T.C.
YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

ISİNG MODEL İÇİN GAUSSİAN YAKLAŞIM

BAŞER TAMBAŞ

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI
FİZİK PROGRAMI

DANIŞMAN
DOÇ. DR. TUNCER KAYA

İSTANBUL, 2018

T.C.

YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

ISİNG MODEL İÇİN GAUSSİAN YAKLAŞIM

Başer TAMBAŞ tarafından hazırlanan tez çalışması 21.06.2018 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı'nda **YÜKSEK LİSANS TEZİ** olarak kabul edilmiştir.

Tez Danışmanı

Doç. Dr. Tuncer KAYA

Yıldız Teknik Üniversitesi

Jüri Üyeleri

Doç. Dr. Tuncer KAYA

Yıldız Teknik Üniversitesi

Prof. Dr. Nazmi POSTACIOĞLU

İstanbul Teknik Üniversitesi

Prof. Dr. Hasan TATLIPINAR

Yıldız Teknik Üniversitesi

ÖNSÖZ

Öncelikle beni öğrencisi olarak kabul eden ve bu süreçte benden bilgi, birikim ve deneyimini esirgemeyen değerli hocam Tuncer KAYA'ya teşekkür ederim. Her zaman desteğini yanında hissettiğim ailem ve arkadaşlarıma da teşekkürü bir borç bilirim.

Haziran, 2018

Başer TAMBAŞ

İÇİNDEKİLER

Sayfa

SİMGE LİSTESİ vi

KISALTMA LİSTESİ viii

ŞEKİL LİSTESİ ix

ÖZET x

ABSTRACT xii

BÖLÜM 1

GİRİŞ 1

1.1 Literatür Özeti 1
1.2 Tezin Amacı 2
1.3 Hipotez 2

BÖLÜM 2

ISİNG MODELİN TANIMI, BİR BOYUTTA ÇÖZÜMLERİ VE KORELASYONLARI 4

2.1 Ising Modelin Tanımı 4
2.2 Bir Boyutta Ising Modelin Çözümleri 6
2.2.1 Serbest Sınır Koşulları ve $h = 0$ Durumu 7
2.2.2 Periyodik Sınır koşulları ve $h = 0$ Durumu 7
2.2.3 Bir Boyutta $h \neq 0$ Durumu için Transfer Matris Yöntemi ile Ising Modelin Çözümü 9
2.3 Bir Boyutlu Ising Modelde Korelasyonlar 14
2.3.1 $h \neq 0$ Durumunda Korelasyonlar 15
2.3.2 $h = 0$ Durumunda Korelasyonlar 21

BÖLÜM 3

ORTALAMA-ALAN TEORİLERİ 24

3.1 Weiss Ortalama-Alan Teorisi 24
3.1.1 $h = 0$ Durumu 26

3.1.2 $h \neq 0$ Durumu 28
3.2 Bragg-Williams Ortalama-Alan Teorisi 30
3.3 Bethe-Peierls Ortalama-Alan Teorisi 34

BÖLÜM 4

ISİNG SİSTEMLER İÇİN KONFİGÜRASYONEL ORTALAMA-ALAN TRANSFER MATRİS METODU 37

4.1 Pür Ortalama-Alan Modeli 37
4.1.1 Analitik Çözüm 40
4.1.2 Nümerik Çözüm 43
4.2 İndirgenmiş Transfer Matris Metodu 44
4.2.1 Analitik Çözüm 47
4.2.2 Nümerik Çözüm 50

BÖLÜM 5

SONUÇ VE ÖNERİLER 52

KAYNAKLAR 54

EK-A

NÜMERİK ÇÖZÜM İÇİN BİLGİSAYAR KODLARI 57

A-1 Pür Ortalama Alan Modeli için Bilgisayar Kodları 57
A-2 İndirgenmiş Transfer Matris Yöntemi için Bilgisayar Kodları 58

ÖZGEÇMİŞ 59

SİMGE LİSTESİ

J	Bağlanım sabiti
h	Dış manyetik alan
K	Bağlanma dayanım parametresi
H	Dış manyetik alan parametresi
σ_i	*i.* manyetik moment
$\langle\sigma\rangle$	Manyetik moment başına düşen manyetizasyon
M	Manyetizasyon
N	Parçacık sayısı
$\lambda_{\pm}$	Öz-değerler
$\mathcal{H}$	Hamiltonyen
k_B	Boltzmann sabiti
$\mathbb{T}$	Transfer matrisi
$\mathbb{U}$	Üniter matris
$\lvert\sigma_i\rangle$	Ket
$\langle\sigma_i\rvert$	Bra
Tr	İz alma işlemcisi
$\boldsymbol{\sigma}$	Manyetik moment matris temsili
$\langle i,j\rangle$	En yakın komşular
m	Manyetik moment başına düşen manyetizasyon
ς	Manyetik alınganlık
$\chi_{\pm}$	Z yönündeki manyetik moment öz-değerleri
K_c	Kritik dayanım parametresi
T	Sıcaklık
T_c	Kritik sıcaklık
β	$1/k_BT$
$\sum_{\{\sigma\}}$	Bütün konfigürasyonlar üzerinden toplam
Q	Bölüşüm fonksiyonu
G	Korelasyon fonksiyonu
L	Uzun-mesafe düzeni

Y	Kısa-mesafe düzeni
$\mathbb{I}$	Birim matris
$\dagger$	Hermitik eşlenik
$*$	Kompleks eşlenik
γ	Komşu veya koordinasyon sayısı
F	Helmholtz serbest enerjisi
C	Isı kapasitesi
$\lvert \pm 1 \rangle$	Manyetik moment öz-ketleri
$\langle \pm 1 \rvert$	Manyetik moment öz-braları
U	İç enerji
z	Fugisite

KISALTMA LİSTESİ

O-A-T	Ortalama Alan Teorisi

ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa

Şekil 2.1 Bir boyutlu Ising modelin periyodiklik koşulu altındaki topolojisi [28]..... 8
Şekil 2.2 Bir boyutlu Ising modelin manyetizasyonu [28] 14
Şekil 3.1 $\langle\sigma\rangle = tanh\, x$ ve $\langle\sigma\rangle = x T_c / T$ fonksiyonları [31]..... 27
Şekil 3.2 Manyetizasyonun sıcaklıkla değişimi Curie eğrisi [31]..... 28
Şekil 3.3 (3.7) denkleminin $h \neq 0$ için çözümü [31]..... 29
Şekil 3.4 (3.29) denkleminin grafiksel çözümü [28] 32
Şekil 3.5 Kendiliğinden manyetizasyon grafiği [28]..... 33
Şekil 3.6 (3.41) denkleminin grafiksel çözümü [28] 36
Şekil 4.1 Manyetik moment başına düşen manyetizasyona $\langle\sigma\rangle$ karşılık kritik bağlanma dayanımları K için pür ortalama alan modelinden elde edilen çeşitli hiper-kübik örgü yapıları için koordinasyon sayısı γ ile tanımlanmış nümerik değerler. 44
Şekil 4.2 Manyetik moment başına düşen manyetizasyona $\langle\sigma\rangle$ karşılık kritik bağlanma dayanımları K için pür indirgenmiş transfer matris yönteminden elde edilen çeşitli hiper-kübik örgü yapıları için koordinasyon sayısı γ ile tanımlanmış nümerik değerler. 51

ÖZET

ISİNG MODEL İÇİN GAUSSİAN YAKLAŞIM

Başer TAMBAŞ

Fizik Anabilim Dalı

Yüksek Lisans Tezi

Tez Danışmanı: Doç. Dr. Tuncer KAYA

Manyetizasyon fenomeni, fizikte daima ilgilenilen bir konu olmayı başarmıştır. Bu sebeple bugün bile fizikte en çok çalışılan konulardan biri olan manyetik faz geçişi konusu Ising tarafından oluşturulan bir modelle 1925 yılında bir boyutta açıklanmış ve tam olarak çözülmüştür. İki boyutta bu model genişletilerek bazı özel durumlar için çözülebilmiştir. Geri kalan durumlar için üç boyut ve daha üstü gibi, kesin çözüm olmamasından dolayı bu fenomeni açıklamak için ortalama-alan teorileri geliştirilmiştir.

Bu tezde Ising modelin tanıtılmasının ardından bir boyutta çözümleri ve korelasyon fonksiyonları gösterilmiştir. Daha sonrasında ortalama-alan teorileri tanıtılarak, konfigürasyonel ortalama-alan transfer matrisi yöntemine geçilmiştir.

Bu yöntemde, L. Kadanoff'un ortalama-alan yaklaşımı ve T. Kaya'nın ortalama-alan yaklaşımının birleştirilmesi hedeflenmiştir. Ortalama alan yaklaşımı, Ising Hamiltonyeninde merkez manyetik momentin yerine belirli bir konfigürasyonel ortalama manyetik momentinin koyulması varsayımı ile yapılmıştır. Bu yaklaşımda iki farklı ortalama-alan yaklaşımı kullanılmıştır. Birincisi pür ortalama-alan yaklaşımı ikincisi ise indirgenmiş transfer matrisi yöntemidir.

Bu iki yaklaşımda da kritik bağlanma dayanım sabitleri hem nümerik olarak hem de analitik olarak eyer-noktası yaklaşımı kullanılarak hesaplanmıştır. Bu çalışmada topluluk ortalaması yerine konfigürasyonel ortalamanın alınması başlangıçta faz geçişi

göstermemesinden dolayı öz-tutarlı ortalama-alan teorilerinden daha uygun fiziksel bir çerçeve sunduğu düşünülmektedir.

Anahtar Kelimeler: Ising model, blok-spin transformasyonu, kritik fenomen

ABSTRACT

GAUSSİAN APPROACH FOR ISING MODEL

Başer TAMBAŞ

Department of Physics

MSc. Thesis

Adviser: Assoc. Prof. Dr. Tuncer KAYA

Magnetization phenomenon has always been a subject of interest in physics. For this reason, one of the most studied topics in physics even today, the phase transition concept of magnetization, was described in 1925 by a model created by Ising and exactly solved in one dimension. In two dimensions, this model has been expanded and solved for some special cases. Since there is no exact solution for the rest of the cases such as three dimensions and higher dimensions, the mean-field theories have been developed to explain this phenomenon.

In this thesis, solutions in one dimension and correlation functions are demonstrated after introducing Ising model. Later the mean-field theories are presented and the configurational mean-field transfer matrix method is introduced.

In this method, it is aimed to combine L. Kadanoff's mean-field approach and T. Kaya's mean-field approach. The mean-field approximation is based on the assumption that a particular configurational average magnetic moment is substituted for the central magnetic moment in Ising Hamiltonian. Two different mean-field approaches have been used in this approach. The first one is the pure mean-field type approach and the second one is the reduced transfer matrix method.

In both of these approaches, the critical coupling strengths are calculated both numerically and analytically using the saddle point approximation. In this study, it is

considered that the adoption of configurational averages instead of the ensemble averages provides a more appropriate physical framework than the self-consistent mean-field theories since it does not assume the existence of phase transition from the outset.

Keywords: Ising model, block-spin transformation, critical phenomena

BÖLÜM 1

GİRİŞ

1.1 Literatür Özeti

Manyetizmanın fiziksel olarak en temel modellerinden biri, en yakın komşular üzerinden Ising modelidir [1]. Ancak, bu model sadece birkaç durum için tam olarak çözülebilmiştir. Bir boyut için tam çözüm Ising tarafından yapılmış ve bu çözümün en önemli sonuçlarından biri bir boyutta sıfırdan farklı sıcaklıklarda faz geçişi öngörmemesidir. İki boyutta ise kare bir örgü için kritik sıcaklık tahmini Kramers ve Wannier tarafından yapılmış olup [2], kısa bir süre sonrasında ise Onsager [3] iki boyut için serbest enerjiyi tam olarak hesaplamıştır. Bu çözümün esas sonucu, iki boyutta kendiliğinden manyetizasyonun var olması ve kritik bağlanma dayanımının $K_c = 0.44$ olarak bulunmasıdır. Bu sonuç, birkaç aşikâr olmayan faz geçişi örneğinin üstesinden matematiksel bir titizlikle gelmesi bakımından özellikle önemlidir. İki boyutlu Ising sistemlerin tarihsel gelişimi açısından daha çok bilgi için Baxter'in son makalesi [4] oldukça tatmin edicidir. Bal peteği ve üçgen örgüler için de tam çözümler mevcuttur [5], [6]. Diğer örgüler ve daha yüksek boyutlar için ise henüz tam çözümler mevcut değildir. Ancak, sistemlerin bazı özelliklerinin içyüzünü anlamak adına çeşitli ortalama alan teorileri önerilmiştir. Ancak, Ising modelin ortalama alan teorileri kritik nokta civarında göz ardı edilen istatistiksel dalgalanmalardan dolayı genelde çöküntüye uğramaktadır. Böylece 1960'lara kadar ortalama alan teorileri ile yaşanan gelişmeleri, daha detaylı kritik özelliklerin saptanabilmesi için 50 ve 60'larda bilgisayar teknolojisinin gelişmesi ile moleküler dinamik ve monte carlo gibi bilgisayar deneyleri [7], [8], 1967 yılından sonrasında Kadanoff ölçekleme teorisi [9] ve 1970 yılına gelindiğinde ise

renormalizasyon grubu [10] gibi yöntemlerle bu alanda gelişmeler yaşanmaya devam etmiştir.

Diğer yandan, ortalama alan teorileri, sistemin genel özelliklerini geniş parametre aralıklarıyla görece daha rahat tahmin kabiliyetlerinden dolayı hâlen önemini korumaktadır. Buna ek olarak, ortalama alan tipi teorilerin tahminleri, seriye açma ve tam çözüm gibi sonuçlarla kıyaslandığında ise oldukça iyi sonuçlar vermektedir. Bu nedenle, daha gelişmiş bir ortalama alan teorisi geliştirmek bugün için hâlen önemlidir ve hatta bununla ilgili son yıllarda birçok teşebbüs mevcuttur [11-16]. Başlıca ortalama-alan teorilerinden bahsetmek gerekirse Weiss'ın [17] teorisi kritik sıcaklıkta faz geçişini görmesi bakımından oldukça başarılıydı. Diğer bir teori olan Bragg-Williams [18] da yerel korelasyonları göz ardı etmesinden dolayı kritik dayanım sabiti için Weiss ile aynı sonucu buluyordu. Bragg-Williams ve Weiss teorilerinin sakıncası bir boyutta kendiliğinden manyetizasyon yani faz geçişi öngörmeleriydi. Kesin çözümlerden bunun mümkün olmadığını biliyoruz. Kritik değerler için daha başarılı bir tahmin ise Bethe-Peierls [19], [20] teorisinden geldi çünkü bu teori yerel korelasyonları hesaba katması bakımından başarılıydı.

Bütün sınırlamalarına rağmen daha çok korelasyon etkisi [21-24] içeren ortalama-alan teorisi halen gerekmektedir. Bu bağlamda öncesinde birçok geliştirilmiş [25], [26] yöntem mevcuttur.

1.2 Tezin Amacı

Bu tezde Kadanoff'un [27] ortalama-alan modeli ile indirgenmiş transfer matris yöntemini [15], [16] topluluk ortalaması yerine konfigürasyonel ortalama hesaba katılarak birleştirilmesi ve böylece yeni bir ortalama-alan metodu geliştirilmesi hedeflenmiştir.

1.3 Hipotez

Öz-tutarlı ortalama-alan teorilerinde merkez manyetik momentin topluluk ortalaması ile etkileştirilmesinin kullanımı fikri kontrol edilemez bir yaklaşıma sebep olmasından dolayı, bu yaklaşımda öz-tutarlı ortalama-alan teorisindeki gibi bir yaklaşım yerine

merkez manyetik momentin, her bir konfigürasyonun ortalaması ile etkileştirilmesinden hareketle bütün komşularının da her birinin bu konfigürasyonel ortalamaya dahil edilmesi fikri çerçevesinde oluşturulacak modelin fiziksel olarak daha iyi bir iç görüye ve saydamlığa sahip olduğu fikri savunulmaktadır.

BÖLÜM 2

ISİNG MODELİN TANIMI, BİR BOYUTTA ÇÖZÜMLERİ VE KORELASYONLARI

Ising model, Ernst Ising tarafından 1925'de doktora hocası Lenz tarafından verilen manyetik faz geçişleri problemini açıklamak için oluşturulmuş ve kombinatoryal olarak bir boyutta çözülmüştür. Bugün halen istatistik mekaniğinde en çok çalışılan modeldir.

2.1 Ising Modelin Tanımı

Bu modelde manyetik momentlerin bir örgü üzerinde dizildiği ve her *i.* manyetik momentin $\sigma_i = \pm 1$ değer aldığı ve bu örgüdeki her manyetik momentin birbirleri ile olan etkileşmelerinin sadece en yakın komşular üzerinden çift olarak etkileştiği göz önüne alınarak hesaba katılmış ve buna ek olarak örgüdeki her manyetik momentin dış manyetik alanla etkileşimi de gözetilmiştir. Böylece Hamiltonyen aşağıdaki gibi verilmiştir.

$$\mathcal{H} = -J\sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - h\sum_i \sigma_i \tag{2.1}$$

Burada h dış manyetik alan ve J ise bağlanım sabitidir. Ayrıca burada $\langle ij \rangle$ en yakın komşular üzerinden anlamına gelir ve bunun toplamı $\frac{\gamma N}{2}$ tane terim içerir, γ ise en yakın komşu sayısı veya koordinasyon sayısı olarak tanımlanır.

Kanonik bölüşüm fonksiyonu ise

$$Q = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta \mathcal{H}\{\sigma\}} \tag{2.2}$$

olarak verilir. Burada $\{\sigma\}$, σ'nın bütün konfigürasyonları üzerinden toplamı anlamına gelirken, $\beta = 1/k_B T$ şeklinde tanımlanıp, k_B Boltzmann sabiti ve T de sıcaklıktır. Ayrıca N tane manyetik moment için toplam 2^N tane konfigürasyon mevcuttur. Ayrıca $N_+ +1$ değerli yani yukarı yönlü manyetik momentlerin sayısı, $N_- -1$ değerli yani aşağı yönlü manyetik momentlerin sayısı, N_{++} yukarı yönlü çiftlerin sayısı, N_{--} aşağı yönlü çiftlerin sayısı ve N_{+-} veya N_{-+} biri aşağı biri yukarı çiftlerin sayısı olarak tanımlanır. N_{+-} ve N_{-+} arasında bir fark yoktur.

Termodinamik büyüklükler, Helmholtz serbest enerjisinden elde edilebilir ve Helmholtz serbest enerjisi

$$F = -k_B T \ln Q \tag{2.3}$$

olarak verilir. İç enerji

$$U = -k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{F}{k_B T}\right) \tag{2.4}$$

ısı kapasitesi

$$C = \frac{\partial F}{\partial T} \tag{2.5}$$

ve manyetizasyon

$$M = -\frac{\partial}{\partial h}\left(\frac{F}{k_B T}\right) = \left\langle \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \right\rangle \tag{2.6}$$

olarak tanımlanır ve burada $\langle\ \rangle$ topluluk ortalamasını belirtmektedir [28].

Yukarıda verilen aşağı ve yukarı yönlü manyetik moment sayılarından iki boyutlu bir kare örgü için aşağıdaki eşitlikler oluşturulabilir.

$$\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_i = N_{++} + N_{--} - N_{+-} = 4N_{++} - 2\gamma N_{+} + \frac{\gamma}{2}N$$
$$\sum_{i}^{N}\sigma_i = N_{+} - N_{-} = 2N_{+} - N \tag{2.7}$$

Son olarak ise sistemin boyutu ve geometrisine göre koordinasyon sayısı yani komşu tanımlanabilir. Aşağıdakileri örnek olarak verebiliriz.

$$\gamma = \begin{cases} 4 & (\text{2 boyutlu kare örgü}) \\ 6 & (\text{3 boyutlu basit kübik örgü}) \\ 8 & (\text{3 boyutlu hacim-merkezli kübik örgü}) \\ 12 & (\text{3 boyutlu yüzey-merkezli kübik örgü}) \end{cases} \tag{2.8}$$

2.2 Bir Boyutta Ising Modelin Çözümleri

Denklem (2.1)'de verilen Hamiltonyeni, β ile çarpıp, manyetik momentlerin bir zincir üzerinde dizildiğini varsayıp ve tek bir indis vasıtası ile yeniden yazacak olursak

$$-\beta\mathcal{H} = K\sum_i \sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{H}{2}\sum_i(\sigma_i + \sigma_{i+1}) \tag{2.9}$$

halini alır. Burada $K \equiv \beta J$ ve $H \equiv \beta h$ olarak tanımlanmıştır. Böylece kanonik bölüşüm fonksiyonu

$$Q = \sum_{\{\sigma\}} exp\left(K\sum_i \sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{H}{2}\sum_i(\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right) \tag{2.10}$$

şeklinde yazılır.

2.2.1 Serbest Sınır Koşulları ve $h=0$ Durumu

Öncelikle sınırdaki manyetik momentlerde bir kısıtlama olmaması ve dış alanın $h=0$ olduğu durum için çözümü gösterelim. O halde bölüşüm fonksiyonu

$$Q=\sum_{\sigma_1}\ldots\sum_{\sigma_N} exp\left(K\sum_{i=1}^{N-1}\sigma_i\sigma_{i+1}\right) \tag{2.11}$$

olur. Yeni bir değişken tanımlayacak olursak $\eta_i \equiv \sigma_i\sigma_{i+1}$ burada $i=1\ldots N-1$ olmak üzere aşağıdaki gibidir.

$$\eta_i=\begin{cases}+1 & \sigma_i=\sigma_{i+1}\\ -1 & \sigma_i=-\sigma_{i+1}\end{cases} \tag{2.12}$$

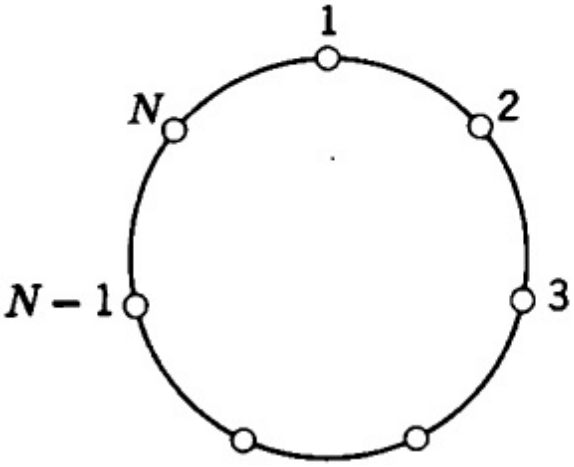
Böylece, bölüşüm fonksiyonumuz

$$\begin{aligned}Q&=\sum_{\sigma_1}\sum_{\eta_1}\ldots\sum_{\eta_{N-1}} e^{K(\eta_1+\eta_2+\ldots+\eta_{N-1})}\\ &=2\left(cosh K\right)^{N-1}\end{aligned} \tag{2.13}$$

halini alır. Yukarıdaki 2, σ_1 üzerinden toplamdan gelirken, üst olan $N-1$ ise η değişkenleri üzerinden toplamdan gelmektedir [29].

2.2.2 Periyodik Sınır koşulları ve $h=0$ Durumu

Manyetik momentlerin örgü üzerindeki dizilimlerini periyodik sınır koşulumuz ile belirlersek örgünün topolojisi aşağıdaki gibi olur ve $\sigma_1=\sigma_{N+1}$ şeklinde ifade edilir.



Şekil 2. 1 Bir boyutlu Ising modelin periyodiklik koşulu altındaki topolojisi [28]

Bu durumda bölüşüm fonksiyonumuzu aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$Q = \sum_{\sigma_1} \ldots \sum_{\sigma_N} exp\left(K \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} + K \sigma_N \sigma_1 \right) \tag{2.14}$$

Bu durumda, sistemi daha önce yaptığımız η_i üzerinden tanımlamaya devam edebiliriz, değişkenlerimiz $\eta_0 \equiv \sigma_1, \eta_1, \ldots \eta_{N-1}$ olmak üzere, aşağıdaki eşitliği yazabiliriz.

$$\sigma_N \sigma_1 \equiv \eta_1 \eta_2 \ldots \eta_{N-1} \tag{2.15}$$

Yukarıdaki ifadeyi (2.14) denkleminde yerine koyacak olursak bölüşüm fonksiyonumuzu aşağıdaki gibi bulmuş oluruz [29].

$$\begin{aligned} Q &= \sum_{\eta_0} \ldots \sum_{\eta_{N-1}} e^{K(\eta_1+\eta_2+\ldots+\eta_{N-1})+K\eta_1\eta_2\ldots\eta_{N-1}} \\ &= 2 \sum_{\eta_0} \ldots \sum_{\eta_{N-1}} e^{K(\eta_1+\eta_2+\ldots+\eta_{N-1})} \sum_{\alpha=0}^{\infty} \frac{\left(K\eta_1\eta_2\ldots\eta_{N-1}\right)^{\alpha}}{\alpha!} \\ &= 2 \sum_{\alpha=0}^{\infty} \frac{K^{\alpha}}{\alpha!} \left[\sum_{\eta} \eta^{\alpha} e^{K\eta} \right]^{N-1} \\ &= 2 \sum_{\alpha=0}^{\infty} \frac{K^{\alpha}}{\alpha!} \left[e^{K} + (-1)^{\alpha} e^{-K} \right]^{N-1} \end{aligned}$$

$$Q = \left(2\cosh K\right)^N + \left(2\sinh K\right)^N \tag{2.16}$$

2.2.3 Bir Boyutta $h \neq 0$ Durumu için Transfer Matris Yöntemi ile Ising Modelin Çözümü

Daha önceki göstermiş olduğumuz çözümlerde, $h \neq 0$ durumu için bölüşüm fonksiyonunu hesaplamak oldukça zordur. Bu nedenle Kramers ve Wannier'in [2] iki boyut için yapmış olduğu transfer matrisi yöntemi çözümü vasıtası ile bir boyutta da üstelik $h \neq 0$ durumunda bile rahatlıkla bölüşüm fonksiyonu hesaplanabilir. Denklem (2.1)'de verilen Ising Hamiltonyenini N tane örgü için aşağıdaki gibi yazarsak

$$Q = \sum_{\sigma_1} e^{K\sigma_1\sigma_2 + \frac{H}{2}(\sigma_1+\sigma_2)} \sum_{\sigma_2} e^{K\sigma_2\sigma_3 + \frac{H}{2}(\sigma_2+\sigma_3)} \ldots \sum_{\sigma_N} e^{K\sigma_N\sigma_{N+1} + \frac{H}{2}(\sigma_N+\sigma_{N+1})} \tag{2.17}$$

ve burada periyodiklik koşulunu $\sigma_1 = \sigma_{N+1}$ şeklinde uyguladığımızda

$$Q = \sum_{\sigma_1} e^{K\sigma_1\sigma_2 + \frac{H}{2}(\sigma_1+\sigma_2)} \sum_{\sigma_2} e^{K\sigma_2\sigma_3 + \frac{H}{2}(\sigma_2+\sigma_3)} \ldots \sum_{\sigma_N} e^{K\sigma_N\sigma_1 + \frac{H}{2}(\sigma_N+\sigma_1)} \tag{2.18}$$

halini alır. Burada her örgü arasındaki etkileşmeyi transfer matrisi tanımlayarak gösterebiliriz. Her $\sigma_i \pm 1$ olmak üzere, her *i.* manyetik moment,

$$\sum_{\{\sigma_i\}} \left|\sigma_i\right\rangle\left\langle\sigma_i\right| = \mathbb{I} \tag{2.19}$$

burada $\mathbb{I}$ birim matris olup, yukarıdaki gibi bazlarla tanımlanabilir. Buna göre, her *i.* manyetik moment

$$\begin{aligned} \left|\sigma_i\right\rangle &= c_+ \left|+\right\rangle + c_- \left|-\right\rangle \\ \left\langle\sigma_i\right| &= c_+^{\,*}\left\langle+\right| + c_-^{\,*}\left\langle-\right| \end{aligned} \tag{2.20}$$

şeklinde öz-vektörlerle tanımlanabilir. Bu bazlar, $\langle + | - \rangle = 0$ ve $\langle + | + \rangle = \langle - | - \rangle = 1$ olmak üzere diklik bağıntılarını ayrıca, c_+ ve c_- katsayı olmak üzere $|c_+|^2 + |c_-|^2 = 1$ normalizasyon koşulunu sağlarlar.

$\boldsymbol{\sigma}_i$ matrisini kolayca hesaplayabilmek için aşağıdaki ortogonal seti oluşturabiliriz. Yalnız, bu seti tamamen $\boldsymbol{\sigma}_i$ 'yi hesaplamak için özel oluşturduk daha sonraki tanımlarda bu öz-vektörleri baştan hesaplayacağız.

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$
$$|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{2.21}$$

sütun matrisleri ve $|\alpha\rangle = (\langle\alpha|)^\dagger$ olarak tanımlandığından ötürü, dolayısı ile

$$\langle + | = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}$$
$$\langle - | = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{2.22}$$

satır matrisleri ile ifade edilir. Şimdi $\boldsymbol{\sigma}_i$ 'nin matris temsilini hesaplayalım.

$$\boldsymbol{\sigma}_i \equiv \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \tag{2.23}$$

şeklinde 2×2 matrisle ifade edilir. σ_i 'nin ± 1 değerleri aldığını biliyoruz bu da demek oluyor ki bu değerler bizim manyetik moment öz-değerlerimizdir ve bunları χ_{+1}, χ_{-1} şeklinde gösteriyoruz. Devamında öz-değer öz-vektör hesabı yardımı ile işlemlerimize devam edeceğiz. Ayrıca $\boldsymbol{\sigma}_i$ 'yi aşağıdaki bağıntı sayesinde de hesaplayabiliriz.

$$\boldsymbol{\sigma}_i = \sum_{\{\sigma\}} |\sigma\rangle \, \sigma_i \, \langle\sigma| \tag{2.24}$$

İşlemlere geçecek olursak

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{\sigma}_i\left|+\right\rangle = \chi_{+1}\left|+\right\rangle \\
&\boldsymbol{\sigma}_i\left|-\right\rangle = \chi_{-1}\left|-\right\rangle \\
&\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = +1\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\
&\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -1\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}
\tag{2.25}
$$

$\boldsymbol{\sigma}_i$ 'nin matris elemanlarını $a_{11} = 1, a_{22} = -1$ ve $a_{12} = a_{21} = 0$ olarak hesaplarız. Sonuç olarak

$$
\boldsymbol{\sigma}_i = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{2.26}
$$

yukarıda bulmuş olduğumuz sonuç $\boldsymbol{\sigma}^z$ matrisidir. Şimdi ise bölüşüm fonksiyonumuza geri dönecek olursak (2.19) denkleminde yapmış olduğumuz tanımı (2.18) denkleminde yerine koyarak işlemlerimize devam ediyoruz

$$
\begin{aligned}
&Q = \sum_{\{\sigma_i\}} \left|\sigma_i\right\rangle\left\langle\sigma_i\right| \prod_i^N e^{K\sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{H}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1})} \\
&Q = \sum_{\sigma_1}\sum_{\sigma_2}\cdots\sum_{\sigma_N} \left|\sigma_1\right\rangle\left\langle\sigma_1\right| e^{K\sigma_1\sigma_2 + \frac{H}{2}(\sigma_1+\sigma_2)} \left|\sigma_2\right\rangle\left\langle\sigma_2\right| e^{K\sigma_2\sigma_3 + \frac{H}{2}(\sigma_2+\sigma_3)} \\
&\qquad\qquad \times \cdots \left|\sigma_N\right\rangle\left\langle\sigma_N\right| e^{K\sigma_N\sigma_1 + \frac{H}{2}(\sigma_N+\sigma_1)} \left|\sigma_{N+1}\right\rangle\left\langle\sigma_{N+1}\right|
\end{aligned}
\tag{2.27}
$$

$\left|\sigma_{N+1}\right\rangle\left\langle\sigma_{N+1}\right| = \left|\sigma_1\right\rangle\left\langle\sigma_1\right|$ periyodiklik koşulumuzu uyguluyoruz. Böylece denklemimiz

$$
\begin{aligned}
&Q = \sum_{\sigma_1}\sum_{\sigma_2}\cdots\sum_{\sigma_N} \left\langle\sigma_1\right| e^{K\sigma_1\sigma_2 + \frac{H}{2}(\sigma_1+\sigma_2)} \left|\sigma_2\right\rangle\left\langle\sigma_2\right| e^{K\sigma_2\sigma_3 + \frac{H}{2}(\sigma_2+\sigma_3)} \\
&\qquad\qquad \times \cdots \left|\sigma_N\right\rangle\left\langle\sigma_N\right| e^{K\sigma_N\sigma_1 + \frac{H}{2}(\sigma_N+\sigma_1)} \left|\sigma_1\right\rangle
\end{aligned}
\tag{2.28}
$$

haline dönüşüyor. Şimdi ise hermityen transfer matrisi $\mathbb{T}$ 'yi tanımlayacak olursak

$$\mathbb{T}=\left\langle \sigma_i \left| e^{K\sigma_i\sigma_{i+1}+\frac{H}{2}(\sigma_i+\sigma_{i+1})} \right| \sigma_{i+1} \right\rangle = \begin{pmatrix} \langle +1|\mathbb{T}|+1\rangle & \langle +1|\mathbb{T}|-1\rangle \\ \langle -1|\mathbb{T}|+1\rangle & \langle -1|\mathbb{T}|-1\rangle \end{pmatrix}$$

$$\langle +1|\mathbb{T}|+1\rangle = \mathbb{T}_{11} = e^{K(1)(1)+\frac{H}{2}((1)+(1))}$$

$$\langle -1|\mathbb{T}|-1\rangle = \mathbb{T}_{22} = e^{K(-1)(-1)+\frac{H}{2}((-1)+(-1))}$$

$$\langle +1|\mathbb{T}|-1\rangle = \mathbb{T}_{12} = e^{K(1)(-1)+\frac{H}{2}((1)+(-1))} = \langle -1|\mathbb{T}|+1\rangle = \mathbb{T}_{21} = e^{K(-1)(1)+\frac{H}{2}((-1)+(1))}$$

$$\mathbb{T}=\begin{pmatrix} e^{K+H} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-H} \end{pmatrix} \tag{2.29}$$

sonucunu elde ederiz. Bölüşüm fonksiyonumuza yani (2.28) denklemine geri dönecek olursak

$$Q=\sum_{\sigma_1}\langle \sigma_1 | \mathbb{T}^N | \sigma_1 \rangle \tag{2.30}$$

halini alır. $\mathbb{T}^N$'yi kolayca hesaplayabilmek için bu matrisi diyagonal hale getirmemiz gerekmektedir. Bunun için yine öz-değer öz-vektör hesabından yardım alıyoruz ve aşağıdaki adımları takip ediyoruz.

$$\begin{aligned} \mathbb{T}|\sigma_1\rangle &= \lambda|\sigma_1\rangle \\ \mathbb{T}\mathbb{U}^{-1}\mathbb{U}|\sigma_1\rangle &= \lambda|\sigma_1\rangle \\ \mathbb{U}\mathbb{T}\mathbb{U}^{-1}\mathbb{U}|\sigma_1\rangle &= \lambda\mathbb{U}|\sigma_1\rangle \\ \langle\sigma_1|\mathbb{U}^{-1}\mathbb{U}\mathbb{T}\mathbb{U}^{-1}\mathbb{U}|\sigma_1\rangle &= \langle\sigma_1|\mathbb{U}^{-1}\lambda\mathbb{U}|\sigma_1\rangle \\ \left(\mathbb{U}\mathbb{T}\mathbb{U}^{-1}\right)_{ii} &= \lambda_i \end{aligned} \tag{2.31}$$

Burada λ, $\mathbb{T}$ matrisinin özdeğeridir. Ayrıca dönüşümü sağlayan $\mathbb{U}^{-1}\mathbb{U}=\mathbb{I}$ olarak tanımlanır, burada $\mathbb{U}$ üniter matris olup $\left(\mathbb{U}^{-1}\right)^{\dagger}=\mathbb{U}$ tanımını sağlar. Öz-değerimizin hesabı ise

$$\det\left(\mathbb{T}-\mathbb{I}\lambda\right)=0 \quad \Rightarrow \quad \begin{vmatrix} e^{K+H}-\lambda & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-H}-\lambda \end{vmatrix}=0 \tag{2.32}$$

işlemini takiben aşağıdaki sonuç bulunur.

$$\lambda_{+,-} = e^{K}\left[cosh H \pm \sqrt{sinh^2 H + e^{-4K}} \right] \tag{2.33}$$

Böylece,

$$\mathbb{U}^{-1}\mathbb{T}\mathbb{U} \equiv \mathbb{P} = \begin{pmatrix} \lambda_{+} & 0 \\ 0 & \lambda_{-} \end{pmatrix} \tag{2.34}$$

$\mathbb{P}$ diyagonal matrisi öz-değerler cinsinden elde edilir. (2.30) denklemindeki toplam ifadesi matrisin İz'ine dönüşür $\sum_{\sigma_1} \to Tr$. Böylece, bölüşüm fonksiyonu aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$\begin{aligned} Q &= Tr\left(\left(\mathbb{U}^{-1}\mathbb{T}\mathbb{U} \right)^{N} \right) = Tr\left(\mathbb{U}^{-1}\mathbb{T}^{N}\mathbb{U} \right) = Tr\left(\mathbb{P}^{N} \right) = {\lambda_{+}}^{N} + {\lambda_{-}}^{N} \\ Q &= {\lambda_{+}}^{N}\left(1 + \left(\frac{\lambda_{-}}{\lambda_{+}} \right)^{N} \right) \end{aligned} \tag{2.35}$$

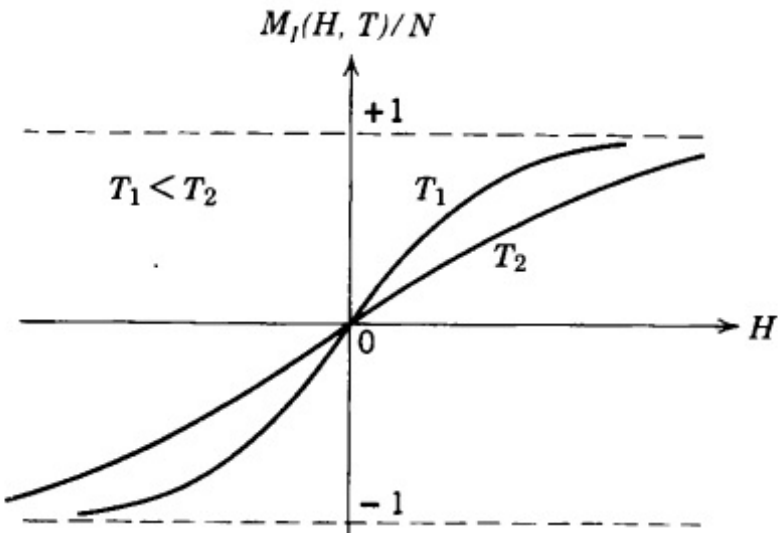
Yukarıdaki ifadeden $h = 0$ için (2.13) denkleminin sağlandığını kolayca görebilirsiniz. Termodinamik limitte $N \to \infty$ bölüşüm fonksiyonu yaklaşık olarak aşağıdaki halini alır.

$$Q \cong {\lambda_{+}}^{N} = \left(e^{K}\left[cosh H + \sqrt{sinh^2 H + e^{-4K}} \right] \right)^{N} \tag{2.36}$$

Buradan da termodinamik büyüklüklere Helmholtz serbest enerjisi (2.3) denklemi vasıtası ile kolayca geçilebilir. Örneğin (2.6) denkleminden bölüşüm fonksiyonu yardımıyla mantik moment başına düşen manyetizasyon ise

$$m = \langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{N}\left\langle \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \right\rangle = \frac{1}{N}\frac{\partial(\ln Q)}{\partial H} \tag{2.37}$$

olarak hesaplanır.



Şekil 2.2 Bir boyutlu Ising modelin manyetizasyonu [28]

2.3 Bir Boyutlu Ising Modelde Korelasyonlar

İki-nokta korelasyon fonksiyonu yani örgüdeki i ve j noktaları arasındaki korelasyonun bağıntısı aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$G(i,j) = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \tag{2.38}$$

Şimdi transfer matrisi yardımıyla yukarıdaki değerleri hesaplayalım.

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_i \rangle &= \frac{1}{Q} \left\{ \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \cdots \sum_{\sigma_N} \sigma_i \prod_j^N e^{K\sigma_j\sigma_{j+1} + \frac{H}{2}(\sigma_j + \sigma_{j+1})} \right\} \\
&= \frac{1}{Q} Tr\left[\langle \sigma_1 | \mathbb{T} | \sigma_2 \rangle \cdots\cdots \langle \sigma_{i-1} | \mathbb{T} | \sigma_i \rangle \sigma_i \langle \sigma_i | \mathbb{T} | \sigma_{i+1} \rangle \cdots\cdots \langle \sigma_N | \mathbb{T} | \sigma_1 \rangle \right] \\
&= \frac{1}{Q} Tr\left[\mathbb{T}^{i-1} \boldsymbol{\sigma} \mathbb{T}^{N-(i-1)} \right] \\
&= \frac{1}{Q} Tr\left[\mathbb{T}^N \boldsymbol{\sigma} \right] \\
&= \frac{1}{Q} Tr\left[\mathbb{U} \mathbb{P}^N \mathbb{U}^{-1} \boldsymbol{\sigma} \right]
\end{aligned} \tag{2.39}$$

Burada $\langle \sigma_i \rangle$ i ve j'den bağımsızdır. $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ ise i ve j'nin farkına bağlıdır, o halde i ve j'nin farkına $j - i = r$ diye tanımlayıp hesaplayabiliriz, çünkü periyodiklik koşulumuz buna bir engel teşkil etmez.

$$
\begin{aligned}
\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle &= \frac{1}{Q} \left\{ \sum_{\{\sigma\}} \sigma_i \sigma_{i+r} e^{K\sum_j \sigma_j \sigma_{j+1} + \frac{H}{2}\sum_i (\sigma_j + \sigma_{j+1})} \right\} \\
&= \frac{1}{Q} \left\{ \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \cdots \sum_{\sigma_N} \sigma_i \sigma_{i+r} \prod_j^N e^{K\sigma_j \sigma_{j+1} + \frac{H}{2}(\sigma_j + \sigma_{j+1})} \right\} \\
&= \frac{1}{Q} Tr \left[\begin{array}{l} \langle \sigma_1 | \mathbb{T} | \sigma_2 \rangle \cdots \langle \sigma_{i-1} | \mathbb{T} | \sigma_i \rangle \sigma_i \langle \sigma_i | \mathbb{T} | \sigma_{i+1} \rangle \cdots \\ \qquad \times \cdots \langle \sigma_{i+r-1} | \mathbb{T} | \sigma_{i+r} \rangle \sigma_{i+r} \langle \sigma_{i+r} | \mathbb{T} | \sigma_{i+r+1} \rangle \cdots \langle \sigma_N | \mathbb{T} | \sigma_1 \rangle \end{array} \right] \\
&= \frac{1}{Q} Tr \left[\mathbb{T}^{i-1} \boldsymbol{\sigma} \mathbb{T}^r \boldsymbol{\sigma} \mathbb{T}^{N-(i-1+r)} \right] \\
&= \frac{1}{Q} Tr \left[\boldsymbol{\sigma} \mathbb{T}^r \boldsymbol{\sigma} \mathbb{T}^{N-r} \right] \\
&= \frac{1}{Q} Tr \left[\boldsymbol{\sigma} \mathbb{U} \mathbb{P}^r \mathbb{U}^{-1} \boldsymbol{\sigma} \mathbb{U} \mathbb{P}^{N-r} \mathbb{U}^{-1} \right]
\end{aligned}
\tag{2.40}
$$

(2.39) denklemi ve (2.40) denklemindeki değerleri tam olarak belirleyebilmemiz için dış alan faktörünü dikkate almalıyız, çünkü $\mathbb{U}$ üniter matrisi, öz-vektörlere dolayısıyla h 'ye bağlı olarak belirlenir [30].

2.3.1 $h \neq 0$ Durumunda Korelasyonlar

Bu durum için öncelikle öz-vektörlerimizi ve bunu takiben $\mathbb{U}$ üniter matrisimizi belirleyelim. Daha sonrasında ise (2.39) ve (2.40) denklemlerimizi hesap edip (2.38) denkleminde yerine koyarak korelasyon fonksiyonunu belirlemiş oluruz. Şimdi öz-vektörlerimizi hesaplayalım. Bunun için aşağıdaki diklik bağıntılarını sağlayacak şekilde bir set oluşturalım.

$$
\langle +1 | -1 \rangle = 0 \text{ ve } \langle +1 | +1 \rangle = \langle -1 | -1 \rangle = 1 \tag{2.41}
$$

Buna göre

$$
|+1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} \tag{2.42}
$$

ve

$$|-1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_- \\ -\alpha_+ \end{pmatrix} \tag{2.43}$$

şeklinde oluşturabiliriz. Öz-değer, öz-vektör hesabımızdan

$$\mathbb{T}|+1\rangle = \lambda_+ |+1\rangle \;\Rightarrow\; \begin{pmatrix} \mathbb{T}_{11} - \lambda_+ & \mathbb{T}_{12} \\ \mathbb{T}_{21} & \mathbb{T}_{22} - \lambda_+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = 0 \tag{2.44}$$

işlemimizin devamından

$$\frac{\alpha_+^{\,2}}{\alpha_-^{\,2}} = \frac{\mathbb{T}_{22} - \lambda_+}{\mathbb{T}_{11} - \lambda_+} \tag{2.45}$$

eşitliğini elde ederiz. Normalizasyon koşulumuz

$$|\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2 = 1 \tag{2.46}$$

olduğunu da göz önüne alarak işlemlerimizin takibine devam edecek olursak

$$\alpha_\pm = \frac{1}{2}\left(1 \pm \frac{e^{2K}\sinh H}{\sqrt{e^{4K}\sinh^2 H + 1}}\right) \tag{2.47}$$

değerlerini bulmuş oluruz.

Şimdi $\mathbb{U}$ üniter matrisimizi hesaplayalım. Bunun için tekrar öz-değer, öz-vektör hesabımıza dönelim

$$\mathbb{T}|\pm 1\rangle = \lambda_\pm |\pm 1\rangle \tag{2.48}$$

Transfer matrisimizin iki öz-vektörü ve iki öz-değeri olduğunu biliyoruz. Diyagonalleştirme işlemlerimizden

$$\mathbb{U}^{-1}\mathbb{T}\mathbb{U} = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix} \;\Rightarrow\; \mathbb{T}\mathbb{U} = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix} \mathbb{U} \tag{2.49}$$

olduğunu gösterdikten sonra $\mathbb{U}$ üniter matrisimizi

$$\mathbb{U} = \left(|+1\rangle \quad |-1\rangle \right) \tag{2.50}$$

şeklinde transfer matrisinin öz-vektörlerinden oluşan bir matris olarak tanımlayabiliriz. Şimdi hesapladığımız sonuçlara göre öz-vektörlerimiz aşağıdaki gibi bulmuş oluruz.

$$|+1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \dfrac{e^{2K} \sinh H}{\sqrt{e^{4K} \sinh^2 H + 1}} \\ 1 - \dfrac{e^{2K} \sinh H}{\sqrt{e^{4K} \sinh^2 H + 1}} \end{pmatrix}$$
$$|-1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_- \\ -\alpha_+ \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - \dfrac{e^{2K} \sinh H}{\sqrt{e^{4K} \sinh^2 H + 1}} \\ -1 + \dfrac{e^{2K} \sinh H}{\sqrt{e^{4K} \sinh^2 H + 1}} \end{pmatrix} \tag{2.51}$$

$\mathbb{U}$ üniter matrisimiz ise aşağıdaki gibidir.

$$\mathbb{U} = \left(|+1\rangle \quad |-1\rangle \right) = \begin{pmatrix} \alpha_+ & \alpha_- \\ \alpha_- & -\alpha_+ \end{pmatrix}$$
$$\mathbb{U} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \dfrac{e^{2K} \sinh H}{\sqrt{e^{4K} \sinh^2 H + 1}} & 1 - \dfrac{e^{2K} \sinh H}{\sqrt{e^{4K} \sinh^2 H + 1}} \\ 1 - \dfrac{e^{2K} \sinh H}{\sqrt{e^{4K} \sinh^2 H + 1}} & -1 + \dfrac{e^{2K} \sinh H}{\sqrt{e^{4K} \sinh^2 H + 1}} \end{pmatrix} \tag{2.52}$$

Şimdi φ 'ye bağlı bir parametreyi aşağıdaki gibi tanımlayalım.

$$\cot 2\varphi = e^{2K} \sinh H, \qquad 0 < \varphi < \frac{\pi}{2} \tag{2.53}$$

Bu tanımı $\mathbb{U}$ üniter matrisimizde yani (2.52) denkleminde yerine koyduğumuzda

$$\mathbb{U} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} \tag{2.54}$$

matrisini elde ederiz. $\boldsymbol{\sigma}$ ve $\mathbb{T}$ matrislerini aşağıdaki işlemlere tabi tutarsak

$$\mathbb{U}^{-1}\mathbb{T}\mathbb{U}=\begin{pmatrix}\lambda_{+} & 0\\ 0 & \lambda_{-}\end{pmatrix} \tag{2.55}$$

ve

$$\begin{aligned}\mathbb{U}^{-1}\boldsymbol{\sigma}\mathbb{U}&=\begin{pmatrix}\cos\varphi & \sin\varphi\\ -\sin\varphi & \cos\varphi\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\varphi & -\sin\varphi\\ \sin\varphi & \cos\varphi\end{pmatrix}\\ &=\begin{pmatrix}\cos 2\varphi & -\sin 2\varphi\\ -\sin 2\varphi & -\cos 2\varphi\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{2.56}$$

sonucunu elde ederiz [6]. Sonuç olarak, (2.55) ve (2.56) denklemindeki sonuçları (2.39) ve (2.40) denkleminde yerine koyup işlemlere devam edersek (2.38) yani korelasyon fonksiyonunu hesaplamış oluruz. Öyleyse

$$\begin{aligned}\langle\sigma_i\rangle&=\frac{1}{Q}Tr\left[\mathbb{U}\mathbb{P}^{N}\mathbb{U}^{-1}\boldsymbol{\sigma}\right]\\ &=\frac{1}{Q}Tr\left[\mathbb{P}^{N}\mathbb{U}^{-1}\boldsymbol{\sigma}\mathbb{U}\right]\\ &=\frac{1}{Q}Tr\left[\begin{pmatrix}\lambda_{+}^{N} & 0\\ 0 & \lambda_{-}^{N}\end{pmatrix}\mathbb{U}^{-1}\boldsymbol{\sigma}\mathbb{U}\right]\\ &=\frac{1}{Q}Tr\left[\begin{pmatrix}\lambda_{+}^{N} & 0\\ 0 & \lambda_{-}^{N}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos 2\varphi & -\sin 2\varphi\\ -\sin 2\varphi & -\cos 2\varphi\end{pmatrix}\right]\\ &=\frac{1}{Q}Tr\left[\begin{pmatrix}\lambda_{+}^{N}\cos 2\varphi & -\lambda_{+}^{N}\sin 2\varphi\\ -\lambda_{-}^{N}\sin 2\varphi & -\lambda_{-}^{N}\cos 2\varphi\end{pmatrix}\right]\end{aligned}$$

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{Q}\left(\lambda_+^{\,N}\cos 2\varphi - \lambda_-^{\,N}\cos 2\varphi\right)$$
$$= \frac{1}{\left(\lambda_+^{\,N}+\lambda_-^{\,N}\right)}\left(\lambda_+^{\,N}\left(\cos 2\varphi - \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N \cos 2\varphi\right)\right)$$
$$= \frac{1}{\lambda_+^{\,N}\left(1+\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N\right)}\left(\lambda_+^{\,N}\left(\cos 2\varphi - \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N \cos 2\varphi\right)\right) \qquad (2.57)$$

$N \to \infty$ limitinde

$$\langle \sigma_i \rangle = \cos 2\varphi \qquad (2.58)$$

olarak hesaplanır. (2.40) denklemine dönecek olursak

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle = \frac{1}{Q} Tr\left[\boldsymbol{\sigma}\mathbb{U}\mathbb{P}^r\mathbb{U}^{-1}\boldsymbol{\sigma}\mathbb{U}\mathbb{P}^{N-r}\mathbb{U}^{-1}\right]$$
$$= \frac{1}{Q} Tr\left[\mathbb{U}^{-1}\boldsymbol{\sigma}\mathbb{U}\mathbb{P}^r\begin{pmatrix}\cos 2\varphi & -\sin 2\varphi\\ -\sin 2\varphi & -\cos 2\varphi\end{pmatrix}\mathbb{P}^{N-r}\right]$$
$$= \frac{1}{Q} Tr\left[\begin{pmatrix}\cos 2\varphi & -\sin 2\varphi\\ -\sin 2\varphi & -\cos 2\varphi\end{pmatrix}\mathbb{P}^r\begin{pmatrix}\cos 2\varphi & -\sin 2\varphi\\ -\sin 2\varphi & -\cos 2\varphi\end{pmatrix}\mathbb{P}^{N-r}\right]$$
$$= \frac{1}{Q} Tr\left[\begin{pmatrix}\cos 2\varphi & -\sin 2\varphi\\ -\sin 2\varphi & -\cos 2\varphi\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\lambda_+^{\,r} & 0\\ 0 & \lambda_-^{\,r}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos 2\varphi & -\sin 2\varphi\\ -\sin 2\varphi & -\cos 2\varphi\end{pmatrix}\mathbb{P}^{N-r}\right]$$
$$= \frac{1}{Q} Tr\left[\begin{pmatrix}\lambda_+^{\,r}\cos 2\varphi & -\lambda_-^{\,r}\sin 2\varphi\\ -\lambda_+^{\,r}\sin 2\varphi & -\lambda_-^{\,r}\cos 2\varphi\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos 2\varphi & -\sin 2\varphi\\ -\sin 2\varphi & -\cos 2\varphi\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\lambda_+^{\,N-r} & 0\\ 0 & \lambda_-^{\,N-r}\end{pmatrix}\right]$$
$$= \frac{1}{Q} Tr\left[\begin{pmatrix}\lambda_+^{\,r}\cos 2\varphi & -\lambda_-^{\,r}\sin 2\varphi\\ -\lambda_+^{\,r}\sin 2\varphi & -\lambda_-^{\,r}\cos 2\varphi\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\lambda_+^{\,N-r}\cos 2\varphi & -\lambda_-^{\,N-r}\sin 2\varphi\\ -\lambda_+^{\,N-r}\sin 2\varphi & -\lambda_-^{\,N-r}\cos 2\varphi\end{pmatrix}\right]$$
$$= \frac{1}{Q} Tr\begin{pmatrix}\lambda_+^{\,N}(\cos 2\varphi)^2 + \lambda_+^{\,N-r}\lambda_-^{\,r}(\sin 2\varphi)^2 & \left(\lambda_-^{\,N} - \lambda_-^{\,N-r}\lambda_+^{\,r}\right)\sin 2\varphi\cos 2\varphi\\ \left(\lambda_+^{\,N-r}\lambda_-^{\,r} - \lambda_+^{\,N}\right)\sin 2\varphi\cos 2\varphi & \lambda_-^{\,N-r}\lambda_+^{\,r}(\sin 2\varphi)^2 + \lambda_-^{\,N}(\cos 2\varphi)^2\end{pmatrix}$$
$$= \frac{1}{Q}\left(\lambda_+^{\,N}(\cos 2\varphi)^2 + \lambda_+^{\,N-r}\lambda_-^{\,r}(\sin 2\varphi)^2 + \lambda_-^{\,N-r}\lambda_+^{\,r}(\sin 2\varphi)^2 + \lambda_-^{\,N}(\cos 2\varphi)^2\right)$$
$$= \frac{1}{\left(\lambda_+^{\,N}+\lambda_-^{\,N}\right)}\left(\left(\lambda_+^{\,N}+\lambda_-^{\,N}\right)(\cos 2\varphi)^2 + \left(\lambda_+^{\,N-r}\lambda_-^{\,r} + \lambda_-^{\,N-r}\lambda_+^{\,r}\right)(\sin 2\varphi)^2\right)$$

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle = (cos2\varphi)^2 + \frac{1}{(\lambda_+^N + \lambda_-^N)} \left(\left(\lambda_+^N \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^r + \lambda_-^N \left(\frac{\lambda_+}{\lambda_-} \right)^r \right) (sin2\varphi)^2 \right)$$

$$= (cos2\varphi)^2 + \frac{1}{\left(\lambda_+^N \left(1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right) \right)} \left(\left(\lambda_+^N \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^r + \lambda_-^N \left(\frac{\lambda_+}{\lambda_-} \right)^r \right) (sin2\varphi)^2 \right) \quad (2.59)$$

$N \to \infty$ limitine götürürsek

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle = (cos2\varphi)^2 + (sin2\varphi)^2 \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^r \quad (2.60)$$

olarak hesaplarız. Yukarıdaki denklemin $\langle \sigma_i \rangle$'ye bağlı olarak daha genel bir şekilde gösterimi ise aşağıdaki gibidir.

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle = \langle \sigma_i \rangle^2 + (1 - \langle \sigma_i \rangle)^2 \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^r \quad (2.61)$$

Sonuç olarak (2.3.1) denkleminden korelasyon fonksiyonu

$$G(i,j) = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle$$

$$= (cos2\varphi)^2 + (sin2\varphi)^2 \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^r - (cos2\varphi)^2$$

$$= (sin2\varphi)^2 \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^r \quad (2.62)$$

şeklinde hesaplamış oluruz. Bu durumda $G(i,r)$'nin $\langle \sigma_i \rangle$'ye bağlı olarak ise aşağıdaki gibi buluruz.

$$G(i,r) = (1 - \langle \sigma_i \rangle)^2 \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^r \quad (2.63)$$

2.3.2 $h=0$ Durumunda Korelasyonlar

Bu durumda, (2.51) denklemindeki öz-vektörlere ve (2.52) denklemindeki $\mathbb{U}$ üniter matrisine $h=0$ değerini vererek bu durumda oluşan öz-vektörleri ve $\mathbb{U}$ üniter matrisini hesaplayabiliriz. Böylelikle öz-vektörlerimiz

$$\begin{aligned} |+1\rangle &= \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ |-1\rangle &= \begin{pmatrix} \alpha_- \\ -\alpha_+ \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{2.64}$$

olarak hesaplanır. $\mathbb{U}$ üniter matrisimiz ise

$$\begin{aligned} \mathbb{U} &= \begin{pmatrix} |+1\rangle & |-1\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_+ & \alpha_- \\ \alpha_- & -\alpha_+ \end{pmatrix} \\ \mathbb{U} &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{2.65}$$

şeklinde hesaplanır. Şimdi $\boldsymbol{\sigma}$ ve $\mathbb{T}$ matrislerini aşağıdaki işlemlere sokarsak

$$\mathbb{U}^{-1}\mathbb{T}\mathbb{U} = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix} \tag{2.66}$$

ve

$$\begin{aligned} \mathbb{U}\boldsymbol{\sigma}\mathbb{U}^{-1} &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{2.67}$$

bu yukarıda bulmuş olduğumuz spin $\boldsymbol{\sigma}^x$ matrisine karşılık gelmektedir. Devamında bu sonuçları (2.39) ve (2.40) denkleminde yerine koyarak (2.38) denklemimizi hesap ederiz [30].

$$\begin{aligned}\langle\sigma_i\rangle &= \frac{1}{Q}Tr\left[\mathbb{P}^N\mathbb{U}^{-1}\mathbb{U}\boldsymbol{\sigma}\right]\\ &= \frac{1}{Q}Tr\left[\mathbb{P}^N\mathbb{U}^{-1}\boldsymbol{\sigma}\mathbb{U}\right]\\ &= \frac{1}{Q}Tr\left[\begin{pmatrix}\lambda_+^N & 0\\ 0 & \lambda_-^N\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\right]\\ &= \frac{1}{Q}Tr\left[\begin{pmatrix}0 & \lambda_+^N\\ \lambda_-^N & 0\end{pmatrix}\right]\\ &= 0\end{aligned} \tag{2.68}$$

Şimdi de $\langle\sigma_i\sigma_{i+r}\rangle$'yi hesap edelim

$$\begin{aligned}\langle\sigma_i\sigma_{i+r}\rangle &= \frac{1}{Q}Tr\left[\boldsymbol{\sigma}\mathbb{U}\mathbb{P}^r\mathbb{U}^{-1}\boldsymbol{\sigma}\mathbb{U}\mathbb{P}^{N-r}\mathbb{U}^{-1}\right]\\ &= \frac{1}{Q}Tr\left[\mathbb{U}^{-1}\boldsymbol{\sigma}\mathbb{U}\mathbb{P}^r\mathbb{U}^{-1}\boldsymbol{\sigma}\mathbb{U}\mathbb{P}^{N-r}\right]\\ &= \frac{1}{Q}Tr\left[\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\lambda_+^r & 0\\ 0 & \lambda_-^r\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\lambda_+^{N-r} & 0\\ 0 & \lambda_-^{N-r}\end{pmatrix}\right]\\ &= \frac{1}{Q}Tr\left[\begin{pmatrix}0 & \lambda_+^r\\ \lambda_-^r & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & \lambda_+^{N-r}\\ \lambda_-^{N-r} & 0\end{pmatrix}\right]\\ &= \frac{1}{\left(\lambda_+^N+\lambda_-^N\right)}Tr\left[\begin{pmatrix}\lambda_+^{N-r}\lambda_-^r & 0\\ 0 & \lambda_-^{N-r}\lambda_+^r\end{pmatrix}\right]\\ &= \frac{\left(\lambda_+^{N-r}\lambda_-^r+\lambda_-^{N-r}\lambda_+^r\right)}{\left(\lambda_+^N+\lambda_-^N\right)}\\ &= \frac{\lambda_+^N\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^r+\lambda_-^N\left(\frac{\lambda_+}{\lambda_-}\right)^r}{\lambda_+^N\left(1+\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N\right)}\end{aligned} \tag{2.69}$$

$N\to\infty$ limitine götürürsek

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle = \frac{\lambda_+^N \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^r + \lambda_-^N \left(\frac{\lambda_+}{\lambda_-}\right)^r}{\lambda_+^N \left(1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N\right)}$$

$$= \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^r = \left(\frac{e^K\left(1-e^{-2K}\right)}{e^K\left(1+e^{-2K}\right)}\right)^r = \left(\frac{2\,sinhK}{2\,coshK}\right)^r$$

$$= \left(tanhK\right)^r \tag{2.70}$$

değerini alır. Korelasyon fonksiyonu ise aşağıdaki gibidir [6].

$$G(i,r) = \langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle = \left(tanhK\right)^r \tag{2.71}$$

BÖLÜM 3

ORTALAMA-ALAN TEORİLERİ

Bu bölümde ortalama alan teorilerinin tanıtımını yapacağız. Öncelikle O-A-T, Ising Hamiltonyeninde, bütün manyetik momentlerin en yakın komşularıyla olan etkileşme terimlerinin toplamı yerine, bütün manyetik momentlerin topluluğun ortalaması olan manyetik moment ile etkileşme terimlerinin toplanması vasıtası ile yapılan yaklaşık modellerdir. Ising sistemlerin bu teorilerle ilgili oldukça geniş bir tarihi vardır. Bu nedenle hepsini burada anlatmak mümkün olmadığı için başlıca modellerden bahsedeceğiz. Bunlar, Weiss [17], Bragg-Williams [18] ve Bethe-Peierls [19], [20] teorileridir.

3.1 Weiss Ortalama-Alan Teorisi

Bu yaklaşımda, örgü üzerindeki manyetik momenti, ortalama manyetik moment değeri ile etkileştirelim. Bunun için örgü üzerindeki en yakın komşular üzerinden etkileşen manyetik momentlerin toplamı yerine örgüdeki her manyetik momentin ortalama manyetik moment değeri ile olan etkileşmesine bakalım. Öncelikle

$$\sigma_i = \left(\sigma_i - \langle\sigma\rangle\right) + \langle\sigma\rangle \tag{3.1}$$

şeklinde bir tanım ile işe başlayabiliriz. Denklem (2.1)'de verilen Ising Hamiltonyenini aşağıdaki gibi yazalım.

$$\mathcal{H} = -\sum_i \sigma_i \left(h + J \sum_{\langle j \rangle} \sigma_j \right) \tag{3.2}$$

Parantez içindeki terim efektif dış alan olarak tanımlanabilir. Şimdi de (3.1) denklemini yukarıda efektif dış alan kısmında yani parantezin içinde yerine koyalım. Ancak bundan önce (3.1) denklemindeki ilk ifadeyi göz ardı edelim çünkü bu terim dalgalanmalara karşılık gelmektedir ve bu yaklaşımın en temel varsayımı bu dalgalanmaları ihmal etmektir. Böylelikle

$$\mathcal{H} = -\sum_i \sigma_i \left(h + J \sum_{\langle j \rangle} \langle \sigma \rangle \right) \tag{3.3}$$

haline dönüşür. Burada parantez içindeki en yakın komşu üzerinden toplam ifadesi de örgü üzerindeki manyetik momentlerin komşu sayısını belirtmektedir.

$$\langle j \rangle \to \gamma \tag{3.4}$$

Sonuç olarak, Hamiltonyenimizin β ile çarpılmış hali aşağıdaki gibidir.

$$-\beta\mathcal{H} = \sum_i \sigma_i \left(H + \gamma K \langle \sigma \rangle \right) \tag{3.5}$$

Buradan da (2.2) denklemi vasıtası ile bölüşüm fonksiyonumuzu hesap edebiliriz.

$$\begin{aligned}
Q &= \sum_{\{\sigma\}} exp\left(\sum_i \sigma_i \left(H + \gamma K \langle \sigma \rangle \right) \right) \\
Q &= \sum_{\sigma_1} \cdots \sum_{\sigma_N} exp\left(\sum_i \sigma_i \left(H + \gamma K \langle \sigma \rangle \right) \right) \\
Q &= \sum_{\sigma_1 = \pm 1} e^{\sigma_1 \left(H + \gamma K \langle \sigma \rangle \right)} \sum_{\sigma_2 = \pm 1} e^{\sigma_2 \left(H + \gamma K \langle \sigma \rangle \right)} \cdots \sum_{\sigma_N = \pm 1} e^{\sigma_N \left(H + \gamma K \langle \sigma \rangle \right)} \\
Q &= \left(e^{\left(H + \gamma K \langle \sigma \rangle \right)} + e^{-\left(H + \gamma K N \langle \sigma \rangle \right)} \right)^N \\
Q &= \left(2 cosh\left(H + \gamma K \langle \sigma \rangle \right) \right)^N
\end{aligned} \tag{3.6}$$

Manyetik moment başına manyetizasyon, (2.37) denkleminden kolayca elde edilebilir [31].

$$\langle\sigma\rangle = \frac{1}{N}\frac{\partial \ln Q}{\partial H} = \frac{1}{NQ}\frac{\partial Q}{\partial H}$$

$$\langle\sigma\rangle = \left(2\cosh\left(H+\gamma K\langle\sigma\rangle\right)\right)^{-1}\frac{\partial}{\partial H}\left(2\cosh\left(H+\gamma K\langle\sigma\rangle\right)\right)$$

$$\langle\sigma\rangle = \frac{\sinh\left(H+\gamma K\langle\sigma\rangle\right)}{\cosh\left(H+\gamma K\langle\sigma\rangle\right)}$$

$$\langle\sigma\rangle = \tanh\left(H+\gamma K\langle\sigma\rangle\right) \tag{3.7}$$

Yukarıdaki denklemin grafiksel olarak çözümü mevcuttur. Bunun için öncelikle

$$x \equiv \beta h + \frac{\gamma J}{k_B T}\langle\sigma\rangle \tag{3.8}$$

olarak tanımlayalım. Devamında

$$T_c \equiv \frac{\gamma J}{k_B} \tag{3.9}$$

tanımını da yaptıktan sonra kritik dayanım parametresini de aşağıdaki gibi tanımlayıp grafiksel çözüme geçebiliriz.

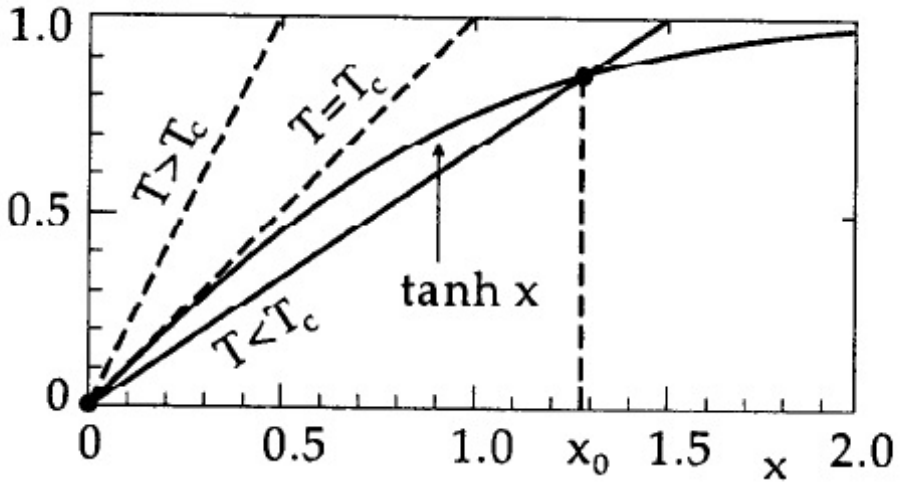
$$K_c = \frac{1}{\gamma} \tag{3.10}$$

3.1.1 $h = 0$ Durumu

Bu durumda (3.7) denklemi aşağıdaki gibidir.

$$\frac{T_c}{T}x = \tanh x \tag{3.11}$$

Nümerik olarak çözümü



Şekil 3.1 $\langle\sigma\rangle = tanh\, x$ ve $\langle\sigma\rangle = x T_c/T$ fonksiyonları [31]

Şekil 3.1'deki grafikten farklı T değerleri için çizilen grafiklerden şu sonuçlara varılır

- $T < T_c$ durumunda $\langle\sigma\rangle \neq 0$ şeklinde mutlak surette bir çözüm mevcuttur ve sistemin daimi bir kendiliğinden manyetizasyonu vardır. Bu da demek oluyor ki sistem ferromanyetik fazdadır. Açıkça söylemek gerekirse kritik sıcaklık bir faz geçişi noktasıdır. Ancak önceki bölümde yapılan tam çözümden bilmiş olmaktayız ki bir faz geçişi yoktur. Tabi bu $\gamma = 2$ yani kare örgü için verilen durumdur. O-A-T yaklaşımları $\gamma = 12$ yani hacim-merkezli kübik örgü gibi komşu sayısı daha büyük olan sistemler için iyi sonuçlar vermektedir [34].
- $T > T_c$ durumunda $\langle\sigma\rangle = 0$ dışında başka bir çözüm mevcut değildir ve sistemin bir manyetizasyonu yoktur. Bu da demek oluyor ki sistem paramanyetik fazdadır.
- Hiperbolik fonksiyonun eğimi orijin üzerinde *1* değerini alır [32].
- Bütün sıcaklıklar için bir $\langle\sigma\rangle = 0$ çözümü mevcuttur.

$T = T_c$ civarında (3.11) denklemi için yaklaşık bir çözüm bulunabilir. Bunun için $tanh\, x$ küçük x değerleri için Taylor serisine açılırsa

$$\frac{T_c}{T} x = x - \frac{1}{3} x^3 \ldots \tag{3.12}$$

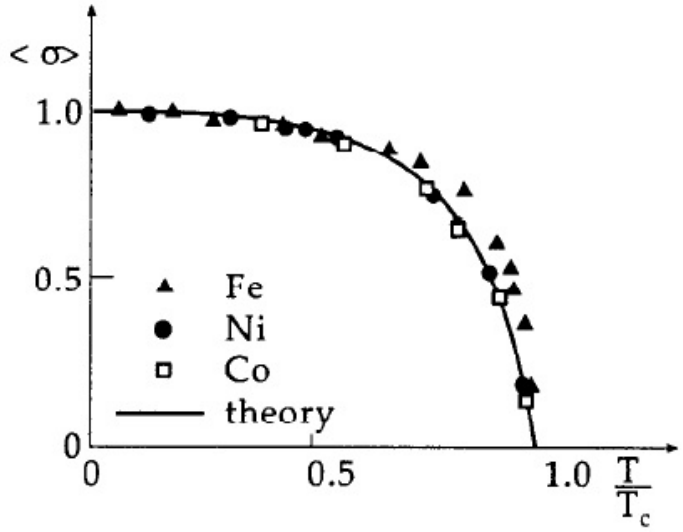
ve bu değerleri de (3.11) denkleminde yerine koyduğumuz taktirde $T \leq T_c$ için

$$x_0 = \left[3\left(1 - \frac{T}{T_c} \right) \right]^{1/2} \tag{3.13}$$

denklemini elde ederiz. Burada

$$x_0 \equiv \langle \sigma \rangle \frac{T_c}{T} \tag{3.14}$$

olarak verilmiştir. Buna göre (3.13) denkleminin grafiksel çözümü aşağıdaki gibidir.

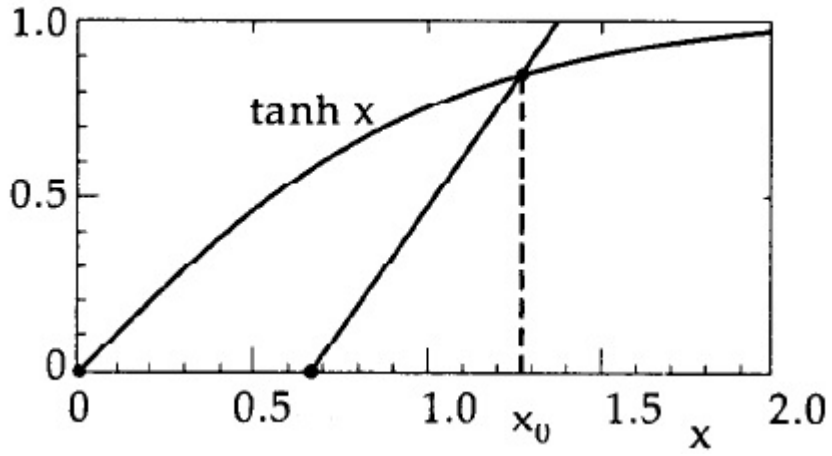


Şekil 3.2 Manyetizasyonun sıcaklıkla değişimi Curie eğrisi [31]

Yukarıdaki grafikten $T > T_c$ için kendiliğinden manyetizasyonun nasıl sıfıra gittiği gözlemlenebilir.

3.1.2 $h \neq 0$ Durumu

(3.7) denklemine geri dönüp nümerik olarak çözersek eğer grafiksel çözümü aşağıdaki gibi elde ederiz.



Şekil 3.3 (3.7) denkleminin $h \neq 0$ için çözümü [31]

- Doğrunun grafiği bu durum için sağa kaymış bulunmaktadır ve $\langle \sigma \rangle \neq 0$ şeklinde mutlak surette bir çözüm mevcuttur.

$T \gg T_c$ ve $H \ll 1$ için grafiğin eğimi olabildiğince büyür ve doğrular arasındaki kesişmeler $x = 0$'a çok yaklaşır. Böylece x 'in küçük değerleri için (3.7) denklemini Taylor serisine açabiliriz.

$$\frac{T_c}{T}(x - H) \approx x \tag{3.15}$$

O halde $T \gg T_c$ için

$$\langle \sigma \rangle = \frac{h}{k_B (T - T_c)} \tag{3.16}$$

manyetizasyon

$$M = N\langle \sigma \rangle = \frac{Nh}{k_B (T - T_c)} \tag{3.17}$$

ve Curie-Weiss yasasına karşılık gelen manyetik alınganlık ise

$$\zeta = \frac{M}{h} = \frac{N}{k_B\left(T - T_c\right)} \tag{3.18}$$

olarak bulunur.

3.2 Bragg-Williams Ortalama-Alan Teorisi

Bu yaklaşımda, Ising modeldeki enerjiyi yukarı yönlü manyetik momentlerin sayısı N_+ ve yukarı yönlü çiftlerin N_{++} sayısı üzerinden belirlemek esasına dayandırmak koşulu ile bir yaklaşım geliştirilmektedir. Bu bağlamda örgü üzerinde N_+/N uzun-mesafe düzeni ölçüsü ve $N_{++}/\left(\gamma N/2\right)$ kısa-mesafe düzeni ölçüsü şeklinde tanımlamalar mevcuttur. Burada kısa-mesafe düzeni, manyetik momentlerin yakın komşuları yani yerel bir korelasyon ölçüsü manasını verirken. Diğer yandan uzun-mesafe düzeni bir korelasyon etkisi gerektirmez.

Şimdi, uzun-mesafe düzeni L ve kısa-mesafe düzeni Y parametrelerini tanımlamalarımızı aşağıdaki gibi yapalım.

$$\begin{aligned} \frac{N_+}{N} &\equiv \frac{1}{2}\left(L+1\right) \qquad \left(-1 \le L \le +1\right) \\ \frac{N_{++}}{\left(\gamma N/2\right)} &\equiv \frac{1}{2}\left(Y+1\right) \qquad \left(-1 \le Y \le +1\right) \end{aligned} \tag{3.19}$$

(2.7) denkleminden

$$\begin{aligned} \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j &= \frac{1}{2}\gamma N\left(2Y - 2L + 1\right) \\ \sum_{i=1}^{N} \sigma_i &= NL \end{aligned} \tag{3.20}$$

buradan uzun-mesafe düzeninin topluluk ortalaması parçacık başına düşen manyetizasyona karşılık geldiği sonucuna varılır. Manyetik moment başına düşen Hamiltonyen (2.1) denkleminden

$$\frac{1}{N}\mathcal{H}(L,Y) = -\frac{1}{2}\gamma J(2Y - 2L + 1) - hL \tag{3.21}$$

olarak verilir.

Bu yaklaşım, uzun-mesafe düzenine takiben bir kısa-mesafe düzeni olmadığı yörüngesinden hareketle daha da açarsak $\left(N_{++}/(\gamma N/2)\right) \approx \left(N_{+}/N\right)^2$ şeklinde tarif edilir veya aşağıdaki gibi ele alınır.

$$Y \approx \frac{1}{2}(L+1)^2 - 1 \tag{3.22}$$

Parçacık başına Hamiltonyen

$$\frac{1}{N}\mathcal{H}(L) \approx -\left(\frac{1}{2}\gamma JL^2\right) - hL \tag{3.23}$$

halini alır. (2.2) denkleminden kanonik bölüşüm fonksiyonu

$$Q = \sum_{\{\sigma\}} e^{\beta N\left(\frac{1}{2}\gamma JL^2 + hL\right)} \tag{3.24}$$

olarak elde edilir. Burada toplam $\{\sigma\}$'nın bütün konfigürasyonları üzerinden yapılır ancak burada toplam yalnızca L'ye bağlıdır. L ise N_{+}'a bağlı olduğuna göre bütün konfigürasyonların sayısı böylece $N!/\left(N_{+}!(N-N_{+})!\right)$ olarak hesaplanır. Bölüşüm fonksiyonu

$$Q = \sum_{L=-1}^{+1} \frac{N!}{\left[\frac{1}{2}N(1+L)\right]!\left[\frac{1}{2}N(L-1)\right]!} e^{\beta N\left(\frac{1}{2}\gamma JL^2 + hL\right)} \tag{3.25}$$

$N \to \infty$ durumunda Q'nun logaritması toplam ifadesindeki en büyük terimin logaritmasına eşit olur. Şimdi yukarıdaki denklemi Stirling yaklaşımıyla $N!$ için açacak olursak

$$\frac{1}{N}lnQ=\beta\left(\frac{1}{2}\gamma JL^2+hL\right)-\left(\frac{1+\bar{L}}{2}ln\frac{1+\bar{L}}{2}\right)-\left(\frac{1-\bar{L}}{2}ln\frac{1-\bar{L}}{2}\right) \tag{3.26}$$

burada $\bar{L}$ toplamı maksimize eden L değeridir. $\bar{L}$ değeri aşağıdaki denklemin kökü olarak bulunabilir.

$$ln\frac{1+\bar{L}}{1-\bar{L}}=2\beta h+2\beta J\gamma\bar{L} \tag{3.27}$$

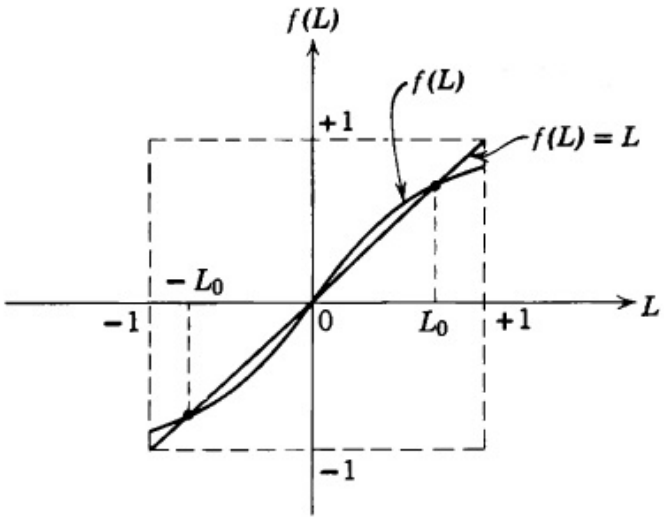
bu da aşağıdaki denkleme eşdeğerdir.

$$\bar{L}=tanh\left(H+\gamma K\bar{L}\right) \tag{3.28}$$

$H=0$ durumu için yukarıdaki denklem

$$\bar{L}=tanh\left(\gamma K\bar{L}\right) \tag{3.29}$$

bunun da grafiksel olarak çözümü aşağıdaki gibidir.



Şekil 3.4 (3.29) denkleminin grafiksel çözümü [28]

Bu çözümden de aşağıdaki özellikleri elde ederiz.

$$\overline{L} = 0 \qquad (\gamma K < 1)$$

$$\overline{L} = \begin{cases} L_0 \\ 0 \qquad (\gamma K < 1) \\ -L_0 \end{cases} \tag{3.30}$$

Bu da demek oluyor ki $K > 1$ için bir T_c sıcaklığı mevcuttur. O halde

$$K_c = \frac{1}{\gamma} \tag{3.31}$$

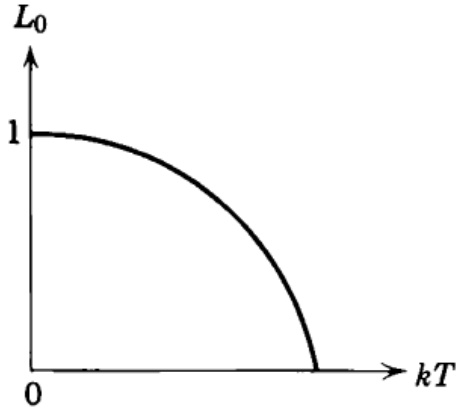
kritik değerini elde ederiz. Öyle ki

$$\overline{L} = \begin{cases} 0 \qquad (T > T_c) \\ \pm L_0 \qquad (T < T_c) \end{cases} \tag{3.32}$$

burada L_0 değeri sıfırdan büyük olan (3.29) denkleminin köküdür. $\overline{L}$ manyetik moment başına düşen manyetizma olduğuna göre T_c civarında faz geçişi görülür. Genel olarak ise L_0 nümerik olarak hesaplanabilir ancak $T = T_c$ ve $T = 0$ civarında bir yaklaşım geliştirilerek de çözülebilir.

$$L_0 \approx \begin{cases} 1 - 2e^{-2T_c/T} & \left(\frac{T_c}{T} \ll 1\right) \\ \left[3\left(1 - \frac{T}{T_c}\right)\right]^{1/2} & \left(0 < 1 - \frac{T}{T_c} \ll 1\right) \end{cases} \tag{3.33}$$

Yukarıdaki değerler için grafik aşağıdaki gibidir [28].



Şekil 3.5 Kendiliğinden manyetizasyon grafiği [28]

3.3 Bethe-Peierls Ortalama-Alan Teorisi

Bu yaklaşım, Bragg-Williams yaklaşımının geliştirilmiş halidir. Bu yaklaşımda yerel korelasyonların hesaba katılmasından ziyade örgü üzerine bir alt-örgü kabulü yapılmıştır. Yalnız bu alt-örgü bütün örgüye dahil edilmeyip sadece bütün örgüye göre küçük sayılabilecek miktardadır ve bu da fugisiteye benzer bir parametreye karşılık gelmektedir. Burada N_+ ve N_{++} ilişkisini alt-örgüyü de hesaba katarak istatistiksel olarak belirleyip bu hesaplanan oranı bütün örgü için sabit kabul ederek ilerlemek üzerine inşa edilmiştir [28].

Sadece $H=0$ durumu için hesap yapacağız. $P(\sigma \quad n)$, merkez manyetik momentinin $\sigma=\pm 1$ değeri için yukarı yönlü yakın komşuların n'inci olasılığıdır. Buna göre $\sigma \pm 1$ için bu olasılık n tane çift $(+ \quad +)$ ve $\gamma - n$ çiftleri $(+ \quad -)$, $\sigma=-1$ için ise n tane çift $(+ \quad -)$ ve $n-\gamma$ çiftleri de $(- \quad -)$ olasılığını alır. Böylece

$$P(+1 \quad n)=\frac{1}{q}\binom{\gamma}{n}e^{\beta J(2n-\gamma)}z^n \tag{3.34}$$

$$P(-1 \quad n)=\frac{1}{q}\binom{\gamma}{n}e^{\beta J(\gamma-2n)}z^n \tag{3.35}$$

burada z^N geri kalan örgülerin arka-plan etkisi parametresi ve q ise normalizasyon faktörüdür. q normalizasyon şartından belirlenebilir.

$$\sum_{n=0}^{\gamma}\left[P(+1 \quad n)+P(-1 \quad n)\right]=1 \tag{3.36}$$

Böylece

$$q=\left(e^{\beta J}+e^{-\beta J}z\right)^{\gamma}+\left(e^{-\beta J}+e^{\beta J}z\right)^{\gamma} \tag{3.37}$$

olarak belirlenir. $P(+1 \quad n)$ aşağıdaki gibi O-A-T tanımlarına dahil edilebilir.

$$\frac{N_+}{N} \equiv \frac{1}{2}(L+1) = \sum_{n=0}^{\gamma}\left[P(+1 \quad n)\right] = \frac{1}{q}\left(e^{\beta J} + e^{-\beta J} z\right)^{\gamma} \tag{3.38}$$

$$\frac{N_{++}}{(\gamma N/2)} \equiv \frac{1}{2}(Y+1) = \frac{1}{\gamma}\sum_{n=0}^{\gamma} n\left[P(+1 \quad n)\right] = \frac{z}{q} e^{\beta J}\left(e^{-\beta J} + e^{\beta J} z\right)^{\gamma-1} \tag{3.39}$$

Enerji Y ve L'ye bağlıdır. Bunlar ise z parametresine bağlı olduğuna göre enerji z cinsinden hesaplanabilir.

Manyetizasyonu hesaplamak için bölüşüm fonksiyonunu hesaplamaya gerek yoktur. Bu, (3.34) ve (3.35) denklemlerinden kolayca hesaplanabilir.

Merkezde bir manyetik momentin yukarı yönde bulunma olasılığı ile komşular arasında yukarı yönde manyetik moment bulunma olasılığının, yöntemin tutarlı olması açısından eşit olması gerekmektedir. Buna göre

$$\sum_{n=0}^{\gamma}\left[P(+1 \quad n)\right] = \frac{1}{\gamma}\sum_{n=0}^{\gamma} n\left[P(+1 \quad n) + P(-1 \quad n)\right] \tag{3.40}$$

koşulundan z'yi belirlememiz mümkündür. O halde (3.34) ve (3.35) denklemlerini kullanarak

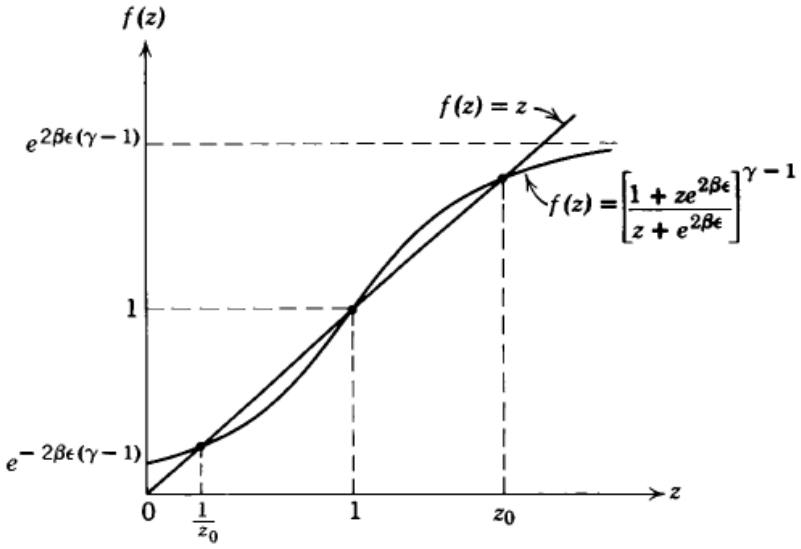
$$z = \left(\frac{1 + e^{2\beta J} z}{z + e^{2\beta J}}\right)^{\gamma-1} \tag{3.41}$$

z'yi belirleriz.

$$\overline{L} = \frac{z^X - 1}{z^X + 1} \qquad X \equiv \frac{\gamma}{\gamma - 1} \tag{3.42}$$

$$\overline{Y} = \frac{2z^2}{\left(1 + e^{2\beta J} z\right)\left(z^X + 1\right)} - 1 \tag{3.43}$$

(3.41) denkleminden



Şekil 3.6 (3.41) denkleminin grafiksel çözümü [28]

elde edilir. Bu grafik için:

- $z=1$ için (3.41)'in daima bir çözümü mevcuttur.
- Eğer z diye bir çözümü varsa $1/z$ diye de bir çözümü mevcuttur.
- z ile $1/z$ arasındaki yer değiştirme, $\bar{L}$ ile $-\bar{L}$ yer değişimine sebep olur.
- $z=1$, $\bar{L}=0$'a karşılık gelirken; $z=\infty$, $\bar{L}=1$'e karşılık gelir.

(3.41) denkleminin sağ tarafının $z=1$'de ki eğimi

$$c=\frac{(\gamma-1)\left(e^{4\beta J}-1\right)}{\left(1+e^{2\beta J}\right)^2} \tag{3.44}$$

olarak bulunur. Kritik dayanım parametresi ise aşağıdaki gibi bulunur [28].

$$K_c=\frac{1}{2}ln\left[\frac{\gamma}{(\gamma-2)}\right] \tag{3.45}$$

BÖLÜM 4

ISİNG SİSTEMLER İÇİN KONFİGÜRASYONEL ORTALAMA-ALAN TRANSFER MATRİS METODU

Bu model iyi bir kritik değer tahmininden ziyade daha çok fiziksel uygunluk gözetilerek oluşturulmuştur. Çünkü öz-tutarlı ortalama-alan teorilerinde merkez manyetik momentin topluluk ortalaması ile etkileştirilmesinin kullanımı fikri kontrol edilemez bir yaklaşıma sebep olmaktadır. Bu nedenle, bu yaklaşımda öz-tutarlı ortalama-alan teorisindeki gibi bir yaklaşım yerine merkez manyetik moment, her bir konfigürasyonun ortalaması ile etkileştirilmesinden hareketle oluşturulmuştur. Üstelik bu konfigürasyonel ortalamaya bütün komşuların her bir konfigürasyonu da dahil edilmiştir. Bu modelde ana esin kaynağı, L. Kadanoff'un [27] ortalama alan yaklaşımı ile T. Kaya'nın [15], [16] ortalama alan yaklaşımı yukarıda bahsedilen konfigürasyonel ortalamaların kullanımı esasıyla birlikte birleştirmek temeline dayanmaktadır. Bu çalışma iki kısma ayrılmıştır. İlki pür ortalama-alan modeli ki burada bütün konfigürasyonlardaki bütün merkez manyetik moment ortalamaları göz önüne alınarak işlem görülmüştür. İkincisi ise indirgenmiş transfer matris metodu ki burada merkez manyetik momentle bir komşusu üzerinden bir yön boyunca transfer matrisi ile etkileşme sağlayarak geri kalan komşular içinse yukarıdaki pür ortalama alan modelindeki esaslar kullanılarak işlem yapılmıştır.

4.1 Pür Ortalama-Alan Modeli

Bu kısımda düşünce ekseni, öz-tutarlı ortalama-alan teorilerine daha zarif fiziksel uyumluluk katarak bu etkileşimli istatistik mekaniksel sistemlerin en basit modelini daha

da işlevsel hale getirme gayretidir. Bu çabanın nedenlerinden biri olarak ise sıklıkla öz-tutarlı ortalama-alan teorilerinin başından beri teoriye bir faz geçişi durumu sokması sebebiyle çoğu zaman önemsiz sonuçlar doğurması diğer bir deyişle, yaklaşımların ne geçerlilik boyutu ne de fiziksel uygunluğu çoğu öz-tutarlı ortalama-alan teorisinde bilinmediğinden dolayı bu çabaya girişilmiştir.

En yakın komşu Ising Hamiltonyeni kübik bir örgü için aşağıdaki gibi verilmektedir.

$$\mathcal{H}\left\{\sigma_{i,j,k}\right\} = -J\sum_{i,j,k}\sigma_{i,j,k}\left(\sigma_{i+1,j,k}+\sigma_{i,j+1,k}+\sigma_{i,j,k+1}\right) - h\sum_{i,j,k}\sigma_{i,j,k} \tag{4.1}$$

Burada i,j,k örgü üzerindeki yerleri belirtmektedir. Manyetik momentler arasındaki etkileşmelerin varlığı bölüşüm fonksiyonunu kesin olarak belirlemeyi oldukça karmaşık kılmaktadır. Çünkü olağanüstü basitleştirmeler altında bile iki, üç ve daha yüksek boyutlarda tam olarak çözülemediği defalarca kez gösterilmiştir. Bu nedenle burada bir ortalama-alan yaklaşımı yapılmaktadır. Ancak bu bölümün en başından beri bahsedilen gerekçelerden ötürü bu yaklaşım, öz-tutarlı ortalama-alan teorilerindeki gibi topluluk ortalaması yerine konfigürasyonel ortalamanın kullanılması vasıtası ile oluşturulması düşünülmektedir. Bu bölümün esas dayanağı aşağıdaki konfigürasyonel ortalama tanımıdır.

$$\sigma_{i,j,k} = \frac{1}{N}\sum_{i,j,k}\sigma_{i,j,k} \tag{4.2}$$

Burada açıkça görülmektedir ki merkez manyetik momentin değeri manyetik momentlerin belirli bir konfigürasyonda toplamının N'ye bölünmesine eşittir. Tam bu noktada, bu model Kadanoff'un [27] iki etkileşen manyetik momenti zayıf bir etkileşmeye maruz bıraktığı sonsuz-mesafe modelinden ayrılmaktadır. Şimdi yukarıda (4.1) denklemi ile verilen Hamiltonyeni herhangi bir hiper-kübik örgü yapısı için koordinasyon numarasıyla temsil etmek kaydıyla genişletelim. Fakat bunu (2.1) denkleminde verilen bir boyutlu en yakın komşu Ising Hamiltonyeni üzerinden zarifçe göstererek yapalım. Daha öncesinde belirli bir konfigürasyonun toplamını aşağıdaki gibi tanımlayalım.

$$S = \sum_{i,j,k} \sigma_{i,j,k} \tag{4.3}$$

Şimdi bir boyutlu en yakın komşu Ising Hamiltonyenimize (4.2) ve (4.3) denklemlerimizi tek bir indisi varmış gibi düşünerek ekleyelim.

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= -J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j - h\sum_i \sigma_i \\
\mathcal{H} &= -J\sum_{\langle i,j\rangle}\left(\frac{1}{N}\sum_i \sigma_i \frac{1}{N}\sum_j \sigma_j\right) - hS \\
\mathcal{H} &= -J\sum_{\langle i,j\rangle}\left(\frac{1}{N^2}S^2\right) - hS
\end{aligned} \tag{4.4}$$

Burada en yakın komşu üzerinden toplam

$$\sum_{\langle i,j\rangle} \rightarrow \frac{N\gamma}{2} \tag{4.5}$$

olarak tanımlanır. Öyleyse

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= -J\frac{N\gamma}{2}\left(\frac{1}{N^2}S^2\right) - hS \\
\mathcal{H} &= -J\frac{1}{2}\left(\frac{\gamma}{N}S^2\right) - hS
\end{aligned} \tag{4.6}$$

halini alır. Buradan da (2.2) denkleminden bu Hamiltonyenimizi yerine koyarak kanonik bölüşüm fonksiyonumuzu aşağıdaki gibi buluruz.

$$Q = \sum_{\{\sigma\}} e^{K\frac{\gamma}{2N}S^2 + HS} \tag{4.7}$$

Buradaki kuadratik ifadenin de üstesinden aşağıdaki eşitlik sayesinde gelebiliriz.

$$e^{\left(\frac{\gamma K}{2N}\right)S^2} = \sqrt{\frac{8\gamma K}{\pi N}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{N}{2\gamma K}\right)t^2 + St}\,dt \tag{4.8}$$

Öyleyse bölüşüm fonksiyonumuz aşağıdaki forma dönüşür.

$$Q = \sqrt{\frac{8\gamma K}{\pi N}} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{\{\sigma\}} e^{-\left(\frac{N}{2\gamma K}\right)t^2 + S(t+H)} dt$$
$$= \sqrt{\frac{8\gamma K}{\pi N}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{N}{2\gamma K}\right)t^2} \left(\sum_{\{\sigma\}} e^{S(t+H)} \right) dt \qquad (4.9)$$

Buradan bütün konfigürasyonlar üzerinden olan parantez içindeki terimi aşağıdaki gibi hesaplarız.

$$\sum_{\{\sigma\}} e^{S(t+H)} = \sum_{\sigma_1} \left(e^{S(t+H)} \right) \sum_{\sigma_2} \left(e^{S(t+H)} \right) \dots \sum_{\sigma_N} \left(e^{S(t+H)} \right)$$
$$\sum_{\{\sigma\}} e^{S(t+H)} = \left(e^{(t+H)} + e^{-(t+H)} \right)^N = \left(2\cosh(t+H) \right)^N \qquad (4.10)$$

Böylece bölüşüm fonksiyonumuz aşağıdaki hali alır.

$$Q = \sqrt{\frac{8\gamma K}{\pi N}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{N}{2\gamma K}\right)t^2} \left(2\cosh(H+t) \right)^N dt \qquad (4.11)$$

Yukarıdaki integralin hesabı zor olduğundan bu integrali bazı yaklaşık metotlar uygulayarak çözeceğiz.

4.1.1 Analitik Çözüm

Burada (4.11)'de verilen integralimizi analitik olarak eyer-noktası yaklaşımını kullanarak çözüme kavuşturacağız. Öncelikle bunun için (4.11) denklemimizi biraz düzenleyelim. Öncelikle parantez içindeki terimi

$$f(t) = 2^N \left(\cosh(H+t) \right)^N \Rightarrow f(t) = e^{N \ln 2} e^{N \ln(\cosh(H+t))} \qquad (4.12)$$

şeklinde düzenledikten sonra logaritmik terimi $g(t) = \ln\left(\cosh(H+t)\right)$ şeklinde tanımlayalım ve bu terimi $t_0 = -H$ civarında Taylor serisine açalım.

$$
\begin{aligned}
g(t) &\approx \sum_{n=0} \frac{g^n(t_0)[t-t_0]^n}{n!} \\
&\approx \left[\left(\cosh(t+H)\right)^{-1}\sinh(t+H)\right]_{t=-H}(t+H) \\
&\qquad + \frac{\left[\left(-\cosh(t+H)\sinh^2(t+H)+\cosh(t+H)\right)\right]_{t=-H}(t+H)^2}{2} \\
&\approx \frac{(t+H)^2}{2}
\end{aligned}
\tag{4.13}
$$

Bu yaklaşık sonucu (4.12) denkleminde yerine koyup, bununla beraber $f(t)$ ifadesini bölüşüm fonksiyonumuzda yeniden yazacak olursak

$$
\begin{aligned}
Q &\approx \sqrt{\frac{8\gamma K}{\pi N}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{N}{2\gamma K}\right)t^2} e^{N\ln 2} e^{N\frac{(t+H)^2}{2}} dt \\
&\approx \sqrt{\frac{8\gamma K}{\pi N}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{N}{2\gamma K}\right)t^2 + N\ln 2 + N\left(\frac{t^2}{2}\right) + N(tH) + N\left(\frac{H^2}{2}\right)} dt \\
&\approx \sqrt{\frac{8\gamma K}{\pi N}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{N}{2}\left(\frac{1}{\gamma K}-1\right)t^2 + (NH)t + N\ln 2 + N\left(\frac{H^2}{2}\right)} dt \\
&\approx \sqrt{\frac{8\gamma K}{\pi N}} \exp\left(N\ln 2 + N\left(\frac{H^2}{2}\right)\right) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{N}{2}\left(\frac{1}{\gamma K}-1\right)t^2 + (NH)t} dt
\end{aligned}
\tag{4.14}
$$

Yukarıdaki integral Gaussian integral formülünden faydalanılarak elde edilebilir.

$$
\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-ax^2 + bx + c\right) dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left(\frac{b^2}{4a} + c\right) \tag{4.15}
$$

O halde

$$
\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{N}{2}\left(\frac{1}{\gamma K}-1\right)t^2 + (NH)t} dt = \sqrt{\frac{\pi}{\left(\frac{N}{2}\left(\frac{1}{\gamma K}-1\right)\right)}} \exp\left(\frac{NH^2}{2\left(\frac{1}{\gamma K}-1\right)}\right) \tag{4.16}
$$

integralimizi (4.14) denkleminde yerine koyarsak

$$Q \approx \sqrt{\frac{8\gamma K}{\pi N}} \sqrt{\frac{\pi}{\left(\frac{N}{2}\left(\frac{1}{\gamma K}-1\right)\right)}} exp\left(N\,ln2 + N\left(\frac{H^2}{2}\right)\right) exp\left(\frac{NH^2}{2\left(\frac{1}{\gamma K}-1\right)}\right)$$

$$Q \approx \sqrt{\frac{16\gamma K}{N^2\left(\frac{1}{\gamma K}-1\right)}} exp\left(N\,ln2 + N\left(\frac{H^2}{2}\right)\right) exp\left(\frac{NH^2}{2\left(\frac{1}{\gamma K}-1\right)}\right) \qquad (4.17)$$

Şimdi yukarıdaki denklemimizden manyetik moment başına düşen manyetizasyonu yani ortalama manyetizasyonu saptayabiliriz. (2.37) denkleminden takiple

$$\langle\sigma\rangle = \frac{1}{N}\frac{\partial(lnQ)}{\partial H}$$

$$= \frac{1}{N}\frac{\partial}{\partial H}\left\{ln\left(\sqrt{\frac{16\gamma K}{N^2\left(\frac{1}{\gamma K}-1\right)}}\right) + lnexp\left(N\,ln2 + N\left(\frac{H^2}{2}\right)\right) + lnexp\left(\frac{NH^2}{2\left(\frac{1}{\gamma K}-1\right)}\right)\right\}$$

$$= \frac{1}{N}\left\{NH + \frac{NH}{\left(\frac{1}{\gamma K}-1\right)}\right\}$$

$$= H\left(1 + \frac{1}{\left(\frac{1}{\gamma K}-1\right)}\right) \qquad (4.18)$$

Burada $\langle\sigma\rangle \neq 0$ farklı değerlerini bulmak için $H \to 0$ limitinde incelememiz gerekiyor. Sıfırdan farklı değerler sadece $(1/\gamma K) - 1 = 0$ durumunda mümkündür. O halde

$$K_c = \frac{1}{\gamma} \qquad (4.19)$$

kritik değerini elde ederiz. Bu sonuç bölüm 3'te detaylı bir şekilde açıklanan Weiss'ın iyi bilinen sonucuyla aynıdır. Yine de yukarıda anlatılan gerekçelerden ötürü bu modelin daha değerli bir fiziksel iç görüsü vardır.

Modele geri dönecek olursak, bu modelin faz geçişi için doğru bir çerçeve verdiğini biliyoruz yine de eyer-noktası yaklaşımından dolayı kritik dayanım parametreleri için geniş bir aralıkta ortalama manyetizasyon için bir ilişki üretemez. Bundan dolayı nümerik çözümü de değerlendirmek gerekiyor.

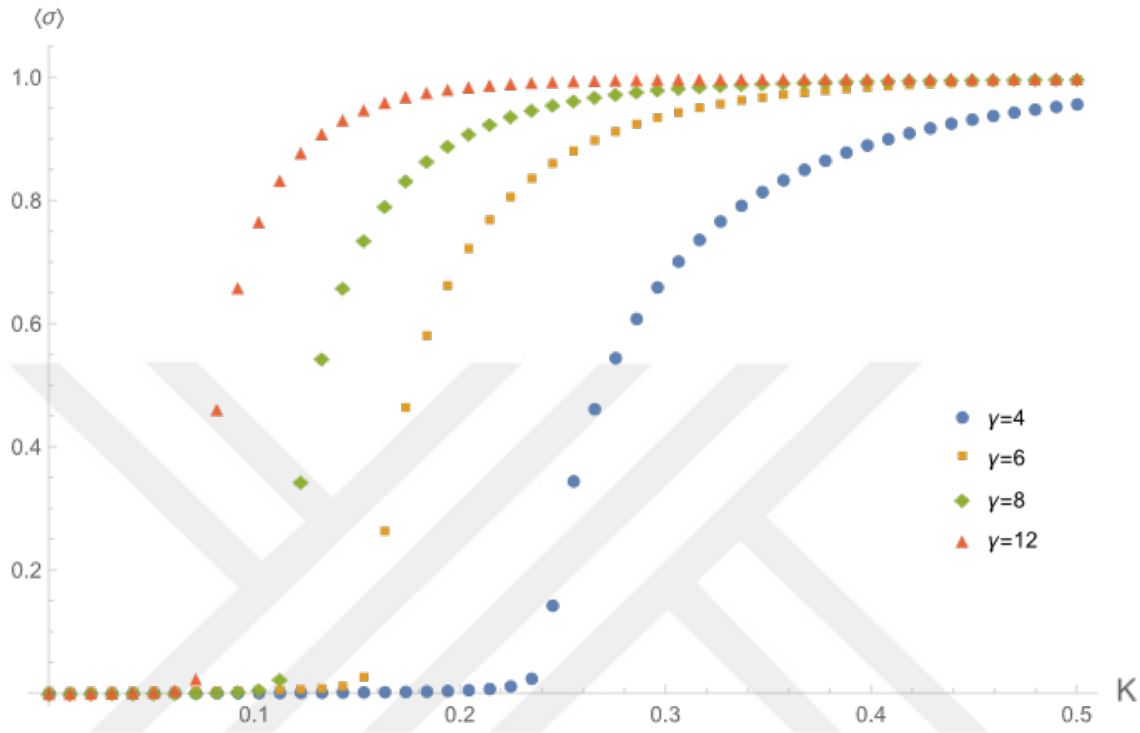
4.1.2 Nümerik Çözüm

(4.11) denklemine geri dönüp (2.37) denkleminde yerine koyarak ortalama manyetizasyon için bir ilişki bulup nümerik olarak çözelim.

$$
\begin{aligned}
\langle\sigma\rangle &= \frac{1}{N}\frac{\partial}{\partial H}\left(ln\left\{ \sqrt{\frac{8\gamma K}{\pi N}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{N}{2\gamma K}\right)t^2} \left(2cosh\left(H+t\right)\right)^N dt \right\} \right) \\
&= \frac{1}{NQ}\frac{\partial}{\partial H}\left\{ \sqrt{\frac{8\gamma K}{\pi N}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{N}{2\gamma K}\right)t^2} \left(2cosh\left(H+t\right)\right)^N dt \right\} \\
&= \frac{1}{Q}\sqrt{\frac{8\gamma K}{\pi N}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{N}{2\gamma K}\right)t^2} \left(2cosh\left(H+t\right)\right)^{N-1} 2sinh\left(H+t\right)dt \\
&= \frac{1}{Q}\sqrt{\frac{8\gamma K}{\pi N}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{N}{2\gamma K}\right)t^2} \left(2cosh\left(H+t\right)\right)^{N} \frac{2sinh\left(H+t\right)}{2cosh\left(H+t\right)}dt \\
&= \frac{1}{Q}\sqrt{\frac{8\gamma K}{\pi N}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{N}{2\gamma K}\right)t^2} \left(2cosh\left(H+t\right)\right)^{N} tanh\left(H+t\right)dt \\
&= \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{N}{2\gamma K}\right)t^2} \left(2cosh\left(H+t\right)\right)^{N} tanh\left(t+H\right)dt}{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{N}{2\gamma K}\right)t^2} \left(2cosh\left(H+t\right)\right)^{N} dt}
\end{aligned}
\qquad (4.20)
$$

$H=0$ için yukarıdaki ilişkiden $\langle\sigma\rangle=0$ olduğu açıktır. Kendiliğinden manyetizasyonun doğru bir şekilde hesaplanmasının yolu kendiliğinden simetri kırılmasıdır. Bu da termodinamik limitte (4.20) denkleminin küçük bir H varlığında, yani $H\to 0$ olmasına izin verilirse eğer doğru bir yaklaşım elde edilmiş olunur. Bu bağlamda eğer N 'nin çok büyük, H 'nin ise çok küçük olduğu değerler için bir yaklaşım geliştirirsek eğer

kendiliğinden manyetizasyonun varlığını görebiliriz. Tabii ki de doğru termodinamik limit $N \to \infty$ ve $H \to 0$ olduğunda elde edilir. Ancak nümerik çözümler, hesaplama ayarından dolayı bir üst limit değeriyle kısıtlıdırlar. Yukarıdaki denklemin Wolfram Mathematica [33] yardımı ile nümerik çözümü aşağıdaki gibidir.



Şekil 4.1 Manyetik moment başına düşen manyetizasyona $\langle\sigma\rangle$ karşılık kritik bağlanma dayanımları K için pür ortalama alan modelinden elde edilen çeşitli hiper-kübik örgü yapıları için koordinasyon sayısı γ ile tanımlanmış nümerik değerler.

Bu çözümde manyetik momentlerin sayısı $N = 10^7$ ve dış manyetik alan $H = 10^{-3}$ olarak ayarlanmıştır. Daha önce de belirtildiği gibi bu kısımda analitik çözümden elde edilen kritik değer Weiss ortalama-alan teorisinin tahmini ile birebir aynıdır. Bu da demek oluyor ki bu kısımda göstermiş olduğumuz model bir boyutta sonlu bir sıcaklıkta faz geçişi öngörüyor. Gelecek kısımda bir boyut için daha da saflaştırılmış bir metotla kritik bağlanım dayanımları için daha doğru tahminler öngören ve aynı zamanda bir boyut için kendiliğinden manyetizasyonu öngörmeyen bir model üzerinde çalışacağız.

4.2 İndirgenmiş Transfer Matris Metodu

Bu kısımda daha önce birçok kez atıfta bulunduğumuz [15], [16] indirgenmiş transfer matris yöntemini daha iyi bir kritik dayanım parametresi tahmini için kullanacağız. Bu

yaklaşımda merkez manyetik momentle bir komşusunun etkileşimi tam olarak elde edilebilir. Daha da açacak olursak, merkez manyetik momentle bir komşusu üzerinden bir yön boyunca etkileşme sağlayarak yani indirgenmiş transfer matrisiyle, geri kalan komşular $\left(\gamma/2\right)-1$ içinse yukarıdaki pür ortalama alan modelindeki esaslar kullanılarak işlem yapıldığından dolayı daha titiz bir yaklaşım modelidir. Böylece bölüşüm fonksiyonu

$$Q=\sum_{\{\sigma\}} exp\left\{K\sum \sigma_{i,j,k}\sigma_{i+1,j,k}+\left(\frac{\gamma}{2}-1\right)\frac{K}{N}S^2+HS\right\} \tag{4.21}$$

olarak verilir. Daha önceki kısımda yaptığımız gibi burada da kuadratik ifadenin üstesinden aşağıdaki gibi geleceğiz.

$$e^{\left(\frac{\gamma}{2}-1\right)\frac{K}{N}S^2}=\sqrt{\frac{4(\gamma-2)K}{\pi N}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{N}{(\gamma-2)K}\right)t^2}dt \tag{4.22}$$

O halde bölüşüm fonksiyonumuz

$$Q=\sqrt{\frac{4(\gamma-2)K}{\pi N}}\int_{-\infty}^{+\infty}\sum_{\{\sigma\}} e^{K\sum \sigma_{i,j,k}\sigma_{i+1,j,k}-\left(\frac{N}{(\gamma-2)K}\right)t^2+S(t+H)}dt$$

$$Q=\sqrt{\frac{4(\gamma-2)K}{\pi N}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{N}{(\gamma-2)K}\right)t^2}\left(\sum_{\{\sigma\}} e^{K\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_{i,j}\sigma_{i+1,j}+\frac{1}{2}(t+H)\sum_{i,j}(\sigma_{i,j}+\sigma_{i,j+1})}\right)dt \tag{4.23}$$

halini alır. Burada parantez içindeki ifade transfer matris yönteminden rahatlıkla hesaplanabilir. Öyleyse şimdi $\sigma_{i,j}=\pm 1$ değerleri için 2×2 bir $\mathbb{T}$ matrisi tanımlamakla başlayalım.

$$\left\langle \sigma_{i,j}\left|\mathbb{T}\right|\sigma_{i+1,j}\right\rangle = e^{K\sigma_{i,j}\sigma_{i+1,j}+\frac{1}{2}(t+H)(\sigma_{i,j}+\sigma_{i,j+1})} \tag{4.24}$$

Bu durumda $\mathbb{T}$ matrisi aşağıdaki gibi olur.

$$\mathbb{T}=\begin{pmatrix} e^{K+(H+t)} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-(H+t)} \end{pmatrix} \tag{4.25}$$

Öyleyse bölüşüm fonksiyonumuz aşağıdaki hali alır.

$$Q=\sqrt{\frac{4(\gamma-2)K}{\pi N}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{N}{(\gamma-2)K}\right)t^2}\left(\sum_{\{\sigma\}}\langle\sigma_1|\mathbb{T}|\sigma_2\rangle\langle\sigma_2|\mathbb{T}|\sigma\rangle\ \ldots\ \langle\sigma_N|\mathbb{T}|\sigma_{N+1}\rangle\right)dt \tag{4.26}$$

Periyodiklik koşulunun da uygulanması ile $\sigma_1=\sigma_{N+1}$ bölüşüm fonksiyonu

$$Q=\sqrt{\frac{4(\gamma-2)K}{\pi N}}\int_{-\infty}^{+\infty} dte^{-\left(\frac{N}{(\gamma-2)K}\right)t^2}\left(\sum_{\sigma_1}\langle\sigma_1|\mathbb{T}^N|\sigma_1\rangle\right) \tag{4.27}$$

olarak elde edilir. Yukarıda parantez içindeki ifadenin diyagonalizasyonla yapılabileceğini ikinci bölümde tüm detaylarıyla gösterdik öyleyse bu terim (2.35) denkleminden kıyasla bölüşüm fonksiyonu içerisinde aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\begin{aligned} Q&=\sqrt{\frac{4(\gamma-2)K}{\pi N}}\int_{-\infty}^{+\infty} dte^{-\left(\frac{N}{(\gamma-2)K}\right)t^2}\left(Tr\left[\mathbb{T}^N\right]\right) \\ &=\sqrt{\frac{4(\gamma-2)K}{\pi N}}\int_{-\infty}^{+\infty} dte^{-\left(\frac{N}{(\gamma-2)K}\right)t^2}\left(\lambda_+^N+\lambda_-^N\right) \end{aligned} \tag{4.28}$$

Burada $\lambda_{+,-}$ terimleri aşağıdaki gibidir.

$$\lambda_{+,-}=e^K\left[cosh\left(H+t\right)\pm\sqrt{sinh^2\left(H+t\right)+e^{-4K}}\right] \tag{4.29}$$

Termodinamik limitte işlem yapacağımızı bildiğimiz için şimdiden $N\to\infty$ için $\lambda_+^N>>\lambda_-^N$ sonucunu kullanırsak eğer bölüşüm fonksiyonumuz aşağıdaki gibi verilir.

$$Q=\sqrt{\frac{4(\gamma-2)K}{\pi N}}\int_{-\infty}^{+\infty}dte^{-\left(\frac{N}{(\gamma-2)K}\right)t^2}\left(e^{K}\left[cosh(H+t)+\left(sinh^2(H+t)+e^{-4K}\right)^{1/2}\right]\right)^{N}$$
$$=\sqrt{\frac{4(\gamma-2)K}{\pi N}}\int_{-\infty}^{+\infty}dte^{-\left(\frac{N}{(\gamma-2)K}\right)t^2}e^{KN}\left(cosh(H+t)+\left(sinh^2(H+t)+e^{-4K}\right)^{1/2}\right)^{N} \quad (4.30)$$

Yukarıdaki integrali yine yaklaşık yöntemlerle çözeceğiz.

4.2.1 Analitik Çözüm

Eyer-noktası yaklaşımı ile yine bu integrali yaklaşık olarak hesaplayabiliriz. Bunun için parantez içindeki terimi aşağıdaki gibi tanımlayalım.

$$f(t)=\left(cosh(H+t)+\left(sinh^2(H+t)+e^{-4K}\right)^{1/2}\right)^{N}$$
$$\Rightarrow f(t)=e^{N\ln\left(cosh(H+t)+\left(sinh^2(H+t)+e^{-4K}\right)^{1/2}\right)} \quad (4.31)$$

Yukarıdaki logaritmik terimi $ln\left(cosh(H+t)+\left(sinh^2(H+t)+e^{-4K}\right)^{1/2}\right)$ $t_0=-H$ civarında Taylor serisine açarsak eğer

$$ln\left(cosh(H+t)+\left(sinh^2(H+t)+e^{-4K}\right)^{1/2}\right)\approx ln\left(1+e^{-2K}\right)+\frac{(H+t)^2}{2e^{-2K}} \quad (4.32)$$

sonucunu elde ederiz. Bu sonucu (4.31) denkleminde yerine koyup, bununla beraber (4.31)'de elde edilen değeri bölüşüm fonksiyonunda yerine koyarsak bölüşüm fonksiyonumuz aşağıdaki hali alır.

$$Q\approx\sqrt{\frac{4(\gamma-2)K}{\pi N}}\int_{-\infty}^{+\infty}dte^{-\left(\frac{N}{(\gamma-2)K}\right)t^2}e^{KN}\left(e^{N\left(ln\left(1+e^{-2K}\right)+\frac{(H+t)^2}{2e^{-2K}}\right)}\right)$$
$$\approx\sqrt{\frac{4(\gamma-2)K}{\pi N}}\int_{-\infty}^{+\infty}dte^{-\left(\frac{N}{(\gamma-2)K}\right)t^2}e^{KN}e^{N\ln\left(1+e^{-2K}\right)}\left(e^{N\left(\frac{(H+t)^2}{2e^{-2K}}\right)}\right)$$

$$
\begin{aligned}
Q &\approx \sqrt{\frac{4(\gamma-2)K}{\pi N}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-\left(\frac{N}{(\gamma-2)K}\right)t^2} e^{KN} e^{N\ln\left(1+e^{-2K}\right)} \left(e^{\frac{N}{2}\left(\frac{H^2}{e^{-2K}}\right)+\left(\frac{NH}{e^{-2K}}\right)t+\frac{N}{2}\left(\frac{1}{e^{-2K}}\right)t^2} \right) \\
&\approx \sqrt{\frac{4(\gamma-2)K}{\pi N}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-\frac{N}{2}\left(\frac{2}{(\gamma-2)K}\right)t^2} e^{KN} e^{N\ln\left(1+e^{-2K}\right)} \left(e^{\frac{N}{2}\left(\frac{H^2}{e^{-2K}}\right)+\left(\frac{NH}{e^{-2K}}\right)t+\frac{N}{2}\left(\frac{1}{e^{-2K}}\right)t^2} \right) \\
&\approx \sqrt{\frac{4(\gamma-2)K}{\pi N}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-\frac{N}{2}\left(\frac{2}{(\gamma-2)K}-\frac{1}{e^{-2K}}\right)t^2} e^{KN} e^{N\ln\left(1+e^{-2K}\right)} \left(e^{\frac{N}{2}\left(\frac{H^2}{e^{-2K}}\right)+\left(\frac{NH}{e^{-2K}}\right)t} \right) \\
&\approx \sqrt{\frac{4(\gamma-2)K}{\pi N}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-\frac{N}{2}\left(\frac{2}{(\gamma-2)K}-\frac{1}{e^{-2K}}\right)t^2+\left(\frac{NH}{e^{-2K}}\right)t} e^{KN+N\ln\left(1+e^{-2K}\right)+\frac{N}{2}\left(\frac{H^2}{e^{-2K}}\right)} \\
&\approx \sqrt{\frac{4(\gamma-2)K}{\pi N}} e^{KN+N\ln\left(1+e^{-2K}\right)+\frac{N}{2}\left(\frac{H^2}{e^{-2K}}\right)} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-\frac{N}{2}\left(\frac{2}{(\gamma-2)K}-\frac{1}{e^{-2K}}\right)t^2+\left(\frac{NH}{e^{-2K}}\right)t}
\end{aligned}
\tag{4.33}
$$

Yukarıdaki integral yine Gaussian integral (4.15) eşitliğinden

$$
\int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-\frac{N}{2}\left(\frac{2}{(\gamma-2)K}-\frac{1}{e^{-2K}}\right)t^2+\left(\frac{NH}{e^{-2K}}\right)t} = \sqrt{\frac{\pi}{\frac{N}{2}\left(\frac{2}{(\gamma-2)K}-\frac{1}{e^{-2K}}\right)}} exp\left(\frac{\left(\frac{NH}{e^{-2K}}\right)^2}{2N\left(\frac{2}{(\gamma-2)K}-\frac{1}{e^{-2K}}\right)} \right) \tag{4.34}
$$

olarak hesaplanır. Buna göre bölüşüm fonksiyonumuz aşağıdaki gibi olur.

$$
\begin{aligned}
Q \approx & \sqrt{\frac{4(\gamma-2)K}{\pi N}} e^{KN+N\ln\left(1+e^{-2K}\right)+\frac{N}{2}\left(\frac{H^2}{e^{-2K}}\right)} \\
& \times \sqrt{\frac{\pi}{\frac{N}{2}\left(\frac{2}{(\gamma-2)K}-\frac{1}{e^{-2K}}\right)}} exp\left(\frac{\left(\frac{NH}{e^{-2K}}\right)^2}{2N\left(\frac{2}{(\gamma-2)K}-\frac{1}{e^{-2K}}\right)} \right)
\end{aligned}
$$

$$Q \approx \sqrt{\frac{8(\gamma-2)K}{N^2\left(\frac{2}{(\gamma-2)K}-\frac{1}{e^{-2K}}\right)}} \times exp\left(KN + N ln\left(1+e^{-2K}\right) + \frac{N}{2}\left(\frac{H^2}{e^{-2K}}\right) + \frac{\left(\frac{NH}{e^{-2K}}\right)^2}{2N\left(\frac{2}{(\gamma-2)K}-\frac{1}{e^{-2K}}\right)} \right) \tag{4.35}$$

Bölüşüm fonksiyonumuzu elde ettiğimize göre (2.37) denkleminden manyetik moment başına düşen manyetizasyonu hesap edebiliriz. Böylece

$$\begin{aligned} \langle\sigma\rangle &= \frac{1}{N}\frac{\partial}{\partial H} ln\left\{ \sqrt{\frac{8(\gamma-2)K}{N^2\left(\frac{2}{(\gamma-2)K}-\frac{1}{e^{-2K}}\right)}} \times exp\left(KN + N ln\left(1+e^{-2K}\right) + \frac{N}{2}\left(\frac{H^2}{e^{-2K}}\right) + \frac{\left(\frac{NH}{e^{-2K}}\right)^2}{2N\left(\frac{2}{(\gamma-2)K}-\frac{1}{e^{-2K}}\right)} \right) \right\} \\ &= \frac{1}{N}\left\{ N\left(\frac{H}{e^{-2K}}\right) + \frac{\left(\frac{NH}{e^{-2K}}\right)\frac{1}{e^{-2K}}}{\left(\frac{2}{(\gamma-2)K}-\frac{1}{e^{-2K}}\right)} \right\} \\ &= \frac{H}{e^{-2K}}\left(1 + \frac{e^{2K}}{\left(\frac{2}{(\gamma-2)K}-\frac{1}{e^{-2K}}\right)} \right) \end{aligned} \tag{4.36}$$

kendiliğinden manyetizasyona karşılık gelen kritik dayanım parametresi için yukarıdaki denklemden önceki kısımda uyguladığımız gibi bir ilişki kurabiliriz. Bu aşağıdaki gibi elde edilir.

$$(\gamma-2)K_c e^{2K_c}=1 \tag{4.37}$$

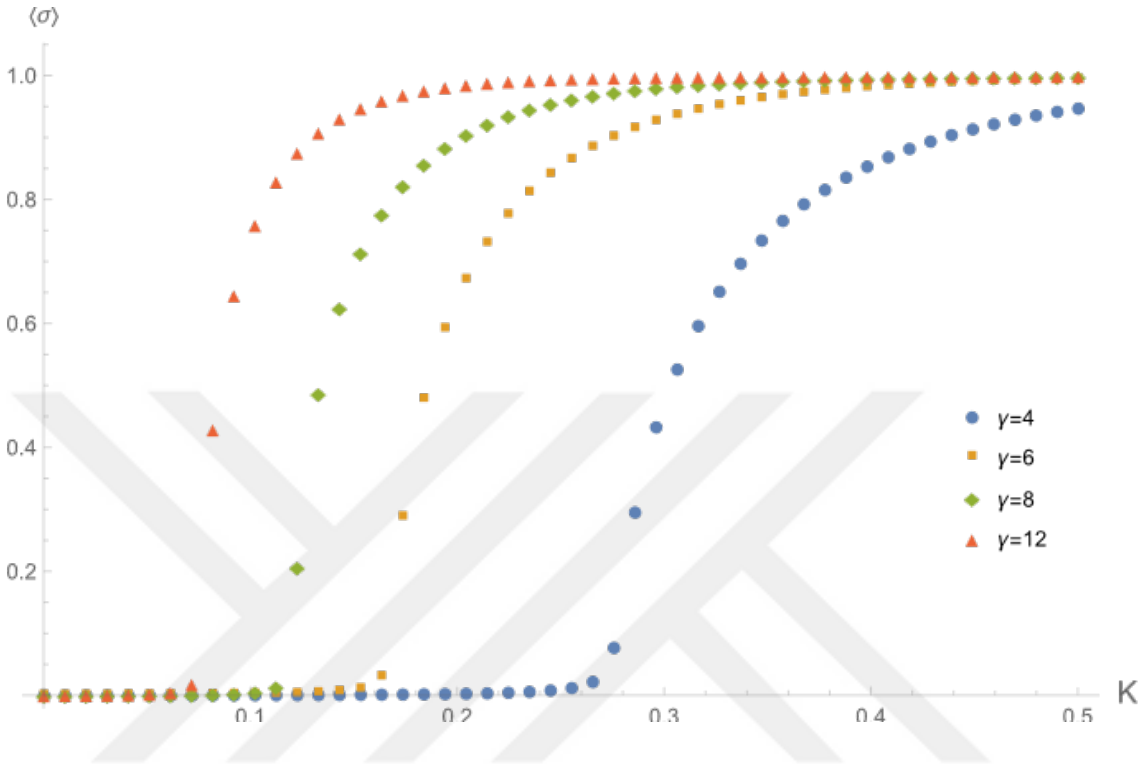
Yukarıda eyer-noktası yaklaşımıyla elde edilen analitik sonuç çok önemli ve değerli olmasına rağmen eyer-noktası yaklaşımının sakıncasından dolayı $K>K_c$ için ilişkili değildir. Bu sebeple ortalama manyetizasyon büyüklüğüne daha doğru bir tahmin için nümerik çözüm gereklidir.

4.2.2 Nümerik Çözüm

(4.30) denklemindeki bölüşüm fonksiyonumuzdan yine (2.37) eşitliğini kullanarak manyetik moment başına düşen manyetizasyonu hesaplayalım.

$$\begin{aligned}
\langle\sigma\rangle &= \frac{1}{N}\frac{\partial(\ln Q)}{\partial H} \\
&= \frac{1}{NQ}\frac{\partial}{\partial H}\left\{\sqrt{\frac{4(\gamma-2)K}{\pi N}}\right. \\
&\qquad \left.\times\int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-\left(\frac{N}{(\gamma-2)K}\right)t^2} e^{KN}\left(\cosh(H+t)+\left(\sinh^2(H+t)+e^{-4K}\right)^{1/2}\right)^N\right\} \\
&= \frac{1}{Q}\sqrt{\frac{4(\gamma-2)K}{\pi N}}\int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-\left(\frac{N}{(\gamma-2)K}\right)t^2} e^{KN}\left(\cosh(H+t)+\left(\sinh^2(H+t)+e^{-4K}\right)^{1/2}\right)^{N-1} \\
&\qquad \times\frac{\partial}{\partial H}\left(\cosh(H+t)+\left(\sinh^2(H+t)+e^{-4K}\right)^{1/2}\right) \\
&= \frac{1}{Q}\sqrt{\frac{4(\gamma-2)K}{\pi N}}\int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-\left(\frac{N}{(\gamma-2)K}\right)t^2} e^{KN}\left(\cosh(H+t)+\left(\sinh^2(H+t)+e^{-4K}\right)^{1/2}\right)^{N-1} \\
&\qquad \times\left(\sinh(H+t)+\left(\sinh^2(H+t)+e^{-4K}\right)^{-1/2}\sinh(H+t)\cosh(H+t)\right) \\
&= \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{N}{2(\gamma-2)K}\right)t^2}\left(\cosh(H+t)+\left(\sinh^2(H+t)+e^{-4K}\right)^{1/2}\right)^{N-1} g(t)dt}{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{N}{2(\gamma-2)K}\right)t^2}\left(\cosh(H+t)+\left(\sinh^2(H+t)+e^{-4K}\right)^{1/2}\right)^{N} dt}
\end{aligned} \tag{4.38}$$

Burada $g(t)=\left(sinh(H+t)+\left(sinh^2(H+t)+e^{-4K}\right)^{-1/2}sinh(H+t)cosh(H+t)\right)$ olarak verilmektedir. Önceki kısımda anlattığımız şeyleri göz önüne alarak bu denklemin Wolfram Mathematica [33] yardımı ile grafiği aşağıdaki gibidir.



Şekil 4.2 Manyetik moment başına düşen manyetizasyona $\langle\sigma\rangle$ karşılık kritik bağlanma dayanımları K için pür indirgenmiş transfer matris yönteminden elde edilen çeşitli hiper-kübik örgü yapıları için koordinasyon sayısı γ ile tanımlanmış nümerik değerler.

Manyetik moment başına manyetizasyon yukarıdaki (Şekil 4.2)'de çizilerek gösterilmiştir. Bu hesaplamada $N=10^7$ ve $H=10^{-3}$ olarak ayarlanmıştır. Analitik olarak eyer-noktası yaklaşımı ile kritik noktalar için saptanan ilişki $(\gamma-2)K_c e^{2K_c}=1$ şeklindedir. Nümerik sonuçlar ile analitik sonuçlar tam bir uyum içindedir. Bunlara ek olarak, bir boyut için analitik ilişkiyi veren ifadenin tahmini tam da olması gerektiği gibi $K_c\to\infty$ veya $T_c=0$ değerleridir. Yaklaşımların birleştirilmesiyle oluşturulan bu çalışma ve indirgenmiş transfer matris bir boyut için kritik değeri tam olarak sağlamaktadır. Ayrıca örgüler için kritik değer tahminleri diğer kısımdakinden daha iyi bir sonuç vermiştir.

BÖLÜM 5

SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışmada, Ising sistemlerin iyi anlaşılabilmesi ve daha gelişmiş teorilerin yapılabilmesi adına başlangıçta olabilecek mümkün oldukça iyi bir Ising model tanıtımı yapıp sonrasında sırasıyla bu sistemler üzerinde geliştirilmiş teorilerin önemli birkaçını adım adım göstermeye gayret ettik. Buraya kadar yaptığımız son bölümde anlatılan konfigürasyonel ortalama-alan transfer matris yöntemi için gerekli ön hazırlığı sağlamaktı. Bu bağlamda son bölümde yapılan en önemli yaklaşım diğer öz-tutarlı ortalama-alan teorilerinden farklı olarak merkez manyetik momentin ortalama manyetik momentle etkileşimi yerine her merkez manyetik momentin en yakın komşularıyla beraber ki konfigürasyonel ortalamasının etkileşimi esasına dayanmaktadır. Bu yaklaşım diğer öz-tutarlı ortalama-alan teorilerinden daha uygun bir fiziksel çerçeve ve saydamlık sağlamaktadır. Çünkü aksi durumda öz-tutarlı ortalama-alan teorilerinin sistemde başlangıçtan beri bir faz geçişi öngörmesi ve bu teorilerin çoğunun dalgalanmaları ihmal etmesinden dolayı fiziksel çerçevede kontrol edilemez bir yapıya bürünmüş olması sebebiyle bu yaklaşım bütün konfigürasyonları hesaba katmasından dolayı ki bu konfigürasyonların içerisinde dalgalanmaların da tutulması sisteme yapılabilecek en önemli yaklaşımı sağlamaktadır.

Dahası bu yöntemde iki farklı ortalama-alan teorisi ile kritik dayanım parametreleri için tahminler yapılmıştır. İlk modelde yani pür ortalama-alan modelinde analitik ilişki $K_c = 1/\gamma$ olarak hesaplanıp, bu ilişki Weiss'ın teorisiyle birebir aynıdır. Weiss'ın teorisinin bir boyutta faz geçişi öngördüğünü bildiğimizden dolayı ikinci yöntemle yani indirgenmiş transfer matris yöntemi ile yapılmış olan ortalama-alan modeliyle yine üzerinde sıkı

sıkıya durduğumuz konfigürasyonel ortalama yaklaşımıyla bir boyutta tam çözümlerin öngördüğü daha iyi bir kritik dayanım parametresi ilişkisi $(\gamma - 2)e^{2K_c} = 1$ olarak elde edilmiştir. Yine de daha iyi değerler elde edilebilirdi ancak bölüşüm fonksiyonumuz için analitik olarak yaptığımız eyer-noktası yaklaşımının dezavantajının da bu yönde ki olumsuz katkısı göz ardı edilemez. Nitekim nümerik hesaplar da bu dezavantaja rağmen analitik değerlerle uyumlu değerler vermiştir.

Sonuç olarak, bu yöntemde iyi bir kritik değer tahmininden ziyade yukarıda anlattığımız gerekçelerden dolayı fiziksel olarak daha uygun ve saydam bir model sunma gayreti ve motivasyonu göz önüne alınmıştır. Böylelikle, bahsettiğimiz bu konfigürasyonel ortalama yaklaşımı ile daha iyi teorilerin yapılmasına imkân tanıyacak altyapı sağlanmaya çalışılmıştır.

KAYNAKLAR

[1] Ising, E., (1925). “Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus”, Z. Physik, 31: 253–258.

[2] Kramers, H.A. ve Wannier, G.H., (1941). "Statistics of the Two-Dimensional Ferromagnet. Part I", Physical Review, 60:252-263.

[3] Onsager, L., (1944). “Crystal Statistics. I. A Two Dimensional Model with an Order-Disorder Transition”, Physical Review, 65:117.

[4] Baxter, R.J., (2010). "Some Comments on Developments in Exact Solutions in Statistical Mechanics since 1944", Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, November 2010:11037.

[5] Domb, C., (1960). “On the Theory of Cooperatif Phenomena”, Adv. Phys., 9:149-361.

[6] Baxter, R.J., (1989). Exactly Solved Models in Statistical Mechanics, Third Edition, Academic Press Limited, San Diego.

[7] Arnold, V.I., (1963). "Small Denominators and Problems of Stability of Motion in Classical and Celestial Mechanics", Russian Mathematical Surveys, 18:85–191.

[8] Sells, R. L., Harris, C.W. ve Guth, E., (1953). "The Pair Distribution Function for a One-Dimensional Gas", The Journal of Chemical Physics, 21:1422-1423.

[9] Kadanoff, L.P., (1966). "Scaling Laws for Ising Models Near T_c", Physics, 2:263-272.

[10] Wilson, K.G., (1971). "Renormalization Group and Critical Phenomena. I. Renormalization Group and the Kadanoff Scaling Picture”, Physical Review B, 4:3174-3183.

[11] Wysin, G.M. ve Kaplan, J., (2000). “Correlated Molecular-Field Theory for Ising Models”, Physical Review E, 61:6399-6403.

[12] Chamberlin, R.V., (2000). "Mean-Field Cluster Model for the Critical Behaviour of Ferromagnets", Nature, 408:337–339.

[13] Zhuravlev, K.K., (2005), "Molecular-Field Theory Method for Evaluating Critical Points of the Ising model", Physical Review E, 72:056104.

[14] Yamamoto, D., (2009). "Correlated Cluster Mean-Field Theory for Spin Systems", Physical Review B, 79:144427.

[15] Kaya, T. ve Arık, M., (2011). "Reduced Transfer Matrix Approach for Ising Model", International Journal of Modern Physics B, 25:2895-2903.

[16] Kaya, T., (2012). "Correlated Reduced Transfer Matrix Approach for Ising Model", International Journal of Modern Physics B, 26:1250085.

[17] Weiss, P., (1907). “The Hypothesis of the Molecular Field and the Property of Ferromagnetism”, J. Phys., 6:661-674.

[18] Bragg, W.L. and Williams, E.J., (1935). "The Irreversible Critical Range In The TiNi Transition", Proceedings of the Royal Society A, 145:669.

[19] Bethe H. A., (1935), “Statistical Theory of Superlattices”, Proc. R. Soc. London Ser. A, 150:552-575.

[20] Peierls, R., (1936). “Ising Model of Magnetism”, Proc. Cambridge Philos. Soc. B, 2:477-481.

[21] Honmura, R., (1984). "Correlated Effective Field Treatment of The Spin One Ising Models", Physical Review B, 30:348.

[22] Honmura, R. and Kaneyoshi, T., (1979). "Contribution to The New Type of Effective Field Theory of The Ising Model", J. Phys. C: Solid StatePhys., 12:3979.

[23] Wilson, K.G., (1983). "The Renormalization Group and Critical Phenomena", Rev. Mod. Phys., 55:583-600.

[24] Fisher, M.E., (1974). "Experimental Critical Exponent Values For Fluids", Rev. Mod. Phys., 46:957.

[25] Taggrat, G.B., (1982). "New Effective Field Theory For The Blume Capel Model", Physica, 116A:34.

[26] Croes, K. ve Indekeu, J.O., (1993). "Mean-Field Renormalization Group: Bibliography and New Applications Using Large Clusters", Modern Physics Letters B, 07:699-709.

[27] Kadanoff, L.P., (2000). Statistical Physics: Statics, Dynamics and Renormalization, First Edition, World Scientific Pub. Co. Inc., Singapore.

[28] Huang, K., (1987). Statistical Mechanics, Second Edition, John Wiley and Sons, New York.

[29] Goldenfeld, N., (1992). Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group, First Edition , Addison-Wesley Publishing Company, Massachusetts.

[30] Kardar, M., (2007). Statistical Physics of Fields, First Edition, Cambridge University Press, New York.

[31] Greiner, W., Neise, L., Stöcker, H. ve Rischke, D., (1995). Classical Theoretical Physics: Thermodynamics and Statistical Mechanics, First Edition, Springer-Verlag, New York.

[32] Karaoğlu, B., (2012). İstatistik Mekaniğe Giriş, İkinci Baskı, Seçkin Yayıncılık San. ve Tic. A.Ş, Ankara.

[33] Wolfram Mathematica: Modern Technical Computing, Numerical Computation, https://www.wolfram.com/mathematica/, 15 Nisan 2018.

EK-A

NÜMERİK ÇÖZÜM İÇİN BİLGİSAYAR KODLARI

Bu bölümde manyetik moment başına düşen manyetizasyona karşılık kritik dayanım parametresi grafiğinin her bir koordinasyon sayısı ile tanımlanmış nümerik hesapları her yöntem için ayrı ayrı kullanılan Mathematica kodları ile birlikte verilmiştir.

A-1 Pür Ortalama Alan Modeli için Bilgisayar Kodları

(4.20) denklemi, $\gamma = 4,6,8,12$ koordinasyon sayılarının her biri için ayrı ayrı aşağıdaki kod yardımıyla koordinasyon sayısının yerine konulması vasıtası ile $\langle\sigma\rangle = f(K)$ grafiğini K 'ya $[0,0.5]$ aralığında 0.01 aralıklarla değerler atayarak her K değeri için $\langle\sigma\rangle$ 'ya karşılık gelen değerler hesaplanmaktadır. Burada manyetik momentlerin sayısı $N = 10^7$ ve dış manyetik alan $H = 10^{-3}$ olarak ayarlanmıştır.

```
For[K = 0, K <= 0.5, K += 0.01, Print[(NIntegrate[Exp[-(10^7)*(t^2)/(2γK)]*(Exp[t + 10^-3] + Exp[-(t + 10^-3)])^(10^7)*((Exp[t + 10^-3] - Exp[-(t + 10^-3)])/(Exp[t + 10^-3] + Exp[-(t + 10^-3)])), {t, -Infinity, 0}] + NIntegrate[Exp[-(10^7)*(t^2)/( 2γK)]*(Exp[t + 10^-3] + Exp[-(t + 10^-3)])^(10^7)*((Exp[t + 10^-3] - Exp[-(t + 10^-3)])/(Exp[t + 10^-3] + Exp[-(t + 10^-3)])), {t, 0, Infinity}])/(NIntegrate[Exp[-(10^7)*(t^2)/( 2γK)]*(Exp[t + 10^-3] + Exp[-(t + 10^-3)])^(10^7), {t, -Infinity, 0}] + NIntegrate[Exp[-(10^7)*(t^2)/( 2γK)]*(Exp[t + 10^-3] + Exp[-(t + 10^-3)])^(10^7), {t, 0, Infinity}])]]
```

A-2 İndirgenmiş Transfer Matris Yöntemi için Bilgisayar Kodları

(4.38) denklemi, $\gamma = 4,6,8,12$ koordinasyon sayılarının her biri için ayrı ayrı aşağıdaki kod yardımıyla koordinasyon sayısının yerine konulması vasıtası ile $\langle\sigma\rangle = f(K)$ grafiğini K'ya $[0,0.5]$ aralığında 0.01 aralıklarla değerler atayarak her K değeri için $\langle\sigma\rangle$'ya karşılık gelen değerler hesaplanmaktadır. Burada manyetik momentlerin sayısı $N = 10^7$ ve dış manyetik alan $H = 10^{-3}$ olarak ayarlanmıştır.

For[K = 0.01, K <= 0.5, K += 0.01, Print[((NIntegrate[(Exp[-(10^7)*(t^2)/(2*(γ-2)*K)]*(Exp[K]*(Cosh[t + (10^-3)] + ((Sinh[t + 10^-3])^2 + Exp[-4*K])^(0.5))^((10^7) - 1)))*(Sinh[t + (10^-3)] + Sinh[t + (10^-3)]*Cosh[t + (10^-3)]*(((Sinh[t + (10^-3)])^2) + Exp[-4*K])^(-0.5)), {t, -Infinity, 0}]) + (NIntegrate[(Exp[-(10^7)*(t^2)/(2*(γ-2)*K)]*(Exp[K]*(Cosh[t + (10^-3)] + ((Sinh[t + 10^-3])^2 + Exp[-4*K])^(0.5))^((10^7) - 1))) (Sinh[t + (10^-3)] + Sinh[t + (10^-3)]*Cosh[t + (10^-3)]*(((Sinh[t + (10^-3)])^2) + Exp[-4*K])^(-0.5)), {t, 0, Infinity}]))/((NIntegrate[Exp[-(10^7)*(t^2)/(2*(γ-2)*K)]*(Exp[K]*(Cosh[t + (10^-3)] + (((Sinh[t + (10^-3)])^2) + Exp[-4*K])^(0.5))^(10^7)), {t, -Infinity, 0}]) + (NIntegrate[Exp[-(10^7)*(t^2)/(2*(γ-2)*K)]*(Exp[K]*(Cosh[t + (10^-3)] + (((Sinh[t + (10^-3)])^2) + Exp[-4*K])^(0.5))^(10^7)), {t, 0, Infinity}]))]]

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : Başer TAMBAŞ

Doğum Tarihi ve Yeri : 22.02.1992, Ardahan

Yabancı Dili : İngilizce

E-posta : baser.tambas@gmail.com

ÖĞRENİM DURUMU

Derece	Alan	Okul/Üniversite	Mezuniyet Yılı
Y. Lisans	Fizik	Yıldız Teknik Üniversitesi	2018
Lisans	Fizik	Yıldız Teknik Üniversitesi	2016
Lise	Matematik-Fen	80. Yıl Ardahan Anadolu Lisesi	2010

İŞ TECRÜBESİ

Yıl	Firma/Kurum	Görevi
2015-2018	Yıldız Teknik Üniversitesi	Asistan Öğrenci

YAYINLARI

Bildiri

1. Kaya, T. ve Tambaş, B., (2018). “Configurational Mean-Field Transfer Matrix Method for Ising Systems”, International Conference on Mathematical Advances and Applications, 11-13 Mayıs 2018, İstanbul.