

135

KATI KÜRE MODELİ İLE BİRİNCİ DERECEDE  
KATI-SIVI FAZ GEÇİŞİNİN İNCELENMESİ

ALİ ŞAHİN

T.C

İNÖNÜ ÜNİVERSİTESİ

FEN VE SOSYAL BİLİMLER ENSTİTÜLERİ

Lisansüstü Eğitim-Öğretim ve Sınav

yönergesi'nin

Fizik Anabilim Dalı için öngördüğü

BİLİM UZMANLIĞI TEZİ

olarak hazırlanmıştır.

Eylül, 1988

İNÖNÜ ÜNİVERSİTESİ  
KÜTÜPHANESİ

İşbu çalışma, Jürimiz tarafından Fizik Anabilim Dalında,  
BİLİM UZMANLIĞI Tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan Prof. Dr. Zekeriya AYDIN *Z. Aydın*

Üye Doç. Dr. Hikmet Uslu *H. Uslu*

Üye Doç. Dr. Servet Ekmekeci Serelme

Onay

Yukarıdaki imzaların, adı geçen öğretim üyelerine ait olduğunu  
onaylarım.

Prof. Dr. A. Nihat BOZCUK  
Enstitü Müdürü



Sevgili Annem ve Berrin'e

Çalışmam boyunca yakın ilgi ve desteğini eksiltmeyen, yerinde ve zamanında uyarılarla yol göstererek bana güç ve moral veren sayın Hocam Doç. Dr. Servet Ekmekçi'ye en içten teşekkürlerimi sunarım.

Çalışmam sırasında gerek duyduğum her türlü yardımı, büyük bir anlayışla yapmış olan Erciyes Üniversitesi, Fen-Ed. Fakültesi, Fizik Bölümü Öğr. Üyesi Doç. Dr. Mustafa Keskin'e; Akdeniz Üniversitesi, Isparta Mühendislik Fakültesi Öğr. Üyesi Yrd. Doç. Dr. Meral Hoşcan'a; İnönü Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Genel Fizik Anabilim Dalı Öğr. Üyesi Yrd. Doç. Dr. Hamza Polat'a; bilgisayar ile ilgili problemlerimin çözümünde yardımcı olan Öğr. Grv. Levent Konaç'a en içten dileklerle teşekkür ederim.

## İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa No</u>
1.1. Giriş .....	1
II.1. Tek boyutta Kümesel Değişim Metodu .....	4
II.1.A. Ising Model .....	4
II.1.B. İç değişkenlerin tanımlanması .....	6
II.1.C. Topluluk ve Gurup .....	7
II.1.D. Entropi ve Serbest enerji ifadelerinin türetilmesi	10
III.1. Irredicible Cluster Integral .....	16
IV.1. Seçilen model için entropinin oluşturulması .....	20
IV.II. Faz geçişi ve entropinin süreksizliği .....	27
IV.III. Sonuç ve Öneriler .....	30
ÖZET .....	32
ABSTRACT .....	33
KAYNAKLAR .....	34
Ek-1. Şekiller ve Tablolar listesi .....	35

## BÖLÜM I

### GİRİŞ

Bilindiği gibi maddeler genel olarak katı, sıvı, ve gaz hallerinden birinde bulunurlar. Katı durumdaki maddeler (Amorf maddeler hariç) kristal yapıdadırlar. Sıcaklık arttıkça moleküller, düzenli durumdan moleküller arası uzaklıkla karşılaştırılabilecek kadar büyük genliklerle titreşim yaparak, düzensiz duruma geçmeye başlarlar. Titreşim yapan katı maddenin molekülleri, komşu durumda bulunan molekülleri de etkileyerek; onların düzgün konumdan çıkmalarını kolaylaştırırlar. Böylece katının kararlı haldeki düzenli durumu, birdenbire hep birlikte çözülmeye başlar ve katı faz sıvı faza dönüşerek, düzensiz duruma gelir. Bu düzenli durumdan düzensiz duruma geçiş her geçişe ait kritik sıcaklıklarda meydana gelir ki; bu sıcaklıklara geçiş sıcaklığı denir(Landau vd. 1978).

Katı fazın sıvı faza dönüşmesi ile ortaya çıkan bu kararsızlık katının bütün moleküllerini birbirine bağlı olarak ilgilendirir. Bu olaylar "Kooperatif Olaylar" olarak adlandırılırlar.

Kooperatif olayların incelenmesi problemi, Fizikçiler, Kimyacılar ve Madde bilimcileri ilgilendiren en önemli problemlerden bir tanesidir. Bu tür problemler çeşitli yöntemlerle incelenir. Bu yöntemlerden bir tanesi Seriyeye açma Yöntemi'dir(Temperly, 1968). Bu yöntemde bölüşüm fonksiyonu veya her hangi bir fiziksel özellik uygun bir noktaya göre seriyeye açılır. Bu açılım genellikle düşük veya yüksek sıcaklıklarda hesaplanır. Daha sonra geçiş bölgesine indirgenir. Bu yöntem çok büyük sayıda terimin açılımı ile yapılırsa iyi sonuç verir. Çok sayıda terim ile seri açılımı yapmak zor ve geliştirilmiş tekniklere ihtiyaç gösterdiğinden dolayı, bu yöntem benzer problemlerin incelenmesinde daha az kullanılır.

Kooperatif olayların incelenmesinde ikinci yöntem ise kapalı form yaklaşımlarıdır(BURLEY, 1976). Bumetotlar, teorikçiler ve de-

neyciler için yeni, karmaşık fiziksel problemlere uygulanmasında seri açılım metoduna göre biraz daha basit ve iyi sonuç verirler.

Kapalı Form Yaklaşımlarının diğer önemli bir özelliği ve kullanılımasının tercih nedeni ise; üç boyutlu yapılarda iki ve tek boyutlu yapılara göre daha iyi sonuçlar verme özelliğine sahip olmalarıdır.

Kapalı Form Yaklaşımlarının en önemlileri;

Ortalama Alan Yaklaşımı(Huang,1963), Bethe metodu (Huang,1963), Kümesel Değişim Yöntemi (Kikuchi,1951) ve Katı küre Modeli(Bellemans ve Nigam,1967)'dir.

Ortalama Alan Yaklaşımı, Kapalı form yaklaşımlarının en eskisidir. Bu metodu ilk defa Bragg-Williams, long-range düzen parametresi kavramını tanımlayarak ve bu kavramı kullanarak geliştirmiştir. Değişik fiziksel problemlere uygulaması Brout tarafından yapılmıştır. Bu metotta entropi tam olarak yazılabilir. Buna karşılık enerji yaklaşık olarak yazılabilmektedir.

Bethe metodu, 1935'de Bethe tarafından long-range parametresi gibi short-range parametresi de dikkate alınarak ilk defa geliştirilmiş ve kullanılmıştır. Bu yöntemde enerji tam olarak, entropi ise yaklaşık olarak yazılabilmektedir.

Kümesel Değişim Yöntemi, Kapalı Form Yaklaşımlarının en önemlisi ve son zamanlarda en fazla kullanılanıdır. İlk defa Kikuchi tarafından tanımlanmıştır(Kikuchi, 1951). Daha sonra Kikuchi ve çalışma gurubunun müşterek çalışmalarıyla daha da geliştirilmiştir. Bu metotta iç değişkenler iyi bir şekilde tanımlanır. Bundan sonra ,diğer termodinamiksel değişkenlerin ifade edilmesi ve çıkarılması bu iç değişkenler cinsinden daha anlaşılır ve basit hale gelir. Kümede en yakın komşu çiftler yerine kare veya üçgen ağlar alındığında daha hassas hesaplamalar yapılabilir. Bu ise Kümesel Değişim Yönteminin geliştirilmiş durumudur. Bu durum yüksek dereceli yaklaşımlar olarak da adlandırılır. Bu metodun zorluğu, iç değişkenler cinsinden örgüye ait şekillenimleri ifade etmektir. Bazı durumlarda bu şekillenimler yaklaşık olarak yazılabilmektedir.

Katı Küre Modeli, aynı spine sahip iki atom yada molekülün yanyana gelmesini sınırlayarak elde edilir. Bu modelde de önemli olan, seçilecek bağımsız değişkenin iyi belirlenmesi ve diğer iç değişkenlerin aynen Kümesel Değişim metodunda olduğu gibi bağımsız değişkenler cinsinden yazılabilmesidir.

Bu çalışmada model olarak iki boyutlu ferromagnetik kare seçilmiş, seçilen bu model üzerinde iç değişkenler tanımlanarak entropi oluşturulmuş ve birinci dereceden katı sıvı faz geçişi incelenmiştir.

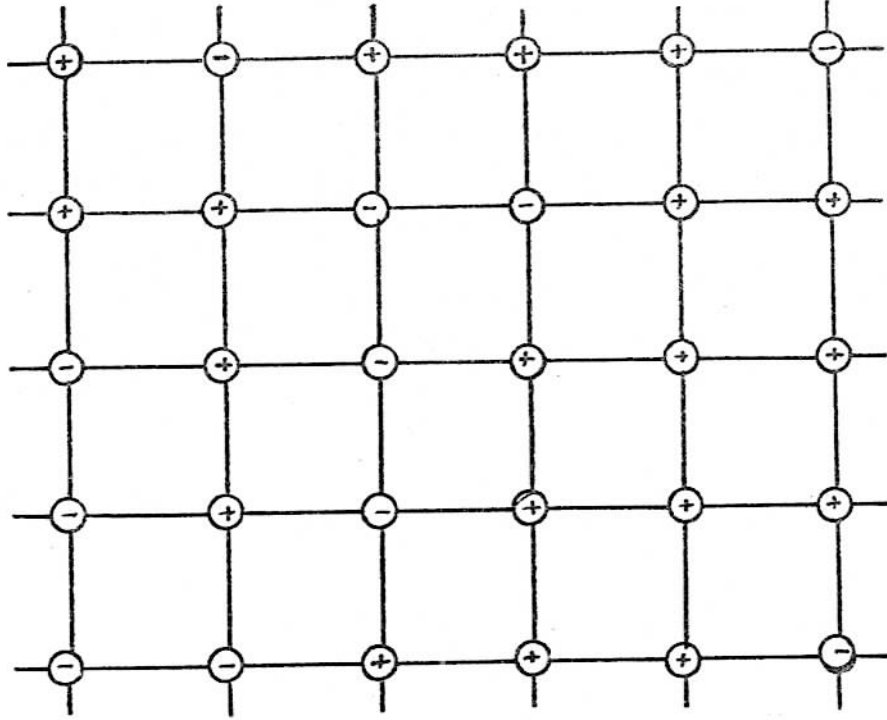
## BÖLÜM II

### II.1 TEK BOYUTTA KÜMESEL DEĞİŞİM METODU

**II.1.A Ising Model:** Bu bölümde kapalı form yaklaşımlarının en önemlisi olan Kümesel değişim metodu, tek boyutlu Ising model ile açıklanacaktır(Kikuchi,1979). Model basit olmasına rağmen kooperatif sistemlerin açıklanmasında da kullanılır. Bu modeli, ilk defa 1920'de Wilhelm Lenz ferromagnetizma problemi üzerinde çalışırken tanımladı. Model daha sonra o'nun öğrencilerinden biri olan Ernest Ising tarafından geliştirildi. Ising model, basit bir kabule dayanır. Bu ise her bir örgü noktasındaki spin magnetik momenti diye adlandırılan spinlerin ya + ya da- doğrultuda olmasıdır. Bu ise spin yukarı veya spin aşağı olarak düşünülür.(Bak şekil 2.1).

Ising modeli için; örgü noktası diye adlandırılan N tane sabit noktanın dizilmesiyle meydana gelen  $n(n=1,2,3)$  boyutlu bir periyodik sistem düşünelim. Burada spinlerin bazıları yukarı yönelirler. Bu spinler + ile gösterilirler ve spin yukarı, bazıları da aşağı doğru yönelir ki bu spinler de - ile gösterilirler ve spin aşağı diye adlandırılırlar. Spinlerin her biri, hem bir magnetik momente hem de yukarı yöne paralel bir dış magnetik alan içinde bulunurlar.

Modelde spinlerin en yakın komşu çiftleri (+ +) veya (- -) dir. Bu spinlerin arasında etkileşim enerjileri  $- \epsilon$  kadar sistemin enerjisine katkıda bulunurlar. Diğer yandan değiştirilebilir bir bağ diye adlandırılan (+ -) veya (- +) antiparalel spinli en yakın komşu çiftler de sistemin enerjisine  $+ \epsilon$  kadar katkıda bulunurlar.  $\epsilon$  pozitif iken pa-



Şekil(2.1): Ising'in Ferromagnet Modeli için basit dörtgen örgü.

ralel spinli hal en düşük enerjiye sahip olduğundan daha karardır. Bu çalışmada  $\epsilon$  enerjisi ile deęil, sadece sistemin termodinamik özellikleriyle ilgilenilecek ve daha çok entropi üzerinde durulacaktır.

**II.1.B İ deęişkenlerin tanımlanması:** Deęişkenlerin tanımlanmasında genel amaç sistemin en iyi bir şekilde tasvir edilmesidir. Bunun için izlenen yol ise, yaklaşım yapmaksızın sistemin entropi veya enerji ifadelerini elde edebilecek şekilde deęişkenler seçmektir ki, bu deęişkenler iç deęişkenler olarak adlandırılırlar. Mevcut problemde enerjinin en yakın komşu çiftlere baęlı olması sebebiyle, Tablo(2.1)'de tanımlanan komşu çiftlere baęlı kesirsel deęişkenler seçmek daha uygundur. Yukarıdaki cümlede kesirsel deęişkenler, şekillenim olasılığı veya sadece olasılık anlamına da gelmektedir. Bu tezde ise genellikle kesirsel deęişkenler ifadesini kullanacağız. Tablo(2.1)'deki y kesirsel deęişkenlerinin anlamı şudur; örgü noktalarının sayısı ve dolayısıyla sistemdeki baęların sayısı N ise, sistemdeki (+ +) baęların sayısı  $y_1N$ , (+ -) baęların sayısı  $y_2N$ , (- +) baęların  $y_3N$  ve (- -) baęların sayısı  $y_4N$  dir.

Baęın gösteriliři		Kesirsel deęişken	Enerji
+	+	$Y_1$	$-\epsilon$
+	-	$Y_2$	$+\epsilon$
-	+	$Y_3$	$+\epsilon$
-	-	$Y_4$	$-\epsilon$

Tablo(2.1): Bir baę için Y kesirsel deęişkeninin tanımlanması.

Olasılık tanımından dolayı Y'ler normalizasyon koşuluna uyarlar.

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

Bir noktanın gösterilişi	Kesirsel değişken
+	$X_1$
-	$X_2$

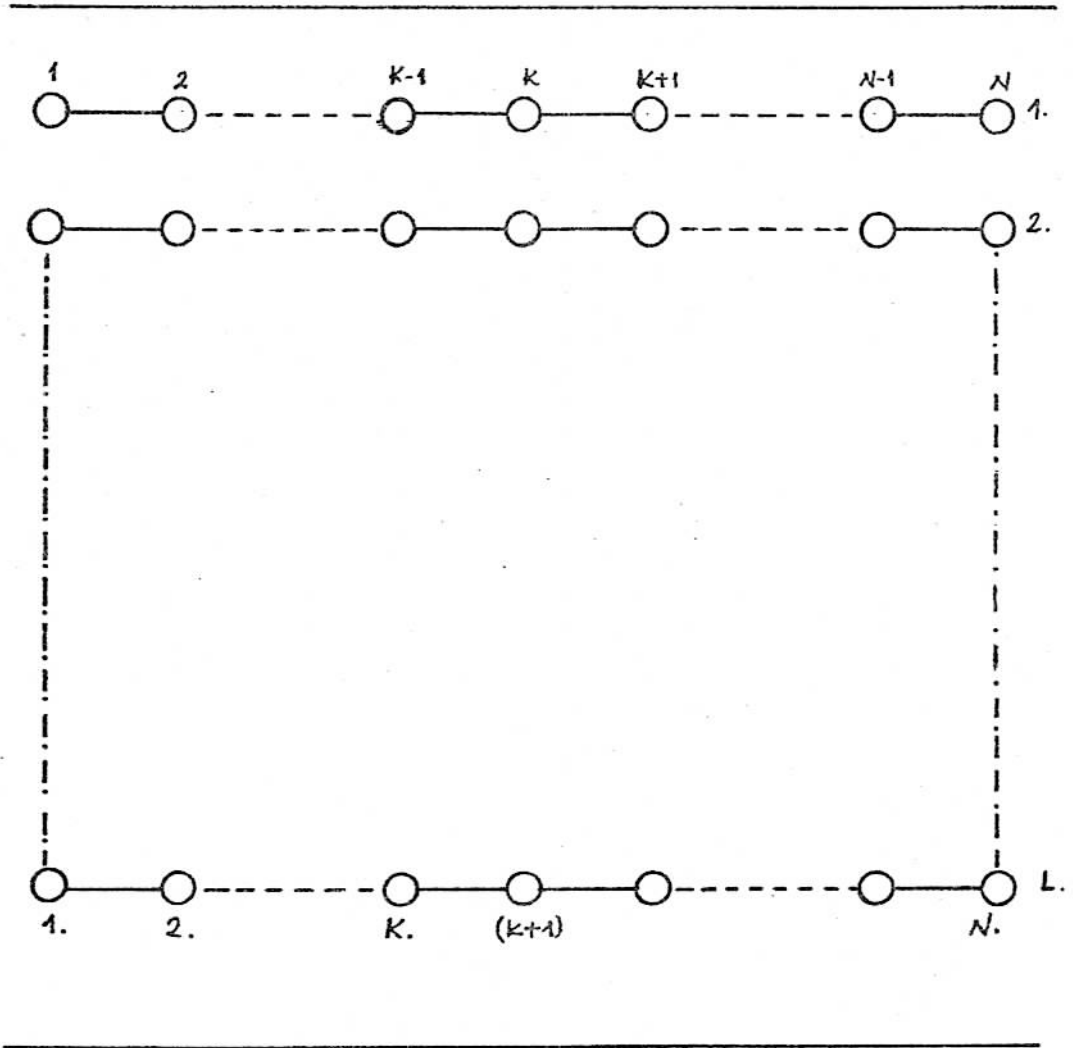
Tablo(2.2): Bir noktayı gösteren X'lerin tanımlanması.

Tablo(2.1)'i kullanarak, sistemin iç enerjisi E, Y'ler vasıtasıyla

$$E = N\epsilon (-Y_1 + Y_2 + Y_3 - Y_4) \quad (2.2)$$

şeklinde yazılabilir. Tablo(2.2)'de gösterildiği gibi +spinlerin kesri  $X_1$  ile, - spinlerin kesri de  $X_2$  ile gösterildi. X'lerin Y'ler vasıtasıyla nasıl yazılabileceği ve aralarındaki ilişkinin ne şekilde olduğu bundan sonraki topluluk ve grup bahsinde açıklanacaktır.

**II.1.C. Topluluk ve Grup:** Bir toplulukdaki sistemlerin hepsinin şekil(2.2)'de olduğu gibi yan yana sıraya sokulduğu düşünölsün. Böyle bir toplulukdaki L sistemlerinin her birine k'ıncı örgü noktası yerleştirilsin. Topluluğun her bir sistemine ait bir tane k'ıncı örgü noktalarının hepsini düşünmek uygun olabilir ki, onlara k'ıncı örgü noktası gurubu denir. Bu grup, şekil(2.2)'de içi dolu yuvarlaklarla gösterilmiştir. Benzer şekilde topluluğun her bir sistemine ait k-(k+1) bağı hepsinin meydana getirdiği şekil(2.2)'de kalın çizgi ile gösterilen k-(k+1) bağ gurubundan da bahsedilebilir.



Şekil(2.2): L sistemden oluşan bir topluluk.

Her bir daire  $+$  veya  $-$  spinlerin yerleştirildiği bir örgü noktasıdır.

Tablo(2.1)'de  $Y_1$ , sistemdeki (+ +) bağların kesri olarak tanımlandı. Bu tanım  $Y_1$ 'in bir toplulukdaki (+ +) bağların kesri olduğunu söylemeye özdeştir. Benzer düşünce ile toplulukdaki  $k-(k+1)$  grubu  $j-(j+1)$  diye söylenen her hangi diğer bir bağ gurubuna denk denebilir. Bu da (+ +) çiftlerinin kesrinin her iki grupta da aynı olduğu düşüncesine özdeştir. Bu yüzden, her hangi bir bağ gurubundaki (+ +) bağların kesrinin  $Y$  olduğu ve böylece bir bağ gurubu ve nokta gurubu için yazılan tablo(2.1) ve tablo(2.2)'deki sonuçlar çıkarılabilir. Diğer bir deyişle  $Y$ 'ler ve  $X$ 'ler şekil(2.2)'deki bir sistem için yatay olarak düşünülebilecekleri gibi, uygun bir set düşey olarak da düşünülebilir. Böylece,  $Y$  ve  $X$ 'ler yatay olarak sistem meydana getirdiği gibi düşey olarak da düşünüldüğünde set meydana getirebilirler. Yatay olarak düşünülen setlerden düşey olarak düşünülen setlere geçildiğinde  $L$ 'nin çok büyük olduğu göz önünde tutulmalıdır. Bununla beraber bu şart ( $L$ 'nin büyük olma şartı) bize zorluk çıkarmaz. Çünkü ileride göreceğimiz gibi  $L$ , sistemin termodinamik özelliklerini belirten terimde yer almaz.  $Y$ 'ler ve  $X$ 'lerin bu düşey açıklaması kullanıldığında, aralarındaki bağıntı kolayca türetilebilir. Bütün bağ guruplarının denk olması yüzünden  $k-(k+1)$  bağ gurubu dikkate alınır. Tablo(2.1) bize bu durumda (+ +) bağların sayısının  $Y_1L$ , (+ -) bağlarınınkinin de  $Y_2L$  olduğunu söyler.  $K$ 'inci nokta gurubu için noktaların sayısı tablo(2.2)'de görüldüğü gibi  $X_1L$ 'dir. Böylece  $k$ 'inci nokta ve  $k-(k+1)$  bağıntı ve daha sonra da  $(k+1)$ 'inci nokta ile  $k-(k+1)$  bağıntı dikkate alarak aşağıdaki bağıntılar elde edilir.

$$X_1 = Y_1 + Y_2$$

$$X_2 = Y_3 + Y_4 \quad (2.3)$$

$$X_1 = Y_1 + Y_3$$

$$X_2 = Y_2 + Y_4$$

İşte bu (2.3) denklemleri türetilmek istenen denklemlerdir. Simetriden dolayı,

$$Y_2 = Y_3 \quad (2.4)$$

bağıntısı bulunur. Bu sistemin homojenliğinin bir sonucudur veya daha açık bir ifadeyle bütün set noktalarının eşit  $X_1$  veya  $X_2$  oluşu kabulünün bir sonucudur. Bu olasılık ifadesi her zaman bir grup vasıtası ile açıklanabilir. Diğer bir deyişle, yukarıdaki ifade, k'inci örgü noktasının grubunda bulunan + spinlerin kesri  $X_2$ 'dir şeklindeki ifadeye denktir.

Daha önce grup kavramı ortaya atılmasına rağmen, daha çok bir nokta veya bağ kullanılacaktır. Böyle bir k-(k+1) bağ Y dağılımına sahiptir denilebilir. Bu da toplulukdaki k-(k+1) bağ grubu için spin çiftleri  $Y_1$ ,  $Y_2$ ,  $Y_3$  ve  $Y_4$  demektir. Burada bahsettiğimiz grup kavramı X'ler ve Y'ler arasındaki bağıntıları elde etmede olduğu gibi, bundan sonraki kısımda bahsedeceğimiz  $\Omega$  ağırlık faktörünü türetmede de kullanılacaktır.

**II.1.D. Entropi ve Serbest Enerji İfadesinin Çıkarılması:** Tanımlanan X ve Y'ler yardımıyla serbest enerji ifadesini teşkil etmek için, denklem (2.2) ile beraber entropiye de ihtiyaç duyulur. Entropi genel halde,

$$S(\omega) = k \ln \Omega(\omega) \quad (2.5)$$

ile tanımlanır. Bu ifadede  $\Omega$  aynı  $\omega$  iç değişkenine sahip bir sistemin farklı durumlarının sayısıdır. Çoğu zaman ağırlık faktörü olarak da adlandırıldığı olur.  $k$  ise Boltzman sabitini göstermektedir. Mevcut problem için  $\Omega$  ağırlık faktörü verilen  $Y_1$ ,  $Y_2$ ,  $Y_3$  ve  $Y_4$  iç değişkenleri ile belirlenen bir sistemin farklı şekillenimlerinin sayısıdır.

$Y_i$ 'lerin fonksiyonu olarak  $\Omega$ 'yı formülleştirmek için, doğrudan doğruya bir sistemin  $\Omega$ 'sı yerine, bir topluluğun (L tane sistem)  $\Omega^{(L)}$  si ile çalışmak daha kolaydır. Burada (t) topluluğu temsil etmektedir.

$\Omega^{(t)}$ , Y iç değişkenleri cinsinden tanımlanan bir topluluğun

durumunun değişik şekillenim sayısıdır. Diğer bir deyişle,  $\Omega^{(t)}$  her bir bağı dağılımı Y olacak şekilde temsil etme sayısıdır.

Şekil(2.2)'de görülen topluluğun kurulması için; sol taraftan başlanıp, k'inci örgü noktasına gelindiği farz edilecektir. Bu işi yaparken her bir bağı Y dağılımında olmasına dikkat edilecektir. Burada k'inci örgü noktasındaki + spin sayıları  $X_1 L$ , -spin sayıları  $X_2 L$  olacaktır daha önceki açıklamalar ışığı altında kolayca görülür. Bundan sonraki basamak ise, (k+1)'inci örgü noktasına k-(k+1) bağı Y dağılımına sahip olacak şekilde + ve - spinler yerleştirmektir. Bunu yapmak için k'inci örgü noktasında bulunan +spinli  $X_1 L$  noktalarından,  $Y_1 L$  noktalarını seçelim. Böylece her  $Y_1 L$  noktaları seçilmiş olur. Sonra +spinli (k+1)'inci örgü noktasına koyunca, (+ +) görünüşlü  $Y_1 L$  bağı tamamlanmış olur. Geri kalan  $X_1 L$  noktalarıyla yani,  $X_1 L - Y_1 L = Y_2 L$  noktalarının her biri için (k+1)'inci örgü noktasına -spin konulursa (- +) görünüşüne sahip  $Y_2 L$  bağı elde edilmiş olur. Sonra -spinli  $X_2 L$  noktalarından başlayarak,  $Y_3 L$  noktasını seçelim ve (k+1)'inci noktaya + spinini yerleştirelim. Geri kalan  $X_2 L - Y_3 L = Y_4 L$  nokta için (k+1)'inci noktaya da bir -spin yerleştirilir. Topluluğu bu şekilde kurmakla k-(k+1) bağı Y dağılımında olması sağlanmış olur. Bu da basit bir analizle;

$$g = \frac{(x_1 \cdot L)!}{(y_1 \cdot L)! (y_2 \cdot L)!} \cdot \frac{(x_2 \cdot L)!}{(y_3 \cdot L)! (y_4 \cdot L)!} \quad (2.6)$$

şeklinde yazılabilir. Bir topluluğun  $\Omega^{(t)}$ 'sini bulmak için de, bu işlemi N defa tekrar etmek gerekir.(Son etki ihmal edilmektedir.). Buradan,

$$\Omega^{(t)}(\gamma) = \left[ \frac{\prod_{i=1}^2 (x_i L)!}{\prod_{i=1}^4 (y_i L)!} \right]^N \quad (2.7)$$

şeklinde yazılır. Burada N topluluk sayısıdır. Her bir topluluk da L

sistemden meydana gelmiştir. Topluluğun entropisi ise denklem(2.5) denklem(2.7) ve Stirling yaklaşımı kullanılarak aşağıdaki şekilde bulunur.

$$S^{(4)}(Y) = k \cdot \text{Ln} \mathcal{L}^{(4)}(Y) = k \cdot \text{Ln} \left[ \sum_{i=1}^2 X_i \cdot \text{Ln} X_i - X_i - \sum_{i=1}^4 Y_i \cdot \text{Ln} Y_i - Y_i \right] \quad (2.8)$$

Topluluğun entropisi  $S^{(4)}$ , topluluktaki sistemlerin sayısı olan  $L$  ile orantılıdır. Dolayısıyla tek bir sistemin entropisi  $S(Y)$  için,

$$S(Y) = S^{(4)}(Y) / L \quad (2.9)$$

ifadesi yazılabilir.

Bu aşamalardan sonra iç enerji ve entropi, kesirsel değişkenler yardımıyla ifade edilebilir. Serbest enerji ifadesi,

$$F(\alpha) = E(\alpha) - T \cdot S(\alpha) \quad (2.10)$$

şeklinde tanımlanır. Burada  $T$  mutlak sıcaklıktır. Denklem(2.10),(2.2) ve (2.8) ile birlikte (2.9)'u da kullanarak serbest enerji için,

$$F(Y) = Nk \left( -Y_1 + Y_2 + Y_3 - Y_4 \right) - NkT \left[ \sum_{i=1}^2 X_i \cdot \text{Ln} X_i - X_i - \sum_{i=1}^4 Y_i \cdot \text{Ln} Y_i - Y_i \right] \quad (2.11)$$

denklemini yazılabilir. Serbest enerji ifadesi bulunduktan sonra diğer termodinamik fonksiyonlar artık basit matematiksel işlemlerle elde edilebilir. Sistemin denge durumundaki davranışını incelemek için serbest enerji  $F$ , iç değişkenlere göre minimize edilmelidir. Burada dört tane  $Y$  değişkeni vardır. Bunlardan bir yada birkaçı bağımsız değişken seçilerek daha aza indirgenebilir. Bu çalışmada  $Y_1$  ve  $Y_2$  değişkenleri bağımsız değişken olarak seçilmiştir. Böylece (2.1) ve (2.4)'e kadar olan denklemler yardımıyla,

$$\begin{aligned}
X_1 &= Y_1 + Y_2 \\
X_2 &= 1 - Y_1 - Y_2 \\
Y_2 &= Y_3 \\
Y_4 &= 1 - Y_1 - 2Y_2
\end{aligned} \tag{2.12}$$

bağıntıları elde edilir. Bu bağıntılar ve serbest enerji denklem (2.11) de yerine yazılır ve  $Y_1$  ile  $Y_2$  'ye göre türevi alınıp minimize edilirse,

$$-N.kT \left[ \text{Ln} \frac{X_1}{X_2} - \text{Ln} \frac{Y_1}{Y_4} \right] = 0 \tag{2.13}$$

ve

$$4N\epsilon - NkT \left[ \text{Ln} \frac{X_1}{X_2} - 2 \cdot \text{Ln} \frac{Y_2}{Y_4} \right] = 0 \tag{2.14}$$

denklemleri elde edilir. Bu denklemlerde  $k = \frac{1}{\beta T}$  yazılarak, denklem (2.13)'den;

$$\frac{X_1}{X_2} = \frac{Y_1}{Y_4} \tag{2.15}$$

olduğu ve denklem(2.14)'den de,

$$Y_1 \cdot Y_4 = Y_2^2 \cdot e^{4\beta\epsilon} \tag{2.16}$$

olduğu görülür. Denklem(2.15) ve (2.16),  $Y_1$  ve  $Y_2$  için çözülmesi gerekli lineer olmayan cebrik denklemlerdir. Bu denklemlerin aşağıda gösterilen basit bir yolla analitik çözümü yapılabilir. Bunun için denklem(2.15), (2.3), ve (2.4) ile X'lerin normalizasyon şartı kullanılarak,

$$\frac{Y_1}{Y_4} = \frac{X_1}{X_2} = \frac{Y_1 + Y_2}{Y_2 + Y_4} \tag{2.17}$$

elde edilir. Bu (2.17) ifadesi de,

$$Y_1 = Y_4 \quad (2.18)$$

ve

$$X_1 = X_2 = 1/2 \quad (2.19)$$

bağıntılarını verir. Denklem(2.16) ve (2.18) yardımıyla,

$$Y_1 = Y_2 \cdot e^{2\beta\epsilon} \quad (2.20)$$

neticesi bulunur ve denklem(2.20), (2.19) ve (2.12)'den

$$Y_1 = \frac{e^{\beta\epsilon}}{4\cosh(\beta\epsilon)} \quad (2.21)$$

$$Y_2 = \frac{e^{-\beta\epsilon}}{4\cosh(\beta\epsilon)}$$

bağıntıları elde edilir. İşte bu bağıntılar serbest enerjiyi minimize eden iç değişkenler grubudur.  $Y_1$  ve  $Y_2$ 'ün bulunmasıyla,  $X_1$ ,  $X_2$  ve  $Y_3$ 'de bulunmuş olur. Bulunan bu değişkenler her hangi bir termodinamik davranışın uygun denleminde yerine konularak, o termodinamik nicelik türetilebilir. Örneğin, sıcaklığın bir fonksiyonu olarak sistemin enerjisi denklem (2.21)'i denklem(2.2)'de kullanarak,

$$E = -N\epsilon \tanh(\beta\epsilon) \quad (2.22)$$

elde edilir. Diğer yandan denklem(2.13)'ü ve (2.14)'ü  $Y_2$  ile çarpıp, denklem(2.10)'dan çıkararak, F serbest enerji ifadesi,

$$F(Y) = N\epsilon(-Y_1 + Y_2 + Y_3 - Y_4) - NkT \left[ \sum_{i=1}^2 X_i \cdot \ln X_i - X_i - \sum_{i=1}^4 Y_i \cdot \ln Y_i - Y_i \right] \quad (2.23)$$

$$+ NkT \left[ \ln \frac{X_1}{X_2} - \ln \frac{Y_1}{Y_4} \right] Y_1 - 4N\epsilon Y_2 - NkT Y_2 \left[ \ln \frac{X_1}{X_2} - 2 \ln \frac{Y_3}{Y_4} \right]$$

olur. Bu denklem, (2.12), (2.18) ve (2.19) ifadeleri kullanılarak,

$$F(Y) = -N\epsilon - 2NkT \cdot X_2 \ln X_2 + 2NkT \cdot Y_4 \ln Y_4 + 2NkT \cdot Y_2 \ln Y_2 \quad (2.24)$$

şeklinde yazılır. Denklem(2.24)'de gerekli kısaltmalar yapılarak  $F(Y)$  serbest enerjinin basit hali,

$$F(Y) = -N\epsilon - NkT \cdot [\ln X_2 - \ln Y_4] \quad (2.25)$$

şeklinde elde edilir. Bu denklemde, (2.18), (2.19) ve (2.21)'in yerine konulmasıyla,

$$F(Y) = -N\epsilon - NkT \cdot \left[ \ln \frac{1}{2} - \ln \frac{e^{\beta\epsilon}}{4 \cosh(\beta\epsilon)} \right] \quad (2.26)$$

bulunur. Denklem(2.26)'da logaritmanın özellikleri kullanılarak serbest enerji için,

$$F(Y) = -NkT \cdot \ln [2 \cdot \cosh(\beta\epsilon)] \quad (2.27)$$

sonucu elde edilir. Bu denklemi Bölüşüm fonksiyonu cinsinden,

$$\frac{Z}{Z_1} = e^{-\beta F} = (e^{\beta\epsilon} + e^{-\beta\epsilon}) \quad (2.28)$$

şeklinde yazabiliriz.

### BÖLÜM III

**III.1. İrreducible Cluster İntegral:** Bu bölümde, daha sonraki bölümlerde kullanılacak olan "İrreducible Cluster İntegral" türetilecektir.

Bilindiği gibi N parçacıktan oluşmuş bir sistemin klasik olarak Hamiltoniyeni,

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} + \sum_{i \neq j} \Phi_{ij} \quad (3.1)$$

şekindedir. Burada  $p_i$ , i'inci parçacığın momentumu,  $m_i$  kütlesi ve  $\Phi_{ij}$ 'de i'inci parçacık ile j'inci parçacık arasındaki etkileşim potansiyel enerjisidir (Huang, 1963).

V hacmine ve T mutlak sıcaklığına sahip N parçacıklı bir sistemin bölüşüm fonksiyonu ise,

$$Q_N(V, T) = \frac{1}{N! h^{3N}} \int d^{3N}p \cdot d^{3N}r \cdot \exp\left(-\beta \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} - \beta \sum_{i \neq j} \Phi_{ij}\right) \quad (3.2)$$

şekindedir. Burada h Planck sabitidir.

Denklem(2.3)'de momentuma bağlı integral alındığında,

$$Q_N(V,T) = \frac{1}{\lambda^{3N} N!} \int d^{3N}r. \exp(-\beta \sum_{i,j} \Phi_{ij}) \quad (3.3)$$

elde edilir. Burada  $\lambda = \sqrt{2\pi\hbar^2/mkT}$  termal dalga boyu ve mevcut integral ise "şekillenim integrali" olarak tanımlanır. Şekillenim integrali  $Z_n(V,T)$  ile gösterilip, denklem(3.3) yeniden yazılırsa,

$$Q_N(V,T) = \frac{1}{N! \lambda^{3N}} Z_n(V,T) \quad (3.4)$$

olduğu görülür.

Blindiği gibi büyük bölüşüm fonksiyonu (Grand partitation function)

$$Z(z,V,T) = \sum_{N=0}^{\infty} \eta^N \cdot Q_N(V,T) \quad (3.5)$$

formundadır(Huang, 1963). Burada  $\eta = z\lambda^{-3}$  ve  $z$  kimyasal potansiyeldir.

Termodinamik limitte, N parçacıktan oluşmuş, V hacmine ve T mutlak sıcaklığına sahip bir sistemin basıncı  $P(V,Z,T)$  ise,

$$P(V,Z,T) = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{kT}{V} \ln Z \quad (3.6)$$

ile verilir. Denklem(3.5)'e dikkat edilirse, N=0 durumunda olacaktır. Eğer N=0 ise denklem(3.5)'in açık yazılmasıyla,

$$Z_n(z,V,T) = 1$$

$$Z_n = 1 + \eta Q_1 + \frac{1}{2!} \eta^2 Q_2 + \frac{1}{3!} \eta^3 Q_3 + \dots + \frac{1}{N!} \eta^N Q_N \quad (3.7)$$

şeklinde olduğu görülür. Denklem(3.7)'nin logaritması alınır ve

$$\ln(1+X) \approx X - \frac{X^2}{2!} + \frac{1}{3!} X^3 - \dots + \frac{X^n}{n!} \quad (3.8)$$

yaklaşımı kullanılarak,

$$\begin{aligned} \ln Z &= \eta Q_1 + \frac{1}{2!} \eta^2 Q_2 + \frac{1}{3!} \eta^3 Q_3 - \frac{1}{2!} \left[ \eta Q_1 + \frac{1}{2!} \eta^2 Q_2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{3!} \eta^3 Q_3 \right]^2 + \frac{1}{3!} \left[ \eta Q_1 + \frac{1}{2!} \eta^2 Q_2 + \frac{1}{3!} \eta^3 Q_3 \right]^3 + \dots \end{aligned} \quad (3.9)$$

olarak elde edilir. Denklem(3.9)  $\eta$  'nün kuvvetlerine göre yeniden düzenlenirse,

$$\ln Z = \eta Q_1 + \eta^2 \left( \frac{1}{2} Q_2 - \frac{1}{2} Q_1^2 \right) + \frac{1}{3!} \eta^3 (Q_3 - 3Q_1 Q_2 + 2Q_1^3) \quad (3.10)$$

eşitliği elde edilir. Burada  $\eta$  'nün katsayıları yeni katsayılar ( $J_n$ 'ler) tanımlanarak, yeniden düzenlenirse,

$$\ln Z = \eta J_1 + \eta^2 J_2 + \eta^3 J_3 + \dots + \eta^n J_n \quad (3.11)$$

eşitliği elde edilir. Ya da seri şeklinde

$$\ln Z = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \eta^n J_n \quad (3.12)$$

olarak yazılabilir.

Denklem(3.6) yardımıyla,

$$\frac{P}{kT} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \eta^n J_n \quad (3.13)$$

elde edilir. Young Lee teoremi(Huang, 1963) yardımıyla,

$$\beta = z \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \left[ \ln Z(z, V, T) \right] \right\} \quad (3.14)$$

ya da

$$\beta = z \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{P}{kT} \right) = z \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \eta^n J_n \right] \quad (3.15)$$

yazılabilir.

Denklem(3.15)'deki türev alınarak ve  $n!=n.(n-1)!$  olduğu göz önünde bulundurularak,

$$f = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} m^n \cdot \dot{J}_n \quad (3.16)$$

elde edilir. Denklem(3.13) ve (3.16) arasındaki ilişkiden,

$$f = a_1 f + a_2 f^2 + a_3 f^3 + \dot{J}_2 (f^2 + 2a_2 f^3 + \dots) \dots + \frac{1}{2} \dot{J}_3 f^3 \quad (3.17)$$

elde edilir. Denklem (3.17)'yi 'nun kuvvetlerine göre yeniden düzenlersek,

$$f = a_1 f + f^2 (a_2 + \dot{J}_2) + f^3 (a_3 + 2a_2 \dot{J}_2 + \frac{\dot{J}_3}{2}) \quad (3.18)$$

elde ederiz. Denklemın sağlanması koşulundan,

$$\begin{aligned} a_1 &= 1 \\ a_2 &= -\dot{J}_2 \\ a_3 &= -2a_2 \dot{J}_2 - \frac{\dot{J}_3}{2} = 2\dot{J}_2^2 - \frac{1}{2} \dot{J}_3 \end{aligned} \quad (3.19)$$

olduğu görülür. Denklem(3.13) bu katsayılar cinsinden yazılarak,

$$P/K_T = \dot{J}_1 (f + a_2 f^2 + a_3 f^3) + \frac{1}{2!} \dot{J}_2 (f^2 + 2a_2 f^3 + \dots) + \frac{1}{3!} \dot{J}_3 (f^3 + \dots) \quad (3.20)$$

elde edilir.  $a_1, a_2, a_3$ 'ün  $\dot{J}_1, \dot{J}_2$  ve  $\dot{J}_3$  cinsinden yerine yazılmasıyla,

$$\frac{P}{f K_T} = 1 - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k}{k+1} \beta_k f^k \quad (3.21)$$

yani "Irreducible Cluster Integral" elde edilmiş olur. Bu bölümün başında belirtildiği gibi denklem(3.21) daha sonraki bölümlerde kullanılacaktır.



## BÖLÜM IV

**IV.1. SEÇİLEN MODEL İÇİN ENTROPİNİN OLUŞTURULMASI:** Bölüm II'de verilen temel bilgiler yardımıyla iki boyutlu ferromagnetik kare örgüde entropinin oluşturulabilmesi için, önce iç değişkenlerin tanımlanması gerekmektedir.




Bu çalışmada, model olarak iki boyutlu ferromagnetik kare seçildiği daha önce belirtilmişti. Kare aynı cins atomlardan oluşmuş olup, spinlerin şekillenim olasılıkları Tablo(4.1)'deki gibidir.

Spin	Olasılık
$\oplus$	$X_1$
$\ominus$	$X_2$

Tablo(4.1): Spinlerin şekillenim olasılıkları.

Burada  $\oplus$  , spinin yönünün yukarı olduğunu,  $\ominus$  ise, spinin yönünün aşağı olduğunu göstermektedir.  $X_1$  spinin yönünün yukarı olma olasılığı,  $X_2$  'de spinin yönünün aşağı olma olasılığıdır.

Ferromagnetik kare, çiftleri de içine aldığından; çiftler ve çiftlere ait şekillenim olasılıklarını da tanımlamak gerekmektedir. Bu şekillenim ve olasılıklar, Tablo(4.2)'deki gibidir.

Çift	Olasılık	$\gamma$
	$Y_1$	1
	$Y_2$	2(Simetriden)
	$Y_3$	1

Tablo(4.2): Çiftlerin şekillenim olasılıkları.

Burada  $Y_1$ , her iki spinin yönünde yukarı olma olasılığını,  $Y_2$  spinlerden birinin yukarı, diğerinin aşağı olma olasılığını,  $Y_3$  ise her iki spinin de aşağı doğru olma olasılığını göstermektedir.  $\gamma$  ise aynı olasılığa sahip farklı şekillenim sayısını göstermektedir.

Tablo(4.2)'de tanımlanan  $Y_1$ ,  $Y_2$  ve  $Y_3$  'ü Tablo(4.1)'de tanımlanan  $X_1$  ve  $X_2$  'nin doğrusal birleşimi olarak;

$$X_1 = Y_1 + Y_2 \quad (4.1)$$

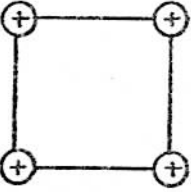
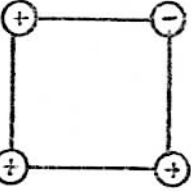
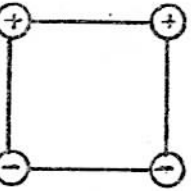
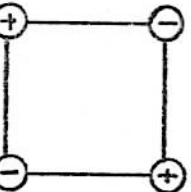
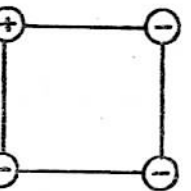
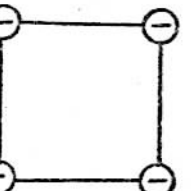
$$X_2 = Y_2 + Y_3$$

şeklinde yazabiliriz. X'ler ve Y'ler olasılık tanımladıkları için normalizasyon şartınıda sağlamaları gerekir. Böylece,

$$\sum_i X_i = 1 \quad (4.2)$$

$$\sum_i \gamma_i Y_i = 1$$

olduğu görülür.

Şekillenim	Olasılık	$\gamma$
	$W_1$	1
	$W_2$	4
	$W_3$	4
	$W_4$	2
	$W_5$	4
	$W_6$	1

Tablo(4.3): Karenin şekillenim olasılıkları.

Burada  $\gamma$  , aynı olasılığa sahip kare örgüde, farklı şekillenimlerin sayısıdır.  $W_i$  'ler ise kareye ait şekillenim olasılıklarını göstermektedir.

Karenin her köşesinde bir atom bulunduğu ve karenin dört köşesi olduğundan, toplam şekillenim sayısı  $(2)^4=16$  tanedir. Kare örgünün sahip olduğu bu şekillenimler Tablo(4.3)'de verilmiştir.

Spin ve çiftşekillenim olasılıkları, kare şekillenim olasılıkları  $w$  cinsinden;

$$\begin{aligned} Y_1 &= W_1 + 2W_2 + W \\ Y_2 &= W_2 + W_3 + W_4 + W_5 \\ Y_3 &= W_3 + 2W_5 + W_6 \end{aligned} \quad (4.3)$$



ve

$$\begin{aligned} X_1 &= Y_1 + Y_2 = W_1 + 3W_2 + 2W_3 + W_4 + W_5 \\ X_2 &= Y_2 + Y_3 = W_2 + 2W_3 + W_4 + 3W_5 + W_6 \end{aligned} \quad (4.4)$$

şeklinde elde edilir.

Tablo(4.1)'de tanımlanan  $\oplus$  spin molekülü ve  $\ominus$  spinin de boşluğu gösterdiği düşünülürse; Katı-Küre Modeli, iki molekülün yanyana gelmesini sınırlandırarak elde edilir. Böylece her molekül ancak kendi boşluğuna hareket edebilir.



Katı-Küre Modeli uygulanarak, Tablo(4.1) yeniden düzenlenirse Tablo(4.4) elde edilir.

Atom	Olasılık
	$X_1$
	$X_2$

Tablo(4.4): Atomların şekillenim olasılıkları.

Tablo(4.4)'de koyu daire molekül, boş daire de boşluğu temsil etmektedir.  $X_1$  molekülün yerinin dolu olma olasılığı  $X_2$  ise, molekülün yerinin boş olma olasılığıdır.

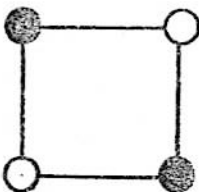
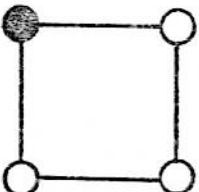
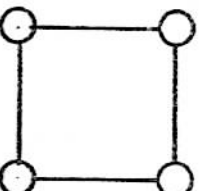
Katı-Küre Modeli'nin getirdiği sınırlama ile Tablo(4.2) yeniden Tablo(4.5)'deki gibi düzenlenebilir.

<u>Çift</u>	<u>Olasılık</u>	<u><math>\gamma</math></u>
	$Y_1$	2
	$Y_2$	1

Tablo(4.5): Çiftlerin şekillenim olasılıkları.

Burada  $Y_1$ , bir molekül ve boşluk çiftini  $Y_2$  ise, boşluk çiftine ait olasılıkları göstermektedir.

Ortaya konan sınırlama ile kareye ait şekillenim ve şekillenim olasılıkları da Tablo(4.6)'daki gibi yeniden düzenlenir. Böylece Tablo(4.3) Tablo(4.6)'ya indirgenmiş olur. Burada da esas olan temel düşünce iki molekülün yanyana gelmesini sınırlamaktır.

Şekillenim	Olasılık	$\gamma$
	$Z_1$	2
	$Z_2$	4
	$Z_3$	1

Tablo(4.6): Karenin şekillenim olasılıkları.

Burada  $Z_1$ ,  $Z_2$  ve  $Z_3$ , iki molekülün yanyana gelmesini önleyecek şekilde tanımlı karenin şekillenim olasılıklarıdır.

Yeni tanımlanan alt kümeleri, seçilen temel kümenin doğrusal birleşimi olarak yazabiliriz. Denklem(4.3) ve denklem(4.4)'e Katı-Küre Modelinin uygulanmasıyla,

$$\begin{aligned} Y_1 &= X_1 = X \\ Y_2 &= 1 - 2X \end{aligned} \quad (4.5)$$

ve

$$\begin{aligned} X_1 &= X \\ X_2 &= 1 - X \end{aligned} \quad (4.6)$$

elde edilir.  $Z_1$  ve  $Z_2$  'nin de  $X$  cinsinden yazılmasıyla,

$$\begin{aligned} Z_1 &= \frac{1}{2} - X \\ Z_2 &= 2X - \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (4.7)$$

elde edilir.

Bu şekilde  $X$ ,  $Y$  ve  $Z$  'ler yeniden yazıldıktan sonra, kare örgü için ağırlık faktörünü yazarak, entropiyi oluşturabiliriz.

Bölüm II'de tartışmasını yaptığımız ağırlık faktörü  $W$ , iki boyutlu ferromagnetik kare için,

$$W = \frac{[Y_i!]^2}{[X_i!][Z_i!]} \quad (4.8)$$

şeklinde verilir (Kikuchi ve Brush, 1966).

Denklemler (2.5) yardımıyla entropi,

$$S = k \ln W = 2k [\ln Y_i!] - k \ln [X_i!] - k \ln [Z_i!] \quad (4.9)$$

elde edilir. Denklem (4.9)'daki logaritmik ifadelerde Stirling yaklaşımı kul-

lanılarak,

$$S = k. [2Y_1 \ln Y_1 - 2Y_1 + 2Y_2 \ln Y_2 - 2Y_2] - k [X_1 \ln X_1 - X_1 + X_2 \ln X_2 - X_2] - k [Z_1 \ln Z_1 - Z_1 + Z_2 \ln Z_2 - Z_2] \quad (4.10)$$

şeklinde yazılabilir.

Denklem(4.5), (4.6) ve (4.7)'deki  $X_i$ ,  $Y_i$  ve  $Z_i$ 'nin değerleri  $X$  cinsinden yerine yazılırsa, birim parçacık başına entropi,

$$\begin{aligned} \frac{S}{N} = & k [2x \ln x - 2x + 2(1-2x) \ln(1-2x) - 2(1-2x)] \\ & - k [x \ln x - x + (1-x) \ln(1-x) - (1-x) + 2(2x-\frac{1}{2}) \ln(2x-\frac{1}{2}) \\ & - 2(2x-\frac{1}{2}) + 4(\frac{1}{2}-x) \ln(\frac{1}{2}-x) - 4(\frac{1}{2}-x)] \end{aligned} \quad (4.11)$$

olarak elde edilir.

**IV.II. FAZ GEÇİŞİ VE ENTROPİNİN SÜREKSİZLİĞİ:** Sıcaklık, basınç, elektrik alan bir sistem üzerine etki ediyorsa; sistemin serbest enerjisi düzgün ve sürekli olarak değişir. Serbest enerjinin bu şekilde değişimleri yapısal değişimlerle ilgili ise, faz geçişleri meydana gelir.

"Clasious-Clapeyron" denklemi Gibbs'in serbest enerjisinin birinci türevindeki süreksizliği ilgilendiren, birinci dereceden faz geçişlerini açıklar(Landau, 1969). Clasious-Clapeyron denklemi,

$$\frac{dP}{dT} = \frac{\Delta S}{\Delta V} \quad (4.13)$$

şeklindedir.

Bu çalışmada denklem(4.13) ile verilen Clasious-Clapeyron denkle-

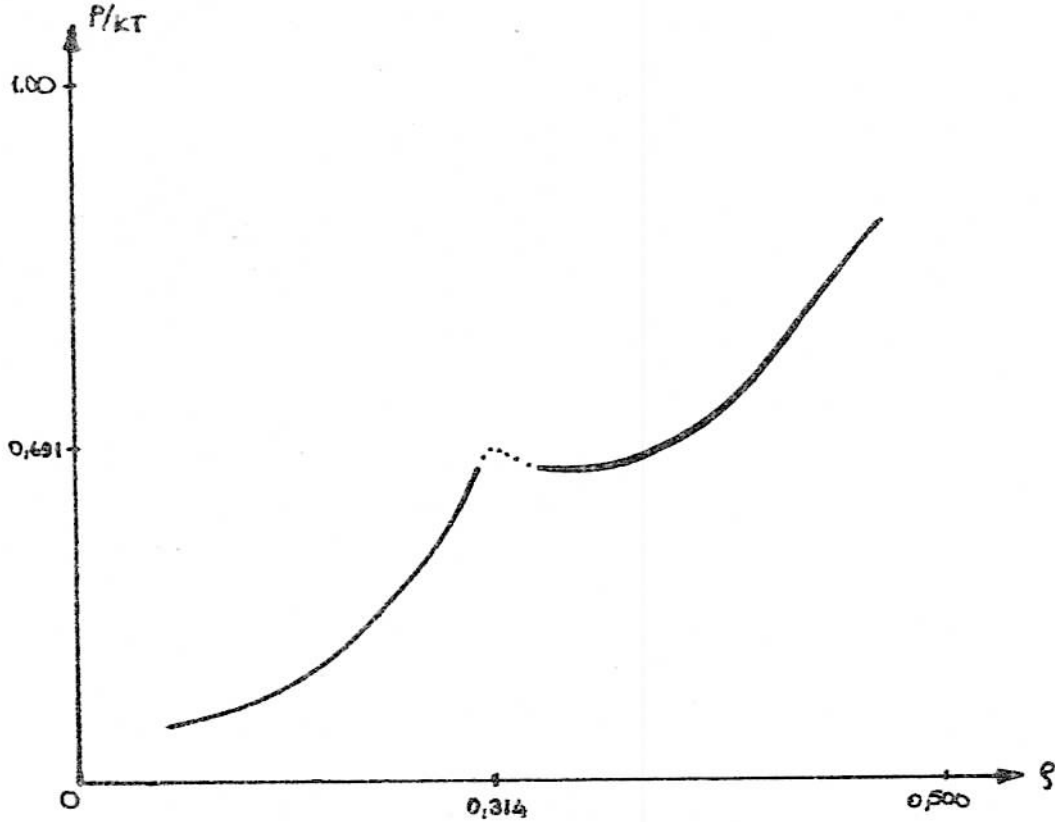
minde entropinin süreksizliği,  $S \rightarrow 0$  koşulu dikkate alınmıştır ve faz geçişi tespit edilmiştir.  $S \rightarrow 0$  koşulu yardımıyla denklem(4.12)'yi sıfır yapan değer, basit bir bilgisayar programı yardımıyla bulunmuştur.  $S \rightarrow 0$  koşulunu sağlayan kritik değer  $X_c=0.314$  olarak elde edilmiştir.

Yapılan çoğu çalışmalarda, genellikle  $\frac{P}{ET}$  dikkate alınarak literatür değerleriyle karşılaştırma yapıldığı için,  $\frac{P}{ET}$  değerleri denklem(3.21) yardımıyla bulunmuş ve Tablo(4.7)'deki veriler elde edilmiştir.

$\frac{P}{kT}$	X
0.7795	0.3032
0.7819	0.3132
0.6912	0.3142
0.7016	0.3150
0.7096	0.3175
0.8017	0.3212
0.8175	0.3332
0.8366	0.3532
0.8832	0.3732
0.9101	0.3832
0.9232	0.3935
0.9700	0.4031
1.0029	0.4132

Tablo(4.7): Çeşitli X değerlerine karşı elde edilen  $\frac{P}{kT}$  değerleri.

Daha önce tanımladığımız X'ler, birim hacim başına yoğunluk  $\rho$ 'ya karşılık geldiğinden (Runnells, 1970), kritik yoğunluk  $\rho_c = 0,314$  olarak bulunmuştur. Tablo(4.7)'deki veriler yardımıyla  $P/\rho T$ 'nin  $\rho$ 'ya göre değişimi incelenmiş ve Çizelge(4.1)'deki gibi bir değişim gözlenmiştir.



Çizelge(4.1):  $P/\rho T$ 'nin  $\rho$ 'ya göre değişimi.

Elde edilen kritik değer yardımıyla katı-sıvı faz geçiş noktasının yeri tespit edilmiş, elde edilen bu değer literatür değerleri ile karşılaştırılması Tablo(4.8)'de verilmiştir. Sonucun literatür değerleri ile uyum içinde olduğu, aşırı bir sapma göstermediği görülmüştür.

	Bethe	veya	En iyi bilinen	Bu çalışma
$X_c$	0,25	0,317	0,370	0,314
$\frac{P_c}{kT}$	0,523	0,693	0,790	0,691

Tablo(4.8): Elde edilen deęerin, literatür deęerleri ile karşılaştırılması.

IV.III. SONUÇ VE ÖNERİLER: Bu çalışmada; Fizikçiler, Kimyacılar ve Madde bilimcilerin üzerinde yoğun çalışmalar yaptığı faz geçişi, iki boyutlu ferromagnetik kare örgü model alınarak, kapalı form yaklaşımlarından Kümesel Değişim Yöntemi ve Katı-Küre Modeli yardımıyla incelendi. Bu metotla kooperatif problemlerin çözümü incelenmeden önce, kullanılan metodun diğer metotlara göre üstünlüğü kısaca tartışıldı.

İlk olarak, tek boyutlu Ising Model örnek seçilerek, Kümesel Değişim Yöntemi incelendi. Bu modelde her bir örgü noktasındaki spin magnetik momentlerinin küçük bir mıknatıs gibi +(yukarı) yada -(aşağı) yönelmesi hareket noktamız oldu. Bu kabul ışığı altında, iç değişkenler tanımlandı ve iç değişkenler cinsinden entropi oluşturuldu. Seçilen kare örgü için de iç değişkenler tanımlanıp, Katı-Küre Modeli elde edilerek faz geçişi araştırıldı. Clasiouş-Clapeyron denkleminin öngördüğü süreksizlik dikkate alınarak,  $S \rightarrow 0$  koşulu yardımıyla faz geçiş noktasında  $X_c = 0,314$  olarak saptandı.

Elde edilen bu deęer, literatür deęerleri ile karşılaştırılarak uyum içinde olduęu, aşırı bir sapma göstermedięi görüldü.

Bu çalışmada kullanılan yöntemin zorluğu, iç deęişkenleri seçilen

tek bir bağımsız değişken cinsinden ifade etmede yatmaktadır. Model basit olduğu zaman kolayca yazılabilmekte fakat geometri karışıkça, iç değişkenleri tek bir bağımsız değişken cinsinden yazmak oldukça zorlaşmaktadır. Bu zorluk yenildiği takdirde, diğer yöntemlerden daha iyi sonuçlar elde edilebilir.

Kullanmış olduğumuz yöntem, düzenli-düzensiz(Order-Disorder) geçiş problemlerinde(Sato ve Kikuchi, 1976), faz dönüşüm problemlerinde (Bodegam ve Mijer, 1982), aşırı soğutulmuş sıvıların incelenmesinde (Bodegam, 1982), geçici kararlı-kararsız durumların incelenmesinde(Keskin ve Meijer, 1983), ani soğutma olaylarının açıklanmasında(Keskin ve Meijer, 1983), özellikle alaşım problemlerinin çözümünde(Bodegam, 1982) ve diğer birçok fiziksel olayların incelenmesinde kullanılır. Yöntem son zamanlarda fazla kullanılması nedeniyle, bu alanda çalışanlar ve çalışacaklar için; çalışmanın yardımcı olacağı ve yol göstereceği inancını vurgulamak isteriz.

## ÖZET

### KATI KÜRE MODELİ İLE BİRİNCİ DERECEDEN KATI-SIVI FAZ GEÇİŞİNİN İNCELENMESİ:

Düzenli-düzensiz(Ořder-disorder) geçiř problemleri, faz dōnūřüm problemleri, ařırı soęutulmuř sıvıların incelenmesi problemi, geçici kararlı kararsız durumların incelenmesi problemi, ani soęutma olaylarının açıklanması vb. birçok fiziksel problemlerin çōzümünde kullanılan Kümesel Deęiřim Yōntemi ve Katı-Küre Modeli, bu çalıřmada birinci dereceden katı-sıvı faz problemine uygulandı.

Model olarak iki boyutlu ferromagnetik kare seçilip, iç deęiřkenler tanımlanarak gerekli termodinamiksel nicelikler oluřturuldu. Kümesel Deęiřim Yōntemi'ne getirilen bir sınırlama ile Katı-Küre Modeli elde edildi. Entropinin süreksizlięi dikkate alınarak, faz geçiř noktası belirlendi.

Elde edilen sonuçlar, dięer yöntemler ile bulunan sonuçlarla karşılařtırıldı. Sonucun uyum içerisinde olduęu görüldü.

Kullanılan yöntemin dięer yöntemlere göre üstün ve üstün olmayan yönleri kısaca tartıřılarak, öneriler verildi.

## ABSTRACT

THE INVESTIGATION OF FIRST ORDERED SOLID-LIQUID  
PHASE TRANSITION:

In this study, Ordered-disordered transition problems, the investigation of supercooling Liquids problems, the investigation of transient stable and unstable behaviour problems, the explanation of prompt cooling effect problems, and also the use and the solution of Cluster Variation Method, and Hard-Square Model utilized in the first order Solid-Liquid phase problems.

As a model, two dimensional ferromagnetic square was chosen, and explained inner variables were used to determine thermodynamics quantities.

Hard-Square Model was obtained by a constraining Cluster-Variation Method. The phase transition point was determined by taking upon the infinite of entropy.

The comparison of obtained results with results given in literature showed that all results were in unity.

Advantage and disadvantage of the method was discussed shortly, and new solution methods have been proposed.

## KAYNAKLAR

- Bodegam E. ve Meijer P.H.E. "Long Term Behaviour of Phase Separation, Computations with the Non-Homogeneous Time Dependent Cluster-Variation Method.", Physica, 122 A, 1982, 13-36.
- Bodegam E. "Süpercooling in Binary Liquid Mixtures.", Doktora tezi, Department of Physics, The Catholic University of America, Washington, D.C., 1982.
- Bellemans A. ve Nigam R.K. "Phase Transition in Two Dimensional Lattice Gases of Hard-Square Molecules.", Journal of Chem. Phys., Vol. 46, Num. 8, 1967, 2922-2935.
- Burley D.M. "Closed Form Approximations for Lattice Systems.", Editör C. Domb ve M.S. Green, Academic Press, Londra, 1976, Vol.2, Bölüm 9.
- Huang K. "Statistical Mechanics.", First Edition, John Willey and Sons Inc. New York, 1963, Bölüm 16,17.
- Huang K. "Statistical Mechanics." First Edition, John Willey and Sons Inc. New York, 1963, Bölüm 15, 316.
- Huang K. "Statistical Mechanics." First Edition, John Willey and Sons Inc., New York, 1963, Bölüm 15, 314.
- Huang K. "Statistical Mechanics", First Edition, John Willey and Sons Inc., New York, 1963, Bölüm 15, 313.
- Keskin M. ve Meijer P.H.E. "A Model for Quenching via Hidden variables; Non-Equilibrium Behaviour of a system Two Long Range Order Parameters.", Physica, 122 A, 1983, 1-12.
- Kikuchi R. "Crystal Statistic", Huges Research Labs., California (Basıl-

mamış), 1979; Bölüm 2, 4.

Kikuchi R. "A theory of Cooperatif Phenonema", Physical Rewiev, 81, 1951, 988-1002.

Landau L.D. ve Lifshitz E.M. "Statistical Physics", Second Edition, Pergaman Press, Oxford, 1978, Bölüm 14.

Temperly H.N.V. "An exactly Soluble Lattice Model of the Fluid-Solid transition.", Proc. Roy. Sos., Vol. 86, 185.

