ÇANKIRI KARATEKİN ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

RASTGELE KRİSTAL ALAN VARLIĞINDA KARMA SPIN-1/2 VE SPIN-2 BLUME-CAPEL MODELİN KRİTİK DAVRANIŞLARI.

OKTAY BARUT

FİZİK ANABİLİM DALI

ÇANKIRI

2019

Her hakkı saklıdır

TEZ ONAYI

Oktay BARUT tarafından hazırlanan " Rastgele Kristal Alan Varlığında Karma Spin-1/2 ve Spin-2 Blume-Capel Modelin Kritik Davranışları " adlı tez çalışması 29/08/2019 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği / ~~oy çokluğu~~ ile Çankırı Karatekin Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı'nda yüksek Lisans Tezi olarak kabul edilmiştir.

Danışman : Prof. Dr. Ali YİĞİT

Jüri Üyeleri :

Başkan **:**Prof. Dr. Erhan ALBAYRAK …….

Üye **:**Prof. Dr. Ali YİĞİT ……..…

Üye **:** Doç. Dr. İlyas İNCİ …….

Yukarıdaki sonucu onaylarım

Prof. Dr. Tamer KEÇELİ

Enstitü Müdürü

ETİK İLKE VE KURALLARA UYGUNLUK BEYANNAMESİ

Çankırı Karatekin Üniversitesi Lisansüstü Eğitim-Öğretim ve Sınav Yönetmeliğine göre hazırlamış olduğum "Rastgele Kristal Alan Varlığında Karma Spin-1/2 ve Spin-2 Blume-Capel Modelin Kritik Davranışları"konulutezin bana ait, özgün bir çalışma olduğunu; çalışmamın hazırlık, veri toplama, analiz vebilgilerin sunumu olmak üzere tüm aşamalarında bilimsel etik ilke ve kurallara uygun davrandığımı, tezin içerdiği yenilik ve sonuçları başka bir yerden almadığımı, tezde kullandığım eserleri usulüne göre kaynak olarak gösterdiğimi, tezin Çankırı Karatekin Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü'nden başka bir bilim kuruluna akademik amaç ve unvan almak amacıyla vermediğimi ve bu çalışmanın Çankırı Karatekin Üniversitesi tarafından kullanılan "Bilimsel İntihal Tespit Programı" ile tarandığını, "intihal içermediğini" beyan ederim. Çalışmamla ilgili yaptığım bu beyana aykırı bir durumun saptanması halinde ortaya çıkacak tüm ahlaki ve hukuki sonuçlara razı olduğumu bildiririm. Çankırı Karatekin Üniversitesi Lisansüstü Eğitim-Öğretim ve Sınav Yönetmeliğinin ilgili maddeleri uyarınca gereğinin yapılmasını arz ederim.(29/08/ 2019)

Öğrencinin Adı Soyadı

Oktay BARUT

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

RASTGELE KRİSTAL ALAN VARLIĞINDA KARMA SPIN-1/2 VE SPIN-2 BLUME-CAPEL MODELİN KRİTİK DAVRANIŞLARI.

OktayBARUT

Çankırı Karatekin Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Ana Bilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Ali YİĞİT

Bu tez çalışmasında, Bethe Kafesi üzerinde karma spin-1/2 ve spin-2 Blume-Capelferrimanyetik Ising modelin (J<0) kritik davranışları üzerine rastgele kristal alanın etkileri araştırıldı. Modelin alt-örgü dipol ve kuadrupolmanyetizasyonlarının tam ifadeleri, kristal alanın rastgele dağılımını içeren tekrarlama bağıntıları terimlerindekoordinasyon sayısı q=3, 4 ve 6 için elde edildi. Bu denklemler nümerik olarak iterasyon metodu kullanılarak çözüldü. Modelde meydana gelen faz dönüşümlerinin doğasını tespit etmek için, alt örgü mıknatıslanmalarının termal davranışları, farklı ihtimaliyet değerleri p için araştırıldı. Sonuç olarak modelin faz diyagramları (D, T) düzleminde koordinasyon sayısı q=3, 4 ve 6 için elde edildi. Model, rastgele durum için sadece ikinci- mertebeden faz dönüşüm çizgileri ve re-entrant davranış sergilemektedir. Diğer taraftan, modelin sergilemiş olduğu telafi sıcaklıklarıdetaylıca araştırıldı ve (D, T_{Telafi}) düzleminde gösterildi.

2019, 39sayfa

Anahtar Sözcükler: Bethe kafesi, Tam tekrarlama bağıntıları, Rastgele kristal alan, Faz diyagram, Telafi sıcaklığı.

ABSTRACT

Master Thesis

CRITICAL BEHAVIORS OF MIXED SPIN-1/2 AND SPIN-2 BLUME-CAPEL MODEL IN RANDOM CRYSTAL FIELD PRESENCE

Oktay BARUT

Çankırı Karatekin University

Graduate School of Natural andAppliedSciences

PhysicsDepartment

Supervisors: Prof. Dr. Ali YİĞİT

Inthisthesis, the effects of random crystal field on the critical behavior of mixed spin-1/2 and spin-2 Blume-Capel ferrimagneticIsing model (J <0) on Bethe lattice were investigated. Exact expressions of the sub-lattice dipole and quadrupole magnetizations of the model were obtained for the coordination numbers q = 3, 4 and 6 in terms of recursion relations involving the random distribution of the crystal field.Theseequationsweresolvednumericallybyusingiteration method. In order to determine the nature of the phase transformations occurring in the model, the thermal behaviors of the sub-lattice magnetizations were investigated for different probability values p. As a result, the phase diagrams of the modelwere obtainedfor the coordination numbers q=3, 4 and 6 in (D, T) plane.The model exhibits only second-order phase transformation lines and reentrant behavior for the random case.On the other hand, the compensation temperatures exhibited by the model were investigated in detail and shown in (D, T_{Telafi}) plane.

2019,39pages

Keywords: Bethelattice, Exactrucursionrelations, Randomcrystalfield, Phasediagram, Compensationtemperature.

TEŞEKKÜR

Yüksek lisans eğitimim boyunca bilgi vetecrübelerinden faydalandığımdanışmanım Sayın Prof. Dr. Ali YİĞİT hocamabana karşı göstermiş olduğu hoşgörü ve sabrından dolayı sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Ayrıca yüksek lisans dersleri aldığım, yine çeşitli konularda bilgi ve tecrübesinden yararlandığım, Fizik anabilim dalının çok değerli hocalarına en içten teşekkürlerimi sunarım.

Tez çalışmama yorumlarıyla katkı sağlayan, değerli hocam Sayın Prof. Dr. Erhan ALBAYRAK' a, ayrıca teşekkürlerimi sunarım.

Yüksek lisans eğitimim boyunca sağladıkları kolaylıklardan ötürü TOBB Fen Lisesi' nindeğerli idarecilerine, yoğun çalışma tempomda bana destek olan, sabır ve anlayış gösteren sevgili eşim Gülsen BARUT' a, teşekkür ederim.

Oktay BARUT
Çankırı, Haziran 2019

İÇİNDEKİLER

ÖZET.....iii
ABSTRACT.....iv
TEŞEKKÜR.....v
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ vii
ŞEKİLLER DİZİNİ.....ix
1.GİRİŞ ve AMAÇ 1
2. KARMA SPINLİ ISING MODELLER VE BETHE KAFESİ.....4
2.1 Karma SpinliIsing Modeller……..…….....4
2.2 Bethe Kafesi ……...……...6
3. METARYAL VE YÖNTEM .....……..... 9
3.1 Karma Spin-1/2 ve Spin-2 BC Ferrimanyetik Ising Modelin Tekrarlama Bağıntıları……9
3.2 Rastgeleliğin Hesaba Dahil Edilmesi…….…...…...13
4. MODELİN KRİTİK DAVRANIŞLARI ……17
4.1 Modelin Düzen Parametrelerinin Sıcaklıkla Değişimi…….....17
4.2 Modelin Faz Diyagramları …… 28
5. SONUÇLAR VE TARTIŞMA 33
KAYNAKLAR 35
ÖZGEÇMİŞ 39

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

Bu çalışmada kullanılan simge ve kısa açıklamaları aşağıda verilmiştir.

Simgeler	**Açıklama**
D	Kristal alan veya tek iyon anizotropi etkileşmesi
g_n (S_0)	Her bir dalın bölüşüm fonksiyonu
H	Hamiltonyen
<i,j>	En yakın komşu spin çifti
J	Bilineer etkileşim parametresi
k_B	Boltzman faktörü
n	Alt ağacın kabuk sayısı
M_2 ; $M_{1/2}$	Alt örgü dipol momentleri
Q_2; $Q_{1/2}$	Alt örgü Kuadrupol momentleri
P(S)	Spin konfigürasyonu üzerinden normalize olmamış olasılık dağılımı
q	En yakın komşu spin sayısıveya koordinasyon sayısı
s	Kuantum spin operatörü
σ_0	Merkezi spin
σ_i	Bethe kafesi üzerindeki i. konumdaki spinler
S_j	Bethe kafesi üzerindeki j. konumdaki spinler
$\left\{S^{(k)}\right\}$	Merkezi spin S_0 hariç olmak üzere Bethe kafesinin k. alt-dalına ait tüm spin konfigürasyonu
T_t	1. Mertebe faz dönüşüm Sıcaklığı
T_C	2. Mertebe faz dönüşüm Sıcaklığı (Curie Sıcaklığı)
{X_n, Y_n, Z_n}	Her bir kabuk için tekrarlama bağıntıları
Z	Bölüşüm Fonksiyonu

Kısaltmalar	**Açıklama**
F	Ferrimanyetik
BC	Blume-Capel
BEG	Blume-Emery-Griffiths
CVMPA	Çift Yaklaşımda Kümesel Değişim Metodu
EFT	Etkin Alan Teorisi
MC	Monte Carlo
MFA	Ortalama Alan Yaklaşımı
TMFSS	Transfer Matris Sonlu Boyut Ölçeklenme

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1.Bir Cayley Ağacının, q=3 ve n=3 konumlu üretiminin gösterimi…….....8

Şekil 4.1. D=2.0 için manyetizasyonların sıcaklıkla değişimi; a) q=3, b) q=4 ve c) q=6 için……..... 19

Şekil 4.2. D=-1.2 için manyetizasyonların sıcaklıkla değişimi; a) q=3, b) q=4 ve c) q=6 için…….....21

Şekil 4.3.D=-5.0 için manyetizasyonların sıcaklıkla değişimi; a) q=3, b) q=4 ve c) q=6 için…….…….....23

Şekil 4.4.Koordinasyon sayısı q=3 ve D=-1.4 için manyetizasyonların ve netmanyetizasyonun sıcaklıkla değişimi; a) p=1.0 ve b) p=0.5 için…….……...24

Şekil 4.5.Koordinasyon sayısı q=6 ve D=-3.0 için manyetizasyonların sıcaklıkladeğişimi; a) p=1.0 ve b) p=0.5 için….....25

Şekil 4.6. Koordinasyon sayısı q=3 ve 4 için manyetizasyonların sıcaklıkla değişimi; sırasıyla a) p=0.8, D=-1.7 ve b) p=0.9, D=-2.5 için……...……26

Şekil 4.7.D=-1.2 için kuadrupol momentin sıcaklıkla değişimi; a) q=3, b) q=4 ve c) q=6 için…….....28

Şekil 4.8. Modelin (D, T) düzleminde farklı ihtimaliyet değerler için faz diyagramları; koordinasyon sayısı a) q=3, b) q=4 ve c) q=6 için…….……30

Şekil 4.9. Modelin (D, T_{Telafi}) düzleminde farklı ihtimaliyet değerler için telafi sıcaklıkları; koordinasyon sayısı a) q=3, b) q=4 ve c) q=6 için……..32

1.GİRİŞ ve AMAÇ

Manyetizmanınen çok bilinen biçimlerinden birisi ferromanyetizmadır ki bazıferromanyetik malzemeler kendi kalıcı manyetik alanını üretirler. Özellikle Manyetizmanın modern teorik araştırmaları Fransız bilim adamları Pierre Curie ve Pierre Weiss tarafından yapılan çalışmalarla doğmuştur. Curie, manyetik malzemelerin üzerine sıcaklığın etkisini incelemiş ve manyetizmanın demir benzeri bir malzemede belirli bir sıcaklığın (Curie sıcaklığı, T_c) üstünde aniden kaybolduğunu görmüştür. Weissise manyetik malzemelerdeki mikro mıknatıslanmanın kendi kendine yönelmiş olduğu ortalama manyetizasyon ile orantılı hayali bir moleküler alana dayanan bir manyetizma teorisi önermiştir.

Ferromanyetizmaya en basit teorik bakış açısı Ising modeli olarak adlandırılmaktadır. Birçok fiziksel olayların termodinamik davranışlarını mesela, akışkan konsantrasyonu, gazların soğurulması, ikili ve üçlü sıvı veya gazların faz dönüşümleri, ikili alaşımlardaki düzenli-düzensiz faz geçişleri, sıvıların donması, manyetik ve elektrik faz geçişleri spin-1/2 Ising modeli veya iki durumlu sistemler kullanılarak açıklanabilmektedir. Spin-1/2 Ising modeli Wilhelm Lenz'in doktora öğrencisi olan ErnstIsing tarafından ferromanyetik problemleri çözmek için 1920 yılında tanıtıldıve Ising, spin-1/2 modelinin tek boyuttaki çözümünü yaptı.

Ising problemi çözerken basit bir model geliştirdi: her bir örgü noktası spin manyetik moment (mıknatıs) diye adlandırılır ve her bir spin manyetik momentin pozitif (yukarı) veya negatif (aşağı) şekilde iki yönelmesi vardır. Diğer bir deyişle her bir örgü noktasında ki spinlerden bazıları yukarı yönelir, bunlar spin yukarı diye ve bazıları ise aşağıya yönelir, bunlar da spin aşağı diye düşünülür. Bu model istatistik fizikte en fazla çalışılan problemlerden biri olan Ising modellerinin en basiti spin-1/2 Ising modelidir. Spin-1/2 Ising modeli iki durumlu ve tek düzen parametreli (yoğunluk, konsantrasyon, kristalografik düzen parametresi, manyetizasyon, elektrik polarizasyon v.b) bir sistem olup yukarıda bahsettiğimiz bir çok fiziksel kooperatif olayın termodinamik davranışlarını açıklamaktadır.

Manyetizmanınen çok bilinen bir başka biçimi ise ferromanyetizma ve antiferromanyetizma ile benzerdavranışlar sergileyen ferrimanyetizmadır. Dış bir manyetik alan yokluğunda bile tıpkıferromanyetlerde olduğu gibi ferrimanyetlerdeCurie sıcaklığının altında kendiliğinden manyetizasyona sahiptir.Gerçekte, ferrimanyetler, antiferromaneytler ile de benzerdir, çünkü bitişik manyetik momentler arasındaki değiş-tokuş etkileşmesi, onların antiparalel olarak hizalanmasına yol açar. Fakat ferrimanyetlerde net manyetizasyon sıfır değildir. Alt örgünün mıknatıslanmasının, zıt yönelime sahip diğer alt örgünün mıknatıslanmasından daha büyük olmasından dolayı net bir mıknatıslanma meydana gelir. Ferrimanyetizma teorisi Néel tarafından antifrromanyetizma konusu ortaya konulurken geliştirilmiştir (Samuel Smart 1955).Ferrimanyetler için yerelleşmiş momentlerin resmi antiferromanyetler için olandan biraz daha karmaşıktır(Spaldin 2010).Ferrimanyetizmatıpkı ferromanyetizma ve antiferromanyetizma gibi çok iyi bilinen kritik sıcaklıkların altında düzenli duruma sahip bir fiziksel kooperatif fenomendir. Néel teorisinden sonra ferrimanyetizma araştırmaları için çok sayıda teorik ve deneysel çalışma yapılmıştır.

Ferrimanyetik malzemeler, potansiyel teknolojik uygulamaları nedeniyle son zamanlarda büyük bir ilgi görmektedirler.Ferrimanyetik malzemelerde, belirli şartlar altında, alt örgü manyetizasyonları kritik Curie (T_C) sıcaklığına ulaşmadan önce, birbirini dengelerler vetam bu sıcaklık noktasında net manyetizasyon sıfır olur. Bu sıcaklık noktası telafi (kompensasyon) sıcaklık noktasıolarak isimlendirilir (Dakhama 1998). Bu davranış ferrimanyetik malzemelere ait bir davranış biçimidir. $Li_{0.5}Fe_{1.25}Cr_{1.205}O_4$ bileşiği bu davranışı sergilemektedir (ZhangandZhao 2017). Telafi sıcaklığının varlığı, termomanyetik kayıt, manyeto-optik, elektronik ve bilgisayar teknolojilerindeki potansiyel cihaz uygulamalarından dolayı önemlidir.

Son yıllarda ise, düzensiz sistemlerin çoklu manyetik kritik davranışların araştırmaya olan ilgi artmaya başlamıştır. Düzensiz manyetik sistemlerin fiziksel özelliklerini benzetmek için, IsingHamiltonyeni'nde var olan etkileşim parametrelerine rastgelelik katıldığı modeller önerilebilir. Bu modellere örnekler olarak, rastgele manyetik alan (Weizenmann et al 2007) ve rastgele kristal alan içeren (Albayrak 2013) veya her ikisini birden içeren (Da Silva et al 2017), spinler arası değiş tokuş etkileşimlerinin rastgele

olduğu (CavaliereandPelissetto 2019) modeller verilebilir. Bu tipteki çalışmalar deneysel sonuçlarla uyumluluğu ve gerçek malzemelerin özelliklerine yakın davranışlar sergiledikleri için araştırmacılar tarafından büyük ilgi çekmektedir.
Bu tez çalışmasının amaçları ise;

i-) Karma spin-1/2 ve spin-2 Blume-CapelferrimanyetikIsing modelinin rastgele kristal alan varlığında faz diyagramlarının mümkün düzlemlerdeBethe Kafesi üzerinde tekrarlama bağıntıları metodu kullanarak elde edilmesi.

ii-) Modelin sergilemiş olduğu kritik davranışların tespit edilmesi.

iii-) Telafi sıcaklık noktalarının kapsamlı olarak araştırılması.
olarak üç kısımda izah edilir.

Tezin 2. Bölümünde karma spinli Ising modelleri ile ilgili literatür özeti ve Bethe kafesi ile ilgili bilgiler verilecektir. 3. Bölümde modelin kritik davranışlarını açıklamak için gerekli olan denklemler tekrarlama metodu kullanılarak elde edilecektir. 4. Bölüm ise düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimlerini ve koordinasyon sayısı q=3, 4 ve 6 için (D, T) düzleminde modelin faz diyagramları ile (D, T_{Telafi}) düzleminde telafi sıcaklıklarınıgösteren şekilleri kapsamaktadır.Son bölüm olan 5. Bölümde elde edilen sonuçlaryer alacaktır.

2. KARMA SPİNLİ ISING MODELLER VE BETHE KAFESİ

2.1 Karma SpinliIsing Modeller

Moleküler-temelli manyetik malzemelerin belirli tiplerini tanımlamak ve ferrimanyetik malzemeleri çalışmak için en iyi model,karma spinliIsingmodelleridir.Bu malzemeler manyetik kutup in-versiyon, ters manyetik histerezis döngüsü gibi karakteristik manyetik davranışlar sergilemektedir (Drissi et al. 2018).Ayrıca, karma spinIsing modeller, tek tipspin içeren Ising modelleregöre daha az yerdeğiştirme simetrisine sahiptirler.İki alt örgülü karma spinliferrimanyetik sistemler yoğun madde fiziği dalında önemli araştırma alanı haline gelmiştir.

Karma spinliIsing model, Hamiltonyen' de yer alan etkileşme parametrelerine göre çeşitli isimler alır. Örneğin bilineer etkileşim parametresi (J) ve bikuadratik etkileşim parametresi (K) etkileşmeleri yanı sıra kristal alan veya tek iyon anizotropi etkileşmesi (D) terimini ihtiva eden model, Blume-Emery-Griffiths modeli (BEG), sadece J ve D terimlerini içeren model Blume-Capel (BC) modeli olarak isimlendirilir. Blume-Capel modeli ilk olarakBlume (Blume 1966) ve ondan bağımsız olarak Capel (Capel 1966) tarafından tanımlanmıştır.

Karma spinliferrimanyetikIsing sistemlerin birçok kombinasyonu vardır ve bunlardan en fazla çalışılanı karma spin-1/2 ve spin-1 sistemidir. Bu çalışmalarda,renormalizasyon grup (RG) tekniği (SchofieldandBowers 1980), yüksek sıcaklık seri açılımı (YousifandBowers 1984), serbest fermiyon yaklaşımı (Tang 1988), Bethe kafesinde tekrarlama metodu (Albayrak and Keskin 2003), Bethe-Peirlsmetodu (BP) (IwashitaandUryu 1983), etkin alan teorisi (EFT) (Ertaş and Keskin 2015), ortalama alan yaklaşımı (MFA) (BenayadandDakhama 1997), Monte Carlo simülasyonu (MC) (Oubelkacem et al 2018), nümerik transfer matris metodu (BuendiaandNovotny 1997) ve çift yaklaşımda kümesel değişim metodu (CVMPA) (Tucker 1999) gibi istatistik fizik temelli çeşitli metotlar kullanılmıştır.

Bir diğer kombinasyon ise karma spin-1/2 ve spin-2 içeren Blume-CapelIsingferrimanyetiksistemidir ki bu tez çalışmasında da aynı karma spinsistemi ele

alınmıştır. Şimdi bu sistem ile ilgili yapılan araştırmalara göz atalım. İlk çalışmada etkin alan teorisi (Kaneyoshi 1994) kullanılarak sistemde üçlü kritik noktaları ve dönüşüm sıcaklıklarını tespit etmek için gerekli genel denklemler elde edilerek sistemin faz diyagramları ortaya konmuştur. Bu çalışmada sistem sadece en yakın komşu sayısı q=4 için üçlü kritik nokta sergilerken q=3 için sergilememiştir. Bir diğer çalışma ise, modelin sonlu sıcaklık faz diyagramlarını elde etmek için Monte Carlo simülasyon metodu kullanılmıştır (BuendiaandLiendo 1997), bir önceki çalışmada elde edilen sonuçların aksine q=4 için model üçlü kritik nokta sergilememiştir. Bu iki çalışmada da telafi sıcaklığı hakkında ise herhangi bir tartışma yapılmamıştır.İki çalışmadaki ile aynı Hamiltonyen' e sahip model Bethe kafesi üzerinde tekrarlama bağıntıları metodu (Albayrak and Yiğit 2005) ile incelenmiştir. Model tıpkı Monte Carlo simülasyon metodunda olduğu gibi en yakın komşu spin sayısı q=3, 4 için üçlü kritik nokta sergilemez iken, daha yüksek komşu spin sayısı q=5 ve 6 için üçlü kritik nokta sergilemiştir. Ayrıca telafi sıcaklık noktaları da kapsamlı olarak tartışılmıştır. Son olarak bal peteği kafesi (en yakın komşu spin sayısı q=3' e karşılık gelmektedir.) üzerinde sistemin faz diyagramları Monte Carlo metot (Zahir et al 2019) kullanılarak incelenmiş ve Bethe kafesi üzerindeki q=3 için elde edilen sonuçlarla uyumlu sonuçlar elde edilmiştir.

Bu çalışmaların yanı sıra, son zamanlarda yapılan çalışmalarda, karma spin modellerin kritik özelliklerini önemli ölçüde etkileyen sistem parametrelerine, rastgeleliğin uygulanmasıyla, bu modellerin kritik özelliklerinin nasıl değiştiği sorusunun cevabının araştırılması araştırmacıların ilgisini çekmeye başlamıştır ve özellikle rastgele kristal alan varlığında yapılan çalışmalarda bir artış gözlemlenmektedir.Rastgele kristal alan varlığında; dekore edilmiş karma spin-1 ve spin-1/2 Isingferrimanyetik modelinin kritik davranışları (Benyoussef et al 2007) ve karma spin-1/2 ve spin-3/2 ferrimanyetik sistemin kritik davranışları ortalama alan teorisi (Bahmad et al 2011) ve etkin alan teorisi ile (Yiğit and Albayrak 2013 a, b) araştırılmıştır,spin-1 ve spin-3/2 içeren ferrimanyetik karma spin sisteminin manyetik özellikleri, ihtimaliyet dağılım tekniği temelinde etkin alan teorisi (Htoutou et al 2017 a, b),Gibbs serbest enerjisi için Bogoliubov eşitsizliği temelinde ortalama alan teorisi (Souza et al 2016)ile incelenmiştir.Bethe Kafesi üzerinde rastgele kristal alanvarlığındakarma spinIsingBC

modelin farklı spin kombinasyonları (1,5/2) (Yiğit and Albayrak 2018), (1/2,5/2) (Albayrak andKarimou 2018), (1, 3/2) (Yiğit and Albayrak 2017) ve (1/2,1) (Albayrak 2013) detaylı olarak incelenmiştir.

Bu literatür özetinden görüldüğü üzere, (1, 1/2), (1, 3/2), (1/2, 3/2), (1/2, 5/2) ve (1, 5/2)spinlerinden oluşan karma spinli Ising modellerin kritik özelliklerinin rastgele kristal alan varlığında detaylı bir biçimde araştırılmıştır. Bir diğer karma spin sistemi olan karma spin-1/2 ve spin-2 modelinin, rastgele kristal alan varlığındaki kritik özellikleri sadece bir çalışmada incelenmiştir. Bu çalışmada ise ortalama alan yaklaşımı kullanılarak (Zahir et al 2018) kare kafes üzerinde modelin kritik davranışları ortaya konmuştur. Sonuç olarak karma spin-1/2 ve spin-2 Blume-CapelIsingferrimanyetik modelin rastgele kristal alan varlığında kritik özellikleri sadece bir yöntem ile araştırılmıştır. Dolaysıyla bu sistemin kritik özelliklerinin farklı bir yöntemle ortaya konulması önemlidir.

2.2Bethe Kafesi

Bethe örgüsü, Şekil 2.1.'de gösterilen sonsuz bir Cayley Ağacı veya düzgün bir ağaçtır yani bağlantısız birleşik bir grafiktir. Tarihsel olarak ismini, bölüşüm fonksiyonu tam olarak Bethe yaklaşımındaki Ising modelinin bölüşüm fonksiyonu olması gerçeğinden almaktadır (Domb 1960)Cayley Ağacı ve Bethe örgüsü katı hal ve istatistik fizikte yaygın bir şekilde kullanılır. Bethe örgüsü geleneksel ortalama alan teorisi başarısız olduğu zaman bile,sistemlerin genel özelliklerini yansıtmasından dolayı ilgi kaynağı olmuştur (Gujrati 1995). Örgü, birinci kuşak (generation) spini olarak isimlendirilebilen bir merkezi $s_0$spininden oluşmaktadır. s_0, q tane en yakın komşuya sahiptir ki bu sayı ikinci kuşak spinini oluşturan koordinasyon sayısıdır. Dolaysıyla toplam olarak ikinci kuşak üçüncü kuşağı oluşturan $q(q-1)$ en yakın komşuya sahiptir ve bu şekilde sonsuza kadar devam etmektedir.

Bir Cayley ağacı oluşturulurken, merkezi bir "0" noktasından başlanır ve hepsi "0" noktasına bağlı q nokta eklenir. Bu q noktaları takımı birinci kabuk (shell) olarak adlandırılır. Daha fazla kabuk oluşturmak için r. kabukta bir nokta alınır ve bu noktaya

(q-1) tane yeni nokta eklenir. Bu işlem r. kabuktaki bütün noktalar için yapılır ve bu yeni noktalar takımı (r+1). kabuk olarak adlandırılır.

Bu şekilde iterasyonel olarak ilerleyerek; 2, 3, …, n kabukları oluşturulur. Burada sınır noktaları hariç her bir noktanın q tane en yakın komşusu vardır. r. kabukta $q(q-1)^{r-1}$ nokta ve grafikteki toplam nokta sayısı

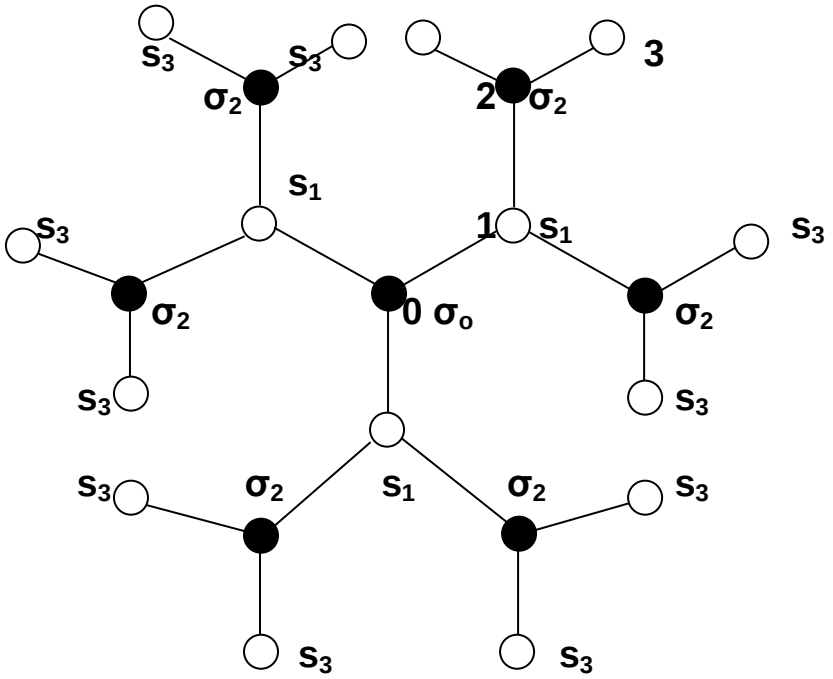
$$\frac{q[(q-1)^n - 1]}{(q-2)} \quad (2.1)$$

(2.1) ile verilir. r. kabuktaki noktalar sınır noktalarıdır. Bunların sadece birer tane komşuları olması nedeniyle diğerlerinden farklıdır, fakat diğer bütün noktaların (iç noktalar) her birinin q tane komşusu vardır. Bu şekildeki bağlantısız olarak oluşturulan grafik Cayley Ağacı olarak adlandırılır.

Bethe kafesi üzerindeki Ising modeli, tam olarak çözülebilen bir modeldir. Modelde en yakın komşu spin etkileşmeleri hesaba katılır. Ortalama alan modelinde olduğu gibi, bu model de kare veya kübik örgü üzerindeki bir modelin yaklaşık davranışına eşdeğer bir davranış sergiler.

Diğer taraftan bu modelin bir eksik tarafı, kritik davranışın, örgünün iletkenliğinden çok koordinasyon sayısına (q) bağlı olmasıdır. Bethe kafesi, düzensiz sistemler teorisinde yapay bir matematiksel model olarak bazı teorik teknikler yardımıyla kesin sonuç vermesi açısından oldukça önemlidir. Bu tür örgüleri tanımlamak kolay olmasına rağmen, fiziksel sistemleri tam olarak tanımlamazlar. Yapının geometrik homojenliğini ve her bir tepe-uçtan q dalının eşitliğini kurmak için, sonsuz boyutlu normal bir örgüde her bir dalın yeni bir boyut için bir basamak olduğunu düşünmek gerekir. Bununla birlikte düzensiz sistemler teorisinde karakteristik birçok problem (perkolasyon, örgü (ağ) iletimi, dallanma ve jel oluşumu) gerçek kristal örgüler üzerinden çok Bethe örgüsü üzerinde daha kolay çözülmüştür. Bethe metodu, sadece Ising modeli ile de sınırlı değildir. Şayet s bir kuantum spin operatörü olarak düşünülürse, Heisenbergferromagnetlerin düzenli-düzensiz özellikleri de hesaplanır (Ziman 1979).Bethe ve Bethe benzeri kafesleri bağ açıları ve uzunlukları değiştirilmeksizin

sonlu boyuttaki Oklid uzayı içine gömülemezler (HughesandSahim 1982). Ayrıca Mosseri ve Sadoc(Mosseriand Sadoc 1982) eğer Bethe kafesini sabit negatif eğrilikli (hiperbolik yada Lobachevsky düzlemi H_2(Coexeter 1947)) iki boyutlu uzaya gömülebilirse, Bethe kafesini sabit bağ açılı ve uzunluklu düzenli kafes olarak düşünülebilen bir yapı olacağını ortaya koymuşlardır.



Şekil 2.1 Bir Cayley Ağacının, q=3 ve n=3 konumlu üretiminin gösterimi

3. METARYAL VE YÖNTEM

Bu bölümde, karma spin-1/2 ve spin-2 BCIsingferromanyetik modelinin kritik davranışlarını açıklamak için gerekli, düzen parametreleri, yani dipol moment ve kuadrupol moment denklemleritekrarlama bağıntıları terimlerindeBethe kafesi üzerinde elde edilecektir. Daha sonra ise rastgele kristal alan katkısının elde edilen bu denklemlere nasıl ilave edileceği gösterilecektir.

3.1 Karma spin-1/2 ve spin-2 BCFerrimanyetik Ising Modelin Tekrarlama Bağıntıları

İlk olarak, modelin saf durumu için yani kristal alanın rastgele olmadığı, tüm kafes konumlarında eşit olarak etki ettiği durum için tekrarlama bağıntılarını elde edelim.

Bethe kafesi üzerinde ilgilenilen modelin Hamiltonyeni

$$H = \sum_{<i,j>} \sigma_i s_j - D_i \sum_i \sigma_i^2 \quad (3.1)$$

ile verilmektedir. Yukarıda verilen (3.1) eşitliğinde ki her σ_i, Bethe kafesi üzerinde ki i. konumdaki spinleri ve S_jj. konumdaki spinleri göstermektedir. Spin-2 ile temsil edilen σ_i, ±2, ±1 ve 0 olmak üzere beş farklı spin değeri alırken, spin-1/2 ile temsil edilen S_j±1/2 olmak üzere iki farklı spin değerine sahiptir. Eşitlik 3.1 de verilen ilk toplamdaki J tüm en yakın komşu spin çiftleri üzerinden bilineer etkileşme parametresini, ikinci toplamdaki D_i ise kristal alan etkileşmesini ifade eder. Bu çalışmada J<0 alınarakferrimanyetik durum elde edilecektir. D_i kristal alan etkileşme parametresi literatürde tek-spin iyon anizotropisi olarak da adlandırılır ve fiziksel orijini, kristal içindeki çeşitli ligandlarla uyumlu olan metal atomları için merkezi olmayan potansiyellerden kaynaklanmaktadır (Hwang et al 2016).

İlgilendiğimiz tüm termodinamik fonksiyonları, sistemin bölüşüm fonksiyonu sayesinde elde edebiliriz. Tanım olarak bölüşüm fonksiyonu

$$Z = \sum e^{-\beta H} = \sum_{Spc} P(spc) = \sum_{\{\sigma,s\}} \exp[\beta(J \sum_{<i,j>} \sigma_i s_j + D_i \sum_i \sigma_i^2)] (3.2)$$

şeklinde olup, burada P(S), tüm spin konfigürasyonu üzerinden normalize olmamış olasılık dağılımıdır. Ayrıca $\beta = 1/k_B T$ ve k_B Boltzmann sabiti olup basitlik için 1 değerine eşit alınmıştır. Eğer Bethe kafesi $\sigma_0$spinli merkezi noktadan kesilirse, birbiriyle bağlantısız q özdeş dala ayrılır. Ayrılan bu dalların sayısı, en yakın komşuların sayısı veya koordinasyon sayısına (q) bağlıdır. Bu dalların her biri, kökü merkezi $\sigma_0$spininde olan ağaçlardır.$P(\{\sigma_0\})$, merkezi konumda, σ_0 değerli spin konfigürasyonunu ifade eder ve

$$P(\{\sigma_0\}) = \exp\left[\beta\left(D_i\sigma_0^2\right)\right] \prod_{k=1}^{q} Q_n(\sigma_0|\{s_1^{(k)}\}) \quad (3.3)$$

şeklinde yazılabilir. Bethe kafesinin merkezi-spin σ_0 konumundan diğer spinlerle bağlantısının kesildiği farz edilirse merkezi-spin konumunda sadece D_i kristal alanı etkin olacaktır.$\{s_1^{(k)}\}$ise Bethe kafesinin k. alt-dalına ait tüm spin konfigürasyonudur. n alt indisi, alt ağacın n tane kabuğa sahip olduğunu yani kökten sınıra kadar n basamak ilerlendiğini belirtir, ve eşitlik 3.3 de bulunan $Q_n(\sigma_0|\{S_1^{(k)}\})$ ifadesi

$$Q_n(\sigma_0|\{S_1^{(k)}\}) = \exp[\beta(J\sigma_0 s_1^{(k)} + J\sum_{<i,j>}\sigma_i s_j + D_i\sum_{<i,j>}\sigma_i^2)] \quad (3.4)$$

şeklindedir. Buna ek olarak, üst alt ağacı, 0 konumuna komşu olan 1 konumundan kesilirse, bu da yine q parçaya ayrılır. Bunlardan biri (0,1) kenarı olup, geri kalanı özdeş dallardır. Bu dalların her biri orijinali gibi bir alt ağaçtır, fakat n-1 kabuğa ve q-1 komşuya sahiptir. Bundan dolayı

$$Q_n(\sigma_0|\{S_1^{(k)}\}) = \exp[\beta J\sigma_0 s_1^{(k)}]\prod_{l=1}^{q-1} Q_{n-1}(s_1^{(k)}|\{\tau_2^{(l)}\}) \quad (3.5)$$

şeklinde bir düzenleme yapılabilir. Burada,$\{\tau_2^l\}$,($s_1^{(k)}$hariç) alt ağacın l. dalı üzerinden spin konfigürasyonudur. Şimdi üst alt ağaç 1 konumuna bitişik 2 konumundan tekrar kesilirse, bir kez daha q parçaya ayrılır.Bu yüzden, $Q_{n-1}(s_1^{(k)}|\{\tau_2^{(l)}\})$ ifadesi,

$$Q_{n-1}(s_1^{(k)}|\{\tau_2^{(l)}\}) = \exp[\beta J s_1\sigma_2 + \beta D_i\sigma_2^2]\prod_{m=1}^{q-1} Q_{n-2}(\tau_2^{(l)}|\{r_3^{(m)}\}) \quad (3.6)$$

şeklini alır. Burada $\{r_3^{(m)}\}$ alt alt ağacın m. dalı üzerindeki tüm spinleri ifade eder. Sonuç olarak bu şekilde Bethe kafesi üzerinde kökten sınıra kadar n basamak ilerlenir (termodinamik limitte $n \to \infty$). Bu yollatüm kabuklar ilave edilir ve tüm Bethe kafesi kurulur ki merkezi spin-2 q tane komşu spin-1/2 ye sahipkenspin-1/2 li diğer jenarasyon ise q-1 tane spin-2 komşuya sahiptir ve spin-2 li diğer jenarasyon q-1 tane komşu spin-1/2 ye sahiptir, böylece sonsuza kadar ilerlenir. Merkezi spinin seçiminin sistem üzerinde hiçbir etkiye sahip değildir ve merkezi spini ister spin-2 ister spin-1/2 seçelim sistem parametrelerinde herhangi bir değişiklik meydana gelmez.

Merkezi spinσ_0'ın bütün diğer spinler ile olan etkileşimi ise her bir dalın bölüşüm fonksiyonu olarak yazılan aşağıdaki toplam ile verilebilir.

$$g_n(\sigma_0) = \sum_{\{S_1\}} Q_n(\sigma_0|\{s_1\}) \quad (3.7)$$

Bu toplam tüm s_1 üzerinden merkezi spin σ_0' ın belirli değerlere sahip belirli bir ihtimaliyeti olduğunu anlatır. Öyle ki spin-2, ±2, ±1 ve 0 spin değerlerine sahiptir. Şimdi tam tekrarlama bağıntılarını elde etmek için tüm bu değerler üzerinden eşitlik 3.6 düşünülürse

$$g_{n-1}(s_1) = \sum_{\sigma_2} \exp\left[\beta\left(J\sigma_2 S_1 + D_i\sigma_2^2\right)\right]\ [g_{n-2}(\sigma_2)\ ]^{q-1} \quad (3.8)$$

elde edilir, s spin değişkenimiz ±1/2 ve σ spin değişkenimizin ±2, ±1 ve 0 mümkün değerlerini almasından dolayı her bir s_1 spin değeri için iki farklı g_{n-1} (s_0) fonksiyonu

$$\begin{aligned} g_{n-1}(\pm 1/2) &= \sum_{\sigma_2} \exp\left[\beta\left(1/2J\sigma_2 + D_i\sigma_2^2\right)\right]\ [g_{n-2}(\sigma_2)\ ]^{q-1} \\ &= \exp(\beta(\pm J + 4D_i)[g_{n-2}(+2)]^{q-1} + \exp(\beta(\mp J + 4D_i)[g_{n-2}(-2)]^{q-1} \\ &+\exp(\beta(\pm J/2 + D_i)[g_{n-2}(+1)]^{q-1} + \exp(\beta(\mp J + D_i)[g_{n-2}(-1)]^{q-1} \\ &+[g_{n-2}(0)]^{q-1} \quad (3.9) \end{aligned}$$

elde edilir.

Eşitlik 3.5 ve 3.7 birlikte düşünülerek ve tüm s_1 spinleriüzerinden toplam alınırsa eşitlik 3.6 aşağıdaki gibi

$$g_n(\sigma_0) = \sum_{s_1} \exp\left[\beta\,(J\sigma_0 S_1)\right]\ [g_{n-1}(s_1)\,]^{q-1} \qquad (3.10)$$

düzenlenir. Şimdi σ_0 değerleri üzerinden bu işlemi yaparsak,

$\sigma_0=\pm 2$ için,

$$g_n(\pm 2) = \sum_{s_1} \exp\left[\pm 2\beta J\, S_1\right]\ [g_{n-1}(s_1)\,]^{q-1}$$

$$= \exp\left[\pm\beta J\,\right)][g_{n-1}(+1/2)\,]^{q-1} + \exp\left[\mp\beta J\,\right)][g_{n-1}(-1/2)\,]^{q-1} \qquad (3.11)$$

$\sigma_0=\pm 1$ için,

$$g_n(\pm 1) = \sum_{s_1} \exp\left[\pm\beta J\, S_1\right]\ [g_{n-1}(s_1)\,]^{q-1}$$

$$= \exp\left[\pm 1/2\beta J\,\right][g_{n-1}(+1/2)\,]^{q-1} + \exp\left[\mp 1/2\beta J\,\right][g_{n-1}(-1/2)\,]^{q-1} \qquad (3.12)$$

ve son olarak $\sigma_0=0$ için

$$g_n(0) = \sum_{s_1}\ [g_{n-1}(s_1)\,]^{q-1} = [g_{n-1}(+1/2)\,]^{q-1} + [g_{n-1}(-1/2)\,]^{q-1} \qquad (3.13)$$

olmak üzere beş farklı $q_n(\sigma_0)$ fonksiyonu elde edilir.

Elde edilen bu g_n ve g_{n-1}fonksiyonlarının birbirine oranlanması ile modelin tekrarlama bağıntıları aşağıdaki şekilde tanımlanabilir.

$$X_n = \frac{g_n(+2)}{g_n(0)},\ Y_n = \frac{g_n(-2)}{g_n(0)}, \qquad Z_n = \frac{g_n(+1)}{g_n(0)}, \qquad W_n = \frac{g_n(-1)}{g_n(0)} \qquad (3.14)$$

$$V_{n-1} = \frac{g_{n-1}(+1/2)}{g_{n-1}(-1/2)} \qquad (3.15)$$

Bu ifadelerin tam hallerini eşitlikler 3.9-3.13kullanarak elde ederiz.

$$X_n = \frac{e^{\beta J} V_{n-1}^{q-1} + e^{-\beta J}}{V_{n-1}^{q-1} + 1}, \quad Y_n = \frac{e^{-\beta J} V_{n-1}^{q-1} + e^{+\beta J}}{V_{n-1}^{q-1} + 1}$$

$$Z_n = \frac{e^{\beta J/2} V_{n-1}^{q-1} + e^{-\beta J/2}}{V_{n-1}^{q-1} + 1}, W_n = \frac{e^{-\beta J/2} V_{n-1}^{q-1} + e^{\beta J/2}}{V_{n-1}^{q-1} + 1} \tag{3.16}$$

$V_{n-1} =$

$$\frac{e^{\beta(J+4D_i)} X_{n-2}^{q-1} + e^{\beta(-J+4D_i)} Y_{n-2}^{q-1} + e^{\beta(J/2+D_i)} Z_{n-2}^{q-1} + e^{\beta(-J/2+D_i)} W_{n-2}^{q-1} + 1}{e^{\beta(-J+4D_i)} X_{n-2}^{q-1} + e^{\beta(J+4D_i)} Y_{n-2}^{q-1} + e^{\beta(-J/2+D_i)} Z_{n-2}^{q-1} + e^{\beta(J/2+D_i)} W_{n-2}^{q-1} + 1} \tag{3.17}$$

Elde edilen bu tekrarlama bağıntılarının hiçbir fiziksel manası yoktur. Ancak modelin kritik davranışlarını ortaya koyan tüm termodinamik fonksiyonları bu tekrarlama bağıntıları terimlerinde elde etmek mümkündür.

3.2 Rastgeleliğin Hesaba Dahil Edilmesi

Bu tez çalışmasında amacımız karma spin-1/2 ve spin-2 BCIsingferrimanyetik modelin kritik davranışları üzerine rastgele kristal alanın etkilerini gözlemlemek olduğundan dolayı, bu durumun nasıl hesaba katılacağı bu kısımda izah edilecektir.

ModelimizinHamiltonyen'i eşitlik 3.1 de verilmişti, buradaki kristal alan parametresini rastgele hale getirmek için öncelikle bir ihtimaliyet dağılım fonksiyonu belirlemek gerekmektedir. Literatür araştırmalarına göre, Gaussian dağılım fonksiyonu, iki modlu dağılım fonksiyonu, üç modlu dağılım fonksiyonu v.b. farklı ihtimaliyet dağılım fonksiyonları bu çalışmalara uygulandığında faz diyagramlarındaki kritik çizgilerin zengin bir davranış sergilediği görülmüştür. Biz de bu çalışmada literatürde en fazla kullanılan iki modlu dağılım fonksiyonunu seçtik. Bahsedilen fonksiyon,

$$P(D_i) = p\delta(D_i - D) + (1 - p)\delta(D_i) \tag{3.18}$$

biçimindedir. Bu dağılım fonksiyonunda ilk terim, spinlerin p miktarının kristal alan tarafından etkilenme derecesini, ikinci terim ise (1-p) kadar spinin kristal alan tarafından etkilenme derecesini ifade eder. Başka bir ifadeyle, kristal alanın Bethe kafesinin n sayılı kabukları üzerindeki spinlerin, p ve (1-p) ihtimaliyetlerinde rastgele olarak

etkilenip etkilemediğini belirler. Bu fonksiyondaki D ise kristal alanın büyüklüğünü ifade eder.

Şimdi kristal alan parametresindeki düzensizliği oluşturmak için, bir önceki kısımda elde etmiş olduğumuz tekrarlama bağıntıları üzerinden eşitlik 3.18 dağılımını kullanarak bir ortalama alma işlemi gerçekleştirmemiz gereklidir.

$$X_{n=}\int X_n P(D_i)dD_i = \int X_n p\delta(D_i - D)dD_i + \int X_n(1-p)\delta(D_i)dD_i$$

$$Y_{n=}\int Y_n P(D_i)dD_i = \int Y_n p\delta(D_i - D)dD_i + \int Y_n(1-p)\delta(D_i)dD_i$$

$$Z_{n=}\int Z_n P(D_i)dD_i = \int Z_n p\delta(D_i - D)dD_i + \int Z_n(1-p)\delta(D_i)dD_i$$

$$W_{n=}\int W_n P(D_i)dD_i = \int W_n p\delta(D_i - D)dD_i + \int W_n(1-p)\delta(D_i)dD_i$$

$$V_{n=}\int V_n P(D_i)dD_i = \int V_n p\delta(D_i - D)dD_i + \int V_n(1-p)\delta(D_i)dD_i \quad (3.19)$$

elde edilir. Artık rastgele kristal alan dağılımlı elde ettiğimiz bu yeni tekrarlama bağıntıları terimlerinde modelin düzen parametreleri olan alt örgü dipol ve kuadupol momentlerini veya mıknatıslanmalarını elde edebiliriz.

Şimdi alt örgü düzen parametreleri manyetizasyonları M_2 ve $M_{1/2}$ ifadelerini elde etmek için bu ifadelerin standart hali,

$$M_2 = \frac{\sum_{\{\sigma_0\}} \sigma_0 P(\{\sigma_0\})}{\sum_{\{\sigma_0\}} P(\{\sigma_0\})}\ , M_{1/2} = \frac{\sum_{\{s_1\}} s_1 P(\{s_1\})}{\sum_{\{s_1\}} P(\{s_1\})} \quad (3.20)$$

ile ifade edilir sistemin bölüşüm fonksiyonu ise,

$$Z_2 = \sum_{\{\sigma_0\}} P(\{\sigma_0\})\ , \qquad Z_{1/2} = \sum_{\{s_1\}} P(\{s_1\}) \quad (3.21)$$

şeklindedir. Eşitlik 3.21 de verilen ifadelerin açık halini elde etmek için eşitlik 3.2, eşitlik 3.3, eşitlik 3.5 ve eşitlik 3.6kullanılarak,

$$Z_2 = \sum_{\{\sigma_0\}} \exp[\beta(D_i\sigma_0^2)][g_n(\sigma_0)]^q, Z_{1/2} = \sum_{\{s_1\}}[g_n(s_1)]^q \quad (3.22)$$

elde edilir. Eşitlik 3.21 ve eşitlik 3.22 kullanılarak alt örgülerin dipol mıknatıslanma ifadeleri,

$$M_2 = Z_2^{-1} \sum_{\{\sigma_0\}} \sigma_0 \exp[\beta(D_i\sigma_0^2)][g_n(\sigma_0)]^q,$$

$$M_{1/2} = Z_{1/2}^{-1} \sum_{\{s_1\}} s_1[g_n(s_1)]^q \quad (3.23)$$

bulunur. S_0 ve $\sigma_0$için mümkün değerler eşitlik 3.23 de yerine yazılırsa ve gerekli işlemler yapılırsa, alt örgü mıknatıslanmaları tekrarlama bağıntıları terimlerinde

$$M_2 = \frac{2e^{4\beta D}\left(X_n^q - Y_n^q\right) + e^{\beta D}\left(Z_n^q - W_n^q\right)}{e^{4\beta D}\left(X_n^q + Y_n^q\right) + e^{\beta D}\left(Z_n^q + W_n^q\right) + 1.0}, M_{1/2} = \frac{\left(V_n^q - 1.0\right)}{2(V_n^q + 1.0)} \quad (3.24)$$

elde edilir, Bu lineer olmayan iki denklemin tekrarlama bağıntıları terimlerinde iterasyon metodu kullanılarak çözülmesi neticesinde sistemde meydana gelen kritik davranışlar gözlemlenir. Benzer şekilde alt örgü kuadrupol mıknatıslanmalarıda hesaplanır. Q_2 ve $Q_{1/2}$ ifadelerini elde etmek için bu ifadelerin standart hali,

$$Q_2 = \frac{\sum_{\{\sigma_0\}} \sigma_0^2 P(\{\sigma_0\})}{\sum_{\{\sigma_0\}} P(\{\sigma_0\})}, Q_{1/2} = \frac{\sum_{\{s_1\}} s_1^2 P(\{s_1\})}{\sum_{\{s_1\}} P(\{s_1\})} \quad (3.25)$$

şeklindedir. Yukarıdaki işlemlere benzer işlemler bu ifadeler içinde yapılırsa,

$$Q_2 = \frac{4e^{4\beta D}\left(X_n^q + Y_n^q\right) + e^{\beta D}\left(Z_n^q + W_n^q\right)}{e^{4\beta D}\left(X_n^q + Y_n^q\right) + e^{\beta D}\left(Z_n^q + W_n^q\right) + 1.0}, \quad M_{1/2} = \frac{1}{4} \quad (3.26)$$

Modelin kuadrupol düzen parametreleride tekrarlama bağıntıları elde edilmiş olur.

Ayrıca alt örgü mıknatıslanmalarının mutlak değerleri arasındaki kesişim noktaları bulunarak,

$$|M_2(T_{Telafi})| = |M_{1/2}(T_{Telafi})| \quad (3.27)$$

ya da

$$\text{işaret}\,[M_2(T_{Telafi})] = -\text{işaret}[M_{1/2}(T_{Telafi})],\ \ T_{Telafi} < T_C \quad (3.28)$$

şartları altında,

$$M_{Net} = |M_2(T_{Telafi})| - |M_{1/2}(T_{Telafi})| = 0 \quad (3.29)$$

net mıknatıslanmanın sıfır olduğu zaman telafisıcaklık yerleri belirlenir.

Bu çalışmada, ilk önce en yakın komşu sayısı q=3, 4 ve 6 için modelin alt örgü dipol ve kuadrupol mıknatıslanmalarıile net mıknatıslanmaların sıcaklıkla değişimleri farklı ihtimaliyet değerleri için incelenerek, modelde meydana gelen faz dönüşümlerinin doğası tespit edilecek ve bu veriler ışığında modelin faz diyagramları (D, T) düzleminde elde edilecektir. Ayrıca modelde meydana gelen telfai sıcaklıklarıda (D,T_{Telafi}) düzleminde gösterilecektir.

4. MODELİN KRİTİK DAVRANIŞLARI

Bu kısımda,karma spin-1/2 ve spin-2 Blume-CapelIsingferrimanyetikmodelin rastgele kristal alan varlığında elde edilen faz diyagramları ve kritik davranışları izah edilecektir. Bir önceki bölümde modelinkritik davranışlarını açıklamak için gerekli olan düzen parametreleri, dipol ve kuadrupol momentleri tekrarlama bağıntıları terimlerinde elde edildi. Bu denklemler nümerik olarak iterasyon metodu kullanılarak çözülmüştür. Bu çözümler kullanılarak, en yakın komşu sayısı q=3, 4 ve 6 için modelin düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimleri vekristal alan değerlerinin kafes üzerinde farklı ihtimaliyet dağılımları (p=0 ile 1 arasında, 0.1 aralıklarla değişimi) için faz diyagramları (D, T) düzleminde elde edilmiştir. Son olarak net manyetizasyon ifadesi kullanılarak modelde meydana gelen telafi sıcaklıkları tespit edilmiştir ve (D,T_{Telafi}) düzleminde gösterilmiştir.

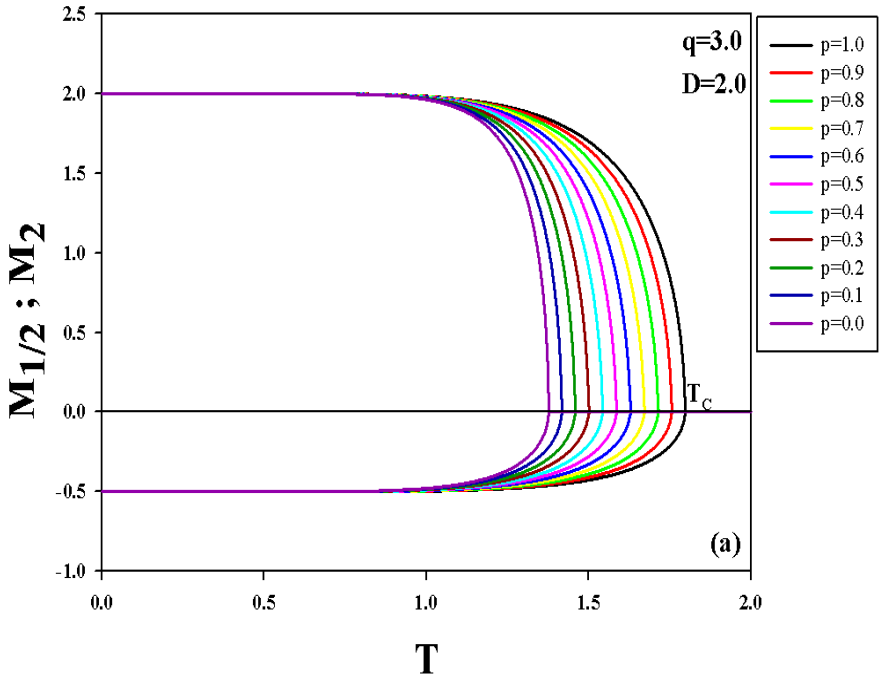
4.1 Modelin Düzen Parametrelerinin Sıcaklıkla Değişimi

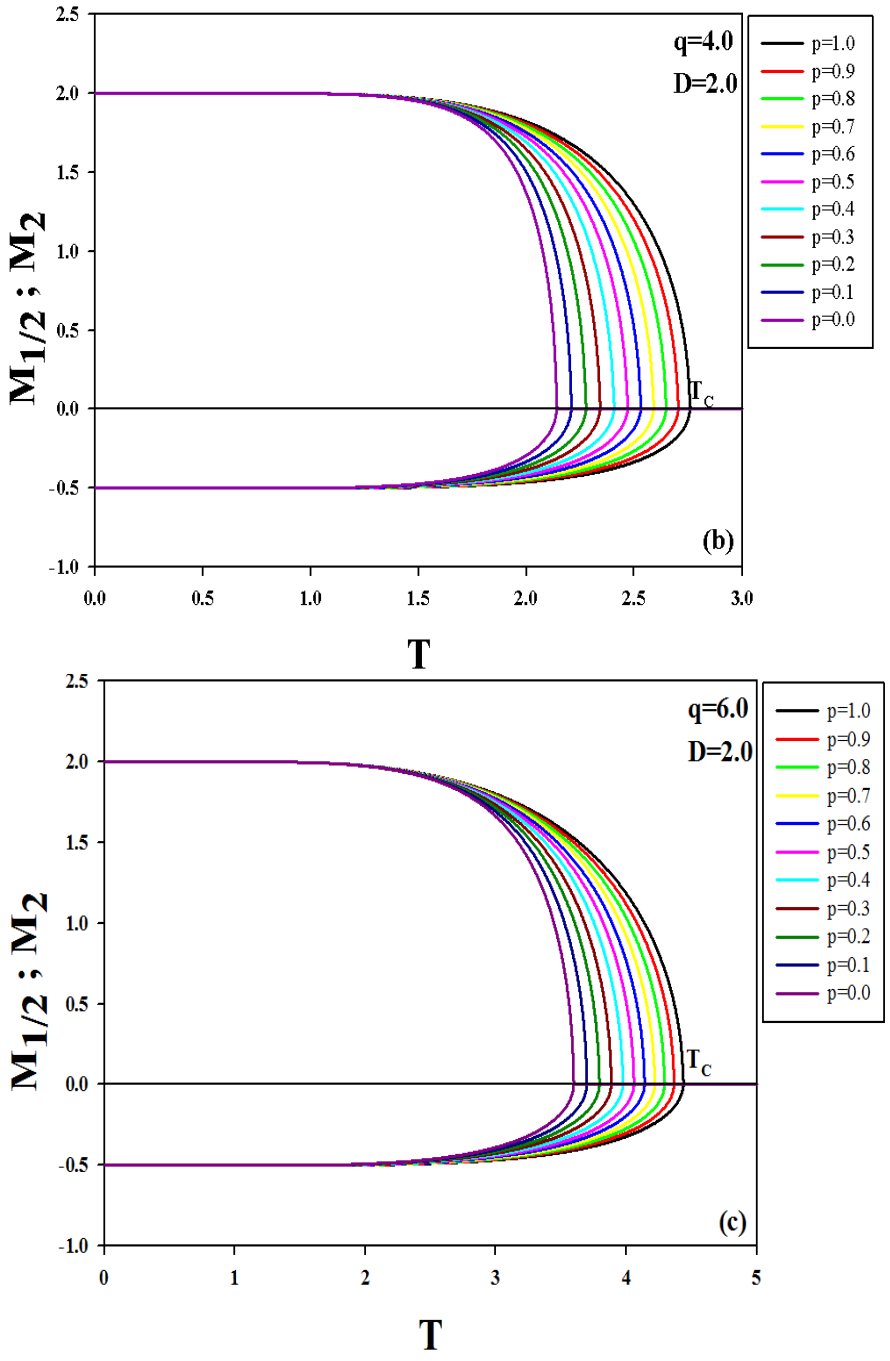
Modelde meydana gelen faz dönüşümlerinin doğasını anlamak için (birinci-mertebe faz dönüşümü veya ikinci-mertebe faz dönüşümü), düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimlerini incelemek oldukça önemli bir role sahiptir. Farklı ihtimaliyet değerleri vekoordinasyon sayısı q=3, 4 ve 6 için düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimleri şekiller 4.1-4.7 ile detaylı olarak gösterilmiştir. Bu şekillerde ikinci-mertebe faz dönüşüm sıcaklığıolan kritik Curie sıcaklığı T_C ile, birinci-mertebe faz dönüşüm sıcaklığı T_t ilegösterilmiştir. Ayrıca kristal alanın dağılım ihtimaliyeti p' nin farklı değerleri farklı bir renk ile gösterilmiştir. Örneğin p=0.8 demek, Bethe kafesinin her bir kabuğu üzerindeki spinlerin % 80 sinin rastgele olarak kristal alandan etkilendiğini ve % 20 sinin ise kristal alandan etkilenmediğini ifade etmektedir, yani verilen ihtimaliyete göre rastgele olarak kristal alan ya spinleri etkisi altına alacak yada almayacaktır.

İlk olarak belirtmeliyiz ki, karma spin-1/2 ve spin-2 Blume-CapelIsingferrimanyetik model, kristal alanın kafes üzerindeki tüm örgü konumlarında ki spinlereaynı değerde etki ettiği durum olan saf durum için 2 farklı düzenli faz sergilemektedir. Bu tez

çalışmasında ise rastgele kristal alan durumu için saf durumdan farklı bir faz daha ortaya çıkmaktadır. Bu ferrimanyetik fazlar tüm şekillerde F kısaltması ile etiketlenmiştir. Şimdi bu düzenli ferrimanyetik fazları ifade edelim, bu fazlardan ilki i-) M_2=+2 ve $M_{1/2}$=-1/2 veya M_2=-2 ve $M_{1/2}$=1/2düzenli ferrimanyetik fazı, ikincisi ii-)M_2=+3/2 ve $M_{1/2}$=-1/2 veya M_2=-3/2 ve $M_{1/2}$=-1/2 düzenli ferimanyetik fazı ve son olarak ise saf durumda olmayan iii-) M_2=0 ve $M_{1/2}$=-1/2veya M_2=0 ve $M_{1/2}$=1/2 ferrimanyetik fazıdır. Ayrıca M_2=0 ve $M_{1/2}$=0 düzensiz paramanyetik faz ise şekillerde P ile etiketlenmiştir.

Şekil 4.1 a, b ve c de, kristal alanın pozitif değeriD=2.0 için düzen parametreleri dipol mıknatıslanmaların sıcaklıkla değişimleri, farklı p ve koordinasyon sayısı q=3, 4 ve 6 için gösterilmiştir.



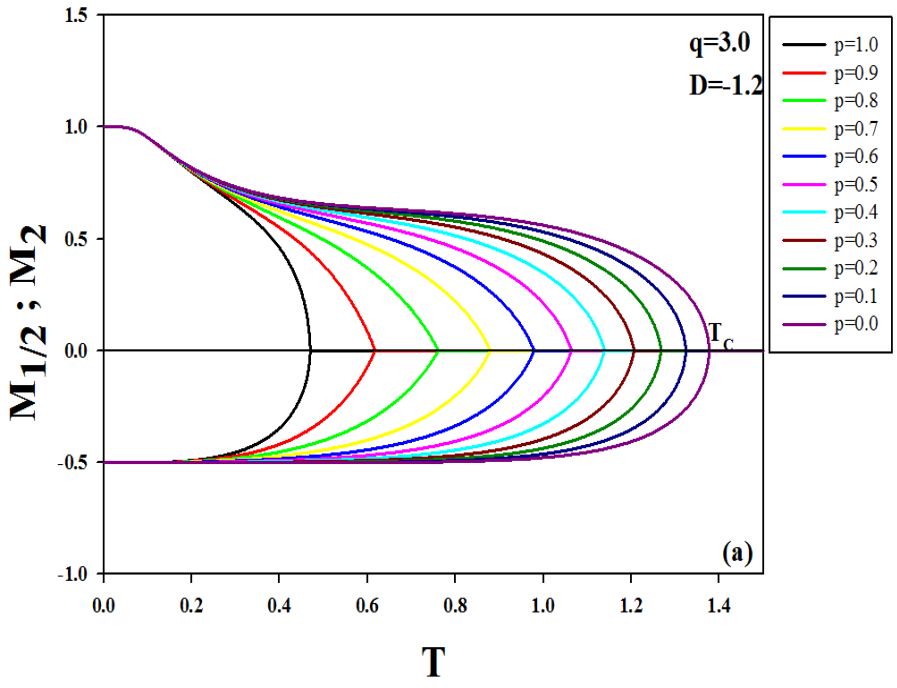


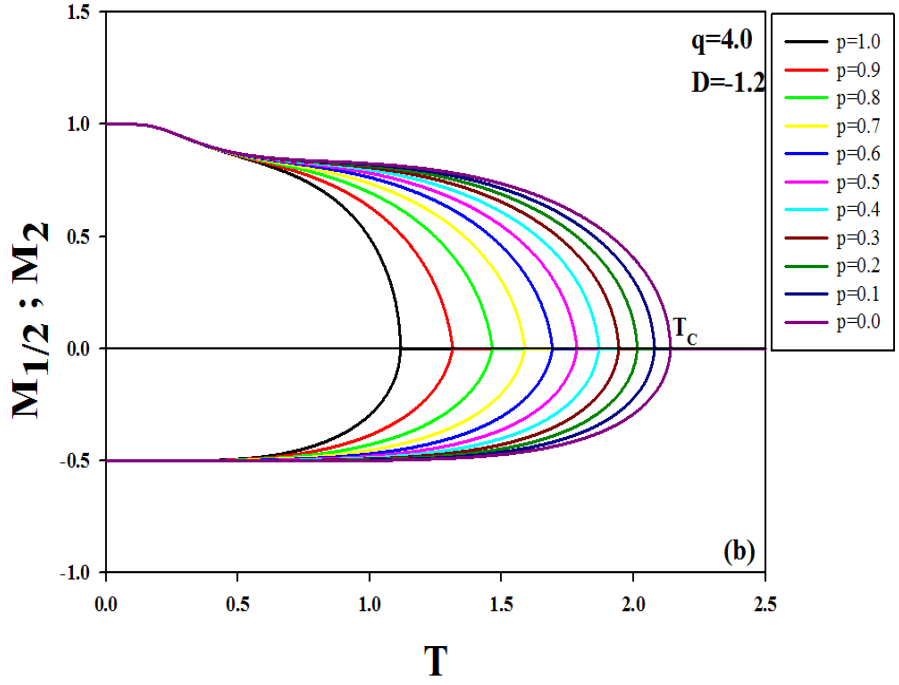
Şekil 4.1.D=2.0 için manyetizasyonların sıcaklıkla değişimi; a) q=3, b) q=4 ve c) q=6 için

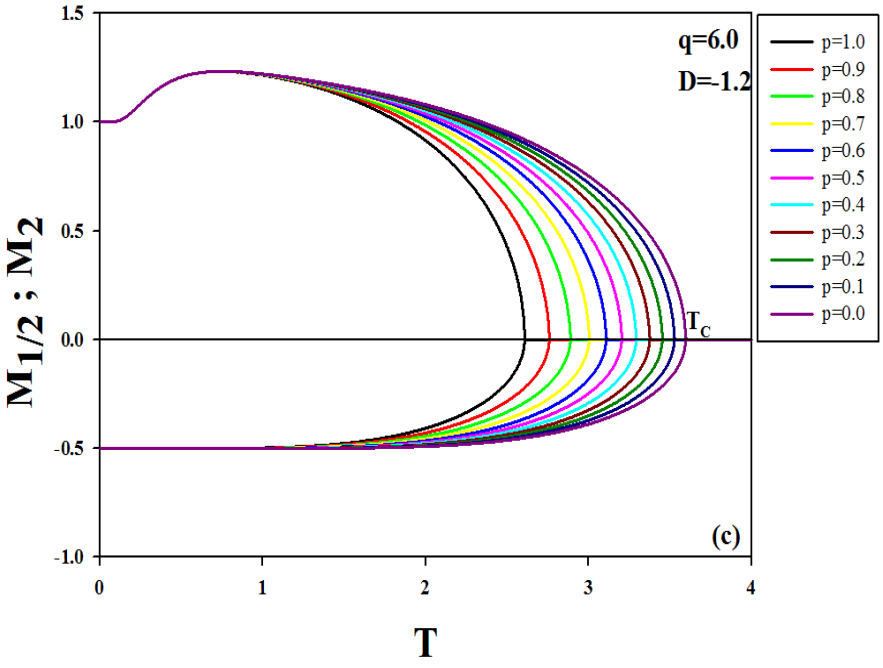
Burada p=1.0 durumu saf duruma karşılık gelirken, p=0 durumu ise, D'nin değerinin tüm kafes üzerinde sıfır olduğu duruma karşılık gelirki bu durumda modelin Hamiltonyen' inde sadece J değeri kalmaktadır. Manyetizasyon eğrileri mutlak sıfır sıcaklığında yani taban durumunda, doyum değeri olarak M_2 =2 ve $M_{1/2}$=-0.5değerlerini

almaktadır ki bu durum bize i. ferrimanyetik fazı işaret etmektedir. Şekillerden görüldüğü üzere sıcaklık arttıkça manyetizasyon eğrileri sürekli olarak azalmakta ve dikkat edilirse belirli bir kritik sıcaklıkta ikinci-mertebe faz dönüşüm sıcaklığında (Curie sıcaklığı T_C) sıfır değerine ulaşmaktadırlar. Böylece sistem taban durum sıcaklığından bu kritik T_C değerine kadar düzenli ferrimanyetik faz sergilerken, bu sıcaklığın üzerine düzensiz paramanyetik faz sergilemektedir. Bu durum tüm p değerleri için faklı T_C sıcaklıklarında meydana gelmektedir. Şekillerde ihtimaliyet değeri p azaldıkça T_C değerleri azalmaktadır. Koordinasyon sayısı q değerleri arttıkçaaynı ihtimaliyet p değerlerinde ikinci-mertebe faz dönüşüm sıcaklıklarının daha büyük değerle sahip olduğu görülmektedir.

ii. düzenli ferrimanyetik faz ise şekil 4.2 a, b ve cde, D=-1.2ve q=3, 4 ve 6 değerleri için elde edilmiştir. Manyetizasyon eğrileri bir önceki şekil ile benzemektedirler bu şekillerdende görüldüğü üzere faz dönüşümlerinin hepsi tüm p değerleri için ikinci-mertebe faz dönüşümleridir, T_C değerleri için önceki şekil ile kıyaslama yapılırsa sadece tek bir fark göze çarpmaktadır, p değerleri azaldıkça T_C değerlerinin arttığı görülmektedir.



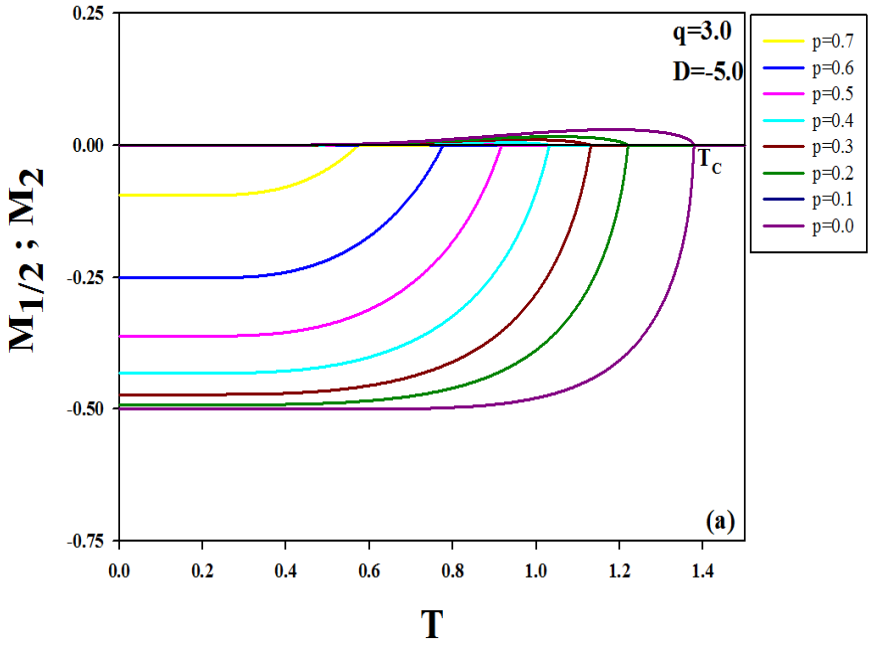


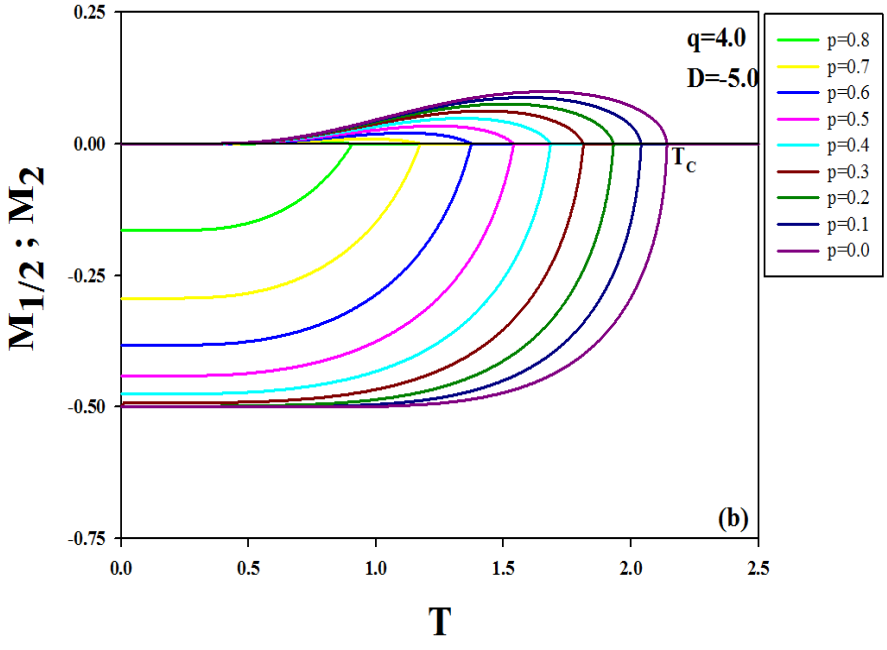


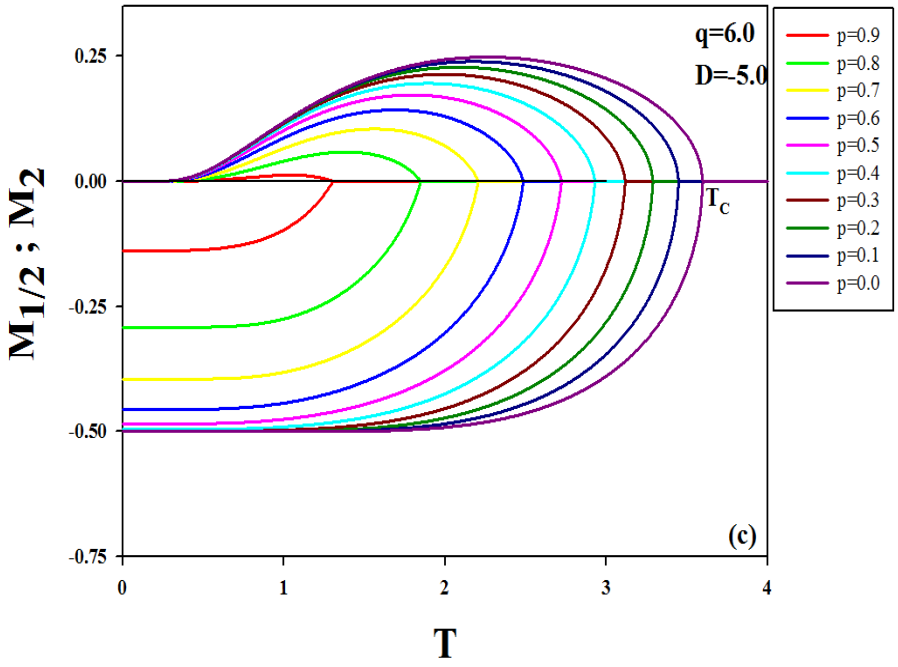
Şekil 4.2.D=-1.2 için manyetizasyonların sıcaklıkla değişimi; a) q=3, b) q=4 ve c) q=6 için

Alt örgü manyetizasyonlarınınsıfır sıcaklıkta farklı değerler aldığı iii. ferrimanyetik faz tipi ise şekil 4.3 a, b ve c de, görülmektedir. Şekillerden görüldüğü üzere $M_{1/2}$manyetizasyon eğrilerinin sıcaklıkla değişimi önceki şekiller ile benzerlik

göstermektedir. M_2manyetizasyon eğrileri ise sıfır sıcaklıkta sıfır doyum manyetizasyon değerine sahip iken sıcaklık arttıkça manyetizasyon değerleri artmakta ve daha sonra azalarak ikinci-mertebe faz dönüşüm sıcaklığında sıfıra gitmektedir. Bu davranışı önceki şekiller ile benzerlik göstermemektedir. Ayrıca kristal alanın bu değerinde, q=3 için p=0.8, 0.9 ve 1.0 değerlerinde, q=4 için ise p=0.9 ve 1.0 değerlerinde,q=6 için p=1.0 değerinde model herhangi bir faz dönüşümü sergilememektedir.

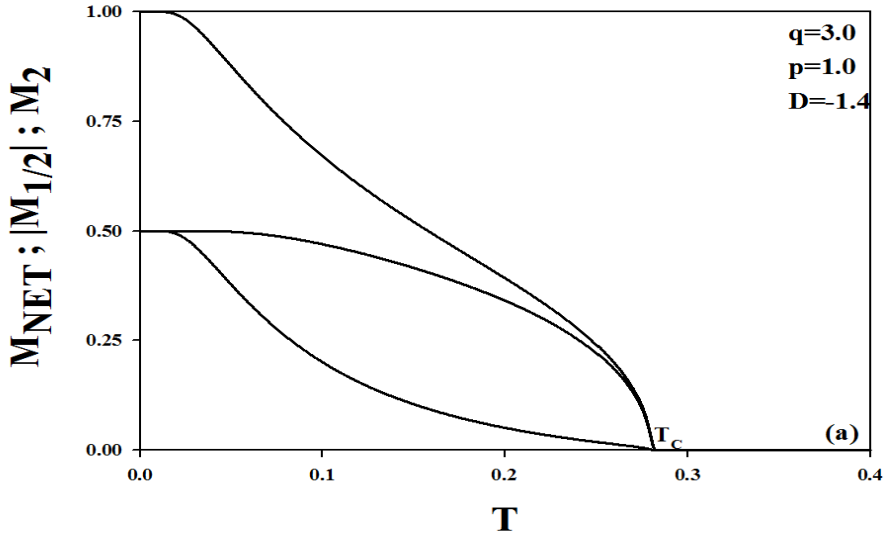


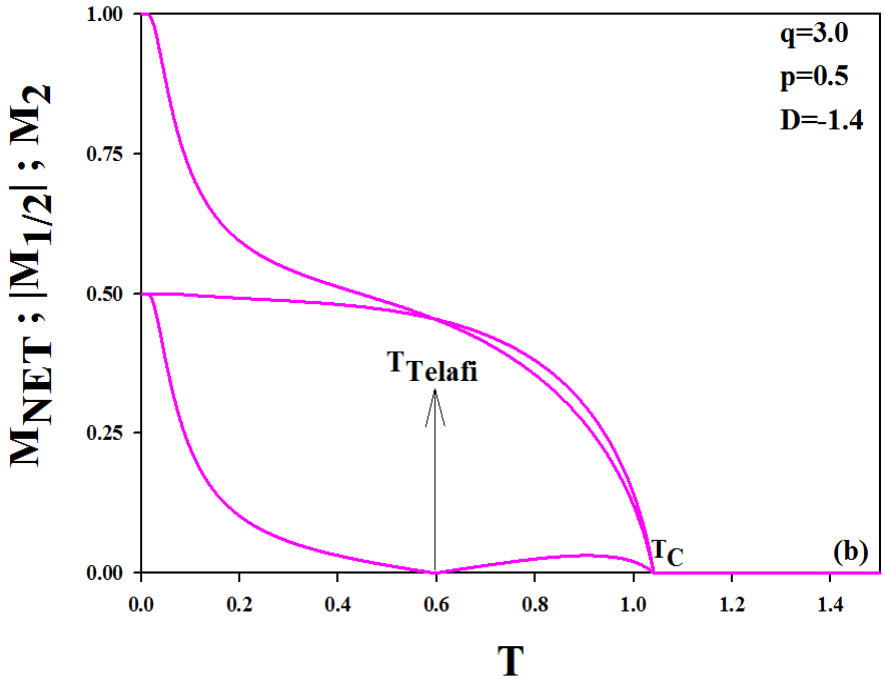




Şekil 4.3.D=-5.0 için manyetizasyonların sıcaklıkla değişimi; a) q=3, b) q=4 ve c) q=6 için

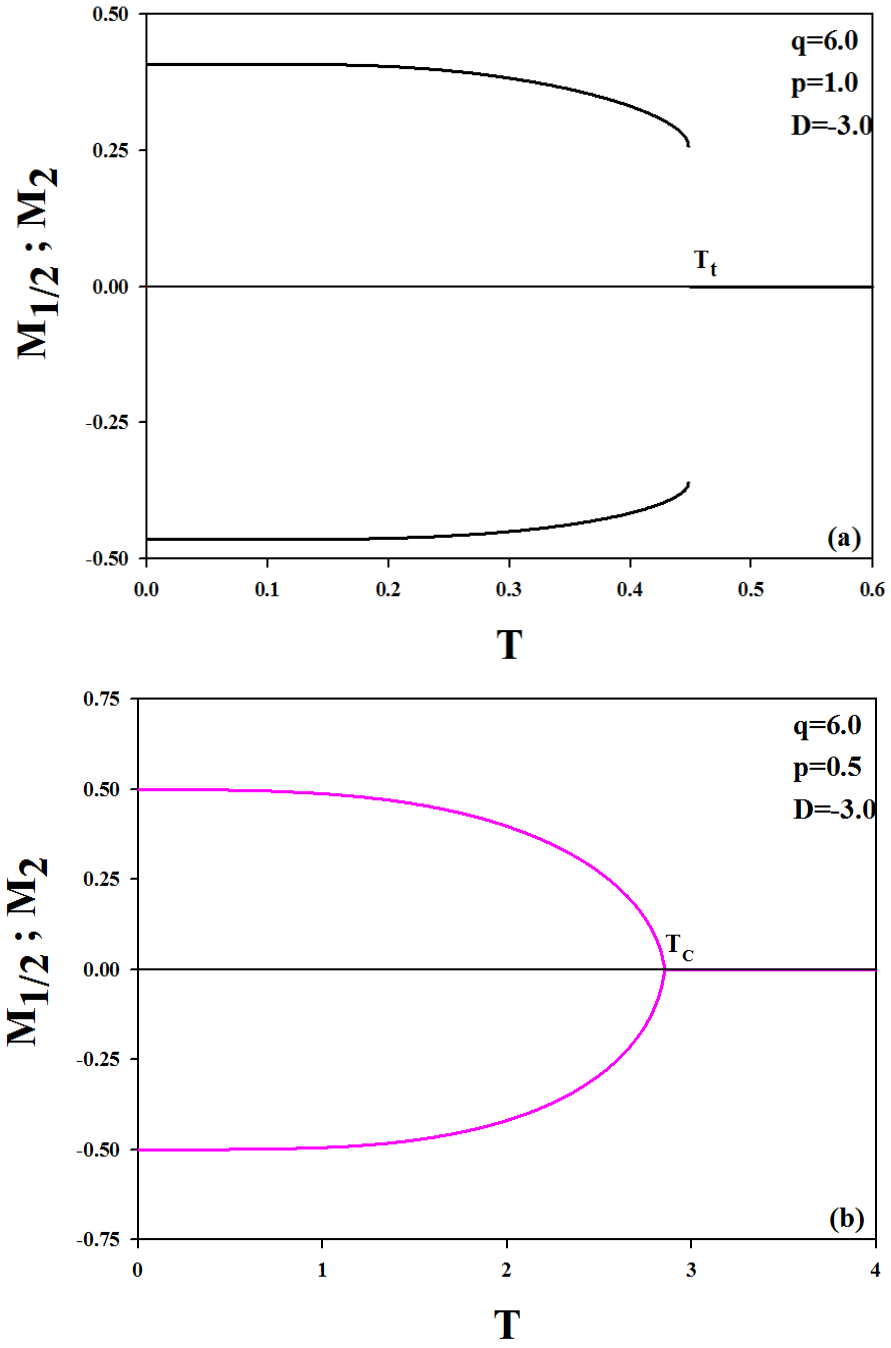
Bir diğer şeklimiz 4.4 a ve b de ise net manyetizasyon eğrisinin sıcaklıkla değişimi koordinasyon sayısı q=3 için saf durum (p=1.0) ve rastgele durum (p=0.5) için gösterilmiştir. Model aynı kristal alan değerinde saf durum için herhangi bir telafi sıcaklığı sergilemezken, kristal alanın rastgele durumunda ise bir tane telafi sıcaklığı sergilemektedir. T_{Telafi}=0.595 değerinde, alt örgü manyetizasyonları bir birlerini iptal etmekteve net manyetizasyoneğrisi, kritik sıcaklık $T_C$değerinden önce sıfır değerineulaşmaktadır.





Şekil 4.4. Koordinasyon sayısı q=3 ve D=-1.4 için manyetizasyonların ve net manyetizasyonun sıcaklıkla değişimi; a) p=1.0 ve b) p=0.5 için

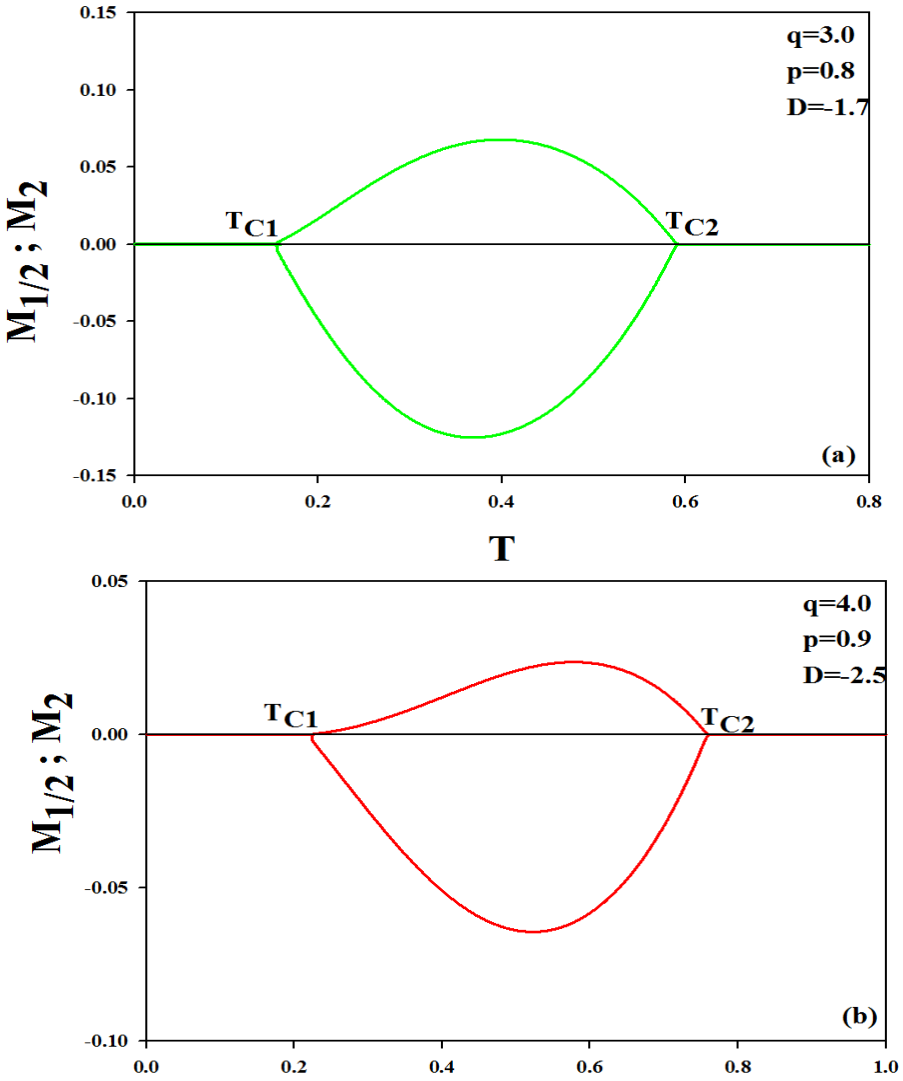
Şimdiye kadar ki incelediğimiz düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimleri modelin manyetizasyon eğrilerinin sadece ikinci-mertebe faz dönüşümüne işaret etmektedir. Şekil 4.5 a da ise p=1.0 saf durum içinbirinci-mertebe faz dönüşüm sıcaklığıT_t ortaya konmaktadır. Öyleki alt örgü mıknatıslanma eğrileri sıfır sıcaklıktaki doyum değerinden sıcaklık artıkça azalmakta ve T_t sıcaklığında bir atlama yaparak süreksizlik sergilemektedir ve sıcaklık. Bu durum uygun kristal alan değerlerinde sadece q=6 değerinde ortaya çıkmaktadır. Burada aynı kristal alan değeri için rastgele durum ise p=0.5 için şekil 4.5 b de gösterilmiştir.Bu iki şekil kıyaslandığı zaman birinci-mertebe faz dönüşüm sıcaklığının (T_t) yerini, ikinci-mertebe faz dönüşüm sıcaklığına (T_C) bıraktığı görülmektedir. Kristal alanın rastgele dağılımının bu duruma sebep olduğunu söyleyebiliriz.



Şekil 4.5. Koordinasyon sayısı q=6 ve D=-3.0 için manyetizasyonların sıcaklıkla değişimi; a) p=1.0 ve b) p=0.5 için

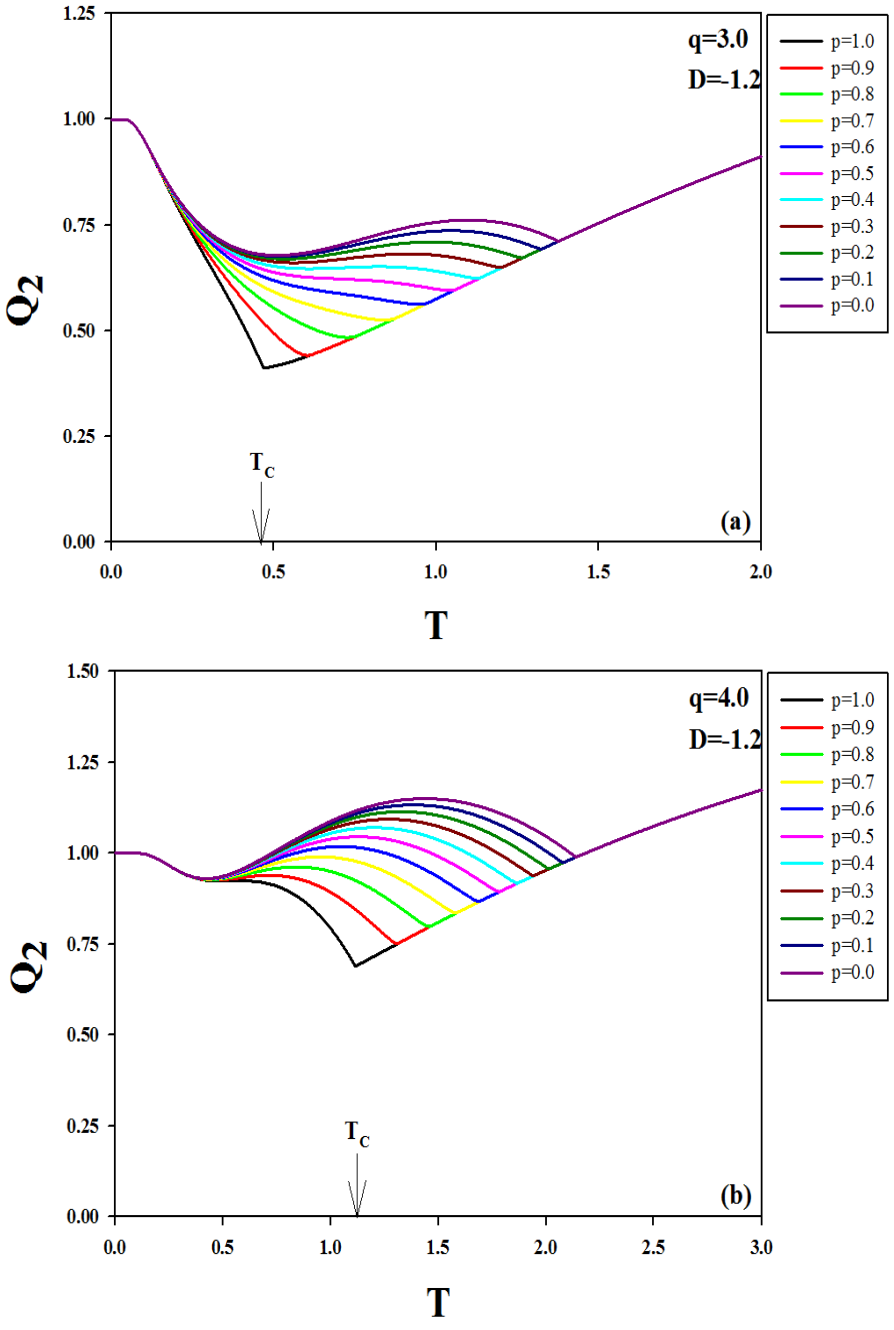
Bir diğerşekillerde 4.6 a ve b deise koordinasyon sayısı q=3 ve 4 içinrastgele durum için alt örgü manyetizasyonlarının sıcaklıkla değişimlerini göstermektedir. Şekilden görüldüğü üzere, mıknatıslanma eğrileri sıfırbaşlangıç değerinden başlayarak ilk önce birinci kritik sıcaklıkta birbirlerinden ayrılmakta ve sıcaklığın daha da artmasıyla tekrar

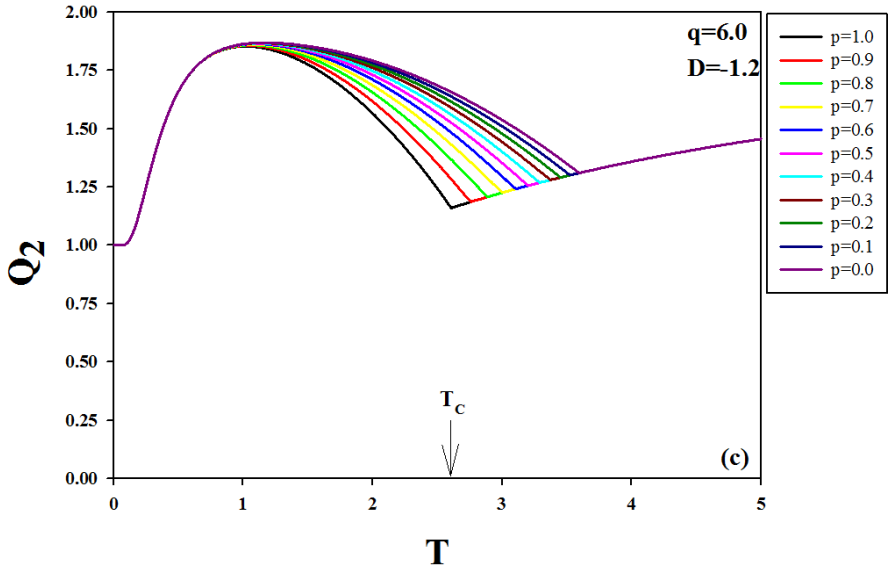
ikinci bir kritik sıcaklıkdeğerinde birbirleri ile birleşmektedirler. q=3 için T_{C1}=0.155 ve T_{C2}=0.593 değerlerini alırken q=4 için ise bu değerler T_{C1}=0.225 ve T_{C2}=0.76 şeklindedir. Şekillerdemanyetizasyon eğrilerine dikkat edilirse bu kritik sıcaklık noktalarına sürekli olarak ulaşmaktadırlar, bu yüzden bu faz dönüşüm sıcaklıkları ikinci-mertebedendir. Manyetizasyon eğrilerinin bu ilginç davranışı re-entrant davranışı olarak isimlendirilmektedir. Bu ilginç davranış birçok karma spin modelinde ortaya çıkmaktadır. İncelediğimiz modelde ise koordinasyon sayısı q=3 ve 4 için kristal alanın çok sınırlı negatif değerlerinde ve rastgele durumda ortaya çıktığı tespit edilmiştir. Ayrıca modelde, saf durum için re-entrant davranış meydana gelmektedir.



Şekil 4.6. Koordinasyon sayısı q=3 ve 4 için manyetizasyonların sıcaklıkla değişimi; sırasıyla a) p=0.8, D=-1.7 ve b) p=0.9, D=-2.5 için

Şimdiye kadar ki şekillerin tümü sadece alt örgü manyetizasyonlarının ve net manyetizasyonun sıcaklıkla değişimleri ile ilgiliydi. Şekil 4.7 a, b ve c de ise bir diğer düzen parametremiz olan kudrupol momentin sıcaklıkla değişimleri verilmektedir. Bu şekillerde sadece spin-2 li alt örgülerin kuadrupol moment Q_2 değişimleri incelenmiştir. Spin-1/2 li alt örgüler için kuadrupol moment ifadesi Q_1 'in değeri sabittir ve 1/4 tür.





Şekil 4.7.D=-1.2 için kuadrupol momentin sıcaklıkla değişimi; a) q=3, b) q=4 ve c) q=6 için

Şekiller 4.7 den görüleceği üzere kuadrupol moment eğrileri sıcaklığın artması ile sürekli olarak değişmekte ve tam T_Csıcaklığında çukur pik yapmaktadırlar. Şekil 4.2 de verilen sistem parametreleri ile şekil 4.7 de verilen sistem parametreleri aynıdır. Dolaysıyla her iki şekil dikkatlice incelendiğinde,model için hem dipol moment hem de kuadrupol moment eğrilerinin aynı T_C sıcaklığında faz dönüşümü gerçekleştirdiği görülmektedir.

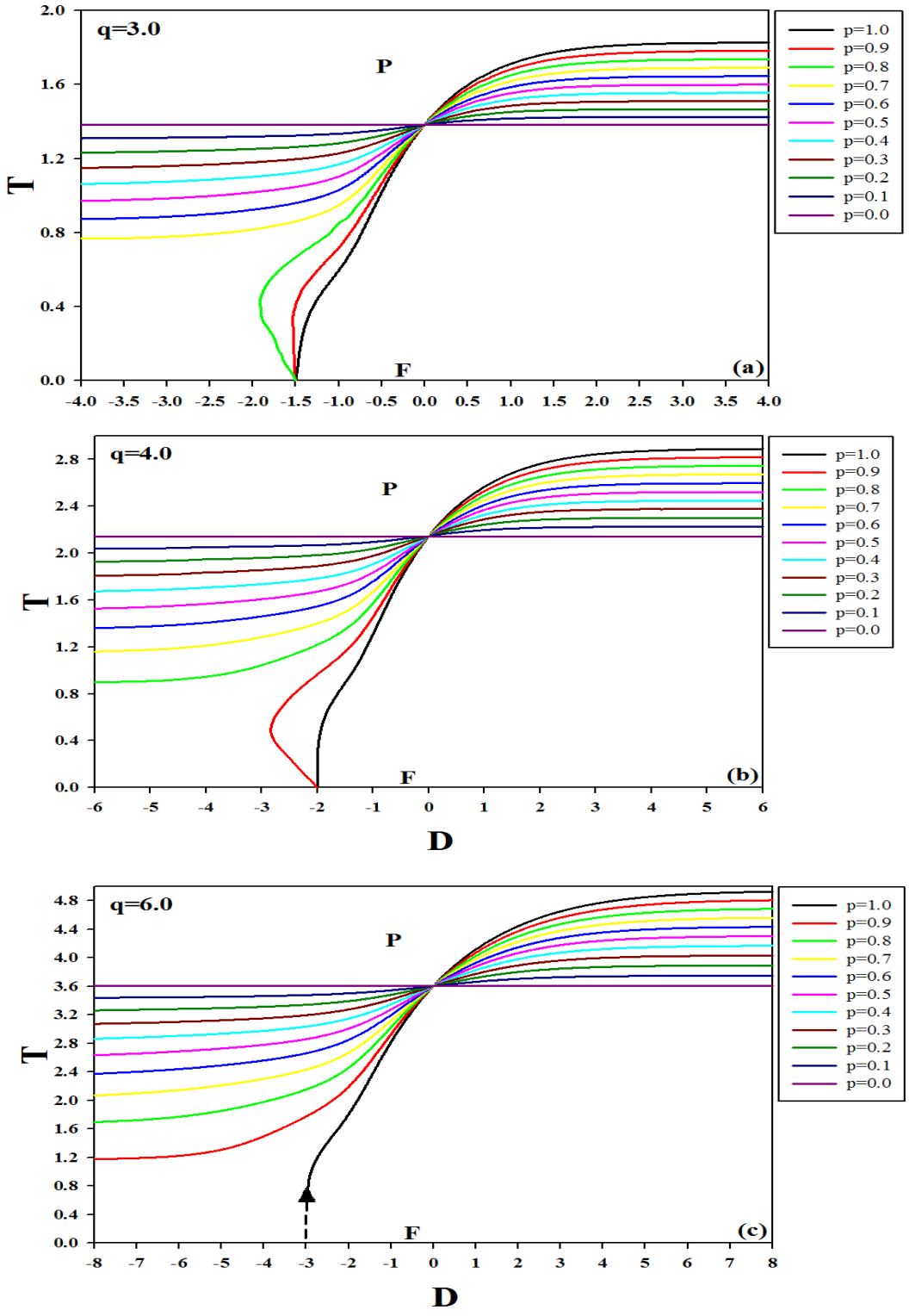
Bethe kafesi üzerinde karma spin-1/2 ve spin-2 BC Isingferrimanyetik sistem için kristal alan varlığında çeşitli sistem parametreleri kullanılarak alt örgü mıknatıslanmalarının sıcaklıkla değişimleri incelenmiş olup, modelde meydana gelen faz dönüşümlerinin doğası tespit edilmiştir. Ayrıca bu grafiklerden elde edilen veriler ışığında modelin faz diyagramları da bir sonraki bölümde ortaya konulacaktır.

4.2 Modelin Faz Diyagramları

Bu kısımda, ilgilenilen modelin faz diyagramları (D, T)düzleminde,kristal alanın Bethe kafesi üzerinde farklı dağılım ihtimaliyetleri p=0.0-1.0 aralığında 0.1 adım miktarı

artışlar için koordinasyon sayısı q=3, 4 ve 6 için verilecektir. Ayrıca modelde meydana gelen telafi sıcaklıkları da (D, T_{Telafi}) düzleminde farklı p değerleri için gösterilecektir. Buradaki amacımız kristal alanın rastgele hale getirilmesi neticesinde modelin karakteristik faz diyagramlarının nasıl etkilendiği sorusuna cevap aramaktır. Faz diyagramlarımızda sürekli çizgiler ikinci-mertebe faz dönüşümü ifade ederken, kesikli çizgiler ise birinci-mertebe faz dönüşümünü, noktalı çizgiler ise telafi sıcaklıklarını ifade etmektedir. Her bir ihtimaliyet değeri farklı renkler ile belirtilmiştir. Ayrıca içi dolu siyah üçgen üçlü kritik noktayı ifade etmektedir.

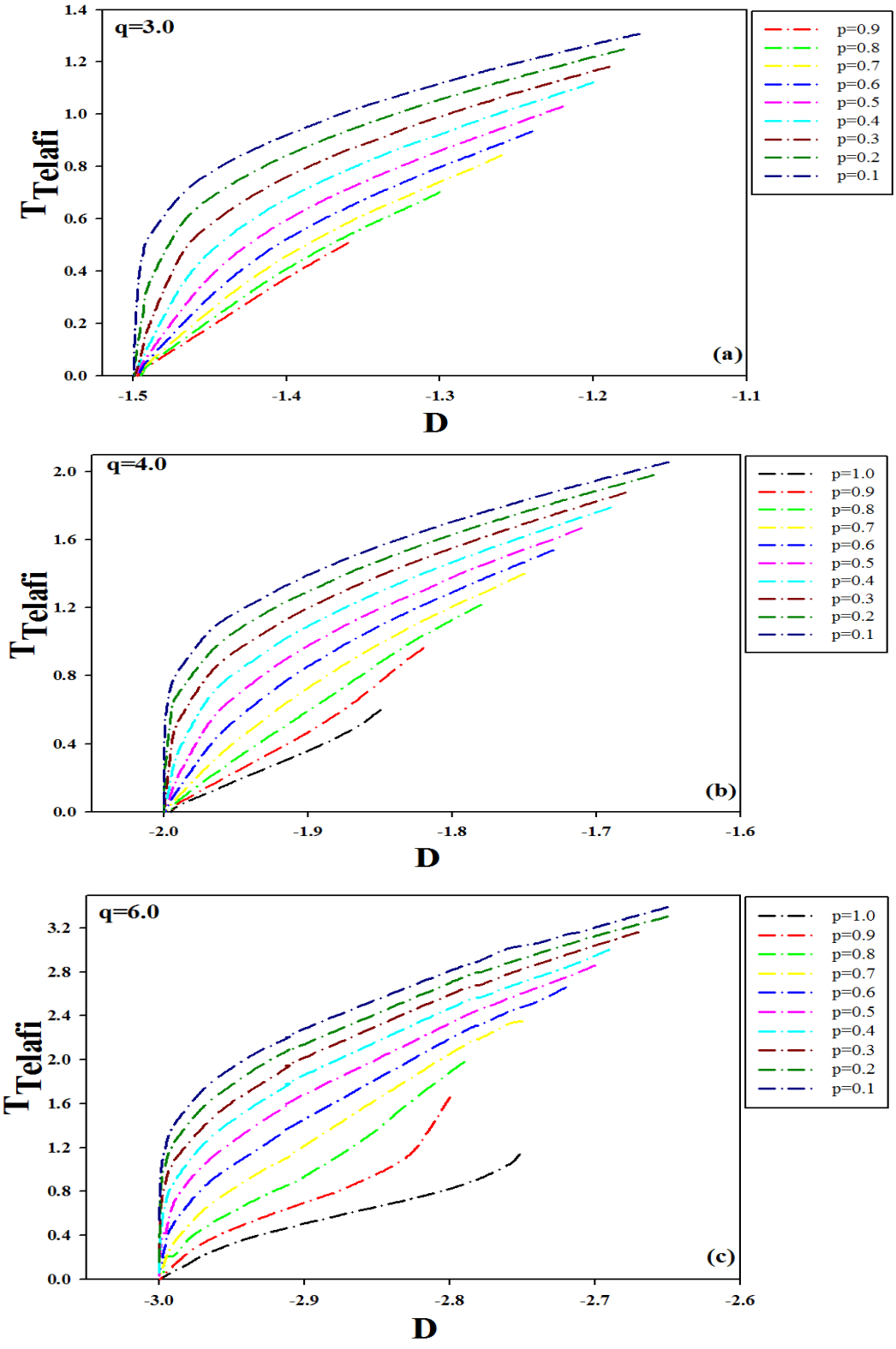
Modelimizin (D, T) düzleminde ki faz diyagramı en yakın komşu sayısı q=3, 4 ve 6 için şekil 4.8 a, b ve c de yer almaktadır. Şekillerde bütün q değerlerinde p=0.0 durumuna karşılık gelen ikinci-mertebe faz dönüşüm çizgisi görüldüğü gibi düz bir çizgiden ibarettir. Bu beklenilen bir durumdur çünkü p=0.0 durumunda kristal alan D=0.0 değerini almaktadır yani Bethe Kafesi üzerindeki bütün spinlere hiçbir etkisi bulunmamaktadır. Modelin Hamiltonyen ifadesinde ise D=0.0 alınırsa sadece J etkileşmesinin ölçeklendirme parametresi olarak kalacağı aşikarıdır. Kristal alan, p=1.0 ihtimaliyet değerinde ise tüm spinleri eşit olarak etkilemektedir. Dolaysıyla bu durum daha önce çalışılmış olan saf duruma karşılık gelmektedir (Albayrak and Yiğit 2005). İhtimaliyetin ara değerleri $0<p<1$ ise rastgele duruma karşılık gelmektedir. Burada belirtmeliyiz ki rastgele durumda bütün q değerleri için faz diyagramlarında düzenli ferrimanyetik (F) fazdan düzensiz (P) paramanyetik faz sadece ikinci-mertebe faz dönüşüm sıcaklıkları ile ayrılmaktadır. Faz diyagramları şekillerden de görüldüğü üzere iki kısma ayırabiliriz. İlk olarak $D<0$ kısmı incelendiğinde,küçük p değerleri için daha düşük negatif D değerlerinde, faz dönüşüm sıcaklık çizgilerinin daha yüksek değerlerde ortaya çıktığı görülmektedir. Fakat koordinasyon sayısı q=3 için p=0.8, p=0.9 ve q=4 için p=0.9 değerinde ikinci-mertebe faz dönüşüm çizgileri q=3 için $D\approx-1.5$ ve q=4 için $D\approx-2.0$ değerlerinde sıfır kritik sıcaklıkta ortaya çıkmaktadır. Bu son durumtıpkı saf durumdakine (p=1.0) benzerdir. Daha sonra ise kristal alan değerinin sıfıra doğru artmasıyla kritik sıcaklık değerlerinin arttığını görmekteyiz. D=0.0 değerinde ise tüm p ve q değerleri için bu kritik çizgiler birleşmektedir. Burada şekil 4.8 a ve b de, ikinci-mertebe faz dönüşüm çizgilerinin p=0.8 ve p=0.9 değerlerinde, q=4 için p=0.9 değerinde re-entrant davranış sergiledikleri görülmektedir.



Şekil 4.8. Modelin (D, T) düzleminde farklı ihtimaliyet değerler için faz diyagramları; koordinasyon sayısı a) q=3, b) q=4 ve c) q=6 için

Faz diyagramlarında ikinci kısım D>0 incelendiğinde ise, tüm ikinci-mertebe faz dönüşüm çizgileri D=0.0 da ortaya çıkmakta ve kristal alanın değeri daha da arttıkça bu kritik çizgiler daha yüksek p değerleri için daha yüksek sıcaklıklara ulaşmaktadırlar ve kristal alanın daha da artmasıyla sabit bir sıcaklıkta dengelenmektedirler. Son olarak q=6 için elde edilen faz diyagramı incelendiğinde p=1.0 saf durumda, düşük sıcaklıklarda birinci-mertebe faz dönüşüm çizgisi D≈-3.0 civarında ortaya çıkmakta ferrimanyetik fazdan paramanyetik fazı birbirinden ayırmaktadır. Kristal alanın daha da artmasıyla üçlü kritik noktada birinci-mertebe faz dönüşüm çizgisi ile ikinci-mertebe faz dönüşüm çizgisi birleşmektedir. Fakat rastgele durumda ise herhangi birinci-mertebe faz dönüşüm çizgisi ve dolaysıyla üçlü kritik noktaya rastlanmamıştır.

Son şekillerimiz ise telafisıcaklıkları, (D,T_{Telafi}) düzleminde farklı ihtimaliyet p değerleri için şekil 4.9 a, b ve c de gösterilmiştir. Şekillerden görüldüğü üzere telafi sıcaklıkları tüm q değerleri için kristal alanın çok sınırlı negatif değerlerinde ortaya çıkmaktadır. Şekillerden görüldüğü üzere telafi sıcaklık çizgileri tüm p ihtimaliyet değerleri için koordinasyon sayısı q=3, 4 ve 6 için kristal alanın sırasıyla D≈-1.5, D≈-2.0 ve D≈-3.0 değerlerinde ortaya çıkmaktadırlar. Telafi sıcaklık çizgileri, kristal alan daha düşük negatif değerlerine doğru arttıkça, daha düşük p ihtimaliyet değerleri için daha yüksek değerlere ulaşmaktadır. Rastgele durum için tüm koordinasyon sayılarında sadece bir tane telafi sıcaklığı ortaya çıkmaktadır. Şekil 4.9 a da görüldüğü üzere saf duruma karşılık gelen p=1.0 durumunda herhangi bir telafi sıcaklığı ortaya çıkmamaktadır. Koordinasyon sayısı q=6 için ise p=1.0 durumunda iki adet telafi sıcaklığı ortaya çıkarken, rastgele durumda ise sadece bir tane telafi sıcaklığı mevcuttur.



Şekil 4.8. Modelin (D, T_{Telafi}) düzleminde farklı ihtimaliyet değerler için telafi sıcaklıkları; koordinasyon sayısı a) q=3, b) q=4 ve c) q=6 için

5. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Sonuç olarak karma spin-1/2 ve spin-2 BC ferrimayetikIsing modelinin kritik davranışları rastgele kristal alan varlığındaBethe kafesi üzerinde tam tekrarlama bağıntıları kullanılarak koordinasyon sayısı q=3, 4 ve 6 için kapsamlı olarak incelenmiş oldu. Öncelikle karma spin-1/2 ve spin-2 modeli hakkında gerekli bilgiler ve bu modelüzerine şimdiye kadar yapılan çalışmalarverildi. Daha sonra ise sistemin bölüşümfonksiyonu, alt-örgümanyetizasyonlarıifadelerinin elde edilmesi için gerekli olan tekrarlama bağıntıları elde edilerek, kristal alanın rastgele hale getirilmesi işleminin nasıl yapıldığı hakkında bilgiler verildi.Elde edilen tekrarlama bağıntıları ve düzen parametrelerinin nümerik olarakiterasyon yoluyla çözülmesiylemodelin düzen parametrelerinin termal değişimleri elde edildi. Faz dönüşümlerinin doğasını anlamak için bu diyagramlar kullanıldı. Modelinmümkün faz diyagramları (D, T) düzleminde farklı ihtimaliyet (p=1.0 ile 0.0 aralığında) değerlerinde en yakın komşu sayısı q=3, 4 ve 6 için elde edildi.Daha önce saf durum ile yapılan çalışmalarda meydana gelen kritik davranışların, rastgele durumdan nasıl etkilendiği sorusuna cevaplar arandı. Şimdi kısaca tez çalışmasında elde edilen sonuçları maddeler halinde verelim.

i-Model rastgele durum da, yani ihtimaliyetin $0<p<1.0$ aralığında, koordinasyon sayısı q=3 ve 4 için tıpkı saf durumda (p=1.0) olduğu gibi,düzenli ferrimanyetik fazdan düzensiz paramanyetik faz sadece ikinci-mertebe faz dönüşüm çizgileri ile ayrılmaktadır.

ii-Koordinasyon sayısı q=6 için isesaf durumda ortaya çıkan birinci-mertebe faz dönüşüm çizgileri, kristal alanın rastgele hale getirilmesi ile yerini ikinci-mertebe faz dönüşüm çizgilerine bırakmıştır. Dolaysıyla saf durumda meydana gelen üçlü kritik nokta kristal alanın rastgele hale getirilmesi ile kaybolmuştur.

iii-Yine saf durumda modelde q=3, 4 ve 6 için herhangi bir re-entrantdavranış gözlemlenmez iken, rastgele durumda koordinasyon sayısı q=3 ve 4 için bu ilginç davranış gözlemlenmiştir.

iv- Kristal alanın rastgele hale getirilmesi, saf durumda modelde ortaya çıkan iki adet düzenli taban durumu faz konfigürasyonlarına ilave olarak yeni bir faz konfigürasyonu ortaya çıkmasına sebep olmuştur.

v- Saf durumda koordinasyon sayısı q=3 için telafi sıcaklığı meydana gelmez ikenkristal alanın rastgele hale getirilmesi ile koordinasyon sayısı q=3 için de model de telafi sıcaklığı gözlemlenmiştir.

vi- Aynı parametreler için modelde meydana gelen tüm kritik faz dönüşüm çizgileri daha yüksek koordinasyon sayısı için daha yüksek sıcaklıklarda meydana gelmiştir.

Bu tez çalışmasında elde edilen sonuçlar umarız ki bu alanda araştırma yapan araştırmacılara yol gösterici olur.

KAYNAKLAR

Albayrak, E., Keskin, M. 2002. Mixed spin-1/2and spin-1 Blume-CapelIsingferrimagneticsystem on theBethelattice.Journal of MagnetismandMagneticMaterials. 261; 196–203.

Albayrak, E. 2013.Themixed spin-1/2 and spin-1 Blume-Capel model withrandomcrystalfield on theBethelattice: Twoapproaches SolidState Communications, 159; 76-78.

Albayrak, E., Karimou, M. 2017.Random crystal field effects on themixed-Spin 1/2 and 5/2 Blume-Capel Model. InternationalJournal ofTheoreticalPhysics, 57; 715–725.

Albayrak, E., Yiğit, A. 2005.Thecriticalbehaviorsandthephasediagram of themixed spin-1/2 and spin-2 Isingsystem on theBethelattice.PhysicaStatusSolidi (b), 242; 1510-1521.

Bahmad, L.,Benayad, M.R., Benyoussef, A. and El Kenz, A. 2011. Theeffect of a randomcrystal-field on themixedIsingspins (1/2, 3/2). ActaPhysicaPolonicaA, 119; 740-746.

Benayad, N., Dakhama, A. 1997.Phasediagrams of themixedspinIsingferromagnetwith a ferrimagneticsurface.Journal of MagnetismandMagneticMaterials, 168; 105-120.

Benyoussef, A., El Kenz, A. and El Yadari, M. 2007.DecoratedferrimagneticIsing model with a randomcrystalfield. Physica B, 393; 204–212.

Blume, M. 1966.Theory of thefirst-ordermagneticphaseChange in UO2. PhysicalRewiew, 141 (2); 517-524.

Buendıa, G. M., Liendo, J. A. 1997. Monte Carlo simulation of a mixedspin 2 andspin 1/2 Isingferrimagneticsystem.Journal of Physics: CondensedMatter, 9; 5439-5448.

Buendıa, G. M., Novotny, M. A. 1997.Numericalstudy of a mixedIsingferrimagneticsystem.Journalof Physics: CondensedMatter, 9;5951-5964.

Capel H. W. 1966. On thepossibility of first-orderphasetransitions in Isingsystems of tripletionswithzerofield-splitting.Physica, 32; 966-988.

Cavaliere, A. G., Pelissetto, A. 2019.DisorderedIsing model withcorrelatedfrustration.Journal of Physics A: Mathematical andTheoretical, 52; 174002.

Coexeter, H.S.M. 1947.Non-EuclideanGeometry, University Toronto Press Toronto.

Dakhama, A. 1998.Exactsolution of a decoratedferrimagneticIsing model. Physica A, 252; 225-237.

Domb, C. 1960. On thetheory of cooperativephenomena in chystals. AdvencedPhysics, 9; 149-161.

Drissi,L.B., Zriouel, S., andNitBen Ahmed, H. 2018. Stone-Walesdefectedmolecular-basedA$Fe^{II}FeI^{III}(C_2O_4)_3$nanoribbons:Thermalandmagneticproperties.Journal of MagnetismandMagneticMaterials, 449; 328–336.

Ertaş, M., Keskin, M. 2015.Dynamicphasetransitionpropertiesforthemixedspin-(1/2,1) Ising model in an oscillatingmagneticfield.Physica B, 470-471; 76–81.

Gujrati, P. D. 1995.BetheorBethe-likelatticecalculationsaremorereliablethanconventionalmean-fieldcalculations. PhysicalRewiewLetters, 74 (5); 809-812.

Htoutou, K., Benhouria, Y., Oubelkacem, A., Ahllaamara, R. AndDrissi, L. B. 2017 a.Randomcrystalfieldeffect on hysteresisloopsandcompensationbehavior of mixedspin-(1, 3/2) Isingsystem.ChinesePhysics B, 26 (12); 127501-10.

Htoutou, K., Oubelkacem, A., Benhouria, Y., Essaoudi, I., Ainane A. AndAhuja, R. 2017 b. TheMagneticproperties of themixedferrimagneticIsingsystemwithrandomcrystalfield.Journal of SuperconductivityandNovelMagnetism, 30; 1247–1256.

Hughes, B.D., Sahim, M. 1982.Randomwalks on theBettheLattice. Journal ofStatistical Physics, 29; 781-784.

Hwang, C-O., Park, S. AndKwak, W. 2016.Study of theAntiferromagneticBlume-Capel Model on KagoméLattice.Journal of Physics: Conference Series, 750; 012016.

Iwashita, T., Uryû, N. 1983.Theeffect of theBiquadraticexchangeinteraction on theCurietemperature of themixedIsingferromagnet. PhysicsLetter, 96A (6); 311-313.

Kaneyoshi, T. 1994.Tricriticalbehavior of mixed spin-1/2 and spin-2 Isingsystem. Physica A, 205; 677-686.

Mosseri, R., Sadoc, J.F. 1982.TheBethelattice : a regulartiling of thehyperbolicplane. Journal de PhysiqueLetters, 43; 249-252.

Oubelkacem, A., Benhouria, Y., Essaoudi, I., Ainane, A. AndAhuja, R. 2018.Themagneticpropertiesandhysteresisbehaviors of themixedspin-(1/2,1) Ferrimagneticnanowire.Physica B, 549; 82-86.

Schofield, S.L., Bowers, R. G. 1980.Renormalisationgroupcalculations on a mixed-spinsystem in twodimensions.Journalof Physics A: Mathematical and General,13; 3697-3706.

Da Silva, W.P., de Arruda,P. H. Z., Tunes, T. M., Godoy,M. and de Arruda, A.S. 2017.Effects of therandomsingle-ionanisotropyandrandommagneticfield in the spin-3/2Blume-Capel model. Journal of MagnetismandMagneticMaterials,422; 367-375.

SamuelSmart, J. 1955. TheNéeltheory of ferrimagnetism:AmericanJournal of Physics, 23; 356-370.

Souza, I.J., de Arruda P. H.Z., Godoy, M., Craco, L. and de Arruda A.S. 2016.Randomcrystal-fieldeffects in a mixed spin-1 and spin-3/2 ferrimagneticIsingsystemPhysica A, 444; 589–600.

Spaldin, N. 2010. Ferrimagnetism. Inmagneticmaterials: Fundamentals and Applications. Cambridge: Cambridge UniversityPress; pp. 113-129.

Tang, K-F. 1988. Critical couplings of mixed spin-1/2-spin-S Ising model: a free-fermionapproximation.Journalof Physics A: Mathematical and General,21; L1097-L1098.

Tucker, J.W. 1999.Theferrimagneticmixedspin1/2 andspin 1 Isingsystem.Journal of MagnetismandMagneticMaterials. 195; 733-740.

Weizenmann, A., Godoy, M., de Arruda,A. S.,de Albuquerque, D. F. AndMoreno, N. O. 2007.Phasediagramandtricriticalbehavior of an Isingmetamagnet model in a trimodalrandomfield.Physica B, 398; 297–300.

Yiğit, A., Albayrak, E. 2013 a.Bimodalrandomcrystalfielddistributioneffects on theferrimagneticmixed spin-1/2 and spin-3/2 Blume–Capel model.Journal of MagnetismandMagneticMaterials, 329; 125–128.

Yiğit, A., Albayrak, E. 2013 b. Mixed spin-1/2 and spin-3/2 Ising model withrandomcrystalfielddistribution.Physica A, 392; 4216–4221.

Yiğit, A., Albayrak, E. 2017.Equalrandomcrystal field of mixed spin-1 and spin-3/2 system.Journal of SuperconductivityandNovelMagnetism, 30; 3103–3108.

Yiğit, A., Albayrak, E. 2018.Randomcrystalfieldeffects on theintegerandhalf-integermixed-spinsystem.SuperlatticesandMicrostructures, 117; 65-71.

Yousif, B. Y., Bowers, R. G. 1984. High-temperatureseriesexpansionstudies of mixed spin-1/2-spin-S Isingmodels.Journalof Physics A: Mathematical and General,17; 3389-3394.

Zahir, H., Bahlagui, T., El Kenz, A., El Bouziani, M., Benyoussef, A., Hasnaoui, A., andSbiaai, K. 2019. Monte Carlo study of themixed-spin (1/2, 2) ferrimagneticIsingsystem on a HoneycombLattice. Journal of SuperconductivityandNovelMagnetism, 32; 963–970.

Zahir, H., Hasnaoui, A., Sbiaai, K., Lafhal, A., Hachem, N., Alrajhi, A. Madani, M. and El Bouziani, M. 2018.Randomcrystal-fieldeffects in a mixed spin-1/2 and spin-2 ferrimagneticIsingsystem.ChineseJournal of Physics, 56; 1949–1963.

Zhang, S., Zhao, D. 2017.Magneticmaterialsfornuclearmagneticresonanceandmagneticresonance imagingfrom: Advances in MagneticMaterials,Processing, Properties, andPerformanceRoutledge.https://www.routledgehandbooks.com/doi/10.4324/9781315371573-4.

Ziman, J. M. 1960. Models of Disorder. Cambridge Universty Pres, Cambridge.

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı **:** Oktay BARUT

Doğum Yeri **:** ANKARA

Doğum Tarihi **:** 30/10/1973

Medeni Hali **:** EVLİ

Yabancı Dili **:** İNGİLİZCE

Adres **:**TOBB FEN LİSESİ

Tel **:** 05324976608

E-posta **:** okybarut@gmail.com

Eğitim Durumu (Kurum ve Yıl)

Lise **:** ANKARA LİSESİ (1990)

Lisans **:** GAZİ ÜNİVERSİTESİ(1997)

Çalıştığı Kurum/Kurumlar ve Yıl

MİLLİ EĞİTİM BAKANLIĞI (1997-2019)