

**T.C.
YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**ISING MODELİ İÇİN KORELE OLMUŞ İNDİRGENMİŞ MATRİS
YÖNTEMİ**

ÖMER YILMAZ

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI**

**DANIŞMAN
DOÇ. DR. TUNCER KAYA**

İSTANBUL, 2011

**T.C.
YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**ISING MODELİ İÇİN KORELE OLMUŞ İNDİRGENMİŞ MATRİS
YÖNTEMİ**

ÖMER YILMAZ

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI**

**DANIŞMAN
DOÇ. DR. TUNCER KAYA**

İSTANBUL, 2011

T.C
YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

ISING MODELİ İÇİN KORELE OLMUŞ İNDİRGENMİŞ MATRİS
YÖNTEMİ

Ömer YILMAZ tarafından hazırlanan bu tez 21.12.2011 Tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı'nda **YÜKSEK LİSANS TEZİ** olarak kabul edilmiştir.

Tez Danışmanı

Doç. Dr. Tuncer KAYA

Yıldız Teknik Üniversitesi

Jüri Üyeleri

Doç. Dr. Tuncer KAYA

Yıldız Teknik Üniversitesi

Prof. Dr. Hasan TATLIPINAR

Yıldız Teknik Üniversitesi

Prof. Dr. Sehan KARTAL

İstanbul Üniversitesi

ÖNSÖZ

Yaşamım boyunca her zaman örnek alacağım, bilgi, birikim ve tecrübesiyle kendini ispatlamış, danışmanlığımı yaptığı sürece benden bu özelliklerini asla esirgemeyen, her zaman gerekli moral ve motivasyonumu sağlayan, çalışkanlığı, azmi ve kararlılığı ile kendine hep hayran bırakan, çok çok değerli ve kıymetli hocam Sayın Doç. Dr Tuncer KAYA'ya,

Tanıştığımız andan beri benden hiçbir desteğini esirgemeyen, tecrübelerini ve sahip olduğu tüm bilgiyi bana titizlikle aktaran, güler yüzü, sevecen tavırlarıyla her zaman yüreğimi ferahlatan, hep sevgi ve saygıyla andığım biricik grup arkadaşım ve dostum Sayın Ceren BAYINDIR'a

Psikolojik destekleri ve hoş sohbetleriyle her zaman yanımda olan biricik arkadaşım Begüm ÇAKICI'ya,

Son olarak, bana gösterdikleri sabırla, yaptığım işte iyi olmam için seferber olan, maddi ve manevi desteklerinin eksikliğini hiç hissetmediğim, parçası olmaktan her zaman gurur ve onur duyduğum, eğitimci duruşlarıyla herkesin saygısını ve sevgisini kazanan sevgili ailem; annem, babam ve kardeşlerime

Tüm kalbimle sonsuz teşekkürlerimi sunarım...

Aralık,2011

Ömer YILMAZ

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
SİMGE LİSTESİ.....	vi
KISALTIMA LİSTESİ.....	vii
ŞEKİL LİSTESİ.....	viii
ÇİZELGE LİSTESİ.....	ix
ÖZET.....	x
ABSTRACT.....	xi
BÖLÜM 1	
GİRİŞ.....	1
1.1 Literatür Özeti.....	1
1.2 Tezin Amacı.....	4
1.3 Hipotez.....	4
BÖLÜM 2	
CMFT İÇİNDEKİ ISİNG MODEL VE SCCF HARİTALAMASI.....	5
BÖLÜM 3	
ISİNG SİSTEMLER İÇİN İNDİRGENMİŞ TRANSFER MATRİS METODU.....	9
BÖLÜM 4	
ISİNG MODELİNİN ÇÖZÜMÜ.....	12
4.1 Tezde Kullanılan Önemli bilgiler.....	12
4.2 Ising Modeli ile İlgili Uygulamalar.....	15
4.3 İki Boyutta Hamiltiyonen.....	17
4.4 Korele Olmuş , m_+ , m_- , $\langle S_i \rangle = m$	18

BÖLÜM 5

SONUÇ VE ÖNERİLER.....19

KAYNAKLAR.....22

ÖZGEÇMİŞ.....25

SİMGE LİSTESİ

β	İndirgenmiş sıcaklık
I	Birim matris
$\langle i,j \rangle$	Birbirine en yakın komşu çiftler
K_B	Boltzman sabiti
z	Koordinasyon sayısı
J	Etkileşme sabiti
H	Hamilton
∂	Kısmi türev
N	Örgü sayısı
T_c	Kritik sıcaklık
ln	Logaritmik
m	Ortalama Mıknatıslanma
λ	Öz değerler
Ö	Öz vektörler
η	Sabitler
σ	Sigma
T	Sıcaklık
Δ	Düzen parametresi
K_c	Kritik etkileşme sabiti

KISALTMA LİSTESİ

SC	Basit kübik
BPW	Bethe-peirles-weise
BCC	Cisim merkezli kübik
d.mond	Diamond
h.comb	Bal peteđi apısı
CF	Korele edilmiş
CMF	Korele edilmiş molekiler alan
ORF	Onsager reaksiyon alan
tr.ang	Üçgen örgü
SCCF	Tutarlı korele edilmiş alan
FCC	Yüzey merkezli kübik

ŞEKİL LİSTESİ

	Sayfa
Şekil 4.1 Sıcaklık değřimi ile faz geişleri.....	14

ÇİZELGE LİSTESİ

Sayfa

Çizelge3.1	Kritik etkileşme değerleri.....	11
------------	---------------------------------	----

**ISING MODELİ İÇİN KORELE OLMUŞ İNDİRGENMİŞ MATRİS
YÖNTEMİ**

Ömer YILMAZ

Fizik Anabilim Dalı

Yüksek Lisans Tezi

Tez Danışmanı: Doç. Dr. Tuncer KAYA

Bu çalışmada değişik koordinasyon sayılarına sahip (z) iki ve üç boyutlu Ising modeller için basit bir transfer matris metodunu kullanmaktayız. Ferromanyetik maddelerin K_c değeri tutarlı korele edilmiş alan yaklaşımı (SSCF) ile olabildiğince doğru öngürülere sahiptir. Önemli fiziki etki içeren bu çalışma sistemlerin bazı dalgalanma etkilerine doğrudan kullanılmaktadır. Bu indirgenmiş transfer metodu SSCF yaklaşımından elde edilen ortalama mıknatıslanma hassasiyeti ile kombine edildiğinde, Bethe-Pierles-Wiess ve de SSCF yaklaşımından elde edilen tahmini K_c değerinden daha doğru bir sonuca ulaştırır. Bu nedenle Ising modellerin yaklaşık K_c değerlerini matematiksel olarak elde ederken yararlandığımız korele edilmiş indirgenmiş transfer matris metodunun potansiyel olarak daha kullanışlı bir proje olduğuna inanmaktayız.

Anahtar Kelimeler: Çeşitli koordinasyon sayılar için kritik sıcaklık

ABSTRACT

CORRELATED REDUCED TRANSFER MATRIX THEORY FOR ISING MODELS

Ömer YILMAZ

Department of Physics

MSc. Thesis

Advisor: Assoc. Prof. Dr. Tuncer KAYA

In this work we present an approximate transfer matrix method for 2D and 3D Ising Models with various number z in order to calculate corresponding critical coupling strengths K_c . The critical coupling strengths of the Ising ferromagnets are obtained quite accurately by simple improvements over the self-consistent correlated field approximation (SCCF). The important physical effect included in transfer matrix method. When used in combination with accuracy of the average magnetization obtained from the SCCF approximation this reduced transfer matrix method leads to estimate of K_c more accurate than those obtained from the Bethe-Peierls-Weiss approximation and also SCCF approximation. Therefore we believe that the approach we refer as the correlated reduced transfer matrix method is potentially very useful scheme for obtaining approximate values of the critical strengths of the Ising models with a mathematically easy manner.

Keywords: Critical temperature for various coordination numbers

YILDIZ TECHNICAL UNIVERSITY
GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCE

GİRİŞ

1.1 Literatür Özeti

Onlarca yıl geçmişine rağmen istatistik fizikte manyetik faz geçişleri için kullanılan Ising model üzerinde hala etkin olarak çalışılan en önemli problemlerden biridir. Bir boyut için analitik çözüm Ising tarafından yapılmış olup [1925,Ising], $T=0$ sıcaklıkta ferromanyetik-paramanyetik faz geçişi öngörülmektedir. Dış manyetik alan yokluğunda iki boyut için çözüm Krammer ve Wannier tarafından elde edildi [1941,Kramers], kısa süre sonra Onsager'de aynı sonuçları elde etti. [1944,Onsager]. Bu çözümü temel sonucu iki boyutta kendiliğinden mıknatıslanma $K_c=0,44$ değerinde olduğu öngörüsüdür. Bu sonuç özellikle sıfırdan farklı sıcaklıklardaki ferromanyetik-paramanyetik faz geçişleri açısından önemlidir. Kare örgü ve üçgünel örgüler için K_c çözümü kesindir[1960,Domb-1989,Baxter]. Diğer örgüler ve ileri boyutlar için K_c nin kesin çözümü yoktur ancak kritik sıcaklıkla karşılaştırıldığında yüksek ve düşük sıcaklıklarda geçerli seri açılımlar vardır[1972,Sykes]. Ek olarak renormalizm grup[1976,Niemeijer ve van Leeuwen-1983,Wilson-1974,Fisher-1967,Kadanoff-1978,Maris]metodları ve ortalama alan teorelerinin çeşitli yöntemleri, Ising sistemler için uygulanmaktadır [1935,Bethe-1935, Bragg veWilliams].

RG teorisi Ising modelinin bir boyutta kesin çözüm ile aynı sonuçları elde etmektedir. İki boyutta bu teori K_c nin 0,507 ye eşit olduğunu öngörmekte olup sonuç Onsager kesin çözümüne çok yakındır.RGT renormalizasyon bağıntısının [1967,Kadanoff] bir ve iki boyuttaki başarısına rağmen tam anlamıyla elde edilmesi derin zorluklara sahiptir , bu nedenle bu teorelinin üç boyutta güvenilir bir K_c sonucu yoktur. Fakat RG kuramının modifiye versyonları daha iyi sonuçlar öngörmektedir[1982,Indekeu,Maritan ve Stella-1993, Kroes ve Indekeu].

Ising sistemler için Bragg-Wiliams [1935,Braggg ve Williams] ve Bethe-Peirles [1935,Bethe-1987,Huang] yaklaşımları önemli yaklaşımlarındandır. Bu yaklaşımlar uzun ve kısa erişimli korelosyonları göz önüne alarak formüle edilir.Spinler arasındaki yerel korelosyon göz ardı edildiğinde Bragg-Wiliams teorisi $1/z$ değerine eşit bir K_c değeri tahmin etmektedir. Burada z verilen herhangi bir konumun en yakın komşu sayısı veya koordinasyon sayısıdır. Spinler arasında tahmini yerel korelasyon dikkate alındığında Bethe-Peirles teorisi için $K_c \frac{1}{2} \ln(z/z-2)$ değerine sahiptir.

Bragg-Wiliams yaklaşımının temel dezavantajı bir boyuttaki sistemler için kendiliğinden mıknatıslanmanın yanlış öngörmesidir.

Diğer yardımcı olguların yanı sıra basitliğinden dolayı ortalama alan yaklaşımı Ising modelin istatistiki açıklamasında önemli rol oynamaktadır. Weiss tarafından geliştirilen ortalama alan yaklaşımı [1907,Weiss] sıfırdan farklı bir kritik geçiş sıcaklığında Ising sistem için oldukça başarı göstermektedir. Ancak bu ortalama alan teorileri Ising sistemler için bazı önemli eksikliklere sahiptir. Örneğin bir boyutlu Ising model için belirli bir sıcaklıkta faz geçişi öngörmektedir. Korelasyon etkilerinin ihmal edilmesi açısından bu bir çelişki tabiki başka bir deyişle kritik sıcaklıklar civarında özel bir spin entegre edilmesiyle eşit şekildeki diğer korelasyon etkilerinin yok sayılması çok önemlidir. Bilinen sınırlamaya rağmen korelasyon etkilerini daha fazla içeren ortalama alan yaklaşımının kullanılması önemlidir. Hala bu konudaki gelişmeler bir çok yöntemle çözümlenmektedir.

Bu konu uzun geçmişi olan bir konudur [1966,Smart]. Bu nedenle tüm gelişmelerden tam olarak bahsetmek olanaksızdır. Fakat bu çalışmada önemli bazı yaklaşımlardan bahsetmek daha değerli olacaktır. Oguchi [1955,Oguchi] ve Uleck [1937, Van Vleck] ortalama alan konumunu çevreleyen bir etkileşim çiftini göz önüne alarak bir yöntem elde ettiler. Fakat bu methodun K_c tahmini ortalama alan tahmininden biraz daha fazla gelişmişlikte tahmin vermektedir.Callen [1963,Streb,Callen ve Horwitz] şematik genişleme yöntemini kullanarak daha sistematik bir yaklaşım geliştirdi. Ising model için geliştirilen bu yöntem içindeki birinci dereceden ortalama alan yaklaşımının öngörüsünü azımsamaktadır. Ancak sıfır dereceli yaklaşım ortalama alan yaklaşımını geliştirmektedir.

Marshal Klein [1960,Marshal] veBrout [1963,Klein ve Brout] tarafından önerilen görüşlere dayanan Mattis[1979,Mattis], her spinin tüm izinli ortalama alan değerlerinin

dağılımına bağlı olan Ising Model üzerinde duruyordu. Bu tasarımın tahmini Bethe-Peirls-Weiss yaklaşımı kadar doğru değildir. Lines [1974, Lines] kısmen etkili alan içinde olan ekstra bir terim olarak, Statik Korelasyon varsayan bir teori geliştirdi. Bu Lines'ın yaklaşımı manyetik sistemler içindeki bir çok problemde uygulanmaktadır [1979, Suzuki, Isu, Motizuki]. Fakat öngörülere aslında küresel modele eşit. Bundan başka iki boyuttaki Ising modele uygulandığında K_c tahmininin olmadığı gözlenmektedir [1981, Fynbo]. Kaneyoshi [1981, Kaneyoshi, Fittipaldi, Honmura ve Manabe], Honmura ve kendisi tarafından geliştirilen üstel operatör tekniğini kullanarak korele edilmiş etkin alan teorisi adı altında yeni bir model geliştirdi [1978, Honmura ve Kaneyoshi]. Daha sonra bu model bir çok yerde kullanıldı [1982, Taggrat-1984, Honmura]. Son zamanlarda Whsin ve Kaplan Ising model için tutarlı etkin korele edilmiş bir yaklaşım önerdiler. Onların K_c yaklaşımları Bethe-Peirls-Weiss yaklaşımından elde edilen kadar doğrudur.

Yukarıda bahsedildiği gibi biz bu çalışmada herhangi bir boyut ve z koordinat sayısı için indirgenmiş transfer matris yöntemini üzerinde çalışmaktayız. Bu yaklaşımın değerlendirilmesinde ilk adım korele edilmiş moleküller alan teorisi içerisinde Wysin ve Kaplan tarafından kullanılan tutarlı korele edilmiş alan yaklaşımını (SCCF) kullanmak oldu. Bu haritanın önemi SCCF yaklaşımının doğruluğu içinde komşu spinlerin korelasyonu içermesidir. Sonraki aşama yaklaşık SCCF değerleriyle transfer matris içinde özel konumda serbestlik derecesine göre spin yerleştirmektir. Bu yerleştirmelerin yararı sistemlerin boyutlarına indirgenmektedir. Aslında bu prosedür ile bir boyut içinde (1D) iki ve üç boyutlu sistemler (2D ve 3D) kolayca eşleştirilebilir. Ve tabiki bir boyutlu Ising modelin matematiksel basitliğinden yararlanılabilir.

Bu indirgenmiş transfer matris yaklaşımı için en duyarlı test tabiki K_c ve kritik β tahminindeki beceridir. Bu çalışmamız sonuç olarak çeşitli Ising sistemler için K_c belirlenmesi ile ilgili olacak. Daha fazla ilerlemeden önce aslında bu indirgenmiş transfer matris yaklaşımından fiziksel beklentilerimizi açıklamak isteriz. Açıkça, herhangi bir ortalama yaklaşımı içinde daha fazla dalgalanma etkilerine kuramda yer verdiğinde, daha doğru öngörülere ulaşılmaktadır. Bizim kullandığımız modelde bazı örgülerin sebeslik dereceleri tam olarak model içinde tutulacağından, indirgenmiş transfer matris yaklaşımının K_c tahminleri SCCF yaklaşımından daha doğru olduğu düşünülebilir. Bu çalışmanın ana hatları şöyledir. Bölüm 2, CMFT resmi içerisindeki SCCF yaklaşımının haritala yöntemleri ile birlikte Ising modelin temel kavramlarından

kısaca bahsedeceđiz. Bölüm3, korele edilmiş indirgenmiş matris yöntemi içinde bir K_c bağıntısı türeteceđiz. Çünkü öncelikle mevcut yaklaşımlar ile K_c değerlerinin tahminlerinin karşılaştırılması ile ilgileneceđiz. Bu yazının son bölümünde metodların gelişimi hakkında bazı görüşleri sunacağız.

1.2 Tezin Amacı

Bu tezde kendi içinde korele olmuş alan kuramın dahada ilerletilmesi hedeflenmiştir.

1.3 Hipotez

Daha fazla korelasyon bilgisinin doğrudan hesaplarda tutulması,sistemin kritik parametrelerinin öngörüsünde daha iyi sonuçlar verir.

BÖLÜM 2

CMFT İÇİNDEKİ İSİNG MODELİ VE SCCF HARİTALAMASI

Bu bölümde kısaca Ising modeli tanımlayalım. Ising model 1925 yılında Lenz tarafından ferromanyetizma için önerilen bir modeldir [Cannavacciuolo ve Landau-2006, Neto, dos Anjoy ve De Sousa]. Modelin Hamiltonyeni dış bir manyetik alanın varlığında aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{\langle i \rangle} \sigma_i \quad (2.1)$$

Bu arada J coupling sabiti, h dış manyetik alan, $\langle i,j \rangle$ örgü konumlarının en yakın komşu çiftleri üzerinden yapılan toplamı göstermekte ve $\sigma_i = \pm 1$. Bu model Hamiltonyen bir çok değişik fizik problemine uygulandı. Belirtildiği gibi bu model öncelikle manyetizma çalışmalarında görüldü. Bunun yanısıra ikili alaşımlar, örgü gazı ve diğer bir çok fiziksel sistemlerde kullanılmaktadır [1989, Baxter]. Ising modeli faz geçişi problemi için kullanılacak en basit modeldir. Modelin basitliğine rağmen, halen modelin bir çok durumda analitik çözümü yoktur. Örneğin uzun yıllar çabalanmasına rağmen üç boyutlu kubik ve dış manyetik alanın varlığında iki boyutlu kare örgüde Ising problemin henüz kesin bir çözümü yoktur. Bu ve diğer bir çok mevcut modelin anlaşılmasında yaklaşık analitik çözümler önemli olmaktadır. Bu nedenle bu tez kapsamında bizde yaklaşık bir metod geliştirme cabasında olacağız.

Analizimiz öncesinde, K_c tahmini için önerilen iki basit plandan bahsedelim, bir korele edilmiş moleküller alan teorisi (CMF) [2000, Wysin ve Kaplan] ve diğeri tutarlı korele edilmiş alan yaklaşımı (SCCF) [2000, Wysin ve Kaplan]. Her yöntemde merkezi spinle komşuları arasındaki korelasyon etkilerini göz önüne alır. CMF planı içindeki matematiksel formalizme rağmen aşağıdaki bölümde tanımlandığı gibi [2000, Wysin ve Kaplan] bizim düşündüğümüz amaca uygun olarak CMF planı komşu alanların merkezi spine bağlı olması gerektiği düşüncesi üzerinde tam olarak uygulanamaz. Diğer bir

deyişle , CMF yaklaşımı ortalama mıknatıslanmadan uzak bazı önemli dalgalanma etkileri içermektedir. Diğer taraftan SCCF planı içindeki matematiksel formalizm amacımıza faydalı değil. Bu çalışmada amacımız SCCF den bulduğumuz K_c değerinden daha iyi tahmin yapmaktır.

Şimdi CMF yaklaşımındaki notasyon ve fikirleri kullanarak SCCF yaklaşımının haritalanmasını tanıtacağız [2000,Wysin ve Kaplan]. Bu haritalanma yönteminden beklentimiz mevcut tutarlı CMF yaklaşımı ile merkezi spinin komşularının korelasyonunu içermesidir. Bu düşüncenin tam olarak uygulanabilmesi için komşu alanların merkezi spine bağlı olması gerekir [2000,Wysin ve Kaplan]. Whsin ve kaplan (z-1) komşu konumlu J ortalama mıknatıslanma değerleri $m = \langle \sigma_j \rangle$ m^+ ve m^- izinli değerleri için ilgili sigma değerinin sırasıyla +1 veya -1 olması gerekir. Bu tutarlı korele edilmiş alan yaklaşımı olarak adlandırılır. Bu yüzden bu çalışmada da aynı terminolojiyi kullandık. Whsin ve kaplanın düşüncelerini kullanarak aşağıdaki m^+ ve m^- bağıntıları için dış manyetik alan altında σ_j merkezi spin ile sabit tutulmuş +1 veya -1 değerleri ifade edilirse;

$$m^+ = \frac{e^{K[(z-1)m^++1]+h_r} - e^{-K[(z-1)m^-+1]-h_r}}{e^{K[(z-1)m^++1]+h_r} + e^{-K[(z-1)m^-+1]-h_r}} \quad (2.2)$$

$$m^- = \frac{e^{K[(z-1)m^+-1]+h_r} - e^{-K[(z-1)m^- -1]-h_r}}{e^{K[(z-1)m^+-1]+h_r} + e^{-K[(z-1)m^- -1]-h_r}} \quad (2.3)$$

Bu arada $m^+ = \langle \sigma_j \rangle \mid \sigma_i = +1$, σ_i spinin +1 değerindeki J'ninci konumunun ortalama mıknatıslanması iken $m^- = \langle \sigma_j \rangle \mid \sigma_i = -1$, σ_i spinin -1 değerindeki J'ninci konumun ortalama mıknatıslanmasıdır.

$K = J / (K_B \cdot T)$ ve $h_r = J / (K_B \cdot T)$ Burada K_B boltzman sabiti ve T sistemin sıcaklığıdır.

J'ninci konumun ± 1 değerinin ortalaması üzerinden dış alan yokluğundaki ortalama mıknatıslanması şöyle ifade edilir.

$$m = \langle \sigma_j \rangle = \frac{e^{Kzm^+} - e^{Kzm^-}}{e^{Kzm^+} + e^{Kzm^-}} \quad (2.4)$$

m^+ ve m^- 'nin cebirsel ortalaması tanımlanırsa sistemin düzen parametresi

$\Delta = \frac{(m^+ + m^-)}{2}$ olur. Whsin ve Kaplan dış alan yokluğunda K_c şöyle elde etmiştir.

$$\cos h^2(K_c) = (z - 1).K_c \quad (2.5)$$

Bağıntının değerlendirilmesinde ortalama mıknatıslanmayı dördüncü eşitlik yerine $m = \tan h(K_z \Delta)$ ile tanımlamak zorundayız. Görünüşe göre ortalama mıknatıslanmanın bu yeni tanımında m^+ ve m^- sıfırdan farklı iken $T \rightarrow T_c$ giderken dördüncü eşitlik sıfıra gider. Şimdi σ_j nin en yakın komşusu saydığımız i 'nin ortalama değerini $\sigma_i = \pm 1$ koşulları için ayrı ayrı değerlendirelim. Görünüşe göre konumuna en yakın komşu sayılar olan kalan en yakın ikinci komşu $z-1$ eşit olan i konumudur. Şimdi $(z-1)$ en yakın komşunun ortalama mıknatıslanma değerini m' alabiliriz. Mıknatıslanma değerinin saptanmasında Whsin ve Kaplanın çalışmalarının değerli olduğunu belirtmek isteriz. Dış alan altında ortalama σ_j değerinin i konumunun $+1$ veya -1 'e bağlı olup olmadığı

$$m^+ = \langle \sigma_j \rangle \mid \sigma_i = +1 = \tan h [K((z-1)m' + 1) + h_r] \quad (2.6)$$

$$m^- = \langle \sigma_j \rangle \mid \sigma_i = -1 = \tan h [K((z-1)m' - 1) + h_r] \quad (2.7)$$

2.6 ve 2.7 eşitliklerde m' yerine m koyulursa $m \ll 1$ aralığındaki $\cos h(K_c) = \sqrt{z(z-1)}.K_c$ olur.

Bu bağıntıdan elde edilen K_c tahminleri 5. Eşitlikten elde edilenden daha az doğru olur. Bu sebepten K_c elde edilmesi amacıyla CMF yaklaşımının içindeki SCCF yaklaşımını planlamayı deneyeceğiz. Bu planlama için 2. ve 3. Eşitliklerdeki m^+ ve m^- leri ;

$m^+ = \gamma \langle \sigma_j \rangle + \eta$ ve $m^- = \gamma \langle \sigma_j \rangle - \eta$ olarak yeniden tanımlayacağız.

Burada γ ve η sabitler η sıfıra çok yakın kabul edilir. Şimdi bu yeni bağıntılar 2.2 ve 2.3 eşitliklerde yerine koyulursa şu hale gelir.

$$m^+ = \langle \sigma_j \rangle \mid \sigma_i = +1 = \tan h [K((z-1)\gamma + 1) + h_r] \quad (2.8)$$

$$m^- = \langle \sigma_j \rangle \mid \sigma_i = -1 = \tan h [K((z-1)\gamma - 1) + h_r] \quad (2.9)$$

2.8 ve 2.9 eşitlikleri 2.6 ve 2.7 eşitlikleriyle karşılaştırıldığında m' 'nin (γ_m) eşit olduğu kolaylıkla elde edilir. Bu yeni tanımlarla , Whsin ve Kaplanın kullandığı ortalama mıknatıslanma

$$m = \tan h [Kz\gamma m + h_r] \quad (2.10)$$

haline gelir.

Limit $h_r \rightarrow 0$ giderken ve $m \ll 1$ iken 2.10 eşitliğindeki bilinmeyen parametre $\gamma = \frac{1}{K_z}$ 'dir. Bu nedenle

$$m' = \frac{m}{K_z} \quad (2.11)$$

ile ifade edilir. Bu ifade 2.6 ve 2.7 eşitliklerinde yerine yazıldığında denklemler şu hale gelir.

$$m^+ = \langle \sigma_i \rangle \mid \sigma_i = +1 = \tan h \left[K \left((z-1) \frac{m}{K_z} + 1 \right) + h_r \right] \quad (2.12)$$

$$m^- = \langle \sigma_i \rangle \mid \sigma_i = -1 = \tan h \left[K \left((z-1) \frac{m}{K_z} - 1 \right) + h_r \right] \quad (2.13)$$

2.12 ve 2.13 eşitliklerinde 2.4 eşitliği içine yerleştirildiğinde ve $m \ll 1$ aralığında limit $T \rightarrow T_c$, $h_r \rightarrow 0$ gider.

$$\cos h^2(K_c) = (z-1)K_c \quad (2.14)$$

Bu sonuç SCCF yaklaşımından elde edilen sonuç ile aynı. Bu nedenle 2.12 ve 2.13 eşitliklerinin K_c nin daha yakın tahmini değerlerinin elde edilmesi bakımından SCCF yaklaşımından potansiyel olarak çok daha yararlı bağıntılar olduğuna inanıyoruz. Bu nedenle, bu tezde indirgenmiş transfer matris yöntemi olarak adlandıracağımız fikirler yardımıyla SCCF yaklaşımının öngörülerinden daha iyi sonuçlar üretecek bir metod geliştireceğiz.

BÖLÜM 3

ISING SİSTEMLER İÇİN İNDİRGENMİŞ TRANSFER MATRİS METODU

Ising sistemlerin makroskobik özellikleri Kanonik bölüşüm fonksiyonundan hesaplanabilir.

$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H\{\sigma_i\}} \quad (3.1)$$

Burada $\beta = \frac{1}{(K_B.T)}$, K_B Boltzman Sabiti ve T sistemin sıcaklığıdır. Hamiltonien z ye en yakın komşu bir hiperkubik için

$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} \text{Exp} \left[\sum_{\langle i \rangle} K \sigma_i (\sigma_{i+1} + F(S_i)) + h_r (\sigma_i) \right] \quad (3.2)$$

Burada $K = \beta J$ ve $h_r = \beta h$ dir. $F(s_i)$, $(z-1)$ 'in σ_{i+1} dışındaki en yakın komşusu σ_i için bir fonksiyondur. Bir hiper kübik için kolaylıkla şu ifade elde edilebilir.

$$F(S_i) = \left(\frac{z}{2} - 1 \right) S_i \quad (3.3)$$

Burada s_i değerlerinin yukarıda sözü edilen σ_i konumunun değerlerine bağlı olduğunu varsayıyoruz. 2.12 ve 2.13 eşitlikleri göz önünde bulundurularak s_i kolaylıkla ifade edilir.

$$S_i | \sigma_i = +1 = m^+ = \tanh \left[K \left((z-1) \frac{m}{K_z} + 1 \right) + h_r \right] \quad (3.4)$$

$$S_i | \sigma_i = -1 = m^- = \tanh \left[K \left((z-1) \frac{m}{K_z} - 1 \right) + h_r \right] \quad (3.5)$$

Şimdi 2×2 şeklindeki P matrisini tanımlayalım.

$$\langle \sigma_i | P | \sigma_{i+1} \rangle = e^{K \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{1}{2} (h_r + K F(S_i)) (\sigma_i + \sigma_{i+1})} \quad (3.6)$$

Sonra bu P matrisi şu hale dönüşür.

$$\begin{pmatrix} e^{h_r+K(1+m^+(\frac{z}{2}-1))} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{-h_r+K(-1+m^-(\frac{z}{2}-1))} \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

Bu matris bölüşüm fonksiyonuna yerleştirildiğinde;

$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} \langle \sigma_1 | P | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | P | \sigma_3 \rangle \dots \langle \sigma_N | P | \sigma_{N+1} \rangle \quad (3.8)$$

N tane vardır.dolayısıyla $\sigma_{N+1}=\sigma_1$ yazdığımızda,

$$Q = \sum_{\{\sigma_1\}} \langle \sigma^1 | P^N | \sigma^1 \rangle = T_r P^{(N)} = \lambda_1^N + \lambda_2^N \quad (3.9)$$

Burada λ_1 ve λ_2 P matrisinin özdeşleri olup ;

$$\lambda_{1,2} = A(B \pm C) \quad (3.10)$$

$$A \text{ ve } B \text{ bağıntıları} \quad A = \frac{1}{2} e^{-(h_r+K)} \quad (3.11)$$

$$B = e^{2h_r+K(4+(z-2)m^+)/2} + e^{K(2+(1-\frac{z}{2})m^-)} \quad (3.12)$$

$C =$

$$\left[e^{2K(2+m^+-\frac{z}{2}m^-)} + e^{2h_r} (4 + e^{2h_r+K(4+(z-2)m^-)} - 2e^{K(8+2m^++(z-2)m^+-zm^-)/2}) \right]^{1/2}$$

ise (3.13)

$\lambda_1 > \lambda_2$ olduğunda termodinamik sınırlarda $N \rightarrow \infty$ gider. Bu nedenle parçalı fonksiyon eğer aşağıdaki formu alır. $\lambda_1^N \gg \lambda_2^N$

$$Q = \lambda_1^N \quad (3.14)$$

Dış alan yokluğunda helmoltz serbest enerji içindeki her bir spin için mıknatıslanma

$$m = \langle \sigma \rangle = \frac{\partial \ln Q}{\partial h_r} \Big|_{h_r=0} \quad (3.15)$$

Şeklinde ifade edilir.

Çizelge3.1 Kritik etkileşme değerleri

Örgü	z	Seriler	BPW	ORF	CF	SCCF	TEZDE
Zincir	2	0	—	—	—	—	0
Bal peteği	3	1,52	1,82	—	2,22	—	1,55
Kare	4	2,27	2,88	—	3,31	2,59	2,35
Üçgen	6	3,64	4,93	—	5,38	4,78	3,85
Dörtgen	4	2,7	2,88	—	3,12	2,6	2,51
Basit Kübik	6	4,51	4,93	3,95	5,38	4,79	4,21
Cisim Merkezli Kübik	8	6,35	6,95	5,74	7,42	6,85	5,91
Yüzey Merkezli Kübik	12	9,79	10,97	8,93	11,44	10,91	9,26

$K_c^{-1} = \frac{K_B T}{J}$ değişik yaklaşımlardan tireler aradaki yaklaşımın başarısızlığını gösteriyor. Bal peteği ,Kare, Üçgen , Dörtgen, Basit Kübik, Cisim Merkezli Kübik, Yüzey Merkezli Kübik [2005,Cannavacciuolo ve Landau-2006,Neto,dos Anjoy,De Sousa-1967,Fisher-1976,Ashcroft ve Mermin]

Ortalama mıknatıslanmayı $\sigma \ll 1$ ve $h_r \ll 1$ içinde değerlendireceğimizden , m^- ve m^+ için aşağıdaki 3.4 ve 3.5 eşitlikleri;

$$m^+ = \tan hK + (1 - \tan h^2 K) \cdot \left(h_r + \frac{z-1}{z} m \right) \quad (3.16)$$

$$m^- = -\tan hK + (1 - \tan h^2 K) \cdot \left(h_r + \frac{z-1}{z} m \right) \quad (3.17)$$

Daha fazla matematiksel zorluklardan kaçınması açısından oldukça uygunlar , bu nedenle Q içindeki benzer yaklaşımların yerine 3.15 eşitliğinin türetilmesi değerlendirilir, $m \ll 1$ durum için seri açılımından elde edilen bağıntı

$$K_c \sec h^4 (K_c) (z - 2)(z - 1) (1 + K_c(z - 2) + \cos h (2K_c)) e^{K_c(4+(z-2) \tan h(K_c))/2} = 4z \quad (3.18)$$

Haline dönüşür.

Bu eşitlik tüm koordinat sayıları (z) için SCCF öngörülerinden daha gelişmiş bir tahmin verir. Bu tabloda petek ve üçgensel örgülerin K_c değerleri 3.18 eşitliği ile $\tan(\pi(z - 2)/(4z)) = e^{K_c}$ bağıntısıyla kare örgüden elde edilirken elmas örgü için K_c değeri basit küpten elde edilmektedir.

ISING MODELİNİN ÇÖZÜMÜ

4.1 Tezde Kullanılan Önemli Bilgiler

$$H = -\epsilon \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H \sum S_i$$

En yakın komşu $S_i = \pm 1$, 2^N tane konfigrasyon

Eğer 3 tane ise 3^N olurdu.

$$Z = \sum_{S_1 \dots S_N} e^{-\beta H \sum_{i=1}^N S_i}$$

$$\begin{array}{cccccccc} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ S_1 & S_2 & S_2 & & & & S_{N-1} & S_N \end{array}$$

Bölümüşüm fonksiyonu

$$Z = \sum_{(S_1, S_2 \dots S_N)} e^{\beta \epsilon \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \beta H \sum S_i} = \sum_{(S_i \dots S_N)} e^{\beta \epsilon \sum_i S_i S_{i+1} + \frac{\beta H}{2} \sum_i (S_i + S_{i+1})}$$

$$Z = \sum_{(S_i \dots S_N)} e^{\beta \epsilon S_1 S_2 + \frac{\beta H}{2} (S_1 + S_2)} \cdot e^{\beta \epsilon S_2 S_3 + \frac{\beta H}{2} (S_2 + S_3)} \dots e^{\beta \epsilon S_{N-1} S_N + \frac{\beta H}{2} (S_{N-1} + S_N)}$$

$$A = \begin{bmatrix} e^{\epsilon \beta + \beta H} & e^{-\beta \epsilon} \\ e^{-\beta \epsilon} & e^{\beta \epsilon - \beta H} \end{bmatrix}$$

$$Z = \sum_{(S_1 \dots S_N)} \langle S_1 | [A] | S_2 \rangle \cdot \langle S_2 | [A] | S_3 \rangle \dots \langle S_{N-1} | [A] | S_N \rangle$$

Anımsatma

$$|S_i \rangle = \begin{pmatrix} | + \rangle \equiv (!) \\ | - \rangle \equiv (!) \end{pmatrix}$$

P matrisini köşegen hale getirelim

$$\begin{bmatrix} e^{\varepsilon\beta+\beta H} & e^{-\beta\varepsilon} \\ e^{-\beta\varepsilon} & e^{\beta\varepsilon-\beta H} \end{bmatrix} = \det \begin{bmatrix} e^{\varepsilon\beta+\beta H} & e^{-\beta\varepsilon} \\ e^{-\beta\varepsilon} & e^{\beta\varepsilon} \end{bmatrix}$$

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta\varepsilon} \left[\cos(\beta H) \pm \sqrt{\sin^2 h(\beta H) + e^{-4\beta\varepsilon}} \right]$$

$$P = \ddot{O}^{-1} \begin{bmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{bmatrix} \ddot{O}$$

Anımsatma ;

$$\sum_{\{S_i\}} |S_i\rangle \langle S_i| = 1 \text{ idi o halde aşağıdaki bölüşüm fonksiyonunda}$$

$$Z = \sum_{(S_1 \dots S_N)} \langle S_1 | \ddot{O}^{-1} \begin{bmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{bmatrix} \ddot{O} \cdot \ddot{O}^{-1} \begin{bmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{bmatrix} \ddot{O} \cdot \ddot{O}^{-1} \dots \ddot{O}^{-1} \begin{bmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{bmatrix} \ddot{O} | S_N \rangle$$

Birim matris

O' halde

$$Z = \sum_{(S_1 \dots S_N)} \langle S_1 | \ddot{O}^{-1} \begin{bmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{bmatrix}^N \ddot{O} | S_N \rangle \quad \text{kalır.}$$

Periyodik sınır koşulu

$$|S_1\rangle \equiv |S_N\rangle \quad , \quad \langle S_1 | S_N \rangle$$

$$Z = \sum_{(S_1)} \langle S_1 | \ddot{O}^{-1} \begin{bmatrix} \lambda_+^N & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{bmatrix} \ddot{O} | S_1 \rangle$$

$$Z = \lambda_+^N + \lambda_-^N \quad \lambda_{\pm} \rightarrow \text{yukarıda yerine yazarsak bölüşüm fonksiyonu bulmuş oluruz.}$$

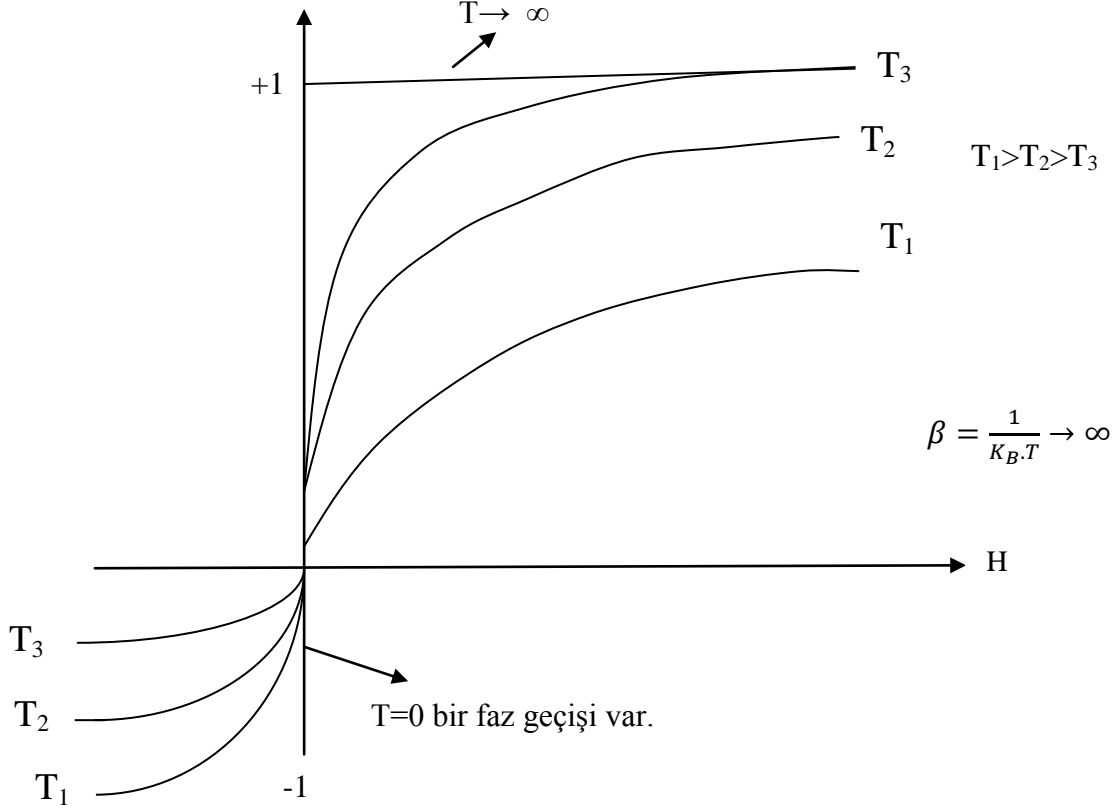
$$Z = \lambda_+^N + \lambda_-^N = \lambda_+^N \left(1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right) \cong \lambda_+^N \text{ yazabilirim.}$$

$$\ln(\lambda_+^N + \lambda_-^N) \cong \ln(\lambda_+^N)$$

$$\langle S \rangle = \frac{1}{\beta H} \cdot \frac{\partial}{\partial H} \ln(Z)$$

$$\langle S \rangle = \frac{\sin h(\beta H)}{\sqrt{\sin^2 h(\beta H) + e^{-4\beta \varepsilon}}}, \quad H \rightarrow 0 \quad \langle S \rangle = 0$$

$T \rightarrow \infty$ ve $H \rightarrow \infty$ götürüp $\langle S \rangle$ inceleyelim



Şekil 4.1 Sıcaklık değişimi ile faz geçişleri

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \langle S \rangle = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\sin(\beta H)}{\sqrt{\sin^2 h(\beta H)^2}} = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\sin h(\beta H)}{|\sin h(\beta H)|} \Rightarrow$$

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\sin h(\beta H)}{|\sin h(\beta H)|} \rightarrow \begin{cases} +1, & H > 0 \\ -1, & H < 0 \end{cases}$$

$$H = -\varepsilon \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H \sum S_i$$

↑↑↑↑.....↑↑↑

N. tane

$T \rightarrow 0$

$H > 0$

↓↓↓↓.....↓↓

$H < 0$

Simetriyi kıran

Dış alan

Uygulama: $H = H S_i$; $S_i = \pm 1$ N tane ise bölüşüm fonksiyonunu bulunuz.

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H} = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H S_i} \quad S_i = \pm 1$$

$$Z = \sum_{S_1} e^{-\beta H S_1} \sum_{S_2} e^{-\beta H S_2} \sum_{S_3} e^{-\beta H S_3} \dots \dots \dots \sum_{S_N} e^{-\beta H S_N}$$

$S_i = \pm 1$
↓

$$Z = \underbrace{(e^{-\beta H} + e^{\beta H})(e^{-\beta H} + e^{\beta H}) \dots \dots \dots (e^{-\beta H} + e^{\beta H})}_{N \text{ tane}}$$

N tane

$$Z = (e^{-\beta H} + e^{\beta H})^N \quad \frac{e^x + e^{-x}}{2} = \cosh x$$

$$Z = (2 \cdot \cosh \beta H)^N \quad \frac{e^x - e^{-x}}{2} = \sinh x$$

4.2 Ising Modeli ile İlgili Uygulamalar

Uygulama:

$$H = -J \sum_i S_i S_{i+1} - h \sum_i S_i \quad \text{Bölüşüm fonksiyonu bulunuz.}$$

. 2^N tane konfigrasyon vardır.

1. i

$$S_i = \pm 1$$

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H} = \sum_{\{S_i\}} e^{\beta J \sum_i S_i S_{i+1} + \beta h \sum_i S_i}$$

$$\beta J = K$$

$$\beta h = H$$

$$Z = \sum_{S_1} \sum_{S_2} \dots \sum_{S_i} \dots \sum_{S_N} e^{K(S_1 \cdot S_2 + S_2 \cdot S_3 + \dots + S_{N-1} \cdot S_N) + H \cdot (S_1 + S_2 + S_3 + \dots + S_N)}$$

Anımsatma

$$H \sum_i S_i = \frac{H}{2} \sum_i (S_i + S_{i+1}) \quad \text{ya da} \quad \sum_i S_i \equiv \sum_i S_{i+1}$$

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{K \cdot S_1 \cdot S_2 + \frac{H}{2}(S_1 + S_2)} \cdot e^{K \cdot S_2 \cdot S_3 + \frac{H}{2}(S_2 + S_3)} \dots \dots \dots e^{K \cdot S_{N-1} \cdot S_N + \frac{H}{2}(S_{N-1} + S_N)}$$

$$e^{K \cdot S_1 \cdot S_2 + \frac{H}{2}(S_1 + S_2)} \Rightarrow \begin{matrix} & +1 & -1 \\ +1 & \begin{bmatrix} e^{K+H} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-H} \end{bmatrix} & \\ -1 & & \end{matrix} = T_{i,i+1}$$

$$\sum_{\{S_i\}} |S_i \rangle \langle S_i| = 1$$

$$|S_i \rangle \equiv (1,0) \quad \text{ve} \quad (0,1)$$

$$(1,0) \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1$$

$$(1,0) \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$$

$$Z = \sum_{\{S_i\}} |S_1 \rangle \langle S_1| T_{1,2} |S_2 \rangle \langle S_2| T_{2,3} |S_3 \rangle \dots |S_{N-1} \rangle \langle S_{N-1}| T_{N-1,N} |S_{N-1} \rangle \langle S_N|$$

$$T_{1,2} = \begin{bmatrix} e^{K+H} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-H} \end{bmatrix}$$

T' matrisimizi köşegen hale getirip kökleri bulalım

$$\det(T_{1,2} - \lambda I) = 0$$

$$\det \left[\begin{pmatrix} e^{K+H} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-H} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} \right] = 0$$

$$\det \begin{pmatrix} e^{K+H} - \lambda & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-H} - \lambda \end{pmatrix} = 0 \quad \Rightarrow (e^{K+H} - \lambda) \cdot (e^{K-H} - \lambda) - \begin{pmatrix} -K \\ e \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -K \\ e \end{pmatrix} = 0$$

$$\text{Burdanda } \lambda_{1,2} = e^K \left[\cos(H) \pm \sqrt{\sin^2 h(H) + e^{-4K}} \right]$$

$$Z = \sum_{\{S_i\}} |S_1 \rangle \langle S_1| T_{1,2} |S_2 \rangle \langle S_2| T_{2,3} |S_3 \rangle \dots |S_{N-1} \rangle \langle S_{N-1}| T_{N-1,N} |S_{N-1} \rangle \langle S_N|$$

$|S_1\rangle = \langle S_N|$ periyodik sınır koşulu

$$T_{1,2} = \ddot{O}^{-1} A \ddot{O} A = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}$$

$$Z = \sum_{(S_1 \dots S_N)} |S_1 \ddot{O}^{-1} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \ddot{O} \cdot \ddot{O}^{-1} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \ddot{O} \dots \ddot{O}^{-1} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \ddot{O} \langle S_N |$$

N tane var

$$Z = \sum_{S_1 \dots S_N} |S_1 \rangle \cdot \ddot{O} \cdot \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix}^N \ddot{O}^{-1} \cdot \langle S_N |$$

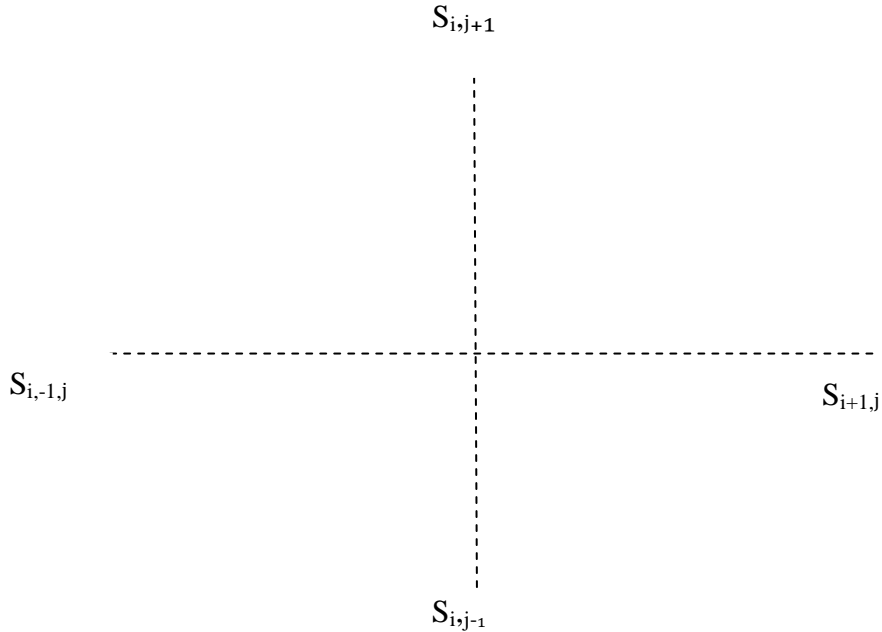
$|S_1 \rangle = \langle S_N |$ sınır koşulundan

$$Z = \sum_{S_1} |S_1 \rangle \cdot \ddot{O} \cdot \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ \lambda_2 & 0 \end{bmatrix}^N \ddot{O}^{-1} \cdot \langle S_1 |$$

$$Z = \lambda_1^N + \lambda_2^N \quad \lambda_1 \text{ ve } \lambda_2 \text{ bulmuştuk}$$

$$Z = \left(e^K \left[\cos(H) + \sqrt{\sin^2 h(H) + e^{-4k}} \right] \right)^N + \left(e^K \left[\cos(h) - \sqrt{\sin^2 h(H) + e^{-4k}} \right] \right)^N$$

4.3 İkinci Boyutta Hamiltonyen



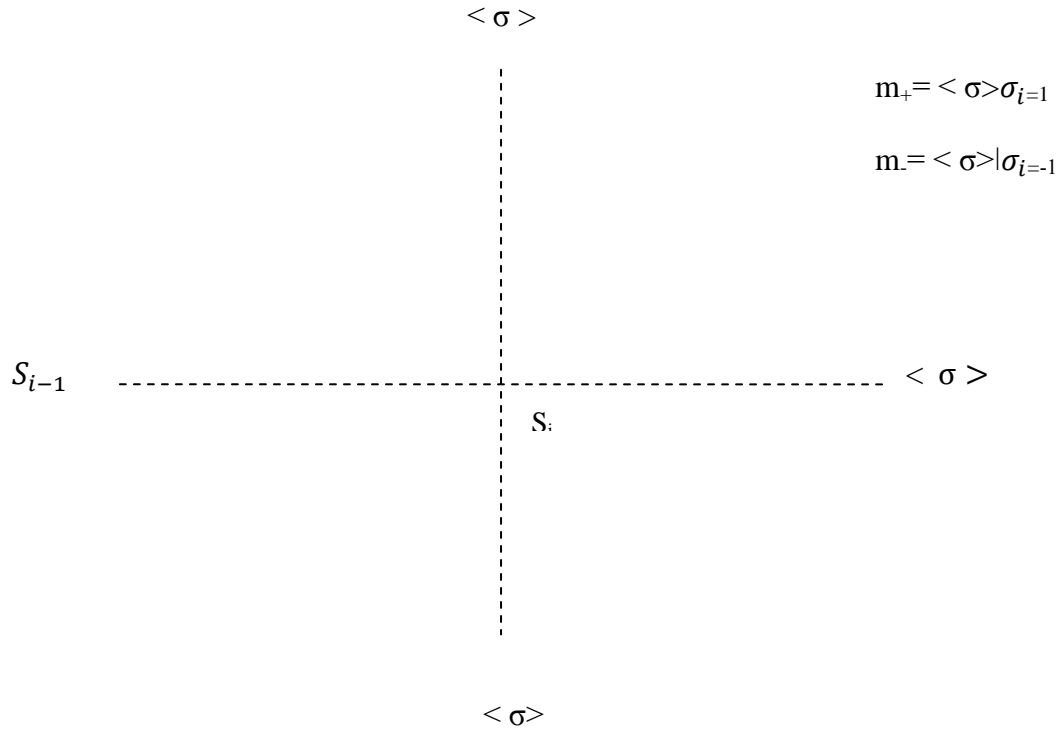
$$H = -J \sum_{i,j} S_{i,j} [S_{i+1,j} + S_{i,j+1}] + h \sum_{i,j} S_{i,j}$$

$$m_+ = +1 = \frac{e^{\beta[(z-1)m_++1]} - e^{-\beta[(z-1)m_-+1]}}{e^{\beta[(z-1)m_++1]} + e^{-\beta[(z-1)m_-+1]}}$$

$$m_- = -1 = \frac{e^{\beta[(z-1)m_+-1]} - e^{-\beta[(z-1)m_- -1]}}{e^{\beta[(z-1)m_+-1]} + e^{-\beta[(z-1)m_- -1]}}$$

$$\Delta = \frac{m_+ + m_-}{2} \quad m = \langle \sigma \rangle = \frac{e^{\beta z m_+} - e^{-\beta z m_-}}{e^{\beta z m_+} + e^{-\beta z m_-}}$$

4.4 Korele Olmuş , m_+ , m_- , $\langle \sigma_i \rangle = m$



$$m_+ = \frac{e^{3\beta J m_+ + \beta J} - e^{-3\beta J m_- - \beta J}}{e^{3\beta J m_+ + \beta J} + e^{-3\beta J m_- - \beta J}} = \tanh[3\beta J m + \beta J]$$

$$m_- = \frac{e^{3\beta J m_+ + \beta J} - e^{-3\beta J m_- - \beta J}}{e^{3\beta J m_+ + \beta J} + e^{-3\beta J m_- - \beta J}} = \tanh[3\beta J m + \beta J]$$

BÖLÜM 5

SONUÇ VE ÖNERİLER

Tablo 1 de çeşitli örgüler için farklı yaklaşımlarla K_c^{-1} değerlerinin elde edilip edilmediğini ve seri açılımlarla mutlak veya yaklaşık çözümün olup olmadığını görmekteyiz [1967,Fisher]. Tabloya yerleştirilen veriler içinden K_c tahminindeki en uygun 35. eşitlikle temsil edilen korele edilmiş indirgenmiş transfer matris yaklaşımıdır [2000,Wysin ve Kaplan]. Diğer deyişle yukarıda bahsettiğimiz fiziksel nedenlerden ötürü bu çalışmadan elde edilen sonuçlarla mutlak çözümün BPW ve SCCF yaklaşımlarından daha yakın olduğu beklenmektedir. K_c tahminindeki en hassas yaklaşım tekniği olduğundan bu method diğer yaklaşımlardan daha gelişmiştir. Daha da önemlisi bu method bir boyut veya $z=2$ için $K_c=0$ sonucu verir. Bu tutarlılık bizim modelin önemli bir testidir. Çünkü bizim model tam olarak bir boyutta karşılık bir method ancak biz yine de diğer yaklaşım methodlarının bu aşamada tam olarak başarısız olduklarını düşünüyoruz. Özel bir yaklaşım düşünersek örneğin SCCF , tahmin edilen K_c değerinin genel özelliği elmas için beklenen K_c değerini abartmaktadır. Dikkat ancak bizim işlemimiz iki boyuttaki tüm yapılar için daha büyük bir tahmin yaparken üç boyutlu örgüler için daha düşük bir tahmin yapmaktadır. Çokça olmamasına rağmen iki boyutlu örgüler için işlemimiz her nasılsa dalgalanma etkilerini abartırken bu nedenle K_c değerini düşürmektedir. Benzer şekilde üç boyutlu örgüler için hesaplamalarımız bazı dalgalanmaları azaltırken K_c değerini artırmaktadır. İşlemimiz sadece koordinat sayılarını kullanarak iki ve üç boyutta K_c değerini kesin doğru olarak tahmin edemez. Daha önemlisi analizimiz yüzey merkezli kübik örgüler için tahmin edilen K_c değeri yüksek koordinasyon sayılarında z seri açılımlar için en yakın olanıdır. İlginç olanı şu ki diğer yaklaşımlar içinde K_c hesaplanmasında en yanlış tahmin $z=12$

için yüzey merkezli K küptür. Bu aşamada analizimizin sonuçlarının ortalama alan düşüncesinden tutarlı olduğunu düşünüyoruz.

Örneğin iki boyutlu örgüler için tahmin edilen K_c değerlerinden en yakın olanı sırasıyla $z=6$ ve $z=8$ sc ve bcc yapılarıdır. Şimdi tablo birde yer almayan diğer teorileri K_c tahminlerini verelim. Honmura ve Koneyashi [1979, Honmura ve Kaneyoshi] tarafından geliştirilen etkili alan teorisinde tahmin edilen K_c^{-1} değerleri kare ve kübik örgüler için sırasıyla 2,885 ve 5,05 dir. Bu tahminlerin doğruluğu tablo 1 de verilen tahminlerden daha kötüdür. Taggari ve Fittipaldi tarafından geliştirilen etkili alan korelasyonunda tahmin edilen K_c^{-1} değerleri kare ve kübik örgüler için sırasıyla 2.68 ve 4,89 dur. Renormalizasyon grup yaklaşımı Ising modellerinin K_c tahminlerinde önemli diğer teoriksel görüntüdür. Prensipte olarak i renormalizasyon grup yaklaşımı tam olarak sonuca ulaşabilir. Ancak bu doğrudan bölüşüm fonksiyonun hesaplanmasından daha zordur. Öyleki bazı yaklaşım metodlarından elde edilen tüm fiziksel nicelikler elde edilmeli ama çok basit koşullar için örneğin bir iki boyutlu örgüler için çok kullanışsızdır. Örnek gerekirse iki boyutlu kare örgü için K_c değeri 1,97 ye eşittir. K_c^{-1} tahmini bu çalışmadaki yaklaşımların tahmininden iyi değildir.

Sonuç olarak oldukça basit bir yaklaşım methodu olarak tanımladığımız korele edilmiş indirgenmiş transfer matris methodu değişik z koordinasyon sayılarıyla iki ve üç boyuttaki K_c değerinin hesaplandığını öngörmektedir. Problemin çözümlenmesinde ortalama alan kavramları ile SCCF yaklaşımının doğruluğu ve transfer matris methodu kullanılmaktadır. İşin özü , bölüşüm fonksiyonu matematiksel kesinlikler ile kullanılırsa yerleştirilen bazı yerel spinlerin serbestlik derecesinin ortalama korelasyonunun değeri ile alakalı iyi bir yaklaşım olur. Ising model için buna riayet doğrusu değişik koordinasyon sayıları ile iki ve üç boyutlu Ising modellerin K_c değeri hesaplanmaktadır. Kendi metodumuzdan elde ettiğimiz K_c değerinin tahmini ile kesin çözümün tahmini iyi bir uyum göstermekte bu çalışmadaki metodumuz, birde örgülerin çoğu için standart SCCF yaklaşımı üzerinde bir gelişme vermekte. Üstelik yöntem matematiksel olarak o kadar karmaşık değil. Bu nedenle bu methotta fiziksel fikirleri takip etmek kolay. Yukarıda bahsettiğimiz nedenlerden dolayı bu çalışmanın içerdiği methodu genel anlamda Ising sistemlerin çözüm yaklaşımında potansiyel olarak umut verici olabilir. Diğer deyişle , bu method bir anlamda tablo 1 deki diğer ortalama alan methodlarından daha çok dalgalanma etkileri içermektedir. Bu nedenle K_c değerinin tahmini daha iyi

matematiksel basitlik gibi fiziksel nitelik bu methodu umulan yaklaşımdan daha güçlü yapmaktadır

KAYNAKLAR

-
- [1] Ising E., (1925), "Computer Simulation of Critical Point Phenomena", Z.Phys, 31,253.
 - [2] Kramers H.A. and Wannier G.H. ,(1941), "Statics of The Two Dimensional Ferromagnet Part 2" Phys. Rev. 60, 252.
 - [3] Onsanger L., (1944), "Analytic Properties of The Onsager Solution of The Ising Model", Phys. Rev. 145, 158-163.
 - [4] Domb C., (1960), "O(2) Symmetry and Critical Lines of The Antiferromagnetic Ising Model", Adv. Phys. 41, 7315-7317.
 - [5] Baxter R.J., (1989), Exactly Solved Models in Statistical Mechanics, 3th. Ed., Academic Pres Limited.
 - [6] Sykes F.M., Gaunt D.S., Roberts P.D., and Wyley J.A., (1972), " High Temperature Series For The Susceptibility of The Ising Model i Two Dimensional Lattices", Journal Phys., 5-624.
 - [7] Niemeijer Th. And van Leeuwen J.M.J., in PhaseTransitionsand Critical Phenomena, edited by Domb C. And Green M.S. (Academic, London, 1976), Vol.6.
 - [8] Wilson K.G., (1983), "The Renormalization Group and Critical Phenomena", Rev. Mod. Phys., Phys. Rev. B, 55,583-600.
 - [9] Fisher M.E., (1974), "Experimental Critical Exponent Values For Fluids", Rev. Mod. Phys. 46, 957
 - [10] Kadanoff L.P., " Static Phenomena Near Critical Points: Theory and Experiment (1967) Rev. Mod. Phys. 39, 395
 - [11] Maris H.J. and Kadanoff L.P., (1978), "Correlated Reduced Transfer Matrix Approach For Ising Model", Am. J. Phys., 46(6), 652
 - [12] Bethe H.A., (1935), Selected Work of Hansa Bethe With Commentary, Proc. Roy. Soc. London Ser., A150, 552
 - [13] Bragg W.L. and Williams E.J., (1935), "The Irreversible Critical Range In The TiNi Transition", Proc. R. Soc. London, Ser. A145, 669
 - [14] Indekeu J.O., (1982) A. Maritanand A.L. "Renormalisation Group Recursions by Mean-Field Approximations", Journal Phys. A15, L291

- [15] Indekeu J.O., (1980), "Comment On The Reliability of a Real Space Renormalisation Approach of The Kinetic Ising Model", *Physics Letters A*, 78,160-162
- [16] Huang K., (1987) *Statistical Mechanics*, 2nd. Ed., John Wiley and Sons Inc.
- [17] Weiss P., (1907), "A Survey of Theory of Ferromagnetism", *J. Phys.* 6, 667.
- [18] Smart J.S., (1966) *Effective Field Theories of Magnetism*, (W.B. Saunders Co., Philadelphia)
- [19] Oguchi T., (1955), "A Theory of Antiferromagnetism" *Prog. Theor. Phys.* 13, 148
- [20] Van Vleck J.H., (1937), "On The Anisotropy of Cubic Ferromagnetic Crystals", *Phys. Rev.* 52, 1178
- [21] Streb B., Callen H.B. and Horwitz G., (1963). "Determination of Critical Temperature for Three Dimensional Ising Systems", *Phys. Rev.* 130, 1978.
- [22] Marshall W., (1960), "Multiple Spin Echoes and Spin Locking in Solids", *Phys. Rev. B* 118, 1520
- [23] Klein M.W. and Brout R., (1963), " Multiple Spin Echoes and Spin Locking in Solids", *Phys. Rev.* 132, 2412.
- [24] Mattis D.C., (1979), " Correlated Effective Field Approximation For Ising Model", *Phys. Rev. B* 19, 4737
- [25] Lines M.E., (1974), "Correlated Effective Field Method in The Location of The Ising Model Tricritical Point", *Phys. Rev. B* 9, 3927
- [26] Suzuki N., Isu T., and Motizuki K., (1979), "On Two Renormalised Effective Field Theories", *Solid State Commun.* 23, 319
- [27] Fynbo, P.B. (1981), "A New Type of Decoupling Approximation For Ising Model with Spin $\frac{1}{2}$ ", *Physica* 105A, 517
- [28] Kaneyoshi T., Fittipaldi I.P., Honmura R., and Manabe T., (1981), " Correlated Reduced Transfer Matrix Approach For Ising Model", *Phys. Rev. B* 24, 481
- [29] Honmura R. and Kaneyoshi T., (1978), "Magnetic Properties of The Glassy Ferromagnets", *Prog. Theor. Phys.* 60, 635
- [30] Taggart G.B., (1982), "New Effective Field Theory For The Blume Capel Model", *Physica* 116A 34
- [31] Honmura R., (1984), "Correlated Effective Field Treatment of The Spin One Ising Models", *Phys. Rev. B* 30, 348.
- [32] Wysin G.M. and Kaplan J., (2000). " Correlated molecular-field theory for Ising models", *Phys. Rev. E* 61, 6399.
- [33] Cannavacciuolo L. and Landau D.P., (2005), "Critical Behavior of The Three Dimensional Compressible Ising Antiferromagnet at Constant Volume: A Monte Carlo Study", *Phys. Rev. B*, 71, 134104
- [34] Neto M.A., dos Anjos R.A., and De Sousa J.R., (2006), "A Magnetic Resonance Imaging Study of Water Ingress in Porous Zeolite", *Phys. Rev. B* 73, 214439
- [35] Fisher M.E., (1967), "Atomic Cluster Fragmentation by Shock Waves", *Rep. Prog. Phys.* 30,615

- [36] Ashcroft N. and Mermin N., Solid State Physics (Holt,Reinhart an Winston, New York, 1976).
- [37] Honmura R. and Kaneyoshi T., (1979),”Contribution to The New Type of Effective Field Theory of The Ising Model” J. Phys. C: Solid StatePhys., 12, 3979
- [38] Taggart G.B. and Fittipalti I.P., (1982),”A New Effective Field Theory for A Heisenberg Ferromagnet”,Phys. Rev B 25, 7026

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı :Ömer YILMAZ
Doğum Tarihi ve Yeri :20.04.1983 Mardin
Yabancı Dili :İngilizce
E-posta :omeryilmaz_85@hotmail.com

ÖĞRENİM DURUMU

Derece	Alan	Okul/Üniversite	Mezuniyet Yılı
Y. Lisans	Fizik	Yıldız Teknik Üniversitesi	2011
Lisans	Fizik	İstanbul Üniversitesi	2009
Lise	Fen Bilimleri	Şenyurt Lisesi	2000