

CELAL BAYAR ÜNİVERSİTESİ * FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**NEMATİK-İZOTROPİK FAZ GEÇİŞLERİNİN GENELLEŞTİRİLMİŞ CLUSTER
VARYASYON YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Özgür AFŞAR

Anabilim Dalı : Fizik

Programı : Katıhal Fiziği

MANİSA 2005

CELAL BAYAR ÜNİVERSİTESİ * FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**NEMATİK-İZOTROPİK FAZ GEÇİŞLERİNİN GENELLEŞTİRİLMİŞ CLUSTER
VARYASYON YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Özgür AFŞAR

Anabilim Dalı : Fizik

Programı : Katıhal Fiziği

MANİSA 2005

CELAL BAYAR ÜNİVERSİTESİ * FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

NEMATİK-İZOTROPİK FAZ GEÇİŞLERİNİN GENELLEŞTİRİLMİŞ CLUSTER
VARYASYON YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Özgür AFŞAR

Tezin Enstitüye Verildiği Tarih : 16.01.2006

Tezin Savunulduğu Tarih : 15.12.2005

Anabilim Dalı : Fizik

Programı : Katıhal Fiziği

Tez Danışmanı : Yrd.Doç.Dr Özhan KAYACAN

Diğer Jüri Üyeleri : Doç.Dr. Harun EĞRİFES

Yrd.Doç.Dr. Halil Babacan

MANİSA 2005

İÇİNDEKİLER

TEŞEKKÜR.....	I
ÖZET.....	II
ABSTRACT.....	III
1. GİRİŞ.....	1
2. NEMATİK-İZOTROPİK FAZ GEÇİŞİ İÇİN GENELLEŞTİRİLMİŞ CLUSTER VARYASYON TEORİSİ.....	4
2.1 Nematik Sıvı Kristallerin Maier-Saupe Modeli.....	4
2.1.1 Teorinin Amacı ve Amacına Gidiş Yolu.....	4
2.1.2 Düzen Parametresinin Tanımı	5
2.1.3 Düzen Parametresi Deneysel Olarak Ölçülmesi.....	5
2.1.4 Anizotropik Moleküllerin Dipol-Dipol Etkileşim Enerjisi	6
2.1.5 Ortalama Düzen Parametresinin Hesabı	7
2.1.6 Sistemin Ortalama Potansiyel İfadesi.....	8
2.1.7 Sistemin Entropi İfadesi.....	8
2.1.8 Sistemin Serbest Enerjisi.....	9
2.1.9 Teorinin Yetersizlikleri.....	10
2.1.10 Modeli İyileştirme çabaları.....	10
2.2 Moleküler İstatistik Teori.....	11
2.2.1 Teorinin Amacı ve Amacına Gidiş Yolu.....	11
2.2.2 Moleküller Arası Dispersiyon Ve İtme Kuvvetlerinin Oluşumu.....	11
2.2.3 Sistemin Ortalama Potansiyel Enerjisi.....	12
2.2.4 Sistemin Entropi İfadesi.....	13
2.2.5 Sistemin Helmutz Serbest Enerjisi.....	14
2.2.6 Teorinin Getirdiği Yenilikler.....	18
3. NEMATİK-İZOTROPİK FAZ GEÇİŞİ İÇİN CLUSTER VARYASYON TEORİSİ VE TSALLİS TERMOİSTATİSTİĞİ ÇERÇEVESİNDE GENELLEŞTİRİLMESİ.....	19
3.1 Tsallis termostatistiği.....	20
3.2 Cluster Varyasyon Metodu ve Tsallis istatistiği Çerçevesinde Genelleştirilmesi.....	24
4. SONUÇLAR VE ÖNERİLER.....	28
KAYNAKLAR.....	32
ÖZGEÇMİŞ	

TEŞEKKÜR

Öncelikle yüksek lisans öğrenimim boyunca her türlü desteğiyle yanımda olan ve bilgi birikimini benimle paylaşan çok değerli danışmam hocam Yrd. Doç. Dr. Özhan Kayacan'a teşekkürün çok az kaldığını bilerek sonsuz minnetlerimi sunuyorum. Ben ve diğer yüksek lisans öğrencilerine çalışmalarını boyunca uygun çalışma ortamlarını sunan değerli bölüm başkanımız Doç. Dr. Nurdağın Can'a teşekkürlerimi sunuyorum. Kendilerinden çok şey öğrendiğim, yüksek lisans öğrenimim boyunca bana hem hocalık hem de ağabeylik yapan değerli hocalarım Yrd. Doç. Dr. Halil Babacan, Yrd. Doç. Dr. Ahmet Ataç ve Yrd. Doç. Dr. Yüksel Karabulut'a teşekkürlerimi sunuyorum.

Kendileriyle tanıştığım için her zaman mutlu olduğum sevgili hocalarım Zekai Tek, Rıfki Odabaşı ve Hasan Ali Aygör'e desteklerinden dolayı teşekkür ediyorum.

Fikir ve önerilerini benimle paylaşan ve manevi desteğini esirgemeyen çok değerli kardeşim Arş. Gör. Fehmi Bardak ve sevgili eşi Cemile'ye, oda Arkadaşım Ahmet Demir'e ve değerli hocam Arş. Gör. Mehmet Ayvacıklı'ya teşekkürlerimi sunuyorum.

Yüksek lisans öğrenimim boyunca tüm desteğiyle yanımda olan kardeşim Yiğit'e ve fedakar annem Gülay Afşar'a sonsuz teşekkürlerimi sunuyorum ve bu tezi kendilerine ithaf ediyorum.

ÖZET

Bu çalışmada ilk adım olarak nematik sıvı kristallerin bazı istatistiksel teorileri bu konunun gelişimine göre göz önüne alındı. Daha sonra nematik-izotropik faz geçişinin Maier-Saupe modeli için cluster varyasyon modeli, nematik-izotropik faz geçişi ele alınarak kullanılan bir formalizm ile genelleştirildi. q' ya bağlı formalizm üç ve dört parçacık cluster varyasyon hesaplarını basitleştirir. Uzun menzil düzen parametresi araştırıldı ve olası genelleştirmenin etkisi entropik indeksin bazı değerleri için gösterildi. Aynı zamanda entropik indekse karşı gelen nematik-izotropik geçiş sıcaklığındaki uzun menzil düzen parametresinin kritik değerleri kaydedildi.

Anahtar kelimeler: Tsallis termostatistiği, cluster varyasyon teorisi, nematik-izotropik geçiş.

ABSTRACT

As first step in this study, some statistical theories of nematic liquid crystals have been considered according to developing of this matter. Later than, a cluster variation theory for the Maier-Saupe model of the nematic-isotropic phase transition is, for the first time, generalized by using nonextensive formalism to examine the nematic-isotropic phase transition. This q -dependent formalism simplifies the cluster variation calculations compared with three- and four-particle cluster variation methods. The long range order parameter is investigated and the effect of the possible generalization is shown for some values of the entropic index. Also the critical value of the long range order parameter at the nematic-isotropic transition temperature vs. the entropic index is reported.

Keywords: Tsallis thermostatistics, cluster variation theory, nematic-isotropic transition.

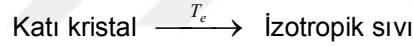
1.GİRİŞ

İzotropik bir sıvı ile katı kristal arasında bulunan bir ara basamak haline sahip maddeye sıvı kristal denir. Bir sıvı kristal fazındaki madde ne bir izotropik sıvı kadar akışkan ne de bir katı kristal kadar katıdır. Yani belirli bir akışkanlığı ancak gösterir.

Kristal içindeki moleküllerin düzenli olduğu, sıvı içindikilerin ise düzensiz olduğu sıvılar ve kristaller arasındaki temel ayrılıktır. Kristalde moleküller belirli doğrultularda moleküler koordinatlarını yöneltmek ve bir örgüdeki belirli yerleri işgal etmek zorunda bırakılırlar. Yani bir kristalde var olan düzen hem konumsal hem de yönelimseldir. Buna karşıt olarak bir sıvıdaki moleküller moleküler eksenleri ile buldukları kap içinde random olarak yayılırlar. Bu nedenle izotropik sıvıda konumsal ve yönelimsel düzen yoktur.

Bir kristalilik fazda X ışını saçılması deneyleriyle düzen, izotropik sıvılarda ise rahat bir akışkanlık olması sebebiyle düzensizlik kanıtlanmıştır. (Chandrasekhar et al, 1969). Sıvı kristaller ise kristalilik katıda bulunan bazı düzen karakteristiklerine ve aynı anda izotropik sıvıda bulunan bazı düzensizliklere sahiptirler. Sıvı kristal fazındaki moleküller bir sıvıdaki moleküller çok fazla benzer fakat onlar bazen bazı konumsal düzenlerini bazen de bazı yönelimsel düzenlerini sürdürürler.

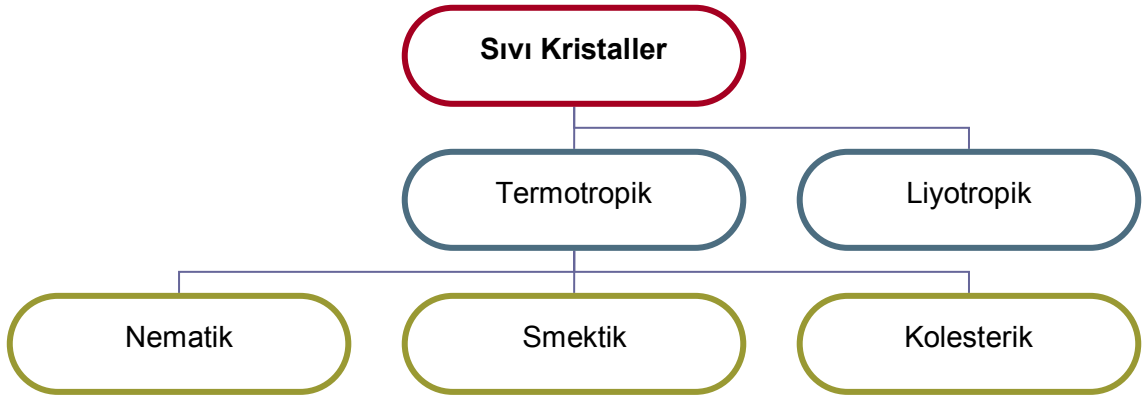
Kristallerin çoğu belirli bir erime sıcaklığında sıvı hale geçmekte yani erimekte dirler.



Bir kısım kristaller de ise erime , hem katı kristal halinin hem de izotropik sıvının bir takım özelliklerini içinde barındıran birkaç basamak halinde meydana gelir. Bu ara duruma sıvı kristal hali veya ara hal anlamına gelen mezomorfik hal denir. Birkaç bin tane organik bileşiğin sıvı kristal faza sahip olduğu bilinmektedir. (Chandrasekhar, 1977).



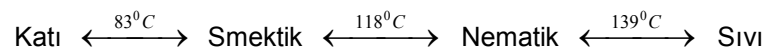
Sıvı kristaller kendi içlerinde en genel olarak mezofaz durumuna geçiş yollarına bağlı olarak termotropik (geçiş oluşumu sıcaklık etkisi ile) sıvı kristal ve lyotropik (geçiş oluşumu çözücü madde etkisi ile) sıvı kristal olmak üzere ikiye ayrılırlar. Termotropik sıvı kristaller ise moleküllerinin konumsal ve yönelimsel düzeninin çeşitliliğine bağlı olarak nematik , kolesterik ve smektik sıvı kristaller olmak üzere üç kısımda sınıflandırılır. Bu çalışmada termotropik sıvı kristallerden olan nematikler üzerinde durulacak ve istatistiksel çalışmalar yapılacaktır.



- Nematik: Uzun menzil düzenini yönelimsel olarak koruyan konumsal olarak korumayan moleküllerden oluşurlar.
- Smektik: Moleküllerin konumsal düzeni korunurken yönelimsel düzenleri bir dereceye kadar korunur.
- Kolesterik: Nematik fazla aynı özelliklere sahiptir fakat molekülleri tercih edilen yöne dik dönen bir eksene sahiptir. (Chandrasekhar, 1977., de Gennes, 1974).

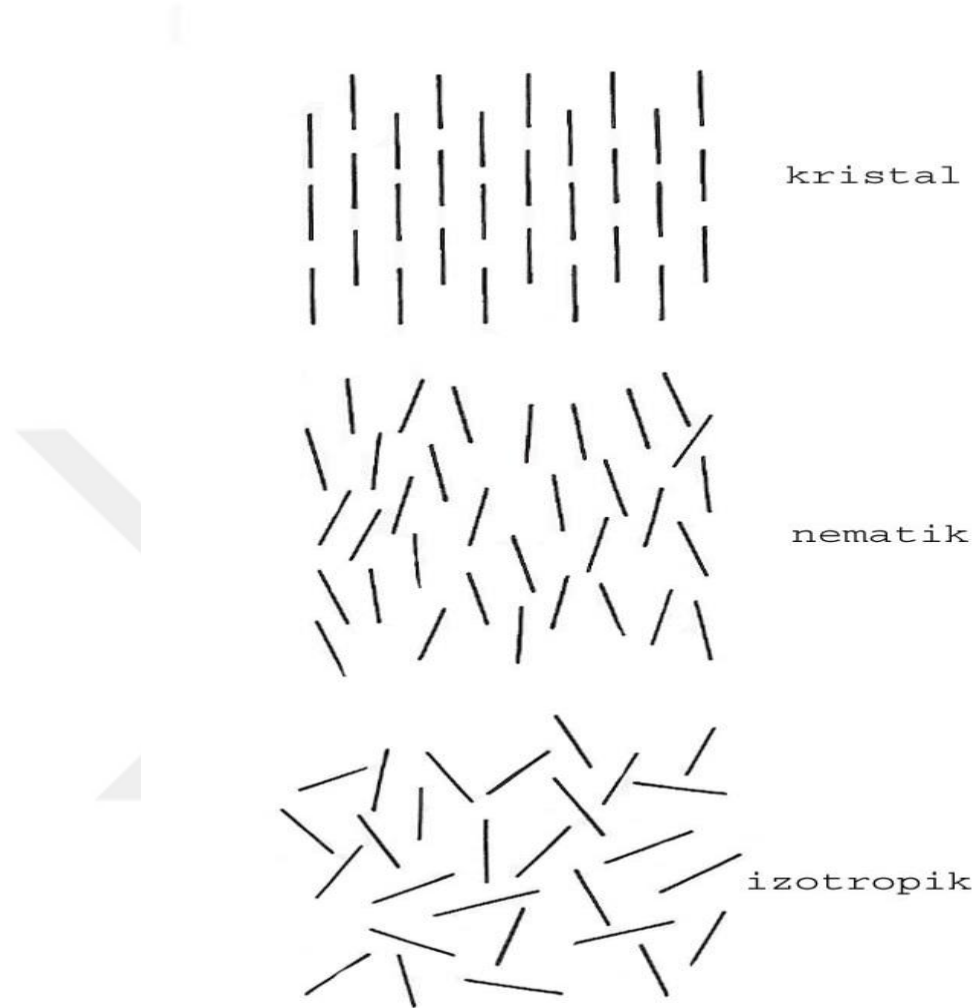
Bir katının ısıtılması ile oluşabilecek olan mezofaz veya mezofaz basamakları katı kristalin yapısına göre değişir. Yani bir katı kristal ısıtılması yoluyla doğrudan izotropik sıvı fazına geçebileceği gibi bir veya birkaç mezofaz durumu da gerçekleşebilir. Bir katı kristalin ısıtılması yoluyla sıvı kristal vermesi için sınırlayıcı etken numunenin kuvvetli olarak anizotropik ve uzunca moleküllerden oluşmasıdır.

Örneğin p-anisol amino tarçın asidi etil esteri kristali erirken şu sıvı kristal basamaklarından geçer. (Cemil Şenvar ve diğerleri, 1980).



Burada katının ısıtılmasıyla sistemin enerjisi artar ve uzun moleküllerin uçları arasındaki bağlar zayıflar. İlk olarak moleküllerin uçları arasındaki zayıf bağlar kopar fakat uzun zincirler arası bağlar ise kopmaz. Bu yüzden konumsal düzen korunurken yönelimsel düzen bir dereceye kadar korunur. Yani oluşan mezofaz, smektik haldir. Sistemin ısısının daha da artırılmayla uzun zincirler arası bağlar da kopar ve konumsal düzen kaybolur fakat moleküllerin belirli bir eksen etrafında sağa ya da sola yönelimleri devam eder. Yani nematik hal oluşur.

Isının daha da artırılmasıyla sistemin düzensizliği daha da artar ve moleküller random olarak yayılır. Yani izotropik sıvı oluşur.



Şekil 1. (Kristal-Nematik-Sıvı)

Katı kristalde moleküller belirli doğrultularda moleküler koordinatlarını yöneltmek ve bir örgüdeki belirli yerleri işgal etmek zorunda bırakılırlar. Yani bir kristalde var olan düzen hem konumsal hem de yönelimseldir.

Nematiklerde konumsal düzen yoktur. Moleküllerin denge konumları birbirlerine göre kaymış olmasına rağmen moleküllerin ortak bir doğrultu etrafında sağa ya da sola yönelimlerini gözlemleyebiliriz. Yani nematik sıvı kristaller hemen hemen bir yönelimsel düzene sahiptir.

Smektiklerde moleküllerin denge konumları aynı doğrultudadır. Buna göre smektik sıvı kristallerde konumsal düzenin varlığından söz edebiliriz.

Ayrıca moleküller yine bir doğrultu etrafında sağa veya sola yönelime sahiptir. Yani smektik sıvı kristaller konumsal düzenin yanında bir dereceye kadar da yönelimsel düzene sahiptir.

Bir sıvıdaki moleküller moleküler eksenleri ile buldukları kap içinde random olarak yayılırlar. Bu nedenle izotropik sıvıda konumsal ve yönelimsel düzen yoktur.

Bu çalışmada nematik sıvı kristallerin Cluster varyasyon teorisi nonextensive bir istatistik olan Tsallis termostatistiği çerçevesinde geliştirilmeden önce extensive olan fiziksel sistemleri incelemede oldukça başarılı olan Boltzman-Gibbs istatistiği çerçevesinde yapılan istatistiki çalışmalardan Maier-Saupe teorisi , Moleküler İstatistik teori ve Cluster Varyasyon Teorisi anlatılacak ve bunlar yetersizlikleri ve getirdiği yenilikler açısından Genelleştirilmiş Cluster varyasyon teorisi ile karşılaştırılacaktır.

2. NEMATİK-İZOTROPİK FAZ GEÇİŞİ İÇİN GENELLEŞTİRİLMİŞ CLUSTER VARYASYON TEORİSİ

Katı kristal, nematik sıvı kristal ve izotropik sıvı arasındaki düzen farklılıklarını bize kesin olarak verebilecek , kristalin düzeninin ölçüsünü belirleyen düzen parametresi ve kristalin kararlılığın bir ölçüsü olan serbest enerji gibi fiziksel niceliklerin teorik hesabında kullanılan bazı istatistiksel teoriler vardır. Bunlar ;

- 1-) Nematik Sıvı Kristallerde Maier-Saupe Teorisi
- 2-) Nematik Sıvı Kristallerin Moleküler İstatistik Teorisi
- 3-) Cluster Varyasyon Teorisi
- 4-) Genelleştirilmiş Cluster Varyasyon Teorisi

2.1 Nematik Sıvı Kristallerin Maier-Saupe Teorisi

2.1.1 Teorinin Amacı ve Amacına Gidiş Yolu

Bu teori bir ortalama alan teorisidir. N tane moleküle sahip bir kristalin bir tek molekülünün kristalin diğer (N-1) tane molekülünün oluşturduğu ortalama alan içinde bulunduğu kabul edilir. (Maier and Saupe, 1958., 1960., 1961). Buradan yola çıkarak ortalama bir düzen parametresi tanımlanır. Bu tanım yapılırken mükemmel bir düzen içinde yapılan katı kristalin düzen parametresi 1, bulunduğu kap içinde random olarak yayılmış izotropik sıvının düzen parametresi 0 kabul edilir. Bu iki sınır durum göz önüne alınarak nematik sıvı kristal için tanımlanmış düzen parametresinin farklı nematik sıvı kristaller sıcaklık ile değişimi ve sistemin serbest enerji grafiğinden nematik – izotropik faz geçişi için mümkün olan kritik sıcaklık hesaplanır ve elde edilen sonuçlar deneysel veriler ile karşılaştırılır.

2.1.2 Düzen Parametresinin Tanımı

Düzen parametresi tanımı ilk olarak 1942 yılında Tsvetkov tarafından ortaya atılmıştır. (Chandrasekhar, 1977).

$$S_i = \frac{1}{2}(3\cos^2\theta_i - 1) \quad (2.1)$$

S_i ; i. Molekülün kalan (N-1) moleküle göre düzeni

θ_i ; i. Molekülün uzun moleküler ekseninin kalan (N-1) molekülün ortalama yönelimi ile yaptığı açı

Kristal yapı için ortalama bir düzen parametresinden bahsedecek olursak ;

$$\bar{S} = \frac{1}{2}\langle 3\cos^2\theta - 1 \rangle \quad (2.2)$$

θ ; Moleküllerin teker teker kalan (N-1) molekül ile yaptıkları açılarının ortalaması

Burada ilginç olan şudur;

$\theta = 0^\circ$ ve $\theta = 180^\circ$ için $\bar{S} = 1$ değerini alır. Bu da mükemmel yönelimi gösteren kristalik fazı temsil eder. Ayrıca iki durum için de düzen parametresinin aynı değeri alması bize moleküllerin yönelimi için spin yukarı veya spin aşağı diye bir durumun olmadığını yani moleküllerin silindirik olarak simetrik olduklarını gösterir. Moleküller buldukları sistem içerisinde random olarak yönelindiklerinde $\bar{S} = 0$ değerini alır. Buradan yola çıkarak düzen parametresinin 0 ile 1 arasında bir değer alacağını ve ancak sistemin sıcaklığının değiştirilmesi ile moleküllerin yöneltimsel düzeninin değişeceğinden sıcaklığa bağlı olarak değişeceğini söyleyebiliriz.

2.1.3 Düzen Parametresinin Deneysel Olarak Ölçülmesi

Düzen parametresi deneysel olarak kesin belirlenebilir fiziksel niceliklere doğrudan bağlıdır. Örneğin süseptibilite ve kırılma indisi gibi niceliklerin ölçülmesi ile malzemenin düzen parametresi hakkında kesin sonuçlar elde edebiliriz. (Saupe and Maier, 1961)

Nematik fazda birim hacim başına süseptibilitenin ortalama z bileşeni ;

$$\chi_z = n(\eta_1\langle \cos^2\theta \rangle + \eta_2\langle \sin^2\theta \rangle) \quad (2.3)$$

n ; Birim hacim başına molekül sayısı

η_1 ve η_2 ; Molekülün temel diamagnetik süseptibiliteleri

θ ; Moleküllerin teker teker kalan (N-1) molekül ile yaptıkları açılarının ortalaması

Bu denklem ilerletilirse ;

$$\chi_z = n \left[\bar{\eta} + \frac{2}{3}(\eta_1 - \eta_2)\bar{S} \right] \quad (2.4)$$

burada ;

$$\bar{\eta} = \frac{1}{3}(\eta_1 + 2\eta_2) \quad (2.5)$$

χ_z nin ölçülmesi ile ortalama düzen parametresinin deneysel olarak kesin sonucunu buluruz.

2.1.4 Anizotropik Moleküllerin Dipol-Dipol Etkileşim Enerjisi

Maier –Saupe teorisinde ortalama alan yaklaşımı kullanılarak kristalin her bir molekülünün kristalin kalan (N-1) molekülünün oluşturduğu potansiyel ile etkileşim içinde bulunduğu varsayılıyor. Ayrıca Maier ve Saupe moleküller arasında etkin olan kuvvetlerin anizotropik dispersiyon kuvvetleri olduğunu varsayarak anizotropik moleküllerin dispersiyon etkileşim enerjilerinin dipol-dipol kısmını almışlar ve i. Molekülün kalan (N-1) molekül ile oluşturduğu etkileşim potansiyelini şu tanımlamışlardır ;

$$U_i = -\frac{A}{V^2} \bar{S} \frac{1}{2} (3 \cos^2 \theta_i - 1) \quad (2.6)$$

U_i ; i. Molekülün kalan (N-1) molekül ile oluşturduğu etkileşim potansiyeli

A ; Basınç hacim ve sıcaklıktan bağımsız bir sabit

V ; Molar hacim

Burada bir dipol dipol etkileşmesi söz konusudur.

$$S_{ort} \longrightarrow Dipol \quad \frac{1}{2} (3 \cos^2 \theta_i - 1) \longrightarrow Dipol$$

$$\bar{S} = \frac{1}{2} (3 \cos^2 \theta - 1) = P_2 \quad (\text{Bağlı Legendre polinomlarının ikincisi}) \quad (2.7)$$

$$\frac{1}{2} (3 \cos^2 \theta_i - 1) = P_2$$

2.1.5 Ortalama düzen parametresinin hesabı

Maier-Saupe teorisi Boltzman Gibbs istatistiğini kullanıyor ve burada bir tek molekül için partiyon fonksyonu ;

$$f_i = \int_0^1 \exp \frac{-U_i}{kT} d(\cos \theta_i) \quad (2.8)$$

burada ;

k ; Boltzman sabiti

T ; Sıcaklık

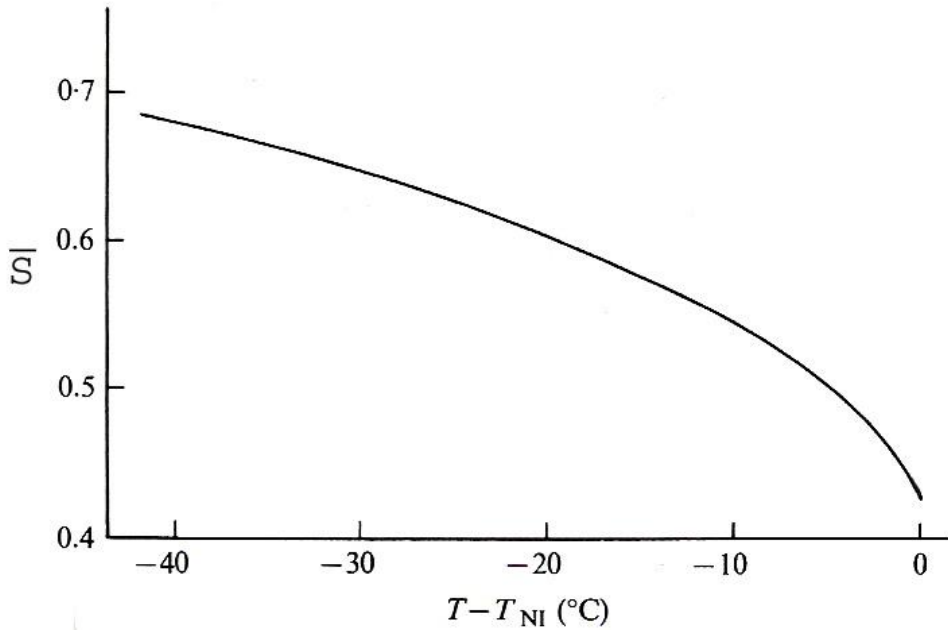
Ortalama düzen parametresi için ;

$$\bar{S} = \frac{S_i f_i}{f_i} \quad (2.9)$$

$$\cos \theta_i = x$$

$$\bar{S} = \int_0^1 \left[\frac{1}{2} (3x^2 - 1) \exp \left(\frac{A}{kTV^2} \bar{S} \frac{1}{2} (3x^2 - 1) \right) \right] dx \quad (2.10)$$

(2.10) denklemini çözülüp \bar{S} nın T ye göre grafiğini çizersek



Şekil 2. P-azoxyanisole için ortalama düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi.

$$T_c = 408 \quad V_c = 225 \text{ cm}^3 \quad A = 13.0 \text{ erg cm}^6$$

2.1.6 Sistemin ortalama potansiyel ifadesi

i. atomun diğer kalan (N-1) tane atomun oluşturduğu bileşke alan ile etkileşim potansiyelini U_i ile vermiştik. Buradan yola çıkarak partisyon fonksiyonu kullanarak ortalama bir potansiyel ifadesi elde edebiliriz.

$$\bar{U} = \frac{N}{2} \frac{U_i f_i}{f_i} \quad (2.11)$$

$$\bar{U} = \frac{N}{2} \left[\frac{-A}{V^2} \bar{S} \frac{1}{2} (3x^2 - 1) \exp\left(\frac{A}{kTV^2} \bar{S} \frac{1}{2} (3x^2 - 1)\right) \right] dx = -\frac{1}{2} NkT B \bar{S}^2 \quad (2.12)$$

burada ;

$$B = \frac{A}{kTV^2} \quad N ; \text{Avagadro sayısı}$$

2.1.7 Sistemin entropi ifadesi

Maier-Saupe bu topluluğu kanonik bir topluluk olarak el alıyor. Boltzman-Gibbs istatistiğine göre kanonik bir topluluğun entropi ifadesi ;

$$S = k\beta U + Nk \ln f \quad (2.13)$$

burada ;

$$\beta = \frac{1}{kT}$$

Gerekli bağıntılar yerine koyulup denklem ilerletilirse ;

$$S = -Nk \left[\frac{1}{2} B \bar{S} (2\bar{S} + 1) - \ln \int_0^1 \exp\left(\frac{3}{2} B \bar{S} \cos^2 \theta\right) d(\cos \theta) \right] \quad (2.14)$$

2.1.8 Sistemin serbest enerjisi

Sistemin Helmotz serbest enerjisi ;

$$F = U - TS \quad (2.15)$$

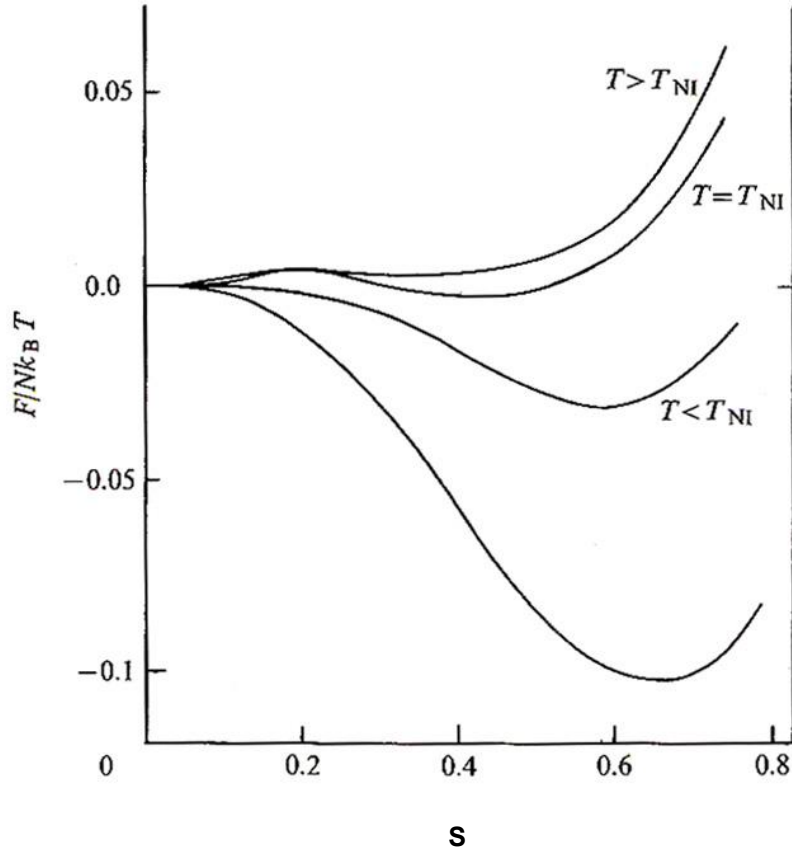
Gerekli bağıntılar yerine konulup işlemlerletilirse ;

$$F = NkT \left[\frac{1}{2} B \bar{S} (S+1) - \int_0^1 \exp \frac{3}{2} BS \cos^2 \theta d \cos \theta \right] \quad (2.16)$$

Serbest enerjinin ne kadar küçük olması sistemin ne kadar kararlı olduğunun bir göstergesidir.

Denge durumunda $\frac{\partial F}{\partial \bar{S}} = 0$ olmalıdır. Çünkü kararlı bir hal olan denge durumunda serbest

enerjinin ortalama düzen parametresi ile değişimi 0 olmalıdır. Bu da $F \rightarrow \bar{S}$ grafiğinde bir minimuma sebep olmalıdır. Buradan yola çıkılarak Maier-Saupe teorisinin teorik hesaplamalarına göre $F \rightarrow \bar{S}$ grafiği ($T = T_c = 408K^0$) çizilirse ;



Şekil 3. P-azoxyanisole için serbest enerjinin ortalama düzen parametresiyle değişimi.

$$T_{NI} = T_c = 408 \text{ K} \quad V_c = 225 \text{ cm}^3 \quad A = 13.0 \text{ erg cm}^6$$

Nematik-izotropik geçiş sıcaklığında görüldüğü üzere grafikte 2 minimum vardır. Birincisi izotropik sıvıya karşılık gelen $\bar{S} = 0$ da ikincisi nematik-izotropik faz geçişine karşılık gelen $S = S_c = 0,4292$ değerinde oluşur. Serbest enerjinin bu minimum değerleri sistemin kararlılığının bir ölçüsüdür. $S = S_c = 0,4292$ noktasında serbest enerjinin minimum olduğu görülür. Bu da kritik sıcaklıkta nematik fazın izotropik fazdan daha kararlı olduğunun göstergesidir. Yani bu sıcaklıkta daha fazla molekül nematik halde bulunma eğilimindedir. $\bar{S} = 0$ a doğru gidildikçe serbest enerjinin arttığını $\bar{S} = 0$ da ise yine bir minimum oluştuğu görülür. Bu da sistemin bu durumda izotropik faza geçtiğini ve yine bir denge durumunda olduğunu gösterir.

2.1.9 Teorinin yetersizlikleri

- Bu teori dipol-dipol etkileşmelerini hesaba katıyor.Uzak etkileşmeleri ve dipol – kuadrupol etkileşmelerini hesaba katmıyor.
- Düzen parametresinin sıcaklık ile değişim grafiği bazı nematikler için (p-azoxyanisole , p-azoxypenthole) deneysel sonuçlar ile uyuşmuyor.
- Bütün nematikler için kritik sıcaklıkta serbest enerjinin düzen parametresi ile değişim grafiğinde ikinci minimum $S = S_c = 0,4292$ noktasında meydana geliyor. Fakat deneysel sonuçlar gösteriyor ki bu minimum noktası 0.25 ile 0.50 arasında değişen bir değere sahiptir.

2.1.10 Modeli iyileştirme çabaları

- Uzak etkileşimler ve dipol-kuadrupol etkileşimleri de hesaba katılarak potansiyel enerji ifadesine yeni çarpanlar eklendi. (Chandrasekhar, S. and Madhusudana, 1970, 1971., 1972., Humphries et al, 1972., 1974).
- Density-functional teori kullanıldı.Bu teoride yoğunluk sıcaklığın bir fonksiyonu olarak yazılır.Sistemin sıcaklığının değiştirilmesiyle sistemin yoğunluğunda meydana gelen değişiklikler göz önüne alınarak potansiyel enerji ifadesine yeni bir çarpan eklenir. (Singh, 2000).
- Teoride kullanılan istatistik (Boltzman Gibbs İstatistiği) değiştirildi. Bu istatistiğin daha genel bir hali olan Tsallis Termo İstatistiği kullanılarak teori iyileştirilmeye çalışıldı. (Kayacan et al, 2001).

2.2 Moleküler İstatistik Teori

2.2.1 Teorinin Amacı ve Amacına Gidiş Yolu

Bu teoride Maier-Saupe teorisine benzer olarak nematik bir sistem için sistemin potansiyel enerji ifadesi ortalama alan yaklaşımı ve Boltzman-Gibbs istatistiğine bağlı kalınarak yazılıyor. Fakat moleküler istatistik teoride , Maier-Saupe teorisinden farklı olarak sistemin potansiyel enerji ifadesi yazılırken moleküller arasındaki dispersiyon kuvvetlerinin yanında birde moleküller arası itme kuvvetlerinin katkısı hesaba katılıyor. (Chandrasekhar and Madhusudana, 1970). Böylece işin içine bir tane daha kuvvetin etkisi sokularak potansiyel enerji ifadesi içinde bir iyileştirme yapılıyor. Daha sonra sistemin kanonik bir topluluk olarak ele alınması ve Boltzman-Gibbs istatistiğinin kullanılması ile nematik sistem için aranan sistemin bazı fiziksel nicelikleri için ortalama değer hesapları kolayca yapılabilir.

2.2.2 Moleküller Arası Dispersiyon ve İtme Kuvvetlerinin Oluşumu

Kuvvetli olarak anizotropik ve molekülleri uzunca olan maddelerin sistemin sıcaklığının uygun şekilde artırılması ile sıvı kristal verme eğiliminde olduğunu söylemiştik. Bu şekilde oluşan bir nematik sistemin moleküler istatistik teoriye göre potansiyel enerji ifadesi, moleküller arası dispersiyon ve itme kuvvetlerinin katkısı ortalama alan yaklaşımı kullanılarak yazılıyor. (Chandrasekhar and Madhusudana, 1970., 1971., 1972).

Moleküller arası dispersiyon kuvvetlerinin kaynağı molekülde çekirdeğe göre hareket halinde olan titreşen elektronlardır. Belirli bir anda molekülün pozitif ve negatif yük merkezleri çakışmaz. Bu anda molekül bir kutuplaşma gösterip bir dipol momente sahip olur. Oluşan bu kısa küçük ömürlü dipoller belirli bir yönelmeye sahiptir ve indüksiyon yoluyla komşu atomları da dipol hale getirirler. İndüksiyon yolu ile oluşan dipol ilk dipole göre anti paraleldir ve bu yüzden moleküller arası bir çekim kuvveti doğar. Yani indüksiyon yolu ile oluşan dipoller ortamda baştan beri var olan dipollerle etkileşerek bir dispersiyon çekim enerjisi oluştururlar.

Moleküller arası itme kuvvetleri de moleküllerdeki atomların çekirdekleri ve elektronları arasındaki itme etkisinden doğar. moleküllerdeki atomların çekirdekleri kendi aralarında, elektronları kendi aralarında bir itme kuvveti doğurur. Bir kristalik fazın ısıtılması ile oluşan mezomorfik halde moleküllerin konumsal ve yönelimsel düzeni kaymıştır. Böylece çekirdeklerin ve de elektronların kristalik faza göre diğer moleküldeki çekirdek ve elektronlar ile oluşturdukları itme merkezleri yer değiştirir. Moleküller arası itme enerjisi de çubuk benzeri moleküllerin itme merkezlerinin bu yer değiştirmesine göre yazılmıştır.

Moleküler istatistik teoride ortalama alan yaklaşımı kullanılarak yazılan sistemin potansiyel enerji ifadesinde dispersiyon ve itme enerjilerinin dipol-dipol ve dipol-kuadrupol kısmının alınmış ve böylece bu teoride Maier-Saupe teorisine göre sadece kısa menzilli etkileşimler değil uzun menzilli etkileşimlerde hesaba katılmıştır.

2.2.3 Sistemin Ortalama Potansiyel İfadesi

Molekülün yüksek geometrik anizotropisi nematik fazın oluşumu için gerekli bir şarttır. En son teorik çalışmalar itme ve dispersiyon etkileşimleri hesaba katıldığında nematik bir topluluktaki bir molekülün potansiyel enerjisinin $\cos^2 \theta_i$ li bir kuvvet serisi olarak tarif edilebildiğini gösterir[9]. Burada θ_i molekülün uzun ekseninin ortamın tek eksenli doğrultusu ile yaptığı açıdır. İtme enerjisi bu hesaplamalarda $(2n+1)$ itme merkezleri tarafından çubuk benzeri moleküllerin yerinin değiştirilmesi ile hesaplandı ve dispersiyon etkisine dipol-dipol ve dipol-kuadrupol katkısı anizotropik osilatör modeline göre hesaplandı. İtme ve dispersiyon enerjilerinin toplamı için V^{-3} lü bir ortalama hacme bağlılığı göz önüne alınarak yönelimsel enerjinin izotropik fazda kaybolduğu şartı ve ortalama alan yaklaşımı kullanılarak potansiyel fonksiyonu şu şekilde indirgenir ;

$$U_i = -V^{-3} \left[BS_1 \left(\frac{3 \cos^2 \theta_i - 1}{2} \right) + D \left(S_1 \frac{5 \cos^4 - 1}{4} + S_2 \frac{3 \cos^2 \theta_i - 1}{2} \right) \right] \quad (2.17)$$

Burada B ve D sabitlerdir ve V molar hacimdir.

$$S_1 = \left\langle \frac{3 \cos^2 \theta - 1}{2} \right\rangle$$

$$S_2 = \left\langle \frac{5 \cos^4 \theta - 1}{4} \right\rangle \quad (2.18)$$

$D=0$ ve (1) denklemini hacme bağlılığı V^{-2} olarak alınırsa denklem Maier-Saupe tarafından kullanılan potansiyel fonksiyonuna indirgenir. Bu da bize gösteriyor ki Maier-Saupe teorisi , Moleküler İstatistik teori içinde özel bir durumdur ve Teori bu durumda indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak evrensel bir eğri verir.

Moleküler istatistik teoriye dayanılarak yazılan potansiyel enerji fonksiyonu;

$$U_i = -V^{-3} (a'X_i^4 + b'X_i^2 + c') \quad (2.19)$$

burada ;

$$a' = \frac{5}{4}DS_1 \quad , \quad b' = \frac{3}{2}(BS_1 + DS_2) \quad , \quad c' = -\frac{1}{4}[2BS_1 + D(S_1 + 2S_2)] \quad (2.20)$$

$$X = \cos \theta \quad , \quad X_i = \cos \theta_i$$

Moleküler istatistik teori incelenen sistemi kanonik bir topluluk olarak ele alıyor ve buna dayanarak Boltzman-Gibbs istatistiğini kullanıyor. Buna göre sistem için bir partiyon fonksiyonu tanımlanırsa ;

$$f_i = \int_0^1 \exp \frac{-U_i}{kT} d(\cos \theta_i) \quad (2.21)$$

Sistemin ortalama potansiyel ifadesini , tanımlanan partiyon fonksiyonunu ve i. molekülün potansiyel enerji fonksiyonunu kullanarak yazarsak ;

$$\bar{U} = \frac{N}{2} \frac{\int_0^1 -V^{-3} (a'X_i^4 + b'X_i^2 + c') \exp \left[\frac{1}{kTV^3} (a'X_i^4 + b'X_i^2 + c') \right] dX_i}{\int_0^1 \exp \left[\frac{1}{kTV^3} (a'X_i^4 + b'X_i^2 + c') \right] dX_i} \quad (2.22)$$

2.2.4 Sistemin Entropi İfadesi

Kanonik bir topluluğun entropi ifadesi

$$S = k\beta U + Nk \ln f \quad (2.23)$$

Burada gerekli bağıntılar yerine yazılırsa ;

$$S = -Nk \left[\left(a \langle X_i^4 \rangle + b \langle X_i^2 \rangle \right) - \log \int_0^1 \exp(aX_i^4 + bX_i^2) dX_i \right] \quad (2.24)$$

burada ;

$$a = \frac{a'}{kTV^3} \quad \text{ve} \quad b = \frac{b'}{kTV^3}$$

2.2.5 Sistemin Helmotz Serbest Enerjisi

Sistemin Helmotz serbest enerjisi ;

$$F = U - TS \quad (2.25)$$

Gerekli bağıntılar yerine konulup işlem ilerletilirse ;

$$F_S = NkT \left[\frac{1}{2} \langle aX_i^4 + bX_i^2 - c \rangle - \log \int_0^1 \exp(aX_i^4 + bX_i^2) HX_i \right] \quad (2.26)$$

burada ;

$$c = \frac{c'}{kTV^3}$$

Düzenli sistemin denge durumu için

$$\left(\frac{\partial F_S}{\partial S_1} \right)_{V,T} = \left(\frac{\partial F_S}{\partial S_2} \right)_{V,T} = 0 \quad (2.27)$$

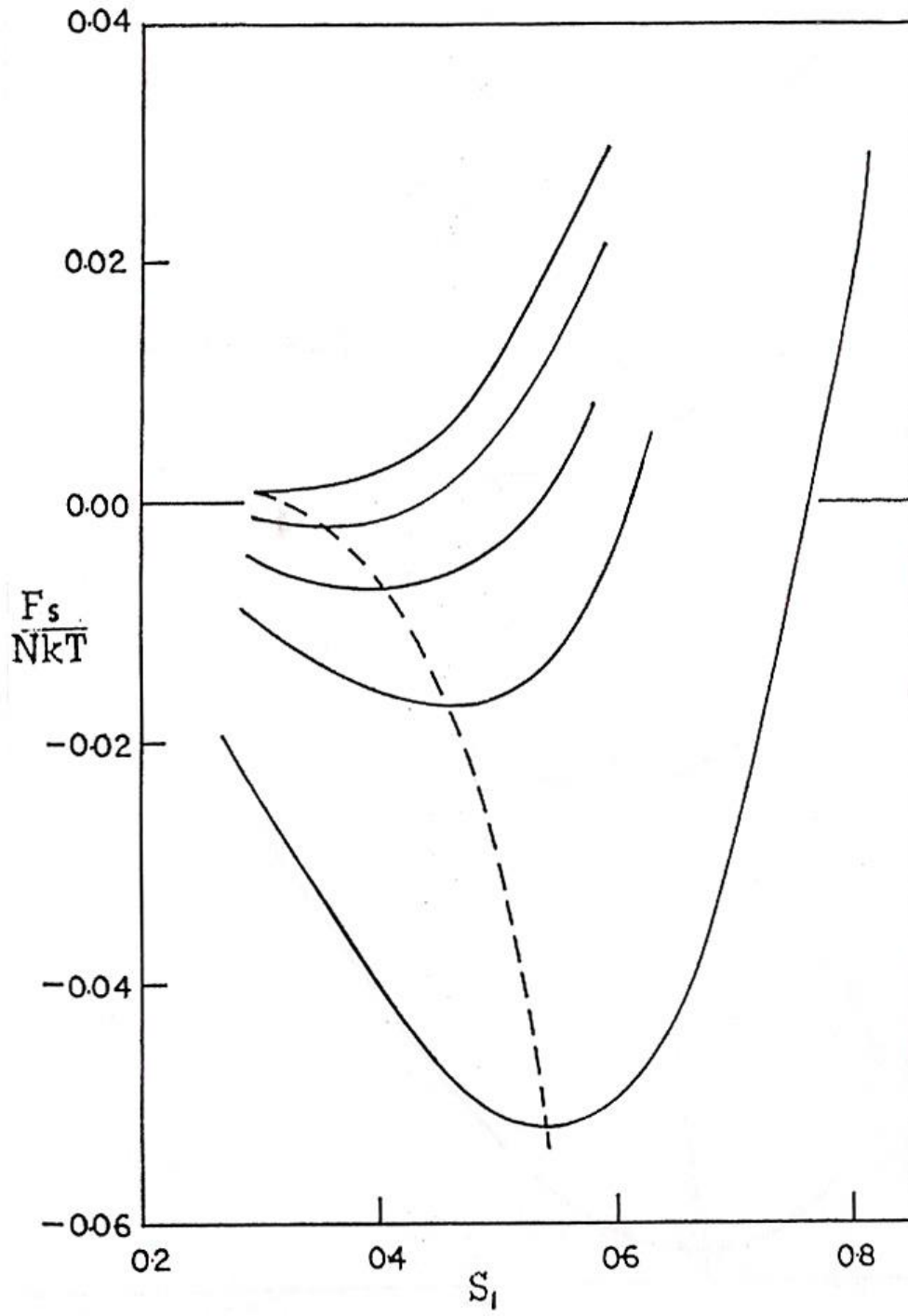
$$\left(\frac{\partial^2 F_S}{\partial^2 S_1} \right)_{V,T} > 0 \quad \text{ve} \quad \left(\frac{\partial^2 F_S}{\partial^2 S_2} \right)_{V,T} > 0 \quad (2.28)$$

Serbest enerjinin bu koşullar altında aynı zamanda bir minimum olduğu şekil 4-5-6 da görülür. Teorideki karmaşık integraller a ve b değerlerinin bir oranı için bilgisayar kullanılarak 10^5 de 1 kesinlik ile çözülebilir. Bu bilgilerden çıkan a,b,B,D değerlerinin örnek bir takımı için serbest enerjiler şekil 4-5-6 da gösterildiği üzere çizilmiştir. Her şekilde a/b nin verilmiş bir değeri için S_1

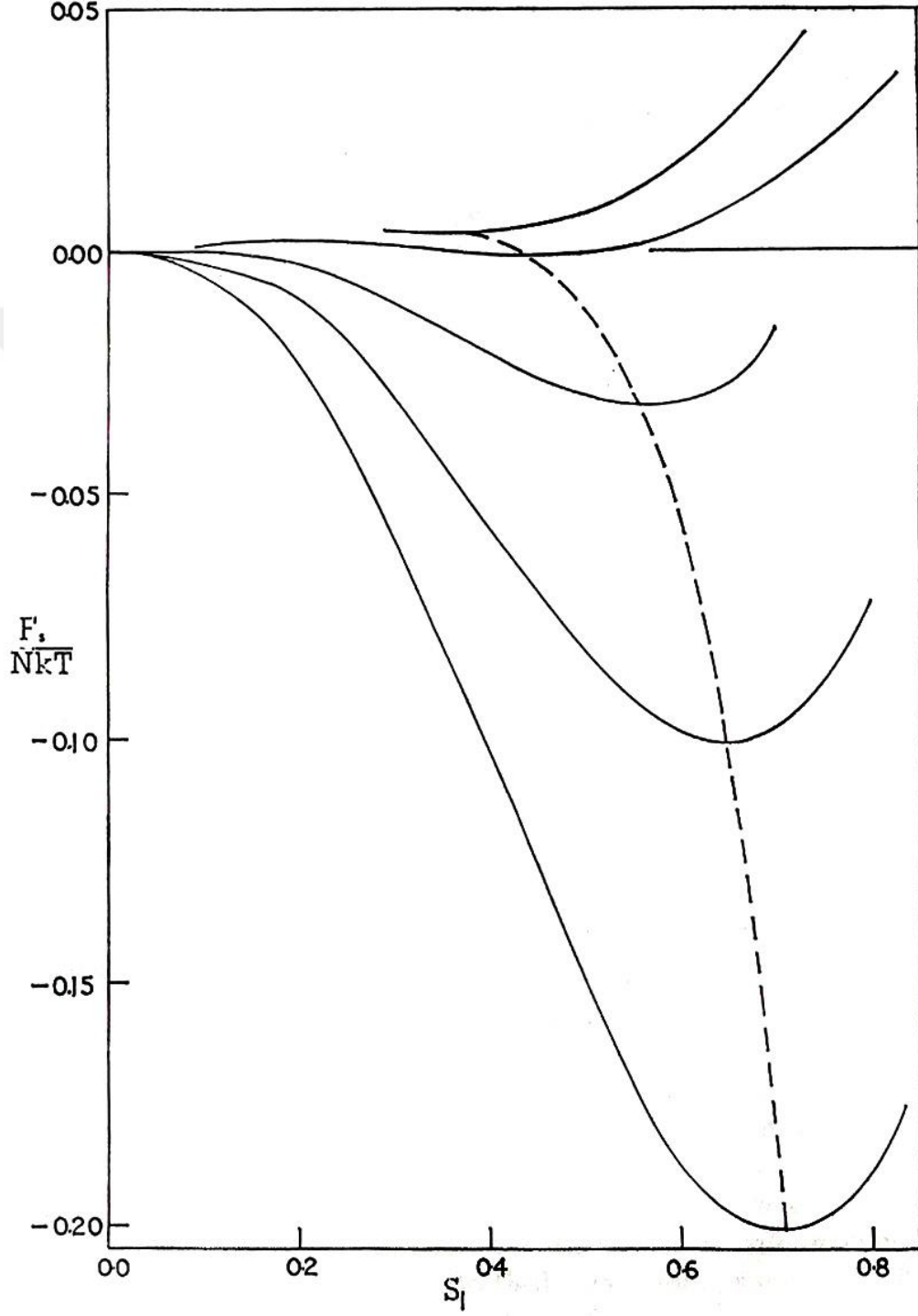
e karşı birleştirilen F_S/NkT eğrilerinin bir ailesi vardır ve $\frac{B}{kTV^3}$, $\frac{D}{kTV^3}$ değerleri farklıdır .Her

eğrideki serbest enerjinin minimumu $\langle X_i^2 \rangle = \langle X^2 \rangle$ ve $\langle X_i^4 \rangle = \langle X^4 \rangle$ denge şartlarını gerçekleştiren S_1 in özel bir değerinde meydana gelir. Kırık eğri S_1 in sabit bir değeri ile serbest enerjinin değişimini gösterir. İzotropik faz veya tamamen düzensiz sistemin serbest enerjisini gösteren sıfır çizgisi ile bu eğrinin ara bölge noktasındaki S_2 ve S_1 düzen parametrelerini belirler.

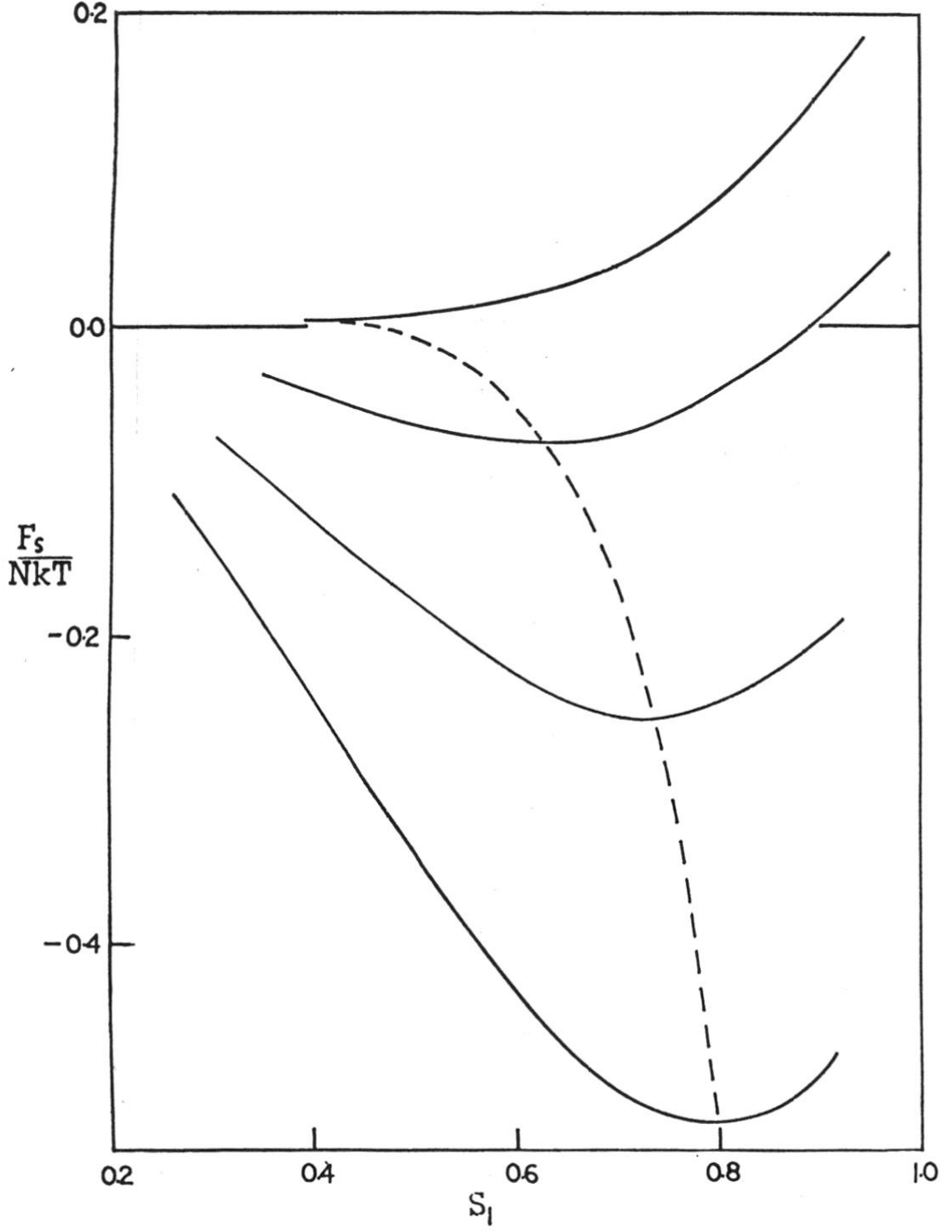
Şekil 4 geçiş noktasındaki düzen parametresinin nasıl farklı a/b değerleri için materyallerin bir sırası için farklı olması gerektiğini gösterir. Maier-Saupe durumu a/b=0' a karşılık gelir.



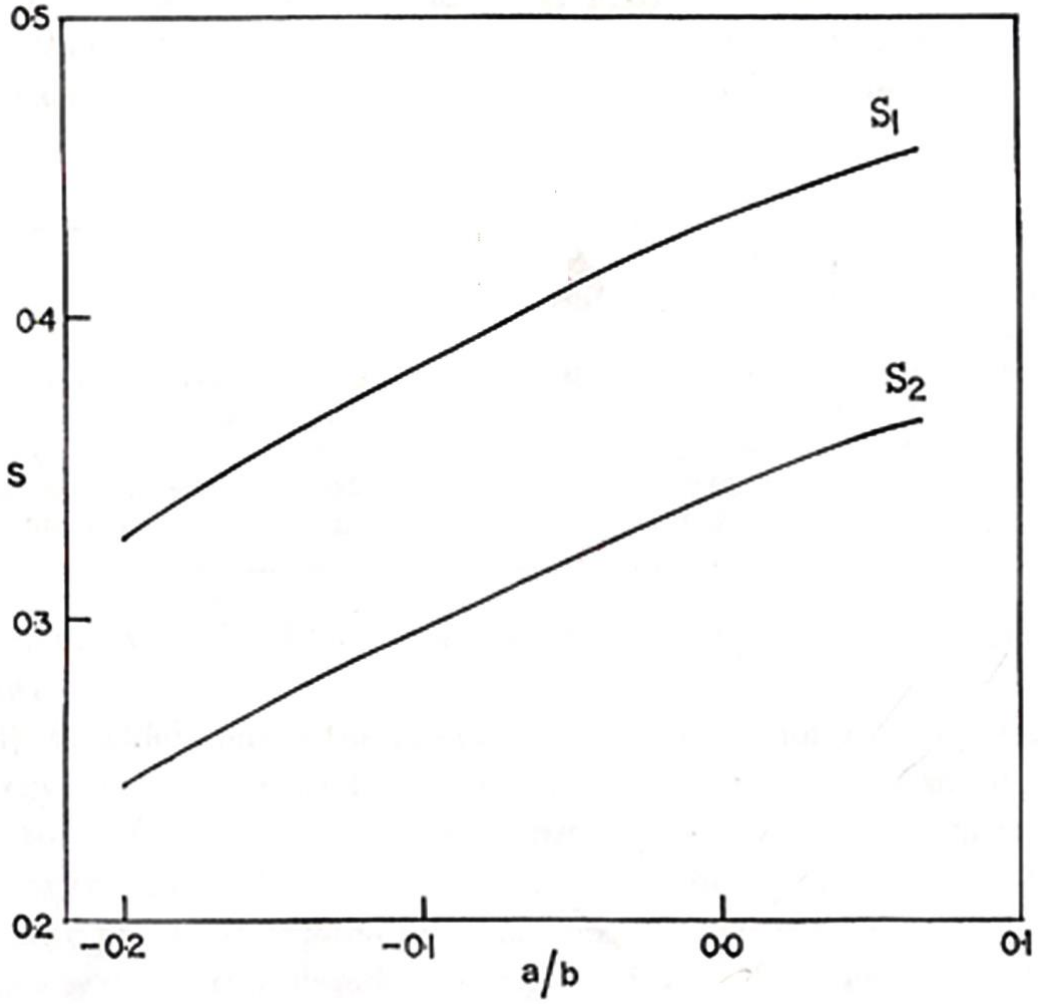
Şekil 4. $a/b=-1/5$ için s_1 ile F_s/NkT nin değişimi. $(\frac{B}{kTV^3}; \frac{D}{kTV^3})$ değerleri yukarıdan aşağıya sırasıyla(6.6137;-1.3435),(6.6745;-1.3530),(6.7794;-1.3714),(6.9244;-1.3979), (7.3192;-1.4721)



Şekil 5. $a/b=0$ için S_1 ile F_s/NkT nin değişimi. $(\frac{B}{kTV^3}; \frac{D}{kTV^3})$ değerleri yukarıdan aşağıya sırasıyla(4.4932;0),(4.5517;0),(4.7880;0),(5.1643;0), (5.5982;0)



Şekil 6. $a/b=1/15$ için S_1 ile F_s/NkT nin değişimi. $(\frac{B}{kTV^3}, \frac{D}{kTV^3})$ değerleri yukarıdan aşağıya sırasıyla (3.9539;0.3377),(4.4044;0.3778),(5.0406;0.4334),(5.8080;0.5003)



Şekil 7. Nematik izotropik geçiş noktasında a/b ye karşı düzen parametreleri.

2.2.6 Teorinin Getirdiği Yenilikler

Moleküler istatistik teori Maier-Saupe teorisine benzer olarak bir ortalama alan teorisidir ve Boltzman-Gibbs istatistiğine dayanır. Fakat moleküller arası etkileşimi göz önünde bulundurken sadece dispersiyon kuvvetlerini hesaba katmayarak bunun yanında moleküller arası itme kuvvetlerini de hesaba katmıştır. Sistem için potansiyel enerji ifadesini yazarken dipol-dipol gibi kısa menzilli etkileşimlerin yanında dipol-kuadrupol etkileşim ifadelerini de enerji

ifadesinin içine sokarak uzun menzilli etkileşimleri de hesaba katmıştır. Böylece bu teori Maier-Saupe teorisini iyileştirme çabaları göz önünde tutulursa başarılı sonuçlar vermiştir.

3. NEMATİK-İZOTROPİK FAZ GEÇİŞİ İÇİN CLUSTER VARYASYON TEORİSİ VE TSALLİS TERMOİSTATİSTİĞİ ÇERÇEVESİNDE GENELLEŞTİRİLMESİ

Nematik sıvı kristalin izotropik fazındaki bazı dalgalanmalar nedeniyle ışığın saçılması gibi bazı olaylarda ön geçiş etkileri gözlenmiştir. (Stinson et al, 1970). Saçılan ışığın şiddetinin $(T - T_c^*)^{-1}$ ifadesine göre davrandığı gözlenmiştir. Burada T_c^* indirgenmiş sıcaklık olarak adlandırılır ve geçiş sıcaklığı T 'nin biraz altında bir değer alır. Ön geçiş olayı Landau modeli tarafından fenomenolojik olarak tanımlanmıştır. (Stinson et al, 1970., de Gennes, 1971). Sıkça kullanılan ortalama alan yaklaşımı bazı nedenlerden dolayı aksar ki bunlardan birisi kısa menzil etkileşimlerinin ihmal edilmesidir. Ön geçiş etkilerinden ayrı olarak kısa menzil düzeninin dahil edilmesinin ortalama alan sonuçlarıyla ilişkili olarak kritik sıcaklıktaki düzen parametresi, özgül ısı ve kritik sıcaklık gibi nematik-izotropik geçiş özelliklerini ne ölçüde değiştirdiği sorusu ortaya atılabilir. Bu göz önüne alınarak Bethe-Peierls yaklaşımıyla tanıtılan bir method ele alındı ve kısa menzil düzeni hesaplandı. (Helfrich, 1969., Dubois-Violette et al, 1971). Bu method daha önceden de incelediğimiz Maier-Saupe modeline uygulandı. Bir diğer methodda Maier-Saupe teorisinin kırık simetri versiyonuna dayandırılan Cluster Varyasyon metodu olarak verilebilir ve bu method Maier-Saupe etkileşmesine uygulanmıştır. (Ypma et al, 1976). Ek olarak iki parçacık-Cluster Varyasyon metodu üç ve dört- parçacık Cluster Varyasyon metoduna genişletilmiştir. (Helfrich, 1969., Dubois-Violette et al, 1971).

Şimdiki çalışma nonextensive formalizm ve iki parçacık-Cluster Varyasyon metodu kullanılarak nematik izotropik faz geçişindeki uzun menzil etkileşim etkilerini gösterir. Nonextensive bir istatistik çerçevesinde Cluster Varyasyon metodunun genelleştirilmesi ilk olarak şimdiki çalışmada gerçekleştirilmiştir. Bu amaçla Tsallis Termostatistliği ile iki parçacık-Cluster Varyasyon metodu genelleştirilmiş ve q entropik indexine göre iki siteli standart Cluster Varyasyon Teorisi parametrize edilmiştir. Bu yaklaşımın bir avantajı üç ve dört parçacık-Cluster varyasyon teorisine göre hesaplamaları kolaylaştırmasıdır. Bu aşamada Maier-Saupe teorisi hakkında bazı yorumlar vermek faydalı olacaktır. Maier-Saupe teorisinde iki majör elemanı olduğu gerçeği önemlidir. Bunların ilki anizotropik potansiyel çiftinin doğası hakkındadır ve bu uzun menzili ve sürekli olmayı gerektirir. İkinci varsayım böyle bir potansiyelden dolayı etkileşen parçacıkların bir dağılımının özelliklerini hesaplamak için kullanılan moleküler alan yaklaşımıdır. Aynı anizotropik potansiyel çiftleri üzerinde yapılan bilgisayar simülasyon deneylerinin sonuçları (Luckhurst et al, 1979) ile bu özelliklerin karşılaştırılması bize ortalama alan yaklaşımının kullanılmasından gelen Maier-Saupe teorisindeki bu kısıtlamaları araştırmamıza olanak sağlar.

Bu anlayıştan yola çıkarak gerçek nematiklerin davranışı ile karşılaştırılmasıyla ortaya çıkmış uyumsuzlukların ortalama alan yaklaşımının ortalama alan yaklaşımının yetersizliğine bağlanabildiği görülebilir. Sonuç olarak uzun sıra anizotropik potansiyel çiftinin deneysel olarak doğrusal olmadığı görüşünü desteklemek için herhangi bir delile gerek yoktur. Bununla birlikte potansiyel çiftinin ayrıntılı biçiminin Maier-Saupe teorisinin yetersizliğinden sorumlu olabildiği işaretler vardır. Bazı bilim adamları aynı zamanda potansiyel fonksiyonuna yüksek mertebeli etkileşimleri ekleyerek Maier-Saupe teorisini geliştirmek için uğraştılar. (Chandrasekhar and Madhusudana, 1971., 1972., Luckhurst et al, 1975). Son zamanlarda olası bir iyileştirme Maier-Saupe teorisini nonextensive bir termostatistik olan Tsallis termostatistiği içinde ele alınarak sunuldu. (Kayacan et al, 2001). Aynı zamanda ortalama alan yaklaşımının tüm dalgalanmaları ihmal ettiği ve bunun Maier-Saupe teorisinin yetersizliğinden kaynaklandığını belirtmek önemlidir. Bununla birlikte potansiyel çiftinin doğrusal olmayan biçiminin bu teorisinin yetersizliğine öncülük ettiğini söylemek gerekir. Daha ileri çalışmalar , uzun menzil etkileşiminin nematik sıvı kristallerdeki nematik-izotropik geçişinde var olabildiğini göstermiştir. (Chandrasekhar and Madhusudana, 1971., Luckhurst et al, 1975). Buradan yola çıkarak bu çalışmada Maier-Saupe teorisine dayandırılan Cluster Varyasyon teorisini ele alarak uzun menzil etkileşimlerinin var olabildiği nematik-izotropik faz geçişine nonextensiveliğin etkisini göstermeyi amaçladık.

3.1 Tsallis Termostatistiği

Boltzman-Gibbs istatistiği termodinamik olarak extensive yani entropinin toplanabilirliği ilkesine uyan sistemlerde başarılı olmasına rağmen nonextensive sistemlerde başarılı sonuçlar vermemiştir. Boltzman-Gibbs istatistiği uzun menzil etkileşimlerinin bulunduğu , uzun menzil mikroskobik hafızanın olduğu ve multifraktal yapıya sahip sistemlerde genel olarak başarısız olmuştur. 1998 yılında fiziksel sistemlere uygulanabilecek bir entropi tanımı Tsallis tarafından ortaya atılmıştır. (Tsallis, 1988).

$$S_q = k \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i^q}{q-1} \quad (3.1)$$

burada ;

k pozitif bir sayı , q reel bir sayı olan entropik index , W toplam konfigürasyon sayısı ve p_i sistemin i . mikrohalde bulunma olasılığıdır. q entropik indexine sistemin nonextensivliğinin bir ölçüsü olarak bakılabilir. $q \rightarrow 1$ limit durumunda Tsallis entropisi Boltzmann-Gibbs entropisine indirgenir.

$$S_1 \equiv S_q = -k_B \sum_{i=1}^W p_i \log p_i \quad (3.2)$$

Bugüne kadar Tsallis termostatistiği birkaç durum ve termostatistiğin bazı kavramlarına başarıyla uygulanmıştır. Dinamik sistemler, uzun menzil etkileşimlerinin var olduğu sistemler, magnetik sistemler, düzensiz difüzyon bunların bazıları olarak verilebilir. (Tsallis, 1988., Curado et al, 1991., Tsallis et al, 2000., Martinez, 2000).

Son zamanlarda da Tsallis termostatistiği termolümünensans ışımaları ve sıvı kristal sistemlerine uygulanmıştır. (Kayacan, 2004., Kayacan et al, 2004).

Tsallis termostatistiği genelleştirilmiş bir istatistik teoridir ve bu teorenin formalizmini ortaya koyan özellikler şu şekilde sıralanabilir.

- Her keyfi $\{p_i\}$ kümesi ve q parametresinin her değeri için $S_q \geq 0$ 'dır.
- Her i değeri için $p_i = 1/W$ olduğunda (eşolasılık) , S_q , $q > 0$ için maksimum , $q < 0$ için minimum değerini alır.
- Sistemin termodinamik kararlılığını (Ramshaw, 1995) garanti edecek şekilde , tüm $\{p_i\}$ 'ler için $q > 0$ iken S_q konkav , $q < 0$ iken konvektir.
- H teoremi : Bazı genel koşullar altında (Mariz, 1992) $\frac{\partial S_q}{\partial t}$, $q > 0$ için pozitif , $q = 0$ için sıfır ve $q < 0$ için negatif olur. Burada t zamandır.
- A ve B birbirinden bağımsız iki sistem olmak üzere $(p_{ij}^{A \cup B} = p_i^A p_j^B)$, S_q aşağıdaki toplanabilirlik kuralına uyar. (Curado et al, 1991).

$$\frac{S_q^{A \cup B}}{k} = \frac{S_q^A}{k} + \frac{S_q^B}{k} + (1-q) \frac{S_q^A}{k} \frac{S_q^B}{k} \quad (3.3)$$

Bu bağıntıda ;

$$S_q^{A \cup B} < S_q^A + S_q^B, (q > 1) \text{ ise } S_q \text{ alt toplanabilirdir.}$$

$$S_q^{A \cup B} > S_q^A + S_q^B, (q < 1) \text{ ise } S_q \text{ süper toplanabilirdir.}$$

$$S_q^{A \cup B} = S_q^A + S_q^B, (q = 1) \text{ ise } S_q \text{ toplanabilirdir (yani ekstensiftir).}$$

Alt toplanabilirlik : tüm sistemin entropisinin sistemi oluşturan parçacıkların entropilerinin toplamından küçük olduğunu ;

Süper toplanabilirlik : tüm sistemin entropisinin sistemi oluşturan parçacıkların entropilerinin toplamından büyük olduğunu gösterir. Bu durumda q entropi indisine sistemin nonextensifliğinin bir ölçüsü olarak bakabiliriz.

- W tane mikrohal , W_a ve W_b mikrohallerine sahip iki tane a ve b altkümelerine ayrılırsa bunlara karşılık gelen olasılıklar $p_1, p_2, \dots, p_{W_{a+1}}$ ve $p_{W_{a+1}}, p_{W_{a+2}}, \dots, p_W$ olarak yazılabilir. Böyle bir sistem için aşağıdaki toplanabilirlik kuralı geçerlidir[24].

$$S_q(p_1, \dots, p_W) = S_1(p_a, p_b) + p_a^q S_q\left(\frac{p_1}{p_a}, \dots, \frac{p_{W_a}}{p_a}\right) + p_b^q S_q\left(\frac{p_{W_{a+1}}}{p_b}, \dots, \frac{p_W}{p_b}\right) \quad (3.4)$$

- S_q entropisi ;

$$\sum_{i=1}^W p_i = 1 \quad (3.5)$$

$$\frac{\sum_{i=1}^W p_i^q \varepsilon_i}{\sum_{i=1}^W p_i} = U_q^{(3)} \quad (3.6)$$

bağ koşulları altında optimum yapıldığında elde edilen dağılım fonksiyonu;

$$p_i^{(3)} = \frac{\left[1 - (1-q)\beta(\varepsilon_i - U_q^{(3)}) / \sum_{j=1}^W (p_j^{(3)})^q\right]^{\frac{1}{1-q}}}{f_q^{(3)}} \quad (3.7)$$

burada $f_q^{(3)}$ ifadesi entropik indisi içeren ve sistemin enerjisi için 3. seçim kullanılarak ortaya çıkarılmış sistemin partiyon fonksiyonudur.

$$f_q^{(3)} = \sum_{i=1}^W \left[1 - (1-q)\beta(\varepsilon_i - U_q^{(3)}) / \sum_{j=1}^W (p_j^{(3)})^q\right]^{\frac{1}{1-q}} \quad (3.8)$$

Sistemin enerji ifadesi için kullanılan ilk iki seçim şu şekildedir.

$$\sum_{i=1}^W p_i \varepsilon_i = U_q^{(1)} \quad (3.9)$$

$$\sum_{i=1}^W p_i^q \varepsilon_i = U_q^{(2)} \quad (3.10)$$

İlk iki seçim son yıllarda birçok farklı sisteme uygulanmıştır. (Curado et al, 1991). Örneğin ortalama enerji için ilk seçim düzensiz Levy süperpozisyonu gibi düzensiz sistemlerin seri matematik zorluklarını ele almak için uygundur. İkinci seçimi ilk olarak (Tsallis, 1988) hesapladı ve ondan sonra yoğun olarak çalışıldı ve kullanıldı. İlk iki seçimin dezavantajı olasılık teorisine uymamasıdır. Yani ilk iki seçim ayrı ayrı kullanılarak ve 1. bağ koşulu kullanılarak elde edilen dağılım fonksiyonu olasılık teorisine göre olması gereken normalizasyon şartını sağlamaz. Fakat 3. seçim en iyi yaklaşımdır ve kullanılması ile elde edilen (3.7) numaralı denklemdeki dağılım fonksiyonu 1'e normalize edilmiştir. Bu seçim en iyi yaklaşım olarak yaygın olarak fiziksel sistemleri tanımlamada kullanılır ve Tsallis-Mendes-Plastino seçimi olarak adlandırılır. (Tsallis et al, 2000). Bu seçim kullanılarak herhangi bir gözlenebilirliğin normalize olmuş q 'ya bağlı beklenen değeri;

$$A_q = \frac{\sum_{i=1}^W p_i^q A_i}{\sum_{i=1}^W p_i^q} = \langle A_i \rangle_q \quad (3.11)$$

burada;

A ; Hamiltonyen ile komüt olan herhangi bir gözlenebilir niceliği gösterir. Bu beklenen değer $q = 1$ 'de konvensiyonel beklenirliğe indirgenir. Yukarıda bahsedildiği gibi (3.11) denklemi bunu gösterir. Literatüre bakarsak, q 'nun ilgili sistemin dinamiklerinden analitik olarak bulunabildiğini görürüz. Boghosian ve arkadaşlarının Boltzman örgü modelindeki sıkıştırılmayan Maiver-Stokes denklemi üzerindeki çalışmalarını (Boghosian et al, 2002), Boldovin ve Robledo'nun lojistik evrensel sınıf haritası üzerindeki çalışmaları (Boldovin et al, 2002), Oliveira ve arkadaşlarının magnetizasyon hakkındaki çalışmalarını (Reis et al, 2002) buna örnek olarak verebiliriz.

3.2 Cluster Varyasyon Metodu ve Tsallis İstatistiği Çerçevesinde Genelleştirilmesi

Literatürde Ypma ve arkadaşları rotasyonel olarak sabit etkileşime cluster varyasyon metodunu uyguladılar.

$$E_{ij} = -J(a_i \cdot a_j)^2 \quad (3.12)$$

Burada a_i ve a_j molekülün uzun eksenini doğrultusundaki birim vektörlerdir. Bu etkileşime i . ve j . iki komşu molekül arasındaki etkileşime enerjisini gösterir. Bu etkileşime Maier-Saupe etkileşimesinin rotasyonel olarak sabit formundan başka bir şey değildir. Raich ve arkadaşları da kırık simetri etkileşimesini kullanmışlardır. (Kashvov et al, 1973).

$$E_{ij} = -J.S(a_i).S(a_j) \quad (3.13)$$

Burada;

$$S(a_i) = \frac{1}{2}(3a_{iz}^2 - 1) \quad (3.14)$$

şeklinde verilir. Bu ifadenin bir nematik-izotropik faz geçişini tanımlamaması bizim için sürpriz değildir çünkü bu etkileşim ortalama alan yaklaşımında beklenildiği gibi bir izotropik fazı göstermeyebilir. Denklem (3.12)'deki model bir hamiltonyen ifadesi ile tanımlanabilir;

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} (a_i \cdot a_j)^2 \quad (3.15)$$

Bu toplam tüm komşu molekül çiftleri üzerindedir. Sonraki H bir ekspansiyon parametresi içermesiyle bir pertürbasyon terimi V ve bir pertürbe olmamış H_0 kısmı içinde ayrılır.

$$\Delta_i = \bar{S} - S(a_i) \quad (3.16)$$

\bar{S} ; varyasyon parametresidir ve serbest enerjinin minimize edilmesi ile bulunacak en iyi değerdir. Bağlılıkların yardımıyla;

$$a_{ix}^2 = \frac{1}{2}[(1 - a_{iz}^2) + (a_{ix}^2 - a_{iy}^2)]$$

$$a_{iy}^2 = \frac{1}{2}[(1 - a_{iz}^2) - (a_{ix}^2 - a_{iy}^2)] \quad (3.17)$$

ayrıca $(a_i \cdot a_j)^2$ ifadesinde aşağıdaki gibi küçük ve baş terimler halinde bölünebilir;

$$(a_i \cdot a_j)^2 = \frac{1}{3} + \frac{2}{3}S(a_i).S(a_j) + W_{ij} \quad (3.18)$$

burada ;

$$W_{ij} = \frac{1}{2}(a_{ix} - a_{iy})(a_{jx} - a_{jy}) + 2a_{ix}a_{iy}a_{jx}a_{jy} + 2a_{ix}a_{iz}a_{jx}a_{jz} + 2a_{ix}a_{iz}a_{jy}a_{jz} \quad (3.19)$$

W_{ij} sıfır çevresinde her iki yönde dalgalanan iki terimli üretimler içerdiğinden çok küçük olması muhtemeldir.

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \frac{1}{3} + \frac{2}{3}(\bar{S} - \Delta_i)(\bar{S} - \Delta_j) + W_{ij} \quad (3.20)$$

ve pertürbe olmamış hamiltonyen Δ_i ve Δ_j içinde lineer olarak seçilebilir.

$$H_0 = -J \sum_{\langle ij \rangle} \left[\frac{1}{3} - \frac{2}{3} \bar{S}(\Delta_i + \Delta_j) + \frac{2}{3} \bar{S}^2 \right] \quad (3.21)$$

pertürbe terimi ise şu şekildedir;

$$V = -J \sum_{\langle ij \rangle} \left[\frac{2}{3} \Delta_i \Delta_j + W_{ij} \right] = \sum_{\langle ij \rangle} V_{ij} \quad (3.22)$$

F serbest enerjisi şu şekilde yazılabilir;

$$\begin{aligned} -\beta F &= \ln \text{Tr}[\exp(-\beta H)] \\ &= \ln \frac{\text{Tr}[\exp(-\beta H_0 - \beta V)]}{\text{Tr}[\exp(-\beta H_0)]} + \ln \text{Tr}[\exp(-\beta H_0)] \\ &= \ln \langle \exp(-\beta V) \rangle_{H_0} + \ln \text{Tr}[\exp(-\beta H_0)] \end{aligned} \quad (3.23)$$

burada ;

$\beta = 1/kT$, k Boltzman sabiti ve T sıcaklıktır. İkinci terim kolaylıkla elde edilip hesaplanabilir;

$$-\beta F_0 = \ln \text{Tr}[\exp(-\beta H_0)] = -\frac{1}{6} N \gamma \beta J (2\bar{S}^2 - 1) + N \ln f_1 \quad (3.24)$$

burada;

$$f_1 = \int da \exp \left[\frac{2}{3} \gamma \beta J \bar{S} S(a) \right]$$

(3.25)

γ , koordinasyon sayısını gösterir.

Eğer denklem (3.23)'deki ilk terim ihmal edilir ve kalan F_0 serbest enerjisi \bar{S} 'ya göre minimize edilirse;

$$\bar{S} = \langle S(a) \rangle_{f_1} \quad (3.26)$$

Denklem (3.26)'daki ortalama, dağılım fonksiyonu ile değerlendirilir.

$$P(\bar{a}) = \frac{1}{f_1} \left[\exp \left(\frac{2}{3} \gamma \beta J \bar{S} S(a) \right) \right] \quad (3.27)$$

Sıfırncı mertebe serbest enerjisi F_0 , ortalama alan yaklaşımında elde edilen serbest enerji ifadesinin kendisidir. Tüm sıcaklıklar için bir çözümün $\bar{S} = 0$ olduğu göz önüne alınırsa denklem (3.26) apaçık olmayan çözümlere sahiptir. Şekil 3'de daha önce çeşitli sıcaklıklar için \bar{S} 'nin bir fonksiyonu olarak serbest enerjinin davranışını vermiştik. İzotropik faz belirli bir T_c^* sıcaklığı altında nematik düzene göre tamamıyla kararsız olur. İki site-cluster yaklaşımı ise;

$$\langle \exp(-\beta V) \rangle_{H_0} = \left\langle \prod_{\langle ij \rangle} \exp(-\beta V_{ij}) \right\rangle_{H_0} \quad (3.28)$$

denkleminin yerine konulması ile kolayca elde edilebilir;

$$\prod_{\langle ij \rangle} \langle \exp(-\beta V_{ij}) \rangle_{H_0} = \left[\langle \exp(-\beta V_{12}) \rangle_{H_0} \right]^{1/2 N \gamma} \quad (3.29)$$

bir sonraki adım olarak, serbest enerji ifadesi de kolayca yazılabilir;

$$-\beta F = \frac{1}{2} N \gamma \ln f_{12} - N(\gamma - 1) \ln f_1 \quad (3.30)$$

burada;

$$f_{12} = \int da_1 \int da_2 \exp \left[\beta J (a_1 a_2)^2 + \frac{2}{3} (\gamma - 1) \beta J \bar{S} (S(a_1) + S(a_2)) \right] \quad (3.31)$$

Eğer serbest enerji ifadesi \bar{S} 'nin değişimine göre minimize edilirse;

$$\frac{1}{2} \langle S(a_1) + S(a_2) \rangle_{f_{12}} = \langle S(a_1) \rangle_{f_1} \quad (3.32)$$

Denklem (3.32)'nin sol tarafındaki termal ortalama, dağılım fonksiyonu ile değerlendirilebilir.

$$P(a_1; a_2) = \frac{1}{f_{12}} \exp \left[\beta J (a_1 \cdot a_2)^2 + \frac{2}{3} (\gamma - 1) \beta J \bar{S} (S(a_1) + S(a_2)) \right] \quad (3.33)$$

Denklem(3.32)'nin sağ tarafının denklem(3.25) ile verilen dağılım fonksiyonu ile değerlendirildiği ve denklem(3.33)'ün de self consistent bir denklem olduğunu not etmek faydalı olacaktır.

Şimdi yukarıda verilen cluster varyasyon metodunun genelleştirilmiş formunu vermek istiyoruz. Denklem(3.32)'deki dağılım fonksiyonu şu şekilde yazılır;

$$(p_i)_{f_1}^{(3)} = \frac{\left[1 + (1-q) \left(\frac{2}{3} \gamma \beta J \bar{S} S(a) \right) / \int da_1 (p_j^{(3)})^q \right]^{1-q}}{(f_1^{(3)})_q} \quad (3.34)$$

ile

$$(f_1^{(3)})_q = \int da_1 \left[1 + (1-q) \left(\frac{2}{3} \gamma \beta J \bar{S} S(a) \right) / \int da_1 (p_j^{(3)})^q \right]^{1-q} \quad (3.35)$$

ve

$$(p_i)_{f_{12}}^{(3)} = \frac{\left[1 + (1-q) \left(\beta J (a_1 \cdot a_2)^2 + \frac{2}{3} (\gamma - 1) \beta J \bar{S} (S(a_1) + S(a_2)) \right) / \int da_1 \int da_2 (p_j^{(3)})^q \right]^{1-q}}{(f_{12}^{(3)})_q}$$

ile

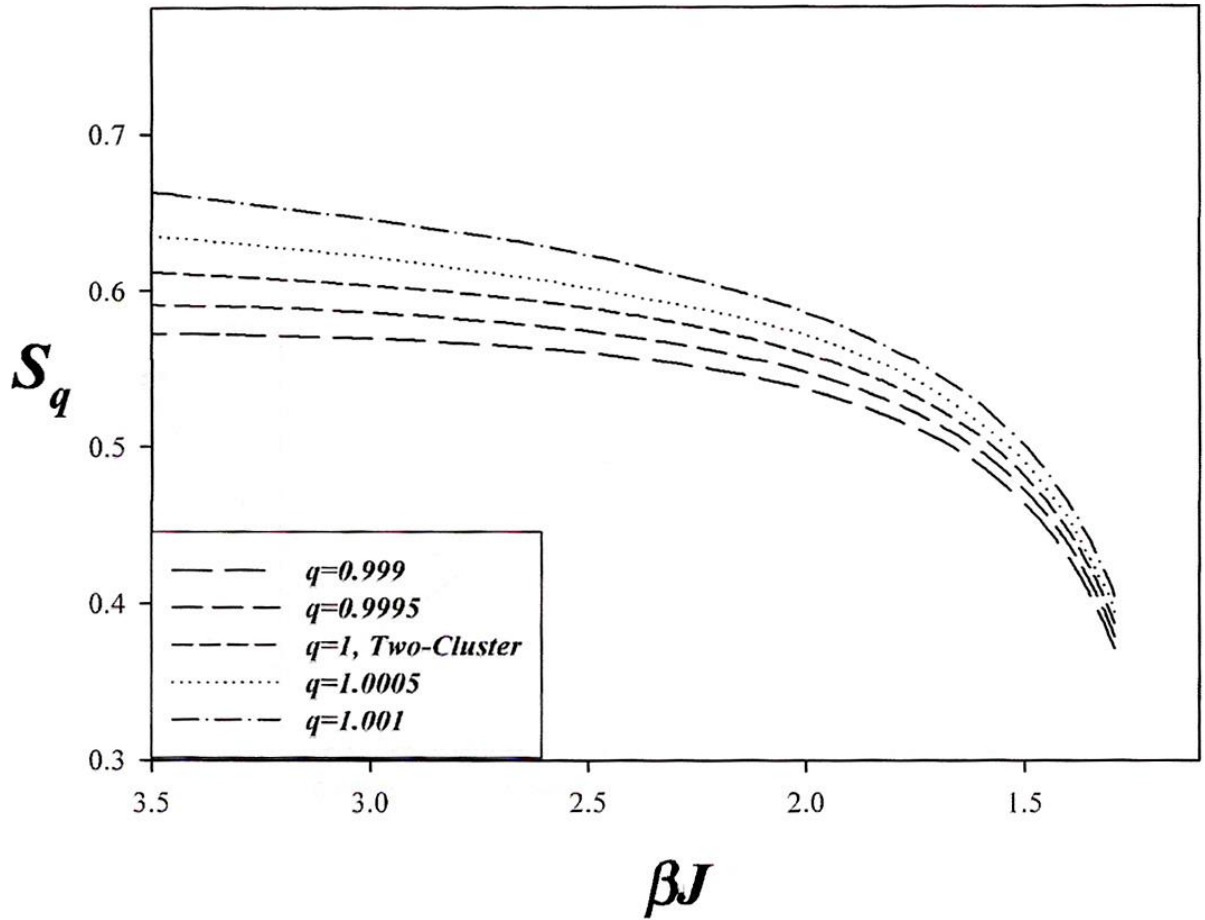
$$(f_{12}^{(3)})_q = \int da_1 \int da_2 \left[1 + (1-q) \left(\beta J (a_1 \cdot a_2)^2 + \frac{2}{3} (\gamma - 1) \beta J \bar{S} (S(a_1) + S(a_2)) \right) / \int da_1 \int da_2 (p_j^{(3)})^q \right]^{1-q}$$

(3.36-37)

Daha sonra denklem (3.11)'deki herhangi bir niceliğin beklenen değer ifadesi değerlendirilir ve dağılım fonksiyonu kullanılarak sıcaklığa karşı uzun menzil düzen parametresi elde edilir. Bu işlemleri yapmaktaki bir amacımız da daha fazla siteli etkileşimlerin hesaba katıldığı ve matematiksel karışıklıkların daha da arttığı üç ve dört parçacık cluster varyasyon metodu ile şimdiye kadar elde edilmiş sonuçları bizim yaptığımız iki parçacık cluster metodunun geliştirilmesi ile elde edilecek sonuçlar ile karşılaştırmak ve de biraz da olsa çalışmayı incelemek isteyenleri bu geliştirme ile matematiksel karışıklıklardan kurtarmaktır.

4. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

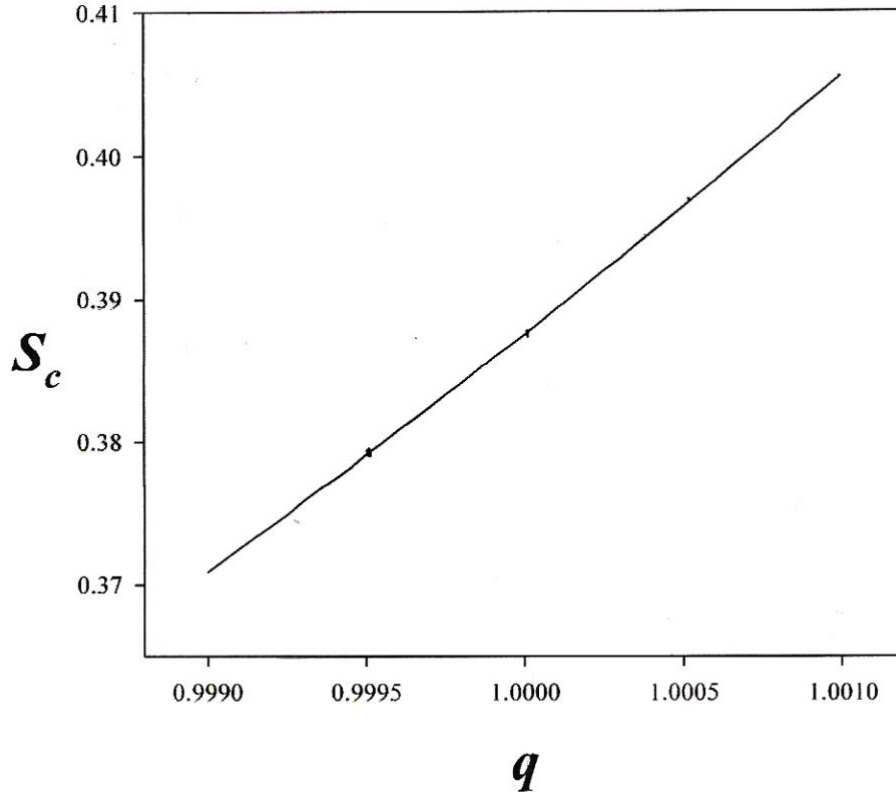
Şekil 2 entropik indeks q 'nun çeşitli değerleri için sıcaklık ile uzun menzil düzen parametresinin değişimini gösterir.



Sekil 8. Entropik indeks q 'nin çeşitli değerleri için sıcaklık ile uzun menzil düzen parametresinin değişimi

Referans 5 deki gibi hegzagonal örgüdeki en yakın komşu sayısı için $\gamma = 6$ 'yı kullandık. Geçiş sıcaklığı $q = 1$ için $\beta_c J = 1.294$ olarak bulundu. q 'yu değiştirirsek sıcaklık ile uzun menzil düzen parametresinin davranışının nitel olarak benzer olduğu gözlemlendi. Uzun menzil etkileşimleri göz önüne alındığı için q parametresi 1'den farklıdır. Bu sonuç oldukça ilginçtir. Bundan başka, genelleştirilen iki siteli cluster teorisi cluster varyasyon hesaplarını kolaylaştırır. O zaman biz 3 ve 4 parçalıklı cluster varyasyon metotları yerine iki siteli genelleştirilmiş cluster teorisini kullanabildiğimiz sonucuna varabiliriz.

Aynı zamanda q artarken nematik-izotropik geçiş sıcaklığındaki uzun menzil düzen parametresinin kritik değerinin arttığına dikkat etmek harcanan emeğe değerdir. Bu durum şekil 3'te de görülebilir.



Şekil 9. Uzun menzil düzen parametresinin kritik değerinin q entropik indeks ile değişimi

Entropik indeksin çeşitli değerleri için genelleştirilmiş formalizm tarafından önceden söylenen hegzagonal örgü için uzun menzil düzen parametresinin değerinin monotonluk olarak azaldığına dikkat ediniz.

Tablo 1. Entropik indeks q ile uzun menzil düzen parametresinin değişimi

q (entropik indeks)	S_c (düzen parametresi)
1.0010	0.405
1.0005	0.396
1.0000	0.387
0.9995	0.378
0.9990	0.370

Haegen (1980) tarafından yapılan çalışmada görülebildiği gibi iki siteli cluster yaklaşımından üç site-cluster yaklaşımına giderkenki azalma yine de ortalama alan yaklaşımından iki site-cluster yaklaşımına giderkenkinden birazcık büyüktür.

Tablo2. Koordinasyon sayıları farklı 3 yapı için değişik yaklaşımlarla hesaplanan düzen parametresinin kritik değerleri

Kullanılan teori	Heksagonal yapı	Basit kübik yapı	Yüzey merkezli yapı
Ortalama alan	$S_c = 0.4290$	$S_c = 0.4290$	$S_c = 0.4290$
İki parçacık-cluster	$S_c = 0.3866$	$S_c = 0.3986$	$S_c = 0.4096$
Üç parçacık-cluster	$S_c = 0.3192$	$S_c = 0.4000$	$S_c = 0.3659$
Dört parçacık-cluster	$S_c = 0.2740$	$S_c = 0.3504$	$S_c = 0.3597$

Bu çalışmada q 'nin azalmasıyla nematik-izotropik geçişindeki uzun menzil düzen parametresindeki azalma hemen hemen aynıdır. Entropik indeksin çok küçük araları için entropik indeks ve düzen parametresi arasındaki ilişki şekil 3 ten görülebileceği üzere lineerdir. Hatta entropik indeksteki çok küçük bir değişimin sonuçları önemli ölçüde etkilediği bir diğer önemli noktadır. Diğer taraftan şimdiki çalışmada kullanılanlarla ilgili olarak entropik indeksteki daha büyük değişimlerin sonuçları büyük oranda etkilediği Tsallis termostatistiği çerçevesinde Maier-Saupe teorisinin genelleştirilmesiyle görülmüştü. (Kayacan et al, 2001).

Önceki çalışmalarda iki siteli cluster varyasyon metodu matematik denklemlerin oldukça zor olduğu 3 ve 4 siteli cluster varyasyon metoduna genişletildi. (Haegen et al, 1980). Karşılaştırma olarak uzun menzil etkileşimlerini içeren daha kolay formalizmleri bu tez çalışmasında veriyoruz. Aynı zamanda etkileşen parçacıkların sayısının artmasının nematik-izotropik faz geçişini karakterize eden niceliklerin iyileşen değerlerine öncülük ettiği bu çalışmada görülür. Bu iyileşme, uzun menzil etkileşimlerinin iki siteli cluster varyasyon metodunun içine dahil edilmesi ile görülebilir. O halde bu çalışmada önerilen geliştirilmiş formalizmin aynı zamanda nematik-izotropik geçişindeki karakteristik özellikleri iyileştirebildiğini söyleyebiliriz.



KAYNAKLAR

1. Chandrasekhar, S., Krishnamurti. D. And Madhusudana, N.V., 1969, Theory of birefringence of nematic liquid crystals, Mol. Cryst. and Liq. Cryst., 8:45.
2. Chandrasekhar, S., 1977, Liquid Crystals, Cambridge University Press.
3. de Gennes, P.G., 1974, The physics of liquid crystals, Clarendon Press, Oxford
4. Cemil Şenvar, Oktay Alpaut, Maddenin Üç Hali, Hacettepe Üniversitesi, 1980,176
5. Maier, W. and Saupe A., 1958, Eine einfache molekulare Theorie des nematischen kristallinflüssigen Zustandes, Z. Naturforsch., 13a:564
6. Maier, W. and Saupe A., 1960, Eine einfache molekular-statistische Theorie des nematischen kristallinflüssigen schichten, Z. Naturforsch., 16a:816
7. Maier, W. and Saupe A., 1961, Methoden zur bestimmung des ordnungsgrades nematischer kristallinflüssiger schichten, Z. Naturforsch., 16a:816
8. Saupe, A. and Maier, W., 1961, Methoden zur Bestimmung des Ordnungsgrades nematischer kristallin flüssiger Schichten, Z. Naturforsch., 16a:564.
9. Chandrasekhar, S. and Madhusudana, N.V., 1971, Molekular statistical theory of nematic liquid crystals, Acta Cryst., A27:303.
10. Chandrasekhar, S. and Madhusudana, N.V., 1972, Molekular statistical theory of nematic liquid crystals, Mol. Cryst. And Liq. Cryst., 17:37.
11. Humphries, R.L., James, P.G. and Luckhurst, G.R., 1972, Molecular field treatment of nematic liquid crystals, J. Chem. Soc., faraday Trans. 2,68:1031.
12. Humphries, R.L., and Luckhurst, G.R., 1974, Determination of the parameters in the pseudo-potential for nematic liquid crystals, Mol. Cryst. And Liq. Cryst., 26:269.
13. Chandrasekhar, S. and Madhusudana, N.V., 1970, Molekular statistical theory of nematic liquid crystals, Acta Cryst. A27,303.
14. S. Singh / Physics Reports 324 (2000) 107-269
15. O. Kayacan, F. Büyükkılıç, D. Demirhan., 2001, Physica A 301,255.
16. T.W. Stinson, J.D. Litster., 1970, Phys. Rev. Lett. 25,503.
17. P.G. de Gennes., 1971, Mol.Cryst. Liq. Cryst. 12,193.
18. J.G.J. Ypma, G. Vertogen, H.T. Koster.,1976, Mol.Cryst. Liq. Cryst. 37,57.
19. W. Helfrich, 1969., J. Chem. Phys. 51,4092.
20. E. Dubois-Violette, P.G. de Gennes, O. Paroch, 1971., J. de Physique 32,305.
21. G.R. Luckhurst, G.W. Gray., 1979, The Molecular Physics of Liquid Crystals, Academic Press.
22. G.R. Luckhurst, C. Zannoni, P.L.Nordio, U. Segre., 1975, Mol. Phys. 30,1345.
23. C. Tsallis., 1988, J. Stat. Phys. 52,479.
24. E.M.F. Curado, C. Tsallis., 1991, J. Phys. A24,L69.

25. C. Tsallis, R.S. Mendes and A.R. Plastino., 2000, *Physica A*, 534.
26. S. Martinez, F. Nicholas, F. Penini, A. Plastino., 2000, *Physica A*, 489.
27. O. Kayacan, 2004., *Chemical Physics*, 297,1.
28. O. Kayacan, N. Can., 2004, *Physica A*, 331,538.
29. Ramshaw, J.D., 1995, Thermodynamic stability conditions for the Tsallis and Reyni entropies, *Phys. Lett. A*, 175:171
30. Mariz, A.M., 1992, On the irreversible nature of the Tsallis and Reyni entropies, *Phys. Lett. A*, 165:409
31. B.M. Boghosian, P.J. Love, P.V. Covoney, I.V. Karlin, S. Succi, J. Yepez., 2002, "Galilean-invariant lattice-Boltzman models with H-theorem" , preprint, [e-print: cond-mat/0211093].
32. F. Boldovin, A. Robledo., 2002, *Phys. Rev. E* 66, 045104 (R).
33. F. Boldovin, A. Robledo., 2002, *Europhys. Lett.* 60, 518.
34. M.S. Reis, J.P. Araújo, V.S. Amaral, E.K. Lenzi, and I.S. Oliveira., 2002, *Phys. Rev. B* 66,134417.
35. M.S. Reis, J.C.C. Freitas, M.T.D. Orlando, E.K. Lenzi, L.S. Oliveira., 2002, *Europhys. Lett.* 58,42.
36. R.A. Kashnow, H.S. Cole., 1973, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 23,329.
37. R. Van der Haegen, J. Debruyne, R. Luyckx, and H.N.W. Lekkerkerker., 1980, *J. Chem. Phys.* 73(5).

ÖZGEÇMİŞ

24.07.1979 Zonguldak'ta doğan Özgür Afşar, ilkokulu İzmir Murat Reis İlkokulunda, ortaokulu İzmir Agah Efendi Ortaokulunda, liseyi İzmir Selma Yiğitalp Lisesinde okuduktan sonra 1998 yılında Celal Bayar Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi fizik bölümüne girdi. 2002 yılında üniversite lisans öğrenimini başarıyla tamamladıktan sonra aynı yıl Celal Bayar Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı'nda yüksek lisans öğrenimine başladı. Halen bu üniversitenin yüksek lisans öğrencisi olan Özgür Afşar yüksek lisans öğreniminde 'nematik sıvı kristaller üzerine yapılan istatistiksel teoriler' ve Tübitak projesi kapsamında 'ağır çekirdeklerin seviye yoğunluğu tayini' konusunda çalışmalar yapmaktadır.

