

**T.C.  
BALIKESİR ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ  
FİZİK ANABİLİM DALI**

**MANYETİK MALZEMELERİN MİKNATISLANMA  
MEKANİZMALARININ İKİ BOYUTLU ISING MODELİYLE  
İNCELENMESİ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**Hatice ÜNAL**

**Balıkesir, Temmuz - 2009**

**T.C.  
BALIKESİR ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ  
FİZİK ANABİLİM DALI**

**MANYETİK MALZEMELERİN MİKNATISLANMA  
MEKANİZMALARININ İKİ BOYUTLU ISING MODELİYLE  
İNCELENMESİ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**Hatice ÜNAL**

**Balıkesir, Temmuz – 2009**

T.C.  
BALIKESİR ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ  
FİZİK ANABİLİM DALI

MANYETİK MALZEMELERİN MİKNATISLANMA  
MEKANİZMALARININ İKİ BOYUTLU ISING MODELİYLE  
İNCELENMESİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Hatice ÜNAL

Tez Danışmanı: Doç. Dr. Mustafa GÖKTEPE

Sınav Tarihi : 17.07.2009

Jüri Üyeleri : Yrd. Doç Dr. Taner TANRISEVER

Doç. Dr. Hakan KÖÇKAR

Doç Dr. Mustafa GÖKTEPE

Balıkesir, Temmuz - 2009

## ÖZET

### MANYETİK MALZEMELERİN MİKNATISLANMA MEKANİZMALARININ İKİ BOYUTLU ISING MODELİYLE İNCELENMESİ

Hatice ÜNAL

Balıkesir Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı

(Yüksek Lisans Tezi / Tez Danışmanı: Doç. Dr. Mustafa GÖKTEPE)  
Balıkesir, 2009

Ferromanyetik malzemelerin başta algılayıcı uygulamaları olmak üzere mühendislik uygulamalarında önemli yere sahip olduğu bilinmektedir. Daha hassas ve güvenilir algılayıcıların geliştirilmesi açısından, bu malzemelerin mıknatıslanma mekanizmalarının anlaşılması gerekmektedir. Bitter-Kolloid ve Kerr etkisi gibi çeşitli yöntemler kullanılarak gözlenebilen manyetik domain yapıların aynı zamanda modelleme çalışmalarının yapılması, mıknatıslanma mekanizmalarının daha iyi anlaşılmasına imkân tanımaktadır.

Bu çalışmada, ferromanyetik katılarda yer alan manyetik domain sistemlerinin mıknatıslanma mekanizmalarının modellenmesi, iki boyutlu Ising model ve Monte Carlo modelleme tekniği kullanılarak yapılmıştır. Sıcaklık ve manyetik alanın manyetizasyon süreci üzerindeki etkileri modellenerek incelenmiştir.

Simulasyonda atomik manyetik momentlerin ferromanyetik domainler içinde sıralanmaları, ferromanyetik malzemenin ısıtıldığı zaman Curie sıcaklığında paramanyetik malzemeye geçişi, manyetik alanın ferromanyetik domainlere ve paramanyetik fazda bulunan sisteme etkileri çalışılmıştır.

**ANAHTAR SÖZCÜKLER:** Manyetik Domain / Ferromanyetik Malzeme / Monte Carlo Yöntemi / Ising Model

## **ABSTRACT**

### **INVESTIGATION OF MAGNETISATION MECHANISM FOR MAGNETIC MATERIALS BY USING TWO DIMENSIONAL ISING MODEL**

**Hatice ÜNAL**

**Balikesir University, Institute of Science, Department of Physics**

**(M. Sc. Thesis / Supervisor : Assoc. Prof. Dr. Mustafa GÖKTEPE)**

**Balikesir - Turkey , 2009**

It is possible to use ferromagnetic materials for many engineering applications such as sensors and transducers. Due to this, understanding of the magnetization processes of ferromagnetic materials is very important issue to improve sensitivity, repeatability and linearity for sensor applications. Magnetization process of magnetic domains can be observed using various methods like colloidal technique and Kerr effect. Magnetization process of the ferromagnetic systems could be more understandable with simulation study.

In this study, the simulation of magnetisation process on magnetic domains has been studied by using two-dimensional Ising model and Monte Carlo simulation technique. The effect of temperature and external magnetic field on magnetisation process were simulated and investigated.

In simulation, ordering of magnetic moments in ferromagnetic domains, transition of ferromagnetic matter to paramagnetic matter when it is heated, the effect of magnetic field to ferromagnetic domains and paramagnetic matter were studied.

**KEY WORDS:** Magnetic Domain / Ferromagnetic Material / Monte Carlo Method / Ising Model

## İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET, ANAHTAR SÖZCÜKLER	ii
ABSTRACT, KEY WORD	iii
İÇİNDEKİLER	iv
SEMBOL LİSTESİ	vi
ŞEKİL LİSTESİ	viii
ÖNSÖZ	xii
1. GİRİŞ	1
2. MANYETİK DOMAINLER	3
2.1 Ferromanyetik Malzemelerde Domain Oluşumu	4
2.1.1 Manyetostatik Enerji	5
2.1.2 Değiş-Tokuş Enerjisi	7
2.1.3 Anizotropi Enerjisi	8
2.2 Manyetik Domain Duvarları	10
2.2.1 Domain Duvar Enerjisi ve Genişliği	12
2.3 Manyetik Domainleri Gözleme Teknikleri	15
2.3.1 Bitter Yöntemi	17
2.3.2 Geçirgen Elektron Mikroskobu	19
2.3.3 Kerr Etkisi	20
2.3.4 Faraday Etkisi	21
3. MANYETİK YAPILARIN MODELLENMESİ	23
3.1 Faz Geçişlerinin Yapısı ve Fiziği	23
3.2 İki Boyutlu Ising Model	24

4.	MONTE CARLO BENZETİM YÖNTEMİ	30
4.1	Monte Carlo İntegrasyon Yöntemi	33
4.2	İstatistik Fizikte Çok Boyutlu İntegrallerin Hesaplanması - Üleşim Fonksiyonu Z	34
4.3	Gelişigüzel Sayı Üretimi	38
4.4	Sayısal Hesap Açısından Önemli Noktalar	42
4.5	Algoritma	45
5.	MONTE CARLO UYGULAMASI SONUÇLARI	48
5.1	Domain Sistemleri Üzerinde Termal Etkinin Gözlenmesi	48
5.2	Domain Sistemleri Üzerinde Manyetik Alan Etkisinin Gözlenmesi	60
5.3	Paramanyetik Fazda Manyetik Alan Etkisinin Gözlenmesi	72
6.	SONUÇ VE TARTIŞMA	86
	KAYNAKLAR	89
	EKLER :	
	EK A Monte Carlo Simulasyon Yöntemiyle İncelenen İki Boyutlu Ising Modelin Algoritması	94
	EK B Monte Carlo Simulasyon Yöntemiyle İncelenen İki Boyutlu Ising Modelin C++ Program Kodu	96

## SEMBOL LİSTESİ

Simge	Adı	Tanımı/Değeri	(SI) Birimi
$T$	Sıcaklık		K
$T_C$	Curie sıcaklığı		K
$p$	Manyetik kutup şiddeti		
$r$	Uzaklık		m
$d$	Uzaklık		m
$\mu_0$	Boş uzayın manyetik geçirgenliği	$4\pi \times 10^{-7}$	Hm <sup>-1</sup>
$\vec{F}$	Kuvvet	$\mu_0 p \vec{H}$	N
$U$	Potansiyel	$-\frac{\mu_0 p}{4\pi r}$	
$\vec{H}$	Manyetik alan şiddeti		Am <sup>-1</sup>
$W$	İş	$\mu_0 \int_0^M \vec{H} \cdot d\vec{M}$	J
$\vec{M}$	Manyetizasyon	$\vec{m}/V$	Am <sup>-1</sup>
$\vec{H}_d$	Demanyetizasyon alanı	$-N_d \vec{M}$	Am <sup>-1</sup>
$N_d$	Demanyetizasyon faktörü		
$E$	Enerji		J
$E_e$	Değiş-tokuş etkileşme enerjisi	$-2J \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$	J
$J$	Değiş-tokuş enerji sabiti		J
$\vec{S}$	Spin açısal momentumu		
$s$	Spin kuantum sayısı		
$h$	Planck sabiti	$6.6 \times 10^{-34}$ Js	
$\phi$	Açı		
$E_a$	Anizotropi Enerjisi	$K_0 + K_1(\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \dots)$	J
$K$	Anizotropi sabiti		J/m <sup>3</sup>
$\alpha$	Doğrultu kosinüsü		



$a$	Örgü aralığı		m
$N$	Atom sayısı		
$\delta$	Domain duvar kalınlığı	$Na$	m
$\eta$	Düzen parametresi		
$n_+$	+z yönünde sıralanan atom sayısı		
$n_-$	-z yönünde sıralanan atom sayısı		
$\vec{m}$	Manyetik moment		$\text{Am}^2$
$r$	Konfigürasyon durumu		
$E_r$	r konfigürasyonunun enerjisi		J
$P_r$	Boltzmann Dağılımı	$\frac{e^{-\beta E_r}}{\sum_r e^{-\beta E_r}}$	
$\beta$	Sistemin sıcaklık parametresi	$(kT)^{-1}$	$\text{J}^{-1}$
$k$	Boltzmann sabiti	$1.381 \times 10^{-23}$	J/K
$w$	Geçiş olasılığı		
$\sigma$	Konfigürasyon		
$I$	[a,b] aralığındaki integral	$\int_a^b f(x)dx$	
$f(x)$	Fonksiyon		
$\langle f \rangle$	Fonksiyonun ortalama değeri		
$\Omega$	Girilebilir durumların sayısı		
$Z$	Üleşim fonksiyonu	$\sum_r e^{-\beta E_r}$	
$\bar{A}$	A niceliğinin ortalama değeri	$\sum_r A_r \frac{1}{Z} e^{-\beta E_r}$	
$\vec{M}_0$	Doyum manyetizasyonu		$\text{Am}^{-1}$
$\vec{M}_s$	Kendiliğinden manyetizasyon		$\text{Am}^{-1}$
$z$	En yakın komşu sayısı		
$t$	Zaman		iterasyon

## ŞEKİL LİSTESİ

### Şekil

<u>Numarası</u>	<u>Adı</u>	<u>Sayfa</u>
Şekil 2.1	Tek manyetik domainin enerjiyi azaltmak için bölünmesi	5
Şekil 2.2	Demir tek kristalinin üç temel kristalografik yön için manyetizasyon eğrileri	10
Şekil 2.3	180° Bloch duvarı	11
Şekil 2.4	Manyetik momentlerin (y,z) düzleminde domain duvarları içerisinde yön değiştirmeleri (a) Bloch duvarı; (b) Neel duvarı	11
Şekil 2.5	İnce bir katmanda iki domain arasında yer alan Neel duvarı	12
Şekil 2.6	Toplam domain duvar enerjisinin duvar kalınlığına bağlılığı	15
Şekil 2.7	Si-Fe numunede, yüksek alanlarda Bitter yöntemi ile gözlenen domainler	18
Şekil 2.8	Si-Fe numunede, daha düşük alanlarda Bitter yöntemi ile gözlenen domainler	18
Şekil 2.9	Bitter yöntemi ile domainlerin gözlenmesi	19
Şekil 2.10	Kerr yöntemi ile domainlerin gözlenmesi	20
Şekil 2.11	Amorf numunede Kerr yöntemi ile gözlenen domainler	21
Şekil 2.12	Faraday yöntemi ile domainlerin gözlenmesi	22
Şekil 3.1	Spinlerin yukarı (+1) ve aşağı (-1) olmak üzere sadece iki yönelime sahip olduğu iki boyutlu Ising örgüsü	25
Şekil 3.2	İki spinin etkileşme enerjisi	26
Şekil 3.3	İki boyutlu Ising modelde $J > 0$ iken sağlanan ferromanyetik düzen	27
Şekil 3.4	Artan sıcaklık etkisiyle gelişigüzelliği artan spin sistemi	27
Şekil 3.5	Değişik sıcaklıklarda, bir domain içinde bireysel manyetik momentlerin sıralanması	29
Şekil 4.1	Ortalama $\langle f \rangle$ değerinden çizilen dikdörtgenin alanı, eğri altında kalan alana eşit olur	33

Şekil 4.2	Bir spinin 4 komşusuyla etkileşmesi	43
Şekil 4.3	İki boyutlu Ising örgüsünün topolojik şeması	44
Şekil 4.4	Spin sisteminden gelişigüzel seçilen spinlerden birinin alt-üst edilmesi	46
Şekil 5.1	Sıfır manyetik alanda azaltılan sıcaklık etkisiyle bir domain içindeki spinlerin +z yönünde paralel sıralanması	52
Şekil 5.2	Sıfır manyetik alanda azaltılan sıcaklık etkisiyle, süreç sonunda spinlerinin tamamı +z yönünde sıralanan bir domainin spin yönelimlerinin $\beta = (kT)^{-1}$ 'ya bağlı değişimi	53
Şekil 5.3	Sıfır manyetik alanda azaltılan sıcaklık etkisiyle spinlerinin tamamı +z yönünde sıralanan sistemin spin başına ortalama manyetizasyonunun $\beta = (kT)^{-1}$ 'ya bağlı değişimi	54
Şekil 5.4	Sıfır manyetik alanda azaltılan sıcaklık etkisiyle spinlerinin tamamı +z yönünde sıralanan sistemin spin başına ortalama enerjisinin $\beta = (kT)^{-1}$ 'ya bağlı değişimi	54
Şekil 5.5	Sıfır manyetik alanda azaltılan sıcaklık etkisiyle bir domain içindeki spinlerin -z yönünde paralel sıralanması	57
Şekil 5.6	Sıfır manyetik alanda azaltılan sıcaklık etkisiyle, süreç sonunda spinlerinin tamamı -z yönünde sıralanan bir domainin spin yönelimlerinin $\beta = (kT)^{-1}$ 'ya bağlı değişimi	58
Şekil 5.7	Sıfır manyetik alanda azaltılan sıcaklık etkisiyle spinlerinin tamamı -z yönünde sıralanan sistemin spin başına ortalama manyetizasyonunun $\beta = (kT)^{-1}$ 'ya bağlı değişimi	59
Şekil 5.8	Sıfır manyetik alanda azaltılan sıcaklık etkisiyle spinlerinin tamamı -z yönünde sıralanan sistemin spin başına ortalama enerjisinin $\beta = (kT)^{-1}$ 'ya bağlı değişimi	59
Şekil 5.9	Sabit sıcaklıkta domain içinde -z yönünde sıralanmış spinlerin, artan manyetik alan etkisiyle +z manyetik alan yönünde sıralanması	62
Şekil 5.10	Sabit sıcaklıkta, 50000. iterasyondan sonra düzenli artırılan manyetik alan etkisiyle, spinlerinin tamamı +z yönünde sıralanan bir domainin spin yönelimlerinin zaman içindeki değişimi	63

Şekil 5.11	Sabit sıcaklıkta 50000. iterasyondan sonra düzenli artırılan manyetik alan etkisiyle sistemin spin başına ortalama manyetizasyonunun zaman içindeki değişimi	63
Şekil 5.12	Sabit sıcaklıkta 50000. iterasyondan sonra düzenli artırılan manyetik alan etkisiyle sistemin spin başına ortalama enerjisinin zaman içindeki değişimi	64
Şekil 5.13	Sabit sıcaklıkta düzenli artırılan manyetik alan etkisiyle sistemin spin başına ortalama enerjisinin manyetik alan $\vec{H}$ ' a bağlı değişimi	64
Şekil 5.14	Sıfır manyetik alanda sıcaklığın ardı ardına azaltılıp artırıldığı sistemin spin başına ortalama enerjisinin zaman içindeki değişimi	68
Şekil 5.15	Sıfır manyetik alanda sıcaklığın ardı ardına azaltılıp artırıldığı sistemin spin başına ortalama manyetizasyonunun zaman içindeki değişimi	69
Şekil 5.16	Sabit manyetik alanda sıcaklığın ardı ardına azaltılıp artırıldığı sistemin spin başına ortalama enerjisinin zaman içindeki değişimi	71
Şekil 5.17	Sabit manyetik alanda sıcaklığın ardı ardına azaltılıp artırıldığı sistemin spin başına ortalama manyetizasyonunun zaman içindeki değişimi	71
Şekil 5.18	Paramanyetik fazda sabit sıcaklıkta bulunan sisteme uygulanan artan manyetik alan etkisi ile spinler manyetik alanın yönünde (+z yönü) paralel sıralanmaya başlaması	74
Şekil 5.19	Paramanyetik fazda sabit sıcaklıkta bulunan sisteme uygulanan artan manyetik alan etkisi ile sistemdeki spin yönelimlerinin manyetik alan $\vec{H}$ ' a bağlı değişimi	75
Şekil 5.20	Paramanyetik fazda sabit sıcaklıkta bulunan sisteme uygulanan artan manyetik alan etkisi ile sistemin spin başına ortalama manyetizasyonunun manyetik alan $\vec{H}$ 'a bağlı değişimi	76
Şekil 5.21	Paramanyetik fazda sabit sıcaklıkta bulunan sisteme uygulanan artan manyetik alan etkisi ile sistemin spin başına ortalama enerjisinin manyetik alan $\vec{H}$ 'a bağlı değişimi	76

Şekil 5.22	Paramanyetik fazda sıfır manyetik alan altında sıcaklığın ardı ardına artırılıp azaltıldığı sistemdeki spin yönelimlerinin zaman içindeki değişimi	79
Şekil 5.23	Paramanyetik fazda sıfır manyetik alan altında sıcaklığı ardı ardına artırılıp azaltılan sistemin spin başına ortalama manyetizasyonunun zaman içindeki değişimi	80
Şekil 5.24	Paramanyetik fazda sıfır manyetik alan altında sıcaklığı ardı ardına artırılıp azaltılan sistemin spin başına ortalama enerjisinin zaman içindeki değişimi	81
Şekil 5.25	Paramanyetik fazda sabit manyetik alan altında sıcaklığın ardı ardına artırılıp azaltıldığı sistemdeki spin yönelimlerinin zaman içindeki değişimi	84
Şekil 5.26	Paramanyetik fazda sabit manyetik alan altında sıcaklığı ardı ardına artırılıp azaltılan sistemin spin başına ortalama manyetizasyonunun zaman içindeki değişimi	85
Şekil 5.27	Paramanyetik fazda sabit manyetik alan altında sıcaklığı ardı ardına artırılıp azaltılan sistemin spin başına ortalama enerjisinin zaman içindeki değişimi	85

## ÖNSÖZ

Çalışmalarım süresince bilgi, deneyim ve desteklerini esirgemeyen, ekip çalışması ruhunu bizlere önemseten, her türlü sorunumuzla ilgilenen özellikle heyecanımı kontrol etmemde bana yol gösterici olan değerli hocam Doç.Dr. Mustafa Göktepe'ye içtenlikle teşekkür ederim.

Ayrıca değerli hocam Yrd.Doç.Dr. Yavuz Ege'ye, bilgi ve tecrübelerini paylaşarak desteğini esirgemediği, değerli zamanını ayırarak her türlü konuda yol gösterdiği için teşekkürlerimi sunarım.

Değerli çalışma arkadaşlarım MTL (Manyetik Teknolojiler Laboratuvarı) grup elemanları Deniz PERİN, Mehmet Gökhan ŞENSOY ve Serdar SPOR'a yardımlarından dolayı teşekkür ederim.

Anlayışlarını ve sabırlarını yitirmeden her zaman yanımda olduklarını hissettiren aileme özellikle eşime, gösterdikleri desteğin yanı sıra bana aşıladıkları çalışma isteği ve başarabilme inancından ötürü teşekkür ederim.

**Balıkesir, 2009**

**Hatice ÜNAL**

**TÜBİTAK- Bilim İnsanı Destekleme Daire Başkanlığı (BİDEB) tarafından 2228  
kodlu Son Sınıf Lisans Öğrencileri için Yurt İçi Lisansüstü (Yüksek  
Lisans/Doktora) Burs Programı kapsamında şahsıma 1 Ekim 2007'den geçerli  
olarak burs verilmektedir.**

**Desteklerinden dolayı**

**TÜBİTAK- Bilim İnsanı Destekleme Daire Başkanlığına teşekkür ederim.**

**Bu çalışma**  
**2009/13 no' lu proje olarak Balıkesir Üniversitesi**  
**Bilimsel Araştırma Projeleri Birimi**  
**tarafından desteklenmiştir.**  
**Desteklerinden dolayı**  
**Bilimsel Araştırma Projeleri Birimine**  
**teşekkür ederiz.**



## 1. GİRİŞ

Ferromanyetizma katı hal fiziğinin en önemli konularından biridir. Ferromanyetik malzemeler algılayıcı uygulamalarında oldukça sık kullanılmaktadır. Bu nedenle domain yapılarının manyetizasyon süreçlerinin incelenmesi, daha hassas ve daha güvenilir algılayıcılar geliştirilmesi açısından önemlidir. Bitter-Kolloid ve Kerr etkisi gibi çeşitli yöntemler kullanılarak gözlenebilen manyetik domain yapıların aynı zamanda modelleme çalışmalarının yapılması, mıknatıslanma mekanizmalarının daha iyi anlaşılmasını sağlamaktadır. Manyetik domainlerin oluşumu, enerji bağıntıları, domain duvar yapıları, genişliği ve enerji bağıntıları ile domain yapılarını gözleme teknikleri Bölüm 2' de verilmiştir.

Ferromanyetik yapıların modellenmesinde, istatistik mekanik temelinde ele alınabilecek belli başlı modellerden birisi olan, Lenz (1920) tarafından ileri sürülen ve daha sonra öğrencisi Ising (1925) tarafından analitik olarak çözülen ve geliştirilen bir model olan Ising modeli kullanılmıştır. Model ilk önce Curie sıcaklığındaki ferromanyetiklerin faz geçişini açıklamaya yönelik olarak keşfedilmişse de model üzerinde küçük değişiklikler yapılarak ikili alaşımlardaki düzen-düzensizlik arası geçişler gibi diğer pek çok faz geçişini açıklamak için de uygulanmıştır; günümüzde, spin camları gibi çok parçalıklı modern fizik problemlerine uygulanmaktadır. Bölüm 3, modele dair detayları içermektedir.

Modelin çözümü, başlıca iki benzetim yönteminden biri olan Monte Carlo benzetim yöntemi kullanılarak yapılmıştır. Fiziksel sistemlerin benzetimleri yapılırken kullanılan sayısal yöntemlerin en geniş sınıfını Monte Carlo yöntemleri oluşturur. Bölüm 4'de yöntemin ayrıntıları verilmiştir; yöntemin daha iyi anlaşılabilmesi için istatistik fizikte üleşim fonksiyonları ve gelişigüzel sayı üretimi konularına değinilmiş, programın yazılmasında sayısal hesap açısından önemli noktalar açıklanmıştır.

Bölüm 5 ise uygulama sonucunda elde edilen sonuçları kapsamaktadır. Uygulamaların gerçekleştirildiği şartlar, elde edilen grafikler bu bölümde verilmiş, sonuçlar yorumlanmıştır.

Sonuç ve tartışma bölümü olan Bölüm 6'da bulgulara ve çalışmanın devamında yapılabileceklere dair önerilere yer verilmiştir.

## 2. MANYETİK DOMAINLER

Ferromanyetik maddelerin moleküllerinin küçük mıknatıslar olduğu 19. yüzyılın başlarında bilim insanları tarafından anlaşılmıştır. Bu moleküler mıknatısların kaynağı ilk defa Amper ve Weber tarafından önerilmiştir [1]. Amper manyetik mıknatısların atom içinde sürekli dairesel hareket yapan elektriksel akımlardan dolayı olduğunu ileri sürmüştür [2].

Manyetize olmamış ferromanyetik malzemede moleküler mıknatıslar gelişigüzel sıralandığından net bir mıknatıslanma gözlenmezken manyetize olmuş malzemede moleküler mıknatıslar uygulanan alan önünde sıralanmaktadır ki bu da net bir mıknatıslanmaya yol açar. Bu şekilde manyetize olmuş ve olmamış ferromanyetik malzemeler arasındaki farkın açıklanmasındaki Weber'in öncü fikirlerini Ewing takip etmiştir [1]. Ewing, özellikle Weber'in öngördüğü moleküler mıknatıslar arasındaki etkileşmelerin temeline dayanarak histerisisin açıklanması ile ilgilenmiştir. Ewing mıknatıslanmamış demirin gerçekte bölgesel olarak paralel sıralanmış çok sayıda moleküler mıknatısı olan düzenli bir durumda olduğunu ortaya çıkaramamıştır [3].

Manyetik davranışın anlaşılmasında, 1905 yılında Langevin'in istatistiksel termodinamik yöntemleri kullanarak geliştirdiği klasik paramanyetizma teorisine kadar, ilerleme sağlanamamıştır. Langevin, atomik mıknatısların oda sıcaklığında zayıf mıknatıslanmaya yol açtığını, daha güçlü mıknatıslanmanın temel atomik mıknatıslar arasındaki ek bir etkileşmeye bağlı olarak ortaya çıktığını göstermiştir [2].

Langevin'in çalışmasından birkaç yıl sonra 1906-1907'de, manyetizmanın anlaşılmasındaki en önemli gelişmelerden biri, Langevin'in istatistiksel termodinamik fikirlerini geliştiren Weiss tarafından yapılmıştır. Weiss, çalışmasında gaz molekülleri arasındaki etkileşimden kaynaklanan gazların yoğunlaşmasının van

der Waals davranışından [4,5] yola çıkmıştır. Weiss, van der Waals teorisinde yer alan “iç basınç” kavramına [6] benzer olarak modeline manyetik etkileşimi ifade eden “moleküler alan” kavramını eklemiştir. Bu model ile Weiss, manyetik doyum ile sıcaklık arasındaki ilişkinin genel şeklini ortaya koymayı başarmıştır. 1926 yılında ise G. Foex ile birlikte yayınladıkları çalışmada bugün “domain yapı” olarak bilinen bir kristal içindeki düzgün manyetize olmuş bölgeleri ortaya çıkarmışlardır [2].

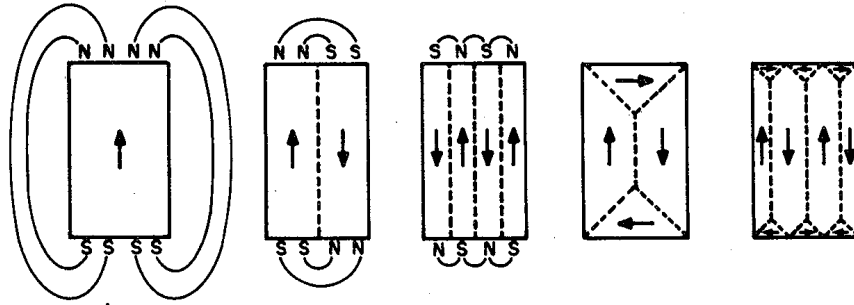
Manyetik domainlerin ilk gerçekçi modeli ise 1935 yılında Landau ve Lifshitz tarafından sunulmuştur. İki bilim adamı, domainlerin toplam enerjisi azaltmak için oluştuklarını ortaya çıkarmışlardır [7].

Sonraki seneler içerisinde manyetizasyon eğrisinin şeklini veya manyetik histerisisin mekanizmasını açıklayan domain yapısı ile ilgili hemen hiçbir uygulama yapılmamıştır. Bu süre zarfında bazı önemli teorik çalışmalar gerçekleştirilmesine rağmen domain yapısı, manyetik malzemeler üzerine yapılan çalışmaların ana konusu olamamıştır. 1949 yılına kadar malzemenin domain yapısı ile ilgili doğrudan deneysel bir ispat ve net bir yaklaşım bulunmamaktadır [8]. 1949 yılı içinde H.J. Williams, R.M. Bozorth ve W. Shockley Bell Telefon Laboratuvarlarında gerçekleştirdikleri, silikon-demir tek kristallerindeki domainler üzerine olan “Magnetic Domain Patterns on Single Crystals of Silicon Iron” isimli çalışmalarını yayınlamışlardır ve böylelikle bu tarihten sonra domain teorisi, manyetizasyon ile ilgili herhangi bir konunun temel unsuru olmuştur [9].

## **2.1 Ferromanyetik Malzemelerde Domain Oluşumu**

Ferromanyetik malzemeler kimi zaman net bir manyetik momente sahip değildirler bu nedenle manyetize olmuş malzemeler gibi davranmayabilirler. Oda sıcaklığında bulunan bir demir, bu duruma örnektir. Ferromanyetik malzemelerin her zaman net bir manyetizasyona sahip olmalarının sebebi, her birinin net manyetizasyonu farklı yönlere bakan domain adı verilen düzenli bölgelerden oluşuyor olmalarıdır. Bireysel manyetizasyonları farklı yönlere bakan domainlerden

oluşan malzemedeki net manyetizasyon sıfır olurken, domainler içindeki manyetizasyon doyum değerindedir. Domainlerin oluşmasının sebebi varlıklarının manyetostatik enerjide düşüşe sebep olmasıdır. 1935 yılında Landau ve Lifshitz Şekil 2.1’de gösterildiği gibi tek bir domain numunesinin bölünmesinin enerjide azalmaya sebep olduğunu kanıtlamışlardır [7].



Şekil 2.1 Tek manyetik domainin enerjisi azaltmak için bölünmesi [10].

Manyetik bir malzeme içerisinde yer alan manyetik momentler çeşitli etkileşimlere maruz kalmaktadırlar. Bunlar, demanyetize alan içindeki manyetik enerjisi ifade eden manyetostatik enerji, manyetik anizotropi, manyetik düzenden sorumlu olan değiş-tokuş etkileşme ve malzemeye uygulanan stres olmadığında sıfır olan manyetoelastik etkileşmedir [10].

Şimdi kısaca manyetik malzemelerdeki toplam enerjiye katkıda bulunan bu etkileşim tiplerini inceleyelim.

### 2.1.1 Manyetostatik Enerji

Kutuplarının manyetik şiddetleri  $+p$  ve  $-p$ , aralarındaki uzaklığı  $d$  olan bir manyetik dipolü ele alalım. Aralarında  $r=|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|$  uzaklık bulunan  $+p(\mathbf{r}_1)$  ve  $-p(\mathbf{r}_2)$  şiddetlerindeki bu kutuplar birbirleri üzerine Coulomb yasası ile verilen bir kuvvet uygularlar.

$$F = \frac{\mu_0 p^2}{4\pi r^2} \quad (2.1)$$

$\mu_0$  boşluğun geçirgenliğidir. Her kutup üzerindeki kuvvet  $-\frac{dU}{dr}$  ile verilir.

$U$  diğer kutuptan dolayı oluşan potansiyeldir.

$$U = -\frac{\mu_0 p}{4\pi r} \quad (2.2)$$

Uygulanan  $\vec{H}$  manyetik alanı içinde bir kutba etki eden kuvvet  $\vec{F} = \mu_0 p \vec{H}$  ile verilir.  $r$  mesafesi ile ayrılan kutup çifti  $p$ 'nin manyetik dipol momenti ise  $m = pr$ 'dir.

Bu iki kutbu  $d$  uzaklığında ayırarak bir manyetik dipol oluşturmak için gereken işi hesaplayabiliriz. Bu iş, bir çubuğun birim parçasının manyetize edilmesi için gereken işe eşittir:

$$\int dW = \int_0^d F(r) dr = \mu_0 \int_0^d p \vec{H} \cdot d\vec{r} = \mu_0 \int_0^M \vec{H} \cdot d\vec{M} \quad (2.3)$$

Böylelikle bu integral ile manyetize olamamış bir malzemeyi manyetize etmek için gereken iş hesaplanabilir [10, 11].

Manyetostatik enerji, manyetik alan yokluğunda ortaya çıkan enerjidir. Bu nedenle var olan tek manyetik alan demanyetizasyon alanıdır [10, 12]. Bu nedenle integralde  $\vec{H}$  manyetik alan ifadesi yerine  $\vec{H}_d$  demanyetizasyon alanı yerleştirilebilir.  $N_d$  demanyetizasyon faktörü olmak üzere  $\vec{H}_d = -N_d \vec{M}$  olduğundan malzemenin kendi demanyetize alanı içindeki enerjisi yani manyetostatik enerjisi şu hali alır:

$$E = -\mu_0 N_d \int \vec{M} \cdot d\vec{M} \quad (2.4)$$

$$E = \frac{\mu_0}{2} N_d M^2 \quad (2.5)$$

### 2.1.2 Değiş-Tokuş Enerjisi

Weiss tarafından ortaya konulan ferromanyetizmayı açıklayan moleküler alan teorisi, kuantum mekaniğinin doğuşuna kadar fiziksel açıklamadan yoksun kalmıştı. Weiss modeline göre gereken manyetik alanlar, manyetik dipolar etkileşmeyle ilişkili olanlardan çok daha büyüktü; bu nedenle bu etkileşme ferromanyetik düzeni açıklamaya yeterli değildi [10]. Kendiliğinden manyetizasyon büyük içsel bir manyetik alanın varlığı ile oluşmaktadır. Bu içsel manyetik alan, enerjinin en düşük değerini almasına da neden olmaktadır. Heisenberg [13] 1928' de böyle bir içsel alanın atomik spinler arası kuantum mekaniksel değiş-tokuş etkileşmeden kaynaklandığını göstermiştir [14]. Spin açısall momentumları sırayla  $\vec{S}_i h/2\pi$  ve  $\vec{S}_j h/2\pi$  olan  $i$  ve  $j$  atomları için Heisenberg değiş-tokuş etkileşme enerjisi şu şekilde ifade edilir [8]:

$$E_e = -2J\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (2.6)$$

$$E_e = -2JS_i S_j \cos \phi. \quad (2.7)$$

Kuantum mekaniksel değiş-tokuş enerji sabiti  $J$ ,  $i$  ve  $j$  atomları arasındaki uzaklığa bağlıdır; bu nedenle ifade etmek gerekir ki ele alınan değiş-tokuş etkileşme en yakın komşu atomların spinleri arasında oluşan etkileşmedir [14].  $J$  sabiti pozitif iken spinler paralel ise ( $\cos \phi = 1$ ) değiş-tokuş enerjisi  $E_e$  en küçük değerini almaktadır ( $\phi$  burada iki spin arasındaki açıyı ifade eder); spinler antiparalel ise ( $\cos \phi = -1$ ) bu kez değiş-tokuş enerjisi  $E_e$  en büyük değerini alır.  $J$  sabiti negatif iken en küçük enerji durumu spinler antiparalel ise sağlanır. Ferromanyetizma, komşu atomlar üzerindeki spin momentlerinin paralel sıralanmasına bağlı olduğuna

göre deęiş-tokuş enerji sabiti  $J'$  nin pozitif deęeri ferromanyetizmanın oluşması için gereklidir [8].

Manyetik malzemelerde manyetik düzenin kurulmasından sorumlu olan etkileşme atomik manyetik momentler arasında var olan elektrostatik kaynaklı deęiş-tokuş etkileşmesidir [10].

### 2.1.3 Anizotropi Enerjisi

Manyetik malzeme içerisindeki manyetik momentler, kristal eksenlerinin yönünden farksız bir yönü göstermezler. Her kristal için, “kolay manyetizasyon yönü” olarak bilinen tercihli bir yön vardır. Bu yönlerde uygulanan manyetik alan ile malzeme, düşük manyetik alan deęerlerinde maksimum manyetizasyona (doyum manyetizasyonuna) erişir [10]. Bir kristalin kolay manyetizasyon yönü demanyetize durumdaki domainin kendiliğinden manyetizasyon yönüdür [8,10]. Deneysel manyetizasyon eğrileri, manyetizasyonun oluşumu için gereken manyetik alan deęerlerinin kolay eksen doğrultularında dięerlerine oranla daha az olduğunu göstermektedir. Demir kristaline uygulanan alan yüzey merkezli kübik örgünün altı [100] yönünden biri yönünde uygulandığında, Şekil 2.2’ de gösterildiđi gibi, alanın çok küçük deęerlerinde doyumun oluştuđu gözlenmiştir [15].

Manyetik anizotropiye çeşitli katkılar vardır. Kristal anizotropi içsel anizotropinin temel kaynağıdır. Dışsal katkılar, numunelerin şekilleri ile ilgilidir [10].

Temel olarak elektronik açısal momentumun, kristal alanı (manyetik iyonların bulunduğu örgü noktalarındaki elektrik alan) ile etkileşmesinden kaynaklanan [10] kristal anizotropi, manyetizasyonu kristal içerisinde belirli bir formun yönlerine sabitleyen bir kuvvet olarak bilinir [8].

Uygulanan dış manyetik alan, manyetizasyon vektörünün yönünü kolay eksenden saptırmak için anizotropi kuvvetine karşı bir iş yapmak zorunda



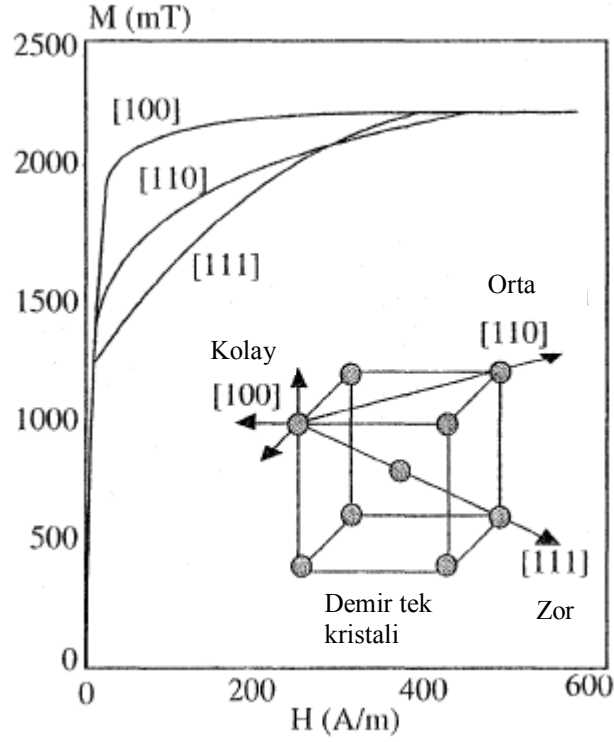
olduğundan, kendiliğinden manyetizasyonun kolay olmayan ekseninde yönlendiği her kristalde enerji depolanmalıdır. Bu enerji kristal anizotropi enerjisidir. Rus fizikçi Akulov 1929'da [16] kristal anizotropi enerjisinin, kristal eksenlerine bağlı kendiliğinden manyetizasyon vektörünün doğrultu kosinüslerinin seri açılımları ile ifade edilebileceğini göstermiştir [8]. Kübik bir kristalde kendiliğinden manyetizasyon vektörünün kristal eksenleri ile yaptığı açılar  $a$ ,  $b$  ve  $c$ , bunların doğrultu kosinüsleri de  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$ , ve  $\alpha_3$  olsun. Buradan kübik bir kristal için kristal anizotropi enerjisi,

$$E_a = K_0 + K_1(\alpha_1^2\alpha_2^2 + \alpha_2^2\alpha_3^2 + \alpha_3^2\alpha_1^2) + K_2\alpha_1^2\alpha_2^2\alpha_3^2 + \dots \quad (2.8)$$

ile verilir [17,18,19].  $K_0$ ,  $K_1$ ,  $K_2$ , ... maddeye özel anizotropi sabitleridir [15]. Daha yüksek mertebeli terimlere gerek duyulmaz hatta çoğunlukla  $K_2$  bile o kadar küçüktür ki onu içeren terim ihmal edilebilir. Ayrıca sadece kendiliğinden manyetizasyon vektörü bir yönden diğerine yön değiştirdiği zaman enerjide oluşan değişim dikkate alındığından, açıdan bağımsız olan, sadece  $K_0$ 'ı içeren terim de ihmal edilir [8].

Domainin doğrultusal özellikleri, pozitif veya negatif olabilen ve ayrıca sıcaklığa da bağlı olan [19] anizotropi sabitlerine bağlıdır. Alan ve manyetizasyon yönlerine bağlı olarak, kristal anizotropi enerjisi  $E_a$ ' ya bir alan enerji terimi eklenir ve de toplamı minimum yapan şartlar için çözüm gerçekleştirilirse Şekil 2.2' deki benzer manyetizasyon eğrileri elde etmek mümkün olur [15]. Van Vleck 1936 yılında, kübik ferromanyetik kristallerin anizotropilerinin detaylı bir incelemesini yayınlamış, çalışmasında Bloch, Akulov, Bozorth gibi bu konuda çalışmalar yapmış bilim adamlarının modelleriyle kendi modelinin karşılaştırmasını da gerçekleştirmiştir [19].

Kristallerin manyetik özellikleri anizotropiktir ve manyetik enerji kristal eksenlerine bağlı olan manyetizasyon vektörünün yönüne bağlıdır. Farklı domain manyetizasyonlarının tamamı kolay eksenlerde yöneldiği zaman kristal anizotropinin toplam enerjiye katkısı minimum olacaktır [15].



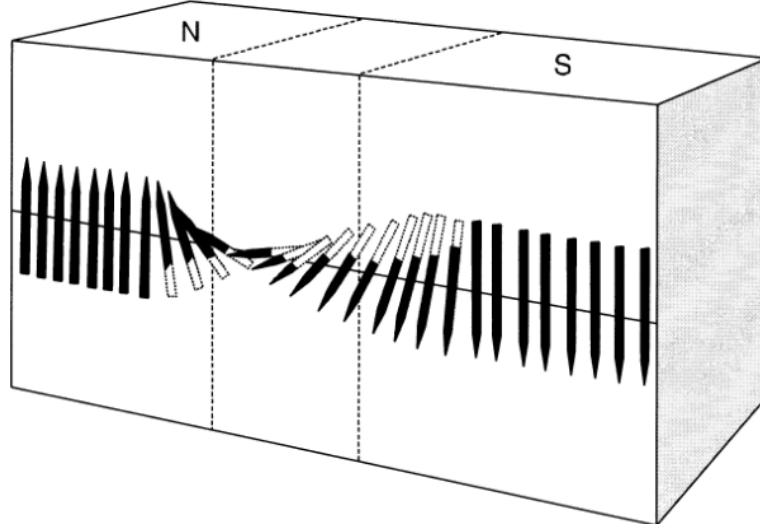
Şekil 2.2 Demir tek kristalinin üç temel kristalografik yön için manyetizasyon eğrileri [15].

## 2.2 Manyetik Domain Duvarları

Manyetizasyon yönleri aralarındaki  $\phi$  açısıyla değişen iki komşu manyetik domain arasında, domain duvarı olarak bilinen sınırlı genişliği olan ara bölgelerde momentlerin nasıl yön değiştirdiği önemlidir [10].

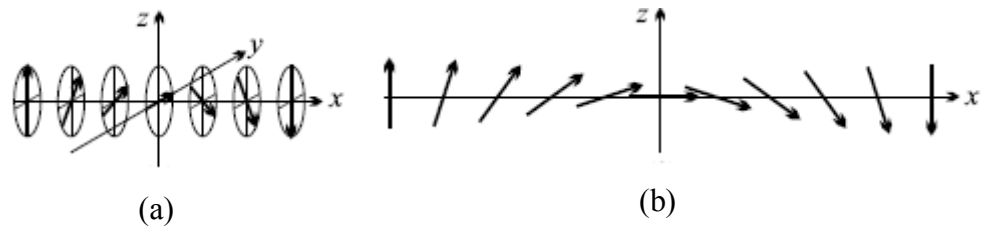
İçlerinde manyetik momentlerin yön değiştirdiği, domainler arasındaki geçiş bölgelerinin oluşumu ilk kez Bloch tarafından 1932 yılında önerilmiş, 1935 yılında Landau ve Lifshitz [7] tarafından ayrıntılı olarak incelenmiştir [20]. Geçiş tabakaları domain duvarları ve bazen de Bloch duvarları olarak adlandırılır; fakat belirtmek gerekir ki bu sadece belirli tipteki domain duvarları için kullanılan isimdir [10]. Domain duvarlarının farklı çeşitleri bulunmaktadır. Bloch domain duvarlarının bir tarafından diğer tarafına toplam açısal yer değiştirme, özellikle kübik maddelerde anizotropi ve momentlerin yönündeki değişimin pek çok atom düzlemi üzerinden gerçekleşmesi sebebiyle, genellikle  $180^\circ$  veya  $90^\circ$  dir. Böylelikle domain duvar

çeşitleri  $180^\circ$  Bloch duvarı,  $90^\circ$  Bloch duvarı ve Neel duvarı olarak sıralanır [21]. Şekil 2.3 de iki komşu domain arasında yer alan, içerisinde manyetik momentlerin yön değiştirdiği ara bölge olan  $180^\circ$  Bloch duvarı görülmektedir.

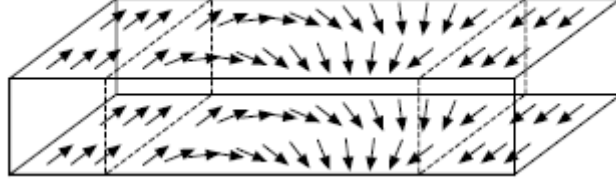


Şekil 2.3  $180^\circ$  Bloch duvarı [10].

Bloch duvarında yer alan manyetik momentler komşu domainlerde yer alan manyetik momentlerden farklı düzlemde dönerler. Momentleri, domain momentleri ile aynı düzlemde dönen duvar ise Neel duvarı olarak bilinmektedir [22]. Bu durum Şekil 2.4’de gösterilmiştir. Neel duvarı içerisindeki momentler komşu domain momentleri ile aynı düzlemde döndüğünden Neel duvarları ince tabaka şeklindeki malzemelerde oluşur (Şekil 2.5); kalın malzemelerde Bloch duvarına oranla oldukça yüksek demanyetizasyon enerjisi ürettiklerinden bu tür malzemelerde oluşmazlar [22,23].



Şekil 2.4 Manyetik momentlerin (y,z) düzleminde domain duvarları içerisinde yön değiştirmeleri (a) Bloch duvarı; (b) Neel duvarı [22].



Şekil 2.5 İnce bir katmanda iki domain arasında yer alan Neel duvarı [22].

### 2.2.1 Domain Duvar Enerjisi ve Genişliği

Kendiliğinden manyetizasyonun farklı yönelimlere sahip olduğu bölgeler arasındaki arayüzler olan domain duvarları, değiş-tokuş ve anizotropi enerjileri arasında var olan yarışın neticesinde belirli bir genişliğe ve yapıya sahiptir [8].

Domain duvar genişliği ve enerjisi ile ilgili olarak yaklaşık bir hesaplama yapılabilir. Aynı  $S$  spinli bir çift atom için değiş-tokuş etkileşme enerjisi, Denklem 2.7' e göre;

$$E_e = -2JS^2 \cos \phi \quad (2.9)$$

olmaktadır.  $\cos \phi$  'nin seri açılımı,

$$\cos \phi = 1 - \frac{\phi^2}{2} + \frac{\phi^4}{24} - \dots \quad (2.10)$$

ile verilir.  $\phi$  küçük olduğu için  $\phi^4$  ve üzerindeki terimleri atar, bu eşitliği Denklem 2.9'da yerine koyarsak,

$$E_e = JS^2 \phi^2 - 2JS^2 \quad (2.11)$$

elde edilir. Açıdan bağımsız olan ikinci terim domain içinde ve duvar içinde aynı değere sahip olduğu için atılabilir. Duvar içinde var olan enerji, spin çifti başına, ilk terim ile verilir.

Domain duvarı alanı başına değiş-tokuş enerjisi bulmak için kristal yapısı hakkında bir kabul yapmalıyız. Bu nedenle kolaylık açısından,  $a$  kenarlı bir hücrenin her köşesinde bir atom bulunan ve duvar düzlemi küp yüzü  $\{100\}$ 'a paralel olan basit kübik yapı düşünelim. Duvar  $N$  atom kalınlığındadır ve duvarın birim alanı başına  $N$  atomlu  $1/a^2$  sıra bulunmaktadır. Böylelikle duvarın birim alanı başına enerji,

$$E_e = (JS^2\phi^2)(N)(1/a^2) \quad (2.12)$$

olur.  $180^\circ$  domain duvarı için  $\phi = \frac{\pi}{N}$  eşitlikte kullanılırsa,

$$E_e = \frac{JS^2\pi^2}{Na^2} \quad (2.13)$$

elde edilir [8, 15].

Anizotropi enerjisi ise, duvar hacminin anizotropi sabiti  $K$  katının sıralanmasıdır;

$$E_a = KNa^3. \quad (2.14)$$

Buradan duvar alanı başına anizotropi enerjisi,

$$E_a = KNa \quad (2.15)$$

olur.  $\delta = Na$  duvar kalınlığı için duvar alanı başına toplam enerji,

$$E = E_e + E_a \quad (2.16)$$

$$E = \frac{JS^2\pi^2}{\delta a} + K\delta \quad (2.17)$$

olarak bulunur. Bu enerji,  $\delta$ 'nın belirli deęerleri için Şekil 2.6'da kesikli çizgilerle gösterildięi gibi bir minimuma sahiptir. Bu minimum Őu Őekilde verilir;

$$\frac{dE}{d\delta} = -\frac{JS^2\pi^2}{\delta^2 a} + K \quad (2.18)$$

$$\delta = \sqrt{\frac{JS^2\pi^2}{Ka}}. \quad (2.19)$$

AŐaęıda verilen Denklem 2.20'ye gre deęiŐ-tokuŐ etkileŐme sabiti  $J$ , Curie sıcaklıęı  $T_C$  ile orantılıdır.

$$J = \frac{3KT_C}{2zS(S+1)} \quad (2.20)$$

$$\delta \approx \sqrt{T_C/K}. \quad (2.21)$$

Buradan denilebilir ki kçük anizotropi sabiti kalın duvar demektir. Duvar kalınlıęı ise sıcaklıkla artar cnk  $K$  hemen her zaman artan sıcaklıkla azalır [15].

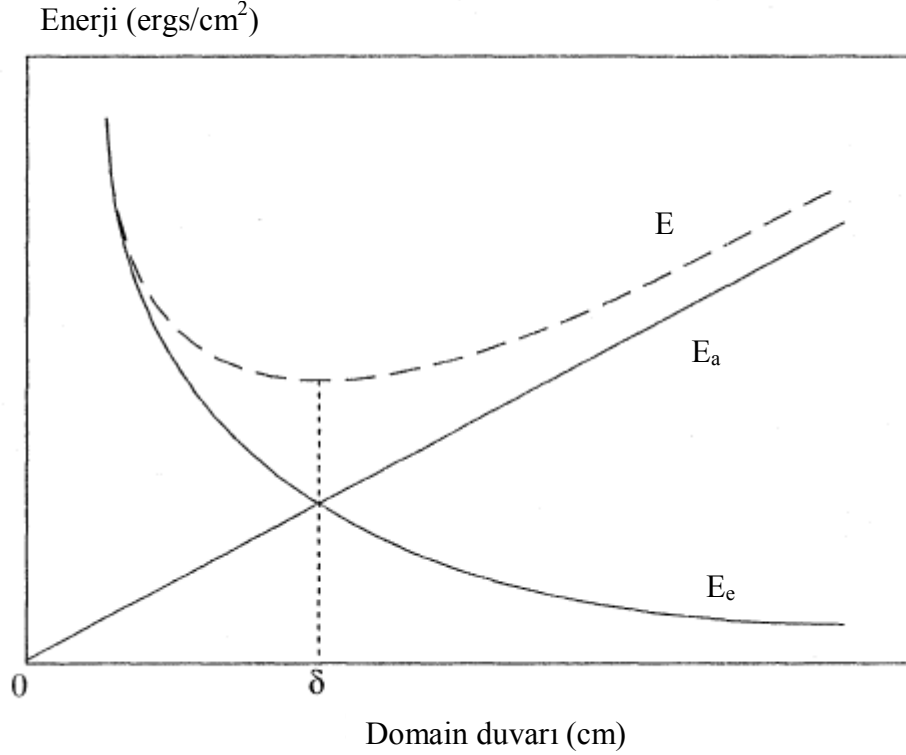
Denklem 2.19'u Denklem 2.17'de yerine koyarsak;

$$E = \sqrt{\frac{JS^2\pi^2 K}{a}} + \sqrt{\frac{JS^2\pi^2 K}{a}} \quad (2.22)$$

$$E = 2K\delta \quad (2.23)$$

elde edilir.

Şekil 2.6’da gösterildiği gibi toplam enerjideki minimum değiş-tokuş ve anizotropi enerjileri eşitse oluşur [8, 15].



Şekil 2.6 Toplam domain duvar enerjisinin duvar kalınlığına bağlılığı [15].

### 2.3 Manyetik Domainleri Gözleme Teknikleri

Manyetik domainlerin ilk önemli deneysel gözlemleri 1930 yılında Barkhausen [24] ve 1931 yılında Bitter [25] tarafından yapılmıştır. Bu gözlemler Weiss’in teorisinin doğruluğunun ispatında önemli rol oynamıştır. Daha sonraları gerek doğrudan gerekse dolaylı olarak ferromanyetik domainlerin sayısız gözlemleri yapılmıştır [26-33].

İlk doğrulama, Barkhausen olayı ile domainlerin dolaylı dedekte edilmesidir [34,35]. Barkhausen olayında domainlerin yeniden yönlenmesi, bir ferromanyetik

içindeki manyetik indüksiyonda kesikli değişikliklere sebep olur. Bu kesikli değişiklikler, numune etrafına sarılmış bir bobinden alınan sinyallerin yükseltilmesiyle dedekte edilebilir. Yeterince doğru ölçülürse Barkhausen olayının diğer bulk özelliklerde de kesikliklere sebep olduğu görülebilir [35].

İkinci doğrulama, Bitter tarafından yapılan, ferromanyetik maddelerin yüzeyleri üzerindeki domain desenlerinin doğrudan gözlenmesidir. Yöntemde maddenin yüzeyi üzerine yayılmış taşıyıcı bir sıvı içinde asılı çok ince  $Fe_2O_3$  parçacıkları kullanılmıştır. Gözlem için kullanılan ilk maddeler, geniş grainlere sahip olan demir ve demir-silikon alaşımıdır [25]. Desenler bir mikroskopla bakıldığı zaman parçacık birikintileri olarak gözlenmiştir. Parçacıklar manyetik alan gradientinin en büyük olduğu konumlarda birikmektedir, bunlar domain duvarlarının yüzeyi kestiği noktalar. Daha sonraki yıllarda taşıyıcı sıvıdaki ferromanyetik parçacıkların kollodial çözeltileri kullanılmıştır [8]. Domain gözlemlerinde uygun yüzey şartlarını elde etmek için, maddenin yüzey gerilmelerini kaldırmak amacıyla madde elektrolitik parlatma işleminden geçirilmelidir. Aksi takdirde gerilmeler domainlerin büyüklüğünü azaltacaktır [32].

Domainleri gözlemek için kullanılan çeşitli tekniklerden en bilinenleri iki grupta toplanabilir:

1. Domain duvarlarını açığa çıkaran teknikler (Bitter yöntemi, elektron mikroskobu).

Yalnız domainler, mıknatıslanma yönleri ne olursa olsun hemen hemen aynı görünürler fakat domain duvarları belirgin ayırt edilebilirdir.

2. Domainleri açığa çıkaran teknikler (Optiksel metodları içeren Kerr ve Faraday etkileri).

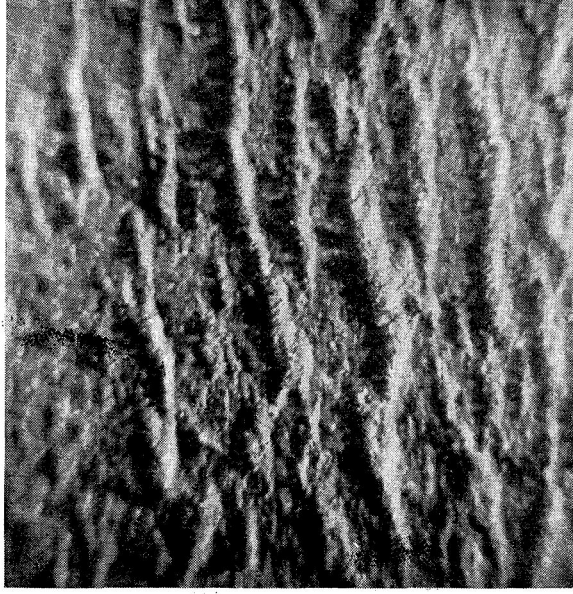
Farklı yönlerde mıknatıslanmış domainler farklı renklerde bölgeler olarak görünürler; domain duvarları ise bu farklı renkte bölgeleri ayıran çizgi şeklinde sınır olarak görünürler [8].



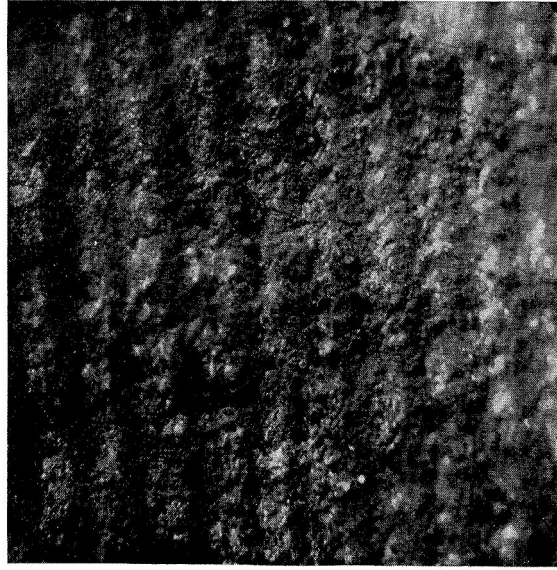
### 2.3.1 Bitter Yöntemi

Kullanım kolaylığı nedeniyle en çok uygulanan yöntemdir denilebilir.

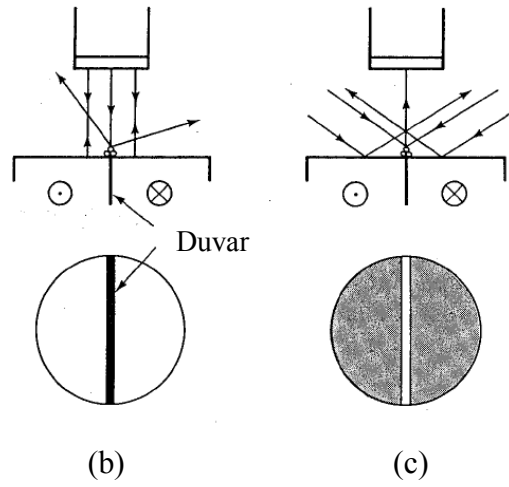
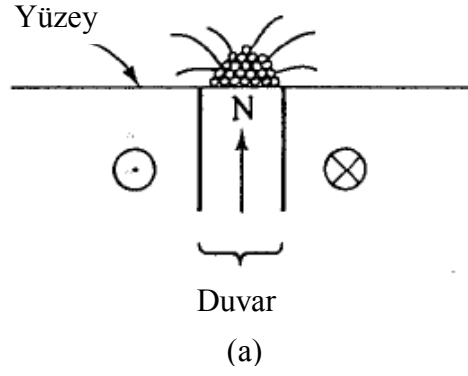
Bitter tarafından 1931’ de geliştirilen yöntem  $Fe_2O_3$ ’ün kolloid parçacıklarından oluşan sıvının gözlem yapılacak maddenin cilalanmış yüzeyine uygulanışını içerir. Bitter kullandığı solüsyon aracılığıyla, Şekil 2.7 ve 2.8’ de gösterilen, manyetik domainlerin ilk fotoğraflarını çekmiştir. Gözlem için kullanılan ilk maddeler, geniş grainlere sahip olan demir ve Şekil 2.7 ve 2.8’ de fotoğrafları görülen demir-silikon alaşımıdır [25]. Şekil 2.9-a’ da yüzeyi ikiye bölen duvarın içindeki spinlerin merkezdeki bir tane ile temsil edildiği, yüzeye dik gösterilen  $180^\circ$ ’lik duvarı ele alalım. Kuzey kutup şeklindeki gibidir ve bu, yüzeyin üzerinden dağılan bir  $\vec{H}$  alanının kaynağıdır. Kolloid parçacıkları bu düzgün olmayan alanın oluşturduğu bölgeye çekilirler ve bu sırada domain duvarının kenarı boyunca çöküntü oluştururlar. Bundan sonra yüzey, yansıtıcı bir mikroskop ile “parlak alan” aydınlatması altında incelenirse (Şekil 2.9-b), domain duvarı aydınlık zemin üzerine siyah çizgi şeklinde görünecektir. Duvarın en üstünde bulunan kolloid parçacıkları, ışığın yan taraflara saçılmasına ve duvarın karanlık görünmesine sebep olurken duvarın her iki tarafında yer alan domainler, üzerlerine dikey olarak gelen ışığı mikroskoba geri yansıtırlar ve bu nedenle aydınlık görünürler. “Karanlık alan” aydınlatması altında gelen ışık malzemeye belli bir açı ile çarpar; domain duvarı karanlık bir zemin üzerinde aydınlık bir çizgi olarak görünür (Şekil 2.9-c); çünkü ışık sadece duvar boyunca yer alan parçacıklar tarafından mikroskoba doğru yansıtılır. Her iki durumda mikroskop altındaki domain duvarı görünümüleri “Bitter modeli” veya “toz modeli” olarak adlandırılır [8].



Şekil 2.7 Si-Fe numunede, yüksek alanlarda Bitter yöntemi ile gözlenen domainler [25].



Şekil 2.8 Si-Fe numunede, daha düşük alanlarda Bitter yöntemi ile gözlenen domainler. Çizgilerin genişliği düzensizliklerden kaynaklanıyor olabilir [25].



Şekil 2.9 Bitter yöntemi ile domainlerin gözlenmesi. (a) Yüzeyi ikiye bölen duvarın içindeki spinlerin merkezdeki bir spin ile temsil edildiği, yüzeye dik olan  $180^\circ$ ’lik domain duvarı. (b) Yüzeyin, yansıtıcı bir mikroskop ile “parlak alan” aydınlatması altında incelenmesi. (c) Yüzeyin, yansıtıcı bir mikroskop ile “karanlık alan” aydınlatması altında incelenmesi [8].

### 2.3.2 Geçirgen Elektron Mikroskobu

Bu alet, elektronları geçirebilmesi açısından yeterince ince ( $1000^\circ\text{A}$  veya daha az kalınlıkta) malzemelerde domain duvarlarının gözlenmesini sağlar.

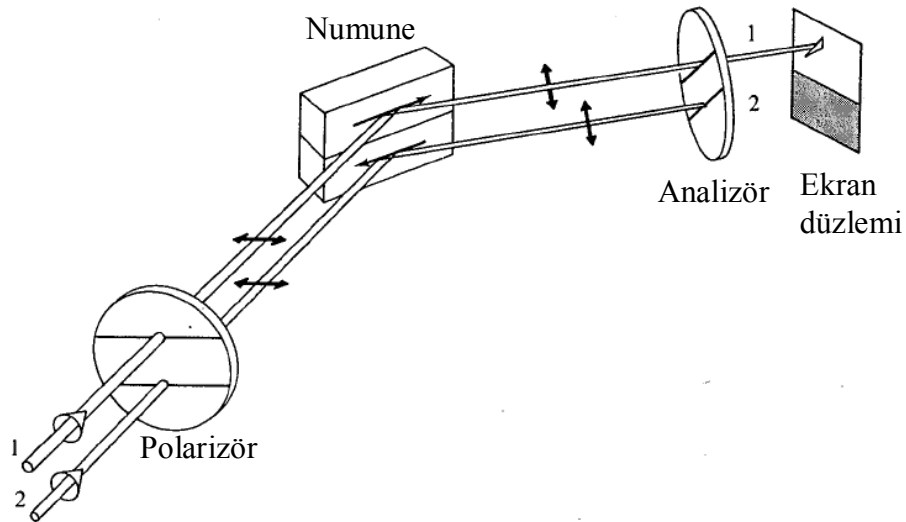
Bitter yöntemi ve elektron mikroskobu domain duvarlarının gözlenmesi için kullanılırken domainlerin gözlenmesi için de Kerr ve Faraday yöntemleri kullanılır. Bu iki manyeto-optik etki, domainleri birbirinden ayırt edebilmek için renkte veya aydınlık-karanlık derecelerinde bir fark oluştururlar [8].

### 2.3.3 Kerr Etkisi

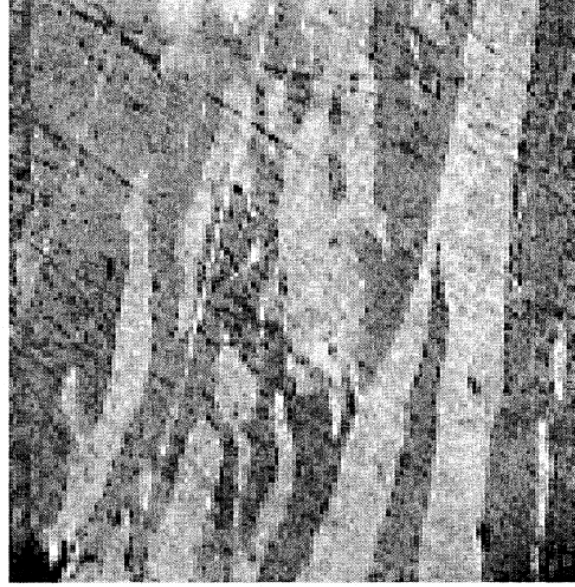
Bu etki, bir ışık ışınının mıknatıslanmış malzemeden yansıması süresince polarizasyon düzleminin dönmesine dayanır. Dönme miktarı küçüktür, 1 dereceden çok az ve ışık ışınının düzlemiyle bağlantılı olan mıknatıslanmanın yönüne ve büyüklüğüne bağlıdır [36].

Kaynaktan çıkan ışık sadece düzlemsel polarize olmuş ışığı geçiren polarizör içine girer (Şekil 2.10) (Birbirine göre antiparalel mıknatıslanmış sadece iki domain içerdiği varsayılan malzeme de Şekil 2.10'da yer almaktadır). 1 ışınının yansıması süresince polarizasyon düzleminin döndüğü yönden farklı bir yöne 2 ışınıninki döner çünkü ikisi, malzeme içinde zıt yönlere domainler ile karşılaşmışlardır. Işık daha sonra bir analizör içinden geçerek bir teleskoba veya düşük-güç mikroskoba yönlenir. Analizör, yansımış olan 2 ışını geçirmeyecek şekilde döndürülür, böylelikle bu ışın söndürülmüş olur ve aşağıdaki domain karanlık görünür [8].

Bu düzenek yardımıyla yüzey üzerinden çekilen fotoğraflarda Şekil 2.11' e benzer şekilde manyetik domainler gözlenir [15].



Şekil 2.10 Kerr yöntemi ile domainlerin gözlenmesi [8].

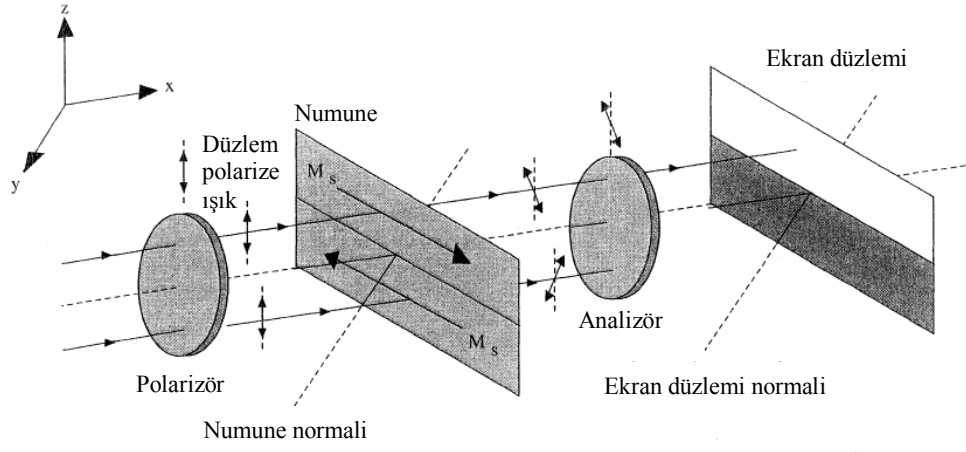


Şekil 2.11 Amorf numunede Kerr yöntemi ile gözlenen domainler [15].

Kerr yöntemi, hareketli domain duvarlarına yönelik çalışmalarda daha kullanışlı, Bitter yöntemine göre bu alanda daha üstündür [8].

#### **2.3.4 Faraday Etkisi**

Faraday etkisi bir ışık ışınının polarizasyon düzleminin, ışının mıknatıslanmış bir malzemedan geçişi sırasında yönelmesine dayanır. Optik sistem, Kerr yöntemindeki ile aynıdır. Farklı olarak kaynak, polarizör, malzeme, analizör ve mikroskop, Şekil 2.12' de gösterildiği gibi aynı sırada yer alır. Yöntem, ışığı geçirebilmesi için yeterince ince olan malzemelerin kullanımı ile sınırlıdır [8,15,37].



Şekil 2.12 Faraday yöntemi ile domainlerin gözlenmesi [15].

### 3. MANYETİK YAPILARIN MODELLENMESİ

Ferromanyetizma katı hal fiziğinin en önemli konularından biridir. Ferromanyetik malzemeler algılayıcı uygulamalarında oldukça sık kullanılmaktadır. Bu nedenle domain yapılarının manyetizasyon süreçlerinin incelenmesi, daha hassas ve daha güvenilir algılayıcılar geliştirilmesi açısından önemlidir.

Fe, Ni gibi ferromanyetik malzemelerde atomların spinlerinin sonlu bir kesri kendiliğinden aynı yöne polarlanarak bir manyetik alan oluşturur ve dış manyetik alana bir artış kazandırır. Bu durum, sıcaklık “Curie sıcaklığı” diye bilinen karakteristik bir sıcaklıktan düşük olduğu zaman gerçekleşir. Curie sıcaklığı paramanyetik halden ferromanyetik hale geçişin yani bir *faz geçişinin* olduğu sıcaklıktır. Bu sıcaklığın üzerinde, paramanyetik fazda iken spinler gelişigüzel bir dağılım gösterirler yani net bir manyetik alan üretimi yoktur [38].

Faz geçişlerini teorik olarak tanımlamak oldukça güç bir iştir. İstatistik mekanik temelinde ele alınabilecek belli başlı modellerden birisi, Lenz (1920) tarafından ileri sürülen ve daha sonra öğrencisi Ising (1925) tarafından analitik olarak çözülen ve geliştirilen bir modeldir. Bu model ilk önce Curie sıcaklığındaki ferromanyetiklerin faz geçişini açıklamaya yönelik olarak keşfedilmişse de model üzerinde küçük değişiklikler yapılarak ikili alaşımlardaki düzen-düzensizlik arası geçişler gibi diğer pek çok faz geçişini açıklamak için de uygulanmıştır; günümüzde, spin camları gibi çok parçacıklı modern fizik problemlerine uygulanmaktadır [39,40].

#### 3.1 Faz Geçişlerinin Yapısı ve Fiziği

Etkileşimli bir sistemde, etkileşimler zayıf değilse (düşük sıcaklıklarda parçacıklar arası etkileşimler şiddetli olur) sistem bir makro durumdan başka bir

makro duruma geçebilir. Bu geçiş makroskobik değişkenlerin belli değerlerinde aniden ortaya çıkar. Bu kesimde manyetik sistemler incelenecektir.

Maddenin birbirinden çok farklı durumları arasındaki geçişler faz geçişleri olarak adlandırılır. Paramanyetik – ferromanyetik arası geçiş bir faz geçiştir. Makroskobik özellikler, serbest enerjiden elde edilebildiği için faz geçişleri serbest enerjinin tekil noktaları ile ilişkilidir. Normal durumda üleşim fonksiyonu  $Z$  tekillik göstermez.

Birlikte bulunma eğrisinin sonlandığı nokta, kritik noktadır. Milyonlarca parçacığın aynı anda hareket ediyor olmaları söz konusu olduğu için kritik noktada her ölçekte salınımlar gözlenebilir [39].

Spinlerin sadece yukarı ve aşağı olmak üzere iki şekilde yönlenebildiği manyetik bir sistem üzerine dış alan uygulanmıyorsa mıknatıslanma her iki yöne bakabilir. Ferromanyetik faz ile paramanyetik fazı ayıran parametreye düzen parametresi denir. Düzen parametresi, farklı fazlarda değişik değerler alan bir termodinamik fonksiyondur. Tipik olarak bir fazda sıfır iken diğer faza geçildiğinde sıfırdan farklı olur. Ferromanyetiğin düzen parametresi,

$$\eta = \frac{n_+ - n_-}{N} = \frac{n}{N} \quad (3.1)$$

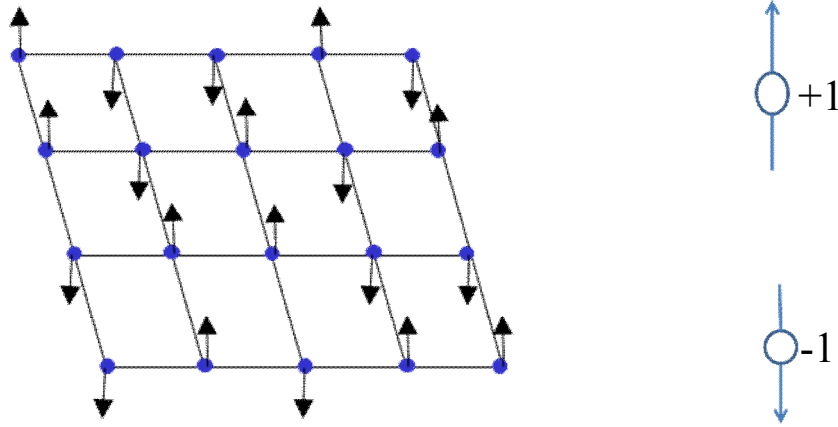
şeklindedir. Sistemin tam düzenli olduğu durumda  $\eta \neq 0$  olurken tam düzensizlik durumunda  $n_+ = n_- = N/2$ , ve  $\eta = 0$  olur. [39,41]

### 3.2 İki Boyutlu Ising Model

Momentler arasındaki Weiss tipi bir çiftlenme fikri, sıcaklığın ve manyetik alanın manyetizasyon üzerindeki etkilerini açıklayan Ising model ile eşleştirilebilir [39]. Modelde, Şekil 3.1' deki benzer olarak, her bir örgü noktasında, elektron spin açısai momentumu  $\vec{S}_i$  olan ve  $\vec{m}$  manyetik momentine sahip bir atom içeren



toplam  $N$  benzer atomlu bir kare örgü bulunmaktadır. Spinin örgüdeki konumu  $i$  indisi ile ifade edilir. Bir spin yukarı (+1) ve aşağı (-1) olmak üzere sadece iki yönelime sahiptir, yani  $s_i$  spin kuantum sayısının z bileşeni, hesaplamalarda kolaylık sağlaması açısından (+1) ve (-1) değerlerini almaktadır (gerçekte değeri  $\pm 1/2$  ' dir.) [40]. Klasik olarak spinler herhangi bir yönde yönelebildiğinden gerçek dışı görülebilen bu kısıtlama kuantum mekaniğinde spinlerin bazı yönlerle sınırlı olmasından ötürü gerçekçi görülebilir. Manyetik alana ( $\vec{H}$ ) göre kuantum mekaniğinde spin yönelimleri kısıtlıdır. Ising modelde spinlerin yönelimindeki kısıtlama spin dalgalarına izin vermez. Bu nedenle üretilebilen en düşük uyarılmış enerji durumu bir spin geri kalan spinlere antiparalel olduğu zamandır ve sonuç olarak temel durum ile ilk uyarılmış durum arasında  $8JS^2$  ' lik bir enerji boşluğu mevcuttur [42].



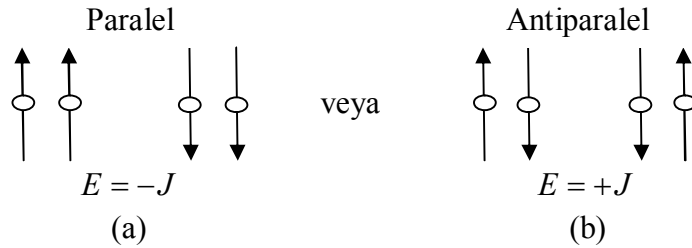
Şekil 3.1 Spinlerin yukarı (+1) ve aşağı (-1) olmak üzere sadece iki yönelime sahip olduğu iki boyutlu Ising örgüsü.

Kısa mesafeli etkileşimler göz önünde bulundurularak Ising modelinde sistemin toplam enerjisi, hem spinlerin birbirleriyle hem de bir  $\vec{H}$  dış manyetik alanıyla etkileşme terimlerinden oluşur [43,44]:

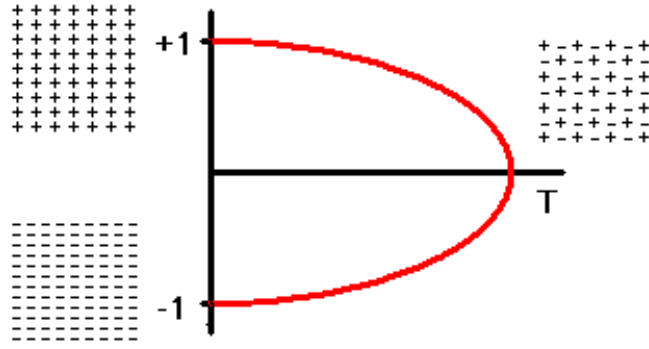
$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \vec{H} \sum_i \vec{S}_i \quad (3.2)$$

$\langle ij \rangle$  sadece komşu spinlerin birbiriyle etkileştiğini gösterir. Kare bir örgüde her spinin sadece en yakın dört komşusuyla etkileştiği varsayılır.  $J$  değiş-tokuş enerji sabitidir ve enerji boyutundadır [43]. (Burada  $\vec{m}$  manyetik moment ifadesi, dış manyetik alan olarak sözü edilen  $\vec{H}$  ifadesi içinde yer almaktadır; böylelikle  $\vec{H}$ , enerji boyutunda bir büyüklüktür [45])

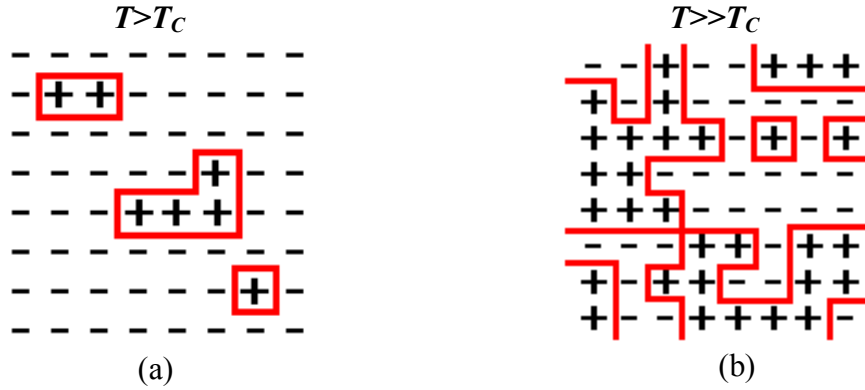
Dış manyetik alan olmasa dahi spinler arasındaki etkileşmeler ferromanyetik düzeni sağlamaya yeterlidir. Herhangi bir noktadaki spinin dört komşusuyla etkileşmesi, komşularının paralel veya antiparalel oluşuna göre, toplam enerjiye değişik katkılarda bulunacaktır. Etkileşme kuvvetinin ölçüsü olan  $J$  sabiti pozitif ise, iki spin arasındaki etkileşmenin enerjiye katkısı, paralel spinler için  $-J$ , antiparalel spinler için  $+J$  olur (Şekil 3.2); o halde spinler enerjiyi minimum yapacak şekilde, paralel konumları tercih ederler.  $J$  sabiti negatif ise spinler antiparalel konumları tercih ederler. Bu durumda  $J>0$  için ferromanyetik düzen,  $J<0$  için antiferromanyetik düzen gerçekleşir.  $J>0$  için ferromanyetik düzenin gerçekleştiği Şekil 3.3'de gösterilmiştir. Dış alanın sıfır olduğu durumda bir domain içindeki tek alan değiş-tokuş etkileşme alanıdır. Sıcaklığın azalmasıyla birlikte momentler arasındaki değiş-tokuş enerjisi termal enerjiyi yenerek momentlerin paralel sıralanmaya geçmesini, belli bir geçiş sıcaklık değerinden (Curie sıcaklığı) aşağıda da momentlerin tamamının paralel sıralanmasını sağlamaktadır. Bu durum bir manyetik domain içinde kendiliğinden manyetizasyonun oluşumudur [42]. Şekil3.4'de bir domain içinde Curie sıcaklığına yaklaşan sıcaklıklarda momentlerin çoğu paralel sıralanırken Curie sıcaklığının çok üzerindeki sıcaklıklarda gelişigüzel sıralandıkları kabaca gösterilmiştir.



Şekil 3.2 İki spinin etkileşme enerjisi.  $J>0$  için paralel spinlerin enerjisi daha küçük olur. (a) Paralel spinlerin enerjisi  $E = -J$  ; (b) Antiparalel spinlerin enerjisi  $E = +J$  .



Şekil 3.3 İki boyutlu Ising modelde  $J>0$  iken sağlanan ferromanyetik düzen.



Şekil 3.4 Artan sıcaklık etkisiyle gelişigüzerliği artan spin sistemi. (a)  $T>T_c$  iken spinlerin çoğu  $-z$  yönünde paralel sıralanmıştır; (b)  $T\gg T_c$  iken spinler, artan sıcaklığın etkisiyle gelişigüzel sıralanmışlardır.

Dış manyetik alanda iki spin paralel ise enerjisi daha düşük olur. Ancak ortamdaki ısısal enerji nedeniyle spinlerin paralelliği tam oluşmaz [40].

Sistemin  $N$  sayıda spinden oluştuğu düşünülür, tüm örgü noktalarındaki  $\{S_1, S_2, \dots, S_N\}$  spinlerinin her birinin belli değerler aldığı bir konfigürasyon  $r$  ile ve enerjisi  $E_r$  ile gösterilirse sistemin bu konfigürasyonda bulunma olasılığı, Boltzmann dağılımı da denilen olasılıkla verilir:

$$P_r = \frac{e^{-\beta E_r}}{\sum_r e^{-\beta E_r}} \quad (3.3)$$

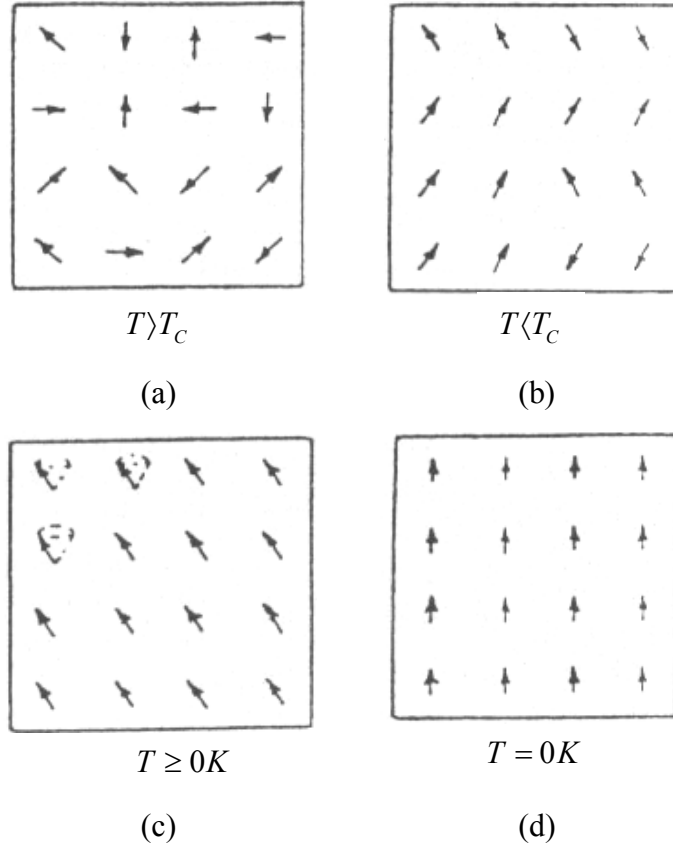
Burada,  $k = 1.3807 \times 10^{-23} JK^{-1}$  Boltzmann değışmezi,  $T$  sistemin mutlak sıcaklığı olmak üzere  $\beta = (kT)^{-1}$  basit olarak sistemin sabit sıcaklık parametresidir. Bunun anlamı şudur: Sistem genelde toplam enerjiyi minimum kılan bir denge konumuna gelmek isteyecektir. Ancak bu arada enerjiyi artıracak bazı spin konfigürasyonlarına da geçebilir; bunların gerçekleşme olasılıkları Boltzmann dağılımıyla verilir [38].

Mıknatıslanma tüm spinlerin toplamı olarak tanımlanır. Spin başına mıknatıslanmanın hesabı için spinlerin toplamı, spin sayısına bölünür [44,45].

$$\vec{M} = \frac{1}{N} [\sum_i^N \vec{S}_i] \quad (3.4)$$

0K'nin üstündeki sıcaklıklarda bireysel manyetik momentler termal enerjiye sahiptir. Bu enerji momentlerin alan etrafında presesyon hareketi (spin dalga hareketi) yapmasına sebep olur. Spin dalga hareketi, sıcaklık arttıkça daha büyük olur. Şekil 3.5'de görüldüğü gibi kendiliğinden manyetizasyonun, doyum manyetizasyonundan daha küçük olmasına sebep olan bu harekettir. Şekil 3.5 - a' da Curie noktasının üzerinde gelişigüzel sıralanma yani paramanyetik durum, (b)' de Curie noktasının altında ferromanyetik durum, (c)' de düşük sıcaklıklarda ( 0K civarında ) spin dalga hareketi, (d)' de 0K'de spin dalga hareketi için hiçbir termal enerji olmadığından tam sıralanma oluştuğu görülmektedir. Domain içindeki manyetik momentlerin tamamı, çok yüksek manyetik alandan dolayı tamamen paralel sıralandığı zaman manyetizasyon, doyum manyetizasyon değerine ulaşır [42,46].

Modelde spinlerin sadece  $-z$  ve  $+z$  yönelimleri söz konusu olduğundan, spinlerin alan etrafındaki presesyon hareketini görmek mümkün değildir. Spinlerin yönelimlerindeki sınırlamanın spin dalga hareketine izin vermemesi Ising modelin kısıtlamalarından biridir.



Şekil 3.5 Değişik sıcaklıklarda, bir domain içinde bireysel manyetik momentlerin sıralanması. (a) Curie noktasının üzerinde gelişigüzel sıralanma yani paramanyetik durum; (b) Curie noktasının altında ferromanyetik durum; (c) Düşük sıcaklıklarda meydana gelen ( 0K civarında ) spin dalga hareketi; (d) 0K’de spin dalga hareketi için hiçbir termal enerji olmadığından meydana gelen tam sıralanma [46].

#### 4. MONTE CARLO BENZETİM YÖNTEMİ

İstatistik fizikte pek çok problemin çözümü bilgisayarlarla yapılmaktadır. Bilgisayarlar ile fiziksel sistemlerin benzerlerini oluşturmak mümkündür. Teorik bir modele yaklaşık bir çözüm bulunmasında, denklemi olan ama çözümü olmayan modellerin çözülmesinde, teorik modellerin test edilmesi, geliştirilmesi ve deney sonuçlarıyla karşılaştırılmasında bilgisayar benzetimleri kullanılabilir. Başlıca iki benzetim yöntemi Monte Carlo ve Moleküler Dinamik yöntemleridir [39].

Bu çalışma kapsamında incelenen manyetik domain sistemlerinin mıknatıslanma mekanizmalarının fiziksel temellerini ortaya koyacak modelleme çalışması Monte Carlo benzetim yöntemi kullanılarak yapılmıştır.

Fiziksel sistemlerin benzetimleri yapılırken kullanılan sayısal yöntemlerin en geniş sınıfını Monte Carlo yöntemleri oluşturur. Modern Monte Carlo yöntemlerinin kökeni, 1940'lı yıllarda Fermi, Ulam, von Neumann, Metropolis ve diğerlerinin fizikteki farklı problemlerin incelenmesinde gelişigüzel sayıların kullanılmasını göz önünde bulundurmalarına dayanır. Monte Carlo simülasyonları ilk olarak, 1949 yılında Metropolis ve Ulam tarafından *modern hesaplama makineleri* kullanılarak yapılmıştır [47,48]. Yöntemin sistemleştirilip ünlü kumar şehrinde esinlenen adını alması iki bilim adamının bu çalışmasının sonucudur [49].

Monte Carlo yöntemi ile faz geçişleri üzerinden çok katlı integralleri hesaplamak, çeşitli spin, gaz, katı modellerinin benzetimini yapmak mümkündür[38]. Monte Carlo yöntemi, çok boyutlu integralleri iyi bir yaklaşıklıkla hesaplama işini stokastik programa dayanarak gerçekleştirir.

İstatistik fizikte çok boyutlu integrallerin hesaplanması üleşim fonksiyonu  $Z$  ile yapılır. Sayısal bir uygulamada integral aslında sistemin bütün konfigürasyonları üzerinden süreksiz bir toplamdır; spinlerin her birinin belli değerler aldığı bir

konfigürasyon  $r$  ile ve enerjisi  $E_r$  ile gösterilirse  $Z = \sum_r e^{-E_r/kT}$ . Monte Carlo yöntemi ise stokastik örnekleme programı vasıtasıyla bu toplamın hesabını yapmayı amaçlar. İstatistiksel bir olayın kendi içinden alınan örneklerle incelenmesi *örnekleme* diye adlandırılır. İki örnekleme programı bulunmaktadır; *basit örnekleme* ve *önem örnekleme*.

Basit örnekleme gelişigüzel konfigürasyonlar üreterek üleşim fonksiyonunu örnekler. Yüksek enerjili konfigürasyonların sayısı düşük enerjili olanlardan oldukça fazla olduğundan bu örnekleme programı verimsizdir; çünkü genellikle ilgilenilen sıcaklık aralığında bu konfigürasyonların büyük çoğunluğu üleşim fonksiyonuna önemli ölçüde katkıda bulunmaz.

Çok katlı sayısal integrallerin tüm konfigürasyonlar üzerinden hesaplanması sorunu, asıl konfigürasyonlar sınırlandırılarak yaklaşık bir çözümle ortadan kaldırılabılır. Bu yaklaşıma *önem örnekleme yaklaşımı* adı verilmektedir. Önem örnekleme, basit örneklemenin aksine *tarafli* bir örnekleme programıdır. Şöyle ki, çalışmasını  $Z$  üleşim fonksiyonu ifadesinde baskın olan konfigürasyonlar yönünde gerçekleştirir. Bunu, belirtilen bir sıcaklıkta Boltzmann dağılımına göre dağılmış konfigürasyonları üreterek yapar.

Önem örnekleme uygun dağılımı, konfigürasyonların Markov zincirine dayanarak oluşturur. Belirtilen bir konfigürasyon  $\sigma_i$ ' den başlanır, zincir geçiş olasılığı  $W(i \rightarrow f)$ ' na bağlı olarak yeni bir konfigürasyon  $\sigma_f$  seçer. Geçiş olasılığı, *ayrıntılı denge eşitliğine* uymalıdır:

$$w_i W(i \rightarrow f) = w_f W(f \rightarrow i), \quad (4.1)$$

$w_i$  ve  $w_f$ , oluşturulan dağılımlarda  $i$  ve  $f$  durumlarının oluş olasılıklarını gösterir. Başka seçeneklerin de olmasıyla birlikte genellikle  $w_i = e^{-E_i/kT}$  olan ( $E_i$ ,  $i$  durumunun enerjisidir.) Boltzmann dağılımları kullanılmaktadır [50].

Bu tarzdaki hesaplamaları içeren ilk algoritmalar Nicholas Metropolis, Arianna W. Rosenbluth, Marshall N. Rosenbluth, Augusta H. Teller ve Edward Teller tarafından geliştirilmiştir [48]. Geliştirilen bu algoritmalar, aşağıdaki gibi denge durumuna yönelen bir seri adım içerir:

- Gelişigüzel olarak seçilmiş bir konfigürasyon  $\sigma_i$ ' dan bir veya daha fazla serbestlik derecesi değiştirilerek yeni gelişigüzel konfigürasyon  $\sigma_f$  oluşturulur.

- Sistemin enerjisindeki değişim  $\Delta E$  hesaplanır.

-  $\Delta E \leq 0$  ise yeni konfigürasyon doğrudan kabul edilir.

-  $\Delta E > 0$  ise bu duruma geçiş olasılığı  $W(i \rightarrow f)$  hesaplanır. Bu durumu kabul edip etmemek üzere  $[0,1]$  aralığında gelişigüzel  $r$  bir sayısı üretilir.

- Eğer  $r \leq W(i \rightarrow f)$  yeni konfigürasyon kabul edilir; değilse yeni konfigürasyon reddedilir, eskisiyle devam edilir [50].

Bu aşamaların bütünü bir *Monte Carlo döngüsü* (MCD) olarak tanımlanır. N tane spin içeren sistemde her bir spinin bir kere taranması için bir Monte Carlo döngüsü en az N defa tekrarlanmalıdır [43] Monte Carlo döngü sayısı (MCD) ne kadar tekrarlanırsa (itere edilirse) hesaplamalarda yapılan istatistiksel hatalar  $1/\sqrt{MCD}$  oranında indirgenmiş olur [39]. Defalarca tekrarlanan Monte Carlo döngülerinden sonra elde edilen son konfigürasyon sistemin kararlı durumunu yansıtır ve bu konfigürasyona göre ısı sıgası, manyetik alınganlık gibi çeşitli termodinamik nicelikler hesaplanabilir [43,44,50].



## 4.1 Monte Carlo İntegrasyon Yöntemi

Monte Carlo yöntemi ile faz geçişleri üzerinden çok katlı integralleri hesaplamak mümkündür [38].

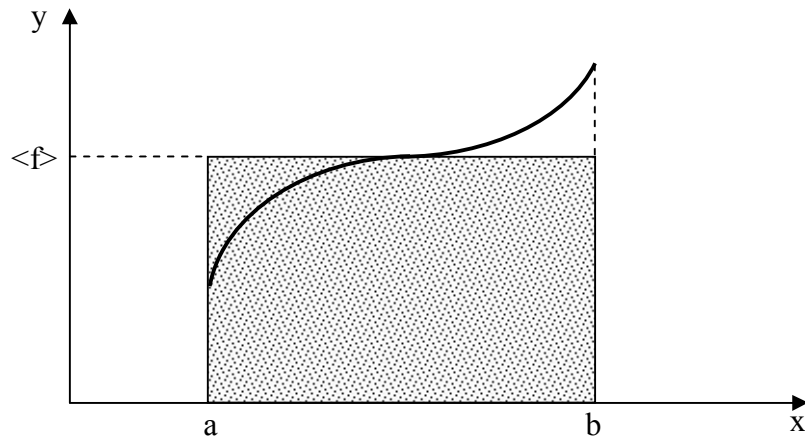
Bir  $f(x)$  fonksiyonunun  $[a,b]$  aralığındaki integrali göz önüne alındığında;

$$I = \int_a^b f(x) dx \quad (4.2)$$

Ortalama değer teoremine göre bir  $f(x)$  fonksiyonunun  $[a,b]$  aralığındaki integrali, Şekil 4.1'de görüldüğü üzere, fonksiyonun ortalama değerinde çizilen dikdörtgenin alanına eşittir:

$$I = (b-a) \langle f \rangle \quad (4.3)$$

O halde, fonksiyonun  $\langle f \rangle$  ortalama değeri  $(b-a)$  ile çarpılıp integrali hesaplanabilir.



Şekil 4.1 Ortalama  $\langle f \rangle$  değerinden çizilen dikdörtgenin alanı, eğri altında kalan alana eşit olur [40].

Fonksiyonun,  $[a, b]$  aralığında gelişigüzel seçilen  $N$  tane noktadaki aritmetik ortalaması hesaplanırsa,

$$\langle f \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \quad (4.4)$$

olur. Böylelikle Monte Carlo integrasyon formülüne ulaşılır:

$$I = \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \quad (4.5)$$

$x_1, x_2, \dots, x_N$  noktaları eşit aralıklarla sıralanmış olmayıp, tümüyle gelişigüzel seçilmiş noktalardır [40].

$N$  sayısı arttıkça sayısal hesap,  $I$  integralinin değerine yaklaşır. Ancak bu yaklaşım umulduğu kadar hızlı değildir. Bu yavaş yaklaşım, gelişigüzel yöntemlerin genel özelliğidir. Burada ispatsız verilen sonuca göre  $N$  sayısı arttıkça, hata payı  $1/\sqrt{N}$  olarak yavaş azalır [39,40].

Bir boyutlu integrallerde Monte Carlo yöntemi gerçekten verimsizken çok boyutlu integrallere gidildiğinde, Monte Carlo yöntemi avantajlı olmaya başlar. Monte Carlo integrasyonunda, parçacık ve boyut sayısı artarken, integrand hesaplanması gereken nokta sayısı çok daha yavaş artar [40,50].

## 4.2 İstatistik Fizikte Çok Boyutlu İntegrallerin Hesaplanması - Üleşim Fonksiyonu $Z$

Toplam enerjisi  $E_0$  ve toplam parçacık sayısı  $N_0$  olan serbestlik derecesi oldukça büyük yalıtık kapalı bir küme içinde belli bir kuantum durumunda enerjisi  $E_{N_r}$ , parçacık sayısı  $N$  olan ve kümeye göre serbestlik derecesi çok küçük bir kesim *sistem* olarak tanımlansın. Kümede bu sistemin dışında kalan yani enerjisi

$(E_0 - E_{Nr})$  ve parçacık sayısı da  $(N_0 - N)$  olan kesim de *ısı deposu* olarak tanımlansın. (Diğer sistemlerle ısısal etkileşimde bulunduğu mutlak sıcaklığı değişmeyen sistem, diğer sistemlere göre bir *ısı deposu* olarak davranır.) Bu tanımlanan ısı deposu ile sistem arasındaki etkileşmelerin zayıf etkileşmeler türünde olduğu varsayılınsın. Isı deposu olarak davranan katı örgü içinde herhangi bir örgü noktasında bulunan bir atom, bu tanıma uygun çevresinden ayırt edilebilen bir mikroskopik sistem olabilir.

Böyle bir sistemin fiziksel özellikleri, istatistik fizik yöntemleri ile incelenirken ilk olarak denge durumundaki sistemi,  $N$  tane parçacığın yerleşebileceği  $E_{Nr}$  enerjili bir kuantum durumunda bulma olasılığı  $P(E_{Nr})$  ele alınmalıdır. Sistem ısı deposu yanında çok küçük olduğu için aranan olasılık, ısı deposunun girilebilir durumlarının sayısı ile orantılı olacaktır. Yani,

$$P(E_{Nr}) \propto \Omega(E_0 - E_{Nr}, N_0 - N) = \Omega(E_d, N_d) \quad (4.6)$$

olur. Burada  $E_d$  ısı deposunun enerjisi,  $N_d$  parçacık sayısıdır. Sistem ısı deposundan çok küçük olduğundan yavaş değişen  $\Omega(E_d, N_d)$  'nin logaritmasını  $E_0$  ve  $N_0$  yakınlarında seriye açarak Denklem (4.6) için iyi bir yaklaşım bulabiliriz.

$$\ln \Omega(E_d, N_d) = \ln \Omega(E_0, N_0) - \left( \frac{\partial \ln \Omega}{\partial \ln E_d} \right)_{E_0} E_{Nr} - \left( \frac{\partial \ln \Omega}{\partial \ln N_d} \right)_{N_0} N \quad (4.7)$$

Bu bağıntıda,

$$\beta = \frac{\partial \ln \Omega}{\partial \ln E_d} = \frac{1}{kT} \quad (4.8)$$

$$-\mu\beta = \frac{\partial \ln \Omega}{\partial \ln N_d} \quad (4.9)$$

alınmıştır. Burada,  $k = 1.3807 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$  Boltzmann değişmezi,  $T$  ısı deposunun mutlak sıcaklığıdır. Böylece  $\beta = (kT)^{-1}$  basit olarak ısı deposunun sabit sıcaklık parametresidir. O halde Denklem (4.7),

$$\ln \Omega(E_d, N_d) = \ln \Omega(E_0, N_0) - \beta E_{Nr} + \beta \mu N \quad (4.10)$$

olarak yazılır, ya da

$$\Omega(E_d, N_d) = \Omega(E_0, N_0) e^{\beta(\mu N - E_{Nr})} \quad (4.11)$$

elde edilir.  $\Omega(E_0, N_0)$ ,  $r$  'den bağımsız olduğu göz önünde bulundurulur ve (4.6) bağıntısına dönülürse,

$$P(E_{Nr}) = C e^{\beta(\mu N - E_{Nr})} \quad (4.12)$$

yazılır. Burada  $C$ ,  $r$  'den bağımsız bir sabittir.

Bir sistemin bir ısı deposu ile etkileşmesi sonunda, sistemin bir  $r$  kuantum durumunda bulunma olasılığı  $P(E_{Nr})$  bağıntısıyla verilir. Bu bağıntı istatistik fizikte çok genel ve temel bir sonuçtur. Burada  $C$  orantı katsayısıdır ve olasılıkların tamlik koşulundan bulunur.

$$P(E_{Nr}) = 1 \quad (4.13)$$

Göz önüne alınan sistem ile ısı deposu arasında yalnızca ısıl etkileşme olduğu ve parçacık değişimi olmadığı varsayalım. Bu durumda sistemde kimyasal potansiyel sıfır olduğu için (4.12) bağıntısından,

$$P(E_r) = C e^{-\beta E_r} \quad (4.14)$$

yazılabilir. Sistemin tüm girilebilir kuantum durumları üzerine yapılan toplamada,

$$\sum_r P(E_r) = C \sum_r e^{-\beta E_r} = 1 \quad (4.15)$$

elde edilir. Buradan,

$$C = \frac{1}{\sum_r e^{-\beta E_r}} \quad (4.16)$$

bulunur. O halde, ısı deposu ile yalnızca ısı etkileşme içinde bulunan bir sistemin  $r$  kuantum durumunda dengede bulunma olasılığı,

$$P(E_r) = \frac{e^{-\beta E_r}}{\sum_r e^{-\beta E_r}} \quad (4.17)$$

olacaktır.

Bu bağıntının tanımladığı olasılık dağılımına kanonik dağılım ve  $e^{-\beta E_r}$  çarpanına da *Boltzmann çarpanı* denir. Belli bir  $T$  sıcaklığındaki bir ısı deposu ile ısı etkileşme içinde olan bir kümenin sistemleri girilebilir kuantum durumlarına (4.17) bağıntısına göre dağılmışlarsa bu küme bir kanonik kümedir.

Bir makroskopik sistemin termodinamik niceliklerinin istatistik fizik kurallarına göre türetilmesinde üleşim fonksiyonları kullanılmaktadır; üleşim fonksiyonlarını oluşturmak için temel bağıntı (4.12) bağıntısıdır. (4.17) bağıntısı,

$$P(E_r) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_r} \quad (4.18)$$

biçiminde de yazıldığında,

$$Z = \sum_r e^{-\beta E_r} \quad (4.19)$$

bağıntısı ile tanımlanan  $Z$  niceliğine *üleşim fonksiyonu* denir ve parçacıkların olası kuantum durumlarına paylaşılmasını belirler.

Bir kanonik kümede olasılık dağılımının (4.17) ile verildiği varsayalım. Böyle bir kanonik kümede bir  $A$  niceliğinin ortalama değeri,

$$\bar{A} = \sum_r A_r P(E_r) = \sum_r A_r \frac{1}{Z} e^{-\beta E_r} \quad (4.20)$$

bağıntısından bulunur. Burada toplama sistemin tüm girilebilir durumları üzerinden yapılır [41,51,52].

Kanonik dağılım, fiziksel bakımdan önem taşıyan problemlerin tartışılmasında kullanılabilir. Monte Carlo yöntemi olasılıkların hesaplanması için mükemmel bir yöntemdir [43,44].

### 4.3 Gelişigüzel Sayı Üretimi

Monte Carlo yönteminin uygulaması gelişigüzel olarak oluşturulmuş veriler kullanılarak yapılmaktadır. Monte Carlo yöntemi bir örnekleme yöntemi olması sebebiyle uygulama sürecinde *örnekleme hatalarının* gözlenmesi mümkündür, bunlar gelişigüzel sayıların değişkenliğinden kaynaklanan hatalardır [53].

Gelişigüzelliğin tam tanımı konumuzun kapsamı dışındadır. Gelişigüzel sayılar önceden tahmin edilemezler ve uygun bir fiziksel yöntem ile üretilmelidirler. Bu tarzda üretilmiş sayılar mevcuttur fakat Monte Carlo benzetimleri için oldukça hantal kalmaktadır [50]. Burada sadece çeşitli basit algoritmalarla bilgisayarlarda üretilen *sahte* gelişigüzel sayılarla ilgilenilecektir. Bu sayılar, tamamen geri üretilebilir sayı dizilerinden oluştuğu için tahmin edilebilirler. Geri üretilebilirlik, benzetim programlarının detaylı denetimine imkan verdiği için istenen bir özelliktir. *Sahte* gelişigüzel sayılar, *gerçek* gelişigüzel sayıların istatistiksel özelliklerine çok

benzer istatistiksel özelliklere (düzgün dağılım ve korelasyon kat sayılarının olmaması gibi) sahiptirler. Bu nedenle verilen bir dizi *sahte* gelişigüzel sayı pek çok uygulama açısından gelişigüzel görünebilir. İlerleyen kısımlarda *sahte* gelişigüzel sayılar ifade edilirken “sahte” ifadesi kullanılmayacaktır.

İhtiyaç duyulan gelişigüzel sayılar 0 ile 1 arasında düzgün dağılan ve korelasyonsuz olan sayılardır. Korelasyonsuz denilirken gelişigüzel sayı dizisi boyunca sadece ikili korelasyonların değil aynı zamanda üçlü ve daha yüksek mertebedeki korelasyonların da olmadığı durum kastedilmektedir. Tabii ki bahsedilenleri tamamen gerçekleyen bir algoritma bulunmamaktadır. Yüksek mertebeli korelasyonların yol açtığı hatalı benzetimler eskiden beri merak ve araştırma konusu olmuştur. Bütün standart testleri geçen ve yıllardır başarılı bir biçimde kullanılan gelişigüzel sayı üreteçleri bile yeni bir uygulama için yeterli olamayabilir, yeni bir Monte Carlo algoritma çeşidi gerektirebilir. Üreteçlerin test edilmesi kendi içinde bir araştırma konusudur.

Gelişigüzel sayı üreteçlerinde ortaya çıkan sınırlama, bilgisayarların sonlu kelime uzunluğundan kaynaklanan, sonlu periyottur. Bütün üreteçler, aynı diziyi tekrar üretebilmek için uzun fakat sonlu bir periyottan sonra başlar. Örneğin 32-bit bilgisayarlar için basit üreteçlerin maksimum periyodu sadece  $2^{30} \sim 10^9$  sayıdır. Bu, geçmiş başarılı uygulamalar için yeterli olmamıştır. Bazıları bu sorunun üstesinden gelebilirken bazıları da gelişigüzel sayı üreteçlerini temsilen, taşınabilir ve elverişli olması açısından, Fortran ve C++ gibi yüksek seviyeli programlama dillerinde kodları tercih etmiştir. Bu kodlar fazlasıyla hızlı olduklarından benzetim programının hızını kesmezler.

Kısmen çelişen bu gereksinimler arasında iyi bir uzlaşım olan yeni üreteçler bulmak hala merak ve ilgi konusudur.

Sıklıkla kullanılmış olan gelişigüzel sayı üretme tekniklerinden en iyi bilinen lineer eşleniksel yöntemdir. Yöntemde 0 ile  $(m-1)$  arasında tekrarlanan  $x_1, x_2, x_3, \dots$  gibi bir tamsayı dizisi oluşturmak için  $x_{i+1} = (ax_i + c) \bmod m$ ,  $i = 0, 1, 2, \dots$  formülü

kullanılır.  $c, m$  ve  $x_0$  değerlerinin seçimi istatistiksel özellikleri ve çevrim uzunluğunu önemli derecede etkiler.  $[0, m-1]$  aralığında gelişigüzel tamsayılar üretildikten sonra bunları  $[0,1]$  aralığında gelişigüzel sayılara dönüştürmek için,  $R_i = x_i/m$ ,  $i = 1, 2, \dots$  işlemi uygulanır. İyi bir üreteç, maksimum yoğunluk ve periyot sağlamalıdır. Maksimum yoğunluk için  $R_i$ ,  $i = 1, 2, \dots$  ile elde edilen değerler  $[0,1]$  aralığında büyük boşluklar bırakmamalı ve  $m$  için büyük bir tamsayı kullanılmalıdır ( bu da yuvarlamaya çok az etki eder, böylelikle her bir  $R_i$  değerinin sürekli değil ayırık olması problemi çözülebilir). Maksimum periyot, maksimum yoğunluğa ulaşmak ve uzun bir çevrim için gereklidir ki bu da  $a, c, m$  ve  $x_0$  değerlerinin uygun seçilmesi ile mümkündür. Bilgisayarlar sayıların binary karşılığını kullandığından  $m$  modül değerinin 2 'nin kuvveti olması hız ve etkinlik açısından önemlidir.  $c$ , sıklıkla 0 olarak alınmıştır ve bu durumda üreteç “multiplikatif eşleşiksel” olarak adlandırılır [50,53].  $m = 2^b$  ve  $c = 0$  iken mümkün olan en uzun periyot,  $P = m/4 = 2^{b-2}$  dir. En uzun periyoda  $x_0$  tek olmak üzere  $a = 3 + 8k$  veya  $a = 5 + 8k$  ( $k=0, 1, \dots$ ) şeklinde seçildiğinde erişilebilir. Örneğin  $a=11$ ,  $m=128$ ,  $c=0$  iken  $x_0=1, 2, 3, 4$  seçilirse maksimum periyot  $P = m/4 = 32$  olacaktır. ve ancak  $x_0=1$  veya 3 iken yani tek iken elde edilebilir [54]

Bir diğer sık kullanılan algoritma ise *shift-register* yöntemidir. Bu tip algortmada ilk olarak bir gelişigüzel sayı dizisi oluşturulur. Yeni üretilen her sayı, dizide daha önce belirlenmiş sayılara ve seçilmiş bir  $m$  modülüne bağlıdır, yani;

$$x_i = (x_{i-p} + x_{i-q}) \bmod m \quad (4.21)$$

burada  $p$  ve  $q$  uygun seçilmelidir. Örneğin bilinen R250 üretici  $p=250$ ,  $q=103$  olarak kullanır ve başlangıçta 250 gelişigüzel sayıya ihtiyaç duyar. Yeni girişi oluşturan sayıların her seferinde yeni sayıyı ekleyip diğerini çıkararak sürekli değişmesinden dolayı algortmaya *shift-register* denilmektedir [50,55]

Bu kısımda değinilecek olan gelişigüzel sayı üreteçleri bunlarla sınırlıdır.



Uygulamada C programlama dili kullanıldığından şans faktörü, C standart kütüphanesinde bulunan *rand* fonksiyonu sayesinde oluşturulmuştur. *rand* fonksiyonu 0 ile *RAND\_MAX* (<*stdlib.h*> öncü dosyasında tanımlı bir sembolik sabit) değeri arasında bir tamsayı yaratır. ANSI standartlarına göre *RAND\_MAX*, iki byte (16 bit) tamsayıların alabileceği en büyük değer olan 32767' den büyük olamaz. Eğer *rand* düzgün olarak çalışarak tamsayılar oluşturursa, 0 ile *RAND\_MAX* arasındaki tüm sayıların üretilme şansı (ihtimali) *rand* her çağrıldığında aynı olacaktır.

Mod operatörünü (%), *rand* ile kullandığımızda belirlediğimiz aralıklarda tamsayılar üretmek mümkündür. Örneğin “*rand()%10* ” ifadesi ile 0 ile 10 dizisindeki (0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9,) tamsayılar üretilecektir. Buna *derecelendirme* denir. 10 sayısı *derecelendirme faktörü* (istenilen aralığın genişliği) olarak adlandırılır. İfadeye 1 eklenerek sayıların dizisi kaydırılabilir; yani “*1+rand()%10* ” ifadesi ile 1-10 dizisi içindeki tamsayılar üretilecektir. 1 sayısı burada *kaydırma değeri*dir (istenilen aralığın başlangıç değeri).

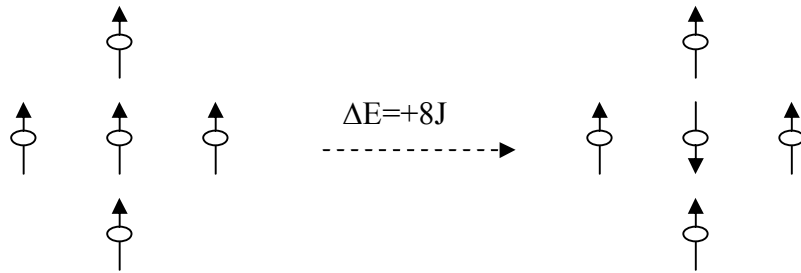
*rand* fonksiyonu gerçekte, sahte gelişigüzel sayılar üretir. *rand* fonksiyonunu tekrar tekrar çağırmak, gelişigüzel gibi görünen bir dizi sayı oluşmasına neden olur. Ancak bu dizi, program her çalıştırıldığında kendini tekrar etmektedir. Programın hataları tamamen ayıklandığında, her çalıştırmada gelişigüzel sayıların farklı bir dizisinin üretilmesi sağlatılabilir. Buna *rassallaştırma* denir ve standart kütüphane fonksiyonu olan *srand* sayesinde yapılır. *srand* fonksiyonu, *unsigned* tipte bir tamsayıyı argüman olarak kullanır ve *rand* fonksiyonunu besleyerek, programın her çalıştırılışında farklı bir dizide gelişigüzel sayılar oluşturulmasını sağlar. Eğer her seferinde besleme girmeden gelişigüzel sayılar oluşturmak istenirse “*srand(time(NULL))* ” ifadesi kullanılmalıdır. Bu ifade, bilgisayarın besleme değeri olarak otomatik bir biçimde kendi saatini okumasına sebep olur. *time* fonksiyonu, o andaki saati saniye biçiminde oluşturur. Bu değer *unsigned* bir tamsayıya dönüştürülür ve gelişigüzel sayı üretiminde besleme olarak kullanılır. *time* fonksiyonu argüman olarak *NULL* kullanır. (*time* programcının o günkü zamanı temsil eden bir dizeyi elde etmesini sağlar; *NULL* bu özelliği, *time* fonksiyonuna yapılan belirli bir çağrıda ortadan kaldırır.) *time* fonksiyonunun prototipi <*time.h*> içindedir [59,60].

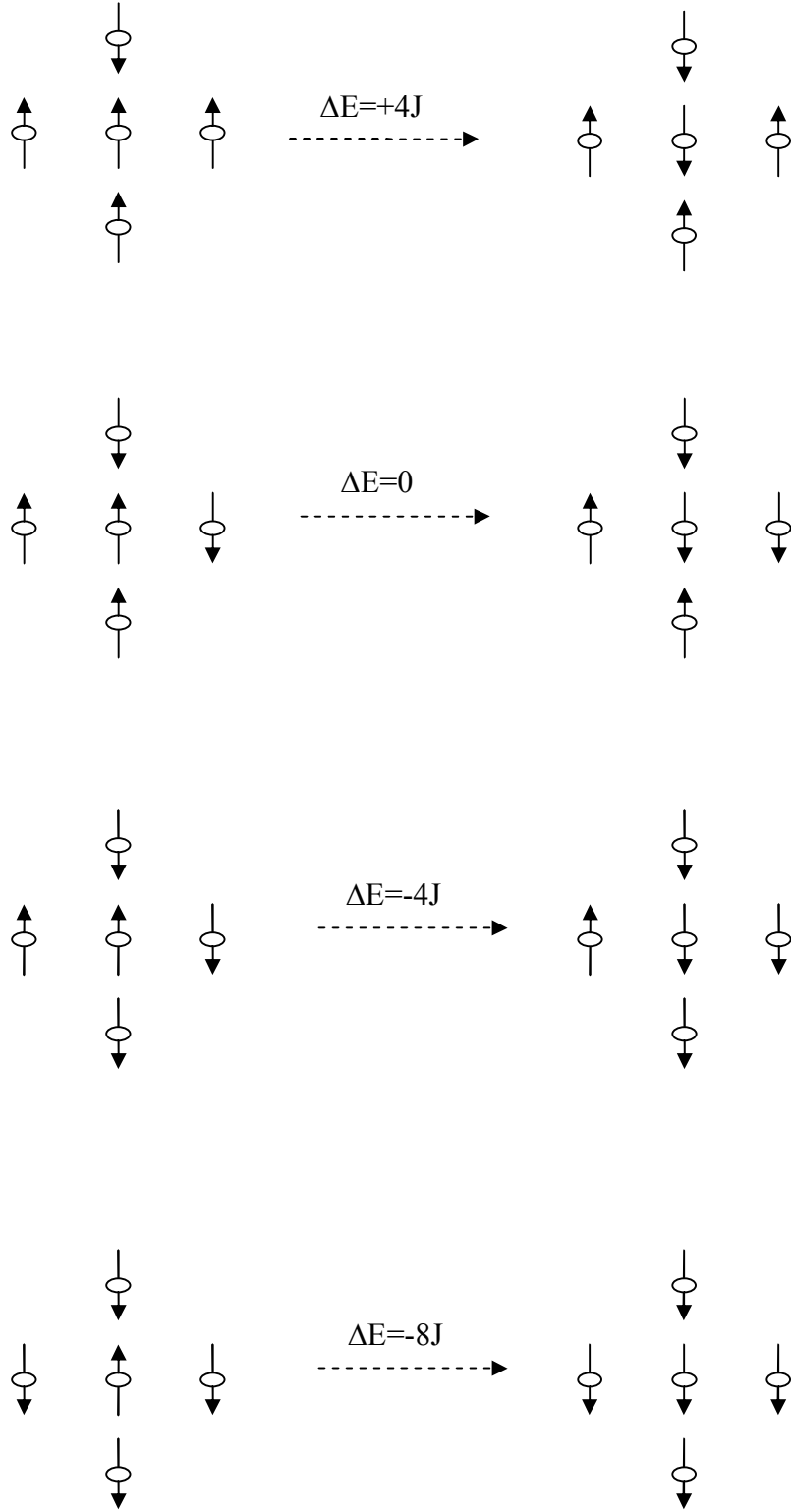
Uygulamada 0 ile 1 arasında düzgün dağılımlı gelişigüzel sayılar oluşturabilmek için “ $(1+\text{rand}(\%9)/10)$ ” ifadesi kullanılmıştır. Elde edilen gelişigüzel sayılardan 0.5 den küçük olan sayı -1, büyük olan ise 1 değerini alacak şekilde başlangıç matrisi oluşturulmuştur. Böylece oluşan konfigürasyonda -1 değerleri aşağı yönlü spinleri, +1 değerleri ise yukarı yönlü spinleri temsil etmektedir.

#### 4.4 Sayısal Hesap Açısından Önemli Noktalar

Ising modelinin Monte Carlo yöntemi ile çözümünde,  $N$  sayıda spin içeren sistemdeki spinlerden gelişigüzel biri seçilerek alt-üst edilir. Bu yeni durumun toplam enerjisine bakılır. Eğer enerji daha düşük oluyorsa bu konfigürasyon kabul edilir. Eğer enerji artıyorsa Boltzmann dağılımındaki olasılık hesaba katılarak devam edilir. Böylece binlerce kez devam edilerek sistemin dengeye ulaşması sağlanır. Denge durumunda manyetizasyon  $\bar{M}$  hesaplanır [40,43,44].

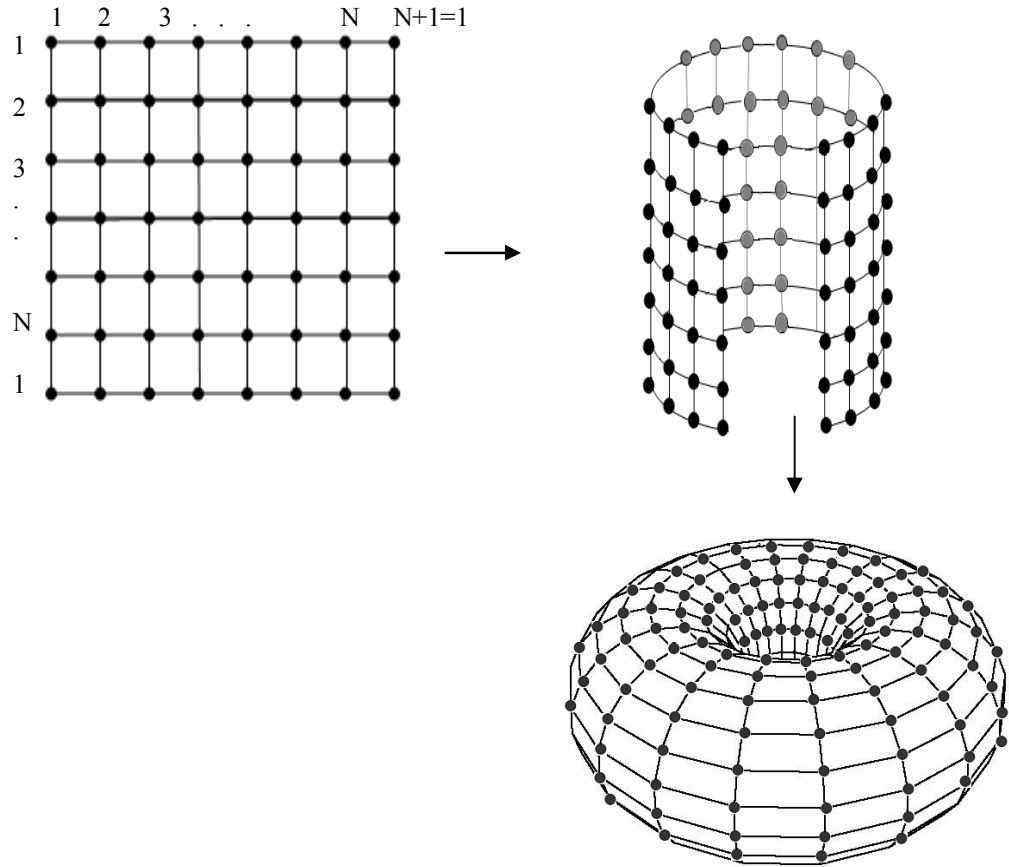
Sayısal hesap açısından önemli olan diğer noktalardan komşu etkileşmelerini inceleyelim. Kare bir örgüde her spinin sadece en yakın 4 komşusuyla etkileştiği varsayılır. Her bir spinin komşularıyla olabilecek farklı etkileşimleri -ki bunlar 5 farklı duruma neden olur- ve bunların enerjiye katkıları Şekil 4.2’ de gösterilmiştir.





Şekil 4.2 Bir spinin 4 komşusuyla etkileşmesi. Merkezdeki spin alt-üst olduğunda enerjiye farklı katkılarda bulunan 5 durum oluşabilir [40].

Küçük bir kare örgünün, gerçekçi bir katı modelindeki  $\sim 10^{23}$  sayıda spinin davranışını vermesi beklenemez; yüzey etkileri önemli olmaya başlar. Örneğin, kenarlardaki spinlerin 4 komşusu olmadığından, bu spinler hesaplara farklı katkıda bulunurlar. Bunun önüne geçmek ve kare örgünün sonsuz genişlikte bir katıyı temsil etmesini sağlamak için periyodik sınır koşulları alınır. Bunun için,  $i=1$  olan en soldaki spinin sol komşusu olarak  $i=N$  olan en sağdaki spin alınır.  $i=N$  olan en sağdaki spinin sağ komşusu olarak ise  $i=1$  olan en soldaki spin alınır. Aynı şartlar, alt ve üst kenarlardaki spinler için tekrar edilir [40]. Şekil 4.3'de gösterilen iki boyutlu Ising örgüsünün topolojik şeması, periyodik sınır koşullarını ifade etmektedir.



Şekil 4.3 İki boyutlu Ising örgüsünün topolojik şeması.

Geçiş olasılığı da sayısal hesap açısından önemli olan noktalardan biridir. Sistemin  $E_1$  enerjili bir durumdan  $E_2$  enerjili bir duruma geçiş olasılığı, bu iki durumun olasılıklarının oranı olacaktır [52]:

$$p_{1 \rightarrow 2} = \frac{e^{-E_2/kT} / Z}{e^{-E_1/kT} / Z} = e^{-\Delta E/kT} \quad (\Delta E > 0) \quad (4.22)$$

Böylece belli bir konfigürasyonda iken, bir spinin alt-üst edildiği durum için 4 komşunun toplam enerjisindeki  $\Delta E$  artışını hesaplamak yeterlidir.

Uygulamanın fiziksel parametreleri  $J$  etkileşme sabiti ve  $T$  sıcaklığı olup, üstel fonksiyonda  $J/kT$  olarak yer almaktadır. O halde boyutsuz bu büyüklük indirgenmiş sıcaklık olarak yazılabilir [40]:

$$T^* = J/kT \quad (4.23)$$

Daha önce de vurgulandığı gibi  $J$  etkileşme sabiti enerji boyutunda bir büyüklüktür [45].

Burada mıknatıslanmanın sıcaklıkla değişimi merteye olarak incelendiği için bu bağl sıcaklıkla çalışmak hesaplamalarda kolaylık sağlar [40,61].

#### 4.5 Algoritma

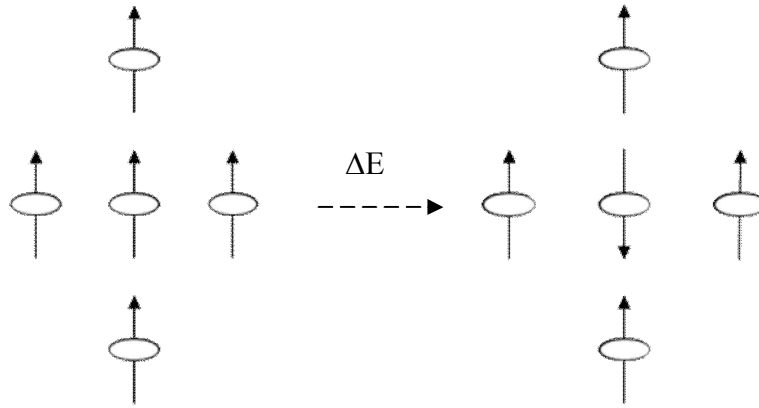
Monte Carlo simülasyonunun algoritması şu adımlarla yapılabilir:

1. Bir kenarında  $L$  sayıda spin olan ve toplam  $L^2$  spinden oluşan kare bir örgüde,  $T$  sıcaklığında ve  $\vec{H}$  dış manyetik alanında, gelişigüzel bir başlangıç konfigürasyonu oluşturulur.

2. Oluşturulan başlangıç konfigürasyonunun enerjisi ve manyetizasyonu kaydedilir.

3. *Monte Carlo döngüsü:*

- Örgüdeki spinlerden biri gelişigüzel seçilip, Şekil 4.4' de gösterildiği gibi alt-üst edilir.



Şekil 4.4 Spin sisteminden gelişigüzel seçilen spinlerden birinin alt-üst edilmesi.

- Alt-üst edilen spinin komşularıyla olan  $\Delta E$  enerji değişimi hesaplanır.

-  $\Delta E \leq 0$  ise yeni konfigürasyon doğrudan kabul edilir.

-  $\Delta E > 0$  ise bu duruma geçiş olasılığı  $W(i \rightarrow f)$  hesaplanır. Bu durumu kabul edip etmemek üzere 0 ile 1 arasında gelişigüzel  $r$  bir sayısı üretilir.

- Eğer  $r \leq W(i \rightarrow f)$  ise yeni konfigürasyon kabul edilir; değilse yeni konfigürasyon reddedilir, eskisiyle devam edilir.

4. Monte Carlo döngüsü defalarca tekrarlanır. Her dönüşte hesaplanan  $\overline{M}$  mıknatıslanma değerleri toplanır.

5. Döngü bittiğinde elde edilen değerler döngü sayısına ve toplam  $N$  spin sayısına bölünerek, spin başına  $\overline{M}$  mıknatıslanması bulunur. Bunun yanında ısı sığası, manyetik alınganlık gibi istenilen diğer termodinamik nicelikler de hesaplatılabilir.
6. Yeni bir  $T$  sıcaklığında ve  $\overline{H}$  dış manyetik alanında yukarıdaki adımlar tekrarlanır [40,50].

## 5. MONTE CARLO UYGULAMASI SONUÇLARI

### 5.1 Domain Sistemleri Üzerinde Termal Etkinin Gözlenmesi

Ising modeli, bir kare örgüde sadece en yakın komşu atomik momentler arasındaki etkileşme alanlarına dayanmaktadır [62]. En yakın komşu atomlar arasındaki değiş-tokuş etkileşmeleri bir domain içindeki momentlerin paralel sıralanmasına sebep olur [63].

Weiss teorisine göre Curie sıcaklığının altında yani ferromanyetik fazda, manyetik domain içindeki manyetizasyonun doyuma ulaşmasını sağlayacak kadar çok sayıda atomik manyetik moment paralel sıralanmakta, bununla birlikte sıralanmanın yönünün domainden domaine gelişigüzel değişmektedir [63]. Domain içinde manyetizasyonun homojen ve bilinen bir  $\vec{M}_s$  (domain içindeki kendiliğinden manyetizasyon) değerinin olmasından dolayı Weiss alanının, bir domain içinde gerçek duruma iyi bir yaklaşım olduğu kabul edilir [64].

0K'de doyum manyetizasyonuna eşit olan domain içindeki kendiliğinden manyetizasyon, sıcaklık arttıkça termal enerjinin etkisiyle azalır ve Curie noktasında 0 olur [42].

Modelde ilk olarak, yüksek sıcaklıkta gelişigüzel atomik manyetik momentlere sahip sistem ele alınmıştır; sistem üzerine dış manyetik alan uygulanmamış sadece sıcaklığın etkisi incelenmiştir. Dış alanın sıfır olduğu durumda bir domain içindeki tek alan değiş-tokuş etkileşme alanıdır [64]. Sıcaklığın azalmasıyla birlikte momentler arasındaki değiş-tokuş enerjisinin termal enerjiyi yenerek momentlerin paralel sıralanmaya geçmesi, belli bir sıcaklık değerinden (Curie sıcaklığı) aşağıda da momentlerin tamamının paralel sıralanması beklenmektedir. Bu durum bir manyetik domain içinde meydana gelen kendiliğinden manyetizasyonun modellenmesi olacaktır.



Spin sistemi olarak  $20 \times 20$ 'lik ( $L=20$ ) 400 elemanlı (her biri  $\pm 1$  değerler alabilen 400 spinli,  $N=400$ ) bir matris ele alınmıştır.  $N$  tane spin içeren sistemde her bir spinin bir kere taranması için, Bölüm 4'te tanımlanan bir Monte Carlo döngüsü en az  $N$  defa tekrarlanmalıdır [43]. Monte Carlo döngüsü (MCD) ne kadar tekrarlanırsa (itere edilirse) hesaplamalarda yapılan istatistiksel hatalar  $1/\sqrt{MCD}$  oranında indirgenmiş olacağından [39] Monte Carlo döngüsü 1000 defa tekrarlanmıştır.  $k = 1.3807 \times 10^{-23} JK^{-1}$  ( $J$  burada Joule birimini ifade etmektedir.) Boltzmann değişmezi,  $T$  sistemin mutlak sıcaklığı olmak üzere sistemin sabit sıcaklık parametresi  $\beta = (kT)^{-1}$ , her 1000 iterasyonda, 0.0125 artırılmış, toplam zaman 100000 iterasyon olarak alınmıştır.  $\beta = (kT)^{-1} = 0$  değerinden başlatılan süreç, 100000 iterasyon sonunda  $\beta = (kT)^{-1} = 1.25J^{-1}$  ( $J$  burada değiş-tokuş etkileşme sabitini ifade etmektedir.) değerinde sonlanmıştır.

$\beta = (kT)^{-1} = 0$  sonsuz sıcaklığında atomik manyetik momentlerin termal enerjisi, momentler arasındaki değiş-tokuş enerjisinden yüksek olduğundan bu durum gelişigüzel paramanyetik sıralanmaya sebep olmaktadır.

Ferromanyetik faz ile paramanyetik fazı ayıran parametreye düzen parametresi denildiği Bölüm 4'te belirtilmiştir. Düzen parametresi, farklı fazlarda değişik değerler alan bir termodinamik fonksiyondur. Ferromanyetiğin düzen parametresi, Denklem 4.1'e göre manyetik alanın olmadığı, bir domain için sistemin tam düzenli olduğu durumda  $\eta \neq 0$  olurken tam düzensizlik durumunda  $n_+ = n_- = N/2$ , ve  $\eta = 0$  olur [38]. Sistemin  $\beta = (kT)^{-1} = 0$  değerinden başlatılan sıcaklık parametresi değeri her 1000 iterasyonda, 0.0125 artırılmıştır.  $\beta = (kT)^{-1} = 0.075J^{-1}$  değerinde 6000. iterasyonda yukarı yönlü spin sayısı  $n_+ = 209$ , aşağı yönlü spin sayısı  $n_- = 191$  ve buradan düzen parametresi  $\eta = 0.0175$  olarak hesaplatılmıştır; buradan sistemin düzensiz durumda yani paramanyetik fazda olduğu görülmektedir. Bu durum, siyah rengin yukarı yönlü spinleri, gri rengin aşağı yönlü spinleri gösterdiği, Şekil 5.1'de yer alan şekillenimlerde belirtilmiştir. Artırılan sıcaklık parametresi  $\beta = (kT)^{-1}$ , yani azaltılan sıcaklık  $T$  etkisiyle spinlerin

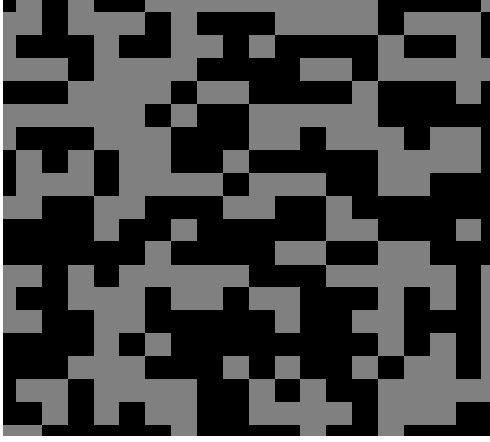
gelişigüzel konumlarından ayrılıp yukarı yönde paralel sıralandıkları gözlenmiştir (Şekil 5.1 ve Şekil 5.2). Şekil 5.2’de, spin sisteminde +z ve -z yönünde sıralanmış spin sayılarının başlangıçta yakın değerlerde bulunduğu (t=0’da  $n_+=166$ ,  $n_-=234$ ) azaltılan sıcaklık  $T$  etkisiyle +z yönünde paralel sıralanan spin sayısının arttığı, -z yönünde sıralanan spin sayısının ise azaldığı görülmektedir (t=50000’de  $n_+=400$ ,  $n_-=0$ ). Şekil 5.2’ de yer alan  $n$ , spin fazlalığı,  $n = n_+ - n_-$ ’yi ifade etmektedir. Sistemin  $\vec{M} = n \cdot \vec{m}$  ile tanımlanan [41,51] sistemin net manyetizasyonu,  $n$  spin fazlalığına bağlıdır. Ferromanyetik şekillenimde tüm spinlerin yukarı yönelimli olduğu duruma soğuk şekillenim denir. Spinlerin gelişigüzel yerleşiminin söz konusu olduğu duruma ise sıcak şekillenim adı verilir [39]. 50000. iterasyonda  $\beta = (kT)^{-1} = 0.637J^{-1}$  değerinde yukarı yönlü spin sayısı  $n_+=400$ , aşağı yönlü spin sayısı  $n_-=0$  olurken buradan düzen parametresi  $\eta = 1$  olarak bulunmuştur. Bu da sistemin sıcak şekillenimden soğuk şekilleneceğine geçtiğini, Şekil 5.3’ te görüldüğü gibi spin başına ortalama manyetizasyonun doyum değerine ulaştığını göstermektedir.

Spin sıralanmasının enerji minimizasyonuna göre yapıldığı, Bölüm 4’ te Monte Carlo döngüsünde ayrıntılarıyla ifade edilmiştir. Uygulamada incelediğimiz durum değiş-tokuş etkileşme sabiti  $J$ ’nin sıfırdan büyük olduğu durumdur.  $J > 0$  olduğu zaman sıralanma paraleldir, bu da ferromanyetizmaya yol açar [43,44]. Programda spinlerin etkileşim enerjisi  $E = J - J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$  olarak hesaplatılmıştır [38]. Böylelikle  $\vec{S}_i = \vec{S}_j$  ise  $\frac{E}{J} = 0$ ,  $\vec{S}_i \neq \vec{S}_j$  ise  $\frac{E}{J} = 1$  olmaktadır. Şekil 5.4’ te sürecin başlangıcında düzensiz duruma denk gelen ortalama enerji değerinin 1 olduğu görülmektedir. Her 1000 iterasyondan sonra sıcaklığın azaltılmasıyla termal etkiyi bastıran spinler arası değiş-tokuş etkileşme enerjisinin minimizasyonunun sağlandığı ve böylelikle sistemin 50000.iterasyon,  $\beta = (kT)^{-1} = 0.637J^{-1}$ ’de düzenli duruma geçmesi ile birlikte ortalama enerjinin 0 olduğu gözlenmiştir.

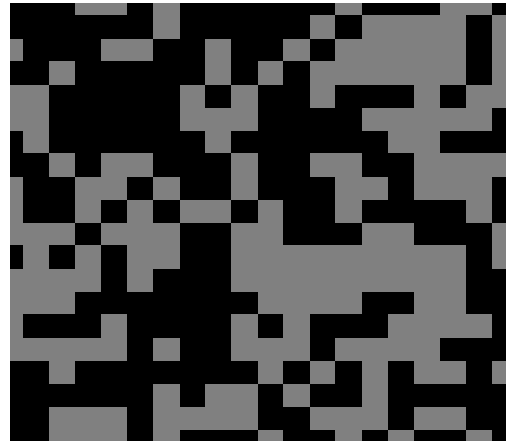
L. Onsager 1944 yılında Ising modelin analitik çözümünü yapmış ve bu geçiş sıcaklık parametresi değeri  $\beta^*$  yı 0.44 olarak hesaplamıştır [65]. K. Binder ve D. P.

Landau da 1984 yılında yaptıkları çalışmada  $\beta$  deęerini Onsager ile uyumlu olarak 0.44' de gözlemişlerdir [66].

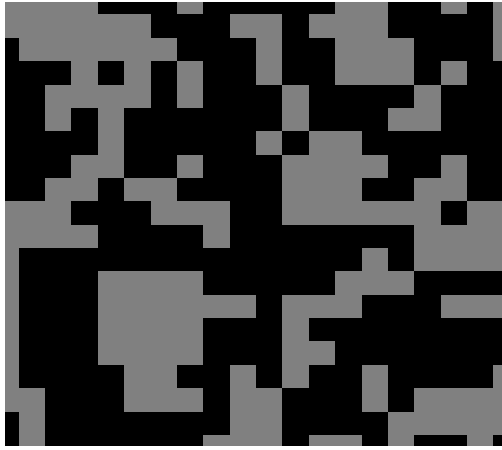
Kritik sıcaklığın altında elektron momentlerinin termal enerjisi gelişigüzel paramanyetik sıralanmaya sebep olmak için yetersiz [64] olduğundan sıcaklık azalışıyla birlikte spinler paralel sıralanmaya geçmiştir. Biner kez tekrarlanan Monte Carlo döngülerinden sonra elde edilen son konfigürasyon sistemin kararlı durumunu yansıtır ve bu konfigürasyona göre çeşitli termodinamik nicelikler hesaplanabilir.



$$\beta=0.075J^l, n_-=191, n_+=209$$



$$\beta=0.3125J^l, n_-=185, n_+=215$$



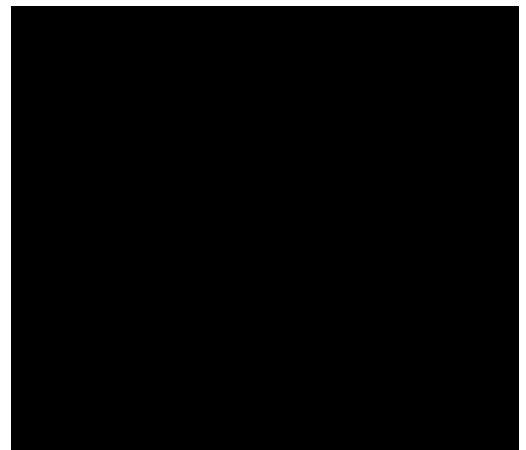
$$\beta=0.4750J^l, n_-=171, n_+=229$$



$$\beta=0.5375J^l, n_-=170, n_+=230$$

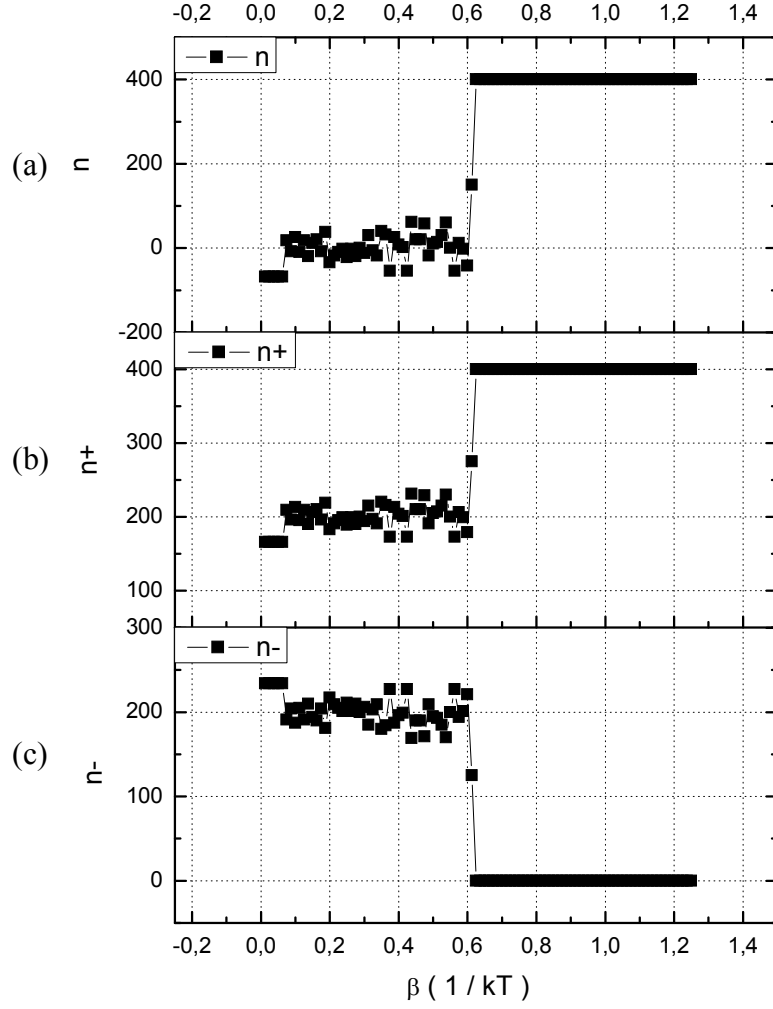


$$\beta=0.6125J^l, n_-=125, n_+=275$$

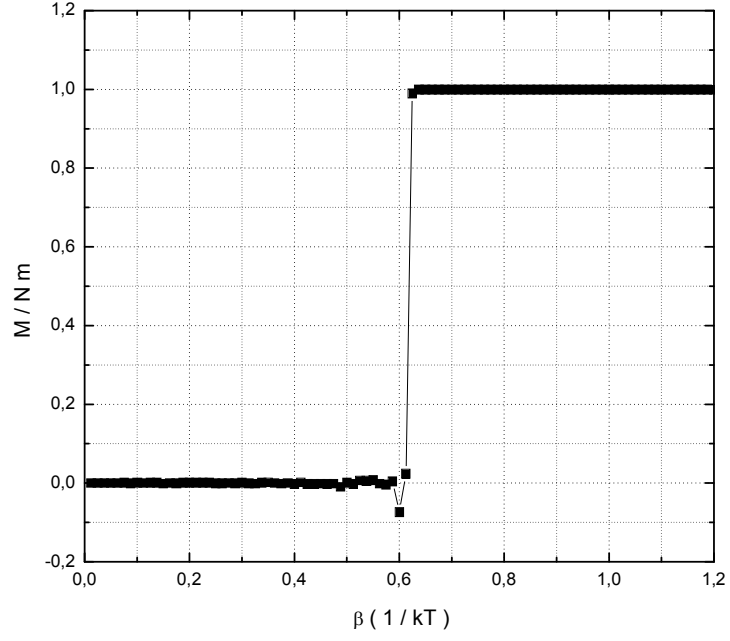


$$\beta=0.6375J^l, n_-=0, n_+=400$$

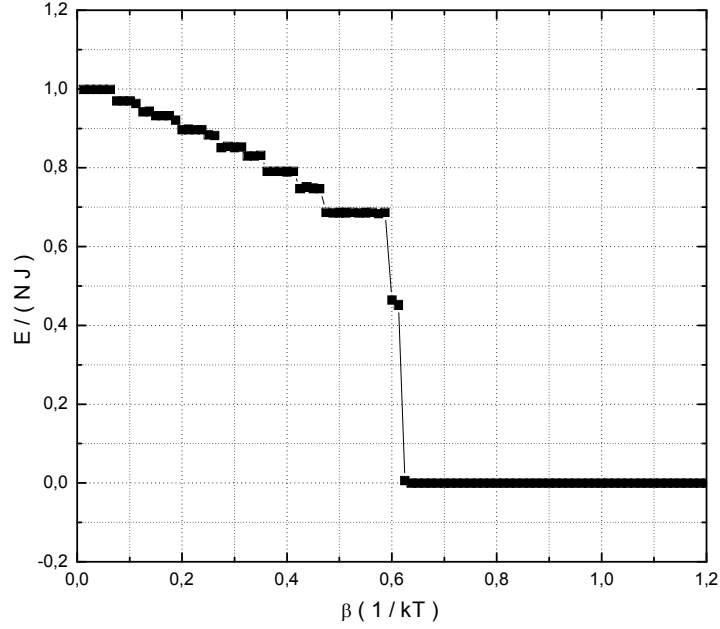
Şekil 5.1 Sıfır manyetik alanda azaltılan sıcaklık etkisiyle bir domain içindeki spinlerin +z yönünde paralel sıralanması.



Şekil 5.2 Sıfır manyetik alanda azaltılan sıcaklık etkisiyle, süreç sonunda spinlerinin tamamı +z yönünde sıralanan bir domainin spin yönelimlerinin  $\beta = (kT)^{-1}$ 'ya bağlı değişimi. (a) +z yönündeki spin fazlalığının ( $n = n_+ - n_-$ )  $\beta = (kT)^{-1}$ 'ya bağlı değişimi; (b) +z yönünde sıralanan spin sayılarının ( $n_+$ )  $\beta = (kT)^{-1}$ 'ya bağlı değişimi; (c) -z yönünde sıralanan spin sayılarının ( $n_-$ )  $\beta = (kT)^{-1}$ 'ya bağlı değişimi.



Şekil 5.3 Sıfır manyetik alanda azaltılan sıcaklık etkisiyle spinlerinin tamamı +z yönünde sıralanan sistemin spin başına ortalama manyetizasyonunun  $\beta = (kT)^{-1}$ 'ya bağlı değişimi.



Şekil 5.4 Sıfır manyetik alanda azaltılan sıcaklık etkisiyle spinlerinin tamamı +z yönünde sıralanan sistemin spin başına ortalama enerjisinin  $\beta = (kT)^{-1}$ 'ya bağlı değişimi.

Spinlerin sadece yukarı ve aşağı olmak üzere iki şekilde yönlenebildiği (modelde spinlerin +1 ve -1 değerlerini aldığından bahsedilmişti) manyetik bir sistem üzerine dış alan uygulanmıyorsa manyetizasyon her iki yöne bakabilir [64]. Bölüm 2’de detaylı bir şekilde ele alınan değiş tokuş enerjisi spinler paralel sıralandığında en küçüktür ve bu ifadede paralel sıralanmanın yönünü belirleyen bir etken yoktur. Yukarıdaki sistemde sıcaklık azalışıyla birlikte spinlerin tamamı yukarı yönde (+z yönünde) paralel sıralanmıştır (Şekil 5.1). Bu kez farklı bir takım gelişigüzel sayıdan oluşan 400 spinli sistemde, spinlerin tamamının aşağı yönde de (-z yönü) paralel sıralanabileceği gösterilecektir.

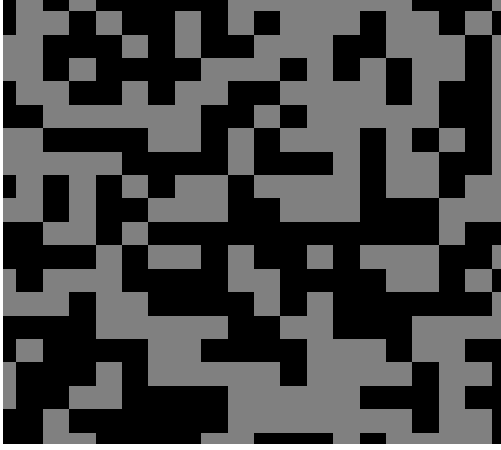
Sistemin sabit sıcaklık parametresi  $\beta = (kT)^{-1}$ , her 1000 iterasyonda, 0.0125 artırılmış, toplam zaman 100000 iterasyon olarak alınmıştır.  $\beta = (kT)^{-1} = 0$  değerinden başlatılan süreç, 100000 iterasyon sonunda  $\beta = (kT)^{-1} = 1.25J^{-1}$  değerinde sonlanmıştır.

Sistemin  $\beta = (kT)^{-1} = 0$  değerinden başlatılan sıcaklık parametresi değeri her 1000 iterasyonda, 0.0125 artırılmıştır.  $\beta = (kT)^{-1} = 0.075$  değerinde yukarı yönlü spin sayısı,  $n_+ = 197$  aşağı yönlü spin sayısı  $n_- = 203$  ve buradan düzen parametresi  $\eta = -0.015$  olarak hesaplatılmıştır; buradan sistemin düzensiz durumda yani paramanyetik fazda olduğu görülmektedir. Bu durum, Şekil 5.5’ de yer alan şekillenimlerde belirtilmiştir. Artırılan sıcaklık parametresi  $\beta = (kT)^{-1}$ , yani azaltılan sıcaklık  $T$  etkisiyle spinlerin gelişigüzel konumlarından ayrılıp bu kez aşağı yönde paralel sıralandıkları gözlenmiştir (Şekil 5.5 ve Şekil 5.6). 50000. adımda  $\beta = (kT)^{-1} = 0.637J^{-1}$  değerinde yukarı yönlü spin sayısı  $n_+ = 0$ , aşağı yönlü spin sayısı  $n_- = 400$  olurken buradan düzen parametresi  $\eta = -1$  olarak bulunmuştur. Şekil 5.6’ da, spin sisteminde +z ve -z yönünde sıralanmış spin sayılarının başlangıçta yakın değerlerde bulunduğu (t=0’da  $n_+ = 197$ ,  $n_- = 203$ ) azaltılan sıcaklık  $T$  etkisiyle -z yönünde paralel sıralanan spin sayısının arttığı, +z yönünde sıralanan spin sayısının ise azaldığı görülmektedir (t=50000’de  $n_+ = 0$ ,  $n_- = 400$ ). Bu da Şekil 5.7’ de

görüldüğü gibi ferromanyetik faza geçen sistemin bir domaini içindeki kendiliğinden manyetizasyonun sağlandığını göstermektedir.

Şekil 5.8’ de sürecin başlangıcında düzensiz duruma denk gelen ortalama enerji değerinin 1 olduğu görülmektedir. Her 1000 iterasyondan sonra sıcaklığın azaltılmasıyla termal etkiyi bastıran spinler arası değiş-tokuş etkileşme enerjisinin minimizasyonunun sağlandığı ve böylelikle sistemin 50000. iterasyon,  $\beta = (kT)^{-1} = 0.637J^{-1}$ ’de düzenli duruma geçmesi ile birlikte ortalama enerjinin 0 olduğu gözlenmiştir.





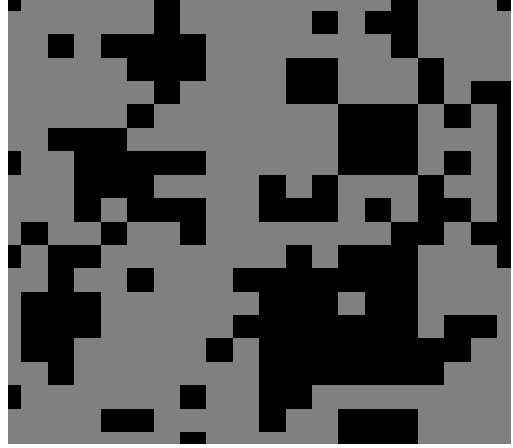
$$\beta=0.075J^l, n.=203, n_+=197$$



$$\beta=0.3125J^l, n.=213, n_+=187$$



$$\beta=0.4750J^l, n.=225, n_+=175$$



$$\beta=0.5375J^l, n.=255, n_+=145$$

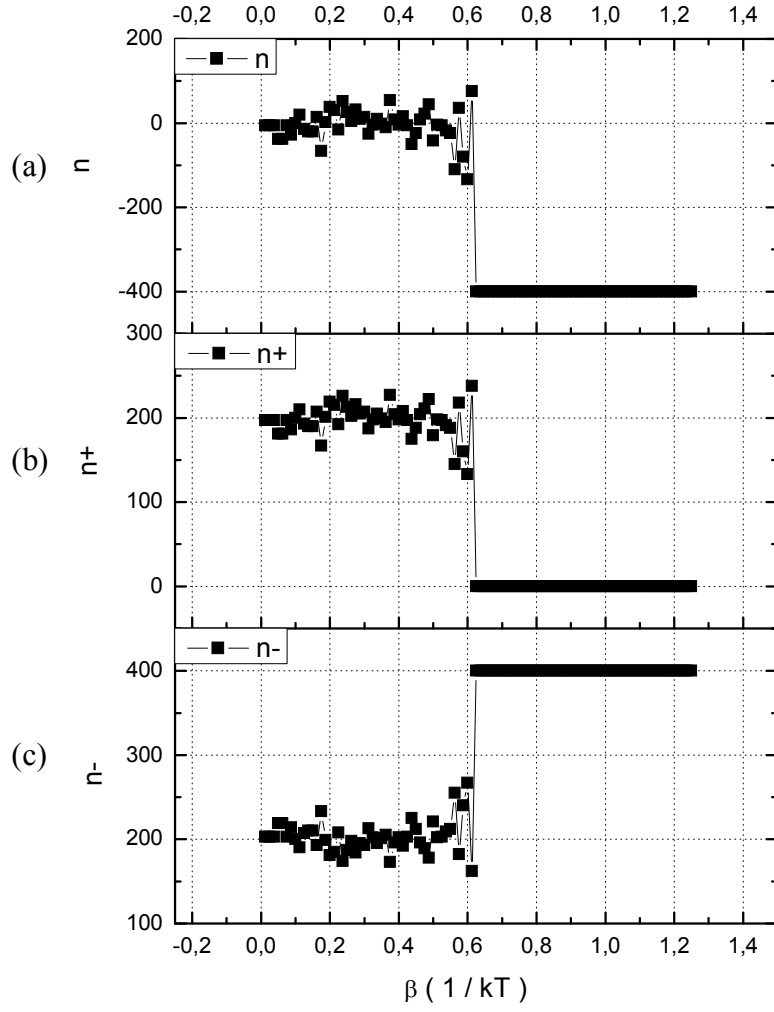


$$\beta=0.6125J^l, n.=267, n_+=133$$

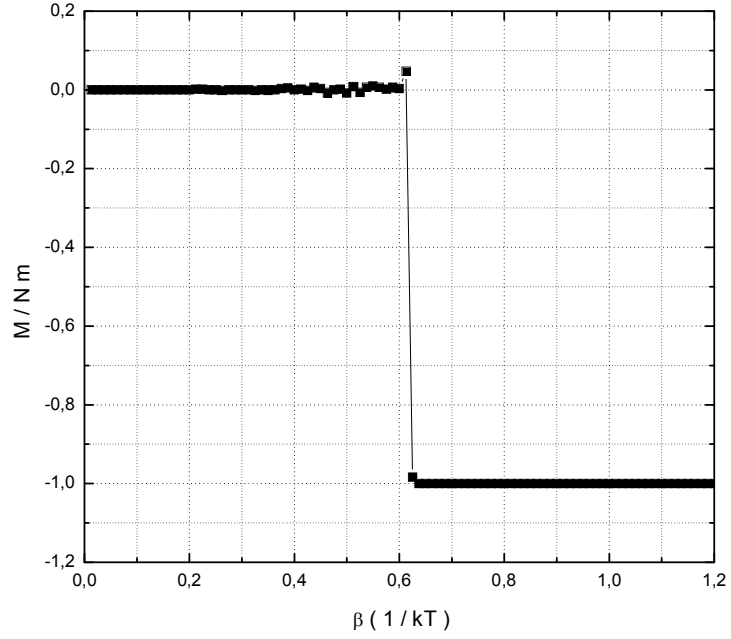


$$\beta=0.6375J^l, n.=400, n_+=0$$

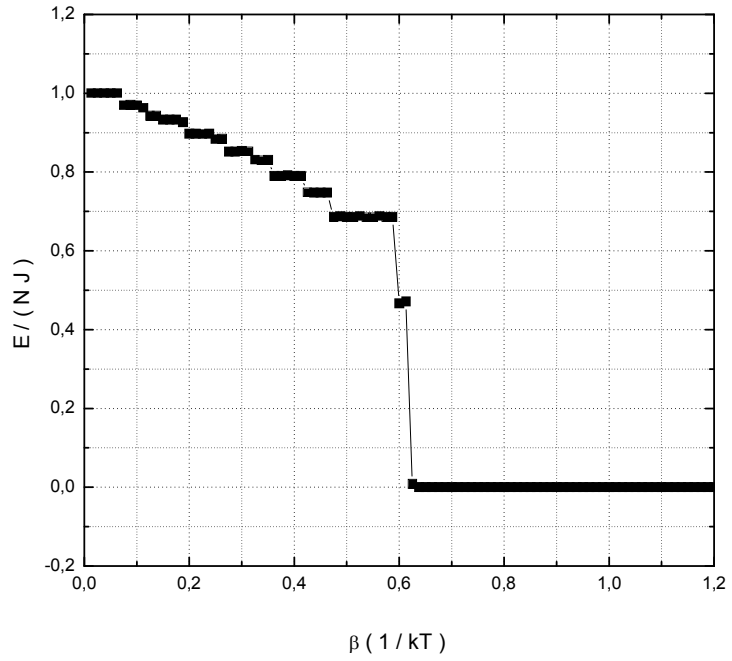
Şekil 5.5 Sıfır manyetik alanda azaltılan sıcaklık etkisiyle bir domain içindeki spinlerin -z yönünde paralel sıralanması.



Şekil 5.6 Sıfır manyetik alanda azaltılan sıcaklık etkisiyle, süreç sonunda spinlerinin tamamı -z yönünde sıralanan bir domainin spin yönelimlerinin  $\beta = (kT)^{-1}$ 'ya bağlı değişimi. (a) +z yönündeki spin fazlalığının ( $n = n_+ - n_-$ )  $\beta = (kT)^{-1}$ 'ya bağlı değişimi; (b) +z yönünde sıralanan spin sayılarının ( $n_+$ )  $\beta = (kT)^{-1}$ 'ya bağlı değişimi; (c) -z yönünde sıralanan spin sayılarının ( $n_-$ )  $\beta = (kT)^{-1}$ 'ya bağlı değişimi.



Şekil 5.7 Sıfır manyetik alanda azaltılan sıcaklık etkisiyle spinlerinin tamamı -z yönünde sıralanan sistemin spin başına ortalama manyetizasyonunun  $\beta = (kT)^{-1}$ , ya bağlı değişimi.



Şekil 5.8 Sıfır manyetik alanda azaltılan sıcaklık etkisiyle spinlerinin tamamı -z yönünde sıralanan sistemin spin başına ortalama enerjisinin  $\beta = (kT)^{-1}$ , ya bağlı değişimi.

Sonuç olarak ele alınan iki durum, Weiss'ın domain içindeki gerçek duruma iyi bir yaklaşıklık olarak kabul gören teorisi ile uyum içindedir. Demanyetize durumda ferromanyetik maddelerin domainleri içinde yer alan manyetik momentler, kendiliğinden manyetizasyon vektörlerini oluşturacak şekilde paralel sıralanırlar; fakat sıralanmanın yönü domainden domaine gelişigüzel olarak değişir (bizim ele aldığımız modelde +z ve -z olmak üzere iki yönelim söz konusudur. Şekil 5.1'de domain içinde sıralanmanın yönü +z, Şekil 5.5'de -z olmuştur.). Bir manyetik alan uygulandığı zaman domainlerin kendiliğinden manyetizasyon vektörleri alana paralel sıralanır. Modellenen durum tek bir domain içinde meydana gelen durumdur.

## 5.2 Domain Sistemleri Üzerinde Manyetik Alan Etkisinin Gözlenmesi

Bu kısımda manyetik alanın, ferromanyetik fazda bir domain içinde yer alan manyetik momentlere etkisi incelenecektir.

Düzensiz paramanyetik fazdan düzenli ferromanyetik faza geçiş sıcaklık parametresi bir önceki bölümde  $\beta = (kT)^{-1} = 0.637J^{-1}$  değerinde gözlenmiştir. Buradan geçiş sıcaklığı yani Curie sıcaklığı değeri  $T_c = 1.570J/k$  olarak hesaplanır. O halde ele alınan modele göre sistem  $T_c = 1.570J/k$  sıcaklığı altındaki sıcaklıklarda ferromanyetik fazda bulunmaktadır. Bu nedenle manyetik alanın, ferromanyetik fazda domainler üzerindeki etkisini incelemek için  $\beta = (kT)^{-1} = 0.650J^{-1}$  yani  $T = 1.538J/k$  olarak alınmıştır.

Sistemin sabit sıcaklık parametresi 50000 iterasyon boyunca  $\beta = (kT)^{-1} = 0.650J^{-1}$  değerinde sabit tutulmuş, sisteme manyetik alan uygulanmamıştır. Sıcaklık sabit, manyetik alan sıfır olduğundan ilk 50000'lik süreçte herhangi bir değişim gözlenmeyecektir. Curie sıcaklığının altında sabit sıcaklıkta bulunan, spinlerin sadece yukarı ve aşağı olmak üzere iki şekilde yönlenebildiği, manyetik bir sistem üzerine dış alan uygulanmıyorsa manyetizasyonun her iki yöne bakabileceği Bölüm 5.1' de ele alınan sistem

üzerinde gözlenmiştir. Bu durumda 50000 iterasyon boyunca  $T = 1.538 J/k$  sabit sıcaklığında, ferromanyetik fazda bir domain içinde tüm spinlerin aynı yönde paralel sıralanmış olarak gözlenmesi beklenmektedir.

$T = 1.538 J/k$  sıcaklığı, Bölüm 5.1’ de gözlenen Curie sıcaklığı  $T_c = 1.570 J/k$  değerinin altında bir değer olduğu için ferromanyetik fazda bulunan sistemin bir domaini içindeki spinlerin tamamı aynı yönde paralel durumda bulunmaktadır (Şekil 5.9). Spinlerin + ve - iki yönelime sahip olduğu sistemde spinlerin tamamı – yönde sıralanmıştır, böylelikle manyetizasyon -1 değerinde doyumda bulunmaktadır (Şekil 5.11).

Şekil 5.12’de sürecin başlangıcından sonuna kadar ortalama enerji değerinin 0 olduğu görülmektedir; çünkü 50000 iterasyondan oluşan süreç boyunca toplam enerjiyi etkileyen parametrelerden sıcaklık  $T = 1.538 J/k$  değerinde sabit tutulmuş, sisteme manyetik alan uygulanmamıştır.

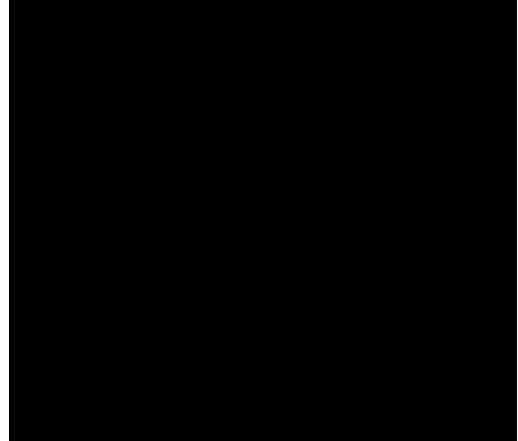
Demanyetize durumda ferromanyetik maddelerin domainleri içinde yer alan manyetik momentler, kendiliğinden manyetizasyon vektörlerini oluşturacak şekilde paralel sıralanırlar (Şekil 5.9 da domain içinde –z yönünde oluşan kendiliğinden manyetizasyon görülmektedir.); fakat sıralanmanın yönü domainden domaine gelişigüzel olarak değişir [63,64]. Bir manyetik alan uygulandığı zaman domainlerin kendiliğinden manyetizasyon vektörleri alana paralel sıralanır. Bu gözlemi gerçekleştirmek için 50000. iterasyondan sonra sıcaklık parametresi  $\beta = (kT)^{-1} = 0.650 J^{-1}$  değerinde, yani sıcaklığı  $T = 1.538 J/k$  değerinde sabit tutulan sisteme bu kez 50000 iterasyon boyunca manyetik alan uygulanmıştır. Sisteme uygulanan manyetik alan, ilk 50000 döngüden sonra her 1000 iterasyonda, 0.025 artırılmış, toplam zaman 100000 iterasyon olarak alınmıştır.  $\vec{H} = 0$  değerinden başlatılan ikinci süreç, 50000 iterasyon sonunda  $\vec{H} = 2.50 J$  değerinde sonlanmıştır.

$T = 1.538 J/k$  sıcaklığı, Bölüm 5.1' de gözlenen Curie sıcaklığı  $T_c = 1.570 J/k$  değerinin altında bir değer olduğu için ferromanyetik fazda bulunan sistemin bir domaini içindeki spinlerin tamamı ilk 50000 iterasyon boyunca  $-z$  yönünde paralel durumda bulunmaktadır (Şekil 5.9 ve Şekil 5.10), böylelikle spin başına kendiliğinden manyetizasyonun doyum değeri -1 olarak gözlenmiştir (Şekil 5.11). 50000. iterasyondan sonra sisteme uygulanan manyetik alanın etkisi gözlenmiş spinlerin tamamı  $+z$  yönünde paralel sıralanmaya geçmiş (Şekil 5.9 ve Şekil 5.10), spin başına manyetizasyonun doyum değeri +1 olarak gözlenmiştir (Şekil 5.11).

Dış manyetik alanda iki spin paralel ise enerjisi daha düşük olur [40,46]. Sistemin toplam enerji ifadesi  $E = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \vec{H} \sum_i \vec{S}_i$  'de de manyetik alanın enerjisi azaltacağı görülmektedir. Bunu destekler biçimde ilk 50000. iterasyondan sonra düzenli artan manyetik alanın uygulandığı sistemde ortalama enerjinin düzenli bir şekilde azaldığı Şekil 5.12 ve 5.13' de gözlenmiştir.

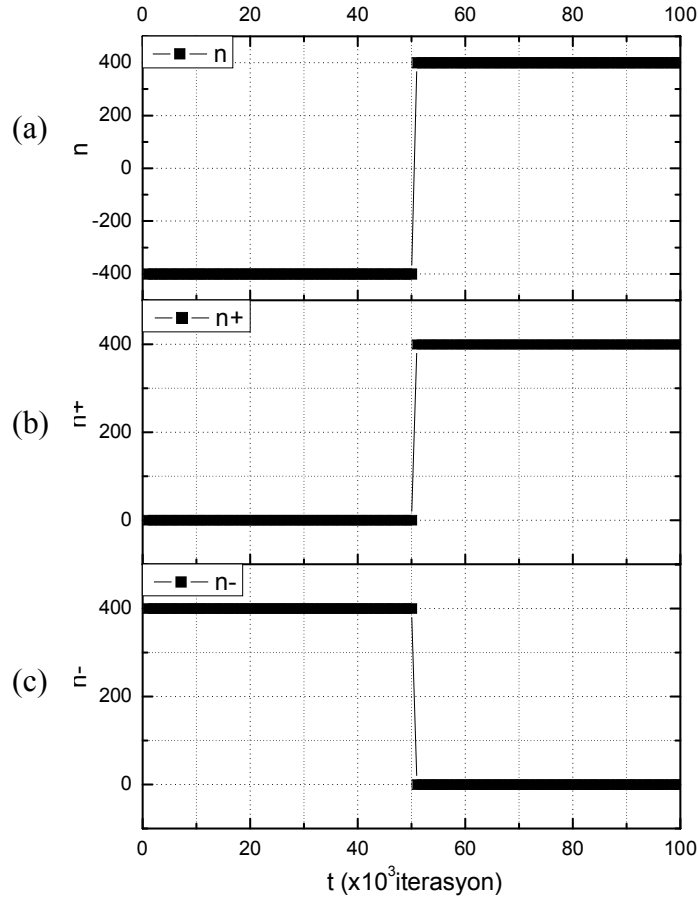


$$\beta = 0.65 J^1, \vec{H} = 0 J, n_- = 400, n_+ = 0$$

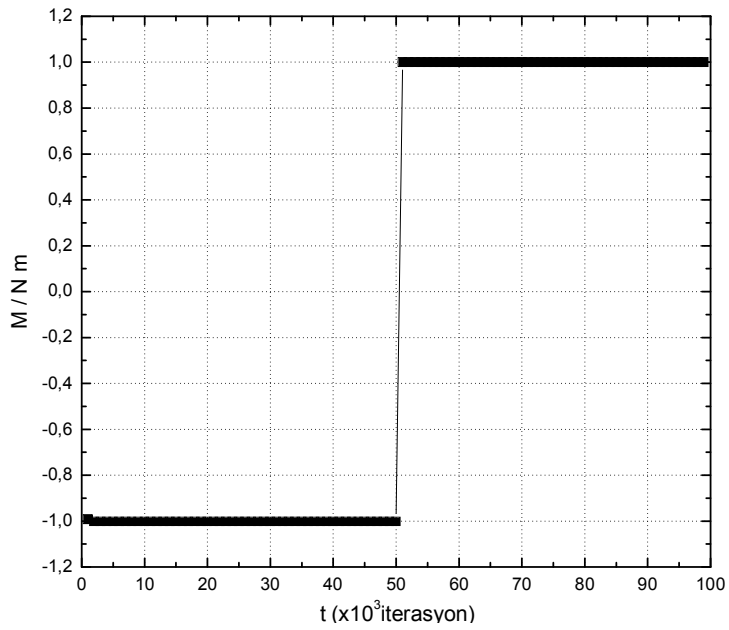


$$\beta = 0.65 J^1, \vec{H} = 0.025 J, n_- = 400, n_+ = 0$$

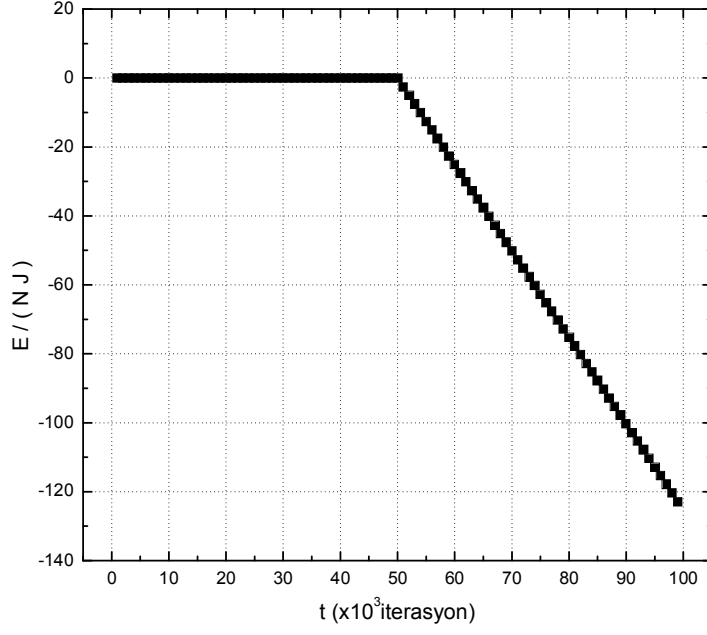
Şekil 5.9 Sabit sıcaklıkta domain içinde  $-z$  yönünde sıralanmış spinlerin, artan manyetik alan etkisiyle  $+z$  manyetik alan yönünde sıralanması.



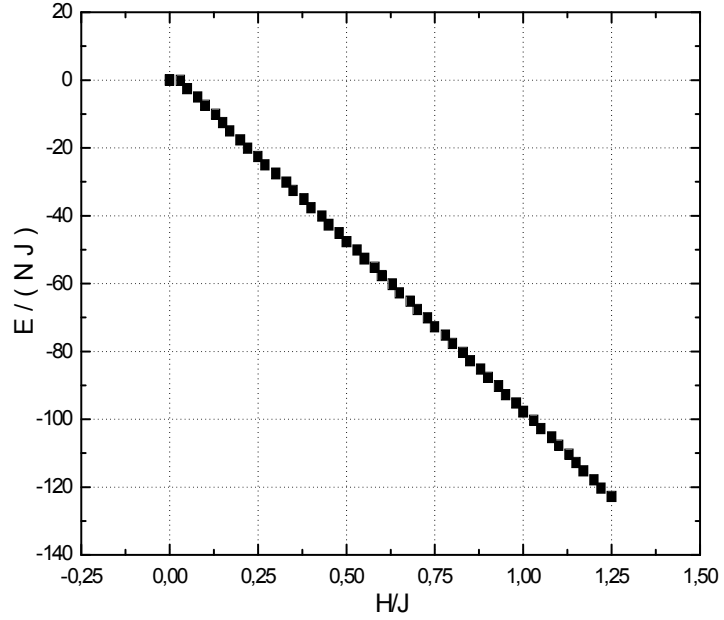
Şekil 5.10 Sabit sıcaklıkta, 50000. iterasyondan sonra düzenli artırılan manyetik alan etkisiyle, spinlerinin tamamı +z yönünde sıralanan bir domainin spin yönelimlerinin zaman içindeki değişimi. (a) +z yönündeki spin fazlalığının ( $n = n_+ - n_-$ ), (b) +z yönünde sıralanan spin sayılarının ( $n_+$ ), (c) -z yönünde sıralanan spin sayılarının zaman içindeki değişimi.



Şekil 5.11 Sabit sıcaklıkta 50000. iterasyondan sonra düzenli artırılan manyetik alan etkisiyle sistemin spin başına ortalama manyetizasyonunun zaman içindeki değişimi.



Şekil 5.12 Sabit sıcaklıkta 50000. iterasyondan sonra düzenli artırılan manyetik alan etkisiyle sistemin spin başına ortalama enerjisinin zaman içindeki değişimi.



Şekil 5.13 Sabit sıcaklıkta düzenli artırılan manyetik alan etkisiyle sistemin spin başına ortalama enerjisinin manyetik alan  $\vec{H}$  'a bağlı değişimi.



0K'nin üstündeki sıcaklıklarda bireysel manyetik momentlerin sahip oldukları termal enerji sebebiyle alan etrafında yaptıkları spin dalga hareketinin, modelde spinlerin sadece  $-z$  ve  $+z$  yönelimleri söz konusu olduğundan, gözlenmesi mümkün değildir (Bölüm 3'de bahsedilen modelin kısıtlamalarından biri de budur). Bu nedenle kendiliğinden manyetizasyon, uygulanan alan ile birlikte ani bir sıçrama göstermiştir (Şekil 5.11). Ferromanyetik katılarda 0K de doyum manyetizasyonu, kendiliğinden manyetizasyona eşittir [64]. Modelde ara yönler alınmadığı için Curie sıcaklığının hemen altında doyum manyetizasyonunun, kendiliğinden manyetizasyona eşit olduğu gözlenmiştir.

Domainler üzerinde manyetik alan etkisini incelemek için ele alınacak ikinci durum, sistemin sıcaklığının ardı ardına azaltılıp artırıldığı durum olacaktır.

İlk olarak, yüksek sıcaklıkta gelişigüzel atomik manyetik momentlere sahip sistem ele alınmıştır; sistem üzerine dış manyetik alan uygulanmamıştır. Dış alanın sıfır olduğu durumda bir domain içindeki tek alan değiş-tokuş etkileşme alanıdır [64]. Sıcaklığın azalmasıyla birlikte momentler arasındaki değiş-tokuş enerjisinin termal enerjiyi yenerek momentlerin paralel sıralanmaya geçmesi, belli bir sıcaklık değerinden (Curie sıcaklığı) aşağıda da momentlerin tamamının paralel sıralanması beklenmektedir. Bu durum, Bölüm 5.1' de modellenen bir manyetik domain içinde meydana gelen kendiliğinden manyetizasyonun oluşumudur. Bu kez Bölüm 5.1' de ele alınan durumda farklı olarak, sürecin devamında sistemin sıcaklığı artırılmıştır. Bununla birlikte momentlerin tekrar gelişigüzel sıralanmaya geçmesi beklenmektedir. Sıcaklığın azaltılıp ardından artırılmasını içeren bu ikili süreç beş defa tekrarlanmıştır. Bir sonraki aşamada aynı sürece manyetik alan uygulanarak sistem üzerindeki etkisi incelenecektir.

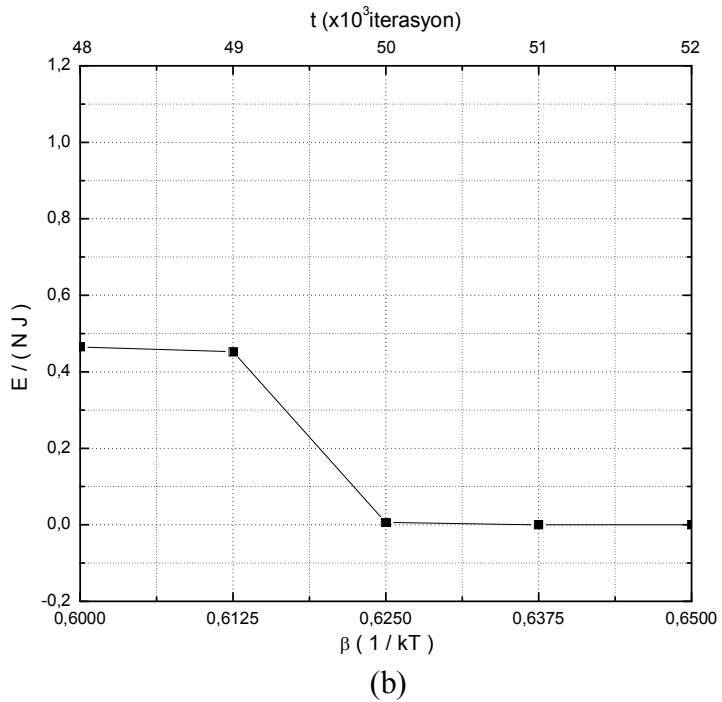
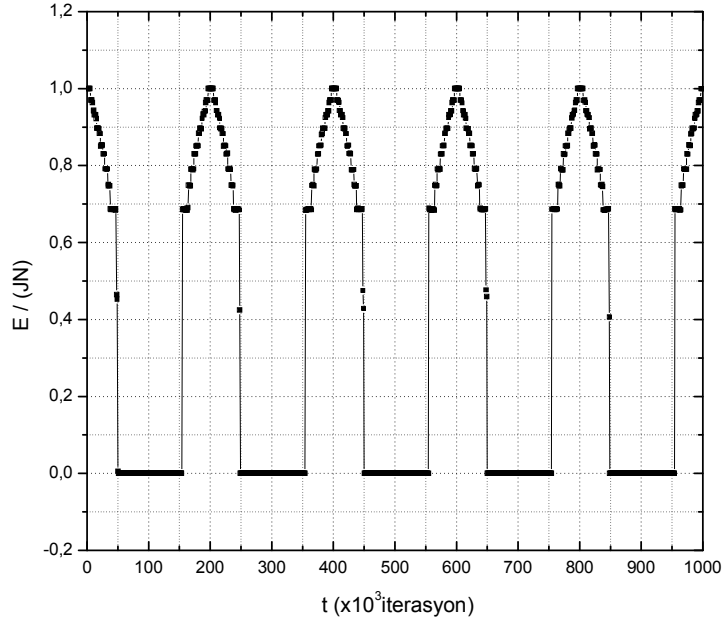
400 spinli sistemin sabit sıcaklık parametresi  $\beta = (kT)^{-1}$ , toplam 100000 iterasyonda, her 1000 iterasyonda, 0.0125 artırılmıştır.  $\beta = (kT)^{-1} = 0$  değerinden başlatılan süreç, 100000 iterasyon sonunda  $\beta = (kT)^{-1} = 1.25J^{-1}$  ( $J$  burada değiş-tokuş etkileşme sabitini ifade etmektedir.) değerinde sonlanmıştır. Hemen ardından

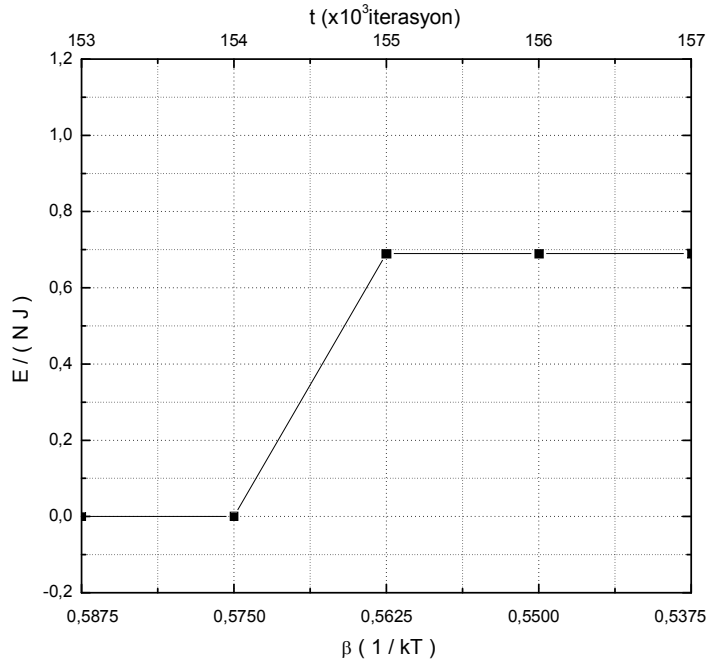
sistemin sabit sıcaklık parametresi  $\beta = (kT)^{-1}$ , yine toplam 100000 iterasyon içinde her 1000 iterasyonda, bu kez 0.0125 azaltılmıştır.  $\beta = (kT)^{-1} = 1.25J^{-1}$  değerinden başlatılan süreç, 100000 iterasyon sonunda  $\beta = (kT)^{-1} = 0$  değerinde sonlanmıştır. 200000 iterasyondan oluşan bu ikili süreç beş defa tekrarlanmıştır.

$\beta = (kT)^{-1} = 0$  sonsuz sıcaklığında atomik manyetik momentlerin termal enerjisi, momentler arasındaki değiş-tokuş enerjisinden yüksek olduğundan bu durum gelişigüzel paramanyetik sıralanmaya sebep olmaktadır. Şekil 5.14'de sürecin başlangıcında düzensiz duruma denk gelen ortalama enerji değerinin 1 olduğu görülmektedir. Her 1000 iterasyondan sonra sıcaklığın azaltılmasıyla termal etkiyi bastıran spinler arası değiş-tokuş etkileşme enerjisinin minimizasyonunun sağlandığı, sistemin 50000. iterasyon  $\beta = (kT)^{-1} = 0.637J^{-1}$ 'de düzenli duruma geçmesi ile birlikte ortalama enerjinin 0 olduğu gözlenmiştir. Spin başına manyetizasyon da 50000. iterasyon  $\beta = (kT)^{-1} = 0.637J^{-1}$ 'de, spinlerin tamamının yukarı yönde sıralanmasıyla +1 doyum değerine ulaşmıştır (Şekil 5.15).

Sıcaklığın azaltıldığı, sistemin +z yönünde düzenli ferromanyetik sıralanmaya geçtiği ilk 100000 iterasyon sonunda artırılmaya başlayan sıcaklık etkisiyle sistemin düzenli sıralanması bozulmaya başlamıştır. Sistemin 155000. iterasyon  $\beta = (kT)^{-1} = 0.563J^{-1}$ 'de, ortalama enerjinin 0 değerinden ayrılmasıyla birlikte ( $E_{ort} = 0.686J$ ) düzensiz duruma geçtiği gözlenmiştir. Spin başına manyetizasyon da 155000. iterasyon,  $\beta = (kT)^{-1} = 0.563J^{-1}$ 'de, spinlerin tamamının gelişigüzel sıralanmasıyla 0 değerini almıştır (Şekil 5.15). Düzensiz durumdan düzenli duruma geçiş sıcaklığını  $\beta = (kT)^{-1} = 0.637J^{-1}$  olarak gözlemiştik, düzenli durumdan düzensiz duruma geçiş sıcaklığını ise  $\beta = (kT)^{-1} = 0.563J^{-1}$  olarak gözledik. Bu farkın neden kaynaklandığı konusunda çalışmalarımız sürmekle beraber, sistemin düzenli yani kararlı durumda daha uzun süre kaldığını, bu nedenle kararsız duruma, beklenenden 5000 döngü sonra ulaştığını gözlemiş olduk.

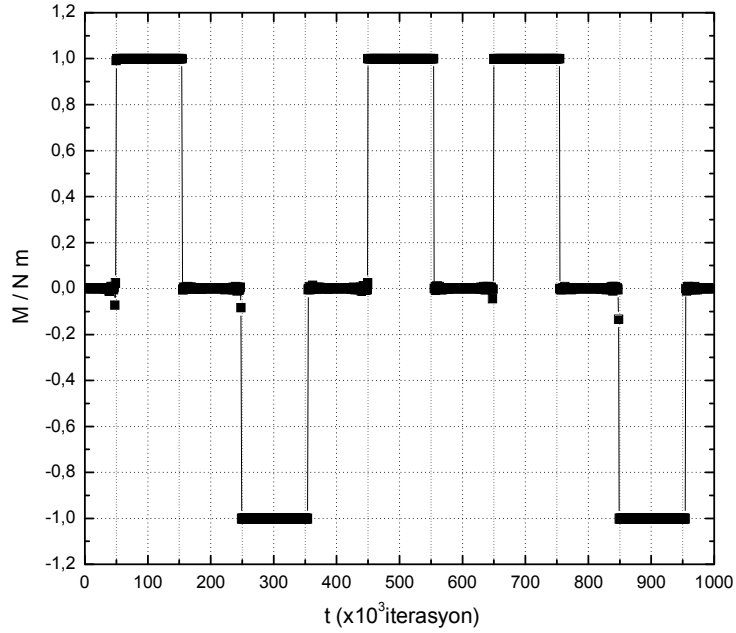
Burada göze çarpan bir diğer husus 249000. iterasyon,  $\beta = (kT)^{-1} = 0.613J^{-1}$  değerinde (beklenen değerden 1000 döngü daha erken), sıcaklık azalmasıyla birlikte spinlerin tamamının bu kez  $-z$  yönünde yönelmiş olmasıdır. Aynı durum 849000. iterasyon,  $\beta = (kT)^{-1} = 0.613J^{-1}$  değerinde de gözlenmiştir (Şekil 5.15).



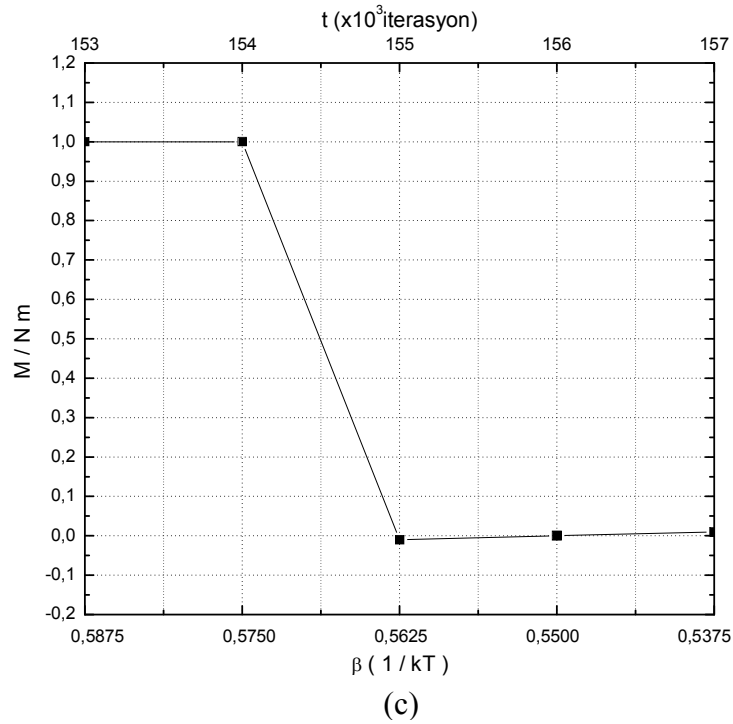
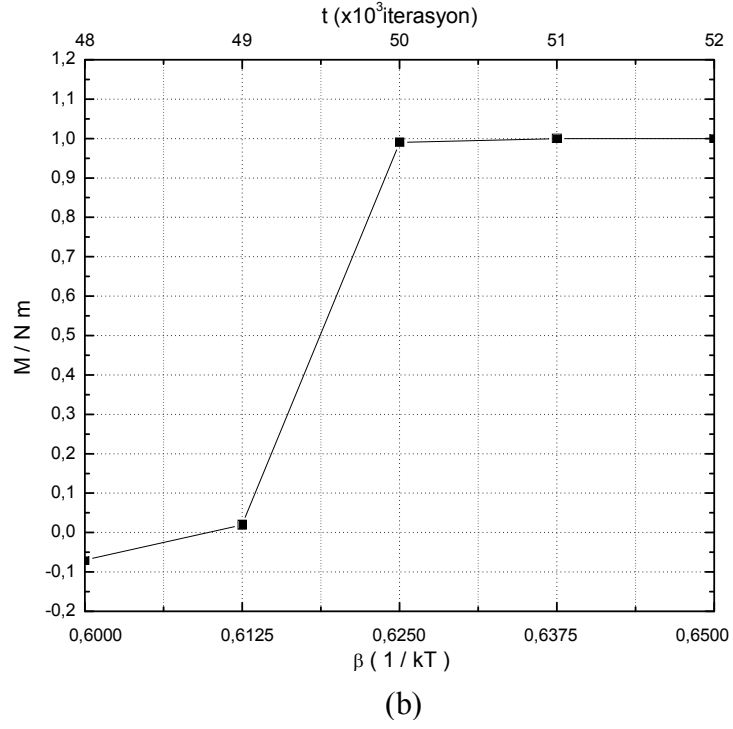


(c)

Şekil 5.14 (a) Sıfır manyetik alanda sıcaklığın ardı ardına azaltılıp artırıldığı sistemin spin başına ortalama enerjisinin zaman içindeki değişimi. (b) Aynı grafiğin  $\beta = (kT)^{-1}$  eksenine birlikte 50000. iterasyona denk gelen enerji değerinin gösterilmesi. (c) Aynı grafiğin  $\beta = (kT)^{-1}$  eksenine birlikte 155000. iterasyona denk gelen enerji değerinin gösterilmesi.



(a)



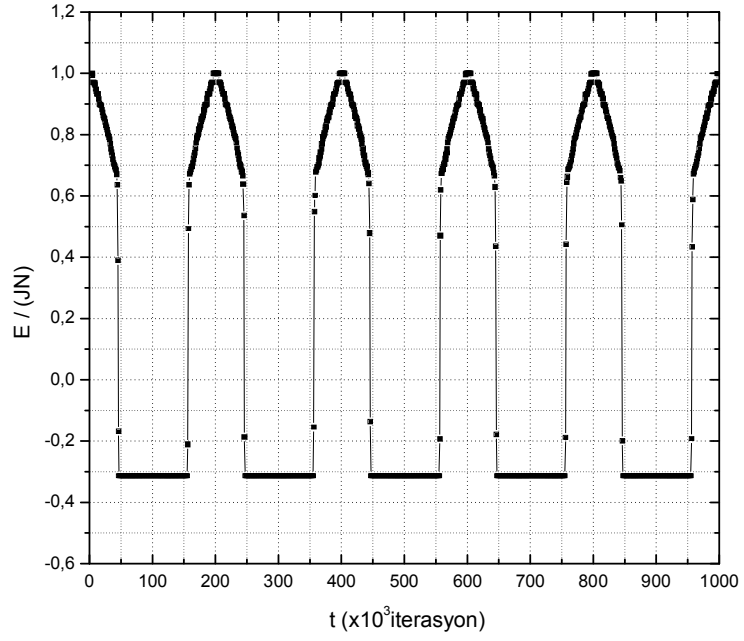
Şekil 5.15 (a) Sıfır manyetik alanda sıcaklığın ardı ardına azaltılıp artırıldığı sistemin spin başına ortalama manyetizasyonunun zaman içindeki değişimi. (b) Aynı grafiğin beta eksenine birlikte 50000. iterasyona denk gelen manyetizasyon değerinin gösterilmesi. (c) Aynı grafiğin beta eksenine birlikte 155000. iterasyona denk gelen manyetizasyon değerinin gösterilmesi.

Sonuç olarak dış manyetik alanın uygulanmadığı, sıcaklığının ardı ardına azaltılıp artırıldığı bir domain içindeki spinler, her sıcaklık azalışıyla aynı sıralanmayı göstermemişlerdir. Bölüm 5.1’de de belirtildiği gibi spinlerin sadece yukarı ve aşağı olmak üzere iki şekilde yönlenebildiği (modelde spinlerin +1 ve -1 değerlerini aldığından bahsedilmişti) manyetik bir sistem üzerine dış alan uygulanmıyorsa manyetizasyon her iki yöne bakabilir (+z ve -z) [64]. Bölüm 2’de detaylı bir şekilde ele alınan değiş tokuş enerjisi spinler paralel sıralandığında en küçüktür ve bu ifadede paralel sıralanmanın yönünü belirleyen bir etken yoktur. Bölüm 5.1’de ele alınan sistemler farklı gelişigüzel sayı kümeleri ile elde edilen farklı sistemlerdi, burada ise aynı sistem üzerinde sıcaklık azalması ile manyetizasyonun yönünün her iki tarafa (+z ve -z) bakabileceği gösterilmiş oldu.

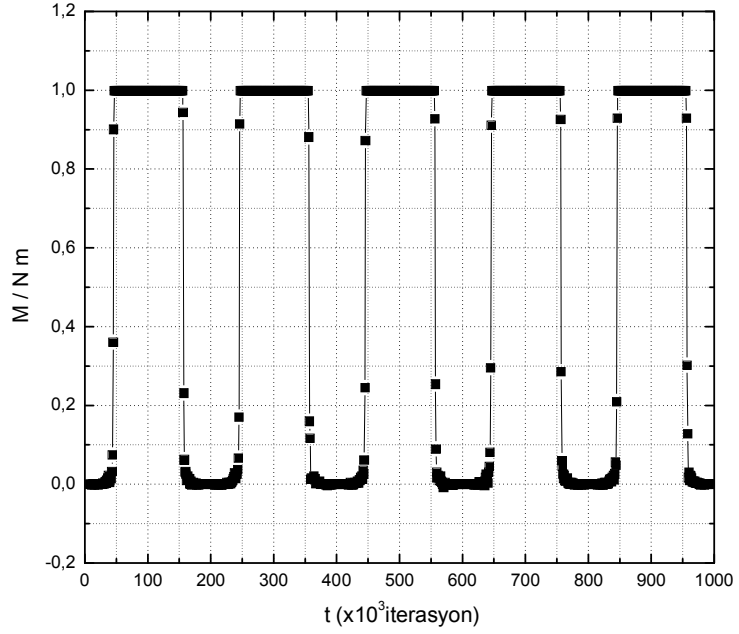
Şimdi ise manyetik alanın bu sistem üzerindeki etkisini görelim. Bunun için sisteme 1000000 iterasyon boyunca  $\bar{H} = 0.03J$  değerinde manyetik alan uygulanmıştır (bu değer özel olarak seçilmiş bir değer değildir, manyetik alanın bu küçük değerinde bile etkisi gözlenebildiği için buna ait sonuçlar verilmiştir.).

Dış manyetik alanda iki spin paralel ise enerjisi daha düşük olur [40,46]. Sistemin toplam enerji ifadesi  $E = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \bar{H} \sum_i \vec{S}_i$ ’de de manyetik alanın enerjisi azaltacağı görülmektedir. Bunu destekler biçimde sabit manyetik alanın uygulandığı sistemde ortalama enerji değerinin, Şekil 5.14’ ten farklı olarak, tam sıralanmanın gerçekleştiği durumda 0’ın altında değer aldığı gözlenmiştir (Şekil 5.16).

Dış manyetik alanın uygulanmadığı, sıcaklığının ardı ardına azaltılıp artırıldığı bir domain içindeki spinler, her sıcaklık azalışıyla aynı sıralanmayı göstermezken (geçiş sıcaklığının altında manyetizasyon farklı yönlere bakabildi), dış manyetik alan etkisi ile spinlerin tamamı, her sıcaklık azalışında geçiş sıcaklığının altında aynı sıralanmayı gösterdi; spin başına manyetizasyon +1 değerinde + z yönünde doyuma ulaştı (Şekil 5.17).



Şekil 5.16 Sabit manyetik alanda sıcaklığın ardı ardına azaltılıp artırıldığı sistemin spin başına ortalama enerjisinin zaman içindeki değişimi.



Şekil 5.17 Sabit manyetik alanda sıcaklığın ardı ardına azaltılıp artırıldığı sistemin spin başına ortalama manyetizasyonunun zaman içindeki değişimi.

### 5.3 Paramanyetik Fazda Manyetik Alan Etkisinin Gözlenmesi

Bu kısımda paramanyetik fazda bulunan sistemde yer alan manyetik momentlere manyetik alanın etkisi incelenecektir.

Düzensiz paramanyetik fazdan düzenli ferromanyetik faza geçiş sıcaklık parametresi önceki bölümlerde de verildiği gibi modelde  $\beta = (kT)^{-1} = 0.637J^{-1}$  değerinde gözlenmiştir. Buradan geçiş sıcaklığı yani Curie sıcaklığı değeri  $T_c = 1.570J/k$  olarak hesaplanır. O halde ele alınan modele göre sistem  $T_c = 1.570J/k$  sıcaklığı üzerindeki sıcaklıklarda paramanyetik fazda bulunmaktadır. Bu nedenle manyetik alanın, paramanyetik fazda bulunan sistem üzerindeki etkisini incelemek için  $\beta = (kT)^{-1} = 0.40J^{-1}$  yani  $T = 2.50J/k$  olarak alınmıştır.

100000 iterasyon boyunca sıcaklık parametresi  $\beta = (kT)^{-1} = 0.40J^{-1}$  değerinde, yani sıcaklığı  $T = 2.50J/k$  değerinde sabit tutulan sisteme manyetik alan uygulanmıştır. Sisteme uygulanan manyetik alan, her 1000 iterasyonda, 0.025 artırılmış, toplam zaman 100000 iterasyon olarak alınmıştır.  $\vec{H} = 0$  değerinden başlatılan süreç, 100000 iterasyon sonunda  $\vec{H} = 2.50J$  değerinde sonlanmıştır.

Bir paramanyetik maddede atomlar ve iyonların sürekli bir dipol momentleri vardır; ancak bu atomlar ve iyonlar zayıf şekilde etkileşirler ve bir dış manyetik alanın yokluğunda gelişigüzel yönelirler. Alan uygulandığı zaman dipoller alan yönünde sıralanmaya başlarlar ancak sıralanma termal uyarılma tarafından engellenir. Sonuç olarak dış manyetik alan çok yüksek ve sıcaklık düşük olmadıkça sıralanma tamamlanmaz. Paramanyetik maddelerde düşük alanlarda manyetizasyon  $\vec{M}$ , manyetik alan  $\vec{H}$  ile orantılıdır  $\vec{M} \propto \vec{H}$ , ancak manyetizasyonun doyuma başladığı çok yüksek alanlarda orantıdan sapmalar meydana gelir [64].

Beklenildiği gibi,  $\beta = (kT)^{-1} = 0.40J^{-1}$  değerinde, yani  $T = 2.50J/k$  sıcaklık değerinde, paramanyetik fazda bulunan sisteme uygulanan artan manyetik alan,



manyetik momentlerin alan yönünde sıralanmasını sağlamıştır (Şekil5.18, Şekil5.19). Spinlerin alan yönünde sıralanması 1000 iterasyon sonunda hemen gözlenebilmiş, manyetizasyon kısa sürede doyum değerine ulaşmıştır (Şekil 5.20). Termal enerji spinlerin tamamının alan yönünde sıralanmasını engellemiş, manyetizasyon 37000. iterasyonda, 0.5450 değerinde, alan yönünde sıralanmış 309 spin ile doyuma ulaşmıştır (Şekil 5.18, Şekil 5.19).

Dış manyetik alanda iki spin paralel ise enerjisi daha düşük olur [40,46]. Sistemin toplam enerji ifadesi  $E = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \vec{H} \sum_i \vec{S}_i$  'de de manyetik alanın enerjisi azaltacağı görülmektedir. Bunu destekler biçimde düzenli artan manyetik alanın uygulandığı sistemde ortalama enerjinin düzenli bir şekilde azaldığı Şekil5.21'de gözlenmiştir.



$$\beta=0.40J^I, \bar{H} = 0.025J, n_-=211, n_+=189$$



$$\beta=0.40J^I, \bar{H} = 0.050J, n_-=119, n_+=81$$

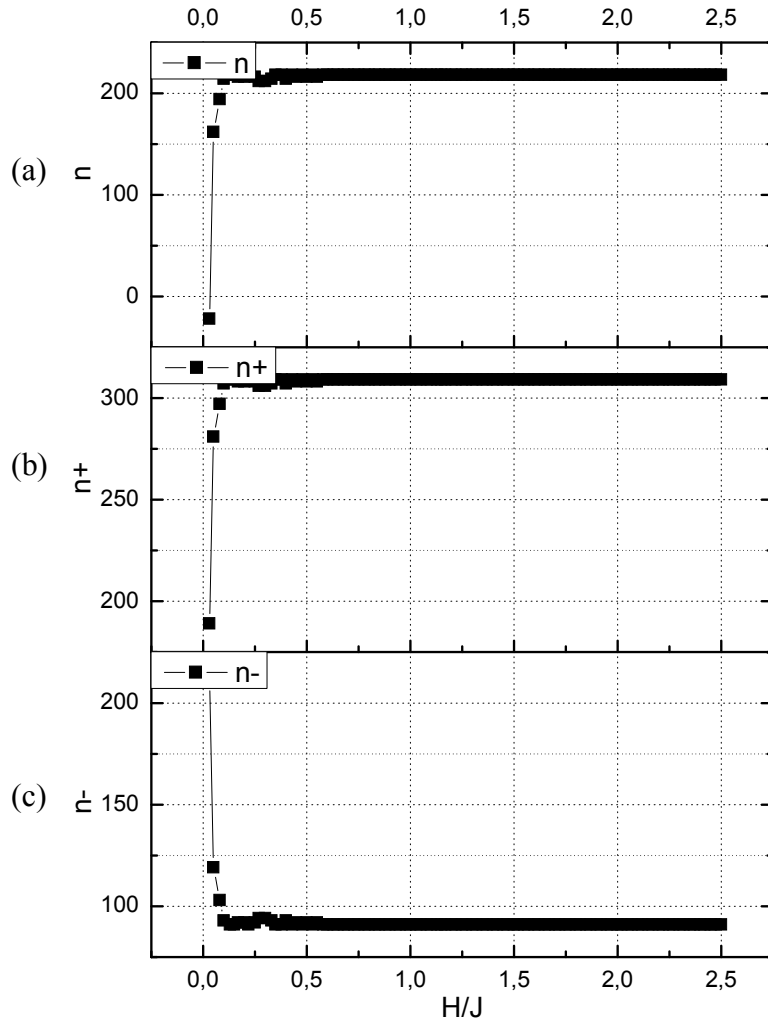


$$\beta=0.40J^I, \bar{H} = 0.925J, n_-=91, n_+=309$$

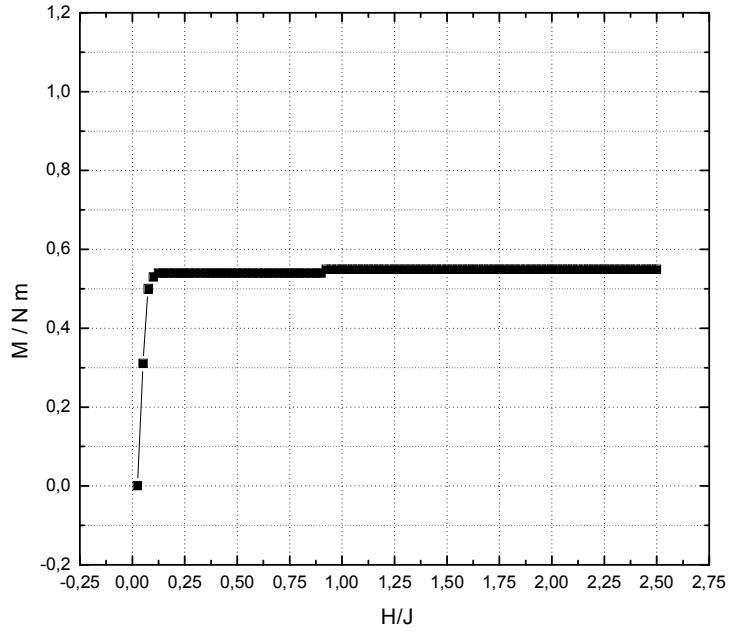


$$\beta=0.40J^I, \bar{H} = 2.50J, n_-=91, n_+=309$$

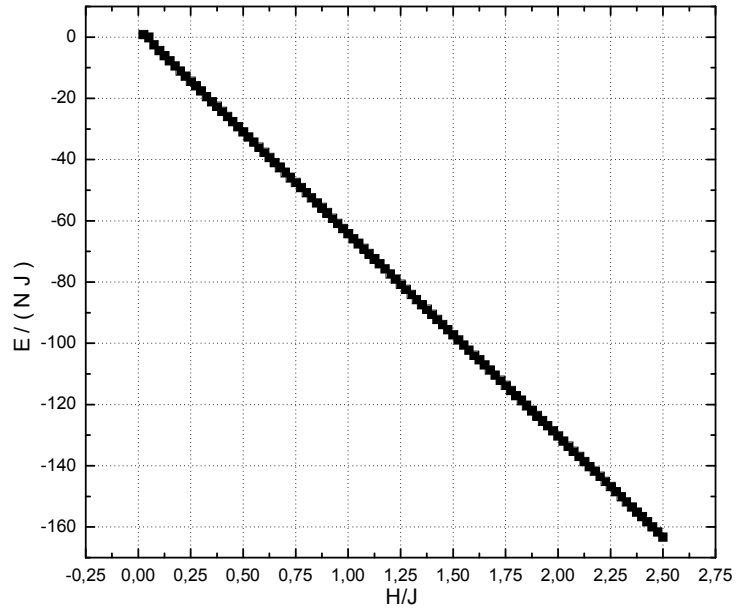
Şekil 5.18 Paramanyetik fazda sabit sıcaklıkta bulunan sisteme uygulanan artan manyetik alan etkisi ile spinlerin manyetik alanın yönünde (+z yönü) paralel sıralanmaya başlaması. Termal uyarılma spinlerin tamamının alan yönünde sıralanmasını engellemiştir.



Şekil 5.19 Paramanyetik fazda sabit sıcaklıkta bulunan sisteme uygulanan artan manyetik alan etkisi ile sistemdeki spin yönelimlerinin manyetik alan  $\vec{H}$ ' a bağlı değişimi. (a) +z yönündeki spin fazlalığının ( $n = n_+ - n_-$ )  $\vec{H}$ ' a bağlı değişimi; (b) +z yönünde sıralanan spin sayılarının ( $n_+$ )  $\vec{H}$ ' a bağlı değişimi; (c) -z yönünde sıralanan spin sayılarının ( $n_-$ )  $\vec{H}$ ' a bağlı değişimi.



Şekil 5.20 Paramanyetik fazda sabit sıcaklıkta bulunan sisteme uygulanan artan manyetik alan etkisi ile sistemin spin başına ortalama manyetizasyonunun manyetik alan  $\vec{H}$ 'a bağlı değişimi.



Şekil 5.21 Paramanyetik fazda sabit sıcaklıkta bulunan sisteme uygulanan artan manyetik alan etkisi ile sistemin spin başına ortalama enerjisinin manyetik alan  $\vec{H}$ 'a bağlı değişimi.

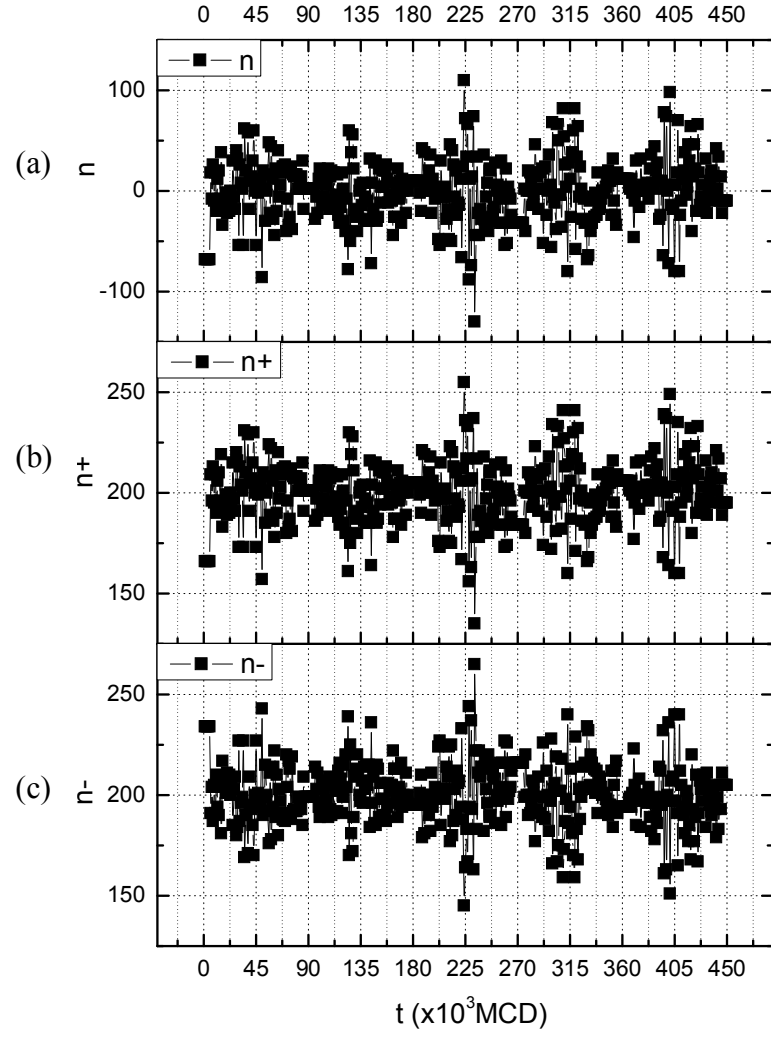
Paramanyetik fazdaki sistem üzerinde manyetik alan etkisini incelemek için ele alınacak ikinci durum, sistemin sıcaklığının ardı ardına azaltılıp artırıldığı durum olacaktır.

İlk olarak, yüksek sıcaklıkta gelişigüzel atomik manyetik momentlere sahip sistem ele alınmıştır; sistem üzerine dış manyetik alan uygulanmamıştır. Bir paramanyetik maddede atomlar ve iyonların sürekli bir dipol momentleri vardır; ancak bu atomlar ve iyonlar zayıf şekilde etkileşirler ve bir dış manyetik alanın yokluğunda gelişigüzel yönelirler [64].

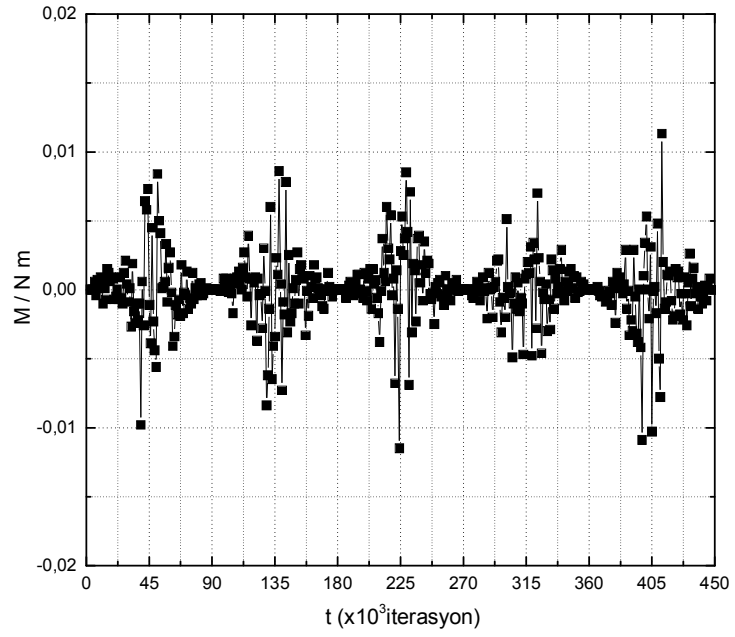
Manyetik alanın, paramanyetik fazda bulunan sistem üzerindeki etkisini incelemek için sıcaklık değişimi, Curie sıcaklık değerinin üzerinde gerçekleştirilmiştir. 400 spinli sistemin sabit sıcaklık parametresi  $\beta = (kT)^{-1}$ , toplam 45000 iterasyonda, her 1000 iterasyonda, 0.0125 artırılmıştır.  $\beta = (kT)^{-1} = 0$  değerinden başlatılan süreç, 45000 iterasyon sonunda  $\beta = (kT)^{-1} = 0.5625J^{-1}$  ( $J$  burada değiş-tokuş etkileşme sabitini ifade etmektedir.) değerinde sonlanmıştır. Hemen ardından sistemin sabit sıcaklık parametresi  $\beta = (kT)^{-1}$ , yine toplam 45000 iterasyon içinde her 1000 iterasyonda, bu kez 0.0125 azaltılmıştır.  $\beta = (kT)^{-1} = 0.5625J^{-1}$  değerinden başlatılan süreç, 45000 iterasyon sonunda  $\beta = (kT)^{-1} = 0$  değerinde sonlanmıştır. 90000 iterasyondan oluşan bu ikili süreç beş defa tekrarlanmıştır.

$\beta = (kT)^{-1} = 0$  sonsuz sıcaklığında atomik manyetik momentlerin termal enerjisi, momentler arasındaki değiş-tokuş enerjisinden yüksek olduğundan bu durum gelişigüzel paramanyetik sıralanmaya sebep olmaktadır. Paramanyetik fazda bulunan sistemde atomik manyetik momentler zayıf şekilde etkileştiklerinden dış manyetik alanın yokluğunda gelişigüzel yönelmişlerdir (Şekil 5.22). Spin sayılarının ve spin başına manyetizasyonun zaman içindeki değişiminde (Şekil 5.23) gözlenen dalgalanmanın sebebi, sıcaklığın artırılıp azaltılmasıdır. Sıcaklık azaldıkça spinler aynı yönde sıralanmak isterken, sıcaklık değeri Curie sıcaklığının üzerindeki

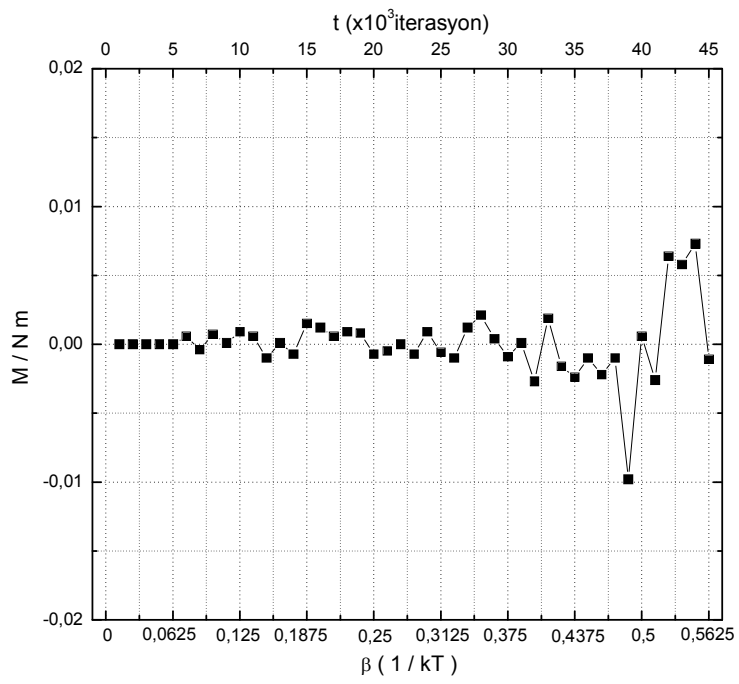
değerlerde değiştirildiğinden, süreç boyunca termal enerji spinlerin tamamının paralel sıralanmasına engel olmuştur. Bu durum spin başına enerjinin zaman içindeki değişimini gösteren Şekil 5.24' ten daha iyi anlaşılmaktadır. İlk 45000'lik iterasyon zamanı içinde azaltılan sıcaklık etkisiyle enerjide de azalma gözlenmiştir. Sıcaklığın azalmasıyla termal enerjinin etkisi azalmış böylelikle değiş-tokuş enerjisi momentlerin etkileşerek paralel sıralanmasını sağlamıştır. Spin başına manyetizasyonun zaman içindeki değişimini gösteren Şekil 5.23' te 45000. iterasyonda manyetizasyonun artışı da bu paralel sıralanan momentler sebebiyle gerçekleşmiştir. 45000. iterasyonda sıcaklık değeri  $T = 1.777 J/k$ , Curie sıcaklığı  $T_c = 1.570 J/k$ 'nin üstünde olduğundan tam sıralanma gerçekleşmemiş, enerji bu nedenle 0 değerine ulaşmamıştır (Şekil 5.24). 45000. iterasyondan sonra azaltılan sıcaklık etkisiyle, beklenildiği gibi, bu sürecin tam tersi gözlenmiştir (Şekil 5.23 ve Şekil 5.24). Bu iki karşıt sürecin 5 defa tekrarlanması da toplam süreci oluşturmaktadır.



Şekil 5.22 Paramanyetik fazda sıfır manyetik alan altında sıcaklığın ardı ardına artırılıp azaltıldığı sistemdeki spin yönelimlerinin zaman içindeki değişimi. (a) +z yönündeki spin fazlalığının ( $n = n_+ - n_-$ ) zaman içindeki değişimi; (b) +z yönünde sıralanan spin sayılarının ( $n_+$ ) zaman içindeki değişimi; (c) -z yönünde sıralanan spin sayılarının ( $n_-$ ) zaman içindeki değişimi.

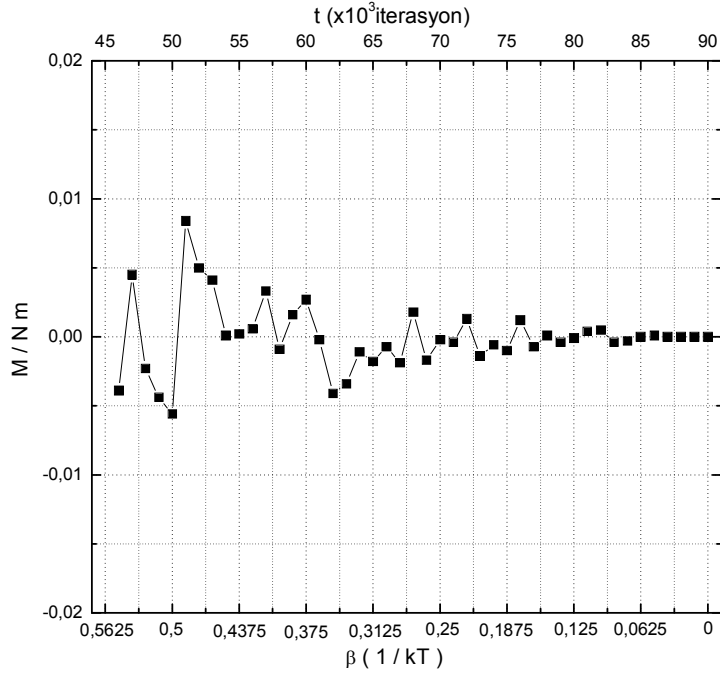


(a)



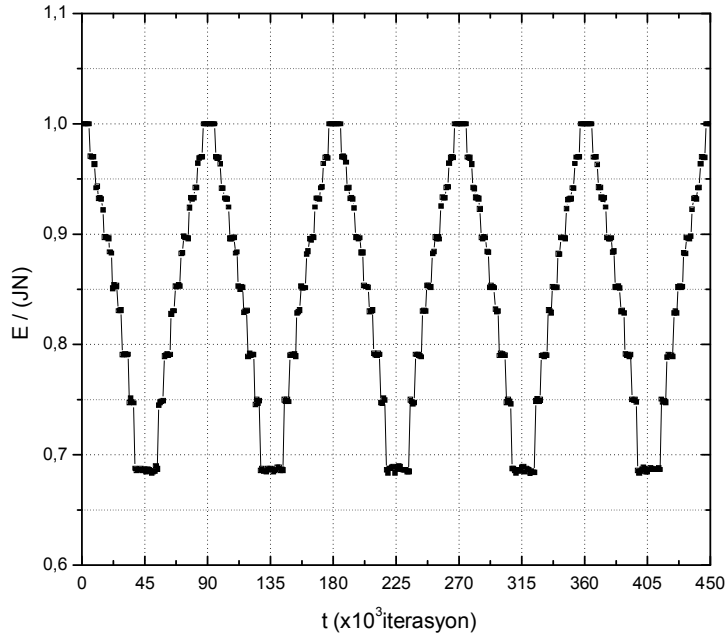
(b)



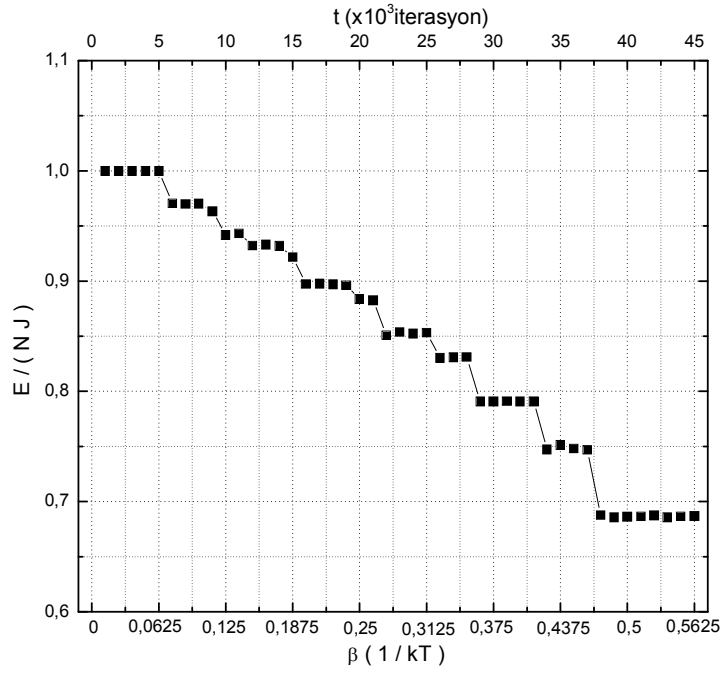


(c)

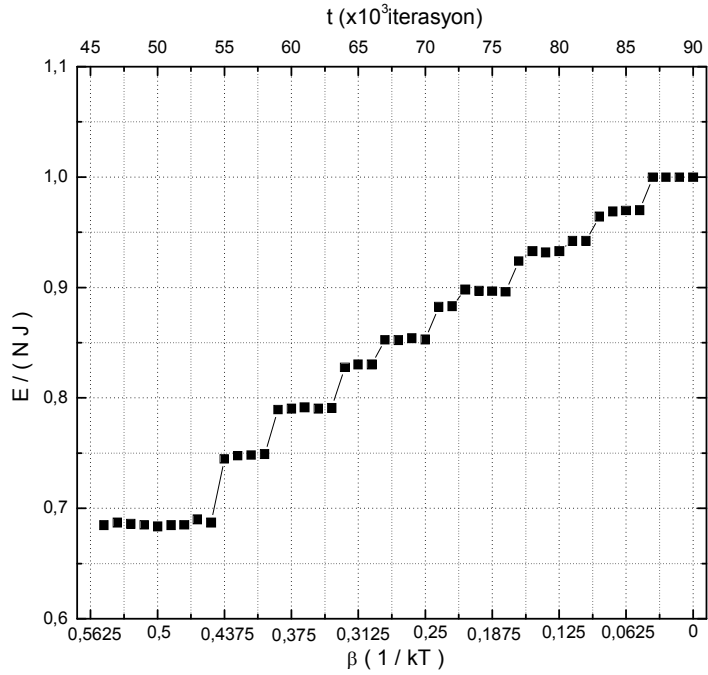
Şekil 5.23 (a) Paramanyetik fazda sıfır manyetik alan altında sıcaklığı ardı ardına artırılıp azaltılan sistemin spin başına ortalama manyetizasyonunun zaman içindeki değişimi. (b) Aynı grafiğin ilk 45000 iterasyonluk kısmının  $\beta = (kT)^{-1}$ 'ya bağlı değişimi. (c) Aynı grafiğin 45000 ile 90000. iterasyonlar arası kısmının  $\beta = (kT)^{-1}$ 'ya bağlı değişimi.



(a)



(b)

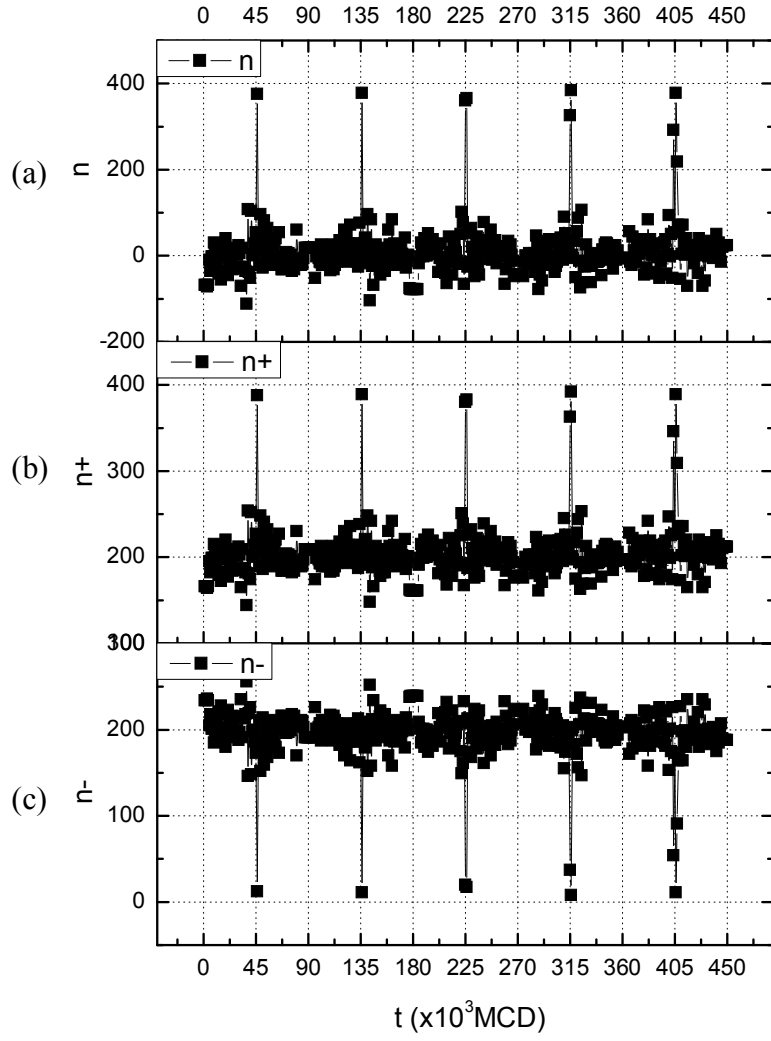


(c)

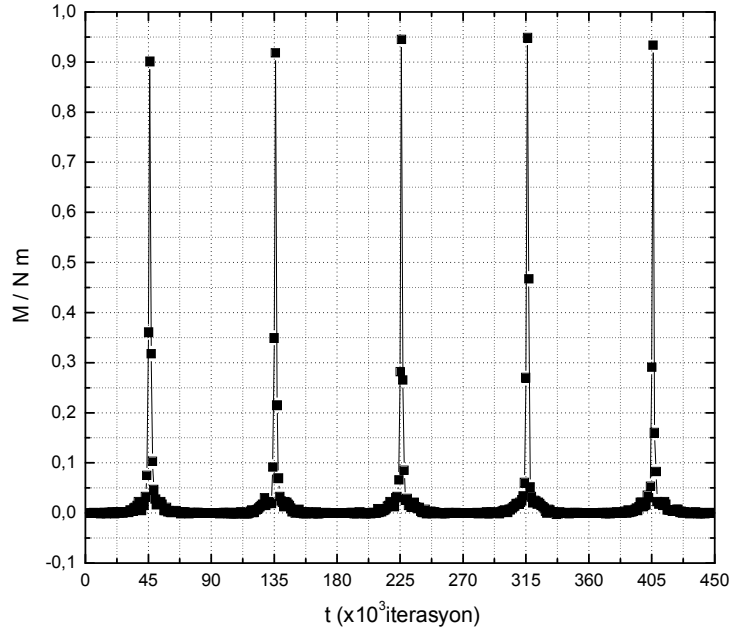
Şekil 5.24 (a) Paramanyetik fazda sıfır manyetik alan altında sıcaklığı ardı ardına artırılıp azaltılan sistemin spin başına ortalama enerjisinin zaman içindeki değişimi. (b) Aynı grafiğin ilk 45000 iterasyonluk kısmının  $\beta = (kT)^{-1}$ 'ya bağlı değişimi. (c) Aynı grafiğin 45000 ile 90000. iterasyonlar arası kısmının  $\beta = (kT)^{-1}$ 'ya bağlı değişimi.

Şimdi ise manyetik alanın bu sistem üzerindeki etkisini görelim. Bunun için sisteme 45000 iterasyon boyunca  $\vec{H} = 0.03J$  değerinde manyetik alan uygulanmıştır (bu değer özel olarak seçilmiş bir değer değildir, manyetik alanın bu küçük değerinde bile etkisi gözlenebildiği için buna ait sonuçlar verilmiştir.).

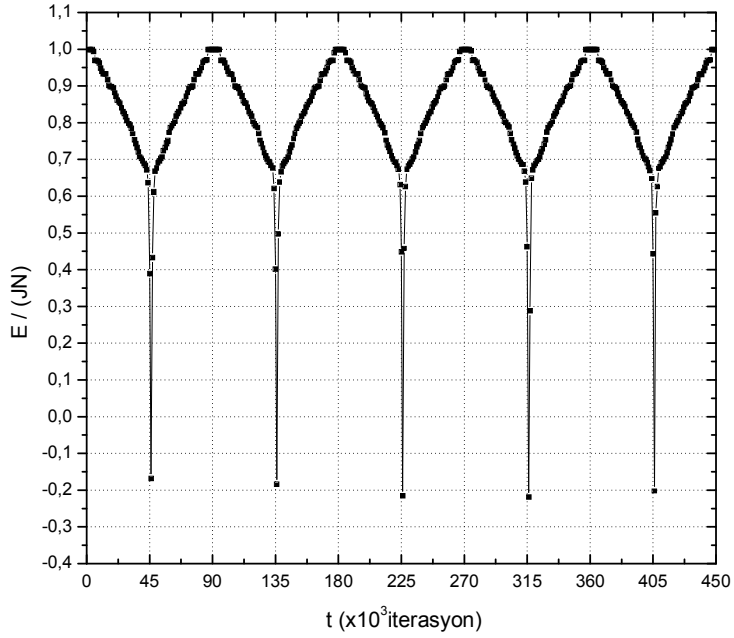
Beklenildiği gibi, paramanyetik fazda bulunan sisteme uygulanan artan manyetik alan, manyetik momentlerin alan yönünde sıralanmasını sağlamıştır (Şekil5.25, Şekil5.26). İlk 45000'lik iterasyon zamanı içinde azaltılan sıcaklık etkisiyle enerjide azalma gözlenmiştir. Dış manyetik alanda iki spin paralel ise enerjisi daha düşük olacağından Şekil 5.27'deki spin başına enerjinin Şekil 5.24'e göre daha düşük değerler aldığı gözlenmiştir. Manyetik alanın etkisiyle spin sayılarının ve spin başına manyetizasyonun zaman içindeki değişiminde gözlenen dalgalanma azalmıştır; manyetik alan spinlerin alan yönünde sıralanmasını sağlamıştır (Şekil5.25, Şekil5.26). Ayrıca manyetik alan daha çok spinin paralel sıralanmasını da sağlamıştır; Şekil 5.22'de 45000. iterasyonda +z yönündeki spin sayısı 206 iken Şekil5.25'da 388 olduğu gözlenmiştir.



Şekil 5.25 Paramanyetik fazda sabit manyetik alan altında sıcaklığın ardı ardına artırılıp azaltıldığı sistemdeki spin yönelimlerinin zaman içindeki değişimi. (a) +z yönündeki spin fazlalığının ( $n = n_+ - n_-$ ) zaman içindeki değişimi; (b) +z yönünde sıralanan spin sayılarının ( $n_+$ ) zaman içindeki değişimi; (c) -z yönünde sıralanan spin sayılarının ( $n_-$ ) zaman içindeki değişimi.



Şekil 5.26 Paramanyetik fazda sabit manyetik alan altında sıcaklığı ardı ardına artırılıp azaltılan sistemin spin başına ortalama manyetizasyonunun zaman içindeki değişimi.



Şekil 5.27 Paramanyetik fazda sabit manyetik alan altında sıcaklığı ardı ardına artırılıp azaltılan sistemin spin başına ortalama enerjisinin zaman içindeki değişimi.

## 6. SONUÇ VE TARTIŞMA

Atomik manyetik momentlerin ferromanyetik domainler içindeki sıralanmasını ve ferromanyetik maddenin ısıtıldığı zaman Curie sıcaklığında paramanyetik maddeye geçişini açıklamak için Weiss, Langevin'in, klasik Boltzman istatistiğine dayalı geliştirdiği paramanyetizma teorisini kullanarak buna ekstra bir terim ilave etmiştir. Bu terim, komşu atomik manyetik momentlerin paralel sıralanmasına sebep olan atomlar arası bir etkileşmeyle ilgilidir.

Domain içinde düzgün kendiliğinden manyetizasyonun olmasından dolayı Weiss alanının, bir domain içinde gerçek duruma iyi bir yaklaşım olduğu kabul edilir [64].

Momentler arasındaki Weiss tipi etkileşme fikri, sıcaklığın ve manyetik alanın manyetizasyon üzerindeki etkilerini açıklayan Ising model ile eşleştirilebilir. Bu nedenle ferromanyetik domainlerin yapılarını daha iyi kavrayabilmek, domainler içinde gerçekleşen manyetizasyon süreçlerini gözleyebilmek için iki boyutlu Ising modelin uygulaması gerçekleştirilmiştir. Uygulamada atomik manyetik momentlerin ferromanyetik domainler içinde sıralanmaları, ferromanyetik maddenin ısıtıldığı zaman Curie sıcaklığında paramanyetik maddeye dönüşmesi, manyetik alanın ferromanyetik domainlere ve paramanyetik fazda bulunan sisteme etkileri incelenmiştir.

Uygulamada ilk olarak belli bir geçiş sıcaklığının altında, spin sisteminde domainlerin ve domainlere ait kendiliğinden manyetizasyonun olduğu gözlenmiştir. Yani gözlenen geçiş sıcaklığının üzerinde sistem, spinlerin gelişigüzel yönlendiği paramanyetik fazda bulunurken, sıcaklığın geçiş sıcaklığının aşağısına azaltılmasıyla sistemin, spinlerin tam düzenli olduğu, ferromanyetik faza geçtiği gözlenmiştir.

Daha sonra demanyetize durumda ferromanyetik maddelerin domainleri içinde yer alan spin manyetik momentlerin, kendiliğinden manyetizasyon vektörlerini oluşturacak şekilde paralel sıralandıkları; fakat sıralanmanın yönünün domainden domaine gelişigüzel olarak değiştiği gözlenmiştir. Çünkü spinlerin sadece yukarı ve aşağı olmak üzere iki şekilde yönlenebildiği manyetik bir sistem üzerine dış alan uygulanmıyorsa manyetizasyon her iki yöne bakabilir.

Bir manyetik alan uygulandığı zaman ise domainlerin kendiliğinden manyetizasyon vektörleri, Weiss'in teorisi ile uyumlu olarak alana paralel sıralanmıştır.

Böylelikle domainler içinde sıcaklığa bağlı oluşan kendiliğinden manyetizasyon gözlenmiş, manyetik alanın domainler içinde yer alan manyetik momentlere etkisi incelenmiştir.

Bunun yanı sıra geçiş sıcaklığının (Curie sıcaklığı) üstünde paramanyetik fazda bulunan sisteme manyetik alanın etkisi de incelenmiştir. Paramanyetik fazda bulunan sistemde yer alan manyetik momentlerin bir dış manyetik alanın yokluğunda gelişigüzel yöneldikleri, Curie sıcaklığına yaklaşıldıkça paralel sıralanmaya geçtikleri fakat termal enerjinin varlığı nedeniyle tam sıralanmayı gerçekleştiremedikleri gözlenmiştir. Paramanyetik fazda bulunan sisteme uygulanan manyetik alan, Curie sıcaklığına yaklaşıldıkça paralel sıralanmaya geçen momentlerin daha çok sayıda ve alan yönünde paralel sıralanmasını sağlamıştır.

Düzensiz durum paramanyetik fazdan, düzenli durum ferromanyetik faza geçiş sıcaklık parametresi değerini  $\beta = (kT)^{-1} = 0.637J^{-1}$  olarak gözlerken düzenli durumdan düzensiz duruma geçiş sıcaklık parametresi değerini ise  $\beta = (kT)^{-1} = 0.563J^{-1}$  olarak gözledik. Bu farkın neden kaynaklandığı konusunda çalışmalarımız sürmekle beraber, sistemin düzenli yani kararlı durumda daha uzun süre kaldığını, bu nedenle kararsız duruma, beklenenden daha sonra ulaştığını gözlemiş olduk.

Düzensiz durum paramanyetik fazdan, düzenli durum ferromanyetik faza geçiş sıcaklık parametresi değerini  $\beta = (kT)^{-1} = 0.637J^{-1}$  olarak gözlediğimiz modelin analitik çözümünü yapan L. Onsager bu değeri 0.44 olarak hesaplamıştır [65]. K. Binder ve D. P. Landau da 1984 yılında yaptıkları çalışmada  $\beta$  değerini Onsager ile uyumlu olarak 0.44' de gözlemişlerdir [66]. Uygulamada spin sayısı, döngü iterasyon sayısı, gelişigüzel sayıların korelasyonu gibi parametreler arasındaki denge ile ilgili detaylı teorik bir çalışma yapılmadığından bu farkın bu parametreler arasındaki ilişkiden kaynaklanabileceği düşünülmektedir.

Bu çalışmada sıcaklık ve manyetik alanın manyetizasyon üzerindeki etkileri incelenmiştir. Bir sonraki aşamada stres gibi çeşitli farklı parametrelerin de etkileri üzerine çalışılacaktır.

Domainlerin incelenmesinde modelleme çalışmasından yola çıkmamızın amacı domain gözleme teknikleri kullanılarak yapılacak olan gözlemleri destekleyecek, karşılaştırılması yapılabilecek veriler elde etmektir. Bu nedenle bu çalışmalara paralel olarak çeşitli tekniklerle domain gözlemleri gerçekleştirilecektir.

Ferromanyetik malzemelerin domain yapılarına dair ayrıntılar kavrandıkça uygulama alanlarında da daha güvenilir sonuçlara ulaşılabilecektir.



## KAYNAKLAR

- [1] Honda K., Okubo J. "On a Molecular Theory of Ferromagnetic Substances," *Ferromagnetic Substances*, **10**, 705-742 (1917).
- [2] Hubert A., Schafer R., "Magnetic Domains," Springer, (2000).
- [3] Ewing J.A., Klaassen H.G. "Magnetic Qualities of Iron," *Proc.Roy.Soc.*, 75-77 (1893).
- [4] Slatter J.C., Kirkwood J.G. "The van der Waals Forces in Gases," *Phys.Rev.*, **37**, 682-697 (1931).
- [5] Margenau H., "Van der Waals Forces," *Reviews of Modern Physics*, **11**, 1-35 (1939).
- [6] Carel J.V.O., Chaudhury M.K., Good R.J., "Interfacial Lifshitz-van der Waals and Polar Interactions in Macroscopic Systems," *Chem.Rev.*, **88**, 927-941 (1988).
- [7] Landau L., Lifshits E, "On The Theory of The Dispersion of Magneticpermeability in Ferromagnetic Bodies," *Phys. Zeitsch. der Sow.*, **8**, 153-169 (1935).
- [8] Cullity B.D., "Introduction to Magnetic Materials," Addison- Wesley, (1972).
- [9] Williams H.J., Bozorth R.M.,and Shockley W., "Magnetic Domain Patterns on Single Crystals of Silicon Iron," *Phys.Rev.*, **75**, 155-178 (1949).
- [10] Guimaraes A.P., "Magnetism and Magnetic Resonance in Solids" John Wiley & Sons, (1998).
- [11] Chikazumi, S., "Physics of Magnetism", Oxford University Press, New York, (1997).
- [12] Goldman A., "Handbook of Modern Ferromagnetic Materials", Kluwer Academic Publishers, New York, (1999).
- [13] Rechenberg H., De Boer F.R. "Dirac and Heisenberg: Congenial Partners in Quantum Mechanics" Werner-Heisenberg-Institut, [www.brera.unimi.it](http://www.brera.unimi.it), 2009.
- [14] Buschow K.H.J., De Boer F.R. "Physics of Magnetism and Magnetic Materials" Kluwer Academic Publishers, (2004).

- [15] Göktepe M., “Magnetic Stress Sensors,” *Encyclopedia of Sensors.*, **5**, 415-465 (2006).
- [16] Bozorth R.M., “The Theory of Ferromagnetic Anisotropy of Single Crystals,” *Phys.Rev.*, **42**, 882-892 (1932).
- [17] Bitter F., “On the Interpretation of Some Ferromagnetic Phenomena,” *Phys.Rev.*, **39**, 337-345 (1932).
- [18] Bozorth R.M., “Determination of Ferromagnetic Anisotropy in Single Crystals and in Polycrystalline Sheets,” *Phys.Rev.*, **50**, 1076-1081 (1936).
- [19] Van Vleck J.H., “On the Anisotropy of Cubic Ferromagnetic Crystals,” *Phys.Rev.*, **50**, 1076-1081 (1936).
- [20] Elmore W.C. “The Magnetic Structure of Iron Crystals,” *Phys.Rev.*, **62**, 486-493 (1942).
- [21] Skomski R., “Simple Models of Magnetism,” Oxford University Press, (2008).
- [22] Solyom J. “Fundamentals of the Physics of Solids, Volume 1-Structure and Dynamics,” Springer (2002).
- [23] Krinchik G.S., Paporkov V.A., Chepurova E.E., “Faraday Effect in a Magnetized Domain Wall,” *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, **49**, 356-358 (1989).
- [24] Barkhausen H., “Whistling Tones from the Earth,” *Phys.Rev.*, **18**, 1155-1159 (1930).
- [25] Bitter F., “On Inhomogenities in the Magnetization of Ferromagnetic Materials,” *Phys.Rev.*, **38**, 1903-1905 (1931).
- [26] Bitter F., “Experiments on the nature of Ferromagnetism,” *Phys.Rev.*, **41**, 507-515 (1932).
- [27] Elmore W.C., “Properties of the Surface Magnetization in Ferromagnetic Crystals,” *Phys. Rev.*, **51**, 982 - 988 (1937).
- [28] Sixtus K.J., “Powder Patterns on Ferromagnetic Crystals,” *Phys. Rev.*, **51**, 870 - 876 (1937).
- [29] Mckeehan L.W., “Optical and Magnetic Properties of Magnetite Suspensions - Surface Magnetization in Ferromagnetic Crystals,” *Phys. Rev.*, **57**, 1177 - 1178 (1940).
- [30] Elmore W.C., “Interpretation of Ferromagnetic Colloid Patterns on Ferromagnetic Crystal Surfaces,” *Phys. Rev.*, **58**, 640 - 642 (1940).

- [31] Williams H.J., "Direction of Domain Magnetization in Powder Patterns," *Phys. Rev.*, **71**, 646-647 (1947).
- [32] Bozorth R.M., "Magnetic Domain Patterns," *J. de Phys. et Radium*, **12**, 308-321 (1951).
- [33] Coleman R.V., Scott G.G., "Magnetic Domain Patterns on Single-Crystal Iron Whiskers," *Phys. Rev.*, **107**, 1276 - 1280 (1957).
- [34] Bozorth R.M., "Barkhausen Effect: Orientation of Magnetization in Elementary Domains," *Conference on Ferromagnetism at the meeting of the American Physical Society*, 353-356 (1931).
- [35] Bozorth R.M., Dillinger J.F., "Barkhausen Effect. III. Nature of Change of Magnetization in Elementary Domains," *Phys. Rev.*, **41**, 345 - 355 (1932).
- [36] Williams H.J., Foster F.G., and Wood E.A., "Observation of the Magnetic Domains by the Kerr Effect," *Phys. Rev.*, **82**, 119 - 120 (1951).
- [37] Bowman M.J., Booth A.D., "A Review of Methods for the Examination of Magnetic Domain Structure," *Metallography*, **4**, 103 - 131 (1971).
- [38] Aslan N., "İstatistik Fizikte Monte Carlo Yöntemi".
- [39] Kabakçioğlu A., Sayar M., Aydın E., Tırnaklı U., "İleri İstatistik Mekanik ve Karmaşıklık Çalıştayı Ders Notları," *Marmaris Kuramsal ve Uygulamalı Fizik Araştırma Enstitüsü (ITAP)* (02-20 Temmuz 2007).
- [40] Karaoğlu Bekir, "Sayısal Fizik," Seyir, (2004).
- [41] Mikailov F., San S.E., "Termodinamik ve İstatistiksel Fizik," Papatya, (2008).
- [42] Kittel C., "Introduction to Solid State Physics," John Wiley&Sons, (1996).
- [43] Landau D. P., Binder K., "A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics," Cambridge (2005).
- [44] Binder K., Heerman D. W., "Monte Carlo Simulation in Statistical Physics," Springer (2002).
- [45] Gould H., Spornick L., Tobochnik J., "Thermal and Statistical Physics Simulations The Consortium for Upper Level Physics Software," John Wiley & Sons, (1995).
- [46] Kittel C., "Physical Theory of Ferromagnetic Domains," *Rev. Mod. Phys.*, **21**, 541-583 (1949).

- [47] Metropolis N., Ulam S., "The Monte Carlo Method" *Journal of the American Statistical Association.*, **44**, 335-341 (1949).
- [48] Metropolis N., Rosenbluth A. W, Rosenbluth M. N, Teller A. H., Teller E., "Equation of State Calculations by Fast Computing Machines" *Journal of Chemical Physics.*, **21**, 1087- 1092 (1953).
- [49] Yazgan K., "Monte Carlo Yöntemleri ve Kısmî Differansiyel Denklem Çözümüne Uygulanmaları," *TCDD.*, **204**, 748-752
- [50] Binder K., "Applications of Monte Carlo Methods to Statistical Physics" *Rep. Prog. Phys.*, **60**, 487-559 (1997).
- [51] Apaydın F., "İstatistik Fizik," Hacettepe Üniversitesi, (2004).
- [52] Reif, F. "Berkeley Fizik Dersleri İstatistik Fizik," Bilim, (1965).
- [53] Gentle J.E., "Random Number Generation and Monte Carlo Methods," Springer (2005).
- [54] "Rasgele Süreçler," İ.Ü. Elektrik Elektronik Mühendisliği iletişim Laboratuvarı Ders Notları, (Aralık 2007).
- [55] Robinson S. O., Dessart D.J. "Random-Number Generators: A Mysterious Use of Algorithms," Yearbook (National Council of Teachers of Mathematics), **1998**, 243-250 (1997).
- [56] Hançerlioğulları A., "Monte Carlo Simulasyon Metodu ve MCNP Kod Sistemi," *Kastamonu Eğitim Dergisi*, **14**, 545 - 556 (2006).
- [57] Şarer B., Hançerlioğulları A., Übeyli M., "Nükleer Hesaplamalarda Monte carlo Yönteminin Kullanımı," 8.Ulusal Nükleer Bilimler ve Teknolojileri Kongresi, Kayseri, Ekim 2003.
- [58] Jindal S., "Monte Carlo Simulation of the Ising Model," Department of Chemical Engineering and Material Sciences, University of California, (09.06.2007)
- [59] Deitel H.M., Deitel P.J., "C ve C++," Sistem, (2007).
- [60] Taşbaşı G.M., "İleri C Programlama," Altaş, (2007).
- [61] Phillips J., "Spontaneous Magnetization Using the Ising Model and Monte Carlo Simulations to Study the Magnetization Phase Transition", Capital University, <http://oldsite.capital.edu/acad/as/csac/Keck/modules.html>, (05.06.2009).
- [62] Wilt. N. V., "Effect of size on a simple model of ferromagnetism", Dordt College, Sioux Center, IA, (2005).
- [63] Bozorth R.M., "Magnetism," *Rev. Mod. Phys.*, **19**, 29-86 (1947).

- [64] Jiles D., "Introduction to Magnetism and Magnetic Materials", Chapman & Hall, London, (1991).
- [65] Onsager L., "Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition," *Phys. Rev.*, **65**, 117 - 148 (1944).
- [66] Binder K., Landau D.P. "Finite-size scaling at first-order phase transitions" *Phys. Rev.*, **30**, 1477-1485 (1984).

## EK A

### Monte Carlo Simulasyon Yöntemiyle İncelenen İki Boyutlu Ising Modelin Algoritması

*Girdiler:* Matris boyutu  $L$ ,  $S$  matrisi elemanları, iterasyon sayısı  $t$ , sıcaklık parametresi  $\beta$ , manyetik alan  $\vec{H}$ .

*Çıktılar:* Spin başına ortalama enerji değeri, spin başına ortalama manyetizasyon değeri.

1.  $L, t, \beta, \vec{H}$  değerlerini oku.
2.  $i \leftarrow 1$  ile  $L$  arası değerler için ve  $j \leftarrow 1$  ile  $L$  arası değerler için 0 ile 1 arasında gelişigüzel seçilmiş sayılardan oluşan  $S_{ij}$  elemanlarını oluştur.
3.  $i \leftarrow 1$  ile  $L$  arası değerler için ve  $j \leftarrow 1$  ile  $L$  arası değerler için  $S_{ij} < 0.5$  ise  $S_{ij} \leftarrow -1$  al.
4.  $i \leftarrow 1$  ile  $L$  arası değerler için ve  $j \leftarrow 1$  ile  $L$  arası değerler için  $S_{ij} > 0.5$  ise  $S_{ij} \leftarrow 1$  al.
5.  $S_{ij}$ 'nin matriste sağ komşusunu  $n_1 \leftarrow S[i][ileri[j]]$ , sol komşusunu  $n_2 \leftarrow S[i][geri[j]]$ , üst komşusunu  $n_3 \leftarrow S[ileri[i]][j]$ , alt komşusunu  $n_4 \leftarrow S[geri[i]][j]$  al.
6.  $i \leftarrow 1$  ile  $L$  arası değerler için ve  $j \leftarrow 1$  ile  $L$  arası değerler için seçilen  $S_{ij} \leftarrow -1$  ise  $n_{eski} \leftarrow -1$  ve  $n_{yeni} \leftarrow 1$  al. (Spin alt-üst et.)
7.  $i \leftarrow 1$  ile  $L$  arası değerler için ve  $j \leftarrow 1$  ile  $L$  arası değerler için seçilen  $S_{ij} \leftarrow 1$  ise  $n_{eski} \leftarrow 1$  ve  $n_{yeni} \leftarrow -1$  al. (Spin alt-üst et.)
8.  $i \leftarrow 1$  ile  $L$  arası değerler için ve  $j \leftarrow 1$  ile  $L$  arası değerler için  $e_{eski} = e[n_{eski}][n_1] + e[n_{eski}][n_2] + e[n_{eski}][n_3] + e[n_{eski}][n_4]$  işlemini yap. (Spinin 4 komşusuyla olan etkileşim enerjisini hesapla.)
9.  $i \leftarrow 1$  ile  $L$  arası değerler için ve  $j \leftarrow 1$  ile  $L$  arası değerler için  $e_{yeni} = e[n_{yeni}][n_1] + e[n_{yeni}][n_2] + e[n_{yeni}][n_3] + e[n_{yeni}][n_4]$ ; işlemini yap. (Alt-üst edilen spinin 4 komşusuyla olan etkileşim enerjisini hesapla.)

10.  $i \leftarrow 1$  ile  $L$  arası deęerler için ve  $j \leftarrow 1$  ile  $L$  arası deęerler için  $-\vec{H} \sum_i \vec{S}_i$  işlemini yap.(Böylelikle spinlerin birbirleriyle ve manyetik alan ile olan etkileşim enerjilerini içeren toplam enerjiyi bul.)
11.  $i \leftarrow 1$  ile  $L$  arası deęerler için ve  $j \leftarrow 1$  ile  $L$  arası deęerler için toplam enerji  $E_{\text{yeni}} \leq E_{\text{eski}}$  ise  $S_{ij} \leftarrow n_{\text{yeni}}$  al.
12.  $i \leftarrow 1$  ile  $L$  arası deęerler için ve  $j \leftarrow 1$  ile  $L$  arası deęerler için toplam enerji  $E_{\text{yeni}} > E_{\text{eski}}$  ise 0 ile 1 arası gelişigüzel bir  $r$  sayısı oluştur ve Boltzmann olasılık dağılımını hesapla,  $P_{\text{eski} \rightarrow \text{yeni}} = \left( e^{-E_{\text{yeni}}/k_B T} / Z \right) / \left( e^{-E_{\text{eski}}/k_B T} / Z \right) = e^{-\Delta E/k_B T}$
13.  $r \leq P$  ise  $S_{ij} \leftarrow n_{\text{yeni}}$  al.
14.  $r > P$  ise  $S_{ij} \leftarrow n_{\text{eski}}$  al.
15.  $\vec{M} = \frac{1}{N} \left[ \sum_i^N \vec{S}_i \right]$  işlemini yap. ( $N=LxL$ )
16. İşlemi bitir.
17. 5-15 arasını  $t$  defa tekrarla.
18. Her  $t$  iterasyon zamanından sonra ,  $\beta$  veya  $\vec{H}$  deęerini ya da her ikisini deęiştir, aynı işlemleri yeniden uygula.
19. İşlemi bitir.

```

/*EK B
Monte Carlo Simulasyon Yöntemiyle İncelenen İki Boyutlu Ising Model*/
#include<stdio.h>
#include<stdlib.h>
#include<conio.h>
#include<math.h>
#include<time.h>
int ibeta=100,iter=1000,L=19,nz=1;/*Veri tipleri tanımlanır.*/
typedef int vector[20],matrix[20][20];
vector geri,ileri;
matrix is;
double enj[20][20], mny[20][20], mnyaln[20][20], sck[20][20];/*Enerji,manyetizasyon,manyetik alan,
sıcaklık değerleri matris halinde de oluşturulabilir.*/
int e[2][2]={{0,1},{1,0}};
int i,j,nit,n,sy,sa,t;
int neski,nyeni,n1,n2,n3,n4;
double bf,beta,T;
double et,eeski,eyeni,EESKI,EYENI,eort;
double p,s,M,Mort,Heski,Hyeni,HESKI,HYENI,H;

```



```

double Mtop,etop;
FILE *dsy1;
FILE *dsy2;
FILE *dsy3;
FILE *dsy4;
FILE *dsy5;
FILE *dsy6;
FILE *dsy7;
FILE *dsy8;
FILE *dsy9;
FILE *dsy10;
FILE *dsy11;
void printfile ()/*Ana programda gerçekleştirilen işlemler bu ara programla dosyalara yazdırılır.*/
{
for(i=0;i<=L;i++)
{
for(j=0;j<=L;j++)
{
if(is[i][j]==1) fprintf(dsy1,"%s","|"); else fprintf(dsy1,"%s",".");
if(is[i][j]==1) fprintf(dsy9,"%2.d",2); else fprintf(dsy9,"%2.d",1);

```

```

fprintf(dsy5, "%7.2f", enj[i][j]);
fprintf(dsy6, "%7.f", mny[i][j]);
fprintf(dsy7, "%7.2f", mnyaln[i][j]);
fprintf(dsy8, "%7.2f", sck[i][j]);
}
fprintf(dsy1, "\n");
fprintf(dsy5, "\n");
fprintf(dsy6, "\n");
fprintf(dsy7, "\n");
fprintf(dsy8, "\n");
fprintf(dsy9, "\n");
}
fprintf(dsy1, "Itrsyn=%d Beta=%5.4f Eort=%6.4f Mort=%8.4f H=%5.3f sy=%d sa=%d t=%d\n", iter, beta, eort, Mort, H, sy, sa, t);
fprintf(dsy1, "\n");
fprintf(dsy2, "Itrsyn=%d Beta=%5.4f Eort=%6.4f Mort=%8.4f H=%5.3f t=%3.d T=%5.4f\n", iter, beta, eort, Mort, H, sy, sa, t, T);
fprintf(dsy3, "%7.3f %7.4f\n", H, Mort);
fprintf(dsy4, "%7.4f %7.4f\n", eort, beta);
fprintf(dsy5, "\n");
fprintf(dsy5, "Enerji Matrisi\n");
fprintf(dsy5, "\n");

```

```

fprintf(dsy6, "\n");
fprintf(dsy6, "Manyetizasyon Matrisi\n");
fprintf(dsy6, "\n");
fprintf(dsy7, "\n");
fprintf(dsy7, "Manyetik Alan Matrisi\n");
fprintf(dsy7, "\n");
fprintf(dsy8, "\n");
fprintf(dsy8, "Sicaklik Matrisi\n");
fprintf(dsy8, "\n");
fprintf(dsy9, "Itrsyn=%d Beta=%5.3f Eort=%6.4f Mort=%8.4f H=%5.3f sy=%d sa=%d t=%d \n", iter, beta, eort, Mort, H, sy, sa, t);
fprintf(dsy9, "\n");
fprintf(dsy10, "%d %d \n", sy, sa);
fprintf(dsy11, "%9.4f %9.3f \n", T, H);
}
void printscr () /*Ana programda gerçekleştirilen işlemler bu ara programla ekrana yazdırılır.*/
{
printf("Itrsyn=%d Beta=%5.3f Eort=%6.4f Mort=%8.4f H=%5.3f sy=%d sa=%d \n", iter, beta, eort, Mort, H, sy, sa);
printf("\n");
printf("\n");
for(i=0; i<=L; i++)

```

```

{
for(j=0;j<=L;j++)
{
if(is[i][j]==1) printf("%s", "|"); else printf("%s", ".");
}
printf("\n");
}
}
main()/*Ana program*/
{
srand(8);/*Bu komut her defasında çağrılan gelişigüzel sayı kümesinin kontrol edilebilirliğini sağlar.*/
neski=0;/*Değişkenlerin başlangıç değerleri girilir*/
nyeni=0;
nit=0;
n1=0;
n2=0;
n3=0;
n4=0;
eeski=0;
eyeni=0;

```

```
beta=0; /*Başlangıç sıcaklık parametresi değeri girilir*/
M=0;
n=1;
H=0; /*Başlangıç manyetik alan değeri girilir*/
t=0;
dsy1=fopen("Konfigurasyon Matrisi .txt", "w+"); /*Bu komut verilerin kaydedileceği dosyaları açar*/
if (dsy1==NULL) { printf("HATA|DOSYA ACILAMADI...");}
dsy2=fopen("Değerler .txt", "w+");
if (dsy2==NULL) { printf("HATA|DOSYA ACILAMADI...");}
dsy3=fopen("Manyetik Alan ve Ortalama Manyetizasyon .txt", "w+");
if (dsy3==NULL) { printf("HATA|DOSYA ACILAMADI...");}
dsy4=fopen("Ort Enerji, beta .txt", "w+");
if (dsy4==NULL) { printf("HATA|DOSYA ACILAMADI...");}
dsy5=fopen("Enerji Matrisi .txt", "w+");
if (dsy5==NULL) { printf("HATA|DOSYA ACILAMADI...");}
dsy6=fopen("Manyetizasyon Matrisi .txt", "w+");
if (dsy6==NULL) { printf("HATA|DOSYA ACILAMADI...");}
dsy7=fopen("Manyetik Alan Matrisi .txt", "w+");
if (dsy7==NULL) { printf("HATA|DOSYA ACILAMADI...");}
dsy8=fopen("Sıcaklık Matrisi .txt", "w+");
```

```

if (dsy8==NULL) { printf("HATA|DOSYA ACILAMADI...");}
dsy9=fopen("Konfigurasyon Matrisi 02 .txt","w+");
if (dsy9==NULL) { printf("HATA|DOSYA ACILAMADI...");}
dsy10=fopen("SpinYukarıAşağı .txt","w+");
if (dsy10==NULL) { printf("HATA|DOSYA ACILAMADI...");}
dsy11=fopen("X, C .txt","w+");
if (dsy11==NULL) { printf("HATA|DOSYA ACILAMADI...");}
dsy12=fopen("T, H.txt","w+");
if (dsy12==NULL) { printf("HATA|DOSYA ACILAMADI...");}
for(i=0;i<=L;i++)/*Periyodik sınır koşulları tanımlanır.*/
{
geri[i]=i-1;
ileri[i]=i+1;
}
geri[0]=L;
ileri[L]=0;
for(i=0;i<=L;i++)/*Spin matrisi is[i][j] gelişigüzel olarak 0 ve 1 sayılarıyla doldurulur.*/
{
for(j=0;j<=L;j++)
{

```

```

is[i][j]=(int)(((float)(rand()%9)/10)+0.5);
}
}
for(n=1;n<=ibeta;n++)
{
t=t+1;
M=0;
et=0;
for(nit=1;nit<=iter;nit++)/*Yukarıda açılan döngü bu komut ile iter kadar tekrarlanır*/
{
Heski=0;
Hyeni=0;
sy=0;
sa=0;
for(i=0;i<=L;i++)
{
for(j=0;j<=L;j++)
{
neski=is[i][j];
if (neski==1) nyeni=0;/*Spin alt-üst edilir*/

```

```

else nyeni=1;
n1=is[i][ileri[j]];/*Spinin komşuları tanımlanır.*/
n2=is[i][geri[j]];
n3=is[ileri[i]][j];
n4=is[geri[i]][j];
eyeni=e[nyeni][n1]+e[nyeni][n2]+e[nyeni][n3]+e[nyeni][n4];/*Spinin 4 komşusuyla etkileşme
enerjisi hesaplanır.*/
eeski=e[neski][n1]+e[neski][n2]+e[neski][n3]+e[neski][n4];
if (nyeni==1) s=1;
else if (nyeni==0) s=-1;
if (neski==1) p=1;
else if (neski==0) p=-1;
Heski=(Heski+p);
Hyeni=(Hyeni+s);
HESKI=H*Heski;/*Spinin manyetik alan ile etkileşme enerjisi hesaplanır*/
HYENI=H*Hyeni;
EESKI=eeski-HESKI;/*Yeni ve eski konfigürasyonlara ait toplam enerjiler hesaplanır.*/
EYENI=eyeni-HYENI;
bf=exp((-1)*beta*(EYENI-EESKI));/*Boltzmann olasılık dağılımı hesaplanır.*/
mnyaln[i][j]=H;

```



```

T=1/beta;
sck[i][j]=T;
if ( EYENI<= EESKI)/*Eski konfigürasyon ile yeni konf. enerjileri aracılığıyla karşılaştırılır.*/
{
is[i][j]=nyeni;
enj[i][j]=EYENI;
et=et+ EYENI;
M=M+s;
mny[i][j]=s;
if (nyeni==1) sy=sy+1;
else sa=sa+1;
}
else
if((float)(1+rand()%9)/10)<=bf)/*Boltzmann olasılık dağılımı,0 ile 1 arası seçilen gelişigüzel sayı ile karşılaştırılır.*/
{
is[i][j]=nyeni;
enj[i][j]=EYENI;
et=et+ EYENI;
M=M+s;

```

```

mny[i][j]=s;
if (nyeni==1) sy=sy+1;
else sa=sa+1;
}
else
{
is[i][j]=neski;
enj[i][j]=EESKI;
et=et+EESKI;
M=M+p;
mny[i][j]=p;
if (neski==1) sy=sy+1;
else sa=sa+1;
}
}
}
eort=et/(iter*2*(L+1)*(L+1));/*Spin başına ortalama enerji hesaplanır.*/
Mort=M/(iter*(L+1)*(L+1));/*Spin başına ortalama manyetizasyon hesaplanır.*/
}
H=H+0.025;/*iter defa tekrarlanan döngü sonunda manyetik alan değeri değiştirilerek döngü başına dönülür.*/

```

```
beta=beta+0.0125; /*iter defa tekrarlanan döngü sonunda sıcaklık parametresi değeri değiştirilerek
döngü başına dönülür.*/
printfscr();/*Bu komut sonucun ekrana yazdırılmasını sağlayan ara programı çağırır.*/
printfile();/*Bu komut sonucun dosyalara yazdırılmasını sağlayan ara programı çağırır.*/
}
fclose(dsy1);/*Verilerin kaydedildiği dosyalar kapatılır.*/
fclose(dsy2);
fclose(dsy3);
fclose(dsy4);
fclose(dsy5);
fclose(dsy6);
fclose(dsy7);
fclose(dsy8);
fclose(dsy9);
fclose(dsy10);
fclose(dsy11);
}
```