

Prof. Dr Mustafa KESKİN danışmanlığında **Salih AKBUDAK** tarafından hazırlanan “Alternatif Tabakalı Balpeteği Örgüsü Üzerinde Karma Spin-1 ve Spin-3/2 Sisteminin Dengeli Davranışı” adlı bu çalışma, jürimiz tarafından Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında **Yüksek Lisans** tezi olarak kabul edilmiştir.

06/01/2011

JÜRİ:

Başkan: Prof. Dr Sedat ÖZSOY

Üye: Prof. Dr. Mustafa KESKİN

Üye: Prof. Dr. Mehmet AKKURT

(Handwritten signatures of Sedat Özsoy, Mustafa Keskın, and Mehmet Akkurt)

ONAY,

Bu tezin kabulü, Enstitü Yönetim Kurulunun 25/01/2011 tarih ve 2011/03-06 sayılı kararı ile onaylanmıştır.

25/01/2011



Prof. Dr Necmettin MARAŞLI
Enstitü Müdürü

T.C.
ERCIYES ÜNİVERSİTESİ
BİLİMSEL ARAŞTIRMA PROJELERİ
KOORDİNASYON BİRİMİ

**KARMA SPİN-1 VE SPİN-3/2 İSİNG SİSTEMİNİN MANYETİK
ÖZELLİKLERİNİN ALTERNATİF BALPETEĞİ ÖRGÜSÜ
ÜZERİNDE İNCELENMESİ**

Proje No: FBY-10-3011

Yüksek Lisans Tez Projesi

SONUÇ RAPORU

Proje Yürütücüsü:
Prof. Dr. Mustafa KESKİN
Fen Fakültesi / Fizik Bölümü

Araştırmacı:
Araş. Gör. Salih AKBUDAK
Fen Bilimleri Enstitüsü / Fizik Bölümü

Mart 2011

KAYSERİ

TEŞEKKÜR

Tez çalışma konumu bana veren ve çalışmalarım süresince değerli fikir ve tecrübeleri ile bana her konuda destek olan değerli hocam Prof. Dr. Mustafa KESKİN'e içtenlikle teşekkür ederim. Ayrıca tez çalışmamı tamamlayabilmem için, gerekli izinleri veren ve her konuda desteğini esirgemeyen Adıyaman Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi dekanı Prof. Dr. Ali BAYRİ'ye ve Fizik Bölüm Başkanı Doç. Dr. Mustafa TOPAKSU'ya teşekkür ederim.

Çalışmamda değerli yorum ve tartışmalarından ötürü Arş Gör. Dr. Bayram DEVİREN, Arş. Gör. Mehmet BATI, Arş. Gör. Mehmet ERTAŞ ve Arş. Gör. Ersin KANTAR arkadaşlarıma teşekkür ederim.

Tez çalışması esnasında FBY-10-3011 nolu proje kapsamında sağladıkları destekten dolayı Erciyes Üniversitesi Araştırma Fonuna teşekkür ederim.

Hayatımın her safhasında maddi ve manevi yardımlarını ve desteklerini esirgemeyerek bulunduğum noktaya gelmemde önemli rolü olan aileme minnet ve şükranlarımı sunarım. Ayrıca çalışmalarım esnasında bana göstermiş olduğu sabır ve anlayıştan dolayı değerli eşim Nüket AKBUDAK'a teşekkür ederim.

ALTERNATİF TABAKALI BALPETEĞİ ÖRGÜSÜ ÜZERİNDE KARMA SPİN-1 VE SPİN-3/2 SİSTEMİNİN DENGELİ DAVRANIŞI

Salih AKBUDAK
Erciyes Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü
Yüksek Lisans Tezi, Ekim 2010
Tez Danışmanı: Prof. Dr. Mustafa KESKİN

ÖZET

Alternatif tabakalı balpeteği örgüsü üzerinde karma spin-1 ve spin-3/2 Ising sistemi korelasyonlu etkin alan teorisi ile incelendi. Spin-1 ve spin-3/2 atomları birbirini takip eden tabakalı balpeteği örgüsü üzerine yayılmıştır. Her bir tabakadaki komşu spinlerin ferromanyetik ve dikey olarak sıralı spinler ve komşu spinlerin bilinear değişim parametresinin işaretine bağlı olarak ferromanyetik veya antiferromanyetik olarak etkileştikleri var sayıldı. Sistemin taban durum faz diyagramı boyuna manyetik alan (h) ve tek-iyon potansiyeli veya kristal alan etkileşim (Δ) düzleminde elde edildi. Ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının ve toplam mıknatıslanmanın sıcaklığa bağlı değişimleri incelendi ve $h=0$ için ($\Delta/|J_3|$, $kT/|J_3|$) düzlemi yanısıra etkileşim parametreleri ve indirgenmiş sıcaklık düzlemlerinde faz diyagramları sunuldu. Telafi (compensation) davranışının türünü ve telafi noktalarını belirlemek için toplam mıknatıslanmanın sıcaklığa bağlılığı çalışıldı. Sistemde paramanyetik, nonmanyetik ve ferrimanyetik fazları içeren faz diyagramları elde edildi. Bununla birlikte, sistemde birinci ve ikinci dereceden faz geçişi meydana geldiğinden, sistem üçlü-kritik nokta da sergilemektedir. Ayrıca sistemin alınganlık ve iç enerjisi nümerik olarak incelendi.

Anahtar Kelimeler: Anahtar kelimeler: Karma spin-1 ve spin-3/2 Ising modeli; Etkin Alan Teorisi; Mıknatıslanma; Faz diyagramı; Telafi sıcaklıkları

EQUILIBRIUM BEHAVIOUR OF MIXED SPIN-1 AND SPIN-3/2 ISING SYSTEM ON A HONEYCOMB LATTICE WITH ALTERNATIVE LAYERS

Salih AKBUDAK

Erciyes University, Graduate School of Natural and Applied Sciences

M. Sc. Thesis, December 2010

Thesis Supervisor: Prof. Mustafa KESKİN

ABSTRACT

A mixed spin-1 and spin-3/2 Ising system with alternative layers of a honeycomb lattice in the absence of a longitudinal magnetic field is studied within the effective-field theory with correlations. Spin-1 atoms and spin-3/2 atoms are distributed in alternative layers of a honeycomb lattice. We consider that the nearest-neighbor spins of each layer are coupled ferromagnetically and the interaction between the vertically aligned spins and adjacent spins are coupled either ferromagnetically or antiferromagnetically depending on the sign of the bilinear exchange interactions. The ground state phase diagram of the model is obtained in the longitudinal magnetic field (h) and a single-ion potential or crystal-field interaction (Δ) plane. We investigate the thermal variations of the layer magnetizations, and present the phase diagrams in the $(\Delta/|J_3|, kT/|J_3|)$ plane as well as the interaction parameters and the reduced temperature planes for $h=0$. We also study the temperature dependence of the total magnetization to find the compensation temperatures, as well as to determine the type of compensation behavior. The phase diagrams contain the paramagnetic, nonmagnetic and ferrimagnetic phases. The system undergoes first- and second -order phase transitions; hence the system presents a tricritical point behavior. Moreover, the susceptibility and internal energy of the system are numerically examined in the absence of the applied longitudinal magnetic field.

Keywords: Mixed spin-1 and spin-3/2 Ising model; Effective-field theory; Magnetization; Phase diagram; Compensation temperature.

İÇİNDEKİLER

TEŞEKKÜR	iii
ÖZET	iv
ABSTRACT	v
İÇİNDEKİLER	vii
ŞEKİL LİSTESİ	vii
1. BÖLÜM	1
GİRİŞ	1
2. BÖLÜM	5
METOT VE MODELİN TANITIMI	5
2. 1. Modelin Tanıtımı	5
2.1.1. Spin-1/2 Ising Modelinin Etkin Alan Teorisi ile incelenmesi	7
2.1.1.1. Manyetik Alınganlık	14
2.1.1.2. İç Enerji	15
2.1.2. Karma Spin-1 ve Spin-3/2 Ising Modelinin Etkin Alan Teorisiyle İncelenmesi	15
2.1.2.1. Manyetik Alınganlık	20
2.1.2.2. İç Enerji	21
3. BÖLÜM	24
FAZ DİYAGRAMLARI VE BAZI TERMODİNAMİK NİCELİKLER	24
3.1. Taban Durum ($T=0$) Faz Diyagramı	24
3.2. Ortalama Altörgü Mıknatıslanmalarının ve Toplam Mıknatıslanmanın Termal Davranışı	25
3.3 Faz Diyagramları	27
3.3.1 (Δ/J_3 , kT/J_3) Düzleminde Faz Diyagramı	27
3.3.2 (kT/J_1 , J_3/J_1) Düzleminde Faz Diyagramı	29
3.3.3 (kT/J_3 , J_1/J_3) ve (kT/J_3 , J_2/J_3) Düzleminde Faz Diyagramları	30
3.3.4 (Δ , J_1), (Δ , J_2), (J_1 , T) ve (J_2 , T) Düzlemlerinde Faz Diyagramları	32
3.4. Termodinamik niceliklerin sıcaklıkla değişimi	34
3.4.1. Manyetik Alınganlık	34
3.4.2 İç Enerji	37
4. BÖLÜM	39
SONUÇ VE TARTIŞMA	39
KAYNAKLAR	41
ÖZGEÇMİŞ	49

ŞEKİL LİSTESİ

- Şekil 2.1. Spin-1 ve spin-3/2 parçacıklarının balpeteği örgüsü üzerinde alternative tabakalarının dizilimlerinin şematik gösterimi. J_1 ve J_2 aynı tabakalar üzerindeki komşu spinler arasındaki etkileşim sabitleri J_3 ise farklı (A ve B) tabakaları arasındaki etkileşim sabitidir. Boş daireler ($\circ$) $\sigma_i = 1$ spinlerini ve dolu daireler ($\bullet$) ise $S_m = 3/2$ spinlerini sembolize eder.6
- Şekil 3.1. Karma spin (1, 3/2) Ising sisteminin ($\Delta/z_1|J_3|$, $h/z_1|J_3|$) düzleminde taban-durum faz diyagramı. a) $J_1=0.1$, $J_2=1.0$ ve $J_3=0.10$ için sistemde nm, i_1 ve i_3 fazları mevcuttur b) $J_1=0.1$, $J_2=1.0$ ve $J_3=1.0$ için sistemde nm, i_1 ve i_3 fazları mevcuttur25
- Şekil 3.2. Karma spin (1, 3/2) Ising sisteminde ortalama altörgü mıknatıslanmaları m_A ve m_B 'nin zamanla değişimi. a) $\Delta = 1.0$, $h = 0.0$, $J_2/J_1 = 0.1$ ve $J_3/J_1 = 1.0$ için sistemde ferrimanyetik (i_3) fazından paramanyetik (p) fazına ikinci-dereceden bir faz geçişi söz konusudur. b) $\Delta = 1.0$, $h = 0.0$, $J_2/J_1 = 0.1$ ve $J_3/J_1 = -1$ için sistemde ferrimanyetik (i_2) fazından paramanyetik (p) faza ikinci-dereceden bir faz geçişi vardır. c) $\Delta = -4.2$, $h = 0.0$ ve $J_1 = J_2 = J_3 = 1.0$ için ardışık iki faz geçişi vardır. İlki, $T_t = 0.3$ sıcaklığında ferrimanyetik (i_1) fazından paramanyetik (p) fazına birinci- dereceden bir faz geçişi ve diğeri $T_C = 0.7$ sıcaklığında nm fazından paramanyetik (p) fazına ikinci-dereceden bir faz geçiştir27
- Şekil 3.3. Karma spin (1, 3/2) Ising sisteminin ($kT/|J_3|$, $\Delta/|J_3|$) düzleminde faz diyagramı. Sürekli ve kesikli çizgiler sırasıyla ikinci dereceden ve birinci dereceden faz geçişlerini gösterir. a) $\Delta = -4.2$, $h=0.0$, $J_1=0.1$, $J_2=1$ ve $J_3=1.0$ için sistemde nm, i_1 ve p fazları ile izole kritik nokta (C) mevcuttur. b) $\Delta = -4.2$, $h=0.0$, $J_1=0.1$, $J_2=1.0$ ve $J_3=1.0$ için sistemde nm, i_1 , i_3 ve p fazları ile çift kritik sonlu nokta (B) mevcuttur28
- Şekil 3.4. Alternatif tabakalı balpeteği örgüsü üzerinde (kT/J_1 , J_3/J_1) düzleminde faz diyagramları. Sürekli, kesikli ve kesikli - noktalı çizgiler sırasıyla ikinci dereceden, birinci dereceden faz geçişlerini ve telafi sıcaklığını gösterir. İzole kritik noktalar (C_i) ve multi-kritik noktalar (A_j) sırasıyla içi boş ve içi dolu dairelerle gösterilmiştir. $J_2/J_1 = 1.0$, 1.5 ve 2.0 için kritik noktalar ($C_3 = C_4 = C_5$) ve çoklu kritik noktalar ($A_1=A_2$) aynı sıcaklıkta oluşur. J_2/J_1 ve J_3/J_1 iç parametreleri, tabakalar arasındaki etkileşimin şiddetini belirler. (a) $J_2/J_1=0.1$ ve 0.3 için ve (b) $J_2/J_1=1.0$, 1.5 ve 2.0 için30
- Şekil 3.5. $\Delta = 1.0$ ve $h=0.0$ için (a) (kT/J_3 , J_1/J_3) düzleminde ve (b) (kT/J_3 , J_2/J_3) düzleminde faz diyagramları31
- Şekil 3.6. Şekil 3. 4'e benzer fakat $h = 0$ için; (Δ , J_1), (Δ , J_2), (J_1 , T) ve (J_2 , T) düzlemlerinde faz diyagramları. Sürekli, kesikli ve kesikli noktalı çizgiler sırasıyla ikinci dereceden, birinci dereceden faz geçişlerini ve telafi sıcaklığını gösterir. Özel noktalar; üçlü kritik (τ), izole kritik (C) ve çift kritik sonlu nokta (B)'dir. (a) $J_2 = J_3 = 1.0$, $kT = 1.0$ için (Δ , J_1) düzleminde (b) $J_1 = J_3 = 1.0$ ve $T = 2.0$ için (Δ , J_2) düzleminde (c) $J_2 = J_3 = 1.0$ ve $\Delta = 1.0$ için (J_1 , T) düzleminde

	(d ₁) $J_1 = 2.0$, $J_3 = 1.0$ ve $\Delta = 1.0$ için (J_2 , T) düzleminde (d ₂) $J_1 = 1$, $J_3 = 1$ ve $\Delta = 1.0$ için (J_2 , T) düzleminde	33
Şekil 3. 7.	$\Delta = 1.0$, $h = 0.0$, $J_2/J_1=0.1$ ve $J_3/J_1 = 1.0$ değerleri için alt örgü mıknatıslanmalarının ve alınganlığın sıcaklıkla değişimi	35
Şekil 3.8.	$\Delta = 1.0$, $h = 0.0$, $J_2/J_1=1.0$ ve $J_3/J_1 = 1.0$ değerleri için alt örgü mıknatıslanmalarının ve alınganlığın sıcaklıkla değişimi	36
Şekil 3. 9.	$\Delta = 1.0$, $h = 0.0$, $J_2/J_1=0.1$ ve $J_3/J_1 = 1.0$ değerleri için alt örgü mıknatıslanmalarının ve iç enerjinin sıcaklıkla değişimi	37
Şekil 3. 10.	$\Delta = 1.0$, $h = 0.0$, $J_2/J_1=1.0$ ve $J_3/J_1 = 1.0$ değerleri için alt örgü mıknatıslanmalarının ve iç enerjinin sıcaklıkla değişimi	38

1. BÖLÜM

GİRİŞ

Yoğun madde fiziğinde veya istatistik fizikte, fiziksel sistemlerin faz diyagramları, termal ve manyetik özellikleri çeşitli kuramsal ve deneysel yöntemlerle incelenebilmektedir. Son yılların ilginç ve önemli araştırma konularından birisi, iki alt örgülü karma spin Ising sistemlerinin incelenmesidir. Karma-spin sistemleri istatistiksel ve yoğun madde fiziğinde en fazla çalışılan konular arasındadır. Bunun sebeplerini şu şekilde sıralayabiliriz: (i) Bu sistemler, termomanyetik kayıt sistemleri alanında potansiyel teknolojik uygulamalara sahiptir [1], (ii) Bu sistemler tek spin sistemlerine göre daha az öteleme simetrisine sahip olduklarından, tek spin sistemlerinde gözlenmeyen birçok yeni ve ilginç kritik olay karma-spin sistemlerinde gözlenir. (iii) Bu sistemler manyetik malzemeler temelli iki metalli moleküler sistemlerin incelenmesi için model oluştururlar [2], (iv) Belirli şartlar altında bu sistemlerde kritik sıcaklıktan düşük bir sıcaklık değerinde toplam mıknatıslanmanın yok olduğu telafi (compensation) sıcaklığı görülmektedir. Telafi sıcaklıklarının varlığı ise teknolojik uygulamalarda önemli bir özelliktir. Karma-spin sistemlerinin denge durumundaki özellikleri, düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimi, kritik üsteller, reentrant olaylar, denge faz geçişleri ve denge faz diyagramları v.b., denge istatistiksel fiziğinde geliştirilen ve iyi bilinen kapalı form yaklaşıkları (ortalama-alan yaklaşığı (OAY), Bragg-Williams, Bethe-Peierls (BP), kümesel değişim, v.s.), seriye açılım, transfer matris (TM), etkin-alan teorisi (EAT), Monte Carlo (MC) hesaplamaları, renormalizasyon grup (RG) teknikleri v.b. gibi yöntemlerle incelenmiş ve incelenmeye devam edilmektedir.

Önemli karma spin sistemleri (yarım tamsayılı- yarım tamsayılı) spin $(1/2, 3/2)$; spin $(1/2, 5/2)$; spin $(3/2, 5/2)$ sistemleri; Karma (yarım tamsayılı- tamsayılı) spin $(1/2, 1)$, spin $(1, 3/2)$,spin $(1, 5/2)$ sistemleri ve karma (tamsayılı- tamsayılı) spin $(1, 2)$ Ising sistemleri olarak verilebilir.

En basit ve aynı zamanda üzerinde en fazla çalışma yapılmış ve yapılmakta olan karma spin modeli, karma spin $(1/2, 1)$ Ising modelidir. Karma spin $(1/2, 1)$ Ising sisteminin dengeli davranışı, RG teknikleri, yüksek sıcaklık seri açılımı, serbest fermiyon yaklaşıklığı, EAT, OAY, kümesel değişim yaklaşıklığı, MC hesaplamaları TM gibi denge istatistiksel fiziğinde iyi bilinen yöntemlerle incelenmiştir [3-11]. Sistemin kesin çözümü, bal peteği örgüsü [12, 13], Bethe örgüsü [14-16], iki katlı Cayley ağacı [17] ve iki tabakalı Bethe örgüsü [18-20] üzerinde yapılmıştır.

Karma spin $(1/2,1)$ Ising sisteminin denge davranışının yanında dinamiği üzerine de birçok çalışma yapılmıştır. Bu sistemin dinamiği üzerine ilk çalışma Buendia ve Machado tarafından yapıldı [21]. Keskin ve arkadaşları [22], Buendia ve Machado'nun çalışmasında gördükleri eksikliklerden dolayı bu sistemi çok daha kapsamlı bir şekilde aynı yöntemle incelediler. Çalışmalarında, (T, h) ve (d, T) düzlemlerinde altı farklı tipte dinamik faz diyagramları elde ettiler. Hâlbuki Buendia ve Machado (T, h) düzleminde yalnız iki farklı temel faz diyagramı bulmuş ve (d, T) düzleminde faz diyagramlarını elde etmemişlerdir. Ekiz ve Keskin [23], modelin dinamiğini, manyetik alan varlığında ve yokluğunda, yol ihtimaliyet yöntemini kullanarak araştırdılar. Godoy ve Figueiredo [24], bilineer etkileşme Hamiltonyenli karma spin $(1/2, 1)$ Ising sisteminin kararlı durumlarını, dinamik çift yaklaşık yöntemini, MC ve sonlu-boyut ölçüm metodunu [25], MC ve dinamik çift yaklaşım methodunu kullanarak araştırdılar [26] ve sistemin faz diyagramlarını elde ettiler. Godoy ve Figueiredo [24-26] yukarıda belirtilen çalışmalarında, sistemi dış manyetik alanın sıfır olduğu durum için incelediler.

Denge davranışları detaylıca incelenen ikinci basit ve önemli sistem ise karma-spin $(1/2, 3/2)$ modelidir. Model, EAT [27] ve MC yöntemi [28] ile incelenmiştir. Diğer taraftan, seyreltik karma-spin $(1/2, 3/2)$ modelinin balpeteği için, manyetik özellikleri EAT kullanılarak araştırılmıştır [29]. Enine alan varlığında seyreltik karma-spin $(1/2, 3/2)$ modeli, EAT ile detaylıca incelenmiştir [30-32]. Boyuna manyetik alan varlığında da, bu modelin manyetik özelliği EAT ile incelenmiştir [33]. Sistemin kuantum mekaniksel incelemesi yani karma-spin $(1/2, 3/2)$ Heisenberg ferrimanyetik sistemi, Green-fonksiyon tekniği ile detaylıca incelenmiştir [34]. Son yıllarda, modelin manyetik özellikleri Bethe [35] ve kare merkezli (union jack) [36], Kagomé [37] örgüleri, iki-katlı Cayley ağacı [38] ve balpeteği [39] örgüleri için incelenmiştir. Bunlara ilaveten

seyreltik karma spin ($1/2$, $3/2$) modeli OAY ile de detaylıca incelenmiştir [40]. Bu sistemin dinamik davranışını ise Deviren ve arkadaşları [41], Glauber tipi dinamik kullanarak, zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında araştırdılar. İki farklı düzlemde dinamik faz diyagramlarını hesapladılar.

Bir diğer önemli karma spin sistemi de spin (1 , $3/2$) Ising sistemidir. Çünkü bu karma spin Ising sistemi demir-nitrit (Fe_4N) bileşiği için model olarak kullanılan sistemlerinden birisidir; özel olarak MC hesaplamaları karma spin-1 ve spin- $3/2$ Ising modeline Fe_4N 'nin karakteristik özelliğini araştırmak için uygulanmıştır [42, 43-46]. Aynı zamanda bu karma spin Ising sistemi $[\text{Co}(\text{hfac})_2]\cdot\text{BNO}$ bileşiği için de prototip bir model oluşturur [47]. Karma spin (1 , $3/2$) Ising sisteminin denge özellikleri, denge istatistiksel fizikte geliştirilen ve iyi bilinen MC, kümesel değişim methodu, Bethe örgüsü üzerinde kesin tekrarlamaya bağıntıları kullanılarak incelenmiştir [48-53]. Son zamanlarda, Bobâk ve Dely [54] kristal alan etkileşme Hamiltonyenli karma spin-1 ve spin- $3/2$ Ising sisteminin faz diyagramlarını, serbest enerji için Bogoliubov eşitsizliğine dayalı ortalama alan teorisi'ni kullanarak araştırdı. Bu çalışma sonucunda sistemin üçlü kritik nokta, üçlü nokta ve izole kritik noktaya sahip olduğunu buldular. Albayrak [55] iki farklı kristal alanlı karma spin-1 ve spin- $3/2$ Ising sistemini Bethe örgüsü üzerinde kesin tekrarlamaya bağıntılarını kullanarak çalıştı. Bu çalışmada sistemin faz diyagramlarını hesapladı ve sistemde sadece üçlü kritik ve izole kritik nokta gösterdiğini buldu. Spin salınımlarının korelasyonları dikkate alınmadığından dolayı, OAY'nin genellikle doğru sonuçlar vermediği görülmektedir. Öte yandan, Bethe örgüsü yapay bir örgüdür ve bu örgü aynı zamanda normal örgülerin gösterdiği geçiş sıcaklığından daha büyük bir geçiş sıcaklığı gösterir ve kritik nokta tayininde gerçekçi sonuçlar vermez [55, 56]. Bu sistemin dinamik davranışının incelenmesi ilk olarak Keskin ve arkadaşları [57] tarafından yapılmıştır. Keskin ve arkadaşları, bu sistemin dinamik davranışını, Glauber tipi dinamik kullanarak, zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında araştırdılar ve sonuçta üç farklı düzlemde dinamik faz diyagramını sundular.

Yukarıdaki belirttiğimiz çalışmalara rağmen karma spin-1 ve spin- $3/2$ sistemini içeren alternatif tabakalı ince filmlerin manyetik özellikleri incelenmemiştir. Bu yüzden bu tezde birbirini takip eden tabakalı balpeteği örgüsü üzerinde karma spin-1 ve spin- $3/2$ Ising ferrimanyetik sistemi EAT kullanılarak incelenecektir. Bunun için öncelikle spin-

1 ve spin-3/2 Ising modelinin tanıtımı yapılacak ve sonra da spin-1/2 Ising modelinin korelasyonlu EAT ile nasıl inceleneceği verilecek. Daha sonra karma spin (1, 3/2) Ising modelinin korelasyonlu EAT incelenmesi yapılacaktır. Özellikle, alt-örgü mıknatıslanmalarının sıcaklığa bağlı davranışları incelenerek sistemdeki faz geçiş sıcaklıkları elde edilecek ve sistemdeki faz geçişlerinin doğası (birinci- veya ikinci derece) karakterize edilecektir. Ayrıca, sistemdeki telafi sıcaklıklarını bulmak için toplam mıknatıslanmaların sıcaklığa bağlı davranışı araştırılacaktır. Ayrıca, sistemin olası spin kombinasyonları için enerjiler bulunacak ve bu enerjiler kıyaslanarak taban durum faz diyagramı sunulacaktır. Balpeteği örgüsü için korelasyonlu EAT kullanılarak sistemin dengeli davranışını veren denklemler elde edilecektir. Elde edilen denklemler, nümerik olarak çözülecek ve düzen parametrelerinin davranışı incelenerek faz geçiş sıcaklıkları belirlenecek ve (T, Δ) , (J_1, T) , (J_2, T) , (Δ, J_1) , (Δ, J_2) , $(kT/J_1, J_3/J_1)$ düzlemlerinde faz diyagramları sunulacaktır. Ayrıca, balpeteği örgüsü için sistemin manyetik alınganlığı ve iç enerjisi hesaplanarak, sonuçların faz geçiş noktalarıyla uyumluluğu test edilecektir.

Bu giriş bilgilerinden sonra, Bölüm 2’de metot ve modelin tanıtımı verildi. Bölüm 3’de düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimi incelenerek faz diyagramları sunuldu. Sonra da, manyetik alınganlık ve iç enerjinin sıcaklıkla değişimi incelendi. Son bölümde ise, yapılan çalışmalar özetlenerek elde edilen sonuçların tartışması yapıldı.

2. BÖLÜM

METOT VE MODELİN TANITIMI

2. 1. Modelin Tanıtımı

Model balpeteği örgüsü üzerinde sırasıyla A ve B gibi alternatif tabakalı karma spin-1 ve spin-3/2 Ising modeli olup, B tabakasinda $\sigma_i = \pm 1, 0$ ve A tabakasinda da $S_j = \pm 3/2, \pm 1/2$ spin değerlerine sahip atomlar bulunmaktadır. Bu durumda dört tane düzen parametresini tanımlamamız gerekecektir. Bunlar;

- 1) A alt örgüsü için ortalama mıknatıslanma (m_A); $m_A \equiv \langle \sigma_i^A \rangle$
- 2) B alt örgüsü için ortalama mıknatıslanma (m_B); $m_B \equiv \langle S_j^B \rangle$
- 3) A alt örgüsü için ortalama kuadropol moment (q_A); $q_A \equiv \langle (\sigma_i^A)^2 \rangle$
- 4) B alt örgüsü için ortalama kuadropol moment (q_B); $q_B \equiv \langle (S_j^B)^2 \rangle$

Bu düzen parametreleri ise aşağıdaki farklı fazları tanımlar.

Bunlar;

i. Paramanyetik faz (p): $m_A = m_B = 0$,

ii. Ferrimanyetik faz (i): $m_A \neq m_B \neq 0$,

a) Ferrimanyetik (1, 3/2) fazı (i_1): $m_A = 1, m_B = 3/2$,

b) Ferrimanyetik (-1, 3/2) fazı (i_2): $m_A = -1, m_B = 3/2$,

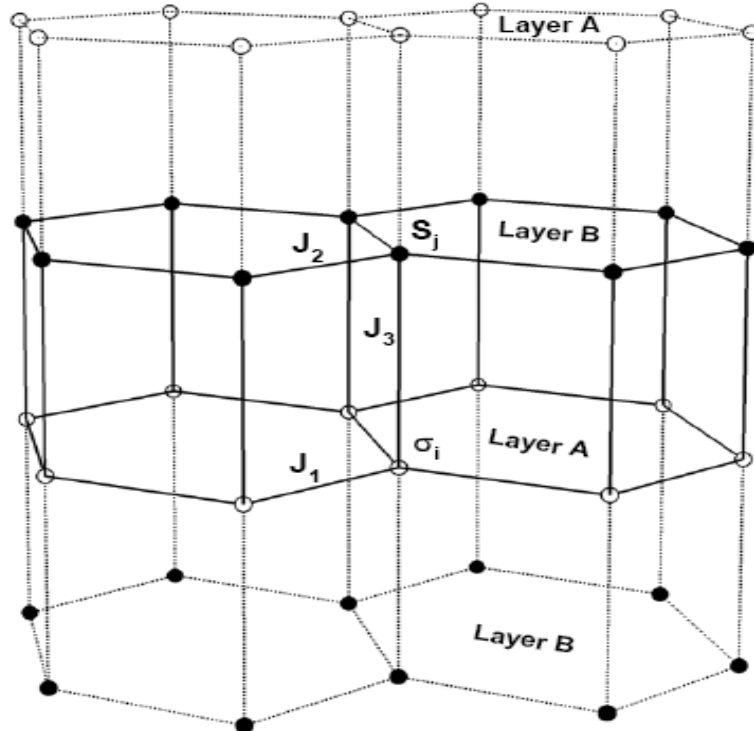
c) Ferrimanyetik (1, 1/2) fazı (i_3): $m_A = 1, m_B = 1/2$,

iii. Nonmanyetik faz (nm): $m_A \neq 0, m_B = 0$ veya $m_A = 0, m_B \neq 0$

Karma spin-1 ve spin-3/2 sistemi için Hamiltonyen ifadesi;

$$\mathcal{H} = -J_1 \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - J_2 \sum_{\langle mn \rangle} S_m S_n - J_3 \sum_{\langle im \rangle} \sigma_i S_m - \Delta \left(\sum_i \sigma_i^2 + \sum_m S_m^2 \right) - h \left(\sum_i \sigma_i + \sum_m S_m \right), \quad (2.1)$$

şeklindedir. Burada J_1 ve J_2 aynı tabakalardaki spinler arasındaki etkileşmeyi J_3 ise farklı tabakalardaki spinler arasındaki etkileşmeyi ifade eder. Δ kristal alan etkileşmesi h ise boyuna manyetik alanı ifade eder. İlk üç toplam $\langle ij \rangle$, $\langle mn \rangle$ ve $\langle im \rangle$ en yakın komşu spinler üzerinden alınıyor. J_1 ve J_2 pozitif olarak alınan, etkileşimleri ferromanyetik olan, aynı spinler arasındaki etkileşim parametrelerini gösterir. J_3 A ve B tabakaları üzerinde bulunan pozitif veya negatif olarak alınan σ -S spinleri arasındaki etkileşimi gösterir. Bu yüzden tabakalar arasında ferromanyetik veya antiferromanyetik etkileşme olduğu kabul edilir.



Şekil 2. 1. Spin-1 ve spin-3/2 parçacıklarının balpeteği örgüsü üzerinde alternatif tabakalarının üzerindeki dizilimlerinin şematik gösterimi. J_1 ve J_2 aynı tabakalar üzerindeki komşu spinler arasındaki etkileşim sabitleri J_3 ise farklı (A ve B) tabakaları arasındaki etkileşim sabitidir. Boş daireler ($\circ$) $\sigma_i = 1$ spinlerini ve dolu daireler ($\bullet$) ise $S_m = 3/2$ spinlerini sembolize eder.

2.1.1. Spin-1/2 Ising Modelinin Etkin Alan Teorisi ile incelenmesi

Karma spin-1 ve spin-3/2 Ising modelini etkin-alan teorisiyle (EAT) incelemekten önce EAT'nin daha iyi anlaşılması için spin-1/2 Ising sistemine uygulamasını vereceğiz. Bu model birçok fiziksel sisteme uygulanmaktadır. Bu kesimde korelasyonlu etkin-alan metodunun spin-1/2 Ising modeline uygulanması neticesinde modelin termal özelliklerini veren denklemler elde edilecektir. Kaneyoshi ve ark. [58, 59] etkin-alan yöntemini spin-1/2 Ising modeline uygulamış olmakla birlikte genelde faz diyagramındaki ikinci-derece faz geçiş çizgilerini analitik olarak oluşturdıkları bir bağıntıya göre elde etmişlerdir. Bununla birlikte etkin-alan teorisi çerçevesinde serbest enerji ifadesi tanımlanamadığı için faz diyagramında birinci-derece faz dönüşüm çizgileri verilememiştir. Bundan dolayı modelin birinci-derece faz dönüşümüne sahip olup olmadığı düzen parametrelerinin ve manyetik özelliklerin (manyetik alınganlık, ısı kapasitesi ve iç enerji) termal değişimlerinin kapsamlıca incelenmesinden geçmektedir.

Spin-1/2 Ising modeli için Hamiltonyen;

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i, \quad (2.2)$$

biçimindedir. Burada h dış manyetik alandır. Birinci toplam en yakın komşu çiftler üzerinden alınacağını, ikinci toplam N özdeş spin üzerinden alınacaktır. $S_i = \pm 1$ değerlerini alır, ve J , i ve j örgü noktaları arasındaki değiş tokuş etkileşme parametresidir. Sistemin bölüşüm fonksiyonu ve i . örgü noktasındaki spin değişkeninin beklenen değeri;

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad (2.3)$$

$$\langle S_i \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} S_i e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad (2.4)$$

burada Tr sistemin girilebilir durumlar üzerinden toplamı anlamına gelmektedir ve $\beta = 1/k_B T$, k_B Boltzmann sabitidir. Spin değişkenlerinin ortalama değeri için kesin bağıntıları denklem (2. 3) ve (2. 4)'den türetilebilir. Bunu elde etmek için, Hamiltonyeni birbirine değiş tokuş edilen (komüt) iki kısma ayırabiliriz; Biri i . örgü noktası ile ilişkili tüm katkıları içeren H_i , diğeri i . örgü noktasına bağlı olmayan kısım H' 'dür. Bu durumda Hamiltoniyen,

$$H = H_i + H', \quad (2.5)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $H_i = - S_i E_i$ iken $E_i = J \sum_{j=1}^z S_j + h$ 'dir ve E_i i. duruma ait yerel alanı açıklayan operatördür. Şunu da belirtmek gerekir ki spin değişkenleri yer değiştirebilir, yani $[S_i, S_j] = 0$, komitatiftir dolayısıyla $[H_i, H'] = [H_i, H] = 0$ 'dır. Bu durumda denklem (2.4) aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\langle S_i \rangle = \frac{1}{Z} \left\{ \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}} \left[\frac{\text{Tr} S_i \exp^{-\beta \mathcal{H}_i}}{\text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}_i}} \right] \right\}, \quad (2.6)$$

burada $\text{Tr} = \sum_{i=-1}^{+1}$ i. durumdaki değişkenle ilgili izi temsil etmektedir. S_i 'nin kısmi izi alınarak,

$$\langle S_i \rangle = \frac{1}{Z} \left\{ \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}} \tanh(\beta E_i) \right\}, \quad (2.7)$$

veya

$$\langle S_i \rangle = \langle \tanh(\beta E_i) \rangle, \quad (2.8)$$

elde edilir. Bu eşitlik Callen tarafından 1963'te elde ettiği spin korelasyonunu ifade eden Callen eşitliği ifadesidir [60]. Bu eşitliğin genelleştirilmiş formu;

$$\langle \{f_i\} S_i \rangle = \langle \{f_i\} \tanh(\beta E_i) \rangle, \quad (2.9)$$

şeklinde tanımlanır. Burada $\{f_i\}$, S_i hariç spin değişkenlerinin herhangi bir keyfi fonksiyonunu, $\langle \dots \rangle$ ise kanonik küme ortalamasını göstermektedir. Ayrıca, (2. 8) eşitliğinin yukarıdaki türetimi, genelleştirilmiş spin-S Ising sistemi içinde aşağıdaki formda elde yazılabilir.

$$\langle \{f_i\} S_i \rangle = S \langle \{f_i\} B_s(\beta E_i) \rangle \quad (2.10)$$

Burada $B_S(x)$ Brillouin fonksiyonudur [61],

$$B_S = \frac{2S+1}{2S} \coth\left(\frac{2S+1}{2S}x\right) - \frac{1}{2S} \coth\left(\frac{x}{2S}\right). \quad (2.11)$$

Denklem (2.10), Ising sisteminin ortalama mıknatıslanması için tam bağıntıdır. Ancak en yakın komşu etkileşimi (koordinasyon sayısı) yüksek olan sistemler için bu eşitliği hesaplamak oldukça zordur. Şunu da belirtmek gerekir ki, standart ortalama alan teorisi E_i 'nin termal ortalaması ve $\tanh$ (ya da Brillouin fonksiyonu)'nun termal ortalaması yaklaşıklıkla kullanılarak (2.7) ve (2.10) eşitliklerinden elde edilebilir, yani,

$$\langle \tanh(\beta E_i) \rangle \approx \tanh(\beta \langle E_i \rangle), \quad (2.12)$$

veya

$$\langle B_S(\beta E_i) \rangle \approx B_S(\beta \langle E_i \rangle) \quad (2.13)$$

elde edilir. Böylece ortalama alan yaklaşıklıkla sonuçlarına ulaşmak için (2. 7), (2. 9) ve (2.10) bağıntıları bir yol göstermektedir. Etkin alan teorisi kullanılarak spin operatörleri arasındaki kinematik eşitlikler daha doğru bir şekilde hesaplanabilir. Bu konudaki ilk sistematik yaklaşım Matsudaira [62] tarafından Callen özdeşliği yerine kesin bağıntı (exact relation) kullanılarak geliştirilmiştir. Benzer bağıntılar yüksek değerli spinler içinde bulunabilirdi. Ancak bu bağıntıların hesaplanması yüksek spinli Ising sistemleri için oldukça zordur. Bunun yerine Honmura ve Kaneyoshi 1979'da diferansiyel operatör tekniğini uygulamışlar ve bu bağıntıları kolayca elde etmişlerdir [63]:

$$\tanh(\beta E_i) = \exp(E_i \nabla) \tanh(x) \Big|_{x=0}, \quad (2.14)$$

$$B_S(\beta E_i) = \exp(E_i \nabla) B_S(x) \Big|_{x=0}, \quad (2.15)$$

burada $\nabla = \partial/\partial x$ diferansiyel operatördür. Burada aşağıdaki matematiksel ilişki ile verilen diferansiyel operatör tekniği kullanılacaktır. Diferansiyel operatör tekniğine göre

üssel bir diferansiyel operatör herhangi bir $f(x)$ fonksiyonu üzerine etki ederse üssel diferansiyel operatör ile $f(x)$ fonksiyonu arasında ilişki aşağıdaki gibi verilebilir [63];

$$e^{a\nabla} f(x) = f(x+a) \quad (2.16)$$

burada a herhangi bir sabittir. Bu bağıntı Taylor serisinin üstel terime genişletilmesiyle kolaylıkla görülebilir,

$$e^{a\nabla} f(x) = \left[1 + a\nabla + \frac{a^2}{2!} \nabla^2 + \dots \right] f(x) = f(x) + a\nabla f(x) + \frac{a^2}{2!} f(x) + \dots = f(x+a). \quad (2.17)$$

Bu eşitlikler kullanılarak (2. 9) ve (2. 10) bağıntıları sırasıyla aşağıdaki formlarda yazılabilir:

$$\langle \{f_i\} S_i \rangle = \langle \{f_i\} e^{E_i \nabla} \rangle \tanh(\beta E_i), \quad (2.18)$$

$$\langle \{f_i\} S_i \rangle = S \langle \{f_i\} e^{E_i \nabla} \rangle B_s(\beta E_i). \quad (2.19)$$

(2.18) ve (2.19) özdeşlikleri, genel formda

$$\langle \{f_i\} S_i \rangle = \langle \{f_i\} e^{E_i \nabla} \rangle f(x) \Big|_{x=0}, \quad (2.20)$$

yazılabilir, bu denklem aynı zamanda diferansiyel operatör tekniğinin temel bağıntısıdır. $f(x)$ fonksiyonu aşağıdaki gibi yazılabilir [64]:

$$f(x) = \frac{1}{\sum_{n=1}^m \exp(\beta \lambda_n)} \left\{ \sum_{n=1}^m \langle \varphi_n | S_i | \varphi_n \rangle \exp(\beta \lambda_n) \right\}, \quad (2.21)$$

burada λ_n ve φ_n sırasıyla H_i 'nin özdeğerleri ve özfonksiyonlarıdır. Spin-1/2 Ising sistemi için $f(x)$ fonksiyonun bulunabilmesi için öncelikle matris temsili bulunmalıdır [65]. Bunlar ise;

$S_z |s, m_s\rangle = m_s \hbar |s, m_s\rangle$, $S^2 |s, m_s\rangle = s(s+1) \hbar^2 |s, m_s\rangle$ ve $m_s = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ değerleri için S_z matris temsili;

$$S_z = \begin{pmatrix} \langle 1/2, 1/2 | S_z | 1/2, 1/2 \rangle & \langle 1/2, 1/2 | S_z | 1/2, -1/2 \rangle \\ \langle 1/2, -1/2 | S_z | 1/2, 1/2 \rangle & \langle 1/2, -1/2 | S_z | 1/2, -1/2 \rangle \end{pmatrix}, \quad (2.22)$$

veya

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.23)$$

elde edilir. Pauli spin matrisleri kullanılarak;

$$\hat{\sigma} = \frac{2}{\hbar} \hat{S} \quad \text{ve} \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

burada σ_z Pauli spin matrislerinin z bileşenidir ve özdeğerleri $\lambda_1=1$ ve $\lambda_2=-1$ 'dir. Özvektörleri ise

$$\varphi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{ve} \quad \varphi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

biçiminde elde edilir. (2.21) denklemi kullanılarak;

$$f_{1/2}(x) = \frac{1}{\sum_{n=1}^2 \exp(\beta \lambda_n)} \left\{ \sum_{n=1}^m \langle \varphi_n | S_{1/2} | \varphi_n \rangle e^{\beta \lambda_n} \right\} \quad (2.26)$$

$$f(x) = \frac{1}{e^{\beta x/2} + e^{-\beta x/2}} \left\{ \langle \varphi_1 | S_{1/2} | \varphi_1 \rangle e^{\beta x/2} + \langle \varphi_2 | S_{1/2} | \varphi_2 \rangle e^{-\beta x/2} \right\} \quad (2.27)$$

$$f_{1/2}(x) = \frac{1}{e^{\beta x/2} + e^{-\beta x/2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{\beta x/2} + \begin{pmatrix} 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} e^{-\beta x/2} \right\} \quad (2.28)$$

Matris çarpımları yapılarak;

$$f_{1/2}(x) = \frac{e^{\beta x/2} - e^{-\beta x/2}}{2(e^{\beta x/2} + e^{-\beta x/2})} = \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{\beta}{2} x\right), \quad (2.29)$$

elde edilir. Ortalama mıknatıslanma, kritik sıcaklık, iç enerji, manyetik alınganlık ve ısı sığası diferansiyel operatör tekniği kullanılarak hesaplanabilir ve farklı sistemlerin faz diyagramları elde edilebilir. (2. 20) eşitliği Ising sistemi için tam bağıntıdır ancak bunu hesaplamak için bazı yaklaşımlar yapmaya ihtiyaç vardır. Bu eşitlik aynı zamanda ortalama alan ve Zernike yaklaşıklıkları sonuçlarını vermektedir [66]. Bunların yanında bu eşitlik kullanılarak Bethe-Pierls yaklaşıklığı sonuçlarıyla aynı sonuçlar elde edilir. (2.20) eşitliği hiperbolik trigonometrik fonksiyonlar cinsinden üssel diferansiyel operatörlere genişletilerek hesaplanabilir. Herhangi bir spin sistemi için üssel diferansiyel operatör, spin değerleri için Van der Waerden özdeşliğinin kullanılmasıyla elde edilebilir [67]. Basit bir uygulama olarak spin-1/2 Ising sistemi için van der Waerden özdeşliğini elde edelim. Van der Waerden özdeşliğinin genel formu

$$F(S_i) = e^{\lambda S_i} = a_0 + a_1 S + a_2 S^2 + a_3 S^3 + a_4 S^4 + \dots, \quad (2.30)$$

şeklinde verilir, burada λ herhangi bir sabittir. Spin-1/2 durumu için $F(1/2) = e^{\lambda/2} = a_0 + \frac{a_1}{2}$ ve $F(-1/2) = e^{-\lambda/2} = a_0 - \frac{a_1}{2}$ bağıntılarından a_0 ve a_1 ifadeleri sırasıyla,

$$a_0 = [F(1/2) + F(-1/2)]/2 = [e^{\lambda/2} + e^{-\lambda/2}]/2, \quad (2.31)$$

$$a_1 = [F(1/2) - F(-1/2)]/2 = [e^{\lambda/2} - e^{-\lambda/2}]/2, \quad (2.32)$$

olarak elde edilir. Bu katsayılar (2.20) eşitliğine yazılıp düzenlendiğinde,

$$e^{\lambda S} = \cosh(\lambda/2) + 2S \sinh(\lambda/2), \quad (2.33)$$

spin-1/2 Ising sistemi için van der Waerden özdeşliği elde edilir. Daha yüksek spinli Ising sistemleri için bu ifade elde edilebilir ancak elde edilen ifadeler oldukça

karmaşıktır. Daha yüksek spinli sistemler için bu ifadelerin hesabı Tucker tarafından yapılmıştır [68].

Bu eşitliklerden yararlanarak etkin alan teorisine göre merkezi spinin termal ortalaması;

$$\langle S_i \rangle = \langle e^{E_i \nabla} \rangle \frac{1}{2} \tanh \left[\frac{\beta}{2} (x + h) \right] \Big|_{x=0}, \quad (2.34)$$

olarak yazılabilir. (23) ve (24) eşitliklerinden yararlanarak,

$$\langle S_i \rangle = \left\langle \prod_{i=1}^{\delta} \left[\cosh \left(\frac{J \nabla}{2} \right) + 2S_i \sinh \left(\frac{J \nabla}{2} \right) \right] \right\rangle \frac{1}{2} \tanh \left[\frac{\beta}{2} (x + h) \right] \Big|_{x=0}, \quad (2.35)$$

yazılabilir. Burada δ en yakın komşu sayısıdır ve bal peteği örgüsü için $\delta = 3$, kare örgü için $\delta = 4$, ... olarak yazılabilir. Herhangi bir örgü için bu eşitlik,

$$\langle S_i \rangle = \left\langle \left[\cosh \left(\frac{J \nabla}{2} \right) + 2S_i \sinh \left(\frac{J \nabla}{2} \right) \right]^{\delta} \right\rangle \frac{1}{2} \tanh \left[\frac{\beta}{2} (x + h) \right] \Big|_{x=0}, \quad (2.36)$$

formuna dönüşür. Bu denklem kesindir ve herhangi bir örgü için geçerlidir. Yüksek spinli sistemler için bu denklemin bütün spin-spin korelasyonlarının tamamı ele alınırsa, problemin çözümü zorlaşır. Bu zorluğu yenmek için ilk çaba korelasyonlar arasındaki etkileşmeyi indirgeyen bağlantısız (decoupling) yaklaşımıdır:

$$\langle S_i (S_{i'})^2 \dots (S_{i^n}) \rangle \cong \langle S_i \rangle \langle (S_{i'})^2 \rangle \dots \langle (S_{i^n}) \rangle, \quad (2.37)$$

Buna göre $i \neq i' \neq \dots \neq i^n$ olmak üzere korelasyonlu etkin-alan teorisi bir çok sisteme uygulanmıştır [63, 69, 70]. Aslında bu yaklaşım hacim (bulk) probleminde Zernike yaklaşımına [65] esas itibarıyla tekabül etmektedir ve yüzey problemlerini içeren çok sayıda manyetik sisteme başarılı bir şekilde uygulanmıştır [63, 69, 70, 72]. Diğer

tarafından ortalama alan yaklaşımında kendi korelasyonları dahil bunun gibi bütün korelasyonlar ihmal edilmektedir. Bu yaklaşımı da kullanarak bal peteği örgüsü için (2.26) eşitliğinde $\delta = 3$ yazılarak ortalama mıknatıslanma ifadesi,

$$m = a_0 + a_1 m + a_2 m^2 + a_3 m^3, \quad (2.38)$$

olarak elde edilir. Bu eşitlikteki $m = \langle S_i \rangle$ ortalama mıknatıslanmadır ve a_0, a_1, a_2 ve a_3 katsayıları diferansiyel operatör tekniği kullanılarak bulunmuştur. Bu katsayılar;

$$\begin{aligned} a_0 &= 1/8 [\tanh(-3J) + 3 \tanh(-J) + 3 \tanh(J) + \tanh(3J)], \\ a_1 &= 3/8 [\tanh(-3J) + \tanh(-J) - \tanh(J) - \tanh(3J)], \\ a_2 &= 3/8 [\tanh(-3J) - \tanh(-J) - \tanh(J) + \tanh(3J)], \\ a_3 &= 1/8 [\tanh(-3J) - 3 \tanh(-J) + 3 \tanh(J) - \tanh(3J)], \end{aligned} \quad (2.39)$$

olarak bulunur. Ayrıca spin-1/2 Ising sistemi için bazı termodinamik nicelikler de aşağıdaki gibi hesaplanabilir.

2.1.1.1. Manyetik Alınganlık

Ortalama mıknatıslanmanın dış manyetik alana göre diferansiyeli alınarak sistemin manyetik alınganlığı hesaplanabilir. Bu durumda spin-1/2 Ising sistemi için manyetik alınganlık,

$$\chi(T) = \left. \frac{\partial m(T, h)}{\partial h} \right|_{h=0}, \quad (2.40)$$

$$\begin{aligned} \chi(T) &= \left\{ \frac{\partial}{\partial h} \left\langle \prod_{i=1}^{\delta} \left[\cosh\left(\frac{JV}{2}\right) + 2S_i \sinh\left(\frac{JV}{2}\right) \right] \right\rangle \right\} \frac{1}{2} \tanh\left[\frac{\beta}{2}(x+h)\right] \Bigg|_{h=0} \\ &+ \left\langle \prod_{i=1}^{\delta} \left[\cosh\left(\frac{JV}{2}\right) + 2S_i \sinh\left(\frac{JV}{2}\right) \right] \right\rangle \frac{1}{2} \operatorname{sech}^2\left[\frac{\beta}{2}(x+h)\right] \Bigg|_{h=0}, \end{aligned} \quad (2.41)$$

herhangi bir örgü için elde edilir.

2.1.1.2. İç Enerji

Hamiltoniyeenin termodinamik ortalaması alınarak spin-1/2 Ising sisteminin iç enerjisi aşağıdaki gibi bulunabilir:

$$U = -J \langle S_i E_i \rangle - h \langle S_i \rangle, \quad (2.42)$$

Burada;

$$\langle S_i E_i \rangle = \delta J \left[\cosh\left(\frac{J\nabla}{2}\right) + 2S_i \sinh\left(\frac{J\nabla}{2}\right) \right]^{\delta-1} \times \frac{\partial}{\partial \nabla} \left[\cosh\left(\frac{J\nabla}{2}\right) + 2S_i \sinh\left(\frac{J\nabla}{2}\right) \right] \frac{1}{2} \tanh\left[\frac{\beta}{2}(x+h)\right] \Bigg|_{h=0} \quad (2.43)$$

şeklinde hesaplanabilir.

2.1.2. Karma Spin-1 ve Spin-3/2 Ising Modelinin Etkin Alan Teorisiyle İncelenmesi

Bu kesimde karma spin-1 ve spin-3/2 Ising modelinin dengeli davranışını bir önceki kesimde en basit sistem olan spin-1/2 Ising modeline uygulayarak açıkladığımız etkin alan teorisini kullanarak inceleyeceğiz. Spin-1/2 için van der Waerden özdeşliği,

$$F(\sigma_i) = e^{\lambda \sigma_i} = \cosh\left(\frac{J\nabla}{2}\right) + 2\sigma_i \sinh\left(\frac{J\nabla}{2}\right), \quad (2.44)$$

elde edilmişti. Bir önceki kesimde yapılan işlemler spin-1 ve spin-3/2 için yapılrısa; spin-1 için;

$$F(\sigma_i) = 1 + \sinh(J\Delta) \langle \sigma_i \rangle + \{ \cosh(J\Delta) - 1 \} \langle \sigma_i^2 \rangle, \quad (2.45)$$

ve spin-3/2 için;

$$F(S_m) = e^{\lambda S_j} = A(J \nabla) + B(J \nabla) \langle S_m \rangle + C(J \nabla) \langle S_m^2 \rangle + D(J \nabla) \langle S_m^3 \rangle, \quad (2.46)$$

elde edilir.

Karma spin-1 ve spin-3/2 Ising sisteminin dengedeki davranışı etkin alan teorisi kullanılarak elde edebilmek için ilk problem ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının hesaplanmasıdır. Callen özdeşliği [73] kullanılarak;

$$M_A = \langle \sigma_i \rangle = \left\langle \prod_{i=1}^{z_1} \left\{ 1 + \langle \sigma_i \rangle \sinh(J_1 \nabla) + \langle \sigma_i^2 \rangle [\cosh(J_1 \nabla) - 1] \right\} \times \prod_{m=1}^{z_2} \left\{ A(J_3 \nabla) + B(J_3 \nabla) \langle S_m \rangle + C(J_3 \nabla) \langle S_m^2 \rangle + D(J_3 \nabla) \langle S_m^3 \rangle \right\} \right\rangle f_k(x) \Big|_{x=0}, \quad (2.47)$$

$$M_B = \langle S_m \rangle = \left\langle \prod_{m=1}^{z_1} \left\{ A(J_2 \nabla) + B(J_2 \nabla) \langle S_m \rangle + C(J_2 \nabla) \langle S_m^2 \rangle + D(J_2 \nabla) \langle S_m^3 \rangle \right\} \times \prod_{i=1}^{z_2} \left\{ 1 + \langle \sigma_i \rangle \sinh(J_3 \nabla) + \langle \sigma_i^2 \rangle [\cosh(J_3 \nabla) - 1] \right\} \right\rangle g_k(x) \Big|_{x=0}, \quad (2.48)$$

burada M_A ve M_B alt örgü mıknatıslanmalarıdır ve z en yakın komşu sayısını göstermektedir. Spin-3/2 için eşitlik (2.48)'deki $A(J_3 \nabla)$, $B(J_3 \nabla)$, $C(J_3 \nabla)$, $D(J_3 \nabla)$ ve (2.49)'daki $A(J_2 \nabla)$, $B(J_2 \nabla)$, $C(J_2 \nabla)$, $D(J_2 \nabla)$ katsayıları aşağıdaki gibidir;

$$\begin{aligned} A(J_3 \nabla) &= \frac{1}{8} \left[9 \cosh\left(\frac{J_3 \nabla}{2}\right) - \cosh\left(\frac{3J_3 \nabla}{2}\right) \right], \\ B(J_3 \nabla) &= \frac{1}{12} \left[27 \sinh\left(\frac{J_3 \nabla}{2}\right) - \sinh\left(\frac{3J_3 \nabla}{2}\right) \right], \\ C(J_3 \nabla) &= \frac{1}{2} \left[-\cosh\left(\frac{J_3 \nabla}{2}\right) + \cosh\left(\frac{3J_3 \nabla}{2}\right) \right], \\ D(J_3 \nabla) &= \frac{1}{3} \left[-3 \sinh\left(\frac{J_3 \nabla}{2}\right) + \sinh\left(\frac{3J_3 \nabla}{2}\right) \right], \end{aligned} \quad (2.49)$$

$$\begin{aligned}
A(J_2 \nabla) &= \frac{1}{8} \left[9 \cosh \left(\frac{J_2 \nabla}{2} \right) - \cosh \left(\frac{3J_2 \nabla}{2} \right) \right], \\
B(J_2 \nabla) &= \frac{1}{12} \left[27 \sinh \left(\frac{J_2 \nabla}{2} \right) - \sinh \left(\frac{3J_2 \nabla}{2} \right) \right], \\
C(J_2 \nabla) &= \frac{1}{2} \left[-\cosh \left(\frac{J_2 \nabla}{2} \right) + \cosh \left(\frac{3J_2 \nabla}{2} \right) \right], \\
D(J_2 \nabla) &= \frac{1}{3} \left[-3 \sinh \left(\frac{J_2 \nabla}{2} \right) + \sinh \left(\frac{3J_2 \nabla}{2} \right) \right].
\end{aligned} \tag{2.50}$$

sistemin $f(x)$ ve $g(x)$ fonksiyonları ise,

$$f(x) = \frac{1}{\sum_{n=1}^3 \exp(\beta \lambda_n)} \left\{ \sum_{n=1}^3 \langle \varphi_n | S_1 | \varphi_n \rangle \exp(\beta \lambda_n) \right\}, \tag{2.51}$$

$$g(x) = \frac{1}{\sum_{n=1}^4 \exp(\beta \lambda_n)} \left\{ \sum_{n=1}^4 \langle \varphi_n | S_{3/2} | \varphi_n \rangle \exp(\beta \lambda_n) \right\}, \tag{2.52}$$

eşitlikleri kullanılarak,

$$f_1(x) = \frac{2 \sinh[\beta(x+h)]}{2 \cosh[\beta(x+h)] + \exp(-\beta \Delta)}, \tag{2.53a}$$

$$f_2(x) = \frac{2 \cosh[\beta(x+h)]}{2 \cosh[\beta(x+h)] + \exp(-\beta \Delta)}, \tag{2.53b}$$

$$g_1(x) = \frac{3 \sinh[3\beta(x+h)/2] + \sinh[\beta(x+h)/2] \exp(-2\beta \Delta)}{2 \cosh[3\beta(x+h)/2] + 2 \cosh[\beta(x+h)/2] \exp(-2\beta \Delta)}, \tag{2.54a}$$

$$g_2(x) = \frac{9 \cosh[3\beta(x+h)/2] + \cosh[\beta(x+h)/2] \exp(-2\beta \Delta)}{4 \cosh[3\beta(x+h)/2] + 4 \cosh[\beta(x+h)/2] \exp(-2\beta \Delta)}, \tag{2.54b}$$

$$g_3(x) = \frac{27 \sinh[3\beta(x+h)/2] + \sinh[\beta(x+h)/2] \exp(-2\beta\Delta)}{8 \cosh[3\beta(x+h)/2] + 8 \cosh[\beta(x+h)/2] \exp(-2\beta\Delta)}, \quad (2.54c)$$

şeklinde elde edilir. Burada $\beta = 1/k_B T$ ve k_B Boltzmann sabitidir. Tüm spin spin korelasyonları hesaba katılırsa denklemlerin çözümü çok zorlaşmaktadır. Bu nedenle bağlantısız (decoupling) yaklaşımı;

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i \sigma_{i'} \dots \sigma_{i^n} \rangle &\cong \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_{i'} \rangle \dots \langle \sigma_{i^n} \rangle, \\ \langle S_j (S_j')^2 \dots (S_j^n)^3 \rangle &\cong \langle S_j \rangle \langle (S_j')^2 \rangle \langle (S_j^n)^3 \rangle, \end{aligned} \quad (2.55)$$

yapılarak, karma spin-1 ve spin-3/2 Ising sistemi için ortalama alt örgü mıknatıslanmaları

$$\begin{aligned} m_A = \langle \sigma_i^k \rangle &= \left[1 + \langle \sigma_i \rangle \sinh(J\Delta) + \langle \sigma_i^2 \rangle \{ \cosh(J\Delta) - 1 \} \right]^3 \times \\ &\quad \left[A(J_3 \nabla) + B(J_3 \nabla) \langle S_m \rangle + C(J_3 \nabla) \langle S_m^2 \rangle + D(J_3 \nabla) \langle S_m^3 \rangle \right]^2 f_1(x) \Big|_{x=0}, \end{aligned} \quad (2.56)$$

$$\begin{aligned} m_B = \langle S_m^k \rangle &= \left[A(J_2 \nabla) + B(J_2 \nabla) \langle S_m \rangle + C(J_2 \nabla) \langle S_m^2 \rangle + D(J_2 \nabla) \langle S_m^3 \rangle \right]^3 \times \\ &\quad \left[1 + \langle \sigma_i \rangle \sinh(J\Delta) + \langle \sigma_i^2 \rangle \{ \cosh(J\Delta) - 1 \} \right]^2 g_1(x) \Big|_{x=0}, \end{aligned} \quad (2.57)$$

elde edilir. Spin-1 ve spin-3/2 için van der Waerden eşitliği karma spin Ising sistemlerinde birbirinden bağımsız $(S_j)^2$ ve $(S_j)^3$ 'nin ortalama değerlerini içermektedir.

Denklem (2. 36)'daki aynı prosedür kullanılarak, q ve r parametreleri kompakt formda aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\begin{aligned} q_A = \langle \sigma_i^2 \rangle &= \left[1 + \langle \sigma_i \rangle \sinh(J\Delta) + \langle \sigma_i^2 \rangle \{ \cosh(J\Delta) - 1 \} \right]^3 \times \\ &\quad \left[A(a) + B(a) \langle S_m \rangle + C(a) \langle S_m^2 \rangle + D(a) \langle S_m^3 \rangle \right]^2 f_2(x) \Big|_{x=0}, \end{aligned} \quad (2.58)$$

$$q_B = \langle S_m^2 \rangle = \left[\frac{\left(A(J_2 \nabla) + B(J_2 \nabla) \langle S_m \rangle + C(J_2 \nabla) \langle S_m^2 \rangle + D(J_2 \nabla) \langle S_m^3 \rangle \right)^3 \times}{\left(1 + \langle \sigma_i \rangle \sinh(J_3 \nabla) + \langle \sigma_i^2 \rangle [\cosh(J_2 \nabla) - 1] \right)^2} \right] g_2(x) \Big|_{x=0}, \quad (2.59)$$

$$r_B = \langle S_m^3 \rangle = \left[\frac{\left(A(J_2 \nabla) + B(J_2 \nabla) \langle S_m \rangle + C(J_2 \nabla) \langle S_m^2 \rangle + D(J_2 \nabla) \langle S_m^3 \rangle \right)^3 \times}{\left(1 + \langle \sigma_i \rangle \sinh(J_3 \nabla) + \langle \sigma_i^2 \rangle [\cosh(J_3 \nabla) - 1] \right)^2} \right] g_3(x) \Big|_{x=0}. \quad (2.60)$$

ile tanımlanmaktadır. Bal peteği örgüsü için (2.57) ve (2.58) denklemlerinde $z=3$ yazılırsa ortalama alt örgü mıknatıslanmaları;

$$\begin{aligned} m_A = & A_0 + A_1 m_A + A_2 m_A^2 + A_3 m_A^3 + A_4 m_A^4 + A_5 m_A^5 + A_6 m_A^6 + A_7 m_B + A_8 m_A m_B \\ & + A_9 m_A^2 m_B + A_{10} m_A^3 m_B + A_{11} m_A^4 m_B + A_{12} m_A^5 m_B + A_{13} m_A^6 m_B + A_{14} m_B^2 \\ & + A_{15} m_A m_B^2 + A_{16} m_A^2 m_B^2 + A_{17} m_A^3 m_B^2 + A_{18} m_A^4 m_B^2 + A_{19} m_A^5 m_B^2 + A_{20} m_A^6 m_B^2 \\ & + A_{21} m_B^3 + A_{22} m_A m_B^3 + A_{23} m_A^2 m_B^3 + A_{24} m_A^3 m_B^3 + A_{25} m_A^4 m_B^3 + A_{26} m_A^5 m_B^3 \\ & + A_{27} m_A^6 m_B^3 + A_{28} m_B^4 + A_{29} m_A m_B^4 + A_{30} m_A^2 m_B^4 + A_{31} m_A^3 m_B^4 + A_{32} m_A^4 m_B^4 \\ & + A_{33} m_A^5 m_B^4 + A_{34} m_A^6 m_B^4 + A_{35} m_B^5 + A_{36} m_A m_B^5 + A_{37} m_A^2 m_B^5 + A_{38} m_A^3 m_B^5 \\ & + A_{39} m_A^4 m_B^5 + A_{40} m_A^5 m_B^5 + A_{41} m_A^6 m_B^5 + A_{42} m_B^6 + A_{43} m_A m_B^6 + A_{44} m_A^2 m_B^6 \\ & + A_{45} m_A^3 m_B^6 + A_{46} m_A^4 m_B^6 + A_{47} m_A^5 m_B^6 + A_{48} m_A^6 m_B^6, \end{aligned} \quad (2.61)$$

$$\begin{aligned} m_B = & B_0 + B_1 m_A + B_2 m_A^2 + B_3 m_A^3 + B_4 m_A^4 + B_5 m_B + B_6 m_A m_B + B_7 m_A^2 m_B \\ & + B_8 m_A^3 m_B + B_9 m_A^4 m_B + B_{10} m_B^2 + B_{11} m_A m_B^2 + B_{12} m_A^2 m_B^2 + B_{13} m_A^3 m_B^2 \\ & + B_{14} m_A^4 m_B^2 + B_{15} m_B^3 + B_{16} m_A m_B^3 + B_{17} m_A^2 m_B^3 + B_{18} m_A^3 m_B^3 + B_{19} m_A^4 m_B^3 \\ & + B_{20} m_B^4 + B_{21} m_A m_B^4 + B_{22} m_A^2 m_B^4 + B_{23} m_A^3 m_B^4 + B_{24} m_A^4 m_B^4 + B_{25} m_B^5 \\ & + B_{26} m_A m_B^5 + B_{27} m_A^2 m_B^5 + B_{28} m_A^3 m_B^5 + B_{29} m_A^4 m_B^5 + B_{30} m_B^6 + B_{31} m_A m_B^6 \\ & + B_{32} m_A^2 m_B^6 + B_{33} m_A^3 m_B^6 + B_{34} m_A^4 m_B^6 + B_{35} m_B^7 + B_{36} m_A m_B^7 + B_{37} m_A^2 m_B^7 \\ & + B_{38} m_A^3 m_B^7 + B_{39} m_A^4 m_B^7 + B_{40} m_B^8 + B_{41} m_A m_B^8 + B_{42} m_A^2 m_B^8 + B_{43} m_A^3 m_B^8 \\ & + B_{44} m_A^4 m_B^8 + B_{45} m_B^9 + B_{46} m_A m_B^9 + B_{47} m_A^2 m_B^9 + B_{48} m_A^3 m_B^9 + B_{49} m_A^4 m_B^9, \end{aligned} \quad (2.62)$$

biçiminde elde edilir. Burada A_i ($i = 0, 1, \dots, 48$) ve B_j ($j = 0, 1, \dots, 49$) katsayıları $\exp(\alpha \nabla) f(x) = f(x + \alpha)$ ve $\exp(\alpha \nabla) g(x) = g(x + \alpha)$ diferansiyel operatör yöntemiyle hesaplanmıştır. (2.61) ve (2.62) denklemleri numerik olarak çözülerek bal

peteği örgüsü için düzen parametreleri ve faz diyagramları elde edilir. Ek 1’de bu katsayılar verilmiştir.

Sistemin toplam mıknatıslanması ise

$$m_T = \frac{m_A + m_B}{2}, \quad (2.63)$$

ile hesaplanabilir. Toplam mıknatıslanma (m_T) bazı durumlarda sıfır olur ki m_T ’nin sıfır olduğu bu sıcaklığa telafi sıcaklığı (T_{telafi}) denilmektedir. Telafi sıcaklığı alt örgü mıknatıslanmaların mutlak değerleri arasındaki geçiş noktalarına bakıldıktan sonra tespit edilebilir. Telafi sıcaklığında alt örgü mıknatıslanmalarının mutlak değerleri değere sahiptirler ve bu durum aşağıdaki eşitlikleri sağlanmalıdır.

$$|m_A(T_{\text{telafi}})| = |m_B(T_{\text{telafi}})|, \quad (2.64)$$

ve

$$\text{sgn}[m_A(T_{\text{telafi}})] = \text{sgn}[m_B(T_{\text{telafi}})]. \quad (2.65)$$

Ayrıca T_C kritik sıcaklık olmak üzere $T_{\text{telafi}} < T_C$ şartıda sağlanmalıdır. Karma spin-1 ve spin-3/2 Ising sistemi için manyetik alınganlık ve iç enerji aşağıdaki gibi hesaplanabilir.

2.1.2.1. Manyetik Alınganlık

Manyetik alınganlığı ortalama alt örgü mıknatıslanmaların dış manyetik alana göre türevi alınarak hesaplanabilir. Bu durumda manyetik alınganlık,

$$\chi_\alpha = \left. \frac{\partial m_\alpha}{\partial h} \right|_{h=0}, \quad (2.66)$$

kullanılarak bulunabilir. Burada α ($\alpha = A, B$) hangi alt örgü mıknatıslanması olduğunu göstermektedir. Böylece toplam manyetik alınganlık ifadesi [74];

$$\chi_{\text{Total}} = \chi_A + \chi_B = \left. \frac{\partial m_A}{\partial h} \right|_{h=0} + \left. \frac{\partial m_B}{\partial h} \right|_{h=0}. \quad (2.67)$$

ile elde edilir.

2.1.2.2. İç Enerji

İç enerjisi Hamiltoniyeenin termodinamik ortalaması alınarak aşağıdaki gibi bulunabilir [75]:

$$U = \langle H \rangle, \quad (2.68)$$

Bu durumda hamiltoniyeen aşağıdaki gibi yazılabilir;

$$H = -\frac{1}{2} \sum_i \sigma_i E_{i\sigma} - \frac{1}{2} \sum_m S_m E_{ms} - \Delta \left(\sum_i (\sigma_i)^2 + \sum_m (S_m)^2 \right) - h \left(\sum_i (\sigma_i) + \sum_m (S_m) \right), \quad (2.69)$$

$$E_{is} = J_1 \sum_{j=1}^3 \sigma_j + J_3 \sum_{m=1}^2 S_m, \quad \text{ve} \quad E_{ms} = J_2 \sum_n^3 S_n + J_3 \sum_i^2 \sigma_i, \quad \text{olmak üzere;}$$

İç enerji;

$$\langle H \rangle = -\frac{N}{2} \langle \sigma_i E_{i\sigma} \rangle - \frac{N}{2} \langle S_m E_{ms} \rangle - N\Delta \left(\langle (\sigma_i)^2 \rangle + \langle (S_m)^2 \rangle \right) - Nh \left(\langle \sigma_i \rangle + \langle S_m \rangle \right), \quad (2.70)$$

$$-U_A = \langle \sigma_i E_{i\sigma} \rangle = \langle E_{i\sigma} \exp(E_{i\sigma} \nabla) f_k(x) \big|_{x=0} = \left[\frac{\partial}{\partial y} K_A(y) \right] \big|_{y=\nabla}, \quad (2.71)$$

$$-U_B = \langle S_i E_{is} \rangle = \langle E_{is} \exp(E_{is} \nabla) g_k(x) \big|_{x=0} = \left[\frac{\partial}{\partial y} K_B(y) \right] \big|_{y=\nabla}, \quad (2.72)$$

Burada,

$$K_A(y) = \langle \exp(y E_{i\sigma}) f_k(x) \big|_{x=0}, \quad \text{ve} \quad K_B(y) = \langle \exp(y E_{is}) g_k(x) \big|_{x=0}, \quad \text{olarak verilebilir.}$$

$$\begin{aligned}
U_A = & -3 \left[1 + \langle \sigma_i \rangle \sinh(J\nabla) + \langle \sigma_i^2 \rangle \{ \cosh(J\nabla) - 1 \} \right]^2 \left[\langle \sigma_i \rangle \cosh(J\nabla) + \langle \sigma_i^2 \rangle \{ -\sinh(J\nabla) \} \right] \times \\
& \left[A(J_3\nabla) + B(J_3\nabla) \langle S_m \rangle + C(J_3\nabla) \langle S_m^2 \rangle + D(J_3\nabla) \langle S_m^3 \rangle \right]^2 \\
& - \left[1 + \langle \sigma_i \rangle \sinh(J\Delta) + \langle \sigma_i^2 \rangle \{ \cosh(J\Delta) - 1 \} \right]^3 2 \left[A(J_3\nabla) + B(J_3\nabla) \langle S_m \rangle + C(J_3\nabla) \langle S_m^2 \rangle + D(J_3\nabla) \langle S_m^3 \rangle \right] \times \\
& \left[A'(J_3\nabla) + B'(J_3\nabla) \langle S_m \rangle + C'(J_3\nabla) \langle S_m^2 \rangle + D'(J_3\nabla) \langle S_m^3 \rangle \right] f_1(x) \Big|_{x=0}, \tag{2.73}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
U_B = & -3 \left[A(J_2\nabla) + B(J_2\nabla) \langle S_m \rangle + C(J_2\nabla) \langle S_m^2 \rangle + D(J_2\nabla) \langle S_m^3 \rangle \right]^2 \\
& \left[A'(J_2\nabla) + B'(J_2\nabla) \langle S_m \rangle + C'(J_2\nabla) \langle S_m^2 \rangle + D'(J_2\nabla) \langle S_m^3 \rangle \right] \times \\
& \left[1 + \langle \sigma_i \rangle \sinh(J\nabla) + \langle \sigma_i^2 \rangle \{ \cosh(J\nabla) - 1 \} \right]^2 \\
& - 2 \left[1 + \langle \sigma_i \rangle \sinh(J\nabla) + \langle \sigma_i^2 \rangle \{ \cosh(J\nabla) - 1 \} \right] \\
& \left[\langle \sigma_i \rangle \cosh(J\nabla) + \langle \sigma_i^2 \rangle \{ -\sinh(J\nabla) \} \right] \\
& \left[A(J_2\nabla) + B(J_2\nabla) \langle S_m \rangle + C(J_2\nabla) \langle S_m^2 \rangle + D(J_2\nabla) \langle S_m^3 \rangle \right]^3 g_1(x) \Big|_{x=0}, \tag{2.74}
\end{aligned}$$

Yukarıdaki A' , B' , C' ve D' katsayıları aşağıdaki gibi verilebilir;

$$\begin{aligned}
A'(J_3\nabla) &= \frac{1}{8} \left[-9 \sinh\left(\frac{J_3\nabla}{2}\right) \frac{J_3}{2} + \sinh\left(\frac{3J_3\nabla}{2}\right) \frac{3J_3}{2} \right], \\
B'(J_3\nabla) &= \frac{1}{12} \left[27 \cosh\left(\frac{J_3\nabla}{2}\right) \frac{J_3}{2} - \cosh\left(\frac{3J_3\nabla}{2}\right) \frac{3J_3}{2} \right], \\
C'(J_3\nabla) &= \frac{1}{2} \left[\sinh\left(\frac{J_3\nabla}{2}\right) \frac{J_3}{2} - \cosh\left(\frac{3J_3\nabla}{2}\right) \frac{3J_3}{2} \right], \\
D'(J_3\nabla) &= \frac{1}{3} \left[-3 \cosh\left(\frac{J_3\nabla}{2}\right) \frac{J_3}{2} + \cosh\left(\frac{3J_3\nabla}{2}\right) \frac{3J_3}{2} \right], \\
A'(J_2\nabla) &= \frac{1}{8} \left[-9 \sinh\left(\frac{J_2\nabla}{2}\right) \frac{J_2}{2} + \sinh\left(\frac{3J_2\nabla}{2}\right) \frac{3J_2}{2} \right], \\
B'(J_2\nabla) &= \frac{1}{12} \left[27 \cosh\left(\frac{J_2\nabla}{2}\right) \frac{J_2}{2} - \cosh\left(\frac{3J_2\nabla}{2}\right) \frac{3J_2}{2} \right], \\
C'(J_2\nabla) &= \frac{1}{2} \left[\sinh\left(\frac{J_2\nabla}{2}\right) \frac{J_2}{2} - \sinh\left(\frac{3J_2\nabla}{2}\right) \frac{3J_2}{2} \right], \\
D'(J_2\nabla) &= \frac{1}{3} \left[-3 \cosh\left(\frac{J_2\nabla}{2}\right) \frac{J_2}{2} + \cosh\left(\frac{3J_2\nabla}{2}\right) \frac{3J_2}{2} \right]. \tag{2.76}
\end{aligned}$$

şeklinde hesaplanabilir.

Bal peteği örgüsü için elde edilen denklemler nümerik olarak çözülerek ortalama alt örgü sıknaştırılmalarının sıcaklığa göre davranışları incelenerek faz geçiş sıcaklıkları

tespit edilebilir. Bundan sonraki kesimde sistemdeki mevcut faz konfigürasyonları taban durum ($T = 0$) faz diyagramı elde edilerek belirlenecek ve $(\Delta/|J|, k_B T/|J|)$ düzlemlerinde faz diyagramı ($T \neq 0$) sunulacaktır. Sistemin manyetik alınganlık ve iç enerjisinin sıcaklığa göre davranışları da incelenecek ve inceleme sonucu bulunan faz geçiş noktalarının doğruluğu test edilecektir.

3. BÖLÜM

FAZ DİYAGRAMLARI VE BAZI TERMODİNAMİK NİCELİKLER

3.1. Taban Durum (T=0) Faz Diyagramı

Taban durum faz diyagramı teorik sonuçların güvenilirliğini kontrol etmek için kullanılır. Bu kesimde karma spin (1, 3/2) Ising modeli için taban durumdaki spin konfigürasyonları dikkate alınarak taban durum faz diyagramı elde edilecektir. Sistemin sıcaklığa bağlı faz diyagramlarını elde etmeden önce taban durum faz diyagramlarını elde etmek gerekir, çünkü bu diyagramlar sıcaklığa bağlı faz diyagramlarının elde edilmesinde kararlı durumların tanımlanması için gereklidir. Taban durum faz diyagramı herhangi bir spin konfigürasyonunun minimum enerji değeri durumuna karşı gelen bir düzlemdeki tüm konfigürasyonların enerjileri karşılaştırılarak elde edilir. Taban durum faz diyagramını elde etmek için modelin iç enerji ifadesi aşağıdaki gibi yazılır:

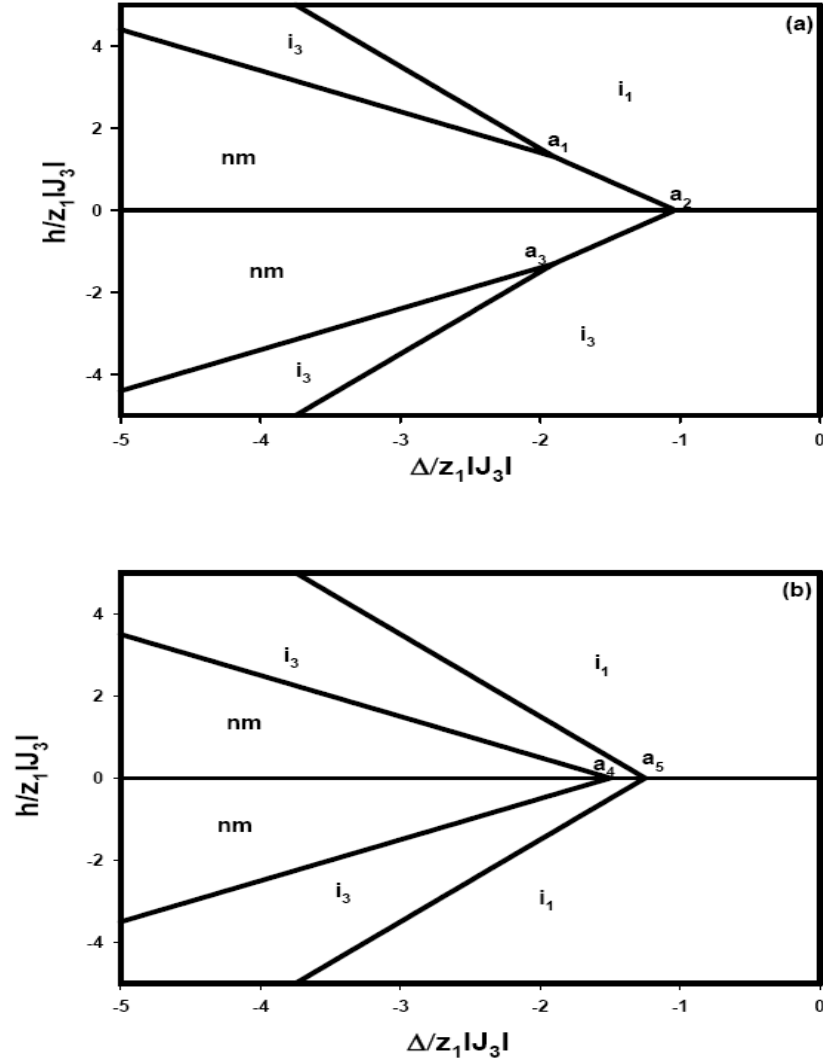
$$E = -J \sigma_1 S_1 - \frac{\Delta}{z} S_1^2 - \frac{h}{z} (\sigma_1 + S_1), \quad (3.1)$$

$$\frac{E}{J} = -\sigma_1 S_1 - \frac{\Delta}{zJ} S_1^2 - \frac{h}{zJ} (\sigma_1 + S_1). \quad (3.2)$$

Eğer sistem anti-ferromanyetik durum için incelenirse yani $J < 0$ için 6 adet farklı spin konfigürasyonu elde edilir. $(\Delta/z_1|J_3|, h/z_1|J_3|)$ düzleminde taban durum faz diyagramları hesaplandı ve Şekil 3. 1’de görüldüğü gibi topolojik olarak farklı iki taban-durum faz diyagramı elde edildi. Şekil 3. 1’de i_1 ve i_3 ferrimanyetik fazlarının yanı sıra nm fazının da olduğu görülmektedir. Şekil 3. 1 (a) ve (b)’de a_1, a_2, a_3, a_4 ve a_5 çoklu kritik noktaları görülmektedir.

Bu çoklu kritik noktalarda birden fazla faz bölgesi bir arada bulunmaktadır. Örneğin, bu noktalardan a_1 çoklu kritik noktası nm, i_1 ve i_3 ve fazlarının, a_2 çoklu kritik noktası da

yine aynı şekilde nm , i_1 ve i_3 fazlarının birlikte bulunduğu kritik noktalardır. Şekil 3. 1 (a) ile 3. 1 (b) arasındaki en temel fark şudur; J_1 in küçük değerleri için elde edilen Şekil 3. 1(a)' da $h/z_1|J_3|=0$ için i_3 fazı gözlenmez.

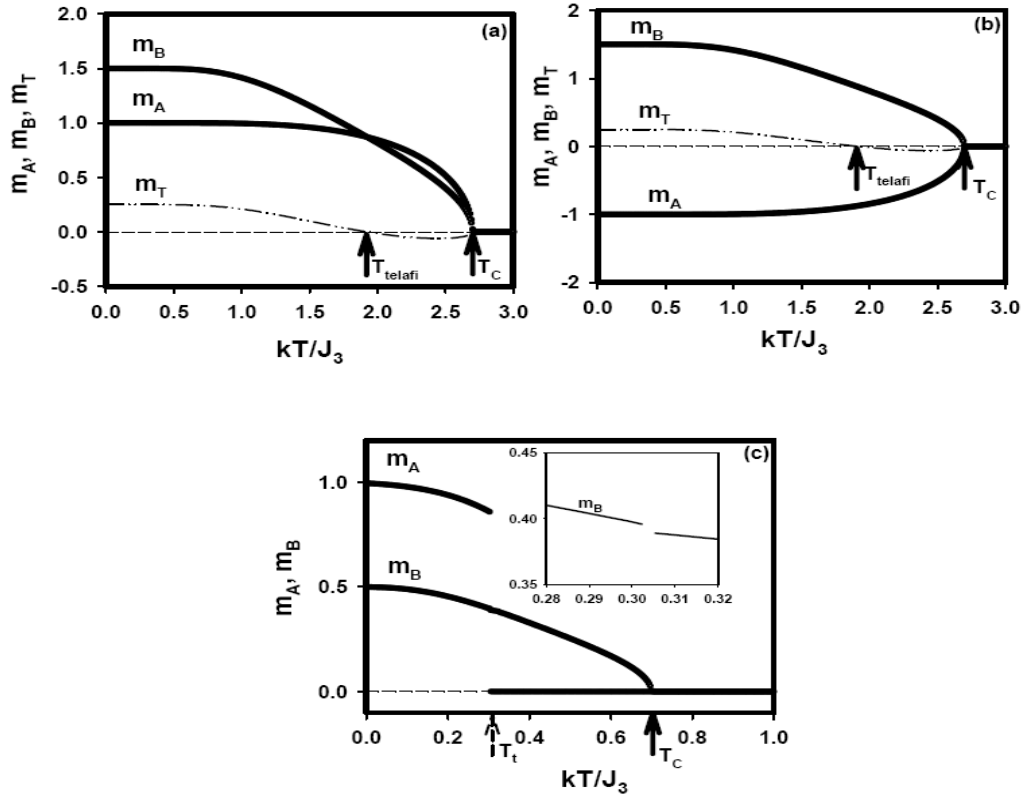


Şekil 3.1. Karma spin (1, 3/2) Ising sisteminin $(\Delta/z_1|J_3|, h/z_1|J_3|)$ düzleminde taban-durum faz diyagramı. a) $J_1=0.1$, $J_2=1.0$ ve $J_3=0.10$ için sistemde nm , i_1 ve i_3 fazları mevcuttur b) $J_1=0.1$, $J_2=1.0$ ve $J_3=1.0$ için sistemde nm , i_1 ve i_3 fazları mevcuttur.

3.2. Ortalama Altörgü Mıknatıslanmalarının ve Toplam Mıknatıslanmanın Termal Davranışı

Sistemde mevcut olan fazlar arasındaki faz sınırlarını belirleyebilmemiz için, faz geçiş sıcaklıklarını hesaplamalı ve faz geçiş sıcaklıklarının doğasını (kesikli veya sürekli yani birinci veya ikinci-derece faz geçişleri) karakterize etmeliyiz. Böylece sistemdeki mevcut faz diyagramlarını sunabiliriz. Alt örgü mıknatıslanmalarının ve toplam

mıknatıslanmanın termal davranışı denklem (2.62) ve (2.63)'ün nümerik olarak çözülmesiyle elde edilmektedir. Alt örgü mıknatıslanmalarının ve toplam mıknatıslanmanın termal davranışı sıcaklığın bir fonksiyonu olarak Şekil 3.2' de verilmiştir. Şekil 3. 2 (a)-(c) manyetik alan yokluğunda ($h = 0$) J_2/J_1 ve J_3/J_1 'in farklı değerleri için çizilmiştir. Şekil 3.2 (a) $J_2/J_1=0.1$, $J_3/J_1=1.0$ ve $\Delta=1.0$ değerleri için alt örgü mıknatıslanmalarının termal davranışını gösterir. Bu şekilde $T=0$ sıcaklığında alt örgü mıknatıslanmaları $m_A = 1$ ve $m_B = 3/2$ 'dir ve sıcaklık arttıkça düzgün ve sürekli bir şekilde sifıra yaklaşırlar. Sonunda $T_C = 2.710$ 'de ikinci dereceden faz geçişi görülür. Bu geçiş ferrimanyetik-(1, 3/2) (i_1) fazından paramanyetik (p) faz geçişidir. Şekil 2(b) J_3/J_1 'in negative değerleri için elde edilmiştir. Bu değerler $J_2/J_1 = 0.1$ ve $J_3/J_1 = -1.0$ 'dir. Bu durumda sıfır sıcaklıkta ($T=0$) $m_A = -1$ ve $m_B = 3/2$ 'dir ve sıcaklık arttıkça m_A düzgün ve sürekli bir biçimde artarak, m_B ise düzgün ve sürekli biçimde azalarak sifıra yaklaşırlar ve $T_C = 2.710$ 'de ikinci-dereceden bir faz geçişi gösterirler. Bu faz geçişi ferrimanyetik-(-1, 3/2) fazdan paramanyetik (p) faza doğrudur. Şekil 2(a) ve 2(b)'de görüldüğü gibi J_2/J_1 değeri sabit tutulup J_3/J_1 'nin işareti değiştirilirse aynı faz geçiş sıcaklığı gözlenir. Gerçekte J_3/J_1 'in işaretinin değiştirilmesi mıknatıslanmalardan birinin işaretinin değişmesiyle telafi edilmektedir (örneğin m_A) dolayısıyla faz geçiş sıcaklığı değişmemektedir. Diğer taraftan toplam mıknatıslanmanın termal davranışından sistemde N-tipi telafi (compensation) sıcaklığı olduğu görülür [76,77]. Şekil 3. 2 (c), $J_2/J_1=1.0$, $J_3/J_1=1.0$ ve $\Delta = -4.2$ değerleri için çizilmiştir. Bu şekilde, sistemin arka arkaya iki faz geçişi gösterdiği görülür; ilki birinci dereceden faz geçişidir çünkü $T_f = 0.300$ değerinde tabaka mıknatıslanmalarının süreksiz olduğu görülür. Geçiş $m_A = 0$ ve $m_B \neq 0.5$ olduğunda (veya $T=0$ sıcaklıkta $m_B = 0.5$) i_3 fazından nm ($m_A = 0$, $m_B \neq 0$ veya $m_B = 0$, $m_A \neq 0$) faza doğrudur. Sonraki $T_C = 0.700$ 'da nm fazdan p fazına ikinci dereceden faz geçişidir. Şunu da belirtmemiz gerekir ki; arka arkaya iki faz geçişi aynı zamanda deneysel olarak $DyVO_4$ da gözlenmiştir [78].



Şekil 3. 2. Karma spin (1, 3/2) Ising sisteminde ortalama altörgü mıknatıslanmaları m_A ve m_B 'nin zamanla değişimi. a) $\Delta = 1.0$, $h = 0.0$, $J_2/J_1 = 0.1$ ve $J_3/J_1 = 1.0$ için sistemde ferrimanyetik (i_3) fazından paramanyetik (p) fazına ikinci-dereceden bir faz geçişi söz konusudur. b) $\Delta = 1.0$, $h = 0.0$, $J_2/J_1 = 0.1$ ve $J_3/J_1 = -1$ için sistemde ferrimanyetik (i_2) fazından paramanyetik (p) faza ikinci-dereceden bir faz geçişi vardır. c) $\Delta = -4.2$, $h = 0.0$ ve $J_1 = J_2 = J_3 = 1.0$ için ardışık iki faz geçişi vardır. İlki, $T_t = 0.3$ sıcaklığında ferrimanyetik (i_1) fazından paramanyetik (p) fazına birinci- dereceden bir faz geçişi ve diğeri $T_C = 0.7$ sıcaklığında nm fazından paramanyetik (p) fazına ikinci-dereceden bir faz geçişidir.

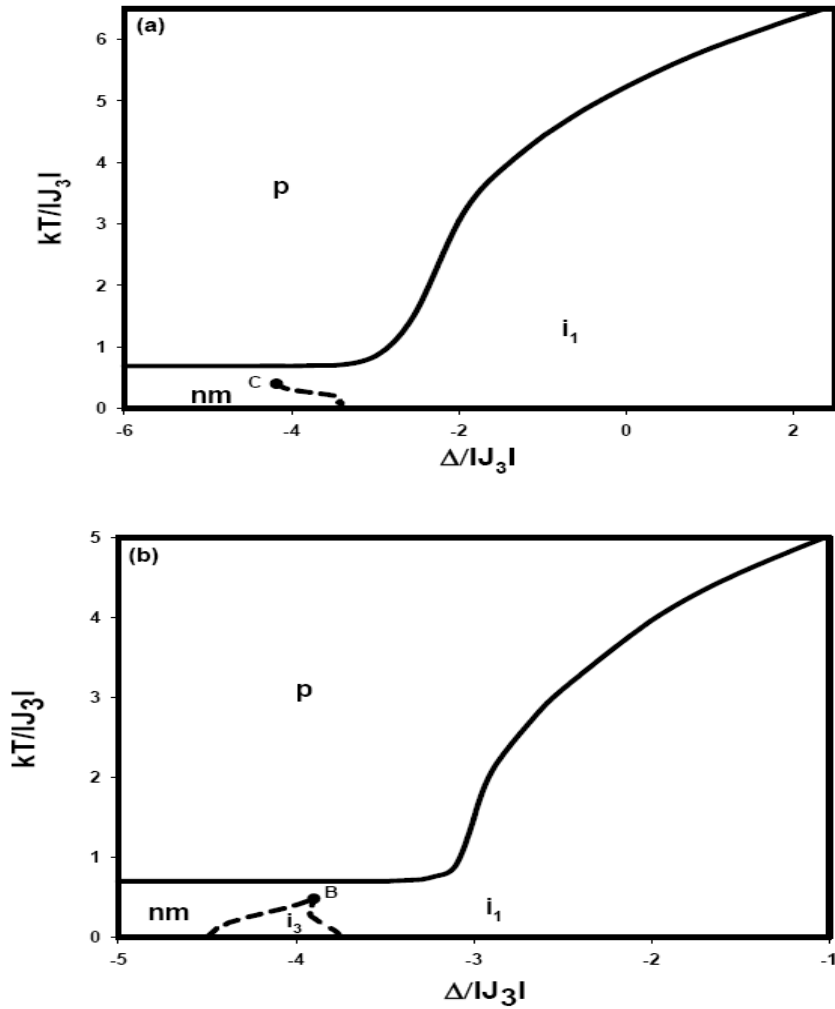
3.3 Faz Diyagramları

Bu kesimde sistemin davranışının daha iyi anlaşılabilmesi için $h=0$ için $(\Delta/|J_3|, kT/|J_3|)$, $(J_3/J_1, kT/J_1)$, $(kT/J_3, J_1/J_3)$, $(kT/J_3, J_2/J_3)$, (Δ, J_1) , (Δ, J_2) , (J_1, T) , ve (J_2, T) düzlemlerinde faz diyagramları verilecektir.

3.3.1 $(\Delta/|J_3|, kT/|J_3|)$ Düzleminde Faz Diyagramı

$h=0$ olduğu durumda sonlu sıcaklık faz diyagramı Şekil 3.3 (a) ve (b) 'de görülmektedir. Şekil 3. 3 (a) ve 3. 3 (b) sırasıyla 3. 1 (a) ve 3. 1 (b)'ye karşılık gelmektedir. İzole kritik

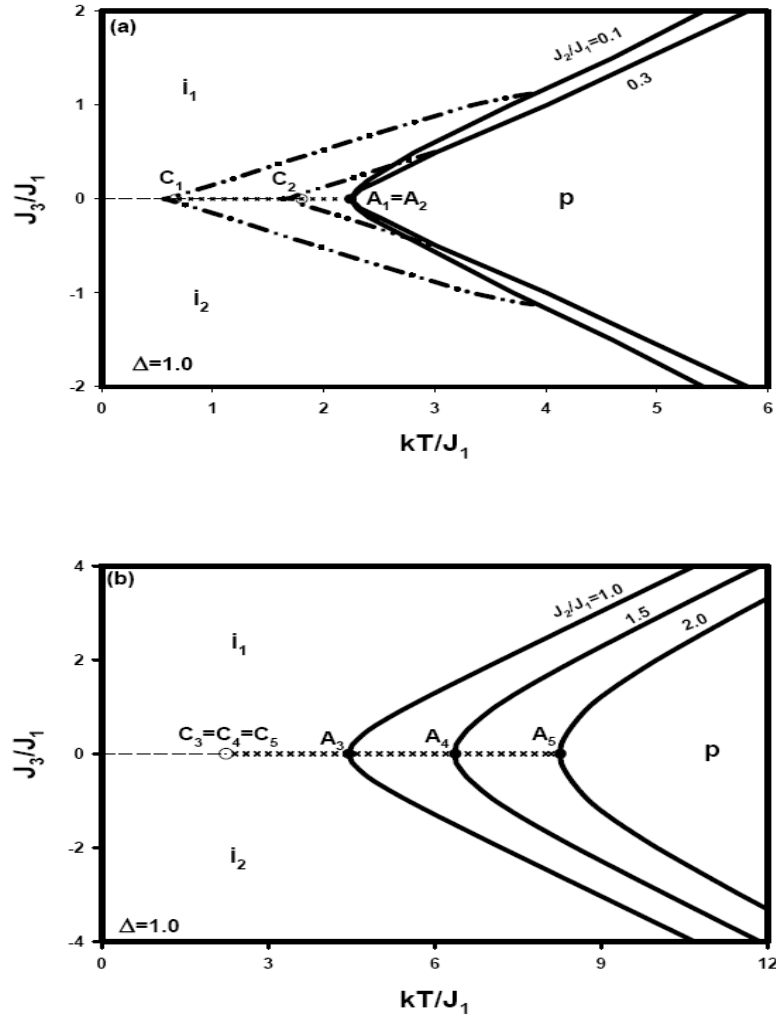
nokta (C)'nin yanında Şekil 3. 3 (a) i_1 , nm ve p fazlarını içerir. Δ 'nın negatif ve T'nin küçük değerleri için i_1 ve nm fazları ayıran birinci-dereceden faz geçiş çizgisi izole kritik nokta (C) üzerinde kaybolur. Diğer faz geçiş sınırları ikinci dereceden faz geçişleridir. İzole kritik nokta aynı zamanda Blume-Capel modelinin ortalama alan çözümlerinde de [79-82] gözlenmiştir. Şekil 3. 3 (b) şu farklılıklar dışında Şekil 3. 3 (a) ile aynıdır: (1) nm (faz ve i_1 fazı arasında i_3 fazı bulunur. (2) Faz diyagramı izole kritik davranış yerine (C) nm fazı i_1 fazından ayıran ikili kritik (bikritik) nokta (B) özelliği gösterir. (3) Nonmanyetik nm ($m_A \neq 0$, $m_B = 0$ veya $m_A = 0$, $m_B \neq 0$), ferrimanyetik i_1 ve ferrimanyetik i_3 fazları arasındaki çizgiler birinci-dereceden faz geçiş çizgileridir.



Şekil 3.3. Karma spin (1, 3/2) Ising sisteminin $(kT/|J_3|, \Delta/|J_3|)$ düzleminde faz diyagramı. Sürekli ve kesikli çizgiler sırasıyla ikinci dereceden ve birinci dereceden faz geçişlerini gösterir. a) $\Delta = -4.2$, $h=0.0$, $J_1=0.1$, $J_2=1$ ve $J_3=1.0$ için sistemde nm, i_1 ve p fazları ile izole kritik nokta (C) mevcuttur. b) $\Delta = -4.2$, $h=0.0$, $J_1=0.1$, $J_2=1.0$ ve $J_3=1.0$ için sistemde nm, i_1 , i_3 ve p fazları ile çift kritik sonlu nokta (B) mevcuttur.

3.3.2 (kT/J_1 , J_3/J_1) Düzleminde Faz Diyagramı

Şekil 3. 4 (kT/J_1 , J_3/J_1) düzleminde elde edilen faz diyagramını göstermektedir. Şekilde sürekli, kesikli ve noktalı kesikli çizgiler sırasıyla ikinci-dereceden faz geçişlerini, birinci dereceden faz geçişlerini ve telafi sıcaklıklarını gösterir. İçi boş daireler birinci dereceden faz geçiş çizgilerinin $J_3/J_1 = 0$ eksenı boyunca kaybolduğu izole kritik noktaları gösterir ve içi dolu daireler çoklu kritik noktalardır. $J_2/J_1 = 0.1, 0.5, 1.0, 1.5$ ve 2.0 değerleri için bu noktalardan izole kritik noktalar C_i , $i = 1,2,3,4$ ve 5 ile ve multikritik noktalar A_j , $j = 1, 2, 3, 4$ ile sembolize edilmiştir. Şekil 3.4 (a) $J_2/J_1=0.1$ ve 0.3 olduğu durumda $J_2/J_1<0.44$ aralığında elde edilmiştir. Faz diyagramında $0 \leq kT/J_1 \leq C_i$ aralığında i_1 ve i_2 fazları arasındaki faz sınır çizgisi birinci-derecedendir. $m_A \neq 0$ ve $m_B=0$ için $C_i \leq kT/J_1 \leq A_i$ aralığında sistem hiçbir faz geçişi göstermez. $kT/J_1 > A_i$ için sistem ikinci-dereceden faz geçişi gösterir. Bu yüzden i_1 , i_2 ve p fazları arasındaki sınırlar ikinci-derecedendir. Bu ikinci dereceden çizgiler Şekil 3. 4'te görüldüğü gibi simetrik kanat şeklindedir. Şunu da belirtmemiz gerekir ki; şekilde görüldüğü gibi $J_2/J_1 \leq 0.44$ için A_i noktaları aynı sıcaklıkta oluşur. i.e, $A_1 = A_2$. Bununla birlikte $J_2/J_1 = 0.44$ için C_i ve A_i aynı sıcaklıkta oluşur. Şekil 3. 4 (b), $J_2/J_1 > 0.44$ için hesaplanmıştır. Bu faz diyagramı Şekil 3. 4 (a)'ya şu farklılıklar dışında benzerdir; burada A_i noktaları yerine C_i noktaları aynı sıcaklıkta oluşur ve telafi (compensation) sıcaklıkları kaybolur. Şekil 3. 4 (a) ve (b)'ye benzer faz diyagramları bethe örgüsü üzerinde karma spin(1, 3/2) [80, 81], balpeteği örgüsü üzerinde alternatif iki tabakalı karma spin(3/2, 2) Ising sistemi ve balpeteği örgüsü üzerinde spin-1/2 Ising sistemi ve EAT çerçevesinde üç alternatif tabakalı kare örgüsü [83] üzerinde elde edilmiştir. Bununla birlikte Şekil 3. 4'teki faz diyagramı tam tekrarlama bağıntısı kullanılarak iki tabakalı Bethe örgüsü [84, 85] üzerinde ve Green fonksiyonu yöntemi ile üçlü tabakalı Co/Cu/Ni sistemi üzerinde elde edilen faz diyagramlarıyla benzerlik göstermektedir.

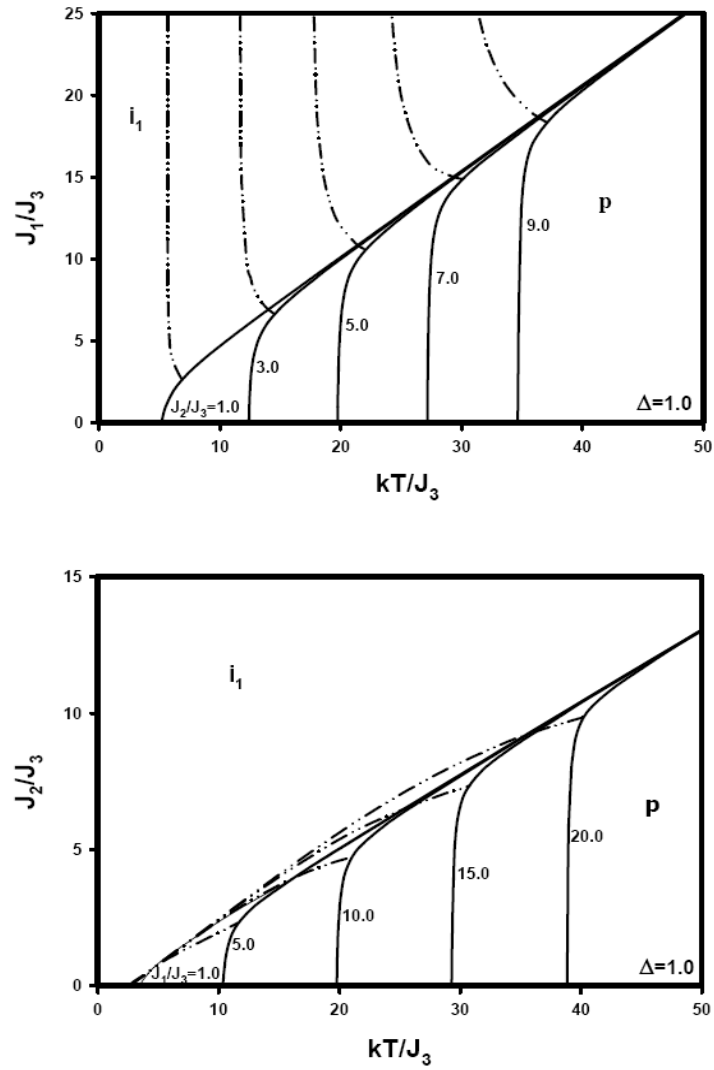


Şekil 3. 4. Alternatif tabakalı balpeteği örgüsü üzerinde $(kT/J_1, J_3/J_1)$ düzleminde faz diyagramları. Sürekli, kesikli ve kesikli - noktali çizgiler sırasıyla ikinci dereceden, birinci dereceden faz geçişlerini ve telafi sıcaklığını gösterir. İzole kritik noktalar (C_i) ve multi-kritik noktalar (A_j) sırasıyla içi boş ve içi dolu dairelerle gösterilmiştir. $J_2/J_1 = 1.0, 1.5$ ve 2.0 için kritik noktalar ($C_3 = C_4 = C_5$) ve çoklu kritik noktalar ($A_1 = A_2$) aynı sıcaklıkta oluşur. J_2/J_1 ve J_3/J_1 iç parametreleri, tabakalar arasındaki etkileşimin şiddetini belirler. (a) $J_2/J_1 = 0.1$ ve 0.3 için ve (b) $J_2/J_1 = 1.0, 1.5$ ve 2.0 için.

3.3.3 $(kT/J_3, J_1/J_3)$ ve $(kT/J_3, J_2/J_3)$ Düzleminde Faz Diyagramları

Şekil 3. 5 (a) ve (b) J_2/J_3 ve J_1/J_3 'ün verilen değerleri için sırasıyla $(kT/J_3, J_1/J_3)$ ve $(kT/J_3, J_2/J_3)$ düzlemlerinde elde edilmiştir. Şekil 3. 4 de olduğu gibi sürekli çizgiler ikinci-dereceden faz geçiş çizgileridir ve dolayısıyla sistem daima ikinci-dereceden faz geçişi gösterir. İkinci dereceden faz geçiş çizgilerinin davranışı her iki şekilde de benzerlik gösterir, $J_2/J_3 = 0$ olduğunda J_1/J_3 (J_2/J_3)'ün küçük değerleri için kT/J_3 'ün küçük değerlerinden başlarlar ve kT/J_3 değeri arttıkça Şekil 3. 5' da görüldüğü gibi

ikinci-dereceden faz geçiş çizgileri J_2/J_3 (J_1/J_3) 'ye göre artarlar. En sonunda hepsi birleşir ve doğrusal (lineer) olarak artarlar. Bununla birlikte telafi sıcaklığı T_{telafi} çizgilerinin davranışı biraz farklıdır. Şekil 3.5 (a)'da T_c (kritik nokta sıcaklığı)'ye denk gelen T_{telafi} çizgileri J_1/J_3 'in küçük değerleri için küçük kT/J_3 değerlerinden başlar ve J_1/J_3 değerleri arttıkça düşük sıcaklıklarda sola doğru küçük bükülmeler yaparlar. Öte taraftan Şekil 3.5 (b)'de $J_2/J_3 = 0$ olduğunda bütün T_{telafi} çizgileri aynı $kT/J_3 = 3.460$ noktasından başlar ve J_2/J_3 arttıkça sıcaklıkları artar ve takip eden ikinci-dereceden faz geçiş çizgisi üzerinde sonlanırlar. Şekil 3. 5 (a) ve (b)'ye benzer faz diyagramları aynı zamanda Bethe örgüsü üzerinde [80] ve Ref [82]'de karma spin-3/2 ve spin-2 Ising modelinde elde edilmiştir.



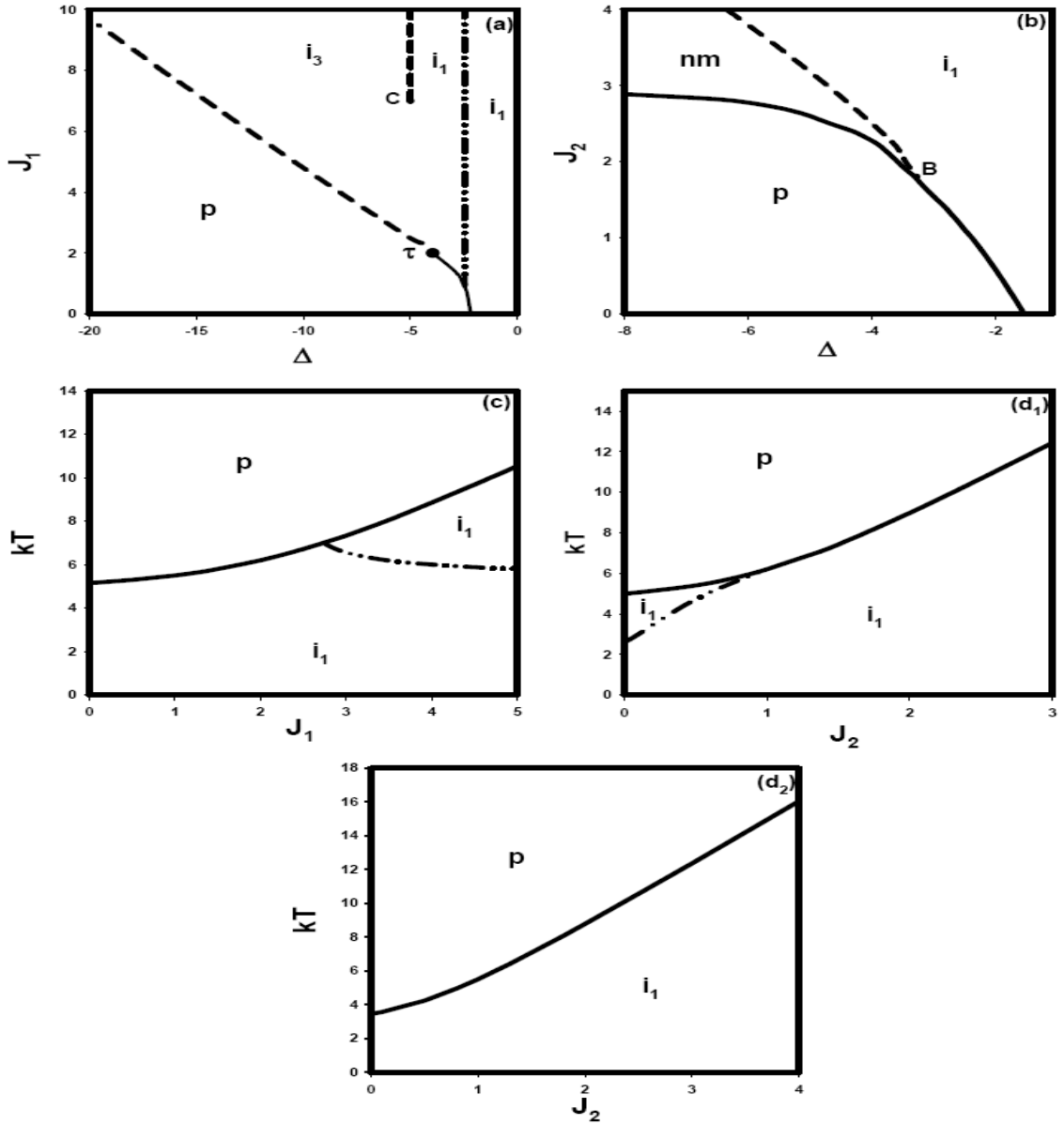
Şekil 3.5. Şekil 3. 4 'e benzer fakat $\Delta = 1.0$ ve $h=0.0$ için; (a) $(kT/J_3, J_1/J_3)$ düzleminde ve (b) $(kT/J_3, J_2/J_3)$ düzleminde faz diyagramları

3.3.4 (Δ, J_1) , (Δ, J_2) , (J_1, T) ve (J_2, T) Düzlemlerinde Faz Diyagramları

Şekil 3. 6 (a)- (d₂)’de telafi davranışını içeren faz diyagramları sırasıyla (Δ, J_1) , (Δ, J_2) , (J_1, T) ve (J_2, T) düzlemlerinde hesaplandı. Bu faz diyagramlarından aşağıdaki ilginç olaylar gözlemlendi. Bu faz diyagramlarındaki sürekli, kesikli ve kesikli - noktalı çizgiler sırasıyla ikinci-dereceden, birinci-dereceden faz geçişlerini ve telafi (compensation) sıcaklıklarını gösterir.

(i) Şekil 3. 6 (a) $J_2 = J_3 = 1.0$ ve $kT = 1.0$ için (Δ, J_1) düzleminde elde edildi ve üçlü kritik(τ) ve izole kritik noktanın (C) yanında i_1 , i_3 ve p fazlarını içerdiği görüldü. Bu fazlar arasındaki faz sınırları J_1 ’in küçük değerleri için birinci derecedendir. J_1 ’in büyük değerleri için i_1 ve p fazları arasındaki faz geçiş çizgisi ikinci derecedendir. i_1 ve i_3 fazları arasındaki birinci dereceden faz geçiş çizgisinin izole kritik noktada sonlandığı görülmektedir. Noktalı kesikli çizgi telafi sıcaklığını gösterir. (ii) $J_1 = J_3 = 1.0$ ve $kT = 2.0$ için faz diyagramı (Δ, J_2) düzleminde elde edildi ve Şekil 3.6 (b)’de görüldüğü gibi sistemin i_1 , nm ve p fazları içerdiği gözlemlendi. Faz diyagramı i_1 , nm, p fazlarının yanında ikili sonlu kritik nokta (B) özelliği sergiler. Bu noktayı vurgulayalım ki, Şekil 3.3 (b)’deki (B) ile bu şekildeki (B) kritik noktası biraz farklı görülmekle beraber, her ikisi de literatürlerde bu şekilde tanımlanmaktadır [57]. i_1 ve nm fazları ile nm ve p fazları arasındaki faz geçiş çizgileri sırasıyla birinci ve ikinci derecedendir. i_1 ve p fazları arasındaki faz sınırı da ikinci derecedendir. Çift kritik sonlu nokta, iki kritik çizginin aynı anda birinci-dereceden faz sınırının üzerinde kaybolduğu yerde oluşur [86]. İkili kritik noktalar deneysel olarak binary ve quasibinary sistemlerdeki sıvı-sıvı buharı dengesinde gözlemlenmiştir [87] ve FeBr₂ [88] metamagnetinde de ikili kritik noktanın bazı örnekleri görülmüştür. (iii) $J_2 = J_3 = 1.0$ ve $\Delta = 1.0$ değerleri için (J_1, T) düzleminde faz diyagramı elde edildi. Sistem p ve i_1 fazlarını içerir ve bu fazlar arasındaki faz sınırı Şekil 3. 6 (c)’de görüldüğü gibi ikinci-derecedendir. Bununla birlikte sistem aynı zamanda telafi sıcaklığı davranışı gösterir. (iv) Şekil 3. 6 (d₁) ve (d₂) sırasıyla $J_1 = 2.0$, $J_3 = 1.0$, $\Delta = 1.0$ ve $J_1 = 1$, $J_3 = 1$, and $\Delta = 1.0$ için (J_1, T) düzleminde elde edilmiştir. Bu figürlerde sistem her zaman, p fazını i_1 fazından ayıran ikinci-dereceden faz geçişi gösterir. Bununla birlikte J_1 in büyük değerleri için (örneğin $J_1 = 2.0$) faz diyagramı bu düzlemde Şekil 3.6’ de görüldüğü gibi aynı zamanda telafi davranışı gösterir. Son olarak şundan da bahsetmeliyiz ki Şekil 3.6 (a) ve (b)’de gösterilen faz diyagramları yalnızca bu sistemde görülmüştür. Bununla birlikte Şekil 3.6 (c), (d₁) ve (d₂)’ye benzer

faz diyagramları referans [82]'de verilen karma spin-3/2 ve spin-2 Ising sisteminde de elde edilmiştir.



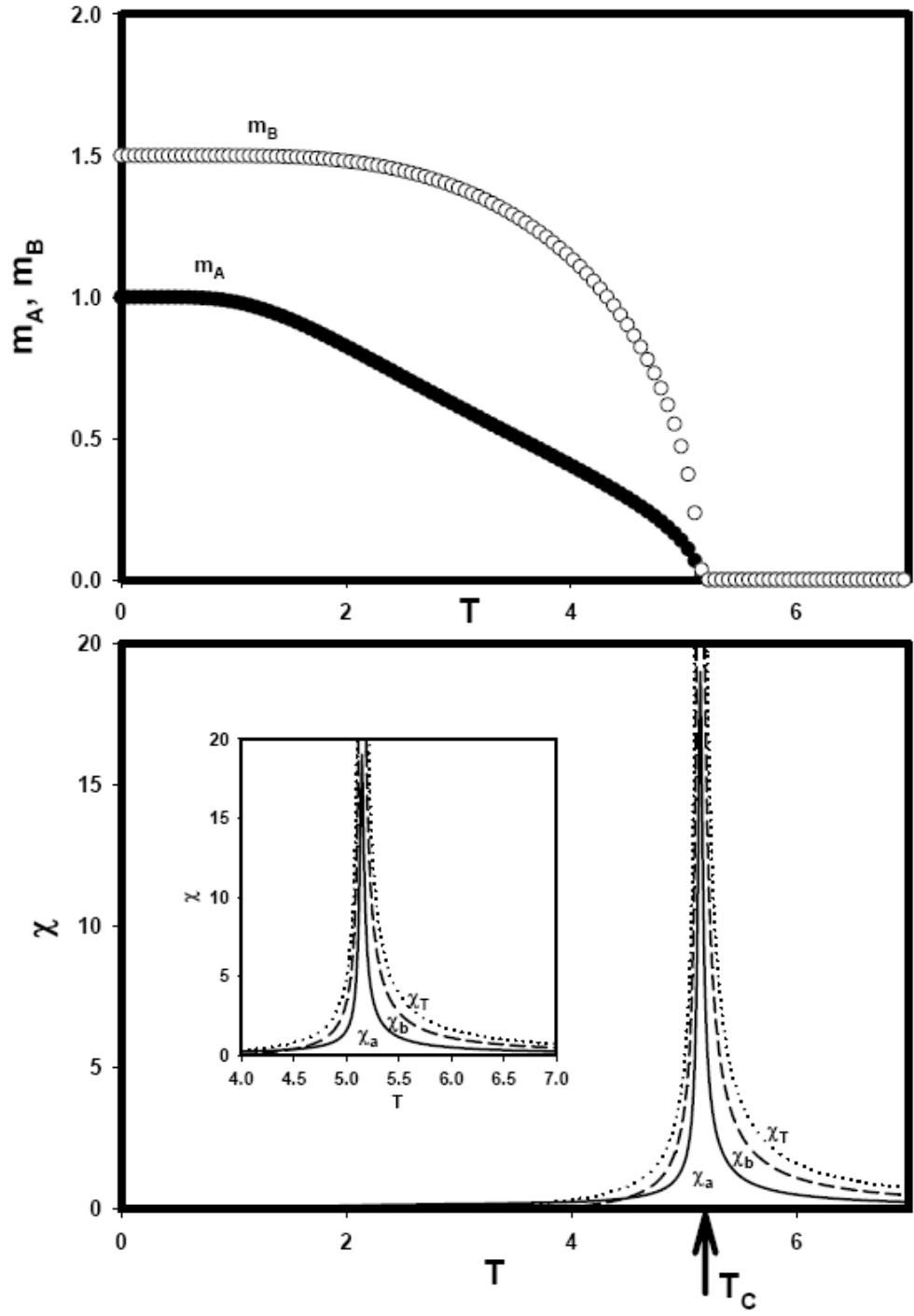
Şekil 3. 6. Şekil 3. 4'e benzer fakat $h = 0$ için; (Δ, J_1) , (Δ, J_2) , (J_1, T) ve (J_2, T) düzlemlerinde faz diyagramları. Sürekli, kesikli ve kesikli noktalı çizgiler sırasıyla ikinci dereceden, birinci dereceden faz geçişlerini ve telafi sıcaklığını gösterir. Özel noktalar; üçlü kritik (τ), izole kritik (C) ve çift kritik sonlu nokta (B)'dir. (a) $J_2 = J_3 = 1.0$, $kT = 1.0$ için (Δ, J_1) düzleminde (b) $J_1 = J_3 = 1.0$ ve $T = 2.0$ için (Δ, J_2) düzleminde (c) $J_2 = J_3 = 1.0$ ve $\Delta = 1.0$ için (J_1, T) düzleminde (d₁) $J_1 = 2.0$, $J_3 = 1.0$ ve $\Delta = 1.0$ için (J_2, T) düzleminde (d₂) $J_1 = 1$, $J_3 = 1$ ve $\Delta = 1.0$ için (J_2, T) düzleminde.

3.4. Termodinamik niceliklerin sıcaklıkla değişimi

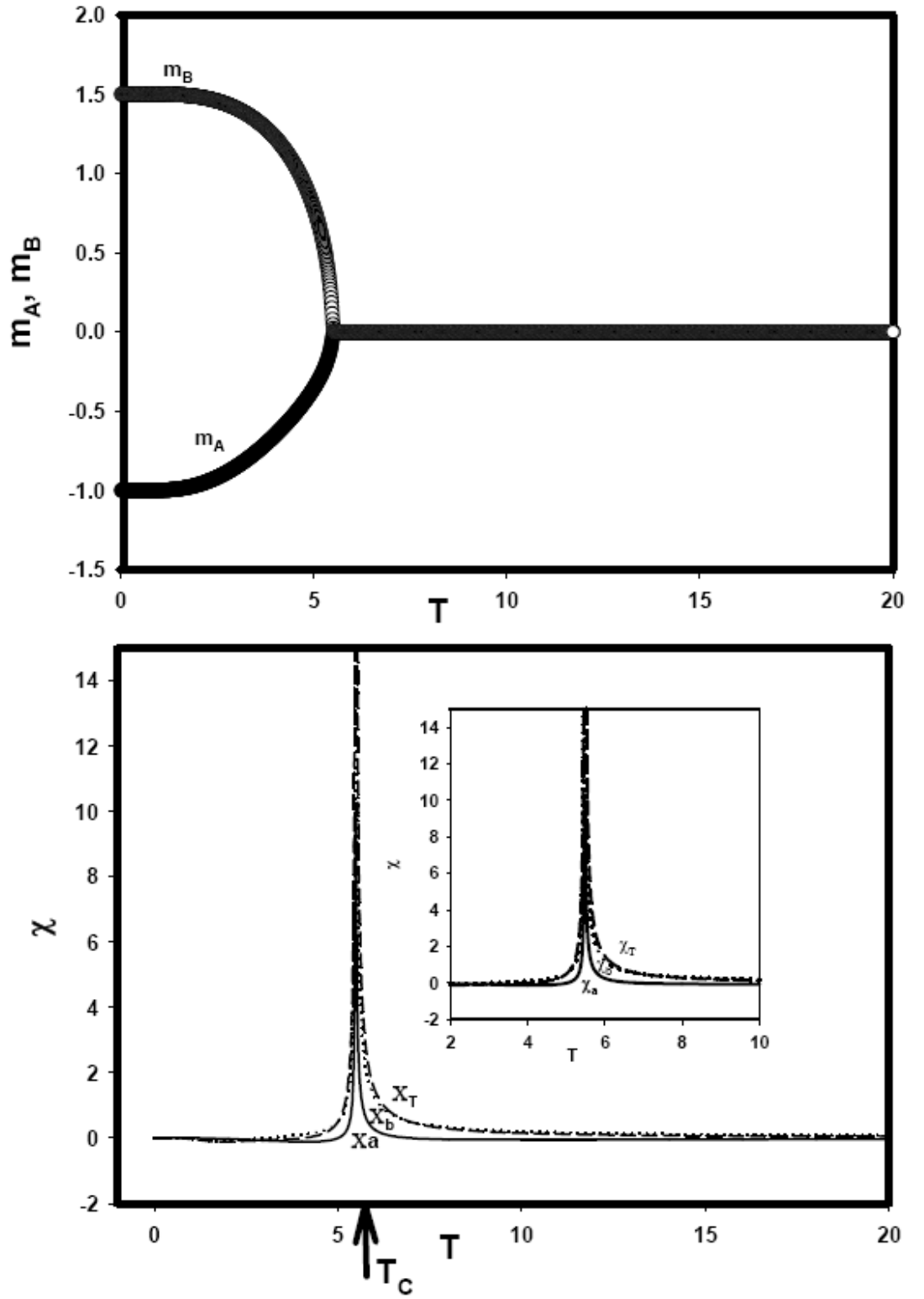
Termodinamik nicelikler sistemin doğası ve faz geçiş noktaları hakkında bilgi verir. Bu bölümde sistemin termodinamik nicelikleri olan iç enerji ve alinganlığın sıcaklıkla değişimi incelenecek ve bu niceliklerin faz geçiş sıcaklığında nasıl bir davranış gösterdiği açıklanacaktır.

3.4.1. Manyetik Alinganlık

Alt örgü mıknatıslanmaları m_A ve m_B 'nin termal davranışı ve bunlara karşı gelen alinganlıklar $\chi_\alpha = (\alpha = a, b \text{ ve } T)$ Şekil 3. 7 ve 3. 8'de gösterilmiştir. Bu alt örgü mıknatıslanmaları ile alinganlıkları hesaplamak için (2.62), (2.63) ve (2.68) denklemleri çözüldü. Şekil 3. 7 manyetik alan yokluğunda ($h = 0$) $\Delta = 1.0$, $J_2/J_1 = 0.1$ ve $J_3/J_1 = 1.0$ değerleri için elde edildi. Şekilden sıcaklık arttıkça alinganlığın arttığı gözlemlendi. Belli bir sıcaklık değerinde alinganlık pik yapmaktadır (sonsuz ıraksamaktadır). Alinganlığın pik yaptığı bu nokta faz geçiş sıcaklığı olarak tanımlanır. Burada i_1 ferrimanyetik fazından p fazına $T_c = 5.4$ sıcaklığında ikinci dereceden bir faz geçişi meydana gelmektedir. Faz geçiş sıcaklığı aynı zamanda toplam mıknatıslanmanın sıfır olduğu sıcaklıktır. Şekilden görüldüğü gibi toplam mıknatıslanmanın sıfır olduğu sıcaklık ile alinganlığın pik yaptığı sıcaklık aynıdır. Şekil 3. 8 de etkileşim parametrelerinin farklı değerleri için elde edildi. Her iki şekilde de faz geçiş sıcaklığından sonra alinganlığın azalarak sıfıra yaklaştığı görülmektedir. Burada ise faz geçiş sıcaklığı $T_c = 5.15$ 'tir. Alt örgü mıknatıslanmaları ile alinganlıkların aynı kritik (T_c) sıcaklık değerini vermesinden dolayı, böylece sonuçların doğruluğu da test edilmiş olmaktadır.



Şekil 3. 7. $\Delta = 1.0$, $h = 0.0$, $J_2/J_1=0.1$ ve $J_3/J_1 = 1.0$ değerleri için alt örgü mıknatıslanmalarının ve alınganlığın sıcaklıkla değişimi.

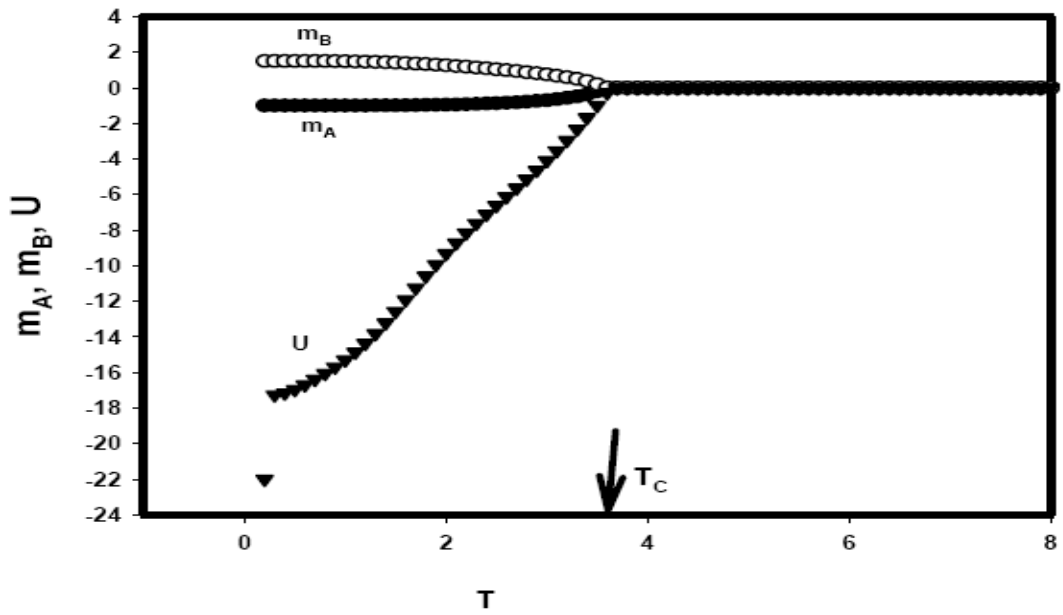


Şekil 3. 8. $\Delta = 1.0$, $h = 0.0$, $J_2/J_1=1.0$ ve $J_3/J_1 = 1.0$ değerleri için alt örgü mıknatıslanmalarının ve alınganlığın sıcaklıkla değişimi.

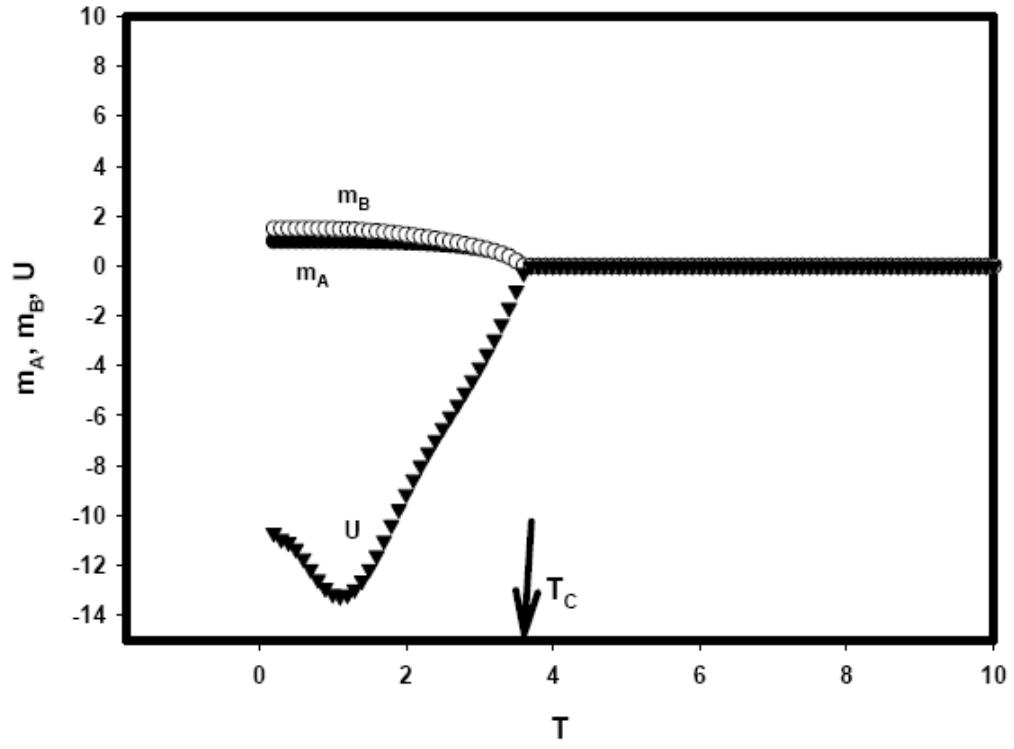
3.4.2 İç Enerji

Sistemin diğeri bir termodinamik niceliğı de iç enerjidir. Şekil 3. 9 ve Şekil 3.10'da iç enerjinin sıcaklıkla değışimi görölmektedir. Şekillerde göröldüğü gibi iç enerji, T_C kritik sıcaklığında süreksizdir. Bu T_C sıcaklığı iç enerjinin türevinin süreksiz olduğı noktaya karşılık gelir. Bu da ikinci-derece faz geçişine karşılık gelir. Benzer davranış daha önceki karma spin (1, 2) [89], karma spin (2, 5/2) [90, 91] çalışmaları da elde edilmiştir.

Son olarak bu noktayı da belirtelim ki, Şekil 3. 1- 3. 6'da elde edilen sonuçlar Solid State Communications dergisinde basım aşamasındadır [92].



Şekil 3. 9. $\Delta = 1.0$, $h = 0.0$, $J_2/J_1=0.1$ ve $J_3/J_1 = 1.0$ değeri için alt örgü miknatislanmalarının ve iç enerjinin sıcaklıkla değışimi



Şekil 3. 10. $\Delta = 1.0$, $h = 0.0$, $J_2/J_1 = 1.0$ ve $J_3/J_1 = 1.0$ değerleri için alt örgü mıknatıslanmalarının ve iç enerjinin sıcaklıkla değişimi

4. BÖLÜM

SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu tez çalışmasında birbirini takip eden (alternatif) tabakalı balpeteği örgüsü üzerinde karma spin-1 ve spin-3/2 Ising sisteminin dengeli davranışı manyetik alan yokluğunda ($h=0$) korelasyonlu EAT kullanılarak incelendi. Önce, modelin daha iyi anlaşılması için model ve benzeri modeller hakkında yapılan çalışmalardan kısaca bahsedildi. Daha sonra EAT tek bir spin-1/2 parçacığından oluşan sisteme uygulanarak metod tanıtıldı. Bu tanıtım kısmından sonra, model yani karma spin-1 ve spin-3/2 Ising sisteminin EAT ile incelemesine geçildi.

Elde edilen yüksek sıcaklık faz diyagramlarının güvenilirliğini kontrol etmek için Şekil 3. 1’de gösterilen taban durum faz diyagramları elde edildi. Faz diyagramlarının i_1 ve i_3 ferrimanyetik fazları ile birlikte nm fazı içerdiği görüldü. Taban durum faz diyagramının $h=0$ ekseninde simetrik olduğu gözlemlendi. Daha sonra alt örgü mıknatıslanmalarının ve toplam mıknatıslanmanın termal davranışı kapsamlıca incelendi ve faz geçişlerinin doğası (birinci veya ikinci- dereceden) ve faz geçiş sıcaklıkları elde edildi. Aynı zamanda bazı durumlarda birbirini izleyen iki faz geçişi de gözlemlendi ki, bu şekilde faz geçişleri deneysel olarak da $DyVO_4$ bileşiğinde [78] gözlemlenmiştir. Ayrıca, ortalama toplam mıknatıslanmanın sıcaklığa göre davranışı incelenerek, telafi sıcaklıkları ve davranışları araştırıldı ve sonuçta sistemde N-tipi telafi (compensation) davranışının olduğu tespit edildi [76-77]. Bu incelemeler sonucu: (i) $(\Delta/|J_3|, kT/|J_3|)$ düzlemindeki faz diyagramları elde edildi ve bu faz diyagramlarında Δ ’nın belli negatif değerleri ve T ’nin küçük değerleri dışında fazları ayıran faz sınır çizgilerinin ikinci-dereceden faz geçiş çizgileridir. Ayrıca Δ ’nın negatif ve T ’nin küçük değerleri için i_1 ve nm fazlarını ayıran birinci-dereceden faz geçiş çizgisi izole kritik nokta (C) üzerinde son bulmaktadır. Bu faz diyagramları sistemin izole kritik nokta (C)

ve çift kritik (bikritik) nokta (B) sergilemektedirler. (ii) $(kT/J_1, J_3/J_1)$ düzleminde faz diyagramı elde edildi. Bu faz diyagramında üçlü kritik ve çoklu kritik noktalara rastlandı. Benzer faz diyagramları Bethe örgüsü üzerinde karma spin $(1, 3/2)$ [80, 81], balpeteği örgüsü üzerinde alternatif iki tabakalı karma spin $(3/2, 2)$ Ising sistemi ve balpeteği örgüsü üzerinde spin-1/2 Ising sistemi ve EAT çerçevesinde üç alternatif tabakalı kare örgü [83] üzerinde elde edilmiştir. (iii) J_2/J_3 ve J_1/J_3 'ün verilen belirli değerleri için sırasıyla $(kT/J_3, J_1/J_3)$ ve $(kT/J_3, J_2/J_3)$ düzlemlerinde faz diyagramları elde edildi. Bu faz diyagramlarından sistemin daima ikinci dereceden faz geçişi gösterdiği görüldü. Bu faz diyagramlarında aynı zamanda telafi davranışı da görüldü. Benzer faz diyagramları Bethe örgüsü üzerinde [80] ve Ref [82]'de karma spin-3/2 ve spin-2 Ising modelinde elde edilmiştir. (iv) Son olarak, (Δ, J_1) , (Δ, J_2) , (J_1, kT) ve (J_2, kT) düzlemlerinde faz diyagramları hesaplandı, sırasıyla Şekil 3. 6 (a), (b), (c), (d₁) ve (d₂)'de gösterildi. Bu faz diyagramlarından sistemin çift kritik sonlu (B), üçlü kritik (τ) ve izole kritik (C) noktanın yanında i_1 , i_3 , nm ve p fazlarını içerdiği görüldü. Çift kritik sonlu nokta (B) $J_3 = 1.0$ ve $kT = 2.0$ için (Δ, J_2) düzleminde elde edilen faz diyagramında görüldü. Çift kritik sonlu nokta, iki kritik noktanın aynı anda birinci-dereceden faz sınırının üzerinde kaybolduğu yerde oluşur [86]. Çift kritik sonlu noktalar deneysel olarak binary ve quasibinary sistemlerdeki sıvı-sıvı buharı dengesinde gözlemlenmiştir [87] ve FeBr₂ metamagnetinde de çift kritik sonlu noktanın bazı örnekleri görülmüştür [88]. Üçlü kritik kritik davranış ise çoklu-bileşikli karışımlarda, NH₄Cl bileşiğinin yönlü düzenli-düzensiz faz geçişlerinde ve DAG, FeCl₂, FeBr₂, Ni (NO₃)₂·2H₂O, vs. gibi bileşiklerin metamagnetik geçişlerinde deneysel olarak gözlemlenmiştir. Şekil 3.6 (a) ve (b)'deki faz diyagramları sadece bu sistemde görülmüştür. Şekil 3.6 (c), (d₁) ve (d₂)'ye benzer faz diyagramları Ref [82]'de verilen karma spin-3/2 ve spin-2 Ising sisteminde de elde edilmiştir.

Faz diyagramlarına ilaveten, sistemin manyetik alınganlık χ_α ve iç enerjisi (U) hesaplandı ve bunların sıcaklığa göre davranışı kapsamlıca incelendi. Kritik sıcaklıkta, sistemin alınganlığının ıraksadığı ve iç enerjinin süreksizlik gösterdiği gözlemlendi. χ_α ve U'nun davranışlarından elde edilen T_C 'ler ile alt örgü mıknatıslanmalarının davranışlarından elde edilen T_C 'lerin tam uyum içinde olduğu gözlemlendi. Böylece, yapılan nümerik hesaplamaların doğruluğu test edilmiş oldu.

KAYNAKLAR

1. Mansuripur M., Magnetization reversal, coercivity, and the process of thermomagnetic Ising thin films of amorphous rare earth-transition metal alloys, *Journal of Applied Physics* , 61, 1580-1587, 1987.
2. Coronado, E. , Dekhais, P. , Gatteschi, D. , Miller, J. S. , *Molecular Magnetism: From Molecular Assemblies to the Devices* (NATO ASI Series E, Vol. 321), Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1996.
3. Vieira, A. P. , de Carvalho, J. X. , Salinas, S. R. , Phase diagram of a random-anisotropy mixed-spin Ising model, *Phys. Rev. B*, 63, 184415, 2001.
4. Kaneyoshi, T. , Surface magnetism of a semi-infinite spin-1/2 Ising system with decorated spin-S atomson a surface, *Phys. Rev. B*, 55, 12497, 1997.
5. Albayrak, E. , Keskin, M. , Mixed spin-1/2 and spin-1 Blume-Capel Ising ferrimagnetic system on the Bethe lattice, *J. Magn. Magn. Mater.*, 261, 196, 2003.
6. Kasama, T. , Muraoka, Y. , Idogaki, T. , Molecular field and Monte Carlo study for the mixed-spin axial next-nearest-neighbor Ising model, *Phys. Rev. B*, 73, 214411, 2006.
7. Belmamoun, Y. , Kerouad, M. , Phase transition and magnetic properties of a bond-diluted mixed spin-1 and spin-1/2 Ising model with the uniaxial and biaxial single-ion anisotropy, *Phys. Scr.* , 77, 1, 2008.
8. Schofield, S. L. , Bowers, R. G., High-temperature series expansion analyses of mixed-spin Ising model, *J. Phys. A: Math. Gen.* 14, 2163, 1981.
9. Kaneyoshi, T. , Theory of Surface Phase Diagrams in Semi-Infinite Mixed Ising Alloys, *J. Phys. Soc. Jpn.* , 56, 2886, 1987.
10. Plascak, J. A. , Multicritical points in the ferromagnetic binary Ising model, *Physica A*, 198, 655, 1993.
11. Buendía, G. M. , Novonty, M. A., Numerical study of a mixed Ising ferrimagnetic system, *J. Phys.: Condens. Matter*, 9, 5951, 1997.
12. Gonçalves, L. L. , Uniaxial Anisotropy Effects in the Ising Model: an Exactly Soluble Model, *Phys. Scr.* , 32, 248, 1985.
13. Gonçalves, L.L. , Uniaxial Anisotropy Effects in the Ising Model: an Exactly Soluble Model, *Phys. Scr.*, 33, 192, 1986.

14. Da Silva, N. R. , Salinas, S. R. , Mixed-spin Ising model on the Bethe lattice, *Phys. Rev. B*, 44, 852, 1991.
15. Albayrak, E. , Exact Calculation Of The Magnetic Susceptibility and the Specific Heat of The Mixed Spin-1/2 and Spin-1 System on the Bethe Lattice, *Int. J. Mod. Phys. B*, 18, 3959, 2004.
16. Ekiz, C. , Erdem, R. , Effect of crystal-field potential on compensation temperature of a mixed spin-1/2 and spin-1 Ising ferrimagnetic system, *Phys. Lett. A*, 352, 291, 2006.
17. Ekiz, C. , Ferrimagnetism in the mixed spin Ising system on a two-fold Cayley tree, *J. Magn. Magn. Mater*, 293, 759, 2005.
18. Albayrak, E. , Bulut, T. , Yilmaz, S. , Critical and Compensation Temperatures of the of Ising Bilayer System Consisting of Spin-1/2 and Spin-1 Atoms, *J. Stat. Phys.*, 127, 967, 2007.
19. Albayrak, E. , Yilmaz, S. , Spin-1/2 and spin-1 Ising model with crystal field on a bilayer Bethe lattice, *Physica A*, 387, 1173, 2008.
20. Ekiz, C. , Influence of anisotropic crystal field on a ferrimagnetic mixed-spin bilayer system, *Physica A*, 387, 1185, 2008.
21. Buendía, G.- M. ,Machado, E. , Kinetics of a mixed Ising ferrimagnetic system *Phys.Rev. E*, 58, 1260, 1998.
22. Keskin M. , Canko O. , Polat Y. , Dynamic phase transitions in the kinetic mixed spin-1/2 and spin-1 Ising ferrimagnetic system under time-dependent magnetic field, *J. Korean.Phys. Soc.*, 53, 497, 2008.
23. Ekiz, C. , Keskin, M., Magnetic properties of the mixed spin-1/2 and spin-1 Ising ferromagnetic system, *Physica A*, 317, 517, 2003.
24. Godoy, M., Figueiredo, W. , Mixed-spin Ising model with one- and two-spin competing dynamics, *Phys. Rev. E* 61, 218, 2000.
25. Godoy, M. , Figueiredo, W. , Critical behavior of the mixed-spin Ising model with two competing dynamics, *Phys. Rev. E*, 65, 026111, 2002.
26. Godoy, M. , Figueiredo, W. , Nonequilibrium antiferromagnetic mixed-spin Ising model, *Phys. Rev. E*, 66, 036131, 2002.
27. Benayad, N. , Dakhama, A. , Klumper, A. , Zittartz, J. , Mixed spin-3/2 and spin-1/2 Ising models with random nearest-neighbour interactions, *Annalen Der Physik*, 5, 387, 1996.

28. Buendia, G. M. , Cardona, R. , Monte Carlo study of a mixed spin-3/2 and spin-1/2 Ising Ferrimagnetic model, *Phys. Rev. B*, 59, 6784, 1999.
29. Bobák, A. , Jurčišin, M. , Ferrimagnetism in diluted mixed spin-1/2 and spin- 3/2 Ising systems, *Journal De Physique IV*, 7, 179, 1997.
30. Bobák, A. , Horvath, D. , Magnetic properties of diluted mixed spin-1/2 and spin-s Ising ferrimagnets with a crystal field, *Phys. Status Solidi B-Basic Research*, 213, 459, 1999.
31. Jiang, W. , Wei, G. Z. , Xin, Z. H. , Magnetic properties of a mixed spin-1/2 and spin-3/2 transverse Ising model with a crystal field , *Physica A*, 293, 455, 2001.
32. Benayad, N. , Dakhama, A. , Klumper, A. , Zittartz, J. , Magnetic properties of a mixed spin-1/2 and spin-3/2 transverse Ising model, *Zeitschrift Fur Physik B-Condensed Matter*, 101, 623, 1996.
33. Wei, G. Z. , Liang, Y. Q. , Zhang, Q. , Xin, Z. H. , Magnetic properties of mixed-spin Ising systems in a longitudinal magnetic field, *J. Magn. Magn. Mater.*, 271, 246, 2004.
34. Li, J. , Wei, G. Z. , Du, A. , Green function study of a mixed spin-3/2 and spin-1/2 Heisenberg ferrimagnetic model, *J. Magn. Magn. Mater.*, 269, 410, 2004.
35. Albayrak, E. , Alci, A., Mixed spin-1/2 and spin-3/2 Blume-Capel Ising ferrimagnetic system on the Bethe lattice, *Physica A*, 345, 48, 2005.
36. Strečka, J. , Canova, L. , Dely, J. , Weak universal critical behaviour of the mixed spin- (1/2, S) Ising model on the Union Jack (centered square) lattice: integer versus half-odd- integer spin-S case, *Phys. Status Solidi B-Basic Solid State Physics*, 243, 1946, 2006.
37. Strečka, J. , Canova, L., Non-universal critical behaviour of a mixed-spin Ising model on the extended Kagome lattice, *Condens. Matter Phys.*, 9, 179-186, 2006.
38. Zhang, X. , Kong, X. M., Ferromagnetism in the mixed spin-1/2 and spin-3/2 Blume- Capel system on the two-fold Cayley tree, *Physica A*, 369, 589-598, 2006.
39. Jaščur, M., Strečka, J., Magnetic properties of a mixed spin-1/2 and spin-3/2 Ising model with an uniaxial and biaxial crystal-field potential, *Physica A*, 358, 393, 2005.
40. Maćkowiak, J., Mean-field heat capacity of dilute magnetic alloys, *arXiv:cond-mat/0703146v1*

41. Deviren, B. , Keskin, M., Canko, O., Kinetics of a Mixed Spin-1/2 and Spin-3/2 Ising Ferrimagnetic Model, *J. Magn. Magn. Mater.*, 321, 458, 2009.
42. Bobák, A. , Jurčišin, M., A theoretical study of the diluted mixed spin-1 and spin-3/2 Ising ferrimagnet, *Physica B*, 233, 187, 1997.
43. Wei, G.- Z., Xin, Z.-H., Wei, J., Phase diagrams and tricritical behavior in mixed spin and spin-3/2 Ising model on honeycomb lattice *J. Magn. Magn. Mater.*, 204, 144, 1999.
44. Bobák, A., Multicritical points in the mixed spin-1 and spin-3/2 Ising system on a square lattice with different single-ion anisotropies, *Physica A*, 286, 531, 2000.
45. Wei, J, Wei, G.- Z., Zhang, Z.- D., Tricritical behavior and magnetic properties for a mixed spin-1 and spin-3/2 transverse Ising model with a crystal field, *Phys. Rev. B*, 68, 134432, 2003.
46. Abubring, O.- F. , Horváth, D., Bobák, A., Jaščur, M., Mean-field solution of the mixed spin-1 and spin-3/2 Ising system with different single-ion anisotropies, *Physica A*, 296, 437, 2001.
47. Numata Y. Inoue K., Baranov N., Kurmoo M., and Kikuchi K, Field-Induced Ferrimagnetic State in a Molecule-Based Magnet Consisting of a CoII Ion and a Chiral Triplet Bis(nitroxide) Radical *J. Am. Chem. Soc.* 129, 9902, 2007.
48. Tucker, J. W. , Mixed spin-1 and spin 3/2 Blume–Capel Ising ferromagnet, *J. Magn. Magn. Mater.* , 237, 215, 2001.
49. Nakamura, Y., Tucker, J. W., Monte Carlo Study of a Mixed Spin-1 and Spin-3/2, Ising Ferromagnet, *IEEE Transactions on Magnetism*, 38, 2406, 2002.
50. Wei, G.- Z., Zhang, Q., Gu, Y., Monte Carlo studies of critical phenomena in mixed spin-1 and spin-3/2 Blume–Capel Ising model on simple cubic lattice, *J. Magn. Magn. Mater.*, 301, 245, 2006.
51. Albayrak, E., Mixed spin-1 and spin-3/2 Blume-Capel Ising Ferrimagnetic system on the Bethe lattice, *Int. J. Mod. Phys. B*, 17, 1087, 2003.
52. Albayrak, E., Alçi, A., Mixed spin-1/2 and spin-3/2 Blume-Capel Ising Ferrimagnetic system on the Bethe lattice, *Physica A*, 345, 48, 2005.
53. Ekiz, C., The possibility of two compensation points in a ferrimagnetic mixed spin-1 and spin-3/2 Ising system using Bethe lattice approach, *J. Magn. Magn. Mater.*, 307, 139, 2006.

54. Bobák, A. , Dely, J. , Phase transitions and multicritical points in the mixed spin- 1 and spin-3/2 Ising system with a single-ion anisotropy, J. Magn. Magn. Mater., 310, 1419, 2007.
55. Albayrak E., The Critical and Compensation Temperatures for the Mixed spin-3/2 and spin-2 Ising Model, Physica B, 391, 47, 1997.
56. Hu, C. K. , Izmailian, N. Sh. , Oganessian, K. B., Exact phase diagrams for an Ising model on a two-layer Bethe lattice, Phys. Rev. E 59, 6489, 1999.
57. Keskin, M., Kantar, E., Canko, O., Kinetics of a mixed spin-1 and spin-3/2 Ising system under a time-dependent oscillating magnetic field, Phys. Rev. E, 77, 051130, 2008.
58. Kaneyoshi, T., The Tricritical Point in Ising Models with Random Bonds and Crystal-Field Interactions, J. Phys. C: Solid State Phys., 19, L557-L561, 1986.
59. Kaneyoshi, T., and Benyoussef, A., Correlated Effective-Field Treatment of the Blume-Capel Model with Half Integer Spins, Phys. Stat. Sol. b, 178, 233-246, 1993.
60. Callen, H.B., A Note on Green Functions and the Ising Model, Phys. Lett., 4, 161, 1963.
61. Suzuki, M. , Generalized Exact Formula for the Correlations of the Ising Model and other Classical Systems, Phys. Lett., 19, 267-268, 1965.
62. Matsudaira, N. , Ising Ferromagnets with Random Impurities. J. Phys. Soc. Jpn., 1593-1599, 1973.
63. Honmura, R. , Kaneyoshi, T. , Contribution to the New Type of Effective Field Theory of the Ising Model, J. Phys. C, 12, 3979-3992, 1979.
64. Jiang, W. , Wei, G.Z. , Xin, Z.H. , Specific Heat of Spin Transverse Ising Model with the Crystal Field on Honeycomb Lattice. Phys. Stat. Sol. b , 219, 157-161, 2000.
65. Richard, L., Introductory Quantum Mechanics, (3rd. Edition) Addison-Wesley.
66. Kaneyoshi, T. , Differential Operator Technique in the Ising Spin Systems, Acta Phys. Pol. A, 83, 703-738, 1993.
67. Waerden, B. , L. , V. , Beweis Einer Baudetschen Vermutung, Nieuw. Arch. Wisk, 15, 212-216, 1927.
68. Tucker, J.M, Generalized Van der Waerden Identities, J. Phys. A, 27, 659-662, 1994.

69. Kaneyoshi, T. , Beyer, H. , Amorphization of Layered Ferro-and Antiferromagnetic Systems, J. Phys. Soc. Japan 49, 1306-1317, 1980.
70. Kaneyoshi, T. , et al. , Amorphization of a Crystalline Diluted Ising Ferrimagnet, Phys. Rev. B, 29, 5121-5127, 1984.
71. Zernike, F. , the Propagation of Order in Co-Operative Phenomena:Part I. the AB Case, Physica 7, 565-585, 1940.
72. Kaneyoshi, T. , Tamura, I. , Sarmento, E.F. , Surface Magnetic Properties of the Ising Model with a Diluted Free Surface, Phys. Rev. B, 28, 6491-6498, 1983.
73. Callen, H.B. , A Note on Green Functions and the Ising Model, Phys. Lett. , 4, 161, 1963.
74. Kaneyoshi, T. , Jascur, M. ,Tomeczak, P. , Transverse Ising Model with Arbitrary Spin, J.Phys. :Condens.Matter, 5, 5331, 1993.
75. Wei G., Zhang Q, Xin Z., and Liang Y., Internal energy and initial succceptibility of mixed spin-2 and spin-5/2 ferrimagnetic system with intralayer coupling, 277, 1, 2004
76. Néel, L., Magnetic Properties of Ferrits: Ferrimagnetism and Antiferromagnetism, Ann. Phys. 3, 137 1948.
77. Chikazumi, S. , Physics of Ferromagnetism (Oxford University Press, Oxford) 1997.
78. Cooke, A. H. , Ellis, C. J., Gehring, K. A. , M. Leask, M. J. , Martin, D. M. , Wanklyn, B. M. , Wells, M. R. , and White, R. L. , Observation of a Magnetically Controllable John Teller Distortion in Dysprosium Vanadate at Low Temperature, Solid State Commun. 8, 689, 1970.
79. Plascak J. A., Moreira J. G., sá Barreto F.C., Mean Field Solution of the General Spin Blume-Capel Model, Phys. Lett. A 173, 360, 1993.
80. Albayrak E., Yilmaz S., J., The spin-1 and spin-3/2 model on a bilayer Bethe lattice with crystal field, Phys. Condens. Matter 19, 376212, 2007.
81. Albayrak E., Bulut T., The Bethe Lattice Treatment of an Ising Bilayer Model Consisting of Spin-1 and Spin-3/2, Physica B 400 , 124, 2007.
82. Deviren B., Polat Y., Keskin M., Phase diagrams in the mixed spin-3/2 and spin-2 Ising system with two alternative layers within the effective-field theory, Chin. Phys. B (gönderildi).

83. Deviren B., Canko O., Keskin M., Effective Field Theory of the Ising Model with three Alternative Layers on the Honeycomb and Square Lattices, J. Magn. Magn. Mater., 320, 2291 2008.
84. Albayrak E., The Ising model on a trilayer Bethe lattice, Phys. Stat. Sol. b 244, 759, 2007.
85. Albayrak E., Canko O., The Exact Phase Diagrams of Spin-1 Ising Model on a two layer Bethe Lattice , Physica A 373, 363, 2007.
86. Plascak J. A., Landau D.P., Universality and Double Critical end Points, Phys. Rev.E 67 015103(R) 2003.
87. Poot W., De Loos T.W., Liquid-liquid-vapour equilibria in binary and quasi-binary systems of CHF₃ with n-alkanes, phenylalkanes and alkanols Physical Chemistry - Chemical Physics 18, 4293, 1999.
88. Katsumata K., Katori H. Aruga, Shapiro S.M., Shirane G., Neutron-Scattering Studies of a Phase Transition in the Metamagnet FeBr₂ Under External Magnetic Fields, Phys. Rev.B 55 11466 1997.
89. Albayrak, E., Yiğit A., The critical behavior of the mixed spin-1 and spin-2 Ising ferromagnetic system on the Bethe lattice, Physica A, 349, 471-486, 2005.
90. Wei, G., Zhang, Q., Zhao, J., Yongwei, G., Tricritical behavior of mixed spin-2 and spin- 5/2 ferrimagnetic Ising system with interlayer coupling, Physica B, 381, 6, 2006.
91. Nakamura, Y., Existence of a compensation temperature of a mixed spin-2 and spin-5/2 Ising ferrimagnetic system on a layered honeycomb lattice, Physical Review B, 62, 11742, 2000.
92. Deviren, B., Akbudak, S., Keskin, M., Mixed spin-1 and spin-3/2 Ising system with two alternative layers of a honeycomb lattice within the effective-field theory, Solid State Commun (yayımlanmıştır).

Ek 1

Denklem (12) ve (13)'teki A_i ($i = 0, 1, \dots, 48$) ve B_j ($j = 0, 1, \dots, 49$) katsayıları aşağıdaki gibidir;

$$A_0 = 1/256 [164f(0) + f(-3J_3) - 18f(-2J_3) + 63f(-J_3) + 63f(J_3) - 18f(2J_3) + f(3J_3)],$$

.

.

$$\begin{aligned} A_{48} = 1/288 [& 400f(0) - 20f(-3J_1) + 120f(-2J_1) - 300f(-J_1) - 300f(J_1) + 120f(2J_1) \\ & - 20f(3J_1) - 20f(-3J_3) + 120f(-2J_3) - 300f(-J_3) - 300f(J_3) + 120f(2J_3) - 20f(3J_3) \\ & + f(-3J_1 - 3J_3) - 6f(-2J_1 - 3J_3) + 15f(-J_1 - 3J_3) + 15f(J_1 - 3J_3) - 6f(2J_1 - 3J_3) \\ & + f(3J_1 - 3J_3) - 6f(-3J_1 - 2J_3) + 36f(-2J_1 - 2J_3) - 90f(-J_1 - 2J_3) - 90f(J_1 - 2J_3) \\ & + 36f(2J_1 - 2J_3) - 6f(3J_1 - 2J_3) + 15f(-3J_1 - J_3) - 90f(-2J_1 - J_3) + 225f(-J_1 - J_3) \\ & + 225f(J_1 - J_3) - 90f(2J_1 - J_3) + 15f(3J_1 - J_3) + 15f(-3J_1 + J_3) - 90f(-2J_1 + J_3) \\ & + 225f(-J_1 + J_3) + 225f(J_1 + J_3) - 90f(2J_1 + J_3) + 15f(3J_1 + J_3) - 6f(-3J_1 + 2J_3) \\ & + 36f(-2J_1 + 2J_3) - 90f(-J_1 + 2J_3) - 90f(J_1 + 2J_3) + 36f(2J_1 + 2J_3) - 6f(3J_1 + 2J_3) \\ & + f(-3J_1 + 3J_3) - 6f(-2J_1 + 3J_3) + 15f(-J_1 + 3J_3) + 15f(J_1 + 3J_3) - 6f(2J_1 + 3J_3) + f(3J_1 + 3J_3)], \end{aligned}$$

$$B_0 = -1/4096 \left[\begin{aligned} & g(-9J_2/2) - 27g(-7J_2/2) + 216g(-5J_2/2) - 240g(-3J_2/2) - 1998g(-J_2/2) \\ & - 1998g(J_2/2) - 240g(3J_2/2) + 216g(5J_2/2) - 27g(7J_2/2) + g(9J_2/2) \end{aligned} \right],$$

.

$$\begin{aligned} B_{49} = +1/864 [& -6g(-9J_2/2) + 54g(-7J_2/2) - 216g(-5J_2/2) + 504g(-3J_2/2) \\ & - 756g(-J_2/2) + 756g(J_2/2) - 504g(3J_2/2) + 216g(5J_2/2) - 54g(7J_2/2) \\ & + 6g(9J_2/2) - g(-9J_2/2 - 2J_3) + 9g(-7J_2/2 - 2J_3) - 36g(-5J_2/2 - 2J_3) \\ & + 84g(-3J_2/2 - 2J_3) - 126g(-J_2/2 - 2J_3) + 126g(J_2/2 - 2J_3) - 84g(3J_2/2 - 2J_3) \\ & + 36g(5J_2/2 - 2J_3) - 9g(7J_2/2 - 2J_3) + 4g(-9J_2/2 - J_3) - 36g(-7J_2/2 - J_3) \\ & + 144g(-5J_2/2 - J_3) - 336g(-3J_2/2 - J_3) + 504g(-J_2/2 - J_3) - 504g(J_2/2 - J_3) \\ & + 336g(3J_2/2 - J_3) - 144g(5J_2/2 - J_3) + 36g(7J_2/2 - J_3) - 4g(9J_2/2 - J_3) \\ & + 4g(-9J_2/2 + J_3) - 36g(-7J_2/2 + J_3) + 144g(-5J_2/2 + J_3) - 336g(-3J_2/2 + J_3) \\ & + 504g(-J_2/2 + J_3) - 504g(J_2/2 + J_3) + 336g(3J_2/2 + J_3) - 144g(5J_2/2 + J_3) \\ & + 36g(7J_2/2 + J_3) - 4g(9J_2/2 + J_3) - g(-9J_2/2 + 2J_3) + 9g(-7J_2/2 + 2J_3) \\ & - 36g(-5J_2/2 + 2J_3) + 84g(-3J_2/2 + 2J_3) - 126g(-J_2/2 + 2J_3) + 126g(J_2/2 + 2J_3) \\ & - 84g(3J_2/2 + 2J_3) + 36g(5J_2/2 + 2J_3) - 9g(7J_2/2 + 2J_3) + g(9J_2/2 + 2J_3)]. \end{aligned}$$

ÖZGEÇMİŞ

Adı ve Soyadı: Salih Akbudak

Baba Adı: Mehmet

Anne Adı: Fatma

Doğum Yeri: Adıyaman

Doğum Tarihi: 01.07.1982

İlk ve orta öğrenimini Adıyaman'da tamamladı. 2001 yılında Boğaziçi Üniversitesi Eğitim Fakültesi Fizik Öğretmenliği Bölümü'nü kazandı. Boğaziçi Üniversitesi Yabancı Diller Yüksekokulunda (YADYOK) bir yıl hazırlık okudu. 2007 yılında lisans eğitimini tamamlayıp 22 Ekim 2007 de Adıyaman Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü'nde Araştırma Görevlisi olarak göreve başladı. Şubat 2008'de Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü'nde Yüksek lisans öğrenimine başladı. "Mixed spin-1 and spin-3/2 Ising system with alternative layers of a honeycomb lattice within the effective field theory" Solid State Communications dergisinde bir adet makalesi basılmıştır.

Katıldığı etkinlikler;

16. Yoğun madde Fiziği Ankara Toplantısı (6 Kasım 2009-Gazi Üniversitesi) (1 Adet bildiri sundu).

ICSM (Antalya-Nisan 2010) – International Congress on Superconductivity and Magnetism (1 Adet bildiri sundu).

TÜBİTAK F. Gürsey Enstitüsü 2008 yoğun programlı Faz Geçişleri ve Renormalizasyon Grup Dersi, Nihat BERKER, 13-24 Temmuz 2008.

İletişim Bilgileri:

Adres: Ali taşı mah. 1222. Sok. No:3 Kat:2/ADİYAMAN

Cep Telefonu: 0530 345 68 36

Ev Telefonu: 0416 214 34 16

Email: sakbudak@adiyaman.edu.tr