

T.C.
ADNAN MENDERES ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI
2018-YL-018

KARMA TİP HEISENBERG SPİN SİSTEMLERİNDE
KUANTUM DOLAŞIKLIĞIN İNCELENMESİ

Yücel BİLİR

Tez Danışmanı:
Dr. Öğr. Üyesi Cenk AKYÜZ

AYDIN

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

Fizik Anabilim Dalı Yüksek Lisans Programı öğrencisi Yücel BİLİR tarafından hazırlanan "Karma Tıp Heisenberg Spin Sistemlerinde Kuantum Dolaşıklığın İncelenmesi." başlıklı tez, 07.05.2018 tarihinde yapılan savunma sonucunda aşağıda isimleri bulunan jüri üyelerince kabul edilmiştir.

	Ünvanı, Adı Soyadı	Kurumu	İmzası
Başkan	: Dr. Öğr. Üyesi Fatih ERMAN	İzmir Yüksek Teknoloji Enst.	
Üye	: Doç. Dr. Haydar UNCU	Adnan Menderes Üniv.	
Üye	: Dr. Öğr. Üyesi Cenk AKYÜZ	Adnan Menderes Üniv.	

Jüri üyeleri tarafından kabul edilen bu Yüksek Lisans tezi, Enstitü Yönetim Kurulunun sayılı kararıyla .../.../2018 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.

07.05.2018

Yücel BİLİR

ÖZET

KARMA TİP HEISENBERG SPİN SİSTEMLERİNDE KUANTUM DOLAŞIKLIĞIN İNCELENMESİ

Yücel BİLİR

Yüksek Lisans Tezi, Fizik Anabilim Dalı
Tez Danışmanı: Dr. Öğr. Üyesi Cenk AKYÜZ
2018, 103 sayfa

Son yıllarda disiplinler arası bir alan olarak ortaya çıkan kuantum hesaplama ve kuantum enformasyon çalışmalarının merkezinde dolaşıklık kavramı yer almaktadır. Heisenberg spin sistemleri ile dolaşıklık oluşturulabilmekte ve dolaşıklığın değişimi kontrol parametreleri olarak adlandırılan ve sistemde yer alan manyetik alan, anizotropi ve Dzyaloshinskii-Moriya (DM) etkileşmesi gibi çeşitli parametrelere göre incelenmektedir. Yoğun madde fiziğindeki çalışmalarda ise Heisenberg spin modelleri fiziksel sistemlerin yapısını incelemek için kullanılmaktadır. Yakın gelecekte dolaşıklık üreten sistemlerin teknolojik uygulamalarında kuantum fiziği ve yoğun madde fiziğindeki bilgi birikiminin kullanılması muhtemel görünmektedir. Bu nedenle bu tezde homojen bir manyetik alanda bulunan farklı türdeki karma tip Heisenberg XXX spin sistemlerinin dolaşıklığı incelenmiştir. Bu sistemlerin taban ve ısısal dolaşıklıkları periyodik sınır koşulları altında negatiflik ölçütü ile hesaplanmıştır. Tezin ilk kısmında iki spinli karma tip Heisenberg XXX spin sistemlerinin taban ve ısısal dolaşıklıkları incelenmiştir. Elde ettiğimiz sonuçlara göre spin $(1, \frac{3}{2})$ karma tip spin sisteminin spin $(\frac{1}{2}, 1)$ ve spin $(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ karma tip spin sistemlerine göre daha büyük dolaşıklık ürettiği ve hem kritik sıcaklığın hem de kritik manyetik alan değerlerinin daha büyük olduğu görülmüştür. Tezin ikinci kısmında ise spin $(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ şeklinde tasarlanan karma tip Heisenberg XXX spin sisteminde taban ve ısısal durum dolaşıklıkları, sadece en yakın komşu etkileşmelerinin olduğu durumda değil, ayrıca hem en yakın hem de ikinci en yakın komşu etkileşmelerinin olduğu durumlarda da incelenmiştir. Spin $(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ sisteminde spin $(\frac{1}{2}, 1)$ ve spin $(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ 'ye göre spin $(1, \frac{3}{2})$ arasındaki dolaşıklık daha büyük olmaktadır. Bu sistemde üçüncü spinin varlığı genel olarak dolaşıklığı azaltmaktadır. Bunun yanında ikinci en yakın komşu (NNN) etkileşmelerinin varlığı ise dolaşıklığın manyetik alan karşısındaki dayanıklılığını artırmaktadır.

Anahtar Sözcükler: Dolaşıklık, Heisenberg XXX Model, Karma Tip Spin Sistemi, Kısmi İz, Negatiflik, Pozitif Kısmi Transpoz, Yoğunluk Matrisi

ABSTRACT

INVESTIGATION OF QUANTUM ENTANGLEMENT IN MIXED TYPE HEISENBERG SPIN SYSTEMS

Yücel BİLİR

M.Sc. Thesis, Department of Physics
Supervisor: Assist. Prof. Dr. Cenk AKYÜZ
2018, 103 pages

In recent years, entanglement appears at the center of quantum computation and quantum information studies which emerged as an interdisciplinary field. Entanglement can be realized in Heisenberg spin systems and its change is investigated with respect to various control parameters such as magnetic field, anisotropy parameter and DM interaction in the system. Heisenberg spin systems are used to investigate the structure of the physical systems in the study of condensed matter physics. It seems highly probable that in near future the knowledge of quantum and condensed matter physics will be used in the technological applications of the entanglement producing systems. Therefore, in this study, entanglement of different mixed-type Heisenberg XXX spin systems in a homogeneous magnetic field is investigated. The ground state and thermal entanglement of these systems are calculated by using the negativity under the periodic boundary conditions. In the first part of the thesis, the ground state and thermal entanglement of two spins mixed-type Heisenberg XXX spin systems are investigated. We have found that $\text{spin}(1, \frac{3}{2})$ mixed spin system is more entangled than $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1)$ and $\text{spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ mixed spin systems and both the critical temperature and the critical magnetic field values for $\text{spin}(1, \frac{3}{2})$ are greater than $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1)$ and $\text{spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ systems. In the second part, ground state and thermal entanglement in Heisenberg XXX system which is designed as mixed $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$, is studied in both cases in the presence of the nearest neighboring (NN) interaction and in the presence of both NN and the next nearest neighboring (NNN) interactions. The entanglement in $\text{spin}(1, \frac{3}{2})$ subsystem is greater than the $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1)$ and $\text{spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ subsystems. It is also found that the presence of the third spin in this designed system generally reduces the entanglement. Also, the presence of NNN interactions increases the strength of the entanglement against the magnetic field.

Key Words: Entanglement, Heisenberg XXX Model, Mixed Spin System, Partial Trace, Negativity, Positive Partial Transpose, Density Matrix

ÖNSÖZ

Disiplinler arası bir çalışma konusu olan kuantum hesaplama ve kuantum enformasyon teorisinin önemli bir başlığını oluşturan kuantum dolaşıklık, birleşik bir sistemi oluşturan alt sistemler arasındaki yerel olmayan korelasyonlar olarak tanımlanır ve klasik olarak yapılması mümkün olmayan kuantum teleportasyon, süper yoğun kodlama ve kuantum kriptoloji gibi kuantum enformasyon işlemleri için bir kaynaktır. Dolaşıklığın oluşturulmasında ve kontrolünde Heisenberg ve Ising spin sistemleri önemli araçlardır. Bu tezde z doğrultusundaki homojen bir manyetik alanda bulunan karma tip Heisenberg spin sistemlerinde dolaşıklık, dolaşıklık ölçütü negatiflik kullanılarak araştırılmıştır. Elde edilen sonuçlar yorumlanarak bu konudaki literatüre katkıda bulunulmuştur.

Tez çalışmamda bana bilgi ve tecrübesiyle her konuda destek olan, rehberlik eden danışmanım Sayın Dr. Öğr. Üyesi Cenk Akyüz'e teşekkürlerimi sunarım. Yüksek lisans eğitimim ve tez çalışmam sırasında bana sabırla ve anlayışla destek olan eşime ve çocuklarıma teşekkürlerimi ve sevgilerimi sunarım.

Yücel BİLİR

İÇİNDEKİLER

KABUL VE ONAY SAYFASI	iii
BİLİMSEL ETİK BİLDİRİM SAYFASI	v
ÖZET	vii
ABSTRACT	ix
ÖNSÖZ	xi
SİMGELER DİZİNİ	xv
ŞEKİLLER DİZİNİ	xvii
ÇİZELGELER DİZİNİ	xix
 1. GİRİŞ	 1
 2. TEMEL KAVRAMLAR	 7
2.1. Kuantum Bit (Kubit)	7
2.2. Yoğunluk Matrisi	9
2.3. Dolaşıklık	10
2.4. Dolaşıklık Uygulamaları	11
2.4.1. Süperyoğun Kodlama	12
2.4.2. Kuantum Teleportasyon	14
2.4.3. Dolaşıklık Değiş Tokuşu	16
2.5. Dolaşıklık Ölçütleri	17
2.6. Spin Sistemleri	19
 3. HESAPLAMALAR	 21
3.1. İki Spinli Karma Sistemler	21
3.1.1. Spin $(\frac{1}{2}, 1)$ Durumu	21
3.1.2. Spin $(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ Durumu	26
3.1.3. Spin $(1, \frac{3}{2})$ Durumu	31
3.2. Üç Spinli Karma Tip Spin Sistemleri	36
3.2.1. Spin $(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$ Durumu	36
3.2.2. Spin $(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ Durumu	43
3.2.3. Spin $(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ Durumu	53
3.2.3.1. En Yakın Komşu Etkileşmeleri Durumu	53
3.2.3.2. En Yakın ve İkinci En Yakın Komşu Etkileşmeleri Durumu	66
 4. TARTIŞMA VE SONUÇ	 84
 KAYNAKLAR	 89
 EKLER	 100

EK1. SPİN MATRİSLERİ	100
EK2. KUANTUM MANTIK KAPILARI	101
ÖZGEÇMİŞ	103

SİMGELER DİZİNİ

H	:Hamiltonyen
$\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z$	:Pauli Spin Matrisleri
s^x, s^y, s^z	:Spin-1 Matrisleri
S^x, S^y, S^z	:Spin- $\frac{3}{2}$ Matrisleri
k_B	:Boltzmann Sabiti
Z	:Bölüşüm Fonksiyonu
B_z	:z Yönünde Manyetik Alan
N	:Negatiflik
ρ	:Yoğunluk Matrisi
J	:Spinler Arasındaki Çiftlenim Sabiti
T	:Sıcaklık
fm	:Ferromanyetik
afm	:Antiferromanyetik
Tr	:İz
T_C	:Kritik Sıcaklık
B_C	:Kritik Manyetik Alan
N_{12}	:1.ve 2. Spinler Arasındaki Negatiflik
N_{23}	:2.ve 3. Spinler Arasındaki Negatiflik
N_{13}	:1.ve 3. Spinler Arasındaki Negatiflik
NN	:En Yakın Komşu Etkileşmesi
NNN	:İkinci En Yakın Komşu Etkileşmesi

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1. CNOT Kuantum Mantık Kapısı.	12
Şekil 2.2. Süper Yoğun Kodlama Şeması.	13
Şekil 2.3. Kuantum Teleportasyon Şeması.	14
Şekil 3.1. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1)$ Modeli	21
Şekil 3.2. İki Spinli Karma Tip Spin Sistemlerinin Taban Durum Dolaşıklıklarının Karşılaştırılması.	23
Şekil 3.3. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1)$ Isısal Durum Dolaşıklığının Kontur Grafiği ($J=1.0$). .	25
Şekil 3.4. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1)$ İçin Negatifliğin a)Manyetik Alana b)Sıcaklığa Göre Değişimi.	25
Şekil 3.5. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ Modeli.	26
Şekil 3.6. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ Isısal Durum Dolaşıklığının Kontur Grafiği ($J=1.0$). .	30
Şekil 3.7. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ İçin Negatifliğin a)Manyetik Alana, b)Sıcaklığa Göre Değişimi.	30
Şekil 3.8. $\text{Spin}(1, \frac{3}{2})$ Modeli.	31
Şekil 3.9. $\text{Spin}(1, \frac{3}{2})$ Isısal Durum Dolaşıklığının Kontur Grafiği ($J=1.0$). .	35
Şekil 3.10. $\text{Spin}(1, \frac{3}{2})$ İçin Negatifliğin a)Manyetik Alana, b)Sıcaklığa Göre Değişimi.	36
Şekil 3.11. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$ Modeli.	37
Şekil 3.12. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$ Sisteminde $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1)$ Alt Sisteminin Taban Durum Dolaşıklığı.	40
Şekil 3.13. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$ Sisteminde $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1)$ Alt Sisteminin Isısal Durum Dolaşıklığının Kontur Grafiği ($J=1.0$).	42
Şekil 3.14. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$ Sisteminde $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1)$ Alt Sisteminin Isısal Dolaşıklığının a)Manyetik Alana b)Sıcaklığa Göre Değişimi. .	42
Şekil 3.15. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ Modeli.	44
Şekil 3.16. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ Ve $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ Alt Sistemlerinin Taban Durum Dolaşıklığının Karşılaştırılması.	48
Şekil 3.17. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ Sisteminde $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ Alt Sisteminin Isısal Durum Dolaşıklığının Kontur Grafiği ($J=1.0$).	50
Şekil 3.18. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ Sisteminde $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ Alt Sisteminin Dolaşıklığının a)Sıcaklığa b)Manyetik Alana Göre Değişimi. .	50
Şekil 3.19. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ Sisteminde $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ Alt Sisteminin Isısal Durum Dolaşıklığının Kontur Grafiği($J=1.0$).	52
Şekil 3.20. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ Sisteminde $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ Alt Sisteminin Isısal Dolaşıklığının a)Sıcaklığa b)Manyetik Alana Göre Değişimi. .	53
Şekil 3.21. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ NN Etkileşmeleri Modeli.	53
Şekil 3.22. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1)$, $\text{Spin}(1, \frac{3}{2})$ Ve $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ Alt Sistemlerinin Taban Durumları.	59
Şekil 3.23. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ Sisteminde $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1)$ Alt Sisteminin Isısal Dolaşıklık Grafiği.	60

Şekil 3.24. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ Sisteminde $\text{Spin}(1, \frac{3}{2})$ Alt Sisteminin Isısal Dolaşıklık Grafiği.	63
Şekil 3.25. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ Sisteminde $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ Alt Sisteminin Isısal Dolaşıklık Grafiği.	65
Şekil 3.26. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ NN ve NNN Etkileşmeleri Modeli.	66
Şekil 3.27. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ NN ve NNN Taban Durum Dolaşıklıkları ($J=0.0$). .	71
Şekil 3.28. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ NN ve NNN Taban Durum Dolaşıklıkları ($J=0.5$). .	71
Şekil 3.29. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ NN ve NNN Taban Durum Dolaşıklıkları ($J=0.6$). .	72
Şekil 3.30. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ NN ve NNN Taban Durum Dolaşıklıkları ($J=1.0$). .	72
Şekil 3.31. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1)$ Alt Sisteminin NN ve NNN Isısal Dolaşıklıkları. . . .	77
Şekil 3.32. $\text{Spin}(1, \frac{3}{2})$ Alt Sisteminin NN ve NNN Isısal Dolaşıklıkları. . . .	80
Şekil 3.33. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ Alt Sisteminin NN ve NNN Isısal Dolaşıklıkları. . .	82

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 2.1. İki Kubit Üzerinden Süper Yoğun Kodlama Dönüşümü	13
Çizelge 2.2. İki Kubit Üzerinden Kuantum Teleportasyon	15
Çizelge 2.3. Spin Sistemleri	20
Çizelge 3.1. Spin $(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$ Sisteminin Spin $(\frac{1}{2}, 1)$ Alt Sisteminde, $0.0 < B_z < 2.0$ Aralığındaki Taban Durumları İçin N_{12}	39

1. GİRİŞ

1900'lü yılların başlarında ilk olarak Max Planck enerjinin süreksizliğini kabul eden kuantum kavramını öne sürerek klasik mekanik kavramları ile açıklanamayan bazı deneysel sonuçları açıklamayı başarmıştır. 1920'li yıllara gelindiğinde ise atomun yapısı, elektronun ve fotonun davranışı hakkında yapılan araştırmalar Albert Einstein, Niels Bohr, Werner Heisenberg, Pascual Jordan, Erwin Schrödinger, Max Born, Paul Dirac, Wolfgang Pauli, John von Neumann gibi bilim insanlarının katkılarıyla bir kuantum devrimi sağlamıştır. Dalga fonksiyonu kavramı bu dönemde ortaya atılmış ve atom altı çalışmalardaki sonuçların kesinlik içermeyip olasılıksal olduğu görülmüştür.

Bu dönemde Niels Bohr'un etrafında şekillenen ve istatistiksel yoruma dayanan kuantum mekaniği ilkeleri Kopenhag yorumu olarak kabul görmüştür. Kopenhag yorumuna göre kuantum mekaniğinin fiziksel sistemlere uygulanması üç temel özellik içermektedir.

i- Sistemin durumu bir dalga fonksiyonu ile temsil edilir.

ii- Sistemin belirli bir andaki dalga fonksiyonu biliniyorsa herhangi bir andaki dalga fonksiyonu hesaplanabilir.

iii- Sistemin herhangi bir özelliği sistem üzerinde yapılan bir ölçüm sonucu ortaya çıkar. Gözlenebilir adı verilen bu özellikler matematiksel olarak sistemin durum uzayına etki eden Hermitik işlemciler aracılığıyla temsil edilirler. Sistemin üzerine yapılan ölçümün sonucu ilgili işlemcinin öz değerlerinden birisidir. Dalga fonksiyonu tüm özelliklerin (öz değerlerin) ölçülme ihtimalleri hakkında bilgi içerir. Ölçümden önce sadece dalga fonksiyonunun özelliklerinin bulunma ihtimalinden söz edilebilirken, ölçümden sonra sistemin durumu ölçümü yapılan işlemcinin özfonksiyonlarından birine çökmektedir.

Klasik mekaniğe göre "gerçeklik" kavramı, bir sistemin üzerinde yapılan ölçümlerden bağımsız olarak belirli özelliklere sahip olduğunu ifade etmektedir. Kuantum mekaniği ise herhangi bir ölçüm yapılmadan önce dalga fonksiyonunun, sistemin hangi özelliklere (konum, momentum, spin gibi tüm ölçülebilir özellikler) sahip olduğu hakkındaki bilgiyi içermediğini ancak bu özelliklere sahip olma ihtimallerini içerdiğini söylemektedir. Ayrıca kuantum mekaniği, bunun sistemin için bir özelliği olarak kabul edilmesi gerektiğini de söyler.

1935 yılında Schrödinger, günümüzde büyük bir çalışma alanına kaynaklık yapan kuantum mekaniksel bir olayı keşfetti. Schrödinger'in "dolaşıklık" (Almanca "verschränkung", İngilizce "entanglement") olarak adlandırdığı bu kuantum mekaniksel özelliğe göre birleşik bir sistemin bütünsel kuantum durumları bulunmaktadır [1, 2]. Dolaşıklık alt sistemlerden meydana gelmiş bir birleşik sistemin parçaları arasındaki kuantum ilinti (korelasyon) olarak da tanımlanabilir. Buna göre birleşik sistem kendini oluşturan alt sistemlerin kuantum durumlarının tensör çarpımı olarak yazılamıyorsa dolaşıktır.

Örneğin bir orbitaldeki iki elektron birbirleriyle dolaşık olabilir. Ölçüm yapılarak bir elektronun spini ölçüldüğünde diğer elektronun spini elimizdeki değere zıt yönelimde olur, yani dolaşık alt sistemlerden birisi üzerine yapılan ölçüm diğer parçacık hakkında ölçüm yapmasak dahi bilgi sahibi olmamızı sağlamaktadır.

Klasik mekanikte etkileşmelerin anlık olarak değiştiği varsayılırdı. Örneğin, birbirinden çok uzakta bulunan iki kütleli cismin arasında olan kütleçekimsel etkileşimde, kütlelerin birinin konumu değişirse bu değişimin anında diğer kütleyle iletildiği kabul edilirdi. Yani bilgi iletimi sonsuz hızlarda gerçekleşmekteydi. Ancak özel görelilik teorisi sayesinde etkileşimlerin uzayda sonlu hızlarla yayıldığı anlaşıldı. Etkileşimlerin uzayda sonlu bir hızda yayılması fikri ise fizik yasalarının "yerel" olduğu anlamına gelmektedir. Ayrıca yerellik ilkesi uzay zamanda gerçekleşen olaylar arasında bir nedensellik sıralaması yapılabilmesini de sağlar.

Einstein, Podolsky ve Rosen'e göre (EPR) [3], dolaşıklık kavramı kuantum mekaniğinin tamamlanmamış bir teori olduğunu göstermekteydi. EPR çalışmasında birbiriyle dolaşık iki alt sistem birbirinden uzaysal olarak çok uzak mesafelere ayrıldıklarında, alt sistemlerden biri üzerinde yapılacak olan ölçümün diğer alt sistem hakkında da yerellik ilkesine aykırı şekilde aynı anda nasıl bilgi sahibi olabileceği sorgulanmıştır. Einstein, yerellik ilkesine aykırı olan bu sonucun dolaşık alt sistemler arasında "yerel gizli değişkenlerin" varlığının öngörülmesiyle düzeltilebileceğini ve ancak o zaman kuantum teorisinin tamamlanmış bir teori olabileceğini ifade etmiştir. Kuantum mekaniğinin klasik mekaniğin "gerçeklik" özelliğini taşımasını ise "Bir insan gökyüzüne bakmasa Ay yerinde olmayacak mıydı?" sözü ile eleştirmiştir.

John Steward Bell 1964'de yazdığı makalede [4] EPR paradoksunu ele almıştır. Bell, oluşturduğu eşitsizlikler ile dolaşık parçacıklar için yerel kuramların kuantum kuramından farklı deneysel sonuçlar öngördüğünü göstererek EPR'nin "Fiziksel sistemlerin özellikleri, sistem üzerine yapılan ölçümden etkilenmez" düşüncesini çürütmüştür. Daha sonra Bell eşitsizliklerinin yerelliğe uymadığını göstermek deneylerle de mümkün olmuştur. Bu deneyler her seferinde kuantum mekaniğinin EPR'nin öngörülerine uymadığını göstermiştir [5].

Kuantum mekaniğinin gelişmesiyle birlikte fizikçilerin yaşadığımız Dünya'ya bakışları da değişmeye başlamıştır. 1982 yılında Richard P. Feynman kuantum mekaniği ile uyumlu sistemlerin modellenmek istenmesi durumunda yine kuantum fiziği ilkelerini temel alan algoritmalar kullanan kuantum bilgisayarların tasarlanması gerektiğini söylemiştir [6]. Bu öngörü kuantum bilgisayarlarının ve kuantum temelli algoritmaların geliştirilmesi için ilham kaynağı olmuştur. 1985 yılında David Deutsch geliştirdiği Deutsch algoritması ile Feynmann'ın ortaya attığı kuantum bilgisayar fikrinin gerçekleştirilebileceğini göstermiştir [7]. Bu algoritma Richard Josza tarafından geliştirilmiş ve ortaya Deutsch-Josza

algoritması çıkmıştır [8]. Daha sonra Peter Shor tarafından kuantum kriptolojide çok önemli bir yere sahip olan çok büyük sayıları çarpanlarına ayırabilmeye yarayan Shor algoritması [9], Lov Grover tarafından ise veri tabanı sorgulamasında kullanılan bir kuantum algoritması [10,11] geliştirilmiştir.

Kuantum algoritmalarının işletilmesinde kuantum bilgisayarlara, dolayısıyla kuantum bitlere ve kuantum mantık kapılarına ihtiyaç duyulmuştur. Bu gelişmelere paralel olarak kuantum sistemlerinde parçacıklar arasındaki ilintilerin kullanılmasının bilgi iletiminde ve güvenliğinde önemli bir rol oynayabileceği öngörülmüştür. Böylece bir sistemin alt sistemleri arasındaki ilintilerin oluşturduğu dolaşıklık kavramı başlangıçta kuantum mekaniğinin garip bir yanı olarak görülse de doğasını anlama üzerine yapılan çalışmalar disiplinler arası bir çalışma alanı olan kuantum hesaplama ve kuantum enformasyon biliminin pek çok uygulamasının doğmasına neden olmuştur [12–14].

Kuantum hesaplama ve kuantum enformasyon çalışmalarının kuantum teleportasyon [15], süperyoğunluklu kodlama [16], dolaşıklık değiş tokuşu [17–20], kuantum kriptografi ve kuantum anahtar dağılım protokolleri [16,21–24] gibi uygulamalarında dolaşıklığın oluşturulması ve kontrolü anahtar rol oynamaktadır.

Yukarıda örnekleri verilen dolaşıklık uygulamalarında dolaşıklığın oluşturulması ve özelliklerinin incelenmesi için Ising ve Heisenberg spin sistemleri kullanışlı modeller olmuşlardır. Heisenberg spin sistemleri dolaşıklığın oluşturulabileceği fiziksel sistemler için iyi bir model olup farklı parametrelerle dolaşıklığın kontrol edilmesinde çok kullanışlıdır.

Spin- $\frac{1}{2}$, spin-1 ve spin- $\frac{3}{2}$ gibi farklı spin durumuna sahip alt sistemlerden oluşan spin sistemine literatürde karma tip spin (mixed type) sistemleri denilmiştir. Son zamanlarda sentezlenen bazı bileşiklerin fiziksel özellikleri incelendiğinde bu bileşiklerin karma tip spinler içeren sistemler ile modellenebileceği görülmüştür.

$NiCu(pba)(D_2O)_3 \cdot 2D_2O$ ($pba = 1,3 - prepoylerebisis(oxamato)$) molekülünde Cu iyonu $spin-\frac{1}{2}$, Ni iyonu $spin-1$ özelliği göstermektedir ve molekülün $spin(\frac{1}{2}, 1)$ karma tip spin sistemini temsil ettiği görülür [25–28]. $V(TCNE)_x \cdot y$ (çözücü) molekülünde V iyonu $spin-\frac{3}{2}$, TCNE iyonu ise $spin-\frac{1}{2}$ özelliğine sahip olup [29–31], sistemin $spin(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ karma tip spin sistemini temsil ettiği görülür [28, 32]. $[NiCr_2(bipy)_2(C_2O_4)_4(H_2O)_2] \cdot H_2O$ molekülünde Cr(III) iyonu $spin-\frac{3}{2}$, Ni(II) iyonu ise $spin-1$ özelliğe sahip olmakta [33] ve $[Co(hfac)_2] \cdot BNO^*$ molekülünde Co(II) iyonu $spin-\frac{3}{2}$, BNO^* $spin-1$ özelliğine sahip olup [34–36] bu sistemlerin $spin(1, \frac{3}{2})$ karma tip spin sistemini temsil ettiği görülür.

Yeni keşfedilen bazı moleküllerde de karma tip spin sistemi özelliklerinin gözlenmesi farklı spin durumları içeren kuantum spin sistemlerinde dolaşıklığın incelenmesini önemli kılmıştır ve bu konu ile ilgili yeni çalışmalar için motivasyon oluşturmuştur. Farklı spinlere sahip alt sistemlerin aralarındaki etkileşmelerin spin sisteminin yapısında dolaşıklık oluşturup oluşturamayacağı ve bu sistemlerde dolaşıklığın nicel olarak değerinin tespit edilmesi bu çalışmaların temel hedefleri olmuştur. Bunun yanında farklı spinlere sahip sistemlerde taban durumdaki veya uyarılmış durumdaki sistemin farklı spinli iki alt sisteminin arasındaki etkileşmeden doğan dolaşıklık incelenirken, diğer spin veya spinlerin dolaşıklık üzerindeki etkisinin bulunup bulunmadığının araştırılması da önemli bir noktayı oluşturur.

Biz bu düşüncelerden yola çıkarak tezimizde önce iki parçacıklı durumlarda ($spin(\frac{1}{2}, 1)$, $spin(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ ve $spin(1, \frac{3}{2})$ spin sistemlerinde) taban ve uyarılmış durumdaki dolaşıklığı z eksenı boyunca homojen bir manyetik alanda bulunan Heisenberg XXX spin modeli kullanarak inceledik. Sonra sırasıyla $spin(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$, $spin(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ karma tip spin sistemlerinde taban durum ve uyarılmış durumdaki dolaşıklığı yine z eksenı boyunca homojen bir manyetik alan etkisinde bulunan Heisenberg XXX spin modeli kullanarak inceledik. İncelediğimiz bu durumların

bazıları literatürde de örnekleri bulunan çalışmalardır [37–43]. Tezimizin son kısmında ise $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ olarak tasarlanan karma tip Heisenberg XXX spin sisteminde periyodik sınır koşulları altında sadece en yakın komşu (NN) spin etkileşmeleri ile hem en yakın komşu (NN) hem de ikinci en yakın komşu (NNN) etkileşmelerinin olduğu durumların taban durum ve ısısal durum dolaşıklığını, homojen bir manyetik alan altında inceledik. Dolaşıklık ölçütü negatiflik ile bu durumlarda dolaşıklığı nicel olarak belirleyip, hesaplamalardan çıkan matematiksel sonuçları farklı durumlar arasında karşılaştırmalı olarak verdik.

2. TEMEL KAVRAMLAR

Bu bölümde kuantum hesaplama ve kuantum enformasyon teorisinde kullanılan temel kavramları tanıtacağız.

2.1. Kuantum Bit (Kubit)

Bir kompleks vektör uzayında iki durumla ifade edilebilen bir sistemin sahip olabileceği herhangi bir kuantum durumuna bir kubit (qubit = quantum bit) denir [44,45]. Bugünkü bilgisayarlar 0 ve 1 gibi ayrı durumları temsil eden klasik bitlere, klasik mantık kapılarını uygulayarak algoritmaları işletmektedirler. Kuantum hesaplama ve kuantum enformasyon kuramı ise iki durumlu kuantum sistemini tanımlayan kubitleri kullanarak kuantum bilgisayarlarını kuantum algoritmaları ile işletmeye çalışır.

İki farklı kuantum durumu Dirac notasyonu kullanılarak, iki boyutlu kompleks vektör uzayında $|0\rangle$ ve $|1\rangle$ gibi ortonormal baz vektörleri ile ifade edilebilir. Bu vektörlerin matris temsili ise

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{ve} \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.1)$$

ile verilebilir. Bunlara göre bir kubit

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

şeklinde yazılabilir. Burada α ve β kompleks katsayılar olup, $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ normalizasyon şartını sağlar. Görüldüğü gibi bir kubit $|0\rangle$ ve $|1\rangle$ kuantum durumlarının lineer bir kombinasyonu (süperpozisyon) durumunda da bulunabilir. Böylece bir kubit klasik bir bite göre sonsuz sayıda durum içererek hesaplama için büyük avantaj sağlamaktadır. İzdüşüm işlemcileri $p_0 = |0\rangle\langle 0|$ ve $p_1 = |1\rangle\langle 1|$ olmak üzere kubit üzerinde izdüşümsel bir ölçüm (projective measurement) yapıldığında $|0\rangle$ sonucu $|\alpha|^2$ olasılığı ile $|1\rangle$ sonucu ise $|\beta|^2$ olasılığı ile gerçekleşecektir.

Fiziksel sistemlerde kubitin karşılığını, kuantum mekniğinde iki durumu olabilen $\text{spin}-\frac{1}{2}$ parçacık, iki farklı polarizasyona sahip bir foton, temel veya uyarılmış enerji durumuna sahip bir atom olarak da ifade edebiliriz.

Kuantum hesaplama ve kuantum enformasyon teorisinde kubitlerin dışında yani ikiden fazla seviyeli kuantum durumlarına sahip temel birimler de olabilir ve genel olarak bunlara kudit denir. Üç seviyeli bir kuantum durumuna ise özel olarak kutrit denir ve bir kutrit üç tane ortonormal baza sahiptir. Bu şekilde bir kutrit

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle + \gamma|2\rangle, \\ |\psi\rangle &= \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \gamma \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.3)$$

süperpozisyon durumu ile verilebilir ve $|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2 = 1$ şeklinde olasılıklar toplamı birdir.

Dört seviyeli bir kuantum durumu ise özel olarak kuadrit olarak isimlendirilir ve dört adet ortonormal baza sahiptir

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle + \gamma|2\rangle + \delta|3\rangle, \\ |\psi\rangle &= \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \gamma \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \delta \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Burada $|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2 + |\delta|^2 = 1$ şeklinde olasılıklar toplamı yine bir olmalıdır.

Tahmin edilebileceği gibi kutritler ve kuadritler, kubitlere göre daha fazla seviyeli olmaları nedeniyle daha fazla bilgi içerebilirler. Ayrıca kuantum durumumuzun dış çevre ile etkileşme içerisinde olması halinde eşevresizlik (decoherence) kuditler ve kutritler için kubitlere göre daha azdır [46].

Birleşik bir sistemin durum uzayı kendini oluşturan alt sistemlerin örneğin H_A , H_B gibi durum uzaylarının $(H_A \otimes H_B)$ tensör çarpımıdır. İlk sistem $|\psi_A\rangle$, ikincisi $|\psi_B\rangle$ durumundaysa birleşik sistemin kuantum durumu $|\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$ olarak

yazılır. Bu birleşik sistemin kuantum durumu $|\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle = |\psi_A\rangle |\psi_B\rangle = |\psi_A \psi_B\rangle$ notasyonlarında da yazılabilir [47].

2.2. Yoğunluk Matrisi

ρ yoğunluk operatörünün genel ifadesi

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|, \quad (2.5)$$

ile yazılabilir. Burada $|\psi_i\rangle$ kuantum sistemindeki durum vektörlerini, p_i ise bu durum vektörlerinin sistemde bulunma olasılıklarını belirtmektedir. Eğer sadece bir p_i değeri sıfırdan farklı ise kuantum durumumuz saf duruma (pure state) karşılık gelmektedir. p_i 'nin sıfırdan farklı olduğu birden fazla durum varsa kuantum durumumuz karışık kuantum duruma (mixed state) karşılık gelmektedir.

H_A ve H_B alt uzaylarına sahip H_{AB} uzayındaki birleşik kuantum durumunun H_A uzayındaki alt sisteme ait indirgenmiş yoğunluk matrisi (reduced density matrix) bileşik sisteme ait ρ yoğunluk operatörünün B sistemi üzerinden kısmi izinin alınması (partial trace)

$$\rho_A = Tr_B(\rho), \quad (2.6)$$

ile bulunabilir. İndirgenmiş yoğunluk matrisinin bulunması, alt sistemlerin kendi aralarındaki etkileşmelerini görebilmek ve etkileşme parametrelerini daha iyi kontrol edebilmek için önemlidir [12].

Kısmi iz en genel ifadesi ile B sistemi üzerinden

$$Tr_B(|a_1\rangle \langle a_1| \otimes |b_1\rangle \langle b_1|) = |a_1\rangle \langle a_1| Tr(|b_1\rangle \langle b_1|), \quad (2.7)$$

şeklinde verilir.

2.3. Dolaşıklık

Fizikte birleşik bir sistem, alt sistemlerin kartezyen çarpımı olarak yazılabilir ve bu durum bileşik sistemin alt sistemlere ayrılabilir olmasını sağlar. Kuantum mekaniğinde ise $|\psi_i\rangle$ kuantum durumu H_i alt kompleks vektör uzayında tanımlı olmak üzere N tane alt sistemden meydana gelen birleşik sistemin vektör uzayı alt uzayların tensör çarpımı olarak yazılabilir

$$H = H_1 \otimes H_2 \otimes \dots \otimes H_N. \quad (2.8)$$

Ancak alt sistemlerin oluşturduğu bir birleşik sistemin kuantum durumu alt sistemlerin kuantum durumlarının tensör çarpımı olarak yazılamayabilir

$$|\psi\rangle \neq |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N\rangle. \quad (2.9)$$

Bu durumda alt sistemlerin birbirleriyle klasik olmayan ilintilere (korelasyon) sahip olduğu yani dolaşık olduğu söylenir [12].

İki parçacıklı ve iki durumlu bir sistemin baz vektörleri $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$ şeklinde yazılabilir. Bu baz vektörleriyle

$$|\beta_{00}\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (2.10)$$

$$|\beta_{01}\rangle = \frac{|01\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (2.11)$$

$$|\beta_{10}\rangle = \frac{|00\rangle - |11\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (2.12)$$

$$|\beta_{11}\rangle = \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (2.13)$$

şeklinde dolaşık kuantum durumları oluşturulabilir. Bu durumlar Bell durumları olarak adlandırılır [12]. İki den fazla parçacık içeren sistemlerin de Bell durumları gibi dolaşık kuantum durumları elde edilebilir. Üç parçacıklı sistemlerde dolaşıklık içeren kuantum durumlarına GHZ durumları denir [48,49].

Kuantum mekaniğinin doğal bir sonucu olan dolaşıklık, kuantum hesaplama ve kuantum enformasyon için geniş bir uygulama alanına sahiptir. Bu nedenle iki veya daha çok parçacıklı sistemlerin dolaşıklık özellikleri ile dolaşıklık miktarlarının belirlenmesi ve sistemdeki fiziksel parametrelerin, sistemin dolaşıklığı üzerindeki etkilerinin bulunması önem kazanmaktadır.

2.4. Dolaşıklık Uygulamaları

Kuantum hesaplama ve kuantum enformasyonda bilginin şekillendirilebilmesi için işlem yapan kuantum devre elemanlarına kuantum mantık kapıları denir. Önce dolaşıklık uygulamalarını daha iyi anlamak için kuantum mantık kapılarının bazılarına bakalım.

Kuantum hesaplamada Pauli operatörleri olarak da bilinen tek kubitlik bir dizi operatör temel bir öneme sahiptir. Pauli operatörleri literatürde bir kaç farklı notasyon ile $\sigma^0, \sigma^1, \sigma^2, \sigma^3$ gibi, $\sigma^0, \sigma^x, \sigma^y, \sigma^z$ veya I, X, Y, Z gibi ifade edilebilirler.

$$I|0\rangle = |0\rangle, \quad I|1\rangle = |1\rangle,$$

olup I birim operatör olmaktadır. Pauli X operatörü

$$X|0\rangle = |1\rangle, \quad X|1\rangle = |0\rangle,$$

şeklinde, Pauli Y operatörü

$$Y|0\rangle = -i|1\rangle, \quad Y|1\rangle = i|0\rangle,$$

şeklinde, Pauli Z operatörü ise

$$Z|0\rangle = |0\rangle, \quad Z|1\rangle = -|1\rangle,$$

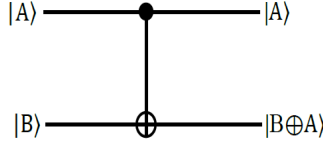
şeklinde işlem yapmaktadır.

Tek kubitlik kuantum mantık kapılarına Hadamard kapısını da örnek verebiliriz. Hadamard kapısı $|0\rangle$ durumunu $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ durumuna çevirirken, $|1\rangle$ durumunu

$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$ durumuna çevirir. Matris temsili ise denklem 2.1’de verilen baza göre

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$

şeklindedir.



Şekil 2.1. CNOT Kuantum Mantık Kapısı.

Şimdi iki kubitlik kuantum mantık kapılarından CNOT (kontrollü değil) kapısını inceleyelim. Burada ilk kubit kontrol, ikincisi ise hedef kubit şeklindedir (şekil 2.1).

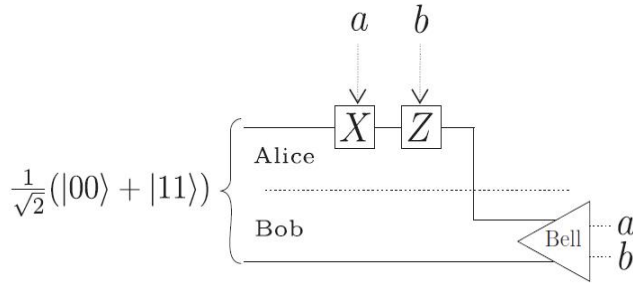
Bu CNOT kapısı baz kubitlerine aşağıdaki gibi etkir;

$$\begin{aligned} CNOT |00\rangle &= |00\rangle, & CNOT |01\rangle &= |01\rangle, \\ CNOT |10\rangle &= |11\rangle, & CNOT |11\rangle &= |10\rangle. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Kuantum mantık kapılarının ve dolaşıklığın kullanıldığı bazı uygulamaları vereceğimiz şu örneklerde görmek mümkündür.

2.4.1. Süperyoğun Kodlama

Alice’in iki bitlik klasik bilgiyi Bob’a göndermek istediğini varsayalım. Bu klasik bilginin, dolaşık bir kubit kullanılarak bir kuantum kanalı üzerinden gönderilebilmesi yöntemine süperyoğun kodlama denir [16, 50–53]. Bunun için Alice’in Bob’a sadece bir kubit göndermesi yeterlidir. Alice ve Bob’un başlangıçta $|\psi\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}$ gibi bir Bell durumunu paylaşıyor olduklarını kabul edelim. Burada birinci kubit Alice’e, ikinci kubit Bob’a aittir. Alice önce kendi kubitine dört tek



Şekil 2.2. Süper Yoğun Kodlama Şeması.

kubitlik kapıdan birini uygular. Bu kapılar daha önce verilen Pauli kapılarıdır. Eğer Alice Bob'a 00 bitlerini göndermek isterse $|\psi\rangle$ 'ye $I \otimes I$ uygular, eğer 01 durumunu göndermek isterse $|\psi\rangle$ 'ye $X \otimes I$ uygular. 10 göndermek isterse $Z \otimes I$ kapısını, 11 göndermek isterse $i(Y \otimes I)$ kapısını $|\psi\rangle$ kubitine uygular. Bu durumlar çizelge 2.1'de görüldüğü gibi ifade edilebilir;

Çizelge 2.1. İki Kubit Üzerinden Süper Yoğun Kodlama Dönüşümü

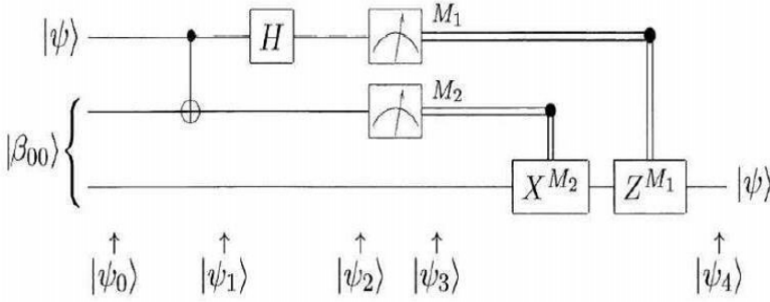
Gönderilen	Dönüşüm	Sonuç
00	$[I \otimes I] \frac{1}{\sqrt{2}}[00\rangle + 11\rangle]$	$\frac{1}{\sqrt{2}}[00\rangle + 11\rangle] = \beta_{00}\rangle$
01	$[X \otimes I] \frac{1}{\sqrt{2}}[00\rangle + 11\rangle]$	$\frac{1}{\sqrt{2}}[10\rangle + 01\rangle] = \beta_{01}\rangle$
10	$[Z \otimes I] \frac{1}{\sqrt{2}}[00\rangle + 11\rangle]$	$\frac{1}{\sqrt{2}}[00\rangle - 11\rangle] = \beta_{10}\rangle$
11	$i[Y \otimes I] \frac{1}{\sqrt{2}}[00\rangle + 11\rangle]$	$\frac{1}{\sqrt{2}}[01\rangle - 10\rangle] = \beta_{11}\rangle$

Yukarıdaki durumlardan birini uygulayan Alice kendi kubitini Bob'a gönderir. Bob elinde bulunan kuantum durumuna ilk önce Alice'den gelen kubit kontrol kubit olmak üzere CNOT kapısını uygular. Sonra sadece ilk kubit Hadamard kapısını uygular. Böylece Bob'un elinde dört Bell durumundan birisi bulunur. Buradan Bob elindeki Bell durumuna bakarak Alice'in göndermek istediği klasik bitleri öğrenmiş olur. Böylece süperyoğun kodlama protokolü gerçekleştirilmiş olur.

Süperyoğun kodlama ile ilgili ilk deneysel çalışmalar 1996 [54] yılında Mattle ve diğerleri tarafından gerçekleştirilmiştir. Bu konunun teknolojik uygulamalarının önemi daha sonra da deneysel çalışmaların devam etmesini sağlamıştır [55–57].

2.4.2. Kuantum Teleportasyon

Kuantum teleportasyon, bir kuantum durumunun farklı uzaysal konumlar arasında yerellik ilkesinden bağımsız olarak taşınabilmesini ifade eder. Kuantum teleportasyonun bu amacına nasıl ulaşabileceğini bir örnekle gösterelim. Diyelim ki kuantum teleportasyon yöntemi ile Alice bir kubit Bob'a iletmek istesin. Alice'in Bob ile sadece klasik kanaldan iletişim kurduğunu düşünelim. Alice $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ gibi bir kuantum durumunu Bob'a göndermek istemektedir. Alice'in kubitini kopyalayarak Bob'a göndermesi kopyalanamama teoremi yüzünden mümkün olmamaktadır [58, 59]. Bennett ve diğerleri tarafından bilginin klasik yollarla aktarılması ile bu problemin çözülebileceği gösterilmiştir [15].



Şekil 2.3. Kuantum Teleportasyon Şeması.

Şekil 2.3’de görülen kuantum teleportasyon şemasında birinci ve ikinci kubitler Alice’e üçüncü kubit Bob’a aittir [12]. Alice ve Bob ilk durumda $|\beta_{00}\rangle$ dolaşık kubitini paylaşmaktadırlar. Alice elindeki bilinmeyen $|\psi\rangle$ kubitini Bob’a

göndermek istemektedir. Teleportasyon protokolüne göre işleminin girdisi

$$\begin{aligned}
 |\psi_0\rangle &= |\psi\rangle |\beta_{00}\rangle, \\
 &= |\psi\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}[|00\rangle + |11\rangle], \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha |0\rangle [|00\rangle + |11\rangle] + \beta |1\rangle [|00\rangle + |11\rangle]], \quad (2.16)
 \end{aligned}$$

şeklinde olmaktadır. Alice kendi kubitlerine (birinci ve ikinci kubitlere) CNOT kapısı uygularsa

$$|\psi_1\rangle = CNOT |\psi_0\rangle, \quad (2.17)$$

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha |0\rangle [|00\rangle + |11\rangle] + \beta |1\rangle [|10\rangle + |01\rangle]], \quad (2.18)$$

elde edilir. Alice elde ettiği $|\psi_1\rangle$ kuantum durumunun ilk kubitine Hadamard kapısını uygularsa, düzenlemelerin ardından $|\psi_2\rangle$ elde edilir

$$\begin{aligned}
 |\psi_2\rangle &= \frac{1}{2}[|00\rangle [\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle] + |01\rangle [\alpha |1\rangle + \beta |0\rangle] \\
 &\quad + |10\rangle [\alpha |0\rangle - \beta |1\rangle] + |11\rangle [\alpha |1\rangle - \beta |0\rangle]]. \quad (2.19)
 \end{aligned}$$

Bu yazımdaki ilk iki kubit Alice'e aittir. Alice bu kubitler üzerinde ölçüm yapınca $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$, $|11\rangle$ durumlarından birini elde eder. Bu ihtimaller karşısında Bob'un sahip olacağı kuantum durumları ise çizelge 2.2'deki gibidir.

Çizelge 2.2. İki Kubit Üzerinden Kuantum Teleportasyon

Alice	Bob
$ 00\rangle$	$\alpha 0\rangle + \beta 1\rangle$
$ 01\rangle$	$\alpha 1\rangle + \beta 0\rangle$
$ 10\rangle$	$\alpha 0\rangle - \beta 1\rangle$
$ 11\rangle$	$\alpha 1\rangle - \beta 0\rangle$

Sonuçta Alice'in ölçüm sonucuna bağlı olarak Bob'un kubit bu olası dört sonuçtan birisi olacaktır. Alice ölçüm sonucunu bir klasik kanal (telefon,e-mail,faks vb) üzerinden Bob'a gönderir. Alice'in gönderdiği ölçüm sonucuna bakarak Bob kendi kubitine $Z^{M_1}X^{M_2}$ dönüşümünü uygulayarak orijinal $|\psi\rangle$ kuantum durumunu elde eder.

Kuantum teleportasyon işlemi ilk kubit ile hedef kubitin aynı olmaması nedeniyle kopyalanamama teoremi ilkeleriyle, klasik kanalın kullanılması nedeniyle ise özel görelilik teorisinin ışıktan daha hızlı bilgi akışına izin vermemesi ilkesi ile çelişmemektedir [59].

Kuantum teleportasyonun teknolojik uygulamalar ile hayatımıza girebilmesi için bilim insanları yaptıkları deneysel çalışmalarla bu olgunun doğasını anlamaya ve araştırmaya devam etmektedirler [60–65].

2.4.3. Dolaşıklık Değiş Tokuşu

Yapılan çalışmalar sonucunda aralarında dolaşıklık olmayan, birbirlerinden çok uzakta olan parçacıkların da aralarında dolaşıklık üretilbileceği gösterilmiştir [17, 20]. Bu olaya dolaşıklık değiş tokuşu denilmiştir (Entanglement swapping). Bu prosedür şöyle gerçekleşir:

Alice ve Bob birer Bell çiftine sahip olsunlar.

$$\begin{aligned} |\beta_{00}\rangle_{12} &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|0_1 0_2\rangle + |1_1 1_2\rangle], \\ |\beta_{00}\rangle_{34} &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|0_3 0_4\rangle + |1_3 1_4\rangle]. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Bu Bell çiftlerindeki 1. ve 4. kubitler Alice'e, 2. ve 3. kubitler Bob'a ait kubitler olsun. Dolaşık olan bu kuantum durumlarının çarpımına bakalım

$$|\beta_{00}\rangle_{12} |\beta_{00}\rangle_{34} = \frac{1}{2} [|0_1 0_2\rangle |0_3 0_4\rangle + |1_1 1_2\rangle |0_3 0_4\rangle + |0_1 0_2\rangle |1_3 1_4\rangle + |1_1 1_2\rangle |1_3 1_4\rangle]. \quad (2.21)$$

Buradan ikinci ve dördüncü kubitler yer değiştirilerek

$$|\beta_{00}\rangle_{14} |\beta_{00}\rangle_{23} = \frac{1}{2} [|0_1 0_4\rangle |0_2 0_3\rangle + |0_1 1_4\rangle |0_2 1_3\rangle + |1_1 0_4\rangle |1_2 0_3\rangle + |1_1 1_4\rangle |1_2 1_3\rangle] \quad (2.22)$$

elde edilir.

Şimdi bir de $|\beta_{00}\rangle_{14} |\beta_{00}\rangle_{23}$ çarpımına bakalım

$$|\beta_{00}\rangle_{14} |\beta_{00}\rangle_{23} = \left[\frac{1}{\sqrt{2}} [|0_1 0_4\rangle + |1_1 1_4\rangle] \right] \left[\frac{1}{\sqrt{2}} [|0_2 0_3\rangle + |1_2 1_3\rangle] \right] \quad (2.23)$$

$$|\beta_{00}\rangle_{14} |\beta_{00}\rangle_{23} = \frac{1}{2} [|0_1 0_4\rangle |0_2 0_3\rangle + |1_1 1_4\rangle |0_2 0_3\rangle + |0_1 0_4\rangle |1_2 1_3\rangle + |1_1 1_4\rangle |1_2 1_3\rangle]. \quad (2.24)$$

(2.22) ve (2.24) denklemlerine bakıldığında (2.22)'de eksik terimler olduğu görülür. Bu eksiklik aşağıdaki eşitlik ile giderilebilir

$$|\beta_{00}\rangle_{12} |\beta_{00}\rangle_{34} = \frac{1}{2} [|\beta_{00}\rangle_{14} |\beta_{00}\rangle_{23} + |\beta_{01}\rangle_{14} |\beta_{01}\rangle_{23} + |\beta_{10}\rangle_{14} |\beta_{10}\rangle_{23} + |\beta_{11}\rangle_{14} |\beta_{11}\rangle_{23}]. \quad (2.25)$$

Eğer Alice 1. ve 4. kubitlere ölçüm yaparsa $\frac{1}{4}$ olasılıkla $|\beta_{00}\rangle_{14}$, $|\beta_{01}\rangle_{14}$, $|\beta_{10}\rangle_{14}$, $|\beta_{11}\rangle_{14}$ sonuçlarından birini elde eder. Bu durumda Bob $|\beta_{00}\rangle_{23}$, $|\beta_{01}\rangle_{23}$, $|\beta_{10}\rangle_{23}$ ve $|\beta_{11}\rangle_{23}$ dolaşık durumlarına sahip olur. Eğer Alice kubitlerine ölçüm yapmadan önce Bob kubitlerden birisini örneğin 3. kubitini Chuck'a verir ve Chuck da Bob'dan çok uzağa giderse Alice kubitlerine ölçüm yaptığında daha önce birbirleriyle hiç etkileşmemiş olan 2. ve 3. kubitler dolaşık hale gelirler. Yani Bob ve Chuck'ın kubitleri dolaşık hale gelmiş olurlar. Bu işlemler sayesinde EPR çiftlerinden birisindeki dolaşıklığı diğer çifte taşımak mümkün olmaktadır. Buna dolaşıklık değiş tokuşu denmektedir. Dolaşıklık değiş tokuşunun deneysel olarak da gerçekleştirilebileceği gösterilmiştir [66].

Kuantum süper yoğun kodlama, kuantum teleportasyon ve dolaşıklık değiş tokuşu ile ilgili deneysel çalışmaların varlığı dolaşıklığın anahtar bir kavram olarak kullanıldığı kuantum hesaplama ve enformasyon teorisinin artık hayatımızda daha çok yer edineceğini bize göstermektedir.

2.5. Dolaşıklık Ölçütleri

Dolaşıklık miktarını belirlemek ve ölçmek için çeşitli yöntemler geliştirilmiştir. İki parçacıklı saf duruma ait dolaşıklık ölçütü için von Neumann tarafından

"Dolaşıklık Entropisi" ileri sürülmüştür [67]. İki kubitlik durumların dolaşıklığını ise Wootters oluşum dolaşıklığı ile ölçmüştür. Wootters iki kubit için dolaşıklığı "Uyum" (Concurrence) olarak nitelendirmiştir [68,69].

Dolaşıklık maliyeti ise dolaşıklık oluşturmanın zorluğunu belirten bir ölçüt olarak ortaya çıkmıştır [70]. Damıtılabilir dolaşıklık kavramı ise Bennett ve Bruss tarafından tanımlanmıştır [71,72].

Özellikle spin- $\frac{1}{2}$ parçacıklardan oluşan tek seviyeli kuantum sistemleri için uyum iyi bir ölçüt iken spin-1 ve spin- $\frac{3}{2}$ gibi yüksek değerli spinler içeren karma tip spin sistemlerinde dolaşıklık ölçütü olarak "Negatiflik" kullanılmaktadır. Negatiflik, pozitif kısmi transpoz (PPT) kriterinden elde edilir ve nicel bir dolaşıklık ölçütüdür.

Tüm sisteme ait yoğunluk matrisinin kısmi izinin (partial trace) alınması ile karşılıklı etkileşimini incelediğimiz alt sistemlerin (farklı seviyeye sahip iki spin) yoğunluk matrisinin yani indirgenmiş yoğunluk matrisinin elde edilmesi mümkün olmaktadır. Elde edilen indirgenmiş yoğunluk matrisinin bir tane bile negatif özdeğeri varsa sistem alt sistemlerine ayıramaz yani sistem dolaşık bir durumdadır denir. Bu kriter PPT (Peres-Horodecki) kriteri denir [73,74].

Dolaşıklık ölçütü olarak negatiflik şöyle ifade edilir

$$E_N(\rho) \equiv \frac{\|\rho^{T_B}\| - 1}{2}. \quad (2.26)$$

Buradaki ρ^{T_B} , B alt sistemine göre ρ yoğunluk matrisinin kısmi izidir [75] ve norm izi

$$\|X\| = \text{Tr} \sqrt{X^\dagger X}, \quad (2.27)$$

şeklinde tanımlıdır.

Tez çalışmamızda farklı seviyeli spinlere sahip karma tip Heisenberg spin sistemlerini kullanmamız, dolaşıklığı nicel olarak ölçebilmek için bizi negatiflik ölçütünü kullanmaya sevk etmiştir.

2.6. Spin Sistemleri

İçerdiği parametrelere bağlı olarak Heisenberg spin sistemleri dolaşıklığın üretilmesinde ve incelenmesinde oldukça verimli bir modeldir. Bir boyutta Heisenberg spin sistemleriyle oluşturulan spin zincirleri periyodik sınır koşulları (PBC) veya açık sınır koşulları (OBC) altında modellenenirler. Ayrıca spin zincirleri sonsuz uzunlukta olabildiği gibi sonlu sayıda spinlerden de oluşabilir. Sadece katıhal sistemlerinde değil, kuantum hesaplama ve kuantum enformasyon alanında da Heisenberg spin modelleri kullanılmaktadır. Örneğin kuantum noktaların [76–79], optik örgülerin [80], nükleer spinin [81–83] boşluk kuantum elektrodinamiğin [84, 85] ve spin elektronuğunun [86, 87] fiziksel yapısının açıklanmasında da Heisenberg modeli kullanılabilir.

$\vec{S}_i$ ve $\vec{S}_j$ gibi iki spin arasındaki değiş tokuş etkileşiminin J parametresi kullanılarak ifade edilmesiyle N tane spinden oluşan (en yakın komşu etkileşimli (NN)) Heisenberg spin sistemi

$$H = \sum_{i=1}^N J_i \vec{S}_i \vec{S}_{i+1}, \quad (2.28)$$

şeklinde yazılabilir. $J > 0$ antiferromanyetik (afm), $J < 0$ ise ferromanyetik (fm) çiftlenim sabitini ifade etmektedir.

Sadece z ekseninde spin etkileşim sabitine sahip spin sistemine Ising Model, (2.28) denkleminin en genel halini içeren ve üç farklı yönelimde spin etkileşmesine sahip spin sistemine Heisenberg XYZ modeli denilir. Heisenberg XYZ modeline ait Hamiltonyen

$$H = \sum_{i=1}^N (J_x S_i^x S_{i+1}^x + J_y S_i^y S_{i+1}^y + J_z S_i^z S_{i+1}^z), \quad (2.29)$$

şeklinde yazılır. Heisenberg XYZ modeli Hamiltonyeni üzerinden tanımımıza devam edersek etkileşme parametrelerinin durumlarına göre spin modelleri aşağıda görülen çizelge 2.3. ile verilebilir [88].

Çizelge 2.3. Spin Sistemleri

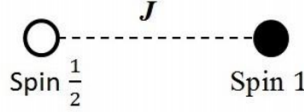
MODEL	KOŞULLAR	HAMILTONİYEN
XYZ	$J_x \neq J_y \neq J_z$	$H = \sum_{i=1}^N (J_x S_i^x S_{i+1}^x + J_y S_i^y S_{i+1}^y + J_z S_i^z S_{i+1}^z)$
Ising	$J_x = J_y = 0, J_z = J$	$H = J \sum_{i=1}^N S_i^z S_{i+1}^z$
XX	$J_x = J_y = J, J_z = 0$	$H = J \sum_{i=1}^N (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y)$
XY	$J_x \neq J_y \neq 0, J_z = 0$	$H = \sum_{i=1}^N (J_x S_i^x S_{i+1}^x + J_y S_i^y S_{i+1}^y)$
XXX	$J_x = J_y = J_z = J$	$H = \sum_{i=1}^N J (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + S_i^z S_{i+1}^z)$
XXZ	$J_x = J_y = J \neq J_z$	$H = \sum_{i=1}^N (J (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y) + J_z S_i^z S_{i+1}^z)$

Literatürde iki spin arasındaki dolaşıklık Ising modelde [90, 91] ve Heisenberg XX [92–94], XY [95–100], XXX [101, 102], XXZ [103–109], XYZ [110–115] spin modellerinde, homojen veya homojen olmayan dış manyetik alan altında [89, 95, 104], taban ve ısısal durumlar için sistemlerin izotropik ve anizotropik olması durumlarında [96, 99, 103, 114] incelenmiştir. İki spin arasındaki etkileşmelerde en yakın komşu (NN) ve ikinci en yakın komşu (NNN) etkileşmelerinin dolaşıklık üzerindeki etkisi de ayrı bir inceleme konusu olmuştur [39, 40, 102, 116]. Ayrıca iki spin arasındaki spin etkileşmelerinden başka spin yörünge etkileşmesinden kaynaklanan DM etkileşmesinin dolaşıklık üzerindeki etkisinin ele alındığı çalışmalar yapılmıştır [117–122]. Benzer şekilde, karma tip spin sistemlerinde dolaşıklığın incelenmesi de literatürde kendine yer bulmuştur [37–43, 123, 124].

3. HESAPLAMALAR

3.1. İki Spinli Karma Sistemler

3.1.1. Spin $(\frac{1}{2}, 1)$ Durumu



Şekil 3.1. Spin $(\frac{1}{2}, 1)$ Modeli

Bu noktadan itibaren yazılan Hamiltonyenlerde $\hbar = 1$ ve Bohr magnetonu $\mu_B = 1$ olarak kabul edilmektedir. z eksenini boyunca uygulanan homojen B_z manyetik alanı altında sistemin Hamiltonyeni

$$H = J(\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y + \sigma_1^z \sigma_2^z) + B_z(\sigma_1^z + \sigma_2^z), \quad (3.1)$$

olmaktadır. Burada σ^α ($\alpha = x, y, z$) Pauli spin operatörlerini, s^γ ($\gamma = x, y, z$) spin-1 operatörlerini göstermektedir. Spin $(\frac{1}{2}, 1)$ sistemine ait Hamiltonyenin matris gösterilimi

$$H = \begin{pmatrix} \frac{3B_z+J}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{B_z}{2} & 0 & \frac{J}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{-B_z-J}{2} & 0 & \frac{J}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{J}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{B_z-J}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{J}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{B_z}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-3B_z+J}{2} \end{pmatrix}, \quad (3.2)$$

şeklinde dir. Bu matrisin özdeğerleri ise

$$E_1 = \frac{1}{2}(-B_z - 2J), \quad (3.3)$$

$$E_2 = \frac{1}{2}(B_z - 2J), \quad (3.4)$$

$$E_3 = \frac{1}{2}(-3B_z + J), \quad (3.5)$$

$$E_4 = \frac{1}{2}(-B_z + J), \quad (3.6)$$

$$E_5 = \frac{1}{2}(B_z + J), \quad (3.7)$$

$$E_6 = \frac{1}{2}(3B_z + J), \quad (3.8)$$

olmaktadır. Bu özdeğerlere karşılık gelen özvektörleri ise

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}[-\sqrt{2}\left|\frac{1}{2}, -1\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, 0\right\rangle], \quad (3.9)$$

$$|\psi_2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}[-\frac{1}{\sqrt{2}}\left|\frac{1}{2}, 0\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, 1\right\rangle], \quad (3.10)$$

$$|\psi_3\rangle = \left|-\frac{1}{2}, -1\right\rangle, \quad (3.11)$$

$$|\psi_4\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}[\frac{1}{\sqrt{2}}\left|\frac{1}{2}, -1\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, 0\right\rangle], \quad (3.12)$$

$$|\psi_5\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}[\sqrt{2}\left|\frac{1}{2}, 0\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, 1\right\rangle], \quad (3.13)$$

$$|\psi_6\rangle = \left|\frac{1}{2}, 1\right\rangle, \quad (3.14)$$

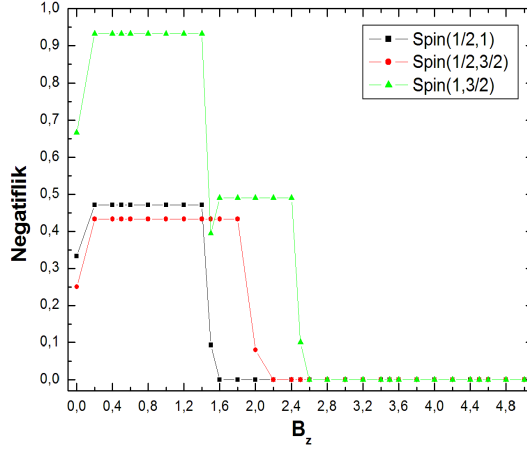
şeklindedir.

Taban Durum

Manyetik alanın $0.0 \leq B_z \leq 5.0$ belirlenen aralığına göre nümerik olarak taban durumlar ve bunlara karşılık gelen özvektörler tespit edilir. Taban durumlar için yoğunluk matrisi ve sonrasında negatiflik hesaplanır.

z yönünde homojen bir manyetik alanda bulunan $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1)$ Heisenberg XXX sisteminde taban durum dolaşıklığının B_z manyetik alanına göre değişimi şekil 3.2’de görülmektedir.

$B_z = 0.0$ ’da taban durum $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ şeklinde iki katlı dejenere olup yoğunluk matrisi $\rho = \frac{1}{2}|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \frac{1}{2}|\psi_2\rangle\langle\psi_2|$ olarak elde edilir ve negatiflik $N = 0.33$ bulunur. B_z manyetik alanının artışı ile birlikte negatiflik değerinde küçük bir



Şekil 3.2. İki Spinli Karma Tip Spin Sistemlerinin Taban Durum Dolaşıklıklarının Karşılaştırılması.

artış gözlenmiş ve bir plato bölgesine ulaşılmıştır. Manyetik alanın $0.0 < B_z < 1.5$ aralığında olduğu bu plato bölgesinde taban durum $|\psi_1\rangle$ dejenere olmayıp yoğunluk matrisi $\rho = |\psi_1\rangle\langle\psi_1|$ şeklindedir. Buradan hesaplanan negatiflik $N = 0.47$ değerine sahiptir.

$B_z = 1.5$ değerinde dolaşıklıkta ani bir düşüş gözlenir ve bu durumda taban durum $|\psi_1\rangle$ ve $|\psi_3\rangle$ şeklinde iki katlı dejeneredir. Bu manyetik alan değerinde yoğunluk matrisi $\rho = \frac{1}{2}|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \frac{1}{2}|\psi_3\rangle\langle\psi_3|$ olup, yoğunluk matrisinden hesaplanan negatiflik $N = 0.09$ değerinde olmaktadır. Bu geçiş değerinden hemen sonra ise negatiflik değerinin sıfıra düştüğü gözlenir. Manyetik alanın $B_z > 1.5$ olduğu bu değerlerde taban durum $|\psi_3\rangle$ ve yoğunluk matrisi $\rho = |\psi_3\rangle\langle\psi_3|$ olup, dolaşıklık gözlenmemektedir.

Benzer bir durum $B_z \rightarrow -B_z$ için de gözlenir. Sonuç olarak taban durum dolaşıklığının manyetik alan B_z 'ye göre değişimine baktığımızda B_z manyetik alanın 0.0 ve ± 1.5 değerlerinde gerçekleşen enerji seviyelerindeki geçişlerden dolayı dolaşıklıkta ani düşüşlere rastlanır.

Şekil 3.2'den de görüldüğü gibi düşük manyetik alan değerleri için manyetik alanın artışıyla birlikte dolaşıklık artmış ve bir plato bölgesine ulaşılmıştır. $B_c = 1.5$ gibi bir kritik değerden sonra dolaşıklık kaybolmaktadır. Literatürde de yapılan benzer çalışmalara baktığımızda elde ettiğimiz sonuçların literatürdeki sonuçlarla uyumlu olduğu görülmüştür [40].

Isısal Durum

Isısal yoğunluk matrisi genel olarak $\rho(T) = \frac{1}{Z} \sum_{i=1}^N e^{-\beta E_i} |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$ şeklinde ifade edilirken Z bölüşüm fonksiyonu $Z = \sum_{i=1}^N e^{-\beta E_i}$ olup burada, $\beta = \frac{1}{k_B T}$ olarak verilir. Burada k_B Boltzman sabiti olup $k_B = 1$ olarak alınmıştır. Buna göre sistemin ısısal yoğunluk matrisinin birinci alt sisteme göre kısmi transpozu alınarak elde edilmiş yoğunluk matrisi

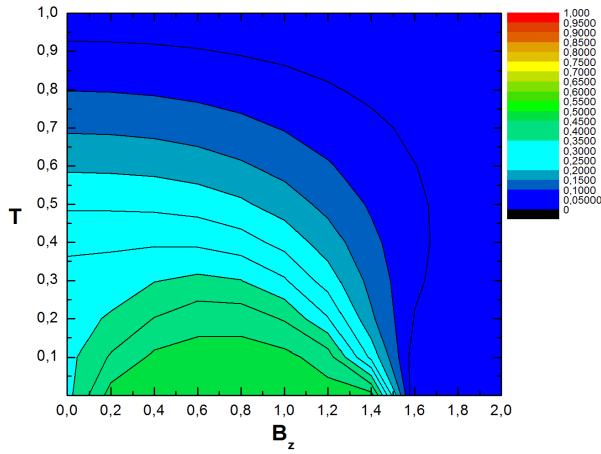
$$\rho^{T1}(T) = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & 0 & \beta & 0 \\ 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 & \delta \\ 0 & 0 & \varepsilon & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \zeta & 0 & 0 \\ \beta & 0 & 0 & 0 & \eta & 0 \\ 0 & \delta & 0 & 0 & 0 & \theta \end{pmatrix}, \quad (3.15)$$

şeklinde olup burada

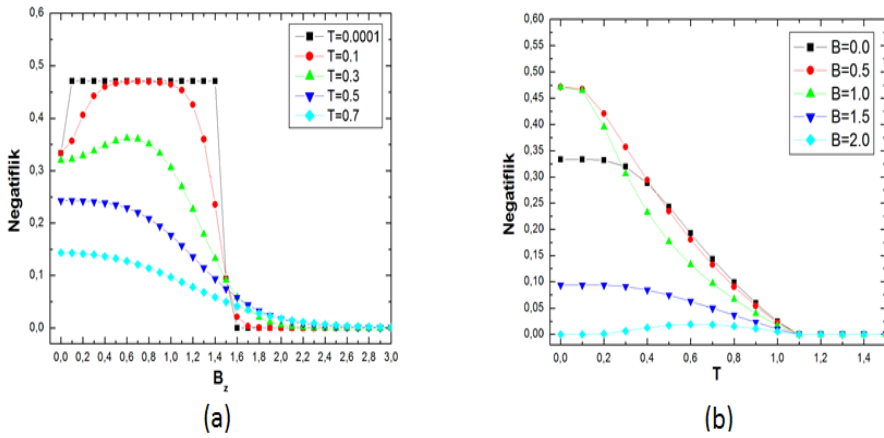
$$\begin{aligned} \alpha &= e^{-\frac{3B_z+J}{2T}}, & \beta &= -\frac{\sqrt{2}}{3} e^{-\frac{B_z+J}{2T}} (-1 + e^{\frac{3J}{2T}}), & \gamma &= \frac{1}{3} e^{-\frac{B_z+J}{2T}} (2 + e^{\frac{3J}{2T}}), \\ \delta &= -\frac{\sqrt{2}}{3} e^{\frac{B_z-J}{2T}} (-1 + e^{\frac{3J}{2T}}), & \varepsilon &= \frac{1}{3} e^{\frac{B_z-J}{2T}} (1 + e^{\frac{3J}{2T}}), & \zeta &= \frac{1}{3} e^{-\frac{B_z+J}{2T}} (1 + e^{\frac{3J}{2T}}), \\ \eta &= \frac{1}{3} e^{\frac{B_z-J}{2T}} (2 + e^{\frac{3J}{2T}}), & \theta &= e^{-\frac{-3B_z+J}{2T}}, \end{aligned}$$

olarak tanımlanmıştır.

Şekil 3.3'de negatifliğin, T sıcaklığına ve B_z manyetik alanına bağlı kontur grafiği verilmiştir. Düşük sıcaklıklarda manyetik alan şiddeti arttırıldığında negatiflik önce artış göstermekte, ardından azalmakta ve kritik bir manyetik alan değerinden sonra da yok olmaktadır. Düşük sıcaklıklarda taban durumdan gelen



Şekil 3.3. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1)$ Isısal Durum Dolaşıklığının Kontur Grafiği ($J=1.0$).



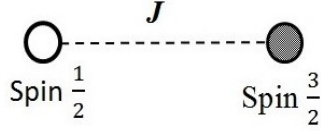
Şekil 3.4. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1)$ İçin Negatifliğin a)Manyetik Alana b)Sıcaklığa Göre Değişimi.

katkının daha fazla olması nedeniyle taban durumdaki negatifliğe benzer sonuçlar gözlenmektedir. Sıcaklık artırıldığında taban durum etkisinin azalmasıyla birlikte manyetik alandaki artışa karşılık negatiflik azalma eğilimi göstermektedir. Düşük sıcaklıklarda kritik manyetik alanın değeri $B_c = 1.6$ iken sıcaklık arttıkça bu değer

2.6'ya ulaşmaktadır. Yani yüksek sıcaklıklarda, büyük manyetik alan değerlerinde bile dolaşıklığın tamamen yok olmadığı görülmektedir.

Belli manyetik alan değerlerinde sıcaklık arttıkça negatiflik azalma eğilimi göstermekte ve kritik sıcaklık değeri $T_c = 1.1$ olmaktadır. Ayrıca şekil 3.4'den T_c 'nin manyetik alandan bağımsız olduğu da görülmektedir. Böylece düşük sıcaklıklarda ve düşük manyetik alan değerlerinde dayanıklı bir negatiflik bölgesi elde edilmektedir.

3.1.2. Spin $(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ Durumu



Şekil 3.5. Spin $(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ Modeli.

z eksenı boyunca homojen bir B_z manyetik alanının olduğu durumda sistemin Hamiltonyeni

$$H = J(\sigma_1^x S_2^x + \sigma_1^y S_2^y + \sigma_1^z S_2^z) + B_z(\sigma_1^z + S_2^z), \quad (3.16)$$

olmaktadır. Burada $\sigma^\alpha (\alpha = x, y, z)$ daha önce tanımladığımız Pauli spin operatörlerini, S^κ ise $(\kappa = x, y, z)$ spin- $\frac{3}{2}$ operatörleri göstermektedir. Bu Hamiltonyenin matris gösterilimi

$$H = \begin{pmatrix} \frac{8B_z+3J}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4B_z+J}{4} & 0 & 0 & \frac{J\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{-J}{4} & 0 & 0 & J & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{-4B_z-3J}{4} & 0 & 0 & \frac{J\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{J\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 & \frac{4B_z-3J}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & J & 0 & 0 & \frac{-J}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{J\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 & \frac{-4B_z+J}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-8B_z+3J}{4} \end{pmatrix}, \quad (3.17)$$

şeklinde olmaktadır. Bu matrisin özdeğerleri

$$E_1 = \frac{-4B_z - 5J}{4}, \quad (3.18)$$

$$E_2 = \frac{4B_z - 5J}{4}, \quad (3.19)$$

$$E_3 = \frac{-5J}{4}, \quad (3.20)$$

$$E_4 = \frac{3J}{4}, \quad (3.21)$$

$$E_5 = \frac{-8B_z + 3J}{4}, \quad (3.22)$$

$$E_6 = \frac{-4B_z + 3J}{4}, \quad (3.23)$$

$$E_7 = \frac{4B_z + 3J}{4}, \quad (3.24)$$

$$E_8 = \frac{8B_z + 3J}{4}, \quad (3.25)$$

olup bu özdeğerlere karşılık gelen özvektörler ise

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{2}[-\sqrt{3}\left|\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.26)$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{2}[-\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{3}\left|-\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle], \quad (3.27)$$

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[-\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.28)$$

$$|\psi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.29)$$

$$|\psi_5\rangle = \left|-\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle, \quad (3.30)$$

$$|\psi_6\rangle = \frac{1}{2}[\left|\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle + \sqrt{3}\left|-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.31)$$

$$|\psi_7\rangle = \frac{1}{2}[\sqrt{3}\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle], \quad (3.32)$$

$$|\psi_8\rangle = \left|\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle, \quad (3.33)$$

şeklindedir.

Taban Durum

z-yönünde homojen bir manyetik alanda bulunan $\text{spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ Heisenberg XXX sisteminde taban durum dolaşıklığının B_z manyetik alanına göre değişimi şekil 3.2’te görülmektedir.

$B_z = 0.0$ ’da taban durum $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle$ şeklinde üç katlı dejenere olup yoğunluk matrisi $\rho = \frac{1}{3}|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \frac{1}{3}|\psi_2\rangle\langle\psi_2| + \frac{1}{3}|\psi_3\rangle\langle\psi_3|$ olmaktadır. Buradan negatiflik $N = 0.25$ olarak elde edilmektedir. B_z manyetik alanının artışı ile birlikte negatiflik değerinde küçük bir artış gözlenmiştir ve bir plato bölgesine ulaşılmıştır. Manyetik alanın $0.0 < B_z < 2.0$ aralığında bu plato bölgesinde taban durum $|\psi_1\rangle$ ve yoğunluk matrisi $\rho = |\psi_1\rangle\langle\psi_1|$ olup, negatiflik $N = 0.43$ değerine sahip olmaktadır.

Manyetik alanın $B_z = 2.0$ değerinde dolaşıklıkta ani bir düşüş gözlenir ve bu durumda taban durum $|\psi_1\rangle, |\psi_5\rangle$ şeklinde iki katlı dejenere olur. Yoğunluk matrisi $\rho = \frac{1}{2}|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \frac{1}{2}|\psi_5\rangle\langle\psi_5|$ olup, negatiflik $N = 0.08$ değerinde olur. Bu geçiş değerinden hemen sonra negatifliğin sıfıra düştüğü gözlenir. Manyetik alanın $B_z > 2.0$ olduğu bu değerlerde taban durum dolaşık olmayan $|\psi_5\rangle$ durumundadır.

Benzer bir durum $B_z \rightarrow -B_z$ için de gözlenir. Sonuç olarak taban durum dolaşıklığının manyetik alan B_z ’ye göre değişimine baktığımızda B_z ’nin 0.0 ve ± 2.0 değerlerinde enerji seviyelerindeki geçişlerden dolayı dolaşıklıkta ani düşüşlere rastlanır.

Şekil 3.2’den de görüldüğü gibi manyetik alanın sıfıra yakın değerlerindeki küçük artışlarında, dolaşıklık bir plato bölgesinde sabit değerler almaktadır. Dolaşıklık $B_c = 2.0$ gibi bir kritik değerden sonra $N = 0.0$ değerine düşerek kaybolur. Elde ettiğimiz bu sonuçların literatürdeki sonuçlarla da uyumlu olduğu görülmüştür [41, 42].

Isısal Durum

Sistemin ısısal yoğunluk matrisinin birinci alt sisteme göre kısmi transpozu alınarak elde edilmiş yoğunluk matrisi

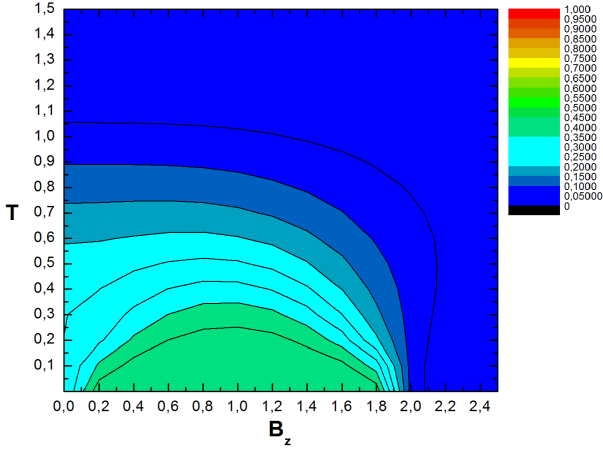
$$\rho^{T1}(T) = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & \kappa & 0 & 0 \\ 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & \delta & 0 & 0 & 0 & 0 & \nu \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \beta & 0 & 0 & 0 \\ \kappa & 0 & 0 & 0 & 0 & \zeta & 0 & 0 \\ 0 & \mu & 0 & 0 & 0 & 0 & \eta & 0 \\ 0 & 0 & \nu & 0 & 0 & 0 & 0 & \theta \end{pmatrix}, \quad (3.34)$$

şeklinde olup, burada

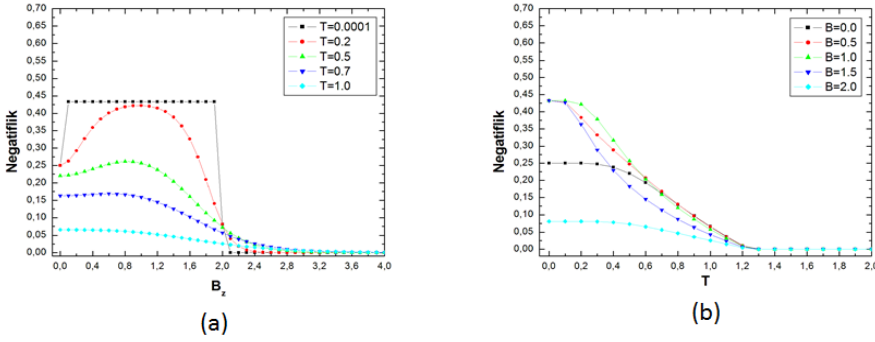
$$\begin{aligned} \alpha &= e^{-\frac{3J+8B_z}{4T}}, & \gamma &= \frac{1}{4}(3 + e^{\frac{2J}{T}})e^{-\frac{4B_z+3J}{4T}}, & \delta &= \frac{1}{2}(1 + e^{\frac{2J}{T}})e^{-\frac{3J}{4T}}, \\ \varepsilon &= \frac{1}{4}(1 + 3e^{\frac{2J}{T}})e^{\frac{4B_z-3J}{4T}}, & \beta &= \frac{1}{4}(1 + 3e^{\frac{2J}{T}})e^{-\frac{4B_z+3J}{4T}}, & \zeta &= \frac{1}{2}(1 + e^{\frac{2J}{T}})e^{-\frac{3J}{4T}}, \\ \eta &= \frac{1}{4}(3 + e^{\frac{2J}{T}})e^{\frac{4B_z-3J}{4T}}, & \theta &= e^{\frac{8B_z-3J}{4T}}, & \kappa &= -\frac{\sqrt{3}}{4}(-1 + e^{\frac{2J}{T}})e^{-\frac{4B_z+3J}{4T}}, \\ \mu &= -\frac{1}{2}(-1 + e^{\frac{2J}{T}})e^{-\frac{3J}{4T}}, & \nu &= -\frac{\sqrt{3}}{4}(-1 + e^{\frac{2J}{T}})e^{\frac{4B_z-3J}{4T}}, \end{aligned}$$

olarak tanımlanmıştır.

Şekil 3.6’da negatifliğin, T sıcaklığına ve B_z manyetik alanına bağlı kontur grafiği verilmiştir. Düşük sıcaklıklarda manyetik alan şiddeti artırıldığında, negatiflik önce artış göstermekte ardından azalmakta ve kritik bir manyetik alan değerinden sonra da yok olmaktadır. Düşük sıcaklıklarda taban durumdan gelen katkının daha fazla olması taban durumdakine benzer sonuçlar vermektedir. Ancak sıcaklık artırıldığında taban durum etkisinin azalmasıyla birlikte manyetik alandaki artışa karşılık negatiflik azalma eğilimi göstermektedir. Düşük sıcaklıklarda kritik manyetik alanın değeri $B_c = 2.1$ iken sıcaklık arttıkça bu değer 3.2’ye kadar ulaşmaktadır. Yani yüksek sıcaklıklarda ve büyük manyetik alan değerlerinde bile dolaşıklığın tamamen yok olmadığı görülmektedir.



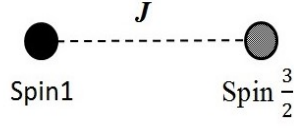
Şekil 3.6. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ Isısal Durum Dolaşıklığının Kontur Grafiği ($J=1.0$).



Şekil 3.7. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ İçin Negatifliğin a)Manyetik Alana, b)Sıcaklığa Göre Değişimi.

Belli manyetik alan değerlerinde sıcaklık arttıkça negatiflik azalma eğilimi göstermekte ve kritik sıcaklık değeri $T_c = 1.3$ olmaktadır. Ayrıca şekil 3.7'den T_c 'nin manyetik alandan bağımsız olduğu görülmektedir. Şekil 3.6'dan ise düşük sıcaklıklarda, manyetik alanın $0.5 \leq B_z \leq 1.5$ aralığında daha büyük bir negatiflik bölgesine sahip olduğu görülmektedir.

3.1.3. Spin $(1, \frac{3}{2})$ Durumu



Şekil 3.8. Spin $(1, \frac{3}{2})$ Modeli.

z ekseninde uygulanan homojen B_z manyetik alanı altında sistemin Hamiltonyeni

$$H = J(s_1^x s_2^x + s_1^y s_2^y + s_1^z s_2^z) + B_z(s_1^z + s_2^z), \quad (3.35)$$

şeklinde olup bu Hamiltonyenin özdeğerleri ise

$$E_1 = -\frac{B_z + 5J}{2}, \quad (3.36)$$

$$E_2 = \frac{B_z - 5J}{2}, \quad (3.37)$$

$$E_3 = -\frac{3B_z + 2J}{2}, \quad (3.38)$$

$$E_4 = -\frac{B_z + 4J}{2}, \quad (3.39)$$

$$E_5 = \frac{B_z - 4J}{2}, \quad (3.40)$$

$$E_6 = \frac{3B_z - 2J}{2}, \quad (3.41)$$

$$E_7 = \frac{-3B_z + 3J}{2}, \quad (3.42)$$

$$E_8 = \frac{3B_z + 3J}{2}, \quad (3.43)$$

$$E_9 = \frac{-5B_z + 3J}{2}, \quad (3.44)$$

$$E_{10} = \frac{-B_z + 3J}{2}, \quad (3.45)$$

$$E_{11} = \frac{B_z + 3J}{2}, \quad (3.46)$$

$$E_{12} = \frac{5B_z + 3J}{2}, \quad (3.47)$$

şeklinde dir. Bu özdeğerlere karşılık gelen özvektörlerimiz ise

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}[\sqrt{3}\left|1, -\frac{3}{2}\right\rangle - \sqrt{2}\left|0, -\frac{1}{2}\right\rangle + \left|-1, \frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.48)$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}[\left|1, -\frac{1}{2}\right\rangle - \sqrt{2}\left|0, \frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{3}\left|-1, \frac{3}{2}\right\rangle], \quad (3.49)$$

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}[-\sqrt{3}\left|0, -\frac{3}{2}\right\rangle + \sqrt{2}\left|-1, -\frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.50)$$

$$|\psi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{15}}[-\sqrt{6}\left|1, -\frac{3}{2}\right\rangle - \left|0, -\frac{1}{2}\right\rangle + 2\sqrt{2}\left|-1, \frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.51)$$

$$|\psi_5\rangle = \frac{1}{\sqrt{15}}[-2\sqrt{2}\left|1, -\frac{1}{2}\right\rangle + \left|0, \frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{6}\left|-1, \frac{3}{2}\right\rangle], \quad (3.52)$$

$$|\psi_6\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}[-\sqrt{2}\left|1, \frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{3}\left|0, \frac{3}{2}\right\rangle], \quad (3.53)$$

$$|\psi_7\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}[\sqrt{2}\left|0, -\frac{3}{2}\right\rangle + \sqrt{3}\left|-1, -\frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.54)$$

$$|\psi_8\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}[\sqrt{3}\left|1, \frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{2}\left|0, \frac{3}{2}\right\rangle], \quad (3.55)$$

$$|\psi_9\rangle = \left|-1, -\frac{3}{2}\right\rangle, \quad (3.56)$$

$$|\psi_{10}\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}}[\sqrt{6}\left|0, -\frac{1}{2}\right\rangle + \left|1, -\frac{3}{2}\right\rangle + \sqrt{3}\left|-1, \frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.57)$$

$$|\psi_{11}\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}}[\sqrt{3}\left|1, -\frac{1}{2}\right\rangle + \left|-1, \frac{3}{2}\right\rangle + \sqrt{6}\left|0, \frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.58)$$

$$|\psi_{12}\rangle = \left|1, \frac{3}{2}\right\rangle, \quad (3.59)$$

şeklinde olmaktadır.

Taban Durum

z yönünde homojen bir manyetik alanda bulunan $\text{spin}(1, \frac{3}{2})$ Heisenberg XXX sisteminde taban durum dolaşıklığının B_z manyetik alanına göre değişimi de şekil 3.2’de görülmektedir.

$B_z = 0.0$ ’da taban durum $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ şeklinde iki katlı dejenere olup yoğunluk matrisi $\rho = \frac{1}{2}|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \frac{1}{2}|\psi_2\rangle\langle\psi_2|$ olup, negatiflik $N = 0.67$ değerindedir. B_z manyetik alanının artışı ile birlikte negatiflik değerinde bir sıçrama gözlenmiş

ve bir plato bölgesine ulaşılmıştır. Manyetik alanın $0.0 < B_z < 1.5$ aralığında olduğu bu plato bölgesinde taban durum $|\psi_1\rangle$ ve bu durum için yoğunluk matrisi $\rho = |\psi_1\rangle\langle\psi_1|$ olmaktadır. Yoğunluk matrisinden hesaplanan negatiflik $N = 0.93$ değerine sahiptir.

$B_z = 1.5$ için dolaşıklıkta bir düşüş gözlenir ve bu durumda taban durum $|\psi_1\rangle$ ve $|\psi_3\rangle$ şeklinde iki katlı dejenere olup yoğunluk matrisi $\rho = \frac{1}{2}|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \frac{1}{2}|\psi_3\rangle\langle\psi_3|$ olmaktadır. Buradan negatiflik $N = 0.39$ değerinde olmaktadır. Sonrasında negatiflik değerinde tekrar bir sıçrama gözlenir. Manyetik alanın $1.5 < B_z < 2.5$ olduğu değerlerde taban durum $|\psi_3\rangle$ için yoğunluk matrisi $\rho = |\psi_3\rangle\langle\psi_3|$ şeklinde olup bu aralıkta negatifliğin $N = 0.49$ değerinde bulunduğu bir plato bölgesine rastlanır. Manyetik alanın $B_z = 2.5$ değerinde taban durum, $|\psi_3\rangle$ ve $|\psi_9\rangle$ şeklinde iki katlı dejenere olup yoğunluk matrisi $\rho = \frac{1}{2}|\psi_3\rangle\langle\psi_3| + \frac{1}{2}|\psi_9\rangle\langle\psi_9|$ olmaktadır. Buradan $B_z = 2.5$ için $N = 0.1$ olmakta ve negatiflik değerinde ani bir düşüş olduğu gözlenmektedir. Sonrasında manyetik alanın $B_z > 2.5$ değerleri için taban durum dolaşık olmayan $|\psi_9\rangle$ değerindedir.

Benzer bir durum $B_z \rightarrow -B_z$ için de gözlenir. Sonuç olarak taban durum dolaşıklığının manyetik alana göre değişimine baktığımızda B_z manyetik alanın $0.0; \pm 1.5; \pm 2.5$ değerlerinde enerji seviyelerindeki geçişlerden dolayı dolaşıklıkta ani düşüşlere rastlanır.

Şekil 3.2'den de görüldüğü gibi manyetik alan arttıkça, plato bölgelerinin gösterdiği basamaklı yapıyla negatiflik azalmaktadır. Literatürden sonuçlara baktığımızda $\text{spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ değerleri için elde edilen maksimum negatiflik değeri $N = 0.5$ [41,42] ve $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1)$ değerleri için elde edilen maksimum negatiflik değeri $N = 0.47$ iken [40], bizim $\text{spin}(1, \frac{3}{2})$ çalışmamızdan elde ettiğimiz maksimum negatiflik değeri $N = 0.93$ olmaktadır. Bunun yanında literatürdeki bu çalışmalarda dolaşıklık, manyetik alanın belli bir kritik değerinden sonra ani bir düşüşle kaybolurken, bizim çalışmamızda önce $B_{c1} = 1.5$ kritik değerinde $N = 0.49$ gibi

bir negatiflik değerine düşmekte, $B_{c2} = 2.5$ gibi ikinci bir kritik değerden sonra da dolaşıklık kaybolmaktadır. Elde ettiğimiz bu verilere göre $\text{spin}(1, \frac{3}{2})$ sisteminde taban durum için negatifliğin bu basamaklı davranışı dolaşıklığın manyetik alana karşı daha dirençli olmasını sağlamaktadır.

Isısal Durum

Modelimizin ısısal yoğunluk matrisinin birinci alt sisteme göre kısmi transpozu alınarak elde edilmiş yoğunluk matrisi

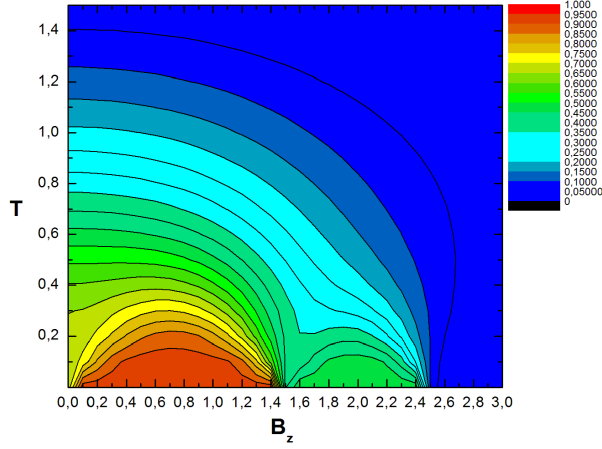
$$\rho^{T1}(T) = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & \sigma & 0 & 0 & 0 & 0 & \tau & 0 \\ 0 & \beta & 0 & 0 & 0 & 0 & \varsigma & 0 & 0 & 0 & 0 & \varphi \\ 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & \phi & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \delta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & \chi & 0 & 0 \\ \sigma & 0 & 0 & 0 & 0 & \zeta & 0 & 0 & 0 & 0 & \omega & 0 \\ 0 & \varsigma & 0 & 0 & 0 & 0 & \eta & 0 & 0 & 0 & 0 & \Lambda \\ 0 & 0 & \phi & 0 & 0 & 0 & 0 & \theta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \kappa & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \chi & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ \tau & 0 & 0 & 0 & 0 & \omega & 0 & 0 & 0 & 0 & \nu & 0 \\ 0 & \varphi & 0 & 0 & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & \xi \end{pmatrix}, \quad (3.60)$$

şeklinde olup burada

$$\begin{aligned} \alpha &= e^{-\frac{5B_z+3J}{2T}}, \quad \beta = \frac{1}{5}(3+2e^{\frac{5J}{2T}})e^{-\frac{3B_z+J}{2T}}, \\ \gamma &= \frac{1}{30}(9+16e^{\frac{7J}{2T}}+5e^{\frac{4J}{T}})e^{-\frac{B_z+3J}{2T}}, \quad \delta = \frac{1}{10}(1+4e^{\frac{7J}{2T}}+5e^{\frac{4J}{T}})e^{-\frac{B_z-3J}{2T}}, \\ \varepsilon &= \frac{1}{5}(2+3e^{\frac{5J}{2T}})e^{-\frac{3(B_z+J)}{2T}}, \quad \zeta = \frac{1}{15}(9+e^{\frac{7J}{2T}}+5e^{\frac{4J}{T}})e^{-\frac{B_z+3J}{2T}}, \\ \eta &= \frac{1}{15}(9+e^{\frac{7J}{2T}}+5e^{\frac{4J}{T}})e^{-\frac{B_z-3J}{2T}}, \quad \theta = \frac{1}{5}(2+3e^{\frac{5J}{2T}})e^{-\frac{3(B_z-J)}{2T}}, \\ \kappa &= \frac{1}{10}(1+4e^{\frac{7J}{2T}}+5e^{\frac{4J}{T}})e^{-\frac{B_z+3J}{2T}}, \quad \mu = \frac{1}{30}(9+16e^{\frac{7J}{2T}}+5e^{\frac{4J}{T}})e^{-\frac{B_z-3J}{2T}}, \\ \nu &= \frac{1}{5}(3+2e^{\frac{5J}{2T}})e^{-\frac{3(B_z-J)}{2T}}, \quad \xi = e^{\frac{5B_z-3J}{2T}}, \\ \sigma &= -\frac{\sqrt{6}}{5}(-1+e^{\frac{5J}{2T}})e^{-\frac{3(B_z+J)}{2T}}, \quad \varsigma = \frac{1}{15\sqrt{2}}(9-4e^{\frac{7J}{2T}}-5e^{\frac{4J}{T}})e^{-\frac{B_z+3J}{2T}}, \end{aligned}$$

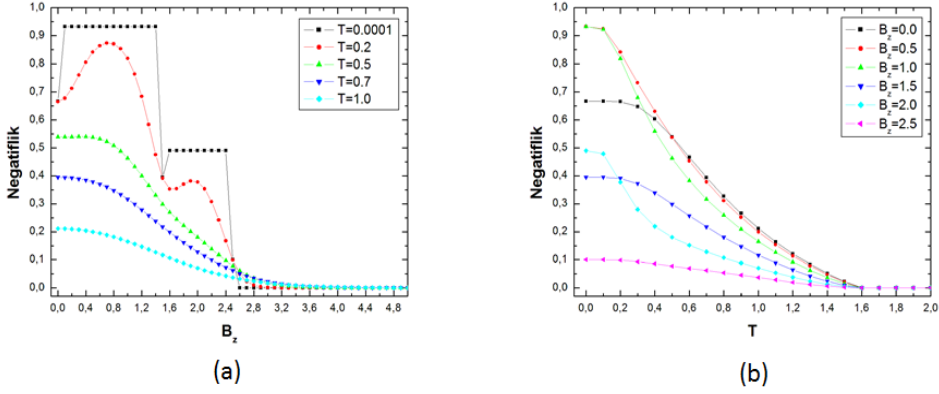
$$\begin{aligned}\tau &= \frac{1}{10\sqrt{3}}(3 - 8e^{\frac{7J}{2T}} + 5e^{\frac{4J}{T}})e^{-\frac{B_z+3J}{2T}}, & \phi &= \frac{1}{5\sqrt{6}}(3 + 2e^{\frac{7J}{2T}} - 5e^{\frac{4J}{T}})e^{-\frac{B_z+3J}{2T}}, \\ \varphi &= \frac{1}{10\sqrt{3}}(3 - 8e^{\frac{7J}{2T}} + 5e^{\frac{4J}{T}})e^{-\frac{B_z-3J}{2T}}, & \chi &= \frac{1}{5\sqrt{6}}(3 + 2e^{\frac{7J}{2T}} - 5e^{\frac{4J}{T}})e^{-\frac{B_z-3J}{2T}}, \\ \omega &= \frac{1}{15\sqrt{2}}(9 - 4e^{\frac{7J}{2T}} - 5e^{\frac{4J}{T}})e^{-\frac{B_z-3J}{2T}}, & \Lambda &= -\frac{\sqrt{6}}{5}(-1 + e^{\frac{5J}{2T}})e^{-\frac{3(B_z-J)}{2T}},\end{aligned}$$

olarak tanımlanır.



Şekil 3.9. Spin($1, \frac{3}{2}$) Isısal Durum Dolaşıklığının Kontur Grafiği ($J=1.0$).

Şekil 3.9’da negatifliğin, T sıcaklığına ve B_z manyetik alanına bağlı kontur grafiği verilmiştir. Düşük sıcaklıklarda taban durumdan gelen katkıların etkisiyle birlikte negatiflik, manyetik alanın artışıyla önce artmakta ardından azalmakta sonrasında yine bir miktar artış gösterip yok olmaktadır. Bu davranışa taban durum negatifliğinde gözlenen iki plato bölgesi neden olmaktadır. Sıcaklık arttıkça plato bölgesi bozularak yerini dalgalı bir yapıya bırakmaktadır. Yüksek sıcaklıklarda negatiflik manyetik alanın artışıyla doğrudan azalma eğilimi göstermektedir. Özellikle düşük sıcaklık ve düşük manyetik alan değerlerinde maksimum dolaşıklığa yakın bir negatiflik bölgesinin gözlenmesi bu modelin en dikkat çekici yanıdır. Düşük sıcaklıklarda $B_{c1} = 1.5$ ’da bir dip ve $B_{c2} = 2.6$ değerinde bir



Şekil 3.10. Spin($1, \frac{3}{2}$) İçin Negatifliğin a)Manyetik Alana, b)Sıcaklığa Göre Değişimi.

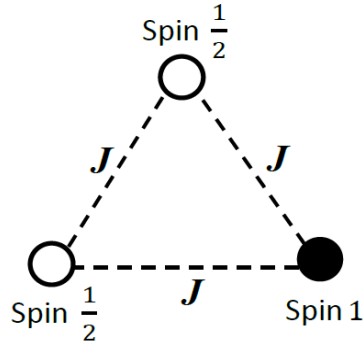
kritik manyetik alan değeri görülmektedir. Sıcaklık arttıkça taban durumdan gelen katkının azalmasıyla plato yapıları bozulmakta ve sistem tek bir kritik manyetik alan değerine sahip olmaktadır. Bu kritik manyetik alan değeri sıcaklık arttıkça $B_c = 3.6$ değerine kadar ulaşabilmektedir.

Düşük sıcaklıklarda en büyük negatifliğin görüldüğü manyetik alan değerleri $0.5 \leq B_z \leq 1.0$ aralığında olup bu değerlerde maksimuma yakın dolaşıklık elde edilmektedir. Belli manyetik alan değerlerinde ise sıcaklık arttıkça negatiflik azalma eğilimi göstermekte olup şekil 3.10'dan kritik sıcaklık değerinin $T_c = 1.6$ olduğu görülür. Ayrıca T_c 'nin manyetik alandan bağımsız olduğu da görülmektedir.

3.2. Üç Spinli Karma Tip Spin Sistemleri

Bu kısımda üç tane spinden meydana gelen bir karma spin sistemini z eksenli boyunca homojen bir B_z manyetik alanı altında inceledik.

3.2.1. Spin($\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}$) Durumu



Şekil 3.11. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$ Modeli.

Kullandığımız spin sistemine ait model şekil 3.11’de görülmektedir. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$ durumuna ait Hamiltonyenimiz

$$H = J[(\sigma_1^x s_2^x + \sigma_1^y s_2^y + \sigma_1^z s_2^z) + (s_2^x \sigma_3^x + s_2^y \sigma_3^y + s_2^z \sigma_3^z) + (\sigma_3^x \sigma_1^x + \sigma_3^y \sigma_1^y + \sigma_3^z \sigma_1^z)] \\ + B_z(\sigma_1^z + s_2^z + \sigma_3^z), \quad (3.61)$$

şeklinde olmaktadır. Hamiltonyenimizin özdeğerleri

$$E_1 = E_2 = \frac{7J}{4} - 2B_z, \quad (3.62)$$

$$E_3 = E_4 = \frac{7J}{4} + 2B_z, \quad (3.63)$$

$$E_5 = E_6 = \frac{1}{4}(J - 2B_z - 2\sqrt{9J^2 - 2B_z J + B_z^2}), \quad (3.64)$$

$$E_7 = E_8 = \frac{1}{4}(J - 2B_z + 2\sqrt{9J^2 - 2B_z J + B_z^2}), \quad (3.65)$$

$$E_9 = E_{10} = \frac{1}{4}(J + 2B_z - 2\sqrt{9J^2 + 2B_z J + B_z^2}), \quad (3.66)$$

$$E_{11} = E_{12} = \frac{1}{4}(J + 2B_z + 2\sqrt{9J^2 + 2B_z J + B_z^2}), \quad (3.67)$$

olmaktadır. Bu özdeğerlere karşılık gelen özvektörler ise

$$|\psi_1\rangle = \left| -\frac{1}{2}, -1, -\frac{1}{2} \right\rangle, \quad (3.68)$$

$$|\psi_2\rangle = \left| -\frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2} \right\rangle, \quad (3.69)$$

$$|\psi_3\rangle = \left| \frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2} \right\rangle, \quad (3.70)$$

$$|\psi_4\rangle = \left| \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2} \right\rangle, \quad (3.71)$$

$$|\psi_5\rangle = \frac{1}{\sqrt{k^2+1}} \left[k \left| \frac{1}{2}, -1, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2} \right\rangle \right], \quad (3.72)$$

$$|\psi_6\rangle = \frac{1}{\sqrt{k^2+1}} \left[k \left| \frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} \right\rangle \right], \quad (3.73)$$

$$|\psi_7\rangle = \frac{1}{\sqrt{m^2+1}} \left[m \left| \frac{1}{2}, -1, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2} \right\rangle \right], \quad (3.74)$$

$$|\psi_8\rangle = \frac{1}{\sqrt{m^2+1}} \left[m \left| \frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} \right\rangle \right], \quad (3.75)$$

$$|\psi_9\rangle = \frac{1}{\sqrt{a^2+1}} \left[a \left| \frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2} \right\rangle \right], \quad (3.76)$$

$$|\psi_{10}\rangle = \frac{1}{\sqrt{a^2+1}} \left[a \left| \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2} \right\rangle \right], \quad (3.77)$$

$$|\psi_{11}\rangle = \frac{1}{\sqrt{c^2+1}} \left[c \left| \frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2} \right\rangle \right], \quad (3.78)$$

$$|\psi_{12}\rangle = \frac{1}{\sqrt{c^2+1}} \left[c \left| \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2} \right\rangle \right], \quad (3.79)$$

şeklinde olmaktadır. Burada k,m,a,c değerleri

$$k = \frac{-J + B_z - \sqrt{9J^2 - 2B_z J + B_z^2}}{2\sqrt{2}J}, \quad m = \frac{-J + B_z + \sqrt{9J^2 - 2B_z J + B_z^2}}{2\sqrt{2}J},$$

$$a = \frac{J + B_z - \sqrt{9J^2 + 2B_z J + B_z^2}}{2\sqrt{2}J}, \quad c = \frac{J + B_z + \sqrt{9J^2 + 2B_z J + B_z^2}}{2\sqrt{2}J}, \quad (3.80)$$

ile ifade edilmektedir.

Taban Durum

Burada manyetik alanın $0.0 \leq B_z \leq 5.0$ aralığında aldığı değerlere göre taban duruma karşılık gelen özvektör yada özvektörler tespit edilmekte, ardından $(\rho_{12})^{T_1}$

yoğunluk matrisinden negatiflik hesaplanmaktadır. Yani ilk olarak birinci ve ikinci spinler için inceleme yapılmaktadır.

$B_z = 0.0$ 'da taban durum $|\psi_5\rangle, |\psi_6\rangle, |\psi_9\rangle, |\psi_{10}\rangle$ şeklinde dört katlı dejenere olup yoğunluk matrisi $\rho_{12} = \frac{1}{4}|\psi_5\rangle\langle\psi_5| + \frac{1}{4}|\psi_6\rangle\langle\psi_6| + \frac{1}{4}|\psi_9\rangle\langle\psi_9| + \frac{1}{4}|\psi_{10}\rangle\langle\psi_{10}|$ şeklinde olmaktadır. Buradan $B_z = 0.0$ için negatiflik $N_{12} = 0.33$ olarak bulunur.

$0.0 < B_z < 2.0$ arasında ise taban durum özvektörleri $|\psi_5\rangle$ ve $|\psi_6\rangle$ olmaktadır. İki katlı dejenere olan bu taban durumun yoğunluk matrisi $\rho_{12} = \frac{1}{2}|\psi_5\rangle\langle\psi_5| + \frac{1}{2}|\psi_6\rangle\langle\psi_6|$ şeklinde olup negatiflik k 'ya bağlı bir ifadedir. k değeri manyetik alana bağlı olduğundan $0.0 < B_z < 2.0$ aralığında manyetik alan artışı ile negatiflik değerleri çizelge 3.1'deki gibi değişim göstermektedir.

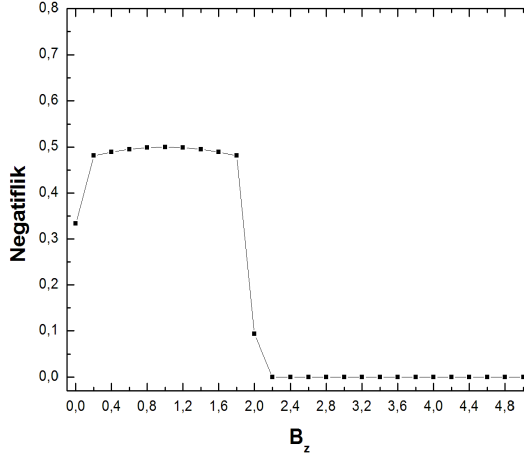
Çizelge 3.1. Spin $(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$ Sisteminin Spin $(\frac{1}{2}, 1)$ Alt Sisteminde, $0.0 < B_z < 2.0$ Aralığındaki Taban Durumları İçin N_{12}

B_z	N_{12}	B_z	N_{12}	B_z	N_{12}
0.2	0.48113	0.8	0.49876	1.4	0.49507
0.4	0.48912	1.0	0.5	1.6	0.48912
0.6	0.49507	1.2	0.49876	1.8	0.48113

Böylece $0.0 < B_z < 2.0$ için negatiflik, tepe noktası $N_{12} = 0.5$ olan eğri şeklinde bir yapı göstermektedir.

$B_z = 2.0$ için taban durum özvektörleri $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_5\rangle, |\psi_6\rangle$ olup dört katlı dejenere'dir. Yoğunluk matrisi $\rho_{12} = \frac{1}{4}|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \frac{1}{4}|\psi_2\rangle\langle\psi_2| + \frac{1}{4}|\psi_5\rangle\langle\psi_5| + \frac{1}{4}|\psi_6\rangle\langle\psi_6|$ şeklinde olup negatiflik $N_{12} = 0.09$ değerine ani bir düşüş göstermektedir. Bu geçiş değerinden hemen sonra ise dolaşıklığın yok olduğu gözlenir.

Manyetik alanın $B_z > 2.0$ olduğu durumlar için ise taban durum $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ şeklinde iki katlı dejenere olup yoğunluk matrisi $\rho_{12} = \frac{1}{2}|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \frac{1}{2}|\psi_2\rangle\langle\psi_2|$ olmaktadır. Bu durumda negatiflik $N_{12} = 0.0$ olarak bulunmaktadır.



Şekil 3.12. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$ Sisteminde $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1)$ Alt Sisteminin Taban Durum Dolaşıklığı.

Bu hesaplamalara göre homojen bir manyetik alanda bulunan $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$ sisteminde $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1)$ alt sisteminde taban durum dolaşıklığının B_z manyetik alanına göre değişimi Şekil 3.12’de görülmektedir. Benzer bir durum $B_z \rightarrow -B_z$ için de gözlenir. Taban durum dolaşıklığının manyetik alana göre değişimine baktığımızda $B_z = 0.0, \pm 2.0$ değerlerinde enerji seviyelerindeki geçişlerden dolayı dolaşıklıkta ani düşüşlere rastlanır. Şekil 3.12’den görüldüğü gibi manyetik alanın sıfıra yakın değerlerindeki küçük artışlarda, negatiflik çizelge 3.1’deki değerleri almakta ve $B_c = 2.0$ gibi bir kritik değerden sonra ise yok olmaktadır. Bu sonuç $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1)$ arasındaki taban durum dolaşıklığının B_z manyetik alanına göre değişimine çok benzemektedir. Ancak $0.0 < B_z < 2.0$ aralığındaki negatiflik değerlerinde küçük değişimlerin gözlenmesinde ve dolaşıklığın manyetik alana karşı biraz daha dayanıklı olmasında üçüncü spinin etkisi olduğu düşünülmektedir.

Ayrıca 1. ve 3. spinler arasındaki taban durum için ele alınan $(\rho_{13})^{T_1}$ ’den de negatiflik hesaplanmış ancak bu taban duruma ait dolaşıklığın olmadığı ($N_{13} = 0.0$) görülmüştür.

Isısal Durum

Sistemin ısısal durum yoğunluk matrisinin birinci ve ikinci spinlere indirgenmiş $\rho_{12}(T)$ indirgenmiş yoğunluk matrisinin birinci alt sisteme göre kısmi transpozu alınarak elde edilen yoğunluk matrisi

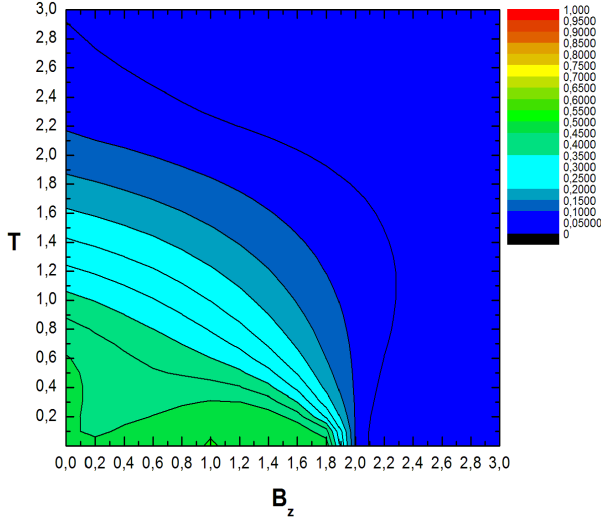
$$\rho_{12}^{T1}(T) = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & 0 & \delta & 0 \\ 0 & \tau & 0 & 0 & 0 & \phi \\ 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \chi & 0 & 0 \\ \gamma & 0 & 0 & 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & \kappa & 0 & 0 & 0 & \omega \end{pmatrix}, \quad (3.81)$$

şeklinde olup burada

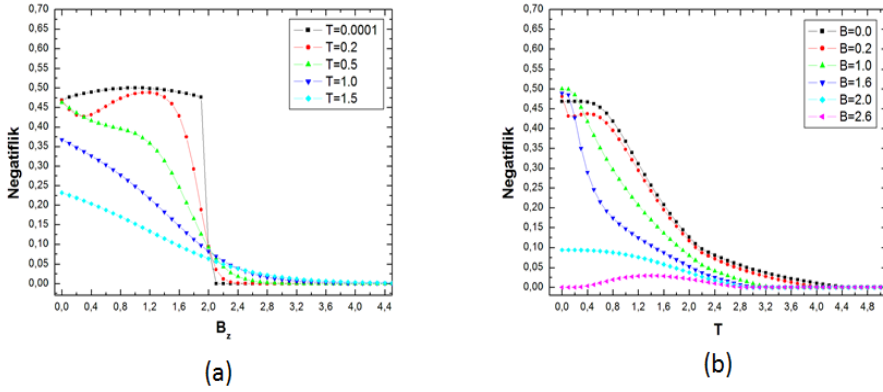
$$\begin{aligned} \alpha &= e^{-\frac{E_3}{T}} + e^{-\frac{E_4}{T}}, \\ \omega &= e^{-\frac{E_1}{T}} + e^{-\frac{E_2}{T}}, \\ \gamma &= \frac{ae^{-\frac{E_{10}+E_9}{T}}(e^{\frac{E_9}{T}} + e^{\frac{E_{10}}{T}})}{1+a^2} + \frac{ce^{-\frac{E_{11}+E_{12}}{T}}(e^{\frac{E_{11}}{T}} + e^{\frac{E_{12}}{T}})}{1+c^2}, \\ \tau &= e^{-\frac{E_9+E_{10}+E_{11}+E_{12}}{T}} \left(\frac{a^2 e^{\frac{E_{11}+E_{12}}{T}}(e^{\frac{E_9}{T}} + e^{\frac{E_{10}}{T}})}{1+a^2} + \frac{c^2 e^{\frac{E_9+E_{10}}{T}}(e^{\frac{E_{11}}{T}} + e^{\frac{E_{12}}{T}})}{1+c^2} \right), \\ \kappa &= \frac{ke^{-\frac{E_5+E_6}{T}}(e^{\frac{E_5}{T}} + e^{\frac{E_6}{T}})}{1+k^2} + \frac{me^{-\frac{E_7+E_8}{T}}(e^{\frac{E_7}{T}} + e^{\frac{E_8}{T}})}{1+m^2}, \\ \Lambda &= e^{-\frac{E_5+E_6+E_7+E_8}{T}} \left(\frac{k^2 e^{\frac{E_7+E_8}{T}}(e^{\frac{E_5}{T}} + e^{\frac{E_6}{T}})}{1+k^2} + \frac{m^2 e^{\frac{E_5+E_6}{T}}(e^{\frac{E_7}{T}} + e^{\frac{E_8}{T}})}{1+m^2} \right), \\ \phi &= e^{-\frac{E_5+E_6+E_7+E_8}{T}} \left(\frac{ke^{\frac{E_7+E_8}{T}}(e^{\frac{E_5}{T}} + e^{\frac{E_6}{T}})}{1+k^2} + \frac{me^{\frac{E_5+E_6}{T}}(e^{\frac{E_7}{T}} + e^{\frac{E_8}{T}})}{1+m^2} \right), \\ \delta &= e^{-\frac{E_9+E_{10}+E_{11}+E_{12}}{T}} \left(\frac{ae^{\frac{E_{11}+E_{12}}{T}}(e^{\frac{E_9}{T}} + e^{\frac{E_{10}}{T}})}{1+a^2} + \frac{ce^{\frac{E_9+E_{10}}{T}}(e^{\frac{E_{11}}{T}} + e^{\frac{E_{12}}{T}})}{1+c^2} \right), \\ \varepsilon &= \frac{e^{-\frac{E_5+E_6}{T}}(e^{\frac{E_5}{T}} + e^{\frac{E_6}{T}})}{1+k^2} + \frac{e^{-\frac{E_7+E_8}{T}}(e^{\frac{E_7}{T}} + e^{\frac{E_8}{T}})}{1+m^2}, \\ \chi &= \frac{e^{-\frac{E_9+E_{10}}{T}}(e^{\frac{E_9}{T}} + e^{\frac{E_{10}}{T}})}{1+a^2} + \frac{e^{-\frac{E_{11}+E_{12}}{T}}(e^{\frac{E_{11}}{T}} + e^{\frac{E_{12}}{T}})}{1+c^2}, \end{aligned}$$

şeklinde ifade edilmektedir.

Şekil 3.13’de spin $(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$ sistemindeki spin $(\frac{1}{2}, 1)$ alt sistemine ait negatifliğin, T sıcaklığa ve B_z manyetik alanına bağlı kontur grafiği verilmiştir. Düşük sıcaklıklarda manyetik alan arttırıldığında negatiflik önce küçük bir miktar azalma göstermekte ardından yine artmakta ve belli bir kritik manyetik alan değerinden sonra yok olmaktadır. Benzer bir davranış küçük manyetik alan değerlerinde de



Şekil 3.13. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$ Sisteminde $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1)$ Alt Sisteminin Isısal Durum Dolaşıklığının Kontur Grafiği ($J=1.0$).



Şekil 3.14. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$ Sisteminde $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1)$ Alt Sisteminin Isısal Dolaşıklığının a)Manyetik Alana b)Sıcaklığa Göre Değişimi.

gözlenmektedir. Sıcaklık arttırıldığında manyetik alanın artışıyla birlikte negatiflik azalma eğilimi göstermektedir. Düşük sıcaklıklarda $B_c = 2.1$ iken sıcaklık artışıyla birlikte kritik manyetik alan değeri $B_c = 4.0$ olmaktadır.

Belli manyetik alan değerlerinde sıcaklık arttıkça negatiflik azalma eğilimi göstermekte olup şekil 3.14'den de görüldüğü gibi $B_z = 0.0$ için kritik sıcaklık değeri $T_c = 4.4$, $B_z = 0.2$ için kritik sıcaklık değeri $T_c = 4.0$ olmakta ve B_z 'nin artan değerleri için $T_c = 3.0$ değerine kadar gerilemekte olduğu gözlenmektedir. Burada 1. ve 2. spinlerin dikkate alındığı alt sistemde, manyetik alanın artışının, kritik sıcaklık değerinde 4.4'den 2.8'e kadar azaltıcı bir etki oluşturduğu görülmektedir.

Sistemin birinci ve üçüncü spinleri için inceleme yapacak olursak bu durumda alt sisteme ait ısısal yoğunluk matrisimiz

$$\rho_{13}^{T1}(T) = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \zeta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \tau \end{pmatrix}, \quad (3.82)$$

şeklinde olup burada

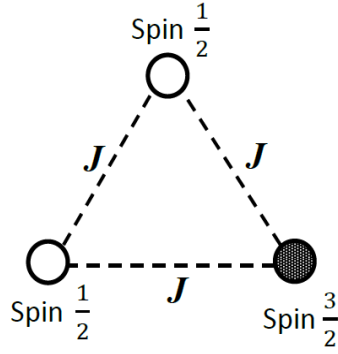
$$\begin{aligned} \alpha &= e^{-\frac{E_4}{T}} + \left(\frac{a^2}{1+a^2}\right)e^{-\frac{E_{10}}{T}} + \left(\frac{c^2}{1+c^2}\right)e^{-\frac{E_{12}}{T}} + \left(\frac{k^2}{1+k^2}\right)e^{-\frac{E_6}{T}} + \left(\frac{m^2}{1+m^2}\right)e^{-\frac{E_8}{T}}, \\ \zeta &= e^{-\frac{E_3}{T}} + \left(\frac{a^2}{1+a^2}\right)e^{-\frac{E_9}{T}} + \left(\frac{c^2}{1+c^2}\right)e^{-\frac{E_{11}}{T}} + \left(\frac{k^2}{1+k^2}\right)e^{-\frac{E_5}{T}} + \left(\frac{m^2}{1+m^2}\right)e^{-\frac{E_7}{T}}, \\ \gamma &= e^{-\frac{E_2}{T}} + \left(\frac{1}{1+a^2}\right)e^{-\frac{E_{10}}{T}} + \left(\frac{1}{1+c^2}\right)e^{-\frac{E_{12}}{T}} + \left(\frac{1}{1+k^2}\right)e^{-\frac{E_6}{T}} + \left(\frac{1}{1+m^2}\right)e^{-\frac{E_8}{T}}, \\ \tau &= e^{-\frac{E_1}{T}} + \left(\frac{1}{1+a^2}\right)e^{-\frac{E_9}{T}} + \left(\frac{1}{1+c^2}\right)e^{-\frac{E_{11}}{T}} + \left(\frac{1}{1+k^2}\right)e^{-\frac{E_5}{T}} + \left(\frac{1}{1+m^2}\right)e^{-\frac{E_7}{T}}, \end{aligned}$$

ile ifade edilmektedir. Buradan hesaplanan negatiflik sıfır olarak bulunur. Elde ettiğimiz bu sonuca göre 1. ve 3. spinler arasında dolaşıklık yoktur.

3.2.2. Spin $(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ Durumu

Şekil 3.15'de görülen spin $(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ durumuna ait Hamiltonyenimiz aşağıdaki gibi olmaktadır

$$\begin{aligned} H &= J[(\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y + \sigma_1^z \sigma_2^z) + (S_2^x \sigma_3^x + S_2^y \sigma_3^y + S_2^z \sigma_3^z) + (\sigma_3^x \sigma_1^x + \sigma_3^y \sigma_1^y + \sigma_3^z \sigma_1^z)] \\ &+ B_z(\sigma_1^z + S_2^z + \sigma_3^z). \end{aligned} \quad (3.83)$$



Şekil 3.15. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ Modeli.

Hamiltonyenimizin özdeğerleri

$$E_{1,2} = \mp \frac{1}{4}(2B_z \pm 9J), \quad (3.84)$$

$$E_{3,4} = -\frac{1}{4}(2B_z + 3J), \quad (3.85)$$

$$E_{5,6} = \frac{1}{4}(2B_z - 3J), \quad (3.86)$$

$$E_{7,8} = \frac{3}{4}(2B_z - J), \quad (3.87)$$

$$E_{9,10} = -\frac{3}{4}(2B_z + J), \quad (3.88)$$

$$E_{11,16} = \frac{1}{4}(\mp 10B_z + 7J), \quad (3.89)$$

$$E_{12,15} = \frac{1}{4}(\mp 6B_z + 7J), \quad (3.90)$$

$$E_{13,14} = \frac{1}{4}(\mp 2B_z + 7J), \quad (3.91)$$

şeklinde olmaktadır. Bu özdeğerlere karşılık gelen özvektörler ise

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left[\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{3} \left| \frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle - \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right. \\ &\quad \left. + \left| -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right], \end{aligned} \quad (3.92)$$

$$\begin{aligned} |\psi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left[\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{3} \left| -\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right. \\ &\quad \left. + \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right], \end{aligned} \quad (3.93)$$

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[-\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.94)$$

$$|\psi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[-\frac{1}{2}\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2}\left|\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.95)$$

$$|\psi_5\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[-\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.96)$$

$$|\psi_6\rangle = \sqrt{\frac{3}{8}}[\frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle - \frac{2}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.97)$$

$$|\psi_7\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[-\left|\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.98)$$

$$|\psi_8\rangle = \frac{1}{2}[-\sqrt{3}\left|\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.99)$$

$$|\psi_9\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[-\left|\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.100)$$

$$|\psi_{10}\rangle = \frac{1}{2}[-\sqrt{3}\left|\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.101)$$

$$|\psi_{11}\rangle = \left|-\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle, \quad (3.102)$$

$$|\psi_{12}\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}[\left|\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{3}\left|-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.103)$$

$$|\psi_{13}\rangle = \sqrt{\frac{3}{10}}[\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.104)$$

$$|\psi_{14}\rangle = \sqrt{\frac{3}{10}}[\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}\left|-\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle + \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.105)$$

$$|\psi_{15}\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}[\left|\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{3}\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.106)$$

$$|\psi_{16}\rangle = \left|\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle, \quad (3.107)$$

şeklinde olmaktadır.

Taban Durum

İlk olarak 1. ve 2. spinler arasındaki spin $(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ alt durumu için yoğunluk matrisi ρ_{12} 'den negatiflik hesaplanmıştır.

$B_z = 0.0$ için taban durum özvektörleri $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ olup iki katlı dejeneredir. Yoğunluk matrisi $\rho_{12} = \frac{1}{2}|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \frac{1}{2}|\psi_2\rangle\langle\psi_2|$ şeklinde olup buradan negatiflik $N_{12} = 0.28$ olarak bulunur.

$0.0 < B_z < 1.5$ aralığında manyetik alanın artışı ile dolaşıklık küçük bir artış göstererek bir plato bölgesine ulaşmıştır. Taban durum $|\psi_1\rangle$ olup yoğunluk matrisi $\rho_{12} = |\psi_1\rangle\langle\psi_1|$ şeklinde olmaktadır. Bu plato bölgesinin negatiflik değeri $N_{12} = 0.38$ olarak bulunur.

$B_z = 1.5$ değerinde dolaşıklıkta ani bir düşüş gözlenmektedir. Burada taban durum $|\psi_1\rangle, |\psi_9\rangle$ ve $|\psi_{10}\rangle$ şeklinde üç katlı dejeneredir. Yoğunluk matrisi $\rho_{12} = \frac{1}{3}|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \frac{1}{3}|\psi_9\rangle\langle\psi_9| + \frac{1}{3}|\psi_{10}\rangle\langle\psi_{10}|$ şeklinde olup negatiflik $N_{12} = 0.17$ gibi bir geçiş değerine sahiptir. Bu geçiş değerinden hemen sonra $1.5 < B_z < 2.5$ aralığında dolaşıklık daha düşük bir plato bölgesine sahip olmaktadır. Taban durum $|\psi_9\rangle$ ve $|\psi_{10}\rangle$ şeklinde iki katlı dejeneredir. Yoğunluk matrisi $\rho_{12} = \frac{1}{2}|\psi_9\rangle\langle\psi_9| + \frac{1}{2}|\psi_{10}\rangle\langle\psi_{10}|$ şeklinde olup buradan bu plato bölgesinin negatiflik değeri $N_{12} = 0.125$ olarak bulunur.

$B_z = 2.5$ değerinde dolaşıklıkta yine ani bir düşüş gözlenmekte olup taban durum $|\psi_9\rangle, |\psi_{10}\rangle$ ve $|\psi_{11}\rangle$ şeklinde üç katlı dejeneredir. Yoğunluk matrisi $\rho_{12} = \frac{1}{3}|\psi_9\rangle\langle\psi_9| + \frac{1}{3}|\psi_{10}\rangle\langle\psi_{10}| + \frac{1}{3}|\psi_{11}\rangle\langle\psi_{11}|$ şeklinde olup $B_z = 2.5$ için negatiflik $N_{12} = 0.04$ olarak bulunur.

$B_z > 2.5$ için taban durum $|\psi_{11}\rangle$ olup yoğunluk matrisi $\rho_{12} = |\psi_{11}\rangle\langle\psi_{11}|$ şeklinde olmaktadır. $B_z > 2.5$ için negatiflik $N_{12} = 0.0$ olarak bulunur. Yani dolaşıklık tamamen yok olmaktadır.

Benzer bir durum $B_z \rightarrow -B_z$ için de gözlenir. Sonuç olarak taban durum dolaşıklığının manyetik alan B_z 'ye göre değişimine baktığımızda, manyetik

alanın $0.0; \pm 1.5$ ve ± 2.5 değerlerinde enerji seviyelerindeki geçişlerden dolayı dolaşıklıkta ani düşüslere rastlanır.

Şekil 3.16’da görüldüğü gibi manyetik alanın sıfıra yakın değerlerindeki küçük artışlarda, dolaşıklık bir plato bölgesinde sabit değerler almaktadır. Dolaşıklık önce $B_{c1} = 1.5$ gibi bir kritik değerden sonra $N_{12} = 0.125$ değerindeki bir plato bölgesine düşmekte, ardından $B_{c2} = 2.5$ gibi bir kritik değerden sonra da yok olmaktadır.

1. ve 3. spinler arasındaki etkileşmeye baktığımızda hesapladığımız N_{13} sonuçlarına göre:

$B_z = 0.0$ için taban durum özvektörleri $|\psi_1\rangle$ ve $|\psi_2\rangle$ şeklinde iki katlı dejenere durumda olup yoğunluk matrisi ise $\rho_{13} = \frac{1}{2}|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \frac{1}{2}|\psi_2\rangle\langle\psi_2|$ şeklinde olmaktadır.

$0.0 < B_z < 1.5$ aralığında ise taban durum özvektörü $|\psi_1\rangle$ şeklinde ve yoğunluk matrisi ise $\rho_{13} = |\psi_1\rangle\langle\psi_1|$ şeklinde olmaktadır.

$B_z = 1.5$ için ise taban durum özvektörleri $|\psi_1\rangle$, $|\psi_9\rangle$ ve $|\psi_{10}\rangle$ şeklinde üç katlı dejenere olup, yoğunluk matrisi $\rho_{13} = \frac{1}{3}|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \frac{1}{3}|\psi_9\rangle\langle\psi_9| + \frac{1}{3}|\psi_{10}\rangle\langle\psi_{10}|$ şeklinde olmaktadır. Buna göre $0.0 \leq B_z \leq 1.5$ için negatiflik $N_{13} = 0.0$ olmakta ve taban durumlar dolaşıklık üretmemektedir.

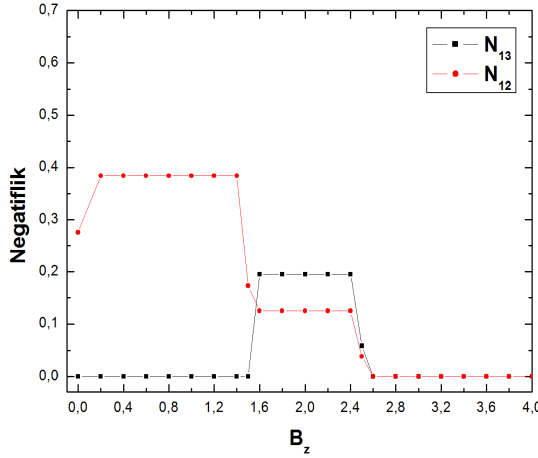
Manyetik alanın $1.5 < B_z$ değerinden sonra negatiflik ani bir sıçrama ile küçük bir artış yapıp bir plato bölgesine ulaşmaktadır. $1.5 < B_z < 2.5$ aralığında taban durum özvektörleri $|\psi_9\rangle$ ve $|\psi_{10}\rangle$ şeklinde iki katlı dejenere olup yoğunluk matrisi $\rho_{13} = \frac{1}{2}|\psi_9\rangle\langle\psi_9| + \frac{1}{2}|\psi_{10}\rangle\langle\psi_{10}|$ şeklinde olmaktadır. Ve negatiflik $N_{13} = 0.2$ değerinde bir plato bölgesine sahiptir.

$B_z = 2.5$ için dolaşıklık ani bir düşüş göstermekte ve taban durum özvektörleri $|\psi_9\rangle$, $|\psi_{10}\rangle$ ve $|\psi_{11}\rangle$ şeklinde üç katlı dejenere dir. Yoğunluk matrisi $\rho_{13} = \frac{1}{3}|\psi_9\rangle\langle\psi_9| + \frac{1}{3}|\psi_{10}\rangle\langle\psi_{10}| + \frac{1}{3}|\psi_{11}\rangle\langle\psi_{11}|$ şeklinde olup buradan negatiflik $N_{13} = 0.06$ olarak bulunur.

$B_z > 2.5$ için taban durum özvektörü $|\psi_{11}\rangle$ olup yoğunluk matrisi $\rho_{13} = |\psi_{11}\rangle\langle\psi_{11}|$ şeklinde olmaktadır ve negatiflik $N_{13} = 0.0$ olarak yok olmaktadır.

Benzer durumlar $B_z \rightarrow -B_z$ için de gözlenir. Sonuç olarak taban durum dolaşıklığının manyetik alana göre değişimine baktığımızda, B_z manyetik alanının ± 1.5 ve ± 2.5 değerlerinde enerji seviyelerindeki geçişlerden dolayı dolaşıklıkta ani çıkış ve düşüşler görülür.

Şekil 3.16'da görüldüğü gibi manyetik alanın sıfıra yakın değerlerindeki küçük artışlarda, dolaşıklık sıfır olmaktadır. Dolaşıklık $B_{c1} = 1.5$ gibi bir kritik değerden sonra $N_{13} = 0.2$ değerindeki bir plato bölgesine çıkmakta, $B_{c2} = 2.5$ gibi bir kritik değerden sonra da yok olmaktadır.



Şekil 3.16. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ Ve $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ Alt Sistemlerinin Taban Durum Dolaşıklığının Karşılaştırılması.

$\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ iki spinli spin sistemindeki taban durum dolaşıklığında manyetik alanın küçük değerleri için daha düşük bir negatiflik platosu gözlenmesine rağmen üçüncü parçacık olarak spin $(\frac{1}{2})$ 'nin varlığının $\text{spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ sistemindeki $\text{spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ alt sisteminin dolaşıklığını manyetik alana daha dayanıklı hale getirdiği görülmektedir. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ için tek bir kritik manyetik alan değeri ($B_c = 2.0$) varken

$\text{spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ sistemindeki $\text{spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ alt sisteminin taban durum dolaşıklığı için $B_{c1} = 1.5$ ve $B_{c2} = 2.5$ gibi iki kritik manyetik alan değeri görülmektedir.

Isısal Durum

Sistemin ısısal durum yoğunluk matrisinin birinci ve ikinci spinlere indirgenmiş haldeki $\rho_{12}(T)$ indirgenmiş yoğunluk matrisinin birinci alt sisteme göre kısmi transpozu alınarak elde edilen yoğunluk matrisi

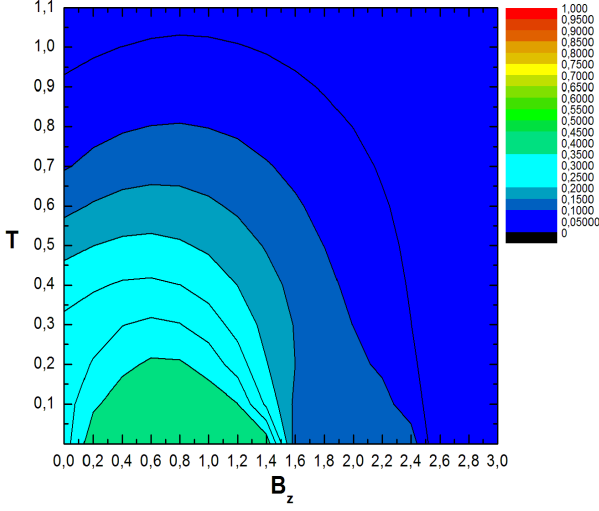
$$\rho_{12}^{T1}(T) = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & \xi & 0 & 0 \\ 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & \tau & 0 \\ 0 & 0 & \delta & 0 & 0 & 0 & 0 & \phi \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \zeta & 0 & 0 & 0 \\ \xi & 0 & 0 & 0 & 0 & \eta & 0 & 0 \\ 0 & \tau & 0 & 0 & 0 & 0 & \kappa & 0 \\ 0 & 0 & \phi & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{pmatrix}, \quad (3.108)$$

ile gösterilmiştir. Burada

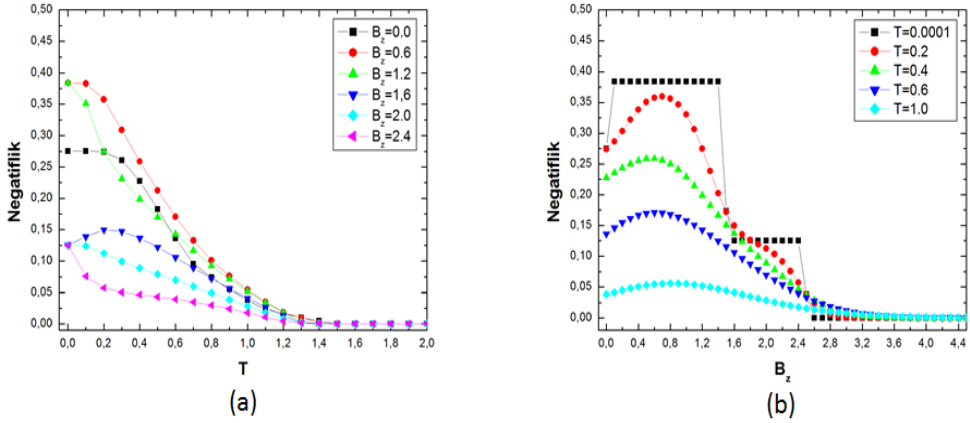
$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{e^{-\frac{10B_z+7J}{4T}}}{20} [20 + 4e^{\frac{B_z}{T}} + 25e^{\frac{2B_z+5J}{2T}}], \\ \gamma &= \frac{e^{-\frac{6B_z+7J}{4T}}}{120} [72 + 30e^{\frac{5J}{2T}} + 36e^{\frac{B_z}{T}} + 20e^{\frac{B_z+4J}{T}} + 75e^{\frac{2B_z+5J}{2T}}], \\ \delta &= \frac{e^{-\frac{2B_z+7J}{4T}}}{120} [36 + 60e^{\frac{5J}{2T}} + 20e^{\frac{4J}{T}} + 36e^{\frac{B_z}{T}} + 24e^{\frac{B_z+4J}{T}} + 75e^{\frac{2B_z+5J}{2T}}], \\ \varepsilon &= \frac{e^{-\frac{2B_z-7J}{4T}}}{40} [4 + 15e^{\frac{5J}{2T}} + 24e^{\frac{4J}{T}} + 8e^{\frac{B_z}{T}} + 50e^{\frac{2B_z+5J}{2T}}], \\ \zeta &= \frac{e^{-\frac{6B_z+7J}{4T}}}{40} [8 + 20e^{\frac{5J}{2T}} + 4e^{\frac{B_z}{T}} + 20e^{\frac{B_z+4J}{T}} + 15e^{\frac{2B_z+5J}{2T}}], \\ \eta &= \frac{e^{-\frac{2B_z+7J}{4T}}}{30} [9 + 15e^{\frac{5J}{2T}} + 5e^{\frac{4J}{T}} + 9e^{\frac{B_z}{T}} + 6e^{\frac{B_z+4J}{T}} + 15e^{\frac{2B_z+5J}{2T}}], \\ \kappa &= \frac{e^{-\frac{2B_z-7J}{4T}}}{60} [6 + 10e^{\frac{5J}{2T}} + 4e^{\frac{4J}{T}} + 12e^{\frac{B_z}{T}} + 5e^{\frac{2B_z+5J}{2T}}], \\ \mu &= \frac{e^{-\frac{6B_z-7J}{4T}}}{10} [2 + 5e^{\frac{5J}{2T}} + 10e^{\frac{B_z}{T}}], \\ \xi &= \frac{e^{-\frac{6B_z+7J}{4T}}}{40\sqrt{3}} [24 + 12e^{\frac{B_z}{T}} - 20e^{\frac{B_z+4J}{T}} + 15e^{\frac{2B_z+5J}{2T}}], \\ \tau &= \frac{e^{-\frac{2B_z+7J}{4T}}}{60} [18 - 10e^{\frac{4J}{T}} + 18e^{\frac{B_z}{T}} - 12e^{\frac{B_z+4J}{T}} - 15e^{\frac{2B_z+5J}{2T}}], \\ \phi &= \frac{\sqrt{3}e^{-\frac{2B_z-7J}{4T}}}{20} [2 - 4e^{\frac{4J}{T}} + 4e^{\frac{B_z}{T}} - 5e^{\frac{2B_z+5J}{2T}}], \end{aligned}$$

ile ifade edilmektedir.

Şekil 3.17’de $\text{spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ sisteminde, $\text{spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ alt sistemine ait negatifliğin, T sıcaklığına ve B_z manyetik alanına bağlı kontur grafiği verilmiştir. Manyetik alan



Şekil 3.17. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ Sisteminde $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ Alt Sisteminin Isısal Durum Dolaşıklığının Kontur Grafiği ($J=1.0$).



Şekil 3.18. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ Sisteminde $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ Alt Sisteminin Dolaşıklığının a)Sıcaklığa b)Manyetik Alana Göre Değişimi.

artışı ile negatiflik önce bir plato bölgesine ulaşmakta ve belli bir kritik manyetik alan değerinden sonra hızla azalarak daha zayıf bir plato bölgesine ulaşmaktadır. İkinci bir kritik manyetik alan değerinden sonra ise negatiflik yok olmaktadır.

Sıcaklık artışı ile birlikte plato bölgeleri önce dalgalı bir yapıya daha sonra da doğrudan azalma eğilimi gösteren bir yapıya dönüşmektedir ve tek bir kritik manyetik alan değeri sisteme hakim olmaktadır. Düşük sıcaklıklarda iki kritik manyetik alan değeri $B_{c1} = 1.6$ ve $B_{c2} = 2.6$ oluşmaktadır. Sıcaklık arttıkça kritik manyetik alan değerinin arttığı görülmektedir. Örneğin $T = 0.2$ için $B_c = 2.8$ olmakta, sıcaklık daha da arttığında $B_c \approx 4.0$ değerine doğru gitmektedir.

Belli manyetik alan değerlerinde sıcaklık arttıkça negatiflik azalma eğilimi göstermekte olup şekil 3.18'den de görüldüğü gibi kritik sıcaklık değeri $T_c = 1.5$ olmaktadır ve kritik sıcaklık değerinin manyetik alandan bağımsız olduğu görülmektedir.

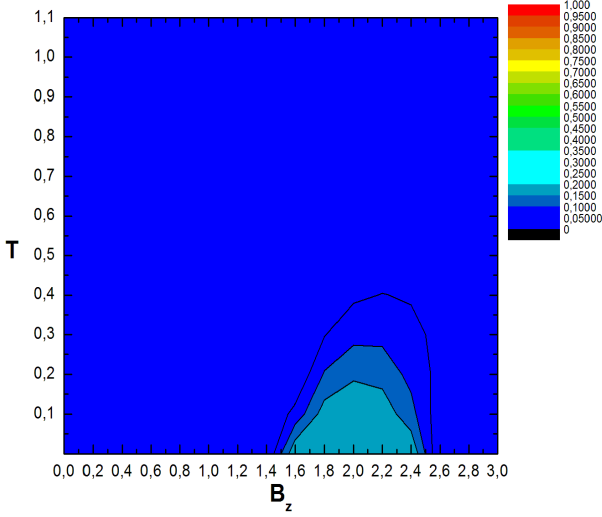
Sistemin ısısal durum yoğunluk matrisinin birinci ve üçüncü spinlere indirgenmiş haldeki $\rho_{13}(T)$ indirgenmiş yoğunluk matrisinin birinci alt sisteme göre kısmi transpozü alınarak elde edilen yoğunluk matrisi

$$\rho_{13}^{T1}(T) = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & \kappa \\ 0 & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \delta & 0 \\ \kappa & 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix}, \quad (3.109)$$

şeklinde olup, burada

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{e^{-\frac{10B_z+7J}{4T}}}{120} \left[120 + 72e^{\frac{B_z}{T}} + 36e^{\frac{2B_z}{T}} + 12e^{\frac{3B_z}{T}} + 20e^{\frac{2B_z+4J}{T}} + 30e^{\frac{2B_z+5J}{2T}} + 60e^{\frac{4B_z+5J}{2T}} + \right. \\ &\quad \left. 72e^{\frac{3B_z+4J}{T}} + 45e^{\frac{6B_z+5J}{2T}} \right], \\ \gamma &= \frac{e^{-\frac{6B_z+7J}{4T}}}{120} \left[24 + 150e^{\frac{5J}{2T}} + 36e^{\frac{B_z}{T}} + 36e^{\frac{2B_z}{T}} + 24e^{\frac{3B_z}{T}} + 24e^{\frac{2B_z+4J}{T}} + 20e^{\frac{B_z+4J}{T}} + \right. \\ &\quad \left. 75e^{\frac{2B_z+5J}{2T}} + 75e^{\frac{4B_z+5J}{2T}} + 150e^{\frac{6B_z+5J}{2T}} \right], \\ \delta &= \frac{e^{-\frac{6B_z+7J}{4T}}}{30} \left[6 + 15e^{\frac{5J}{2T}} + 9e^{\frac{B_z}{T}} + 9e^{\frac{2B_z}{T}} + 6e^{\frac{3B_z}{T}} + 6e^{\frac{2B_z+4J}{T}} + 5e^{\frac{B_z+4J}{T}} + 15e^{\frac{2B_z+5J}{2T}} + \right. \\ &\quad \left. 15e^{\frac{4B_z+5J}{2T}} + 15e^{\frac{6B_z+5J}{2T}} \right], \\ \varepsilon &= \frac{e^{-\frac{2B_z+7J}{4T}}}{40} \left[4 + 15e^{\frac{5J}{2T}} + 20e^{\frac{4J}{T}} + 12e^{\frac{B_z}{T}} + 24e^{\frac{2B_z}{T}} + 40e^{\frac{3B_z}{T}} + 8e^{\frac{B_z+4J}{T}} + 20e^{\frac{2B_z+5J}{2T}} + \right. \\ &\quad \left. 10e^{\frac{4B_z+5J}{2T}} \right], \\ \kappa &= \frac{e^{-\frac{6B_z+7J}{4T}}}{30} \left[6 - 15e^{\frac{5J}{2T}} + 9e^{\frac{B_z}{T}} + 9e^{\frac{2B_z}{T}} + 6e^{\frac{3B_z}{T}} + 6e^{\frac{2B_z+4J}{T}} - 15e^{\frac{4B_z+5J}{2T}} - 15e^{\frac{6B_z+5J}{2T}} - \right. \\ &\quad \left. 15e^{\frac{2B_z+5J}{2T}} + 5e^{\frac{B_z+4J}{T}} \right], \end{aligned}$$

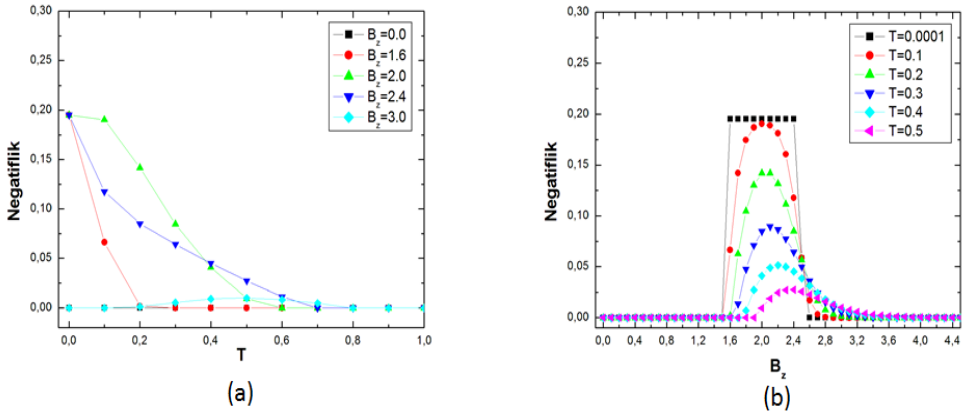
ile ifade edilmektedir.



Şekil 3.19. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ Sisteminde $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ Alt Sisteminin Isısal Durum Dolaşıklığının Kontur Grafiği($J=1.0$).

Şekil 3.19’de $\text{spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ sisteminde, $\text{spin}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ alt sistemine ait negatifliğin, T sıcaklığa ve B_z manyetik alanına bağlı kontur grafiği verilmiştir. Düşük sıcaklıklarda taban durumun katkısı ile $1.5 < B_z < 2.6$ aralığında zayıf bir negatiflik bölgesi gözlenmektedir. Sıcaklığın artışıyla birlikte negatifliğin oluşmaya başladığı kritik manyetik alan değeri $B_{c1} = 1.5$ değerinden başlayıp 2.0 değerine doğru arttığı, negatifliğin yok olduğu kritik manyetik alan değeri $B_{c2} = 2.6$ değerinden başlayıp 4.0 değerine doğru arttığı şekil 3.20’den görülmektedir.

Yine şekil 3.20’den, $1.5 < B_z < 2.6$ aralığında belli manyetik alan değerlerinde sıcaklık arttıkça negatiflik azalmaktadır. Ayrıca şekil 3.20’de manyetik alan değeri arttıkça kritik sıcaklık değerinin de $T_c = 0.2$ ’den 0.7’e doğru artış gösterdiği görülmektedir.

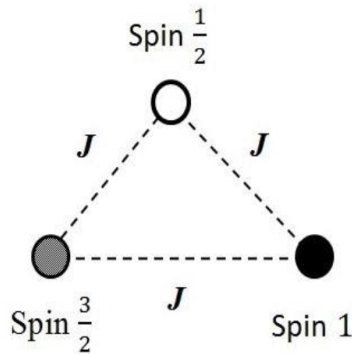


Şekil 3.20. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ Sisteminde $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ Alt Sisteminin Isısal Dolaşıklığının a) Sıcaklığa b) Manyetik Alana Göre Değişimi.

3.2.3. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ Durumu

Çalışmamızın bu kısmında üç farklı spinden oluşan $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ sistemimizi z yönünde homojen bir manyetik alan altında önce sadece en yakın komşu (NN) etkileşmelerinin olduğu durumda sonra ise hem en yakın (NN) hem de ikinci en yakın (NNN) komşu etkileşmelerinin olduğu durum için inceleyeceğiz.

3.2.3.1. En Yakın Komşu Etkileşmeleri Durumu



Şekil 3.21. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ NN Etkileşmeleri Modeli.

İlk olarak periyodik sınır koşulları altında sadece en yakın komşu (NN) etkileşmelerinin olduğu durumu inceleyelim. Bu durumda spin $(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ durumuna ait Hamiltonyenimiz

$$H = J[(\sigma_1^x s_2^x + \sigma_1^y s_2^y + \sigma_1^z s_2^z) + (s_2^x S_3^x + s_2^y S_3^y + s_2^z S_3^z) + (S_3^x \sigma_1^x + S_3^y \sigma_1^y + S_3^z \sigma_1^z)] \\ + B_z(\sigma_1^z + s_2^z + S_3^z), \quad (3.110)$$

olmaktadır. Hamiltonyenimize ait özdeğerlerimiz

$$E_1 = E_2 = \frac{-9J - 4B_z}{4}, \quad (3.111)$$

$$E_3 = E_4 = \frac{-9J + 4B_z}{4}, \quad (3.112)$$

$$E_5 = E_6 = \frac{-J - 8B_z}{4}, \quad (3.113)$$

$$E_7 = E_8 = \frac{-J - 4B_z}{4}, \quad (3.114)$$

$$E_9 = E_{10} = \frac{-J + 4B_z}{4}, \quad (3.115)$$

$$E_{11} = E_{12} = \frac{-J + 8B_z}{4}, \quad (3.116)$$

$$E_{13} = \frac{-13J}{4}, \quad (3.117)$$

$$E_{14} = E_{15} = \frac{-9J}{4}, \quad (3.118)$$

$$E_{16} = E_{17} = \frac{-J}{4}, \quad (3.119)$$

$$E_{18} = \frac{11J}{4}, \quad (3.120)$$

$$E_{19} = \frac{11J - 12B_z}{4}, \quad (3.121)$$

$$E_{20} = \frac{11J - 8B_z}{4}, \quad (3.122)$$

$$E_{21} = \frac{11J - 4B_z}{4}, \quad (3.123)$$

$$E_{22} = \frac{11J + 4B_z}{4}, \quad (3.124)$$

$$E_{23} = \frac{11J + 8B_z}{4}, \quad (3.125)$$

$$E_{24} = \frac{11J + 12B_z}{4}, \quad (3.126)$$

şeklinde olup bu özdeğerlere karşılık gelen özvektörlerimiz ise

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{14}}[\sqrt{6}\left|\frac{1}{2}, 0, -\frac{3}{2}\right\rangle - 2\left|\frac{1}{2}, -1, -\frac{1}{2}\right\rangle - \sqrt{3}\left|-\frac{1}{2}, 1, -\frac{3}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.127)$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{12}}[\sqrt{3}\left|\frac{1}{2}, 0, -\frac{3}{2}\right\rangle - \sqrt{2}\left|\frac{1}{2}, -1, -\frac{1}{2}\right\rangle - \sqrt{6}\left|-\frac{1}{2}, 1, -\frac{3}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.128)$$

$$|\psi_3\rangle = \sqrt{\frac{3}{8}}[\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}\right\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}\left|-\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, 0, \frac{3}{2}\right\rangle], \quad (3.129)$$

$$|\psi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[\frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}\right\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right\rangle + \left|\frac{1}{2}, -1, \frac{3}{2}\right\rangle], \quad (3.130)$$

$$|\psi_5\rangle = \frac{1}{2}[-\sqrt{3}\left|\frac{1}{2}, -1, -\frac{3}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, -1, -\frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.131)$$

$$|\psi_6\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}[-\sqrt{2}\left|\frac{1}{2}, -1, -\frac{3}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, 0, -\frac{3}{2}\right\rangle], \quad (3.132)$$

$$|\psi_7\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[-\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{1}{2}, 0, -\frac{3}{2}\right\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}\left|-\frac{1}{2}, 1, -\frac{3}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.133)$$

$$|\psi_8\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}[-\frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2}, 0, -\frac{3}{2}\right\rangle - \sqrt{2}\left|\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\left|-\frac{1}{2}, 1, -\frac{3}{2}\right\rangle], \quad (3.134)$$

$$|\psi_9\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}[-\sqrt{\frac{3}{2}}\left|\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\left|\frac{1}{2}, -1, \frac{3}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, 0, \frac{3}{2}\right\rangle], \quad (3.135)$$

$$|\psi_{10}\rangle = \sqrt{\frac{2}{5}}[\frac{1}{2}\left|\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}\right\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}\left|\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2}\left|\frac{1}{2}, -1, \frac{3}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.136)$$

$$|\psi_{11}\rangle = \sqrt{\frac{3}{4}}[-\frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}\right\rangle], \quad (3.137)$$

$$|\psi_{12}\rangle = \sqrt{\frac{3}{5}}[-\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}\right\rangle + \left|\frac{1}{2}, 0, \frac{3}{2}\right\rangle], \quad (3.138)$$

$$|\psi_{13}\rangle = \frac{1}{2}[-\left|\frac{1}{2}, 1, -\frac{3}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}\right\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2}\right\rangle \\ + \frac{1}{\sqrt{3}}\left|-\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}\right\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}\left|-\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, -1, \frac{3}{2}\right\rangle], \quad (3.139)$$

$$|\psi_{14}\rangle = \sqrt{\frac{3}{8}}[\left|\frac{1}{2}, 1, -\frac{3}{2}\right\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2}\right\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}\left|-\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}\right\rangle \\ + \left|-\frac{1}{2}, -1, \frac{3}{2}\right\rangle], \quad (3.140)$$

$$|\psi_{15}\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}[\left|\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}\right\rangle - \sqrt{2}\left|\frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2}\right\rangle - \sqrt{2}\left|-\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}\right\rangle \\ + \left|-\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.141)$$

$$|\psi_{16}\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}}[-\left|\frac{1}{2}, 1, -\frac{3}{2}\right\rangle + \sqrt{3}\left|\frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2}\right\rangle - \sqrt{3}\left|-\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}\right\rangle \\ + \left|-\frac{1}{2}, -1, \frac{3}{2}\right\rangle], \quad (3.142)$$

$$|\psi_{17}\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}[-\left|\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}\right\rangle - \sqrt{2}\left|\frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{2}\left|-\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}\right\rangle \\ + \left|-\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.143)$$

$$|\psi_{18}\rangle = \frac{1}{\sqrt{20}}[\left|\frac{1}{2}, 1, -\frac{3}{2}\right\rangle + \sqrt{6}\left|\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{3}\left|\frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2}\right\rangle \\ + \sqrt{3}\left|-\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{6}\left|-\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, -1, \frac{3}{2}\right\rangle], \quad (3.144)$$

$$|\psi_{19}\rangle = \left|-\frac{1}{2}, -1, -\frac{3}{2}\right\rangle, \quad (3.145)$$

$$|\psi_{20}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[\frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2}, -1, -\frac{3}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\left|-\frac{1}{2}, 0, -\frac{3}{2}\right\rangle \\ + \left|-\frac{1}{2}, -1, -\frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.146)$$

$$|\psi_{21}\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}[\frac{2}{3}\left|\frac{1}{2}, 0, -\frac{3}{2}\right\rangle + \left|\frac{1}{2}, -1, -\frac{1}{2}\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}\left|-\frac{1}{2}, 1, -\frac{3}{2}\right\rangle \\ + \sqrt{2}\left|-\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2}\right\rangle], \quad (3.147)$$

$$\begin{aligned}
|\psi_{22}\rangle &= \sqrt{\frac{2}{15}} \left[\frac{3}{2} \left| \frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{3} \left| \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{2}, -1, \frac{3}{2} \right\rangle \right. \\
&\quad \left. + \sqrt{\frac{3}{2}} \left| -\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2}, 0, \frac{3}{2} \right\rangle \right], \quad (3.148)
\end{aligned}$$

$$|\psi_{23}\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \left[\sqrt{3} \left| \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{2} \left| \frac{1}{2}, 0, \frac{3}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2} \right\rangle \right], \quad (3.149)$$

$$|\psi_{24}\rangle = \left| \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2} \right\rangle, \quad (3.150)$$

şeklinde olmaktadır.

Taban Durum Hesaplamaları

Aşağıda spin $(\frac{1}{2}, 1)$, spin $(1, \frac{3}{2})$ ve spin $(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ alt sistemlerine ait negatiflik hesaplarının sonuçları sırasıyla N_{12} , N_{23} ve N_{13} olarak verilmiştir.

$0.0 \leq B_z < 1.0$ iken taban durum özvektörü $|\psi_{13}\rangle$ olup yoğunluk matrisi $\rho = |\psi_{13}\rangle \langle \psi_{13}|$ olmaktadır. Manyetik alanın $0.0 \leq B_z < 1.0$ aralığında N_{12} , N_{23} ve N_{13} değerlerinin bir plato bölgesine sahip oldukları görülmektedir. Bu plato bölgelerinin negatiflik değerleri sırasıyla $N_{12} = 0.0$, $N_{23} = 0.67$ ve $N_{13} = 0.25$ olmaktadır.

Sonrasında $B_z = 1.0$ için taban durum özvektörleri $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_{13}\rangle$ ve yoğunluk matrisi $\rho = \frac{1}{3} |\psi_1\rangle \langle \psi_1| + \frac{1}{3} |\psi_2\rangle \langle \psi_2| + \frac{1}{3} |\psi_{13}\rangle \langle \psi_{13}|$ olmaktadır. $B_z = 1.0$ için N_{23} ve N_{13} negatiflik değerlerinde sırasıyla 0.25 ve 0.08 gibi ani düşmeler gözlenirken N_{12} değerinde 0.1 gibi bir değere canlanma gözlenmektedir. Bu davranışın sebebi $B_z = 1.0$ için sistemin enerji değerlerinde meydana gelen seviye geçişleridir.

Manyetik alanı artırıp $1.0 < B_z < 2.0$ aralığındaki değerlere bakacak olursak, bu durumda taban durum $|\psi_1\rangle$ ve $|\psi_2\rangle$ şeklinde iki katlı dejenere olup yoğunluk matrisi $\rho = \frac{1}{2} |\psi_1\rangle \langle \psi_1| + \frac{1}{2} |\psi_2\rangle \langle \psi_2|$ olmaktadır. 1. ve 2. spinler arası negatifliğin artarak $N_{12} = 0.31$ değerinde bir plato bölgesine ulaştığı gözlenirken, 2. ve 3. spinler arasındaki negatiflik değeri çok küçük bir canlanma gösterip $N_{23} = 0.29$

değerinde bir plato bölgesine ulaşmaktadır. Bu arada 1. ve 3. spinler arasındaki dolaşıklık ise $N_{13} = 0.05$ gibi çok küçük bir değerde bir plato oluşturmaktadır.

Manyetik alanın $B_z = 2.0$ değerinde ise yine sistemin enerji seviyeleri arasındaki geçişlerden dolayı negatiflik değerinde ani düşmeler gözlenir. $B_z = 2.0$ için taban durum özvektörleri $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_5\rangle$ ve $|\psi_6\rangle$ şeklinde dört katlı dejenere olup yoğunluk matrisi $\rho = \frac{1}{4}|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \frac{1}{4}|\psi_2\rangle\langle\psi_2| + \frac{1}{4}|\psi_5\rangle\langle\psi_5| + \frac{1}{4}|\psi_6\rangle\langle\psi_6|$ şeklinde olmaktadır. $B_z = 2.0$ için negatiflik değerleri $N_{12} = 0.15, N_{23} = 0.04, N_{13} = 0.01$ gibi geçiş değerlerine sahip olmaktadır.

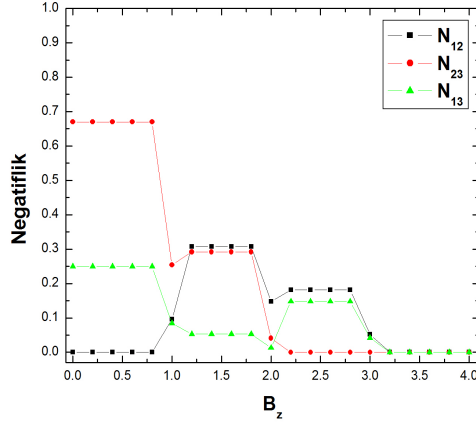
Manyetik alanın $2.0 < B_z < 3.0$ değerlerinde taban durum $|\psi_5\rangle$ ve $|\psi_6\rangle$ şeklinde iki katlı dejenere olup, yoğunluk matrisi $\rho = \frac{1}{2}|\psi_5\rangle\langle\psi_5| + \frac{1}{2}|\psi_6\rangle\langle\psi_6|$ şeklinde olmaktadır. $2.0 < B_z < 3.0$ aralığında 2. ve 3. spinler arasında dolaşıklık bulunmamaktadır. Ancak $N_{12} = 0.18$ ve $N_{13} = 0.15$ gibi düşük değerlerdeki dolaşıklıklara sahip olmaktadır.

$B_z = 3.0$ için taban durum özvektörleri $|\psi_5\rangle, |\psi_6\rangle$ ve $|\psi_{19}\rangle$ şeklinde üç katlı dejenere olup, yoğunluk matrisi $\rho = \frac{1}{3}|\psi_5\rangle\langle\psi_5| + \frac{1}{3}|\psi_6\rangle\langle\psi_6| + \frac{1}{3}|\psi_{19}\rangle\langle\psi_{19}|$ şeklinde olmaktadır. $B_z = 3.0$ için $N_{23} = 0.0$ değeri ile dolaşıklığa sahip olmamakla birlikte $N_{12} = 0.05, N_{13} = 0.04$ şeklinde hala az da olsa dolaşıklık göstermektedir.

Manyetik alanın daha da artmasıyla sistem tamamen dolaşık olmayan hale gelmektedir. $3.0 < B_z \leq 4.0$ için taban durum özvektörü $|\psi_{19}\rangle$ ve yoğunluk matrisi $\rho = |\psi_{19}\rangle\langle\psi_{19}|$ olmaktadır. $3.0 < B_z \leq 4.0$ için taban durum negatifliğinin değeri tüm alt sistemlerin taban durumları için yok olmaktadır.

Isısal Durum Hesaplamaları

Isısal duruma bakıldığında sistemin ısısal durum yoğunluk matrisinin birinci ve ikinci spinlere indirgenmiş haldeki $\rho_{12}(T)$ yoğunluk matrisinin birinci alt sisteme



Şekil 3.22. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1)$, $\text{Spin}(1, \frac{3}{2})$ Ve $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ Alt Sistemlerinin Taban Durumları.

göre kısmi transpozu alınarak elde edilen yoğunluk matrisi

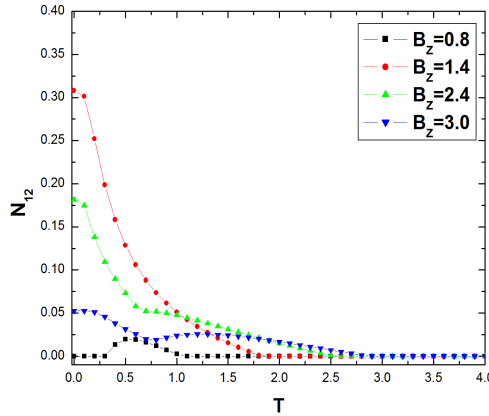
$$\rho_{12}^{T_1}(T) = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & 0 & \delta & 0 \\ 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 & \zeta \\ 0 & 0 & \eta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \kappa & 0 & 0 \\ \mu & 0 & 0 & 0 & \nu & 0 \\ 0 & \xi & 0 & 0 & 0 & \tau \end{pmatrix}, \quad (3.151)$$

elde edilir. Burada

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{120} [12e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 30e^{-\frac{E_{11}}{T}} + 48e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 30e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 45e^{-\frac{E_{14}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{18}}{T}} + \\ &24e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 60e^{-\frac{E_{23}}{T}} + 120e^{-\frac{E_{24}}{T}} + 30e^{-\frac{E_3}{T}} + 20e^{-\frac{E_4}{T}} + 60e^{-\frac{E_9}{T}}], \\ \delta &= \frac{1}{1260\sqrt{2}} [-540e^{-\frac{E_1}{T}} - 504e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 210e^{-\frac{E_{13}}{T}} - 420e^{-\frac{E_{15}}{T}} - 420e^{-\frac{E_{17}}{T}} + \\ &378e^{-\frac{E_{18}}{T}} - 630e^{-\frac{E_2}{T}} + 168e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 504e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 420e^{-\frac{E_{23}}{T}} + 315e^{-\frac{E_3}{T}} + 420e^{-\frac{E_7}{T}} - \\ &280e^{-\frac{E_8}{T}}], \gamma = \frac{3}{7}e^{-\frac{E_1}{T}} + \frac{1}{5}e^{-\frac{E_{10}}{T}} + \frac{3}{5}e^{-\frac{E_{12}}{T}} + \frac{1}{6}e^{-\frac{E_{13}}{T}} + \frac{1}{6}e^{-\frac{E_{15}}{T}} + \frac{1}{6}e^{-\frac{E_{17}}{T}} + \frac{3}{10}e^{-\frac{E_{18}}{T}} + \\ &\frac{1}{4}e^{-\frac{E_2}{T}} + \frac{2}{15}e^{-\frac{E_{21}}{T}} + \frac{2}{5}e^{-\frac{E_{22}}{T}} + \frac{1}{3}e^{-\frac{E_{23}}{T}} + \frac{1}{8}e^{-\frac{E_3}{T}} + \frac{1}{3}e^{-\frac{E_4}{T}} + \frac{1}{3}e^{-\frac{E_7}{T}} + \frac{1}{9}e^{-\frac{E_8}{T}}, \\ \zeta &= \frac{1}{30\sqrt{2}} [5e^{-\frac{E_{13}}{T}} - 10e^{-\frac{E_{15}}{T}} - 10e^{-\frac{E_{17}}{T}} + 9e^{-\frac{E_{18}}{T}} - 5e^{-\frac{E_2}{T}} + 10e^{-\frac{E_{20}}{T}} + 12e^{-\frac{E_{21}}{T}} + \\ &4e^{-\frac{E_{22}}{T}} - 20e^{-\frac{E_6}{T}} + 10e^{-\frac{E_9}{T}}], \\ \eta &= \frac{2}{7}e^{-\frac{E_1}{T}} + \frac{3}{10}e^{-\frac{E_{10}}{T}} + \frac{1}{12}e^{-\frac{E_{13}}{T}} + \frac{1}{8}e^{-\frac{E_{14}}{T}} + \frac{1}{3}e^{-\frac{E_{15}}{T}} + \frac{3}{8}e^{-\frac{E_{16}}{T}} + \frac{1}{3}e^{-\frac{E_{17}}{T}} + \frac{3}{20}e^{-\frac{E_{18}}{T}} + \\ &\frac{1}{6}e^{-\frac{E_2}{T}} + \frac{1}{6}e^{-\frac{E_{20}}{T}} + \frac{1}{5}e^{-\frac{E_{21}}{T}} + \frac{1}{15}e^{-\frac{E_{22}}{T}} + \frac{1}{2}e^{-\frac{E_4}{T}} + \frac{3}{4}e^{-\frac{E_5}{T}} + \frac{2}{3}e^{-\frac{E_6}{T}} + \frac{2}{3}e^{-\frac{E_8}{T}} + \frac{1}{6}e^{-\frac{E_9}{T}}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\kappa &= \frac{3}{14}e^{-\frac{E_1}{T}} + \frac{2}{5}e^{-\frac{E_{10}}{T}} + \frac{3}{4}e^{-\frac{E_{11}}{T}} + \frac{1}{12}e^{-\frac{E_{13}}{T}} + \frac{1}{8}e^{-\frac{E_{14}}{T}} + \frac{1}{3}e^{-\frac{E_{15}}{T}} + \frac{3}{8}e^{-\frac{E_{16}}{T}} + \frac{1}{3}e^{-\frac{E_{17}}{T}} + \\
&\frac{3}{20}e^{-\frac{E_{18}}{T}} + \frac{1}{2}e^{-\frac{E_2}{T}} + \frac{1}{15}e^{-\frac{E_{21}}{T}} + \frac{1}{5}e^{-\frac{E_{22}}{T}} + \frac{1}{6}e^{-\frac{E_{23}}{T}} + \frac{1}{4}e^{-\frac{E_3}{T}} + \frac{1}{6}e^{-\frac{E_7}{T}} + \frac{2}{9}e^{-\frac{E_8}{T}}, \\
\mu &= \frac{1}{1260\sqrt{2}}[-540e^{-\frac{E_1}{T}} - 504e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 210e^{-\frac{E_{13}}{T}} - 420e^{-\frac{E_{15}}{T}} - 420e^{-\frac{E_{17}}{T}} + \\
&378e^{-\frac{E_{18}}{T}} - 630e^{-\frac{E_2}{T}} + 168e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 504e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 420e^{-\frac{E_{23}}{T}} + 315e^{-\frac{E_3}{T}} + 420e^{-\frac{E_7}{T}} - \\
&280e^{-\frac{E_8}{T}}], \\
\nu &= \frac{1}{120}[20e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 20e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 20e^{-\frac{E_{17}}{T}} + 36e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 10e^{-\frac{E_2}{T}} + 40e^{-\frac{E_{20}}{T}} + 48e^{-\frac{E_{21}}{T}} + \\
&16e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 45e^{-\frac{E_3}{T}} + 40e^{-\frac{E_6}{T}} + 40e^{-\frac{E_9}{T}}], \\
\xi &= \frac{1}{30\sqrt{2}}[5e^{-\frac{E_{13}}{T}} - 10e^{-\frac{E_{15}}{T}} - 5e^{-\frac{E_2}{T}} + 10e^{-\frac{E_{20}}{T}} + 12e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 4e^{-\frac{E_{22}}{T}} - 20e^{-\frac{E_6}{T}} + \\
&10e^{-\frac{E_9}{T}}], \\
\tau &= \frac{1}{14}e^{-\frac{E_1}{T}} + \frac{1}{4}e^{-\frac{E_{13}}{T}} + \frac{3}{8}e^{-\frac{E_{14}}{T}} + \frac{1}{8}e^{-\frac{E_{16}}{T}} + \frac{1}{20}e^{-\frac{E_{18}}{T}} + e^{-\frac{E_{19}}{T}} + \frac{1}{2}e^{-\frac{E_{20}}{T}} + \frac{1}{5}e^{-\frac{E_{21}}{T}} + \\
&\frac{1}{4}e^{-\frac{E_5}{T}} + \frac{1}{2}e^{-\frac{E_7}{T}},
\end{aligned}$$

ile ifade edilmektedir. Burada manyetik alan $0.0 \leq B_z \leq 5.0$ aralığında değişirken, sıcaklığın değeri $0.0 < T \leq 10.0$ aralığında alınarak dolaşıklık nümerik olarak hesaplanmıştır. 1. ve 2. spinlerin arasındaki ısısal dolaşıklığın B_z manyetik alanına ve T sıcaklığına bağlı değişimi şekil 3.23'de bazı manyetik alan değerleri için görülmektedir.



Şekil 3.23. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ Sisteminde $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1)$ Alt Sisteminin Isısal Dolaşıklık Grafiği.

Sistemin ısısal durum yoğunluk matrisinin ikinci ve üçüncü spinlere indirgenmiş haldeki $\rho_{23}(T)$ indirgenmiş yoğunluk matrisinin ikinci alt sisteme göre kısmi transpozu alınarak elde edilen yoğunluk matrisi

$$\rho_{23}^{T_2}(T) = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & \Xi & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma & 0 \\ 0 & \delta & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & \Gamma \\ 0 & 0 & \zeta & 0 & 0 & 0 & 0 & \eta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \theta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \vartheta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \iota & 0 \\ \kappa & 0 & 0 & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & \nu & 0 & 0 & 0 & 0 & \xi & 0 & 0 & 0 & 0 & \varpi \\ 0 & 0 & \Delta & 0 & 0 & 0 & 0 & \partial & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \varsigma & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \tau & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \upsilon & 0 \\ \phi & 0 & 0 & 0 & 0 & \varphi & 0 & 0 & 0 & 0 & \chi & 0 \\ 0 & \Phi & 0 & 0 & 0 & 0 & \omega & 0 & 0 & 0 & 0 & \Omega \end{pmatrix}, \quad (3.152)$$

şeklinde olup, burada

$$\alpha = \frac{3}{4}e^{-\frac{E_{11}}{T}} + \frac{1}{6}e^{-\frac{E_{23}}{T}} + e^{-\frac{E_{24}}{T}},$$

$$\Xi = \frac{1}{20\sqrt{6}}[-24e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 8e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 20e^{-\frac{E_{23}}{T}} - 15e^{-\frac{E_3}{T}}],$$

$$\gamma = \frac{1}{40\sqrt{3}}[-12e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 10e^{-\frac{E_{13}}{T}} - 15e^{-\frac{E_{14}}{T}} - 15e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 8e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 20e^{-\frac{E_4}{T}} - 20e^{-\frac{E_9}{T}}],$$

$$\varepsilon = \frac{1}{60\sqrt{3}}[-12e^{-\frac{E_{10}}{T}} - 10e^{-\frac{E_{13}}{T}} - 20e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 20e^{-\frac{E_{17}}{T}} + 18e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 24e^{-\frac{E_{22}}{T}} - 15e^{-\frac{E_3}{T}} - 20e^{-\frac{E_4}{T}}],$$

$$\Gamma = \frac{1}{280\sqrt{3}}[-60e^{-\frac{E_1}{T}} + 70e^{-\frac{E_{13}}{T}} - 105e^{-\frac{E_{14}}{T}} - 105e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 42e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 56e^{-\frac{E_{21}}{T}} - 140e^{-\frac{E_7}{T}}],$$

$$\zeta = \frac{1}{120}[12e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 10e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{14}}{T}} + 40e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 45e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 40e^{-\frac{E_{17}}{T}} + 18e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 24e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 30e^{-\frac{E_3}{T}} + 20e^{-\frac{E_4}{T}} + 60e^{-\frac{E_9}{T}}],$$

$$\delta = \frac{1}{40}[8e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 5e^{-\frac{E_{11}}{T}} + 8e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 4e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 10e^{-\frac{E_{23}}{T}} + 5e^{-\frac{E_3}{T}}],$$

$$\eta = \frac{1}{10\sqrt{6}}[e^{-\frac{E_{13}+E_{18}+E_2+E_{21}}{T}}[4e^{\frac{E_{13}+E_{18}+E_2}{T}} - 5e^{\frac{E_{13}+E_{18}+E_{21}}{T}} + 3e^{\frac{E_{13}+E_2+E_{21}}{T}} - 5e^{\frac{E_{18}+E_2+E_{21}}{T}}]],$$

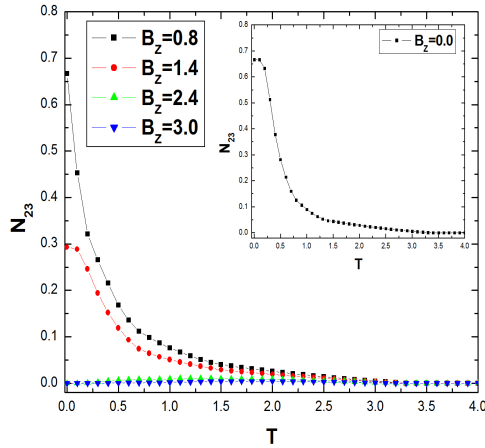
$$\theta = \frac{3}{14}e^{-\frac{E_1}{T}} + \frac{1}{4}e^{-\frac{E_{13}}{T}} + \frac{3}{8}e^{-\frac{E_{14}}{T}} + \frac{1}{8}e^{-\frac{E_{16}}{T}} + \frac{1}{20}e^{-\frac{E_{18}}{T}} + \frac{1}{2}e^{-\frac{E_2}{T}} + \frac{1}{15}e^{-\frac{E_{21}}{T}} + \frac{1}{6}e^{-\frac{E_7}{T}} + \frac{2}{9}e^{-\frac{E_8}{T}},$$

$$\begin{aligned}
\vartheta &= \frac{3}{5}e^{-\frac{E_{12}}{T}} + \frac{2}{15}e^{-\frac{E_{22}}{T}} + \frac{1}{3}e^{-\frac{E_{23}}{T}} + \frac{3}{8}e^{-\frac{E_3}{T}} + \frac{1}{3}e^{-\frac{E_9}{T}}, \\
\iota &= \frac{1}{10\sqrt{6}}(e^{-\frac{E_{13}+E_{18}+E_{22}+E_{10}+E_4}{T}}(-10e^{\frac{E_{13}+E_{18}+E_{22}+E_{10}}{T}} + 4e^{\frac{E_{13}+E_{18}+E_{10}+E_4}{T}} \\
&\quad + 3e^{\frac{E_{13}+E_{22}+E_4+E_{10}}{T}} - 5e^{\frac{E_{18}+E_{22}+E_4+E_{10}}{T}})), \\
\kappa &= \frac{1}{20\sqrt{6}}(-24e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 8e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 20e^{-\frac{E_{23}}{T}} - 15e^{-\frac{E_3}{T}}), \\
\Lambda &= \frac{1}{120}[24e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 20e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 20e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 20e^{-\frac{E_{17}}{T}} + 36e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 48e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 15e^{-\frac{E_3}{T}} \\
&\quad + 40e^{-\frac{E_4}{T}}], \\
\mu &= \frac{1}{30\sqrt{2}}[e^{-\frac{E_{13}+E_{15}+E_{17}+E_{18}+E_{21}}{T}}[12e^{\frac{E_{13}+E_{15}+E_{17}+E_{18}}{T}} + 9e^{\frac{E_{13}+E_{15}+E_{17}+E_{21}}{T}} \\
&\quad + 10e^{\frac{E_{13}+E_{15}+E_{18}+E_{21}}{T}} - 10e^{\frac{E_{13}+E_{17}+E_{18}+E_{21}}{T}} - 5e^{\frac{E_{15}+E_{17}+E_{18}+E_{21}}{T}}]], \\
\nu &= \frac{1}{60\sqrt{2}}[-12e^{-\frac{E_{10}}{T}} - 10e^{-\frac{E_{13}}{T}} - 20e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 20e^{-\frac{E_{17}}{T}} + 18e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 24e^{-\frac{E_{22}}{T}} \\
&\quad - 15e^{-\frac{E_3}{T}} - 20e^{-\frac{E_4}{T}}], \\
\xi &= \frac{1}{60}[10e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 10e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 10e^{-\frac{E_{17}}{T}} + 18e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 5e^{-\frac{E_2}{T}} + 24e^{-\frac{E_{21}}{T}}], \\
\varpi &= \frac{1}{210\sqrt{6}}[-180e^{-\frac{E_1}{T}} - 105e^{-\frac{E_2}{T}} - 210e^{-\frac{E_{20}}{T}} + 84e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 140e^{-\frac{E_8}{T}}], \\
\Delta &= \frac{1}{10\sqrt{6}}[e^{-\frac{E_{13}+E_{18}+E_2+E_{21}}{T}}[4e^{\frac{E_{13}+E_{18}+E_2}{T}} - 5e^{\frac{E_{13}+E_{18}+E_{21}}{T}} + 3e^{\frac{E_{13}+E_2+E_{21}}{T}} - 5e^{\frac{E_{18}+E_2+E_{21}}{T}}]], \\
\partial &= \frac{3}{7}e^{-\frac{E_1}{T}} + \frac{1}{4}e^{-\frac{E_2}{T}} + \frac{1}{3}e^{-\frac{E_7}{T}} + \frac{2}{15}e^{-\frac{E_{21}}{T}} + \frac{1}{3}e^{-\frac{E_6}{T}} + \frac{1}{3}e^{-\frac{E_7}{T}} + \frac{1}{9}e^{-\frac{E_8}{T}}, \\
\varsigma &= \frac{1}{120}[36e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 30e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 45e^{-\frac{E_{14}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 8e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 60e^{-\frac{E_4}{T}} \\
&\quad + 20e^{-\frac{E_9}{T}}], \\
\tau &= \frac{1}{10\sqrt{6}}[e^{-\frac{E_{10}+E_{13}+E_{18}+E_{22}+E_4}{T}}[-10e^{\frac{E_{10}+E_{13}+E_{18}+E_{22}}{T}} + 4e^{\frac{E_{10}+E_{13}+E_{18}+E_4}{T}} \\
&\quad + 3e^{\frac{E_{10}+E_{13}+E_{22}+E_4}{T}} - 5e^{\frac{E_{10}+E_{18}+E_{22}+E_4}{T}} + 6e^{\frac{E_{13}+E_{18}+E_{22}+E_4}{T}}]], \\
v &= \frac{1}{14}e^{-\frac{E_1}{T}} + \frac{1}{12}e^{-\frac{E_{13}}{T}} + \frac{1}{8}e^{-\frac{E_{14}}{T}} + \frac{1}{3}e^{-\frac{E_{15}}{T}} + \frac{3}{8}e^{-\frac{E_{16}}{T}} + \frac{1}{3}e^{-\frac{E_{17}}{T}} + \frac{3}{20}e^{-\frac{E_{18}}{T}} + \frac{1}{5}e^{-\frac{E_{21}}{T}} + \\
&\quad \frac{1}{2}e^{-\frac{E_7}{T}}, \\
\phi &= \frac{1}{40\sqrt{3}}[-12e^{-\frac{E_{10}}{T}} - 10e^{-\frac{E_{13}}{T}} - 15e^{-\frac{E_{14}}{T}} - 15e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 8e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 20e^{-\frac{E_4}{T}} \\
&\quad - 20e^{-\frac{E_9}{T}}], \\
\varphi &= \frac{1}{30\sqrt{2}}[e^{-\frac{E_{13}+E_{15}+E_{17}+E_{18}+E_{21}}{T}}[12e^{\frac{E_{13}+E_{15}+E_{17}+E_{18}}{T}} + 9e^{\frac{E_{13}+E_{15}+E_{17}+E_{21}}{T}} \\
&\quad + 10e^{\frac{E_{13}+E_{15}+E_{18}+E_{21}}{T}} - 10e^{\frac{E_{13}+E_{17}+E_{18}+E_{21}}{T}} - 5e^{\frac{E_{15}+E_{17}+E_{18}+E_{21}}{T}}]], \\
\chi &= \frac{2}{7}e^{-\frac{E_1}{T}} + \frac{1}{6}e^{-\frac{E_2}{T}} + \frac{1}{2}e^{-\frac{E_{20}}{T}} + \frac{1}{5}e^{-\frac{E_{21}}{T}} + \frac{1}{4}e^{-\frac{E_5}{T}} + \frac{2}{3}e^{-\frac{E_8}{T}}, \\
\Phi &= \frac{1}{280\sqrt{3}}[-60e^{-\frac{E_1}{T}} - 70e^{-\frac{E_{13}}{T}} - 105e^{-\frac{E_{14}}{T}} - 105e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 42e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 56e^{-\frac{E_{22}}{T}} \\
&\quad - 140e^{-\frac{E_7}{T}}],
\end{aligned}$$

$$\omega = \frac{1}{210\sqrt{6}}[-180e^{-\frac{E_1}{T}} - 105e^{-\frac{E_2}{T}} - 210e^{-\frac{E_{20}}{T}} 84e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 140e^{-\frac{E_8}{T}}],$$

$$\Omega = \frac{1}{6}e^{-\frac{E_{20}}{T}} + \frac{3}{4}e^{-\frac{E_5}{T}} + \frac{2}{3}e^{-\frac{E_6}{T}} + e^{-\frac{E_{19}}{T}},$$

ile ifade edilmektedir. 2. ve 3. spin arasındaki ısısal dolaşıklık B_z manyetik alanına ve T sıcaklığına bağlı değişimi şekil 3.24'te görülmektedir.



Şekil 3.24. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ Sisteminde $\text{Spin}(1, \frac{3}{2})$ Alt Sisteminin Isısal Dolaşıklık Grafiği.

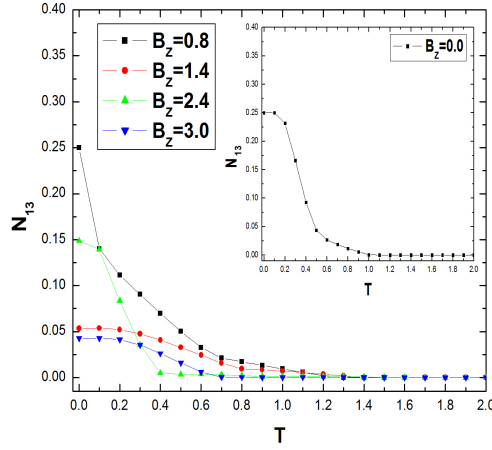
Sistemin ısısal durum yoğunluk matrisinin birinci ve üçüncü spinlere indirgenmiş haldeki $\rho_{13}(T)$ matrisinin birinci alt sisteme göre kısmi transpozunu alınarak elde edilen yoğunluk matrisi

$$\rho_{13}^{T_1}(T) = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta & 0 & 0 \\ 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & \delta & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & \zeta \\ 0 & 0 & 0 & \eta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \theta & 0 & 0 & 0 \\ \kappa & 0 & 0 & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 \\ 0 & \mu & 0 & 0 & 0 & 0 & \nu & 0 \\ 0 & 0 & \xi & 0 & 0 & 0 & 0 & \tau \end{pmatrix}, \quad (3.153)$$

elde edildi. Burada

$$\begin{aligned}
\alpha &= \frac{1}{30}(9e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 18e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 2e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 10e^{-\frac{E_{23}}{T}} + 30e^{-\frac{E_{24}}{T}} + 15e^{-\frac{E_4}{T}} + 5e^{-\frac{E_9}{T}}), \\
\Delta &= \frac{1}{40\sqrt{3}}(-30e^{-\frac{E_{11}}{T}} - 10e^{-\frac{E_{13}}{T}} - 15e^{-\frac{E_{14}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 16e^{-\frac{E_{22}}{T}} + \\
&20e^{-\frac{E_{23}}{T}} - 15e^{-\frac{E_3}{T}}), \\
\gamma &= \frac{1}{120}(24e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 30e^{-\frac{E_{11}}{T}} + 48e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 10e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{14}}{T}} + 40e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 45e^{-\frac{E_{16}}{T}} + \\
&40e^{-\frac{E_{17}}{T}} + 18e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 48e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 60e^{-\frac{E_{23}}{T}} + 15e^{-\frac{E_3}{T}} + 40e^{-\frac{E_4}{T}}), \\
\delta &= \frac{1}{420}(-60e^{-\frac{E_1}{T}} + 84e^{-\frac{E_{10}}{T}} - 70e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 70e^{-\frac{E_{15}}{T}} - 70e^{-\frac{E_{17}}{T}} + 126e^{-\frac{E_{18}}{T}} + \\
&84e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 84e^{-\frac{E_{22}}{T}} - 105e^{-\frac{E_3}{T}}), \\
\varepsilon &= \frac{1}{420}(120e^{-\frac{E_1}{T}} + 42e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 70e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 70e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 70e^{-\frac{E_{17}}{T}} + 126e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 70e^{-\frac{E_2}{T}} + \\
&84e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 84e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 105e^{-\frac{E_3}{T}} + 70e^{-\frac{E_4}{T}} + 280e^{-\frac{E_8}{T}} + 210e^{-\frac{E_9}{T}}), \\
\zeta &= \frac{1}{40\sqrt{3}}(-10e^{-\frac{E_{13}}{T}} - 15e^{-\frac{E_{14}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 10e^{-\frac{E_2}{T}} + 20e^{-\frac{E_{20}}{T}} + \\
&16e^{-\frac{E_{21}}{T}} - 30e^{-\frac{E_5}{T}}), \\
\eta &= \frac{3}{7}e^{-\frac{E_1}{T}} + \frac{1}{4}e^{-\frac{E_{13}}{T}} + \frac{3}{8}e^{-\frac{E_{14}}{T}} + \frac{1}{8}e^{-\frac{E_{16}}{T}} + \frac{1}{20}e^{-\frac{E_{18}}{T}} + \frac{1}{4}e^{-\frac{E_2}{T}} + \frac{1}{6}e^{-\frac{E_{20}}{T}} + \frac{2}{15}e^{-\frac{E_{21}}{T}} + \\
&\frac{3}{4}e^{-\frac{E_5}{T}} + \frac{2}{3}e^{-\frac{E_6}{T}} + \frac{1}{3}e^{-\frac{E_7}{T}} + \frac{1}{9}e^{-\frac{E_8}{T}}, \\
\theta &= \frac{1}{120}(90e^{-\frac{E_{11}}{T}} + 30e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 45e^{-\frac{E_{14}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 16e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 20e^{-\frac{E_{23}}{T}} + \\
&45e^{-\frac{E_3}{T}} + 40e^{-\frac{E_9}{T}}), \\
\kappa &= \frac{1}{40\sqrt{3}}(-30e^{-\frac{E_{11}}{T}} - 10e^{-\frac{E_{13}}{T}} - 15e^{-\frac{E_{14}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 16e^{-\frac{E_{22}}{T}} + \\
&20e^{-\frac{E_{23}}{T}} - 15e^{-\frac{E_3}{T}}), \\
\Lambda &= \frac{1}{420}(30e^{-\frac{E_1}{T}} + 168e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 70e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 70e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 70e^{-\frac{E_{17}}{T}} + 126e^{-\frac{E_{18}}{T}} + \\
&84e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 84e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 105e^{-\frac{E_3}{T}} + 210e^{-\frac{E_7}{T}}), \\
\mu &= \frac{1}{420}(-60e^{-\frac{E_1}{T}} + 84e^{-\frac{E_{10}}{T}} - 70e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 70e^{-\frac{E_{15}}{T}} - 70e^{-\frac{E_{17}}{T}} + 126e^{-\frac{E_{18}}{T}} + \\
&84e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 84e^{-\frac{E_{22}}{T}} - 105e^{-\frac{E_3}{T}}), \\
\nu &= \frac{1}{120}(10e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{14}}{T}} + 40e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 45e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 40e^{-\frac{E_{17}}{T}} + 18e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 10e^{-\frac{E_2}{T}} + \\
&60e^{-\frac{E_{20}}{T}} + 48e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 30e^{-\frac{E_5}{T}}), \\
\xi &= \frac{1}{40\sqrt{3}}(-10e^{-\frac{E_{13}}{T}} - 15e^{-\frac{E_{14}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 10e^{-\frac{E_2}{T}} + 20e^{-\frac{E_{20}}{T}} + \\
&16e^{-\frac{E_{21}}{T}} - 30e^{-\frac{E_5}{T}}), \\
\tau &= \frac{3}{14}e^{-\frac{E_1}{T}} + e^{-\frac{E_{13}}{T}} + \frac{1}{2}e^{-\frac{E_2}{T}} + \frac{1}{3}e^{-\frac{E_{20}}{T}} + \frac{1}{15}e^{-\frac{E_{21}}{T}} + \frac{1}{3}e^{-\frac{E_6}{T}} + \frac{1}{6}e^{-\frac{E_7}{T}} + \frac{2}{9}e^{-\frac{E_8}{T}},
\end{aligned}$$

ile ifade edilmektedir. 1. ve 3. spinlerin arasındaki ısısal dolaşıklık B_z manyetik alanına ve T sıcaklığına bağlı değişimi şekil 3.25'te görülmektedir.



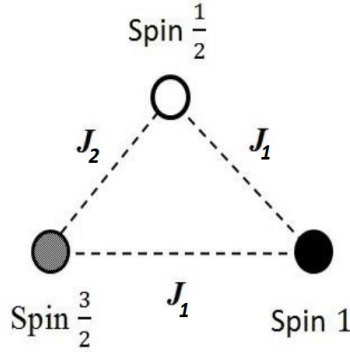
Şekil 3.25. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ Sisteminde $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ Alt Sisteminin Isısal Dolaşıklık Grafiği.

Sıfırdan farklı sıcaklıklarda sistem, tüm kuantum durumlarının Boltzmann ağırlıklarıyla orantılı bir karışımından oluşur. Sistemimize ait ikili ısısal dolaşıklıkların farklı manyetik alan değerleri için sıcaklığa göre değişimleri sırasıyla şekil 3.23, şekil 3.24 ve şekil 3.25'te görülmektedir. Bilindiği üzere sıcaklık arttıkça dolaşıklık azalmakta ve bir kritik T_c değerinden sonra dolaşıklık kaybolmaktadır. 1. ve 2. spinler için $B_z = 0.0$ olduğu durumda $N_{12} = 0.0$ olmaktadır ve kritik sıcaklık T_c , manyetik alan B_z arttıkça kademeli olarak artmaktadır. Şekil 3.23'ten de görülebileceği gibi T_c , manyetik alanın 0.8, 1.4, 2.4 ve 3.0 değerleri için sırasıyla 1.1, 1.7, 2.5 ve 2.9'dur. Ancak bu davranış düşük sıcaklıklarda bile N_{12} 'nin küçük değerler alması nedeniyle çok dikkat çekici değildir. Benzer bir durum şekil 3.25'te de görülen N_{13} için de söylenebilir. Buradaki tek fark $B_z = 0.0$ için negatifliğin sıfırdan farklı olmasıdır. 2. ile 3. spinler arasındaki negatiflik değerlerine baktığımızda, şekil 3.24'ten görüldüğü

gibi düşük manyetik alan ve düşük sıcaklık değerleri için N_{23} 'ün yüksek değerler aldığı gözlenir. Ancak sıcaklığın veya manyetik alanın veya her ikisinin birden artmasıyla N_{23} 'ün azaldığı görülür. Farklı manyetik alan değerleri için kritik sıcaklıklara baktığımızda ise manyetik alanın olmadığı durumda $T_c = 3.4$ iken örneğin $B_z = 0.8$ için $T_c = 3.3$ olmaktadır ve buradan manyetik alanın artışının kritik sıcaklığı kademeli olarak azalttığı söylenebilir.

3.2.3.2. En Yakın ve İkinci En Yakın Komşu Etkileşmeleri Durumu

Çalışmamızın bu son kısmında ise yine z yönünde homojen bir manyetik alanın olduğu durumda $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ karma tip Heisenberg XXX spin sisteminde, sadece en yakın komşu etkileşmelerini (NN) değil ikinci en yakın komşu spin etkileşmelerini (NNN) de dikkate aldık ve en yakın komşu etkileşmeleri $\text{spin}-\frac{1}{2}$ ile $\text{spin}-1$ ve $\text{spin}-1$ ile $\text{spin}-\frac{3}{2}$ arasında, ikinci en yakın komşu etkileşmelerini de $\text{spin}-\frac{3}{2}$ ile $\text{spin}-\frac{1}{2}$ arasında olacak şekilde tanımlayıp, bu sistem için taban durum ve ısısal durum dolaşıklıklarını inceledik.



Şekil 3.26. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ NN ve NNN Etkileşmeleri Modeli.

Farklı seviyelere sahip spinlerin arasında periyodik sınır koşulları altında en yakın komşu (NN) ve ikinci en yakın komşu (NNN) etkileşmelerinin olduğu durumda ele aldığımız sistemimizin Hamiltoniyeni şöyledir,

$$H = J_1 [(\sigma_1^x s_2^x + \sigma_1^y s_2^y + \sigma_1^z s_2^z) + (s_2^x s_3^x + s_2^y s_3^y + s_2^z s_3^z)]$$

$$+J_2[(S_3^x\sigma_1^x+S_3^y\sigma_1^y+S_3^z\sigma_1^z)]+B_z[\sigma_1^z+s_2^z+S_3^z]. \quad (3.154)$$

Hamiltonyenimizin özdeğer ve özvektörleri aşağıdaki gibi elde edilir. Özdeğerlerimiz

$$E_1 = \frac{-5J_2-8J_1}{4}, \quad (3.155)$$

$$E_{2,5} = \frac{-5J_2\mp 4J_1}{4}, \quad (3.156)$$

$$E_{3,4} = \frac{-5J_2-4J_1\mp 4B_z}{4}, \quad (3.157)$$

$$E_{6,9} = \frac{-5J_2+4J_1\mp 8B_z}{4}, \quad (3.158)$$

$$E_{7,8} = \frac{-5J_2+4J_1\mp 4B_z}{4}, \quad (3.159)$$

$$E_{10} = \frac{3J_2-12J_1}{4}, \quad (3.160)$$

$$E_{11,12} = \frac{3J_2-12J_1\mp 4B_z}{4}, \quad (3.161)$$

$$E_{13} = \frac{3J_2-4J_1}{4}, \quad (3.162)$$

$$E_{14,17} = \frac{3J_2-4J_1\mp 8B_z}{4}, \quad (3.163)$$

$$E_{15,16} = \frac{3J_2-4J_1\mp 4B_z}{4}, \quad (3.164)$$

$$E_{18} = \frac{3J_2+8J_1}{4}, \quad (3.165)$$

$$E_{19,24} = \frac{3J_2+8J_1\mp 12B_z}{4}, \quad (3.166)$$

$$E_{20,23} = \frac{3J_2+8J_1\mp 8B_z}{4}, \quad (3.167)$$

$$E_{21,22} = \frac{3J_2+8J_1\mp 4B_z}{4}, \quad (3.168)$$

olmaktadır. Bu özdeğerlere karşılık gelen özvektörlerimiz ise

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle = & \frac{1}{2}\left[-\left|\frac{1}{2},1,-\frac{3}{2}\right\rangle+\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{1}{2},0,-\frac{1}{2}\right\rangle-\frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2},-1,\frac{3}{2}\right\rangle\right. \\ & \left.+\frac{1}{\sqrt{3}}\left|-\frac{1}{2},1,-\frac{1}{2}\right\rangle-\sqrt{\frac{2}{3}}\left|-\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right\rangle+\left|-\frac{1}{2},-1,\frac{3}{2}\right\rangle\right], \end{aligned} \quad (3.169)$$

$$\begin{aligned}
|\psi_2\rangle &= \sqrt{\frac{3}{8}}\left[\left|\frac{1}{2}, 1, -\frac{3}{2}\right\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2}\right\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}\left|-\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}\right\rangle\right. \\
&\quad \left. + \left|-\frac{1}{2}, -1, \frac{3}{2}\right\rangle\right], \tag{3.170}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|\psi_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left[\sqrt{\frac{3}{2}}\left|\frac{1}{2}, 0, -\frac{3}{2}\right\rangle - \left|\frac{1}{2}, -1, -\frac{1}{2}\right\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}\left|-\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}\right\rangle\right. \\
&\quad \left. + \left|-\frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2}\right\rangle\right], \tag{3.171}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|\psi_4\rangle &= \sqrt{\frac{3}{8}}\left[\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}\right\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}\left|-\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}\right\rangle\right. \\
&\quad \left. + \left|-\frac{1}{2}, 0, \frac{3}{2}\right\rangle\right], \tag{3.172}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|\psi_5\rangle &= \frac{1}{\sqrt{8}}\left[-\left|\frac{1}{2}, 1, -\frac{3}{2}\right\rangle - 2\sqrt{23}\left|\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}\right\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2}\right\rangle\right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{\sqrt{3}}\left|-\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}\right\rangle + 2\sqrt{23}\left|-\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, -1, \frac{3}{2}\right\rangle\right], \tag{3.173}
\end{aligned}$$

$$|\psi_6\rangle = \frac{1}{2}\left[-\sqrt{3}\left|\frac{1}{2}, -1, -\frac{3}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, -1, -\frac{1}{2}\right\rangle\right], \tag{3.174}$$

$$\begin{aligned}
|\psi_7\rangle &= \frac{1}{2}\left[-\sqrt{32}\left|\frac{1}{2}, 0, -\frac{3}{2}\right\rangle - \left|\frac{1}{2}, -1, -\frac{1}{2}\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\left|-\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}\right\rangle\right. \\
&\quad \left. + \left|-\frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2}\right\rangle\right], \tag{3.175}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|\psi_8\rangle &= \sqrt{\frac{3}{8}}\left[-\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}\right\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\left|-\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}\right\rangle\right. \\
&\quad \left. + \left|-\frac{1}{2}, 0, \frac{3}{2}\right\rangle\right], \tag{3.176}
\end{aligned}$$

$$|\psi_9\rangle = \sqrt{\frac{3}{4}}\left[-\frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}\right\rangle\right], \tag{3.177}$$

$$\begin{aligned}
|\psi_{10}\rangle &= \sqrt{\frac{3}{40}}\left[\left|\frac{1}{2}, 1, -\frac{3}{2}\right\rangle - 2\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{3}\left|\frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2}\right\rangle\right. \\
&\quad \left. + \sqrt{3}\left|-\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}\right\rangle - 2\sqrt{\frac{2}{3}}\left|-\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, -1, \frac{3}{2}\right\rangle\right], \tag{3.178}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|\psi_{11}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{20}}\left[-\sqrt{\frac{3}{2}}\left|\frac{1}{2}, 0, -\frac{3}{2}\right\rangle + \left|\frac{1}{2}, -1, -\frac{1}{2}\right\rangle + 2\sqrt{3}\left|-\frac{1}{2}, 1, -\frac{3}{2}\right\rangle\right. \\
&\quad \left. - \frac{3}{\sqrt{2}}\left|-\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2}\right\rangle\right], \tag{3.179}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|\psi_{12}\rangle &= \sqrt{\frac{3}{40}}[-\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{3}\left|\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right\rangle - 2\sqrt{2}\left|\frac{1}{2}, -1, \frac{3}{2}\right\rangle \\
&\quad - \sqrt{\frac{2}{3}}\left|-\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, 0, \frac{3}{2}\right\rangle],
\end{aligned} \tag{3.180}$$

$$\begin{aligned}
|\psi_{13}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{8}}[-\left|\frac{1}{2}, 1, -\frac{3}{2}\right\rangle + \sqrt{3}\left|\frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2}\right\rangle - \sqrt{3}\left|-\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}\right\rangle \\
&\quad + \left|-\frac{1}{2}, -1, \frac{3}{2}\right\rangle],
\end{aligned} \tag{3.181}$$

$$\begin{aligned}
|\psi_{14}\rangle &= \frac{1}{2}\left[\frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2}, -1, -\frac{3}{2}\right\rangle + 2\sqrt{\frac{2}{3}}\left|-\frac{1}{2}, 0, -\frac{3}{2}\right\rangle \right. \\
&\quad \left. + \left|-\frac{1}{2}, -1, -\frac{1}{2}\right\rangle\right],
\end{aligned} \tag{3.182}$$

$$\begin{aligned}
|\psi_{15}\rangle &= \frac{1}{2}\left[-\frac{1}{\sqrt{6}}\left|\frac{1}{2}, 0, -\frac{3}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, -1, -\frac{1}{2}\right\rangle - \frac{2}{\sqrt{3}}\left|-\frac{1}{2}, 1, -\frac{3}{2}\right\rangle \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{\sqrt{2}}\left|-\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2}\right\rangle\right],
\end{aligned} \tag{3.183}$$

$$\begin{aligned}
|\psi_{16}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{24}}[-\sqrt{6}\left|\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{3}\left|\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right\rangle + 2\sqrt{2}\left|\frac{1}{2}, -1, \frac{3}{2}\right\rangle \\
&\quad - \sqrt{6}\left|-\frac{1}{2}, 1, -\frac{3}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, 0, \frac{3}{2}\right\rangle],
\end{aligned} \tag{3.184}$$

$$|\psi_{17}\rangle = \frac{1}{\sqrt{12}}[\sqrt{3}\left|\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}\right\rangle + 2\sqrt{2}\left|\frac{1}{2}, 0, \frac{3}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}\right\rangle], \tag{3.185}$$

$$\begin{aligned}
|\psi_{18}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{20}}\left[\left|\frac{1}{2}, 1, -\frac{3}{2}\right\rangle + \sqrt{6}\left|\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{3}\left|\frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{3}\left|-\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}\right\rangle \right. \\
&\quad \left. + \sqrt{6}\left|-\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, -1, \frac{3}{2}\right\rangle\right],
\end{aligned} \tag{3.186}$$

$$|\psi_{19}\rangle = \left|-\frac{1}{2}, -1, -\frac{3}{2}\right\rangle, \tag{3.187}$$

$$|\psi_{20}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2}, -1, -\frac{3}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\left|-\frac{1}{2}, 0, -\frac{3}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, -1, -\frac{1}{2}\right\rangle\right], \tag{3.188}$$

$$\begin{aligned}
|\psi_{21}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{5}}\left[\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{1}{2}, 0, -\frac{3}{2}\right\rangle + \left|\frac{1}{2}, -1, -\frac{1}{2}\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}\left|-\frac{1}{2}, 1, -\frac{3}{2}\right\rangle \right. \\
&\quad \left. + \sqrt{2}\left|-\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2}\right\rangle\right],
\end{aligned} \tag{3.189}$$

$$\begin{aligned}
|\psi_{22}\rangle &= \sqrt{\frac{2}{15}}[\sqrt{\frac{3}{2}}\left|\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{3}\left|\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\left|\frac{1}{2}, -1, \frac{3}{2}\right\rangle \\
&\quad + \sqrt{\frac{3}{2}}\left|-\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, 0, \frac{3}{2}\right\rangle], \quad (3.190)
\end{aligned}$$

$$|\psi_{23}\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}[\sqrt{3}\left|\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{2}\left|\frac{1}{2}, 0, \frac{3}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}\right\rangle], \quad (3.191)$$

$$|\psi_{24}\rangle = \left|\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}\right\rangle, \quad (3.192)$$

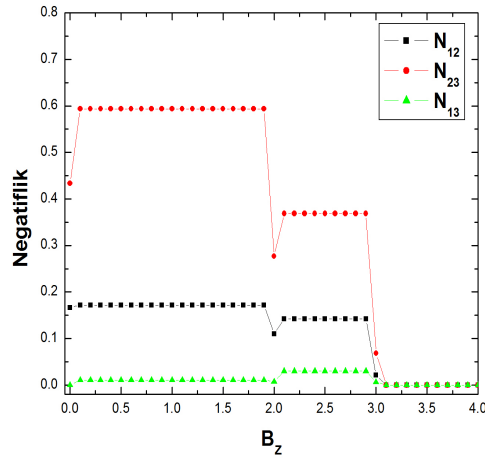
şeklinde olmaktadır. Hamiltonyenimizde en yakın komşu spin etkileşmesi için değiş tokuş parametresi $J_1 = 1$ seçilip, ikinci en yakın komşu etkileşmesi için değiş tokuş parametresi $J_2 = J$ olarak alınmış ve J 'nin, $[0, 1]$ aralığında değişimi incelenmiştir.

Taban Durum Hesaplamaları

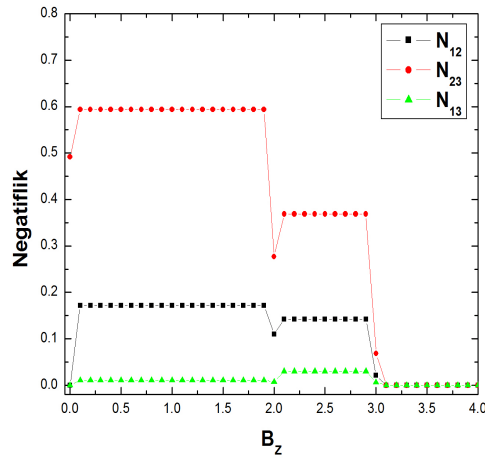
Bu kısımda ilk olarak, ikinci en yakın komşu spinler (NNN) arası değiş tokuş çiftlenim sabiti J 'nin farklı değerleri için taban durumlara ait ikili dolaşıklıklara bakacak olursak $J = 0.0, 0.5, 0.6$, ve 1.0 değerleri için taban durum dolaşıklığının manyetik alana göre değişimleri sırasıyla şekil 3.27, şekil 3.28, şekil 3.29 ve şekil 3.30'de görülmektedir.

A) Şekil 3.27'den görüldüğü gibi $J = 0.0$ ($0.0 \leq J \leq 0.4$ değerlerini de kapsar) değeri için manyetik alanın $B_z = 0.0$ değerinde taban durum $|\psi_{10}\rangle$, $|\psi_{11}\rangle$ ve $|\psi_{12}\rangle$ şeklinde olup üç katlı dejeneredir ve yoğunluk matrisi $\rho^A = \frac{1}{3}|\psi_{10}\rangle\langle\psi_{10}| + \frac{1}{3}|\psi_{11}\rangle\langle\psi_{11}| + \frac{1}{3}|\psi_{12}\rangle\langle\psi_{12}|$ şeklinde olmaktadır. $J = 0.0$ ve $B_z = 0.0$ değerleri için negatiflikler $N_{12}^A = 0.17$, $N_{23}^A = 0.43$ ve $N_{13}^A = 0.0$ değerine sahip olmaktadır.

Manyetik alanın artışı ile birlikte $0.0 < B_z < 2.0$ aralığında taban durum $|\psi_{11}\rangle$ şeklinde dejenere değildir ve yoğunluk matrisi $\rho^A = |\psi_{11}\rangle\langle\psi_{11}|$ şeklinde olmaktadır. Bu durumda $N_{12}^A = 0.17$ şeklinde yine aynı değeri alırken, $N_{23}^A = 0.59$ ve $N_{13}^A = 0.01$ değerinde plato yapısı göstermektedir.

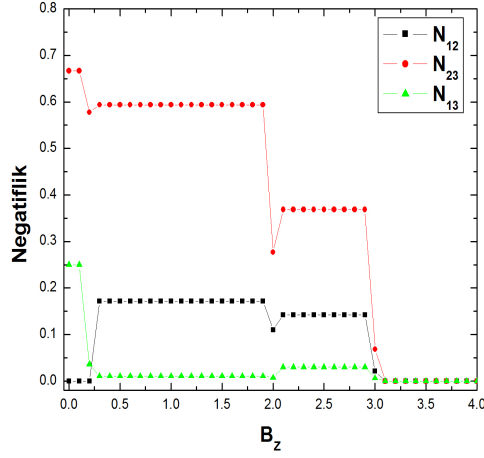


Şekil 3.27. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ NN ve NNN Taban Durum Dolaşıklıkları ($J=0.0$).

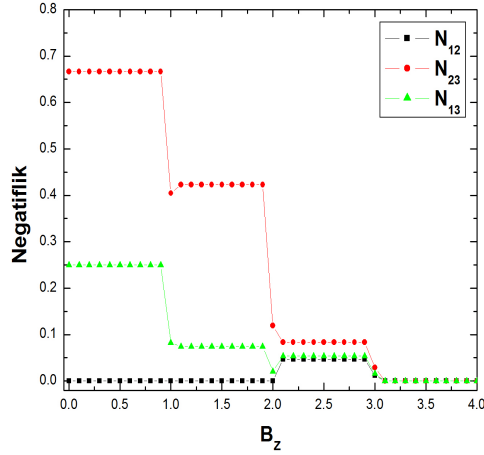


Şekil 3.28. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ NN ve NNN Taban Durum Dolaşıklıkları ($J=0.5$).

$B_z = 2.0$ için taban durum $|\psi_{11}\rangle$ ve $|\psi_{14}\rangle$ şeklinde iki katlı dejenere olup yoğunluk matrisi $\rho^A = \frac{1}{2}|\psi_{11}\rangle\langle\psi_{11}| + \frac{1}{2}|\psi_{14}\rangle\langle\psi_{14}|$ şeklinde olmaktadır. $B_z = 2.0$ için negatiflik değerleri $N_{12}^A = 0.11$, $N_{23}^A = 0.28$ ve $N_{13}^A = 0.01$ olarak bulunur.



Şekil 3.29. Spin($\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}$) NN ve NNN Taban Durum Dolaşıklıkları ($J=0.6$).



Şekil 3.30. Spin($\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}$) NN ve NNN Taban Durum Dolaşıklıkları ($J=1.0$).

Manyetik alanın $2.0 < B_z < 3.0$ aralığında ise taban durum $|\psi_{14}\rangle$ şeklinde olup yoğunluk matrisi $\rho^A = |\psi_{14}\rangle \langle \psi_{14}|$ şeklinde olmaktadır. Burada $N_{12}^A = 0.14$, $N_{23}^A = 0.37$, $N_{13}^A = 0.03$ negatiflik değerlerine sahip platolar gözlenmektedir.

Manyetik alanın $B_z = 3.0$ değeri için taban durum $|\psi_{14}\rangle, |\psi_{19}\rangle$ şeklinde iki katlı dejenere olup yoğunluk matrisi $\rho^A = \frac{1}{2}|\psi_{14}\rangle\langle\psi_{14}| + \frac{1}{2}|\psi_{19}\rangle\langle\psi_{19}|$ olmaktadır. $B_z = 3.0$ için negatiflik $N_{12}^A = 0.02, N_{23}^A = 0.07, N_{13}^A = 0.01$ değerlerine sahip olmaktadır.

$3.0 < B_z \leq 4.0$ için taban durum $|\psi_{19}\rangle$ olup yoğunluk matrisi $\rho^A = |\psi_{19}\rangle\langle\psi_{19}|$ olmaktadır. Manyetik alanın $B_z > 3.0$ değerleri için taban durumlar, $N_{12}^A = N_{23}^A = N_{13}^A = 0.0$ şeklinde dolaşık olmayan değerlere sahip olmaktadır.

B) Şekil 3.28’de ise $J = 0.5$ değeri için taban durum dolaşıklıklarının manyetik alana göre değişimi görülmektedir. Manyetik alanın $B_z = 0.0$ değeri için taban durum $|\psi_1\rangle, |\psi_{10}\rangle, |\psi_{11}\rangle$ ve $|\psi_{12}\rangle$ şeklinde dört katlı dejenere olup yoğunluk matrisi $\rho^B = \frac{1}{4}|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \frac{1}{4}|\psi_{10}\rangle\langle\psi_{10}| + \frac{1}{4}|\psi_{11}\rangle\langle\psi_{11}| + \frac{1}{4}|\psi_{12}\rangle\langle\psi_{12}|$ olmaktadır. $B_z = 0.0$ için $N_{12}^B = 0.0$ ve $N_{13}^B = 0.0$ olurken $N_{23}^B = 0.49$ değeri elde edilmektedir. $J = 0.5$ değeri için N_{12} dolaşık olmayan duruma geçmiştir. N_{23} ’de ise az da olsa artış gözlenmiş olmakla beraber N_{13} ’de bir değişiklik olmayıp dolaşık olmayan durumda kalmıştır. Manyetik alanın artışı ile birlikte dolaşıklık değerleri yine $J = 0.0$ değeri için olan dolaşıklık değerleri ile aynıdır.

C) Şekil 3.29’da ise $J = 0.6$ ($0.6 \leq J \leq 0.9$ değerlerini de kapsar) değeri için taban durum dolaşıklıklarının manyetik alana göre değişimleri görülmektedir. Manyetik alanın $B_z = 0.0$ ve 0.1 değerleri için taban durum $|\psi_1\rangle$ olup dejenere değildir. Yoğunluk matrisi $\rho^C = |\psi_1\rangle\langle\psi_1|$ olmaktadır. Manyetik alanın bu iki değeri için $N_{12}^C = 0.0$ şeklinde dolaşık değilken, $N_{23}^C = 0.67$ ve $N_{13}^C = 0.25$ değerleri ile daha önceki durumlara göre artış göstermektedirler.

Manyetik alanın $B_z = 0.2$ değeri için ise taban durum $|\psi_1\rangle$ ve $|\psi_{11}\rangle$ şeklinde iki katlı dejenere olup yoğunluk matrisi $\rho^C = \frac{1}{2}|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \frac{1}{2}|\psi_{11}\rangle\langle\psi_{11}|$ olmaktadır. $B_z = 0.2$ için dolaşıklık $N_{12}^C = 0.0, N_{23}^C = 0.58$ ve $N_{13}^C = 0.03$ değerlerine düşmektedir.

Manyetik alanı artırmaya devam edersek $0.2 < B_z < 2.0$ aralığında taban durum $|\psi_{11}\rangle$ olup dolaşıklık değerleri yine $N_{12} = 0.17, N_{23} = 0.59$ ve $N_{13} = 0.01$

değerlerinde plato yapısı göstermektedirler. Manyetik alanın $B_z > 2.0$ değerleri için ise dolaşıklık daha önceki J değerleri ile aynı dolaşıklık değerlerini göstermektedir.

$J = 0.7, 0.8$ ve 0.9 için elde edilen sonuçlar da $J = 0.6$ durumunun sonuçları ile aynı olmaktadır.

D) Şekil 3.30'da $J = 1.0$ için dolaşıklıkların manyetik alana göre değişimleri görülmektedir. Manyetik alanın $0.0 \leq B_z < 1.0$ aralığında taban durum $|\psi_1\rangle$ olup $N_{12}^D = 0.0$, $N_{23}^D = 0.67$ ve $N_{13}^D = 0.25$ değerlerini almaktadır. Bu değerler, $J = 0.6$ ve $B_z = 0.0$ için elde edilen sonuçlara eşit olmaktadır.

$B_z = 1.0$ manyetik alan değeri için taban durum $|\psi_1\rangle$, $|\psi_3\rangle$ ve $|\psi_{11}\rangle$ şeklinde üç katlı dejenere olup yoğunluk matrisi $\rho^D = \frac{1}{3}|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \frac{1}{3}|\psi_3\rangle\langle\psi_3| + \frac{1}{3}|\psi_{11}\rangle\langle\psi_{11}|$ olmaktadır. $B_z = 1.0$ için negatiflik değerleri $N_{12}^D = 0.0$, $N_{23}^D = 0.4$ ve $N_{13}^D = 0.08$ değerlerini almaktadırlar.

Manyetik alanın $1.0 < B_z < 2.0$ aralığında taban durum $|\psi_{11}\rangle$ ve $|\psi_3\rangle$ şeklinde iki katlı dejenere olup, yoğunluk matrisi $\rho^D = \frac{1}{2}|\psi_3\rangle\langle\psi_3| + \frac{1}{2}|\psi_{11}\rangle\langle\psi_{11}|$ olmaktadır. Buradan $N_{12}^D = 0.0$, $N_{23}^D = 0.42$, $N_{13}^D = 0.01$ negatiflik değerlerinde plato bölgeleri görülmektedir.

$B_z = 2.0$ manyetik alan değeri için taban durum $|\psi_3\rangle$, $|\psi_6\rangle$, $|\psi_{11}\rangle$ ve $|\psi_{14}\rangle$ şeklinde dört katlı dejenere olup yoğunluk matrisi $\rho^D = \frac{1}{4}|\psi_3\rangle\langle\psi_3| + \frac{1}{4}|\psi_6\rangle\langle\psi_6| + \frac{1}{4}|\psi_{11}\rangle\langle\psi_{11}| + \frac{1}{4}|\psi_{14}\rangle\langle\psi_{14}|$ olmaktadır. $B_z = 2.0$ için negatiflik değerleri $N_{12}^D = 0.0$, $N_{23}^D = 0.12$ ve $N_{13}^D = 0.02$ olmaktadır.

Manyetik alanın $2.0 < B_z < 3.0$ aralığında taban durum $|\psi_6\rangle$ ve $|\psi_{14}\rangle$ şeklinde iki katlı dejenere olup ve yoğunluk matrisi $\rho^D = \frac{1}{2}|\psi_6\rangle\langle\psi_6| + \frac{1}{2}|\psi_{14}\rangle\langle\psi_{14}|$ olmaktadır. Buradan negatiflik $N_{12}^D = N_{13}^D = 0.05$ ve $N_{23}^D = 0.08$ değerlerinde plato bölgelerine sahip olmaktadır.

$B_z = 3.0$ değerinde taban durum $|\psi_6\rangle$, $|\psi_{14}\rangle$ ve $|\psi_{19}\rangle$ şeklinde üç katlı dejenere olup yoğunluk matrisi $\rho^D = \frac{1}{3}|\psi_6\rangle\langle\psi_6| + \frac{1}{3}|\psi_{14}\rangle\langle\psi_{14}| + \frac{1}{3}|\psi_{19}\rangle\langle\psi_{19}|$ olmaktadır.

$B_z = 3.0$ için negatiflik $N_{12}^D = 0.01$, $N_{23}^D = 0.03$, $N_{13}^D = 0.02$ gibi oldukça düşük değerlerdeki geçiş değerlerine sahip olmaktadır.

$B_z > 3.0$ manyetik alan değerleri için ise taban durum dolaşık olmayan $|\psi_{19}\rangle$ durumundadır.

Isısal Durum Hesaplamaları

Bu kısımda ise ikinci en yakın komşu (NNN) spinler arası değiş tokuş çiftlenim sabiti J 'nin farklı ($J = 0.0, 0.5, 0.6$ ve 1.0) değerleri için ısısal durumlara ait ikili dolaşıklıkları inceledik. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1)$, $\text{spin}(1, \frac{3}{2})$ ve $\text{spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ arasındaki ikili dolaşıklıklar sırasıyla N_{12} , N_{23} ve N_{13} ile gösterdik. Sistemin ısısal durum yoğunluk matrisinin birinci ve ikinci spinlere indirgenmiş haldeki $\rho_{12}(T)$ indirgenmiş yoğunluk matrisinin birinci alt sisteme göre kısmi transpozunu alınarak elde edilen yoğunluk matrisi

$$\rho_{12}^{T_1}(T) = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & 0 & \gamma & 0 \\ 0 & \delta & 0 & 0 & 0 & \varepsilon \\ 0 & 0 & \zeta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \eta & 0 & 0 \\ \kappa & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & \nu & 0 & 0 & 0 & \xi \end{pmatrix}, \quad (3.193)$$

şeklinde elde edilir. Burada

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{40} (10e^{-\frac{E_1}{T}} + 3e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 2e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 5e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 10e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 10e^{-\frac{E_{17}}{T}} + 2e^{-\frac{E_{18}}{T}} + \\ &15e^{-\frac{E_2}{T}} + 8e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 20e^{-\frac{E_{23}}{T}} + 40e^{-\frac{E_{24}}{T}} + 20e^{-\frac{E_3}{T}} + 10e^{-\frac{E_4}{T}} + 5e^{-\frac{E_5}{T}} + 10e^{-\frac{E_9}{T}}), \\ \gamma &= \frac{1}{60\sqrt{2}} (10e^{-\frac{E_1}{T}} - 18e^{-\frac{E_{10}}{T}} - 18e^{-\frac{E_{11}}{T}} - 9e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 10e^{-\frac{E_{15}}{T}} - 20e^{-\frac{E_{17}}{T}} + 18e^{-\frac{E_{18}}{T}} + \\ &8e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 24e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 20e^{-\frac{E_{23}}{T}} + 15e^{-\frac{E_4}{T}} - 10e^{-\frac{E_5}{T}} - 15e^{-\frac{E_8}{T}}), \\ \delta &= \frac{1}{120} (20e^{-\frac{E_1}{T}} + 24e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 9e^{-\frac{E_{11}}{T}} + 27e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 5e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 80e^{-\frac{E_{17}}{T}} + \\ &36e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 16e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 48e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 40e^{-\frac{E_{23}}{T}} + 15e^{-\frac{E_4}{T}} + 40e^{-\frac{E_5}{T}} + 45e^{-\frac{E_7}{T}} + 15e^{-\frac{E_8}{T}}), \\ \varepsilon &= \frac{1}{60\sqrt{2}} (10e^{-\frac{E_1}{T}} - 18e^{-\frac{E_{10}}{T}} - 9e^{-\frac{E_{11}}{T}} - 18e^{-\frac{E_{12}}{T}} - 20e^{-\frac{E_{14}}{T}} - 15e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 10e^{-\frac{E_{16}}{T}} + \\ &18e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 20e^{-\frac{E_{20}}{T}} + 24e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 8e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 20e^{-\frac{E_3}{T}} - 10e^{-\frac{E_5}{T}} - 15e^{-\frac{E_7}{T}}), \\ \zeta &= \frac{1}{120} (10e^{-\frac{E_1}{T}} + 27e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{11}}{T}} + 72e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 45e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 10e^{-\frac{E_{14}}{T}} + 30e^{-\frac{E_{15}}{T}} + \end{aligned}$$

$$40e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 18e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 15e^{-\frac{E_2}{T}} + 20e^{-\frac{E_{20}}{T}} + 24e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 8e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 40e^{-\frac{E_3}{T}} + 5e^{-\frac{E_5}{T}} + 90e^{-\frac{E_6}{T}} + 30e^{-\frac{E_7}{T}},$$

$$\eta = \frac{1}{120}(10e^{-\frac{E_1}{T}} + 27e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 72e^{-\frac{E_{11}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 45e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 40e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 30e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 10e^{-\frac{E_{17}}{T}} + 18e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 15e^{-\frac{E_2}{T}} + 8e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 24e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 20e^{-\frac{E_{23}}{T}} + 30e^{-\frac{E_4}{T}} + 5e^{-\frac{E_5}{T}} + 60e^{-\frac{E_8}{T}} + 90e^{-\frac{E_9}{T}}),$$

$$\kappa = \frac{1}{60\sqrt{2}}(10e^{-\frac{E_1}{T}} - 18e^{-\frac{E_{10}}{T}} - 18e^{-\frac{E_{11}}{T}} - 9e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 10e^{-\frac{E_{15}}{T}} - 20e^{-\frac{E_{17}}{T}} + 18e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 8e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 24e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 20e^{-\frac{E_{23}}{T}} + 15e^{-\frac{E_4}{T}} - 10e^{-\frac{E_5}{T}} - 15e^{-\frac{E_8}{T}}),$$

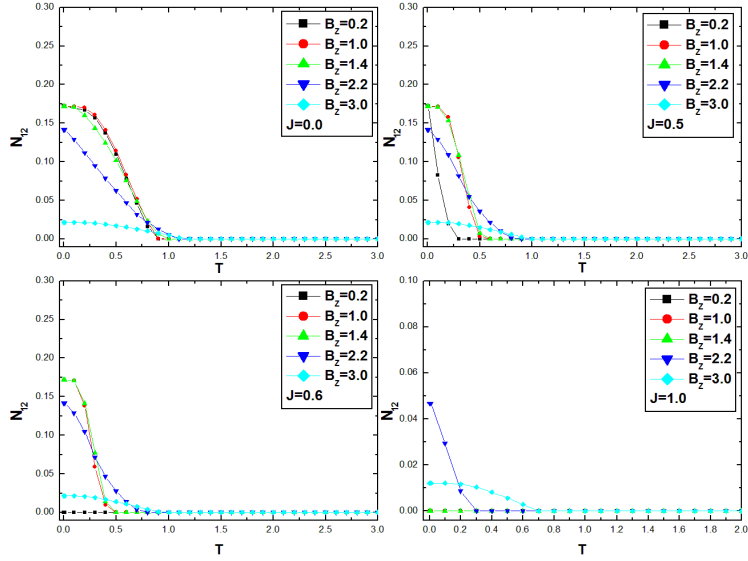
$$\mu = \frac{1}{120}(20e^{-\frac{E_1}{T}} + 24e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 27e^{-\frac{E_{11}}{T}} + 9e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 80e^{-\frac{E_{14}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 5e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 36e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 40e^{-\frac{E_{20}}{T}} + 48e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 16e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 20e^{-\frac{E_3}{T}} + 45e^{-\frac{E_4}{T}} + 40e^{-\frac{E_5}{T}} + 15e^{-\frac{E_7}{T}} + 45e^{-\frac{E_8}{T}}),$$

$$\nu = \frac{1}{60\sqrt{2}}(10e^{-\frac{E_1}{T}} - 18e^{-\frac{E_{10}}{T}} - 9e^{-\frac{E_{11}}{T}} - 18e^{-\frac{E_{12}}{T}} - 20e^{-\frac{E_{14}}{T}} - 15e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 10e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 18e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 20e^{-\frac{E_{20}}{T}} + 24e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 8e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 20e^{-\frac{E_3}{T}} - 10e^{-\frac{E_5}{T}} - 15e^{-\frac{E_7}{T}}),$$

$$\xi = \frac{1}{120}(30e^{-\frac{E_1}{T}} + 9e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{11}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 30e^{-\frac{E_{14}}{T}} + 30e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 120e^{-\frac{E_{19}}{T}} + 45e^{-\frac{E_2}{T}} + 60e^{-\frac{E_{20}}{T}} + 24e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 40e^{-\frac{E_3}{T}} + 15e^{-\frac{E_5}{T}} + 30e^{-\frac{E_6}{T}} + 30e^{-\frac{E_7}{T}}),$$

ile ifade edilmektedir. $\rho_{12}^{T_1}(T)$ yoğunluk matrisinden hareketle manyetik alan $0.0 \leq B_z \leq 5.0$ aralığında değişirken, sıcaklığın $0.0 < T \leq 10.0$ aralığı için dolaşıklıklar nümerik olarak hesaplanmıştır. Spin($\frac{1}{2}, 1$) durumunda belli manyetik alan değerleri için, belirtilen J değerlerinde ikili ısısal dolaşıklığın sıcaklığa bağlı değişimleri sırasıyla şekil 3.31, şekil 3.32 ve şekil 3.33’de görülmektedir.

Şekil 3.31’de manyetik alan B_z ’nin farklı ($B_z = 0.2, 1.0, 1.4, 2.2$ ve 3.0) değerleri için N_{12} ’nin T sıcaklığına göre değişimleri seçili her bir J değeri için görülmektedir. $J = 0.0$ için baktığımızda düşük sıcaklıklarda ve manyetik alanın $0.0 \leq B_z < 2.0$ değerlerinde $N_{12} = 0.17$ değerinde bulunur. Sıcaklığın artışıyla birlikte dolaşıklığın beklenildiği gibi azaldığı ve $T_c = 0.9$ gibi bir kritik sıcaklık değerinden sonra tamamen ortadan kalktığı görülür. $B_z \geq 2.0$ için ise düşük sıcaklıklarda bile dolaşıklığın manyetik alanın artışı ile azaldığı görülmektedir. Benzer bir durum



Şekil 3.31. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1)$ Alt Sisteminin NN ve NNN Isısal Dolaşıklıkları.

$J = 0.5$ için de gözlenmektedir. Ancak buradaki fark $B_z = 0.0$ için dolaşıklığın gözlenmemesidir. Manyetik alanın $0.1 \leq B_z < 2.0$ değerleri için dolaşıklık $N_{12} = 0.17$ değerinden başlayıp sıcaklık artışı ile birlikte daha çabuk azalırken kritik sıcaklık da buna bağlı olarak $T_c = 0.5$ olur. $J = 0.6$ için olan duruma bakıldığında, manyetik alanın $0.4 \leq B_z < 2.0$ değerleri için düşük sıcaklıklarda $J = 0.0$ ve $J = 0.5$ değerlerindeki durumların aynısı gözlenmekte ve dolaşıklık $N_{12} = 0.17$ değerini almaktadır. Burada da dolaşıklık sıcaklık artışıyla birlikte azalmakta olup kritik sıcaklık yine $T_c = 0.5$ değerinde olmaktadır. $J = 1.0$ için bakıldığında ise J 'nin artışının tüm sıcaklıklar ve manyetik alanlar için birinci ve ikinci spinler arası dolaşıklığı oldukça azalttığı görülür.

Sistemin ısısal durum yoğunluk matrisinin ikinci ve üçüncü spinlere indirgenmiş haldeki $\rho_{23}(T)$ indirgenmiş yoğunluk matrisinin ikinci alt sisteme göre kısmi transpozunu alınarak elde edilen yoğunluk matrisi

$$\rho_{23}^{T_2}(T) = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma & \delta & \varepsilon & 0 & 0 & \beta & 0 \\ 0 & \zeta & \eta & 0 & 0 & 0 & \theta & 0 & 0 & 0 & 0 & \vartheta \\ 0 & \iota & \kappa & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 & 0 & \nu \\ 0 & 0 & 0 & \xi & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & \varpi & 0 & 0 \\ \psi & 0 & 0 & 0 & 0 & \varsigma & 0 & 0 & 0 & 0 & \tau & 0 \\ \upsilon & \phi & 0 & 0 & 0 & 0 & \varphi & 0 & 0 & 0 & 0 & \chi \\ \omega & 0 & \Gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Theta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & \Xi & 0 & 0 \\ \Upsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & \Phi & 0 & 0 & 0 & 0 & \Omega & 0 \\ 0 & \Pi & \lambda & 0 & 0 & 0 & \rho & 0 & 0 & 0 & 0 & \Psi \end{pmatrix}, \quad (3.194)$$

şeklindedir. Burada

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{12} (e^{-\frac{E_{17}}{T}} + 2e^{-\frac{E_{23}}{T}} + 12e^{-\frac{E_{24}}{T}} + 9e^{-\frac{E_9}{T}}), \\ \gamma &= \frac{1}{20\sqrt{6}} (-3e^{-\frac{E_{12}}{T}} - 20e^{-\frac{E_{17}}{T}} + 8e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 20e^{-\frac{E_{23}}{T}} - 15e^{-\frac{E_4}{T}} + 15e^{-\frac{E_8}{T}}), \\ \delta &= -\frac{1}{4} \sqrt{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_8}{T}}, \\ \varepsilon &= \frac{-1}{4\sqrt{6}} (e^{-\frac{E_{16}}{T}}), \\ \beta &= \frac{1}{40\sqrt{3}} (10e^{-\frac{E_1}{T}} + 9e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 12e^{-\frac{E_{12}}{T}} - 15e^{-\frac{E_{13}}{T}} - 20e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{18}}{T}} - 15e^{-\frac{E_2}{T}} + 8e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 5e^{-\frac{E_5}{T}}), \\ \zeta &= \frac{1}{20} (e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 5e^{-\frac{E_{17}}{T}} + 4e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 10e^{-\frac{E_{23}}{T}} + 5e^{-\frac{E_4}{T}} + 5e^{-\frac{E_8}{T}} + 5e^{-\frac{E_9}{T}}), \\ \eta &= -\frac{1}{4} e^{-\frac{E_8}{T}}, \\ \theta &= \frac{1}{60\sqrt{2}} (-10e^{-\frac{E_1}{T}} - 18e^{-\frac{E_{10}}{T}} - 9e^{-\frac{E_{12}}{T}} - 15e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 18e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 24e^{-\frac{E_{22}}{T}} - 15e^{-\frac{E_4}{T}} + 10e^{-\frac{E_5}{T}}), \\ \vartheta &= \frac{1}{40\sqrt{3}} (10e^{-\frac{E_1}{T}} + 9e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 12e^{-\frac{E_{11}}{T}} - 15e^{-\frac{E_{13}}{T}} - 20e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{18}}{T}} - 15e^{-\frac{E_2}{T}} + 8e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 5e^{-\frac{E_5}{T}}), \\ \iota &= -\frac{1}{4} e^{-\frac{E_8}{T}}, \\ \kappa &= \frac{1}{120} (10e^{-\frac{E_1}{T}} + 27e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 45e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 30e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 18e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 15e^{-\frac{E_2}{T}} + 24e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 30e^{-\frac{E_4}{T}} + 5e^{-\frac{E_5}{T}} + 30e^{-\frac{E_8}{T}}), \\ \mu &= \frac{1}{10\sqrt{6}} (-5e^{-\frac{E_1}{T}} - 3e^{-\frac{E_{10}}{T}} - 9e^{-\frac{E_{11}}{T}} + 5e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 3e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 4e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 5e^{-\frac{E_5}{T}}), \\ \nu &= \frac{1}{\sqrt{6}} (e^{-\frac{E_3}{T}}), \\ \xi &= \frac{1}{120} (30e^{-\frac{E_1}{T}} + 9e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 72e^{-\frac{E_{11}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 40e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 30e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{18}}{T}} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& 45e^{-\frac{E_2}{T}} + 8e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 60e^{-\frac{E_3}{T}} + 15e^{-\frac{E_5}{T}}), \\
\varepsilon &= \frac{1}{120}(9e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 5e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 80e^{-\frac{E_{17}}{T}} + 16e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 40e^{-\frac{E_{23}}{T}} + 45e^{-\frac{E_4}{T}} + 45e^{-\frac{E_8}{T}}), \\
\varpi &= \frac{1}{10\sqrt{6}}(-5e^{-\frac{E_1}{T}} - 3e^{-\frac{E_{10}}{T}} - 9e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 5e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 3e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 4e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 5e^{-\frac{E_5}{T}}), \\
\psi &= \frac{1}{20\sqrt{6}}(-3e^{-\frac{E_{12}}{T}} - 20e^{-\frac{E_{17}}{T}} + 8e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 20e^{-\frac{E_{23}}{T}} - 15e^{-\frac{E_4}{T}} + 15e^{-\frac{E_8}{T}}), \\
\varsigma &= \frac{1}{120}(20e^{-\frac{E_1}{T}} + 24e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 27e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 36e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 48e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 15e^{-\frac{E_4}{T}} + \\
& 40e^{-\frac{E_5}{T}} + 15e^{-\frac{E_8}{T}}), \\
\tau &= \frac{1}{60\sqrt{2}}(-10e^{-\frac{E_1}{T}} - 18e^{-\frac{E_{10}}{T}} - 9e^{-\frac{E_{11}}{T}} - 15e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 18e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 24e^{-\frac{E_{21}}{T}} - 20e^{-\frac{E_3}{T}} + \\
& 10e^{-\frac{E_5}{T}} + 15e^{-\frac{E_7}{T}}), \\
v &= -\frac{1}{4}\sqrt{\frac{3}{2}}e^{-\frac{E_8}{T}}, \\
\phi &= \frac{1}{60\sqrt{2}}(-10e^{-\frac{E_1}{T}} - 18e^{-\frac{E_{10}}{T}} - 9e^{-\frac{E_{12}}{T}} - 15e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 18e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 24e^{-\frac{E_{22}}{T}} - 15e^{-\frac{E_4}{T}} + \\
& 10e^{-\frac{E_5}{T}}), \\
\varphi &= \frac{1}{120}(20e^{-\frac{E_1}{T}} + 24e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 27e^{-\frac{E_{11}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 36e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 48e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 20e^{-\frac{E_3}{T}} + \\
& 40e^{-\frac{E_5}{T}} + 15e^{-\frac{E_7}{T}}), \\
\chi &= \frac{1}{20\sqrt{6}}(-3e^{-\frac{E_{11}}{T}} - 20e^{-\frac{E_{14}}{T}} - 5e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 20e^{-\frac{E_{20}}{T}} + 8e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 15e^{-\frac{E_7}{T}}), \\
\omega &= -\frac{1}{4\sqrt{6}}e^{-\frac{E_{16}}{T}}, \\
\Gamma &= \frac{1}{10\sqrt{6}}(-5e^{-\frac{E_1}{T}} - 3e^{-\frac{E_{10}}{T}} - 9e^{-\frac{E_{11}}{T}} + 5e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 3e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 4e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 5e^{-\frac{E_5}{T}}), \\
\Delta &= \frac{1}{120}(9e^{-\frac{E_{11}}{T}} + 80e^{-\frac{E_{14}}{T}} + 5e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 40e^{-\frac{E_{20}}{T}} + 16e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 45e^{-\frac{E_7}{T}}), \\
\Theta &= \frac{1}{120}(30e^{-\frac{E_1}{T}} + 9e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 72e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 40e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 45e^{-\frac{E_2}{T}} + \\
& 8e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 15e^{-\frac{E_5}{T}}), \\
\Lambda &= \frac{1}{10\sqrt{6}}(-5e^{-\frac{E_1}{T}} - 3e^{-\frac{E_{10}}{T}} - 9e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 5e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 3e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 4e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 5e^{-\frac{E_5}{T}}), \\
\Xi &= \frac{1}{120}(10e^{-\frac{E_1}{T}} + 27e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{11}}{T}} + 45e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 30e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 18e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 15e^{-\frac{E_2}{T}} + \\
& 24e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 40e^{-\frac{E_3}{T}} + 5e^{-\frac{E_5}{T}} + 30e^{-\frac{E_7}{T}}), \\
\Upsilon &= \frac{1}{40\sqrt{3}}(10e^{-\frac{E_1}{T}} + 9e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 12e^{-\frac{E_{12}}{T}} - 15e^{-\frac{E_{13}}{T}} - 20e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{18}}{T}} - 15e^{-\frac{E_2}{T}} + \\
& 8e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 5e^{-\frac{E_5}{T}}), \\
\Phi &= \frac{1}{60\sqrt{2}}(-10e^{-\frac{E_1}{T}} - 18e^{-\frac{E_{10}}{T}} - 9e^{-\frac{E_{11}}{T}} - 15e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 18e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 24e^{-\frac{E_{21}}{T}} - \\
& 20e^{-\frac{E_3}{T}} + 10e^{-\frac{E_5}{T}} + 15e^{-\frac{E_7}{T}}), \\
\Omega &= \frac{1}{60}(3e^{-\frac{E_{11}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{14}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 30e^{-\frac{E_{20}}{T}} + 12e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 20e^{-\frac{E_3}{T}} + 15e^{-\frac{E_6}{T}} + \\
& 15e^{-\frac{E_7}{T}}),
\end{aligned}$$

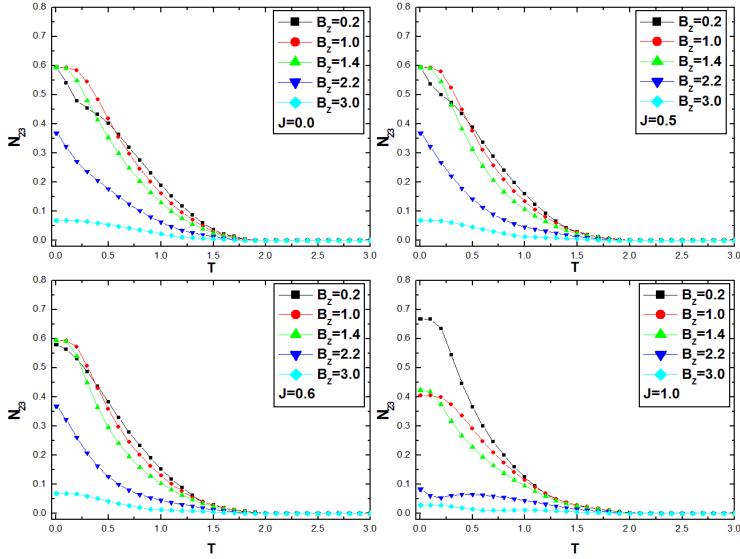
$$\Pi = \frac{1}{40\sqrt{3}}(10e^{-\frac{E_1}{T}} + 9e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 12e^{-\frac{E_{11}}{T}} - 15e^{-\frac{E_{13}}{T}} - 20e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{18}}{T}} - 15e^{-\frac{E_7}{T}} + 8e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 5e^{-\frac{E_5}{T}}),$$

$$\lambda = -\frac{1}{\sqrt{6}}e^{-\frac{E_3}{T}},$$

$$\rho = \frac{1}{20\sqrt{6}}(-3e^{-\frac{E_{11}}{T}} - 20e^{-\frac{E_{14}}{T}} - 5e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 20e^{-\frac{E_{20}}{T}} + 8e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 15e^{-\frac{E_7}{T}}),$$

$$\Psi = \frac{1}{12}(e^{-\frac{E_{14}}{T}} + 12e^{-\frac{E_{19}}{T}} + 2e^{-\frac{E_{20}}{T}} + 9e^{-\frac{E_6}{T}}),$$

ile ifade edilmektedir.



Şekil 3.32. Spin(1, $\frac{3}{2}$) Alt Sisteminin NN ve NNN Isısal Dolaşıklıkları.

Şekil 3.32’de manyetik alan B_z ’nin farklı ($B_z = 0.2, 1.0, 1.4, 2.2$ ve 3.0) değerleri için N_{23} ’ün T sıcaklığına göre değişimleri, seçili her bir J değeri için görülmektedir. $J = 0.0$ için baktığımızda düşük sıcaklıklarda ve manyetik alanın $0.0 < B_z < 2.0$ aralığındaki değerleri için $N_{23} = 0.6$ değerinde bulunur ve sıcaklık artışıyla

birlikte N_{23} azalır $T_c = 1.9$ kritik sıcaklık değerinden sonra dolaşıklık yok olmaktadır. Manyetik alanın $B_z \geq 2.0$ değerleri için ise düşük sıcaklıklarda dahi dolaşıklık küçük değerler almasına rağmen kritik sıcaklık yine $T_c = 1.9$ değerinde bulunmaktadır. Benzer durumlar $J = 0.5$ ve $J = 0.6$ için de söylenebilir. Ancak düşük ve belli değerlerden sonraki sıcaklıklarda manyetik alan arttıkça dolaşıklığın azaldığı gözlenirken, bu değerden önceki sıcaklıklarda dolaşıklığın manyetik alana göre artan azalan bir yapı sergilediği gözlenmiştir. Ancak bu davranışın görüldüğü sıcaklık değerinin J arttıkça azaldığı da gözlenmiştir. $J = 1.0$ için ise çok düşük sıcaklıklarda manyetik alanın $0.0 < B_z \leq 0.8$ değerleri için $N_{23} = 0.67$ değerinde bulunurken manyetik alanın artışı ile birlikte dolaşıklık azalmıştır. Bunun yanında daha önce belirli sıcaklıklarda bahsedilen artan azalan davranışın neredeyse kaybolduğu ve kritik sıcaklığın çok az artarak $T_c = 2.0$ değerini aldığı gözlenir.

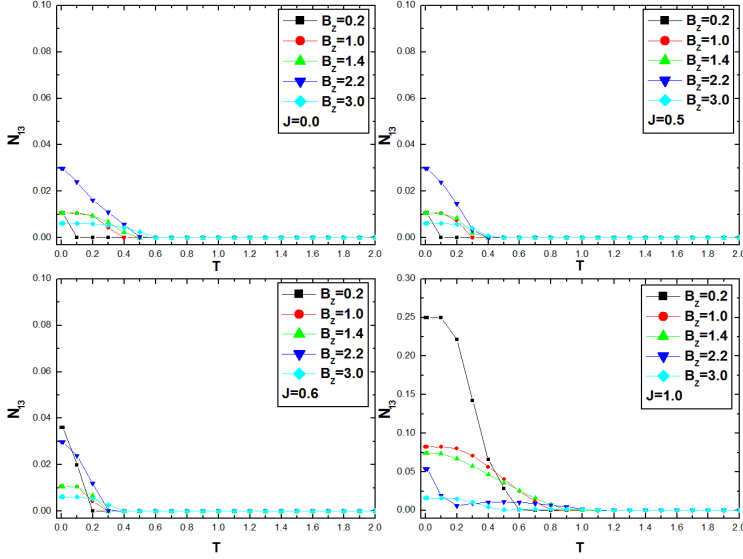
Sistemin ısısal durum yoğunluk matrisinin birinci ve üçüncü spinlere indirgenmiş haldeki $\rho_{13}(T)$ indirgenmiş yoğunluk matrisinin birinci alt sisteme göre kısmi transpozu alınarak elde edilen yoğunluk matrisi

$$\rho_{13}^{T_1}(T) = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & \delta & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & \zeta & 0 & 0 & 0 & 0 & \eta \\ 0 & 0 & 0 & \kappa & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \nu & 0 & 0 & 0 \\ \xi & 0 & 0 & 0 & 0 & \varsigma & \tau & 0 \\ 0 & \phi & 0 & \chi & 0 & \omega & \Delta & 0 \\ 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & \Xi \end{pmatrix}, \quad (3.195)$$

şeklinde elde edilir.

Burada

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{15} (9e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 5e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 10e^{-\frac{E_{17}}{T}} + e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 5e^{-\frac{E_{23}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{24}}{T}}), \\ \gamma &= \frac{1}{40\sqrt{3}} (-10e^{-\frac{E_1}{T}} + 9e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 9e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 5e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 10e^{-\frac{E_{17}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{18}}{T}} - \\ &15e^{-\frac{E_2}{T}} + 16e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 20e^{-\frac{E_{23}}{T}} - 15e^{-\frac{E_4}{T}} - 5e^{-\frac{E_5}{T}} - 15e^{-\frac{E_8}{T}} - 30e^{-\frac{E_9}{T}}), \end{aligned}$$



Şekil 3.33. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ Alt Sisteminin NN ve NNN Isısal Dolaşıklıkları.

$$\begin{aligned}
 \delta &= \frac{1}{120}(10e^{-\frac{E_1}{T}} + 27e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 27e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 45e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 30e^{-\frac{E_{17}}{T}} + 18e^{-\frac{E_{18}}{T}} + \\
 &15e^{-\frac{E_2}{T}} + 48e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 60e^{-\frac{E_{23}}{T}} + 15e^{-\frac{E_4}{T}} + 5e^{-\frac{E_5}{T}} + 15e^{-\frac{E_8}{T}} + 30e^{-\frac{E_9}{T}}), \\
 \varepsilon &= \frac{1}{60}(-10e^{-\frac{E_1}{T}} + 12e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 3e^{-\frac{E_{11}}{T}} + 3e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 18e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 12e^{-\frac{E_{21}}{T}} + \\
 &12e^{-\frac{E_{22}}{T}} - 20e^{-\frac{E_3}{T}} - 15e^{-\frac{E_4}{T}} - 20e^{-\frac{E_5}{T}} - 15e^{-\frac{E_7}{T}}), \\
 \zeta &= \frac{1}{60}(10e^{-\frac{E_1}{T}} + 12e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 3e^{-\frac{E_{11}}{T}} + 3e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 18e^{-\frac{E_{18}}{T}} + \\
 &12e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 12e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 20e^{-\frac{E_3}{T}} + 15e^{-\frac{E_4}{T}} + 20e^{-\frac{E_5}{T}} + 15e^{-\frac{E_7}{T}}), \\
 \eta &= \frac{1}{40\sqrt{3}}(-10e^{-\frac{E_1}{T}} + 9e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 9e^{-\frac{E_{11}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 10e^{-\frac{E_{14}}{T}} + 5e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{18}}{T}} - \\
 &15e^{-\frac{E_2}{T}} + 20e^{-\frac{E_{20}}{T}} + 16e^{-\frac{E_{21}}{T}} - 5e^{-\frac{E_5}{T}} - 30e^{-\frac{E_6}{T}} - 15e^{-\frac{E_7}{T}}), \\
 \kappa &= \frac{1}{120}(30e^{-\frac{E_1}{T}} + 9e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 9e^{-\frac{E_{11}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 10e^{-\frac{E_{14}}{T}} + 5e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{18}}{T}} + \\
 &45e^{-\frac{E_2}{T}} + 20e^{-\frac{E_{20}}{T}} + 16e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 60e^{-\frac{E_3}{T}} + 15e^{-\frac{E_5}{T}} + 90e^{-\frac{E_6}{T}} + 45e^{-\frac{E_7}{T}}), \\
 \mu &= \frac{1}{4}e^{-\frac{E_{16}}{T}}, \\
 \nu &= \frac{1}{120}(30e^{-\frac{E_1}{T}} + 9e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 9e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 5e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 10e^{-\frac{E_{17}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{18}}{T}} + \\
 &45e^{-\frac{E_2}{T}} + 16e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 20e^{-\frac{E_{23}}{T}} + 45e^{-\frac{E_4}{T}} + 15e^{-\frac{E_5}{T}} + 45e^{-\frac{E_8}{T}} + 90e^{-\frac{E_9}{T}}),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\xi &= \frac{1}{40\sqrt{3}}(-10e^{-\frac{E_1}{T}} + 9e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 9e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 5e^{-\frac{E_{16}}{T}} + 10e^{-\frac{E_{17}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{18}}{T}} - \\
&15e^{-\frac{E_2}{T}} + 16e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 20e^{-\frac{E_{23}}{T}} - 15e^{-\frac{E_4}{T}} - 5e^{-\frac{E_5}{T}} - 15e^{-\frac{E_8}{T}} - 30e^{-\frac{E_9}{T}}), \\
\varsigma &= \frac{1}{60}(10e^{-\frac{E_1}{T}} + 12e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 3e^{-\frac{E_{11}}{T}} + 3e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 18e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 12e^{-\frac{E_{21}}{T}} + \\
&12e^{-\frac{E_{22}}{T}} + 20e^{-\frac{E_3}{T}} + 15e^{-\frac{E_4}{T}} + 20e^{-\frac{E_5}{T}} + 15e^{-\frac{E_7}{T}} + 15e^{-\frac{E_8}{T}}), \\
\tau &= -\frac{1}{4}e^{-\frac{E_8}{T}}, \\
\phi &= \frac{1}{60}(-10e^{-\frac{E_1}{T}} + 12e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 3e^{-\frac{E_{11}}{T}} + 3e^{-\frac{E_{12}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 18e^{-\frac{E_{18}}{T}} + 12e^{-\frac{E_{21}}{T}} + \\
&12e^{-\frac{E_{22}}{T}} - 20e^{-\frac{E_3}{T}} - 15e^{-\frac{E_4}{T}} - 20e^{-\frac{E_5}{T}} - 15e^{-\frac{E_7}{T}}), \\
\chi &= \frac{1}{4}e^{-\frac{E_{16}}{T}}, \\
\omega &= -\frac{1}{4}e^{-\frac{E_8}{T}}, \\
\Delta &= \frac{1}{120}(10e^{-\frac{E_1}{T}} + 27e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 27e^{-\frac{E_{11}}{T}} + 45e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 30e^{-\frac{E_{14}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 18e^{-\frac{E_{18}}{T}} + \\
&15e^{-\frac{E_2}{T}} + 60e^{-\frac{E_{20}}{T}} + 48e^{-\frac{E_{21}}{T}} + 20e^{-\frac{E_3}{T}} + 5e^{-\frac{E_5}{T}} + 30e^{-\frac{E_6}{T}} + 15e^{-\frac{E_7}{T}} + 30e^{-\frac{E_8}{T}}), \\
\Lambda &= \frac{1}{40\sqrt{3}}(-10e^{-\frac{E_1}{T}} + 9e^{-\frac{E_{10}}{T}} + 9e^{-\frac{E_{11}}{T}} + 15e^{-\frac{E_{13}}{T}} + 10e^{-\frac{E_{14}}{T}} + 5e^{-\frac{E_{15}}{T}} + 6e^{-\frac{E_{18}}{T}} - \\
&15e^{-\frac{E_2}{T}} + 20e^{-\frac{E_{20}}{T}} + 16e^{-\frac{E_{21}}{T}} - 5e^{-\frac{E_5}{T}} - 30e^{-\frac{E_6}{T}} - 15e^{-\frac{E_7}{T}}), \\
\Xi &= \frac{3e^{-\frac{E_{11}}{T}}}{5} + \frac{2e^{-\frac{E_{14}}{T}}}{3} + \frac{e^{-\frac{E_{15}}{T}}}{3} + \frac{e^{-\frac{E_{16}}{T}}}{4} + e^{-\frac{E_{19}}{T}} + \frac{e^{-\frac{E_{20}}{T}}}{3} + \frac{e^{-\frac{E_{21}}{T}}}{15},
\end{aligned}$$

ile ifade edilmektedir.

Şekil 3.33’de manyetik alan B_z ’nin farklı $B_z = 0.2, 1.0, 1.4, 2.2$ ve 3.0 değerleri için N_{13} ’ün T sıcaklığına göre değişimleri, seçili her bir J değeri için görülmektedir. Şekil 3.33’e $J = 0.0, 0.5$ ve 0.6 değerleri için bakıldığında verilen manyetik alan değerlerinde ve çok düşük sıcaklıklarda birinci ve üçüncü spinler arası N_{13} dolaşıklığının çok küçük değerler aldığı ve sıcaklığın artışı ile birlikte beklenildiği gibi N_{13} ’ün değerinin azalıp sıfır olduğu görülür. $J = 1.0$ için baktığımızda ise yine düşük sıcaklıklarda diğer J değerlerine göre daha büyük N_{13} değerleri elde edildiği gözlenir. Yukarıda seçili manyetik alanın değerlerindeki artışın N_{13} ’ü azalttığı görülmektedir.

4. TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu tezde, z yönünde homojen bir manyetik alanda bulunan farklı türdeki karma tip (farklı spinlerden oluşan) Heisenberg XXX spin sistemlerinin taban ve ısısal dolaşıklıklarının periyodik sınır koşulları altında incelenmesi ve karşılaştırılması amaçlanmıştır. Gelecekte üretilmesi beklenen kuantum bilgisayarlarının ve büyük ölçekte gerçekleştirilmesi planlanan kuantum enformasyon işlemlerinin yapısında önemli bir kaynak olan dolaşıklığın oluşturulması ve kontrol edilmesi ihtiyacı, anizotropi parametresinin, safsızlığın, homojen ve homojen olmayan dış manyetik alanların, Dzialoshinskii-Moriya (DM) ve ikinci en yakın komşu (NNN) etkileşmelerinin ele alındığı iki ve daha fazla spin içeren sistemlerin detaylı şekilde incelenmesini önemli hale getirmektedir. Halihazırda literatürde sentezlendiği bildirilen $NiCu(pba)(D_2O)_3 \cdot 2D_2O(pba = 1,3 - prepoylebisis(oxamato))$ ($spin(\frac{1}{2}, 1)$ için), $V(TCNE)_x \cdot y$ (çözücü) ($spin(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ için), $[NiCr_2(bipy)_2(C_2O_4)_4(H_2O)_2] \cdot H_2O$ ($spin(1, \frac{3}{2})$ için) gibi moleküllerin, tezimizde ele aldığımız karma tip spin sistemi modellerini temsil edebileceği düşünülürse çalışmamızın önemi, teorik bakış açımızın uygulamaya dönüştürebilir olması açısından da ortaya çıkacaktır.

Tezin ilk kısmında iki spinli karma tip Heisenberg XXX spin sistemlerinde, ikinci kısmında ise üç spinli karma tip Heisenberg XXX spin sistemlerinde taban ve ısısal durumlar incelenmiştir. Tezin birinci kısmında $spin(\frac{1}{2}, 1)$, $spin(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$, $spin(1, \frac{3}{2})$ ve ikinci kısmında ise $spin(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$ [37–39], $spin(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ gibi literatürde de örnekleri olan durumlar ele alınmış olup tezin ikinci kısmının sonunda ise özgün bir model olarak tasarlanmış $spin(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ durumu için önce en yakın komşu etkileşmeleri (NN), daha sonra da en yakın ve ikinci en yakın komşu etkileşmeleri (NN ve NNN) dikkate alınarak dolaşıklığın manyetik alana ve sıcaklığa bağlı değişimleri incelenmiştir.

Hesaplamalar sonucunda $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1)$ ve $\text{spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ durumları için yapılan taban ve ısısal durum hesaplamalarının literatürle uyumlu olduğu görülmüştür. $\text{Spin}(1, \frac{3}{2})$ için yapılan taban durum hesaplamalarında diğer iki spinli durumlara göre daha büyük bir dolaşıklık değeri elde edilmiş olup, diğer çalışmalardan farklı olarak taban durum için iki plato bölgesi gözlenmiştir. Ayrıca $\text{spin}(1, \frac{3}{2})$ spin sisteminin diğer iki spinli sistemlere göre, manyetik alanın artışına karşı daha dayanıklı bir dolaşıklık üretmekte olduğu görülmüştür. $\text{Spin}(1, \frac{3}{2})$ için ısısal durum hesapları yapıldığında ise sistemin kritik sıcaklığının diğer iki spinli spin sistemlerindeki sonuçlara göre daha büyük olduğu görülmüştür. Buradan $\text{spin}(1, \frac{3}{2})$ spin sisteminin dolaşıklığının sıcaklık artışına karşı daha dayanıklı olduğu sonucuna varılmıştır.

$\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$ ve $\text{spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ gibi üç spinli sistemlerde, taban durumda birinci ve üçüncü spinler arası dolaşıklık değerleri karşılaştırıldığında, ikinci spinin $\text{spin}-1$ yerine $\text{spin}-\frac{3}{2}$ olması dolaşıklığı ifade ettiğimiz negatiflik değerini sıfırdan değerinden bir miktar artırmaktadır. Üçüncü spinin $\text{spin}-\frac{1}{2}$ olması halinde taban durumda birinci ve ikinci spinler arasındaki negatiflik değerlerine bakıldığında (3.1.1. ve 3.1.2. alt başlıklarında incelenen sistemlere göre) $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$ sisteminin daha büyük değerde bir negatiflik platosuna sahip olduğu görülürken, $\text{spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ sisteminin farklı olarak iki plato bölgesine sahip olduğu ve manyetik alanın artışına karşı daha dayanıklı bir dolaşıklığa sahip olduğu görülmektedir. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$ ve $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ üç spinli sistemlerin birinci ve ikinci spinler arası taban durumlarının negatiflikleri karşılaştırıldığında ise üçüncü spinin $\text{spin}-\frac{1}{2}$ yerine $\text{spin}-\frac{3}{2}$ olması, $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$ sisteminin daha büyük değerdeki bir dolaşıklık plato bölgesine sahip olduğunu göstermekle birlikte, $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ sisteminin iki platoya sahip olması sayesinde manyetik alanın artışına karşı daha dayanıklı bir dolaşıklığa sahip olduğu görülmüştür. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ sisteminin birinci ve ikinci spinler arası taban durum dolaşıklığı ile $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ sisteminin birinci ve üçüncü spinler arası taban durum dolaşıklığı karşılaştırıldığında diğer spinin $\text{spin}-\frac{1}{2}$ yerine $\text{spin}-1$ olması $\text{spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ sisteminin daha büyük değerde bir dolaşıklık plato bölgesine sahip

olduğunu göstermekle birlikte, iki yerine üç plato bölgesine sahip olması sayesinde $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ sisteminin manyetik alanın artışına karşı daha dayanıklı bir dolaşıklığa sahip olduğu görülmüştür.

İki spinli ile üç spinli spin sistemlerinin benzer alt sistemleri arasındaki karşılaştırmalarda ise üç spinli sistemlere geçildiğinde sistemlerin taban durum dolaşıklığının azaldığı ancak üç spinli durumların manyetik alanın artışına karşı daha dayanıklı olduğu sonucuna varılmıştır. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1)$ ve $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$ sisteminin birinci ve ikinci spinleri arasındaki taban durum dolaşıklıkları yaklaşık aynı değere sahip olmakta iken $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ sisteminin birinci ve ikinci spinleri arasındaki taban duruma ait dolaşıklık değeri azalmaktadır.

$\text{Spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ ile $\text{spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ sisteminin birinci ve ikinci spinleri arasındaki ve $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ sisteminin birinci ve üçüncü spinleri arasındaki taban durumlarına ait dolaşıklık değerleri karşılaştırıldığında, $\text{spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ sisteminin $\text{spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ ve $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ sistemlerinin eşdeğer alt sistemlerinden daha büyük dolaşıklığa sahip olduğu görülmekle birlikte manyetik alanın artışına karşı daha zayıf bir dolaşıklığa sahip olduğu görülmüştür. Karşılaştırdığımız bu spin sistemlerinde üçüncü spinin varlığı ilave plato bölgesinin oluşmasına neden olmaktadır.

$\text{Spin}(1, \frac{3}{2})$ sisteminin taban durumunun, $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ sisteminin ikinci ve üçüncü spinleri arasındaki taban durumuna göre daha büyük bir dolaşıklık değere sahip olduğu ve manyetik alanın artışına karşı daha dayanıklı olduğu görülmüştür.

Bunun yanında $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ spin sisteminin NN etkileşimi ile NN ve NNN etkileşmelerinin olduğu hallerde taban durumlar için dolaşıklıklar karşılaştırıldığında ikinci en yakın etkileşmelerinin eklenmesiyle birinci ve üçüncü spinler arası taban durum dolaşıklık değerinin neredeyse yok olduğu, birinci ve ikinci spinler arasındaki taban durum dolaşıklık değerinin NNN etkileşmeleri ifade eden J parametresinin sıfırdan 1'e artmasıyla azaldığı, ancak ikinci ve üçüncü spinler arasındaki taban durum dolaşıklık değerinin çok değişmediği görülmüştür.

Ayrıca ikinci en yakın komşu etkileşmelerin eklenmesi, manyetik alanın artışına karşı taban durum dolaşıklığının davranışını da çok değiştirmemiştir.

$\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$ ve $\text{spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ spin sistemlerinin birinci ve ikinci spinler arası ısısal dolaşıklıkları karşılaştırıldığında ise üçüncü spin aynı olmasına rağmen $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1)$ alt sistemi, $\text{spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ alt sistemine göre daha büyük bir kritik sıcaklık değerine sahip olmaktadır. Ayrıca bu sistemlerin belirtilen alt sistemlerinde üçüncü spin olarak $\text{spin}-\frac{1}{2}$ 'nin eklenmesiyle, benzer iki spinli sistemlerin ısısal durumuna göre daha büyük kritik sıcaklıklara sahip olduğu görülmüştür. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$ ve $\text{spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ sistemlerinin birinci ve üçüncü spinler arası ısısal dolaşıklıklarına bakıldığında, dolaşıklığın manyetik alanın belli değerlerinde taban durumdakine benzer bir davranış gösterdiği ve düşük değerlerde dolaşıklığa sahip olduğu görülmüştür. $\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$ ve $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ sistemlerinin birinci ve ikinci spinler arası ısısal dolaşıklıkları karşılaştırıldığında üçüncü spin $\text{spin}-\frac{1}{2}$ iken T_c kritik değerinin manyetik alanın artışı ile azalmakta iken $\text{spin}-\frac{3}{2}$ olduğunda kritik sıcaklığın manyetik alanın artışı ile artmakta olduğu görülmüştür. Ayrıca bu alt sistemlerin iki spinli $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1)$ sistemine göre daha büyük kritik sıcaklığa sahip olduğu sonucuna da varılmıştır. İki spinli $\text{spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ sistemi ile $\text{spin}(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ spin sistemlerinin birinci ve ikinci spinleri arası ve $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ sisteminin birinci ve üçüncü spinleri arası ısısal durum dolaşıklıkları karşılaştırıldığında ise kritik sıcaklık değerinin değişmediği görülmüştür. Bunun yanında $\text{spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ sisteminin ikinci ve üçüncü spinleri arasındaki ısısal dolaşıklığa ait kritik sıcaklık değeri, $\text{spin}(1, \frac{3}{2})$ sisteminin ısısal dolaşıklığının kritik sıcaklık değerine göre daha büyük olmakla birlikte T_c kritik sıcaklığı manyetik alanla çok fazla değişmemektedir.

$\text{Spin}(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2})$ sistemi için ikinci en yakın komşu etkileşmeleri eklendiğinde birinci ve ikinci spinler arası ısısal dolaşıklığa ait kritik sıcaklık oldukça düşük değerler almaktadır. İkinci ve üçüncü spinler arası için ise ikinci en yakın komşu etkilerinin

ısısal duruma ait kritik sıcaklığı küçük bir miktar azalttığı ancak J 'nin artışının kritik sıcaklığı değiştirmediği görülmüştür. Birinci ve üçüncü spinler arası için ise ikinci en yakın komşu etkilerinin ısısal duruma ait kritik sıcaklığı azalttığı ve J 'nin artışının kritik sıcaklığın değişken bir yapı göstermesine neden olduğu görülmüştür.

Tezde göz önüne aldığımız karma tip Heisenberg XXX spin sistemlerinde yaptığımız incelemeler sonucunda spin-1 ile spin- $\frac{3}{2}$ içeren iki spinli sistemlerin yada üç spinli sistemlerin alt sistemlerinin diğer karma tip spin sistemlerine göre taban ve ısısal durumlarda daha büyük dolaşıklığa sahip olduğu görülmüştür. Ayrıca bu seçimin sıcaklığın artışına karşı daha dayanıklı dolaşıklıklar oluşturduğu sonucuna varılmıştır.

KAYNAKLAR

- [1] Schrödinger, E. 1935. Die Gegenwärtige Situation in der Quantenmechanik. **Naturwissenschaften**, 23 (49): 807-812, 823-828, 844-849.
- [2] Schrödinger, E. 1935. Discussion of Probability Relations between Separated Systems. **Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society**, 31: 555-563.
- [3] Einstein, A., Podolsky, B., Rosen, N. 1935. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? **Physical Review**, 47 (10): 777-780.
- [4] Bell, J.S. 1964. On the Einstein Podolsky Rosen paradox. **Physics**, 1 (3): 195-200.
- [5] Aspect, A., Grangier, P., Roger, G. 1982. Experimental realization of Einstein-Podolsky-Rosen-Bohm Gedankenexperiment: A new violation of Bell's inequalities. **Physical Review Letters**, 49 (2): 91-94.
- [6] Feynman, R.P. 1982. Simulating physics with computers. **International Journal of Theoretical Physics**, 21 (6): 467-488.
- [7] Deutsch, D. 1985. Quantum theory, the Church-Turing principle and the universal quantum computer. **Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences**, 400: 97-117.
- [8] Deutsch, D., Jozsa, R. 1992. Rapid solution of problems by quantum computation. **Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences**, 439: 553-558.
- [9] Shor, P.W. 1995. Scheme for reducing decoherence in quantum computer memory. **Physical Review A**, 52 (4): 2493-2496.
- [10] Grover, L.K. 1996. A fast quantum mechanical algorithm for database search. **Proceedings, 28th Annual ACM Symposium on the theory of computing (STOC)**, ACM Press, pp. 212-219, New York.
- [11] Grover, L.K. 1997. Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack. **Physical Review Letters**, 79 (2): 325-328 .
- [12] Nielsen, M.A., Chuang, I.L. 2000. Quantum computation and quantum information. Cambridge University Press., Cambridge, United Kingdom.
- [13] Bennett, C.H. ,DiVincenzo, D.P. 2000. Quantum information and computation. **Nature**, 404 (6775): 247-255.

- [14] Kane, B.E. 2000. Silicon-based quantum computation. **Fortschritte der Physik**, 48 (9-11): 1023-1041.
- [15] Bennett, C.H., Brassard G., Crpeau C., Jozsa R., Peres A. and Wootters W.K. 1993. Teleporting an unknown quantum state via dual classical and Einstein-Podolsky-Rosen channels. **Physical Review Letters**, 70 (13): 1895-1899.
- [16] Bennett, C.H., Wiesner, S.J. 1992. Communication via one-and two-partical operators on Einstein-Podolsky-Rosen states. **Physical Review Letters**, 69 (20): 2881-2884.
- [17] Bose, S., Vedral, V., Knight, P.L. 1998. Multiparticle generalization of entanglement swapping. **Physical Review A**, 57 (2): 822-829.
- [18] Yurke, B., Stoler, D. 1992. Bell's-inequality experiments using independent-particle sources. **Physical Review A**, 46 (5): 2229-2234.
- [19] Yurke, B., Stoler, D. 1992. Einstein-Podolsky-Rosen effects from independent particle sources. **Physical Review Letters**, 68 (9): 1251-1254.
- [20] Zukowski, M., Zeilinger, A., Horne, M.A., Ekert, A.K. 1993. "Event-ready-detectors" Bell experiment via entanglement swapping. **Physical Review Letters**, 71 (26): 4287-4290.
- [21] Bennett, C.H., Brassard, G. 1984. Quantum cryptography: Public key distribution and coin tossing. Proceedings of IEEE International Conference on Computers, Systems, and Signal Processing, IEEE, Bangalore, India, 175-179.
- [22] Bennett, C.H., Brassard, G., Mermin, N.D. 1992. Quantum cryptography without Bell's theorem. **Physical Review Letters**, 68 (5): 557-559
- [23] Ekert, A.K. 1991. Quantum cryptography based on Bell's theorem. **Physical Review Letters**, 67 (6): 661-663.
- [24] Gisin, N. Ribordy, G., Tittel, W., Zbinden, H. 2002. Quantum cryptography. **Reviews of Modern Physics**, 74 (1): 145-195.
- [25] Nonoyama, K., Ojima, H., Nonoyama, M. 1976. Synthesis of copper(II) and nickel(II) complexes of several N-monosubstituted oxamide derivatives. **Inorganica Chimica Acta**, 20 : 127-132.
- [26] Pei, Y., Verdaguer, M., Kahn, O., Sletten, J., Renard, J.P. 1987. Magnetism of Mn^{II} Cu^{II} ve $Ni^{II}Cu^{II}$ ordered bimetallic chains.

- Crystal structure of $MnCu(bpa)(H_2O)_3 \cdot 2H_2O$ (pba=1,3-propylerebasis (oxamato)). **American Chemical Society**, 26 (1): 138-143.
- [27] Drillon, M., Coronado, E., Georges, R., Gianduzzo, J.C., Curely, J. 1989. Ferrimagnetic Heisenberg chains $[(\frac{1}{2}-S)](S=1 \text{ to } (\frac{5}{2}))$: Thermal and magnetic properties. **Physical Review B**, 40 (16): 10992-10996.
- [28] Van Koningsbruggen, P.J., Kahn, O., Nakatani, K., Pei, Y., Renard, J.P., Drillon, M., Legoll, P. 1990. Magnetism of A-copper(II) bimetallic chain compounds (A=iron,cobalt,nickel): one-and three-dimensional behaviors. **Inorganic Chemistry**, 29 (18): 3325-3331.
- [29] Manriquez, J.M., Yee, G.T., McLean, R.S., Epstein, A.J., Miller, J.S. 1991 . A room-temperature molecular/organic-based magnet. **Science**, 252 (5011): 1415-1417.
- [30] Du, G., Joo, J., Epstein, A.J., Miller, J.S. 1993. Anomalous charge transport phenomena in molecular-based magnet $V(TCNE)_x \cdot y(solvent)$. **Journal of Applied Physics**, 73 (10): 6566-6568.
- [31] Morin, B.G., Zhou, P., Hahm, C., Epstein, A.J., Miler, J.S. 1993. Complex ac susceptibility studies of the disordered molecular based magnets $V(TCNE)_x$: Role of spinless solvent. **Journal of Applied Physics**, 73 (10): 5648-5650.
- [32] Ekiz, C. 2005. Mixed spin- $\frac{1}{2}$ and spin- $\frac{3}{2}$ Ising system in a longitudinal magnetic field. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, 293 (3): 913-923.
- [33] Stanica, N., Stager, C.V., Cimpoesu, M., Andruh, M. 1998. Synthesis and magnetic properties of a new oxalato-bridged heterotrinnuclear complex, $[NiCr_2(bipy)_2(C_2O_4)_4(H_2O)_2] \cdot H_2O$. A rare case of antiferromagnetic coupling between Cr(III) and Ni(II) ions. **Polyhedron**, 17 (10): 1787-1789.
- [34] Numata, Y., Inoue, K., Baranov, N., Kurmoo, M., Kikuchi, K. 2007. Field-Induced ferrimagnetic state in a molecule-based magnet consisting of a Co^{II} ion and a chiral triplet Bis(nitroxide) radical. **Journal of American Chemical Society**, 129 (32): 9902-9909.
- [35] Caneschi, A., Gatteschi, D., Lalioti, N., Sangregorio, C., Sessoli, R., Venturi, G., Vindigni, A., Rettori, A., Pini, M.G., Novak, M.A. 2001. Cobalt(II)-Nitronyl nitroxide chains as molecular magnetic nanowires. **Angewandte Chemie International Edition**, 40 (9): 1760-1763.

- [36] Ishii, N., Okamura, Y., Chiba, S., Nogami, T., Ishida, T. 2008. Giant coercivity in a one-dimensional cobalt-radical coordination magnet. **Journal of the American Chemical Society**, 130 (1): 24-25.
- [37] Han, S.D., Aydiner, E. 2014. Thermal entanglement in the mixed three-spin XXZ Heisenberg model on a triangular cell. **Chinese Physics B**, 23 (5): 050305.
- [38] Jami, S., Amerian, Z. 2014. Thermal entanglement of a qubit-qutrit chain. **International Journal of Recent Advanced in Physics**, 3 (2): 75-84.
- [39] Zad, H.A. 2015. Entanglement in the mixed-three-spin XXX Heisenberg model with the next-nearest-neighbour interaction. **Acta Physica Polonica B**, 46 (10): 1911-1924.
- [40] Sun, Z., Wang, X.G., Hu, A.Z., Li, Y.-Q. 2005. Entanglement properties in $(\frac{1}{2}, 1)$ mixed-spin Heisenberg systems. **Physica A: Statistical and Theoretical Physics**, 370 (2): 483-500.
- [41] Guo, K.-T., Liang, M.-C., Xu, H.-Y., Zhu, C.-B. 2011. Entanglement in a two-spin $(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ mixed-spin Heisenberg XX chain with an inhomogeneous external magnetic field. **Science China Physics, Mechanics, Astronomy**, 54 (3) : 491-495.
- [42] Guo, K.-T., Liang, M.-C., Xu, H.-Y., Zhu, C.-B. 2010. Entanglement in a two-spin $(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ mixed-spin Heisenberg XXZ chain with an inhomogeneous external magnetic field. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, 43 (50) : 505301.
- [43] Wang, F., Jia, H.H., Zhang, H.L., Zhang, X.A., Chang, S.L. 2009. Thermal entanglement in a mixed-spin Heisenberg XXZ model under on a nonuniform external magnetic field. **Science in China Series G: Physics, Mechanics and Astronomy**, 52 (12): 1919-1924.
- [44] Schumacher, B. 1993. Quantum coding. **Physical Review A**, 51 (4): 2738-2747.
- [45] Nielsen, M.A. 1998. Quantum information theory. PhD Thesis, University of New Mexico ,quant-ph/0011036.
- [46] Melikidze, A., Dobrovitski, V.V., De Raedt, H.A., Katsnelson, M.I., Harmon, B.N. 2004. Parity effects in spin decoherence. **Physical Review B**, 70 (1): 014435-1-5.
- [47] Kaye P., Laflamme R., Mosca M. 2006. An Introduction to Quantum Computing. Oxford University Press, Oxford.

- [48] Grenberger, D.M., Horne M.A., Shimony A., Zeilinger A. 1990. Bell's theorem without inequalities. **American Journal of Physics**, 58 (12): 1131-1143.
- [49] Grenberger, D.M., Horne M.A., Zeilinger A. 1989. Going beyond Bell's theorem. Bell's Theorem, Quantum Theory and Conceptions of the Universe, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, pp. 69-72.
- [50] Barenco, A., Ekert, A.K. 1994. Dense coding based on quantum entanglement. **Journal of Modern Optics**, 42 (6): 1253-1259.
- [51] Bose, S., Plenio, M.B., Vedral, V. 2000. Mixed state dense coding and its relation to entanglement measures. **Journal of Modern Optics**, 47 (2-3): 291-310.
- [52] Hausladen, P., Josza, R., Schumacher, B., Westmoreland, M., Wootters, W.K. 1996. Classical information capacity of a quantum channel. **Physical Review A**, 54 (3): 1869-1876.
- [53] Bruß, D., Lewenstein, M., Sen(De), A., Sen, U., D'Ariano, G.M., Macchiavello, C. 2006. Dense coding with multipartite quantum states. **International Journal of Quantum Information**, 04 (03): 415-429.
- [54] Mattle, K., Weinfurter, H., Kwiat, P.G., Zeilinger, A. 1996. Dense coding in experimental quantum communications. **Physical Review Letters**, 76 (25): 4656-4659.
- [55] Fang, X., Zhu, X., Feng, M., Mao, X., Du, F. 1999. Experimental implementation of dense coding using nuclear magnetic resonance. **Physical Review A**, 61 (2): 022307-1-5.
- [56] Jing, J., Zhang, J., Yan, Y., Zhao, F., Xie, C., Peng, K. 2003. Experimental demonstration of tripartite entanglement and controlled dense coding for continuous variables. **Physical Review Letters**, 90 (16): 167903-1-4.
- [57] Mizuno, J., Wakui, K., Furusawa, A., Sasaki, M. 2005. Experimental demonstration of entanglement assisted coding using two-mode squeezed vacuum state. **Physical Review A**, 71 (1): 012304-1-4.
- [58] Dieks, D. 1982. Communication by EPR devices. **Physics Letters A**, 92 (6): 271-272.
- [59] Wootters, W.K., Zurek, W.H. 1982. A single quantum cannot be cloned. **Nature**, 299 (5886): 802-803.

- [60] Furusawa A., Sorensen J.L., Braunstein S.L., Fuchs C.A., Kimble H.J., Polzik E.S. 1998. Unconditional quantum teleportation. **Science**, 282 (5389): 706-709.
- [61] Bouwmeester D., Pan J.-W., Mattle K., Eible, M., Weinfurter, H., Zeilinger A. 1997. Experimental quantum teleportation. **Nature**, 390 (6660): 575-586.
- [62] Herbst, T., Scheidl, T., Fink, M., Handsteiner, J., Wittmann, B., Ursin, R., Zeilinger, A. 2015. Teleportation of entanglement over 143 km. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, 112 (46): 14202-14205.
- [63] Ma, X.-S., Herbst, T., Scheidl, T., Wang, D., Kropatschek, S., Naylor, W., Wittmann, B., Mech, A., Kofler, J., Anisimova, E., Makarov, V., Jennewein, T., Ursin, R., Zeilinger A. 2012. Quantum teleportation over 143 kilometres using active feed-forward. **Nature**, 489 : 269 273.
- [64] Ursin, R., Tiefenbacher, F., Schmitt-Manderbach, T., Weier, H., Scheidl, T., Lindenthal, M., Blauensteiner, B., Jennewein, T., Perdigues, J., Trojek, P., Ömer, B., Fürst, M., Meyenburg, M., Rarity, J., Sodnik, Z., Barbieri, C., Weinfurter, H., Zeilinger, A. 2007. Entanglement-based quantum communication over 144 km. **Nature**, 3 (7): 481 486.
- [65] Boschi, D., Branca, S., De Martini, F., Hardy, L., Popescu, S. 1998. Experimental realization of teleporting an unknown pure quantum state via dual classical and Einstein-Podolsky-Rosen channels. **Physical Review Letters**, 70 (13): 1895 1899.
- [66] Pan, J.-W., Bouwmeester, D., Weinfurter, H., Zeilinger, A. 1998. Experimental entanglement swapping: Entangling photons that never interacted. **Physical Review Letters**, 80 (18): 3891-3894.
- [67] Von Neumann, J. 1955. Mathematical foundations of quantum mechanics. Princeton University Press, Princeton, New Jersey.
- [68] Wootters, W.K. 1998. Entanglement of formation of an arbitrary of two qubits. **Physical Review Letters**, 80 (10): 2245-2248.
- [69] Hill, S., Wootters, W.K. 1997. Entanglement of a pair of quantum bits. **Physical Review Letters**, 78 (26): 5022-5025.
- [70] Plenio, M.B., Virmani, S. 2007. An introduction to entanglement measures. **Quantum Information and Computation**, 7 (1): 1-51.
- [71] Bruß, D. 2002. Characterizing entanglement. **Journal of Mathematical Physics**, 43 (9): 4237-4251.

- [72] Bennett, C.H., DiVincenzo, D.P., Smolin, J.A., Wootters, W.K. 1996. Mixed state entanglement and quantum error correction. **Physical Review A**, 54 (5): 3824-3851.
- [73] Peres, A. 1996. Separability criterion for density matrices. **Physical Review Letters**, 77 (8): 1413-1415.
- [74] Horodecki, M., Horodecki, P., Horodecki, R. 1996. Separability of mixed states: Necessary and sufficient conditions. **Physics Letters A**, 223 (1-2) : 1-8.
- [75] Vidal, G., Werner, R.F. 2002. Computable measure of entanglement. **Physical Review A**, 65 (3): 032314-1-11.
- [76] Burkard, G., Engel, H.-A., Loss, D. 2000. Spintronic and quantum dots for quantum computing and quantum communication. **Fortschritte der Physik**, 48 : 965-968.
- [77] Loss, D., DiVincenzo, D.P. 1998. Quantum computation with quantum dots. **Physical Review A**, 57 (1): 120-126.
- [78] Burkard, G., Loss, D., DiVincenzo, D.P. 1999. Coupled quantum dots as quantum gates. **Physical Review B**, 59 (3): 2070-2078.
- [79] Hu, X., de Souza, R., Sarma, S.D. 2001. Interplay between Zeeman coupling and swap action in spin-based quantum computer models: Error correction in inhomogeneous magnetic fields. **Physical Review Letters**, 86 (5): 918-921.
- [80] Sørensen, A., Mølmer, K. 1999. Spin-spin interaction and spin-squeezing in an optical lattice. **Physical Review Letters**, 83 (11): 2274-2277.
- [81] Kane, B.E. 1998. A silicon-based nuclear spin quantum computer. **Nature**, 393 (6681): 133-137.
- [82] Cory, D.G., Fahmy, A.F., Havel, T.F. 1997. Ensemble quantum computing by NMR spectroscopy. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, 94 (5): 1634-1639.
- [83] Gershenfeld, N.A., Chuang, I.L. 1997. Bulk spin-resonance quantum computation. **Science**, 275 (5298): 350-356.
- [84] Imamoglu, A., Awschalom, D.D., Burkard, G., DiVincenzo, D.P., Loss, D., Sherwin, M., Small, A. 1999. Quantum information processing using quantum dot spins and cavity QED. **Physical Review Letters**, 83 (20): 4204-4207.

- [85] Zheng, S.-B., Guo, G.C. 2000. Efficient scheme for two-atom entanglement and quantum information processing in cavity QED. **Physical Review Letters**, 85 (11): 2392-2395.
- [86] DiVincenzo, D.P., Burkard, G., Loss, D., Sukhorukov, E.V. 2000. Quantum computation and spin electronics. **Quantum Mesoscopic Phenomena and Mesoscopic Devices in Microelectronics**, 559 : 399-428
- [87] Vrijen, R., Yablonovitch, E., Wang, K., Jiang, H.W., Balandin, A., Roychowdhury, V., Mor, T., DiVincenzo, D.P. 2000. Electron spin resonance transistors for quantum computing in silicon-germanium heterostructures. **Physical Review A**, 62 (1): 012306.
- [88] Gürkan, Z.N. 2010. Entanglement and topological soliton structures in Heisenberg spin models. İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Doktora Tezi, İzmir
- [89] Asoudeh, M., Karimipour, V. 2005. Thermal entanglement of spins in an inhomogenous magnetic field. **Physical Review A**, 71 (2): 022308-1-6.
- [90] Terzis, A.F., Paspalakis, E. 2004. Thermal entanglement in a two-qubit Ising model under a site-dependent external magnetic field. **Physics Letters A**, 333 (5-6): 438-445.
- [91] Gunlycke, D., Bose, S., Kendon, M., Vedral, V. 2001. Thermal concurrence mixing in a one-dimensional Ising model. **Physical Review A**, 64 (4) , 0432032.
- [92] Wang, X. 2002. Thermal and ground-state entanglement in Heisenberg XX qubit rings. **Physical Review A**, 66 (3): 034302.
- [93] Cao, M., Zhu, S. 2005. Thermal Entanglement between alternate qubits of a four-qubit Heisenberg XX chain in a magnetic field. **Physical Review A**, 71 (3): 034311.
- [94] Xi, X.-Q., Chen, W.-X., Hao, S.-R., Yue, R.-H. 2002. Pairwise thermal entanglement in the n -qubit ($n \leq 5$) Heisenberg XX chain. **Physics Letters A**, 300 (6): 567-572.
- [95] Sun, Y., Chen, Y., Chen, H. 2003. Thermal entanglement in the two qubit Heisenberg XY model under a nonuniform external magnetic field. **Physical Review A**, 68 (4): 044301-1-4.
- [96] Kamta, G.L., Starace, A.F. 2002. Anisotropy and magnetic field effects on the entanglement of a two qubit Heisenberg XY chain. **Physical Review Letters**, 88 (10): 107901.

- [97] Qin, M., Tao, Y.J., Hu, M.L., Tian, D.P. 2008. Entangled in spin-1 Heisenberg XY chain. **China Series G: Physics, Mechanics and Astronomy**, 51 (7): 817-822.
- [98] Wang, X. 2001. Entangled in the quantum Heisenberg XY model. **Physical Review A**, 64 (1): 012313.
- [99] Sun, Z. Wang, X.G., Li, Y.-Q. 2006. Effects of staggered magnetic field on entanglement in the anisotropic XY model. **Communications in Theoretical Physics**, 45 (1): 61.
- [100] Wu, K.-D., Zhou, B., Cao, W.-Q. 2007. Thermal entanglement in a four-qubit Heisenberg spin model with external magnetic fields. **Physics Letters A**, 362 (5-6): 381-389.
- [101] Hu, M.L., Tian, D.P. 2007. Effects of impurity on the entanglement of the three-qubit Heisenberg XXX spin chain. **Science in China Series G: Physics, Mechanics and Astronomy**, 50 (2): 208-214.
- [102] Kwek, L.C., Takahashi, Y., Choo, K.W. 2009. Spin chain under next nearest neighbour interaction. **Journal of Physics: Conference Series**, 143 (1): 012014.
- [103] Wang, X. 2001. Effects of anisotropy on thermal entanglement. **Physics Letters A**, 281 (2-3): 101-104.
- [104] Zhang, G.F., Li, S.S. 2005. Thermal entanglement in a two-qubit Heisenberg XXZ spin chain under an inhomogeneous magnetic field. **Physical Review A**, 72 (3): 034302.
- [105] Albayrak, E. 2010. Thermal entanglement in two-qutrit spin-1 anisotropic Heisenberg model with inhomogeneous magnetic field. **Chinese Physics B**, 19 (9): 090319.
- [106] Zhang, Y., Long, G.-L. 2007. Ground-state and thermal entanglement in three-spin Heisenberg-XXZ chain with three-spin interaction. **Communications in Theoretical Physics**, 48 (2): 249-254.
- [107] Cao, M., Zhu, S.-Q. 2006. Effects of anisotropy on pair-wise entanglement of a four-qubit Heisenberg XXZ chain. **Chinese Physics Letters**, 23 (11): 2888-2891.
- [108] Wu, K.D., Zhou, B. 2006. Thermal entanglement in the anisotropic XXZ model under an inhomogeneous magnetic field. **International Journal of Modern Physics B**, 20 (15): 2117-2127.

- [109] Wang, X., Fu, H., Solomon, A.I. 2001. Thermal entanglement in three-qubit Heisenberg models. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, 34 (50): 11307.
- [110] Yang, G.H., Gao, W.B., Zhou, L., Song, H.S. 2007. The entanglement in anisotropic Heisenberg XYZ chain with inhomogeneous magnetic field . **Communications in Theoretical Physics**, 48 (3): 453-457.
- [111] Xi, X.-Q., Hao, S.-R., Chen, W.-X., Yue, R.-H. 2002. Entanglement of two-qubit quantum Heisenberg XYZ chain. **Chinese Physics Letters**, 19 (8): 1044-1047.
- [112] Rigolin, G. 2008. Thermal entanglement in the two-qubit Heisenberg XYZ model. **International Journal of Quantum Information**, 02 (03): 393-406.
- [113] Albayrak, E. 2011. Thermal entanglement in the XYZ model for a two-qutrit system . **Optics Communications**, 284 (6): 1631-1636.
- [114] Abliz, A., Gao, H.J., Xie, X.C., Wu, Y.S., Liu, W.M. 2006. Entanglement control in an anisotropic two-qubit Heisenberg XYZ model with external magnetic fields. **Physical Review A**, 74 (5): 052105.
- [115] Zhou, L., Song, H.S., Guo, Y.Q., Li, C. 2003. Enhanced thermal entanglement in an anisotropic Heisenberg XYZ chain . **Physical Review A**, 68 (2): 024301.
- [116] Gu, S.-J., Li, H., Li, Y.-Q., Lin, H.-Q. 2004. The entanglement of Heisenberg chain with next-nearest-neighbor interaction. **Physical Review A**, 70 (5): 052302.
- [117] Li, D.-C., Wang, X.-P., Cao, Z.-L. 2008. Thermal entanglement in the anisotropic Heisenberg XXZ model with the Dzyaloshinskii-Moriya interaction. **Journal of Physics: Condensed Matter**, 20 (32): 325229.
- [118] Albayrak, E. 2011. Thermal entanglement in a two-qutrit spin-1 anisotropic Heisenberg model. **Chinese Physics Letters**, 28 (2): 020306.
- [119] Li, D.-C., Cao, Z.-L. 2009. Thermal entanglement in the anisotropic Heisenberg XYZ model with different Dzyaloshinskii-Moriya couplings. **Chinese Physics Letters**, 26 (2): 020309.
- [120] Jafari, R., Langari, A. 2011. Three-qubits ground state and thermal entanglement of anisotropic Heisenberg (XXZ) and Ising model with Dzyaloshinskii-Moriya interaction. **International Journal of Quantum Information**, 9 (4): 1057-1079.

- [121] Gürkan, Z.N., Pashaev, O.K. 2010. Entanglement in two qubit magnetic models with DM antisymmetric anisotropic exchange interaction. **International Journal of Modern Physics B**, 24 (8): 943-965.
- [122] Abliz, A., Cai, J.-T., Zhang, G.-F., Jin, G.-S. 2009. Entanglement in a three-qubit anisotropic Heisenberg XXZ spin ring with Dzyaloshinskii-Moriya interaction. **Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics**, 42 (21): 215503.
- [123] Zad, H.A. 2016. Entanglement detection in the mixed-spin Ising-XY model. **Chinese Physics B**, 25 (3): 030303.
- [124] Zhou, C.-B., Xiao, S.-Y., Zhang, S.-W., Ran, Y.-Q. 2016. Entanglement in mixed-spin($\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$) Heisenberg XXZ model with Dzyaloshinskii-Moriya interaction. **International Journal of Theoretical Physics**, 55 : 875-885.

EK1. SPİN MATRİSLERİ

Spin- $\frac{1}{2}$ için spin matrisleri aynı zamanda Pauli matrisleri olarak da bilinirler. Pauli spin matrisleri şöyledir;

$$\sigma^x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{EK1.1})$$

$$\sigma^y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{EK1.2})$$

$$\sigma^z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{EK1.3})$$

Spin-1 için spin matrisleri aşağıdaki gibidir;

$$s^x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{EK1.4})$$

$$s^y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{EK1.5})$$

$$s^z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{EK1.6})$$

Spin- $\frac{3}{2}$ için spin matrisleri aşağıdaki gibidir;

$$S^x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{EK1.7})$$

$$S^y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{3} & 0 & 0 \\ i\sqrt{3} & 0 & -2i & 0 \\ 0 & 2i & 0 & -i\sqrt{3} \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{EK1.8})$$

$$S^z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}. \quad (\text{EK1.9})$$

EK2. KUANTUM MANTIK KAPILARI

Tek kubitlik NOT (Değil) kapısına Pauli X matrisi de denir.

$$NOT \equiv X \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{EK2.1})$$

$$NOT |0\rangle = NOT \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |1\rangle,$$

$$NOT |1\rangle = NOT \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |0\rangle.$$

Tek kubitlik Hadamard mantık kapısı

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (\text{EK2.2})$$

şeklinde ifade edilir. Hadamard mantık kapısının kuantum durumlarına etkisi aşağıdaki gibi gösterilmiştir;

$$\begin{aligned} H|0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] = \frac{1}{\sqrt{2}} [|0\rangle + |1\rangle], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H|1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] = \frac{1}{\sqrt{2}} [|0\rangle - |1\rangle]. \end{aligned}$$

İki kubitlik CNOT kapısı

$$CNOT = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{EK2.3})$$

şeklinde temsil edilir. CNOT kapısının iki kubitlik kuantum durumlarına uyguladığı dönüşümler

$$CNOT |00\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$CNOT|11\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

şeklinde gerçekleşir.

ÖZ GEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : Yücel BİLİR
Doğum Yeri ve Tarihi : BERLİN 21/03/1976

EĞİTİM DURUMU

Lisans Öğrenimi : Dokuz Eylül Üniversitesi
Buca Eğitim Fak., Fizik Eğitimi Böl.
Yüksek Lisans Öğrenimi : Adnan Menderes Üniversitesi
Fen-Edebiyat Fak., Fizik Böl.
Bildiği Yabancı Diller : İngilizce

İŞ DENEYİMİ

Çalıştığı Kurumlar ve Yıl : Aydın Lisesi, 2008-2018

BİLİMSEL FAALİYETLER

a)Ulusal Bildiriler : Yücel BİLİR
Manyetik alanın $\text{spin}(1, \frac{3}{2})$ karma tip
Heisenberg XXX sisteminin taban ve ısısal
dolaşıklığı üzerindeki etkilerinin
incelenmesi.
ADIM Fizik Günleri VI., 19-21 Temmuz 2017,
Sözlü Sunum
: Yücel BİLİR, Cenk AKYÜZ
Homojen bir manyetik alanda bulunan
dört kubitlik $J_1 - J_2$
Heisenberg XX sisteminin ısısal
dolaşıklığının incelenmesi.
ADIM Fizik Günleri IV., 28-29 Mayıs 2015,
Poster Sunumu
: Yücel BİLİR, Cenk AKYÜZ
Safsızlığın $J_1 - J_2$ Heisenberg sisteminin
taban durum dolaşıklığı
üzerindeki etkilerinin incelenmesi.
ADIM Fizik Günleri III., 17-18 Nisan 2014,
Poster Sunumu

İLETİŞİM

E-posta Adresi : yclbilir76@yahoo.com
Tarih : 07.05.2018