

**UKUROVA NİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

DOKTORA TEZİ

Muhammet Serdar AVUŞ

**DİELEKTRİK DURULMANIN KUSUR-DESTEKLİ KESİRLİ
STOKASTİK ISING MODELİ**

FİZİK ANABİLİM DALI

ADANA, 2010

**ÇUKUROVA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**DİELEKTRİK DURULMANIN KUSUR-DESTEKLİ KESİRLİ STOKASTİK
ISING MODELİ**

Muhammet Serdar ÇAVUŞ

DOKTORA TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

Bu Tez .././2010 Tarihinde Aşağıdaki Jüri Üyeleri Tarafından
Oybirliği/Oyçokluğu ile Kabul Edilmiştir.

.....
Prof.Dr.Süleyman BOZDEMİR
DANIŞMAN

.....
Prof. Dr. Metin ÖZDEMİR
ÜYE

.....
Prof. Dr. Doğan DÖNMEZ
ÜYE

.....
Prof. Dr. Kerim KIYMAÇ
ÜYE

.....
Yard. Doç. Dr. Sıtkı EKER
ÜYE

Bu Tez Enstitümüz Fizik Anabilim Dalında hazırlanmıştır.
Kod No:

Prof. Dr. İlhami YEĞİNGİL
Enstitü Müdürü

Bu Çalışma Ç. Ü. Araştırma Projeleri Birimi Tarafından Desteklenmiştir.
Proje No: FEF2009D3

Not: Bu tezde kullanılan özgün ve başka kaynaktan yapılan bildirişlerin, çizelge ve fotoğrafların
kaynak gösterilmeden kullanımı, 5846 sayılı Fikir ve Sanat Eserleri Kanunundaki hükümlere
tabidir.

ÖZ

DOKTORA TEZİ

**DİELEKTRİK DURULMANIN KUSUR-DESTEKLİ KESİRLİ STOKASTİK
ISING MODELİ**

Muhammet Serdar ÇAVUŞ

**ÇUKUROVA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI**

Danışman: Prof. Dr. Süleyman BOZDEMİR

Yıl : 2010, Sayfa: 106

Jüri : Prof. Dr. Süleyman BOZDEMİR

Prof. Dr. Metin ÖZDEMİR

Prof. Dr. Doğan DÖNMEZ

Prof. Dr. Kerim KIYMAÇ

Yrd. Doç. Dr. Sıtkı EKER

Bu çalışmada, mevcut dielektrik durulma modellerinden daha iyi sonuçlar veren kesirli bir dielektrik durulma modeli geliştirildi. Modelin geliştirilmesi sırasında, Glarum'un kusur difüzyon modeli ve Glauber'ın stokastik Ising modeli, kesirli hesap tekniği kullanılarak yeniden analiz edildi. Elde edilen sonuçlar, klasik kusur difüzyon ve stokastik Ising modellerinin sonuçlarıyla karşılaştırıldı ve kesirli yöntemle elde edilen çözümlerin diğerlerine göre üstünlükleri ortaya kondu. Daha sonra, kesirli hesap tekniği kullanarak çözümlerini yaptığımız kusur difüzyon ve stokastik Ising yaklaşımı birleştirilerek "Kusur Destekli Kesirli Stokastik Ising Modeli" adında yeni bir birleşik durulma modeli geliştirildi. Bu modelin sonuçları bazı ampirik fonksiyonlarla temsil edilen dielektrik durulma verileriyle karşılaştırıldı. Birleşik modelden elde edilen durulma fonksiyonunun Fourier dönüşümünün frekansa bağlı eğrilerinin KWW, Cole-Cole, Cole-Davidson ve Havriliak-Negami fonksiyonlarından elde edilen eğrilerle tam bir uyum içinde olduğu gösterildi. Elde edilen sonuçlar, dielektrik durulmada gözlenen, yukarıda bahsettiğimiz evrensel non-Debye tipi davranışların yeni bir moleküler yorumuna yol açmaktadır.

Anahtar Kelimeler: Kusur difüzyon, Stokastik Ising modeli, Kesirli hesap, Dielektrik durulma, Kesirli durulma

ABSTRACT

PhD THESIS

DEFECT-ASSISTED FRACTIONAL STOCHASTIC ISING MODEL OF DIELECTRIC RELAXATION

Muhammet Serdar ÇAVUŞ

**ÇUKUROVA UNIVERSITY
INSTITUTE OF BASIC AND APPLIED SCIENCES
DEPARTMENT OF PYHSICS**

Supervisor: Prof. Dr. Süleyman BOZDEMİR

Year : 2010, Pages: 106

Jury : Prof. Dr. Süleyman BOZDEMİR
Prof. Dr. Metin ÖZDEMİR
Prof. Dr. Doğan DÖNMEZ
Prof. Dr. Kerim KIYMAÇ
Asst. Prof. Dr. Sıtkı EKER

In this study, a fractional dielectric relaxation model giving better results than the existing dielectric relaxation models is developed. During the development of the model, Glauber's stochastic Ising model and Glarum's defect diffusion model are re-analyzed by using the fractional calculus technique. The results obtained are compared both with the results of the classical defect diffusion and stochastic Ising models, and a superiority of the fractional solutions according to these models is shown. Then, a new cooperative relaxation model, namely "Defect Assisted Fractional Stochastic Ising Model", is developed by combining the defect diffusion and stochastic Ising approaches, which are solved by using the fractional calculus technique. The results of this model are compared with the dielectric relaxation data represented by some empirical functions. It is shown that frequency dependent plots of the Fourier transform of correlation function obtained from the cooperative model are fully compatible with the empirical KWW, Cole-Cole, Cole-Davidson and Havriliak-Negami functions. The results obtained leads to a new molecular interpretation of the universal non-Debye type behaviors mentioned above.

Key Words: Defect Diffusion, Stochastic Ising model, Fractional calculus,
Dielectric relaxation, Fractional relaxation

TEŞEKKÜR

Öncelikle, bu tezin yönetiminde, oluşumunda ve aynı zamanda çalışmalarım sırasında karşılaştığım sorunların çözümünde bütün olanakları sağlayan ve her türlü desteğini esirgemeyen tez danışmanım Prof. Dr. Süleyman BOZDEMİR'e teşekkürlerimi sunarım.

Ayrıca çalışmalarımda tavsiyelerini, önerilerini ve yardımlarını eksik etmeyen Prof. Dr. Metin ÖZDEMİR'e, Prof. Dr. Doğan DÖNMEZ'e ve halen görev yapmakta olduğum Kastamonu Üniversitesi'ndeki değerli yöneticilere, bana her türlü kolaylığı sağlayan ve sıcak bir ortam yaratan tüm Fizik Bölümü hocalarıma teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

SAYFA

ÖZ	I
ABSTRACT	II
TEŞEKKÜR	III
İÇİNDEKİLER	IV
ÇİZELGELER DİZİNİ	VIII
ŞEKİLLER DİZİNİ	X
SİMGELER VE KISALTMALAR	XIV
1. GİRİŞ	1
1.1. Dielektriğin Doğası ve Temel Kavramları	3
1.1.1. Elektrik Dipol, Dipol Moment ve Kutuplanma	3
1.1. 2. Dielektrik Sabiti ve Kutuplanabilirlik	7
1.1. 3. Dielektrik Maddelerde Kutuplanma Çeşitleri	9
1.1. 3.1. Elektronik Kutuplanma	10
1.1. 3. 2. Atomik kutuplanma	10
1. 1.3. 3. İyonik kutuplanma	11
1. 1.3. 4. Yönelme kutuplanması	11
1. 1.3. 5. Arayüzey kutuplanması	14
1. 1.4. Dielektriklerde iç alan problemi	15
1.1. 4. 1. Clausius-Mossotti denklemi	18
1. 1.5. En Yakın İki Dipolün Etkileşme Enerjisi	20
1. 1.6. Zamana Bağlı Alanlarda Lineer Dielektrikler	22
1. 1.7. Frekansa Bağlı Kompleks Dielektrik Fonksiyonu	26
2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR	31
2. 1. Szigeti dielektrik teorisi	32
2. 2. Kusur Difüzyon Modeli	34
2.3. Hiyerarşik Kısıtlanmış Dinamik Durulma Modeli	37
2. 4. Förster Direkt-Transfer Modeli	37
2. 5. Fraktal Durulma modeli	38
2. 6. Ising Modeline Dayanan Çalışmalar	39

2. 7. Süzülme Modeli.....	40
2. 8. Kesirli Durulma Süreçleri.....	40
2. 9. Deneysel Sonuçların Yorumuna Dayanan Ampirik Fonksiyonlar.....	41
3. MATERYAL VE METOD.....	47
3. 1. Kesirli (Fractional) Diferansiyel Hesap Tekniği.....	47
3. 2. Mittag-Leffler Fonksiyonları.....	48
3.3. Keyfi Dereceden Türev ve İntegraller (Diferintegraller).....	49
3. 3. 1. Grünwald-Letnikov tanımı.....	49
3. 3. 2. Riemann-Liouville Tanımı.....	49
3. 3. 3. Cauchy Diferintegral Tanımı.....	50
3. 3. 4. Caputo Kesirli Türevi.....	50
3. 4. Kesirli Türev ve İntegrallerin Özellikleri.....	51
3. 4. 1. Lineerlik.....	51
3. 4. 2. Homojen Olma Özelliği.....	51
3. 4. 3. Bir Serinin Diferintegralı.....	51
3. 4. 4. Kesirli Türevlerin Leibniz Kuralı.....	52
3. 4. 5. Birleşme özelliği.....	52
3. 4. 6. Bileşik Fonksiyonların Kesirli Türevleri.....	53
3. 4. 7. Bir Parametreye Bağlı Bir İntegralin Riemann-Liouville Kesirli Türevi.....	53
3. 4. 8. Ölçek değişikliği.....	54
3. 5. Kesirli Diferansiyel Tekniğinde Kullanılan Bazı Önemli Dönüşümler.....	55
3. 5. 1. Riemann-Liouville ve Grünwald-Letnikov Kesirli İntegrallerinin Laplace Dönüşümü.....	55
3. 5. 2. Riemann-Liouville Kesirli Türevin Laplace Dönüşümü.....	55
3. 5. 3. Caputo Türevinin Laplace Dönüşümü.....	55
3. 5. 4. Grünwald-Letnikov Kesirli Türevinin Laplace Dönüşümü.....	56
3. 5. 5. Kesirli İntegrallerin Fourier Dönüşümü.....	56
3. 5. 6. Kesirli Türevlerin Fourier Dönüşümü.....	56
4. BULGULAR VE TARTIŞMA	59
4. 1. Kusur Difüzyon Modelinden Elde Edilen Kesirli Dipol Korelasyon Fonksiyonu.....	59

4. 2. Ising Modelinden Elde Edilen Kesirli Dipol Korelasyon Fonksiyonu.....	64
4. 3. Birleşik Model: Kusur Destekli Kesirli Stokastik Ising Modeli.....	69
5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER	87
KAYNAKLAR.....	93
ÖZGEÇMİŞ	99
EKLER.....	100
Ek 1.....	100
Ek 2.....	103
Ek 3.....	105

ÇİZELGELER DİZİNİ SAYFA

Çizelge 1.1. Bazı yalıtkan maddelerin dielektrik sabitleri ve dielektrik dayanıklılıkları.....	7
--	---

ŞEKİLLER DİZİNİ

SAYFA

Şekil 1.1.	Bir nokta yük sisteminin elektrik momenti.....	4
Şekil 1.2.	Elektrik alan içine konulmuş dielektrik maddede dipol yönelmesi, yüzeylerde kutuplanmanın ve içerde iç alanın oluşumunun şematik gösterimi.....	6
Şekil 1.3.	Elektrik alan içine konulmuş kutuplu maddenin bir çift-kutbundaki yönelme.....	12
Şekil 1.4.	Arayüzey – Uzay Yük kutuplanması.....	14
Şekil 1.5.	(a) arasında dielektrik bir madde bulunan yüklü bir kondansatör, (b) Dielektrik ortamda küresel oyuk.....	16
Şekil 1.6.	Aralarında r mesafesi bulunan iki dipol.....	21
Şekil 1.7.	Yoğun fazdaki polar bileşikler için frekansa bağlı dielektrik sabitinin dağılımı ve kayıp pikleri.....	25
Şekil 2.1.	Debye bağıntısı için kayıp eğrileri.....	42
Şekil 2.2.	Cole-Cole bağıntısının α 'nın farklı değerleri için kayıp eğrileri.....	43
Şekil 2.3.	Cole-Davidson bağıntısının β 'nın farklı değerleri için kayıp eğrileri....	44
Şekil 2.4.	Havriliak ve Negami bağıntısının α ve β 'nın farklı değerleri için kayıp eğrileri.....	45
Şekil 3.1.	Bir parametrelili Mittag-Leffler fonksiyonları.....	48
Şekil 4.1.	α 'nın farklı değerleri için KWW tipi kesirli dipol korelasyon fonksiyonu eğrileri.....	62
Şekil 4.2.	(4.6) kesirli dipol korelasyon fonksiyonunun $1 \leq \alpha \leq 1.5$ değerleri için kayıp eğrileri.....	62
Şekil 4.3.	(4.6) kesirli dipol korelasyon fonksiyonunun $0.5 < \alpha < 1$ değerleri için kayıp eğrileri.....	63
Şekil 4.4.	(4.6) kesirli dipol korelasyon fonksiyonunun $\beta = 0.6$ değeri için kayıp eğrileri.....	64
Şekil 4.5.	(4.6) kesirli dipol korelasyon fonksiyonunun $\beta = 0.65$ değeri için kayıp eğrileri.....	64

Şekil 4.6. (4.26) korelasyon fonksiyonunun $\beta = 0.4, 0.6, 0.8$ değerleri için kayıp eğrileri.....	69
Şekil 4.7. Kesirli kompleks dielektrik fonksiyonu $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ ve Debye denklemi kayıp eğrileri.....	72
Şekil 4.8. Kesirli kompleks dielektrik fonksiyonu $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ ve Cole-Cole denklemi kayıp eğrileri.....	72
Şekil 4.9. Kesirli kompleks dielektrik fonksiyonu $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ ve Cole-Davidson denklemi kayıp eğrileri.....	73
Şekil 4.10. Kesirli kompleks dielektrik fonksiyonu $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ ve Cole-Davidson denklemi reel eğrileri.....	74
Şekil 4.11. Kesirli kompleks dielektrik fonksiyonu $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ ve Cole-Davidson denklemi kayıp eğrileri.....	74
Şekil 4.12. Kesirli kompleks dielektrik fonksiyonu $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ ve Cole-Davidson denklemi reel eğrileri.....	75
Şekil 4.13. Kesirli dielektrik fonksiyonu $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ ve Cole-Davidson denklemi kayıp eğrileri.....	75
Şekil 4.14. Kesirli dielektrik fonksiyonunu $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ 'nın $\alpha = 0.505, \beta = 0.98$ değerleri için reel ve sanal bileşenleri eğrileri.....	76
Şekil 4.15. Kesirli kompleks dielektrik fonksiyonu $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ ve Havriliak-Negami denklemi kayıp eğrileri.....	77
Şekil 4.16. Havriliak-Negami ve kesirli kompleks dielektrik fonksiyonu $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ kayıp eğrileri.....	78
Şekil 4.17. $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ bağıntısının $\alpha = 0.7$ sabit değerine karşılık $\beta = 0.5, 0.4, 0.3$ değerlerine göre kayıp eğrileri.....	79
Şekil 4.18. $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ bağıntısının $\alpha = 0.7$ sabit değerine karşılık $\beta = 0.5, 0.4, 0.3$ değerlerine göre reel eğrileri	79
Şekil 4.19. $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ bağıntısının $\alpha = 0.7$ sabit değerine karşılık $\beta = 0.5, 0.6, 0.7$ değerlerine göre kayıp eğrileri	80
Şekil 4.20. $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ bağıntısının $\alpha = 0.7$ sabit değerine karşılık $\beta = 0.5, 0.6, 0.7$ değerlerine göre reel eğrileri	81

Şekil 4.21. $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ bağıntısının farklı q değerleri için Debye tipi kayıp eğrileri.....	82
Şekil 4.22. $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ bağıntısının farklı q değerleri için Debye tipi reel eğrileri.....	82
Şekil 4.23. $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ bağıntısının farklı q değerleri için Cole-Cole tipi kayıp eğrileri.....	83
Şekil 4.24. $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ bağıntısının farklı q değerleri için Cole-Cole tipi reel eğrileri...	83
Şekil 4.25. $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ bağıntısının farklı q değerleri için Cole-Davidson tipi kayıp eğrileri.....	84
Şekil 4.26. $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ bağıntısının farklı q değerleri için Cole-Davidson reel eğrileri.....	85
Şekil 4.27. $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ bağıntısının farklı q değerleri için Havriliak-Negami tipi kayıp eğrileri.....	86
Şekil 4.28. $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ bağıntısının farklı q değerleri için Havriliak-Negami tipi reel eğrileri.....	86

SİMGELER VE KISALTMALAR

P	: Kutuplanma vektörü
D	: Yerdeğiştirme vektörü
E, E_0	: Dış elektrik alan
ϵ_r	: Bağlı dielektrik geçirgenliği
ϵ	: Maddenin elektriksel geçirgenliği (permittivite)
ϵ_0	: Boşluğun elektriksel geçirgenliği
ϵ'	: Bağlı dielektrik sabitinin gerçel kısmı
ϵ''	: Bağlı dielektrik sabitinin sanal kısmı
σ	: Yüzey yük yoğunluğu
χ	: Maddenin elektrik duygunluğu (dielektrik duygunluk)
$\chi(\omega)$	: Normalize edilmiş kompleks dielektrik fonksiyonu
$\chi'(\omega)$	: Normalize edilmiş kompleks dielektrik fonksiyonunun reel kısmı
$\chi''(\omega)$	: Normalize edilmiş kompleks dielektrik fonksiyonunun sanal kısmı
α	: Kesirli diferansiyel operatörün üssü
β	: Kesirli diferansiyel operatörün üssü
D^α	: Kesirli diferansiyel operatör
D^β	: Kesirli diferansiyel operatör
$D^{\alpha(t)}$	: Kinetik kesirli diferansiyel operatör

1. GİRİŞ

Elektrikle ilgili kavramlar, ki buna dielektrik de dahil, statik elektriklenmeyle başlayıp milattan önce 600'lere kadar uzanır. Bu tarihlerde Yunanlı filozof Tales, kehribarın bir beze sürtüldüğünde saman parçaları gibi hafif nesneleri çektiğini keşfetmiştir. Bazı maddelerin sözünü ettiğimiz statik elektriklenme özelliğine daha şiddetli bir derecede sahip olduğu da bilinir. Eski Yunanda kehribarın *elektrik* adıyla anılması dolayısıyla “elektrik” kelimesi bilimsel bir terim olarak kullanılmaya başlanmıştır (Kao, 2004). Sonrasında Fraday tarafından orijinali Yunanca olan *dia* ön ekiyle başlayan *Dielektrik* kelimesi türetilmiştir. Dielektrik kelimesi elektrik alanını ya da elektrik akısını geçiren fakat yüklü parçacıkların geçmesine izin vermeyen maddeler için kullanılmıştır. Bu, dielektriklerin, elektronlar da dahil herhangi bir yüklü parçacığın serbestçe hareketine izin vermediği anlamına gelir. Yani normal koşullarda dielektrikler, elektrik akımını iletmezler. Bu durumda bir dielektrik madde genel anlamda bir yalıtkan olarak düşünülebilir. Gezegenimizde doğal ideal bir dielektrik yoktur. Mükemmel bir vakum ideal bir dielektrik gibi düşünülebilir fakat böyle bir vakum da henüz elde edilememiştir (Kao, 2004).

Tanım olarak, atomik yapısında serbest yük bulundurmeyen tüm gaz, sıvı ve katı maddeler dielektrik maddeler olarak adlandırılırlar. Başka bir ifadeyle bir iletkende serbest yükler bulunabilirken, ki bu yükler madde içinde serbestçe dolaşabilmektedir, makroskobik olarak nötr olan dielektriklerde tüm yükler belirli atom ya da moleküllere bağlıdır ve hareketleri molekül içinde sınırlı olmaktadır. Bu mikroskobik yer değiştirmeler dielektrik maddelerin karakteristik davranışlarını belirlemektedir. Elektrik iletkenliğine sahip olmayan bu malzemeler bir dış alan altında yüklü parçacıkların yer değiştirmesiyle elektrik yük merkezlerinin kayması sonucunda kutuplanabilirler.

Dielektrikler birer yalıtkan olmalarına rağmen yalıtkanlar ile dielektrikler üzerine yapılan çalışmalar birbirinden oldukça farklılık göstermektedir. Elektriksel yalıtkanlık, yalıtkanlar ve dielektrikler şeklinde iki sınıfa ayrılmıştır. Yalıtkan olarak nitelendirilen malzemeler $E \leq 10^6 V/m$ dielektrik sınırının altında uygulanan elektrik alanında hiçbir elektriksel iletkenlik göstermeyen, özellikle elektrik

mühendisliğinde istenmeyen elektrik yüklerinin akışını önlemek için kullanılan dielektriklerdir. Yalıtkanlarla ilgili olan çalışmalarda yalıtkanların iç fiziksel özellikleri pek dikkate alınmaksızın makroskobik çerçevede yalıtkan malzemelerin mümkün olabilen en düşük elektriksel iletkenliğe ve yüksek elektrik alan altında herhangi bir bozulmaya karşı en yüksek dirence sahip olmalarının yanı sıra uzun ömür, düşük maliyet, yüksek sıcaklıklara dayanabilme ve kimyasal yapısını koruma gibi özelliklerinin de olması istenir. Oysa, dielektrik ile ilgili olan çalışmalar, yalıtkanları da içine alan daha genel bir yapıya sahip olup, doğal ve uyarılmış elektrik kutuplanma, durulma süreçleri ve malzemelerin elektrik ve optik özelliklerinden sorumlu olan yük taşıyıcılarının davranışlarını ve özellikle zamanla değişen elektrik alanı altında dielektrik malzemenin kutuplanma ve durulma sürecinin mikroskobik mekanizmasının anlaşılması üzerine kurulmuştur (Jonsher, 1983). Bununla birlikte dielektrikle ilgili çalışmalar 18. yy ın ortalarına kadar pek dikkat çekmemiş olmasına karşın dielektrik özelliklerin araştırılmasıyla birlikte maddenin yapısını anlamada önemli adımlar atılmıştır (Smyth, 1955).

Dielektrik materyallerde yük taşıyıcıların, yapısal ve kimyasal kusurlarla ve onların etkileşimleriyle ya da diğer uyarıcı kaynaklarla olan ilişkileri önemli bir rol oynamaktadır. Günümüz ileri teknoloji çağında, özellikle elektronikteki yönelim bazı dielektrik materyallerden yapılan katı malzemelerin kullanılması yönündedir. Katı dielektrik maddeler elektrik mühendisliği başta olmak üzere ilgili bilim dallarında diğer dielektriklere göre belki de en fazla kullanılanıdır. Katı dielektrikler dediğimiz porselen, cam, seramik ve çoğu plastiğin yanı sıra hava, nitrojen ve sülfür hexafluoride de kullanımına sıkça rastlanılan gaz fazdaki dielektriklerdir (Kao, 2004).

Dielektrik ölçümler, yiyecek bilimi, kimya, biyoloji, tıp, ilaç araştırmaları, nano teknoloji, askeri savunma, elektronik, malzeme bilimi, tarım ve daha birçok alanda incelenen malzemelerin yapısal özelliklerinin anlaşılmasında yaygın bir şekilde kullanılmaktadır. Maddelerin dielektrik özellikleri nem oranı, kimyasal yoğunluk, biyokütle, hacim yoğunluğu, kusurlar, kimyasal reaksiyonlar, mekanik gerilme gibi birçok fiziksel ve kimyasal özelliklerle yakından ilişkilidir. Özellikle maddelerin moleküler yapılarını belirlemede dielektrik ölçüm yöntemleri başarı ile

kullanılmaktadır (Ufuktepe ve Bozdemir, 1997; William ve ark., 1967; Debye, 1945).

Dielektrik maddelerin özellikleri, fizikçiler, kimyacılar, elektrik mühendisleri ve biyologlar gibi farklı dallardan bilim insanlarının ilgisini çekmiştir. Bu ilgiler farklı beklentilerde olmuştur: örneğin elektrik mühendisleri, dielektrik malzemenin değişen alan ve sıcaklık altında ne kadar enerji kaybına neden olduğuyla ilgili araştırma yaparlarken, kimyacılar elde edilen bu bilgilerle moleküllerin özellikleri ve yapıları üzerine temel araştırmalar yapabilmektedirler. Fizikçilerin ise bu maddelerdeki enerji kayıpları ve diğer ortaya çıkan gözlemlerin altında yatan fiziksel mekanizmaları açıklamakla ilgili çalışmalar yaptıklarını görüyoruz. Bu yararlılık zinciri daha da uzatılabilir. Bu nedenle ve daha birçok farklı amaçlar doğrultusunda dielektriklerin değişik özelliklerinin araştırılması ve ortaya çıkan deneysel verilerin analizlerinin yapılabilmesi ve yorumlanabilmesi için dielektrik kuramların geliştirilmesi zorunlu bir hal almıştır ve bu konu üzerindeki gerek deneysel gerek kuramsal çalışmalar büyük bir hızla devam etmektedir (Fröhlich, 1958; Jonscher, 1983,1996).

1.1. Dielektriğin Doğası ve Temel Kavramları

1. 1. 1. Elektrik Dipol, Dipol Moment ve Kutuplanma

Bir q nokta yükünün sabit bir noktaya göre elektrik momentini

$$\mathbf{m} = q\mathbf{r} \quad (1.1)$$

olarak tanımlanır. Burada $\mathbf{r}$, q nokta yüküne seçilen bir noktadan uzanan yarıçap vektördür. Bu durumda sabit bir noktaya göre q_i yük sisteminin toplam elektrik momentini

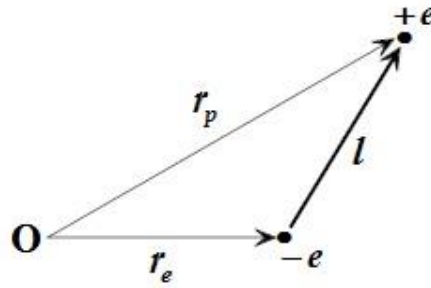
$$\mathbf{m} = \sum_i q_i \mathbf{r}_i \quad (1.2)$$

olarak verilir.

Bir dielektrik malzeme içindeki atom veya moleküllerin pozitif yük merkezleri ile negatif yük merkezlerinin birbiriyle çakışık olmaması sonucu oluşan dipol, aralarında l uzaklığı olan, eşit büyüklükte fakat zıt işaretli iki noktasal yükün oluşturduğu sistem olarak tanımlanır ve sistemin net yükünün sıfır olması durumunda elektrik moment, orijinin seçiminden bağımsızdır. Aynı büyüklükte zıt yüklü iki parçacık için net yükün sıfır olduğu durumda (1.2) denklemi, sistemin toplam elektrik momentini için

$$\mathbf{m} = (\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_e)e \quad (1.3)$$

şeklinde yazılabilir.



Şekil 1.1. Bir nokta yük sisteminin elektrik momentini

Burada $\mathbf{r}_p$ ve $\mathbf{r}_e$ orijinden pozitif ve negatif yük merkezlerine uzanan yarıçap vektörleridir. Böylece (1.3) denklemi daha basit bir biçimde

$$\mathbf{m} = e\mathbf{l} \quad (1.4)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $\mathbf{l} = \mathbf{r}_p - \mathbf{r}_e$ olup $\mathbf{l}$, negatif yük merkezinden pozitif yük merkezine uzanan vektördür. Buradan da anlaşılacağı üzere yüklerin konumları birbirinden farklı ve net yükü sıfır olan bir yük sisteminin elektrik momentini *dipol moment* olarak adlandırılır (Böttcher ve Bordewijk, 1978).

Yukarıda verilen denklemler bir ideal dipol için uygun fakat ideal olmayan sistemleri betimlemesi açısından oldukça basit kalmaktadır. Birçok nötr molekül ideal olmayan dipol momentlere sahiptir ve bu tür moleküllerde pozitif ve negatif

yük dağılımlarının ağırlık merkezleri doğal olarak çakışık değildir. Bilindiği gibi bir yük sistemi, bir dış elektrik alana bırakıldığında da geçici bir dipol moment oluşur. Alanın etkisi altında, yük sistemi içerisindeki pozitif ve negatif yükler birbirinden ayrılır, yani sistem kutuplanır. Alanın etkisi olduğu sürece kutuplu olan bu geçici diyebileceğimiz dipoller genellikle ideal dipoller olarak ele alınabilir. Bununla birlikte, moleküler mesafelerde alan hesaplanırken sürekli dipoller genellikle ideal olarak ele alınmaz.

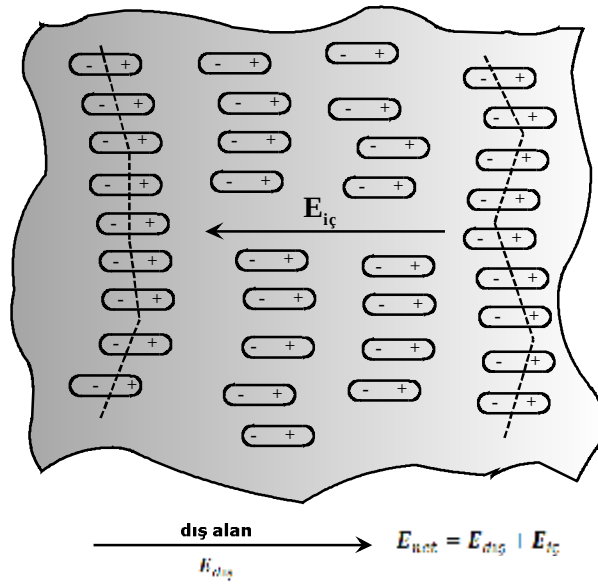
Moleküler dipol momentlerin değerleri genelde Debye birimi ile ifade edilir. D ile gösterilen Debye birimi, 10^{-18} elektrostatik birime (e.s.b) eşittir. Simetrik olmayan moleküllerde sürekli dipol momentler $0,5D$ ile $5D$ arasında değişir. Bu, beklenen bir değer aralığıdır çünkü temel yük e_0 , $4,4 \cdot 10^{-10}$ esb 'dir ve moleküllerdeki yük merkezleri arasındaki mesafe yaklaşık $10^{-9} - 10^{-8}$ cm civarındadır. Dipol moment, elektrik kutuplanma teorisinde çok önemli bir nicelik kazandığından bu yana Debye birimi ile ifade edilir (Bötcher, 1978).

Kutuplanmış bir maddenin molekülleri, uyarılmış dipollere sahip olur. Birim hacimdeki dipolmomenti olarak tanımlanan kutuplanma,

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{\sum_i \mathbf{m}_i}{\Delta V} = \frac{d\mathbf{m}}{dV} \text{ C/m}^2 \quad (1.5)$$

bağıntısı ile ifade edilir. Burada $\sum_i \mathbf{m}_i = \Delta \mathbf{m}$, ΔV hacmindeki dipollerin vektörel toplamıdır. Moleküler bir dielektrikte, örneğin CO_2 'de, elektronların moleküllere sıkıca bağlı olmasından dolayı artı ve eksi yüklerin yük merkezlerinin bir dış alan etkisiyle birbirlerinden ayrılmaları sıfır olmayan bir dipol momente sahip kutuplu bir molekül ya da atom oluşmasına neden olur. Bu maddelerin dipolmomentleri 10^{-30} C.m basamağındadır ve böyle bir durumda dipole, uyarılmış dipol denir. Kutuplanmış atom veya moleküllerden oluşan dielektrik madde net bir dipol moment kazandığı için bu tür dielektriklere "kutuplanmış dielektrik" denir. Böyle durumlarda dielektrik madde içinde net bir yük yoğunluğu oluşur. Böylece iletkenin aksine, bir dielektrik içinde sıfırdan farklı bir elektrik alanı ve yük yoğunluğu bulunabilir.

Dıştan uygulanan elektrik alan etkisinde maddesel yük yoğunluğunun değişmesi ile meydana gelen kutuplanma, aynı zamanda madde içerisinde bir iç elektrik alanının doğmasına da neden olur (Şekil 1.2). Kutuplanma alanıyla dış elektrik alanının vektörel toplamı madde içindeki net elektrik alanını verecektir. Net alan, kutuplanma alanının dış alana zıt yönlü oluşundan dolayı, dış alandan daha küçüktür. İletken cisimlerde bu iki alan aynı büyüklükte olduğu için net alan sıfırdır ve bu nedenle iletkenlerde net bir kutuplanmadan bahsedilemez.



Şekil 1.2. Elektrik alan içine konulmuş dielektrik maddede dipol yönelmesi, yüzeylerde kutuplanmanın ve içerde iç alanın oluşumunun şematik gösterimi

Kutuplanma işlemi, bağlı elektronları içerdiğinden dielektrik özellikler atomik ve moleküler yapının ayrıntılarına bağlıdır. Bu nedenle maddelerin dielektrik özellikleri çok değişken ve davranışları da oldukça farklı olabilmektedir. Örneğin yalıtkan maddeler çok büyük şiddette ($E \approx 10^6 V/m$) bir elektrik alan etkisinde kaldıklarında, elektrik alan ile hızlandırılan elektronlar molekül örgü yapısına şiddetle çarparak malzemede kalıcı bozulmalara ve çığ iyonlaşmasına neden olabilmektedir. Bu olaya “dielektriğin çöküşü” denir. Çöküş olmaksızın dielektriğin dayanabildiği en büyük elektrik alan şiddetine malzemenin “dielektrik dayanıklılığı” denir. Çizelge 1.1 ‘de bilinen bazı yalıtkan maddelerin yaklaşık dielektrik dayanıklılığı ve dielektrik sabitleri verilmiştir.

Çizelge 1.1. Bazı yalıtkan maddelerin dielektrik sabitleri ve dielektrik dayanıklılıkları

Malzeme	Dielektrik sabiti ($\epsilon_r = E_{dış} / E_{net}$)	Dielektrik dayanıklılık E (V/m)
Hava (atmosfer basıncında)	1.0	$3 \cdot 10^6$
Maden yağı	2.3	$15 \cdot 10^6$
Kağıt	2.4	$15 \cdot 10^6$
Polistren	2.6	$20 \cdot 10^6$
Lastik	2.3–4.0	$25 \cdot 10^6$
Cam	4–10	$30 \cdot 10^6$
Mika	6.0	$200 \cdot 10^6$

1. 1. 2. Dielektrik Sabiti ve Kutuplanabilirlik

Bir dış elektrik alanının dielektrik maddeler üzerindeki etkileri dielektrik sabiti, duyunluk, kutuplanabilirlik ve elektriksel kutuplanma gibi kavramlarla açıklanır. Dielektrik sabiti, bir malzemenin elektriksel açıdan ne kadar yalıtkan olduğunun bir ölçütüdür. Sabit bir potansiyel altında yüklenen bir kondansatörün levhaları arasında bir dielektrik madde yerleştirildiğinde potansiyel farkının düştüğü gözlenir çünkü dielektrik maddenin kutuplanması sonucunda oluşan kutuplanma alanı, uygulanan dış alana zıt yönde olduğu için dış alanı zayıflatacaktır. Boşluktaki kondansatörün alanının dielektrik ortamdaki ölçülen iç alana oranı veya boşluktaki potansiyel farkının maddesel ortamın bulunduğu haldeki potansiyel farkına oranı o maddenin dielektrik sabiti olarak adlandırılır. Bu tanım başka bir biçimde, boşlukta iki elektriksel yük arasındaki elektrostatik kuvvetin aynı yüklerin maddesel bir ortamda iken aralarındaki elektrostatik kuvvete oranı olarak da verilebilir.

Her ne kadar dielektrik ortamın kutuplanması o ortama etki eden elektrik alan nedeniyle gerçekleşse de kutuplanmanın derecesi sadece elektrik alan şiddetine bağlı değildir. Ortamı oluşturan moleküllerin özellikleri de kutuplanmanın derecesinde

oldukça önemli bir etkidir. Eğer ortamı oluşturan dielektrik madde izotropik ise kutuplanmanın derecesi kutuplanmaya neden olan dış elektrik alanla orantılı olacaktır. Bu durumda kutuplanma

$$\mathbf{P} = \varepsilon_0 \chi \mathbf{E} \quad (1.6)$$

ile verilir. Burada χ dielektrik duygunluk olarak adlandırılır ve boyutsuz bir niceliktir. Makroskobik $\mathbf{E}$ alanı ile $\mathbf{P}$ kutuplanması arasındaki bağlantı χ katsayısı ile sağlanır.

Elektrostatik bir ortam için

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} \quad (1.7)$$

eşitliği geçerlidir. Burada $\mathbf{D}$ 'ye elektrik öteleme vektörü veya elektrik akı yoğunluğu denir. $\mathbf{D}$ 'nin kaynağı serbest yüklerdir ve (1.6) denkleminin yardımıyla

$$\mathbf{D} = \varepsilon_r \varepsilon_0 \mathbf{E} \quad (1.8)$$

bağıntısı elde edilir. Burada $\varepsilon_r = 1 + \chi$ alınmıştır. Burada ε_r boyutsuz bir niceliktir ve dielektrik katsayısı adını alır. Doğal veya yapay pek çok madde homojen değildir ve hatta izotropik olmayan dielektrik maddeler çoğunluktadır. Böyle ortamlarda dielektrik sabiti konumdan bağımsız değildir. Pek çok kristalde ε_r , konumun fonksiyonu olmaktadır ve bu, kristalin farklı eksenleri boyunca ölçülen ε_r değerlerinin birbirinden farklı olması anlamına gelmektedir. Bu tür maddelere genelde izotropik olmayan maddeler denir. (1.8) denkleminde $\varepsilon_r \varepsilon_0 = \varepsilon$ seçildiği takdirde yer değiştirme vektörü ve elektrik alan arasındaki bağıntı

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} \quad (1.9)$$

ile verilir. Burada ε , dielektrik geçirgenlik (permittivity) olarak adlandırılır. İzotropik ya da kübik yapıdaki bir ortamın boşluğa göre dielektrik sabiti ε_r ise makroskobik $\mathbf{E}$ alanı cinsinden

$$\varepsilon_r = \frac{\varepsilon_0 E + P}{\varepsilon_0 E} = 1 + \chi \quad (1.10)$$

şeklinde tanımlanır.

1. 1. 3. Dielektrik Maddelerde Kutuplanma Çeşitleri

Dielektrikler, kutuplu (polar) ve kutuplu olmayan (apolar) olmak üzere iki grupta toplanırlar. Bu iki sınıf maddede kutuplanma mekanizmaları birbirinden farklılıklar gösterir. Buradaki kutuplanabilme kavramı, elektrik alan içine konulan maddenin moleküllerine ait elektrik dipol momentlerinin elektrik alanla aynı doğrultulu yönelmesini ifade etmektedir. Maddeyi oluşturan moleküller, dipol momentleri olsun ya da olmasın, bir elektrik alan içine konulduklarında böyle bir momente geçici olarak sahip olabilirler ve bunlar kısmen de olsa alanla paralel duruma geçerler.

Moleküllerinde ısısal uyarılmadan dolayı rastgele dağılmış pozitif ve negatif yük merkezlerinin doğal olarak çakışık olmadığı asimetrik bir durumun sonucu olarak, üzerinde herhangi bir dış olan olmaması durumunda bile bir dipol momente sahip olan maddelere polar dielektrik madde denir. Polar dielektrikler bir elektrik alan içine konduğu zaman dielektrik içindeki rastgele yönelmiş dipol momentler yönelimlerini dış elektrik alanla aynı yönde yapmaya çalışırlar ve böylece net bir kutuplanma meydana gelir. Yani, bir polar dielektrik madde bir dış elektrik alan içine konulduğunda, bu polar dielektrik maddenin moleküllerinde yüklerin yer değiştirmesinin yanı sıra, ayrıca dielektrik maddenin kutuplanmasına katkıda bulunan kalıcı dipol momentin yönlenmesinden kaynaklanan ek bir kutuplanma mekanizması da ortaya çıkmaktadır. HCl , H_2O , HBr , NH_3 , $MgCl$, CO , NO vb. bu tür maddelere örnek olarak verilebilir.

Bir dış elektrik alan olmadığı durumda negatif ve pozitif yük merkezleri hemen hemen çakışık olan bir dielektrik maddede doğal bir dipol momentten bahsedilmez ve bu tür dielektriklere apolar dielektrikler denir. Soygazlar, apolar dielektrikler için iyi bir örnektir. Bu tür dielektrikler bir dış elektrik alan içine konduğu zaman alanın uyguladığı kuvvet etkisi ile pozitif ve negatif yük merkezleri bir miktar birbirinden ayrılır ve bu ayrılma bir dipol moment oluşturur. Kutuplanma, uygulanan bir dış alanın etkisi süresince olmaktadır ve dış alan kaldırılırsa artık kutuplanma da

gözlenmeyecektir. Kısaca, kutuplanmanın dış alanla doğru orantılı olduğu söylenebilir (Ufuktepe ve Bozdemir, 1997).

Dielektriklerde temel olarak elektronik, atomik, iyonik, yönelme ve arayüzey kutuplanması olmak üzere beş çeşit kutuplanma meydana gelmekle birlikte polar ve polar olmayan dielektriklerde kutuplanma mekanizmaları birbirinden farklılık göstermektedir.

1. 1. 3. 1. Elektronik Kutuplanma

Optik kutuplanma olarak da isimlendirilen elektronik kutuplanma, bir dış elektrik alanının, atom ya da moleküllerin elektron bulutlarının temelde simetrik olan dağılımlarını bozması sonucu oluşur (Kao, 2004). Klasik açıdan bakıldığında bir atomun merkezi elektrik açıdan nötr nötronlar ve pozitif yüklü protonlardan oluşur. Elektronlar ise bu merkez etrafında kapalı yörüngelerde hareket ederler. Herhangi bir anda elektron ve çekirdek, negatif yükten pozitif yüke yönelen bir dipol moment meydana getirir. Bununla birlikte elektronun simetrik hareketi ile sürekli değişen dipolün eksenini, dipol momentin zaman ortalamasının sıfır olmasına neden olur. Toplam elektronik yükün çekirdek ile çakışık bir küresel dağılıma sahip olduğu ve yük yoğunluğunun merkezden radyal olarak azaldığı düşünülürse, bir atom, bir elektrik alan içerisine yerleştirildiğinde yüklü parçacıklara bir elektrik kuvveti etki eder ve negatif yük bulutunun merkezi çekirdeğe göre bir miktar yer değiştirir. Bu, atom içerisinde bir net dipol momentin oluşmasına neden olur ve bu kutuplanma elektronik kutuplanma olarak adlandırılır (Raju, 2003). Elektronların bağlanma kuvvetlerine göre kutuplanmanın derecesi de değişir ve elektronik kutuplanma yaklaşık 10^{15} - 10^{16} Hz frekans aralığında gerçekleşir.

1. 1. 3. 2. Atomik Kutuplanma

Elektronik boyutta yerdeğiştirmenin sonucu olarak ortaya çıkan elektronik kutuplanmanın aksine atomik kutuplanma çok atomlu bir molekülün bir dış elektrik alanı altında molekülü oluşturan atom merkezlerinin göreceli olarak birbirlerine göre

çok küçük miktarlarda yer değiştirmesi neticesinde meydana gelir (Raju, 2003). Bu aslında normal örgü titreşimlerinin bozulması, yani bir kristal örgüdeki atomların hareketidir ve bu nedenle atomik kutuplanmaya titreşim kutuplanması da denir (Kao, 2004). Bütün moleküllerde atomik kutuplanma olsa da atomik kutuplanma ifadesi genelde görelî olarak daha zayıf bağılı moleküller için kullanılır. Böylesi yerdeğistirmeler düşük frekanslarda elektronik kutuplanma için olandan daha önemli hale gelirler. Atomik kutuplanma yaklaşık 10^{13} - 10^{14} Hz aralığında gerçekleşmektedir.

1. 1. 3. 3. İyonik Kutuplanma

İyonik bir örgü içinde pozitif iyonlar, uygulanan dış alan yönünde yer değiştirirken negatif iyonlar ise alanın zıt yönünde yer değiştirirler. Bu durumda tüm madde içinde açık bir kutuplanma meydana gelir.

İyonlar elektronlara göre daha ağır olduklarından iyonik kutuplanma süresi yaklaşık infra-red frekansı bölgesine denk gelen 10^{-12} - 10^{-13} s aralığındadır. İyonik kutuplanma adından da anlaşılacağı üzere genel olarak iyonik materyallerde oluşur (Böttcher ve Bordevijk, 1978).

1. 1. 3. 4. Yönelme Kutuplanması

Yönelme kutuplanması polar maddeler olarak adlandırılan, sürekli dipol momentlere sahip parçacık ya da moleküllerden meydana gelen dielektriklerde gözlenir (Kao, 2004). Materyal içindeki sürekli dipol momentlere dış elektrik alan bir tork uygulayarak onları kendisiyle aynı yönelime zorlar ve bunun sonucunda yönelim kutuplanması oluşur (Şekil 1.3). Bir molekülün benzer olmayan elemanları arasındaki asimetrik yük dağılımı bir dış alanın yokluğunda da var olan sürekli dipol momentlere sebep olur. Bazı dielektriklerde dört kutuplu (kuardropol), sekiz kutuplu (oktupol) ve bunun gibi çok kutuplar bulunabilmektedir fakat bunların kutuplanmaya katkısı oldukça azdır. Elektronik, atomik ve iyonik kutuplanmaların ortak yönü, her bir kutuplanma sürecinde yüklerin dönmeyip, birbirlerinden uzaklaşmalarıdır.

Yönelme kutuplanmasında ise kalıcı dipoller, dış alan etkisiyle dönmeye zorlanırlar. Yönelme kutuplanması 10^3 - 10^9 Hz aralığında gözlenir (Ufuktepe ve Bozdemir, 1997).

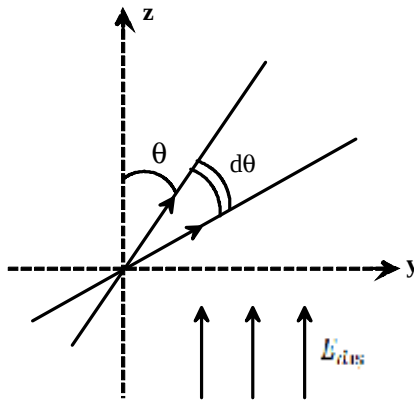
Çok atomlu bazı moleküllerde atomik bağ kısmen iyoniktir. Her bir atom pozitif veya negatif yükle yüklenme eğilimindedir. Çok atomlu moleküllerde birçok atomik bağ, sürekli dipol momentine sahip olabilir. Bütün molekülün dipol moment, her bir bağın dipol momentlerinin toplamına eşittir.

Kalıcı dipol momente sahip moleküllere elektrik alanı uygulandığında, normal olarak tüm moleküllerin alan doğrultusunda yönelmesi beklenir. Ancak, bu yönelme moleküllerin ısı enerjisi ve karşılıklı etkileşimleri nedeni ile doğan potansiyel enerjileri tarafından engellenir.

İstatistik mekaniğin yöntemleri kullanılarak moleküler dipol yönelmelerinin mertebesi nicel olarak çıkartabilir. Şöyle ki, T sıcaklığında, birim hacim başına kutuplu moleküllerin bir topluluğu göz önüne alınsın. Klasik olarak, her bir dipol, alan doğrultusu ile keyfi bir θ açısı yapacak biçimde yönelecektir. Elektrik alanı, Şekil 1.3 'de görüldüğü gibi, z -eksenine paralel olarak uygulanmış olsun. Her bir dipolün üzerine etki eden $E_{y\text{erel}}$ alan içindeki enerjisi

$$U = -mE_{y\text{erel}}\cos\theta \quad (1.11)$$

ile verilir.



Şekil 1.3. Elektrik alan içine konulmuş kutuplu maddenin bir çift-kutbundaki yönelme

Kutuplanma, $\langle P \rangle = Nm \langle \cos\theta \rangle$ olup, burada $m \langle \cos\theta \rangle$ ısı ortalamalı dipolmomentidir. Boltzman'ın dağılım yasasına göre, $d\Omega$ katı açısı içinde kalan bir bölgede bir molekülün göreceli bulunma olasılığı, $e^{-U/k_B T}$ ile orantılıdır. O halde,

$$\langle \cos\theta \rangle = \frac{\int e^{-\beta U} \cos\theta d\Omega}{\int e^{-\beta U} d\Omega} \quad (1.12)$$

olur. Burada, T mutlak sıcaklık, $\beta = 1/k_B T$, $k_B T = 1.38 \times 10^{-23} J/K$ Boltzman sabiti ve $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$ 'dır. İntegrali tüm katı açılar üzerinden aldığımızda

$$\langle \cos\theta \rangle = \frac{\int_0^{2\pi} 2\pi \sin\theta \cos\theta e^{\beta m E \cos\theta} d\theta}{\int_0^{2\pi} 2\pi \sin\theta e^{\beta m E \cos\theta} d\theta} = \coth x - \frac{1}{x} \equiv L(x) \quad (1.13)$$

bulunur. Burada $x = mE_{yerel}/k_B T$ ve $L(x)$ Langevin fonksiyonudur. Deneysel olarak en önemli durum $mE \ll k_B T$ dir. $x \ll 1$ limitinde

$$L(x) = \frac{1}{x} + \frac{x}{3} - \frac{x^3}{45} + \dots + \left(-\frac{1}{x}\right)$$

biçiminde seriye açılabilir. Buradan

$$\langle P \rangle = Nm \left[\coth\left(\frac{mE}{k_B T}\right) - \frac{k_B T}{mE} \right] \approx \frac{Nm^2 E}{3k_B T} \quad (1.14)$$

olur. Yönelme kutuplanması, diğerlerinden farklı olarak, sıcaklıkla ters orantılı değişir ve bu nedenle yüksek sıcaklıklarda kaybolur. Manyetizmadaki benzeri özelliklere sahip paramanyetik maddelerden esinlenerek, bunlara *paraelektrik* maddeler denir. Ortamdaki elektronik kutuplanmayı da hesaba katarsak, toplam kutuplanma için

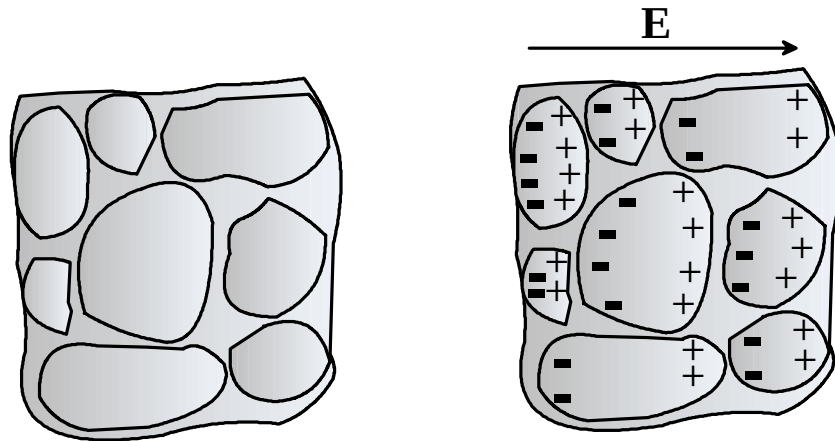
$$P = P_e + \frac{Nm^2 E}{3k_B T} = \left(\alpha_e + \frac{m^2}{3k_B T} \right) N E_{yerel} \quad (1.15)$$

yazabiliriz.

Bazı dielektrik malzemelerin dış bir alan yokluğunda bile dipol momentlerinin olduğu, yani net dipol momentlerinin sıfır olmadığı gözlenir. Böyle malzemelere *elektret* denir. Elektretler bazı mum ya da plastiklerin ısıtılıp (yumuşatılmaları) bir elektrik alana konulmaları ile yapılabilir. Bu malzemelerdeki kutuplu moleküller uygulanan alanla dizilmeye ve normal sıcaklıklarına döndürülmeleri ile yeni konumlarında dondurulmaya çalışılır. Sonrasında, dış elektrik alan olmaksızın bile kalıcı kutuplanma varlığını sürdürür. Elektretler ya da ferroelektrikler kalıcı mıknatısların elektriksel eşdeğerleridir.

1. 1. 3. 5. Arayüzey kutuplanması

Uzay-yük kutuplanması olarak da bilinen ara yüzey kutuplanması genel olarak elektriksel açıdan heterojen materyallerde gözlenir. Daha önce sözünü ettiğimiz kutuplanmalardan farklı olarak ara yüzey kutuplanması bir madde elemanından daha fazlası olduğunda veya birbirine zıt kimyasal diziler içeren bir maddede farklı oluşumlar olduğunda ve bu heterojen sistemlerin ara yüzeylerinde yük taşıyıcıları engellendiğinde meydana gelir (Şekil 1.4).



Şekil 1.4. Arayüzey – Uzay Yük kutuplanması

Kutuplanma, hareketli yüklü parçacıkların bir dış elektrik alan altında ara yüzeylerde toplanmasıyla meydana gelmektedir ve bu yüzeyler, serbest yüklerin bir

kristalden diğerine hareketini engelleyici rol oynarlar. Diğer bir ifadeyle arayüzey kutuplanması gerçek tek bir kristaldeki kusurlar (boşluklar, safsızlıklar, çatlaklar, vs.) üzerinde serbest yüklerin birikiminin bir sonucu olarak meydana gelmektedir. Bu yük artışının neden olduğu birikmeden dolayı elektrik alanın bozulması maddenin tüm sığasının artmasına neden olur (Koşal, 2001). Örneğin polikristal materyallerde birleşme yüzeylerinde serbest yükler birikebilir ve bu birikmiş yüklerden doğan kutuplanma diğer kutuplanmalara bir katkı sağlar. Bu kutuplanma mekanizması düşük ve orta düzeyde frekanslardaki dielektrik yapıların tasarımında büyük rol oynamaktadır. $\text{Pb}(\text{Zr}_{0.52}\text{Ti}_{0.48})\text{O}_3$, SrTiO_3 , $\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{Ga}_{0.8}\text{Mg}_{0.2}\text{O}_3$ vb. maddeler 10^{-3} - 10^3 Hz aralığında görülen arayüzey kutuplanmasına örnek olarak verilebilir.

1. 1. 4. Dielektriklerde iç alan problemi

Moleküllerin karakteristik özelliklerinin uygunluğa nasıl bağlı olduğu, ortamdaki moleküller üzerine etkiyen yerel alan ile, dıştan uygulanan alan arasındaki ilişkiyle belirlenir. Bu, dielektrikte iç alan problemi olarak bilinir ve dipoller arasındaki etkileşmelerin önemsenmediği ortamlar dışında henüz doyurucu bir çözümü yapılabilmiş değildir.

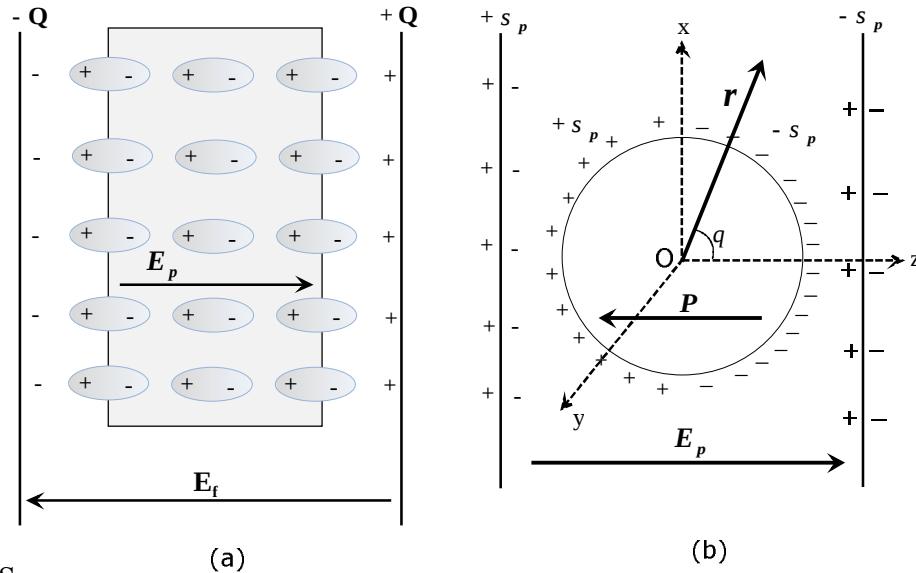
Çizgisel ortamın χ uygunluğu (1.6) denkleminde $P = \epsilon_0 \chi E_{iç}$ bağıntısı ile tanımlanmıştır. Burada $E_{iç}$, ortamın ortalama makroskobik iç alanıdır. 10^{-3} cm uzaysal boyutlarda dağılmış 10^{10} mertebesinde moleküler dipol içeren, molekül aralıklarının büyük olduğu yoğun ortamlarda, makroskobik alan ile herhangi bir moleküle veya molekül kümesine etkiyen alan arasında önemli bir fark olmayabilir fakat moleküllerin birbirine çok yakın olduğu 10^{-7} cm uzaysal boyutlarda $10^{10} - 10^{12}$ sayıda molekülün bulunduğu ortamlarda, komşu moleküllerin kutuplanmasının anlık değerlerinin sıfırdan farklı olduğu göz önüne alınırsa, verilen herhangi bir molekül üzerine etkiyen E_{yerel} alanı, E makroskobik alandan farklı olmalıdır.

E_{yerel} alanının hesaplanması için şöyle bir sistem düşünülebilir: Yüklü bir kondansatörün levhaları arasına yerleştirilmiş ve düzgün olarak kutuplanmış dielektrik ortamda yarıçapı a (çok küçük) olan, içinde bir miktar dipol bulunan

küresel bir oyuk olsun (Şekil 1.5). Oyuğun merkezindeki dipola etki eden yerel veya moleküler alan

$$\mathbf{E}_{yerel} = \mathbf{E}_f + \mathbf{E}_p + \mathbf{E}_L + \mathbf{E}' \quad (1.16)$$

bağıntısı ile verilir. Burada $\mathbf{E}_f$ yüklü kondansatörün levhalarındaki serbest yüklerin alanı, $\mathbf{E}_p$ kutuplanmış dielektrik ortamın dış yüzeylerinde oluşan $\mp\sigma$ bağlı yüklerin alanı, $\mathbf{E}_L$ oyuk dışındaki ortamı temsil eden oyuk yüzeyindeki bağlı yüklerin alanı ve $\mathbf{E}'$ ise oyuk içinde bulunan çift-kutupların alanını temsil etmektedir.



Ş
Şekil 1.5. (a) arasında dielektrik bir madde bulunan yüklü bir kondansatör,
(b) Dielektrik ortamda küresel oyuk

(1.16) ifadesinin sağındaki ilk iki alanın toplamına, ortamın makroskobik alanı diyelim ve $\mathbf{E}$ ile gösterelim. Böylece

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_f + \mathbf{E}_p = \left(\frac{\sigma_s}{\varepsilon_0} - \frac{\sigma_p}{\varepsilon_0} \right) \mathbf{n} \quad (1.17)$$

yazabiliriz. Burada $\mathbf{n}$ yüzeye dik birim vektördür. Dielektrik ortamın dış yüzeyleriyle kondansatör levhaları arasında belli bir boşluk bulunmasından dolayı burada $D = \sigma_s$ olup, sürekliidir. Yani dielektrik ortam ile aynı

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E}_f = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} \quad (1.18)$$

şeklindedir. (1.17) ve (1.18) ifadeleri (1.16) ifadesi ile birleştirilirse

$$\mathbf{E}_{yemel} = \mathbf{E} + \mathbf{E}_L + \mathbf{E}' \quad (1.19)$$

elde edilir. Bu sonuç, oyuğun geometrisinden bağımsız ve oldukça geneldir. Lorentz alanı olarak da bilinen $\mathbf{E}_L$, $\mathbf{P}$ kutuplanmasıyla anlatılan bir ortalama yaklaşıklıkta işe karışan oyuğun dışındaki dipollerden gelen katkıdır. Doğru bir hesaplamının yapılabilmesi için, söz konusu dipole yakın olan moleküllerin özel şekillenimlerini ve konumlarını bilmemiz gerekir. Fakat bu her madde için mümkün olmayabilir. Şekil 1.5b 'de görüldüğü gibi küresel oyuk yüzeyinde oluşan kutuplanma yüklerinin yüzey yük yoğunluğu $\sigma_p = \mathbf{P} \cdot \mathbf{n} = P_n$ dir. Kutuplanmanın yönünü $\mathbf{P}$ yönünde gösterir ve kutupsal koordinatları kullanırsak bu yüklerin küre merkezinde oluşturduğu elektrik alanı $\mathbf{E}_L$ için

$$\mathbf{E}_L = \frac{P}{4\pi\epsilon_0} \int_{\phi=0}^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \cos^2\theta \sin\theta d\theta = \frac{P}{3\epsilon_0} \quad (1.20)$$

bulunur. Küre yarıçapını çok küçük varsaydığımız için $\mathbf{P}$ vektörü küre içinde sabit olur. Oyuk içindeki yakın moleküler dipollerin oluşturduğu alanı saptamak, özel geometrik yapı dışında, çok zordur. Lorentz, basit bir kübik örgüdeki çift-kutuplar için, her örgü köşesinde $\mathbf{E}'$ alanının sıfır olduğunu göstermiştir. Böylece basit kübik örgüler için $\mathbf{E}' = 0$ ise, tümü ile gelişigüzel durumlar için de $\mathbf{E}' = 0$ olması düşünülebilir. Buna göre, cam gibi kristal yapısız (amorf) maddelerin, yakın moleküllerinden meydana gelen bir iç alana sahip olmamaları beklenir.

1. 1. 4. 1. Clausius-Mossotti denklemi

Yukarıda izlenen yöntemle göre, dielektrik bir ortamda bulunan bir dipol üzerine etkiyen net yerel alan, ortamdaki makroskobik $\mathbf{E}$ alanı ile Lorentz alanının toplamına eşit olmaktadır:

$$\mathbf{E}_{yerel} = \mathbf{E} + \frac{\mathbf{P}}{3\epsilon_0} \quad (1.21)$$

Etki ile kutuplanan bir moleküler dipolün $\mathbf{m}$ momenti $\mathbf{E}_{yerel}$ alanı ile orantılı olup, $\mathbf{m} = \epsilon_0 \alpha \mathbf{E}_{yerel}$ yazılır. α orantı katsayısına kutuplanabilirlik (polarizability) denir ve maddenin moleküler düzeyde kutuplanmasının bir ölçüsüdür. Dipollerin karşılıklı etkileşmediği durumlarda $\mathbf{P}$ kutuplanması için,

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{P} \rangle &= N \langle \mathbf{m} \rangle \\ &= \epsilon_0 N \alpha \langle \mathbf{E}_{yerel} \rangle \\ &= \epsilon_0 N \alpha \langle \mathbf{E} + \frac{\mathbf{P}}{3\epsilon_0} \rangle \end{aligned} \quad (1.22)$$

yazar ve $\mathbf{E}$ ile $\mathbf{P}$ 'nin aynı yönlü vektörler olduğunu göz önüne alır ve $\mathbf{P}$ için daha önce bulduğumuz $\mathbf{P} = \epsilon_0(\epsilon_r - 1)\mathbf{E}$ 'eşitliğini (1.22) de yerine koyarsak

$$\begin{aligned} \epsilon_0(\epsilon_r - 1)\mathbf{E} &= \epsilon_0 N \alpha \left(\mathbf{E} + \frac{\epsilon_r - 1}{3} \mathbf{E} \right) \\ \frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} &= \left(\frac{N}{3} \right) \alpha \\ \alpha &= \frac{3}{N} \left(\frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} \right) = \frac{3}{N} \left(\frac{\chi}{\chi + 3} \right) \end{aligned} \quad (1.23)$$

bulunur. Bu ifade tek tip bir molekül için, Clausius-Mosotti denklemi olarak bilinir ve ϵ_r dielektrik sabitini veya χ makroskobik duyunluğu, mikroskobik kutuplanabilirlik α 'ya ve çift kutup yoğunluğu N 'ye bağlamaktadır. Denklemin

geçerliliği yaklaşık olarak gazlar ve sıvılara uygundur. Dipollerin karşılıklı etkileşmelerinin önemli rol oynadığı katı maddelerde geçerliliği oldukça zayıftır.

Sadece polar maddeleri ele alırsak, orada yönelme kutuplanması diğerlerinden farklı olarak sıcaklıkla ters orantılıdır. Bu nedenle yüksek sıcaklıklarda kaybolur. Manyetizmadaki benzeri özelliklere sahip paramanyetik maddelerden esinlenerek, bunlara paraelektrik maddeler denir. Ortamdaki elektronik kutuplanmayı da hesaba katarsak, toplam kutuplanma için

$$P = P_e + \frac{Nm^2 E_{yere\ell}}{3k_B T} = \left(\alpha_e + \frac{m^2}{3k_B T} \right) N E_{yere\ell} \quad (1.24)$$

yazabiliriz.

Clausius-Mossotti denklemi, kutuplu moleküllerin bulunduğu bir ortamda geçerli olduğunu varsayarsak ve elektronik kutuplanabilirlik α_e 'yi ihmal edersek yönelme kutuplanabilirliği için

$$\alpha = \frac{P}{N E_{yere\ell}} = \frac{m^2}{3k_B T} \quad (1.25)$$

elde edilir. Bunu (1.23) ifadesinde yerine yazarsak, χ duygunluk için

$$\frac{m^2}{3k_B T} = \frac{3\varepsilon_0}{N} \frac{\chi}{\chi+3} \quad \text{ya da} \quad \chi(T) = \frac{3T_c}{T-T_c} \quad (1.26)$$

bulunur. Burada $T_c = Nm^2/9\varepsilon_0 k_B$ kritik sıcaklık denir. Bu, manyetizmada *Curie-Weiss* yasası olarak bilinir. Sıcaklık kritik sıcaklığa doğru yaklaştıkça duygunluk, asimtotik olarak sonsuz olmaktadır. Bu özellik sadece Ferroelektrik maddelerde gözlenmiştir. Ferroelektrik maddeler, dıştan bir elektrik alanı uygulanmadan kalıcı kutuplanması olan maddelerdir. Baryum Titanat ($BaTiO_3$) ferroelektrik maddelere iyi bir örnektir.

Dielektrik bir ortamda yerel elektrik alanın Lorentz alanı alınması ve Clausius-Mossotti denkleminin geçerli kabul edilmesi halinde her maddenin duygunluğunun

belli bir kritik sıcaklıkta sonsuz olması beklenir. Ferroelektrik maddeler dışındaki ortamlarda böyle bir özellik gözlenmemiştir. Bu tutarsızlığı Onsager (1936) ilk kez dielektrik ortamda bir dipol üzerine etki eden yerel elektrik alanını, $\nabla^2 \Phi = 0$ Laplace denkleminin küresel koordinatlarda çözümünden ve elektrostatiğin sınır-değer problemlerini kullanarak gidermeyi başarmıştır.

1. 1. 5. En Yakın İki Dipolün Etkileşme Enerjisi

Birbirinden r mesafede bulunan $\mathbf{m}_1$ ve $\mathbf{m}_2$ ile verilen iki dipol için (Şekil 1.6) etkileşme enerjisi

$$H_{m_1, m_2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{1}{r^3} \mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{m}_2 - \frac{3}{r^5} (\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{r})(\mathbf{m}_2 \cdot \mathbf{r}) \right] \quad (1.27)$$

şeklinde verilir. $\mathbf{m}_1$ ve $\mathbf{m}_2$ dipolleri arasındaki açı γ olsun. Bu durumda γ için θ_1, θ_2 ve $\varphi_2 - \varphi_1$ ifadeleri cinsinden

$$\cos(\gamma) = \sin\theta_1 \sin\theta_2 \cos(\varphi_2 - \varphi_1) + \cos\theta_1 \cos\theta_2 \quad (1.28)$$

yazılabilir. Böylece enerji ifadesi için, dipoller arası mesafe ve açılar cinsinden

$$H_{m_1, m_2} = \frac{m_1 m_2}{4\pi\epsilon_0 r^3} \{ \sin\theta_1 \sin\theta_2 \cos(\varphi_2 - \varphi_1) - 2\cos\theta_1 \cos\theta_2 \} \quad (1.29)$$

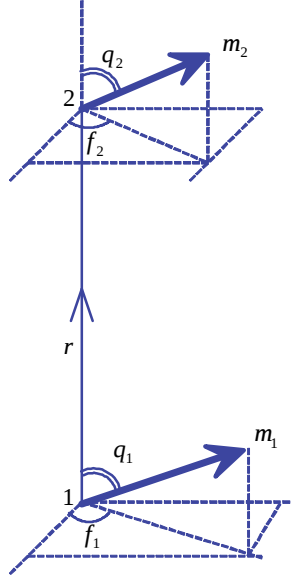
bağıntısı elde edilir. (1.29) bağıntısından $\theta_1 = \theta_2$ yada $\theta_1 = \theta_2 = \pi$ için ($\leftarrow \dots r \dots \leftarrow$) enerjinin minimum değerine

$$(H_{m_1, m_2})_{min} = -2 \frac{m_1 m_2}{4\pi\epsilon_0 r^3} \quad (1.30)$$

ulaşılır. $\theta_1 = 0$ ve $\theta_2 = \pi$ yada $\theta_1 = \pi, \theta_2 = 0$ değerleri ile ($\rightarrow \dots r \dots \leftarrow$) enerjinin

$$(H_{m_1, m_2})_{maks} = +2 \frac{m_1 m_2}{4\pi\epsilon_0 r^3} \quad (1.31)$$

ile verilen maksimum değerine ulaşılır.



Şekil 1.6. Aralarında r mesafesi bulunan iki dipol

Dipollerin farklı özel yönelimleri için de enerji ifadeleri yazmak mümkündür. Örneğin dipol yönelimlerinin $\varphi_1 - \varphi_2 = \pi$ ve $\theta_1 = \theta_2 = \pi/2$ koşulları ile anti paralel olduğu ($\uparrow \dots r \dots \downarrow$) durum için

$$(H_{m_1, m_2})_{antipar} = -\frac{m_1 m_2}{4\pi\epsilon_0 r^3} \quad (1.32)$$

bağıntısı yada $\varphi_1 - \varphi_2 = 0$ ve $\theta_1 = \theta_2 = \pi/2$ koşulları ile paralel olduğu ($\uparrow \dots r \dots \uparrow$) durum için

$$(H_{m_1, m_2})_{par} = \frac{m_1 m_2}{4\pi\epsilon_0 r^3} \quad (1.33)$$

ifadesi elde edilir.

1. 1.6. Zamana Bağlı Alanlarda Lineer Dielektrikler

Statik durumlarda, yani zamandan bağımsız elektrik alanın neden olduğu kutuplanma elektrik alan şiddetiyle orantılı ve denge halindedir. Dinamik durumda ise elektrik alan zamanla değişmektedir ve kutuplanma da elektrik alan şiddetiyle bir denge içinde olmak zorunda değildir. Dinamik durumda, elektrik alan şiddeti zamanla değiştiği için bu değişen alanın neden olduğu kutuplanma da değişir.

Mikroskobik parçacıklar (moleküller, iyonlar, atomlar ve elektronlar) kutuplanmanın belli bir değerine ulaşmak için 10^{-6} s veya daha az olan karakteristik bir zamana ihtiyaç duyarlar. Şayet elektrik alan şiddeti hissedilir bir şekilde periyodik olarak değişirse madde içindeki mikroskobik parçacıklar bu değişime uygun bir kutuplanma gerçekleştiremeyebilir. Yani elektrik alan şiddetinin değişim hızına yetişemeyen bir kutuplanma meydana gelir. Bu durumda kutuplanma, elektrik alanın değişimiyle aynı anda gerçekleşemez, yani bir gecikme gözlenir. Bu durum ‘mikroskobik parçacıkların elektrik alan değişimine olan tepkisi bir zaman gecikmesiyle olur’ şeklinde ifade edilebilir.

Elektrik alan şiddetinin zamanla değişimi mikroskobik parçacıkların kutuplanmasıyla karşılaştırıldığında yeterince yavaşsa bu durumda kutuplanmayla elektrik alan şiddeti bir uyum içinde olur. Bu duruma yarı-statik durum denir ve $\mathbf{E}(t)$ ile orantılı bir $\mathbf{P}(t)$ kutuplanması görülür. Lineer ve izotropik bir dielektrik için

$$\mathbf{P}(t) = \varepsilon_0 \chi \mathbf{E}(t) \quad (1.34)$$

ve

$$\mathbf{D}(t) = \varepsilon_r \varepsilon_0 \mathbf{E}(t) \quad (1.35)$$

yazabiliriz. Statik durum için geçerli olan bağıntılar yarı-statik durum için de geçerlidir. İzotropik bir ortam ile, kendi içerisinde lineer olan yani malzeme üzerinde herhangi bir noktanın diğer noktalardan bir farka sahip olmaması, bir başka deyişle malzeme üzerinde yapılan bir ölçümün malzemenin yönünden veya herhangi bir

noktasından bağımsız olmasını kastediyoruz. Amorf katılar, kutuplanma teorisinde izotropik bir ortam teşkil ederler. Lineer kristal yapıya sahip olmayan bu maddeler, elektrik alanının uygulanma yönünden bağımsız olarak her noktasında yönden bağımsız özdeş kutuplanmalar gösterirler.

Dinamik durum için en kolayı elektrik alanının harmonik olarak ele alınmasıdır. Bu halde zamana bağlı elektrik alan

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 \cos(\omega t) \quad (1.36)$$

ile verilir. Burada $\mathbf{E}_0$ genliktir ve ω da sinüzoidal değişimin açısal frekansıdır. Eğer sinüzoidal elektrik alanının frekansı çok yüksek ise mikroskopik parçacıklar bu değişime aynı anda (eş zamanlı olarak) bir tepki veremezler. Bu davranış, yarı-statik durumlar için de geçerlidir. Lineer, izotropik bir madde için yer değiştirme vektörü $\mathbf{D}$, elektrik alanla δ faz farkıyla bir tepki içindedir. Yani yer değiştirmedeki gecikme δ faz farkıyla olmaktadır. Bunu

$$\mathbf{D}(t) = \mathbf{D}_0 \cos(\omega t - \delta) \quad (1.37)$$

şeklinde ifade ederiz. Buradan

$$\mathbf{D}(t) = \mathbf{D}_0 \cos \delta \cos(\omega t) + \mathbf{D}_0 \sin \delta \sin(\omega t) \quad (1.38)$$

elde edilir. (1.37) denklemi, frekansın yeterince küçük olması durumunda δ 'nın sıfır olması nedeniyle statik durumu karşılar. Elektrik alanının frekansı değiştiği zaman δ faz farkı da frekansa bağlı olarak değişecektir. Eğer frekans yeterince düşük ise δ sıfır olacak ve durgun veya yarı durgun şartlara ulaşacaktır. (1.38) denklemini aşağıdaki biçimde yeniden yazarsak

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}_0 \cos \delta \cos(\omega t) + \mathbf{D}_0 \sin \delta \sin(\omega t) \quad (1.39)$$

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}_1 \cos(\omega t) + \mathbf{D}_2 \sin(\omega t) \quad (1.40)$$

$$\varepsilon'(\omega) = \frac{D_1}{E_0} = (D_0/E_0) \cos(\delta) \quad (1.41)$$

$$\varepsilon''(\omega) = \frac{D_2}{E_0} = (D_0/E_0) \sin(\delta) \quad (1.42)$$

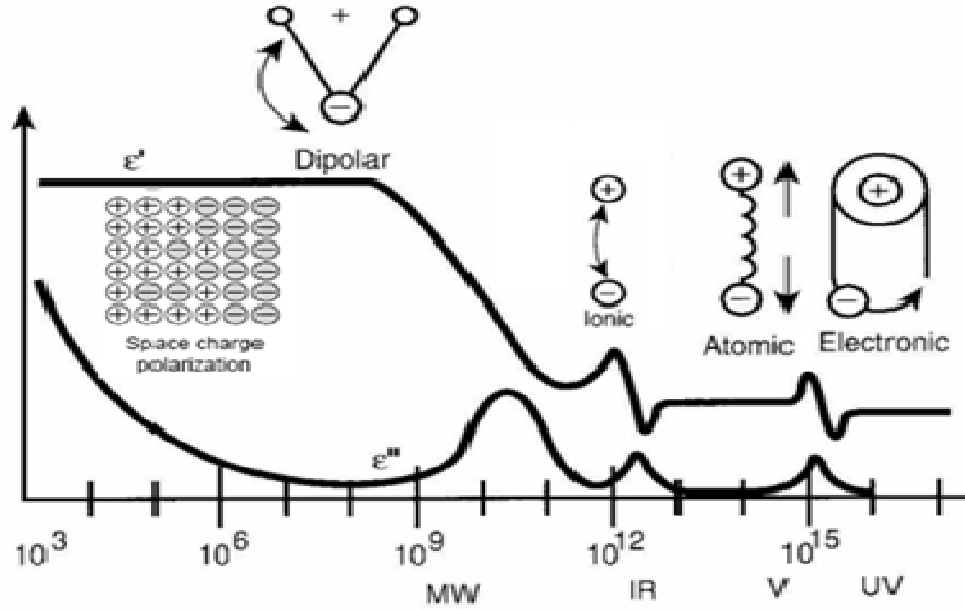
elde edilir. Böylece periyodik bir alan için D ile E arasındaki ilişki, genlik ve faz farkı yerine $\varepsilon'(\omega)$ ve $\varepsilon''(\omega)$ gibi frekansa bağlı dielektrik geçirgenliğin reel ve sanal bileşenleri cinsinden yazılır. Böylece (1.38) denklemi daha basit bir biçimde

$$\mathbf{D}(t) = \varepsilon'(\omega)\mathbf{E}_0\cos(\omega t) + \varepsilon''(\omega)\mathbf{E}_0\sin(\omega t) \quad (1.43)$$

yazılabilir.

Frekansın sıfır olması durumunda (1.43) denklemi statik duruma indirgenir ve burada $\varepsilon'(0) = \varepsilon$ statik durumdaki dielektrik sabitine karşılık gelir. Buradan, $\varepsilon'(\omega)$ 'nın sinüzoidal bir alan etkisindeki bir malzemede genelleştirilmiş dielektrik sabiti olduğunu söyleyebiliriz. Böylece $\varepsilon'(\omega)$, “*frekansa bağlı dielektrik sabiti*” olarak adlandırılır.

$\mathbf{D}(t)$ 'yi belirleyen diğer bir parametre ise $\varepsilon''(\omega)$ 'dir. Bu parametre $\mathbf{E}(t)$ ye göre $\pi/2$ 'lik faz farkına sahip olan $\mathbf{D}(t)$ 'nin diğer bileşeninin genliğinin bir ölçüsüdür ve “*kayıp faktörü*” olarak adlandırılır. Frekansa bağlı olan dielektrik sabiti $\varepsilon'(\omega)$ ve kayıp faktörü $\varepsilon''(\omega)$ uygun deneylerle frekansın fonksiyonu olarak ölçülebilirler. Düşük frekanslarda $\varepsilon'(\omega)$ ifadesi statik durumdaki ε 'a eşittir, bu halde $\varepsilon''(\omega)$ sıfır olmaktadır. Frekans yükselirken belirli aralıklarda $\varepsilon'(\omega)$ azalırken $\varepsilon''(\omega)$ ise artar. ε' ile ε'' 'nın frekansa göre değişimleri arasında ters bir ilişki vardır.



Şekil 1.7. Yoğun fazdaki polar bileşikler için frekansa bağlı dielektrik sabitinin dağılımı ve kayıp pikleri

Daha önce de sözünü ettiğimiz gibi, deneysel gerçekler bize kutuplanmaların ara yüzey, yönelim (orientation), iyonik, atomik ve elektronik olmak üzere beş kısımda gerçekleştiğini göstermektedir. Kutuplanmalar moleküllerin, iyonların, atomların ve elektronların bir dış elektrik alan etkisiyle hareketlerinden oluşmaktadır ve bu beş kısım kutuplanmanın her biri farklı karakteristik zamanlara sahiptirler. Bu, Şekil 1.7 'den kolayca görülmektedir. İlk olarak $10^{-3} - 10^3 \text{ Hz}$ aralığında arayüzey kutuplanmaları, $10^3 - 10^9 \text{ Hz}$ aralığında yönelme kutuplanmaları, $10^{12} - 10^{13} \text{ Hz}$ aralığında iyonik kutuplanma, $10^{14} - 10^{15} \text{ Hz}$ atomik ve yukarı frekanslarda ise elektronik kutuplanma gözlenmektedir.

Bu kutuplanma süreçleri her frekansta üst üste binerek bir tepki oluşturmazlar, yani moleküler düzeyde bir tepkiyle karşılaşıldıktan sonra elektrik alanın frekansı daha da arttırılırsa elektrik alanın bu artan frekansına karşı moleküller bir tepki vermekte gecikirler. Frekans daha da arttığında moleküller hiç tepki veremez hale gelirler. Moleküler düzeyden atomik düzeye geçildiğinde yalnızca atomlar ve elektronlar bu yüksek frekansa bir cevap ya da bir tepki verebilirler. Atomik frekans aşılmıca atomlar da moleküller gibi bu yüksek frekansa tepki veremezler. Dış alanın

frekansı elektronun frekansı yakınlarında ise yalnızca elektronlardan kaynaklanan bir tepki vardır.

Frekansa bağlı dielektrik sabiti ve kayıp faktörü, farklı frekans bölgelerinde farklı davranışlar göstermektedir. Elektromanyetik spektrumun optik bölgesinde bunların davranışı kırılma indisi ve soğurma (absorpsiyon) ölçümleriyle belirlenir. Kırılma indisinin frekansa göre gösterdiği değişime dağılım (dispersion) adı verilir. Optik bölgede frekansla kırılma indisindeki artış normal dağılım özelliği gösterir. Bazı özel durumlarda bunun tam tersi olabilmektedir; frekansın artan değerlerine karşılık kırılma indisinde bir azalma olur, ki buna anormal dağılım denir. Yapılan çalışmalarda moleküler hareketlerin elektrik alanın gerisinde kaldığı frekanslarda tüm polar bileşiklerde bu durum gözlenmiş ve aslında bu dağılımın normal olduğu anlaşılmıştır.

Yönelme kutuplanması için dağılım bölgesinde frekansa bağlı dielektrik sabitinin frekansa göre değişimini veren eğri, atomik ve elektronik kutuplanma için olandan farklılık gösterir. ϵ'' 'nın atomik ve elektronik kutuplanma için verdiği maksimumlar diğerinden daha keskindir. Bu, yönelim kutuplanması ve uyarılmış kutuplanma veren moleküler süreçlerin her dağılım bölgesinde farklı kaynaklı olması sonucudur. Yönelme ve uyarılma ile oluşan kutuplanmaların dinamik davranışlarındaki farklılık durulma ve rezonans olaylarıyla karakterize edilebilir (Böttcher ve Bordewijk, 1978).

1. 1. 7. Frekansa Bağlı Kompleks Dielektrik Fonksiyonu

Değişken bir alan içindeki dielektrik için $\mathbf{D}$ ile $\mathbf{E}$ arasındaki ilişki frekansa bağlıdır. Dielektrik ortamı oluşturan materyalin, moleküler veya elektronik titreşimlerinin öz frekanslarına yakın olan frekans değerlerinde, durgun veya yarı durgun durum için geçerli olan $\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}$ bağıntısı artık geçerli değildir. Yani elektrik alan $\mathbf{E}$ ile kutuplanma $\mathbf{P}$ ve $\mathbf{D}$ arasında bir faz gecikmesi olur. Her hangi bir anda $\mathbf{P}$ ve $\mathbf{D}$ 'nin değeri aynı andaki $\mathbf{E}$ 'nin değeri ile belirlenemez. Sebep-sonuç ilkesine göre t anındaki uyarılma, t zamanından önceki $\mathbf{E}$ 'in yapmış olduğu etki sonucunda ortaya çıkar. Yani ϵ artık bir sabit olmaktan çıkarak frekansa bağlı olarak bir dağılım

gösterir. Genel olarak dispersiyon adı verilen olayın meydana geldiği yüksek frekans değerlerine sahip periyodik alanlar için kompleks dielektrik katsayısı, lineer ve izotropik dielektrikler için ortamın özelliklerine ve frekansa bağlı olarak

$$\frac{\varepsilon^*(\omega) - \varepsilon_\infty}{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty} = \int_0^\infty f(t) e^{-i\omega t} dt \quad (1.44)$$

ile verilir (Landau ve Lifshitz, 1960). Burada $f(t)$ tepki fonksiyonu olarak bilinir. Ortamın özelliklerine ve zamana bağlı bir fonksiyondur ve birim elektriksel alan başına kutuplanmadaki gecikmeyi verir. $f(t)$ tepki fonksiyonu; $f(t) = -d\phi(t)/dt$ eşitliği ile ifade edilir. Burada $\phi(t)$ durulma fonksiyonu olup tanım gereği $t = 0$ anında sabit bir dış alanın kaldırılmasından sonra sistemin birim hacimdeki toplam elektrik dipol momentinin zamanla nasıl bozunacağını ifade eder ve $\phi(t) = P(t)/P(0)$ ile verilir. Buna göre harmonik bir alan içindeki sistemi karakterize eden kompleks dielektrik sabiti $\varepsilon^*(\omega)$ ile $\phi(t)$ durulma fonksiyonu arasındaki bağıntı

$$\frac{\varepsilon^*(\omega) - \varepsilon_\infty}{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty} = \int_0^\infty e^{-i\omega t} \left(-\frac{d\phi(t)}{dt} \right) dt \quad (1.45)$$

veya bu eşitliğin sağ tarafının kısmi integralinin alınmasıyla

$$\frac{\varepsilon^*(\omega) - \varepsilon_\infty}{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty} = 1 - i\omega \int_0^\infty e^{-i\omega t} \phi(t) dt \quad (1.46)$$

şeklinde integral denklemiyle verilir. Kompleks dielektrik sabiti $\varepsilon^*(\omega)$, ω 'nın sonsuza yaklaşan limit değerinde, ε_∞ ve ω 'nın sıfıra yaklaşan limit değerinde de ε_s gibi bir değere eşit olur. $[\varepsilon^*(\omega) - \varepsilon_\infty]/(\varepsilon_s - \varepsilon_\infty)$ ifadesine normalize edilmiş kompleks dielektrik duygunluk fonksiyonu denir ve genelde $\chi(\omega)$ ile gösterilir. Normalize edilmiş dielektrik fonksiyonu $\chi(\omega)$ 'nın reel kısmı $\chi'(\omega)$, sanal kısmı $\chi''(\omega)$ olmak üzere $\chi(\omega) = \chi'(\omega) - i\chi''(\omega)$ ile verilir. (1.45) ve (1.46) eşitliklerinden yararlanarak bir sistemin durulma fonksiyonu analitik olarak verildiğinde veya deneysel olarak ölçüldüğünde onun normalize edilmiş kompleks

dielektrik sabitinin reel ve sanal kısımları bulunabilir. (1.46) denkleminin ters Laplace dönüşümü yapılarak da $\phi(t)$ durulma fonksiyonu $\chi(\omega)$ cinsinden ifade edilebilir

Dielektrik içinde depolanan enerji χ' ile orantılı, ısı şeklinde açığa çıkan enerji ise $\chi''(\omega)$ ile orantılıdır. Dielektrik içinde birim hacimde, birim zamanda açığa çıkan enerji:

$$W = \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} IE dt \quad (1.47)$$

ile verilir. Burada I kondansatör içindeki akımdır; $I = dq/dt$, q ise kondansatör levhalarındaki yüzey yük yoğunluğudur. Ayrıca $D = q$ olduğu için akım;

$$I = \frac{dD}{dt} = \omega(-D_1 \sin(\omega t) + D_2 \sin(\omega t)) \quad (1.48)$$

şeklinde olur. Buradan birim hacimde birim zamanda açığa çıkan enerji şu şekilde olur:

$$W = \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} \omega[-D_1 \sin(\omega t) + D_2 \sin(\omega t)] E_0 \cos(\omega t) dt \quad (1.49)$$

$$W = \frac{\omega}{4\pi} D_2 E_0 = \frac{\omega}{4\pi} E_0^2 \chi'' \quad (1.50)$$

Normalize edilmiş dielektrik duyguluk fonksiyonu $\chi(\omega) = \chi'(\omega) - i\chi''(\omega)$ 'nın reel ve sanal bileşenleri arasında Kramers-Kronig dönüşümleri Landau ve Lifshitz (1960) tarafından ortaya konmuş, daha sonra Sıtkı Eker (1997) tarafından yüksek lisans çalışması olarak dielektrikte bir takım uygulamaları yapılmıştır:

$$\chi'(\omega) = \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\chi''(z)}{z^2 - \omega^2} dz \quad (1.51)$$

$$\chi''(\omega) = -\frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\chi'(z)}{z^2 - \omega^2} dz \quad (1.52)$$

Kramers-Kronig bağıntıları katıların dielektrik davranışlarının yorumunda temel bir öneme sahiptir. Bağıntı, lineer bir sistemde dielektrik fonksiyonunun sanal kısmı belli bir frekans aralığında biliniyorsa reel kısmını bulma olanağı verir ve bunun tersi de mümkündür.

2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR

Bu bölümde, dielektrik durulma mekanizmasını açıklamak için geliştirilmiş ve “Debye teori, Hiyerarşik Kısıtlanmış Dinamik Durulma Modeli, Förster Direkt-Transfer Modeli, Szigeti dielektrik teorisi, Süzülme Modeli, Fraktal Durulma modeli, Bariyer modelleri, Zincir-dinamik modeli, Kusur Difüzyon Modeli, Stokastik Ising Modeli’ne dayalı çalışmalar ve Kesirli Durulma Süreçleri” olarak da bilinen çalışmalardan bazılarının temel varsayımları ve dielektrik durulma mekanizmasını açıklamadaki yaklaşımları kısaca değerlendirilecektir.

Günümüze kadar yapılan çalışmalar sonucunda evrensel durulma yasasının birbirinden farklı sistemlerde de aynı olduğu gözlenmiş ve kabul edilmiştir. Birbirinden farklı dipolar sistemlerde gözlenen kesirli-üs yasası veya KWW (Kohlrausch-Williams-Watts) yasasını elde eden çok sayıda model çalışmaları yapılmıştır. Zener (1937) tarafından termodinamik ısı alanı ile zorlayıcı (strain) arasındaki karşılıklı etkileşmeyi hesaba katarak, bir lineer katı içindeki zorlayıcı alanın (strain field) durulmasını açıklamak için ortaya konulan model, Debye (1945) tarafından genelleştirilerek dielektrik durulmaya uygulanmıştır (Meltzler ve Klafter, 2002). Debye, bir sıvı içindeki dipol momentlerin, yönlendirilmiş sıralı bir düzenden gelişigüzel bir düzene durulmaları sırasında sıvı parçacıkları ile rastgele çarpıştığını varsaymıştır. Başlangıçta bir dış alan etkisiyle yönlendirilmiş, dipol momentleri $m(t)$ ve yarıçapı R olan küçük küresel dipolar moleküllerin dış alan kaldırıldıktan sonra viskozitesi η ve sıcaklığı T olan bir sıvı içinde nasıl durulacağını ifade eden bu model, ele alınan difüzyon denkleminin belli koşullar altında çözümünden

$$\phi(t) = e^{-t/\tau}, \quad \tau = 4\pi\eta R/kT \quad (2.1)$$

durulma fonksiyonu ortaya koymuştur. Burada τ , karakteristik durulma zamanıdır. Daha sonraları dielektrik durulmanın analiziyle ilgili yapılan deneysel çalışmalar dielektrik durulmanın dinamik davranışını belirleyen durulma fonksiyonlarının klasik Debye durulma fonksiyonuna uymadığını ortaya koymuştur (Williams ve Watt, 1970; Cole, 1989). Debye teorisi, DiMarzio ve Bishop (1974) tarafından viskoelastik

malzemelere uygulanırken, Ivanov (1964) ve Anderson (1972) tarafından da sonlu atlamalı durumlar için geliştirilmiştir.

Williams ve Watts (1970) camı ve polimerik malzemelerle yapılan deneysel sonuçlara dayanarak, bu tür malzemelerin gösterdikleri davranışların, kesirli-üs yasası veya KWW yasası olarak da bilinen ve Debye fonksiyonunun genelleştirilmiş bir hali olan

$$\phi(t) = e^{-(t/\tau)^\beta}, \quad 0 < \beta \leq 1 \quad (2.2)$$

şeklindeki ampirik bir durulma fonksiyonuyla ifade edilebileceğini göstermişlerdir. Dielektrik durulma da dahil olmak üzere birbirinden farklı birçok fiziksel sistemlere ait deneysel gözlemleri açıklamak için KWW fonksiyonu kullanılmaktadır. Kohlrausch'un ilk defa visko-elastikliği açıklamak için önermiş olduğu bu bağıntı Williams ve Watts (1970) tarafından dielektrik durulmayı açıklamada kullanılmıştır. KWW durulma yasasını elde eden fiziksel modellerin dayandığı ortak özellik, hiyerarşik olarak kısıtlanmış veya zorlanmış dinamikleri temel almalarıdır. Jonscher (1977) tarafından KWW durulma fonksiyonunun uyduğu deneysel gözlemlerin geniş bir derlemesi yapılmıştır.

2. 1. Szigeti Dielektrik Teorisi

Szigeti (1949), 1949-1961 yılları arasında kristallerin dielektrik davranışları üzerine bir dizi makale yayınlamıştır. Szigeti'nin teorisi farklı yapıdaki izotropik, anizotropik, iyonik ve kovalent kristallere uygulanabilir bir niteliktedir ve bu teorisi maddenin dielektrik, spektroskopik ve elastik özelliklerini birbirine bağlamaktadır. Teorisi kovalent ve iyonik kristallere ve poliatomik kristallere ek olarak diatomik kristallere de uygulama alanı bulmuştur. Etkin iyonik yükler kavramı, teorisinin önemli kısımlarından biri olarak ortaya çıkmaktadır.

Szigeti, teorisini dielektrik sabiti ve örgü frekansı arasında bir ilişki kurarak geliştirmiştir. Teorinin ana özellikleri aşağıdaki gibidir:

- (i) İyonlar deforme olabilirler

- (ii) Dielektrik içindeki kutuplanma iki kısma sahiptir: infrared kutuplanma ve ultraviyole kutuplanma
- (iii) Ultraviyole kutuplanma elektrik kutuplanmayla aynıyken infrared kutuplanma elektrik ve atomik kutuplanmadan olan katkılara sahiptir.
- (iv) Atomik ve elektronik kutuplanmalar bağımsız değildir ve aralarında bir etkileşim vardır. Bu etkileşimler kısa ve uzun-mesafeli (long-range) etkiler açısından ikiye ayrılır.
- (v) Toplam dipol moment iki kısma ayrılır: $M = M_i + M_u$, burada M_u ultraviyole frekanslı elektronik salınımların frekansdır ve M_i infrared kısmıdır. M_i kısmı $M_i = \sum_j \frac{\partial M}{\partial Q_j} Q_j$ şeklinde verilir ve burada Q_j normal koordinatlardır.

Szigei yaptığı bu varsayımlar sonucunda

$$\varepsilon_s = \varepsilon_\infty + [(\varepsilon_\infty + 2)/3]^2 [s^2 (ze)^2 N / \pi \mu v_t^2] \quad (2.3)$$

bağıntısını elde etmiştir. (2.3) denklemindeki ilk terim ultraviyole kutuplanmanın katkısını, ikinci terim ise infrared kutuplanma nedeniyle olan katkıyı temsil etmektedir. Ayrıca s , elektronik ve atomik yerdeğiştirmelerin kısa-mesafeli etkileşimlerini ifade eder ve $sze = sze^*$ olarak tanımlanıp e^* etkin yüküdür.

Szigei'nin kendisinin yanı sıra teori birçok bilim adamları tarafından da geliştirilmiştir. Kısaca özetleyecek olursak Yamashita (1952), Yamashita ve Kurosava (1955) teoriyi kuantum mekanik variation method kullanarak yeniden ele almışlardır. Daha sonrasında Dick ve Overhauser (1958) daha fazla kutuplanma mekanizmalarının etkilerinin de hesaba katılması gerektiğini varsayıp teoriye kısa-mesafeli etkileşim ve takas (exchange) yük kutuplanması etkilerini de eklemişler. Hanlon ve Lawson (1959) ise mekanik kutuplanma etkilerini hesaba katarken Mitskevitch (1964) ise iyonik bozulmalar (distortion) üzerinde dipol etkileşmelerinin etkileri olduğu varsayımına dayanan geliştirmeler yapmıştır (Sirdeshmukh ve ark., 2007).

2. 2. Kusur Difüzyon Modeli

Debye yapısında olmayan durulma davranışını açıklayabilen birleşik bir durulma modeli, Glarum (1960) tarafından *kusur difüzyon modeli* adı altında ortaya konmuştur. Model, bir kusurun, madde içinde difüzyon hareketi yaparak, birbiriyle etkileşmeyen durulma merkezlerinden birine ulaştığı zaman durulmaya sebep olduğu fikrine dayanır. Glarum'un bir boyutta ortaya koyduğu bu modelde sadece en yakın kusurların durulma merkezine ulaşır ulaşmaz anlık dönmeye veya yön değiştirmeye neden olmasıyla durulmanın meydana geldiği varsayılmış ve bu varsayım ışığında elde edilen durulma fonksiyonunun Cole-Cole ve Cole-Davidson davranışı gösterdiği gözlenmiştir.

Daha sonraları Hunt ve Powles (1966) kusur difüzyon modelini üç boyuta genelleştirmişler fakat genelleştirme sonucunda ulaşılan bulguların bir boyutlu analizden elde edilen sonuçlarla çok büyük farklılıklar göstermediği ortaya çıkmıştır. Bununla birlikte Phillips ve ark. (1972) Glarum'un çalışmasını iki en yakın komşu kusuru göz önüne alan bir modele genişletmişlerdir. Bu genelleştirmeler model üzerinde büyük çaplı sonuçsal değişiklik ortaya koymamıştır.

Daha sonra Bordewijk (1975) sadece en yakın komşulukta bulunan kusuru değil de tüm kusurları göz önüne alarak kusur difüzyon modelini geliştirmiştir ve bir boyutta $b = 0.5$ olduğu KWW durulma fonksiyonunu ve üç boyutta da Debye fonksiyonunu elde etmiştir.

Shlesinger ve Montroll (1984) rasgele sıçrama hareketi yapan kusurlar için bekleme zamanlarının bir hiyerarşisini ileri sürerek KWW fonksiyonunun nasıl $0 < b < 1$ aralığına genelleştirilebileceğini göstermiştir. Aynı çerçevede bu modellerin fraktal geometrilere genişletilmesi ile ilgili çalışmalar da yapılmıştır (Klafter ve Blumen, 1985).

Bozdemir (1985), bir boyutta kusur difüzyon modelini yeniden ele alarak n 'ninci mertebeden düzeltmesini yapmış ve yalnızca dipolün kendisini değil, üzerinde birçok kusur bulunan bir sistem içinde dipolar-zincirin tümünü göz önüne alan *moleküler zincir kusur difüzyon modelini* ortaya koymuştur. Modelin temel öngörüsü, dipol zinciri üzerindeki hareketli kusurlardan her hangi birinin dipolü döndürerek

tüm zincirin durulmasına neden olduğudur. Bozdemir bu modelinde kusur dağılımı için kesirli (fractional) Gama dağılımını kullanarak KWW fonksiyonunu elde etmiş ve özelliklerini ayrıntılı bir şekilde incelemiştir.

Herhangi bir durulma merkezine ulaşan bir ilk kusurun durulmaya neden olduğu öngörüsüne dayanan Kusur difüzyon modeli “Her hangi bir durulma merkezine bir kusur ulaşmadığı sürece durulma meydana gelmez” ve “Sistem içinde hareket eden kusurlar rastgele yürüme hareketi yaparlar” şeklinde olan iki temel varsayımın yanısıra “Kusur, durulma merkezine ulaşır ulaşmaz anlık olarak durulma meydana gelir”, “Bir durulma merkezinin durumu diğer merkezlerin bulunduğu durumdan bağımsızdır” ve “Bir kusurun hareketi difüzyon denklemi ile tanımlanırken durulma merkezi sabit olarak alınır” şeklindeki üç yardımcı varsayıma dayanır.

Kusur difüzyon modelinde, $t = 0$ anında bir kusurun $x = l$ noktasında bulunduğunu farz edilir ve en yakın kusurun $0 - t$ zaman aralığında $x = 0$ noktasına ilk defa ulaşma olasılığı da $P(t)$ ile verilir. Kusurun hareketini belirleyen ifade ise

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2} \quad (2.4)$$

şeklindeki difüzyon denklemi ile belirlenir ve bir kusurun durulma merkezine ulaşma olasılığını, kusurun pozisyonuna ve difüzyon katsayısına bağlar. Kusurun başlangıçtaki konumu $P(0,0) = 1$ ve $P(l,0) = 0, l \neq 0$ şeklindeki sınır şartları ile verilir. Ayrıca en yakın kusurun $x = 0$ noktasına ilk ulaşan kusur olduğundan emin olmak için $l \geq 0$ göz önüne alınmıştır. Bunun yanında $x < 0$ için $P(x,t) = 0$ olması gerektiğinden kusurun $x = 0$ noktasına ulaştıktan sonra sistemden ayrıldığı veya kaybolduğu farz edilmiştir. Bu sınır şartlarına göre difüzyon denkleminin çözümü

$$\dot{P}(l,t) = -D \left(\frac{\partial P(x,t)}{\partial x} \right)_{x=l} \quad (2.5)$$

$$\dot{P}(l,t) = \frac{lt^{-3/2}}{(4\pi D)^{1/2}} \exp(-l^2/4Dt) \quad (2.6)$$

ile verilir. Kusurların difüzyon hareketi yapmasından dolayı sistem içinde kusurların dağılımı gelişigüzel olup verilen bir durulma merkezine en yakın kusurun l ile $l + \Delta l$ arasında bulunma olasılığı

$$f(l) = \frac{1}{l_0} \exp(-l/l_0) \quad (2.7)$$

Şeklinde seçilmiş ve birim uzunluk başına düşen kusur sayısı $1/2l_0$ olarak alınmıştır. Buna göre $P(t)$ olasılığı $\dot{P}(l, t)$ 'nin tüm olası l değerleri üzerinden ortalaması alındıktan sonrada elde edilen $\dot{P}(l, t)$ 'nin t 'ye göre integralinin alınmasıyla

$$\dot{P}(t) = \int_0^\infty f(l) \dot{P}(l, t) dl \quad (2.8)$$

$$P(t) = \int_0^t \dot{P}(t) dt \quad (2.9)$$

$$P(t) = 1 - \exp(t/\tau_D) \operatorname{erfc}(t/\tau_D)^{1/2} \quad (2.10)$$

elde edilir. Böylece dipol korelasyon fonksiyonu için

$$\phi(t) = 1 - P(t) \quad (2.11)$$

$$\phi(t) = \exp(t/\tau_D) \operatorname{erfc}(t/\tau_D)^{1/2} \quad (2.12)$$

ifadesine ulaşılır. Burada durulma zamanı $\tau_D = l_0^2/D$ ile verilir ve kusurun $2l_0$ kadar mesafeyi kat etmesi için geçen süre olarak tanımlanır. Elde edilen bu korelasyon fonksiyonu frekans uzayında Cole-Cole bağıntısının $\alpha = 1/2$ özel durumunu vermektedir. Bu durulma mekanizmasının dışında dipollerin kusurlarla ve kendileriyle etkileşmedikleri dikkate alınarak elde edilen Debye durulma fonksiyonu ile yukarıda verilen durulma fonksiyonunun çarpımı frekans uzayında Cole-Davidson davranışını ($\beta = 1/2$) vermektedir.

2.3. Hiyerarşik Kısıtlanmış Dinamik Durulma Modeli

Palmer ve arkadaşları (1984) durulma mekanizmasının basamaklar halinde meydana geldiği, sistem üzerindeki kısıtlayıcılar ve zorlayıcılardan dolayı serbestlik derecesi büyük olan yerel yapı durulmaya uğramadan serbestlik derecesi küçük olanının durulmaya uğramadığı, yani hiyerarşik bir düzenin olduğu hiyerarşik kısıtlanmış dinamik bir durulma modeli önermişlerdir. Sistemin her bir düzeyindeki serbestlik derecesinin o seviyede bulunan N_n tane Ising spininin oluşturduğu konfigürasyonla belirlendiği modelin önerdiği durulma fonksiyonu

$$\phi(t) = \sum_{n=0}^{\infty} w_n e^{(-t/\tau_n)} \quad (2.13)$$

ile verilir. Burada $N = \sum_{n=0}^{\infty} N_n$ ve $w_n = N_n/N$ ile tanımlıdır. Fonksiyon parametrelerin uygun şekilde seçimiyle, epeyce karmaşık hesaplamalardan sonra

$$\phi(t) \approx w_0 e^{(-t/\tau)^\beta} \quad (2.14)$$

şeklindeki KWW durulma fonksiyonu elde edilmektedir (Palmer ve ark. 1984).

2. 4. Förster Direk-Transfer Modeli

Model, uyarılmış seviyede olan bir donardan statik kusurlara doğrudan enerji transferi olduğu varsayımına dayanmaktadır (Förster,1949; Blumen, 1981). Verilen bir sistemdeki bir donordan x_i konumunda bulunan bir durağan kusura doğrudan bir enerji iletimi olduğu ve bir t anına kadar donorun uyarılmış seviyede kalma olasılığını temsil eden

$$\phi_i(t) = \exp[-tV(x_i)] \quad (2.15)$$

şeklinde bir durulma fonksiyonu önerilmiştir. Burada $V(x_i)$ durulma hızıdır ve durulma zamanı ise $\tau(x_i) = 1/V(x_i)$ ile verilmiştir. Bazı yaklaşıklıklarla birlikte durulma hızının $V(x_i) = a/x^k$ şeklindeki seçimi için durulma fonksiyonu

$$\phi(t) = \exp[-(t/\tau)^{d/k}] \quad (2.16)$$

şeklinde KWW formundaki durulma fonksiyonuna dönüşmektedir. Burada a yoğunluk fonksiyonu olup bir sabit, d boyut ve k ise durulma hızını karakterize eden bir üsteldir. Model paralel durulma mekanizmaları olduğu varsayımı için de aynı sonuca ulaşmaktadır (Klafter ve Shlesinger, 1986).

2. 5. Fraktal Durulma Modeli

Fraktal geometri, düzgün veya simetrik bir geometrik yapıya sahip olmayan cisimlerin şekillerini açıklamak için Mandelbrot (1983) tarafından geliştirilmiştir. Fraktal yapıda olan cisimleri karakterize eden nicel ölçüm fraktal boyutları ile ilgili ölçümlerdir. d_f fraktal boyutu ölçeklendirmeye dayanan bir teknikte bulunur.

Fraktal durulma modeli KWW tipindeki dielektrik durulma davranışını açıklamak için ileri sürülmüştür (Shelisinger ve Montroll, 1983; Dissado ve Hill, 1987; Niklasson, 1987). Fraktal durulma mekanizmalarında, süreci oluşturan olaylar kendi-kendine benzer bir yolla meydana gelmektedir. Yani olaylar hiyerarşik zaman aralıklarında hiyerarşik bir düzen içinde meydana gelmektedir. Gerçek sistemlerdeki süreçleri modellemek için stokastik fraktallara ihtiyaç duyulmuştur (Mandelbrot, 1983). Dielektrik durulmanın fiziksel mekanizması fraktal zaman süreçleri ve fraktal uzay süreçleriyle açıklanmaya çalışılmıştır. Fraktal zaman süreçlerine dayanan modeller dielektrik durulmanın bazı özelliklerini anlamak için ileri sürülmüşlerdir. Böyle bir süreçte ortalama olay sayısı

$$N(t) \approx t^{d_f} \quad (2.17)$$

ifadesiyle verilir. Böylece fraktal zaman kavramı bekleme-zamanları dağılımı ile ilişkilendirilir. Materyal içindeki uzaysal dağılımdaki düzensizlik fraktal yapıyla tanımlanır. Buna bir örnek; dielektrik durulmaya neden olan durumların (states) süzülme modeline göre oluşum gösteren fraktal yapıdır. T sıcaklığındaki kompleks bir sistemin KWW yapısında bir durulma göstermesinin sistemdeki mümkün girilebilir durumların konfigürasyon uzayının fraktal morfolojisinin bir sonucu olduğu ileri sürülmüştür (Jund ve ark., 2001).

2. 6. Ising Modeline Dayanan Çalışmalar

Ising modeli, dielektrik durulmanın anlaşılması açısından öneme sahip olan ve yaygın olarak kullanılan modellerden biridir. Ising modelinin tek boyutta zamana bağlı analitik çözümü Glauber (1963) tarafından yapılmış olmakla birlikte Anderson (1970) ilk defa en yakın dipol etkileşmelerini dikkate alan bir nümerik çözüm ile dielektrik durulmaya uygulamıştır.

Daha sonra Bozdemir (1981), Glauber'ın dinamik Ising modelini sonlu ve sonsuz elemanlı dipol zincirlerinin durulmasına uygulamış ve ilk defa ilgili dipol korelasyon fonksiyonlarının ve kompleks dielektrik sabitinin analitik ifadelerini türetmeyi başarmıştır. Bozdemir, sonlu bir zincir veya sonsuz bir dipol zincirinin içindeki tek bir dipolün durulma fonksiyonunun Debye tipinde olmadığını ortaya koymuştur. Bu davranışın dipoller arasındaki en yakın etkileşmelerin doğal bir sonucu olduğunu öngören Bozdemir, modelin bir çok dielektrik maddede gözlenen durulma verileriyle uyumlu olduğunu göstermiştir.

Daha sonrasında Skinner (1983) öncekilerden farklı geçiş olasılıkları seçerek, Anderson ve Bozdemir'in yaptığı modelleri temel alan, tek boyutlu moleküler zincir için bir korelasyon fonksiyonu türetmiştir. Elde ettiği sonuç, $0.5 \leq \beta \leq 0.74$ değerleri için KWW durulma fonksiyona uygunluk göstermiştir.

Uzun diyebileceğimiz bir zaman aralığı sonrasında Brey ve Prados (1996) Bozdemir'in elde ettiği sonuçlara, düşük sıcaklık limitinde geçerli olan ve Cole-Davidson ($\beta_{CD} = 0.5$) tipinde dielektrik fonksiyonunu ortaya koyan bir yaklaşımla değişik bir yoldan ulaşmıştır.

2. 7. Süzülme Modeli

Bu model fiziksel problemlerin bilgisayar modellemelerinde, faz-geçişleri, ölçeklendirme bağıntıları, kritik-üsler ve yeniden-normalizasyon grupları gibi kavramları incelemede ve grafiksel analizlerinde kullanılan bir tekniktir.

Üç boyutta oluşturulan zayıf iletken-yalıtkan bileşiklerin, iletken parçacıkların konsantrasyonunun bir fonksiyonu olarak frekansa bağlı kompleks dielektrik fonksiyonu süzülme modeli ile nümerik simülasyon tekniği kullanılarak elde edilebilmiş (Calame, 2003) ve bu sistemlerin süzülme eşiğinin altında, düşük iletkenlik konsantrasyonu için Debye tipinde bir davranış sergilerken yüksek iletkenlik konsantrasyonunda ise Cole-Davidson tipinde davranış gösterdiği gözlenmiştir. Dielektrik karışımların süzülme modeli Tuncer ve ark. (2002) tarafından yapılmış ve frekans bölgesinde Debye tipinde olmayan davranışlar elde edilmiş ve bu tür bir davranışın süzülme modelinin oluşturduğu fraktal geometriden kaynaklandığı öngörülmüştür.

2. 8. Kesirli Durulma Süreçleri

Kesirli hesap tekniği kullanılarak, durulma süreçlerini açıklamaya dayalı çalışmalar özellikle son on yılı kapsayan bir zaman aralığında ağırlık kazanmıştır. Çalışmalar genel olarak

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = K \frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial t^2} \quad (2.18)$$

ile verilen difüzyon denklemi ve farklı difüzyon tipi denklemlerin kesirli hesap tekniği ile çözümlerine dayanmaktadır. Burada $P(x,t)$ olasılık yoğunluk fonksiyonudur. Bu noktada geniş bir yelpazede sürdürülen dielektrikle ilgili kesirli durulma yaklaşımları öncelikli olarak Hilfer (2002), Uchaikin (2003), Reyes-Melo ve ark. (2005), Coffey ve ark. (2004) ve Nigmatullin (2007) tarafından yapılmış ve bu

çalışmalar frekans bölgesinde Debye ve Cole-Cole tipi davranışları açıklamada oldukça başarılı olmuşlardır.

2. 9. Deneysel Sonuçların Yorumuna Dayanan Ampirik Fonksiyonlar

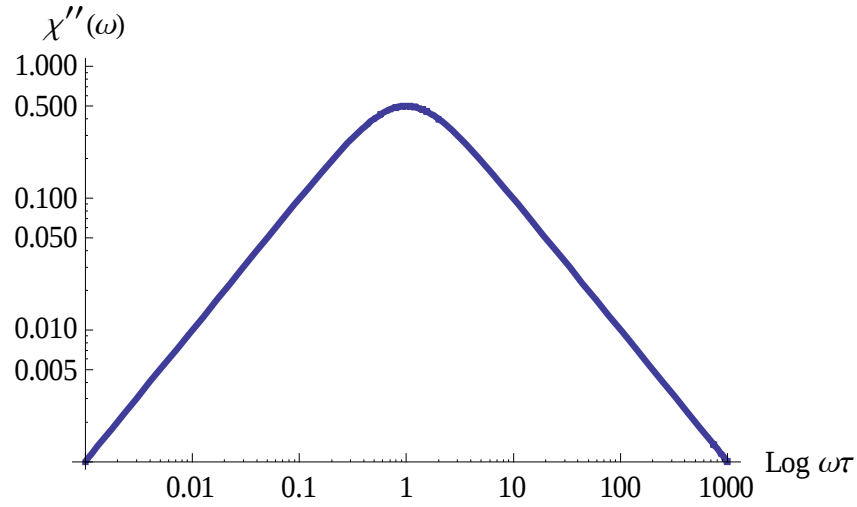
Dielektrik durulma süreçlerini açıklamak için yapılan ilk fiziksel modellerden biri Debye modelidir. Birbiriyle etkileşmediği varsayılan dipollerden oluşan sistemlerde, dipollerin sürtünmeli bir ortamda difüzyon hareketini ele alarak, $f(t)$ durulma fonksiyonunun

$$\phi(t) = \exp(-t/\tau) \quad (2.19)$$

biçiminde üstel olması gerektiğini ortaya koymuştur. Burada τ 'ya makroskobik durulma zamanı denir. Bu modelden, denklem (1.46) yardımıyla kompleks dielektrik fonksiyonu için

$$\chi(\omega) = \frac{1}{1+i\omega\tau} \quad (2.20)$$

bağıntısı elde edilir. Debye bağıntısı için kayıp eğrisi Şekil 2.1 'de verilmiştir. Debye tipi durulmalar, net bir şekilde genelleştirilemese de, daha çok α -durulma da denen ve alçak frekans bölgesinde ya da yüksek sıcaklık limitlerinde katı amorf polimerlerde sıkça gözlenmelerinin yanısıra Alkyl halide sıvıların poly(vinyl bromide) in dioxane ve polyvinyle chloride in tetrahydrofuran'ın su katkılı (dilute) çözeltilerinde karşımıza çıkmaktadır. Bununla birlikte NH_4HSO_4 gibi ferroelektriklerde de Debye benzeri eğriler gözlenmiştir (Bozdemir, 1978).



Şekil 2.1. Debye bağıntısı için kayıp eğrisi. Yarıgenişlik $1,14D$ ve eğrinin eğimleri $m = \pm 1$ dir.

Fakat sonraları yapılan deneysel çalışmalar, dielektrik durulmanın dinamik davranışını belirleyen fonksiyonların klasik Debye durulma yasasına uymadığını göstermiş ve dielektrik durulma için sadece deneysel gözlemleri ifade eden matematiksel fonksiyonlar olarak nitelendirilebilen, fiziksel modellerden çıkartılmayan, ampirik fonksiyonlar ileri sürülmüştür.

Zaman bölgesinde ortaya konulan en önemli ampirik durulma fonksiyonlarından biri daha önce de sözünü ettiğimiz ve Kohlrausch (1854), Williams ve Watts (1970) tarafından ortaya konulan

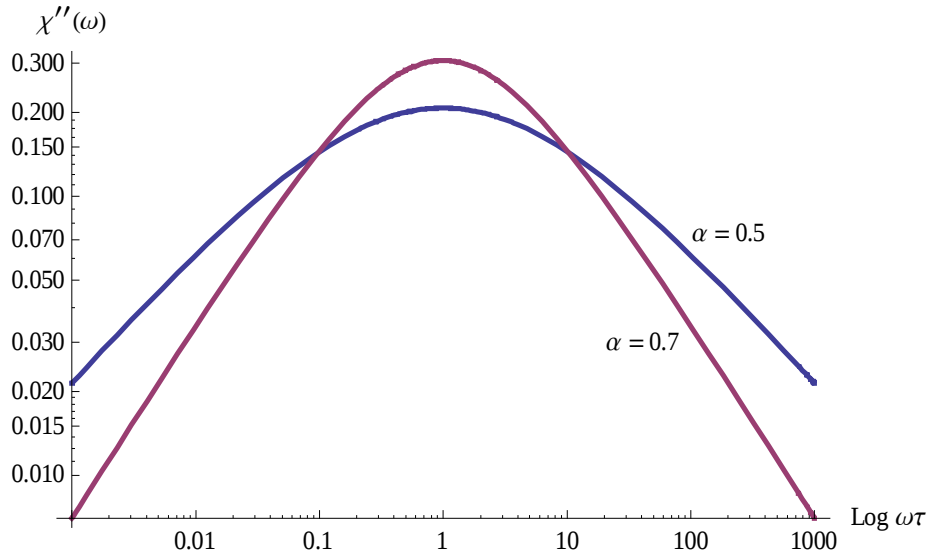
$$f(t) = \exp[-(t/t)^b], \quad 0 < b < 1 \quad (2.21)$$

şeklindeki KWW fonksiyonudur. α -pikleri sergileyen Polyvinyl acetate, polyvinyl octonate, polyethyl acrylate, polymethyl acrylate, polypropylene oxide gibi bazı amorf polimerlerin KWW fonksiyonuyla daha uyumlu olduğu görülmüştür (Bozdemir, 1978).

Diğer taraftan kompleks dielektrik sabiti için, frekans uzayında, gözlemlere dayalı en önemli ampirik ifadelerden ilki Cole ve Cole (1941) tarafından

$$\chi(\omega) = \frac{1}{1+(i\omega\tau)^\alpha}, \quad 0 < \alpha < 1 \quad (2.22)$$

biçiminde önerilmiştir. α 'nın farklı değerleri için kayıp eğrileri Şekil 2.2 'de verilmiştir. Çoğu polimer yapılarla birlikte ferroelektrik maddelerin $0.9 < \alpha < 1$ aralığında Cole-Cole bağıntısına uygunluk gösterdiği görülmüştür. Durulma zamanının dağılımlarını hesaba katan bazı öneriler olsa da bu küçük sapmaların nedenleri pek açıklanabilmiş değildir (Bozdemir, 1978).



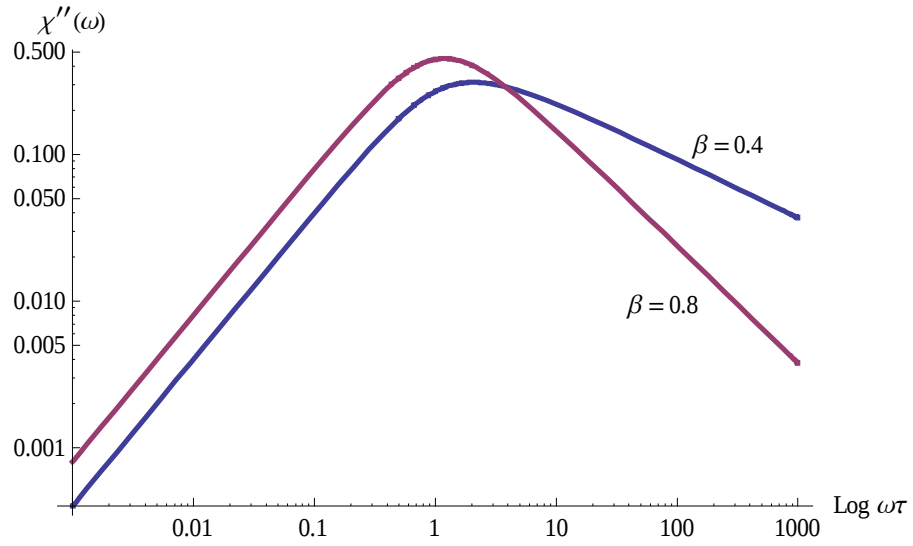
Şekil 2.2. Cole-Cole bağıntısının α 'nın farklı değerleri için kayıp eğrileri

Deneyisel çalışmalara daha uyumlu bir diğer öneri ise Davidson ve Cole (1950) tarafından

$$\chi(\omega) = \frac{1}{(1+i\omega\tau)^\beta} \quad , \quad 0 < \beta < 1 \quad (2.23)$$

biçiminde önerilmiştir. β 'nın farklı değerleri için kayıp eğrileri Şekil 2.3 'de verilmiştir. Çeşitli $\text{Na}_2\text{O} - \text{SiO}_2$ camları ve $\text{Cs}_2\text{O} - \text{SiO}_2$ ve $\text{Na}_2\text{O} - \text{SiO}_2$ bileşikleri Cole-Davidson davranışını sergileyen iyi birer örnektirler (Bozdemir, 1978).

Şekil 2.3 'den de açıkça görülebileceği gibi β 'nın bire yaklaşan değerleriyle birlikte Cole-Davidson denklemi Debye denklemine ve Şekil 2.2 için α 'nın bire yaklaşan değerleriyle Cole-Cole bağıntısının Debye bağıntısına dönüştüğü görülmektedir.



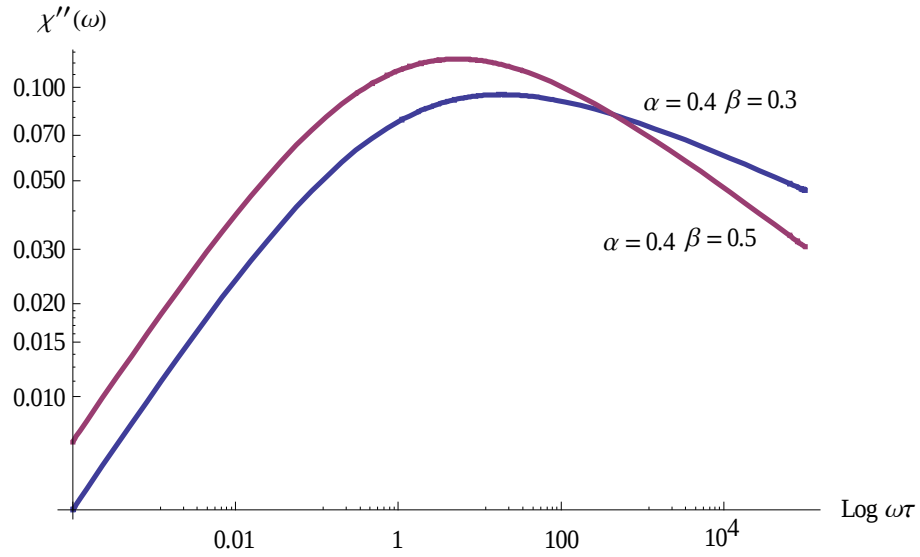
Şekil 2.3. Cole-Davidson bağıntısının β 'nın farklı değerleri için kayıp eğrileri

En son olarak Havriliak ve Negami (1966) tarafından Cole-Cole ve Cole-Davidson fonksiyonlarının bir kombinasyonu da diyebileceğimiz

$$\chi(\omega) = \frac{1}{[1+(i\omega\tau)^\alpha]^\beta}, \quad 0 < \alpha < 1, \quad 0 < \beta < 1 \quad (2.24)$$

bağıntısı ortaya konmuştur. (2.24) ifadesi incelendiğinde Havirliak-Negami bağıntısının $\beta = 1$ değeri için Cole-Cole, $\alpha = 1$ değeri için Cole-Davidson ve $\alpha = 1$, $\beta = 1$ değerleri için Debye bağıntısına dönüştüğü rahatlıkla görülebilmektedir. (2.24) ile verilen Havirliak-Negami bağıntısının α ve β 'nın farklı değerleri için kayıp eğrileri Şekil 2.4 'de verilmiştir.

Tez çalışmasının buraya kadar olan kısmında dielektrik durulmayla ilgili temel kavramları, gelişmeleri ve dielektrik durulma mekanizmasını açıklamaya yönelik fiziksel kuramların temel özellikleri ve ulaşabildikleri sonuçlarla birlikte deneysel verilere dayanılarak ortaya konulan ampirik fonksiyonlar ve bu fonksiyonların genel özellikleri verilmiştir.



Şekil 2.4. Havriliak ve Negami bağıntısının α ve β 'nın farklı değerleri için kayıp eğrileri

Mevcut kuramların dayandığı fiziksel mekanizmaların ve kuramların sonuçlarının, dielektrik durulmayla ilgili gözlemleri açıklamada yeteri kadar tatmin edici olamadığı görülmüştür (Jonscher, 1983). Biz bu çalışmamızda mevcut kuramlardan çok daha iyi sonuçlar veren ve fiziksel temelleri sağlam bir kesirli (fractional) dielektrik durulma modeli geliştirmiş bulunuyoruz. Modelin geliştirilmesi sırasında, Glarum'un kusur difüzyon modeli ve Glauber'ın stokastik Ising modeli, kesirli hesap tekniği kullanılarak yeniden analiz edildi. Elde edilen sonuçlar, klasik kusur difüzyon ve stokastik Ising modelinin sonuçlarıyla karşılaştırıldı ve kesirli çözümlerin diğerlerine göre üstünlükleri ortaya kondu. Daha sonra, kesirli hesap tekniği kullanarak çözümlerini yaptığımız kusur difüzyon ve stokastik Ising yaklaşımı birleştirilerek “Kusur Destekli Kesirli Stokastik Ising Modeli” adında yeni bir birleşik durulma modeli geliştirildi. Bu modelin sonuçları bazı ampirik fonksiyonlarla temsil edilen dielektrik durulma verileriyle karşılaştırıldı. Birleşik modelden elde edilen korelasyon fonksiyonunun ve onun frekansa bağlı ifadesinin, literatürde dielektrik durulmayı zaman ve frekans uzayında temsil eden ampirik KWW, Cole-Cole, Cole-Davidson ve Havriliak-Negami fonksiyonlarıyla tam bir uyum içinde olduğu gösterildi.

Bununla birlikte bu çalışma evrelerini gerçekleştiren kullandığımız Kesirli hesap tekniğine ilişkin temel ve genel bilgiler Kesim 3 'de “Meteryal Metod” başlığı

altında verilmiştir. Çalışmanın “Sonuç ve Öneriler” kısmında ayrıca kesirli hesap tekniğinin fiziksel yorumu yapılmaya çalışılmış ve bununla ilgili öneriler de ortaya konulmuştur.

3. MATERYAL VE METOD

Bu çalışma sırasında fiziksel problemlere yapılan yaklaşımlarda Kesirli Hesap Tekniği olarak adlandırılan, oldukça eski bir geçmişi olsa da yakın bir zamanda büyük oranda geliştirilmiş ve birçok bilim dalında yaygın uygulama alanları bulmuş bir matematiksel teknik kullanıldı. Bu kesimde bu matematiksel hesap tekniğinin genel özellikleri üzerinde durulacaktır.

3. 1. Kesirli (Fractional) Diferansiyel Hesap Tekniği

Kesirli diferansiyel, matematiksel analizin bir kolu olarak, türev ve integralin tam olmayan, yani keyfi derecelere genişletilmiş bir şeklidir. Kesirli hesap tekniği, Leibniz'in 1695'te "Bir fonksiyonun birinci, ikinci, üçüncü vs. türevlerinin nasıl alındığını biliyoruz fakat $3/2$ nci türevini nasıl alabiliriz ? Bir fonksiyonu $1/2$ defa integre edebilir miyiz ?" düşüncesiyle doğup, Leibniz'in L'Hospital'a yönelttiği "Tam sayı dereceden türevler, kesirli dereceden türevlere genelleştirilebilir mi?" sorusu ile bir başlangıç kazandığını söyleyebiliriz. Leibniz'in kesirli türevler üzerine ortaya attığı bu soru, 300 yıldan daha fazla bir zamandır Liouville, Riemann, Weyl, Fourier, Laplace, Lagrange, Euler, Abel, Lacroix, Grunwald ve Letnikov gibi ünlü birçok matematikçinin de üzerinde çalıştığı bir konu olmuştur (Loverro, 2004).

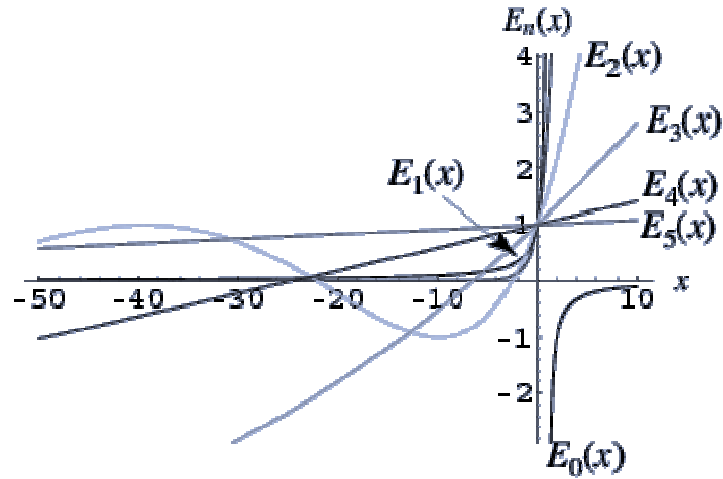
O günden bu yana hızla artan bir biçimde, kesirli diferansiyel denklemler iletim hatları teorisi, sıvıların kimyasal analizi, ısı transferi, difüzyon, Schrodinger denklemi, malzeme bilimi, visko-elastik yapılar, akışkanlar, elektrokimya, fraktal süreçler ve fazlasını da içine alan birçok uygulama alanı bulmuştur (Bayın, 2004). Kesirli hesap tekniğinin matematik uygulamalarının çoğu 20.yy bitmeden ortaya koyulmuştur fakat mühendislik ve bilimsel uygulamalarda heyecan verici başarılar elde etmesi ancak geçtiğimiz yüz yıl içerisinde gerçekleşebilmiştir. Şu var ki kesirli diferansiyel denklemler anlaması oldukça güç olmasının yanı sıra tamsayı kuvvetli diferansiyellere göre daha doğru ya da kesin olduğu da söylenemez.

3. 2. Mittag-Leffler Fonksiyonları

Mittag-Leffler fonksiyonları (Mittag ve Leffler, 1903) kesirli diferansiyel yönteminde çok yaygın kullanım alanları bulan ve özellikle diferansiyel denklemlerin çözümlerinde karşımıza çıkan oldukça önemli bir fonksiyondur ve Mittag-Leffler tarafından

$$E_{\alpha}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(\alpha k + 1)} \quad (3.1)$$

şeklinde tanımlanmıştır.



Şekil 3.1. Bir parametrelili Mittag-Leffler fonksiyonları

İki parametrelili Mittag-Leffler fonksiyonları olarak adlandırılan genelleştirme ise Agarwal ve Humbert tarafından yapılmış olup

$$E_{\alpha,\beta}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(\alpha k + \beta)} \quad (3.2)$$

seri açılımıyla verilir. Mittag-Leffler fonksiyonları α ve β 'nın farklı değerleri için incelendiğinde (3.12) denklemi yardımıyla

$$E_{1,1}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(k+1)} = e^z \quad (3.3)$$

$$E_{1,2}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(k+2)} = \frac{1}{z} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{k+1}}{\Gamma(k+2)} = \frac{e^z - 1}{z} \quad (3.4)$$

$$E_{1,3}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(k+3)} = \frac{1}{z^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{k+2}}{\Gamma(k+3)} = \frac{e^z - 1 - z}{z^2} \quad (3.5)$$

ve en genel haliyle

$$E_{1,n}(z) = \frac{1}{z^{n-1}} \left\{ e^z - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{k} \right\} \quad (3.6)$$

özelliklerine sahip olduğu kolayca görülebilir (Podlubyn I., 1999).

3.3. Keyfi Dereceden Türev ve İntegraller (Diferintegraller)

3.3.1. Grünwald-Letnikov tanımı

Türev ve integralin ortak ifadesi Grünwald-Letnikov tarafından en genel haliyle

$$\frac{d^q f(x)}{d(x-a)^q} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\sum_{j=0}^{N-1} \frac{\Gamma(j-q)}{\Gamma(j+1)} f(x - j \frac{x-a}{N})}{\left(\frac{x-a}{N} \right)^q \Gamma(-q)} \quad (3.7)$$

şeklinde verilir (Podlubny I. 1999, Bayın S. 2004).

3.3.2. Riemann-Liouville Tanımı

Riemann-Liouville tanımı kesirli hesap tekniğinde oldukça fazla kullanım alını bulmuştur. Tanım, $q < 0$ değerleri için

$$\frac{d^q f(x)}{d(x-a)^q} = \frac{1}{\Gamma(-q)} \int_a^x (x - \tau)^{-q-1} f(\tau) d\tau \quad (3.8)$$

şeklindedir ve $q \geq 0$ değerleri için ise

$$\frac{d^q f(x)}{dx^q} = \frac{d^n}{dx^n} \left[\frac{1}{\Gamma(n-q)} \int_a^x (x-\tau)^{-q+n-1} f(\tau) d\tau \right] \quad (3.9)$$

bağıntısıyla verilir. Burada n tamsayısı ($q - n < 0$) olacak şekilde seçilmelidir. (Bayın, S., 2004, Podlubny I.,1999).

3. 3. 3. Cauchy Diferintegral Tanımı

Cauchy bağıntısı

$$\frac{d^q f(x)}{dx^q} = \frac{\Gamma(q+1)}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{(z-x)^{q+1}} dz, \quad q < 0, \neq \text{tamsayı} \quad (3.10)$$

şeklinde verilir ve ifade q 'nun negatif ve tamsayıdan farklı değerleri için diferintegral tanımı olarak kullanılır. Burada z , C kapalı yolu içinde bir noktayı temsil etmektedir. İntegral, C yolunun yarıçapının sonsuza gittiği durumda, saatin tersi yönünde hesaplanır (Bayın, 2004).

3. 3. 4. Caputo Kesirli Türevi

Kesirli diferansiyel tekniğinde, başlangıç koşullarını fiziksel durumlara en uygun şekilde veren Caputo olmuştur. Caputo'nun tanımı

$${}_a^C D_t^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha-n)} \int_a^t \frac{f^{(n)}(\tau)}{(t-\tau)^{\alpha+1-n}} d\tau, \quad n-1 < \alpha < n \quad (3.11)$$

ile verilir. Caputo yaklaşımının en temel avantajı, Caputo kesirli türevlerinin tamsayı dereceden diferansiyel denklemlerdekiyle aynı formda başlangıç koşullarına sahip olmasıdır. Başka bir ifadeyle $t = a$ alt limitinde, bilinen bir fonksiyonun tam derece türevlerinin limit değerlerini içermesidir (Podlubyn, 1999).

3. 4. Kesirli Türev ve İntegrallerin Özellikleri

3. 4. 1. Lineerlik

Kesirli dereceden türevler de tamsayı türevlere benzer bir lineerlik özelliğine sahiptir:

$$D^\alpha[\lambda f(x) + \mu g(x)] = \lambda D^\alpha f(x) + \mu D^\alpha g(x) \quad (3.12)$$

Bu özellik Riemann-Liouville kesirli türev tanımı kullanılarak

$$\begin{aligned} D^\alpha[\lambda f(x) + \mu g(x)] &= \frac{1}{\Gamma(k-\alpha)} \frac{d^k}{dx^k} \int_a^x (x-\tau)^{k-\alpha-1} [\lambda f(\tau) + \mu g(\tau)] d\tau \\ &= \frac{\lambda}{\Gamma(k-\alpha)} \frac{d^k}{dx^k} \int_a^x (x-\tau)^{k-\alpha-1} f(\tau) d\tau + \frac{\mu}{\Gamma(k-\alpha)} \frac{d^k}{dx^k} \int_a^x (x-\tau)^{k-\alpha-1} g(\tau) d\tau \\ &= \lambda D^\alpha f(x) + \mu D^\alpha g(x) \end{aligned} \quad (3.13)$$

kolay bir şekilde doğrulanabilir (Podlubny, 1999).

3. 4. 2. Homojen Olma Özelliği

Diferintegrallerin homojen olma özelliği klasik diferansiyel denklemlere benzer şekilde

$$D_x^\alpha[\lambda f(x)] = \lambda D_x^\alpha f(x) \quad (3.14)$$

ile verilir. Burada C herhangi bir sabittir (Bayın, 2004).

3. 4. 3. Bir Serinin Diferintegralı

Düzgün yakınsak bir serinin diferintegralin doğrusallık özelliğinden faydalanılarak bütün α değerleri için

$$\frac{d^\alpha}{d(x-a)^\alpha} \sum_{j=0}^{\infty} f_j = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{d^\alpha f_j}{d(x-a)^\alpha} \quad (3.15)$$

şeklinde terim terim diferintegralı alınabilir. Diferintegralenen seri de aynı aralıkta düzgün yakınsaktır ve seri açılımı yapılabilen fonksiyonlar için

$$\frac{d^\alpha}{d(x-a)^\alpha} \sum_{j=0}^{\infty} a_j [x-a]^{k+(j/n)} = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \frac{\Gamma\left(\frac{kn+j+n}{n}\right)}{\Gamma\left(\frac{kn-\alpha n+j+n}{n}\right)} [x-a]^{k-\alpha+(j/n)} \quad (3.16)$$

bağıntısı $k > -1$, $a_0 \neq 0$ ve n değerinin pozitif tamsayı olması koşulları altında geçerlidir (Bayın S., 2004).

3. 4. 4. Kesirli Türevlerin Leibniz Kuralı

Eğer $f(t)$ ve $g(t)$ fonksiyonlarının türevleri $[a, t]$ aralığında sürekliyseler

$${}_a D_t^\alpha \{g(t)f(t)\} = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{\alpha}{k} g^{(k)}(t) {}_a D_t^{\alpha-k} f(t) \quad (3.17)$$

ifadesi Leibniz kuralı olarak adlandırılır. Leibniz kuralı özellikle kesirli türevi bilinen bir fonksiyon ile bir polinomun çarpımının kesirli türevini hesaplamada çok kullanışlıdır (Podlubny I., 1999).

3. 4. 5. Birleşme özelliği

Diferintegrallerde $D^\alpha D^\beta f = D^\beta D^\alpha f$, $D^\alpha D^\beta f = D^{\alpha+\beta} f$, $D^\alpha f = g \Rightarrow D^\alpha g = f$ gibi işlemler ancak belirli durumlarda geçerlidir. Bir $f(t)$ sürekli fonksiyonu için α ve β pozitif sayılar olmak üzere $\alpha < \beta$ yani $\alpha - \beta < 0$ olduğu durumlarda

$$D^\alpha [D^{-\beta} f(t)] = D^{\alpha-\beta} f(t) \quad (3.18)$$

eşitliği geçerlidir. Ancak, önce türevin sonra da integralin alındığı durumlarda ise

$${}_a D^{-\beta} [{}_a D^{\alpha} f(t)] = {}_a D^{\alpha-\beta} f(t) - \sum_{k=\beta-\alpha}^{\beta-1} \frac{(t-a)^k}{k!} f^{(\alpha-\beta+k)}(a) \quad (3.19)$$

denklemini ile diferintegraller hesaplanır (Podlubny I., 1999, Bayın S., 2004).

3. 4. 6. Bileşik Fonksiyonların Kesirli Türevleri

Herhangi bir $f(t)$ fonksiyonu

$$f(t) = F[h(t)] \quad (3.20)$$

şeklinde verilen bir bileşik fonksiyon olsun. Burada $h(t)$ diferansiyellenebilir bir fonksiyondur. Bu durumda $f(t)$ 'nin kesirli dereceden türevi

$$\begin{aligned} {}_a D_t^{\alpha} [f(t)] &= {}_a D_t^{\alpha} \{F[h(t)]\} \\ &= \frac{(t-a)^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)} f(t) + \sum_{k=1}^{\infty} \binom{\alpha}{k} \frac{k!(t-a)^{k-\alpha}}{\Gamma(k-\alpha+1)} \sum_{m=1}^k F^{(m)}[h(t)] \sum_{r=1}^k \frac{1}{a_r!} \left[\frac{h^{(r)}(t)}{r!} \right]^{a_r} \end{aligned} \quad (3.21)$$

ile verilir. Bu ifade Bruno zincir kuralı olarak adlandırılır. Burada toplam $\sum$

$$\sum_{r=1}^k r a_r = k \text{ ve } \sum_r a_r = m \quad (3.22)$$

olmak üzere $a_1, a_2, \dots, a_k$ 'nın negatif olmayan tamsayı değerleri üzerinden alınır (Podlubny I., 1999)

3. 4. 7. Bir Parametreye Bağlı Bir İntegralin Riemann-Liouville Kesirli Türevi

Üst limitiyle aynı parametreye bağımlı iki parametrelili bir integralin türevi

$$\frac{d}{dt} \int_0^t F(t, \zeta) d\zeta = \int_0^t \frac{\partial F(t, \zeta)}{\partial t} d\zeta + F(t, t-0) \quad (3.23)$$

şeklinde verilir. Böyle bir integralin Rieman-Liouville kesirli türevi ise, $0 < \alpha < 1$ olmak üzere

$${}_0D_t^\alpha \int_0^t K(t, \tau) d\tau = \int_0^t {}_\tau D_t^\alpha K(t, \tau) d\tau + \lim_{\tau \rightarrow t-0} {}_\tau D_t^{\alpha-1} K(t, \tau) \quad (3.24)$$

ile verilir. Eğer $K(t, \tau)$ yerine $K(t - \tau)f(\tau)$ şeklinde bir fonksiyon alırsak yukarıdaki bağıntı

$$\begin{aligned} {}_0D_t^\alpha \int_0^t K(t - \tau)f(\tau) d\tau &= \int_0^t {}_\tau D_t^\alpha K(\tau)f(t - \tau)d\tau \\ &+ \lim_{\tau \rightarrow +0} f(t - \tau) {}_0D_t^{\alpha-1} K(\tau) \end{aligned} \quad (3.25)$$

halini alır (Podlubny I., 1999).

3. 4. 8. Ölçek değişikliği

Bir fonksiyonun alt limit a 'ya göre ölçek değişikliği

$$x \rightarrow \beta(x - a) + a \quad (3.26)$$

olarak anlaşılır burada β sabit olup ölçek faktörüdür. Alt limitin sıfır olduğu durumda $x \rightarrow \beta x$ olacaktır. Alt limitin sıfırdan farklı olduğu durumlarda ölçek değişikliği diferintegrallerde

$$\frac{d^\alpha f\{\beta(x-a)+a\}}{[d(\beta(x-a))]^\alpha} = \beta^{-\alpha} \frac{d^\alpha f\{\beta(x-a)+a\}}{[d(x-a)]^\alpha} \quad (3.27)$$

olarak verilir. Bu formül a 'nın sıfır olduğu durumlarda daha kullanışlıdır. Bu durumda formül

$$\frac{d^\alpha f\{\beta x\}}{[d(\beta x)]^\alpha} = \beta^{-\alpha} \frac{d^\alpha f\{\beta x\}}{[dx]^\alpha} \quad (3.28)$$

halini alır (Bayın, 2004).

3. 5. Kesirli Diferansiyel Tekniğinde Kullanılan Bazı Önemli Dönüşümler

Kesirli diferansiyel hesap tekniği ile çözülen birçok problemde aşağıdaki dönüşümleri iyi bilmek ve kullanmak çok önemlidir.

3. 5. 1. Riemann-Liouville ve Grünwald-Letnikov Kesirli İntegrallerinin Laplace Dönüşümü

$\alpha > 0$ olmak üzere

$$\mathcal{L}\{ {}_0D_t^{-\alpha} f(t); s \} = s^{-\alpha} F(s) \quad (3.29)$$

denklemini Riemann-Liouville ve Grünwald-Letnikov tarafından kesirli integrallerin Laplace dönüşümü olarak verilir (Podlubny, 1999).

3. 5. 2. Riemann-Liouville Kesirli Türevin Laplace Dönüşümü

Riemann-Liouville kesirli türevlerinin Laplace dönüşümü, $\alpha > 0$ olmak üzere

$$\mathcal{L}\{ {}_0D_t^{\alpha} f(t); s \} = s^{\alpha} F(s) - \sum_{k=0}^{n-1} [{}_0D_t^{\alpha-k-1} f(t)]_{t=0}, \quad n-1 \leq \alpha < n \quad (3.30)$$

ile verilir. Bununla birlikte $t = 0$ alt limitinde kesirli türevlerin limit değerlerinin fiziksel gösteriminin bulunmaması nedeniyle pratik olarak uygulanabilirliği sınırlıdır (Podlubny, 1999; Bayın, 2004).

3. 5. 3. Caputo Türevinin Laplace Dönüşümü

Caputo kesirli türevinin Laplace dönüşüm denklemi

$$\mathcal{L}\{ {}_0^C D_t^{\alpha} f(t); s \} = s^{\alpha} F(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^{\alpha-k-1} f^{(k)}(0), \quad n-1 \leq \alpha < n \quad (3.31)$$

ile verilir. Caputo kesirli türevinin Laplace dönüşümünün bu ifadesi $f(t)$ ve onun türevlerini içermektedir. Bu haliyle bazı fiziksel süreçlere uygulanması çok daha kolaydır. Örneğin, $f(0)$ başlangıç durumu, $f'(0)$ başlangıç hızı ve $f''(0)$ başlangıç ivmesi olabilir. Bununla birlikte lineer kesirli diferansiyel denklemlerin çözümünde de kullanışlı bir ifadedir (Podlubny, 1999; Bayın, 2004).

3. 5. 4. Grünwald-Letnikov Kesirli Türevinin Laplace Dönüşümü

$0 < \alpha < 1$ olmak üzere

$$\mathcal{L}\{ {}_0D_t^\alpha f(t); s \} = s^\alpha F(s) \quad (3.32)$$

ile verilen bağıntı Grünwald-Letnikov kesirli türevinin Laplace dönüşümü olarak adlandırılır (Podlubny I., 1999, Miller K.S., Ross B., 1993).

3. 5. 5. Kesirli İntegrallerin Fourier Dönüşümü

$0 < \alpha < 1$ olmak üzere

$$\mathcal{F}\{ {}_{-\infty}D_t^{-\alpha} g(t); \omega \} = (i\omega)^{-\alpha} G(\omega) \quad (3.33)$$

ile verilen denkleme Rieman-Liouville kesirli türevin Fourier dönüşümü denir. Bu dönüşüm Grünwald-Letnikov ${}_{-\infty}^G D_t^{-\alpha} g(t)$ kesirli integrali ve Caputo ${}_{-\infty}^C D_t^{-\alpha} g(t)$ kesirli integralleri için de geçerlidir (Podlubny, 1999).

3. 5. 6. Kesirli Türevlerin Fourier Dönüşümü

Rieman-Liouville, Grünwald-Letnikov ve Caputo denklemlerinin her biri için, alt limitlerin $a = -\infty$ olması durumunda Fourier dönüşümleri

$$\mathcal{F}\{-\infty D_t^\alpha g(t); \omega\} = (-i\omega)^\alpha G(\omega) , \quad n - 1 < \alpha < n \quad (3.34)$$

şeklinde verilir (Podlubny, 1999).

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

Bu kesimde ilk olarak kusur difüzyon modeli kesirli hesap tekniği kullanılarak yeniden ele alındı ve bulunan sonuçlar dielektrik durulma mekanizması açısından yorumlandı. Ardından, aynı şekilde Glauber'ın stokastik Ising modeli, kesirli hesap tekniği kullanılarak çözülüp yorumlandıktan sonra bulunan sonuçlar birleştirilerek “Kusur Destekli Kesirli Stokastik Ising Modeli” adı altında yeni bir model ortaya kondu. Birleşik modelden elde edilen analitik bağıntı, Kesim 2’de ayrıntıları verilen ve çok geniş bir yelpazede dielektrik durulma verileriyle uyumlu, ampirik Cole-Cole, Cole-Davidson ve Havirliak-Negami fonksiyonlarıyla karşılaştırıldı. Sonuç olarak, modelin non-Debye tipi dielektrik durulmayı açıklamadaki başarısı ortaya kondu.

4. 1. Kusur Difüzyon Modelinden Elde Edilen Kesirli Dipol Korelasyon Fonksiyonu

Kusur difüzyon modelinin temel özellikleri Kesim 2.7’de ayrıntılı bir biçimde gözden geçirilmişti. Atom boşlukları (holes) ya da malzeme içindeki safsızlıklar olarak nitelendirilebilen kusurlar, elektrik yüküyle yüklü olmaları ve bir dipolle etkileşimleri sonucunda ilgili dipolün alan ve potansiyelini değiştirirler ve bu potansiyel değişimi dipolün daha hızlı bir şekilde durulmasına neden olur. Bu temel düşünceden yola çıkarak, bu kesimde Bordewijck’in kusur difüzyon modeline olan yaklaşımı, Bozdemir’in (1985) “Dielektrik durulmanın moleküler zincir kusur difüzyon modeli” şeklinde önerdiği, kusurun, bir moleküler dipol zinciri üzerindeki bir dipole etki ederek moleküler zincirin durulmasına neden olabileceği varsayımıyla düzeltilip genelleştirildi ve model, kesirli hesap tekniği kullanılarak yeniden ele alınıp analiz edildi.

Moleküler bir dipol zinciri üzerindeki bir dipole herhangi bir kusurun ulaşması sonucunda zincirin durulmaya geçtiği varsayımı altında, bir t zaman aralığında moleküler zincir üzerindeki bir dipolden x mesafede bulunan herhangi bir kusurun dipole ulaşabilme olasılığı, bir soğurma duvarının varlığında Chandrasekhar (1943) tarafından

$$\dot{P}_1(x, t) = \frac{x t^{-3/2}}{\sqrt{4\pi D}} \exp(-x^2/4Dt) \quad (4.1)$$

ile verilmiştir. Bir boyutta ($x = 0$ ‘dan $x = a$ ‘ya) bir dipolün $x = x_0$ konumunda olduğu varsayımıyla bir kusurun x konumunda bulunma olasılığı $\eta(x) = 1/a$ ile tanımlanır (Bordewijk, 1975). Bu olasılık x ve x_0 ‘dan bağımsız ve Glarum’un varsaydığı gibi $x - x_0$ ‘a bağlı olup molekülün $x - x_0$ mesafede konumlu olan bir kusur için değişime eşittir. Bu durumda herhangi bir konumda bulunan bir kusurun birim zamanda dipole ulaşma olasılığı konum uzayı üzerinden alınan ortalama ile zamana bağlı olarak

$$\begin{aligned} \dot{P}_1(t) &= \int_0^a \eta(x) \dot{P}_1(x - x_0, t) dx \\ &= \frac{1}{a} \frac{t^{-3/2}}{\sqrt{4\pi D}} \int_0^a |x - x_0| \exp(-(x - x_0)^2/4Dt) dx \\ &= \frac{2\sqrt{D}}{a\sqrt{\pi}} t^{-1/2} \end{aligned} \quad (4.2)$$

şeklinde elde edilir. Böylelikle bir t zaman aralığında kusurun moleküle ulaşma olasılığı bir boyutta, Kesim 3 ‘de verilen kesirli integral hesabı kullanılarak

$$\begin{aligned} {}_1P_\alpha(t) &= \frac{2\sqrt{D}}{a\sqrt{\pi} \Gamma(\alpha)} \int_0^t (t - \xi)^{\alpha-1} \xi^{-1/2} d\xi \\ &= \frac{2\sqrt{D}}{a \Gamma(\alpha+1/2)} t^{\alpha-1/2} \end{aligned} \quad (4.3)$$

bağıntısı şeklinde elde edilir. Bu ifade bir t zaman aralığında tek bir kusur tarafından yönlendirilen bir dipol için olasılık fonksiyonu olup bu kusur tarafından yönlendirilmeyen bir dipol için olasılık $1 - {}_1P_\alpha(t)$ şeklinde olacaktır. N tane kusurun hesaba katıldığı bir genelleştirme yapıldığı takdirde, moleküler zincir üzerindeki bir dipol için bu kusurların herhangi biri tarafından yönlendirilmeme olasılığı

$$1 - P_\alpha(t) = \left[1 - {}_1P_\alpha(t)\right]^N = \left[1 - \frac{2\sqrt{D}}{a\Gamma(\alpha+1/2)} t^{\alpha-1/2}\right]^N \quad (4.4)$$

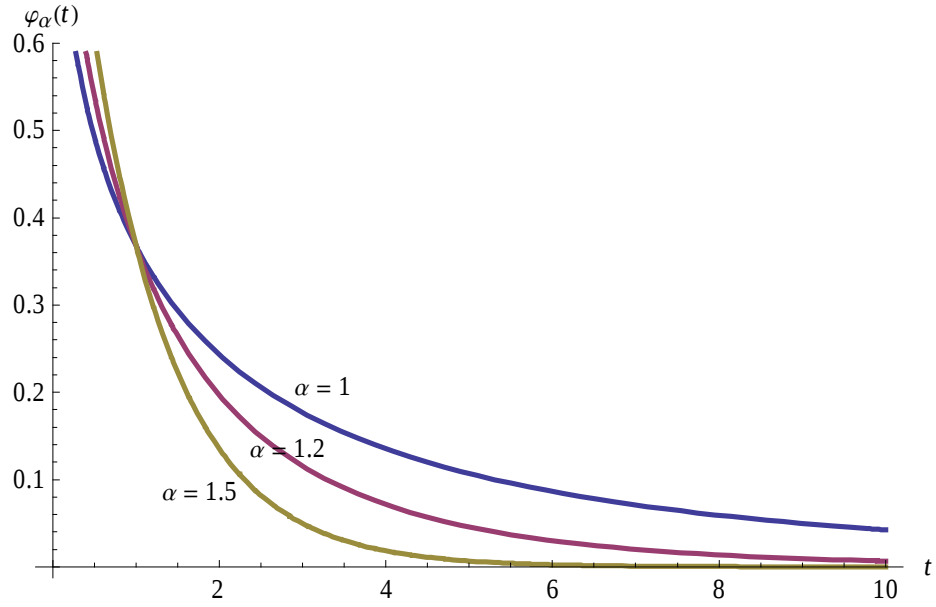
hesabıyla $N \rightarrow \infty$ limitinde, $a = 2Nx_0$ için

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left[1 - \frac{\sqrt{D} t^{\alpha-1/2}}{x_0 \Gamma(\alpha+1/2)} \frac{1}{N}\right]^N = e^{-\left(\frac{\sqrt{D}}{x_0 \Gamma(\alpha+1/2)} t^{\alpha-1/2}\right)} \quad (4.5)$$

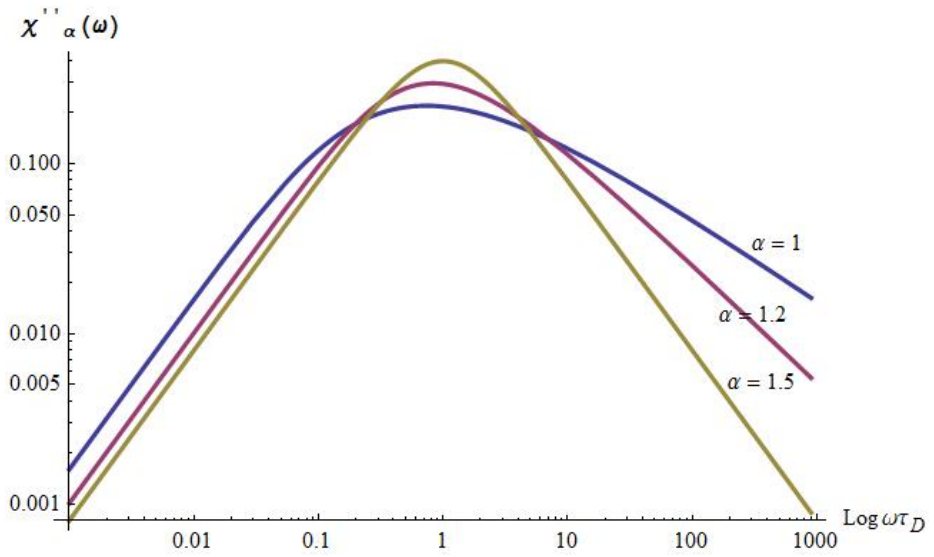
olacaktır. Böylece, durulma zamanı $\tau_D = (x_0 \Gamma(\alpha + 1/2)/\sqrt{D})^{\alpha-1/2}$ seçimiyle

$$\varphi_\alpha(t) = e^{-\left(\frac{t}{\tau_D}\right)^{\alpha-1/2}} \quad (4.6)$$

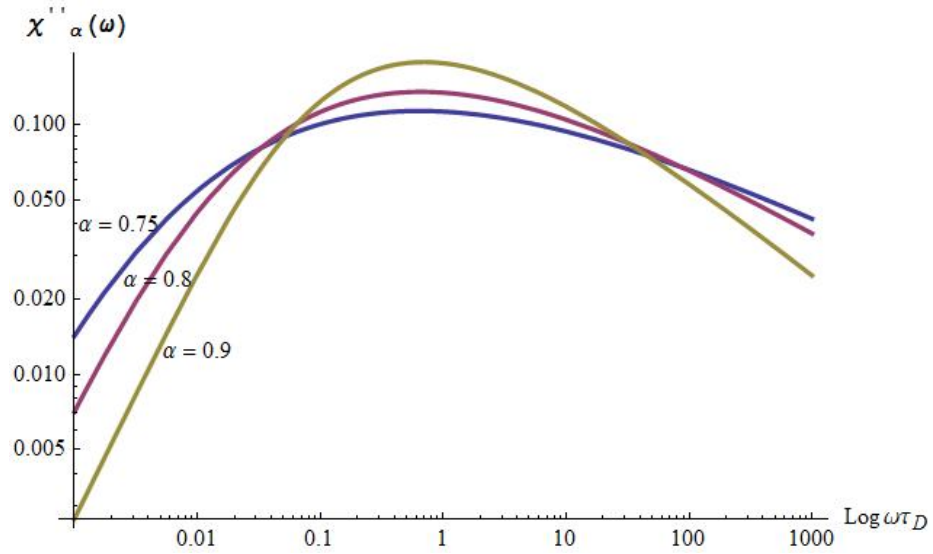
$1/2 < \alpha \leq 3/2$ değerleri için KWW fonksiyonu biçiminde olan kesirli korelasyon bağıntısına ulaşırız. Bilindiği gibi KWW bağıntısı zaman bölgesinde evrensel nitelikli bir fonksiyondur. Şekil 4.1'de (4.6) ile elde edilen kesirli dipol korelasyon fonksiyonunun zaman uzayında α 'nın değişen değerlerine göre nasıl bir davranış sergilediği görülmektedir. (4.6) tipindeki bir fonksiyonun ω -uzayında dielektrik duygunluğu veren analitik bir çözümü yoktur fakat (4.6) ifadesinin (1.46) bağıntısı yardımıyla frekans bölgesindeki davranışı bir grafik üzerinde incelendiğinde, ifadenin $\alpha = 1.5$ için Debye ve daha küçük değerleri içinse Cole-Davidson tipi davranışlar sergilediği açıkça görülmektedir (Şekil 4.2 ve Şekil 4.3).



Şekil 4.1. α 'nın farklı değerleri için KWW tipi kesirli dipol korelasyon fonksiyonu eğrileri



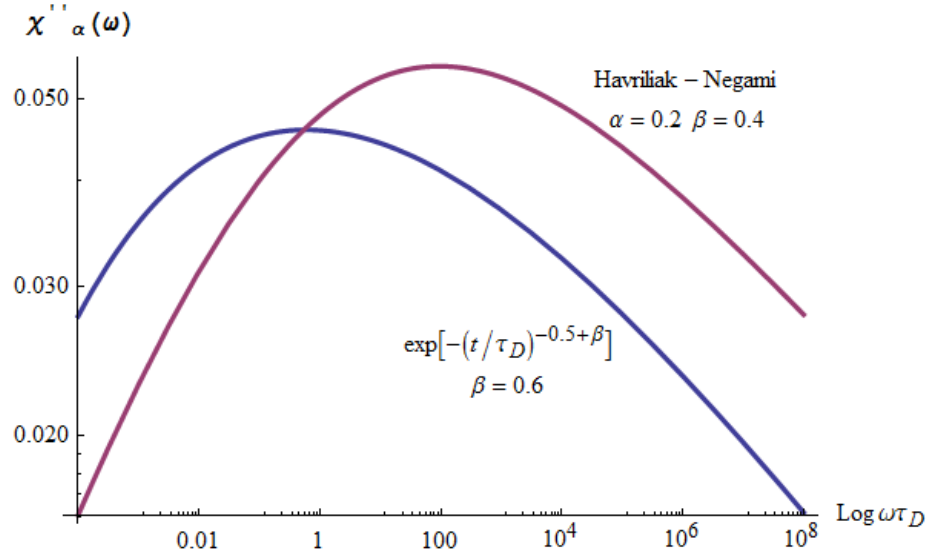
Şekil 4.2. (4.6) kesirli dipol korelasyon fonksiyonunun $1 \leq \alpha \leq 1.5$ değerleri için kayıp eğrileri



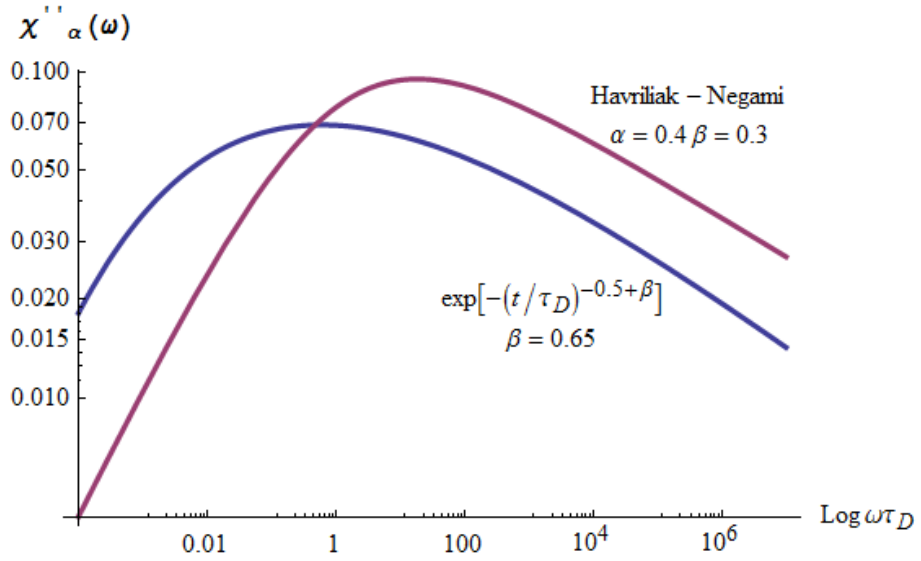
Şekil 4.3. (4.6) kesirli dipol korelasyon fonksiyonunun $0.5 < \alpha < 1$ değerleri için kayıp eğrileri

Şekil 4.4 ve Şekil 4.5 incelendiğinde (4.6) bağıntısının $0.5 < \alpha < 0.75$ aralığında düşük frekans bölgesinde küçük bir farklılıkla fakat yüksek frekans bölgesinde iyi bir uyumlulukla Havrilik-Negami tipi bir davranış sergilediği açık bir şekilde görülmektedir.

Diğer taraftan $\alpha = 1$ değeri için (4.6) bağıntısı $\varphi_\alpha(t) = \exp[-(t/\tau_D)^{1/2}]$ şeklini alır, ki bu sonuç Bordewijck'in de tek boyuta elde ettiği (Bordewijck, 1975) korelasyon bağıntısının kendisidir. Bu noktada kusur-dipol etkileşmelerinin lineer olmayan bir zaman boyutunda gerçekleştiğini ya da her bir kusur-dipol etkileşme zamanlarının birbirinden farklılık gösterdiğini söyleyebiliriz. Bu bağlamda, zamana bağlı kusur-dipol etkileşimi olasılık fonksiyonunun kesirli yapıda oluşu aslında her bir kusur-dipol etkileşim olasılığının aynı olamayacağını ortaya koyar. Kesirli yaklaşım, herhangi bir kusurun dipolar zincir üzerindeki etki-olasılığının değişken oluşunu daha iyi karşılamasından dolayı klasik yaklaşımlara göre daha kapsamlı bir sonuç ortaya koymaktadır.



Şekil 4.4. (4.6) kesirli dipol korelasyon fonksiyonunun $\beta = 0.6$ değeri için kayıp eğrileri



Şekil 4.5. (4.6) kesirli dipol korelasyon fonksiyonunun $\beta = 0.65$ değeri için kayıp eğrileri

4. 2. Ising Modelinden Elde Edilen Kesirli Dipol Korelasyon Fonksiyonu

Glauber'ın bir boyutlu stokastik Ising modeli çalışmalarının dielektrik durulumaya uygulamaları Anderson (1970), Bozdemir (1981) ve daha sonra da Brey ve Parados (1996) tarafından çalışılmıştır. Onların çalışmalarının kısa bir analizi şu

şekildedir: N tane örgü noktası içeren ve her bir örgü noktasında iki spin durumu bulunan ($s = \pm 1$) bir boyutlu bir spin zinciri dikkate alalım. s konfigürasyonu için sistemin enerjisi, en yakın komşu etkileşimleri dikkate alan Ising Hamiltoniyeni ile

$$H(s) = -J \sum_i s_i s_{i+1} \quad (4.7)$$

şeklinde verilir. Burada J , komşu iki spin arasındaki çiftlenim sabitidir. t' anında s' konfigürasyonunda bulunan bir spinin t anında s konfigürasyonunda bulunma koşullu olasılığı $P_{1|1}(s, t|s', t')$ şeklinde verilir. Eğer örgü üzerindeki j inci spinin s_j değerinden $-s_j$ değerine birim zamandaki geçiş olasılığı $\omega_i(s)$ ise, $P_{1|1}(s, t|s', t')$ koşullu olasılık fonksiyonu Master denklemini sağlar:

$$\frac{dP_{1|1}(s, t|s', t')}{dt} = \sum_{i=-\infty}^{\infty} [\omega_i(\mu_i s) P_{1|1}(\mu_i s, t|s', t') - \omega_i(s) P_{1|1}(s, t|s', t')] \quad (4.8)$$

Burada $\mu_i s$, j inci spinin s_j değerinden $-s_j$ değerine geçişinden elde edilen bir konfigürasyondur. Geçiş olasılıkları Glauber tarafından

$$\omega_i(s) = \frac{\alpha}{2} \left[1 - \frac{\gamma}{2} s_i (s_{i-1} + s_{i+1}) \right] \quad (4.9)$$

şeklinde seçilir. Burada α , i . dipolün bir konumdan diğer konuma etkileşimsiz durumda birim zamanda geçiş olasılığıdır. γ ise ısı banyosunun T sıcaklığında komşu iki dipol arasındaki etkileşmeyi temsil eden J 'nin bir fonksiyonudur ve

$$\gamma = \tanh \frac{2J}{k_B T} \quad (4.10)$$

ile verilir. Burada k_B Boltzman sabitidir. i inci spin konfigürasyonu $\langle s(0)s(t) \rangle$ için denge durumunda

$$F_{i,j}(t) = \langle s_i(t)s_j(0) \rangle = \sum_s \sum_{s'} s_i s'_j P_{1|1}(s, t|s', 0) P_{eq}(s') \quad (4.11)$$

şeklinde bir set fonksiyon tanımlanabilir. Burada sistemin denge dağılım fonksiyonu

$$P_{eq}(s) = e^{-H(s)/k_B T} / \sum_s e^{-H(s)/k_B T} \quad (4.12)$$

şeklinde tanımlanır. (4.11) denkleminin zamana göre türevi

$$\frac{\partial F_{i,j}(t)}{\partial t} = -\alpha F_{i,j}(t) + \frac{\alpha\gamma}{2} [F_{i-1,j}(t) + F_{i+1,j}(t)] \quad (4.13)$$

bağıntısını ortaya koyar. (4.13) denklemini için başlangıç koşulu

$$F_{i,j}(0) = \langle s_i s_j \rangle = \xi^{|i-j|} \quad (4.14)$$

ile verilir. Burada $\xi = \tanh(J/k_B T)$ 'dir. (4.13) ve (4.14) denklemleri yardımıyla

$$f_n(t) = F_{i,j}(t) = \langle s_{j+n}(t) s_j(0) \rangle \quad (4.15)$$

bağıntısı tanımlanabilir. Burada $n = i - j$ dir. Bu fonksiyonlar

$$\frac{\partial f_n(t)}{\partial t} = -\alpha f_n(t) + \frac{\alpha\gamma}{2} [f_{n-1}(t) + f_{n+1}(t)] \quad (4.16)$$

denklemini sağlarlar. Burada n bir tamsayı olup $-\infty < n < \infty$ arasında değer alır.

Konumun ve zamanın bir fonksiyonu olan (4.16) denklemini

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} = -\alpha f(x,t) + \frac{\alpha\gamma}{2} [f(x-1,t) + f(x+1,t)] \quad (4.17)$$

şeklinde yazılabilir. Eğer (4.17) denklemini seriye açılır ve yüksek dereceden terimler ihmal edilirse

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} = (\alpha\gamma - \alpha)f(x,t) + \frac{\alpha\gamma}{2} \frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial x^2} \quad (4.18)$$

şeklinde difüzyon tipi bir diferansiyel denkleme ulaşırız. (4.18) denklemi değişkenlere ayırma yöntemiyle çözülebilir: $f(x, t) = \phi(t)R(x)$,

$$\frac{\partial[\phi(t)R(x)]}{\partial t} = (\alpha\gamma - \alpha)\phi(t)R(x) + \frac{\alpha\gamma}{2} \frac{\partial^2[\phi(t)R(x)]}{\partial x^2} \quad (4.19)$$

Çözümün zamana bağlı kısmı, genelleştirilmiş kesirli diferansiyel biçiminde

$${}_0D_t^\beta \phi(t) = -\lambda\phi(t) + \xi(t) \quad (4.20)$$

yazılabilir. Burada D_t^β Caputo türev operatörü; λ , ayırma parametresi ve $\xi(t)$ ise

$$\xi(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ \frac{(-\lambda t^\beta)^k \rho(t)}{\Gamma(\beta k + \mu)} \right\} \quad (4.21)$$

şeklinde Mittag-Leffler tipi bir fonksiyonla tanımlanan ve dipol-fonon etkileşmeleri ile kusurlardan kaynaklı etkileşmeleri ifade eden durulma fonksiyonudur. Burada $\rho(t) = \left(t^{-\beta} \Gamma(\beta k + 1) / \Gamma(\beta k + 1 - \beta) \right) + \lambda$ ile tanımlıdır (Ayrıntılı çözüm Ek 1’de verilmiştir). Bu durumda (4.20) kesirli diferansiyel denkleminin $\lim_{t \rightarrow 0} \phi(t) = 1$ başlangıç koşulu altında çözümü

$$\phi(t) = E_{\beta, \mu} \{ -\lambda t^\beta \} , 0 < \beta \leq 1 \quad (4.22)$$

şeklinde zamana bağlı kesirli dipol korelasyon fonksiyonunu verecektir (Ayrıntılı çözüm Ek 1’de verilmiştir). Burada $E_{\beta, \mu}(z)$

$$E_{\beta, \mu}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(\beta k + \mu)} \quad (4.23)$$

ile verilen Mittag-Leffler fonksiyonudur. (4.20) bağıntısının $\mu = 1$ durumuna karşılık gelen $\xi(t) = 0$ idealize durum için zamana bağlı çözümü tek parametrelili Mittag-Leffler fonksiyonu cinsinden

$$\phi(t) = E_{\beta}\{-\lambda t^{\beta}\} \quad (4.24)$$

şeklindedir (Ayrıntılı çözüm Ek 3’de verilmiştir). Bu ifade (1.46) denkleminde yerine yazılarak normalize edilmiş kompleks dielektrik fonksiyonu $\chi(\omega)$ için

$$\begin{aligned} \chi(\omega) &= 1 - i\omega \int_0^{\infty} e^{-i\omega t} E_{\beta}\{-\lambda t^{\beta}\} dt \\ &= \frac{1}{1+(i\omega\tau_c)^{\beta}} \end{aligned} \quad (4.25)$$

Cole-Cole bağıntısı elde edilir. Burada durulma zamanı $\tau_c = \lambda^{-1/\beta}$ şeklinde alınmıştır. Diğer bir yandan (4.25) bağıntısının $\beta = 1$ değeri için, zaman bölgesinde e^{-t/τ_c} ya da frekans bölgesinde $1/(1 + i\omega\tau_c)$ ile verilen Debye bağıntısını vereceği görülmektedir. Bununla birlikte zamanın çok çok küçük değerleri için (4.24) korelasyon bağıntısı

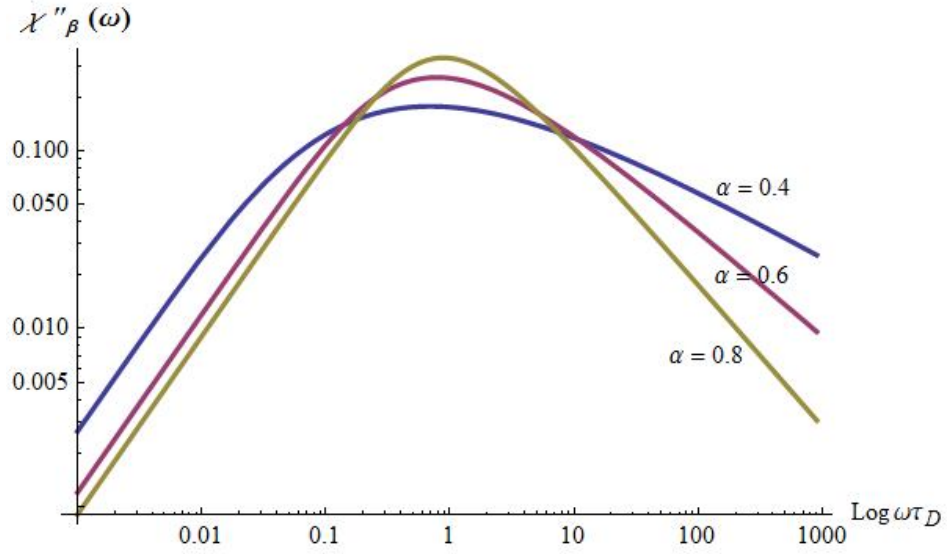
$$\phi(t) \approx 1 - \frac{(t/\tau_c)^{\beta}}{\Gamma(\beta+1)} \approx \exp\left[-\frac{(t/\tau_c)^{\beta}}{\Gamma(\beta+1)}\right], 0 < \beta \leq 1 \quad (4.26)$$

şeklinde KWW fonksiyonuna ulaşır (Mainardi ve ark., 2000). (4.26) bağıntısının farklı β değerleri için kayıp eğrileri Şekil 4.6 ‘da verilmiştir.

Bunun yanı sıra (4.24) bağıntısı, küçük τ_c değerleri için

$$\phi(t) \approx \frac{\sin(\beta\pi)}{\pi} \frac{\Gamma(\beta)}{(t/\tau_c)^{\beta}}, 0 < \beta \leq 1 \quad (4.27)$$

şeklinde Algebraic decay fonksiyonuna dönüşür (Scalas, 2006).



Şekil 4.6. (4.26) korelasyon fonksiyonunun $\beta = 0.4, 0.6, 0.8$ değerleri için kayıp eğrileri

4. 3. Birleşik Model: Kusur Destekli Kesirli Stokastik Ising Modeli

Glarum'ın geliştirdiği kusur difüzyon modeli daha önce de ayrıntılı olarak incelediğimiz gibi temel olarak kusur-dipol ilişkisi üzerine kurulu olup kusurların neden olduğu durulmayı betimleyen kusur-dipol korelasyonlarını vermektedir. Diğer yandan Glauber'ın stokastik Ising modelini temel alan, bir boyutta spin-zaman oto-korelasyon fonksiyonu ile moleküler bir zincirin dipol korelasyon fonksiyonunun özdeş olduğunu varsayan yaklaşım, dipol-dipol etkileşmelerine ait korelasyon fonksiyonlarını verir. İlk olarak, bu yaklaşımlar ve bu yaklaşımlara yapılan kesirli hesap tekniği uygulamasının sonuçları kısaca şu şekilde özetlenebilir: Kusur difüzyon yaklaşımı yalın olarak (2.21) bağıntısı ile verilen KWW fonksiyonunun $\beta = 1/2$ özel durumunu vermektedir. Yaklaşım üç boyuta genelleştirildiğinde ise Debye bağıntısına ulaşılmaktadır (Bordewijk, 1975). Diğer taraftan, yaptığımız bu çalışmadan da açıkça görüleceği üzere kesirli kusur difüzyon yaklaşımı sonucunda Debye bağıntısıyla birlikte KWW bağıntısına doğrudan ulaşılabilmektedir. (4.6) ile verilen kusur destekli kesirli korelasyon fonksiyonunun frekans uzayında Cole-Cole ve Cole-Davidson tipi davranışlar sergilediği ve bunun yanında $0.5 < \beta < 0.75$

aralığında özellikle yüksek frekans bölgesinde Havriliak-Negami tipi davranışları da iyi bir şekilde karşıladığı görülmüştür . Bu noktada kesirli yaklaşımın bizi daha genel sonuçlara götürdüğü açık bir şekilde ortaya çıkmaktadır.

Stokastik Ising temelli model ele alındığında ise modelin yalın olarak ulaştığı ifade kusur difüzyon modelinde olduğu gibi Cole-Cole bağıntısının $\alpha = 1/2$ özel durumudur. Yaklaşımdan elde edilen fonksiyon, modelden elde edilen etkileşme sabitinin farklı değerleri için Debye ve Cole-Davidson bağıntısının özelliklerini göstermektedir. Diğer yandan, stokastik Ising modeline kesirli hesap tekniği ile yapılan yaklaşım sonucunda Debye, KWW, Cole-Cole ve Algebraic decay fonksiyonlarının elde dileyebileceği açık bir şekilde gösterildi.

Bu tez çalışmasının temel varsayımı Ising ve Kusur difüzyon tipi etkileşmelerin stokastik yapısının bir bütün içerisinde birleşik süreçler olarak ele alınmasının dielektrik durulma mekanizmalarını açıklamada çok daha etkin olabileceği yönündedir. Bu varsayım daha önce Bozdemir (1985) tarafından ortaya atılmış fakat analitik bir incelemesi verilmemiştir. Bu çalışma ile, birleşik modele ait öngörü, kesirli hesap tekniği kullanılarak analitik bir ifadeye kavuşmuştur. Öyle ki, kusur difüzyon ve Ising modelinden elde edilen kesirli olasılık fonksiyonları kullanılarak birleşik modelin tek boyutta kesirli stokastik korelasyon fonksiyonu için

$$\psi_{\alpha,\beta}(t) = e^{-\left(\frac{t}{\tau_D}\right)^{\alpha-1/2}} E_{\beta,\mu}\{-\lambda t^\beta\} \quad (4.28)$$

biçiminde yeni bir ifade yazabiliriz. Böylece, (4.28) bağıntısı (1.46) ifadesinde

$$\chi_{\alpha,\beta}(\omega) = 1 - i\omega \int_0^\infty \exp(-i\omega t) e^{-(t/\tau_D)^{\alpha-1/2}} E_{\beta,\mu}\{-\lambda t^\beta\} dt \quad (4.29)$$

şeklinde yerine yazılırsa kesirli kompleks dielektrik fonksiyonu $\chi(\omega)$ için

$$\chi_{\alpha,\beta}(\omega) = 1 - \frac{(i\omega\tau_C)^\beta}{1+(i\omega\tau_C)^\beta} \exp(-i\omega\tau_D)^{-\alpha+1/2} \quad (4.30)$$

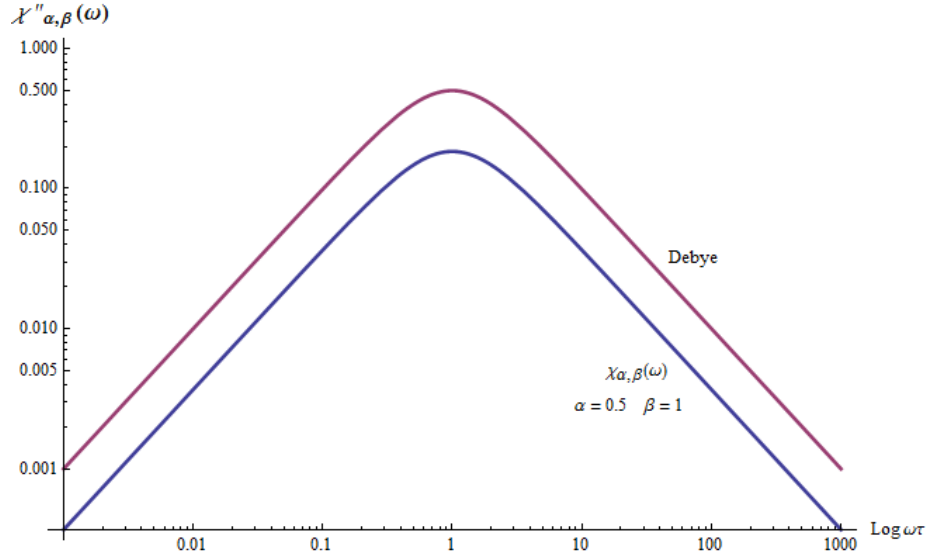
elde ederiz (Ayrıntılı çözüm Ek 2’de verilmiştir).

İlk olarak, bir kusur tarafından uyarılan dipol zincirinin durulma zamanı ile dipol-dipol etkileşmelerinin bir sonucu olarak ortaya çıkan durulma zamanlarının eşit oldukları $\tau_C = \tau_D = \tau$ şeklindeki bir durum için $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ ’nın (4.30) bağıntısı ile elde ettiğimiz kesirli dielektrik fonksiyonunu, dielektrik durulma mekanizmaları için verilen ampirik fonksiyonlarla doğrudan karşılaştırılabiliriz.

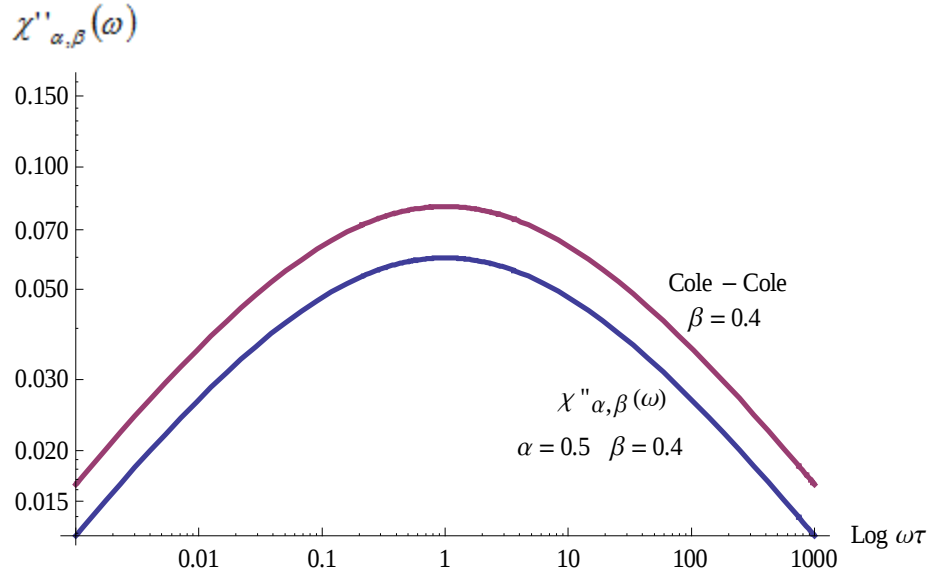
Bu çalışma sonucunda elde ettiğimiz (4.30) ile verilen kesirli kompleks dielektrik fonksiyonu, kolaylıkla görüleceği üzere, $\beta = 1$ ve $\alpha = 1/2$ değerleri için Debye bağıntısına; $0 < \beta \leq 1$ ve $\alpha = 1/2$ değerleri için ise Cole-Cole bağıntısına doğrudan dönüşmektedir. Burada çok önemli bir sonuç da ortaya çıkmaktadır: Kesirli kompleks dielektrik fonksiyonunun $\beta = 1$ ve $\alpha = 1/2$ için Debye bağıntısına dönüşmesi, Debye’ın öngördüğü ve ele aldığı gibi çevresiyle hiç etkileşmeyen, yalıtılmış bir sistemin olmayacağını açık bir şekilde ortaya koymaktadır. Öyle ki, kesirli kompleks dielektrik fonksiyonunu Debye bağıntısına dönüştüren parametreler kusur-dipol ve dipol-dipol etkileşmelerinin derecelerini gösteren parametreleridir.

Şekil 4.7 ve Şekil 4.8 ‘da Debye ve Cole-Cole ampirik fonksiyonları ile $\chi''_{\alpha,\beta}(\omega)$ fonksiyonun $\log(\omega\tau)$ ya göre grafikleri karşılaştırmalı olarak verilmiştir. Bu noktada, kesirli yaklaşımın belirgin parametreler altında klasik yaklaşımların sonuçlarını karşılayabilmesi beklenen bir sonuç olmakla birlikte yorumsal zorlukları da beraberinde getirmektedir. $\alpha = 0.5$ değeri için kesirli kompleks dielektrik fonksiyonu üzerinde kusur-dipol etkileşmelerinden gelen terim ortadan kalkmaktadır. Bu noktada Debye tipi bir durulmanın özellikle dipol-dipol etkileşmelerini ele alan bir yaklaşımda karşımıza çıkmasını bekleriz. $\beta = 1$ değeri ile klasik bir difüzyon hareketi yapan dipoller tanımlanmış olur, ki bu durum, dielektrik durulmayla ilgili deneyler incelendiğinde, deneylerle çok uyumlu değildir. O halde burada, tek bir parçacığın difüzyon hareketi sırasında, hareketin zamanla değiştiğini, yani ardışık durumlara ait difüzyonların farklı hızlarda gerçekleştiğini söyleyebiliriz. Durulma zamanı dağılım fonksiyonları yöntemiyle bu zorluğun pek aşılammış olması, zamanın, ilgili uzayda lineer olarak akmadığı düşüncesini doğurmaktadır. Bu durum bizi her ne kadar yeni bir kesirli istatistik teorisi geliştirmeye zorlasa da,

kesirli hesap tekniğinin fiziksel yorumlarındaki yetersizlik böyle bir istatistiğin geliştirilmesini büyük ölçüde zorlaştırmaktadır.



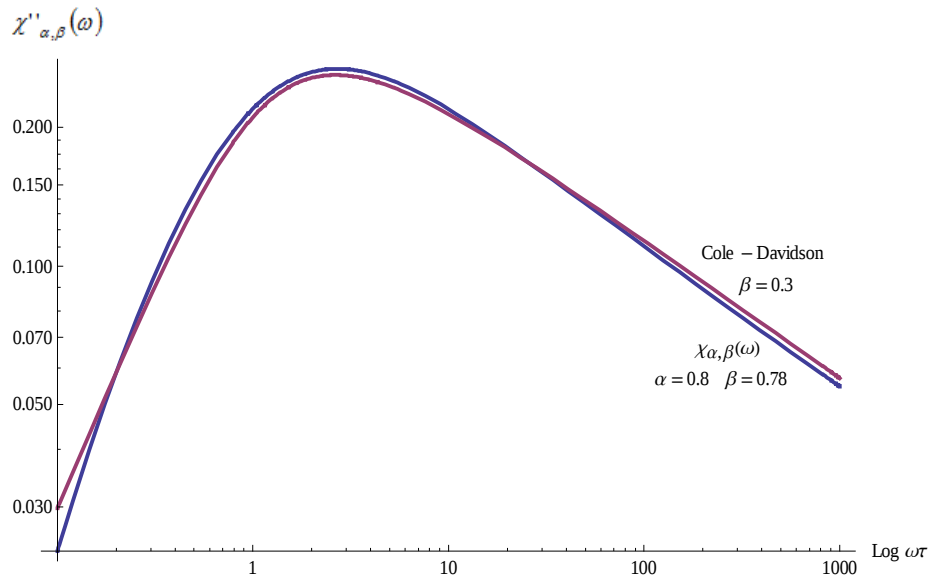
Şekil 4.7. Kesirli kompleks dielektrik fonksiyonu $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ ve Debye denklemi kayıp eğrileri



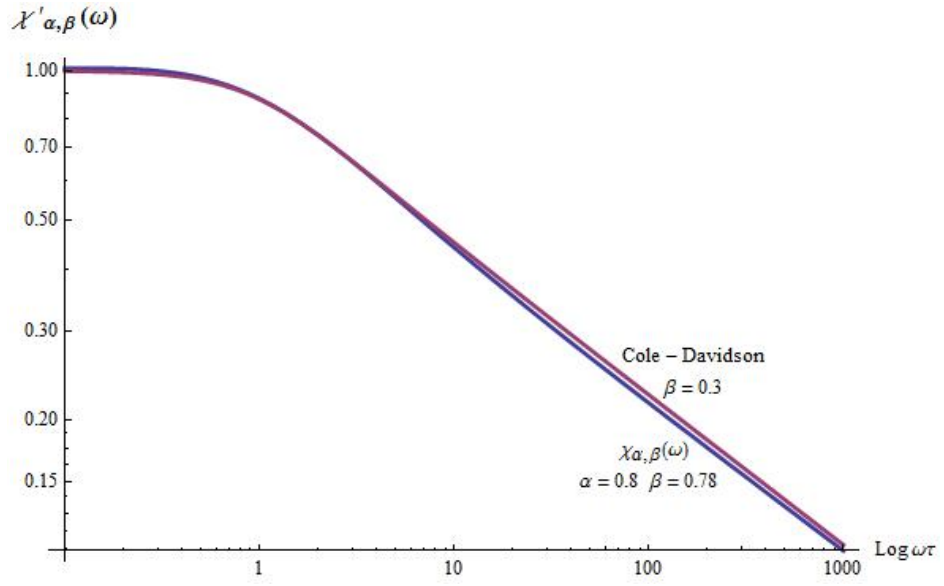
Şekil 4.8. Kesirli kompleks dielektrik fonksiyonu $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ ve Cole-Cole denklemi kayıp eğrileri

Şekil 4.9, Şekil 4.11 ve Şekil 4.13 ile verilen Cole-Davidson ve $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ kesirli dielektrik fonksiyonu kayıp eğrileri incelendiğinde ise Cole-Davidson denkleminin $\beta = 0.3, 0.4, 0.8$ değerlerine karşılık gelen grafikleri ile $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ 'nın sırasıyla $\alpha = 0.8, 0.86, 0.505$ ve $\beta = 0.78, 0.68, 0.98$ değerlerine karşılık gelen kayıp eğrilerinin oldukça uyumlu olduğu görülmektedir.

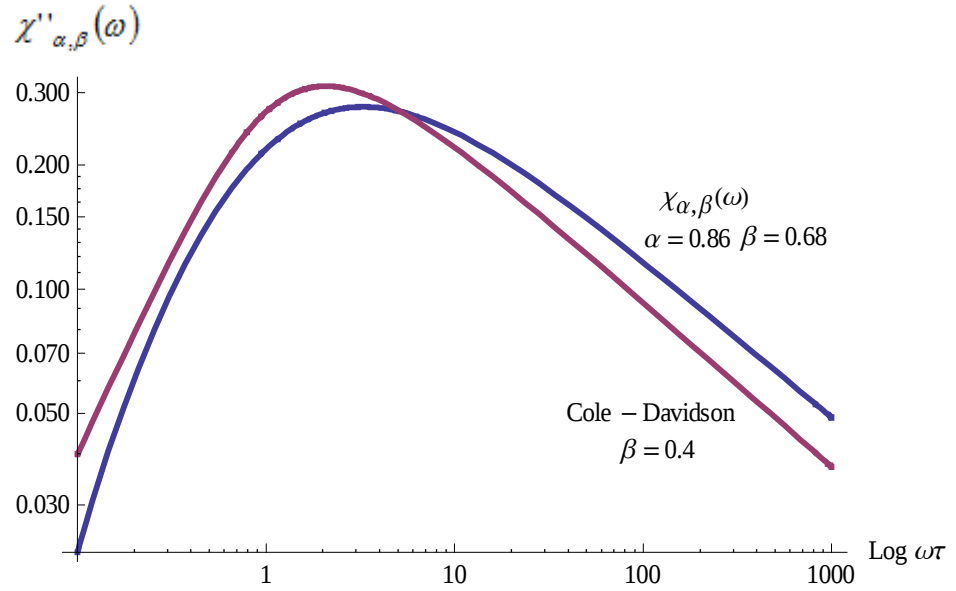
Şekil 4.9 ve Şekil 4.11 incelendiğinde Cole-Davidson bağıntısının β 'nın 0.3'den 0.4'e değişmesi sırasında birleşik modelden elde edilen bağıntıda α 'nın büyürken (0.8 'den 0.86 'ya) β 'nın küçüldüğünü (0.78'den 0.68'e) görüyoruz. Birleşik modelde α 'nın kusur-dipol ve β 'nın dipol-dipol etkileşmelerinin bir derecesini temsil ettikleri düşünülürse Cole-Davidson bağıntısının Debye bağıntısına yaklaşması sırasında $\beta = 0.5$ değerinin altındaki durumlarda birleşik modelde α ve β değerlerinin büyümesine karşın Cole-Davidson bağıntısının $\beta = 0.8$ olduğu, yani Debye bağıntısına daha fazla yaklaştığı durumda birleşik modelde α 'nın 0.55 değerine düştüğü fakat β 'nın 0.98 değerine yükseldiğini görüyoruz. Bu bağlamda kusur-dipol etkileşmelerinin zayıflayıp dipol-dipol etkileşmelerinin baskın olduğu durumun Debye tipi bir etkileşmeyi daha iyi tanımladığını söyleyebiliriz.



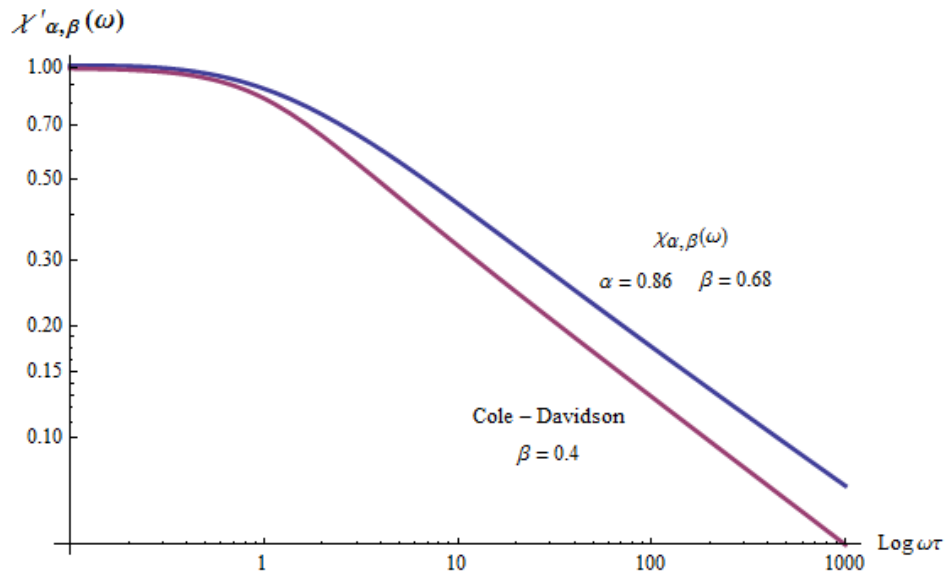
Şekil 4.9. Kesirli kompleks dielektrik fonksiyonu $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ ve Cole-Davidson denklemi kayıp eğrileri



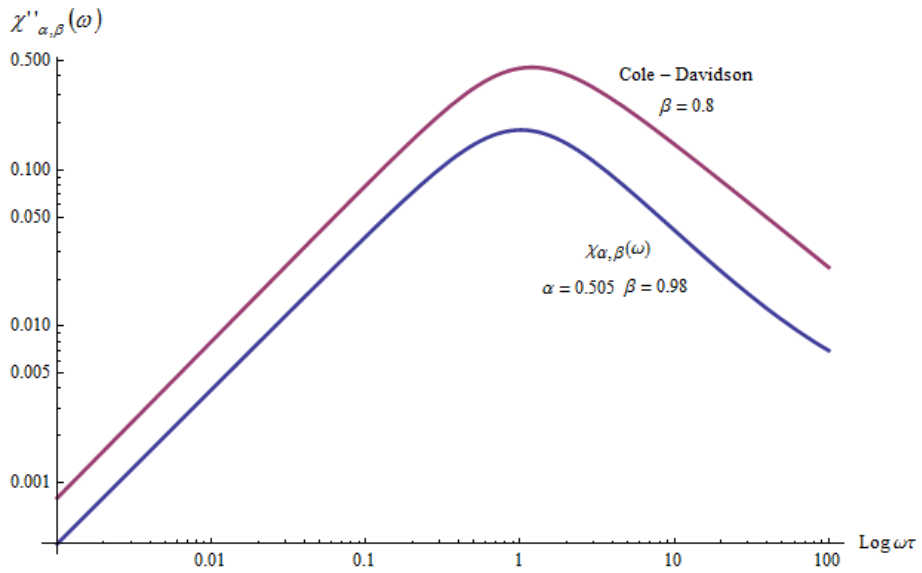
Şekil 4.10. Kesirli kompleks dielektrik fonksiyonu $\chi'_{\alpha,\beta}(\omega)$ ve Cole-Davidson denklemi reel eğrileri



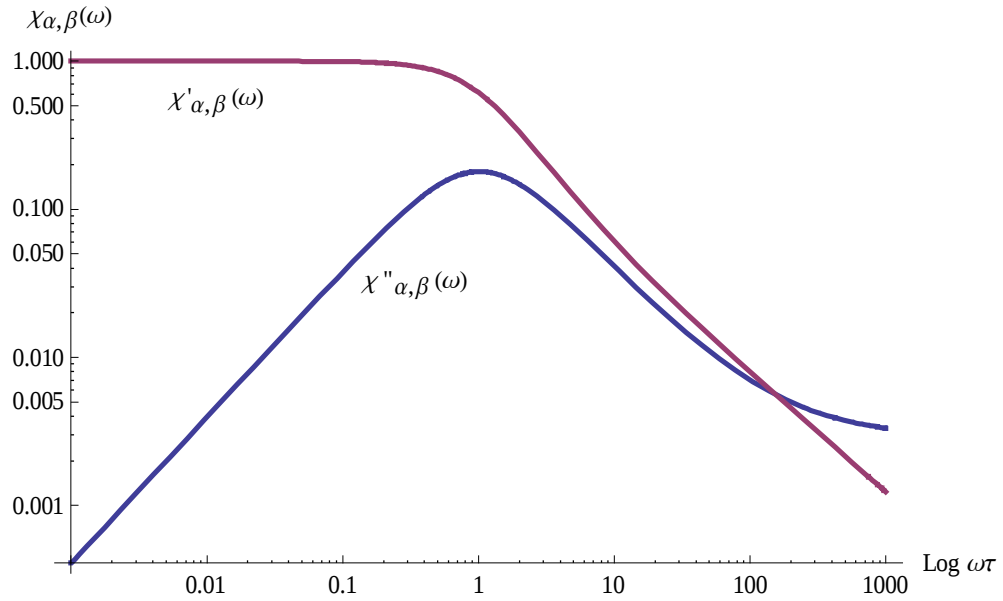
Şekil 4.11. Kesirli kompleks dielektrik fonksiyonu $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ ve Cole-Davidson denklemi kayıp eğrileri



Şekil 4.12. Kesirli kompleks dielektrik fonksiyonu $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ ve Cole-Davidson denklemi reel eğrileri



Şekil 4.13. Kesirli dielektrik fonksiyonu $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ ve Cole-Davidson denklemi kayıp eğrileri

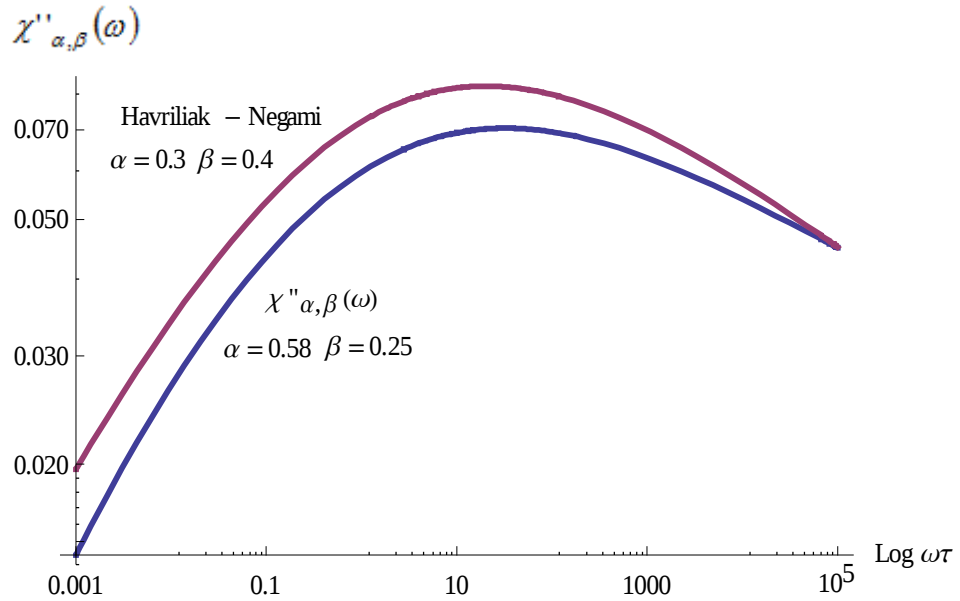


Şekil 4.14. Kesirli dielektrik fonksiyonunu $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ 'nın $\alpha = 0.505$, $\beta = 0.98$ değerleri için reel ve sanal bileşenleri eğrileri

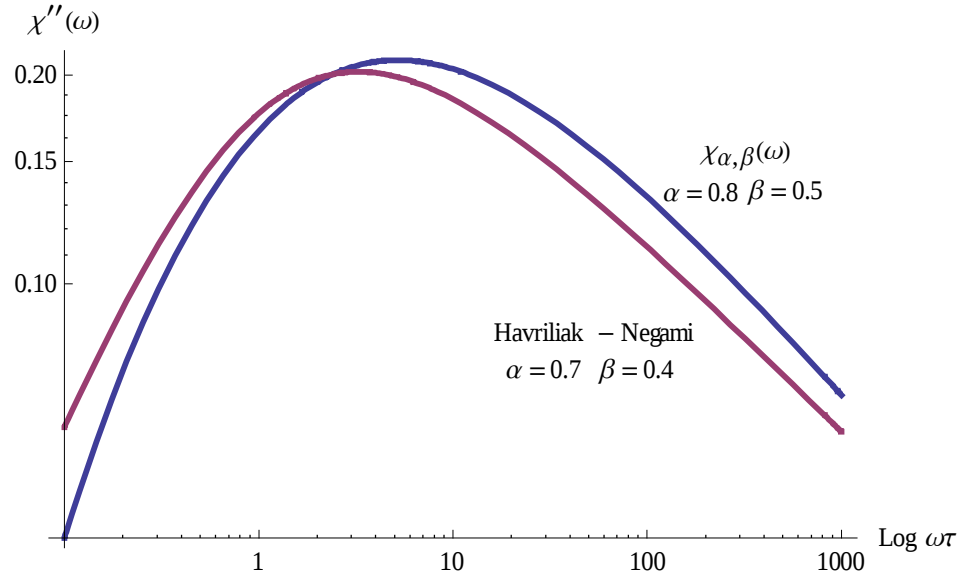
Şekil 4.15 ve Şekil 4.16 ile verilen Havriliak-Negami ve $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ kesirli dielektrik fonksiyonu kayıp eğrileri incelendiğinde Havriliak-Negami denkleminin $\alpha = 0.3$, $\beta = 0.4$ 'e karşılık gelen grafiği ile $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ 'nın $\alpha = 0.58$ ve $\beta = 0.25$ değerlerine karşılık gelen grafiklerinin, Havriliak-Negami denkleminin $\alpha = 0.7$, $\beta = 0.4$ 'e karşılık gelen grafiği ve $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ 'nın $\alpha = 0.8$, $\beta = 0.5$ değerlerine karşılık gelen grafiklerinin oldukça uyumlu olduğu görülmektedir.

Özellikle, bu çalışmada elde edilen kesirli dielektrik fonksiyonunun yüksek frekans bölgesinde Cole-Davidson tipi davranışları daha iyi karşılamaşının yanında Havriliak-Negami tipi davranışları hem alçak hem yüksek frekans bölgesinde çok daha başarılı bir şekilde verdiği görülmektedir. Bu noktada, birleşik modelin β 'nın küçük değerleri için Havriliak-Negami bağıntısını daha iyi karşılamaşığı ilgi çekici bir durumdur. Birleşik modelin β parametresinin dipol-dipol etkileşmelerini temsil ettiği düşünülürse, β 'nın küçülen değerleri için kayıp eğrisinin daha geniş frekans aralığına yayılması ve bununla birlikte yarı genişliğinin de artmasının, dış alanın büyüyen frekansı ile birlikte dipollerin bu değişen frekansa uzun bir süre tepki verebilmesinin bir sonucu olduğu düşüncesini güçlü kılar. Bunun, dış alanın sistemin iç enerjisini değiştirmesinden kaynaklandığı düşünülebilir. Şöyle ki, sistemin iç

enerjisinin artması dipol-fonon etkileşmelerini güçlendirecektir. Bu durum, durulma zamanını azaltacak ve bu nedenle durulma frekans aralığını büyütecektir. Diğer taraftan iç enerjideki artış kusurların birim zamandaki hareketlerini hızlandıracığından kusurların birim zamanda ulaştıkları moleküler dipol sayısı da artacaktır. Kusurlardan kaynaklı anlık dipol durulmalarının sistemin ortalama durulma zamanını aşağı çekmesi nedeniyle frekans uzayında genişleyen bir frekans aralığı gözlenecektir. Her ne kadar birleşik modelin Havriliak-Negami tipi bir davranışı karşılayan β değerlerinin küçük olması söz konusu ise de birleşik modelin α parametresinin β parametresine göre göreceli olarak büyüdüğü ve bu nedenle kusur-dipol etkileşmelerinden gelen katkının da göreceli olarak büyüdüğü düşünülebilir. Aynı zamanda, sistemin bu şekildeki tepkisi, zamana bağlı olasılıkların değişmesine neden olacaktır, ki bu şekildeki bir değişimin yapısı kesirli hesap tekniğinin esnekliği içinde daha rahat bir biçimde ifade edilebilmektedir.



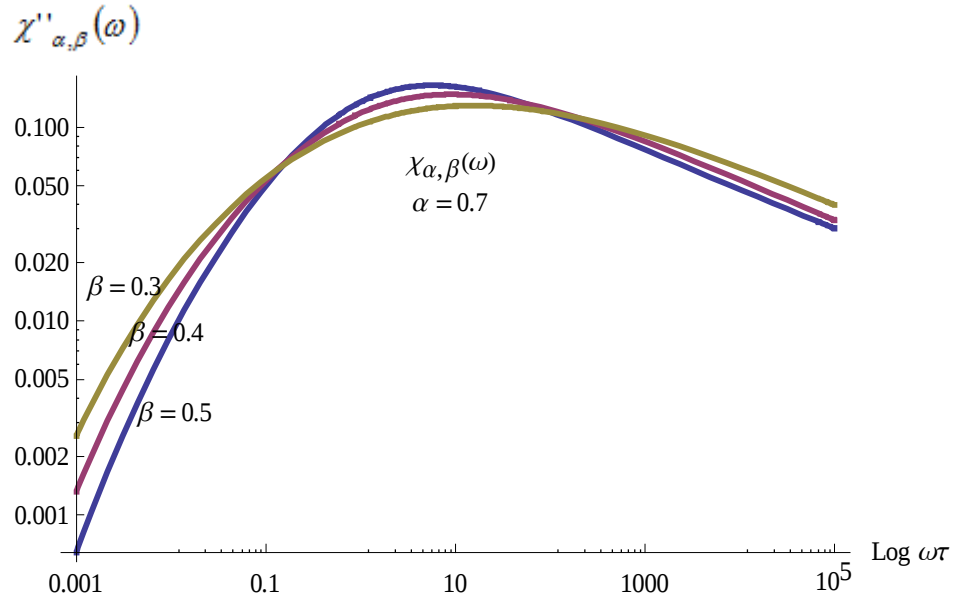
Şekil 4.15. Kesirli kompleks dielektrik fonksiyonu $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ ve Havriliak-Negami denklemi kayıp eğrileri



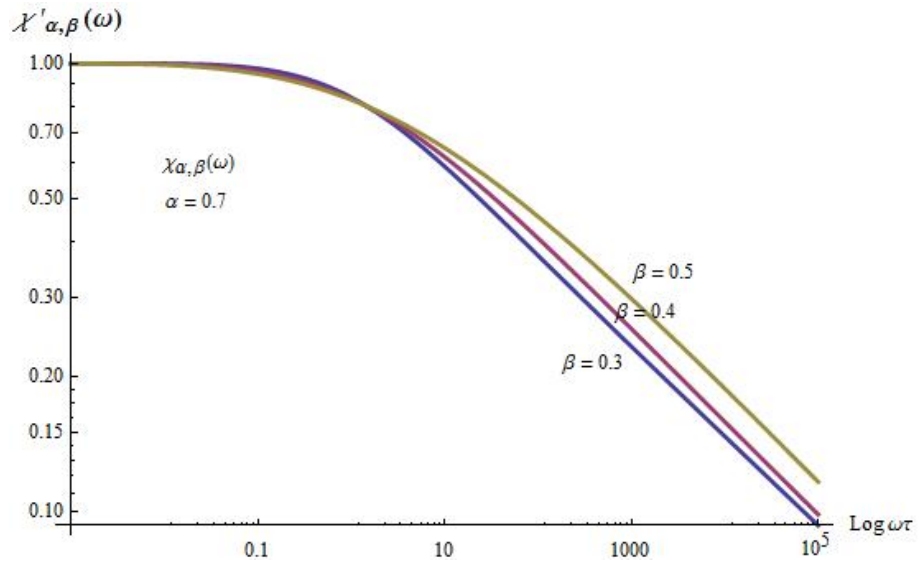
Şekil 4.16. Havriliak-Negami ve kesirli kompleks dielektrik fonksiyonu $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ kayıp eğrileri

Şekil 4.15 ve Şekil 4.16 ‘ya bir başka bir açıdan bakıldığında Havriliak-Negami bağıntısında β ‘nın sabit 0.4 değerine karşılık α parametresinin 0.3 ‘ten 0.7 ‘ye yükseldiğinde Havriliak-Negami bağıntısı Cole-Davidson bağıntısı davranışı sergilemeye başlamakta ve bu durumu karşılayan birleşik modelde α ve β parametrelerinin de büyüdüğü görülmektedir. Bu noktada birleşik modelde α ‘nın β parametresine oranla göreceli olarak daha fazla büyümesi aslında kusur-dipol etkileşmelerinin baskın olduğu bir duruma karşılık gelmektedir ki bu durum klasik kusur-difüzyon modelinin ortaya koyduğu Cole-Cole, Cole-Davidson davranışı bulgularıyla uyum içindedir.

Şekil 4.17’de görüldüğü gibi $\alpha = 0.7$ sabit değerine karşılık β ‘nın 0.5 ‘den 0.3’e azalan değerlerinde $\chi''_{\alpha,\beta}(\omega)$ kayıp eğrisinin yarı genişliği artmaktadır. Bu değişim daha önce açıkladığımız dipo-dipol etkileşme teriminin Havriliak-Negami davranışını sergilemedeki etkisini açık bir şekilde göstermektedir.



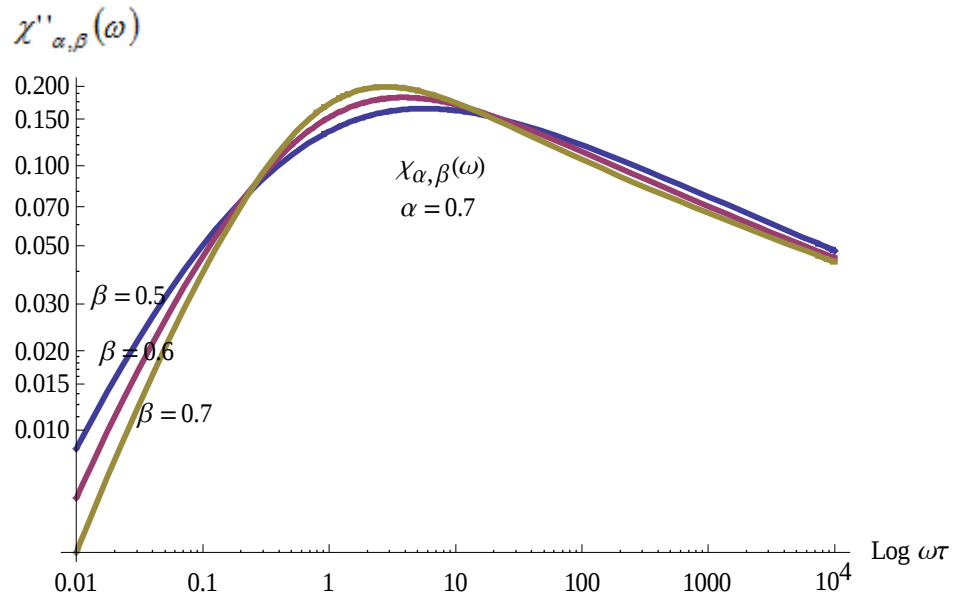
Şekil 4.17. $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ bağıntısının $\alpha = 0.7$ sabit değerine karşılık $\beta = 0.5, 0.4, 0.3$ değerlerine göre kayıp eğrileri.



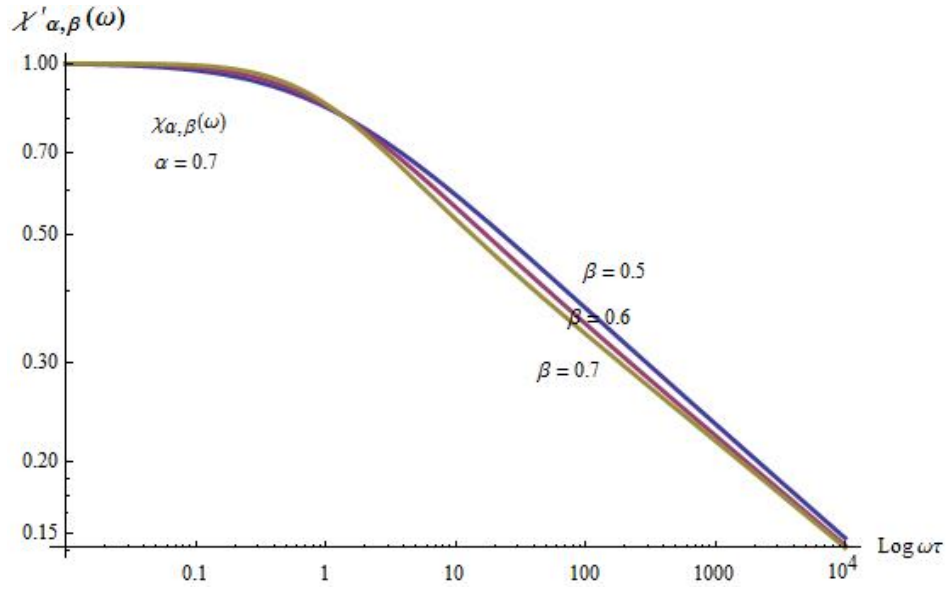
Şekil 4.18. $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ bağıntısının $\alpha = 0.7$ sabit değerine karşılık $\beta = 0.5, 0.4, 0.3$ değerlerine göre reel eğrileri

Bununla birlikte birleşik modelin $\alpha = 0.7$ sabit değerine karşılık β 'nin 0.5'den 0.7'ye yükselen değerlerinde Şekil 4.19 kayıp eğrisinden görüleceği üzere yüksek

frekans bölgesinde kayda değer bir değişiklik gözlenmezken alçak frekans bölgesinde artan β değerleriyle birlikte eğim de artmakta ve bağıntı Cole-Davidson tipi bir davranış göstermeye başlamaktadır. Burada β değerinin azalmasıyla Havriliak-Negami bağıntısına yaklaşıırken β değerinin büyümesiyle Cole-Davidson tipi bir davranışla karşılaştığımızı söylemek mümkündür. Bu çalışmada ortaya koyduğumuz β 'nın stokastik Ising yaklaşımı temeliyle dipol-dipol etkileşmelerinin bir sonucu olarak ortaya çıktığı düşünülürse özellikle yüksek frekans bölgesinde dipol-dipol etkileşmelerinin kusur-dipol etkileşmelerine göre daha etkin olduğu ve bu nedenle β 'nın artan ve azalan değerlerinin Cole-Davidson ve Havriliak-Negami davranışları arasındaki geçişi sağlaması beklenen bir sonuç olarak ortaya çıkmaktadır.



Şekil 4.19. $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ bağıntısının $\alpha = 0.7$ sabit değerine karşılık $\beta = 0.5, 0.6, 0.7$ değerlerine göre kayıp eğrileri

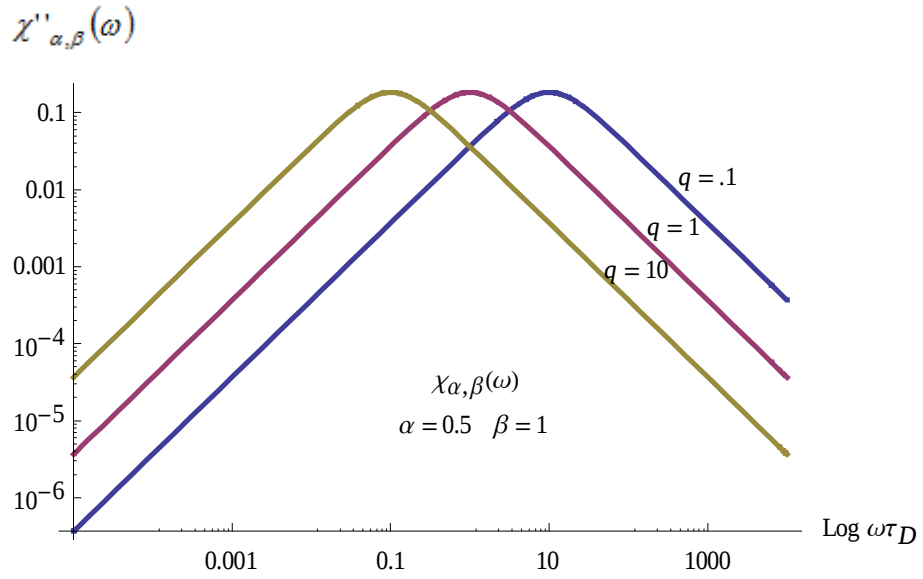


Şekil 4.20. $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ bağıntısının $\alpha = 0.7$ sabit değerine karşılık $\beta = 0.5, 0.6, 0.7$ değerlerine göre reel eğrileri

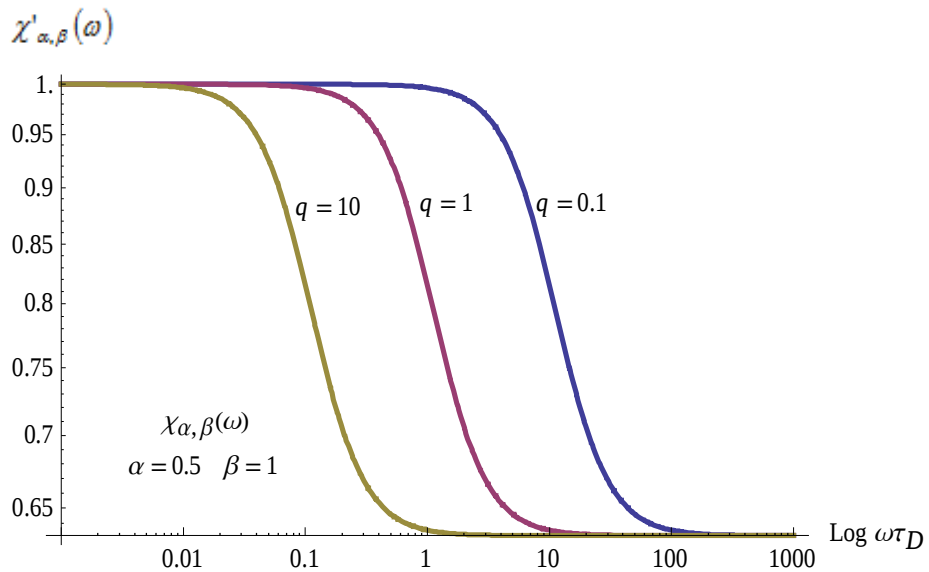
Buraya kadar olan kısımda, kusur-dipol ve dipol-dipol etkileşim zamanlarının iki süreçte de aynı olduğunu varsaydık ve grafikleri de bu doğrultuda yorumladık. Şimdi $q = \tau_c/\tau_D$ olarak durulma zamanlarının farklı olması durumunda nasıl bir değişim olduğunu görmek istersek, (4.30) ile verilen kesirli kompleks dielektrik fonksiyonunu

$$\chi_{\alpha,\beta}(\omega) = 1 - \frac{(i\omega q\tau_D)^\beta}{1+(i\omega q\tau_D)^\beta} \exp(-i\omega\tau_D)^{-\alpha+1/2} \quad (4.31)$$

şeklinde düzenleyebiliriz. Dipol-dipol etkileşimleri durulma zamanını veren τ_c ve kusur-dipol etkileşimleri durulma zamanı τ_D arasındaki orantı hangi frekans aralıklarında ne tür etkileşmelerin baskın olduğuyla ilgili bir fikir edinmemizi sağlayabilir. Şöyle ki, klasik kusur-difüzyon modelinin öngörüsü, bir kusurun dipolle etkileşmesi sonucu meydana gelen durulmanın anlık olduğu şeklindedir. Bu bağlamda modellerin öngörüsü olarak τ_D durulma zamanı τ_c durulma zamanından daha küçük olmaktadır.



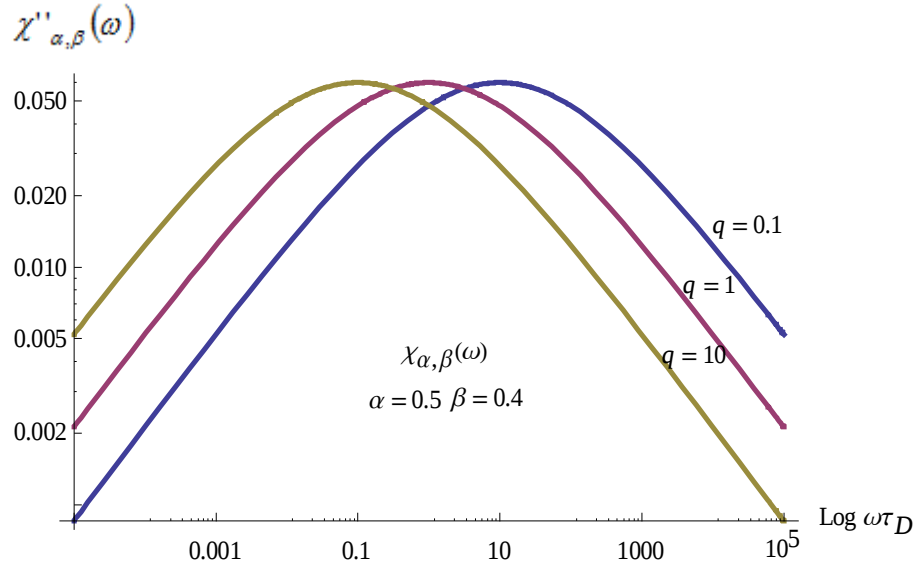
Şekil 4.21. $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ bağıntısının farklı q değerleri için Debye tipi kayıp eğrileri



Şekil 4.22. $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ bağıntısının farklı q değerleri için Debye tipi reel eğrileri

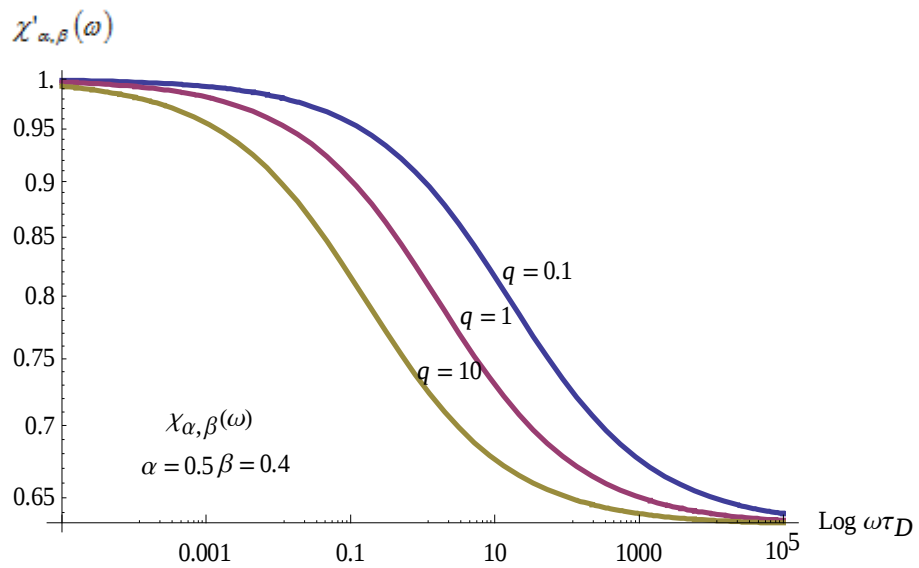
Şekil 4.21 incelendiğinde kusur-dipol etkileşmeleri durulma zamanının dipol-dipol etkileşmeleri durulma zamanından büyük olduğu durumda ($\tau_D > \tau_C$) kayıp piklerinin yüksek frekans bölgesine doğru, küçük olduğu ($\tau_D < \tau_C$) durumda ise alçak frekans bölgesine doğru kaydığı görülmektedir. Kayıp eğrilerinin yarı genişliğinde ise herhangi bir değişiklik olmamaktadır. Benzer bir durum Şekil 4.23 incelendiğinde de görülmektedir. Cole-Cole tipi davranışları gösteren grafikler için

$\tau_D > \tau_C$ durumunda kayıp eğrisi pikleri yine yüksek frekans bölgesine doğru kaymakta ve yarı genişlik değişmemektedir.



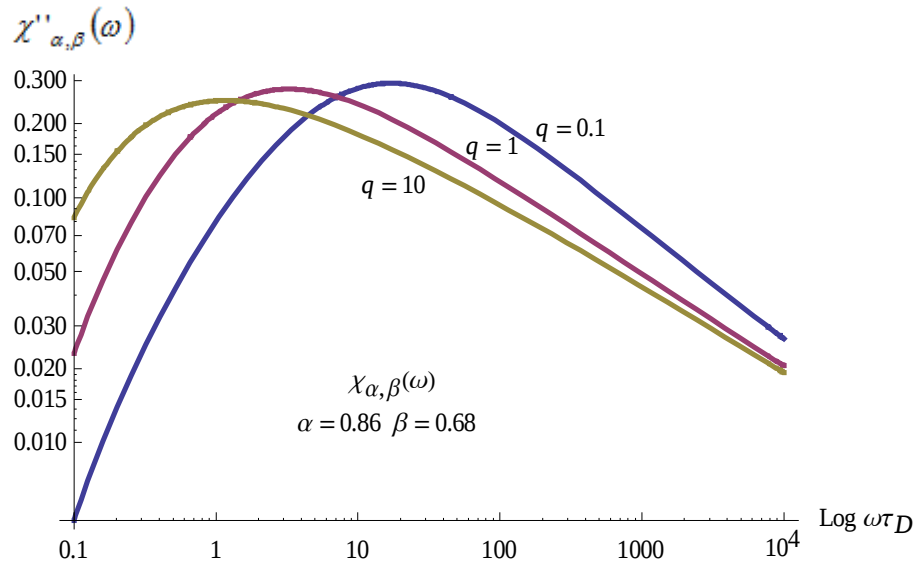
Şekil 4.23. $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ bağıntısının farklı q değerleri için Cole-Cole tipi kayıp eğrileri

Grafiklerdeki bu kaymalar beklenen bir durumdur. τ_C durulma zamanının τ_D durulma zamanından büyük olması kayıp piklerinin, büyük durulma zamanlarını karşılayan, alçak frekans bölgesine doğru kaymasına neden olacaktır.

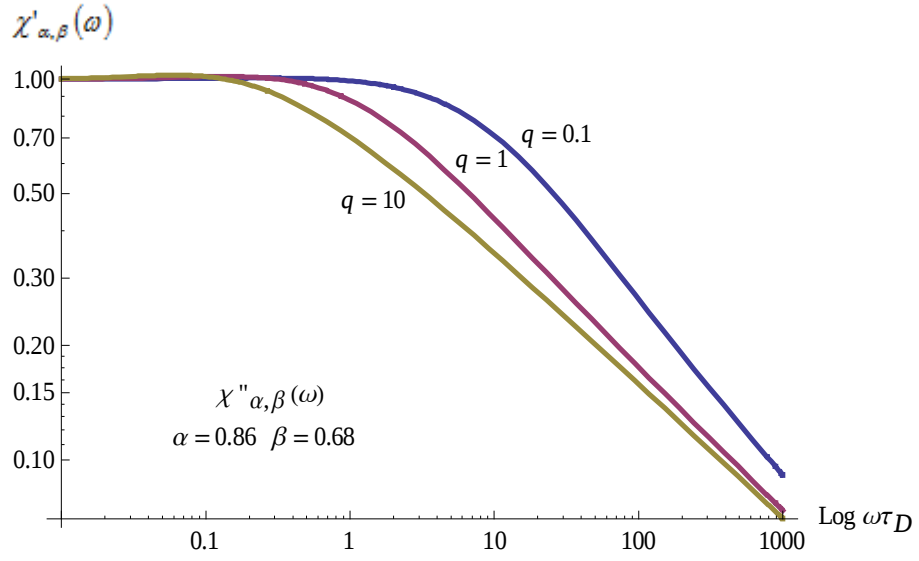


Şekil 4.24. $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ bağıntısının farklı q değerleri için Cole-Cole tipi reel eğrileri

Bununla birlikte, yukarıda incelenen Debye ve Cole-Cole tipi davranışların aksine Cole-Davidson ve Havriliak-Negami tipi davranışlarda durulma zamanları oranı değiştikçe kesirli kompleks dielektrik fonksiyonunun verdiği tepkilerde farklı bir biçimde değişiklik göstermektedir. Şekil (4.25) ile verilen Cole-Davidson tipi bir davranış incelendiğinde τ_c 'nin τ_D durulma zamanına oranla büyümesi, beklenildiği gibi kayıp piklerini alçak frekans bölgesine kaydırmakta fakat bunun yanında kayıp piklerinin yarı genişliğinin de artmasına sebep olmaktadır. Birleşik modelden de açıkça görülmektedir ki kusur-dipol etkileşmelerinin durulma zamanının, modelin öngördüğü gibi, daha düşük olması durumunda dielektrik durulma verileriyle daha uyumlu hale gelen eğrilere yaklaşılmaktadır.

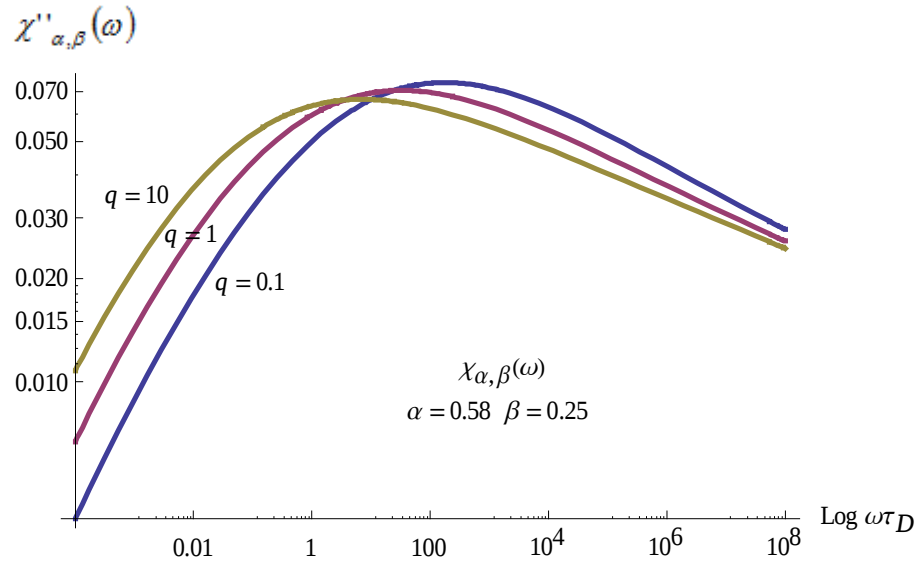


Şekil 4.25. $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ bağıntısının farklı q değerleri için Cole-Davidson tipi kayıp eğrileri

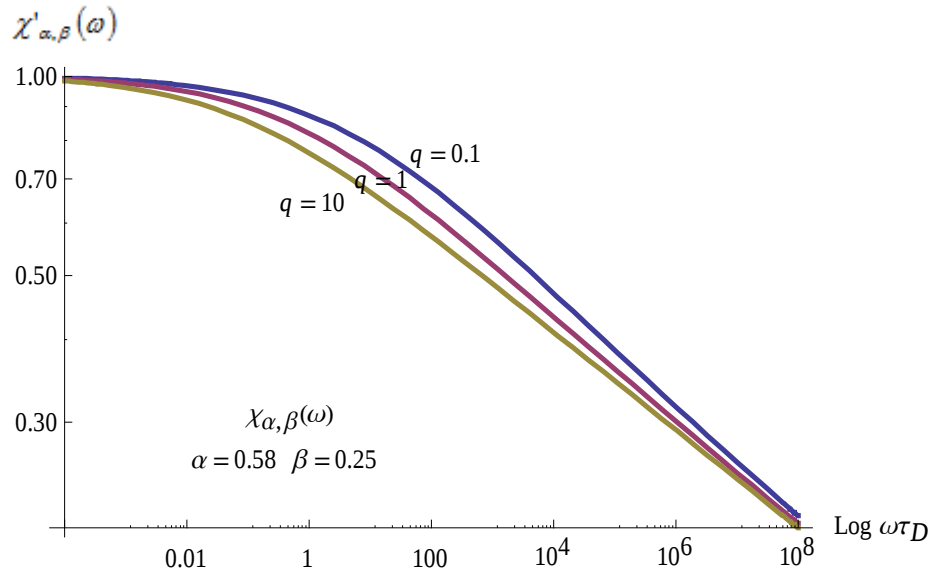


Şekil 4.26. $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ bağıntısının farklı q değerleri için Cole-Davidson reel eğrileri

Benzer bir durum Şekil 4.27 ile verilen Havriliak-Negami tipi eğriler için de geçerlidir. Oradaki tek fark, büyüyen q değerleriyle birlikte kayıp eğrilerinin, alçak frekans bölgesinde eğimlerinin değişmemesine karşın yüksek frekans bölgesinde giderek artmasıdır. Düşük frekans bölgesinde gerek sistemin iç enerjisindeki değişimin küçük boyutlarda olması gerekse dış alana verilen tepkilerde bir zorluğun olmaması nedeniyle kayıp eğrilerinin hemen hemen aynı eğimlere sahip olmasını bekleriz, fakat yüksek frekans bölgesinde bu bahsettiğimiz koşullar ve durumlar daha karışık, düzensiz bir hal almakta ve farklı dipolar mekanizmaların verdikleri tepkilerin birbirinden farklılık göstermeleri kayıp eğrilerinde de eğim farklılıklarının oluşmasına neden olmaktadır.



Şekil 4.27. $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ bağıntısının farklı q değerleri için Havriliak-Negami tipi kayıp eğrileri



Şekil 4.28. $\chi_{\alpha,\beta}(\omega)$ bağıntısının farklı q değerleri için Havriliak-Negami tipi reel eğrileri

5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Fiziksel mekanizmaları açıklamaya dayalı model çalışmalarında iki önemli tehlikenin olduğu söylenebilir: İlk olarak, bir modelde öngörülen varsayımların doğada bulunduğu dair bir güvence yoktur. Bir model, birbirinden çok farklı fiziksel süreçlere, bu süreçler aynı mekanizmaya sahipmiş gibi uygulanabilmektedir. İkinci tehlike, bir modeli formüle ederken, matematiksel kolaylık ve zorlamalardan dolayı yapılmak zorunda olunan yaklaşımlardır. Yaklaşımlar sırasında yapılan ihmallerin, doğanın fiziksel yapısını açıklamada çok önemli ayrıntılar olmadığı iddia edilemez. Her ne kadar bir modelin ortaya konması sırasında çok önemli zorluklar olsa da modelin kabul edilebilirliği, o modelin ilgili fiziksel gözlemleri karşılayıp karşılayamadığı ve fiziksel olayı açıklamada ne kadar mantıklı olduğuyla belirlenebilir (Bozdemir, 1978).

Kesim 4.1 ve 4.2 'de bir sistem içerisindeki birçok yapının birbirleriyle olan etkileşimlerini hesaba katarak geliştirilen birleşik model çalışmasında, Glarum'ın Kusur difüzyon modeli ve Glauber'ın stokastik Ising modeli kesirli hesap tekniği kullanılarak ayrı ayrı yeniden ele alındı. Ulaşılan sonuçlar ortaya koymaktadır ki kesirli hesap tekniği non-Debye durulma mekanizmalarının çözülmesine yönelik diferansiyel denklemlerin çözümlerinde klasik yaklaşıma göre çok daha genel ve başarılı sonuçlar vermektedir. Daha önce Kesim 2'de genel özelliklerini verdiğimiz, dielektrik durulma mekanizmalarını açıklamaya yönelik, Hiyerarşik kısıtlanmış dinamik durulma modeli, Förster direkt-transfer modeli, Fraktal durulma modeli vs. gibi modellerin daha çok KWW ve azınlıkla Cole-Cole ve Cole-Davidson tipi davranışları vermelerine karşın kesirli birleşik model KWW, Debye, Cole-Cole bağıntılarını doğrudan vermesinin yanında Cole-Davidson ve Havriliak-Negami fonksiyonlarının davranışlarını da sergilemektedir.

Dielektrik durulma mekanizmasını açıklamaya yönelik kusur difüzyon ve Ising temelli klasik yaklaşımların ayrı ayrı elde ettiği başarıların tek başlarına belirli bir noktaya kadar yeterli olabildikleri görülmektedir. Bu modellere yapılan kesirli yaklaşımlarla, dielektrik durulma verilerini temsil edebilen daha genel fonksiyonlar elde edilmiştir. Ayrıca bu çalışmada Debye tipi olmayan davranışların Mittag-Leffler

fonksiyonlarıyla da tanımlanabildiği ve bu fonksiyonların durulma süreçlerini tanımlamada önemli bir rol oynadığı da ortaya konmuştur.

Bununla birlikte klasik yaklaşımlara ayrı ayrı yapılan kesirli hesap tekniği genelleştirmesi de durulma süreçlerini betimlerken belirli bir noktaya kadar başarılı olabilmektedir. Oysaki birden fazla durulma mekanizmasının aynı anda işleyebileceği öngörüsüne dayanan birleşik modelin oldukça büyük bir spektrumda deneysel verileri karşılayabildiği görülmüştür. Bu bakımdan, kesirli hesap ile birlikte, modelin, sistem içindeki etkileşimleri oldukça uygun bir biçimde tanımladığı söylenebilir.

Kusur-dipol ve dipol-dipol etkileşimli durulma zamanlarının eşit kabul edildiği durum için birleşik modelden elde edilen kesirli kompleks dielektrik fonksiyonunun kayıp eğrileri Debye, Cole-Cole, Cole-Davidson ve Havriliak-Negami davranışlarını net bir şekilde sergilemektedir. Benzer şekilde durulma zamanlarının farklı olabileceği durum için kayıp eğrileri, ampirik fonksiyonları net bir şekilde karşılamakla birlikte Debye ve Cole-Cole davranışını sergileyen kayıp eğrilerinin yarı genişliğinde herhangi bir değişiklik ortaya çıkmamış fakat Cole-Davidson ve Havriliak-Negami tipi kayıp eğrilerinde alçak frekans bölgesine gidildikçe yarı genişliklerin arttığı gözlenmiştir. Bu durum, q değerinin 1 'den büyük olması, doğal olarak τ_C durulma zamanının τ_D durulma zamanına oranla göreceli olarak büyümesi nedeniyle frekans uzayında, doruk noktalarının (piklerin) alçak frekans bölgesine doğru kaymasına ve bu nedenle kusur-difüzyon etkileşimleri ve dipol-dipol etkileşimleri durulma zamanlarının birbirlerine oranla büyümesi sonucunda frekans uzayında kayıp eğrilerinin yarı genişliklerinin de artmasına neden olmuştur.

Dielektrik durulma süreçlerine ait deneysel veriler incelendiğinde yalnızca malzemenin yapısına bakarak onun ne tür durulma biçimi göstereceğine dair bir gruplandırma yapmak çok zordur. Dielektrik malzemeyi meydana getiren bütün bileşenler aynı çatı altında çok farklı davranışlar sergileyebilirler. Özellikle dış alanla birlikte sistemin uyarılması ve iç enerjisindeki değişim, süreci açıklamaya yönelik model çalışmaları için büyük bir zorluk oluşturmaktadır, çünkü sistem sürekli bir değişim halindedir ve değişimin her basamağında sistemi oluşturan her parçacığın sistemin diğer öğeleriyle olan etkileşimi de değişecektir. Bu noktadaki temel

yaklaşımlardan biri durulma sürecinde en baskın olan mekanizmaları tanımlayabilmek ve bu mekanizmaların birlikte oluşturdukları tepkisel davranışı formülize edip yorumlayabilmektir. Bu tür bir yaklaşım, her ne kadar bütün etkileşme süreçlerini hesaba katmasa da, bütün etkileşmelerin ele alındığında karşılaşılabilecek matematiksel zorluklar da düşünüldüğünde, uygun bir yöntem olarak karşımıza çıkmaktadır, ki bu çalışmadaki ana düşünce ve yaklaşım da bu yöndedir.

Ele alınan dielektrik durulma sürecinde, dipollerin kesirli bir olasılık dağılımı gösterebileceği öngörüsüne dayalı olarak durulma mekanizmasının matematiksel temsilinin de kesirli diferansiyel denklemlerle ifade edilmesi gerektiği düşüncesi bu tez çalışmasının temelini oluşturmakla birlikte kesirli hesap tekniğinin ortaya koyduğu α ve β kesirli parametrelerinin fiziksel anlamlarını yorumlamak kolay değildir, ki bu hesap tekniğinin net bir fiziksel yorumu da halen tam olarak yapılamamıştır. Bizim bu noktadaki öngörümüz, fiziksel süreçleri açıklamak amacıyla yazılan diferansiyel denklemlerin temelde tek bir parçacık için yazılıp sonra bunu tüm sistemin davranışı olarak genelleştirilmesi sırasında her bir parçacığın farklı davranışlar sergilediği gerçeğinin denklemleri yaratmadaki zorluğundan dolayı göz ardı edilmesinden kaynaklandığı şeklindedir. Farklı durulma zamanı dağılım fonksiyonları kullanılarak bu zorluk aşılmaya çalışılmıştır fakat bu yaklaşım fiziksel bulunmadığı için çok eleştirilmiştir (Jonsher, 1983). Bununla birlikte, bir fiziksel süreçte bir parçacığın diğer bir parçacıkla olan etkileşme hızı ve zamanının, sistem içerisindeki kusurlar, etkileşimler, enerji kayıpları vb. nedenlerden dolayı sürekli değişim halinde olması bu değişimin ifadesinin en iyi bir biçimde kesirli diferansiyel denklemlerle verilebileceği fikrini doğurmaktadır. Sistemin değişim hızının azalan bir şekilde olduğu öngörüsü, neden kesirli hesap tekniği kullanılarak ulaşılan fiziksel sonuçlarda kesirli α ya da β parametrelerinin sistemi tanımlayan klasik ifadenin üstlerinden daha küçük olduğuyula uyumludur. Bu çalışmada α ve β parametrelerinin büyüklüğü temsil ettikleri mekanizmaların sürece olan etkilerinin büyüklükleriyle orantılı olarak ele alınmıştır. Bu şekildeki bir düşünce her ne kadar kesirli dereceden diferansiyellere net bir fiziksel anlam kazandırmasa da, bu parametrelerin fiziksel süreçlerde neyi, nasıl temsil ettikleri

noktasındaki yorumlara olanak sağlamaktadır, ki böyle bir bakış açısı çalışmanın “Bulgular ve Tartışma” kısmında ağırlıklı olarak kullanılmıştır. Bununla birlikte birleşik modelin ortaya koyduğu esnek α ve β parametrelerinin, ele alınan fiziksel sürecin doğasına hangi mekanizmaların daha fazla etki ettiğine dair yorumlara izin verdiğini görüyoruz. Kesirli hesap her ne kadar fiziksel süreçlere ait diferansiyel denklemlerin üstlerinin kesirli dereceden olmasının fiziksel verileri açıklamada çok daha başarılı olduğunu ortaya koysa da α ve β parametrelerinin, ortamın değişkenleriyle (sıcaklık, enerji, vs) olan ilişkisini açıklamada şimdilik fazla bir başarı sağladığı söylenemez.

Kesirli dağılım ve yaklaşımların ortaya koyduğu bir başka nokta, özellikle elektronik ve atomik düzeylerdeki harekete eşlik eden zaman uzayının düzensiz bir akışa sahip olabileceği ve bu düzensiz zaman akışının parçacıkların olasılık dağılımlarını kesirli yapabileceği yönündedir. Diğer yandan, uzayın zamana bağlı esnek yapısından kaynaklı yerel enerji dağılımlarındaki düzensizlik ya da enerjinin kuantumlanmasının, o uzayda zamanın düzensiz akmasının ya da zamanın kuantize olmasının bir sonucu olarak fiziksel bir gerçeklik kazandığı öngörülebilir. Diğer bir ifadeyle, yüklü parçacıkların enerjilerindeki kuantumlanma, o uzayda zamanın kuantumlanmasının bir sonucu olarak ortaya çıkmakta ve zamandaki düzensizlik, uzayda yerel gerilme ve sıkışmalara neden olmaktadır.

Kesirli hesap tekniği üzerinde günümüzde “kinetik diferansiyel operatör” olarak da adlandırılan ve $D^{\alpha(t)}$ şeklinde bir gösterime sahip değişken üstelli bir operatör ile fiziksel süreçlere açıklama getirilmeye çalışılmaktadır (Ingman ve Suzdalnitsky, 2004). Burada t , ele alınan fiziksel mekanizmaya ait değişkeni temsil etmektedir. Kinetik diferansiyel operatörler, uzay-zamanın esnek olduğu öngörümüze uygun bir yapıya sahiptir. Bununla birlikte $\alpha(t)$ ‘nin yapısı literatürde lineer olarak alınmaktadır, oysa bizim öngörümüz $\alpha(t)$ ‘nin üstel olarak değişen bir yapısının olması gerektiği yönündedir. Bu öngörü fiziksel deneylerin özellikle üstel azalmaları desteklediği sonucunun yanı sıra parçacık etkileşmelerinin de üstel bir hız ya da zaman değişimine sahip olması gerektiği düşüncesine dayanmaktadır. Bu noktada, bu türde önerilen bir diferansiyel operatörün matematiksel işlemler sırasında ne kadar rahat kullanılabileceği ve özellikle zaman-frekans uzayı arasındaki

dönüşümleri rahatlıkla karşılayıp karşılayamayacağı problemiyle karşılaşılır. Bu zorlukların zaman içinde aşılmasıyla birlikte kompleks yapıli fiziksel süreçlerin doğası çok daha iyi bir şekilde anlaşılacaktır.

KAYNAKLAR

- ANDERSON, M., 1972., Polym. Prepr.13:1147. 31.
- ANDERSON, J. E., 1970. Model Calculations of Cooperative Motions in Chain Molecules, J. Math. Phys., 52: 2821
- BAYIN, S., Fen ve Mühendislik Bilimlerinde Matematik Yöntemler, Ders Kitapları A.Ş., 2004.
- BÖTTCHER, C.J., BORDEWIJK, P., 1978. Theory of Electric Polarization, Elsevier, Amsterdam, 553s.
- BORDEWIJK, P., 1975. Defect-diffusion Models of Dielectric Relaxation, Chem. Phys. Lett., 32(3): 592-596.
- BOZDEMİR, S., 1981a. An Ising Model Analysis of Dielectric Polarization I, Phys. Stat. Sol. B, 103: 459.
- BOZDEMİR, S., 1981b. An Ising Model Analysis of Dielectric Polarization II, Phys. Stat. Sol. B, 104: 37-47.
- BOZDEMİR, S., 1985. Some Comments and Corrections on Defect-diffusion Models of Dielectric Relaxation, Phys. Stat. Sol. B, 128: 119-131.
- BREY, J. J., PARADOS, A., 1996. Low-Temperature Relaxation In The One Dimensional Ising Model, Physical Review E, 53 (1): 458-464.
- CHANDRASEKHAR, S.. 1943, Revs. Modern Phys. 15, 1
- COFFEY, W. T., KALMYKOV, Y. P., TİTOV, S. V., 2004. Inertial effects in anomalous dielectric relaxation, J. Molecular Liquids 114 (2004), 35-41.
- COLE, K.S., COLE, R. H., 1941. J. Chem. Physics, 9: 341.
- DAVIDSON, D.W., COLE, R. H., 1950. J. Chem. Physics, 18: 1417.
- DEBYE, P., 1945. Polar Molecules, Dover, Newyork.
- DİCK, B. G., OVERHAUSER, A. W., 1958. Phys. Rev. 112, 90
- DİMARZİO and BİSHOP, 1974. J.Chem.Phys. 60, 3802
- DİSSADO, L. A., HİLL, R. M., 1987. Solid State Ionics, Volume 22, Issue 4, Pages 331-336
- FRÖHLİCH, H., 1958. Theory of dielectrics, dielectri constant and dielectric loss, Oxford University Press, USA; 2 edition

- GLAUBER, R. J., 1963. Time Dependent Statistics of the Ising Model, *J. Math. Phys. Cambridge*, 4: 294.
- GLARUM, S.H., 1960. Defect Diffusion Models, *J. Chem. Phys.*, 33: 639.
- HAVRILIAK, S., NEGAMI, S., 1966. *J. Polymer Sci. C14*: 99.
- HILFER, R., 2002. Experimental evidence for fractional time evolution in glass forming materials, *Chemical Physics* 284 (2002) 399–408
- HUNT, B. I., POWLES, J. G., 1966. Nuclear spin relaxation and a model for Molecular reorientation in supercooled liquids and glasses, *Proc. Phys. Soc.*, 88: 513-528.
- INGMAN, D., SUZDALNITSKY, J., 2004. Control of damping oscillations by fractional differential operator with time-dependent order, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 193, 5585–5595
- IVANOV, E.N., 1964. *Sov. Phys. JETP* 18, 1041
- HANLON, J. E., LAWSON A. W., 1959., Effective Ionic Charge in Alkali Halides *Phys. Rev.* 113, 472.
- JONSCHER, A.K., 1983. *Dielectric Relaxation in Solid*, Chelsea Dielectrics Press, London, 415s
- JONSCHER, A.K., 1996. *Universal Relaxation Law*, Chelsea Dielectrics Press, London, 380s.
- JUND P., JULLIEN R., AND CAMPBELL I., 2001. Random walks on fractals and stretched exponential relaxation, *Phys. Rev. E* 63, 036131 (2001) [4 pages]
- KLAFTER, J., SHLESINGER, M.F. 1986. On the relationship among three theories of Relaxation in Disordered Systems, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 83: 848-851.
- KLAFTER, J., BLUMEN, A., 1985. Concentration fluctuation in reaction kinetics, *J. Chem. Phys.* 82, 3198
- KAO, K. C., 2004. *Dielectric Phenomena In Solids With Emphasis On Physical Concepts Of Electronic Processes*, Elsevier Academic Press
- LANDAU, L.D., LIFSHITZ, E.M., 1960. *Electrodynamics of continuous media*, Pergamon Press, Oxford, 417s.

- KOŞAL, M., 2001. Mos Yapısında SiO₂ 'nin Kompleks dielektrik Sabitinin Frekansa Bağlı Değişiminin C-V Ölçüm Yöntemleriyle Belirlenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Çukurova Üniv. Fen Bil. Ens., Adana
- LOVERRO A., (2004). Fractional Calculus: History, Definitions and Applications for the Engineer Definitions and Applications for the Engineer, Department of Aerospace and Mechanical Engineering, University of Notre Dame.
- MAINARDI, F., RABERTO, M., GORENFLO, R., SCALAS, E., 2000. arXiv:cond-mat/0006454 v2 11
- MANDELBROT, B. 1983. The Fractal Geometry of Nature. New York : W. H. Freeman and Company
- MCDUFFİE, G. E., AND LİTOVİTZ, T. A., 1962. J. Chem. Phys. 37 1699-1705
- MELTZLER, R., KLAFTER, J., 2002, Journal of Non-Crystalline Solids 305, 81–87
- MİTSKEVİTCH, V. V., 1964. Soviet Phys. Solid State 5, 2568
- MİTTAG-LEFFLER G.M. MİTTAG–LEFFLER, C. R., 1903. Acad. Sci. Paris 137, 554;
- NİGMATULLİN, R. 2007. Physica B 388, 418–434
- NİKLASSON, G. A., 1987. Fractal aspects of the dielectric response of charge Carriers in disordered materials, J. Appl. Phys., 62: R1-R14.
- ONSAGER, L., 1936. J. Am. Chem. Soc. 58, 1486-1493
- PALMER, R. G., STEİN, D. L., ABRAHAMAS, E., ANDERSON, P. W., 1984. Models hierarchically constrained dynamics for glassy relaxation, Phys. Review Lett., 53(10): 958-961.
- PHİLLİPS, M. C., BARLOW, A. J., LAMB, J., 1972. Relaxation in liquids: a defect-Diffusion model of viscoelasticity, Proc. Roy. Soc. A, 329: 193-218.
- PHİLLİPS, J.C.,1996. Stretched exponential relaxation in molecular and electronic Glasses, Rep. Prog. Phys. 59: 1133-1207.
- PODLUBYN I., 1999. Fractional differential equations, Academic Press
- RAJU, G. G., 2003. Dielectrics in Electric Fields, (Power Engineering, 19), CRC Press.

- REYES-MELO E., MARTINEZ-VEGA J., GUERRERO-SALAZAR C., ORTIZ-MENDEZ U., 2005. Application of fractional calculus to the modeling of dielectric relaxation phenomena in polymeric materials, *Journal of Applied Polymer Science*, Vol. 98, 923–935
- SCALAS, E., 2006. *Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems*, 567 Part I 3-16
- SHLESINGER, M. F., MONTROLL, E. W., 1984. On the Williams-Watts function of Dielectric relaxation, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 81: 1280-1283.
- SIRDESHMUKH, D. B., SIRDESHMUKH, L. ve SUBHADRA, K. G., 2007. Fifty years of Szigeti's dielectric theory – A review, *Indian Academy of Sciences*, Vol. 69, October, pp. 491–520
- EKER S., 1997. Kramer-Kronig Dönüşümlerinin Nümerik İntegrasyonu ve Dielektrik Verilerine Uygulaması, Yüksek Lisans Tezi, Çukurova Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı.
- SKINNER, J. L., 1983. Kinetic Ising Model for Polymer Dynamics, *J. Chem. Phys.*, 79(4): 1955-1964.
- SMYTH, C. P., 1955. *Dielectric Behavior And Structure*, Mcgraw Hill.
- SZİGETİ, B., 1949. *Trans. Faraday Soc.* 45, 155
- TUNCER, E., SERDYUK, Y. V., GUBANSKI, S. M., 2002. Dielectric mixtures: electrical properties and modeling, *IEEE*, 9(5):809-828.
- UCHAIKIN, J. J., 2003 , *Relaxation Processes and Fractional Differential Equations*, *International Journal of Theoretical Physics*, Vol. 42, No. 1
- UFUKTEPE, Y., BOZDEMİR, S., 1997. *Elektromanyetik Teori*, Baki Kitap ve Yayınevi, Adana
- WERON, A., WERON, K., WOYCZYNSKI, W.A., 1995. Relaxation function in Dipolar materials, *J. Stats. Phys.*, 78:1027-1038.
- WILLIAMS, G., MCCRUM, N. G., 1967. *Anelastic and Dielectric Effects in Polymeric Solids*, John Wiley and Sons, London.
- YAMASHITA, J., 1952. *Progr. Theoret. Phys. Japan* 8, 280
- YAMASHITA, J., KUROSAWA, J., 1955. *J. Phys. Soc. Japan* 10, 610

ZENER, C., 1937. Elasticity and Anelasticity of Metals, The University of Chicago, Chicago, IL, 1948, p. 76; Zener, C., Phys. Rev. 53 (1938) 90, 52 (1937) 230

ÖZGEÇMİŞ

Mayıs 1978 'de Almanya'da doğdu. İlk ve orta dereceli öğrenimini Adana'da tamamladı. 1997 yılında Karadeniz Teknik Üniversitesi Fizik bölümüne girdi ve aynı üniversiteden mezun oldu. 2002 yılında Çukurova Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsüne kaydolarak Yüksek Lisans eğitimime başladı ve 2006 yılında yine aynı üniversitede Doktora eğitimime devam etti. 2009 yılında Kastamonu Üniversitesi Fizik Bölümünde Uzman Fizikçi olarak çalışmaya başladı ve halen aynı kurumda uzman olarak çalışmaya devam etmektedir.

EKLER

Ek 1:

(4.24) kesirli diferansiyel denklemi $\lim_{t \rightarrow 0} \phi(t) = 1$ başlangıç koşulu altında

$${}_0D_t^\beta \phi(t) = -\lambda \phi(t) + \xi(t) \quad , \quad 0 < \beta \leq 1 \quad (1)$$

biçiminde verilmiştir. İfadenin, (3.31) ile verilen kesirli türevlerin Laplace dönüşümü yapılacak olursa

$$s^\beta \Phi(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^{\beta-k-1} \Phi^{(k)}(0) = -\lambda \Phi(s) + \Xi(s) \quad (2)$$

bağıntısı yardımıyla, $k = 0$ için

$$\Phi(s) = \frac{s^{\beta-1} + \Xi(s)}{s^{\beta} + \lambda} \quad (3)$$

ifadesi elde edilir. Burada $s^{\beta-1} + \xi(s) = f(s)s^{\alpha-\mu}$ şeklinde bir dönüşüm yapılsa

$$\Phi(s) = f(s) \frac{s^{\beta-\mu}}{s^{\beta} + \lambda} \quad (4)$$

ifadesine ulaşılır. Burada $F(t) = \mathcal{L}^{-1}\{f(s)\}$ ve $g(t) = \mathcal{L}^{-1}\{G(s)\} = \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{s^{\alpha-\beta}}{s^{\beta} + \lambda}\right\}$ olduğu kabul edilirse ve

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{s^{\beta-\mu}}{s^{\beta} + \lambda}\right\} = t^{\beta-1} E_{\beta, \mu}(-\lambda t^\beta) \quad (5)$$

sonucu da kullanılarak

$$\begin{aligned}\phi(t) &= \mathcal{L}^{-1} \left\{ f(s) \frac{s^{\alpha-\beta}}{s^{\beta+\lambda}} \right\} = \int_0^t F(t-\zeta) g(\zeta) d\zeta \\ &= \int_0^t F(t-\zeta) \zeta^{\beta-1} E_{\beta,\mu}(-\lambda \zeta^\beta) d\zeta\end{aligned}\quad (6)$$

convolution teoremini yazabiliriz. Böylece $F(t-\zeta) = 2\delta(t-\zeta)\zeta^{1-\beta}$ dönüşümü ile, burada δ Dirac-delta işlemcisidir, (6) bağıntısı

$$\phi(t) = \int_0^t 2\delta(t-\zeta) E_{\beta,\mu}(-\lambda \zeta^\beta) d\zeta \quad (7)$$

halini alır. Buradan, (4.26) ile verilen kesirli korelasyon fonksiyonu

$$\phi(t) = E_{\beta,\mu}(-\lambda t^\beta) \quad (8)$$

elde edilir.

Elde edilen kesirli korelasyon fonksiyonu (8) ifadesi (1) denkleminde yerine yazılırsa

$${}_0D_t^\beta E_{\beta,\mu}\{-\lambda t^\beta\} = -\lambda E_{\beta,\mu}\{-\lambda t^\beta\} + \xi(t) \quad (9)$$

ve ifade Mittag-Leffler fonksiyonlarının açık biçimleri yerlerine yazılarak yeniden düzenlenirse

$${}_0D_t^\beta \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ \frac{(-\lambda t^\beta)^k}{\Gamma(\beta k + \mu)} \right\} + \lambda \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ \frac{(-\lambda t^\beta)^k}{\Gamma(\beta k + \mu)} \right\} = \xi(t) \quad (10)$$

elde edilir. Burada kesirli türevler için

$${}_aD_t^\rho (t-a)^\nu = \frac{\Gamma(\nu+1)}{\Gamma(-\rho+\nu+1)} (t-a)^{\nu-\rho}, \quad 0 \leq m \leq \rho < m+1, \quad \nu > 0 \quad (11)$$

bağıntısından (Podlubyn, 1999) faydalanarak

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left\{ \frac{(-\lambda t^{\beta})^k}{\Gamma(\beta k + \mu)} t^{-\beta} \Gamma(\beta k + \mu) \right\} + \lambda \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ \frac{(-\lambda t^{\beta})^k}{\Gamma(\beta k + \mu)} \right\} = \xi(t) \quad (12)$$

$\xi(t)$ fonksiyonu için

$$\xi(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ \frac{(-\lambda t^{\beta})^k}{\Gamma(\beta k + \mu)} \left[\frac{t^{-\beta} \Gamma(\beta k + 1)}{\Gamma(\beta k + 1 - \beta)} + \lambda \right] \right\} \quad (13)$$

(4.25) bağıntısına ulaşırız.

Ek 2:

Birleşik model için elde edilen

$$\chi(\omega) = 1 - i\omega \int_0^\infty \exp(-i\omega t) e^{-(t/\tau_D)^{\alpha-1/2}} E_{\beta,\mu}\{-\lambda t^\beta\} dt \quad (14)$$

(4.34) bağıntısında $e^{-(t/\tau_D)^{\alpha-1/2}}$ exponansiyel ifadesinin

$$e^{-(t/\tau_D)^{\alpha-1/2}} = \sum_{n=0}^\infty \frac{[-(t/\tau_D)^{\alpha-1/2}]^n}{\Gamma(n+1)} \quad (15)$$

seri açılımı ve Mittag-Leffler fonksiyonlarının

$$E_{\beta,\mu}\{-\lambda t^\beta\} = \sum_{k=0}^\infty \frac{[-\lambda t^\beta]^k}{\Gamma(\beta k + \mu)} \quad (16)$$

ile verilen açık ifadeleri (14) denkleminde yerine yazılırlarsa

$$\chi(\omega) = 1 - i\omega \sum_{n=0}^\infty \left\{ \frac{[-(1/\tau_D)^{\alpha-1/2}]^n}{\Gamma(n+1)} \left[\sum_{k=0}^\infty \frac{(-\lambda)^k}{\Gamma(\beta k + \mu)} \int_0^\infty \exp(-i\omega t) t^{\alpha n - n/2} t^{\beta k} dt \right] \right\} \quad (17)$$

ve burada $\alpha n - n/2 = \mu - 1$ dönüşümü yapılırsa

$$\chi(\omega) = 1 - i\omega \sum_{n=0}^\infty \left\{ \frac{[-(1/\tau_D)^{\alpha-1/2}]^n}{\Gamma(n+1)} \left[\sum_{k=0}^\infty \frac{(-\lambda)^k}{\Gamma(\beta k + \mu)} \int_0^\infty e^{(-i\omega t)} t^{\mu-1+\beta k} dt \right] \right\} \quad (18)$$

elde edilir. Burada

$$\int_0^\infty e^{(-i\omega t)} t^{\mu-1+\beta k} dt = (i\omega)^{-\mu-\beta k} \Gamma(\mu + \beta k) \quad (19)$$

integral sonucu (18) denkleminde yerine yazılırsa

$$\begin{aligned}
\chi(\omega) &= 1 - i\omega \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \frac{[-(1/\tau_D)^{\alpha-1/2}]^n}{\Gamma(n+1)} \left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\lambda)^k}{\Gamma(\beta k + \mu)} (i\omega)^{-\mu-\beta k} \Gamma(\mu + \beta k) \right] \right\} \\
&= 1 - i\omega \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \frac{[-(1/\tau_D)^{\alpha-1/2}]^n}{\Gamma(n+1)} \left[\sum_{k=0}^{\infty} (-\lambda)^k (i\omega)^{-\mu-\beta k} \right] \right\} \\
&= 1 - i\omega \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \frac{[-(1/\tau_D)^{\alpha-1/2}]^n}{\Gamma(n+1)} \left[\sum_{k=0}^{\infty} (-\lambda)^k (i\omega)^{-(\alpha n - \frac{n}{2} + 1) - \beta k} \right] \right\} \\
&= 1 - i\omega \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} [-\lambda(i\omega)^{\beta}]^k \right\} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[-(1/\tau_D)^{\alpha-1/2}]^n}{\Gamma(n+1)} (i\omega)^{-(\alpha n - \frac{n}{2} + 1)} \\
&= 1 - \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} [-\lambda(i\omega)^{\beta}]^k \right\} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[-(1/i\omega\tau_D)^{\alpha-1/2}]^n}{\Gamma(n+1)} \tag{20}
\end{aligned}$$

elde edilir. Böylece $\lambda = \tau_C^{\beta}$ için

$$\chi(\omega) = 1 - \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} [-(i\omega\tau_C)^{\beta}]^k \right\} \exp(-i\omega\tau_D)^{-\alpha+1/2} \tag{21}$$

ifadesi düzenlenerek

$$\chi(\omega) = 1 - \frac{(i\omega\tau_C)^{\beta}}{1+(i\omega\tau_C)^{\beta}} \exp(-i\omega\tau_D)^{-\alpha+1/2} \tag{22}$$

bağıntısına ulaşılır.

Ek 3:

(4.24) denklemi, Mittag-Leffler fonksiyonunun açık ifadesi şeklinde (1.46) denkleminde yerine yazılırsa

$$\begin{aligned}
 c(w) &= 1 - iw \int_0^{\infty} e^{-iwt} E_b(-(t/t)^b) dt \\
 &= 1 - iw \int_0^{\infty} e^{-iwt} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left(-(t/t)^b\right)^k}{\Gamma(bk+1)} dt \\
 &= 1 - iw \int_0^{\infty} e^{-iwt} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k t^{bk}}{\Gamma(bk+1) t^{bk}} dt \\
 &= 1 - iw \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\Gamma(bk+1) t^{bk}} \int_0^{\infty} e^{-iwt} t^{bk} dt
 \end{aligned} \tag{23}$$

elde edilir. (23) denklemindeki integral ifadesini çözmek için; $iwt = y$ ve $bk = x$ dönüşümleri yapılırsa

$$\begin{aligned}
 c(w) &= 1 - iw \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\Gamma(bk+1) t^{bk}} \int_0^{\infty} e^{-y} \frac{y^x}{(iw)^x iw} dy \\
 &= 1 - iw \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\Gamma(bk+1) t^{bk}} \frac{1}{(iw)^{x+1}} \int_0^{\infty} e^{-y} y^x dy
 \end{aligned} \tag{24}$$

bulunur. Gama fonksiyonunun özelliğinden faydalanılarak

$$\begin{aligned}
 c(w) &= 1 - iw \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\Gamma(bk+1) t^{bk}} \left(\frac{1}{(iw)^{bk+1}} \Gamma(bk+1) \right) \\
 &= 1 - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(iwt)^{bk}}
 \end{aligned}$$

$$= 1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{(i\omega t)^b}}$$

ve böylece

$$c(\omega) = \frac{1}{1 + (i\omega t)^b} \quad (25)$$

olarak elde ederiz.