T.C.
MARMARA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

İKİ BOYUTLU FERROMAGNETİK BÖLGELERİN GELİŞİMİNİN MONTE CARLO METODU İLE İNCELENMESİ

Murat KARAGÖZ
(Fizikçi, MSc.)

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI
ATMOSFERİK FİZİK PROGRAMI

DANIŞMAN
Doç.Dr.Şahin AKTAŞ

İSTANBUL 2002

T.C.
MARMARA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

KABUL VE ONAY BELGESİ

İKİ BOYUTLU FERROMAGNETİK BÖLGELERİN GELİŞİMİNİN MONTE CARLO METODU İLE İNCELENMESİ

Murat KARAGÖZ'ün İki Boyutlu Ferromagnetik Bölgelerin Gelişiminin Monte Carlo Metodu İle İncelenmesi isimli Lisansüstü tez çalışması, M.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulunun 8.4.2002 tarih ve 2002/08-24 sayılı kararı ile oluşturulan jüri tarafından Fizik Anabilim Dalı Atmosferik Fizik Programında YÜKSEK LİSANS Tezi olarak Kabul edilmiştir.

Danışman	: Doç.Dr.Şahin AKTAŞ	(M.Ü.)
Üye	: Prof.Dr.Işık AYTAŞ	(M.Ü.)
Üye	: Prof.Dr.Gürcan ORALTAY	(M.Ü.)

Tezin Savunulduğu Tarih 14.5.2002

ONAY

M.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun 1.7.2002 tarih ve 2002/11-70 sayılı kararı ile Murat KARAGÖZ'ün Fizik Anabilim Dalı Atmosferik Fizik Programında Y.Lisans (MSc.) derecesi alması onanmıştır.

Marmara Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Müdürü
Prof.Dr.Adnan AYDIN

ÖNSÖZ

Yapmış olduğum bu yüksek lisans tezinde; bilgisayar da simülasyon " Monte Carlo metoduyla ferromanyetizmadaki bölgelerin gelişiminin incelenmesi " ile daha önce bu konuda yapılmış olan çalışmaların bir adım daha ilerisine gitmeyi amaçladık ve bunu yaptığımızı umuyorum. Bu alanda daha sonra çalışma yapacak arkadaşlarımıza da ışık tutacağını ümit ediyorum.

Her şeyden önce tez çalışmamda başından beri bana ışık tutan ve yardımcı olan çok değerli tez hocam Doç. Dr. Şahin AKTAŞ' a teşekkürü bir borç biliyorum. Tez çalışmalarımda manen beni destekleyen ve yardımcı olan sevgili Demet YILDIRIM' a teşekkürler.

Nisan, 2002 Murat KARAGÖZ

İÇİNDEKİLER

ÖZET

İKİ BOYUTLU FERROMAGNETİK BÖLGELERİN GELİŞİMİNİN MONTE CARLO METODU İLE İNCELENMESİ.

İki boyutlu ferromagnetik bölgelerin gelişimini araştırmak için, Monte Carlo metodu kullanarak bu sistemi temsil edecek bilgisayar simülasyonu yapıldı. İlk olarak bir boyutta ferromanyetizmanın olmadığı gözlendi. Daha sonra iki boyuttaki ferromanyetik bölgelerin gelişimini incelemek için gerekli olan bilgisayar simülasyonu geliştirildi. Burada iki boyutlu ferromagnetik bölgelerin gelişimi incelendi. Etkileşme sabiti ve sıcaklığın değerini değiştirerek paramagnetik durumdan ferromagnetik duruma faz geçişlerinin fiziksel özellikleri incelendi. Manyetizasyonun sıcaklığa göre değişim grafikleri elde edildi ve yorumlandı. Son olarak da üç boyutta ferromanyetizmanın oluşması incelendi.

Nisan, 2002 Murat KARAGÖZ

ABSTRACT

USİNG MONTE CARLO METHOD TO EXAMİNE DEVELOPMENT OF TWO DİMENSİON FERROMAGNETİC REGİONS.

To research development of two dimension ferromagnetic regions, using with Monte Carlo Method has been made some computer simulation programs which represent this system. In this research, it is experienced that there is no ferromagnetism in the one dimension. Then, the computer simulation program was developed two examine the two dimension ferromagnetic regions. Here, the ferromagnetic domains with the two dimension were examined. There after, physical properties of the passings of the phases from the paramagnetic state to the ferromagnetic state were examined by changing the constant of interaction and the value of the heat. It was examined that how the phase passing and system magnetism are depend upon the interaction between spins and developing of ferromagnetic regions. Some grafics are gotten when changing heat valve in the magnetic regions. Finally the developping of the ferromagnetism in three dimension was investigated.

Nisan, 2002 Murat KARAGÖZ

YENİLİK BEYANI

İKİ BOYUTLU FERROMAGNETİK BÖLGELERİN GELİŞİMİNİN MONTE CARLO METODU İLE İNCELENMESİ.

Biz, "İki boyutlu ferromagnetik bölgelerin gelişiminin Monte Carlo metodu ile incelenmesi" adlı tez çalışmamız boyunca incelediğimiz bütün spin sistemleri için düşük enerjili durumda bulunmayı tercih ettiklerini bilerek, farklı sıcaklık ve farklı etkileşme değerlerinde ferromanyetik bölgelerin nasıl değiştiğini ve paramagnetik-ferromagnetik faz geçiş anını Monte Carlo metodu ile tespit edip, ferromagnetik alanların gelişimini inceledik. Ayrıca iki boyutlu spin sisteminde spine etkileyen en yakın komşularla ferromanyetizma olduğunu biliyorduk. Ayrıca 3 boyutlu spin sisteminde ferromanyetizmanın nasıl etki ettiğini görmek istedik, ve bununla da ilgili gözlemlerimizi yaptık. Bu etkinin nasıl olduğunu ve nedenlerini tez metninde ayrıntılı olarak açıklayacağız.

Nisan, 2002 Doç. Dr. Şahin AKTAŞ Murat KARAGÖZ

SEMBOL LİSTESİ

B	**: Manyetik İndüksiyon Alanı**
E	**: Enerji**
E	**: Elektrik Alan**
F	**: Serbest enerji**
g	**: Spektroskopik Yarılma Faktörü**
H	**: Teorik Manyetik Alan**
J	**: Spinler Arası Etkileşme Sabiti**
M	**: Manyetizasyon**
P	**: Polarizasyon**
S	**: Entropi**
T	**: Sıcaklık**
T_c	**: Kritik Sıcaklık**
$U(w_0)$	**: Foton Yoğunluğu**
χ	**: Manyetik Alınganlık**
μ	**: Manyetik Moment**
μ_B	**: Bohr Manyetonu**
w_0	**: Fotonların Frekansı**
γ	**: Jiromanyetik Oran**

ŞEKİL LİSTESİ

BÖLÜM I . GİRİŞ VE AMAÇ

I.1.GİRİŞ

Bir B manyetik alanı etkisinde iki boyutlu birbiri ile etkileşen spin sistemi ele alalım. Bazı spinler alan ile aynı yönde iken, bazıları ise zıt yönde yönelmiştir. Buradaki B alanı; spinleri kendisi ile aynı yönde yönelmeye zorlayan dış bir etkidir ve bunun dışında başka herhangi bir etki olmadığı müddetçe, spinler kendi enerjilerini minimumda tutmak isterler.

Serbest bir atomun manyetik momenti;

a) Elektronların sahip oldukları spine,

b) Elektronların çekirdek etrafındaki yörünge açısal momentumlarına,

c) Uygulanan manyetik alan etkisi ile ortaya çıkan yörünge momentumunun değişimine bağlıdır.

Elektronların sahip oldukları spinler mıknatıslanmaya paramanyetik bir katkı getirir. Elektron kabuğu dolu olan atomların spinleri ve yörünge momentleri sıfırdır, bundan dolayı, doldurulmamış kabuklar için atomun manyetik momentinin anlamı vardır.

Manyetik doygunluk; manyetik alan etkisi altındaki bir cismin manyetize olma özelliğine o cismin manyetik doygunluğu denir. Manyetizasyon;

$$M = \chi H$$

olarak tanımlanır.

Burada M manyetizasyon, H makroskopik manyetik alan olmak üzere; χ sabiti, " manyetik doygunluk " olarak tanımlanan boyutsuz bir büyüklüktür. Bazen birim kütleye ya da maddenin mol sayısına bağlı olarak da verilir.

Manyetik maddeler manyetik doygunluklarına, paramanyetik, nonmanyetik ve diamanyetik olma durumlarına göre sınıflandırılırlar.

$\chi > 0$ ise paramanyetik,

$\chi = 0$ ise nonmanyetik,

$\chi < 0$ ise diamanyetik,

Eğer $H = 0$ iken $M \neq 0$ ise ferromanyetik,

Eğer $H \neq 0$ iken $M = 0$ ise antiferromanyetik,

Ferromanyetik durumun nonmanyetik durumdan farkını şöyle açıklayabiliriz: Ferromanyetik bir spin dağılımında spinlerin birbirleri ile etkileşmeleri sonucunda manyetize olurlar, yani bu etkileşmenin neticesinde bir manyetizasyona sahip olurlar. Bunun yanında, nonmanyetik bir maddenin dışsal manyetik alanla etkileşerek manyetize olmaları mümkün değildir. Antiferromanyetik bir dağılımda ise spinlerin birbirleri ile etileşmeleri sonucunda spinler manyetize olmazlar.

Bir cisim uygulanan bir manyetik alan içerisinde iken, atomdaki elektron akımlarının manyetik alandan kısmen yalıtma eğilimi diamanyetizmayı oluşturur.

Elektromanyetizmada Lenz kanununa göre, bir devredeki manyetik akının değişmesi durumunda, manyetik akının değişmesini önleyecek bir elektrik akımı oluşur.
Bir süperiletkende ya da elektron yörüngesinde, bu tür akımın varlığından dolayı oluşan manyetik alan uygulanan alanla aynı yönde olsa bile, onun artış ya da azalışına tepki olarak azalır ya da artar. Bu tür bir akımla ilişkili olan manyetik momente " diamanyetik moment " adı verilir.

I.2. AMAÇ

Bizim bu çalışmadaki amacımız; istatistiki bir metod olan Monte Carlo Metodunu kullanarak, belli bir sıcaklıktaki iki boyutlu spin sistemi için, bu sistemdeki spin geçişlerin ihtimallerini rasgele sayılar ile temsil ederek sistemin manyetik özelliklerini belirlemek ve ferromanyetik bölgelerin zamana bağlılığını ve bu yolla Ferromanyetik / Paramanyetik faz geçişini daha detaylı olarak incelemektir. Daha sonra aynı işlemleri üç boyutlu spin sistemi için yapıp boyut farkının muhtemel etkisini araştırmak olacaktır.

BÖLÜM II . FERROMANYETİZMA

II.1. Giriş

Bu bölümde iki boyutlu ferromagnetik sistemde simülasyon yapacağız. Burada belli manyetik momenti göz önüne alacağımız parçacıklar olan (spin) klasik parçacıklar olarak kabul edeceğiz. Spinler bir birleri ile etkileşeceklerdir. Spinlerin etkileşmesi; kendisine en yakın komşu spinlerle etkileşme şeklinde olacaktır. Bunun için etkileşme enerjisi;

$$E = \Sigma S_i S_j$$

olarak verilir. Burada toplam, < i, j >'nin en yakın komşu spinlerin her biri ile gerçekleştirdikleri bütün etkileşmeler üzerinden alınmıştır ve J ise etkileşme sabitidir.

$J < 0$ ise ferromagnetik

$J > 0$ ise antiferromagnetik

. . . . . . ↑ ↓ ↑ . . . .　　1

i-1　i　i+1

. . . . . . ↑ ↑ ↑ . . . .　　2

i-1　i　i+1

Şekil (2.1) Bir Boyutlu Spin Dağılımı.

$E = \Sigma\, S_i\, S_j$

$E_1 = J\,[S_i\, S_{i-1} + S_i\, S_{i+1}] = J\,[(-1)(+1)+(-1)(+1)] = -2\,J$

$E_2 = J\,[S_i\, S_{i-1} + S_i\, S_{i+1}] = J\,[(+1)(+1)+(+1)(+1)] = +2\,J$

$\Delta E = E_2 - E_1 = 2\,J - (-2\,J) = 4\,J$

Şimdi de bir boyutlu sistemde ferromagnetik düzenin neden oluşmayacağını açıklayalım. Bir boyutlu yapıda bir spin iki tane komşu spine sahip olacağı için etkileşme sonucunda spinin yeni bir duruma geçmesi ve dolayısıyla sistemin dengeye ulaşması imkansız olacaktır. Örneğin şekil (2.1)' deki gibi bir boyutlu yapıyı ele alalım. Yukarı spinler için s (i) = "+", aşağı spinler için ise s (i) = "-" olsun. Buna göre i. spin flip olduğunda yeni bir duruma geçmez, yani $E_1 = E_2$ olur. Buradan da anlaşılacağı üzere sistemin dengeye ulaşması çok zordur. Bu açıklama her ne kadar mantıklı gözükse de, tatmin edici değildir. Bu yüzden, yapılması gereken en doğru şey; bir boyutlu etkileşen spin sitemi için bir bilgisayar programı yaparak, sistemin dengeye erişmeyeceğini görmektir. Biz de bu amaçla bir bilgisayar programı yaptık ve yaptığımız programın sonucunda; değişik sıcaklık değerlerine karşılık gelen manyetizasyon değerlerinin hep sıfıra yakın (1000 tane spinden oluşan sistemde) ihmal edilebilir değerler oluğunu gördük. Şekil (2.2.a, 2.2.b)

```
B=0.25
m=10
- - + - - + - + + - - + - + - + - + + + + + - + + - + +

m=16
+ - + - + - - - - - - + - + + - - - - - + - - + - + - +

m=-42
- - - - - + - - - + + - - - - + + + - + + - - - + - - +

m=-74
+ + - - - + - + + - - - + + + + + - + + + - + + - - - -

m=64
- - + + + + + + + + + - - - + - + + + - - - + + - - + +

m=-44
+ - - - - + - - - + - + + - - - + + + - - - + + - - + +

B=0.50
m=42
+ + - - - + + + - + - - + + + + + + - + + + + + + + + +

m=8
+ + + + + - + + - + + + + - - + + + + + - - + - + - + +

m=-72
- - + + + - + + + - - + - + + + - - - - + + + + - - + -

m=50
+ - - + + + - - - + - - + - + - + - - - - + + + + + + +

m=56
- - - - - + + + + + - + + + + + - - - + - - - + - + + +

m=96
- + - - - - + - - + - + - + + - - - - + + - - - - + + +
```

Şekil (2.2.a) J = - 2 Değeri için Farklı B değerlerinde 200 Adımda Bir Monte Carlo Metodu İle Birinci Kademe Komşu Spinlerin Etki Ettiği Durumdaki Ferromanyetizma (Not : 1000 tane spinden oluşan bir sistemin belli bir kesiti alınmıştır.)

B=0.75
m=-36
- - - - - + + - - - - + + - + + - + - - - - - + + - + +

m=-34
+ + - - - - + + - + - + - + - + + + + - - - + + - + + -

m=2
- - - + + + - - + + - + - - - + + - - - + + + + + - - +

m=-54
- - - - - - - + + - - - - + + + + + + + + - + + + + + +

m=52
- - - - + - - - - - - + + - - + - + + + - - - - - - + +

m=70
+ + - + + + + + + + + + + - - - - - - - + - - - + + + -

B=1.0
m=-12
- - + - - - + + + - + + + + + - + + + - + + - - + - - +

m=100
+ + + + + + + + + + + + - + + + - - - - - + - - - - + +

m=-10
- - - - - - - - + - + + - - - - - + + + + + - - - - - -

m=-62
- - - - - - - - + + + + - - - - - + - - - - - - - - + +

m=-26
- - - - - - - - - - - - - - + + + - - - + - - - - + + +

m=84
+ + + + + + + + + + - - - - - - + + + + - + + + + - - -

Şekil (2.2.b) J=-2 Değeri için Farklı B değerlerinde 200 Adımda Bir Monte Carlo Metodu İle Birinci Kademe Komşu Spinlerin Etki Ettiği Durumdaki Ferromanyetizma. (Not:1000 tane spinden oluşan bir sistemin belli bir kesiti alınmıştır.)

Daha sonra bir boyutlu spin sisteminde ikinci kademe spinleri de sisteme dahil ettiğimizde sistemde ne gibi bir değişiklik olacağını merak ettik. Bunun için tekrar bilgisayar programı yaparak, sistemin dengeye erişip erişmeyeceğini görmek istedik. Neticede ikinci kademe spinleri de hesaba katmamıza rağmen manyetizasyonda ciddi bir değişiklik olmadığını gördük. Çünkü ele aldığımız spinle ikinci kademe spinler arasındaki etkileşme sabiti J' nin değeri oldukça azalmıştı (yaklaşık J/4 oranında). Böylece bir boyutta yaptığımız deneyde ikinci kademe spinlerin spin sistemine önemli bir katkıda bulunmadıklarını belirlemiş olduk. Şekil (2.4.a, 2.4.b) Böylece bir boyutta ferromanyetik düzenin oluşmayacağına dair kesin sonuçlar elde etmiş olduk. İki boyutta ise bir spinin en yakın komşu sayısı dört olacağı için, flip olması neticesinde spinin yeni bir duruma geçmesi ve dolayısı ile sistemin dengeye ulaşması daha olasıdır. Şimdi iki boyutlu ferromanyetik yapı için uygulamamıza geçmeden önce ferromanyetizma hakkında genel bir bilgi verelim.

Ferromanyetizma; bir spin grubu makroskobik boyutta bir toplam moment elde etmek için çoğunluk manyetik moment aynı yönde yöneldiği zaman ortaya çıkar. Mesela, 30 tane spinden oluşan bir dağılımda, 18 tane spin yukarı, 12 tane spinin de aşağı yönde olduğunu belirten bir makro durum var ise, bu durum ferromanyetik düzenin oluşması için yeterlidir. Burada önemli olan konu; spinler arasındaki etkileşmenin böyle bir düzenin oluşmasında nasıl bir rol oynadığıdır. Yüksek sıcaklıklarda genel olarak sistemin manyetizasyonunda gevşeme olacağını düşünecek olursak, biz burada sistemin manyetik özelliklerinin sıcaklığa nasıl bağlı olduğunu anlamaya çalışacağız.

$$\begin{array}{ccc} \uparrow & \downarrow & \uparrow \\ \\ \downarrow & \uparrow & \uparrow \\ \\ \uparrow & \downarrow & \uparrow \end{array}$$

Şekil 2.3 : İki Boyutta Karesel Spin Dağılımı

B=0.25

m=14

- - - + + + + + + + + + + - + + + - + - + - - - + + + - -

m=-54

- - - + - - - - + - - + + + + + + + + + + + + + + - - - -

m=46

- - + + + + + + + + + - + - + - - - + + + - - - - + + + +

m=-10

- - + + + + - + + + + + + + - - + + + + + + + + + + + - +

m=-2

- - - - - - - - + - - - - - + + + + + - - - - + + + + + +

m=6

- - + - - + + + + + + + - - - - + + - - - - - - - - + + +

B=0.50

m=46

- - - - - - - - - - - - + + + + + + + + + + + + + + + + +

m=-68

- - - - - - - - - - - - - + - + + + + + - + - - - - + + +

m=-4

- - - - - + - - + + + - - - + - + + - - - - - - - - - + +

m=4

- - - - + + + + + + + + + + + + + + + - - + - - - - - - -

m=28

- - - - - + + + + + + + - - + + + + - - - - - - - - - + +

m=-100

- - + -

Şekil (2.4.a) J = - 2 Değeri için Farklı B değerlerinde 200 Adımda Bir Monte Carlo Metodu İle İkinci Kademe Komşu Spinlerin Etki Ettiği Durumdaki Ferromanyetizma (Not : 1000 tane spinden oluşan bir sistemin belli bir kesiti alınmıştır.)

```
B=0.75
m=-188

- - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - -

m=-184
- - - - - - - - - + - - - - - - + + + + + + + + + + + + +

m=118
- - - - - - - - - - - - - - - - + + - - - - - - - + + + +

m=-130
- - - - + + + + + + + + + + + + + + + + + + + + + + + + +

m=30
- - - - - - + + + + + + + + + + + + + + + - - - + + + + +

m=28
- - - + + + + + + - - - - - - - - - - - - - - - - - - - -

B=1.0
m=134
- - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - -

m=162
- - - - - - - - + + + + + + + + + + + + + + + + + + + + +

m=406
- - - - - - - - - - - - - - - - - + + + + + + + + + + + +

m=-250
- - - - - - - - - - - - - + + + + + + + - - - - - - - - -

m=6
- - - + + + + + + + + + + + + + + + + + + + + + + + + + +

m=-312
- - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - -
```

Şekil (2.4.b) J = - 2 Değeri için Farklı B değerlerinde 200 Adımda Bir Monte Carlo Metodu İle İkinci Kademe Komşu Spinlerin Etki Ettiği Durumdaki Ferromanyetizma (Not : 1000 tane spinden oluşan bir sistemin belli bir kesiti alınmıştır.)

Bizim üzerinde düşüneceğimiz ferromagnetik model şekil (2.3) de şematik olarak gösterilmiştir. Sistemdeki (i, j) spin aşağı ve yukarı yönde olmak üzere iki mümkün durumdan sadece birine sahip olur ve biz bu durumları uygun olması açısından yukarı spinler için s_i = "+", aşağı spinler için s_i = "-", olarak aldık. Bu spinlerin her biri dağılımdaki diğer spinler ile etkileşirler. En yakın komşu spinler arasındaki etkileşmeler dikkate alınacaktır. Bu düşünceyle, spin sisteminin enerji ifadesi aşağıdaki gibi verilir.

$$E = \Sigma S_i S_j \qquad (2.1.1)$$

Burada ele aldığımız spin sisteminin enerjisini (2.1.1) denklemi ile ifade edebiliriz. (2.1.1) denklemine göre iki komşu spin, eğer aynı yönde ise – J, zıt yönde ise + J olacak şekilde etkileşme enerjisine sahip olurlar. Eğer her bir spin komşularına parelel ise, dağılımdaki her spin diğer spinlere paralel olacağından, sistem için sıfırdan farklı bir manyetik moment söz konusu olacaktır.

Bir manyetik alanın yokluğunda sıfırdan farklı bir manyetik momente sahip olan bir sistem için, kendiliğinden manyetizasyona sahip olduğu söylenir.

Bütün spinler birbirlerine paralel iken, spin sisteminin enerjisi minimum olduğunda, sıcaklığın düzensizlik etkisi dikkate alınmalıdır. Bizim sistemimizin bir T sıcaklığında dengede olduğunu kabul edelim. Bunu görmek için bir yol; farklı spinlerin aşağı–yukarı flip olmasını zaman üzerinden ele almaktır. Böylece sistem farklı spin konfigürasyonları içerisinde olacaktır. Deneysel bir ölçümde gözlenen davranış, sistemin mümkün olan farklı konfigürasyonlarda geçireceği zamana bağlı olacaktır. Bu ısıl dengedeki bir sistem için istatistiksel mekaniğin temel bir sonucudur ve sistemin herhangi bir özel durumunda bulunma olasılığı Boltzmann çarpanı ile orantılıdır.

$$P_\alpha \sim \exp (- E_\alpha / k_B T) \qquad (2.1.2)$$

Burada E_α sistemin α durumundaki enerjisi, k_B Boltzmann sabiti ve P_α sistemin α durumunda bulunma olasılığıdır. Bu durumların her biri, spinlerin özel bir konfigürasyonudur ve biz bu durumların her birini sistemin bir mikrodurumu olarak kabul edebiliriz. N tane spinden oluşan bir dağılımın olduğunu varsayalım. Her bir spin için mümkün iki durum vardır. Ancak, sistemin içinde bulunacağı mikro durumların her birinin enerjisi düzene bağlı olmadığı için, ferromanyetizmada 2^N tane mümkün mikro durum yoktur.

İstatistiki olarak bakıldığında spin sisteminin herhangi bir sıcaklıkta sahip olacağı termal enerji, sistemin bir mikro durumundan diğerine geçmesine neden olur. Spinler bu geçiş esnasında enerji kazanır ya da kaybeder. Toplam manyetik moment gibi bir büyüklüğün makroskopik ölçümü, ölçüm boyunca sistemin bulunduğu çok sayıda mikro durum üzerinden ortalama alınarak yapılır. Bu ölçümü yapmak için önce sistemin farklı mikro durumlarda bulunma olasılığını hesaplamamız gerekir.

Örneğin, bir M_α mikro durumunun manyetik momenti; bu durumda bulunan bütün spinler üzerinden toplam alınarak hesaplanır. Sistemin ölçülmüş manyetizasyonu aşağıdaki gibidir.

$$M = \Sigma M_\alpha P_\alpha \tag{2.1.3}$$

Burada $M_\alpha = \Sigma s_i$, P_α, M_α mikro durumunun olma ihtimali α mikro durumunda bulunan tüm spinler üzerinden alınan toplamdır.

II.2. Basit Yaklaşımla Monte Carlo Metodu

Bir spin sistemini simüle etmek için, öncelikle özel bir spin grubu alınır. İstatistik mekaniğe göre, enerji alış-verişinin rolü bir T sıcaklığında sistemin dengeye erişmesini sağlamaktır. Sistemin enerji kazanması yada kaybetmesi ile spinler, sistemin yeni bir mikro duruma geçmesini sağlayacak şekilde flip (durum değiştirirler) olurlar. Bu mikro durumların her biri spin sisteminin özel bir durumunun yerini tutar. Manyetizasyon gibi bazı büyüklüklerin ölçülmüş değerleri, sistemin farklı mikro durumlarda bulunma olasılıklarına bağlıdırlar. Mikro durumlarının zamana bağlı ortalaması ölçülen değere eşittir.

Monte Carlo Metodu, spin sistemi ile enerji alış-verişi arasında enerjinin değişimini simüle etmek için nümerik bir yaklaşım kullanılır. Giriş bölümünde şematik olarak gösterilmiş olan özel bir mikro durumdaki sistemle işe başlayabiliriz. Öncelikle bir spin seçilir ve daha sonra, bu spini simüle etmek için gerekli olan enerji (2.1.1) bağıntısını kullanarak hesap edilir. Flip olma enerjisi E_{flip} (yani spinlerin yön değiştirmesi için gerekli olan enerji) negatif ise spin flip olur. Eğer flip olma enerjisi E_{flip} pozitif ise, o zaman bir karar vermek gerekir. Bunun için 0 - 1 arasında keyfi olarak rasgele bir sayı belirlenir ve bu sayı
$P = \exp (- E_{flip} / k_B T)$ (Boltzmann çarpanı) ile kıyaslanır. Eğer Boltzmann çarpanı rasgele sayıdan büyük ise, spin flip olur, değilse olmaz. Bu durumda sistem rasgele sayının değerine bağlı olarak farklı bir mikro duruma geçebilir ya da geçmeyebilir. Tüm spinler için bu yapıldığında Monte Carlo zaman basamağı tamamlanır. Neticede tanımlanmış olan algoritmaya göre spinin durum değiştirip değiştirmeyeceği belirlenir.

Bu işlem çok kere tekrarlanır, yani bir anlamda her bir spine flip olması için çok sayıda imkan sağlanmış olur. Biz, her Monte Carlo zaman basamağını enerji alışverişi vasıtasıyla spinlerin etrafı ile etkileşmesi olarak alabiliriz. Bir spinin flip olma olasılığı ifadesi Boltzmann çarpanının T'yi yani sıcaklığı da içermesi ile bu etkileşmenin sıcaklığa bağımlılığı verilmiş olur. Biz daha önce $E_{flip} < 0$ olduğunda yani spin düşük enerjili duruma geçtiğinde, seçilmiş olan spinin her zamam durum değiştireceğini söylemiştik. Eğer, bu tek flip olma kriteri olsa idi, spin topluluğu hızla en düşük enerjili duruma doğru giderdi. Bu da bizim modelimiz için bütün spinlerin birbirlerine paralel oldukları mikro durum (düşük sıcaklıkta) yani ferromanyetik durumdur.

Bununla birlikte, her hangi bir sıcaklıkta bizim $E_{flip} > 0$ olması ile geçiş olasılıkları Boltzmann çarpanı ile ilişkili olan daha yüksek enerjili durumlara geçişlere izin vermemiz gerekir. Düşük sıcaklıklarda bu çarpan küçüktür ve doğal olarak spinin daha yüksek enerjili durumlara geçiş olasılığı da düşük olur. Ayrıca, düşük sıcaklıklarda sistem en düşük enerjili duruma çok yakın olan bir mikro durumda bulunacaktır. Eğer, düşük enerjili ve yüksek enerjili olmak üzere sadece iki durum var ise; manyetizasyon, düşük enerjili durumu temsil eden değere sahip olur. Yüksek sıcaklıklarda, Boltzmann çarpanı bire yakın olacağından, daha yüksek enerjili duruma flip olma olasılığı tamamen anlamlı olacaktır. Sıcaklığın çok yüksek olması ile, Boltzmann çarpanı bire yaklaşacağı için bu durum düzenlemesini tam bir düzensizliğe doğru meyillendirir. Bu durum paramanyetik durumdur.

Bu tartışmalar Monte Carlo metodunun yüksek ve düşük sıcaklık limitlerinin her ikisinde de doğru nitel neticeler verdiğini gösterir. Şimdi bazı şeyleri nicel olarak düşünelim. Bir Monte Carlo spin flipi, iki mikro durumu birleştirir. Biz bu durumları ($E_1 > E_2$) olacak şekilde, E_1 ve E_2 enerjileri ile temsil edelim. Eğer sistem 1 durumunda ise, seçili spinin verilen bir zaman basamağı boyunca flip olma olasılığı belirlenir.

1 durumundan 2 durumuna geçiş oranının $E_1 > E_2$ olduğunu farz edip $W(1 \rightarrow 2)$ olarak alırsak bu oran $W(1 \rightarrow 2) = 1$ olur. Aynı şekilde, eğer sistem 2 durumunda ise, bir sonraki zaman basamağı boyunca 1 durumuna dönüşüm oranı $E_{flip} = E_1 - E_2 > 0$ olması ile $W(1 \rightarrow 2) = \exp[-(E_1 - E_2) / k_B T]$ olacaktır. Sistemimiz termal dengeye eriştiğinde, herhangi bir özel durumda bulunma olasılığı, ortalama üzerinden, zamandan bağımsızdır. Bu durumda biz 1 durumundan 2 durumuna geçişlerin sayısının, ters yöndeki geçişlerin sayısına eşit olması gerektiğini bekleriz. Bu tür geçişlerin sayısı; geçiş oranları ve sistemin başlangıç durumunda bulunma olasılıklarının çarpımı ile orantılıdır. $1 \rightarrow 2$ ve $2 \rightarrow 1$ dönüşümlerini ifade eden eşitlik,

$$P_1 W(1 \rightarrow 2) = P_2 W(2 \rightarrow 1) \qquad (2.2.1)$$

olarak verilir. Burada, P_1 ve P_2 sistemin bu iki mikro durumunda bulunma olasılıklarıdır. Eşitlikte W çarpanlarını kullanırsak,

$$P_1 / P_2 = \exp [- (E_1 - E_2) / k_B T)] \qquad (2.2.2)$$

buluruz. Bu sonucu (2.1.2) ile mukayese ederek, termal dengedeki bir sistem için bunun kesin olarak beklenen sonuç olduğunu görürüz. Böylece Monte Carlo algoritması bizi doğru Boltzmann çarpanları tarafından verilen, farklı mikro durumlarda bulunma olasılıklarının bulunduğu duruma götürür.

İki boyutlu spin sistemine ilişkin yaptığımız 15 x 15 karesel bir spin sistemini model olarak aldık. İlk olarak rasgele sayı yardımı ile spinler için başlangıç koşullarını belirledik. Daha sonra 225 tane spinden oluşan bu sistem için tarama işlemine başladık. Bu işlem esnasında spinler için yüksek enerjili durumdan düşük enerjili duruma geçme ihtimalini P = 1.0 alırken, düşük enerjili durumdan yüksek enerjili duruma geçme ihtimalini bir rasgele sayı yardımı ile belirledik ve gerekli geçiş işlemini yaptıktan sonra sistemdeki diğer spinler sıra ile taranıp aynı işleme tabi tutulduktan sonra tüm sistemin

$$M = \Sigma\, s (i, j)$$

olarak verilen manyetizasyonu hesapladık. Tüm spin sistemini bu şekilde bir kez taramak bir Monte Carlo Zaman adımı olarak alınır. Bu işlem sistem dengeye ulaşıncaya dek tekrar edildi. Biz bu çalışmamızda spin sisteminin 2000 adımını inceledik ve 2000. adımda sistemde fazla olan (+ veya – sayısında) durumda ciddi değişimler olmadığı bu adımda sistemimizin dengeye ulaştığını kabul ettik. Daha sonra J etkileşme sabitinin farklı değerleri için sistemin sıcaklığa bağlılığını ve faz geçişinin karakteristiğini incelediğimizde sıcaklığın etkisinin azaldığını ve daha önceki duruma göre biraz daha yüksek sıcaklıklarda ferromagnetik duruma geçiş olduğunu gözlemledik. Grafik (1-a, b, c) Etkileşme sabiti, J = - 1 iken faz geçişinin kademeli olduğunu ve faz geçiş kalınlığının geniş bir bant aralığında oluğunu belirledik.

Etkileşme sabiti, J değeri güçlendirildiğinde faz geçiş bandının daha ince ve paramagnetik durumdan ferromagnetik duruma geçişlerin küçük J değerlerine göre keskin olduğunu gözlemledik. Böyle bir durumun olmasını fiziksel olarak bekliyorduk. Çünkü J değeri mutlak olarak artırıldığın da ferromagnetik durum güçlenir.

$$\begin{array}{ccc} & + & \\ + & - & - \\ & + & \end{array}$$

Birinci kademe komşu spinlerin ele alındığı spin sistemi.

$E = \Sigma\, S_i S_j$

$\Delta E = J s(i,j) \times (s(i,j+1) + s(i,j-1) + s(i+1,j) + s(i-1,j))$

Bu durumda yukarıda şekli verilen sistemimizin enerji değerini hesaplarsak;

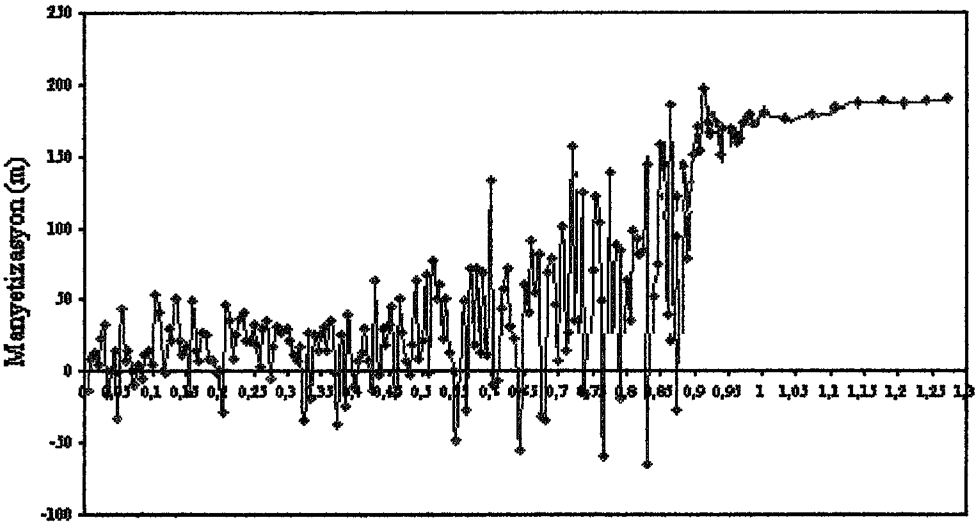
$\Delta E = J(-1/2) \times ((+1/2)+(+1/2)+(+1/2)+(-1/2))$

$\Delta E = J(-1/2) \times (2/2)$

$\Delta E = -J\,1/2$

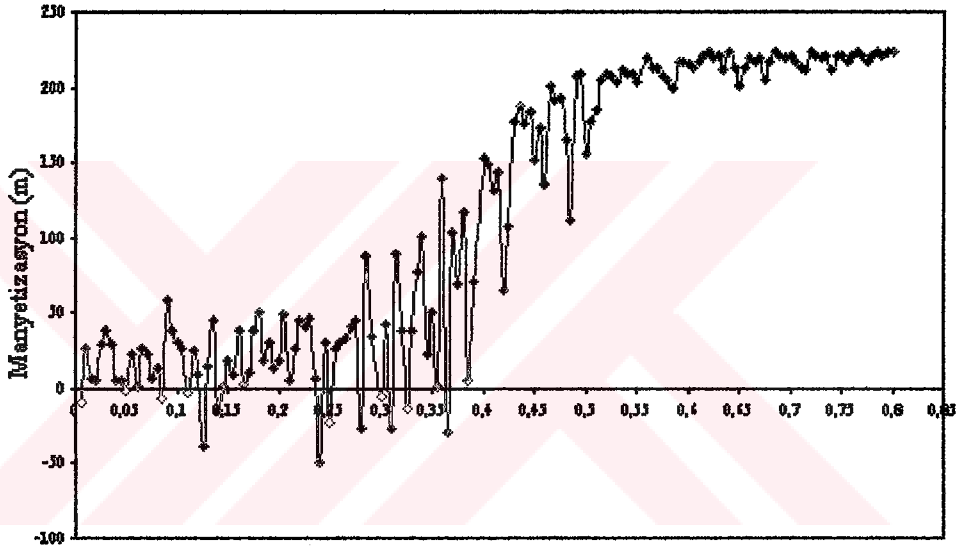
olarak elde edilir.

(a)



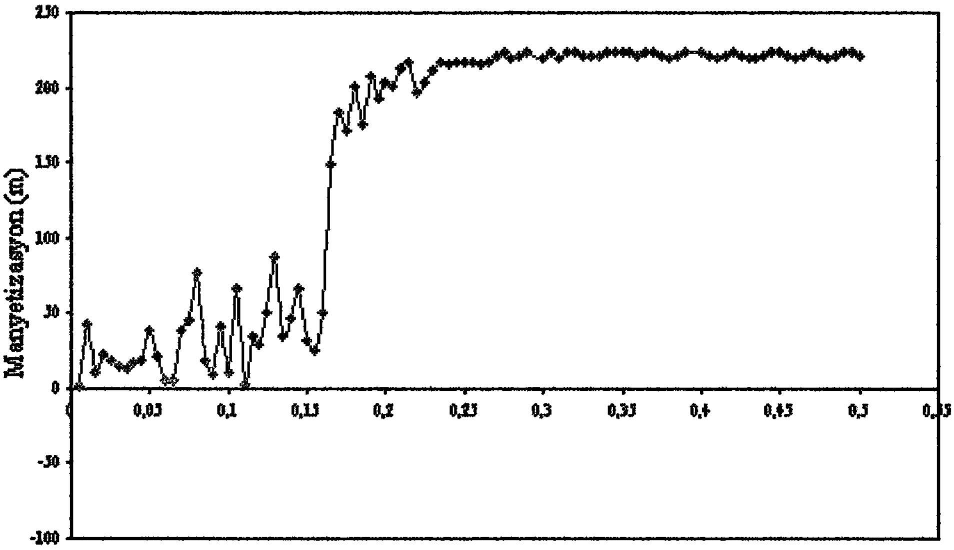
B=1/kT (J=-1; B 0.005'den 1.3'e 0.005 aralıklarla değişiyor.)

(b)



B=1/kT (J=-2; B 0.005'den 0.8'e 0.005 aralıklarla değişiyor.)

(c)



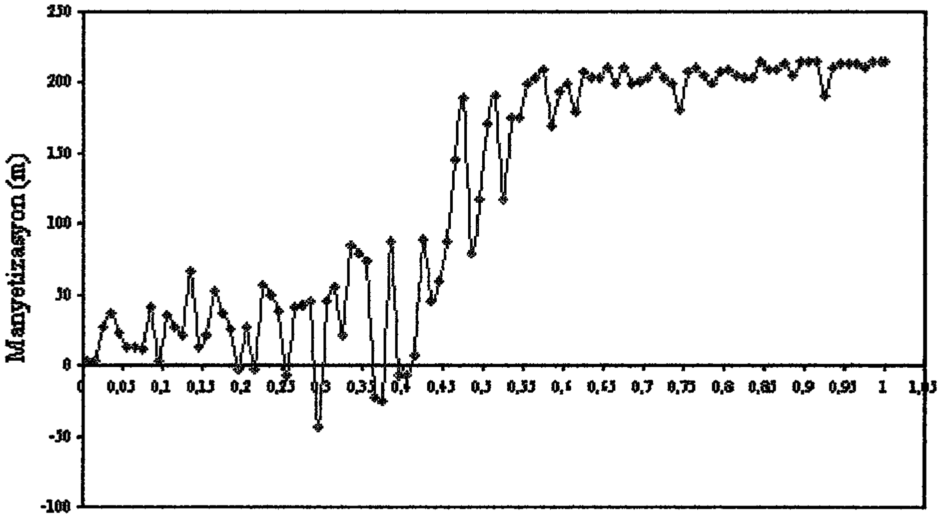
B=1/kT (J=-5. B: 0.005'den 0.5'e 0.005 aralıklarla değişiyor.)

Grafik (1- a, b, c) Monte Carlo Metodu İle İki Boyutta Ferromanyetizma

Daha sonra, birinci kademe komşu spinlerle, ikinci kademe komşu spinleri de hesaba kattığımız takdirde, ne olacağını görmek istedik. Bunun için aynı işlemleri yaptığımızda elde ettiğimiz grafiklerde birinci kademe spinler de elde ettiğimiz aynı J değerindeki grafiklerle karşılaştırdık. İkinci kademe spinlerin ferromanyetizmaya önemli ölçüde katkı sağladıklarını gözlemledik. İkinci kademe komşu spinleri de hesaba kattığımızda paramanyetik durumdan ferromanyetik duruma geçişin daha keskin ve daha yüksek sıcaklıklarda olduğunu gözlemledik. Grafik (2-a, b, c) Bu beklediğimiz bir sonuçtu. Çünkü ele aldığımız spine etki eden spin sayısı artmıştı bu da paramanyetik durumdan ferromanyetik duruma geçişi güçlendirdi. Dolayısıyla spin sistemi de düşük enerjili durumu tercih ettiğinden paramanyetik durumdan ferromanyetik duruma geçiş birinci derecede komşu spinlere göre daha keskin oldu.

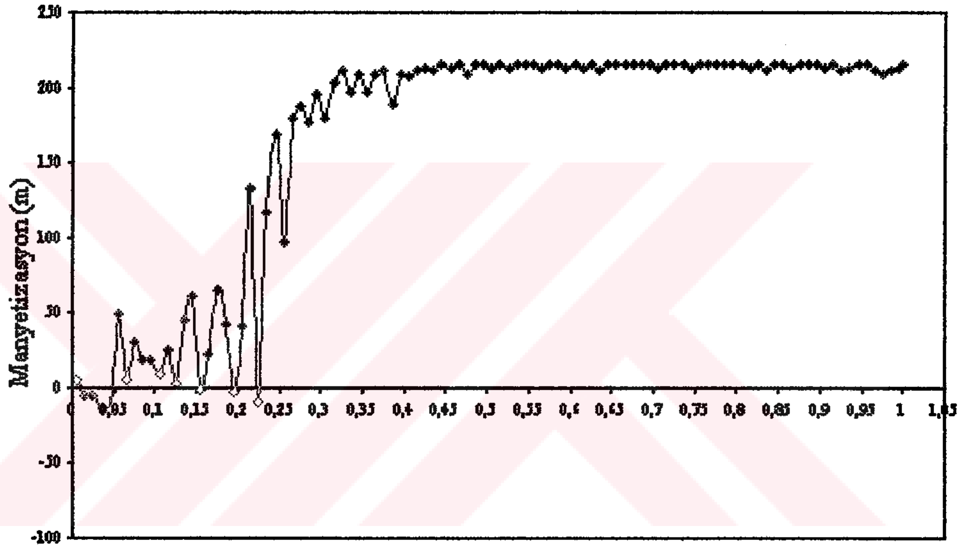
Son olarakta üç boyutlu bir spin sisteminde ferromanyetizmanın nasıl oluşacağını görmek istedik. Bunun için daha önce iki boyutlu ferromanyetik sistem için yaptığımız işlemlerin üç boyutlu uygulaması için ilgili algoritmayı yazdık. Ve bu işlemleri üç boyutlu spin sistemi için tekrarladık. Yapmış olduğumuz bu üç boyutlu tarama işleminde paramanyetik durumdan ferromanyetik duruma geçişin iki boyutta yapılan simülasyonlara göre daha yüksek sıcaklıklarda olduğunu, geçiş bandının onlara göre daha dar ve keskin bir geçiş olduğunu, ferromanyetik duruma geçtikten sonra ortalama spin sayısında fazla değişiklik olmadığını saptadık. Grafik (3-a, b, c) Bu sonuç bizim beklediğimiz bir sonuçtu çünkü üç boyutta ferromanyetik düzenin oluşacağı "mıknatıs" örneğinden dolayı biliniyordu.

(a)



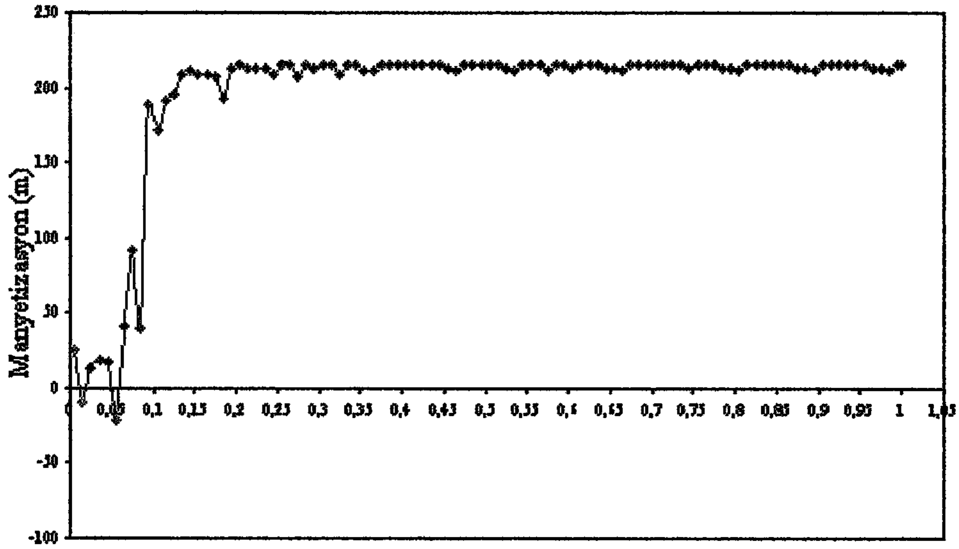
B=1/kT (J=-1, B; 0.005'den 1.0'a 0.01 aralıklarla değişiyor.)

(b)



B=1/kT (J=-2, B; 0.005'den 1.0'a 0.01 aralıklarla değişiyor.)

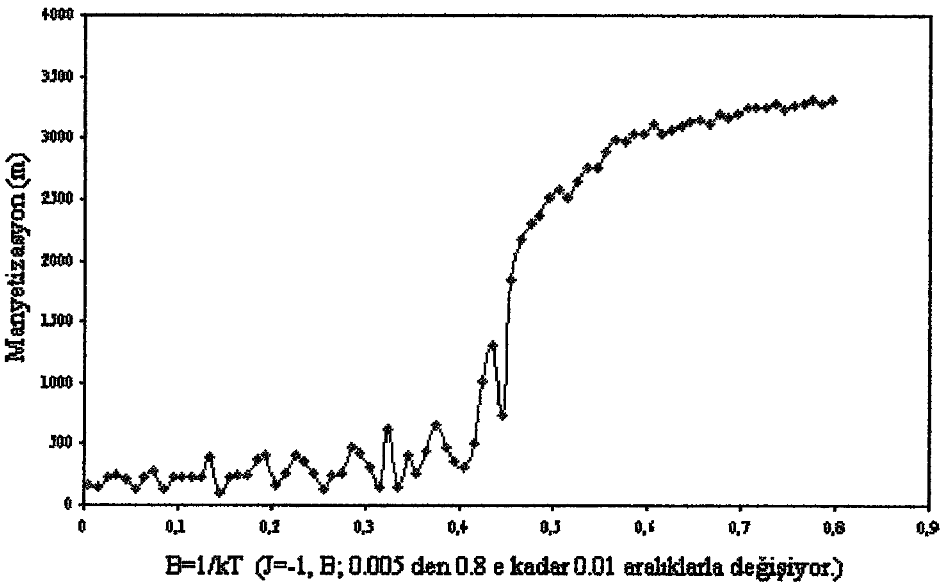
(c)



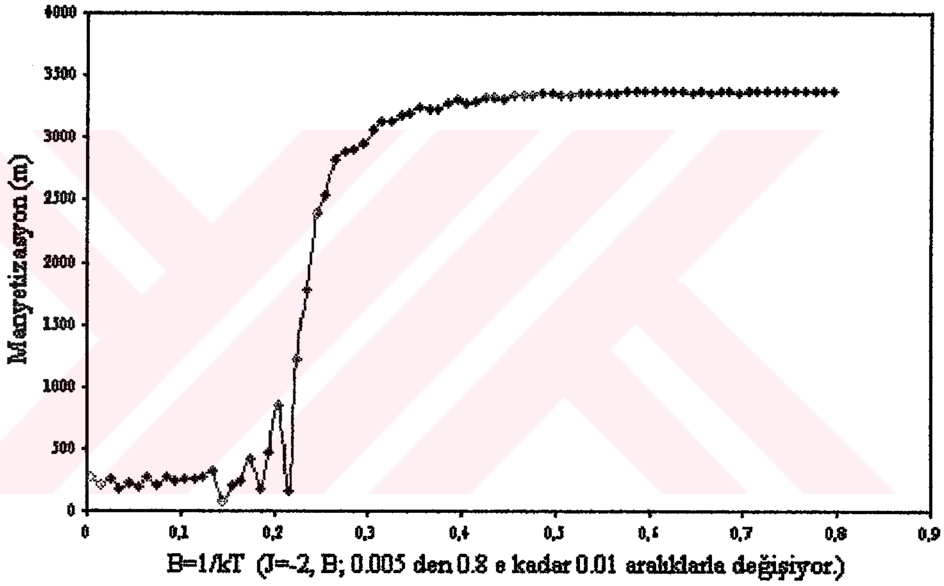
B=1/kT (J=-5, B; 0.005'den 1.0'a 0.01 aralıklarla değişiyor.)

Grafik (2-a, b, c) Monte Carlo Metodu İle İkinci Kademe Komşu Spinlerinde Etki Ettiği İki Boyutta Ferromanyetizma

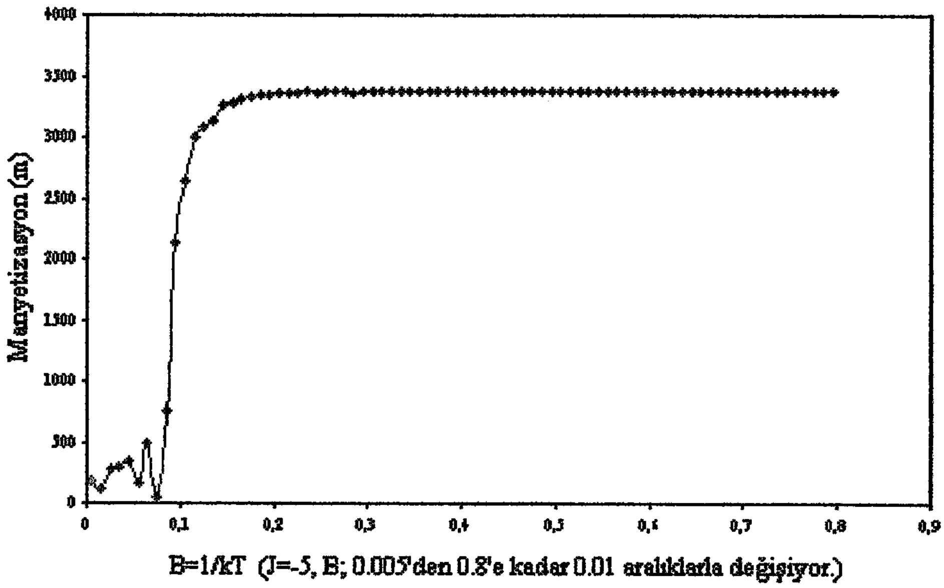
(a)



(b)



(c)



Grafik (3-a, b, c) Monte Carlo Metodu İle Üç Boyutta Ferromanyetizma

BÖLÜM III . FAZ GEÇİŞİ

III . 1 . GENEL BİLGİ

Kristalin sıcaklık veya basınçları değiştikçe bir kristal yapısından diğerine geçiş yapmaları oldukça yaygındır. Mutlak sıfırda kararlı olan bir A yapısı, olabilecek tüm kristal yapıları arasında en düşük iç enerjiye sahip olmalıdır. Bu A yapısının hangisi olacağı basınçla değişebilir, çünkü atomik hacim küçüldüğünde sıkı paketlenmiş yapılar ve hatta metalik yapı daha elverişli hale gelebilir.

Başka bir B yapısı A'ya göre daha alçak frekansta bir yumuşak fonon spektrumuna sahip olabilir. Sıcaklık arttırıldıkça B yapısındaki fonon durumları A'daki fononlara göre daha çok uyarılır. Entropi, doluluk oranı ile artacağı için B yapısının entropisi A'ya göre daha yüksek olur.

O halde sıcaklığın artışına göre kararlı bir A yapısından B yapısına dönüşebilir. T sıcaklığındaki kararlı yapı $F = U - T\,S$ serbest enerjisinin minimumu ile tayin edilir. A'dan B'ye bir geçiş olması için öyle bir T_c sıcaklığı olmalıdır ki;

$F_A\,(T_c) = F_B\,(T_c)$ olsun. Bu sıcaklığa geçiş sıcaklığı (kritik sıcaklık) denir.

Bazı yapısal faz geçişlerinde numunenin makroskopik fiziksel özellikleri çok az değişme gösterir. Ancak, geçiş uygulanan bir gerilmeye bağlı ise kristalin mekanik şekil değişimi geçiş sıcaklığı yakınında çok daha kolay olur, çünkü iki fazın göreli oranı gerilme altında değişecektir. Diğer yapısal faz geçişleri makroskopik elektrik özelliklerinde çarpıcı değişmelere neden olurlar.

III .1.2. Ferroelektrik ve Ferrromanyetik Faz Geçişleri

Ferroelektik geçişler yapısal faz geçişlerinin bir alt grubunu oluştururlar. Bu alt grup kristalinde kalıcı bir dielektrik sabit değerleri sıcaklığa kuvvetle ve anormal bir biçimde bağlıdırlar. Bunlar arasında piezo-elektrik etki, pio-elektrik etki, elektron-optik etkiler sayılabilir.

III. 2 . Landeu Faz Geçiş Teorisi

Ferroelektik bir kristalde ferroelektrik ve paraelektrik durumlar arasındaki birinci dereceden bir faz geçişi, geçiş sıcaklığında satürasyon polarizasyonu değerinin sonlu bir süreksizlik göstermesiyle ayırt edilir. Örneğin normal ve süperiletken durumlar arasındaki veya ferromanyetik ve paramanyetik durumlar arasındaki geçişler ikinci derecedendirler. Bu geçişlerde düzensizlik derecesi, sıcaklık arttırıldığında sürekli bir şekilde sıfıra gider.

Ferroelektrik bir kristalin davranışı için tutarlı termodinamik teori elde etmek için enerjiyi P polarizasyonu cinsinden bir seri açılımı olarak ele almak gerekir. Tek boyutta Landeu serbest enerjisi F şöyle bir seri açılımı yazılabilir.

$$F(P; T, E) = -E P + g_0 + 1/2\, g_2 P^2 + 1/4\, g_4 P^4 + 1/6\, g_6 P^6 + \ldots \qquad (3.2.1)$$

Burada g katsayıları sıcaklığa bağlı olacaktır. E, enerji T, sıcaklık ve P, polarizasyonu temsil etmektedir.

Eğer polarize olmamış kristalde inversiyon simetri merkezi yoksa bu seride P'nin tek kuvvetleri bulunmaz. Ancak tek kuvvetlerin önemli olduğu kristallerin varlığı da bilinmektedir. Serbest enerjinin seri açılımı her zaman mümkün olmayabilir, özellikle geçiş sıcaklığı civarında analitik olmayan terimler işe karışır.

Isısal dengedeki P değeri F'nin minumum olduğu yerdedir ve o halde, uygulanan bir E elektrik alanında denge polarizasyonu için ekstrumum koşulu

$$dF / dP = 0 = - E + g_2 P + g_4 P^3 + g_6 P^5 + \ldots \quad (3.2.2)$$

olur. Burada numunenin ince uzun bir çubuk şeklinde ve uygulanan alanın çubuk eksenine paralel olduğunu varsayacağız.

Ferroelektrik bir durum elde edebilmek için (3.1.1)'deki P^2'li terimin katsayısının belirli bir T_0 sıcaklığında sıfır olması beklenir.

$$g_2 = \gamma (T - T_0) \quad (3.2.3)$$

Burada γ pozitif bir sabittir ve T_0 geçiş sıcaklığına eşit veya daha büyük olabilir. Küçük bir g_2 değeri polarize olmamış örgünün kararsız olduğunu gösterir. g_2'nin sıcaklıkla değişmesi örgünün ısısal genleşmesi ve diğer anhormanik örgü etkileşmelerinden kaynaklanır.

III. 3 . İkinci Dereceden Geçiş

Denklem (3.2.1)'deki g_4 katsayıları pozitif ise g_6 katsayısının katabileceği bir yenilik yoktur ve ihmal edilebilir. Sıfır elektrik alanındaki polarizasyon denklem (3.2.2)'den bulunur.

$$\gamma (T - T_0) P_S + g_4 P_S^3 = 0 \quad (3.3.1)$$

Buna göre, ya $P_S = 0$ veya $P_S^2 = (\gamma / g_4)(T - T_0)$ olacaktır. $T \geq T_0$ için (3.2.1) denkleminin reel kökü ancak $P_S = 0$ da olabilir, çünkü γ ve g_4 pozitif sayılardır. O halde, T_0 Curie sıcaklığı $T < T_0$ için elektrik alanda Landeu geçiş enerjisinin minimum olduğu yerde

$$|P_S| = (\gamma / g_4)^{1/2}(T - T_0)^{1/2} \quad \text{olur.}$$

III. 4. Birinci Dereceden Geçiş

Denklem (3.2.1)'deki g_4 katsayısı negatif ise birinci derece olur . Bu durumda g_6 katsayısını da hesaba katmamız gerekir. F' nin eksi sonsuza gitmesini engellemek için g_6 katsayısı pozitif alınır.

$$\gamma(T - T_0) P_S - |g_4| P_S^3 + g_6 P_S^5 = 0 \qquad (3.4.1)$$

yine, ya $P_S = 0$ veya

$$\gamma(T - T_0) P_S - |g_4| P_S^2 \; g_6 P_S^4 = 0 \qquad (3.4.2)$$

T_c geçiş sıcaklığında paraelektrik ve ferroelektrik durumların serbest enerjileri eşit olur. Yani, $P_S = 0$ için F değeri (3.4.1) ile verilen minimumdaki F değerine eşit olmalıdır.

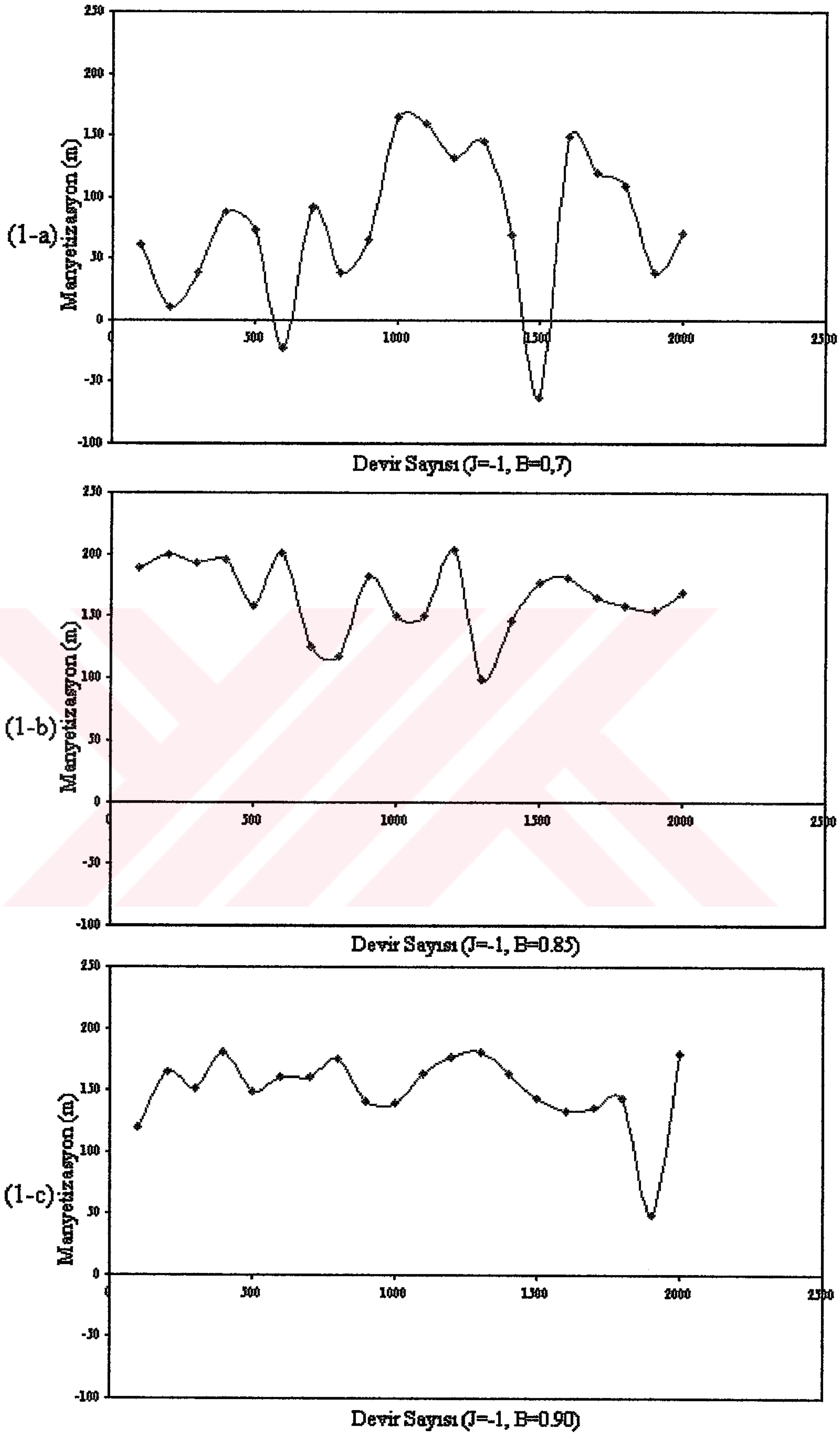
Dielektrik sabit uygulanan elektrik alandaki polarizasyondan bulunur ve denklem (3.2.2)' den hesaplanır. Denge durumunda, geçişin üstündeki sıcaklıklarda P_S^4 ve P_S^6 terimleri ihmal edilebilir. Buna göre;

$E = \gamma(T - T_0) P$ veya $W_T^2 / W_L^2 = \varepsilon(\infty) / \varepsilon(o)$ denklemine göre

$$\varepsilon(T > T_c) = 1 + 4\pi\gamma P / E = + 4\pi / \gamma(T - T_0) \qquad (3.4.3)$$

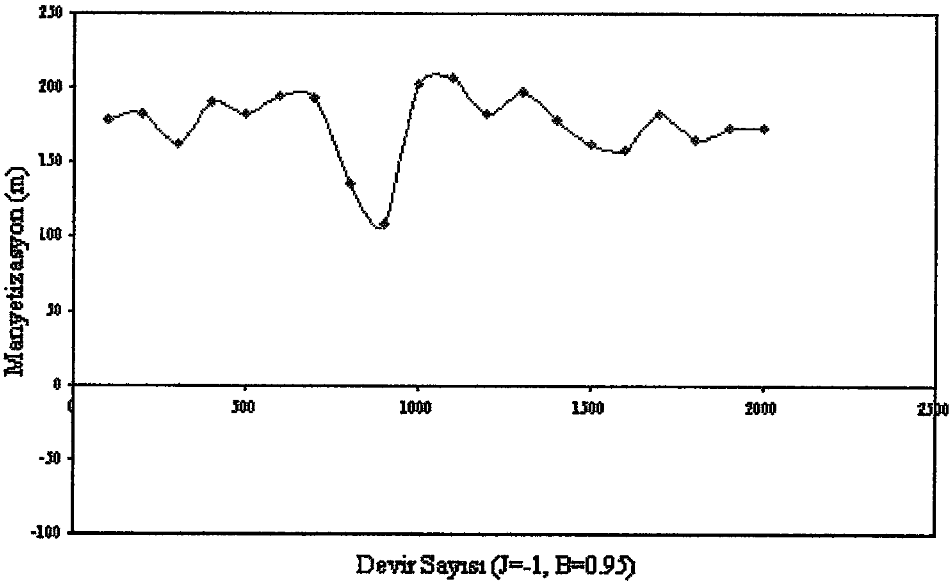
bulunur. Bu sonuç birinci veye ikinci geçiş oluşuna bakılmaksızın doğrudur, ancak, geçiş ikinci derece ise $T_0 = T_c$, birinci derece ise $T_0 < T_c$ olur. T_0 sıcaklığı $g_2 = \gamma (T - T_0)$ denklemleriyle tanımlı olup T_c ise geçiş sıcaklığıdır.

Ferromanyetizmada faz geçişi ile ilgili algoritmayı yazdık. Daha önce elde ettiğimiz iki boyutta ferromanyetik sistemdeki grafiklerden paramanyetik durumdan ferromanyetik duruma geçişin olduğu T_c kritik sıcaklığın sağındaki ve solundaki örneğin manyetizasyonunu inceledik. Spin sisteminin dengeye ulaşmasını (ulaşmamasını) spin topluluğunun belli zaman aralıklarındaki manyetizasyonu ele alınarak gözlendi. Bu işlemleri farklı J değerleri ve aynı J değerindeki farklı sıcaklık değerleri için tekrarladık. Grafik (4 - 5)

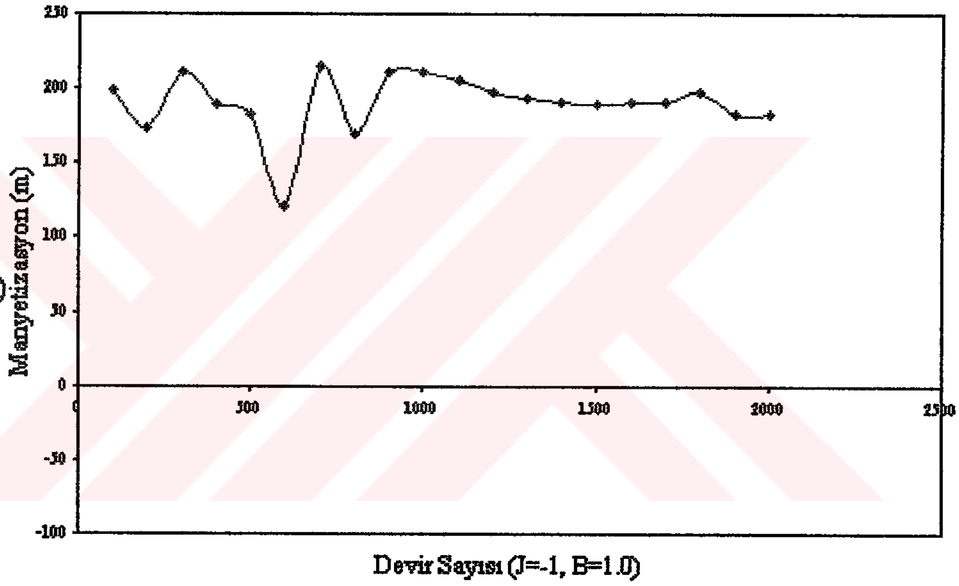


Grafik (4.1- a, b, c) Monte Carlo Metodu İle İki Boyutta Faz Geçiş Grafiği

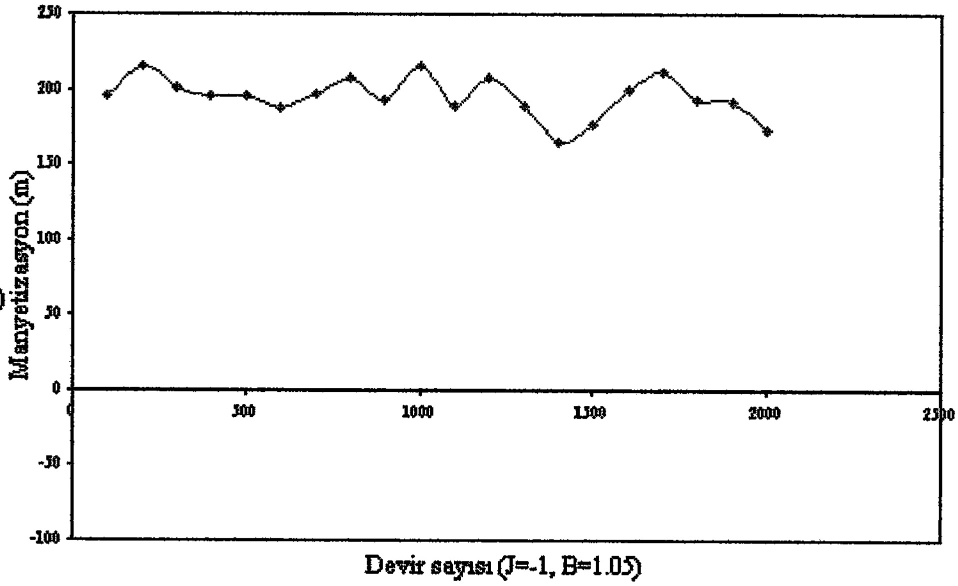
(1-d)



(1-e)



(1-f)



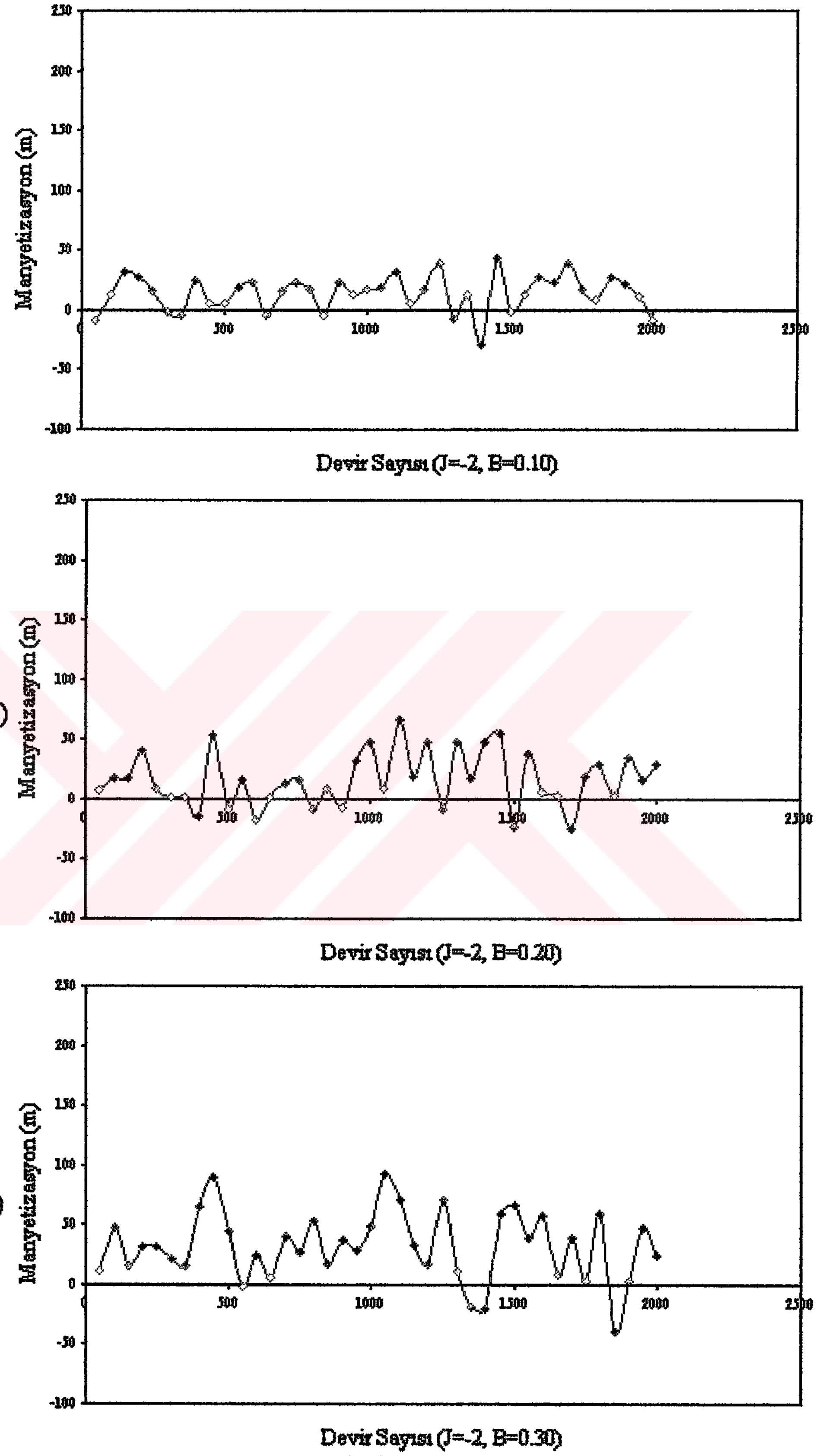
Grafik (4.1- d, e, f) Monte Carlo Metodu İle İki Boyutta Faz Geçiş Grafiği

Grafik (1.a) ‘daki faz geçişini görmek için bir bilgisayar programı yapmamız gerekiyordu, bunu yaptık. J = - 1 için faz geçişini görmek için paramagnetik durumdan ferromagnetik duruma geçişten önce ve sonraki değerlere göre programızı çalıştırdık ve elde ettiğimiz manyetizasyon değerlerinin adım sayısına göre değişim grafiklerini elde ettik. Faz geçişinden önceki sıcaklık değerlerinde manyetizasyon değerlerinde dalgalanmalar olduğunu, faz geçiş sıcaklığında da bu değerlerde dalgalanmalar olduğu ve bundan büyük sıcaklıklarda ise manyetizasyon değerlerinde fazla bir değişiklik olmadığını gözlemledik. Yapmış olduğumuz bu işlemleri Grafik (1.b) içinde tekrarladık. J = - 2 değeri için yapılan bu işlemler sonucunda faz geçişinden önceki değerler için yapılan grafiklerde manyetizasyon değerinde önemli bir artış olmadığı ve genellikle sıfir etrafında dalgalanma olduğunu gözlemledik. Faz geçişinin olduğu ve daha yüksek sıcaklıklarda manyetizasyon değerinin artığını ve belli bir sıcaklık değerinden sonra önemli bir değişikliğin olmadığı gözlemledik. Grafik (4.2.a,b,c,d,e,f)

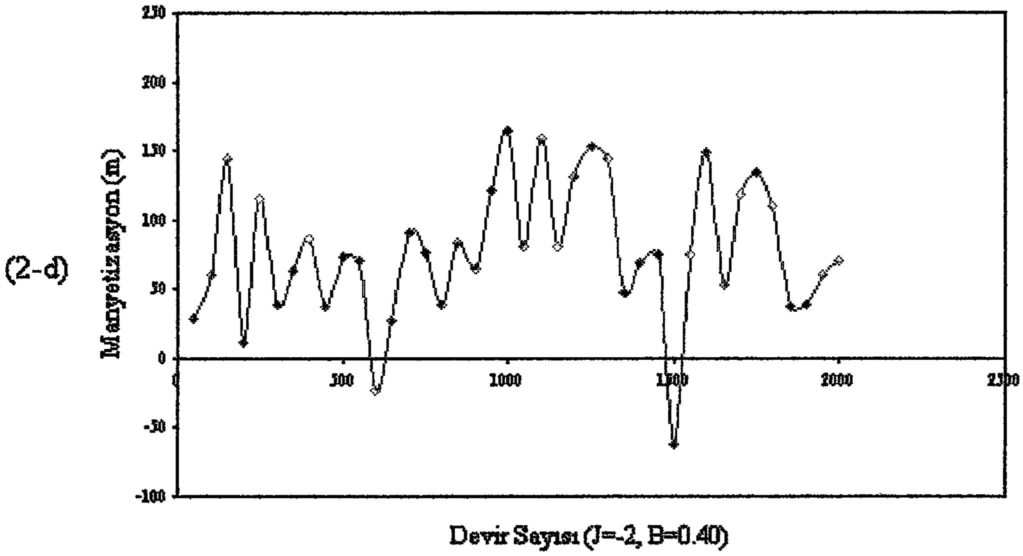
(2-a)

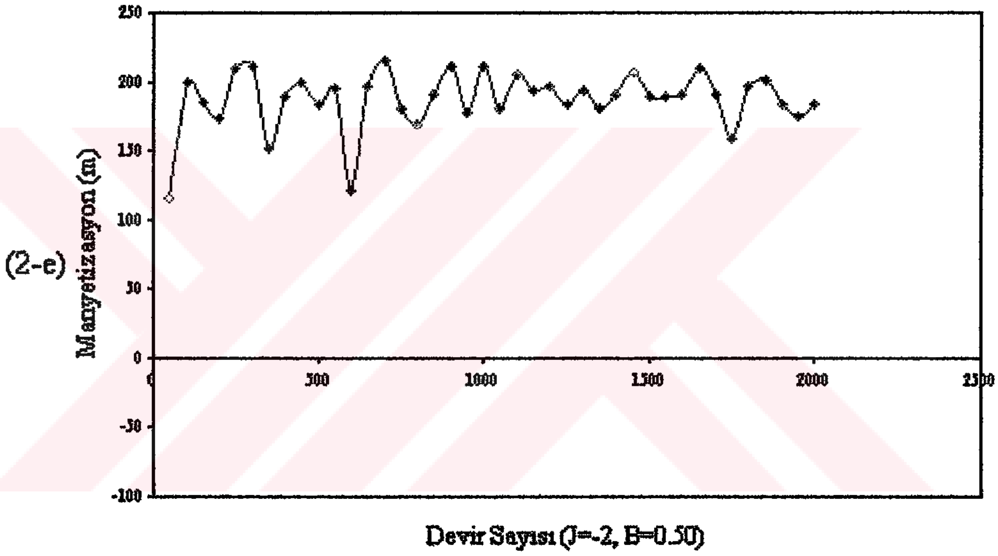
(2-b)

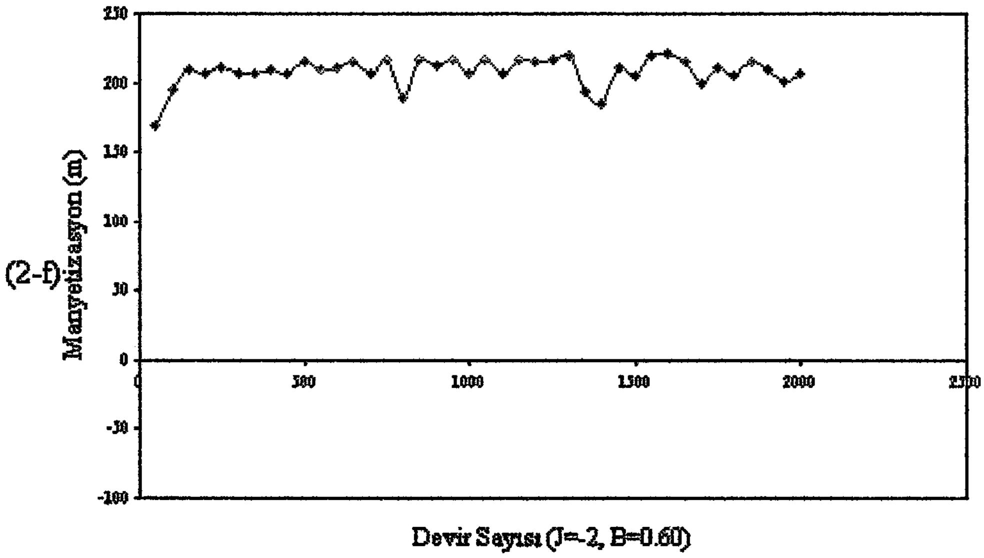
(2-c)



Grafik (4.2-a, b, c) Monte Carlo Metodu İle İki Boyutta Faz Geçiş Grafiği



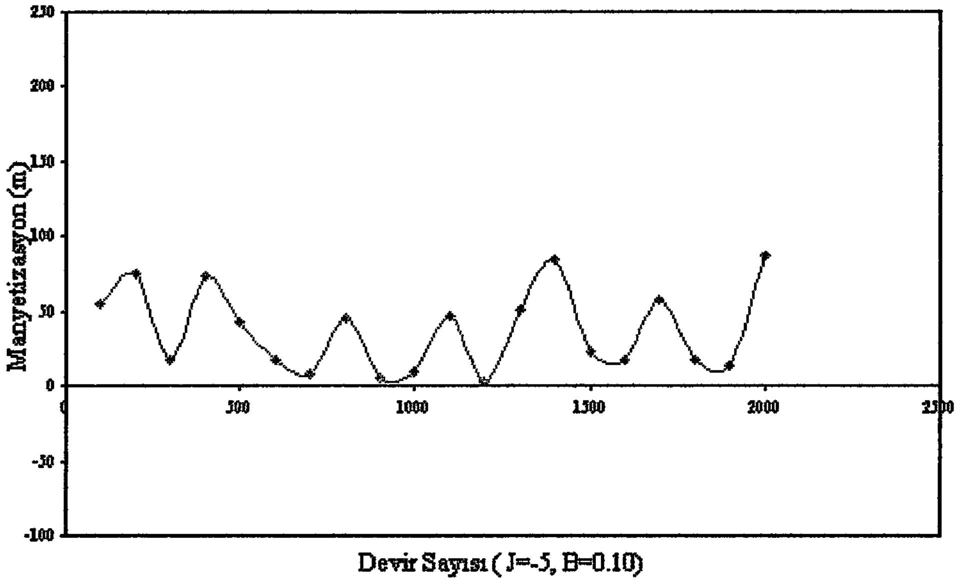




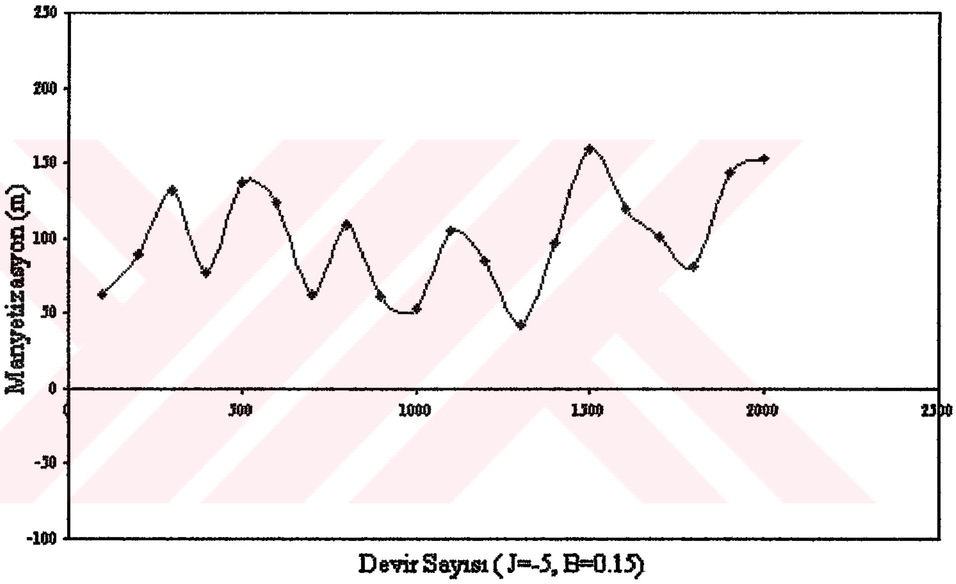
Grafik (4.2-d, e, f) Monte Carlo Metodu İle İki Boyutta Faz Geçiş Grafiği

İki boyutta Monte Carlo Metodu ile yapmış olduğumuz Grafik (1.c)' deki faz geçişini görmek için daha önce J = - 1 ve J = - 2 için yaptığımız işlemleri J = - 5 için tekrarladık. Yapmış olduğumuz işlemler sonucun da elde ettiğimiz grafiklerde etkileşme sabiti J' nin artmasından dolayı manyetizasyon değerinin yüksek sıcaklıklarda bile arttığını ve sıcaklığın düşürülmesiyle manyetizasyon değerinin yükseldiğini saptadık. Faz geçişinin olduğu sıcaklık değeri ve daha düşük sıcaklık değerlerinde artık manyetizasyonda değişiklik olmadığını ve maksimum olduğunu belirledik. Grafik (4.3.a, b, c, d, e, f)

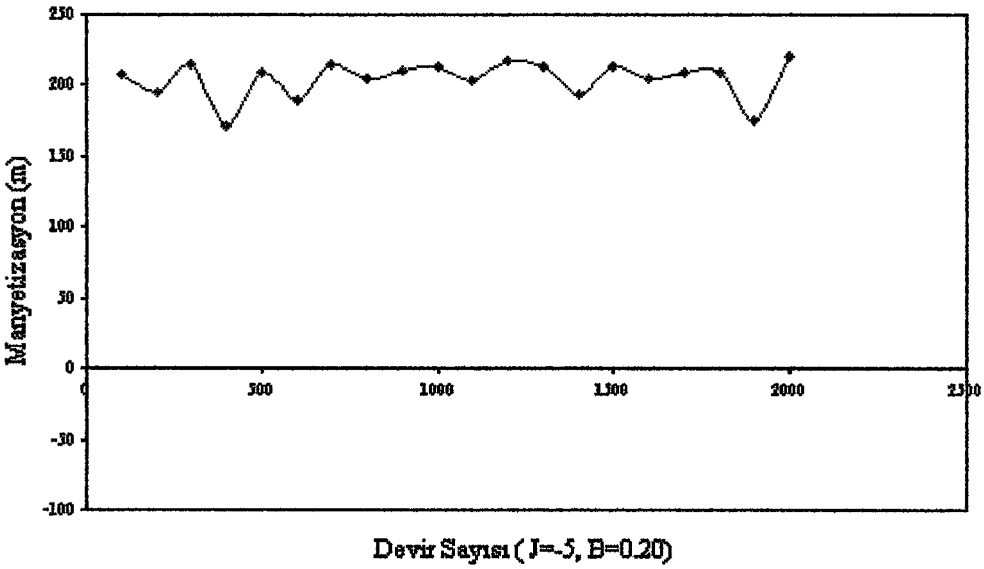
(3-a)



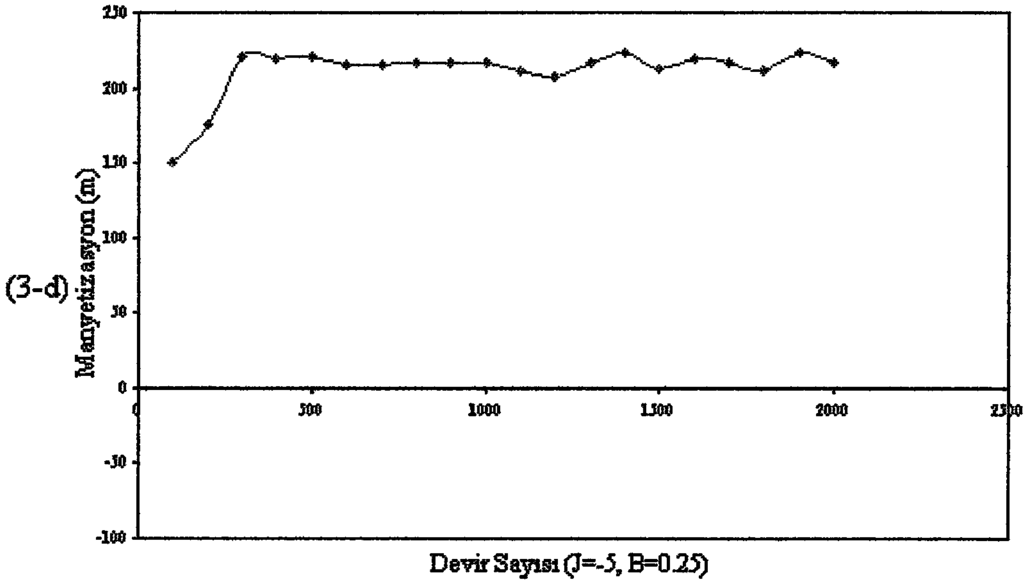
(3-b)

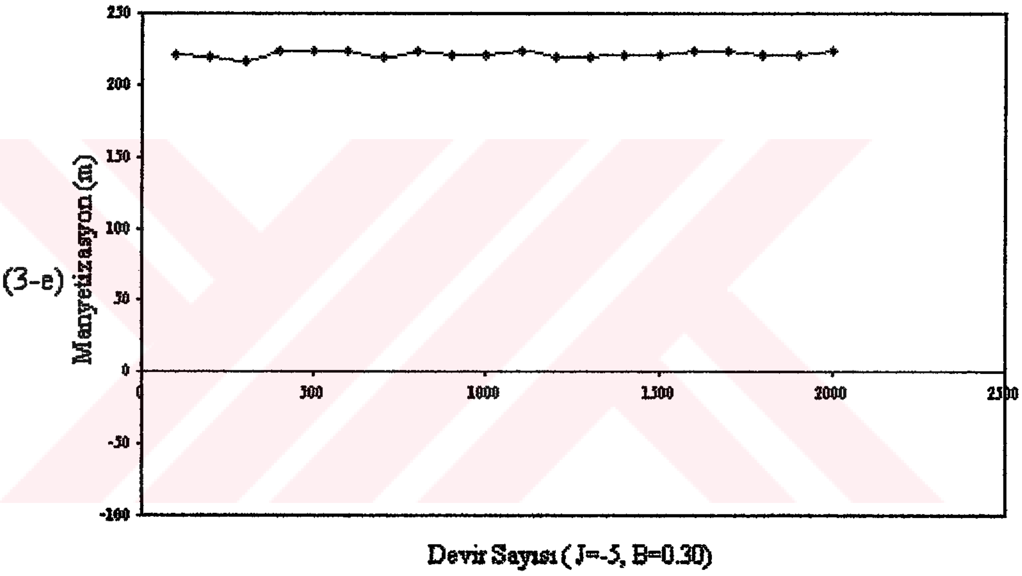


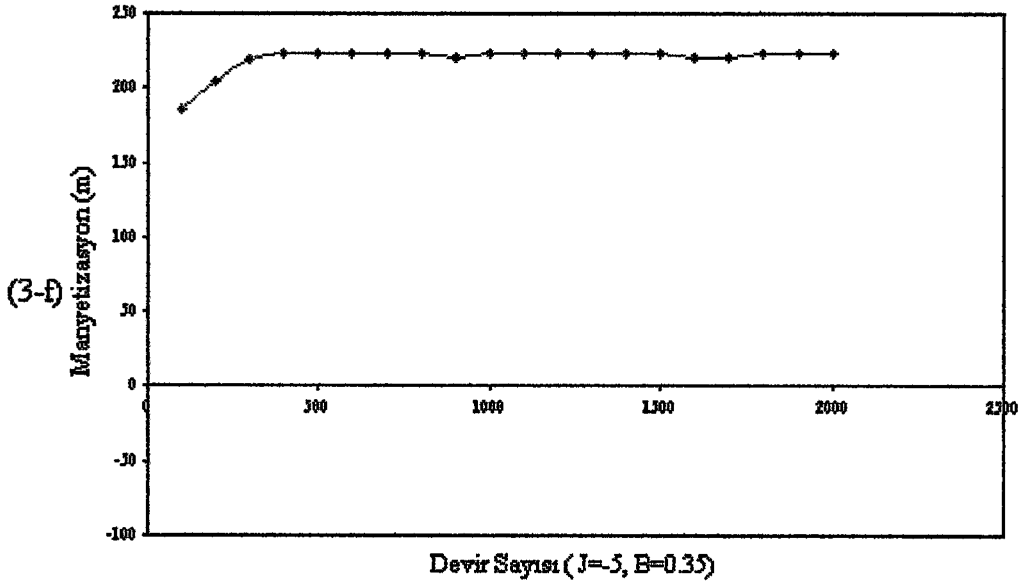
(3-c)



Grafik (4.3-a, b, c) Monte Carlo Metodu İle İki Boyutta Faz Geçiş Grafiği



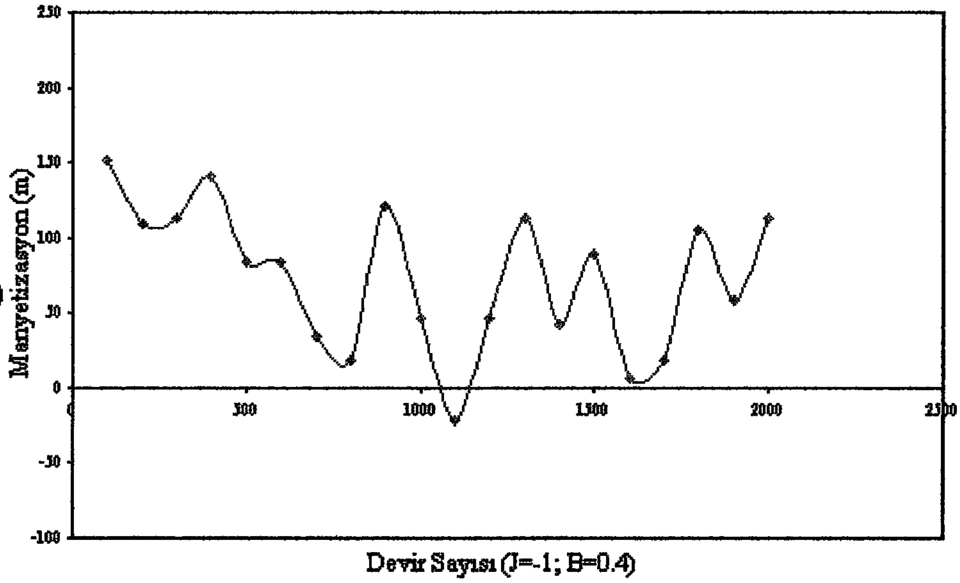




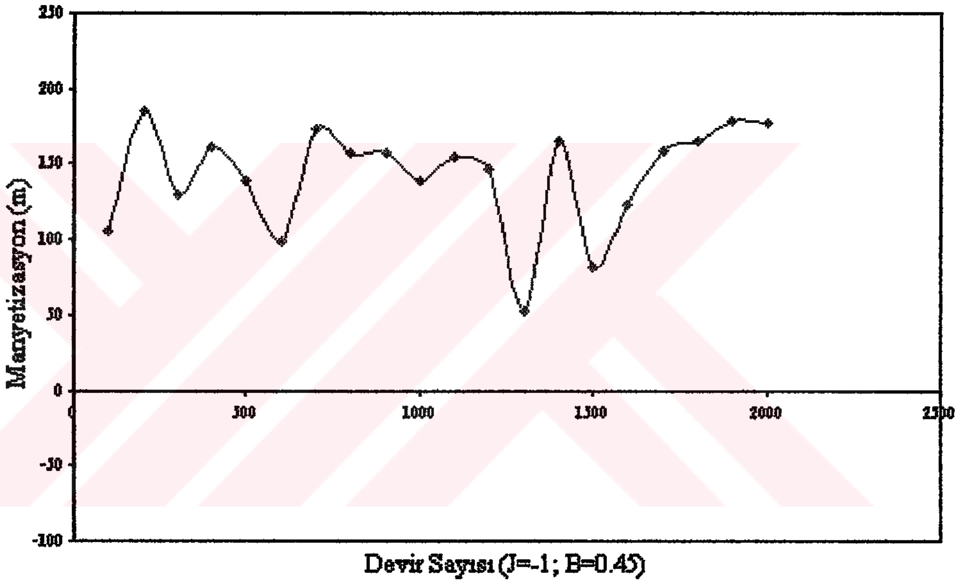
Grafik (4.3-d, e, f) Monte Carlo Metodu İle İki Boyutta Faz Geçiş Grafiği

İki boyutta en yakın komşu spinlerin etkileşmesi ile oluşan ferromanyetik durumdaki faz geçişlerini inceledikten sonra iki boyutta en yakın birinci kademe ve ikinci kademe spinlerin de etki ettiği durumda faz geçişinin nasıl olacağını görmek istedik. Bunun için daha önce yaptığımız işlemleri tekrarladık. Grafik (2.a)' daki J = - 1 değeri için faz geçiş grafiklerini elde ettik. Grafik (5.1.a, b, c, d, e, f) Bu grafiklerde en yakın komşu spinlerin etki ettiği duruma göre manyetizasyon değerlerinde artma olduğunu belirledik.

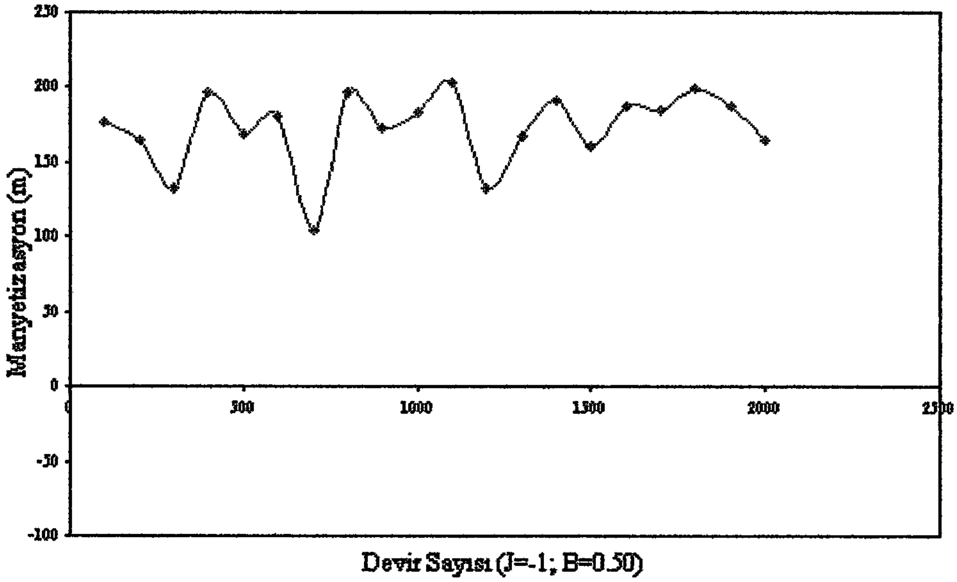
(1-a)



(1-b)

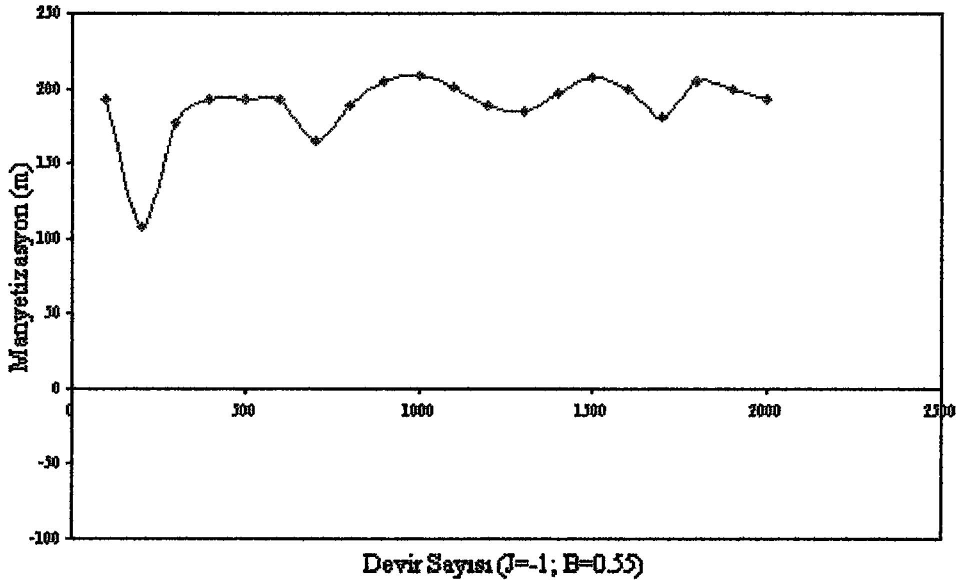


(1-c)

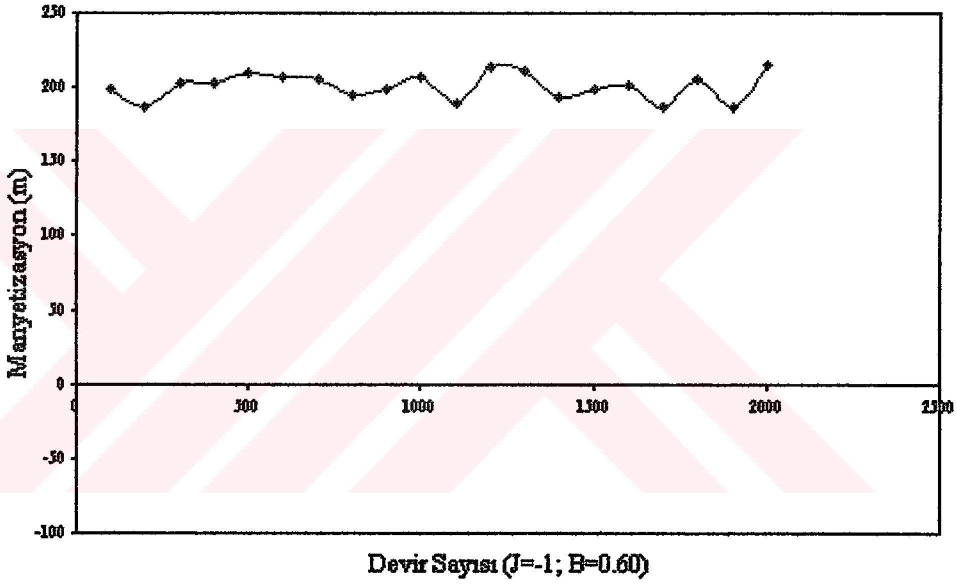


Grafik (5.1-a, b, c) Monte Carlo Metodu İle İkinci Kademe Komşu Spinlerinde Etki Ettiği İki Boyutta Faz Geçiş Grafiği

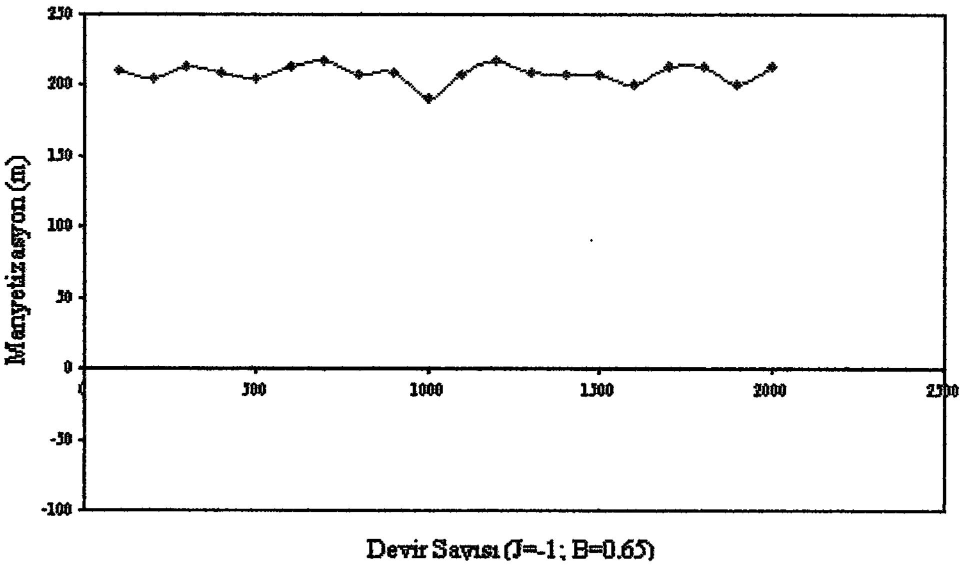
(1-d)



(1-e)



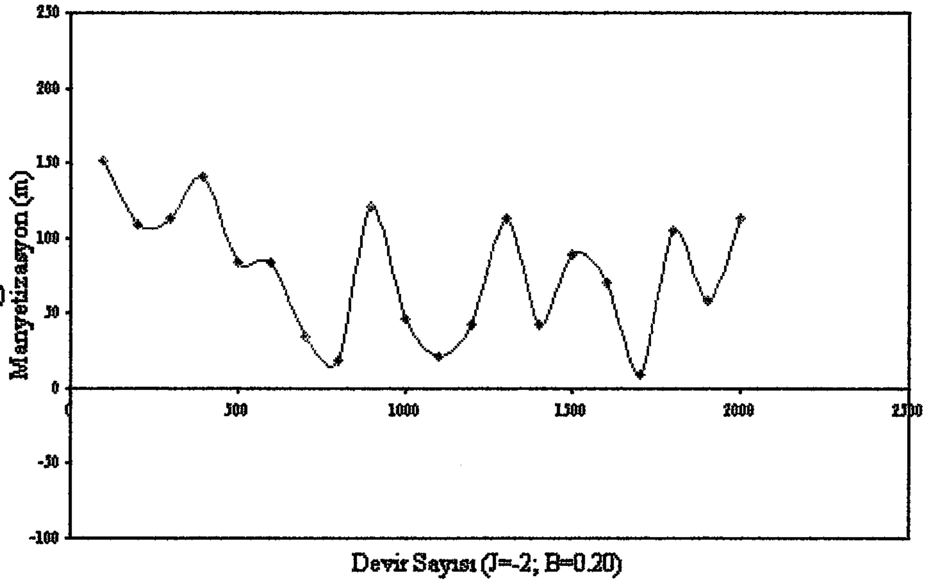
(1-f)



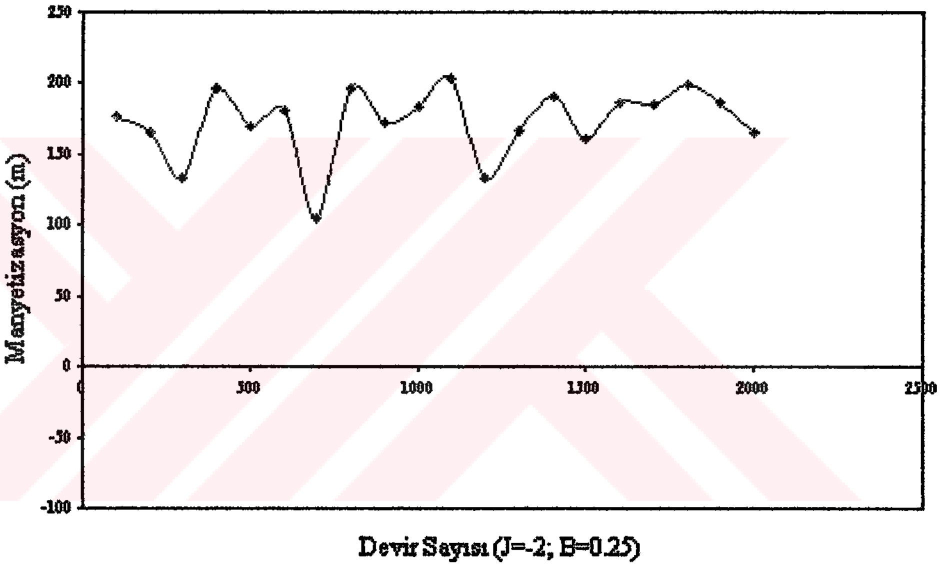
Grafik (5.1-d, e, f) Monte Carlo Metodu İle İkinci Kademe Komşu Spinlerinde Etki Ettiği İki Boyutta Faz Geçiş Grafiği

J = - 1 için faz geçiş grafiklerini başarı ile elde ettikten sonra J = - 2 için faz geçiş grafiğini görmek istedik. Grafik (2.b)' deki faz geçiş sıcaklığı ve ondan önce ve sonraki sıcaklık değerleri için manyetizasyon değerlerini elde ettik. Daha sonra manyetizasyonun devir sayısına göre değişim grafiklerini elde ettik. Grafik (5.2.a, b, c, d, e, f) Etkileşme sabiti arttığı için manyetizasyon değerlerinde de artış olduğunu saptadık. Manyetizasyon değerlerinin faz geçiş sıcaklığı ve sonraki sıcaklık değerlerinde fazla değişmediğini gözlemledik.

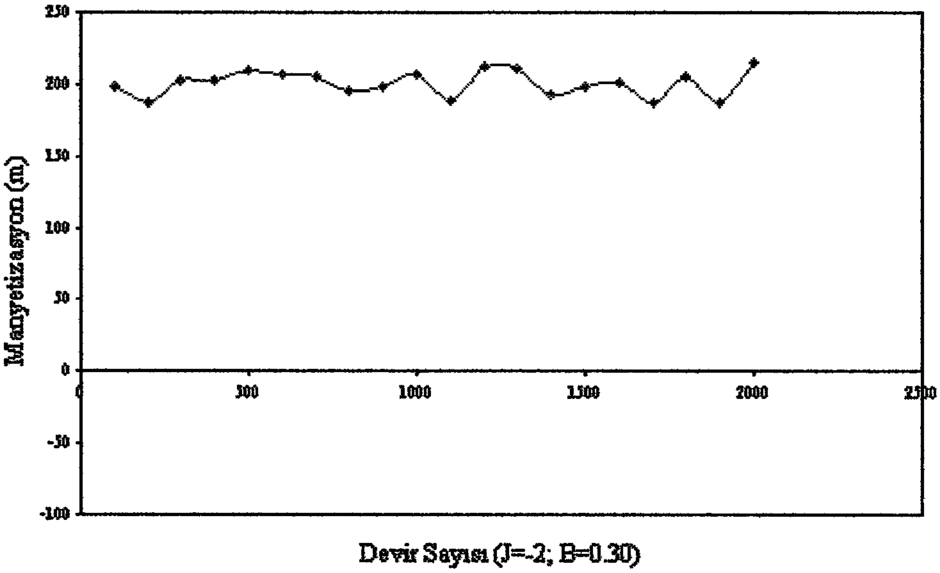
(2-a)



(2-b)

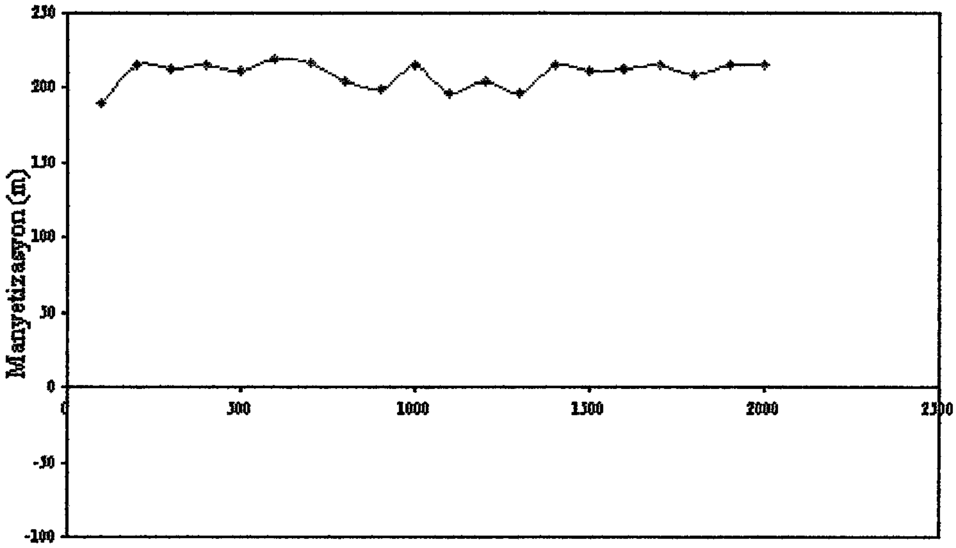


(2-c)



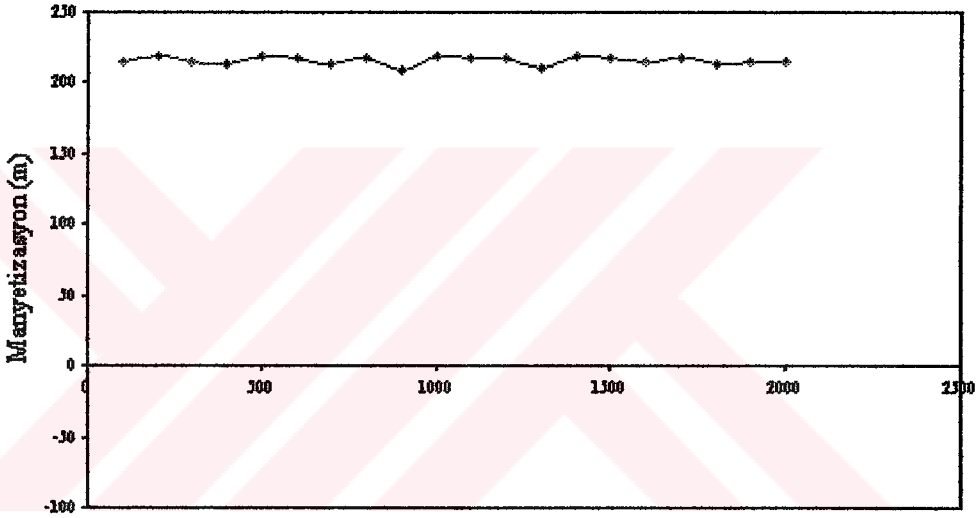
Grafik (5.2-a, b, c) Monte Carlo Metodu İle İkinci Kademe Komşu Spinlerinde Etki Ettiği İki Boyutta Faz Geçiş Grafiği

(2-d)



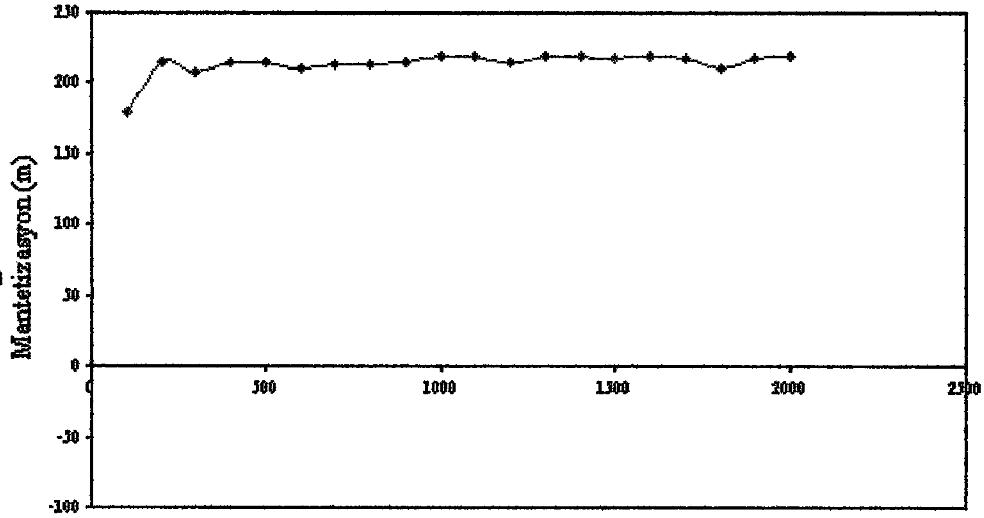
Devir sayısı (J=-2; B=0.35)

(2-e)



Devir Sayısı (J=-2; B=0.40)

(2-f)

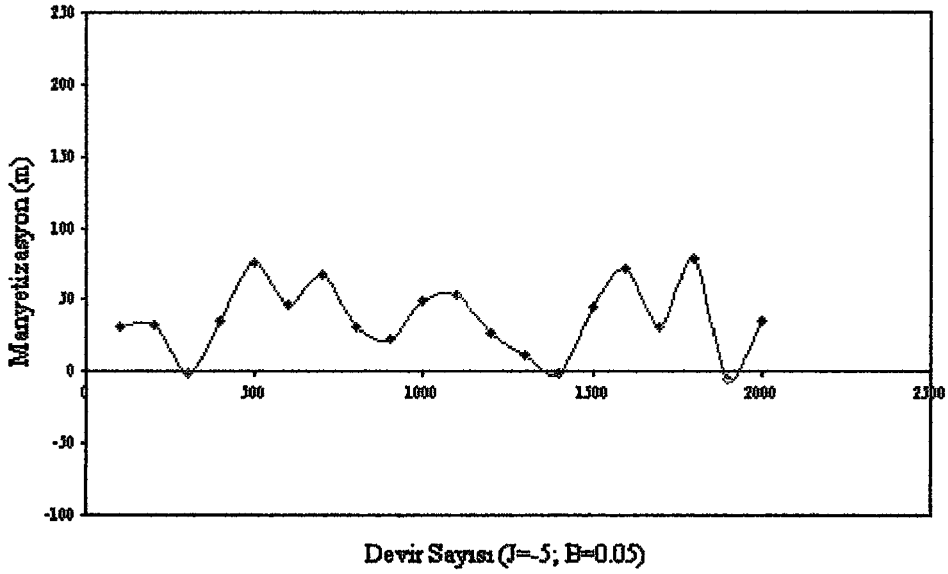


Devir Sayısı (J=-2; B=0.45)

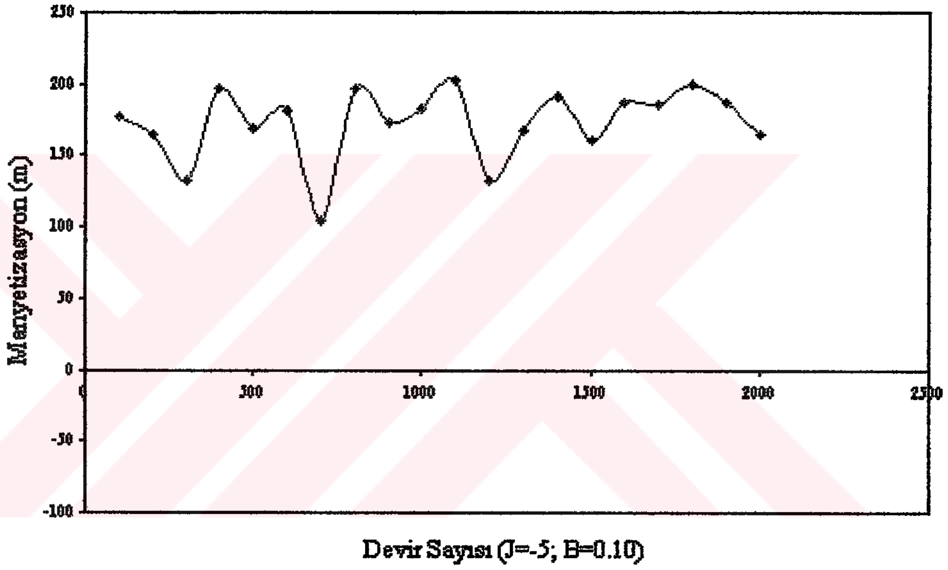
Grafik (5.2-d, e, f) Monte Carlo Metodu İle İkinci Kademe Komşu Spinlerin de Etki Ettiği İki Boyutta Faz Geçiş Grafiği

J = - 1 ve J = - 2 değerleri için faz geçiş grafiklerini elde ettikten sonra son olarak J değerinin –5 olması durumunda faz geçişindeki değişimi incelemek istedik. Grafik (2.c)' deki verilere göre daha önce yapmış olduğumuz işlemleri tekrarladık. Bunun sonucunda faz geçiş grafiklerini elde ettik. Grafik (5.3.a, b, c, d, e). Bu grafiklerde etkileşme sabiti J' nin büyük olmasından ve ikinci kademe spinlerin de etki etmesinden dolayı manyetizasyon değerlerinin maksimum olduğu ve ihmal edilebilecek kadar az bir dalgalanmanın olduğunu saptadık. Buradan büyük J değerlerinde faz geçişinin daha güçlü olduğunu, paramanyetik durumdan ferromanyetik duruma geçişlerde geçiş bandının daha dar bir aralıkta olduğunu belirlemiş olduk.

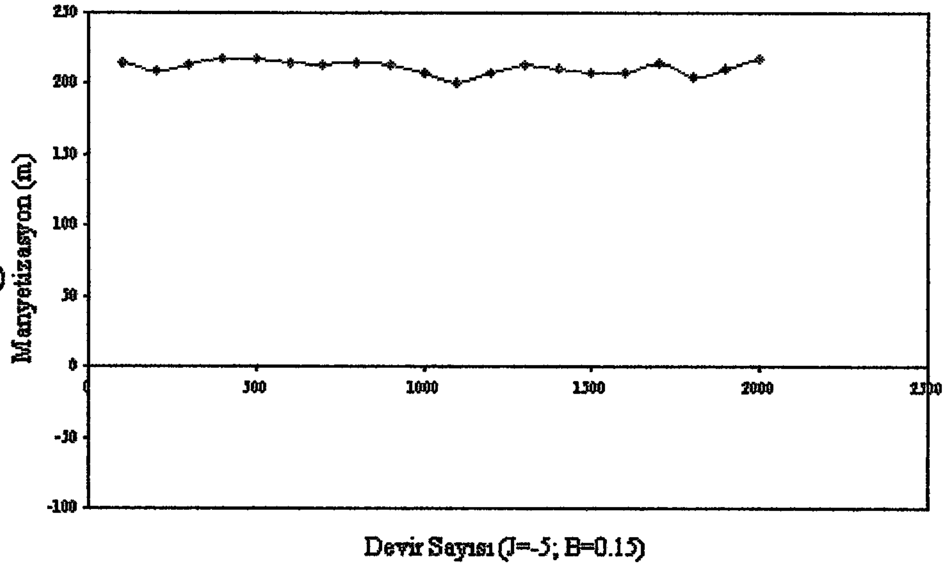
(3-a)



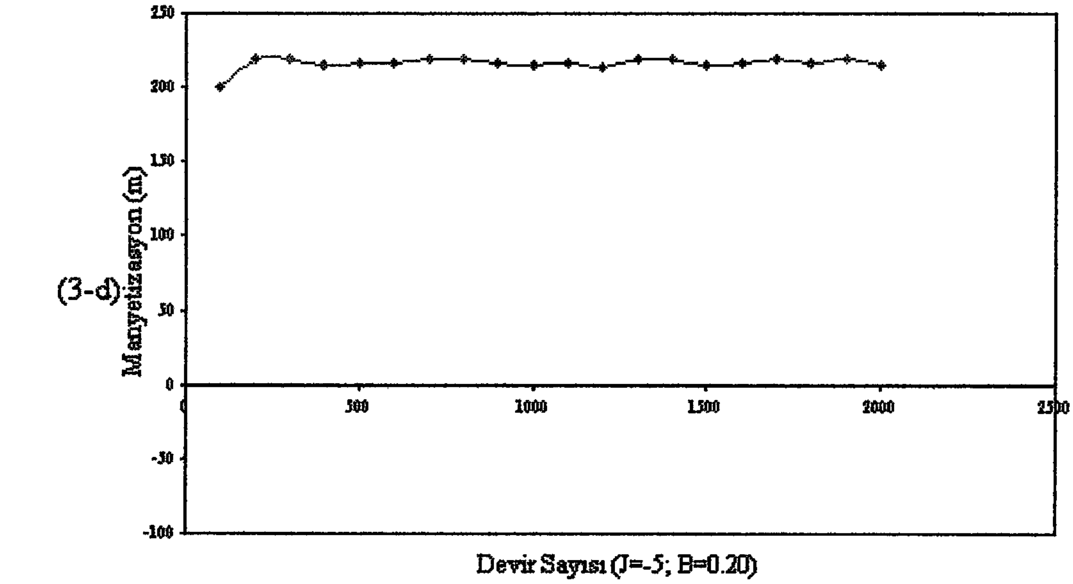
(3-b)

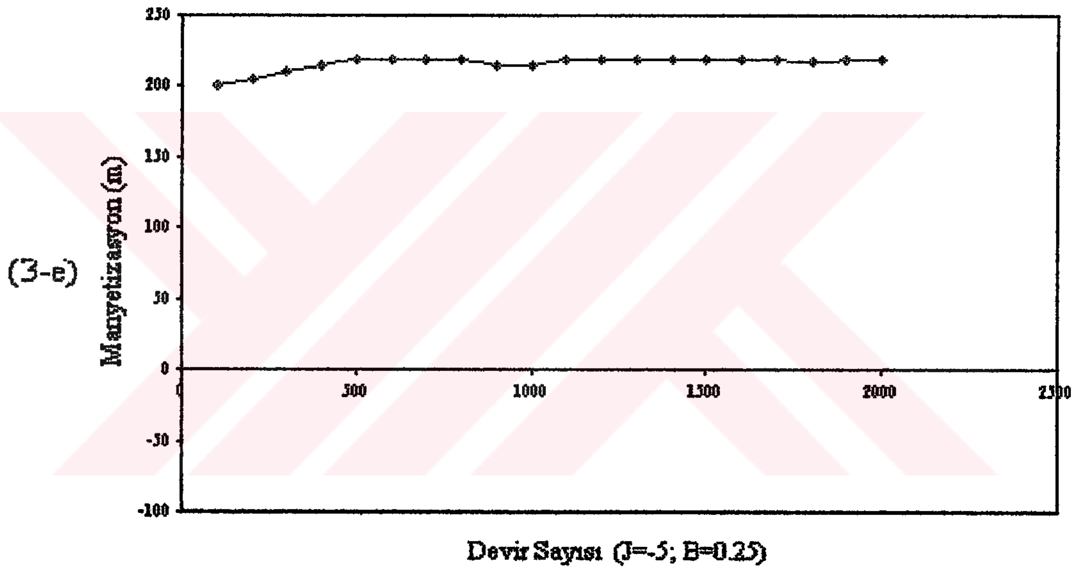


(3-c)



Grafik (5.3-a, b, c) Monte Carlo Metodu İle İkinci Kademe Komşu Spinlerin Etki Ettiği İki Boyutta Faz Geçiş Grafiği





Grafik (5.3-d, e) Monte Carlo Metodu İle İkinci Kademe Komşu Spinlerinde Etki Ettiği İki Boyutta Faz Geçiş Grafiği

BÖLÜM IV. SONUÇLAR VE YORUMLAR

Bizim bu çalışmadaki amacımız, öncelikle iki boyutlu ferromanyetik bölgelerin gelişimini Monte Carlo Metodu ile incelemek ve buna bağlı olarak sistemin fiziksel özelliklerini belirlemekti. Bunun için ilk önce iki boyutlu 15 x 15 kare matristen oluşan rasgele spin sistemi ele aldık. Spin sistemini yazmış olduğumuz algoritmaya göre sistem dengeye gelene kadar taradık. Yukarı yönde olan spinleri "+", aşağı yönde olan spinleri "–" sembolleriyle adlandırdık ve bu sistemde Monte Carlo Metodu ile iki boyutta feromanyetik bölgelerin oluşumunu ve bu bölgelerin gelişimini izledik. Burada incelediğimiz sistemde "+" ve "-" durumda olan spin sayılarının ve bölgelerin yavaş yavaş değişerek yukarı yönde bulunan "+" durumundaki spinlerin (bazı sistemlerde "-" sayısında da artış olabilir) sayısının arttığını gözlemledik. Bu aşamadan sonra + ve – durumundaki spinlerin sayılarında bir değişiklik olmadığını gözledik. Bu durum paramanyetik durumdan ferromanyetik duruma geçiştir. İşte bu değişimin yavaşladığı hatta durduğu durumu denge durumu olarak aldık. Böylece aşama aşama spin sistemindeki ferromanyetik bölgelerin gelişimini inceledik. Grafik (7.a, b, c, d,). Bir boyutlu sistem için ferromanyetik düzeni elde ettik. Fakat, bir boyutlu sistemde her bir spinin sadece iki komşu spini olmasından dolayı sistemin manyetize olmadığını gözlemledik.

Etkileşme sabiti J' yi –1, -2, -5 alarak spin için en yakın komşularını etki ettirerek sistemi inceledik. Ayrıca, her bir spin için ikinci komşu spinlerle olan etkileşmeleri de hesaba katarak sistemi bir kez daha simüle ettik. Doğal olarak bu etkileşmeler, spine etki eden spinlerin artması ve her birinin ferromanyetizma enerjisine katkıda bulunmasından dolayı önemli bir ölçüde ferromanyetizmaya katkıda bulunduklarını gözlemledik.

```
m=49
- - + - - - - - - - + + + + -
- + + - - - + + - + - + + + +
- - + - - - - + - - + - + + +
- + - - - - - + + - + + + + +
+ - + - - - + + + + + + - + +
+ - - + + - - + + + + + + + +
+ + + + - - + + + + + - - + +
+ + + + + + + + + + - - - - +
+ + + - - + + + + + + + + + +
- - - - - - - - + + + + + + +
- - + + + + + + + - + + + + +
+ + + + - - - - - - - - - + +
+ + + + + + - - - + - - + + +
+ + + + + + - - - + + - + + +
- + + + - - - - - + + - + - +
```

```
m=57
- - + + + + + - - - + + - - -
- - + + + + + + - + + + + + +
- + - - + - + + - + + + - + +
- + + + + - + - - + + + + + +
- - - - - - - - - - - - + + +
- - - - - + + - - + - + - + +
+ + - + - + + - + + - - - - +
- + + + + + + - + + - + + + +
+ + + + + + + + + + - + + + +
+ + + + - - + - - - - - + + +
+ + + - - + + + - - - - - - +
+ - - + - + + + - + + - + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + - + + - - - + + + + - +
- + + + + - - - - + + + + - +
```

```
m=17
- - - + - + - - - + + + - - -
- - + - - - + + + + + + + + +
+ + - + + + + + + + - + + + +
+ + - + + + + + + + - + + - +
- + + + + - - + + + + + + + +
- + + + + - - + + + + - - - +
- + + - + + - - - + + - - - +
+ - - - + - - - - - - - - - +
+ - - - - - - - - - - - - + +
+ + - - - - + + + + + - - - +
+ + - - - - - - + + - - - + +
+ + + - - - - - - - - - - + +
+ + + + - - - - + - - - - - +
+ - + + - - + + + + + + + + +
- - + - - - + + + + + + + + +
```

```
m=59
- + + - - - + + - + - + + + +
+ + + + - - - - - - - + + + +
- + + + - - + + - - - - + + +
+ + + - - + - + - + + + + + +
+ + + - - + + + + + + + + + +
- + - - + + - - + + + + + + +
+ + + + + + + - - - + + + + +
+ + + - + + + + - + + + + + +
+ + + - - + + + + + + + + + +
+ + + + + + - - + + + - + + +
+ - + + - - - - - + - + + + +
+ - + - - - - + - - - - - + +
+ + + - - - - + + - - - - + +
+ + + + - - + + - - - - - - +
- - + - - + + - - - - - + + +
```

```
m=-21
- + + + + + + + - - - - - + -
+ + + + - - - + + - - - - + +
+ + + + - - - + + + - - - + +
+ + + - - - - - - - + - - + +
+ - + - - - - - - - - - - + +
+ - + - + - - - - - - - + + +
+ - - - + - - - - + - - + + +
- - - - - - - - - + - + + - +
- - - - + + - - + + + - + + +
- - - - + + - - - - + + + + +
- - + - - + - - - - - + + + +
+ + + + + + + - - - + + - + +
+ + + - - - - - - - - + + - +
+ + + + + - + + - - - - - - +
- + - + - + + - - - - - - - +
```

```
m=25
- - - + - - - - + + + - - - -
- + - + - - - - - - + - - + +
+ + - + + - - - - - + + - - +
+ + + + + + + + - - - - - - +
+ + + + + + + - - - - - - + +
+ + + + + + - - - + + - + + +
+ + + + + + - - - - + + - + +
+ - - - + + + - - - - + + + +
- - - - - - + - - + - + + + +
+ + + + + - - - - + + + + + +
+ + + + + + + - - - + + + + +
+ + + + + + + + + + - + + + +
+ - - + - - + - + - - + + + +
+ - - - - - - + + + - - - - +
- - - - - - + + + + - - - + +
```

Şekil (7.a) **J = - 2, B = 0.30 değeri için 200 devirde bir + ve – spinlerin birbirleri ile etkileşimlerinin değişiminin matrissel gösterimi.**

```
m=165
- - - - + + + + + + + + + + +
- - - - - - + + + + + + + + +
- - - - - - + + + + + + + + +
+ + - - + + + + + + + + + + +
+ + + - + + + + + + + + + + +
+ + + - + - - + + + + + + - +
+ + + + + + + + + + + + + - +
+ + + + + + + + + + + + + + +
- + + + + + + + + + + + + + +
- + + + + + + + + + + + + + +
- + - - + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
- + + + + + + + + + + + + + +
```

```
m=149
- + + + + + + + - + + - + + +
+ + + + - + + + + + - - + + +
- + + + + + + + + + + + + + +
- - + + - + + + + + - + + + +
+ - + + + + + + + + + + - - +
+ - + + + - + + + + + + + + +
- + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
- - + + + - + + + + + + + + +
+ - - - + + + - + + + + + + +
+ + - - - + + - - + + + + + +
+ + - - - + + + + + + - + + +
+ + + - - + + + + - - + + + +
- + + + + + + + + + + + + + +
```

```
m=131
- - - - + + + - + - + - - - +
- - - - + + + + + + + + + - +
+ - - + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + - + + - +
+ + + + + + - + + + - - + - +
+ + + + + + + + + - - - + + +
+ + + + + + + + - - - - + + +
+ + + - + + + + + - - + + + +
+ + + - + + + + + - - + + + +
+ + + + + - + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + - + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + - + + + + + + + + + + +
+ + + + + - + - + + + - - + +
- + + + + + - - - + - + + + +
```

```
m=109
- - - - - + + + + + + + + - -
+ - - - - + + - - + + + + + +
+ - - + + + + - + + + + + + +
- + + + + + + + + + + + + + +
- - - + + + + + + + + + + - +
- - + + - + + + - + + + + + +
+ - + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + - + + + + - + +
+ + + + + + + - + + + + + + +
+ + + + + + + - - - - + + + +
+ + + + + + + - - - - + + + +
+ + + + + + + + - - + + + + +
+ + - - + + + - - - + + + + +
+ - - - - + - - - - + + + + +
- - - - + + - - + + + + + + +
```

```
m=69
- - - - - + + - - + - - + + +
+ - - - - - - - - - - - + + +
+ + + - - - - + - - - + + + +
+ + + + - - - + - - - + + + +
+ + - + - - - - - - - - + + +
+ - - - - - + + + - - - + + +
+ + - - - + - - + + + + + - +
- - - - + + - - + + + + + + +
- + - - + + - - + + + + + + +
+ + + + + - - - - + + + + + +
+ + + + + + + - + - + + + + +
+ + + + + + + + + - + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
- - - - + + + + + + + + + + +
```

```
m=71
- - - - + + + + + - - - + + +
- - - - - + - - + - - - + + +
- - - - - - - - + - + - + + +
+ - - - + - - + + + + + + + +
- - + - - - - - - + + + + + +
+ + - - - - - + + + + + + + +
- + - - - - - + + + + + + + +
- + - - - + + + + + + + + + +
- + - - + + + + + + + - + + +
+ + - + + + + + + + - - + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + - + + - + + + + + + +
+ + + + + + + + - - + + + + +
+ + + + + + + + - - - - + + +
- - - + + + + + - - - - + + +
```

Şekil (7.b) J = - 2, B = 0.40 değeri için 200 devirde bir + ve – spinlerin birbirleri ile etkileşimlerinin değişiminin matrissel gösterimi.

Yapmış oluğumuz bu 15 x 15 matrissel gösterimle Monte Carlo Metodu ile iki boyutta ferromanyetizmadaki spinlerin aşama aşama nasıl değiştiğini görmek istedik. Giriş bölümünde de belirttiğimiz gibi burada yukarı yöndeki spinleri + ile aşağı yöndeki spinleri de - sembolleri ile gösterdik. $J = -2$ için ele aldığımız spin sisteminde sıcaklık değerini belli miktarda düşürerek ($B = 1 / kT$) spinlerin birbirleri ile nasıl etkileştiğini gözlemledik. Bu gözlemimiz esnasında yüksek sıcaklıklarda manyetizasyon değerinde bir artış olmadığını, hatta sıfıra yakın değerlerde olduğunu saptadık. Bu da bize aşağı ve yukarı yöndeki spinlerin sayılarının yaklaşık olarak aynı olduğunu gösterdi. Bu durumda sistemimiz paramanyetiktir. Sıcaklığı yavaş yavaş düşürdüğümüzde yukarı yöndeki spinlerin yani +' ların sayısının aşağı yöndeki spinlerin yani - 'lerin sayılarına oranla fazlalaştığını gördük. Bu da bize sistemimizin paramanyetik durumdan ferromanyetik duruma geçtiğini gösterdi. $B = 0.30$' da paramanyetik durum baskın fakat $B = 0.40$' da ferromanyetizmaya geçiş başladı. $B = 0.50$' de iyice fazlalaşan +' ların sayısı ferromanyetizmanın olduğunu kanıtladı. $B = 0.60$ değerinde yani sıcaklığın iyice düşürüldüğü durumda tamamen + spinlerden oluşan bir bölge ortaya çıktı. Bununla birlikte; paramanyetik durumdan ferromanyetik duruma geçişi aşama aşama kanıtlamış olduk. Böylece ferromanyetik bölgelerin gelişimini başarı ile incelemiş olduk.

```
m=211
- - + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + - + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + - + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + - + + + + + + + + + + +
+ + + - + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
- + + + + + + + + + + + + + +
```

```
m=191
- + + + + + - + + - - + + + +
- + + + + + + + + - + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + - + + + + +
+ + + + + + + + - - - + + + +
+ + + + + + + + - + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + - - + + + + + + + + + +
+ + + - - + + + + + + + + + +
- + + + + + + + + - + + + + +
```

```
m=197
- - - - + + + + + + + + + + +
+ - - - + + + + + + + + + + +
+ - - + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + - + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
- + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + - + + + + + - + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
- + + + + + + + + + + + + + +
```

```
m=197
- + + + + + + + + + + + + + +
- + + + + + + + + + + + + + +
- + + + + + + + + + - + + + +
- + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
- - + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + - + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + - + + +
+ + + + + + + + + + + - - - +
+ + + + + + + + + + + + + - +
+ + + + + + + + + + + + + + +
- + + + + + + + + + + + + + +
```

```
m=191
- - + + + + + + - + + + + + +
- + + + + - + + - + + + + + +
- + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + - + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + - + + +
+ + - + + + + - + + + + + + +
+ + + + + - + + + - + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + - + +
+ - + + + + + + + + + + + + +
- - + + + + + + + + + + + + +
```

```
m=183
- - - + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
- + + + + + + + + + + + - + +
+ + + - + + + + + + + - - + +
+ + + + + + - + + + + - + + +
+ + + + + - - + + + + + - - +
+ + + + + + + + - + + + - + +
+ + + + + + + + - + + + - + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
- - - + + + + + + + + + + + +
```

Şekil (7.c) $J = -2$, $B = 0.50$ değeri için 200 devirde bir + ve – spinlerin birbirleri ile etkileşimlerinin değişiminin matrissel gösterimi.

```
m=207
- + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + - + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + - + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + - - + + + + + +
+ + + + + + + - + + + + + + +
- + + + + - + - + + + + + + +
```

```
m=221
- + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
- + + + + + + + + + + + + + +
```

```
m=215
- - + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + - + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + - + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
- + + + + + + + + + + + + + +
```

```
m=205
- - + + + + + + + + + + + + +
- - - + + + + + + + + + + + +
- + + + + + + + + + + + + + +
- + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + - + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
- + + + + + + + + + + - + + +
```

```
m=185
- + + + + + + + + + + + + + +
- + + + + + + + + + + + + + +
- - + + + + + + + + + + + + +
- - - + + + + + + + + + + + +
- - - + + + + + + + + + + + +
- - - + + + + + + + + + + + +
- - + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + - + + +
- + + - - + + + + + + - + + +
```

```
m=207
- - + + + + + + + + + + + + +
- - + + + + + + + + + + + + +
- - + + + + + - - + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
+ + + + + + + + + + + + + + +
- + + + + + + + + + + + + + +
```

Şekil (7.d) J = - 2, B = 0.60 değeri için 200 devirde bir + ve − spinlerin birbirleri ile etkileşimlerinin değişiminin matrissel gösterimi.

Daha sonra aynı işlemleri üç boyutlu spin sistemi için tekrarladık, sonuçta üç boyutta da ferromanyetik düzenin olduğunu daha belirgin bir şekilde gözlemledik. Ayrıca, üç boyutta ferromanyetik düzenin oluşacağını "mıknatıs" örneğinden dolayı kesin olarak biliyoruz.

İki boyutta ve üç boyutta ferromanyetik düzenin oluşacağını başarıyla gösterdikten sonra iki ve üç boyutlu ferromanyetik düzendeki faz geçişlerini gözlemledik. Burada J etkileşme değerinin güçlendikçe faz geçişlerinin daha iyi dengeye ulaştığını gözlemledik.

Sonuç olarak, Monte Carlo Metodunu kullanarak iki ve üç boyutlu ferromanyetik bölgelerin gelişimini inceledik ve başarılı sonuçlar elde ettik.

KAYNAKLAR

[1] : Prof Dr. Tahsin Nuri Durlu, Katıhal Fiziğine Giriş, 1992

[2] : C. Kittel, Introduction To Solid State Physics, 5th Edition , 1998

[3] : Computational Physics, Nicholas J. Giordane Prentice Hall, N.J., 1997

[4] : S. Aktaş, "Computer Sımulations of one Dimensional Ising Spin Chain by Using Random Numbers", Master Thesis, Wichita state University, 1986

[5] : S. Ünlü, " Monte Carlo Metodu Kullanılarak İki Boyutlu Paramanyetik ve Ferromanyetik Sistemlerin İncelenmesi", Master Tezi Marmara Üniversitesi, 2001

EKLER

Bu bölümde, yaptığımız programların algoritmaları tez metninde anlattığımız sıraya göre yerleştirilmişlerdir. Programların sırası aşağıdaki gibidir.

Ek 1 : Monte Carlo Metodu ile bir boyutta ferromanyetizma

Ek 2 : Monte Carlo Metodu ile ikinci kademe komşu spinlerin etki ettiği bir boyutta ferromanyetizma.

Ek 3 : Monte Carlo Metodu ile iki boyutlu ferromanyetizma

Ek 4 : Monte Carlo Metodu ile ikinci kademe komşu spinlerin etki ettiği iki boyutta ferromanyetizma.

Ek 5 : Monte Carlo Metodu ile üç boyutta ferromanyetizma.

Ek 6 : Monte Carlo Metodu ile iki boyutta ferromanyetik sistemin faz geçiş grafiği.

Ek 7 : Monte Carlo Metodu ile ikinci kademe spinlerin etki ettiği iki boyutta ferromanyetik sistemin faz geçiş grafiği.

Ek 1: Monte Carlo Metodu İle Bir Boyutta Ferromanyetizma

```
program ferromanyetizma
real          :: x, ran, DE, JE, P, B
integer       :: s(5000)
integer       :: i, z, a, d, tam, m, n
character(1)::ss(5000)
open(1,file='mk',status='old',form='formatted')
! B=1/(kT)
        write (*,*)     ' N DEĞERİNİ GİRİNİZ :  '
         read  (*,*)     n
         write (*,*)     ' KAÇ  DEVİR :  '
         read  (*,*)     d
         write (*,*)    ' KAÇ  ADIM : '
         read  (*,*)     a
         write (*,*)    ' B " DEĞERİNİ GİRİNİZ :'
         read  (*,*)     B
         write (1,*)    ' B" DEĞERİ:  ',B
         write (*,*)    ' JE  DEĞERİNİ GİRİNİZ  :'
         read  (*,*)     JE
do  i=1,n
        s(i)= 1
        ss(i)='+'
        call random_number(ran)
        if (ran > 0.35) then
        s(i)=-1
        ss(i)='-'
        end if
 end do
! Dizi oluşturuldu
 do z=1,d
           do i=1,n
                      DE=-JE*s(i)*(s(i+1)+s(i-1))
                       if  (DE < 0.0) then
                          s(i)=-s(i)
                                 else
                         P=exp(-DE*B)
                         call random_number(x)
                         if(x <= P)  then
                            s(i)=-s(i)
                         end if
                       end if
               end do
        tam=mod(z,a)
         if(tam.eq.0)then         ! adım  adım  yazdırma işlemi
        write(*,*) z, '.    Dizi'
        write(1,*)  z, '.    Dizi'
        m=0
                      do i=1,n

                         m=m+s(i)    ! her Dizideki her işareti sırayla topluyor
```

```
                    if (s(i).eq.-1) then        !Dizideki işaretleri karakter yapar
                      ss(i)= '-'
                          else
                          ss(i)='+'
                    endif
            end do
           write(1,*) 'm=',m
           write(*,*)(ss(i),' ',i=1,n)  ! Diziyi yazdır
           write(1,*)(ss(i),' ',i=1,n)
     endif
end do
close(1)
 end program ferromanyetizma
```

Ek 2 : Monte Carlo Metodu İle İkinci Kademe Komşu Spinlerin Etki Ettiği Bir Boyutta Ferromanyetizma

```
program ferromanyetizma
real          :: x, ran, DE, JE1, JE2, P, B, DE1, DE2
integer       :: s(5000)
integer       :: i, z, a, d, tam, m, n
character(1) :: ss(5000)
open(1,file='b1',status='new',form='formatted')
! B=1/(kT)
        write(*,*)  ' n  DEĞERİNİ GİRİNİZ :  '
        read (*,*)   n
        write(*,*)  ' KAÇ  DEVİR :  '
        read (*,*)   d
        write(*,*)  ' KAÇ  ADIM : '
        read (*,*)    a
        write(*,*)  ' B " DEĞERİNİ GİRİNİZ :'
        read (*,*)   B
        write(*,*)  ' JE1  DEĞERİNİ GİRİNİZ  :'
        read (*,*)   JE1
         JE2=JE1/(4.0)
do  i=1,n
        s(i)= 1
        ss(i)='+'
        call random_number(ran)
        if (ran > 0.35) then
        s(i)=-1
        ss(i)='-'
        end if
end do
! Dizi oluşturuldu
do z=1,d
          do i=1,n
                    DE1=-JE1*s(i)*(s(i+1)+s(i-1))
                         DE2=-JE2*s(i)*(s(i-1)+s(i-2)+s(i+1)+s(i+2))
                         DE=DE1+DE2
                     if  (DE < 0.0) then
                         s(i)=-s(i)
                     else
                        P=exp(-DE*B)
                        call random_number(x)
                     if(x <= P)  then
                         s(i)=-s(i)
                     end if
              end if
              end do
          tam=mod(z,a)
        if(tam.eq.0)then        ! adım  adım  yazdırma işlemi
       write(*,*) z, '.    Dizi'
       write(1,*)  z, '.    Dizi'
```

```
m=0
        do i=1,1000
          m=m+s(i)     ! her dizideki her işareti sırayla topluyor
            if (s(i).eq.-1) then          ! dizideki işaretleri karakter yapar
              ss(i)= '-'
                else
                ss(i)='+'
              endif
      end do
        write(1,*) 'JE1=',JE1
        write(1,*) 'B"DEĞERİ=',B
        write(1,*) 'm=',m
         write(*,*)(ss(i),' ',i=1,n)         ! diziyi yazdır
        write(*,*)
        write(1,*)
         write(1,*)(ss(i),' ',i=1,n)
      endif
  end do
close(1)
  end program ferromanyetizma
```

Ek 3: Monte Carlo Metodu İle İki Boyutta Ferromanyetizma

```
program ferromanyetizma
real           :: x, ran, DE, JE, P, B
integer        :: s(15,15)
integer        ::i, j, z, a, d, tam, m, r
character(1) ::ss(15,15)
open(1,file='w',status='old',form='formatted')
! B=1/(kT)
        write(*,*)   ' KAÇ  DEVİR :  '
        read(*,*)     d
        write(*,*)   ' KAÇ  ADIM : '
        read(*,*)     a
        write(*,*)   ' JE  DEĞERİNİ GİRİNİZ  :'
        read(*,*)     JE
do  i=1,15
   do   j=1,15
        s(i,j)= 1
        s(i,j)='+'
        call random_number(ran)
        if (ran > 0.35) then
        s(i,j)=-1
        ss(i,j)='-'
        end if
    end do
 end do
! matris oluşturuldu
  r=0
 do B=0.005,1.5,0.005
         r=r+1
   do z=1,d
           do i=1,15
              do j=1,15
                     DE=-JE*s(i,j)*(s(i,j+1)+s(i,j-1)+s(i+1,j)+s(i-1,j))
                      if  (DE < 0.0) then
                          s(i,j)=-s(i,j)
                       else
                         P=exp(-DE*B)
                         call random_number(x)
                       if(x <= P)  then
                          s(i,j)=-s(i,j)
                       end if
                 end if
                end do
        end do
        tam=mod(z,a)
         if(tam.eq.0)then          ! adım  adım  yazdırma işlemi
           write(*,*) z, '.     Matris'
           write(1,*)'  '
           write(1,*)' JE = ',JE
        write(1,*) r,'.B değeri ',  z, '.     Matris'
```

```
m=0
      do i=1,15
        do j=1,15
        m=m+s(i,j)   ! her matristeki her işareti sırayla topluyor
          if (s(i,j).eq.-1) then      !   matristeki   işaretleri   karakter
yapar
            ss(i,j)= '-'
              else
              ss(i,j)='+'
            endif
        end do
      end do
        write(1,*) 'm= ', m
        write(1,*)'B= ',B
     do  i=1,15          ! matrisi yazdır
    write(*,*)(ss(i,j),' ',j=1,15)
    write(1,*)(ss(i,j),' ',j=1,15)
   end do
   endif
  end do
end do
 close(1)
   end program ferromanyetizma
```

Ek 4 : Monte Carlo Metodu İle İkinci Kademe Komşu Spinlerin Etki Ettiği İki Boyutta Ferromanyetizma

```
program ferromanyetizma
real          :: x, ran, DE, JE1, JE2, DE1, DE2, P, B
integer       :: s(15,15)
integer       ::i, j, z, a, d, tam, m, r
character(1) ::ss(15,15)
open(1,file='JE1=-30',status='old',form='formatted')
! B=1/(kT)
        write(*,*)  ' KAÇ  DEVİR : '
        read(*,*)    d
        write(*,*)  ' KAÇ  ADIM : '
        read(*,*)    a
        write(*,*)  ' JE1  DEĞERİNİ GİRİNİZ  :'
        read(*,*) JE1
        JE2=JE1/((2.0)**(1.0/2.0))
do  i=1,15
   do  j=1,15
        s(i,j)= 1
        ss(i,j)='+'
        call random_number(ran)
        if (ran > 0.35) then
        s(i,j)=-1
        ss(i,j)='-'
       end if
   end do
 end do
! matris oluşturuldu
  r=0
 do B=0.005,1.0,0.01
        r=r+1
   do z=1,d
          do i=1,15
             do j=1,15
                   DE1=-JE1*s(i,j)*(s(i,j+1)+s(i,j-1)+s(i+1,j)+s(i-1,j))
                        DE2=-JE2*s(i,j)*(s(i-1,j-1)+s(i-1,j+1)+s(i+1,j-1)+s(i+1,j+1))
                        DE=DE1+DE2
                    if  (DE < 0.0) then
                        s(i,j)=-s(i,j)
                     else
                       P=exp(-DE*B)
                       call random_number(x)
                     if(x <= P)  then
                       s(i,j)=-s(i,j)
                     end if
              end if
             end do
       end do
```

```
           tam=mod(z,a)
            if(tam.eq.0)then          ! adım  adım  yazdırma işlemi
             write(*,*) z, '.     Matris'
             write(1,*)'  '
             write(1,*)' JE1 = ',JE1
              write(1,*) r,'.B değeri ',  z, '.     Matris'
           m=0
                           do i=1,15
                             do j=1,15
                             m=m+s(i,j)   ! her matristeki her işareti sırayla topluyor
                                 if (s(i,j).eq.-1) then        !   matristeki   işaretleri   karakter
yapar
                                   ss(i,j)= '-'
                                        else
                                        ss(i,j)='+'
                                  endif
                              end do
                     end do
                           write(1,*) 'm= ', m
                           write(1,*)'B= ',B
                 do  i=1,15          ! matrisi yazdır
             write(*,*)(ss(i,j),' ',j=1,15)
              write(1,*)(ss(i,j),' ',j=1,15)
            end do
             endif
end do
                  end do
 close(1)
      end program ferromanyetizma
```

Ek 5: Monte Carlo Metodu İle Üç Boyutta Ferromanyetizma

```
program ferromanyetizma
real           :: x, ran, DE, JE, P, B
integer        :: s(15,15,15)
integer        ::i, j, k, z, a, d, tam, m
character(1)  ::ss(15,15,15)
open(1,file='F3=J=-2',status='old',form='formatted')
! B=1/(kT)
        write(*,*)  ' KAÇ  DEVİR :  '
        read(*,*)     d
        write(*,*)  ' KAÇ  ADIM : '
        read(*,*)     a
        write(*,*)  ' B " DEĞERİNİ GİRİNİZ :'
        read(*,*)     B
        write(*,*)  ' JE  DEĞERİNİ GİRİNİZ  :'
        read(*,*)     JE
  do  k=1,15
   do  i=1,15
       do   j=1,15
        s(i,j,k)= 1
        ss(i,j,k)='+'
        call random_number(ran)
        if (ran > 0.4) then
        s(i,j,k)=-1
        ss(i,j,k)='-'
                end if
          end do
   end do
end do
! matris oluşturuldu
do z=1,d
          do k=1,15
             do i=1,15
                do j=1,15
DE=-JE*s(i,j,k)*(s(i,j,k-1)+s(i,j-1,k)+s(i-1,j,k)+s(i,j,k+1)+s(i,j+1,k)+s(i+1,j,k))
                       if  (DE < 0.0) then
                          s(i,j,k)=(-1.0)*s(i,j,k)
                          else
                            P=exp(-DE*B)
                            call random_number(x)
                           if(x <= P)  then
                          s(i,j,k)=(-1.0)*s(i,j,k)
                            end if
                end if
                          end do
               end do
       end do
```

```
tam=mod(z,a)
 if(tam.eq.0)then        ! adım  adım  yazdırma işlemi
write(*,*) z, '.     Matris'
write(1,*)  z, '.     Matris'
m=0
                    do k=1,15
                      do i=1,15
                        do j=1,15
                      m=m+s(i,j,k)          !   her   matristeki   her   işareti   sırayla
topluyor
                            if (s(i,j,k).eq.-1) then  !   matristeki   işaretleri   karakter
yapar
                              ss(i,j,k)= '-'
                                    else
                                    ss(i,j,k)='+'
                              endif
                          end do
                      end do
               end do
                    write(1,*) 'JE=',JE
                    write(1,*) 'B"DEĞERİ=',B
                    write(1,*) 'm=',m
               do k=1,15
               write(*,*)
               write(1,*)
               write(1,*) 'k=',k
          do  i=1,15          ! matrisi yazdır
     write(*,*)(ss(i,j,k),' ',j=1,15)
     write(1,*)(ss(i,j,k),' ',j=1,15)
   end do
              end do
              endif
   end do
close(1)
     end program ferromanyetizma
```

Ek 6: Monte Carlo Metodu İle İki Boyutta Ferromanyetik Sistemin Faz Geçiş Grafiği

```
program ferromanyetizma
real            :: x, ran, DE, JE, P, B, mag
integer         :: s(15,15)
integer         ::i, j, z, a, d, tam, m
character(1)  ::ss(15,15)
open(1,file='mkg-2',status='new',form='formatted')
! B=1/(kT)
        write(*,*)   ' KAÇ  DEVİR :  '
        read(*,*)     d
        write(*,*)   ' KAÇ  ADIM : '
        read(*,*)     a
        write(*,*)   ' B " DEĞERİNİ GİRİNİZ :'
        read(*,*)     B
        write(1,*)   ' B" DEĞERİ:  ',B
        write(*,*)   ' JE  DEĞERİNİ GİRİNİZ  :'
        read(*,*)     JE
do  i=1,15
   do   j=1,15
        s(i,j)= 1
        ss(i,j)='+'
        call random_number(ran)
        if (ran > 0.35) then
        s(i,j)=-1
        ss(i,j)='-'
        end if
   end do
 end do
! matris oluşturuldu
 do z=1,d
   mag=0.0
          do i=1,15
             do j=1,15
                    DE=-JE*s(i,j)*(s(i,j+1)+s(i,j-1)+s(i+1,j)+s(i-1,j))
                     if  (DE < 0.0) then
                        s(i,j)=-s(i,j)
                                      mag=mag+s(i,j)
                      else
                        P=exp(-DE*B)
                        call random_number(x)
                      if(x <= P)  then
                        s(i,j)=-s(i,j)
                        mag=mag+s(i,j)
                      end if
                end if
               end do
        end do
        tam=mod(z,a)
         if(tam.eq.0) then        ! adım  adım  yazdırma işlemi
             write(*,*) z, '.     Matris'
```

```
                write(1,*)  z, '.     Matris'
                write(1,*) 'mag=',mag
                m=0
                   do i=1,15
                     do j=1,15
                         m=m+s(i,j)          ! her matristeki her işareti sırayla topluyor
                         if (s(i,j).eq.-1) then         ! matristeki işaretleri karakter yapar.
                             ss(i,j)= '-'
                         else
                             ss(i,j)='+'
                         endif
                    end do
                end do
                write(1,*) 'm= ', m
                do  i=1,15           ! matrisi yazdır
                    write(*,*)(ss(i,j),' ',j=1,15)
                    write(1,*)(ss(i,j),' ',j=1,15)
               end do
          endif
end do
 close(1)
      end program ferromanyetizma
```

Ek 7 : Monte Carlo Metodu İle İkinci Kademe Komşu Spinlerin Etki Ettiği İki Boyutta Ferromanyetik Sistemin Faz Geçiş Grafiği

```
program ferromanyetizma
real            :: x, ran, DE, JE1, JE2, P, B, DE1, DE2
integer         :: s(15,15)
integer         ::i, j, z, a, d, tam, m
character(1)  ::ss(15,15)
open(1,file='JE=-2+0.35',status='old',form='formatted')
! B=1/(kT)
        write(*,*)  ' KAÇ  DEVİR : '
        read(*,*)     d
        write(*,*)  ' KAÇ  ADIM : '
        read(*,*)     a
        write(*,*)  ' B " DEĞERİNİ GİRİNİZ :'
        read(*,*)     B
        write(*,*)  ' JE1  DEĞERİNİ GİRİNİZ  :'
        read(*,*)     JE1
         JE2=JE1/((2.0)**(1.0/2.0))
do  i=1,15
   do  j=1,15
        s(i,j)= 1
        ss(i,j)='+'
        call random_number(ran)
        if (ran > 0.35) then
        s(i,j)=-1
        ss(i,j)='-'
        end if
    end do
 end do
! matris oluşturuldu
 do z=1,d
          do i=1,15
             do j=1,15
                   DE1=-JE1*s(i,j)*(s(i,j+1)+s(i,j-1)+s(i+1,j)+s(i-1,j))
                        DE2=-JE2*s(i,j)*(s(i-1,j-1)+s(i-1,j+1)+s(i+1,j-1)+s(i+1,j+1))
                        DE=DE1+DE2
                    if  (DE < 0.0) then
                       s(i,j)=-s(i,j)
                     else
                       P=exp(-DE*B)
                       call random_number(x)
                     if(x <= P)  then
                       s(i,j)=-s(i,j)
                     end if
               end if
              end do
       end do
```

```
tam=mod(z,a)
 if(tam.eq.0)then        ! adım  adım  yazdırma işlemi
   write(*,*) z, '.     Matris'
 write(1,*)  z, '.     Matris'
 m=0
                 do i=1,15
                   do j=1,15
                   m=m+s(i,j)   ! her matristeki her işareti sırayla topluyor
                       if (s(i,j).eq.-1) then       !   matristeki   işaretleri   karakter
yapar
                          ss(i,j)= '-'
                               else
                               ss(i,j)='+'
                          endif
                   end do
           end do
                 write(1,*) 'JE1=',JE1
                 write(1,*) 'B"DEĞERİ=',B
                 write(1,*) 'm=',m
        do  i=1,15          ! matrisi yazdır
               write(*,*)(ss(i,j),' ',j=1,15)
   write(1,*)(ss(i,j),' ',j=1,15)
  end do
   endif
 end do
close(1)
     end program ferromanyetizma
```

ÖZGEÇMİŞ

06 Haziran 1977' de Afyon'da doğdum. İlk ve orta okulu İzmit'te okudum. 1994 yılında Yeşilköy 50. Yıl Lisesinden mezun oldum. 1995 yılında girdiğim Üniversite Yerleştirme Sınavında Konya Selçuk Üniversitesi Fen/Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünü kazandım. Haziran 1999'da bölümümü 79,15 not ortalaması ile birinci olarak bitirdim. Aynı sene Selçuk Üniversitesinde açılan yüksek lisans sınavlarında başarılı oldum ve yüksek lisansa başladım. M.E.B. da öğretmenliğe baş vurdum ve tayinim İstanbul'a çıktı. Bundan dolayı yüksek lisans öğrenimini İstanbul'da yapmak istedim. 2000 yılında Marmara Üniversitesi'nin açmış olduğu yüksek lisans sınavlarına başvurdum ve Atmosferik Fizik Programında yüksek lisans hakkı kazandım. Ve halen bu programda okumaktayım.

Nisan, 2002 Murat KARAGÖZ