

DOKUZ EYLÜL ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

SPİN SİSTEMLERİNİN DENGE
YAKINLARINDAKİ KİNETİK
DAVRANIŞLARININ İNCELENMESİ

Erol VATANSEVER

Temmuz, 2011

İZMİR

**SPİN SİSTEMLERİNİN DENGE
YAKINLARINDAKİ KİNETİK
DAVRANIŞLARININ İNCELENMESİ**

Dokuz Eylül Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü

Yüksek Lisans Tezi

Fizik Anabilim Dalı

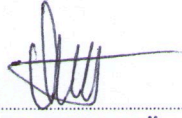
Erol VATANSEVER

Temmuz, 2011

İZMİR

YÜKSEK LİSANS TEZİ SINAV SONUÇ FORMU

EROL VATANSEVER, tarafından **YRD. DOÇ. DR. GÜL GÜLPINAR** yönetiminde hazırlanan **“SPİN SİSTEMLERİNİN DENGE YAKINLARINDAKİ KİNETİK DAVRANIŞLARININ İNCELENMESİ”** başlıklı tez tarafımızdan okunmuş, kapsamı ve niteliği açısından bir Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir.



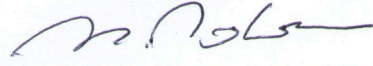
Yrd. Doç. Dr. Gül GÜLPINAR

Yönetici



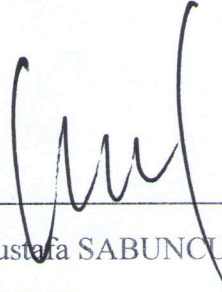
Prof. Dr. A. Nihat BERKER

Jüri Üyesi



Prof. Dr. Hamza POLAT

Jüri Üyesi



Prof. Dr. Mustafa SABUNCU

Müdür

Fen Bilimleri Enstitüsü

TEŐEKKÜR

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

Sayısal verilerin elde edilmesinde yararlandığımız bilgisayar olanakları için Boğaziçi Üniversitesi ve TÜBİTAK'a bağılı olan Feza Gürsey Enstitüsü bünyesindeki Gilgamesh Cluster'ından yararlanmamızı sağlayan Enstitü müdürü Prof. Dr. Teoman TURGUT'a

Her zaman yakınlığını ve yardımını hissettiğim bölümümüz araştırma görevlilerinden sayın Dr. Aylin YILDIZ'a

Son olarak, bu güne kadar maddi ve manevi her konuda destekleriyle benimle birlikte olan değerli aileme ve Araş. Gör. Zeynep DEMİR'e teşekkürlerimi sunarım.

Erol VATANSEVER

SPİN SİSTEMLERİNİN DENGE YAKINLARINDAKİ KİNETİK DAVRANIŞLARININ İNCELENMESİ

ÖZ

Bu tez çalışmasında, kristal alan düzensizliği içeren kinetik Blume-Capel (BC) modelinin kinetik faz geçişi özellikleri üzerinde çalışılmıştır. Sistemin zamanla değişimi Glauber stokastik dinamiğini ile modellenerek, sınımlı bir dış manyetik alan etkisi altındaki sistemin kararlı hal çözümleri iki farklı yaklaşım altında (ortalama alan yaklaşımı (OAY) ve etkin alan yaklaşımı (EAY)) elde edilmiştir. İlk olarak, master denklem formülasyonu ile OAY ve EAY kinetik hal denklemleri türetilmiş daha sonra bu denklemlerin sayısal çözümleri yapılarak manyetizasyonun zamanla değişimi elde edilmiştir. Ardından, manyetizasyonun bir periyot üzerinden zaman ortalamasına karşılık gelen dinamik düzen parametresinin zamanla değişimi elde edilerek dinamik faz geçişi noktaları ve faz diyagramları elde edilmiştir. Yapılan hesaplamalar düzensizliğin faz diyagramları üzerinde dramatik etkiler yarattığını ortaya koymuştur.

Anahtar Sözcükler: Donmuş Düzensizlik, Rassal Kristal Alan, Kinetik Blume-Capel Modeli, Kinetik Ising Modeli.

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

ABSTRACT

In this thesis, we have studied the kinetic phase transition properties of the Blume-Capel model with random single ion anisotropy. By making use of the Glauber stochastic dynamics, the stationary states of the system under the effect of the oscillating magnetic field are obtained in two different approximations: mean field approximation (MFA) and effective field approximation (EFA). The time averaged magnetization acts as the order parameter and divides temperature field plane into three regions: ferromagnetic, paramagnetic and coexistence of ferromagnetic and paramagnetic phases. It is observed that the topology of the dynamical phase diagram depends strongly on the concentration of the crystal field.

Keywords: Quenched Randomness, Random Crystal Field, Kinetic Blume-Capel Model, Kinetic Ising Model.

İÇİNDEKİLER

Sayfa

YÜKSEK LİSANS TEZİ SINAV SONUÇ FORMU	ii
TEŞEKKÜR.....	iii
ÖZ	iv
ABSTRACT.....	v
BÖLÜM BİR - GİRİŞ	1
BÖLÜM İKİ - MODELLER VE METOT	5
2.1 Ising Modeli	5
2.1.1 Bir Boyutlu Örgü İçin Kesin Çözüm	6
2.1.2 d-Boyutlu Örgü İçin Ortalama Alan Yaklaşımı (OAY)	9
2.1.3 Etkin Alan Yaklaşımı (EAY) Altında Ising Modeli	15
2.2 Spin-1 Blume-Capel (BC) Modeli	16
2.3 Master Denklemi ve Glauber Modeli	17
2.3.1 Genel Formülasyon	17
2.3.2 Markov Zincirleri	20
2.3.3 Master Denklemi	21
2.3.4 Master Denklemine Türetimi	22
2.3.5 Ayrıntılı Denge	23
2.3.6 Tek Spinden Oluşan Sistem İçin Glauber Modeli	25
2.3.7 N Spinden Oluşan Sistem İçin Glauber Modeli	26

BÖLÜM ÜÇ - ISING MODELİNDE DİNAMİK FAZ GEÇİŞLERİ	29
3.1 Ising Modelinde Dinamik Faz Geçişlerinin OAY Altında İncelenmesi	29
3.2 Ising Modelinde Dinamik Faz Geçişlerinin EAY Altında İncelenmesi	33
BÖLÜM DÖRT - OAY ALTINDA KİNETİK SPİN-1 BC MODELİ	37
4.1 Kristal Alan Düzensizliği İçeren Kinetik Spin-1 BC Modeline Ait Dinamik Denklemlerin OAY Altında Elde Edilmesi	37
4.2 Dinamik Faz Geçiş Noktaları, Dinamik Faz Diyagramları ve Kristal Alan Düzensizliğinin Diyagramlar Üzerindeki Etkileri	40
BÖLÜM BEŞ - EAY ALTINDA KİNETİK SPİN-1 BC MODELİ	53
5.1 Kristal Alan Düzensizliği İçeren Kinetik Spin-1 BC Modeline Ait Dinamik Denklemlerin EAY Altında Elde Edilmesi	53
5.2 Dinamik Faz Geçiş Noktaları, Dinamik Faz Diyagramları ve Kristal Alan Düzensizliğinin Diyagramlar Üzerindeki Etkileri	54
BÖLÜM ALTI - ÖZET VE SONUÇLAR	62
KAYNAKLAR	64
EK.....	69

BÖLÜM BİR

GİRİŞ

Ising modeli 1925 yılında ortaya atılmasına rağmen bu model ile tanımlanabilen sistemlerin dinamik yönleri hala aktif bir çalışma alanını oluşturmaktadır (Chakrabarti ve Acharyya, 1999). Salınlı bir dış manyetik alan altındaki Ising modeli, ilgi çekici dinamik bir sistemdir. Geçtiğimiz birkaç yıl içinde, salınlı bir dış manyetik alan altındaki Ising modelinin dinamik yanıtı bilgisayar simülasyonları kullanılarak detaylı bir biçimde gerçekleştirilmiştir (Acharyya ve Chakrabarti, 1995; Thomas ve Dhar, 1993; Sengupta, Marathe ve Puri, 1990; Tome ve Oliveira, 1990; Rao, Krishnamurthy ve Pandit, 1990; Lo ve Pelcovits, 1990). Dinamik histeresis yanıtı (Rao, Krishnamurthy ve Pandit, 1990; Thomas ve Dhar, 1993; Sengupta, Marathe ve Puri, 1990) ve denge dışı faz geçişi (Tome ve Oliveira, 1990; Acharyya, 1999; M. Acharyya ve A. B. Acharyya, 2008), salınlı bir dış manyetik alan altındaki Ising modelinin önemli iki özelliğidir. Salınlı bir manyetik alan altındaki Ising modelindeki dinamik geçişler ilk olarak Tome ve Oliviera tarafından incelenmiştir (Tome ve Oliveira, 1990). Ortalama mıknatıslanmayı elde edebilmek için, OAY altında elde ettikleri dinamik hareket denklemini çözmüşlerdir. Salınlı manyetik alanın bir periyodu üzerinden ortalama mıknatıslanmayı belirleyerek dinamik düzen parametresinin, manyetik alanın genliğine ve sıcaklığa bağlı olarak sıfıra gittiğini göstermişlerdir. Düzenli ve düzensiz fazı birbirinden ayıran dinamik faz diyagramını manyetik alan ve sıcaklık düzleminde çizmişler ve bu diyagram üzerinde yer alan üçlü kritik noktanın yerini belirlemişlerdir. Bu durum daha sonra, Monte-Carlo yöntemi (Acharyya, 1999) ve kinetik Ising modeline ait ortalama alan dinamik durum denkleminin çözülmesiyle (M. Acharyya ve A. B. Acharyya, 2008) teyit edilmiştir.

Sıfır frekans limitinde, ortalama alan dinamik hareket denkleminin çözümünden elde edilen faz geçişi gerçek anlamda dinamik bir faz geçişi değildir (Tome ve Oliveira, 1990). Bunun sebebi, dalgalanmaların ve gürültülerin olmadığı durumlarda, dış manyetik alan değerinin zorlayıcı manyetik alandan daha düşük olmasından

kaynaklanan, manyetizasyonun serbest enerjinin bir kuyusundan diğereine geçememesidir.

Monte-Carlo simülasyonu kullanılarak, kinetik Ising modelindeki dinamik faz geçişinin doğası ilk olarak Lo ve Pelcovits (1990) tarafından çalışılmıştır. Dalgalanmaların varlığından dolayı sıfır frekans limitinde dinamik faz geçişi ortadan kalkar. İlerleyen yıllarda, başka bir grup tarafından, salınımlı bir dış manyetik alan altındaki kinetik Ising modelinin dengedışı dinamik faz geçişi Monte-Carlo simülasyonu kullanılarak incelenmiştir (Acharyya ve Chakrabarti, 1995). Dinamik faz geçişleri, dinamik histeresis döngüsünün simetrisinde meydana gelen kırılma ile ilgilidir. Dinamik anlamda düzensiz faz, histeresisteki simetriye karşılık gelir, düzenli fazda ise bu simetri gözden kaybolur. Dinamik faz geçiş noktası yakınında ac süseptibilitenin sıcaklıkla değişimi yine onlar tarafından çalışılmıştır ve burada ac süseptibilitenin imajiner kısmının dinamik faz geçiş noktasında pik yaptığını gözlemlenmiştir. Elde etmiş oldukları bu sonuçlar: Faz geçişlerinin belirgin bir özelliğini gösterir ve termodinamik doğası hakkında bilgi verir. Yakın zaman önce, OAY ve Monte-Carlo simülasyonu altında, dinamik düzen parametresinin durulma davranışı incelenmiştir (Acharyya, 1997). Durulma davranışının Debye türü bir durulma davranışı olduğunu ve dinamik faz geçiş noktası yakınında ıraksadığını gözlemlenmiştir.

Bu tezin ana amacını kristal alan düzensizliği içeren kinetik spin-1 BC modelinin dinamik davranışı oluşturmaktadır. Bu bağlamda, spin-1 BC modelinden bahsetmek yerinde olacaktır. Spin-1 Ising sistemleri çok geniş aralıktaki sistemlerin incelenmesinde kullanılmıştır: Hareketli kusurları bulunan materyaller, yapısal camlar (Kirkpatrick ve Thirumalai, 1987), $\text{He}^3 - \text{He}^4$ karışımlarındaki süperakışkan geçişi (Blume, Emery ve Griffiths, 1971), bunalımlı Ising örgü gazı sistemleri (Nicodemi ve Coniglio, 1997), ikili akışkanlar, ikili alaşımlar ve bunalımlı perkolasyon (Coniglio, 1993). Yakın zaman önce, Blume-Capel (Blume ve Capel, 1966) ve Blume-Emery-Griffiths modelleri, ters erime olayını derinlemesine araştırmak için kullanılmıştır. Bu olay, polimerler, koloidler, ve çözücü-yağ karışımları gibi pek çok sistemde ortaya çıkmaktadır (Schupper, Shnerb, 2005).

Diğer yandan, birbirleriyle rekabet eden etkileşimlere sahip olan Ising sistemleri, kritiklik ve faz diyagramlarını güçlü bir şekilde etkiler.

Manyetik sistemlerdeki düzensizlik etkileri sadece teorik olarak değil deneysel olarak da çalışılmıştır (Bouchiat, Dartyge 1981; Katsumata, Nire ve Tanimoto 1982; Belanger, ve Young, 1991). Renormalizasyon grup çalışmaları, birinci derece geçişlerin ikinci derece geçişlerle yer değiştirdiğini ve bunun sonucunda üçlü kritik ve kritik son noktaların sıcaklıkla bastırıldığını göstermişlerdir (Hui ve Berker, 1989).

Düzensizlik içeren özel bir manyetik sistem olan donmuş düzensizlik içeren spin-1 Ising sistemi aerojellerdeki helyum karışımlarının faz sınırını belirlemek için kullanılır (Maritan ve diğerleri, 1992; Buzano, Maritan ve Pelizzola, 1994). Bu gerçekten dolayı, Blume-Capel modelinin çoklu kritik faz diyagramı üzerindeki kristal alan düzensizliklerinin etkisi çalışma motivasyonu oluşturmuş ve EAY (Kaneyoshi, 1986), OAY (Benyoussef ve Biaz, 1987; Boccara ve diğerleri, 1989), küme değişim metodu (Buzano, Maritan ve Pelizzola, 1994) rastgele dış alan (Kauffman ve Kanner, 1990) gibi pek çok metod kullanılarak çalışılmıştır. Branco ve arkadaşları, sırasıyla BC ve BEG Hamiltoniyenleri için RG (Branco ve Boechat, 1997; Branco, 1999) teorisini ve OAY'nı (Branco ve Bachmann, 1998) kullanarak rastgele kristal alan etkilerini incelemişlerdir. Son zamanlarda, Renormalizasyon grup teorisi kullanılarak, kristal alan etkileşimi içeren BC modeli de incelenmiştir (Snowman, 2009). Son olarak, sonsuz-erim etkileşimleri içeren BC modelinin multikritik davranışını, kristal alana düzensizlik eklenerek incelenmiştir (Salmon ve Tapia, 2010). Rasgele kristal alan etkileşimi içeren BC modelinin denge özelliklerinin geniş ölçüde çalışılmış olmasına rağmen, bildiğimiz kadarıyla, modelin kinetik özellikleri Glauber modeliyle çalışılmamıştır. Bundan dolayı, bu tezin konusu sınımlı bir dış manyetik alan etkisi altında donmuş iki değerli kristal alan içeren spin-1 BC modelini çalışmaktır. Sistemin zaman evrimini inceleyebilmek için Glauber dinamiği kullanılmıştır (Glauber, 1963). Dinamik faz geçiş noktaları ve farklı kristal alan konsantrasyonları için manyetik alan ve sıcaklık düzleminde dinamik faz diyagramları elde edilmiştir. Saf BC modeli için ilk çalışma Buendia ve Machado tarafından gerçekleştirilmiştir (Buendia ve Machado, 1998). Bu çalışmada,

manyetik alan ve sıcaklık düzleminde sadece iki faz diyagramı sunulmuştur. İlerleyen zamanlarda, Keskin ve arkadaşları, faz diyagramlarından birinin, olası tüm manyetik alan genliklerine bakılmadığından dolayı eksik olduğunu belirterek faz diyagramlarını manyetik alan ve sıcaklık düzleminde sunmuş ve beş ayrı faz topolojisi elde etmişlerdir (Keskin, Canko ve Temizer, 2005).

Bu giriş bilgilerinin ardından, ikinci bölümde, bir boyutlu Ising modelinin kesin çözümünden, OAY altında elde edilen d boyutlu Ising modeline ait bazı termodinamik niceliklerin analitik formları ve sıcaklıkla değişimlerinden, spin-1 BC modelinden bahsedilmiştir. Ayrıca, yine bu bölümde, Markov zincirlerinden, Master denkleminde, tek ve N spinden oluşan sistemlerin Glauber dinamiğinden söz edilmiştir. Üçüncü bölümde, OAY ve EAY altında, kinetik spin-1/2 Ising modelinin dinamik yapısı incelenmiştir. Her iki yaklaşım yöntemi altında, dinamik düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişiminden faydalanılarak dinamik faz diyagramları oluşturulmuştur. Dinamik döngü alanı ve dinamik korelasyon niceliklerinin sıcaklıkla değişimleri yine bu bölüm içerisinde ele alınmıştır. Dördüncü bölümde, OAY altında, kristal alan düzensizliği içeren kinetik spin-1 BC modelinin denge dışı davranışı üzerine odaklanılmıştır. Bu amaç doğrultusunda, Glauber dinamiğinden yararlanılarak dinamik hal denklemleri oluşturulmuş ve uygun yöntemler aracılığı ile manyetizasyonun zamana göre değişimini veren çözüm elde edilmiştir. Daha sonra, manyetizasyonun bir periyot üzerinden ortalaması olan dinamik düzen parametresinden yararlanılarak dinamik faz geçiş noktaları tespit edilmiş ve faz diyagramları manyetik alan sıcaklık düzleminde sunulmuştur. Yine bu bölüm içerisinde, manyetik alandaki salınım kaldırılarak statik bir dış manyetik alan etkisi altındaki kristal alan düzensizliği içeren kinetik spin-1 BC modeline ait düzen parametresinin sıcaklıkla değişiminden söz edilmiştir. Beşinci bölümde, EAY altında, kristal alan düzensizliği içeren kinetik spin-1 BC modelinin denge dışı davranışları incelenmiştir. Bir önceki bölümde yapılan analize benzer şekilde, dinamik faz geçiş noktalarından yararlanılarak dinamik faz diyagramları manyetik alan sıcaklık düzleminde oluşturulmuş ve kristal alan konsantrasyon değerlerinin bu diyagramlar üzerinde etkilerine odaklanılmıştır. Son olarak, altıncı bölümde elde edilen bulguların tartışılması yer almaktadır.

BÖLÜM-2

MODELLER VE METOT

2.1 Ising Modeli

Denge istatistik mekaniğinin en önemli sorunsallarından birini düzenli halden düzensiz hale geçişler oluşturur (Reichl, 1997). En basit örnek olarak, μ manyetik momente sahip 1/2 spinli N parçacığın oluşturduğu bir sistem verilebilir. Herhangi bir örgü noktası en yakın komşu spinlerinin oluşturduğu manyetik alanlarla ve dış manyetik alan ile etkileşir. Böyle bir sistem için Hamiltoniyen aşağıdaki gibi yazılabilir (Ising, 1925):

$$\hat{H} = \sum_{ij} \epsilon_{ij} S_i S_j - \mu B \sum_{i=1}^N S_i \quad (2.1.1)$$

Buradaki ilk toplam sembolü en yakın komşular üzerinden toplamı gösterir. Diğer yandan, ϵ_{ij} i . ve j . noktalar arasındaki manyetik etkileşim enerjisini, S_i i . noktadaki spinin z bileşenini ve son olarak B dışardan uygulanan manyetik alanı göstermektedir. Spin-1/2 için, i noktasında bulunan spin pozitif z doğrultusunda yönelmiş ise $S_i = +1$, negatif z doğrultusunda yönelmiş ise $S_i = -1$ 'dir. Denklem (2.1.1) ile verilen Hamiltoniyen kinetik enerji içermeyip sadece spin yönelimleri hakkındaki bilgiyi ve örgü sitelerinin uzaysal dağılımını içerir. $\epsilon_{ij} < 0$ ve $B = 0$ durumunda, tüm örgü noktalarında yer alan spinlerin yukarı veya aşağı yönlü olması durumu sistemin en düşük enerji seviyesini oluşturacaktır. Bu iki durum eş olasılığa sahiptir. $B \neq 0$ durumunda ise tüm örgü noktalarındaki spinlerin yukarı yönlü olması enerji bakımından tercih edilen durumdur. Benzer şekilde, $\epsilon_{ij} > 0$ ve $B = 0$ durumunda, komşu spinlerin birbirine zıt yönde yönelmiş olmaları tercih edilen durumu oluşturacaktır. Böyle bir sistem için bölüşüm fonksiyonu aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$Z_N(T) = \sum_{\{S_i = \pm 1\}} \exp \left[-\beta \sum_{ij} \epsilon_{ij} S_i S_j + \beta \mu B \sum_{i=1}^N S_i \right] \quad (2.1.2)$$

Burada ilk toplam terimi, tüm farklı konfigürasyonların göz önüne alınacağını belirtir. Manyetik etkileşim enerjisi spinleri düzenli duruma yönlendirirken, termal enerji örgüdeki spinleri rastgele yönlendirme eğilimindedir. Bu iki çekişme düzenli-düzensiz faz geçişine sebep olmaktadır. Düşük sıcaklıklarda sistem düzenli fazda olacaktır. Sıcaklığın artırılmasıyla birlikte, düzenli faz gözden kaybolur ve spinler rastgele yönelmeye başlarlar. Denklem (2.1.1) ile tanımlanan sistem Ising modeli olarak bilinir ve ilk olarak Ising tarafından ferromagnetizmanın yapısını araştırmak için kullanılmıştır (Ising, 1925). Model aynı zamanda, örgü gazlarının yapısı (Mahan ve Francisco, 1977), ikili alaşımlar (Upton ve Yeomans, 1989) ve DNA'nın yapısı (Etchegoin ve Nöllmann, 2003) gibi çok sayıda fiziksel sistemi başarılı bir şekilde tanımlamada kullanılır.

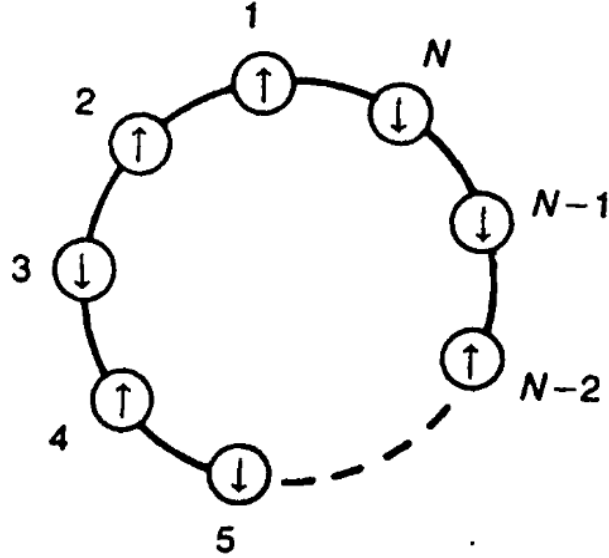
Bir ve iki boyutlu sistemler için Ising modeli kesin olarak çözülebilir. Ancak üç boyutlu sistemler için kesin çözümü mevcut değildir. Diğer yandan, Ising modeli bir boyut ve sonlu sıcaklıkta faz geçişi sergilemez, ancak iki boyutta sergiler. Bir boyuttaki örgü, termal enerji ile rekabet edebilecek kadar en yakın komşu sayısına sahip değildir, iki ve daha üstü uzaysal boyutlar için ise bu sorun ortadan kalkar. İki boyutlu Ising modeli kesin olarak Onsager tarafından çözülmüştür (Onsager, 1944; Kaufman, 1949; Kaufman ve Onsager, 1949). Bu model, faz geçişi gerçekleştirip kesin olarak çözülebilen ender modellerdendir.

Bu bölümde, Ising modelinin iki basit çeşidini göz önüne alacağız. İlk olarak, bir boyutlu Ising modelinin termodinamik özelliklerinin belirlenmesinde kullanılacak olan analitik ifadeler irdelenecektir. Bir boyutlu örgü sonlu bir sıcaklıkta faz geçişi sergilemez. Ancak çözüm metodu, çözülmesi çok daha zor olan iki boyutlu örgü için matematiksel kolaylıklar içerir. Bu bölümde ayrıca, OAY altında faz geçişi gerçekleştiren d boyutlu bir sistemin termodinamik özelliklerinden söz edilecektir.

2.1.1 Bir Boyutlu Örgü İçin Kesin Çözüm

Bu bölümde, herhangi bir yaklaşım yöntemi kullanmadan, N spinden oluşan bir boyutlu Ising modeli transfer matrisi yöntemi kullanılarak çözülecektir. Bu amaç

doğrultusunda ilk olarak, Şekil 2.1'deki gibi eşit aralıklarla sıralanmış N örgü noktasından oluşan bir boyutlu bir sistem göz önüne alalım. Tüm en yakın komşuların aynı etkileşim enerjisi ($\epsilon_{ij} = -\epsilon$) ile etkileştiklerini varsayalım.



Şekil 2.1 N spinden oluşan bir boyutlu periyodik örgü.

Böylece, en düşük enerjili durum, tüm spinlerin aynı yönlü yöneldiği durum olacaktır. Örgünün periyodiklik şartı; $S_{i+N} = S_i$ gibidir. Verilen bir durum için toplam enerjisi:

$$E\{S_i\} = -\epsilon \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} - \mu B \sum_{i=1}^N S_i \quad (2.1.3)$$

ile ifade edebiliriz. Bu durumda, denklem (2.1.2) ile verilen bölüşüm fonksiyonu aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$Z_N(T, B) = \sum_{S_1=\pm 1} \dots \sum_{S_N=\pm 1} \exp \left[\beta \sum_{i=1}^N (\epsilon S_i S_{i+1} + \frac{1}{2} \mu B (S_i + S_{i+1})) \right] \quad (2.1.4)$$

Burada, periyodik örgü için $\sum_{i=1}^N S_i = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (S_i + S_{i+1})$ özelliği kullanılmıştır. Bu formülasyon, 2×2 'lik bir matris oluşturmamıza olanak sağlar,

$$\bar{P} = \begin{pmatrix} e^{\beta(\epsilon+\mu B)} & e^{-\beta\epsilon} \\ e^{-\beta\epsilon} & e^{\beta(\epsilon-\mu B)} \end{pmatrix}, \quad (2.1.5)$$

burada matris elemanları aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$\langle S_i | \bar{P} | S_{i+1} \rangle = e^{\beta \left(\epsilon S_i S_{i+1} + \frac{1}{2} \mu B (S_i + S_{i+1}) \right)}. \quad (2.1.6)$$

O halde bölüşüm fonksiyonu,

$$\begin{aligned} Z_N(T, B) &= \sum_{S_1=\pm 1} \dots \sum_{S_N=\pm 1} \langle S_1 | \bar{P} | S_2 \rangle \langle S_2 | \bar{P} | S_3 \rangle \dots \langle S_N | \bar{P} | S_1 \rangle, \\ &= \sum_{S_1=\pm 1} \langle S_1 | \bar{P}^N | S_1 \rangle = \text{Tr}[\bar{P}^N] = \lambda_+^N + \lambda_-^N = \lambda_+^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right], \end{aligned} \quad (2.1.7)$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada λ_{\pm} nicelikleri \bar{P} matrisinin özdeğerleridir. $\lambda_+ > \lambda_-$ olduğu kabul edilmiştir. \bar{P} 'nin özdeğerleri kolaylıkla bulunur:

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta\epsilon} \left[\cosh(\beta\mu B) \pm \sqrt{\cosh^2(\beta\mu B) - 2e^{-2\beta\epsilon} \sinh(2\beta\epsilon)} \right]. \quad (2.1.8)$$

$N \rightarrow \infty$ durumunda, termodinamik niceliklere sadece en büyük özdeğerden katkı gelir. Bu durum, spin başına Gibbs serbest enerjiden kolaylıkla görülebilir:

$$g(T, B) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} G_N(T, B) = -k_B T \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln[Z_N(T, B)]. \quad (2.1.9)$$

Denklem (2.1.9)'da, $\lim_{N \rightarrow \infty} (\lambda_-/\lambda_+)^N = 0$ yaklaşımı kullanılmıştır. Böylece spin başına Gibbs serbest enerjisi aşağıdaki gibi elde edilir:

$$g(T, B) = -\epsilon - k_B \ln \left[\cosh(\beta\mu B) + \sqrt{\cosh^2(\beta\mu B) - 2e^{-2\beta\epsilon} \sinh(2\beta\epsilon)} \right]. \quad (2.1.10)$$

Ising sistemine ait düzen parametresi olan mıknatıslanma ise spin başına serbest enerjinin dış manyetik alana göre türevinden (2.1.11) no'lu denklemdeki gibidir:

$$\langle S \rangle = - \left(\frac{\partial g}{\partial \mu B} \right) = \frac{\sinh(\beta\mu B)}{\sqrt{\cosh^2(\beta\mu B) - 2e^{-2\beta\epsilon} \sinh(2\beta\epsilon)}}. \quad (2.1.11)$$

Denklem (2.1.11)'den görüldüğü üzere $B \rightarrow 0$ durumunda bir boyutlu Ising modeli faz geçişi göstermez.

2.1.2 d Boyutlu Örgü İçin Ortalama Alan Yaklaşımı (OAY)

Bu bölümde, ilk olarak Weiss (1907) tarafından ele alınan, d boyutlu bir Ising örgü sisteminin termodinamik özelliklerinin anlaşılmasını sağlayan analitik ifadeler incelenecektir. OAY altında, N spinden oluşan ve d boyutlu bir Ising sistemi için Hamiltoniyen aşağıdaki gibidir:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nu \epsilon \langle S \rangle S_i - \mu B \sum_{i=1}^N S_i = - \sum_{i=1}^N E(\epsilon, B) S_i. \quad (2.1.12)$$

Burada, ϵ spin-spin etkileşim sabiti, ν en yakın komşu sayısı ve $E(\epsilon, B) = \frac{1}{2} \nu \epsilon \langle S \rangle + \mu B$ 'dir. Son olarak, $\frac{1}{2}$ faktörü ise, aynı spin çiftlerini iki kez saymadığımızı ifade eden terimdir. $\langle S_i \rangle \equiv \langle S \rangle$ niceliği, site başına ortalama spindir. $\nu \epsilon \langle S \rangle S_i$ niceliği, i . site ve onun en yakın komşuları arasındaki ortalama manyetik etkileşim enerjisidir. Bu sisteme ait bölüşüm fonksiyonu aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$Z_N = \left(\sum_{S_i=\pm 1} e^{\beta E S_i} \right)^N = (2 \cosh(\beta E))^N. \quad (2.1.13)$$

Parçacık başına serbest enerji ifadesini,

$$g(\epsilon, B) = -k_B T \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{N} \ln(Z_N) \right) = -k_B T \ln(2 \cosh(\beta E)), \quad (2.1.14)$$

elde edebiliriz. i . sitedeki S_i spinin olasılığı $P(S_i)$;

$$P(S_i) = \frac{e^{\beta E S_i}}{\sum_{S_i=\pm 1} e^{\beta E S_i}} = \frac{e^{\beta E S_i}}{2 \cosh(\beta E)}, \quad (2.1.15)$$

gibidir. OAY altında, $P(S_i)$ olasılığı, en yakın komşular arasındaki etkileşimi hesaba katmasından dolayı özel bir forma sahiptir.

Sistemin ortalama manyetizasyonu aşağıdaki gibidir:

$$\langle M \rangle = N\mu\langle S \rangle. \quad (2.1.16)$$

Burada $\langle S \rangle$ aşağıdaki formdadır:

$$\langle S \rangle = \frac{\sum_{S_i=\pm 1} S_i e^{\beta E S_i}}{\sum_{S_i=\pm 1} e^{\beta E S_i}} = \tanh(\beta E) = \tanh\left(\beta\left(\frac{1}{2}v\epsilon\langle S \rangle + vB\right)\right). \quad (2.1.17)$$

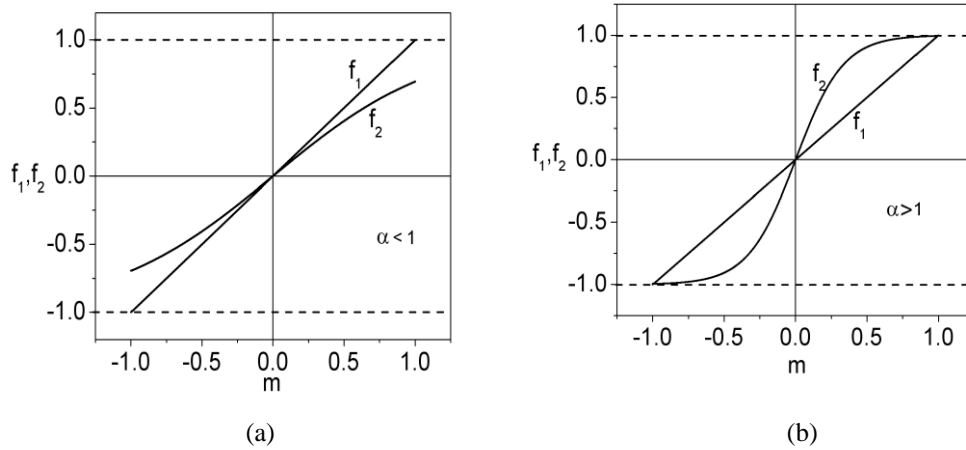
Örgü spini için manyetizasyon düzen parametresidir. $B = 0$ iken, yüksek sıcaklıkta spinler rastgele yönelmiş olurlar ve manyetizasyon sıfır olur. Düşük sıcaklıkta ise, sıfırdan farklı bir değerde olur ki bu durum spinlerin kendi kendine aynı yönlü yöneldiği duruma karşılık gelmektedir. Bu durum aynı zamanda ferromanyetik faz olarak bilinir.

Spin başına ortalama spin ifadesinden yararlanarak kritik sıcaklığı hesaplayabiliriz. $B = 0$ için durumu için $\langle S \rangle$ 'yi yazalım;

$$\langle S \rangle = \tanh\left(\beta\frac{1}{2}v\epsilon\langle S \rangle\right) = \tanh\left(\frac{v\epsilon\langle S \rangle}{2k_B T}\right). \quad (2.1.18)$$

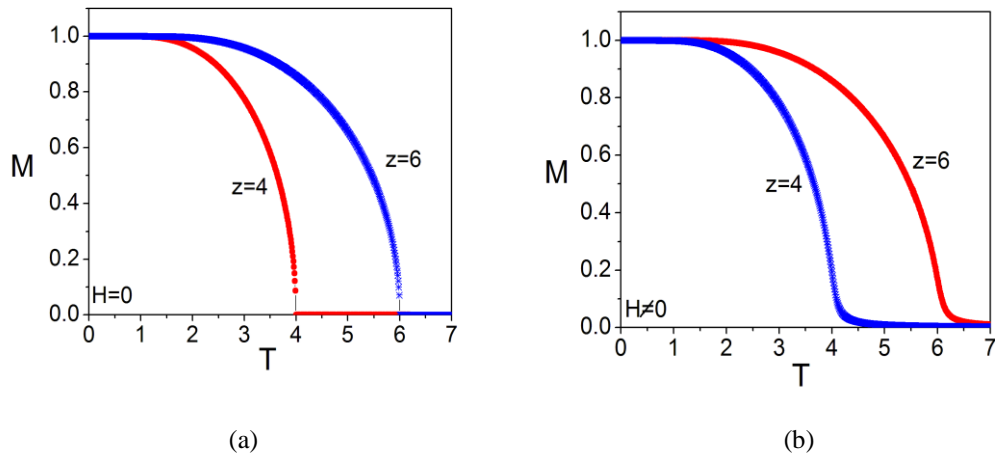
$\langle S \rangle$ 'nin hesaplanabilmesi için bu denklemin çözülmesi gerekmektedir. Bu çözüm grafiksel olarak, $f_1 \equiv \langle S \rangle - \langle S \rangle$ 'ye ve $f_2 \equiv \tanh(\alpha\langle S \rangle) - \langle S \rangle$ 'ye karşı çizilerek yapılabilir. $\alpha < 1$ ve $\alpha > 1$ durumları için, f_1 ve f_2 fonksiyonlarının $\langle S \rangle$ 'ye göre değişimleri sırasıyla Şekil 2.2.a ve Şekil 2.2.b'de sunulmuştur. $\alpha < 1$ durumu için, sadece bir tane kesişen nokta vardır ve bu nokta $\langle S \rangle = 0$ 'da bulunmaktadır. $\alpha > 1$ durumu için ise, üç tane kesişen nokta vardır ve bu noktalar $\langle S \rangle = 0$ ve $\langle S \rangle = \pm S_0$ 'da bulunmaktadır. Bu değerler için spin başına serbest enerjinin değerleri aşağıdaki gibi olur:

$$g(\epsilon, 0) = \begin{cases} -k_B T \ln(2) & \langle S \rangle = 0 \text{ ise,} \\ -k_B T \ln\left(2 \cosh\left(\frac{1}{2}\beta v \epsilon S_0\right)\right) & \langle S \rangle = \pm S_0 \text{ ise} \end{cases} \quad (2.1.19)$$



Şekil 2.2 f_1 ve f_2 fonksiyonlarının m 'ye göre değişimleri. a) $\alpha < 1$ ve b) $\alpha > 1$

Böylelikle, $\langle S \rangle = \pm S_0$ değerleri serbest enerjiyi minimize ettiğinden dolayı termodinamik denge değerleri tanımlanmış olur. Faz geçiş noktası $\alpha = 1$ 'de gerçekleşir. Bu durumda, OAY altında kritik sıcaklık $T = T_c = v\epsilon/2k_B$ 'dir. Spin-1/2 Ising modelinin OAY altındaki hal denklemi doğrusal olmayan bir denklemdir. Mıknatıslanmanın sıcaklıkla değişimini incelemek için yapılması gereken kök bulma işleminin gerçekleştirilmesidir. Bu amaçla sıklıkla tercih edilen bir yöntem olan Newton-Raphson yönteminden yararlanılarak farklı örgü tipleri için düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi Şekil 2.3.a'daki gibi elde edilmiştir. Şekil 2.3.a'dan da açıkça görülebileceği üzere: Başlangıçta aynı yönlü olan tüm spinlerin artan ısısal çalkantı ile birlikte (artan enerji) yönelimleri bozulmakta ve mıknatıslanma sürekli olarak azalarak Curie sıcaklığı olarak adlandırılan özel bir sıcaklıkta sıfıra inmekte ve faz geçişi fenomeni gerçekleşmektedir. Bu durum ferromıknatıs-paramıknatıs, düzenli-düzensiz ya da ikinci derece faz geçişi olarak bilinir. Faz geçiş sıcaklığından sonraki herhangi bir sıcaklıkta özel durum olmadıkça manyetizasyonun değeri sıfırdır. Diğer yandan Curie sıcaklığı farklı örgü tipleri için (bal betegi, kare örgü vb.) değişiklik gösterir. Şekil 2.3.b'de dış manyetik alanın bulunduğu durumda manyetizasyonun sıcaklıkla değişimi gösterilmektedir.



Şekil 2.3 Dış manyetik alan sıfır iken farklı örgü tipleri için manyetizasyonun sıcaklıkla değişimi (a). Dış manyetik alanın sonlu değeri ve farklı örgü tipleri için manyetizasyonun sıcaklıkla değişimi (b).

Burada görüldüğü üzere artan sıcaklıkla beraber spinlerin yönelimleri bozulmakta fakat ilk durumun tersine fiziksel manyetik alan spinleri minimum enerji için zorlamakta olduğundan faz geçişi fenomeni gerçekleşmemektedir. Manyetik alanın sıfırdan farklı her değeri için bu durum geçerliliğini korur.

d boyutlu bir Ising örgüsü için OAY, faz geçişi olayının sonlu bir sıcaklıkta gerçekleşeceğini söyler. Bu durum, bir boyut için yaptığımız kesin çözümle uyumlu değildir.

Şimdi, kritik sıcaklık komşuluğundaki ısı kapasitesinin davranışını inceleyim. $B = 0$ için iç enerjinin formu aşağıdaki gibidir:

$$U = -\frac{1}{Z_N} \frac{\partial Z_N}{\partial \beta} = -\frac{1}{2} N \nu \epsilon \langle S \rangle^2. \quad (2.1.20)$$

İç enerjinin sıcaklığa göre türevinden faydalanarak ısı kapasitesini (2.1.21) no'lu denklemden gibi bulabiliriz:

$$C_N = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_N = -k_B \beta^2 \left(\frac{\partial U}{\partial \beta} \right)_N = N k_B \nu \epsilon \beta^2 \langle S \rangle \left(\frac{\partial \langle S \rangle}{\partial \beta} \right)_N. \quad (2.1.21)$$

Burada $(\partial \langle S \rangle / \partial \beta)_N$ aşağıdaki gibi bulunur:

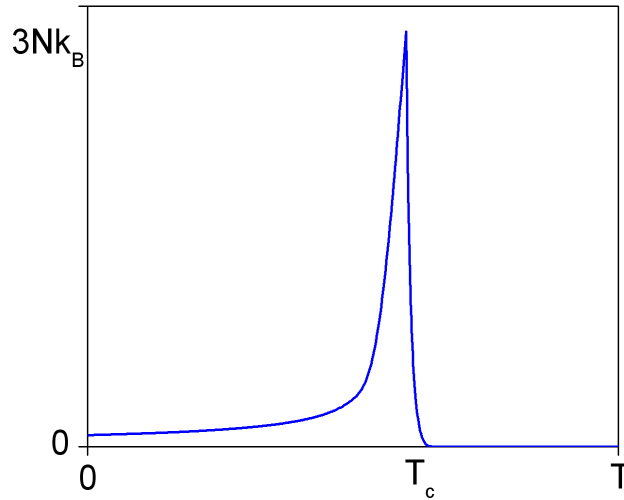
$$\left(\frac{\partial \langle S \rangle}{\partial \beta}\right)_N = \operatorname{sech}^2\left(\beta \frac{\nu \epsilon}{2} \langle S \rangle\right) \left[\frac{\nu \epsilon}{2} \langle S \rangle + \beta \frac{\nu \epsilon}{2} \left(\frac{\partial \langle S \rangle}{\partial \beta}\right)_N \right], \quad (2.1.22)$$

$$\left(\frac{\partial \langle S \rangle}{\partial \beta}\right)_N = \frac{\nu \epsilon \langle S \rangle}{3 \cosh^2\left(\beta \frac{\nu \epsilon}{2} \langle S \rangle\right) - \beta \nu \epsilon}. \quad (2.1.23)$$

Sonuç olarak ısı kapasitesi:

$$C_N = \frac{Nk_B \beta^2 \nu^2 \epsilon^2 \langle S \rangle^2}{2 \cosh^2\left(\beta \frac{\nu \epsilon}{2} \langle S \rangle\right) - \beta \nu \epsilon} = \frac{2Nk_B \langle S \rangle^2 (T_C/T)^2}{[\cosh^2(\langle S \rangle T_C/T) - T_C/T]}, \quad (2.1.24)$$

olur. Şekil 2.4'te sıcaklığın bir fonksiyonu olan ısı kapasitesi çizilmiştir, bu şekilden açıkça görülebildiği üzere, ısı kapasitesi kritik sıcaklıkta sonlu bir sıçrama sergilemektedir. Bu değer $T = T_C$ noktasında $3Nk_B$ değerine yaklaşmaktadır.



Şekil 2.4 Sıcaklığın bir fonksiyonu olan ısı kapasitesinin kritik noka civarındaki değişimi

Son nicelik olarak manyetik süseptibilite hesaplanmıştır. Manyetik süseptibilite aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$\chi_{T,N}(B) = \left(\frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B}\right)_{T,N} = N\mu \left(\frac{\partial \langle S \rangle}{\partial B}\right)_{T,N}. \quad (2.1.25)$$

Burada $\left(\frac{\partial \langle S \rangle}{\partial B}\right)_{T,N}$ ifadesi:

$$\left(\frac{\partial \langle S \rangle}{\partial B}\right)_{T,N} = \operatorname{sech}^2 \left[\beta \frac{\nu \epsilon}{2} \langle S \rangle + \beta \nu B \right] \left[\beta \frac{\nu \epsilon}{2} \left(\frac{\partial \langle S \rangle}{\partial B}\right)_{T,N} + \beta \mu \right], \quad (2.1.26)$$

$$\left(\frac{\partial \langle S \rangle}{\partial B}\right)_{T,N} = \frac{2\beta \mu}{2 \cosh^2 \left[\beta \frac{\nu \epsilon}{2} \langle S \rangle + \beta \mu B \right] - \beta \nu \epsilon}, \quad (2.1.27)$$

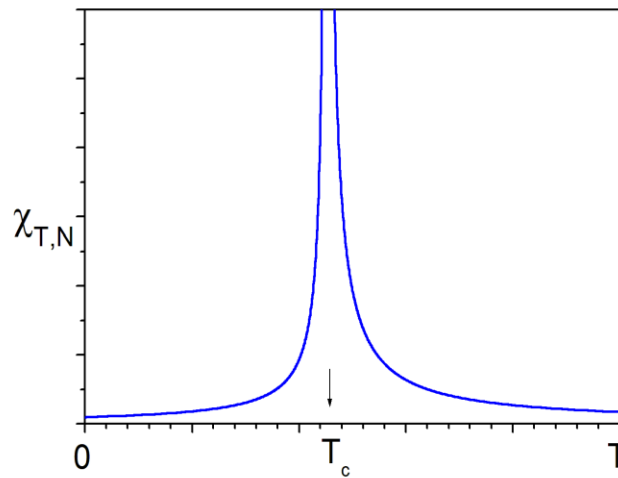
gibi bulunur. Son olarak, manyetik süseptibilite ifadesi aşağıdaki hali alır:

$$\chi_{T,N}(B) = \frac{2\beta N \mu^2}{2 \cosh^2 \left[\beta \frac{\nu \epsilon}{2} \langle S \rangle + \beta \mu B \right] - \beta \nu \epsilon}. \quad (2.1.28)$$

$B = 0$ limitinde süseptibilite:

$$\chi_{T,N}(0) = \frac{2\beta N \mu^2}{2 \cosh^2 \left[\beta \frac{\nu \epsilon}{2} \langle S \rangle \right] - \beta \nu \epsilon} = \frac{2N \mu^2}{\nu \epsilon} \frac{T_c/T}{\cosh^2(\langle S \rangle T_c/T) - T_c/T}, \quad (2.1.29)$$

halini alır. Elde edilen bu denklemin incelenmesi halinde manyetik süseptibilitenin kritik sıcaklık yakınında sonsuza ıraksadığı görülebilir. Yapılan analizle uyumlu olarak, Şekil 2.5'te sıcaklığın bir fonksiyonu olan manyetik duygunluğun sıcaklıkla değişimi görülmektedir.



Şekil 2. 5 Sıcaklığın bir fonksiyonu olan manyetik süseptibilitenin kritik sıcaklık civarındaki değişimi

2.1.3 Etkin Alan Yaklaşımı Altında Ising Modeli

Bu bölümde, spin-1/2 Ising modeli için, sıcaklığın bir fonksiyonu olan düzen parametresi EAY altında elde edilecektir. EAY ilk olarak Kaneyoshi tarafından Ising modelinin denge manyetik özelliklerini incelemek amacıyla ortaya atılmıştır ve o tarihten günümüze kadar birçok spin sistemine başarıyla uygulanmıştır (Kaneyoshi, 1986). EAY spin-spin korelasyonlarını içerdiğinden dolayı OAY göre daha doğru sonuçlar vermektedir. EAY altında manyetizasyonun sıcaklıkla değişimini inceleyebilmek için daha önce yaptığımız gibi sistemi tanımlayan Hamiltoniyeni kullanarak hal denklemini elde etmemiz gerekir. Bu bağlamda, iki boyutta kare örgü için:

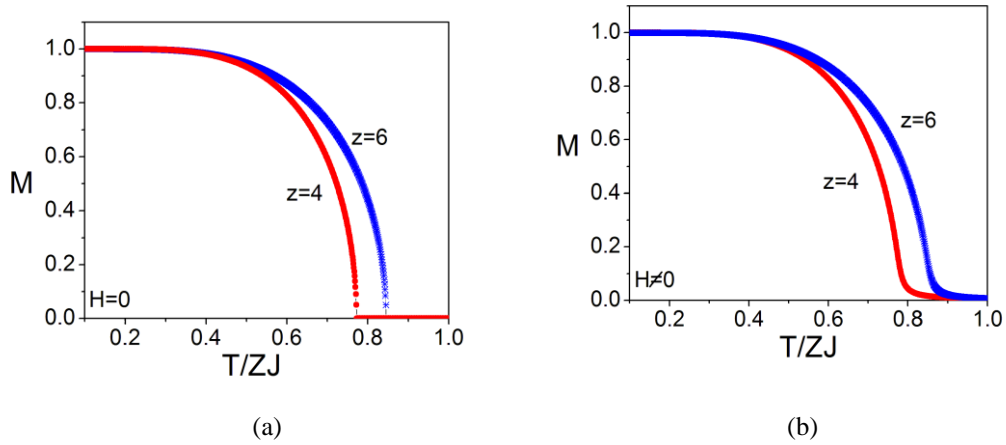
$$M = a_0 + a_1M + a_2M^2 + a_3M^3 + a_4M^4, \quad (2.1.30)$$

şeklinde ve üç boyutta kübik örgü için ise aşağıdaki gibi bulunur:

$$M = b_0 + b_1M + b_2M^2 + b_3M^3 + b_4M^4 + b_5M^5 + b_6M^6. \quad (2.1.31)$$

Buradaki a_i ($i = 0 - 4$) ve b_j ($j = 0 - 6$) katsayıları Ek'te verilmiştir. Elde edilen bu hal denklemlerinin uygun numerik yöntemler kullanılarak çözülmesinin ardından manyetizasyonun sıcaklıkla değişimi Şekil 2.6.a'daki gibi elde edilir.

Şekil 2.6.a'dan da açıkça görüldüğü üzere EAY altında bulunan faz geçiş sıcaklığı ortalama alan yaklaşımından bulunan faz geçiş sıcaklığından küçüktür. Bu kullandığımız yöntemin OAY'dan daha üstün olduğunu gösterir. Benzer şekilde dış manyetik alanın varlığı halinde faz geçişi fenomeni gerçekleşmez (Şekil 2.6.b).



Şekil 2.6 Dış manyetik alanın var olmadığı durumda, kare ($z=4$) ve kübik ($z=6$) örgü tipleri için manyetizasyonun sıcaklıkla değişimleri (a). Sıfırdan farklı sonlu bir dış manyetik alan değerinde kare ve kübik örgüde manyetizasyonun sıcaklıkla değişimi (b).

2.2 Spin-1 Blume-Capel (BC) Modeli

Kristal alan etkileşimi veya tek-iyon anizotropisi içeren spin-1 Ising modeli Blume ve Capel tarafından aynı yıllarda birbirinden bağımsız bir şekilde bulunmuştur. Bu nedenle model Blume-Capel modeli olarak adlandırılmıştır. Bu modeli tanımlayan Hamiltoniyen aşağıdaki gibidir (Blume ve Capel, 1966).

$$\hat{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j + D \sum_{i=1}^N S_i^2 - H \sum_{i=1}^N S_i \quad (2.2.1)$$

Burada $S_i = \pm 1, 0$ spin değişkenini, J_{ij} i . ve j . spinler arasındaki değiş-tokuş etkileşim sabitini, D kristal alan etkileşimini ve son olarak H ise dışardan uygulanan manyetik alanı temsil etmektedir. Blume Capel Modeli yaklaşık olarak 45 yıl önce ortaya konulmuştur ve o günden bu yana birçok kuramsal çalışmanın temel konusu olmayı sürdürmektedir. Bu modelin uygulandığı fiziksel sistemlere örnek olarak çok bileşenli akışkanlar, üçlü alaşımlar ve manyetik sistemlerdeki multikritik olaylar verilebilir. Denge davranışı ilk olarak OAY ile incelenmiş ve bunun ardından yüksek ve düşük sıcaklık seri açılımları (Saul, Wortis ve Stauffer, 1974), Green diyagramı

yöntemi (Yang ve Wang, 1975), Monte-Carlo simülasyonu (Jain ve Landau, 1980), renormalizasyon grup hesaplamaları (Burkhardt, 1976), EAY (Kaneyoshi, 1986), küme değişim metodu (Buzano ve Pelizzola, 1995), istikrarlı bir termodinamiğe dayanan pertürbe olmayan yaklaşım (Grallau ve Kierlik, 2001) ve Bethe-Peierls açılımı yaklaşımı (Du, Yü ve Liu, 2003) gibi birçok yöntem kullanılarak günümüze kadar çalışılmıştır.

2.3 Master Denklemi ve Glauber Modeli

Bu bölümde, zamana bağlı kooperatif olayların irdelenmesinde sıklıkla kullanılan metotlardan birisi olan Glauber modeli (1963) ve Glauber modelinin temelini oluşturan master denkleminin türetimi, markov zincirleri ve detaylı denge konuları hakkında kısaca bilgi verilecektir. Daha sonra, Glauber modeli, tek ve N spinden oluşan Ising sistemlerine uygulanacaktır.

2.3.1 Genel Formülasyon

Bu alt bölümde, kullanacağımız notasyon hakkında bilgi verilmektedir. Tüm özellikleri tek bir Y rassal (stokastik) değişkeni ile tanımlanabilen bir sistem düşünelim. Y , bir Brownian parçacığın hızını, kutudaki parçacıkların sayısını veya sırada bekleyen insanların sayısını ifade edebilir. Y rassal değişkenini karakterize etmek için tanımlayacağımız olasılık yoğunluğu için aşağıdaki notasyonu kullanacağız:

$P_1(y_1, t_1) \equiv$ (Y rassal değişkeninin t_1 anında y_1 değerine sahip olma olasılık yoğunluğu)

$P_2(y_1, t_1; y_2, t_2) \equiv$ (Y rassal değişkeninin t_1 anında y_1 ve t_2 anında y_2 değerine sahip olma ortak olasılık yoğunluğu)

$P_n(y_1, t_1; y_2, t_2; \dots; y_n, t_n) \equiv$ (Y rassal değişkeninin t_1 anında y_1 , t_2 anında y_2 , ... t_n anında y_n ve değerine sahip olma ortak olasılık yoğunluğu)

Ortak olasılık yoğunlukları pozitifdir ve (2.3.2) no'lu denklemdeki gibi indirgenebilirler:

$$P_n \geq 0, \quad (2.3.1)$$

$$\int P_n(y_1, t_1; y_2, t_2; \dots; y_n, t_n) dy_n = P_{n-1}(y_1, t_1; y_2, t_2; \dots; y_{n-1}, t_{n-1}). \quad (2.3.2)$$

Ortak olasılık yoğunlukları aynı zamanda normalizedirler:

$$\int P_1(y_1, t_1) dy_1 = 1. \quad (2.3.3)$$

Denklem (2.3.2) ve (2.3.3)'de kullanılan Y rassal değişkeninin sürekli olduğu kabul edilmiştir. Y 'nin kesikli olması durumunda integralin yerini kesikli toplam alır. Rassal değişkenlerin zamana bağlı aralıklarını uygulayabiliriz $\langle y_1(t_1)y_2(t_2) \times \dots \times y_n(t_n) \rangle$ Bu değişkenler aşağıdaki gibi tanımlanır ve farklı zamanlardaki rassal değişkenler arasındaki korelasyonu (ilinti) verir:

$$\begin{aligned} \langle y_1(t_1)y_2(t_2) \dots y_n(t_n) \rangle \\ = \int \int y_1 y_2 \dots y_n P_n(y_1, t_1; y_2, t_2; \dots; y_n, t_n) dy_1 \dots dy_n. \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

Tüm n ve τ 'lar için tanımlanan bir süreç;

$$P_n(y_1, t_1; y_2, t_2; \dots; y_n, t_n) = P_n(y_1, t_1 + \tau; y_2, t_2 + \tau; \dots; y_n, t_n + \tau), \quad (2.3.5)$$

şartını sağlıyorsa kararlı bir süreçtir. Böylelikle, kararlı bir süreç için;

$$P_1(y_1, t_1) = P_1(y_1), \quad (2.3.6)$$

olur ve $\langle y_1(t_1)y_2(t_2) \rangle$ niceliği sadece zamanlar arasındaki mutlak farka ($|t_1 - t_2|$) bağlı olur. Dengedeki tüm süreçler kararlıdır. Burada koşullu bir olasılık tanıtmak zorundayız:

$P_{1|1}(y_1, t_1 | y_2, t_2) \equiv (t_1$ anında y_1 değerine sahip olan Y rassal değişkeninin t_2 anında y_2 değerine sahip olma koşullu olasılığı).

Koşullu olasılık aşağıdaki nicelik ile tanımlanır:

$$P_1(y_1, t_1)P_{1|1}(y_1, t_1|y_2, t_2) = P_2(y_2, t_2). \quad (2.3.7)$$

Denklem (2.3.2) ve (2.3.7)'in kullanılmasıyla, farklı zamanlara ait olasılık yoğunlukları için aşağıdaki eşitliği buluruz:

$$P_1(y_2, t_2) = \int P_1(y_1, t_1)P_{1|1}(y_1, t_1|y_2, t_2)dy_1. \quad (2.3.8)$$

Burada koşullu olasılık yoğunluğu;

$$\int P_{1|1}(y_1, t_1|y_2, t_2)dy_2 = 1, \quad (2.3.9)$$

özelliğine sahiptir. Aynı zamanda aşağıdaki gibi ortak koşullu olasılık yoğunluğu tanıtabiliriz:

$P_{k|l}(y_1, t_1; \dots; y_k, t_k | y_{k+1}, t_{k+1}; \dots; y_{k+l}, t_{k+l}) \equiv (y_1, t_1; \dots; y_k, t_k)$ şeklinde verilen sabit değerleri için Y rassal değişkenin $(y_{k+1}, t_{k+1}; \dots; y_{k+l}, t_{k+l})$ değerlerine sahip olma koşullu ortak olasılık yoğunluğu).

Koşullu ortak olasılık yoğunluğu aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$P_{k|l}(y_1, t_1; \dots; y_{k+l}, t_{k+l}) = \frac{P_{k+l}(y_1, t_1; \dots; y_k, t_k; y_{k+1}, t_{k+1}; \dots; y_{k+l}, t_{k+l})}{P_k(y_1, t_1; \dots; y_k, t_k)}. \quad (2.3.10)$$

Farklı zamanlara ait rassal değişkenlerin değerleri arasında bir korelasyon olduğunda, koşullu ortak olasılık yoğunlukları önemli hale gelir. Fakat, rassal değişken sadece kendi geçen zamanına bağlıysa, koşullu ortak olasılık yoğunluğu ve ortak olasılık yoğunluğu ifadelerinin önemi az olur. Rassal değişken sadece kendi geçen hafıza zamanına sahipse, koşullu ortak olasılık yoğunluğu, $P_{n-1|1}(y_1, t_1; \dots; y_{n-1}, t_{n-1} | y_n, t_n)$, aşağıdaki formda olmalıdır:

$$P_{n-1|1}(y_1, t_1; \dots; y_{n-1}, t_{n-1} | y_n, t_n) = P_{1|1}(y_{n-1}, t_{n-1} | y_n, t_n). \quad (2.3.11)$$

Burada, $t_1 < t_2 < \dots < t_n$ 'dir. Diğer bir deyişle, t_n anındaki y_n koşullu olasılığı tamamiyle t_{n-1} anındaki y_{n-1} değerinden faydalanılarak bulunur ve daha önceki zamanlara ait herhangi bir bilgiden etkilenmez. Koşullu olasılık yoğunluğu *geçiş*

olasılığı olarak bilinir. (2.3.11) no'lu denklemini sağlayan bir süreç Markov zinciri olarak bilinir. Bir Markov zinciri tamamen, $P_1(y, t)$ ve $P_{1|1}(y_1, t_1|y_2, t_2)$ şeklindeki iki fonksiyon kullanılarak belirlenir. Olasılık yoğunluğu hiyerarşisi bu fonksiyonlardan oluşturulabilir. Örneğin,

$$\begin{aligned} P_3(y_1, t_1; y_2, t_2; y_3, t_3) &= P_2(y_1, t_1; y_2, t_2)P_{2|1}(y_1, t_1; y_2, t_2|y_3, t_3), \\ &= P_1(y_1, t_1)P_{1|1}(y_1, t_1|y_2, t_2)P_{1|1}(y_2, t_2|y_3, t_3). \end{aligned} \quad (2.3.12)$$

$t_1 < t_2 < t_3$ yaklaşımı altında, (2.3.12) denklemini y_2 üzerinden integre edersek;

$$P_2(y_1, t_1; y_3, t_3) = P_1(y_1, t_1) \int P_{1|1}(y_1, t_1|y_2, t_2)P_{1|1}(y_2, t_2|y_3, t_3)dy_2, \quad (2.3.13)$$

eşitliğini elde ederiz. Her tarafı $P_1(y_1, t_1)$ 'na bölersek;

$$P_{1|1}(y_1, t_1|y_3, t_3) = \int P_{1|1}(y_1, t_1|y_2, t_2)P_{1|1}(y_2, t_2|y_3, t_3)dy_2, \quad (2.3.14)$$

olur. (2.3.14) no'lu denklem *Chapman-Kolmogorov* denklemi olarak bilinir. Burada, y_1, t_1 'den y_3, t_3 'e geçiş olasılığını, ilk olarak y_1, t_1 'den y_2, t_2 'ye ve daha sonra y_2, t_2 'den y_3, t_3 'e olacak şekilde iki basamaktan oluşan bir sürece ayırdığımızı belirtmek gerekir. Bu adımların istatistiksel olarak birbirinden bağımsız olduğu söylenebilir. $y_2, t_2 \rightarrow y_3, t_3$ şeklinde tanımlanan geçiş olasılığı kendisinden önce gerçekleşmiş olan $y_1, t_1 \rightarrow y_2, t_2$ geçişinden etkilenmez. Elde ettiğimiz bu denklemleri bir sonraki alt bölümde Markov zincirini incelerken kullanacağız.

2.3.2 Markov Zincirleri

Markov süreçlerinin en basit örneği olarak Markov zincirleri verilebilir (Reichl, 1997). Bu zincirler, Y rassal değişkeninin kesikli zaman aralıklarındaki geçişlerini içerirler. Y 'nin $n = 1, 2, \dots, M$ olmak üzere $\{y(n)\}$ şeklinde realizasyonları olduğunu ve $s = 0, 1, \dots, \infty$ olmak üzere $t = s\tau$ zamanlarında geçişlerin meydana geldiğini düşünelim. $P(n, s)$, Y 'nin $t = s$ zamanında $y(n)$ realizasyonuna sahip olma olasılığını gösterebilir. $P_{1|1}(n_1, s_1|n_2, s_2)$ ifadesi Y 'nin s_1 zamanında $y(n_1)$

realizasyonuna sahip olduğu verildiğinde s_2 zamanında $y(n_2)$ realizasyonuna sahip olma koşullu olasılığını belirtsin. $P(n, s)$ ve $P_{1|1}(n_1, s_1|n_2, s_2)$ büyüklükleri tamamiyle Markov zincirinin zamanla değişimini belirler. $P(n, s)$ ifadesi için (2.3.8) denklemini aşağıdaki biçimde yazabiliriz:

$$P(n, s + 1) = \sum_{m=1}^M P(m, s)P_{1|1}(m, s|n, s + 1). \quad (2.3.15)$$

Chapman-Kolmogorov denkleminden yararlanarak koşullu olasılığı; ,

$$P_{1|1}(n_0, s_0|n, s + 1) = \sum_{m=1}^M P_{1|1}(n_0, s_0|m, s)P_{1|1}(m, s|n, s + 1), \quad (2.3.16)$$

formunda ifade edebiliriz. $P_{1|1}(m, s|n, s + 1)$ niceliği geçiş olasılığı olarak bilinir. Sistem, s anında m durumundayken bir sonraki adımda n durumuna sıçraması koşullu olasılıktır. Bundan dolayı, bir durumdan diğer durumlara olan tüm geçişler hakkındaki bilgileri içerir.

2.3.3 Master Denklemi

Genellikle olaylar arasındaki zaman aralıklarının sürekli yada rassal olarak değişebildiği durumları düşünme ihtiyacı duyarız. Böyle süreçler için, olasılığın zamana bağlı olduğu bir diferansiyel denklem elde etmek zorundayız (Reichl, 1997). Bu bölümde rassal süreçlerin zamanla değiştiği, zamandan çok daha kısa bir zaman aralığında meydana gelen temel olay ve geçişleri içeren süreçler düşünülecektir. Böyle süreçlerin zaman evrimi *master denklemi* kullanılarak gerçekleştirilir.

2.3.4 Master Denkleminin Türetimi

(2.3.8) denklemini aşağıdaki formda yeniden yazarak başlayalım:

$$P_1(n, t + \Delta t) = \sum_{m=1}^M P_1(m, t) P_{1|1}(m, t | n, t + \Delta t). \quad (2.3.17)$$

$P_1(n, t)$ ifadesi için diferansiyel denklem aşağıdaki gibi bulunur:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_1(n, t)}{\partial t} &\equiv \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left(\frac{P_1(n, t + \Delta t) - P_1(n, t)}{\Delta t} \right), \\ &\equiv \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} P_1 \left((m, t) P_{1|1}(m, t | n, t + \Delta t) - \delta_{m,n} \right). \end{aligned} \quad (2.3.18)$$

$\Delta t \rightarrow 0$ limitinde çalıştığımız için, $P_{1|1}(m, t | n, t + \Delta t)$ ifadesini Taylor serisine açabilir ve sadece en düşük mertebedeki terimi kullanabiliriz. Olasılığı tüm zaman aralıklarında korunumlu olmasını sağlamak için, en yaygın formu;

$$P_{1|1}(m, t | n, t + \Delta t) = \delta_{m,n} \left[1 - \Delta t \sum_{l=1}^M w_{m,l}(t) \right] + w_{m,n}(t) \Delta t + \dots, \quad (2.3.19)$$

gibidir. Burada $w_{m,n}(t)$ geçiş olasılığı oranıdır. Denklem (2.3.19)'deki $w_{m,n}(t) \Delta t$ ifadesi, $t \rightarrow t + \Delta t$ zaman aralığında, m durumundan n durumuna geçiş olasılığıdır. Benzer şekilde, $[1 - \Delta t \sum_{l=1}^M w_{m,l}(t)]$ ifadesi $t \rightarrow t + \Delta t$ zaman aralığında herhangi bir geçişin gerçekleşmemesine karşılık gelen olasılıktır. (2.3.19) no'lu denklemi (2.3.18) no'lu denklemde yerine koyarsak;

$$\frac{\partial P_1(n, t)}{\partial t} = \sum_{m=1}^M [P_1(m, t) w_{m,n}(t) - P_1(n, t) w_{n,m}(t)], \quad (2.3.20)$$

eşitliğini elde ederiz. Bu denklem *master denklemini* olarak bilinir. Master denklemini, tüm diğer durumlardan n durumuna olan geçişler ve n durumu dışındaki tüm durumlara olan geçişlerin olasılık oranlarını verir. Koşullu olasılık ($P_{1|1}(n_0, 0 | n, t)$) aynı zamanda bir master denklemini sağlar:

$$\frac{\partial P_{1|1}(n_0, 0|n, t)}{\partial t} = \sum_{m=1}^M [P_{1|1}(n_0, 0|m, t)w_{m,n}(t) - P_{1|1}(n_0, 0|n, t)w_{n,m}(t)]. \quad (2.3.21)$$

Burada $P_{1|1}(n_0, 0|n, t)$ ifadesi, $t = 0$ anında n_0 durumunda bulunan sistemi t anında n durumunda bulma olasılığıdır. Koşullu olasılık başlangıç değer şartını sağlar, $P_{1|1}(n_0, 0|n, 0) = \delta_{n,n_0}$. Geçiş matrisini kullanarak, master denklemini kısa ve öz bir formda aşağıdaki gibi yazabiliriz:

$$W_{m,n}(t) = w_{m,n}(t) - \delta_{m,n} \sum_{n'=1}^M w_{m,n'}(t). \quad (2.3.22)$$

O halde, master denkleminin yeni formu;

$$\frac{\partial P_1(n, t)}{\partial t} = \sum_{m=1}^M P_1(n, t)W_{m,n}(t), \quad (2.3.23)$$

olur. (2.3.22) no'lu denklemindeki geçiş matrisi, $n \neq m$ için $W_{m,n} \geq 0$ 'yı ve her bir m için $\sum_n W_{m,n} = 0$ şartlarını sağlamalıdır. Diğer bir deyişle, $W_{m,n}$ 'in satırına olan girdiler sıfıra eklenmelidir. Dirac notasyonunu kullanırsak, (2.3.23) no'lu denklemi daha sade bir biçimde yazabiliriz. $P_1(n, t) = \langle p(t)|n \rangle$ olsun, burada $\langle p(t)|$ olasılık vektörüdür. $P_{1|1}(n_0, t_0|n, t) = \langle n_0|P(t_0|t)|n \rangle$ eşitliğindeki $P(t_0|t)$ niceliği koşullu olasılık operatörüdür. Benzer şekilde, $W_{m,n}(t) = \langle m|W(t)|n \rangle$ yazılabilir. Master denkleminin olasılık operatörleri ve koşullu olasılık operatörleri altındaki yeni formları denklem (2.3.24) ve denklem (2.3.25) deki gibi olur:

$$\frac{\partial \langle p(t)|}{\partial t} = \langle p(t)|W(t), \quad (2.3.24)$$

$$\frac{\partial P(0|t)}{\partial t} = P(0|t)W(t). \quad (2.3.25)$$

2.3.5 Ayrıntılı Denge

Geçiş oranlarının;

$$P^s(n)w_{n,m} = P^s(m)w_{m,n}, \quad (2.3.26)$$

olması durumunda detaylı denge sağlanmış olur. Burada $P^s \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} P_t(n, t)$ ifadesi sistemin uzun ömürlü kararlılık olasılığıdır ve zamandan bağımsızdır (geçiş oranlarının zamandan bağımsız oldukları varsayılmıştır). $P^s(n)$ ifadesi geçiş matrisinin sol özvektörüdür. (2.3.26) no'lu denklem, dengede m seviyesinden n seviyesine olasılık akışı ile n seviyesinden m seviyesine olasılık akışınının aynı olduğunu söyler. (2.3.26) denkleminin iterasyonu ile $P^s(n)$ ifadesi bulunabilir. Örneğin, $P^s(2) = P^s(1)(w_{1,2}/w_{2,1})$ ve $P^s(3) = P^s(2)(w_{2,3}/w_{3,2}) = P^s(1)(w_{1,2}/w_{2,1})(w_{2,3}/w_{3,2})$ gibi. $P^s(1)$ ifadesi ise olasılığın bire normalize olması özelliğinden bulunabilir. Denklem (2.3.26)'de verilen master denkleminin dinamik evrimi simetrik bir matristen yararlanılarak gösterilebilir:

$$\begin{aligned} V_{n,m} &= \sqrt{\frac{P^s(n)}{P^s(m)}} W_{n,m} = \sqrt{\frac{P^s(n)}{P^s(m)}} w_{n,m} - \delta_{n,m} \sum_{n'} w_{n,n'} \\ &= \sqrt{\frac{P^s(n)}{P^s(m)}} w_{m,n} - \delta_{n,m} \sum_{n'} w_{m,n'} = V_{m,n}. \end{aligned} \quad (2.3.27)$$

$\tilde{P}(n, t) = P_1(n, t)/\sqrt{P^s(n)}$ şeklinde bir fonksiyonun tanıtılmasıyla master denkleminin yeni formu aşağıdaki gibi olur:

$$\frac{\partial \tilde{P}(n, t)}{\partial t} = \sum_{m=1}^M \tilde{P}(m, t) V_{m,n}. \quad (2.3.28)$$

Dirac notasyonunu tekrar kullanarak $\langle \tilde{p}(t) | n \rangle = \tilde{P}(n, t)$ ve $V_{n,m} = \langle n | V | m \rangle$ eşitliklerini yazalım. Bu durumda, master denkleminin çözümü;

$$\langle \tilde{p}(t) | = \langle \tilde{p}(0) | e^{Vt}, \quad (2.3.29)$$

halini alır. $V_{n,m}$ simetrik bir matristir ve ortonormal özvektör setine sahiptir. V 'nin özdeğerleri λ_i sembolü ile sol ve sağ özvektörleri ise sırasıyla $\langle \psi_i |$ ve $|\psi_i \rangle$ sembolleriyle gösterilir, burada $i = 0 \dots M - 1$ 'dir. Sol ve sağ özvektörler birbirine benzerdir. Böylelikle, $\langle \psi_i | V = \langle \psi_i | \lambda_i$ ve $V |\psi_i \rangle = \lambda_i |\psi_i \rangle$ olur.

2.3.6 Tek Spinden Oluşan Sistem için Glauber Modeli

Basitlik açısından, ilk olarak modeli en basit sistem olan tek bir Ising spininden oluşan bir sistem üzerinden irdeleyelim ve bu sistemin bir ısı banyosu ile etkileştiğini kabul edelim. Bu durumda ısı banyosu ile olan etkileşim spinin belirli bir geçiş olasılığı ile bulunduğu durumdan başka bir duruma geçiş yapmasına (flip olmasına) neden olacaktır. Bu tip bir sistemin tam olarak betimlenebilmesi bu sisteme ait olasılık fonksiyonunun, $p(s, t)$, belirlenebilmesi ile gerçekleştirilebilir. Olasılık fonksiyonu ilk olarak normalizasyon şartını sağlamalıdır:

$$\sum_{s_j=\pm 1} p(s_j, t) = p(1, t) + p(-1, t) = 1. \quad (2.3.30)$$

Glauber dinamiğinde olasılık fonksiyonunu hesaplayabilmemiz için izleyeceğimiz yol, olasılık fonksiyonunun sağladığı diferansiyel denklemi yazmak ve bu denklemi çözmektir. Bu denklem iki terimden oluşacaktır. Master denklemindeki ilk terim, spinin o anda bulunduğu halden başka bir hale geçiş yapma olasılığını belirtecek ve birim zaman başına geçiş olasılığı ile olasılık fonksiyonunun çarpımına eşit olacaktır, öte yandan herhangi bir spinin bulunduğu durumdan başka bir duruma geçmesi durumunda o andaki durumun olasılığı azalacağından önünde bir eksi işareti bulunacaktır. İkinci terim ise spinin başka bir halde iken bu hale geçmesini temsil eder ve pozitif duruma katkı yaptığı için önündeki işaret artıdır.

$$\frac{d}{dt} p(s, t) = -\omega(s)p(s, t) + \omega(-s)p(-s, t) \quad (2.3.31)$$

Bu denklem *master denklemi* olarak adlandırılır. N spinden oluşan bir sistem için 2^N adet master denklemi söz konusudur. Tahmin edileceği üzere çok yalın olan bir kaç sistem dışında master denkleminin tam olarak çözülebilmesi mümkün değildir, ama tek spinden oluşan basit bir sistem için mümkündür. Bunun için aşağıdaki gibi bir fonksiyon tanıtmak yerinde olacaktır:

$$Q(t) = \sum_{s_j=\pm 1} s_j p(s_j, t)$$

$$= p(1, t) - p(-1, t). \quad (2.3.32)$$

Normalizasyon koşulundan yararlanarak $p(s, t)$ 'nin formu;

$$p(s, t) = \frac{1}{2}(1 + sQ(t)), \quad (2.3.33)$$

şeklinde elde edilir. Ayrıca $Q(t)$ 'nin tanımından, tek spinden oluşan sistem için olasılık fonksiyonu aşağıdaki gibi bulunur:

$$p(\pm 1, t) = \frac{1}{2}(1 \pm sQ(t)). \quad (2.3.34)$$

Bunun ardından, sistem dinamiğini karakterize eden dinamik hal denklemi olan $Q(t)$ 'nin zamanla değişimi birkaç cebirsel işlemin ardından aşağıdaki gibi bulunur:

$$\frac{d}{dt}Q(t) = -2\omega Q(t). \quad (2.3.35)$$

Bu diferansiyel denklemin çözümünden;

$$Q(t) = Q(0) \exp(-2\omega t) \quad (2.3.36)$$

elde edilir. Burada $Q(t)$, eksponansiyel olarak azalan bir fonksiyondur ve dengede sifıra gitmektedir. Bu durum dengedeki sıfır mıknatıslanmaya karşılık gelir ve dengedeki durumla tamamen uyumludur (Gülpınar, 2005).

2.3.7 N Spinden Oluşan Sistem İçin Glauber Modeli

Bu bölüm, Glauber stokastik modeli kullanılarak N spinden oluşan ferromanyetik kinetik Ising modeline ait dinamik davranışı bulmaya yöneliktir. Bu irdelemeyi yapabilmek için N parçacıktan oluşan sisteme ait master denkleminde kısaca söz etmekte fayda vardır. N parçacıktan oluşan master denklemi aşağıdaki gibidir:

$$\frac{d}{dt}P(S_1, \dots, S_N; t) = - \sum_i \sum_{S_i \neq S_i'} \omega_i (S_i \rightarrow S_i') P(S_1, \dots, S_i, \dots, S_N; t)$$

$$+ \sum_i \sum_{S_i \neq S_i'} \omega_i (S_i' \rightarrow S_i) P(S_1, \dots, S_i', \dots, S_N; t). \quad (2.3.37)$$

Bu denklemde $P(S_1, \dots, S_N; t)$, spinlerin belirli bir $(S_1, \dots, S_N; t)$ konfigürasyonunun t anında ortaya çıkma olasılığıdır. Denklemde sağ tarafındaki ilk terim olasılığın bulunulan durumdan geçiş (flip out) ile azalmasını ikinci terim ise farklı bir durumdan geçiş olması ile bu durumun ortaya çıkma olasılığının artışı ifade etmektedir. Diğer yandan master denkleminin çözümü olan dağılımın denge halinde kanonik dağılımla uyumlu olması gerekir. Kinetik spin-1/2 Ising modeli için sistemin enerjisi aşağıda verilen Hamiltoniyen ile tanımlanır (Tome ve Oliveira, 1990):

$$\hat{H} = \frac{-J}{N} \sum_{i,j} S_i S_j - H(t) \sum_i S_i. \quad (2.3.38)$$

Burada J , S_i ve $H(t)$ sırasıyla, spin-spin değiş-tokuş sabiti, spin değişkeni ve salınımlı dış manyetik alandır. Spin-1/2 Ising modeli için $S_i = \pm 1$ ve $J > 0$ 'dır. Buna ek olarak $H(t)$ 'nin formu;

$$H(t) = H_0 \cos(\omega t), \quad (2.3.39)$$

şeklindedir. Sistem τ zaman ölçeğine bağlı olarak gelişir. τ tek bir spinin terslenme frekansıdır. Geçiş olasılığı i . spinin t anında terslenme olasılığıdır ve ω_i ile gösterilir. Geçiş olasılığı Glauber stokastik dinamiği uyarınca aşağıdaki gibi bulunur:

$$\omega_i = \frac{1}{2\tau} (1 - S_i \tanh(\beta E_i)). \quad (2.3.40)$$

Burada E_i etkin alandır ve formu aşağıdaki gibidir:

$$E_i = \frac{J}{N} \sum_{j \neq i} S_j + H(t). \quad (2.3.41)$$

Master denkleminin kısaca tanıtılmasının ve birkaç cebirsel işlemin ardından ortalama spin momentinin zamana göre değişimini ifade eden dinamik hal denklemi:

$$\tau \frac{d}{dt} \langle S_i \rangle = -\langle S_i \rangle + \langle \tanh(\beta E_i) \rangle, \quad (2.3.42)$$

gibidir. OAY altında bu ifadenin yeni formu:

$$\Omega \frac{dm}{d\xi} = -m + \tanh \left(\frac{1}{T} (m + h \cos \xi) \right), \quad (2.3.43)$$

şeklindedir. Burada $m = \langle S_i \rangle$ ve $\xi = \omega t$ 'dir. Ayrıca $T = (\beta J)^{-1}$, $h = H_0/J$ ve $\Omega = \omega\tau$ olmak üzere her biri boyutsuz niceliklerdir.

BÖLÜM ÜÇ

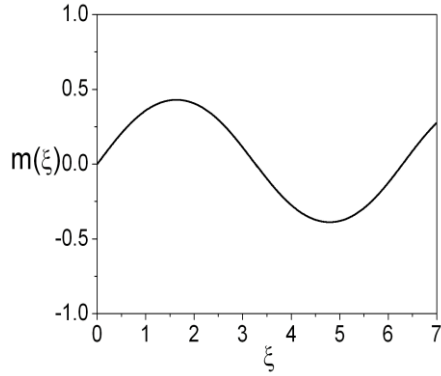
ISING MODELİNDE DİNAMİK FAZ GEÇİŞLERİ

3.1 Ising Modelinde Dinamik Faz Geçişlerinin OAY Altında İncelenmesi

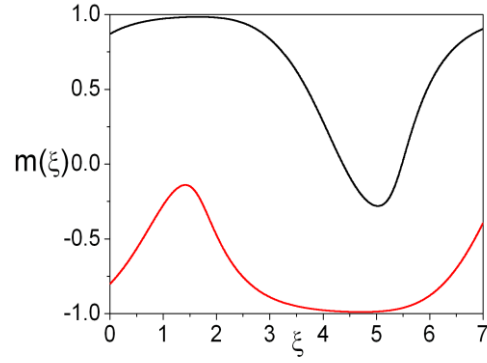
Bu bölümde, kinetik spin-1/2 Ising modeline ait denge dışı faz geçişi özellikleri incelenecektir. Bu amaç doğrultusunda 2.3.3 alt bölümünde elde ettiğimiz dinamik hal denkleminde yararlanılacaktır. Bu hal denklemi bir tür başlangıç değer problemidir ve genellikle çözümümüz belirli bir geçiş bölgesinin ardından kararlı davranmaktadır. Buna ek olarak inceleme altına aldığımız sistem bize iki tür çözüm sunar. Bu çözümlerden birincisi;

$$m(\xi + \pi) = -m(\xi) \quad (3.1.1)$$

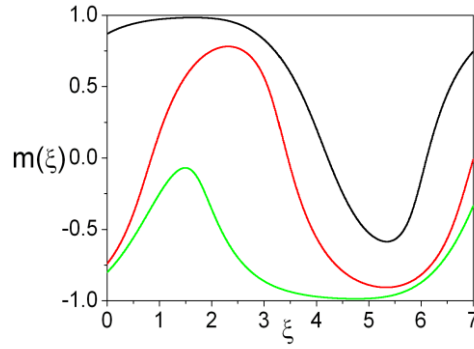
olması durumudur. Bu simetrik çözüme karşılık gelmektedir ve manyetizasyon değeri sıfır civarında salınır, Şekil 3.1.a'dan da açıkça görülebildiği üzere bu durum aynı zamanda paramanyetik faza karşılık gelmektedir.



(a)



(b)



(c)

Şekil 3.1 Kinetik spin-1/2 Ising modelinin OAY altında elde edilen manyetizasyonunun $\Omega = 0.2\pi$ değeri için zamanla değişimleri. (a) $T=0.9$ ve $h=0.25$ değerlerinde paramanyetik faza karşılık gelen simetrik çözüm. (b) $T=0.85$ ve $h=0.25$ değerlerinde ferromanyetik faza karşılık gelen asimetric çözüm. (c) $T=0.39$ ve $h=0.55$ değerleri için ise ferromanyetik ve paramanyetik fazların bir arada bulunduğu simetrik ve asimetric çözümler.

İkincisi çözüm ise asimetric çözümdür. Simetrik çözümün aksine asimetric çözümde manyetizasyon değeri sonlu bir değer civarında salınır ve bu durum ferromanyetik faza karşılık gelir (Şekil 3.1.b). Manyetizasyon değeri aşağıdaki şartı sağlar:

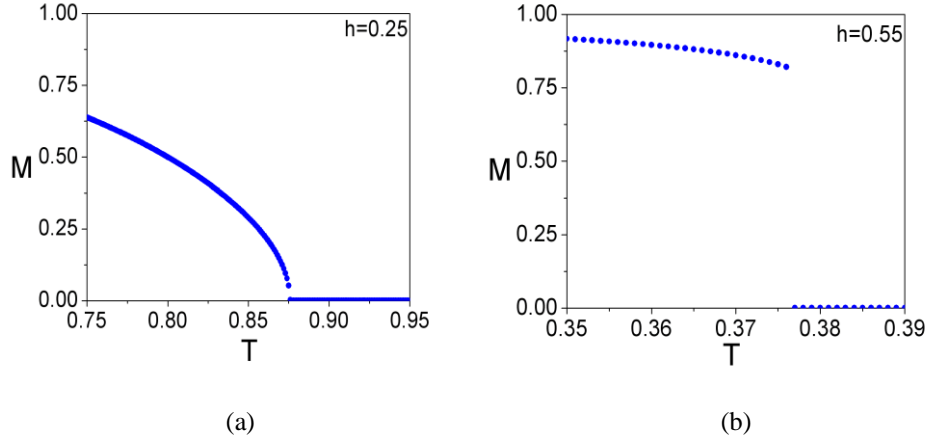
$$m(\xi + 2\pi) = m(\xi) \quad (3.1.2)$$

Dinamik faz geçişlerinde manyetizasyonun bir periyot üzerinden ortalaması dinamik düzen parametresi olarak kabul edilir. Faz geçiş türünün cinsini belirlemek için bu ifade kullanılır. Bu ifadenin formu aşağıdaki gibidir:

$$M = \frac{1}{2\pi} \oint m(\xi) d\xi. \quad (3.1.3)$$

Burada integralin alt sınırı başlangıç etkilerinin önemini yitirdiği diğer bir deyişle kararlı bölgenin başladığı sınır değerdir. Kinetik Ising modelinin dinamik davranışını betimleyen kinetik hal denklemi bir tür başlangıç değer problemi olması sebebiyle dört adımlı Runge-Kutta yöntemi (RK4) kullanılmış ve manyetizasyonun zamanla değişimi elde edilmiştir. $h = 0.25$ değeri için sistem Curie sıcaklığı olarak

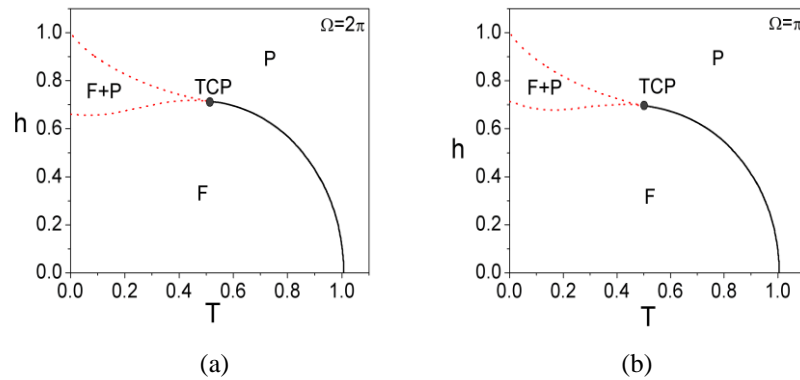
adlandırılan özel bir sıcaklıkta düzenli fazdan düzensiz faza geçiş yaparak ikinci dereceden bir geçiş gerçekleştirir (Şekil 3.2.a). Şekil 3.2.b'de ise dinamik düzen parametresi kesiklilik sergileyerek birinci dereceden bir faz geçişi sergilemektedir.



Şekil 3.2 Kinetik spin-1/2 Ising modelinin OAY altında elde edilen dinamik düzen parametresinin sıcaklıkla değişimleri. (a) $h=0.25$ değeri için ikinci derece faz geçişi, (b) $h=0.55$ için ise birinci derece faz geçişi.

Denge dışı faz geçişi fenomeni, sistemin başlangıçta Landau tipi ikili kuyu potansiyelinin birinde olduğu göz önüne alarak açıklanabilir. Sıcaklığa bağlı olarak, sistemi bir kuyudan diğerine getirmek için manyetik alan gereklidir. Eğer uygulanan salınımlı manyetik alanın genliği gerekli miktardan daha küçük ise sistem bir kuyu içinde salınır ki burası başlangıçtaki kuyudur. Bu durumda manyetizasyon işaret değiştirmez. Sonuç olarak, ortalama mıknatıslanmanın büyüklüğü sıfırdan farklıdır ($M \neq 0$). Bu durum, dinamik anlamda düzenli ve asimmetrik faza neden olur. Artan sıcaklıkla birlikte iki kuyu arasındaki yükseklik azalır ve sistemi bir kuyudan diğerine taşımak için daha küçük bir manyetik alan değeri gereklidir. Sonuç olarak, mıknatıslanma bu manyetik alan değeri için işaretini değiştirir. Böylece dinamik faz geçişi diğer adıyla simetri kırılması olayı gerçekleşmiş olur. Artan manyetik alan değerleri ile geçiş sıcaklıkları düşme eğilimi sergiler. Bu durum, dinamik faz geçişinin faz sınır çizgisini niteliksel olarak açıklamaktadır.

Fakat tüm bunlara rağmen, gerçekten bu geçişe gerçek bir dinamik geçiş diyebilir miyiz? Gerçek bir dinamik faz geçişi statik limitte yok olmalıdır. Statik limitte neler olduğunu incelemek istersek, bu durumu manyetik alanın son derece küçük frekans ile değiştiği duruma benzetebiliriz. Böylece, özel bir sıcaklıkta, sistemi bir kuyudan diğerine getirebilmek için sonlu bir manyetik alan değeri uygulanmalıdır. Sistem, yeterli alana sahip olana kadar bekleyecektir. Eğer frekans çok küçükse sistem çok uzun süre bekleyecektir. Fakat yeterli manyetik alan değerine ulaşmadıkça sistem diğer kuyuya geçemeyecek ve dinamik faz geçiş fenomeni gerçekleşmeyecektir.



Şekil 3.3 Kinetik spin-1/2 Ising modelinin OAY altında elde edilen dinamik faz diyagramları. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci ve ikinci dereceden faz geçişlerine karşılık gelmektedir. Ayrıca, dinamik üçlü kritik nokta içi dolu yuvarlak sembolü ile belirtilmiştir. (a) $\Omega = 2\pi$ ve (b) $\Omega = \pi$.

Ayrıca Şekil 3.3.a ve Şekil 3.3.b'den açıkça görüldüğü üzere değişen sürücü kuvvet frekansıyla dinamik faz sınır çizgileri değişmektedir. Azalan frekansla birlikte faz sınırı eğrisi içe doğru kapanmaktadır. Bu durumu açıklayabilmek için statik limitte dinamik faz geçişlerinin yok olduğunu söyleyebiliriz. Bu durum, dinamik faz geçişleri için önemli bir imzadır (Acharyya, 1999).

3.2 Ising Modelinde Dinamik Faz Geçişlerinin EAY Altında İncelenmesi

Bu bölümde, ω açısal frekansına sahip salınımlı bir dış manyetik tarafından sürülen sistemin dinamiği EAY altında irdelenecektir. Ele aldığımız spin-1/2 Ising sistemini Glauber stokastik modeli yardımıyla incelendiğinde aşağıdaki eşitlik elde edilir:

$$\tau \frac{dm}{dt} = -m + \langle \tanh(\beta(E_i + h)) \rangle \quad (3.2.1)$$

Burada $\beta = \frac{1}{kT}$ ve $E_i = J \sum_j S_j$ 'dir. OAY'da spinler arası korelasyonlar hesaba dahil değildir. Ancak daha ileriki yıllarda Honmura ve Kaneyoshi tarafından başlatılan korelasyonların hesaba dahil edildiği durumda $\langle \tanh(\beta(E_i + h)) \rangle$ ifadesi direkt kendisine eşit değildir ve analitik olarak hesaplanması gerekir. Bu ifadeyi hesaplamak için kullanılan yöntemlerden birisi diferansiyel operatör tekniğidir. Diferansiyel operatör tekniğinden faydalanarak bu ifadeyi aşağıdaki gibi yazabiliriz:

$$\begin{aligned} \langle \tanh(\beta(E_i + h)) \rangle &= \langle \exp(E_i \nabla) \tanh(\beta(x + h)) \rangle \Big|_{x=0} \\ &= \langle \exp(E_i \nabla) f(x + h) \rangle \Big|_{x=0}. \end{aligned} \quad (3.2.2)$$

Burada $\nabla = \frac{d}{dx}$ diferansiyel operatörü ve $f(x + h) = \tanh(\beta(x + h))$ dir. Van der Waerden eşitliği ve ayırım bağıntısından yararlanarak dinamik hal denklemini elde edebiliriz:

$$\exp(aS_i) = \cosh(a) + S_i \sinh(a), \quad (3.2.3)$$

$$\langle S_i \cdot S_j \dots S_m \rangle = \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \dots \langle S_m \rangle \quad i \neq j \neq m, \quad (3.2.4)$$

$$\langle \tanh(\beta(E_i + h)) \rangle = [\cosh(J\nabla) + M \sinh((J\nabla))^z f(x + h)] \Big|_{x=0}. \quad (3.2.5)$$

Burada z en yakın komşu sayısıdır. Kare örgü için manyetizasyonun zamanla değişimini veren dinamik hal denklemi;

$$\frac{dm}{dt} = -m + a_0 + a_1 m + a_2 m^2 + a_3 m^3 + a_4 m^4, \quad (3.2.6)$$

gibidir. Benzer işlemler kübik örgü tipi için yapıldığında dinamik hal denklemini aşağıdaki gibi bulunur:

$$\frac{dm}{dt} = -m + b_0 + b_1m + b_2m^2 + b_3m^3 + b_4m^4 + b_5m^5 + b_6m^6, \quad (3.2.7)$$

Buradaki a_i ($i = 0 - 4$) ve b_j ($j = 0 - 6$) katsayıları Ek'te verilmiştir. Dinamik düzen parametresi, manyetizasyonun bir periyot üzerinden ortalaması alınarak bulunur (Tome ve Oliveira, 1990).

$$M = \frac{\omega}{2\pi} \oint m(t) dt \quad (3.2.8)$$

Bunun sonucunda iki tür çözüm tanımlanabilir. Birincisi manyetizasyonun sıfır değeri civarında salınarak ve $M = 0$ değerini sağlayan simetrik çözümdür. İkincisi ise manyetizasyonun sıfırdan farklı sonlu bir değerde salındığı, ayrıca $M \neq 0$ sonucunu veren antisimetrik çözümdür. Histeresis döngü alanı aşağıdaki gibi tanımlanır (Shi, Wei ve Li, 2008):

$$A = - \oint m(t) dh = h_0 \omega \oint m(t) \cos(\omega t) dt. \quad (3.2.9)$$

Bu ifade, histeresisten dolayı enerji kaybına karşılık gelir. Dinamik korelasyon aşağıdaki gibi tanımlanır (Acharyya, 1998);

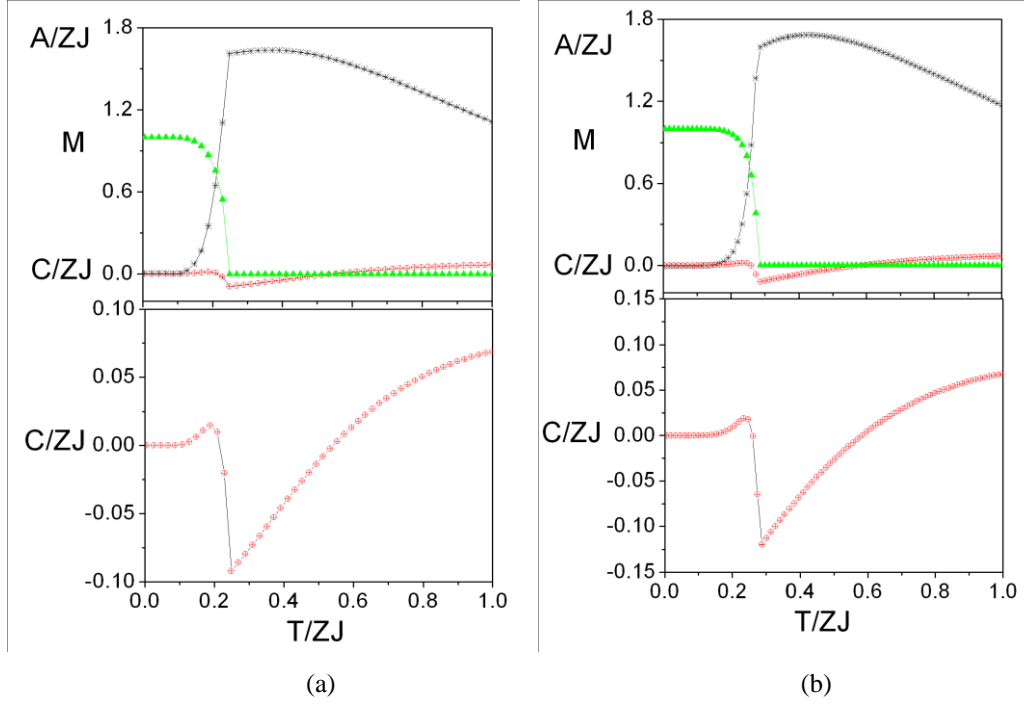
$$C = \langle m(t)h(t) \rangle - \langle m(t) \rangle \langle h(t) \rangle, \quad (3.2.10)$$

şeklinde tanımlanır. Burada $\langle \dots \rangle$ ifadesi salınımlı dış manyetik alanın bir periyodu üzerinden zaman ortalamasını ifade eder. $\langle h(t) \rangle = 0$ olduğundan;

$$C = \frac{\omega}{2\pi} \oint m(t)h(t) dt = \frac{\omega h_0}{2\pi} \oint m(t) \sin(\omega t) dt, \quad (3.2.11)$$

yazılabilir.

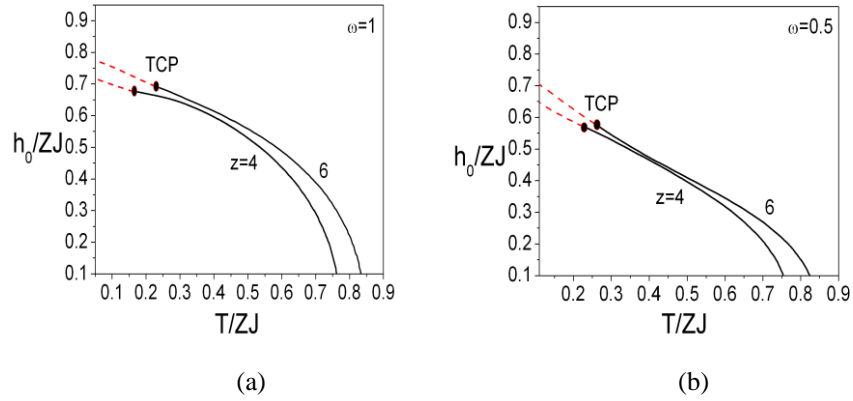
$h_0/ZJ = 0.6$ ve $\omega = 0.2\pi$ değerleri ve farklı iki tip örgü için, dinamik düzen parametresi, dinamik korelasyon ve histeresis döngü alanının sıcaklıkla değişimi Şekil 3.4.a ve Şekil 3.4.b'deki gibidir.



Şekil 3.4 Kinetik spin-1/2 Ising modelinin EAY altında elde edilen dinamik düzen parametresi, dinamik korelasyon ve dinamik histerezis döngü alanının $\frac{h_0}{ZJ} = 0.6$ ve $\omega = 0.2\pi$ değerleri için sıcaklıkla değişimleri . (a) $z=4$ ve (b) $z=6$.

Bu şekilden de açıkça görüldüğü üzere manyetizasyon değerleri sonlu bir değerden başlayarak artan sıcaklıkla beraber azalmakta ve faz geçişi gerçekleşmektedir. Dinamik korelasyon ve histerezis döngü alanı tam faz geçiş noktasında, sırasıyla minimum ve maksimum yapmaktadır. Yüksek frekanslarda, asimetric histerezis döngüsünden simetric döngüye geçebilmek zordur ve daha yüksek sıcaklık veya daha büyük manyetik alan genliği gerektirir. OAY yerine daha üst yaklaşım yöntemlerinin kullanılması durumunda, termal dalgalanmaların bir sonucu olarak histerezis döngü alanı sifira gitmelidir. Diğer yandan, ortalama alan yaklaşımında, tüm spinlere ortalama bir alana maruz kaldığı kabul edildiğinden, sistem bir minimumda kalabilir ve bunun sonucunda sonlu alana sahip bir histerezis var olabilir.

İki örgü tipi için oluşturulmuş dinamik faz diyagramları h_0/ZJ ve T/ZJ düzlemimde $\omega = 0.5$ ve $\omega = 1.0$ değerleri için sırasıyla Şekil 3.5.a ve Şekil 3.5.b'deki gibi sunulmuştur.



Şekil 3.5 Kinetik spin-1/2 Ising modelinin EAY altında elde edilen dinamik düzen paramatresi, dinamik korelasyon ve dinamik histeresis döngü alanının $\frac{h_0}{ZJ} = 0.6$ ve $\omega = 0.2\pi$ değerleri için sıcaklıkla değişimleri. (a) $z=4$ ve (b) $z=6$.

Bu faz diyagramlarında düz ve kesikli çizgiler sırasıyla ikinci ve birinci derece dinamik faz geçişlerine karşılık gelmektedir. Burada, düşük sıcaklık ve yüksek manyetik alan değerlerinde birinci dereceden faz geçişi, nispeten daha yüksek sıcaklık ve düşük manyetik alan değerlerinde ise ikinci dereceden faz geçişi gözlenir. Faz sınırı boyunca bu iki faz geçiş türünün uç uca birleştiği yerde bir adet dinamik üçlü kritik nokta (dynamical tricritical point (DTCP)) bulunur.

EAY altında bulduğumuz faz diyagramları, OAY altında bulduğumuz faz diyagramlarının aksine, düşük sıcaklık ve yüksek manyetik alan değerlerinde ferromanyetik ve paramanyetik fazlar birarada bulunmaz. Bu durum spin-spin korelasyonlarının hesaba katılmasının bir sonucudur.

BÖLÜM DÖRT

OAY ALTINDA KİNETİK SPİN-1 BC MODELİ

Bu bölümde, OAY kullanılarak kristal alan düzensizliği içeren kinetik spin-1 Blume-Capel modelinin dinamik faz geçiş noktaları ve dinamik faz diyagramları elde edilmiştir. Ayrıca, elde edilen bu faz diyagramları üzerinde kristal alandaki düzensizliğin getirdiği etkiler tartışılmıştır.

4.1 Kristal Alan Düzensizliği İçeren Spin-1 BC Modeline Ait Dinamik Denklemlerinin OAY Altında Elde Edilmesi

Bu bölümde, kristal alan düzensizliği içeren ve aynı zamanda ω açısız frekansına sahip salınımlı bir dış manyetik alan tarafından sürülen kinetik spin-1 Blume-Capel modelinde dinamik faz geçişleri OAY altında incelenecektir. Bu sistemi tanımlayan Hamiltoniyen aşağıdaki gibidir:

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - \sum_{i=1}^N \Delta_i S_i^2 - H(t) \sum_{i=1}^N S_i. \quad (4.1.1)$$

Burada J_{ij} en yakın iki spin arasındaki spin-spin etkileşim sabiti, Δ_i kristal alan terimi ve $H(t)$ ($H(t) = H_0 \cos(wt)$) dışardan uygulanan salınımlı manyetik alandır. Kristal alan davranışının aşağıdaki olasılık dağılımı uyarınca olduğu varsayılmaktadır:

$$P(\Delta_i) = p\delta(\Delta_i - \Delta) + (1 - p)\delta(\Delta_i). \quad (4.1.2)$$

Sistemimizin T sıcaklığında bir ısı banyosu ile etkileşim halinde olduğunu düşünerek yazabildiğimiz master denklemi aşağıdaki gibidir:

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dt} P(S_1, \dots, S_N; t) \\
&= - \sum w_i(S_i \rightarrow S'_i) P(S_1, \dots, S'_i, \dots, S_N; t) \\
&+ \sum w_i(S'_i \rightarrow S_i) P(S_1, \dots, S_i, \dots, S_N; t)
\end{aligned} \tag{4.1.3}$$

Daha önce de ifade ettiğimiz gibi sol taraftaki ifade, sistemin t anında S_1, \dots, S_N konfigürasyonunda bulunma olasılığının zamana göre değişimidir. Sağ taraftaki ilk terim ise i . spinimizin $S_i \rightarrow S'_i$ durumunu ifade eden geçiş olasılığıdır. Bu duruma karşılık gelen enerjideki değişim:

$$\begin{aligned}
& \Delta E(S_i \rightarrow S'_i) = E(S'_i) - E(S_i) \\
& \Delta E(S_i \rightarrow S'_i) = -(S'_i - S_i) \left(J \sum_{\langle ij \rangle} S_j + H \right) - (S_i'^2 - S_i^2) \Delta_i.
\end{aligned} \tag{4.1.4}$$

Spin-1 Blume-Capel modeli üç durumlu bir modeldir. (4.1.4) denklemindeki enerji değişimini bulabilmek için olası tüm konfigürasyonların hesaplanması gerekir ve hesaplanan enerji değişimleri aşağıdaki gibidir:

$$\begin{array}{ccc}
\Delta E(1 \rightarrow 1) & \Delta E(1 \rightarrow 0) & \Delta E(1 \rightarrow -1) \\
\Delta E(0 \rightarrow 1) & \Delta E(0 \rightarrow 0) & \Delta E(0 \rightarrow -1) \\
\Delta E(-1 \rightarrow 1) & \Delta E(-1 \rightarrow 0) & \Delta E(-1 \rightarrow -1)
\end{array}$$

Basitlik açısından $J \sum_{\langle ij \rangle} S_j + H = a$ diyelim. Bu durumda enerjideki değişimler:

$$\begin{aligned}
& \Delta E(1 \rightarrow 0) = a + \Delta_i, \\
& \Delta E(1 \rightarrow -1) = 2a, \\
& \Delta E(0 \rightarrow 1) = -a - \Delta_i, \\
& \Delta E(0 \rightarrow -1) = a - \Delta_i, \\
& \Delta E(-1 \rightarrow 0) = -a + \Delta_i, \\
& \Delta E(-1 \rightarrow 0) = -2a,
\end{aligned} \tag{4.1.5}$$

şeklinde olacaktır. Kanonik küme olasılık dağılım ifadesinden yararlanılarak $(S_i \rightarrow S'_i)$ geçiş olasılığı:

$$w_i(S_i \rightarrow S'_i) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta \Delta E(S_i \rightarrow S'_i))}{\sum_{i'} \exp(-\beta \Delta E(S_i \rightarrow S'_i))}, \quad (4.1.6)$$

şeklinde verilir. Bulduğumuz bu enerji değişim ifadelerini (4.1.6) denkleminde yerine yazar ve her $S_i \rightarrow S'_i$ geçişi için geçiş olasılıklarını bulmak istersek;

$$\begin{aligned} w_i(1 \rightarrow 0) &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta \Delta_i)}{2 \cosh(\beta a) + \exp(-\beta \Delta_i)}, \\ w_i(-1 \rightarrow 0) &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta \Delta_i)}{2 \cosh(\beta a) + \exp(-\beta \Delta_i)}, \\ w_i(1 \rightarrow -1) &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta a)}{2 \cosh(\beta a) + \exp(-\beta \Delta_i)}, \\ w_i(0 \rightarrow -1) &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta a)}{2 \cosh(\beta a) + \exp(-\beta \Delta_i)}, \\ w_i(0 \rightarrow 1) &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(\beta a)}{2 \cosh(\beta a) + \exp(-\beta \Delta_i)}, \\ w_i(-1 \rightarrow 1) &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(\beta a)}{2 \cosh(\beta a) + \exp(-\beta \Delta_i)}, \end{aligned} \quad (4.1.7)$$

ifadelerini elde ederiz. Geçiş olasılıklarına dikkat edilirse varılan son durum başlangıç durumundan bağımsızdır yani $w_i(S_i \rightarrow S'_i) = w_i(S'_i)$ şeklindedir. O halde;

$$\begin{aligned} \sum_{S_i \neq S'_i} w_i(S'_i) &= w_i(1) + w_i(0) + w_i(-1), \\ \sum_{S_i \neq S'_i} w_i(S'_i) &= \frac{1}{\tau}, \end{aligned} \quad (4.1.8)$$

olduğu kolaylıkla yazılabilir. Beklenen değer ifadesinin tanımından yararlanır ve bu ifadenin zamana göre türevini alırsak aşağıdaki eşitliği elde ederiz:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle S_j \rangle &= \sum_{\{S_j\}} \left(P(S_1, \dots, S_N; t) \frac{d}{dt} S_j + S_j \frac{d}{dt} P(S_1, \dots, S_N; t) \right), \\ \frac{d}{dt} \langle S_j \rangle &= \sum_{\{S_j\}} S_j \frac{d}{dt} P(S_1, \dots, S_N; t). \end{aligned} \quad (4.1.9)$$

(4.1.9) denkleminde master denklemini yerine yazar ve normalizasyon şartından yararlanarak dinamik hal denklemini aşağıdaki gibi buluruz:

$$\tau \frac{d}{dt} \langle S \rangle = -\langle S \rangle + \left\langle \int \frac{2 \sinh(\beta(J \sum_j S_j + H(t)))}{2 \cosh(\beta(J \sum_j S_j + H(t))) + \exp(-\beta \Delta_i)} P(\Delta_i) d\Delta_i \right\rangle. \quad (4.1.10)$$

Kristal alan olasılık dağılımının denklem (4.1.2)'deki gibi olduğu hatırlarsa, OAY altında dinamik hal denklemini aşağıdaki gibi bulunur:

$$\begin{aligned} \Omega \frac{d}{d\xi} m = -m + p \frac{2 \sinh\left(\frac{m+h\cos(\xi)}{T}\right)}{2 \cosh\left(\frac{m+h\cos(\xi)}{T}\right) + \exp\left(-\frac{d}{T}\right)} \\ + (1-p) \frac{2 \sinh\left(\frac{m+h\cos(\xi)}{T}\right)}{2 \cosh\left(\frac{m+h\cos(\xi)}{T}\right) + 1}. \end{aligned} \quad (4.1.11)$$

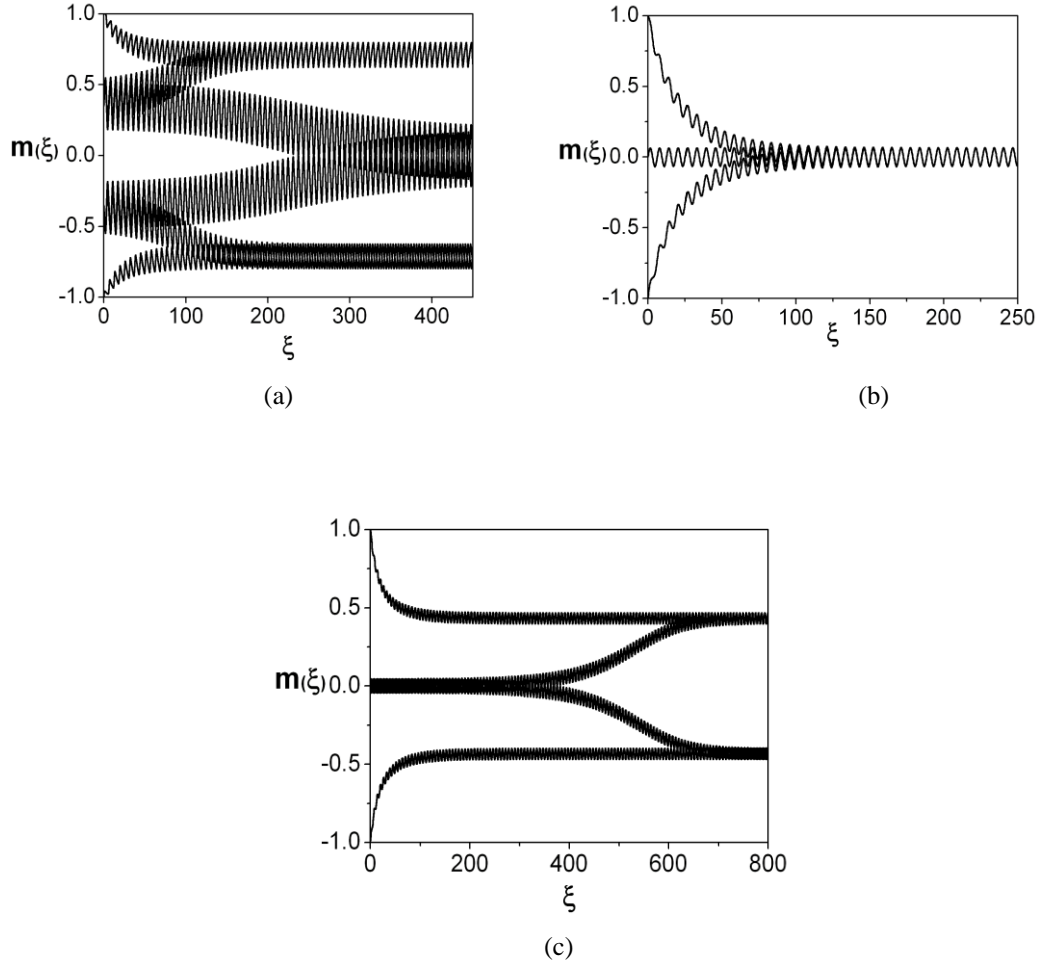
Burada; $\xi = wt$, $m = \langle S \rangle$, $T = (\beta zJ)^{-1}$, $d = \Delta/zJ$, $h = H_0/zJ$ ve $\Omega = w\tau$ olarak alınmıştır. $\Omega = 2\pi$ ve kare örgü için $z = 4$ alınmıştır.

4.2 Dinamik Faz Geçiş Noktaları, Dinamik Faz Diyagramları ve Kristal Alan Düzensizliğinin Diyagramlar Üzerindeki Etkileri

Dinamik hal denkleminin elde edilmesinin ardından sayısal çözüm yapılarak mıknatıslanmanın zamana göre değişimi, dinamik düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi ve $h - T$ düzlemindeki dinamik faz diyagramları elde edilmiştir. (4.1.11) ile verilen dinamik hal denklemini RK4 yöntemi kullanılarak çözüldüğünde iki tip çözüm verir. Bu çözümlerden birincisi simetrik çözümdür ve aşağıdaki şekilde ifade edilir:

$$m(\xi + \pi) = -m(\xi). \quad (4.2.1)$$

Paramanyetik faza karşılık gelen bu çözümde, mıknatıslanma sıfır civarında salınır. Bir diğer çözüm ise, kararsız çözüm ya da diğer adıyla asimetrik çözümdür. İkinci tip çözümde ise manyetizasyon zamanla paramanyetik fazın aksine sonlu bir değer civarında değişir. Denklem (4.1.11) verilen parametreler için RK4 yöntemi kullanılarak çözülmüştür ve elde edilen sonuçlar Şekil 4.1'da gösterilmiştir.



Şekil 4.1 $p=0.9$ iken, mıknatıslanmanın zamanla değişimi; (a) $d=-0.25, h=0.5$ ve $T=0.7$ değerleri için paramanyetik faza, (b) $d=-0.25, h=0.25$ ve $T=0.5$ değerleri için ferromanyetik faza ve (c) $d=-0.25, h=0.75$ ve $T=0.1$ değerleri için ise bir arada bulunma bölgesine karşılık gelir.

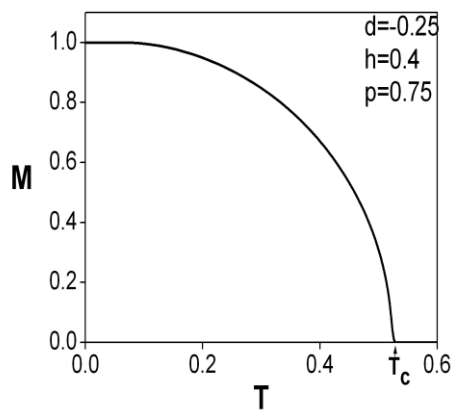
Şekil 4.1'dan açıkça görüldüğü üzere başlangıç değerlerine bağlı olarak sistemin üç farklı davranış gerçekleştirir. Bir diğer deyişle, sistem paramanyetik (P),

ferromanyetik (F) ve bir arada bulunma bölgesi (F+P) olan paramanyetik ve ferromanyetik fazlarının bir arada bulunduğu durumları içerir. Şekil 4.1.a'da, çözümlerin başlangıç değerlerine bağlı olmadığı paramanyetik fazlar mevcuttur ve burada manyetizasyon sıfır civarında salınır. Şekil 4.1.b'de manyetizasyonun sonlu bir değer civarında salındığı çözüm; ferromanyetik faza karşılık gelir ve Şekil 4.1.a'da olduğu gibi başlangıç değerlerine bağlı değildir. Oysa Şekil 4.1.c, kristal alan düzensizliği (p), kristal alan (d) ve manyetik alan (h) değerlerine bağlı olarak başlangıç değerlerinin önem kazandığı paramanyetik ve ferromanyetik fazların bir arada bulunduğu bölgeleri içerir.

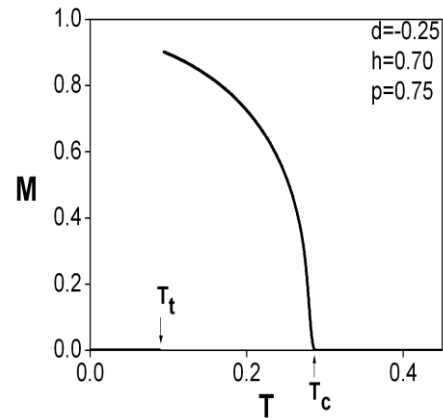
Buraya kadar gelinen noktada, (4.1.11) denkleminin çözülmesiyle elde edilen ve Şekil 4.1'da verilen manyetizasyonun zamana göre değişimleri, ferromanyetik ve paramanyetik olmak üzere toplamda iki tip çözüm olduğunu, ayrıca ferromanyetik ve paramanyetik fazların birarada bulunduğu bir karışım bölgesinin varlığını göstermektedir. Kristal alan düzensizliği içeren kinetik spin-1 Blume-Capel modelinin dinamik faz sınırlarını bulabilmek için dinamik düzen parametresinden yararlanır ve bu düzen parametresi elde edilen çözümlerin bir periyot üzerinden ortalaması alınarak elde edilir. Manyetizasyonun bir periyot üzerinden ortalaması alınarak elde edilen dinamik düzen parametresi:

$$M = \frac{w}{2\pi} \oint m(\xi) d\xi, \quad (4.2.2)$$

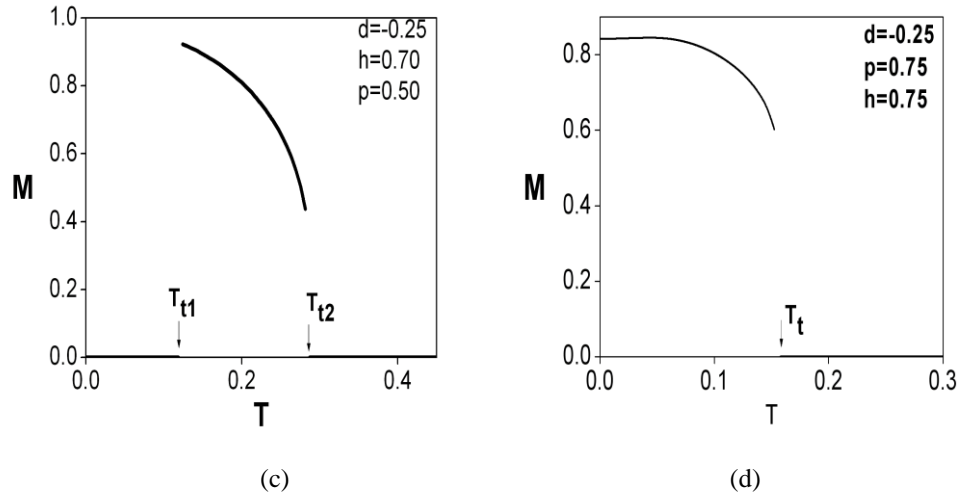
gibidir.



(a)



(b)

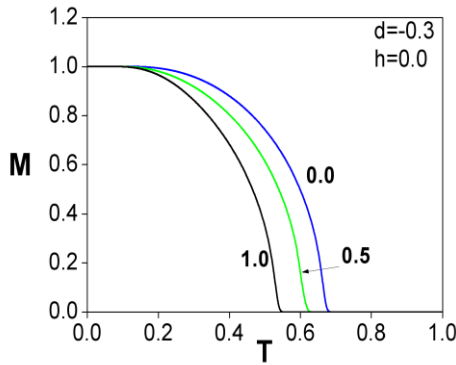


Şekil 4.2 İndirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olan dinamik düzen parametresinin sıcaklıkla değişimleri. T_t ve T_c sırasıyla birinci ve ikinci dereceden faz geçişlerini işaret eder. (a) Sistem ikinci dereceden faz geçişi gerçekleştirir. (b) Biri birinci dereceden diğeri ise ikinci dereceden olmak üzere ard arda iki faz geçişi gerçekleşir. Şekil aynı zamanda re-entrance olayının varlığını gösterir. (c) Sistem ard arda iki adet birinci dereceden faz geçişi gerçekleştirir. (d) Sistem birinci derece faz geçişi gerçekleştirir.

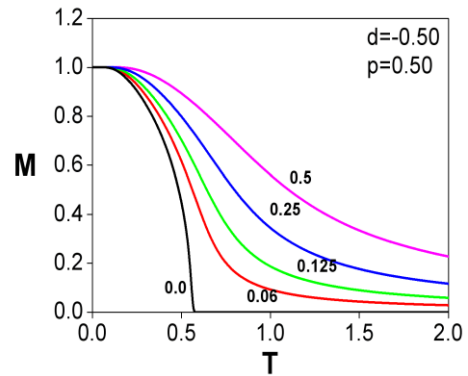
Dinamik düzen parametresi p , d , h , ve T' 'nin bir fonksiyonudur. Dinamik faz sınırlarını içeren dinamik faz diyagramları dinamik düzen parametresinden yararlanılarak elde edilir. Dinamik düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi Şekil 4.2'de verilmiştir. Burada T_c ve T_t sırasıyla ikinci dereceden ve birinci dereceden faz geçişlerini göstermektedir. Şekil 4.2.a'da, $p = 0.75$, $d = -0.25$, $h = 0.4$ ve $m(0) = 1$ değerleri için dinamik düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi görülmektedir. Artan sıcaklıkla birlikte mıknatıslanma değeri azalmakta ve Curie sıcaklığında sıfıra giderek ikinci dereceden dinamik faz geçişi gerçekleşmektedir. Şekil 4.2.b'de ise p, d, h değerleri Şekil 4.2.a ile aynı fakat $m(0) = 0$ 'dır. Şekilden açıkça görüldüğü üzere, sistem ard arda iki faz geçişi gerçekleştirmektedir. Bunlardan ilki paramanyetik fazdan ferromanyetik faza olmak üzere birinci dereceden, diğeri ise ferromanyetik fazdan paramanyetik faza olmak üzere ikinci

dereceden faz geçişidir. Şekil 4.2.a ve Şekil 4.2.b bize ferromanyetik ve paramanyetik fazların birarada bulunduğu karışım bölgesinin varlığını işaret eder. Bununla beraber, Şekil 4.2.c'de sistem birbirini izleyen iki süreksiz faz geçişiyle beraber re-entrance olayını gerçekleştirir ki bunlar T_{t_1} ve T_{t_2} 'de yer alır. Şekil 4.2.d'de ise $p = 0.75$, $h = 0.75$ ve $d = -0.25$ değerleri için dinamik düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi gösterilmektedir. Şekilden de kolayca görülebileceği üzere sistem sadece birinciden faz geçişi gerçekleştirmiştir. Diğer bir deyişle ferromanyetik fazdan paramanyetik faza süreksizlik sergileyerek geçmiştir.

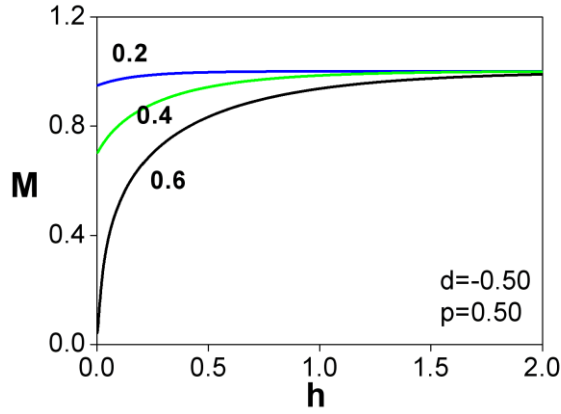
Bu irdelemelerin ardından salınımlı dış manyetik alanın etkisini görmek amacıyla manyetik alanın zamana bağlılığı ortadan kaldırılarak sisteme statik bir manyetik alan uygulanması halinde dinamik düzen parametresinin sıcaklıkla değişimine bakılmıştır. Elde edilen sıcaklık davranışları Şekil 4.3'de gösterilmiştir. Şekil 4.3.a, dış manyetik alan olmadığı durumda, farklı kristal alan konsantrasyonları için ortalama mıknatıslanmanın sıcaklıkla değişimini gösterir. Her eğriye eşlik eden sayı p 'nin değerini gösterir. Burada, kristal alan negatif işaretli olduğundan sabit manyetik alan değeri için artan düzensizlikle birlikte kritik sıcaklık artar.



(a)



(b)



(c)

Şekil 4.3 (a) Dış manyetik alanın olmadığı durumda farklı konsantrasyon değerleri için M 'in sıcaklıkla değişimleri. Eğriye eşlik eden sayılar konsantrasyon (p) değerlerine karşılık gelmektedir. (b) $p=0.5$ iken, farklı statik dış manyetik alan değerlerinde M 'in sıcaklıkla değişimleri. Eğriye eşlik eden sayılar manyetik alan değerlerine karşılık gelmektedir. (c) $d=-0.5$ durumunda, statik manyetik alanın bir fonksiyonu olan M 'in manyetik alanla değişimleri. Eğriye eşlik eden sayılar indirgenmiş sıcaklık değerlerine karşılık gelmektedir.

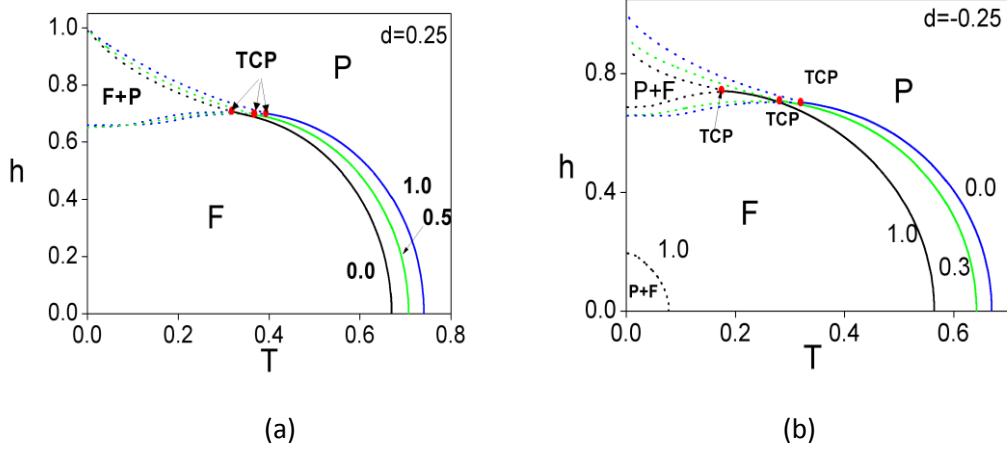
Diğer yandan, statik limitte ($w = 0$) dinamik faz geçişleri kaybolur. Pertürbe olmamış sistemin statik geçiş sıcaklığına örnek olarak verilebilir (Chakrabarti ve Acharyya, 1997). Şekil 4.3.b, $d = -0.5$ ve $p = 0.5$ iken, sabit statik manyetik alanlar için ortalama mıknatıslanmanın sıcaklıkla değişimini gösterir. Şekil 4.3.c, $d = -0.50$ ve $p = 0.50$ için farklı sabit sıcaklıklar için ortalama mıknatıslanmanın statik manyetik alanla değişimini verir. Bu şekillerden, statik olarak sıfırdan farklı herhangi bir manyetik alan değeri için faz geçişi fenomeninin gerçekleşmediği görülür.

Şimdi sistemin faz diyagramlarına odaklanabiliriz. Şekil 4.4, Şekil 4.5, Şekil 4.6 ve Şekil 4.7 (h, T) düzleminde hesaplanan ortalama alan dinamik faz diyagramlarını gösterir ki bu diyagramlar saf Blume-Capel modelinin beş farklı faz diyagramı üzerinde kristal alan düzensizliğinin etkilerini ortaya çıkarır. Bu faz diyagramlarında

kesikli çizgiler ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci dereceden ve ikinci dereceden faz geçişlerine karşılık gelmektedir. Sürekli ve süreksiz faz geçiş sınırlarının uç uca birleştiği yerde bulunan *DTCP*'ler ise içi dolu yuvarlak ile sembolize edilmiştir. İlk olarak Şekil 4.4.a'da, $d = 0.25$ için ikili kristal alan dağılımı içeren iki boyutlu kinetik BC modelinin dinamik faz diyagramı verilmiştir. Her bir eğriye eşlik eden sayı kristal alan konsantrasyon (p) değeridir. En dıştaki eğri saf BC modeline karşılık gelir ve burada donmuş düzensizlik yoktur. Azalan p değerleriyle birlikte düzenli fazlar ve birinci dereceden faz sınırları daralır. Bu sonuçlar RG sonuçları ile uyum içerisinde (Hui ve Berker, 1989). Son olarak, benzer faz diyagramlarının kinetik spin-1/2 Ising (Tome ve Oliveira, 1990) modelinde olduğu gibi karma kinetik spin-1/2 ve spin-1 (Buendia ve Machado, 1998) sistemlerinde görüldüğünü de vurgulayabiliriz. Bu faz diyagramının diğerlerine benzemesinin sebebi J , d ve h arasındaki rekabettir. Spin-1 Blume-Capel modelinin Hamiltoniyeni pozitif kristal alan değerleri için spin-1/2 Ising modeline benzer sonuçlar içerir.

(Keskin, Canko ve Temizer, 2005) referansında verildiği gibi negatif kristal alan değerleri için saf BC modeli dört farklı faz diyagramı topolojisine sahiptir ki bu topolojiler d 'nin değerine bağlı olarak değişir. Şimdi bu faz diyagramları üzerinde kristal alandaki düzensizliklerin etkilerini tartışalım.

1) $-0.0104 > d \geq -0.4654$ için, saf BC modelinin dinamik faz diyagramı pozitif d durumuna benzer fakat düşük manyetik alan ve düşük sıcaklık değerlerinde bir tane P+F bölgesi daha içerir. Bu F+P bölgesi ve F fazı arasındaki sınır birinci derece faz geçişlerinin oluşturduğu sınırdır (Bakınız (Keskin, Canko ve Temizer, 2005) Şekil7(b)). Blume Capel modelinde, negatif kristal alan etkileşimi manyetik olmayan durumlar olarak isimlendirilen boşlukları açığa çıkarır.



Şekil 4.4 Kristal alan düzensizliği içeren kinetik spin-1 Blume Capel modelinin (h, T) düzlemindeki faz diyagramları. Sistemde paramanyetik (P), ferromanyetik (F) ve iki fazın birarada bulunduğu (F+P) bölgeleri bulunmaktadır. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci dereceden ve ikinci dereceden faz geçişlerini gösterir. $d = 0.25$ (a) ve $d = -0.25$ (b) değerleri için çizilmiş olan bu faz diyagramları üstündeki her bir eğriye eşlik eden rakamlar konsantrasyon (p) değerlerini gösterir.

Şekil 4.4.b bu durumu sergiler: artan negatif kristal alan konsantrasyonu ile beraber düzensiz faz gerileri ve DTCP daha düşük sıcaklıklara doğru geriler. Böylece kristal alan konsantrasyon değeri (0.95) 'in altına düştüğünde, düşük manyetik alan ve düşük sıcaklık bölgesindeki F+P fazı artan boşluklarla beraber gözden kaybolur.

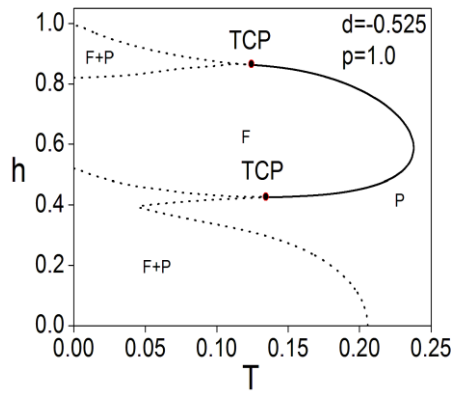
2) $-0.4654 > d \geq -0.5543$ için ise sistem iki tane DTCP içerir. Bunlardan birisi $d = 0.25$ ve $d = -0.25$ için elde edilen faz diyagramlarına benzer yerde ortaya çıkarken diğeri düşük manyetik alan bölgesinde gözlemlenir. Buna ek olarak, birinci derece faz geçişi çizgisi düşük sıcaklık ve düşük manyetik alan bölgesinde var olur ve P+F fazı hem F fazından hem de P fazından ayrılır. Donmuş düzensiz kristal alan uyguladığımızda, değişen kristal alan konsantrasyonu ile topolojinin dramatik olarak değiştiği bulunur. Bizim hesaplarımız, p değerine bağlı olarak değişen dört farklı faz diyagramı olduğunu göstermiştir:

2.a) Tip 1 ($p \geq 0.97$): Sistem, saf durumla benzer faz diyagramına sahiptir (Şekil 4.5.a).

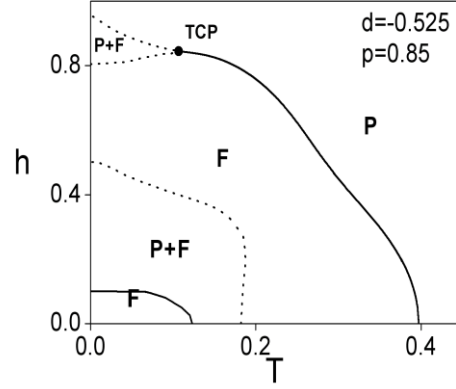
2.b) Tip 2 ($0.97 > p \geq 0.85$): Düşük sıcaklık ve manyetik alan bölgesindeki DTCP gözden kaybolur. Böylece, ikinci derece faz geçiş çizigisi $h = 0$ eksenine birleşmiş olur. Ek olarak, P+F fazı daralır ve yerini düzenli faza bırakır (Şekil 4.5.b).

2.c) Tip 3 ($0.85 > p \geq 0.31$): Artan kristal alan boşluklarıyla düşük manyetik alan ve sıcaklık değerlerindeki karışım bölgesi daha yüksek alan değerlerine taşınır. Kristal alan konsantrasyonunun bu değer aralığı için faz diyagramında bir adet DTCP bulunur.

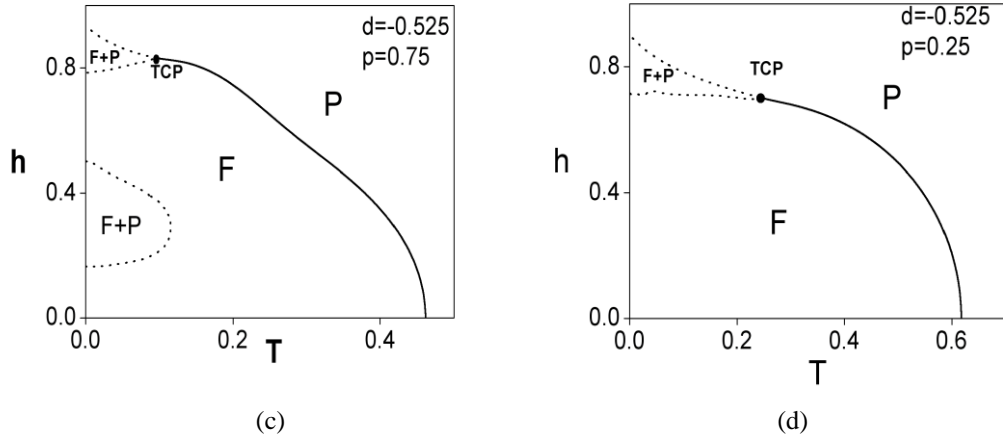
2.d) Tip 4 ($0.31 > p \geq 0.0$): Burada kristal alan etkileşimi oldukça seyrektilir. Şekil 4.5.d'den görebildiğimiz gibi F+P fazı gözden kaybolur.



(a)



(b)



Şekil 4.5 $d=-0.525$ iken, farklı kristal alan konsantrasyonları (p) için kristal alan düzensizliği içeren Blume-Capel modelinin (T, h) düzlemindeki faz diyagramları. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci dereceden ve ikinci dereceden faz geçişlerini gösterir. (a) $p=1.0$, (b) $p=0.85$, (c) $p=0.75$ ve (d) $p=0.25$ için.

3) $-0.5543 > d \geq -0.9891$ için, saf sistem acayip bir faz diyagramı sergiler ki bu diyagram düşük sıcaklık bölgelerinde üç tane farklı F+P fazı içerir. P ve F fazlarına ek olarak iki adet dinamik üçlü kritik nokta içerir. Diğer yandan, kristal alana düzensizlik eklenirse dört adet faz diyagramı topolojisi elde edilir ki bunlar kristal alan konsantrasyonuna göre bağlı olarak değişir (Şekil 4.6):

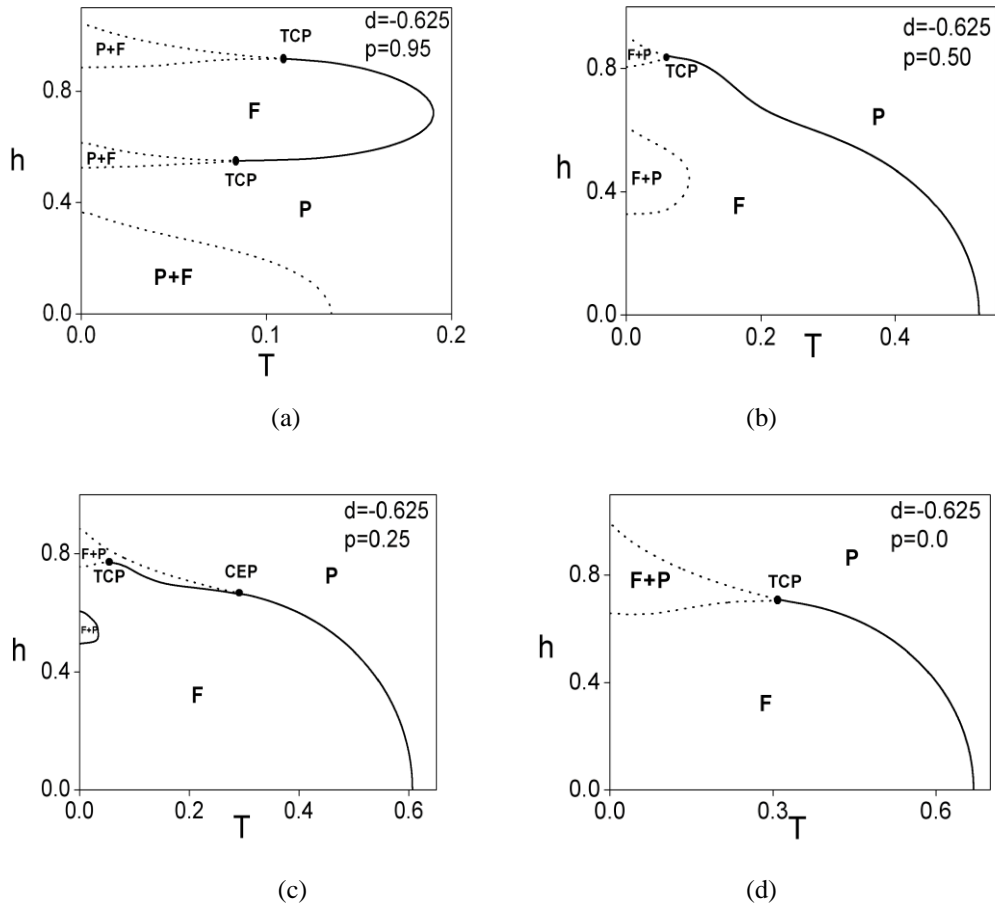
3.a) Tip 1 ($1.0 \geq p > 0.8$): Rastgele kristal alan içeren kinetik spin-1 Blume Capel modelinin dinamik faz diyagramı saf duruma benzesemesine rağmen, artan kristal alan düzensizliği ile birlikte düzenli faz daha düşük sıcaklıklara doğru kayar ve düşük sıcaklık ve manyetik bölgesindeki F+P bölgesi daralır. Son olarak $p = 0.79$ ' da gözden kaybolur (Şekil 4.6.a).

3.b) Tip 2 ($0.80 \geq p > 0.32$): Kristal alan konsantrasyonunun bu aralığı için, F fazı genişler ve sistem tek bir DTCP içerir (Şekil 4.6.b).

3.c) Tip 3 ($0.32 \geq p > 0.10$): F+P fazıyla F fazını birbirinden ayıran faz sınırı tamamen ikinci dereceden faz geçişlerinden oluşur. Bunun sonucunda DTCP sıfır sıcaklığa doğru hareket eder. Böylece, F+P fazı ve P fazı arasındaki sınır birinci

derece olarak kalır. DTCP'ye ek olarak, sistem bir tane dinamik kritik son nokta (dynamical critical end point (DCEP)) sergiler (Şekil 4.6.c).

3.d) Tip 4 ($0.1 \geq p > 0.0$): Çok düşük sıcaklık ve manyetik alan değerleri için davranış Tip-3'ten farklıdır, P+F bölgesi gözden kaybolur ve DCEP gözlenmez. Konsantrasyon değerinin bu aralığı için sistem, düşük sıcaklık ve yüksek manyetik alan değerlerinde sadece bir tane DTCP sergiler (Şekil 4.6.d).



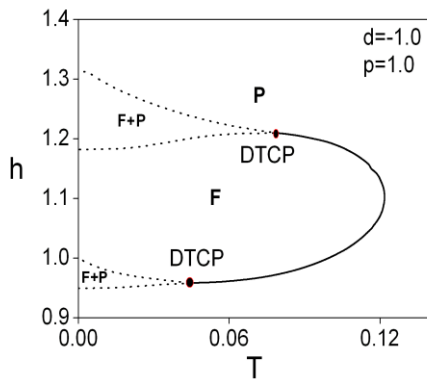
Şekil 4. 6 $d=-0.625$ iken, farklı kristal alan konsantrasyonları (p) için kristal alan düzensizliği içeren Blume-Capel modelinin (T , h) düzlemindeki faz diyagramları. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci dereceden ve ikinci dereceden faz geçişlerini gösterir. (a) $p=0.95$, (b) $p=0.50$, (c) $p=0.25$ ve (d) $p=0.0$ için.

4) $-0.9891 > d$ için, faz diyagramı topolojisi diğer topolojilerden tamamiyle farklıdır: saf BC modeli için düşük sıcaklık ve düşük manyetik alan değerlerinde F+P bölgesi içermez. Şekil 4.7.a ve Şekil 4.7.d arasında p 'nin değerine bağlı olarak değişen üç tip faz diyagramı sunulmuştur:

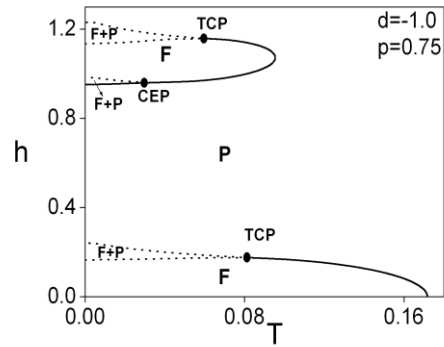
4.a) Tip 1 ($1.0 \geq p > 0.994$): Kristal alan konsantrasyonunun bu aralığı için, sistem iki adet DTCP içerir ve topolojisi saf duruma çok benzerdir (Şekil 4.7.a).

4.b) Tip 2 ($0.993 \geq p > 0.14$): Azalan kristal alan düzensizliği konsantrasyonuyla birlikte F+P ve F fazlarını birbirinden ayıran sınır ikinci derece faz geçiş noktalarından oluşur. Bunun sonucu olarak, en dıştaki DTCP, DCEP'ye dönüşür (Şekil 4.7.b, Şekil 4.7.c).

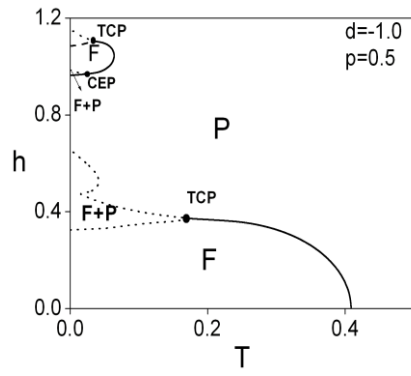
4.c) Tip 3 ($0.14 \geq p \geq 0.0$): Son olarak, $d = -1$ ve $p = 0.0$ için sistem, düşük sıcaklık ve yüksek manyetik alan değerlerinde bir adet DTCP sergiler. Bu noktanın olduğu yerde iki sınır çizgisi birleşir (Şekil 4.7.d). Bu durum, kinetik Ising spin-1/2 (Tome ve Oliveira, 1990) ve kinetik karma Ising (Buendia ve Machado, 1998) modellerinde de gözlenir.



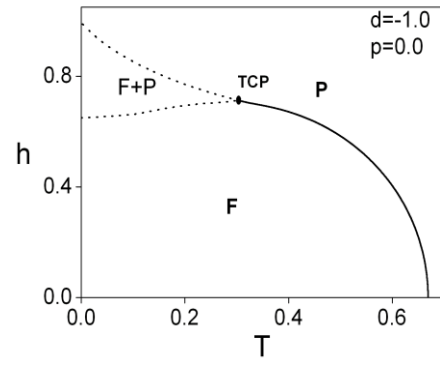
(a)



(b)



(c)



(d)

Şekil 4.7 $d=-1.0$ iken, farklı kristal alan konsantrasyonları (p) için kristal alan düzensizliği içeren Blume-Capel modelinin (T, h) düzlemindeki faz diyagramları. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci dereceden ve ikinci dereceden faz geçişlerini gösterir. (a) $p=1.0$, (b) $p=0.75$, (c) $p=0.50$ ve (d) $p=0.0$ için.

BÖLÜM BEŞ

EAY ALTINDA KİNETİK SPİN-1 BC MODELİ

Bu bölümde, EAY kullanılarak kristal alan düzensizliği içeren kinetik spin-1 Blume-Capel modelinin dinamik faz geçiş noktaları ve dinamik faz diyagramları elde edilmiştir. Ayrıca, elde edilen bu faz diyagramları üzerinde kristal alandaki düzensizliğin getirdiği etkiler tartışılmıştır.

5.1 Kristal Alan Düzensizliği İçeren Spin-1 BC Modeline Ait Dinamik Denklemlerinin EAY Altında Elde Edilmesi

Bu bölümde, ortalama alan yaklaşımına göre daha iyi bir yaklaşım modeli olan EAY kullanılarak ω açısız frekansına sahip zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altındaki kristal alan düzensizliği içeren kinetik spin-1 Blume-Capel modeline ait dinamik hal denklemleri elde edilmiştir. Bu bağlamda, sistem Hamiltoniyeni olarak denklem (4.1.1)'den yararlanılmıştır. Yukarıdaki analize benzer şekilde sistem Glauber stokastik modeli yardımıyla incelendiğinde dinamik hal denkleminin aşağıdaki gibi olduğunu daha önce göstermiştik:

$$\tau \frac{d}{dt} \langle S \rangle = -\langle S \rangle + \left\langle \int \frac{2 \sinh(\beta(J \sum_j S_j + H(t)))}{2 \cosh(\beta(J \sum_j S_j + H(t))) + \exp(-\beta \Delta_i)} P(\Delta_i) d\Delta_i \right\rangle.$$

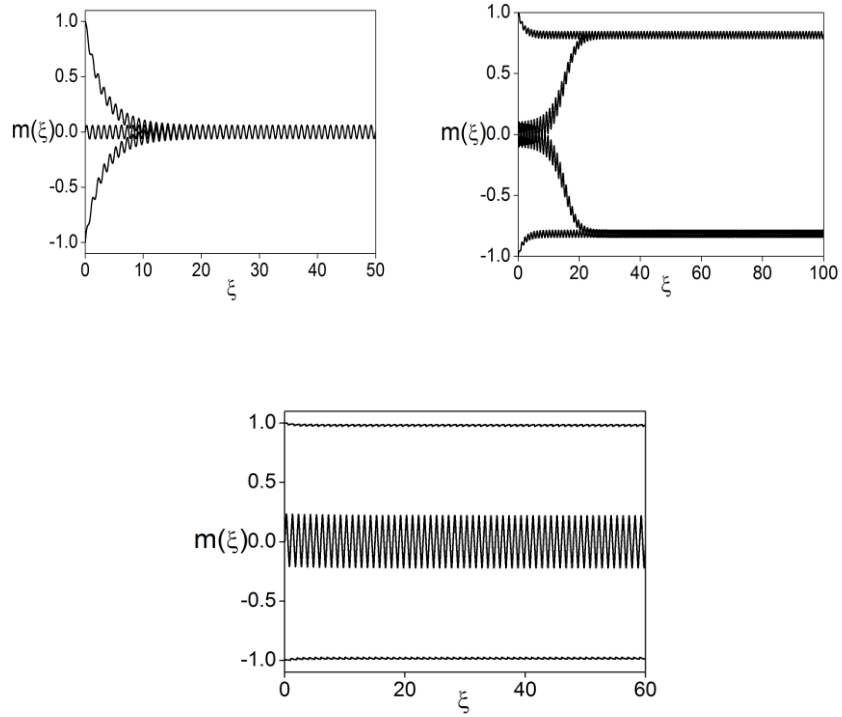
Bölüm 4.2'de detaylıca anlatılan EAY kullanıldığında, iki boyutta kare örgü için dinamik hal denklemleri aşağıdaki gibi elde edilir:

$$\Omega \frac{d}{d\xi} m = -m + c_0 + c_1 m + c_2 m^2 + c_3 m^3 + c_4 m^4 + c_5 m^5 + c_6 m^6 + c_7 m^7 + c_8 m^8. \quad (5.1.1)$$

Burada $\Omega = w\tau$ ve $\xi = wt'$ 'dir. Buradaki c_k ($k = 0 - 8$) katsayıları Ek'te verilmiştir. Bu tez boyunca $\Omega = 2\pi$ alınmıştır.

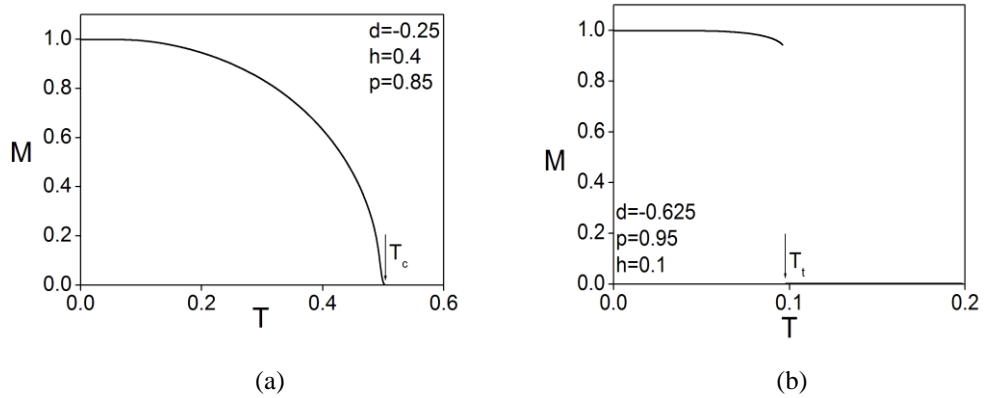
5.2 Dinamik Faz Geçiş Noktaları, Dinamik Faz Diyagramları ve Kristal Alan Düzensizliğinin Diyagramlar Üzerindeki Etkileri

Bu bölümde, EAY altında kristal alan düzensizliği içeren kinetik spin-1 BC modeline ait dinamik faz geçiş noktaları ve dinamik faz diyagramları elde edilmiştir. Ayrıca, kristal alandaki düzensizliğin faz diyagramlarına getirdiği etkiler tartışılmıştır. Bölüm 5.1'de elde edilen dinamik hal denklemi RK4 yöntemi kullanılarak çözülmesiyle manyetizasyonun zamana göre değişimi elde edilmiştir. Bu çözümlemenin, uygun integrasyon yöntemi yardımıyla dinamik faz geçiş noktaları tespit edilerek, dinamik faz diyagramları (T, h) düzleminde elde edilmiştir. Denklem (5.1.1)'de verilen dinamik hal denkleminin sayısal çözümünden elde edilen manyetizasyonun zamana göre değişimi Şekil 5.1'de verilmiştir. Bu şekilden de açıkça görüldüğü üzere, uygulanan parametre (kristal alan konsantrasyonu, manyetik alan, sıcaklık vs.) değerlerine bağlı olarak manyetizasyon zamanla salınımlı olarak değişmektedir. Şekil 5.1.a'da paramanyetik faza karşılık gelen simetrik çözüm Şekil 5.1.b'de ise ferromanyetik faza karşılık gelen asimetric çözüm görülür ve bu iki çözüm başlangıç değerlerinden bağımsızdır. Şekil 5.1.c'de ise öncekilerin aksine başlangıç değerlerinin önem kazandığı simetrik ve asimetric çözümler diğer bir deyişle, ferromanyetik ve paramanyetik fazların bir arada olduğu karışım bölgesi bulunmaktadır. Bu durumlar faz diyagramlarından açıkça görülebilir. Bu irdelemelerin ardından, fazlar arasındaki sınırları bulabilmek için dinamik faz geçiş noktalarının hesaplanması gerekir ve bulunan bu faz geçiş noktalarından kristal alan düzensizliği içeren kinetik spin-1 BC modeline ait dinamik faz diyagramları elde edilir. Daha önce de detaylıca belirtildiği üzere, indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olan dinamik düzen parametresi zamana bağlı olarak değişen manyetizasyonun bir periyot üzerinden ortalaması alınarak elde edilir.



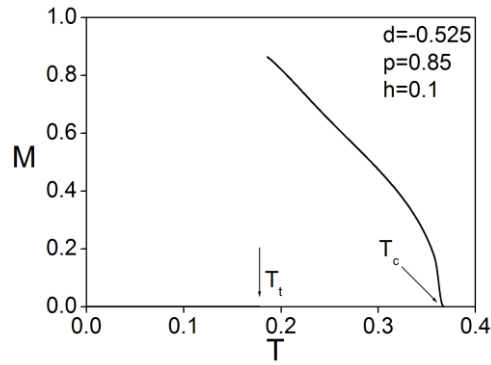
Şekil 5.1 $d = -0.25$ iken, $p=1.0$, $h=0.5$ ve $T=0.75$ (a) değerleri için paramanyetik faza karşılık gelen simetrik çözümler görülmektedir. $p=0.0$, $h=0.4$ ve $T=0.4$ (b) değerleri için ferromanyetik faza karşılık gelen asimetric çözümler görülmektedir. $p=0.0$, $h=0.1$ ve $T=0.75$ değerleri için ise ferromanyetik ve paramanyetik fazların bir arada bulunduğu karışım bölgesi görülmektedir.

EAY altında, kristal alan düzensizliği içeren kinetik spin-1 BC modeline ait dinamik düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimleri Şekil 5.2'deki gibidir.



(a)

(b)



(c)

Şekil 5.2 İndirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olan dinamik düzen parametresinin sıcaklıkla değişimleri. T_t ve T_c sırasıyla birinci ve ikinci dereceden faz geçişlerini işaret eder. (a) 'da ikinci derece ve (b)'de birinci derece faz geçişi gerçekleştirir. (c) Ard arda ilki birinci dereceden diğeri ise ikinci dereceden olmak üzere iki adet faz geçişi gerçekleştirir.

Artan sıcaklıkla birlikte dinamik düzen parametresinde meydana gelen süreksizlik sergileyerek sıfıra gitmesi birinci derece faz geçişine, sürekli olarak sıfıra gitmesi ise ikinci derece faz geçişine karşılık gelmektedir. Sözü geçen bu faz geçiş türleri, Şekil 5.2'de açıkça görülmektedir. Ortalama mıknatıslanma $d = -0.25$, $p = 0.85$ ve $h = 0.4$ değerleri için sürekli faz geçişi (Şekil 5.2.a), $d = -0.625$, $p = 0.95$ ve $h = 0.1$ değerleri için ise süreksiz faz geçişi (Şekil 5.2.b) sergiler. $d = -0.525$, $p = 0.85$ ve $h = 0.1$ değerleri için, biri düzensiz fazdan düzenli faza diğeri ise düzenli fazdan düzensiz faza olmak üzere sırasıyla birinci ve ikinci dereceden ard arda iki dinamik faz geçişi sergilemektedir (Şekil 5.2.c).

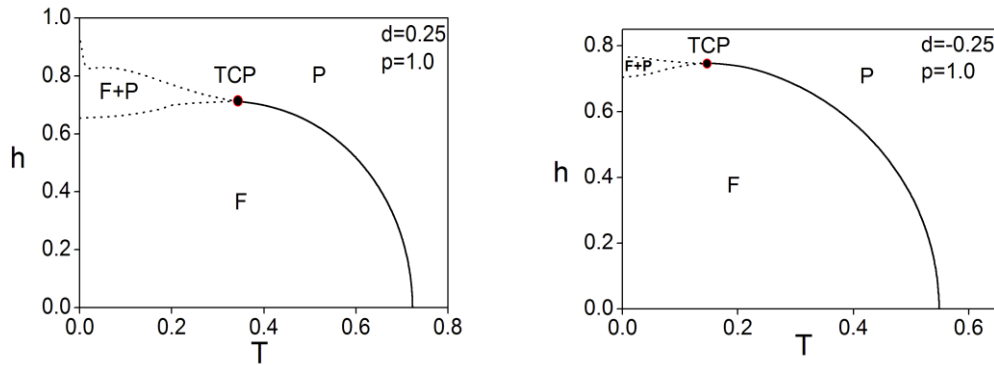
Elde edilen dinamik faz geçiş noktalarından yararlanarak kristal alan düzensizliği içeren kinetik spin-1 Blume-Capel modeline ait dinamik faz diyagramlarını bulabiliriz. Bu faz diyagramları düzenli ve düzensiz fazları birbirinden ayıran sınır çizgisine sahiptir. EAY altında elde etmiş olduğumuz dinamik faz diyagramları, saf Blume-Capel modelinin beş farklı faz diyagramı üzerinde kristal alan düzensizliğinin ve spin-spin korelasyonlarının etkilerini göstermektedir. Faz diyagramlarında, kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci derece ve ikinci derece faz geçişlerine karşılık gelmektedir. Ayrıca, sürekli ve süreksiz faz geçişlerinin uç uca birleştiği yerde bulunan DTCP içi dolu yuvarlak ile gösterilmiştir. Spin-spin korelasyonlarının

hesaba katılmasından dolayı EAY, OAY'na göre daha gerçekçi bir yaklaşım yöntemidir. Bu fark, dinamik düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi ve dinamik faz diyagramları üzerinde kendisini açıkça göstermektedir.

(Keskin, Canko ve Temizer, 2005)' de açıkça belirtildiği üzere, saf BC modeli pozitif kristal alan değerleri için bir, negatif kristal alan değerleri için ise dört farklı faz diyagramı topolojisine sahiptir ki bu topolojiler d 'nin değerine bağlı olarak değişir. OAY altında, kristal alan konsantrasyonunun faz diyagramlarına getirdiği yenilikleri daha önce tartışmıştık. Şimdi ise spinler arasındaki korelasyonu hesaba katan EAY altında, kristal alan konsantrasyonlarının faz diyagramları üzerindeki etkilerine bakacağız. EAY altında elde edilen faz topolojileri aşağıdaki gibidir.

Tüm pozitif kristal alan ve p değerleri için elde edilen faz diyagramları saf BC modeline benzerdir. Ancak, korelasyonların hesaba katılmasından dolayı, faz geçiş sıcaklıkları OAY'na göre daha düşüktür. Nitekim bu durum beklentilerle uyumludur.

1) $-0.0104 > d \geq -0.4654$ aralığındaki kristal alan ve tüm p değerleri için elde edilen faz diyagramları saf BC modeline benzerdir. Ancak, korelasyonların hesaba katılmasıyla birlikte, düşük sıcaklık ve düşük manyetik alan bölgesinde süreksiz faz geçiş noktalarının oluşturduğu karışım bölgesi gözden kaybolur (Şekil 5.3.b).



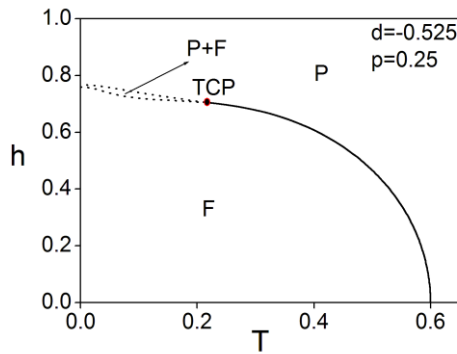
Şekil 5.3 EAY altında, kristal alan düzensizliği içeren kinetik spin-1 Blume Capel modelinin (T, h) düzlemindeki faz diyagramları. Sistemde paramanyetik (P), ferromanyetik (F) ve iki fazın birarada bulunduğu (F+P) bölgeleri bulunmaktadır. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci dereceden ve ikinci dereceden faz geçişlerini gösterir. (a) $d = 0.25$ ve (b) $d = -0.25$ 'dir.

2) $-0.4654 > d \geq -0.5543$ aralığındaki kristal alan değerleri için, faz topolojisi konsantrasyon değerlerine bağlı olarak değişmektedir. Sözü edilen bu durumlar aşağıdaki gibidir:

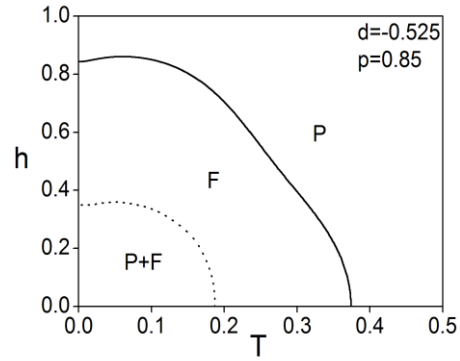
2.a) Tip 1 ($0 \leq p \leq 0.34$): Kristal alan konsantrasyonunun bu değer aralığı için sistem homojen kristal alan içeren kinetik BC modeli ile benzer yapıda bir faz diyagramı sergiler. Burada, düşük sıcaklık ve yüksek manyetik alan değerlerinde bir adet F+P bölgesi ve DTCP bulunur (Şekil 5.4.a).

2.b) Tip 2 ($0.35 \leq p \leq 0.94$): Artan kristal alan konsantrasyonu ile birlikte, faz diyagramının şekli açık bir şekilde değişmektedir. Düşük sıcaklık ve yüksek manyetik alan değerlerinde görülen birinci dereceden geçişler yerlerini ikinci dereceden geçişlere bırakmaktadır. Ayrıca, düşük sıcaklık ve düşük manyetik alan değerlerinde karışım bölgesi görülmektedir (Şekil 5.4.b).

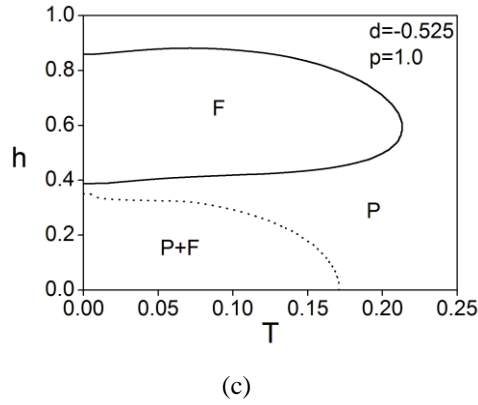
2.c) Tip 3 ($0.95 \leq p \leq 1.0$): Kristal alan konsantrasyonunun bu değer aralığı için, düşük sıcaklık ve düşük manyetik alan değerlerinde bir adet karışım bölgesi ve yüksek manyetik alan düşük sıcaklık değerlerinde ikinci derece faz geçiş noktalarıyla düzensiz fazdan ayrılan ferromanyetik bölge bulunmaktadır.



(a)



(b)



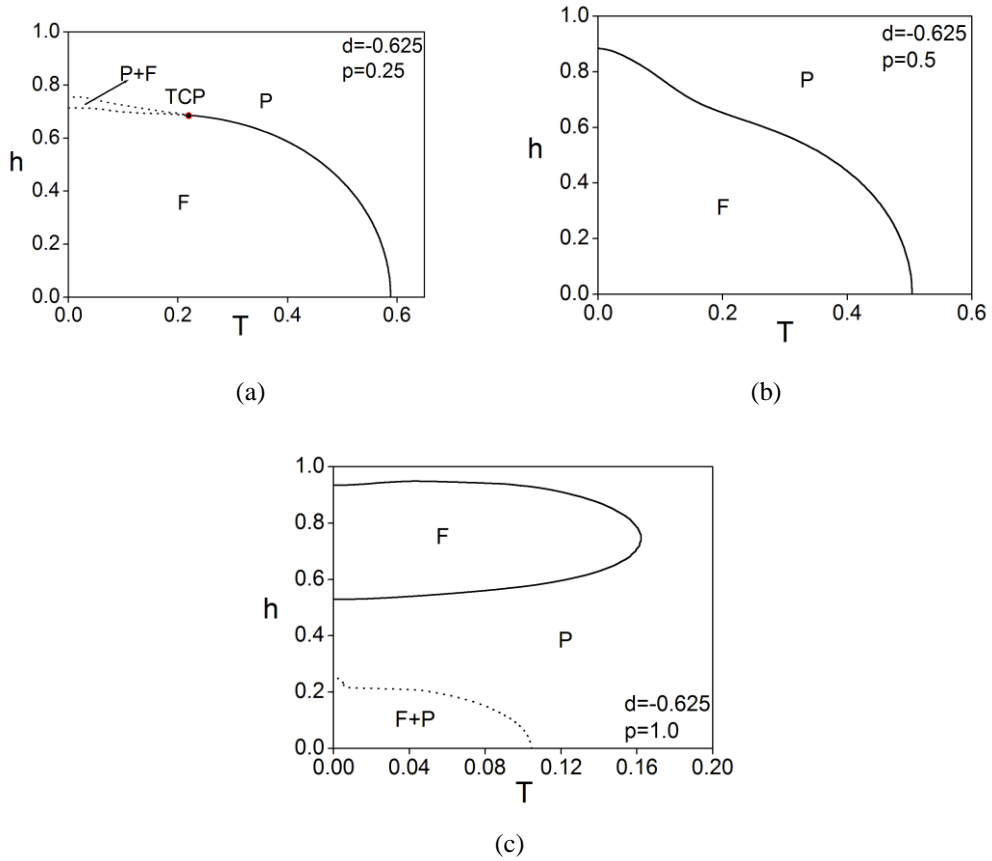
Şekil 5.4 $d=-0.525$ iken, farklı kristal alan konsantrasyonları için kristal alan düzensizliği içeren BC modelinin (T, h) düzlemindeki faz diyagramları. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci ve ikinci dereceden faz geçişini işaret eder. (a) $p=0.25$, (b) $p=0.85$ ve (c) $p=1.0$

3) $-0.5543 > d \geq -0.9891$ aralığındaki kristal alan değerleri için, faz topoloji konsantrasyon değerlerine bağlı olarak değişmektedir. Sözü edilen bu durumlar aşağıdaki gibidir:

3.a) Tip 1 ($0 \leq p \leq 0.30$): Kristal alan konsantrasyonunun bu değer aralığı için, düşük sıcaklık ve yüksek manyetik alan değerlerinde birinci dereceden faz geçişlerinin çevrelediği F+P bölgesi ve bir adet DTCP bulunmaktadır. Bu durum, saf duruma benzerdir (Şekil 5.5.a).

3.b) Tip 2 ($0.31 \leq p \leq 0.71$): Artan kristal alan konsantrasyonu ile birlikte birinci dereceden geçişler yerini ikinci dereceden geçişlere bırakmaktadır (Şekil 5.5.b).

3.c) Tip 3 ($0.72 \leq p \leq 1.0$): Kristal alan konsantrasyonunun bu değer aralığı için, düşük sıcaklık ve düşük manyetik alan değerlerinde süreksiz faz geçiş noktalarının çevrelediği F+P bölgesi bulunmaktadır. Buna ilaveten, yüksek manyetik alan ve düşük sıcaklıklarda düzenli faz görülmektedir (Şekil 5.5.c).



Şekil 5.5 $d=-0.625$ iken, farklı kristal alan konsantrasyonları (p) için kristal alan düzensizliği içeren Blume-Capel modelinin (T, h) düzlemindeki faz diyagramları. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci dereceden ve ikinci dereceden faz geçişlerini gösterir. (a) $p=0.25$, (b) $p=0.85$, (c) $p=1.0$ için.

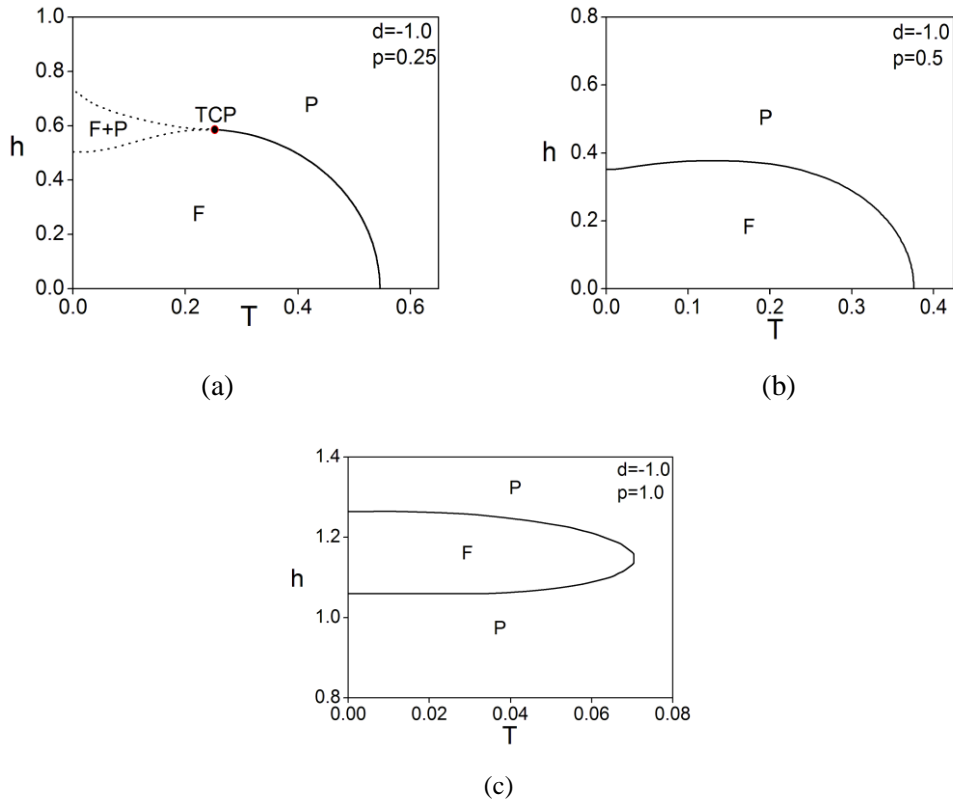
$-0.9891 > d$ aralığındaki kristal alan değerleri için, faz topoloji konsantrasyon değerlerine bağlı olarak değişmektedir. Sözü edilen bu durumlar aşağıdaki gibidir:

4.a) Tip 1 ($0 \leq p \leq 0.42$): Kristal alan konsantrasyonunun bu aralığı için sistem bir adet dinamik üçlü kritik nokta içermektedir. Bu durum, saf durumun faz diyagramı ile paralellik sergiler (Şekil 5.6.a).

4.b) Tip 2 ($0.43 \leq p \leq 0.75$): Artan kristal alan konsantrasyonu ile birlikte düşük sıcaklık ve yüksek manyetik alan değerlerinde gözlenen birinci derece faz geçişlerinden oluşan sınır çizgisi yerini ikinci dereceden faz geçişlerinden oluşan

sınır çizgisine bırakmakta ve dolayısıyla DTCP noktası gözden kaybolmaktadır (Şekil 5.6.b).

4.c) Tip 3 ($0.76 \leq p \leq 1.0$): Kristal alan konsantrasyonunun bu aralığı için düzenli ve düzensiz fazlar ikinci dereceden faz geçişlerinin oluşturduğu sınır ile birbirinden ayrılmaktadır (Şekil 5.6.c).



Şekil 5.6 $d=-1.0$ iken, farklı kristal alan konsantrasyonları (p) için kristal alan düzensizliği içeren Blume-Capel modelinin (T , h) düzlemindeki faz diyagramları. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci dereceden ve ikinci dereceden faz geçişlerini gösterir. (a) $p=0.25$, (b) $p=0.50$, (c) $p=1.0$ için.

BÖLÜM ALTI

ÖZET VE SONUÇLAR

Bu tez çalışmasının ana amacını kristal alan düzensizliği içeren kinetik spin-1 BC modelinin denge dışı davranışları oluşturmaya rağmen, OAY ve EAY altında, ω açısal frekansına sahip salınımlı bir dış manyetik alan etkisi altındaki kinetik spin-1/2 Ising modelinin denge dışı davranışı, bütünlük sağlamak amacıyla incelenmiştir. İndirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olan düzen parametresinin sıcaklıkla değişiminden elde edilen dinamik faz geçiş noktaları yardımıyla manyetik alan ve sıcaklık düzlemlerinde dinamik faz diyagramları oluşturulmuştur. Bu faz diyagramlarında, düşük manyetik alan yüksek sıcaklık ve yüksek manyetik alan düşük sıcaklık değerlerinde sırasıyla ikinci dereceden ve birinci dereceden faz geçiş sınır çizgileriyle, düzenli ve düzensiz fazlar birbirinden ayrılmaktadır. Birinci derece ve ikinci faz geçişlerinin uç uca birleştiği noktalarda bulun üçlü kritik noktalar yine bu faz diyagramları üzerinde yer almaktadır. Ayrıca, faz diyagramlarından, artan ve azalan frekans değerleriyle birlikte sırasıyla faz sınır çizgilerinin dışa doğru genişlediği ve içe doğru daraldığı görülmektedir. Elde ettiğimiz bu sonuçlar, sıfır frekans limitinde dinamik faz geçişlerinin ortadan kalkması gerçeğiyle uyum içerisinde olduğundan yapılan analizlerin kararlı olduğunu gösterir.

Tez çalışmasının ilerleyen bölümlerinde, birçok fiziksel sisteme başarıyla uygulanabilen, zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan etkisi altındaki kristal alan düzensizliği içeren kinetik Blume-Capel modelinin kararlı durumları, OAY ve EAY altında incelenmiştir. Sistemin zaman evrimini Glauber modelini kullanılarak belirlenmiştir. Her iki yöntem altında elde edilen dinamik hal denklemlerinden, manyetizasyonun zamana göre değişimi tespit edilmiştir. Sabit kristal alan, manyetik alan ve konsantrasyon değerleri için, sıcaklığın bir fonksiyonu olan dinamik düzen parametresinin sıcaklıkla değişimlerinden dinamik faz geçiş noktaları saptanmış ve bu noktalar yardımıyla, manyetik alan ve sıcaklık düzlemlerinde, kristal alan düzensizliği içeren kinetik spin-1 BC modeline ait faz diyagramları oluşturulmuştur. OAY ve spin-spin korelasyonlarını hesaba katan EAY altında, kristal alan konsantrasyonunun dinamik faz diyagramları üzerindeki etkisi detaylı bir şekilde

incelenmiş ve diyagramların kristal alan etkileşimi ve konsantrasyon değerlerine güçlü bir şekilde bağlı olduğu bulunmuştur. Tüm pozitif indirgenmiş kristal alan ve konsantrasyon değerleri için sistemin davranışı kinetik Ising modeli (Tome ve Oliveira, 1990) ve kinetik karma Ising spin (1/2, 1) (Buendia ve Machado, 1998) modeline benzemektedir. Düşük sıcaklık ve yüksek manyetik alan değerlerinde birinci derece faz geçişlerinin ve F+P bölgesinin bulunduğu tespit edilmiştir. Artan sıcaklık ve azalan manyetik alanla birlikte birinci derece faz geçişlerinin ikinci mertebe faz geçişlerine döner. Dolayısıyla, sistem dinamik üçlü kritik nokta sergiler. Önceki bölümlerde de ayrıntılı olarak belirttiğimiz gibi, kinetik spin-1 BC modelinde düzensiz kristal alanın varlığı, düşük sıcaklık düşük manyetik alan ve düşük sıcaklık yüksek manyetik alan bölgelerindeki F+P bölgelerini önlemeye çalışır. Elde edilen bu sonuçların daha önce RG teorisi (Hui ve Berker, 1989) ile elde edilen sonuçlarla uyumlu olduğu vurgulanabilir. Birinci derece faz çizgileri ve aynı zamanda çoklu kritik noktaların bazıları ortalama alan yaklaşımının eseridir. Bunun sebebi ise; manyetik alan değerinin faz geçişi için gerekli olan zorlayıcı manyetik alan değerinden daha düşük olması ve sıcaklığın faz geçiş sıcaklığından daha düşük olduğu durumlarda, zamana bağlı manyetizasyon sıfır frekans limitinde bile simetrik olmayan çözüm sunmasıdır. Dalgalanmaların olmadığı durumda, sistem serbest enerji kuyularından birilerinde tuzaklanır ve diğerine geçemez (Acharyya, 1999).

Son olarak, manyetik alandaki salınımın sistem üzerindeki etkisini görmek amacıyla, manyetik alandaki salınım kaldırılarak statik bir manyetik alan etkisi altındaki düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi incelenmiştir. Sıfırdan farklı herhangi statik bir manyetik alan değeri için, faz geçişi olayının gerçekleşmediği gözlenmiştir. Yapılan bu analizin ardından, dinamik faz geçişlerine salınımlı dış manyetik alanının sebep olduğu anlaşılmıştır. OAY ve EAY altında kristal alan düzensizliği içeren kinetik spin-1 Blume-Capel modeli çalışması ilginç faz diyagramları olduğunu gösterir. Bu yüzden, bu çalışmanın deneysel ve teorik olarak diğer çalışmaları tetiklemesini umut ediyoruz.

KAYNAKLAR

- Acharyya, M. ve Chakrabarti, B. K. (1995). Response of Ising systems to oscillating and pulsed fields: Hysteresis, ac, and pulse susceptibility, *Phys. Rev. B*, 52 (9), 6550-6568.
- Acharyya, M. (1997). Nonequilibrium phase transition in the kinetic Ising model: Critical slowing down and the specific-heat singularity, *Phys. Rev. E*, 56 (3), 2407-2411.
- Acharyya, M. (1998). Nonequilibrium phase transition in the kinetic Ising model: Is the transition point the maximum lossy point?, *Phys. Rev. E*, 58 (1), 179-186.
- Acharyya, M. (1999). Nonequilibrium phase transition in the kinetic Ising model: Existence of a tricritical point and stochastic resonance, *Phys. Rev. E*, 59 (1), 218-221.
- Acharyya, M. ve Acharyya, A. B. (2008). *Comm. Comp. Phys.*, 3, 397.
- Belanger, D. P. ve Young, A. P. (1991). The random field Ising model, *J. Magn. Magn. Mater.*, 100 (2), 269-272.
- Benyoussef, A., Biaz, T., Saber, M. ve Touzani, M. (1987). The spin-1 Ising model with a random crystal field: the mean field solution, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 20 (32), 5349-5354.
- Blume, M., Emery, V. J. ve Griffiths, R. B. (1971). Ising model for the λ transition and phase separation in $He^3 - He^4$ mixtures, *Phys. Rev. A*, 4 (3), 1071-1077.
- Blume, M. (1966). Theory of the first-order magnetic phase change in UO_2 , *Phys. Rev.*, 141 (2), 517-524.; Capel, H. W. (1966). On the possibility of first-order phase transition in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting, *Physica*, 32 (5), 966-988.

- Bouchiat, H., Dartyge, E., Monod, P. ve Lambert, M. (1981). Diffuse x-ray determination of local atomic order in a spin-glass alloy systems, *Phys. Rev. B*, 23 (3), 1375-1383.
- Boccara, N., Elkenzi, A. ve Sabers, M. (1989). Mean-field theory of the spin-1 Ising model with a random crystal field , *J. Phys.: Condens. Matter*, 1 (33), 5721-5724.
- Branco, N. S. (1999). Blume-Emery-Griffiths model in a random crystal field, *Phys. Rev. B*, 60 (2), 1033-1037.
- Branco, N. S. ve Bachmann, L. (1998). Mean-field study of the degenerate Blume-Emery-Griffiths model in a random crystal field, *Physica A*, 257 (1-4), 319-324.
- Branco, N. S. ve Boechat, B. M. (1997). Real-space renormalization-group study of the two-dimensional Blume-Capel model with a random crystal field, *Phys. Rev. B*, 56 (18), 11673-11677.
- Buendia, G. M. ve Machado, E. (1998). Kinetics of a mixed Ising ferrimagnetic system, *Phys. Rev. E*, 58 (2), 1260-1265.
- Burkhardt, T. W. (1976). Application of Kadanoff's lower-bound renormalization transformation to the Blume-Capel model, *Phys. Rev. B*, 14 (3), 1196-1201.
- Buzano, C., Maritan, A. ve Pelizzola, A. (1994). A cluster variation approach to the random-anisotropy Blume-Emery-Griffiths model, *J. Phys. Condens. Matter*, 6 (2), 327-338.
- Buzano, C., Maritan, A. ve Pelizzola, A. (1994). A cluster variation approach to the random-anisotropy Blume-Emery-Griffiths model, *J. Phys. Condens. Matter*, 6 (2), 327-338.
- Buzano, C. ve Pelizzola, A. (1995). New topologies in the phase diagram of the semi-infinite Blume-Capel model, *Physica A*, 216 (1-2), 158-168.
- Chakrabarti, B. K. ve Acharyya, M. (1999). Dynamics transitions and hysteresis, *Rev. Mod. Phys.* 71 (3), 847-859.

- Coniglio, A. (1993). Connectivity properties in complex systems, *J. Phys. IV*, 3 (C1), 1-13.
- Du, A., Yü, Y.Q. ve Liu, H.J. (2003). Expanded Bethe-Peierls approximation for the Blume-Capel model, *Physica A*, 320, 387-397
- Etchegoin, P. ve Nöllmann, M. (2003). A model for protein-DNA interaction dynamics, *J. Theo. Bio.*, 220 (2), 233-239.
- Glauber, R. J. (1963). Time-dependent statistics of the Ising model, *J. Math. Phys.*, 4 (2), 294.
- Grollau, S., Kierlik, E., Rosinberg, M.L. ve Tarjus G. (2001). Thermodynamically self-consistent theory for the Blume-Capel model, *Phys. Rev. E*, 63 (4), 041111.
- Gülpınar, G. (2005). *Zamana bağlı fiziksel sistemlerin denge dışı istatistiksel mekanik ile incelenmesi*. İzmir-Ege Üniv.
- Hui, K. ve Berker, A. N. (1989). Random-field mechanism in random-bond multicritical systems, *Phys. Rev. Lett.*, 62 (21), 2507-2510.
- Ising, E. (1925). Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus, *Z. Phys.*, 31 (1), 253-258.
- Jain, A. K. Landau, D. P. (1980). Monte Carlo study of the fcc Blume-Capel model, *Phys. Rev. B*, 22 (1), 445-452.
- Kaneyoshi, T. (1986). The critical point in Ising models with random bonds and crystal-field interactions, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 19 (25), L557-L561.
- Katsumata, K., Nire, T. ve Tanimoto, M. (1982). Spin-glass behavior of a randomly mixed insulating ferromagnet and antiferromagnet, *Phys. Rev. B*, 25 (1), 428-431.
- Kaufman, B. (1949). Crystal Statistics. II. Partition function evaluated by spinor analysis, *Phys. Rev.*, 76 (8), 1232-1243.

- Kaufman, B. ve Onsager, L. (1949). Crystal Statistics. III. Short-range order in a binary Ising lattice, *Phys. Rev.*, 76 (8), 1244-1252.
- Kaufman, M. ve Kanner, M. (1990). Random-field Blume-Capel model: Mean-field theory, *Phys. Rev. B*, 42 (4), 2378-2382.
- Keskin, M., Canko, O. ve Temizer, Ü. (2005). Dynamic phase transition in the kinetic spin-1 Blume-Capel model under a time-dependent oscillating external field, *Phys. Rev. E*, 72 (3), 036125.
- Kirkpatrick, T. R. ve Thirumalai, D. (1987). p-spin-interaction spin-glass model: Connections with the structural glass problem, *Phys. Rev. B*, 36 (10), 5388-5397.
- Lo, W. S. ve Pelcovits, R. A. (1990). Ising model in a time-dependent magnetic field, *Phys. Rev. A*, 42 (12), 7471-7474.
- Mahan, G. D. ve Francisco, H. C. (1977). Ising model with magnetic field and the lattice gas, *Phys. Rev. B*, 16 (3), 1168-1176.
- Maritan, A., Cieplak, M., Swift, M. R., Toigo, F., ve Banavar, J. R. (1992). Random-anisotropy Blume-Emery-Griffiths model, *Phys. Rev. Lett.*, 69 (2), 221-224.
- Nicodemi, M. ve Coniglio, A. (1997). The glassy transition of the frustrated Ising lattice gas, *J. Phys. A*, 30 (7), L187-L194.
- Onsager, L. (1944). Crystal Statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition, *Phys. Rev.*, 65 (3-4), 117-149.
- Rao, M., Krishnamurthy, H. R. ve Pandit, R. (1990). Magnetic hysteresis in two model spin systems, *Phys. Rev. B*, 42 (1), 856-887.
- Reichl, L. E. (1997). *A modern course in statistical physics* (2nd ed.). A Wiley-Interscience Publication.
- Salmon, O. D. R. ve Tapia, J. R. (2010). Multicriticality in the Blume-Capel model under a continuous-field probability distribution, *J. Phys. A: Math. Theor.*, 43 (12), 125003.

- Saul, D.M., Wortis, M. ve Stauffer, D. (1974). Tricritical behavior of the Blume-Capel model, *Phys. Rev. B*, 9 (11), 4964-4980.
- Schupper, N. ve Shnerb, N. M. (2005). Inverse melting and inverse freezing: A spin model, *Phys. Rev. E*, 72 (4), 046107.
- Sengupta, S., Marathe, Y. ve Puri, S. (1990). Cell-dynamical simulation of magnetic hysteresis in the two-dimensional Ising system, *Phys. Rev. B*, 45 (14), 7828-7831.
- Shi, X., Wei, G. ve Li, L. (2008). Effective-field theory on the kinetic Ising model, *Phys. Lett. A*, 372 (37), 5922-5927.
- Snowman, D. P. (2009). Blume-Capel Ising ferromagnet with competing crystal-field interactions, *Phys. Rev. E*, 79 (4), 041126.
- Thomas, P. B. ve Dhar, D. (1993). Hysteresis in isotropic spin systems, *J. Phys. A: Math. Gen.*, 26 (16), 3973-3981.
- Tome, T. ve de Oliveira, M. J. (1990). Dynamic phase transition in the kinetic Ising model under a time-dependent oscillating field, *Phys. Rev. A*, 41 (8), 4251-4254.
- Upton, P. ve Yeomans, J. (1989). Model for binary alloys: An Ising model with isotropic competing interactions, *Phys. Rev. B*, 40 (1), 479-492.
- Weiss, P. (1907). *J. Phys. Radium*, 6, 661.
- Yang, D. H. Y. ve Wang, Y. L. (1975). Green's-function diagrammatic technique for complicated level systems. II. An application to the spin-1 Heisenberg ferromagnet with easy-axis single-ion anisotropy, *Phys. Rev. B*, 12 (3), 1057-1070.

EK

$e^{a\Delta}f(x) = f(x + a)$ özelliğinden yararlanarak bulunan a_i ($i = 0 - 4$) ve b_j ($j = 0 - 6$) katsayıları sırasıyla aşağıdaki gibidir:

$$a_0 = \frac{1}{16}(f(H + 4J) + 4f(H + 2J) + 6f(H) + 4f(H - 2J) + f(H - 4J)),$$

$$a_1 = \frac{1}{4}4(f(H + 4J) + 2f(H + 2J) - 2f(H - 2J) - f(H - 4J)),$$

$$a_2 = \frac{3}{8}(f(H + 4J) - 2f(H) + f(H - 4J)),$$

$$a_3 = \frac{1}{4}(f(H + 4J) - 2f(H + 2J) + 2f(H - 2J) - f(H - 4J)),$$

$$a_4 = \frac{1}{16}(f(H + 4J) - 4f(H + 2J) + 6f(H) - 4f(H - 2J) + f(H - 4J)),$$

$$b_0 = \frac{1}{64}(f(H + 6J) + 6f(H + 4J) + 15f(H + 2J) + 20f(H) + 15f(H - 2J) + 6f(H - 4J) + f(H - 6J)),$$

$$b_1 = \frac{3}{32}(f(H + 6J) + 4f(H + 4J) + 5f(H + 2J) - 5f(H - 2J) - 4f(H - 4J) - f(H - 6J)),$$

$$b_2 = \frac{15}{64}(f(H + 6J) + 2f(H + 4J) - f(H + 2J) - 4f(H) - f(H - 2J) + 2f(H - 4J) + f(H - 6J)),$$

$$b_3 = \frac{5}{16}(f(H + 6J) - 3f(H + 2J) + 3f(H - 2J) - f(H - 6J)),$$

$$b_4 = \frac{15}{64}(f(H + 6J) - 2f(H + 4J) - f(H + 2J) + 4f(H) - f(H - 2J) - 2f(H - 4J) + f(H - 6J)),$$

$$b_5 = \frac{3}{32}2(f(H + 6J) - 4f(H + 4J) + 5f(H + 2J) - 5f(H - 2J) + 4f(H - 4J) - f(H - 6J)),$$

$$b_6 = \frac{1}{64}(f(H + 6J) - 6f(H + 4J) + 15f(H + 2J) - 20f(H) + 15f(H - 2J) - 6f(H - 4J) + f(H - 6J)).$$

Kristal alan düzensizliği içeren kinetik spin-1 Blume-Capel için elde edilen katsayılar ise aşağıdaki gibidir:

$$c_0 = f(H),$$

$$c_1 = 2f(H + J) - 2f(H - J),$$

$$c_2 = -3f(H) + 2f(H + J) + 2f(H - J) + 3/2f(H + 2J) - 4f(H) + 3/2f(H - 2J),$$

$$c_3 = 3f(H + 2J) - 3f(H - 2J) + 1/2f(H + 3J) + 15/2f(H - J) - 15/2f(H + J) - 1/2f(H - 3J),$$

$$c_4 = 1/16f(H + 4J) + 75/8f(H) - 7/4f(H - 2J) - 15/2f(H - J) + 6f(H) + 3/2f(H - 3J) - 15/2f(H + J) - 7/4f(H + 2J) + 1/16f(H - 4J) + 3/2f(H + 3J),$$

$$c_5 = 1/4f(H + 4J) - 1/4f(H - 4J) + 9f(H + J) - f(H - 3J) + 13/2f(H - 2J) + f(H + 3J) - 13/2f(H + 2J) - 9f(H - J),$$

$$c_6 = 9f(H + J) + 3/8f(H - 4J) + 9f(H - J) - f(H + 3J) - 3/2f(2J) + 3/8f(4J) - 39/4f(H) - 3/2f(-2J) - 4f(H) - f(-3J),$$

$$c_7 = -1/4f(-4J) + 7/2f(-J) + 1/4f(4J) - 7/2f(J) + 3/2f(-3J) - 3/2f(3J) + 7/2f(2J) - 7/2f(-2J),$$

$$c_8 = -7/2f(-J) + 27/8f(H) + 7/4f(-2J) - 1/2f(3J) - 1/2f(-3J) - 7/2f(J) + f(H) + 1/16f(4J) + 1/16f(-4J) + 7/4f(2J).$$