

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

KARMA SPİN-2 VE SPİN-5/2 ISING SİSTEMİNİN DİNAMİĞİ

Hazırlayan Mehmet ERTAŞ

Danışman Prof. Dr. Mustafa KESKİN

Doktora Tezi

Eylül 2012 KAYSERİ

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

KARMA SPİN-2 VE SPİN-5/2 ISING SİSTEMİNİN DİNAMİĞİ (Doktora Tezi)

Tezi Hazırlayan Mehmet ERTAŞ

Tezi Yöneten Prof. Dr. Mustafa KESKİN

Bu çalışma, TÜBİTAK 2211-Yurt İçi Doktora Bursu ve Erciyes Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Birimi FBD-10-3047 kodlu proje ile desteklenmiştir.

> Eylül 2012 KAYSERİ

Bu çalışmadaki tüm bilgilerin, akademik ve etik kurallara uygun bir şekilde elde edildiğini beyan ederim. Aynı zamanda bu kural ve davranışların gerektirdiği gibi, bu çalışmanın özünde olmayan tüm materyal ve sonuçları tam olarak aktardığımı ve referans gösterdiğimi beyan ederim.

i

"Karma Spin-2 ve Spin-5/2 Ising Sisteminin Dinamiği" adlı Doktora tezi, Erciyes Üniversitesi Lisansüstü Tez Önerisi ve Tez Yazma Yönergesi 'ne uygun şekilde hazırlanmıştır.

M.E 2-

Araş. Gör. Mehmet ERTAŞ

Tezi Hazırlayan

M. Hashin

Prof. Dr. Mustafa KESKIN

Danışman

Achmer Ahhn

Fizik Anabilim Dalı Başkanı Prof. Dr. Mehmet AKKURT

Prof. Dr. Mustafa KESKİN danışmanlığında Mehmet ERTAŞ tarafından hazırlanan "Karma Spin-2 ve Spin-5/2 Ising Sisteminin Dinamiği" adlı bu çalışma, jürimiz tarafından Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında Doktora tezi olarak kabul edilmiştir.

17.09.2012

JÜRİ:

Başkan: Prof. Dr. Sedat ÖZSOY

Üye : Prof. Dr. Mustafa KESKİN

Üye : Prof. Dr. Necmettin MARAŞLI

Üye : Prof. Dr. Cesur EKİZ

Üye : Doç. Dr. Ayşen DURMUŞ

Bidodym ur. Koskij Muamos

ONAY:

Bu tezin kabulü, Enstitü Yönetim Kurulunun 92/10/2012 tarih ve 2012/25-16 sayılı kararı ile onaylanmıştır.

02/10.12012

Dr. Necmettin MARAŞLI Müdür Enstitü Müdürü

ÖNSÖZ / TEŞEKKÜR

Çalışmalarım sırasında değerli fikir ve tecrübeleri ile bana destek sağlayan, emeğini ve yardımlarını esirgemeyen saygı değer hocam Prof. Dr. Mustafa Keskin'e ve tez izleme komitesi üyeleri değerli hocalarım Prof. Dr. Sedat ÖZSOY ve Prof. Dr. Necmettin MARAŞLI 'ya en içten dileklerimle teşekkürlerimi sunarım.

Bu tez çalışmasının oluşumu sırasında birçok konuda yardımlarını gördüğüm Nevşehir Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi öğretim üyesi Yrd. Doç. Dr. Bayram DEVİREN 'e ve değerli yorum ve tartışmalarından ötürü tüm çalışma arkadaşlarıma teşekkürlerimi sunarım.

Tez çalışması süresince sağladıkları desteklerden dolayı Türkiye Bilimsel ve Teknoloji Araştırma Kurumu (TÜBİTAK) 2211-Yurt İçi Doktora bursu programı çerçevesinde TÜBİTAK'a ve FBD-10-3047 kodlu proje kapsamında Erciyes Üniversitesi Bilimsel Araştırma Birimine teşekkür ederim.

Hayatım boyunca her şartta maddi manevi yardımlarını esirgemeyerek bu günlere gelmemde önemli ölçüde rolü olan canım anneme, babama, kardeşime ve ablama minnet ve şükranlarımı canı gönülden sunarım. Ayrıca çalışmalarım esnasında beni hep anlayışla karşılayan canım eşim ve sevgili meslektaşım Hatice Okusal ERTAŞ' a hem değerli yorumları hem de anlayışından dolayı teşekkürlerimi sunarım. Son olarak biricik yavrum Fatıma' tüz Zehra ERTAŞ 'a teşekkürlerimi sunarım.

Mehmet ERTAŞ Eylül 2012

KARMA SPİN-2 VE SPİN-5/2 ISING SİSTEMİNİN DİNAMİĞİ

Mehmet ERTAŞ

Erciyes Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü

Doktora Tezi, Eylül 2012 Tez Danışmanı: Prof. Dr. Mustafa KESKİN

KISA ÖZET

Zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan varlığında aşağıda belirtilen tek ve iki-alt örgülü Ising sistemlerinin dinamik davranışları incelendi: (i) Karma spin (2, 5/2) Ising sisteminin dinamiği birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler için Glauber-tipi stokastik dinamik yaklaşımı (GTSDY) ve ortalama-alan yaklaşıklığı (OAY) kullanılarak; (ii) karma spin (2, 5/2) Ising sisteminin dinamiği iki tabakalı kare örgü üzerinde GTSDY ve OAY kullanılarak; (iii) tek örgülü spin-2 ve spin-5/2 Ising sistemlerinin dinamiği kare örgü için GTSDY ve etkin-alan teorisi (EAT) kullanılarak; (iv) karma spin (2, 5/2) Ising sisteminin dinamiği kare örgü üzerinde GTSDY ve EAT kullanılarak incelendi. Elde edilen dinamik denklemler Adams-Moulton ve Romberg integrasyon metotlarıyla çözüldü. Sistemlerdeki fazları bulmak için ortalama düzen parametrelerinin zamanla değişimleri incelendi. Dinamik faz geçişlerinin doğasını (birinci- ve ikinci-derece) karakterize etmek ve dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıklarını elde etmek için dinamik düzen parametrelerinin davranışı indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak incelendi. Ayrıca, kare örgü üzerinde spin-2, spin-5/2 ve karma (2, 5/2) Ising sistemlerinde, histerisis eğrisi alanının ve korelasyon fonksiyonlarının davranışı indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak incelendi. Bütün sistemler için, dinamik faz diyagramları farklı düzlemlerde sunuldu. Dinamik faz diyagramları, etkileşim parametrelerine bağlı olarak, üçlü kritik nokta, çift kritik son nokta, kritik son nokta, coklu nokta, üçlü nokta ve dörtlü nokta gibi dinamik kritik noktalara sahiptir ve aynı zamanda re-entrant davranış sergilemektedir. Dinamik telafi sıcaklığı, yalnızca karma spin (2, 5/2) Ising sisteminde birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler için incelendi ve N-, ve Q-tipi davranışlar tespit edildi.

Anahtar Kelimeler: Karma spin (2, 5/2) Ising modeli, Ortalama-alan yaklaşıklığı, Etkin-alan teorisi, Glauber-tipi stokastik dinamik, Dinamik faz geçişleri, Dinamik faz diyagramları, Dinamik telafi sıcaklığı

DYNAMICS OF THE MIXED SPIN-2 AND SPIN-5/2 ISING SYSTEMS

Mehmet ERTAŞ

Erciyes University, Graduate School of Natural and Applied Sciences Ph.D. Thesis, September 2012 Thesis Supervisor: Prof. Dr. Mustafa KESKİN

ABSTRACT

Dynamic behaviors of the following one and two-sublattice Ising systems under a timedependent oscillating external magnetic field are investigated: (i) The dynamic behavior of mixed spin (2, 5/2) Ising system is studied on alternate layers of a hexagonal lattice by using the mean-field approximation (MFA) and Glauber-type stochastic dynamic approach (GTSDA), (ii) the dynamic behavior of mixed spin (2, 5/2) Ising system is examined on a two-layer square lattice by using the dynamic MFA and GTSDA, (iii) the dynamic behaviors of one-sublattice spin-2 and spin-5/2 Ising systems are investigated on square lattice by using the effective-field theory (EFT) and GTSDA, (iv) the dynamic behavior of mixed spin (2, 5/2) Ising system is investigated on square lattice by using the EFT and GTSDA. The calculated dynamic equations are solved by Adams-Moulton and Romberg integration methods. The time variations of average order parameters are investigated to find the phases in the systems. The behaviors of the dynamic order parameters as a function of the reduced temperature are studied to characterize the nature (first- and second-order) of the dynamic phase transitions and obtain the dynamic phase transition (DPT) temperatures. The behavior of the dynamic hysteresis loop area and correlation as a function of the reduced temperature are also investigated in spin-2, spin-5/2 and mixed spin (2, 5/2) Ising systems on the square lattice. The dynamic phase diagrams are presented in different planes for all systems. The dynamic phase diagrams exhibit many dynamic critical points, such as tricritical point, double critical end point, critical end point, multicritical point, triple point, and quadruple point as well as reentrant behavior depending on interaction parameters. The dynamic compensation temperature is also studied for only the mixed spin (2, 5/2) Ising system on alternate layers of a hexagonal lattice, and the N- and Q-type behaviors are found.

Keywords: Mixed spin (2, 5/2) Ising system, Mean-field approximation, Effective-field theory, Glauber-type stochastic dynamic, Dynamic phase transitions, Dynamic phase diagrams, Dynamic phase transitions, Dynamic phase diagrams, Dynamic compensation temperature.

İÇİNDEKİLER

KARMA SPİN-2 VE SPİN-5/2 ISİNG SİSTEMİNİN DİNAMİĞİ

<u>S</u>	<u>ayfa</u>
BİLİMSEL ETİĞE UYGUNLUK	i
YÖNERGEYE UYGUNLUK SAYFASI	ii
KABUL VE ONAY	iii
ÖNSÖZ / TEŞEKKÜR	iv
ÖZET	v
ABSTRACT	vii
İÇİNDEKİLER	ix
ŞEKİLLER LİSTESİ	xii
GİRİŞ	. 1

1. BÖLÜM

KARMA SPİN (2, 5/2) ISING SİSTEMİNİN DİNAMİK DAVRANIŞININ GLAUBER GEÇİŞ ORANLARI TEMELLİ DİNAMİK ORTALAMA-ALAN YAKLAŞIKLIĞI KULLANARAK İNCELENMESİ

1.1.	Birbirini Takip Eden Tabakalı Altıgen Örgü İçin	15
1.1.1.	Giriş	15
1.1.2.	Model ve Ortalama-Alan Dinamik Denklemleri	16
1.1.2.1.	Modelin Tanıtımı	16
1.1.2.2.	Ortalama-Alan Dinamik Denklemlerinin Elde Edilmesi	18
1.1.3.	Dinamik Faz Geçiş Noktaları ve Dinamik Faz Diyagramları	25
1.1.3.1.	. Ortalama Alt Örgü Mıknatıslanmalarının Zamanla Değişimi	25
1.1.3.2.	. Dinamik Faz Geçiş Noktaları	29
1.1.3.3.	. Dinamik Telafi Davranışları	34
1.1.3.4.	. (d, T) Düzleminde Dinamik Faz Diyagramları	35
1.1.3.5.	. (J ₂ , T) Düzleminde Dinamik Faz Diyagramları	36

1.1.3.6. (-J ₃ , T) Düzleminde Dinamik Faz Diyagramları	38
1.1.3.7. (d, J ₂) Düzleminde Dinamik Faz Diyagramları	39
1.1.3.8. (d, -J ₃) Düzeleninde Dinamik Faz Diyagramları	40
1.2. İki Tabakalı Kare Örgü İçin	41
1.2.1. Giriş	41
1.2.2. Model ve Ortalama-Alan Dinamik Denklemleri	42
1.2.2.1. Modelin Tanıtımı	42
1.2.2.2. Ortalama-Alan Dinamik Denklemlerinin Elde Edilmesi	44
1.2.3. Dinamik Faz Geçiş Noktaları ve Dinamik Faz Diyagramları	51
1.2.3.1. Ortalama Alt Örgü Mıknatıslanmalarının Zamanla Değişimi	52
1.2.3.2. Dinamik Faz Geçiş Noktaları	57
1.2.3.3. (T, h) Düzleminde Dinamik Faz Diyagramları	59

2. BÖLÜM

KARMA SPİN (2, 5/2) ISING SİSTEMİNİN DİNAMİK DAVRANIŞININ GLAUBER GEÇİŞ ORANLARI TEMELLİ KORELASYONLU ETKİN-ALAN TEORİSİ İLE İNCELENMESİ

2.1.	Spin-2 Blume-Capel Modelinin Dinamiği	71
2.1.1.	Giriş	71
2.1.2.	Model ve Etkin-Alan Dinamik Denklemleri	72
2.1.2.1.	Modelin Tanıtımı	72
2.1.2.2.	Etkin-Alan Dinamik Denklemlerinin Elde Edilmesi	73
2.1.3.	Dinamik Faz Geçiş Noktaları ve Dinamik Faz Diyagramları	77
2.1.3.1.	Ortalama Mıknatıslanmanın Zamanla Değişimi	77
2.1.3.2.	Dinamik Faz Geçiş Noktaları	80
2.1.3.3.	(T/zJ, h/zJ) Düzleminde Dinamik Faz Diyagramları	83
2.2.	Spin-5/2 Blume-Capel Modelinin Dinamiği	87
2.2.1.	Giriş	87
2.2.2.	Model ve Etkin-Alan Dinamik Denklemleri	87
2.2.2.1.	Modelin Tanıtımı	87

2.2.2.2. Etkin-Alan Denklemlerinin Elde Edilmesi
2.2.3. Dinamik Faz Geçiş Noktaları ve Dinamik Faz Diyagramları
2.2.3.1. Ortalama Mıknatıslanmanın Zamanla Değişimi 93
2.2.3.2. Dinamik Faz Geçiş Noktaları
2.2.3.3. (T/zJ, h/zJ) Düzleminde Dinamik Faz Diyagramları 100
2.2.3.4. (T/zJ, D/zJ) Düzleminde Dinamik Faz Diyagramları 104
2.3. Karma Spin (2, 5/2) Blume-Capel Modelinin Dinamiği104
2.3.1. Giriş
2.3.2. Model ve Etkin-Alan Dinamik Denklemleri108
2.3.2.1. Modelin Tanıtımı
2.3.2.2. Etkin-Alan Denklemlerinin Elde Edilmesi 110
2.3.3. Dinamik Faz Geçiş Noktaları ve Dinamik Faz Diyagramları 115
2.3.3.1. Ortalama Mıknatıslanmaların Zamanla Değişimi 115
2.3.3.2. Dinamik Faz Geçiş Noktaları
2.3.3.3. (T/zJ, h/zJ) Düzleminde Dinamik Faz Diyagramları

3. BÖLÜM

SONUÇ-TARTIŞMA VE ÖNERİLER

Sonuç-Tartışma ve Öneriler	126
KAYNAKLAR	134
ÖZGEÇMİŞ	155

ŞEKİLLER LİSTESİ

- Şekil 1.5. $J_2 = 2.0, J_3 = 0.2, d = -1.5$ ve $h_0 = 0.1$ değerleri için dinamik alt örgü mıknatıslanmalarının $(|M_{\sigma}|, |M_s|)$ ve dinamik toplam mıknatıslanmanın $((|M_T|))$ indirgenmiş sıcaklığa bağlı olarak iki farklı başlangıç değeri için davranışları. T_t ve T_c sırasıyla p fazından i₁ fazına birinci- ve i₁ fazından p fazına ikinci-derece faz geçiş sıcaklıklarını göstermektedir..... 33

- Şekil 1.11. Birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerinde karma spin-2 ve spin-5/2 Ising modelinin (-J₃, T) düzleminde dinamik faz diyagramı. Sistemde p ve i₁ temel fazlarının yanında i₁ + p, i₂ + p ve i₄ + p karma fazları mevcuttur. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinciderece faz geçiş çizgilerini göstermektedir. E dinamik kritik son noktayı temsil etmektedir (J₃ = 0.8, d = 0.1 ve h₀ = 1.0).......40
- Şekil 1.12. Birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerinde karma spin-2 ve spin-5/2 Ising modelinin (d, $-J_3$) düzleminde dinamik faz diyagramı. Sistemde p ve i₁ remel fazlarının yanında i₁ + p ve i₄ + p karma fazları

- Şekil 1.14. İki tabakalı kare örgü üzerinde karma spin (2, 5/2) Ising modeli için ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının zamanla değişimi. (a) Sistemde sadece paramanyetik (p) faz mevcuttur (\mathbf{J}_1) 1.0, $J_2/|J_1| = 0.5, J_3/|J_1| = 0.1, h = 6.0, d = -1.0, T = 6.0$). (b) Sistemde ferromanyetik (f) faz mevcuttur ($J_1 = 1.0, J_2 / |J_1| = 0.5, J_3 / |J_1| = 0.1, h =$ 6.0, d = -0.1, T = 2.1). (c) Sistemde compensated (c) faz mevcuttur J_1 = 1.0, $J_2/|J_1| = 0.5$, $J_3/|J_1| = 0.1$, h = 3.0, d = 0.1, T = 2.1). (d) Sistemde antiferromanyetik (af) faz mevcuttur (J_1) = -1.0. $J_2/|J_1| = 2.0, J_3/|J_1| = -2.0, h = 3.0, d = -2.0, T = 3.0$). (e) Sistemde yüzey (sf) faz mevcuttur ($J_1 = -1.0$, $J_2 / |J_1| = 0.2$, $J_3 / |J_1| = 1.0$, h = 4.0, d = -1.0, T = 2.0). (f) Sistemde mixed (m) faz mevcuttur (J_1 = -1.0, $J_2/|J_1| = 0.2, J_3/|J_1| = 1.0, h = 4.0, d = -1.0, T = 2.0$. (g) Sistemde (nm) mevcuttur $(J_1 = -1.0,$ manyetik olmayan faz

- Şekil 1.17. İki tabakalı kare örgü üzerinde karma spin-2 ve spin- 5/2 Ising modeli için dinamik alt örgü mıknatıslanmalarının $(M_1^{A,B})$ ve $(M_2^{A,B})$ indirgenmiş sıcaklığa bağlı olarak davranışları. T_c = 7.6 değerinde antiferromanyetik (f) fazdan paramanyetik faza (p) ikinci-derece faz

xiv

- Şekil 1.21. Şekil 1.20 ile aynı fakat Şekil 2.20'den farklı olarak sistemde bir veya iki tane dinamik üçlü kritik nokta mevcut. (a) $J_2/|J_1| = 0.5, J_3/|J_1| = 0.1, d = 0.1.$ (b) $J_2/|J_1| = 0.5, J_3/|J_1| = 0.1, d = -1.$ (c) $J_2/|J_1| = 0.5, J_3/|J_1| = 0.1, d = -2.$ (d) $J_2/|J_1| = 1, J_3/|J_1| = 0.7, d = 2.$ (e) $J_2/|J_1| = 0.1, J_3/|J_1| = -0.1, d = 0.1.$ (f) $J_2/|J_1| = 0.1, J_3/|J_1| = -0.1, d = -1.8.$ (g) $J_2/|J_1| = 0.2, J_3/|J_1| = -2.0, d = 1.0$ (h) $J_2/|J_1| = 0.2, J_3/|J_1| = -2.0, d = -1.0.$
- Şekil 1.22. Şekil 1.20 ile aynı fakat Şekil 2.20'den farklı olarak sistemin dinamik faz diyagramları AFM/FM durumu için elde edildi. (a) $J_2/|J_1| = 0.5, J_3/|J_1| = 0.1, d = -2.0.$ (b) $J_2/|J_1| = 0.1, J_3/|J_1| = -0.1, d = 0.1.$ (c) $J_2/|J_1| = 0.1, J_3/|J_1| = -0.1, d = -1.8...$ 68
- Şekil 1.23. Şekil 1.20 ile aynı fakat Şekil 2.20'den farklı olarak sistemin dinamik faz diyagramları AFM/FM durumu için elde edildi ve sistemde bir veya iki tane dinamik üçlü kritik nokta mevcut. (a) $J_2 / |J_1| = 0.5$, $J_3 / |J_1| = 0.1$, d = 0.1. (b) $J_2 / |J_1| = 0.2$, $J_3 / |J_1| = 1.0$, d = -1.0. (c) $J_2 / |J_1| = 0.5$, $J_3 / |J_1| = -1.0$, d = -1.0. (d) $J_2 / |J_1| = 0.5$, $J_3 / |J_1| = 0.1$, d = -4.0. (e) $J_2 / |J_1| = 0.5$

- Şekil 2.8. Spin-5/2 Blume-Capel modeli için ortalama mıknatıslanmanın (m(wt)) zamanla değişimi. (a) Sistemde paramanyetik (P) faz mevcuttur (D/zJ = -1.0, h/zJ = 1.0 ve T/zJ = 0.5). (b) Sistemde ferromanyetik-5/2 (F_{5/2}) faz mevcuttur (D/zJ = -1.3, h/zJ = 0.1 ve T/zJ = 0.2). (c) Sistemde ferromanyetik-3/2 (F_{3/2}) mevcuttur (D/zJ = -2.25, h/zJ = 0.05 ve T/zJ =

- Şekil 2.13. Spin-5/2 Blume-Capel modelinin (T/zJ, h/zJ) düzleminde dinamik faz diyagramları. Sistemde P, F_{5/2} temel fazlarının yanında altı adet F_{5/2} + F_{1/2}, F_{5/2} + F_{3/2} ve F_{5/2} + P karma fazları mevcut. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş çizgilerini göstermektedir. İçi dolu daireler dinamik üçlü kritik noktayı gösterir.
 (a) D/zJ = 1. (b) D/zJ = -0.275. (c) D/zJ = -0.3. (d) D/zJ = -0.375........ 106
- Şekil 2.14. Spin-5/2 Blume-Capel modelinin (D/zJ, T/zJ) düzleminde dinamik faz diyagramları. Sistemde P, $F_{5/2}$ $F_{1/2}$, temel fazlarının yanında altı adet $F_{3/2} + F_{1/2}$, $F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2}$, $F_{3/2} + F_{1/2} + P$ ve $F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2} + P$ karma fazları mevcut. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş çizgilerini göstermektedir. Z dinamik sıfır-

sıcaklık kritik noktayı, B dinamik çift kritik son nokta ve A dinamik çoklu kritik noktayı göstermektedir. (a) h/zJ = 0.125. (b) h/zJ = 0.625...107

- Şekil 2.15. Her bir σ (boş daireler) spininin en yakın komşusu olan S (dolu daireler) spinlerinin kare örgüsü üzerindeki yerleşiminin taslağı.
 Böylece model A ve B gibi birbiri içine girmiş iki alt örgülü Ising modeli olarak ele alınabilir ve A ve B alt örgüler üzerinde sırasıyla σ ve S spinleri yerleşmişlerdir.
- Şekil 2.17. Karma spin-2 ve spin-5/2 Blume-Capel modeli için dinamik mıknatıslanmaların (M_{A,B}), histerisis çevrim bölgesinin (A/zJ) ve korelasyonun (C/zJ) sıcaklığa bağlı olarak iki farklı başlangıç değeri için davranışları. T_C/zJ ferrimanyetik-I (i₁) fazdan paramanyetik faza (p) ikinci-derece faz geçiş sıcaklığını gösterirken T_t/zJ ferrimanyetik-I (i₁) fazdan paramanyetik (p) fazına birinci-derece faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.
- Şekil 2.19. Şekil 2.18 ile aynı fazkat sistemin dinamik faz diyagramları dinamikortalama-alan yaklaşımı ile elde edildi. (a) D/zJ = -0.375. (b) D/zJ = -0.45.

GİRİŞ

Aralarında kuvvetli bir şekilde etkileşen parçacıklardan oluşan sistemlerin fiziksel özelliklerinin incelenmesi birçok zor matematiksel problemi içine alır. Teorisyenler bu matematiksel zorlukları aşabilmek için bu sistemlerin basit matematiksel modellerini kurmaya çalışmışlardır. Daha farklı bir ifadeyle, etkileşen parçacıklardan oluşan sistemlerde parçacıkların davranışını kesin olarak açıklayan basit bir matematiksel ifade bulmak için çabalamışlardır. Bu modellerden ilk ve en başarılısı tek boyutta ferromanyetik faz dönüşümünü açıklamak için Wilhelm Lenz tarafından önerilmiş [1] ve öğrencisi Ernest Ising [2, 3] tarafından çözülmüştür. Bu model genel olarak Ising modeli diye adlandırılır. Modelin iki boyutta kesin çözümü Onsager [4] tarafından yapılmıştır. Ising modelleri içinde en basit ve en yaygın olarak kullanılan model, spin-1/2 Ising modelidir. Bu model tek düzen parametreli ve iki durumlu bir sistem olup akışkan konsantrasyonu, gazların soğurulması, ikili sıvı veya gazların faz geçişleri, ikili alaşımlardaki düzenli-düzensiz faz geçişleri, vb. gibi sistemlerin incelenmesinde kullanılmıştır [5, 6]. Bu sistem günümüzde birçok farklı fiziksel sistem veya olayları incelemede kullanılmaktadır [7, 8, 9 ve içindeki kaynaklar].

Diğer taraftan manyetik alaşımlar gibi hem manyetik hem de yapısal türde iki tip düzenin görüldüğü fiziksel sistemlerin davranışları, bir tek düzen parametreli spin-1/2 Ising modeliyle açıklanamaz. Bu tür sistemleri açıklayabilmek için en az iki düzen parametresi gerekmektedir. Bu özellikteki fiziksel sistemlerin incelenmesinde iki düzen parametreli ve üç durumlu spin-1 Ising modeli kullanılmaktadır. Spin-1 Ising modeli, He³-He⁴ karışımı, faz ayrışması ve ikili alaşımlarda ferromanyetizma, sıvı kristal karışımlar, su-yağ ve sabun gibi yüzey aktif bir molekülden (amfilik) oluşan mikroemüksiyonlar, re-entrant olaylar, manyetik düzenlilik v.b., birçok fiziksel

kooperatif olayın termodinamik özelliklerinin açıklanmasında kullanılmıştır. Bununla birlikte, nadir toprak bileşenlerinden biri olan DyVO₄ (Dysprosium Vanadate) üzerinde yapılan deneysel çalışmalarda [10-15], DyVO₄'ün 14K'de tetragonal yapıdan ortorombik yapıya kristalografik ve 3 K'de de manyetik olmak üzere arka arkaya iki faz geçişi verdiği görülmüştür. Bu tür sistemler ise, ilk defa Sivardière ve Blume [16] tarafından önerilen dört durumlu spin-3/2 Ising modeliyle açıklanabilmektedir. Daha sonra Krinsky ve Mukamel [17] spin-3/2 Ising modeli ile etanol (C₂H₅OH), karbondioksit (C₂O) ve su (H₂O)'dan oluşan üçlü sıvı karışımın açıklanabileceğini ve Sivardière [18] de spin-3/2 Ising modelinin çift spin-1/2 Ising modeline özdeş olduğunu göstermiştir. Günümüzde de spin-1 [19, 20, 21, ve içindeki kaynaklar] ve spin-3/2 [22, 23, 24, ve içindeki kaynaklar] Ising sistemleri üzerine çalışmalar halen devam etmektedir.

Yüksek spinli veya karma spin Ising modelleri termomanyetik ve moleküler tabanlı kayıt sistemlerini, telafi sıcaklıklarının varlığını, ferrimanyetik yapıya sahip karmaşık bileşikleri, amorf yapıya sahip alaşımları, seyreltik ferrimanyetik sistemleri, moleküler tabanlı mıknatısları, yarı-iletken alaşımları, ferrimanyetik düzenlilik ve düzenlidüzensiz faz geçişleri gibi daha karmaşık sistemleri incelemede kullanılır. Yüksek spinli Ising sistemlerinin en önemlilerinden iki tanesi spin-2 ve spin-5/2 Ising sistemleridir. Bu sistemlerden tek boyutta spin-2 Ising modeli üzerine ilk çalışma, genelleştirilmiş Bethe yaklaşımı kullanılarak Obokata ve Oguchi tarafından yapıldı [25]. Bu model TmCd ve TmZn moleküllerinin faz dönüşümlerini açıklamada kullanılmıştır [26]. Ray ve Sivardiére moleküler alan yaklaşımı ile, spin-2 ikili-üçlü sistemini kullanarak dipolar ve kuadrupolar düzen parametreleri üzerine çalışma yaptılar [27]. Iwashita ve arkadasları biquadratik (K) etkilesme parametresinin negatif değerleri için, dört-spin model yaklaşımından yararlanarak, bilineer (J) ve bikuadratik (K) etkileşme parametreli S = 1, 3/2, 2 ve 3 Ising sisteminin manyetik özellikleri üzerine çalışma yaptılar [28]. Bu çalışmalarda, spin-2 Ising modelinin dipol momentinin sıcaklığa bağlılığı incelendi ve sistemin temel durumu ayrıca tartışıldı. Diğer önemli yüksek spinli Ising sistemlerinden biri olan spin-5/2 Ising modeli üzerine ilk çalışma ise çift yaklaşım için kümesel değişim yöntemi ile Tucker tarafından yapıldı [29]. Bu çalışmada, manyetizasyonun sadece termal değişimi araştırılmıştır. O zamandan beri, spin 5/2 Ising modellerinin çeşitli yönleri OAY [30], EFT [31] ve RG [32] gibi yöntemlerle incelenmiştir. Bu model Rb_2MnF_4 molekülünün faz dönüşümlerini açıklamada kullanılmıştır [33]. Günümüzde de spin-2 [34, 35, ve içindeki kaynaklar] ve spin-5/2 [36, 37, ve içindeki kaynaklar] Ising sistemleri üzerine çalışmalar devam etmektedir.

Diğer taraftan, karma spin Ising sistemleri ile ilgili çalışmalara 1980'li yıllarda başlanmış ve bu spin sistemleri zamanımızda da kullanılan ve kullanılmaya da devam edilen en önemli sistemler olmuşlardır. Son yıllarda, karma spin Ising sistemleri istatistiksel ve yoğun madde fiziğinde en fazla çalışılan konular arasındadır. Sebebi ise: (i) Bu sistemlerin, termomanyetik kayıt sistemleri alanında potansiyel teknolojik uygulamaları olması [38], (ii) Bu sistemler saf spin sistemlerine göre daha az öteleme simetrisine sahip olduklarından, saf spin sistemlerinde gözlenmeyen birçok yeni ilginç kritik olayların karma-spin sistemlerinde gözlenmesi, (iii) Bu sistemlerin, moleküler tabanlı manyetik malzemelerin incelenebilmesine model oluşturması [39], (iv) Belirli şartlar altında, bu sistemlerde kritik sıcaklıktan düşük bir sıcaklık değerinde toplam mıknatıslanmanın yok olduğu telafi sıcaklıklarının gözlenmesidir. Telafi sıcaklıklarının varlığı ise teknolojik uygulamalarda önemli bir özelliktir.

Karma-spin sistemlerinin denge durumundaki özellikleri, düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimi, kritik üsteller, re-entrant 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.

En iyi bilinen ve üzerinde yoğun bir şekilde çalışma yapılmış veya yapılmakta olan karma spin Ising sistemlerinden birisi karma spin (2, 5/2) Ising sistemidir. Bu karma spin Ising sistemi, teknolojik uygulamalarının yanı sıra akademik araştırmalar için de olası yararlı özelliklerinden dolayı yoğun bir ilgi duyulan ferrimanyetik malzemeleri incelemek için iyi bir model oluşturmaktadır. Bu sistem, N(n-C₄H₉)₄ Fe^{II}Fe^{III} (C₂O₄)₃ [40-45], AM^{II}Fe^{III} (C₂O₄)₃ (A = N(n-C₃H₇), M^{II}=Mn, Fe) [46, 47], ve AFe^{II}Fe^{III} (C₂O₄)₃ [A = N(n-C_nH_{2n+1})₄ [41, 43, 48-50] gibi moleküler tabanlı manyetik malzemelerin manyetik davranışlarını araştırmak için kullanılan prototipik bir sistemdir. Karma spin-2

ve spin-5/2 Ising sistemi üzerine ilk çalışma Kaneyoshi ve arkadaşları [40] tarafından EAT kullanılarak bal peteği örgüsü üzerinde yapılmıştır. Bu çalışmada moleküler temelli mıknatıs olan N(n-C₄H₉)₄Fe^{II} Fe^{III} (C₂O₄)₃, $\sigma = 2$ (Fe^{II}) ve S = 5/2 Fe^{III})'ün toplam mıknatıslanmasının sıcaklığa bağlılığının karakteristik özelliğini sınıflandırmak için, telafi (compensation) sıcaklığı üzerinde pozitif tek iyon aniztropisinin veya kristal alan etkileşim parametresinin etkisi araştırıldı. Nakamura [41, 42], bal peteği örgüsü üzerinde MC hesaplamalarını kullanarak, $AFe^{II} Fe^{III} (C_2O_4)_3 (A = N(n-C_nH_{2n+1})_4)$ [38]'nin karekteristik özelliğini ve toplam mıknatıslanmanın sıcaklığa bağlılığını [39] araştırmıştır. Yine Nakamura [43], tabakalı bal peteği örgüsü üzerinde, AFe^{II} Fe^{III} $(C_2O_4)_3$ [A = N(n-C_nH_{2n+1}), n = 3-5]' nin karakteristik davranışını sınıflandırmak için, karma spin-2 ve spin-5/2 Ising sisteminin manyetik özeliklerini MC hesaplamalarını kullanarak incelemiştir. Bu çalışmada özellikle, telafi sıçaklığı üzerine tabakalar arası etkileşme parametresinin ve tek iyon anizotropisinin etkisini araştırmıştır. Jiang ve arkadaşları [44, 45] moleküler tabanlı manyetik malzeme olan $AFe^{II}Fe^{III}(C_2O_4)_3$ 'nin manyetik özelliklerini korelasyonlu EAT ile bal peteği örgüsü üzerinde inceleyip, kristal-alan etkileşme parametresinin sistem üzerine etkisini araştırdılar. Wei ve arkadaslari [46, 47], karma spin-2 ve spin-5/2 ferrimanyetik sisteminin iç enerjisini, 1sı sığasını, alınganlığını ve üçlü kritik davranışını korelasyonlu EAT ile incelediler. Li ve arkadaşları, tabakalı bal peteği örgüsü üzerinde karma spin-2 ve spin-5/2 sisteminin manyetik özelliklerini çoklu alt tabakalı Green-fonksiyon tekniğini kullanarak (C₂O₄)₃ $[A=N(n-C_nH_{2n+1}), n=3-5]$ 'nin [48] manyetik davranışını ve sistemin compensation davranışını araştırmak için çalıştılar [49]. Li ve arkadaşları aynı zamanda [50], bal peteği örgüsü üzerinde karma spin-2 ve spin-5/2 Hesisenberg ferromanyetik sistemini, AFe^{II} Fe^{III} $(C_2O_4)_3$ [A=N(n-C_nH_{2n+1}), n=3-5]'nin düşük sıcaklıktaki davranışını araştırmak için çalıştılar. Son yıllarda, Albayrak ve Yiğit [51], karma spin-2 ve spin-5/2 Ising ferrimanyetik sisteminin kritik davranışını, tekrarlama bağlantılarını kullanarak Bethe örgüsü üzerinde incelediler.

Diğer karma spin Ising sistemleri üzerine yapılan çalışmalar ise aşağıdaki gibi özetlenebilir:

• En basit yarım tam sayılı-tam sayılı karma spin Ising sistemi karma spin (1/2, 1) modelidir. Model, RG tekniği [52], yüksek sıcaklık seri açılım [53], serbest-yarım tam

sayılı yaklaşımı [54], BP yöntemi [55, 56], EAT [57-60], OAY [61, 62], MC hesaplamaları [63, 64], kümesel-değişim yaklaşığı [65, 66], TM yöntemi [67] ile incelemiştir. Ayrıca, modelin bal peteği [68], Bethe [69, 70] ve zar (diced) [71] örgüleri için kesin çözümleri de yapılmıştır. Bu çalışmalara ek olarak, seyreltik karma spin (1/2, 1) Ising modelinin manyetik özellikleri EAT ile kapsamlıca incelenmistir [72-74]. Öteleme alanın varlığında, model EAT [75-77], yol-integral gösterimli çift model yaklaşımı [78], sonlu küme yaklaşımı [79], ortalama-alan RG yöntemi [80] ile de incelenmiştir. Bunlara ilaveten, enine alan varlığında seyreltik karma spin (1/2, 1) Ising modeli, EAT ile detaylıca incelenmiştir [81, 82].

• Karma spin (1, 3/2) Ising demir-nitrit (Fe₄N) bileşiği için model olarak kullanılan ilginç bir karma spin Ising sistemidir; özel olarak MC hesaplamaları karma spin-1 ve spin-3/2 Ising modeline Fe₄N'nin karakteristik özelliğini araştırmak için uygulanmıştır [83-86]. Seyreltik karma spin (1, 3/2) Ising modeli EAT [87] ile incelenerek, farklı düzlemlerde faz diyagramları elde edilmiştir. Farklı kristal alan varlığında yine bu model OAY [88], kümesel değişim yönteminin çift yaklaşığıyla [89], EAT [90] ve MC [91] hesaplamalarıyla incelenerek, düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimleri detaylıca araştırılmış ve faz diyagramları sunulmuştur. Modelin kesin çözümü dekorasyon dönüşüm yöntemiyle yapılmış, taban-durum faz diyagramları elde edilmiş ve aynı zamanda ısı sığası ve manyetik alınganlığın sıcaklığa göre değişimleri incelenmiştir [92]. Aynı yöntemle basit kübik örgü için kesin çözümü yapılarak, faz diyagramları kapsamlıca verilmiştir [93]. Son yıllarda, modelin Bethe örgüsü üzerindeki kesin çözümleri detaylıca incelenmiş [94, 95] ve model demir nitrür sistemine uygulanarak manyetik özellikleri araştırılmıştır [96].

• En iyi bilinen yarım tam sayılı-yarım tam sayılı karma spin Ising sistemlerinden birisi karma spin (1/2, 3/2) Ising modeli olup, bu model ilk olarak Bobák ve Jurcišin tarafından EAT kullanılarak çalışılmış ve telafi sıcaklıklığının sadece spinlerin büyüklüğüne değil örgünün yapısına da bağlı olduğu bulunmuştur [97]. Bobák ve Jurcišin bilineer ve kristal-alan etkileşim parametreli seyreltik karma spin-1/2 ve spin-3/2 Ising modelini EAT kullanarak bal peteği örgüsünde incelemiş ve modelin ikili telafi noktaya sahip olduğunu göstermişlerdir [98]. Ayrıca, bu karma spin sisteminin denge davranışları EAT [99] ve MC yöntemi [100] ile detaylıca çalışılmıştır. Kristalalan etkileşimli karma spin (1/2, 3/2) enine Ising modelinin manyetik özellikleri, EAT kullanılarak detaylı biçimde araştırılmıştır [101-103]. Bu modelin faz diyagramları düzen parametrelerinin termal davranışı incelenerek elde edilmiştir. Boyuna manyetik alan varlığında da, bu modelin manyetik özellikleri (manyetizasyonun termal davranışı, manyetik alınganlığı ve faz diyagramları) EAT ile incelenmiştir [104]. Karma spin (1/2, 3/2) Heisenberg ferrimanyetik sisteminde en yakın ve ikinci en yakın spin etkileşimleri incelemek için Green-fonksiyon tekniği kullanılmıştır [105]. Modelin manyetik özellikleri Bethe [106], kare merkezli (union jack) [107], Kagomé [108], iki-katlı Cayley ağacı [109] ve bal peteği [110] örgüleri için incelenmiştir. Bunlara ilaveten seyreltik karma spin-1/2 ve spin-3/2 modeli OAY ile de detaylıca incelenmiştir [111].

• Diğer bir yarım tam sayılı karma spin sistemi olan, karma spin (1/2, 5/2) Ising sistemi üzerine yapılan çalışmalar genellikle son yıllarda yapılmıştır. Bu karma spin sistemiyle ilgili çalışmalar aşağıdaki gibidir. Karma spin (1/2, 5/2) sisteminin Bethe örgüsündeki kesin çözümü, kristal-alan etkisi göz önünde bulundurularak incelenmiş ve faz diyagramları ile mıknatıslanma eğrileri verilmiştir [112]. Strečka [113], karma spin-1/2 ve spin-5/2 sisteminin banyo döşeme (bathroom tile) tipi örgü üzerindeki kesin çözümünü yapmış ve özellikle mıknatıslanmanın sıcaklığa göre değişimini inceleyerek, faz diyagramını elde etmiştir. Matašovská ve Jaščur [114], dekore edilmiş düzlemsel örgülerde karma spin-S ve spin-1/2 Ising modelinde kesin çözümü elde etmek için genelleştirilmiş eşleştirme dönüşümünü kullanarak, re-entrant ve telafi davranışları incelemişlerdir.

• En yüksek spin değerlerine sahip olan yarım tam sayılı karma spin sistemi, karma spin (3/2, 5/2) Ising sistemidir. Bu karma spin Ising sistemi ile ilgili ilk çalışmada sistemin iç enerjisi ve faz diyagramları bal peteği örgüsünde EAT kullanılarak incelenmiştir [115]. Sistemin aynı zamanda Bethe örgüsündeki çözümü, tekrarlama bağıntıları kullanılarak araştırılmış ve kristal alan değerlerine bağlı olarak bir ya da iki telafi sıcaklığı sergilediği bulunmuştur [116]. Ayrıca sistem birinci- ve ikinci-derece faz geçişleri sergilemesine rağmen üçlü kritik noktaya sahip değildir. Son yıllarda, iki-katlı Cayley ağacı üzerinde karma spin (3/2, 5/2) Ising modeli tekrarlama bağıntıları cinsinden çalışılmış ve modelin birinci ve ikinci-derece faz geçişleri sergiledikleri bulunmuştur [117]. Bu karma spin sisteminin taban durum faz diyagramları, de la Espriella ve

Buendía [118] tarafından detaylı biçimde incelenmiştir. Birçok deney, ferrisitokrom (ferricytochrome) e' olarak bilinen belirli tipteki ferric heme proteinin fazla bilinmeyen manyetik özelliklerin arkasında, spin-3/2 ve spin-5/2 atomlarının birleşiminin olduğunu göstermektedir [119-122]. Heme proteinleri, kan tarafından oksijen taşınmasında önemli bir rolü olmasının yanında optiksel iletişimdeki potansiyel uygulamalar ile yeni biyo malzemeleri tasarlamak için kullanılmaktadır ve nano gözenekli geçirgen (nanoporous) katalik malzemeler için de temel oluşturmaktadır [123-125].

• Karma tam sayılı-tam sayılı Ising sistemlerinden en önemlisi karma spin (1, 2) Ising sistemi olup, bu sistemin denge faz diyagramları üzerine ilk çalışma, ayrık yol-integral temsili (discretized path-integral representation) çift yaklaşım yöntemi kullanılarak, Weng ve Li [126] tarafından yapılmıştır. Iwashita ve arkadaşları [127], çeşitli yüksek spin etkileşmeleri için dört-spin model yaklaşımını kullanarak, karma spin (1, 2) Ising sisteminin mıknatıslanmasının sıcaklığa bağlılığını araştırmışlardır. Zhang ve arkadaşları [128], MC ve EAT kullanarak, bal peteği örgü tabakasında karma spin (1, 2) Ising sisteminin manyetik özelliklerini çalışmışlardır. Albayrak ve Yiğit [129] ise karma spin (1, 2) Ising sisteminin kritik davranışlarını, tekrarlama bağıntılarını kullanarak incelemişlerdir. Son zamanlarda OAY ve MC hesaplamaları kullanılarak, farklı anizotropik spin (1, 2) Ising sisteminin manyetik özelliklerini manyetik özellikleri ve arkadaşları [131] bu karma spin sisteminin manyetik özelliklerini (mıknatıslanma, manyetik alınganlık, iç enerji, ısı sığası) boyuna manyetik alan varlığında ve yokluğunda EAT kullanarak bal peteği ve kare örgüler üzerinde inceleyerek, sistemin faz diyagramını elde etmişlerdir.

• Diğer karma-spin sistemleri üzerine daha az çalışma bulunmakla birlikte, bu çalışmalar genellikle son yıllarda yapılmıştır. Bunlar: Karma-spin (1/2, 2) Ising sistemi ilk olarak çift model [126] ve dört-spin model [127] yaklaşıklıklarıyla incelenmiştir. Bu karma spin sisteminin dekore edilmiş düzlemsel örgü için kesin çözümü yapılmış ve sistemin termodinamik özellikleri incelenmiştir [132]. Ayrıca, Bethe örgüsü üzerindeki kesin çözümü de yapılarak, kritik davranışlar incelenmiş ve sistemin faz diyagramları elde edilmiştir [133]. Son yıllarda, Deviren ve arkadaşları, karma-spin (1, 5/2) [134] ve karma-spin (3/2, 2) [135] sistemlerinin denge özelliklerini korelasyonlu EAT kullanarak kapsamlıca incelemişlerdir. Ayrıca farklı kristal alan etkileşme Hamiltonyenli karma-

spin (3/2, 2) Ising sisteminin faz geçiş sıcaklıkları ve çoklu kritik noktaları, OAY kullanılarak elde edilmiştir [136, 137]. Bu karma spin sisteminin Bethe örgüsü üzerindeki kesin çözümü de yapılmıştır [138].

Karma spin Ising sistemlerinin denge özelliklerinin anlaşılması için kapsamlı çalışmalar yapılmasına rağmen, dengesiz özellikleri için yeterli sayıda çalışma yapılmamıştır. Dengesiz sistemlerdeki ilginç problemlerden birisi, dengesiz veya dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıklarının hesaplanması ve dinamik faz diyagramlarının elde edilmesidir. Dinamik faz geçişlerine sebep olan mekanizma kesin olarak keşfedilmediği gibi temel fenomenolojisi de halen çok az geliştirilebilmiştir ve bundan dolayı da üzerinde çok çalışılan ve çalışılması gerekli konulardan birisi olmuştur. Dinamik faz geçiş sıcaklıkları ilk olarak, Glauber-tipi stokhastik dinamik [139] kullanılarak, zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında kinetik spin-1/2 Ising modelinin kararlı durumlarının OAY metodu ile incelenmesi sonucu bulunmuştur [140, 141]. Daha sonra, kinetik spin-1/2 Ising modeli için dinamik faz geçişleri, dinamik OAY metodu [142, 143] ve dinamik MC hesaplamaları ile incelenmiştir [144-154]. Tutu ve Fujiwara [155], Landau tipi potansiyelleri olan sistemlerde DFG sıcaklıklarını elde edebilecek sistematik bir metot geliştirmişler ve dinamik faz diyagramlarını sunmuşlardır. Tek boyutlu kinetik spin-1/2 Ising modelindeki DFG'ler Glauber metoduyla incelenmiştir [156]. Son zamanlarda ise, spin-1 [157-161], spin-3/2 [162-166], spin-2 [167, 168], spin-5/2 [169, 170] gibi Ising sistemlerinde DFG sıcaklıkları elde edilmiş ve dinamik faz diyagramları sunulmustur. Ayrıca, Heisenberg spin sistemleri [171-174], CO basıncının periyodik değişimi ile CO oksidasyonu için Ziff-Gulari-Barshad modeli [175], XY modeli [176, 177] gibi daha karmaşık sistemlerde DFG sıcaklıkları elde edilmiş ve dinamik faz diyagramları sunulmuştur. Ayrıca, spin-1/2 Ising modeli korelasyonlu EAT ve Glaubertipi stokhastik dinamik kullanılarak incelenmiş ve modelin dinamik faz diyagramları elde edilmiştir [178-181]. DFG sıcaklıkları, deneysel olarak ilk defa, çok ince Co/Cu (001) ferromanyetik filmlerinde gözlenmiştir [182, 183]. Bu çalışmalara ilaveten, ferroik sistemlerde (ferromağnet, ferroelektrik ve ferroelastik) [184], YbaCuO filmlerde [185], C₁₀E₃/D₂O sisteminde [186], aşırı ince Fe/Au(001) filmlerde [187, 188], [Co/Pt]₃ manyetik çok tabakalı sisteminde [189], ince polikristal Ni₈₀Fe₂₀ filmlerde [190], photoinduced faz geçişlerinde [191], yüksek sıcaklık Bi₂Sr₂CaCu₂O_v süperilerken bileşiğinde [192] ve PEN (polietilen naftalin) nano bileşiklerinde [193] DFG sıcaklıkları gözlenmiştir.

Dengesiz sistemlerdeki ilginç problemlerden bir diğeri ise dinamik telafi sıcaklıklarının bulunmasıdır. Telafi sıcaklığı (T_{telafi}), kritik sıcaklığın altında toplam mıknatıslanmanın sıfır olduğu sıcaklıktır [194]. Bu sıcaklık $T = T_{telafi}$ 'de alt örgülerin manyetik momentlerinin birbirlerini yok etmelerinden meydana gelmektedir. Bu durumda toplam mıknatıslanma sıfır olduğundan malzeme dış alanla etkileşmez. Oda sıcaklığı civarında telafi sıcaklığının varlığı bazı ferromanyetik malzemelerde termomanyetik kayıt sistemleri açısından kritik öneme sahiptir [195-198]. Buna ilaveten, bu sıcaklıkta bazı fiziksel nicelikler ilginç davranışlar göstermektedir. Örneğin, artık mıknatıslanma (coercivitiy) alanı telafi sıcaklığı yakınlarında sıcaklığa çok güclü bir sekilde bağlıdır. Öyle ki, artık mıknatıslanma alanı T_{telafi} sıcaklığının altında mimumuma düşer ve T = T_{telafi}'de maksimum olur ve küçük, kararlı manyetik bölgeler meydana gelir [199-201]. Benzer tanımla, dinamik telafi sıcaklığı (T_{telafi}), kritik sıcaklığın altında toplam dinamik mıknatıslanmanın sıfır olduğu sıcaklıktır. Karma spin Ising sistemlerinde dinamik telafi sıcaklığın varlığı, Leite ve arkadaşları [202] tarafından, dinamik ortalama-alan yaklaşımı ve dinamik Monte-Carlo simülasyonunu kullanarak $\sigma = 1/2$ ve S = 1.0 karma Ising sisteminde ferrimanyetik küçük parçacıkların dinamik telafi sıcaklıklar üzerine sonlu boyut etkisini incelendiler ve telafi sıcaklığının varlığının yalnızca σ ve S spinlerinin örgü içi etkileşmelerine bağlı olduğunu buldular. Godoy ve arkadaşları [203], dinamik ortalama-alan yaklaşımı ve dinamik Monte-Carlo simülasyonunu kullanarak birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerinde $\sigma = 1/2$ ve S = 1 karma Ising sisteminde dinamik telafi sıcaklıklarını incelediler ve Hamiltonyendeki farklı etkileşmelerin telafi sıcaklığı üzerine etkisini tespit ettiler. Keskin ve Ertaş [204], aynı sistemi dinamik ortalama alan yaklaşımı ile salınımlı dış manyetik alan varlığında incelediler. Keskin ve arkadaşları [205] birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerinde $\sigma = 1/2$ ve S = 3/2 karma Ising sisteminin dinamik davranışını Glauber-tipi stokhastik dinamik kullanarak incelediler. Çalışmalarında, hem dinamik faz geçiş sıcaklığı hem de dinamik telafi sıcaklığı için dinamik faz diyagramlarını elde ettiler ve etkileşme parametrelerine bağlı olarak sistemde P- ve L-tipi davranış meydana geldiğini gözlediler. Telafi sıcaklığı, deneysel olarak da farklı sistemlerde gözlenmiştir. Chern ve arkadaşları [206], Fe₃O₄ ve Mn₃O₄ süper örgülerinin faz diyagramlarını ve telafi sıcaklıklarını bileşiklerin sıcaklığa bağlı karakteristiklerini inceleyerek elde ettiler. Kageyama ve arkadaşları [207] nikel II format dehidratın (Ni(HCOO₂) 2H₂O) manyetik özelliklerini inceleyerek bu bileşiğin düşük sıcaklıklarda zayıf bir ferrimanyet olduğunu buldular. Ayrıca, bu bileşik belirli bir sıcaklıkta manyetik olarak düzenli bir duruma geçer ki burada sistem ilginç manyetik özelliklere sahiptir. Bu özellikler, kendiliğinden olan zayıf bir ferromanyetizma, telafi sıcaklığı ve ani değişen mıknatıslanma olaylarıdır. Yakın zamanda, Korkmaz ve Temizer [208], birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerinde karma spin-1 ve spin-2 Ising sisteminde dinamik telafi sıcaklıklarını incelediler ve etkileşme parametrelerine bağlı olarak sistemde L- ve N-tipi davranış meydana geldiğini gözlediler.

Karma spin sistemlerinin dengesiz davranışları son yıllarda yoğun sekilde araştırılmaya başlanmıştır. Bu çalışmalardan ilki karma spin (1/2, 1) Ising sistemi üzerine Buendía ve Machado tarafından yapılmıştır [209]. Keskin ve arkadaşları [210], Buendía ve Machado'nun çalışmasında gördükleri eksikliklerden dolayı bu sistemi çok daha kapsamlı bir şekilde aynı yöntemle incelemişlerdir. Çalışmalarında, (T, h) ve (d, T) düzlemlerinde altı farklı tipte dinamik faz diyagramları elde etmişlerdir. Hâlbuki Buendía ve Machado (T, h) düzleminde yalnız iki farklı temel faz diyagramı bulmuş ve (d, T) düzleminde faz diyagramlarını elde etmemişlerdir. Ekiz ve Keskin [66], modelin dinamiğini, manyetik alan varlığında ve yokluğunda, yol ihtimaliyet yöntemini kullanarak araştırmışlardır. Godoy ve Figueiredo [211], bilineer etkileşme Hamiltonyenli dengesiz karma spin (1/2, 1) Ising sisteminin kararlı durumlarını, önce dinamik çift yaklaşık yöntemi, MC ve sonlu-boyut ölçüm metotlarını [212] kullanarak, daha sonra MC ve dinamik çift yaklaşım metotlarını kullanarak araştırmışlardır [213] ve sistemin faz diyagramlarını elde ettiler. Godoy ve Figueiredo yukarıda belirtilen çalışmalarında [211-213], sistemi dış manyetik alanın sıfır olduğu durum için incelediler. Godoy ve Figueiredo ayrıca, kristal alan etkileşme parametresini içeren aynı modelin dinamiğini MC ve dinamik çift yaklaşık metodunu kullanarak araştırdılar [214, 215]. Karma spin (1/2, 3/2), spin (1/2, 5/2), spin (3/2, 5/2), spin (1, 3/2), spin (1/2, 2), spin (1, 5/2), spin (3/2, 2) ve spin (1, 2) Ising sistemlerinin dinamiği üzerine ilk çalışmalar Keskin ve arkadaşları tarafından [216-223] yapılmıştır. Keskin ve arkadaşları, zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında bu sistemlerin dinamik

davranışlarını, Glauber-tipi stokhastik dinamik kullanarak incelemişler ve sistemlerin dinamik faz diyagramlarını farklı düzlemlerde sunmuşlardır.

Literatürde bu çalışmaların olmasına rağmen, önemli karma spin Ising sistemlerinden birisi olan karma spin (2, 5/2) Ising sisteminin DFG sıcaklıkları, dinamik telafi sıcaklıkları ve dinamik faz diyagramları, en iyi bilgilerimiz dahilinde, bu tez çalışması kapsamı dışında incelenmemiştir. Bu tezde, literatürdeki bu eksikleri gidermek için karma spin (2, 5/2) Ising sisteminin DFG sıcaklıkları, dinamik faz diyagramları ve dinamik telafi sıcaklıkları Glauber-tipi stokhastik dinamik temelli DOAY ve korelasyonlu EAT ve Glauber-tipi stokhastik dinamik yaklaşımı kullanılarak elde edilecektir ki biz kolaylık olması açısından dinamik etkin-alan teorisi (DEAT) kısaltmasını kullanacağız. Burada şu noktayı da belirtelim ki, karma spin (2, 5/2) Ising sistemini DFG sıcaklıkları ve dinamik tek örgülü spin-2 ve spin-5/2 Ising sistemlerinin DFG sıcaklıkları ve dinamik faz diyagramları bEAT ile incelenecektir. Bu yöntem dengesiz istatistik fizikte geliştirilen birkaç önemli yöntemden birisi olup son yıllarda yoğun bir şekilde kullanılmaktadır.

Bu tez çalışmasının ilk aşamasında, dinamik telafi sıcaklığını incelemek için zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerinde, karma spin (2, 5/2) Ising sistemi, ortalama-alan yaklaşıklığı ve Glauber-tipi stokhastik dinamik kullanılarak incelenecektir. Glauber geçiş oranları kullanılarak ortalama-alan dinamik denklemleri elde edilecektir. Sistemlerde mevcut olan fazları bulmak için ortalama düzen parametrelerinin zamanla değişimleri incelenecektir. Daha sonra bir periyot içinde ortalama düzen parametrelerinin veya dinamik düzen parametrelerinin, indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak davranışları incelenerek DFG sıcaklıkları tespit edilecek ve aynı zamanda dinamik faz geçişlerinin doğası (kesikli veya sürekli yani birinci- veya ikinci-derece faz geçişleri) karakterize edilecektir. Ayrıca, dinamik telafi sıcaklığını bulabilmek için dinamik toplam mıknatıslanmanın sıcaklığın bir fonksiyonu olarak davranışı incelenecektir. Sistemin dinamik faz diyagramları, etkileşme parametrelerinin farklı değerlerine göre farklı düzlemlerde sunulacaktır. Bu tez çalışmasının ikinci aşamasında, zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında karma spin (2, 5/2) Ising sisteminin dinamik davranışları iki

tabakalı kare örgü için DOAY kullanılarak incelenecektir. Glauber geçiş oranları uygulanarak ortalama-alan dinamik denklemleri elde edilecektir. Sistemlerde mevcut olan fazları bulmak için ortalama düzen parametrelerinin zamanla değişimleri incelenecektir. Daha sonra bir periyot içinde ortalama düzen parametrelerinin veya dinamik düzen parametrelerinin, indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak davranışları incelenerek DFG sıcaklıkları tespit edilecek ve aynı zamanda dinamik faz geçişlerinin doğası (kesikli veya sürekli yani birinci- veya ikinci-derece faz geçişleri) karakterize edilecektir. Sistemlerdeki mevcut etkileşme parametrelerinin farklı değerleri için DFG sıcaklıklarından faydalanılarak farklı düzlemlerde dinamik faz diyagramları sunulacaktır. Burada şu noktayı da belirtelim ki, OAY denge istatistiksel fiziğinde en eski ve en iyi bilinen vöntemlerden birisidir. Bu vöntemle, geçmişte olduğu gibi günümüzde de Ising sistemlerinin termodinamik özellikleri, düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimi, kritik üsteller, reentrant olaylar, faz geçişleri ve faz diyagramları v.b., incelenmeye devam edilmektedir. Bununla birlikte bu metot sistemlerdeki dalgalanmaların korelasyonlarını içermediğinden dolayı, şayet sistem birinci dereceden enerji kuyusuna gelirse, buradan en düşük enerjili duruma geçemeyecektir. Çünkü OAY'nda spin korelasyonlarının etkisi hesaplamalar içine girmemektedir. Bundan dolayı, DOAY ile elde edilen dinamik faz diyagramlarında bulunmuş olan bazı birinciderece faz geçiş çizgileri ve dolayısıyla bazı özel noktalar, özellikle dinamik üçlü kritik nokta, dinamik çift (double) kritik son nokta ve dinamik kritik son nokta gibi özel noktalar, muhtemelen DOAY'nın bir yapay sonucu olabilir. Dolayısıyla bu tez çalışmasının üçüncü aşamasında, İsing sistemlerinin dinamik özellikleri üzerine spin korelasyonlarının etkilerini elde etmek için, seçilen bir spinin en yakın komşu spinler arasındaki korelasyonun etkisini hesaba katan ve DOAY'den daha iyi sonuçlar veren korelasyonlu EAT ve Glauber-tipi stokhastik dinamik, yanı DEAT, kullanılarak tek örgülü spin-2 BC ve tek örgülü spin-5/2 BC sistemleri incelenecek. Böylece bu iki çalışma, alt örgülerinden birisinde spin-2, diğerinde spin-5/2 değerine sahip dinamik karma spin (2, 5/2) Ising sisteminin DEAT kullanılarak incelenmesi ile elde edilecek sonuçların yorumlanmasına ve alt örgüler üzerindeki yüksek spin değerlerinin etkisinin incelenmesine 151k tutacaktır.

Bu giriş bilgilerinden sonra Bölüm 1, karma spin (2, 5/2) Ising modelinin dengesiz davranışı sırasıyla birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler ve iki tabakalı kare örgüler kullanılarak incelenmesi olmak üzere iki kısımdan olusur. Birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerinde bu karma spin modelinin ortalama-alan dinamik denklemleri Glauber geçiş oranları kullanılarak elde edildi. Elde edilen bu ortalamaalan dinamik denklemleri Adams-Multon kestirme ve düzeltme ve Romberg integrasyon metotları kullanılarak nümerik olarak çözüldü. Ortalama düzen parametrelerinin zamana bağlı davranışı incelenerek sistemde mevcut olan fazlar tespit edildi. Dinamik düzen parametrelerinin indirgenmiş sıcaklığa göre davranışları incelenerek DFG sıcaklıkları bulundu ve aynı zamanda dinamik faz geçişlerinin doğası (kesikli veya sürekli yani birinci- veya ikinci-derece faz geçişleri) karakterize edildi. Dinamik telafi sıcaklığını bulabilmek için dinamik toplam mıknatıslanmanın sıcaklığın bir fonksiyonu olarak davranışı incelendi. Etkileşme parametrelerinin farklı değerleri icin DFG noktalarından ve dinamik telafi sıcaklıklarından faydalanarak (d, T), (J_2, T) , (-J₃, T), (d, J₂) ve (d, -J₃) düzlemlerinde verildi. Bu karma spin modeli iki tabakalı kare örgü üzerinde çalışırken, birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerindeki işlemlere benzer işlemler yapılarak, sistemde mevcut olan fazlar ve DFG sıcaklıkları tespit edildi. Etkileşme parametrelerinin farklı değerleri için DFG noktalarından faydalanarak hem ferromanyetik/ferromanyetik hemde antiferromanyetik/ferromanyetik durumlar için sistemin dinamik faz diyagramları (T, h) düzleminde sunuldu.

Bölüm 2, sırasıyla spin-2 Blume-Capel, spin-5/2 Blume-Capel ve karma spin (2, 5/2) Blume-Capel modellerinin dinamik davranışlarının korelasyonlu EAT ve Glauber-tipi stokhastik dinamik kullanılarak kare örgü üzerinde incelenmesinden oluşur. Bu üç sistem içinde dinamik etkin-alan denklemlerini elde etmek için Glauber geçiş oranları kullanılacaktır. Sistemlerdeki mevcut olan fazları elde etmek için, ortalama mıknatıslanmanın zamana bağlı davranışları incelendi. Elde edilecek olan bu diferansiyel denklemler Adams-Moulton kestirme ve düzeltme, Runge-Kutta, vb gibi nümerik yöntemlerle çözülecek ve ortalama düzen parametrelerinin zamana göre değişimi kapsamlıca incelenerek sistemlerde oluşan fazlar tespit edildi. Dinamik düzen parametrelerini veren denklemler Adams-Moulton kestirme ve düzeltme ve Romberg integrasyon yöntemiyle beraber kullanılarak çözülecek ve dinamik düzen parametrelerinin, histerisis eğrisi alanının ve korelasyon fonksiyonlarının indirgenmiş sıcaklığa göre değişimleri kapsamlıca incelenerek, sistemlerde meydana gelen dinamik faz geçişlerinin tabiatı (birinci- ve ikinci-derece) karakterize edildi ve aynı zamanda dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıkları bulundu. Sonrada, hesaplanan DFG sıcaklıkları kullanılarak sistemlerin dinamik faz diyagramları (T/zJ, h/zJ) düzleminde sunulacaktır. Burada şu noktayı da belirtelim ki, EFT metodu matematiksel karmaşıklığa yol açmadan, Van der Waerden eşitliklerinin kullanılması ile spin-spin korelâsyonlarının bazı etkilerini tanımlayabilir ve DOAY ile elde edilen sonuçlardan çok daha üstün sonuçlar sağlayabilir. Tez kapsamında yapılan bu üç çalışma ile Kaynak [167, 169]'da verilen çalışmaları kıyasladığımızda DOAY'daki bazı birinci-dereceden faz geçiş çizgilerinin özel noktaların sanal oldukları görüldü.

Son bölümde ise, yapılan çalışmalar özetlenerek elde edilen sonuçların tartışılması yapılmış ve gelecekte yapılabilecek veya yapılması gerekli çalışmalar önerilmiştir.

1. BÖLÜM

KARMA SPİN (2, 5/2) ISING SİSTEMİNİN DİNAMİK DAVRANIŞININ GLAUBER GEÇİŞ ORANLARI TEMELLİ DİNAMİK ORTALAMA-ALAN YAKLAŞIKLIĞI KULLANARAK İNCELENMESİ

1.1. Birbirini Takip Eden Tabakalı Altıgen Örgü İçin

1.1.1. Giriş

Bu bölümde zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerinde karma spin (2, 5/2) Ising modelinin tanıtımı yapılacak ve master denkleminden vola cıkılarak modelin dinamik davranısını veren ortalamaalan dinamik denklemleri Glauber-tipi stokhastik dinamik kullanılarak elde edilecektir. Elde edilen ortalama-alan dinamik denklemleri, Adams-Moulton kestirme ve düzeltme yöntemi ve Romberg integrasyon metotları kullanılarak nümerik olarak çözülecektir. Sistemde mevcut olan fazları elde etmek için ortalama düzen parametrelerinin zamanla değişimleri incelenecek. Daha sonra bir periyot içinde ortalama düzen parametrelerinin veya dinamik düzen parametrelerinin, sıcaklığın fonksiyonu olarak davranışları incelenerek dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıkları tespit edilecek ve aynı zamanda DFG'lerinin doğası (kesikli veya sürekli yani birinci- veya ikinci-derece faz geçişleri) karakterize edilecektir. Ayrıca sistemde var olan dinamik telafi sıcaklıklarını bulabilmek için dinamik toplam mıknatıslanmanın sıcaklığın bir fonksiyonu olarak davranışı incelenecektir. Etkileşme parametrelerinin farklı değerleri için DFG noktalarından ve dinamik telafi sıcaklıklarından faydalanarak (d, T), (J₂, T), (-J₃, T), (d, J_2) ve (d, $-J_3$) düzlemlerinde dinamik faz diyagramları sunulacaktır.

1.1.2. Model ve Ortalama-Alan Dinamik Denklemleri

1.1.2.1. Modelin Tanıtımı

Karma spin (2, 5/2) Ising modeli, A ve B gibi birbiri içine girmiş iki alt örgülü Ising modeli şeklinde ele alınabilir. Örgünün birbirini takip eden her tabakasında sırasıyla $\sigma = \pm 2, \pm 1, 0$ ve S = $\pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$ spinli parçacıklar yer almaktadır. Bu spinli parçacıklar örgü noktalarında öyle bir şekilde dağılmışlardır ki, Şekil 1.1'de görüldüğü gibi birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüleri oluşturmuşlardır.



Şekil 1.1. Birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerinde spinlerin yerleşiminin taslağı. Örgü, σ (boş daireler) ve S (dolu daireler) spinlerinin birbirini takip eden tabakalara yerleşmesiyle oluşmuştur. Böylece model A ve B gibi birbiri içine girmiş iki alt örgülü Ising modeli olarak ele alınabilir ve A ve B alt örgüler üzerinde sırasıyla σ ve S spinleri yerleşmiştir.

Birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerinde karma spin (2, 5/2) Ising modeli için aşağıdaki düzen parametreleri mevcuttur. Bunlar:
- a) A alt örgüsü için: (1) ortalama mıknatıslanma düzen parametresi (m_σ), (2) kuadrupol moment (q_σ) düzen parametresi, (3) octupolar (r_σ) düzen parametresi, (4) hexadecapole (v_σ) düzen parametresi,
- b) B alt örgüsüiçin: (1) ortalama mıknatıslanma düzen parametresi (m_S), (2) kuadrupol moment (q_s) düzen parametresi, (3) octupolar (r_s) düzen parametresi, (4) hexadecapole (v_s) düzen parametresi, (5) triakontadipole (w_s) düzen parametresi.

Burada, m, r ve w düzen parametreleri ile q ve v düzen parametrelerinin termal davranışları birbirlerine benzerlik gösterir [224]. Sistemimiz BC modeli olduğundan q veya v düzen parametrelerinin davranışları incelenmeyecek. r ve w düzen parametrelerinin davranışları benzediğinden dolayı burada yalnızca m düzen parametresinin termal davranışını inceleyeceğiz. Bu düzen parametreleri birbirini takip eden tabakalı altıgen örgü üzerinde karma spin (2, 5/2) Ising modeli için üç farklı temel fazı tanımlamaktadır. Bu temel fazlar:

- i) Paramanyetik faz (p): $m_{\sigma} = m_{s} = 0$,
- ii) Ferrimanyetik fazlar:
 - a) Ferrimanyetik-I fazı (i₁): $m_{\sigma} = \pm 2$, $m_s = \pm 5/2$,
 - b) Ferrimanyetik-II fazı (i₂): $m_{\sigma} = \pm 2$, $m_s = \pm 3/2$,
 - c) Ferrimanyetik-III fazı (i₃): $m_{\sigma} = \pm 2$, $m_s = \pm 1/2$,
 - d) Ferrimanyetik-IV fazı (i₄): $m_{\sigma} = \pm 1$, $m_s = \pm 1/2$,
- iii) Manyetik olmayan faz (nm): $m_{\sigma} = 0$, $m_s = \pm 1/2$,

biçimindedir. Bu sistemin Hamiltonyen ifadesi,

$$\mathcal{H} = -\mathbf{J}_{1}\sum_{\langle ij\rangle}\boldsymbol{\sigma}_{i}\mathbf{S}_{j} - \mathbf{J}_{2}\sum_{\langle ij\rangle}\boldsymbol{\sigma}_{i}\boldsymbol{\sigma}_{j} - \mathbf{J}_{3}\sum_{\langle ij\rangle}\mathbf{S}_{i}\mathbf{S}_{j} - D\left(\sum_{i}\boldsymbol{\sigma}_{i}^{2} + \sum_{j}\mathbf{S}_{j}^{2} + \right) - H\left(\sum_{i}\boldsymbol{\sigma}_{i}^{2} + \sum_{j}\mathbf{S}_{j}\right), \quad (1.1)$$

şeklindedir. Burada $\langle ij \rangle$ toplamın en yakın komşu çiftler üzerinden olacağını göstermektedir. J₁, J₂ ve J₃ sırasıyla σ -S, σ - σ ve S-S için en yakın komşu çiftler

arasındaki bilineer etkileşme parametreleridir. Şekil 1.1'den görüldüğü gibi J_1 etkileşmesi için tabakalar arasındaki en yakın komşu sayısı 4 ($z_1 = 4$), J_2 ve J_3 etkileşmeleri için her bir tabakadaki spinler arasındaki en yakın komşu sayıları 2'dir ($z_2 = z_3 = 2$). Sistem üzerindeki bilineer etkileşim parametrelerinin etkisini gözlemlemek için, σ ve S spinlerinin yerleştikleri tabakalardaki spinler arasındaki etkileşmeler birbirinden farklı ($J_2 \neq J_3$) olarak ele alınacak. Ayrıca, altıgen örgüler veya tabakalar arası etkileşimin antiferromanyetik olması için J_1 parametresi tüm hesaplamalarda negatif alınacaktır. D, kristal alan etkileşmesi veya tek-iyon anizotropi sabiti ve son terim H ise zamanla değişen salınımlı dış manyetik alandır ve

$$H = H_0 \cos(wt), \qquad (1.2)$$

şeklinde tanımlanır. Burada H₀ ve w = $2\pi f$, sırasıyla salınımlı alanın genliği ve açısal frekansıdır. f ise spin değişim (flipping) frekansıdır. Sistem T_A mutlak sıcaklıkta izotermal ısı banyosu ile temas halindedir.

1.1.2.2. Ortalama-Alan Dinamik Denklemlerinin Elde Edilmesi

Bu kesimde zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında karma spin-2 ve spin-5/2 Ising modeli için sistemin dinamik davranışını açıklayan ortalama-alan dinamik denklemleri, birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerinde elde edilecektir. Bunun için Glauber dinamiği kullanılacak ve master denkleminden yararlanılacak. Sistem Glauber-tipi stokhastik dinamiğe göre birim zamanda $1/\tau$ oranında değişim gösterir. B alt örgüsündeki spinler sabit kaldığı zaman, sistemin t zamanında, $\sigma_1, \sigma_2, ...$ σ_N , spin konfigürasyonuna sahip olduğu andaki ihtimaliyet fonksiyonu P^{σ} ($\sigma_1, \sigma_2, ... \sigma_N$) ile tanımlanır. A alt örgüsü üzerindeki spinler sabit kaldığı zaman, sistemin t zamanında, S₁, S₂, ..., S_N spin konfigürasyonuna sahip olduğu andaki ihtimaliyet fonksiyonu ise P^S(S₁, S₂,...,S_N; t) ile tanımlanır. W^{σ}_i ($\sigma_i \rightarrow \sigma'_i$), *i*. spinin σ_i durumundan σ'_i durumuna (B alt örgüsü üzerindeki spinler sabit olduğu zaman), W^S_j (S_j \rightarrow S[']_j), ise *j*. spinin S_j durumundan S[']_j durumuna (A alt örgüsü üzerindeki spinler sabit olduğu zaman) birim zamandaki geçiş olasılığıdır. B alt örgüsündeki spinlerin bir an için sabit olduğu düşünülürse, A alt örgüsü için master denklemi,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} \mathrm{P}^{\sigma}\left(\sigma_{1},\sigma_{2},...,\sigma_{N};t\right) = -\sum_{i} \left(\sum_{\sigma_{i}\neq\sigma_{i}^{'}} \mathrm{W}_{i}^{\sigma}\left(\sigma_{i}\rightarrow\sigma_{i}^{'}\right)\right) \mathrm{P}^{\sigma}\left(\sigma_{1},\sigma_{2},...,\sigma_{i},...,\sigma_{N};t\right) + \sum_{i} \left(\sum_{\sigma_{i}\neq\sigma_{i}^{'}} \mathrm{W}_{i}^{\sigma}\left(\sigma_{i}^{'}\rightarrow\sigma_{i}\right) \mathrm{P}^{\sigma}\left(\sigma_{1},\sigma_{2},...,\sigma_{i}^{'},...,\sigma_{N};t\right)\right),$$
(1.3)

şeklinde yazılır. Sistem T_A mutlak sıcaklığında ısı banyosu ile temas halinde olduğu için, her spin σ_i durumundan σ'_i durumuna birim zamanda geçiş olasılığıyla değişebilir. Denge durumunda,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} \mathbf{P}^{\sigma} \left(\boldsymbol{\sigma}_{1}, \boldsymbol{\sigma}_{2}, ..., \boldsymbol{\sigma}_{N}; t \right) = 0, \qquad (1.4)$$

olduğundan denklem (1.3)'den denge durumu için olasılık yoğunlukları oranı,

$$\frac{W_{i}^{\sigma}(\sigma_{i} \rightarrow \sigma_{i})}{W_{i}^{\sigma}(\sigma_{i} \rightarrow \sigma_{i})} = \frac{P^{\sigma}(\sigma_{1}, \sigma_{2}, ..., \sigma_{i}, ..., \sigma_{N})}{P^{\sigma}(\sigma_{1}, \sigma_{2}, ..., \sigma_{i}, ..., \sigma_{N})},$$
(1.5)

olur. Buradan,

$$P_0^{\sigma}(\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_i^{'}, ..., \sigma_N) \alpha \exp(\beta H), \qquad (1.6)$$

yazılır. Burada $P_0^{\sigma}(\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma'_i, ..., \sigma_N)$ sistem dengede iken $(\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma'_i, ..., \sigma_N)$ konfigürasyonun da spinlerin bulunma ihtimaliyetini gösterir. Sistem dengede iken, master denklemi ve kanonik dağılımın genel tanımı yardımıyla, her bir spinin σ_i durumundan σ'_i durumuna birim zamanda geçiş olasılığı veya olasılık yoğunluğu,

$$W_{i}^{\sigma}\left(\sigma_{i} \rightarrow \sigma_{i}^{'}\right) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp\left(-\beta \Delta E_{i}^{\sigma}\left(\sigma_{i} \rightarrow \sigma_{i}^{'}\right)\right)}{\sum_{\sigma_{i}^{'}} \exp\left(-\beta \Delta E_{i}^{\sigma}\left(\sigma_{i} \rightarrow \sigma_{i}^{'}\right)\right)},$$
(1.7)

şeklinde yazılır. Burada $\beta = 1/k_B T_A$ 'dir ve k_B Boltzman faktörü, T_A mutlak sıcaklık, $\sum_{\sigma'_i}$ ise toplamın $\sigma'_i = \pm 2, \pm 1, 0$, mümkün beş değeri üzerinden alınacağını göstermektedir. $\Delta E_i^{\sigma} (\sigma_i \rightarrow \sigma'_i)$, herhangi bir spinin σ_i durumundan σ'_i durumuna geçişi sırasında sistemin enerjisinde meydana gelen değişmedir ve Hamiltonyen ifadesinden yararlanarak,

$$\Delta \mathbf{E}_{i}^{\sigma} \left(\boldsymbol{\sigma}_{i} \rightarrow \boldsymbol{\sigma}_{i}^{'} \right) = - \left(\boldsymbol{\sigma}_{i}^{'} - \boldsymbol{\sigma}_{i} \right) \left(\mathbf{J}_{1} \sum_{j} \mathbf{S}_{j} + \mathbf{J}_{2} \sum_{j} \boldsymbol{\sigma}_{j} + \mathbf{H} \right) - \left[\left(\boldsymbol{\sigma}_{i}^{'} \right)^{2} - \left(\boldsymbol{\sigma}_{i} \right)^{2} \right] \mathbf{D}, \qquad (1.8)$$

şeklinde elde edilir. σ_i durumundan σ'_i durumuna geçiş sırasında mümkün olan tüm enerji değişimleri (1.8) denkleminden elde edilir. Bulunan bu enerji değişimi ifadeleri (1.7) denkleminde yerine yazılırsa, her σ_i durumu için olasılık yoğunlukları,

$$W_{i}^{\sigma}(2 \to 0) = W_{i}^{\sigma}(1 \to 0) = W_{i}^{\sigma}(-1 \to 0) = W_{i}^{\sigma}(-2 \to 0)$$

= $\frac{1}{\tau} \frac{1}{2 \exp(\beta D) \cosh(\beta x) + 2 \exp(4\beta D) \cosh(2\beta x) + 1}$, (1.9a)

$$W_{i}^{\sigma}(2 \rightarrow 1) = W_{i}^{\sigma}(0 \rightarrow 1) = W_{i}^{\sigma}(-1 \rightarrow 1) = W_{i}^{\sigma}(-2 \rightarrow 1)$$
$$= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(\beta x)\exp(\beta D)}{2\exp(\beta D)\cosh(\beta x) + 2\exp(4\beta D)\cosh(2\beta x) + 1},$$
(1.9b)

$$W_{i}^{\sigma}(1 \rightarrow 2) = W_{i}^{\sigma}(0 \rightarrow 2) = W_{i}^{\sigma}(-1 \rightarrow 2) = W_{i}^{\sigma}(-2 \rightarrow 2)$$
$$= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(2\beta x)\exp(4\beta D)}{2\exp(\beta D)\cosh(\beta x) + 2\exp(4\beta D)\cosh(2\beta x) + 1},$$
(1.9c)

$$W_{i}^{\sigma}(1 \rightarrow -1) = W_{i}^{\sigma}(2 \rightarrow -1) = W_{i}^{\sigma}(0 \rightarrow -1) = W_{i}^{\sigma}(-2 \rightarrow -1)$$
$$= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta x)\exp(\beta D)}{2\exp(\beta D)\cosh(\beta x) + 2\exp(4\beta D)\cosh(2\beta x) + 1},$$
(1.9d)

$$W_{i}^{\sigma}(2 \rightarrow -2) = W_{i}^{\sigma}(1 \rightarrow -2) = W_{i}^{\sigma}(0 \rightarrow -2) = W_{i}^{\sigma}(-1 \rightarrow -2)$$
$$= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-2\beta x)\exp(4\beta D)}{2\exp(\beta D)\cosh(\beta x) + 2\exp(4\beta D)\cosh(2\beta x) + 1},$$
(1.9e)

olarak bulunur. Burada $x = J_1 \sum_j S_j + J_2 \sum_j \sigma_j + H$ olarak tanımlanmıştır. Master denklemi ve olasılık yoğunluğu ifadelerinden yararlanılarak, A alt örgüsü için sistemin dinamik davranışını veren denklem aşagıdaki gibi elde edilir. Ayrıca, ihtimaliyetler toplamı bire eşit olduğu için master denkleminin her iki tarafı σ_k ile çarpılırsa [225],

$$\tau \frac{d}{dt} \langle \sigma_{k} \rangle = -\langle \sigma_{k} \rangle + \left\langle \frac{2 \exp(4\beta D) \sinh\left[2\beta \left(J_{1}\sum_{j} S_{j} + J_{2}\sum_{j} \sigma_{j} + H\right)\right] + \exp(\beta D) \sinh\left[\beta \left(J_{1}\sum_{j} S_{j} + J_{2}\sum_{j} \sigma_{j} + H\right)\right]}{\exp(4\beta D) \cosh\left[2\beta \left(J_{1}\sum_{j} S_{j} + J_{2}\sum_{j} \sigma_{j} + H\right)\right] + \exp(\beta D) \cosh\left[\beta \left(J_{1}\sum_{j} S_{j} + J_{2}\sum_{j} \sigma_{j} + H\right)\right] + \frac{1}{2} \right\rangle},$$
(1.10)

şeklinde veya ortalama-alan yaklaşımı kullanılarak aşağıdaki gibi

$$\Omega \frac{d}{d\xi} m_{\sigma} = -m_{\sigma} + \left\langle \frac{2 \exp(4d/T) \sinh(2a_1/T) + \exp(d/T) \sinh(a_1/T)}{\exp(4d/T) \cosh(2a_1/T) + \exp(d/T) \cosh(a_1/T) + \frac{1}{2}} \right\rangle, \quad (1.11)$$

elde edilir. Burada
$$a_1 = \left(\left(-z_1 m_s + z_2 m_\sigma \frac{J_2}{|J_1|} + h_0 \cos(\xi) \right) \right), T = \frac{k_B T_A}{|J_1|}, d = \frac{D}{|J_1|}, h_0 = \frac{H_0}{|J_1|},$$

 $m_{\sigma} = \langle \sigma \rangle$, $m_s = \langle S \rangle$, $\xi = wt$, $\Omega = \tau w$, $w = 2\pi f$, f spin değişim frekansı ve w manyetik alan frekansıdır.

Şimdi, A alt örgüsü için yapılan hesaplamalara benzer olarak, A alt örgüsündeki spinlerin bir an için sabit olarak kaldığı ve geçişlerin B alt örgüsü üzerinde bulunan spinler arasında meydana geldiği düşünülürse, B alt örgüsü için master denklemi,

$$\frac{d}{dt} P^{s}(S_{1}, S_{2}, ..., S_{N}; t) = -\sum_{j} \left(\sum_{S_{j} \neq S'_{j}} W^{s}_{j}(S_{j} \rightarrow S'_{j}) \right) P^{s}(S_{1}, S_{2}, ..., S_{j}, ..., S_{N}; t)
+ \sum_{j} \left(\sum_{S_{j} \neq S'_{j}} W^{s}_{j}(S'_{j} \rightarrow S_{j}) P^{s}(S_{1}, S_{2}, ..., S'_{j}, ..., S_{N}; t) \right),$$
(1.12)

şeklinde yazılır. Sistem T_A mutlak sıcaklığında ısı banyosu ile temas halinde olduğu için, her spin S_j durumundan S'_j, durumuna birim zamanda geçiş olasılığıyla değişebilir. Denge durumunda,

$$\frac{d}{dt}P_0^{s}(S_1, S_2, ..., S_N; t) = 0, \qquad (1.13)$$

olduğundan denklem (1.12)'den denge durumu için olasılık yoğunlukları oranı,

$$\frac{W_{j}^{s}(S_{j} \rightarrow S_{j}')}{W_{j}^{s}(S_{j}' \rightarrow S_{j})} = \frac{P^{s}(S_{1}, S_{2}, ..., S_{j}, ..., S_{N})}{P^{s}(S_{1}, S_{2}, ..., S_{j}', ..., S_{N})},$$
(1.14)

şeklinde yazılır. Buradan

$$P_0^{S}(S_1, S_2, S_3, ..., S_N) \alpha \exp(-\beta \mathcal{H}), \qquad (1.15)$$

yazılır. Burada $P_0^{S}(S_1, S_2, ..., S_i', ..., S_N)$ sistem dengede iken $(S_1, S_2, ..., S_i', ..., S_N)$ konfigürasyonun da spinlerin bulunma ihtimaliyetini gösterir. Sistem dengede iken, master denklemi ve kanonik dağılımın genel tanımı yardımıyla, her bir spinin σ_i durumundan σ'_i durumuna birim zamanda geçiş olasılığı veya olasılık yoğunluğu

$$W_{j}^{s}\left(S_{j} \rightarrow S_{j}'\right) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp\left(-\beta \Delta E_{j}^{s}\left(S_{j} \rightarrow S_{j}'\right)\right)}{\sum_{S_{j}'} \exp\left(-\beta \Delta E_{j}^{s}\left(S_{j} \rightarrow S_{j}'\right)\right)},$$
(1.16)

şeklinde yazılır. Burada $\beta = 1/k_B T_A$, k_B Boltzmann sabiti, T_A mutlak sıcaklık, $\sum_{S_j^{-1}}$ ifadesi ise toplamın $S'_j = \pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$, mümkün altı değeri üzerinden alınacağını göstermektedir. $\Delta E_j^s (S_j \rightarrow S'_j)$, herhangi bir spinin S_j durumundan S'_j durumuna geçişi sırasında sistemin enerjisinde meydana gelen değişmedir ve Hamiltonyen ifadesinden yararlanarak,

$$\Delta \mathbf{E}_{j}^{s}(\mathbf{S}_{j} \rightarrow \mathbf{S}_{j}') = -\left(\mathbf{S}_{j}' - \mathbf{S}_{j}\right)\left(\mathbf{J}_{1}\sum_{i}\sigma_{i} + \mathbf{J}_{3}\sum_{i}\mathbf{S}_{i} + \mathbf{H}\right) - \left[\left(\mathbf{S}_{j}'^{2}\right) - \left(\mathbf{S}_{j}^{2}\right)\right]\mathbf{D} \quad , \tag{1.17}$$

şeklinde bulunur. S_j durumundan S'_j durumuna geçişi sırasında mümkün olan tüm enerji değişimleri (1.17) denkleminden elde edilir. Bulunan bu enerji değişimi ifadeleri (1.16) denkleminde yerine yazılırsa, her S_j durumu için olasılık yoğunlukları şu şekilde elde edilir.

$$\begin{split} W_{j}^{S}(3/2 \to 5/2) = W_{j}^{S}(1/2 \to 5/2) = W_{j}^{S}(-1/2 \to 5/2) = W_{j}^{S}(-3/2 \to 5/2) = W_{j}^{S}(-5/2 \to 5/2) \\ &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(\frac{5}{2}\beta_{a_{2}})\exp(2\beta D)}{2\exp(2\beta D)\cosh(\frac{5}{2}\beta_{a_{2}})+2\exp(-2\beta D)\cosh(\frac{3}{2}\beta_{a_{2}})+2\exp(-4\beta D)\cosh(\frac{1}{2}\beta_{a_{2}})}, \end{split}$$
(1.18a)
$$W_{j}^{S}(5/2 \to 3/2) = W_{j}^{S}(1/2 \to 3/2) = W_{j}^{S}(-1/2 \to 3/2) = W_{j}^{S}(-3/2 \to 3/2) = W_{j}^{S}(-5/2 \to 3/2) \\ &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(\frac{3}{2}\beta_{a_{2}})\exp(-2\beta D)}{2\exp(2\beta D)\cosh(\frac{5}{2}\beta_{a_{2}})+2\exp(-2\beta D)\cosh(\frac{3}{2}\beta_{a_{2}})+2\exp(-4\beta D)\cosh(\frac{1}{2}\beta_{a_{2}})}, \end{split}$$
(1.18b)
$$&= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(\frac{1}{2}\beta_{a_{2}})\exp(-2\beta D)}{2\exp(2\beta D)\cosh(\frac{5}{2}\beta_{a_{2}})+2\exp(-2\beta D)\cosh(\frac{3}{2}\beta_{a_{2}})+2\exp(-4\beta D)\cosh(\frac{1}{2}\beta_{a_{2}})}, \end{split}$$
(1.18c)
$$&= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(\frac{1}{2}\beta_{a_{2}})\exp(-4\beta D)}{2\exp(2\beta D)\cosh(\frac{5}{2}\beta_{a_{2}})+2\exp(-2\beta D)\cosh(\frac{3}{2}\beta_{a_{2}})+2\exp(-4\beta D)\cosh(\frac{1}{2}\beta_{a_{2}})}, \end{cases}$$
(1.18d)
$$&= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\frac{1}{2}\beta_{a_{2}})\exp(-4\beta D)}{2\exp(2\beta D)\cosh(\frac{5}{2}\beta_{a_{2}})+2\exp(-2\beta D)\cosh(\frac{3}{2}\beta_{a_{2}})+2\exp(-4\beta D)\cosh(\frac{1}{2}\beta_{a_{2}})}, \end{cases}$$
(1.18d)
$$&= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\frac{1}{2}\beta_{a_{2}})\exp(-4\beta D)}{2\exp(2\beta D)\cosh(\frac{5}{2}\beta_{a_{2}})+2\exp(-2\beta D)\cosh(\frac{3}{2}\beta_{a_{2}})+2\exp(-4\beta D)\cosh(\frac{1}{2}\beta_{a_{2}})}, \end{cases}$$
(1.18e)
$$&= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\frac{3}{2}\beta_{a_{2}})\exp(-2\beta D)}{2\exp(2\beta D)\cosh(\frac{5}{2}\beta_{a_{2}})+2\exp(-2\beta D)\cosh(\frac{3}{2}\beta_{a_{2}})+2\exp(-4\beta D)\cosh(\frac{1}{2}\beta_{a_{2}})}, \end{cases}$$
(1.18e)
$$&= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\frac{3}{2}\beta_{a_{2}})\exp(-2\beta D)}{2\exp(2\beta D)\cosh(\frac{3}{2}\beta_{a_{2}})+2\exp(-4\beta D)\cosh(\frac{1}{2}\beta_{a_{2}})}, \end{cases}$$
(1.18e)
$$&= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\frac{3}{2}\beta_{a_{2}})\exp(-2\beta D)\cosh(\frac{3}{2}\beta_{a_{2}})+2\exp(-4\beta D)\cosh(\frac{1}{2}\beta_{a_{2}})},$$
(1.18e)
$$&= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\frac{3}{2}\beta_{a_{2}})\exp(-2\beta D)}{2\exp(2\beta D)\cosh(\frac{3}{2}\beta_{a_{2}})+2\exp(-4\beta D)\cosh(\frac{1}{2}\beta_{a_{2}})},$$
(1.18f)
$$&= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(2\beta D)\cosh(\frac{5}{2}\beta_{a_{2}})+2\exp(-2\beta D)\cosh(\frac{3}{2}\beta_{a_{2}})+2\exp(-4\beta D)\cosh(\frac{1}{2}\beta_{a_{2}})},$$
(1.18f)
$$&= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(2\beta D)\cosh(\frac{5}{2}\beta_{a_{2}})+2\exp(-2\beta D)\cosh(\frac{3}{2}\beta_{a_{2}})+2\exp(-4\beta D)\cosh(\frac{1}{2}\beta_{a_{2}})},$$
(1.18f)

Burada $a_2 = J_1 \sum_i \sigma_i + J_3 \sum_i S_i + H$ şeklinde tanımlanır. Bu eşitlikler göz önüne alındığında (1.12) ile verilen master denklemi

$$\frac{d}{dt} P^{s}(S_{1}, S_{2}, ..., S_{N}; t) = -\sum_{j} \left(\sum_{S_{j} \neq S_{j}'} W_{j}^{s}(S_{j}') \right) P^{s}(S_{1}, S_{2}, ..., S_{j}, ..., S_{N}; t)
+ \sum_{j} W_{j}^{s}(S_{j}) \left(\sum_{S_{j} \neq S_{j}'} P^{s}(S_{1}, S_{2}, ..., S_{j}', ..., S_{N}; t) \right),$$
(1.19)

şeklinde dönüşür. Master denkleminden yararlanılarak, B alt örgüsü için sistemin dinamik davranışını veren denklem şu şekilde elde edilir. İhtimaliyetler toplamı bire eşit olduğu için (1.19)'un her iki tarafı S_k ile çarpılırsa [225]

$$\tau \frac{d}{d\xi} \langle S_k \rangle = -\langle S_k \rangle + \left\langle \frac{5 \exp(2d/T) \sinh\left(\frac{5}{2} \frac{a_2}{T}\right) + 3 \exp(-2d/T) \sinh\left(\frac{3}{2} \frac{a_2}{T}\right) + \exp(-4d/T) \sinh\left(\frac{1}{2} \frac{a_2}{T}\right)}{2 \exp(2d/T) \cosh\left(\frac{5}{2} \frac{a_2}{T}\right) + 2 \exp(-2d/T) \cosh\left(\frac{3}{2} \frac{a_2}{T}\right) + \exp(-4d/T) \cosh\left(\frac{1}{2} \frac{a_2}{T}\right)} \right\rangle,$$
(1.20)

şeklinde olur. Burada $a_2 = J_1 \sum_i \sigma_i + J_3 \sum_i S_i + H$ olarak tanımlanmıştır. Ortalama-alan yaklaşımı kullanılırsa, B alt örgüsü için ortalama-alan dinamik denklemi,

$$\Omega \frac{d}{d\xi} m_{s} = -m_{s} + \left\langle -\frac{5 \exp(2d/T) \sinh\left(\frac{5}{2} \frac{a_{3}}{T}\right) + 3 \exp(-2d/T) \sinh\left(\frac{3}{2} \frac{a_{3}}{T}\right) + \exp(-4d/T) \sinh\left(\frac{1}{2} \frac{a_{3}}{T}\right)}{2 \exp(2d/T) \cosh\left(\frac{5}{2} \frac{a_{3}}{T}\right) + 2 \exp(-2d/T) \cosh\left(\frac{3}{2} \frac{a_{3}}{T}\right) + \exp(-4d/T) \cosh\left(\frac{1}{2} \frac{a_{3}}{T}\right)} \right\rangle,$$
(1.21)

burada $a_3 = \left(\left(-z_1 m_{\sigma} + z_3 m_s \frac{J_3}{|J_1|} + h_0 \cos(\xi) \right) \right)$ şeklindedir. Böylece sistemin ortalama-

alan dinamik denklemleri elde edilmiş oldu. Hesaplamalarımızda, J_1 alt örgüler arası etkileşme parametresi -1 olarak sabit alınmıştır. T, h ve Ω boyutsuz parametrelerdir. Sistemimizde $\Omega = 2\pi$ değerinde sabittir. Gelecek kesimde bu denklemlerin nümerik çözümleri yapılacak ve çözümler tartışılacaktır.

1.1.3. Dinamik Faz Geçiş Noktaları ve Dinamik Faz Diyagramları

Bu kesimde, öncelikle (1.11) ve (1.21) ile verilen ortalama-alan dinamik denklemlerinin Adams-Moulton kestirme ve düzeltme yöntemi kullanılarak nümerik olarak çözülmesiyle ortalama düzen parametrelerinin, yani A ve B alt örgüleri için ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının ($m_{\sigma}(\xi)$ ve $m_{\rm S}(\xi)$) zamana bağlı davranışları incelenecektir. Daha sonra, (1.11) ve (1.21) denklemleri Adams-Moulton kestirme ve düzeltme, ve Romberg integrasyon yöntemleri kullanılarak nümerik olarak çözülerek ve bir periyot içinde ortalama düzen parametrelerinin yani dinamik alt örgü mıknatıslanmaların davranışları indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak incelenerek, dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıkları tespit edilecek ve aynı zamanda DFG'lerin doğası (kesikli veya sürekli yani birinci- veya ikinci-derece faz geçişleri) karakterize edilecektir. Ayrıca, dinamik toplam mıknatıslanmanın davranışı sıcaklığın bir fonksiyonu olarak incelenerek dinamik telafi sıcaklıkları tespit edilecektir. Bütün bu incelemeler sonucu, sistemin dinamik faz diyagramları beş farklı düzlemde, yani (d, T), (J₂, T), (-J₃, T), (d, J₂) ve (d, -J₃) düzlemlerinde sunulacaktır.

1.1.3.1. Ortalama Alt Örgü Mıknatıslanmalarının Zamanla Değişimi

Sistemde mevcut olan fazları bulabilmek için denklem (1.11) ve (1.21) ile verilen ortalama-alan dinamik denklemlerin kararlı çözümleri farklı J₂, J₃, d, h₀ ve T değerleri için incelenecektir. Denklem (1.11) ve (1.21)'in kararlı çözümleri 2π periyodu için ξ 'nin periyodik bir fonksiyonu olacaktır, yani

$$\mathbf{m}_{\sigma}(\boldsymbol{\xi} + 2\pi) = \mathbf{m}_{\sigma}(\boldsymbol{\xi}), \tag{1.22}$$

ve

$$m_{s}(\xi + 2\pi) = m_{s}(\xi).$$
 (1.23)

Ayrıca, aşağıdaki özelliklerin sağlanıp veya sağlanmamasına göre sistemde üç tip çözüm mevcuttur.

$$\mathbf{m}_{\sigma}(\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\pi}) = -\mathbf{m}_{\sigma}(\boldsymbol{\xi}), \tag{1.24}$$

ve

$$m_{s}(\xi + \pi) = -m_{s}(\xi).$$
 (1.25)

Eğer çözüm, (1.24) ve (1.25) denklemleriyle verilen özelliğe sahipse simetrik çözüm olarak adlandırılır ve bu paramanyetik (p) çözüme karşılık gelir. Bu çözümde, ortalama düzen parametreleri, yani ortalama alt örgü mıknatısları ($m_{\sigma}(\xi)$ ve $m_{s}(\xi)$) birbirine eşittir ve sıfır değeri civarında salınarak dış manyetik alana uyum gösterirler. İkinci çözüm ise, (1.24) ve (1.25) denklemleriyle verilen özelliğe sahip değildir ve bu simetrik olmayan çözüm ferrimanyetik (i) faza karşılık gelir ve artık dış manyetik alana uyum göstermezler. Bu çözümde $m_{\sigma}(\xi)$ ve $m_{s}(\xi)$ sırasıyla ±2 ve ∓5/2 değeri etrafında salınırlarsa ferrimanyetik-I (i₁); ±2 ve ∓3/2 değeri etrafında salınırlarsa ferrimanyetik-II (i₂); ±2 ve ∓1/2 değeri etrafında salınırlarsa ferrimanyetik-III (i₂); ±0 ve ∓1/2 değeri etrafında salınırlarsa ferrimanyetik-III (i₂); e uyarken denklem (1.24)' e uymaz ve bu manyetik olmayan (nm) faza karşılık gelir. Bu durumda $m_{\sigma}(\xi)$ sıfır değeri etrafında salınır ve dış manyetik alana uyum gösterire. Bu çözümler açık bir şekilde (1.11) ve (1.21) ile verilen ortalama-alan dinamik denklemlerin nümerik olarak çözülmesiyle görülür.

Verilen parametreler ve başlangıç değerleri için Adams-Moulton kestirme ve düzeltme yöntemi kullanılarak (1.11) ve (1.21) numaralı denklemler çözüldü ve sistemde p, nm, i_1 , i_2 , i_3 ve i_4 temel fazlarının yanında yedi adet karma faz bulundu. Bu karma fazlar i_1 ve p fazlarının bir arada bulunduğu $i_1 + p$ karma fazı; i_1 ve nm fazlarının bir arada bulunduğu $i_1 + p$ karma fazı; i_1 ve nm fazlarının bir arada bulunduğu $i_2 + p$ karma fazı; i_2 ve nm fazlarının bir arada bulunduğu $i_2 + nm$ karma fazı; i_3 ve p fazlarının bir arada bulunduğu $i_3 + p$; i_4 ve p fazlarının bir arada bulunduğu $i_4 + p$ karma fazı ve son olarak i_4 ve nm fazlarının bir arada bulunduğu $i_4 + nm$ karma fazı bulundu. Temel fazlara karşılık gelen çözümler Şekil 1.2'de gösterilirken karma fazıara karşılık gelen çözümler ve fazlarının bir.

bundan dolayı sistemde sadece paramanyetik (p) faz mevcuttur. Bu durumda $m_{\sigma}(\xi)$ ve $m_{s}(\xi)$ birbirine eşittir ve sıfır değeri civarında salınırlar. Şekil 1.2 (b)-(e)'de ferrimanyetik çözümler mevcuttur ve bu çözümler Şekil 1.2(b)'de $m_{\sigma}(\xi)$ ve $m_{s}(\xi)$ sırasıyla ±2 ve ∓5/2 değerleri etrafında salınırlarken i₁ fazına, Şekil 1.2(c)'de $m_{\sigma}(\xi)$ ve $m_{s}(\xi)$ sırasıyla ±2 ve ∓3/2 değerleri etrafında salınırlarken i₂ fazına, Şekil 1.2(d)'de $m_{\sigma}(\xi)$ ve $m_{s}(\xi)$ sırasıyla ±2 ve ∓1/2 değerleri etrafında salınırlarken i₃ fazına, Şekil 1.2(d)'de $m_{\sigma}(\xi)$ ve $m_{s}(\xi)$ sırasıyla ±2 ve ∓1/2 değerleri etrafında salınırlarken i₃ fazına, Şekil 1.2(e)'de $m_{\sigma}(\xi)$ ve $m_{s}(\xi)$ sırasıyla ±1 ve ∓1/2 değerleri etrafında salınırlarken i₄ fazına karşılık gelmektedir. Şekil 1.2(f)'de $m_{\sigma}(\xi)$ ve $m_{s}(\xi)$ sırasıyla 0 ve ∓1/2 değerleri etrafında salınırlar ve bu çözüm nm fazına karşılık gelir. Bu temel çözümler başlangıç değerlerine bağlı değildir.

Sistemde mevcut olan karma fazlar Şekil 1.3'te gösterilmiştir. Şekil 1.3(a)-(g)'de iki farklı çözüm mevcuttur. Şekil 1.3(a)'da i₁ ve p fazları bir arada bulunmaktadır. İlk çözümde, $m_{\sigma}(\xi) = \pm 2$ civarında salınırken, $m_{s}(\xi) = \pm 5/2$ salınır ve burada ferrimanyetik-I (i₁) fazı elde edilmiştir. İkinci çözümde ise $m_{\sigma}(\xi)$ ve $m_{s}(\xi)$ sıfır değeri civarında salınırlar, yani sistemde paramanyetik (p) faz elde edilmiştir. Böylece, sistemde $i_1 + p$ karma fazı bulunmaktadır. Şekil 1.3(b)'de i_1 ve nm fazları bir arada bulunmaktadır. Buradaki ilk çözümde $m_{\sigma}(\xi)$ ve $m_{s}(\xi)$ sırasıyla ±2 ve $\pm 5/2$ değerleri etrafında salınırlar. Bundan dolayı sistemde i1 fazı mevcuttur. İkinci çözümde ise $m_{\sigma}(\xi)=0$ değeri etrafında salınırken $m_{s}(\xi)=\pm 1/2$ değerleri etrafında salınır. Bundan dolayı sistemde nm fazı mevcuttur. Bundan dolayı, sistemde $i_1 + nm$ karma fazı mevcuttur. Şekil 1.3(c)'de i2 ve p fazları bir arada bulunmaktadır. Buradaki ilk çözümde $m_{\sigma}(\xi) = \pm 2$ civarında salınırken, $m_{s}(\xi) = \pm 3/2$ salınır ve burada i₂ fazı elde edilir. İkinci çözümde ise $m_{\sigma}(\xi)$ ve $m_{s}(\xi)$ sıfır değeri civarında salınırlar ve burada p fazı elde edilir. Bundan dolayı sistemde $i_2 + p$ karma fazı mevcuttur. Şekil 1.3(d)'de i_2 ve nm fazları bir arada bulunmaktadır. Buradaki ilk çözümde $m_{\sigma}(\xi)$ ve $m_{s}(\xi)$ sırasıyla ±2 ve $\pm 3/2$ değerleri etrafında salınırlar. Bundan dolayı sistemde i₂ fazı mevcuttur. İkinci çözümde ise $m_{\sigma}(\xi)=0$ değeri etrafında salınırken $m_{s}(\xi)=\pm 1/2$ değerleri etrafında salınır. Bundan dolayı sistemde nm fazı mevcuttur. Bundan dolayı, sistemde i₂ + nm



Şekil 1.2. Birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerinde karma spin (2, 5/2) Ising modeli için ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının zamanla değişimi. (a) Sistemde paramanyetik (p) faz mevcuttur ($J_2 = 2.0$, $J_3 = 0.7$, d = -4.5, $h_0 = 4.0$, T = 18). (b) Sistemde ferrimanyetik-I faz (i₁) mevcuttur ($J_2 = 2.0$, $J_3 = 0.1$, d = 1, $h_0 = 0.1$, T = 4.0). (c) Sistemde ferrimanyetik-II faz (i₂) mevcuttur ($J_2 = 2.0$, $J_3 = -0.2$, d = -3.0, $h_0 = 2.5$, T = 3.0). (d) Sistemde ferrimanyetik-III faz (i₃) mevcuttur ($J_2 = 15$, $J_3 = 0.1$, d = -12, $h_0 = 2.5$, T = 2.5). (e) Sistemde ferrimanyetik-IV faz (i₄) mevcuttur ($J_2 = 8.0$, $J_3 = 0.1$, d = -10, $h_0 = 2.5$, T = 1.0). (f) Sistemde manyetik olmayan faz (non manyetik) (nm) mevcuttur ($J_2 = 1.2$, $J_3 = 0.5$, d = -3.0, $h_0 = 0.1$, T = 0.15).

karma fazı mevcuttur. Şekil 1.3(e)'de i₃ ve p fazları bir arada bulunmaktadır. Buradaki ilk çözümde $m_{\sigma}(\xi) = \pm 2$ civarında salınırken, $m_s(\xi) = \mp 1/2$ salınır ve burada i₃ fazı elde edilir. İkinci çözümde ise $m_{\sigma}(\xi)$ ve $m_s(\xi)$ sıfır değeri civarında salınırlar ve burada p fazı elde edilir. Bundan dolayı sistemde i₃ + p karma fazı mevcuttur. Şekil 1.3(f)'de i₄ ve p fazları bir arada bulunmaktadır. Buradaki ilk çözümde $m_{\sigma}(\xi)$ ve $m_s(\xi)$ sırasıyla ±1 ve ∓1/2 salınır ve burada i₄ fazı elde edilir. İkinci çözümde ise $m_{\sigma}(\xi)$ ve $m_s(\xi)$ sıfır değeri civarında salınırlar ve burada p fazı elde edilir. Bundan dolayı sistemde i₄ + p karma fazı mevcuttur. Şekil 1.3(g)'de i₄ ve nm fazları bir arada bulunmaktadır. Buradaki ilk çözümde $m_{\sigma}(\xi)=\pm 1$ civarında salınırken, $m_s(\xi)=\mp 1/2$ salınır ve burada i₄ fazı elde edilir. İkinci çözümde ise $m_{\sigma}(\xi)=\pm 1/2$ değerleri etrafında salınır. Bundan dolayı sistemde nm fazı salınırken $m_s(\xi)=\mp 1/2$ değerleri etrafında salınır. Bundan dolayı sistemde nm fazı mevcuttur. Bundan dolayı, sistemde i₄ + nm karma fazı mevcuttur.

1.1.3.2. Dinamik Faz Geçiş Noktaları

Sistemde mevcut olan fazlar arasındaki dinamik faz sınırlarını belirleyebilmemiz için, dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıklarını hesaplamalı ve DFG'lerinin doğasını (kesikli veya sürekli yani birinci- veya ikinci-derece faz geçişleri) karakterize etmeliyiz. Daha sonra da dinamik faz diyagramlarını sunabiliriz. DFG sıcaklıkları bir periyot başına ortalama düzen parametrelerinin yani dinamik alt örgü mıknatıslanmalarının davranışının sıcaklığın bir fonksiyonu olarak incelenmesiyle elde edilecektir. Ayrıca, sistemde dinamik telafi sıcaklıklarını bulabilmek için dinamik toplam mıknatıslanmanın

$$\left(M_{T} = \left(\frac{M_{\sigma}(\xi) + M_{s}(\xi)}{2}\right)\right)$$
 sıcaklığın bir fonksiyonu olarak davranışı incelenecektir.

Dinamik düzen parametreleri veya dinamik alt örgü mıknatıslanmaları (M_{σ}, M_{s}) ve dinamik toplam mıknatıslanma (M_{T})

$$M_{\sigma} = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} m_{\sigma}(\xi) d\xi , \qquad (1.26)$$



Şekil 1.3. Şekil 1.2 ile aynı, fakat mevcut karma fazlar gösterilmiştir. (a) Sistemde $i_1 + p$ karma fazı mevcuttur ($J_2 = 8.0$, $J_3 = 0.5$, d = -10, $h_0 = 2.5$, T = 1.2). (b) Sistemde $i_1 + nm$ karma fazı mevcuttur ($J_2 = 1.1$, $J_3 = 0.7$, d = -2.5, $h_0 = 0.1$, T = 0.2). (c) Sistemde $i_2 + p$ karma fazı mevcuttur ($J_2 = 2.0$, $J_3 = 0.87$, d = -4.0, $h_0 = 1.5$, T = 2.0). (d) Sistemde $i_2 + nm$ karma fazı mevcuttur ($J_2 = 6.0$, $J_3 = 0.7$, d = -4.5, $h_0 = 0.15$, T = 0.1). (e) Sistemde $i_3 + p$ karma fazı mevcuttur ($J_2 = 4.0$, $J_3 = 0.7$, d = -4.5, $h_0 = 0.15$, T = 1.0). (f) Sistemde $i_4 + p$ karma fazı mevcuttur ($J_2 = 8.0$, $J_3 = 0.5$, d = -10, $h_0 = 2.5$, T = 1.2). (g) Sistemde $i_4 + nm$ karma fazı mevcuttur ($J_2 = 7.0$, $J_3 = 0.8$, d = -7.0, $h_0 = 0.1$, T = 5.0).

$$M_{s} = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} m_{s}(\xi) d\xi , \qquad (1.27)$$

$$M_{\rm T} = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} \left(\frac{m_{\sigma}(\xi) + m_{\rm s}(\xi)}{2} \right) d\xi , \qquad (1.28)$$

şeklinde tanımlanır. M_{σ} , M_{s} ve M_{T} 'nin davranışları etkileşim parametrelerinin birkaç farklı değeri için indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak, Adams-Moulton kestirme ve düzeltme ile Romberg integrasyon yöntemi gibi nümerik metotların birleştirilmesiyle incelendi. Dinamik faz sınırlarının, DFG sıcaklıklarının ve dinamik telafi sıcaklıklarının nasıl elde edildiği Şekil 1.4, Şekil 1.5 ve Şekil 1.6'da gösterilmektedir. Bu şekillerde, Tt ve Tc, sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş sıcaklıklarını göstermektedir. Şekil 1.4, $J_2 = 3.0$, $J_3 = 0.8$, d = -1.0 ve $h_0 = 0.1$ için $|M_{\sigma}|, |M_{s}|$ ve $|M_{T}|$ 'nin davranışlarını indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak göstermektedir. Bu şekilde, T = 0'da $|M_{\sigma}| = 2$ ve $|M_{s}| = 5/2$ 'dir, ve indirgenmiş sıcaklık artarken $|M_{\sigma}|$ ve $|M_s|$ sürekli olarak azalarak, $T_c = 16.96$ değerinde sıfır olmaktadır. Böylece sistemde ferrimanyetik-I (i1) fazından paramanyetik (p) faza ikinciderece faz geçişi T_c = 16.96 değerinde meydana gelmektedir. Buna ilaveten, dinamik toplam mıknatıslanmanın $|M_T|$ indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak davranışı incelendiğinde sistemde dinamik telafi davranışı meydana gelmektedir ki bu N-tipi olarak bilinmektedir ve telafi davranış [226] bu davranış Néel [194] sınıflandırılmasından sonra yapılmıştır.

Şekil 1.5(a) ve Şekil 1.5(b), $J_2 = 2.0$, $J_3 = 0.2$, d = -1.5 ve $h_0 = 0.1$ için $|M_{\sigma}|$, $|M_s|$ ve $|M_T|'$ nin indirgenmiş sıcaklıkla değişimini farklı başlangıç değerleri için göstermektedir. Şekil 1.5(a), Şekil 1.4'e benzemekle beraber Şekil 1.4'den farkı, i₁' den p fazına ikinci dereceden faz geçiş sıcaklığı $T_c = 11.29$ değerinde meydana gelmektedir. Şekil 1.5(b)'de, sistem peş peşe iki faz geçişi sergilemektedir. Bu geçişlerin birincisi p fazından i₁ fazına birinci-dereceden faz geçişidir ($T_t = 0.36$). Burada dinamik düzen parametrelerinde indirgenmiş sıcaklık artarken belirli bir sıcaklıkta yani $T = T_t$ değerinde süreksiz bir şekilde p fazından i₁ fazına geçiş olmaktadır. İkincisi ise i₁ fazın-



Şekil 1.4. Birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerinde karma spin-2 ve spin-5/2 Ising modeli için dinamik alt örgü mıknatıslanmalarının $(|M_{\sigma}|, |M_{s}|)$ ve dinamik toplam mıknatıslanmanın $(|M_{T}|)$ indirgenmiş sıcaklığa bağlı olarak davranışları. T_c = 16.96 değeri ferrimanyetik-I (i₁) fazdan paramanyetik faza ikinci-derece faz geçiş sıcaklığını göstermektedir ve sistem N-tipi dinamik telafi davranışı sergilemektedir. (J₂ = 2.0, J₃ = 0.2, d = -1.0 ve h₀ = 0.1).

dan p fazına,ikinci-dereceden faz geçişidir ($T_c = 11.29$). Şekil 1.5(a) ve (b) dikkatli incelendiğinde sistemde T_t sıcaklığına kadar karma $i_1 + p$ fazı bulunurken, T_t ile T_c sıcaklıkları arasında sadece i_1 fazı, T_c sıcaklığından sonra sadece p fazı bulunmaktadır.

Şekil 1.6(a) ve Şekil 1.6(b), $J_2 = 8.0$, $J_3 = 0.1$, d = -10 ve $h_0 = 2.5$ için $|M_{\sigma}|, |M_s|$ ve $|M_T|'$ nin indirgenmiş sıcaklıkla değişimini farklı başlangıç değerleri için göstermektedir. Şekil 1.6(a)'da, T = 0'da $|M_{\sigma}|=1$ ve $|M_s|=1/2$ 'dir ve indirgenmiş sıcaklık artarken $|M_{\sigma}|$ ve $|M_s|$ sürekli olarak azalarak, belirli bir sıcaklıkta yani $T = T_t = 2.52$ değerine ulaştığında süreksiz bir şekilde i₄ fazından p fazına geçiş olmaktadır. Şekil 1.6(b)'de bütün sıcaklık değerleri için $|M_{\sigma}|, |M_s|$ ve $|M_T|$ 'daima sıfıra eşittir. Dolayısı ile sistem faz geçişi vermemektedir ve bu durum paramanyetik faza karşılık gelmektedir. Ayrıca, bu durumda sistemde dinamik telafi sıcaklığı meydana gelmemektedir. Şekil 1.6(a) ve (b) dikkatli incelendiğinde sistemde T_t sıcaklığına kadar karma i₄ + p fazı bulunurken, T_t sıcaklığından sonra sadece p fazı bulunmaktadır.



Şekil 1.5. $J_2 = 2.0$, $J_3 = 0.2$, d = -1.5 ve $h_0 = 0.1$ değerleri için dinamik alt örgü mıknatıslanmalarının $(|M_{\sigma}|, |M_s|)$ ve dinamik toplam mıknatıslanmanın $((|M_T|))$ indirgenmiş sıcaklığa bağlı olarak iki farklı başlangıç değeri için davranışları. T_t ve T_c sırasıyla p fazından i₁ fazına birinci- ve i₁ fazından p fazına ikinci-derece faz geçiş sıcaklıklarını göstermektedir.



Şekil 1.6. $J_2 = 8.0$, $J_3 = 0.1$, d = -10 ve $h_0 = 2.5$ değerleri için dinamik alt örgü mıknatıslanmalarının $(|M_{\sigma}|, |M_s|)$ ve dinamik toplam mıknatıslanmanın $((|M_T|))$ indirgenmiş sıcaklığa bağlı olarak iki farklı başlangıç değeri için davranışları. T_t , i_4 fazından p fazına birinci-derece faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.

1.1.3.3. Dinamik Telafi Davranışları

Dengeli ve dengesiz sistemlerde ilginç problemlerden birisi ise telafi sıcaklıklarının bulunmasıdır. Telafi sıcaklığı (T_{telafi}), kritik sıcaklığın altında toplam mıknatıslanmanın sıfır olduğu sıcaklıktır Birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerinde karma (2, 5/2) Ising modeli üzerinde dinamik telafi etki detaylı biçimde araştırıldı ve Şekil 1.7(a) ve (b)'de gösterildiği gibi sistemin sırasıyla Q- ve N- tipi davranış sergilediği bulundu ki bu Néel [194] sınıflandırılmasından sonra yapılan ve telafi davranışı [226] olarak bilinen davranıştır.



Şekil 1.7. Birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerinde karma spin (2, 5/2) Ising modeli için dinamik toplam mıknatıslanmanın ($|M_T|$) farklı etkileşim parametreleri için indirgenmiş sıcaklığa bağlı olarak davranışları. (a) J₂ = 2, J₃ = 0.8, d = -7, h₀ = 0.1. (b) J₂ = 2, J₃ = 0.2, d = -1 ve h₀ = 0.1.

1.1.3.4. (d, T) Düzleminde Dinamik Faz Diyagramları

Önceki kesimde dinamik faz geçiş (DFG) noktaları ve faz geçişlerinin doğası tespit edildiğinden dolayı artık sistemin dinamik faz diyagramlarını sunabiliriz. Bu kesimde etkileşme parametreleri J₂, J₃ ve h₀'ın farklı değerleri için (d, T) düzleminde dinamik faz diyagramları sunulacak ve (d, T) düzlemindeki dinamik faz diyagramları üzerine J₂, J₃, bilineer etkileşim parametreleri ile h₀ manyetik alanının etkisi incelenecektir. Şekil 1.8'de J₂, J₃, ve h₀'ın farklı değerleri için (d, T) düzleminde dinamik faz diyagramları gösterilmiştir ve farklı temel topolojide yedi adet dinamik faz diyagramı elde edilmiştir. Faz diyagramlarında, içi dolu daireler dinamik üçlü kritik noktayı temsil ederken, TP dinamik üçlü (triple) nokta ve QP dinamik dörtlü (kuadrupol) noktayı temsil etmektedir. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş çizgilerini göstermektedir. Bu dinamik faz diyagramları incelendiğinde bulunan ilginç ve temel sonuçlar şunlardır:

i) Şekil 1.8(a), $J_2 = 1.1$, $J_3 = 0.9$ ve $h_0 = 0.1$ değerleri için (d, T) düzleminde elde edilen dinamik faz diyagramını göstermektedir. Bu faz diyagramında, indirgenmiş sıcaklığın (T) belirli değerlerinde ve indirgenmiş tek-iyon anizotropisinin (d) belirli değerlerinde, paramanyetik faz mevcuttur. d ve T' nin düşük değerlerinde ise çözümler ferrimanyetik-I (i₁)' dir. Paramanyetik (p) faz ile ferrimanyetik-I (i₁) faz arasındaki dinamik faz sınırı, $i_1 \rightarrow p$, indirgenmiş sıcaklığın yüksek değerlerinde ikinci-derece faz geçiş çizgisi iken hem indirgenmiş sıcaklığın hem de indirgenmiş kristal alan etkileşme parametresinin düşük değerlerinde, $i_1 + p$ karma fazı bulunmaktadır. $i_1 + p$ karma fazı, i_1 fazı ve p fazından birinci-derece faz geçiş çizgisiyle ayrılmıştır. Sistem aynı zamanda bir tane dinamik üçlü nokta ve her iki birinci-derece faz geçiş çizgisini birleştiren ve birincidereceden ikinci-dereceye faz geçişini gösteren bir dinamik üçlü kritik nokta sergilemektedir. Ayrıca sistemde re-entrant davranış gözlenmektedir, yani, sistem sıcaklık artarken paramanyetik (p) fazdan düzenli fazlara ve yeniden p fazına geri döner. Bu faz diyagramına benzer faz diyagramı daha önce yalnızca birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerinde karma spin-1/2 ve spin-1 [204] (bu çalışmada dinamik üçlü nokta ve re-entrant davranış gözlenmemiştir) Ising sisteminde elde edilmiştir. ii) Şekil 1.8(b)'de $J_2 = 15$, $J_3 = 0.1$ ve $h_0 = 2.5$ değerleri için (d, T) düzleminde elde edilen dinamik faz diyagramı sunulmustur. Bu faz diyagramı Sekil 1.8(a)'ya benzemekle

birlikte Sekil 1.8(a)'dan farklı olarak asağıdaki özellikler sıralanabilir: 1) Sistemde dinamik telafi etki gözleniyor. 2) Dinamik üçlü nokta ve re-entrant davranışlar gözlenmiyor. 3) $i_1 + p$ karma fazı kayboluyor. iii) Şekil 1.8(c)'de $J_2 = 1.5$, $J_3 = 0.9$ ve h_0 = 1 değerleri için (d, T) düzleminde elde edilen dinamik faz diyagramı sunulmuştur. Bu faz diyagramı Şekil 1.8(b)'ye benzemekle birlikte Şekil 1.8(b)'den farklı olarak sistemde reentrant davranış gözlenmektedir. iv) Şekil 1.8(d)'de $J_2 = 2$, $J_3 = 0.8$ ve $h_0 =$ 10 değerleri için elde edilen dinamik faz diyagramı sunulmuştur. Bu faz diyagramı Şekil 1.8(c)'ye benzemekle birlikte Şekil 1.8(c)' den farkı: Sistemde hem indirgenmiş sıcaklığın düşük ve indirgenmiş kristal alan etkileşme parametresinin yüksek değerlerinde, hem de indirgenmiş sıcaklığın yüksek ve indirgenmiş kristal alan etkileşme parametresinin düşük değerlerinde paramanyetik faz meydana gelmektedir. v) Şekil 1.8(e)'de $J_2 = 1.5$, $J_3 = 0.8$ ve $h_0 = 2.5$ değerleri için (d, T) düzleminde elde edilen dinamik faz diyagramı sunulmuştur. Bu faz diyagramı Şekil 1.8(a)'ya benzemekle birlikte Şekil 1.8(a)'dan farklı olarak sistemde dinamik telafi etki gözleniyor. vi) Şekil 1.8(f)'de $J_2 = 6.0$, $J_3 = 0.95$ ve $h_0 = 1.5$ değerleri için (d, T) düzleminde elde edilen dinamik faz diyagramı sunulmuştur. Bu faz diyagramında p, i_1 , i_2 , $i_1 + p$, $i_2 + p$ ve $i_4 + p$ fazlarının yanında bir adet dinamik üçlü kritik nokta ve iki adet dinamik üçlü nokta TP bulunmaktadır. Bu faz diyagramında, indirgenmiş sıcaklığın yüksek değerleri için, yalnızca i2 ve p fazları arasındaki dinamik faz sınırı ikinci-dereceden faz geçiş çizgisidir, diğer fazlar arasındaki dinamik faz sınırları birinci-derece faz geçiş çizgileridir. vii) Şekil 1.8(g)'de $J_2 = 1.1$, $J_3 = 0.9$ ve $h_0 = 0.1$ değerleri için (d, T) düzleminde elde edilen dinamik faz diyagramı sunulmuştur. Bu faz diyagramında p, i₁, nm, i₁ + nm ve i₄ + nm fazlarının yanında iki adet dinamik üçlü kritik nokta, bir adet dinamik üçlü nokta TP ve bir adet dinamik dörtlü nokta QP bulunmaktadır. Bu faz diyagramında, indirgenmiş sıcaklığın yüksek değerleri ve kristal alan etkileşme parametresinin çok düşük değerleri için, yalnızca i1 ile p ve nm ile p fazları arasındaki dinamik faz sınırları ikinci-dereceden faz geçiş çizgisidir, diğer fazlar arasındaki dinamik faz sınırları birinci-derece faz geçiş çizgileridir.

1.1.3.5. (J₂, T) Düzleminde Dinamik Faz Diyagramları

 $J_3 = 0.8$, d = -1.0 ve $h_0 = 0.1$ değerleri için (J_2 , T) düzleminde elde edilen dinamik faz diyagramı Şekil 1.9'da gösterilmektedir. Bu faz diyagramında, kesikli ve sürekli çizgi-



Şekil 1.8. Birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerinde karma spin (2, 5/2) Ising modelinin (d, T) düzleminde dinamik faz diyagramları. Sistemde p, nm, i₁, ve i₂ temel fazlarının yanında yedi adet i₁ + p, i₁ + nm, i₂ + p, i₄ + p ve i₄ + nm karma fazları mevcuttur. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş çizgilerini göstermektedir. İçi dolu daire dinamik üçlü kritik noktayı ifade ederken, TP dinamik üçlü, QP dinamik dörtlü (kuadrupol) noktayı temsil etmektedir. İçi dolu üçgen ise i₁ + p fazı ile i₂ + p fazının ayrılma noktasıdır. (a) J₂ = 1.1, J₃ = 0.9, h₀ = 0.1. (b) J₂ = 1.5, J₃ = 0.1, h₀ = 2.5. (c) J₂ = 1.5, d = 0.9, J₃ = 1.0. (d) J₂ = 2.0, J₃ = 0.8 ve h₀ = 10. (e) J₂ = 1.5, J₃ = 0.8, h₀ = 2.5. (f) J₂ = 6.0, J₃ = 0.95, h₀ = 1.5. (g) J₂ = 1.1, J₃ = 0.9, h₀ = 0.7.

ler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş çizgilerini göstermektedir. Bu dinamik faz diyagramı p ve i₁ temel fazlarına sahiptir ve bu fazlar arasındaki dinamik faz sınırı ikinci-derece faz geçiş çizgisidir. Sistemde ayrıca dinamik telafi etkisi gözlenmektedir. Bu faz diyagramına benzer faz diyagramı, birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerinde karma spin (1/2, 1) [204] Ising modelinde elde edilmiştir.



Şekil 1.9. Birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerinde karma spin-2 ve spin-5/2 Ising modelinin (J₂, T) düzleminde dinamik faz diyagramı. Sistemde p ve i₁ fazı mevcuttur. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş çizgilerini göstermektedir. (J₃ = 0.8, d = -1.0 ve h₀ = 0.1).

1.1.3.6. (-J₃, T) Düzleminde Dinamik Faz Diyagramları

Bu kesimde dinamik faz diyagramı (-J₃, T) düzleminde J₂ = 2.0, d = -1.5 ve h₀ = 0.1 değerleri için elde edilmiştir ve Şekil 1.10'da gösterilmiştir. Bu faz diyagramında, kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş çizgilerini göstermektedir. Bu dinamik faz diyagramı p ve i₁ temel fazları ile i₁ + p karma fazına sahiptir. i₁ ve p temel fazları arasındaki dinamik faz sınırı ikinci-derece faz geçiş çizgisi iken i₁ + p karma fazı ile i₁ temel fazı arasındaki faz sınırı birinci-derece faz geçiş çizgisi çizgisi iken i₁ + p karma fazı ile i₁ temel fazı arasındaki faz sınırı birinci-derece faz geçiş çizgisi çizgisidir. Sistemde ayrıca dinamik telafi etkisi gözlenmektedir.



Şekil 1.10. Birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerinde karma spin-2 ve spin-5/2 Ising modelinin (J_3 , T) düzleminde dinamik faz diyagramı. Sistemde p ve i₁ temel fazlarının yanında i₁ + p karma fazı mevcuttur. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş çizgilerini göstermektedir. ($J_2 = 0.8$, d = -1.0 ve h₀ = 0.1).

1.1.3.7. (d, J₂) Düzleminde Dinamik Faz Diyagramları

Bu kesimde dinamik faz diyagramı (d, J₂) düzleminde $J_3 = 0.8$, T = 0.1 ve $h_0 = 1.0$, değerleri için elde edilmiştir ve Şekil 1.11'de gösterilmiştir. Bu faz diyagramında p ve i₁ temel fazlarının yanında üç adet i₁ + p, i₂ + p ve i₄ + p karma fazları bulundu. Bu fazlar arasındaki dinamik faz sınırları genellikle birinci-derece faz geçiş çizgileri ile birbirinden ayrılırken, J₂'nin yüksek değerlerindeki i₁ + p ve i₂ + p karma fazları arasındaki faz sınırı ikinci-derece faz geçiş çizgisidir. Sistemde ayrıca dinamik kritik son nokta (E) ve dinamik telafi etkisi gözlenmektedir.



Şekil 1.11. Birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerinde karma spin-2 ve spin-5/2 Ising modelinin (-J₃, T) düzleminde dinamik faz diyagramı. Sistemde p ve i₁ temel fazlarının yanında i₁ + p, i₂ + p ve i₄ + p karma fazları mevcuttur. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş çizgilerini göstermektedir. E dinamik kritik son noktayı temsil etmektedir. (J₃ = 0.8, d = 0.1 ve h₀ = 1.0).

1.1.3.8. (d, -J₃) Düzleminde Dinamik Faz Diyagramları

Bu kesimde dinamik faz diyagramı (d, -J₃) düzleminde J₂ = 1.5, T = 2.0 ve h₀ = 2.2 değerleri için elde edilmiştir ve Şekil 1.12'de gösterilmiştir. Bu faz diyagramında sadece p ve i₁ temel fazları bulunmaktadır ve bu fazlar arasındaki dinamik faz sınırı birinci-derece faz geçiş çizgileridir. Ayrıca bu faz diyagramı i₁ + p ve i₂ + p karma fazlarına sahiptir ve bu karma fazlar arasındaki faz sınırı yine birinci-derece faz geçiş çizgileridir.



Şekil 1.12. Birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerinde karma spin-2 ve spin-5/2 Ising modelinin (d, $-J_3$) düzleminde dinamik faz diyagramı. Sistemde p ve i₁ temel fazlarının yanında i₁ + p ve i₄ + p karma fazları mevcuttur. Kesikli çizgiler birinci- derece faz geçiş çizgilerini göstermektedir (J₂ = 1.5, T = 2.0 ve h₀ = 2.2).

Bu bölümde elde edilen sonuçlar Physical. Review E dergisinde yayınlanmıştır [227].

1.2. İki Tabakalı Kare Örgü İçin

1.2.1. Giriş

Bu bölümde zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında iki tabakalı kare örgü üzerinde karma spin (2, 5/2) Ising modelinin tanıtımı yapılacak ve master denkleminden yola çıkılarak modelin dinamik davranışını veren ortalama-alan dinamik denklemleri Glauber-tipi stokhastik dinamik kullanılarak elde edilecektir. Elde edilen ortalama-alan dinamik denklemleri, Adams-Moulton kestirme ve düzeltme yöntemi ve Romberg integrasyon metotları kullanılarak nümerik olarak çözülecektir. Sistemde mevcut olan fazları elde etmek için ortalama düzen parametrelerinin zamanla değişimleri incelenecek. Daha sonra bir periyot içinde ortalama düzen parametrelerinin veya dinamik düzen parametrelerinin, sıcaklığın fonksiyonu olarak davranışları incelenerek dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıkları tespit edilecek ve aynı zamanda DFG'lerinin doğası (kesikli veya sürekli yani birinci- veya ikinci-derece faz geçişleri) karakterize edilecektir. Tabakalar içi etkileşim parametreleri olan J_1 ve J_2 'nin hem ferromanyetik/ferromanyetik (yani $J_1 > 0$, $J_2 > 0$) hem de antiferromanyetik /ferromanyetik (yani $J_1 < 0$, $J_2 > 0$) olduğu durumlar için DFG noktalarından faydalanarak (T, h) düzleminde dinamik faz diyagramları sunulacaktır.

1.2.2. Model ve Ortalama-Alan Dinamik Denklemleri

1.2.2.1. Modelin Tanıtımı

İki tabakalı kare örgü, bir tabakalı kare örgünün bir uzantısıdır ve bu yüzden birbirinin aynısı G₁ ve G₂ kare örgüleri iki tabakalı kare örgü oluşturacak biçimde Şekil 1.13'te gösterildiği gibi birbirlerine paralel olarak yerleştirilmişlerdir. Her bir tabaka aynı zamanda iki alt-örgülü sistemden oluşmaktadır. Birinci tabakada A ve B alt örgüleri üzerinde sırasıyla $\sigma_{i'} = \pm 2, \pm 1, 0$ ve $\sigma_{j'} = \pm 2, \pm 1, 0$ ve ikinci tabakada A ve B alt örgüleri üzerinde sırasıyla S_i = $\pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$ ve S_j = $\pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$ spinleri vardır.

İki tabakalı kare örgü üzerinde karma spin (2, 5/2) Ising modeli için aşağıdaki düzen parametreleri mevcuttur.

- a) Birinci tabakadaki A alt örgüsü için ortalama mıknatıslanma (m_1^A): $m_1^A \equiv \langle \sigma_{i'} \rangle$,
- b) Birinci tabakadaki B alt örgüsü için ortalama mıknatıslanma (m_1^B): $m_1^B \equiv \langle \sigma_{i} \rangle$,
- c) İkinci tabakadaki A alt örgüsü için ortalama mıknatıslanma (m_2^A) : $m_2^A \equiv \langle S_i \rangle$,
- d) İkinci tabakadaki B alt örgüsü için ortalama mıknatıslanma (m_2^B): $m_2^B \equiv \langle S_j \rangle$.

Diğer düzen parametreleri Kesim 1.1.2.1'de açıklanan sebeplerden dolayı kullanılmayıp yalnızca m düzen parametresi kullanılmaktadır. Burada ortalama mıknatıslanma ifadesi bir tarafa yönelimin diğer tarafa yöneliminden fazlalığına göstermektedir. Bu düzen parametreleri iki tabakalı kare örgü üzerinde karma spin (2, 5/2) Ising modeli için yedi farklı temel fazı tanımlamaktadır. Bu temel fazlar:



Şekil 1.13. İki tabakalı kare örgü: G1 ve G2 üst ve alt tabakaları işaret ediyor.

- i) Paramanyetik faz (p): $m_1^A = m_1^B = m_2^A = m_2^B = 0$,
- ii) Ferromanyetik faz (f): $m_1^A = m_1^B \neq 0$ ve pozitif spin değerleri,
- $$\begin{split} m_2^A &= m_2^B \neq 0 \text{ ve pozitif spin değerleri,} \\ m_1^A &= m_1^B \neq 0 \text{ ve pozitif spin değerleri,} \\ m_1^A &= m_1^B \neq 0 \text{ ve pozitif spin değerleri, veya} \\ m_2^A &= m_2^B \neq 0 \text{ ve negatif spin değerleri, veya} \\ m_1^A &= m_1^B \neq 0 \text{ ve negatif spin değerleri,} \\ m_2^A &= m_2^B \neq 0 \text{ ve pozitif spin değerleri,} \\ m_2^A &= m_2^B \neq 0 \text{ ve pozitif spin değerleri,} \\ \text{iv) Karma faz (m): } m_1^A &= -m_1^B, m_2^A &= -m_2^B, \\ \text{v) Antiferromanyetik faz (af): } m_1^A &= -m_1^B, -m_2^A &= m_2^B, \end{split}$$

vi) Manyetik olmayan faz (m):
$$m_1^A = m_1^B = 0$$
, $m_2^A = m_2^B \neq 0$
veya $m_1^A = m_1^B \neq 0$, $m_2^A = m_2^B = 0$,

biçimindedir. Bu fazların tanımlanması Kaynak [227-233]'a göre yapılmıştır. Sistemin Hamiltonyen ifadesi,

$$\mathcal{H} = -J_{1} \sum_{\langle i'j' \rangle} \sigma_{i'} \sigma_{j'} - J_{2} \sum_{\langle ij \rangle} S_{i} S_{j} - J_{3} \left(\sum_{\langle ii' \rangle} \sigma_{i'} S_{i} + \sum_{\langle jj \rangle} \sigma_{j'} S_{j} \right) - D \left(\sum_{\langle i' \rangle} \sigma_{i'}^{2} + \sum_{\langle j\rangle} \sigma_{j'}^{2} + \sum_{\langle i\rangle} S_{i}^{2} + \sum_{\langle j\rangle} S_{j}^{2} \right)$$

$$- H \left(\sum_{\langle i' \rangle} \sigma_{i'} + \sum_{\langle j\rangle} \sigma_{j'} + \sum_{\langle i\rangle} S_{i} + \sum_{\langle j\rangle} S_{j} \right),$$

$$(1.29)$$

şeklindedir. Burada <i' j'> birinci tabakadaki en yakın komşu spin çiftleri üzerinden, <ij> ikinci tabakadaki en yakın komşu spin çiftleri üzerinden, <i' i> ve <j' j> ise birinci ve ikinci tabakalar arasındaki en yakın koşu spin çiftleri üzerinden toplamı ifade eder. G₁ tabakasındaki (birinci tabaka) en yakın komşu spinler arası bilineer etkileşim parametresi J₁ iken, G₂ tabakasındaki (ikinci tabaka) en yakın komşu spinler arası bilineer etkileşim parametresi J₂'dir. G₁ ve G₂ tabakalarındaki en yakın komşular arası (tabakalar arası etkileşme) bilineer etkileşim parametresi J₃'tür. D, kristal alan etkileşmesi veya tek-iyon anizotropi sabiti ve son terim H ise zamanla değişen salınımlı dış manyetik alandır ve

$$H = H_0 \cos(wt), \tag{1.30}$$

şeklinde tanımlanır. Burada H₀ ve w = $2\pi f$ sırasıyla salınımlı alanın genliği ve açısal frekansıdır. f spin değişim (flipping) frekansı ve w manyetik alan frekansıdır. Sistem T_A mutlak sıcaklıkta izotermal ısı banyosu ile temas halindedir.

1.2.2.2. Ortalama-Alan Dinamik Denklemlerinin Elde Edilmesi

Bu kesimde zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında, karma spin-2 ve spin-5/2 Ising modeli için sistemin dinamik davranışını açıklayan ortalama-alan dinamik denklemleri, iki tabakalı kare örgü üzerinde elde edilecektir. Bunun için Glauber dinamiğini kullanacağız ve master denkleminden yararlanacağız. Sistem Glauber-tipi stokhastik dinamiğe göre birim zamanda $1/\tau$ oranında değişim gösterir. Sistemin t zamanında $\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_N, S_1, S_2, ..., S_N$, spin konfigürasyonuna sahip olduğu andaki ihtimaliyet fonksiyonu her bir tabaka için $P(\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_N, S_1, S_2, ..., S_N; t)$ şeklinde tanımlanır. Birinci tabaka için, $W_i^A(\sigma_i^A \rightarrow \sigma_i^{A'})$, i'. spinin σ_i^A durumundan $\sigma_{i'}^{A'}$ durumuna (B alt örgüsü üzerindeki spinler sabit olduğu zaman) birim zamandaki geçiş olasılığıdır. B alt örgüsündeki spinlerin bir an için sabit olduğu düşünülürse, A alt örgüsü için master denklemi,

$$\frac{d}{dt} P_{1}^{A}(\sigma_{1}^{A}, \sigma_{2}^{A}, ..., \sigma_{N}^{A}; t) = -\sum_{i} \left(\sum_{\sigma_{i}^{A} \neq \sigma_{i}^{A'}} W_{i}^{A}(\sigma_{i}^{A} \to \sigma_{i}^{A'}) \right) P_{1}^{A}(\sigma_{1}^{A}, \sigma_{2}^{A}, ..., \sigma_{i}^{A}, ..., \sigma_{N}^{A}; t) + \sum_{i} \left(\sum_{\sigma_{i}^{A} \neq \sigma_{i}^{A'}} W_{i}^{A}(\sigma_{i}^{A'} \to \sigma_{i}^{A}) P_{1}^{A}(\sigma_{1}^{A}, \sigma_{2}^{A}, ..., \sigma_{i}^{A'}, ..., \sigma_{N}^{A}; t) \right),$$
(1.31)

şeklinde yazılır. Sistem T_A mutlak sıcaklığında ısı banyosu ile temas halinde olduğu için, her spin σ_i^A durumundan $\sigma_i^{A'}$ durumuna birim zamanda geçiş olasılığıyla değişebilir. Denge durumunda,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} P_1^{\mathrm{A}} \left(\sigma_1^{\mathrm{A}}, \sigma_2^{\mathrm{A}}, \dots, \sigma_N^{\mathrm{A}}; t \right) = 0, \qquad (1.32)$$

olduğundan denklem (1.31)'den denge durumu için olasılık yoğunlukları oranı,

$$\frac{W_{i}^{\sigma}\left(\sigma_{i}^{A}\rightarrow\sigma_{i}^{A'}\right)}{W_{i}^{\sigma}\left(\sigma_{i}^{A'}\rightarrow\sigma_{i}^{A}\right)} = \frac{P^{\sigma}\left(\sigma_{1},\sigma_{2},...,\sigma_{i}^{A},...\sigma_{N}\right)}{P^{\sigma}\left(\sigma_{1},\sigma_{2},...,\sigma_{i}^{A'},...\sigma_{N}\right)},$$
(1.33)

olur. Buradan,

$$P_{1}^{A}(\sigma_{1}^{A},\sigma_{2}^{A},...,\sigma_{i}^{A'},...,\sigma_{N}^{A}) \alpha \exp(\beta H), \qquad (1.34)$$

yazılır. Sistem dengede iken, master denklemi ve kanonik dağılımın genel tanımı yardımıyla, her bir spinin σ_i^A durumundan $\sigma_i^{A'}$ durumuna birim zamanda geçiş olasılığı veya olasılık yoğunluğu,

$$W_{i}^{\sigma}\left(\sigma_{i}^{A} \to \sigma_{i}^{A'}\right) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp\left(-\beta \Delta E_{i}^{A}\left(\sigma_{i}^{A} \to \sigma_{i}^{A'}\right)\right)}{\sum_{\sigma_{i}^{A'}} \exp\left(-\beta \Delta E_{i}^{A}\left(\sigma_{i}^{A} \to \sigma_{i}^{A'}\right)\right)}, \qquad (1.35)$$

şeklinde yazılır. Burada $\beta = 1/k_{B}T$ 'dir ve k_{B} Boltzmann faktörü, T_{A} mutlak sıcaklık, $\sum_{\sigma_{i}^{A'}}$ ise toplamın $\sigma_{i}^{A'} = \pm 2, \pm 1, 0$, mümkün beş değeri üzerinden alınacağını göstermektedir. $\Delta E_{i}^{A} (\sigma_{i}^{A} \rightarrow \sigma_{i}^{A'})$, herhangi bir spinin σ_{i}^{A} durumundan $\sigma_{i}^{A'}$ durumuna geçişi sırasında sistemin enerjisinde meydana gelen değişmedir ve Hamiltonyen ifadesinden yararlanarak,

$$\Delta E_{i'}^{A}(\sigma_{i'}^{A} \to \sigma_{i'}^{A'}) = -(\sigma_{i'}^{A'} - \sigma_{i'}^{A})(J_{1}\sum_{j'}\sigma_{j'}^{B} + J_{3}\sum_{i}S_{i}^{A} + H) - \left(\left(\sigma_{i'}^{A'}\right)^{2} - \left(\sigma_{i'}^{A}\right)^{2}\right)D, \quad (1.36)$$

şeklinde elde edilir. $\sigma_{i'}^{A}$ durumundan $\sigma_{i'}^{A'}$ durumuna geçişi sırasında mümkün olan tüm enerji değişimleri (1.36) denkleminden elde edilir. Bulunan bu enerji değişimi ifadeleri (1.35) denkleminde yerine yazılırsa, her $\sigma_{i'}^{A}$ durumu için olasılık yoğunlukları,

$$W_{i}^{A}(2 \to 0) = W_{i}^{A}(1 \to 0) = W_{i}^{A}(-1 \to 0) = W_{i}^{A}(-2 \to 0) = W_{i}^{A}(0)$$
$$= \frac{1}{\tau} \frac{1}{2 \exp(\beta D) \cosh(\beta x) + 2 \exp(4\beta D) \cosh(2\beta x) + 1}, \quad (1.37a)$$

$$W_{i}^{A}(2 \to 1) = W_{i}^{A}(0 \to 1) = W_{i}^{A}(-1 \to 1) = W_{i}^{A}(-2 \to 1) = W_{i}^{A}(1)$$

= $\frac{1}{\tau} \frac{\exp(\beta x)\exp(\beta D)}{2\exp(\beta D)Cosh(\beta x)+2\exp(4\beta D)Cosh(2\beta x)+1}$, (1.37b)

$$W_{i}^{A}(1 \to 2) = W_{i}^{A}(0 \to 2) = W_{i}^{A}(-1 \to 2) = W_{i}^{A}(-2 \to 2) = W_{i}^{A}(2)$$

= $\frac{1}{\tau} \frac{\exp(2\beta x)\exp(4\beta D)}{2\exp(\beta D)Cosh(\beta x)+2\exp(4\beta D)Cosh(2\beta x)+1},$ (1.37c)

$$W_{i}^{A}(1 \to -1) = W_{i}^{A}(2 \to -1) = W_{i}^{A}(0 \to -1) = W_{i}^{A}(-2 \to -1) = W_{i}^{A}(-1)$$

= $\frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta x)\exp(\beta D)}{2\exp(\beta D)Cosh(\beta x) + 2\exp(4\beta D)Cosh(2\beta x) + 1}$, (1.37d)

$$W_{i}^{A}(2 \to -2) = W_{i}^{A}(1 \to -2) = W_{i}^{A}(0 \to -2) = W_{i}^{A}(-1 \to -2) = W_{i}^{A}(-2)$$

= $\frac{1}{\tau} \frac{\exp(-2\beta x)\exp(4\beta D)}{2\exp(\beta D)Cosh(\beta x) + 2\exp(4\beta D)Cosh(2\beta x) + 1}$, (1.37e)

burada $x = J_1 \sum_{\langle j' \rangle} \sigma_{j'}^B + J_3 \sum_i S_i^A + H$ olarak tanımlanmıştır. Master denklemi ve olasılık yoğunluğu ifadelerinden yararlanılarak, A alt örgüsü için sistemin dinamik davranışını veren denklem aşagıdaki gibi elde edilir. Ayrıca, ihtimaliyetler toplamı bire eşit olduğu için master denkleminin her iki tarafi $\langle \sigma_{k'}^A \rangle$ ile çarpılırsa [225],

$$\tau \frac{d}{dt} \langle \sigma_{k}^{A} \rangle = - \langle \sigma_{k}^{A} \rangle + \left\langle \frac{4 \exp(4\beta D) \sinh\left[2\beta \left(J_{1} \sum_{j'} \sigma_{j'}^{B} + J_{3} \sum_{i} S_{i}^{A} + H\right)\right] + 2 \exp(4\beta D) \sinh\left[\beta \left(J_{1} \sum_{j'} \sigma_{j'}^{B} + J_{3} \sum_{i} S_{i}^{A} + H\right)\right]}{1 + 2 \exp(4\beta D) \cosh\left[2\beta \left(J_{1} \sum_{j'} \sigma_{j'}^{B} + J_{3} \sum_{i} S_{i}^{A} + H\right)\right] + 2 \exp(\beta D) \cosh\left[\beta \left(J_{1} \sum_{j'} \sigma_{j'}^{B} + J_{3} \sum_{i} S_{i}^{A} + H\right)\right]\right\rangle, \quad (1.38)$$

şeklinde veya ortalama-alan yaklaşımı kullanılarak aşağıdaki gibi

$$\Omega \frac{d}{d\xi} m_{l}^{A} = -m_{l}^{A} + \frac{2 \exp\left(\frac{4d}{T}\right) \sinh\left[\frac{2}{T}\left(zm_{l}^{B} + \frac{J_{3}}{J_{1}}m_{2}^{A} + h\cos\xi\right)\right] + \exp\left(\frac{d}{T}\right) \sinh\left[\frac{1}{T}\left(zm_{l}^{B} + \frac{J_{3}}{J_{1}}m_{2}^{A} + h\cos\xi\right)\right] + \exp\left(\frac{d}{T}\right) \sinh\left[\frac{1}{T}\left(zm_{l}^{B} + \frac{J_{3}}{J_{1}}m_{2}^{A} + h\cos\xi\right)\right] + (1.39) + \exp\left(\frac{4d}{T}\right) \cosh\left[\frac{2}{T}\left(zm_{l}^{B} + \frac{J_{3}}{J_{1}}m_{2}^{A} + h\cos\xi\right)\right] + \exp\left(\frac{d}{T}\right) \sinh\left[\frac{1}{T}\left(zm_{l}^{B} + \frac{J_{3}}{J_{1}}m_{2}^{A} + h\cos\xi\right)\right] + 1/2,$$

burada $m_1^A \equiv \left\langle \sigma_{i'}^A \right\rangle$, $m_1^B \equiv \left\langle \sigma_{j'}^B \right\rangle$, $m_2^A \equiv \left\langle S_i^A \right\rangle$, $m_2^B \equiv \left\langle S_j^B \right\rangle$, $\xi = wt$, $T = (\beta J_1)^{-1}$, $h = H_0/J_1$, $d = D/J_1$ ve $\Omega = \tau w$, $w = 2\pi f$, f spin değişim (flipping) frekansı ve w manyetik alan frekansıdır.

Şimdi, birinci tabakadaki A alt örgüsü için yapılan hesaplamalara benzer olarak, A alt örgüsündeki spinlerin bir an için sabit olarak kaldığı ve geçişlerin birinci tabakadaki B alt örgüsü üzerinde bulunan spinler arasında meydana geldiği düşünülürse, B alt örgüsü için master denklemi,

$$\frac{d}{dt} P_{2}^{B} \left(\sigma_{1}^{B}, \sigma_{2}^{B}, ..., \sigma_{N}^{B}; t \right) = -\sum_{j} \left(\sum_{\sigma_{j}^{B} \neq \sigma_{j}^{B'}} W_{j}^{B} \left(\sigma_{j}^{B} \rightarrow \sigma_{j}^{B'} \right) \right) P_{2}^{B} \left(\sigma_{1}^{B}, \sigma_{2}^{B}, ..., \sigma_{j}^{B}, ..., \sigma_{N}^{B}; t \right)
+ \sum_{j} \left(\sum_{\sigma_{j}^{B} \neq \sigma_{j}^{B'}} W_{j}^{B} \left(\sigma_{j}^{B'} \rightarrow \sigma_{j}^{B} \right) P_{2}^{B} \left(\sigma_{1}^{B}, \sigma_{2}^{B}, ..., \sigma_{N}^{B}; t \right) \right), \quad (1.40)$$

şeklinde yazılır. Sistem T_A mutlak sıcaklığında ısı banyosu ile temas halinde olduğu için, her spin σ_j^{B} durumundan $\sigma_j^{B'}$, durumuna birim zamanda geçiş olasılığıyla değişebilir. Denge durumunda,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} P_2^{\mathrm{B}}\left(\sigma_1^{\mathrm{B}}, \sigma_2^{\mathrm{B}}, ..., \sigma_N^{\mathrm{B}}; t\right) = 0, \qquad (1.41)$$

olduğundan denklem (1.40)'dan denge durumu için olasılık yoğunlukları oranı

$$\frac{W_{j}^{B}\left(\sigma_{j}^{B}\rightarrow\sigma_{j}^{B'}\right)}{W_{j}^{B}\left(\sigma_{j}^{B'}\rightarrow\sigma_{j}^{B}\right)} = \frac{P_{2}^{B}\left(\sigma_{1}^{B},\sigma_{2}^{B},...,\sigma_{j}^{B},...,\sigma_{N}^{B}\right)}{P_{2}^{B}\left(\sigma_{1}^{B},\sigma_{2}^{B},...,\sigma_{j}^{B'},...,\sigma_{N}^{B}\right)},$$
(1.42)

şeklinde yazılır. Buradan

$$P_{2}^{B}\left(\sigma_{1}^{B},\sigma_{2}^{B},\sigma_{3}^{B},...,\sigma_{N}^{B}\right)\alpha \exp\left(-\beta\mathcal{H}\right),$$
(1.43)

ile tanımlanan genel kanonik dağılım ifadesinden faydalanılırsa olasılık yoğunluğu, şeklinde yazılır. Burada $\beta = 1/k_B T_A$, k_B Boltzmann faktörü, T_A mutlak sıcaklık, $\sum_{\sigma^{B'}}$ ise toplamın $\sigma_j^{B'} = \pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2,$ mümkün altı değeri üzerinden alınacağını göstermektedir.

$$W_{j}^{B}\left(\sigma_{j}^{B} \to \sigma_{j}^{B'}\right) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp\left(-\beta \Delta E_{j}^{B}\left(\sigma_{j}^{B} \to \sigma_{j}^{B'}\right)\right)}{\sum_{\sigma_{j}^{B'}} \exp\left(-\beta \Delta E_{j}^{B}\left(\sigma_{j}^{B'} \to \sigma_{j}^{B}\right)\right)},$$
(1.44)

 $\Delta E_{j}^{B} \left(\sigma_{j}^{B} \rightarrow \sigma_{j}^{B'} \right), \text{ herhangi bir spinin } \sigma_{j}^{B} \text{ durumundan } \sigma_{j}^{B'} \text{ durumuna geçişi sırasında sistemin enerjisinde meydana gelen değişmedir ve Hamiltonyen ifadesinden yararlanarak}$

$$\Delta E_{j}^{B}\left(\sigma_{j}^{B} \to \sigma_{j}^{B'}\right) = -\left(\sigma_{j}^{B'} - \sigma_{j}^{B}\right) \left(J_{1}\sum_{i}\sigma_{i}^{} + J_{3}\sum_{i}S_{i}^{} + H\right) - \left[\left(\sigma_{j}^{B'}\right)^{2} - \left(\sigma_{j}^{B}\right)^{2}\right]D, \quad (1.45)$$

şeklinde bulunur. σ_j^{B} durumundan $\sigma_j^{B'}$ durumuna geçişi sırasında mümkün olan tüm enerji değişimleri (1.45) denkleminden elde edilir. Bulunan bu enerji değişimi ifadeleri (1.44) denkleminde yerine yazılırsa, her σ_j^{B} durumu için olasılık yoğunlukları şu şekilde elde edilir:

$$W_{j}^{B}(2 \to 0) = W_{j}^{B}(1 \to 0) = W_{j}^{B}(-1 \to 0) = W_{j}^{B}(-2 \to 0) = W_{j}^{B}(0)$$

$$= \frac{1}{\tau} \frac{1}{2 \exp(\beta D) \cosh(\beta x) + 2 \exp(4\beta D) \cosh(2\beta x) + 1}, \quad (1.46a)$$

$$W_{j}^{B}(2 \to 1) = W_{j}^{B}(0 \to 1) = W_{j}^{B}(-1 \to 1) = W_{j}^{B}(-2 \to 1) = W_{j}^{B}(1)$$

$$= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(\beta x) \exp(\beta D)}{2 \exp(\beta D) \cosh(\beta x) + 2 \exp(4\beta D) \cosh(2\beta x) + 1}, \quad (1.46b)$$

$$W_{j}^{B}(1 \to 2) = W_{j}^{B}(0 \to 2) = W_{j}^{B}(-1 \to 2) = W_{j}^{B}(-2 \to 2) = W_{j}^{B}(2)$$

= $\frac{1}{\tau} \frac{\exp(2\beta x)\exp(4\beta D)}{2\exp(\beta D)Cosh(\beta x) + 2\exp(4\beta D)Cosh(2\beta x) + 1}$, (1.46c)

$$W_{j}^{B}(1 \to -1) = W_{j}^{B}(2 \to -1) = W_{j}^{B}(0 \to -1) = W_{j}^{B}(-2 \to -1) = W_{j}^{B}(-1)$$

= $\frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta x)\exp(\beta D)}{2\exp(\beta D)Cosh(\beta x) + 2\exp(4\beta D)Cosh(2\beta x) + 1}$, (1.46d)

$$W_{j}^{B}(2 \to -2) = W_{j}^{B}(1 \to -2) = W_{j}^{B}(0 \to -2) = W_{j}^{B}(-1 \to -2) = W_{j}^{B}(-2)$$

= $\frac{1}{\tau} \frac{\exp(-2\beta x)\exp(4\beta D)}{2\exp(\beta D)Cosh(\beta x) + 2\exp(4\beta D)Cosh(2\beta x) + 1}$, (1.46e)

burada $x = J_1 \sum_{\langle j' \rangle} \sigma_{i'}^A + J_3 \sum_j S_j^A + H$. Bu eşitlikler göz önüne alındığında (2.40) ile verilen master denklemi

$$\frac{d}{dt} P_{2}^{B} \left(\sigma_{1}^{B}, \sigma_{2}^{B}, ..., \sigma_{N}^{B}; t\right) = -\sum_{j} \left(\sum_{\sigma_{j}^{B} \neq \sigma_{j}^{B'}} W_{j}^{B} \left(\sigma_{j}^{B'}\right) \right) P_{2}^{B} \left(\sigma_{1}^{B}, \sigma_{2}^{B}, ..., \sigma_{j}^{B}, ..., \sigma_{N}^{B}; t\right) + \sum_{j} W_{j}^{B} \left(\sigma_{j}^{B}\right) \left(\sum_{\sigma_{j}^{B} \neq \sigma_{j}^{B'}} P_{2}^{B} \left(\sigma_{1}^{B}, \sigma_{2}^{B}, ..., \sigma_{N}^{B'}; t\right)\right),$$
(1.47)

şekline dönüşür. Master denkleminden yararlanılarak, B alt örgüsü için sistemin dinamik davranışını veren denklem şu şekilde elde edilir. İhtimaliyetler toplamı bire eşit olduğu için (1.47)'nin her iki tarafı σ_k^{B} ile çarpılırsa [225]

$$\tau \frac{d}{dt} \langle \sigma_{k}^{B} \rangle = - \langle \sigma_{k}^{B} \rangle + \left\langle \frac{4 \exp(4\beta D) \sinh\left[2\beta \left(J_{1} \sum_{i} \sigma_{i}^{A} + J_{3} \sum_{j} S_{j}^{A} + H\right)\right] + 2 \exp(4\beta D) \sinh\left[\beta \left(J_{1} \sum_{i} \sigma_{i}^{A} + J_{3} \sum_{j} S_{j}^{A} + H\right)\right]}{1 + 2 \exp(4\beta D) \cosh\left[2\beta \left(J_{1} \sum_{i} \sigma_{i}^{A} + J_{3} \sum_{j} S_{j}^{A} + H\right)\right] + 2 \exp(\beta D) \cosh\left[\beta \left(J_{1} \sum_{i} \sigma_{i}^{A} + J_{3} \sum_{j} S_{j}^{A} + H\right)\right]}\right\rangle, \quad (1.48)$$

şekline veya ortalama-alan yaklaşımı kullanılarak aşağıdaki gibi elde edilir:

$$\Omega \frac{d}{d\xi} m_{1}^{B} = -m_{1}^{B} + \frac{2 \exp\left(\frac{4d}{T}\right) \sinh\left[\frac{2}{T}\left(zm_{1}^{A} + \frac{J_{3}}{J_{1}}m_{2}^{B} + h\cos\xi\right)\right] + \exp\left(\frac{d}{T}\right) \sinh\left[\frac{1}{T}\left(zm_{1}^{A} + \frac{J_{3}}{J_{1}}m_{2}^{B} + h\cos\xi\right)\right]}{\exp\left(\frac{4d}{T}\right) \cosh\left[\frac{2}{T}\left(zm_{1}^{A} + \frac{J_{3}}{J_{1}}m_{2}^{B} + h\cos\xi\right)\right] + \exp\left(\frac{d}{T}\right) \sinh\left[\frac{1}{T}\left(zm_{1}^{A} + \frac{J_{3}}{J_{1}}m_{2}^{B} + h\cos\xi\right)\right] + 1/2},$$
(1.49)

burada $m_1^A \equiv \left\langle \sigma_{i'}^A \right\rangle$, $m_1^B \equiv \left\langle \sigma_{j'}^B \right\rangle$, $m_2^A \equiv \left\langle S_i^A \right\rangle$, $m_2^B \equiv \left\langle S_j^B \right\rangle$, $\xi = wt$, $T = (\beta J_1)^{-1}$, $h = H_0/J_1$, $d = D/J_1$ ve $\Omega = \tau w$, $w = 2\pi f$, f spin değişim (flipping) frekansı ve w manyetik alan frekansıdır.

Bu hesaplamalar sonucunda birinci tabakadaki A ve B alt örgüleri için ortalama-alan dinamik denklemleri elde edilmiş oldu. Benzer işlemler ikinci tabakadaki A ve B alt örgüleri için de yapılırsa ikinci tabakadaki A ve B alt örgüleri için ortalama-alan dinamik denklemleri sırasıyla aşağıdaki şekilde elde edilir:

$$\Omega \frac{d}{d\xi} m_2^A = -m_2^A + \frac{5 \sinh\left[\frac{5}{2T}x\right] + 3 \exp\left(-\frac{4d}{T}\right) \sinh\left[\frac{3}{2T}x\right] + \exp\left(-\frac{6d}{T}\right) \sinh\left[\frac{1}{2T}x\right]}{2\cosh\left[\frac{5}{2T}x\right] + 2\exp\left(-\frac{4d}{T}\right) \cosh\left[\frac{3}{2T}x\right] + \exp\left(-\frac{6d}{T}\right) \cosh\left[\frac{1}{2T}x\right]},$$
(2.50)

burada $x = \left(\frac{J_2}{J_1}zm_2^B + \frac{J_3}{J_1}m_1^A + h\cos\xi\right)$. İkinci tabakanın B alt örgüsü için ortalamaalan dinamik denklemi ise,

$$\Omega \frac{d}{d\xi} m_2^{\rm B} = -m_2^{\rm B} + \frac{5\sinh\left[\frac{5}{2T}y\right] + 3\exp\left(-\frac{4d}{T}\right)\sinh\left[\frac{3}{2T}y\right] + \exp\left(-\frac{6d}{T}\right)\sinh\left[\frac{1}{2T}y\right]}{2\cosh\left[\frac{5}{2T}y\right] + 2\exp\left(-\frac{4d}{T}\right)\cosh\left[\frac{3}{2T}y\right] + \exp\left(-\frac{6d}{T}\right)\cosh\left[\frac{1}{2T}y\right]}, \quad (1.51)$$

burada $y = \left(\frac{J_2}{J_1}zm_2^A + \frac{J_3}{J_1}m_1^B + h\cos\xi\right)$ şeklindedir. Böylece sistemin ortalama-alan

dinamik denklemleri elde edilmiş oldu. T, h ve Ω boyutsuz parametrelerdir. Sistemimizde $\Omega = 2\pi$ değerinde sabittir. Gelecek kesimde bu denklemlerin nümerik çözümleri yapılacak ve çözümler tartışılacaktır.

1.2.3. Dinamik Faz Geçiş Noktaları ve Dinamik Faz Diyagramları

Bu kesimde, öncelikle (1.39), (1.49), (1.50) ve (1.51) ile verilen ortalama-alan dinamik denklemlerinin Adams-Moulton kestirme ve düzeltme yöntemi kullanılarak nümerik olarak çözülmesiyle ortalama düzen parametrelerinin, yani birinci ve ikinci tabakalardaki A ve B alt örgüleri için ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının $(m_1^A, m_1^B, m_2^A ve m_2^B)$ zamana bağlı davranışları incelenecektir. Daha sonra, (1.39),

(1.49), (1.50) ve (1.51) denklemleri Adams-Moulton kestirme ve düzeltme, ve Romberg integrasyon yöntemleri kullanılarak nümerik olarak çözülerek ve bir periyot içinde ortalama düzen parametrelerinin yani dinamik alt örgü mıknatıslanmaların davranışları indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak incelenerek, dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıkları tespit edilecek ve aynı zamanda dinamik faz geçişlerinin doğası (kesikli veya sürekli yani birinci- veya ikinci-derece faz geçişleri) karakterize edilecektir. Bütün bu incelemeler sonucu, sistemin dinamik faz diyagramları hem ferromanyetik/ferromanyetik (yani $J_1 > 0$, $J_2 > 0$) hem de antiferromanyetik /ferromanyetik (yani $J_1 < 0$, $J_2 > 0$) olduğu durumlar için DFG noktalarından faydalanarak (T, h) düzleminde dinamik faz diyagramları sunulacaktır.

1.2.3.1. Ortalama Alt Örgü Mıknatıslanmalarının Zamanla Değişimi

Sistemde mevcut olan fazları bulabilmek için denklem (1.39), (1.49), (1.50) ve (1.51) ile verilen ortalama-alan dinamik denklemlerin kararlı çözümleri farklı J_1 , J_2 , J_3 , d, h ve T değerleri için incelenecektir. Denklem (1.39), (1.49), (1.50) ve (1.51)'in kararlı çözümleri 2π periyodu için ξ 'nin periyodik bir fonksiyonu olacaktır, yani

$$m_1^{A}(\xi+\pi) = m_1^{A}(\xi) \text{ ve } m_1^{B}(\xi+\pi) = m_1^{B}(\xi),$$
 (1.52)

ve

$$m_2^{A}(\xi+\pi) = m_2^{A}(\xi) \text{ ve } m_2^{B}(\xi+\pi) = m_2^{B}(\xi).$$
 (1.53)

Ayrıca, aşağıdaki özelliklerin sağlanıp veya sağlanmamasına göre sistemde üç tip çözüm mevcuttur.

$$m_{l}^{A}(\xi+\pi) = -m_{l}^{A}(\xi) \text{ ve } m_{l}^{B}(\xi+\pi) = -m_{l}^{B}(\xi), \qquad (1.54)$$

ve

$$m_{2}^{A}(\xi+\pi) = -m_{2}^{A}(\xi) \text{ ve } m_{2}^{B}(\xi+\pi) = -m_{2}^{B}(\xi).$$
(1.55)
53

Eğer cözüm, (1.54) ve (1.55) denklemleriyle verilen özelliğe sahipse simetrik cözüm olarak adlandırılır ve bu paramanyetik (p) çözüme karşılık gelir. Bu çözümde, ortalama düzen parametreleri, yani ortalama alt örgü mıknatıslanmaları $\left(m_1^A=m_1^B=m_2^A=m_2^B\right)$ birbirine eşittir ve sıfır değeri civarında salınarak dış manyetik alana uyum gösterirler. İkinci çözüm ise, (1.54) ve (1.55) denklemleriyle verilen özelliğe sahip değildir ve bu simetrik olmayan çözüme karşılık gelir ve artık mıknatıslanmalar dış manyetik alana uyum göstermezler. Eğer m₁^A, m₁^B sırasıyla 2, 2; 1, 1 değerleri etrafında salınırken, m2, m2 sırasıyla 5/2, 5/2; 3/2, 3/2; 1/2, 1/2 değerleri etrafında salınırsa bu çözüm ferromanyetik (f) faza karşılık gelir. Eğer m_1^A 2 değeri etrafında, m_1^B -2 değeri etrafında, m_2^A -5/2 değeri etrafında ve m_2^B 5/2 değeri etrafında veya bu mıknatıslanmalar belirtilen değerlerin aksi yönünde salınırlarsa bu çözüm antiferromanyetik faza (af) karşılık gelir. Eğer m₁^A, m₁^B sırasıyla 2, 2 değerleri etrafında salınırken m_2^A, m_2^B sırasıyla 5/2, -5/2 değerleri etrafında veya bu mıknatıslanmalar belirtilen değerlerin aksi yönünde salınırlarsa bu çözüm yüzey fazı (sf) olarak isimlendirilir. Eğer m_1^A , m_1^B sırasıyla 2, 2; 1, 1 değerleri etrafında salınırken, m_2^A , m_2^B sırasıyla -5/2, -5/2; -3/2, -3/2; -1/2, -1/2 değerleri etrafında veya bu mıknatıslanmalar belirtilen değerlerin aksi yönünde salınırlarsa bu çözüm telafi faza (c) karşılık gelir. Bununla birlikte eğer m_1^A , m_1^B sırasıyla 2, -2; 1, -1 değerleri etrafında salınırken m2, m2 sırasıyla 5/2, -5/2; 1/2, -1/2 değerleri etrafında veya bu mıknatıslanmalar belirtilen değerlerin aksi yönünde salınırlarsa bu çözüm karma faz (m) olarak isimlendirilir. Üçüncü tip çözüm denklem (1.55)'e uyarken denklem (1.54)' e uymaz ve bu manyetik olmayan faza (nm) karşılık gelir. Bu durumda m_1^A ve m_1^B $\left(\text{veya }m_2^A \text{ ve }m_2^B\right)$ sıfır değeri etrafında salınırlar ve dış manyetik alana uyum gösterirler. Diğer taraftan, m_2^A ve m_2^B (veya m_1^A ve m_1^B) sıfır olmayan bir değer etrafında salınır ve dış manyetik alana uyum göstermezler. Bu çözümler veya fazlar detaylı bir şekilde Tablo 1.1' de gösterilmiştir. Ayrıca, bu çözümler açık bir şekilde (1.39), (1.49), (1.50) ve (1.51) ile verilen ortalama-alan dinamik denklemlerin nümerik olarak çözülmesiyle görülür. (1.39), (1.49), (1.50) ve (1.51) numaralı denklemler, verilen parametreler ve başlangıç değerleri için Adams-Moulton kestirme ve düzeltme

			M	lıknatıslanmaların Salınımı		
FAZLAR	Sembol	Konfigürasyon	m ₁ ^A	m_1^B	m ₂ ^A	m_2^{B}
Paramanyetik Faz	р	000	0	0	0	0
Ferromanyetik Faz	f		2	2	5/2	5/2
		T T	2	2	3/2	3/2
		8 8	2	2	1/2	1/2
		<u> </u>	1	1	5/2	5/2
			1	1	3/2	3/2
			1	1	1/2	1/2
Antiferromanyetik Faz	af	$\begin{array}{c}\uparrow \downarrow \\\downarrow \uparrow\end{array}$	2	-2	-5/2	5/2
Yüzey Fazı	sf	$\uparrow \uparrow \\ \downarrow \uparrow$	2	2	-5/2	5/2
Telafi Fazı	c	$\wedge \uparrow$	2	2	-5/2	-5/2
			2	2	-3/2	-3/2
			2	2	-1/2	-1/2
		V V	1	1	-1/2	-1/2
			-2	-2	5/2	5/2
Karma Faz	m		2	-2	5/2	-5/2
			2	-2	1/2	-1/2
			1	-1	5/2	-5/2
			1	-1	1/2	-1/2
Manyetik olmayan Faz	nm	00 00	0	0	5/2	5/2
			0	0	3/2	3/2
			0	0	1/2	1/2
		veya	0	0	-1/2	-1/2
		r r	2	2	0	0
			1	1	0	0
			-2	-2	0	0
		00 00	-1	-1	0	0

Tablo 1.1. İki tabakalı kare örgü üzerinde karma spin (2, 5/2) Ising modeli için temel çözümler ve fazların ayrıntılı gösterimi.

yöntemi kullanılarak çözüldü ve sistemde p, f, c, af, m, sf ve nm temel fazlarının yanında on iki adet karma faz bulunmuştur. Bu karma fazlar f ve p fazlarının bir arada bulunduğu f + p karma fazı; f ve c fazlarının bir arada bulunduğu f + c karma fazı; f ve nm fazlarının bir arada bulunduğu f + nm karma fazı; c ve p fazlarının bir arada bulunduğu c + p karma fazı; c ve nm fazlarının bir arada bulunduğu c + nm karma fazı; af ve m fazlarının bir arada bulunduğu af + m karma fazı; af ve p fazlarının bir arada bulunduğu af + p karma fazı, m ve p fazlarının bir arada bulunduğu m + p karma fazı; nm ve p fazlarının bir arada bulunduğu nm + p karma fazı ve f, nm, p fazlarının bir arada bulunduğu f + nm + p karma fazı te fazlara karşılık gelen çözümler Şekil 1.14'de ve karma fazlara karşılık gelen çözümler Şekil 1.15'te gösterilmiştir.

Şekil 1.14(a)'da yalnızca simetrik çözüm görülmektedir ve bundan dolayı sistemde sadece paramanyetik (p) faz mevcuttur. Bu durumda m_1^A , m_1^B , m_2^A , m_2^B birbirine eşittir ve sıfır değeri civarında salınırlar. Şekil 1.14(b)-(f)'de antisimetrik çözümler mevcuttur ve bu çözümler Şekil 1.14(b)'de m_1^A , m_1^B sırasıyla 2 ve m_2^A , m_2^B sırasıyla 5/2 değerleri etrafında salınırlar ve bu f fazına, Şekil 1.14(c)'de m_1^A , m_1^B sırasıyla 2 ve m_2^A , m_2^B sırasıyla -5/2, -5/2 değerleri etrafında salınırlar ve bu c fazına, Şekil 1.14(d)'de m_1^A , m_1^B sırasıyla 2, -2 ve m_2^A , m_2^B sırasıyla 5/2, -5/2 değerleri etrafında salınırlar ve bu af fazına karşılık gelir. Şekil 1.14(e)'de m_1^A , m_1^B sırasıyla 2, -2 ve m_2^A , m_2^B sırasıyla 5/2, -5/2 değerleri etrafında salınırlar ve bu m fazına, Şekil 1.14(f)'de m_1^A , m_1^B sırasıyla 2, 2 ve m_2^A , m_2^B sırasıyla -5/2, 5/2 değerleri etrafında salınırlar ve bu sf fazına karşılık gelir. Şekil 1.14(e)'de m_1^A , m_1^B sırasıyla 2, -2 ve m_2^A , m_2^B sırasıyla 2, 2 ve m_2^A , m_2^B sırasıyla -5/2, 5/2 değerleri etrafında salınırlar ve bu sf fazına karşılık gelir. Diğer taraftan, Şekil 1.14(g)'de m_1^A , m_1^B birbirine eşittir, sıfır değeri ve m_2^A , m_2^B sırasıyla 5/2, -5/2 değerleri etrafında salınırlar ve bu nm fazına karşılık gelir.

Sistemde mevcut karma fazlardan f + p, c + p, af + p, m + p, sf + p ve nm + p karma fazları Şekil 1.15'de gösterilmiştir. Şekil 1.15(a)'da f ve p fazları bir arada bulunmaktadır. İlk çözümde, m_1^A , m_1^B sırasıyla 2, 2 ve m_2^A , m_2^B sırasıyla 5/2, 5/2 değerleri civarında salınırlar ve bundan dolayı sistemde f fazı mevcuttur. İkinci çözümde ise m_1^A , m_1^B , m_2^A , m_2^B sıfır değeri civarında salınırlar, yani sistemde paramanyetik (p) faz elde edilmiştir. Böylece, sistemde f + p karma fazı bulunmaktadır.



Şekil 1.14. İki tabakalı kare örgü üzerinde karma spin (2, 5/2) Ising modeli için ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının zamanla değişimi. (a) Sistemde sadece paramanyetik (p) faz mevcuttur ($J_1 = 1.0, J_2 / |J_1| = 0.5, J_3 / |J_1| = 0.1$, h = 6.0, d = -1.0, T = 6.0). (b) Sistemde ferromanyetik (f) faz mevcuttur (J₁ = 1.0, $J_2/|J_1| = 0.5$, $J_3/|J_1| = 0.1$, h = 6.0, d = -0.1, T = 2.1). (c) Sistemde telafi (c) faz mevcuttur $J_1=1.0$, $J_2/|J_1|=0.5$, $J_3/|J_1|=0.1$, h = 3.0, d = 0.1, T = 2.1). (d) Sistemde antiferromanyetik faz (af) mevcuttur (J_1 = - 1.0, $J_2/|J_1| = 2.0, J_3/|J_1| = -2.0, h = 3.0, d = -2.0, T = 3.0$). (e) Sistemde yüzey fazı (sf) mevcuttur ($J_1 = -1.0$, $J_2 / |J_1| = 0.2$, $J_3 / |J_1| = 1.0$, h = 4.0, d = -1.0, T = 2.0). (f) Sistemde karma fazı (m) mevcuttur $(J_1 =$ -1.0, $J_2/|J_1| = 0.2, J_3/|J_1| = 1.0, h = 4.0, d = -1.0, T = 2.0$. (g) Sistemde manyetik olmayan faz (nm) mevcuttur $(J_1$ -1.0,= $J_2/|J_1| = 0.5, J_3/|J_1| = 0.1, h = 3.0, d = 0.1, T = 2.0).$

Şekil 1.15(b)'de c ve p fazları bir arada bulunmaktadır. Buradaki ilk çözümde, m_1^A , m_1^B sırasıyla 2, 2 ve m_2^A, m_2^B sırasıyla -3/2, -3/2 değerleri civarında salınırlar ve bundan dolayı sistemde c fazı mevcuttur. İkinci çözümde ise $m_1^A, m_1^B, m_2^A, m_2^B$ sıfır değeri civarında salınırlar ve bundan dolayı sistemde p fazı mevcuttur. Bundan dolayı, sistemde c + p karma fazı mevcuttur. Şekil 1.15(c)'de af ve p fazları bir arada bulunmaktadır. Buradaki ilk çözümde, m_1^A , m_1^B sırasıyla 2, -2 ve m_2^A , m_2^B sırasıyla -5/2, 5/2 değerleri civarında salınırlar ve bundan dolayı sistemde af fazı mevcuttur. İkinci çözümde ise m_1^A , m_1^B , m_2^A , m_2^B sıfır değeri civarında salınırlar ve bundan dolayı sistemde p fazı mevcuttur. Bundan dolayı, sistemde af + p karma fazı mevcuttur. Şekil 1.15(d)'de m ve p fazları bir arada bulunmaktadır. Buradaki ilk çözümde, m_1^A , m_1^B sırasıyla 1, -1 ve m_2^A, m_2^B sırasıyla 5/2, -5/2 değerleri civarında salınırlar ve bundan dolayı sistemde m fazı mevcuttur. İkinci çözümde ise $m_1^A, m_1^B, m_2^A, m_2^B$ sıfır değeri civarında salınırlar ve bundan dolayı sistemde p fazı mevcuttur. Bundan dolayı, sistemde m + p karma fazı mevcuttur. Şekil 1.15(e)'de sf ve p fazları bir arada bulunmaktadır. Buradaki ilk çözümde, m_1^A , m_1^B sırasıyla 2, 2 ve m_2^A , m_2^B sırasıyla -5/2, 5/2 değerleri etrafında salınırlar ve bundan dolayı sistemde sf fazı mevcuttur. İkinci çözümde ise m_1^A , m_1^B , m_2^A , m_2^B sıfır değeri civarında salınırlar ve bundan dolayı sistemde p fazı mevcuttur. Bundan dolayı, sistemde sf + p karma fazı mevcuttur.

1.2.3.2. Dinamik Faz Geçiş Noktaları

Sistemde mevcut olan fazlar arasındaki dinamik faz sınırlarını belirleyebilmemiz için, dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıklarını hesaplamalı ve DFG'lerinin doğasını (kesikli veya sürekli yani birinci- veya ikinci-derece faz geçişleri) karakterize etmeliyiz. Daha sonra da dinamik faz diyagramlarını sunabiliriz. DFG sıcaklıkları bir periyot başına ortalama düzen parametrelerinin yani dinamik alt örgü mıknatıslanmalarının davranışının ($M_1^{A,B}$ ve $M_2^{A,B}$) sıcaklığın bir fonksiyonu olarak incelenmesiyle elde edilecektir. Dinamik düzen parametreleri veya dinamik alt örgü mıknatıslanmaları ($M_1^{A,B}$ ve $M_2^{A,B}$),



Şekil 1.15. Şekil 1.14 ile aynı, fakat mevcut karma fazlar gösterilmiştir. (a) Sistemde f+ p karma fazı mevcuttur ($J_1 = -1.0$, $J_2/|J_1| = 0.5$, $J_3/|J_1| = 0.1$, h = 0.1, d = -3.0, T = 0.6). (b) Sistemde c + p karma fazı mevcuttur ($J_1 = -1$, $J_2/|J_1| = 0.2$, $J_3/|J_1| = -2.0$, h = 3.0, d = -1.0, T = 2.0). (c) Sistemde af + p karma fazı mevcuttur ($J_2/|J_1| = 0.5$, $J_3/|J_1| = -1.0$, h = 7.0, d = -1.0, T = 0.1). (d) Sistemde m + p karma fazı mevcuttur ($J_2/|J_1| = 0.2$, $J_3/|J_1| = 1.0$, h = 8.0, d = -1.0, T = 0.1). (e) Sistemde sf + p karma fazı mevcuttur ($J_2/|J_1| = 0.2$, $J_3/|J_1| = -2.0$, h = 2.0, d = -1.0, T = 2.0).

$$M_{1}^{A} = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} m_{1}^{A}(\xi) d\xi, \qquad M_{1}^{B} = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} m_{1}^{B}(\xi) d\xi$$
(1.56)

ve

$$M_{2}^{A} = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} m_{2}^{A}(\xi) d\xi, \qquad M_{2}^{B} = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} m_{2}^{B}(\xi) d\xi, \qquad (1.57)$$

şeklinde tanımlanır. Dinamik düzen parametreleri $M_1^{A,B}$ ve $M_2^{A,B}$ 'nin davranışları etkileşim parametrelerinin birkaç farklı değeri için indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak Adams-Moulton kestirme ve düzeltme ile Romberg integrasyon yöntemi gibi nümerik metotların bir arada kullanılmasıyla incelendi. Fazlar arasındaki dinamik faz sınırları ile DFG sıcaklılarının nasıl elde edildiği Şekil 1.16, Şekil 1.17, Şekil 1.18 ve Şekil 1.19'da gösterilmektedir. Bu şekillerde, T_t ve T_c, sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş sıcaklıklarını göstermektedir. Şekil 1.16, J₁ = 1.0, J₂/|J₁|=1.0, J₃/|J₁|=0.7, d = 2.0 ve h = 0.1 için $M_1^{A,B}$ ve $M_2^{A,B}$ 'nin davranışlarını indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak göstermektedir. Bu şekilde, T = 0'da $M_1^{A,B}$ = 2 ve $M_2^{A,B}$ = 5/2'dir ve indirgenmiş sıcaklık artarken $M_1^{A,B}$ ve $M_2^{A,B}$ sürekli olarak azalarak, T_c = 15.6 değerinde sıfır olmaktadır. Böylece sistemde T_c = 15.6 değerinde ferromanyetik (f) fazdan paramanyetik (p) faza ikinci-derece faz geçişi meydana gelmektedir.

Şekil 1.17, $J_1 = -1.0$, $J_2 / |J_1| = 0.5$, $J_3 / |J_1| = 0.1$, d = -3.0 ve h = 0.2 için $M_1^{A,B}$ ve $M_2^{A,B}$ 'nin davranışlarını indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak göstermektedir. Bu şekilde, T = 0'da $M_1^A = 2$, $M_1^B = -2$ ve $M_2^A = -5/2$, $M_2^B = 5/2$ 'dir ve indirgenmiş sıcaklık artarken M_1^A ve M_2^B sürekli olarak azalırken M_2^A ve M_2^B sürekli olarak artar ve $T_c = 15.6$ değerinde sıfır olurlar. Böylece sistemde $T_c = 7.6$ değerinde af fazdan p faza ikinci-derece faz geçişi meydana gelmektedir.



Şekil 1.16. İki tabakalı kare örgü üzerinde karma spin-2 ve spin-5/2 Ising modeli için dinamik alt örgü mıknatıslanmalarının $(M_1^{A,B})$ ve $(M_2^{A,B})$ indirgenmiş sıcaklığa bağlı olarak davranışları. T_c = 15.6 değeri, ferromanyetik (f) fazdan paramanyetik (p) faza ikinci-derece faz geçiş sıcaklığını göstermektedir. J₁ = 1.0, J₂/|J₁| = 1.0, J₃/|J₁| = 0.7, d = 2.0 ve h = 0.1.

Şekil 1.18, Şekil 1.17'ye benzemekle birlikte, Şekil 2.17'den farklı olarak, T = 0'da $M_1^A = 2$, $M_1^B = -2$ iken $M_2^A = 1/2$, $M_2^B = -1/2$ 'dir ve bu yüzen sistemde T_c = 3.607 sıcaklık değerinde, m fazdan p faza ikinci-derece faz geçişi meydana gelir.

Şekil 1.19'da, T = 0'da $M_1^A = 0$, $M_1^B = 0$ iken $M_2^A = 1/2$, $M_2^B = 1/2$ 'dir ve indirgenmiş sıcaklık artarken M_2^A ve M_2^B sürekli olarak azalarak, belirli bir sıcaklıkta yani T = T_t = 0.406 değerine ulaştığında süreksiz bir şekilde nm fazından p fazına birinci-derece faz geçişi olmaktadır.

1.2.3.3. (T, h) Düzleminde Dinamik Faz Diyagramları

Önceki kesimde dinamik faz geçiş (DFG) noktaları ve faz geçişlerinin doğası tespit edildiğinden dolayı artık sistemin dinamik faz diyagramlarını sunabiliriz. Bu kesimde hem ferromanyetik/ferromanyetik (FM/FM), yani $J_1 > 0$ ve $J_2 > 0$, hem de

antiferromanyetik/ferromanyetik (AFM/FM) durumlar için sistemin dinamik faz diyagramları (T, h) düzleminde sunularak, dinamik faz diyagramları üzerine J_1 , J_2 , J_3 , bilineer etkileşim parametreleri ile D kristal alan etkileşme parametrelerinin etkileri in-



Şekil 1.17. İki tabakalı kare örgü üzerinde karma spin-2 ve spin-5/2 Ising modeli için dinamik alt örgü mıknatıslanmalarının $(M_1^{A,B})$ ve $(M_2^{A,B})$ indirgenmiş sıcaklığa bağlı olarak davranışları. T_c = 7.6 değeri, antiferromanyetik (f) fazdan paramanyetik faza (p) ikinci-derece faz geçiş sıcaklığını göstermektedir. J₁ = -1.0, J₂ / |J₁| = 0.5, J₃ / |J₁| = 0.1, d = -3.0 ve h = 0.2.

celenecektir. Sistemin dinamik faz diyagramları FM/FM durumu için Şekil 1.20 ve Şekil 1.21'de gösterilirken AFM/FM durumu için Şekil 1.22 ve Şekil 1.23'de gösterilmiştir. İçi dolu daireler dinamik üçlü kritik noktayı temsil ederken, TP dinamik üçlü nokta, QP dinamik dörtlü nokta, B dinamik çift kritik son nokta, E dinamik kritik son nokta gibi özel noktaları temsil etmektedir. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş çizgilerini göstermektedir. Şekil 1.20'deki dinamik faz diyagramları incelendiğinde aşağıdaki ilginç ve temel sonuçlar elde edilir.

i) Dinamik faz diyagramları etkileşim parametrelerine bağlı olarak yalnızca p ve nm fazlarını içerir. Sistem bu iki temel fazın yanında etkileşim parametrelerine bağlı olarak



Şekil 1.18. Şekil 2.17 ile aynı fakat burada $T_c = 3.607$ değerinde mixed (m) fazdan paramanyetik faza (p) ikinci-derece faz geçişi meydana gelmektedir. $J_1 = -1.0$, $J_2/|J_1| = 0.2$, $J_3/|J_1| = 1.0$, d = -2.0 ve h = 0.05.

f + p, f + nm, c + p, nm + p ve f + nm + p karma fazlarını da içerir. ii) Bu fazlar arasındaki dinamik faz sınırı yalnızca birinci-derece faz geçiş çizgisidir. (T, h) düzleminde elde edilen bu faz diyagramlarından Şekil 1.20 (d) ve Şekil 1.20 (e)'de elde edilen dinamik faz diyagramların benzeri, Kaynak [161, 166]'da sunulan, daha önceki çalışmalarda da elde edildi. Yalnız Kaynak [161 ve 166] ile verilen sistemlerdeki faz diyagramlarında a fazı yerine sırasıyla c telafi fazı ve nm manyetik olmayan faz meydana gelmektedir.

Şekil 1.21'deki dinamik faz diyagramları incelendiğinde aşağıdaki ilginç ve temel sonuçlar elde edilir.

i) Şekil 1.21'deki dinamik faz diyagramları, iki tabakalı karma spin (2, 5/2) Ising sistem için elde edilen en zengin ve en ilginç dinamik faz diyagramlarını göstermektedir. Öyle ki sistemde yedi farklı f + p, c + nm, c + p, nm + p, f + nm ve f + nm + p karma fazlarının yanında paramanyetik (p), ferromanyetik (f) ve telafi (c) fazları mevcuttur.

ii) Sistem aynı zamanda etkileşim parametrelerine bağlı olarak üç tane dinamik çift kritik son nokta (B), iki tane dinamik sıfır-sıcaklık kritik nokta (Z) ve bir tane de dinamik dörtlü nokta (QP) içermektedir.

iii) Bu fazlar arasındaki dinamik faz sınırı çoğunlukla birinci-derece faz geçiş çizgisidir.

iv) Sistemde (Şekil 1.21 (c) ve Şekil 1.21 (e)) re-entrant olay gözlenmektedir. Çünkü Şekil 1.20 (c)'de sıcaklık artarken sistemde önce p fazından f + nm + p fazına sonra tekrar p fazına geçiş olur. Şekil 1.21 (e)'de ise önce p fazından c + nm fazına sonra tekrar p fazına geçiş olur.



Şekil 1.19. J₁ = 1.0, J₂ / $|J_1| = 0.5$, J₃ / $|J_1| = 0.1$, d = -4.0 ve h = 0.1 değerleri için dinamik alt örgü mıknatıslanmalarının $(M_1^{A,B})$ ve $(M_2^{A,B})$ indirgenmiş sıcaklığa bağlı olarak davranışları. T_t = 0.406 değeri manyetik olmayan fazdan (nm) paramanyetik faza (p) birinci-derece faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.



Şekil 1.20. İki tabakalı kare örgü üzerinde karma spin-2 ve spin-5/2 Ising modelinin FM/FM durumu için (T, h) düzleminde dinamik faz diyagramı. Sistemde yalnızca birinci-derece faz geçiş çizgileri mevcuttur. Sistemde p ve nm temel fazlarının yanında f + p, f + nm, nm + p, c + p ve f + nm +p karma fazları mevcuttur. Kesikli çizgiler birinci- derece faz geçiş çizgilerini göstermektedir. (a) $J_2/|J_1| = 0.5$, $J_3/|J_1| = 0.1$, d = -4. (b) $J_2/|J_1| = 0.5$, $J_3/|J_1| = 0.1$, d = -3.0. (c) $J_2/|J_1| = 1.0$, $J_3/|J_1| = 0.7$, d = -3.0. (d) $J_2/|J_1| = 0.1$, $J_3/|J_1| = -0.1$, d = -3.0. (e) $J_2/|J_1| = 0.2$, $J_3/|J_1| = -4.0$, d = -3.0.

(T, h) düzleminde elde edilen bu faz diyagramlarından Şekil 1.21 (d)'de elde edilen dinamik faz diyagramının benzeri, daha önce kinetik spin-1/2 [140], spin-1 [157, 159, 160], spin-3/2 [162, 164, 165], spin-2 [167,168], spin-5/2 [169, 170] Ising sistemlerinde elde edilmiştir. Bu faz diyagramına benzeri faz diyagramları karma spin (1/2, 1) [209, 210], spin (1/2, 5/2) [217] ve spin (3/2, 5/2) [218], spin (1, 3/2) [219], spin (1/2, 2) [220], spin (1, 5/2) [221], spin (3/2, 2) [222], spin (1, 2) [223] Ising modellerinde de elde edilmiştir (bu karma spin Ising çalışmalarında f fazının yerine i fazı gelmektedir).

Şekil 1.22'deki dinamik faz diyagramları incelendiğinde aşağıdaki ilginç ve temel sonuçlar elde edilir.

 i) Dinamik faz diyagramları etkileşim parametrelerine bağlı olarak yalnızca p ve nm içerir. Sistem bu iki temel fazın yanında etkileşim parametrelerine bağlı olarak yalnızca nm + p karma fazını içerir.

ii) Bu fazlar arasındaki dinamik faz sınırı yalnızca birinci-derece faz geçiş çizgisidir.

iii) Dinamik faz diyagramlarından Şekil 1.22 (a) ve Şekil 1.22 (b) birer tane dinamiküçlü (TP) nokta içerir. Şekil 1.22 (a) aynı zamanda bir tane dinamik kritik sonlu nokta(E)

(T, h) düzleminde elde edilen bu faz diyagramlarından Şekil 1.22 (c)'de elde edilen dinamik faz diyagramının benzeri, Kaynak [161, 166] 'da sunulan, daha önceki çalışmalarda da elde edildi. Yalnız Kaynak 161 ve 166 ile verilen sistemlerdeki faz diyagramlarında a fazı yerine nm manyetik olmayan faz meydana gelmektedir. Ayrıca benzer faz diyagramı, bu tez çalışması kapsamında birbirini takip eden tabakalı altıgen örgü üzerinde karma spin (2, 5/2) [227] Ising sisteminde elde edilmiştir.

Şekil 1.23'deki dinamik faz diyagramları incelendiğinde aşağıdaki ilginç ve temel sonuçlar elde edilir.

i) Şekil 1.23'deki dinamik faz diyagramları, altı farklı nm + p, m + p, af + p, af + m, sf
+ p, c + p ve af + nm + p karma fazlarının yanında p, af, sf, nm, m ve c fazlarını içerir.



Şekil 1.21. Şekil 1.20 ile aynı fakat Şekil 1.20'den farklı olarak sistemde bir veya iki tane dinamik üçlü kritik nokta mevcut. (a) $J_2/|J_1| = 0.5$, $J_3/|J_1| = 0.1$, d = 0.1. (b) $J_2/|J_1| = 0.5$, $J_3/|J_1| = 0.1$, d = -1.0. (c) $J_2/|J_1| = 0.5$, $J_3/|J_1| = 0.1$, d = -2.0. (d) $J_2/|J_1| = 1$, $J_3/|J_1| = 0.7$, d = 2.0. (e) $J_2/|J_1| = 0.1$, $J_3/|J_1| = -0.1$, d = 0.1. (f) $J_2/|J_1| = 0.1$, $J_3/|J_1| = -0.1$, d = -1.8. (g) $J_2/|J_1| = 0.2$, $J_3/|J_1| = -2$, d = 1. (h) $J_2/|J_1| = 0.2$, $J_3/|J_1| = -2$, d = -1.0.

ii) Sistem aynı zamanda etkileşim parametrelerine bağlı olarak iki tane dinamik üçlü nokta (TP) içerir.

iii) Bu fazlar arasındaki dinamik faz sınırı çoğunlukla birinci-derece faz geçiş çizgisidir.

iv) Sistemde re-entrant olay gözlenmektedir. Çünkü Şekil 1.23 (g)'de sıcaklık artarken sistemde önce p fazından sf fazına sonra tekrar p fazına geçiş olur.

(T, h) düzleminde elde edilen bu faz diyagramlarından Şekil 1.22 (a)'da elde edilen dinamik faz diyagramının benzeri, daha önce kinetik spin-1/2 [140], spin-1 [157, 159, 160], spin-3/2 [162, 164, 165], spin-2 [167,168], spin-5/2 [169, 170] Ising sistemlerinde elde edilmiştir. Bu faz diyagramına benzeri faz diyagramları karma spin (1/2, 1) [209, 210], spin (1/2, 5/2) [217] ve spin (3/2, 5/2) [218], spin (1, 3/2) [219], spin (1/2, 2) [220], spin (1, 5/2) [221], spin (3/2, 2) [222], spin (1, 2) [223] ve spin (2, 5/2) [227] Ising modellerinde de elde edilmiştir (bu karma spin Ising çalışmalarında nm fazının yerine i fazı gelmektedir).



Şekil 1.22. Şekil 1.20 ile aynı fakat Şekil 2.20'den farklı olarak sistemin dinamik faz diyagramları AFM/FM durumu için elde edildi. (a) $J_2/|J_1| = 0.5, J_3/|J_1| = 0.1, d = -2.0.$ (b) $J_2/|J_1| = 0.1, J_3/|J_1| = -0.1, d = 0.1.$ (c) $J_2/|J_1| = 0.1, J_3/|J_1| = -0.1, d = -1.8.$



Şekil 1.23. Şekil 1.20 ile aynı fakat Şekil 1.20'den farklı olarak sistemin dinamik faz diyagramları AFM/FM durumu için elde edildi ve sistemde bir veya iki tane dinamik üçlü kritik nokta mevcut. (a) $J_2/|J_1| = 0.5$, $J_3/|J_1| = 0.1$, d = 0.1; (b) $J_2/|J_1| = 0.2$, $J_3/|J_1| = 1.0$, d = -1.0. (c) $J_2/|J_1| = 0.5$, $J_3/|J_1| = -1.0$, d = -1.0. (d) $J_2/|J_1| = 0.5$, $J_3/|J_1| = 0.1$, d = -4.0. e) $J_2/|J_1| = 1.0$, $J_3/|J_1| = 0.7$, d = -3.0. (f) $J_2/|J_1| = 0.2$, $J_3/|J_1| = -2.0$, d = 1. (g) $J_2/|J_1| = 0.2$, $J_3/|J_1| = -2.0$, d = -1.0. (h) $J_2/|J_1| = 2.0$, $J_3/|J_1| = -2.0$, d = -2.0.

Bu bölümde elde edilen sonuçlar Physics Letters A dergisinde yayınlanmıştır [234].

2. BÖLÜM

KARMA SPİN (2, 5/2) ISING SİSTEMİNİN DİNAMİK DAVRANIŞININ GLAUBER GEÇİŞ ORANLARI TEMELLİ KORELASYONLU ETKİN-ALAN TEORİSİ KULLANARAK İNCELENMESİ

Tek örgülü spin-2 Blume-Capel (BC) ve spin-5/2 Blume-Capel (BC) Ising sistemlerinin dinamiği daha önce Glauber geçiş oranları temelli dinamik ortalama-alan yaklaşıklığı (DOAY) [167, 169] ile kapsamlıca incelenmesine rağmen, bu sistemlerin temelindeki fenomoloji henüz tam manası ile bilinememektedir. Ayrıca giriş bölümünde de belirttiğimiz gibi OAY denge istatistiksel fiziğinde en eski ve en iyi bilinen yöntemlerden birisidir. Bununla birlikte bu metot, sistemlerdeki dalgalanmaların korelasyonlarını içermediğinden dolayı, şayet sistem birinci dereceden enerji kuyusuna gelirse, buradan en düşük enerjili duruma geçemeyecektir. Çünkü OAY'nda spin korelasyonlarının etkisi hesaplamalar içine girmemektedir. Bundan dolayı da faz diyagramlarında bulunmuş olan bazı birinci-derece faz geçiş çizgileri ve dolayısıyla bazı özel noktalar, özellikle dinamik üçlü kritik nokta, dinamik çift (double) kritik son nokta ve dinamik kritik son nokta gibi özel noktalar, muhtemelen OAY'nın bir yapay sonucu olabilir. Dolayısıyla bu tez çalışmasının bu bölümünde, İsing sistemlerinin dinamik özellikleri üzerine spin korelasyonlarının etkilerini elde etmek için, seçilen bir spinin en yakın komsu spinler arasındaki korelasyonun etkisini hesaba katan ve OAY'den daha iyi sonuçlar veren korelasyonlu EAT ve Glauber-tipi stokhastik dinamik kullanılarak tek örgülü spin-2 BC ve tek örgülü spin-5/2 BC sistemleri incelenecek. Böylece alt örgülerinden birisinde spin-2, diğerinde spin-5/2 değerine sahip dinamik karma spin (2, 5/2) Ising sisteminin korelasyonlu EAT ve Glauber-tipi stokhastik dinamik kullanılarak incelenmesi ile elde edilecek sonuçların yorumlanmasına ve alt örgüler üzerindeki yüksek spin değerlerinin etkisinin incelenmesine ışık tutacaktır. Dolayısıyla bu bölümde sırasıyla spin-2 BC, spin-5/2 BC ve karma spin (2, 5/2) BC

sistemlerinin dinamik davranışları korelasyonlu EAT ve Glauber-tipi stokhastik dinamik kullanılarak incelenecektir.

2.1. Spin-2 Blume-Capel Modelinin Dinamiği

2.1.1. Giriş

Zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında Glauber geçiş oranları temelli dinamik ortalama-alan yaklaşıklığı (DOAY) kullanarak spin-2 Ising sisteminin dinamik davranışı kapsamlıca araştırıldı. Bu çalışmada özellikle dinamik faz geçiş sıcaklıkları (DFG) hesaplanmış ve dinamik faz diyagramları sunulmuştur [167]. Bu çalışma sonucunda spin-2 Ising sisteminin ilginc dinamik davranış sergilediği ve DOAY ile zengin faz diyagramları verdiği bulunmuştur. Bu DOAY metodu en iyi ve en eski bilinen metotlardan biridir ve hala yaygın literatürde sürekli olarak kullanılmaktadır. Ayrıca bu metot, faz geçişleri ve bütün termodinamik özelliklerin kısmen basit bir açıklamasını sunar ve böylece basit bir yol sağlar. Diğer taraftan, bu yöntemde spin dalgalanmalarının ilişkileri (korelasyonla) hesaplamalara katılmadığından bazı birincidereceden faz geçiş sıcaklıkları ve özel noktalar yapay birinci-dereceden faz geçiş sıcaklıkları ve yapay özel noktalar olabilir. Bu yüzden, spin-2 Ising sisteminin dinamiği daha doğru sonuçlar veren metotlarla incelenmelidir. Bu kesimde tek örgülü, tek iyon anizotropi veya kristal alan etkileşme Hamiltonyenli spin-2 Ising sisteminin, yani spin-2 BC sisteminin, dinamik davranışı Glauber geçiş oranları temelli korelasyonlu etkin-alan teorisi ile salınımlı dış manyetik alan varlığında kapsamlı bir şekilde incelenecektir. Dinamik etkin-alan denklemini elde etmek için Glauber geçiş oranları kullanılacaktır. Elde edilecek olan bu diferansiyel denklem Adams-Moulton kestirme ve düzeltme, Runge-Kutta, vb. gibi nümerik yöntemlerle çözülecek ve ortalama düzen parametresinin zamana göre değişimi incelenerek sistemde oluşan fazlar tespit edilecektir. Dinamik düzen parametresini veren denklemler Adams-Moulton kestirme ve düzeltme ve Romberg integrasyon yöntemleri beraber kullanılarak çözülecek ve dinamik düzen parametresinin, histerisis eğrisi alanının ve korelasyon fonksiyonlarının indirgenmiş sıcaklığa göre değişimleri incelenerek, sistemde meydana gelen dinamik faz geçişlerinin tabiatı (birinci- ve ikinci-derece) karakterize edilecek ve aynı zamanda DFG sıcaklıkları

bulunacaktır. Sonrada, hesaplanan DFG sıcaklıkları kullanılarak sistemin dinamik faz diyagramları (T/zJ, h/zJ) düzleminde sunulacaktır.

2.1.2. Model ve Etkin-Alan Dinamik Denklemleri

2.1.2.1. Modelin Tanıtımı

Kristal alan etkileşmeli veya tek iyon anizotropili Ising Hamiltonyenli modeller genelde Blume-Capel (BC) modelleri diye adlandırılır ve bu modeller istatistik fizik ve yoğun madde fiziğinde en fazla kullanılan modellerden biridir. Bu model ilk olarak spin-1 Ising modeli için Blume [232] ve Capel [233, 234] tarafından birbirinden bağımsız olarak geliştirilmiştir ve 40 yıldan beri çeşitli fiziksel sistemlerde meydana gelen çoklu kritik olayların incelenmesinde temel rol oynamaktadır. Giriş bölümünde de anlatıldığı gibi düşük spin değerlerine sahip Ising sistemleri üzerinde birçok çalışma yapılmasına rağmen yüksek spin değerlerine sahip Ising sistemleri üzerinde birçok çalışma yapılmasına oldukça sınırlıdır. Bu bakımdan tezin bu bölümünde spin-2 BC modeli kare örgü üzerinde çalışılacaktır. Şekil. 2.1'de görüldüğü gibi örgünün her bir noktasındaki spinler sadece σ -spinleridir.



Şekil 2.1. Kare örgü üzerindeki σ (dolu daireler) spinlerinin yerleşiminin taslağı.

Bu model, beş durumlu ve iki düzen parametreli bir modeldir. Bu beş durum $S_i = \pm 2$, ± 1 , 0'dır. Bu modelin dört tane düzen parametresi vardır. Bunlar, (1) m, ortalama mıknatıslanmadır ki bir tarafa yönelmenin diğer tarafa yönelmeden fazlalığını gösterir ve dipol moment diye adlandırılır; (2) *r* octupolar düzen parametresi; (3) q kuadropol momenttir ve q = $\langle S^2 \rangle$ veya q = $\langle S^2 \rangle - 2$ seklinde tanımlanır. İkinci tanım sıcaklık sonsuza gittiğinde q = 0 olmasını sağlar. (4) ν hexadecapole düzen parametresidir. m ve *r* düzen parametreleri ile q ve ν düzen parametrelerinin termal davranışları birbirlerine benzerlik gösterir [225]. Bu düzen parametreleri iki farklı temel fazı tanımlamaktadır. Bu temel fazlar:

- i) Paramanyetik faz (p): m = 0,
- ii) Ferromanyetik fazlar:
 - a) Ferromanyetik-1 fazı (F₁): $m = \pm 1$,
 - b) Ferromanyetik-2 fazı (F_2): m = ±2.

Spin-2 Blume-Capel modeli için Hamiltonyen ifadesi,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - D \sum_i \sigma_i^2 - h(t) \sum_i \sigma_i, \qquad (2.1)$$

şeklindedir. Burada, $\langle ij \rangle$ toplamın en yakın komsu çiftler üzerinden alınacağını göstermektedir. J bilineer etkileşme parametresi, D kristal alan etkileşmesi veya tekiyon anizotropi sabiti ve son terim h(t) ise zamanla değişen salınımlı dış manyetik alandır ve

$$\mathbf{h}(\mathbf{t}) = \mathbf{h}_0 \sin(\mathbf{w}\mathbf{t}), \tag{2.2}$$

şeklinde tanımlanır. Burada h_0 ve $w = 2\pi v$ sırasıyla salınımlı alanın genliği ve açısal frekansıdır. Sistem T mutlak sıcaklığında, izotermal ısı banyosu ile temas halindedir.

2.1.2.2. Etkin-Alan Dinamik Denklemlerinin Elde Edilmesi

Bu kesimde zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında spin-2 BC modeli için sistemin dinamik davranışını açıklayan etkin-alan dinamik denklemleri, kare örgü üzerinde elde edilecektir. Bu metot ilk kez Honmura ve Kaneyoshi [236] ile Kanesyoshi ve arkadaşları [237] tarafından tanımlandı. Korelasyonlu etkin-alan teorisinde, spin-2 Ising sistemi için ortalama mıknatıslanma ifadesi,

$$\left\langle \sigma_{i}^{n} \right\rangle = \left\langle \prod_{i=1}^{z} \left[1 + A(\alpha) \sigma_{i} + B(\alpha) \sigma_{i}^{2} + C(\alpha) \sigma_{i}^{3} + D(\alpha) \sigma_{i}^{4} \right] \right\rangle f_{n}(\mathbf{x} + h) \Big|_{\mathbf{x} = 0}, \qquad (2.3)$$

olarak verilir. Bu eşitlik Callen'ın 1963'te, spin-1/2 [238] için elde ettiği spin korelasyonunu ifade eden Callen eşitliği ifadesinin, spin-2 için genelleştirilmiş şeklidir. Burada <...> ifadesi kanonik küme ortalamasını göstermektedir. Spin-2 için n = 1, 2, 3 ve 4 değerlerini alır. $\alpha = J\nabla$, $\nabla = \partial/\partial x$ diferansiyel operatör ve <...> kanonik küme ortalamasını göstermektedir. z en yakın komşu sayısıdır ve kare örgü için z = 4 alınır. Van der Waerden [239] özdeşliğinden faydalanarak, spin-2 sistemi için A(α), B(α), C(α), ve D(α) katsayıları aşağıdaki şekilde bulunur:

$$A(\alpha) = \frac{1}{6} \left[8 \sinh(\alpha) - \sinh(2\alpha) \right],$$

$$B(\alpha) = \frac{1}{12} \left[16 \cosh(\alpha) - \cosh(2\alpha) - 15 \right],$$

$$C(\alpha) = \frac{1}{6} \left[\sinh(2\alpha) - 2\sinh(\alpha) \right],$$

$$D(\alpha) = \frac{1}{12} \left[\cosh(2\alpha) - 4\cosh(\alpha) + 3 \right].$$

(2.4)

Spin-2 için $f_n(x + h)$ (n = 1, 2, 3, 4) fonksiyonları,

$$f_1(\mathbf{x}+h) = \frac{1}{2} \frac{4\sinh\left[2\beta(\mathbf{x}+h)\right] + 2\sinh\left[\beta(\mathbf{x}+h)\right]\exp(-3\beta \mathbf{D})}{\cosh\left[2\beta(\mathbf{x}+h)\right] + \cosh\left[\beta(\mathbf{x}+h)\right]\exp(-3\beta \mathbf{D}) + \exp(-4\beta \mathbf{D})},$$
(2.5a)

$$f_{2}(\mathbf{x}+h) = \frac{1}{2} \frac{8\cosh\left[2\beta(\mathbf{x}+h)\right] + 2\cosh\left[\beta(\mathbf{x}+h)\right]\exp(-3\beta \mathbf{D})}{\cosh\left[2\beta(\mathbf{x}+h)\right] + \cosh\left[\beta(\mathbf{x}+h)\right]\exp(-3\beta \mathbf{D}) + \exp(-4\beta \mathbf{D})},$$
(2.5b)

$$f_{3}(\mathbf{x}+h) = \frac{1}{2} \frac{16\sinh\left[2\beta(\mathbf{x}+h)\right] + 2\sinh\left[\beta(\mathbf{x}+h)\right]\exp(-3\beta \mathbf{D})}{\cosh\left[2\beta(\mathbf{x}+h)\right] + \cosh\left[\beta(\mathbf{x}+h)\right]\exp(-3\beta \mathbf{D}) + \exp(-4\beta \mathbf{D})},$$
(2.5c)

ve

$$f_4(\mathbf{x}+h) = \frac{1}{2} \frac{32\cosh\left[2\beta(\mathbf{x}+h)\right] + 2\cosh\left[\beta(\mathbf{x}+h)\right]\exp(-3\beta \mathbf{D})}{\cosh\left[2\beta(\mathbf{x}+h)\right] + \cosh\left[\beta(\mathbf{x}+h)\right]\exp(-3\beta \mathbf{D}) + \exp(-4\beta \mathbf{D})},$$
(2.5d)

şeklinde tanımlanır. (2.3) denklemi kesindir ve herhangi bir örgü için geçerlidir. Spin-2 gibi, 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) yaklaşımdır:

$$\left\langle \sigma_{i} \sigma_{r}^{2} \dots \sigma_{i^{n}}^{4} \right\rangle \cong \left\langle \sigma_{i} \right\rangle \left\langle \sigma_{r}^{2} \right\rangle \dots \left\langle \sigma_{i^{n}}^{4} \right\rangle.$$
 (2.6)

Buna göre $i \neq i' \neq ... \neq i^n$ olmak üzere korelasyonlu etkin-alan teorisi birçok sisteme uygulanmıştır [236, 240, 241]. Aslında bu yaklaşım, esas itibariyle hacim veya yoğun (bulk) probleminde Zernike yaklaşımına [242] tekabül etmektedir ve yüzey problemlerini içeren çok sayıda manyetik sisteme başarılı bir şekilde uygulanmıştır [236, 240, 241, 243, 244]. Bağlantısızlık (decoupling) yaklaşımı da kullanılarak kare örgü için (2.3) eşitliğinde z = 4 yazılırsa,

$$\mathbf{m} = \left\langle \sigma_{i} \right\rangle = \left[1 + \mathbf{A}(\alpha) \left\langle \sigma_{i} \right\rangle + \mathbf{B}(\alpha) \left\langle \sigma_{i}^{2} \right\rangle + \mathbf{C}(\alpha) \left\langle \sigma_{i}^{3} \right\rangle + \mathbf{D}(\alpha) \left\langle \sigma_{i}^{4} \right\rangle \right]^{4} f_{1}(\mathbf{x} + h) \Big|_{\mathbf{x} = 0}, \qquad (2.7)$$

$$q = \left\langle \sigma_{i}^{2} \right\rangle = \left[1 + A(\alpha) \left\langle \sigma_{i} \right\rangle + B(\alpha) \left\langle \sigma_{i}^{2} \right\rangle + C(\alpha) \left\langle \sigma_{i}^{3} \right\rangle + D(\alpha) \left\langle \sigma_{i}^{4} \right\rangle \right]^{4} f_{2}(\mathbf{x} + h) \Big|_{\mathbf{x} = 0}, \qquad (2.8)$$

$$r = \left\langle \sigma_{i}^{3} \right\rangle = \left[1 + A(\alpha) \left\langle \sigma_{i} \right\rangle + B(\alpha) \left\langle \sigma_{i}^{2} \right\rangle + C(\alpha) \left\langle \sigma_{i}^{3} \right\rangle + D(\alpha) \left\langle \sigma_{i}^{4} \right\rangle \right]^{4} f_{3}(\mathbf{x} + h) \Big|_{\mathbf{x} = 0},$$
(2.9)

$$\nu = \left\langle \sigma_{i}^{4} \right\rangle = \left[1 + A(\alpha) \left\langle \sigma_{i} \right\rangle + B(\alpha) \left\langle \sigma_{i}^{2} \right\rangle + C(\alpha) \left\langle \sigma_{i}^{3} \right\rangle + D(\alpha) \left\langle \sigma_{i}^{4} \right\rangle \right]^{4} f_{4}(\mathbf{x} + h) \Big|_{\mathbf{x} = 0}, \qquad (2.10)$$

burada m mıknatıslanma, q kuadrupol, r octupolar ve v hexadecapole düzen parametreleri olup, m ve r düzen parametreleri ile q ve v düzen parametrelerinin

termal davranışları birbirlerine benzerlik gösterir [225]. Spin-2 BC sisteminin Hamiltonyen ifadesi Eşitlik 2.1'de görüldüğü gibi bikuadratik etkileşme parametresi (K) içermediğinden q (veya ν) düzen parametrelerin termal davranışları bu tez çalışmasında incelenmedi. Böylece bu tez çalışmasında yalnızca m düzen parametresinin termal davranışı incelendi. Eşitlik (2.7)'nin sağ tarafi açılırsa,

$$m = a_{0} + a_{1}m + a_{2}m^{2} + a_{3}m^{3} + a_{4}m^{4} + a_{5}m^{5} + a_{6}m^{6} + a_{7}m^{7} + a_{8}m^{8} + a_{9}m^{9} + a_{10}m^{10} + a_{11}m^{11} + a_{12}m^{12} + a_{13}m^{13} + a_{14}m^{14} + a_{15}m^{15} + a_{16}m^{16},$$
(2.11)

elde edilir. Burada a_i (i = 1, 2,...,16) katsayıları, diferansiyel operatör tekniği kullanılarak,

$$\begin{aligned} a_{0} &= f(h), \\ a_{1} &= -\frac{1}{3} \Big[-f(h-2J) + 8f(h-J) - 8f(h+J) + f(h+2J) \Big], \\ a_{2} &= \frac{1}{24} \Bigg[-250f(h) + f(h-4J) - 16f(h-3J) + 60f(h-2J) + 80f(h-J) + \\ 80f(h+J) + 60f(h+2J) - 16f(h+3J) + f(h+4J) \\ &\vdots \\ a_{15} &= \frac{1}{41472} \Bigg[-f(h-8J) + 14f(h-7J) - 90f(h-6J) + 350f(h-5J) - 910f(h-4J) \\ + 1638f(h-3J) - 2002f(h-2J) + 1430f(h-J) - 1430f(h+J) \\ + 2002f(h+2J) - 1638f(h+3J) + 910f(h+4J) - 350f(h+5J) \\ + 90f(h+6J) - 14f(h+7J) + f(h+8J) \\ \end{vmatrix},$$
(2.12)
$$a_{16} &= -\frac{1}{331776} \Bigg[\frac{12870f(h) - f(h-8J) - 16f(h-7J) + 120f(h-6J) - 560f(h-5J) \\ + 1820f(h-4J) - 4368f(h-3J) + 8008f(h-2J) - 11440f(h-J) \\ - 11440f(h+J) + 8008f(h+2J) - 4368f(h+3J) + 1820f(h+4J) \\ - 560f(h+5J) + 120f(h+6J) - 16f(h+7J) + f(h+8J) \\ \end{vmatrix}.$$

şeklinde elde edilir. Glauber-tipi stokhastik dinamik kullanılırsa, özellikle de Glauber geçiş oranları kullanılırsa, dinamik etkin-alan denklemi,

$$\frac{d}{dt}m = -m + a_0 + a_1m + a_2m^2 + a_3m^3 + a_4m^4 + a_5m^5 + a_6m^6 + a_7m^7 + a_8m^8 + a_9m^9 + a_{10}m^{10} + a_{11}m^{11} + a_{12}m^{12} + a_{13}m^{13} + a_{14}m^{14} + a_{15}m^{15} + a_{16}m^{16},$$
(2.13)

formunda elde edilir. Böylece sistemin dinamik etkin-alan denklemi elde edilmiş oldu. Gelecek kesimde bu denklemin nümerik çözümleri yapılacak ve bu çözümler tartışılacaktır.

2.1.3. Dinamik Faz Geçiş Noktaları ve Dinamik Faz Diyagramları

2.1.3.1. Ortalama Mıknatıslanmanın Zamanla Değişimi

Bu kesimde, (2.13) ile verilen etkin-alan dinamik denkleminin Adams-Moulton kestirme ve düzeltme yöntemi kullanılarak nümerik olarak çözülmesiyle ortalama düzen parametresinin, yani ortalama mıknatıslanmanın (m (wt)) zamana bağlı davranışı incelenecektir. Sistemde var olan fazları bulmak için denklem (2.13) ile verilen etkinalan dinamik denkleminin kararlı çözümleri farklı D/zJ, h/zJ ve T/zJ değerleri için incelenecektir. Denklem (2.13)'ün kararlı çözümleri 2π periyodu için wt'nin periyodik bir fonksiyonu olacaktır, yani

$$m(wt+2\pi) = m(wt).$$
 (2.14)

Ayrıca, aşağıdaki özelliklerin sağlanıp veya sağlanmamasına göre sistemde iki tip çözüm olduğu bulundu:

$$m (wt+2\pi) = -m (wt).$$
 (2.15)

Eğer çözüm, (2.15) denklemiyle verilen özelliğe sahipse simetrik çözüm olarak adlandırılır ve bu paramanyetik (P) çözüme karşılık gelir. İkinci çözüm ise, (2.15) denklemiyle verilen özelliğe sahip değildir ve bu simetrik olmayan çözüm olarak adlandırılır ki bu çözüm ferromanyetik (F) çözüme karşılık gelir. Bu çözümde m(wt) sıfır olmayan değerler etrafında salınır. Eğer m (wt) = ± 2 değeri etrafında salınıyorsa ferromanyetik-2 (F₂) faz ve m (wt) = ± 1 değeri etrafında salınıyorsa ferromanyetik-1 (F₁) faz olarak adlandırılır. Bu durumda ortalama mıknatıslanma dış manyetik alana uymaz. Bu çözümlerin gerçekliği açık bir şekilde (2.13) ile verilen etkin-alan dinamik denkleminin nümerik olarak çözülmesiyle görülür. (2.13) numaralı denklemin, verilen parametreler ve başlangıç değerleri için Adams-Moulton kestirme ve düzeltme yöntemi kullanılarak çözülmesiyle sistemde P, F_2 , F_1 temel fazlarının yanında üç adet karma faz bulundu. Bu karma fazlar F_2 ve P fazlarının bir arada bulunduğu $F_2 + P$ karma fazı; F_1 ve P fazlarının bir arada bulunduğu $F_1 + P$ karma fazı ve F_2 , F_1 ve P fazlarının bir arada bulunduğu $F_2 + F_1 + P$ karma fazlarıdır. Temel fazlara karşılık gelen çözümler Şekil 2.2'de ve karma fazlara karşılık gelen çözümler Şekil 2.3'te gösterilmiştir.

Şekil 2.2(a)'da yalnızca simetrik çözüm elde edildi ve bundan dolayı sistemde sadece paramanyetik (P) faz mevcuttur. Bu durumda m (wt) sıfır değeri civarında salınır. Şekil 2.2 (b) ve (c)'de yalnızca simetrik olmayan çözümler elde edilmiştir. Şekil 2.2 (b)'de $m(wt) = \pm 2$ değerleri etrafında salınır, bundan dolayı sistemde ferromanyetik-2 (F₂) faz mevcuttur. Şekil 2.2(c)'de m (wt) = 1.0 değeri etrafında salınır, bundan dolayı sistemde ferromanyetik-1 (F₁) faz mevcuttur. Bu çözümler başlangıç değerlerine bağlı değildir.

Sistemde mevcut olan karma fazlar Şekil 2.3'de gösterilmiştir. Başlangıç değerlerine bağlı olmak üzere bu şekillerden Şekil 2.3(a) ve (b)'de iki farklı çözüm, Şekil 2.3(c)'de ise üç farklı çözüm elde edilmiştir. Şekil 2.3(a)'da F_2 ve P fazları bir arada bulunmaktadır. İlk çözümde, başlangıç değeri 2 ve 1 değerleri için m (wt) = ± 2 civarında salınır, bu durumda F_2 fazı elde edilir. İkinci çözümde ise başlangıç değeri 0 için m (wt) = 0 değeri civarında salınır, bu durumda salınır, bu durumda salınır, bu durumda salınır, bu durumda sistemde P fazı elde edilir. Bu yüzden sistemde $F_2 + P$ karma fazı mevcuttur. Şekil 2.3(b)'de Şekil 2.2(a)' ya benzerdir fakat burada F_2 yerine F_1 fazı gelir ve sistemde $F_1 + P$ karma fazı mevcuttur. Şekil 2.3(c)'de üç farklı çözüm elde edilmiştir. Bu şekilde F_2 , F_1 ve P fazları bir arada bulunmaktadır. İlk çözümde, başlangıç değeri 2 için m (wt) = ± 2 civarında salınırken sistemde F_2 fazı elde edilmiştir. İkinci çözümde ise başlangıç değeri 1 için m (wt) = ± 1 civarında salınır, bu durumda sistemde F_1 fazı elde edilmiştir. Üçüncü çözümde ise başlangıç değeri 1 için m (wt) = ± 1 civarında salınır, bu durumda sistemde F_1 fazı elde edilmiştir. Üçüncü çözümde ise başlangıç değeri 0 için m (wt) sıfır değeri civarında salınır ve burada P fazı elde edilmiştir. Üç çözümden sistemde $F_2 + F_1 + P$ karma fazı elde edilmiştir.

Şekil 2.2 ve Şekil 2.3'e bakıldığında sistemde altı farklı çözüm olduğu görülmektedir. Bu fazlar sırasıyla, P, F₂, F₁ temel fazlarının yanında $F_2 + P$, $F_1 + P$ ve $F_2 + F_1 + P$ karma fazlarıdır.



Şekil 2.2. Spin-2 Blume-Capel modeli için ortalama mıknatıslanmanın (m(wt)) zamanla değişimi. (a) Sistemde paramanyetik (P) faz mevcuttur (D/zJ = -1.0, h/zJ = 1.0 ve T/zJ = 0.5). (b) Sistemde ferromanyetik-2 (F₂) faz mevcuttur (D/zJ = -2.5, h/zJ = 0.05 ve T/zJ = 0.1). (c) Sistemde ferromanyetik-1 (F₁) faz mevcuttur (D/zJ = -2.5, h/zJ = -2.5, h/zJ = 0.1 ve T/zJ = 0.05).



Şekil 2.3. Şekil 2.2 ile aynı fakat sistemde karma fazlar mevcuttur. (a) Sistemde $F_2 + P$ karma fazı mevcuttur (D/zJ = -1.0, h/zJ = 1.0 ve T/zJ = 0.5). (b) Sistemde F_1 + P karma fazı mevcuttur (D/zJ = -1.3, h/zJ = 0.1 ve T/zJ = 0.2). (c) Sistemde $F_2 + F_1 + P$ karma fazı mevcuttur (D/zJ = -2.25, h/zJ = 0.05 ve T/zJ = 0.1).

2.1.3.2. Dinamik Faz Geçiş Noktaları

Sistemde mevcut olan fazlar arasındaki dinamik faz sınırlarını belirleyebilmemiz için, dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıklarını hesaplamalı ve dinamik faz geçişlerinin doğasını

(kesikli veya sürekli yani birinci- veya ikinci-derece faz geçişleri) karakterize etmeliyiz. Daha sonra dinamik faz diyagramlarını sunabiliriz. DFG sıcaklıkları bir periyot başına ortalama düzen parametresinin yani dinamik mıknatıslanmanın, histerezis çevrim bölgesinin ve korelasyonun davranışının indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak incelenmesiyle elde edilecektir. Bu amaç için Eşitlik 2.13, etkileşme parametrelerinin bir kaç değeri için sıcaklığın bir fonksiyonu olarak Adams-Moulton kestirme ve düzeltme ile Romberg integrasyon yöntemi gibi nümerik metotların birleştirilmesiyle incelendi.

Dinamik düzen parametresi veya salınımlı dış manyetik alanın bir periyodu üzerinden mıknatıslanmanın zaman ortalaması olarak dinamik mıknatıslanma,

$$Q = \frac{w}{2\pi} \int m(t) dt.$$
 (2.16)

Diğer taraftan, histerezis çevrim bölgesi,

$$A = -\int m(t)dh = -h_0 w \int m(t)\cos(wt)dt, \qquad (2.17)$$

şeklindedir. Dinamik korelasyon,

$$C = \frac{w}{2\pi} \int m(t) h(t) dt = \frac{w h_0}{2\pi} \int m(t) \sin(wt) dt, \qquad (2.18)$$

şeklindedir.

Bu dinamik mıknatıslanmanın, histerezis çevrim bölgesinin ve dinamik korelasyonun davranışı etkileşme parametrelerinin farklı değerleri için indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak Adams-Moulton kestirme ve düzeltme ile Romberg integrasyon yönteminin birleştirilmesiyle incelendi. Fazlar arasındaki dinamik faz sınırlarının, DFG sıcaklıklarının nasıl elde edildiği Şekil 2.4 ve Şekil 2.5'de gösterilmektedir. Bu şekillerde, T_c/zJ ferromanyetik-2 (F₂) fazından paramanyetik (P) fazına ikinci-derece

faz geçiş sıcaklığını gösterirken, T_t/zJ ferromanyetik-1 (F₁) fazından paramanyetik (P) fazına birinci-derece faz geçiş sıcaklıklarını göstermektedir.

Şekil 2.4, D/zJ = 0.5 ve h/zJ = 0.15 için Q, A ve C'nin davranışını indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak göstermektedir. Bu şekilde, sıfır sıcaklıkta Q = 2'dir ve bu düzen parametresi indirgenmiş sıcaklık artarken sürekli olarak azalarak, $T_c/zJ =$ 2.045 değerinde sıfır olmaktadır. Böylece sistemde F₂ fazından P faza $T_c/zJ =$ 2.045 değerinde ikinci-derece faz geçişi meydana gelmektedir. Bununla beraber faz geçiş sıcaklığı olan $T_c/zJ =$ 2.045 sıcaklık değerinde histerezis çevrim bölgesi (A) maksimum bir değere sahip olurken dinamik korelasyon ise minimum bir değere sahip olur.



Şekil 2.4. Spin-2 Blume-Capel modeli için dinamik mıknatıslanmanın (Q), histerezis çevrim bölgesinin (A) ve korelasyonun (C) sıcaklığa bağlı olarak davranışı. T_c/zJ ferromanyetik-2 (F₂) fazdan paramanyetik faza (P) ikinci-derece faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.

Şekil 2.5(a) ve Şekil 2.5(b), D/zJ = -2.5 ve h/zJ = 0.05 için Q, A ve C'nin indirgenmiş sıcaklıkla değişimini farklı başlangıç değerleri için göstermektedir. Şekil 2.5(a)'da, T =

0'da, Q = 1'dir ve indirgenmiş sıcaklık artarken sürekli olarak azalarak, belirli bir sıcaklıkta yani $T_t/zJ=0.08$ değerine ulaştığında süreksiz bir şekilde F_1 fazından P fazına geçiş olmaktadır. Şekil 2.5(b)'de bütün sıcaklık değerleri için Q daima sıfıra eşittir. Dolayısı ile sistem faz geçişi vermemektedir ve bu durum paramanyetik faza karşılık gelmektedir. Ayrıca, bu durumda sıcaklık sıfırdan artırınca A ve C sıfır değerinden belirli bir pozitif değere artar ve T_t/zJ sıcaklığında A ve C aniden yüksek bir pozitif değere sıçrama yapar. Şekil 2.5(a) ve (b) dikkatli incelendiğinde sistemde T_t/zJ sıcaklığına kadar karma $F_1 + P$ fazı bulunurken, T_t/zJ sıcaklığından sonra sadece P fazı bulunmaktadır. Bu gerçekler Şekil 2.6(f)'deki faz diyagramında açıkça görülebilir.



Şekil 2.5. Spin-2 Blume-Capel modeli için dinamik mıknatıslanmanın (Q), histerezis çevrim bölgesinin (A) ve korelasyonun (C) sıcaklığa bağlı olarak iki farklı başlangıç değeri için davranışları. T_t/zJ paramanyetik fazdan (P) ferromanyetik-1 (F₁) fazına birinci-derece faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.

2.1.3.3. (T/zJ, h/zJ) Düzleminde Dinamik Faz Diyagramları

DFG sıcaklıklarını elde ettikten sonra sistemin dinamik faz diyagramlarını (T/zJ, h/zJ) düzleminde sunabiliriz. Bu kesimde, kristal alan etkileşim parametresi (D/zJ)'nin farklı

değerleri için (T/zJ, h/zJ) düzleminde elde edilen dinamik faz diyagramları Şekil 2.6'da gösterilmiştir. Şekillerde kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş çizgilerini, içi dolu daireler dinamik üçlü kritik noktayı ve Z dinamik sıfır-sıcaklık kritik noktayı göstermektedir. Şekillerden görüleceği gibi sistem ya dinamik üçlü kritik nokta içermektedir.

Şekil 2.6'da yedi farklı tipte dinamik faz diyagramı elde edilmiştir. Bu dinamik faz diyagramları:

i) D/zJ = 1.0 için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.6(a)'da gösterilmiştir. Bu faz diyagramında, yüksek indirgenmiş sıcaklıkta (T/zJ) ve yüksek indirgenmiş manyetik alan genliğinde (h/zJ), paramanyetik (P) faz mevcuttur. h/zJ ve T/zJ' nin düşük değerlerinde ise ferromanyetik-2 (F₂) fazı gözlenmektedir. Bu iki bölge arasındaki dinamik faz sınırı, $F_2 \rightarrow P$, ikinci-derece faz geçiş çizgisidir. İndirgenmiş sıcaklığın düşük ve indirgenmiş manyetik alan genliğinin belirli değerlerinde F₂ ve P fazlarının birlikte bulunduğu F₂ + P karma fazı bulunmaktadır. F₂ + P karma fazı, F₂ ve P fazlarından birinci-derece faz geçiş çizgisiyle ayrılmıştır. Sistem aynı zamanda her iki birinci-derece faz çizgisini birleştiren ve birinci-dereceden ikinci-dereceye faz geçişini gösteren yalnızca bir dinamik üçlü kritik nokta sergilemektedir. Bu tip faz diyagramının benzeri kinetik spin-1/2 [140], spin-1 [157, 160], spin-3/2 [162, 165] (bu çalışmalarda F₂ fazı yerine f_{3/2} fazı meydana gelmektedir) ve spin-2 [167] Ising sistemlerinde elde edilmiştir. Ayrıca bu faz diyagramı karma spin (1/2, 1) [209], (1, 3/2) [220] (bu çalışmada F₂ fazı yerine i fazı meydana gelmektedir) ve (1/2, 3/2) [217] Ising sistemlerinde de elde edilmiştir.

ii) D/zJ = -1.3 için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.6(b)'de gösterilmiştir. Bu faz diyagramında, P ve F₂ temel fazlarının yanı sıra sistemde iki karma faz, F₂ + P ve F₁ + P karma fazları bulunmaktadır. Bu fazlardan F₂ + P ile F₂, F₁ + P ile F₂ ve F₁ + P ile P fazları birinci-derece, F₂ ile P fazları ise ikinci-derece dinamik faz geçiş çizgisiyle birbirinden ayrılmıştır. Sistemde bir adet dinamik üçlü kritik nokta vardır.

iii) D/zJ = -1.5 için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.6(c)'de gösterilmiştir. Sistemde P ve F₂ temel fazları ile birlikte iki tane karma faz, F₂ + P ve F₁ + P karma fazları bulunmaktadır. Bu fazlardan, $F_2 + P$ ile P fazları ikinci-derece, diğer bütün fazlar ise birinci-derece dinamik faz geçiş çizgisiyle birbirinden ayrılmıştır. Sistemde iki tane dinamik üçlü kritik nokta gözlenmektedir.

iv) Şekil 2.6(d), D/zJ = -1.8 değerinde elde edilen dinamik faz diyagramını göstermektedir. Bu faz diyagramı Şekil 2.6(c)'ye benzemekle birlikte Şekil 2.6(c)'den farklı olarak: 1) T ve h'nin düşük değerlerinde $F_2 + F_1 + P$ karma fazı oluşmaktadır. 2) T'nin düşük değerlerinde ve h'nin yüksek değerlerinde $F_2 + P$ karma fazı ile $F_1 + P$ karma fazı kaybolmaktadır. Bu yüzden sistemde Şekil 2.6(c) den farklı olarak bir tane üçlü kritik nokta bir tane de dinamik sıfır-sıcaklık kritik nokta (Z) mevcuttur.

v) D/zJ = -2.25 için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.6(e)'de gösterilmiştir. Bu faz diyagramında, sistem P, F₁ + P ve F₂ + F₁ + P fazlarına sahiptir ve bu fazlar arasındaki dinamik faz sınırı birinci-derece faz geçiş çizgisidir. Dolayısı ile sistemde dinamik üçlü kritik nokta bulunmamaktadır.

vi) D/zJ = -2.5 için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.6(f)'de sunulmuştur. Bu faz diyagramı Şekil 2.6(e)'ye benzer fakat Şekil 2.6(e)'den farklı olarak indirgenmiş sıcaklığın ve indirgenmiş manyetik alan genliğinin küçük değerlerinde oluşan $F_2 + F_1 + P$ fazı kaybolmuştur ve sistemde bulunan diğer $F_1 + P$ faz bölgesi büyümüştür. Diğer taraftan, T'nin düşük değerlerinde ve h'nin belirli değerlerinde yine $F_1 + P$ karma fazı oluşmaktadır.

vii) D/zJ = -2.75 için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.6(g)'de sunulmuştur. Bu faz diyagramı Şekil 2.6(e)'ye benzer fakat Şekil 2.6(e)'den farklı olarak indirgenmiş sıcaklığın ve indirgenmiş manyetik alan genliğinin küçük değerlerinde oluşan $F_2 + F_1 + P$ fazı kaybolmuştur ve sistemde bulunan diğer $F_1 + P$ faz bölgesi büyümüştür.

Bu bölümde elde edilen sonuçlar Journal of Magnetism and Magnetic Materials dergisinde yayınlanmıştır [245].



Şekil 2.6. Spin-2 Blume-Capel modelinin (T/zJ, h/zJ) düzleminde dinamik faz diyagramları. Sistemde P, F₂ temel fazlarının yanında üç adet F₂ + P, F₁ + P ve F₂ + F₁ + P karma fazları mevcut. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş çizgilerini göstermektedir. İçi dolu daire dinamik üçlü kritik noktayı, Z dinamik sıfır-sıcaklık kritik noktayı gösterir.
(a) D/zJ = 1. (b) D/zJ = -1.3. (c) D/zJ = -1.5. (d) D/zJ = -1.8. (e) D/zJ = -2.5. (f) D/zJ = -2.5.

2.2. Spin-5/2 Blume-Capel Modelinin Dinamiği

2.2.1. Giriş

Bu kesimde zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında spin-5/2 Blume-Capel (BC) modelinin tanıtımı yapılacak ve dinamik davranışı kapsamlı bir şekilde Van der Waerden özdeşliği temelli korelasyonlu etkin-alan teorisi ile salınımlı dış manyetik alan varlığında incelenecektir. Dinamik etkin-alan denklemini elde etmek için Glauber geçiş oranları kullanılacaktır. Elde edilecek olan bu diferansiyel denklem, Adams-Moulton kestirme ve düzeltme, Runge-Kutta, vb. gibi nümerik yöntemlerle çözülecek ve ortalama düzen parametresinin zamana göre değişimi kapsamlıca incelenerek sistemde oluşan fazlar tespit edilecektir. Dinamik düzen parametresini veren denklemler Adams-Moulton kestirme ve düzeltme ve Romberg integrasyon yöntemiyle beraber kullanılarak çözülecek ve dinamik düzen parametresinin, histerezis eğrisi alanının ve korelasyon fonksiyonlarının indirgenmiş sıcaklığa göre değişimleri kapsamlıca incelenerek, sistemde meydana gelen dinamik faz geçişlerinin tabiatı (birinci- ve ikinci-derece) karakterize edilecek ve aynı zamanda dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıkları bulunacaktır. Sonrada, hesaplanan DFG sıcaklıkları kullanılarak sistemin dinamik faz diyagramları (T/zJ, h/zJ) ve (D/zJ, T/zJ) düzlemlerinde sunulacaktır. Böylece alt örgülerinden birisinde spin-5/2 değerine sahip dinamik karma spin (2, 5/2) Ising sisteminde elde edilen sonuçların yorumlanması ve alt örgüler üzerindeki yüksek spin değerlerinin etkisini araştırma da kolaylık sağlayacaktır.

2.1.2. Model ve Etkin-Alan Dinamik Denklemleri

2.1.2.1. Modelin Tanıtımı

Spin-5/2 Blume-Capel (BC) sistemi kare örgü üzerinde çalışılacaktır ve Şekil 2.7'de görüldüğü gibi örgünün her bir noktasındaki spinler sadece S-spinleridir.



Şekil 2.7. Kare örgü üzerindeki S (dolu daireler) spinlerinin yerleşiminin taslağı.

Bu model, altı durumlu ve iki düzen parametreli bir modeldir. Bu altı durum S_i = ±5/2, ±3/2, ±1/2'dir. Bu modelin beş tane düzen parametresi vardır. Bunlar: (1) m, ortalama mıknatıslanmadır ki bir tarafa yönelmenin diğer tarafa yönelmeden fazlalığını gösterir ve dipol moment diye adlandırılır; (2) q kuadropol momenttir ve q = $< S^2 >$ veya q = $< S^2 > .35/12$ seklinde tanımlanır. İkinci tanım sıcaklık sonsuza gittiğinde q = 0 olmasını sağlar, (3) *r* octupolar düzen parametresi; (4) *v* hexadecapole düzen parametresi; (5) *w* triakontadipole düzen parametresi. m, *r* ve *w* düzen parametreleri ile q ve *v* düzen parametrelerinin termal davranışları birbirlerine benzerlik gösterir [225]. Bu düzen parametreleri iki farklı temel fazı tanımlamaktadır. Bu temel fazlar:

- i. Paramanyetik faz (P): m = 0,
- ii. Ferromanyetik fazlar:
 - a) Ferromanyetik-5/2 fazı (F_{5/2}): $m = \pm 5/2$,
 - b) Ferromanyetik-3/2 fazı ($F_{3/2}$): m = ±3/2,
 - c) Ferromanyeitk-1/2 fazı (F_{1/2}): $m = \pm 1/2$,
Spin-5/2 Blume-Capel modeli için Hamiltonyen ifadesi,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - D \sum_i S_i^2 - h(t) \sum_i S_i, \qquad (2.19)$$

şeklindedir. Burada, $\langle ij \rangle$ toplamın en yakın komsu çiftler üzerinden alınacağını göstermektedir. J bilineer etkileşme parametresi, D kristal alan etkileşmesi veya tekiyon anizotropi sabiti ve son terim h(t) ise zamanla değişen salınımlı dış manyetik alandır ve

$$\mathbf{h}(\mathbf{t}) = \mathbf{h}_0 \sin(\mathbf{w}\mathbf{t}), \tag{2.20}$$

seklinde tanımlanır. Burada h_0 ve $w = 2\pi v$ sırasıyla salınımlı alanın genliği ve açısal frekansıdır. Sistem T mutlak sıcaklığında izotermal ısı banyosu ile temas halindedir.

3.2.2.2. Etkin-Alan Dinamik Denklemlerinin Elde Edilmesi

Bu kesimde zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında spin-5/2 BC modeli için sistemin dinamik davranışını açıklayan etkin-alan dinamik denklemleri, kare örgü üzerinde elde edilecektir. Bu metot ilk kez Honmura ve Kaneyoshi [236] ile Kanesyoshi ve arkadaşları [237] tarafından tanımlandı. Korelasyonlu etkin-alan teorisinde, spin-5/2 Ising sistemi için ortalama mıknatıslanma ifadesi,

$$\left\langle \mathbf{S}_{i}^{n}\right\rangle = \left\langle \prod_{i=1}^{z} \left[\mathbf{A}(\alpha) + \mathbf{B}(\alpha)\mathbf{S}_{i} + \mathbf{C}(\alpha)\mathbf{S}_{i}^{2} + \mathbf{D}(\alpha)\mathbf{S}_{i}^{3} + \mathbf{E}(\alpha)\mathbf{S}_{i}^{4} + \mathbf{F}(\alpha)\mathbf{S}_{i}^{5} \right] \right\rangle f(\mathbf{x}+h) \Big|_{\mathbf{h}=0}, \quad (2.21)$$

formunda verilir. Bu eşitlik Callen'nın 1963'te, spin-1/2 [238] için elde ettiği spin korelasyonunu ifade eden Callen eşitliği ifadesinin, spin-5/2 için genelleştirilmiş şeklidir. Burada <...> ifadesi kanonik küme ortalamasını göstermektedir. Spin-5/2 için n = 1, 2, 3, 4 ve 5 değerlerini alır. $\alpha = J\nabla$, $\nabla = \partial/\partial x$ diferansiyel operatör ve <...> kanonik küme ortalamasını göstermektedir. z en yakın komşu sayısıdır ve kare örgü için z = 4 alınır. Van der Waerden [239] özdeşliğinden faydalanarak, spin-5/2 sistemi için A(α), B(α), C(α), D(α), E(α) ve F(α) katsayıları aşağıdaki şekilde bulunur:

$$A(\alpha) = \frac{1}{128} \left[3\cosh\left(\frac{5\alpha}{2}\right) - 25\cosh\left(\frac{3\alpha}{2}\right) + 150\cosh\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right],$$

$$B(\alpha) = \frac{1}{960} \left[9\sinh\left(\frac{5\alpha}{2}\right) - 125\sinh\left(\frac{3\alpha}{2}\right) + 2250\sinh\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right],$$

$$C(\alpha) = \frac{1}{48} \left[-5\cosh\left(\frac{5\alpha}{2}\right) + 39\cosh\left(\frac{3\alpha}{2}\right) - 34\cosh\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right],$$

$$D(\alpha) = \frac{1}{24} \left[-\sinh\left(\frac{5\alpha}{2}\right) + 13\sinh\left(\frac{3\alpha}{2}\right) - 34\sinh\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right],$$

$$E(\alpha) = \frac{1}{24} \left[\cosh\left(\frac{5\alpha}{2}\right) - 3\cosh\left(\frac{3\alpha}{2}\right) + 2\cosh\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right],$$

$$F(\alpha) = \frac{1}{60} \left[\sinh\left(\frac{5\alpha}{2}\right) - 5\sinh\left(\frac{3\alpha}{2}\right) + 10\sinh\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right].$$

(2.22)

Spin-5/2 için f_n (x + h) (n = 1, 2, 3, 4, 5) fonksiyonları,

$$f_{1}(\mathbf{x}+h) = \frac{5\sinh\left(\frac{5\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right) + 3\exp\left(-4\beta D\right)\sinh\left(\frac{3\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right) + \exp(-6\beta D)\sinh\left(\frac{\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right)}{2\cosh\left(\frac{5\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right) + 2\exp\left(-4\beta D\right)\cosh\left(\frac{3\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right) + 2\exp\left(-6\beta D\right)\cosh\left(\frac{\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right)}, (2.23a)$$

$$f_{2}(\mathbf{x}+h) = \frac{25\cosh\left(\frac{5\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right) + 9\exp\left(-4\beta D\right)\cosh\left(\frac{3\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right) + \exp\left(-6\beta D\right)\cosh\left(\frac{\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right)}{4\cosh\left(\frac{5\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right) + 4\exp\left(-4\beta D\right)\cosh\left(\frac{3\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right) + 4\exp\left(-6\beta D\right)\cosh\left(\frac{\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right)}, (2.23b)$$

$$f_{3}(\mathbf{x}+h) = \frac{125\sinh\left(\frac{5\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right) + 27\exp\left(-4\beta D\right)\cosh\left(\frac{3\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right) + \exp(-6\beta D)\sinh\left(\frac{\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right)}{8\cosh\left(\frac{5\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right) + 8\exp\left(-4\beta D\right)\cosh\left(\frac{3\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right) + 8\exp\left(-6\beta D\right)\cosh\left(\frac{\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right)}, (2.23c)$$

$$f_{4}(\mathbf{x}+h) = \frac{625\cosh\left(\frac{5\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right) + 81\exp\left(-4\beta D\right)\cosh\left(\frac{3\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right) + \exp(-6\beta D)\cosh\left(\frac{\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right)}{16\cosh\left(\frac{5\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right) + 16\exp\left(-4\beta D\right)\cosh\left(\frac{3\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right) + 16\exp\left(-6\beta D\right)\cosh\left(\frac{\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right)}, (2.23d)$$

$$f_{5}(\mathbf{x}+h) = \frac{3125\sinh\left(\frac{5\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right) + 243\exp\left(-4\beta D\right)\cosh\left(\frac{3\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right) + \exp(-6\beta D)\cosh\left(\frac{\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right)}{32\cosh\left(\frac{5\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right) + 32\exp\left(-4\beta D\right)\cosh\left(\frac{3\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right) + 32\exp\left(-6\beta D\right)\cosh\left(\frac{\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right)}, (2.23e)$$

şeklinde tanımlanır. (2.21) denklemi kesindir ve herhangi bir örgü için geçerlidir. Spin-5/2 gibi, 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) yaklaşımdır:

$$\left\langle \mathbf{S}_{i} \mathbf{S}_{i}^{2} \dots \mathbf{S}_{i^{n}}^{5} \right\rangle \cong \left\langle \mathbf{S}_{i} \right\rangle \left\langle \mathbf{S}_{i^{2}}^{2} \right\rangle \dots \left\langle \mathbf{S}_{i^{n}}^{5} \right\rangle.$$
(2.24)

Buna göre $i \neq i' \neq ... \neq i^n$ olmak üzere korelasyonlu etkin-alan teorisi birçok sisteme uygulanmıştır [236, 240, 241]. Aslında bu yaklaşım, esas itibariyle hacim veya yoğun (bulk) probleminde Zernike yaklaşımına [242] tekabül etmektedir ve yüzey problemlerini içeren çok sayıda manyetik sisteme başarılı bir şekilde uygulanmıştır [236, 240, 241, 243, 244]. Bağlantısızlık (decoupling) yaklaşımı da kullanılarak kare örgü için (2.3) eşitliğinde z = 4 yazılırsa, düzen parametreleri

$$\mathbf{m} = \langle \mathbf{S}_{i} \rangle = \left[\mathbf{A}(\alpha) + \mathbf{B}(\alpha) \langle \mathbf{S}_{i} \rangle + \mathbf{C}(\alpha) \langle \mathbf{S}_{i}^{2} \rangle + \mathbf{D}(\alpha) \langle \mathbf{S}_{i}^{3} \rangle + \mathbf{E}(\alpha) \langle \mathbf{S}_{i}^{4} \rangle + \mathbf{F}(\alpha) \langle \mathbf{S}_{i}^{5} \rangle \right]^{4} f_{1}(\mathbf{x} + h) \big|_{\mathbf{x} = 0}, \quad (2.25)$$

$$q = \left\langle S_{i}^{2} \right\rangle = \left[A(\alpha) + B(\alpha) \left\langle S_{i} \right\rangle + C(\alpha) \left\langle S_{i}^{2} \right\rangle + D(\alpha) \left\langle S_{i}^{3} \right\rangle + E(\alpha) \left\langle S_{i}^{4} \right\rangle + F(\alpha) \left\langle S_{i}^{5} \right\rangle \right]^{4} f_{2}(x+h) \Big|_{x=0}, \quad (2.26)$$

$$r = \left\langle \mathbf{S}_{i}^{3} \right\rangle = \left[\mathbf{A}(\alpha) + \mathbf{B}(\alpha) \left\langle \mathbf{S}_{i} \right\rangle + \mathbf{C}(\alpha) \left\langle \mathbf{S}_{i}^{2} \right\rangle + \mathbf{D}(\alpha) \left\langle \mathbf{S}_{i}^{3} \right\rangle + \mathbf{E}(\alpha) \left\langle \mathbf{S}_{i}^{4} \right\rangle + \mathbf{F}(\alpha) \left\langle \mathbf{S}_{i}^{5} \right\rangle \right]^{4} f_{3}(\mathbf{x}+h) \Big|_{\mathbf{x}=0}, (2.27)$$

$$\nu = \left\langle \mathbf{S}_{i}^{4} \right\rangle = \left[\mathbf{A}(\alpha) + \mathbf{B}(\alpha) \left\langle \mathbf{S}_{i} \right\rangle + \mathbf{C}(\alpha) \left\langle \mathbf{S}_{i}^{2} \right\rangle + \mathbf{D}(\alpha) \left\langle \mathbf{S}_{i}^{3} \right\rangle + \mathbf{E}(\alpha) \left\langle \mathbf{S}_{i}^{4} \right\rangle + \mathbf{F}(\alpha) \left\langle \mathbf{S}_{i}^{5} \right\rangle \right]^{4} f_{4}(\mathbf{x}+h) \Big|_{\mathbf{x}=0}, (2.28)$$

$$w = \left\langle \mathbf{S}_{i}^{5} \right\rangle = \left[\mathbf{A}(\alpha) + \mathbf{B}(\alpha) \left\langle \mathbf{S}_{i} \right\rangle + \mathbf{C}(\alpha) \left\langle \mathbf{S}_{i}^{2} \right\rangle + \mathbf{D}(\alpha) \left\langle \mathbf{S}_{i}^{3} \right\rangle + \mathbf{E}(\alpha) \left\langle \mathbf{S}_{i}^{4} \right\rangle + \mathbf{F}(\alpha) \left\langle \mathbf{S}_{i}^{5} \right\rangle \right]^{4} f_{5}(\mathbf{x}+h) \Big|_{\mathbf{x}=0}.$$
(2.29)

ifadeleri ile tanımlanır. m, r ve w düzen parametreleri ile q ve v düzen parametrelerinin termal davranışları birbirlerine benzerlik gösterir [225]. Spin-5/2 BC sisteminin Hamiltonyen ifadesi Eşitlik 2.19'da görüldüğü gibi bikuadratik etkileşme parametresi (K) içermediğinden q (veya v) düzen parametrelerin termal davranışları bu tez çalışmasında incelenmedi. Böylece bu tez çalışmasında yalnızca m düzen

parametresinin termal davranışı incelendi. Eşitlik (2.25)'in sağ tarafı açılırsa, m düzen parametresi için, m düzen parametresi için,

$$m = a_{0} + a_{1}m + a_{2}m^{2} + a_{3}m^{3} + a_{4}m^{4} + a_{5}m^{5} + a_{6}m^{6} + a_{7}m^{7} + a_{8}m^{8} + a_{9}m^{9} + a_{10}m^{10} + a_{11}m^{11} + a_{12}m^{12} + a_{13}m^{13} + a_{14}m^{14} + a_{15}m^{15} + a_{16}m^{16} + a_{17}m^{17} + a_{18}m^{18} + a_{19}m^{19} + a_{20}m^{20},$$
(2.30)

ifadesi elde edilir. Burada a_i (i = 1, 2,..., 20) katsayıları diferansiyel operatör tekniği kullanılarak,

$$\mathbf{a}_{0} = \frac{1}{4294967296} \begin{bmatrix} 81 f (h-10 \mathbf{J}) - 2700 f (h-9 \mathbf{J}) + 49950 f (h-8 \mathbf{J}) - 576300 f (h-7 \mathbf{J}) \\ + 4572925 f (h-6 \mathbf{J}) - 23752176 f (h-5 \mathbf{J}) + 75239400 f (h-4 \mathbf{J}) \\ -59476400 f (h-3 \mathbf{J}) - 342915150 f (h-2 \mathbf{J}) + 1157549400 f (h-\mathbf{J}) \\ + 2673589236 f (0) + 1157549400 f (h+3 \mathbf{J}) - 342915150 f (h+2 \mathbf{J}) \\ -59476400 f (h+3 \mathbf{J}) + 75239400 f (h+4 \mathbf{J}) - 23752176 f (h+5 \mathbf{J}) \\ + 4572925 f (h+6 \mathbf{J}) - 576300 f (h+7 \mathbf{J}) + 49950 f (h+8 \mathbf{J}) - 2700 f (h+9 \mathbf{J}) \\ + 81 f (h+10 \mathbf{J}) \end{bmatrix}$$

$$a_{1} = \frac{1}{8053063680} \begin{bmatrix} -243 f(h-10J) + 9450 f(h-9J) - 232200 f(h-8J) + 3500550 f(h-7J) \\ -36915425 f(h-6J) 260628264 f(h-5J) - 1238698800 f(h-4J) \\ +3102663800 f(h-3J) - 1437457950 f(h-2J) - 18688785300 f(h-J) \\ +18688785300 f(h+J) + 1437457950 f(h+2J) - 3102663800 f(h+3J) \\ +1238698800 f(h+4J) - 260628264 f(h+5J) + 36915425 f(h+6J) \\ -3500550 f(h+7J) + 232200 f(h+8J) - 9450 f(h+9J) + 243 f(h+10J) \end{bmatrix}$$
(2.31)

•

$$\mathbf{a}_{20} = \frac{1}{207360000} \begin{bmatrix} f(h-10\mathrm{J}) - 20f(h-9\mathrm{J}) + 190f(h-8\mathrm{J}) - 1140f(h-7\mathrm{J}) + 4845f(h-6\mathrm{J}) \\ -15504f(h-5\mathrm{J}) + 38760f(h-4\mathrm{J}) - 77520f(h-3\mathrm{J}) + 125970f(h-2\mathrm{J}) \\ -167960f(h-3\mathrm{J}) + 184756f(h) - 167960f(h+3\mathrm{J}) + 125970f(h+2\mathrm{J}) \\ -77520f(h+3\mathrm{J}) + 38760f(h+4\mathrm{J}) - 15504f(h+5\mathrm{J}) + 4845f(h+6\mathrm{J}) \\ -1140f(h+7\mathrm{J}) + 190f(h+8\mathrm{J}) - 20f(h+9\mathrm{J}) + f(h+10\mathrm{J}) \end{bmatrix}$$

şeklinde elde edilir. Glauber-tipi stokhastik dinamik kullanılırsa, özellikle de Glauber geçiş oranları kullanılırsa, dinamik etkin-alan denklemi,

$$\frac{d}{dt}m = -m + a_0 + a_1m + a_2m^2 + a_3m^3 + a_4m^4 + a_5m^5 + a_6m^6 + a_7m^7 + a_8m^8 + a_9m^9 + a_{10}m^{10}$$
(2.32)
+ $a_{11}m^{11} + a_{12}m^{12} + a_{13}m^{13} + a_{14}m^{14} + a_{15}m^{15} + a_{16}m^{16} + a_{17}m^{17} + a_{18}m^{18} + a_{19}m^{19} + a_{20}m^{20},$

olarak elde edilir. Böylece sistemin dinamik etkin-alan denklemi elde edilmiş oldu. Gelecek kesimde bu denklemin nümerik çözümleri yapılacak ve bu çözümler tartışılacaktır.

2.2.3. Dinamik Faz Geçiş Noktaları ve Dinamik Faz Diyagramları

2.2.3.1. Ortalama Mıknatıslanmanın Zamanla Değişimi

Bu kesimde, (2.32) ile verilen etkin-alan dinamik denkleminin Adams-Moulton kestirme ve düzeltme yöntemi kullanılarak nümerik olarak çözülmesiyle ortalama düzen parametresinin, yani ortalama mıknatıslanmanın (m (wt)) zamana bağlı davranışı incelenecektir. Sistemde var olan fazları bulmak için denklem (2.32) ile verilen etkinalan dinamik denkleminin kararlı çözümleri farklı D/zJ, h/zJ ve T/zJ değerleri için incelenecektir. Denklem (2.32)'nin kararlı çözümleri 2π periyodu için wt'nin periyodik bir fonksiyonu olacaktır, yani

$$m(wt+2\pi) = m(wt),$$
 (2.33)

biçiminde olacaktır. Ayrıca, aşağıdaki özelliklerin sağlanıp veya sağlanmamasına göre sistemde iki tip çözüm olduğu bulundu:

$$m(wt+2\pi) = -m(wt).$$
 (2.34)

Eğer çözüm, (2.34) denklemiyle verilen özelliğe sahipse simetrik çözüm olarak adlandırılır ve bu paramanyetik (P) çözüme karşılık gelir. İkinci çözüm ise, (2.34) denklemiyle verilen özelliğe sahip değildir ve bu simetrik olmayan çözüm olarak adlandırılır ki bu çözüm ferromanyetik (F) çözüme karşılık gelir. Bu çözümde m (wt) sıfır olmayan değerler etrafında salınır. Eğer m (wt) = $\pm 5/2$ değeri etrafında salınıyorsa ferromanyetik-5/2 (F_{5/2}) faz, m (wt) = $\pm 3/2$ değeri etrafında salınıyorsa ferromanyetik3/2 (F_{3/2}) faz ve m (wt) = ±1/2 değeri etrafında salınıyorsa ferromanyetik-1/2 (F_{1/2}) faz olarak adlandırılır. Bu durumda ortalama mıknatıslanma dış manyetik alana uymaz. Bu çözümlerin gerçekliği açık bir şekilde (2.32) ile verilen etkin-alan dinamik denkleminin nümerik olarak çözülmesiyle görülür. (2.32) numaralı denklemin, verilen parametreler ve başlangıç değerleri için Adams-Moulton kestirme ve düzeltme yöntemi kullanılarak çözülmesiyle sistemde P, F_{5/2}, F_{3/2} ve F_{1/2} temel fazlarının yanında sekiz adet karma faz bulundu. Bu karma fazlar F_{5/2} ve P fazlarının bir arada bulunduğu F_{5/2} + P karma fazı; F_{5/2} ve F_{3/2} fazlarının bir arada bulunduğu F_{5/2} + F_{3/2} karma fazı, F_{5/2} ve F_{1/2} fazlarının bir arada bulunduğu F_{5/2} + F_{1/2} karma fazı; F_{3/2} ve F_{1/2} fazlarının bir arada bulunduğu F_{3/2} + F_{1/2} karma fazı; F_{1/2} ve P fazlarının bir arada bulunduğu F_{1/2} + P karma fazı; F_{5/2}, F_{3/2} ve F_{1/2} fazlarının bir arada bulunduğu F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2} karma fazı, F_{5/2}, F_{3/2}, F_{1/2}, P fazlarının bir arada bulunduğu F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2} karma fazı ve F_{5/2}, F_{3/2}, F_{1/2}, P fazlarının bir arada bulunduğu F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2} karma fazı ve F_{5/2}, F_{3/2}, F_{1/2}, P fazlarının bir arada bulunduğu F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2} karma fazı ve F_{5/2}, F_{3/2}, F_{1/2}, P fazlarının bir arada bulunduğu F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2} + P karma fazı ve F_{5/2}, F_{3/2}, F_{1/2}, P fazlarının bir arada bulunduğu F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2} + P karma fazı ve F_{5/2}, F_{3/2}, F_{1/2}, P

Şekil 2.8(a)'da yalnızca simetrik çözüm elde edildi ve bundan dolayı sistemde sadece paramanyetik (P) faz mevcuttur. Bu durumda m (wt) sıfır değeri civarında salınır. Şekil 2.8 (b), (c) ve (d)'de yalnızca simetrik olmayan çözümler elde edilmiştir. Şekil 2.8 (b)'de m (wt) = $\pm 5/2$ değerleri etrafında salınır, bundan dolayı sistemde ferromanyetik-5/2 (F_{5/2}) faz mevcuttur. Şekil 2.8(c)'de m (wt) = $\pm 3/2$ değerleri etrafında salınır, bundan dolayı sistemde ferromanyetik-3/2 (F_{3/2}) faz mevcuttur. Şekil 2.8 (d)'de m (wt) = $\pm 1/2$ değerleri etrafında salınır, bundan dolayı sistemde ferromanyetik-1/2 (F_{1/2}) faz mevcuttur. Bu çözümler başlangıç değerlerine bağlı değildir.

Sistemde mevcut olan karma fazlar Şekil 2.9'da gösterilmiştir. Başlangıç değerlerine bağlı olmak üzere bu şekillerden Şekil 2.9(a)-(e)'de iki farklı çözüm, Şekil 2.9(f) ve (g)'de üç farklı çözüm ve Şekil 2.9(h)'da dört farklı çözüm elde edilmiştir. Şekil 2.9(a)'da $F_{5/2}$ ve P fazları bir arada bulunmaktadır. İlk çözümde, başlangıç değeri 5/2, 3/2 ve 1/2 değerleri için m (wt) = $\pm 5/2$ civarında salınır, bu durumda $F_{5/2}$ fazı elde edilir. İkinci çözümde ise başlangıç değeri 0 için m (wt) = 0 değeri civarında salınır, bu durumda sistemde P fazı elde edilir. Bu yüzden sistemde $F_{5/2}$ + P karma fazı mevcuttur. Şekil 2.9(b)'de $F_{5/2}$ ve $F_{3/2}$ fazları bir arada bulunmaktadır. İlk çözümde, başlangıç değeri 6 değeri 5/2 değeri için m (wt) = $\pm 5/2$ civarında salınır, bu durumda fazı mevcuttur.



Şekil 2.8. Spin-5/2 Blume-Capel modeli için ortalama mıknatıslanmanın (m(wt)) zamanla değişimi. (a) Sistemde paramanyetik (P) faz mevcuttur (D/zJ = -1.0, h/zJ = 1.0 ve T/zJ = 0.5). (b) Sistemde ferromanyetik-5/2 (F_{5/2}) faz mevcuttur (D/zJ = -1.3, h/zJ = 0.1 ve T/zJ = 0.2). (c) Sistemde ferromanyetik-3/2 (F_{3/2}) mevcuttur (D/zJ = -2.25, h/zJ = 0.05 ve T/zJ = 0.1). (d) Sistemde ferromanyetik-1/2 (F_{1/2}) mevcuttur (D/zJ = -2.25, h/zJ = 0.05 ve T/zJ = 0.05 ve T/zJ = 0.1).

İkinci çözümde ise başlangıç değerleri 3/2, 1/2 ve 0 için m (wt) = $\pm 3/2$ değeri civarında salınır, bu durumda sistemde F_{3/2} fazı elde edilir. Bu yüzden sistemde F_{5/2} + F_{3/2} karma fazı mevcuttur. Şekil 2.9(c)'de F_{5/2} ve F_{1/2} fazları bir arada bulunmaktadır. İlk çözümde, başlangıç değeri 5/2 ve 3/2 değerleri için m (wt) = $\pm 5/2$ civarında salınır, bu durumda F_{5/2} fazı elde edilir. İkinci çözümde ise başlangıç değeri 1/2 için m (wt) = $\pm 1/2$ değeri civarında salınır, bu durumda sistemde F_{1/2} fazı elde edilir. Bu yüzden sistemde F_{5/2} + F_{1/2} karma fazı mevcuttur. Şekil 2.9(d)'de F_{3/2} ve F_{1/2} fazları bir arada bulunmaktadır. İlk çözümde, başlangıç değerleri 5/2, 3/2 ve 0 değerleri için m (wt) = $\pm 3/2$ civarında

salınır, bu durumda $F_{3/2}$ fazı elde edilir. İkinci çözümde ise başlangıç değeri 1/2 için m (wt) = $\pm 1/2$ değeri civarında salınır, bu durumda sistemde F_{1/2} fazı elde edilir. Bu yüzden sistemde $F_{3/2} + F_{1/2}$ karma fazı mevcuttur. Şekil 2.9(e)'de $F_{1/2}$ ve P fazları bir arada bulunmaktadır. İlk çözümde, başlangıç değeri 5/2, 3/2 ve 1/2 değerleri için m (wt) $=\pm 1/2$ civarında salınır, bu durumda F_{1/2} fazı elde edilir. İkinci çözümde ise başlangıç değeri 0 için m (wt) = 0 değeri civarında salınır, bu durumda sistemde P fazı elde edilir. Bu yüzden sistemde $F_{1/2}$ + P karma fazı mevcuttur. Şekil 2.9(f)'de $F_{5/2}$, $F_{3/2}$ ve $F_{1/2}$ fazları bir arada bulunmaktadır. İlk çözümde, başlangıç değeri 5/2 değeri için m (wt) = $\pm 5/2$ civarında salınır, bu durumda F_{5/2} fazı elde edilir. İkinci çözümde başlangıç değeri 3/2 için m (wt) = $\pm 3/2$ değeri civarında salınır, bu durumda sistemde F_{3/2} fazı elde edilir. Úçüncü çözümde ise başlangıç değeri 1/2 için m (wt) = $\pm 1/2$ değeri civarında salınır, bu durumda sistemde $F_{1/2}$ fazı elde edilir Bu yüzden sistemde $F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2}$ karma fazı mevcuttur. Şekil 2.9(g)'de F_{5/2}, F_{3/2} ve P fazları bir arada bulunmaktadır. İlk çözümde, başlangıç değeri 5/2 değeri için m (wt) = $\pm 5/2$ civarında salınır, bu durumda F_{5/2} fazı elde edilir. İkinci çözümde başlangıç değerleri 3/2 ve 1/2 için m (wt) = $\pm 3/2$ değeri civarında salınır, bu durumda sistemde $F_{3/2}$ fazı elde edilir. Üçüncü çözümde ise başlangıç değeri 0 için m (wt) = 0 değeri civarında salınır, bu durumda sistemde P fazı elde edilir Bu yüzden sistemde $F_{5/2} + F_{3/2} + P$ karma fazı mevcuttur. Şekil 2.9(h)'de $F_{5/2}$, F_{3/2}, F_{1/2} ve P fazları bir arada bulunmaktadır. İlk çözümde, başlangıç değeri 5/2 değeri için m (wt) = $\pm 5/2$ civarında salınır, bu durumda F_{5/2} fazı elde edilir. İkinci çözümde başlangıç değeri 3/2 için m(wt) = $\pm 3/2$ değeri civarında salınır, bu durumda sistemde $F_{3/2}$ fazı elde edilir. Üçüncü çözümde başlangıç değeri 1/2 için m (wt) = ±1/2 değeri civarında salınır, bu durumda sistemde $F_{1/2}$ fazı elde edilir. Dördüncü çözümde ise başlangıç değeri 0 için m (wt) = 0 değeri civarında salınır, bu durumda sistemde P fazı elde edilir Bu yüzden sistemde $F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2} + P$ karma fazı mevcuttur. Bu yüzden sistemde $F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2} + P$ karma fazı mevcuttur.

Şekil 2.8 ve Şekil 2.9'a bakıldığında sistemde on iki farklı çözüm olduğu görülmektedir. Bu fazlar sırasıyla, P, $F_{5/2}$, $F_{3/2}$, $F_{1/2}$ temel fazlarının yanında $F_{5/2}$ + P, $F_{5/2}$ + $F_{3/2}$, $F_{5/2}$ + $F_{1/2}$, $F_{5/2}$ + $F_{1/2}$, $F_{5/2}$ + $F_{1/2}$, $F_{5/2}$ + $F_{1/2}$, $F_{5/2}$ + $F_{1/2}$, $F_{1/2}$ + P ve $F_{5/2}$ + $F_{3/2}$ + $F_{1/2}$ + P karma fazlarıdır.



Şekil 2.9. Spin-5/2 Blume-Capel modeli için ortalama mıknatıslanmanın (m(wt)) zamanla değişimi. (a) Sistemde $F_{5/2} + P$ karma fazı mevcuttur (D/zJ = 1, T/zJ = 1.0 ve h/zJ = 1.95). (b) Sistemde $F_{5/2} + F_{3/2}$ karma fazı mevcuttur (D/zJ = -0.275, T/zJ = 0.1 ve h/zJ = 0.1). (c) Sistemde $F_{5/2} + F_{1/2}$ karma fazı mevcuttur (D/zJ = -0.3, T/zJ = 0.1 ve h/zJ = 0.1). (d) Sistemde $F_{3/2} + F_{1/2}$ karma fazı mevcuttur (D/zJ = -0.55, T/zJ = 0.1 ve h/zJ = 0.1). (e) Sistemde $F_{1/2} + P$ karma fazı mevcuttur (D/zJ = -0.55, T/zJ = 0.1 ve h/zJ = 0.1). (e) Sistemde $F_{5/2} + F_{3/2} + F_{3/2} + F_{1/2}$ karma fazı mevcuttur (D/zJ = -1, T/zJ = 0.22 ve h/zJ = 0.5). (f) Sistemde $F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2}$ karma fazı mevcuttur (D/zJ = -0.5, T/zJ = 0.1 ve h/zJ = 0.125). (g) Sistemde $F_{5/2} + F_{3/2} + P$ karma fazı mevcuttur (D/zJ = -0.45, T/zJ = 2.3 ve h/zJ = 1.0). (h) Sistemde $F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2} + P$ karma fazı mevcuttur (D/zJ = -0.25 ve h/zJ = 0.125).

2.2.3.2. Dinamik Faz Geçiş Noktaları

Sistemde mevcut olan fazlar arasındaki dinamik faz sınırlarını belirleyebilmemiz için, dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıklarını hesaplamalı ve dinamik faz geçişlerinin doğasını (kesikli veya sürekli yani birinci- veya ikinci-derece faz geçişleri) karakterize etmeliyiz. Daha sonra dinamik faz diyagramlarını sunabiliriz. DFG sıcaklıkları bir periyot başına ortalama düzen parametresinin yani dinamik mıknatıslanmanın, histeresis çevrim bölgesinin ve korelasyonun davranışının indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak incelenmesiyle elde edilecektir. Bu amaç için Eşitlik 2.32, etkileşme parametrelerinin bir kaç değeri için sıcaklığın bir fonksiyonu olarak Adams-Moulton kestirme ve düzeltme ile Romberg integrasyon yöntemi gibi nümerik metotların birleştirilmesiyle incelendi.

Dinamik düzen parametresi veya salınımlı dış manyetik alanın bir periyodu üzerinden mıknatıslanmanın zaman ortalaması olarak dinamik mıknatıslanma,

$$Q = \frac{W}{2\pi} \int mdt, \qquad (2.35)$$

bağıntısı ile verilir. Diğer taraftan, histerezis çevrim bölgesi,

$$A = -\int m(t)dh = -h_0 w \int m(t)\cos(wt)dt, \qquad (2.36)$$

şeklindedir. Dinamik korelasyon,

$$C = \frac{w}{2\pi} \int m(t) h(t) dt = \frac{w h_0}{2\pi} \int m(t) \sin(wt) dt, \qquad (2.37)$$

şeklindedir.

Bu dinamik mıknatıslanmanın, histerezis çevrim bölgesinin ve dinamik korelasyonun davranışı etkileşme parametrelerinin farklı değerleri için indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak Adams-Moulton kestirme ve düzeltme ile Romberg integrasyon yönteminin birleştirilmesiyle incelendi. Fazlar arasındaki dinamik faz sınırlarının, DFG sıcaklılarının nasıl elde edildiği Şekil 2.10 ve Şekil 2.11'de gösterilmektedir. Bu şekillerde, T_c/zJ , ferromanyetik-5/2 (F_{5/2}) fazından paramanyetik (P) fazına ikinciderece faz geçiş sıcaklığını gösterirken, T_t/zJ paramanyetik (P) fazından ferromanyetik-5/2 (F_{5/2}) fazına birinci-derece faz geçiş sıcaklıklarını göstermektedir.

Şekil 2.10, D/zJ = 0.5 ve h/zJ = 0.125 için Q, A ve C'nin davranışını indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak göstermektedir. Bu şekilde, sıfır sıcaklıkta Q = 5/2'dir ve bu düzen parametresi indirgenmiş sıcaklık artarken sürekli olarak azalarak, $T_c/zJ =$ 3.775 değerinde sıfır olmaktadır. Böylece sistemde $F_{5/2}$ fazından P fazına $T_c/zJ = 3.775$ değerinde ikinci-derece faz geçişi meydana gelmektedir. Bununla beraber faz geçiş sıcaklığı olan $T_c/zJ = 3.775$ sıcaklık değerinde histerezis çevrim bölgesi (A) maksimum bir değere sahip olurken dinamik korelasyon ise sıfırdan farklı pozitif bir değere sahip olur.

Şekil 2.11(a) ve Şekil 2.11(b), D/zJ = -0.375 ve h/zJ = 0.1 için Q, A ve C'nin indirgenmiş sıcaklıkla değişimini farklı başlangıç değerleri için göstermektedir. Şekil 2.11(a) Şekil 2.10(a)'ya benzemekle birlikte Şekil 2.10(a)'dan farkı ferromanyetik-5/2 fazından paramanyetik (P) fazına ikinci-derece faz geçiş sıcaklığı Tc/zJ = 1.85 değerinde meydana gelmektedir. Şekil 2.11(b)'de, sistem peş peşe iki faz geçişi sergilemektedir.

Bu geçişlerin birincisi $F_{1/2}$ fazından $F_{5/2}$ fazına birinci-dereceden faz geçişidir ($T_t/zJ = 0.185$). Burada dinamik düzen parametrelerinde indirgenmiş sıcaklık artarken belirli bir sıcaklıkta yani $T = T_t/zJ$ değerinde süreksiz bir şekilde $F_{5/2}$ fazına geçiş olmaktadır. İkincisi ise $F_{5/2}$ fazından P fazına, ikinci-dereceden faz geçişidir ($T_C/zJ = 1.85$). Şekil 2.11(a) ve (b) dikkatli incelendiğinde sistemde T_t/zJ sıcaklığına kadar karma $F_{5/2} + F_{1/2}$ fazı bulunurken, T_t/zJ ile T_c/zJ sıcaklıkları arasında sadece $F_{5/2}$ fazı, T_c/zJ sıcaklığından sonra sadece P fazı bulunmaktadır. Ayrıca, bu durumda sıcaklık sıfırdan artırınca A ve C sıfır değerden belirli bir pozitif değere artar ve T_t/zJ sıcaklığında A aniden yüksek bir pozitif değere sıçrama yapar. Bu gerçekler Şekil 2.13(d)'deki faz diyagramında açıkça görülebilir.



Şekil 2.10. Spin-5/2 Blume-Capel modeli için dinamik mıknatıslanmanın (Q), histerisis çevrim bölgesinin (A) ve korelasyonun (C) sıcaklığa bağlı olarak davranışı. T_C/zJ ferromanyetik-5/2 (F_{5/2}) fazdan paramanyetik faza (P) ikinci-derece faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.

2.2.3.3. (T/zJ, h/zJ) Düzleminde Dinamik Faz Diyagramları

DFG sıcaklıklarını elde ettikten sonra sistemin dinamik faz diyagramlarını (T/zJ, h/zJ) ve (D/zJ, T/zJ) düzlemlerinde sunabiliriz. Bu kesimde, kristal alan etkileşim parametresi (D/zJ)'nin farklı değerleri için (T/zJ, h/zJ) düzleminde elde edilen dinamik faz diyagramları Şekil 2.12 ve Şekil 2.13'de gösterilmiştir. Şekillerde kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş çizgilerini, içi dolu daireler dinamik üçlü kritik noktayı, Z dinamik sıfır-sıcaklık kritik noktayı, B dinamik çift kritik son nokta ve A dinamik çoklu kritik noktayı göstermektedir.



Şekil 2.11. Spin-5/2 Blume-Capel modeli için dinamik mıknatıslanmanın (Q), histerezis çevrim bölgesinin (A) ve korelasyonun (C) sıcaklığa bağlı olarak iki farklı başlangıç değeri için davranışları. T_C/zJ ferromanyetik-5/2 (F_{5/2}) fazdan paramanyetik faza (P) ikinci-derece faz geçiş sıcaklığını gösterirken T_t/zJ ferromanyetik-1/2 (F_{1/2}) fazdan ferromanyetik-5/2 (F_{5/2}) fazına birinciderece faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.

Şekillerden görüleceği gibi sistem ya dinamik üçlü kritik nokta içermemekte ya da bir tane dinamik üçlü-kritik nokta içermektedir.

Şekil 2.12'de sistem dinamik üçlü kritik nokta sergilememekte ve altı farklı tipte dinamik faz diyagramı elde edilmiştir. Diğer taraftan Şekil 2.13'de sistem bir tane dinamik üçlü kritik nokta sergilemekte ve dört farklı tipte dinamik faz diyagramı elde edilmiştir. Bu dinamik faz diyagramları:

i) D/zJ = -1.0 için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.12(a)'da gösterilmiştir. Sistemde $F_{1/2}$ ve P temel fazları ile birlikte, $F_{1/2} + P$ karma fazı bulunmaktadır. Bu fazlar ikinciderece dinamik faz geçiş çizgisiyle birbirinden ayrılmıştır. Ayrıca, sistemde iki tane dinamik sıfır-sıcaklık kritik nokta (Z) mevcuttur. ii) D/zJ = -0.625 için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.12(b)'de gösterilmiştir. Bu faz diyagramı Şekil 2.12(a)'ya benzemektedir, fakat T/zJ ve h/zJ'nin düşük değerleri için $F_{3/2} + F_{1/2}$ karma faz bölgesi meydana gelmektedir ve $F_{1/2}$ faz bölgesi küçülüp, $F_{1/2} + P$ karma faz bölgesi büyümektedir. $F_{3/2} + F_{1/2}$ ile $F_{1/2} + P$ fazları arasındaki dinamik faz sınırları ikinci-derece faz geçiş çizgisi iken diğer fazlar arasındaki dinamik faz geçiş çizgisi birinci-derece faz geçiş çizgisidir. Sistemde yine iki tane dinamik sıfır-sıcaklık kritik nokta (Z) mevcuttur.

iii) D/zJ = -0.55 için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.12(c)'de gösterilmiştir. Bu faz diyagramı Şekil 2.12(b)'ye benzemektedir, fakat T'nin düşük h'nin yüksek değerleri için $F_{1/2}$ bölgesi meydana gelmektedir ve bu faz ile $F_{1/2}$ + P karma fazı arasındaki dinamik faz sınırı ikinci-derece faz geçiş çizgisidir. Dolayısıyla sistemde Şekil 2.12(b)'den farklı olarak iki tane daha dinamik sıfır-sıcaklık kritik nokta (Z) mevcuttur.

iv) D/zJ = -0.45 için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.12(d)'de gösterilmiştir. Bu faz diyagramında, P temel fazı ile $F_{5/2} + P$, $F_{5/2} + F_{3/2}$, $F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2}$, $F_{5/2} + F_{3/2} + P$ ve $F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2} + P$ karma fazları mevcuttur. $F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2}$ ile $F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2} + P$ fazları birinci-derece faz geçiş çizgisiyle birbirinden ayrılmıştır. Diğer bütün fazlar arasındaki dinamik geçiş çizgisi ikinci-derece faz geçiş çizgisidir. Ayrıca sistemde, üç dinamik sıfır-sıcaklık kritik nokta (Z), iki dinamik çoklu kritik nokta (A) ve bir dinamik çift kritik son nokta (B) mevcuttur.

v) D/zJ = -0.5 için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.12(e)'de gösterilmiştir. Sistemde bir adet dinamik çoklu kritik nokta (A) ve dört adet dinamik sıfır-sıcaklık kritik nokta (Z) vardır. Bu faz diyagramında, bir temel faz P ve beş adette bir arada faz bölgesi $F_{5/2}$ + P, $F_{5/2} + F_{1/2}$, $F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2}$, $F_{5/2} + F_{3/2} + P$ ve $F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2} + P$ bulunmaktadır. Bu fazlar arasındaki faz sınırları yalnızca ikinci -derece dinamik faz sınırıyla ayrılmıştır.

vi) D/zJ = -0.525 için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.12(f)'de gösterilmiştir. Bu faz diyagramı Şekil 2.12(e)'ye benzerdir fakat bir kaç farklılık vardır. (1) T/zJ'nin düşük değerlerinde meydana gelen $F_{5/2} + F_{1/2}$ karma fazı yerine $F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2}$ karma fazı meydana gelmektedir. (2) $F_{5/2} + F_{3/2} + P$ karma fazı yerine $F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2} + P$ karma

fazı meydana gelmektedir. (3) Dinamik çoklu kritik nokta (A) yerine sıfır-sıcaklık kritik nokta (Z) meydana gelmektedir.

vii) D/zJ = 1.0 için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.13(a)'da gösterilmiştir. Bu faz diyagramında, yüksek indirgenmiş sıcaklıkta (T/zJ) ve yüksek indirgenmiş manyetik alan genliğinde (h/zJ) paramanyetik (P) faz mevcuttur. h/zJ ve T/zJ' nin düşük değerlerinde ise ferromanyetik-5/2 (F_{5/2}) fazı gözlenmektedir. Bu iki bölge arasındaki dinamik faz sınırı, $F_{5/2} \rightarrow P$, ikinci-derece faz geçiş çizgisidir. İndirgenmiş sıcaklığın düşük ve indirgenmiş manyetik alan genliğinin belirli değerlerinde F_{5/2} ve P fazlarının birlikte bulunduğu F_{5/2} + P karma fazı bulunmaktadır. F_{5/2} + P karma fazı, F_{5/2} ve P fazlarından birinci-derece faz geçiş çizgisiyle ayrılmıştır. Sistem aynı zamanda her iki birinci-derece faz çizgisini birleştiren ve birinci-dereceden ikinci-dereceye faz geçişini gösteren yalnızca bir dinamik üçlü kritik nokta sergilemektedir. Bu tip faz diyagramının benzeri kinetik spin-1/2 [140], spin-1 [157, 159], spin-3/2 [162, 165] (bu çalışmalarda F_{5/2} fazı yerine F_{3/2} fazı meydana gelmektedir) ve spin-2 [167, 245] Ising sistemlerinde elde edilmiştir. Ayrıca bu faz diyagramı karma spin (1/2, 1) [209], (1, 3/2) [220] (bu çalışmada F_{5/2} fazı yerine i fazı meydana gelmektedir) ve (1/2, 3/2) [217] Ising sistemlerinde de elde edilmiştir.

viii) D/zJ = -0.275 için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.13(b)'de gösterilmiştir. Bu faz diyagramı Şekil 2.13(a)'ya benzer, fakat sistemde h/zJ ve T/zJ'nin düşük değerleri için $F_{5/2} + F_{3/2}$ karma fazı meydana gelir. Ayrıca, $F_{5/2} + P$ karma faz bölgesi daha küçük olur. Bu fazlar arasındaki dinamik faz sınırı, $F_{5/2}$ ile P fazları arasındaki faz geçişi ikinciderece faz geçiş çizgisi iken diğer fazlar arasındaki faz geçiş çizgisi birinci-derece faz geçiş çizgisidir.

viii) D/zJ = -0.3 için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.13(c)'de gösterilmiştir. Bu faz diyagramı Şekil 2.13(b)'ye benzer, fakat sistemde h/zJ ve T/zJ'nin yüksek değerleri için $F_{5/2} + P$ karma fazı kaybolur. Ayrıca sistemde re-entrant davranış gözlenmektedir, yani, sistem sıcaklık artarken paramanyetik (P) fazdan $F_{5/2}$ fazına ve yeniden P fazına geri döner.

ix) D/zJ = -0.375 için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.13(d)'de gösterilmiştir. Bu faz diyagramı Şekil 2.13(c)'ye benzerdir fakat bir kaç farklılık vardır. (1) h/zJ ve T/zJ'nin düşük değerleri için $F_{5/2} + F_{3/2}$ karma fazı yerine $F_{5/2} + F_{1/2}$ karma fazı meydana gelir. (2) T/zJ'nin ve h/zJ'nin düşük değerlerinde $F_{5/2} + P$ karma faz bölgesi oluşur. (3) Sistemde re-entrant davranış gözlenmez.

2.2.3.4. (D/zJ, T/zJ) Düzleminde Dinamik Faz Diyagramları

(h/zJ)'nin farklı değerleri için (D/zJ, h/zJ) düzleminde elde edilen dinamik faz diyagramları Şekil 2.14'de gösterilmiştir. Şekillerde kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş çizgilerini, Z dinamik sıfır-sıcaklık kritik noktayı, B dinamik çift kritik son nokta ve A dinamik çoklu kritik noktayı göstermektedir.

i) h/zJ = 0.125 için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.14(a)'da gösterilmiştir. Bu faz diyagramında, $F_{1/2}$ ve P temel fazları ile $F_{3/2} + F_{1/2}$, $F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2}$, $F_{3/2} + F_{1/2} + P$ ve $F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2} + P$ karma fazları mevcuttur. $F_{3/2} + F_{1/2}$ ile $F_{1/2}$, $F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2}$ ile $F_{1/2}$ fazları birinci-derece, diğer fazlar ise ikinci-derece dinamik faz geçiş çizgisiyle birbirinden ayrılmıştır. Ayrıca sistemde, bir dinamik çift kritik son nokta (B) mevcuttur ve bir dinamik çoklu kritik nokta (A) mevcuttur.

ii) h/zJ = 0.625 için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.14(b)'de gösterilmiştir. Bu faz diyagramında, $F_{5/2}$ ve P temel fazları ile $F_{5/2}$ + P karma fazı mevcuttur. Bu fazlar ikinciderece dinamik faz geçiş çizgisi ile birbirinden ayrılmıştır. Ayrıca sistemde, iki tane sıfır-sıcaklık kritik nokta (Z) mevcuttur.

2.3. Karma Spin-2 ve Spin-5/2 Blume-Capel Modelinin Dinamiği

2.3.1. Giriş

Bu kesimde zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında karma spin (2, 5/2) Blume-Capel (BC) modelinin tanıtımı yapılacak ve dinamik davranışı kapsamlı bir şekilde Van der Waerden özdeşliği temelli korelasyonlu etkin-alan teorisi ile salınımlı dış manyetik alan varlığında incelenecektir. Dinamik etkin-alan denklemlerini elde etmek için Glauber geçiş oranları kullanılacaktır. Elde edilecek olan bu diferansiyel denklem Adams-Moulton kestirme ve düzeltme, Runge-Kutta, vb gibi nümerik



yöntemlerle çözülecek ve ortalama düzen parametresinin zamana göre değişimi kapsamlıca incelenerek sistemde oluşan fazlar tespit edilecektir.

Şekil 2.12. Spin-5/2 Blume-Capel modelinin (T/zJ, h/zJ) düzleminde dinamik faz diyagramları. Sistemde P, $F_{5/2}$ temel fazlarının yanında altı adet $F_{5/2} + F_{1/2}$, $F_{3/2} + F_{1/2}$, $F_{5/2} + P$, $F_{1/2} + P$, $F_{5/2} + F_{3/2} + P$, $F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2}$ ve $F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2} + P$ karma fazları mevcut. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birincive ikinci-derece faz geçiş çizgilerini göstermektedir. Z dinamik sıfırsıcaklık kritik noktayı ve A dinamik çoklu kritik noktayı gösterir. (a) D/zJ = -1.0. (b) D/zJ = -0.625. (c) D/zJ = -0.55. (d) D/zJ = -0.45. (e) D/zJ = -0.5. (g) D/zJ = -0.525.



Şekil 2.13. Spin-5/2 Blume-Capel modelinin (T/zJ, h/zJ) düzleminde dinamik faz diyagramları. Sistemde P, $F_{5/2}$ temel fazlarının yanında altı adet $F_{5/2} + F_{1/2}$, $F_{5/2} + F_{3/2}$ ve $F_{5/2} + P$ karma fazları mevcut. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş çizgilerini göstermektedir. İçi dolu daireler dinamik üçlü kritik noktayı gösterir. (a) D/zJ = 1. (b) D/zJ = -0.275. (c) D/zJ = -0.3. (d) D/zJ = -0.375.

Bu bölümde elde edilen sonuçlar Journal of Magnetism and Magnetic Materials dergisinde yayınlanmıştır [246].



Şekil 2.14. Spin-5/2 Blume-Capel modelinin (D/zJ, T/zJ) düzleminde dinamik faz diyagramları. Sistemde P, $F_{5/2} F_{1/2}$, temel fazlarının yanında altı adet $F_{3/2} +$ $F_{1/2}$, $F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2}$, $F_{3/2} + F_{1/2} + P$ ve $F_{5/2} + F_{3/2} + F_{1/2} + P$ karma fazları mevcut. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş çizgilerini göstermektedir. Z dinamik sıfır-sıcaklık kritik noktayı, B dinamik çift kritik son nokta ve A dinamik çoklu kritik noktayı göstermektedir. (a) h/zJ = 0.125 ve (b) h/zJ = 0.625.

Dinamik düzen parametresini veren denklemler Adams-Moulton kestirme ve düzeltme ve Romberg integrasyon yöntemleri beraber kullanılarak çözülecek. Dinamik düzen parametresinin, histerisis eğrisi alanının ve korelasyon fonksiyonlarının indirgenmiş

sıcaklığa göre değişimleri kapsamlıca incelenerek, sistemde meydana gelen dinamik faz geçişlerinin tabiatı (birinci- ve ikinci-derece) karakterize edilecek ve aynı zamanda dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıkları bulunacaktır. Sonrada, hesaplanan DFG sıcaklıkları kullanılarak sistemin dinamik faz diyagramları (T/zJ, h/zJ) düzleminde sunulacaktır. Son olarak, dinamik ortalama alan yaklaşımında bazı birinci-derece faz geçiş çizgilerinin sanallığını gösterebilmek ve korelasyonların etkisini görebilmek için, aynı sistem dinamik ortalama alan yaklaşımı kullanılarak incelenerek, sistemin dinamik faz diyagramları (T/zJ, h/zJ) düzleminde

2.3.2. Model ve Etkin-Alan Dinamik Denklemleri

2.3.2.1. Modelin Tanıtımı

Karma spin (2, 5/2) Ising modeli, A ve B gibi birbiri içine girmiş iki alt örgülü Ising modeli şeklinde ele alınabilir. A ve B alt örgülerinde sırasıyla $\sigma = \pm 2, \pm 1, 0$ ve S = $\pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$ spinli parçacıklar yer almaktadır. Bu spinli parçacıklar örgü noktalarında öyle bir şekilde dağılmışlardır ki, Şekil 2.15'de görüldüğü gibi her σ - spininin en yakın komşusu S-spinidir.



Şekil 2.15. Her bir σ (boş daireler) spininin en yakın komşusu olan S (dolu daireler) spinlerinin kare örgüsü üzerindeki yerleşiminin taslağı. Böylece model A ve B gibi birbiri içine girmiş iki alt örgülü Ising modeli olarak ele alınabilir ve A ve B alt örgüler üzerinde sırasıyla σ ve S spinleri yerleşmişlerdir.

Karma spin (2, 5/2) Ising sistemi için aşağıdaki düzen parametreleri mevcuttur. Bunlar;

- a) A alt örgüsü için: (1) ortalama mıknatıslanma düzen parametresi (m_A), (2) kuadrupol moment (q_A) düzen parametresi, (3) octupolar (r_A) düzen parametresi, (4) hexadecapole (v_A) düzen parametresi,
- b) B alt örgüsüiçin: (1) ortalama mıknatıslanma düzen parametresi (m_B), (2) kuadrupol moment (q_B) düzen parametresi, (3) octupolar (r_B) düzen parametresi, (4) hexadecapole (v_B) düzen parametresi, (5) triakontadipole (w_B) düzen parametresi.

Burada, m, r ve w düzen parametreleri ile q ve v düzen parametrelerinin termal davranışları birbirlerine benzerlik gösterir [225]. Bu düzen parametreleri kare örgü üzerinde karma spin (2, 5/2) Ising modeli için iki farklı temel fazı tanımlamaktadır. Bu temel fazlar:

- i) Paramanyetik faz (p): $m_A = m_B = 0$,
- ii) Ferrimanyetik fazlar:
 - a) Ferrimanyetik-I fazı (i₁): $m_A = \pm 2$, $m_A = \pm 5/2$,
 - b) Ferrimanyetik-II fazı (i₂): $m_{\sigma} = \pm 1$, $m_s = \pm 5/2$,

biçimindedir. Bu sistemin Hamiltonyen ifadesi,

$$\mathcal{H} = -J\sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i S_j - D\left[\sum_i \sigma_i^2 + \sum_j S_j^2\right] - h(t)\left[\sum_i \sigma_i + \sum_j S_j\right]$$
(2.38)

şeklindedir. Burada, $\langle ij \rangle$ toplamın en yakın komsu çiftler üzerinden alınacağını göstermektedir. J bilineer etkileşme parametresi, D kristal alan etkileşmesi veya tekiyon anizotropi sabiti ve son terim h(t) ise zamanla değişen salınımlı dış manyetik alandır ve

$$h(t) = h_0 \sin(wt),$$
 (2.39)

şeklinde tanımlanır. Burada h_0 ve $w = 2\pi v$ sırasıyla salınımlı alanın genliği ve açısal frekansıdır. Sistem T mutlak sıcaklıkta izotermal ısı banyosu ile temas halindedir.

2.3.2.2. Etkin-Alan Dinamik Denklemlerinin Elde Edilmesi

Spin-2 ve spin-5/2 Ising sistemlerinin ortalama mıknatıslanma ifadeleri $\langle \sigma \rangle$ ve $\langle S \rangle$ sırasıyla Kesim 2.1.2.2 ve Kesim 2.2.2.2'de verilmişti. Buradan hareketle karma spin (2, 5/2) Ising sisteminin A ve B alt örgüleri için ortalama mıknatıslanma ifadeleri sırasıyla;

$$\left\langle \sigma_{i}^{n} \right\rangle = \left\langle \prod_{i=1}^{z} \left[A(\alpha) + B(\alpha) S_{j} + C(\alpha) S_{j}^{2} + D(\alpha) S_{j}^{3} + E(\alpha) S_{j}^{4} + F(\alpha) S_{j}^{5} \right] \right\rangle f_{n}(\mathbf{x}+h) \Big|_{\mathbf{x}=0}, \qquad (2.40)$$

ve

$$\left\langle \mathbf{S}_{j}^{k}\right\rangle = \left\langle \prod_{j=1}^{z} \left[1 + \mathbf{K}(\alpha)\sigma_{i} + \mathbf{L}(\alpha)\sigma_{i}^{2} + \mathbf{M}(\alpha)\sigma_{i}^{3} + \mathbf{N}(\alpha)\sigma_{i}^{4}\right] \right\rangle g_{k}(\mathbf{x}+h)\Big|_{\mathbf{x}=0}, \qquad (2.41)$$

bağıntılarıyla verilirler. Burada, spin-2 için n = 1, 2, 3, 4 değerlerini alırken spin-5/2 için k = 1, 2, 3, 4, 5 değerlerini alır. $\alpha = J\nabla$, $\nabla = \partial/\partial x$ diferansiyel operatördür. z en yakın komsu sayısıdır ve kare örgü için z = 4 alınır. Van der Waerden özdeşliğinden [239] faydalanarak, Kesim 2.2.2.2 ve Kesim 2.1.2.2'de olduğu gibi, spin-5/2 sistemi için A(α), B(α), C(α), D(α), E(α) ve F(α) katsayıları ile spin-2 sistemi için K(α), L(α), M(α) ve N(α) katsayıları,

$$A(\alpha) = \frac{1}{128} \left[3\cosh\left(\frac{5\alpha}{2}\right) - 25\cosh\left(\frac{3\alpha}{2}\right) + 150\cosh\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right],$$

$$B(\alpha) = \frac{1}{960} \left[9\sinh\left(\frac{5\alpha}{2}\right) - 125\sinh\left(\frac{3\alpha}{2}\right) + 2250\sinh\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right],$$

$$C(\alpha) = \frac{1}{48} \left[-5\cosh\left(\frac{5\alpha}{2}\right) + 39\cosh\left(\frac{3\alpha}{2}\right) - 34\cosh\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right],$$

$$D(\alpha) = \frac{1}{24} \left[-\sinh\left(\frac{5\alpha}{2}\right) + 13\sinh\left(\frac{3\alpha}{2}\right) - 34\sinh\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right],$$

$$E(\alpha) = \frac{1}{24} \left[\cosh\left(\frac{5\alpha}{2}\right) - 3\cosh\left(\frac{3\alpha}{2}\right) + 2\cosh\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right],$$

$$F(\alpha) = \frac{1}{60} \left[\sinh\left(\frac{5\alpha}{2}\right) - 5\sinh\left(\frac{3\alpha}{2}\right) + 10\sinh\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right],$$

(2.42)

ve

$$K(\alpha) = \frac{1}{6} \left[8 \sinh(\alpha) - \sinh(2\alpha) \right],$$

$$L(\alpha) = \frac{1}{12} \left[16 \cosh(\alpha) - \cosh(2\alpha) - 15 \right],$$

$$M(\alpha) = \frac{1}{6} \left[\sinh(2\alpha) - 2 \sinh(\alpha) \right],$$

$$N(\alpha) = \frac{1}{12} \left[\cosh(2\alpha) - 4 \cosh(\alpha) + 3 \right],$$

(2.43)

olarak ifade edilirler. Spin-2 sistemi için $f_n(x+h)$ (n = 1, 2, 3, 4) ve spin 5/2 sistemi için $g_k(x+h)$ (k = 1, 2, 3, 4, 5) fonksiyonları şu şekilde tanımlanır:

$$f_1(\mathbf{x}+h) = \frac{1}{2} \frac{4\sinh\left[2\beta(\mathbf{x}+h)\right] + 2\sinh\left[\beta(\mathbf{x}+h)\right]\exp(-3\beta \mathbf{D})}{\cosh\left[2\beta(\mathbf{x}+h)\right] + \cosh\left[\beta(\mathbf{x}+h)\right]\exp(-3\beta \mathbf{D}) + \exp(-4\beta \mathbf{D})},$$
(2.44a)

$$f_{2}(\mathbf{x}+h) = \frac{1}{2} \frac{8\cosh\left[2\beta(\mathbf{x}+h)\right] + 2\cosh\left[\beta(\mathbf{x}+h)\right]\exp\left(-3\beta \mathbf{D}\right)}{\cosh\left[2\beta(\mathbf{x}+h)\right] + \cosh\left[\beta(\mathbf{x}+h)\right]\exp\left(-3\beta \mathbf{D}\right) + \exp\left(-4\beta \mathbf{D}\right)},$$
(2.44b)

$$f_3(\mathbf{x}+h) = \frac{1}{2} \frac{16\sinh\left[2\beta(\mathbf{x}+h)\right] + 2\sinh\left[\beta(\mathbf{x}+h)\right]\exp(-3\beta \mathbf{D})}{\cosh\left[2\beta(\mathbf{x}+h)\right] + \cosh\left[\beta(\mathbf{x}+h)\right]\exp(-3\beta \mathbf{D}) + \exp(-4\beta \mathbf{D})},$$
 (2.44c)

$$f_4(\mathbf{x}+h) = \frac{1}{2} \frac{32\cosh\left[2\beta(\mathbf{x}+h)\right] + 2\cosh\left[\beta(\mathbf{x}+h)\right]\exp(-3\beta \mathbf{D})}{\cosh\left[2\beta(\mathbf{x}+h)\right] + \cosh\left[\beta(\mathbf{x}+h)\right]\exp(-3\beta \mathbf{D}) + \exp(-4\beta \mathbf{D})},$$
 (2.44d)

ve

$$g_{1}(y+h) = \frac{5\sinh\left(\frac{5\beta}{2}(y+h)\right) + 3\exp(-4\beta D)\sinh\left(\frac{3\beta}{2}(y+h)\right) + \exp(-6\beta D)\sinh\left(\frac{\beta}{2}(y+h)\right)}{2\cosh\left(\frac{5\beta}{2}(y+h)\right) + 2\exp(-4\beta D)\cosh\left(\frac{3\beta}{2}(y+h)\right) + 2\exp(-6\beta D)\cosh\left(\frac{\beta}{2}(y+h)\right)}, (2.45a)$$

$$g_{2}(y+h) = \frac{25\cosh\left(\frac{5\beta}{2}(y+h)\right) + 9\exp(-4\beta D)\cosh\left(\frac{3\beta}{2}(y+h)\right) + \exp(-6\beta D)\cosh\left(\frac{\beta}{2}(y+h)\right)}{4\cosh\left(\frac{5\beta}{2}(y+h)\right) + 4\exp(-4\beta D)\cosh\left(\frac{3\beta}{2}(y+h)\right) + 4\exp(-6\beta D)\cosh\left(\frac{\beta}{2}(y+h)\right)}, (2.45b)$$

$$g_{3}(y+h) = \frac{125\sinh\left(\frac{5\beta}{2}(y+h)\right) + 27\exp(-4\beta D)\cosh\left(\frac{3\beta}{2}(y+h)\right) + \exp(-6\beta D)\sinh\left(\frac{\beta}{2}(y+h)\right)}{8\cosh\left(\frac{5\beta}{2}(y+h)\right) + 8\exp(-4\beta D)\cosh\left(\frac{3\beta}{2}(y+h)\right) + 8\exp(-6\beta D)\cosh\left(\frac{\beta}{2}(y+h)\right)}, (2.45c)$$

$$g_{4}(\mathbf{x}+h) = \frac{625\cosh\left(\frac{5\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right) + 81\exp(-4\beta D)\cosh\left(\frac{3\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right) + \exp(-6\beta D)\cosh\left(\frac{\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right)}{16\cosh\left(\frac{5\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right) + 16\exp(-4\beta D)\cosh\left(\frac{3\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right) + 16\exp(-6\beta D)\cosh\left(\frac{\beta}{2}(\mathbf{x}+h)\right)}, (2.45d)$$

$$g_{5}(y+h) = \frac{3125 \sinh\left(\frac{5\beta}{2}(y+h)\right) + 243 \exp(-4\beta D) \cosh\left(\frac{3\beta}{2}(y+h)\right) + \exp(-6\beta D) \cosh\left(\frac{\beta}{2}(y+h)\right)}{32 \cosh\left(\frac{5\beta}{2}(y+h)\right) + 32 \exp(-4\beta D) \cosh\left(\frac{3\beta}{2}(y+h)\right) + 32 \exp(-6\beta D) \cosh\left(\frac{\beta}{2}(y+h)\right)}.$$
(2.45e)

burada, $\beta = 1/k_B T$ şeklindedir ve k_B Boltzmann sabitidir. Yüksek spinli karma Ising sistemleri için (2.40) ve (2.41) eşitliklerinin, bütün spin-spin korelasyonlarının tamamı ele alınırsa, problemin çözümü zorlaşır. Bu zorluğu yenmek için ilk çaba korelasyonlar arasındaki etkileşmeyi indirgeyen bağlantısız (decoupling) yaklaşımdır:

$$\left\langle \sigma_{i} \sigma_{i^{\prime}}^{2} \dots \sigma_{i^{n}}^{4} \right\rangle \cong \left\langle \sigma_{i} \right\rangle \left\langle \sigma_{i^{\prime}}^{2} \right\rangle \dots \left\langle \sigma_{i^{n}}^{4} \right\rangle,$$
 (2.46a)

ve

$$\left\langle \mathbf{S}_{j} \mathbf{S}_{j^{\prime}}^{2} \dots \mathbf{S}_{j^{n}}^{5} \right\rangle \cong \left\langle \mathbf{S}_{j} \right\rangle \left\langle \mathbf{S}_{j^{\prime}}^{2} \right\rangle \dots \left\langle \mathbf{S}_{j^{n}}^{5} \right\rangle,$$
 (2.46b)

buna göre $i \neq i' \neq ... \neq i^n$ ve $j \neq j' \neq ... \neq j^n$ olmak üzere korelasyonlu etkin-alan teorisi birçok sisteme uygulanmıştır [236, 240, 241]. Aslında bu yaklaşım, esas itibariyle hacim veya yoğun (bulk) probleminde Zernike yaklaşımına [242] tekabül etmektedir ve yüzey problemlerini içeren çok sayıda manyetik sisteme başarılı bir şekilde uygulanmıştır [236, 240, 241, 243, 244]. Bağlantısızlık (decoupling) yaklaşımı da kullanılarak kare örgü için (3.40) ve (3.41) eşitliklerinde z = 4 yazılırsa,

$$\mathbf{m}_{A} = \left\langle \sigma_{i} \right\rangle = \left[\mathbf{A}(\alpha) + \mathbf{B}(\alpha) \left\langle \mathbf{S}_{j} \right\rangle + \mathbf{C}(\alpha) \left\langle \mathbf{S}_{j}^{2} \right\rangle + \mathbf{D}(\alpha) \left\langle \mathbf{S}_{j}^{3} \right\rangle + \mathbf{E}(\alpha) \left\langle \mathbf{S}_{j}^{4} \right\rangle + \mathbf{F}(\alpha) \left\langle \mathbf{S}_{j}^{5} \right\rangle \right]^{4} f_{1}(\mathbf{x} + h) \Big|_{\mathbf{x} = 0}, \quad (2.47)$$

$$q_{A} = \left\langle \sigma_{i}^{2} \right\rangle = \left[A(\alpha) + B(\alpha) \left\langle S_{j} \right\rangle + C(\alpha) \left\langle S_{j}^{2} \right\rangle + D(\alpha) \left\langle S_{j}^{3} \right\rangle + E(\alpha) \left\langle S_{j}^{4} \right\rangle + F(\alpha) \left\langle S_{j}^{5} \right\rangle \right]^{4} f_{2}(x+h) \Big|_{x=0}, \quad (2.48)$$

$$r_{\rm A} = \left\langle \sigma_{\rm i}^3 \right\rangle = \left[A(\alpha) + B(\alpha) \left\langle S_{\rm j} \right\rangle + C(\alpha) \left\langle S_{\rm j}^2 \right\rangle + D(\alpha) \left\langle S_{\rm j}^3 \right\rangle + E(\alpha) \left\langle S_{\rm j}^4 \right\rangle + F(\alpha) \left\langle S_{\rm j}^5 \right\rangle \right]^4 f_3(x+h) \right|_{x=0}, \quad (2.49)$$

$$\nu_{\rm A} = \left\langle \sigma_{\rm i}^{4} \right\rangle = \left[A(\alpha) + B(\alpha) \left\langle S_{\rm j} \right\rangle + C(\alpha) \left\langle S_{\rm j}^{2} \right\rangle + D(\alpha) \left\langle S_{\rm j}^{3} \right\rangle + E(\alpha) \left\langle S_{\rm j}^{4} \right\rangle + F(\alpha) \left\langle S_{\rm j}^{5} \right\rangle \right]^{4} f_{4}(\mathbf{x} + h) \Big|_{\mathbf{x} = 0}, \quad (2.50)$$

ve

$$m_{\rm B} = \left\langle S_{\rm j} \right\rangle = \left[1 + K(\alpha) \left\langle \sigma_{\rm i} \right\rangle + L(\alpha) \left\langle \sigma_{\rm i}^{2} \right\rangle + M(\alpha) \left\langle \sigma_{\rm i}^{3} \right\rangle + N(\alpha) \left\langle \sigma_{\rm i}^{4} \right\rangle \right]^{4} g_{1}(y+h) \Big|_{y=0}, \qquad (2.51)$$

$$q_{\rm B} = \left\langle S_{\rm j}^2 \right\rangle = \left[1 + K(\alpha) \left\langle \sigma_{\rm i} \right\rangle + L(\alpha) \left\langle \sigma_{\rm i}^2 \right\rangle + M(\alpha) \left\langle \sigma_{\rm i}^3 \right\rangle + N(\alpha) \left\langle \sigma_{\rm i}^4 \right\rangle \right]^4 g_2(y+h) \Big|_{y=0}, \qquad (2.52)$$

$$r_{\rm B} = \left\langle S_{\rm j}^{3} \right\rangle = \left[1 + \mathrm{K}(\alpha) \left\langle \sigma_{\rm i}^{2} \right\rangle + \mathrm{L}(\alpha) \left\langle \sigma_{\rm i}^{2} \right\rangle + \mathrm{M}(\alpha) \left\langle \sigma_{\rm i}^{3} \right\rangle + \mathrm{N}(\alpha) \left\langle \sigma_{\rm i}^{4} \right\rangle \right]^{4} g_{3}(y+h) \Big|_{y=0}, \qquad (2.53)$$

$$\nu_{\rm B} = \left\langle {\rm S}_{\rm j}^{\rm 4} \right\rangle = \left[1 + {\rm K}(\alpha) \left\langle {\rm \sigma}_{\rm i}^{\rm 2} \right\rangle + {\rm L}(\alpha) \left\langle {\rm \sigma}_{\rm i}^{\rm 2} \right\rangle + {\rm M}(\alpha) \left\langle {\rm \sigma}_{\rm i}^{\rm 3} \right\rangle + {\rm N}(\alpha) \left\langle {\rm \sigma}_{\rm i}^{\rm 4} \right\rangle \right]^{\rm 4} g_{\rm 4}({\rm y} + h) \Big|_{{\rm y} = 0}, \qquad (2.54)$$

$$w_{\rm B} = \left\langle S_{\rm j}^{\rm 5} \right\rangle = \left[1 + \mathrm{K}(\alpha) \left\langle \sigma_{\rm i}^{\rm 2} \right\rangle + \mathrm{L}(\alpha) \left\langle \sigma_{\rm i}^{\rm 2} \right\rangle + \mathrm{M}(\alpha) \left\langle \sigma_{\rm i}^{\rm 3} \right\rangle + \mathrm{N}(\alpha) \left\langle \sigma_{\rm i}^{\rm 4} \right\rangle \right]^4 g_5(y+h) \Big|_{x=0}, \qquad (2.55)$$

elde edilir. m, r ve w'nın düzen parametreleri ile q ve v düzen parametrelerinin termal davranışları birbirlerine benzerlik gösterir [225]. Karma spin-2 ve spin-5/2 BC sisteminin Hamiltonyen ifadesi Eşitlik 2.38'de görüldüğü gibi bikuadratik etkileşme parametresi (K) içermediğinden q (veya v) düzen parametrelerin termal davranışları bu tez çalışmasında incelenmedi. Böylece bu tez çalışmasında yalnızca m düzen parametresinin termal davranışı incelendi. Eşitlikler (2.47) ve (2.51)'in sağ tarafları açılırsa, alt örgü mıknatıslanmaları için,

$$m_{A} = a_{0} + a_{1}m_{B} + a_{2}m_{B}^{2} + a_{3}m_{B}^{3} + a_{4}m_{B}^{4} + a_{5}m_{B}^{5} + a_{6}m_{B}^{6} + a_{7}m_{B}^{7} + a_{8}m_{B}^{8} + a_{9}m_{B}^{9} + a_{10}m_{B}^{10} + a_{11}m_{B}^{11} + a_{12}m_{B}^{12} + a_{13}m_{B}^{13} + a_{14}m_{B}^{14} + a_{15}m_{B}^{15} + a_{16}m_{B}^{16} + a_{17}m_{B}^{17} + a_{18}m_{B}^{18} + a_{19}m_{B}^{19} + a_{20}m_{B}^{20},$$
(2.56)

ve

$$m_{\rm B} = b_0 + b_1 m_{\rm B} + b_2 m_{\rm B}^{\ 2} + b_3 m_{\rm B}^{\ 3} + b_4 m_{\rm B}^{\ 4} + b_5 m_{\rm B}^{\ 5} + b_6 m_{\rm B}^{\ 6} + b_7 m_{\rm B}^{\ 7} + b_8 m_{\rm B}^{\ 8} + b_9 m_{\rm B}^{\ 9} + b_{10} m_{\rm B}^{\ 10} + b_{11} m_{\rm B}^{\ 11} + b_{12} m_{\rm B}^{\ 12} + b_{13} m_{\rm B}^{\ 13} + b_{14} m_{\rm B}^{\ 14} + b_{15} m_{\rm B}^{\ 15} + b_{16} m_{\rm B}^{\ 16},$$
(2.57)

ifadeleri elde edilir. Burada a_i (i = 1, 2,..., 20) ve b_j (j = 1, 2,..., 16) katsayıları diferansiyel operatör tekniği kullanılarak elde edilir. Bu katsayılar Kesim 2.1.2.2 ve Kesim 2.2.2.1'de verildiğinden dolayı burada verilmedi. Glauber-tipi stokhastik dinamik kullanılırsa, özellikle de Glauber geçiş oranları kullanılırsa, dinamik etkin-alan denklemleri,

$$\frac{d}{dt}m_{A} = -m_{A} + a_{0} + a_{1}m_{B} + a_{2}m_{B}^{2} + a_{3}m_{B}^{3} + a_{4}m_{B}^{4} + a_{5}m_{B}^{5} + a_{6}m_{B}^{6} + a_{7}m_{B}^{7} + a_{8}m_{B}^{8} + a_{9}m_{B}^{9} + a_{10}m_{B}^{10} + a_{11}m_{B}^{11} + a_{12}m_{B}^{12} + a_{13}m_{B}^{13} + a_{14}m_{B}^{14} + a_{15}m_{B}^{15} + a_{16}m_{B}^{16} + a_{17}m_{B}^{17} + a_{18}m_{B}^{18} + a_{19}m_{B}^{19} + a_{20}m_{B}^{20},$$
(2.58)

* •

$$\frac{d}{dt}m_{B} = -m_{B} + b_{0} + b_{1}m_{A} + b_{2}m_{A}^{2} + b_{3}m_{A}^{3} + b_{4}m_{A}^{4} + b_{5}m_{A}^{5} + b_{6}m_{A}^{6} + b_{7}m_{A}^{7} + b_{8}m_{A}^{8} + b_{9}m_{A}^{9} + b_{10}m_{A}^{10} + b_{11}m_{A}^{11} + b_{12}m_{A}^{12} + b_{13}m_{A}^{13} + b_{14}m_{A}^{14} + b_{15}m_{A}^{15} + b_{16}m_{A}^{16},$$
(2.59)

olarak elde edilir. Böylece sistemin dinamik etkin-alan denklemi elde edilmiş oldu. Gelecek kesimde, bu denklemin nümerik çözümleri yapılacak ve bu çözümler tartışılacaktır.

2.3.3. Dinamik Faz Geçiş Noktaları ve Dinamik Faz Diyagramları

2.3.3.1. Ortalama Mıknatıslanmaların Zamanla Değişimi

Bu kesimde, (2.58) ve (2.59) ile verilen etkin-alan dinamik denkleminin Adams-Moulton kestirme ve düzeltme yöntemi kullanılarak nümerik olarak çözülmesiyle ortalama düzen parametrelerinin, yani ortalama mıknatıslanmaların ($m_A(wt)$ ve $m_B(wt)$) zamana bağlı davranışı incelenecektir. Sistemde var olan fazları bulmak için denklem (2.58) ve (2.59) ile verilen etkin-alan dinamik denkleminin kararlı çözümleri, farklı D/zJ, h/zJ ve T/zJ değerleri için incelenecektir. Denklem (2.58) ve (2.59)'un kararlı çözümleri 2 π periyodu için wt'nin periyodik bir fonksiyonu olacaktır, yani

$$m_{A,B}(wt+2\pi) = m_{A,B}(wt),$$
 (2.60)

eşitliği ile ifade edilecektir. Ayrıca, aşağıdaki özelliklerin sağlanıp veya sağlanmamasına göre sistemde iki tip çözüm olduğu bulundu. Bunlar sırasıyla,

$$m_A(wt+\pi) = m_A(wt), \qquad (2.61a)$$

ve

$$m_{\rm B}(\mathrm{wt}+\pi) = -m_{\rm B}(\mathrm{wt}), \qquad (2.61b)$$

ifadeleri ile verilirler. Eğer çözüm, (2.61a) ve (2.61b) denklemleriyle verilen özelliğe sahipse simetrik çözüm olarak adlandırılır ve bu paramanyetik (p) çözüme karşılık gelir. Bu çözümde, ortalama düzen parametreleri, yani ortalama alt örgü mıknatısları birbirine eşittir ve sıfır değeri civarında salınarak dış manyetik alana uyum gösterirler. İkinci çözüm ise, (2.61a) ve (2.61b) denklemleriyle verilen özelliğe sahip değildir ve bu simetrik olmayan çözüm ferrimanyetik (i) faza karşılık gelir ve artık dış manyetik alana uyum göstermezler. Bu çözümde $m_A(wt)$ ve $m_B(wt)$ sırasıyla ±2 ve $\mp 5/2$ değeri etrafında salınırlarsa ferrimanyetik-I fazına (i₁); ±1 ve $\mp 3/2$ değeri etrafında salınırlarsa ferrimanyetik-II (i₂) fazına; karşılık gelir. Verilen parametreler ve başlangıç değerleri için Adams-Moulton kestirme ve düzeltme yöntemi kullanılarak (2.58) ve

(2.59) numaralı denklemler çözüldü ve sistemde p ve i_1 , temel fazlarının yanında üç adet karma faz bulundu. Bu karma fazlar i_1 ve i_2 fazlarının bir arada bulunduğu $i_1 + i_2$ karma fazı; i_1 ve p fazlarının bir arada bulunduğu $i_1 + p$ karma fazı ve son olarak i_1 , i_2 ve p fazlarının bir arada bulunduğu $i_1 + i_2 + p$ karma fazları bulundu. Bu fazlara karşılık gelen çözümler Şekil 2.16'da gösterilmiştir. Şekil 2.16(a)'da yalnızca simetrik çözüm görülmektedir ve bundan dolayı sistemde sadece paramanyetik (p) faz mevcuttur. Bu durumda $m_A(wt)$ ve $m_B(wt)$ birbirine eşittir ve sıfır değeri civarında salınırlar. Şekil 2.16(b)'de ferrimanyetik çözüm mevcuttur ve bu çözümde $m_A(wt)$ ve $m_B(wt)$ sırasıyla ± 2 ve $\pm 5/2$ değerleri etrafında salınırlarken i₁ fazına karşılık gelmektedir. Bu temel çözümler başlangıç değerlerine bağlı değildir. Şekil 2.16(c) ve Şekil 2.16(d)'de iki farklı çözüm mevcut iken Şekil 2.16(e)'de üç çözüm mevcuttur. Şekil 2.16(c)'de i1 ve i2 fazları bir arada bulunmaktadır. İlk çözümde, $m_A(wt) = \pm 2$ civarında salınırken, $m_B(wt) = \pm 5/2$ salınır ve burada ferrimanyetik-I (i₁) fazı elde edilmiştir. İkinci çözümde ise $m_A(wt) = \pm 1$ ve $m_B(wt) = \pm 5/2$ değeri civarında salınırlar, yani sistemde ferrimanyetik-II (i₂) faz elde edilmiştir. Böylece, sistemde i₁ + i₂ karma fazı bulunmaktadır. Şekil 2.16(d)'de i1 ve p fazları bir arada bulunmaktadır. Buradaki ilk çözümde $m_A(wt) = \pm 2$ civarında salınırken, $m_B(wt) = \pm 5/2$ salınır. Bundan dolayı sistemde i₁ fazı mevcuttur. İkinci çözümde ise $m_A(wt)$ ve $m_B(wt)$ sıfır değeri civarında salınırlar ve burada p fazı elde edilir. Bundan dolayı sistemde $i_1 + p$ karma fazı mevcuttur. Şekil 2.16(e)'de i1, i2 ve p fazları bir arada bulunmaktadır. Buradaki ilk çözümde $m_A(wt) = \pm 2$ civarında salınırken, $m_B(wt) = \pm 5/2$ değerleri etrafında salınırlar. Bundan dolayı sistemde i₁ fazı mevcuttur. İkinci çözümde ise $m_A(wt) = \pm 1$ ve $m_B(wt) = \pm 5/2$ değerleri etrafında salınır. Bundan dolayı sistemde i₂ fazı mevcuttur. Üçüncü çözümde ise $m_A(wt)$ ve $m_B(wt)$ sıfır değeri civarında salınırlar ve burada p fazı elde edilir Bundan dolayı, sistemde $i_1 + i_2 + p$ karma fazı mevcuttur.

2.3.3.2. Dinamik Faz Geçiş Noktaları

Sistemde mevcut olan fazlar arasındaki dinamik faz sınırlarını belirleyebilmemiz için, dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıklarını hesaplamalı ve dinamik faz geçişlerinin doğasını

(kesikli veya sürekli yani birinci- veya ikinci-derece faz geçişleri) karakterize etmeliyiz. Daha sonra dinamik faz diyagramlarını sunabiliriz. DFG sıcaklıkları, bir periyot başına ortalama düzen parametresinin yani dinamik mıknatıslanmaların, histerezis çevrim bölgesinin ve korelasyon davranışının indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak incelenmesiyle elde edilecektir. Bu amaç için Eşitlik 2.69 ve Eşitlik 2.70, etkileşme parametrelerinin bir kaç değeri için sıcaklığın bir fonksiyonu olarak Adams-Moulton kestirme ve düzeltme ile Romberg integrasyon yöntemi gibi nümerik metotların birleştirilmesiyle incelendi.

Dinamik düzen parametreleri veya salınımlı dış manyetik alanın bir periyodu üzerinden mıknatıslanmaların zaman ortalaması olarak dinamik mıknatıslanmalar,

$$M_{A,B} = \frac{W}{2\pi} \int m_{A,B} dt,$$
 (2.62)

ifadesi yardımıyla hesaplanır. Diğer taraftan, histerezis çevrim bölgesi,

$$A = -\int m_{A,B}(t) dh = -h_0 w \int m_{A,B}(t) \cos(wt) dt, \qquad (2.63)$$

şeklindedir. Dinamik korelasyon,

$$C = \frac{W}{2\pi} \int m_{A,B}(t) h(t) dt = \frac{Wh_0}{2\pi} \int m_{A,B}(t) \sin(Wt) dt, \qquad (2.64)$$

şeklindedir.

Bu dinamik mıknatıslanmaların, histerisis çevrim bölgesinin ve dinamik korelasyonun davranışı etkileşme parametrelerinin farklı değerleri için indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak Adams-Moulton kestirme ve düzeltme ile Romberg integrasyon yönteminin birleştirilmesiyle incelendi. Fazlar arasındaki dinamik faz sınırlarının, DFG sıcaklılarının nasıl elde edildiği Şekil 2.17 ve Şekil 2.18'de gösterilmektedir. Bu şekillerde, T_c/zJ ferrimanyetik-I (i₁) fazından paramanyetik (p) fazına ikinci-derece faz geçiş sıcaklığını gösterirken, T_t/zJ paramanyetik (p) fazından ferrimanyetik-I (i₁) fazına



Şekil 2.16. Karma spin-2 ve spin-5/2 Blume-Capel modeli için ortalama mıknatıslanmaların zamanla değişimi. (a) Sistemde paramanyetik (p) faz mevcuttur (D/zJ = 0.025, h/zJ = 2.0 ve T/zJ = 2.0). (b) Sistemde ferrimanyetik-I (i₁) fazı mevcuttur (D/zJ = -0.375, h/zJ = 1.0 ve T/zJ = 0.7). (c) Sistemde $i_1 + i_2$ karma fazı mevcuttur (D/zJ = 0.025, h/zJ = 0.5 ve T/zJ = 1.5). (d) Sistemde $i_1 + p$ karma fazı mevcuttur (D/zJ = -0.5, h/zJ = 1.0 ve T/zJ = 0.9). (e) Sistemde $i_1 + i_2 + p$ karma fazı mevcuttur (D/zJ = 0.025, h/zJ = 0.5 ve T/zJ = 1.5).

birinci-derece faz geçiş sıcaklıklarını göstermektedir. Şekil 2.17(a), D/zJ = -0.25 ve h/zJ = 0.15 için M_{A,B}, A ve C'nin davranışını indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak

göstermektedir. Bu şekilde, sıfır sıcaklıkta $M_A = 2$ ve $M_B = 5/2$ 'dir ve bu düzen parametresi indirgenmiş sıcaklık artarken sürekli olarak azalarak, $T_c/zJ = 1.755$ değerinde sıfır olmaktadır. Böylece sistemde i₁ fazından p fazına $T_c/zJ = 1.755$ değerinde ikinci-derece faz geçişi meydana gelmektedir. Bununla beraber faz geçiş sıcaklığı olan $T_c/zJ = 1.755$ sıcaklık değerinde histerezis çevrim bölgesi (A) sıfır olurken dinamik korelasyon ise sıfırdan farklı negatif bir değere sahip olur.

Şekil 2.17(b) ve Şekil 2.17(c), D/zJ = -0.45 ve h/zJ = 0.45 için M_{A,B}, A ve C'nin indirgenmiş sıcaklıkla değişimini farklı başlangıç değerleri için göstermektedir. Şekil 2.17(a)'da, T = 0'da, M_A = 2 ve M_B = 5/2'dir ve indirgenmiş sıcaklık artarken sürekli olarak azalarak, belirli bir sıcaklıkta yani T_t/zJ= 0.55 değerine ulaştığında süreksiz bir şekilde i₁ fazından p fazına geçiş olmaktadır. Bununla beraber faz geçiş sıcaklığı olan T_t/zJ = 0.55 sıcaklık değerinde histerezis çevrim bölgesi (A/zJ) ve korelasyon (C/zJ) ise sıfırdan farklı pozitif bir değere sahip olur. Şekil 2.17(c)'de bütün sıcaklık değerleri için M_{A,B} daima sıfıra eşittir. Dolayısı ile sistem faz geçişi vermemektedir ve bu durum paramanyetik faza karşılık gelmektedir. Ayrıca, bu durumda sıcaklık sıfırdan artırılınca A/zJ sıfır olurken ve C/zJ sıfır değerden belirli bir pozitif değere artar. Şekil 2.17(a) ve (b) dikkatli incelendiğinde sistemde T_t/zJ sıcaklığına kadar karma i₁ + p fazı bulunurken, T_t/zJ sıcaklığından sonra sadece p fazı bulunmaktadır. Bu gerçekler Şekil 2.18(e)'deki faz diyagramında açıkça görülebilir.

2.3.3.3. (T/zJ, h/zJ) Düzleminde Dinamik Faz Diyagramları

DFG sıcaklıklarını elde ettikten sonra sistemin dinamik faz diyagramlarını (T/zJ, h/zJ) düzleminde sunabiliriz. Bu kesimde, kristal alan etkileşim parametresi (D/zJ)'nin farklı değerleri için (T/zJ, h/zJ) düzleminde elde edilen dinamik faz diyagramları Şekil 2.18'de gösterilmiştir. Şekillerde kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş çizgilerini, içi dolu daireler dinamik üçlü kritik noktayı, Z dinamik sıfır-sıcaklık kritik noktayı, B dinamik çift kritik son noktayı, E dinamik kritik son noktayı ve TP dinamik üçlü noktayı göstermektedir. Şekillerden görüleceği gibi sistem ya dinamik üçlü kritik nokta içermemekte ya da bir tane dinamik üçlü-kritik nokta içermektedir. Son olarak, dinamik ortalama alan yaklaşımında bazı birinci-derece faz geçiş çizgilerinin sanallığını gösterebilmek ve korelasyonların etkisini görebilmek için,

aynı sistem dinamik ortalama alan yaklaşımı kullanılarak çözülmüş, sistemin dinamik faz diyagramları (T/zJ, h/zJ) düzleminde sunulmuş ve Şeklil 2.19'da gösterilmiştir.

Şekil 2.18'de yedi farklı tipte dinamik faz diyagramı elde edilmiştir. Bu dinamik faz diyagramları:

i) D/zJ = 0.025 için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.18(a)'da gösterilmiştir. Bu faz diyagramında, yüksek indirgenmiş sıcaklıkta (T/zJ) ve yüksek indirgenmiş manyetik alan genliğinde (h/zJ), paramanyetik (p) faz mevcuttur. h/zJ ve T/zJ' nin düşük değerlerinde ise ferromanyetik-I (i₁) ve ferrimanyetik-II (i₂) fazlarının bir arada bulunduğu karma i₁ + i₂ fazı gözlenmektedir. Bu iki bölge arasındaki dinamik faz sınırı, i₁ + i₂ \rightarrow p, ikinci-derece faz geçiş çizgisidir. İndirgenmiş sıcaklığın yüksek ve indirgenmiş manyetik alan genliğinin düşük değerlerinde i₁ ve p fazlarının birlikte bulunduğu i₁ + p karma fazı ile i₁, i₂ ve p fazlarının bir arada bulunduğu i₁ + i₂ + p karma fazı bulunmaktadır. i₁ + i₂ karma fazı, i₁ + i₂ + p ve p fazlarından birinci-derece faz geçiş çizgisiyle ayrılmıştır. Sistem aynı zamanda bir dinamik üçlü kritik nokta yanında bir dinamik çift kritik son nokta (B) sergilemektedir.

ii) D/zJ = 0.25 için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.18(b)'de gösterilmiştir. Bu faz diyagramı Şekil 2.18(a)'ya benzemekle birlikte Şekil 2.18(a)'dan farklı olarak: 1) T/zJ'nin düşük ve h/zJ'nin yüksek değerlerinde $i_2 + i_1 + p$ karma fazı kaybolmakta ve bunun sonucu olarak dinamik çift kritik son nokta (B) kaybolmaktadır. 2) Sistemde bir adet dinamik üçlü nokta (TP) meydana gelmektedir. Bu tip faz diyagramının benzeri kinetik spin-1/2 [140], spin-1 [157, 160], spin-3/2 [162, 165] (bu çalışmalarda i_1 fazı yerine $f_{3/2}$ fazı meydana gelmektedir) ve spin-2 [167] (bu çalışmalarda i_1 fazı yerine f_2 fazı meydana gelmektedir) Ising sistemlerinde elde edilmiştir. Ayrıca bu faz diyagramı karma spin (1/2, 1) [209], (1, 3/2) [220] ve (1/2, 3/2) [217] Ising sistemlerinde de elde edilmiştir.

iii) D/zJ = -0.25 elde edilen faz diyagramı Şekil 2.18(c)'de gösterilmiştir. Bu faz diyagramı Şekil 2.18(b)'ye benzemekle birlikte Şekil 2.18(b)'den farklı olarak dinamik üçlü nokta kaybolmakta (TP) ve sistemde Ayrıca sistemde re-entrant davranış



gözlenmektedir. Yani, sistem sıcaklık artarken paramanyetik (p) fazdan $i_1 + p$ fazına ve yeniden p fazına geri dönmektedir.

121

Şekil 2.17. Karma spin-2 ve spin-5/2 Blume-Capel modeli için dinamik mıknatıslanmaların (M_{A,B}), histerezis çevrim bölgesinin (A/zJ) ve korelasyonun (C/zJ) sıcaklığa bağlı olarak iki farklı başlangıç değeri için davranışları. T_c/zJ ferrimanyetik-I (i₁) fazdan paramanyetik faza (p) ikinciderece faz geçiş sıcaklığını gösterirken T_t/zJ ferrimanyetik-I (i₁) fazdan paramanyetik (p) fazına birinci-derece faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.

iv) Şekil 2.18(d), D/zJ = -0.375 değerinde elde edilen dinamik faz diyagramlarını göstermektedir. Bu faz diyagramında, sistem p, i₁ temel fazlarının yanı sıra i₁ + p karma fazına sahiptir ve bu fazlar arasındaki dinamik faz sınırı i₁ ile p arasında h/zJ ve T/zJ'nin yüksek değerleri için birinci-derece iken h/zJ ve T/zJ'nin düşük değerleri için ikinci-derece faz geçiş çizgisidir. Dolayısı ile sistemde bir tane dinamik faz geçiş çizgisi ikinci-derece faz geçiş çizgisidir. Diğer taraftan i₁ + p ile p arasındaki dinamik faz geçiş çizgisi ikinci-derece faz geçiş çizgisidir. Diğer fazlar arasındaki dinamik faz geçiş çizgisi birinci-derece faz geçiş çizgisidir. Diğer fazlar arasındaki dinamik faz geçiş çizgisi birinci-derece faz geçiş çizgisidir. Sistemde bir dinamik kritik son nokta (E) ve bir dinamik sıfır-sıcaklık kritik nokta mevcuttur. Bu tip faz diyagramının benzeri kinetik spin-2 BC [245] (bu çalışmada ferrimanyetik fazı yerine ferromanyetik faz meydana gelirken karma fazlarda farklı olmaktadır) Ising sisteminde elde edilmiştir.

v) D/zJ = -0.45 için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.18(e)'de gösterilmiştir. Bu faz diyagramı Şekil 2.18(d)'ye benzemekle birlikte Şekil 2.18(d)'den farklı olarak, T/zJ ve h/zJ'nin düşük değerlerinde $i_1 + p$ karma fazı ile E dinamik kritik son nokta yok olmaktadır.

vi) D/zJ = -0.5 için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.18(f)'de sunulmuştur. Bu faz diyagramında, sistem p ve i₁ + p fazlarına sahiptir ve bu fazlar arasındaki dinamik faz sınırı birinci-derece faz geçiş çizgisidir. Dolayısı ile sistemde dinamik üçlü kritik nokta bulunmamaktadır.

Şekil 2.19'da iki farklı tipte dinamik faz diyagramı elde edilmiştir. Bu dinamik faz diyagramları:

i) Şekil 2.19(a), D/zJ = -0.375 değerinde elde edilen dinamik faz diyagramlarını göstermektedir. Bu faz diyagramında, sistem p ve i₁ temel fazlarının yanında i₁ + p karma fazına sahiptir ve bu fazlar arasındaki dinamik faz sınırı i₁ ile p arasında h/zJ ve T/zJ'nin yüksek değerleri için ikinci-derece iken diğer bütün fazlar arasındaki dinamik faz sınırı birinci-derece faz geçiş çizgisidir. Sistemde bir tane dinamik üçlü kritik noktanın yanında bir tane dinamik üçlü nokta (TP) mevcuttur.

ii) D/zJ = -0.45 için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.19(b)'de gösterilmiştir. Bu faz diyagramında, i₁ ve p temel fazları ile i₁ + p karma fazı mevcuttur. i₁ + p ile p fazları

ikinci-derece, diğer fazlar ise birinci-derece dinamik faz geçiş çizgisiyle birbirinden ayrılmıştır. Ayrıca sistemde bir dinamik kritik son nokta (E) mevcuttur.

Korelasyonun etkisini ve dinamik ortalama-alan yaklaşımındaki bazı birinci-derece faz geçişlerinin sanal olup olmadıklarını görebilmek için, Şekil 2.18 (d) ile Şekil 2.19 (a) ve Şekil 2.18 (e) ile Şekil 2.19 (b) karşılaştırıldığında aşağıdaki sonuçlar elde edilir:

1) Şekil 2.19 (a)'da yalnızca i_1 ile p fazları arasındaki dinamik faz sınırı T/zJ ve h/zJ'nin yüksek değerleri için ikinci-dereceden faz geçiş çizgisidir, diğer fazlar arasındaki dinamik faz sınırları birinci-derece faz geçiş çizgileridir. Şekil 2.19 (b)'de yalnızca $i_1 + p$ ile p fazları arasındaki dinamik faz sınırları birinci-derece faz geçiş çizgileridir. Diğer fazlar arasındaki dinamik faz sınırları birinci-derece faz geçiş çizgileridir. Diğer taraftan, Şekil 2.18 (d)'de, yalnızca $i_1 + p$ ile p ve i_1 ile p fazları arasındaki dinamik faz sınırları birinci-derece faz geçiş çizgileridir. Diğer taraftan, Şekil 2.18 (d)'de, yalnızca $i_1 + p$ ile p ve i_1 ile p fazları arasındaki dinamik faz sınırları ikinci-derece faz geçiş çizgileridir. Şekil 2.18 (e)'de, yalnızca $i_1 + p$ ile p fazları arasındaki dinamik faz sınırları ikinci-derece faz geçiş çizgileridir. Şekil 2.18 (e)'de, yalnızca $i_1 + p$ ile p fazları arasındaki dinamik faz sınırları ikinci-derece faz geçiş çizgileridir. Şekil 2.18 (e)'de, yalnızca $i_1 + p$ ile p fazları arasındaki dinamik faz sınırları ikinci-derece faz geçiş çizgileridir. Şekil 2.18 (e)'de, yalnızca $i_1 + p$ ile p fazları arasındaki dinamik faz sınırları ikinci-derece faz geçiş çizgileridir. Şekil 2.18 (e)'de, yalnızca $i_1 + p$ ile p fazları arasındaki dinamik faz sınırları arasındaki dinamik faz sınırları arasındaki dinamik faz sınırları arasındaki dinamik faz sınırları arasındaki dinamik faz sınırları arasındaki dinamik faz sınırları arasındaki dinamik faz sınırları arasındaki dinamik faz sınırları arasındaki dinamik faz sınırları arasındaki dinamik faz sınırları arasındaki dinamik faz sınırları arasındaki dinamik faz sınırları arasındaki dinamik faz sınırları arasındaki dinamik faz sınırları arasındaki dinamik faz sınırları arasındaki dinamik faz sınırları arasındaki dinamik faz sınırları arasındaki dinamik faz sınırları arasındaki dinamik faz sınırları arasındaki dinamik faz sınırları arasındaki dinamik faz sınırları arasındaki dinamik faz sınırları arasındaki dina

Şekil 2.19(a)'da görüldüğü gibi dinamik üçlü kritik nokta, dinamik ortalama-alan yaklaşımında T/zJ'nin düşük h/zJ'nin yüksek değerleri için meydana gelirken Şekil 2.18 (d)'de görüldüğü gibi dinamik etkin-alan yaklaşımında T/zJ'nin yüksek h/zJ'nin düşük değerleri için meydana gelmektedir. Diğer taraftan, Şekil 2.18 (e)'de dinamik üçlü kritik nokta sergilerken Şekil 2.19 (b)'de sistem dinamik üçlü kritik nokta yerine dinamik üçlü kritik son nokta (E) sergilemektedir.

Bu bölümde elde edilen sonuçlar Physical Review E dergisinde inceleme altındadır [247].



Şekil 2.18. Karma spin-2 ve spin-5/2 Blume-Capel modelinin (T/zJ, h/zJ) düzleminde dinamik faz diyagramları. Sistemde p, i₁ temel fazlarının yanında altı adet $i_1 + p$, $i_1 + i_2$ ve $i_1 + i_2 + p$ karma fazları mevcuttur. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş çizgilerini göstermektedir. İçi dolu daireler dinamik üçlü kritik noktayı gösterir. (a) D/zJ = 0.25. (b) D/zJ = -0.275. (c) D/zJ = -0.3. (d) D/zJ = -0.375. (e) D/zJ= -0.45. (f) D/zJ = -0.5.


Şekil 2.19. Şekil 2.18 ile aynı fakat sistemin dinamik faz diyagramları dinamik ortalama-alan yaklaşımı kullanılarak elde edildi. (a) D/zJ = 0.25. (b) D/zJ = -0.275. (c) D/zJ = -0.3. (d) D/zJ = -0.375. (e) D/zJ = -0.45. (f) D/zJ = -0.5.

3. BÖLÜM

SONUÇ-TARTIŞMA VE ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında, denge durumu birçok farklı metot ile ayrıntılı bir şekilde incelenen fakat dinamik davranışı, en iyi bilgilerimiz dahilinde, bu tez çalışması kapsamı dışında incelenmemiş olan karma spin (2, 5/2) Ising sisteminin dinamik davranışı hem Glauber geçiş oranları temelli ortalama-alan yaklaşımı (DOAY) hem de Glauber geçiş oranları temelli korelasyonlu etkin-alan teorisi (DEAT) kullanılarak incelendi. Ayrıca, bu karma spin sisteminin dinamik davranışının yanında spin-2 Blume-Capel (BC) ve spin-5/2 BC sistemlerinin dinamik davranışı da DEAT kullanılarak bu tez çalışması kapsamında incelendi.

Birinci bölümdeki giriş bilgilerinden sonra, ikinci bölümde ilk olarak karma spin (2, 5/2) Ising sisteminin dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıkları, dinamik telafi sıcaklıkları ve dinamik faz diyagramları, birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler için DOAY kullanılarak elde edildi. Öncelikle sistemin dinamik davranışını açıklayan ortalama-alan dinamik denklemleri elde edildi. Sistemde mevcut olan fazları bulmak için, Adams-Moulton kestirme ve düzeltme yöntemi kullanılarak ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının zamana bağlı olarak davranışları incelendi. Sistemde, paramanyetik (p), ferremanyetik-I (i₁), ferrimanyetik-II (i₂), ferrimanyetik-III (i₃), ferrimanyetik-IV (i₄) ve manyetik olmayan (nm) temel fazlarının yanında yedi farklı karma faz bulundu. Bu karma fazlar, i_1 ve p fazlarının bir arada olduğu $i_1 + p$ karma fazı, i_1 ve nm fazlarının bir arada olduğu i_1 + nm karma fazı, i_2 ve p fazlarının bir arada olduğu $i_2 + p$ karma fazı, i_2 ve nm fazlarının bir arada olduğu $i_2 + nm$ karma fazı, i_3 ve p fazlarının bir arada olduğu $i_3 + p$ karma fazı ve i_4 ve p fazlarının bir arada olduğu $i_4 + p$ karma fazlarıdır. Temel fazlar Şekil 1.2 ve karma fazlar Şekil 1.3'te gösterildi. Daha sonra, bir periyot içinde ortalama düzen parametrelerinin veya dinamik düzen parametrelerinin indirgenmiş sıcaklığa ve indirgenmiş tek-iyon anizotropisine bağlı davranışları, Adams-Moulton kestirme ve düzeltme yöntemi ve Romberg integrasyon yöntemi kullanılarak incelendi. Sonuçta dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıkları tespit edildi ve aynı zamanda dinamik faz geçişlerinin doğası (kesikli veya sürekli yani birinci veya ikinci-derece faz geçişleri) karakterize edildi. Sistemde dinamik telafi sıcaklıklarını bulabilmek için dinamik toplam mıknatıslanmanın sıcaklığın bir fonksiyonu olarak davranışı incelendi. Dinamik alt örgü mıknatıslanmalarının ve toplam dinamik mıknatıslanmaların sıcaklığa bağlıkları Şekil 1.4-Şekil 1.7'de gösterildi. Daha sonra sistemin dinamik faz diyagramları, etkileşme parametrelerinin farklı değerlerine göre (d, T), (J₂, T), (-J₃, T), (d, J₂) ve (d, -J₃) düzlemlerinde elde edildi ve bu faz diyagramları Şekil 1.8-Şekil 1.12'de gösterildi. (d, T) düzleminde vedi, diğer düzlemlerde ise birer adet farklı topolojide dinamik faz diyagramı elde edildi. Etkileşme parametrelerine bağlı olarak elde edilen bu dinamik faz diyagramlarından Şekil 1.8 (a)-(f)'de elde edilen faz diyagramları bir adet; Şekil 1.8 (g)'de elde edilen dinamik faz diyagramı ise iki adet dinamik üçlü kritik nokta içermektedir. Şekil 1.9-Şekil 1.12' de ede edilen dinamik faz diyagramları dinamik üçlü kritik nokta içermemektedir. Yine etkileşme parametrelerine bağlı olarak, dinamik telafi sıcaklığı etkisi yani alt örgü mıknatıslanmalarının birbirini yok ettiği ve toplam mıknatıslanmanın ortadan kaybolduğu durum Şekil 1.8(a)'daki dinamik faz diyagramında gözlenmezken, elde edilen diğer dinamik faz diyagramlarında telafi sıcaklığı etkisi gözlenmektedir. Ayrıca, Şekil 1.8 (e)-(g)'de elde edilen dinamik faz diyagramları dinamik üçlü nokta (TP), Şekil 1.8 (f)'de elde faz diyagramı TP'nin yanında dinamik dörtlü nokta (QP) ve Şekil 1.11'de elde edilen dinamik faz diyagramı ise dinamik kritik son nokta (E) gibi özel noktalar içermektedir. Bu karma spin sistemi için (J₂, T) düzleminde elde edilen dinamik faz diyagramına benzer faz diyagramı daha önce birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerinde karma spin (1/2, 1) [204] Ising sisteminde de elde edilmiştir.

Birinci bölümünün ikinci kısmında, karma spin (2, 5/2) Ising sisteminin DFG sıcaklıkları ve dinamik faz diyagramları DOAY kullanılarak iki tabakalı kare örgü üzerinde elde edildi. Birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerindeki işlemlere benzer işlemler yapılarak, sistemde mevcut olan fazlar ve DFG sıcaklıkları tespit edildi. Böylece, sistemde paramanyetik (p), ferromanyetik (f), antiferromanyetik (af), yüzey

(sf), telafi (c), karma (m) ve manyetik olmayan (nm) temel fazlarının yanı sıra f ve p fazlarının bir arada bulunduğu f + p karma fazı; f ve c fazlarının bir arada bulunduğu f + c karma fazı; f ve nm fazlarının bir arada bulunduğu f + nm karma fazı; c ve p fazlarının bir arada bulunduğu c + p karma fazı; c ve nm fazlarının bir arada bulunduğu c + nm karma fazı; af ve m fazlarının bir arada bulunduğu af + m karma fazı; af ve p fazlarının bir arada bulunduğu af + p karma fazı, m ve p fazlarının bir arada bulunduğu m + p karma fazı; nm ve p fazlarının bir arada bulunduğu nm + p karma fazı ve f, nm, p fazlarının bir arada bulunduğu f + nm + p karma fazlarının olduğu görüldü. Sistemde mevcut olan bu fazları elde etmek için ortalama düzen parametrelerinin zamanla değişimleri incelendi ve temel fazlar (p, f, c, af, m, sf ve nm). Şekil 1.14'de, karma fazlar (f + p, c + p, af + p, m + p, sf + p ve nm + p karma fazları) Şekil 1.15'de gösterildi. Daha sonra dinamik alt örgü mıknatıslanmalarının sıcaklığa bağlı davranışları incelenerek DFG sıcaklıkları tespit edildi ve aynı zamanda dinamik faz geçişlerinin doğası (kesikli veya sürekli yani birinci- veya ikinci-derece faz geçişleri) karakterize edildi. Dinamik alt örgü mıknatıslanmalarının sıcaklığa bağlılıkları Şekil 1.16-Şekil 1.19'da verildi. Daha sonra sistemin dinamik faz diyagramları, tabakalar içi etkileşim parametreleri olan J₁ ve J₂'nin hem ferromanyetik/ferrmanyetik (FM/FM) (yani $J_1 > 0, J_2 > 0$) hem de antiferromanyetik /ferromanyetik (AFM/FM) (yani $J_1 < 0, J_2$) > 0) olduğu durumlar için DFG noktalarından faydalanarak (T, h) düzleminde elde edildi. Sistemin dinamik faz diyagramları FM/FM durumu için Şekil 1.20 ve Şekil 1.21'de gösterilirken AFM/FM durumu için Şekil 1.22 ve Şekil 1.23' de gösterildi. FM/FM durumu için on üç ve AFM/FM durumu için on bir farklı topolojide dinamik faz diyagramları elde edildi. Etkileşme parametrelerine bağlı olarak elde edilen bu dinamik faz diyagramlarından; Şekil 1.21 (b)-(h) ve Şekil 1.23'de elde edilen faz diyagramları bir adet ve Sekil 1.21 (a)'da elde edilen faz diyagramı iki adet dinamik üçlü kritik nokta içermektedir. Şekil 1.20 ve Şekil 1.22'deki faz diyagramları dinamik üçlü kritik nokta içermemektedir. Ayrıca, (T, h) düzleminde elde edilen bu faz diyagramlarından Şekil 1.21 (d)'de elde edilen dinamik faz diyagramının benzeri, daha önce kinetik spin-1/2 [140], spin-1 [157, 159, 160], spin-3/2 [162, 164, 165], spin-2 [167,168], spin-5/2 [169, 170] Ising sistemlerinde elde edilmistir. Bu faz diyagramına

benzeri faz diyagramları karma spin (1/2, 1) [209, 210], spin (1/2, 5/2) [217] ve spin

(3/2, 5/2) [218], spin (1, 3/2) [219], spin (1/2, 2) [220], spin (1, 5/2) [221], spin (3/2, 2)

[222], spin (1, 2) [223] Ising modellerinde de elde edilmiştir (bu karma spin Ising çalışmalarında f fazının yerine i fazı gelmektedir).

Tezin ikinci bölümünde sırasıyla tek örgülü spin-2 Blume-Capel (BC), spin-5/2 BC ve karma spin (2, 5/2) Ising sistemlerinin dinamiği DEAT ile incelendi. Spin-2 BC modeli beş durumlu bir model olduğundan çalışması düşük spinli modellere göre daha zor, fakat elde edilen faz diyagramları oldukça zengindir. Öncelikle, sistemin dinamik davranışını açıklayan etkin-alan dinamik denklemleri, kare örgü üzerinde Glauber geçiş oranları temelli korelasyonlu etkin-alan teorisi ile elde edildi. Elde edilen bu diferansiyel denklem Adams-Moulton kestirme ve düzeltme, Runge-Kutta, vb gibi nümerik yöntemlerle çözüldü ve ortalama düzen parametresinin zamana göre değişimi kapsamlıca incelenerek sistemde oluşan fazlar tespit edildi. Sistemde paramanyetik (P), ferromanyetik-2 (F2) ve ferromanyerik-1 (F1) temel fazlarının yanı sıra F2 ve P fazlarının bir arada bulunduğu $F_2 + P$ karma fazı; F_1 ve P fazlarının bir arada bulunduğu $F_1 + P$ karma fazı ve F_2 , F_1 ve P fazlarının bir arada bulunduğu $F_2 + F_1 + P$ karma fazlarının olduğu görüldü. Temel fazlara karşılık gelen çözümler Şekil 2.2'de ve karma fazlara karşılık gelen cözümler Sekil 2.3'te gösterildi. Daha sonra sistemde mevcut olan fazlar arasındaki dinamik faz sınırlarını (kesikli veya sürekli yani birinci- veya ikinciderece faz geçişleri) belirleyebilmek için, dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıklarını hesaplandı. DFG sıcaklıkları bir periyot başına ortalama düzen parametresinin yani dinamik mıknatıslanmanın, histerezis çevrim bölgesinin ve korelasyonun davranışının indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak incelenmesiyle elde edildi. Dinamik mıknatıslanmanın, histerezis çevrim bölgesinin ve korelasyonun, sıcaklığa bağlılıkları Şekil 2.4 ve Şekil 2.5'de verildi. Daha sonra sistemin dinamik faz diyagramları, (T/zJ, h/zJ) düzleminde elde edilip Şekil 2.6'da gösterildi. Ayrıca, (T, h) düzleminde elde edilen bu faz diyagramlarından Şekil 2.6 (a)'da elde edilen dinamik faz diyagramının benzeri, kinetik spin-1/2 [140], spin-1 [157, 160], spin-3/2 [162, 165] (bu çalışmalarda F_2 fazı yerine $f_{3/2}$ fazı meydana gelmektedir) ve spin-2 [167] Ising sistemlerinde elde edilmiştir. Ayrıca bu faz diyagramı karma spin (1/2, 1) [209], (1, 3/2) [219] (bu calışmada F₂ fazı yerine i fazı meydana gelmektedir) ve (1/2, 3/2) [216] Ising sistemlerinde de elde edilmiştir.

İkinci bölümün ikinci kısmında spin-5/2 BC modelinin DFG sıcaklıkları ve dinamik faz diyagramları kare örgü için DEAT kullanılarak elde edildi. Spin-5/2 BC modeli altı durumlu bir model olduğundan çalışması spin-2 BC modeline göre daha zor, fakat elde edilen faz diyagramları oldukça zengindir. Öncelikle, sistemin dinamik davranışını açıklayan etkin-alan dinamik denklemleri, kare örgü üzerinde Glauber geçiş oranları temelli korelasyonlu etkin-alan teorisi ile elde edildi. Elde edilen bu diferansiyel denklem Adams-Moulton kestirme ve düzeltme, Runge-Kutta, vb gibi nümerik yöntemlerle çözüldü ve ortalama düzen parametresinin zamana göre değişimi kapsamlıca incelenerek sistemde oluşan fazlar tespit edildi. Sistemde paramanyetik (P), ferromanyetik-5/2 ($F_{5/2}$), ferromanyerik-3/2 ($F_{3/2}$) ve ferromanyerik-1/2 ($F_{1/2}$) temel fazlarının yanı sıra $F_{5/2}$ ve P fazlarının bir arada bulunduğu $F_{5/2}$ + P karma fazı; $F_{5/2}$ ve $F_{3/2}$ fazlarının bir arada bulunduğu $F_{5/2} + F_{3/2}$ karma fazı, $F_{5/2}$ ve $F_{1/2}$ fazlarının bir arada bulunduğu $F_{5/2} + F_{1/2}$ karma fazı; $F_{3/2}$ ve $F_{1/2}$ fazlarının bir arada bulunduğu $F_{3/2} + F_{1/2}$ karma fazı; $F_{1/2}$ ve P fazlarının bir arada bulunduğu $F_{1/2}$ + P karma fazı; $F_{5/2}$, $F_{3/2}$ ve $F_{1/2}$ fazlarının bir arada bulunduğu $\mathrm{F}_{5/2}+\mathrm{F}_{3/2}+\mathrm{F}_{1/2}$ karma faz ve $\mathrm{F}_{5/2},\,\mathrm{F}_{3/2},\,\mathrm{F}_{1/2},\,\mathrm{P}$ fazlarının bir arada bulunduğu $F_{5/2} + \, F_{3/2} + \, F_{1/2} + P$ karma fazıdır. Temel fazlara karşılık gelen çözümler Şekil 2.8'de ve karma fazlara karşılık gelen çözümler Şekil 2.9'da gösterildi.

Daha sonra sistemde mevcut olan fazlar arasındaki dinamik faz sınırlarını (kesikli veya sürekli yani birinci- veya ikinci-derece faz geçişleri) belirleyebilmek için, dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıkları hesaplandı. DFG sıcaklıkları bir periyot başına ortalama düzen parametresinin yani dinamik mıknatıslanmanın, histerezis çevrim bölgesinin ve korelasyonun davranışının indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak incelenmesiyle elde edildi. Dinamik mıknatıslanmanın, histerimiz çevrim bölgesinin ve korelasyonun, sıcaklığa bağlılıkları Şekil 2.10 ve Şekil 2.11'de verildi. Daha sonra sistemin dinamik faz diyagramları, (T/zJ, h/zJ) ve (T/zJ, D/zJ) düzleminde elde edilip Şekil 2.12 ve Şekil 2.13'de gösterildi. (T, h) düzleminde elde edilen bu faz diyagramlarından Şekil 2.13 (a)'da elde edilen dinamik faz diyagramının benzeri kinetik spin-1/2 [140], spin-1 [157, 159], spin-3/2 [162, 165] (bu çalışmalarda $F_{5/2}$ fazı yerine $F_{3/2}$ fazı meydana gelmektedir) ve spin-2 [167, 245] Ising sistemlerinde elde edilmiştir. Ayrıca bu faz diyagramı karma spin (1/2, 1) [209], (1, 3/2) [219] (bu çalışmada $F_{5/2}$ fazı yerine i fazı meydana gelmektedir) ve (1/2, 3/2) [218] Ising sistemlerinde de elde edilmiştir.

Tezin son kısmında karma spin (2, 5/2) Ising sisteminin DFG sıcaklıkları ve dinamik faz diyagramları kare örgü için DEAT kullanılarak elde edildi. Öncelikle, sistemin dinamik davranışını açıklayan etkin-alan dinamik denklemleri, kare örgü üzerinde Glauber geçiş oranları temelli korelasyonlu etkin-alan teorisi ile elde edildi. Elde edilen bu diferansiyel denklemler Adams-Moulton kestirme ve düzeltme, Runge-Kutta, vb gibi nümerik yöntemlerle çözüldü ve ortalama düzen parametrelerinin zamana göre değişimi kapsamlıca incelenerek sistemde oluşan fazlar tespit edildi. Sistemde paramanyetik (p), ferrimanyetik-I (i1) ve ferromanyetik-II (i2) temel fazlarının yanı sıra i1 ve p fazlarının bir arada bulunduğu $i_1 + p$ karma fazı; i_1 ve i_2 fazlarının bir arada bulunduğu $i_1 + i_2$ karma fazı ve i1, i2 ve p fazlarının bir arada bulunduğu i1 + i2+ p karma fazlarının olduğu görüldü. Bu çözümler Şekil 2.16'da gösterildi. Daha sonra sistemde mevcut olan fazlar arasındaki dinamik faz sınırlarını (kesikli veya sürekli yani birinci- veya ikinciderece faz geçişleri) belirleyebilmek için, dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıkları hesaplandı. DFG sıcaklıkları bir periyot başına ortalama düzen parametrelerinin yani dinamik mıknatıslanmaların, histerezis çevrim bölgesinin ve korelasyonun davranışının indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak incelenmesiyle elde edildi. Dinamik mıknatıslanmaların, histerezis çevrim bölgesinin ve korelasyonun, sıcaklığa bağlılıkları Şekil 2.17'de verildi. Daha sonra sistemin dinamik faz diyagramları, (T/zJ, h/zJ) düzleminde elde edilip Şekil 2.18'de gösterildi. Şekil 2.18(b)'de elde edilen faz diyagramının benzeri spin-1/2 [140], spin-1 [157, 160], spin-3/2 [162, 165] (bu çalışmalarda i_1 fazı yerine $f_{3/2}$ fazı meydana gelmektedir) ve spin-2 [167] (bu çalışmalarda i1 fazı yerine f2 fazı meydana gelmektedir) Ising sistemlerinde elde edilmiştir. Ayrıca bu faz diyagramı karma spin (1/2, 1) [209], (1, 3/2) [219] ve (1/2, 3/2) [216] Ising sistemlerinde de elde edilmiştir. Son olarak, dinamik ortalama alan yaklasımında bazı birinci-derece faz geçiş çizgilerinin sanallığını ve korelasyonların etkisini görebilmek için, aynı sistem dinamik ortalama alan yaklaşımı kullanılarak çözüldü ve sistemin dinamik faz diyagramları (T/zJ, h/zJ) düzleminde sunuldu ve Şekil 2.19'da gösterildi.

Bu tez çalışmamızın, DFG sıcaklıklarını çalışmalarını daha fazla bilgisayar zamanı ve kapasitesi isteyen DMC ve renormalizasyon teknikleri gibi daha duyarlı ve iyi sonuç veren yöntemlerle araştırmaya çalışan veya çalışacak bilim adamlarına temel oluşturma

niteliğinde olmasını ümit etmekteyiz. Aynı zamanda, deneysel yapılan ve yapılacak olan DFG çalışmalarına az da olsa ışık tutacağını düşünmekteyiz.

Son olarak, bu tez çalışması kapsamında yapılan analizlerden elde edilen tecrübe ve birikimler ışığında aşağıda önerilen çalışmalar yapılabilir:

1- Glauber-tipi stokastik dinamik kullanılarak değişik ve özellikle de daha karmaşık fiziksel sistemlerin dinamik davranışları incelenebilir ve dinamik faz diyagramları, elde edilebilir.

2- Hesaplamaların belli aşamasından sonra kullandığımız ortalama-alan yaklaşımı (OAY), sistemlerdeki dalgalanmaların korelasyonlarını içermediğinden dolayı, şayet sistem birinci dereceden enerji kuyusuna gelirse, buradan en düşük enerjili duruma geçemeyecektir. Çünkü OAY'nda gürültü ve dalgalanmalar hesaplamalar içine girmemektedir. Bundan dolayı da faz diyagramlarında bulunmuş olan bazı birinciderece faz geçiş çizgileri ve dolayısıyla bazı özel noktalar, özellikle dinamik üçlü kritik nokta, dinamik çift kritik son nokta ve dinamik kritik son nokta gibi özel noktalar, muhtemelen OAY'nın bir yapay sonucu olabilir. Bu yüzden tezin üçüncü bölümünde spin dalgalanmalarının ilişkilerini (correlations) hesaplamalara katan DEAT yöntemi kullanıldı ve yukarıda bahsedilen OAY'ından kaynaklanan eksiklikler çalışmalarda gözlendi. Dolayısıyla, bu ve benzeri sistemlerin aşağıda belirtilen ve daha hassas sonuç veren başka yöntemlerle incelenmesi önem arz etmektedir.

- i. Dinamik Monte Carlo (DMC) hesaplamaları: Bu metot daha hassas sonuç veren yöntemdir. Fakat, bu yöntemin yüksek spinli, spin-1 ve spin-3/2, v.b. gibi sistemlere, ve karma-spin sistemlerine uygulanması daha da zordur. Özellikle: düzen parametrelerinin tanımlanması en büyük zorluk olarak karşımıza çıkmaktadır. Dolayısıyla, DMC kullanılırken düzen parametrelerinin tanımına dikkat edilmesi önem arz etmektedir.
- ii. Kikuchi [247] tarafından geliştirilen zamana bağlı çift yaklaşım (ZBÇY) yöntemi: Bu yöntem, gerçek fiziksel sistemler dahil olmak üzere birçok farklı sistemlerin dengesiz davranışlarını incelemede kullanılan önemli dinamik

yöntemlerden birisidir. Dolayısıyla bu yöntem DFG sıcaklıklarının hesaplanması ve dinamik faz diyagramlarının elde edilmesi araştırmalarında önemli bir dinamik yöntem potansiyeline sahiptir. Bu yöntem Ising modelleri ve bazı gerçek fiziksel sistemler dahil olmak üzere bir çok farklı kooperatif sistemlerin dengesiz yani dinamik davranışlarını incelemede başarılı bir şekilde kullanılmıştır ve kullanılmaktadır. Bu yöntemde, spin dalgalanmalarının ilişkileri (correlations) hesaplamalara katıldığından dinamik ortalama-alan yaklaşığından (DOAY) daha üstündür ve dolayısıyla bu yöntemde birinci-derece faz geçişleri ve bazı özel noktalar, özellikle dinamik üçlü kritik nokta, dinamik çift kritik son nokta ve dinamik kritik son nokta, daha doğru olarak hesaplanabilmektedir. Bu yöntemin diğer bir üstünlüğü ise, serbest enerji kolayca elde edilebildiğinden, sistemlerde oluşabilecek yarı kararlı ve kararsız çözümlerin kolayca tespit edilebilmesidir.

KAYNAKLAR

- Lenz, W. F, beitrag zum verstandnis der magnetischen erscheinungen in festen körpern. Physikalische Zeitschrift, 21: 613-615, 1920.
- Ising, E., Beitrag zur Theorie des Ferro- und Paramagnetismus, Doctora Dissertation. Mathematisch-Naturwissenchaftliche Fakultat der Hamburgischen Universitat, Hamburg, 1924.
- Ising, E., Beitrag zur theorie des ferromagnetismus, Physikalische Zeitschrift, 31: 253-258, 1925.
- Onsager, L., Crystal statistics. 1. a. two-dimensional model with an orderdisorder transition, Physical Review, 65: 117-149, 1944.
- 5. Ma, S.K., Modern theory of critical phenomena, Benjamin, New York, 1976.
- 6. Ma, S.K., Statistical Mechanics, World Scientific Publishing Co, 1985.
- Vatansever, E., Aktaş, B.O, Yuksel, Y., Akici, U., Polat, H., Stationary state solutions of a bond diluted kinetic 1sing model: an effective-field theory analysis. Journal of Statistical Physics, 147:1068-1076, 2012.
- Keskin, M., Şarlı, N., Deviren, B., Hysteresis behaviors in a cylindrical Ising nanowire. Solid State Communications, 151: 1025-1030, 2011.
- Gülpınar, G., Vatansever, E., Critical behavior of AC antiferromagnetic and ferromagnetic susceptibilities of a spin-1/2 metamagnetic Ising system. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 324: 983-990, 2012.
- 10. Cooke, A.H., et al., Crystal Statistics. I.A. Observation of a magnetically controllable jahn teller distortion in dysprosium vanadate at low temperatures. Solid State Communications, 8: 689-692, 1970.
- 11. Cooke, A.H., Martin, D. M., Wells, M. R., The specific heat of dysprosium vanadate. Solid State Communications, 9: 519-522, 1971.
- Cooke, A.H., Martin, D. M., Wells, M. R., Magnetic and thermal properties of dysprosium vanadate. Jornal Physics (Paris) Colloq, C1-32: 488-489, 1971.
- Will, G., Schafer, W., the magnetic structure of antiferromagnetic DyVO4.
 Journal of Physics C: Solid State Physics, 4: 811-819, 1971.
- 14. Seyatat, M., et al., Experimental study of magnetic and crystallographic transition in DyVO4. **Physics Letters, 34A:** 361-362, 1971.

- Sieger, M., Kasten, A., Paul, W., Ferrimagnetic phase in the metamagnet DyV O₄. Solid State Communications, 53: 909-913, 1985.
- Sivardière, J., Blume, M., Dipolar and quadrupolar ordering in spin s=3/2 Ising systems. Physical Review B, 5: 1126-1134, 1972.
- 17. Krinsky, S., Mukamel, D., Spin-3/2 Ising model for tricritical points in ternary fluid mixtures. **Physical Review B**, 11: 399-410, 1975.
- Sivardière, J., Double spin one-half lattice gas model. Le Journal de Physique, 37, 1267-1277, 1976.
- Albayrak, E., Erdinç, A., The coupled spin-1 Blume-Capel sublattices with different bilinear interactions. International Journal of Modern Physics B, 26: 1250042-1250051, 2012.
- 20. Yüksel, Y., Akıncı, Ü., Polat, H., Critical behavior and phase diagrams of a spin-1 Blume–Capel model with random crystal field interactions: an effective field theory analysis. Physica A, 391: 2819-2832, 2012.
- Argin, K., Canko, O., Blume–Capel model on the antiferromagnetic fcc lattice, Physica A, 391: 2556-2563, 2012.
- 22. Albayrak, E., Random crystal field effects for spin-3/2 Blume-Capel model, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 323: 2846-2850, 2012.
- El Hallani, F., Ez-Zahraouy, H., Benyoussef, A., Multilayer transitions in spin-3/2 Blume-Capel model with RKKY interaction in a transverse field. Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, 24: 2299-2305, 2012.
- Cengiz, T., Albayrak, E., The Bethe lattice treatment of sound attenuation for a spin-3/2 Ising model. Physica A, 391: 2948-2956, 2012.
- Obokata, T., Oguchi, T., One-dimensional Ising model with general spin.
 Journal of the Physical Society of Japan, 25: 322-325, 1968.
- Aleonard, R., Morin, P., TmCd quadrupolar ordering and magnetic interactions.
 Physical Review B, 19: 3868-3872, 1979.
- Ray, D., Sivardiére J., Dipolar and quadrupolar orderings in the Γ3-Γ5 magnetic system. Physical Review B, 18: 1401-1405, 1978.
- Iwashita, T., Satou, R., Imada, T., Idogaki, T., Dimensional crossover behaviour of the zero-temperature magnetization for the selective magnetic dilution, Physica B, 284-288: 1203-1204, 2000.

- Tucker, J. W., Ising ferromagnet with biquadratic exchange interaction and uniaxial anisotropy. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 71: 27-31, 1987.
- Plascak, J. A., Moreira, J. G., Barreto, F. C., Mean-field solution of the general spin Blume-Capel model. Physics Letters A, 173: 360–364, 1993.
- Kaneyoshi, T., Jăšcur, M., Contribution to the theory of the spin-5/2 Blume-Capel model. Physiscs Status Solidi B, 175: 225–236, 1993.
- Song, W. J., Yang, C. Z., Study of the critical-behavior for the S=5/2 transverse Ising-model in a random-field. Physiscs Status Solidi B, 185: 227–233, 1994.
- 33. Lee, Y. S., Greven, M., Wells, B. O., Birgeneau, B. J., Shirane, G., Spin correlations in the two dimensional spin-5/2 Heisenberg antiferromagnet Rb₂MnF₄. The European Physical Journal B, 5: 15–22, 1998.
- 34. Iwashita, T., Uragami, K., Muraoka, Y. et al., Monte Carlo Simulations of the Spin-2 Blume-Emery-Griffiths model, Journal of Physics Conference Series Volume: 200, Article Number: 022020, Karlsruhe, Germany, 26-31 July 2009.
- Zhao, J., Xu, X.-G., Wei, G.-Z., Phase diagram of transverse Spin-2 Ising model with longitudinal crystal field. Communications in Theoretical Physics, 52: 163-167, 2009.
- 36. Valldor, M., Heyer, O., Komarek, A. C., Senyshyn, A., Braden, M., Lorenz T., Magnetostrictive N'eel ordering of the spin-5/2 ladder compound BaMn₂O₃: distortion-induced lifting of geometrical frustration. Physical Review B, 83: 024418-024426, 2011.
- 37. Sandra, K., Niesen, O., Heyer, T.L., Martin, V., Antiferromagnetic Heisenberg S
 = 5/2 spin chain compound SrMn₂V₂O₈. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 323: 2575-2578, 2011.
- 38. Mansuripur, M., Magnetization Reversal, Coercivity, and the process of thermomagnetic recording in thin films of amorphous rare earth transition Metal Alloys. Journal of Applied Physics, 61: 1580-1587, 1987.
- Coronado, E., et al., Molecular Magnetism: From Molecular Assemblies to the Devices (NATO ASI Series E, Vol. 321), Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1996.

- 40. Kaneyoshi, T., Nakamura, Y., Shin, S., A diluted mixed spin-2 and spin-5/2 ferrimagnetic Ising system: a study of a molecular-based magnet. Journal of Physics: Condensed Matter, 10: 7025-7035, 1998.
- Nakamura, Y., Monte Carlo study of a mixed spin-2 and spin-5/2 Ising system on a honeycomb lattice. Journal of Physics: Condensed Matter, 12: 4067-4074, 2000.
- 42. Nakamura, Y., Monte Carlo Simulation of mixed S = 2 and S = 5/2 Ising system. **Progress of Theoretical Physics, 138:** 466-467, 2000.
- 43. 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: 11742-11746, 2000.
- 44. Jiang, W., Wang, W., Zhang, F., Ren, W.J., Magnetic properties of a molecular-based magnet AFe^{II}Fe^{III}(C₂O₄)₃ with biaxial crystal field. Journal of Applied Physics, 105: 07E321-07E321 (2009).
- 45. Jiang, W., Lo, V.C., Bai, B.D., Yang, J., Magnetic hysteresis loops in molecular-based magnetic materials AFe^{II}Fe^{III}(C₂O₄)₃. Physica A, 389: 2227-2233, 2010.
- 46. Wie, G., Zhang, Q., Xin, Z., Liang, Y., Internal energy and initial susceptibility of mixed spin-2 and spin-5/2 ferrimagnetic Ising system with interlayer coupling. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 277: 1-5, 2004.
- 47. Wei, G., Zhang, Q., Zhao, J., Gy, Y., Tricritical behavior of mixed spin-2 and spin-5/2 ferrimagnetic Ising system with interlayer coupling. Physica B, 381: 1-6, 2004.
- 48. Li, J., Du, A., Wie, G., Green function study of a mixed spin-2 and spin-5/2 Heisenberg ferrimagnetic system on a honeycomb lattice, Physiscs Status Solidi B, 238: 191-197, 2003.
- 49. Li, J., Du, A., Wie, G., The compensation behavior of a mixed spin-2 and spin-5/2 Heisenberg ferrimagnetic system on a honeycomb lattice. Physica B, 348: 79-88, 2004.
- 50. Li, J., Du, A., Wie, G., Low-temperature properties of a mixed spin Heisenberg ferrimagnetic system on a honeycomb lattice, Physiscs Status Solidi B, 240: 610-617, 2003.

- 51. Yiğit, A., Albayrak, E., A Bethe lattice study of the mixed spin-2 and spin-5/2 Ising model. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 309: 87-95, 2007.
- 52. Schofield, S.L., Bowers, R.G., Renormalization group calculations on a mixedspin system in 2 dimensions. Journal of Physics A: Mathematical and General, 13: 3697-3706, 1980.
- 53. Schofield, S.L., Bowers, R.G., High-temperature series expansion analyses of mixed-spin ising-models. Journal of Physics A: Mathematical and General, 14: 2163-2169, 1981.
- 54. Tang, F.K., Critical couplings of mixed spin-1/2 and spin-S Ising model: va free-fermion approximation. Journal of Physics A: Mathematical and General, 21: L1097- L1098, 1988.
- 55. Iwashita, T., Uryu, N., The effect of the biquadratic exchange interaction on the curie-temperature of the mixed ising ferromagnet. Physics Letters A, 96: 311-313, 1983.
- 56. Iwashita, T., Uryu, N., The curie-temperature of the two-dimensional quadratic Ising ferromagnet with mixed spins of s = 1/2 and s = 1. Journal of the Physical Society of Japan, 53: 721-728, 1984.
- 57. Kaneyoshi, T., Curie temperatures and tricritical points in mixed using ferromagnetic systems. Journal of the Physical Society of Japan, 56: 2675-2680, 1987.
- 58. Kaneyoshi, T., Magnetic properties of a mixed spin Ising-model with random nearest-neighbor interactions. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 92: 59-67, 1990.
- Siqueira, A.F., Fittipaldi, I.P., Thermodynamical properties of a mixed using ferromagnetic system. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 54-57: 678-680, 1986.
- 60. Kaneyoshi, T., Theory of surface phase-diagrams in semi-infinite mixed Ising alloys. Journal of the Physical Society of Japan, 56: 2886-2895, 1987.
- Plascak, J.A., Multicritical points in the ferromagnetic binary Ising-model, Physica A, 198: 655-665, 1993.

- Vieira, A.P., de Carvalho, J.X., Salinas, S.R., Phase diagram of a randomanisotropy mixed-spin Ising model. Physisacl Review B, 63: 184415-184422, 2001.
- 63. Zhang, G.M., Yang, C.Z., Monte-Carlo study of the 2-dimensional quadratic Ising ferromagnet with spins s = 1/2 and s = 1 and with crystal-field interactions, **Physical Review B**, 48: 9452-9455, 1993.
- 64. Buendia, G.M., Novotny, M.A., Numerical study of a mixed Ising ferrimagnetic system. Journal of Physics: Condensed Matter, 9: 5951-5964, 1997.
- 65. Tucker, J.W., The ferrimagnetic mixed spin-1/2 and spin-1 Ising system, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 195: 733-740, 1999.
- 66. Ekiz, C., Keskin M., Magnetic properties of the mixed spin-1/2 and spin-1 Ising ferromagnetic system. Physica A, 317: 517-534, 2003.
- 67. Fu, H.H., Yao, K.L., Liu, Z.L., Thermodynamic properties of mixed-spin chains in magnetic field by the transfer matrix method, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 305: 253-258, 2006.
- Goncalves, L.L., Uniaxial Anisotropy Effects in the Ising-Model-An Exactly Soluble Model, Physica Scripta, 32: 248-252, 1985.
- 69. Da Silva, N.R., Salinas S.R., Mixed-spin Ising-model on the Bethe lattice.
 Physical Review B, 44: 852-855, 1991.
- 70. Albayrak, E., Keskin, M., Mixed spin-1/2 and spin-1 Blume-Capel Ising ferrimagnetic System on the Bethe lattice. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 261: 196-203, 2003.
- Jaščur, M., Strečka, J., Reentrant transitions of a mixed-spin Ising model on the diced lattice. Condensed Matter Physics, 8: 869-880, 2005.
- 72. Jaščur, M., Kaneyoshi, T., Dilution in a mixed spin Ising system. Physica B, 215: 318-324, 1995.
- 73. Xin, Z.H., Wei, G.Z., Liu, T.S., Phase diagrams of the diluted mixed-spin Ising model on a honeycomb lattice. Physica A, 248: 442-453, 1998.
- 74. Htoutou, K., Ainane, A., Saber, M., The transverse crystal-field effects of the mixed spin Ising bilayer system. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 269: 245-258, 2004.

- 75. Kaneyoshi, T., Sarmento, E. F., Fittipaldi, I. P., Magnetic-properties of amorphous mixed Ising spin systems in a transverse field. Physical Review B, 38: 2649-2658, 1988.
- 76. Yan, S.L., Yang, C.Z., Tricritical behaviour on the mixed transverse Ising spin system with a crystal field. Physiscs Status Solidi B, 208: 151, 1996.
- 77. Boughrara, M., Kerouad, M., Saber, M., Effect of a random longitudinal field and crystal field on a decorated ferrimagnetic Ising model. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 316: e287-e290, 2007.
- 78. Weng, X.M., Li, Z.Y., On the Random transverse field mixed spin Ising model of spin-1/2 and spin-1, Physiscs Status Solidi B, 197: 487-494, 1996.
- 79. Benayad, N., Zerhouni, R., Magnetic properties of the mixed spin transverse Ising model with longitudinal crystal field interactions. Physiscs Status Solidi B, 201: 491-503, 1997.
- Benayad, N., Zerhouni, R., Klumper A., Zittartz J., Mixed spin-1/2 and spin-1 Ising model in transverse random fields. Physica A, 262: 483-495, 1999.
- 81. Yan, S.L., Yang, C.Z., Effect of the transverse field on the bond-diluted mixed Ising spin system with single-10n anisotropy. Phys. Rev. B, 57: 3512-3517, 1998.
- 82. Benayad, N., Dakhama, A., Fathi, A., et al., The diluted mixed spin-1/2 and spin-1 ising model in a transverse random. Journal of Physics: Condensed Matter, 10: 3141-3157, 1998.
- Bobák, A., Jurcisin, M., A Theoretical study of the diluted mixed spin-1 and spin-3/2 Ising ferrimagnet. Physica B, 233: 187-195, 1997.
- 84. Wei, G.-Z., Xin, Z.-H., Wei, J., Phase diagrams and tricritical behavior in mixed spin-1 and spin-3/2 ising model on honeycomb lattice. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 204: 144-150, 1999.
- Bobák, A., Multicritical points in the mixed spin-1 and spin-3/2 Ising system on a square lattice with different single-10n anisotropies. Physica A 286: 531-540, 2000.
- 86. 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. Physical Review B, 68: 134432, 2003.

- 87. Bobák, A., Jurcisin, M., Compensation temperature in a diluted mixed spin-1 and spin-3/2 Ising ferrimagnet with a crystal field. Journal of Physics: Condensed Matter, 204: 787-791, 1997.
- Abubrig, O.F., Horvath, D., Bobak, A., Mean-field solution of the mixed spin-1 and spin-3/2 ising system with different single-ion anisotropies. Physica A, 296: 437-450, 2001.
- Tucker, J.W., Mixed spin-1 and spin 3/2 Blume-Capel Ising ferromagnet.
 Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 237: 215-224, 2001.
- 90. Jiang, W., 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. Physical Review B, 68: 134432-134436, 2003.
- 91. Wei, G.Z., Zhang, Q., Gu, Y.W., Monte Carlo studies of critical phenomena in mixed spin-1 and spin-3/2 Blume-Capel Ising model on simple cubic lattice. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 301: 245-250, 2006.
- 92. Fireman, E.C., Cressoni, J.C., dos Santos, R.J.V., Thermodynamics of an alternate σ = 1 and s = 3/2 ising chain mapped onto an effective BEG model.
 Physica A, 329: 147-160, 2003.
- 93. Oitmaa, J., Zheng, W.H., Ferrimagnetism and compensation points in a decorated 3d Ising models. Physica A, 328: 185-192, 2003.
- 94. Albayrak, E., Mixed spin-1 and spin-3/2 Blume-Capel Ising ferrimagnetic system on the Bethe lattice, International Journal Modern Physics B, 17: 1087-1100, 2003.
- 95. Ekiz, C., The possibility of two compensation points in a ferrimagnetic mixed spin-1 and spin-3/2 Ising system using Bethe lattice approach. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 307: 139-147, 2006.
- 96. Liu, J., Zhang, Q., Yu, H., Sun, F., Magnetic properties of the Ising ferromagnetic iron nitride system, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 288: 48-55, 2005.
- Bobák, A., Jurcisin, M., Ferrimagnetism in diluted mixed-spin two-dimensional Ising models. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 163: 292-298, 1996.
- Bobák, A., Jurcisin, M., Ferrimagnetism in diluted mixed spin-1/2 and spin-3/2 Ising systems. Journal de Physique IV, 7: 179-180, 1997.

- 99. Benayad, N., et al., Mixed spin-3/2 and spin-1/2 using models with random nearest-neighbour interactions. Annalen Der Physik, 5: 387-398, 1996.
- 100. Buendia, G. M., Cardona, R., Monte Carlo study of a mixed spin-3/2 and spin-1/2 ising ferrimagnetic model. **Physical Review B**, **59**: 6784-6789, 1999.
- 101. Benayad, N., Dakhama, A., Klümper, A., Zittartz, J., Magnetic properties of a mixed spin-1/2 and spin-3/2 transverse Ising model. Zeitschrift Fur Physik B, 101: 623-630, 1996.
- 102. Bobák, A., Horváth, D., Magnetic properties of diluted mixed spin-1/2 and spin-s using ferrimagnets with a crystal field. Physiscs Status Solidi B, 213: 459-470, 1999.
- 103. 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: 455-464, 2001.
- 104. Wei, G.-Z., et al, Magnetic properties of mixed-spin using systems in a longitudinal magnetic field. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 271: 246-253, 2004.
- 105. Li, J., Wei, G., Du, A., Green function study of a mixed spin-3/2 and spin-1/2 heisenberg ferrimagnetic model, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 269: 410-418, 2004.
- 106. Albayrak, E., Alçi, A., Mixed spin-1/2 and spin-3/2 blume-capel Ising ferrimagnetic system on the bethe lattice. **Physica A**, 345: 48-60, 2005.
- 107. Strečka, J., Weak universality, bicritical points and reentrant transitions in the critical behaviour of a mixed spin-1/2 and spin-3/2 using model on the union jack (centered square) lattice. Physiscs Status Solidi B, 343: 708-715, 2006.
- 108. Strečka, J., Canová, L., Non-universal critical behaviour of a mixed-spin Ising model on the extended kagome lattice. Condensed Matter Physics, 9: 179-186, 2006.
- 109. 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.
- 110. 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: 393-412, 2005.

- 111. Mackowiak, J., Mean-Field Heat Capacity of Dilute Magnetic Alloys, Cond-Mat/0703146, 2007.
- 112. Ekiz, C., Mixed spin-1/2 and spin-s using ferrimagnets with a crystal field.Physica A, 353: 286-296, 2005.
- 113. Strečka, J., Exact results of a mixed spin-1/2 and spin-s using model on a bathroom tile (4-8) lattice: effect of uniaxial single-ion anisotropy. Physica A, 360: 379, 2006.
- 114. Matašovská, S., Jaščur, M., Reentrant transitions and multicompensation phenomena of the exactly solvable mixed spin-s and spin-1/2 Ising model on decorated planar lattice. Physica A, 383: 339-350, 2007.
- 115. Zhang, Q., Wei, G., Gu, Y., The study of the phase diagram and internal energy of the mixed spin-3/2 and spin-5/2 ferrimagnetic Ising system with interlayer coupling by effective-field theory; a simple approach of calculating internal energy. **Physiscs Status Solidi B, 242:** 924-932, 2005.
- 116. Albayrak, E., Yiğit, A., Mixed spin-3/2 and spin-5/2 Ising system on the bethe lattice. Physics Letters A, 353: 121-129, 2006.
- 117. Yessoufou, R. A., Amoussa, S. H., Hontinfinde, F., Magnetic properties of the mixed spin-5/2 and spin-3/2 blume-capel using system on the two-fold cayley tree. Central European Journal of Physics, 7: 555-567, 2009.
- 118. De La Espriella, N., Buendía, G.M., Ground state phase diagrams for the mixed Ising 3/2 and 5/2 spin model. Physica A, 389, 2725-2732, 2010.
- 119. Maltempo, M.M., Moss, T.H., The spin 3/2 state and quantum spin mixtures in haem proteins. **Quart Rev Biophys, 9:** 181-215, 1976.
- 120. Dugad, L.B., Marathe, V.R., Mitra, S., Electronic structure of spin-mixed iron (111) porphyrins: a proton magnetic resonance study. Proc. Indian Acad. Sci. 95: 189-205, 1985.
- 121. Weiss, R., Gold, A., Terner, J., Cytochromes c': biological models for the s = 3/2, 5/2 spin-state admixture. **Chemical Reviews, 106:** 2550-2579, 2006.
- 122. Zeng, Y.,et al., Azide-inhibited bacterial heme oxygenases exhibit an s=3/2(d(xz),d(yz))(3) (d(xy))(1)(d(z)(2))(1) spin state: mechanistic implications for heme oxidation. Journal of the American Chemical Society, 127: 9794-9807, 2005.

- 123. Patel, B.R., Suslick, K.S., Discotic liquid crystals from a bis-pocketed porphyrin. Journal of the American Chemical Society, 120: 11802-11803, 1998.
- 124. Rakow, N.A., Suslick, K.S., A colorimetric sensor array for odour visualization. **Nature**, **406**: 710-714, 2000.
- 125. Kosal, M. E., Suslick, K.S., Microporous porphyrin and metalloporphyrin materials. Journal of Solid State Chemistry, 152: 87-98, 2000.
- 126. Weng, X.M., Li, Z.Y., Transverse-random-field mixed using model with arbitrary spins. **Physical Review B**, 53: 12142-12147, 1996.
- 127. Iwashita, T., et al., Mixed Ising spin system with higher-order spin interaction. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 226: 577, 2001.
- 128. Zhang, Q., Wei, G., Xin, Z., Liang, Y., Effective-field theory and Monte Carlo study of a layered mixed spin-1 and spin-2 Ising system on honeycomb lattice. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 280: 14-16, 2004.
- 129. Albayrak, E., Yigit, A., The critical behavior of the mixed spin-1 and spin-2 Ising ferromagnetic system on the bethe lattice. **Physica A, 349:** 471, 2005.
- 130. Wie, G.-Z., Gu, Y.-W., Liu, J., Mean-field and Monte Carlo studies of a mixed spin-1 and spin-2 Ising system with different anisotropies. Physical Review B, 74: 024422-024426, 2006.
- 131. Deviren, B., Ertaş, M., Keskin M., The effective-field theory studies of critical phenomena in a mixed spin-1 and spin-2 Ising model on honeycomb and square lattices. Physica A, 389: 2036-2047, 2010.
- 132. Strečka, J., Jaščur, M., Thermodynamic properties of the exactly solvable transverse 1sing model on decorated planar lattices. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 260: 415, 2003.
- 133. Albayrak, E., Yigit, A., The critical behaviors and the phase diagram of the mixed spin-1/2 and spin-2 Ising system on the bethe lattice. Physiscs Status Solidi B, 242: 1510, 2005.
- 134. Deviren, B., Bati, M., Keskin, M., The effective-field study of a mixed spin-1 and spin-5/2 Ising ferrimagnetic system. Physica Scripta, 79: 065006-065009, 2009.

- 135. Deviren, B., Kantar, E., Keskin, M., Magnetic properties of a mixed spin-3/2 and spin-2 using ferrimagnetic system within the effective-field theory. Journal of Korean Physics Society, 56: 1738-1747, 2010.
- 136. Bobák, A., Dely, J., Phase Transitions and multicritical points in the mixed spin-3/2 and spin-2 Ising system with a single-10n anisotropy. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 310: 1419-1421, 2007.
- 137. Miao, H., Wei, G., Geng, J., Phase transitions and multicritical points in the mixed spin-3/2 and spin-2 Ising model with different single-10n anisotropies, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 321: 4139-4144, 2009.
- 138. Albayrak, E., The critical and compensation temperatures for the mixed spin-3/2 and spin-2 Ising model. Physica B, 391: 47-53, 2007.
- 139. Glauber, R.J., Time-dependent statistics of the Ising model, Journal of Mathematical Physics, 4: 294-307, 1963.
- 140. Tome, T., Oliveira, M.J., Dynamic phase transition in the kinetic Ising model under a time-dependent oscillating field. Physical Review A, 41: 4251-4254, 1990.
- 141. Mendes, J.F.F., Lage, E.J.S., Dynamics of the infinite ranged potts model, Journal of Statistical Physics, 64: 653-672, 1991.
- 142. Acharyya, M., Nonequilibrium phase transition in the kinetic Ising model: critical slowing down and the specific-heat singularity. Physical Review E, 56: 2407-2411, 1997.
- 143. Chatterjee, A., Chakrabarti, B.K., Fluctuation cumulant behavior for the fieldpulse-induced magnetization-reversal transition in Ising models. Physical Review E, 67: 046113-1-046113-5, 2003.
- 144. Sides, S.W., Rikvold, P.A., Novotny, M.A., Kinetic Ising model in an oscillating field: finite-size scaling at the dynamic phase transition. Physical Review Letters, 81: 834-837, 1998.
- 145. Sides, S.W., Rikvold, P.A., Novotny, M.A., Kinetic Ising model in an oscillating field: avrami theory for the hysteretic response and finite-size scaling for the dynamic phase transition. Physical Review E, 59: 2710-2729, 1999.

- 146. Korniss, G., White, C.J., Rikvold, P.A., Novotny, M.A., Dynamic phase transition, universality, and finite-size scaling in the two-dimensional kinetic Ising model in an oscillating field. **Phys. Rev. E, 63:** 16120-16134, 2001.
- 147. Korniss, G., Rikvold, P.A., Novotny, M.A, Absence of first-order transition and tricritical point in the dynamic phase diagram of a spatially extended bistable system in an oscillating field. **Phys. Rev. E, 66:** 56127-56138, 2002.
- 148. Chakrabarti, B.K., Acharyya, M., Dynamic transitions and hysteresis, **Reviews** of Modern Physics, 71, 847-859, 1999.
- 149. Godoy, M., Figueiredo, W., Kinetic phase transition in the mixed-spin Ising model. **Brazilian Journal of Physics, 34:** 422-424, 2004.
- 150. Krawiecki, A., Dynamical phase transition in the Ising model on a scale-free network, International Journal of Modern Physics B, 19: 4769-4776, 2005.
- 151. Zimmer, M.F., Ising model in an oscillating magnetic field: mean-field theory, Physical Review E, 47: 3950-3955, 1993.
- 152. Acharyya, M., Chakrabarti, B.K., Response of Ising systems to oscillating and pulsed fields: hysteresis, ac, and pulse susceptibility. Physical Review B, 52: 6550-6568, 1995.
- 153. Acharyya, M., Nonequilibrium phase transition in the kinetic 1sing model: 1s the transition point the maximum lossy point. Physical Review E, 58: 179-186, 1998.
- 154. Fujisaka, H., Tutu, H., Rikvold, P.A., Dynamic phase transition in a timedependent ginzburg-landau model in an oscillating field. Physical Review E, 63: 36109-36120, 2001.
- 155. Tutu, H., Fujiwara, N., Landau theory of dynamic phase transitions and systematic perturbation expansion method for getting phase diagrams, Journal of the Physical Society of Japan, 73: 2680-2696, 2004.
- 156. Khorrami, M., Aghamohammadi, A., Dynamical phase transition of a onedimensional kinetic Ising model with boundaries. Physical Review E, 65: 56129-56134, 2002.
- 157. Keskin, M., Canko, O., Temizer, Ü., Dynamic phase transition in the kinetic spin-1 Blume-Capel model under a time-dependent oscillating external field.
 Physical Review E, 72, 36125-36134, 2005.

- 158. Keskin, M., Canko, O., Temizer, Ü., Dynamic phase transition in the kinetic spin-1 Blume-Capel model: phase diagrams in the temperature and crystalfield interaction plane. Journal of Experimental and Theoretical Physics, 104: 936-942, 2007.
- 159. Keskin, M., Canko, O., Kantar, E., Dynamic dipole and quadrupole phase transitions in the kinetic spin-1 model. International Journal of Modern Physics C, 17: 1239-1255, 2006.
- 160. Keskin, M., Canko, O., Temizer, Ü., Dynamic phase transition in the kinetic Blume-Emery-Griffiths model in an oscillating external field. International Journal of Modern Physics C, 17: 1717-1737, 2006.
- 161. Keskin M., et al., Dynamic phase transition in the kinetic Blume-Emery-Griffiths model: phase diagrams in the temperature and interaction parameters planes. Phase Transition, 80: 855-866, 2007.
- 162. Keskin, M., Canko, O., Deviren, B., dynamic phase transition in the kinetic spin-3/2 Blume-Capel model under a time-dependent oscillating external field. Physical Review E, 74: 11110-11119, 2006.
- 163. Keskin, M., Canko, O., Deviren, B., Dynamic phase transition in the kinetic spin-3/2 Blume-Capel model phase diagrams in the temperature and crystalfield interaction plane. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 313: L1-L5, 2007.
- 164. Keskin, M., Canko, O., Kirak, M., Dynamic dipole and quadruple phase transition in the kinetic spin-3/2 model. Journal of Statistical Physics, 127: 359-380, 2007.
- 165. Canko, O., Deviren, B., Keskin M., Dynamic phase transition in the spin-3/2 Blume-Emery-Griffiths model in an oscillating field, Journal of Physics: Condensed Matter, 18: 6635-6653, 2006.
- 166. Keskin, M., Deviren, B., Canko, O., Kirak M., Dynamic phase transition in the kinetic spin-3/2 Blume-Emery-Griffiths model: phase diagram in the temperature and interaction parameters planes. Acta Physica Polonica B, 38: 2445-2457, 2007
- 167. Keskin, M., Canko, O., Ertaş, M., Kinetics of the Spin-2 Blume-Capel model under a time-dependent oscillating external field. Journal of Experimental and Theoretical Physics., 105: 1190-1197, 2007.

- 168. Ertaş, M., Canko, O., Keskin, M., Dynamic phase transition in the kinetic spin2 Blume-Emery-Griffiths model in an oscillating field. Journal of
 Magnetism and Magnetic Materials, 320: 1765-1774, 2008.
- 169. Deviren, B., Keskin, M., Canko, O., Dynamic phase transition and dynamic phase diagrams in the spin- 5/2 Blume-Capel model under a time-dependent oscillating external field. Phase Transtions, 82: 683-698, 2009.
- 170. Keskin, M., Ertaş, M., Dynamic phase transition in the kinetic spin-5/2 Blume-Emery-Griffiths model in an oscillating external magnetic field, Phase Transition, 83: 349-367, 2010.
- 171. Jang, H., Grimson, M.J., Hysteresis and the dynamic phase transition in thin ferromagnetic films. **Physical Review E, 63:** 066119-066128, 2001.
- 172. Jang, H., Grimson, M.J., Hall, C.K, Dynamic phase transitions in thin ferromagnetic films. **Physical Review B**, 67: 094411-094421, 2003.
- 173. Jang, H., Grimson, M.J, Hall, C.K., Exchange anisotropy and the dynamic phase transition in thin ferromagnetic heisenberg films. Physical Review E, 68: 046115-046119, 2003.
- 174. Huang, Z., Chen, Z., Zhang, F., Du, Y., Dynamic phase transition in the heisenberg model under a time-dependent oscillating field. Physics Letters A, 338: 485-493, 2005.
- 175. Machado, E., et al., Response of a catalytic reaction to periodic variation of the co pressure: increased CO₂ production and dynamic phase transition.
 Physical Review E, 71: 016120-016126, 2005.
- 176. Yasui, T., et al., Dynamic phase transitions in the anisotropic XY Spin System in an oscillating magnetic field. Physical Review E, 66: 036123-036140, 2002.
- 177. Yasui, T., et al., Erratum: Dynamic phase transitions in the anisotropic xy spin system in an oscillating magnetic field. Journal of the Physical Society of Japan, 67: 019901-019905, 2003.
- 178. Shi, X.L., Wei, H.L., Effective-field theory on the transverse Ising model under a time oscillating longitudinal field. Physics Letters A, 374: 1885-1888, 2010.

- 179. Deviren, B., Canko, O., Keskin, M., Kinetic Ising model in a time-dependent oscillating external magnetic field: Effective-field theory, Chinese Physics B, 19: 050518, 2010.
- 180. Shi, X.L., Wei, G.Z., Li, L., Effective-field theory on the kinetic Ising model.Physics Letters A, 372: 5922-5927, 2008.
- 181. Shi, X.L., Wei, G.Z., Effective-field theory on the transverse Ising model under a time oscillating longitudinal field. Physics Letters A, 374: 1885-1888, 2010.
- 182. Jiang, Q., Yang, H.N., Wang, G.C., Scaling and dynamics of low-frequency hysteresis loops in ultrathin co films on a Cu (001) surface. Physical Review B, 52: 14911-14916, 1995.
- 183. Jiang, Q., Yang, H.N., Wang, G.C., Field dependent resonance frequency of hysteresis loops in a few monolayer thick Co/Cu(001) films. Journal of Applied Physics., 79: 5122-5124, 1996.
- 184. Kleemann, W., et al., Dynamic phase transitions in ferroic systems with pinned domain walls. Phase Transitions, 78: 811-816, 2005.
- 185. Samoilenko, Z.A., et al., Dynamic phase transitions in amorphous YbaCuO films under ar laser irradition. **Inorganic Materials, 39:** 836-842, 2003.
- 186. Oliviero, C., et al., Dynamic phase diagram and onion formation in the system C₁₀E₃/D₂O. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 228: 85-90, 2003.
- 187. He, Y.L., Wang, G.C., Observation of dynamic scaling of magnetic hysteresis in ultrathin ferromagnetic Fe/Au(001) films. Physics Review Letters, 70: 2336-2339, 1993.
- 188. He, Y.L., Liew, Y.F., Wang, G.C., Growth and magnetic dynamic scaling of ultrathin ferromagnetic films Fe/Au(001). Journal of Applied Physics, 75: 5580-5587, 1994.
- 189. Robb, D.T., et al., Evidence for a dynamic phase transition in [Co/Pt]₃ magnetic multilayers. Physical Review B, 78: 134422-134432, 2008.
- 190. Choi, B.C., et al., Dynamics of magnetization reversal in thin polycrystalline Ni₈₀Fe₂₀ films. Physical Review B, 60: 11906-11909, 1999.

- 191. Yamauchi, T., et al., Spectroscopic investigation of the dynamical behavior of the photoinduced phase transition of Na_{0.6}Co_{1.3}[Fe(CN)₆] 4H₂O. Physical Review B, 72: 214425-214431, 2005.
- 192. Maeda, A., Togawa, Y., Kitano, H., An experimental approach to understand dynamical phase diagram of driven vortices of High-Tc superconductors, Physica C, 369: 177-181, 2002.
- 193. Kanuga, K., Cakmak, M., Dynamic phase diagram derived from large deformation non-linear mechano-optical behavior of polyethylene naphthalate nanocomposites. **Polymer, 48,** 7176-7192, 2007.
- 194. Néel, L., Magnetic Properties of ferrites: ferrimagnetism and antiferromagnetism. Annals of Physics, 3: 137-98, 1948.
- 195. Mansiripur, M., Magnetization Reversal, Coercivity, and the process of thermomagnetic recording in thin films of amorphous rare earth-transition metal alloys. Journal Applied Physics, 61: 1580-1587, 1987.
- 196. Mathoniere, C., Nuttall, C.J., Carling, S.G., Day, P., Ferrimagnetic mixedvalency and mixed-metal Tris(oxalato)iron(III) compounds: synthesis, structure, and magnetism. **Inorganic Chemistry**, **35**: 1201-1206, 1996.
- 197. Hernando, A., Kulik, T., Exchange interactions through amorphous paramagnetic layers in ferromagnetic nanocrystals. Physical Review B, 49: 7064-7067, 1994.
- 198. Alex, M., Shono, K., Kuroda, S., Koshino, N., Ogawa, S., Ce-Substituted garnet media for magneto-optic recording. Journal Applied Physics, 67: 4432-4434, 1990.
- 199. Shieh, H.P., Kryder, M.H., Magneto-optic recording materials with direct overwrite capability. Applied Physics Letters, 49: 473-474, 1986.
- 200. Connell, G., Allen, R., Mansuripur, M., Magneto-Optical Properties of Amorphous Terbium– Iron Alloys. Journal Applied Physics, 53: 7759-7761, 1982.
- 201. Ostoréro, J., Escorne, M., Percheron-Guégan, A., Soulette, F., Le Gall, H., Dy₃Fe₅O₁₂ garnet thin films grown from sputtering of metallic targets. Journal Applied Physics, 75: 6103-6105, 1994.

- 202. Leite, V.S., Godoy, M., Figueiredo, W., Finite-size effects and compensation temperature of a ferrimagnetic small particle. Physical Review B, 71: 094427-094433, 2005.
- 203. Godoy, M., Leite, V.S., Figueiredo, W., Mixed-spin Ising model and compensation temperature. **Physical Review B, 69:** 054428-054434, 2004.
- 204. Keskin, M., Ertaş, M., Mixed-spin Ising model in an oscillating magnetic field and compensation temperature. Journal of Statistical Physics, 139: 333-344, 2010.
- 205. Keskin M., Deviren B., Canko, O., Dynamic compensation temperature in the mixed spin-1/2 and spin-3/2 Ising model in an oscillating external magnetic field on alternate layers of hexagonal lattice. IEEE Transaction on Magnetics, 45: 2640- 2643, 2009.
- 206. Chern, G., Horng, L., Shieh, W.K., Wu, T.C., antiparallel state, compensation point, and magnetic phase diagram of Fe₃O₄/Mn₃O₄ superlattices. Physical Review B, 63: 094421-094426, 2001.
- 207. Kageyama, H., Khomskii, D. I., Levitin, R. Z., Vasil'ev, A. N., Weak ferrimagnetism, compensation point and magnetization reversal in Ni(HCOO)₂·2H₂O. **Physical Review B, 67:** 224422-224429, 2003.
- 208. Korkmaz, T., Temizer, Ü., Dynamic compensation temperature in the mixed spin-1 and spin-2 Ising model in oscillating field on alternate layers of a hexagonal lattice. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 324: 3876-3886, 2012.
- 209. Buendia, G.-M., Machado, E., Kinetics of a mixed Ising ferrimagnetic system. **Physical Review E, 58:** 1260-1265, 1998.
- 210. Keskin, M., Canko, O., Polat, Y., Dynamic phase transitions in the kinetic mixed spin-1/2 and spin-1 using ferrimagnetic system under time-dependent magnetic field. Journal of Korean Physics Society, 53: 497-504, 2008.
- 211. Godoy, M., Figueiredo, W., Mixed-spin Ising model with one- and two-spin competing Dynamics. **Physical Review E, 61:** 218-222, 2000.
- 212. Godoy, M., Figueiredo, W., Critical behavior of the mixed-spin Ising model with two competing Dynamics. Physical Review E, 65: 026111-026115, 2002.

- 213. Godoy, M., Figueiredo, W., Nonequilibrium antiferromagnetic mixed-spin Ising model. **Physical Review E, 66,** 036131-036136, 2002.
- 214. Figueiredo, W., Godoy, M., Leite, V. S., Compensation temperature of the mixed spin Ising model on the hexagonal lattice. Brazilian Journal of Physics, 34: 392-394, 2004.
- 215. Godoy, M., Figueiredo, W., Competing dynamics in the mixed-spin 1sing model with crystal-field interaction. **Physica A**, **339**: 392-396, 2004.
- 216. Keskin, M., Deviren, B., Canko, O., Dynamic compensation temperature in the mixed spin-1/2 and spin-3/2 Ising model in an oscillating field on alternate layers of hexagonal lattice. IEEE Transactions on Magnetics, 45: 2640-2643, 2009.
- 217. Deviren, B., Keskin, M., Canko, O.,, Dynamic phase transitions in the kinetic mixed spin-1/2 and spin-5/2 Ising model under a time-dependent oscillating magnetic field. Phase Transition, 83: 526-542, 2010.
- 218. Deviren, B., Keskin, M., Dynamic phase transitions and compensation temperatures in a mixed spin-3/2 and spin-5/2 Ising system. Journal Statistical Physics, 140: 934-947, 2010.
- 219. 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. Physical Review E, 77: 051130-051139, 2008.
- 220. Keskin, M., Canko, O., Güldal, S., Kinetics of a mixed spin-1/2 and spin-2 Ising ferrimagnetic system. **Physics Letters A: 374,** 1-7, 2009.
- 221. Keskin, M., Canko O., Batı, M., Dynamic phase diagrams of a mixed spin-1 and spin-5/2 Ising system in an oscillating magnetic field. Jornal Korean Physics Society, 55: 1344-1356, 2009.
- 222. Keskin, M., Polat Y., Phase diagrams of a nonequilibrium mixed spin-3/2 and spin-2 Ising system in an oscillating magnetic field. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 321: 3905, 2009.
- 223. Keskin, M., Ertaş, M., Canko, O., Dynamic phase transitions and dynamic phase diagrams in the kinetic mixed spin-1 and spin-2 Ising system in an oscillating magnetic field. Physica Scripta, 79: 025501-025512, 2009.

- 224. Kaneyoshi, T., Benyoussef, A., Correlated effective-field treatment of the Blume-Capel model with half-integer spins. Physica Status Solidi B, 178: 233-246, 1993.
- 225. Suzuki, M., Kubo, R., Dynamics of the Ising model near the critical point. Journal of the Physical Society of Japan 24: 51-60, 1968.
- 226. Chikazumi, C., Physics of Ferromagnetism, Oxford University Press, Oxford, 1997.
- 227. Keskin, M., Ertaş, M., Existence of a dynamic compensation temperature of a mixed spin-2 and spin-5/2 Ising ferrimagnetic system in an oscillating field.
 Physical Review E, 80: 061140-061151, 2009.
- 228. Wu, M.Y., Ye, A.J., Li, Z.B., Zeng, W.G., Short-time critical dynamic process of two-layer Ising model. Acta Physica Sinica, 49: 1168-1170, 2000.
- 229. Canko, O., Kantar, E., Keskin, M., Nonequilibrium phase transition in the kinetic Ising model on a two-layer square lattice under the presence of an oscillating field. **Physica A, 388,** 28-40, 2009.
- 230. Ertaş, M., Keskin, M., Dynamic magnetic behavior of the mixed-spin bilayer system in an oscillating field within the mean-field theory. Physics Letters A, 376: 2455-2466, 2012.
- 231. Blume, M., Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in UO₂.,Physical Review, 141: 517-524, 1966.
- 232. Capel, H.W., On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting. **Physica**, **32**: 966-988, 1966.
- 233. Capel, H.W., On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting. **Physica**, **37**, 423-441, 1967.
- 234. Ertaş, M., Keskin, M., Dynamic magnetic behavior of the mixed-spin bilayer system in an oscillating field within the mean-field theory. Physics Letters A, 376: 2455-2466, 2012.
- 235. Honmura, R., Kaneyoshi, T., Contribution to the new type of effective field theory of the Ising Model. Journal of Physics C: Solid State Physics, 12, 3979-3992, 1979.
- 236. Kaneyoshi, T., Fittipaldi, I.P., Honmura, R., Manabe, T., Physical Review B,
 24: 481-484, 1981.

- 237. Callen, H.B., A note on Green functions and the Ising model. Physics Letters,4: 161-164, 1963.
- 238. Waerden, B., L., V., Beweis einer baudetschen vermutung. Nieuw Arch Wisk, 15: 212-216, 1927.
- 239. Kaneyoshi, T., Beyer, H., Amorphization of layered ferro- and antiferromagnetic systems. Journal Physics Society Japan 49: 1306-1317, 1980.
- 240. Kaneyoshi, T., et al., Amorphization of a crystalline diluted Ising ferromagnet.Physical Review B, 29: 5121-5127, 1984.
- 241. Zernike, F., the propagation of order in Co-Operative phenomena: part I. the AB case. Physica 7: 565-585, 1940.
- 242. Kaneyoshi, T., Tamura, I., Sarmento, E.F.. Surface magnetic properties of the Ising model with a diluted free surface. Physical Review B, 28: 6491-6498, 1983.
- 243. Kaneyoshi, T., Critical temperatures and the compensation temperatures of disordered and amorphous ferrimagnetic Ising systems. Physical Review B, 33: 7688-7699, 1986.
- 244. Ertaş, M., Deviren, B., Keskin, M., Dynamic phase transitions and dynamic phase diagrams of the spin-2 Blume–Capel model under an oscillating magnetic field within the effective-field theory. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 324: 704-710, 2012.
- 245. Ertaş, M., Deviren, B., Keskin, M., Dynamic phase transitions and dynamic phase diagrams in the kinetic spin-5/2 Blume-Capel model in an oscillating external magnetic field: effective-field theory and the Glauber-type stochastic dynamics approach. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 324: 1503-1511, 2012.
- 246. Ertaş, M., Deviren, B., Keskin, M., Nonequilibrium magnetic properties in a two-dimensional kinetic mixed Ising system within the effective-field theory and Glauber-type stochastic dynamics approach. Physical Review E, incelemede.
- 247. Kikuchi, R., The path probability method. Progress of Theoretical Physics, 35: 1-64, 1966.

ÖZGEÇMİŞ

Nisan 1982'de Kayseri de doğdu. İlk, orta ve lise öğrenimini Kayseri'de tamamladı. 2001 yılında Atatürk Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Matematik Bölümünü kazandı. 2002 yılında tekrar üniversite sınavına girerek Erciyes Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünü kazandı ve bu bölümü 2006 yılında 3.56/ 4.00 not ortalaması ile birinci olarak bitirdi ve aynı yıl Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü'nde Yüksek Lisans öğrenimine başladı. Yüksek lisans öğrenimini 2008 yılında tamamladı. Yüksek lisans öğreniminin birinci yılında TÜBİTAK projesi kapsamında burslu öğrenci olarak bir yıl çalıştı ve öğreniminin ikinci yılında TÜBİTAK-BİDEB 2210 Yurt İçi Yüksek Lisans Bursunu kazandı. 2008 yılında Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Bölümü'nde doktora eğitimine başladı. 2009 Ağustos ayında Araştırma Görevlisi sınavını kazanarak Erciyes Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik bölümünde göreve başladı. 2009 Ekim ayından itibaren TÜBİTAK-BİDEB 2211 Yurt İçi Doktora Bursunu kazandı. Halen Erciyes Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümünde Araştırma Görevlisi olarak görev yapmaktadır. Evli ve Fatıma'tüz Zehra isminde bir çocuk babasıdır. Phys. Rev. E, Phys. Lett. A, J. Stat. Phys., Phys. Scr., Phase Trans., JETP, J. Magn. Magn. Mater. ve Physica A dergilerinde toplam 15 adet ortak yazarlı makalesi yayınlandı. The 4th Asian Physics Symposium'da sunulmuş bir adet AIP Conference Proceedings'i ve Phys. Rev. E dergisinde incelemede olan bir adet makalesi vardır. Ayrıca, Yurt içinde İstanbul İstatistik Fizik Günlerinde ve Nihat Berker Onuruna 60. Doğum Yıldönümü Toplantısında (Berker-FEST) sunulmuş 2 adet, ve Yurt dışında ABD, Endonezya ve Suudi Arabistan'da yapılan toplantılarda sunulmuş 3 adet olmak üzere toplam 5 adet bildirisi vardır.

<u>İletişim Bilgileri</u>:

<u>Adres</u> :	Erciyes Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü
	Kayseri
<u>Cep Tel</u> :	0530 467 18 23
Ev Tel:	0352 339 47 09
<u>E-Mail:</u>	mehmetertas @ erciyes.edu.tr
	mhmtertas82 @ gmail.com