

DOKUZ EYLÜL ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

DONMUŞ DÜZENSİZLİKLER İÇEREN BİR ÖRGÜ
SİSTEMİNİN DURULMA DAVRANIŞININ
İNCELENMESİ

Mehmet AĞARTIOĞLU

Mayıs, 2012

İZMİR

DONMUŞ DÜZENSİZLİKLER İÇEREN BİR ÖRGÜ SİSTEMİNİN DURULMA DAVRANIŞININ İNCELENMESİ

Dokuz Eylül Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü

Yüksek Lisans Tezi

Fizik Anabilim Dalı

Mehmet AĞARTIOĞLU

Mayıs, 2012

İZMİR

YÜKSEK LİSANS TEZİ SINAV SONUÇ FORMU

MEHMET AĞARTIOĞLU, tarafından YRD. DOÇ. DR. GÜL GÜLPINAR yönetiminde hazırlanan “DONMUŞ DÜZENSİZLİKLER İÇEREN BİR ÖRGÜ SİSTEMİNİN DURULMA DAVRANIŞININ İNCELENMESİ” başlıklı tez tarafımızdan okunmuş, kapsamı ve niteliği açısından bir Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir.



Yrd. Doç Dr. Gül GÜLPINAR

Yönetici



Prof. Dr. Harun POLAT

Jüri Üyesi



Prof. Dr. Nihat BERKEK

Jüri Üyesi



Prof. Dr. Mustafa SABUNCU

Müdür

Fen Bilimleri Enstitüsü

TEŞEKKÜR

Yüksek Lisans tez çalışmam süresince çalışmalarımı yönlendiren, ilgisini ve desteğini hiçbir zaman esirgemeyen saygıdeğer hocam Yrd. Doç. Dr. Gül GÜLPINAR'a

Her zaman yakınlığını ve yardımını hissettiğim bölümümüz doktora öğrencisi ve aynı zamanda arkadaşım Erol VATANSEVER'e

Son olarak, bu güne kadar maddi ve manevi her konuda destekleriyle benimle birlikte olan değerli aileme teşekkürlerimi sunarım.

Mehmet AĞARTIOĞLU

DONMUŞ DÜZENSİZLİKLER İÇEREN BİR ÖRGÜ SİSTEMİNİN DURULMA DAVRANIŞININ İNCELENMESİ

ÖZ

Bu tez çalışmasında, Onsager tersinmez termodinamiği kuramı kullanılarak, karma spin-1 ve spin-2 Ising ferromanyetik sisteminin dinamik özellikleri üzerinde çalışılmıştır. Öncelikle sistemin denge halinden bir küçük dış manyetik alan sayesinde sistem dengeden uzaklaştırıldığı kabul edilmiştir. Daha sonra bu alanın kesildiğini varsayarak, denge komşuluğunda manyetik Helmotz serbest enerji ifadesini hesaplanmış ve doğrusal yanıt kuramından faydalanarak sisteme ait durulma davranışları sıcaklığın bir fonksiyonu olarak hesaplanmıştır. Bunun ardından, kinetik denklemlerin zamana bağlı sinüzoidal bir dış alan varlığı halindeki stasyonier çözümleri yapılarak, manyetik dispersiyon ve absorpsiyon katsayılarının sıcaklık ve frekans bağılıkları elde edilmiştir. Elde edilen sonuçlar literatürdeki deneysel ve kuramsal çalışmalarla karşılaştırılmıştır.

Anahtar Sözcükler: Karma spin-1 ve spin-2 Ising modeli, durulma zamanları, manyetik dispersiyon faktörü, manyetik absorpsiyon faktörü, argand diyagramları.

INVESTIGATION OF THE KINETIC BEHAVIORS OF THE SPIN SYSTEMS IN THE NEIGHBOURHOOD OF THE EQUILIBRIUM

ABSTRACT

In this thesis, mixed spin-1 and spin-2 ferromagnetic system is studied by using a method which combines equilibrium theory of critical phenomena and Onsager irreversible thermodynamics. In order to obtain the relaxation of the magnetization to equilibrium in this system, we assume a small uniform external field that is applied a short while, which removes the system slightly from equilibrium. After, the system is exposed to time-depended external magnetic field. By studying the steady state solutions of the mixed spin-1 and spin-2 Ising model we analyzed magnetic dispersion and absorption factors as a function of temperature and frequency. Finally a comparison of our results to previous experimental and theoretical data is given.

Keywords: Mixed spin-1 and spin-2 Ising model, relaxation times, magnetic dispersion factor, magnetic absorption factor, argand diagrams.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
YÜKSEK LİSANS TEZİ SINAV SONUÇ FORMU	ii
TEŞEKKÜR.....	iii
ÖZ	iv
ABSTRACT.....	v
BÖLÜM BİR - GİRİŞ	1
BÖLÜM İKİ - MODELLER VE METOT	4
2.1 Ising Modeli	4
2.2 Ising modelinin Bir Boyuttaki Kesin Çözüm	6
2.3 Ortalama Alan Yaklaşımı	8
2.4 Rayleigh-Ritz Varyasyonel Prensibi	8
2.4.1 Saf Sistem İçin Rayleigh-Ritz Teoremi	9
2.4.2 Karma Sistem İçin Rayleigh-Ritz Teoremi	9
2.4.3 Gibbs-Bogoliubov Eşitsizliği	10
2.5 Tersinmez Süreçler ve Onsager Teorisi	11
2.5.1 1930 Öncesi Tersinmez Süreçlerin Karşılıklı İlişkisi	11
2.5.2 Mikroskobik Tersinirlik Prensibi	13

BÖLÜM ÜÇ – KARMA ISING MODELİ16

3.1 Karma Spin-1 ve Spin-2 Ising Modeli	16
3.2 Taban Durum Faz Diyagramı.....	17
3.3 Sonlu Sıcaklık Faz Diyagramı.....	19
3.4 Birinci Derece Faz Geçişİ.....	20
3.5 Denge Duygunluğunun Ortalama Alan Yaklaşımı Altında İncelenmesi	26

**BÖLÜM DÖRT – KARMA SPİN-1 VE SPİN-2 MODELİNİN DİNAMİK
ÖZELLİKLERİ.....28**

4.1 Durulma Davranışlarının İncelenmesi	28
4.2 AC Alınganlıkların İncelenmesi	32
4.2.1 Düşük Frekans Limitinde Dinamik Alınganlık	33
4.2.2 Yüksek Frekans Limitinde Dinamik Alınganlık	35
4.3 AC Alınganlıkların Frekans ile Değişimi.....	37

BÖLÜM BEŞ – DENEYSEL SONUÇLARLA KARŞILAŞTIRMA.....40

BÖLÜM ALTI - ÖZET VE SONUÇLAR 44

KAYNAKLAR 47

EKLER..... 51

BÖLÜM BİR

GİRİŞ

Faz geçişlerinin teorisinde Ising modelinin istatistik özellikleri hakkında birçok çalışma gerçekleştirilmiştir. Tek bir spin değeri içeren Ising modelinin yanı sıra farklı büyüklükteki spin değerlerinden oluşan Ising modeli de mevcuttur. Böyle Ising modeline karma spin Ising modeli denilmektedir. Son yıllarda, İki alt örgülü karma spin S_A ve spin S_B Ising ferromanyetik veya ferrimanyetik sistemler tek spin sistemlerle karşılaştırıldığında daha az öteleme simetrisine sahip olmasından dolayı tek spin sistemlerine göre daha çok ilgi çekici haline gelmiştir. Bu yüzden karma Ising modelleri son yıllarda hem teorik olarak hem de deneysel olarak daha yoğun olarak çalışılmıştır. Bu modeller manyetik materyallere dayanan bimetalik moleküler sistemin anlaşılmasında belirgin hale gelmiştir. Karma spin sistemleri manyeto-optik kaydediciler için kullanışlıdır. Deneysel incelemeler $M_nNi(EDTA) \cdot 6H_2O$ bileşiğinin karma spin sistemi olduğunu ortaya koymuştur (Benyoussef, Bahmad ve El Kenz, 2008). Ayrıca $A_k[B(CN)_6]_nH_2O$ bileşiği de karma bir ferrimanyetik sisteme örnek olarak gösterilebilir (Yiğit, 2006). Prusya mavisi olarak isimlendirilen bileşikler arasında $(A_p^II M_{n-1-p}^{II})_{1,5} [C_r^{III} (C_n)_6] \cdot z H_2O$, $(A^II = Ni^{II}, Fe^{II})$ gibi çoklu metaller de karma modelin örnekleri arasında yer alırlar (Bobak, Abubrig ve Balcerzak, 2003).

Spin karma modelleri üzerinde birçok kuramsal çalışma yapılmıştır: İlk olarak karma spin-1/2 ve spin-1 üzerinde çalışılmıştır. Karma spin -1/2 ve spin-1 modeli Dakhama tarafından tam olarak çözülmüştür (Dakhama, 1998). Daha sonra, Dakmaha ve Benayed 2 boyutta Ising ferromanyetik için tam çözümü gerçekleştirmişlerdir (Dakhama ve Benayad, 2000). Ek olarak, karma Ising spin sistemleri, yüksek sıcaklık seri açılımı (Schofield ve Bowers, 1981), Monte carlo simülasyonu (Guo-Ming Zhang ve Chuan- Zhang Yang, 1993), renormalizasyon grup tekniği (Boechat ve diğerleri, 2002) , etkin alan yaklaşımı (Tucker, 2001), ortalama alan yaklaşımı (Wei, Gu ve Liu, 2006), Bethe-Pierls (BP) yaklaşımı (Iwashtia ve Uryu, 1984) ve sayısal transfer matris yöntemi (Buendia ve Novotny,

1997) ile incelenmiştir. Tüm bu çalışmalarda karma Spin Ising modeli denge şartlarında incelenmiştir. Bunun yanı sıra karma spin Ising modelinin denge dışı özellikleri de analiz edilmiştir. Bu çalışmalara örnek olarak 2009 yılında Keskin ve çalışma arkadaşları tarafından ortalama alan yaklaşımında zamana bağlı bir dış manyetik alan altında karma spin-1 ve spin-2 Ising sistemi incelenmiştir. (Keskin, Ertaş ve Canko, 2009). Ayrıca Godoy ve arkadaşları kinetik karma spin-1/2 ve spin-1 modelini ortalama alan yaklaşımı altında incelemişlerdir (Godoy ve diğerleri, 2004).

Bu tezin amacı, tek-iyon anizotropisine sahip karma spin-1 ve spin-2 Ising modelinin dinamik özelliklerini ortalama alan yaklaşımı altında ve Onsager tersinmez termodinamiği kullanarak incelemektedir. Bu kapsamda sisteme ait durulma davranışı, düşük ve yüksek frekans limitinde ac alınganlıkları ve son olarak Argand diyagramları sunulmuştur.

Ising modeline ait dinamik alınganlığın kritik özellikleri bilim insanlarının merak ettiği konulardan biri olmuştur. 1966 yılında Barry spin-1/2 Ising modeli üzerinde araştırmalar yapmıştır (Barry 1966). Bununla birlikte, önemli çalışmalardan biri olan makalelerinde, Suzuki ve Kubo, kinetik Ising modelinin alınganlığının zamana bağlılığını irdelemişlerdir. Kinetik Ising modelinin dinamik faz geçişleri üzerinde de çalışmalar yapılmıştır. 1995 yılında Acharrya ve Chakrabarti tarafından salınımlı bir dış manyetik alan altında kinetik Ising modeli üzerinde yapılan çalışmada kinetik dinamik faz geçiş noktasında karmaşık alınganlığın pik yaptığını gözlemlemişlerdir. Kısa bir vakit sonra Acharrya, Monte-Carlo simülasyonu ile ve ortalama alan yaklaşımı altında, faz geçiş noktası yakınında dinamik düzen parametresini inceleyerek bu yanıt fonksiyonun Debye türü bir durulma davranışını olduğunu belirterek dinamik faz geçişi yakınında ıraksadığı gözlemlenmiştir (Acharrya, 1997). Bununla birlikte yakın zamanda dinamik faz geçişleri teorisi üzerinde Onsager tersinmez termodinamik kuramı kullanılarak da incelemeler yapılmıştır. 2008 yılında Erdem tarafından spin-1 Blume-Emery-Griffiths (BEG) modeli üzerinde yüksek ve düşük frekans limitinde inceleme yapmıştır (Erdem, 2008). Spin-1/2

modelin ait alınganlıklar ise yakın zaman önce ac alınganlığın dispersiyon ve absorbsiyon faktörlerinin sıcaklıkla değişimleri ortaya konulmuştur.

Yaptığımız literatür araştırması uyarınca karma spin-1 ve spin-2 Ising modeline ait dinamik özelliklerin Onsager tersinmez termodinamik kuramı incelenmediğini belirledik. Bu nedenle bu tez çalışmasında karma spin-1 ve spin-2 modeli Onsager tersinmez termodinamik kuramı yardımıyla incelenmiştir. Birinci bölümde karma sistemler ve tarihi süreci hakkında bir giriş verilmiştir. İkinci bölümde ise denge faz geçişlerinin teorisinde kullanılan metotlardan ve bu metotlar yardımıyla denge dışı faz geçişlerinin teorisini oluşturan Onsager tersinmez termodinamik kuramından bahsedilecektir. Üçüncü bölüm karma spin-1 ve karma spin-2 Ising modeline ait denge çözümlerini ve bu denge çözümlerinden de yararlanarak ve Onsager teorisini de kullanarak karma spin-1 ve spin-2 Ising modeline ait dinamik denklemlerinin elde edilmesini içermektedir. Dinamik denklemlerin çözümünden sisteme ait birinci ve ikinci derece faz geçiş noktalarında durulma zamanlarını inceleyeceğiz. Daha sonra bu durulma zamanlarından ve elde edilmiş olan dinamik denklemlerden faydalanarak sisteme ait dinamik manyetik absorbsiyon ve dispersiyon katsayılarını sıcaklıkla değişimleri incelenecektir. Ardından, birçok durulma davranışı mevcut eden sistemlerde durulma davranışlarını birbirlerinden ayırabilmek amacıyla manyetik dispersiyon ve manyetik absorbsiyon katsayılarının logaritmasının frekansın logaritması ile değişimlerine bakarak modelimize ait durulma zamanlarının hangi fazlarda etkin olduğunu gözlemleyeceğiz. Son olarak ise, Manyetik dispersiyon katsayısının, manyetik absorbsiyon katsayısına göre değişimleri incelenerek Cole-Cole analizi (Argand diyagramı) yaparak düzenli ve düzensiz fazda sisteme ait durulma davranışlarının sayısı belirlenecektir.

BÖLÜM İKİ

MODELLER VE METOT

Kritik sıcaklık terimi ilk olarak 1869 yılında T. Andrew tarafından sıvı ve gaz karbondioksit eş sıcaklığı ile ilgili yayınlanan makalesinde kullanıldı. Dört yıl sonra Van Der Waals, Andrews' in deneysel olarak elde ettiği verilerin mantıklı bir açıklamasını vermek için gazın kinetik teorisi üzerinde bir düşünce ortaya attı.

Manyetizma alanında ise kritik sıcaklık terimi 1889 yılında Hapkinson tarafından manyetik özelliğini kaybeden bir manyetik materyal için kullanıldı. Fakat 1895 yılında Pierre Curie Andrews'in akışkanlar için elde ettikleri ile karşılaştırarak makale olarak yayınladı. Daha sonra 1907 yılında Pierre Weiss, Van Der Waals 'ın çalışmasına paralel olarak mıknatıs içinde bir moleküler alan kabul eden bir çalışma ortaya koydu. 1925 yılında W. Lenz ferromanyetizmayı açıklamak için bir model arıyordu ki öğrencisi olan E. Ising bir model ileriye sürdü. Ising her atom bir μ_0 manyetik momentine sahip olduğunu, her bir manyetik momentin dış bir manyetik alana ya paralel ya da anti-paralel yönelebileceğini varsaydı. Ayrıca Ising bir örgüdeki en yakın spinler arası bir etkileşim olduğunu ve bu etkileşimin enerjiye paralel spinler için $-J$, antiparalel spinler için ise $+J$ ($J>0$) kadar katkı verdiğini düşündü. Daha sonra 1941 yılında Montroll, Lassetre ve Howe, Kramers ve Wanner tarafından üç bağımsız çalışma ortaya konuşmuştur. Son olarak, 1944 yılında Onsager iki boyutta sıfır alana sahip Ising modelini tam olarak çözmüştür.

2.1 Ising Modeli

1925 yılında bir doktora öğrencisi olan Ising, kritik sıcaklığı açıklayabilmek adına bir teorem ortaya koymuştur ki bu teorem ferromanyetizmayı açıklamaya hizmet etmektedir. En basit model olarak bilinen Ising modeli manyetik materyalleri iyi bir şekilde açıklayabilmektedir. Bu nedenle günümüzde hala daha faz geçişleri teorisi ve diğer birçok alanda kullanımını sürdürmektedir. Ising N adet manyetik atomdan oluşan düzenli bir örgü sistemi düşünerek bu örgülerdeki atomları birer spin olarak

kabul etmiştir. Bu spinlerin ise sadece +1 veya -1 olmak üzere iki değer aldığını ve bu spinlerin dış bir manyetik alan ile etkileştiğini varsaymıştır. Ayrıca Ising spinler arası bir etkileşim sabiti tanımlamıştır. Böylesi bir sistem için Hamiltonyen aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\mathfrak{K} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (2.1.1)$$

Buradaki birinci toplam sembolü en yakın komşular üzerinden toplamı gösterir. Diğer yandan, J, i. ve j. noktadaki spinler arasındaki manyetik etkileşim enerjisini, i. noktadaki spinin z bileşenini ve son olarak h dışarıdan uygulanan manyetik alanı göstermektedir. Burada, J>0 durumunda, T=0 ve T=∞ uç durumları incelenerek faz geçişi olduğu gözlemlenir.

T=0 sıcaklığında sistem taban durumdadır ve bütün spinler uygulanan manyetik alan yönünde yönelirler.

T=∞ sıcaklığında bütün spinler rastgele yönelme eğilimini gösterirler. Bu iki ifade bir faz geçişi noktası olan T_c gibi bir noktada ayrılacaktır. Tam bu noktada düzenli fazdan düzensiz faza geçiş gözlemlenir.

Böylesi bir sistem için bölüşüm fonksiyonu kolay bir şekilde aşağıdaki gibi bulunabilir.

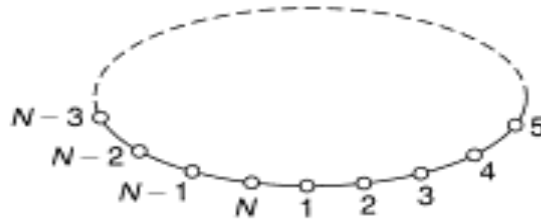
$$Z_N(T) = \sum_{\sigma_i=\pm 1} \exp(-\beta \sum_{\langle ij \rangle} J \sigma_i \sigma_j - \beta h \sum_{i=1}^N \sigma_i) \quad (2.1.2)$$

Burada spinler, manyetik alan tarafında düzenli duruma karşılık gelmek isterken buna karşılık spinler arasındaki etkileşimden dolayı düzensiz bir dağılım isteyeceklerdir. Buradaki çekişme düzenli-düzensiz faz geçişine sebep olmaktadır. Ising modelini bir boyutta Ising modelini tam olarak çözmüş olup, iki boyutta ise 1944 yılında Onsager tarafından tam olarak çözülmüştür. Ayrıca, Ising modeli bir boyutta faz geçişi sergilememektedir. Bunun sebebi, örgü arasındaki termal enerji ile manyetik alandan kaynaklanan düzenli hale geçmeye yetecek kadar komşu sayısı olmayışıdır. İki boyut ve daha üstü çözümlerde ise bu sorun ortadan kalkmasına

karşılık Ising modelini 3 boyut ve daha üst boyutlarda tam çözüm henüz gerçekleştirilmemiştir.

2.2 Ising Modelinin Bir Boyuttaki Kesin Çözümü

Bu bölümde, herhangi bir yaklaşım yöntemi kullanmadan, N spinden oluşan bir boyutlu Ising modeli transfer matrisi yöntemi kullanılarak çözülecektir. Bu amaç doğrultusunda ilk olarak, Şekil 2.1'deki gibi eşit aralıklarla sıralanmış N örgü noktasından oluşan bir boyutlu bir sistem göz önüne alalım.



Şekil 2.1 N spinden oluşan bir boyutlu periyodik örgü.

Böylesi bir sistem için manyetik alan altında serbest enerjiyi bulabilmek için periyodik sınır koşullarını kullanmalıyız.

$$\mathfrak{K} = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - h \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (2.2.1)$$

ile ifade edebiliriz. Bu durumda bölüşüm fonksiyonu aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$Z_N(T, B) = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \exp \left[\beta \sum_{i=1}^N (J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{1}{2} h (\sigma_i + \sigma_{i+1})) \right] \quad (2.2.2)$$

$$Z_N(T, B) = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \prod_{i=1}^N \exp (\beta (J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{1}{2} h (\sigma_i + \sigma_{i+1}))) \quad (2.2.3)$$

Bu örgü bizim 2×2 'lik bir matris oluşturmamıza olanak sağlar.

$$\bar{P} = \begin{pmatrix} P_{11} & P_{1-1} \\ P_{-11} & P_{-1-1} \end{pmatrix}, \quad (2.2.4)$$

Burada ;

$$P_{11}=e^{\beta(J+h)}$$

$$P_{-1-1}=e^{\beta(J-h)}$$

$$P_{-11}=P_{1-1}=e^{-\beta J}$$

Bu ifadelerden yararlanarak bölüşüm fonksiyonunu yazabiliriz.

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_i\}} P_{\sigma_1\sigma_2} P_{\sigma_2\sigma_3} \dots P_{\sigma_N\sigma_1} = T_r P^N \quad (2.2.5)$$

P matrisi köşegenleştirilebilir ve λ_1 ve λ_2 seküler determinantın kökleridir.

$$|P - \lambda I| = 0 \quad (2.2.6)$$

Benzer şekilde P^N matrisi λ_1^N ve λ_2^N öz değerlerine sahiptir ve P^N ifadesinin izi öz değerlerinin toplamıdır.

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

Denklem(2.2.6)'nın çözümünden özdeğerler bulunur.

$$\lambda_{1,2} = e^{\beta J} \cosh \beta h \pm \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2 \beta h + e^{-2\beta J}} \quad (2.2.7)$$

λ_1 pozitif kök olarak dikkate alınıp, λ_2 den her zaman büyüktür. Ising modeline ait serbest enerji aşağıdaki gibi elde edilir.

$$G = -k_B T \ln(\lambda_1^N + \lambda_2^N) = -k_B T [N \ln \lambda_1 + \ln(1 + (\lambda_2/\lambda_1)^N)] \quad (2.2.8)$$

Termodinamik limitte serbest enerji ($N \rightarrow \infty$),

$$G = -k_B T \ln \lambda_1^N = -k_B T \ln (e^{\beta J} \cosh \beta h + \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2 \beta h + e^{-2\beta J}}) \quad (2.2.9)$$

Serbest enerji ifadesinden yararlanarak, mıknatıslanma ifadesini bulabiliriz.

$$M = \langle \sigma_0 \rangle = -\frac{1}{N} \frac{\partial G}{\partial h} = \frac{k_B T}{\lambda_1} \frac{\partial \lambda_1}{\partial h}$$

$$M = \frac{\sinh \beta h}{\sqrt{2 \sinh^2 \beta h^2 + e^{-4\beta J}}}$$

Özel bir durum olarak, $h=0$ aldığımız takdirde sıfır sıcaklıktan farklı olarak bir mıknatıslanma ifadesi gözlenmez. Yani bu durumda bir boyutlu Ising modelinin faz geçişinin var olmadığı ortaya koymaktadır.

2.3 Ortalama Alan Yaklaşımı

Ortalama alan kuramında sıfırıncı dereceden yaklaşımlar yapılır ve mıknatıslanmadaki dalgalanmalar yok sayılır. Bu yaklaşımda her bir spinin komşularının ortalama değerini gördüğü ve herhangi bir noktadaki spin değerinin ortalama değere eşit olduğu varsayılır.

Bununla birlikte spin- $1/2$ Ising modeline ait Hamiltonyen aşağıdaki gibidir.

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + H \sum_{i=1} \sigma_i \quad (2.3.1)$$

Bu Hamiltonyenden yararlanarak ve $\langle \sigma \rangle = M$ ifadesinden yararlanarak öz tutarlılık denklemi aşağıdaki gibi elde edilir.

$$M = \tanh(zJM + H) \quad (2.3.2)$$

Burada z en yakın komşu sayısını göstermektedir.

Bunun yanı sıra herhangi bir fiziksel sistem için analitik olarak çözilemeyen problemlerde en kullanışlı yöntemlerden biri varyasyon metodu olarak bilinir. Bogoliubov eşitsizliği (BI) eşitsizliği, fiziksel bir sistemin serbest enerjisini hesaplamada kullanılır. BI termodinamik düzensiz bir harmonik zincir için serbest enerji hesaplamada kullanılır. Gibbs-Bogoliubov sıfır sıcaklık limitinde Rayleigh-Ritz teoremine dönüşür. Bir kuvantum sistemin taban durum enerjisi ifade eden Rayleigh-Ritz teoremi herhangi bir durumda Hamiltonyenin beklenen değeri için bir alt sınır olarak ifade edilir.

2.4 Rayleigh-Ritz Varyasyonel Prensipleri

Herhangi bir Hamiltonyen' in beklenen değeri taban durum enerjisinden daha küçük olamayacağını ifade eder. Aşağıda saf bir sistem için herhangi bir durumun

enerjisinin taban durumun enerjisinden daha küçük olamayacağını göstereceğiz ve daha sonra bunu karma sistem için genelleştireceğiz.

2.4.1 Saf Sistem İçin Rayleigh-Ritz Teoremi

$$\langle \hat{H} \rangle \equiv \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \geq E_0$$

Kanıt:

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} - E_0 \rangle &= \langle \psi | (\hat{H} - E_0) | \psi \rangle \\ &= \sum_{m,n} \psi_m^* \psi_n \langle m | (\hat{H} - E_0) | n \rangle \\ &= \sum_{m,n} \psi_m^* \psi_n \underbrace{\langle m | n \rangle}_{\delta_{mn}} (E_n - E_0) \\ &= \sum_n \underbrace{|\psi_n|^2}_{\geq 0} \underbrace{(E_n - E_0)}_{\geq 0} \geq 0 \end{aligned}$$

2.4.2 Karma Sistem İçin Rayleigh-Ritz Teoremi

$\hat{W}$, Hilbert uzayında herhangi bir kuantum durumuna karşılık gelmesi koşuluyla aşağıdaki bağıntı yazılabilir.

$$\langle \hat{H} \rangle \equiv \text{Tr}(\hat{W} \hat{H}) \geq E_0$$

Kanıt:

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} - E_0 \rangle &= \text{Tr}(\hat{W} (\hat{H} - E_0)) \\ &= \sum_{m,n} \langle m | p_n | n \rangle \langle n | (\hat{H} - E_0) | m \rangle \\ &= \sum_{m,n} |\langle m | n \rangle|^2 p_n (E_m - E_0) \\ &= \sum_n p_n (E_n - E_0) \geq 0 \end{aligned}$$

Burada;

$\sum_n p_n = 1$, $\widehat{W} = \sum_n p_n \widehat{W}_n$, $\widehat{W}_n = |n\rangle\langle n|$ olarak verilmektedir.

2.4.3 Gibbs-Bogoliubov Eşitsizliği

Rayleigh-Ritz teoremi bir kuantum sistemin taban durumuna (ground state) karşılık gelir. Eğer bir kuantum sistem bir termal sistem ile etkileşim içinde ise, böylesi bir sistem taban durumda ($|0\rangle$) değildir. Bu durumda öz değer ifadesi aşağıdaki gibi olmaktadır.

$$\widehat{W}_{can} = e^{-\beta \mathcal{H}} / Z, \quad Z = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}}$$

Gibbs-Bogoliubov eşitsizliği, Rayleigh-Ritz teoreminin en genel halidir. Bir sisteme ait kanonik serbest enerji $F = -k_B T \ln \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}}$, $\widehat{W}_t$, deneme (trial) kuvantum durumu ve $\hat{S}_t = -k_B T_r(\widehat{W}_t \ln \widehat{W}_t)$ ' dir.

$$\langle F \rangle \leq \hat{H}_t - T S_t$$

Kanıt:

$$\begin{aligned} T S_t &= -k_B T \text{Tr}(\widehat{W}_t \ln \widehat{W}_t) \\ &\leq -k_B T \text{Tr}(\widehat{W}_t \ln \widehat{W}_{can}) \\ &= -k_B T \text{Tr}(\widehat{W}_t (-\beta \mathcal{H} - \ln Z)) \\ &= \text{Tr}(\widehat{W}_t \hat{H}) - F \end{aligned}$$

Gibbs-Bogoliubov eşitsizliği bir deneme durumu kullanarak bir sistemin gerçek serbest enerjisini tahmin etmemizi sağlar. Kanonik durumda bir çok etkileşme içeren bir sistemde bütün parçacıklarının korelasyonlarından dolayı bu sistemi betimleyen bir ifade yazmak imkansızdır. Eğer bu sisteme ait bir deneme durumu kullanıyorsanız, bütün bu korelasyonları yok sayabilirsiniz. Bu yüzden de, Gibbs-Bogoliubov eşitsizliği ortalama alan teorisinden türeyen en güzel yöntemdir. Sonuçta bu yöntem klasik istatistik fizikte geçerliliğini sürdürür. Bundan dolayı, $w(p,q)$ gibi

bir klasik durum ile $\widehat{W}$ gibi bir quantum durumuna geçmek istersek, o zaman bütün faz uzayı üzerinden bir integral tarafından Hilbert uzayını tararız.

$$\int d\mathcal{L} w(p, q) \ln w(p, q) \geq \int d\mathcal{L} w(p, q) \ln w'(p, q)$$

$$F \leq \langle H \rangle_t - TS_t$$

Burada;

$$d\mathcal{L} = dp_1 \dots dp_N dq_1 \dots dq_N / (2\pi\hbar)^N$$

$$\langle H_t \rangle = \int d\mathcal{L} w(p, q) H(p, q) \quad \text{ve} \quad S_t = - \int d\mathcal{L} w_t(p, q) \ln w_t(p, q) \quad \text{olmaktadır.}$$

2.5 Tersinmez Süreçler ve Onsager Teorisi

Onsager'ın çalışmaları arasında tersinmez olaylar üzerindeki iki makalesi ön plana çıkarlar. Bu makaleler eşzamanlı tersinmez süreçleri anlatmaktadırlar (Onsager, 1931, 1932).

Aslında 1930' lardan önce tersinmez süreçler ile ilgili çalışmalar 19. Yüzyılın ortalarına kadar uzanır. 19. Yüzyılın sonlarında ve 20.yüzyılın başlarında tersinmez süreçler varlığı ile ilgili bir simetri ilişkisi göstermek için çok fazla zaman harcandı. Bu ilişkileri gözlemlemek için kullanılan metot tam olarak kuasi-termodinamikti. Fakat eş zamanlı termodinamik için karşılıklı ilişkinin varlığı 1930 yıllarında tekrar gözden geçirildi.

2.5.1 1930 Öncesi Tersinmez Süreçlerin Karşılıklı İlişkisi

Bir grup, karşılıklı etkileşimler ile tersinmez süreçler arasında izotropik olmayan kütleler içinde geçiş süreçlerini biçimlendirdiler. 1828 yılında Duhammel ve 1851 yılında Stokes tarafından kristaldeki ısı iletimini teorik olarak analiz ettiler. Stokes genel lineer fenomenolojik kuralı ısı akışı için yazdı.

$$j_i = \sum_{j=1}^3 \lambda_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j}, \quad (i = 1, 2, 3) \quad (2.5.1.1)$$

Burada λ_{ij} ısı iletim katsayısı ve Stokes'un gözlemlerine göre ısı iletkenlik tensörü λ_{ij} unsuru simetrik olmalıdır ($\lambda_{ij} = \lambda_{ji}$). Eğer kristal yeteri kadar simetrikse veya kristal

düşük simetriye bile sahip olsa altı tane rastgele sabitle tanımlanabilir. Her şeyden önce bu sonuç moleküler radyasyon teorisini kolayca ifade eder. Bu teorem 1828 yılında Duhammel' in inceleme yazısında kullanıldı. Stokes bu hipotezi dikkatle inceleyerek ısı iletkenlik tensörü simetrik olmasaydı sorusuna yanıt aradı ve yanıt olarak ise ısı akışının döne döne gideceğini ifade etti. Isının bu dönme hareketi difüzyon tarafından üretilir ve tuhaf bir yapıya sahip olduğu betimlenir. Bu da moleküler radyasyon teorisinden bağımsız olduğundan dolayı ısı iletkenlik tensörü en genelde simetrik olacağını ifade etti. Voigt yaptığı çalışmadan yola çıkarak λ_{ij} asimetrik ise o zaman λ_{ij} sıfır olmalıdır. Böylece 1929-1930 yıllarından önce yapılan çalışmalarda kristaldeki ısı iletkenlik tensörünün simetrik olduğu söylemişlerdir. Kristalin kendisi simetrik olmasa bile teorik olarak λ_{ij} simetrik olmalıdır.

İkinci grup ise, izotropik sistemlerde çiftlenimli süreçler, çiftlenimli tersinmez süreçlere dönüştürülerek biçimlendirilir. Bu grup içindeki standart örnek termoelektrik olaydır. 1854 yılında Thomas bir karşılıklı ilişki kurdu.

Thomas' ın gözlemlerine göre, bir elektrik akımı I , bir ısı akışı J , iki kaybolan akılar, bir anizotropik sistemde bir elektrik alan (E) ve bir kuvvet (X) tarafından meydana gelir. X kuvveti sıcaklığın gradyenti olarak verilir.

$$X = -\frac{(\text{grad } T)}{T} \quad (2.5.1.2)$$

Denge dışı termodinamikte bu kuvvetler, akışkanın eşleniği olarak verilir. Hacim başına entropi üretime σ , iki sürece eşlik eden ifade aşağıdaki gibi verilir.

$$T\sigma = JX + IE \quad (2.5.1.3)$$

Lineer fenomenolojik kurala göre, konjuge (eşlenik) kuvvetlerin lineer bir fonksiyonu olarak I ve J akılarını yazarak formüle edilebilir. Fakat X ve I ' nın bir fonksiyonu olarak ta E ve J nicelikleri yazılabilir.

$$J = \lambda TX + \pi Ib \quad (2.5.1.4)$$

$$E = \eta TX + RI \quad (2.5.1.5)$$

Burada λ sıfır akımdaki ısı iletkenliği, R izotermal öz direnç, η diferansiyel termoelektrik gücü, π elektrik akım başına tek tip sıcaklıkta ısı taşınmasıdır.

$$T\sigma = \lambda TX^2 + (\pi + \eta T)XT + RI^2 \quad (2.5.1.6)$$

Burada ilk terim ısı iletkenliği tarafından entropi üretiminden gelir. Son terim elektrik akımı tarafından enerji kaybıdır. İkinci terim termoelektrik süreç tarafından sebep olan ek bir üretim terimidir.

Elektrik akımı ve ısı akışının tersinirliğinden dolayı denklem (2.5.1.6)' da ikinci terim aniden kaybolmaktadır. O halde $\eta = -\frac{\pi}{T}$ olmaktadır. Bütün bu karşılıklı ilişkiler deneysel olarak desteklenmiştir.

2.5.2 Mikroskopik Tersinirlik Prensibi

Onsager, tersinmez süreçler için karşılıklı üzerine (Onsager, 1931, 1932) iki makale yayımlandı. Farklı A, B, C üç homojen fazda belli bir madde varsa bir reaksiyon meydana gelir. Bu reaksiyon ile maddelerden biri kendiliğinden diğer ikisine dönüşebilir.

A, B, C maddelerinin t zamanına içinde değişim hızları n_a , n_b , n_c olmaktadır.

$$\frac{\partial n_a}{\partial t} = -(k_{ba} + k_{ca})\eta_a + (k_{ab})\eta_b + (k_{ac})\eta_c \quad (2.5.2.1)$$

Burada k_{ba} , k_{ca} , k_{ac} , k_{ab} sabit oran katsayılarıdır.

Denklem (2.5.2.1)' de sol tarafı sıfır olduğu zaman sonlu denge çözümleri olan n_a^e , n_b^e , n_c^e ifadelerinin elde edip aşağıdaki denkleme ulaşırız.

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = \sum_j L_{ij}A_j \quad (i, j = A, B, C) \quad (2.5.2.2)$$

Burada A_j , dengeden küçük bir sapmadır ve $\frac{\partial n_i}{\partial t}$ akısının eşleniğidir.

$$A_i = \frac{RT}{\eta_i^e} (\eta_i - \eta_i^e) \quad (2.5.2.4)$$

L_{ij} , fenomenolojik katsayısıdır.

$$L_{ij} = \frac{k_{ij} \eta_i^e}{RT} \quad (2.5.2.5)$$

Burada R gaz sabitidir.

Bu noktada Onsager denge şartlarını gözlemledi.

$$k_{ij} \eta_j^e = k_{ji} \eta_i^e \quad (2.5.2.6)$$

Eğer ki sistem dengedeysen, her bireysel reaksiyon kendisiyle dengede olmalıdır. O halde denklem (2.5.2.5) ve (2.5.2.6) karşılaştırıldığında $L_{ij} = L_{ji}$ olmaktadır. Dengedeki reaksiyondaki $A \rightarrow B$ geçişi sıkça $B \rightarrow A$ olarak da karşımıza çıkmaktadır. Denklem (2.5.2.6)' deki detaylı denge saati dinamik tersinmezliğin bir sonucudur.

Onun birinci makalesindeki analizinden sonra, ikinci makalesinde tersinmez süreçlerin karşılıklı ilişkisini tamamladı ve entropi için aşağıdaki ifadeyi oluşturur.

$$\Delta S = - \frac{1}{2} \sum_{i,k}^n g_{ik} \alpha_i \alpha_k \quad (2.5.2.7)$$

$$g_{ik} = - \frac{\partial^2 S}{\partial \alpha_i \partial \alpha_k} \quad (2.5.2.8)$$

α_i = Sistemdeki dalgalanmalar

S_0 = Maksimum entropi

Boltzmann entropi postülasından yararlanarak α_i için olasılık yoğunluğu aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$f(\alpha_1 \dots \alpha_n) = f(0, \dots, 0) e^{\Delta S/k_B} \quad (2.5.2.9)$$

Burada k_B , Boltzmann sabitidir.

Onsager ayrıca eşlenik değişkenlerini ifade etmiştir.

$$X_i = k_B \frac{\partial \ln f}{\partial \alpha_i} = \frac{\partial \Delta S}{\partial \alpha_i} \quad (2.5.2.10)$$

Karşılıklı ilişkinin kanıtı üç adımda verilebilir. Bunlardan birincisi:

$$\langle \alpha_i X_i \rangle = -k_B \delta_{ij} \quad (\text{Eğer } i \neq j \text{ ise } \delta_{ij} = 0; \delta_{ii} = 1) \quad (2.5.2.11)$$

Burada $\langle \dots \rangle$ ifadesi dağılım fonksiyonu (denklem 2.5.2.9) üzerinden ortalamadır.

Onsager ikincisi tanımda ise korelasyon fonksiyonu üzerinde odaklandı.

$$\langle \alpha_i(t) \alpha_j(t + \tau) \rangle = \langle \alpha_j(t) \alpha_i(t + \tau) \rangle \quad (2.5.2.12)$$

Eğer sistem denge yakınında ise, denge aralığında dalgalanmalar gerekli değildir.

O halde;

$$\frac{\partial \alpha_i}{\partial t} = - \sum_j M_{ij} \alpha_j(t) = \sum_k L_{ik} X_k(t) \quad (2.5.2.13)$$

$$L_{ik} = \sum_j M_{ij} g_{jk}^{-1} \quad (2.5.2.14)$$

Onsager hipotezinde dalgalanmalar tekrar yazılabilir.

$$\alpha_j(t + \tau) = \alpha_j(t) + \tau \sum_k L_{jk} X_k(t) \quad (2.5.2.15)$$

Burada $L_{ij}=L_{ji}$ ilişkisi yazılabilir veya L_{ij} simetriktir.

Ayrıca; $L_{ij}(B)=L_{ij}(-B)$ ifadesi dış bir manyetik alan altında yazılabilir.

Sonuçta Onsager dış manyetik alan yokluğunda kuasi-termodinamik ilişki minimum enerji kaybıyla ilişkilidir. Ayrıca Onsager ilişkisi iki türdür.

Bunlardan birincisi, $t \rightarrow -t$ zaman tersinmezliğinden doğmaktadır. Lineer bir elektriksel materyal için verilmiş olan lineer bir iletkenlik matrisi olan σ için $\sigma = \sigma^T$ yazılabilmektedir. Burada T matrisin transpozu anlamına gelmektedir. Bir başka deyişle σ simetrik bir matristir (Smith, 1999).

İkinci tip Onsager ilişkisi $\sigma(\vec{H}) = \sigma^T(-\vec{H})$ ile ifade edilmiştir. Burada $\vec{H}$ dış bir manyetik alandır. Burada σ konum, sıcaklık, basınç ve manyetik alana bağlı olabilir. İkinci tip Onsager ilişkisi üç varsayım altında geçerlidir.

1) Materyal lineerdir. $\langle \vec{J} \rangle = \sigma \vec{E}$.

Burada $\langle \dots \rangle$ ifadesi zaman ve termal ortalamaya karşılık gelmektedir.

2) Materyal denge yakınında olmalıdır veya maksimum entropiye yakındır.

3) $t \rightarrow -t$ ve $H \rightarrow -H$ altında fizik kuralları değişmezdir.

BÖLÜM ÜÇ

KARMA SPİN-1 VE SPİN-2 ISING MODELİ DENGİ ÖZELLİKLERİ

3.1 Karma spin-1 ve Spin-2 Ising Modeli

Bu bölümde karma spin-1 ve spin-2 Ising modeline ait alınganlık ifadelerini elde ederek bu ifadeleri nümerik yöntemler yardımıyla sıcaklığa bağılı olarak çözdüreceğiz. İlk olarak bu modele ait Hamiltonyen ifadesinden Gibbs-Bogoliubov eşitsizliğinden de yararlanarak serbest enerji ifadesi türetilmiştir (Wei, Gu ve Liu, 2006). Daha sonra bu serbest enerji ifadesinden de yararlanarak mıknatıslanma ifadeleri elde edilecektir. Son olarak, denge alınganlıkları sıcaklığa bağılılığı bulunacaktır.

Karma Spin-1 ve spin-2 modeline ait Hamiltonyen aşağıdaki verilmiştir.

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i S_j + D_A \sum_{\langle i \rangle} \sigma_i^2 + D_B \sum_{\langle j \rangle} S_j^2 \quad (3.1.1)$$

Bu sistem için iki alt örgü vardır. A alt örgüsü σ_i spinleri tarafından işgal edilmiştir. Diğer bir alt örgü olan B ise S_j spinleri tarafından işgal edildiği düşünülür. A alt örgüsünü dolduran spinler $\sigma_i = \pm 1, 0$ spin değerlerini alırlar. B alt örgüsünü dolduran spinler ise $S_j = \pm 2, \pm 1, 0$ spin değerlerini almaktadır. D_A ve D_B sırasıyla A ve B alt örgülerine ait kristal alan ifadelerini temsil ederler. Ayrıca J ($J > 0$) ferromanyetik değiş-tokuş etkileşim sabitidir.

İlk olarak Gibbs-Bogoliubov eşitsizliğini ve modele ait bir deneme Hamiltonyen ifadelerini vereceğiz.

$$G(H) \leq \Phi \equiv G_0(H_0) + \langle H - H_0 \rangle_0 \quad (3.1.2)$$

$$H_0 = - \sum_i \gamma_A \sigma_i + D_A \sum_i \sigma_i^2 - \sum_i \gamma_B S_j + D_B \sum_i S_j^2 \quad (3.1.3)$$

Burada $\gamma_A = zJM_B$, $\gamma_B = zJM_A$ ifadeleri yazılabilir.

(3.1.1), (3.1.2) ve (3.1.3) denklemleri kullanılarak ortalama alan yaklaşımı altında karma Ising modeline ait serbest enerji aşağıdaki gibi verilir.

$$\begin{aligned}
 G &= \frac{-\beta\varphi}{N} \\
 &= \left(\frac{1}{2} \left\{ \log \left(1 + 2 \exp \left(-\frac{D_{A_r}}{T_r} \right) \cosh \left(\frac{M_B}{T_r} \right) \right) \right\} \right. \\
 &\quad \left. + \left\{ \log \left(1 + 2 \exp \left(-\frac{D_{B_r}}{T_r} \right) \cosh \left(\frac{M_A}{T_r} \right) + 2 \exp \left(-4 \frac{D_{B_r}}{T_r} \right) \cosh \left(\frac{2M_B}{T_r} \right) \right\} \right\} \right) \\
 &\quad - \frac{1}{2} \left(\frac{M_A M_B}{T_r} \right)
 \end{aligned} \tag{3.1.4}$$

Sistemin denge davranışlarını inceleyebilmek için serbest enerjinin minimizasyon koşulundan $(\{\partial G/\partial M_A\} = 0, \{\partial G/\partial M_B\} = 0)$ yararlanılarak hal denklemleri aşağıdaki gibi elde edilir.

$$M_A = \frac{2a}{1 + 2 \exp \left(-\frac{D_{A_r}}{T_r} \right) \cosh \left(\frac{M_B}{T_r} \right)} \tag{3.1.5}$$

$$M_B = \frac{2 \exp \left(-\frac{D_{B_r}}{T_r} \right) \sinh \left(\frac{M_A}{T_r} \right) + 4 \exp \left(-4 \frac{D_{B_r}}{T_r} \right) \sinh \left(\frac{M_A}{T_r} \right)}{1 + 2 \exp \left(-\frac{D_{B_r}}{T_r} \right) \cosh \left(\frac{M_A}{T_r} \right) + 2 \exp \left(-4 \frac{D_{B_r}}{T_r} \right) \cosh \left(\frac{2M_B}{T_r} \right)} \tag{3.1.6}$$

Bu sistemin denge özelliklerini inceleyebilmek için (3.1.6) ve (3.1.5) denklemleri iteratif yöntemle çözülmesi gerekir (Bu denklemler fortran95 programında Newton-Raphson yöntemi ile çözülmüştür). Diğer yandan, çözümün fiziksel olması için iteratif yöntemlerde kullanılan başlangıç değerleri önem kazanır. Bu nedenle sonlu faz diyagramını elde edebilmek için sonlu sıcaklık faz diyagramını elde etmeden önce $T=0$ faz diyagramını bulmak gerekir.

3.2 Taban Durum Faz Diyagramı

$T=0$ faz diyagramı elde edilmesinde $J>0$ olmasından dolayı sisteme ait taban durumları şu şekilde yazabilir.

- i) Düzenli fazları, $O_1: E(+1, +2)$ ve $O_2: E(+1, +1)$ olmak üzere iki grupta yazabiliriz.

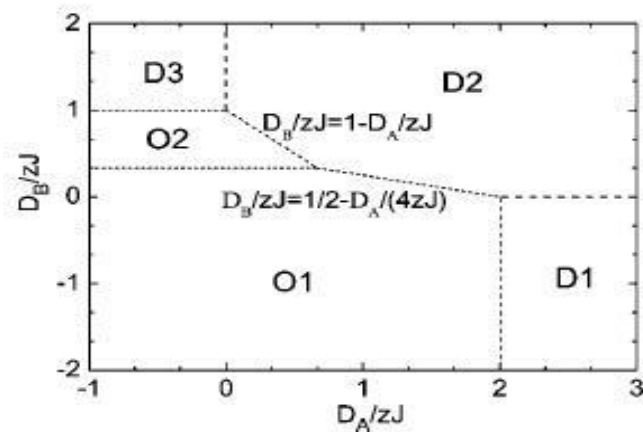
ii) Düzensiz fazları ise $D_1: E(0, \pm 2)$, $D_2: E(0, 0)$ veya $D_3: E(\pm 1, 0)$ olmak üzere üç grupta yazabiliriz.

Taban durumda taban durum enerjisini tam olarak yazabildiğimizden dolayı, her bir durum için taban durum enerjisi yazılır ve olası geçişlerin enerjileri eşitlenerek taban durum faz diyagramı oluşturulur.

Karma spin-1 ve spin-2 modeline ait parçacık başına temel durum enerjisi aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$E_g = -\frac{zJ}{2}\sigma_A\sigma_B + \frac{1}{2}D_A\sigma_A^2 + \frac{1}{2}D_B\sigma_B^2$$

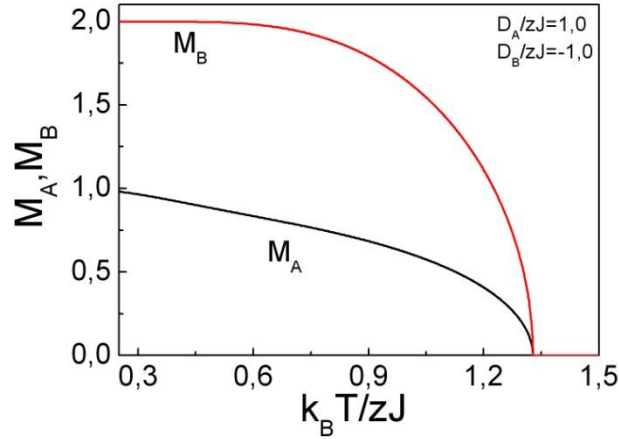
Burada z en yakın komşu sayısını temsil eder. Temel durum faz diyagramı her durumun temel durum enerjisini karşılaştırarak elde edilebilir. Burada O_1 ile D_2 fazları arasındaki faz çizgisi $D_B/zJ = (1/2) - (D_A/4zJ)$, O_2 ile D_2 fazları arasında $D_B/zJ = 1 - D_A/zJ$, O_1 ile O_2 arasında $D_B/zJ = 1/3$, O_1 ile D_2 arasında $D_A/zJ = 2$, O_2 ile D_3 arasında $D_B/zJ = 1$ ve D_1 ile D_2 arasında $D_B/zJ = 0$ bağıntıları bulunarak temel durum faz diyagramı çizilebilir. Gerekli ara işlemler ekte verilmiştir. Temel durum faz diyagramı oluşturulduktan sonra artık sonlu sıcaklık faz diyagramını da oluşturarak bu sisteme ait bir faz diyagramı oluşturabiliriz. Bu hesaplar Wei ve arkadaşlarının elde ettiği temel durum faz diyagramı ile uyum içerisinde (Wei, Gu ve Liu, 2006).



Şekil 3.1 Karma spin-1 ve spin-2 Ising modeline ait taban durum faz diyagramı

Ayrıca $T=0$ taban durum faz diyagramı serbest enerji hesabında, entropi katkısı gelmediğinden dolayı sistemin iç enerjisi serbest enerjiye eşit olmaktadır.

Serbest enerjinin minimizasyon koşulundan elde ettiğimiz hal denklemleri çözüldüğü takdirde şekil 3.2’ de verilen mıknatıslama sıcaklık grafikleri elde edilir.



Şekil 3.2 Karma spin-1 ve spin-2 Ising modeline ait mıknatıslanma sıcaklık grafiği.

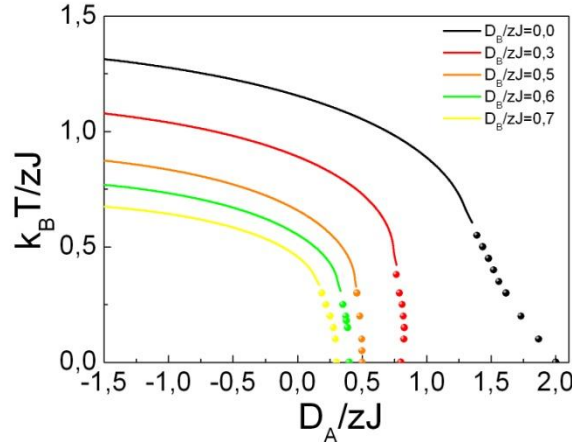
Şekil 3.2 $D_A/zJ=1$ ve $D_B/zJ=-1$ değerleri için düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimini inceler. Bunun yanı sıra karma spin-1 ve spin-2 Ising modelini daha iyi anlayabilmek için sisteme ait bütün faz geçiş noktalarını bilmemiz gerekmektedir.

3.3 Sonlu Sıcaklık Faz Diyagramı

Sonlu sıcaklık faz diyagramını elde edebilmek için $(D_A/zJ, k_B T/zJ)$ düzlemini incelemek gerekir ki bu düzlem bu sistem için bir faz diyagramıdır. Wei ve arkadaşları sonlu sıcaklıkta bu sistem için faz diyagramı oluşturmuşlardır(Wei, Gu ve Liu, 2006).

Sonlu sıcaklık faz diyagramına göre, $D_A/zJ=0$, $D_B/zJ=0$ yani anizotropi yokluğunda geçiş sıcaklık değerleri $z=3, 4, 6$ komşu sayılarına sahip örgüler için $k_B T/zJ= 3,464, 4,169, 6,928$ olarak hesaplanmıştır. Ayrıca $D_B/zJ \leq -10$ olduğu zaman TCP noktaları birbirine çok yakın olacaktır. $D_A/zJ > 2$ değerinde karma spin-1 ve karma spin-2 Ising modeline ait herhangi bir faz geçişi gözlemlenmez. Bu modele

ait Hamiltonyen' e bakılacak olursa (3.1.1), $D_B/zJ \rightarrow -\infty$ olduğu zaman B altörgüsündeki bütün spinler $S_B = 2$ veya $S_B = -2$ değerlerini alır ve karma spin-1 ve spin-2 Ising modeli, karma spin-1 ve spin-1/2 Ising sistemine eşit bir hal alır. Karma spin-1 ve spin-2 Ising modeline ait faz diyagramı Wei ve arkadaşları tarafından oluşturulsa da özgünlük açısından şekil 3.3 bir faz diyagramı elde edilmiştir.



Şekil 3.3 Karma spin-1 ve spin-2 Ising modeline ait sonlu sıcaklık faz diyagramı

Şekil 3.3' de sürekli çizgiler ikinci derece faz geçiş noktalarını gösterirken, noktalar ise birinci derece faz geçiş noktalarını simgeler. Birinci derece faz geçiş noktalarını bulabilmek için ancak serbest enerji kontrolü altında hesaplanır. Ayrıca ikinci derece faz geçiş noktasının bittiği birinci derece faz geçişinin başladığı noktalar ise üçlü kritik nokta olarak adlandırılır.

3.4 Birinci Derece Faz Geçışı

Örgü modellerin tam çözümleri sadece denge halleri için söz konusudur. Diğer yandan Şekil 3.5 ve Şekil 3.7'de birinci dereceden faz geçişinin varlığı halinde serbest enerji yoğunluklarının ξ_i ve ρ_{n-1} 'e göre değişimleri verilmiştir. Şimdi, Van Der Waals gazını ele alarak birinci dereceden geçişlerin klasik yaklaşımlarda nasıl ortaya çıkacağını inceleyelim. Bilindiği üzere yoğun termodinamik nicelikler molekül başına hacmin homojen akışkanın kararsız davrandığı ve farklı yoğunluklara

sahip olan iki eşlenik faza ayrıştığı tüm aralık için süreklidirler. Ayrıca aşağıdaki denklemlerde kullanıldığı da, sabit sıcaklık ve $j \neq i, j \neq n$ için,

$$f_{n-1} = u - TS - \sum_{i=1}^{n-1} \rho_i \epsilon_i = \epsilon_n, \quad (3.4.1)$$

$$df_{n-1} = SdT - \sum_{i=1}^{n-1} \rho_i \epsilon_i \quad (3.4.2)$$

$$df_{n-1} = d\epsilon_n = \rho_i d\epsilon_n \quad (3.4.3)$$

eşitliği geçerli olacağı açıktır. Molekül başına yoğunlukların ele alındığı tek bileşenli akışkan örneğinde, $n=2$ olup, $\epsilon_n = \mu$ 'dür. Ayrıca $\epsilon_{n-1} = \epsilon_1 = -P$ ve $\rho_1 = v$ seçilir. ϵ_n ve ϵ_i 'nin tüm ρ_i aralığı boyunca sürekli kaldığı klasik kuramda faz ayrımının gözlenebilmesi için ρ_i 'ye karşı ϵ_i eğrisinin S-şekli sergilemesi gerekir.

Şekil 3'den görüldüğü üzere ρ_i 'nin yeterince büyük ve küçük değerleri için $\frac{\partial \epsilon_i}{\partial \rho_i} > 0$ olmaktadır. Bununla beraber $\frac{\partial \epsilon_i}{\partial \rho_i} < 0$ olan bir ρ_i aralığı söz konusudur. Denklem (3.1.3) 'den anlaşılabileceği üzere bu noktada $\rho_i \neq 0$ kabulünün geçerli olması ve $\frac{\partial \epsilon_i}{\partial \rho_i}$ 'nin işaret değiştirmesi halinde $\frac{\partial f_{n-1}}{\partial \rho_i}$ de işaret değiştirecektir. O halde f_{n-1} 'nin ϵ_i 'ye göre değişimi Şekil 3.4'deki gibi olacaktır.

Şekil 3.4' de ABE kısmı stabil halleri temsil eder ve her bir ρ_i 'i için f_{n-1} 'nin minimum değer almasına karşılık gelir ve bu kısım şekil 3.5'de verilen denge eğrisine karşılık gelir. Diğer yandan BCD döngüsü ise kararsız hallere karşılık gelir ve C ve D' deki kasplar $\frac{\partial f_{n-1}}{\partial \rho_i}$ ve $\frac{\partial \epsilon_i}{\partial \rho_i} > 0$ 'nin işaret değiştirdiği ϵ_i değerlerini imlerler. O halde faz birlikteliği sergileyen hallerin bulunması ve birinci dereceden geçişlerin bulunması klasik kuramda üç eşdeğer yolla bulunabilir:

- (i) $f_{n-1} - \rho_i$ eğrisi çizilerek AC ve ED' yi verecek denli çok nokta elde edilerek, B kesişim noktası saptanır (Bknz. şekil 3.4).
- (ii) Sabit sıcaklık ve $j \neq i, j \neq n$ olan ρ_j 'ler için ϵ_i 'ye karşı ρ_i eğrisi çizilerek şekil 3.6' daki gibi Maxwell düzeltmesi gerçekleştirilir.

Bu yol sayısal hesaplamalar açısından (i) kadar uygun değildir. Bununla beraber

$\frac{\partial \epsilon_i}{\partial \rho_i} < 0$ olan bir ρ_i aralığı söz konusudur ve bu durum faz ayırımına neden olan instabilite döngüsünün ortaya çıkmasına neden olur.

Ayrıca birinci dereceden geçişlerin sonlandığı nokta olan kritik noktada

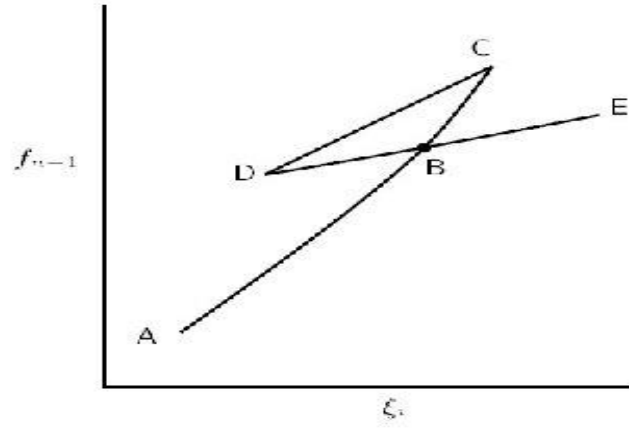
$\frac{\partial \epsilon_i}{\partial \rho_i} = 0$ ve $\frac{\partial^2 \epsilon_i}{\partial \rho_i^2} < 0$ ilişkileri sağlanır. Bu yöntem karma spin-1 ve karma spin-2 Ising modeline uygulanmıştır.

(iii) $f_{n-2}(=f_{n-1}+\rho_{n-1}\epsilon_{n-1} - \rho_{n-1})$ 'ye karşı çizilir. Faz ayırımının meydana gelmesi halinde eğri yukarı doğru konveks bir yapı sergiler ve

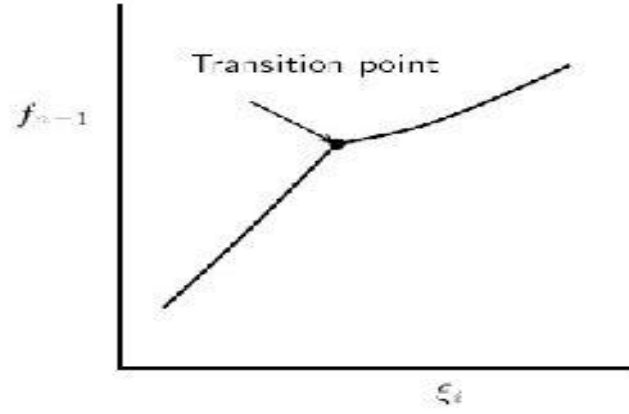
$$\epsilon_{n-1} = \frac{\partial f_{n-2}}{\partial \rho_{n-1}}, \quad \rho_n = f_{n-2} - \epsilon_{n-1}\rho_{n-1} = f_{n-2} - \rho_{n-1} \frac{f_{n-2}}{\rho_{n-1}}$$

ilişkilerinin varlığından dolayı, şekil 3.7'deki gibi çift teğet çizilerek eşnelik fazlar bulunabilir. Konveks zarf şekil 3.7' deki denge eğrisine karşılık gelir. $i < n$ için herhangi bir ϵ_i , ϵ_{n-1} 'e yeniden etiketlenebileceğinden bu yöntem de en az (i) ve (ii)'de verilen yöntemler kadar geneldir.

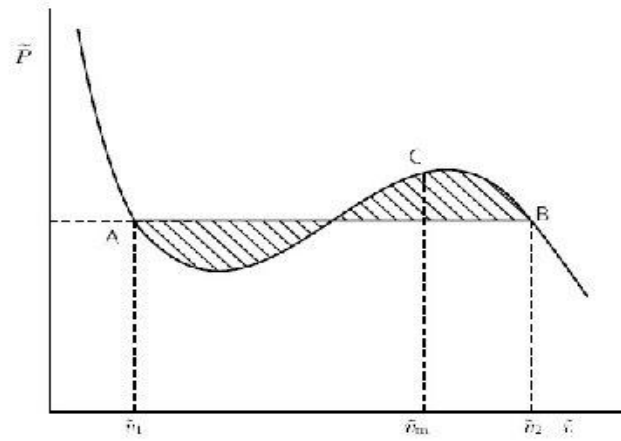
Bu yöntemlerin ışığında karma spin-1 ve karma spin-2 için birinci derece faz geçiş noktalarını doğru bir şekilde hesaplayabilmek için yöntem (i)' den yararlanılmıştır. Kristal alan değerlerini yani D_A/zJ ve D_B/zJ değerlerini sabit alarak mıknatıslanmanın sıcaklıkla değişimi incelendiğinde bir faz geçiş noktası elde edilir (Bknz. Şekil. 3.9). Fakat bu şekilde serbest enerjiyi minimize eden stabil ve stabil olmayan bütün noktaları ele almış oluruz. Bu noktaları görebilmek için sabit sıcaklıkta sisteme ait elde edilmiş Gibbs serbest enerjisini $- D_A/zJ$ indirgenmiş kristal alana göre değişimine bakarak stabil ve stabil olmayan bütün noktaları elde ederiz. Bu stabil ve stabil olmayan noktaların kesişim noktası olarak bu noktadaki kristal alan değeri ele aldığımız sıcaklığın değeri gerçek faz geçiş sıcaklığını noktasını belirler. Daha sonra bu kesişim noktası bize o kristal alan değerinde ilk seçtiğimiz gerçek faz geçiş noktasını vermektedir.



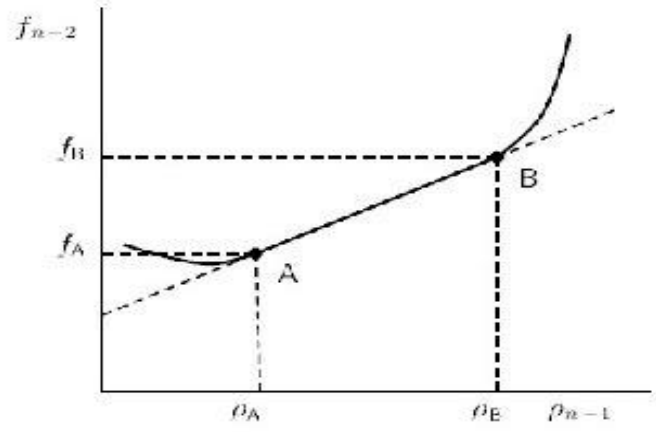
Şekil 3.4 Klasik serbest enerji-alan izotermi; AB ve BE kararlı hallere karşılık gelmektedir.



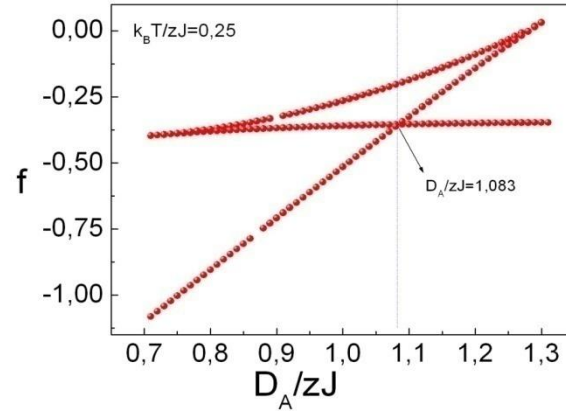
Şekil 3.5 Birinci dereceden geçiş noktasını imleyen serbest enerji-alan izotermi.



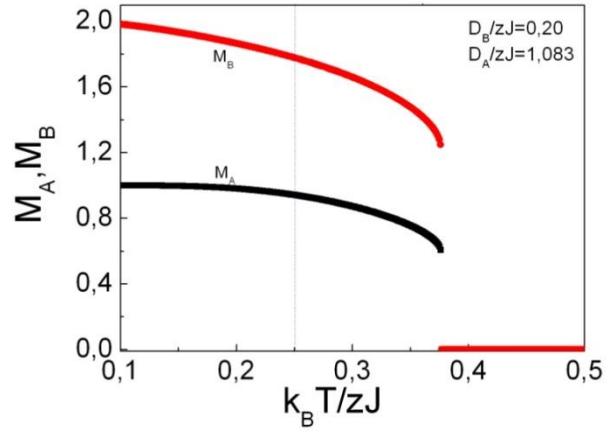
Şekil 3.6 $T < T_c$ için van der Waals gazına ait izoterm ve Maxwell düzeltmesi.



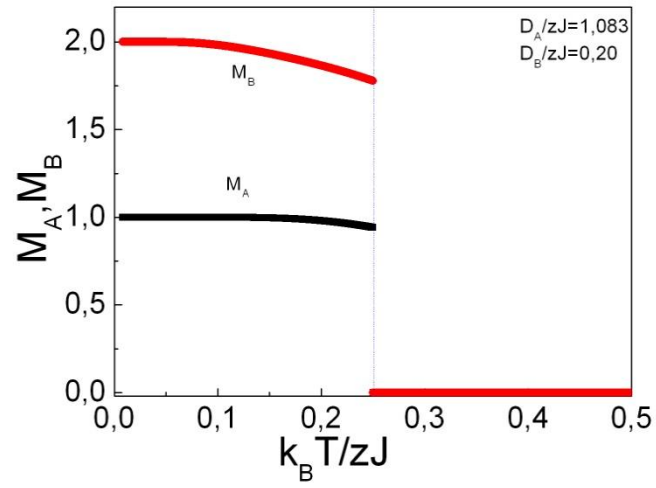
Şekil 3.7 İki fazın birlikteliğini imleyen çift AB teğetine sahip serbest enerji yoğunluk izoterminin.



Şekil 3.8 Karma spin-1 ve spin-2 Ising modeline ait enerji kristal alan izoterminin.



Şekil 3.9 Birinci dereceden faz geçişi sıcaklığı yakınındaki düzen parametrelerinin düzeltilmemiş faz geçişi noktası.



Şekil 3.10 Birinci dereceden faz geçişi sıcaklığı yakınındaki düzen parametrelerinin düzeltilmiş hali görülmektedir.

3.5 Denge Duygunluğun Ortalama Alan Yaklaşımı Altında İncelenmesi

Denklem (3.1.5) ve (3.1.6) olan sisteme ait hal denklemlerini dış manyetik alan olan H ' a göre türevlerini aldığımızda M_A ve M_B mıknatıslanma ifadelerinin H ile değişimleri bulunur.

$$\chi_A = \frac{\partial}{\partial H} \left(M_A - \frac{2 \exp\left(-\frac{D_{Ar}}{T_r}\right) \sinh\left(\frac{M_B}{T_r}\right)}{1 + 2 \exp\left(-\frac{D_{Ar}}{T_r}\right) \cosh\left(\frac{M_B}{T_r}\right)} \right) = 0,$$

$$\chi_B = \frac{\partial}{\partial H} \left(M_B - \frac{2 \exp\left(-\frac{D_{Br}}{T_r}\right) \sinh\left(\frac{M_A}{T_r}\right) + 4 \exp\left(-4\frac{D_{Br}}{T_r}\right) \sinh\left(\frac{M_A}{T_r}\right)}{1 + 2 \exp\left(-\frac{D_{Br}}{T_r}\right) \cosh\left(\frac{M_A}{T_r}\right) + 2 \exp\left(-4\frac{D_{Br}}{T_r}\right) \cosh\left(\frac{2M_B}{T_r}\right)} \right) = 0 \quad (3.5.1)$$

Sisteme ait toplam denge alınganlık ifadesi $\chi_T = (\chi_A + \chi_B)/2$ şeklinde tanımlanabilir.

$$\chi_T = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{\partial M_T}{\partial H}, \quad M_T = \frac{M_A + M_B}{2} \quad (3.5.2)$$

Denklem (3.2.2) ' den yararlanarak denge alınganlıkları aşağıdaki gibi bulunur.

$$\chi_{M_A} = c_2 a_{12} - c_1 a_{22} / a_{12} a_{21} - a_{11} a_{22} \quad (3.5.3)$$

$$\chi_{M_B} = c_1 a_{21} - c_1 a_{11} / a_{12} a_{21} - a_{11} a_{22} \quad (3.5.4)$$

Burada a_{11} , a_{12} , a_{21} , a_{22} , c_1 , c_2 katsayıları aşağıdaki gibi verilir.

$$a_{11} = 1, 0,$$

$$a_{22} = 1, 0,$$

$$c_1 = 2, 0,$$

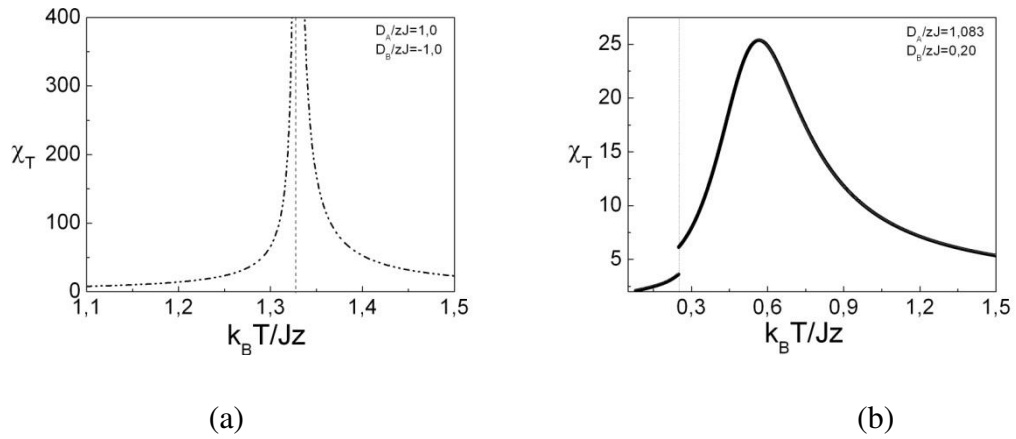
$$c_2 = 2, 0,$$

$$a_{21} = \left(\frac{1}{T_{in}} \right) \left[\frac{2e^{-D_{Bin}/T_{in}} \cosh(M_A/T_{in}) + 8e^{-4D_{Bin}/T_{in}} \cosh(2M_A/T_{in})}{1 + 2e^{-D_{Bin}/T_{in}} \cosh(M_A/T_{in}) + 2e^{-D_{Bin}/T_{in}} \cosh(2M_A/T_{in})} \right]$$

$$+ \left[\frac{\{4e^{-D_{Bin}/T_{in}} \sinh(M_A/T_{in}) + 8e^{-4D_{Bin}/T_{in}} \sinh(2M_A/T_{in})\}}{1 + 2e^{-D_{Bin}/T_{in}} \cosh(M_A/T_{in}) + 2e^{-D_{Bin}/T_{in}} \cosh(2M_A/T_{in})^2} \right]$$

$$a_{12} = \left(\frac{1}{T_{in}} \right) \left\{ \left[\frac{2e^{-D_{Ain}/T_{in}} \cosh(M_B/T_{in})}{1 + 2e^{-D_{Ain}/T_{in}} \cosh(M_B/T_{in})} \right] + \left[\frac{4e^{-D_{Ain}/T_{in}} \sinh(M_B/T_{in})^2}{1 + 2e^{-D_{Ain}/T_{in}} \cosh(M_B/T_{in})^2} \right] \right\} \quad (3.5.5)$$

Burada; $T_{in} = k_B T/zJ$, $D_{Ain} = D_A/zJ$ ve $D_{Bin} = D_B/zJ$ olarak alınmıştır.



Şekil 3.11 Karma spin-1 ve spin-2 modeline ait toplam denge duygunluğun sıcaklıkla değişimi.

Şekil 3.11.a ‘da ikinci derece faz geçişinde denge alınganlığın sıcaklıkla değişimi verilmiştir. Burada denge alınganlık kritik noktada ıraksama yapmaktadır. Görüldüğü üzere toplam denge duygunluk ortalama alan yaklaşımı altında kritik nokta civarında ıraksamaktadır. Şekil 3.11.b’ de ise birinci derece faz geçişi yakınında denge alınganlığın sıcaklıkla değişimi gözükmemektedir ve birinci derece faz geçiş noktasında denge alınganlık bir sıçrama gerçekleştirerek sonra bir maksimum yapıya ulaşmaktadır.

BÖLÜM DÖRT

FAZ GEÇİŞ YAKININDAKİ KARARLI ÇÖZÜMLER

4.1 Durulma Davranışlarının İncelenmesi

Burada karma spin-1 ve spin-2 Ising modeline ait durulma davranışlarını inceleyeceğiz. Bu incelemeyi yapabilmek için dış manyetik alanın denge değerinden yeterince küçük olduğu kabul edilir. Bu da sistemi doğrusal yanıt kuramı kullanarak incelenebileceği sonucu doğurur. Sisteme uygulanan dışarıdan manyetik alan sistemin enerjisinin denge civarından arttırma eğilimi gösterir. Dolayısıyla sistem için denge komşuluğunda yeni bir enerji formu tanımlanır.

$$G(M_A, M_B, T, H) = G^0(M_{A0}, M_{B0}, T, H) + \Delta G \quad (4.1.1)$$

Burada, M_{A0} ve M_{B0} dengedeki mıknatıslanmaları ifade etmektedir. M_A ve M_B ise denge dışı mıknatıslanmaları belirtir. ΔG sistemdeki enerji artışını göstermekle beraber uygulanan manyetik alan değeri çok küçük olduğundan dolayı sistemdeki enerji artış miktarı bir o kadar küçüktür. Bundan dolayı sistemdeki enerji artış miktarını Taylor serisi yardımıyla bulabiliriz.

$$\begin{aligned} \Delta G = & \frac{1}{2} \frac{\partial^2 G}{\partial M_A^2} (M_A - M_{A0}) + \frac{\partial^2 G}{\partial M_A \partial M_B} (M_A - M_{A0})(M_B - M_{B0}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 G}{\partial M_B^2} (M_B - M_{B0}) + \\ & \frac{\partial^2 G}{\partial M_A \partial H} (M_A - M_{A0})(H - H_0) + \frac{\partial^2 G}{\partial H^2} (H - H_0)^2 + \frac{\partial G}{\partial H} (H - H_0) \end{aligned} \quad (4.1.2)$$

(4.1.2) denklemindeki katsayılar aşağıdaki gibi bulunur.

$$\begin{aligned} C_1 = \frac{\partial^2 G}{\partial M_A^2} |_{eq} = & \left(\frac{1}{T_{in}} \right)^2 \left[\left\{ \frac{e^{-D_{Bin}/T_{in}} \cosh(M_A/T_{in}) + e^{-4D_{Bin}/T_{in}} \cosh(2M_A/T_{in})}{1 + 2e^{-D_{Bin}/T_{in}} \cosh(M_A/T_{in}) + 2e^{-4D_{Bin}/T_{in}} \cosh(2M_A/T_{in})} \right\} - \right. \\ & \left. \left\{ \frac{e^{-D_{Bin}/T_{in}} \sinh(M_A/T_{in}) + 4e^{-4D_{Bin}/T_{in}} \sinh(2M_A/T_{in})}{1 + 2e^{-D_{Bin}/T_{in}} \cosh(M_A/T_{in}) + 2e^{-4D_{Bin}/T_{in}} \cosh(2M_A/T_{in})} \right\}^2 \right] \end{aligned} \quad (4.1.3)$$

$$C_2 = \frac{\partial^2 G}{\partial M_A \partial M_B} |_{eq} = - \frac{1}{2T_{in}} \quad (4.1.4)$$

$$C_3 = \frac{\partial^2 G}{\partial M_B^2} |_{eq} = \left(\frac{1}{T_{in}} \right)^2 \left[\left\{ \frac{e^{-D_{Ain}/T_{in}} \cosh(M_B/T_{in})}{1+2e^{-D_{Ain}/T_{in}} \cosh(M_B/T_{in})} \right\} - \left\{ \frac{2e^{-D_{Ain}/T_{in}} \sinh(M_B/T_{in})}{1+2e^{-D_{Ain}/T_{in}} \cosh(M_B/T_{in})} \right\}^2 \right] \quad (4.1.5)$$

$$C_4 = \frac{\partial^2 G}{\partial M_A \partial H} |_{eq} = \frac{1}{T_{in}} \quad (4.1.6)$$

$$C_5 = \frac{\partial^2 G}{\partial M_B \partial H} |_{eq} = \frac{1}{T_{in}} \quad (4.1.7)$$

$$C_6 = \frac{\partial^2 G}{\partial H^2} |_{eq} = 0 \quad (4.1.8)$$

$$C_7 = \frac{\partial G}{\partial H} |_{eq} = \frac{M_A + M_B}{T_{in}} \quad (4.1.9)$$

Sistemden uygulanan manyetik alanı kaldırdığımız takdirde sistem tekrar dengeye gelmek isteyecektir. Bu sebeptendir ki sistem denge dışından, dengeye gelirken bir geri çağırıcı kuvvet tarafından çağırılıyormuş gibi kabul edilir. Bu genelleştirilmiş kuvvetler ile genelleştirilmiş akılar arasında bir ilişki kurulur.

$$X_{MA} = \frac{\partial \Delta G}{\partial (M_A - M_{A0})} = C_1(M_A - M_{A0}) + C_2(M_B - M_{B0}) + C_4(H - H_0) \quad (4.1.10)$$

$$X_{MB} = \frac{\partial \Delta G}{\partial (M_B - M_{B0})} = C_2(M_A - M_{A0}) + C_3(M_B - M_{B0}) + C_5(H - H_0) \quad (4.1.11)$$

Genelleştirilmiş kuvvetler ile genelleştirilmiş akılar arasında doğrusal ilişki fenomenolojik katsayılar yardımıyla bir matris formunda yazılabilir.

$$\begin{bmatrix} \dot{M}_A \\ \dot{M}_B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma_{MA} & \gamma \\ \gamma & \gamma_{MB} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_{MA} \\ X_{MB} \end{bmatrix} \quad (4.1.12)$$

$$\dot{M}_A = \gamma_{MA} X_{MA} + \gamma X_{MB} \quad (4.1.13)$$

$$\dot{M}_B = \gamma X_{MA} + \gamma_{MB} X_{MB} \quad (4.1.14)$$

Uygulanan dış manyetik alanı sistem üzerinden çektiğimiz takdirde ve (4.1.10) ve (4.1.11) denklemleri, denklem (4.1.13) ve (4.1.14)' te yerine konulduğunda kinetik denklemleri aşağıdaki gibi elde ederiz.

$$\dot{M}_A = (\gamma_{MA} C_1 + \gamma C_2)(M_A - M_{A0}) + (\gamma_{MA} C_2 + \gamma C_3)(M_B - M_{B0}) \quad (4.1.15)$$

$$\dot{M}_B = (\gamma_{MB}C_2 + \gamma C_1)(M_A - M_{A0}) + (\gamma_{MA}C_3 + \gamma C_2)(M_B - M_{B0}) \quad (4.1.16)$$

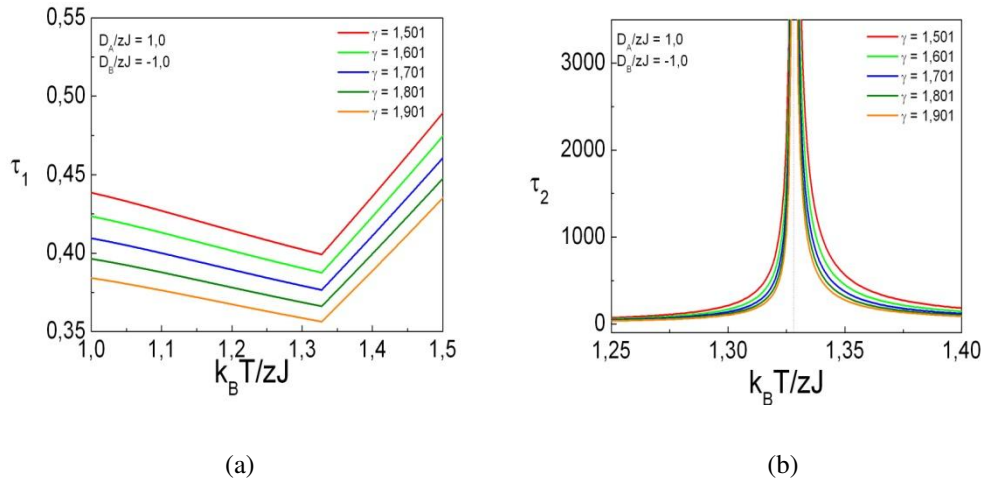
Denklem (4.1.15) ve (4.1.16) denklemlerinden yararlanılarak aşağıdaki gibi bir matris formu elde edilebilir.

$$\begin{bmatrix} \dot{M}_A \\ \dot{M}_B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\gamma_{MA}C_1 + \gamma C_2) & (\gamma_{MA}C_2 + \gamma C_3) \\ (\gamma_{MB}C_2 + \gamma C_1) & (\gamma_{MA}C_3 + \gamma C_2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_A - M_{A0} \\ M_B - M_{B0} \end{bmatrix} \quad (4.1.17)$$

Lineer yanıt kuramı yardımıyla denklem (4.1.15) ve (4.1.16)' de yer alan genelleştirilmiş akılar için $(\dot{M}_A, \dot{M}_B) e^{-t/\tau}$ formunda bir çözüm kullanılarak kritik sıcaklık yakınında karma spin-1 ve spin-2 Ising modeline ait durulma zamanlarını elde ederiz.

$$\frac{1}{\tau_1} = -\gamma C_2 - \frac{1}{2}\gamma_{MB}C_3 - \frac{1}{2}\gamma_{MA}C_1 + \frac{1}{2}[4\gamma_{MB}\gamma C_2C_3 + 4\gamma_{MA}\gamma C_2C_1 + \gamma_{MB}^2C_3^2 - 2\gamma_{MB}\gamma_{MA}C_1C_3 + \gamma_{MA}^2C_1^2 + 4\gamma_{MB}\gamma_{MA}C_2^2 + 4\gamma^2C_1C_3]^2 \quad (4.1.18)$$

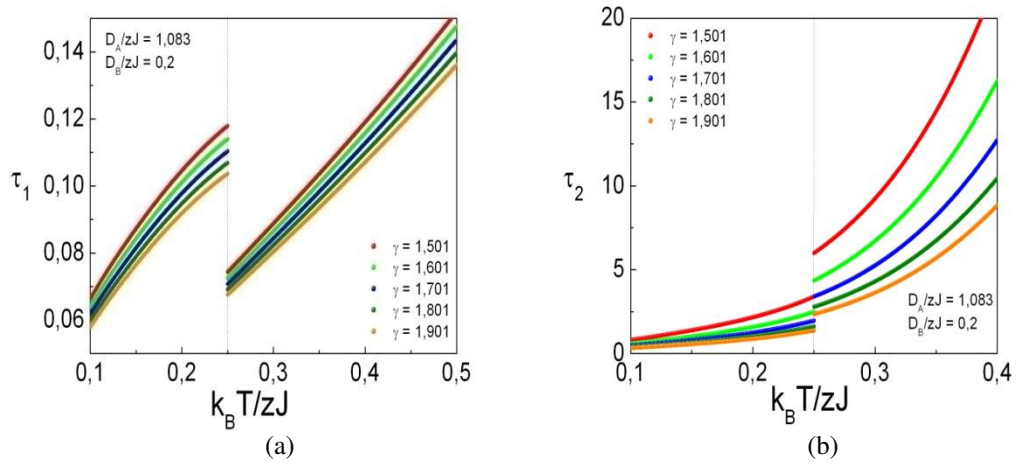
$$\frac{1}{\tau_2} = -\gamma C_2 - \frac{1}{2}\gamma_{MB}C_3 - \frac{1}{2}\gamma_{MA}C_1 - \frac{1}{2}[4\gamma_{MB}\gamma C_2C_3 + 4\gamma_{MA}\gamma C_2C_1 + \gamma_{MB}^2C_3^2 - 2\gamma_{MB}\gamma_{MA}C_1C_3 + \gamma_{MA}^2C_1^2 + 4\gamma_{MB}\gamma_{MA}C_2^2 + 4\gamma^2C_1C_3]^2 \quad (4.1.19)$$



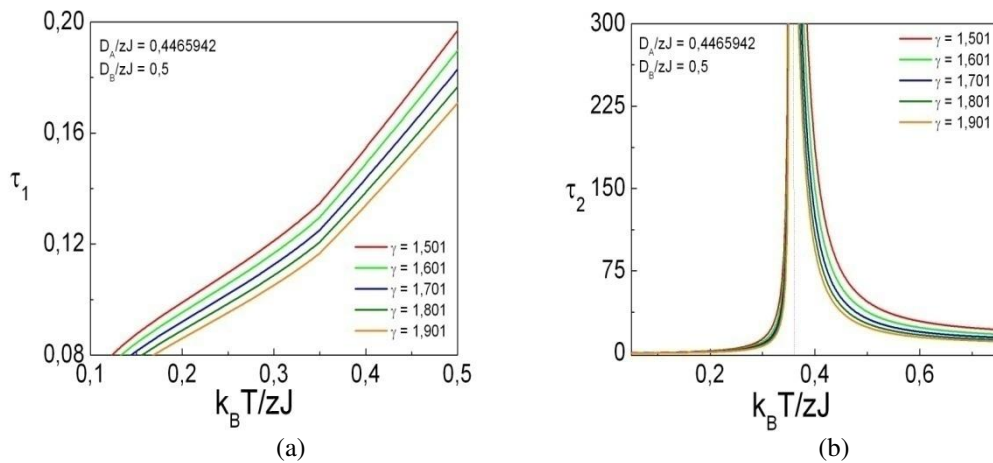
Şekil 4.1 İkinci derece faz geçişinde Onsager katsayılarının değişimine bağlı olarak, kritik sıcaklık civarında durulma zamanları.

Şekil 4.1 görüldüğü üzere ikinci derece faz geçişinde karma spin-1 ve spin-2 Ising modeline ait durulma zamanları Onsager katsayısına bağlı olarak ortalama alan yaklaşımı altında incelendiğinde baskın durulma zamanı olan τ_2 kritik nokta

civarında ıraksamaktadır. Diğer durulma zamanı ise kritik nokta civarında bir değişiklik sergilemiştir. Şekil 4.2’ de görüldüğü üzere birinci derece faz geçişinde karma spin-1 ve spin-2 Ising modeline ait durulma zamanları ortalama alan yaklaşımı altında incelendiğinde baskın durulma zamanı olan τ_2 kritik noktada yukarı bir zıplama yapmaktadır. Diğer durulma zamanı ise kritik nokta civarında aşağı doğru bir zıplama gerçekleştirmiştir. Şekil 4.3 ise üçlü kritik nokta yakınında ikinci derece faz geçişi yakınında olduğu gibi baskın durulma zamanı olan τ_2 ıraksamaktadır. Diğer durulma zamanı ise bir kritik sıcaklıkta değişiklik sergiler.



Şekil 4.2 Birinci derece faz geçişinde Onsager katsayılarının değişimine bağlı olarak kritik sıcaklık civarında durulma zamanları.



Şekil 4.3 Üçlü kritik faz geçiş noktasında onsager katsayılarının değişimine bağlı olarak kritik sıcaklık civarında durulma zamanları.

4.2 AC Alınganlıkların İncelenmesi

Bölüm 3.3 de elde edilen durulma zamanlarını da kullanarak bu bölümde düşük ve yüksek frekans limitinde karma spin-1 ve spin-2 Ising modeline ait Ac alınganlık ifadelerini elde edeceğiz. Bu incelemeyi yapabilmek için ω açısal frekansına sahip sistemine sürekli bir salınımlı alan uygulanır. Bu uyarım altında aşağıdaki ifadeleri yazabiliriz.

$(H - H_0) = H_1 e^{i\omega t}$ varlığı halinde, ω frekansı ile salınım yapar. Bu nedenle,

$$(M_A - M_{A0}) = M_{A1} e^{i\omega t}$$

$$(M_B - M_{B0}) = M_{B1} e^{i\omega t} \quad (4.2.1)$$

şeklinde bir ifade yazılabilir.

Denklem (4.2.1)'i, denklem (4.1.15) ve (4.1.16)' da yerine koyarsak,

$$\begin{aligned} (I\omega + \gamma_{MA}C_1 + \gamma C_2)M_{A1} + (\gamma_{MA}C_2 + \gamma C_3)M_{B1} &= -(\gamma_{MA}C_4 + \gamma C_5)H_1 \\ (\gamma_{MB}C_2 + \gamma C_1)M_{A1} + (I\omega + \gamma_{MB}C_3 + \gamma C_2)M_{B1} &= -(\gamma C_4 + \gamma_{MB}C_5)H_1 \end{aligned} \quad (4.2.2)$$

Homojen olmayan bu denklem sisteminden $\frac{M_{A1}}{H_1}$ ve $\frac{M_{B1}}{H_1}$ oranını aşağıdaki formda yazabiliriz.

$$\frac{M_{A1}}{H_1} = \frac{\begin{vmatrix} -(\gamma_{MA}C_4 + \gamma C_5) & (\gamma_{MA}C_2 + \gamma C_3) \\ -(\gamma C_4 + \gamma_{MB}C_5) & (I\omega + \gamma_{MB}C_3 + \gamma C_2) \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} (I\omega + \gamma_{MA}C_1 + \gamma C_2) & (\gamma_{MA}C_2 + \gamma C_3) \\ (\gamma_{MB}C_2 + \gamma C_1) & (I\omega + \gamma_{MB}C_3 + \gamma C_2) \end{vmatrix}} \quad (4.2.3)$$

Denklem (4.2.3) çözüldüğü takdirde karma spin-1 ve spin-2 Ising sisteminin A tabakasına ait gerçel ve sanal alınganlıklar aşağıdaki gibi bulunur.

$$X'_{MA} = \frac{((C_5C_2 + C_3C_5)\tau_1\tau_2(1 - \omega^2\tau_1)(\gamma^2 - \gamma_{MA}\gamma_{MB})) + (\omega^2\tau_1\tau_2)(C_5\gamma + C_4\gamma_{MA})}{(1 + \omega^2\tau_1^2)(1 + \omega^2\tau_2^2)}$$

$$X''_{MA} = \frac{((C_5C_2 - C_3C_5)(\tau_1 + \tau_2)\omega\tau_1\tau_2(\gamma^2 - \gamma_{MA}\gamma_{MB})) + (1 - \omega^2\tau_1)(\omega\tau_1\tau_2)(C_5\gamma + C_4\gamma_{MA})}{(1 + \omega^2\tau_1^2)(1 + \omega^2\tau_2^2)} \quad (4.2.4)$$

$$\frac{M_{B1}}{H_1} = \frac{\begin{vmatrix} -(I\omega + \gamma_{MA}C_1 + \gamma C_2) & (\gamma_{MA}C_4 + \gamma C_5) \\ -(\gamma C_1 + \gamma_{MB}C_2) & (\gamma_{MB}C_5 + \gamma C_4) \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} (I\omega + \gamma_{MA}C_1 + \gamma C_2) & (\gamma_{MA}C_2 + \gamma C_3) \\ (\gamma_{MB}C_2 + \gamma C_1) & (I\omega + \gamma_{MB}C_3 + \gamma C_2) \end{vmatrix}} \quad (4.2.5)$$

Denklem (4.2.5) çözüldüğü takdirde karma spin-1 ve spin-2 Ising sisteminin B tabakasına ait gerçel ve sanal alınganlıklar aşağıdaki gibi bulunur.

$$X'_{MB} = \frac{((C_5C_1 - C_2C_4)\tau_1\tau_2(1 - \omega^2\tau_1)(-\gamma^2 + \gamma_{MA}\gamma_{MB})) + (\omega^2\tau_1\tau_2)(C_5\gamma_{MB} + C_4\gamma)}{(1 + \omega^2\tau_1^2)(1 + \omega^2\tau_2^2)}$$

$$X''_{MB} = \frac{((C_5C_2 - C_3C_5)(\tau_1 + \tau_2)\omega\tau_1\tau_2(-\gamma^2 + \gamma_{MA}\gamma_{MB})) + (1 - \omega^2\tau_1)(\omega\tau_1\tau_2)(C_5\gamma_{MB} + C_4\gamma)}{(1 + \omega^2\tau_1^2)(1 + \omega^2\tau_2^2)} \quad (4.2.6)$$

Bu hesaplar esnasında, karma Ising modeli için indüklenmiş mıknatıslanma ifadeleri (birim hacim başına) aşağıdaki formdan yararlanılarak hesaplar yapılmıştır.

$$M_A - M_{A\infty} = \text{Re}(X(\omega)H_{MA_1}e^{i\omega t}), \quad M_B - M_{B\infty} = \text{Re}(X(\omega)H_{MB_1}e^{i\omega t})$$

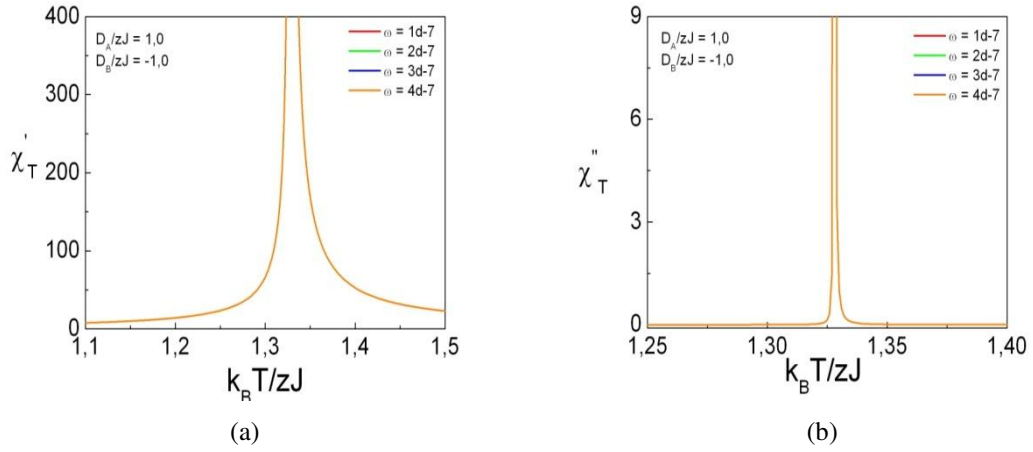
$$X_{MA}(\omega) = X'_{MA}(\omega) - iX''_{MA}(\omega), \quad X_{MB}(\omega) = X'_{MB}(\omega) - iX''_{MB}(\omega) \quad (4.2.7)$$

Denklem (4.2.4) ve (4.2.6) ifadeleri düşük frekans ve yüksek frekans limitlerinde sıcaklıkla değişimleri nümerik yöntemler yardımıyla incelenecektir.

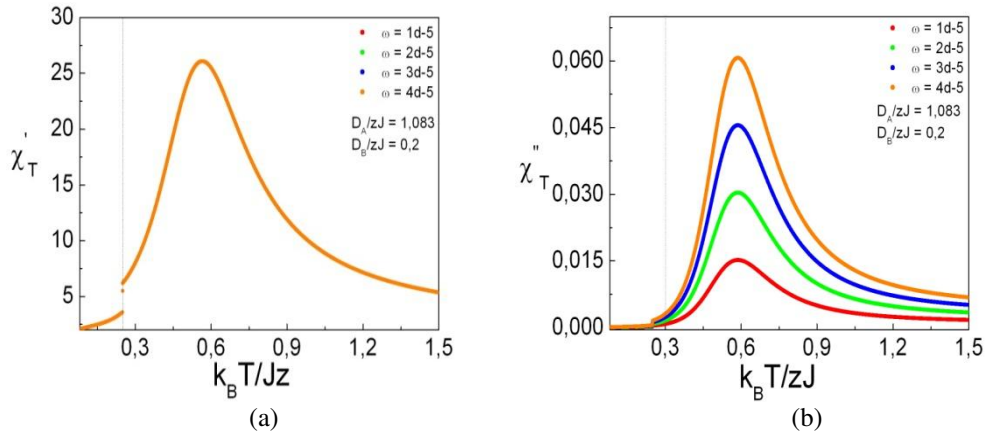
4.2.1 Düşük Frekans Limitinde AC Alınganlık

Bölüm 4.2' de ikinci derece faz geçişi noktası yakınında toplam ac alınganlığın gerçel kısmı olan manyetik dispersiyon ve sanal kısmı olan manyetik absorbsiyon katsayıları hesaplanmıştır. Bu bölümde ise bu katsayıların düşük frekans limitinde ($\omega\tau_1 \ll 1$) sıcaklıkla değişimleri incelenecektir. Şekil4. 4 görüldüğü üzere ikinci derecede faz geçiş noktasında gerçel ve sanal kısım ıraksamaktadır ki bu düşük frekans limitinde gerçel kısım, denge alınganlık ile bir bire bir sonuç vermektedir. Beklendiği üzere, bulunan sonuçlar ikinci derece faz geçiş noktasındaki denge alınganlık çözümleri ile aynı değerleri vermektedir. Şekil4. 5' de ise birinci derece faz geçişinde düşük frekansta manyetik dispersiyon ve manyetik absorbsiyon

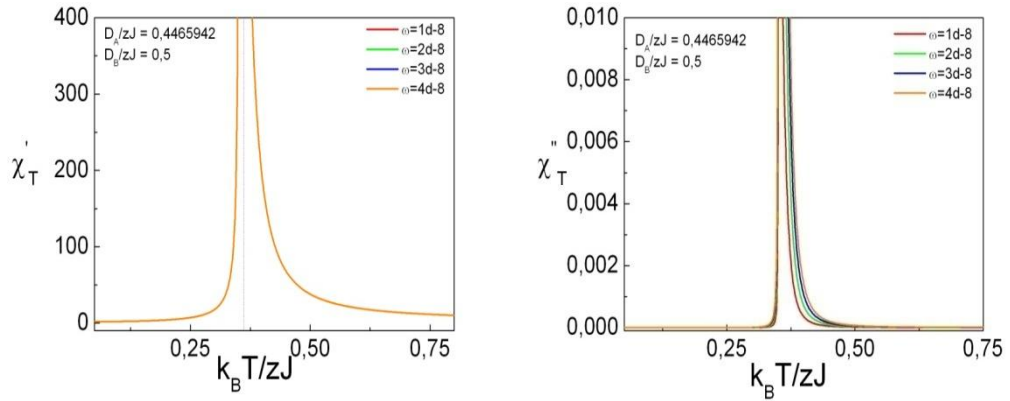
katsayıları verilmektedir. Şekilden de görüleceği gibi gerçel kısım birinci derece denge alınganlık ile aynı sonucu vermektedir ki enerji kaybına sebep olan yani manyetik absorpsiyon kısmı kritik sıcaklıkta bir zıplama gerçekleştirmiştir ve kritik sıcaklıktan sonra ulaştığı maksimum noktası reel kısımdan farklı olarak artan frekans ile birlikte artmaktadır.



Şekil 4. 4 İkinci derece faz geçiş noktasında düşük frekans limitinde ac alınganlığın dispersiyon ve absorpsiyon faktörlerinin sıcaklıkla değişimleri



Şekil 4.5 Birinci derece faz geçiş noktasında düşük frekans limitinde ac alınganlığın dispersiyon ve absorpsiyon faktörlerinin sıcaklıkla değişimleri

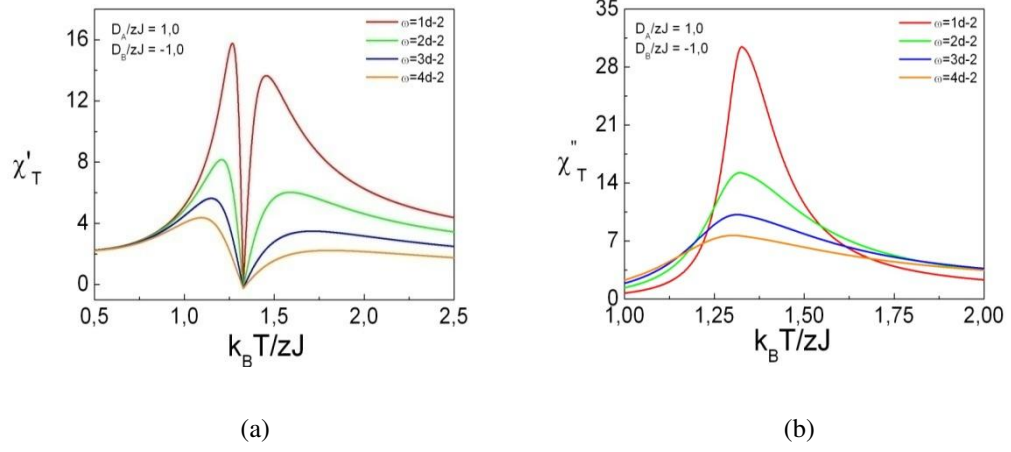


Şekil 4.6 Üçlü kritik noktada düşük frekans limitinde ac alınganlığın dispersiyon ve absorbsiyon faktörlerinin sıcaklıkla değişimle

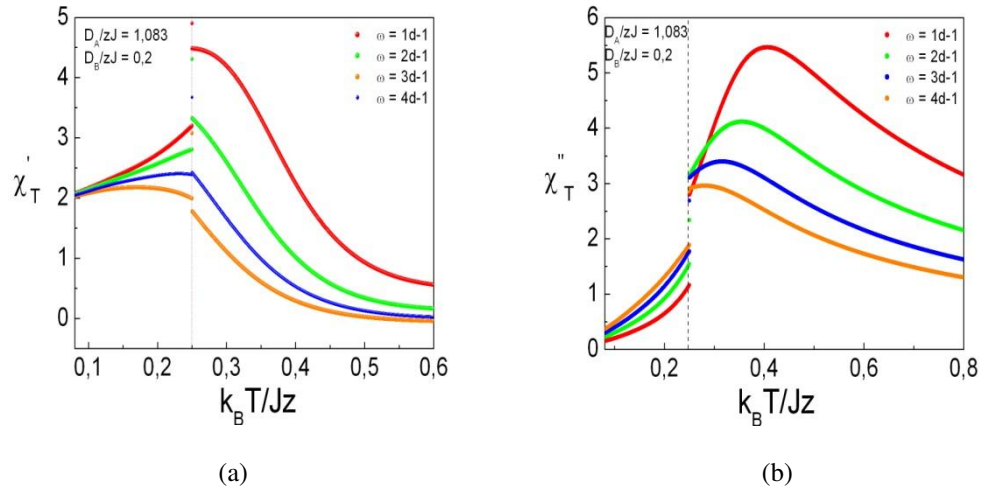
4.2.2 Yüksek Frekans Limitinde AC Alınganlık

Bölüm 4.2' de faz geçişi noktasında toplam ac alınganlığın manyetik dispersiyon (reel) ve manyetik absorbsiyon (sanal) katsayıları hesaplanmıştır. Bu bölümde ise bu katsayıların yüksek frekans limitinde ($\omega\tau_1 \gg 1$) sıcaklıkla değişimleri incelenecektir. Şekil 4.7.b' de alınganlığın absorbsiyon kısmı kritik noktada bir maksimum yapı sergilerken, şekil 4.7.a 'da dispersiyon kısmı ferromanyetik fazda bir maksimum yapı sergileyerek kritik sıcaklıkta aniden minimum bir değere düşer ve tekrar paramanyetik fazda bir maksimum yapı görülmektedir.

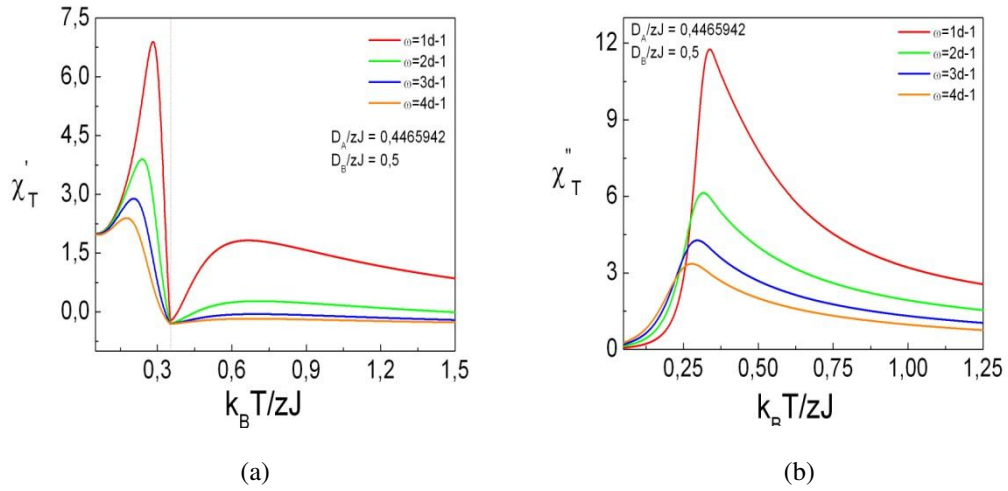
Şekil 4.8' de ise birinci derece faz geçiş noktasında ac alınganlığın sıcaklıkla değişimleri verilmiştir. Şekil 4.8.a 'da manyetik dispersiyon katsayısı kritik sıcaklıkta maksimum değerine ulaşarak bir zıplama yapmaktadır. Ayrıca uygulanan frekans değeri arttıkça bu maksimum değer azaldığı gözlemlenir. Şekil 4.8. b' de manyetik absorbsiyon kısmı birinci derece faz geçiş noktasında bir sıçrama yapar ve daha sonra bir maksimum noktaya ulaşır. Dispersiyon kısmına benzer olarak absorbsiyon kısmı da artan frekans ile birlikte maksimum yapının değerinde azalma olduğu gözlenmiştir. Şekil 4.9.a 'da ise üçlü kritik noktada manyetik dispersiyon ve manyetik absorbsiyonun sıcaklıkla değişimlerin incelenmiştir. Üçlü kritik noktada bu manyetik dispersiyon ve manyetik absorbsiyonun sıcaklıkla değişimleri ikinci derece faz geçiş noktasında ki gibi yapılar sergilemektedir.



Şekil 4,7 İkinci derece faz geçişinde yüksek frekans limitinde ac alınganlığın dispersiyon ve absorpsiyon faktörlerinin sıcaklıkla değişimleri.



Şekil 4.8 Birinci derece faz geçişinde yüksek frekans limitinde ac alınganlığın dispersiyon ve absorpsiyon faktörlerinin sıcaklıkla değişimleri.



Şekil 4.9 Üçlü kritik noktada yüksek frekans limitinde ac alınganlığın dispersiyon ve absorbsiyon faktörlerinin sıcaklıkla değişimleri.

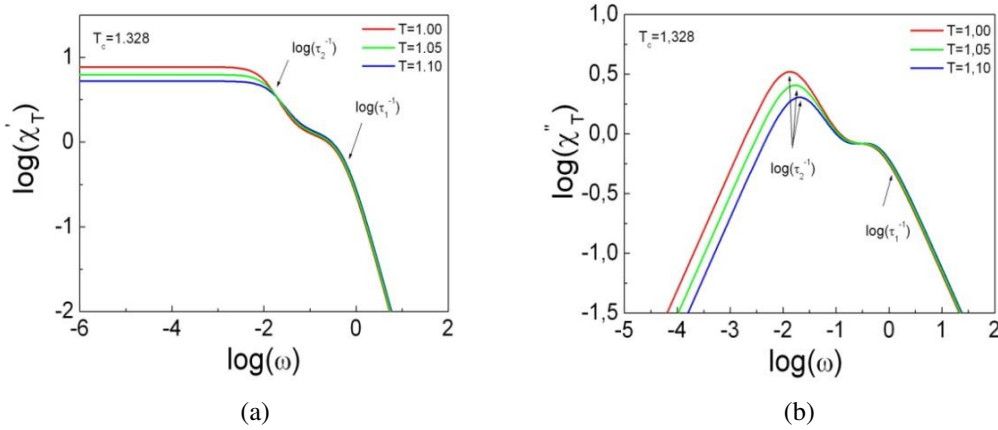
4.3 AC Alınganlığın Frekans ile Değişimi

Bu bölümde faz geçiş noktası yakınında ($T_c=1,327$) sıcaklığı sabit tutarak toplam manyetik dispersiyon ve manyetik absorbsiyon katsayılarının frekansa karşı değişimlerine bakılmıştır. İlk olarak düzenli fazda frekansın logaritmasına ($\log \omega$) karşılık, manyetik dispersiyon katsayısının logaritması ($\log (X_T')$) çizdirilmiştir. Şekil (4,10)'da görüldüğü üzere ferromanyetik fazda iki adet plato gerçekleştirmiştir. Bu platoların değerinin düştüğü yerlerin bir tanesi baskın durulma zamanı olan τ_2' ya karşılık gelirken, diğer platonun düştüğü yer ise τ_2' den daha kısa sürede gerçekleşen ve bir dinamik süreç τ_1 'e karşılık gelmektedir. Diğer yandan düzenli fazda frekansın logaritmasına ($\log \omega$) karşılık, manyetik absorbsiyon katsayısının logaritması ($\log (X_T'')$) bakıldığı zaman iki adet maksimum yapı gözlemlenir. Bu maksimum yapılar, manyetik dispersiyondaki platoların düştüğü yerlerde gerçekleşir.

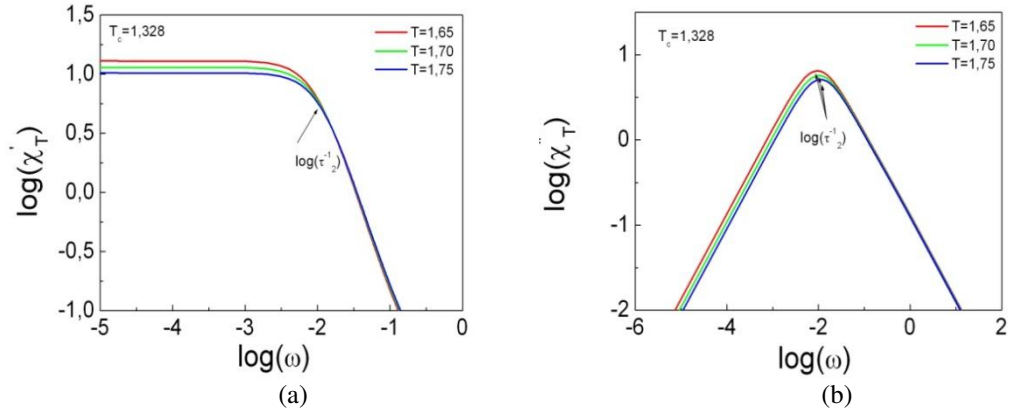
Düzensiz fazda (paramanyetik), manyetik dispersiyon katsayısının logaritması ($\log (X_T')$) frekansın logaritması ($\log \omega$) ile değişimine bakıldığı zaman (şekil4.11), düzensiz fazda bir adet plato gözlemlenmektedir. Bu platonun değerinin düştüğü yer baskın olmayan durulma zamanına (τ_1) karşılık gelir. Aynı zamanda manyetik dispersiyon katsayısının logaritması ($\log (X_T'')$) frekansın logaritmasına ($\log \omega$) ile değişimine bakılırsa bir adet maksimum yapı sergilediği ve bu maksimum yapı dispersiyon kısmında platonun değerinin düştüğü yere karşılık gelir.

Aynı zamanda ac alınganlığın absorpsiyon katsayısının, dispersiyon katsayısına göre değişimi Argand diyagramlarını vermektedir. Bu diyagramlar(şekil4.12), incelenen sistemde durulma davranış sayısını göstermektedir. Ferromanyetik (düzenli) fazda Argand diyagramı iki adet yarım çember içerir ki bu iki adet durulma zamanının var olduğunu ifade eder (şekil 4.12.a). Bu yarım çemberlerden büyük olan büyük durulma zamanına karşılık gelirken küçük yarım çember küçük durulma zamanına karşılık gelmektedir.

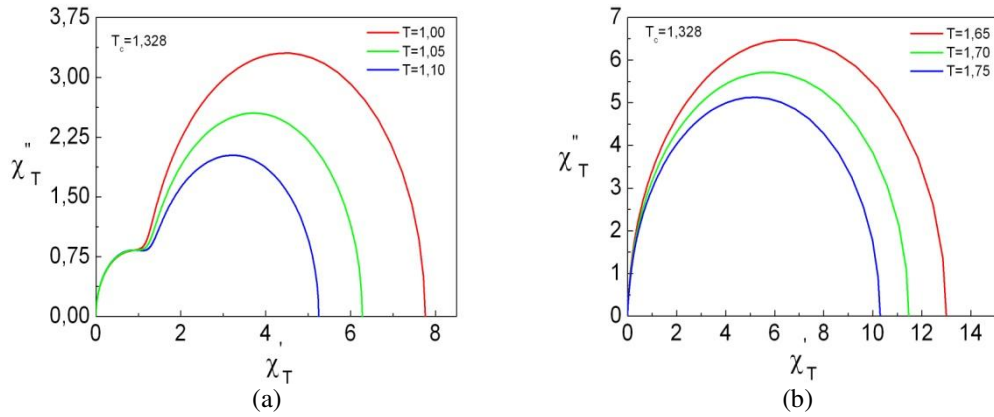
Aynı zamanda sıcaklığın artmasıyla yarım çemberlerin küçüldüğü gözükmemektedir. Düzensiz faza bakılacak olursa sıcaklığın artmasıyla düzenli fazda olan iki adet yarım çemberler birleşerek bir adet yarım çember meydana getiriler (şekil 4.12.b). Bu şekilde bakılacak olursa düzenli fazın aksine düzensiz fazda sıcaklığın artmasıyla yarım çemberlerin küçüldüğü gözükmemektedir.



Şekil 4.10 Düzenli fazda toplam manyetik alınganlığın gerçel ve sanal kısımlarının frekansla değişimlerini veren logaritmik eğriler. Burada, $\gamma_{mB} = -2,0$, $\gamma_{mA} = -0,0001$ $\gamma = 0.25$ değerlerini almaktadır .



Şekil 4.11 Düzensiz fazda toplam manyetik alınganlığın gerçel ve sanal kısımlarının frekansla değişimlerini veren logaritmik eğriler. Burada, $\gamma_{mB} = -1,0$, $\gamma_{mA} = -0,0001$, $\gamma = 0,28$, değerlerini almaktadır .



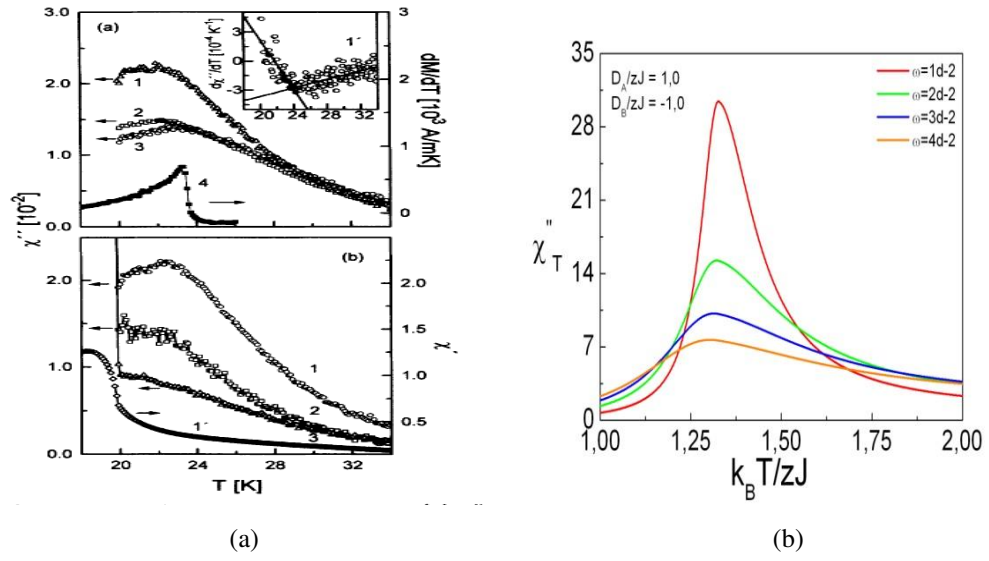
Şekil 4.12 Farklı sıcaklık değerleri için (a) düzenli fazdaki (b) düzensiz fazdaki argand diyagramları. Burada, $\gamma_{mB} = -1,0$, $\gamma_{mA} = -0,0001$, $\gamma = 0,28$, değerlerini almaktadır .

BÖLÜM BEŞ

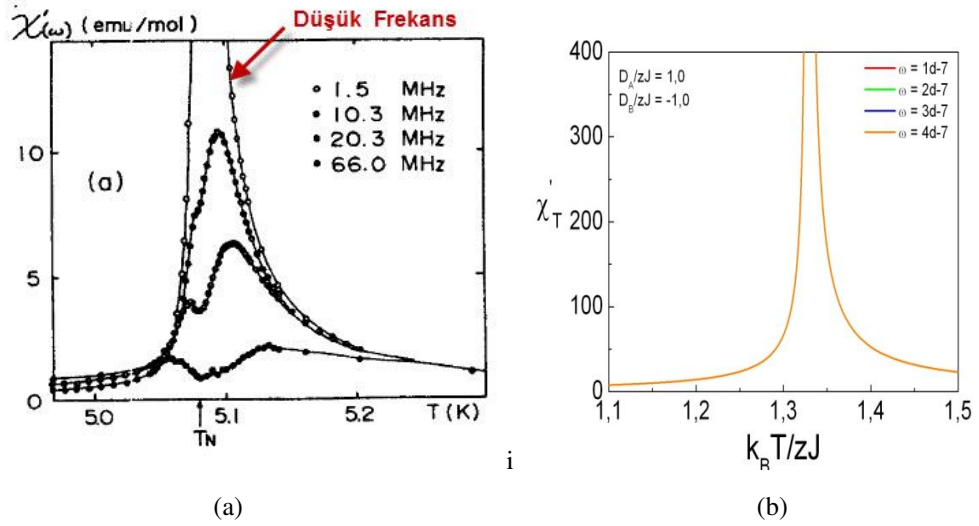
DENEYSEL SONUÇLAR İLE KARŞILAŞTIRMA

Denge istatistik mekanik kuramlarını kullanarak denge dışı istatistik mekanik özelliklerini bulmamıza yardımcı olan Onsager tersinmez termodinamik kuramı ile elde ettiğimiz manyetik absorpsiyon katsayısının sıcaklıkla değişimi ikinci derece faz geçişi (şekil 5.1.b)' da verilmiştir. Şekil5.1.a' da ise, alan indüklemeli faz geçişi sergileyen F_eCl_2 malzemesinin Binek ve çalışma arkadaşlarının gerçekleştirdikleri deneylerle elde edilmiş olan veriler yer almaktadır (Binek, Kleemann, 1994). Bu verilere göre faz geçiş sıcaklığında her iki grafikte bir maksimum yapmaktadır. Ayrıca Dekker ve arkadaşları $R_{b_2}C_{u_{1-x}}Co_xF_4$ bileşiği üzerinde yaptığı deneysel çalışma sonucunda sanal alınganlığın sıcaklıkla değişimine bakmışlardır (Decker, Arts, Wijn, 1989). Bu çalışmanın sonucunda elde edilen veriler ile bizim elde ettiğimiz karma spin-1 ve spin-2 model için yüksek frekans limitinde elde ettiğimiz sonuçlarla uyum içerisindedir. Ayrıca, Matsuura $Co(HCOO)_2 \cdot 2H_2O$ malzemesi üzerinde proton NMR ile inceleyerek alınganlığın sıcaklıkla ile değişimine bakmıştır (şekil5.2.a) . Elde edilen veriler, bizim elde ettiğimiz düşük frekans limiti (Şekil5.2.b) ile uyum içindedir. Benzer şekilde şekil5.3.a' de ise aynı malzemenin yüksek frekanstaki verileri gösterilmiştir (Matsuura, 2002). Bizim elde ettiğimiz yüksek frekans (şekil5.3.b) ile elde ettiğimiz sonuçlarla uyum içinde olduğu gözlemlenmiştir.

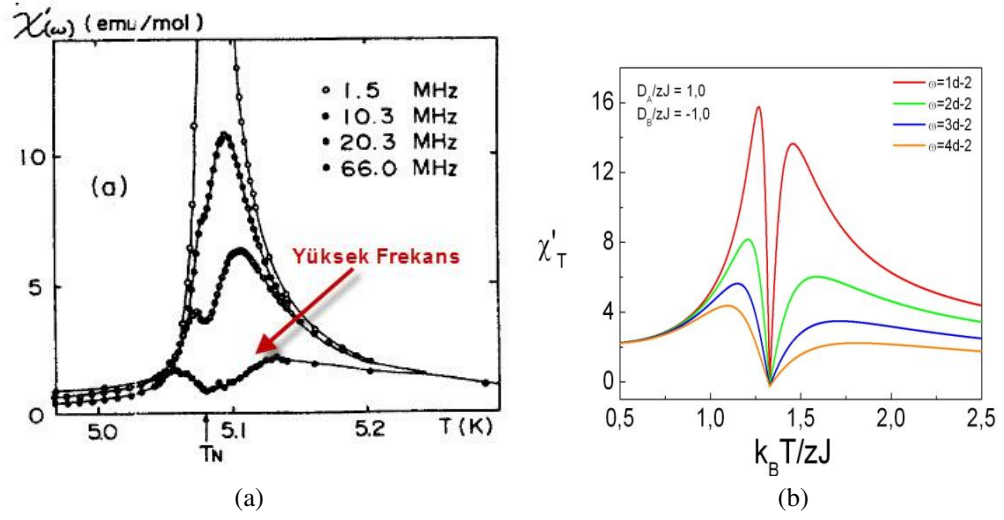
Alınganlığın frekans ile değişimleri daha önceki yıllarda deneysel olarak irdelenmiştir. Quilliam ve arkadaşları tarafından 2011 yılında $H_{O_2}Ti_2O_7$ spin ice materyal üzerinde deneysel olan manyetik absorpsiyon (Şekil5.5.a) ve manyetik dispersiyon (Şekil5.4.a) katsayısını frekans ile değişimine bakmıştır (Şekil4.4.a). Elde edilen sonuçlar ile bizim elde manyetik dispersiyon(şekil 5.4.b) ve manyetik absorpsiyon (Şekil5.5.b) katsayılarının frekans ile değişimleri uyum içerisindedir. Ayrıca Srinath ve Srikanth 2005 yılında $Y_{b_{14}}MnS_{b_{14}}$ bir ferromıknatis için Cole-cole analizi yapmışlardır (şekil5.6.a) (Srinath, Poddar ve Srikanth, 2005). Benzer şekilde bizim elde ettiğimiz sonuçlar (Şeki5.6.b) ile uyum içerisindedir.



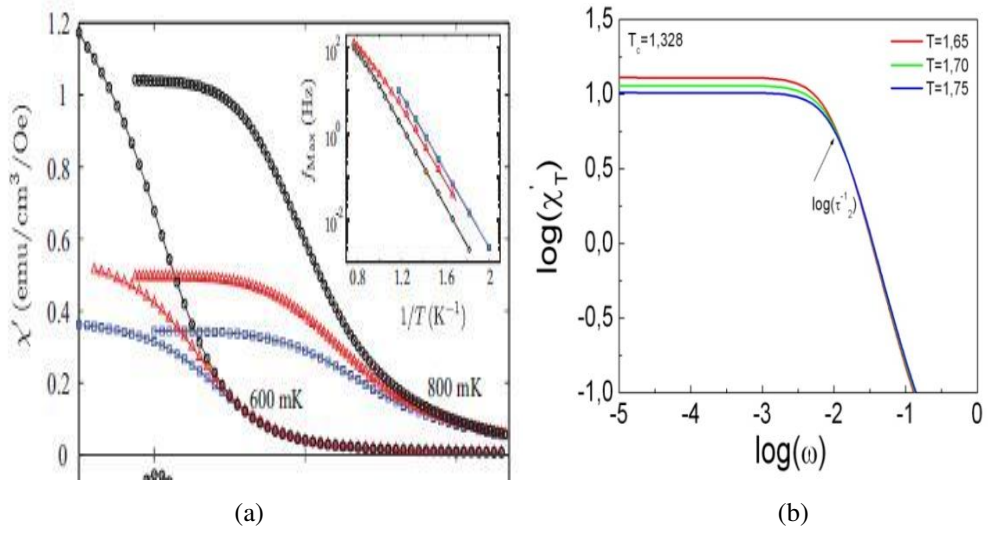
Şekil 5.1(a) $FeCl_2$ malzemesinin manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi
(b) Modelimize ait absorpsiyon katsayısının sıcaklıkla değişimi.



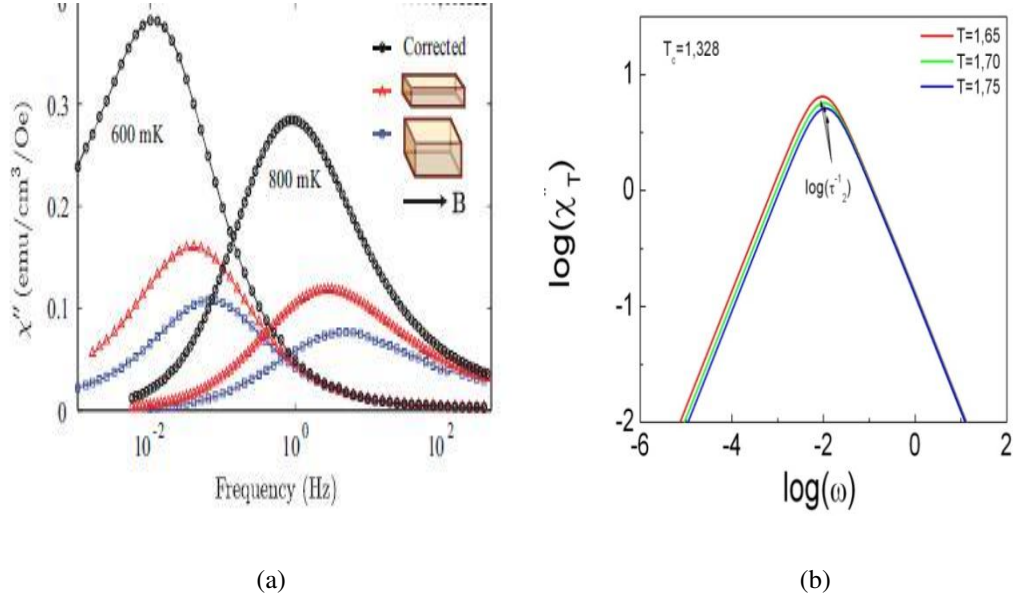
Şekil 5.2 (a) $Co(HCOO)_2 \cdot 2H_2O$ malzemesinin manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi
(b) Düşük frekans limitinde gerçel alınganlığın sıcaklıkla değişimi.



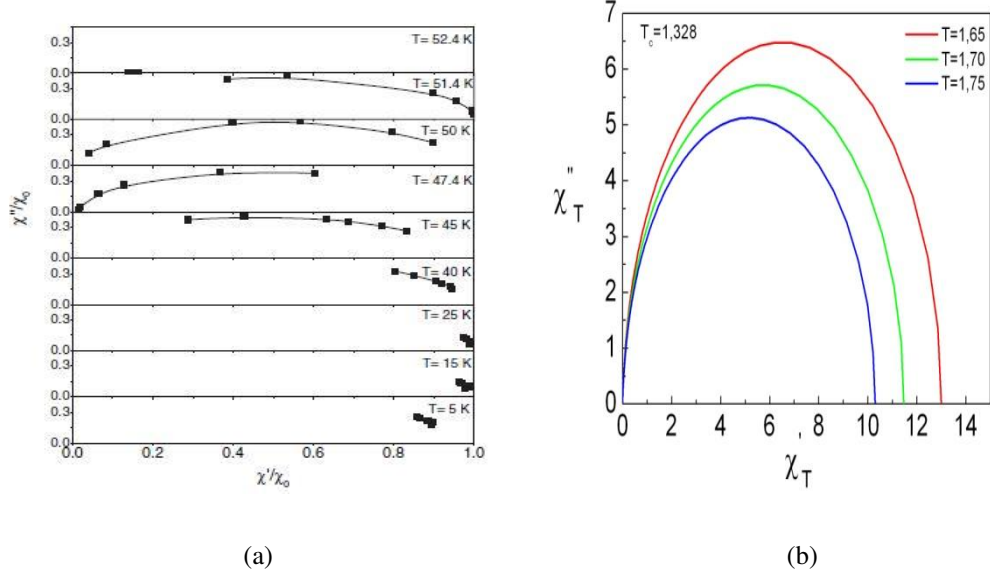
Şekil 5.3 (a) $\text{Co}(\text{HCOO})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ malzemesinin manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi
(b) Yüksek frekans limitinde gerçel alınganlığın sıcaklıkla değişimi.



Şekil 5.4 (a) $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ malzemesinin manyetik alınganlığın frekans ile değişimi
(b) Manyetik dispersiyon katsayısının frekans ile değişimi.



Şekil 5.5 (a) $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ malzemesinin manyetik alınganlığın frekans ile değişimi
(b) Manyetik absorpsiyon katsayısının frekans ile değişimi.



Şekil 5.6 (a) $\text{Yb}_{14}\text{MnSb}_{14}$ malzemesinin manyetik alınganlığın frekans ile değişimi
(b) Manyetik dispersiyon katsayısının frekans ile değişimi.

BÖLÜM ALTI

ÖZET VE SONUÇLAR

Bu tez çalışmasının amacı ortalama alan yaklaşımı altında Onsager tersinmez termodinamik kuramını kullanarak karma spin-1 ve spin-2 Ising modeline ait denge dışı davranışını incelemektir. Onsager tersinmez termodinamik kuramından faydalanmak amacıyla ilk olarak sistemin denge davranışlarını incelememiz gerekir. Çünkü Onsager tersinmez termodinamik kuramı denge faz geçişleri kuramı ile denge dışı faz geçişleri teorisi arasında bir köprü görevi görmektedir. Bundan dolayı ilk olarak karma spin-1 ve spin-2 Ising modelinin serbest enerjisini elde ederek, serbest enerjinin minimizasyon koşulundan indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak hal denklemlerini elde ettik. Daha sonra denge faz geçiş noktalarında indirgenmiş kristal alan ve sıcaklık düzleminde denge faz diyagramı oluşturulmuştur. Bu faz diyagramında düşük sıcaklık değerlerinde görülen birinci derece faz geçişleri ve yüksek sıcaklık değerlerinde görülen ikinci derece faz geçiş noktalarında Onsager tersinmez termodinamik kuramını da kullanarak sisteme ait durulma zamanlarını inceledik. İkinci derece faz geçiş noktasında elde edilen iki adet durulma zamanlarından biri kritik nokta civarında ıraksamakta ki bu durulma zamanı baskın durulma zamanı olarak nitelendirilir. Diğeri ise baskın olmayan durulma zamanı olarak nitelendirilebilir ve bu durulma zamanı kritik nokta civarında bir değişim sergilemektedir. Öte yandan birinci derece faz geçiş noktasına bakıldığında ise, baskın durulma zamanı yukarıya doğru bir sıçrama hareketi yaparken, baskın olmayan durulma zamanı ise aşağı doğru bir sıçrama hareketi gerçekleştirmektedir.

Daha sonra ise, sisteme ait birinci derece ve ikinci derece faz geçişleri yakınında denge ve denge dışı alınganlık ifadeleri elde edilmiştir. Burada ilk olarak indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak denge alınganlık ifadesini elde ederek sıcaklığa göre değişimi incelenmiştir. Literatürdeki çalışmalara uygun olarak ortalama alan yaklaşımı altında ikinci derece faz geçiş noktasında ıraksama gerçekleştirmiştir. Bununla beraber AC alınganlığın dispersiyon ve absorbsiyon katsayıları sıcaklığın ve frekansın bir fonksiyonu cinsinden elde ederek bu ifadeleri yüksek ve düşük frekans

limitinde inceledik. İlk olarak ac alınganlığın dispersiyon ve absorbsiyon kısmına bakıldığı takdirde, dispersiyon kısmının iraksadığı gözlenmiştir.

Düşük frekans limitinde elde edilen alınganlığın dispersiyon kısmı ile denge alınganlık sonuçları aynı çıkması gerekir. Elde ettiğimiz sonuçlarda bu iki alınganlığın bire bir aynı çıktığı gözlemlenmiştir. Bu yüzden yapılan çalışmanın doğruluğunu bu şekilde kanıtlamış oluruz. Öte yandan yüksek frekans limitinde manyetik dispersiyon ve absorbsiyon kısmına bakıldığı zaman, absorbsiyon kısmının kritik sıcaklıkta maksimum bir yapı sergilediği gözlemlenir. Dispersiyon kısmına bakıldığı zaman ise, düzenli fazda kritik sıcaklıktan hemen önce bir maksimum, düzensiz fazda ise kritik sıcaklığın hemen ardından bir maksimum yaptığı gözlemlenir. Bu iki maksimum kesim noktası olan ikinci derece faz geçiş noktasında ise alınganlığın değerinin sıfıra veya sıfıra yakın bir değere ulaştığı gözlemlenir. Son olarak ise, manyetik dispersiyon ve manyetik absorbsiyon katsayılarının sabit sıcaklıkta frekans ile değişimleri irdelenmiştir. İlk olarak, ferromanyetik fazda manyetik dispersiyon katsayısının frekans ile değişimini bakıldığı zaman iki adet plato gözlemlenmektedir. Bu platoların değerlerinin düştüğü yerlerde sisteme ait durulma zamanın yerini belirtir. Absorbsiyon kısmında ise bu platoların değerlerinin düştüğü yerlerde bir maksimum yapı sergiler. Bizim sistemimize ele aldığımız zaman sadece spin-spin etkileşimlerinden kaynaklanan iki adet durulma zamanı mevcuttur. Dolayısıyla bunların değerlerini bulmak o kadar zor olmamakla beraber, spin-spin ve spin-örgü etkileşimleri hesaba katıldığı zaman çok fazla sayıda sisteme ait durulma zamanı mevcuttur. Bu durulma zamanlarının çoğu kritik sıcaklıkta iraksamaktadır. Bu yüzden ki bunları ayırt edebilmek amacıyla manyetik dispersiyon veya absorbsiyon katsayılarının logaritmasının, frekansın logaritması ile değişimi faz geçişleri teorisinde önemli bir yer tutar. Öte yandan paramanyetik fazda ise, düzenli fazda iki adet plato sıcaklığın artmasıyla karşımıza tek bir plato olarak çıkmaktadır. Aynı zamanda bu platonun düştüğü yerde manyetik absorbsiyon katsayısı maksimum yapı sergiler ve bu maksimum yapı sisteme ait bir durulma zamanına karşılık gelir.

Bununla birlikte sisteme ait durulma davranışının sayısı Argand diyagramı yoluyla bulunabilir ki bu diyagramlar manyetik dispersiyon katsayısına göre manyetik absorbsiyon katsayısının değişimiyle elde edilir. Argand diyagramı ise ferromanyetik fazda iki adet yarım çember gösterir ki bu dispersiyon katsayısının

frekans ile deęişiminde elde ettięimiz plato sayısına eřittir. Aynı zamanda dzensiz fazda da beklenildięi üzere bir adet yarım ember gzlemlenir.

Sonuta karma spin-1 ve spin-2 Ising modeli dinamik faz geiřleri ok zengindir. Bu yzden de bu alıřmanın hem teorik hem de deneysel birok alıřmayı yol amasını umut ediyoruz.

KAYNAKLAR

- Andrews, T., (1869). The bakerian lecture: On the continuity of the gaseous and liquid states of matter, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, 159, 575-590.
- Acharyya, M. ve Chakrabarti, B. K. (1995). Response of Ising systems to oscillating and pulsed fields: Hysteresis, ac, and pulse susceptibility, *Phys. Rev. B*, 52 (9), 6550-6568.
- Binek Ch., S., Kleemann, W., (1994). Domainlike antiferromagnetic correlations of paramagnetic F_eCl_2 , *Phys. Rev. Lett.*, 72 (8), 1287-1290.
- Binek C., Kuttler, S. ve Kleemann, W., (1995). Magnetic-field-induced Griffiths phase versus random-field critically and domain wall susceptibility of $F_{e_{0,47}}Z_{n_{0,53}}F_2$, *Phys. Rev. Lett.*, 75 (12), 2412-2415.
- Boechat, B., Filgueiras, R., A., Cordeiro, C., ve Branco, N., S., (2002). Renormalization Group magnetization of a ferrimagnetic Ising system, *Physica A*, 304 (3-4), 429-442.
- Bobak, A., Abubrig, F., O., ve Balcerzak, T., (2003). Multicritical points in the mixed ferromagnetic-ferrimagnetic ternary alloy with a single-ion anisotropy, *Phys. Rev. B*, 68 (22), 224405.
- Plischke M. , Bergersen B. ,(1996). Equilibrium Statistical Physics . World Scientific Publishing co. pte. ltd
- Benyoussef, A., Bahmad, L. ve El Kenz, A., (2008). Study of the mixed Ising spins (1/2,3/2) in a random crystal field, *arXiv: 0810.4128*.
- Decker, C., Arts, A., F., M. Ve Wijn, H., W de , (1989), Activated dynamics in a two-dimensional Ising spin glass: $R_{b_2}C_{u_{1-x}}C_{o_x}F_4$, *Phys. Rev. B* ,40 (16), 11243-

11251.

Dakhama, A. (1998) Exact solution of a decorated ferrimagnetic Ising model, *Physica A*, 252 (1-2). 225-237.

Dakhama, A., Benayad, N. (2000). On the existence of compensation temperature in 2d mixed-spin Ising ferrimagnets: an exactly solvable model, *J. Magn. Magn. Mater.*, 213 (1-2). 117-125.

Derserno, M., (2004), Rayleigh-Ritz and Gibb-Bogoliubov, *Department of Chemistry and Biochemistry UCLA, USA*.

Erdem, R., Keskin, M., (2001). Dynamics of a spin-1 Ising system in the neighborhood of equilibrium states, *Phys. Rev. E*, 64 (2), 026102.

Erdem, R., (2008). Magnetic relaxation in a spin-1 Ising model near the second order phase transition point, *J. Magn. Magn. Mater.*, 320 (18), 2273–2278.

Guo-Ming Zhang, Chuan Zhang Yang, (1993). Monte carlo study of the two-dimensional quadratic Ising ferromagnet with spins $S=1/2$ and $S=1$ and with crystal-field interactions, *Phys. Rev. B*, 48 (13), 9452-9455.

Godoy, M., Leite, V., S., (2004). Mixed-spin Ising model and compensation temperature, *Phys. Rev.*, 69 (5), 054428.

Hapkinson, J. (1889). Magnetic and Other Physical Properties of Iron at a High, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, 180, 443-465.

Hemmer, P., C., Holden, H., Ratkhe, S., K., (1996). The collected works of Lars Onsager. Singapore : World Scientific Publishing co. pte. ltd.

- Ising, E. (1925). Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus, *Z. Phys.*, 31 (1), 253-258.
- Kramers, H., A., Wannier, G., H., (1941). Statistics of the two-dimensional ferromagnet part1, *Phys. Rev.*, 60 (3), 252-262.
- Kaufman, B., Onsager, L., (1949). Crystal Statistics. III. Short-Range Order in a Binary Ising Lattice, *Phys. Rev.*, 76 (8), 1244-1252.
- Kaneyoshi, T., Mielnicki, J., Balcerzak, T., Wiatrowski, G., (1990). Magnetization process of a disordered phase in a mixed-bond spin-1 Ising ferromagnet, *Phys. Rev. B*, 42 (7), 4388-4392.
- Keskin, M., Ertas, M., Canko, O., (2009). Dynamic phase transitions and dynamic phase diagrams in the kinetic mixed spin-1 and spin-2 Ising system in an oscillating magnetic field, *Phys. Scr.*, 79 (2), 025501.
- Lavis, D., A. Bell, G., M. (1998). *Statistical mechanics of lattice system 1 Closed-form and exact solutions. Springer.*
- Matsuura, M., (2011). Networking and cooperative dynamics in complex physical system, *Memoirs of fukui University of technology*, 32, 297-304.
- Moreno-Pirajan J.,C, (2011). Nonequilibrium Thermodynamics of Ising Magnets. Thermodynamics system in equilibrium and non- equilibrium. (255-278) Hrvatistan.
- Onsager, L., (1931). Reciprocal relations in irreversible process 1, *Phys. Rev.*, 37 (4), 405-426.
- Onsager, L., (1931). Reciprocal relations in irreversible process 1, *Phys. Rev.*, 38 (12), 2265-2279.

- Onsager, L. (1944). Crystal Statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition, *Phys. Rev.*, 65 (3-4), 117-149.
- Prato, D. ve Barraco, D.,E., (1996). Bogoliubov inequality, *Revista Mexicana de Fisica* , 42 (1), 145-150.
- Schofield, S., L., ve Bowers, R., G., (1981). High-Temperature series expansion analyses of mixed-spin Ising models ,*J. Phys. A: Math. Gen.* 14, 2163-2169.
- Smith,W., D., (1999). *Criticism of Onsager's reciprocal relations*.
- Srinath, S., Poddar, P. ve Srikanth, H., (2005). Observation of a new magnetic anomaly below the ferromagnetic curie temperature in $Y_{b_{14}}M_nS_{b_{14}}$, *PRL* 95 (22), 227205.
- Yiğit, A. (2006). Bethe Kafesi Üzerinde Karma Spin-1 ve Spin-2 Blume-Capel Ising Ferromanyetik Sistemin Kritik Davranışları. Erciyes Üniv.
- Wei, G., Gu, Y.,Liu, J., (2006). Mean field and monte carlo studies of a mixed spin-1 and spin- Ising system with different anisotropies, *Phys. Rev. B*, 74 (2), 024422.
- Quilliam, J., A., Yaraskavitch, L., R., Dabkowska, H., A., Gaulin, B., D., Kycia, J., B., (2011). Dynamics of the magnetic susceptibility deep in the coulomb phase of the dipolar spin ice material $Ho_2Ti_2O_7$, *Phys. Rev. E* ,8 (9), 094424.

EKLER

Karma spin-1 ve spin-2 modeline ait temel durum enerjisi aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$E_g = -\frac{zJ}{2} \sigma_A S_B + \frac{1}{2} D_A \sigma_A^2 + \frac{1}{2} D_B S_B^2$$

$O_1: E(+1, +2)$ durumu için sisteme ait taban durum enerjisi; yani $\sigma_A=1$ ve $S_B=2$ spin değerlerini alır. O halde;

$$E_{g_{o1}} = -\frac{zJ}{2} (1)(2) + \frac{1}{2} D_A (1)^2 + \frac{1}{2} D_B (2)^2$$

$$E_{g_{o1}} = -1 + \frac{1}{2zJ} D_A + \frac{2D_B}{zJ}$$

$O_2: E(+1, +1)$ durumu için sisteme ait taban durum enerjisi; yani $\sigma_A=1$ ve $S_B=1$ spin değerlerini alır. O halde;

$$E_{g_{o1}} = -\frac{zJ}{2} (1)(1) + \frac{1}{2} D_A (1)^2 + \frac{1}{2} D_B (1)^2$$

$$E_{g_{o2}} = \frac{-1}{2} + \frac{D_A}{2zJ} + \frac{D_B}{2zJ} \text{ olmaktadır.}$$

$D_1: E(+1, \pm 2)$ durumu için sisteme ait taban durum enerjisi; yani $\sigma_A=1$ ve $S_B=\pm 2$ spin değerlerini alır. O halde;

$$E_{g_{D1}} = -\frac{zJ}{2} (0)(2) + \frac{1}{2} D_A (0)^2 + \frac{1}{2} D_B (2)^2$$

$$E_{g_{D1}} = 2 \frac{D_B}{zJ} \text{ olmaktadır.}$$

$D_2: E(0, 0)$ durumu için sisteme ait taban durum enerjisi; yani $\sigma_A=0$ ve $S_B=0$ spin değerlerini alır. O halde;

$$E_{g_{D2}} = -\frac{zJ}{2}(0)(0) + \frac{1}{2}D_A(0)^2 + \frac{1}{2}D_B(0)^2 = 0 \text{ olmaktadır.}$$

$D_3: E(\pm 1, 0)$ durumu için sisteme ait taban durum enerjisi; yani $\sigma_A = \pm 1$ ve $S_B = 0$ spin değerlerini alır. O halde;

$$E_{g_{D1}} = -\frac{zJ}{2}(1)(0) + \frac{1}{2}D_A(1)^2 + \frac{1}{2}D_B(0)^2$$

$$E_{g_{D1}} = \frac{D_A}{2zJ} \text{ olmaktadır.}$$

İlk olarak, $O_1: E(+1, +2)$ ile $D_2: E(0, 0)$ arasındaki taban durum faz geçişindeki hesapları inceleyeceğiz.

$E_{g_{O1}} = E_{g_{D2}}$ eşitliğini kullanarak;

$$-1 + \frac{1}{2zJ}D_A + \frac{2D_B}{zJ} = -\frac{zJ}{2}(0)(0) + \frac{1}{2}D_A(0)^2 + \frac{1}{2}D_B(0)^2 \text{ yazılabilir.}$$

Böylece $O_1: E(+1, +2)$ ile $D_2: E(0, 0)$ arasındaki taban durum faz geçişinden ;

$$\frac{D_B}{zJ} = \frac{1}{2} - \frac{D_A}{4zJ} \text{ ifadesi bulunur.}$$

İkinci olarak, $O_1: E(+1, +2)$ ile $D_1: E(0, 2)$ arasındaki taban durum faz geçişindeki hesapları inceleyeceğiz.

$E_{g_{O1}} = E_{g_{D1}}$ eşitliğini kullanarak;

$$-1 + \frac{1}{2zJ}D_A + \frac{2D_B}{zJ} = 2\frac{D_B}{zJ} \text{ yazılabilir.}$$

Böylece $O_1: E(+1, +2)$ ile $D_1: E(0, 2)$ arasındaki taban durum faz geçişinden ;

$$\frac{D_A}{zJ} = 2 \text{ ifadesi bulunur.}$$

Üçüncü olarak, $O_1: E(+1, +2)$ ile $O_2: E(1, 1)$ arasındaki taban durum faz geçişindeki hesapları inceleyeceğiz.

$E_{g_{O1}} = E_{g_{O2}}$ eşitliğini kullanarak;

$$-1 + \frac{1}{2zJ} D_A + \frac{2D_B}{zJ} = \frac{-1}{2} + \frac{D_A}{2zJ} + \frac{D_B}{zJ} \text{ yazılabilir.}$$

Böylece $O_1: E(+1, +2)$ ile $O_2: E(1, 1)$ arasındaki taban durum faz geçişinden ;

$$\frac{D_B}{zJ} = \frac{1}{3} \text{ olarak bulunur.}$$

Dördüncü olarak, $O_2: E(+1, +1)$ ile $D_2: E(0, 0)$ arasındaki taban durum faz geçişindeki hesapları inceleyeceğiz.

$$E_{g_{o2}} = E_{g_{D2}} \text{ eşitliğini kullanarak;}$$

$$\frac{-1}{2} + \frac{D_A}{2zJ} + \frac{D_B}{zJ} = 0 \text{ yazılabilir.}$$

Böylece $O_1: E(+1, +1)$ ile $D_2: E(0, 0)$ arasındaki taban durum faz geçişinden ;

$$\frac{D_B}{zJ} + \frac{D_A}{zJ} = 1 \text{ olarak bulunur.}$$

Beşinci olarak, $O_2: E(+1, +1)$ ile $D_3: E(1, 0)$ arasındaki taban durum faz geçişindeki hesapları inceleyeceğiz.

$$E_{g_{o2}} = E_{g_{D3}} \text{ eşitliğini kullanarak;}$$

$$\frac{-1}{2} + \frac{D_A}{2zJ} + \frac{D_B}{zJ} = \frac{D_A}{2zJ} \text{ yazılabilir.}$$

Böylece $O_2: E(+1, +1)$ ile $D_3: E(1, 0)$ arasındaki taban durum faz geçişinden ;

$$\frac{D_B}{zJ} = 1 \text{ olarak bulunur.}$$

Son olarak ise;

$D_1: E(+1, +2)$ ile $D_2: E(0, 0)$ arasındaki taban durum faz geçişindeki hesapları inceleyeceğiz.

$$E_{g_{D1}} = E_{g_{D2}} \text{ eşitliğini kullanarak;}$$

$$\frac{2D_B}{zJ} = 0 \text{ yazılabilir.}$$

Böylece $D_1: E(+1, +2)$ ile $D_2: E(0, 0)$ arasındaki taban durum faz geçişinden ;

$$\frac{D_B}{zJ} = 0 \text{ olarak bulunur.}$$

