T_c}\right)\right]\lambda_c^2-4\frac{1}{8}\left[\tanh\left(\frac{4J}{k_B T_c}\right)-2\tanh\left(\frac{2J}{k_B T_c}\right)\right]+1=0 \quad (8.52)$$

Buradan daha basit olarak

$$\left[\tanh 2 \ln 2-2 \tanh \ln 2\right] \lambda_c^3-\frac{3}{2}\left[\tanh 2 \ln 2-2 \tanh \ln 2\right] \lambda_c^2-\frac{1}{2}\left[\tanh 2 \ln 2-2 \tanh \ln 2\right]+1=0 \quad (8.53)$$

elde edilir. Bu denklemin köklerini bulup reel olan kökü alırsak

$$\lambda_c=\frac{1}{3} \quad (8.54)$$

bulunur.

T. Kaneyoshi ve diğerleri değişik γ değerleri için hesap yaptıklarında genel bir sonuca ulaşmıştır (T. Kaneyoshi vd., 1981). Buldukları genel sonuç λ_c ve T_c için

$$\frac{k_B T_c}{J}=\frac{2}{\ln \left[\frac{\gamma}{\gamma-2}\right]}, \quad (8.55)$$

$$\lambda_c=\frac{1}{\gamma-1} . \quad (8.56)$$

Burada γ en yakın komşu sayısıdır.

Dikkat edilecek olursa (8.55) ifadesi Bethe-Peierls metodu ile aynı sonucu vermektedir.

9. KORELASYONLU İNDİRGENMİŞ TRANSFER MATRİS METODU

Kanonik bölüşüm fonksiyonu:

$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H\{\sigma_i\}}, \quad (9.1)$$

iki boyutta Hamiltonyen:

$$H\{\sigma_i\} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J \sigma_{i,j} (\sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j+1}) - \sum_{i,j} h \sigma_{i,j}. \quad (9.2)$$

İndirgenmiş matris metodunda $\sigma_{i,j}$, ortalama spin manyetizasyonu ile yer değiştirilir. Korelasyonlu indirgenmiş transfer matris metodunda ise $\sigma_{i,j}$, T. Kaneyoshi ve diğerlerinin sunduğu çok parçacıklı korelasyon fonksiyonu ile yer değiştirilir (T. Kaneyoshi vd., 1981). Çok parçacıklı korelasyon fonksiyonu aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$\sigma_{i+\delta} = \langle \sigma_{i+\delta} \rangle + \lambda (\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle). \quad (9.3)$$

Bu ifadeyi bizim modelimiz için 2 boyutta düzenlersek

$$\sigma_{i,j+1} = \langle \sigma \rangle + \lambda (\sigma_{i,j} - \langle \sigma \rangle) \quad (9.4)$$

ifadesi bulunur. Dikkat edilirse $\lambda = 0$ için indirgenmiş transfer matris metodunda yapılan dönüşüm

$$\sigma_{i,j+1} = \langle \sigma \rangle, \quad (9.5)$$

elde edilir. Çok parçacıklı korelasyon fonksiyonu Hamiltonyende yerine konur.

$$H\{\sigma_i\} = \sum_{\langle i,j \rangle} -J \sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} + \sum_{\langle i,j \rangle} -J \sigma_{i,j} [\langle \sigma \rangle + \lambda (\sigma_{i,j} - \langle \sigma \rangle)] - \sum_{i,j} h \sigma_{i,j} \quad (9.6)$$

$$H\{\sigma_i\} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J \sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} - \sum_{\langle i,j \rangle} J \langle \sigma \rangle \sigma_{i,j} - \sum_{i,j} J \lambda \sigma_{i,j} \sigma_{i,j} + \sum_{\langle i,j \rangle} J \lambda \langle \sigma \rangle \sigma_{i,j} - \sum_{i,j} h \sigma_{i,j} \quad (9.7)$$

$$H\{\sigma_i\} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J \sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} - \sum_{\langle i,j \rangle} [J \langle \sigma \rangle (1 - \lambda) + h] \sigma_{i,j} - \sum_{i,j} J \lambda \quad (9.8)$$

Bu eşitliği aşağıdaki gibi düzenleyebiliriz:

$$H\{\sigma_i\} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J \sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} - \sum_{\langle i,j \rangle} [J \langle \sigma \rangle (1 - \lambda) + h] \frac{1}{2} (\sigma_{i,j} + \sigma_{i+1,j}) - \sum_{i,j} J \lambda. \quad (9.9)$$

Bu bulduğumuz Hamiltonyen ifadesini bölüşüm fonksiyonunda yerine koyarız.

$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp[-\beta H\{\sigma_i\}] \quad (9.10)$$

$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[\sum_{\langle i,j \rangle} K \sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} + \sum_{\langle i,j \rangle} [K \langle \sigma \rangle (1-\lambda) + H] \frac{1}{2} (\sigma_{i,j} + \sigma_{i+1,j}) + \sum_{i,j} K \lambda \right] \quad (9.11)$$

Bu ifadede $K=\beta J$ ve $H=\beta h$ terimleri yerine konursa bölüşüm fonksiyonu:

$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[\sum_{\langle i,j \rangle} K \sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} + \sum_{\langle i,j \rangle} [K \langle \sigma \rangle (1-\lambda) + H] \frac{1}{2} (\sigma_{i,j} + \sigma_{i+1,j}) + \sum_{i,j} K \lambda \right]. \quad (9.12)$$

Bölüşüm fonksiyonunu çözmek için transfer matris yönteminden yararlanılır. P transfer matrisinin elemanlarını aşağıdaki eşitlikten bulabiliriz:

$$\langle \sigma_{i,j} | P | \sigma_{i+1,j} \rangle = e^{K \sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} + \frac{1}{2} [K \langle \sigma \rangle (1-\lambda) + H] (\sigma_{i,j} + \sigma_{i+1,j}) + K \lambda}. \quad (9.13)$$

$$\begin{aligned} \langle +1 | P | +1 \rangle &= e^{K + (K \langle \sigma \rangle (1-\lambda) + H) + K \lambda} \\ \langle -1 | P | -1 \rangle &= e^{K - (K \langle \sigma \rangle (1-\lambda) + H) + K \lambda} \\ \langle +1 | P | -1 \rangle &= e^{-K + K \lambda} \\ \langle -1 | P | +1 \rangle &= e^{-K + K \lambda} \end{aligned} \quad (9.14)$$

Böylece P matrisi:

$$\begin{pmatrix} e^{K + K \langle \sigma \rangle (1-\lambda) + H + K \lambda} & e^{-K + K \lambda} \\ e^{-K + K \lambda} & e^{K - K \langle \sigma \rangle (1-\lambda) - H + K \lambda} \end{pmatrix}. \quad (9.15)$$

Sınır şartları $\sigma_{N+1}^2 = \sigma_1$ kabul edilirse bölüşüm fonksiyonu

$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} \langle \sigma_1 | P^{N^2} | \sigma_1 \rangle = \text{Tr} P^{(N^2)} = m_1^{N^2} + m_2^{N^2}, \quad (9.16)$$

burada m_1 ve m_2 , P matrisinin özdeğerleridir. Q bölüşüm fonksiyonunu bulmak için tek yapmamız gereken bu özdeğerleri bulup yerine koymaktır.

P matrisinin özdeğerlerini bulmak için aşağıdaki determinant sıfıra eşitlenir.

$$\begin{vmatrix} e^{K + K \langle \sigma \rangle (1-\lambda) + H + K \lambda} - m & e^{-K + K \lambda} \\ e^{-K + K \lambda} & e^{K - K \langle \sigma \rangle (1-\lambda) - H + K \lambda} - m \end{vmatrix} = 0 \quad (9.17)$$

$$\left[e^{K+K<\sigma>(1-\lambda)+H+K\lambda} - m \right] \left[e^{K-K<\sigma>(1-\lambda)-H+K\lambda} - m \right] - e^{-2K(1-\lambda)} = 0 \quad (9.18)$$

$$m^2 - m \left[e^{K(1+\lambda)+K<\sigma>(1-\lambda)+H} + e^{K(1+\lambda)-K<\sigma>(1-\lambda)-H} \right] + e^{2K(1+\lambda)} - e^{-2K(1-\lambda)} = 0 \quad (9.19)$$

$$m_{1,2} = \frac{e^{K(1+\lambda)+K<\sigma>(1-\lambda)+H} + e^{K(1+\lambda)-K<\sigma>(1-\lambda)-H}}{2} \quad (9.20)$$

$$m \frac{\sqrt{\left(e^{K(1+\lambda)+K<\sigma>(1-\lambda)+H} + e^{K(1+\lambda)-K<\sigma>(1-\lambda)-H} \right)^2 - 4 \left(e^{2K(1+\lambda)} - e^{-2K(1-\lambda)} \right)}}{2}$$

$$m_{1,2} = \frac{e^{K(1+\lambda)+K<\sigma>(1-\lambda)+H} + e^{K(1+\lambda)-K<\sigma>(1-\lambda)-H}}{2} \quad (9.21)$$

$$m \frac{\sqrt{e^{2K(1+\lambda)+2K<\sigma>(1-\lambda)+2H} + e^{2K(1+\lambda)-2K<\sigma>(1-\lambda)-2H} + 2e^{2K} - 4e^{2K(1+\lambda)} + 4e^{-2K(1-\lambda)}}}{2}$$

P matrisinin özdeğerleri aşağıdaki gibi bulunur:

$$m_{1,2} = e^{K(1+\lambda)} \left[\cosh \left[K <\sigma> (1-\lambda) + H \right] m \sqrt{\sinh^2 \left[K <\sigma> (1-\lambda) + H \right] + e^{-4K}} \right]. \quad (9.22)$$

Termodinamik limitlerde çalışacağımız için $N^2 \rightarrow \infty$ limitinde $m_1^{N^2} ? m_2^{N^2}$ olduğu görülür.

Bu durumda:

$$Q = m_1^{N^2} + m_2^{N^2} \approx m_1^{N^2} \quad (9.23)$$

$$Q = e^{K(1+\lambda)N^2} \left[\cosh \left[K <\sigma> (1-\lambda) + H \right] m \sqrt{\sinh^2 \left[K <\sigma> (1-\lambda) + H \right] + e^{-4K}} \right]^{N^2}. \quad (9.24)$$

Böylece Q bölüşüm fonksiyonu K, $<\sigma>$ ve H değişkenlerine bağlı olarak bulunmuş olur.

Helmholtz serbest enerji formalizminde ortalama spin manyetizasyonu:

$$<\sigma> = \frac{1}{N^2} \frac{\partial \ln Q}{\partial H} \quad (9.25)$$

$$\langle \sigma \rangle = \frac{\frac{\partial}{\partial H} \cosh \left(K <\sigma> (1-\lambda) + H \right) + \frac{\partial}{\partial H} \sqrt{\sinh^2 K <\sigma> (1-\lambda) + H - e^{-4K}}}{\cosh \left(K <\sigma> (1-\lambda) + H \right) + \sqrt{\sinh^2 K <\sigma> (1-\lambda) + H - e^{-4K}}}. \quad (9.26)$$

Son olarak manyetizasyon aşağıdaki gibi bulunur:

$$\langle \sigma \rangle = \frac{\left(1 + K(1-\lambda) \frac{\partial \langle \sigma \rangle}{\partial H} \right) \sinh(K(1-\lambda) \langle \sigma \rangle + H)}{\sqrt{\sinh^2(K(1-\lambda) \langle \sigma \rangle + H) - e^{-4K}}}. \quad (9.27)$$

Burada manyetizasyonun türevini bulmak için aşağıdaki yolu izleyelim.

İlk başta yazdığımız Hamiltonyen:

$$H\{\sigma_i\} = \sum_{\langle i,j \rangle} -J\sigma_{i,j}(\sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j+1}) - \sum_{i,j} h\sigma_{i,j}. \quad (9.28)$$

Bu sefer $\sigma_{i,j+1}$ ve $\sigma_{i+1,j}$ 'yi korelasyon fonksiyonu

$$\sigma_{i+\delta} = \langle \sigma_{i+\delta} \rangle + \lambda(\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle), \quad (9.29)$$

ile yer değiştirelim. Korelasyon fonksiyonunu 2 boyut için düzenlersek

$$\sigma_{i+1,j} = \langle \sigma \rangle + \lambda(\sigma_{i,j} - \langle \sigma \rangle), \quad (9.30)$$

$$\sigma_{i,j+1} = \langle \sigma \rangle + \lambda(\sigma_{i,j} - \langle \sigma \rangle), \quad (9.31)$$

ifadeleri bulunur. Dikkat edilirse $\lambda = 0$ için indirgenmiş transfer matris metodunda yapılan

$$\sigma_{i+1,j} = \langle \sigma \rangle \text{ ve } \sigma_{i,j+1} = \langle \sigma \rangle, \quad (9.32)$$

dönüşüm elde edilir. Bu durumda Hamiltonyen:

$$H\{\sigma_i\} = - \sum_{\langle i,j \rangle} 2J \left[\langle \sigma \rangle + \lambda(\sigma_{i,j} - \langle \sigma \rangle) \right] \sigma_{i,j} - \sum_{i,j} h\sigma_{i,j} \quad (9.33)$$

$$H\{\sigma_i\} = - \sum_{\langle i,j \rangle} 2J \langle \sigma \rangle \sigma_{i,j} - \sum_{i,j} 2J\lambda \sigma_{i,j} \sigma_{i,j} + \sum_{i,j} 2J\lambda \langle \sigma \rangle \sigma_{i,j} - \sum_{i,j} h\sigma_{i,j} \quad (9.34)$$

$$H\{\sigma_i\} = - \sum_{\langle i,j \rangle} 2J \langle \sigma \rangle (1-\lambda) \sigma_{i,j} - \sum_{i,j} h\sigma_{i,j} - \sum_{i,j} 2J\lambda. \quad (9.35)$$

Bu eşitliği aşağıdaki gibi yeniden düzenleriz:

$$H\{\sigma_i\} = - \sum_{\langle i,j \rangle} 2J \langle \sigma \rangle (1-\lambda) \sigma_{i,j} - \sum_{i,j} \frac{1}{2} h (\sigma_{i,j} + \sigma_{i+1,j}) - \sum_{i,j} 2J\lambda. \quad (9.36)$$

Bu bulduğumuz Hamiltonyeni bölüşüm fonksiyonunda yerine koyarız.

$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[\sum_{\langle i,j \rangle} 2K \langle \sigma \rangle (1-\lambda) \sigma_{i,j} + \sum_{\langle i,j \rangle} H \frac{1}{2} (\sigma_{i,j} + \sigma_{i+1,j}) + \sum_{i,j} 2K\lambda \right] \quad (9.37)$$

P matrisinin elemanları aşağıdaki eşitlikten

$$\langle \sigma_{i,j} | P | \sigma_{i+1,j} \rangle = e^{2K\langle \sigma \rangle (1-\lambda)\sigma_{i,j} + \frac{1}{2}H(\sigma_{i,j} + \sigma_{i+1,j}) + 2K\lambda} \quad (9.38)$$

bulunur. Bulunan elemanlar

$$\begin{aligned} \langle +1 | P | +1 \rangle &= e^{2K\langle \sigma \rangle (1-\lambda) + H + 2K\lambda} \\ \langle -1 | P | -1 \rangle &= e^{-2K\langle \sigma \rangle (1-\lambda) - H + 2K\lambda} \\ \langle +1 | P | -1 \rangle &= e^{2K\langle \sigma \rangle (1-\lambda) + 2K\lambda} \\ \langle -1 | P | +1 \rangle &= e^{-2K\langle \sigma \rangle (1-\lambda) + 2K\lambda} \end{aligned} \quad (9.39)$$

yerine konursa P matrisi:

$$\begin{pmatrix} e^{2K\langle \sigma \rangle (1-\lambda) + H + 2K\lambda} & e^{2K\langle \sigma \rangle (1-\lambda) + 2K\lambda} \\ e^{-2K\langle \sigma \rangle (1-\lambda) + 2K\lambda} & e^{-2K\langle \sigma \rangle (1-\lambda) - H + 2K\lambda} \end{pmatrix}. \quad (9.40)$$

Sınır şartları, $\sigma_{N+1}^2 = \sigma_1$ kabul edilirse bölüşüm fonksiyonu

$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} \langle \sigma_1 | P^{N^2} | \sigma_1 \rangle = \text{Tr} P^{(N^2)} = m_1^{N^2} + m_2^{N^2}, \quad (9.41)$$

burada m_1 ve m_2 , P matrisinin özdeğerleridir. Q bölüşüm fonksiyonunu bulmak için tek yapmamız gereken bu özdeğerleri bulup yerine koymaktır.

P matrisinin özdeğerlerini bulmak için aşağıdaki determinant sıfıra eşitlenir.

$$\begin{vmatrix} e^{2K\langle \sigma \rangle (1-\lambda) + H + 2K\lambda} - m & e^{2K\langle \sigma \rangle (1-\lambda) + 2K\lambda} \\ e^{-2K\langle \sigma \rangle (1-\lambda) + 2K\lambda} & e^{-2K\langle \sigma \rangle (1-\lambda) - H + 2K\lambda} - m \end{vmatrix} = 0 \quad (9.42)$$

$$\left[e^{2K\langle \sigma \rangle (1-\lambda) + H + 2K\lambda} - m \right] \left[e^{-2K\langle \sigma \rangle (1-\lambda) - H + 2K\lambda} - m \right] - e^{4K\lambda} = 0 \quad (9.43)$$

$$m^2 - m \left[e^{2K(1-\lambda) + H + 2K\lambda} + e^{-2K(1-\lambda) - H + 2K\lambda} \right] + e^{2K\lambda} - e^{4K\lambda} = 0 \quad (9.44)$$

Burada $m_1 = 0$ ve

$$m_2 = \frac{1}{2} \left[e^{2K(1-\lambda) + H + 2K\lambda} + e^{-2K(1-\lambda) - H + 2K\lambda} \right] \quad (9.45)$$

$$m_2 = e^{2K\lambda} 2 \cosh(2K(1-\lambda) + H). \quad (9.46)$$

(9.41) denklemi aşağıdaki eşitliğe dönüşür:

$$Q = m_2^{N^2}. \quad (9.47)$$

Bulunan özdeğer yerine konursa bölüşüm fonksiyonu

$$Q = e^{2K\lambda N^2} \left[2 \cosh \left[2K \langle \sigma \rangle (1-\lambda) + H \right] \right]^{N^2} \quad (9.48)$$

bulunur. Helmholtz serbest enerji formalizminde ortalama spin manyetizasyonunu:

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{N^2} \frac{\partial \ln Q}{\partial H} \quad (9.49)$$

$$\langle \sigma \rangle = \frac{2 \sinh \left(2K \langle \sigma \rangle (1-\lambda) + H \right) \left(1 + 2K(1-\lambda) \frac{\partial \langle \sigma \rangle}{\partial H} \right)}{2 \cosh \left(K \langle \sigma \rangle (1-\lambda) + H \right)}. \quad (9.50)$$

Bu ifadeyi basitleştirirsek, manyetizasyon:

$$\langle \sigma \rangle = \tanh \left(2K \langle \sigma \rangle (1-\lambda) + H \right) \left(1 + 2K(1-\lambda) \frac{\partial \langle \sigma \rangle}{\partial H} \right). \quad (9.51)$$

Buradan $\partial \langle \sigma \rangle / \partial H$ çekilir.

$$\frac{\partial \langle \sigma \rangle}{\partial H} = \left[\frac{\langle \sigma \rangle}{\tanh \left(2K \langle \sigma \rangle (1-\lambda) + H \right)} - 1 \right] \frac{1}{2K(1-\lambda)} \quad (9.52)$$

(9.52) ifadesi (9.27) ifadesinde yerine konur.

$$\langle \sigma \rangle = \frac{\left(1 + K(1-\lambda) \frac{\partial \langle \sigma \rangle}{\partial H} \right) \sinh \left(K(1-\lambda) \langle \sigma \rangle + H \right)}{\sqrt{\sinh^2 \left(K(1-\lambda) \langle \sigma \rangle + H \right) - e^{-4K}}} \quad (9.53)$$

$$\langle \sigma \rangle = \frac{\sinh \left(K(1-\lambda) \langle \sigma \rangle + H \right)}{\sqrt{\sinh^2 \left(K(1-\lambda) \langle \sigma \rangle + H \right) - e^{-4K}}} \quad (9.54)$$

$$\left(1 + K(1-\lambda) \frac{1}{2K(1-\lambda)} \left[\frac{\langle \sigma \rangle}{\tanh \left(2K \langle \sigma \rangle (1-\lambda) + H \right)} - 1 \right] \right) \langle \sigma \rangle = \frac{\left(1 + \frac{1}{2} \left[\frac{\langle \sigma \rangle}{\tanh \left(2K \langle \sigma \rangle (1-\lambda) + H \right)} - 1 \right] \right) \sinh \left(K(1-\lambda) \langle \sigma \rangle + H \right)}{\sqrt{\sinh^2 \left(K(1-\lambda) \langle \sigma \rangle + H \right) - e^{-4K}}} \quad (9.55)$$

Sonuç olarak, bulunan manyetizasyon:

$$\langle \sigma \rangle = \frac{\sinh(K(1-\lambda) \langle \sigma \rangle + H) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2 \tanh(2K \langle \sigma \rangle (1-\lambda) + H)} \right)}{\sqrt{\sinh^2(K(1-\lambda) \langle \sigma \rangle + H) - e^{-4K}}}. \quad (9.56)$$

Dikkat edilirse λ yerine 0 koyduğumuz zaman 2 boyutta indirgenmiş transfer matris metodunda elde ettiğimiz sonucun aynısı elde edilir. T. Kaneyoshi ve diğerleri kritik nokta için λ değerini $1/(\gamma-1)$ bulmuştur (T. Kaneyoshi vd., 1981). Burada γ , en yakın komşu sayısıdır. 2 boyutta kare latis için $\gamma = 4$ 'dür. (9.56) denklemini H yerine 0 ve λ yerine 1/3 alınıp Matlab'ta nümerik olarak çözüldü. Matlabta yazılan kod:

```
for i=1:1000 cevap(i)=0;end

K=0.001:0.001:1;

sigma=0.001:0.001:1.1;

lamda=1/3;

for i=1:1000 cevap(i)=0;end

for i=1:1000
    for j=1:1100

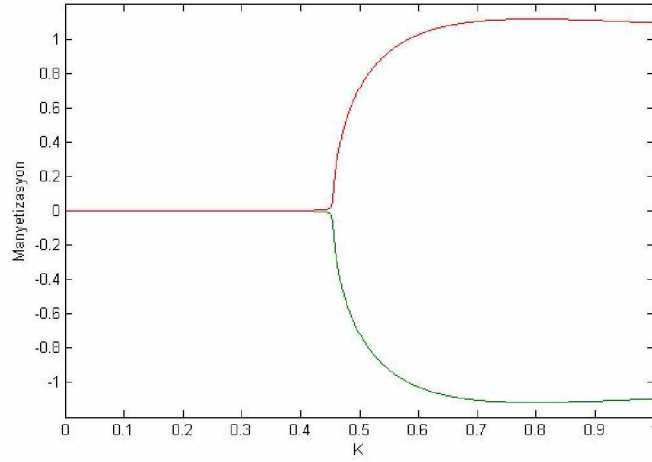
v=[sinh(K(i)*sigma(j)*(1-lamda))*(1/2+sigma(j)/(2*tanh(2*K(i)*sigma(j)*(1-
lamda)))))/[(sinh(K(i)*sigma(j)*(1-lamda))*sinh(K(i)*sigma(j)*(1-lamda))+exp(-
4*K(i)))]^(0.5)];

if abs(v-sigma(j))<0.0001

cevap(i)=sigma(j);

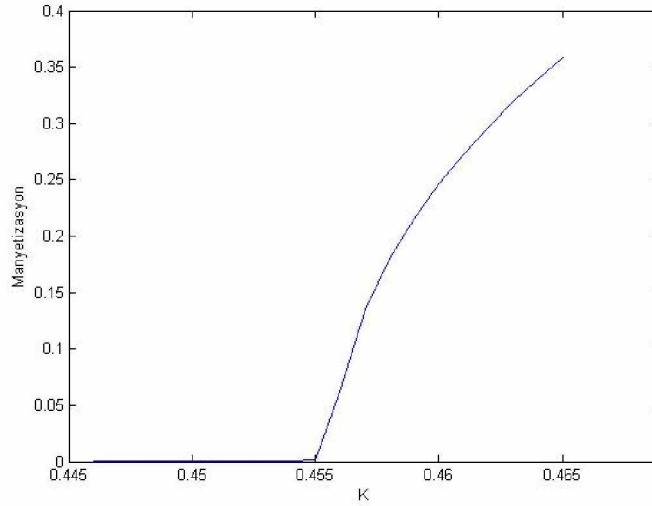
end
end
end.
```

Elde edilen grafik Şekil 9.1’de verilmiştir.



Şekil 9.1 2 boyutta korelasyonlu transfer matris metodunda manyetizasyonun davranışı

Grafikte dikkat edilirse kritik nokta civarında bir eğrilik vardır. Bu eğriliğin sebebi Matlab’ta yazılan koddan ileri gelmektedir. Kritik nokta civarında manyetizasyonun davranışını gözlemlemek için daha hassas nümerik hesap yapılır. Matlabta daha hassas bir nümerik hesap yapılarak kritik nokta civarında elde edilen grafik Şekil 9.2’de verilmiştir.



Şekil 9.2 2 boyutta korelasyonlu transfer matris metodunda kritik nokta civarında manyetizasyonun davranışı

Şekil 9.2’den K_c değerinin 0.455 olduğu gözükmemektedir. Bu sonuç gerçek sonuçtan sadece %3.4 farklıdır.

10. SONUÇLAR

Bu çalışmada Ising modelin bilinen kesin sonuçları ve bazı ortalama alan teorileri anlatılmıştır.

Tezin son kısmında 2 boyutta kare latis ve 3 boyutta basit kübik yapı Ising model için yeni bir metod geliştirilmiştir. Ortalama alan yaklaşımı kullanılarak geliştirilen metodun adı indirgenmiş transfer matris metodudur. Bu metotta kritik sıcaklık için bir denklem bulunmuştur. K , $\langle\sigma\rangle$ ve H değişkenlerine bağlı bu denklemin analitik çözümü olmadığından Matlab programında nümerik olarak çözülmüştür. Dış alan 0 alınarak 2 boyutta $K_c=0.399$ ve 3 boyutta $K_c=0.247$ değerleri bulunmuştur. Daha sonra kritik üsteller bulunmuştur.

Son bölümde geliştirilen indirgenmiş transfer matris metodu çok parçacıklı korelasyon fonksiyonu kullanılarak daha da geliştirilmiştir. Bu metod korelasyonlu indirgenmiş transfer matris metodu olarak adlandırılmıştır. Bu metod ile sadece 2 boyutlu kare latis çözülmüştür. Dış manyetik alan 0 alınarak 2 boyutta $K_c=0.455$ değeri bulunmuştur. Bu değer indirgenmiş transfer matris metoduna göre daha iyi bir sonuç vermektedir.

Bulunan K_c kritik değerlerini daha önceki teorilerle karşılaştırmak için diğer teorilerin bulunduğu kritik K_c değerleri tablo halinde Çizelge 10.1' de verilmiştir.

Tanımladığımız kritik K_c değeri:

$$K_c = \frac{J}{k_B T_c}$$

Çizelge 10.1 K_c 'lerin karşılaştırılması

Teori(2D)	K_c	<i>hata oranı</i> $\frac{K_c - 0.44}{0.44} * 100$
L. Onsager	$K_c = 0.44$	% 0
Bragg – Williams	$K_c = \frac{1}{\gamma}, \gamma = 4,$ $K_c = 0.25$	% 43
Bethe – Peierls	$K_c = \frac{J}{k_B T_c} = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\gamma}{\gamma - 2} \right)$ $\gamma = 4, K_c = 0.346$	% 21.36
Yeni Korelasyonlu Etkin Alan Teorisi	$K_c = \frac{J}{k_B T_c} = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\gamma}{\gamma - 2} \right)$ $\gamma = 4, K_c = 0.346$	% 21.36
Renormalizasyon Grup Teorisi	$K_c = 0.507$	% 15.22
İndirgenmiş Transfer Matris Teorisi	$K_c = 0.399$	% 9.3
Korelasyonlu İndirgenmiş Transfer Matris Teorisi	$K_c = 0.455$	% 3.4

Hata oranlarından görüldüğü gibi, indirgenmiş transfer matris metodu ile korelasyonlu indirgenmiş transfer matris metodu, 2 boyutta dış manyetik alan yokken çok iyi sonuç vermektedir.

3 boyut için indirgenmiş transfer matris metodunun K_c için tahmin ettiği değer 0.247'dir. bu sonuç A. L. Talapov ve H. W. J. Blöte'nin kabul edilmiş simülasyon sonucundan sadece % 10 sapmıştır. İndirgenmiş transfer matris metodu 1 boyutta kesin sonuç verir.

İndirgenmiş transfer matris metodunun 2 boyutta Ising modelin çözümü için tahmin ettiği

kritik üstel değeri $\beta = 0,79305234$ ve katsayı $B_\beta = 18,7224811$ 'dir.

İndirgenmiş transfer matris metodunun 3 boyutta Ising modelin çözümü için tahmin ettiği kritik üstel değeri $\beta = 0,84337535$ ve katsayı $B_\beta = 31,79280807$ 'dir.

Ortalama alan teorisinde bulunan kritik üsteller sırası ile

$$\alpha = 0, \beta = \frac{1}{2}, \gamma = 1, \delta = 3,$$

ve Onsager çözümünden hesaplanan kritik üsteller ise

$$\alpha = 0, \beta = \frac{1}{8}, \gamma = \frac{7}{4} \text{ 'dür.}$$

Korelasyonlu indirgenmiş transfer matris metodunda λ sabit alındı. Daha sonraki çalışmalarında λ 'yı manyetizasyona ve manyetik alana bağlı olarak alıp daha iyi bir sonuç bulmayı umuyorum.

İndirgenmiş transfer matris metodunda manyetizasyon bazı değerlerde 1 değerini aşıyor. Manyetizasyonun en büyük değeri 1'dir. Bu problemi de ileride incelemeyi düşünüyorum

KAYNAKLAR

- Akgöbek G., Yıldırım E. Ö., Güleç A., Akın E., Atav Ü., (2003), "Faz Geçişlerinin Nitel Tanımı: Kritik Üsteller", S. Ü. Fen. Ed. Fak. Fen Dergisi, 22:25
- Aschroft N.W., Mermin N.D., (1976), "Solid State Physics", Harcourt College Publishers, New York
- Bethe H. A., (1935), "Statistical Theory of Superlattices", Proc. R. Soc. London Ser. A, 150:552-575
- Callen H.B., (1963), "A Note on Green Functions and the Ising Model", Phys. Lett. 4, 161-161
- Domb C., (1960), Adv. Phys. **9**, "On the Theory of Cooperatif Phenomena", 149-361
- Durlu T.N., (1996), "Katıhal Fiziğine Giriş", Bilim, Ankara
- Fisher M.E., (1974), "The renormalization group in the theory of critical behavior", Rev. Mod. Phys. 46, 597-616
- Honmura R., (1984), "Correlated-Effective-Field Treatment of the Anisotropic Ising Ferromagnet: Thermodynamical Properties", Phys. Rev. B 30, 348-358
- Honmura R., Kaneyoshi T. (1979), "Contribution to the New Type of Effective-Field Theory of the Ising Model", J. Phys. C 12, 3979-3992
- Hook J.R, Hall H.E, (1999), "Katıhal Fiziği", Literatür Yayıncılık, İstanbul
- Huang K, (1987), "Statistical Mechanics", John Wiley and Sons, New York
- Ising E., (1925), "Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus", Zeits f. Physik, **31**, 253-258
- Kadanoff L.P. vd., (1967), "Static Phenomena Near Critical Points: Theory and Experiment", Rev. Mod. Phys. 39, 395-431
- Kaneyoshi T., Fittipaldi I.P, Honmura R., Manabe T., (1981), "New Correlated-Effective-Field Theory in the Ising Model", Phys. Rev. B 24, 481-484
- Kaneyoshi T., (1980), "Spin Glass Ordering Temperature Beyond Its Mean Field Value", J Magn. Magn. Mater, 15-18:119
- Kaneyoshi T., Beyer H. (1980), "Amorphization of Layered Ferro- and Antiferromagnetic Systems", J. Phys. Soc. Jpn. 49:1306

- Karaoğlu B., (2003), “İstatistik Mekaniğe Giriş”, Seyir Yayıncılık, İstanbul
- Kaya T. ve Arık M.M., (2009), “Reduced Transfer Matrix Approach in Ising Model”, International Journal of Modern Physics B, (Kabul Edildi).
- Kramers H. A., Wannier G. H., (1941), “Statistics of the Two-Dimensional Ferromagnet. Part I”, Phys. Rev. 60, 252-262
- Lines M.E., (1974), “Many-Body Theory of Magnetism for Ions With Complicated Level Structure ”, Phys. Rev. B, 9:3927
- Onsager L. (1944), “Crystal Statistics. I. A Two Dimensional Model with an Order-Disorder Transition”, Phys. Rev., 65:117
- Peierls R., (1936), “Ising Model of Magnetism”, Proc. Cambridge Philos. Soc. B2, 477-481
- Turton R., (2005), “Katıların Fiziği”, Aktif Yayınevi, Erzurum
- Serway R.A., Beichner R.J., (2002), “Fizik 2”, Palme Yayıncılık
- Smart J. S., 1966, Effective Field Theories of Magnetism, Philadelphia, W.B. Saunders Co.,
- Streb B., Callen H. B., Horwitz G., (1963), “Cluster Expansion for the Heisenberg Ferromagnet”, Phys. Rev. 130, 1798-1808
- Sykes M.F., Gaunt D.S., Roberts P. D., Wyley J. A. (1972), “ High temperatures for the susceptibility of the Ising model II. Three dimensional lattices”, J. Phys. A, 5:640
- Taggart G.B., (1982), “Correlated Effective Field Approximation for the Dilute Ising Ferromagnet”, Physica 116A, 34-44
- Weiss P., (1907), “The Hypothesis of the Molecular Field and the Property of Ferromagnetism”, J. Phys. 6, 661-674
- Wilson K.G., (1983), “The renormalization group and critical phenomena”, Rev. Mod. Phys. 55, 583-600; (1971), Renormalization Group and Critical Phenomena. I. Renormalization Group and the Kadanoff Scaling Picture”, Phys. Rev. B, 4, 3174-3183
- Wysin G.M. ve Kaplan J., (2000), “Correlated Molecular-Field Theory for Ising Models”, Phys. Rev. E 61, 6399-6403

ÖZGEÇMİŞ

Doğum tarihi	06.06.1984	
Doğum yeri	İstanbul	
Lise	1995 - 2002	Beşiktaş Atatürk Anadolu Lisesi
Lisans	2002 - 2007	Yıldız Üniversitesi Fen - Edebiyat Fak. Fizik Bölümü
		Yıldız Üniversitesi Kimya – Metalurji Fak. Matematik Mühendisliği
Yüksek Lisans	2007 - 2009	Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı, Fizik Programı