

**T.C.
MARMARA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**MONTE CARLO SİMÜLASYONU İLE
İSİNG MODELİ VE FAZ GEÇİŞLERİ**

**Ömer AŞÇI
(520308014)**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI**

**DANIŞMAN
Prof. Dr. Uğur YAŞI
Prof. Dr. Necdet ASLAN**

İSTANBUL 2011

TEŐEKKÜR

Bana bu alıŐmayı veren, bitmeyen tikenmeyen alıŐma ve araŐtırma arzusıyla yireklendiren Prof Dr Necdet ASLAN ve bu deęerli insanla tanıŐmamı saęlayan, yardımlarını esirgemeyen bÖlüm başkanımız Prof Dr Uęur YAHŐI hocamıza; eŐim, annem ve babama ayrıca ders aŐamasında dersini almıŐ olduęum ya da almadıęım deęerli Öęretmenlerimize, birlikte ders takip ettięim arkadaşlarımıza teŐekkür ederim.

Eylöl, 2011

Ömer AŐCI

İÇİNDEKİLER

	SAYFA
TEŞEKKÜR.....	i
İÇİNDEKİLER.....	ii
ÖZET.....	iv
ABSTRACT.....	v
SEMBOLLER.....	vi
ŞEKİLLER.....	viii
I. GİRİŞ – TEMEL KAVRAMLAR VE ISING MODEL	1
I.1. TEMEL KAVRAMLAR.....	1
I.2. ISING MODEL.....	6
I.3 POTTS MODEL.....	10
II. İSTATİSTİK MEKANİKTE TEMEL KAVRAMLAR.....	12
II.1. FAZ UZAYI.....	12
II.1.1 N PARÇACIK İÇİN FAZ UZAYI.....	14
II.1.2 İSTATİSTİK KÜMELER.....	14
II.1.2 ERGOTİK İLKE VE LIOUVILLE TEOREMİ.....	15
II.2. MİKROKANONİK KÜME.....	18
II.2.1 MİKROKANONİK KÜMEDE İDEAL TEK ATOMLU GAZ....	20
II.2.2 MİKROKANONİK KÜMEDE KATILARIN ÖZGÜL ISISI VE EINSTEİN KRİSTALİ.....	21
II.2.3 MİKROKANONİK KÜMEDE PARAMANYETİZMA.....	25
II.3 KANONİK KÜME.....	28
II.3.1 BÖLÜŞÜM FONKSİYONU.....	28
II.3.2 KANONİK KÜMEDE İÇ ENERJİ.....	31
II.3.3 LAGRANGE ÇARPANLARI YÖNTEMİ.....	32
II.3.4 HELMHOLTZ SERBEST ENERJİSİ.....	34
II.3.5 KANONİK KÜMENİN TEMEL ÖZELLİKLERİ.....	35
II.3.6 TEDİRGEMELER.....	37

II.3.7 KANONİK KÜMEDE EİNSTEİN KRİSTALİ.....	38
II.3.8 KANONİK KÜMEDE DEBYE KRİSTAL MODELİ.....	40
II.3.9 KANONİK KÜMEDE PARAMANYETİZMA	45
III. SİMÜLASYONLARDA KULLANILABİLECEK YAKLAŞIK	
YÖNTEMLER.....	48
III.1 MEAN FIELD TEORY.....	48
III.2 NEWTON METODU	53
III.3 MONTE CARLO METODU.....	54
III.4 ISING MODEL VE İKİNCİ DERECE FAZ GEÇİŞİ.....	56
III.5 BİRİNCİ DERECE FAZ GEÇİŞİ.....	63
IV. NÜMERİK SONUÇLAR.....	68
IV.1 İÇ ENERJİNİN SICAKLIKLA DEĞİŞİMİ	68
IV.2 MAGNETİZASYONUN SICAKLIKLA DEĞİŞİMİ.....	70
IV.3 MANYETİK DUYGUNLUĞUN SICAKLIKLA DEĞİŞİMİ	71
IV.4 ISING MODEL – HİSTERİSİS ETKİSİ, MANYETİZASYONUN MANYETİK ALANLA DEĞİŞİMİ	73
IV.5 ISING MODEL HİSTERİSİS ETKİSİ, MANYETİK DUYGUNLUĞUN MANYETİK ALANLA DEĞİŞİMİ	74
IV.6 POTTS MODEL	75
KAYNAKLAR.....	79

ÖZET

MONTE CARLO SİMÜLASYONU İLE İSİNG MODELİ VE FAZ GEÇİŞLERİ

Deney yapmanın çokta mümkün olmadığı sistemleri (nükleer, istatistik, yüksek enerji, astrofizik gibi) incelerken genellikle tercih edilen yöntem problemin doğal bir kopyasını simüle etmektir. Simülasyon hazırlamak; 1- Problemin doğru anlaşılması, 2- Çözüme giden yolun basamaklandırılarak algoritmanın oluşturulması, 3- Problemden gerekli verileri alarak çözüme kavuşturan programın yazılması basamaklarını içerir. Tabii ki her araştırmacının arzu ettiği, az bilgiyle çok veriye ulaşmak istenilen bir durumdur. Simülasyonlar bu noktada; az bilgiyle çok veriye ulaşmak, ulaşılan verilerin birbirleriyle olan ilişkileri, değişimleri gibi pek çok şeyi beraberinde getirir. İyi yazılmış ve problemin doğasına yakın simülasyonlar deneysel ortamlarda malzeme, zaman gibi kısıtlayıcıları düşünmekten kurtarır. Böylelikle incelenen sistemdeki ilişkili büyüklüklerin arasındaki değişimler kolaylıkla takip edilebilir.

Araştırmamıza ising modeli tanıyarak (1. bölüm) başladık. Ardından simülasyonda kullanılabilecek yöntemleri (3. bölüm) inceledik. Sonrasında bilgisayarımıza Linux işletim sistemini kurarak programımızı yazdık. Programımız ising model için dış manyetik alan varken bile önerilen sonuçları doğruladı. Bundan cesaret alarak bir adım daha atıp potts modeli araştırdık. Programımızda önemli birkaç değişiklik yaparak potts model içinde gayet doğru sonuçlar aldık. Son olarak aldığımız sonuçlara hysteresis etkisi katmak ve sonuçları incelemek üzere programı hysteresis etkisi sonuçlarını alabilecek biçimde düzenledik.

Özet olarak; çalışmamızda ising ve potts model; birinci en yakın komşu için monte carlo simülasyonu ile hazırlanmış ve Linux işletim sisteminde C programıyla incelenmiştir. Bunun için; 1. Bölümde spin kavramı ayrıntılı bir biçimde verilip ising ve potts model genel hatlarıyla verilmiş, 2. Bölümde konu ile ilgili istatistik mekaniğin getirdiği temel kavramlar, 3. Bölümde simülasyonların temel mantığını ifade eden yaklaşım yöntemleri, 4. Bölümde çalışmamızda elde ettiğimiz veriler sunulmuştur.

Eylül, 2011

Ömer AŞÇI

ABSTRACT

ISING MODEL BY MONTE CARLO SIMULATION AND PHASE TRANSITIONS

Simulating a natural copy of the problem is the method that is generally preferred while examining the systems (e.g. nuclear, statistics, high energy, astrophysics) on which it is impossible to do experiments. Preparing the simulation includes those steps: 1- Understanding the problem correctly, 2- Forming the algorithm by processing the procedures, 3- Writing the programme by collecting the essential data which help reaching the solution. Certainly, all researchers would like to reach much data with less knowledge. At this point, simulations help us to reach much data with less knowledge, to see the relationship and changes between the data reached. Simulations which are well-written and related to the nature of the problem prevent us from thinking about the restrictions in experimental environment such as timing and materials. In this way, changes between the connected enormities in the examined system can be followed easily.

We started our research by recognizing ising model (1st part). After that, we have searched the methods that can be used in simulation (3rd part). Afterwards, by setting up Linux operating system on our computers, we wrote our program. Our program confirmed the suggested results even there was exterior magnetic field for ising model. Taking courage from this, we stepped one more and searched the potts model. By making a few important changes in our program, we got really correct results for the potts model, too. Finally, to add hysteresis effect to our results and to examine the results, we arranged our program to be able to get results of hysteresis effects.

To sum up, in our research ising and potts model; for the first nearest neighbour have been prepared by monte carlo simulation and examined by C program in Linux operating system. Because of this, in part 1, the concept of spin has been given in detail, ising and potts models have been given commonly, in part 2, the main concepts that statistics mechanics ,which are related to the topic, brought, in part 3, approaches and methods which express the basic sense of simulation, in part 4, data that we have obtained in our research have been presented.

SEMBOLLER

β	: Beta parametresi
B	: Basınç (J/m^3)
c	: Işık hızı ($3 \cdot 10^8$ m/s)
c_v	: Öz (spesifik) ısı ($cal / ^\circ K$)
$D(\epsilon)$: Debye fonksiyonu
Δ	: Değişim
ϵ	: Kip (salınım) frekansı
E	: Enerji (J)
ΔE	: Enerjideki standart sapma
F	: Helmholtz serbest enerjisi
h	: Planck sabiti (J.s)
H	: Manyetik alan (T)
J	: Toplam yörüngesel açısal momentum ($kg \cdot m^2/s$)
χ	: Manyetik duygunluk
k	: Yay sabiti (N/m)
k_B	: Boltzman sabiti ($1,381 \cdot 10^{23}$ J/ $^\circ K$)
K	: Yer değiştirme sabiti
l	: Orbital (yan) kuantum sayısı
λ	: Dalga boyu (Å)
L	: Açısal momentum (J.s)
Γ	: Hamiltonien (toplam enerji) fonksiyonu
μ	: Manyetik dipol moment
m	: Kütle (kg)
M_α	: α mikro halinin manyetik momenti
M	: Mıknatıslanma
n	: Baş kuantum sayısı
N_A	: Avogadro sayısı ($6,022 \cdot 10^{23}$ tanecik/mol)
N	: Parçacık sayısı
p	: Olasılık
P	: Çizgisel momentum ($kg \cdot m/s$)

q	: Konum (m)
P_α	: Sistemin α durumunda bulunma olasılığı
R	: İdeal gaz sabiti (8,314 J/mol.°K)
ρ	: Manyetik kuantum sayısı
s	: Spin kuantum sayısı
S	: Entropi
t	: Zaman (s)
T	: Sıcaklık (°K)
ω	: Açısal hız (rad/s)
Ω	: Mikro durum sayısı
x	: Konum (m)
Z	: Bölüşüm fonksiyonu

ŞEKİLLER

SAYFA NO

Şekil 1.1 Bohr atom modeline göre, hidrojen atomunda dairesel yörüngede dolaşan elektron.....	2
Şekil 1.2 Hidrojen atomunda kararlı bir yörüngede elektronun dalga boyu.....	3
Şekil 1.3 Gözlem, sistemden alınacak verileri doğrudan etkiler.....	4
Şekil 1.4 Elektronun spin hareketi.....	5
Şekil 1.5 Stern Gellach deneyi.....	5
Şekil 1.6 Atomik orbital şekilleri ve yörüngelere elektron dizilişi.....	6
Şekil 1.7 Doğal bir mıknatıs için şematik spin modeli.....	7
Şekil 2.1 Faz uzayı.....	12
Şekil 2.2 Tek Boyutta harmonik osilatörün faz uzayındaki yörüngesi.....	13
Şekil 2.3 Siyah toplar durumları ayıran duvarları, beyaz toplar enerji kuantumlarıdır.....	22
Şekil 2.4 (2.42) denkleminde göre katıların özgül ısısı.....	24
Şekil 2.5 Isı banyosu içindeki sistem.....	28
Şekil 2.6 Kanonik kümenin enerjisi ortalama değerden çok az sapma gösterir.....	38
Şekil 2.7 Özdeş yaylara bağlanarak harmonik hareket yapan özdeş cisimler.....	40
Şekil 2.8 Katıların özgül ısısı (Einstein ve Debye modellerinin karşılaştırılması).....	44
Şekil 3.1 Mean-Field denkleminin çözümünde relaksasyon metodunun düşük ve yüksek sıcaklıkta işleyişi.....	51
Şekil 3.2 Mean-Field denkleminin relaksasyon metodunun kullanılarak çözümünde kritik sıcaklık.....	52
Şekil 3.3 Newton metodunu kullanarak Mean-Field denkleminin çözümü.....	54
Şekil 3.4 Periyodik sınır koşullarıyla Ising spinleri. Spinler noktalı çizgilerle bağlantılıdır.....	57
Şekil 3.5 10x10 kare kafeste Ising modele göre, magnetizasyonun zamana karşılık farklı sıcaklık değişimleri.....	59
Şekil 3.6 10x10 kare kafeste Ising modeli için sıcaklığın fonksiyonu olarak anlık mıknatıslanma.....	61
Şekil 3.7 10x10 kare kafeste Ising model için sıcaklık fonksiyonu olarak	

ortalama termal enerji.....	62
Şekil 3.8 10x10 kare kafes için dalgalanma-dağılma ısı kapasitesi kullanılarak hesaplanır.....	62
Şekil 3.9 Bazı sıcaklıklarda 10x10 kare kafeste magnetizasyonun manyetik alana göre dağılımı.....	63
Şekil 3.10 (Solda) Ferromanyetik bir maddenin H-T faz diyagramı. (Sağda) Kritik sıcaklık yalınlarında şematik basınç-sıcaklık diyagramı.....	65
Şekil 3.11 Kritik sıcaklık altında 10x10 kare kafes için hyteresis döngüsü.....	66
Şekil 4.1 21x21 spinde ising modele göre iç enerjinin sıcaklıkla değişimi.....	69
Şekil 4.2 41x41 spinde ising modele göre iç enerjinin sıcaklıkla değişimi.....	69
Şekil 4.3 81x81 spinde ising modele göre iç enerjinin sıcaklıkla değişimi.....	70
Şekil 4.4 21x21 spin sisteminde ising modele göre manyetizasyonun sıcaklıkla değişimi.....	70
Şekil 4.5 41x41 spin sisteminde ising modele göre manyetizasyonun sıcaklıkla değişimi.....	71
Şekil 4.6 81x81 spin sisteminde ising modele göre manyetizasyonun sıcaklıkla değişimi.....	71
Şekil 4.7 21x21 spinde ising modele göre manyetik duygunluğun sıcaklıkla değişimi.....	72
Şekil 4.8 41x41 spinde ising modele göre manyetik duygunluğun sıcaklıkla değişimi.....	72
Şekil 4.9 81x81 spinde ising modele göre manyetik duygunluğun sıcaklıkla değişimi.....	72
Şekil 4.10 21x21 spin sisteminde ising-hysterisis e göre manyetizasyonun manyetik alanla değişimi.....	73
Şekil 4.11 41x41 spin sisteminde ising-hysterisis e göre manyetizasyonun manyetik alanla değişimi.....	73
Şekil 4.12 81x81 spin sisteminde ising-hysterisis e göre manyetizasyonun manyetik alanla değişimi.....	74
Şekil 4.13 21x21 spinde ising-hysterisis e göre manyetik duygunluğun manyetik alanla değişimi.....	74
Şekil 4.14 41x41 spinde ising-hysterisis e göre manyetik duygunluğun manyetik alanla değişimi.....	75
Şekil 4.15 41x41 spinde ising-hysterisis e göre manyetik duygunluğun	

manyetik alanla deęiřimi.....	75
řekil 4.16 Spin yönelimleri.....	75
řekil 4.17 Potts ve Ising modellerine göre 41x41 örgüde iç enerji-sıcaklık deęiřimleri.....	76
řekil 4.18 Potts ve Ising modellerine göre 41x41 örgüde manyetizasyon-sıcaklık deęiřimleri.....	76
řekil 4.19 Potts ve Ising modellerine göre 41x41 örgüde ısı kapasitesi-sıcaklık deęiřimleri.....	77
řekil 4.20 Potts ve Ising modellerine göre 41x41 örgüde histerisis deęiřimleri.....	77
řekil 4.21 Potts modele göre 41x41 örgüde 1000 ve 2000 monte carlo adımları için manyetizasyon-manyetik alan grafikleri.....	77
řekil 4.22 Potts modele göre 41x41 örgüde 1000 ve 2000 monte carlo adımları için iç enerji-manyetik alan grafikleri.....	78
řekil 4.23 Potts modele göre 41x41 örgüde 1000 ve 2000 monte carlo adımları için ısı kapasitesi-manyetik alan grafikleri.....	78
řekil 4.24 Potts modele göre 41x41 örgüde 1000 ve 2000 monte carlo adımları için manyetik duygunluk-manyetik alan grafikleri.....	78

I. GİRİŞ - TEMEL KAVRAMLAR VE ISING MODEL

I.1. TEMEL KAVRAMLAR

Manyetizma temelinde, kuantum mekaniği ile açıklanabilen bir olaydır. (1895-1952) Neils BOHR daha kuantum mekaniği kurulmadan önce manyetizmanın klasik fizik ile tarif edilemeyeceğini önermişti. Manyetizmanın temel unsuru elektron spini ve ona eşlik eden manyetik momenttir. Bundan dolayı öncelikle elektron spininin ne olduğunu anlamak yerinde olacaktır.

Proton ve nötronun oluşturduğu çekirdek çevresinde elektronların dairesel yörüngelerde dolaştığı 1911 yılında Ernest RUTHERFORD tarafından, *Rutherford atom modelinde* ifade edilir. Buna karşın model sürekli enerji spektrumunu öngörür. Atomların ışımaya yapmasını açıklayamaz. Nedeni ise atomda öngörüleebilecek tüm yörüngelerin kararlı olduğunu savunmasıydı. Ayrıca elektronun merkezci ivmesiyle hareketi ile niçin çekirdeğe düşmediğini açıklayamamaktadır.

1913 yılında Neils Bohr yeni bir atom modeli fikrini ileri sürdü. Modele göre, çekirdeğe en yakın enerji seviyesinde hareket eden elektron yörüngesi kararlıdır. Atom ışımaya yapmaz. Atoma elektronu iyonlaştırmadan, sadece uyarabilecek yeterlilikte enerji verildiğinde, elektron daha yüksek bir enerji seviyesine çıkar. Bu durumda atom kararsızdır. Tekrar kararlı hale geçmek için elektron üst enerji düzeyinden eski enerji seviyesine inerken atom, aradaki enerji farkına eşit enerjide bir foton yayımlar. Böylece Bohr atomların nasıl ışımaya yaptığı açıklamış olur. Neils Bohr hidrojen atomunun spektrum çizgilerini, Planck'ın kuantum kavramlarını kullanarak, kuramını ortaya atmıştır. Kuramdaki varsayımlar şunlardır.

1. Elektronlar çekirdek çevresinde dönüşlerini $\frac{h}{2\pi}$ nin tam katına denk düşen açısal momentum değerlerinde, kararlı yörüngelerde dolaşırlar.

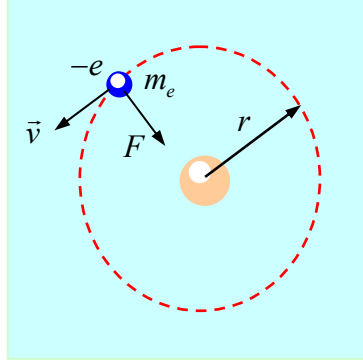
$$L = n \frac{h}{2\pi} \quad n = 1, 2, \dots \hat{=} N^+ \quad (1.1)$$

2. Herhangi bir kararlı enerji seviyesinde elektron dairesel yörüngede dolaşır.

3. Elektron kararlı yörüngelerden birinde dolaşırken, atom ışına yapmaz. Buna karşın elektron yüksek enerji düzeyinden, düşük enerji düzeyine geçerken atom aradaki enerji farkına eşit ışına yapar.

$$hf = E_{ilk} - E_{son} \quad (1.2)$$

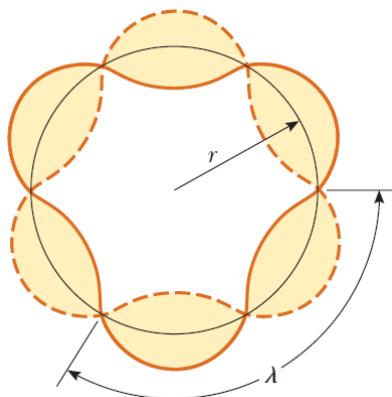
4. Elektron hareketinin mümkün olduğu kararlı seviyeler K, L, M, N, O gibi harflerle veya en düşük enerji düzeyi 1 olmak üzere 2, 3, 4, .. diye bir tam sayı ile belirtilirken n ile gösterilir.



Şekil 1.1 Bohr atom modeline göre, hidrojen atomunda dairesel yörüngede dolaşan elektron

Bu atom modeli o günün şartlarında birçok soruya yanıt verebiliyor olmasına karşın bugün yalnızca tek elektronu bulunan hidrojen ve benzeri atomlarda yeterli olduğunu gayet iyi biliyoruz. Ne bileşiklerin yapısı nede çok elektronlu atomlar için bu öneriler yetersizdir.

1924 yılına gelindiğinde Lois De Broglie, optikteki fermat prensibi ve mekanikteki en küçük etki prensibi ile benzerlik kurarak, ışığın gösterdiği dalga-parçacık ikileminin, maddeler tarafından da gösterilmesi gerektiğini ileri sürdü. Bu amaçla De Broglie; Einstein in özel rölativite teorisi ile Planck ın kuantum teorisini kullandı. Foton için $E = P \cdot c$ ve $E = \frac{hc}{\lambda}$ ifadelerini eşitleyerek, De Broglie dalga boyunu veren ifadeye ulaşılabilir.



Şekil 1.2 Hidrojen atomunda kararlı bir yörüngede elektronun dalga boyu.

$$\lambda_{DB} = \frac{h}{p} \quad (1.3)$$

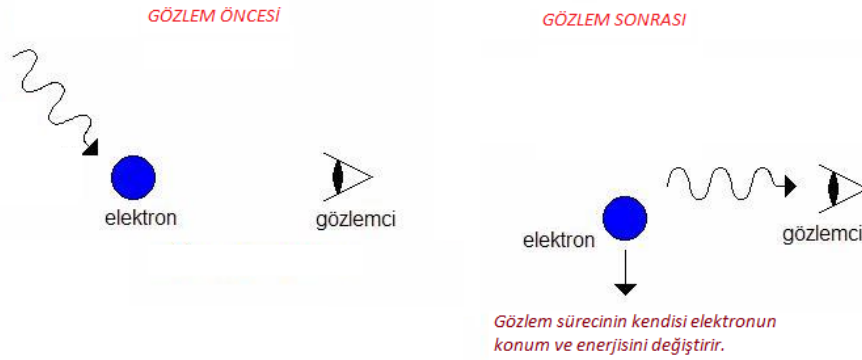
Bir gitar teli nasıl belli frekanslarda titreşiyorsa atomun çevresinde dolanan elektronunda, de Broglie dalgası, sadece belli dalga boylarına sahip olmalıydı. Bu çeşit bir dalga 1913 yılında Bohr'un hidrojen atomundaki elektronların enerji seviyelerini bulduğunda yaptığı varsayımları açıklıyordu. Ayrıca makroskobik boyuttaki cisimlerin momentumları çok daha büyük olduğundan, de Broglie dalga boyları ölçülemeyecek kadar küçüktür.

1925 de Werner HEISENBERG kuantum mekaniğinin vazgeçilmez bir ilkesi olan belirsizlik ilkesini ortaya koydu. Belirsizlik ilkesi bir parçacığın bazı farklı özelliklerinin birlikte belirlenemeyeceğini söyler. Örneğin, bir parçacığa ait momentum ve konum aynı anda ölçülemez. Kuantum mekaniğine göre, parçacığın bu iki özelliğindeki belirsizlikleri çarpımı en az planck sabiti, $h=6,626.10^{-34}$ J.s kadardır.

$$\Delta x . \Delta P = h \quad (1.4)$$

Denklem (1.4) e göre konumu belli bir anda kesin olarak bilinen bir parçacığın momentumu sonsuz belirsizliktedir. Bu yüzden parçacık kısa sürede o noktadan ayrılır. Benzer şekilde momentumu kesin olarak bilinen bir parçacığın konumu sonsuz belirsizliktedir. Doğada rastlanan parçacıkların bulunduğu kuantum durumlarında parçacıkların hem konum hem de momentumu bir miktar belirsiz olmak zorundadır. Werner Heisenberg, mikroskop örneğini bu ilkeyi açıklamak için geliştirdi. Mikroskobik bir parçacığın yerini "görerek" ölçmeye çalıştığımızı düşünün. Böyle bir ölçümde parçacığın üzerine ışık göndermek, dolayısıyla parçacıkla ışığı etkileştirmek bile parçacığın konumunu tam olarak belirlemeye yetmez. Ölçümde en azından kullanılan ışığın dalga boyu kadar bir hata yapılır. Bunun yanı sıra ışık parçacıkla etkileştiği için ölçüm, parçacığın hızında bir

değişmeye de neden olur. Işık parçacığına çarpıp yansıdığı sırada en az bir fotonun momentumu parçacığına aktarılır.



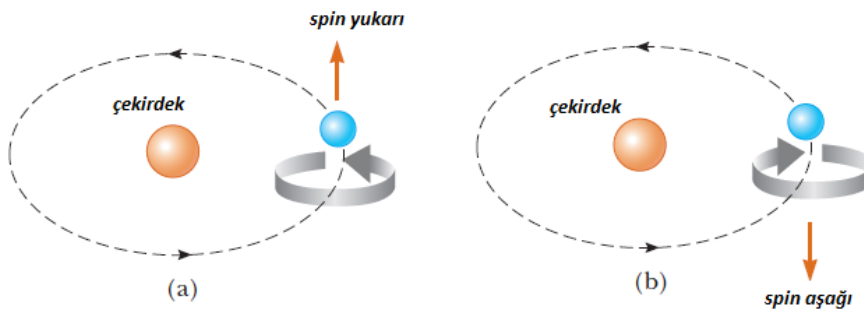
Şekil 1.3 Gözlem, sistemden alınacak verileri doğrudan etkiler.

Parçacığın momentumu ölçümden önce tam olarak bilinse bile, konumun ölçülmesi parçacığın momentumunu h/λ kadar değiştirir. Parçacığın yerini daha iyi belirlemek üzere daha kısa dalga boylu ışık kullansak bile, ölçümümüz momentumdaki belirsizliği arttıracak, ama her durumda, ikisinin belirsizlikleri çarpımı en az h kadar olacaktır. Bu anlamda atomda elektronların yörüngelerinden bahsetmek yerine orbital kavramı çok daha anlamlı olacaktır.

Yine 1925 yılında, Wolfgang PAULI bir atomda iki elektronun aynı enerji seviyesinde birlikte bulunamayacaklarını ifade eden prensibini ortaya koymuştur. Böylelikle;

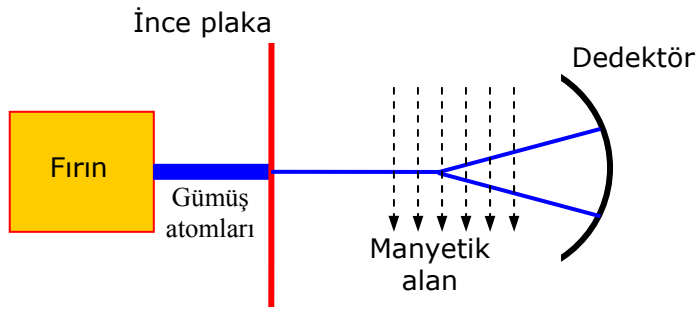
- n Baş kuantum sayısı,
- l Orbital kuantum sayısı,
- m Manyetik kuantum sayısı

dışında dördüncü bir kuantum sayısı olan, s spin kuantum sayısı Pauli tarafından gerekli görülmüştür. Spin elektronun kendi ekseninde dönüşü ile ortaya çıkan bir kavramdır.



Şekil 1.4 Elektronun spin hareketi.

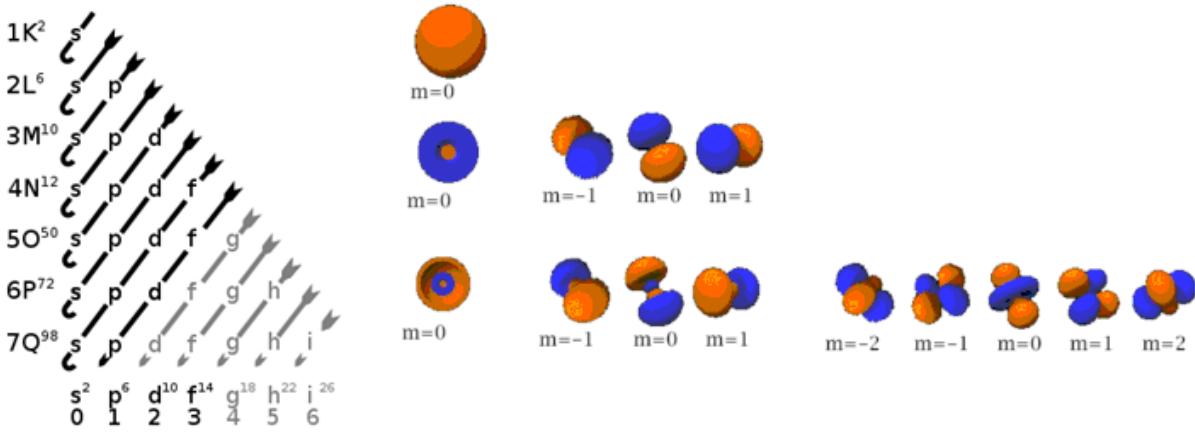
Elektronun kendi ekseninde iki farklı yönden biride dönmesi gerektirdiğinden, spin dönüş yönüne göre, $s = -1/2$ ve $s = +1/2$ diye iki farklı değer alır. Ayrıca spin kuantum sayısı, atom spektrumlarında gözlenen çizgilerin ince yapısını açıklamak için ortaya çıkmıştır. Bu öneri için deneysel kanıt, O. Stern ve W. Gerlack tarafından verilmiş deneyde, gümüş metal buharı ince bir demet halinde güçlü bir manyetik alandan geçirilmiştir. Manyetik alandan geçen gümüş atomlarının iki yöne ayrıldıkları görülmüştür. Nedeniyse, gümüş atomunda en dış yörüngede bir tek elektron olması ve her bir gümüş atomunda spinin farklı olabileceğiydi.



ŞEKİL 1.5 Stern Gerlach deneyi.

Dönen yüklü tanecik manyetik özellik gösterdiğinden elektron küçük bir mıknatıs gibi davranır ve elektronun iki türlü dönme hareketi zıt yönlenmiş iki mıknatıs oluşturur. O halde spinleri zıt olan elektronları taşıyan atomlar zıt iki yöne saparlar. Sonuç olarak dört kuantum sayısı da bilinen bir elektronun bulunduğu yörünge ve dönme yönü belirlenebilir. Bu noktada, W. Pauli nin ortaya koyduğu Pauli dışarlama ilkesi gereğince elektronların kuantum sayılarına ilişkin bir kısıtlama vardır. Aynı atomda herhangi iki elektronun tüm kuantum sayıları aynı olamaz, en az biri farklı olması gerekir.

Tüm bu bilgiler ışığında Bohr atom modelinde önerilen; K, L, M, N enerji seviyelerinin yanında her seviyenin, alt enerji seviyeleri olan s, p, d, f tanımlanır. Bu alt yörüngelerden elektronun en büyük olasılıkla bulunacağı yörüngemsiye orbital adını vermek doğru olacaktır. [6,12,9]



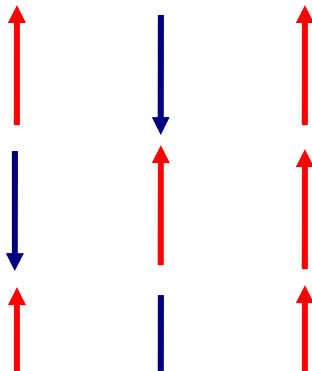
Şekil 1.6 Atomik orbital şekilleri ve yörüngelere elektron dizilişi.

1.2. ISING MODEL

Elektron spini, atom ve moleküller için, manyetik özelliklerin açıklanmasına yarar. Özellikle katılarda sıkı bağlı yapısı dolayısıyla elektron denizi denilebilecek kadar çok elektron, tümüyle spin topluluğu gibi davranır. Tekrar başa dönecek olursak maddeye ait manyetik özellikleri klasik fizik açıklamakta yetersiz kalmaktadır.

Bir spin topluluğundaki spinlerin pek çoğu aynı doğrultuya yöneldiğinde ferromanyetizma ortaya çıkar. Bunun sonucu olarak elde edilen ürün, toplam manyetik moment, makroskobik ölçüde büyüktür. Ferromanyetizmada araştırma konusu olan asıl mesele olarak;

- Spinler arasındaki etkileşimin madde içerisinde bir uçtan diğerine nasıl gerçekleştiği,
- Yüksek sıcaklıklarda sistemlerin manyetik özelliklerini kayb ettiklerini bilsek bile sıcaklığın manyetik özellik üzerindeki etkisinin nedenini ve nasıl gerçekleştiğini, bilmek isteriz. Ferromanyetik özelliği ile tanınan demir, bu özelliğini yaklaşık 1000 K derece sıcaklık üzerinde kaybeder.



Şekil 1.7 de doğal bir mıknatıs (ferromagnet) modeli gösterilmiştir. Şekilde bir magnetik moment topluluğu görülüyor. Her bir magnetik moment oklarla;

$$\uparrow \text{ Spin yukarı } +\frac{1}{2} \qquad \downarrow \text{ Spin aşağı } -\frac{1}{2}$$

belirtilmiştir. Daha da basitleştirmek üzere spinleri düzenli bir katede üzerinde varsayabiliriz. Spin bir kuantum mekaniği olayı olmasından dolayı varsayımımız bir anlamda kuantum kuralları içinde olmalıdır. Spinlerin tam bir kuantum mekaniği modeli davranışı gösterebilmesi için, spin açısai momentumunu simülasyonlarımızda kuantum kurallarını uygulayabileceğimiz şeylere ihtiyaç duyarız. Devamında ise, öylesine zor bir hesaplama trafiği oluşur ki buna yer verilmeyecektir. Bunun yerine burada birkaç basitleştirme yapacağız. Bu alanda çok fazla iş yapılmasına rağmen her ne kadar basitleştirme yapsakta modelimiz fizikteki manyetizma konusunun tüm gerçeklerini kapsar.

Her bir spin ya +z ya da -z yi göstereceğini varsayalım. Yani +z yukarı spin, -z aşağı spin demek. Başka bir yönlendirmeye izin verilmiyor. Bu yüzden sistemdeki i. spin yalnızca iki değerden sadece birini alabilir. Uygun olsun diye biz bu değerleri $s_i = \pm 1$ diye ya +1 yada -1 alıyoruz. Her bir spin diğer spinlerle kafes içinde etkileşim kurar. Artık bu spin topluluğu ISING SPINLERI olarak adlandırılır. Doğal bir mıknatısta bu etkileşim spin çiftleri arasında paralel hiza yapacaktır. Gerçek bir manyetik materyalde en geniş etkileşim, birbirine en yakın komşu spinler arasında olacaktır ve bu etkileşim iki spinin arasının gitgide açılmasıyla aniden düşecektir. Bütün bunlarla en basit ising model şunu varsayar, etkileşim sadece en yakın komşular arasında ve sistemin enerjisi,

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j \quad (1.5)$$

diye hesaplanır.

i ve j; En yakın komşu spinler,

J; Yer değiştirme sabiti,

s_i ; i. spin deęişkeni,

s_j ; j. spin deęişkeni,

Spin sistemini özel bir durumda düşünmek teoremi anlamaya yardımcı olacaktır. Her bir spinin özel düzenlenmiş yerleri var. Öyleyse (1.5) deki eşitlik parçalanmamış tam sistemin özel bir halidir. (1.5) Enerji fonksiyonu ve yukarıda verilen ising spin tanımı birlikte ISING modelini tanımlamaya hizmet eder. Ising modeli ilk olarak Wilhelm Lenzin aklına geldi ve 1920 lerde Ernst Ising'e tez konusu olarak önermiştir. Ising modelin nicel (sayısal) davranışlarında ilerlemeden önce ilk olarak nitel davranışlara bakacağız, sonra istatistiksel mekanięi gözden geçireceğiz. (1.5) Enerji denklemine göre, iki komşu spin aynı yönlü ise etkileşim enerjileri $-J$, iki komşu spin zıt yönlü ise etkileşim enerjileri $+J$ dir. J pozitif olarak varsayıldığından komşu spinler paralel hizalı olarak etkileşip dururlar.

Eğer her spin kendi komşularına paralel olursa kafes içindeki her bir spin tüm diğer spinlere de paralel olacaktır. Böylelikle manyetik momentlerin tümünün hizalanması, bizi sıfır olmayan bir manyetik moment toplamına götürecektir. Bunun sonucu olarak da doğal bir mıknatıs (ferromagnet) elde edilir. Manyetik alan yokken manyetik momenti olan bir sistem, Anlık Mıknatıslanma (Spontaneous Magnetization) olarak isimlendirilir. Tüm spinler birbirine paralel olsa ve bu durumdayken de spin sisteminin enerjisi en düşük olsa bunun nedeni olarak sıcaklığın düzeni bozan etkisini düşünmeliyiz. Spin sisteminin T sıcaklığında bir ısı banyosunda dengede olduğunu varsayabiliriz. Sonuçta da izlenen davranış kanonik topluluk olarak algılanmaktadır.

Metodlardan biri şunu gözlemektir, zaman ilerledikçe farklı spinler ileri geri (flip back and forth) takla atarlar. Sistem bu taklalara uyarak farklı spin konfigürasyonlarına doğru taşınacaktır. Deneysel bir ölçümde gözlemlenen davranış, farklı muhtemel spin konfigürasyonlarında ne kadar zaman harcayacağına bağlı olacaktır. İstatistik mekanięin temel sonucu şudur ki, bir ısı banyosuyla denge halinde olan sistem için herhangi bir özel haldeki sistemin bulunma olasılığı Boltzman faktörü ile orantılıdır.

$$P_\alpha \propto e^{-\frac{E_\alpha}{k_B T}} \quad (1.6)$$

Burada;

E_α : α halinin enerjisi,

k_B : Boltzman sabiti,

P_α : Sistemin α halinde bulunma olasılığıdır.

Bu hallerin her biri spinlerin özel bir konfigürasyonudur. Bu konfigürasyonlar SİSTEMİN MİKROHALİ (microstate of the system) diye isimlendirebiliriz. Eğer içinde N tane ising spini olan bir kafesimiz var ise her spin sadece 2 halde bulunacağından, 2^N tane farklı muhtemel mikrohalleri olacaktır. Sisteme tüm olarak baktığımızda biz en çok şununla ilgileneceğiz. N çok büyük olduğundan mikrohal sayısı da çok büyüktür. Böylece N spinli sistemler ve sonuç olarak da mikrohalleri çok büyük olacaktır. İşte bu, problemi çözülmesi zor hale getirecektir. Ama aynı zamanda da bazı enteresan davranışlara da sebep olacaktır. Mikroskobik açıdan bakıldığında bu ısı banyosunda dengede olan spin sistemlerinin etkileşimidir. Isı banyosu sistemin bir mikrohalden diğer bir mikrohale geçişine sebep olmaktadır. Bireysel spinler +1 den -1 ya da -1 den +1 e takla atarlar. Bu arada ya ısı banyosundan enerji kazanırlar ya da ısı banyosuna enerji kaybederler. Toplam manyetik moment gibi miktarın makroskobik ölçümü, etkin olarak birçok mikrohalin üzerinde ortasını bulur. Öyle ki ölçüm boyunca sistem ziyaret eder. Makroskobik davranışı hesaplamak yerine burada P_α , çeşitli mikrohallerde sistemin bulunma olasılıklarını hesaplama ihtiyacı duyarız. Örneğin bir mikrohalin manyetik momenti M_α , özel haldeki tüm spinler için geçerli olan s_j değerlerinin toplamıdır. Sistemin ölçülen mıknatıslanması;

$$M = \sum_{\alpha} M_{\alpha} P_{\alpha} \quad (1.7)$$

ki α mikrohalinde spin yönlerine denk gelen bu toplamda, spin değişkenlerinin (s_j nin) sayısal değerleriyle $M_{\alpha} = \sum s_j$ dir. Benzer şekilde diğer özellikleri de P_{α} olasılığı ile açıklanabilir.

Tüm bunlar istatistik mekanikten tanıdık gelecektir. Hesaplama mikrohallerin çok fazla sayıda olmasından dolayı zor olacaktır. Biz burada N nin, spin sayısının sonsuz olduğu sistemleri inceliyor olacağız. Bu yüzden durum sayısı gerçektende çok fazla olacaktır. Analitik bakış bu sistemlere ilişkin çok korku verecek şekilde ispatlar yapmış ve sadece birkaç bağıl sonuç elde etmiştir. Bu da, problemin çözümü için simülasyonları oldukça cazip kılmaktadır. [6,7,11]

I.3 POTTS MODEL

Gerçekte spinler düzlemde n kadar yönelim gösterebilirler. 1952 de Ising modelin daha genel bir ifadesi olarak ortaya konulan Potts modeli inceleyelim. Orjinalinde problem Domb tarafından Ising modelde olduğu gibi paralel ve anti paralel olarak etkileşen sistem olarak varsayılmıştır. Yaklaşık genelleştirme olarak düzlemde mümkün n sayıda eşit aralıklı açı için yönelim düşünülebilir.

$$\theta_n = 2\pi \frac{n}{q}, \quad (n=1, 2, \dots, q-1) \quad (1.8)$$

En genel form ise en yakın komşu spinlerin komşu açılardaki etkileşimine bağlı olduğudur. Buna ait hamiltonien ise şöyle yazılabilir.

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J(\theta_{ij}) \quad (1.9)$$

Denklemden $J(\theta)$ ve $\theta_{ij} = \theta_i - \theta_j$ ise 2π periyotlu i ve j komşu spinleri arasındaki etkileşim fonksiyonudur. Burada $J(\theta_{ij})$ fonksiyonu;

$$J(\theta) = -\epsilon_1 \cos\theta \quad (1.10)$$

diye seçilebilir. Burada Potts n=2, 3, 4 alarak kare kafeste modelin kritik noktasını belirleyebilmiştir hatta daha da ileri taşıyarak makalesinde tüm q lar için kritik nokta civarında,

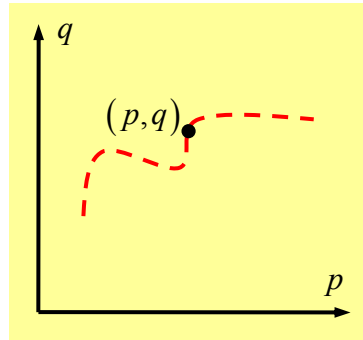
$$J(\theta_{ij}) = \epsilon_2 \delta_{kr}(n_i, n_j) \quad (1.11)$$

diye ifade etmiştir. Ancak ne olursa olsun konunun ising modelini temel aldığını ve aralarında açılarının değiştiği komşu spinler arasındaki etkileşimleri inceler. İsing model spinler arasındaki iki farklı açı için inceleme yaparken, potts model aradaki bu kısıtlamayı çok daha serbest kılar. [13,8]

II. İSTATİSTİK MEKANİKTE TEMEL KAVRAMLAR

II.1. FAZ UZAYI

Bir sistemi oluşturan parçacıkların her birinin konum, momentum veya kuantum sayıları verilerek belirlenen, her farklı durumuna *mikro durum* denir. Klasik mekanikte bir parçacığın $H(q,p)$ hamiltonieni verilmişse, hamilton denklemleri kullanılarak konum $q(t)$ ve momentum $p(t)$ çözümlerine ulaşabiliriz. Eksenleri q konum ve p momentum olan iki boyutlu uzaya *faz uzayı* denir.

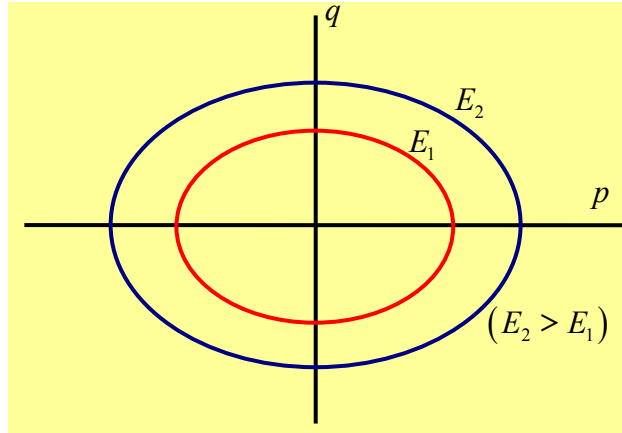


Şekil 2.1 Faz uzayı

Şekil 2.1 de bir parçacığı verilen bir t anında mikro durumu faz uzayında $p(t)$ ve $q(t)$ değerlerine denk gelen bir noktadır. Zaman değiştikçe parçacık farklı bir mikro duruma denk geleceğinden parçacık faz uzayında hareket edecektir. Bu durum tek boyutta harmonik salıncı için incelenebilir.

$$H(q,p)=E=\frac{p^2}{2m}+\frac{mw^2q^2}{2} \quad (2.1)$$

Harmonik salıncı faz uzayında eliptik yörünge çizerken E değerine bağlı olarak eksen uzunlukları değişir.



Şekil 2.2 Tek boyutta harmonik osilatörün faz uzayındaki yörüngesi

Klasik sistemlerde mikro durumların sayısına bakıldığında, ciddi bir sorunla karşılaşırız. Parçacığın konum ve momentumu sürekli değerler alabildiğinden faz uzayında hareketin bulunduğu bölgedeki mikro durumların sayısı sonsuz olur.

$$E_1 \leq H(p,q) \leq E_2 \quad (2.2)$$

Örneğin parçacığın enerjisi E_1 ile E_2 arasında değişirken iki elips arasında sonsuz sayıda nokta vardır. Mikro durum sayısı sonsuz olduğundaysa istatistiksel inceleme yapmak olanak dışıdır. Bu durumdan sıyrılmak için kuantum mekanikteki belirsizlik ilkesi kullanılır. Belirsizlik ilkesine göre, konum ve momentumdaki belirsizliklerin çarpımı en az Planck sabiti

kadar olmalıdır. ($\Delta p \Delta q \geq h$) Bu durumda faz uzayında diferansiyel yüzey elemanı $dp.dq$, Planck sabitinden küçükse ölçülemeyecek ve fiziksel bir anlamı olmayacaktır. Buna göre, bir mikro durumun kapsadığı alan h olup, $dp.dq$ yüzey elemanı içindeki mikro durum sayısı,

$$d\Omega = \frac{dpdq}{h} \quad (2.3)$$

dır. Böylelikle parçacığın enerjisi $[E_1, E_2]$ aralığında değişiyorsa, toplam mikro durum sayısı,

$$\Omega = \int_{E_1 \leq H(p,q) \leq E_2} \frac{dpdq}{h} \quad (2.4)$$

dır. Böylelikle toplam mikro durum sayısı sonlu değerler alabilecektir. [2,4,5,7,8,10]

II.1.1 N PARÇACIK İÇİN FAZ UZAYI

Faz uzayı kavramında verilen mikro durum sayısı (2.4) denklemini, üç boyutlu uzay ve N parçacık için kullanabiliriz. Her bir parçacığın üç adet konum, üç adet momentum olmak üzere altı koordinatı vardır.

$$(p_1, p_2, p_3, q_1, q_2, q_3) \quad (2.5)$$

Böylelikle N parçacığa ait $6N$ adet kanonik koordinat vardır.

$$\underbrace{p_1, p_2, p_3, q_1, q_2, q_3}_{1.} \cdots \underbrace{p_{3N-2}, p_{3N-1}, p_{3N}, q_{3N-2}, q_{3N-1}, q_{3N}}_{N.} \quad (2.6)$$

Tüm bunları hamiltoniende yerine koyarak,

$$H(q, p, t) = \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m} + V(q_1, q_2, \dots, q_{3N}, t) \quad (2.7)$$

yazabiliriz. Parçacığın faz uzayındaki hareketini daha net anlayabilmek içinse Hamilton denklemleri kullanılmalıdır.

$$\left. \begin{aligned} \dot{q}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial q_i} \end{aligned} \right\} \leftrightarrow (i=1, 2, \dots, 3N) \quad (2.8)$$

Sonuç olarak N boyutlu uzayda, $[E_1, E_2]$ enerji aralığında mikro durumların toplam sayısını veren bağıntı şöyle yazılabilir. [2,4,5,7,8,10]

$$\Omega = \int_{E_1 \leq H(p,q) \leq E_2} \frac{dp_1 dq_1 \dots dp_{3N} dq_{3N}}{h^{3N}} \quad (2.9)$$

II.1.2 İSTATİSTİK KÜMELER

Bir sistemdeki mikroskobik parametreler nasıl hesaplanır? İlke olarak, sistemin mikro durumlarının zaman içinde nasıl geliştiğini bilmek gerekir. Örneğin basıncı hesaplamak gerekiyorsa, moleküllerin sistemin duvarlarıyla çarpışması esnasında birim yüzeye etkileyen ortalama kuvveti bilmeliyiz. Bunu da zaman ortalaması üzerinden yapmak gerekir.

$$\langle F \rangle_{zaman} = \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} F[p(t), q(t)] dt \quad (2.10)$$

(2.10) denkleminde, işlem zaman ortalaması üzerinden alınıyor ve τ zamanı yeterince uzun bir zaman dilimidir. Pratikteyse aksi bir durum söz konusudur. Molekül sayısının çokluğundan dolayı, mikro durumların zaman içindeki değişimlerini anında hesaplamak mümkün değildir. Bunun yerine W. Gibbs tarafından kullanılan istatistik kümeler kavramına dayalı bir yol izlenir.

Bir sistemde aynı mikro durumları sağlayan fakat farklı mikro durumda çok sayıda kopyası çıkarılmış olsun ya da sistemin değişik zaman dilimlerinde fotoğraflarını çekerek yan yana koymuş olalım. Bu sistemler topluluğuna *istatistik küme* adı verilir. Küme elemanlarının her biri, faz uzayında farklı bir noktaya denk gelirken zaman ilerledikçe birbirinden bağımsız farklı yörüngelerde dolaşacaklardır. Örneğin hacmi V, iç enerjisi E ve molekül sayısının aynı olduğu sistemler topluluğuna *mikrokanonik küme* denir. Aynı durum iç enerjisinin sabit olduğu sistemlerde geçerlidir. Diğer taraftan hacmi V, sıcaklığı ve molekül sayısı aynı olan topluluğuna *kanonik küme* denir. Bir ısı banyosu içindeki sistemler bu kümede incelenir.

Faz uzayında (p, q) noktası civarında, mikro durum yoğunluğu $\rho(p, q, t)$ alındığında, $dp dq$ yüzey elemanı içine düşen mikro durum sayısı $\rho(p, q, t) dp dq$ dır. (2.10) denkleminde dönülecek olursa F kuvvetinin küme içinde $t=0$ anında mikro durumlar üzerinden ortalaması şöyle alınır.

$$\langle F \rangle_{küme} = \frac{\int F(p, q) \rho(p, q) dp dq}{\int \rho(p, q) dp dq} \quad (2.11)$$

Burada p ve q ; $3N$ sayıda koordinatı barındırır. [2,4,5,7,8,10]

II.1.3 ERGODİK İLKE VE LİOUVILLE TEOREMİ

Ergodik ilke: dengedeki bir sistemde fiziksel bir A büyüklüğünün zaman ortalaması, aynı sistemi temsil eden küme ortalamaları üzerinden alınan ortalamasına eşittir. Bu ilkenin temel dayanağı $\rho(p, q, t)$ yoğunluk fonksiyonunun zaman içinde değişimini belirleyen *Liouville teoremi*dir. En genel durumda yoğunluk fonksiyonu $\rho(p, q, t)$ şeklinde zamana açık bağımlıdır. Ayrıca faz koordinatları da zamana bağımlı olabilir. Bu fonksiyonun zamana göre türevini alalım.

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial\rho}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial\rho}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial\rho}{\partial t} = \frac{\partial\rho}{\partial p} \dot{p} + \frac{\partial\rho}{\partial q} \dot{q} + \frac{\partial\rho}{\partial t} \quad (2.12)$$

Bu denklemin fiziksel anlamı, $\partial\rho/\partial t$ terimi faz uzayında sabit bir yerdeki yüzey elemanı içinde yoğunluğun zaman içindeki değişimini ifade eder. $\partial\rho/\partial t$ ise, faz uzayında yörüngeyle birlikte hareket eden bir yüzey elemanı içinde yoğunluğun hem konumla ve hem de zamanla değişimini ifade eder. Kısmi türevleri farklı bir biçimde yazmak üzere; $\rho\dot{p}$ ve $\rho\dot{q}$ çarpımlarının sırasıyla p ve q ya göre kısmi türevlerini aldığımızdaysa,

$$\frac{d}{dp}(\rho\dot{p}) = \frac{\partial\rho}{\partial p} \dot{p} + \rho \frac{\partial\dot{p}}{\partial p} \quad (2.13)$$

$$\frac{d}{dq}(\rho\dot{q}) = \frac{\partial\rho}{\partial p} \dot{q} + \rho \frac{\partial\dot{q}}{\partial p} \quad (2.14)$$

elde edilir. İşe yarar biçimde tekrar düzenlendiğinde,

$$\frac{\partial\rho}{\partial p} \dot{p} = \frac{d}{dp}(\rho\dot{p}) - \rho \frac{\partial\dot{p}}{\partial p} \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial q} \dot{q} = \frac{d}{dq}(\rho\dot{q}) - \rho \frac{\partial\dot{q}}{\partial q} \quad (2.16)$$

denklemlerine ulaşılabilir. (2.12) de (2.15) ve (2.16) kullanılarak tekrar yazıldığında,

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{d}{dp}(\rho\dot{p}) + \frac{d}{dq}(\rho\dot{q}) - \rho \left(\frac{\partial\dot{q}}{\partial q} + \frac{\partial\dot{p}}{\partial p} \right) + \frac{\partial\rho}{\partial t} \quad (2.17)$$

elde edilir ki burada parantez içi terimler hamilton denklemleri göz önünde bulundurulduğunda sıfırdır. Böylelikle (2.17) denklemini aşağıdaki formda yazılabilir.

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{d}{dp}(\rho\dot{p}) + \frac{d}{dq}(\rho\dot{q}) + \frac{\partial\rho}{\partial t} \quad (2.18)$$

(2.18) denkleminde \dot{p} ve \dot{q} hız bileşenleri ve türevleri ise diverjans gibi düşünüldüğünde,

$$\frac{d\rho}{dt} = \bar{\nabla}(\rho\dot{q}) + \frac{\partial\rho}{\partial t} \quad (2.19)$$

akışkanlar mekaniğinde sıklıkla karşılaşılan süreklilik denklemi elde edilmiş olur. (2.19) a göre; madde miktarı değişmeyen bir akışkanda herhangi bir hacim elemanındaki yoğunluk zamana göre değişiyorsa ($\partial\rho/\partial t$ terimi), bu hacim elemanından dışarıya ($\bar{\nabla}(\rho\dot{q})$ terimi), bir madde akışı vardır.

Faz uzayındaki durum bundan farksızdır. Kümedeki mikro durumların yani faz uzayındaki noktaların sayısı sabittir, sadece yerel yoğunluk değişebilir. Demek ki, faz uzayında süreklilik denklemi, Liouville teoreminin bahsettiği üzere,

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = 0 \quad (2.20)$$

dır ve bu ifade *Liouville teoremi* olarak bilinir. Anlamıysa; makroskobik sistemimiz dengede değilse, yoğunluk fonksiyonu $\rho(p, q, t)$ diye zamana açık bağımlıdır. Denge durumuna ulaşıldığıdaysa, faz uzayının herhangi bir noktasında faz uzayının herhangi bir bölgesinde faz uzayının herhangi bir bölgesinde mikro durum yoğunluğu sabit kalır. Daha doğrusu gerçek sistem t zamanıyla değiştiğinde faz uzayında başka bir (p, q) nokta civarına yer değiştirmiş olsak da Liouville teoremine göre, bu noktada da durum yoğunluğunun aynı olduğunu ifade eder. Bu durumda, belli bir alandaki yoğunluk dağılımını kullanarak ortalama almak mümkündür. İşte bu yüzden, zaman ortalaması yerine küme ortalaması alabiliriz. Küme ortalaması alabilmek için sistemin, faz uzayındaki her noktaya uğraması gerekmez. Tekrar ergotik ilkeye geri dönersek baş bir ifadeyle; Dengedeki bir sistemin zaman içindeki gelişimi, yörüngesi faz uzayındaki her noktanın yeterince yakınından geçecek şekilde gerçekleşir.

İstatistik mekanikte yoğunluk fonksiyonu olarak mikrokanonik küme için,

$$\rho(p, q) = \text{sabit} \quad (2.21)$$

yazılabiliyorken Kanonik küme içinse,

$$\rho(p, q) \propto e^{-\frac{E}{k_B T}} \quad (2.22)$$

olduğunu söyler. [2,4,5,7,8,10]

II.2 MİKROKANONİK KÜME

İstatistik mekanik, temel varsayımlar ve tanımlar üzerine kurulmuştur. Temel varsayım mikrokanojik küme çerçevesinde ifade edilir. İncelenen sistemin makro durumu; E iç enerjisi, V hacmi ve N toplam parçacık sayısı verilerek belirtilmişse bu sistemin mikro durumları bir mikrokanojik küme oluşturur. İç enerji ve parçacık sayısı burada sabit tutulduğu için, sistem ısı olarak dengede, çevresiyle enerji veya parçacık alışverişi yapamaz. Bu anlamda, yalıtılmış ve termodinamik dengede bulunan bir sistemin tüm mikro durumlarında bulunma olasılıkları aynıdır. Faz uzayı cinsinden ifade edilecek olursa, mikrokanojik kümede bir sistemin mikro durum yoğunluğu faz uzayının her bölgesinde aynı sabit değerdedir. (2.21) denklemine göre, mikrokanojik kümedeki toplam durum yoğunluğu sabit olması gerektiğinden, mikrokanojik bir kümede toplam mikro durum sayısı,

$$\Omega = \int \frac{dp_1 dq_1 \dots dp_{3N} dq_{3N}}{h^{3N}} \rho(p, q) \quad (2.23)$$

şeklinde hesaplanabilir.

İstatistik mekanik toplam mikro durum sayısı ile bağlantılı yeni bir entropi tanımı ortaya koyar.

$$S = k_B \ln \Omega \quad (2.24)$$

Orantı katsayısı, *Boltzman sabiti*, ideal gaz sabiti ve avogadro sayısı cinsinden bir orandır.

$$k_B = \frac{R}{N_A} = 1,381 \cdot 10^{-23} \text{ J / K}$$

Dikkat edilmesi önerilen iki önemli nokta vardır.

1. Bu entropi yaygın türden bir değişkendir. Anlamıysa; A ve B gibi iki sistem için toplam mikro durum sayısı $\Omega_{AB} = \Omega_A \Omega_B$ iken entropi $S_{AB} = S_A + S_B$ olduğudur.

2. Bu entropi, termodinamiğin ikinci yasasıyla uyumludur. Bunun anlamıysa, (E_1, V_1, N_1) ve (E_2, V_2, N_2) parametreleriyle belirlenmiş iki mikrokanoik kümenin toplamıyla elde edilmiş kümenin mikrodurum sayısı, $\Omega(E, V, N) \geq \Omega_1(E_1, V_1, N_1)\Omega_2(E_2, V_2, N_2)$ iken sistemin entropisi, $S \geq S_1 + S_2$ dir.

Entropinin biliniyor olması sıcaklık ve basınç gibi deęerlerinde hesaplanmasına olanak saęlar. Termodinamiğin birinci kanununa göre, $dE = TdS - PdV$ den entropi çekildiğinde;

$$dS = \frac{1}{T}dE + \frac{P}{T}dV \quad (2.25)$$

olup kısmi türevler alındığında,

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_V \quad \text{ve} \quad \frac{P}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_E \quad (2.26)$$

denklemlerine ulaşılr.

Mikrokanoik küme uygulamalarında yol gösterici olması bakımından dört önemli nokta vardır.

1. İncelenen sistemin mikrodurumları ister klasik, ister kuantum yoluyla belirtilmiş olsun her mikro durumun eşit olasılıkta olduğunu klasik istatistik mekanik söyler. Kuantum istatistik mekanikteyse, her mikro durumda bulunma olasılığı fermion ve bozon türü parçacıklara göre farklılık gösterir.
2. Temel varsayım yalıtılmış yani mikrokanoik küme çerçevesinde yapılır. Çevresinden ısı alan veya madde alışverişi fiziksel sistemler kanonik sistemler olup ek varsayım yapmak gerekmez.
3. Temel varsayım termodinamik dengede olan sistemler için yapılmıştır. Dengede olmayan sistemler içinse termodinamiğin ikinci yasası kullanılarak dengeye ulaşma kriterleri aranır.
4. Mikrokanoik kümede çalışmak sistemin enerji alışverişine izin vermediğinden zordur. Bununla birlikte matematiksel zorlukları beraberinde getirir. Yinede, teorik açıdan önemli bir temel noktadır. [2,4,5,7,8,10]

II.2.1 MİKROKANONİK KÜMEDE İDEAL TEK ATOMLU GAZ

V hacimli bir kaptaki N molekülden oluşan ideal gaz için inceleme yapıyoruz. Moleküller arası etkileşmeyi ihmal ettiğimizden her bir parçacık serbest parçacık gibi davranır.

$$E = \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m} \quad (2.27)$$

(2.27) de her bir parçacık üç momentum bileşeninden oluştuğundan (2.27) denklemini 3N terimden oluşur. Buradaki toplam mikro durum sayısı,

$$\Omega = \int \dots \int_{E=\sum_i p_i^2/2m} \frac{dp_1 \dots dp_{3N} dq_1 \dots dq_{3N}}{h^{3N}} \quad (2.28)$$

diye yazılmalıdır. N sayıda molekülün kendi aralarında etkileşimini tüm permütasyon sayısına bölerek moleküllerin ayırd edilmez olduğunu hesaba dahil etmiş oluruz.

$$\Omega = \frac{1}{N! h^{3N}} \int \dots \int_{E=\sum_i p_i^2/2m} dp_1 \dots dp_{3N} dq_1 \dots dq_{3N} \quad (2.29)$$

(2.29) da, $V = \int dq_1 dq_2 dq_3$ diye N parçacık için eşit hacimler düşünüldüğünde integral bir nebze hafifler.

$$\Omega = \frac{V^N}{N! h^{3N}} \int \dots \int_{E=\sum_i p_i^2/2m} dp_1 \dots dp_{3N} \quad (2.30)$$

İşlemin nasıl alındığından çok elde edilecekler önemlidir. Bu yüzden burada sadece sonuçla yetinebiliriz.

$$\Omega = \left(\frac{V}{h^3} \right)^N \frac{(2\pi m E)^{3N/2}}{(3N/2)!} \quad (2.31)$$

Bu noktada $S = k_B \ln \Omega$ entropi ifadesi kullanılarak,

$$S(E, V, N) = Nk_B \left[\frac{5}{2} + \ln \left\{ \frac{V}{h^3 N} \left(\frac{4\pi m E}{3N} \right)^{3/2} \right\} \right] \quad (2.32)$$

tek atomlu ideal gazlar için temel denklem olan Sackur-Tetrode denkleminde ulaşılmış olur. (2.26) denklemleri ve $Nk_B = nR$ eşitliği kullanıldığında ideal gaz denklemi elde edilmiş olur. ($PV = nRT$) [2,4,5,7,8,10]

1.2.2 MİKROKANONİK KÜMEDE KATILARIN ÖZGÜL ISISI ve EİNSTEİN KRİSTALİ

Tüm katıların sabit hacimde özgül ısıları bazı ortak özellikler gösterir. Özgül ısı c_v ;

1. (T büyük) Yüksek sıcaklıkta, $3Nk_B =$ sabit,
2. (T küçük) Düşük sıcaklıkta, $c_v \propto aT + bT^3$

şartlarını barındırır. Düşük sıcaklıklarda aT terimi serbest elektron katkısını, bT^3 terimi ise örgü katkısını ifade eder. Katı bir kristali, kübik bir kristalin köşelerine yerleştirilmiş N tane atom olarak ele almış olalım. Atomların her biri üç eksen boyunca titreşim yaparken üç serbestlik derecesi vardır. Varsayılan bu kristali Einstein kristal modelinde incelemek üzere iki varsayım yapmak gerekir.

1. Atomlar arası etkileşim yok, yani toplam enerji salınıcıların enerjisidir.
2. Tüm atomların eksenler boyunca harmonik hareket titreşim frekansları aynıdır.

$$w_{1x} = w_{1y} = w_{1z} = \dots = w_{Nz} = w \quad (2.33)$$

Kuantum mekaniğinde tek boyutlu harmonik salınıcıya ait enerji düzeyleri;

$$\varepsilon = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar w \quad (n=0, 1, \dots \text{ Kuantum sayısı}) \quad (2.34)$$

dir. Kristale ait toplam enerjiyi yazmak için bu enerjiyi $3N$ kere yazmak gerekir.

$$E = \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) \hbar w + \dots + \left(n_{3N} + \frac{1}{2} \right) \hbar w = \sum_{i=1}^{3N} \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \hbar w \quad (2.35)$$

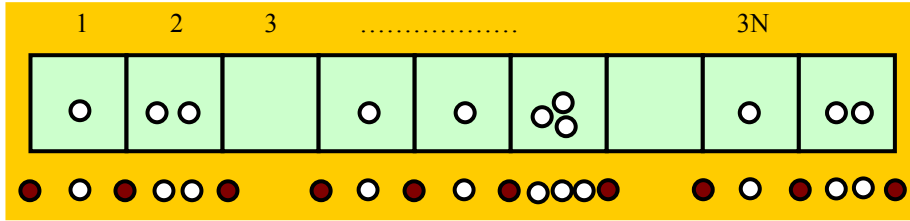
Tekrar düzenlendiğindeyse,

$$E = \underbrace{(n_1 + n_2 + \dots + n_{3N})}_M \hbar\omega + \frac{3N}{2} \hbar\omega = M \hbar\omega + \frac{3N}{2} \hbar\omega \quad (2.36)$$

yazılabilir ki burada M toplam kuantum sayısıdır.

Bir başka açıdan, M kuantum sayısı ve N parçacık sayısı sistemin mikrodurumunu ifade eden (M,N) parametreleridir. M değeri farklı salınıcılara ne kadar farklı biçimde dağılmışsa o kadar sayıda mikro durum olacaktır.

Verilen M ve N sayıları için, M tane enerji kuantumunu 3N serbestlik derecesi arasında kaç farklı şekilde dağıtabiliriz?



Şekil 2.3 Siyah toplar durumları ayıran duvarları, beyaz toplar enerji kuantumları.

Bu sorunun cevabını daha anlaşılır kılmak için Şekil-2.3 incelenebilir. Böylelikle, toplam mikro durum sayısı,

$$\Omega = \frac{(M + 3N - 1)!}{M!(3N - 1)!} \quad (2.37)$$

bulunabilir. (2.24) denklemi kullanıldığında entropiye ulaşılabilir.

$$S = k_B M \left[\left(1 + \frac{3N}{M} \right) \ln \left(1 + \frac{M}{3N} \right) - M \ln \left(\frac{M}{3N} \right) \right] \quad (2.38)$$

(2.36) denklemi (2.38) denklemi içinde kullanılabilir. Ancak (2.26) denklemindeki

$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_V$ ifadesi zincir kuralıyla işleme alınır; $\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{\partial S}{\partial M} \frac{\partial M}{\partial E}$ dir. (2.36) denkleminde

$\frac{\partial M}{\partial E} = \frac{1}{\hbar\omega}$ olup, (2.38) den $\frac{\partial S}{\partial M}$ hesaplanarak birleştirildiğinde;

$\frac{1}{T} = \frac{1}{\hbar\omega} \frac{\partial}{\partial M} \left\{ k_B M \left[\left(1 + \frac{3N}{M} \right) \ln \left(1 + \frac{M}{3N} \right) - M \ln \left(\frac{M}{3N} \right) \right] \right\}$ elde edilir ki düzenlenerek,

$\frac{1}{T} = \frac{k_B}{\hbar\omega} \ln \left(\frac{M+3N}{M} \right)$ bulunabilir ki buradan kuantum sayısı parçacık sayısına bağlı olarak

bulunabilir.

$$M = \frac{3N}{e^{\hbar\omega/k_B} - 1} \quad (2.39)$$

(2.36), (2.39) a göre tekrar düzenlendiğindeyse enerji yalnızca parçacık sayısına bağlı olarak hesaplanabilir.

$$E = 3N \left[\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B} - 1} \right] \quad (2.40)$$

Tüm bu incelemeleri sabit hacimde özgül ısıya ulaşabilmek için yaptık. Son olarak

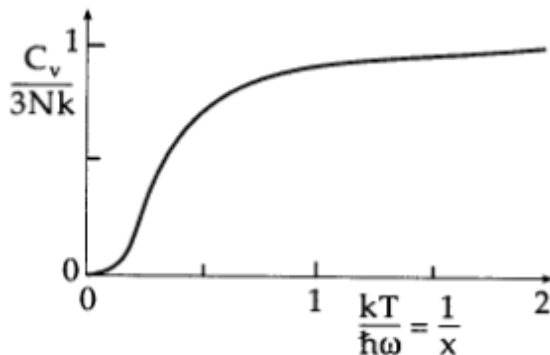
$c_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V$ ile (2.40) işleme alındığında,

$$c_v = \frac{3N(\hbar\omega)^2}{k_B T^2} \frac{e^{\hbar\omega/k_B}}{(e^{\hbar\omega/k_B} - 1)^2} \quad (2.41)$$

elde edilir ki, burada, $\theta_E = \frac{\hbar\omega}{k_B}$ kısaltması yaparak θ_E Einstein sıcaklığı diye

tanımladığımızda sonuç olarak Einstein modelinde bir katının özgül ısısı şu ifadeye eşittir.

$$c_v = 3Nk_B \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2 \frac{e^{\theta_E/T}}{(e^{\theta_E/T} - 1)^2} \quad (2.42)$$



Şekil 2.4 (2.42) denkleminde göre katıların özgül ısısı.

Son olarak (2.42) denkleminin yüksek ve düşük sıcaklık limitlerine bakmalıyız.

I. Yüksek sıcaklıkta: $T \gg \theta_E$ olup bu durumda $\frac{\theta_E}{T} \ll 1$ olur. $x = \frac{\theta_E}{T}$ alınarak $e^x \approx 1 + x$

hatırlanacak olursa, $e^{\frac{\theta_E}{T}} \approx 1 + \frac{\theta_E}{T}$ dir. Böylelikle yüksek sıcaklıkta limit,

$$c_v \approx 3Nk_B \quad (2.43)$$

olup, gerçek katıların yüksek sıcaklık limiti böyledir. (2.43) Dulong-Petit yasası adıyla bilinir.

II. Düşük sıcaklıkta: $T \ll \theta_E$ olup bu durumda, $x = \frac{\theta_E}{T} \gg 1$ dir. Bu şart (2.42) denkleminde

üssel fonksiyonu çok büyük olup, paydada 1 ihmal edilebilir. $e^{\theta_E/T} - 1 \approx e^{\theta_E/T}$ diye hesaplandığında,

$$c_v \approx 3Nk_B \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2 e^{-\theta_E/T} \quad (2.44)$$

bulunur. Ancak (2.44) deneyle bağdaşmaz. Gerçek katıların özgül ısıları $c_v \approx aT + bT^3$

şeklinde sifıra gitmelidir. Yüksek sıcaklık limiti Einstein kristal modelindeki aksaklığı ifade eder. Bunun nedeni, Einstein kristal modeli atomlar arası etkileşmeyi ve serbest elektronları ihmal eder. [2,4,5,7,8,10]

II.2.3 MİKROKANONİK KÜMEDE PARAMANYETİZMA

Ferromanyetik; demir, nikel, kobalt gibi elementlerin dışında kalan diğer tüm elementlerin kalıcı mıknatıslığı olmamasına karşın dış manyetik alanda mıknatıslanırlar. dış manyetik alanında böyle bir maddede oluşacak M magnetizasyonu uygulanan alanla orantılıdır. Orantı katsayısı χ manyetik duygunluk adını alır.

$$M = \chi H \quad (2.45)$$

Paramanyetizma sıcaklık ile manyetik özelliği şu şekilde özetler.

1. Yüksek sıcaklıkta, mıknatıslanma özelliği kalmaz. ($T \rightarrow \infty \Rightarrow M \rightarrow 0$)
2. Düşük sıcaklıklarda mıknatıslanma sabit kalır.
3. Diğer sıcaklıklarda mıknatıslanma sıcaklıkla ters orantılıdır. ($M \propto 1/T$)

Paramanyetizma atomdaki elektron spininden kaynaklanır. Uygulanan dış manyetik alanada spinler ya aynı yönlü veya zıt yönlü olarak dengede kalır.

Her elektron manyetik momenti $\vec{\mu}$ olan bir manyetik dipole sahiptir. Buna karşılık bir $\vec{\mu}$ manyetik dipolün dış \vec{H} manyetik alanındaki enerjisi,

$$\varepsilon = -\vec{\mu}\vec{H} \quad (2.46)$$

olup, spin ve manyetik alanın aynı yada zıt yönelimiyle farklı farklı hesaplanır.

1. Spin ve manyetik alan aynı yönlüyse enerji, $\varepsilon = -\mu H$
2. Spin ve manyetik alan zıt yönlüyse enerji, $\varepsilon = \mu H$ dir.

Her bir spini 1/2 alıp, N sayıda manyetik dipol manyetik alanda bulunurken;

- n tanesi alanla aynı yöne (+ yönde),
- Kalan N-n tanesi alana zıt yönde,

yönelmiş olsun. Bu durumda N tane dipolün enerjisi (2.46) kullanılarak,

$E = n(-\mu H) + (N - n)\mu H$ yazılıp düzenlendiğinde;

$$E = (N - 2n)\mu H \quad (2.47)$$

bulunur.

Magnetizasyon, birim hacimdeki net manyetik dipol moment diye tanımlandığından, sistemin manyetik dipol momentini, $M = \frac{n\mu + (N-n)(-\mu)}{V}$ olup işlem yapıldığında;

$$M = (2n - N) \frac{\mu}{V} \quad (2.48)$$

bulunabilir. Son denklemlerle (E,V,N) değerleri sabitken, bilinen bu değerlerle M magnetizasyonunu belirlemek mümkündür.

Bunların yanında problemde, toplam mikro durum sayısını bulmak üzere, spinlerin kaç farklı konfigürasyonu olduğunu bulmalıyız. Bir doğru boyunca N adet dipolün, pozitif veya negatif yönde mümkün sıralanış sayısı N! dir. Pozitif yönde ve negatif yöndeki dipollerin kendi aralarındaki permütasyonları yeni bir mikro durum olmayacağından N!, sayısı n!(N-n)! e bölünmelidir. Böylelikle toplam mikro durum sayısı, aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$\Omega = \frac{N!}{n!(N-n)!} \quad (2.49)$$

Mikro durum sayısı belirlendiğinden entropiyi $S = k_B \ln \Omega$ ifadesini kullanılarak hesaplanabiliriz. Düzenlerken, Stirling $\ln N! = N \ln N - N$ formülünü kullanabiliriz.

$$S = k_B [N \ln N - N - (n \ln n - n) - (N-n) \ln (N-n) + (N-n)] \quad (2.50)$$

$$(2.26) \text{ dan ise sıcaklığa ulaşabiliriz. Bu amaçla, } \frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_V = \left(\frac{\partial S}{\partial n} \right)_V \frac{\partial n}{\partial E}$$

yazdığımızda bunun çözümü için n ile E arasındaki ilişkiye ihtiyaç duymak üzere, (2.47)

kullanılabilir. $E = (N - 2n) \mu H \Rightarrow n = \frac{N}{2} - \frac{E}{2\mu H}$ işlem yapıldığındaysa, $\frac{\partial n}{\partial E} = \frac{1}{2\mu H}$ ulaşılır

ki buradan, sıcaklığa ulaşmak üzere (2.50) yi kullanabiliriz. Böylelikle,

$$\frac{1}{T} = \frac{k_B}{2\mu H} \ln \left(\frac{n}{N-n} \right) \quad (2.51)$$

yazılabilirken, bir başka şekilde,

$$\frac{n}{N} = \frac{e^{\mu H / k_B T}}{e^{\mu H / k_B T} + e^{-\mu H / k_B T}} \quad (2.52)$$

yazmamız mümkündür. (2.48) denkleminde (2.52) kullanıldığında,

$$M = \frac{\mu N}{V} \frac{e^{\mu H / k_B T} - e^{-\mu H / k_B T}}{e^{\mu H / k_B T} + e^{-\mu H / k_B T}} \text{ elde edilir ki düzenlendiğinde,}$$

$$M = \frac{\mu N}{V} \tanh\left(\frac{\mu H}{k_B T}\right)$$

magnetizasyonun sıcaklık ve dış manyetik alanla olan değişiminin ifadesine ulaşılmış oluruz.

Tekrar başa dönerek bu ifadenin gerçeğiyle uyumunu kontrol etmek mümkündür.

Basitleştirmek amacıyla, $x = \frac{\mu H}{k_B T}$ diye varsayar, $M = \frac{\mu N}{V} \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$ alabiliriz.

I. Düşük sıcaklıkta; $T \rightarrow 0$ ve $x \rightarrow \infty$ olacağından negatif üssel fonksiyon ihmal edilerek;

$$M \rightarrow \frac{\mu N}{V} \text{ alınabilir.}$$

II. Yüksek sıcaklıkta; $T \rightarrow \infty$ ve $x \rightarrow 0$ olup, $e^x \approx 1 + x$ yaklaşımıyla

$$M = \frac{\mu N}{V} \frac{2x}{2} = \frac{\mu^2 N H}{V k_B T} \rightarrow 0 \text{ diye gerçeğiyle uyumlu doğru bir davranış bulunmuş olur.}$$

[2,4,5,7,8,10]

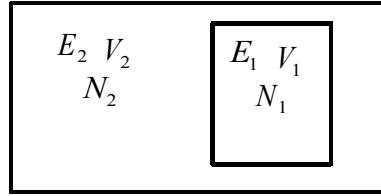
II.3 KANONİK KÜME

II.3.1 BÖLÜŞÜM FONKSİYONU

Mikrokanonik kümede çalışmanın iki önemli zorluğu vardır.

1. Sistemin iç enerjisi E, sabit olmalı,
2. Mikro durum sayısını (E,V,N) ye bağlı olarak hesaplamak her zaman kolay olmayabilir.

Deneyisel açıdan çevresiyle ısı alışverişi yapabilen bir sistemle çalışmak daha kolaydır. Enerji bu durumda değişken olacağından, mikrokanonik kümeye dahil edilemez ve istatistik mekaniğin temel ilkelerini uygulanamaz. Bu amaçla ısı banyosu içinde yeni bir sistem tasarlanır.



Şekil 2.5 Isı banyosu içindeki sistem.

Şekil 2.5 te incelemek istediğimiz 1. sistem, dış ortamdan yalıtılmış 2. ortam – ısı banyosu içindedir. Toplam sistem dış ortamdan tümüyle yalıtılmış ve sistemin ısı banyosuyla enerji alışverişi mümkündür. Her iki sisteme ait enerji, hacim, tanecik sayıları sistemlere ait parametreleri oluşturur. Bu parametreler arasında;

$$E_1 + E_2 = E = \text{sabit} \quad (2.54)$$

$$V_1 + V_2 = V = \text{sabit} \quad (2.55)$$

$$N_1 + N_2 = N = \text{sabit} \quad (2.56)$$

yazılabildiği gibi, toplam sistemi (1+2) mikrokanonik sistemde incelemek mümkündür.

Denge durumunda toplam sistemin mikro durum sayısı her iki alt sistemin mikro durum sayıları çarpımına eşittir. Bahsettiğimiz dengeye ulaşıncaya dek mikro durum sayısını 1. ve 2. sistem arasındaki enerji alışverişi mümkün kıldığından mikro durum sayılarını yalnızca enerjiye bağlı olarak yazabiliriz. $\Omega(E, V, N) = \Omega(E)$

$$\Omega(E) = \Omega_1(E_1) \Omega_2(E - E_1) \quad (2.57)$$

Aynı şekilde toplam sistemin entropisinde mikrokanonik kümede yazılabilir.

$$S = S_1 + S_2 = k_B \ln \Omega(E) = k_B \ln \Omega_1(E_1) + k_B \ln \Omega_2(E - E_1) \quad (2.58)$$

E_1 enerjisi değişken, E toplam sistemin enerjisi dengede olacağından entropi maksimum olmalıdır.

$$\left(\frac{\partial S}{\partial E_1}\right)_V = 0 \quad (2.59)$$

Düzenlendiğinde,

$$\left(\frac{\partial S}{\partial E_1}\right)_V = \left(\frac{\partial S_1}{\partial E_1}\right)_V + \left(\frac{\partial S_2}{\partial E_2}\right)_V \frac{\partial E_2}{\partial E_1} = 0 \quad (2.60)$$

yazılabilirken, $E_2 = E - E_1$ olduğundan $\frac{\partial E_2}{\partial E_1} = \frac{\partial}{\partial E_1}(E - E_1) = -1$ dir. Bu nedenle,

$$\left(\frac{\partial S_1}{\partial E_1}\right)_V - \left(\frac{\partial S_2}{\partial E_2}\right)_V = 0 \quad (2.61)$$

dir. (2.26) denkleminde dönecek olursak, $\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_V$ den $\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} = 0$ ve,

$$T_1 = T_2 \quad (2.62)$$

dir. Enerji alışverişi yapabilen bu tip sistemlerde iç enerji sürekli değişebilirken sisteme ait sıcaklık çevre yani ısı banyosuyla aynı kalır. Bu bizi durum değişkenlerinde E iç enerji yerine T sıcaklığa götürür. Çünkü sistemin ısı banyosuyla enerji alışverişi olsa dahi sıcaklığı sabit kalır.

$$(E, V, N) \rightarrow (T, V, N) \quad (2.63)$$

Sistemin iç enerjisi değişikçe bulunabileceği mikro durumları i indisiyle gösterirken her bir durumda enerjisi E_i alalım. Her bir durumda ısı banyosunun enerjisi; $E - E_i$ olup ve mikro durumlarının sayısı $\Omega_2(E - E_i)$ dir. Buna göre sistemin i . mikro durumda bulunma olasılığı, ısı banyosunun $E - E_i$ enerjili mikro durumları sayısının diğer alınabilecek tüm mikro durum sayılarına oranıdır.

$$P_i = \frac{\Omega_2(E - E_i)}{\sum_i \Omega_2(E - E_i)} \quad (2.64)$$

Sistem ısı banyosunun yanında çok küçük seçildiğinden, $E \approx E_i$ dir. $\Omega_2(E - E_i)$ mikro durum sayısının logaritmasının Taylor açılımı,
 $\ln \Omega_2(E - E_i) \approx \ln \Omega_2(E) + \frac{\partial \ln \Omega_2}{\partial E}(-E_i)$ biçiminde yazılabilir. $S = k_B \ln \Omega$ yi kullanılarak;

$$\frac{\partial \ln \Omega_2}{\partial E} = \frac{1}{k_B} \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_V = \frac{1}{k_B T} \quad (2.65)$$

yazmak mümkündür. Bir adım gerideki işlem hatırlandığında,

$\ln \Omega_2(E - E_i) \approx \ln \Omega_2(E) - \frac{E_i}{k_B T}$ yazılabilirken, logaritma fonksiyonundan ters logaritma fonksiyonuna geçilerek,

$$\Omega_2(E - E_i) \approx \Omega_2(E) e^{-\frac{E_i}{k_B T}} \quad (2.66)$$

bulunur ki (2.64) de yazılarak,

$$p_i = \frac{e^{-\frac{E_i}{k_B T}}}{\sum_i e^{-\frac{E_i}{k_B T}}} \quad (2.67)$$

(2.67) nin paydasındaki toplam kanonik topluluğun en temel büyüklüğü, bölüşüm fonksiyonuna ulaşılmış olur. Diğer taraftan istatistik mekanikte sıklıkla kullanılan 1/enerji boyutundaki β parametresi,

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \quad (2.68)$$

diye tarif edildiğinde, bölüşüm fonksiyonunu aşağıdaki yazılabilir..

$$Z(T, V, N) = \sum_i e^{-\beta E_i} \quad (2.69)$$

Kanonik toplulukta bölüşüm fonksiyonu bilindikten sonra diğer tüm termodinamik büyüklükler hesaplanabilir. Böylelikle E_i enerjili mikro durumların olasılığı bölüşüm fonksiyonu cinsinden yazılabilir.

$$p_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{\sum_i e^{-\beta E_i}} \quad (2.70)$$

Klasik varsayımlara dayanan bu teoriye Maxwell–Boltzmann istatistiği adı verilir.

[2,4,5,7,8,10]

II.3.2 KANONİK KÜMEDE İÇ ENERJİ

İç enerji, tüm mikro durumların enerjileri ortalamasıdır. Denklem olarak ifade edildiğindeyse, her E_i değerini kendi olasılığıyla çarparak toplam alınmalıdır.

$$E = \frac{1}{Z} \sum_i E_i e^{-\beta E_i} \quad (2.71)$$

Bu toplamda, $\sum_i E_i e^{-\beta E_i} = -\sum_i \frac{\partial}{\partial \beta} [e^{-\beta E_i}] = -\frac{\partial}{\partial \beta} \sum_i [e^{-\beta E_i}] = -\frac{\partial Z}{\partial \beta}$ olduğundan;

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z \quad (2.72)$$

kanonik kümede iç enerji ifadesine ulaşılabilir. [2,4,5,7,8,10]

II.3.3 LAGRANGE ÇARPANLARI YÖNTEMİ

Burada bölüşüm fonksiyonunu değişik bir yoldan tekrar elde ederek; fiziksel önemi olan entropi, serbest enerji gibi büyüklüklere nasıl geçileceği verilecektir.

Isı banyosuyla enerji alışverişi yapan sistemimizin enerjisi, değişken olduğundan mikrokanonik kümedekinden farklı bir yol izlenmelidir. Isı banyosu içinde sistemimizle özdeş M sayıda kopya ile doldurulsun. Bu kopyaların birbirleri ve ısı banyosuyla enerji alışverişine izin verilirken toplam sistem yalıtılsın. Böylece toplam sistem mikrokanoniktir. Kopya sayısı çok büyük olduğundaysa sistemlerin bazıları aynı mikro durumda olabilir. 1. mikro durumdakilerin sayısı n_1 , 2. mikro durumdakilerin sayısı n_2 , ..., i. mikro durumdakilerin sayısı n_i alındığında;

$$M = \sum_i n_i \quad (2.73)$$

yazılabilir. Bu durumların kaç farklı biçimde oluştuğuyorsa, toplam mikro durum sayısını verir.

$$\Omega = \frac{M!}{n_1!n_2!\dots} \quad (2.74)$$

Buradan mikrokanonik sistem oluşturan toplam sistemin entropisi, $S_{top} = k_B \ln \Omega$ ifadesinde

Stirling formülü de kullanılarak, $S_{top} = k_B \left[M \ln M - M - \sum_i (n_i \ln n_i - n_i) \right]$ yazılabilir. Son

ifade (2.73) le düzenlendiğindeyse,

$$S_{top} = k_B M \left[\sum_i \left(\frac{n_i}{M} \right) \ln \left(\frac{n_i}{M} \right) \right] \quad (2.75)$$

sonucuna ulaşılır. Ancak gerçek bir sistemde $M \rightarrow \infty$ olduğundan, $\frac{n_i}{M}$ oranı i. mikro durumda bulunma olasılığını verir.

$$p_i = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{n_i}{M} \quad (2.76)$$

Yine aynı mantıkla, sistemin entropisi $\frac{S_{top}}{M}$ yazılabilir. Böylelikle (2.75) ve (2.76) birlikte,

$$S(E, V, T) = -k_B \sum_i p_i \ln p_i \quad (2.77)$$

dir. Buraya dek kanonik kümede p_i olasılıklarını bilemediğimizden, dengedeki sistemin entropisinin maksimum olma gereğini kullanabilir ve (2.77) nin denge durumu için maksimum olması gerektiğini düşünebiliriz. p_i olasılıkları birbirinden bağımsız olsaydı, bu durumda p_i değişkenlerine göre kısmi türevler alır sıfıra eşitler p_i olasılıklarına ulaşabilirdik. Burada elimiz bağlanmışken yardımcı olabilecek iki kısıtlama vardır.

1. Olasılıklar toplamı birdir. ($\sum_i p_i = 1$ olasılıkların temel koşulu)

2. Toplam iç enerji belirlidir. ($E = \sum_i p_i E_i$)

Kısıtlamalardan ötürü Lagrange çarpanları yöntemi kullanılır. Yöntemde, kısıtlama bağıntıları entropiyi maksimum yapacak biçimde parametreleriyle yer alır.

$$S = -k_B \sum_i p_i \ln p_i + \alpha \sum_i p_i + \beta \sum_i p_i E_i = \text{maksimum} \quad (2.78)$$

α ve β parametreleri kısıtlamalara uygun olmalıdır. (2.78) in p_i ye göre türevi alınarak sıfıra eşitlenebilir. $\frac{\partial S}{\partial p_i} = 0$ işlemi $i=1$ için yazıldığında; $-k_B \ln p_i - k_B + \alpha + \beta E_i = 0$ ve genel ifadesiyle de;

$$-k_B \ln p_i - k_B + \alpha + \beta E_i = 0 \quad (2.79)$$

dir. Böylelikle,

$$p_i = \frac{e^{\frac{(\alpha + \beta E_i)}{k_B}}}{e} \quad (2.80)$$

olasılığına ulaşmış oluruz. Birinci kısıtlamadan $\sum_i p_i = 1$ den $\sum_i \frac{e^{\frac{(\alpha + \beta E_i)}{k_B}}}{e} = 1$ dir. Ayrıca ikinci kısıtlama $E = \sum_i p_i E_i$ kullanıldığında; tekrar $p_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z}$ (2.70) denkleminde ulaşılmış olur.

β parametresini bulmak üzere, (2.79) denklemini p_i ile çarparak, i üzerinden toplam alalım.

$$-k_B \underbrace{\sum_i p_i \ln p_i}_S - k_B \underbrace{\sum_i p_i}_1 + \alpha \underbrace{\sum_i p_i}_1 + \beta \underbrace{\sum_i p_i E_i}_E = 0 \text{ den,}$$

$$S = k_B - \alpha - \beta E \quad (2.81)$$

(2.81) denkleminde ulaşılmış olur. (2.26), $\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_V$ denkleminde, $\beta = -\frac{1}{T}$ ye ulaşılır ki

böylelikle, $p_i = \frac{e^{-E_i/k_B T}}{Z}$ olasılığına tekrar ulaşılabilir. [2,4,5,7,8,10]

II.3.4 HELMHOLTZ SERBEST ENERJİSİ

(2.81), entropi ifadesi içinde α ve β parametreleri kullanılarak,

$$S = k_B \ln Z + \frac{E}{T} \quad (2.82)$$

elde edilir. Düzenlendiğindeyse;

$$E - TS = -k_B T \ln Z \quad (2.83)$$

bulunur ki ifadede sol taraf helmholtz serbest enerjisine eşit olduğundan, kanonik kümede serbest enerji aşağıdaki gibidir.

$$F = -k_B T \ln Z \quad (2.84)$$

Anlaşılabacağı üzere, kanonik kümede termodinamik bağlantı entropi değil, helmholtz serbest enerjisiyle sağlanır. Termodinamik parametrelere aşağıdaki gibi ulaşmak mümkündür.

[2,4,5,7,8,10]

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V \text{ entropi} \quad (2.85)$$

$$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T \text{ basınç} \quad (2.86)$$

$$E = F + TS \text{ iç enerji} \quad (2.87)$$

$$c_v = -\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = -T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2}\right)_V \text{ öz ısı} \quad (2.88)$$

II. 3.5 KANONİK KÜMENİN GENEL ÖZELLİKLERİ

I. Klasik Mekanikte Bölüşüm Fonksiyonu

(2.69) bölüşüm fonksiyonu ifadesi hem klasik, hem de kuantum mekaniği çerçevesinde yazılabilir. Klasik mekanikte enerjinin hamilton fonksiyonu $H(p, q)$ nun hareket sabiti olduğunu faz uzayında incelenmişti. Bu durumda $H(p, q) = E$ dir ve klasik bölüşüm fonksiyonu,

$$Z = \frac{1}{N!} \int \frac{d^{3N}p d^{3N}q}{h^{3N}} e^{-\beta E(p, q)} \quad (2.89)$$

olacaktır.

II. Bölüşüm Fonksiyonunun Çarpanlara Ayrılması

Bölüşüm fonksiyonu iki durumda çarpanlarına ayrılabilir.

a. Bağımsız Parçacıklar

Sistem N adet özdeş, birbiriyle etkileşmeyen parçacıktan oluşuyorsa enerji öz değerleri, $E_i = \varepsilon_{i1} + \varepsilon_{i2} + \dots + \varepsilon_{iN}$ olur. Bölüşüm fonksiyonuysa, ikinci bir toplam üzerinden hesaplanır.

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i} = \sum_{i1} \dots \sum_{iN} e^{-\beta(\varepsilon_{i1} + \dots + \varepsilon_{iN})} = \sum_{i1} e^{-\beta \varepsilon_{i1}} \dots \sum_{iN} e^{-\beta \varepsilon_{iN}} \quad (2.90)$$

Parçacıklar özdeş olduğundan her bir toplam aynı mikro durumları oluşturacaktır. Her bir alt duruma ait bölüşüm fonksiyonu z_l ise;

$$z_l = \sum_i e^{-\beta \varepsilon_i} \quad (2.91)$$

diye hesaplanır. Parçacıklar (ayrıt edilebilir) özdeşse, sisteme ait bölüşüm fonksiyonu,

$$Z = z_l^N \quad (2.92)$$

iken ayrıt edilemeyen parçacıklar içinse,

$$Z = \frac{z_l^N}{N!} \quad (2.93)$$

dir.

b. Enerjinin Toplanabilirlik İlkesi

Enerji farklı kaynaklardan meydana geldiğinde her bir katkı ayrı ayrı toplanabilir. Örneğin CO₂ molekülünde enerji; ε_o öteleme, ε_d dönme, ε_t titreşim, ε_e elektronik enerji katkılarından oluşur.

$$\varepsilon = \varepsilon_o + \varepsilon_d + \varepsilon_t + \varepsilon_e \quad (2.94)$$

Böylelikle bölüşüm fonksiyonu çarpanlarına ayrılabilir.

$$z_l = \sum_i e^{-\beta\varepsilon_i} = \sum_i e^{-\beta(\varepsilon_o + \varepsilon_d + \varepsilon_t + \varepsilon_e)} = \underbrace{\sum_i e^{-\beta\varepsilon_o}}_{z_o} + \underbrace{\sum_i e^{-\beta\varepsilon_d}}_{z_d} + \underbrace{\sum_i e^{-\beta\varepsilon_t}}_{z_t} + \underbrace{\sum_i e^{-\beta\varepsilon_e}}_{z_e} \text{ ve}$$

$$z_l = z_o \cdot z_d \cdot z_t \cdot z_e \quad (2.95)$$

enerjinin toplanabilir olduğu sistemlerde entropi denklemi elde edilebilir. [2,4,5,7,8,10]

II.3.6 TEDİRGEMELER

Kanonik bir sistemin E enerjisi değişkenlik gösterirken sıcaklığın sabit olduğundan bahsetmiştik. Enerjideki değişkenlik nispetinde sapmalar ne derece ciddi olabilir? Bunun cevabını standart sapmadan aramalıyız. E enerjisindeki standart sapma olasılık teorisine göre, şöyle tanımlanır.

$$\Delta E = \sqrt{\langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2} \quad (2.96)$$

Kanonik kümede her mikro durumun olasılığı $p_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{\sum_i e^{-\beta E_i}}$ (2.70) kullanarak, $\langle E \rangle$ ve $\langle E^2 \rangle$

ortalamalarını hesaplamak mümkündür.

$$\langle E \rangle = \sum_i p_i E_i = \frac{1}{Z} \sum_i E_i e^{-\beta E_i} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \quad (2.97)$$

$$\langle E^2 \rangle = \sum_i p_i E_i^2 = \frac{1}{Z} \sum_i E_i^2 e^{-\beta E_i} = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \quad (2.98)$$

(2.97) ve (2.98) i (2.96) yı kullanarak bir araya getirelim.

$$\Delta E^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} - \left(-\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 = \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \right) \quad (2.99)$$

(2.99), $E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z$ (2.72) denklemiyle daha sade yazılabilir.

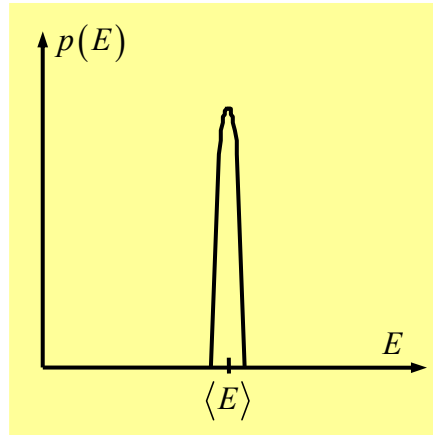
$$\Delta E^2 = -\frac{\partial E}{\partial \beta} \quad (2.100)$$

Bağıl hatayı tüm bunları kullanarak, standart sapmanın ortalama değere oranı biçiminde hesaplamak mümkündür.

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{1}{E} \sqrt{-\frac{\partial E}{\partial \beta}} \quad (2.101)$$

İdeal gazın iç enerjisi $E = \frac{3}{2} N k_B T$ veya $E = \frac{3N}{2\beta}$ dır. Bu, (2.101) denkleminde

kullanıldığında, $\frac{\Delta E}{E} \propto \frac{1}{\sqrt{N}}$ bulunur.



Şekil 2.6 Kanonik kümenin enerjisi ortalama değerinden çok az sapma gösterir.

Bu sonuç, parçacık sayısının oldukça büyük olmasıyla bağlı hatanın küçülmesi gerekir. Anlamı ise, kanonik kümede enerji alışverişi serbest olsa bile, sistemin enerjisi ortalama değerden çok az sapacaktır. Yani $N \rightarrow \infty$ limitinde kanonik küme mikrokantonik kümeye eşdeğerdir. [2,4,5,7,8,10]

II.3.7 KANONİK KÜMEDE EİNSTEİN KRİSTALİ

Hatırlanacak olursa, mikrokantonik kümede N atomdan oluşan bir katıda tüm atomların aynı frekansla üç ayrı doğrultuda titreşim yaptığını varsayarak Einstein kristal modelini incelemiştik. Atomlar birbirleriyle etkileşmediği ve yerleri belli olduğundan, bölüşüm fonksiyonu tek atomun bölüşüm fonksiyonu cinsinden $Z = z_l^N$ yazılabilir. Üç ayrı doğrultuda titreşim yapan harmonik salıncının öz değerleri üç kuantum sayısıyla belirlenir.

$$\varepsilon_{n_x, n_y, n_z} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_y + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_z + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (n_x, n_y, n_z=0, 1, \dots) \quad (2.102)$$

(2.102) ye göre tek harmonik salıncı için bölüşüm fonksiyonu, üç toplam içerir.

$$z_l = \sum_{n_x, n_y, n_z} e^{-\beta\varepsilon_{n_x, n_y, n_z}} = \sum_{n_x} e^{-\beta\left(n_x + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega} + \sum_{n_y} e^{-\beta\left(n_y + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega} + \sum_{n_z} e^{-\beta\left(n_z + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega} \quad (2.103)$$

Bu toplamlar özdeş olduğundan her biri, geometrik seri toplamından yararlanılarak hesaplanabilir.

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega} = e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}} \underbrace{\left[1 + e^{-\beta\hbar\omega} + e^{-2\beta\hbar\omega} \dots\right]}_{\frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}} = \frac{1}{2\sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)} \quad (2.104)$$

Bu durumda tüm katıya ait bölüşüm fonksiyonu,

$$Z = \left[\frac{1}{2\sinh(\beta\hbar\omega/2)} \right]^{3N} \quad (2.105)$$

dur. Buradan iç enerji ve özgül ısı hesaplanabilir.

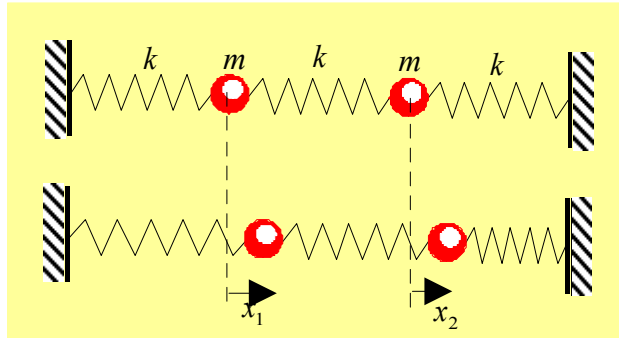
$$E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = 3N \left[\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B} - 1} \right] \quad (2.106)$$

$$c_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = \frac{3N(\hbar\omega)^2}{k_B T^2} \frac{e^{\hbar\omega/k_B}}{(e^{\hbar\omega/k_B} - 1)^2} \quad (2.107)$$

Son denklemler daha önce mikrokanyonik kümede Einstein kristali için elde edilen, (2.40) ve (2.41) denklemlerine özdeşdir. Bu sonuçların öz ısıda deneysel sonuçlarla örtüşmediğini görmüştük. [2,4,5,7,8,10]

II.3.8 KANONİK KÜMEDE DEBYE KRİSTAL MODELİ

Katılarda Einstein modelinde alçak sıcaklıklarda deneyle uyuşmaz sonuç elde etmemizin en önemli nedeni, tüm serbestlik derecelerinde titreşimin aynı frekansta olduğunu varsaymamızdır. Halbuki atomlar arası etkileşimleri göz önünde bulundurmamak ve bu etkileşimler sonrasında yeni titreşim frekansları-normal kipleri ortaya çıkarabileceğini düşünmemiz gerekirdi.



Şekil 2.7 Özdeş yaylara bağlanarak harmonik hareket yapan özdeş cisimler.

Klasik mekanikte normal kiplerin nasıl meydana geldiği basitçe anlatılır. Şekil 2.7 de verilen m kütleli özdeş cisimler, yay sabiti k olan özdeş yaylara bağlanmıştır. Titreşim sırasında kütlelerin genlikleri sırasıyla; x_1 ve x_2 olsun. Cisimlerin hareket denklemleri,

$$-kx_1 + k(x_1 - x_2) = m\ddot{x}_1 \quad (2.108)$$

$$-k(x_2 - x_1) - kx_2 = m\ddot{x}_2 \quad (2.109)$$

dir. $w_o^2 = k/m$ diye parametre tanımlanarak, (2.108) ve (2.109) denklemleri düzenlendiğinde,

$$w_o^2(x_2 - 2x_1) = \ddot{x}_1 \quad (2.110)$$

$$w_o^2(x_1 - 2x_2) = \ddot{x}_2 \quad (2.111)$$

(2.110) ve (2.111) sabit katsayılı diferansiyel denklemler olduğundan, $x = A \cos wt$ biçiminde bir çözüm önerilebilir. Bu çözüm (2.110) ve (2.111) için yerine yazılıp düzenlendiğinde,

$$(w^2 - 2w_o^2)x_1 + w_o^2x_2 = 0 \quad (2.112)$$

$$w_o^2x_1 + (w_o^2 - 2w^2)x_2 = 0 \quad (2.113)$$

(2.112), (2.113) homojen denklem sisteminde çözümü olabilmesi için, x_1 ve x_2 nin katsayılar determinantı sıfır olmalıdır.

$$\det \begin{vmatrix} (w^2 - 2w_o^2) & w_o^2 \\ w_o^2 & (w_o^2 - 2w^2) \end{vmatrix} = 0 \rightarrow w^4 - 4w_o^2w^2 + 3w_o^4 = 0 \quad (2.114)$$

(2.113) denkleminin kökleri normal salınım kiplerinin frekanslarını verir.

$$\begin{aligned} w_1 &= w_o \\ w_2 &= \sqrt{3}w_o \end{aligned} \quad (\text{Normal salınım frekansları}) \quad (2.115)$$

Çözüm kümesindeki ilk çözüm Einstein kristal modelinde varsaydığımız eşit frekanslı durumdur. İkinci çözümse, yeni bir frekanstır. Klasik mekanikte N tane salıncı için N tane birbirinden farklı normal kip frekansı (w_1, w_2, \dots, w_N) vardır.

Debye kristal modelinde N tane birbirinden bağımsız atomun $3N$ serbestlik derecesi vardır. Bunlardan birinin bölüşüm fonksiyonuysa, Einstein modelinde verilen (2.104) de olduğu gibidir.

$$z_l = \frac{1}{2 \sinh(\beta \hbar \omega / 2)} \quad (2.116)$$

Buna göre $3N$ sayıda salınıcının bölüşüm fonksiyonu,

$$Z = z_1 z_2 \dots z_{3N} = \prod_{j=1}^{3N} z_j \quad (2.117)$$

dur. Burada her bir çarpandaki kip frekansı ayrı bir w_j kip frekansında olacaktır. E iç enerjisinde çalışmak üzere (2.117) nin logaritmasını alıyoruz.

$$\ln Z = \prod_{j=1}^{3N} \ln z_j = - \prod_{j=1}^{3N} \ln [2 \sinh(\beta \hbar \omega / 2)] \quad (2.118)$$

N sayısı oldukça büyük olduğundan titreşimlerin dalga boyu atomlar arası uzaklığa nispeten çok büyük olacaktır. Bunun anlamı, w_j değerleri arasındaki fark çok küçük olup sıfıra giderken, frekans sürekli bir değişken olarak varsayılabilir. Sonuç olarak j indisi üzerinden toplam almaktansa integral alınmalıdır. Ancak integral işlemini alırken;

- w ile $w+dw$ aralığı arasına ne kadar salınım kipi düştüğünü ifade eden, normal kip yoğunluğu $D(w)$ bilinmeli,
- Atomların salınım kipleri en küçük salınımdan başlayarak $3N$ sayıdaki salınım kipini işgal edeceği Debye frekansına w_D dek yerleşirler.

noktalarına dikkat etmek gerekir. Böylelikle, $\sum_j \rightarrow \int_0^{w_D} dw D(w) = 3N$ dönüşümü yapmış,

toplamı integrale dönüştürmüş oluruz. Bu anlamda (2.118) aşağıdaki hale dönüşmüş olacaktır.

$$\ln Z = - \int_0^{w_D} dw D(w) \ln [2 \sinh(\beta \hbar \omega / 2)] \quad (2.119)$$

Normal kip yoğunluğunu anlamak üzere, bir kenar uzunluğu a olan katı bir kristalde dalga sayısı $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ iken kararlı dalga oluşturabilmesi için; $k_x = \frac{\pi}{a} n_x$, $k_y = \frac{\pi}{a} n_y$, $k_z = \frac{\pi}{a} n_z$ olup, $n_x, n_y, n_z = 1, 2, \dots$ diye tam sayı olmalıdır. Buradan dalga sayısı ile frekans arasındaki ilişki, $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{\pi^2}{a^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = w^2 / v^2$ dir. Dalga sayıları, üç

boyutlu bir uzayın pozitif bölgesinde, her birinin hacmi $\left(\frac{\pi}{a}\right)^3$ olan küplerin köşelerine yerleşirler. Yarıçapı k ile $k+dk$ dalga sayıları arasındaki bölgede kalan normal kip sayısı; sekizde birlik kabuk bölgenin hacmi, kübün hacmine oranlanarak bulunur.

$$D(k)dk = \frac{4\pi k^2 dk}{8(\pi/a)^3} = \frac{V}{2\pi^2} k^2 dk \quad (2.120)$$

(2.120) denkleminde $V = a^3$ alındı. Bu denklemi $D(w)$ olarak tanımlanan kip yoğunluğuna dönüştürmek üzere; $k^2 = w^2/v^2$ den $dk = dw/v$ değişken dönüşümü yaparak,

$$D(w)dw = D(k)dk = \frac{V}{2\pi^2 v^3} w^2 dw \quad (2.121)$$

bulunabilir. Ancak her dalga sayısı ikisi enine, biri boyuna olmak üzere üç salınım kipine sahip olduğundan olması gereken (2.121) denkleminin üç katıdır.

$$D(w)dw = \frac{3V}{2\pi^2 v^3} w^2 dw$$

Tekrar Debye modeli için varsayımlarımızdan biri olan $\sum_j \rightarrow \int_0^{w_D} dw D(w) = 3N$ e geri dönülürse, $\int_0^{w_D} dw D(w) = \frac{3V}{2\pi^2 v^3} \int_0^{w_D} w^2 dw = 3N$ yazmak mümkündür. Bu sayede debye frekansı diye tanımlanan normal kip frekansı cinsinden kip yoğunluğu,

$$D(w) = \frac{9N}{w_D^3} w^2 \quad (w < w_D) \quad (2.122)$$

Şimdi tekrar (2.119) denkleminde geri dönelim. (2.122) de elde ettiğimiz normal kip

yoğunluğunu kullandığımızda, $\ln Z = -\frac{9N}{w_D^3} \int_0^{w_D} dw w^2 \ln[2 \sinh(\beta \hbar \omega / 2)]$ yazmak mümkün

olduğu gibi, buradan iç enerji elde edilebilir.

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = \frac{9N\hbar}{2w_D^3} \int_0^{w_D} \frac{dw w^3}{\tanh(\beta \hbar \omega / 2)} = \frac{9N\hbar w_D}{8} + \frac{9N\hbar}{w_D^3} \int_0^{w_D} \frac{dw w^3}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} \quad (2.123)$$

Daha basit yazmak üzere, $x = \beta\hbar\omega$ alınsa bile bu integralin analitik bir çözümü yoktur.

$$E = \frac{9N\hbar\omega_D}{8} + \frac{9Nk_B T}{x_D^3} \int_0^{x_D} \frac{dx \cdot x^3}{e^x - 1} \quad (x = \hbar\omega / k_B T) \quad (2.124)$$

Öz ısıya geçmek üzere; $\frac{\partial}{\partial T} = \frac{dx}{dT} \frac{\partial}{\partial x} = -\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) \frac{\partial}{\partial x}$ kullanılarak (2.124) işleme alınırsa,

$$c_v = 9Nk_B \left(\frac{1}{x_D}\right)^3 \int_0^{x_D} \frac{dx x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} \quad (2.125)$$

bulunabilir. Bu noktada,

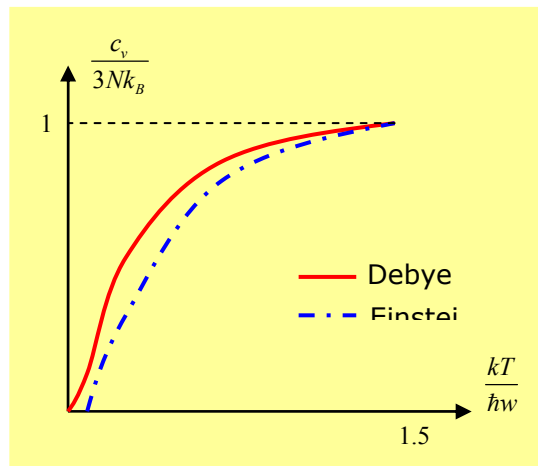
$$\theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B} = x_D T \quad (2.126)$$

debye sıcaklığı ve

$$D(x_D) = \frac{3}{x_D^3} \int_0^{x_D} \frac{dx x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} \quad (2.127)$$

Debye fonksiyonu tanımlandığında, özgül ısı ifadesi (2.125) aşağıdaki forma dönüşmüş olur.

$$c_v = 3Nk_B D(x_D) \quad (2.128)$$



Şekil 2.8 Katıların özgül ısısı. (Einstein ve Debye modellerinin karşılaştırılması)

Debye modeli için yüksek ve düşük sıcaklık limitlerini inceleyerek olması gerekene yakınlığına bakabiliriz.

I. Yüksek sıcaklıkta $x = \hbar\omega/k_B T \ll 1$ olacak, bu durumda debye fonksiyonu içindeki üssel

fonksiyon $e^x \approx 1+x$ olup, $D(x_D) \approx \frac{3}{x_D^3} \int_0^{x_D} \frac{dx x^4 (1+x)}{(1+x-1)^2} = \frac{3}{x_D^3} \int_0^{x_D} x^2 dx = 1$ olur. Böylelikle yüksek

sıcaklıkta özgül ısı, $\lim_{T \rightarrow \infty} c_v = 3Nk_B$ değerine yaklaşır.

II. Düşük sıcaklıkta $x = \hbar\omega/k_B T \gg 1$ olup, debye fonksiyonunda integralin üst limiti sonsuz olur. İntegralde, $e^x - 1 \approx e^x$ yaklaşımı yapılırsa,

$D(x_D) \approx \frac{3}{x_D^3} \int_0^{x_D} \frac{x^4 e^x dx}{(e^x)^2} = \frac{3}{x_D^3} \int_0^{x_D} x^4 e^{-x} dx = \frac{3}{x_D^3} 4! = \frac{72T^3}{\theta_D^3}$ olur. Bu durumda düşük sıcaklıkta öz

ısı, $\lim_{T \rightarrow 0} c_v \propto T^3$ limitine yaklaşır. Bununla birlikte Debye modelinin deneyle uyumlu olduğu anlaşılmış olur. [2,4,5,7,8,10]

I.3.9 KANONİK KÜMEDE PARAMANYETİZMA

Katı cismi oluşturan atomlardan her birinin manyetik dipol momenti,

$$\vec{\mu} = g \mu_B \vec{J} \quad (2.129)$$

diye bilinir. Denklemden \vec{J} yörüngesel açısal momentum olup, yörünge \vec{l} ve spin açısal

momentumu \vec{s} toplamıdır. Diğer taraftan μ_B bohr magnetonu olup $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$ diye

hesaplanırken, (2.129) da g Lande faktörü (çarpanı) dır.

Bir \vec{H} dış manyetik alanında manyetik bir dipolün enerjisi (2.46) denklemiyle verilen, $\varepsilon = -\vec{\mu} \cdot \vec{H}$ diye hesaplanır. Burada farklı olarak m manyetik dipol momenti tanımlayarak,

$$\varepsilon_m = -\vec{\mu} \cdot \vec{H} = -\mu H m \quad (2.130)$$

diye denklemde yerini alır. Manyetik dipol moment m nin değeri ise, $m = -J, -J+1, \dots, J-1, J$ dir ve toplam $(2J+1)$ tane değeri vardır. Her bir dipolün yeri belli olduğundan ayırt edilebilir parçacıklar olarak düşünülerek toplam sistemin bölüşüm fonksiyonu yazılmalıdır. Öncelikleyse her bir dipolün bölüşüm fonksiyonunu yazabiliriz.

$$z_l = \sum_{m=-J}^J e^{-\beta\mu H m} \quad (2.131)$$

Denklemde $x = \beta\mu H$ diye değişken dönüşümü yapılarak,

$$z_l = \sum_{m=-J}^J e^{-mx} = e^{-(-J)x} + e^{-(J-1)x} + \dots + e^{-Jx} \quad (2.132)$$

elde edilen geometrik seri, $z_l = e^{-Jx} [1 + e^x + \dots + e^{2/x}]$ dir. Geometrik seri toplamı bilinen,

$1 + x + \dots + x^n = \frac{1 - x^{n+1}}{1 - x}$ ifadesi kullanıldığında (2.132) denklemi,

$$z_l = e^{-Jx} \left[\frac{1 - e^{(2J+1)x}}{1 - e^x} \right] = \frac{e^{-Jx} - e^{(J+1)x}}{1 - e^x} = \frac{\sinh \left[\left(J + \frac{1}{2} \right) x \right]}{\sinh \frac{1}{2} x} \quad (2.133)$$

(2.133) e dönüşmüş olur. Toplam sistemin bölüşüm fonksiyonuysa,

$$Z = \left\{ \frac{\sinh \left[\left(J + \frac{1}{2} \right) x \right]}{\sinh \left[\left(\frac{1}{2} \right) x \right]} \right\}^N \quad (1.134)$$

dir. Fark edilebileceği gibi kanonik kümede hesap yapmak çok daha kolaydır.

Buradan hareket ederek öncelikle serbest enerji ve ardından diğer termodinamik büyüklükleri hesaplayalım. Daha önce elde ettiğimiz (2.84) denklemini kullanarak serbest enerjii,

$$F = -Nk_B T \ln \left\{ \frac{\sinh \left[\left(J + \frac{1}{2} \right) x \right]}{\sinh \left[\left(\frac{1}{2} \right) x \right]} \right\} \quad (1.135)$$

(2.85) den entropiyi $\beta = 1/k_B T$ olarak,

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V = Nk_B \left[\ln \left[2 \cosh(\beta\mu H) \right] - \beta\mu H \tanh(\beta\mu H) \right] \quad (1.136)$$

(2.87) den iç enerji,

$$E = F + TS = N\mu H \tanh(\beta\mu H) \quad (1.137)$$

(2.88) den öz ısı,

$$c_v = -\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = -T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2}\right)_V = Nk_B \frac{(\beta\mu H)^2}{\cosh^2(\beta\mu H)} \quad (1.138)$$

değerleri bulunmuş olur. Makroskobik anlamda cismin M magnetizasyonu, birim hacimdeki ortalama magnetik moment olarak hesaplanırken serbest enerji cinsinden ifade edilir.

[2,4,5,7,8,10]

$$M = \frac{N\langle\mu\rangle}{V} = \frac{N}{V} \sum_{m=-J}^J p_m \mu_m = \frac{N}{V} \frac{\sum_m \mu_m e^{\beta\mu H m}}{\sum_m e^{\beta\mu H m}} \quad (1.139)$$

$$M = -\left(\frac{\partial F}{\partial H}\right)_T = \frac{N\mu}{V} \tanh(\beta\mu H) \quad (1.140)$$

III. SİMÜLASYONLARDA KULLANILABİLECEK YAKLAŞIK YÖNTEMLER

Bu bölümde spin sisteminin özelliklerini hesaplamada kullanılabilecek yaklaşım ve yöntemler anlatılmaya çalışılacaktır. Bunlar nümerik olmasına karşın, olduğundan çok daha basit ve problemin doğasına olabildiğince uygundur. Problem içerisinde sonuçlara ulaşmamızı zorlaştıran değişkenler; gerektiğinde ortama eklenebilir, çıkartılabilir ya da büyüklüğü değiştirilerek sonuçları gerçeğe uygun incelenebilir. Böylelikle ortam değişkenlerine tümüyle hakim olduğumuz simülasyonla deneyin doğasına uygunluk sağlanmış olacaktır. Tüm bunların yanında sistemdeki değişkenlerin büyüklüklerini, birbirleri ile olan durumlarını rahatlıkla simülasyonun işlediği kısa süre içinde tablo ya da grafiğe dönüştürebiliriz. Tabi ki burada anlatacağımız yöntemlerle problemin tarif ettiğimiz resmini çizmiş olmanın ilk aşamasını kaydetmiş, sonrasında bilgisayar programı yazmamız gerekecektir. Bu bölümde program algoritma ve mantığı için uygun yöntemler tarif edilmiştir. [6,14,15,16,17,18]

III. 1 MEAN FIELD TEORY

Mıknatıslanma ortalama spin hızına $\langle s_i \rangle$ bağlıdır. Açısal parantezler burada termal ortalamaı vurgular. Bir ısı banyosu ile termal dengede bulunan sistem için zaman ortalaması olarak düşünmek yararlı olacaktır. Giriş de bahsedildiği üzere ısı banyosu ile etkileşim halinde olan spinleri +1 den -1 e ya da tam tersine attıracaktır. Termal ortalama farklı mikrohalleri göre bir ortalama değildir. Burada bahsedilen mikrohaller spin taklaları sonucu oluşa gelmiştir. Sonsuz genişlikte bir sistem için tüm spinler aynı ortalama hızına sahip olacaktır. Bu spinlerin bir anlamda tümünün eşit büyüklükte olduğu fark edilerek görülebilir. Öyle ki ideal bir durum için, her bir spin en yakın 4 komşusu ile etkileşim kurar. Yine ideal bir durum için her bir spin sonsuz şekilde herhangi bir sınırdan uzaktır. Bu yüzden tüm spinler aynı averaj öz değere sahip olmalıdır. Burada T sıcaklığındaki, N spinli bir sistem için toplam magnetizasyon,

$$M_\alpha = \sum_j s_j \quad (3.1)$$

ve

$$M = \sum_{\alpha} \left(\sum s_j P_{\alpha} \right) \quad (3.2)$$

ifadeleri kullanılacak olursa şu olacaktır.

$$M = \sum_i \langle s_i \rangle = N \langle s_i \rangle \quad (3.3)$$

Eğer probleme bir manyetik alan etkirse, enerji fonksiyonu denklem (1.5) e benzer olarak şu hale gelecektir.

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - \mu H \sum_i s_i \quad (3.4)$$

Burada

H : Manyetik alan,

μ : Her bir spine eşlik eden manyetik momenttir.

Bu alan, spinlerin H ya paralel olarak kendilerini düzenlemelerine neden olacaktır. Buda enerjiyi aşağıya çekecektir.

Mean-field yaklaşımını elde etmek için, ilk olarak şunu varsayalım, bizim sistemimiz sadece tek bir adet spine sahip olmalıdır. (s_i) Böylece, tek enerji alan enerjisi olacaktır. Bir spin yalnızca iki halde olabilir.

$$(\text{spin halleri}) s_i = \begin{cases} +1 \\ -1 \end{cases} \rightarrow (\text{spin erjileri}) E = \begin{cases} +\mu H \\ -\mu H \end{cases} \quad (3.5)$$

Sistemin bu hallerde bulunma ihtimaliyse,

$$P_+ = C e^{\frac{+\mu H}{k_B T}} \quad (3.6)$$

$$P_- = C e^{\frac{-\mu H}{k_B T}}$$

dir. İhtimaller toplamı 1 olacağından C katsayısı iki ihtimalin toplamının bir bölümü diye hesaplanabilir.

$$C = \frac{1}{e^{\frac{+\mu H}{k_B T}} + e^{\frac{-\mu H}{k_B T}}} \quad (3.7)$$

Termal averajı ise,

$$\langle s_i \rangle = \sum_{s_i} s_i P_{\pm} = P_+ - P_- = \frac{e^{\frac{\mu H}{k_B T}} + e^{\frac{-\mu H}{k_B T}}}{e^{\frac{\mu H}{k_B T}} - e^{\frac{-\mu H}{k_B T}}} \quad (3.8)$$

diye yazılabileceğinden, artık şöyle hesaplayabiliriz.

$$\langle s_i \rangle = \tanh\left(\frac{\mu H}{k_B T}\right) \quad (3.9)$$

Bu bir manyetik alan içerisindeki tek bir spinin davranışının tam sonucudur. Şimdi bunu N spinli etkileşim halindeki sistem için yaklaşık bir çözüm elde etmekte kullanıyoruz. Mean-field yaklaşımı temelde şu varsayıma dayanır. “ s_i spininin komşu spinlerle olan etkileşimi, s_i üzerinde hareket eden etkin manyetik alana eşdeğerdir.” $\langle s_i \rangle$, (3.9) deki denklem kullanılarak hesaplanabilir. Burada H ve H_{eff} kullanılır. (3.4) deki denklem bu durumda yeniden şu şekilde yazılması önerilebilir.

$$E = -\left(J \sum_{\langle ij \rangle} s_j \right) s_i - \mu H s_i \quad (3.10)$$

J : s_i nin komşularıyla olan etkileşimi tasvir eder.

Burada, J yi içeren terim, manyetik alan biçiminde şöyledir,

$$\mu H_{eff} = J \sum s_j \quad (3.11)$$

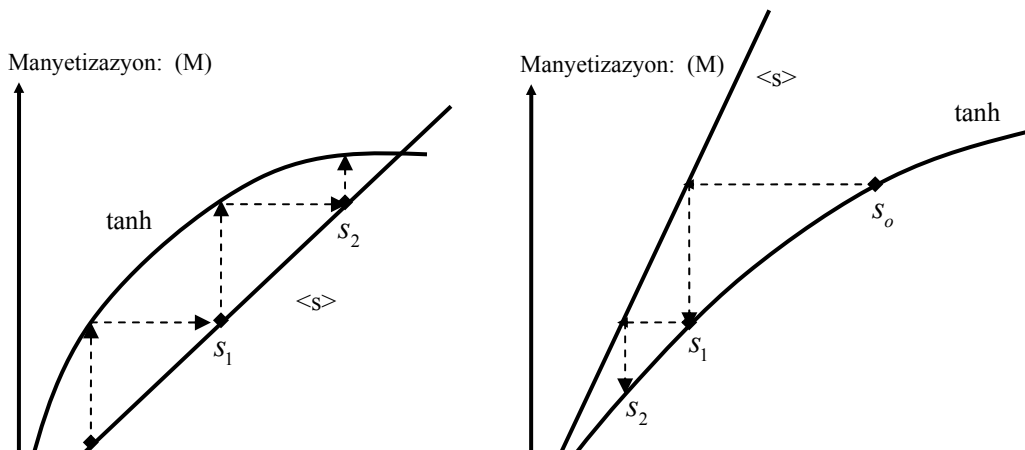
Şimdi de yaklaşık değer almaya sıra gelir. Burada s_j , H_{eff} kendi termal averaj değerleri ile yer değiştirildiğini varsayabiliriz. Tüm spinler aynı averaj hizasına sahip oldukları için, onların termal averaj değerleride, aynı olacaktır. Tüm alt indisleri ihmal ederek denklemi şu hale getiriyoruz. Dışarıdan uygulanan gerçek alan $H = 0$

$$H_{eff} = \frac{J}{\mu} \sum \langle s \rangle = \frac{zJ}{\mu} \langle s \rangle \quad (3.12)$$

Burada z , en yakın komşuların sayısıdır. (3.12) Denklemi (3.9) daki denklem ile birleştirdiğimizde;

$$\langle s \rangle = \tanh\left(\frac{zJ \langle s \rangle}{k_B T}\right) \quad (3.13)$$

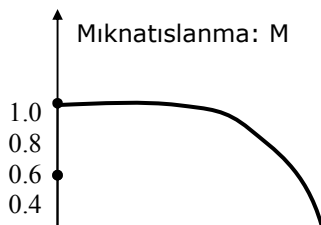
elde edilir. Bu $\langle s \rangle$ için kesin bir bağıntıdır. Analitik olarak çözülemez. $\langle s \rangle$ küçük olduğundan limitle çözülebilir. Bu yüzden sayısal yaklaşımı ciddiye almamız gerekiyor.



Şekil 3.1 Mean-Field denkleminin çözümünde relaksasyon metodunun düşük ve yüksek sıcaklıkta işleyişi.

Problemi daha anlaşılır kılmak amacıyla Şekil 3.1 de Toplam magnetizasyona karşılık ortalama spin hizasının düşük ve yüksek sıcaklık değerlerindeki grafikleri veriliyor. $\langle s \rangle$ nin çözümü iki eğrinin kesiştiği noktalardadır. $\langle s \rangle = 0$ da her zaman bir çözüm vardır. Bu çözüm sıfır mıknatıslanmayla termal averaja tekabül eder. Buna paramanyetik faz denir. Düşük sıcaklıklarda ayrıca ikinci bir çözüm daha vardır. Bu sıcaklıklarda $\tanh\left(\frac{zJ\langle s \rangle}{k_B T}\right)$ fonksiyonu $\langle s \rangle$ den daha büyük bir başlangıç eğimine sahiptir. Bu nedenle $\langle s \rangle \neq 0$ yani sıfırdan farklı bir toplam mıknatıslanmaya denk gelen ikinci bir çözümü verir. Buna ferromanyetik faz denir. Ferromanyetik faz ($\langle s \rangle \neq 0$ li çözümlerde), $\langle s \rangle = 0$ dakinden daha düşük bir serbest enerji vardır. Mean-field teorisinin tahmini şudur; düşük sıcaklıklarda sistem gerçekten de ferromanyetiktir.

(3.13) denklemini çözmenin en basit yollarından biride Relaxation (gevşeme) metodudur. Öncelikle s_0 başlangıç tahmini ile işe başlanır ve (3.13) denkleminin sağına eklenerek s_1 değerine ulaşılır ($s_1 = \tanh\left(\frac{zJ s_0}{k_B T}\right)$). Bu proses ile devam edildiğinde s_n lerin ardışık değerleri yeterince küçülür. Bunun anlamı çözüm noktasına oldukça yakın olduğumuzdur. Prosedür bizi yüksek sıcaklıklarda $\langle s \rangle = 0$ ve düşük sıcaklıklarda $\langle s \rangle \neq 0$ çözümlerine çok yaklaştırıyor. Relaxasyon metodu çözüme yakınlaştığımızı gösterirken, çözüme NE KADAR HIZLI ulaşabileceğimizi söylemez.



Şekil 3.2 Mean-Field denkleminin relaksasyon metodunun kullanılarak çözümünde kritik sıcaklık.

Şekil 3.2 de relaksasyon metodunu kullanarak elde edilen, sıcaklığa bağlı $\langle s \rangle$ için mean-field çözümü gösterilmektedir. Mıknatıslanma $\langle s \rangle$ ye bağlı olduğu için düşük sıcaklıklarda $M > 0$ için anlık mıknatıslanma vardır. Yani sistem ferromanyetikdir. Yüksek sıcaklıklarda sıcaklığın bozucu etkisi baskın gelir ve $M=0$ ile sistem paramanyetik tir. Ancak iki faz arasındaki geçiş Şekil 3.2 ye göre ani olarak gerçekleşmektedir. Bu geçiş sıcaklığı T_c diye gösterilirken Kritik Sıcaklık diye isimlendirilir. Mean field teorisinin tahmini kritik sıcaklığın 4 olduğudur. (yani $J/k_B=1$ alınır). Bu geçiş için anlık mıknatıslanma, order parametresi olarak bilinir. Net olarak, sistemin hangi fazda olduğunu bize söyler. Burada order parametresi M nin sıfır olmayan değeri için, sistemin ferromanyetik fazda olduğu, $M=0$ için ise sistemin paramanyetik fazda olduğu bulunduğuudur. Ancak Şekil 3.2 de $\lim_{T \rightarrow T_c} \left(\frac{dM}{dT} \right)$ eğimi kritik sıcaklık civarında oldukça büyüktür.

Bu sorunu aşmak için küçük $x = \frac{zJ \langle s \rangle}{k_B T}$ değerleri için $\tanh(x) \approx x - \frac{x^3}{3}$ yazılabilir. Bu mantıkla $\langle s \rangle$ küçük olduğunda (3.13) denklemi;

$$\langle s \rangle = \tanh \left(\frac{zJ \langle s \rangle}{k_B T} \right) \approx \frac{zJ \langle s \rangle}{k_B T} - \frac{1}{3} \left(\frac{zJ \langle s \rangle}{k_B T} \right)^3 \quad (3.14)$$

şeklinde yazılabilir. $\langle s \rangle = 0$ verildiğinde denklemin bir çözüm kümesi de bulunmuş olur.

$$\langle s \rangle = \sqrt{\frac{3}{T} \left(\frac{k_B T}{zJ} \right)^3 \left(\frac{zJ}{k_B} - T \right)^{1/2}} \square (T_c - T)^\beta \quad (3.15)$$

son adımda $T_c = \frac{zJ}{k_B}$ ve $\beta = \frac{1}{2}$ tanımı yapıldı. β parametresi kritik bileşendir.

Mean-field yaklaşımının β parametresi ile vermiş olduğu kuvvet kanunu doğru bir yaklaşım olmasına karşın bunun doğru değeri 0.5 değil 2 dir. [6,14,15,16,17,18]

III.2 NEWTON METODU

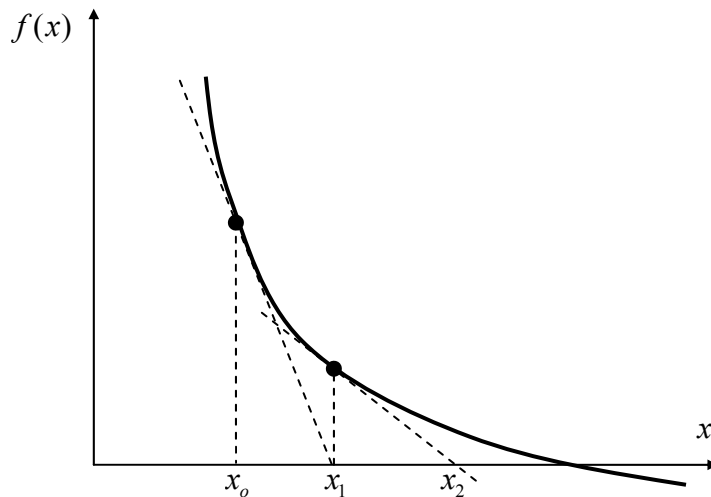
Şekil 3.2 den, bu metodun her zaman (3.13) deki çözüme yaklaştığını görebiliriz.

Kritik sıcaklık yakınlarında $\langle s \rangle$ ve $\tanh\left(\frac{zJ\langle s \rangle}{k_B T}\right)$ in kesişim noktalarını bulmak istiyorsak,

yaklaşık olarak aynı eğimde olmaları gerekir. Bu yaklaşmanın oldukça yavaş olmasına neden olacaktır, çünkü iteration (tekrarlama) $\langle s \rangle$ eksenini boyunca çok küçük bir mesafe hareket edecektir. Bu yüzden yakınsamayı hızlandırmanın yollarını ele almak faydalı olacaktır. Yollardan biri (3.13) denklemini,

$$f(\langle s \rangle) = \langle s \rangle - \tanh\left(\frac{zJ\langle s \rangle}{k_B T}\right) = 0 \quad (3.16)$$

biçiminde ele almaktır. Bu yüzden, $f(\langle s \rangle)$ fonksiyonunun çözüm kümesine (köklerine) ihtiyacımız vardır. Bu pek çok yerde yüksek bir problemdir.



Şekil 3.3 Newton metodunu kullanarak Mean-Field denkleminin çözümü

Şekil 3.3 de bir hiperbolik fonksiyon $f(x)$ i görüyoruz. Çözüm kümesi bulmak için, yani $f(x) = 0$ için x değerini bulmak için, x_0 başlangıç çözümü için tahmini bir ilk değer ile başlarız. Düzeltilmiş bir tahmin elde etmek yerine $f(x)$ in türevine x_0 da değer verir ve bunu x ekseninde yerine koyarak doğrusal bilinen bir tahmin elde etmede kullanırız (ekseni x_1 de kesen kesikli çizgide olduğu gibi). x eksenini kestiği yer, x eksenine paralel yani $f(x)$ düz bir doğru olsaydı tam çözüme ulaşılacak ve eğrilik sıfır olacaktı. Bu yüzden x_1 yeterince doğru yaklaşım olmayabilir. Prosesi x_1 den başlatarak x_2 vesaire deneyerek daha iyi bir yakın değer elde etmek için tekrar edilir.

Bu yaklaşım Newton metodu olarak bilinir ve genellikle $f(x)$ eğimini kullandığı içindir ki, relaxation algoritmasından üstündür. Çünkü daha az iterasyonla sonuca ulaşmak mümkündür. [6,14,15,16,17,18]

III.3 MONTE CARLO METODU

Bilgisayarda fiziksel sistemlerin benzerlerini yaratmak mümkündür. Günümüzde pek çok sistemin benzetimleri (simülasyonları) başarıyla yapılmaktadır. Konumuz bu tür fiziksel bir sistemin nasıl kullanılabileceğini açıklamaktadır. Fiziksel sistemlerin benzetimleri yapılırken birkaç metod kullanabiliriz. Burada Monte Carlo olarak bilinen bir yöntemden yararlanacağız.

İstatistik mekaniğinde de moleküler dinamik metodlarının yanı sıra Monte Carlo yöntemi kullanılmaktadır. Monte Carlo yöntemiyle fiziğin bu dalında, faz geçişleri üzerinden çok boyutlu integralleri hesaplamak bir takım spin, gaz katı gibi modellerin benzetimini yapmak mümkündür.

Bilindiği gibi çok zor nümerik integrallerin tüm konfigürasyonlar üzerinden hesaplanması mümkün değildir. Fakat bu sorun konfigürasyonları sınırlayarak yaklaşık bir çözümle halledilebilir. Bu yaklaşıma “importance sampling” yaklaşımı adı verilmektedir.

Mean-field teoriye göre; ising modelin paramanyetik ve ferromanyetik fazları arasında ani geçiş olacağını tahmin etmede başarılıydı. Bunun dışında kritik sıcaklık T_c yakınlarındaki davranışı tahmin etmede, mean-field yaklaşımı doğru iken, kritik bileşen değerlerini doğru olarak elde etmez. Davranışın doğru bir resmini elde etmek için özellikle faz geçişi yakınlarında çok daha güçlü bir yaklaşıma ihtiyaç duyulur. Bu yaklaşımın adı Monte Carlo metodudur. Metodun net bir tanımıyla başlamak yerine, pratik anlamda metodun nasıl çalıştığını tarif etmek daha uygundur. Bu metotta amaçlanan; “bir spin sisteminin çevresiyle nasıl etkileşim kurduğunu simüle etmektir”.

İstatistik fizik dilinde, çevre; ısı banyosu demektir ve ısı banyosunun rolü; enerjii spin sistemi ile yer değiştirmektir. Böylelikle sistemi T sıcaklığında bir yerlerde dengeye getirmektir. Sistem ısı banyosundan enerji kazandıkça veya ısı banyosuna enerji vererek enerji kaybettikçe, spinler, sistemin yeni mikroskobik hallerine taşınmasına neden olan taklalar atarlar. Bu mikro hallerin her biri, spinlerin kısmi-özel bir düzenlemesine karşılık gelirler. Mıknatıslanma, gibi niceliklerin ölçülen değerleri, sistemin farklı mikro hallerinde bulunma olasılıklarına bağlıdır.

Monte carlo metodu, spin sistemi ve ısı banyosu arasındaki enerji değişimini simüle (taklit) etmek için, en uygun imkanları seçen bir yaklaşım kullanılır. Şekil 1.7 de şematik olarak gösterilen özel bir mikro hal içindeki sistem ile başlarsak, banyo ile olan etkileşim şu şekilde model edilir.

Birinci Adım

- Bir spin seçilir. Spinin takla atması için gerekli enerji E_{flip} hesaplanır. Ising modelimize göre, bu E_{flip} , (1.5) denklemi kullanılarak hesaplanır.
- Eğer E_{flip} negatifse, (böylece spin ters çevrilerek enerji azaltılır) spin takla atmıştır ve sistem farklı bir mikro hale hareket eder.
- Eğer E_{flip} pozitif ise, (böylece sistemin enerjisi arttırılır) bir karar verilmelidir.
- 0 ile 1 arasındaki sıradan belirtilen bir sayı oluşturulur ve boltzman faktörü $\left(-\frac{E_{flip}}{k_B T}\right)$ ile kıyaslanır.
- Eğer boltzman faktörü rastgele sayıdan büyük ise, spin takla attırılır, küçük ise spin hiç rahatsız ettirilmeden bırakılır.

- Böylelikle, bu durumda, spin ya farklı bir mikro hale hareket edebilir ya da etmeyebilir. Her şey rastgele sayıya bağlıdır.
- Böylelikle monte carlo metodunun birinci adımı tamamlanmış olur.

İkinci Adım

- Başka bir spin seçilir. E_{flip} hesaplanır ve yukarıda tarif edilen algoritmaya göre sonra spin ya takla attırılır ya da sabit bırakılır.

Bu prosedür böylelikle bir sürü kere tekrar edilir. Böylelikle her spine takla atma şansı verilir. Sonuç olarak sistemin kararlı durumu bulunmuş olur. [6,14,15,16,17,18]

III. 4 ISING MODEL VE İKİNCİ DERECE FAZ GEÇİŞİ

Şimdi Monte Carlo metodunu kullanarak Ising modeldeki faz geçişlerini incelemeye hazırız. İki tür geçiş hesaplayacağız.

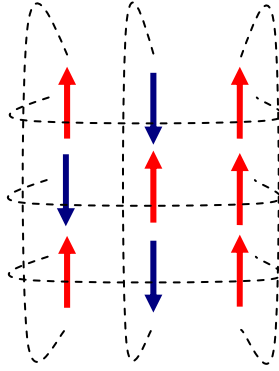
- 1. derece faz geçişi,
- 2. derece faz geçişi,

Bu sınıflandırmaların tam bir tanımını vermektense faz geçişleriyle ilgili örnek vererek ele alacağız. Modelimiz Şekil 1.7 deki gibi kare kafes üzerinde yerleri belirlenmiş Ising spin topluluğudur. Spinler birbirleri ve manyetik alanla etkileşim halindedir. (3.4) deki enerji denkleminde $H=0$ durumunu alarak başlayalım. Bir manyetik alan fonksiyonu gibi olan davranışı birinci derece faz geçişinde inceliyoruz. Uygun olsun diye enerjiyi k_B biriminde ölçüyoruz ve $T=1$ alıyoruz. Böylelikle sıcaklık T , etkin biçimde birimsiz oluyor. Her adım boyunca bir spin seçer, (3.4) e göre takla atmak için gerekli olan enerjiyi hesaplarız. Sonra boltzman faktörünün 0-1 aralığında özdeş olarak dağıtılan rastgele bir sayıyı nasıl kıyaslandığına bağlı olarak ya spine takla attıracağız, ya da spini değiştirmeden bırakacağız.

Programımızda kafesin başarılı sıraları boyunca hareket ederek, spinleri sistematik olarak seçmek için iki loop (halka) kullanıyoruz. Spinleri rastgele de seçebilirdik. Fakat öyle çok zaman adımı (time step) ile belirtilir ki her bir spinin takla atmak için bir sürü fırsatı vardır, bu yüzden sonuçlar spinlerin nasıl seçildiğine bağlı değildir. Kafes aralığından geçme işlemini tamamladıktan sonra toplam manyetik momenti $M = \sum s_i$ ve toplam enerjiyi (3.4) e

göre hesaplarız, sonra termal denge, uygun deęerleri elde etmek için kafes aralıęından geen bir ok spinin M ve E nin ortalamasını alırız.

İdeal olarak ok byk sistemlerin davranıřını hesaplamak isteriz. Gerek bir ferromanyetik sistem (bir para demir gibi) pek ok sayıda spin ierir (yaklařık 10^{23}). Hedeflerimizden birisi gerek sistem davranıřını anlamaktır. Dahası tarif edilen faz geiřleri yalnızca ok geniř sistemlerle sınırlıdır ve ok geniř sistemlerde gerekleřir. Halbuki doęru bir simlasyon iin gerekli olan sayma zamanı bizi yaklařık 10^3 kadar spin ieren kafeslerle sınırlayacaktır. Byle sonlu bir sistem iin uçlardaki spinlerin davranıřı, pronounced etkisine sahip olabilir.



řekil 3.4 Periyodik sınır kořullarıyla Ising spinleri. Spinler noktalı izgilerle baęlantılıdır.

Kare bir kafesde, i spinlerdeki (interior spin) en yakın drt komřu spine sahipken u spinler u adet en yakın komřu spine sahiptir. Bu u spinler eęer kşedeysse, yalnızca iki adet en yakın komřu spine sahiptir. Komřu spinin aynı yn gstermeye meyletmesine sebep olan yer deęiřtirme (1.5) etkileřimidir. U spinler daha az komřuya sahip olduęu iin kafesin ucundaki spinler dięer spinlerle daha az hizalanma eęilimi gsterecektir. Gerek sistemlerde de uc spinler vardır. Bu spinlerin fraksiyonu ierdeki sayıyla kıyaslandığıında kk bir kafese gre, ok daha byk olacaktır. Bu yzden bizim simlasyonlarımızda mmkn olduęu kadar ucların etkilerini minimize etmek nemli yer teřkil eder. Bunu bařarmanın bir yolu, řekil 3.4 de gsterildięi gibi periyodik sınır kořulları kullanmaktır. Bizim orijinal Ising model tarifimiz de spinlerin yalnızca onlara en yakın komřu spinlerle etkileřtięini belirtmiřtik. řimdi ise řunu varsayıyoruz. Utaki bir spin kafesin karřıt kenarındaki spinle de etkileřir. (řekil 3.4 de noktalı izgiyle gsterildięi gibi).

Alternatif olarak şunu da hayal edebiliriz. Kafesimiz bir torus üzerindedir. Böylelikle bu uç spinler, her bir spin, geride kalan her bir spine gerçekten komşudur. Başka şekilde söylemek gerekirse, uç spin kavramı elimine edilmiştir. Şimdi her spinin dört yakın komşusu vardır ve spinler birbirine eşit mesafededir.

Periyodik sınır koşullarının kullanımı bu yüzden bize geniş sınır etkilerinden kaçınmamızı sağlar. Hâlbuki bu şu manaya gelmez. Periyodik sınır koşullarına sahip 5x5 lik bir kafes çok daha büyük bir kafesle aynı şekilde davranacaktır. Periyodik sınır koşulları $L \times L$ boyutunda olan bir kafes için, iki spin arasındaki mesafe $\frac{L}{\sqrt{2}}$ kafes aralığından daha geniş olamaz (Bir köşegen boyunca maksimum mesafe = $\frac{L}{\sqrt{2}}$).

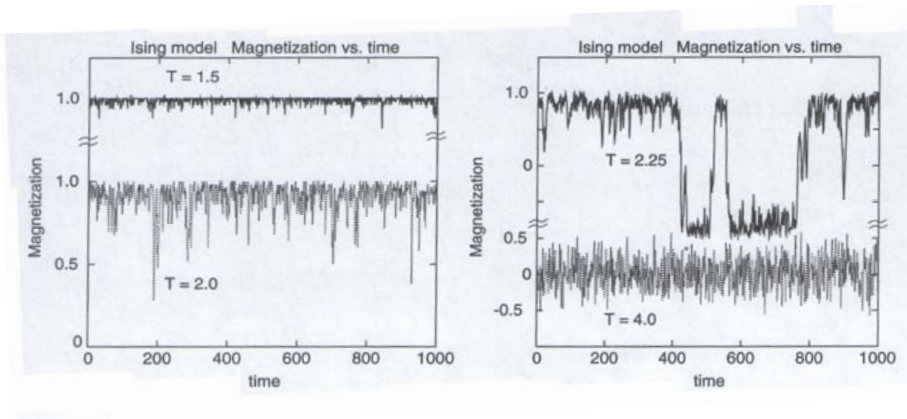
Periyodik sınır koşulları monte carlo simülasyonlarında ve pek çok diğer benzer hesaplamalarda sıklıkla kullanılmaktadır. Fakat hayal edebileceğimiz, sadece sınır koşulları değildir. Onun yerine,

* Spin sisteminin basitçe uçlarda sonlandığı serbest sınır koşulları
veya

* Uçlardaki spinlerin tüm spinleri tek bir yönü göstermeyi zorladıkları bağlı sınır koşullarını seçebiliriz.

Burada ve bir sonraki kısımda işimiz için, periyodik sınır koşullarına iş vereceğiz. Çünkü bu koşullar sonlu kafes ölçüsünün etkilerini minimize etmeye eğilim gösterecektir. Hâlbuki yukarıda söylendiği gibi bu, bu tarz etkileri tamamen ortadan kaldırmayacaktır. Çok büyük bir sistemin özelliklerini hesaplamanın en iyi yolu;

- Farklı ölçülerde bir sürü kafesler olarak simülasyonlar gerçekleştirmek, ardından
- Sonsuz kafes limitine değer biçmektir.



Şekil 3.5 10x10 kare kafeste Ising modele göre, magnetizasyonun zamana karşılık farklı sıcaklık değişimleri.

Simülasyonlarımız için, sistemin ferromanyetik halde olacağını bildiğimiz düşük sıcaklıklarda incelemeye başlayabiliriz. Bu yüzden, tüm spinlerin pozitif yönü gösterdiği yani tam hizalı hale denk düşen başlangıç spin konfigürasyonu seçiyor monte carlo prosedürünü miknatislanmayı hesaplamak için kullanıyoruz. Buradaki miknatislanma, simülasyon ilerledikçe monte carlo zaman fonksiyonu olacaktır. Bazı sıcaklıklarda 10x10 luk bir kafes için bazı sonuçlar Şekil 3.5 de gösterilmiştir. Burada zaman birimi kafesteki tam bir geçişe karşılık gelir. Bu yüzden, her bir zaman adımı boyunca, spinlerden her birinin 1 kere takla atma fırsatı olmuştur. En düşük sıcaklıkta miknatislanma birbirine paralel olan tüm spinlerin doyma değerine çok yakın kalır. Monte Carlo kuralları bir spinin fırsat buldukça negatif yöne takla atmasına önderlik ederken, M deki dalgalanmalar küçüktür. Sıcaklık $T=2$ ye yükseltildiğinde M nin ortalama değeri tam hizalı değer yaklaşık %90 ına karşılık gelecek bir değere düşer. Çünkü bu sıcaklıktaki boltzman faktörü bir spin taklasının zamanın %10 derecesinde daha yüksek enerji haline geçmesini ister. Sistemimiz halen ferromanyetiktir, fakat olayın derecesi daha düşük sıcaklıklarda gerçek değerinden azalmıştır. Ayrıca, dalgalanmaların büyüklüğü keskin bir şekilde artar.

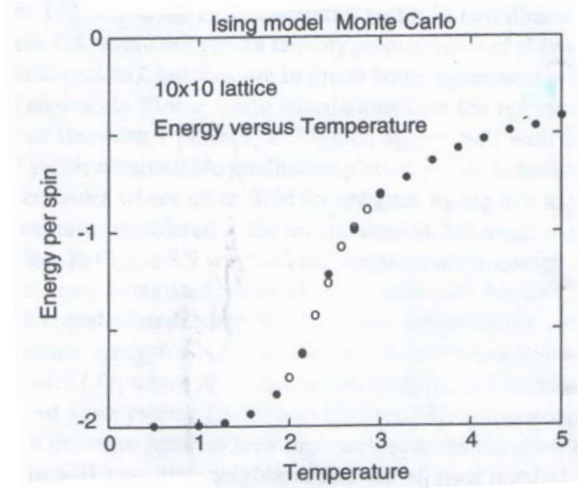
Bu dalgalanmalar birkaç sebepten önemlidir.

1. Birkaç diğer termodinamik niceliği hesaplamak için, istatistiksel mekaniğin dalgalanma-dağılma (fluctuation-dissipation) ilişkisiyle birlikte nasıl kullanılabileceğini kısaca göreceğiz.
2. Daha önemli olanı: bu değeri artırılmış dalgalanmalar şöyle sinyal verir.

Burada ikinci dereceden faz geçişine yaklaşıyoruz. Yani kritik noktaya yaklaşıyoruz. Kendi kritik noktasında olan bir sistem küçük pertürbasyonlara oldukça duyarlıdır. Çünkü sistemin özellikleri, sıcaklıktaki, manyetik alan gibi değişikliklerden çok hızlı bir şekilde etkilenir. Bu dalgalanmaların, T_c deki müstesna durumlara bağlı olduğunu göreceğiz.

Sistemi $T=2.25$ e kadar ısıttığımızda dalgalanmalar büyür. Sistem $M \approx \pm 0.8$ değer aralığında dalgalanır. Bu yüzden tüm sistemin manyetik momentinin yön değiştirdiği yerde dalgalanmalar mevcuttur. Kare bir kafes üzerindeki Ising model için, tam analitik

hesaplamalar şu sonuca götürür. $T_c = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} \approx 2.27$, bu durumda kritik noktaya çok yakınız. Daha yüksek sıcaklıklara ilerledikçe, $T=4$ de, dalgalanmaların büyüklük olarak azaldığı ve dalgalanmaların $M \approx 0$ civarlarında merkezleştirildiğini buluruz ki bu T_c nin yukarısındaki paramanyetik faza denk düşer. Davranış farklı sıcaklıklar için kıyaslandığında dalgalanmaların T_c civarında en büyük olduğu görülür. Bunları daha ayrıntılı olarak kısaca analiz edeceğiz.



Şekil 3.6 10x10 kare kafeste Ising modeli için sıcaklığın fonksiyonu olarak anlık mıknatıslanma.

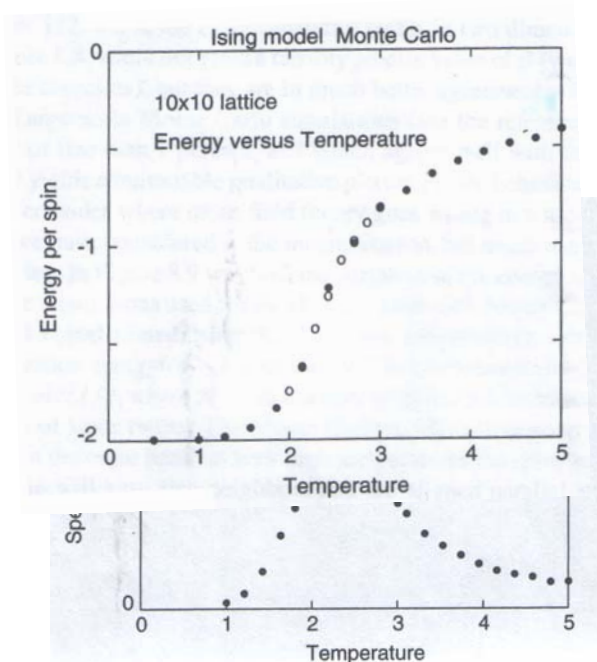
Farklı sıcaklıklardaki simülasyonlardan, M nin ortalama değerlerini zaman geçtikçe sıcaklığa bağlı olarak mıknatıslanmayı elde etmek üzere hesaplayabiliriz. Şekil 3.6 da bazı sonuçlar gösterilmiştir. İstatistiksel hatalardan dolayı (Şekil 3.5 teki gibi ortalama data almak gibi) sonuçlara bazı lekeler (scatter) varken M , T ($T=T_c$ =Kritik sıcaklık ≈ 2.27) değerinde aceleyle sıfıra düşer. Tüm bu sonuçlar toplam davranışı nitelerken birkaç şekilde düzeltilebilirdi.

Birinci yol, simülasyonları alınacak iterasyonları basitçe daha uzun çalıştırabilirdik. Böylelikle her bir sıcaklıkta daha çok monte carlo adımına yer verilir. Bu $(\frac{1}{\sqrt{N_{steps}}})$ =hesaplama kullanılan monte carlo zaman adımlarının sayısı) $\frac{1}{\sqrt{N_{steps}}}$ le orantılı olan bir orandaki istatistiksel hataları azaltacaktı. İkinci yol, daha geniş kafes aralığında çalışabilirdik ve sonsuz kafes limitine yuvarlama yapabiliirdi.

Şekil 3.2 deki mean field tahmini ile M için monte carlodan elde edilen sonuçları kıyaslamak enteresandır. İki sonuçta nitelik olarak aynı iken, mean field teori T_c değerini yaklaşık olarak 2 faktörüyle olduğundan fazla tahmin eder. Ayrıca mean field in M için olan tahmini T_c de sıfıra gider. Bu monte carlo sonuçlarında bulduğumuzdan bir şekilde daha yavaştır. Daha önce belirttiğimiz gibi T_c civarında M nin varyasyonu kritik bileşen β tarafından aşağıdaki gibi belirlenir.

$$M \approx (T_c - T)^\beta \quad (3.17)$$

Mean field teori $\beta = \frac{1}{2}$ olarak tahmin eder. Halbuki iki boyuttaki analitik sonuç $\beta = \frac{1}{8}$ olduğudur. Şekil 3.6 deki monte carlo sonuçları β nın, kesin değerini elde etmez. Buna rağmen monte carlo sonuçları β nın kesin değeriyle bir nebze olsun mean field'dan daha iyi bir anlaşma içindedir. Geniş ölçülü monte carlo simülasyonları %1 den daha az bir belirsizlik içeren bir β değerini elde eder ve bu değer analitik sonuçla iyi anlaşır. Bu yüzden mean field teori davranışın makul nitel resmini elde ederken öngördüğümüz nicel detaylar doğru değildir. Şimdi mean field teorisinin nerede yanlış yaptığını ele alalım.



Şekil 3.7

10x10 kare kafeste Ising

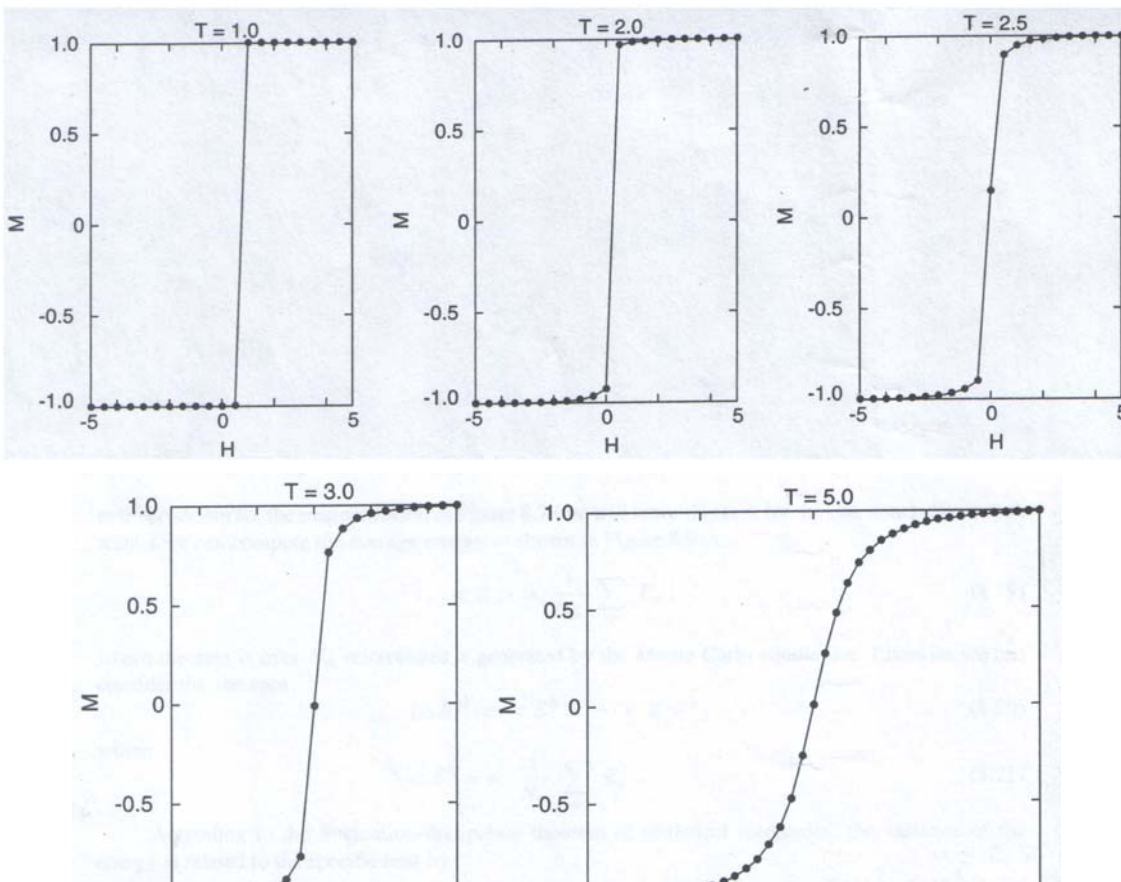
model için sıcaklık fonksiyonu olarak ortalama termal enerji.

Şekil 3.8 10x10 kare kafes için dalgalanma-dağılıma ısı kapasitesi kullanılarak hesaplanır.

II. 5 BİRİNCİ DERECE FAZ GEÇİŞİ

Önceki bölümde İsing modelin kritik nokta yakınlığında davranışı verildi. Bu $M \neq 0$ da ferromanyetik halden $M = 0$ daki paramanyetik hale geçiş olan İKİNCİ DERECE FAZ GEÇİŞİ olarak isimlendirilir. Peki birinci derece faz geçişi nedir?

Birinci derece faz geçişleri aslında doğada oldukça yaygındır. Suyun donması ve bunun gibi tipik örneklerdir. Manyetik alanın etkisini dahil edersek Ising model sayesinde birinci derece faz geçişini gözleyebiliriz. Monte Carlo metodu daha önce tanımlandığı gibi, sadece fark (3.4) de verilen bir spin alanında enerji kaybı ya da kazancı içeriyor olmalıdır.



Şekil 3.9 Bazı sıcaklıklarda 10x10 kare kafeste magnetizasyonun manyetik alana göre dağılımı

Şimdi problemde iki bağımsız değişkenimiz; T ve H var. Bu geniş bir faz diyagramında araştırma içerir. Denge sıcaklığında alanın bir fonksiyonu ile değişimini göz önüne alalım. Şekil 3.9 da gösterildiği gibidir. $T = 1.0$ da ve $H < 0$ magnetizasyonu ile geniş ve negatiftir. Bu sıcaklıkta spinler alan yokluğunda bile aynı doğrultuda dizilecektir. Burada alan M mıknatıslanma vektörünün yönündedir. Çünkü alan enerjisi spinleri H alanı ile aynı doğrultuya gelmesine yol açar. Bu H ın sıfırdan arttığında niçin M nin aniden işaret değiştirdiğini açıklar. M nin bu süreksiz değişimi Birinci derece faz geçişinin göstergesidir.

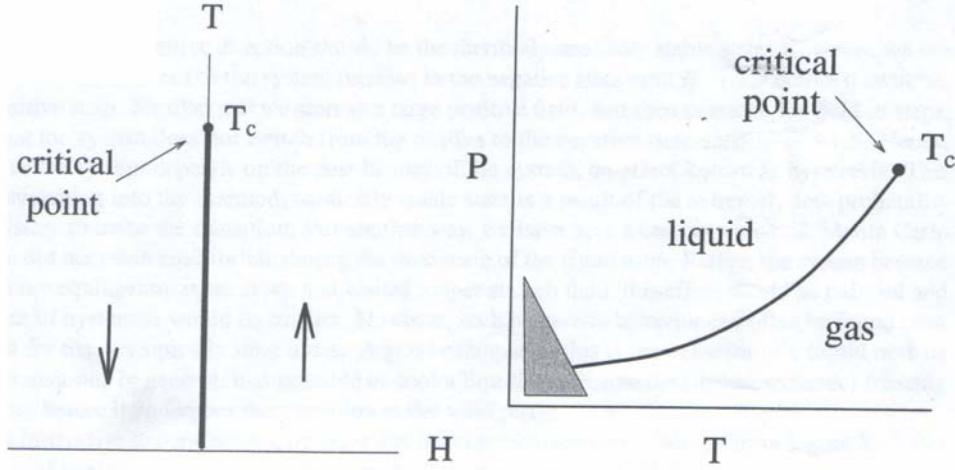
Magnetizasyondaki bu süreksizlik tüm spinlerin aynı anda tersine dönmesiyle ilişkili olarak sistemin iki halini içerir.

$$M \rightarrow -M \quad (3.23)$$

$H = 0$ olduğunda bu iki hal eşit olasılıklı, fakat küçük bir alan uygulandığında biri diğerinden daha muhtemel olacaktır. Alanın bir fonksiyonu olarak M deki süreksiz sıçrayış T_c altındaki tüm sıcaklıklarda bulunur. Enerji ve simetri göz önüne alınırsa $H = 0$ da bu sıçrayışı bekleriz, bu bazen hysteresis ile ilişkili geçiştir. $T = 1.0$ de sonuç olarak küçük fakat sıfırdan biraz büyük H ın bir değerinde sıçrayış görülebilir. Burada sistem periyot zamanı üzerinden metafaza yakalanmıştır ($H < 0$ ile $M < 0$ da).

T_c üzerindeki sıcaklıkta, kendiliğinden oluşan manyetizasyon kaybolur ki burada alan sıfırdan arttığından M süreksiz değildir. Böylece Birinci derece faz geçişi yoktur. T_c Üzerindeki sıcaklıklarda ($H < 0$ olduğunda) negatif magnetizasyon ve ($H > 0$ olduğunda) pozitif magnetizasyon ile bu halden zorluk çıkarmadan gider.

T_c nin altında bulunan (keşfedilen) süreksizliğin şiddeti sadece önceki bölümde ifade edilen iki kez kendiliğinden meydana gelen magnetizasyondur. T_c sıcaklığında magnetizasyonun gözden kaybolduğunu buluruz ki bu alanın bir fonksiyonu olarak gözlenen Birinci derece faz geçişi ile sıcaklığın bir fonksiyonu olarak gözlenen İkinci derece faz geçişi arasında yakın bir ilişki demektir. Bu bağlantı $H - T$ faz diyagramında değerlendirilir.



Şekil 3.10

(Solda) Ferromanyetik bir maddenin H-T faz diyagramı. (Sağda) Kritik sıcaklık yalınlarında şematik basınç-sıcaklık diyagramı.

Düşük sıcaklıklarda sistem $\pm M$ ye denk gelen iki belirgin faza sahiptir, Şekil 3.10 da oklar bunu gösteriyor. Bir fazdan diğerine sıcaklık ekseninde geçitle geçebiliriz ki bu Şekil 3.9 da görüldüğü gibidir. T_c nin altındayken M değişkeni süreksizdir. Bu birinci derece faz geçişini konumudur ve Şekil 3.10 da gösterildiği gibi $H - T$ grafiğindeki çizginin bir sonucudur. Çizgide birinci derece faz geçişi kritik sıcaklıkta biter. Böylelikle kendiliğinden meydana gelen magnetizasyon kaybolur. Bu sıcaklıkta iki faz arasındaki fark gözden kaybolur ki T_c nin üzerinde M nin süreksizliğinin yokluğunda pozitif alandan negatif alana geçebiliriz.

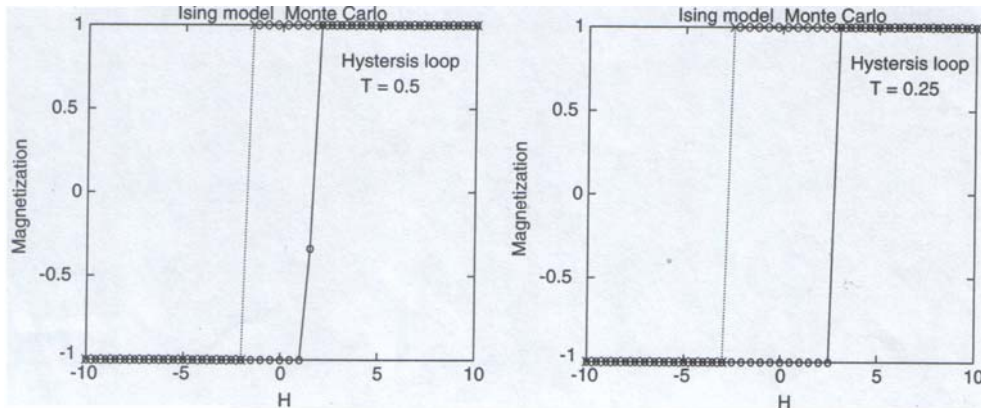
Faz diyagramından birinci derece faz geçişine kritik nokta son verdiğini görebiliriz. Ayrıca bu geometri, birinci derece faz geçişinin genel özelliğidir. Örneğin sıvı gaz sisteminde de benzer bir durum vardır. Bu durum ilişkili değişkenler basınç, (H nin yerine), sıcaklık ve yoğunluk (M nin yerine) Şekil 3.10 da görülüyor. Sıvıdan gaza geçiş yoğunluğun süreksizliğinde basınç üzerinden yine birinci derece faz geçişidir. Basıncın artışında bu süreksizliğin şiddeti küçülür ve kritik noktada kaybolur. Bir spin sisteminde T_c sıcaklığında sıvı-gaz sisteminin çeşitli özelliklerinde tuhaflıklar vardır. Bu tuhaflıklar kritik üs ile kuvvet

kanunu ile tanımlanır. İlginç olarak, sıvı-gaz sisteminde kritik üssün değeri ising modeli için bulunanla aynı olduğuna inanılır. Bu davranış bütünlüğünde önerilen kritik davranışın temel özelliklerinin spesifik model veya sistemin sınırlarını aşmasıdır. Bu çok ilginç konuyu okuyucu referansta belirtilen kaynaklardan takip edebilir.

Şekil 3.10 a geri döndüğümüzde, ising model faz diyagramının ilginç bir özelliği yukarı fazdan aşağı faza, iki farklı yolla geçiştir. Birincisi sıcaklık ekseninde geçiştir. Böylelikle bu birinci derece faz geçişi örneğidir. Diğeri yüksek sıcaklıkta kritik nokta civarına gitmektir ki bu bütünüyle birinci derece faz geçişinden sakınılmış olunur. Elbette, bu iki fikir bir sıvı gaz sisteminden elde edilebilir. Her ikisinde de birinci derece faz geçiş çizgisi boyunca geçebiliriz veya kritik nokta civarında kılavuzluk ederek geçiş olmadan sıvıdan gaza gider.

Son olarak birinci ve ikinci derece faz geçişi arasındaki önemli farkı vurgulamalıyız. Kritik nokta yakınındaki dalgalanmalar , garip davranışı (singular behavior) önceden tahmin edilebilir genişliktedir. Bu sistem bilinenleridir ki olanlar hakkında önemlidir. Bununla birlikte, birinci derece faz geçişi aniden gerçekleşir. Dalgalanmalarda artış veya diğer bir çeşit uyarı yakınında olmasından korktuğumuz dalgalanmalar yoktur.

Bu uyarı yokluğu geçiş öncesi ve sonrası farklıdır ki spin dizilişi (spin configurations) ile bağlantılıdır. Burada düşük sıcaklıklar göz önünde bulundurulur, iki hal, tüm spinlerin her biri diğerine M nin yukarı ve aşağı yönü ile hemen hemen paraleldir. Sistem başlangıçta bu durumlardan birinde ise, ardından sırasıyla tüm spinlerin temel olarak diğer hale dönmesi gerekir. Monte Carlo flipping kuralları düşük sıcaklıktan itibaren zamanda bir spin içerir hatta çok nadiren tek bir spin enerji artışı ile döner, büyük sayıdaki spin olasılığı birbiri üzerine gelebilmek için aşırı derecede az sayıda spin birlikte döner.



Şekil 3.11 Kritik sıcaklık altında 10x10 kare kafes için hysteresis döngüsü.

Bu Şekil 3.11 de resmedilmiştir. Düşük sıcaklıklarda H ın fonksiyonu olarak M için sonuçlar gösteriliyor. Her bir sıcaklıkta büyük miktarda negatif alan uygularız. Böylelikle spinler negatif yönde tümüyle hizalanır. Alan aşamalarla arttırılıyor. Spin dizilişinin pozitif alan etkisi altında dengede olmasını bekleriz. Bu noktada tüm spin noktalarının pozitif yönlü olmaları termodinamik denge halidir. Bununla birlikte Şekil 3.11 de $T = 0.5$ de pozitif hale değişmeden önce $H \approx 1.5$ e dek sistem negatif halde kalır. Benzer olarak, büyük pozitif alanda başlarsak ardından aşamalarda alan azalır sistemin $H \approx 1.5$ a dek pozitiften negatife değişmediğini görürüz. Böylece sistemin hali önceki hysteresis gibi bilinen bir etki durumuna bağlıdır. Bu değişimdeki erteleme termodinamik denge halinde geçiş yapmak için sistemin oldukça düşük olasılığının sonucudur. [6,14,15,16,17,18]

IV NÜMERİK SONUÇLAR

Bu çalışmada amaçlanan Ising modelini, kritik sıcaklık civarında C programlama diliyle hazırlayarak Monte Carlo metodu ile simüle ettik. Böylelikle kritik sıcaklık civarındaki faz geçişlerine ait; kritik sıcaklık ve kritik bileşen değerlerine ulaşabildik. Daha da önemlisi hazırladığımız bu simülasyonla şartları kolaylıkla değiştirip modele ait; manyetizasyon, spesifik ısı, iç enerji, manyetik duygunluk değerlerinin sıcaklık ve değişen manyetik alanla nasıl değişiklikler sergilediğini grafik olarak elde etmiş olduk. Ayrıca sıcaklık haricinde dış manyetik alan uygulayarak bu alanın spinleri nasıl etkilediğini gözlemledik. Manyetik alanı negatiften pozitif değıştirip sıcaklığı sabit tutarsak mıknatıslanmanın manyetik alanla nasıl değıştiğini bulduk. Ayrıca manyetik alan pozitif değerden geri götürerek histerisis etkisini gözledik. Ising model haricinde ayrıca Potts modeli kullanarak spinlerin 16ya varan açıda dönmeleri sağladık ve spinlerin aralarındaki açının kullanılması gerektiğini gösterdik. Mesela eğer normal Ising modelindeki enerji etkileşim Hamiltoniyeni

$$H = -J \sum_{i,j} S_i S_j - \mu H \sum_i S_i \quad (4.1)$$

olarak alınmışken, Potts modelinde bu

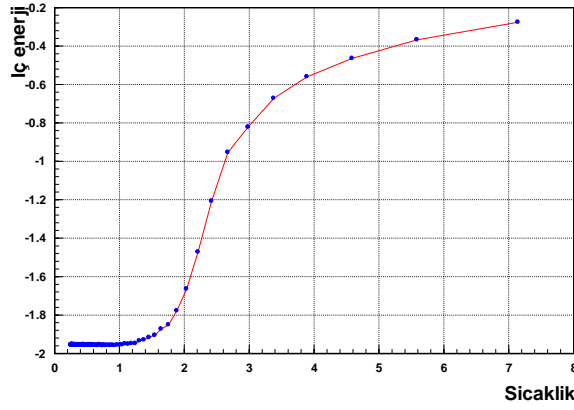
$$H = -J \sum_{i,j} S_i S_j \cos \theta_{i,j} - \mu H \sum_i S_i \cos \alpha_i \quad (4.2)$$

olarak alınmıştır. Burada θ iki spin arasındaki açı, α ise manyetik alanla herhangi spin arasındaki açıdır. Simülasyonları yaparken kare örgü kullanarak spinleri örgü noktalarına yerleştirdik.

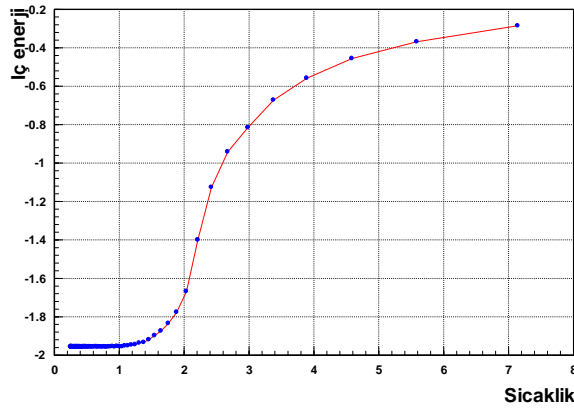
IV.1 İÇ ENERJİNİN SICAKLIKLA DEĞİŞİMİ

Bu bölümde spinleri sadece yukarı ($S_i=+1$) ve aşağı ($S_i=-1$) olan Ising model simüle edilmiştir. Manyetik alan $H=0$ alınarak sıcaklığın nasıl faz geçişini sağladığını gösterilmiştir.

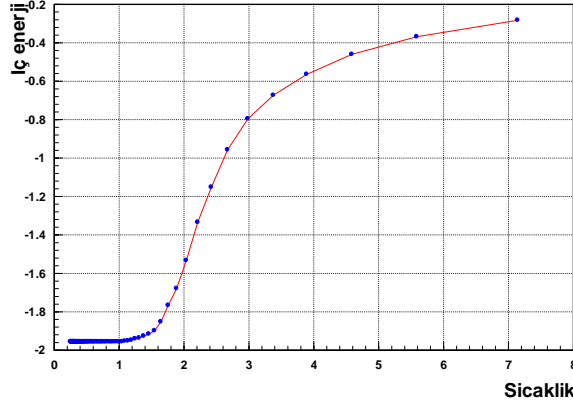
Bu ferromanyetik-paramanyetik faz geiři daha nce ngrldęi gibi kritik sıcaklık olan $T_c=2.3$ civarında gerekleřiemiřtir. Buna gre her seferinde 50 iterasyon ieren Monte Carlo yntemi kullanan bilgisayar kodumuzun doęru alıřtıęını syleyebiliriz. Ařaęıda 21x21, 41x41, ve 81x81 lik kare rgde elde edilen i enerji grafikleri verilmiřtir. Burada elde edilen sonular daha nce verilen Őekil 3.7 ile tamamen uyum iindedir. rgdeki spin sayısı arttıka faz geiř blgesinin yerinin deęiřmedięi fakat daha dzgnce deęiřtięi grlmektedir. Burada not edilmesi gerken en nemli nokta iterasyonların yksek sıcaklıklardan bařlayıp dřk sıcaklıklara doęru gitmesidir. Bu nedenle $\beta \approx 1/T$ deęerleri yaklařık 0.1 den bařlatılıp 6-7 deęerine kadar arttırılmıř yani sıcaklıklar yaklařık 10 dan 0.1 e kadar dřrlmřtir. Grafikler ise sıcaklıęa gre verilmiřtir.



Őekil 4.1 21x21 spinde ising modele gre i enerjinin sıcaklıkla deęiřimi.



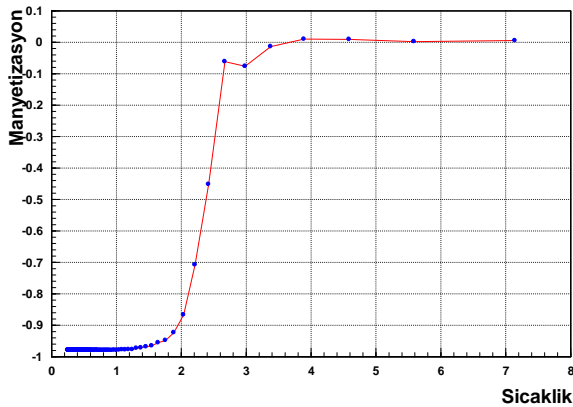
Őekil 4.2 41x41 spinde ising modele gre i enerjinin sıcaklıkla deęiřimi.



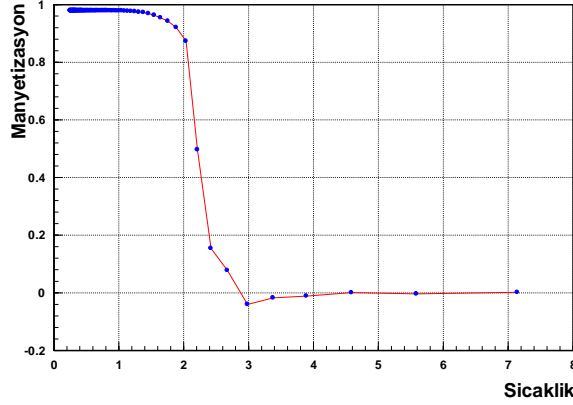
Şekil 4.3 81x81 spinde ising modele göre iç enerjinin sıcaklıkla değişimi.

IV.2 MAGNETİZASYONUN SICAKLIKLA DEĞİŞİMİ

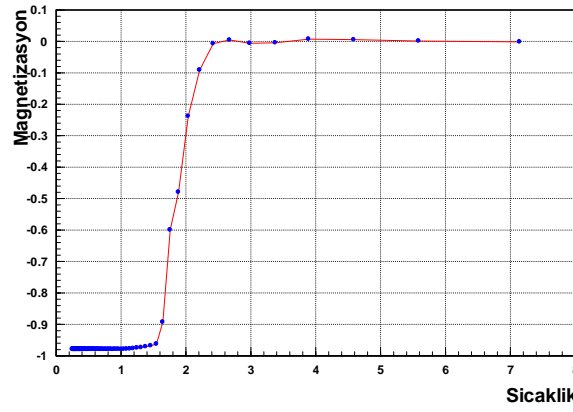
Yine dış manyetik alan sıfır alınıp sadece sıcaklık değiştirildiğinde manyetizasyonun (mıknatıslanma) nasıl değiştiği aşağıdaki grafiklerde gösterilmiştir. Gelişigüzel numaraların her seferinde farklı olması sebebiyle spinler düşük sıcaklıklarda ya tamamen yukarı (bu durumda mıknatıslanma=1) ya da tamamen aşağı (mıknatıslanma=-1) yönelmektedir. Bu durumun kontrol edilmesi imkansız olup her 2 sonuç ta doğrudur. 21x21 den 81x81 e değişen 3 örgüde elde edilen aşağıdaki sonuçlar Şekil 3.9 a tamamen uygundur. Buna göre sistem yüksek sıcaklıklarda paramanyetik iken sıcaklık düştükçe ferromanyetik hale dönüşmekte ve spinler aynı yöne yönelmektedir. Böylelikle bir önceki bölümde görüldüğü gibi iç enerjileri de minimuma inmektedir.



Şekil 4.4 21x21 spin sisteminde ising modele göre manyetizasyonun sıcaklıkla değişimi.



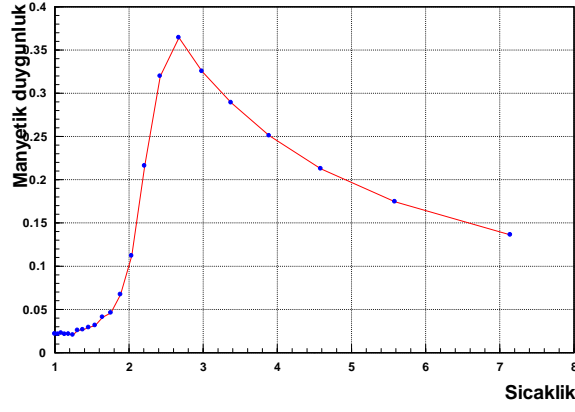
Şekil 4.5 41x41 spin sisteminde ising modeline göre manyetizasyonun sıcaklıkla değişimi.



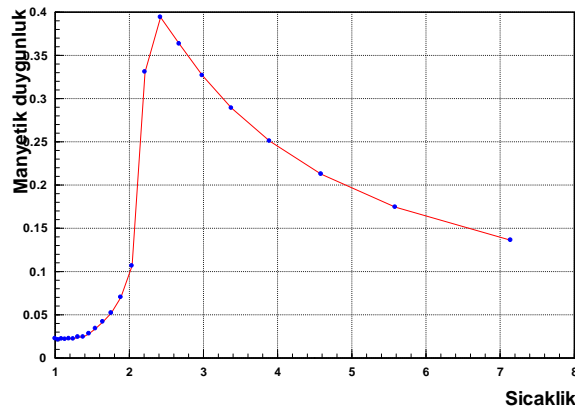
Şekil 4.6 81x81 spin sisteminde ising modeline göre manyetizasyonun sıcaklıkla değişimi.

IV.3 MANYETİK DUYGUNLUĞUN SICAKLIKLA DEĞİŞİMİ

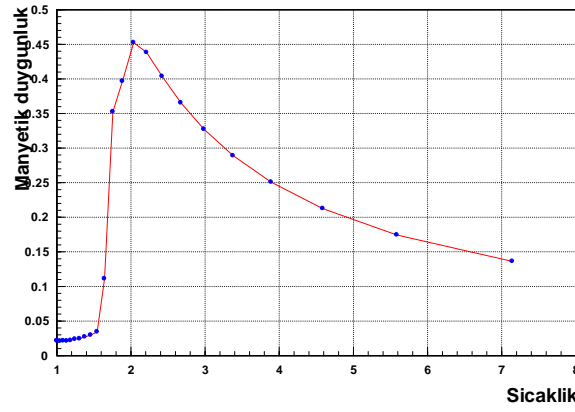
Şekil 3.8 de görüldüğü gibi (denklem 3.22 den elde edilen) manyetik duygunluk kritik sıcaklık civarında tepe değerine ulaşmaktadır. Aşağıda 3 farklı örgüden de görüldüğü gibi tarafımızdan elde edilen manyetik duygunluk aynen kritik sıcaklık olan 2.3 civarında tepe değerine ulaşmaktadır. Bu da spin sisteminin kritik sıcaklık civarında sıcaklıkla son derece etkin olarak değişebildiğini göstermektedir. Düşük sıcaklıklarda spin sistemi artık ferromanyetik hale geldiğinden, manyetik duygunluğu da paramanyetik sisteme göre azalmıştır. Yani spinlerin tümü aynı yönde iken bu spinlerin dış manyetik alandan etkilenmeleri son derece azalmıştır. Çünkü tüm sistem artık sade bir mıknatıs haline gelmiştir. 21x21 grafiğinde maksimum değer $T=2.6$ civarında iken bu değer 81x81 örgüsünde doğru değer olan $T=2.3$ e yaklaştığı görülmektedir. Bu da örgü nokta sayısının çözüm hassasiyetini nasıl arttırdığını göstermektedir.



Şekil 4.7 21x21 spinde ising modele göre manyetik duygunluğun sıcaklıkla değişimi.



Şekil 4.8 41x41 spinde ising modele göre manyetik duygunluğun sıcaklıkla değişimi.

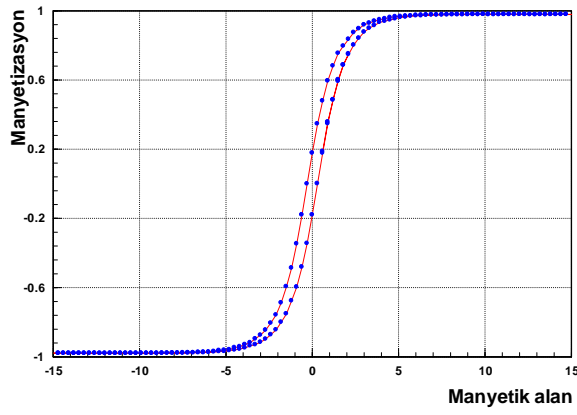


Şekil 4.9 81x81 spinde ising modele göre manyetik duygunluğun sıcaklıkla değişimi.

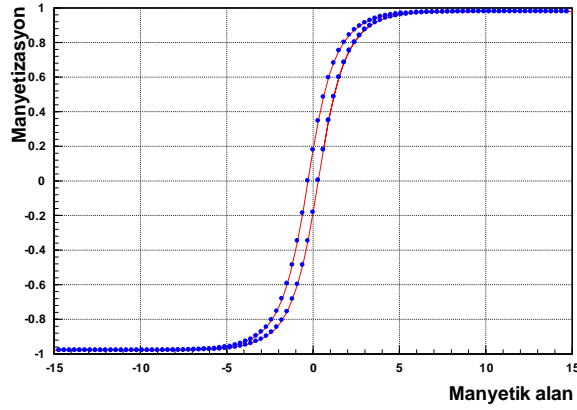
IV.4 ISING MODEL – HISTERİSİS ETKİSİ, MANYETİZASYONUN

MANYETİK ALANLA DEĞİŞİMİ

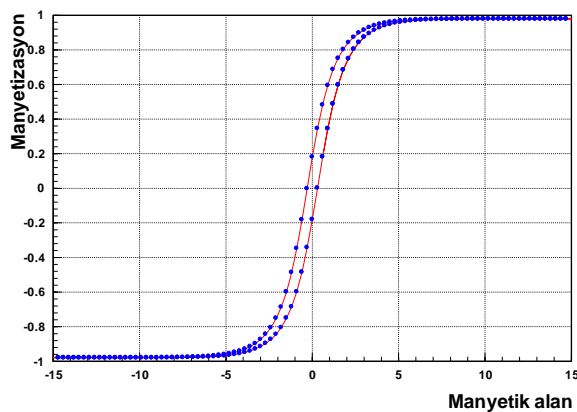
Bu bölümde sıcaklık $T=4$ değerinde sabit tutularak manyetik alan değerleri -15 değerinden +15 değerine arttırılmış daha sonra da geri dönülerek -15 değerine tekrar inilmiştir. Seçilen sıcaklık kritik sıcaklıktan daha büyük olduğundan sistemin histerisis etkisi oldukça düzgün bir şekilde görülmektedir. Bu da daha önce sadece 1 yön için verilen Şekil 3.9 a uygundur. Östelik bu eğri neredeyse örgüdeki spin sayısından bağımsız görülmektedir.



Şekil 4.10 21x21 spin sisteminde ising-histerisis e göre manyetizasyonun manyetik alanla değişimi.



Şekil 4.11 41x41 spin sisteminde ising-histerisis e göre manyetizasyonun manyetik alanla değişimi.

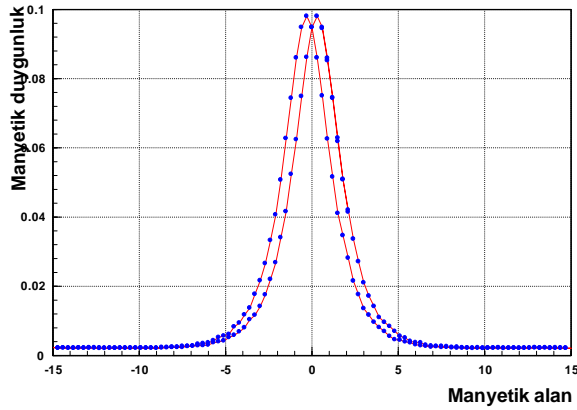


Şekil 4.12 81x81 spin sisteminde ising-hysterisis e göre manyetizasyonun manyetik alanla deęişimi.

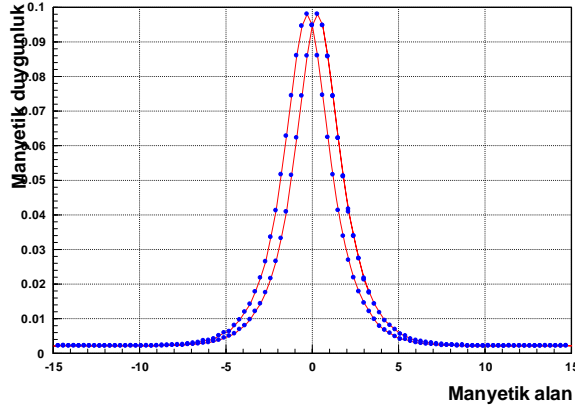
IV.5 ISING MODEL – HISTERISIS ETKİSİ, MANYETİK DUYGUNLUĞUN

MANYETİK ALANLA DEĞİŞİMİ

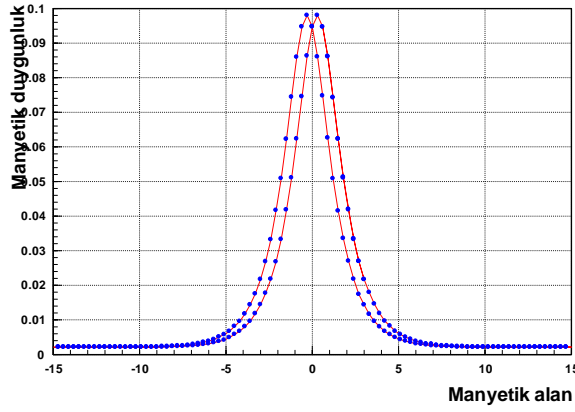
Aşağıdaki grafiklerde, aynı örgüler için manyetik duygunluğun dış manyetik alanla nasıl deęiştięi gösterilmektedir. Buna göre manyetik duygunluk dış manyetik alanın sıfır olduęu deęerlerde maksimuma ulaşmış fakat her iki yöndeki manyetik alan deęeri arttıkça da minimuma inmiştir. Ayrıca bu grafiklerden manyetik duygunluğun da histerisis etkisi gösterdięi görülmektedir



Şekil 4.13 21x21 spinde ising-hysterisis e göre manyetik duygunluğun manyetik alanla deęişimi.



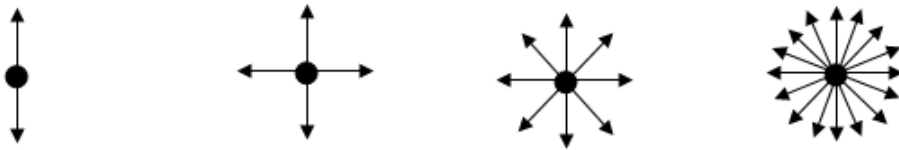
Şekil 4.14 41x41 spinde ising-hysteresis e göre manyetik duygunluğun manyetik alanla değişimi.



Şekil 4.15 41x41 spinde ising-hysteresis e göre manyetik duygunluğun manyetik alanla değişimi.

IV.6 POTTS MODEL

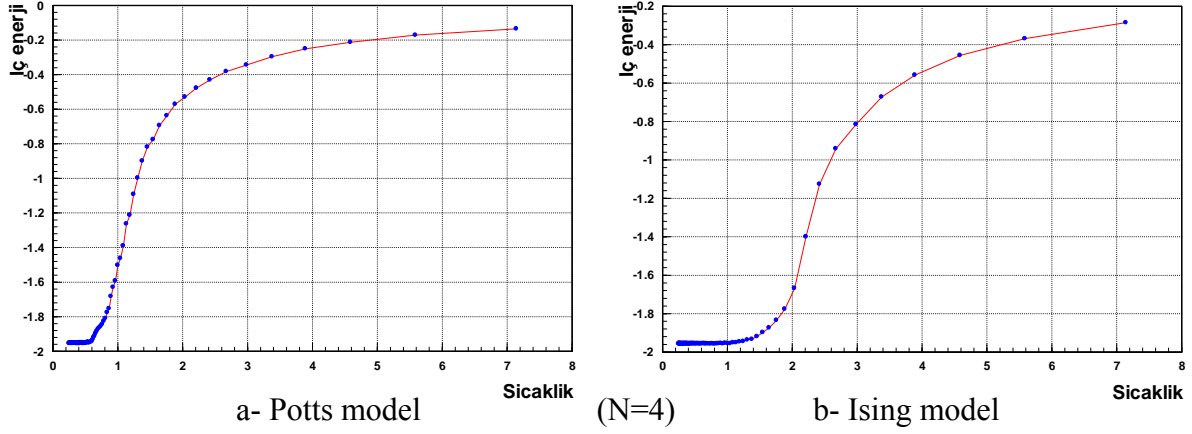
Bilindiği gibi Ising modelde spinler ya aşağı ya da yukarı yönelebilmektedirler. Fakat potts modelde kodumuz 2 den 16 ya kadar istenildiği kadar açıda yönelimlere izin verecek şekilde çalışmaktadır. Biz 4, 8 ve 16 yönelim seçerek bu modelin Ising modelinden farklılığını anlamaya çalıştık. Sonuçlar benzeri çıkmasına rağmen bariz farklılıklar gözledik ve en önemlisi de açı sayısı fazla olduğundan Monte Carlo iterasyon sayısının artırılması gerektiğini gösterdik. Aşağıda verilen Şekil 4.16 da kullanılan spin yönelimleri gösterilmiştir. [13]



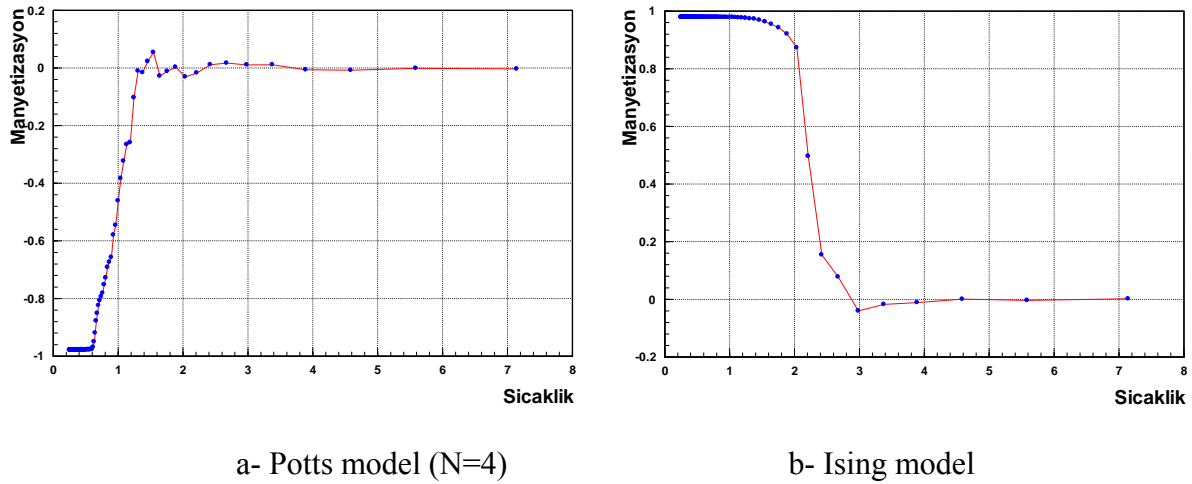
a) Ising-2 yönelim b) Potts-4 yönelim c) Potts-8 yönelim d) Potts-16 yönelim

Şekil 4.16 Potts modelde spin yönelimleri

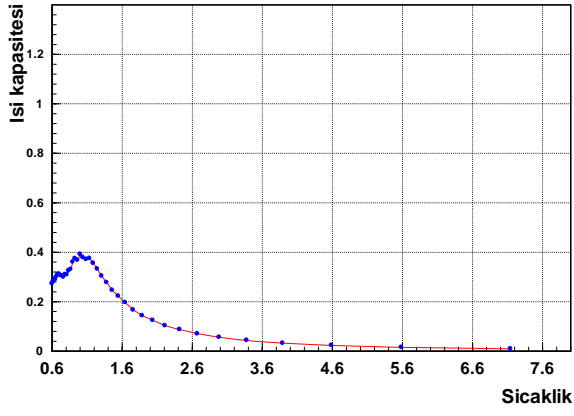
Bu bölümde Potts modeli için 41x41 örgü seçilmiş ve $N=4$ yönelime sahip olan spinler için aşağıdaki iç enerji, manyetizasyon, ısı kapasitesi ve histerisis grafikleri elde edilmiştir. Bu grafiklerin sağ taraflarına ise Ising model ile elde edilen grafikler karşılaştırılmak amacıyla çizilmiştir.



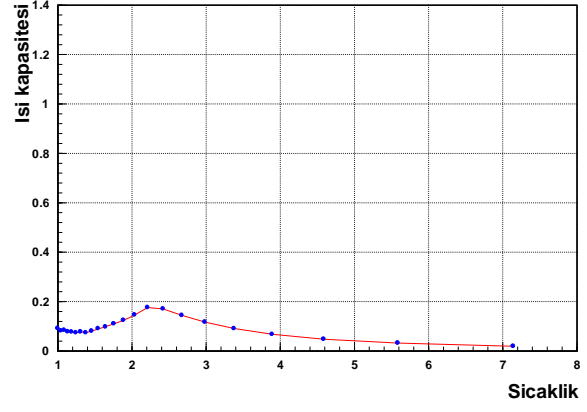
Şekil 4.17 Potts ve Ising modellerine göre 41x41 örgüde iç enerji-sıcaklık değişimleri



Şekil 4.18 Potts ve Ising modellerine göre 41x41 örgüde iç manyetizasyon-sıcaklık değişimleri

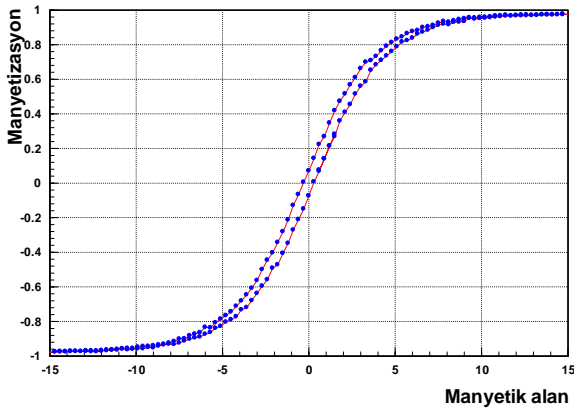


a- Potts model (N=4)

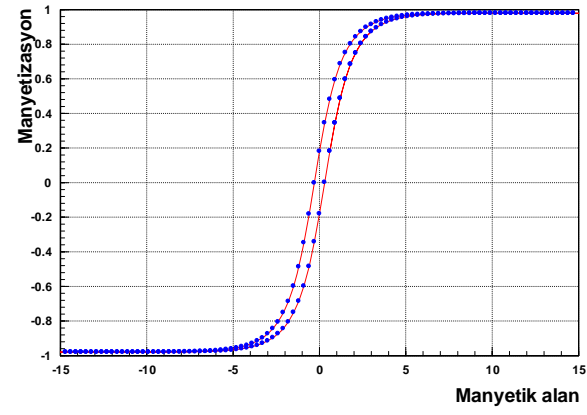


b- Ising model

Şekil 4.19 Potts ve Ising modellerine göre 41x41 örgüde ısı kapasitesi-sıcaklık değişimleri

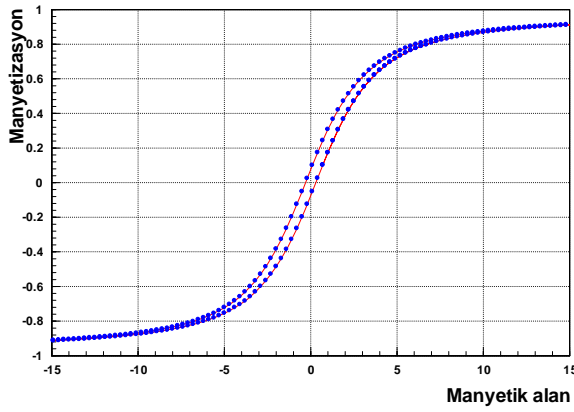


a- Potts model (N=4)

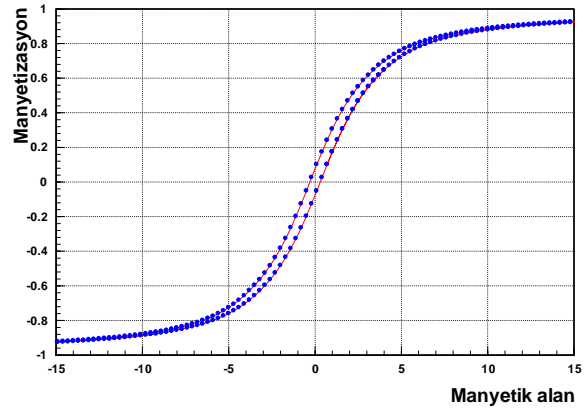


b- Ising model

Şekil 4.20 Potts ve Ising modellerine göre 41x41 örgüde histerisis değişiminde manyetizasyon – manyetik alan değişimleri.

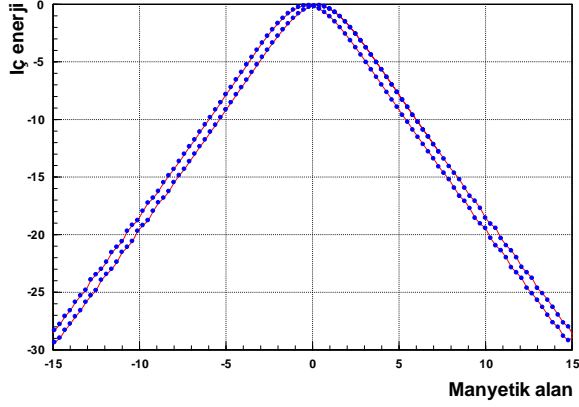


a- Potts model (N=4)

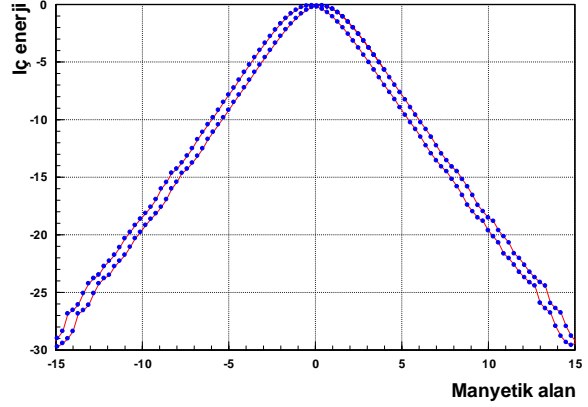


b- Ising model

Şekil 4.21 Potts ve Ising modellerine göre 41x41 örgüde histerisis değişiminde manyetizasyon – manyetik alan değişimleri.

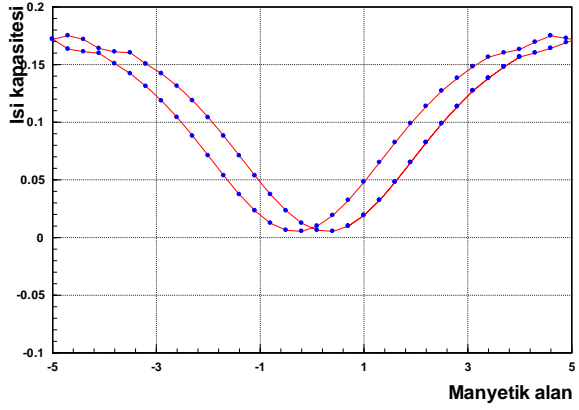


a- Potts model ($N=4$)

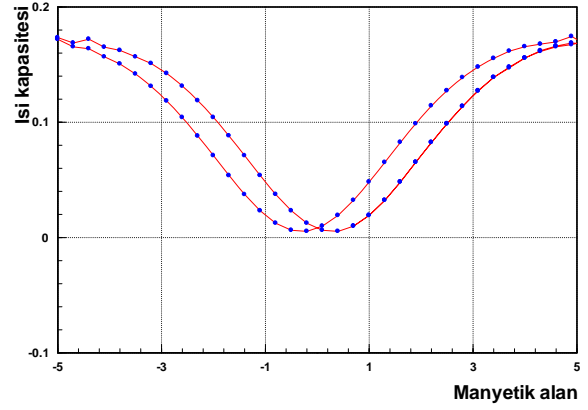


b- Ising model

Şekil 4.22 Potts ve Ising modellerine göre 41×41 örgüde histerisis değişiminde iç enerji – manyetik alan değişimleri.

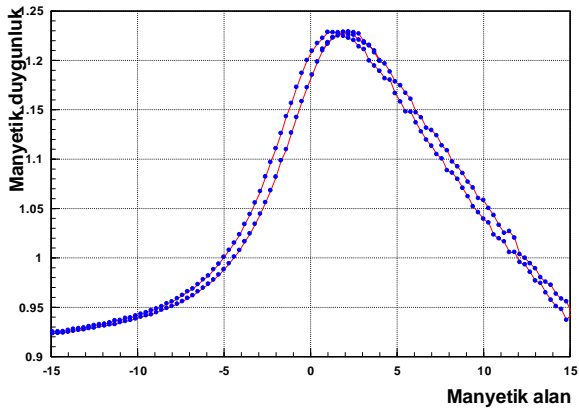


a- 1000 adım

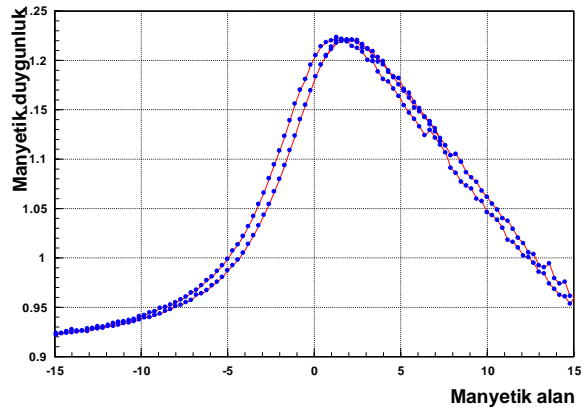


b- 2000 adım

Şekil 4.23 Potts modele göre 41×41 örgüde 1000 ve 2000 monte carlo adımları için ısı kapasitesi-manyetik alan grafikleri.



a- 1000 adım



b- 2000 adım

Şekil 4.24 Potts modele göre 41×41 örgüde 1000 ve 2000 monte carlo adımları için manyetik duygunluk-manyetik alan grafikleri.

KAYNAKLAR

1. Kittel C., Kroemer H. (1980) Thermal Physics, Second Edition: 151-180
2. J.R. Hook, H.E. Hall (1990) Solid State Physics Second Edition: 200
3. Güriş S., Bülbül Ş. (1995) Olasılık: 30
4. Kittel C.- Karaoğlu B. (1996 Çeviri), Katıhal Fiziğine Giriş: 295-308
5. Karaoğlu B. (2003), İstatistik mekaniğe giriş: 31-80
6. Giordana NJ. Computational Physics (07458): 204- 232
7. Pathria R.K Statistical Mechanics, Second edition: 11-28
8. Kubo R., Statistical Machanics: 1-28,102,183
9. Taylor JR., Zafaritos C. – Karaoğlu B. (1996 çeviri) Modern Fizik: 54-60, 201-203
10. Greiner Neise Stöcker, Thermodynamics and Statistical Mechanics (1994): 142-150, 159-250
11. Landau LD, Lifshitz EM. (1958) Statistical Physics: 253-270
12. BH. Bransden, CJ. Joachain – F Köksal, H Gümüş (1999 Çeviri)Atom ve molekül fiziği: 1-49
13. F.Y. Wu, Institut für Festkörperforschung der Kernforschungsanlage D-5170 Jülich, West Germany /American Phy Soc. / 1982
14. Michael Mihalco and Andrew Paradis /Department of Physics & Astronomy / ECE 498 /2006
15. Tobias Preis, Peter Virnau, Wolfgang Paul, Johannes J. Schneider / Journal of Computational Physics 228/ 2009
16. D Ivaneyco, B Berche, Yu Holovatce, J Ilnyskiy / Physica A 387 / 2008
17. J Engels, L Feromme, M Seniuch / Science Direct – Nuclear Physics B 655 / 2003
18. P Bortolotti, A Magni, V Bosso, G Bertotti / Science Direct – Journal of Magnetism and Magnetic Materyals 310 / 2007

ÖZGEÇMİŞ

Adı ve Soyadı : Ömer AŞÇI
Baba adı : Burhan
Anne adı : Halise
Doğum yeri : Siirt
Doğum yılı : 1976

İlk, orta ve lise eğitimini İstanbul da tamamladı. Yüksek öğrenimini Yıldız Teknik Üniversitesi Fen edebiyat Fakültesi Fizik bölümünü 2000 yılında bölüm birincisi olarak bitirdi. Mezun olduktan bu güne değin özel kurumlarda Fizik ve Fen bilgisi öğretmenliği, Fizik zümre başkanlığı, editörlük gibi görevler üstlenmiştir. Halen özel bir kurumda fizik öğretmenliği yapmaktadır. Geleceğe yönelik ideallerini gerçekleştirmek amacıyla lisansüstü eğitimini Marmara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik ABD da tamamlamaktadır.