

T.C.
ADNAN MENDERES ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI
2015-YL-035

DEKORE EDİLMİŞ BETHE ÖRGÜSÜ ÜZERİNDE
KARMA SPİN- $\frac{1}{2}$ VE SPİN-1 ISING-HEISENBERG
MODELİN FAZ DİYAGRAMLARI

Hazırlayan
Orhan ÇİZER

Danışmanı:
Prof. Dr. Cesur EKİZ

AYDIN-2015

T.C.
ADNAN MENDERES ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRLÜĞÜNE
AYDIN

Fizik Anabilim Dalı Yüksek Lisans Programı öğrencisi Orhan ÇİZER tarafından hazırlanan ‘ Dekore Edilmiş Bethe Örgüsü Üzerinde Karma Spin $\frac{1}{2}$ ve Spin 1 Ising-Heisenberg Modelin Faz Diyagramları ’ başlıklı tez, 16.06.2015 tarihinde yapılan savunma sonucunda aşağıda isimleri bulunan jüri üyelerince kabul edilmiştir.

	Ünvanı, Adı Soyadı	Kurumu	İmzası
Başkan	: Prof. Dr. Cesur EKİZ	Adnan Menderes Üniv.	...
Üye	: Doç. Dr. Gül GÜLPINAR	Dokuz Eylül Üniv.	...
Üye	: Yrd. Doç. Dr. Nuray HORASAN	Adnan Menderes Üniv.	...

Jüri üyeleri tarafından kabul edilen bu Yüksek Lisans tezi, Enstitü Yönetim Kurulununsayılı kararıyla tarihinde onaylanmıştır.

Prof. Dr. Aydın ÜNAY
Enstitü Müdürü

T.C.
ADNAN MENDERES ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRLÜĞÜNE
AYDIN

Bu tezde sunulan tüm bilgi ve sonuçların, bilimsel yöntemlerle yürütülen gerçek deney ve gözlemler çerçevesinde tarafımdan elde edildiğini, çalışmada bana ait olmayan tüm veri, düşünce, sonuç ve bilgilere bilimsel etik kuralların gereği olarak eksiksiz şekilde uygun atıf yaptığımı ve kaynak göstererek belirttiğimi beyan ederim.

16/06//2015

Orhan ÇİZER

ÖZET

DEKORE EDİLMİŞ BETHE ÖRGÜSÜ ÜZERİNDE KARMA SPİN-1/2 VE SPİN-1 ISING-HEISENBERG MODELİN FAZ DİYAGRAMLARI

Orhan ÇİZER

Yüksek Lisans Tezi, Fizik Anabilim Dalı

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Cesur EKİZ

2015, 49 sayfa

Bu çalışmada, karma spin-1 ve spin-1/2 Ising-Heisenberg modelini dekore edilmiş elmas yapılı Bethe örgüsü üzerinde inceledik. İncelediğimiz sistem Ising ve Heisenberg spinlerini içeren karma bir klasik-kuantum sistemidir ki spinler kendi aralarında en yakın Ising veya XXZ Heisenberg etkileşmesine sahiptirler. Model, dekorasyon-iterasyon dönüşümünün tam tekrarlı bağıntıları ile birlikte kullanılmasıyla incelenmiştir. Bu kesin çözüm çerçevesinde, dekore edilmiş elmas benzeri Bethe örgüsü üzerinde karma spin Ising-Heisenberg modelinin bölüşüm fonksiyonu ile basit Bethe örgüsü üzerinde spin-1 Blume-Emery-Griffiths (BEG) modelinin bölüşüm fonksiyonu arasında tam bir transformasyon bağıntısı elde edildi. Ayrıca tam dönüşüm teoremleri ve tam spin özdeşlikleri, kesin sonuçların analitik hesaplanmasında kullanılmıştır. Her iki Ising ve Heisenberg alt-örgü mıknatıslanmaları modelin faz diyagramlarının ve toplam ve alt-örgü mıknatıslanmalarının termal davranışlarının incelenmesinde kullanılmıştır.

Modelin taban durumunun iki farklı fazdan oluştuğu gösterilmiştir. Klasik ferromagnetik fazın (CFP) yanısıra düzensiz faz (DP) modelin taban durumunu oluşturur. Ising ve Heisenberg spinleri arasındaki etkileşme spin-sıvı düzensiz taban durumuna yol açar. Modelin sonlu sıcaklık faz diyagramlarında reentrant bölgelerin olabilirliği kapsamlıca incelenmiştir. Modelde ikinci dereceden faz dönüşüm çizgilerinin sınırlı bir parametre değerinde reentrant davranış sergilediği görülmüştür. Reentrant davranışın görüldüğü bölge klasik ferromagnetik ve düzensiz spin-sıvı fazı arasındaki taban durum sınırına oldukça yakın ve koordinasyon sayısının $q > 4$ değeri alındığı durumdur. Diğer taraftan reentrant davranış için, koordinasyon sayısının $q = 3$ ve 4 olduğu sistem uygun faz sınırları göstermemektedir. Ayrıca her iki alt-örgü mıknatıslanmaları, kuadropolar moment ve üçlü korelasyon parametresinin termal değişimleri kapsamlıca incelendi ve tartışıldı.

Anahtar Kelimeler: Ising-Heisenberg modeli; Bethe örgüsü; Reentrant faz geçişi; Tam çözüm

ABSTRACT

PHASE DIAGRAMS OF THE MIXED SPIN-1/2 AND SPIN-1 ISING HEISENBERG MODEL ON THE DECORATED BETHE LATTICE

Orhan ÇİZER

M.Sc. Thesis, Department of Physics

Supervisor: Prof. Dr. Cesur EKİZ

2015, 49 pages

In this work, we have studied the mixed spin-1 and spin-1/2 Ising–Heisenberg model on the diamond-like decorated Bethe lattice. The model under consideration describes a hybrid classical-quantum system consisting of the Ising and Heisenberg spins, which interact among themselves either through the Ising or XXZ Heisenberg nearest-neighbor interaction. The model was studied by combining the decoration-iteration transformation with the exact recursion relations. Within the framework of this rigorous method, we have obtained a precise mapping relationship between the partition function of the mixed-spin Ising–Heisenberg model on the diamond-like decorated Bethe lattice and the partition function of the equivalent spin-1 BEG model on a simple Bethe lattice. In addition, the rigorous mapping theorems and exact spin identities have been employed in order to derive analytically precise results. Both sublattice magnetizations of the Ising and Heisenberg spins are exactly calculated with the aim to examine phase diagrams, thermal variations of the total and sublattice magnetizations.

It has been demonstrated that the ground-state phase diagram constitutes two different phases. Apart from the usual CFP, the peculiar DP may form the ground state. A competition between Ising and Heisenberg interactions leads to a peculiar spin-liquid ground state. A possibility of observing reentrant regions in the finite-temperature phase diagrams have been also investigated in detail. It has been evidenced that the second-order phase transition line displays reentrance just in a restricted region of the parameter space, which is close enough to the ground-state boundary between the CFP and DP, if and only if, the sufficiently high coordination number $q > 4$ is assumed. On the other hand, no reentrance can be found in the relevant phase boundaries for the system with the coordination number $q = 3$ and 4. The thermal dependences of both sublattice magnetizations, quadrupolar moment and higher order correlation function were also investigated and discussed in detail.

Key words: Ising–Heisenberg model; Bethe lattice; Reentrant phase transition; Exact result

ÖNSÖZ

Hayatım boyunca maddi manevi her türlü desteęi saęlayan anneme, bana her zaman destek olan arkadaşlarıma, her yönüyle takdir ettięim ve hiçbir zaman yardımlarını esirgemeyen çok deęerli hocam Prof. Dr. Cesur EKİZ'e çok teşekkür ederim.

Orhan ÇİZER

İÇİNDEKİLER

KABUL VE ONAY SAYFASI.....	iii
BİLİMSEL ETİK BİLDİRİM SAYFASI	v
ÖZET.....	vii
ABSTRACT	ix
ÖNSÖZ	xi
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	xv
TABLolar DİZİNİ	xvii
1.GİRİŞ	1
2. KAYNAK ÖZETLERİ	6
3. MATERYAL VE YÖNTEM	9
3.1 Materyal	9
3.2 Yöntem.....	10
3.2.1. İterasyon Metodunun Bethe Örgüsü Üzerinde spin-1/2 Ising Modeline Uygulanması.....	10
4. BULGULAR VE TARTIŞMA	16
4.1. Dekorasyon-İterasyon Dönüşümünün Spin-1/2 Ising Heisenberg Modeline	16
4.1.1. Ising Magnetizasyonu	23
4.1.2. Heisenberg Magnetizasyonu	24
4.2. Ising Heisenberg Modelin Magnetizasyon Bağlılarının Diferansiyel Operatör Tekniği Kullanılarak Hesaplanması.....	25
4.3. Ising ve Heisenberg Magnetizasyonlarının Sıcaklığa Göre Değişimleri.....	26
4.4. Faz Diyagramları.....	35
5. TARTIŞMA VE SONUÇ.....	41
KAYNAKLAR	43
ÖZGEÇMİŞ	49

ŞEKİLLER DİZİNİ

- Şekil 1.1. Bir manyetik madde için sıcaklığın fonksiyonu olarak mıknatıslanma...2
- Şekil 3.1. Bethe örgüsü üzerinde çiftli dekore edilmiş Ising-Heisenberg modelinin topolojik yapısı.....9
- Şekil 3.2. Bir Cayley Ağacının, $q=3$ ve $n=4$ Konumlu Üretiminin Gösterimi....10
- Şekil 4.1. Dekore edilmiş Bethe örgüsü üzerinde spin-1/2 Ising-Heisenberg modelinin şematik temsili.....16
- Şekil 4.2. Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modeli için $q=3$ koordinasyon sayılı Bethe örgüsü üzerinde, $J_H/J_I = 1.0$ ve $\Delta = 1.0$ değerlerinde alt örgü magnetizasyonlarının, kuadropolar momenti ve üçlü korelasyon parametresinin sıcaklıkla değişimleri.....27
- Şekil 4.3. Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modeli için $q=4$ koordinasyon sayılı Bethe örgüsü üzerinde, $J_H/J_I = 1.0$ ve $\Delta = 1.0$ değerlerinde alt örgü magnetizasyonlarının, kuadropolar momenti ve üçlü korelasyon parametresinin sıcaklıkla değişimleri.....28
- Şekil 4.4. Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modeli için $q=4$ koordinasyon sayılı Bethe örgüsü üzerinde, $J_H/J_I = 1.0$ ve $\Delta = 4.5$ değerlerinde alt örgü magnetizasyonlarının, kuadropolar momenti ve üçlü korelasyon parametresinin sıcaklıkla değişimleri.....29
- Şekil 4.5. Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modeli için $q=6$ koordinasyon sayılı Bethe örgüsü üzerinde; $J_H/J_I = 1.0$ ve $\Delta = 1.0$ sabit değerlerinde alt örgü magnetizasyonlarının, kuadropolar momenti ve üçlü korelasyon parametresinin sıcaklıkla değişimleri.....30
- Şekil 4.6. Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modeli için $q=6$ koordinasyon sayılı Bethe örgüsü üzerinde; $J_H/J_I = 1.0$ ve $\Delta = 5.2$ sabit değerlerinde alt örgü magnetizasyonlarının, kuadropolar momenti ve üçlü korelasyon parametresinin sıcaklıkla değişimleri.....31
- Şekil 4.7. Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modeli için, $q=4$ koordinasyon sayılı Bethe örgüsü üzerinde; $J_H/J_I = 1.0$ ve $q = 4$ sabit değerlerinde anizotropi parametrelerinin farklı değerleri için toplam magnetizasyonların sıcaklıkla değişimleri.....32

- Şekil 4.8. Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modeli için, $q=6$ koordinasyon sayılı Bethe örgüsü üzerinde; $J_H/J_I = 1.0$ ve $q = 6$ sabit değerlerinde anizotropi parametrelerinin farklı değerleri için toplam magnetizasyonların sıcaklıkla değişimleri.....33
- Şekil 4.9. Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modeli için, $q=3$ koordinasyon sayılı Bethe örgüsü üzerinde; $J_H/J_I = 1.0$ ve $kT/J_I = 1.0$ sabit değerlerinde anizotropi parametrelerinin farklı değerleri için alt örgü mıknatıslanmaları, kuadropolar moment ve üçlü korelasyon parametresinin sıcaklıkla değişimleri.....34
- Şekil 4.10. Bethe örgüsü üzerinde karma spin-1 ve spin-1/2 Ising-Heisenberg modelin taban durumları için faz diyagramı.....36
- Şekil 4.11. Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising Heisenberg modelinde Bethe örgüsü koordinasyon sayısı $q=3$ için J_H/J_I parametresinin farklı değerinde anizotropi parametresinin Δ fonksiyonu olarak kritik sıcaklık değerleri...37
- Şekil 4.12. Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modelinde Bethe örgüsü koordinasyon sayısı $q=4$ için J_H/J_I parametresinin farklı değerinde anizotropi parametresinin bir fonksiyonu olarak kritik sıcaklık değerleri.....38
- Şekil 4.13 Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modelinde Bethe örgüsü koordinasyon sayısı $q=5$ için J_H/J_I parametresinin farklı değerinde anizotropi parametresinin bir fonksiyonu olarak kritik sıcaklık değerleri.....39
- Şekil 4.14 Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modelinde Bethe örgüsü koordinasyon sayısı $q=6$ için J_H/J_I parametresinin farklı değerinde anizotropi parametresinin bir fonksiyonu olarak kritik sıcaklık değerleri.....40

TABLolar DİZİNİ

Tablo 4.1. Spin-1 Blume-Emery-Griffiths modelinin spin durumları için dekorasyon- iterasyon dönüşümünde parametreler gösterilmesi.....	21
--	----

1. GİRİŞ

Fiziksel olayların sistematiğini, meydana geliş şekillerini incelemek için bazı özelliklerinden faydalanılmaktadır. Bu olayların kimyasal, manyetik, fiziksel, termodinamik vb. davranışları o yapı hakkında bize bilgi vermektedir. Fiziksel kooperatif olayların termodinamik davranışları, örneğin sıvıların donması, gazların soğurulması, akışkan konsantrasyonu, ikili veya üçlü sıvı ve gaz karışımlarının faz dönüşümleri, ikili alaşımlardaki düzenli-düzensiz faz geçişleri, manyetik faz geçişleri spin-1/2 Ising veya iki durumlu sistemler kullanılarak açıklanabilmektedir.

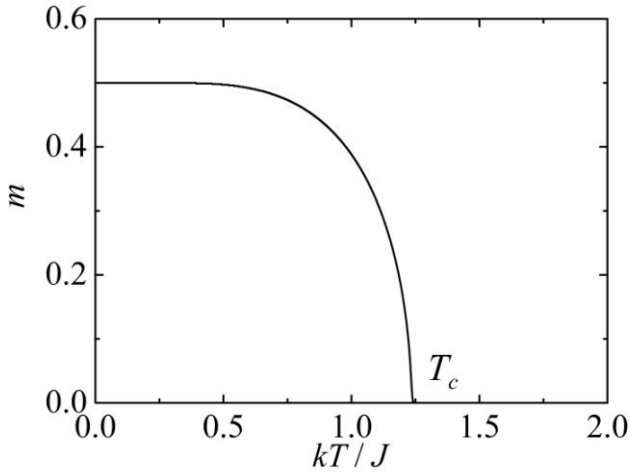
Spin-1/2 Ising modeli, Wilhelm Lenz tarafından 1920 yılında ferromanyetik maddelerin (demir, nikel v.b.) faz dönüşümlerinin açıklanabilmesi amacıyla doktora öğrencisi Ernest Ising'e tez önerisi olarak verilmiş ve 1925 yılında Ising tarafından bir modelleme yapılarak matematiksel olarak sonuçlar ortaya konulmuştur (Ising, 1925). Ising, modelin tek boyuttaki çözümünü yaparak tek boyutta faz dönüşümünün olmadığını görmüştür. Ortaya çıkan bu sonuç neticesinde ilk önceleri modele olan ilgi azalmıştır. Ancak daha sonraki yıllarda Heisenberg modelinin geliştirilmesi ve 1944 yılında Onsager tarafından modelin iki boyuttaki tam çözümünün yapılması, modele olan ilgiyi artırmıştır (Onsager,1944). Önceleri Lenz-Ising modeli olarak anılan model sonraları Ising modeli olarak isimlendirilmiştir. Model, en basit versiyonu olan iki durumlu hali ile ele alındığında ferromanyetik paramanyetik ya da antiferromanyetik-paramanyetik faz geçişini açıklayan bir modeldir. Faz geçişlerinin istatistik mekaniksel açıklamasına dair en basit modellerdendir. Modelin basit olmasına rağmen bu denli üzerinde çalışılır olmasının sebepleri arasında, gerçekte de bu modelle örtüşen sistemler olmasının yanı sıra evrensellik kavramı ile çok daha farklı sistemlerin de böylesine basit bir modelle açıklanabilmesi gösterilmektedir.

Faz geçişi, sistemin bir fazdan diğer bir faza geçmesi olayıdır ve bu olay sırasında sistemde ilginç davranışlar gözlenir. Sistemi oluşturan parçacıklar arasında sonsuz erimli bir korelasyon oluşur. Bunun yanında sistemin termodinamik fonksiyonlarından bazıları ıraksar. Faz geçişi, diğer termodinamiksel değişkenler sabit tutulduğunda, belli bir sıcaklıkta oluşur ve bu sıcaklık kritik sıcaklık denir.

Sistemin kendi içerisinde dengede olup olmadığının anlaşılabilmesi düzen parametresi adı verilen bir değişken tarafından açıklanabilmektedir. Manyetik

sistemler için düzen parametresi olarak sistemin manyetizasyonu böyle bir parametredir. Manyetizasyon sıfır ise sistem düzensizdir. Ferromanyetik fazdan paramanyetik faza geçiş sırasında sistemin düzenli halden düzensiz hale geçmesi ise kritik bir sıcaklık değerinde meydana gelir. Konuya ilişkin bir örnek vermek gerekirse, 1/2 spinli parçacıklardan oluşmuş sisteme, kritik sıcaklığın altındaki bir sıcaklıkta, manyetik alan uygulanırsa sistemi oluşturan parçacıkların spinleri alan doğrultusunda yönelirler. Belli bir süre geçtikten sonra manyetik alan sıfırlanırsa, sistemin parçacıklarının spinleri aynı doğrultuda kalırlar. Sistemdeki net manyetizasyon ise sistemin kritik sıcaklığın üstünde bir sıcaklıkta ısıtılması ile sıfıra gider.

Demir, Nikel gibi bazı katıların kalıcı mıknatıslanma özelliğine ferromanyetizma denir. Ferromanyetizma elektronların spin manyetik momentlerinden kaynaklanır. Katı cisimdeki tüm atomların manyetik momentleri hep birlikte aynı yönde dizildiğinde makroskopik olarak gözlenen bir mıknatıslanma oluşur. Ancak, ortamdaki ısısal çalkantı nedeniyle ferromanyetik düzen, sıcaklık arttıkça bozulur ve Curie sıcaklığı denilen kritik bir T_c değerinde sıfır olur (Şekil 1.1). Bu, ikinci dereceden bir faz geçişidir. Kritik T_c sıcaklığı üstünde mıknatıslık kaybolur.



Şekil 1.1. Bir manyetik madde için sıcaklığın fonksiyonu olarak mıknatıslanma

Şekil 1.1' de bir manyetik madde için sıcaklığın fonksiyonu olarak mıknatıslanma ve bir magnet için ferromanyetik-paramanyetik faz geçişini göstermektedir. Manyetik sistem, kritik sıcaklığın altındaki değerlerde ferromanyetik fazda iken, sıcaklığın kritik sıcaklık ve üzeri değerleri için paramanyetik faza geçmiştir. Bu şekilde göze çarpan ilk şey bir kritik sıcaklık değeri ve bu değerde sistemin faz dönüşümü göstermesidir. Faz geçişleri birinci dereceden faz geçişi ve ikinci dereceden faz geçişi olmak üzere ikiye ayrılır. İki fazın Gibbs ya da Helmholtz serbest enerjilerinin kritik sıcaklıkta birbirine eşit yani sürekli, ancak sıcaklığa ya da basınca göre türevlerinin süreksiz olduğu faz geçişlerine birinci dereceden faz geçişi denir. İkinci dereceden faz geçişinde ise kritik nokta da serbest enerjinin sıcaklığa göre türevi tanımlı yani süreklidir.

Bununla birlikte çoğu fiziksel sistemler tek düzen parametresiyle incelenemez. Mesela bir manyetik alaşımı incelemek için en az üç durum ve iki düzen parametresi olan modellere gerek vardır. Bu modele en iyi örnek ise spin-1 Ising modelidir. Spin-1 Ising modeli üç durumlu ve iki düzen parametrelili bir sistemdir. Bu model bir çok fiziksel sistemin davranışlarını incelemek için kullanılmıştır. Faz ayrışması ve ikili alaşımlarda ferromanyetizma, sıvı karışımlar, sıvı kristal karışımlar, katı-sıvı gaz karışımlar, mikroemülsiyonlar, re-entrant olaylar, donma, manyetik düzenlilik, faz dönüşümleri, düzenli ve düzensiz geçişler, yarı kararlı ve kararsız durumlar gibi birçok fiziksel kooperatif olayın termodinamik özelliklerinin açıklanması bu model kullanılarak yapılmaktadır.

Ising modellerinin gelişmesiyle birlikte tek tip spin sistemlerinin yanı sıra karma spin sistemlerini içeren çalışmalar da artmaya başlamıştır. Son zamanlarda iki alt örgülü karma sistemleri tek tip spinli sistemlerle karşılaştırıldığında daha az yer değiştirme simetrisine sahip olmasından dolayı tek spin sistemlerine göre çok daha ilgi çekicidir ve tek tip spin sistemlerinde gözlemlenmeyen bir çok fiziksel olayı sergilemektedirler. Ayrıca tek spin sistemlerine göre çok daha zengin faz diyagramları vermektedirler. Karma spin sistemleri üzerine sadece teorik amaçla değil, moleküler temelli manyetik malzemeleri incelemek amacıyla deneysel olarak da çalışılmıştır. Karma spinli Ising modelleri, akademik araştırmalara yaptığı katkı kadar, teknolojik gelişmeler için önemli özelliklere ve yarara sahip olan ferrimanyetik maddelerin incelenmesinde de önemli bir rol oynar. Yarım sayılı ve tam sayılı spin sistemlerini içeren karma spin Ising modelleri yoğun olarak çalışılmıştır. Bunlara örnek olarak karma spin-1 ve spin-1/2 Ising sistemi, karma spin-1 ve spin-3/2 Ising sistemi verilebilir.

Faz geçişlerinin sistem parçacıkları arasındaki etkileşimlerin bir sonucu olduğu göz önüne alındığında, oluşturulacak mikroskobik modelde parçacıklar arasındaki etkileşmelerin göz önüne alınması yeterlidir. Faz geçişlerinin incelenmesi amacıyla yapılan pek çok çalışmada böyle bir yapı ele alınarak, Ising modelleri, Heisenberg modelleri, XY model gibi spin modelleri ortaya konmuştur. Spinin n boyutlu brim vektörlerle tanımlandığı model, genel olarak $O(n)$ modeli olarak bilinir ve $n=1$ Ising modeli, $n=2$ XY modeli, $n=3$ klasik Heisenberg modeli şeklinde tanımlanır. $n \rightarrow \infty$ limitinde ise küresel modeller elde edilir. İlgilenilen modele göre, S_i spin değişkeni kesikli veya sürekli değerler alır. Spin-1/2 Ising modelinde, $S_i = \pm 1$ olmak üzere iki farklı değere sahiptir. $S_i = \pm 1, 0$ olmak üzere üç durumlu Ising modeli spin-1 Ising modeli olarak bilinir.

Kuantum Heisenberg modeli ise istatistik mekanikte üzerinde sıklıkla çalışılan modeller arasındadır. Model, manyetik sistemlerde spinin kuantum mekaniksel olarak ele alındığı faz dönüşümleri ve kritik olayların incelenmesinde kullanılmaktadır. Son zamanlarda özellikle düşük boyutlu Heisenberg modeli ilginç kuantum olaylarının incelenmesi için yararlı bir model olmasından dolayı yoğun bir ilgi görmüştür. Model, daha sonraları bir boyutlu antiferromanyetik kuantum Heisenberg modelinde Haldane aralıklarının, kuantum faz dönüşümlerinin, spin-Peierls kararsızlıklarının, dimerizasyon, kuantum dolaşıklığı, magnetizasyon platoları v.b. gibi olayların tanımlanmasında kullanılmıştır. Bu olayların yanı sıra iki-boyutlu Cu-O tabakalarını içeren yüksek sıcaklık süperiletken malzemelerdeki manyetik düzenlenim iki-boyutlu spin-1/2 kuantum Heisenberg modeli vasıtasıyla açıklanmaktadır.

Modelin yaklaşık çözümleri farklı istatistik mekaniksel yöntemlerle detaylı olarak incelenmektedir. Diğer taraftan, model üzerinde teorik olarak yoğun bir çaba sarf edilmesine rağmen, kuantum Heisenberg modelinin kuantum doğasıyla ilgili matematiksel zorluklar yüzünden, henüz sadece Heisenberg etkileşmelerini içeren karma spin durumları için az sayıda tam çözüm mevcuttur. Genel olarak modelin çözümündeki matematiksel güçlük, Hamiltonyene dahil edilen kuantum spin operatörlerinin komute etmemesidir. Modelin çözülmesi zor olan bu temel zorluğu bizi Bethe örgüsü üzerinde hem Ising atomlarını hem de Heisenberg atomlarını içeren bir Ising-Heisenberg modelinin tanımlanmasına motive etmiştir. Bu şekilde bir model ilk olarak 1961 'li yıllarda tanımlanmıştır. Böylece Ising ve Heisenberg etkileşmelerini içeren modelin tam çözümüne daha kolay bir tarzda ulaşılabilir.

Bu amaç için, ilk olarak Syozi tarafından geliştirilen ve daha sonra dikkate değer şekilde Fisher tarafından genelleştirilen dekorasyon-iterasyon dönüşüm yöntemini kullanacağız (Syozi I.1951, Fisher M. 1959).

Çalışmada, dekorasyon-iterasyon yöntemini, düzenli Bethe örgüsünün her bağı üzerine bir çift Heisenberg atomu koymak suretiyle kullanacağız. Bu şekilde, sırasıyla Ising- ve Heisenberg tipi atomlardan kurulu iç içe iki alt-örgüden oluşan çift dekore edilmiş bir model elde edeceğiz. Bahsedilen örgü üzerinde kurulu böyle bir model teorik ve deneysel bakımdan ilginç olabilir. Teorik bakımdan bu modelin en önemli özelliği, tam hesaplama yöntemi ile Ising sistemlerinin manyetik özelliklerinin, kuantum Heisenberg atomlarınca ne şekilde modifiye edileceğinin incelenmesini mümkün kılmasıdır. Diğer taraftan deneysel bakımdan model, çalışmada incelenen sisteme benzer topolojik yapıya sahip manyetik materyallerin sentezlenmesine yardımcı olabilir.

2. KAYNAK ÖZETLERİ

Son zamanlarda istatistik mekanikte ve yoğun madde fiziğinde üzerinde yoğun olarak çalışılan modellerden biri Kuantum Heisenberg modelidir. Özellikle düşük boyutlu kuantum Heisenberg sistemleri, zengin kuantum olayları sergilemelerinden dolayı ilgi odağı olmuşlardır. Kuantum Heisenberg ferromagnetlerinde tamsayı spin değerleri için Haldane aralıkları (Haldane, 1983) olarak adlandırılan, sistemin taban durumu ile ilk uyarılmış durumu arasında bir boşluk mevcut olmasına karşın, kesirli spinler için bu aralıkların olmadığı bir uyarılma spektrumu bulunması dikkat çekici olmuştur. Bununla birlikte kuantum faz dönüşümleri (Sachdev, 1999), spin-Peierls kararsızlığı (Hase vd., 1993; Taylor ve Müller, 1985), dimerizasyon (Richter, 1993; Oitmaa ve Weihong, 1996), kuantum dolaşıklığı (Wang, 2001), magnetizasyon platoları (Hida, 1994; Oshkawa vd., 1997; Okamoto ve Kitazawa, 1999) v.b. gibi olaylar en iyi şekilde spin-1/2 kuantum Heisenberg modelinin kullanılmasıyla açıklanabilmektedir.

Üzerinde teorik olarak yoğun bir şekilde çalışılmasına rağmen sadece Heisenberg spinlerini içeren modelin tam çözümü sadece tek boyutta yapılmış ve sayıca sınırlı kalmış (Bethe, 1931; Orbach, 1958; Walker, 1959), daha yüksek boyutlar için ise ancak yaklaşık yöntemler (Rushbrooke vd., 1972-1976; Mielnicki vd., 1988; Idogaki ve Uryu, 1992) kullanılarak çeşitli fiziksel olaylar açıklanmaya çalışılmıştır. Yani iki boyut ve daha yukarısı için modelin tam çözümü yapılamamış, tek boyutta yapılan çalışmalar ise sayıca sınırlı kalmıştır. Kuantum Heisenberg modelinin tam çözümünde karşılaşılan en önemli zorluk ise sistemi tanımlayan kuantum mekaniksel Hamiltonyenin spin operatörlerinin komute (değiş-tokuş) etmemesi ile ilgilidir.

Diğer taraftan Ising ve Heisenberg etkileşme terimlerinin her ikisini içeren bir Ising-Heisenberg karma spin zincirinin ilk olarak ileri sürülmesi Lieb ve çalışma arkadaşları (Lieb vd., 1961; Lieb ve Mattis, 1962) tarafından yapılmıştır. Lieb ve çalışma arkadaşları bu çalışmada modelin tam çözümünü yapmışlar ve modelin taban durumu ile uyarılmış durumlarını kuantum mekaniğinin temel ilkelerini kullanarak elde etmişlerdir. Modelin yaklaşık çözüm yöntemleri ile incelenmesi devam etmesine rağmen Heisenberg spin operatörlerinin komute etmemesi sebebiyle tam çözümleri üzerindeki ilerleme sınırlı kalmıştır. Bununla birlikte son yıllarda bu model Yao ve çalışma arkadaşları (Yao vd., 2002) tarafından anizotropik Heisenberg etkileşmeli duruma başarılı bir şekilde genelleştirilmiştir.

Yao ve çalışma arkadaşları (Yao vd., 2002) nın yaptığı çalışmada ise sistemin tam çözümüne ulaşabilmek için Jordan-Wigner ve Bogoliubov dönüşümleri kullanılarak taban durumları ve uyarılmış durumlar elde edilmiştir. Ayrıca taban durumlar üzerindeki özellikle keyfi Ising çiftlenim parametrelerinde bir enerji aralığı olan temel uyarılmaları incelemiştir.

Modelin spin operatörlerinin komute etmemesi ile ilgili matematiksel güçlükleri ortadan kaldırmak için dönüşüm tekniklerinin kullanılması Jaščur ve çalışma arkadaşları (Verdauger vd., 1983; Pei vd., 1987; Kahn vd., 1988; Strečka ve Jaščur, 2002a,b; Strečka ve Jaščur, 2003; Čanova vd., 2006; Strečka ve Jaščur, 2006; Strečka vd., 2008) tarafından yapılmıştır. Daha açık olarak Strečka ve Jaščur (Strečka ve Jaščur, 2002) Ising- ve Heisenberg tipi atomlar içeren çift Heisenberg atomlarınca dekore edilmiş bir kare örgü üzerinde modelin manyetik özelliklerini incelemiştir. Bu çalışmada, taban durum, faz diyagramları ve temel fiziksel nicelikler için tam çözümleri elde etmişler ve kuantum antiferromanyetik fazın varlığını tespit etmişlerdir. Böylece sadece Ising atomlarını içeren orijinal kare örgü üzerine, Heisenberg atomlarını yerleştirmekle ve dönüşüm yöntemine dayalı tam çözüm ile Ising sistemlerinin ne şekilde modifiye edileceği bu çalışmada gösterilmiştir. Yine kuantum antiferromanyetik fazın, sistemlerde kuantum dalgalanmalarının bir sonucu olduğu ve makroskobik ölçekte bu fazın varlığı çalışmada ortaya çıkmaktadır. Yine Strečka ve Jaščur (Strečka ve Jaščur, 2003), bir dış manyetik alan varlığında spin-1/2 ve spin-S ($S=1/2, 1$) Ising-Heisenberg antiferromanyetik zincir için tam sonuçlar elde etmek için dekorasyon-iterasyon tekniğini kullanmışlardır. Bu çalışmadan ortaya çıkan en önemli sonuç ise tam hesaplama tekniği ile elde edilen çok basamaklı magnetizasyon platolarının ortaya çıkmasıdır. Ayrıca yine aynı çalışmada, magnetizasyon platolarının davranışının esas itibarıyla Ising ve Heisenberg spinleri arasındaki etkileşme parametresine bağlı olduğu ve modelde diyagonal olmayan etkileşme parametresinin (J_{Δ}) sistemin Ising benzeri davranışını önemli ölçüde modifiye ettiği görülmüştür. Ising-Heisenberg zinciri üzerindeki teorik çalışma ile son zamanlarda yapılan bazı deneysel karma-spin zincirleri arasında bir ilişki bulunmaktadır (Verdauger vd., 1983; Pei vd., 1987; Kahn vd., 1988; Strečka ve Jaščur, 2002; Strečka vd., 2008). Ayrıca molekül mühendisliğindeki son gelişmeler bir boyutlu ve iki farklı tip manyetik iyonun AABAABAAB... yapısında bir polimerik bileşiğin yakın gelecekte sentezleneceği ümit edilmektedir. Aynı grup diğer bir çalışmada karma spin-1/2 ve spin-S Ising-Heisenberg elmas dizilimli zincir yapıların taban

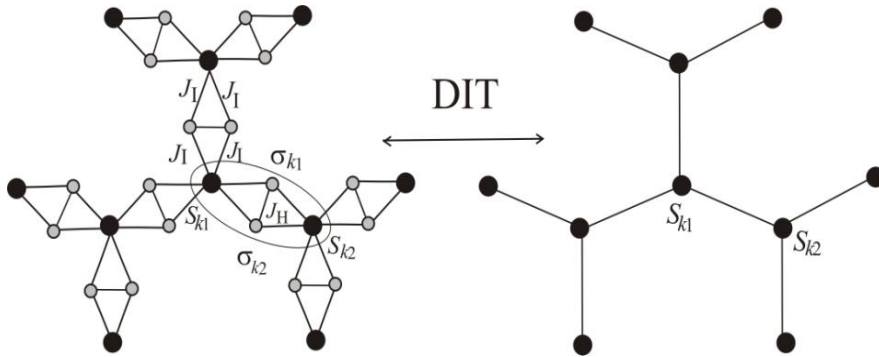
durum ve sonlu-sıcaklık özellikleri genelleştirilmiş dekorasyon-iterasyon tekniğine dayalı analitik hesaplamalarla incelemiştir (Čanova vd., 2006). Özellikle Ising ve Heisenberg tipi parametreler arasındaki etkileşme ile ortaya çıkan geometrik frustrasyon etkisinin incelenmesi üzerinde durulmuştur. Geometrik frustrasyon ve kuantum etkileri arasındaki karşılıklı etkileşim sonucu, bazı klasik düzenli durumlara ek olarak karışık spin durumlu çeşitli kuantum taban durumları bulunmuştur. Yine bu çalışmadan ortaya çıkan en önemli sonuçlar arasında magnetizasyon eğrilerindeki platolar, manyetik alınganlığın sıcaklığa göre değişiminde yuvarlak minimumun görülmesi, çift sivrilige sahip ısı kapasitesi eğrileri ve frustrasyonla birlikte ortaya çıkan yüksek magneto-kalorik etki sayılabilir. Ayrıca aynı çalışmada düzensiz duruma frustrasyon ile sürülen sisteme, düşük bir dış manyetik alan uygulandığında üç maksimuma sahip ısı kapasitesi eğrileri elde edilmiştir. Aynı çalışma grubu tarafından değişik topolojik yapıya sahip sistemlerin düzenli ve düzensiz durumları, geometrik spin frustrasyonu, re-entrant faz dönüşümleri ve taban durum özellikleri yine aynı yöntemle tam olarak çözümlenmiştir (Strečka ve Jaščur, 2006). Bu çalışmaların tamamında daha önce Syozi (Syozi, 1951) tarafından geliştirilen ve Fisher (Fisher, 1959) tarafından genelleştirilen dekorasyon-iterasyon dönüşümü değişik örgü tipleri için kullanılmış ve böylece modelin kesin çözümü yapılmıştır.

Modelin manyetik özellikleri iki boyutlu farklı örgüler için yukarıda verilen kısa literatür analizinde tam olarak incelenmesine rağmen, farklı bir topolojik yapıya sahip olan Bethe örgüsü üzerinde ise şimdiye kadar incelenmemiştir. Dolayısıyla kullanılan yöntemin bir tam çözüm yöntemi olması, daha önce Bethe örgüsü üzerinde kullanılmamış olması ve bu alanda yapılacak diğer yaklaşık yöntemlere temel teşkil etmesi ve böylece literatürdeki boşluğu doldurması ümit edilmektedir.

3. MATERYAL VE YÖNTEM

3.1. Materyal

Bu çalışmada Ising-Heisenberg modelinin manyetik özellikleri çift dekore edilmiş Bethe örgüsü üzerinde dekorasyon-iterasyon dönüşüm yöntemi ile incelenecektir. Daha açık olarak, Ising ve Heisenberg atomlarını (spinlerini) içeren Bethe örgüsünün topolojik yapısı şöyle oluşturulur: Merkezi atomdan (siyah daire) başlanır ve herşeyde bu atoma bağlı q atom (siyah daireler) eklenir. Bu q atomları 1. kabuğu oluşturur. Ardından daha fazla kabuk oluşturmak için merkezi atoma ($q-1$) atom eklenir. Bu şekilde iteratif olarak giderek 2, 3, ..., n . kabuklar oluşur. Bu durumda sınır noktaları hariç olmak üzere her bir Ising atomunun $q=3$ tane en yakın komşusu vardır. Elde edilen q koordinasyon sayılı örgü üzerinde komşu Ising atomlarının arasına üç uzaysal bileşene sahip olan çift olarak kuantum Heisenberg atomları (gri daireler) yerleştirilir.



Şekil 3.1. Bethe örgüsü üzerinde çiftli dekore edilmiş Ising-Heisenberg modelinin topolojik yapısı. Siyah daireler Ising atomlarını ve içi boş daireler ise Heisenberg atomlarını göstermektedir.

Böylece şekilde görüldüğü gibi gerek Ising gerekse kuantum Heisenberg spinlerini içeren ve Ising-Heisenberg modelini tasvir edecek olan örgü elde edilir. İncelenecek olan modelin toplam Hamiltonyeni

$$H = -J_H \sum_{i,j}^{Nq/2} \left[\Delta(\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y) + \sigma_i^z \sigma_j^z \right] - J_I \sum_{k,l}^{2Nq} S_k^z \sigma_l^z \quad (3.1)$$

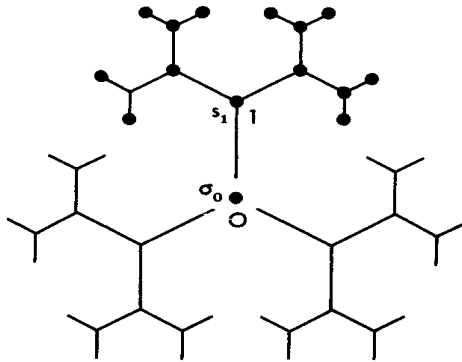
olarak verilebilir. Burada σ_l^z ve S_k^z sırasıyla spin-1/2 ve spin-1 operatörlerinin uzaysal bileşenlerini, J_I Ising ve Heisenberg atomları arasındaki tek uzaysal bileşene sahip anizotropi parametresini ve $J_H(\Delta)$ ise Heisenberg atomları arasındaki üç uzaysal bileşen içeren anizotropik çiftlenim parametresini gösterir. Hamiltonyendeki Δ parametresi sistemin Ising veya Heisenberg rejiminde bulunmasını sağlar.

3.2. Yöntem

Bu bölümde, q koordinasyon sayılı, dekore edilmiş Bethe örgüsü üzerinde spin-1/2 İsing-Heisenberg modelinin manyetik özellikleri tam tekrarlamaya bağıntılarına dayalı kesin bir metot ile dekorasyon-iterasyon dönüşümünün birlikte kullanılmasıyla tam çözüm elde edilecektir. Modelin tam çözümü, spin-1/2 Ising-Heisenberg modelini, q koordinasyon sayılı basit Bethe örgüsü üzerindeki etkin etkileşmeli spin-1/2 Ising modeline dönüştürmekle elde edilir. İlk önce Bethe örgüsü, spin değeri $S = 1$ olan atomlarla dekore edilecek ve dekorasyon-iterasyon dönüşümü uygulandıktan sonra model q koordinasyon sayılı basit Bethe örgüsü üzerinde spin değeri $\sigma = 1/2$ olan spin-1/2 Ising modeline dönüşecektir.

3.2.1. İterasyon Metodunun Bethe Örgüsü Üzerinde spin-1/2 Ising Modeline Uygulanması

Bu kesimde Bethe örgüsü üzerindeki tam olarak çözülebilen spin-1/2 Ising modelini ele alacağız ki, buda bir kare veya kübik örgü üzerinde modelin yaklaşık olarak çözümlenmesine eşdeğerdir (Bethe, 1935).



Şekil 3.2. Bir Cayley Ağacının, $q = 3$ ve $n = 4$ Konumlu Üretiminin Gösterimi

Bir Cayley Ağacı oluşturulurken, Şekil 3.2’de görüldüğü gibi merkezi ‘0’ noktasından başlanır ve hepsi ‘0’ noktasına bağlı q noktası eklenir. Bu q noktalarının takımı birinci kabuk (shell) olarak adlandırılır (Baxter, 1982). Daha fazla kabuk oluşturmak için r . kabukta bir nokta alınır ve bu noktaya $(q-1)$ tane nokta eklenir. Bu işlem r . kabuktaki bütün noktalar için yapılır ve bu yeni noktalar takımını $(r+1)$. kabuk olarak adlandırılır. Bu şekilde iteratif olarak ilerleyerek, 2., 3., ..., n . kabukları oluşturulur. Bu şekilde bağlantısız olarak oluşturulan grafik, Cayley Ağacı olarak adlandırılır.

Burada sınır noktaları hariç her bir noktanın q tane en yakın komşusu vardır. r . kabukta $q(q-1)^{r-1}$ nokta ve grafikteki toplam nokta sayısı,

$$\frac{q[(q-1)^n - 1]}{(q-2)} \quad (3.2.1)$$

ifadesi ile verilir. n . kabukdaki noktalar sınır noktalarıdır. Bunların sadece birer tane komşuları olmaları sebebiyle diğerlerinden farklıdır. Fakat diğer bütün noktaların (iç noktalar) her birinin q tane komşusu vardır. Böyle bir grafikte ‘devre’ yoktur ve Cayley ağacı olarak bilinir. Şekildeki sınır noktalarının ihmal edilmesi durumunda q koordinasyon sayılı bir Bethe örgüsü olarak düşünülebilir. Böyle noktalar eşdeğer olmalıdırlar ve her birinin ' q ' tane komşusu vardır. Başka şekilde söylemek gerekirse, bir Cayley ağacı üzerinde bir Ising modeli oluşturulursa o zaman bölüşüm fonksiyonu Z , grafik içerisindeki iç noktalardan ve sınır noktaları ya da üzerindeki noktalardan gelen bütün katkıları ihtiva eder. Termodinamik limitte bile sınır noktaları ya da yakınlarındaki bölgelerin katkıları ihmal edemeyiz. Eğer toplam bölüşüm fonksiyonu düşünülürse, o zaman Cayley ağacı üzerinde Ising modeli düşünülüyor demektir. Bu problem çözülmüştür. (Runnels,1967; Eggarter, 1974; Müler-Hartman and Zittartz, 1974) ve olağan dışı özellikleri vardır. Fakat burada biz bunu düşünmeyeceğiz. Bunun yerine, bu çalışmada Bethe örgüsü üzerindeki iç noktaların bölüşüm fonksiyonuna katkısını etkili olarak düşüneceğiz.

Şimdi Cayley ağacı üzerinde sınır terimlerini ihmal ederek Bethe örgüsü üzerinde spin-1/2 Ising modelini düşünelim. Bölüşüm fonksiyonu;

$$Z = \sum_{\sigma} P(\sigma) \quad (3.2.2)$$

ve

$$P(\sigma) = e^{\beta[J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \sigma_i]} \quad (3.2.3)$$

şeklinde olup $P(\sigma)$, spin konfigürasyonu üzerinden normalize olmamış olasılık dağılımıdır. Özellikle, merkezi konum '0' daki spin σ_0 ise, o zaman oradaki magnetizasyon,

$$M = \langle \sigma_0 \rangle = \sum_{\sigma} \frac{\sigma_0 P(\sigma)}{Z} \quad (3.2.4)$$

bağıntısı ile verilir. Şekil 3.2' den açıkça görüldüğü gibi eğer grafik (örgü) '0' da kesilirse, birbirleriyle bağlantısız q tane özdeş dala ayrılır. Ayrılan bu dalların sayısı, en yakın komşuların sayısı veya koordinasyon sayısına bağlıdır. Bu dalların her biri, kökü σ_0 spininde olan ağaçlardır.

$P(\sigma)$, merkezi konumda, σ_0 değerli spin konfigürasyonu ifade eder.

$$P(\sigma) = \exp \beta(h\sigma_0) \prod_{j=1}^q Q_n(\sigma_0 | s^{(j)}) \quad (3.2.5)$$

Burada $S^{(j)}$, j . alt-ağaç üzerindeki spinleri belirtir. σ_0 hariç,

$$Q_n(\sigma_0 | s) = \exp \beta \left[J \sum_{(i,j)} s_i s_j + J s_1 \sigma_0 + h \sum_i s_i \right] \quad (3.2.6)$$

s_i , alt-ağacın i . konumundaki spinidir (spin değeri σ_0 olan kök hariç). Konum 1, Konum 0 'a komşudur, Şekil 3.2'in üst ağacında gösterildiği gibi.

(3.2.6) ifadesindeki ilk toplam, (0,1) hariç alt-ağacın bütün kenarları üzerindedir. Burada ki n , alt-ağacın n tane kabuğu olduğu gerçeğindedir, öyle ki kökten sınıra kadar olan n basamaktır. Şekil 3.2' deki gibi, üst-alt ağaç '0' a komşu olan '1' konumunda kesilirse o zaman ' q ' tane parçacığa bölünür: Bunlardan birincisi

(0,1) gövde, diğerleri ise benzer dallardır. Bu dallardan her biri orijinali gibi bir alt ağaçtır, fakat $(n - 1)$ tane kabuğu vardır. Öyle ki,

$$Q_n(\sigma_0|s) = e^{\beta(J\sigma_0s_1+h s_1)} \prod_{j=1}^{q-1} Q_{n-1}(s_1|t^{(j)}) \quad (3.2.7)$$

Burada $t^{(j)}$ alt ağacın j . dal üzerindeki s_1 spini hariç bütün spinleri ifade eder.

$$P(\sigma) = e^{\beta h \sigma_0} \prod_{j=1}^q Q_n(\sigma_0|s^{(j)}) \quad (3.2.8)$$

ve

$$Q_n(\sigma_0|s) = e^{\beta J \sigma_0 s_1} \prod_{j=1}^{q-1} Q_{n-1}(s_1|t^{(j)}) \quad (3.2.9)$$

faktörizasyon ilişkileri M , yani manyetizasyonu hesaplamamızı kolaylaştırır.

Merkezi spin σ_0 'ın bütün diğer spinler ile olan etkileşimi, aşağıdaki toplam ile verilir:

$$g_n(\sigma_0) = \sum_s Q_n(\sigma_0|s) \quad (3.2.10)$$

Denklem (3.2.2) ve (3.2.5) bağıntısından bölüşüm fonksiyonu,

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\sigma} P(\sigma) \\ &= \sum_{\sigma_0} e^{\beta h \sigma_0} \prod_{j=1}^q Q_n(\sigma_0|s^{(j)}) \\ &= \sum_{\sigma_0} e^{\beta h \sigma_0} [g_n(\sigma_0)]^q \end{aligned} \quad (3.2.11)$$

bulunur. Benzer olarak, denklem (3.2.4) ve (3.2.5) bağıntısından, Magnetizasyon

$$\begin{aligned}
M &= Z^{-1} \sum_{\sigma_0} \sigma_0 e^{\beta h \sigma_0} [g_n(\sigma_0)]^q \\
&= \frac{\sum_{\sigma_0} \sigma_0 e^{\beta h \sigma_0} [g_n(\sigma_0)]^q}{\sum_{\sigma_0} e^{\beta h \sigma_0} [g_n(\sigma_0)]^q}
\end{aligned} \tag{3.2.12}$$

Burada $x_n = \frac{g_n(-1/2)}{g_n(+1/2)}$ olarak tanımlanırsa yukarıdaki magnetizasyon ifadesi;

$$M = \frac{1}{2} \frac{e^{\beta h/2} - e^{-\beta h/2} x_n^q}{e^{\beta h/2} + e^{-\beta h/2} x_n^q} \tag{3.2.13}$$

olarak elde edilir. x_n biliniyorsa, M hesaplanabilir. x_n 'i elde etmek için,

$$\begin{aligned}
g_n(\sigma_0) &= \sum_s Q_n(\sigma_0 | s) \\
&= \sum_s e^{\beta(J\sigma_0 s_1 + h s_1)} \prod_{j=1}^{q-1} Q_{n-1}(s_1 | t^{(j)}) \\
g_n(\sigma_0) &= \sum_{s_1} e^{\beta(J\sigma_0 s_1 + h s_1)} [g_{n-1}(s_1)]^{q-1}
\end{aligned} \tag{3.2.14}$$

ifadesi σ_0 'ın $\mp \frac{1}{2}$ değeri için hesaplanır:

$$\begin{aligned}
\sigma_0 = +\frac{1}{2} \text{ için:} \quad g_n(+1/2) &= \sum_{s_1} e^{\beta(\frac{J}{4} + \frac{h}{2})} g_{n-1} [(+1/2)]^{q-1} \\
&\quad + e^{\beta(-\frac{J}{4} - \frac{h}{2})} g_{n-1} [(-1/2)]^{q-1}
\end{aligned} \tag{3.2.15}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_0 = -\frac{1}{2} \text{ için:} \quad g_n(-1/2) &= \sum_{s_1} e^{\beta(-\frac{J}{4} + \frac{h}{2})} g_{n-1} [(+1/2)]^{q-1} \\
&\quad + e^{\beta(\frac{J}{4} - \frac{h}{2})} g_{n-1} [(-1/2)]^{q-1}
\end{aligned} \tag{3.2.16}$$

değerleri bulunmuş olur. Bulduğumuz bu değerler,

$$x_n = \frac{g_n(-1/2)}{g_n(+1/2)} \quad (3.2.17)$$

denkleminde yerine yazılırsa,

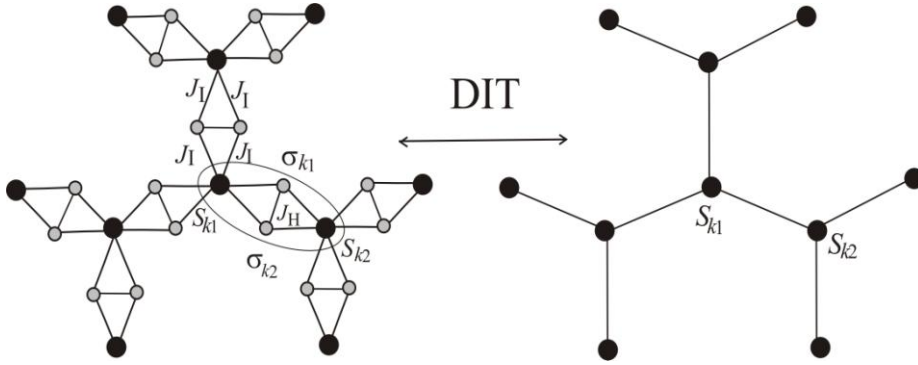
$$x_n = \frac{e^{\beta(-\frac{J}{4} + \frac{h}{2})} x_n^{q-1} + e^{\beta(-\frac{J}{4} - \frac{h}{2})} x_n^{q-1}}{e^{\beta(\frac{J}{4} + \frac{h}{2})} x_n^{q-1} + e^{\beta(-\frac{J}{4} - \frac{h}{2})} x_n^{q-1}} \quad (3.2.18)$$

şeklinde elde edilir.

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

4.1. Dekorasyon-İterasyon Dönüşümünün Karma Spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg Modeline Uygulanması

Bu kesimde, dekorasyon-iterasyon dönüşümü, dekore edilmiş Bethe örgüsü üzerindeki karma spin-1/2 ve Spin-1 Ising Heisenberg modeline uygulanacaktır. Ayrıca tam tekrarlamaya yönteminin de modele uygulanmasıyla sistemin tam çözümü yapılmış olacaktır. Şekil. 4.1 de içi dolu daireler spin 1 Ising atomlarını ve içi boş olan dairelerde spin-1/2 Heisenberg atomlarıyla dekore edilmiş olan ve koordinasyon sayısı $q=3$ olan Bethe örgüsünü göstermektedir.



Şekil 4.1. Dekore edilmiş Bethe örgüsü üzerinde karma spin-1 ve spin-1/2 Ising-Heisenberg modelinin şematik temsili.

Şekilden de açıkça görüldüğü gibi dekorasyon-iterasyon dönüşümü vasıtasıyla sol taraftaki karma spin-1 ve spin-1/2 Ising - Heisenberg spinlerini içeren karma sistem, sağ taraftaki sadece spin-1 Ising spinlerini içeren basit Bethe örgüsü üzerindeki efektif etkileşmeli spin-1 Ising modeline dönüşmektedir.

Karma Spin 1 ve Spin-1/2 Ising-Heisenberg modelinin dekore edilmiş Bethe örgüsü üzerindeki Hamiltonyeni,

$$H = -J_H \sum_{i,j}^{Nq/2} [\Delta(\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y) + \sigma_i^z \sigma_j^z] - J_I \sum_{k,l}^{2Nq} S_k^z \sigma_l^z \quad (4.1.1)$$

şeklinde verilebilir.

Ayrıca, Hamiltonyendeki ilk toplam tüm Heisenberg atomları üzerindedir. İkinci toplam ise Ising ve Heisenberg atomları üzerindedir. Toplam Hamiltonyen bağ Hamiltonyen cinsinden

$$H = \sum_{k=1}^{Nq/2} H_k \quad (4.1.2)$$

şeklinde verilir. Bağ Hamiltonyen H_k , Heisenberg atomlarının k. çifti ile ilgili bütün etkileşme terimlerini içerir ve

$$H_k = -J_H [\Delta(\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y) + \sigma_i^z \sigma_j^z] - h(\sigma_{k1}^z + \sigma_{k2}^z) \quad (4.1.3)$$

formunda verilir, burada $h = J_I(S_{k1}^z + S_{k2}^z)$ 'dir. Tam çözüm yönteminin ilerlemesinde çok önemli bir nokta olan gözlem altındaki sistemimiz için bölüşüm fonksiyonunun hesaplanmasıdır. Bağ Hamiltonyenleri için standart komitasyon bağıntısını ($[H_k, H_j] = 0, k \neq j$) kullanarak dekore edilmiş elmas yapıları Ising-Heisenberg modelinin bölüşüm fonksiyonu,

$$Z_{IHM} = \sum_{\{S\}} \prod_{k=1}^{\frac{Nq}{2}} \text{Tr}_k e^{(-\beta H_k)} = \sum_{\{S\}} \prod_{k=1}^{\frac{Nq}{2}} Z_k, \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (4.1.4)$$

şeklinde ifade edilir. Burada k_B Boltzmann sabiti ve T mutlak sıcaklıktır. N , Ising atomlarının toplam sayısını ve q , dekore olmamış yani orijinal örgünün koordinasyon sayısını göstermektedir.

Şimdi H_k 'nin yani (4.1.3) ifadesinin matris formunu elde edeceğiz. Bunun için öncelikle Pauli spin matrislerinin verilmesi gereklidir. Pauli spin matrisleri,

$$\sigma_{k1}^x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_{k1}, \quad \sigma_{k1}^y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}_{k1}, \quad \sigma_{k1}^z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}_{k1} \quad (4.1.5)$$

ve

$$\sigma_{k2}^x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_{k2}, \quad \sigma_{k2}^y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}_{k2}, \quad \sigma_{k2}^z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}_{k2} \quad (4.1.6)$$

olarak verilirler. Yukarıdaki Pauli spin matrislerini model Hamiltonyene uygulayarak H_k 'nin içindeki tüm hesaplamalar yapılır. Hesaplanan tüm ifadeleri H_k 'nin içinde yerine koyarsak ve $H_k = H'_k$ olarak tanımlanırsa:

$$H'_k |\varphi_1\rangle = -\frac{J_H}{4} |\varphi_1\rangle - h |\varphi_1\rangle \quad (4.1.7)$$

$$H'_k |\varphi_2\rangle = -\frac{J_H \Delta}{4} |\varphi_3\rangle + \frac{J_H}{4} |\varphi_2\rangle \quad (4.1.8)$$

$$H'_k |\varphi_3\rangle = -\frac{J_H \Delta}{4} |\varphi_2\rangle + \frac{J_H}{4} |\varphi_3\rangle \quad (4.1.9)$$

$$H'_k |\varphi_4\rangle = -\frac{J_H}{4} |\varphi_4\rangle + h |\varphi_4\rangle \quad (4.1.10)$$

ifadeleri elde edilmiş olur. $H_k = H'_k$ bond Hamiltonyenin Heisenberg gösteriminde matris elemanlarını $\langle \Psi_m | H_k | \Psi_n \rangle = \langle m | H_k | n \rangle$ bağıntısını kullanarak elde edebiliriz. Bu bağıntıları kullanabilmek için notasyonda kolaylaştırıcı eleman olarak kullanılan kronecker delta fonksiyonunun özelliği kullanılabilir:

$$\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij} \quad \begin{pmatrix} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{pmatrix}. \quad (4.1.11)$$

H'_k 'nin sıfırdan farklı terimleri için uygulandığında, diagonal matris elemanları

$$\langle \varphi_1 | H'_k | \varphi_1 \rangle = -\frac{J_H}{4} - h \quad (4.1.12)$$

$$\langle \varphi_2 | H'_k | \varphi_2 \rangle = \frac{J_H}{4} \quad (4.1.13)$$

$$\langle \varphi_3 | H'_k | \varphi_3 \rangle = \frac{J_H}{4} \quad (4.1.14)$$

$$\langle \varphi_4 | H'_k | \varphi_4 \rangle = -\frac{J_H}{4} + h \quad (4.1.15)$$

formunda elde edilir. Diğer taraftan diagonal olmayan matris elemanları ise

$$\langle \varphi_3 | H'_k | \varphi_2 \rangle = -\frac{J_H \Delta}{2} \quad (4.1.16)$$

$$\langle \varphi_2 | H'_k | \varphi_3 \rangle = -\frac{J_H \Delta}{2} \quad (4.1.17)$$

şeklinde verilirler. Özdeğer denklemi $(H - E_i I) \Psi_i = 0$ ifadesi kullanılarak enerji özdeğerleri elde edilebilir:

$$\langle \varphi_f | H'_k | \varphi_j \rangle = \begin{vmatrix} -\frac{J_H}{4} - h - E_i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{J_H}{4} - E_i & -\frac{J_H \Delta}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{J_H \Delta}{2} & \frac{J_H}{4} - E_i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{J_H}{4} + h - E_i \end{vmatrix} = 0. \quad (4.1.18)$$

Böylece özdeğerleri,

$$E_{1,2} = -\frac{J_H}{4} \pm h \quad (4.1.19)$$

$$E_{3,4} = \frac{J_H}{4} \pm \frac{J_H \Delta}{2} \quad (4.1.20)$$

İfadeleri ile verilirler. Elde edilen enerji özdeğerleri, karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modelinin $H_k = H'_k$ Hamiltonyeninin Z_k bölüşüm fonksiyonunun elde edilmesinde kullanılacaktır. (4.1.4) bağıntısı ile verilen bölüşüm fonksiyonu Z_k ifadesi aşağıdaki formda yazılır:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \underbrace{Tr}_{\{\sigma_j\}} e^{-\beta H} = \sum_{\{S_i\}} \underbrace{Tr}_{\{\sigma_j\}} e^{-\beta \sum_{k=1}^{Nq/2} H_k} . \quad (4.1.21)$$

Böylece modelin toplam bölüşüm fonksiyonu iç kısmındaki toplamın özelliğinden dolayı

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \prod_{k=1}^{Nq/2} Tr_k e^{-\beta H_k} \quad (4.1.22)$$

ifadesi şeklinde yazılabilir. $Z_k = Tr_k e^{-\beta H_k} = Tr_k e^{-\beta H'_k}$ olduğu bilindiğine göre bölüşüm fonksiyonu,

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \prod_{k=1}^{Nq/2} Z_k \quad (4.1.23)$$

denklemleriyle verilir. Bu durumda enerji özdeğerleri içeren,

$$Z_k = \sum_{m=1}^4 e^{-\beta E_m} \quad (4.1.24)$$

ifadesiyle verilir. Daha öncede ifade edildiği gibi burada E_m , $H_k = H'_k$ Hamiltonyeninin özdeğerleridir. Bu durumda bölüşüm fonksiyonu,

$$Z_k = 2e^{\frac{\beta J_H}{4}} \cosh(\beta h) + 2e^{-\frac{\beta J_H}{4}} \cosh\left(\frac{\beta J_H \Delta}{2}\right) \quad (4.1.25)$$

olarak elde edilir. Burada $h = J_I(S_{k1}^z + S_{k2}^z)$ olarak daha önce verilmişti. Bu ifade (4.1.25) ifadesinde yerine yazılırsa Z_k ifadesi yeniden;

$$Z_k = 2e^{\frac{\beta J_H}{4}} \cosh[\beta J(S_{k1}^z + S_{k2}^z)] + 2e^{-\frac{\beta J_H}{4}} \cosh\left(\frac{\beta J_H \Delta}{2}\right) \quad (4.1.26)$$

olarak bulunur. Böylece bağ Hamiltonyeninin bölüşüm fonksiyonuna dekarasyon-iterasyon dönüşümü uygulanırsa, Şekil 4.1'de sağ tarafta görülen ve Blume-Emery-Griffiths modelinin etkileşme parametrelerini içeren aşağıdaki ifade elde edilir:

$$Z_k = Ae^{\beta J S_{k1}^z S_{k2}^z + \frac{\beta D}{q} [(S_{k1}^z)^2 (S_{k2}^z)^2] + \beta K (S_{k1}^z)^2 (S_{k2}^z)^2}. \quad (4.1.27)$$

Yukarıdaki dönüşümden sonra spin-1 Ising modelinin spin değerleri yerine konularak mapping parametreleri elde edilmeye çalışılır. Mapping parametreleri elde edilirken spin-1 Ising modeli üç durumlu olduğu için sadece aşağıdaki spin durumları göz önüne alınır. Bu spin durumlarını bir tablo üzerinde daha iyi görebiliriz.

Tablo4.1. Spin-1 Blume-Emery-Griffiths modelinin spin durumları için dekarasyon- iterasyon dönüşümünde parametreler gösterilmektedir.

S_{k1}^z	S_{k2}^z	DEKORASYON-İTERASYON DÖNÜŞÜMÜ
∓ 1	∓ 1	$2e^{\frac{\beta J_H}{4}} \cosh(2\beta J_I) + 2e^{-\frac{\beta J_H}{4}} \cosh\left(\frac{\beta J_H \Delta}{2}\right) = Ae^{\beta J + \frac{2\beta D}{q} + \beta K}$
∓ 1	± 1	$2e^{\frac{\beta J_H}{4}} + 2e^{-\frac{\beta J_H}{4}} \cosh\left(\frac{\beta J_H \Delta}{2}\right) = Ae^{-\beta J + \frac{2\beta D}{q} + \beta K}$
∓ 1 0	0 ± 1	$2e^{\frac{\beta J_H}{4}} \cosh(\beta J_I) + 2e^{-\frac{\beta J_H}{4}} \cosh\left(\frac{\beta J_H \Delta}{2}\right) = Ae^{\frac{\beta D}{q}}$
0	0	$2e^{\frac{\beta J_H}{4}} + 2e^{-\frac{\beta J_H}{4}} \cosh\left(\frac{\beta J_H \Delta}{2}\right) = A$

Yukarıdaki tabloda spin konfigürasyonları için verilen eşitliklerde hesaplamalar oldukça uzundur. Böylece Tablo 1.1' de belirtilen spin durumlarının $S_{k1}^z = 0$ ve $S_{k2}^z = 0$ değerlerini aldığı anda mapping parametresi (A),

$$A = 2e^{\frac{\beta J_H}{4}} + 2e^{-\frac{\beta J_H}{4}} \cosh\left(\frac{\beta J_H \Delta}{2}\right) \quad (4.1.28)$$

olarak verilir. Aynı şekilde $S_{k1}^z = 0, \mp 1$ ve $S_{k2}^z = 0, \pm 1$ değerlerini aldığı durumlarda dönüşüm parametresi yerine yazılırsa,

$$\beta D = q \ln \left[\frac{2e^{\frac{\beta J_H}{4}} \cosh(\beta J_I) + 2e^{-\frac{\beta J_H}{4}} \cosh\left(\frac{\beta J_H \Delta}{2}\right)}{2e^{\frac{\beta J_H}{4}} + 2e^{-\frac{\beta J_H}{4}} \cosh\left(\frac{\beta J_H \Delta}{2}\right)} \right] \quad (4.1.29)$$

eşitliği elde edilir. Burada D , tek-iyon anizotropi parametresi veya kristal alan etkileşme terimi olarak adlandırılır. $S_{k1}^z = 0, \mp 1$ ve $S_{k2}^z = 0, \pm 1$ spin şekillenimlerinin kullanılmasıyla βJ aşağıdaki gibi hesaplanır:

$$\beta J = \frac{1}{2} \ln \left[\frac{2e^{\frac{\beta J_H}{4}} \cosh(2\beta J_I) + 2e^{-\frac{\beta J_H}{4}} \cosh\left(\frac{\beta J_H \Delta}{2}\right)}{2e^{\frac{\beta J_H}{4}} + 2e^{-\frac{\beta J_H}{4}} \cosh\left(\frac{\beta J_H \Delta}{2}\right)} \right]. \quad (4.1.30)$$

Diğer taraftan . $S_{k1}^z = \mp 1$ ve $S_{k2}^z = \pm 1$ spin durumları için βK parametresi,

$$\beta K = \frac{1}{2} \ln \left[\frac{\left[2e^{\frac{\beta J_H}{4}} \cosh(2\beta J_I) + 2e^{-\frac{\beta J_H}{4}} \cosh\left(\frac{\beta J_H \Delta}{2}\right) \right] \left[2e^{\frac{\beta J_H}{4}} + 2e^{-\frac{\beta J_H}{4}} \cosh\left(\frac{\beta J_H \Delta}{2}\right) \right]}{2e^{\frac{\beta J_H}{4}} \cosh(2\beta J_I) + 2e^{-\frac{\beta J_H}{4}} \cosh\left(\frac{\beta J_H \Delta}{2}\right)} \right] \quad (4.1.31)$$

olarak elde edilir. Diğer taraftan modelin bölüşüm fonksiyonu,

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \prod_{k=1}^{Nq/2} A e^{\beta J S_{k1}^z S_{k2}^z + \frac{\beta D}{q} [(S_{k1}^z)^2 + (S_{k2}^z)^2] + \beta K (S_{k1}^z)^2 (S_{k2}^z)^2} \quad (4.1.32)$$

(4.1.32) ifadesi ile verilebilir. Modelin yukarıdaki bölüşüm fonksiyonundaki çarpım genişletilerek,

$$Z = \sum_{\{S_i\}} A^{\frac{Nq}{2}} e^{\beta J \sum_{k=1}^{\frac{Nq}{2}} S_{k1}^z S_{k2}^z + \beta D \sum_{k=1}^N (S_{k1}^z)^2 + \beta K \sum_{k=1}^{\frac{Nq}{2}} (S_{k1}^z)^2 (S_{k2}^z)^2} \quad (4.1.33)$$

ifadesine dönüştürülebilir.

Şimdi bütün bu elde ettiğimiz sonuçlar neticesinde daha genelleştirilmiş bir ifade elde edebiliriz. Bütün bu sonuçları birleştirdiğimizde ortaya daha önceden farkında olmadığımız bir benzerlik çıkacaktır. Bu durum,

$$H_{BEG} = -J \sum_{(i,j)} S_{k1}^z S_{k2}^z - D \sum_{i=1}^N (S_k^z)^2 - K \sum_{(i,j)} (S_{k1}^z)^2 (S_{k2}^z)^2 \quad (4.1.34)$$

ifadesi ile tanımlı Blume-Emery-Griffiths (BEG) model Hamiltonyeni şeklinde açıklanır. Böylece dekorasyon-iterasyon dönüşümü vasıtasıyla karma spin-1/2 ve spin Ising modelinin bölüşüm fonksiyonu ve spin-1 Blume-Emery-Griffiths modelinin bölüşüm fonksiyonu arasında,

$$Z_{IHM}(\beta, J_I, J_H, \Delta) = A^{\frac{Nq}{2}} Z_{BEG}(\beta, J, D, K) \quad (4.1.35)$$

eşitliği elde edilir. Bu bağıntı yardımıyla modelin denge durumunda manyetik ve termal özelliklerini tanımlayacak olan Ising ve Heisenberg manyetizasyon bağıntıları elde edilebilir.

4.1.1. Ising Magnetizasyonu

Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modelinin (4.1.35) bağıntısı ile verilen bölüşüm fonksiyonunu kullanarak Ising manyetizasyonunu hesaplayabiliriz. Öncelikle hesapladığımız ara dönüşümleri model Hamiltonyenin bölüşüm fonksiyonunda yerine koyduğumuzda Ising magnetizasyonunu elde etmiş oluruz:

$$m_I = \frac{1}{Z_{IHM}} \sum_{\{S_i\}} \underbrace{Tr}_{\{\sigma_j\}} S_{k1}^z e^{-\beta H} \quad (4.1.1.1)$$

(4.1.1.1) ifadesi,

$$m_I = \frac{1}{Z_{IHM}} \sum_{\{S_i\}} S_{k1}^z \prod_{k=1}^{Nq/2} Tr e^{-\beta H_k} \quad (4.1.1.2)$$

şeklinde yazılabilir. Bu İfade bölüşüm fonksiyonun mapping parametresini içerir denkleme yerine yazılırsa,

$$m_I = \frac{1}{Z_{IHM}} \sum_{\{S_i\}} S_{k1}^z \prod_{k=1}^{\frac{Nq}{2}} A e^{\beta J S_{k1}^z S_{k2}^z + \frac{\beta D}{q} [(S_{k1}^z)^2 + (S_{k2}^z)^2] + \beta K (S_{k1}^z)^2 + (S_{k2}^z)^2} \quad (4.1.1.3)$$

ifadesi elde edilmiş olur. Böylece bu ifade,

$$m_I = \frac{1}{Z_{BEG}} \sum_{\{S_i\}} S_{k1}^z e^{-\beta H_{BEG}} \quad (4.1.1.4)$$

ifadesine dönüşür. (4.1.1.4) denkleminde gerekli sadeleştirme işlemleri yapıldığında Ising magnetizasyonunun spin-1 Blume-Emery-Griffiths modelinin q koordinasyonu sayılı Bethe örgüsü üzerindeki magnetizasyona eşit olduğu görülür:

$$\langle S_{k1}^z \rangle = m_{BEG} . \quad (4.1.1.5)$$

Aynı işlemler diğer parametreler için uygulandığında, modelin mıknatıslanma, kuadropolar moment ve üçlü korelasyon ifadeleri sırasıyla aşağıdaki gibi verilirler:

$$m_I = \langle S_{k1}^z \rangle = \langle S_{k1}^z \rangle_{BEG} \equiv m_{BEG}(\beta J, \beta K, \beta D) \quad (4.1.1.6)$$

$$q_I = \langle (S_{k1}^z)^2 \rangle = \langle (S_{k1}^z)^2 \rangle_{BEG} \equiv q_{BEG}(\beta J, \beta K, \beta D) \quad (4.1.1.7)$$

$$t_I = \langle S_{k1}^z (S_{k2}^z)^2 \rangle = \langle S_{k1}^z (S_{k2}^z)^2 \rangle_{BEG} \equiv t_{BEG}(\beta J, \beta K, \beta D) . \quad (4.1.1.8)$$

Böylece modeldeki Ising spinlerinin alt örgü mıknatıslanması (m_I), kuadropolar momenti (q_I) ve daha yüksek mertebedeki korelasyon fonksiyonu (t_I) için özdeşlikler elde edilmiş oldu.

4.1.2. Heisenberg Magnetizasyonu

Heisenberg magnetizasyonunu elde etmek için Callen-Suzuki özdeşliğinden faydalanabiliriz. Modelin Heisenberg manyetizasyon bağıntısı,

$$m_H = \langle \frac{1}{2} (\sigma_{k1}^z + \sigma_{k2}^z) \rangle = \frac{1}{Z_{IHM}} \sum_{\{S_i\}} \underbrace{Tr}_{\{\sigma_j\}} \left\{ \left[\frac{(\sigma_{k1}^z + \sigma_{k2}^z)}{2} \right] e^{-\beta H} \right\} \quad (4.1.2.1)$$

ifadesi ile tanımlanabilir. Bu ifadeyi daha sade şekilde,

$$m_H = \left\langle \frac{Tr \left\{ \left[\frac{(\sigma_{k1}^z + \sigma_{k2}^z)}{2} \right] e^{-\beta H'_k} \right\}}{Tr_k e^{-\beta H'_k}} \right\rangle \quad (4.1.2.2)$$

ifadesi şeklinde yazabiliriz. Burada,

$$m_H = \frac{1}{2} \left\langle \frac{Tr \left\{ [(\sigma_{k1}^z + \sigma_{k2}^z)] e^{-\beta H'_k} \right\}}{Tr_k e^{-\beta H'_k}} \right\rangle \quad (4.1.2.3)$$

denklemleri ile verilen Callen-Suzuki özdeşliği elde edilmiş olur. Bölüşüm fonksiyonunun $h = J_I (S_{k1}^z + S_{k2}^z)$ ifadesinde tanımlı h parametresine göre türevi alınarak elde edilen ifade yerine yazılırsa,

$$m_H = \frac{1}{2} \left\langle \frac{2e^{\frac{\beta J_H}{4}} \sinh(\beta h)}{2e^{\frac{\beta J_H}{4}} \cosh(\beta h) + 2e^{-\frac{\beta J_H}{4}} \left(\frac{\beta J_H \Delta}{2} \right)} \right\rangle \quad (4.1.2.4)$$

elde edilir. $h = J_I (S_{k1}^z + S_{k2}^z)$ olarak bilindiğinden gerekli sadeleştirilmeler yapılarak aşağıdaki fonksiyon tanımlanır:

$$F(x) = \frac{1}{2} \frac{\sinh(\beta J_I x)}{\cosh(\beta J_I x) + e^{-\frac{\beta J_H}{2}} \cosh\left(\frac{\beta J_H \Delta}{2}\right)}. \quad (4.1.2.5)$$

Bu fonksiyonu miknatislanma bağıntılarını çözmek için kullanacağız. Bu amaç için öncelikle bilgisayar programlama dillerinden fortran programlama dili ve grafik çizim programlarından orijin programı kullanılarak modelin termal ve manyetik özelliklerini inceleyebiliriz.

4.2. Ising Heisenberg Modelin Magnetizasyon Bağıntılarının Differansiyel Operatör Tekniği Kullanılarak Hesaplanması

$e^{\alpha \nabla_x} f(x) = f(x + \alpha)$ uygulamasında ∇ , bir differansiyel operatördür ve $\nabla_x = \frac{d}{dx}$ şeklinde belirtilir. Differansiyel operatör tekniği ile elde ettiğimiz Heisenberg magnetizasyonunda gerekli işlem uygulandığında

$$m_H = \langle e^{(S_{k1}^z + S_{k2}^z) \nabla_x} \rangle \quad (4.2.1)$$

(4.2.1.) denklemleri şeklinde Heisenberg Magnetizasyonu elde edilebilir. Burada spin-1 durumu için Van Der Waerden özdeşliği hesaplanır:

$$e^{\alpha S_i^z} = \sum_{m=0}^{2S} a_m (S_i^z)^m \quad (4.2.2)$$

(4.2.2) ifadesi bu özdeşliği kullanabilmemiz için gerekli olan toplamdır. Elde edilen (4.2.2) ifadesinde bulduğumuz değerler yerine konulursa; Heisenberg magnetizasyon bağıntısı,

$$m_H = 2m_I F(1) + t_1 [F(2) - 2F(1)] \quad (4.2.3)$$

şeklinde elde edilir. Bu durumda,

$$m_1 = \langle S_{k1}^z \rangle_{IHM} = \langle S_{k2}^z \rangle_{BEG} \equiv m_{BEG} (\beta J, \beta K, \beta D) \quad (4.2.4)$$

$$q_I = \langle (S_{k1}^z)^2 \rangle_{IHM} = \langle (S_{k1}^z)^2 \rangle_{BEG} \equiv q_{BEG} (\beta J, \beta K, \beta D) \quad (4.2.5)$$

$$t_1 = \langle S_{k1}^z (S_{k2}^z)^2 \rangle_{IHM} = \langle S_{k1}^z (S_{k2}^z)^2 \rangle_{BEG} \equiv t_{BEG} (\beta J, \beta K, \beta D) \quad (4.2.6)$$

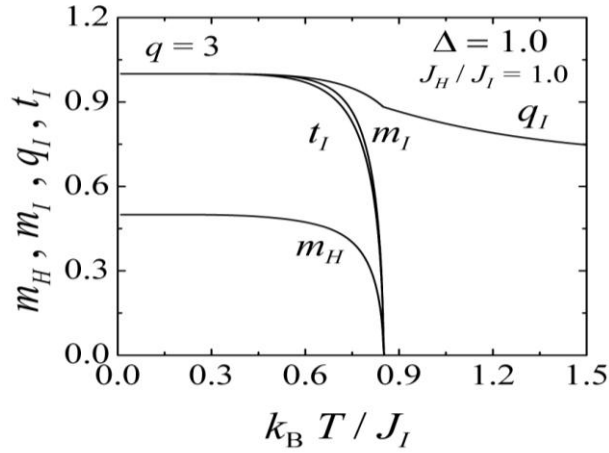
$$F(x) = \frac{1}{2} \left[\frac{\sinh(\beta J_I x)}{\cosh(\beta J_I x) + e^{-\frac{\beta J_H}{2}} \cosh\left(\frac{\beta J_H \Delta}{2}\right)} \right] \quad (4.2.7)$$

(4.2.4), (4.2.5), (4.2.6) , (4.2.7) denklemleri elde edilmiş olur.

Yukarıdaki $\langle \dots \rangle_{IHM}$ ve $\langle \dots \rangle_{BEG}$ sembolleri, Bethe örgüsü üzerinde dekore edilmiş karma spin $\frac{1}{2}$ ve spin-1 Ising-Heisenberg modeli için gerçekleştirilen standart termal ortalamayı ve sırasıyla J, K ve D etkileşme parametrelili Bethe örgüsü üzerindeki spin-1 BEG modelini gösterir. Böylelikle, örgü mıknatıslanması, dört kutuplu (kuadrupolar) moment ve basit Bethe örgüsü üzerindeki eşdeğer spin-1 BEG modelinin daha yüksek bir mertebedeki korelasyon fonksiyonu elde edilmiş oldu.

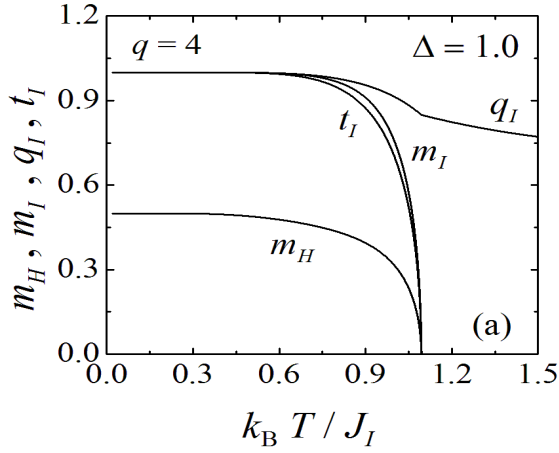
4.3. Ising ve Heisenberg Magnetizasyonlarının Sıcaklığa Göre Değişimleri

Bu kesimde yukarıda elde edilen Ising ve Heisenberg mıknatıslanma ifadelerinin nümerik ve iteratif çözümleri modeli tanımlayan etkileşme parametrelerinin farklı değerleri için yapılarak sistemin termal davranışı ve faz dönüşümleri incelenecektir.



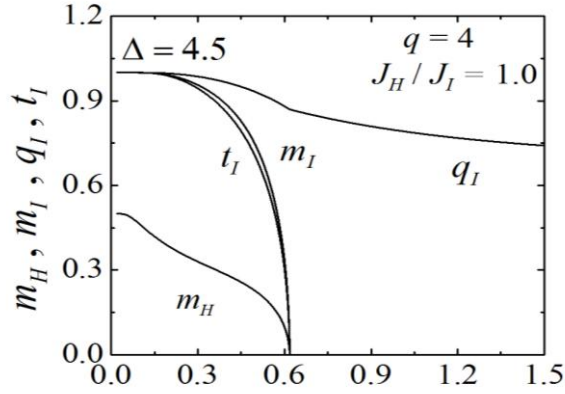
Şekil 4.2. Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modeli için $q=3$ koordinasyon sayılı Bethe örgüsü üzerinde, $J_H/J_I = 1.0$ ve $\Delta = 1.0$ değerlerinde alt örgü magnetizasyonlarının, kuadropolar momenti ve üçlü korelasyon parametresinin sıcaklıkla değişimleri.

Şekil 4.2, Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modeli için $q=3$ koordinasyon sayılı Bethe örgüsü üzerinde, $J_H/J_I = 1.0$ ve $\Delta = 1.0$ değerlerinde alt örgü magnetizasyonlarının, kuadropolar momenti ve üçlü korelasyon parametresinin sıcaklıkla değişimleri görülmektedir. Her üç düzen parametreside (mıknatıslanmalar ve üçlü korelasyon parametresi) sıcaklık artışıyla birlikte monoton olarak azalmakta ve belli bir kritik sıcaklık değerinde ikinci dereceden sürekli faz dönüşümü geçirmektedir. Diğer taraftan kuadropolar moment herhangi bir faz dönüşümüne uğramaz. Bu kritik sıcaklık değerinin altında düzenli olan sistem, bu sıcaklığın üzerinde düzensiz paramanyetik faz sergilemektedir. Bununla birlikte modelin faz dönüşüm özelliği üzerine etkili olabilecek bir parametre, karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modelinin tasvir edildiği Bethe örgüsünün koordinasyon sayısının artırılarak değişiminin incelenmesidir. Bu amaçla sistem $q = 4$ için incelenerek faz geçiş özellikleri üzerinde durulabilir.



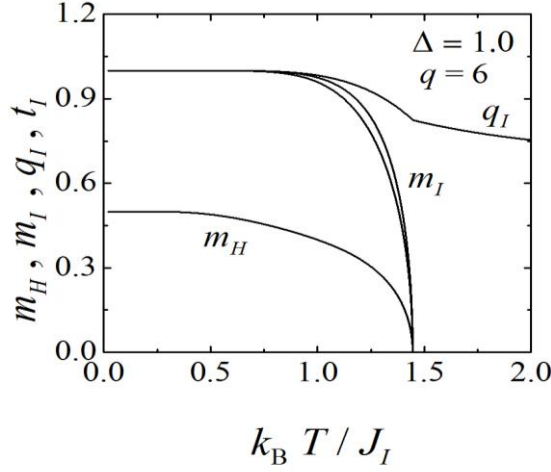
Şekil 4.3. Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modeli için $q=4$ koordinasyon sayılı Bethe örgüsü üzerinde, $J_H/J_I = 1.0$ ve $\Delta = 1.0$ değerlerinde alt örgü magnetizasyonlarının, kuadropolar momenti ve üçlü korelasyon parametresinin sıcaklıkla değişimleri.

Şekil 4.3’de karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modelinde $J_H/J_I = 1.0$ ve $\Delta = 1.0$ için Bethe örgüsünün koordinasyon sayısının $q=4$ olması durumunda alt örgü magnetizasyonları m_H ve m_I , kuadropolar momenti q_I ve üçlü korelasyon parametresinin t_I sıcaklıkla değişimleri görülmektedir. Şekilde açıkça görüldüğü gibi sıcaklığın artışıyla birlikte mıknatıslanmalar ve üçlü korelasyon parametresi sürekli olarak azalmakta ve belirli bir indirgenmiş sıcaklık değerinde sıfır olmakta yani yok olmaktadır. Böylece bu sıcaklık değerinde sistem ikinci dereceden sürekli bir faz dönüşümü geçirmektedir. Diğer taraftan kuadropolar moment q_I herhangi bir faz dönüşümü geçirmemekte, sıfırdan farklı değerler olarak sıcaklık artışıyla birlikte çok daha yavaş bir şekilde azalmaktadır.



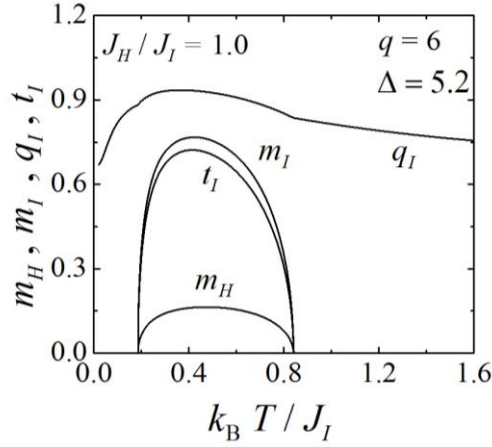
Şekil 4.4. Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modeli için $q=4$ koordinasyon sayılı Bethe örgüsü üzerinde, $J_H/J_I = 1.0$ ve $\Delta = 4.5$ değerlerinde alt örgü magnetizasyonlarının, kuadropolar momenti ve üçlü korelasyon parametresinin sıcaklıkla değişimleri.

Sistemde Heisenberg spinlerini kontrol eden anizotropi parametresinin etkisini incelemek üzere Şekil 4.4'de diğer parametreler sabit tutulurken $\Delta = 4.5$ durumunda alt örgü magnetizasyonları m_H ve m_I , kuadropolar momenti q_I ve üçlü korelasyon parametresinin t_I sıcaklığa göre değişimleri elde edildi. Buradanda açıkça görüldüğü gibi anizotropi parametresinin artışı ikinci dereceden faz dönüşümü üzerinde azaltıcı bir etkiye sahiptir. Mıknatıslanmalar ve üçlü korelasyon parametresi yine ikinci dereceden sürekli faz geçişi göstermesine rağmen bu dönüşüm daha düşük bir sıcaklık değerinde gerçekleşmektedir. Yine anizotropinin sistem üzerindeki daha yüksek değerleri için $\Delta = 4.5$ den daha büyük değerler verilerek inceleme yapıldığında ikinci dereceden faz dönüşüm sıcaklığının giderek daha küçük değerler aldığı görülmektedir. Bununla birlikte Δ nın tam olarak $\Delta = 5$ değerinde taban duruma ulaşılmakta ikinci dereceden faz dönüşümü kaybolmaktadır.



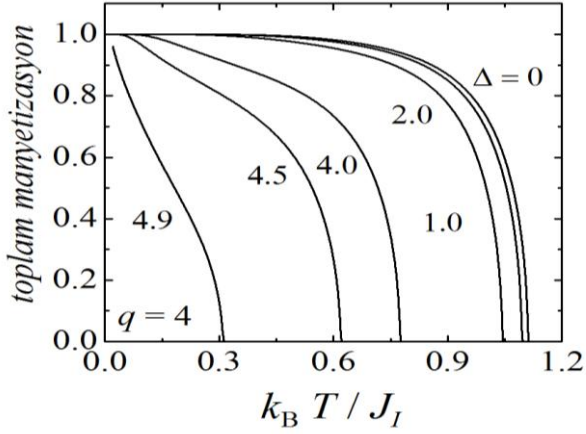
Şekil 4.5. Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modeli için $q=6$ koordinasyon sayılı Bethe örgüsü üzerinde; $J_H/J_I = 1.0$ ve $\Delta = 1.0$ sabit değerlerinde alt örgü magnetizasyonlarının, kuadropolar momenti ve üçlü korelasyon parametresinin sıcaklıkla değişimleri.

Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modelinde, sistemi tanımlayan etkileşme parametreleri ile Bethe örgüsünün koordinasyon sayısının kritik davranışlar üzerinde etkisini incelemek amacıyla alt örgü magnetizasyonları m_H ve m_I , kuadropolar momenti q_I ve üçlü korelasyon parametresinin t_I sıcaklığa göre değişimleri Şekil 4.5'te görülmektedir. Model, sabit anizotropi parametresi $\Delta = 1.0$ için koordinasyon sayısının $q = 4$ den 6 ya çıkarılması yani daha fazla spin etkileşmesi durumunda mıknatıslanma ve üçlü korelasyon parametrelerinin ikinci dereceden faz dönüşümlerinin daha yüksek indirgenmiş sıcaklık değerinde meydana geldiği görülmektedir. Sistemin sabit anizotropilerde farklı koordinasyon sayıları için detaylı incelemeleri sonucunda koordinasyon sayısı artışının faz geçiş sıcaklığı üzerinde artırıcı bir etkiye sahip olduğu sonucuna varılmıştır.



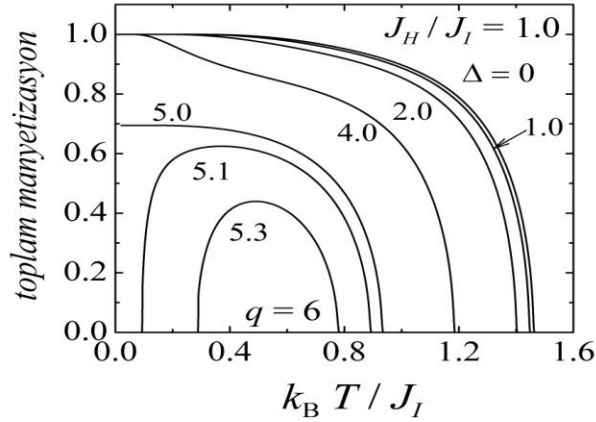
Şekil 4.6. Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modeli için $q=6$ koordinasyon sayılı Bethe örgüsü üzerinde; $J_H/J_I = 1.0$ ve $\Delta=5.2$ sabit değerlerinde alt örgü magnetizasyonlarının, kuadropolar momenti ve üçlü korelasyon parametresinin sıcaklıkla değişimleri.

Diğer taraftan $q = 6$ koordinasyon sayılı Bethe örgüsü üzerinde artan anizotropilelerin sistemin manyetik ve termal özellikleri üzerine etkisi olabileceği düşüncesinden yola çıkılarak Şekil 4.6'da karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modeli için, $q=6$ koordinasyon sayılı Bethe örgüsü üzerinde; $J_H/J_I = 1.0$ ve $\Delta=5.2$ sabit değerlerinde alt örgü magnetizasyonlarının, kuadropolar momenti ve üçlü korelasyon parametresinin sıcaklıkla değişimleri verildi. Şekilde açıkça görüldüğü gibi $\Delta=5.2$ için sistem farklı bir davranış sergilemekte reentrant faz geçişi olarak adlandırılan ardı ardına iki kez faz dönüşümü meydana gelmektedir. Heisenberg mıknatıslanması diğer durumlarda olduğu gibi daima daha düşük değerler almaktadır. Bununla birlikte reentrant faz dönüşümü anizotropi parametresinin sınırlı değerinde yüksek koordinasyon sayılı Bethe örgüsü durumunda meydana gelmektedir.



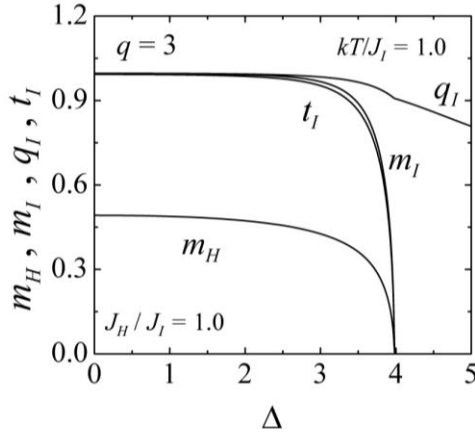
Şekil 4.7. Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modeli için, $q=4$ koordinasyon sayılı Bethe örgüsü üzerinde; $J_H/J_I = 1.0$ ve $q = 4$ sabit değerlerinde anizotropi parametrelerinin farklı değerleri için toplam manyetizasyonların sıcaklıkla değişimleri.

Şekil 4.7’de, $q = 4$ koordinasyon sayılı Bethe örgüsü üzerinde artan anizotropiler için karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modelinde $J_H/J_I = 1.0$ için Δ nın 0 dan başlamak üzere (Ising limiti) artan değerleri için toplam mıknatıslanmaların indirgenmiş sıcaklığa göre değişimleri görülmektedir. Burada da açıkça görüldüğü gibi alt-örgü mıknatıslanmalarının termal değişimlerinde olduğu gibi anizotropinin artışı toplam mıknatıslanmanın faz geçiş sıcaklığı üzerinde azaltıcı bir etkiye sahip olmaktadır. Böylece çok yüksek anizotropilerde mıknatıslanmalar kaybolmaktadır.



Şekil 4.8. Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modeli için, $q=6$ koordinasyon sayılı Bethe örgüsü üzerinde; $J_H/J_I = 1.0$ ve $q = 6$ sabit değerlerinde anizotropi parametrelerinin farklı değerleri için toplam manyetizasyonların sıcaklıkla değişimleri.

Diğer taraftan $q = 6$ koordinasyon sayılı Bethe örgüsü üzerinde artan anizotropilerin sistemin manyetik ve termal özellikleri üzerine etkisi olabileceği düşüncesinden yola çıkılarak Şekil 4.8'de karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modeli için $q=6$ koordinasyon sayılı Bethe örgüsü üzerinde $J_H/J_I = 1.0$ için Δ 'nın farklı değerlerinde toplam manyetizasyonların sıcaklıkla değişimleri verildi. Şekilde açıkça görüldüğü daha öncede görüldüğü gibi artan koordinasyon sayısı toplam mıknatıslanmada reentrant faz geçişinin görülmesine yol açmaktadır. Diğer taraftan re-entrant faz dönüşümü anizotropi parametresinin sınırlı değerinde yüksek koordinasyon sayılı Bethe örgüsü durumunda meydana gelmektedir.



Şekil 4.9. Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modeli için, $q=3$ koordinasyon sayılı Bethe örgüsü üzerinde; $J_H/J_I = 1.0$ ve $kT/J_I = 1.0$ sabit değerlerinde anizotropi parametrelerinin farklı değerleri için alt örgü mıknatıslanmaları, kuadrupolar moment ve üçlü korelasyon parametresinin sıcaklıkla değişimleri.

Şekil 4.9'da karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modeli için $q=3$ koordinasyon sayılı Bethe örgüsü üzerinde $J_H/J_I = 1.0$ ve $kT/J_I = 1.0$ için magnetizasyonların, kuadrupolar moment ve korelasyon fonksiyonunun değişimleri verildi. Şekilde görüldüğü gibi sabit sıcaklıkta anizotropi parametresinin artışı tüm düzen parametrelerini azaltıcı yönde bir etkiye sahiptir. Böylelikle belirli bir anizotropide bu düzen parametrelerinden mıknatıslanmalar ve üçlü korelasyon parametresi yok olmaktadır. Ayrıca kuadrupolar moment değeri ise gittikçe azalmaktadır.

4.4. Faz Diyagramları

Bu kesimde, karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modeli için taban durum ve sonlu sıcaklık değerleri için modelin özellikleri incelenecektir. Sonuçları tartışmadan önce, ferromanyetik ($J_H > 0, J_I > 0$) ve ferrimanyetik ($J_H > 0, J_I < 0$) sistem için faz diyagramlarının aynı özelliği gösterdiğini belirtmek isteriz.

İlk olarak, Bethe örgüsü üzerinde dekore edilmiş spin-1 ve spin-1/2 Ising-Heisenberg modeli taban durumu davranışlarını inceleyelim. Bunun için, taban durumu faz diyagramı şekil 4.10'daki $\Delta - J_H/J_I$ düzleminde gösterilmiştir. Taban durumu faz diyagramı analitik hesaplamalar sonucu elde edilmiştir. Bu şekilde görebileceğiniz gibi, iki farklı fazdan biri, Δ ve J_H/J_I parametreleri arasındaki karşılıklı etkileşime bağlı olan taban durumunda görülebilir. Taban durumu faz diyagramında ortaya çıkan fazlar aşağıdaki özvektörler aracılığıyla açıkça karakterize edilebilir.

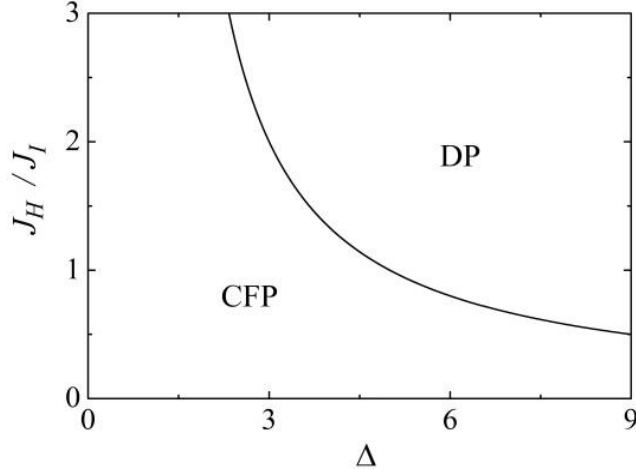
Klasik Ferromanyetik faz durumları için:

$$[CFP] = \prod_{i=1}^N [S_i^z = 1] \prod_{k=1}^{\frac{Nq}{2}} \left[\sigma_{k1}^z = \frac{1}{2}, \sigma_{k2}^z = \frac{1}{2} \right] \quad (4.4.1)$$

Antiferromanyetik faz durumları için:

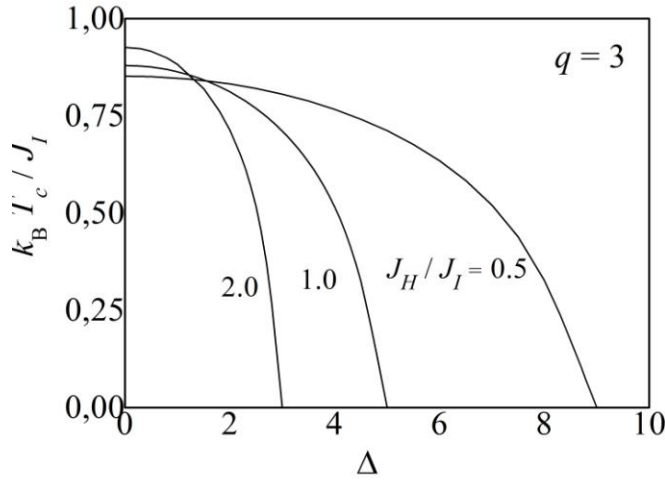
$$[DP] = \prod_{i=1}^N [S_i^z = \pm 1, 0] \prod_{k=1}^{\frac{Nq}{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left[\sigma_{k1}^z = \frac{1}{2}, \sigma_{k2}^z = -\frac{1}{2} \right] + \left[\sigma_{k1}^z = -\frac{1}{2}, \sigma_{k2}^z = \frac{1}{2} \right] \right) \quad (4.4.2)$$

şeklinde gösterilirler. Bu özvektörlerde, spin-1 Ising atomlarının tüm spin durumları için ilk ve son bileşke hesaplamaları spin-1/2 Heisenberg atomlarının tüm çiftlerinin spin durumlarının ötesine geçer.



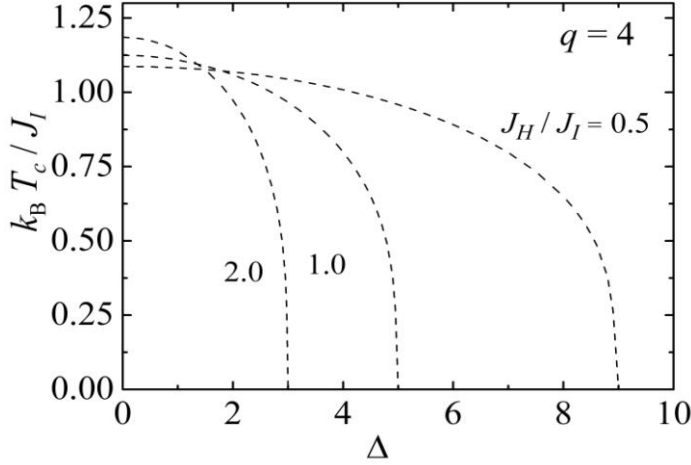
Şekil 4.10. Bethe örgüsü üzerinde karma spin-1 ve spin- $\frac{1}{2}$ Ising-Heisenberg modelin taban durumları için faz diyagramı.

Şekil 4.10’da Klasik ferromanyetik faz durumu CFP ile gösterilirken düzensiz faz durumu DP ile gösterilmiştir. Klasik ferromanyetik faz durumunda sistemde tüm Ising ve Heisenberg spinleri aynı yönelimi tercih ederlerken, düzensiz faz durumunda Heisenberg spinleri için kuantum dolaşıklığı mevcutken, Ising spinleri için tam bir düzensizlik sözkonusudur. Şekilde görülen sürekli çizgi bu iki fazı birbirinden ayırır. Şekilde görüldüğü gibi $\Delta < \Delta_c = 1 + J_I/J_H$ için taban durumları anizotropi parametresinin değişimine bağlı olarak karma spin sistemin faz durumları kesin bir şekilde tam çizgi ile gösterilmiştir. Diğer taraftan $S_i^z = \mp 1$, spin durumları için, $\Delta < \Delta_c$ için düzensiz faz durumlarının taban durumlarında makroskopik bir değişim gözlemlenir. Bu değişim kuantum Heisenberg spin çiftlerinin kuantum dolaşıklığı ve Ising spin çiftlerinin rastgele dizilimi sonucunda meydana gelmiştir. Bu tam çizgi ile ayrılmış kısım içerisinde geometrik dizilimi bozulmuş düzensiz faz durum merkezinde Heisenberg spin çiftleri arasında etkili antiferromagnetik korelasyon oluşur. Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modelinin taban durum davranışını inceledikten sonra sonlu sıcaklık faz diyagramları üzerinde durabiliriz.



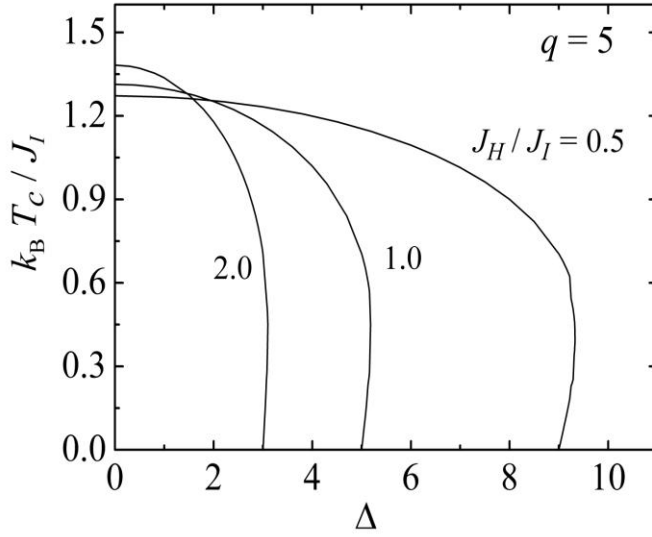
Şekil 4.11. Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising Heisenberg modelinde Bethe örgüsü koordinasyon sayısı $q=3$ için J_H/J_I parametresinin farklı değerinde anizotropi parametresinin Δ fonksiyonu olarak kritik sıcaklık değerleri.

Yukarıdaki Şekil 4.11’de kritik sıcaklığın $k_B T_c / J_I$ bağımlılığı koordinasyon sayısı q ve J_H/J_I oranının çeşitli değerlerinde anizotropi parametresinin değişimi gösterilmiştir. Bu şekillerde paramanyetik fazın düzenli (CFP) faz dönüşüm çizgisinden ayrıldığı tasvir edilmiş olup dönüşüm çizgilerinin üzerindeki herhangi bir sıcaklık değerinde her zaman paramanyetik fazın (DP) görüldüğü belirtilmiştir. Şekildeki düz çizgiler 2. dereceden faz dönüşümünü göstermektedir. Şekildeki faz diyagramında indirgenmiş J_H/J_I oranının üç farklı değeri için anizotropi parametresine karşı çizilen kritik sıcaklık değerleri gösterilmektedir. Bu faz diyagramında belirgin bir şekilde görülmektedir ki, J_H/J_I oranının değeri ne olursa olsun kritik sıcaklık değeri azaldıkça Δ anizotropi parametresinin değeri artar. Kritik sıcaklık değeri koordinasyon sayısı $q=3$ olduğunda sistemin bir negatif eğimi ile mutlak sıfır sıcaklığına ulaşır. Bununla birlikte, koordinasyon sayısının $q=3$ olduğu durumlarda kritik sıcaklığa bağlı Δ anizotropi parametresinin eğimleri sistem için aynı değerlerde bağlı olduğu görülmektedir.



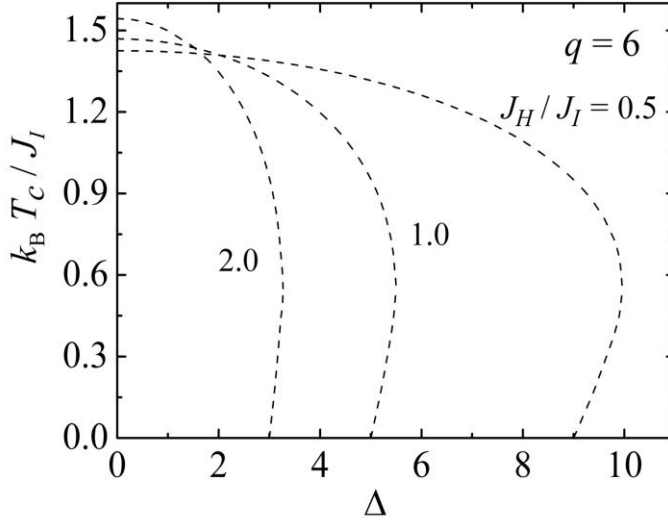
Şekil 4.12. Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modelinde Bethe örgüsü koordinasyon sayısı $q=4$ için J_H/J_I parametresinin farklı değerinde anizotropi parametresinin bir fonksiyonu olarak kritik sıcaklık değerleri.

Yukarıdaki Şekil 4.12' de kritik sıcaklığın $k_B T_c / J_I$ bağımlılığı, koordinasyon sayısı q ve J_H / J_I oranının çeşitli değerlerinde anizotropi parametresinin değişimi gösterilmiştir. Şekilde kesikli çizgilerle gösterilen faz dönüşüm çizgileri, 2. dereceden faz dönüşümü çizgileridir. J_H / J_I oranının üç değeri için anizotropi parametresine karşı çizilen kritik sıcaklık değerleri gösterilmektedir. J_H / J_I oranının değeri ne olursa olsun kritik sıcaklık değeri azaldıkça Δ anizotropi parametresinin değeri artar. Şekil 4.10'da taban durumlarında gösterildiği gibi taban durum sınırlarında adı geçen kritik sıcaklık değeri sıfır olma eğilimindedir. Koordinasyon sayısı $q=4$ olduğu farklı durumlarda sistemin davranışı aynı şekil 4.11'de olduğu gibidir. Değişen anizotropi parametresine bağlı kritik sıcaklık değerleri karşılaştırılsa bu şekillerde koordinasyon sayısının kritik davranışları nasıl etkilediği hakkında bilgi sahibi oluruz. İlginç biçimde koordinasyon sayısının bu özel değerlerinde sonsuz bir eğim ile DP ve CFP arasında sınırlı sıcaklık faz sınırları sıfır derece sıcaklığa yaklaşır.



Şekil 4.13 Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modelinde Bethe örgüsü koordinasyon sayısı $q=5$ için J_H/J_I parametresinin farklı değerinde anizotropi parametresinin bir fonksiyonu olarak kritik sıcaklık değerleri .

Anizotropi parametresinin kritik sıcaklığa bağımlılığının gösterildiği şekil 4.13’de başka bir özel durum olan koordinasyon sayısının $q=5$ olduğu durumları koordinasyon sayısının bu yüksek değerleri için CFP ve DP arasında taban durum faz sınırında ilginç noktalar ile karşılaşılmıştır. Öyle ki, küçük reentrant davranışlar anizotropi parametresinin oldukça dar bir alanda değiştiği bölgede tespit edilmiştir. Modelde reentrant davranışlar, $q=3$ ve 4 koordinasyon sayıları için görülmemesine rağmen Şekil 4.13’de görüldüğü gibi $q \geq 5$ için açıkça görülmektedir. Ayrıca modelin termal özelliklerinden yani mıknatıslanmaların ve üçlü korelasyon parametresinin sıcaklıkla değişiminden burada verilen değerler için re-entrant davranış yani ardıl şekilde 2. dereceden faz dönüşümü geçirdiği görülmektedir. Böylece sistemde re-entrant davranışlar $q>4$ olduğu daha yüksek koordinasyon sayılarında ortaya çıkmıştır ve bu davranışlar daha belirgin olarak bu koordinasyon sayılarında görülmektedir. Bu re-entrant davranışın nedeni yüksek boyutları ifade eden gerçek sistemlerde uygun etkileşme parametreleridir.



Şekil 4.14 Karma spin-1/2 ve spin-1 Ising-Heisenberg modelinde Bethe örgüsü koordinasyon sayısı $q=6$ için J_H/J_I parametresinin farklı değerinde anizotropi parametresinin bir fonksiyonu olarak kritik sıcaklık değerleri.

Modelin tanımlandığı Bethe örgüsü koordinasyon sayısının sistemin faz dönüşümü özellikle re-entrant davranışı üzerine etkisini incelemek için Şekil 4.14'te görülen koordinasyon sayısının $q=6$ olduğu durumda sistemin faz diyagramı elde edildi. Şekilden de net bir şekilde görüldüğü gibi koordinasyon sayısının artırılması re-entrant faz davranışını daha belirgin hale getirmiştir. Sonuç olarak gerçek fiziksel örgüleri tanımlayan yüksek koordinasyonlu Bethe örgüsü, modelin daha belirgin re-entrant davranış sergilemesinde önemlidir. Ayrıntılı incelemeler neticesinde modelde daima ikinci dereceden faz geçişi meydana geldiği görülmüştür.

TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu çalışmada, Dekore edilmiş Bethe örgüsü üzerinde karma spin $1/2$ ve spin-1 Ising-Heisenberg modelinin manyetik özellikleri (faz dönüşümleri, termal değişimleri, faz diyagramları) dekorasyon-iterasyon dönüşümü ve tam tekrarlama yönteminin birlikte kullanılmasıyla incelenmiştir. Karma spin $1/2$ ve spin-1 Ising-Heisenberg modelinin, dekore edilmiş Bethe örgüsü üzerinde tam formülasyonu en genel q koordinasyon durumları için yapılmıştır. Giriş bölümünde kısa bilgi verildikten sonra kaynak özetlerinde konu hakkında geçmişte yapılan çalışmalar ve günümüze kadar devam eden çalışmalar hakkında bilgi verilmiştir. Materyal ve yöntem kısmında dış manyetik alanın olmadığı durumda model Hamiltonyen tanımlanmış olup elde edilen bağıntıların Blume-Emery-Griffiths (BEG) modeli ile ilişkili durumları açıkça ortaya konulmuştur. Dördüncü bölüm sonunda, faz diyagramları ve magnetizasyon bağıntıları kullanılarak elde edilen grafikler açıklanmıştır.

Çalışmada, Ising ve Heisenberg spinleri olmak üzere iki farklı spin kombinasyonunu içeren, Ising ve Heisenberg spinleri arasında anizotropik etkileşme parametresi J_1 ile, Heisenberg spinleri arasında üç uzaysal bileşene sahip anizotropik etkileşme parametresini $J(\Delta)$ içeren Ising-Heisenberg modelinin manyetik ve termal özellikleri incelenmiştir. Başlangıçta sadece Ising spinlerini içeren örgü noktalarının arasına çiftler halinde Heisenberg spinleri yerleştirilerek Ising-Heisenberg modelini tanımlayan örgü ve Hamiltonyen tanımlanmış olup, bölüşüm fonksiyonu (Z) ifadesi buradaki dekore edilmiş örgüyü tanımlayan Hamiltonyen yardımıyla elde edilmiştir. Bu bölüşüm fonksiyonu ise dekorasyon-iterasyon dönüşümü vasıtasıyla sadece Ising spinlerini içeren keyfi istatistiksel bir sistemi tanımlayan Hamiltonyenin bölüşüm fonksiyonuna, dönüşüm parametreleri vasıtasıyla ($A, \beta J, \beta K, \beta D$) bağlandığı görülmüştür. Böylece dekore edilmiş Ising-Heisenberg modeli ile dönüşüm sonrası sadece Ising modelinin bölüşüm fonksiyonları arasında bir ifade elde edilmiştir. Bu bağıntıların kullanılmasıyla Ising magnetizasyonu, Heisenberg magnetizasyonu, üçlü korelasyon parametresi gibi manyetik niceliklerin tam ifadeleri elde edilmiştir. Bu ifadeler tam olarak elde edildikten sonra özellikle Ising-Heisenberg magnetizasyonlarının ve üçlü korelasyon parametresinin sıcaklığa (T) göre değişimleri ve faz dönüşümleri nümerik olarak çözümlenerek kapsamlıca incelenmiştir. Özellikle magnetizasyonların geçirmiş oldukları faz dönüşümleri ile re-entrant davranış özellikleri ayrıntılı ele alınmıştır. Teorik bakımdan bu modelin en önemli özelliği, tam hesaplama

yöntemi ile Ising sistemlerinin manyetik özelliklerinin, kuantum Heisenberg atomlarınca ne şekilde modifiye edileceğinin incelenmesini mümkün kılmıştır. Diğer taraftan deneysel bakımdan model, çalışmada incelenen sisteme benzer topolojik yapıya sahip manyetik materyallerin sentezlenmesine yardımcı olabilir.

Çalışmada kullanılan mapping dönüşümleri ve sistemin analitik spin kimlikleri hem Heisenberg hem de Ising spinlerinin alt örgü magnetizasyonlarını elde etmek için kullanılmıştır. Taban durum faz diyagramlarının düzenli durum fazı ve düzensiz durum fazı olarak iki farklı fazı oluşturduğu Şekil 4.10'da gösterilmiştir. Sistemin taban durumlarında klasik faz (CFP) durumu dışında kendine özgü düzensiz faz (DP) durumu XXZ Heisenberg etkileşiminin Ising etkileşimi üzerinde olduğu görülmüştür. Sonlu sıcaklık faz diyagramlarında gözlemlenen re-entrant faz bölgeleri ayrıntılı olarak incelenmiştir. Ancak yeterince yüksek koordinasyon sayısının olduğu $q > 4$ ve üzeri durumlar varsayılarak düzenli faz (CFP) ve düzensiz faz (DP) arasındaki yeterince yakın taban durum sınırlarında ikinci derece faz dönüşümü sadece re-entrant fazın görüldüğü bölgelerde gerçekleşmiştir. Diğer taraftan koordinasyon sayısının $q=3$ ve $q=4$ olduğu durumlarda sistemde re-entrant davranış bulunmaz. Ising ve Heisenberg alt örgü magnetizasyonlarının termal bağımlılıkları, kuadrupolar momentleri, yüksek derece korelasyon fonksiyonu araştırılmış ve ayrıntılı olarak ele alınmıştır.

Çalışmanın sonunda belirtmek isteriz ki, dönüşüm parametreleri vasıtası ile spin-1 BEG modeline dönüşüm gerçekleştirilmiştir. Bu dönüşüm, eşdeğer spin-1 BEG modeli ile ilgili tam çözüm eksikliğinin giderilmesi ve oldukça az bulunan tam sonuçlar elde etmek için kullanılmıştır. Kullanılan yöntem ve materyal oldukça karmaşık bir Hamiltonyene sahip sistemin araştırılması ve kesin sonuçlar elde edilmesi için uzatılabilir. Kesin çözüm yöntemi ve dekorasyon-iterasyon dönüşümünün birleştirilmesine dayanan bir yaklaşım dış manyetik alan varlığında uygulanabilir. Ayrıca başka etkileşim terimleri dikkate alınarak mevcut modeli genişletmek mümkündür. Örneğin Ising spinleri arasındaki tek-iyon anizotropi parametresi, en yakın komşu biliner ve bikuadratik etkileşim parametresi gibi parametrelerin kullanıldığı sistemler düşünülebilir. Bu ve benzeri parametreler oluşturularak çözümlenen daha genel modellerde birinci derece faz geçişleri ya da çoklu özel noktaları da dahil olmak üzere daha karmaşık kritik davranışlar incelenebilir.

KAYNAKLAR

- Baxter, R. 1982. Ising Model on the Bethe Lattice. Exactly Solved Models in Statistical Mechanics, Academic Press, pp.47-49, New York.
- Bethe, H. A. 1931. On the Theory of Metals, I. Eigenvalues and Eigenfunctions of a Linear Chain of Atoms. **Z. Phys.**, 71: 205-226.
- Brush, G. S. 1967. History of the Lenz-Ising Model. **Review of Modern Physics**, Volume 39, Number 4: 886.
- Čanova, L., Strečka, J., Jaščur, M. 2006. Geometric frustration in the class of exactly solvable Ising–Heisenberg diamond chains. **J. Phys.: Condens. Matter** 18:4967.
- Domb, C. 1960. On the Theory of Cooperative Phenomena. **Adv. Phys.**, 9:149-361.
- Donath, M. 1999. Magnetic Order And Electronic Structure in Thin Films. **J. Phys., Condens. Matter** 11: 9421.
- Ekiz C., Strečka, J., Jaščur, M. 2011. Phase Diagrams Of The Mixed Spin-1 And Spin-1/2 Ising-Heisenberg Model On The Diamond-Like Decorated Bethe Lattice. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials** 323: 493-498
- Fisher, M. 1959. Transformations of Ising Models. **Phys. Rev.**, 113: 969.
- Gujrati, P.T. 1995. Bethe or Beth-like lattice calculation are more reliable than conventional mean-field calculations. **Phys. Rev. Lett.**, 74: 809-812.
- Haldane, F. D. M. 1983. Nonlinear Field Theory of Large-Spin Heisenberg Antiferromagnets: Semiclassically Quantized Solitons of the One-Dimensional Easy-Axis Néel State. **Phys. Lett., A** 50: 1153.
- Hase, M., Terasaki, I., Uchinokuro, K. 1993. Observation of the spin-Peierls transition in linear Cu^{2+} (spin-1/2) chains in an inorganic compound CuGeO_3 **Phys. Rev. Lett.**, 70: 3651.
- Helmers, H.J. 1995. Ferrromagnetic Monolayers, **Int. J. Mod. Phys.**, B9: 3115-3180.

- Hida, K. 1994. Magnetic properties of the spin-1/2 Ferromagnetic-Antiferromagnetic Trimerized Heisenberg chain. **J. Phys. Soc. Jpn.**, 63: 2359-2364.
- Huang, K. 1972. Definition of the Ising Model. Statistical Mechanics, John Wiley&Sons, pp.341-344, New York.
- Idogaki, T., Uryu, N. 1992. A new effective field theory for the anisotropic Heisenberg ferromagnet. **Physica A.**, 181 : 173.
- Ising, E. 1925. Beitrag sur Theorie des Ferromagnetismus. **Zeit. Fur Physik**, 31: 253-258.
- Kahn, O., Pei, Y., Verdauger, M., Renard, J.P., Sletten, J., Am, J. 1988. Magnetic ordering of manganese(II) copper(II) bimetallic chains; design of a molecular based ferromagnet. **Chem. Soc.**, 110: 782-789.
- Kittel, C. 1986. Ferromagnetizm and Antiferromagnetizm. Introduction to Solid State Physics, John Wiley&Sons, pp.325-329, Newyork
- Kramers, H. A., Wannier, G. H. 1941. Statistics of Two-Dimensional Ferromagnet. **Phys. Rev.**, 60: 252-262.
- Landau, D. P., Binder, K. 2009. Some necessary background. A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, Cambridge University Press, pp.7-47, Cambridge.
- Lieb, E.H., Mattis, D.C. 1962. Ordering Energy Levels of Interacting Spin Systems. **J. Math. Phys.**, 3: 749.
- Lieb, E.H., Schultz, T.D., Mattis, D.C. 1961. Two Soluble Models of an Antiferromagnetic Chain. **Ann. Phys.**, 16: 407.
- Ma, S.K. 1985. Ising model. Statistical Mechanics, World Scientific Publishing Co, pp.297-310, Singapore.
- Mariz, M., Tsalis, C., Albuquerque, A.L. 1985. Phase Diagram of the Ising Model on a Cayley Tree In The Presence of Competing Interactions and Magnetic Field. **Jour. Stat. Phys.**, 40: 577-592.

- Mielnicki, J., Wiatrowski, G., Balcerzak, T. 1988. The Ising-Heisenberg Two-Atom Cluster Approximation of Ferromagnet ($S=1/2$). **J. Magn. Mater.** 71: 186.
- Müler-Hartman, E., Zittartz, J. 1974. New type of phase transition. **Phys. Rev.Lett.**, 33: 893.
- O’Handley, R.C., Sun S.W. 1991. Surface Magnetoelastic Coupling. **Phys. Rev. Lett.**, 66: 2798-2801.
- Oitmaa, J., Weihong, Z. 1996. Series expansion for the J_1 - J_2 Heisenberg antiferromagnet on a square lattice. **Phys. Rev.**, B 54: 3022.
- Okamoto, K., Kitazawa, A. 1999. Magnetization plateau and quantum phase transition of the $S = 1/2$ trimerized XXZ spin chain. **J. Phys.**, A 32: 4601.
- Onsager, L. 1944. Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition. **Phys. Rev.**, 65: 117-149.
- Orbach, R.L. 1958. Linear Antiferromagnetic Chain with Anisotropic Coupling. **Phys. Rev.**, 112: 309.
- Oshkawa, M., Yamanaka, M., Affleck, I. 1997. Magnetization plateaus in spin chains:“Haldane gap” for half-integer spins. **Phys. Rev. Lett.**, 78: 1984.
- Pei, Y., Verdauger, M., Kahn, O., Sletten, J., Renard, J. P. 1987. Magnetism of Mniicuii and Niiicuii Ordered Bimetallic Chains - Crystal-Structure of $Mncu(Pba)(H_2O)_3 \cdot 2H_2O$ (Pba =1,3-Propylenebis(Oxamato)). **Inorg. Chem.**, 26: 138-143.
- Richter, J. 1993. Zero temperature magnetic ordering in the inhomogeneously frustrated quantum Heisenberg antiferromagnet on square lattice. **Phys. Rev.**, B 47: 5794.
- Rushbrooke, G. S., Baker, G.A., Wood, P. J. 1972-1976. in Phase Transition and Critical Phenomena, edited by Domb, C. and Green, M.S. **Academic Press.**, Vols. 1-6, London.

- Sachdev, S. 1999. Basic concepts. Quantum Phase Transitions, Cambridge University Press, pp.3-10, Cambridge.
- Strečka, J., Jaščur, M. 2002. Magnetic properties of exactly solvable doubly decorated Ising-Heisenberg planar models. **Phys. Rev.**, B 66: 174415.
- Strečka, J., Jaščur, M. 2002. **Phys. Stat. Sol.** (b) 233: R12-R14.
- Strečka, J., Jaščur, M. 2003. Existence of the magnetization plateau in a class of exactly solvable Ising-Heisenberg chains. **J. Phys. : Condens. Matter** 15: 4519.
- Strečka, J., Jaščur, M., Canova, L. 2008. M. Hagiwara. Exact solution of the geometrically frustrated spin-1/2 Ising-Heisenberg model on the triangulated (triangles-in-triangles) lattice. **Acta Physica Polonica A** 113: 453.
- Syozzi, I. 1951. In Phase Transition and Critical Phenomena. **Prog. Theor. Phys.** 6: 341.
- Taylor, J. H., Müller, G. 1985. Magnetic field effects in the dynamics of alternating or anisotropic quantum spin chains. **Physica A** 130: 1.
- Vannimenus, J. 1981. Modulated Phase of an Ising System with Competing Interactions on a Cayley Tree. **Z. Phys.**, B, 43: 141-148.
- Verdager, M., Julve, M., Michalowicz, A., Kahn, O. 1983. **Inorg. Chem.** 22: 2624.
- Walker, L.R. 1959. Antiferromagnetic Linear Chain. **Phys. Rev.**, 116: 1089.
- Wang, X. 2001. Effects of anisotropy on thermal entanglement. **Phys. Lett.**, A 281: 101.
- Wu, R., Freeman, A.J. 1992. Structural and Magnetic Properties of Fe/Ni(111), **Phys.Rev.**, B 45: 7205- 7210.
- Yao, H., Li, J., Gong, C.D. 2002. Exact solution of anisotropic antiferromagnetic alternating Heisenberg-Ising spin chain. **Solid State Commun.**, 121: 687.

- Yeoman, J. M. 1992. Stastical mechanics and thermodynamics. *Statistical Mechanics of Phase Transitions*, Oxford University Press, pp.15-31, Newyork.
- Ziman, J. M. 1979. Random walks on the Bethe lattice. *Models Of Disorder*, (Hughes, B.D., and Sahim, M., Eds.), Cambridge University Press, pp.272-282, Cambridge.

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : Orhan ÇİZER
Doğum Yeri ve Tarihi : ÖDEMİŞ-19. 01. 1986

EĞİTİM DURUMU

Lisans Öğrenimi : Balıkesir Üniversitesi
Fakültesi : Fizik Bölümü
Yüksek Lisans Öğrenimi : Adnan Menderes Üniversitesi-Fizik A.B.D.
Bildiği Yabancı Diller : İngilizce

İŞ DENEYİMİ

Çalıştığı Kurumlar ve Yıl : İzmir Beydağ Kaymakamlığı SYDV – 2012

İLETİŞİM

E-posta Adresi : orhancizer35@hotmail.com
Tarih : 16/06/2015