77

KÜMESEL DEĞİŞİM YÖNTEMİ İLE BİR VE İKİ BOYOTLU ISING MODELİ İÇİN KRİTİK SICAKLIĞIN TAYİNİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Hazırlayan
YÜKSEL UFAKTEPE

İNÖNÜ ÜNİVERSİTESİ
FEN-EDEBİYAT FAKÜLTESİ
FİZİK BÖLÜMÜ

MALATYA-1984

TEŞEKKÜR

Yüksek Lisans tez çalışmam, İnönü Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünde görevli, öğretim üyesi Yrd.Doç. Dr.Servet EKMEKÇİ yönetiminde yürütülmüştür. Çalışmamın konusunu öneren ve çalışmalarım sırasında yakın ilgi ve yardımlarını gördüğüm sayın Yrd. Doç. Dr. Servet EKMEKÇİ' ye ve tezimin daktilo edilmesinde emeği geçen sayın Naife YILMAZ' a teşekkür ederim.

ÖZET

Bu çalışmada, son zamanlarda kritik sıcaklık bulunmasında dikkate değer bir yöntem olan kümesel değişim yöntemi, bir ve iki boyutlu antiferromanyetik Ising modellere uygulanmıştır.
Bir boyutlu sistemin kritik sıcaklığa sahip olmadığı görülmüştür. İkiboyutlu antiferromanyetik açı Ising modelinin kritik sıcaklığı bulunmuştur. Bu kritik değerin Neel sıcaklığı olmayıp Curie sıcaklığı olduğu görülmüştür. Bulunan bu değerin Onsager' in kesin değerinden % 5 lik bir sapma gösterdiği gözlenmiştir.

SUMMARY

In this Study, Cluster Variation method which is considered new method finding critical temperature recently applied to one and two dimensional antiferromagnetic Ising models. It has been shown that onedimensional system has no critical temperature. Critical temperature has been found to 2- dimensional antiferromagnetic angle Ising model. It has been seen this value was not a Neel temperature, but it was a Curie temperature. It has been observed that the obtained value deviated from onsager' s exact value in the order of % 5.

İÇİNDEKİLER

GİRİŞ 1

I- KATILARIN MANYETİK ÖZELLİKLERİ 1

1- FERROMANYETİZMA 2

2- ANTİFERROMANYETİZMA 4

3- BRAGG-WILIAMS YAKLAŞIMI 5

4- BETHE YAKLAŞIMI 6

II- BÖLÜM 1. 9

1- TEK BOYUTLU KÜMESEL DEĞİŞİM YÖNTEMİ 9

III- BÖLÜM 2. 16

1- KÜMESEL DEĞİŞİM YÖNTEMİ İLE İKİ BOYUTLU AÇI İÇİN NEEL SICAKLIĞININ BULUNMASI 16

2- SONUÇ VE TARTIŞMA 30

KAYNAKLAR 32

Ek: BİLGİSAYAR ÇÖZÜMLEMESİ 33

GİRİŞ

I- KATI CİSİMLERİN MANYETİK ÖZELLİKLERİ

Manyetizma, elektronların spin ve yörüngesel momentlerinin bir çizgi gibi düzgün şekillerde dizilmelerinden doğmaktadır. Dış manyetik alan veya kristalde bu alanla birlikte iç etkileşme, diziliş için önemli olmaktadır. Buna göre katılar manyetik özelliklerine göre sınıflandırılabilirler. Manyetik alan $\vec{H}$ ve manyetik indüksiyon $\vec{B}$, manyetik alandaki katıların tanımında kullanılan iki alan çeşididir. Aralarında manyetik geçirgenlik (μ) ile

$$\vec{B} = \mu \vec{H} \qquad (1)$$

şeklinde bir ilişki vardır. Atomik açıdan bakılınca, katıların manyetizmalarının manyetik dipollerden meydana geldiğini anlarız. Bu dipoller,ya maddenin içinde mevcuttur veya manyetik alandan dolayı meydana gelmektedir. Buna göre maddenin içindeki boşluk alanı $\vec{H}$' ye ek olarak manyetizasyon ($\vec{M}$) ' de vardır. $\vec{M}$, birim hacim başına düşen manyetik momentdir. Manyetik moment 4π faktörü ile manyetik indüksiyona bağlanabilir.

$$\vec{B} = \vec{H}+4\pi\vec{M} \qquad (2)$$

(1) ve (2) denklemlerinden $\vec{M}$ ve χ,

$$\vec{M} = \chi .\vec{H} \qquad \chi = \frac{\mu-1}{4\pi} \qquad (3)$$

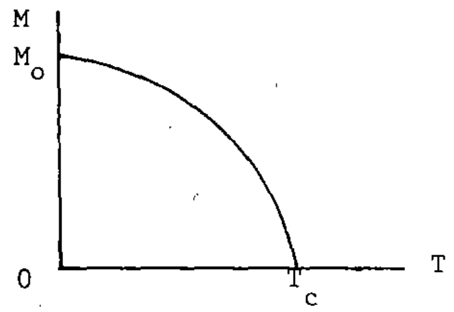
olur. χ katsayısına maddenin manyetik alınganlığı (Susceptibilite) denir. χ, manyetizasyonu manyetik alana bağlar. Denklem 3' e göre, manyetizasyon manyetik alanla aynı yönde olmalıdır.

Maddelerin uygulanan manyetik alana yanıt veriş biçimleri, tek tek atomların ya da moleküllerin özelliklerine ve ayrıca bunların etkileşmelerine bağlıdır. *Diyamanyetik* maddeler, net açısal momentumları sıfır olan atom ya da moleküllerden oluşur. Bu durumda uygulanan dış manyetik alana yanıt veriş, dolanan atomik akımların yaratılması şeklinde olur ki, bu akımlar, uygulanan alana zıt, çok küçük bir mıknatıslanma doğurur, (örnek: Bizmut) bu nedenle χ negatiftir (μ <1) .Yani diyamanyetizma çok küçük bir etkidir. Eğer maddenin temel atomik birimi çiftlenmemiş elektronlardan ötürü net bir açısal momentuma sahip ise, madde *Paramanyetiktir.* Tek elektronun manyetik momenti uygulanan alana paralel yönelir. Bu yüzden χ burada pozitiftir (μ>1).

1- FERROMANYETİZMA

Ferromanyetik maddeler paramanyetiktirler, fakat atomlar arasındaki etkileşmeler nedeniyle, iyice farklı davranış gösterirler.Ferromanyetizma, paramanyetizmanın, aşrı halinin belli şekilde uzatılmasıdır. Önemli özellikleri Weiss tarafından tanımlanmış olan ferromanyetler, dış manyetik alanın mevcut olmadığı durumda bile kendiliğinden manyetik momente sahiptirler /1/. Sıfır manyetik alanda manyetizasyona sahip olma özelliğine, kendiliğinden (Spanteneous) manyetizasyon denir. Basit ferromanyetlerde bütün spinler aynı yönde birbirine paralel ve yukarı yöndedir. Kendiliğinden sahip oldukları manyetik momente doymuş (saturation) moment denir.

Kendiliğinden manyetizasyonun sıcaklıkla değiştiği ve mutlak sıfırda maksimum değer alıp, sıcaklığın artmasıyla monoton olarak azalarak Curie sıcaklığı denilen belirli bir sıcaklıkta kaybolduğu gözlenmiştir. Manyetizasyonun sıcaklıkla değişimi Şekil- 1' de verilmiştir.



Şekil 1. Isısal manyetizasyon eğrisi.

Ferromanyetik metaller (Fe, Ni, Co, Gd,) ve bir çok alaşım ile son bulunan ferromanyetik yalıtkanlar (EuO, EuS, vs) bu şekilde termomanyetik özellik gösterirler.

Curie sıcaklığının altında, ferromanyetik maddeler kendiliğinden mıknatıslanma gösterirler; yani bölge olarak adlandırılan mikroskobik açıdan büyük sayılan bir hacim içindeki tüm manyetik momentler bir yöne dizilirler. Dış alanın uygulanması, bu bölgelerin değişmesine ve farklı bölgelerdeki momentlerin beraberce aynı yöne gelmelerine neden olur. Böylece tüm madde yığını mıknatıslanma doygunluğuna erişir. Dış alanın kaldırılması, momentlerin oldukça büyük bir kesrini hâla aynı yönde dizili bırakır; Böylece bir sürekli mıknatıslanma ortaya çıkar. Weiss, her elemanter momentin kristaldeki, diğer bütün momentlerin meydana getirdiği iç manyetik alan, veya moleküler alan etkisinde olduğunu kabul etmiştir. Buna göre, her lokalize yönelme bir lokalize manyetizasyon meydana getirir. Bu da komşu momentlerle etkileşen bir alan oluşturur.

Manyetizasyon arttıkça alanın şiddeti de artar ve olay bütün domen mıknatıslanıncaya kadar hızla devam eder.

Weiss, iç alanın manyetizasyonla doğru orantılı,

yani,

$$\vec{B}_{iç} = \lambda \vec{M} \qquad (1)$$

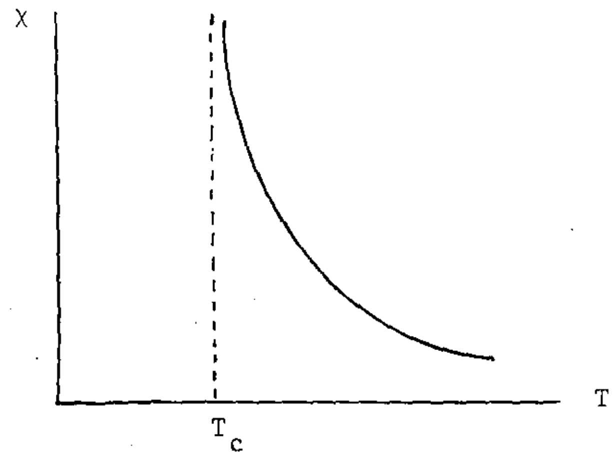
olduğunu kabul etmiştir. Buradaki λ moleküler alan katsayısıdır. Ferromanyetler için manyetik alan başına manyetizasyon olarak bilinen χ manyetik alınganlığı,

$$\chi = \frac{C}{T-T_c} \qquad (2)$$

eşitliği ile verilir. Burada $T_c = \lambda C$ ferromanyetik Curie sıcaklığı, C ise Curie sabitidir.

(2) bağıntısı Curie-Weiss yasası olarak bilinir.

Manyetik alınganlık, Curie noktası yakınında sonsuza gider (Şekil-2)



Şekil 2. Manyetik alınganlığın sıcaklığa bağlılığı.

Yani Curie noktası üzerinde materyal paramanyetik fazdadır. Bir manyetik sistemde Hamiltonyen H,

$$H = -2J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \, \vec{S}_j \qquad (3)$$

şeklinde verilir ve Heisenberg Hamiltonyeni olarak bilinir. Burada J etkileşme sabitidir. $\vec{S}_i$ ve $\vec{S}_j$ ise i ve j atomlarının toplam spin vektörleridir.

J, ferromanyetlerde pozitif olduğu, halde antiferromanyetlerde negatif olmaktadır.

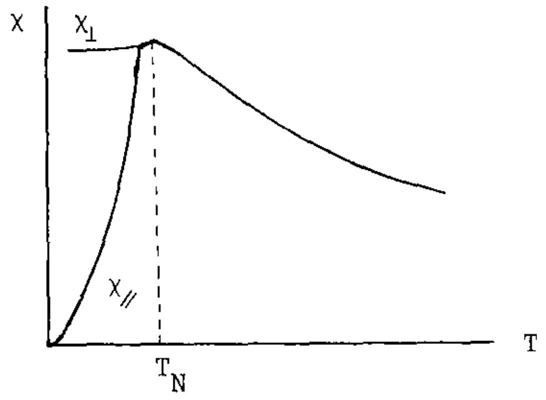
2- ANTİFERROMANYETİZMA

Antiferromanyetlerin spinleri birbirlerine zıt-paralel olduğundan, en yakın komşular arasında negatif etkileşme enerjisiyle karakterize edilirler. Ayrıca mikroskobik manyetizasyonları daima eşit ve zıt yönlü olduğundan hacim manyetizasyonu göstermezler.

Yani kritik sıcaklık altında (Neel sıcaklığı) net moment sıfırdır. Magnetik alınganlıkları

$$\chi = \frac{C}{T+T_N} \qquad (4)$$

şeklinde verilir. Antiferromanyetik bir materyalin, alt örgünlerinin magnetizasyon doğrultusuna dik olarak,dış alanın uygulanması halinde, $\chi_\perp$ ve alt örgü magnetizasyonuna paralel bir alan uygulanmasıyla,$\chi_{//}$ in incelenmesi ile elde edilen tipik davranışı, Şekil-3' de gösterilmiştir.



Şekil 3. Isısal alınganlık eğrisi.

Katıların, bir dış manyetik alana verdikleri cevaba göre bu şekilde sınıflandırmak mümkün olmaktadır. Katıların manyetik özelliklerini inceleyen ve kritik parametreler elde etmede kullanılan kümesel değişim yöntemi /2/ 1.Bölümde geniş şekilde yer almaktadır. Bunun yanında manyetik sistemler için faz geçişlerini açıklayan ve kritik parametreler bulan, Bragg-Williams /3/veBethe/4/ yaklaşımları bilinmektedir.

3- BRAGG WILLIAMS YAKLAŞIMI

Bragg-Williams (B-W) yaklaşımı, ferromanyetik-paramanyetik geçişler için Ising modelin /5/ bir basit durumudur. Ising modelin üstünlüğü, alt örgülerin kullanılmaya gerek duyulmamasıdır.

N spinli bir sistemde, (+) spinlerin sayısı $X_1 N$ ve (-) spinlerin sayısı $X_2 N$ olarak yazılır. Etkileşme enerjileri; (++) çifti veya (--) çifti için $-\varepsilon$ ve (+-) çifti için $+\varepsilon$ alınır.

(B-W) yaklaşımında sistemin F serbest enerjisi:

$$e^{-F/kT} = \underset{\{x_i\}}{\mathrm{Max}} \frac{N!}{(X_1N)!\ (X_2N)!} \exp\left[- E\,(x_1, x_2)\ /kT \right] \qquad (5)$$

dir. Burada sistemin $E(X_1,X_2)$ enerjisi, (X_1,X_2) parametreleri tarafından karakterize edilir.

$\exp\left[- E(X_1, X_2)\ /kT \right]$ Boltzman faktörü denge konumunda (X_1,X_2) ile belirlenen konumlardan birine orantılıdır. Boltzman faktörü, N örgü noktası üzerinde X_1N tane (+) spin ve X_2N tane (-) spinin oluşturduğu kombinasyonu ile çarpılmıştır.

Bragg-Williams yaklaşımında E (X_1,X_2) enerjisi,

$$E(X_1,X_2) = W\,N \sum_{i=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} \varepsilon_{ij}\, X_i X_j \qquad (6)$$

eşitliği ile verilir. Burada

$$\varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = -\varepsilon \quad \text{ve} \quad \varepsilon_{12} = \varepsilon_{21} = +\varepsilon \qquad (7)$$

olup, W örgünün koordinasyon sayısıdır. Yukarıdaki enerji ifadesi bir yaklaşımdır, çünkü yakın komşu (ij) çiftlerin sayısı genellikle X_iX_j' ye eşit değildir. Bunun yanında, dikkat edildiğinde denklem 5' deki kombinasyon faktörü tamdır. Sistemin enerjisi bir yaklaşımla elde edilmektedir. Bunun sonucu olarak B-W yaklaşımı ile bulunmuş olan kritik parametreler kesin çözümdenuzaktır.

4- BETHE YAKLAŞIMI

Bu yaklaşım, B-W yaklaşımında elde edilen enerji ifadesini ele alıp çıkarmıştır. Böylece, enerji ifadesi bu yol ile tam doğru olarak yazılmıştır. Bu amaçla herhangi yakın-komşu (i,j) çifti için bulunmuş olasılığı gösteren y_{ij} değişkeni tanımlanır. B-W yaklaşımı için denklem 6' da verilen enerji ifadesinin yerine,

$$E\{y_{ij}\} = wN \sum_{i=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} \varepsilon_{ij}\, y_{ij} \tag{7}$$

eşitliği yazılır. Bu enerji ifadesi kesin doğrudur. Denklem 5' deki serbest enerji yerine ise, yeni şekli ile,

$$e^{-F/kT} = \underset{\{y_{ij}\}}{\mathrm{Max}}\; \Omega\{y_{ij}\} \exp\left[- E\{y_{ij}\}/kT\right] \tag{8}$$

yazılır. Burada $\Omega\{y_{ij}\}$, wN yakın komşu bağları üzerinde $\{y_{ij}\}$ çiftlerinin dağılma olasılığıdır. $S\{y_{ij}\}$' nin uygun tanımıyla ağırlık faktörü,

$$\Omega\{y_{ij}\} = \exp\left[S\{y_{ij}\}/k\right] \tag{9}$$

olarak türetilir. $S\{y_{ij}\}$' ye entropi denir ve $\{y_{ij}\}$ değişken seti ile tanımlanır.

Denklem 8 ve 9' u kullanarak

$$e^{-F/kT} = \exp\left[- \mathrm{Min}\, F\{y_{ij}\}/kT\right] \tag{10}$$

eşitliği bulunur. Burada,

$$F\{y_{ij}\} = E\{y_{ij}\} - TS\{y_{ij}\} \tag{11}$$

dir. Sistemin serbest enerjisi $F\{y_{ij}\}$, yine $\{y_{ij}\}$ değişken setine bağlıdır.

$\{y_{ij}\}$ çift değişkenleri serbest enerji formülünde kullanılarak, $\Omega\{y_{ij}\}$ ağırlık faktörü,

$$\Omega\{y_{ij}\}=\frac{\left[\prod_i (X_iN)!\right]^{2w-1}}{\left[\prod_i \prod_j (y_{ij}N)!\right]^{w} N!^{w-1}} \qquad (12)$$

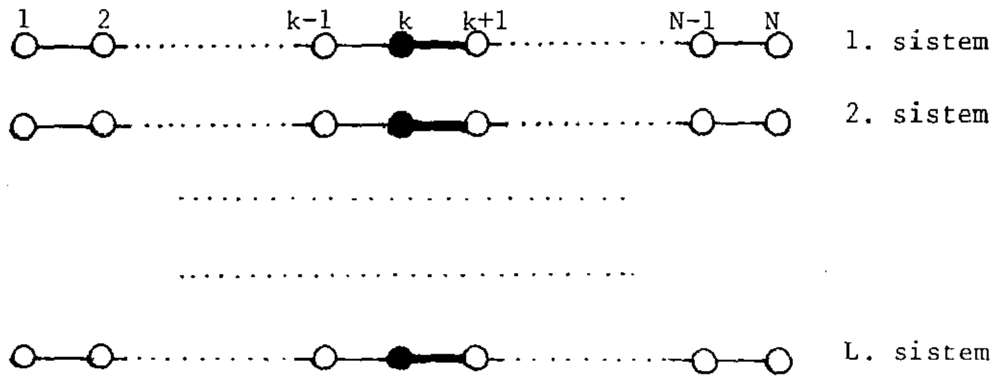
yazılabilir. Bu ifade lineer sistem için (w=1) kesin doğrudur fakat w>1 için yaklaşımdır. Bethe yaklaşımında dikkat edildiğinde enerji ifadesi tam, fakat kambinasyon faktörü yaklaşımdır. Bu yaklaşım (B-w) yaklaşımından daha iyi sonuçlar vermesine rağmen güvenilir değildir.

Kikuchi'nin Kümesel Değişim Yöntemi bu iki yaklaşımı da kapsamaktadır. Geniş bir yorumlamayla (KD) yöntemine bakıldığında çok daha etkin ve verimli olduğu anlaşılır.

II- BÖLÜM 1.

1 - TEK BOYUTLU KÜMESEL DEĞİŞİM YÖNTEMİ

Kümesel Değişim Yöntemini açıklamak için, tek boyutlu antiferromanyetik Ising modelini örnek olarak sunmak yararlı olacaktır. Antiferromanyetik Ising modeli, sistemin spinlerinin zıt yönde birbirine paralel ve spinler arasındaki etkileşme enerjisinin negatif olmasıdır. Herbiri N örgü noktasından meydana gelmiş sistem bir topluluk oluştursun. L tane sistemden meydana gelmiş doğrusal örgü noktaları topluluğu Şekil 1-1'de verilmiştir.



Şekil 1-1. Doğrusal örgü noktaları topluluğu.

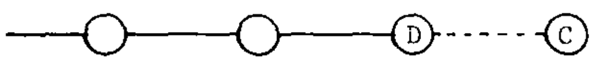
Her sistemdeki k. örgü noktaları siyah dairelerle, yine her sistemin k-k+1 bağı koyu bir çizgi ile gösterilmiştir. (++), (+ -), (- +) ve (--) spin bağlarının olma olasılığı y_1, y_2, y_3, ve y_4 gösterimleriyle Tablo 1-1'de verilmiştir.

Tablo 1-1. Spin ve bağların şekillenme olasılığı.

BAĞ	y_i	ε_i	SPİN	OLASILIK
(+) A —— B (+)	y_1	$-\varepsilon$	A (+)	$X_{1A}=y_1+y_2$
(+) A —— B (-)	y_2	ε	A (-)	$X_{2A}=y_3+y_4$
(-) A —— B (+)	y_3	ε	B (+)	$X_{1B}=y_1+y_3$
(-) A —— B (-)	y_4	$-\varepsilon$	B (-)	$X_{2B}=y_2+y_4$

Tablodaki X_{1A} , X_{1B} A ve B spinlerinin (+) olasılığını ve X_{2A}, X_{2B} ise, A ve B spinlerinin (-) olasılıklarını göstermektedir. (++), (--) bağlarında etkileşme enerjileri $-\varepsilon$ ve (+-), (-+) bağlarının spinleri arasındaki etkileşme enerjisi ise $+\varepsilon$ olarak alınmıştır.

N tane örgü noktasından oluşan L sistem topluluğunu elde etmek için Şekil 1-2' de verilen, topluluğun bir ara sistemini oluşturalım.



Şekil 1-2. Topluluğun bir ara sistemi.

Bu ara sistemde, D-örgü noktasının sol tarafındaki bütün bağların oluştuğunu varsayıp, sisteme bir C-örgü noktasını ekleyelim. Problem, C-örgü noktasına yerleştirilecek spinin y_1, y_2, y_3 ve y_4 olasılıklarının verilen değerlerini sağlamak üzere kaç şekilde konulabileceğidir.

D-örgü noktaları topluluğunda (+) spinlerin sayısı $(X_{1A}+X_{1B}).L$ ve (-) spinlerin sayısı $(X_{2A}+X_{2B}).L$ dir.

D noktasında (+) spinlerin olduğu durumda y_1 ve y_2 olasılıklarıyla (++), (+-) şekillenimleri oluşur.

Bu işlemi yapma olasılığı g_1 ile gösterilirse,

$$g_1 = \frac{(X_{1A}L)!\ (X_{1B}L)!}{(y_1L)!\ \ (y_2L)!} \tag{1-1}$$

olur. D-örgü noktasında (-) spinlerin olduğu durumda, y_3, y_4 olasılıklarıyla (-+) ve (--) şekillenimleri oluşur. Bu işlemi yapma olasılığı g_2

$$g_2 = \frac{(X_{2A}L)!\ (X_{2B}L)!}{(y_3L)!\ \ (y_4L)!} \tag{1-2}$$

olarak bulunur. C-örgü noktası üzerine bir spini yerleştirmek için toplam olasılık W_L , g_1 ve g_2' nin çarpımı olup,

$$W_L = \frac{(X_{1A}L)!\ (X_{2A}L)!\ (X_{1B}L)!\ (X_{2B}L)!}{(y_1L)!\ (y_2L)!\ (y_3L)!\ (y_4L)!} \tag{1-3}$$

eşitliği ile verilir.

Bütün L-sistem topluluğu için aynı işlem N defa tekrarlandığında, $(W_L)^N$ elde edilir. Burada, W_L' ye ağırlık faktörü denir ve onun logaritmasının k boltzman faktörü ile çarpımı entropiyi verir.

$$S = k\ln\,(W_L)^N \tag{1-4}$$

stirling yaklaşımı kullanılarak,

$$S = kN\left[\sum_{i=1}^{2} (X_{iA}\ln X_{iA} - X_{iA}) + \sum_{i=1}^{2} (X_{iB}\ln X_{iB} - X_{iB}) - \sum_{i=1}^{4} (y_i\ln y_i - y_i)\right] \tag{1-5}$$

olarak yazılır. Sistemin toplam enerjisi E,

$$E= W_c \, N \varepsilon \, (-y_1+y_2+y_3-y_4) \qquad (1-6)$$

dir. Burada W_c koordinasyon sayısıdır. Entropi ve enerji denklemlerinden sistemin serbest enerjisi F= E- TS olduğundan, birim örgü başına serbest enerji Φ,

$$\Phi = \sum_{i=1}^{4} \varepsilon_i y_i - kT \Big[\sum_{i=1}^{2} (X_{iA} \ln X_{iA} - X_{iA}) + \sum_{i=1}^{2} (X_{iB} \ln X_{iB} - X_{iB})$$

$$- \sum_{i=1}^{4} (y_i \ln y_i - y_i) \Big] + \lambda \Big[(1- \sum_{i=1}^{4} y_i) \Big] \qquad (1-7)$$

olarak elde edilir. Burada λ normalizasyon koşulu için konulmuş lagrange katsayısıdır.

Sistemin denge konumunda durum denklemleri, serbest enerjinin seçilen y_i değişkenlerine göre türevi alınıp sıfıra eşitlenerek bulunur.

Bu işlem yapıldığında, kendi içinde uyumlu (Self Consistent) 4 denklem aşağıda verildiği gibi bulunur.

$$\begin{aligned} y_1 &= \exp(\beta\varepsilon) \exp(\beta\lambda) (X_{1A} X_{1B}) \\ y_2 &= \exp-(\beta\varepsilon) \exp(\beta\lambda) (X_{1A} X_{2B}) \\ y_3 &= \exp-(\beta\varepsilon) \exp(\beta\lambda) (X_{2A} X_{1B}) \\ y_4 &= \exp(\beta\varepsilon) \exp(\beta\lambda) (X_{2A} X_{2B}) \end{aligned} \qquad (1-8)$$

Burada $\beta = \dfrac{1}{kT}$ dir. Neel sıcaklığını elde etmek için serbest enerjinin y_i değişkenlerine göre ikinci türevi olan Hessien oluşturulur/6/.

$$
A_{ij} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial y_i \partial y_j} = \begin{pmatrix} y_1^{-1}-X_{1A}^{-1}-X_{1B}^{-1} & -X_{1A}^{-1} & -X_{1B}^{-1} & 0 \\ -X_{1A}^{-1} & y_2^{-1}-X_{1A}^{-1}-X_{2B}^{-1} & 0 & -X_{2B}^{-1} \\ -X_{1B}^{-1} & 0 & y_3^{-1}-X_{2A}^{-1}-X_{1B}^{-1} & -X_{2A}^{-1} \\ 0 & -X_{2B}^{-1} & -X_{2A}^{-1} & y_4^{-1}-X_{2A}^{-1}-X_{2B}^{-1} \end{pmatrix} \qquad (1\text{-}9)
$$

Det (A_{ij})= o koşulunu sağlayan T_N Neel sıcaklığı, istenen kritik sıcaklıktır. Bu determinantı çözmek için, X_{1A}, X_{2A}, X_{1B} ve X_{2B} değişkenlerinin birbirine eşit olduğu düzensiz (disorder) durumu dikkate alalım. Matematiksel olarak,

$$
\begin{aligned}
X_{1A} &= X_{2A} = \frac{1}{2} \\
X_{1B} &= X_{2B} = \frac{1}{2}
\end{aligned} \qquad (1\text{-}10)
$$

dir.

H= exp ($2\beta\varepsilon$) olarak tanımlanırsa y_i değişkenlerini H cinsinden ifade etmek gerekir. Tablo-1' den,

$$
\begin{aligned}
X_{1A} &= y_1+y_2 \\
X_{2A} &= y_3+y_4 \\
X_{1B} &= y_1+y_3 \\
X_{2B} &= y_2+y_4
\end{aligned} \qquad (1\text{-}11)
$$

yazılır. Düzensiz durum için denklem (1.10) yardımı ile,

$$y_1+y_2-y_3-y_4 = 0$$

$$y_1-y_2+y_3-y_4 = 0 \qquad (1-12)$$

ve

$$y_1 = y_4$$

$$y_2 = y_3 \qquad (1-12)$$

eşitlikleri bulunur. y_1 ve y_2 bağımsız değişken, y_3 ve y_4 bağımlı değişken olarak seçilirse, serbest enerji ϕ' nin y_1 ve y_2 bağımsız değişkenlerine göre türevleri alındığında,

$$\frac{y_1}{y_4} = \frac{X_{1A} \; X_{1B}}{X_{2A} \; X_{2B}} \qquad (1-14)$$

ve

$$\exp(4\beta\varepsilon) = \frac{(X_{1A} \; X_{1B}) \; y_4^2}{(X_{2A} \; X_{2B}) \; y_2^2} \qquad (1-15)$$

elde edilir.

Bu iki denklemden,

$$y_1 = y_2 \; \exp \; (2\beta\varepsilon) \qquad (1-16)$$

veya

$$y_1 = \left(\frac{1}{2} - y_1 \right) \exp \; (\; 2\beta\varepsilon) \qquad (1-17)$$

bulunur.

Normalizasyon koşulu ($\sum_{i=1}^{4} y_i = 1$) ve

$H = \exp(2\beta\varepsilon)$ eşitliğinden,

$$y_1 = \frac{H}{2(1+H)} \quad , \quad y_2 = \frac{1}{2(H+1)} \tag{1-18}$$

elde edilir. y_1 ve y_2 değerleri, A_{ij} determinantında yerine konulduğunda,

$$A_{ij} = \begin{pmatrix} \frac{2(1-H)}{H} & -2 & -2 & 0 \\ -2 & 2(H-1) & 0 & -2 \\ -2 & 0 & 2(H-1) & -2 \\ 0 & -2 & -2 & \frac{2(1-H)}{H} \end{pmatrix} \tag{1-19}$$

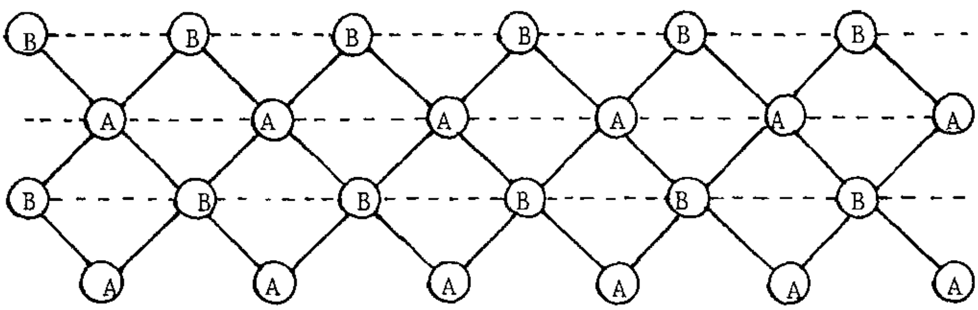
elde edilir. Det $(A_{ij}) = 0$ yapıldığında, determinantı sağlayan kök ($H^2=-1$) negatif olduğundan bir fiziksel anlama sahip değildir. Bu sonuç tek boyutlu Ising modelin kritik sıcaklık vermemesidir/7/.

III - BÖLÜM 2

1- KÜMESEL DEĞİŞİM YÖNTEMİ İLE İKİ BOYUTLU AÇI İÇİN NEEL SICAKLIĞININ BULUNMASI

İki boyutlu Ising modeli, açı örgü noktalarında $\mp$ spinleri bulunan, $H = -J \sum_{<ij>} \vec{S}_i \vec{S}_j - h \sum_i \vec{S}_i$ enerjili bir sistem tanımlar. Bu sistem J>0 için ferromanyetik, J<0 için antiferromanyetiktir. Bu çalışmada h dış manyetik alanın sıfır olduğu J<0 durumu ele alınmaktadır.

Modelimizde (Şekil 2-1.), (ABB) açı örgüsü A ve B gibi farklı iki atomdan maydana gelmiştir.

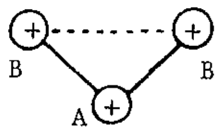
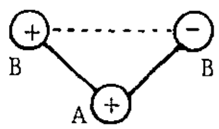
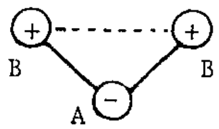
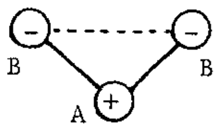
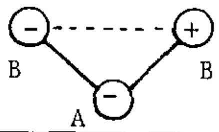
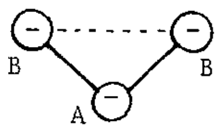


Şekil 2-1. Açı örgü.

İki boyutlu açı, temel küme olarak düşünüldüğünde, $2^3 = 8$ tane spin şekillenimi vardır. (Tablo 2-1).

Tabloda simetriden dolayı 6 tane spin şekillenimi görülmektedir.

Tablo 2-1. İki boyutlu açının şekillenim olasılıkları.

AÇI	Z_i	γ_i †
	Z_1	1
	Z_2	2
	Z_3	1
	Z_4	1
	Z_5	2
	Z_6	1

† γ_i = *Aynı olasılığa sahip şekillenim sayısı.*

Temel kümenin alt kümeleri A ve B spinleri, (AB) ve (BB) çiftlerinden oluşmaktadır. A ve B spinlerinin iki şekillenimi (+) ve (-) dir. Tablo 2-2'de (AB) çifti için $y_1(++)$, $y_2(+-)$, $y_3(-+)$ ve $y_4(--)$ olmak üzere dört spin şekillenimi verilmiştir.

Tablo 2-2. Çiftlerin ve spinlerin şekillenim olasılıkları ve aralarındaki bağıntılar.

ÇİFT	y_i	ε_i	SPİN	OLASILIK
A(+)———(+)B	y_1	$-\varepsilon$	A (+)	$X_{1A}=y_1+y_2$
A(+)———(−)B	y_2	ε	A (−)	$X_{2A}=y_3+y_4$
A(−)———(+)B	y_3	ε	B (+)	$X_{1B}=y_1+y_3$
A(−)———(−)B	y_4	$-\varepsilon$	B (−)	$X_{2B}=y_2+y_4$

Tablodaki ε değerleri aynı yönlü spinler için negatif, zıt yönlüler için pozitif seçilmiştir. (BB) çifti ise $W_1(++)$, $2W_2(+-)$ ve $W_3(--)$ olmak üzere üç spin şekillenimine sahiptir. (Tablo 2-3.)

Tablo 2-3. Aynı atomlu çiftlerin şekillenim olasılıkları.

ÇİFT	W_i	β_i †
B (+)- - - -(+) B	W_1	1
B (+)- - - -(−) B	W_2	2
B (−)- - - -(−) B	W_3	1

† β_i = *Aynı olasılığa sahip şekillenim sayısı.*

Alt kümeler temel kümelerin çizgisel birleşimi olarak,

$$y_1 = Z_1 + Z_2$$

$$y_2 = Z_2 + Z_4$$

$$y_3 = Z_3 + Z_5$$

$$y_4 = Z_5 + Z_6$$

$$W_1 = Z_1 + Z_3$$

$$W_2 = Z_2 + Z_5 \qquad (2\text{-}1)$$

$$W_3 = Z_4 + Z_6$$

$$X_{1A} = y_1 + y_2 = Z_1 + 2Z_2 + Z_4$$

$$X_{2A} = y_3 + y_4 = Z_3 + 2Z_5 + Z_6$$

$$X_{1B} = y_1 + y_3 = Z_1 + Z_2 + Z_3 + Z_5$$

$$X_{2B} = y_2 + y_4 = Z_2 + Z_4 + Z_5 + Z_6$$

yazılır. Alt ve temel kümelerin,

$$\sum_{i=1}^{6} \gamma_i Z_i = 1, \quad \sum_{i=1}^{4} y_i = 1, \quad \sum_{i=1}^{3} \beta_i W_i = 1, \quad \sum_{i=1}^{2} X_{iA} = 1, \quad \sum_{i=1}^{2} X_{iB} = 1 \qquad (2\text{-}2)$$

Normalizasyon koşulunu sağlaması gerekir.

Şimdi genellikle Ω notasyonu ile gösterilen yeni bir kavram tanımlayacağız. Ω temel ve alt kümelerin bir fonksiyonu olup, ağırlık faktörü olarak bilinir.
Aldığımız model için,

$$\Omega = \frac{[A - B]^4\,[B \cdots B]^2}{\left[\begin{smallmatrix} B \cdots B \\ A \end{smallmatrix}\right]^4 [A]\,[B]} = \frac{(y_i)^4!\,(w_i)^2!}{(Z_i)^4!\,(X_{iA})!\,(X_{iB})!} \tag{2-3}$$

şeklinde verilir. Ağırlık faktörünün logaritmasının k_B boltzman faktörü ile çarpımı, $S= k_B \ln\Omega$ entropiyi verir. Stirling yaklaşımı ile,

$$S= k_B N \Big[\; 4 \sum_{i=1}^{4} (y_i \ln y_i - y_i) + 2 \sum_{i=1}^{3} \beta_i\, (w_i \ln w_i - w_i) - 4 \sum_{i=1}^{6} \gamma_i (Z_i \ln Z_i - Z_i)$$

$$- \sum_{i=1}^{2} (X_{iA} \ln X_{iA}) - \sum_{i=1}^{2} (X_{iB} \ln X_{iB} - X_{iB}) \Big] \tag{2-4}$$

bulunur. Sistemin toplam enerjisi $E = 4N \sum_{i=1}^{4} \varepsilon_i y_i$

ve birim spin başına serbest enerjisi $\phi = \dfrac{F}{N} = \dfrac{E-TS}{N}$

olmak üzere,

$$\beta\phi = 4\beta\varepsilon(-Z_1+Z_3+Z_4-Z_6) - 4 \sum_{i=1}^{4} (y_i \ln y_i - y_i) - 2 \sum_{i=1}^{3} \beta_i (w_i \ln w_i - w_i)$$

$$+ 4 \sum_{i=1}^{6} \gamma_i (Z_i \ln Z_i - Z_i) + \sum_{i=1}^{2} (X_{iA} \ln X_{iA} - X_{iA}) + \sum_{i=1}^{2} (X_{iB} \ln X_{iB} - X_{iB}) + \mu\beta\Big(1 - \sum_{i=1}^{6} \gamma_i Z_i\Big) \tag{2-5}$$

elde edilir. Burada $\beta = \dfrac{1}{kT}$, $\mu\beta$ lagrange katsayısıdır ve normalizasyon koşulu için konulmuştur.

Serbest enerjinin, denge durumunda minimum olma koşulu ile "kendi içinde uyumlu" altı denklem elde edilir.

$$Z_1 q = e^{\beta\varepsilon} y_1 w_1^{1/2} (X_{1A} X_{1B})^{-1/4}$$

$$Z_2 q = (y_1 y_2)^{1/2} w_2^{1/2} (X_{1A})^{-1/4} (X_{1B} X_{2B})^{-1/8}$$

$$Z_3 q = e^{-\beta\varepsilon} y_3 w_1^{1/2} (X_{2A} X_{1B})^{-1/4}$$

$$Z_4 q = e^{-\beta\varepsilon} y_2 w_3^{1/2} (X_{1A} X_{2B})^{-1/4} \qquad (2\text{-}6)$$

$$Z_5 q = (y_3 y_4)^{1/2} w_2^{1/2} (X_{2A})^{-1/4} (X_{1B} X_{2B})^{-1/8}$$

$$Z_6 q = e^{\beta\varepsilon} y_4 w_3^{1/2} (X_{2A} X_{2B})^{-1/4}$$

Burada $q = e^{-\mu\beta/4}$ dir. Bu denklem takımı bütün X' lerin $\frac{1}{2}$ değerine sahip olduğu" düzensizlik" durumunda çözülecektir.

$$X_{1A} = y_1 + y_2 = \frac{1}{2}$$

$$X_{2A} = y_3 + y_4 = \frac{1}{2}$$

$$X_{1B} = y_1 + y_3 = \frac{1}{2} \qquad (2\text{-}7)$$

$$X_{2B} = y_2 + y_4 = \frac{1}{2}$$

Bu denklemlerden,

$$y_1 + y_2 - y_3 - y_4 = 0$$

$$y_1 + y_3 - y_2 - y_4 = 0 \qquad (2\text{-}8)$$

eşitlikleri bulunur. Denklem (2-8)' in çözümü

$$y_1 = y_4$$
$$y_2 = y_3 \qquad (2\text{-}9)$$

eşitliklerini verir. Denklem (2-6) takımının çözümü ile temel değişkenlerimizi enerjinin bir fonksiyonu olarak elde ederiz.

$$y_1 = Z_1 + Z_2 = \frac{1}{Q}\left[Ey_1 (w_1)^{1/2} + (y_1 y_2)^{1/2} (w_2)^{1/2} \right]$$

$$y_2 = Z_2 + Z_4 = \frac{1}{Q}\left[(y_1 y_2)^{1/2} (w_2)^{1/2} + E^{-1} y_2 (w_3)^{1/2} \right]$$

$$w_1 = Z_1 + Z_3 = \frac{1}{Q}\left[Ey_1 (w_1)^{1/2} + E^{-1} y_3 (w_1)^{1/2} \right] \qquad (2\text{-}10)$$

$$w_2 = Z_2 + Z_5 = \frac{1}{Q}\left[(y_1 y_2)^{1/2} (w_2)^{1/2} + (y_3 y_4)^{1/2} (w_2)^{1/2} \right]$$

Burada $Q = q.2^{-1/2}$ ve $E = e^{\beta\varepsilon}$ dir.

y_1 ve y_2' yi denklem 2-10' dan çözersek,

$$y_1 = \frac{Q^2 (3E^2 - 1)}{8 E^2} \qquad (2\text{-}11)$$

$$y_2 = \frac{Q^2 E^2 (3 - E^2)}{8 E^2}$$

bulunur. Normalizasyon koşulu $2y_1 + 2y_2 = 1$ den

Buradaki M matrisi,

$$
M = \begin{pmatrix}
Z_1^{-1}-y_1^{-1}-(2w_1)^{-1}+1 & -y_1^{-1}+1 & -(2w_1)^{-1} \\[2ex]
-(2y_1)^{-1}+\frac{1}{2} & Z_2^{-1}-(2y_1)^{-1}-(2y_2)^{-1}+1 & (2y_2)^{-1}-\frac{1}{2} \\[2ex]
-(2w_1)^{-1} & y_2^{-1}-1 & Z_3^{-1}-y_2^{-1}-(2w_1)^{-1}+1
\end{pmatrix} \qquad (2\text{-}15)
$$

dir. Denk. (2-13)' deki değerleri, M matrisinde yerine koyarsak tek değişkene bağlı olarak,

$$
M = \begin{pmatrix}
\dfrac{2H^4-7H^3-13H^2+51H-9}{3H^3+5H^2+H-1} & \dfrac{2H^2-9H+1}{3H-1} & \dfrac{2H^2-9H+1}{6H-2} \\[3ex]
\dfrac{2H^2-9H+1}{6H-2} & \dfrac{-H^4+H^3+20H^2+H-1}{-3H^3+10H^2-3H} & \dfrac{-H^2+9H-2}{-2H^2+6H} \\[3ex]
\dfrac{2H^2-12H+2}{H^2+2H+1} & \dfrac{-H^2+9H-2}{-H^2+3H} & \dfrac{-9H^4+51H^3-13H^2-7H+2}{-H^4+H^3+5H^2+3H}
\end{pmatrix} \qquad (2\text{-}16)
$$

elde ederiz. Det. (M)' yi sıfır yapan kök,

$$H=\frac{5+\sqrt{17}}{4} = 2{,}2807764$$

olarak bulunur. (Ek: Bilgisayar çözümlemesi).

$$H = \exp(2\beta\varepsilon) = 2{,}2807764$$

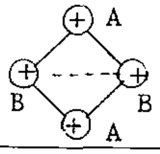
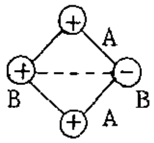
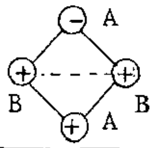
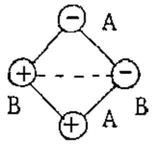
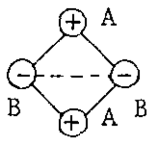
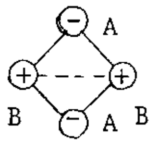
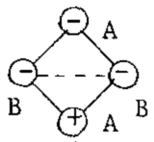
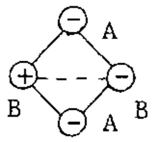
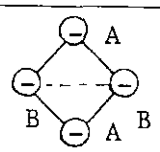
ve $k\,T_k = 2{,}4256657$

elde edilir. Bu ise iki boyutlu ferromanyetik sistemler için bulunan Curie sıcaklığıdır /9/.

Şekil 2-1' de verilen açı örgüsü, kare şekillenimi oluşturmaktadır.

Yani iki boyutlu kare ve açı sistemleri için aynı sonucu bulmamız gerekir. Farklı iki atomdan meydana gelmiş kare örgü şekillenim olasılıkları Tablo 2-4' de gösterilmiştir.

Tablo 2-4. Kare örgünün şekillenim olasılıkları.

Şekillenim	U_i	γ_i
	u_1	1
	u_2	2
	u_3	2
	u_4	4
	u_5	1
	u_6	1
	u_7	2
	u_8	2
	u_9	1

Tablo 2-1' de verilen açı örgünün temel ve alt kümeleri; kare örgü cinsinden,

$$Z_1 = u_1 + u_3$$

$$Z_2 = u_2 + u_4$$

$$Z_3 = u_3 + u_6$$

$$Z_4 = u_5 + u_7$$

$$Z_5 = u_4 + u_8 \qquad (2\text{-}17)$$

$$Z_6 = u_7 + u_9$$

$$y_1 = Z_1 + Z_2 = u_1 + u_2 + u_3 + u_4$$

$$y_2 = Z_2 + Z_4 = u_2 + u_4 + u_5 + u_7$$

$$y_3 = Z_3 + Z_5 = u_3 + u_4 + u_6 + u_8$$

$$y_4 = Z_5 + Z_6 = u_4 + u_7 + u_8 + u_9$$

$$w_1 = Z_1 + Z_3 = u_1 + 2u_3 + u_6$$

$$w_2 = Z_2 + Z_5 = u_2 + 2u_4 + u_8$$

$$w_3 = Z_4 + Z_6 = u_5 + 2u_7 + u_9$$

olarak yazılır. Kare örgünün, temel şekillenim olasılıkları düzensizlik (disorder) durumunda, $H = e^{2\beta\varepsilon}$ nun fonksiyonu olarak,

$$u_1 = u_9 = \frac{(3H-1)^2}{16\Delta}$$

$$u_2 = u_3 = u_4 = u_7 = u_8 = \frac{(3H-1)(3-H)}{16\Delta} \qquad (2\text{-}18)$$

$$u_5 = u_6 = \frac{(3-H)^2}{16\Delta}$$

eşitlikleriyle verilir /9/. Bu sonuçları denk. 2-17' de yerine yazılırsa, denklem 2-13 eşitlikleri tekrar elde edilir.

Böylece, kare örgünün temel kümeleri cinsinden açı örgü için bulunan sonuçların geçerli olduğu görülür. Ayrıca bu çalışmada elde edilen kritik sıcaklığın iki boyutlu kare örgü için bulunan değer ile aynı olması, sonucun doğruluğunun bir kanıtıdır. Değişik yaklaşım yöntemlerinin Ising modellere uygulanmasıyla elde edilen kritik parametreler Tablo 2-5' de verilmiştir /10/.

Tablo 2-5 çeşitli yaklaşımlar için Ising modelin kritik parametreleri.

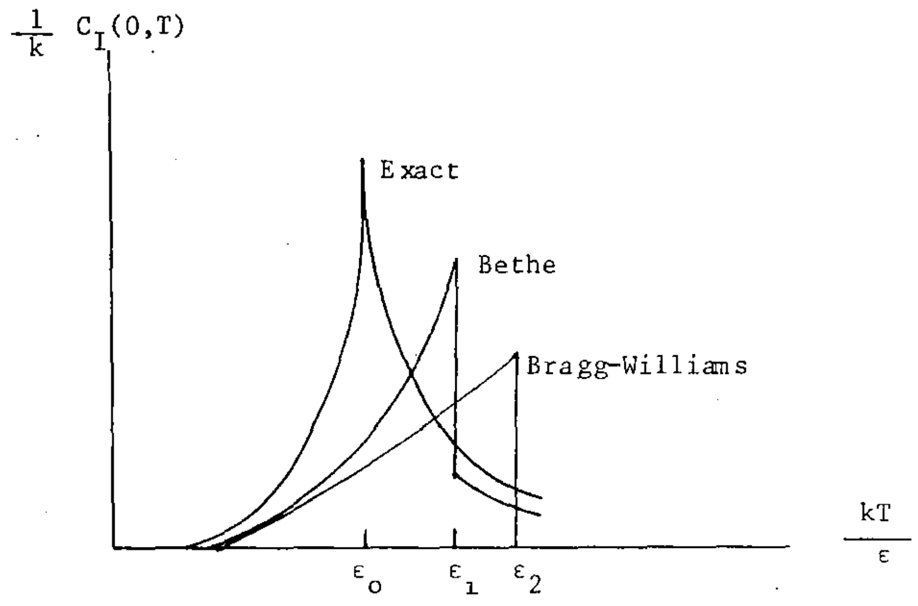
	Kare Z=4		Üçgen Z=6		Basit kübik Z= 8	
Yaklaşım	β_c	$\frac{RT_c}{E_c}$	β_c	$\frac{RT_c}{E_c}$	β_c	$\frac{RT_c}{E_c}$
Bragg-Williams	0.607	2.00	0.717	2.00	0.717	2.00
Bethe (1.)	0.500	1.44	0.667	1.65	0.667	1.65
Bethe (2.)	-	-	-	-	0.656	1.58
Kikuchi	0.439	1.21	0.600	1.30	0.646	1.53
Exact	0.414	1.135	0.578	1.214	-	-

$\beta_c = \exp(-V/kT_c)$

E_c = Şekillenim enerjisindeki toplam değişme = NzV/4

Tabloda görüldüğü gibi, Bragg-Williams ve Bethe yaklaşım yöntemleri kullanılarak bulunmuş kritik parametreler, kesin çözümden çok sapmaktadır. Bu ise, ağırlık faktörü ve enerjinin belirlenmesindeki hatalardan meydana gelmektedir. Bethe 1. ve Bethe 2. yaklaşımlarının verdiği sonuçlar bunun açık kanıtıdır.

İki-boyutlu Ising modelin ısı sığası için, Bragg-Williams ve Bethe-Peierls yöntemleri kullanılarak elde edilmiş olan eğriler, Şekil 2-2' de görülmektedir/11/.



Şekil 2-2. İki-boyutlu Ising modelin ısı sığası.

Şekilde, $\varepsilon_o = \dfrac{1}{2\,\mathrm{Sinh}^{-1} 1} = 2.27$, $\varepsilon_1 = \dfrac{2}{\log 2} = 2.88$ ve

$\varepsilon_2 = 4$ değerleriyle belirlenmiştir. Buna göre bu iki yöntem kesin çözümden uzak ve hatalı sonuçlar verirler.

Kikuchi' nin kümesel değişim yöntemi yüksek boyutlu kümeleri içerdiğinden, yukarıdaki yaklaşımlar bu yöntemin özel durumları olarak düşünülebilir. Kümesel Değişim yöntemi kesin çözüme yakın, iyi sonuçlar vermektedir.

Bu çalışmada bulunan, H= 2.2807764 kritik parametresinden, Tablo 2-4' de verilen $\beta_c = \exp(-V/kT_c)$ parametresini elde etmek istersek, $\beta_c = 0.438$ bulunur. Bu değer Kikuchi' nin kare örgü için bulduğu kritik değerin aynısıdır. Bu da, bu çalışmada elde edilen sonucun ne kadar güvenilir olduğunu ortaya koymaktadır.

ve Kikuchi' nin iki boyutlu kare için bulduğu değerin ayni olduğu gözlenmiştir. Kikuchi' nin kümesel değişim yönteminin iki boyutlu açı Ising-modeline uygulanmasıyla elde edilen değer, Onsager' in kesin çözümünden % 5 lik bir sapma göstermiştir/12/. Bu sapma, diğer yaklaşımların verdiği sonuçlar incelendiğinde, kesin çözüme en yakın bir değer olduğu görülür.

KAYNAKLAR

1- KITTEL, C., Introduction to solid state Physics, New York, John Wiley and sons Inc., 529, 1971.

2- KIKUCHI, R.,Physical Review, 81,988,1951.

3- BRAGG,W.L., and WILLIAMS,E.J., Proc.Roy.Soc. A 145,699,1934.

4- BETHE, H.A.,Proc.Roy.Soc., A 150,552,1935.

5- HUANG, K., Statistical Mechanics, New York, John Wiley and sons Inc., 330,1963.

6- MIEJER, P.H.E., STAM, W.C., Physica, 90A,77,1978.

7- LIFSHITZ, E.M., PITAEVSKII., L.P., Statistical Physics,Oxford, Pergamon Press Ltd., 537,1980.

8- RAO, C.N.R., RAO, K.J., Phase Transitions in solids, New York, Mc Graw-Hill, Inc., 179,1978.

9- EKMEKÇİ,. S., Kümesel Değişim yöntemi ile iki boyutlu kare için Curie ve Neel sıcaklıklarının bulunması., Doğa Dergisi, Seri-A, Cilt-7, Sayı-3,398,402,1983.

10- SMOLUCHOWSKI, R., in "Hand Book of Physics", ed.E.U. Condon and Hugh-Odishaw, McGraw-Hill, New York, 1958.

11- HUANG, K., Statistical Mechanics, New York, JOhn Wiley and sons Inc., 372,1972.

12- VDOVICHENKO, N.V., Soviet Physics Jept, 21,350,1965.

```
      A(1,1)=(2.*X**4-7.*X**3-13.*X**2+51.*X-9.)/(3.*X**3+5.*X**2+X-
      A(1,2)=(2*X**2-9*X+1)/(3*X-1)
      A(1,3)=(2*X**2-12*X+2)/(X**2+2*X+1)
      A(2,1)=(2*X**2-9*X+1)/(6*X-2)
      A(2,2)=(-X**4+X**3+20*X**2+X-1)/(-3.*X**3+10*X**2-3*X)
      A(2,3)=(-X**2+9*X-2)/(-2.*X**2+6*X)
      A(3,1)=(2*X**2-12*X+2)/(X**2+2*X+1)
      A(3,2)=(-X**2+9*X-2)/(-X**2+3*X)
      A(3,3)=(-9.*X**4+51*X**3-13*X**2-7*X+2)/(-X**4+X**3+5*X**2+3*X
      ND=K
      CALL DET(ND,A,D)
      IF(MM.GT.1) GO TO 201
      IF(D)202,200,204
  202 JK=1
      GO TO 205
  204 JK=2
  205 DEL=1.0
      X=X+YYY
      GO TO 300
  201 GO TO(206,207),JK
C     DET NEGATIF
  206 IF(D)208,200,209
  208 X=X+YYY*DEL
      GO TO 300
  209 X=X-YYY*DEL
      DEL=0.100*DEL
      IF(DEL-.1E-6)200,200,211
  211 X=X+YYY*DEL
      GO TO 300
C     DET POZITIF
  207 IF(D)212,200,213
  212 X=X-YYY*DEL
      DEL=0.100* DEL
      IF(DEL-.1E-6)200,200,214
  214 X=X+YYY*DEL
      GO TO 300
  213 X=X+YYY*DEL
      GO TO 300
  200 H=X
      WRITE(6,80) H,D
   80 FORMAT(10X,'H=',F12.9,E18.10)
      IF(X.LE.0.0) GO TO 400
      X=X+YYY
      MM=0
      GO TO 300
  400 STOP
      END

C     DETERMINANT HESABI

      SUBROUTINE DET(N,A,D)
      DIMENSION B(9,9),A(9,9)
      D=1.00
    1 D=D*A(1,1)
      IF (N.EQ.1) GO TO 4
      DO 2 I=2,N
      DO 2 J=2,N
    2 B(I,J)=A(I,J)-A(I,1)*A(1,J)/A(1,1)
      N=N-1
      DO 3 I=1,N
      DO 3 J=1,N
    3 A(I,J)=B(I+1,J+1)
      GO TO 1
    4 RETURN
      END


      NO ERRORS DETECTED.  NUMBER OF CARDS = 70.
      COMPILATION TIME = 6 SECONDS ELAPSED,  0.93 SECONDS PROCESSIN
      DE STACK SIZE = 7 WORDS.  FILESIZE = 79 WORDS.  ESTIMATED COR
      TOTAL PROGRAM CODE = 228 WORDS.  ARRAY STORAGE = 162 WORDS.
      NUMBER OF PROGRAM SEGMENTS = 6.  NUMBER OF DISK SEGMENTS = 21
      PROGRAM CODE FILE = (AI0063)YUKSEL ON METU01.


         H= 2.280776407   .1563382597E-07
         H= 0.438447188  -.6130367209E-07
         H= 0.333333334   .7766343489E+09
         H= 0.219223595  -.3633196380E-08
         H= 0.171572876   .4861250047E-07
         H= 0.000000001  -.2182113455E+11
```