

**T.C.
ADNAN MENDERES ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI
2015-YL-034**

**SPİN-1/2 ISING-HEISENBERG MODELİNİN
DEKORE EDİLMİŞ BETHE ÖRGÜSÜ ÜZERİNDE
MANYETİK ÖZELLİKLERİ**

Okan İBİŞ

**Tez Danışmanı:
Prof. Dr. Cesur EKİZ**

AYDIN-2015

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

Fizik Anabilim Dalı Yüksek Lisans Programı öğrencisi Okan İBİŞ tarafından hazırlanan “ Spin-1/2 Ising-Heisenberg Modelinin Dekore Edilmiş Bethe Örgüsü Üzerinde Manyetik Özellikleri” başlıklı tez, tarihinde yapılan savunma sonucunda aşağıda isimleri bulunan jüri üyelerince kabul edilmiştir.

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

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

Prof. Dr. Aydın ÜNAY
Enstitü Müdürü

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

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

.../.../2015

Okan İBİŞ

ÖZET

SPİN-1/2 ISING-HEISENBERG MODELİNİN DEKORE EDİLMİŞ BETHE ÖRGÜSÜ ÜZERİNDE MANYETİK ÖZELLİKLERİ

Okan İBİŞ

Yüksek Lisans Tezi, Fizik Anabilim Dalı

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Cesur EKİZ

2015, 41 sayfa

Elmas yapılı dekore edilmiş Bethe örgüsü üzerinde spin-1/2 Ising-Heisenberg modeli, kesin tekrarlama yöntemine dayalı yöntem ile dekorasyon-iterasyon dönüşümünün birlikte kullanılmasıyla tam olarak çözüldü. Klasik ferromanyetik fazın yanı sıra incelenen ferromanyetik XXZ Heisenberg etkileşmeli kuantum spin modeli ayrıca düzensiz bir spin sıvı taban durumu sergileyebilir ki bu faz sırasıyla XXZ Heisenberg ile Ising tipi etkileşmeden kaynaklanmaktadır. Esas olarak modelin faz diyagramlarındaki faz çizgileri Bethe örgüsünün koordinasyon sayısına bağlı olduğu gösterilmiştir.

Bethe örgüsünde koordinasyon numarasının 4 ten küçük olması durumunda ($q < 4$) sonlu-sıcaklık faz sınırının düzenli ve düzensiz fazlar arasındaki sıfır-sıcaklık faz geçişine yaklaştığı ve negatif eğime sahip olduğu görülmüştür. Bethe örgüsünde koordinasyon numarasının 4 ten büyük olması durumunda ($q > 4$) eğimin pozitif olduğu, koordinasyon numarasının 4 e eşit olduğu durumda ise eğimin sonsuz gradyana sahip olduğu gösterilmiştir. Bu gerçeğe bağlı olarak, 4 ten yeterince büyük koordinasyon numarasına sahip elmas benzeri dekore edilmiş Bethe örgülerinde sıfır-sıcaklık düzenli ve düzensiz faz geçişlerinin yakınında reentrant faz geçişleri gözlenebilir. Sonlu-sıcaklık faz diyagramlarına ek olarak, bu çalışmada dikkatler gözlenen reentrant davranışın bağımsız kontrolünü sağlayacak kendiliğinden magnetizasyonun sıcaklık değişimlerine verilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Ising-Heisenberg modeli; dekorasyon-iterasyon dönüşümü; tam çözümler; manyetik özellikler.

ABSTRACT

**MAGNETIC PROPERTIES OF SPIN-1/2 ISING-HEISENBERG
MODEL ON THE DECORATED BETHE LATTICE**

Okan İBİŞ

M.Sc. Thesis, Department of Physics

Supervisor: Prof. Dr. Cesur EKİZ

2015, 41 pages

The spin-1/2 Ising-Heisenberg model on diamond-like decorated Bethe lattices is exactly solved by combining the decoration-iteration mapping transformation with the rigorous method based on exact recursion relations. Apart from the classical ferromagnetic phase, the investigated quantum spin model with the ferromagnetic XXZ Heisenberg interaction may also exhibit a disordered spin liquid ground state on behalf of the geometric frustration triggered by a competition between the easy-plane XXZ Heisenberg interaction and the easy-axis Ising-type interaction, respectively. It is evidenced that the finite-temperature phase boundary between the spontaneously ordered and disordered phases basically depends on a coordination number q of the underlying Bethe lattice.

It is shown that the finite-temperature phase boundary approaches the zero-temperature phase transition between the ordered and disordered phases with a negative slope for the Bethe lattices with the coordination number $q < 4$, with a positive slope for the Bethe lattices with the coordination number $q > 4$ and with an infinite gradient for the Bethe lattice with the particular value of the coordination number $q = 4$. Owing to this fact, reentrant phase transitions can be observed in a close vicinity of the zero-temperature transition between the ordered and disordered phases for the diamond-like decorated Bethe lattices with a sufficiently high coordination number $q > 4$. In addition to the finite-temperature phase diagrams, our attention is also focused on temperature variations of the spontaneous magnetization, which may provide an independent check of the observed reentrance.

Key Words: Ising-Heisenberg model; the transformation of the decoration-iteration; complete solutions; magnetic characteristics.

ÖNSÖZ

Bu çalışmada bilgi birikimini ve zamanını esirgemeyen çok değerli hocam Prof. Dr. Cesur EKİZ'e teşekkür ederim. Ayrıca çalışmam esnasında her türlü desteğini gösteren eşim Berna Kaya İBİŞ ve özellikle arkadaşlarımdan Atilla EREN ile Duygu SELVİ'ye teşekkür ederim.

Okan İBİŞ

İÇİNDEKİLER

KABUL VE ONAY SAYFASI.....	iii
BİLİMSEL ETİK BİLDİRİM SAYFASI.....	v
ÖZET.....	vii
ABSTRACT.....	ix
ÖNSÖZ.....	xi
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	xv
ÇİZELGELER DİZİNİ.....	xvii
1. GİRİŞ.....	1
1.1. Ising Modeli.....	5
1.2. Heisenberg Modeli.....	8
1.3. Bethe Örgüsü.....	9
2. KAYNAK ÖZETLERİ / KURAMSAL TEMEL.....	12
3. MATERYAL VE YÖNTEM.....	15
3.1. Materyal.....	15
3.2. Yöntem.....	16
3.2.1. İterasyon Metodunun Bethe Örgüsü Üzerinde Spin-1/2 Ising Modeline Uygulanması.....	16
4. BULGULAR VE TARTIŞMA.....	22
4.1. Dekorasyon-İterasyon Dönüşümünün Spin-1/2 Ising-Heisenberg Modeline Uygulanması.....	22
4.1.1. Ising ve Heisenberg Magnetizasyonlarının Sıcaklığa Göre Değişimleri.....	27
4.1.2. Faz Diyagramları.....	32
5. TARTIŞMA VE SONUÇ.....	34
KAYNAKLAR.....	35
ÖZGEÇMİŞ.....	41

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 1.1. Kritik sıcaklıkta antiferromanyetik fazdan paramanyetik faza geçiş.....	3
Şekil 1.2. Kritik noktalarda antiferromanyetik ve ferromanyetik fazdan paramanyetik faza geçiş.....	4
Şekil 1.3. Spinlerin herhangi bir andaki pozitif (+) ya da negatif (-) durumları (Kındermann ve Sneel, 1980).....	6
Şekil 1.4. Üçüncü mertebeden bir yarı Cayley ağacı; x_o ağacımızın kökü (sabit nokta) (Saygılı, 2012).....	9
Şekil 3.1. $q = 3$ koordinasyon sayılı dekore edilmiş Bethe örgüsü üzerindeki Ising-Heisenberg modeli.....	15
Şekil 3.2. Bir Cayley Ağacının, $q = 3$ ve $n = 4$ Konumlu Üretiminin Gösterimi.....	16
Şekil 4.1. Dekore edilmiş Bethe örgüsü üzerinde spin-1/2 Ising-Heisenberg modelinin şematik temsili.....	22
Şekil 4.2. Farklı koordinasyon sayıları $q = 3, 4, 5$ ve 6 Ising ve Heisenberg mıknatıslanmalarının sıcaklık bağımlılıkları. $\Delta = 0$ ve $J_H/J_I = 1$	27
Şekil 4.3. Spin-1/2 Ising-Heisenberg modelinde $J_H/J_I = 1$, $q = 3$ için anizotropi parametresinin $\Delta = 0, 1, 2$ ve 2.8 değerleri için Ising ve Heisenberg magnetizasyonlarının termal değişimleri.....	28
Şekil 4.4. Spin-1/2 Ising-Heisenberg modelinde $J_H/J_I = 1$, $q = 6$ için anizotropi parametresinin $\Delta = 1$ ve 2.5 değerleri için Ising ve Heisenberg magnetizasyonlarının termal değişimleri.....	29
Şekil 4.5. Spin-1/2 Ising-Heisenberg modelinde $J_H/J_I = 1$, $q = 6$ için anizotropi parametresinin $\Delta = 3.1$ değeri için Ising ve Heisenberg magnetizasyonlarının termal değişimleri.....	30
Şekil 4.6. Spin-1/2 Ising-Heisenberg modelinde antiferromagnetik durumda Ising ve Heisenberg mıknatıslanmalarının termal değişimleri. $J = -1$ (sabit) a) Koordinasyon sayısı $q = 3$ ve anizotropi parametresi $\Delta = 1.5$ b) Koordinasyon sayısı $q = 6$ ve anizotropi parametresi $\Delta = 2$	31

Şekil 4.7. $J_H/J_I = 1$ ve $\Delta = 3$ olmak üzere koordinasyon sayıları $q = 3$ ve $q = 4$ için faz diyagramları.....32

Şekil 4.8. $J_H/J_I = 1$ ve $\Delta = 3$ olmak üzere koordinasyon sayıları $q = 5, q = 6$ ve $q = 8$ için faz diyagramları.....33

TABLolar DİZİNİ

Tablo 4.1. İki durumlu spin-1/2 Ising modeli için bütün spin yönelimleri için şekillenimler.....	24
---	----

1. GİRİŞ

Maddenin katıdan sıvıya, sıvıdan gaza, mıknatıssızlıktan mıknatıslılığa veya iletken den süperiletkene dönüştüğü kritik noktayı oluşturan ve faz geçişleri olarak bilinen olgu, istatistik fiziğin en önemli inceleme alanlarıdır. Faz geçişleri makro düzeyde bazı davranış biçimleri içerir ki, mikro düzeydeki ayrıntılara bakarak bunları öngörmek pek kolay olmaz. Katı bir cisim ısıtıldığında artan enerjisiyle beraber molekülleri titreşir. Bu moleküller aralarındaki bağlara rağmen birbirlerini iterler ve maddeyi genleşmek zorunda bırakırlar. Isı arttıkça genleşme de artar. Fakat, belirli bir sıcaklık ve basınca gelince, değişme birdenbire ani ve süreksiz hale döner. Moleküller arasındaki bağ önceleri uzamaktayken şimdi kopar. Kristal şekil kaybolur ve moleküller birbirinden uzaklaşır. Bu olaylar, katı cisimlerin değil de, akışkan cisimlerin yasalarına uyarlar. Atomun ortalama enerjisi hemen hemen değişmemiş, fakat madde (şimdi bir gaz, bir mıknatıs ya da bir iletken haline gelmiş) yepyeni faza geçmiştir.

Fazlar maddelerin belli özelliklerine göre sınıflandırılmasıyla oluşmuşlardır ve her bir faz kendine özgü belli özellikler sergiler.

Maddeler magnetik durumlarına göre diyamanyetik maddeler, paramanyetik maddeler, ferromanyetik maddeler ve antiferromanyetik maddeler olarak sınıflandırılır. Diyamanyetik malzemelerde normal konumda çekirdek etrafında zıt yönde ve aynı hızla dönen elektronlar birbirlerinin magnetik momentlerini yok ederler. Bir dış alan uygulanınca elektronlar ek bir magnetik kuvvet altında kalırlar. Ek kuvvet nedeniyle elektronların gördüğü merkezci kuvvet artık aynı olmaz. Magnetik momenti alana antiparalel olan elektronun hızı artarken, paralel olan elektronun hızı azalır. Bu durumda, elektronların magnetik momentleri birbirlerini yok etmez ve malzeme magnetik alana zıt yönde bir dipol moment gösterir (Güngör, 2011). Atomdaki bu davranış biçimine “diyamanyetizma” denir.

Birçok atomda son elektron yörüngelerinde tek sayıda elektron vardır. Dolayısıyla bu atomda elektronlar birbirlerinin oluşturdukları magnetizmayı nötralize edemezler ve bu atom ortamda güçlü magnetik alan olmadan da magnetizma nedeni olur. Bu davranış özelliğindeki atomlar için “paramanyetik” denir. Bununla birlikte, bu atom yalnız başına bir magnetizm nedeni olduğu halde, bu atomlardan oluşmuş bir element de magnetizasyon görülmez. Bunun nedeni elementi oluşturan atomların magnetizasyon vektörlerinin rastgele dağılım göstermesi ve

birbirlerinin magnetizasyonlarını nötralize etmeleridir. Eđer bu element güçlü bir magnetik alan içine konacak olursa elektronların neden olduđu bu magnetizmalar belli bir düzene gireceğinden belirgin bir magnetizasyon gözlenebilir. Diyamanyetizmde olduđu gibi paramanyetik elementlerde de oluşan bu magnetizma ortamda bulunan güçlü magnetik alanın gücü ile doğrudan orantılıdır. Bununla birlikte farklı olarak, oluşan magnetizma ortamın güçlü magnetik alan vektörü ile aynı yönde olur (diamanyetizmde ters yönde olmaktadır) (Konez, 1995).

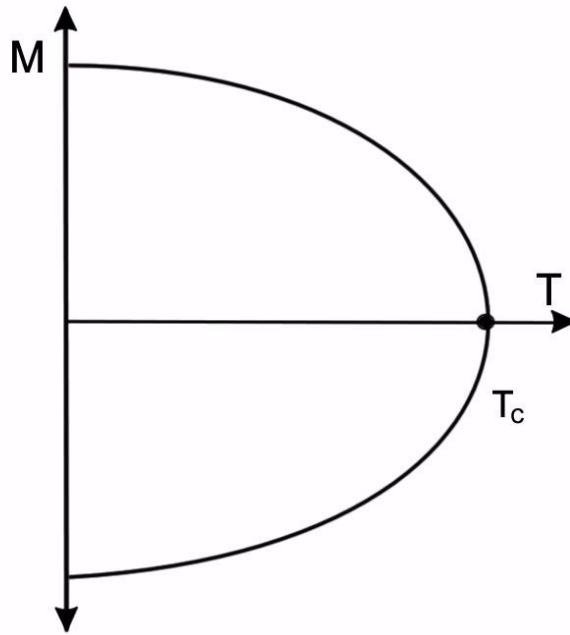
Bir ferromanyetik maddenin magnetik yapısı diyamanyetik ve paramanyetik maddelere göre daha karmaşıktır. Ferromanyetik bir maddeye, çok büyük moleküler alanın etkisinde kalmış paramanyetik bir madde gözüyle bakılabilir.

Yine element içinde dađınık magnetizasyon vektörleri nedeni ile magnetizasyon nedeni olmayan, fakat paramanyetik elementlerden farklı olarak ortamdaki manyetik alana ileri derecede duyarlı olan elementler de vardır. Bunlar çok daha zayıf dış manyetik alanda bile güçlü magnetizma nedeni olmaktadır ve dış magnetik alan ortamdaki uzaklaştırılsa bile bu magnetizasyon devam etmektedir. Bu davranış özelliğine “Ferromanyetizm” denmektedir (Konez, 1995). Ferromanyetik malzemeler yüksek manyetik alınganlık ve manyetik geçirgenliğe sahip malzemelerdir. Manyetik alınganlığı ~ 50-10000 civarındadır ve sıcaklığa bađlıdır (Güngör 2011). Dış magnetik alan uzaklaştırılsa dahi element magnetizasyonunun devam etmesi özelliğinden faydalanılarak sabit güçlü magnetik elementler (Permanent magnet) elde edilebilmektedir. Ferromanyetik elementler; demir (Fe), nikel (Ni), kobalt (Co) ve F_3O_4 ’dir.

Paramanyetik maddelerde uygulanan magnetik alan maddeyi kısmen yönlendiren etkiyi sağlar. Ferromanyetik davranış deđişik bir yapı oluşturur. Bu yapı klasik olarak açıklanamayan, komşu moleküller yada arasındaki deđiş-tokuş enerjisi diye bilinen bir kuantal olguyla ilgili ve olay oldukça basittir. Büyük sayıda magnetik momentler birbirlerinin magnetik momentlerinin yönelmelerinde iş birliği yaparlar. Yani belirli bir magnetik momentin yakın komşularıyla etkileşme enerjisi, hepsi aynı yöndeysse daha düşüktür. Yönelme paramanyetik bir madde de elde edilenden çok daha büyük bir oranda gerçekleşir (Karabekirođulları, 2005).

Ferromanyetik bir malzemedeki dipol momentlerin yönelmelerinde birbirleriyle işbirliği yapmalarına karşı koyan, sıcaklıkla çođalan gelişigüzel yönelme

eğilimidir. Yani madde içindeki ısısal çalkantı hareketi bu düzeni bozmak ister, fakat sıcaklık fazla yüksek değilse dipolleri etkileyemez. Bu nedenle, yüksek sıcaklıklarda ferromanyetik düzenin yok olması şaşırtıcı değildir. Şaşırtıcı olan belirli bir sıcaklıkta (Curie noktası) birden bozulmasıdır. Curie noktası, kaynama veya donma noktası gibi, kritik bir sıcaklıktır, dereceli değil birden olur. Bir maddenin durumunda belirli bir sıcaklıkta olan bu ani değişikliklere faz geçişleri denir (Yeoman, 1992). Curie sıcaklığı'nın altında manyetik momentler paralel dizildiklerinden madde ferromanyetikdir, Curie sıcaklığının üstünde ise magnetik momentler gelişigüzel yönelmekte ve madde paramanyetik olmaktadır.



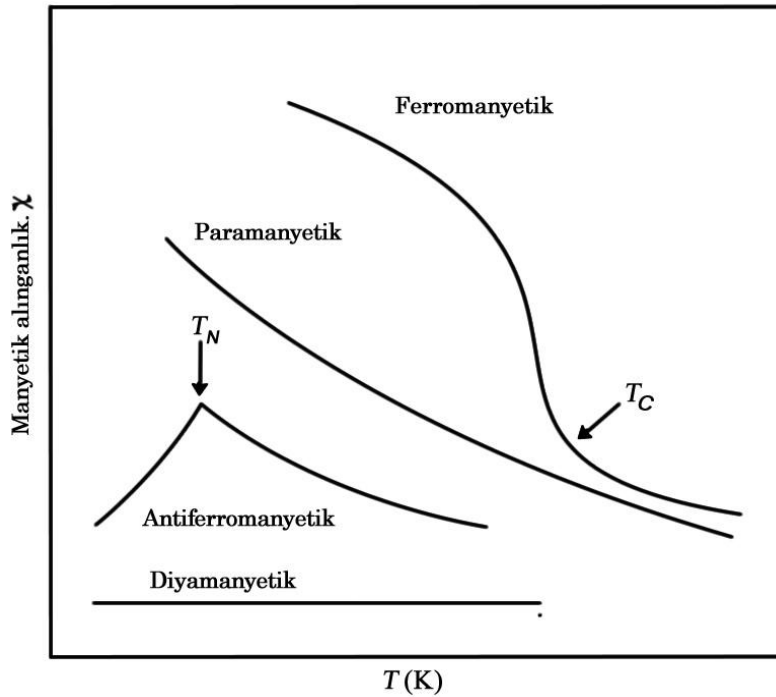
Şekil 1.1. Kritik sıcaklıkta antiferromanyetik fazdan paramanyetik faza geçiş

Saf demirin Curie noktası 770 °C'dir. Bu sıcaklığın üzerinde bir demir parçası ne bir mıknatıs olabilir, ne de bir mıknatıs tarafından çekilebilir. Curie noktasındaki değişim atomik mıknatısların paralel doğrultuda yönelebilmeye yeteneklerini kaybetmelerinden kaynaklanıyor. Bu değişimin erimeyle herhangi bir ilgisi yoktur. Örneğin demir 1538 °C'de erir fakat mıknatıslığını 770°C'de

kaybeder. Bir başka örnek ise, Disprosyum metali -185°C 'de, oda sıcaklığının çok altında, mıknatıslığını kaybeder ve 1411°C 'de erir.

Antiferromanyetik malzemelerde atomlar net bir magnetik momente sahiptirler ve bu magnetik momentler birbirlerine paralel ve birbirlerini yok edecek şekilde yönelimleri birbirlerine terstir. Bu yönelimlerin ters olmasının nedeni deęiş tokuř etkileřimleridir. Antiferromanyetik bir maddeye bir dıř magnetik alan uygulandıęında magnetik alanla ters yönelimli olan magnetik momentler uygulanan alanla aynı yönde yönelmeye bařlar. Uygulanan dıř magnetik alan arttıkça, malzemenin toplam mıknatıslanmasının da arttıęı görölmektedir.

Antiferromanyetizmanın kuramı ilk kez Néel tarafından verilmiřtir. Antiferromanyetik bir maddenin magnetik alınganlıęı, tüm sıcaklıklarda pozitif ve küçüktür. Fakat sıcaklık azaldıkça alınganlık önce artar ve Néel sıcaklıęında çok keskin olmayan bir maksimuma ulařtıktan sonra azalmaya bařlar. Malzeme Néel sıcaklıęının üstünde paramanyetik, altında antiferromanyetikdir. Antiferromanyetik maddelerde, T_N kritik sıcaklıęının altında spinlerin birbirine zıt yönelme eęilimleri, bu sıcaklık aralıęındaki termal enerjiye oranla oldukça büyüktür.



řekil 1.2. Kritik noktalarda antiferromanyetik ve ferromanyetik fazdan paramanyetik faza geçiř

Ferromanyetik ve antiferromanyetik yapıların modellenmesinde, istatistik mekanik temelinde ele alınabilecek belli başlı modellerden birisi olan, Lenz (1920) tarafından ileri sürülen ve daha sonra öğrencisi Ising (1925) tarafından analitik olarak çözülen ve geliştirilen bir model olan Ising modeli kullanılmıştır. Model ilk önce Curie sıcaklığındaki ferromanyetiklerin faz geçişini açıklamaya yönelik olarak keşfedilmişse de model üzerinde küçük değişiklikler yapılarak yoğunlaşma, magnetizasyon, kristalografik düzen parametresi, elektrik polarizasyon, ikili-üçlü sıvı ve gaz karışımlarının faz dönüşümleri, gazların soğurulması, akışkan konsantrasyonu, ikili alaşımlardaki düzenli ve düzensiz faz geçişleri vb. birçok fiziksel olayın termodinamik davranışlarını açıklamaktadır (Ma, 1985). Günümüzde, spin camları gibi çok parçacıklı modern fizik problemlerine uygulanmaktadır.

1.1. Ising Modeli

Fizikçiler ve diğer bilim adamlarının karmaşık sistemlerin davranışlarını incelemek için kullandıkları Ising modeli, matematiksel bir modelleme aracıdır. Ising modelinin yapısı bir karmaşık sistemin iç elemanlarını incelemek ve sistemin tüm davranışını belirlemek için elemanların birbirleriyle olan etkileşimlerini yaklaşım metotları ile tahmin etmeye olanak sağlayan bir sistemdir (Ising, 1925).

1925' te Uhlenbeck ve Goudsmit, elektronun bir $s = 1/2$ spinine sahip olduğu ve magnetik alanda bu spinin doğrultusunun alana ya paralel yada antiparalel yönelecek şekilde kuantlandığını söyleyen varsayımı ortaya koydular. Aynı yıl Lenz, öğrencisi Ising'e; spinler arasında etkileşme, kristal örgüsündeki paralel spinler birbirini çekecek, antiparalel spinler de birbirini itecek şekilde tanımlanırsa yeterince düşük sıcaklıklarda tüm spinlerin aynı yönde yönelebileceğini ve modelin ferromanyetizmanın atomik bir tanımını verebileceğini önerdi. Modeli sınamak için kriter, modelin ferromanyetizmayla ilgili tekilliklere yol açıp açmadığı yada daha açık olarak bir T_C kritik sıcaklığının ortaya çıkıp çıkmadığıdır (Tırnaklı, 1995). Ising, spin-1/2 Ising modelinin tek boyuttaki çözümünü yapmış fakat faz dönüşümünü bulamamıştır. Ortaya çıkan bu sonuç neticesinde modele olan ilgi azalmıştır.

Ising, her bir nokta veya köşede küçük bir dipol veya spin takılı olan eksen üzerindeki noktaların bir dizisini $0, 1, 2, \dots, n$ şeklinde düşünmüştür. Spin, verilen herhangi bir anda yukarı (pozitif) veya aşağı (negatif) yönelimi ifade eder. Bu

spinlerin durumlarını gösteren konfigürasyonlar genel olarak aşağıdaki şekilde görüldüğü formdadır;



Şekil 1.3. Spinlerin herhangi bir andaki pozitif (+) ya da negatif (-) durumları (Kindermann ve Sneel, 1980).

Her bir örgü noktasında, elektron spin açılal momentumu olan \vec{S}_i ve \vec{m} magnetik momentine sahip bir atom içeren toplam N benzer atomlu bir örgü bulunmaktadır. Spinin örgüdeki konumu i indisi ile ifade edilir. Bir spin yukarı (+1) ve aşağı (-1) olmak üzere sadece iki yönelime sahiptir, yani S_i spin kuantum sayısının z bileşeni, hesaplamalarda kolaylık sağlaması açısından (+1/2) ve (-1/2) değerlerini almaktadır (Karaoğlu, 2004). Örgünün geometrik yapısı önemli olmadığından kare, kübik, hegzagonal v.b yapıda olabilirler (Huang, 1972). Kare bir örgüde her spinin sadece en yakın dört komşusuyla etkileştiği varsayılır. J değiş-tokuş enerji sabitidir ve enerji boyutundadır (Landau ve Binder, 2009). $J = 0$ olduğunda değiş-tokuş enerjisi meydana gelmez ve paramanyetiklik oluşur. Bu sebeple spinler arasında bir etkileşme ve ortak bir davranış olmaz. Bunun sonucunda faz geçişi de gerçekleşmez.

Dış magnetik alan olmasa dahi spinler arasındaki etkileşmeler ferromanyetik düzeni sağlamaya yeterlidir. Herhangi bir noktadaki spinin dört komşusuyla etkileşmesi, komşularının paralel veya antiparalel oluşuna göre, toplam enerjiye değişik katkılarda bulunacaktır. Etkileşme kuvvetinin ölçüsü olan J sabiti pozitif ise, iki spin arasındaki etkileşmenin enerjiye katkısı, paralel spinler için $-J$, antiparalel spinler için $+J$ olur ; o halde spinler enerjiyi minimum yapacak şekilde, paralel konumları tercih ederler. J sabiti negatif ise spinler antiparalel konumları tercih ederler. Bu durumda $J > 0$ için ferromanyetik düzen, $J < 0$ için antiferromanyetik düzen gerçekleşir (Kittel, 1986). Dış manyetik alanda iki spin paralel ise enerjisi daha düşük olur. Ancak ortamdaki ısısal enerji nedeniyle spinlerin paralelliği tam oluşmaz (Karaoğlu, 2004). Dış alanın sıfır olduğu

durumda bir domain içindeki tek alan deęiş-tokuş etkileşme alanıdır. Sıcaklığın azalmasıyla birlikte momentler arasındaki deęiş-tokuş enerjisi termal enerjiyi yenerek momentlerin paralel sıralanmaya geçmesini, belli bir geçiş sıcaklık deęerinden (Curie sıcaklığı) aşığıda da momentlerin tamamının paralel sıralanmasını sağlamaktadır. Bu durum bir magnetik domain içinde kendiliğinden magnetizasyonun oluşumudur (Kittel, 1986).

Ancak daha sonraki yıllarda Heisenberg modelinin geliştirilmesi ve Onsager tarafından modelin iki boyuttaki ve sıfır manyetik alanda tam çözümünün yapılması, modele olan ilgiyi artırmıştır. İlk önceleri Lenz-Ising modeli olarak anılan model daha sonraları Ising modeli olarak adlandırılmıştır. 1941 yılında Kramers ve Wannier dış manyetik alan yokluğunda kare örgü için kritik sıcaklık deęerini veren bir ifade buldu (Kramers ve Wannier, 1941). 1944 yılında Onsager, Helmholtz serbest enerjisini kullanarak Kramers ve Wannier tarafından bulunan kritik sıcaklık deęerinin doğruluğunu açık bir şekilde gösterdi (Onsager, 1944). 1960 yılında Domb, iki boyutta bal peteęi ve üçgen örgü için Ising modelinin tam çözümü yaptı (Domb, 1960).

Ayrıca, termomanyetik ve moleküler tabanlı kayıt sistemleri, telafi sıcaklıklarının varlığı, ferrimanyetik yapıya sahip karmaşık bileşikler, amorf yapıya sahip alaşımlar, seyreltik ferrimanyetik sistemler, moleküler tabanlı mıknatıslar, yarı-iletken alaşımlar, ferrimanyetik düzenlilik ve düzenli-düzensiz faz geçişleri gibi daha karmaşık fiziksel sistemlerin termodinamik davranışlarını incelemek için daha yüksek spinli (spin-1, spin-3/2, spin-2 ve spin-5/2) veya karma spin Ising sistemleri gibi, daha fazla durumlu ve birden fazla düzen parametrelili bir model gerekmektedir. Karma spin Ising sistemleri ile ilgili çalışmalara 1980' li yıllarda başlanmış ve bu spin sistemleri zamanımızda da kullanılan ve kullanılmaya da devam edilen en önemli sistemler olmuşlardır (Korkmaz, 2013).

Ising modellerinin gelişmesiyle birlikte ince filmler, çok tabakalı yapılar ve buna benzer magnetik sistemler de modern fizikteki yerini almıştır. Çünkü bu malzemeler farklı magnetik maddelerin yapılandırılmasıyla, yeni magnetik maddelerin sentezlenmesi, düzeltilmesi ve bilgi depolaması gibi çeşitli uygulama alanlarında, teknolojik avantajlar sağlamaktadır (Onsager, 1944; Helmers, 1995). Bu malzemelere manyeto-rezistans (Baibich vd., 1988; Binasch vd., 1989), yüzey magnetik anizotropisi (Sayama vd., 2004), manyeto-clastik (O' Handley ve Sun,

1991; Bochi vd., 1994) etkileşim ve gelişmiş yüzey magnetik momenti (Wu ve Freeman, 1992; Donath, 1999) örnek olarak verilebilir.

1.2. Heisenberg Modeli

Ising, kendi çalışmasından yapılan tek çağdaş alıntının Heisenberg tarafından yapıldığını belirtmektedir. Heisenberg 1928 yılında kendi ferromanyetizma teorisini öne sürdüğü zaman şöyle demiştir:

“Ising, bir zincirdeki 2 komşu atom arasında yeterince yönelimli (yönlendirilmiş) büyük kuvvetler varsayımının ferromanyetizmayı açıklamaya yetmediğini göstermekte başarılı olmuştur”.

Bu yüzden Heisenberg, spinler arasında daha karmaşık bir etkileşime dayanan kendi teorisini geliştirmek için tek gerekçe olarak ferromanyetizmi açıklama konusunda Lenz-Ising modelinin başarısız olduğunu öne sürmüştür. Bu şekilde, ferromanyetizm teorilerinin doğal gelişim sırası tersine dönmüştür. İlk önce, daha karmaşık olan Heisenberg modelinden yararlanılmış ve teorisyenler ancak bundan sonra daha basit olan Lenz-Ising modelinin özelliklerini incelemeye geçmişlerdir (Brush, 1967).

Birçok magnetin çok gerçekçi bir Ising-Heisenberg modeli için Hamiltonyen,

$$H_k = -J_H [\Delta(S_{k1}^x S_{k2}^x + S_{k1}^y S_{k2}^y) + S_{k1}^z S_{k2}^z] - J_I (\mu_{k1}^z + \mu_{k2}^z) (S_{k1}^z + S_{k2}^z) \quad (1.1)$$

şeklinindedir. Buradaki x,y, ve z'ler spin uzayındaki kartezyen eksenlerdir. $J_H = 0$ için Ising modelini tekrar elde edeceğiz. Bu Heisenberg modelidir. Bu modelde spin operatörü aynı kalmaktadır.

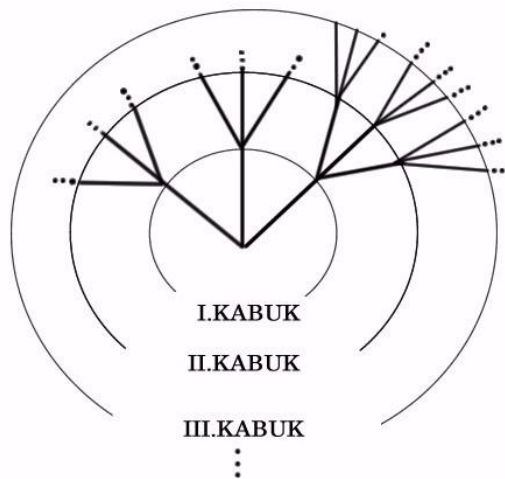
Heisenberg modeli, bazı magnetik maddelerin özelliklerini açıklar. Bununla beraber ferromanyetizmaya neden olan ve değiş-tokuş etkileşmesinide tanımlayan mikroskobik Hamiltonyeni ifade eder. Aynı zamanda, ayırt edilemez olan spinlerin olasılığını içermez ve spin uzayında tam bir izotropinin olduğunu kabul eder (Karabekiroğulları, 2005).

Katıhal fiziğinde ve istatistik fizikte üzerinde sıklıkla çalışılan modellerden birisi Heisenberg modeli, magnetik sistemlerde spinin kuantum mekaniksel olarak ele alındığı faz dönüşümleri ve kritik olayların incelenmesinde kullanılmaktadır. Son

zamanlarda özellikle düşük boyutlu Heisenberg modeli ilginç kuantum olaylarının incelenmesi için yararlı bir model olmasından dolayı yoğun bir ilgi görmüştür.

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

1.3. Bethe Örgüsü



Şekil 1.4. Üçüncü mertebeden bir yarı Cayley ağacı; x_0 ağacımızın kökü (sabit nokta) (Saygılı, 2012).

Şekil 1.4'te gösterilen, $q \geq 1$ olmak üzere bir Γ^q (q -ncü mertebeden) Cayley ağacı; q tane nokta ve her noktadan çıkan $q + 1$ tane kenarı bulunan bağlantısız (döngüsüz) birleşik bir grafiğe sahip olan yarı sonsuz bir ağaçtır. Bir yarı Cayley

ağacı oluşturulurken, merkezi bir “ x_0 ” noktasından başlanır ve hepsi bu “ x_0 ” noktasına bağlı q tane nokta eklenir, bu q tane noktalar takımı “birinci kabuk” (shell) olarak adlandırılır. Daha sonra bu q tane noktanın her birine yine q tane nokta eklenerek $q \cdot q = q^2$ tane yeni nokta oluşur ve bu q^2 tane noktalar takımına ise “ikinci kabuk” denir. Bu şekilde iterasyonel olarak ilerleyerek üçüncü, dördüncü ve sonraki kabuklar oluşturulur. Böylece sonsuza uzanan bir örgü diyagramı olan yarı Cayley ağacı elde edilir. Burada başlangıç noktası “ x_0 ” hariç (x_0 'ın q tane) bütün noktaların $q + 1$ tane “en yakın komşuluğu” vardır (Saygılı, 2012).

Cayley ağacı üzerindeki örgü modellerinin incelenmesi son zamanlarda yoğun olarak çalışılmaktadır. Bu örgü modelleri temel bilimlerde özellikle fizikteki karşılığı olarak gerçek uygulama alanlarına sahip olmamasına rağmen gerçek sistemlerin çözümüne ilham kaynağı olmasından dolayı hem matematikçiler hem de diğer bilim dallarında çalışan bilim insanları tarafından incelenmektedir. Vannimenus tarafından ilk olarak ikinci mertebeden Cayley ağacı üzerinde en yakın komşuluklu ve sonraki en yakın komşuluklu Ising modelinin faz diyagramı incelenmiştir (Vannimenus, 1981). Bu çalışmada ferromanyetik ve paramanyetik faz bölgelerine ilave olarak modulated faz bölgesi de elde edilmiştir. Sıfıra yakın sıcaklıklarda çoklu-kritik (Lifshitz) noktası elde edilmiştir. Yine Tsalis ve ark. , tarafından ikinci mertebeden Cayley ağacı üzerinde üç etkileşim sabitli Ising modelinin faz diyagramları incelenmiştir (Mariz vd., 1985). Uğuz ve Akın tarafından üçlü avize yapısına benzer Cayley ağacı üzerinde üç etkileşimli Ising modelinin faz diyagramları incelenmiştir. Bu çalışmada sıfır olmayan sıcaklıklarda çoklu-kritik (Lifshitz) noktalarının varlığı gösterilmiştir (Uğuz, 2010).

Sonsuz bir Cayley ağacı içerisindeki sonlu bir bölge ise Bethe örgüsü olarak adlandırılır (Gujrati, 1995). Bethe örgüsü üzerindeki Ising modeli, tam olarak çözülebilen bir modeldir.

Bununla birlikte düzensiz sistemler teorisinde karakteristik birçok problem vardır. Örneğin, perkolasyon, örgü (ağ) iletimi, dallanma ve jel oluşumu, gerçek kristal örgüler üzerinden çok Bethe örgüsü üzerinde daha kolay çözülmüştür. Bethe kafesi sadece Ising modeli ile de sınırlı değildir. Şayet S bir kuantum spin operatörü olarak düşünülürse, Heisenberg ferromanyetlerinin düzenli-düzensiz özellikleri de hesaplanır (Ziman, 1979).

Ising ve Heisenberg modelleri ilk olarak magnetik sistemlerdeki kritik noktaları ve faz dönüşümlerini açıklayabilmek için ileri sürülmüş ve daha sonraları, değişik magnetik sistemlerin anlaşılması için geliştirilmiş modellerdendir. Bununla birlikte kuantum Heisenberg modelinde magnetik sistemler için spin kavramı, kuantum mekaniksel bir bakışla ele alınır. Bu yüzden model magnetizmadaki kuantum olaylarını ön plana çıkarmasından dolayı araştırmacılar için önemli bir ilgi alanı olmuştur. Bu modelleri ve kullanım alanlarını ilerletmeye yönelik bütün teorik çalışmaların, özellikle magnetik nano parçacık sistemleri, kuantum faz dönüşümleri, dimerizasyon, kuantum dolaşıklığı, magnetizasyon platoları ve iki boyutlu tabakalardan oluşan yüksek sıcaklık süperiletkenleri gibi birçok teknolojik öneme sahip araştırma alanlarında yapılan deneysel ve teorik çalışmalara ve bu çalışmalarda elde edilen bulgulara yol göstereceği düşünülmektedir.

Bu tezde ise amacımız, spin-1/2 Ising- Heisenberg modelinin dekore edilmiş Bethe örgü üzerinde magnetik özelliklerini, dekorasyon-iterasyon dönüşümü ve tam tekrarlama yöntemini kullanarak incelemektir. Modelin tam çözümünün incelenmesinde ilk önce dekorasyon-iterasyon dönüşümü modele uygulanacak ve daha sonrada Bethe örgüsü üzerinde modelin tam tekrarlama yöntemine dayalı çözümü yapılacaktır. Elde edilen mıknatıslanma bağıntılarının bilgisayar çözümüyle modelin magnetik özellikleri incelenecektir.

2. KAYNAK ÖZETİ

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

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

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

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

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

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

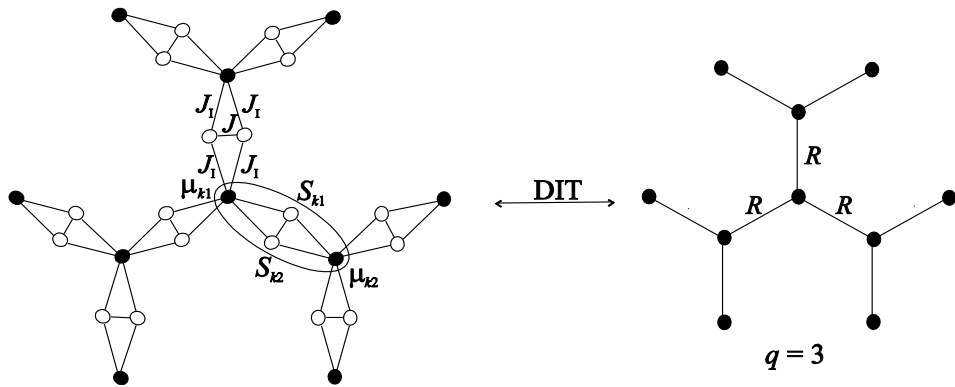
Modelin magnetik özellikleri iki boyutlu farklı örgüler için yukarıda verilen kısa literatür analizinde tam olarak incelenmesine rağmen, farklı bir topolojik yapıya sahip olan Bethe örgüsü üzerinde ise şimdiye kadar incelenmemiştir. Dolayısıyla kullanılan yöntemin bir tam çözüm yöntemi olması, daha önce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

3. MATERYAL VE YÖNTEM

3.1. Materyal

Bu çalışmada göz önüne alınacak sistem, dekore edilmiş Bethe örgüsü üzerinde aşağıda verilen Hamiltonyeni ile tanımlanan spin-1/2 Ising-Heisenberg modelidir:

$$H = -J_H \sum_{i,j}^{Nq/2} [\Delta(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z] - J_I \sum_{k,l}^{2Nq} S_k^z \mu_l^z \quad (3.1)$$



Şekil 3.1. $q = 3$ koordinasyon sayılı dekore edilmiş Bethe örgüsü üzerindeki Ising-Heisenberg modeli

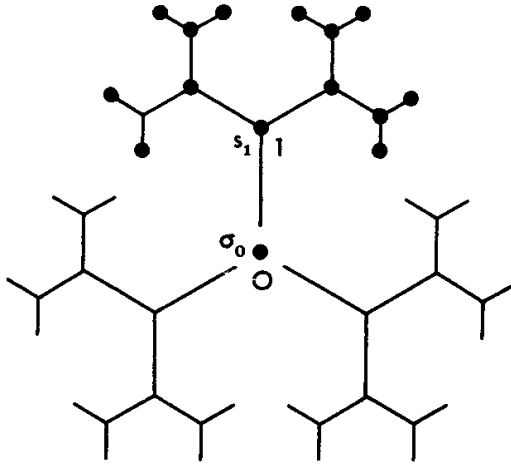
Şekil 3.1’de gösterildiği gibi incelenen sistemde, ilk olarak sadece Ising spinlerini içeren örgü noktalarının arasına çiftler halinde Heisenberg spinleri yerleştirilerek Ising-Heisenberg modelini tanımlayan örgü ve Hamiltonyeni elde edildi. Sırasıyla, μ_l^z ve S_k^z sırasıyla spin-1/2 ve spin-1 operatörlerinin uzaysal bileşenlerini, J_I Ising ve Heisenberg atomları arasındaki tek uzaysal bileşene sahip anizotropi parametresini ve $J_H(\Delta)$ ise Heisenberg atomları arasındaki üç uzaysal bileşen içeren anizotropik çiftlenme parametresini gösterir. Hamiltonyendeki Δ parametresi sistemin Ising veya Heisenberg rejiminde bulunmasını sağlar.

3.2. Yöntem

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

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

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



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

Bir Cayley Ağacı oluşturulurken, Şekil 3.1’de görüldüğü gibi merkezi ‘0’ noktasından başlanır ve hepsi ‘0’ noktasına bağlı q noktası eklenir. Bu q noktalarının takımı birinci kabuk (shell) olarak adlandır (Baxter, 1982). Daha fazla

kabuk oluşturmak için r . kabukta bir nokta alınır ve bu noktaya $(q-1)$ tane nokta eklenir. Bu işlem r . kabuktaki bütün noktalar için yapılır ve bu yeni noktalar takımını $(r+1)$. kabuk olarak adlandırılır. Bu şekilde iteratif olarak ilerleyerek, 2., 3., ..., n . kabukları oluşturulur. Bu şekilde bağlantısız olarak oluşturulan grafik, Cayley Ağacı olarak adlandırılır.

Burada sınır noktaları hariç her bir noktanın q tane en yakın komşusu vardır. r . kabukta $q(q-1)^{r-1}$ nokta ve grafikteki toplam nokta sayısı $\frac{q[(q-1)^n - 1]}{(q-2)}$

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

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

$$Z = \sum_{\sigma} P(\sigma) \quad (3.2)$$

ve

$$P(\sigma) = e^{\beta[J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \sigma_i]} \quad (3.3)$$

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

$$M = \langle \sigma_0 \rangle = \sum_{\sigma} \frac{\sigma_0 P(\sigma)}{Z} \quad (3.4)$$

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

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

$$P(\sigma) = \exp \beta(h\sigma_0) \prod_{j=1}^q Q_n(\sigma_0 | s^{(j)}) \quad (3.5)$$

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

$$Q_n(\sigma_0 | s) = \exp \beta \left[J \sum_{(i,j)} s_i s_j + J s_1 \sigma_0 + h \sum_i s_i \right] \quad (3.6)$$

S_i , alt-ağacın i . konumundaki spinidir (spin değeri σ_0 olan kök hariç). Konum 1, Konum 0'a komşudur, Şekil 3.2'in üst ağacında gösterildiği gibi ilk toplam, (0,1) hariç alt-ağacın bütün kenarları üzerindedir. Burada ki n , alt-ağacın n tane kabuğu olduğu gerçeğindedir, öyle ki kökten sınıra kadar olan n basamaktır. Şekil 3.2'deki gibi, üst-alt ağaç '0' a komşu olan '1' konumunda kesilirse o zaman q tane parçacığa bölünür: Bunlardan birincisi (0,1) gövde, diğerleri ise benzer dallardır. Bu dallardan her biri orijinali gibi bir alt ağaçtır, fakat $(n - 1)$ tane kabuğu vardır. Öyle ki,

$$Q_n(\sigma_0|s) = e^{\beta(J\sigma_0s_1+h_s)} \prod_{j=1}^{q-1} Q_{n-1}(s_1|t^{(j)}) \quad (3.7)$$

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

$$P(\sigma) = e^{\beta h \sigma_0} \prod_{j=1}^q Q_n(\sigma_0|s^{(j)}) \quad (3.8)$$

ve

$$Q_n(\sigma_0|s) = e^{\beta J \sigma_0 s_1} \prod_{j=1}^{q-1} Q_{n-1}(s_1|t^{(j)}) \quad (3.9)$$

faktörizasyon ilişkileri M , yani magnetizasyonu hesaplamamızı kolaylaştırır.

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

$$g_n(\sigma_0) = \sum_s Q_n(\sigma_0|s) \quad (3.10)$$

Denklem (3.2) ve (3.5) bağıntısından bölüşüm fonksiyonu,

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\sigma} P(\sigma) \\ &= \sum_{\sigma_0} e^{\beta h \sigma_0} \prod_{j=1}^q Q_n(\sigma_0|s^{(j)}) \\ &= \sum_{\sigma_0} e^{\beta h \sigma_0} [g_n(\sigma_0)]^q \end{aligned} \quad (3.11)$$

bulunur. Benzer olarak, denklem (3.4) ve (3.5) bağıntısından, Magnetizasyon

$$\begin{aligned}
M &= Z^{-1} \sum_{\sigma_0} \sigma_0 e^{\beta h \sigma_0} [g_n(\sigma_0)]^q \\
&= \frac{\sum_{\sigma_0} \sigma_0 e^{\beta h \sigma_0} [g_n(\sigma_0)]^q}{\sum_{\sigma_0} e^{\beta h \sigma_0} [g_n(\sigma_0)]^q}
\end{aligned} \tag{3.12}$$

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

$$M = \frac{1}{2} \frac{e^{\beta h/2} - e^{-\beta h/2} x_n^q}{e^{\beta h/2} + e^{-\beta h/2} x_n^q} \tag{3.13}$$

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

$$\begin{aligned}
g_n(\sigma_0) &= \sum_s Q_n(\sigma_0 | s) \\
&= \sum_s e^{\beta(J\sigma_0 s_1 + h s_1)} \prod_{j=1}^{q-1} Q_{n-1}(s_1 | t^{(j)}) \\
g_n(\sigma_0) &= \sum_{s_1} e^{\beta(J\sigma_0 s_1 + h s_1)} [g_{n-1}(s_1)]^{q-1}
\end{aligned} \tag{3.14}$$

İfadesi σ_0 'ın $\mp 1/2$ değeri için hesaplanır:

$$\begin{aligned}
\sigma_0 = +1/2 \text{ için:} \quad g_n(+1/2) &= \sum_{s_1} e^{\beta(\frac{J}{4} + \frac{h}{2})} g_{n-1}[(+1/2)]^{q-1} \\
&\quad + e^{\beta(-\frac{J}{4} - \frac{h}{2})} g_{n-1}[(-1/2)]^{q-1}
\end{aligned} \tag{3.15}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_0 = -1/2 \text{ için:} \quad g_n(-1/2) &= \sum_{s_1} e^{\beta(-\frac{J}{4} + \frac{h}{2})} g_{n-1}[(+1/2)]^{q-1} \\
&\quad + e^{\beta(\frac{J}{4} - \frac{h}{2})} g_{n-1}[(-1/2)]^{q-1}
\end{aligned} \tag{3.16}$$

$$x_n = \frac{g_n(-1/2)}{g_n(+1/2)} \quad (3.17)$$

denklem (3.15) ve (3.16), (3.17) denkleminde yerine yazarsak,

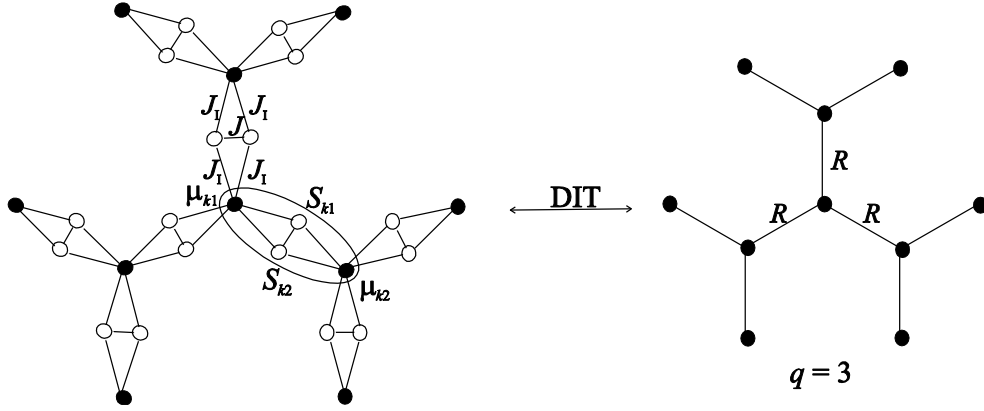
$$x_n = \frac{e^{\beta(\frac{J}{4} + \frac{h}{2})} x_n^{q-1} + e^{\beta(\frac{J}{4} - \frac{h}{2})} x_n^{q-1}}{e^{\beta(\frac{J}{4} + \frac{h}{2})} x_n^{q-1} + e^{\beta(\frac{J}{4} - \frac{h}{2})} x_n^{q-1}} \quad (3.18)$$

şeklinde elde edilir.

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

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

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



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

Şekil 4.1'de açıkça görüldüğü gibi dekorasyon-iterasyon dönüşümü vasıtasıyla sol taraftaki spin-1/2 Ising ve Heisenberg spinlerini içeren karma sistem, sağ taraftaki sadece spin-1/2 Ising spinlerini içeren basit Bethe örgüsü üzerindeki efektif etkileşmeli spin-1/2 Ising modeline dönüşmektedir.

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

$$H = -J_H \sum_{(i,j)}^{Nq/2} [\Delta(S_{k1}^x S_{k2}^x + S_{k1}^y S_{k2}^y) + S_{k1}^z S_{k2}^z] - J_I \sum_{(k,l)}^{2Nq} S_k^z \mu_l^z, \quad (4.1)$$

olarak ifade edilir. Burada q , Bethe örgüsündeki koordinasyon sayısıdır. Sistemin bölüşüm fonksiyonu,

$$Z = \sum_{\{\mu_i\}} \text{Tr}_{\{S_j\}} e^{-\beta H} = \sum_{\{\mu_i\}} \text{Tr}_{S_j} e^{-\beta \sum_{k=1}^{Nq/2} H_k} = \sum_{\{\mu_i\}} \prod_{k=1}^{Nq/2} \text{Tr}_k e^{-\beta H_k} = \sum_{\{\mu_i\}} \prod_{k=1}^{Nq/2} Z_k \quad (4.2)$$

formunda ifade edilir. Bölüşüm fonksiyonundaki Z_k ifadesini yazıp dekorasyon-iterasyon dönüşümü uygulanırsa,

$$\begin{aligned} Z_k &= \{2e^{\frac{\beta J_H}{4}} \cosh[\beta J_I (\mu_{k1}^z + \mu_{k2}^z)] + 2e^{-\frac{\beta J_H}{4}} \cosh(\frac{\beta J \Delta}{2})\} \\ &= A e^{\beta R \mu_{k1}^z \mu_{k2}^z} \end{aligned} \quad (4.3)$$

şeklinde elde edilir. Burada, $\beta = 1/(k_B T_c)$, k_B Boltzmann sabitidir ve T mutlak sıcaklıktır. μ_{k1}^z ve μ_{k2}^z spinlerin aldıkları değerlerdir. Dekorasyon-iterasyon dönüşümü vasıtasıyla Ising ve Heisenberg spinlerini içeren karma sistem, bu dönüşüm yapıldıktan sonra sistem sadece Ising spinlerini ihtiva eden ve spinler arasında etkin etkileşme parametresi R olan spin-1/2 Ising modeline dönüşmektedir.

Yukarıdaki dönüşümden sonra spin-1/2 Ising modelinin spin değerleri yerlerine konularak her iki model arasındaki dönüşüm parametreleri elde edilir. (Burada spin-1/2 Ising modeli iki durumlu olduğu için sadece aşağıdaki dört farklı şekillenime karşılık gelen spin durumları göz önüne alınır).

Tablo 4.1. İki durumlu spin-1/2 Ising modeli için bütün spin yönelimleri için şekillenimler.

μ_{k1}^z	μ_{k2}^z	
$\mp \frac{1}{2}$	$\mp \frac{1}{2}$	$V_1 = 2e^{\frac{\beta J}{4}} \cosh(\beta J_I) + 2e^{-\frac{\beta J}{4}} \cosh\left(\frac{\beta J \Delta}{2}\right) = Ae^{\frac{\beta R}{4}}$ (1)
$\mp \frac{1}{2}$	$\pm \frac{1}{2}$	$V_2 = 2e^{\frac{\beta J}{4}} + 2e^{-\frac{\beta J}{4}} \cosh\left(\frac{\beta J \Delta}{2}\right) = Ae^{-\frac{\beta R}{4}}$ (2)

Tablo 4.1 de verilen farklı konfigürasyonlar birbirine oranlanırsa,

$$\frac{V_1}{V_2} = e^{\frac{1}{2}\beta R} = \frac{2e^{\frac{\beta J}{4}} \cosh(\beta J_I) + 2e^{-\frac{\beta J}{4}} \cosh\left(\frac{\beta J \Delta}{2}\right)}{2e^{\frac{\beta J}{4}} + 2e^{-\frac{\beta J}{4}} \cosh\left(\frac{\beta J \Delta}{2}\right)} \quad (4.4)$$

elde edilir. Bu ifade ise daha sade bir formda elde edilir:

$$\beta R = 2 \ln \left\{ \frac{\cosh(\beta J_I) + e^{-\frac{\beta J}{2}} \cosh\left(\frac{\beta J \Delta}{2}\right)}{1 + e^{-\frac{\beta J}{2}} \cosh\left(\frac{\beta J \Delta}{2}\right)} \right\} \quad (4.5)$$

Diğer taraftan diğer bir dönüşüm parametresi A ,

$$V_1 V_2 = Ae^{\frac{1}{4}\beta R} \cdot Ae^{-\frac{1}{4}\beta R} = A^2 \Rightarrow A = \sqrt{V_1 V_2} \quad (4.6)$$

eşitliğinden elde edilir:

$$A = \left[\left(2e^{\frac{\beta J}{4}} \cosh(\beta J_I) + 2e^{-\frac{\beta J}{4}} \cosh\left(\frac{\beta J \Delta}{2}\right) \right) \cdot \left(2e^{\frac{\beta J}{4}} + 2e^{-\frac{\beta J}{4}} \cosh\left(\frac{\beta J \Delta}{2}\right) \right) \right]^{1/2} \quad (4.7)$$

Böylece yukarıda yapılan işlemlerden sonra Bethe örgüsü üzerinde spin-1/2 Ising modelinin bölüşüm fonksiyonu;

$$Z = A^{Nq/2} \sum_{\{\mu_i\}} e^{\beta R \sum_{k=1}^{Nq/2} \mu_{k1}^z \mu_{k2}^z} \quad (4.8)$$

ifadesi ile verilebilir. Spin-1/2 Ising modelinin efektif etkileşmeli Bethe örgüsü üzerindeki Hamiltoniyeni aşağıdaki gibi verilebilir:

$$H_{ISING} = -R \sum_{(i,j)} \mu_{k1}^z \mu_{k2}^z \quad (4.9)$$

Böylece Ising-Heisenberg modeli ile sadece Ising spinleri arasında etkileşmeleri içeren Ising modelinin bölüşüm fonksiyonları arasında aşağıdaki eşitlik yazılabilir:

$$Z_{IHM}(J_I, J, \Delta) = A^{Nq/2} Z_{ISING}(\beta R) \quad (4.10)$$

Şimdi sırasıyla modelin Ising ve Heisenberg magnetizasyon bağıntısını hesaplayabiliriz. İlk olarak Ising manyetizasyon ifadesi,

$$m_I = \langle \mu_{k1}^z \rangle = \langle \mu_{k1}^z \rangle_{ISING} \quad (4.11)$$

bağıntısı kullanılarak hesaplanabilir. Bu hesaplama ise spin-1/2 Ising modelinin Bethe örgüsü üzerindeki mıknatıslanma ifadesine eşittir. Ising spinlerinin termal ortalaması,

$$m_I = \langle \mu_{k1}^z \rangle = \frac{1}{Z_{IHM}} \sum_{\{\mu_i\}} \mu_{k1}^z \prod_{k=1}^{Nq/2} Tr_k e^{-\beta H_k} \quad (4.12)$$

bağıntısından hesaplanır. Hesaplamalar devam ettirilince yukarıda da ifade edildiği gibi Ising magnetizasyonu,

$$m_I = \langle \mu_{k1}^z \rangle = \langle \mu_{k1}^z \rangle_{ISING} \equiv m_{ISING}(\beta R) \quad (4.13)$$

şeklinde elde edilir. Diğer taraftan Heisenberg magnetizasyonun hesaplanması çok daha uzun hesaplamaları gerektirir. Heisenberg magnetizasyonu, Heisenberg spinlerinin ortalama değeri alınarak bulunabilir:

$$m_H = \left\langle \frac{1}{2} (S_{k_1}^z + S_{k_2}^z) \right\rangle. \quad (4.14)$$

Heisenberg magnetizasyonun hesaplanmasında Callen-Suzuki özdeşliği kullanılarak uzun hesaplamalar neticesinde, magnetizasyon için;

$$m_H = \frac{1}{2} \left\langle \frac{\sinh[\beta J_I (\mu_{k_1}^z + \mu_{k_2}^z)]}{\cosh[\beta J_I (\mu_{k_1}^z + \mu_{k_2}^z)] + e^{-\frac{\beta J}{2}} \cosh\left(\frac{\beta J \Delta}{2}\right)} \right\rangle \quad (4.15)$$

bağıntısı elde edilir. Bu bağıntı ise yine karmaşık hesaplamalar sonucunda en sade şekilde

$$m_H = \langle e^{(\mu_{k_1}^z + \mu_{k_2}^z) \nabla_x} \rangle F(x) \quad (4.16)$$

formunda verilebilir. Burada $F(x)$,

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

bağıntısı ile verilir. $F(x)$ fonksiyonu mıknatıslanma ifadesinde kullanıldığında, Heisenberg magnetizasyonu,

$$m_H = 2m_A F(1) \quad (4.17)$$

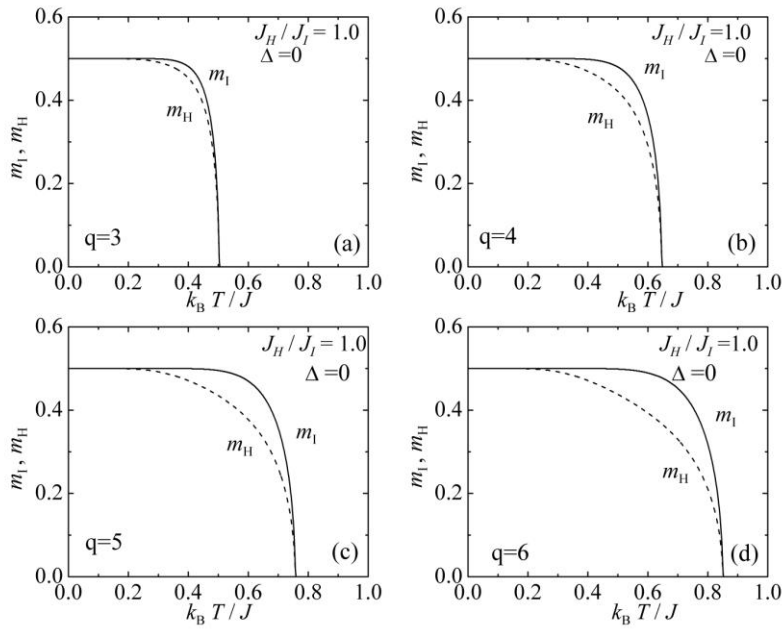
olarak elde edilir.

Böylece spin-1/2 Heisenberg spinlerince dekore edilmiş Bethe örgüsü üzerinde Ising ve Heisenberg magnetizasyonları elde edilmiş oldu. Bu magnetizasyon

ifadeleri sistemin termal davranışı başta olmak üzere faz dönüşümleri gibi birçok magnetik özelliğin incelenmesinde önemlidir. Bu amaç için bu bölümde analitik olarak elde edilen sistemin Ising ve Heisenberg magnetizasyon ifadelerinin bilgisayar ortamında nümerik çözümünün yapılması gereklidir.

4.1.1. Ising ve Heisenberg Magnetizasyonlarının Sıcaklığa Göre Değişimleri

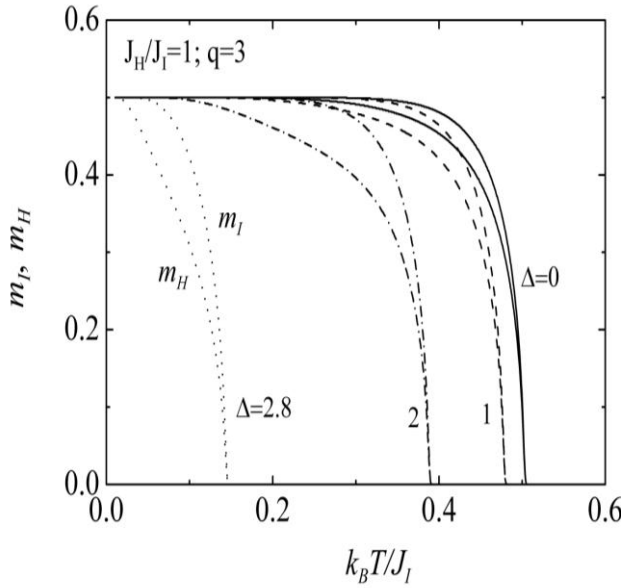
Bu kesimde yukarıda elde edilen Ising ve Heisenberg mıknatıslanma ifadelerinin nümerik ve iteratif çözümleri modeli tanımlayan etkileşme parametrelerinin farklı değerleri için yapılarak sistemin termal davranışı ve faz dönüşümleri incelenecektir.



Şekil 4.2. Farklı koordinasyon sayıları $q = 3, 4, 5$ ve 6 Ising ve Heisenberg mıknatıslanmalarının sıcaklık bağımlılıkları. $\Delta = 0$ ve $J_H / J_I = 1$.

Sistemin manyetik özelliklerini incelemeye bir diğer parametrede modelin üzerinde incelendiği Bethe örgüsü koordinasyon sayısı olacaktır. Ferromagnetik durumda sistemin Hamiltonyenindeki etkileşme parametreleri $J_H > 0$, $J_I > 0$ olarak alınacaktır. İlk olarak anizotropi parametresi $\Delta = 0$ değeri için yani sistemi Ising modeli limitinde ele alınarak inceleme yapalım:

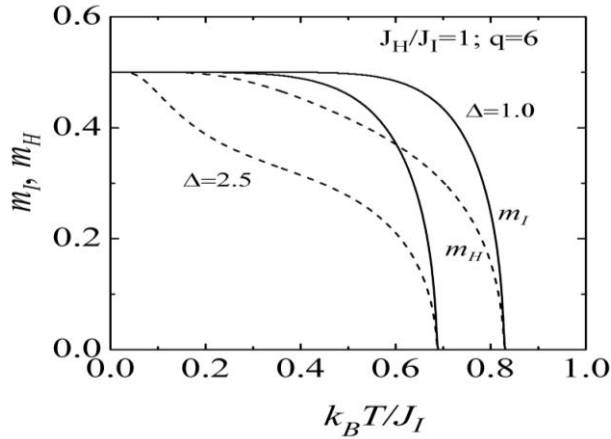
Şekil 4.2'de anizotropi parametrelerinin $\Delta = 0$ ve $J_H/J_I = 1$ sabit değeri ve artan koordinasyon sayıları için ($q = 3, 4, 5$ ve 6) Ising ve Heisenberg magnetizasyonlarının termal değişimleri verilmektedir. Şekilde açıkça görüldüğü gibi mıknatıslanmalar ikinci dereceden faz dönüşümü geçirmekte yani sıcaklık arttıkça sürekli olarak azalmakta ve belirli bir sıcaklık değerinde sıfır olmakta yani yok olmaktadır. Diğer taraftan sistemin faz dönüşüm sıcaklığı üzerinde Bethe örgüsünün farklı koordinasyon sayılarının etkisini incelemek üzere elde edilen değişimlerde koordinasyon sayısı artışının sadece ikinci dereceden faz dönüşüm sıcaklığının artışı üzerine etkisi olduğu görülmektedir. Ayrıca sıcaklık artışıyla birlikte Heisenberg mıknatıslanması daima Ising mıknatıslanmasından küçük değerler almaktadır.



Şekil 4.3. Spin-1/2 Ising-Heisenberg modelinde $J_H/J_I = 1$, $q = 3$ için anizotropi parametresinin $\Delta=0, 1, 2$ ve 2.8 değerleri için Ising ve Heisenberg magnetizasyonlarının termal değişimleri.

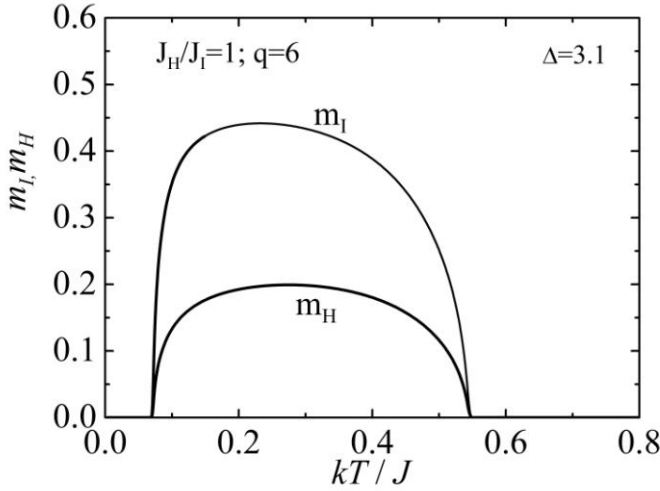
Şekil 4.3'de $J_H/J_I = 1$, $q = 3$ sabit parametreleri için anizotropi parametresinin $\Delta = 0, 1, 2$ ve 2.8 değerleri için Ising ve Heisenberg magnetizasyonlarının termal değişimleri görülmektedir. Burada görüldüğü gibi sistem bütünüyle ikinci dereceden faz dönüşümü geçirmekle birlikte anizotropi parametresi Δ nın artışıyla, ikinci dereceden faz dönüşüm sıcaklığı azalmakta ve $\Delta = 0$ için yok olmamaktadır.

Yani Δ nın ikinci dereceden faz dönüşüm sıcaklığını azaltıcı yönde bir etkisi olmaktadır. Diğer taraftan spin-1/2 Ising-Heisenberg modelinin Bethe örgüsü üzerindeki koordinasyon sayısı $q = 4$ için Şekil 4.3'deki hesaplamalar yapıldığında aynı sonuçlara ulaşılmaktadır. Bununla birlikte Bethe örgüsü koordinasyon sayısının sistemin magnetik özellikleri üzerinde önemli bir etkiye sahip olduğu bilindiğinden Şekil 4.4'te koordinasyon sayısı $q = 6$ için Ising ve Heisenberg mıknatıslanmalarının sıcaklığa göre değişimleri grafiksel olarak elde edildi.



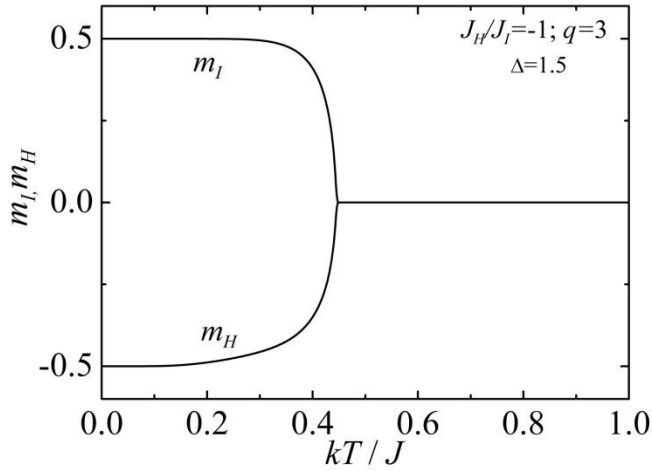
Şekil 4.4. Spin-1/2 Ising-Heisenberg modelinde $J_H/J_I = 1$, $q = 6$ için anizotropi parametresinin $\Delta = 1$ ve 2.5 değerleri için Ising ve Heisenberg magnetizasyonlarının termal değişimleri.

Şekil 4.4'te $q = 6$ koordinasyon sayılı dekore edilmiş Bethe örgüsü üzerinde Ising ve Heisenberg mıknatıslanmalarının sıcaklık bağımlılıkları görülmektedir. Anizotropi parametresi Δ nın 1 den 2.5 değerine artmasıyla ikinci dereceden faz dönüşüm sıcaklığı azalmaktadır. Diğer taraftan Şekil 4.5'te anizotropi parametresinin daha fazla artırılmasıyla sistemde daha farklı bir magnetik özellik göze çarpmaktadır.

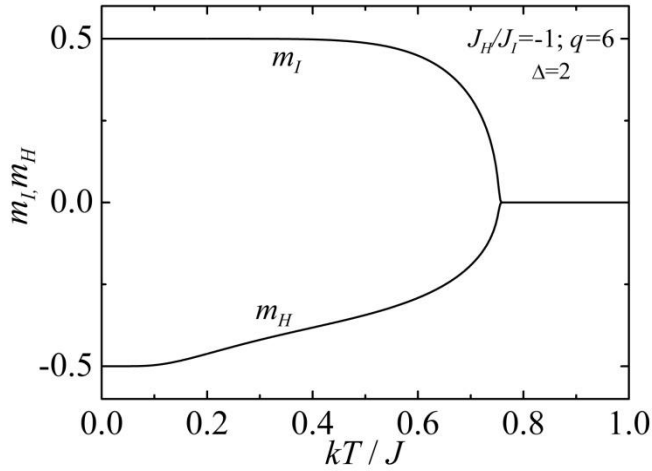


Şekil 4.5. Spin-1/2 Ising-Heisenberg modelinde $J_H/J_I = 1$, $q = 6$ için anizotropi parametresinin $\Delta = 3.1$ değeri için Ising ve Heisenberg magnetizasyonlarının termal değişimleri.

Şekil 4.5'te çok açık şekilde görüldüğü gibi bir önceki parametrelerden farklı olarak anizotropi parametresinin 3.1 değerine çıkarılması sistemin magnetik davranışı, özellikle faz dönüşümü üzerine büyük etkiye sahiptir. Sistemde sıcaklık artışıyla birlikte Ising ve Heisenberg magnetizasyonları iki defa ikinci dereceden faz dönüşümüne uğramaktadır. Yani sistem koordinasyon sayısının $q = 6$ ve anizotropi bağıntısının $\Delta = 3.1$ değeri için re-entrant faz dönüşümü geçirmektedir. Sistemin kapsamlı biçimde incelenmesi neticesinde anizotropi parametresinin sınırlı bir aralığında re-entrant faz dönüşümüne uğradığı görülmüştür. Bu bölgenin parametre olarak değeri ise sistemin faz diyagramından bir sonraki kesimde açıkça görülecektir. Ayrıca sistemde re-entrant faz davranışının spin-1/2 Ising-Heisenberg modelinin koordinasyon sayısı ile de yakından bağlantılı olduğu sonucuna varılmıştır. Mıknatıslanmaların faz dönüşümlerinin kapsamlı incelenmesinden koordinasyon sayısı $q = 3$ ve 4 için tüm anizotropi parametrelerinde ardıl faz dönüşümü görülmemekte yani re-entrant davranış bulunmamaktadır. Diğer taraftan Bethe örgüsünün koordinasyon sayısının $q \geq 5$ değerleri için sistemde anizotropi parametresinin sınırlı bir aralığında meydana geldiği tespit edilmiştir.



a)



b)

Şekil 4.6. Spin-1/2 Ising-Heisenberg modelinde antiferromagnetik durumda Ising ve Heisenberg mıknatıslanmalarının termal değişimler. $J = -1$ (sabit) a) Koordinasyon sayısı $q = 3$ ve anizotropi parametresi $\Delta = 1.5$ b) Koordinasyon sayısı $q = 6$ ve anizotropi parametresi $\Delta = 2$.

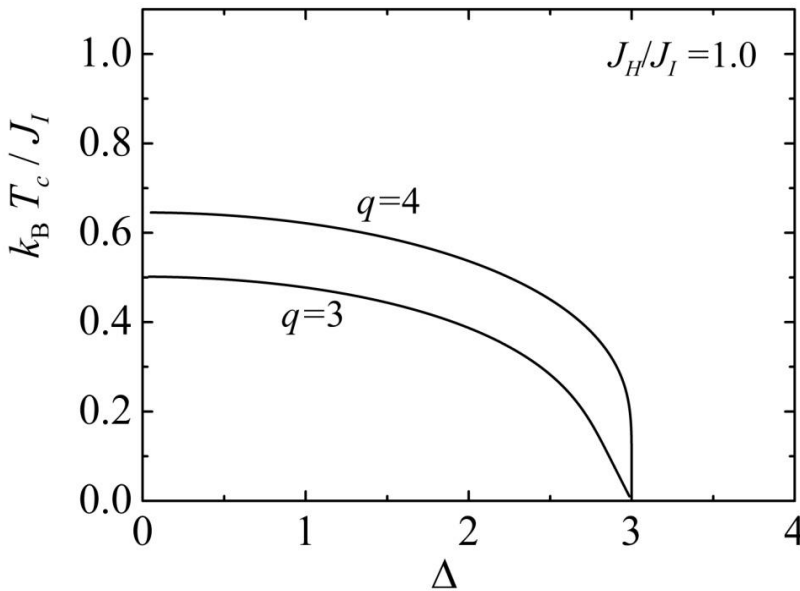
Şekil 4.6 (a) 'da spin-1/2 Ising-Heisenberg modelinin antiferromagnetik durumda ($J = -1$ sabit olmak üzere), koordinasyon sayısı $q = 3$ ve $\Delta = 1.5$ parametreleri için alt-örgü mıknatıslanmaları görülmektedir. Antiferromagnetik etkileşme durumu burada görüldüğü gibi mıknatıslanmaların taban durumda zıt yönelimlere

sahip olmasına yol açmakta ve sıcaklık artışıyla birlikte Néel sıcaklığında sıfır olmaktadır. Yani sistem antiferromagnetik fazdan düzensiz paramagnetik faza geçmektedir.

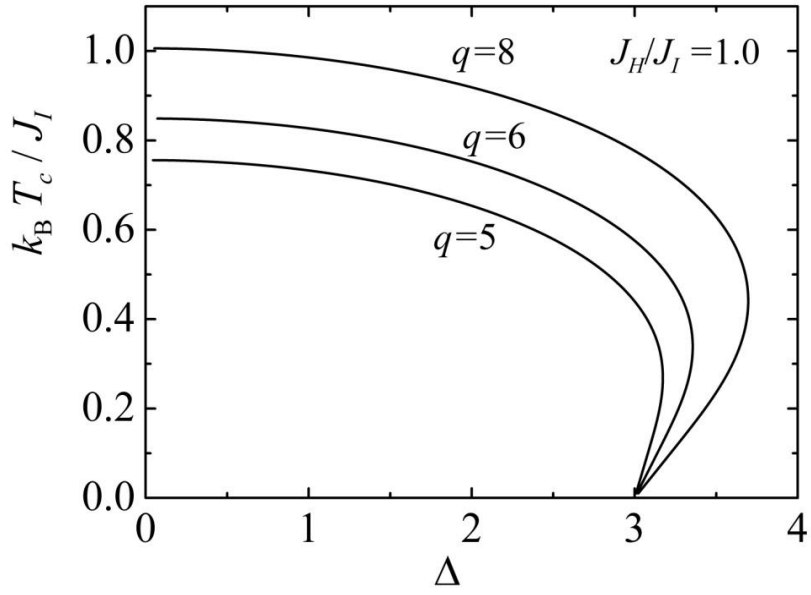
4.1.2. Faz Diyagramları

Bu kısımda, spin 1/2 Isin-Heisenberg modelinin dekore edilmiş Bethe örgüsü üzerinde değişik parametreler için faz diyagramları verilmiştir. Modelin faz diyagramlarının elde edilmesinde, önceki kesimde incelenmiş olan mıknatıslanmaların faz dönüşüm sıcaklıkları ve termal değişimleri kullanılmıştır.

Şekil 4.7 ve şekil 4.8, Bethe örgüsü üzerinde spin-1/2 atomları arasındaki ferromanyetik etkileşme $J_H/J_I = 1$ durumunda farklı koordinasyon sayıları için faz diyagramlarını gösterir. Tüm koordinasyon sayıları için faz dönüşüm çizgileri, ferromanyetik ve düzensiz paramanyetik fazyı birbirinden ayırır. Şekil 4.7'de gösterilen faz diyagramlarından $q = 3$ ve $q = 4$ koordinasyon sayıları için re-entrant davranış gözlenmezken, Şekil 4.8'de gösterilen faz diyagramlarından bu davranış $q \geq 5$ için gözlenmektedir.



Şekil 4.7. $J_H/J_I = 1$ ve $\Delta = 3$ olmak üzere koordinasyon sayıları $q = 3$ ve $q = 4$ için faz diyagramları



Şekil 4.8. $J_H/J_I = 1$ ve $\Delta=3$ olmak üzere koordinasyon sayıları $q = 5, q = 6$ ve $q = 8$ için faz diyagramları

5. TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu çalışmada, en genel q koordinasyon sayılı dekore edilmiş Bethe örgüsü üzerinde spin 1/2 Isin-Heisenberg modelinin magnetik özellikleri dekorasyon-iterasyon dönüşümü ve tam tekrarlama yönteminin birlikte kullanılmasıyla incelenmiştir. Spin 1/2 Isin-Heisenberg modelinin, dekore edilmiş Bethe örgüsü üzerinde tam formülasyonu en genel q koordinasyon sayılı spin durumu (-1/2 ve +1/2) için yapılmıştır. Modelin en genel Hamiltonyeni, Ising ve Heisenberg atomları arasındaki tek uzaysal bileşene sahip anizotropi parametresini J_I ve J_H ise Heisenberg atomları arasındaki üç uzaysal bileşen içeren anizotropik çiftlenim parametresini gösterir. Hamiltonyendeki Δ parametresi sistemin Ising veya Heisenberg rejiminde bulunmasını sağlar. Ayrıca, Hamiltonyendeki ilk toplam tüm Heisenberg atomları üzerindedir. İkinci toplam ise Ising ve Heisenberg atomları üzerindedir. Dekorasyon-iterasyon dönüşümü kullanılarak spin-1/2 Ising-Heisenberg modeli (dekore edilmiş Bethe örgüsü üzerinde) ve basit Bethe örgüsü üzerindeki spin-1/2 Ising modeli arasında tam bir ölçekleme eşitliği elde edilmiştir. Dekorasyon-iterasyon dönüşümü ve tam tekrarlama yöntemi vasıtasıyla Ising mıknatıslanmaları ve Heisenberg mıknatıslanma ifadeleri elde edilmiştir. Modelin magnetik özelliklerinin incelenmesinde $J > 0$ ferromanyetik ve $J < 0$ antiferromanyetik durumda özellikle kritik davranış, re-entrant olayı, termal değişimler ve faz dönüşümleri üzerinde durulmuştur. Model ferromanyetik ve antiferromanyetik en yakın komşu etkileşimleri durumunda modeli tanımlayan Hamiltonyendeki etkileşme parametrelerinin değişik değerleri için kritik davranış sergilemektedir. Faz diyagramlarının elde edilmesi sonucunda faz diyagramında ferromanyetik ve paramanyetik fazın meydana geldiği görülmüştür. Spin-1/2 Ising-Heisenberg modeli bu durumda $q \geq 5$ için re-entrant davranış sergilemektedir. $q \leq 4$ için re-entrant davranış faz diyagramında görülmez.

KAYNAKLAR

- Baibich, M.N., Broto, J. M., Fert, A., Nguyen Van Dau, F., Petroff, F., Etienne, P., Creuzet, G., Friederich, A., Chazelas J. 1988. Magnetoresistance of (001) Fe/(001) Cr Magnetic Superlattices, **Phys. Rev. Lett.**, 61: 2472-2475
- Baxter, R. 1982. Ising Model on the Bethe Lattice. Exactly Solved Models in Statistical Mechanics, Academic Press, pp.47-49, New York.
- Bethe, H. A. 1931. On the Theory of Metals, I. Eigenvalues and Eigenfunctions of a Linear Chain of Atoms. **Z. Phys.**, 71: 205-226.
- Binasch, G., Grünberg, P., Saurenbach, F., Zinn W. 1989. Magnetoresistance in layered Magnetic Structures With Antiferromagnetic Interlayer Exchange, **Phys. Rev.**, B39: 4828-44830.
- Bochi, G., Song O., O’Handley, R.C. 1994. Surface Magnetoelastic Coupling Coefficients of Single-Crystal Fcc Co Thin Films, **Phys. Rev.**, B50: 2043-2046.
- Brush, G. S. 1967. History of the Lenz-Ising Model. **Review of Modern Physics**, Volume 39, Number 4: 886.
- Čanova, L., Strečka, J., Jaščur, M. 2006. Geometric frustration in the class of exactly solvable Ising–Heisenberg diamond chains. **J. Phys.: Condens. Matter** 18:4967.
- Domb, C. 1960. On the Theory of Cooperative Phenomena. **Adv. Phys.**, 9:149-361.
- Donath, M. 1999. Magnetic Order And Electronic Structure in Thin Films. **J. Phys., Condens. Matter** 11: 9421.
- Eggarter, T. P. 1974. Cayley trees, the Ising problem, and the thermodynamic limit. **Phys. Rev.**, B9: 2989.
- Fisher, M. 1959. Transformations of Ising Models. **Phys. Rev.**, 113: 969.

- Gujrati, P.T. 1995. Bethe or Beth-like lattice calculation are more reliable than conventional mean-field calculations. **Phys. Rev. Lett.**, 74: 809-812.
- Güngör, E. 2011. Geçiş Metali Komplekslerinde Manyeto–Yapısal İlişki. Balıkesir Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Doktora Tezi, Balıkesir.
- Haldane, F. D. M. 1983. Nonlinear Field Theory of Large-Spin Heisenberg Antiferromagnets: Semiclassically Quantized Solitons of the One-Dimensional Easy-Axis Néel State. **Phys. Lett.**, A 50: 1153.
- Hase, M., Terasaki, I., Uchinokuro, K. 1993. Observation of the spin-Peierls transition in linear Cu^{2+} (spin-1/2) chains in an inorganic compound CuGeO_3 **Phys. Rev. Lett.**, 70: 3651.
- Helmers, H.J. 1995. Ferrromagnetic Monolayers, **Int. J. Mod. Phys.**, B9: 3115-3180.
- Hida, K. 1994. Magnetic properties of the spin-1/2 Ferromagnetic-Ferromagnetic-Antiferromagnetic Trimerized Heisenberg chain. **J. Phys. Soc. Jpn.**, 63: 2359-2364.
- Huang, K. 1972. Definition of the Ising Model. Statistical Mechanics, John Wiley&Sons, pp.341-344, New York.
- Idogaki, T., Uryu, N. 1992. A new effective field theory for the anisotropic Heisenberg ferromagnet. **Physica A.**, 181 : 173.
- Ising, E. 1925. Beitrag sur Theorie des Ferromagnetismus. **Zeit. Fur Physik**, 31: 253-258.
- Kahn, O., Pei, Y., Verdauger, M., Renard, J.P., Sletten, J., Am, J. 1988. Magnetic ordering of manganese(II) copper(II) bimetallic chains; design of a molecular based ferromagnet. **Chem. Soc.**, 110: 782-789.
- Karabekiroğulları, M. 2005. İstatistiksel Mekanik İle Mıknatıslanma Modellerinin İncelenmesi. Ege Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Doktora Tezi, İzmir.

- Karaođlu, B. 2004. Ising Modeli. Sayısal Fizik, Seyir Yayıncılık, pp.50-53, İstanbul.
- Kindermann, R., Snel, J.L. 1980. Markov Random Fields and their Applications: Contemporary Mathematics. **American Mathematical Society**, Vol. 1: 141.
- Kittel, C. 1986. Ferromagnetizm and Antiferromagnetizm. Introduction to Solid State Physics, John Wiley&Sons, pp.325-329, Newyork
- Konez, O. 1995. Atomik Partaküller ve Manyetizma, [http://www.konez.com/atomic_particles.htm], Erişim Tarihi: 03.05.2015.
- Korkmaz, T. 2013. Karma Spin-1 ve Spin-2 Ising Modelinde Dinamik Faz Geçişleri Ve Dinamik Telafi Sıcaklığı. Bozok Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Yüksek Lisans Tezi, Yozgat.
- Kramers, H. A., Wannier, G. H. 1941. Statistics of Two-Dimensional Ferromagnet. **Phys. Rev.**, 60: 252-262.
- Landau, D. P., Binder, K. 2009. Some necessary background. A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, Cambridge University Press, pp.7-47, Cambridge.
- Lieb, E.H., Schultz, T.D., Mattis, D.C. 1961. Two Soluble Models of an Antiferromagnetic Chain. **Ann. Phys.**, 16: 407.
- Lieb, E.H., Mattis, D.C. 1962. Ordering Energy Levels of Interacting Spin Systems. **J. Math. Phys.**, 3: 749.
- Ma, S.K. 1985. Ising model. Statistical Mechanics, World Scientific Publishing Co, pp.297-310, Singapore.
- Mariz, M., Tsalis, C., Albuquerque, A.L. 1985. Phase Diagram of the Ising Model on a Cayley Tree In The Presence of Competing Interactions and Magnetic Field. **Jour. Stat. Phys.**, 40: 577-592.
- Mielnicki, J., Wiatrowski, G., Balcerzak, T. 1988. The Ising-Heisenberg Two-Atom Cluster Approximation of Ferromagnet ($S=1/2$). **J. Magn. Mater.**

- 71: 186. Müller-Hartman, E., Zittartz, J. 1974. New type of phase transition. **Phys. Rev. Lett.**, 33: 893.
- O'Handley, R.C., Sun S.W. 1991. Surface Magnetoelastic Coupling. **Phys. Rev. Lett.**, 66: 2798-2801.
- Oitmaa, J., Weihong, Z. 1996. Series expansion for the J_1 - J_2 Heisenberg antiferromagnet on a square lattice. **Phys. Rev.**, B 54: 3022.
- Okamoto, K., Kitazawa, A. 1999. Magnetization plateau and quantum phase transition of the $S = 1/2$ trimerized XXZ spin chain. **J. Phys.**, A 32: 4601.
- Onsager, L. 1944. Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition. **Phys. Rev.**, 65: 117-149.
- Orbach, R.L. 1958. Linear Antiferromagnetic Chain with Anisotropic Coupling. **Phys. Rev.**, 112: 309.
- Oshkawa, M., Yamanaka, M., Affleck, I. 1997. Magnetization plateaus in spin chains: "Haldane gap" for half-integer spins. **Phys. Rev. Lett.**, 78: 1984.
- Pei, Y., Verdauger, M., Kahn, O., Sletten, J., Renard, J. P. 1987. Magnetism of Mniicuii and Niiicuii Ordered Bimetallic Chains - Crystal-Structure of $Mncu(Pba)(H_2O)_3 \cdot 2H_2O$ (Pba = 1,3-Propylenebis(Oxamato)). **Inorg. Chem.**, 26: 138-143.
- Richter, J. 1993. Zero temperature magnetic ordering in the inhomogeneously frustrated quantum Heisenberg antiferromagnet on square lattice. **Phys. Rev.**, B 47: 5794.
- Rushbrooke, G. S., Baker, G.A., Wood, P. J. 1972-1976. in Phase Transition and Critical Phenomena, edited by Domb, C. and Green, M.S. **Academic Press.**, Vols. 1-6, London.
- Sachdev, S. 1999. Basic concepts. Quantum Phase Transitions, Cambridge University Press, pp.3-10, Cambridge.

- Sayama, J., Asahi, T., Mizutani, K., Osaka, T. 2004. Newly Developed $SmCo_5$ Thin Film With Perpendicular Magnetic anisotropy. **J. Phys.: D Appl. Phys.**, 37: L1- L4.
- Saygılı, H. 2012. Cayley Ağacı Üzerinde Üç Etkileşimli Ising Modelinin Dinamik Davranışları, Gaziantep Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Yüksek Lisans Tezi, Gaziantep.
- Strečka, J., Jaščur, M. 2002. Magnetic properties of exactly solvable doubly decorated Ising-Heisenberg planar models. **Phys. Rev.**, B 66: 174415.
- Strečka, J., Jaščur, M. 2002. **Phys. Stat. Sol.** (b) 233: R12-R14.
- Strečka, J., Jaščur, M. 2003. Existence of the magnetization plateau in a class of exactly solvable Ising-Heisenberg chains. **J. Phys. : Condens. Matter** 15: 4519.
- Strečka, J., Jaščur, M. 2006. Disordered and ordered states of exactly solvable Ising-Heisenberg planar models with a spatial anisotropy **Acta Physica Slovaca** 56: 65.
- Strečka, J., Jaščur, M., Canova, L. 2008. M. Hagiwara. Exact solution of the geometrically frustrated spin-1/2 Ising-Heisenberg model on the triangulated (triangles-in-triangles) lattice. **Acta Physica Polonica A** 113: 453.
- Syozı, I. 1951. In Phase Transition and Critical Phenomena. **Prog. Theor. Phys.** 6: 341.
- Taylor, J. H., Müller, G. 1985. Magnetic field effects in the dynamics of alternating or anisotropic quantum spin chains. **Physica A** 130: 1.
- Tırnaklı, U. 1995. Faz geçişleri, Mıknatıslanma Modelleri ve Ising Sistemi. Ege Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Yüksek Lisans Tezi, İzmir.
- Uguz, S., Akın, H., 2010. Phase Diagrams of Competing Quadruple and Binary Interactions on Cayley Tree-Like Lattice: Triangular Chandelier. **Physica A**, 389 (9): 1839-1848.

- Vannimenus, J. 1981. Modulated Phase of an Ising System with Competing Interactions on a Cayley Tree. **Z. Phys.**, B, 43: 141-148.
- Verdauger, M., Julve, M., Michalowicz, A., Kahn, O. 1983. **Inorg. Chem.** 22: 2624.
- Walker, L.R. 1959. Antiferromagnetic Linear Chain. **Phys. Rev.**, 116: 1089.
- Wang, X. 2001. Effects of anisotropy on thermal entanglement. **Phys. Lett.**, A 281: 101.
- Wu, R., Freeman, A.J. 1992. Structural and Magnetic Properties of Fe/Ni(111), **Phys.Rev.**, B 45: 7205- 7210.
- Yao, H., Li, J., Gong, C.D. 2002. Exact solution of anisotropic antiferromagnetic alternating Heisenberg-Ising spin chain. **Solid State Commun.**, 121: 687.
- Yeoman, J. M. 1992. Stastical mechanics and thermodynamics. *Statistical Mechanics of Phase Transitions*, Oxford University Press, pp.15-31, Newyork.
- Ziman, J. M. 1979. Random walks on the Bethe lattice. *Models Of Disorder*, (Hughes, B.D., and Sahim, M., Eds.), Cambridge University Press, pp.272-282, Cambridge.

ÖZ GEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : Okan İBİŞ
Doğum Yeri ve Tarihi : Siverek – 07/11/1983

EĞİTİM DURUMU

Lisans Öğrenimi : Ege Üniversite Fizik Bölümü
Yüksek Lisans Öğrenimi : Adnan Menderes Üniversitesi Fizik Bölümü
Bildiği Yabancı Diller : İngilizce

İŞ DENEYİMİ

Çalıştığı Kurumlar ve Yıl : İzmir Büyükşehir Belediyesi – 2008 (halen çalışıyor)

İLETİŞİM

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