

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

**SPİN-3/2 ISING MODELİNİN DİNAMİK DAVRANIŞININ  
İNCELENMESİ**

**Tezi Hazırlayan  
Osman CANKO**

**Tezi Yöneten  
Prof. Dr. Mustafa KESKİN**

**Fizik Anabilim Dalı  
Doktora Tezi**

**Eylül 2006  
KAYSERİ**

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

**SPİN-3/2 ISING MODELİNİN DİNAMİK DAVRANIŞININ  
İNCELENMESİ**

**Tezi Hazırlayan  
Osman CANKO**

**Tezi Yöneten  
Prof. Dr. Mustafa KESKİN**

**Fizik Anabilim Dalı  
Doktora Tezi**



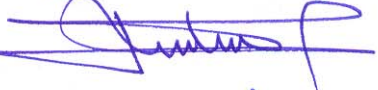


**Bu çalışma, Erciyes Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Birimi tarafından  
FBT-03-09 kodu ile desteklenmiştir.**

**Eylül 2006  
KAYSERİ**

Prof. Dr. Mustafa KESKİN danışmanlığında Osman CANKO tarafından hazırlanan “Spin-3/2 Ising Modelinin Dinamik Davranışının İncelenmesi” adlı bu çalışma, jürimiz tarafından Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında **Doktora** tezi olarak kabul edilmiştir.

04-09-2006

**JÜRİ :**

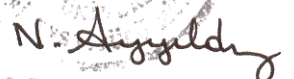
Başkan : Prof. Dr. A. Nihat BERKER   
Üye : Prof. Dr. Mustafa KESKİN   
Üye : Prof. Dr. Mehmet GÜNDÜZ   
Üye : Prof. Dr. Sedat ÖZSOY   
Üye : Prof. Dr. Necmettin MARAŞLI 

**ONAY :**

Bu tezin kabulü Enstitü Yönetim Kurulunun 15/09/2006 tarih ve 2006/27-16 sayılı kararı ile onaylanmıştır.

20 / 09 / 2006.



  
Prof. Dr. Nusret AYYILDIZ  
Enstitü Müdürü

**TEŞEKKÜR**

Öncelikle bana bu tez çalışma konusunu veren, çalışmalarımın başından sonuna kadarki tüm aşamalarında yardımını esirgemeyen, değerli fikir ve tecrübeleri ile bana büyük destek sağlayan saygıdeğer hocam ve tez danışmanım sayın Prof. Dr. Mustafa KESKİN'e ve tez izleme komitesi üyeleri değerli hocalarım Prof. Dr. Sedat ÖZSOY ve Prof. Dr. Necmettin MARAŞLI'ya en içten dileklerle teşekkürlerimi sunarım. Feza Gürsey Enstitüsünde verdiği "Phase Transitions and Renormalization-Group Theory" başlıklı yaz okulu ile teorik yoğun madde fiziğindeki ufkumu genişleten Koç Üniversitesi Öğretim Üyesi Prof. Dr. A. Nihat BERKER'e de teşekkür ederim. Ayrıca, tezin yazımında yardımlarını gördüğüm, Doç. Dr. Erhan ALBAYRAK, Doç. Dr. Kâzım KEŞLİOĞLU ve Yrd. Doç. Dr. Ahmet ERDİNÇ'e de teşekkürü bir borç bilirim. Yine tezin L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X ile yazımında desteğini gördüğüm Arş. Gör. Mustafa YILDIRIM'a da teşekkür ederim. Son olarak, tüm bu yorucu çalışmalar sırasında bana her zaman sabır ve anlayış gösterip destek olan kıymetli eşime, aileme ve tüm çalışma arkadaşlarıma da teşekkürü bir borç bilirim.

**SPİN-3/2 ISING MODELİNİN DİNAMİK DAVRANIŞININ İNCELENMESİ**

**Osman CANKO**  
**Erciyes Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü**  
**Doktora Tezi, Eylül 2006**  
**Tez Danışmanı: Prof. Dr. Mustafa KESKİN**

**ÖZET**

En yakın komşu bilinear ve biquadratik etkileşme Hamiltonyenli spin-3/2 Ising modelinin dinamik davranışı iki farklı metot kullanılarak incelendi. İlk olarak, sistemin dengeli davranışı özetle verildi ve özellikle faz geçiş sıcaklıkları ve bunların doğası (birinci- veya ikinci-derece) belirlendi. Ayrıca, deneysel olarak gözlenebilir iki nicelik olan öz ısı ve alınganlığı incelendi ve alınganlık için kritik üsteli de elde ettik. Daha sonra, sistemin dinamik davranışını tersinmez termodinamiğin Onsager teorisini kullanarak incelendi ve sonuç olarak üç durulma zamanı bulduk. Bu durulma zamanlarının sıcaklığa göre davranışları değişik etkileşme parametreleri ve fenomenolojik katsayılar için araştırıldı. Faz geçişi yakınındaki sıcaklıklar için durulma zamanları kritik üsteller yoluyla tanımlanarak, bu durulma zamanlarından birinin ıraksayarak sistemin kritik yavaş durulmasına sebep olduğunu gözlemledik. Aynı zamanda, dinamik davranış ile deneysel sonuçlar arasında karşılaştırma yapılabilmesi için sistemdeki ses soğurulma ve dispersiyon katsayıları da incelendi. Son olarak, sistemin dinamik davranışını incelemek için yol ihtimaliyet metodu kullanıldı. Nokta dağılımlı yol ihtimaliyet metodu modele uygulandı ve dinamik veya oran denklemleri olarak adlandırılan lineer olmayan diferansiyel denklem seti bulundu. Bu denklemler üç boyutlu bir akış diyagramı vasıtasıyla ve Runge-Kutta metoduyla çözüldü. Böylece, düzen parametrelerinin kararlı, yarı kararlı veya kararsız olarak sınıflandırılması bu çözümler ile serbest enerji değerleri kullanılarak yapıldı. Sonuçların tartışılması son bölümde verildi.

**Anahtar Kelimeler:** Spin-3/2 Ising modeli; Tersinmez termodinamiğin Onsager teorisi; Ses soğurulması ve dispersiyonu; Kritik üsteller; Yol ihtimaliyet yöntemi.

# THE INVESTIGATION OF THE DYNAMICAL BEHAVIOR OF SPIN-3/2 ISING MODEL

**Osman CANKO**

**Erciyes University, Graduate School of Natural and Applied Sciences**

**Ph. D. Thesis, September 2006**

**Thesis Supervisor: Prof. Dr. Mustafa KESKİN**

## ABSTRACT

The dynamical behavior of the spin-3/2 Ising model Hamiltonian with nearest-neighbor bilinear and biquadratic interactions is investigated by using two different methods. First, the equilibrium behavior of the system is given briefly, especially the phase transition temperatures and their nature (first- or second-order) are determined. Moreover, we have examined the specific heat and the susceptibility which are two experimentally observable quantities and the critical exponent for the susceptibility has also been found. Subsequently, we have investigated the dynamic behavior of the system by using Onsager theory of irreversible thermodynamics and as a result three relaxation times are found. The behaviors of the relaxation times with respect to temperature are analyzed for various interaction parameters and the phenomenological coefficients. By defining relaxation times via the critical exponents for temperatures near the phase transition, we have observed that one of the relaxation times is found to be divergent which causes the system to undergo critical slowing down. In addition, in order to make a comparison between the dynamical behavior and experimental results the sound attenuation and dispersion coefficients in the system are also calculated. Finally, the path probability method is used to investigate the dynamical behavior of the system. The path probability method with point distribution is applied to the model and the set of nonlinear differential equations, which is called the dynamic or rate equations, is obtained. These equations are solved by means of a three-dimensional flow diagram and the Runge-Kutta method. Hence, the classification of order parameter as stable, metastable or unstable is done by using these solutions with the free energy values. The discussions of the results are given in the the last section.

**Keywords:** Spin-3/2 Ising model; Onsager theory of irreversible thermodynamics; Sound attenuation and dispersion; Critical exponents; Path probability method.

**İÇİNDEKİLER**

KABUL VE ONAY . . . . .	i
TEŞEKKÜR . . . . .	ii
ÖZET . . . . .	iii
ABSTRACT . . . . .	iv
ŞEKİLLER LİSTESİ . . . . .	vii
<b>1. BÖLÜM</b>	
GİRİŞ . . . . .	1
<b>2. BÖLÜM</b>	
SPİN-3/2 ISING MODELİNİN DENGELİ DAVRANIŞI . . . . .	11
2.1. Modelin Tanımı . . . . .	11
2.2. Sistemin Denge Durumunun İncelenmesi . . . . .	13
2.3. Analitik İfadeler ve Faz Diyagramı . . . . .	16
2.4. Öz Isı ve Manyetik Alınganlık Hesabı . . . . .	26
<b>3. BÖLÜM</b>	
MODELİN DİNAMİK DAVRANIŞININ ONSAGER TEORİSİ İLE İNCELENMESİ . . . . .	32
3.1. Tersinmez Süreçler ve Onsager Teorisi . . . . .	32
3.1.1. Tersinmez Süreçler . . . . .	32
3.1.2. Onsager Teorisi . . . . .	35
3.2. Onsager Teorisinin İzotropik Spin-3/2 BEG Modeline Uygulanması .	39
3.3. Kinetik Denklemin Çözümü . . . . .	42
3.4. Dalga Hareketi ve Ses Dalgaları . . . . .	54
3.5. Spin-3/2 Ising Sisteminde Ses Dalgaları . . . . .	57
<b>4. BÖLÜM</b>	
MODELİN DİNAMİK DAVRANIŞININ YOL İHTİMALİYET METODU İLE İNCELENMESİ . . . . .	65
4.1. Dinamik Sistem . . . . .	65

4.2. Yol İhtimaliyet Metodu . . . . .	65
<b>5. BÖLÜM</b>	
SONUÇLAR VE TARTIŞMALAR . . . . .	76
KAYNAKLAR . . . . .	80
ÖZGEÇMİŞ . . . . .	95



## ŞEKİLLER LİSTESİ

- Şekil 2.1. Düzen parametrelerinin sıcaklığa göre değişimi. 1 alt indisi ile gösterilen sürekli çizgiler kararlı, 2 alt indisi ile gösterilen kesikli-noktalı çizgiler yarı kararlı ve 3 alt indisi ile gösterilen kesikli çizgiler kararsız durumu göstermektedir.  $T_{cM}$  ve  $T_{cQ}$  sırasıyla  $M$  ve  $Q$  için ikinci derece faz dönüşüm sıcaklıklarıdır.  $T_{cM2}$ ,  $M_2$  için ve  $T_{c3}$ ,  $M_3$  ve  $Q_3$  için kritik sıcaklıklardır,  $J/K=0.25$ . **a)** Dipol ve quadrupol momentinin sıcaklığa göre değişimi **b)** Dipol, quadrupol ve oktipolar momentinin sıcaklığa göre değişimi. . . . . 17
- Şekil 2.2. Şekil 2.1 ile aynı fakat,  $J/K=0.8$ .  $T_{cQ2}$ ,  $Q_2$  için kritik sıcaklıktır.  $T_t$  birinci derece faz sıcaklığıdır.  $T_l$  ve  $T_u$  alt ve üst limit kararlılık sıcaklıklarıdır. **a)** Dipol ve quadrupol momentinin sıcaklığa göre değişimi **b)** Dipol, quadrupol ve oktipolar momentinin sıcaklığa göre değişimi. . . . . 18
- Şekil 2.3. Şekil 2.1 ile aynı fakat,  $J/K=2.5$ .  $T_{t2}$  de  $M_2$  için birinci derece faz geçiş sıcaklığıdır. **a)** Dipol ve quadrupol momentinin sıcaklığa göre değişimi **b)** Dipol, quadrupol ve oktipolar momentinin sıcaklığa göre değişimi. . . . . 19
- Şekil 2.4. Sistemin ( $k_B T/K, J/K$ ) düzleminde faz diyagramı. İnce ve kalın çizgiler sırasıyla birinci ve ikinci derece faz dönüşümüne karşılık gelmektedir. Üçgenler üçlü kritik nokta  $T_{tr}$ 'ı göstermektedir. **a)** Sürekli çizgiler nümerik çözümlere ve kesikli çizgiler de seriye açılım ile bulunan analitik çözümlere karşılık gelmektedir. **b)** Nümerik çözüm ile elde edilen faz diyagramı. Sürekli çizgiler kararlı, kesikli noktalı çizgiler yarı kararlı ve kesikli çizgiler de kararsız faz dönüşüm çizgilerini gösterir. . . . . 25
- Şekil 2.5. Öz ısı  $C$ 'nin sıcaklığa bağımlılığı. **a)** İkinci derece faz geçişi görülmektedir.  $J/K=0.25$ . **b)** Sistem üçlü kritik noktata sahiptir,  $J/K=0.46$ . **c)** Birinci derece faz geçişi görülmektedir.  $J/K=0.8$ . **d)** Şekil (b)'nin aynı fakat  $J/K=164/85$ . **e)** Şekil (a)'nın aynı fakat  $J/K=2.5$ . . . . . 28
- Şekil 2.6. Şekil 2.5'in aynı fakat manyetik alınganlık,  $\chi K$ . . . . . 30
- Şekil 2.7. Şekil 2.6'nın aynı fakat alınganlığın tersi,  $(1/\chi K)$ . . . . . 31

- Şekil 3.1. Sistemin ardışık iki faz geçişi verdiği durum için durulma zamanlarının sıcaklıkla değişimi. Düşey kesikli çizgiler, sırasıyla dipolar ve quadropolar düzen parametreleri için faz geçiş sıcaklıklarını göstermektedir. (a)-(c)  $J/K = 0.25$  ve (d)-(f)  $J/K = 0.53$ . . . . . 44
- Şekil 3.2. Sistemin birinci faz geçişi verdiği durum için durulma zamanlarının sıcaklıkla değişimi. Düşey kesikli çizgi birinci derece faz geçiş sıcaklıklarını göstermektedir. (a)-(c)  $J/K = 0.8$  ve (d)-(f)  $J/K = 1.5$ . . . . . 45
- Şekil 3.3. Sistemin ikinci derece faz geçişi verdiği durum için durulma zamanlarının sıcaklıkla değişimi. Düşey kesikli çizgi ikinci derece faz geçiş sıcaklıklarını göstermektedir. (a)-(c)  $J/K = 2.5$  ve (d)-(f)  $J/K = 4.0$ . . . . . 46
- Şekil 3.4. Durulma zamanlarının indirgenmiş sıcaklıkla değişiminin logaritmik grafiği.  $T_{cM}$  ve  $T_{cQ}$  sırasıyla dipolar ve quadropolar düzen parametresinin ikinci derece faz geçiş sıcaklığıdır. Sırasıyla faz geçiş sıcaklığına aşağıdan ve yukarıdan yaklaşıırken hesaplanan kritik üstel değerleri şeklin sol ve sağ tarafında verilmiştir. . . . . 50
- Şekil 3.5. Durulma zamanlarının indirgenmiş sıcaklıkla değişiminin logaritmik grafiği.  $T_{tM}$  ve  $T_{cQ}$  sırasıyla dipolar düzen parametresi için birinci, quadropolar düzen parametresi için ikinci derece faz geçiş sıcaklığıdır. Şeklin sol ve sağ tarafları faz geçiş sıcaklığına yukarıdan ve aşağıdan yaklaşıldığını göstermektedir. . . . . 51
- Şekil 3.6. Sistemin birinci derece faz geçişi verdiği durum için durulma zamanlarının indirgenmiş sıcaklıkla değişiminin logaritmik grafiği.  $T_t$  birinci derece faz geçiş sıcaklıklarını göstermektedir. Büyük semboller  $J/K = 1.5$  için, küçük semboller de  $J/K = 0.8$  için yapılan hesapları göstermektedir. . . . . 52
- Şekil 3.7. Sistemin ikinci derece faz geçişi verdiği durum için durulma zamanlarının indirgenmiş sıcaklıkla değişiminin logaritmik grafiği.  $T_c$  ikinci derece faz geçiş sıcaklıklardır. Büyük semboller  $J/K = 4.0$  için, küçük semboller de  $J/K = 2.5$  için yapılan hesapları göstermektedir. . . . . 53

- Şekil 3.8. Ses soğurulması ve dispersiyonunun sıcaklıkla değişimi. Artan frekans ile ses dispersiyonunun genliği azalmakta ve soğurulmanın ise genliği artmaktadır. Burada 50, 100 ve 150kHz'lik ses dalgaları kullanılmıştır. (a)-(b)  $J/K = 0.25$ , (c)-(d)  $J/K = 0.8$  ve (e)-(f)  $J/K = 2.5$  . . . . . 63
- Şekil 4.1.  $J/K$ 'nın değişik değerleri ve iki farklı oran sabiti seti için üç boyutlu faz uzayında sistemin akış diyagramları: (sürekli)  $k_1 = k_2 = 1$  ve kesikli  $k_1 = 1$  ve  $k_2 = 10$ . Çember kararlı, içi dolu kare yarı kararlı ve içi dolu daire kararsız çözümleri göstermektedir. (a)  $J/K = 0.25$  ve  $k_B T/K = 0.1$  (b)  $J/K = 0.80$  ve  $k_B T/K = 0.35$  (c)  $J/K = 2.5$  ve  $k_B T/K = 0.25$ . . . . . 70
- Şekil 4.2.  $J/K=0.8$  ve  $k_B T/K = 0.35$  için  $M$  ve  $Q$  terimleriyle serbest enerji yüzeyi. Kararlı çözümler çemberle, yarı kararlı çözümler içi dolu kareyle ve kararsız çözümler de daireyle gösterilmiştir. . . . . 72
- Şekil 4.3. Farklı oran sabiti değerleri için  $M$ ,  $Q$  ve  $R$  düzen parametrelerinin gevşeme eğrileri:  $k_1 = k_2 = 1$  (sürekli çizgi)  $k_1 = 1$  ve  $k_2 = 10$  (kesikli çizgi).  $i$  alt indisi başlangıç değerini, 1 kararlı ve 2 yarı kararlı durumu göstermektedir. (a)  $J/K = 0.25$  ve  $k_B T/K = 0.1$  için ( $M_i = 1.5$ ,  $Q_i = 0.43$ ,  $R_i = -1.5$ ). (b) a) ile aynı fakat  $Q_i = 0.42$  ve sistem yarı kararlı durumda durulmaktadır. (c)  $J/K = 0.8$  ve  $k_B T/K = 0.35$  için ( $M_i = 1.5$ ,  $Q_i = -0.19$ ,  $R_i = -1.5$ ). (d) c) ile aynı fakat  $Q_i = -0.20$  ve sistem yarı kararlı durumda durulmaktadır. (e)  $J/K = 2.5$  ve  $k_B T/K = 0.25$  için ( $M_i = 0.72$ ,  $Q_i = -1.0$ ,  $R_i = -1.5$ ). (f) e) ile aynı fakat  $M_i = 0.71$  ve sistem yine yarı kararlı durumda durulmaktadır. . . . . 74

## 1. BÖLÜM

### GİRİŞ

Yüzyıllardan beri varlığı bilinen manyetik maddeler ve manyetizma biliminde, ileri teknoloji aletlerinin ve malzemelerin yapımında en önemli konulardan biridir. Birçok araştırma ve uygulama alanına konu olan manyetizma, istatistik fizik ve fen bilimlerinin birçok alanında da önemli bir rol oynamıştır. Manyetizmanın incelenmesinde, manyetik etkileşmeler iki kısımda sınıflandırılabilir: Bunlardan ilki, tek başına elektronun veya manyetik momente sahip olan atomların sadece dış manyetik alanla etkileştiği ideal sistemlerdir. İdeal sistemlerde parçacıklar arasındaki etkileşmeler ihmal edildiği için, bu sistemlerin davranışları temel olarak bir tek parçacığın davranışı şeklinde ele alınabilir. İdeal spin sistemine örnek olarak Curie kanununa uyan paramanyetik bir maddeyi ve ideal gaz sistemine örnek olarak da durum denklemi Boyle-Charles kanunuyla tanımlanan bir gazı verebiliriz. Harmonik olarak titreşen bir örgünün parçacıkları arasındaki kuvvetli etkileşmelere rağmen, normal kipler veya fononların varlığı karşısında sistemi ideal olarak ele alabiliriz. Manyetik etkileşmelerin ikinci sınıfını da parçacıklar arasındaki etkileşmelerin kesinlikle ihmal edilemediği sistemler oluşturmaktadır. Bu tür sistemler aynı zamanda kooperatif sistemler olarak da adlandırılmaktadır. Kooperatif sistemlerde faz geçişi olarak adlandırılan ve numunenin daha önce sahip olmadığı yeni bir yapı, düzenleme veya özellik kazandığı değişimler görülür. Kooperatif sistemlere örnek olarak, sıcaklığı Curie sıcaklığının ( $T_c$ ) altındaki sıcaklıklara indirilen paramanyetik bir maddenin ferromanyetik olması ile ideal bir gazın basıncının artırılması veya sıcaklığının azaltılması ile sıvı duruma yoğunlaşması gibi olayları verebiliriz. Benzer olarak, ideal bir Bose gazı da dalga fonksiyonunun simetrisi nedeniyle atomlar arasında çekici etkileşmelerin olduğu kooperatif bir

sistem olarak ele alınabilir. Bu durumda Bose gazı da bir Bose yoğunlaşmasına uğrayacaktır. Bunların yanı sıra bazen de canlıların biyolojik fonksiyonlarını faz geçişinin bir sonucu olarak kabul edebiliriz. Biyolojik sistemlerdeki faz geçişinin bir örneği de hücrede sentezlenen belirli amino asit gruplarından oluşan bir polipeptid zincirinin çevre koşullarının bir dereceye kadar değiştirilmesi sonucu doğal yapısındaki proteinlerin denature (doğallığı değişmiş) diye adlandırılan bir duruma geçmesi olarak bilinir. İdeal sistemlerin tersine, sistemdeki etkileşmeleri ihmal edemediğimiz zaman problemler oldukça karmaşık olacaktır çünkü bu durumda bir çok parçacığın kollektif davranışının göz önüne alınması gerekecektir.

Curie [1] ve Hopkinson'un [2] katıların manyetik özelliklerini incelediği ilk deneysel çalışmalarından birkaç yıl sonra, manyetik sistemleri açıklamaya yönelik teorik çalışmalar başlamıştır. İlk teorik çalışma ideal sistem olan ve temel olarak üç başlıkta toplayabileceğimiz; (i) alınganlığı sıcaklıkla ters orantılı olarak değişen yani Curie kanununa uyan birçok hidratlı (sulu) metalik tuzların, (ii) pratik olarak yüzlerce derece boyunca alınganlığı sıcaklıktan bağımsız olan metallerin ve (iii) Curie noktasının üzerindeki ferromanyetik elementlerin oluşturduğu paramanyetik maddeleri açıklamak için Langevin [3, 4] tarafından yapılmıştır. Langevin paramanyetizmanın doğru bir yorumunu yapmış ve bir dış manyetik alan varlığında paramanyetik bir maddenin ortalama manyetizasyonu ile sıcaklık arasındaki bağıntıyı bulmuştur. Bundan iki yıl sonra da, diğer Fransız fizikçi Weiss [5, 6] kooperatif sistem olarak ele alınan ve dış manyetik alanın yokluğunda bile kendiliğinden manyetizasyona sahip olan demir, nikel, cobalt ve bazı nadir toprak elementlerinin oluşturduğu ferromanyetik maddeleri açıklayan modelini önerdi. Weiss, teorisinde atom veya molekül üzerine uygulanan etkin alanın manyetizasyonun şiddetiyle orantılı yapay bir iç moleküler alandan kaynaklandığını kabul etmiştir. Weiss teorisi, kritik veya Curie sıcaklığının altında ferromanyetizmanın görüleceğini ve manyetik alınganlığın ise Curie-Weiss kanunu ile verileceğini göstermiştir. Bu teoriye göre, tam kritik sıcaklıkta manyetik alınganlık sonsuza gitmektedir [7, 8].

Günümüzde ise ferromanyetizmanın açıklanması ile ilgili iki teori sıklıkla kullanılmaktadır. Bunlardan ilki Ising [9, 10] modelidir. Ising modeli, Lenz'in

öğrencisi Ising'in 1924'teki doktora tezinde [9] önerilmiştir. Ising, Lenz'in [11] daha önce önerdiği modeli kullanarak ferromanyetizmayı açıklamaya çalışmıştır. Ising modelinde, kristaldeki sabit örgü noktalarında, iki yönelime sahip "çubuklar" şeklinde manyetik momentlerin olduğu düşüncesi klasik olarak ele alınmıştır. Ising modeli, akışkanlar sistemindeki örgü-gaz modeline benzeyen manyetik bir modeldir. Diğer model ise, manyetik momentlerin kuantum mekaniksel üç-bileşenli spin matrisleri şeklinde ele alındığı Heisenberg [12] modelidir. Bu modelde sistemin enerjisi üç-bileşenli spin operatörlerinin skaler çarpımıyla ifade edilmektedir. Heisenberg modelindeki x ve y bileşenleri ihmal edildiği zaman model Ising modeline dönüşür. z bileşeni ihmal edildiğinde de model XY modeli olarak adlandırılır. XY modeli tek boyutlu durumda tam olarak çözülebildiğinden dolayı teorik olarak ilginçtir fakat XY modeliyle tam olarak gösterilebilecek gerçek bir fiziksel sistem bulunamamıştır. Buna karşılık, Ising modeli bir yönde kuvvetli anizotropiye sahip gerçek fiziksel sistemlere karşılık gelmektedir. Transfer matris metoduyla bir boyutlu örgü için Ising modeli tam olarak çözüldüğünde, modelin sıfırdan farklı sıcaklıklarda faz geçişi vermediği görülmüştür [9,10,13–16]. İki boyutlu örgü için Ising modelinin kritik sıcaklığı önce Kramer ve Wannier [17] tarafından hesaplanmış ve daha sonra da tam analitik çözüm Onsager [18] tarafından yapılmıştır. Üç boyutlu sistemler için ne Ising modelinin ne de Heisenberg modelinin henüz kesin çözümü elde edilememiştir.

Ising tarafından tanımlanan ve iki durumlu yapıya sahip olan model, spin-1/2 Ising modeli olarak da adlandırılmaktadır. Spin-1/2 Ising modeli, konsantrasyon, yoğunluk, sıvıların yoğunlukları farkı, periyodik düzenlenme, manyetik moment, periyodik manyetik moment, elektrik polarizasyonu ve çiftlenmiş elektron genliği gibi bir tek düzen parametresiyle karakterize edilebilen akışkan konsantrasyonu, sıvı-gaz karışımı, karışım ayrışması, ikili metalik alaşımlar, ferromanyetizma, antiferromanyetizma, elektrik faz geçişleri ve süperiletkenlik gibi kooperatif olayların incelenmesinde sıklıkla kullanılmaktadır [19,20].

Bununla birlikte, manyetik alaşımlar gibi hem manyetik hem de yapısal türde iki tip düzenlenmenin görüldüğü fiziksel sistemlerin davranışları bir tek düzen parametrelili spin-1/2 Ising modeliyle açıklanamaz. Bu tür sistemleri açıklayabilmek için en az iki düzen parametresi gerekmektedir. Bu özellikteki fiziksel sistemleri incelenmek için

iki düzen parametrelili ve üç durumlu spin-1 Ising modeli kullanılmaktadır. Spin-1 Ising modeli,  $\text{He}^3\text{-He}^4$  karışımı, faz ayrışması ve ikili alaşımlarda ferromanyetizma, sıvı kristal karışımlar, su-yağ ve sabun gibi yüzey aktif bir molekülden (amfilik) oluşan mikroemülsiyonlar, re-entrant olaylar, manyetik düzenlilik v.b., birçok fiziksel kooperatif olayın termodinamik özelliklerinin açıklanmasında kullanılmıştır. Bununla birlikte, nadir toprak bileşenlerinden biri olan  $\text{DyVO}_4$  (Dysprosium Vanadate) üzerinde yapılan deneysel çalışmalarda [21–26],  $\text{DyVO}_4$ 'ün 14 K'de tetragonal yapıdan ortorombik yapıya kristaloğrafik ve 3 K'de de manyetik olmak üzere arka arkaya iki faz geçişi verdiği görülmüştür. Bu tür sistemler ise, ilk defa Sivardière ve Blume [27] tarafından önerilen dört durumlu spin-3/2 Ising modeliyle açıklanabilmektedir. Daha sonra, Krinsky ve Mukamel [28] spin-3/2 Ising modeli ile etanol ( $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ ), karbondioksit ( $\text{CO}_2$ ) ve su ( $\text{H}_2\text{O}$ )'dan oluşan üçlü sıvı karışımın açıklanabileceğini ve Sivardière [29] de spin-3/2 Ising modelinin çift spin-1/2 Ising modeline özdeş olduğunu göstermiştir.

Ising modelleri, göz önüne alınan Hamiltonyendeki etkileşme terimlerine göre değişik isimler almaktadır. İlk kez spin-1 Ising modelini incelemek için Blume [30] ve Capel [31] tarafından birbirinden bağımsız olarak ele alınan bilineer (J) ve kristal alan (D) etkileşme Hamiltonyenli Ising modeli Blume-Capel (BC) modeli olarak adlandırılmaktadır [32–36].  $\text{He}^3\text{-He}^4$  karışımının açıklanması için Blume, Emery ve Griffiths [37] tarafından önerilen bilineer (J), biquadratik (K) ve kristal alan (D) etkileşme Hamiltonyenli spin-1 Ising modeli, Blume-Emery-Griffiths (BEG) veya spin-1 BEG [38–42] modeli olarak adlandırılmaktadır. BEG modelindeki kristal alan etkileşme terimi ihmal edildiği durumda, model izotropik BEG [43] modeli olarak adlandırılmaktadır. Diğer taraftan, Hamiltonyen x veya y yönünde bir enine alan terimi içerdiğinde model, enine Ising modeli olarak adlandırılmaktadır. Ayrıca model üzerindeki etkin alan teriminin iki veya üç delta ( $\delta$ ) fonksiyondan oluşan ihtimaliyetler toplamı şeklinde ele alındığı durumda ise Ising modeli rasgele iki modlu veya üç modlu Ising modeli olarak adlandırılmaktadır.

En basit Hamiltonyenli durumun göz önüne alındığı spin-3/2 BC modeli ortalama alan yaklaşımı (MFA) ile Sivardière [44] tarafından incelenmiştir. Daha sonra bu modeli, etkin-alan teorisini (EFT) kullanarak bal peteği örgü için Kaneyoshi ve

Jaščur [45], Kaneyoshi ve Benyoussef [46], Peliti ve Saber [47]; bal peteği ve kare örgü için de Gal ve ark. [48] incelemiştir. İki boyutlu örgü için model üzerine, sonlu büyüklük ölçekleme konformal değişmezlik ve Monte Carlo (MC) simülasyonu ile Xavier ve ark. [49] ve kapsamlı MC simülasyonu ile Plascak ve Landau [50] tarafından çalışılmıştır. Modeli, Albayrak ve Keskin [51], Özsoy ve ark. [52] da Bethe örgüsü üzerinde tekrarlama bağıntılarını elde ederek incelemiştir. Bakchachi ve Bouziani [53] ise modeli üç boyutlu yarı sonsuz örgü için MFA ve renormalizasyon grup (RG) teorisi ile incelemiştir. Spin-3/2 BC modelinde dış manyetik alan etkisinin de hesaba katılmasıyla bir boyutlu antiferromanyetik örgü için MC simülasyonu ile Chen ve ark. [54], iki boyutlu örgü için transfer matris sonlu büyüklük ölçekleme ve MC simülasyonu ile Bekhechi ve Benyoussef [55], Bethe örgüsü üzerinde tekrarlama bağıntıları ile Ekiz [56,57], basit kübik örgü için de kümesel değişim metodu (CVM) iki-spin küme yaklaşımı ile Ilkovič [58] ve Ornstein-Zernike yaklaşımına dayanan bir teori ile Grollau [59] incelemiştir. Jiang ve ark. spin-3/2 BC modelindeki kristal alan etkileşmesini önce enine (x yönünde) alarak [60] bal peteği, kare ve basit kübik örgüler için, sonra da iki eksenli (x ve y yönünde) alarak [61] bal peteği örgü için EFT ile incelemiştir.

Spin-3/2 BEG modeli de MFA ve MC simülasyonu ile Barreto ve Bonfim [62] tarafından incelenmiştir. Daha sonra spin-3/2 BEG modelini EFT ile bal peteği örgü için Kaneyoshi ve Jaščur [63], kare örgü için ise Bakkali ve ark. [64], tekrarlama bağıntıları ile Bethe örgüsü için de Ekiz ve ark. [65] incelemiştir. Dış manyetik alan varlığında spin-3/2 BEG modeli de MFA ile Sivardière [66] tarafından ve düzenli örgüler için taban durumunun incelenmesi ise Canko ve Keskin [67] tarafından yapılmıştır. İzotropik spin-3/2 BEG modeli ise MFA ile Sivardière ve Blume [27], Özsoy ve Keskin [68] tarafından incelenmiştir.

Bununla birlikte, bazı çalışmalarda fiziksel anlamı üzerinde durulmadan daha yüksek dereceli etkileşme terimlerinin de göz önüne alındığı çok daha genel Hamiltonyenli spin-3/2 Ising modeli ile ilgilenilmiştir. Modeli, kare örgü için Bakchich ve ark. [69] RG teorisi ile, Tsushima ve ark. [70] yoğunluk matrisi RG teorisi ve MC simülasyonu ile, Tsushima ve Horiguchi [71] köşe transfer matrisi RG teorisi ile, Bakchich ve Bouziani [72] de iki alt örgü durumunu Migdal-Kadanof tipi RG



yaklaşımı ile incelerken en genel Hamiltonyeni göz önüne almışlardır. Tucker [73] çift yaklaşımda CVM ile düzenli örgüleri incelerken, Izmailian [74] da Wu'nun [75] önerdiği metotla bal peteği örgüyü incelerken en genel Hamiltonyenli durumu göz önüne almışlardır. Ayrıca, en genel Hamiltonyenli spin-3/2 Ising modelinin Ashkin-Teller modeline özdeş olduğunu Horiguchi ve Honda [76], sekiz tepe (vertex) modeline indirgenebileceğini Izmailian [77] ve iki-tabakalı Ising modeline denk olduğunu da Horiguchi ve ark. [78] göstermiştir.

Bilineer etkileşmeli enine Ising modeli, kesikli yol integral gösterimi (DPIR) ile ortalama alan renormalizasyon grup (MFRG) metodu kullanılarak Song [79] tarafından incelenmiştir. Enine spin-3/2 BC modeli de değişik düzenli örgüler için EFT ile Jiang ve ark. [80–84] tarafından incelenmiştir. Diğer taraftan, bilinear etkileşmeli spin-3/2 Ising modelindeki dış manyetik alanın rasgele iki kipli olduğu durumu EFT ile Jaščur ve Kaneyoshi [85], Liang ve ark. [86] incelemiştir. Hem enine hem de dış manyetik alanın rasgele iki kipli olduğu durum ise DPIR ile çift yaklaşımın birleştirilmesiyle düzenli örgüler için Albayrak [87], EFT ile de bal peteği, kare ve basit kübik örgüler için Liang ve ark. [88] tarafından yapılmıştır. Modeldeki dış manyetik alanın rasgele iki kip yerine üç kipli alındığı durumun incelenmesini de bal peteği örgü için DPIR ile kümesel değişim yaklaşımı birleştirilerek Song [89], düzenli örgüler için de DPIR ile çift yaklaşımı birleştirerek Albayrak ve Canko [90] yapmıştır.

Yukarıda bahsedilen çalışmalarda sistemlerin dengeli yani statik davranışı ile ilgilenilmiş ve temel olarak değişik Hamiltonyenler için faz diyagramları ve kritik üsteller elde edilmiştir. Sistemler kritik nokta veya yakınında iken statik özelliklerinde önemli değişiklikler ortaya çıktığından dolayı sistemlerin kritik nokta yakınındaki davranışı üzerinde ayrıntılı olarak durulmaktadır. Sistemlerin kritik sıcaklık yakınındaki davranışları, fiziksel kapsamı aynı yönelimli spin gruplarının düzenlenmesiyle oluşan kümeleri ifade eden konum korelasyon uzunluğu  $\xi$  ile belirlenir. Sıcaklık, kritik sıcaklığa yukarıdan yaklaşırken bir diğerine göre rasgele bir yönetime sahip olan kümeler ve  $\xi$  artar. Kritik sıcaklığın altında ise orjinal kümeler domainler içinde büyür ve domaine zıt manada bir yönelimle yeni gruplar şekillenir. Böylece, bu zıt-domain kümelerinin konum korelasyon uzunluğu düşen

sıcaklık ile azalır. Her bir bölgede için  $\nu$  statik ölçekleme üsteli olmak üzere  $\xi$ 'nin sıcaklık bağımlılığı  $\xi \simeq |1 - T/T_c|^{-\nu}$  bağıntısıyla verilir. Sistemlerin statik özellikleri kapsamında tek-zaman korelasyon fonksiyonu, termodinamik katsayılar ve zamandan-bağımsız pertürbasyona lineer cevap gibi tek-zaman denge dağılımıyla belirlenebilen nicelikler incelenmektedir [91].

Bununla birlikte, verilen bir anda basitçe parçacıkların denge dağılımıyla belirlenemeyip, hareketin denklemlerine bağlı olan çok-zamanlı korelasyon fonksiyonu, transport katsayıları ve gevşeme oranları gibi nicelikler sistemin dinamik özellikleri kullanılarak incelenebilmektedir. Örneğin, gevşeme olayı denilen dengeden uzak bir başlangıç durumunda hazırlanan sistemin tekrar denge durumuna ne kadar hızlı döneceği sorusu ancak dinamik olarak incelenebilir. Kritik durumda sistem dengede değil iken, denge durumuna exponansiyel olarak gevşeyecektir. Genel olarak da gevşeme zamanı  $\tau$ , konum korelasyon uzunluğu  $\xi$  ile belirlenir ve sıcaklık kritik değerine yaklaşırken,  $z$  dinamik kritik üstel olmak üzere  $\xi \sim \tau^z$  şeklinde verilir. Dolayısıyla, kritik sıcaklıkta  $\xi$  ıraksadığı için  $\tau$  da ıraksayacaktır ve sistemde kritik yavaş-durulma (slowing-down) olayı görülecektir. Sonuç olarak, çoğunlukla kritik olay teorilerinde tartışılan statik özelliklerinin yanı sıra, sistem kritik nokta veya yakınında iken dinamik özelliklerinde de farklılıkların meydana geleceği açıktır [92].

Van Hove [93] ve Landau ve Khalatnikov'un [94] önerdiği kritik yavaş durulmanın geleneksel teorisi, düzen parametreleri için kinetik veya transport katsayılarının kritik noktada sınırlı kaldığını kabul eder. Genel olarak bu durumda gevşeme oranları, kinetik veya transport katsayılarının statik alınganlığa oranıyla belirlenmektedir. Faz geçişinde düzen parametresi alınganlığı ıraksayacağından, geleneksel teoriler kritik noktada gevşeme oranlarını sıfıra götüren en az bir modun olması gerektiğini belirtir. Düzen parametrelerinin bu yavaş gevşemesi de dinamik özelliklerde ve diğer transport katsayılarında anormalliklerin (değişikliklerin) görülmesine sebep olmaktadır.

Çoğu durumda ise geleneksel teorilerin tam doğru olmadığı bilinmektedir. Kritik noktada kinetik katsayıların sıfıra gittiği örnekler ile kinetik veya transport katsayılarının ıraksadığı örnekler de mevcuttur. Bununla birlikte, transport veya

kinetik katsayılar hiç bir durumda düzen parametresi alınganlığı kadar kuvvetli iraksamaz ve en azından düzen parametrelerinin gevşeme oranlarına uygulanırken, bütün durumlarda hâlâ kritik yavaş durulma olayı bulunur.

Burada anlatılan dinamik özelliklerin ölçümü ise bir çok deneyle yapılabilir. Örneğin, zamana-bağlı korelasyon fonksiyonları inelastik nötron saçılmasıyla, veya frekans-kararlı (frequency-resolved) ışık saçılma deneyleriyle belirlenir. Gevşeme oranları, sıcaklığı veya bazı diğer parametreleri değiştirip tekrar denge durumuna doğru sistemin oranlarını izleyerek ölçülebilir. Ayrıca, gevşeme oranları akustik soğurulma veya manyetik rezonans deneylerinden de direk olarak elde edilebilir. Transport katsayıları ise direk olarak veya saçılma deneylerinden çıkarımla ölçülebilir.

Statik ve dinamik olayları çalışmada bahsedilmesi gereken bir diğer konu da evrensellik kavramının önemidir. Çünkü bu durumda kritik olaylar gösteren sistemleri, verilen bir sınıftaki bütün elemanların "özdeş" kritik özellikler gösterdiği evrensel sınıflar olarak adlandırılan geniş gruplar içine bölmek mümkündür. Evrensellik hipotezi kabul edildiği zaman, bilinen statik davranışla ve verilen korunum kanunları, simetri v.s., ile tutarlı olan en basit dinamik modelleri çalışmak yeterlidir. Şayet bu modelin kritik davranışını çözebilirsek, o zaman sınıfın bütün elemanlarının kritik davranışını bilebiliriz. Kritik olayların incelenmesinde atomlar arası mesafeye kıyasla çok büyük olan  $\xi$  korelasyon fonksiyonunun davranışıyla ilgilenildiğinden, kritik davranış için mikroskopik Hamiltonyenin çoğu ayrıntısının önemsiz olacağını kabul etmek doğaldır. Bu yüzden, evrensellik kabulünü test etmek için modele korunum kanunlarıyla tutarlı bütün mümkün pertürbasyonlar eklenilmeli ve kritik noktada da bu pertürbasyonların "ilgisiz" olduğu gösterilmelidir. Pratikte ise hem statik hem de dinamik davranış için, sadece basit sistemlerde küçük pertürbasyonları çalışmak mümkündür.

Dinamik evrensellik sınıflarını belirleyen özelliklerden kısaca bahsedecek olursak, statik kritik olaylar düzen parametresinin simetrisi kadar uzayın boyutu  $d'$ 'ye de bağlı olduğu bilinmektedir. Ayrıca statik üsteller, uzun-mesafe kuvvetlerin, kirliliklerin v.b., var olup olmadığına da bağlıdır. Bununla birlikte dinamik özellikler, statik

durumu etkilemeyen sistemin ek özellikleri üzerine bağlı olacaktır. Kritik sıcaklıktan uzakta bir sistemin hidrodinamik davranışını belirlemede korunum kanunlarının önemli bir rol oynadığını biliyoruz. Doğal olarak, bu özelliklerin kritik noktada uzun-dalgaboyu ve düşük-frekans davranışını etkilemesini bekleriz. Korunum kanunları ve düzen parametreleri arasındaki Poisson-parantezi ilişkileri ve korunan yoğunluklar, boyutlar ile birlikte düzen parametresi simetrisi ve statik kritik olayları etkileyen diğer özellikler kritik dinamikler için evrensellik sınıfını belirlemede yeterli olduğu düşünülen bir hipotezdir [95].

Görüldüğü gibi sistemlerin kritik davranışlarının anlaşılmasında dinamik özellikler de üzerinde durulması gereken önemli bir konudur. Yukarıdaki bilgilerden anlaşılacağı üzere spin-3/2 Ising modelinin denge davranışı üzerine bir çok sayıda çalışma yapılmış olmasına rağmen, modelin dinamik davranışı üzerine sadece yakın zamanda yapılan iki tip çalışma vardır. Bu çalışmaların ilkinde, Grandi ve Figueiredo [96] genelleştirilmiş iki boyutlu spin-3/2 BC modelinin dinamik davranışını MC simülasyonu ve küçük-zaman dinamik ölçekleme kullanarak incelemiş ve statik ve dinamik kritik üstelleri belirlemiştir. İkinci çalışmada ise Keskin ve ark. [97, 98] salınımlı bir dış manyetik alan altında spin-3/2 BC [97] ve BEG [98] modellerinin zamana bağlı davranışını Glauber-tipi stokastik dinamik kullanarak incelemiştir ve dinamik düzen parametreleri yardımıyla da dinamik faz geçiş sıcaklıkları bulmuştur. Bu tez çalışmasının amacı ise spin-3/2 Ising modelinin dinamik davranışını önce tersinmez termodinamiğin Onsager teorisi ile sonra da yol ihtimaliyet metodu (PPM) ile incelemektir.

Bu giriş bilgilerinden sonra ikinci bölümde, sistemin dinamik davranışının daha iyi anlaşılabilmesi için önce spin-3/2 Ising modelinin dengeli davranışı incelenecektir. Özellikle, sistemin dinamik davranışının incelenmesinde kullanılacak olan faz geçiş sıcaklıkları ve üçlü kritik noktalar ile faz dönüşüm noktaları yakınında düzen parametreleri için analitik ifadeler elde edilecektir. Daha sonra bu analitik ifadeler ile nümerik çözümler arasında karşılaştırma yapılacaktır. Yine bu bölümde sistemin öz ısısı ve manyetik alınganlığı da kapsamlıca tartışılacak ve paramanyetik bölgede manyetik alınganlık için kritik üstel hesaplanacaktır.

Sistemin dinamik davranışı, üçüncü bölümde tersinmez termodinamiğin Onsager teorisi kullanarak incelenecektir. Sistemin dinamik davranışını belirleyen diferansiyel denklem sistemi diğer adıyla kinetik denklemler elde edilecektir. Bu kinetik denklemlerin çözümüyle bulunan ve sistemin gevşemesini karakterize eden durulma zamanlarının değişik Onsager katsayıları için sıcaklıkla değişimi incelenecektir. Kritik sıcaklık civarında durulma zamanlarının davranışı ise kritik üsteller ile ifade edilecektir. Ayrıca bu çalışmanın devamında sistemde ilerleyen ses dalgalarının soğurulması (attenuation) ve dağılımı (dispersion) olayları da kapsamlıca tartışılacaktır. Bu bölümde elde edilen sonuçlar ile diğer teorik ve deneysel çalışmaların sonuçları arasında karşılaştırmalar da yapılacaktır.

Bölüm 4'te sistemin dinamik davranışı yol ihtimaliyet metodu ile incelenecektir. Yol ihtimaliyet metodu ile sistemin dinamik davranışını veren denklem sistemi elde edilecek ve bu dinamik denklem sisteminin çözümleri Runge-Kutta ve akış diyagramları şeklinde gösterilecektir. Bu çözümler kullanılarak hem sistemin denge davranışının incelenmesinde bulunan çözümlerin sınıflandırılması yapılacak hem de dengeli davranışın incelenmesinde elde edilen çözümlerin eksiksiz olarak bulunup bulunmadığı kontrol edilmiş olacaktır.

Son bölümde ise yapılanlar çalışmalar kısaca özetlenerek, elde edilen sonuçların tartışılması verilecektir.

## 2. BÖLÜM

### SPİN-3/2 ISING MODELİNİN DENGELİ DAVRANIŞI

#### 2.1. Modelin Tanımı

Spin-3/2 Ising modeli, dört durumlu ve üç düzen parametrelili bir sistemdir. Burada bahsedilen dört durum sistemdeki her bir spin durumunun ortalama kesirsel değerleri olup iç, nokta veya durum değişkenleri olarak adlandırılır. Bu durum değişkenleri  $X_1$ ,  $X_2$ ,  $X_3$  ve  $X_4$  ile gösterilir ve bunlar sırasıyla spin ortalama kesirsel değerinin  $+3/2$ ,  $+1/2$ ,  $-1/2$  ve  $-3/2$  olma ihtimaline karşı gelirler.  $X_i$ 'ler normalizasyon şartına uyacaklarından,

$$\sum_{i=1}^4 X_i = 1 \quad (2.1)$$

olarak yazılabilir. Sistemdeki üç düzen parametresi de uzun menzil düzen parametresi olup şu şekilde tanımlanabilir:

1.  $M \equiv \langle S_i \rangle$  ortalama mıknatıslanma olup, çift kutup momenti veya dipol momenti olarak adlandırılır ve bir tarafa yönelmenin diğer tarafa yönelmeden fazlalığını gösterir.

2.  $Q$ , quadrupol momentidir ve mıknatıslanmanın karesinin lineer bir fonksiyonudur ve matematiksel olarak,

$$Q \equiv \langle Q \rangle = \langle S_i^2 \rangle - 5/4 \quad (2.2)$$

şeklinde tanımlanabilir.

3.  $R$ , oktopolar momenttir ve mıknatıslanmaya lineer olarak bağlı olup,

$$R \equiv \langle R \rangle = 5/3 \langle S_i^3 \rangle - 41/12 \langle S_i \rangle \quad (2.3)$$

şeklinde tanımlanır, burada  $\langle \dots \rangle$  termal beklenen değeri göstermektedir. Denklem

(2.2) ve (2.3) tanımları yüksek sıcaklıklarda quadrupol ve oktopolar momentlerinin sıfır olmasını sağlamaktadır. Bu tanımlama bazı araştırmacıların kullandığı [49, 51, 65, 71, 72, 77],  $Q \equiv \langle S_i^2 \rangle$  ve  $R \equiv \langle S_i^3 \rangle$  tanımlarından farklıdır.

Düzen parametrelerinin iç değişkenler cinsinden ifadesi ise,

$$M = 3/2X_1 + 1/2X_2 - 1/2X_3 - 3/2X_4, \quad (2.4a)$$

$$Q = X_1 - X_2 - X_3 + X_4, \quad (2.4b)$$

$$R = 1/2X_1 - 3/2X_2 + 3/2X_3 - 1/2X_4 \quad (2.4c)$$

şeklindedir. Denklem (2.1) ve (2.4)'ün kullanılmasıyla, iç değişkenlerin düzen parametreleri cinsinden ifadeleri

$$X_1 = \frac{1}{20} (5 + 6M + 5Q + 2R), \quad (2.5a)$$

$$X_2 = \frac{1}{20} (5 + 2M - 5Q - 6R), \quad (2.5b)$$

$$X_3 = \frac{1}{20} (5 - 2M - 5Q + 6R), \quad (2.5c)$$

$$X_4 = \frac{1}{20} (5 - 6M + 5Q - 2R) \quad (2.5d)$$

olarak elde edilir. Bilineer ve biquadratik etkileşmeli spin-3/2 Ising modelinin diğer adıyla izotropik spin-3/2 BEG modelinin Hamiltonyeni,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - K \sum_{\langle ij \rangle} Q_i Q_j \quad (2.6)$$

ile verilmektedir. Burada her bir  $i$  örgü noktasındaki  $S_i$ ,  $\pm 3/2$  ve  $\pm 1/2$  değerlerini alır  $\langle ij \rangle$  de toplamın en yakın komşu çiftler üzerinden alındığını göstermektedir.  $J$  ve  $K$  da sırasıyla bilineer ve biquadratik etkileşme sabitidir.

## 2.2. Sistemin Denge Durumunun İncelenmesi

Bu kesimde, izotropik spin-3/2 BEG modelinin dengeli davranışı kümesel değişim metodu kullanılarak incelenecektir. Kümesel değişim metodu ilk olarak Kikuchi [99, 100] tarafından tanımlanmış ve daha sonra Kurata ve ark. [101] ve Kikuchi [102, 103] tarafından geliştirilmiştir. Kümesel değişim metodu, son zamanlarda sıklıkla kullanılan kapalı form yaklaşımlarının en önemlisidir ve bir çok fiziksel kooperatif olayın incelenmesinde iyi sonuçlar vermektedir. Ayrıca, metodun bir diğer önemli tarafı da zamana bağlı durumlara genelleştirilebilmesidir [104–106]. Metot, uzun mesafe düzen parametresi kavramı üzerine bina edilen Bragg-Williams [13] yaklaşımı ile spinlerin bölgesel (lokal) korelasyonunun bir ölçüsü olan kısa mesafe düzen parametresini de içeren Bethe [13, 107] yaklaşımının geliştirilmiş bir şeklidir. Modelin dengeli davranışı incelenirken kümesel değişim metodunda genel olarak şu basamaklar takip edilir: (i) ilk olarak küme diye adlandırılan zayıf etkileşen sistemler topluluğu tanımlanır, (ii) alınan kümenin şekillenimi (konfigürasyonu) iç değişkenler cinsinden ifade edilir, (iii) iç enerji ile şekillenim yardımıyla bulunan entropi kullanılarak da sistemin serbest enerjisi bulunur. Böylece serbest enerji ifadesinin iç değişkenlere göre türevinin sıfıra eşitlenmesi ile de sistemin dengeli davranışını belirleyen lineer olmayan denklem sistemi elde edilir.

Kümenin şekillenimi olan  $W$  ağırlık faktörü iç değişkenler cinsinden

$$W = \frac{N!}{\prod_{i=1}^4 (NX_i)!} \quad (2.7)$$

şeklinde ifade edilir. Burada  $N$  sistemdeki örgü nokta sayısını ve  $X_i$ 'ler de iç değişkenleri göstermektedir. Entropi tanım gereği,

$$S = k_B \ln W \quad (2.8)$$

şeklinindedir. Böylece ağırlık faktörü yardımıyla entropi iç değişkenlerin fonksiyonu olarak yazılabilir. Denklem (2.7) denklem (2.8)'de kullanılır ve Stirling yaklaşıklığı



$(\ln N! \cong N \ln N - N)$  göz önüne alındığı takdirde entropi

$$S = -k_B N \sum_{i=1}^4 X_i \ln X_i, \quad (2.9)$$

şeklinde elde edilir. Sistemin iç enerjisini ise (2.4) ve (2.6) denklemlerinin kullanılmasıyla iç değişkenler cinsinden,

$$\begin{aligned} \beta \frac{E}{N} &= -\beta J M^2 - \beta K Q^2 \\ &= -\beta J \left( \frac{3}{2} X_1 + \frac{1}{2} X_2 - \frac{1}{2} X_3 - \frac{3}{2} X_4 \right)^2 - \beta K (X_1 - X_2 - X_3 + X_4)^2, \end{aligned} \quad (2.10)$$

yazabiliriz. Burada  $k_B$  Boltzmann faktörü ve  $T$  mutlak sıcaklık olmak üzere  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  şeklinde tanımlanmıştır. Böylece, sistemin Helmholtz serbest enerjisinin

$$F = E - T S \quad (2.11)$$

şeklinde tanımını kullanarak, denklem (2.10), (2.9) yardımıyla parçacık başına boyutsuz serbest enerji ifadesi

$$\phi = \beta \frac{F}{N} = \beta \frac{E}{N} + \sum_{i=1}^4 X_i \ln X_i + \lambda \left( 1 - \sum_{i=1}^4 X_i \right) \quad (2.12)$$

olarak elde edilir. Burada  $\lambda$  normalizasyon sabiti olup Lagrange çarpanı olarak da adlandırılır. Sistem dengede iken serbest enerji minimum olacağından, denklem (2.12)'nin iç değişkenlere göre türevi alınıp sıfıra eşitlenmelidir. Bu da matematiksel olarak

$$\frac{\partial \phi}{\partial X_i} = 0, \quad (i = 1, ..4), \quad (2.13)$$

şeklinde ifade edilir. (2.1), (2.12) ve (2.13) denklemlerinin kullanılmasıyla iç değişkenler

$$X_i = \frac{e_i}{Z}, \quad (i = 1, ..4), \quad (2.14)$$

olarak bulunur. Burada

$$e_i = \exp \left( -\frac{\beta}{N} \frac{\partial E}{\partial X_i} \right), \quad Z = \sum_{i=1}^4 e_i \quad (2.15)$$

olup,  $Z$  bölüşüm fonksiyonudur. (2.10) denklemini (2.15) denkleminde kullanılarak,  $e_i$  değerleri

$$\begin{aligned} e_1 &= e^{\beta(3JM+2KQ)}, & e_2 &= e^{\beta(JM-2KQ)}, \\ e_3 &= e^{\beta(-JM-2KQ)}, & e_4 &= e^{\beta(-3JM+2KQ)} \end{aligned} \quad (2.16)$$

şeklinde elde edilir. Böylece denklem (2.12)'de (2.4), (2.14), (2.15) ve (2.16) kullanılırsa, parçacık başına boyutsuz serbest enerji daha sade olarak,

$$\phi = \beta \frac{F}{N} = \beta JM^2 + \beta KQ^2 - \ln Z \quad (2.17)$$

şeklinde bulunur. Yine, (2.4), (2.14), (2.15) ve (2.16) denklemlerinin kullanılmasıyla, sistemin denge davranışını belirleyen lineer olmayan öz-bağlılık denklem sistemi

$$M = \frac{3e^{2\beta KQ} \sinh(3\beta JM) + e^{-2\beta KQ} \sinh(\beta JM)}{2e^{2\beta KQ} \cosh(3\beta JM) + 2e^{-2\beta KQ} \cosh(\beta JM)}, \quad (2.18a)$$

$$Q = \frac{2e^{2\beta KQ} \cosh(3\beta JM) - 2e^{-2\beta KQ} \sinh(\beta JM)}{2e^{2\beta KQ} \cosh(3\beta JM) + 2e^{-2\beta KQ} \cosh(\beta JM)}, \quad (2.18b)$$

$$R = \frac{e^{2\beta KQ} \sinh(3\beta JM) - 3e^{-2\beta KQ} \sinh(\beta JM)}{2e^{2\beta KQ} \cosh(3\beta JM) + 2e^{-2\beta KQ} \cosh(\beta JM)} \quad (2.18c)$$

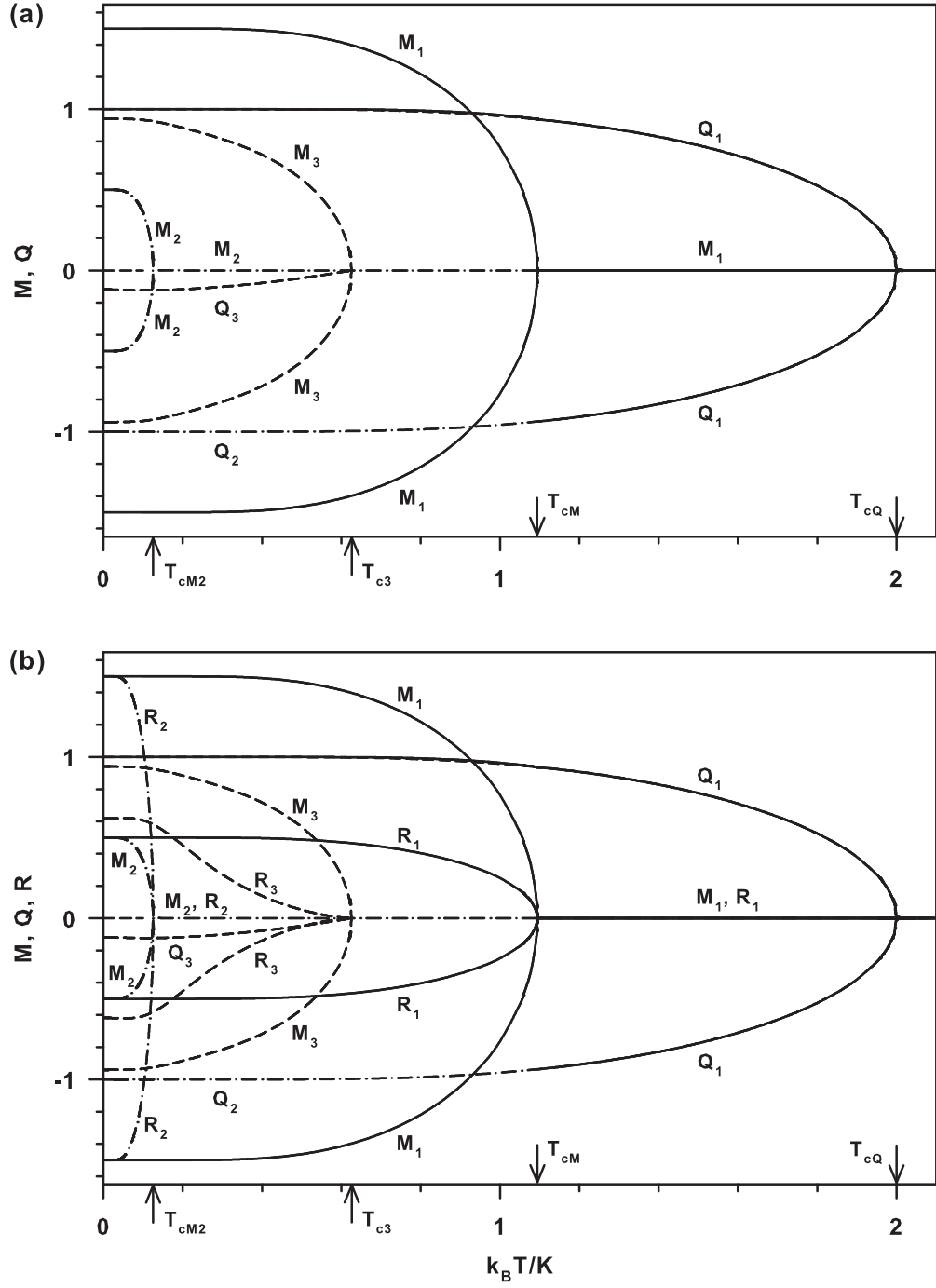
olarak elde edilir. Sistemin dengeli davranışı  $R$  oktopolar momentinden bağımsızdır. Çünkü sistemin serbest enerjisi olan (2.17) ve özbağlılık denklem sistemi olan (2.18a) ve (2.18b) denklemleri oktopolar momenti  $R$ 'yi içermemektedir. Bu yüzden sistemin dengeli davranışının incelendiği birçok çalışmada ya oktopolar momenti hiç göz önüne alınmamış ya da oktopolar momentinin davranışı üzerinde ayrıntılı olarak durulmamıştır. Oktupolar momenti üzerinde durulmamasının bir diğer sebebi ise (2.18c) denkleminde görüleceği üzere, dipol momenti  $M$  faz geçişi verdiğinde yani sıfır olduğunda  $\sinh(\beta JM) = 0$  olacağından, oktopolar momenti ile dipol momenti aynı sıcaklıkta faz geçişi verecektir. Sonuç olarak, sistemin dengeli davranışının incelenmesinde oktopolar momentinin davranışı üzerinde durmaya gerek kalmamaktadır. Bununla birlikte, sistemin dinamik davranışının inceleneceği Bölüm 3 ve Bölüm 4'de, hesaplamaların yapılabilmesi için  $R$  oktopolar momentinin de göz önüne alınması gerekmektedir.

Denklem (2.18c) ihmal edilerek, lineer olmayan (2.18a) ve (2.18b) denklem sistemi nümerik olarak çözülebilir. Değişik  $J/K$  değerleri için bu denklem sisteminin nümerik çözümü yapılmış ve düzen parametrelerinin kararlı durumları ve faz diyagramı Sivardière ve Blume [27] tarafından verilmiştir. Yakın zamanda da düzen parametrelerinin kararlı durumlarının yanı sıra yarıkararlı ve kararsız durumlarının da ayrıntılıca incelenmesi ve denge faz diyagramına ilaveten yarıkararlı ve kararsız faz diyagramı Özsoy ve Keskin tarafından yapılmıştır [68, 108]. Bu denklemlerin nümerik çözümleri bu çalışmalarda geniş bir şekilde tartışıldığı için burada kısa bir özet verilecektir.

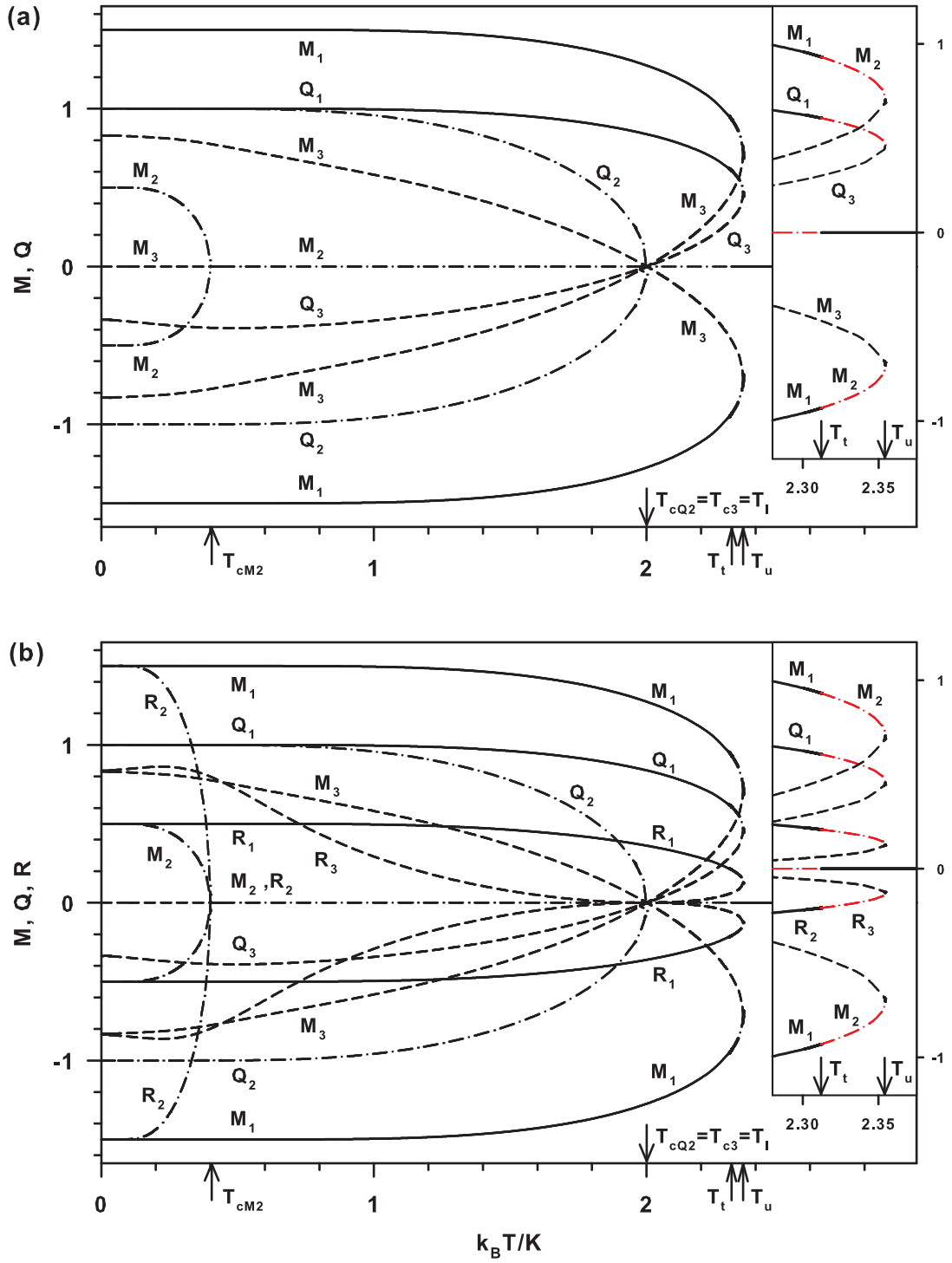
Şekil 2.1-şekil 2.3'de sistemin genel davranışını belirleyen öz-bağıllık denklem sisteminin değişik  $J/K$  değerleri için Newton-Rapson metodu kullanılarak yapılan nümerik çözümler verilmiştir. Çözümlerde oktopolar düzen parametresinin etkisi de gösterilmiştir. Şekillerde 1 alt indisi ile gösterilen sürekli çizgiler kararlı durumları, 2 alt indisi ile gösterilen kesikli noktalı çizgiler yarı kararlı durumları ve 3 alt indisi ile gösterilen kesikli çizgiler ise kararsız durumları göstermektedir. Bu sınıflandırmanın nasıl yapıldığı Bölüm 4'de ayrıntılı olarak anlatılacaktır.  $T_{cM}$ ,  $T_{cQ}$  ve  $T_c$  sırasıyla manyetizasyon ( $M$ ), quadrupol ( $Q$ ) ve her iki düzen parametresinin ( $M$  ve  $Q$ ) sürekli bir şekilde sıfıra gittiği kritik veya ikinci derece faz dönüşüm sıcaklığıdır.  $T_{cM2}$ ,  $T_{cQ2}$  ve  $T_{c3}$  de sırasıyla  $M_2$ ,  $Q_2$  ile  $M_3$  ve  $Q_3$  için kritik sıcaklıktır.  $T_t$  ve  $T_{t2}$  de düzen parametresinin kararlı ve yarı kararlı durumlarının süresiz bir şekilde sıfıra gittiği birinci derece faz geçiş sıcaklıklarını göstermektedir.  $T_l$  sistem birinci derece faz geçişine uğradığında düzen parametrelerinin kararsız branşının sıfır olduğu alt kararlılık limit sıcaklığıdır. Son olarak da  $T_u$  düzen parametrelerinin kararlı durumlarının devamı olan yarı kararlı durumlarının süresizlik geçirdiği sıcaklık olup bu sıcaklık yüksek kararlılık limit sıcaklığı olarak adlandırılır. Faz geçiş noktaları Özsoy ve Keskin tarafından [68, 108] ayrıntılı olarak verildiği için burada tekrar etmeyeceğiz.

### 2.3. Analitik İfadeler ve Faz Diyagramı

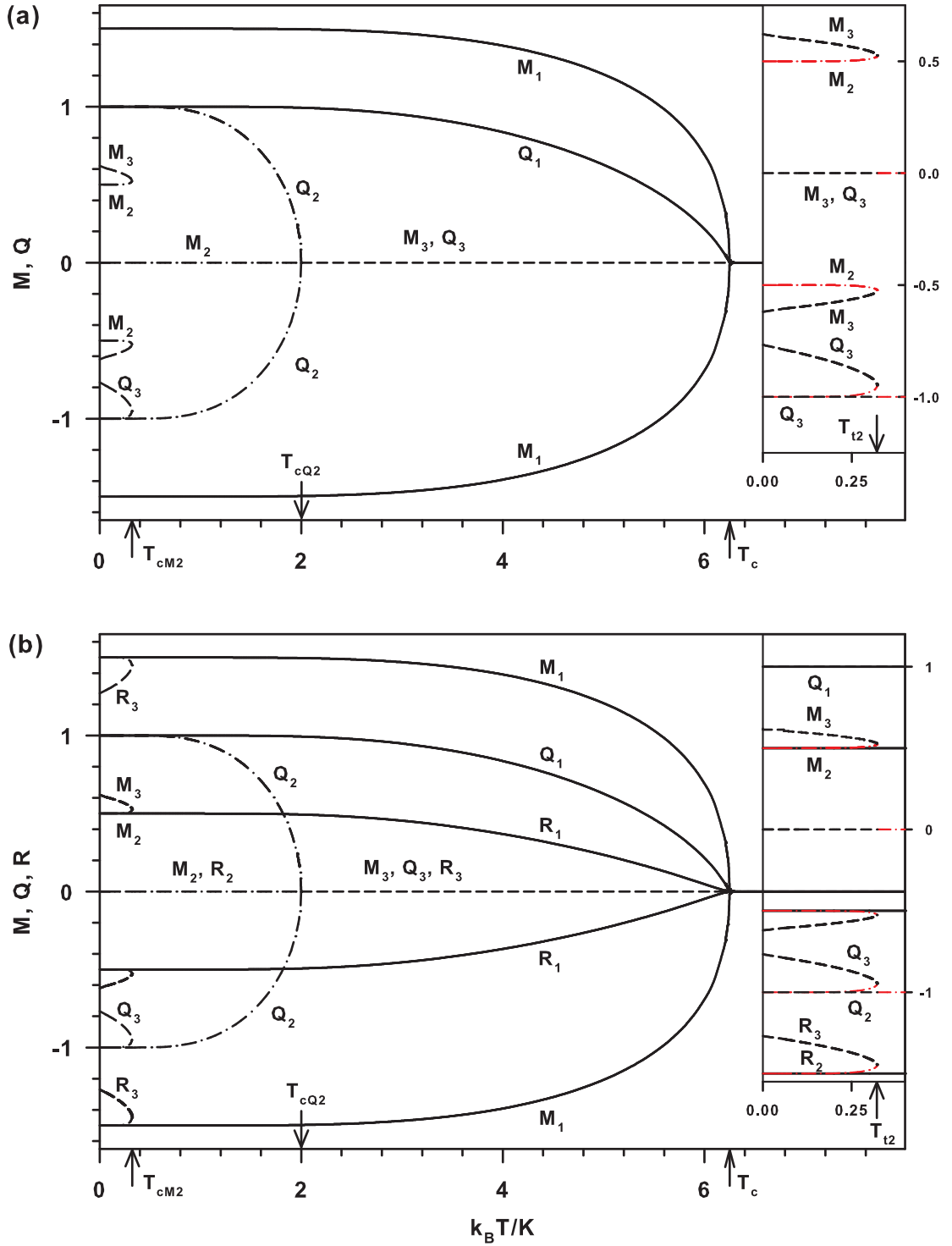
Bu kesimde,  $R$  oktopolar momenti göz önüne alınmadan sistemin denge durumu incelenecektir. Sistemin denge davranışını belirleyen (2.18) öz-bağıllık denklem



Şekil 2.1. Düzen parametrelerinin sıcaklığa göre değişimi. 1 alt indisi ile gösterilen sürekli çizgiler kararlı, 2 alt indisi ile gösterilen kesikli-noktalı çizgiler yarı kararlı ve 3 alt indisi ile gösterilen kesikli çizgiler kararsız durumu göstermektedir.  $T_{cM}$  ve  $T_{cQ}$  sırasıyla  $M$  ve  $Q$  için ikinci derece faz dönüşüm sıcaklıklarıdır.  $T_{cM2}$ ,  $M_2$  için ve  $T_{c3}$ ,  $M_3$  ve  $Q_3$  için kritik sıcaklıklardır,  $J/K=0.25$ . **a)** Dipol ve quadrupol momentinin sıcaklığa göre değişimi **b)** Dipol, quadrupol ve oktopolar momentinin sıcaklığa göre değişimi.



Şekil 2.2. Şekil 2.1 ile aynı fakat,  $J/K=0.8$ .  $T_{cQ2}$ ,  $Q_2$  için kritik sıcaklıktır.  $T_t$  birinci derece faz sıcaklığıdır.  $T_1$  ve  $T_u$  alt ve üst limit kararlılık sıcaklıklarıdır. **a)** Dipol ve quadrupol momentinin sıcaklığa göre değişimi **b)** Dipol, quadrupol ve oktipolar momentinin sıcaklığa göre değişimi.



Şekil 2.3. Şekil 2.1 ile aynı fakat,  $J/K=2.5$ .  $T_{t2}$  de  $M_2$  için birinci derece faz geçiş sıcaklığıdır. **a)** Dipol ve quadrupol momentinin sıcaklığa göre değişimi **b)** Dipol, quadrupol ve oktopolar momentinin sıcaklığa göre değişimi.

sisteminin üç tip çözümü vardır. Bunlar: (i) paramanyetik faza karşılık gelen  $M = Q = 0$  durumudur. Denklem (2.18)'den açıkça görülebileceği üzere, herhangi bir  $J/K$  değeri için bütün sıcaklıklarda bulunabilecek önemsiz çözümdür; (ii) sadece quadropolar düzenlenmenin görüldüğü ferroquadropolar çözüm  $M = 0, Q \neq 0$  durumudur; (iii)  $M \neq 0, Q \neq 0$  quadropolar düzenlenmeli ferromanyetik çözümün bulunduğu durumdur. Aşağıda özel durumlar için analitik sonuçlarda bu çözüm tipleri görülmektedir.

a) Bilineer etkileşme sabitinin yokluğunda yani  $J = 0$ ; bu durumda düzen parametreleri denklem (2.18)'den,

$$M = 0 \quad \text{ve} \quad Q = \tanh(2\beta K Q) \quad (2.19a)$$

veya

$$M = 0 \quad \text{ve} \quad Q = \frac{1}{4\beta K} \ln \frac{1+Q}{1-Q} \quad (2.19b)$$

olarak bulunur. Bu durumda bilineer etkileşme sabiti olmadığından  $M = 0$  olmaktadır ve çözüm de ferroquadropolar faza karşılık gelir. Denklem (2.19a)'un kritik sıcaklık civarında seriye açılmasıyla  $T_{cQ}$  ( $k_B T_{cQ} = 2K$ ) sıcaklığının altında quadropolar düzenlenme olduğu görülür. Burada  $T_{cQ}$ ,  $Q$  için ikinci derece faz geçiş sıcaklığıdır. Yine, denklem (2.19a) ifadesinden  $T_{cQ}$ 'nin altında  $Q \sim (T_{cQ} - T)^{1/2}$  olarak bulunur, böylece bu duruma karşılık gelen kritik üstel  $1/2$ 'ye eşittir. Ayrıca, taban durumu yani sıfır sıcaklığında,  $S_i \pm 3/2$  ve  $\pm 1/2$  değerlerine sahip olacağından  $Q_i = S_i^2 - 5/4$  şeklindeki tanımı göz önüne alınırsa  $S_i = \pm 3/2$  iken  $Q_i = +1$  ve  $S_i = \pm 1/2$  iken de  $Q_i = -1$  değerini alacaktır. Bu sonuç denklem (2.19b)'deki logaritmik ifadenin tanım aralığının içinde kalmaktadır çünkü bu denklemde  $T \rightarrow 0$  iken quadropolar düzen parametresinin biri  $-1$  değerine ve diğeri de  $+1$  değerine yaklaşan iki branşı olacaktır. Böylece sistem iki durumlu bir yapıya dönüştüğü için etkin spin değeri spin-1/2 olarak düşünülebilir.

b) Biquadratik etkileşmenin yokluğunda yani  $K = 0$ ; için (2.18) denklem sisteminden,

$$M = \frac{3 \sinh(3\beta JM) + \sinh(\beta JM)}{2 \cosh(3\beta JM) + 2 \cosh(\beta JM)} \equiv \frac{3}{2} B_{3/2}(3\beta JM), \quad (2.20a)$$

$$Q = 1 - \operatorname{sech}(2\beta JM), \quad (2.20b)$$

elde edilir. Burada  $B_{3/2}(3\beta JM)$  Brillouin fonksiyonudur. Şayet Brillouin fonksiyonu kritik sıcaklık civarında seriye açılırsa, kritik sıcaklık  $T_c$ 'nin altında dipolar düzenlenmenin görüleceği ve faz geçiş sıcaklığının ise  $k_B T_c = \frac{2}{3}JS(S+1) = \frac{5}{2}J$  değerinde ve ikinci derece olacağı bulunur.  $T_c$ 'nin altında  $M \sim (T_c - T)^{1/2}$  ve  $Q \sim M^2 \sim (T_c - T)$  şeklindedir, böylece kritik üstel 1/2'ye eşittir.  $T \rightarrow 0$  iken, Brillouin fonksiyonu 1 olacağından  $M$  düzen parametresinin  $M \rightarrow \pm 3/2$  şeklinde;  $\operatorname{sech}(2\beta JM)$  de 0 olacağından  $Q$  düzen parametresi de  $Q \rightarrow +1$  şeklindeki doyum değerlerine ulaşacağı yine denklem (2.20)'den görülür. Bu durumda, sistemde quadrupolar düzenlenmeli ferromanyetik faz görülmektedir. Yukarıdakinin aksine, kinematik etkileşme sebebiyle  $K = 0$  alınmasına rağmen quadrupolar düzenlenme sistemde hâlâ mevcuttur.

c)  $J \ll K$  durum için;

Bu durumda, dipolar etkileşme hemen hemen ihmal edilebileceğinden, quadrupolar faz geçişinin  $T_{cQ}$ 'da olmasını ve  $k_B T_{cQ} = 2K$  değerinin de değişmemesini bekleriz.  $T \simeq 0K$  sıcaklığı civarında ise  $J \neq 0$  olduğundan, artık dipolar düzenlenme mümkündür. Bu durumda, sıcaklık sıfıra çok yakın olduğu için yaklaşık olarak  $2\beta KQ \sim \infty$  alınabilir, böylece denklem (2.18b)'den  $Q \cong 1$  olacağı (2.18a)'dan da  $M = \frac{3}{2} \tanh 3\beta JM$  olacağı bulunur. Böylece, faz geçiş sıcaklığı  $k_B T_{cM} = 9J/2$  değerinde olup, ikinci derecedir. Sistem, taban durumu sadece  $\pm 3/2$  çiftinden ibaret olan iki durumlu bir yapıdadır dolayısıyla sistemin etkin spin değerini 1/2 olarak düşünebiliriz fakat manyetik momenti değeri 3/2 alınmalıdır. Böylece faz geçiş sıcaklığı  $k_B T_{cM} = 2J(3/2)^2 = 9J/2$  olarak bulunur. Her iki etkileşme sabiti de olduğu için sistemde quadrupolar düzenlenmeli ferromanyetik faz görülmektedir.

d)  $J/K > 0$  olmak üzere, keyfi  $J/K$  değerleri için;

(2.18a) ve (2.18b) denklemlerindeki  $e^{2\beta KQ}$  terimi elenerek,

$$Q = 2M \coth(\beta JM) - \frac{3}{2}M \operatorname{csch}(\beta JM) \operatorname{sech}(\beta JM) + \frac{3}{4} \operatorname{sech}^2(\beta JM) - 2 \quad (2.21)$$



bulunur. Kritik sıcaklık yakınında  $M \approx 0$  olacağından, denklem (2.21) seriye açılabilir. Böylece

$$Q = \left( \frac{1}{2\beta J} - \frac{5}{4} \right) + \left( \frac{5}{3} - \frac{3\beta J}{4} \right) \beta J M^2 + \left( -\frac{23}{45} + \frac{\beta J}{2} \right) (\beta J)^3 M^4 + \dots \quad (2.22)$$

olarak bulunur. Denklem (2.22) ifadesinin, (2.18a) denkleminin kritik sıcaklık civarında seriye açılımında kullanılmasıyla,

$$\left( \frac{1}{2\beta J} - \frac{5}{4} \right) \left( 8 + \frac{8K}{J} - 36\beta K \right) = AM^2 + BM^4 + \dots \quad (2.23)$$

elde edilir. Burada

$$A = -\frac{94\beta K}{3} - 10\beta J + 138\beta^2 JK + \frac{41}{3}\beta^2 J^2 - \frac{189}{2}\beta^3 J^2 K, \quad (2.24a)$$

$$B = -\frac{6247}{90}\beta^3 J^2 K - \frac{41}{6}\beta^3 J^3 + \frac{281}{2}\beta^4 J^3 K + \frac{73}{12}\beta^4 J^4 - \frac{423}{8}\beta^5 J^4 K \quad (2.24b)$$

şeklinindedir. Bu seriye açılımda, kritik sıcaklık yakınında  $M \approx 0$  iken  $Q$ 'nun da aynı anda  $Q \approx 0$  olduğu kabul edilmiştir. Diğer bir ifadeyle, ferroquadrupolar çözümü gösteren (2.22) denklemdeki ilk terimin  $M \approx 0$  iken küçük olduğu kabul edilmiştir. Dolayısıyla, bu terimin ihmal edilemediği yani sistemde ferroquadrupolar çözümün olduğu durumda sonuçlarda bir miktar hata payı olacaktır.

Denklem (2.23) içerisinde dipolar çözümün simetrisi nedeniyle  $M$ 'in tek kuvvetleri görülmemektedir. Kritik sıcaklıkta denklem (2.23)'ün sağ tarafı sıfır olacağından, özdeş olarak denklemin sol tarafı da

$$\frac{k_B T_c}{J} = \frac{5}{2}, \quad \text{veya} \quad \frac{k_B T_{cM}}{J} = \frac{9}{2(1 + J/K)} \quad (2.25)$$

şeklindeki gibi iki farklı tarzda sıfır olur. İlk çözüm ( $T_c$ ) denklem (2.22)'de göz önüne alınırsa, quadrupolar çözümün  $M$  ile aynı anda sıfır olduğu görülür. Dolayısıyla,  $T_c$ ,  $M$  ve  $Q$ 'nun her ikisi için kritik sıcaklık olacaktır. İkinci çözüm ( $T_{cM}$ ) için ise  $M = 0$  iken quadrupolar çözümün sıfırdan farklı olacağı denklem (2.22) yardımıyla görülebilir. Bu durumda sistem ferroquadrupolar fazı içermektedir ve daha önce bahsedildiği gibi seriye açılım kullanılarak bulunan sonuçlar da bir miktar hata payı olacaktır. Denklem (2.23) ve (2.24) kullanılarak, kritik sıcaklık civarında şu sonuçlar

bulunabilir:  $J/K > 164/85$  için,  $M$  ve  $Q$ ,  $k_B T_c = \frac{5J}{2}$  sıcaklığı ve üzerinde yok olacaktır ve  $T_c$  civarındaki ifade,

$$M \simeq \left[ \frac{75(5J - 4K)}{2J(85J - 164K)} \right]^{1/2} (k_B T_c - k_B T)^{1/2}, \quad (2.26a)$$

$$Q \simeq \frac{60}{85J - 164K} (k_B T_c - k_B T) \quad (2.26b)$$

olarak verilebilir. Böylece  $\beta'$  kritik üsteli  $1/2$ 'ye eşittir ve faz geçişi ikinci derecedendir. İkinci derece ve birinci derece faz geçiş çizgilerinin kesiştiği yani üçlü kritik nokta değeri  $J/K = 164/85$  için,

$$M \simeq \left[ \frac{1434375}{1182481K} \right]^{1/4} (k_B T_{tr} - k_B T)^{1/4}, \quad (2.27a)$$

$$Q \simeq \frac{19125}{28841K} (k_B T_{tr} - k_B T)^{1/2} \quad (2.27b)$$

olarak bulunur. Böylece, üçlü kritik nokta ( $T_{tr}$ )'da,  $\beta'$  üsteli  $1/4$ 'e eşittir. Birinci derece faz geçişinin görüldüğü  $J/K < 164/85$  ve  $J/K > 4/5$  aralığında ise,

$$M \simeq \left[ \frac{75(5J - 4K)}{2J(164K - 85J)} \right]^{1/2} (k_B T - k_B T_c)^{1/2}, \quad (2.28a)$$

$$Q \simeq \frac{60}{164K - 85J} (k_B T - k_B T_c) \quad (2.28b)$$

şeklindedir. Ferroquadrupolar bölge olan  $J/K < 4/5$  değerinin altında ise  $M$ ,  $k_B T_{cM} = \frac{9J}{2(1+J/K)}$  sıcaklığı ve üzerinde yok olacaktır. Quadrupolar düzen parametresi ise yukarıdaki **c)** maddesinde açıklandığı gibi  $k_B T_{cQ} = 2K$  sıcaklığı ve üzerinde yok olacaktır. Dolayısıyla, bu iki sıcaklık aralığında ferroquadrupolar çözüm olacaktır.  $T_{cM}$  sıcaklığı civarında dipol momentinin analitik ifadeleri ise,  $J/K < 4/5$  ve  $J/K > (97 - 5\sqrt{313})/22$  aralığı için,

$$M \simeq \left[ \frac{27(4K - 5J)}{2J(-11J^2/K + 97J - 36K)} \right]^{1/2} (k_B T - k_B T_{cM})^{1/2} \quad (2.29)$$

şeklindedir ve faz geçişi birinci derecedendir. Sistemdeki ikinci üçlü kritik nokta değeri olan  $J/K = (97 - 5\sqrt{313})/22$  için,

$$M \simeq \left[ \frac{135(373645453 + 20523815\sqrt{313})}{29471571968K} \right]^{1/4} (k_B T_{tr} - k_B T)^{1/4} \quad (2.30)$$

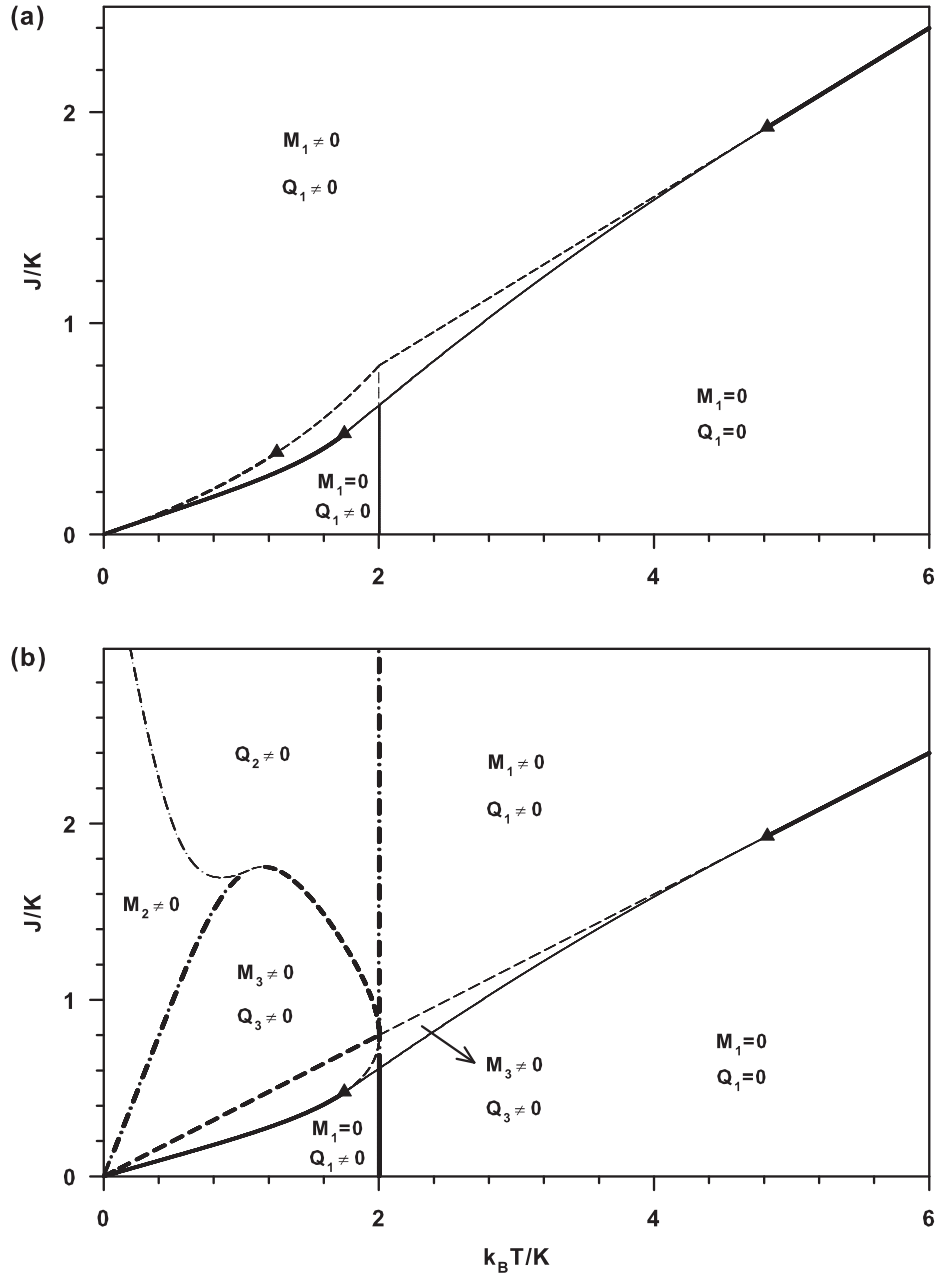
olarak bulunur ve son olarak da  $J/K < (97 - 5\sqrt{313})/22$  ve  $J/K > 0$  aralığı için

$$M \simeq \left[ \frac{27(4K - 5J)}{2J(11J^2/K - 97J + 36K)} \right]^{1/2} (k_B T_{cM} - k_B T)^{1/2} \quad (2.31)$$

şeklindedir ve faz geçişi ikinci derecedendir. (2.29), (2.30) ve (2.31) denklemleri sadece  $M$  düzen parametresini içermektedir,  $T_{cM}$  sıcaklığı ve üzerinde  $M = 0$  olmaktadır.  $T_{cM}$ 'in bu değeri denklem (2.22) kullanılırsa, quadrupolar çözümün bu sıcaklıkta sıfırdan farklı olduğu görülür. Çözüm artık ferroquadrupolar olup yine denklem (2.19) ile verilir.

e) Bütün bu çözümlere ilaveten dördüncü bir çözüm seti daha mevcuttur. Bu çözümler ise sadece nümerik hesaplama ile bulunabilmektedir ve bu çözümler şekil 2.1-2.3'de gösterilmiş olan kararsız çözümlere karşılık gelmektedir. Buradaki çözümlere benzer analitik hesaplamalar daha önce spin-1 Ising sistemi için Chen ve Levy [109] ile Tanaka ve Mannari [110] tarafından yapıldığını belirtmemizde fayda vardır.

Şimdi yukarıdaki ifadeler doğrultusunda, denklem (2.25) kullanılarak  $(k_B T/K, J/K)$  düzleminde analitik faz diyagramını elde edebiliriz. Analitik ifadeler yardımıyla ve nümerik hesaplamalarla elde edilen faz diyagramı şekil 2.4(a)'da görülmektedir. Şekil 2.4(a)'da, ince kesikli çizgiler analitik ve ince düz çizgiler ise nümerik hesaplamalar için elde edilen birinci derece faz geçiş çizgilerini göstermektedir; kalın kesikli ve kalın düz çizgiler de sırasıyla analitik ve nümerik çözümlere karşı gelmektedir. Üçgenler ise üçlü kritik noktaları yani  $T_{tr}$  göstermektedir. Analitik ifadelerle ile nümerik hesaplamalar arasındaki uyum düşük ve yüksek sıcaklık bölgelerinde oldukça iyidir. Bununla birlikte  $0.5 \leq k_B T/K \leq 4.5$  aralığında uyum iyi değildir. Uyumsuzluğun sebebi, yukarıda da açıklandığı üzere bu aralıkta quadrupolar çözümün ile dipol momentinin aynı anda sıfır olmamasından kaynaklanmaktadır diğer bir deyişle bu aralıkta ferroquadrupolar çözüm gözükmemektedir. Bununla birlikte tersinmez termodinamiğin Onsager teorisi [111, 112] ile sistemin dinamik davranışının incelenmesinde bu analitik ifadeleri kullanabiliriz. Şekil 2.4(b)'de ise nümerik hesaplama ile elde edilen kararlı faz diyagramlarına ilaveten yarı kararlı ve kararsız faz dönüşüm çizgileri de görülmektedir. Şekilde kalın çizgiler ikinci derece, ince çizgiler de birinci derece



Şekil 2.4. Sistemin  $(k_B T/K, J/K)$  düzleminde faz diyagramı. İnce ve kalın çizgiler sırasıyla birinci ve ikinci derece faz dönüşümüne karşılık gelmektedir. Üçgenler üçlü kritik nokta  $T_{tr}$ 'i göstermektedir. **a)** Sürekli çizgiler numerik çözümlere ve kesikli çizgiler de seriye açılım ile bulunan analitik çözümlere karşılık gelmektedir. **b)** Numerik çözüm ile elde edilen faz diyagramı. Sürekli çizgiler kararlı, kesikli noktalı çizgiler yarı kararlı ve kesikli çizgiler de kararsız faz dönüşüm çizgilerini gösterir.

faz dönüşümünü göstermektedir. Burada nümerik olarak elde edilen faz diyagramı daha önce Özsoy ve Keskin [68,108] tarafından elde edilen faz diyagramından biraz farklıdır. Özsoy ve Keskin'in faz diyagramında faz dönüşüm çizgileri belli bir alt sınır değerinden başlamakta ve daha sonra da yarı kararlı ve kararsız faz dönüşüm çizgileri aniden son bulmaktadır. Burada ise, nümerik çözümler sıfırdan başlamaktadır ve yüksek değerlerde ise son bulmamaktadır. Ayrıca şunu da belirtelim ki burada nümerik olarak faz diyagramları elde edilirken faz geçiş sıcaklıklarının daha doğru ve kesin olarak belirlenmesi için serbest enerji ifadesinin iç değişkenlere göre ikinci türevi olan Hessian determinantı da hesaba katılmıştır. Hessian determinantı Keskin ve Özsoy [68,108] tarafından ayrıntılı olarak incelendiği için burada tekrar edilmeyecektir.

#### 2.4. Öz Isı ve Manyetik Alınganlık Hesabı

Bu kesimde sistemin en önemli cevap fonksiyonlarından olan, manyetik öz ısının ve alınganlığın davranışını indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak inceleyeceğiz. Ferromanyetik malzemelerin öz ısısı, toplam öz ısının çoğunlukla fononlar ve iletim elektronlarından gelen kısmı üzerine eklenen önemli bir manyetik bileşeni içermektedir. Malzemelerin manyetik olmadığı  $T_c$ 'nin üzerindeki sıcaklıklarda bile bu bileşen mevcuttur [113]. Moleküler-alan yaklaşımında [109] toplam öz ısıya gelen manyetik katkı

$$C = \frac{\partial \langle \mathcal{H} \rangle}{\partial T}, \quad (2.32)$$

ile hesaplanır. Genellikle, öz ısının hesaplanmasında

$$C = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2}, \quad (2.33)$$

tanımını da sıklıkla kullanılmaktadır. Buna göre, (2.32) tanımı ile denklem (2.6) kullanılarak veya denklem (2.33) ile (2.17) kullanılarak, sistemin öz ısısı

$$C = -2\beta (JM^2 + KQ^2) + \frac{a}{b} \quad (2.34)$$

olarak bulunur. Burada,

$$a = 2\beta K Q^2 \left[ 1 - 2\beta J \left( \frac{5}{4} + Q - M^2 \right) \right] + 2\beta J M^2 [1 - 2\beta K + 2\beta K Q^2] \\ + 4\beta^2 J K M Q (1 - Q) [2M - \tanh \beta J M],$$

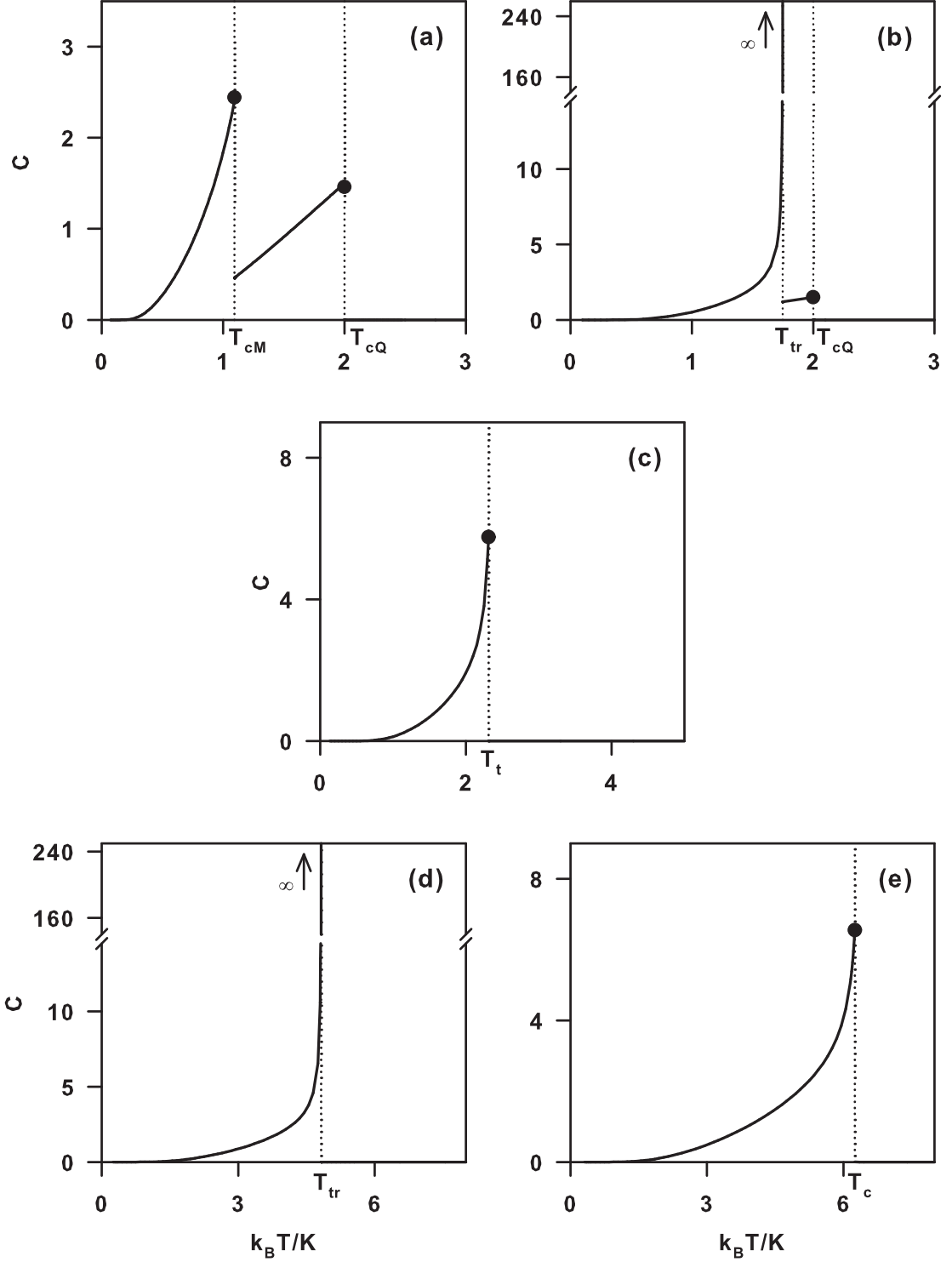
$$b = [1 - 2\beta K + 2\beta K Q^2] \left[ 1 - 2\beta J \left( \frac{5}{4} + Q - M^2 \right) \right] - \beta^2 J K (1 - Q)^2 \\ [2M - \tanh \beta J M]^2$$

şeklindedir. Şekil 2.5'de değişik  $J/K$  değerleri için öz ısı  $C$ 'nin nümerik çözümünü indirgenmiş sıcaklığın  $k_B T/K$  fonksiyonu olarak çizilmiştir. Faz geçiş sıcaklığının üzerinde öz ısının yok olması denklem (2.34)'den de açıkça görüleceği üzere bu bölgede her iki uzun-mesafe düzen parametresinin de sıfır olmasından kaynaklanmaktadır. Manyetizmanın olmadığı bu bölgede de bulunması gereken öz ısı, kısa-mesafe düzen parametresinin hesaba katılmasıyla bulunabilmektedir [113]. Şekil 2.5(a) ve (e), sistemin uğradığı ikinci derece faz geçişi için öz ısının termal davranışını göstermektedir. Diğer taraftan şekil 2.5 (c) sistemin birinci derece faz geçişi için  $C$ 'nin termal davranışını vermektedir. Son olarak, şekil 2.5(b) ve (d) sistemde görülen iki üçlü kritik nokta değeri olan  $J/K=0.46$  ve  $164/85$  için  $C$ 'nin termal davranışını göstermektedir. Chen ve Levy [109] de spin-1 Ising sistemi için öz ısının ikinci derece faz geçişinde sınırlı kaldığını ve kritik noktada ise sonsuza gittiğini göstermiştir. Ayrıca, şekil 2.5(a)'da öz ısının ardışık iki faz geçişi sebebiyle iki "pik" verdiği görülmektedir. Bu ise deneysel olarak  $\text{DyVO}_4$  de gözlenen öz ısının termal değişimine nitel olarak benzemektedir [22].

Modelin  $\chi$  manyetik alınganlığını ise

$$\chi = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\partial M}{\partial h} \quad (2.35)$$

şeklinde tanımlandığı için, Hamiltonyene bir dış manyetik alan ( $h$ ) terimi eklenerek, düzen parametreleri yeniden elde edildi. Böylece (2.35)'deki dış manyetik alana göre



Şekil 2.5. Öz ısı  $C$ 'nin sıcaklığa bağımlılığı. **a)** İkinci derece faz geçişi görülmektedir.  $J/K=0.25$ . **b)** Sistem üçlü kritik noktata sahiptir,  $J/K=0.46$ . **c)** Birinci derece faz geçişi görülmektedir.  $J/K=0.8$ . **d)** şekil (b)'nin aynı fakat  $J/K=164/85$ . **e)** şekil (a)'nın aynı fakat  $J/K=2.5$ .

türev alındı ve sonra da dış manyetik alan yerine sıfır konularak, manyetik alınganlık

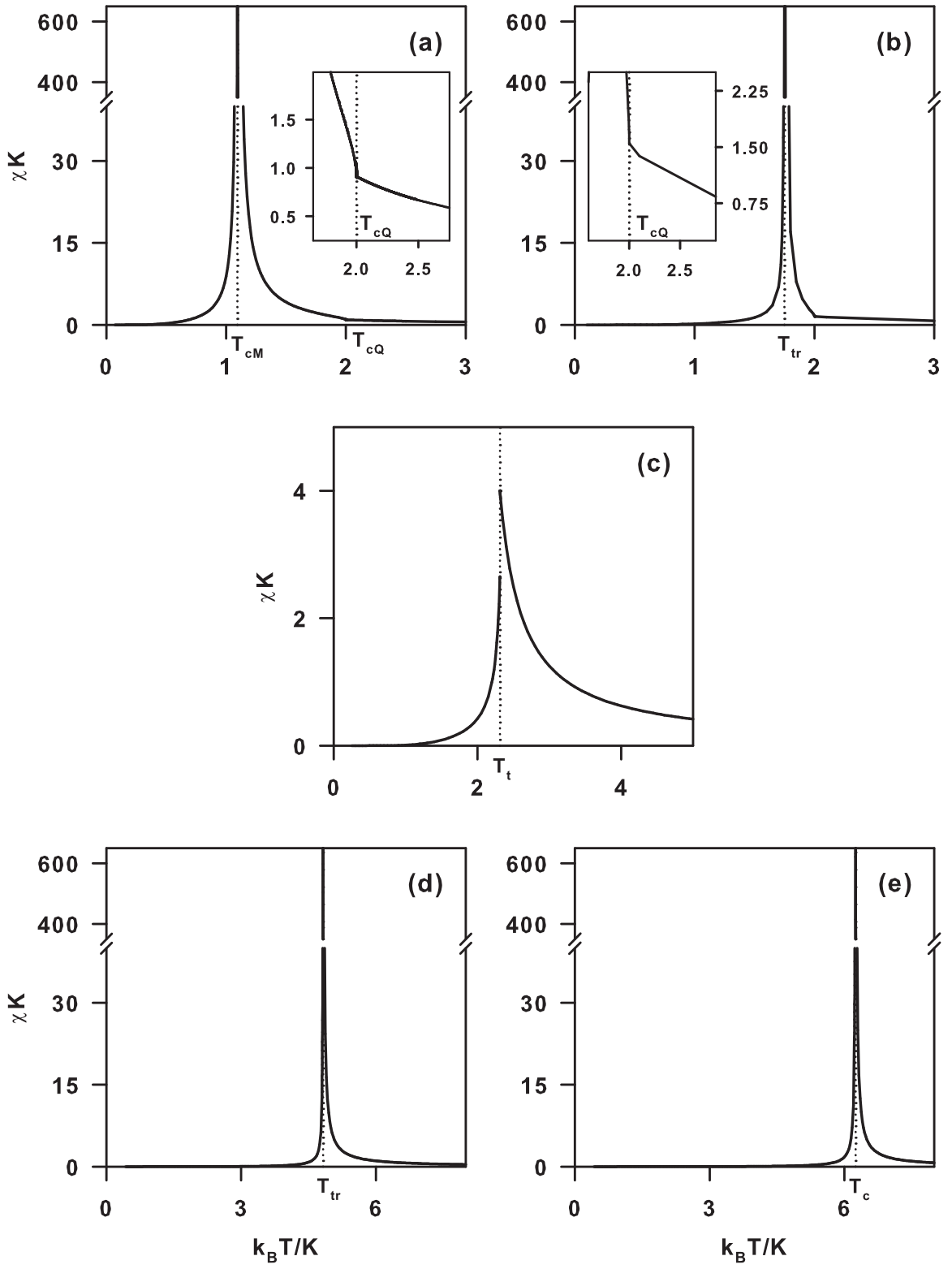
$$\begin{aligned} \chi &= -\frac{1}{2J} + \frac{1}{2J} [1 - 2\beta K(1 - Q^2)] \\ &\times \left\{ 1 - 2\beta K(1 - Q^2) + 2\beta J \left[ M^2 - \frac{5}{4} - Q \right] + 4\beta^2 JK(1 - Q) \right. \\ &\times \left. \left( (1 + Q) \left[ Q + \frac{5}{4} - M^2 \right] - (1 - Q) \left[ M - \frac{1}{2} \tanh \beta JM \right]^2 \right) \right\}^{-1} \end{aligned} \quad (2.36)$$

şeklinde bulundu. Şekil 2.6 da  $J/K$ 'nın değişik değerleri için alınganlığın sıcaklığa bağımlılığı çizilmiştir. Sistem ikinci derece faz geçiş sıcaklığına yaklaşırken şekil 2.6 (a) ve (e), ve üçlü kritik ( $T_{tr}$ ) noktaya yaklaşırken de, şekil 2.6 (b) ve (d)'den görüleceği gibi  $T_c$  ve  $T_{tr}$  sıcaklıklarında  $\chi$  çok hızlı artarak sonsuza gitmektedir. Diğer taraftan, şekil 2.6 (c)'den görüleceği gibi birinci derece faz geçiş sıcaklığı ( $T_t$ ) için  $\chi$  sınırlı kalmakta ve süreksizlik karakteri göstermektedir. Ayrıca, sistemin Curie-Weiss kanununa uyduğunu göstermek için alınganlığın tersi şekil 2.7 çizilmiştir. Şekil 2.7'de değişik  $J/K$  değerleri için indirgenmiş sıcaklığın fonksiyonu olarak alınganlığın tersi  $1/K\chi$  görülmektedir. Şekil 2.7'den geçiş sıcaklığının üzerinde, paramanyetik alınganlığın

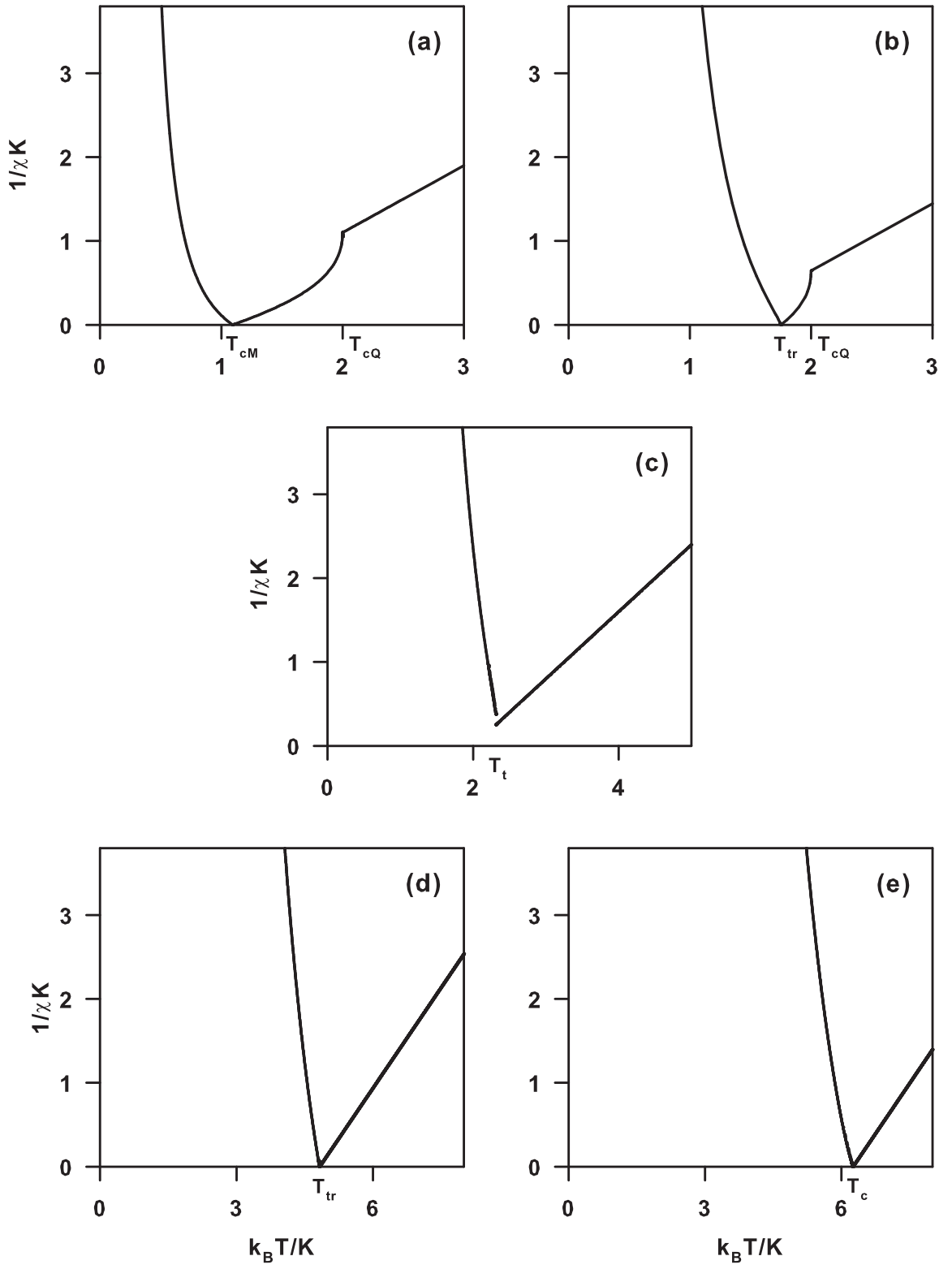
$$\frac{1}{\chi} = \frac{4k_B}{5}(T - T_c) \quad (2.37)$$

şeklindeki Curie-Weiss kanununa uyduğu görülmektedir. Böylece, bu doğru denkleminin eğiminden, paramanyetik fazda manyetik alınganlığa karşılık gelen kritik üstel  $\gamma$ 'nın 1 olduğu görülmektedir. Son olarak alınganlığın tersinin sıcaklığa bağımlılığının benzeri bir davranışın spin-1 Ising sistemi için Tanaka ve Mannari [110] tarafından bulunduğunu da belirtelim.





Şekil 2.6. Şekil 2.5'in aynı fakat manyetik alınganlık,  $\chi K$ .



Şekil 2.7. Şekil 2.6'nın aynı fakat alınganlığın tersi,  $(1/\chi K)$ .

## 3. BÖLÜM

### MODELİN DİNAMİK DAVRANIŞININ ONSAGER TEORİSİ İLE İNCELENMESİ

#### 3.1. Tersinmez Süreçler ve Onsager Teorisi

##### 3.1.1. Tersinmez Süreçler

Klasik termodinamik, genellikle sistemlerin denge durumlarını ve tersinir olan bir denge durumundan diğerine geçiş süreçlerini incelemektedir. Temel olarak, tersinir denge durumları zamandan bağımsız olarak ele alınabileceği için, klasik termodinamikte olayın akış yönü dışında tersinmez süreçlerin zamanla değişimi ile ilgilenilmez. Klasik olarak dengesiz durumlar ise anormallikler veya düzeltilebilir geçici kararsızlıklar olarak ele alır. Bu yüzden klasik termodinamiği, denge dışı süreçlerin teorisini vermediği için "termostatistik" olarak adlandırmak daha uygundur.

Diğer taraftan, tersinmez süreçleri tanımlamada; elektrik akımı ve potansiyel gradyenti arasındaki Ohm kanunu ( $\vec{J} \sim \vec{\nabla}\phi$ ), ısı akışı ve sıcaklık gradyenti arasındaki Fourier kanunu ( $\vec{J}_Q \sim \vec{\nabla}T$ ), bir karışımdaki bileşenin madde akısı ve konsantrasyon gradyenti arasındaki Fick kanunu ( $\vec{J}_n \sim \vec{\nabla}c_n$ ) ve kesme kuvveti ve hız gradyenti arasındaki Newton kanunu ( $\vec{\Pi}^S \sim (\vec{\nabla}\vec{u})^S$ ) gibi orantılı şekilde ifade edilen pek çok "fenomenolojik" kanun vardır. Bu orantıların, kapsamlı bir tersinmez süreç teorisinden elde edilmediğini ve bunların tamamen deneysel olarak doğrulanabilen kanunlar olduğu belirtmek için, "fenomenolojik" kanunlar olarak adlandırılmıştır. Bu orantı ifadeleri, elektriksel iletkenlik katsayısı ( $\rho$ ), ısı iletkenlik katsayısı ( $\kappa$ ), difüzyon katsayısı ( $D$ ) ve viskozite katsayısı ( $\eta$ ) gibi fenomenolojik katsayılar kullanılarak eşitlikler halinde de yazılabilir.

Termodinamik sistemlerde iki veya daha fazla tersinmez süreç eş zamanlı olarak meydana gelirse, süreçler birbirlerine karışabilir ve böylece yeni çapraz etkiler ortaya çıkabilir. Böyle iki çapraz etkinin bir örneği; ısı ve elektrik iletimlerinin karışımıyla ortaya çıkan termo-elektrik olaydır. Termo-elektrik olayda, Peltier etkisi olarak adlandırılan elektrik akımı sonucunda metallerin birleşim yerlerinde oluşan ısı değişimi veya soğurulması olayı ile metallerin birleşim yerlerinin farklı sıcaklıklarda tutulması sonucu oluşan elektromotor kuvveti yani termoelektrik kuvvet şeklindeki çapraz etkiler görülür. Çapraz olayların diğer iyi bilinen bir örneği ise ısı ve difüzyon iletimleri arasındaki çiftlenim olayıdır. Bu olayda, termal difüzyon veya Ludwig-Soret etkisi denilen ve bir sıvı veya gaz karışımına uygulanan sıcaklık gradyentinin net bir kütle akısına yol açması ve bunun sonucunda konsantrasyon gradyentinin şekillenmesi olayı ile konsantrasyon gradyentinin sonucunda sıcaklık farkının oluşması olayı yani Dufour etkisi şeklindeki çapraz olaylar görülür. Difüzyon potansiyeli de difüzyon ve elektrik iletimi arasındaki karışımın bir örneğini oluşturur. Farklı yönde sıcaklık gradyenti sebebiyle anizotropik bir kristalin bir yöndeki ısı iletimi aynı çapraz etki sınıfındadır ve karşılıklı etki yine benzer bir olaydır. Bunların dışında değişik diğer etkiler de mevcuttur. Matematiksel olarak, çapraz etkiler yukarıda bahsedilen fenomenolojik kanunlara yeni terimlerin eklenmesiyle tanımlanabilir. Örneğin termal difüzyon için, Fick kanununun sağ tarafına sıcaklık gradyentiyle orantılı bir terim eklenir. Böylece, yeni kanun madde akısının normal difüzyondaki gibi sadece konsantrasyon gradyentiyle değil aynı zamanda termal difüzyon yani sıcaklık gradyentiyle de oluşabileceğini ifade eder. Dufour çapraz etkisi de Fourier kanununa konsantrasyon gradyentiyle orantılı bir terimin eklenmesiyle tanımlanır. Bu durumda ısı akısı, normal ısı iletimindeki sıcaklık gradyenti ile konsantrasyon gradyentini yani Dufour etkisini içeren bir kanunla ifade edilir. Matematiksel olarak, diğer çapraz etkileri de içerecek benzer genellemeler yapmak mümkündür.

İstatistik mekanikte ve kinetik teorilerde aynı fiziksel ve kimyasal özellikler göz önüne alınır. Buradaki teoriler, Boltzmann denklemi gibi parçacıklar için transport denklemlerine dayanır. Elektrik ve ısı iletimi, termoelektrik ve diğer etkiler gibi çoğu transport olayı bu denklemlerle incelenir. Belli bir bakış açısından, prensipte

istatistik mekanik ve kinetik teoriler fizikçiler için çok tatminkârdır; bu teoriler olayların tam bir tanımını ve fenomenolojik ilişkilerde görülen katsayılar için nümerik değerleri vermektedirler. Bununla birlikte, bu teoriler sadece tersinmez olayların özel sınıfları için geliştirilmiştir ve özel moleküler model tabanlıdır. Böylece bu teoriler daha derin fiziksel tanım içine gitmesine rağmen, tersinmez süreçler için makroskopik ve genel bir teori yapısında değildir.

Denge dışı süreçleri incelemenin bir diğer metodu da, alışılmış termostatistik kanunlarının tersinmez süreçlerin "tersinir" olarak kabul edilen kısmına uygulanır iken aslında "tersinmez" olarak düşünülen sürecin kalan kısmının hesaba katılmadığı, "sanki-termostatistik teoriler" diye adlandırılan teoriler tabanlıdır. Bu metodun klasik örneği Thomson'un termoelektriklik uygulamasıdır. Thomson ısı iletimi ve elektrik iletimini "tersinmez" olarak göz önüne almış ve sadece olayın geri kalan "tersinir" kısmı: "tersinir" Thomson ve Peltier ısıları için termostatistiğin ikinci kanununu yazmıştır. Thomson kendisi de düşüncelerinin tatmin etmeyen özelliğinin tamamen farkındaydı ve "tersinir" ve "tersinmez" kısımlara bölmenin bir hipotez olduğunu ve hesaplama sonuçlarının deneysel olarak test edilmesi gerektiği gerçeğini de vurgulamıştır. Çıkarılan bağlantıların ise termoelektriklik üzerindeki deneylerle bütünüyle doğrulanması ise dikkate değerdir. Bununla birlikte, birçok çalışmaya rağmen genel düşüncelerden Thomson'un hipotezini doğrulamanın mümkün olmadığı ortaya çıkmıştır. Bu teşebbüslerden en iyi bilinen ve en önemlisi, Boltzmann'ın entropi üretiminin pozitif tanımlı karakterinin fenomenolejik katsayılar arasında bazı ilginç eşitsizlikleri geçerli kılacağını ispatladığı çalışmadır. Boltzmann kesin teoriler üzerindeki düşüncelerinin Thomson'un sonuçlarını vermeyeceğini göstermiştir. Thomson'inkine benzer teoriler termal difüzyon (Soret etkisi) için Eastman ve Wagner tarafından ve difüzyon potansiyeli için Helmholtz tarafından geliştirilmiştir. Daha sonraki gelişmeler tersinmez süreçleri tam olarak "tersinir" ve "tersinmez" kısımlara bölme meselesinde bazen ciddi zorluğun olduğunu göstermiştir. Örneğin difüzyon potansiyeli teorisinde, difüzyon "tersinmez" olarak düşünülmeli ve böylece dikkat dışına atılmalıdır. Halbuki termal difüzyon uygulamasında, madde akısının tamamen "tersinir" kısım olması ise oldukça gariptir. Termal difüzyon ve difüzyon potansiyelinin her ikisinin

etkisi birlikte meydana gelebileceği gerçeği açısından, bu şekilde bölme biraz keyfi gözükmemektedir. Böylece sanki-termostatistik teorinin başarısı, geniş kapsamda sürecin paylaşılmasının talihli bir şekilde seçimine bağlıdır. Sanki-termostatistik teorilerin bir diğer güçlüğü de denge dışı süreçlerin tam bir teorisini oluşturmadıkları ve sadece iki farklı tersinmez etki arasındaki etkileşmeden çıkan çapraz olayların sınırlı bir sayısına uygulanabilmesidir.

Gerçekten sistematik olarak makroskopik ve tersinmez süreçlerin genel termodinamiği Onsager tarafından 1931'de yayınlanan [111, 112] ve daha sonra Casimir [114] tarafından sadeleştirilen teori tabanlıdır. Onsager'in makalesi, ikinci dünya savaşının başlangıcından sonra açıkça formülize edilmiş olan en önemli uygulamaların çoğunluğunu temelde içermektedir. Bu teorem, istatistik mekaniğin genel fikirleri vasıtasıyla ispatlanmıştır. Ayrıca, Onsager teorisi tabanlı teori de niçin doğru olmayan sanki-termodinamik metotların bazı durumlarda doğru sonuçlar verdiğini göstermiştir. Genellikle, termostatistikte temel kanunlarla yapıldığına benzer şekilde, Onsager teoremi termodinamiğin yeni bir prensibi olarak düşünülebilir ve bir aksiyon olarak kabul edilebilir.

### 3.1.2. Onsager Teorisi

Önceki kesimde sıcaklık gradyenti, konsantrasyon gradyenti veya potansiyel gradyenti gibi sebeplerin tersinmez olayları nasıl meydana getirdiğini gördük. Bu nicelikler genellikle tersinmez süreçlerin termodinamiğinde "kuvvetler" olarak adlandırılır ve  $X_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) ile gösterilir. Bu kuvvetler, alışıldığı gibi Newtonyen anlamdaki kuvvetler olmadığından bu isim biraz yanıltıcı gözükmemektedir. Bu nicelikler için bazı araştırmacıların kullandığı "eğilim" (affinity) ismi de tercih edilebilir. Bu kuvvetlerin sonucunda ısı akısı, difüzyon akısı ve elektriksel iletimi gibi bazı tersinmez olaylar meydana gelmekteydi. Bu olaylar ise "akılar" veya bazen "akışlar" veya "akımlar" olarak adlandırılır. Bu akılar da burada  $J_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) ile sembolize edilecektir.

En genel durumda herhangi bir kuvvet herhangi akıyı arttırabilir. Mesela bir konsantrasyon gradyenti ve sıcaklık gradyentinin ikisi birden normal ve termal

difüzyon şeklinde difüzyon akısına sebep olduğunu görmüştük. Aynı iki kuvvet normal ısı iletimi ve Dufour etkisi şeklindeki ısı akılarına da neden olabilmekteydi. Böylece tersinmez olayları, herhangi bir akının bütün kuvvetlerin katkılarında oluşabileceğini gösteren şu genel tipteki lineer fenomenolojik ilişkilerle ifade edebiliriz:

$$J_i = \sum_{k=1}^n L_{ik} X_k \quad (i = 1, 2, \dots, n). \quad (3.1)$$

Burada  $L_{ik}$  ( $i, k = 1, 2, \dots, n$ ) katsayıları fenomenolojik veya kinetik katsayılar diye adlandırılır. Örneğin, burada  $L_{ii}$  katsayıları, ısı iletim, elektriksel iletim ve normal difüzyon katsayılarına karşılık gelirken,  $i \neq k$  için  $L_{ik}$  katsayıları termal difüzyon katsayısı, Dufour katsayısı gibi benzeri çapraz olaylarla ilgili katsayıları göstermektedir.

Şimdi bu kesimin temeli olan şu temel özelliği formüle edebiliriz: *Onsager'in temel teoremi*, "akılar"  $J_i$  ve "kuvvetler"  $X_i$  için özel bir seçim yapılmasını sağlayan, fenomenolojik katsayılar matrisi  $L_{ik}$ 'nin simetrik olduğunu ifade eder, yani

$$L_{ik} = L_{ki}, \quad (i, k = 1, 2, \dots, n) \quad (3.2)$$

şeklinde yazılabilir. Bu özdeşlikler Onsager karşılıklı ilişkileri olarak adlandırılır. Bunlar, yukarıdaki örneklerde anlatıldığı şekliyle ısı iletimi ve difüzyon akısı gibi aynı anda meydana gelen tersinmez süreçlerin birbirlerine karışmalarından ortaya çıkan termal difüzyon ve Dufour etkisi gibi iki karşılıklı olay arasındaki bağlantıyı ifade eder. Bu eşitlik çapraz olayların birbirlerine yapmış olduğu çapraz etkinin birbirinden bağımsız olmadığını ifade eder. Onsager'in karşılıklı ilişkisinin genel ispatı (3.2), "mikroskopik tersinirlik" özelliğinin kabulüne yani  $t$  zamanına göre herbir parçacığın hareketinin bütün mekanik denklemlerinin simetrisinin diğer ifadeyle  $t \rightarrow -t$  dönüşümü altında değişmezliğinin bir göstergesi olarak ispatlanır. Bu, hareketin kuantum mekanik denklemleri için olduğu gibi klasik mekanik denklemleri için de doğrudur. Mikroskopik tersinirlik özelliği, termodinamiğin temel kanunlarından daha az geneldir.

Tarihsel olarak ilginç not ise Onsager'in ilk olarak anizotropik kristallerde ısı iletimini ve sonra da kimyasal tek-moleküllü üçgen reaksiyonu şeklindeki iki özel durumu

düşünmeyle fikirlerini izah etmesidir. Bunlardan ilki (3.2)'nin açık bir örneği olmakta ve ikincisi mikroskopik tersinirlik ile (3.2)'nin bağlantısını göstermektedir.

Mikroskopik tersinirlik özelliğini açıklamak için şu örneği verebiliriz. Şayet, bir sisteme  $\vec{B}$  dış manyetik alanı uygulanırsa, (3.2) Onsager karşılıklı ilişkisi

$$L_{ik}(\vec{B}) = L_{ki}(-\vec{B}) \quad (i, k = 1, 2, \dots, n). \quad (3.3)$$

şeklinde modifiye edilmelidir. Bu denklem,  $L_{ik}$  katsayısının  $\vec{B}$ 'nin ve  $L_{ki}$  katsayısının da  $-\vec{B}$ 'nin aynı fonksiyonu olduğunu ifade etmektedir. Burada,  $i = k$  durumu düz bir fiziksel anlama sahiptir ve  $L_{ik}$  matrisinin köşegen elemanları olan fenomenolojik katsayıların manyetik alan kuvvetinin çift fonksiyonu olduğunu gösterir. Denklem (3.3)'ün orijini, Lorentz kuvveti ifadesinin özel şeklinde yatmaktadır. Parçacık hızı ( $d\vec{r}/dt$ ) ve manyetik alanın vektörel çarpımı olan bu özel şekil, mikroskopik tersinirlik üzerinde belirli bir etkiye sahiptir ve bütün parçacıkların önceki yollarını takip etmelerini sağlamak için sadece hızları değil aynı zamanda manyetik alanında tersine çevirmek gerektiğini belirtmektedir.

Entropinin artış hızı tersinmez olaylar için bir potansiyel rolü oynar. Bu yüzden, tersinmez süreçlerin termodinamik teorisini geliştirmede entropi kaynağından uygun akılar ve kuvvetleri bulmak çok önemlidir. Yukarıda bahsedilen temel özelliğin ifadesindeki, akılar ve kuvvetler için "*özel bir seçim*" bu yolla elde edilebilir. Sistemdeki entropi değişimini hesaplamak için, sistemin adiyabatik olarak yalıtılmış olduğunu ve bir çok lokal bölgelerden oluştuğunu göz önüne alalım. Sistemin durumunun da lokal basınçlar, sıcaklıklar, konsantrasyonlar gibi  $A_1, A_2, \dots, A_n$  parametreleri vasıtalarıyla tanımlanabilir olduğunu kabul edelim. Termostatistik dengede bu parametrelerin değerlerini de  $A_1^0, A_2^0, \dots, A_n^0$  ile gösterelim. Uygunluk için durum değişkenlerimiz olarak, durum parametrelerinin denge değerlerinden sapmaları olan  $\alpha_i = A_i - A_i^0$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ )'i kullanalım. Denge durumunda entropi maximumdur ve o zaman durum değişkenleri  $\alpha_i$ 'ler tanım gereği sıfır olacaktır. Sistem adiyabatik olarak yalıtıldığı için entropi değişimi tersinmez süreçler ile sistemin içinde gerçekleşir. Böylece denge dışı durum için, sistemin entropi değişimini bu ( $\alpha_i$ ) niceliklerinin Taylor serisi açılımı şeklinde yazabilmemiz mümkündür. Sistemin bütün lokal bölgeleri için bu açılımlar yapılırsa, bir alt



bölgenin kaybettiği entropi diğeri tarafından kazanılacağı için bu açılımdaki lineer terimler birbirinin tersi işaretlisi olacaktır. Böylece toplam entropi değişimindeki lineer terimler yok olacaktır ve ilk yaklaşım olarak denge değerinden entropinin  $\Delta S$  sapması

$$\Delta S = -\frac{1}{2} \sum_{i,k} g_{ik} \alpha_i \alpha_k, \quad (3.4)$$

şeklinde durum değişkenleri  $\alpha_i$ 'nin quadratik bir ifadesi şeklinde yazılabilir. (3.2) ile (3.3)'ün geçerli olduğu ve (3.1) denkleminde kullanılan, "akılar" ve "kuvvetler" için ifadeleri yazmak artık mümkündür. Onsager teorisinde bu "akılar" ve "kuvvetler" sırasıyla durum değişkenleri  $\alpha_i$ 'nin zaman türevleri

$$J_i = \dot{\alpha}_i, \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (3.5)$$

ve durum değişkenleri  $\alpha_i$ 'nin aşağıdaki lineer kombinasyonu

$$X_i = \partial(\Delta S)/\partial\alpha_i = -\sum_{k=1}^n g_{ik} \alpha_k, \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (3.6)$$

şeklinde yazılabilir. Böylece, Onsager teoreminin ifadesi tamamlanmaktadır.

Tersinmez süreç sırasında birim zaman başına entropi üretimini veren ve entropi üretimi veya entropi kaynak gücü olarak adlandırılan entropinin zaman türevini yazmak da fiziksel açıdan ilginçtir:

$$\dot{\Delta S} = -\sum_{i,k} g_{ik} \dot{\alpha}_i \alpha_k = \sum_i J_i X_i \geq 0. \quad (3.7)$$

Genellikle (3.6) denkleminde (3.7)'yi hesaplamak daha kolaydır ve bir kez  $\Delta S$  bulununca, özellikle (3.7)'den uygun akıları ( $J_i$ ) ve kuvvetleri ( $X_i$ ) seçmenin kolay olduğu böyle basit bir şeklin varlığı avantajına sahiptir. Aynı  $i$  indeksli  $J_i$  akıları ve  $X_i$  kuvvetleri konjüğe (eşlenik) parametreler diye adlandırılır.  $\Delta S$  ifadesi değişik yollarla konjüğe  $J_i$  ve  $X_i$  toplamına bölünebileceğinden, kuvvetler ve akıların seçiminde bazı serbestliklerin mevcut olduğunu belirtelim. Fakat yapılan bütün seçimler için, (3.1)'in  $L_{ik}$  katsayıları arasında Onsager ilişkisi (3.2) ve (3.3) geçerli olacaktır. Entropi üretiminin pozitif veya sıfır olmasını gerektirini belirten (3.7) eşitsizliğinin sağlanması için fenomenolojik katsayıların bütün köşegen elemanlarının

pozitif ve köşegen dışı elemanların ise köşegen elemanlarına göre küçük olması gerekmektedir.

Özetle, ilk olarak entropi üretimi  $\Delta S$  hesaplanmasıyla (3.7)'den eşlenik (konjüğe) akılar ( $J_i$ ) ve kuvvetleri ( $X_i$ ) bulmada ve ikinci olarak fenomenolojik eşitlikler (3.1)'in ve Onsager karşılıklı ilişkisi (3.2) ve (3.3)'nin çalışılmasında keyfi karmaşıklığın tersinmez süreçlerin termodinamik teorisinde mevcut olduğunu söyleyebiliriz. Onsager'in hesaplamalarında, transport denklemlerinin özel detaylarının hiçbirinin kullanılmaması sonuçların genel olduğunu yani keyfi bir tersinmez süreç için geçerli olduğunu ifade eder. Her ne kadar Onsager teoreminin ispatı fiziksel sistemlerin mikroskopik davranışı üzerindeki fikirlere dayansa da sonuçların makroskopik olduğunu belirtelim. Bu durum, termo-istatistikte ikinci kanunun durumuna tamamen benzerlik göstermektedir. Bütün bu yöntemler makroskopik teorisinin limitleri içine düşmektedir ve herhangi bir süreç için geçerlidir. Böylece, "Tersinmez süreçlerin termodinamikleri" adı bilimin bu branşı için doğrulanmış gözükmektedir [115–117].

### 3.2. Onsager Teorisinin İzotropik Spin-3/2 BEG Modeline Uygulanması

Onsager teorisini izotropik spin-3/2 BEG modeline uygulamak ve kinetik denklemleri bulmak için, spin-3/2 Ising sistemini tanımlayan durum parametreleri  $A_i$ 'leri sırasıyla,  $A_1 = M$ ,  $A_2 = Q$  ve  $A_3 = R$  şeklinde dipolar, quadropolar ve oktopolar düzen parametreleri olarak alalım. Durum değişkenleri de tanım gereği durum parametrelerinin denge değerlerinden sapmaları olarak alınacağından,

$$\alpha_M = M - M_0, \quad \alpha_Q = Q - Q_0, \quad \alpha_R = R - R_0 \quad (3.8)$$

olarak yazabiliriz. Bu ve sonraki bütün denklemlerde "0" alt indisi denge değerlerini göstermek için kullanılacaktır. Denklem (3.4) yardımıyla denge değerinden entropinin sapmasını,

$$\begin{aligned} \Delta S = S - S_0 &= -\frac{1}{2} \left[ g_{MM} (M - M_0)^2 + 2 g_{MQ} (M - M_0) (Q - Q_0) + 2 g_{MR} \right. \\ &\times (M - M_0)(R - R_0) + g_{QQ} (Q - Q_0)^2 + 2 g_{QR} (Q - Q_0)(R - R_0) \\ &\left. + g_{RR} (R - R_0)^2 \right], \end{aligned} \quad (3.9)$$

yazabiliriz. Buradaki  $g_{ij}$  katsayıları, entropi üretim katsayıları olarak adlandırılır. Bu katsayılar pozitif tanımlıdır çünkü etkileşen bir sistemde madde veya ısı akışı ile çevreden sisteme sağlanan entropi pozitif, sıfır veya negatif olabilir iken adiyabatik olarak yalıtılmış bir sistemde, entropi değişimi tersinir süreçte sıfır ve tersinmez süreç için de pozitif tanımlı olmalıdır. Ayrıca, baştaki negatif işareti ile de denge durumunda entropinin maksimum olmasını garanti etmektedir. Denge durumu yakınlarında, Helmholtz serbest enerjisi termodinamik niceliklerdeki sapmalara göre Taylor serisine açılır ve açılım sadece ikinci derece niceliklere kadar tutulursa, bu yaklaşımda serbest enerji

$$F = F_0 + T \Delta S \quad (3.10)$$

ile verilir [118, 119]. Burada,  $F_0$  denklem (2.17) ile verilen denge serbest enerjisidir. Böylece, entropi üretim katsayıları,

$$g_{ij} = \frac{1}{T} \left( \frac{\partial^2 F}{\partial \alpha_i \partial \alpha_j} \right)_0 = \left( \frac{\partial^2 \Delta S}{\partial \alpha_i \partial \alpha_j} \right)_0, \quad (3.11)$$

ifadesinden faydalanılarak hesaplanabilir. Denklem (3.11) yardımıyla entropi üretim katsayıları aşağıdaki gibi bulunur,

$$g_{MM} = \frac{1}{T} \left( \frac{\partial^2 F}{\partial M^2} \right)_0 = -Nk_B \left[ \frac{2J}{k_B T} - \frac{18(1+Q_0)}{d_1} - \frac{2(1-Q_0)}{d_2} \right], \quad (3.12a)$$

$$g_{MQ} = \frac{1}{T} \left( \frac{\partial^2 F}{\partial M \partial Q} \right)_0 = Nk_B \left[ -\frac{6(3M_0 + R_0)}{d_1} + \frac{2(M_0 - 3R_0)}{d_2} \right], \quad (3.12b)$$

$$g_{MR} = \frac{1}{T} \left( \frac{\partial^2 F}{\partial M \partial R} \right)_0 = Nk_B \left[ \frac{6(1+Q_0)}{d_1} - \frac{6(1-Q_0)}{d_2} \right], \quad (3.12c)$$

$$g_{QQ} = \frac{1}{T} \left( \frac{\partial^2 F}{\partial Q^2} \right)_0 = -Nk_B \left[ \frac{2K}{k_B T} - \frac{25(1+Q_0)}{2d_1} - \frac{25(1-Q_0)}{2d_2} \right], \quad (3.12d)$$

$$g_{QR} = \frac{1}{T} \left( \frac{\partial^2 F}{\partial Q \partial R} \right)_0 = Nk_B \left[ -\frac{2(3M_0 + R_0)}{d_1} - \frac{6(M_0 - 3R_0)}{d_2} \right], \quad (3.12e)$$

$$g_{RR} = \frac{1}{T} \left( \frac{\partial^2 F}{\partial R^2} \right)_0 = Nk_B \left[ \frac{2(1+Q_0)}{d_1} + \frac{18(1-Q_0)}{d_2} \right]. \quad (3.12f)$$

Burada  $d_1 = (5 + 6M_0 + 5Q_0 + 2R_0)(5 - 6M_0 + 5Q_0 - 2R_0)$  ve  $d_2 = (5 + 2M_0 - 5Q_0 - 6R_0)(5 - 2M_0 - 5Q_0 + 6R_0)$  şeklindedir. Denklem (3.5) ve (3.8)'in kullanılmasıyla,

$$J_M = \frac{d\alpha_M}{dt} = \frac{dM}{dt}, \quad (3.13a)$$

$$J_Q = \frac{d\alpha_Q}{dt} = \frac{dQ}{dt}, \quad (3.13b)$$

$$J_R = \frac{d\alpha_R}{dt} = \frac{dR}{dt} \quad (3.13c)$$

düzen parametrelerinin zamanla değişimlerinin sistemdeki akılara karşılık geldiğini buluruz. (3.6) denklemindeki ilk ifade göz önüne alınırsa, kuvvetler

$$X_M = \frac{\partial \Delta S}{\partial \alpha_1} = \frac{\partial \Delta S}{\partial (M - M_0)}, \quad (3.14a)$$

$$X_Q = \frac{\partial \Delta S}{\partial \alpha_2} = \frac{\partial \Delta S}{\partial (Q - Q_0)}, \quad (3.14b)$$

$$X_R = \frac{\partial \Delta S}{\partial \alpha_3} = \frac{\partial \Delta S}{\partial (R - R_0)} \quad (3.14c)$$

şeklinde kolayca yazılabilir. Böylece, denklem (3.9) denklem (3.14)'de yerine konulmasıyla veya daha kolayca (3.6) denklemindeki ikinci ifadenin kullanılmasıyla kuvvetler

$$\begin{pmatrix} X_M \\ X_Q \\ X_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -g_{MM} & -g_{MQ} & -g_{MR} \\ -g_{MQ} & -g_{QQ} & -g_{QR} \\ -g_{MR} & -g_{QR} & -g_{RR} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M - M_0 \\ Q - Q_0 \\ R - R_0 \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

olarak bulunur. Tersinmez termodinamiğin Onsager Teorisine göre, kuvvetler ile akılar arasındaki lineer fenomenolojik ilişki denklem (3.1)'de tanımlanmıştır. Bu ilişkiyi sağlayan fenomenolojik katsayılar matrisi önce denklem (3.2) de simetrik durumlar için verilmiş daha sonra da ters zaman simetrikli durumları da içerecek şekilde denklem (3.3)'de genişletilmiştir. Ters zaman simetrisine göre  $M$  ve  $R$  tek fonksiyon iken  $Q$  çift fonksiyon olduğu için fenomenolojik katsayılar matrisi simetrik olmayacaktır. Böylece, akılar ve kuvvetleri birbirine bağlayan lineer bağıntı, tek fonksiyonlar için köşegen dışı ifadelerin birbirinin zıt işaretlisi olduğu şu lineer fenomenolojik katsayılar matrisi vasıtasıyla kurulur:

$$\begin{pmatrix} J_M \\ J_Q \\ J_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma_M & -\gamma & \epsilon \\ \gamma & \gamma_Q & -\eta \\ \epsilon & \eta & \gamma_R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_M \\ X_Q \\ X_R \end{pmatrix}. \quad (3.16)$$

Burada fenomenolojik katsayılar matrisinin köşegen elemanları olan  $\gamma_M$ ,  $\gamma_Q$  ve  $\gamma_R$  durum parametrelerinin normal akılarına, köşegen dışında kalan diğer fenomenolojik katsayılar da çapraz olaylarla ilgili akılara karşılık gelmektedir. (3.15) ifadesi ile

verilen kuvvetler denklem (3.16)'de yerine konulur ve denklem (3.13) tanımları yardımıyla kinetik denklem sistemi

$$\begin{pmatrix} \frac{dM}{dt} \\ \frac{dQ}{dt} \\ \frac{dR}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma_M & -\gamma & \epsilon \\ \gamma & \gamma_Q & -\eta \\ \epsilon & \eta & \gamma_R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -g_{MM} & -g_{MQ} & -g_{MR} \\ -g_{MQ} & -g_{QQ} & -g_{QR} \\ -g_{MR} & -g_{QR} & -g_{RR} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M - M_0 \\ Q - Q_0 \\ R - R_0 \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

şeklinde elde edilir.

### 3.3. Kinetik Denklemin Çözümü

Denge durumları yakınında modelin dinamiğini çalışmak için (3.17) diferansiyel denklem sistemi ile verilen lineer kinetik denklemin çözümünün  $e^{-t/\tau}$  şeklinde olduğunu kabul edelim.  $M(t)$ ,  $Q(t)$  ve  $R(t)$ 'nin denge değerlerine yaklaşması bu kinetik denklemin çözümü ile elde edilen ve gevşeme zamanları adı verilen üç karakteristik zaman ile belirlenecektir. Böylece, bu zamanların bulunması için seküler determinantın çözümü gerekmektedir.

$$\begin{vmatrix} \tau^{-1} - \gamma_M g_{MM} + \gamma g_{MQ} - \epsilon g_{MR} & -\gamma_M g_{MQ} + \gamma g_{QQ} - \epsilon g_{QR} & -\gamma_M g_{MR} + \gamma g_{QR} - \epsilon g_{RR} \\ -\gamma g_{MM} - \gamma_Q g_{MQ} + \eta g_{MR} & \tau^{-1} - \gamma g_{MQ} - \gamma_Q g_{QQ} + \eta g_{QR} & -\gamma g_{MR} - \gamma_Q g_{QR} + \eta g_{RR} \\ -\epsilon g_{MM} - \eta g_{MQ} - \gamma_R g_{MR} & -\epsilon g_{MQ} - \eta g_{QQ} - \gamma_R g_{QR} & \tau^{-1} - \epsilon g_{MR} - \eta g_{QR} - \gamma_R g_{RR} \end{vmatrix} = 0. \quad (3.18)$$

Bu determinantın açılımıyla genel tipi şu şekilde verilen bir üçüncü dereceden bir denklem elde edilir:

$$a_1 \tau^{-3} + a_2 \tau^{-2} + a_3 \tau^{-1} + a_4 = 0. \quad (3.19)$$

Burada  $a_1 = 1$ ,  $a_2 = -\gamma_M g_{MM} - \gamma_Q g_{QQ} - \gamma_R g_{RR} - 2\epsilon g_{MR}$ ,  $a_3 = \gamma_M \gamma_Q (g_{MM} g_{QQ} - g_{MQ}^2) + \gamma_M \gamma_R (g_{MM} g_{RR} - g_{MR}^2) + \gamma_Q \gamma_R (g_{QQ} g_{RR} - g_{QR}^2) + g_{MM} (\gamma^2 g_{QQ} - \epsilon^2 g_{RR}) + g_{QQ} (\eta^2 g_{RR} - 2\gamma \eta g_{MR}) + 2\gamma_Q \epsilon (g_{MR} g_{QQ} - g_{MQ} g_{QR}) - \gamma^2 g_{MQ}^2 - \eta^2 g_{QR}^2 + \epsilon^2 g_{MR}^2 + 2\gamma \eta g_{MQ} g_{QR}$ ,  $a_4 = (\gamma_M \eta^2 - \gamma_Q \epsilon^2 + \gamma_R \gamma^2 + \gamma_M \gamma_Q \gamma_R) (g_{MM} g_{QR}^2 + g_{QQ} g_{MR}^2 + g_{RR} g_{MQ}^2 - g_{MM} g_{QQ} g_{RR} - 2g_{MR} g_{MQ} g_{QR}) + 2\epsilon \gamma \eta g_{MM} (g_{QR}^2 - g_{QQ} g_{RR}) + 2\epsilon \gamma \eta (g_{MR}^2 g_{QQ} + g_{MQ}^2 g_{RR} - 2g_{MQ} g_{MR} g_{QR})$  şeklindedir. Bu denklemin çözümü ile üç gevşeme zamanı

$$\begin{aligned} \tau_1^{-1} = & -\frac{a_2}{3a_1} + \frac{\sqrt[3]{-2a_2^3 + 9a_1 a_2 a_3 - 27a_1^2 a_4 + \sqrt{4(3a_1 a_3 - a_2^2)^3 + (-2a_2^3 + 9a_1 a_2 a_3 - 27a_1^2 a_4)^2}}}{3\sqrt[3]{2} a_1} \\ & + \frac{\sqrt[3]{-2a_2^3 + 9a_1 a_2 a_3 - 27a_1^2 a_4 - \sqrt{4(3a_1 a_3 - a_2^2)^3 + (-2a_2^3 + 9a_1 a_2 a_3 - 27a_1^2 a_4)^2}}}{3\sqrt[3]{2} a_1}, \end{aligned} \quad (3.20a)$$

$$\tau_2^{-1} = -\frac{a_2}{3a_1} - \frac{(1-i\sqrt{3})\sqrt[3]{-2a_2^3+9a_1a_2a_3-27a_1^2a_4+\sqrt{4(3a_1a_3-a_2^2)^3+(-2a_2^3+9a_1a_2a_3-27a_1^2a_4)^2}}}{6\sqrt[3]{2}a_1} - \frac{(1+i\sqrt{3})\sqrt[3]{-2a_2^3+9a_1a_2a_3-27a_1^2a_4-\sqrt{4(3a_1a_3-a_2^2)^3+(-2a_2^3+9a_1a_2a_3-27a_1^2a_4)^2}}}{6\sqrt[3]{2}a_1}, \quad (3.20b)$$

$$\tau_3^{-1} = -\frac{a_2}{3a_1} - \frac{(1+i\sqrt{3})\sqrt[3]{-2a_2^3+9a_1a_2a_3-27a_1^2a_4+\sqrt{4(3a_1a_3-a_2^2)^3+(-2a_2^3+9a_1a_2a_3-27a_1^2a_4)^2}}}{6\sqrt[3]{2}a_1} - \frac{(1-i\sqrt{3})\sqrt[3]{-2a_2^3+9a_1a_2a_3-27a_1^2a_4-\sqrt{4(3a_1a_3-a_2^2)^3+(-2a_2^3+9a_1a_2a_3-27a_1^2a_4)^2}}}{6\sqrt[3]{2}a_1} \quad (3.20c)$$

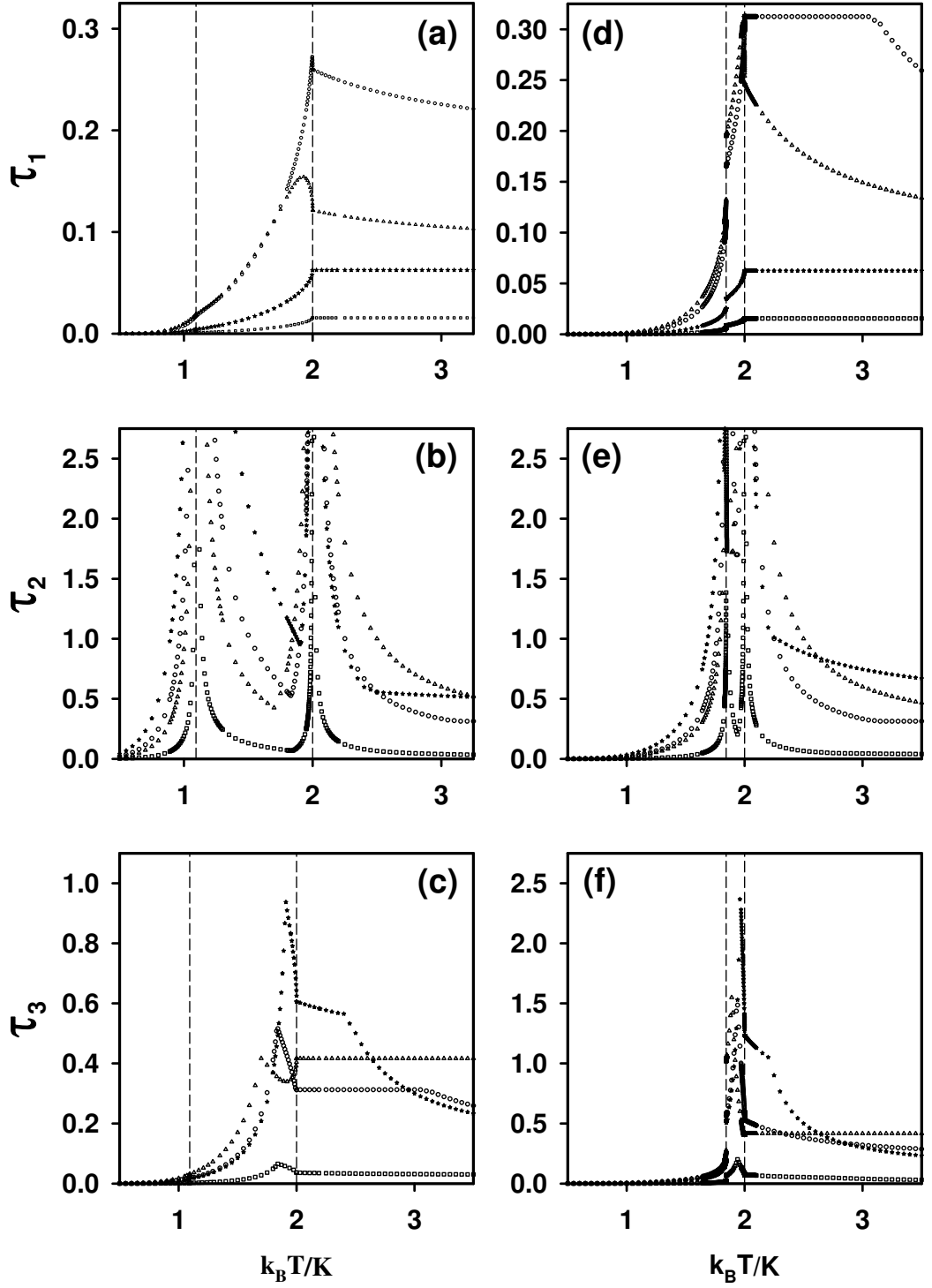
olarak bulunur [120]. (3.19) denkleminin bütün katsayıları reel olduğu zaman, şu şekilde bir discriminant tanımlayabiliriz:  $\Delta = (3a_1a_3 - a_2^2)^3 + \frac{1}{4}(-2a_2^3 + 9a_1a_2a_3 - 27a_1^2a_4)^2$ . Buna göre (i) discriminant sıfırdan büyük ise, bir kök gerçek diğer ikisi kompleks eşleniktir; (ii) discriminant sıfır ise, bütün kökler reel ve en az ikisi aynı olacaktır; (iii) discriminant sıfırdan küçük ise bütün kökler reel ve birbirinden farklıdır. Discriminant negatif iken trigonometri yardımıyla denklemler şu şekle indirgenebilir:

$$\tau_1^{-1} = -\frac{a_2}{3a_1} + \frac{2}{3a_1}\sqrt{a_2^2 - 3a_1a_3} \cos\left(\frac{\theta}{3}\right), \quad (3.21a)$$

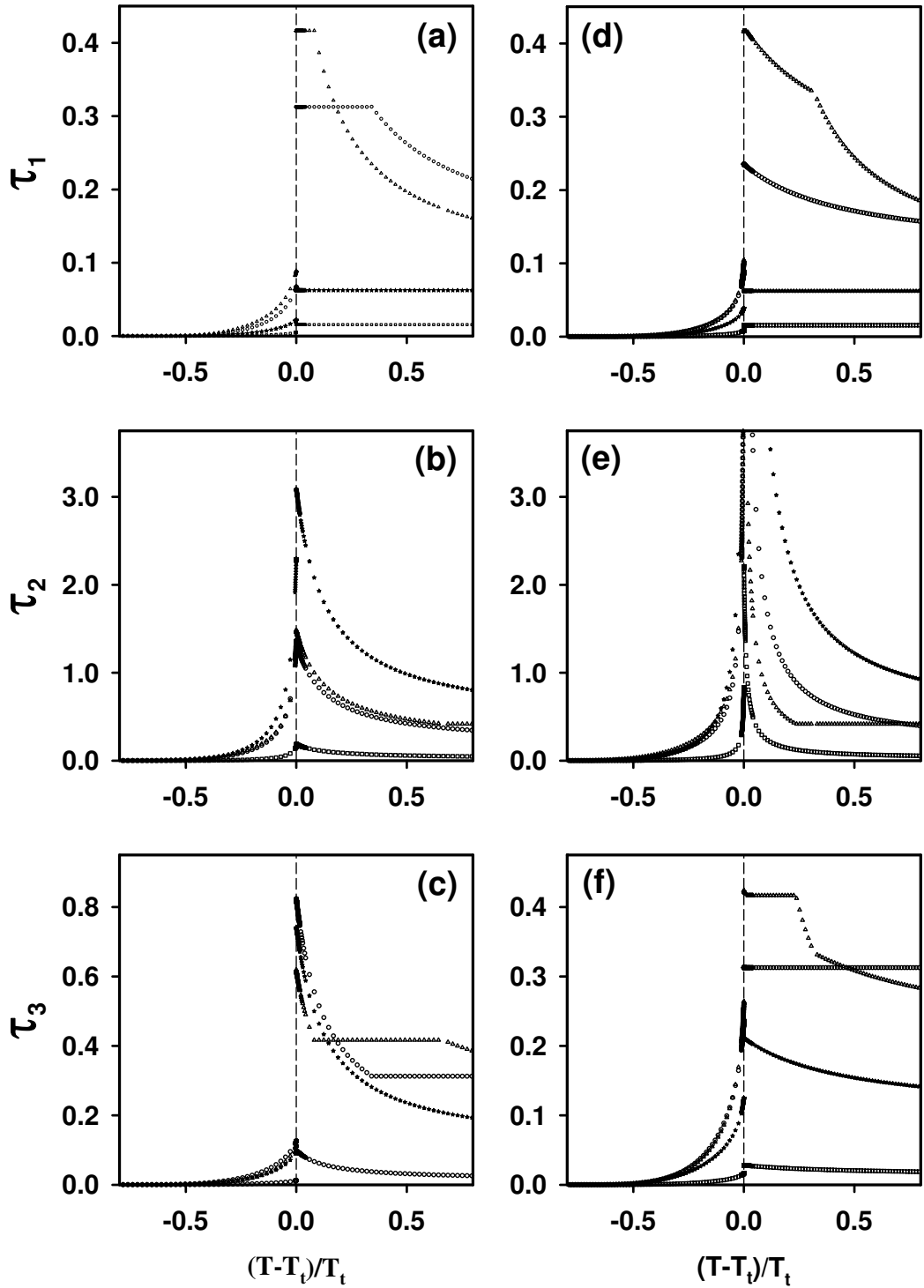
$$\tau_2^{-1} = -\frac{a_2}{3a_1} + \frac{2}{3a_1}\sqrt{a_2^2 - 3a_1a_3} \cos\left(\frac{\theta + 2\pi}{3}\right), \quad (3.21b)$$

$$\tau_3^{-1} = -\frac{a_2}{3a_1} + \frac{2}{3a_1}\sqrt{a_2^2 - 3a_1a_3} \cos\left(\frac{\theta + 4\pi}{3}\right). \quad (3.21c)$$

Burada  $\theta = \arccos\left(\frac{-2b^3+9abc-27a^2d}{2\sqrt{(b^2-3ac)^3}}\right)$ . Biz bu çalışmada, sadece reel köklerle yani discriminantın negatif olduğu çözümlerle ilgileneceğiz. Reel kökler, genellikle köşegen dışı fenomenolojik katsayıların köşegen elemanları ile karşılaştırıldığında ihmal edilebildiği zaman elde edilmektedir. Köşegen dışı elemanların köşegen elemanlara göre ihmal edilebilir olması kabulü tamamiyle tersinmez termodinamiğe dış bir teori ile tam olarak doğrulanabilir [121]. Bu üç karakteristik  $\tau_1$ ,  $\tau_2$  ve  $\tau_3$  zamanı, düzen parametreleri  $M$ ,  $Q$  ve  $R$ 'nin denge değerlerine ne kadar hızlı yaklaşacağını belirler. Bölüm 2'de bulunan denge faz diyagramındaki farklı bölgeleri gösteren değişik  $J/K$  değerleri ve değişik Onsager katsayıları için durulma zamanlarının sıcaklığa karşı davranışı şekil 3.1-3.3 de gösterilmiştir. Şekillerde, çember  $\gamma_M = 7.0, \gamma_Q = 9.0, \gamma_R = 4.0, \gamma = 0.04, \epsilon = 0.005, \eta = 0.006$ ; üçgen

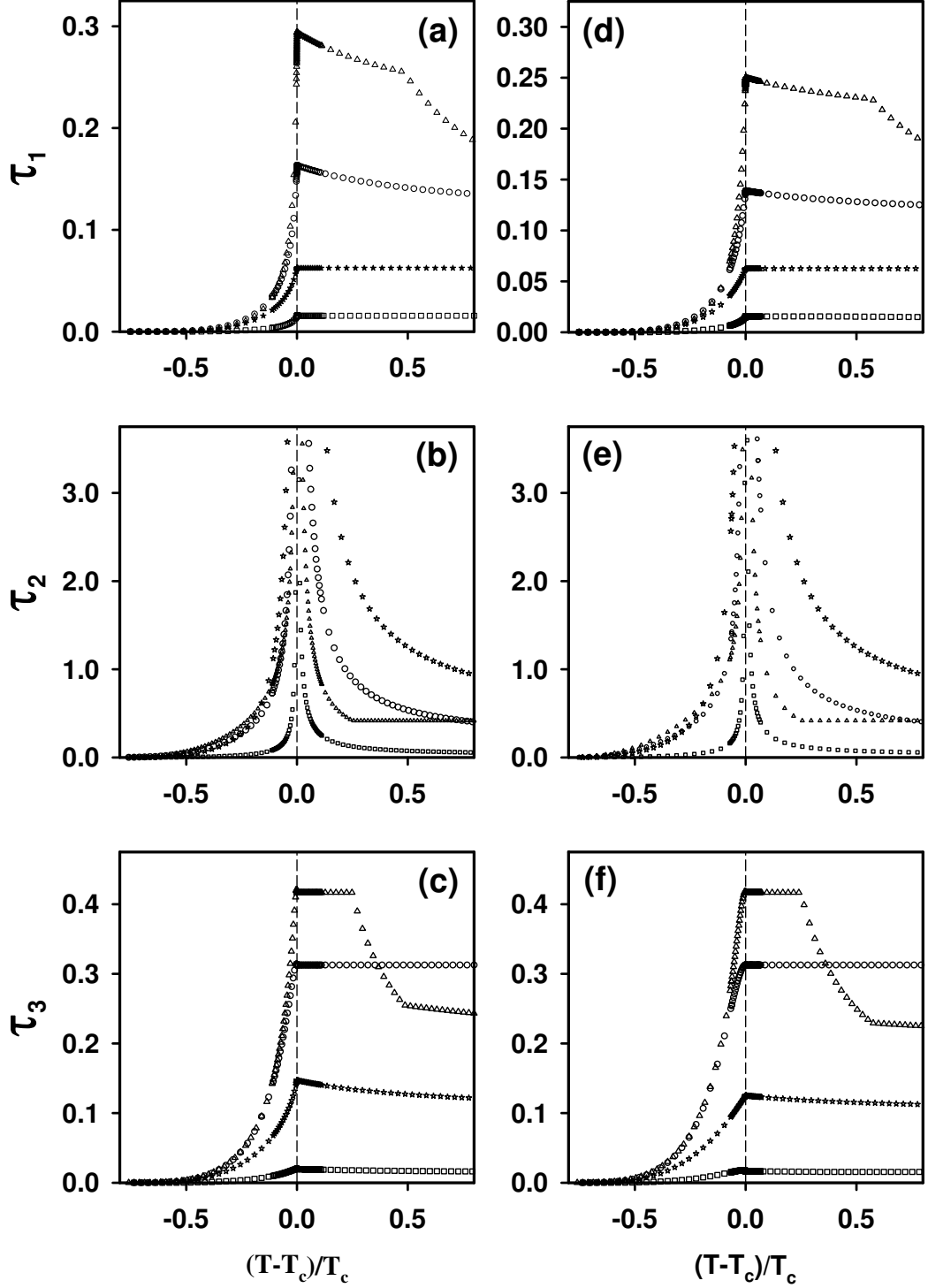


Şekil 3.1. Sistemin ardışık iki faz geçişi verdiği durum için durulma zamanlarının sıcaklıkla değişimi. Düşey kesikli çizgiler, sırasıyla dipolar ve quadropolar düzen parametreleri için faz geçiş sıcaklıklarını göstermektedir. (a)-(c)  $J/K = 0.25$  ve (d)-(f)  $J/K = 0.53$ .



Şekil 3.2. Sistemin birinci faz geçişi verdiği durum için durulma zamanlarının sıcaklıkla değişimi. Düşey kesikli çizgi birinci derece faz geçiş sıcaklıklarını göstermektedir. (a)-(c)  $J/K = 0.8$  ve (d)-(f)  $J/K = 1.5$ .





Şekil 3.3. Sistemin ikinci derece faz geçişi verdiği durum için durulma zamanlarının sıcaklıkla değişimi. Düşey kesikli çizgi ikinci derece faz geçiş sıcaklıklarını göstermektedir. (a)-(c)  $J/K = 2.5$  ve (d)-(f)  $J/K = 4.0$ .

$\gamma_M = 15.0, \gamma_Q = 5.0, \gamma_R = 3.0, \gamma = 0.001, \epsilon = 0.001, \eta = 0.005$ ; yıldız  $\gamma_M = 3.0, \gamma_Q = 10.0, \gamma_R = 20.0, \gamma = 0.08, \epsilon = 0.010, \eta = 0.0030$  ve kare  $\gamma_M = 50.0, \gamma_Q = 75.0, \gamma_R = 80.0, \gamma = 0.01, \epsilon = 0.001, \eta = 0.002$  şeklinde alınan Onsager katsayıları için hesaplamayı göstermektedir. Ayrıca, şekillerdeki düşey kesikli çizgi faz geçiş sıcaklıklarını göstermektedir. Şekil 3.1 sistemin ardışık iki faz geçişi verdiği duruma karşı gelmektedir. Bunlardan, şekil 3.1(a)-(c)'de sistem ardışık iki tane ikinci derece faz geçişi vermektedir çünkü ikinci derece faz geçişinde kritik yavaş durulmanın olması için durulma zamanlarından en az birisi ıraksamalıydı. Böylece  $\tau_2$ 'nin iki farklı noktada ıraksaması sistemde ardışık iki tane ikinci derece faz geçişi olduğunu göstermektedir. Diğer durulma zamanları olan  $\tau_1$  ve  $\tau_3$  ise bu ikinci derece faz geçişinde tepe (cusp) yaparak sınırlı kalmaktadır. Burada gözlenen  $\tau_2$ 'nin ıraksadığı bu noktalar, Bölüm 2'de bulunan önce dipolar  $T_{CM}$  ve sonra da quadrupolar  $T_{CQ}$  düzen parametrelerinin ardışık iki faz geçişi verdiği sıcaklıklarla uyumludur. Benzer olarak şekil 3.1(d)-(f)'de de yine ardışık iki faz geçişi gözlenmektedir fakat bu kez ilk faz geçişinde durulma zamanları atlama süreksizliği göstermektedir. Dolayısıyla bu süreksizlik sistemde birinci derece faz geçişi olduğunu belirtir. Bu da, Bölüm 2'de bulunan sırasıyla dipol ve quadrupol momentleri için bulunan birinci derece  $T_{LM}$  ve ikinci derece  $T_{CQ}$  sıcaklıkları ile uyumludur.

Şekil 3.2'de sistemin birinci derece faz geçişi verdiği  $J/K = 0.8$  ve  $J/K = 1.5$  şeklindeki iki farklı etkileşme sabiti değeri için durulma zamanlarının sıcaklıkla değişimini göstermektedir. İlk etkileşme sabiti  $J/K = 0.8$  için durulma zamanları şekil 3.2(a)-(c)'de ikinci etkileşme sabiti için durulma zamanları da şekil 3.2(d)-(f)'de gösterilmiştir. Bu şekillerde, birinci derece faz geçiş sıcaklığındaki atlama süreksizliği çok daha açık olarak görülmektedir. Ayrıca, şekil 3.2(e)'deki  $\tau_2$  durulma zamanının ıraksamadığını sadece düşey eksen değerinin küçük olması sebebiyle bu şekilde gözüktüğünü belirtelim. Şekil 3.2'deki duruma benzer olarak şekil 3.3'de de ikinci derece faz geçişi veren iki farklı etkileşme sabiti için durulma zamanları çizilmiştir. Bunlardan ilki olan 3.3(a)-(c)'de  $J/K = 2.5$  ve ikincisi olan 3.3(d)-(f)'de ise  $J/K = 4.0$  olarak alınmıştır. Bu şekillerden görüldüğü üzere sistemin birinci derece faz geçişi verdiği değerlerde durulma zamanları sınırlı kalmakta ve faz geçiş sıcaklığında atlama süreksizliği göstermektedir. Buna karşılık sistemin ikinci derece

faz geçişi verdiđi durumlarda ise iki durulma zamanı yani  $\tau_1$  ve  $\tau_3$  bir cusp yaparak sınırlı kalmakta iken diđer durulma zamanı olan  $\tau_2$  ise sonsuza ıraksamaktadır.

Bölüm 1'de bahsedildiđi gibi, kritik olaylar statik ve dinamik olmak üzere iki kısımda sınıflandırılabilir. Statik olaylarda manyetizasyon, alınganlık, öz ısı, spin konfigürasyonlarının ihtimaliyet dağılımı gibi denge özelliklerini incelemektedir. Dinamik olaylarda gevşeme zamanları, ısı difüzyonu ve spin dalgası ilerlemesi gibi zamana bađlı olaylarla ilgilenilmektedir. Günümüzde statik olaylar, dinamik olaylardan çok daha iyi şekilde anlaşılmıştır [19]. Kritik olayların incelenmesinde temel problem, kritik sıcaklık yakınlarında verilen bir sistemin davranışdır. Bu davranış ise kritik sıcaklıkta sistemin sahip olduđu tekilliklerle ilgili deđişik fiziksel niceliklerle işaretlenmektedir. Geleneksel olarak verilen bir sistemin kritik davranışının nitel doğasını belirleyen bu tekillikler, kritik üstellerin karakterize ettiđi kuvvet kanunları ile ifade edilmektedir. Genel olarak, kritik üstellerin evrensel olduđuna yani Hamiltonyenin detaylarından bađımsız olduđuna inanılmaktadır [122]. Kritik nokta üstellerinin doğal tanımı,

$$\lambda = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln \tau(\varepsilon)}{\ln(\varepsilon)}, \quad \varepsilon = \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right| \quad (3.22)$$

şeklindedir. Burada  $\lambda$ ,  $\tau(\varepsilon)$  fonksiyonuna eşlik eden kritik üsteldir. Deneysel olarak, kritik üsteller sıklıkla verilerin log-log grafiđinin eğiminin ölçülmesiyle belirlenir. Bu özellikle kritik üsteli belirlemede kolay bir metot olmasına karşılık, kritik sıcaklığın önceden bilinmesini gerektirmektedir [7]. Bu yüzden, gevşeme zamanlarının kritik sıcaklık yakınlarındaki davranışlarının daha iyi anlaşılabilmesi için olayın kritik üstellerle incelenmesi gerekmektedir. Ayrıca, kritik üstellerin evrenselliđi de araştırılması gereken bir diđer önemli konudur.  $\tau(\varepsilon)$  fonksiyonuna karşı gelen (3.22) denkleminde tanımlanan kritik üstelin negatif deđeri kritik noktada sonsuza ıraksamaya, pozitif deđeri sıfıra yaklařmaya karşılık gelmektedir.  $\lambda$ 'nın sıfır olduđu ara durumun davranışı ise tek tip ile açıklanamaz.  $\lambda = 0$  durumunda, logaritmik ıraksama, atlama süreksizliđi veya kritik noktada gevşeme zamanının sınırlı kalarak türevlerinden biri ıraksadıđı "cusp" şeklindeki davranışlar olabilir. Diđer taraftan logaritmik ıraksamadan, "cusp"ı ayırt etmek için yeni bir kritik üstel olan  $\lambda'$  tanımlanır.  $\lambda'$  kritik üstelini bulmak için, önce  $\varepsilon \rightarrow 0$  iken  $\tau_i^{(j)}(\varepsilon) =$

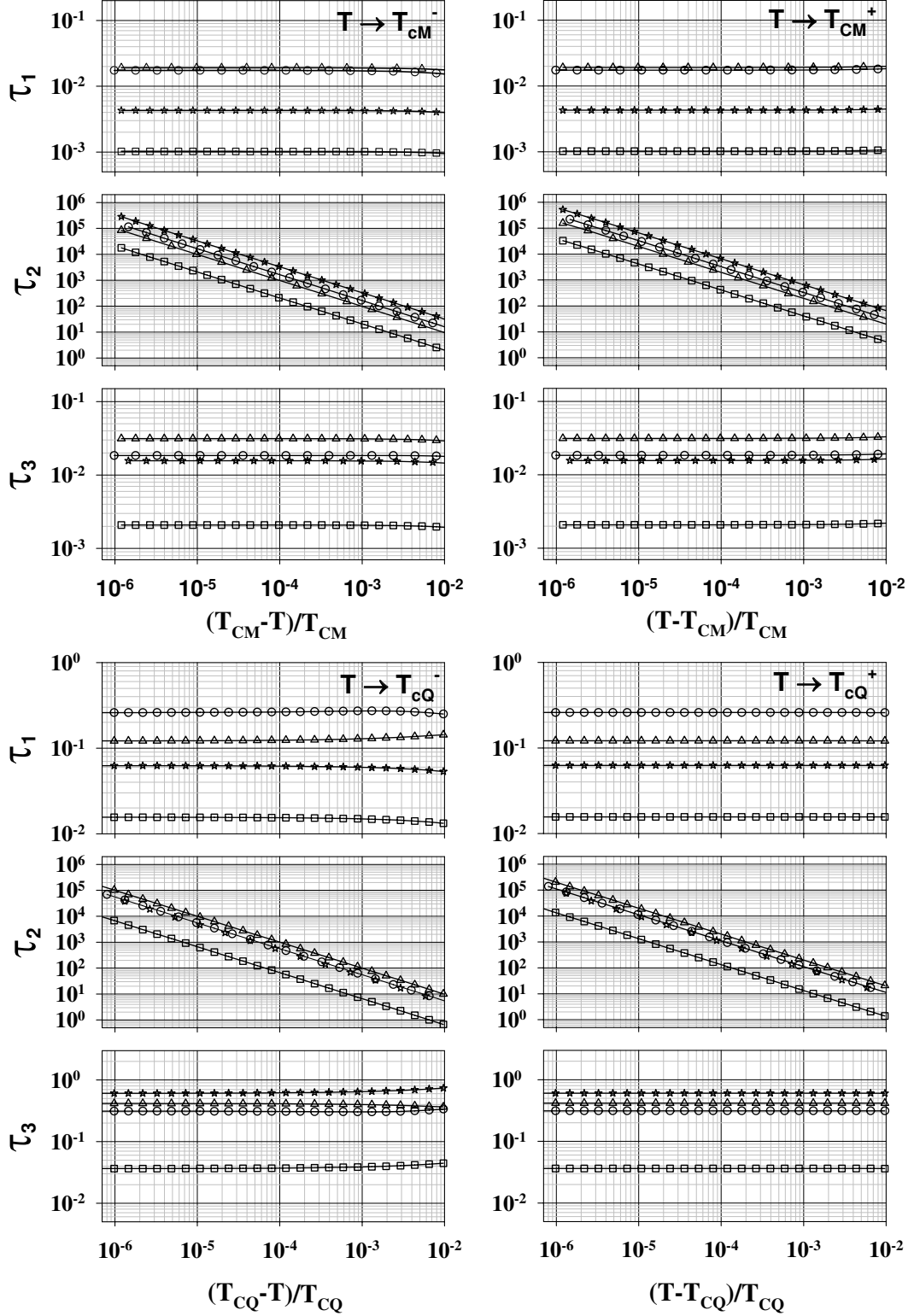
$\partial^j \tau_i / \partial (\varepsilon)^j$  türevlerinin iraksadığı en küçük tam sayı  $j$  bulunur ve

$$\lambda' = j + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln |\tau^{(j)}(\varepsilon)|}{\ln(\varepsilon)} \quad (3.23)$$

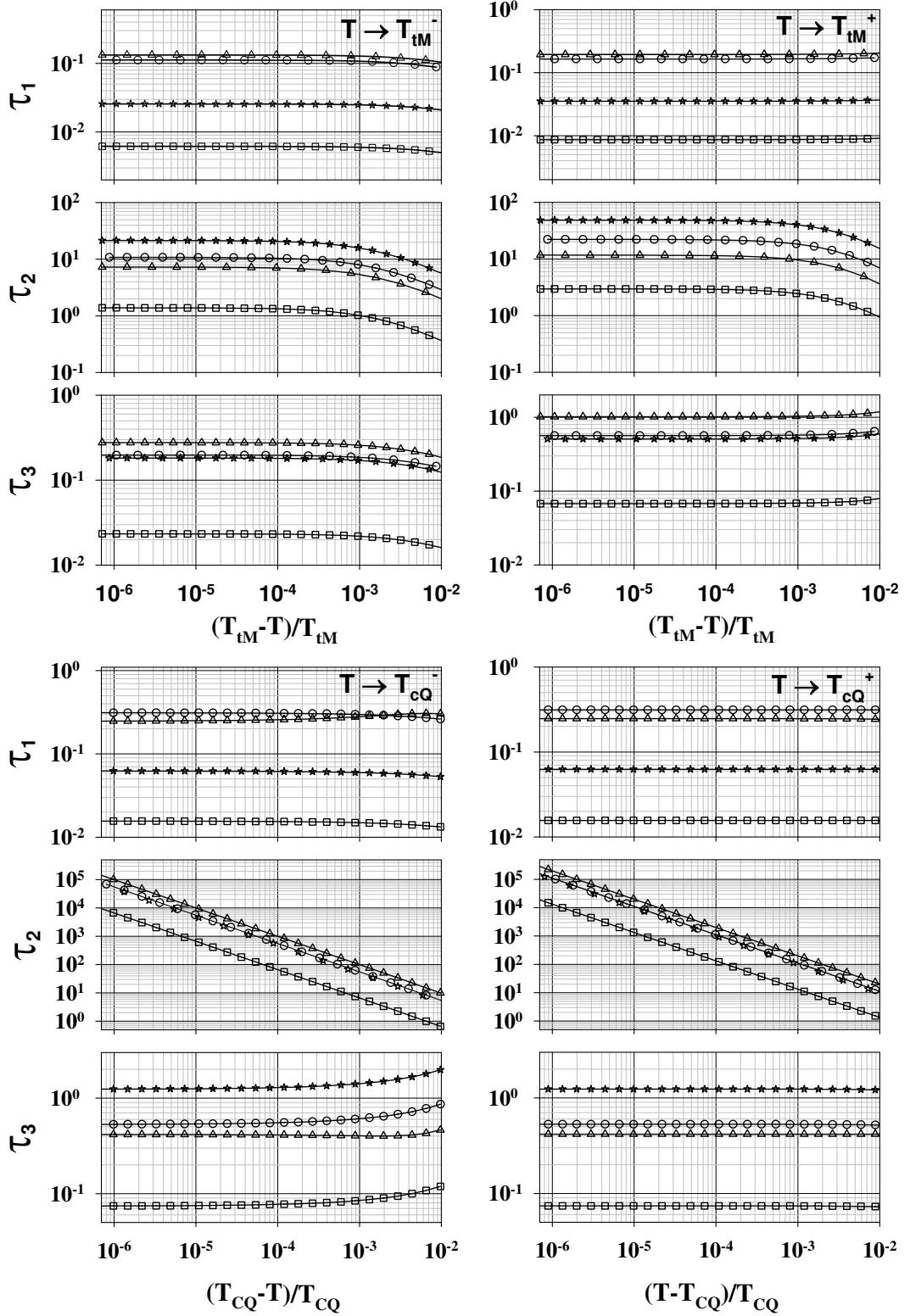
ifadesinden  $\lambda'$  kritik üsteli hesaplanır [7]. Şekil 3.1-3.3'deki durulma zamanlarının logaritmik grafikleri (3.22) tanımına uygun olması için indirgenmiş sıcaklığa göre şekil 3.4-3.7'de çizilmiştir. Şekil 3.4 ve 3.5 şekil 3.1'e karşılık gelirken, şekil 3.6, şekil 3.2'ye ve şekil 3.7 de şekil 3.3'e karşılık gelmektedir. Şekil 3.4,  $J/K = 0.25$  değerinde gözlenen iki ardışık ikinci derece faz geçişi için çizilmiştir. Şeklin üst tarafında dipolar faz geçişine sağ ve soldan yaklaşılan durumlar için logaritmik eğri görülmektedir. Sistemdeki quadrupolar momentinin verdiği ikinci dereceden faz geçişi için davranış da şekil 3.4'ün alt tarafında görülmektedir. Bu şekiller vasıtasıyla artık kritik sıcaklık yakınında durulma zamanlarının davranışını daha net olarak söyleyebiliriz. Şekillerden görüldüğü gibi,  $\tau_1$  ve  $\tau_3$  için grafiğin eğimi her zaman sıfırdır.  $\tau_2$  için ise grafiğin eğimi  $-1 \pm 0.02$  şeklindedir, yani kritik sıcaklıkta  $\tau_2$ , yaklaşık olarak  $-1$  kritik üsteli ile iraksamaktadır.

Şekil 3.5'de önce birinci sonra da ikinci derece faz geçişinin görüldüğü şekil 3.1'in  $J/K = 0.53$  değerine karşı gelmektedir. Bu şekilden dipol momentinin birinci derece faz geçişi yaptığı  $T_{LM}$  sıcaklığına yukarıdan ve aşağıdan yaklaşılırken bütün durulma zamanlarının eğimi yaklaşık olarak sıfır bulunurken, quadrupolar momentinin ikinci derece faz geçişi yaptığı  $T_{cQ}$  sıcaklığına yaklaşılırken ise yine  $\tau_1$  ve  $\tau_3$  için eğim yaklaşık olarak sıfır ve  $\tau_2$  için ise yaklaşık olarak  $-1$  olmaktadır. Dolayısıyla birinci derece faz geçişinde durulma zamanlarının iraksamadığı görülmektedir.

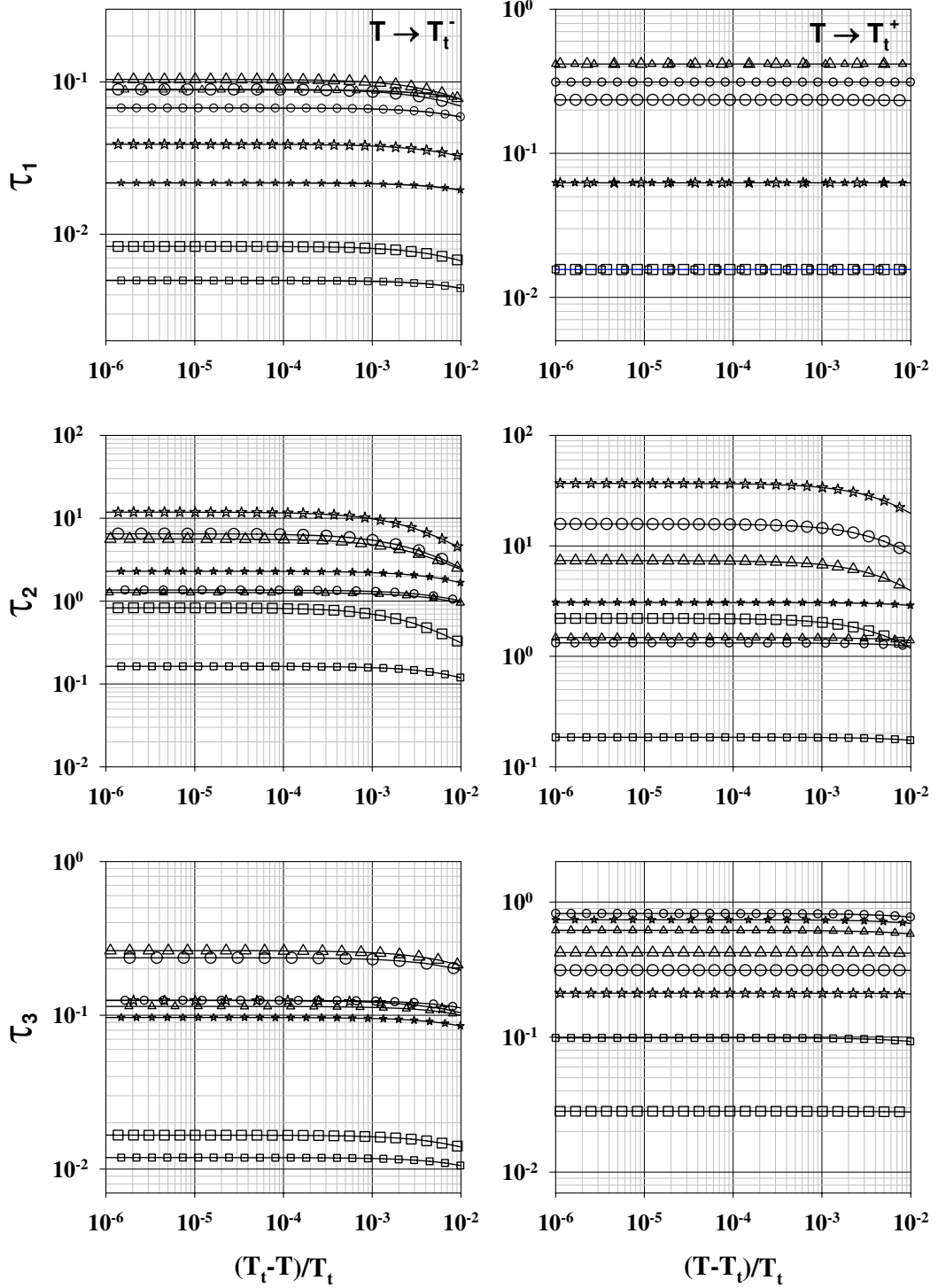
Yukarıdakilere benzer olarak şekil 3.2'deki durulma zamanlarının davranışı şekil 3.6'te indirgenmiş sıcaklığa göre logaritmik olarak gösterilmiştir. Bu şekilde, küçük semboller  $J/K = 0.8$  ve büyük semboller de  $J/K = 1.5$  değeri için yapılan hesaplamaları göstermektedir. Buradan da net bir şekilde birinci derece faz geçişinde kritik üstelin yaklaşık sıfır olduğunu görmekteyiz. Benzer olarak ikinci derece faz geçişlerinin görüldüğü şekil 3.3'e karşılık çizilen şekil 3.7 grafinden de kritik üstellerin yukarıdaki değerlerle uyumlu olduğu görülmektedir. Böylece faz diyagramının farklı bölgelerini gösteren bir çok farklı  $J/K$  değerine karşılık hep aynı kritik üstelleri bulduğumuz için bu kritik üstellerin evrensel olduğunu söyleyebiliriz. Böylece,



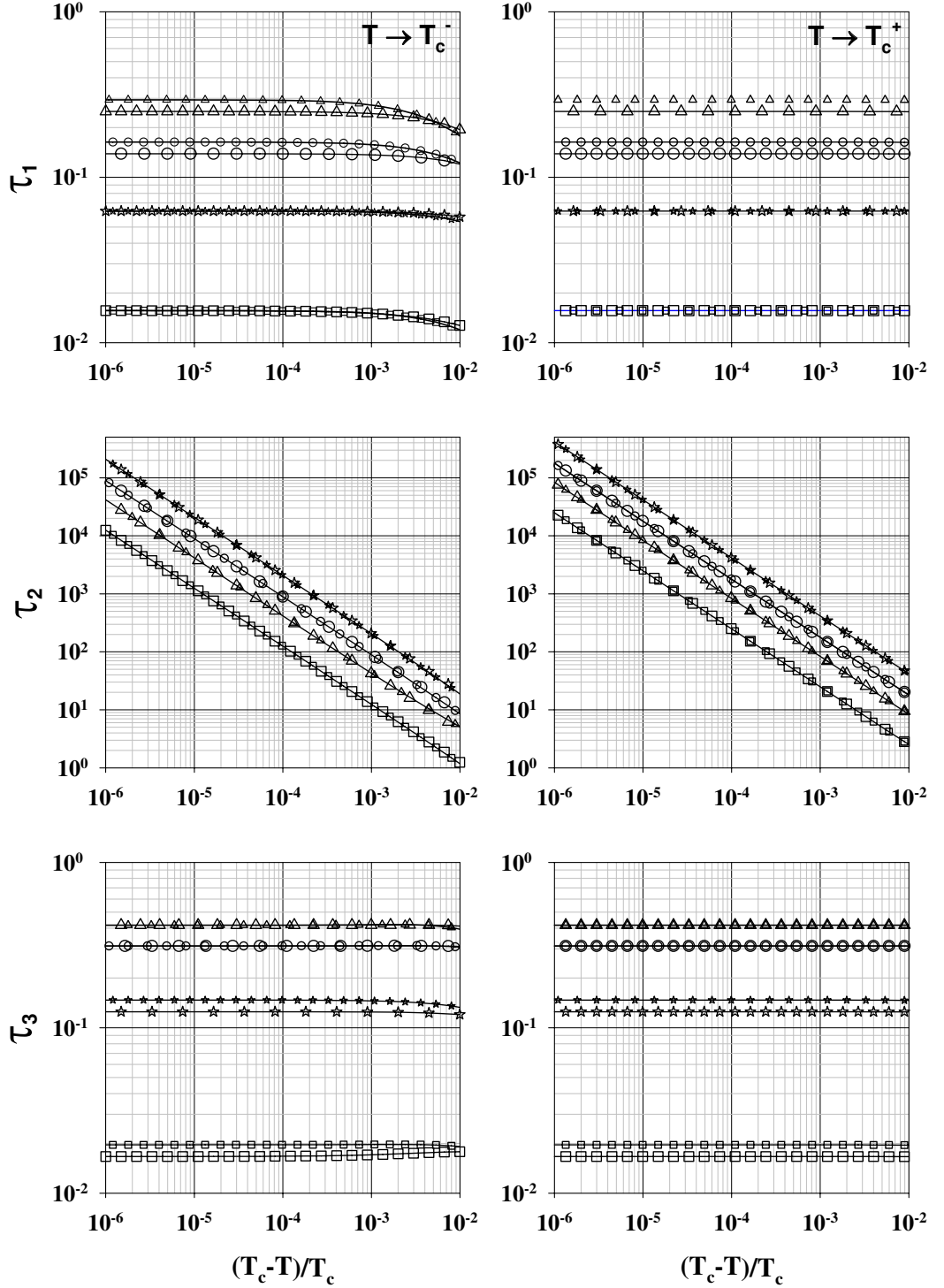
Şekil 3.4. Durulma zamanlarının indirgenmiş sıcaklıkla değişiminin logaritmik grafiği.  $T_{cM}$  ve  $T_{cQ}$  sırasıyla dipolar ve quadrupolar düzen parametresinin ikinci derece faz geçiş sıcaklığıdır. Sırasıyla faz geçiş sıcaklığına aşağıdan ve yukarıdan yaklaşılrken hesaplanan kritik üstel değerleri şeklin sol ve sağ tarafında verilmiştir.



Şekil 3.5. Durulma zamanlarının indirgenmiş sıcaklıkla değişiminin logaritmik grafiği.  $T_{tM}$  ve  $T_{cQ}$  sırasıyla dipolar düzen parametresi için birinci, quadropolar düzen parametresi için ikinci derece faz geçiş sıcaklığıdır. Şeklin sol ve sağ tarafları faz geçiş sıcaklığına yukarıdan ve aşağıdan yaklaşıldığını göstermektedir.



Şekil 3.6. Sistemin birinci derece faz geçişi verdiği durum için durulma zamanlarının indirgenmiş sıcaklıkla değişiminin logaritmik grafiği.  $T_t$  birinci derece faz geçiş sıcaklıklarını göstermektedir. Büyük semboller  $J/K = 1.5$  için, küçük semboller de  $J/K = 0.8$  için yapılan hesapları göstermektedir.



Şekil 3.7. Sistemin ikinci derece faz geçişi verdiği durum için durulma zamanlarının indirgenmiş sıcaklıkla değişiminin logaritmik grafiği.  $T_c$  ikinci derece faz geçiş sıcaklıklardır. Büyük semboller  $J/K = 4.0$  için, küçük semboller de  $J/K = 2.5$  için yapılan hesapları göstermektedir.



Bölüm 1’de belirtilen gevşeme oranlarını sıfıra götüren modun burada elde edilen  $\tau_2$  olduğunu ve bununla kritik sıcaklıkta düzen parametresi alınganlığı ıraksamasından sorumlu olduğunu söyleyebiliriz.

Buradakine benzer olarak spin-1/2 [118,121] ve spin-1 Ising [123–127] sistemleri için de durulma zamanları hesaplanmış ve bu sistemler için iki farklı durulma zamanı elde edilmiştir. Spin-1/2 ve spin-1 Ising sistemlerinde, bu iki durulma zamanlarından birinin ikinci derece faz geçiş sıcaklığında ıraksadığı bulunmuştur. Yine spin-1/2 Ising modelinin antiferromanyetik durumunun incelenmesinde Barry ve Harrington [119] üç durulma zamanı elde etmiştir ve bu üç durulma zamanlarından da yalnız birinin ( $\tau_2$ ) ikinci derece faz geçişinde ıraksadığını bulmuştur. Ayrıca, spin-1 Ising modeli için de birinci derece faz geçişinde durulma zamanlarının sınırlı kaldığı ve ikinci derece faz geçişinde kritik üstel hesabı yapıldığında durulma zamanlarından birinin kritik sıcaklıkta  $-1$  kritik üsteli ile ıraksadığı bulunmuştur [123,124]. Dolayısıyla bu kesimdeki hesaplamalarımız daha önce Ising modelleri ile yapılan hesaplamalarla uyum içindedir. Burada  $\lambda'$  kritik üstelini hesaplamamızın sebebini belirtelim. Şekillerden kritik sıcaklık civarındaki durulma zamanlarının davranışının net olarak görülmesinin yanı sıra matematiksel olarak  $\lambda'$  kritik üstelini hesaplamak ilginç bir problem olmasına karşılık fiziksel olarak sistemde durulma zamanlarından birinin ıraksayıp sistemde bir kritik yavaş durulma olup olmadığı olayı önemlidir. Burada ise ikinci derece faz geçişinde  $\tau_2$  durulma zamanının sistemde kritik yavaş durulma olayının görülmesine sebep olduğu bulunmuştur. Spin sistemlerinin kritik dinamiklerini hakkındaki bilgi manyetik sistemlerdeki ultrasonik soğurulma çalışmaları ile yapılabildiğinden bu kesimin devamında deneysel sonuçlarla karşılaştırma yapabilmek için spin-3/2 Ising sisteminde ses dalgaları incelenecektir.

### 3.4. Dalga Hareketi ve Ses Dalgaları

Dalga hareketleri kavramı modern fiziğin en önemli konularından birini teşkil etmektedir. Temel olarak dalgaları, mekanik, elektromanyetik ve madde dalgaları şeklinde üç ana başlıkta sınıflandırabiliriz. Mekanik dalgalar, ortamın kendisinde herhangi bir değişiklik olmaksızın ortamdaki bir parçacıktan diğerine enerji

aktarılmasıyla dağılımın ortam boyunca ilerlemesidir. Bu dağılımın ilerleme yönü ile parçacıkların denge konumları etrafındaki titreşim hareketlerine göre dalgalar enine, boyuna veya yüzey dalgaları olarak adlandırılmaktadır. Bu tür bir dalga hareketinde, ilerleme yönü ve ilerleme yönü boyunca bir ortama gereksinim vardır. Bu dalgalardan farklı olarak, elektromanyetik dalgalar ise boş uzayda ilerleyebilmektedir. Gözlenen ilerlemenin mekanik dalgalardakine benzer olarak tanımlanabilmesi maksadıyla ortam üzerindeki ısrar sonucu "esir" maddesinden bahsedilmiştir. Bununla birlikte elektromanyetik dalga denklemlerinde, dalganın davranışının herhangi bir materyal ortamının özelliğiyle ilgili olmadığı sonucu görülmektedir. Bu yüzden elektromanyetik dalgalar mekanik dalgalardan ayrılmaktadır. Madde dalgası ise Bohr hipotezine göre, hareket eden her bir parçacığa momentumuyla ters orantılı bir dalganın eşlik etmesi sonucu tanımlanmıştır. Madde dalgaları elektron, nötron gibi küçük kütleli parçacıkların hareketlerinin incelenmesinde fiziksel anlam kazanmaktadır [128].

Bu kesimin devamında incelenecek olan ses dalgaları, elastik dalgaların bir çeşidi olup, eylemsizlik ve elastiklik gibi iki özelliğe sahip ortam boyunca ilerleyen mekanik dalgalardandır. Bu özellikteki bir ortamda ses dalgaları ilerlerken, parçacıkların eş zamanlı olmayan yerdeğiştirmeleri sonucu, ortamda yoğunluk değişimi meydana gelir. Dolayısıyla ses dalgaları ortam boyunca bir yoğunluk dalgası olarak ilerler. Yoğunluk değişimi de basıncın değişimiyle veya daha genel olarak orijinal durumu geri getirmeye çalışan bir tepki kuvvetiyle bağlantılıdır.

Ses dalgalarının ortam içerisindeki; geçiş süresi, soğurulması, saçılması veya frekans içeriği (dispersiyon) gibi özelliklerine bakılarak malzeme analizi yapılabilmektedir. Düşük frekanslarda, örgü yapısı sesin ilerlemesinde bir etkiye sahip olmayacağından bu aralıkta kristal sürekli bir ortam gibi davranır. Bu yüzden malzemelerin incelenmesinde kullanılacak olan ses dalgasının frekansı artırılarak, ses dalgasının dalgaboyu bitişik atomlar veya iyonlar arasındaki mesafe ile karşılaştırılabilir boyutlara getirilmelidir. Böylece ancak yüksek frekanslı ses dalgaları ile kristalin kesikli yapısı araştırılabilir. Zamanla gelişen teknoloji sayesinde de yüksek frekanslı mekanik titreşimleri elde etme, algılama ve böylece malzemeleri daha hassas ve küçük boyutlarda incelenmek mümkün olmuştur. Yüksek frekanslı mekanik

titreşimler elde etmede bilinen en iyi teknikler; 1847'de Joule tarafından keşfedilen magnetik büzülüm olayı (magnetostrictive) ve 1880'de Curie kardeşlerin [129, 130] keşfettiği piezoelektirik olaydır. Magnetik büzülüm olayında, bir bobin içerisine ferromanyetik bir çubuk materyal yerleştirilir. Selonoid boyunca akmakta olan bir elektrik akımı ile materyali mıknatıslayan bir manyetik alan üretir ve sonuç olarak selonoidin içindeki çubuğun boyunun değişmesini sağlayan bir mekanik gerilim üretilir. Bu etki tersinirdir yani manyetik bir çubuğa uygulanan bir mekanik burulma sonucu çubuğun boyunun değişimi manyetizasyonun değişimine eşlik eder ve selonoidin içinde indüklenmiş bir elektrik voltajı oluşturur. Piezoelektrik olay ise doğada kaya kristalleri olarak bulunan quartz kristali ( $SiO_2$ , silikon dioxide) gibi bir piezoelektrik kristalin uygun düzlemde kesildikten sonra üzerine plakalar vasıtasıyla mekanik titreşimler uygulandığında elektrik titreşimlerinin meydana gelmesidir. Bundan bir yıl sonra Lipmann [131] bu olayın tersiniri olan, mekanik plakalar arasına yerleştirilen quartz kristaline elektrik potansiyeli uygulandığında mekanik titreşimler elde edilebileceğini bulmuştur. İlk bakışta, magnetik büzülüm olayı ile piezoelektrik etki benzer gözükmektedir. Bununla birlikte, magnetik büzülüm olayın piezoelektrik etkiden ayrıldığı noktalar şunlardır: (i) öncelikle mıknatıslanmanın sebep olduğu boydaki değişimin manyetik alanın yönüne bağlı olmaması, (ii) uygulanan manyetik alan kuvvetinin şiddeti ile çubuğun boyundaki görelî değişim arasındaki ilişkinin genelde lineer olmaması ve (iii) son olarak da magnetostriktive etkinin büyüklüğünün materyal üzerine uygulanan sıcaklık ve mekanik gerilim gibi önceki uygulamalara bağlı olması yönünden farklılık arz etmektedir. Magnetostriktive üreticiler (transducerlar) üretim basitliği ve hem yüksek mekanik hem de elektriksel sağlamlık avantajına sahip olmasına rağmen, magnetik büzülüm olayı sonucu elde edilen titreşimlerin frekansı kHz'ler basamağında iken, piezoelektrik olay sonucu elde edilen frekans MHz'ler basamağındadır. Bu tür yöntemlerle üretilen ve frekanslı 20kHz üzerindeki ses dalgaları özel olarak ultrases olarak adlandırılmaktadır. Ultrases, önceleri radar amaçlı olarak denizaltıların ve buzdağlarının algılanmasında kullanılmasından sonra tıpta ve malzeme analizinde de zararsız bir şekilde kullanılabileceği görülmüştür [132, 133].

Ultras ses dalgaları kullanılarak bir çok deney sisteminde tahribatsız bir şekilde malzeme analizi yapılabilmektedir. Örneğin, ultras sesin soğurulma ve dispersiyonundaki anormallikler bize katıların faz geçişleri yakınındaki düzen parametrelerinin dalgalanmalarının dinamikleri hakkında önemli bilgileri verir [134]. Ayrıca, ultras ses soğurulma deneyleri ile BEC (Bose Einstein Yoğuşması) gibi kompleks düzen parametrelili sistemlerin faz geçişlerinin incelenmesi [135] yapılabilir. Ultras ses dalgaları, örgüler arası mesafenin değişmesi sonucu manyetik etkileşmenin değişmesi olan manyetoelastiklik özelliklerinin incelenmesinde de kullanılmaktadır [136, 137]. Bunlara ilaveten, faz geçiş sıcaklıkları ses hızının süreksizlik gösterdiği yerlere bakılarak kolayca bulunabilir [138]. Mesela, ultras sesin dispersiyonu bakarak nematik-izotropik faz geçiş sıcaklıklarının deneysel olarak tayin edilebilmektedir [139]. Bu kesimin devamında spin-3/2 Ising sistemi üzerinde ses dalgalarının soğurulması ve dispersiyonu incelenecek ve teorik ve deneysel çalışmalarla karşılaştırmalar yapılacaktır.

### 3.5. Spin-3/2 Ising Sisteminde Ses Dalgaları

Bilineer, biquadratik ve oktipolar etkileşmeli spin-3/2 Ising sisteminde ilerleyen bir ses dalgasının hızını veren bağıntının elde edilmesi için önce sistemin serbest enerjisi Bragg-Williams modelinde moleküler alan yaklaşımı kullanılarak,

$$F = F_\ell(V, T) - NJM^2 - NKQ^2 - k_B T \ln W(M, Q, R) \quad (3.24)$$

şeklinde yazılabileceği Bölüm 2'den görülür. Burada  $V$ ,  $N$ ,  $k_B$  ve  $T$  sırasıyla kristal hacmi, spin sayısı, Boltzmann faktörü ve mutlak sıcaklıktır.  $F_\ell(V, T)$ , sistemin şekillenim durumundan bağımsız olan örgü serbest enerjisini,  $W(S, Q, R)$  ise şekillenim durumunun dipolar, quadrupolar ve oktipolar düzen parametreleri ile temsilini göstermektedir. (3.24) ifadesindeki son terim

$$\begin{aligned} \ln W(M, Q, R) = & -N \left[ \frac{5+6M+5Q+2R}{20} \ln\left(\frac{5+6M+5Q+2R}{20}\right) + \frac{5+2M-5Q-6R}{20} \right. \\ & \times \ln\left(\frac{5+2M-5Q-6R}{20}\right) + \frac{5-2M-5Q+6R}{20} \ln\left(\frac{5-2M-5Q+6R}{20}\right) \\ & \left. + \frac{5-6M+5Q-2R}{20} \ln\left(\frac{5-6M+5Q-2R}{20}\right) \right] \end{aligned} \quad (3.25)$$

şeklinde yazılabilir. Kesim 3.2'de olduğu gibi sıfır alt indisi denge değerlerini

göstermek için kullanılacaktır. Buna göre,  $a_0$ ,  $a$  örgü hacminin denge değeri (örgü sabiti diye de adlandırılır),  $M_0$ ,  $Q_0$  ve  $R_0$  sırasıyla dipolar, quadrupolar ve octupolar düzen parametresinin denge değerini göstermektedir ve (3.24) denklemi kullanılarak denge değerlerini,

$$\frac{\partial F}{\partial a} = 0 \quad (\text{sıfır basınç}) \quad \text{ve} \quad \frac{\partial F}{\partial M} = \frac{\partial F}{\partial Q} = \frac{\partial F}{\partial R} = 0 \quad (3.26)$$

bağıntılarından buluruz. Daha önce yapıldığına benzer olarak denge durumları yakınlarında Helmholtz serbest enerjisi termodinamik büyüklüklerin dalgalanma miktarına göre Taylor serisine açılıp, ikinci mertebe terimden sonraki terimler ihmal edilirse, serbest enerji

$$F(V(a), T, M, Q, R) = F_0(a_0, T, M_0, Q_0, R_0) + T\Delta S \quad (3.27)$$

şeklinde yazılır. Burada  $F_0(a_0, T, M_0, Q_0, R_0)$  serbest enerjinin denge değerini temsil etmektedir. Bu durumda  $\Delta S$  entropi üretim ifadesi örgü sabitini de içerecek şekilde

$$\begin{aligned} \Delta S = & \frac{1}{2} [g_{MM}(M - M_0)^2 + 2g_{MQ}(M - M_0)(Q - Q_0) + 2g_{MR}(M - M_0)(R - R_0) \\ & + g_{QQ}(Q - Q_0)^2 + 2g_{QR}(Q - Q_0)(R - R_0) + g_{RR}(R - R_0)^2 + g_{aa}(a - a_0)^2 \\ & + 2g_{Ma}(M - M_0)(a - a_0) + 2g_{Qa}(Q - Q_0)(a - a_0) + 2g_{Ra}(R - R_0) \\ & \times (a - a_0)] \end{aligned} \quad (3.28)$$

şeklinde genelleştirilmelidir. (3.28) eşitliğindeki  $g_{MM}$ ,  $g_{MQ}$ ,  $g_{MR}$ ,  $g_{QQ}$ ,  $g_{QR}$  ve  $g_{RR}$  entropi üretim katsayıları (3.12) ifadeleri ile verilmişti,  $g_{aa}$ ,  $g_{Ma}$ ,  $g_{Qa}$  ve  $g_{Ra}$  katsayıları da

$$g_{aa} = \frac{1}{T} \left( \frac{\partial^2 F}{\partial a^2} \right)_0 = -Nk_B \left[ \frac{1}{k_B T} \left( M_0^2 \frac{\partial^2 J}{\partial a^2} + Q_0^2 \frac{\partial^2 K}{\partial a^2} \right) - \frac{1}{Nk_B T} \frac{\partial^2 F_\ell}{\partial a^2} \right], \quad (3.29a)$$

$$g_{Ma} = \frac{1}{T} \left( \frac{\partial^2 F}{\partial M \partial a} \right)_0 = \frac{1}{T} \left( \frac{\partial^2 F}{\partial a \partial M} \right)_0 = -Nk_B \left[ \frac{2}{k_B T} M_0^2 \frac{\partial J}{\partial a} \right], \quad (3.29b)$$

$$g_{Qa} = \frac{1}{T} \left( \frac{\partial^2 F}{\partial Q \partial a} \right)_0 = \frac{1}{T} \left( \frac{\partial^2 F}{\partial a \partial Q} \right)_0 = -Nk_B \left[ \frac{2}{k_B T} Q_0^2 \frac{\partial K}{\partial a} \right], \quad (3.29c)$$

$$g_{Ra} = \frac{1}{T} \left( \frac{\partial^2 F}{\partial R \partial a} \right)_0 = \frac{1}{T} \left( \frac{\partial^2 F}{\partial a \partial R} \right)_0 = 0 \quad (3.29d)$$

şeklinde bulunur. Tersinmez termodinamiğin Onsager teorisine göre kuvvetler için

$$\begin{pmatrix} X_M \\ X_Q \\ X_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -g_{MM} & -g_{MQ} & -g_{MR} \\ -g_{MQ} & -g_{QQ} & -g_{QR} \\ -g_{MR} & -g_{QR} & -g_{RR} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M - M_0 \\ Q - Q_0 \\ R - R_0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -g_{Ma} \\ -g_{Qa} \\ -g_{Ra} \end{pmatrix} (a - a_0) \quad (3.30)$$

yazılabilir. Böylece, Onsager teorisine göre akımlar ile kuvvetler arasındaki lineer ilişki

$$\begin{pmatrix} J_M \\ J_Q \\ J_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma_M & -\gamma & \varepsilon \\ \gamma & \gamma_Q & -\eta \\ \varepsilon & \eta & \gamma_R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_M \\ X_Q \\ X_R \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

ile verilmekteydi. (3.31) denkleminde (3.30)'nin kullanılmasıyla,

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \frac{dM}{dt} \\ \frac{dQ}{dt} \\ \frac{dR}{dt} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \gamma_M & -\gamma & \varepsilon \\ \gamma & \gamma_Q & -\eta \\ \varepsilon & \eta & \gamma_R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -g_{MM} & -g_{MQ} & -g_{MR} \\ -g_{MQ} & -g_{QQ} & -g_{QR} \\ -g_{MR} & -g_{QR} & -g_{RR} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M - M_0 \\ Q - Q_0 \\ R - R_0 \end{pmatrix} \\ &+ \begin{pmatrix} \gamma_M & -\gamma & \varepsilon \\ \gamma & \gamma_Q & -\eta \\ \varepsilon & \eta & \gamma_R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -g_{Ma} \\ -g_{Qa} \\ -g_{Ra} \end{pmatrix} (a - a_0) \end{aligned} \quad (3.32)$$

elde edilir. Şayet sistem üzerinde örgü sabitini denge değerinden saptıracak bir dış etki bulunmuyorsa, yani  $a - a_0 = 0$  ise, (3.32) denklemi, durulma zamanlarını bulmada kullanılan (3.17) kinetik denkleminde dönüşecektir. Spin-3/2 Ising sistemi  $\omega$  frekanslı bir ses dalgasının etkisinde kaldığı düşünülürse, sistemdeki bütün değişkenler dolayısıyla düzen parametreleri denge değerlerine göre dalgalanma miktarı aynı olan  $\omega$  frekansı ile titreşecektir. Böylece (3.32) ile verilen kinetik denklemler için duran dalga çözümü kullanıldığında, sistemdeki dalgalanmaları

$$\begin{aligned} a - a_0 &= a_1 e^{i\omega t}, & M - M_0 &= M_1 e^{i\omega t}, \\ Q - Q_0 &= Q_1 e^{i\omega t}, & R - R_0 &= R_1 e^{i\omega t} \end{aligned} \quad (3.33)$$

şeklinde yazabiliriz. (3.33) eşitlikleri (3.32)'de kullanılırsa,  $M_1$ ,  $Q_1$  ve  $R_1$  genlikleri için şu ifadeler elde edilir:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} i\omega + \gamma_M g_{MM} - \gamma g_{MQ} + \varepsilon g_{MR} & \gamma_M g_{MQ} - \gamma g_{QQ} + \varepsilon g_{QR} & \gamma_M g_{MR} - \gamma g_{QR} + \varepsilon g_{RR} \\ \gamma g_{MM} + \gamma_Q g_{MQ} - \eta g_{MR} & i\omega + \gamma_M g_{MQ} + \gamma_Q g_{QQ} - \eta g_{QR} & \gamma g_{MR} + \gamma_Q g_{QR} - \eta g_{RR} \\ \varepsilon g_{MM} + \eta g_{MQ} + \gamma_R g_{MR} & \varepsilon g_{MQ} + \eta g_{QQ} + \gamma_R g_{QR} & i\omega + \varepsilon g_{MR} + \eta g_{QR} + \gamma_R g_{RR} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_1 \\ Q_1 \\ R_1 \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} -\gamma_M g_{Ma} + \gamma g_{Qa} - \varepsilon g_{Ra} \\ -\gamma g_{Ma} - \gamma_Q g_{Qa} + \eta g_{Ra} \\ -\varepsilon g_{Ma} - \eta g_{Qa} - \gamma_R g_{Ra} \end{pmatrix} (a_1). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Bu matris işleminin yapılmasıyla da,  $M_1$  için

$$\begin{aligned}
M_{1/a_1} = & \frac{\tau_1\tau_2\tau_3}{(1+i\omega\tau_1)(1+i\omega\tau_2)(1+i\omega\tau_3)} [i\omega \{ (\gamma g_{MQ} + \gamma_Q g_{QQ} + \varepsilon g_{MR} + \gamma_R g_{RR}) \\
& \times (-\gamma_M g_{Ma} + \gamma g_{Qa} - \varepsilon g_{Ra}) - (\gamma_M g_{MQ} - \gamma g_{QQ} + \varepsilon g_{QR}) (-\gamma g_{Ma} - \gamma_Q g_{Qa} \\
& + \eta g_{Ra}) - (\gamma_M g_{MR} - \gamma g_{QR} + \varepsilon g_{RR}) (-\varepsilon g_{Ma} - \eta g_{Qa} - \gamma_R g_{Ra}) \} + \{ -\omega^2 \\
& + (\gamma g_{MQ} + \gamma_Q g_{QQ} - \eta g_{QR}) (\varepsilon g_{MR} + \eta g_{QR} + \gamma_R g_{RR}) - (\gamma g_{MR} + \gamma_Q g_{QR} \\
& - \eta g_{RR}) (\varepsilon g_{MQ} + \eta g_{QQ} + \gamma_R g_{QR}) \} (-\gamma_M g_{Ma} + \gamma g_{Qa} - \varepsilon g_{Ra}) + \{ (\gamma_M g_{MR} \\
& - \gamma g_{QR} + \varepsilon g_{RR}) (\varepsilon g_{MQ} + \eta g_{QQ} + \gamma_R g_{QR}) - (\gamma_M g_{MQ} - \gamma g_{QQ} + \varepsilon g_{QR}) (\varepsilon \\
& \times g_{MR} + \eta g_{QR} + \gamma_R g_{RR}) \} (-\gamma g_{Ma} - \gamma_Q g_{Qa} + \eta g_{Ra}) + \{ (\gamma_M g_{MQ} - \gamma g_{QQ} \\
& + \varepsilon g_{QR}) (\gamma g_{MR} + \gamma_Q g_{QR} - \eta g_{RR}) - (\gamma_M g_{MR} - \gamma g_{QR} + \varepsilon g_{RR}) (\gamma g_{SQ} + \gamma_Q \\
& \times g_{QQ} - \eta g_{QR}) \} (-\varepsilon g_{Ma} - \eta g_{Qa} - \gamma_R g_{Ra})], \tag{3.35}
\end{aligned}$$

$Q_1$  için

$$\begin{aligned}
Q_{1/a_1} = & \frac{\tau_1\tau_2\tau_3}{(1+i\omega\tau_1)(1+i\omega\tau_2)(1+i\omega\tau_3)} [i\omega \{ (\gamma_M g_{MM} - \gamma g_{MQ} + 2\varepsilon g_{MR} + \eta g_{QR} \\
& + \gamma_R g_{RR}) (-\gamma g_{Ma} - \gamma_Q g_{Qa} + \eta g_{Ra}) - (\gamma g_{MM} + \gamma_Q g_{MQ} - \eta g_{MR}) (-\gamma_M g_{Ma} \\
& + \gamma g_{Qa} - \varepsilon g_{Ra}) - (\gamma g_{MR} + \gamma_Q g_{QR} - \eta g_{RR}) (-\varepsilon g_{Ma} - \eta g_{Qa} - \gamma_R g_{Ra}) \} \\
& + \{ -\omega^2 + (\gamma_M g_{MM} - \gamma g_{MQ} + \varepsilon g_{MR}) (\varepsilon g_{MR} + \eta g_{QR} + \gamma_R g_{RR}) - (\gamma_M g_{MR} \\
& - \gamma g_{QR} + \varepsilon g_{RR}) (\varepsilon g_{MM} + \eta g_{MQ} + \gamma_R g_{MR}) \} (-\gamma g_{Ma} - \gamma_Q g_{Qa} + \eta g_{Ra}) \\
& + \{ (\gamma_M g_{MR} - \gamma g_{QR} + \varepsilon g_{RR}) (\gamma g_{MM} + \gamma_Q g_{MQ} - \eta g_{MR}) - (\gamma_M g_{MM} - \gamma g_{MQ} \\
& + \varepsilon g_{MR}) (\gamma g_{MR} + \gamma_Q g_{QR} - \eta g_{RR}) \} (-\varepsilon g_{Ma} - \eta g_{Qa} - \gamma_R g_{Ra}) + \{ (\gamma g_{MR} \\
& + \gamma_Q g_{QR} - \eta g_{RR}) (\varepsilon g_{MM} + \eta g_{MQ} + \gamma_R g_{MR}) - (\gamma g_{MM} + \gamma_Q g_{MQ} - \eta g_{MR}) \\
& \times (\varepsilon g_{MR} + \eta g_{QR} + \gamma_R g_{RR}) \} (-\gamma_M g_{Ma} + \gamma g_{Qa} - \varepsilon g_{Ra})] \tag{3.36}
\end{aligned}$$

ve  $R_1$  için

$$\begin{aligned}
R_1/a_1 = & \frac{\tau_1\tau_2\tau_3}{(1+i\omega\tau_1)(1+i\omega\tau_2)(1+i\omega\tau_3)} [i\omega \{ (\gamma_M g_{MM} + \varepsilon g_{MR} + \gamma_Q g_{QQ} - \eta g_{QR}) \\
& \times (-\varepsilon g_{Ma} - \eta g_{Qa} - \gamma_R g_{Ra}) - (\varepsilon g_{MM} + \eta g_{MQ} + \gamma_R g_{MR})(-\gamma_M g_{Ma} + \gamma g_{Qa} \\
& - \varepsilon g_{Ra}) - (\varepsilon g_{MQ} + \eta g_{QQ} + \gamma_R g_{QR})(-\gamma g_{Ma} - \gamma_Q g_{Qa} + \eta g_{Ra}) \} + \{ -\omega^2 \\
& + (\gamma_M g_{MM} - \gamma g_{MQ} + \varepsilon g_{MR})(\gamma g_{MQ} + \gamma_Q g_{QQ} - \eta g_{QR}) - (\gamma_M g_{MQ} - \gamma g_{QQ} \\
& + \varepsilon g_{QR})(\gamma g_{MM} + \gamma_Q g_{MQ} - \eta g_{MR}) \} (-\varepsilon g_{Ma} - \eta g_{Qa} - \gamma_R g_{Ra}) + \{ (\gamma_M g_{MQ} \\
& - \gamma g_{QQ} + \varepsilon g_{QR})(\varepsilon g_{MM} + \eta g_{MQ} + \gamma_R g_{MR}) - (\gamma_M g_{MM} - \gamma g_{MQ} + \varepsilon g_{MR}) \\
& \times (\varepsilon g_{MQ} + \eta g_{QQ} + \gamma_R g_{QR}) \} (-\gamma g_{Ma} - \gamma_Q g_{Qa} + \eta g_{Ra}) + \{ (\gamma g_{MM} + \gamma_Q g_{MQ} \\
& - \eta g_{MR})(\varepsilon g_{MQ} + \eta g_{QQ} + \gamma_R g_{QR}) - (\gamma g_{MQ} + \gamma_Q g_{QQ} - \eta g_{QR})(\varepsilon g_{MM} + \eta \\
& \times g_{MQ} + \gamma_R g_{MR}) \} (-\gamma_M g_{Ma} + \gamma g_{Qa} - \varepsilon g_{Ra})] \quad (3.37)
\end{aligned}$$

ifadeleri bulunur. Burada  $\tau_1$ ,  $\tau_2$  ve  $\tau_3$  daha önce denklem (3.20) ile verilen ve sistemin durulmasını karakterize eden üç durulma zamanıdır.  $\tau_1$ ,  $\tau_2$  ve  $\tau_3$ 'den oluşan kompleks ifadeleri daha sade olarak,

$$\begin{aligned}
\frac{\tau_1\tau_2\tau_3}{(1+i\omega\tau_1)(1+i\omega\tau_2)(1+i\omega\tau_3)} = & \frac{\tau_1^3\tau_2\tau_3}{(\tau_1-\tau_2)(\tau_1-\tau_3)} \frac{1}{(1+i\omega\tau_1)} \\
& + \frac{\tau_1\tau_2^3\tau_3}{(\tau_2-\tau_1)(\tau_2-\tau_3)} \frac{1}{(1+i\omega\tau_2)} + \frac{\tau_1\tau_2\tau_3^3}{(\tau_3-\tau_1)(\tau_3-\tau_2)} \frac{1}{(1+i\omega\tau_3)} \quad (3.38)
\end{aligned}$$

şeklinde yazılabilir. Sistemdeki ses dalgası ilerlerken basınçtaki  $(p - p_0)$  tepki  $(V - V_0)$ 'a göre minimum iş diferansiyeli

$$(p - p_0) = \frac{\partial(T \Delta S)}{\partial(V - V_0)} = \frac{a_0}{3V_0} \frac{\partial(T \Delta S)}{\partial(a - a_0)} \quad (3.39)$$

ile elde edilir. Denklem (3.27) ve (3.28)'den

$$\begin{aligned}
(p - p_0) = & - \left[ \left( \frac{\partial^2 F_\ell}{\partial a^2} \right)_0 (a - a_0) - N M_0^2 \left( \frac{\partial^2 J}{\partial a^2} \right)_0 (a - a_0) - N Q_0^2 \right. \\
& \times \left( \frac{\partial^2 K}{\partial a^2} \right)_0 (a - a_0) + T g_{Ma} (M - M_0) + T g_{Qa} (Q - Q_0) \\
& \left. + T g_{Ra} (R - R_0) \right] \left[ \frac{a_0}{3V_0} \right] \quad (3.40)
\end{aligned}$$



ve

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_{ses} &= -\frac{a_0^2}{9V_0^2} \left[ \left(\frac{\partial^2 F_\ell}{\partial a^2}\right)_0 - N M_0^2 \left(\frac{\partial^2 J}{\partial a^2}\right)_0 - N Q_0^2 \left(\frac{\partial^2 K}{\partial a^2}\right)_0 \right. \\ &\quad \left. + T g_{Ma} \frac{M_1}{a_1} + T g_{Qa} \frac{Q_1}{a_1} + T g_{Ra} \frac{R_1}{a_1} \right] \end{aligned} \quad (3.41)$$

elde edilir.  $\rho = \frac{M}{V}$  yoğunluk ifadesi kullanılırsa,

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_{ses} &= \frac{a_0^2}{9\mathcal{M}} \left[ \left(\frac{\partial^2 F_\ell}{\partial a^2}\right)_0 - N M_0^2 \left(\frac{\partial^2 J}{\partial a^2}\right)_0 - N Q_0^2 \left(\frac{\partial^2 K}{\partial a^2}\right)_0 \right. \\ &\quad \left. + T g_{Ma} \frac{M_1}{a_1} + T g_{Qa} \frac{Q_1}{a_1} + T g_{Ra} \frac{R_1}{a_1} \right] \end{aligned} \quad (3.42)$$

ve sonuç olarak,

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_{ses} &= c_0^2 \left[ 1 - \frac{a_0^2}{9\mathcal{M}c_0^2} \left\{ N M_0^2 \left(\frac{\partial^2 J}{\partial a^2}\right)_0 + N Q_0^2 \left(\frac{\partial^2 K}{\partial a^2}\right)_0 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - T g_{Ma} \frac{M_1}{a_1} - T g_{Qa} \frac{Q_1}{a_1} - T g_{Ra} \frac{R_1}{a_1} \right\} \right] \end{aligned} \quad (3.43)$$

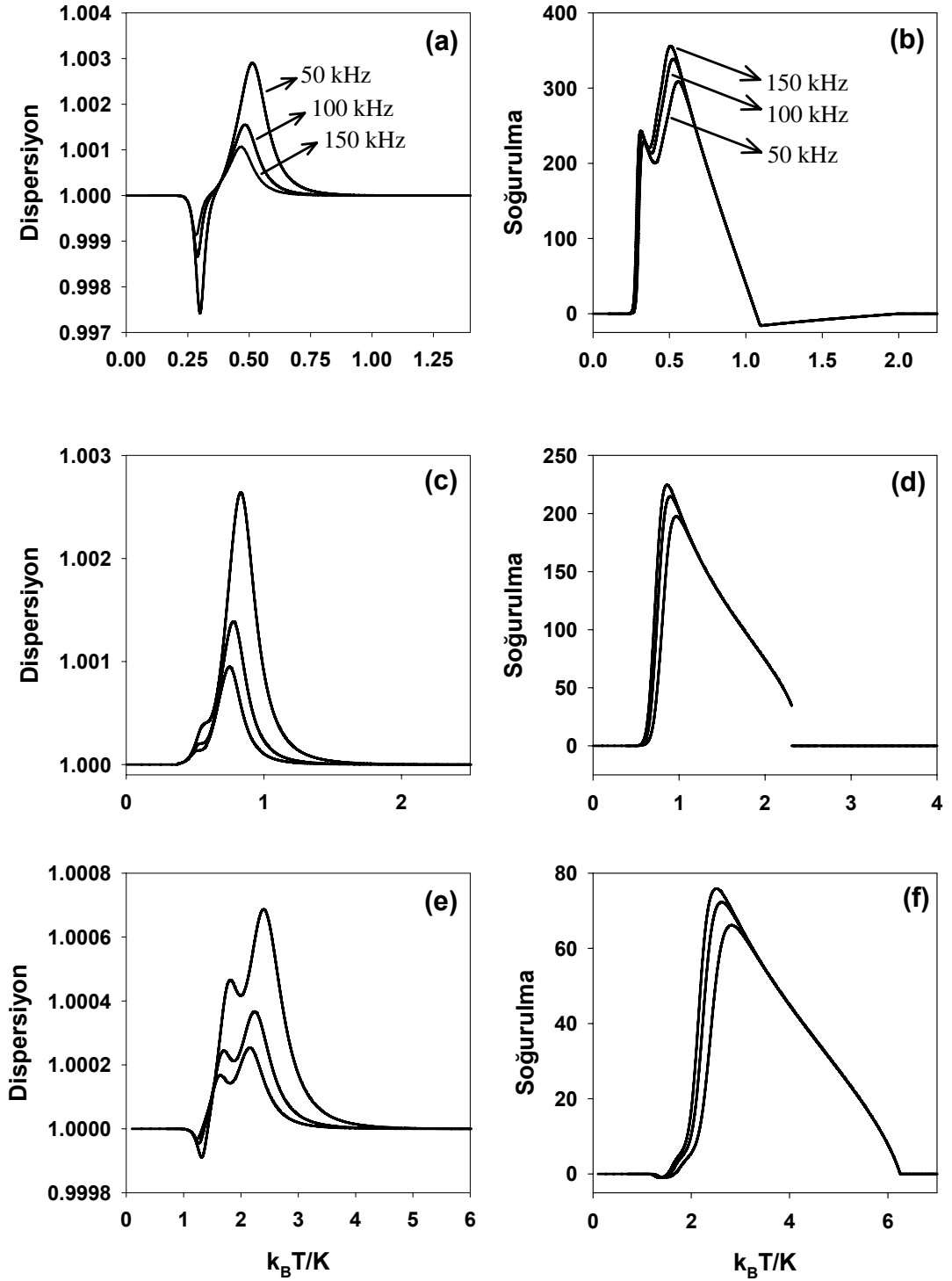
bulunur. Burada

$$c_0^2 = \frac{a_0^2}{9M} \left(\frac{\partial^2 F_\ell}{\partial a^2}\right)_0 \quad (3.44)$$

şeklinde tanımlanmıştır. J ve K sabitlerinin  $F_\ell$  örgü serbest enerjisi ile kıyaslandığında daha yavaş değişim göstermesi varsayımından dolayı bu eşitlikteki bütün terimlerin birinci terime göre küçük olduğu ortaya çıkar. Böylece binom açılımından yararlanılarak sistemdeki ses hızını veren bağıntı

$$\begin{aligned} c_{ses} = \left[ \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_{ses} \right]^{1/2} &\cong c_0 \left[ 1 + \frac{a_0^2}{18\mathcal{M}c_0^2} \left\{ N M_0^2 \left(\frac{\partial^2 J}{\partial a^2}\right)_0 + N Q_0^2 \left(\frac{\partial^2 K}{\partial a^2}\right)_0 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - T g_{Ma} \frac{M_1}{a_1} - T g_{Qa} \frac{Q_1}{a_1} - T g_{Ra} \frac{R_1}{a_1} \right\} \right] \end{aligned} \quad (3.45)$$

olarak bulunur. Burada  $c_0$  yüksek frekanslarda ve yüksek sıcaklıklarda ses hızıdır. Bu ifadenin reel kısmı yani  $Re(c_{ses})$  dispersiyonu, sanal kısmı yani  $Im(-\omega/c_{ses})$  de sesin soğurulmasına karşılık gelir. Fiziksel olarak ses dispersiyonu ortamın sesin frekansına bağlı olarak ilerleyen ses dalgasına verdiği tepkiyi göstermektedir. Ses soğurulması da bir ortamda ilerleyen ses dalgasının ortam içerisinde ilerlerken kaybettiği enerjiye karşılık gelir. Böylece bu son denklemi kullanarak sesin sıcaklıkla değişimini inceleyebiliriz. Şekil 3.8'de sırasıyla  $J/K = 0.25, 0.8$  ve  $2.5$  etkileşme



Şekil 3.8. Ses soğurulması ve dispersiyonunun sıcaklıkla değişimi. Artan frekans ile ses dispersiyonunun genliği azalmakta ve soğurulmanın ise genliği artmaktadır. Burada 50, 100 ve 150kHz'lik ses dalgaları kullanılmıştır. (a)-(b)  $J/K = 0.25$ , (c)-(d)  $J/K = 0.8$  ve (e)-(f)  $J/K = 2.5$

sabiti deęerleri ve  $\gamma_M = 50.0$ ,  $\gamma_Q = 10.0$ ,  $\gamma_R = 3.0$ ,  $\gamma = 0.0020$ ,  $\epsilon = 0.0020$  ve  $\eta = 0.0020$  fenomenolojik katsayıları için ses dispersiyonu ve soęurulmasının sıcaklıkla deęişimi görölmektedir. Şekil 3.8'de  $50kHz$ ,  $100kHz$  ve  $150kHz$ 'lik üç farklı frekansa karşılık sesin dispersiyonunun ve soęurulmasının sıcaklığa karşı davranışı görölmektedir. Frekans artarken, ses dispersiyonunun genlięi azalmakta ve soęurulma genlięi artmaktadır.

Ayrıca, artan frekans ile ses soęurulmasının maksimumu da daha düşük sıcaklıklara doğru kaymaktadır. Ses soęurulmasındaki bu davranış yani artan frekans ile soęurulma maksimumunun düşük sıcaklıklara doğru kayması ve bu maksimumun üzerindeki sıcaklıklarda faz geçişinin olduęu deneysel olarak da gözlenmiştir [140]. Yine,  $RbMnF_3$  tek kristali üzerinde [141] ve  $MnF_2$ 'nin Néel noktası yakınında yapılan [142] çalışmalarda ultrasesin soęurulma olayı için benzer davranışlar gözlenmiştir. Magnonların, BEC (Bose Einstein Yoęuşması) noktası yakınındaki ses soęurulması olayının incelenmesinde de keskin bir pik bulunmuştur [135]. Teorik olarak da tersinmez termodinamięin Onsager teorisi kullanılarak spin-1/2 Ising modeli için benzer analitik hesaplamalar yapılmıştır [143]. Daha sonra da spin-1 Ising modeli için ses soęurulma [144–146] ve dispersiyonunun analitik ifadeleri bulunarak [147] sıcaklıkla ilişkisi incelendięinde yine benzer davranışlar görölmüştür.

## 4. BÖLÜM

### MODELİN DİNAMİK DAVRANIŞININ YOL İHTİMALİYET METODU İLE İNCELENMESİ

#### 4.1. Dinamik Sistem

Dinamik sistem, geometrik bir uzaydaki bir noktanın zamana bağımlılığını belli bir kural ile tanımlayan matematiksel bir kavramdır. Bir sarkacın salınımını, bir borunun içindeki suyun akışını veya bir göldeki balıkların sayısını tanımlamada kullanılan matematiksel modeller dinamik sistemlere örnek olarak verilebilir. Dinamik sistemin gelişim kuralı, şimdiki durumdan gelecekte hangi durumların çıkacağını tanımlayan sabit bir kuraldır ve bu şimdiki durum ile gelecekteki durum arasındaki nedensel ilişkiyi verir. Dinamik sistemlerin zamanla gelişim kuralı, sadece gelecek bir andaki sistemin durumunu tam olarak verir ve sistemin gelecek bütün zamanlardaki durumunu belirleyebilmek için, ilerleyen zamana karşı gelen bir çok küçük adımlı iterasyon ilişkisi gerekir. Bu iterasyon yöntemi, sistemi çözmeye veya integre etmeye karşılık gelir. Sistem bir kere çözüldüğünde de verilen bir başlangıç noktası ile sistemin gelecekteki bütün noktaları belirlenebilir. Bu noktaların toplamı ise trajektörü veya yörünge olarak bilinir.

#### 4.2. Yol İhtimaliyet Metodu

Bu kesimde, sistemin dinamik davranışını belirleyen dinamik veya oran denklemleri setini çıkarmak için Kikuchi'nin [104–106] nokta dağılımlı yol ihtimaliyet metodu (PPM) kullanılacaktır. PPM, kümesel değişim metodunun [99–103] zamana bağlı durumlara doğal bir genelleştirmesidir ve denge istatistik mekaniğinde çok iyi bilinen başarılı yaklaşımlar için oran denklemlerinin sistematik bir çıkarımını vermektedir. PPM, düzenli sistemlerin örgü konumlarındaki yer değiştirme

difüzyonu [148, 149], katı elektrolitlerdeki difüzyon ve iyonik iletkenlik [150], cisim merkezli kübik (bcc) alaşımlarda düzenli-düzensiz geçişlerin kinetikleri [151, 152], ikili alaşımlar [153], ve spin-1/2 Ising modeli [154], spin-1 Ising sistemleri [39, 155–158], fonon ve atomik difüzyon sistemleri [159], üçlü sistemler [160–162] ve Si (001) bölgesel yüzeyi üzerindeki akım-indüklenmiş bölge (domain) dönüşüm olayının mikroskopik mekanizması [163] gibi homojen ve homojen olmayan sistemlerin dengesiz davranışları tanımlamak için başarıyla uygulanmıştır. PPM'in, deneyler ile birleşen atomik parametreleri değerlendirmede nasıl kullanılabileceğini görmek için çalışmaların yapıldığını da belirtelim [164]. Bundan başka, PPM yarıiletken hetero-yapıların elektronik özellikleri üzerinde arayüzey düzensizliğinin etkisini çalışmada da kullanılmıştır [165, 166]. Bunlara ilaveten, düzensiz-L1<sub>2</sub> geçişlerinin biçimsel (configurational) kinetiğini çalışmada PPM kullanılmıştır [167]. Düzensiz-B2 geçişleri için kinetik gelişim süreçleri, PPM kullanılarak elde edilmiştir [168]. Son zamanlarda da metot voltaj-kapılı iyon kanallarının basit dinamiğini çalışmada kullanılmıştır [169].

Bu metotta, durum değişkenlerinin zamanla değişimlerinin oranı

$$\frac{dX_i}{dt} = \sum_{i \neq j} (\mathbb{X}_{ji} - \mathbb{X}_{ij}) \quad (4.1)$$

olarak yazılır. Burada  $\mathbb{X}_{ij}$ ,  $i$  durumundan  $j$ 'ye geçen sistem için yol ihtimaliyet oranıdır. Zamanla sistemin dengeye ulaşmasını garanti eden ayrıntılı denge koşulu kullanılırsa

$$\mathbb{X}_{ij} = \mathbb{X}_{ji} \quad (4.2)$$

şeklinde olması gerektiği görülür. Buradaki  $\mathbb{X}_{ij}$ , üç faktörün çarpımı şeklindedir. Bunlar;  $k_{ij} = k_{ji}$  olmak üzere  $k_{ij}$  oran sabitleri,  $i$  durumundaki sistemin kesri olan  $X_i/Z$  ve üçüncü olarak zamandan-bağımsız durum olan denge durumunu sağlayan sıcaklığa-bağlı bir faktördür. Kikuchi [105] tarafından  $\mathbb{X}_{ij}$  için aşağıdaki iki seçim önerilmiştir:

$$\text{(A)} \quad \mathbb{X}_{ij} = k_{ij} Z^{-1} X_i \exp \left( -\frac{\beta}{2} \left[ \frac{\partial E}{\partial X_i} - \frac{\partial E}{\partial X_j} \right] \right), \quad (4.3a)$$

$$\text{(B)} \quad \mathbb{X}_{ij} = k_{ij} Z^{-1} X_i \exp \left( -\beta \frac{\partial E}{\partial X_i} \right). \quad (4.3b)$$

Kikuchi [105] tarafından **(A)** kabulü tarife I ve **(B)** kabulü de tarife II olarak adlandırılmıştır. Her iki tanım da denklem (4.2) ile ifade edilen gereksinimleri karşılamaktadır. Burada  $E$  sistemin iç enerji ve  $Z$  ise bölüşüm fonksiyonudur. Buradaki  $k_{ij}$  oran sabitleri sıcaklığın fonksiyonu olabilir. Bu sıcaklık bağımlılığı için en basit kabul  $k_0 e^{-u/k_B T}$  şeklinde bir Arrhenius faktörü kullanmaktır. Burada  $u$ ,  $T = 0$ 'da olması gerektiği gibi oranın sifira gitmesini sağlayan aktivasyon enerjisidir.

Dinamik denklemlerin çözümü olan akış diyagramları ve gevşeme (veya durulma) eğrilerinin genel davranışı her iki tarifenin kullanılmasında da ciddi bir değişim göstermez yani çizgiler tarife I veya II kullanıldığında az veya çok aynı desen içinde kalır [154,170]. Bu yüzden, biz burada dinamik denklem setini çıkarmak için sadece tarife II'yi kullanacağız. Şimdi yol ihtimaliyet metodunu kullanarak, spin-3/2 Ising modelinin dinamik davranışını çalışabiliriz. Böylece (4.1) ve (4.3b), (2.10) ve (2.15) ile birlikte kullanılarak durum değişkenlerinin zamanla değişimi

$$Z \frac{dX_1}{dt} = k_1 (X_2 e_1 - X_1 e_2) + k_2 (X_4 e_1 - X_1 e_4) + k_3 (X_3 e_1 - X_1 e_3), \quad (4.4a)$$

$$Z \frac{dX_2}{dt} = k_1 (X_1 e_2 - X_2 e_1) + k_2 (X_3 e_2 - X_2 e_3) + k_3 (X_4 e_2 - X_2 e_4), \quad (4.4b)$$

$$Z \frac{dX_3}{dt} = k_1 (X_4 e_3 - X_3 e_4) + k_2 (X_2 e_3 - X_3 e_2) + k_3 (X_1 e_3 - X_3 e_1), \quad (4.4c)$$

$$Z \frac{dX_4}{dt} = k_1 (X_3 e_4 - X_4 e_3) + k_2 (X_1 e_4 - X_4 e_1) + k_3 (X_2 e_4 - X_4 e_2) \quad (4.4d)$$

olarak elde edilir. Burada  $e_i$ , denklem (2.16) verilmişti ve  $k_i$  oran sabitleri de aşağıdaki gibi seçilmiştir. İlk oran sabiti  $k_{12} = k_{34} = k_1$  örgü boyunca parçacıkların ötelenmesine karşı gelir. İkinci oran sabiti  $k_{14} = k_{23} = k_2$  verilen bir konumdaki parçacığın dönmesine (yön değiştirmesine) eşlik eder ve üçüncü oran sabiti olan  $k_{13} = k_{24} = k_3$  de parçacıkların aynı anda hem ötelenme hem de dönmesini göstermektedir. Bu tanımlara göre, Tablo 4.1'de oran sabitlerinin durumu Bölüm 2'de verilen durum değişkenleri  $X_i$ 'ler cinsinden verilmiştir.

Düzen parametrelerinin zamanla değişimi olan dinamik veya oran denklem seti, denklem (2.4) kullanılmasıyla, durum değişkenleri cinsinden

$$\frac{dS}{dt} = \frac{3}{2} \frac{dX_1}{dt} + \frac{1}{2} \frac{dX_2}{dt} - \frac{1}{2} \frac{dX_3}{dt} - \frac{3}{2} \frac{dX_4}{dt}, \quad (4.5a)$$

Tablo 4.1. Oran sabitlerinin tanımları.

	$X_1$	$X_2$	$X_3$	$X_4$
$X_1$		$k_1$	$k_3$	$k_2$
$X_2$	$k_1$		$k_2$	$k_3$
$X_3$	$k_3$	$k_2$		$k_1$
$X_4$	$k_2$	$k_3$	$k_1$	

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{dX_1}{dt} - \frac{dX_2}{dt} - \frac{dX_3}{dt} + \frac{dX_4}{dt}, \quad (4.5b)$$

$$\frac{dR}{dt} = \frac{1}{2} \frac{dX_1}{dt} - \frac{3}{2} \frac{dX_2}{dt} + \frac{3}{2} \frac{dX_3}{dt} - \frac{1}{2} \frac{dX_4}{dt} \quad (4.5c)$$

olarak bulunur. (4.4), (4.5)'de yerine konulursa, düzen parametreleri için dinamik denklemler sırasıyla  $M$  için

$$\begin{aligned} Z \frac{dM}{dt} = & \left( k_1 - \frac{k_2 + k_3}{2} \right) \left[ \frac{1}{4} (e_1 - e_2 + e_3 - e_4) + \frac{M}{10} (e_1 - 3e_2 - 3e_3 + e_4) - \frac{Q}{4} \right. \\ & \times (e_1 + e_2 - e_3 - e_4) - \frac{R}{10} (3e_1 + e_2 + e_3 + 3e_4) \left. \right] + \frac{k_2 - k_3}{2} \left[ \frac{1}{4} (e_1 - e_2 \right. \\ & + e_3 - e_4) - \frac{M}{10} (7e_1 - 5e_2 - 5e_3 + 7e_4) + \frac{Q}{4} (5e_1 - 3e_2 + 3e_3 - 5e_4) \\ & - \frac{R}{10} (9e_1 - 5e_2 - 5e_3 + 9e_4) \left. \right] + \frac{k_2 + k_3}{2} \left[ \frac{1}{2} (3e_1 + e_2 - e_3 - 3e_4) - (e_1 \right. \\ & + e_2 + e_3 + e_4) M \left. \right], \quad (4.6) \end{aligned}$$

$Q$  için

$$\begin{aligned} Z \frac{dQ}{dt} = & (k_1 - k_3) \left[ \frac{1}{2} (e_1 - e_2 - e_3 + e_4) + \frac{M}{5} (e_1 - 3e_2 + 3e_3 - e_4) - \frac{Q}{2} (e_1 + e_2 \right. \\ & + e_3 + e_4) + \frac{R}{5} (-3e_1 - e_2 + e_3 + 3e_4) \left. \right] + k_3 [(e_1 - e_2 - e_3 + e_4) - (e_1 + e_2 \\ & + e_3 + e_4) Q], \quad (4.7) \end{aligned}$$

ve  $R$  için

$$\begin{aligned} Z \frac{dR}{dt} = & \left( k_1 - \frac{k_2 + k_3}{2} \right) \left[ \frac{1}{2} (e_1 - e_2 + e_3 - e_4) + \frac{M}{5} (e_1 - 3e_2 - 3e_3 + e_4) - \frac{Q}{2} \right. \\ & \times (e_1 + e_2 - e_3 - e_4) - \frac{R}{5} (3e_1 + e_2 + e_3 + 3e_4) \left. \right] + \frac{k_2 - k_3}{2} \left[ \frac{1}{2} (e_1 - e_2 \right. \\ & + e_3 - e_4) - \frac{M}{5} (2e_1 + 2e_4) + \frac{Q}{2} (2e_2 - 2e_3) + \frac{R}{5} (e_1 - 5e_2 - 5e_3 + e_4) \left. \right] \\ & + \frac{k_2 + k_3}{2} \left[ \frac{1}{2} (e_1 - 3e_2 + 3e_3 - e_4) - (e_1 + e_2 + e_3 + e_4) R \right] \quad (4.8) \end{aligned}$$

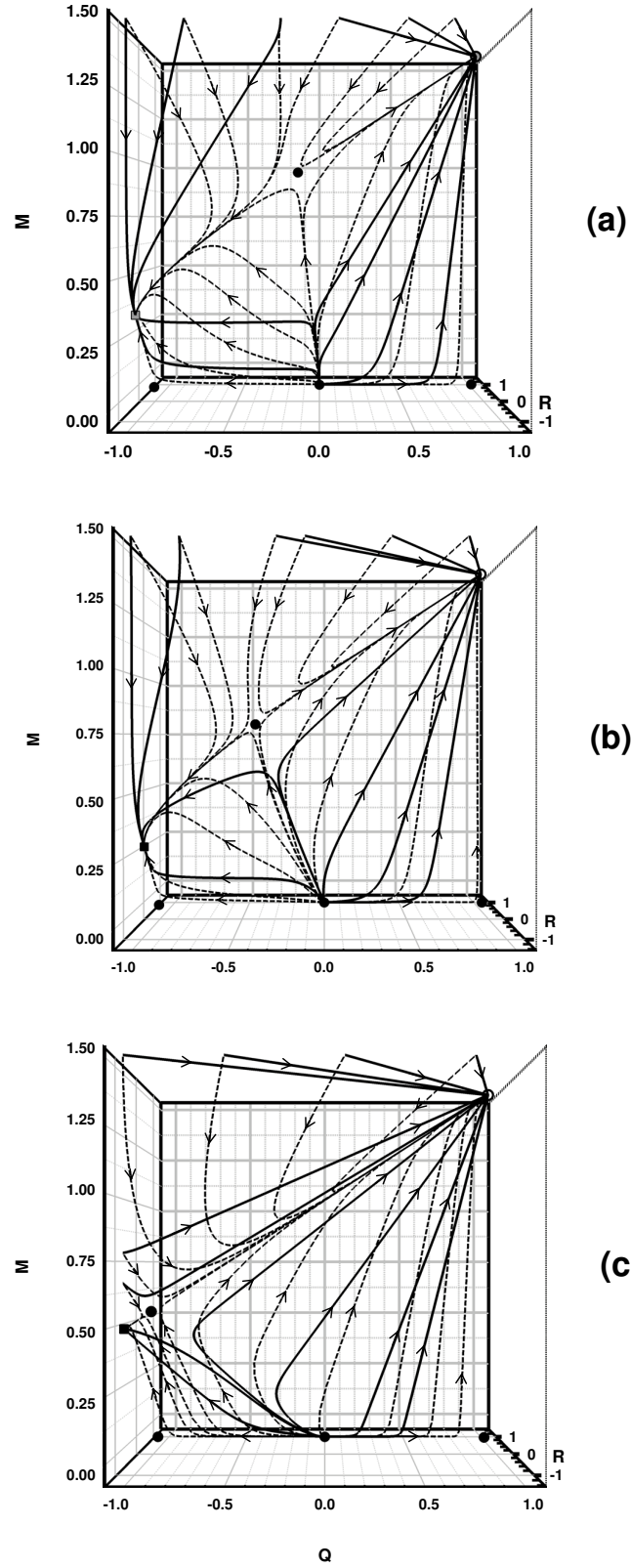
şeklinde elde edilir.

Bu dinamik denklem setinin çözümü iki farklı metotla yapıldı. Bunlardan ilki dinamik denklemlerin çözümlerini akış diyagramı şeklinde vermektir [171]. Akış diyagramı, üç boyutlu faz uzayında  $M$ ,  $Q$  ve  $R$ 'nin sınıra çok yakın bir başlangıç değeri ile başlanarak elde edilen dinamik denklem setinin çözümünü gösterir.  $M$ ,  $Q$  ve  $R$ 'nin değerleri, zaman verilen küçük adımlarla, yani  $\Delta t$ , ilerlerken hesaplanır ve akış hareketlerini gösteren noktaların bileşimi "çözüm eğrilerini" oluşturur. Çözüm eğrileri, Bölüm 2'de elde edilen sistemin sırasıyla ardışık ikinci derece faz geçişi, birinci derece faz geçişi ve tekrar ikinci derece faz geçişi gösterdiği  $J/K$  değerleri ile sabit  $k_i$  ve  $k_B T/K$  için mümkün bir çok farklı başlangıç değerleri göz önüne alınarak yapıldı ve bulunan sonuçlar şekil 4.1'de gösterildi.

Şekil 4.1'de, içi boş yuvarlak (çember) sistemin içinde durulduğu ve en düşük serbest enerjili çözüm olan kararlı denge durumunu, içi dolu kare yine sistemin içinde durulduğu fakat en düşük serbest enerjili olmayan yarı kararlı durumu ve içi dolu yuvarlak (daire) de akış eğrilerinin bu noktada durulacakmış gibi yaptıktan sonra keskin veya yumuşak dönüşler yaparak kaçtığı kararsız çözümleri göstermektedir. Burada parçacığın aynı anda ötelenme ve dönmesi şeklindeki çift sürecin olmadığını kabul edilmiştir ve böylece hesaplamalarda  $k_3 = k_1 k_2$  şeklinde alınarak iki farklı oran sabiti için hesaplama yapılmıştır. Şekil 4.1'de,  $k_1 = k_2 = 1$  durumu için yapılan ilk hesaplama sürekli eğri ile ve  $k_1 = 1$  ve  $k_2 = 10$  durumu için yapılan ikinci hesaplama da kesikli eğriler ile gösterilmiştir. İkinci hesaplamada  $k_2 > k_1$  seçilmesinin sebebi, bir çok sistemde dönme olayının ötelemeden daha kısa zamanda olmasıdır.

Şekil 4.1(a)'da  $J/K = 0.25$  ve  $k_B T/K = 0.1$  değerleri için akış diyagramı gösterilmiştir. Şekil 4.1(a)'da sistem iki farklı değerde durulmaktadır. Bunlardan ilki  $M = 1.5$ ,  $Q = 1.0$ ,  $R = 0.5$  değeridir ve en düşük serbest enerjili durum olduğundan çember ile gösterilmiştir. Sistemin durulduğu diğer değer de  $M = 0.3552$ ,  $Q = -1.0$ ,  $R = -1.0656$ 'dır ve bu durum da içi dolu kare ile gösterilmiştir. Ayrıca, akış eğrilerinin yakınından uzaklaşarak başladığı  $M = 0.0$ ,  $Q = 0.0$ ,  $R = 0.0$  değeri ile akış eğrilerinin kaçtığı noktalar olan  $M = 0.0$ ,  $Q = \pm 1.0$ ,  $R = 0.0$  ve  $M = 0.9335$ ,  $Q = -0.1226$ ,  $R = -0.6069$  değerler de kararsız çözümlere karşı gelmektedir ve daire





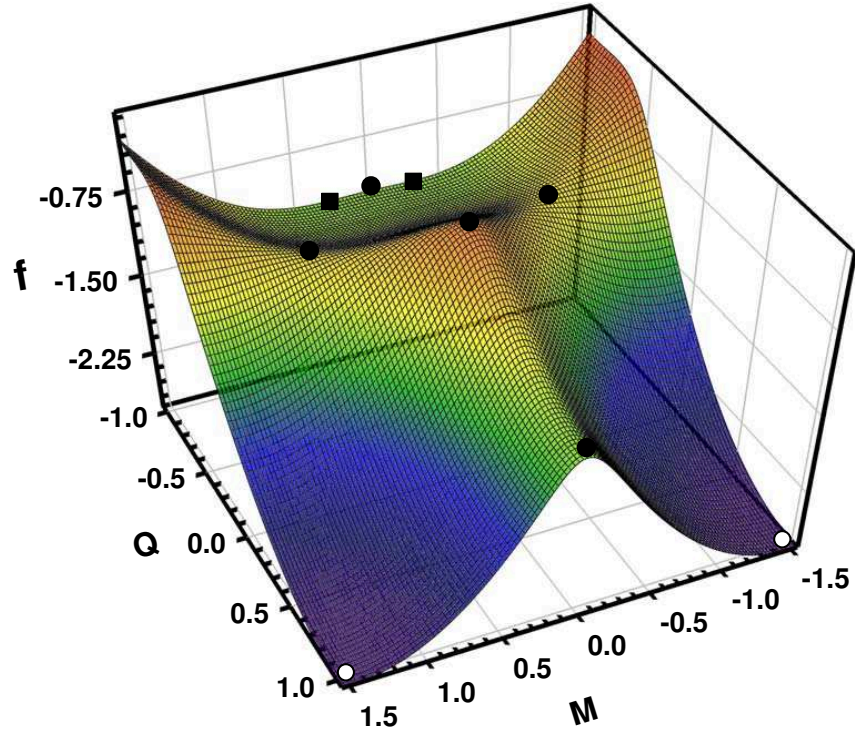
Şekil 4.1.  $J/K$ 'nın değişik değerleri ve iki farklı oran sabiti seti için üç boyutlu faz uzayında sistemin akış diyagramları: (sürekli)  $k_1 = k_2 = 1$  ve kesikli  $k_1 = 1$  ve  $k_2 = 10$ . Çember karalı, içi dolu kare yarı kararlı ve içi dolu daire kararsız çözümleri göstermektedir. (a)  $J/K = 0.25$  ve  $k_B T/K = 0.1$  (b)  $J/K = 0.80$  ve  $k_B T/K = 0.35$  (c)  $J/K = 2.5$  ve  $k_B T/K = 0.25$ .

ile gösterilmiştir. Böylece, şekil 4.1(a) verilen dinamik denklemin çözümlerinden yararlanılarak şekil 2.1'de elde edilen denge durumu çözümlerinin sınıflandırması kolayca yapılabilir. Benzer olarak, alt indis 1 kararlı, 2 yarı kararlı ve 3 kararsız çözümleri göstermek üzere, şekil 4.1(b)'de  $M_1 = 1.5$ ,  $Q_1 = 1.0$ ,  $R_1 = 0.5$ ;  $M_2 = 0.2907$ ,  $Q_2 = -0.9999$ ,  $R_2 = -0.8719$ ;  $M_3 = 0.0$ ,  $Q_3 = 0.0$ ,  $R_3 = 0.0$ ;  $M_3 = 0.0$ ,  $Q_3 = \pm 1.0$ ,  $R_3 = 0.0$ ; ve  $M_3 = 0.7895$ ,  $Q_3 = -0.3844$ ,  $R_3 = -0.8297$  ve şekil 4.1(c)'de  $M_1 = 1.5$ ,  $Q_1 = 1.0$ ,  $R_1 = 0.5$ ;  $M_2 = 0.5028$ ,  $Q_2 = -0.9943$ ,  $R_2 = -1.4941$ ;  $M_3 = 0.0$ ,  $Q_3 = 0.0$ ,  $R_3 = 0.0$ ;  $M_3 = 0.0$ ,  $Q_3 = 1.0$ ,  $R_3 = 0.0$ ; ve  $M_3 = 0.5637$ ,  $Q_3 = -0.8726$ ,  $R_3 = -1.3726$  değerleri elde edilmiştir. Sırasıyla şekil 4.1(b) kullanılarak şekil 2.2'de şekil 4.1(c) kullanılarak da şekil 2.3'de elde edilen denge durumu çözümlerinin sınıflandırması yapılabilir.

Şekillerden de görüldüğü gibi sistem, başlangıç değerleri ve oran sabitlerine bağlı olarak iki farklı noktada durulmaktadır. Dinamik çalışmayla bulunan kararlı ve yarı kararlı durumlar Bölüm 2'de denge çalışması ile bulunan değerlerle tamamen aynıdır. Bununla birlikte, dinamik çalışmayla kararsız durumları elde etmek ise oldukça zahmetli bir iş olmasına rağmen denge çalışmasına yakın değerler bulunabilir. Akış diyagramı ile denge durumunun incelenmesinde elde çözümlerin sınıflandırılmasının yapılmasının yanı sıra düzen parametreleri için bütün çözümlerin elde edilip edilmediğinin de kontrolü yapılmış olmaktadır. Son olarak, manyetizasyon eksenini simetrik olduğundan basitlik için bu şekillerde negatif manyetizasyon çözümlerinin gösterilmediğini de belirtelim.

Akış diyagramlarını daha detaylıca açıklamak ve kararlı, yarı kararlı ve kararsız durumların serbest enerji değerlerini göstermek için  $M$  ve  $Q$  düzen parametreleriyle üç boyutlu serbest enerji yüzeyi şekil 4.1(b)'ye karşı gelen  $J/K = 0.8$  ve  $k_B T/K = 0.35$  değeri için elde edildi. Ayrıca, bu şekil verilen  $k_B T/K = 0.35$  değeri için şekil 2.2'ye de karşılık gelmektedir. Şekil 4.2'de yine çember serbest enerjinin en derin minimumu olan kararlı durumu, içi dolu kare bölgesel minimumlar olan yarı kararlı durumu ve daire de tepe veya eyer noktalarına karşı gelen kararsız durumu veya çözümü göstermektedir. Akış diyagramındaki çözümler, bu eyer noktalarına yaklaşıp durulacak gibi yaptıktan sonra başlangıç değerine ve oran sabitlerine bağlı olarak enerji çukurları olan kararlı veya yarı kararlı durumlarda durulmaktadır.

Böylece, kararlı, yarı kararlı ve kararsız durumların  $M$  ve  $Q$  değerleri şekil 4.2'deki serbest enerji yüzeyinden çok açıkça görülmektedir. Şayet şekil 4.2 ile şekil 4.1 ve verilen  $k_B T/K$  değeri için şekil 2.2 karşılaştırılırsa, kararlı, yarı kararlı ve kararsız çözümlerin birbiri ile tam uyumlu olduğu görülür. Ayrıca, şekil 4.2'den  $M = 0$  eksenini boyunca serbest enerji yüzeyinin simetrik olduğu, dolayısıyla serbest enerjinin türevleri olan düzen parametresi çözümlerinin de  $M = 0$  eksenine göre simetrik olacağı görülmektedir. Daha önce Bölüm 2'de belirtildiği gibi serbest enerjinin davranışı  $R$ 'den bağımsız olduğu için, serbest enerji yüzeyinin hesaplanmasında  $R$  göz önüne alınmamıştır, fakat dinamik denklemlerin çözümünün yapılabilmesi için oktupolar düzen parametresinin de hesaplarda kullanılması gerekmektedir.



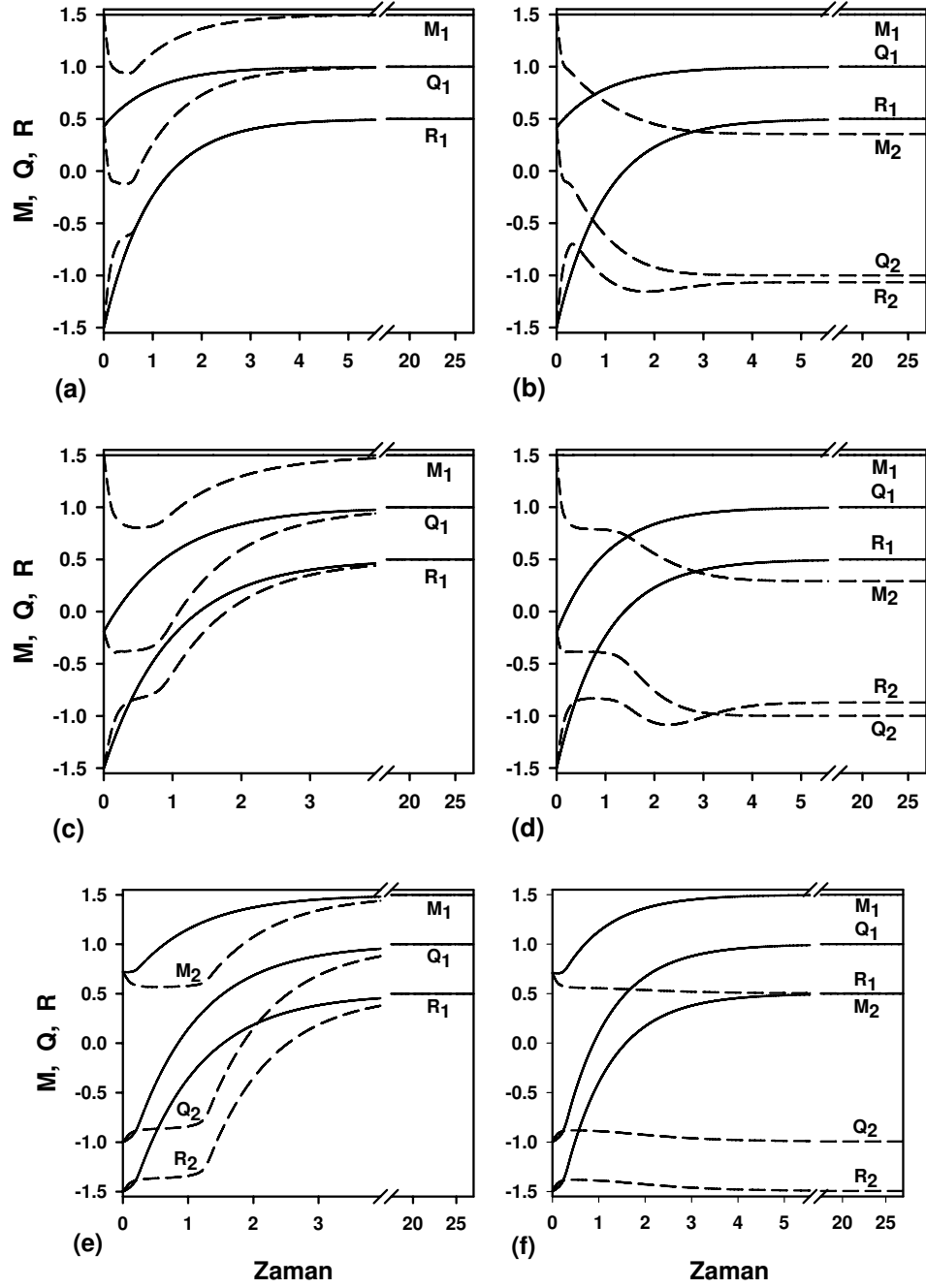
Şekil 4.2.  $J/K=0.8$  ve  $k_B T/K = 0.35$  için  $M$  ve  $Q$  terimleriyle serbest enerji yüzeyi. Kararlı çözümler çemberle, yarı kararlı çözümler içi dolu kareyle ve kararsız çözümler de daireyle gösterilmiştir.

İkinci olarak dinamik denklemlerin çözümü Runge-Kutta metodu ile yapıldı. Bu çözüm, düzen parametrelerinin gevşeme eğrilerini çalışmak ve yarı kararlı durumun düzlük (flatness) özelliği ile birlikte "overshooting" olarak adlandırılan çözümün

kararsız duruma gitme eğilimi gösterip keskin bir U dönüşü yaparak geri dönmesi olayını görmek için kullanılmıştır. Değişik  $J/K$  ve sabit  $k_i$  ve  $k_B T/K$  değerleri için düzen parametrelerinin gevşeme (durulma) eğrileri şekil 4.3'de çizildi. Sonuçlar arasında karşılaştırma yapabilmek için  $J/K$ ,  $k_i$  ve  $k_B T/K$  değerleri şekil 2.1-2.3 ve şekil 4.1'deki değerlere uygun olarak seçilmiştir.

Şekil 4.3'de yarı kararlı durumların düzlük özelliği ve "overshooting" olayı açıkça görülmektedir. Örneğin, bu şekillerden şekil 4.3(e)'nin çok ilginç durulma süreci gösterdiğini belirtebiliriz. Şekilde durulma eğrisi üzerinde iki düz bölge vardır. Bu şekil ile şekil 4.3(f) karşılaştırılacak olursa, ilk düzlüğün yarı kararlı duruma karşı geldiği görülmektedir. Bu durumda sistem önce yarı kararlı durumda durulmakta fakat bir zaman sonra sistem yavaşça kararlı duruma "sızmaya" başlamakta ve sonunda kararlı durumda durulmaktadır. Şayet sıcaklık kritik noktaya daha yakın seçilirse bu gevşeme olayı çok daha uzun zamanda gerçekleşmektedir. Sistem yarı kararlı duruma sahip olduğundan, başlangıç koşullarına ve oran sabitlerine bağlı olarak sistem ya kararlı veya yarı kararlı durumda durulur. Şekil 4.1 ve 4.3 başlangıç değerleri yarı kararlı çözüm veya duruma yakın seçildiğinde sistemin yarı kararlı durum içinde aksi hallerde de kararlı durumda durulduğunu göstermektedir. Ayrıca, şayet başlangıç değeri kararlı duruma çok yakın değil ve  $k_2 > k_1$  ise, sistem yarı kararlı durumda  $k_1 = k_2$ 'de olduğundan daha çok durulmaktadır. Yani sistemin yön değiştirme hızını belirleyen  $k_2$  sabiti artırılırsa, sistem daha çok yarı kararlı durumda durulmaktadır.

Bu gerçekler, yani kararlı veya yarı kararlı durum elde etmenin başlangıç koşullarına ve oran sabitlerine bağlı olması deneysel olarak da gözlenmiştir [172–174]. Örneğin, yarı kararlı faz veya duruma karşı gelen amorf metalik alaşımlar veya metalik camları elde etmek için aşağıdaki iki temel koşul gerekmektedir: (1) Belli alaşımlar için belli kompozisyonları kullanmak. Yani, başlangıç koşulları yarı kararlı faz veya durumu elde etmek için çok önemlidir. (2) İyi-hazırlanmış sıvı alaşımları çok hızlıca soğutmak. Bu seviyede, şayet sistemler yarı kararlı durum veya fazlarda kalırlarsa özelliklerinin önemli ölçüde değişeceğini belirtebiliriz. Örneğin alaşımları hızlı soğutma olayı yarı kararlı durum olan amorf yapıya götürebilir. Yarı kararlı fazda da alaşımların sertlik, aşınma, yorulma, paslanmaya karşı dayanıklılık ve manyetik



Şekil 4.3. Farklı oran sabiti değerleri için  $M$ ,  $Q$  ve  $R$  düzen parametrelerinin gevşeme eğrileri:  $k_1 = k_2 = 1$  (sürekli çizgi)  $k_1 = 1$  ve  $k_2 = 10$  (kesikli çizgi).  $i$  alt indisi başlangıç değerini, 1 kararlı ve 2 yarı kararlı durumu göstermektedir. (a)  $J/K = 0.25$  ve  $k_B T/K = 0.1$  için ( $M_i = 1.5$ ,  $Q_i = 0.43$ ,  $R_i = -1.5$ ). (b) a) ile aynı fakat  $Q_i = 0.42$  ve sistem yarı kararlı durumda durulmaktadır. (c)  $J/K = 0.8$  ve  $k_B T/K = 0.35$  için ( $M_i = 1.5$ ,  $Q_i = -0.19$ ,  $R_i = -1.5$ ). (d) c) ile aynı fakat  $Q_i = -0.20$  ve sistem yarı kararlı durumda durulmaktadır. (e)  $J/K = 2.5$  ve  $k_B T/K = 0.25$  için ( $M_i = 0.72$ ,  $Q_i = -1.0$ ,  $R_i = -1.5$ ). (f) e) ile aynı fakat  $M_i = 0.71$  ve sistem yine yarı kararlı durumda durulmaktadır.

özelliklerinin [172–174] ciddi şekilde düzeldiği bilinmektedir. Diğer taraftan yarı kararlılık, tamamlayıcı metal-oksit yarıiletken dinamik D-mandalında çok geniş ölçekte yüksek performans integrasyonunda ciddi bir problem oluşturmaktadır [175].

Şekil 4.1 ile 4.3 ve verilen  $k_B T/K$  değerleri için şekil 2.1-2.3 karşılaştırılırsa, kararlı ve yarı kararlı çözümlerin tam olarak birbiriyle uyumlu olduğu görülür. Ayrıca, şekil 4.1 ve 4.3’de bulunan kararsız çözüm değerleri verilen  $k_B T/K$  değerleri için şekil 2.1-2.3’deki değerlerle oldukça uyumludur. Böylece bu dinamik çalışma ile denge çalışmasında bulduğumuz düzen parametreleri çözümlerinin kararlı, yarı kararlı ve kararsız olarak sınıflandırmasının yapılabileceği sonucuna ulaşabiliriz. Şunu da belirtelim ki bu şekiller, özellikle şekil 4.1 sistemin yarı kararlı duruma gevşemesinden nasıl sakınılabileceğini önermektedir. Yakın zamanda, Bouabci ve Carneiro [176] ve Rachadi ve Benyoussef [177] de spin modellerinin birinci derece faz geçişindeki yarı kararlılığı atlatmak için Monte Carlo kümesel algoritması sunmuşlardır.

Son olarak, spin-1 BEG modelinin Cu-Al-Mn şekil-hafızalı alaşımlar [178], yarı iletken alaşımlar [179–183] ve üçlü sistemler [160,184] ve  $(A^{III}B^V)_{1-x}C_{2x}^{IV}$ -yarıiletken alaşımlarda ikinci derece faz geçişinin kararsız devamı [182,183] gibi bazı gerçek sistemlerin yarı kararlı faz diyagramları ile uyumlu olduğunun bulunduğunu belirtelim. Spin-1 Ising sisteminin yarı kararlı faz diyagramları özellikle tek- ve çift-örgülü spin-1 BEG modeli kapsamına çalışılmıştır [32,39,185–187]. Diğer taraftan spin-3/2 Ising sistemini kullanarak herhangi gerçek bir fiziksel sistemin yarı kararlı faz diyagramı elde edilmesi en iyi bilgilerimiz dahilinde görülmemiştir. Bununla beraber, tek-örgülü bilinear ve biquadratik etkileşme Hamiltonyenli spin-3/2 Ising yani izotropik spin-3/2 BEG modelinin yarı kararlı faz diyagramı, yakın zamanda elde edilip sunulmuştur [68].

## 5. BÖLÜM

### SONUÇLAR VE TARTIŞMALAR

Aralarında kuvvetlice etkileşen parçacıklar sistemini istatistik mekanik ile incelemek problemi oldukça zordur. Bu zorluklar, teorikçileri doğada mevcut bu sistemlerin basit matematiksel modellerini kurmaya ve çalışmaya yöneltmiştir. Bu tür modellerde aranılan özelliklerinden birisi bu modelin matematiksel olarak şeffaflığıdır yani incelenen bir sistemden başka sistemlere kolayca geçilebilmesidir. Bu modellerin ilk ve en başarılılarından birisi ferromanyetik faz geçişlerini açıklamak için Ising tarafından ortaya atılmıştır [9, 10]. Ising modeli manyetik sistemleri açıklamak için ortaya atılmış fakat basit dönüşümlerle başka sistemlere kolayca geçilebildiğinden günümüzde çok aktif olarak kullanılmaktadır. Ising modellerinin dengeli davranışının çalışılmasında matematiksel problemler büyük olmakla birlikte, zamanla büyük ölçekte değişikliğe uğrayan sistemlere göre en azından görece olarak çok daha iyi tanımlanmıştır. Bu yüzden, her ne kadar basit bile olsa istatistik sistemlerin zamana bağlı davranışının incelenmesi çok büyük önem arz etmektedir. Ising sistemi üzerindeki dinamik çalışmalar da görece olarak basitliği sebebiyle genellikle spin-1/2 Ising modeli için sıklıkla yapılmıştır fakat daha yüksek spin değerleri üzerinde fazlaca durulmamıştır. Biz de bu tez çalışmasında, dengeli durumu birçok metot ile ayrıntılı olarak incelenen fakat dinamik davranışı kapsamlıca çalışılmayan spin-3/2 Ising modelinin dinamik davranışını inceledik.

Bu tez çalışmasında bilineer (J) ve biquadratik (K) etkileşme Hamiltonyenli spin-3/2 Ising modelinin dinamik davranışı incelendi. İlk olarak, dinamik davranışın incelenmesinde kullanılacak olan faz geçişinin birinci veya ikinci merteye olan doğası, faz geçiş sıcaklıkları ve kritik noktaları tespit etmek için sistemin dengeli davranışı kümesel değişim metodu ile incelenmiştir. Bu dengeli davranışın incelenmesinde,

düzen parametreleri elde edilmiş ve kritik sıcaklık civarında düzen parametreleri seriye açılarak faz geçiş sıcaklıkları ile iki tane üçlü kritik nokta analitik olarak bulunmuştur. Bu analitik ifadelerin doğruluğunu kontrol etmek için nümerik çözüm yapılarak, analitik ifadeler ve nümerik çözüm ile bulunan faz diyagramları karşılaştırılmıştır. Nümerik olarak faz geçişleri bulunurken, birinci derece faz geçişinin hesaplanmasında serbest enerji, ikinci derece faz geçişinin bulunmasında Hessian determinantından yararlanılmıştır. Ayrıca, bu bölümde sistemin dengeli davranışının incelenmesinde önemli bir yer tutan ve deneysel gözlenebilirler olan öz ısı ve manyetik alınganlık için analitik ifadeler bulunmuştur. Böylece elde edilen öz ısının ardışık iki pik verdiği davranış ile  $DyVO_4$  üzerinde yapılan deney sonuçlarının arasındaki nitel benzerlik belirtilmiştir. Bu bölümün sonunda paramanyetik fazda manyetik alınganlığın Curie-Weiss kanununa uyduğu gösterilmiş ve kritik üstel değerinin  $-1$  olduğu verilmiştir. Bu bölümde elde edilen sonuçlar ise yayınlanmıştır [188].

Üçüncü bölümde sistemin dinamik davranışı tersinmez termodinamiğin Onsager teorisi ile incelenmiştir. Onsager teorisini kullanarak, sistemin denge durumları yakınlarındaki davranışını belirleyen kinetik denklemler elde edildi. Bu kinetik denklemden, düzen parametrelerinin zamanla  $\exp(-t/\tau)$  şeklindeki sönümlü çözümü olduğu düşünülerek seküler determinant bulundu. Bu seküler determinantın çözümü sistemin denge değerine dönmesini belirleyen üç karakteristik durulma zamanını vermektedir. Bu durulma zamanlarının sıcaklık ile değişimleri incelendi. Değişik etkileşme parametreleri ve Onsager (fenomenolojik) katsayılar için durulma zamanlarının sıcaklık ile değişimi kritik üstel vasıtasıyla tanımlandı. Bu kritik üstelin etkileşme parametreleri ve fenomenolojik katsayılardan bağımsız olduğu ve sadece faz geçişinin doğasına (birinci veya ikinci derece) bağlı olduğu bulundu ve böylece kritik üstelin evrensel olduğu gösterildi. Kritik üstelin hesabı ile bu durulma zamanlarından sadece birinin,  $\tau_2$ , ikinci derece faz geçiş sıcaklığındaki davranışının  $-1$  kritik üsteli ile belirlendiği görülmüştür. Böylece, ikinci derece faz geçiş noktasına (kritik noktaya) yaklaşırken durulma zamanlarından birinin ıraksaması sebebiyle sistemde kritik yavaş durulma olayının görüleceği ve düzen parametresi alınganlığının da bu noktada ıraksayacağı anlaşılmıştır. Bu bölümün bir kısmı olan



durulma zamanlarının ikinci derece faz geçiş sıcaklıkları yakınındaki davranışlarının incelenmesi yayınlanmıştır [189]. Bu bölümün devamında spin-3/2 Ising sisteminde ilerleyen ses dalgasının dağınımı (dispersiyonu) ve soğurulması için analitik ifadeler elde edilerek, sesin dispersiyonunun ve soğurulmasının sıcaklıkla değişimi incelendi. Bu incelemede artan frekanslar ile dispersiyonun genliğinin azaldığı ve soğurulma maksimumlarının da faz geçiş sıcaklığından daha düşük sıcaklıklara doğru kaydığı bulundu.  $RbMnF_3$  tek kristali [141],  $MnF_2$  gibi antiferromanyetik [142] sistemler, sıvı helyum ve amorf  $SiO_2$  [190] gibi sistemler üzerindeki ultrasonik çalışmalarında ses dalgalarının soğurulma maksimumlarının kritik sıcaklıktan önce olması ve bunun artan frekans ile daha düşük sıcaklık değerlerine kayması olayı gözlenmiştir ve bunun da bizim sonuçlarımızla uyumlu olduğu bulunmuştur.

Dördüncü bölümde, sistemin dinamik davranışının yol ihtimaliyet metodu ile incelenmiştir. Yol ihtimaliyet metodu ile sistemin dinamik veya oran denklemleri elde edilmiş ve bu denklemlerin çözümleri de akış diyagramları ve Runge-Kutta metodu kullanılarak yapılmıştır. Akış diyagramı ve Runge-Kutta metodu ile bulunan durulma eğrileri kullanılarak, ikinci bölümde sistemin dengeli davranışı incelenmesinde bulunan çözümlerin hem sınıflandırılması yapılmış ve hem de bulunan çözümlerin eksiksiz bulunduğu gösterilmiştir. Şayet yol ihtimaliyet metodunda sistemin başlangıç değeri yarı kararlı duruma yakınında verilirse, sistem en düşük enerjili olan kararlı durum yerine ikincil minimum olan yarı kararlı durumda durulduğu görülmüştür. Bu gerçek ise deneysel olarak aşırı soğutma teknolojisinde gözlenmektedir [172–174]. Daha sonra, yol ihtimaliyet metodu ile bulunan bu dinamik denklemlerin çözümü ikinci yol olarak Runge-Kutta metodu ile yapıldı ve böylece yarı kararlı durumların düzlük özelliği ile kararsız durumların "overshooting" özelliği görülmüştür. Yol ihtimaliyet metodu ile dinamik denklemlerin çözümünde, şayet sıcaklık kritik sıcaklık yakınında verilirse durulma olayının çok uzun sürdüğü de bulunmuştur. Bu da tersinmez termodinamiğin Onsager teorisindeki durulma zamanlarından biri kritik sıcaklıkta iraksayarak ve sistemin denge durumuna ulaşmasının çok uzun zaman almasına sebep olacağı durum ile tamamen aynıdır. Bu kesimin sonunda, sistemin yarı kararlı ve kararsız durumlarda durulmasının, sistemin başlangıç değerlerine ve oran sabitlerine bağlı

olduđu ve bunun da deneysel olarak da gözlemlendiđi açıklanmıştır. Bu bölümde yapılan çalışmalar da yayınlanmıştır [191].

Son olarak, nispeten basit iki dinamik metotla incelediđimiz spin-3/2 Ising modelinin dinamiđinin gelecekte dinamik Monte-Carlo hesaplamaları veya renormalizasyon grup teknikleri gibi daha gelişmiş dinamik metotlarla incelemelere bir temel oluşturacağı düşünceindeyiz. En kısa zamanda daha gelişmiş dinamik yöntemlerle bu modelin dinamik davranışının incelenmesini önermekte ve ümit etmekteyiz.

**KAYNAKLAR**

1. Curie, P., Magnetic Properties of Materials at Various Temperatures, Ann. Chim. Phys. 5, 289-405, 1895.
2. Hopkinson, J., Magnetic Properties of Alloys of Nicel and Iron, Proc. R. Soc. 48, 1-13, 1890.
3. Langevin, P., Electronic Theory of Magnetism, Comptes Rendus 139, 1204-1207, 1904.
4. Langevin, P., Electronic Theory of Magnetism, Annal. Chim. Phys. 5, 70-127, 1905.
5. Weiss, P., Temperature-variation of Ferromagnetism, Comptes Rendus 143, 1136-1139, 1906.
6. Weiss, P., Hypothesis of the Molecular Field and Ferromagnetism, Journ. de Physique 6, 661-690, 1907.
7. Stanley, H. E., Introduction to Phase Transition and Critical Phenomena, Clarendon Press, Oxford, 1971.
8. Tebble, R. S. and Craik, D. J., Magnetic Materials, Wiley-Interscience, London, 1969.
9. Ising, E., Beitrag zur Theorie des Ferro- und Paramagnetismus, Doctora Dissertation, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät der Hamburgischen Universität, Hamburg, 1924.
10. Ising, E., Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus, Z. Phys. 31, 253-258, 1925.
11. Lenz, W., Beitrag zum Verständnis der Magnetischen Erscheinungen in festen Körpern, Z. Phys. 21, 613-615, 1920.
12. Heisenberg, W., Zur Theorie des Ferromagnetismus, Z. Phys. 49, 619-636, 1928.
13. Huang, K., Statistical Mechanics, John & Wiley Sons Inc., 1987.
14. Baxter, R. J., Exactly Solved Models in Statistical Mechanics, Academic Press Inc., New York, 1982.
15. Toda, M., Kubo, R. and Saitô, N., Statistical Physics I Equilibrium Statistical Mechanic, Springer-Verlag, 1992.
16. Greiner, W., Neise, L., Stöcker, H., Thermodynamics and Statistical Mechanics, Springer-Verlag, New York, 1994.

17. Kramer, H. A. and Wannier, G. H., Statistics of the Two-Dimensional Ferromagnet. Part I, Phys. Rev. 60, 252-262, 1941.
18. Onsager, L., Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with a Order-Disorder Transition, Phys. Rev. 65, 117-149, 1944.
19. Ma S. K., Modern Theory of Critical Phenomena, Benjamin, New York, 1976.
20. Ma S. K., Statistical Mechanics, World Scientific Publishing Co., 1985.
21. Cooke, A. H., Ellis, C. J. , Gehring, K. A., Leask, M. J. M , Martin, D. M., Wanklyn, B. M., Wells, M. R., and White, R. L., Observation of a Magnetically Controllable Jahn Teller Distortion in Dysprosium Vanadate at Low Temperatures, Solid State Commun. 8, 689-692, 1970.
22. Cooke, A. H., Martin, D. M., and Wells, M. R., The Specific Heat of Dysprosium Vanadate, Solid State Commun. 9, 519-522, 1971.
23. Cooke, A. H., Martin, D. M., and Wells, M. R., Magnetic and Thermal Properties of Dysprosium Vanadate, J. Phys. (Paris), Colloq. 32, C1 488-489, 1971.
24. Will, G. and Schäfer, W., The Magnetic Structure of Antiferromagnetic  $\text{DyVO}_4$ , J. Phys. C: Solid St. Phys. 4, 811-819, 1971.
25. Sayetat, F., Boucherle, J. X., Belakhovsky, M. , Kallel, A., Tcheou, F., and Fuess, H., Experimental Study of Magnetic and Crystallographic Transition in  $\text{DyVO}_4$ , Phys. Letters 34A, 361-362, 1971.
26. Sieger, M. , Kasten, A., and Paul, W., Ferrimagnetic Phase in the Metamagnet  $\text{DyVO}_4$ , Solid State Commun. 53, 909-913, 1985.
27. Sivardière, J. and Blume, M., Dipolar and Quadrupolar Ordering in Spin  $S=3/2$  Ising Systems, Phys. Rev. B 5, 1126-1134, 1972.
28. Krinsky, S., and Mukamel, D., Spin-3/2 Ising Model for Tricritical Points in Ternary Fluid Mixtures, Phys. Rev. B 11, 399-410, 1975.
29. Sivardière, J., Double Spin One-half Lattice Gas Model, Le journal de Physique 37, 1267-1277, 1976.
30. Blume, M., Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in  $\text{UO}_2$ , Phys. Rev. 141, 517-524, 1966.

31. Capel, H. W., On the Possibility of First-Order Phase Transitions in Ising Systems of Triplet Ions with Zero-Field Splitting, *Physica (utr)* 32, 966-988, 1966.
32. Ekiz, C., Keskin, M., and Yalçın, O., Metastable and Unstable States of the Blume-Capel Model Obtained by the Cluster Variation Method and the Path Probability Method, *Physica A* 293, 215-232, 2001.
33. Deng, Y., Guo, W., and Blöte, H. W. J., Percolation Between Vacancies in the Two-dimensional Blume-Capel Model, *Phys. Rev. E* 72, 016101-1-016101-11, 2005.
34. Keskin, M., Canko, O., and Temizer, Ü., Dynamic Phase Transition in the Kinetic Spin-1 Blume-Capel Model under a Time-dependent Oscillating External Field, *Phys. Rev. E* 72, 036125-1-036125-10, 2005.
35. Silva, C. J., Caparica, A. A., and Plascak, J. A., Wang-Landau Monte Carlo Simulation of the Blume-Capel Model, *Phys. Rev. E* 73, 036702-1-036702-6, 2006.
36. Özkan, A., Seferoğlu, N., and Kutlu, B., Critical Exponents of the Three-dimensional Blume-Capel Model on a Cellular Automaton, *Physica A* 362, 327-337, 2006.
37. Blume, M., Emery, V. J., Griffiths, R. B., Ising Model for the  $\lambda$  Transition and Phase Separation in He<sup>3</sup>-He<sup>4</sup> Mixtures, *Phys. Rev. A* 4, 1071-1077, 1971.
38. Baran, O. R., and Levitskii, R. R., Reentrant phase transitions in the Blume-Emery-Griffiths model on a simple cubic lattice: The two-particle cluster approximation, *Phys. Rev. B* 65, 172407-1-172407-4, 2002.
39. Ekiz, C., and Keskin, M., Multicritical phase diagrams of the Blume-Emery-Griffiths Model with Repulsive Biquadratic Coupling Including Metastable Phases, *Phys. Rev. B* 66, 054105-1-054105-11, 2002.
40. Rachadi, A., and Benyoussef, A., Monte Carlo study of the Blume-Emery-Griffiths Model at the Ferromagnetic-antiquadrupolar-disordered Phase Interface, *Phys. Rev. B* 69, 064423-1-064423-5, 2004.
41. Crisanti, A., and Leuzzi, L., Thermodynamic Properties of a Full-replica-symmetry-breaking Ising Spin Glass on Lattice Gas: The random

- Blume-Emery-Griffiths-Capel Model, Phys. Rev. B 70, 014409-1-014409-22, 2004.
42. Erdinç, A., Canko, O., and Keskin, M., Multicritical Behavior of the Antiferromagnetic Blume-Emery-Griffiths Model with the Repulsive Biquadratic Coupling in an External Magnetic Field, J. Magn. Magn. Mater. 301, 6-12, 2006.
  43. Tucker, J. W., The Effective-field Theory of the Isotropic Blume-Emery-Griffiths Model, J. Phys. C:Solid State Phys. 21, 6215-6218, 1988.
  44. Sivardière, J., Magnetism in  $S=3/2$  Ising Systems: a Simple Model for a Tetracritical Point, phys. stat. sol (b) 114, K15-19, 1982.
  45. Kaneyoshi, T., and Jaščur, M., Critical Concentration of a Diluted Spin-3/2 Ising Ferromagnet, phys. stat sol. (b) 173, K37-42, 1992.
  46. Kaneyoshi, T., and Benyoussef, A., Correlated Effective-Field Treatment of the Blume-Capel Model with Half-Integer Spins, phys. stat. sol. (b) 178, 233-246, 1993.
  47. Peliti, L., and Saber, M., The Spin-3/2 Blume-Capel Model on a Honeycomb Lattice, phys. stat. sol. (b) 195, 537-548, 1996.
  48. Le Gal, G., Kaneyoshi, T., and Khater, A., Phase Diagram and Paramagnetic Susceptibility of Spin 3/2 Blume-Capel Model in the Correlated Effective-field Treatment, Physica A 195, 174-187, 1993.
  49. Xavier, J. C., Alcaraz, F. C., Penã Lara, D., and Plascak, J. A., Critical Behavior of the Spin-3/2 Blume-Capel Model in Two Dimensions, Phys. Rev. B 57, 11575-11581, 1998.
  50. Plascak, J. A., and Landau, D. P., Universality and Double Critical End Points, Phys. Rev. E 67, 015103-1-015103-4, 2003.
  51. Albayrak, E., Keskin, M., The spin-3/2 Blume-Capel Model on the Bethe Lattice Using the Recursion Method, J. Magn. Magn. Mater. 218, 121-127, 2000.
  52. Özsoy, O., Albayrak, E., Keskin, M., Statistical Mechanics of the Spin-3/2 Blume-Capel Model on the Bethe Lattice Using the Recursion Method, Physica A 304, 443-460, 2002.
  53. Bakchich, A., El Bouziani, M., The Semi-infinite Spin-3/2 Blume-Capel Model, J. Phys.: Condens. Matter 11, 6147-6157, 1999.

54. Chen, X. Y., Jiang, Q., Shen, W. Z., and Zhong, C. G., The Properties of One-dimensional Spin-S ( $S \geq 1$ ) Antiferromagnetic Ising Chain with Single-ion Anisotropy, *J. Magn. Magn. Mater.* 262, 258-263, 2003.
55. Bekhechi, S., Benyoussef, A., Multicritical Behavior of the Antiferromagnetic Spin-3/2 Blume-Capel Model: Finite-size-scaling and Monte Carlo Studies, *Phys. Rev. B* 56, 13954-13959, 1997.
56. Ekiz, C., Dimensionality Effects for the Spin-3/2 Ising Antiferromagnet near Tricriticality on a Recursive Lattice, *Phys. Lett. A* 325, 99-103, 2004.
57. Ekiz, C., The Antiferromagnetic Spin-3/2 Blume-Capel Model on the Bethe Lattice Using the Recursion Method, *J. Magn. Magn. Mater.*, 284, 409-415, 2004.
58. Ilkovič, V., Cluster Expansion for the Spin-3/2 Blume-Capel Model, *Physica A* 234, 545-553, 1996.
59. Grollau, S., Phase Diagram of the Spin-3/2 Blume-Capel Model in Three Dimensions, *Phys. Rev. E* 65, 056130-1-056130-6, 2002.
60. Jiang, W., Wei, G. Z., Du, A., Guo, L. Q., Phase Diagrams and Tricritical Behavior in a Spin-3/2 Ising Model with Transverse Crystal Field, *Physica A* 313, 503-512, 2002.
61. Jiang, W., Wei, G. Z., Zhang, Q., Effects of Biaxial Crystal-field on Spin-3/2 Honeycomb Lattice, *Physica A* 329, 161-169, 2003.
62. Sá Barreto, F. C., and De Alcantara Bonfim, O. F., Phase Transitions in the Spin-3/2 BEG Model, *Physica A* 172, 378-390, 1991.
63. Kaneyoshi, T., and Jaščur, M., Theory and Phase Diagram of a Spin-3/2 BEG Model, *Phys. Lett. A* 177, 172-176, 1993.
64. Bakkali, A., Kerouad, M., and Saber, M., The Spin-3/2 Blume-Emery-Griffiths Model, *Physica A* 229, 563-573, 1996.
65. Ekiz, C., Albayrak, E., and Keskin, M., Multicritical Phase Diagrams of the Spin-3/2 Blume-Emery-Griffiths Model on the Bethe Lattice Using the Recursion Method, *J. Magn. Magn. Mater.* 256, 311-321, 2003.
66. Sivardière, J., Magnetism in  $S=3/2$  Models Magnetization Jump and Reorientations, Heat Magnetization, and Tricritical Points, *phys. stat. sol. (b)* 76, 77-92, 1976.

67. Canko, O., Keskin, M., The Ground-state Phase Diagrams of the Spin-3/2 Ising Model, *Phys. Lett. A* 320, 22-27, 2003.
68. Özsoy, O., Keskin, M., Critical Properties of a Spin-3/2 Ising Model with Bilinear and Biquadratic Interactions, *Physica A* 319, 404-420, 2003.
69. Bakchich, A., Bassir, A., and Benyoussef, A., Phase Transitions in the Spin-3/2 Blume-Emery-Griffiths Model, *Physica A* 195, 188-196, 1993.
70. Tsushima, N., Honda, Y., and Horiguchi, T., Critical Properties of a Spin-3/2 Ising Model on a Square Lattice, *J. Phys. Soc. Jpn.* 66, 3053-3062, 1997.
71. Tsushima, N., and Horiguchi, T., Phase Diagrams of Spin-3/2 Ising Model on a Square Lattice in Terms of Corner Transfer Matrix Renormalization Group Method, *J. Phys. Soc. Jpn.* 67, 1574-1582, 1998.
72. Bakchich, A., and El Bouziani, M., Position-space Renormalization-group Investigation of the Spin-3/2 Blume-Emery-Griffiths Model with Repulsive Biquadratic Coupling, *J. Phys.: Condens. Matter* 13, 91-99, 2001.
73. Tucker, J. W., Cluster Variational Theory of Spin-3/2 Ising Models, *J. Magn. Mater.* 214, 121-129, 2000.
74. Izmailian, N. Sh., and Ananikian, N. S., General Spin-3/2 Ising Model in a Honeycomb Lattice: Exactly Solvable Case, *Phys. Rev. B* 50, 6829-6832, 1994.
75. Wu, F. Y., On Horiguchi's Solution of the Blume-Emery-Griffiths Model, *Phys. Lett. A* 116, 245-246, 1986.
76. Horiguchi, T., Honda Y., Spin-3/2 Ising Model and Ashkin-Teller Model, *Prog. Theor. Phys.* 93, 981-985, 1995.
77. Izmailian, N. Sh., A spin-3/2 Ising Model on a Square Lattice, *JETP Letter* 63, 290-295, 1996.
78. Horiguchi, T., Lipowski, A., Tsushima, N., Spin-3/2 Ising Model and Two-layer Ising model, *Physica A* 224, 626-638, 1996.
79. Song, W. J., and Yang, C. Z., The Critical Properties of Spin=3/2 Ising Model with a Tranverse Field, *Solid State Commun.* 91, 145-148, 1994.
80. Jiang, W., Wei, G. Z., Xin, Z. H., Specific Heat of Spin-3/2 Transverse Ising Model with the Crystal Field on Honeycomb Lattice, *phys. stat. sol. (b)* 219, 157-161, 2000.



81. Jiang, W., Wei, G. Z., Xin, Z. H., Effect of a Crystal Field on Phase Transitions in a Spin-3/2 Transverse Ising Model, *J. Magn. Magn. Mater.* 217, 225-230, 2000.
82. Jiang, W., Wei, G. Z., and Xin, Z. H., Properties of Ground State in the Spin-3/2 Transverse Ising Model with Crystal Field, *phys. stat. sol. (b)* 218, 553-560, 2000.
83. Jiang, W., Wei, G. Z., Properties of Spin-3/2 Transverse Ising Model with Anisotropic Crystal Field on a Honeycomb Lattice, *Physica A* 284, 215-222, 2000.
84. Jiang, W., Guo, L. Q., Wei, G. Z., Du, A., Longitudinal and Transverse Magnetizations of Spin-3/2 Transverse Ising Model with the Crystal Field on Square Lattice, *Physica B* 307, 15-21, 2001.
85. Jaščur, M., Kaneyoshi, T., Spin-3/2 Ising Model in a Random Field, *Physica A* 195, 497-505, 1993.
86. Liang, Y. Q., Wei, G. Z., Zhang, Q., Xin, Z. H., A Theoretical Study of the Spin-3/2 Ising Model in a Random Field with Crystal Field, *J. Magn. Magn. Mater.* 265, 305-310, 2003 ve 267, 275-280, 2003.
87. Albayrak, E., Phase Diagrams of the Quantum Transverse Spin-3/2 Ising System with Bimodal Random Field, *Phys. Rev. B* 65, 134429-1-134429-6, 2002.
88. Liang, Y. Q., Wei, G. Z., Zhang, Q., Xin, Z. H., Song, G. L., Phase Diagram and Tricritical Behavior of a Spin-3/2 Transverse Ising Model in a Random Field, *J. Magn. Magn. Mater.* 284, 47-53, 2004.
89. Song, W. J., and Yang, C. Z., Studies on Critical Properties for S-3/2 Transverse Ising Model in a Random Field with CEA and DPIR, *Solid. State Commun.* 91, 141-144, 1994.
90. Albayrak, E., Canko, O., Trimodal Random-field Spin-3/2 Ising System in a Transverse Field, *J. Magn. Magn. Mater.* 270, 333-344, 2004.
91. Dissado L. A., and Hill, R. M. Dynamic Scaling near the Ferromagnetic Phase Transition of YIG, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 14, L649-L654, 1981.
92. Alcaraz, F. C., Droz, M., Henkel, M., and Rittenberg, V., Reaction-Diffusion Processes, Critical Dynamics, and Quantum Chains, *Ann. Phys.* 230, 250-302, 1994.

93. L. Van Hove, Time-Dependent Correlations between Spins and Neutron Scattering in Ferromagnetic Crystals, *Phys. Rev.* 95, 1374-1384, 1954.
94. Landau, L. D., and Khalatnikov, I. M., Anomalous Sound Absorption near a Second-order Phase Transition Point, *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 96, No.3, 469-472, 1954; reprinted in *Collected Papers of L. D. Landau*, edited by D. ter Haar (Pergamon, London, 1965).
95. Hohenberg, P. C., and Halperin, B. I., Theory of Dynamic Critical Phenomena, *Rev. Mod. Phys.* 49, 435-479, 1977.
96. Grandi, B. C. S., and Figueiredo, W., Short-time Dynamics for the Spin-3/2 Blume-Capel Model, *Phys. Rev. E* 70, 056109-1-056109-5, 2004.
97. Keskin, M., Canko, O., and Deviren, B., Dynamic Phase Transition in the Kinetic Spin-3/2 Blume-Capel Model under a Time-dependent Oscillating External Field, *Phys. Rev. E*, basımda.
98. Canko, O., Keskin, M., and Deviren, B., Dynamic Phase Transition in the Kinetic Spin-3/2 Blume-Emery-Griffiths Model in an Oscillating Field, *J. Phys.: Condens. Matter* 18, 6635-6653, 2006.
99. Kikuchi, R., A Theory of Cooperative Phenomena, *Phys. Rev.* 81, 988-1003, 1951.
100. Kikuchi, R., A Theory of Cooperative Phenomena II. Equation of States for Classical Statistics, *J. Chem. Phys.* 19, 1230-1241, 1951.
101. Kurata, M., Kikuchi, R., and Watari, T., A Theory of Cooperative Phenomena III. Detailed Discussions of the Cluster Variation Method, *J. Chem. Phys.* 21, 434-448, 1953.
102. Kikuchi, R., and Brush, S. G., Improvement of the Cluster-Variation Method, *J. Chem. Phys.* 47, 195-203, 1967.
103. Kikuchi, R., The Cluster Variation Method, *Le journal de Physique* 7, 307-313, 1967.
104. Kikuchi, R., Irreversible Cooperative Phenomena, *Annals of Physics* 10, 127-151, 1960.
105. Kikuchi, R., The Path Probability Method, *Suppl. Prog. Theor. Phys.* 35, 1-64, 1966.

106. Wada, K., Kaburagi, M., Uchida, T., and Kikuchi, R., Reformulation of the Path Probability Method and Its Application to Crystal Growth Models, *J. Stat. Phys.* 53, 1081-1101, 1988.
107. Bethe, H. A., Statistical Theory of Super Lattices, *Proc. Roy. Soc. London A* 150, 552-575, 1935.
108. Özsoy, O., Spin-3/2 Ising Sisteminin Yarıkararlı, Kararsız Durumları ve Bunların Varlığındaki Faz Diyagramları, Doktora Tezi, Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kayseri 2002.
109. Chen, H. H. , and Levy, P. M., Dipole and Quadrupole Phase Transitions in Spin-1 Models, *Phys. Rev. B* 7, 4267-4284, 1973.
110. Tanaka, M., and Mannari, I., Phase Transitions of a Solvable Spin-One System with Bilinear and Biquadratic Interactions, *J. Phys. Soc. Jpn.* 41, 741-746, 1976.
111. Onsager, L., Reciprocal Relations in Irreversible Process. I., *Phys. Rev.* 37, 405-426, 1931.
112. Onsager, L., Reciprocal Relations in Irreversible Process. II., *Phys. Rev.* 38, 2265-2279, 1931.
113. Crangle, J., *Solid State Magnetism*, Edward Arnold, London, 1991.
114. Casimir, H. B. G., On Onsager's Principle of Microscopic Reversibility, *Rev. Mod. Phys.* 17, 343-350, 1945.
115. De Groot, S. R., *Thermodynamics of Irreversible Processes*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1951.
116. De Groot, S. R., and Mazur, P., *Non-Equilibrium Thermodynamics*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1962.
117. Mazur, P., Mesoscopic Nonequilibrium Thermodynamics; Irreversible Processes and Fluctuations, *Physica A* 274, 491-504, 1999.
118. Barry, J. H., Ultrasonic Attenuation near the Order-Disorder Transition Point of the Second-Order, Ph. D. Thesis, the Catholic University of America, Washington D.C., 1961.
119. Barry, J. H., and Harrington D. A., Theory of Relaxation Phenomena in Ising Antiferromagnets, *Phys. Rev. B* 4, 3068-3077, 1971.
120. Spiegel, M. R., *Mathematical Handbook of Formulas and Tables*, Schaum's Outline Series, McGraw-Hill, New York, 1968.

121. Barry, J. H., Magnetic Relaxation near a Second-Order Phase-Transition Point, *J. Chem. Phys.* 45, 4172-4177, 1966.
122. Pathria, R. K., *Statistical Mechanics*, Butterworth-Heinemann, (2nd edition), Oxford, 1996.
123. Erdem, R., Spin-1 Ising Sisteminin Kritik Sıcaklık Yakınlarındaki Durulma Teorisi, Doktora Tezi, Erciyes Üniversitesi, Kayseri, 2001.
124. Erdem, R., and Keskin, M., Dynamics of a Spin-1 Ising System in the Neighborhood of Equilibrium States, *Phys. Rev. E* 64, 026102-1-026102-9, 2001.
125. Erdem, R., and Keskin, M., Theory of Relaxation Phenomena in a Spin-1 Ising System near the Second-Order Phase Transition Point, *phys. stat. sol. (b)* 225, 145-155, 2001.
126. Keskin M., and Erdem, R., Effect of the Off-diagonal Onsager Rate Coefficient on the Relaxation Times in a Spin-1 Ising System, *Phys. Lett. A* 297, 427-431, 2002.
127. Erdem, R., Ekiz, C., and Keskin, M., Relaxation Phenomena in the Blume-Emery-Griffiths Model near the Critical and Multicritical Points, *phys. stat. sol. (b)* 240, 220-229, 2003.
128. Wood, A., *Acoustics*, Blackie and Son Ltd., London & Glasgow, 1940.
129. Curie, J., and Curie, P., Sur l'électricité Polaire Dans les Cristaux Hémihédres à Faces Inclinées, *Comp. Rend. Séances Acad. Sci.* 91, 383-386, 1880.
130. Curie, J., and Curie, P., Développement par Compression de l'électricité Polaire Dans les Cristaux Hemiédres à Faces Inclinées, *Bull. Soc. Minéral. Fr.* 3, 90-93, 1880.
131. Lipmann, G., *An. Chim. Phys.* 24, 145-149, 1881.
132. Kuttruff, H., *Ultrasonics, Fundamentals and Applications*, Elsevier Applied Science, New York, 1991; çeviri: *Physik und Technik des Ultraschalls*, S. Hirzel Verlag, Stuttgart, 1988.
133. Deniz, A., Alümina Seramiklerinde Tanecik Boyutunun Ultrases ile Belirlenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Afyon Kocatepe Üniversitesi, Afyon, 2005.
134. Pawlak, A., Propagation of Ultrasound near the Phase Transition in Ising Systems, *J. Phys.: Condens. Matter* 1, 7989-8006, 1989.

135. Sherman, E. Ya., Lemmens, P., Busse, B., Oosawa, A. and Tanaka, H., Sound Attenuation Study on the Bose-Einstein Condensation of Magnons in  $\text{TlCuCl}_3$ , *Phys. Rev. Lett.* 91, 057201-1-057201-4, 2003.
136. Moran, T. J., and Lüthi, B., Elastic and Magnetoelastic Effects in Magnetite, *Phys. Rev.* 187, 710-714, 1969.
137. Wang, P. S., and Lüthi, B., Rotational Invariance and Magnetoelastic Phenomena in Paramagnets, *Phys. Rev. B* 15, 2718-2725, 1977.
138. Barmatz, M., Rudnick, I., Velocity and Attenuation of First Sound near the  $\lambda$  Point of Helium, *Phys. Rev.* 170, 224-238, 1968.
139. Mullen, M. E., Lüthi, B., and Stephen, M. J., Sound Velocity in a Nematic Liquid Crystal, *Phys. Rev. Lett.* 28, 799-801, 1972.
140. Golding, B., and Barmatz, M., Ultrasonic Propagation near the Magnetic Critical Point of Nickel, *Phys. Rev. Lett.* 23, 223-226, 1969.
141. Jimbo, T., and Elbaum, C., Ultrasonic Studies of Antiferromagnetic Resonance in  $\text{RbMnF}_3$  near the Néel Temperature, *Phys. Rev. Lett.* 28, 1393-1396, 1972.
142. Bachellerie, A., Joffrin, J., and Levelut, A., Attenuation of High-Frequency Acoustic Waves on the Low-Temperature Side of the  $\text{MnF}_2$  Néel Point, *Phys. Rev. Lett.* 30, 617-620, 1973.
143. Tanaka, T., Meijer P. H. E., and Barry J. H., Theory of Relaxation Phenomena near the Second-Order Phase-Transition Point, *J. Chem. Phys.* 37, 1397-1402, 1962.
144. Erdem, R., and Keskin, M., Sound Attenuation in a Spin-1 Ising System near the Critical Temperature, *Phys. Lett. A* 291, 159-164, 2001.
145. Keskin, M. and Erdem, R., Critical Behaviors of the Sound Attenuation in a Spin-1 Ising Model, *J. Chem. Phys.* 118, 5947-5954, 2003.
146. Erdem, R., and Keskin, M., On the Temperature Dependence of the Sound Attenuation Maximum as a Function of Frequency and Magnetic Field in a Spin-1 Ising Model near the Critical Region, *Phys. Lett. A* 326, 27-31, 2004.
147. Erdem, R., and Keskin, M., Sound Dispersion in a Spin-1 Ising System near the Second-Order Phase Transition Point, *Phys. Lett. A* 310, 74-79, 2003.
148. Kikuchi, R., and Sato, H., Substitutional Diffusion in an Ordered System, *J. Chem. Phys.* 51, 161-181, 1969.

149. Kikuchi, R., and Sato, H., Correlation Factor in Substitutional Diffusion in Binary Alloys, *J. Chem. Phys.* 53, 2702-2713, 1970.
150. Sato, H., and Kikuchi, R., Cation Diffusion and Conductivity in Solid Electrolytes. I, *J. Chem. Phys.* 55, 677-702, 1971.
151. Sato, H., and Kikuchi, R., Kinetics of Order-disorder Transformations in Alloys, *Acta Metall.* 24, 797-809, 1976.
152. Gschwend, K., Sato, H., and Kikuchi, R., Kinetics of Order-disorder Transformations in Alloys. II, *J. Chem. Phys.* 69, 5006-5019, 1978.
153. Qin, Z., Allnatt, A. R., and Allnatt, E. L., Approximate Expressions for the Phenomenological Coefficients of a Binary Alloy with Short Range Order, *J. Phys.: Condens. Matter* 10, 5295-5308, 1998.
154. Meijer, P. H. E., Keskin, M., and Bodegom, E., A Simple Model for the Dynamics towards Metastable States, *J. Stat. Phys.* 45, 215-232, 1986.
155. Keskin, M., and Meijer, P. H. E., A Model for Quenching via Hidden Variables; Non-equilibrium Behaviour of a System with two Long Range Order Parameters, *Physica A* 122, 1-12, 1983.
156. Keskin, M., and Meijer, P. H. E., Dynamics of a Spin-1 Model with the Pair Correlation, *J. Chem. Phys.* 85, 7324-7333, 1986.
157. Keskin, M., A Model for Quenching via Hidden Variables; Non-equilibrium Behaviour of a System with two Long Range Order Parameters II: Influence of a Magnetic Field, *Physica A* 135, 226-236, 1986.
158. Keskin, M., Ari, M., and Meijer, P. H. E., Stable, Metastable and Unstable Solutions of a Spin-1 Ising System Obtained by the Molecular-field Approximation and the Path Probability Method, *Physica A* 157, 1000-1017, 1989.
159. Mohri, T., and Miyagishima, S., Two Distinctive Relaxation Times Leading to Kinetic Behavior in Configurational Relaxation Process, *Mater. Trans., JIM* 39, 154-158, 1998.
160. Ni, J., and Gu, B., Transient Ordered States During Relaxation from a Quenched Disordered State to an Equilibrium Disordered State, *Phys. Rev. Lett.* 79, 3922-3925, 1997.

161. Ni, J., and Gu, B., Transient Ordered States in the Fe-Co-Al Ternary Alloy, *Phys. Rev. B* 61, 8598-8601, 2000.
162. Ni, J., Gu, B., Ashino, T., and Iwata, S., Kinetics of Ordering for a Ternary Alloy in the Pair Approximation, *J. Chem. Phys.* 113, 10272-10278, 2000.
163. Ohmi, H., Uchida, T., and Wada, K., Microscopic Kinetic Mechanism in Current-Induced Conversion on Si(001) Vicinal Surface, *Jpn. J. Appl. Phys.* 35, 226-233, 1996.
164. Wang, C. C., Akbar, S. A., Demixing of (Ni,Co)O under an Oxygen Potential Gradient(II), *J. Electrochem. Soc.* 139, L77-L78, 1992.
165. Masuda-Jindo, K., and Kikuchi, R., Computer Simulation Study on the Atomic Structure of Semiconductor Heterostructures, *Comp. Mater. Sci.* 14, 190-196, 1999.
166. Masuda-Jindo, K., and Kikuchi, R., Study of the Misfit Dislocations in Semiconductor Heterostructures by Density Functional TB Molecular Dynamics and Path Probability Methods, *J. Microelectronics* 34, 615-617, 2003.
167. Mohri, T., Ichikawa, Y., and Suzuki, T., Configurational Kinetics for Disorder-L1<sub>2</sub> Transition Studied by the Path Probability Method, *J. Alloys and Comp.* 247, 98-103, 1997.
168. Ohno, M. and Mohri, T., Phase Field Calculations with CVM Free Energy for a Disorder-B2 Transition, *Mater. Sci. Eng. A* 312, 50-56, 2001.
169. Özer, M., and Erdem, R., Dynamics of Voltage-gated Ion Channels in Cell Membranes by the Path Probability Method, *Physica A* 331, 51-60, 2004.
170. Keskin, M., Escape from the Metastable Equilibrium States via Hidden Thermodynamic Variables, *Doktora Tezi*, The Catholic University of America, Washington D.C., 1982.
171. Minorski, N., *Nonlinear Oscillations*, Van Nostrand, New York 1962.
172. Jones, H., *Rapid Solidification of Metals and Alloys*, Institution of Metallurgists, London 1982.
173. Luborsky, F. E., (Ed.), *Amorphous Metallic Alloys*, Butterworths, London, 1983.
174. Turnbull, D., In: R. L. Ashbrook (Ed.), *Rapid Solidification Technology*, American Society for Metals, Park, OH 1983.

175. Juan-Chico, J., Bellido, M. J., Acosta, A. J., Valencia, M., and Huertas, J. L., Analysis of Metastable Operation in a CMOS Dynamic D-latch, *Analog Integr. Circ. Signal Process.*, 14, 143-157, 1997.
176. Bouabci, M. B., and Carneiro, C. E. I., Eliminating Metastability in First-order Phase Transitions, *Phys. Rev. B* 54, 359-363, 1996.
177. Rachadi, A., and Benyoussef, A., Mixed Cluster Monte Carlo Algorithms for the Blume-Emery-Griffiths Model, *Phys. Rev. B* 68, 064113-1-064113-5, 2003.
178. Obradó, E., Frontera, C., Mañosa, L., and Planes, A., Order-disorder Transitions of Cu-Al-Mn Shape-memory Alloys, *Phys. Rev. B* 58, 14245-14255, 1998.
179. Newman, K. E., and Dow, J. D., Zinc-blende-diamond order-disorder Transition in Metastable Crystalline  $(\text{GaAs})_{1-x}\text{Ge}_{2x}$  Alloys, *Phys. Rev. B* 27, 7495-7508, 1983.
180. Gu, B. L., Newman, K. E., and Fedders, P. A., Role of Correlations in  $(\text{GaSb})_{1-x}\text{Ge}_{2x}$  Alloys, *Phys. Rev. B* 35, 9135-9148, 1987.
181. Gu, B. L., Ni, J., and Zhu, J. L., Structure of the Alloy  $(\text{GaAs})_{1-x}\text{Ge}_{2x}$  and Its Electronic Properties, *Phys. Rev. B* 45, 4071-4076, 1992.
182. Osório, R., Froyen, S., and Zunger, A., Superlattice Energetics and Alloy Thermodynamics of GaAs/Ge, *Solid State Commun.* 78, 249-255, 1991.
183. Osório, R., Froyen, S., and Zunger, A., Structural Phase Transition in  $(\text{GaAs})_{1-x}\text{Ge}_{2x}$  and  $(\text{GaP})_{1-x}\text{Si}_{2x}$  Alloys: Test of the Bulk Thermodynamic Description, *Phys. Rev. B* 43, 14055-14072, 1991.
184. Ni, J., and Gu, B. L., The Metastable Phase Diagram and the Kinetics of Transient Ordered States in a Ternary System, *J. Phys.: Condens. Matter* 10 3523-3534, 1998.
185. Keskin, M., and Ekiz, C., The metastable Phase Diagram of the Blume-Emery-Griffiths Model in addition to the Equilibrium Phase Diagram, *J. Chem. Phys.* 113, 5407-5412, 2000.
186. Erdinç, A., and Keskin, M., Quadrupolar Ordering and Metastable Phase Diagram in a Ferroquadrupolar Phase, *Phys. Lett. A* 320, 28-34, 2003.
187. Keskin, M., and Erdinç, A., Multicritical Phase Diagrams of the Blume-Emery-Griffiths Model with Repulsive Biquadratic Coupling Including



- Metastable Phases: the Pair Approximation and the Path Probability Method with Pair Distribution, *J. Magn. Magn. Mater.* 283, 392-408, 2004.
188. Canko, O., and Keskin, M., Analytical Expressions of the Order Parameters near the Transition Temperatures in the Spin-3/2 Ising System with Bilinear and Biquadratic Interactions, *Int. J. Mod. Phys. B* 20, 455-467, 2006.
189. Keskin, M., and Canko, O., Theory of Relaxation Phenomena in a Spin-3/2 Ising System near the Second-order Phase Transition Temperature, *Phys. Lett. A* 348, 9-16, 2005
190. Zhu, T. C., Maris, H. J., and Tauc, J., Attenuation of Longitudinal-acoustic Phonons in Amorphous SiO<sub>2</sub> at Frequencies up to 440 GHz, *Phys. Rev. B* 44, 4281-4289, 1991.
191. Canko, O., and Keskin, M., Spin-3/2 Ising Model by the Cluster Variation Method and the Path Probability Method, *Physica A* 363, 315-326, 2006.

**ÖZGEÇMİŞ**

Adı ve Soyadı : Osman CANKO  
Baba Adı : Yunus  
Anne Adı : Ayşe  
Doğum Yeri : Gülbayır / Kayseri  
Doğum Tarihi : 09.05.1976

İlk öğrenimini Kayseri’de, orta öğrenimini Ankara’da ve lise öğrenimini de Kayseri’de tamamladı. 1997 yılında Erciyes Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünden mezun oldu. Aynı yıl Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Ana Bilim Dalında yüksek lisansa başladı. 2000 yılında yüksek lisans programını tamamlayıp aynı enstitüde doktora öğrenimine başladı. Halen Erciyes Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü’nde araştırma görevlisi olarak görev yapmaktadır. Phys. Rev. E, J. Phys.: Condens. Matter., Physica A, Phys. Lett. A, J. Magn. Mater., Int. J. Mod. Phys. B, Eur. Phys. J. B dergilerinde 17 adet makalesi yayımlandı. İstanbul Fizik Günleri, Türk Fizik Derneği Kongreleri, Balkan Fizik Topluluğunun 6. Uluslararası Konferansı ve Statistical Physics and Dynamical Systems: Methods and Applications, Nor-Amberd, Ermenistan, toplantılarında sunulmuş toplam 21 adet bildirisi vardır.

İletişim adresi : canko@erciyes.edu.tr  
Telefon : 0 535 500 80 19