

57222



**TRANSFER MATRİS METODUNUN  
BİLİNEER ve BİKUADRATİK DEĞİŞME  
ETKİLEŞMELİ HAMILTONİYENE SAHİP  
SPİN-1 ISING MODELİNE UYGULANMASI**

Abdullah KAPLAN

Yüksek Lisans Tezi  
FİZİK ANABİLİM DALI  
ISPARTA-1996

T.C.  
SÜLEYMAN DEMİREL ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**TRANSFER MATRİS METODUNUN  
BİLİNEER ve BİKUADRATİK DEĞİŞME  
ETKİLEŞMELİ HAMILTONİYENE SAHİP  
SPİN-1 ISING MODELİNE UYGULANMASI**

Abdullah KAPLAN

Yüksek Lisans Tezi

FİZİK ANABİLİM DALI



Prof. Dr. Ali KÖKÇE  
(Danışman)



Prof. Dr. Semiha BAHÇELİ



Yrd. Doç. Dr. Ekrem ARTUNÇ

## ÖZET

Transfer matris metodu, bilineer (J) ve bikuadratik (K) deęişim etkileşme Hamiltoniyenine sahip spin-1 Ising modeline magnetik alan yokluęunda uygulandı. Spin-1 Ising modelinin moleküler alan yaklaşımla incelenmesine alternatif olarak, transfer matris metodu ele alındı. Transfer matris metodunda düzen parametresi olan kuadrupol moment (Q) sıcaklıęın fonksiyonu olarak bulundu. Bunun sonucu olarak; Q' nun kararlı çözümleri elde edilip, faz geçişleri belirlendi. Anizotropinin ( $\frac{\Delta}{K}$ ) deęişimine baęlı olarak kuadrupol moment Q' nun sıcaklıęa baęlı olarak deęiştii görüldü. Transfer matris metoduyla elde edilen kuadrupol düzen parametresinin sıcaklıęa baęlı kararlı çözümlerinin, moleküler alan yaklaşımla elde edilen kararlı çözümlerle uygunluęu belirlendi.



## *ABSTRACT*

The transfer matrix method has been applied to spin-1 Ising model having Hamiltonian with bilinear ( $J$ ) and biquadratic ( $K$ ) variation interaction in the absence of magnetic field. Transfer matrix method has been considered as an alternative to examining of Ising model with molecular field approximation. The quadrupol moment ( $Q$ ) being order parameter in the transfer matrix method has been found to be the function of temperature. As a result, stable solutions of  $Q$  have been obtained and phase transitions have been determined. The quadrupol moment  $Q$  have been observed to change with respect to temperature in accordance with the variation of anisotropy ( $\frac{\Delta}{K}$ ). Temperature dependent stable solutions of quadrupol order parameter obtained by transfer matrix method has been determined to agree with stable solutions obtained by molecular field approximation.

## **ÖNSÖZ ve TEŞEKKÜR**

Süleyman Demirel Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı'nda yüksek lisans tezi olarak sunulan "Transfer Matris Metodunun Bilineer Değişme Etkileşmeli (J) ve Bikuadratik Değişme Etkileşmeli (K) Hamiltoniyene Sahip Spin-1 Ising Modeline Uygulanması" konulu bu çalışmada yaygın olarak kullanılan moleküler alan yaklaşımına alternatif olarak transfer matris metodu ele alınmıştır.

Çalışmada spin-1 Ising modeli ve transfer matris metodu tanıtılıp, metodun magnetik alan yokluğunda spin-1 Ising modeline uygulanması incelenmiştir.

Tüm çalışmalarım boyunca ilgi ve yardımlarını esirgemeyen değerli danışman hocam Süleyman Demirel Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü Öğretim Üyesi Prof. Dr. Ali KÖKCE ve çalışmalarına destek ve katkılarından dolayı Erciyes Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü Öğretim Üyesi Prof. Dr. Mustafa KESKİN' e teşekkürlerimi sunarım. Ayrıca yardımlarını gördüğüm Maden Mühendisliği Bölüm Başkanı Doç. Dr. Lütfullah GÜNDÜZ ve Matematik Bölümü Araştırma Görevlisi Nihat AYYILDIZ' a da teşekkürlerimi arz ederim.

## İÇİNDEKİLER

	Sayfa No:
ÖZET .....	i
ABSTRACT .....	ii
ÖNSÖZ ve TEŞEKKÜR .....	iii
İÇİNDEKİLER .....	iv
ŞEKİLLER LİSTESİ .....	v
SİMGELER LİSTESİ .....	vi
1. GİRİŞ .....	1
1.1. Ising Modellerinin Tarihçesi .....	1
1.2. Spin-1 Ising Modeli .....	1
2. MODELİN TANIMI .....	4
2.1. Modelin Tanımı .....	4
2.2. Genel Olarak Hamiltoniyeğin Yazılışı .....	5
3. METODUN TANIMI .....	8
3.1. Transfer Matris Metodunun Spin-1/2 Ising Modeline Uygulanması .....	8
4. TRANSFER MATRİS METODUNUN MAGNETİK ALAN YOKLUĞUNDA SPİN-1 ISING MODELİNE UYGULANMASI .....	12
5. SONUÇLAR VE TARTIŞMA .....	16
KAYNAKLAR .....	26
ÖZGEÇMİŞ .....	28

## ŞEKİLLER LİSTESİ

	Sayfa No:
Şekil 3.1. Tek Boyutta Ising Örgüsünün Topolojisi.....	8
Şekil 4.1. $\frac{\Delta}{K} = 2$ için Q' nun sıcaklığa göre değişimi.....	16
Şekil 4.2. $\frac{\Delta}{K} = 1.6$ için Q' nun sıcaklığa göre değişimi.....	17
Şekil 4.3. $\frac{\Delta}{K} = 1.346$ için Q' nun sıcaklığa göre değişimi.....	18
Şekil 4.4. $\frac{\Delta}{K} = 1.34$ için Q' nun sıcaklığa göre değişimi.....	19
Şekil 4.5. $\frac{\Delta}{K} = \frac{4}{3}$ için Q' nun sıcaklığa göre değişimi.....	20
Şekil 4.6. $\frac{\Delta}{K} = 1.2$ için Q' nun sıcaklığa göre değişimi.....	21
Şekil 4.7. $\frac{\Delta}{K} = 0.8$ için Q' nun sıcaklığa göre değişimi.....	22
Şekil 4.8. $\frac{\Delta}{K} = -0.4$ için Q' nun sıcaklığa göre değişimi.....	23

## SİMGELER LİSTESİ

E	Şekillenim enerjisi
F	Helmoltz Serbest Enerjisi
H	Magnetik alan
H <sub>3</sub>	Üçüncü dereceden magnetik pertürbasyon
<ij>	En yakın spin çifti
J	Bilineer değişme etkileşme sabiti
J <sub>ij</sub>	Spinler arasındaki 'Değiş-Tokuş' enerjisi
K	Biküadratik değişme etkileşme sabiti
k	Boltzmann sabiti
k <sub>ij</sub>	İki spin arasındaki 'Coulomb' enerjisi
N	Örgü nokta sayısı
Q	Kuadrupol moment
S	Miknatislanma
T	Transfer Matris
T	Sıcaklık
X <sub>i</sub>	İç nokta veya durum değişkenleri
X <sub>1,2,3</sub>	Özvektörler
Z	Bölüşüm fonksiyonu
$\beta$	1/kT
$\Delta$	Anizotropi
$\epsilon$	Etkileşme enerji sabiti
$\lambda_{1,2,3}$	Özdeğerler
$\tau$	kT/K



## 1. GİRİŞ

### 1.1. Ising modellerinin tarihçesi

Birçok fiziksel kooperatif olayların termodinamik özelliklerinin açıklanması, spin-1 Ising modeli kullanılarak yapılmaktadır. Örneğin; donma, magnetik düzenlilik, faz dönüşümleri, düzenli ve düzensiz geçişler, ikili ve üçlü akışkanların incelenmesi v.b.leridir.

En basit Ising modeli olan spin-1/2 Ising modelini Lenz ilk defa 1920 yılında, ferromagnetizma problemi için öğrencisi Ising'e önerdi. Ising bu modeli 1925 yılında yayınladı ve böylece model Ising adıyla anılmaya başlandı. Ising, spin-1/2 için tek boyuttaki çözümünü yaptı. Çözümün sonucunda modelin ferromagnetik özellik göstermediğini gördü.

Heisenberg, 1928 yılında ferromagnetizma için kendi teorisini ortaya koydu. Böylece bir süre ferromagnetizma olayının incelenmesi Heisenberg modeli ile açıklandı. Daha sonra Gorsky düzenli, düzensiz geçişler için istatistik bir teori kurmaya çalıştı ve bu teori 1934 yılında Bragg-Williams tarafından geliştirildi. Bu çalışmalar sonunda "Ising Modelinin Sıfıncı Yaklaşımı" olarak bilinen Bragg-Williams yaklaşımına dönüştü. Bir yıl sonra bu yaklaşım Bethe tarafından daha da geliştirilerek "Ising Modelinin Birinci Yaklaşımı" olarak bilinen Bethe-Peierls yaklaşımını ortaya koydu.

1941 yılında Kramers ve Wannier matris metodunu spin-1/2 Ising modeline uyguladılar. Daha sonra 1944 yılında Onsager, magnetik alan yokluğunda iki boyutlu Ising modelinin tam çözümünü başardı. Fakat bu çözüm magnetik alanın var olduğu durumlarda yetersiz kaldı [1]. Ising modeli ile çalışmalarda kullanılan metodlardan birisi transfer matris metodudur. Diğerleri ise; Kümesel Değişim Metodu, Monte Carlo, Renormalizasyon, Etkin Alan Teorisi v.b. metodlardır.

### 1.2. Spin-1 Modeli

En genel Hamiltoniyenli spin-1 Ising modeli, Blume-Emery -Griffiths modeli [2] olarak da bilinir. En yakın komşu çifti için etkileşme Hamiltoniyeni;

$$H = -H \sum_{j=1}^N S_j + \Delta \sum_{j=1}^N S_j^2 - J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H_3 \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j (S_i + S_j) - K \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 \quad (1.1)$$

formülü ile verilir [3]. Burada N, örgü nokta sayısını; H, S' den dolayı gelen magnetik alanı;  $\Delta$ , anizotropiyi; J, bilineer değişim etkileşme sabitini, K; bikuadratik değişim etkileşme

sabitini ve  $H_3$  ise üçüncü dereceden magnetik pertürbasyonu göstermektedir. Bu Hamiltoniyene  $Q'$  dan dolayı gelen magnetik alan ve dış magnetik alan da eklenebilir.

Chen ve Levy [4]  $J$  ve  $K$  etkileşme sabitli Hamiltoniyeni kullanarak spin-1 Ising modelinin moleküler alan yaklaşımı ile çözümü üzerinde ilk defa çalışanlar arasında bulunmaktadır. Chen ve Levy bu çalışmalarında değişik simetrikli Hamiltoniyenler kullanıp, çeşitli düzen tipleri ve faz dönüşümlerini incelemişlerdir. Keskin ve Meijer [5] ise, aşırı soğutma olayını açıklayabilmek için  $J$  ve  $K$  etkileşme sabitli spin-1 Ising modelini kullanmışlardır. Daha sonra Keskin [6], dış magnetik alanın etkisini de göz önüne alarak aşırı soğutma olayını açıklayabilmek için spin-1 Ising modelini kullanmıştır. Her iki çalışmada da spin-1 Ising modelinin bazı özel durumları için, dengeli ve dengesiz davranışlar incelenmiştir. Bu incelemeler yapılırken, dengeli durum davranışı için kapalı form yaklaşım metodlarından [7] olan en düşük yaklaşımlı kümesel değişim metodu [8] ve dengesiz davranış için yol ihtimaliyet metodu [9] kullanılmıştır.

Harris [10], spin-1 Ising modelinin Monte Carlo simülasyon hesaplarını yarıkararlı (metastable) durumlar hakkında bilgi edinmek için yapmıştır. Spin-1 Ising modelinin renormalizasyon grup çalışmaları, Krinsky ve Furman [11] tarafından ve daha sonra ise daha kapsamlı bir şekilde Berker ve Wortis [12] tarafından yapılmıştır. Chen ve Joseph [13] ile Oitmaa [14, 15], Spin-1 Ising modelinin yüksek sıcaklıkta seviye açma çalışmalarını yapmışlardır.

Modelin örgü gaz tarzı çözümleri ise, Lajzerowicz ve Sivardiere [16] tarafından yapılmıştır. Sistemin Ising Hamiltoniyeni, yoğunlaşma ve katılmasında rol oynayan kuadropolar ve dipolar etkileşmeleri içine alır. Bu çalışmada moleküler alan yaklaşımı kullanılmıştır. Daha sonra Sivardiere ve Lajzerowicz [17] ikili bir sıvıdaki faz ayrılması ve yoğunlaşmanın tarifi için spin-1 örgü gaz modelini kullanmışlardır. Yine Sivardiere ve Lajzerowicz [18] bu seri çalışmalarının sonucunda, ikili bir sıvının davranışını sergilemek için kullandıkları spin-1 örgü gaz modelini, sabit bir basınçta tutulan üçlü bir sıvının davranışını göstermek için de kullanmışlardır. Modelin kapsamlı faz diyagramları da Furman ve arkadaşları [19] tarafından verilmiştir. Son zamanlarda Lawrie ve Sarbash [20] da üçlü kritik noktaların incelenmesinde spin-1 Ising modelini kullanmışlardır. Keskin ve Meijer [21] ise, ikili etkileşmeyi göz önüne alarak  $J$  ve  $K$  Hamiltoniyenli spin-1 modelinin dengeli ve dengesiz davranışını kapsamlıca incelemişlerdir. Kararlı durum çözümleri yanında, birçok teorik ve deneysel çalışmada çok önemli rol oynayan, örneğin; basit akışkanlarda, ikili

alaşımlarda, ikili akışkanlarda, jellerde, yarı iletkenlerde, lazerlerde, süper iletkenlerde, minerallerde, düzenli ve düzensiz sistemlerde v.b. yarı kararlı ve kararsız çözümleri de elde etmişlerdir. Chakraborty ve Morita [22], spinlerin dipolar ve kuadropolar olarak etkileştiklerini göz önüne alarak, J ve K etkileşmeli spin-1 Ising modelinin Bethe örgüsü üzerine incelemiştir. Keskin ve Özgan [23], bilineer ve bikuadratik spin-1 Ising modelinin kararlı, yarı kararlı ve kararsız çözümlerini, çiftlenim oranı küçük olduğu durumlar için, serbest enerji yüzeylerini kullanarak elde etmişlerdir. Spin-1 Ising modeliyle ilgili birçok çalışmalar yapılmıştır. Burada tez ile daha çok ilgisi olan araştırmalara yer verilmiştir.

Bu tezde amaç, magnetik alan yokluğunda ( $H=0$ ) transfer matris metodunun spin-1 Ising modeline uygulanmasıdır[24]. Bu bilgilerden sonra Bölüm II' de Ising modelinin tanımı ve genel olarak Hamiltoniyenin yazılışı açıklandı. Bölüm III' de transfer matris metodunun spin-1/2 Ising modeline uygulanışı anlatıldı. Bölüm IV' de transfer matris metodu spin-1 Ising modeline uygulanarak ele alınan sistemin kararlı bölge çözümleri elde edilip, faz geçişleri belirlendi. Bölüm V' de ise bütün bu olayların sonuçları değerlendirildi.

## 2. MODELİN TANIMI

### 2.1. Modelin Tanımı

Spin-1 Ising modeli, üç durumlu ve iki düzen parametrelili bir sistemdir. Burada söz konusu edilen düzen parametrelerinin her ikisi de uzun menzil düzen parametresidir. Söz konusu edilen üç durum ise, sistemdeki her bir spin durumlarının ortalama kesirsel değerini gösterir ve  $X_1$ ,  $X_2$  ve  $X_3$  ile gösterilir. Bu  $X_i$ ' ler *iç nokta* veya *durum değişkenleri* diye adlandırılır. Sistemdeki spin ortalama değerleri +1, 0, -1 dir. Burada  $X_1$ , spin ortalama kesirsel değerinin +1 olma ihtimalini;  $X_2$ , spin ortalama kesirsel değerinin 0 olma ihtimalini ve  $X_3$  ise spin ortalama kesirsel değerinin -1 olma ihtimalini gösterirler.  $X_i$ ' ler normalizasyon şartına uyacaklarından,

$$\sum_{i=1}^3 X_i = 1 \quad (2.1)$$

şeklinde yazılır.

Modeldeki iki düzen parametresi ise:

1)  $S$ , ortalama mıknatıslanmadır ki, bir tarafa yönelmenin diğer tarafa yönelmeden daha fazla olmasını gösterir ve magnetik dipol momenti diye de adlandırılır.

2)  $Q$ , kuadrupol momentidir ve mıknatıslanmanın karesinin ortalamasının  $\langle S^2 \rangle$  çizgisel bir fonksiyonudur ve matematiksel olarak aşağıdaki gibi tanımlanır;

$$\langle Q \rangle = 3\langle S^2 \rangle - 2 \quad (2.2)$$

Sistemin sahip olduğu bu uzun menzil parametrelerinin  $X_i$  iç değişkenleri cinsinden değerleri;

$$\begin{aligned} S &\equiv \langle S \rangle = X_1 - X_3 \\ Q &= \langle Q \rangle = X_1 - 2X_2 + X_3 \end{aligned} \quad (2.3)$$

şeklinde hesaplanır. (2.1) ve (2.3) denklemlerini kullanarak iç değişkenler düzen parametreleri cinsinden,

$$\begin{aligned} X_1 &= \frac{1}{3} + \frac{1}{2}S + \frac{1}{6}Q \\ X_2 &= \frac{1}{3}(1 - Q) \end{aligned}$$

$$X_3 = \frac{1}{3} - \frac{1}{2}S + \frac{1}{6}Q \quad (2.4)$$

şeklinde elde edilir. Böylece bu dönüşümlerle spin ortalama kesirsel değerleri uzun menzil düzen parametreleri cinsinden ifade edilmiş olur. İncelenen sistemin Hamiltoniyeni ise Denklem (1.1)'de  $H=H_3=\Delta=0$  alınarak,

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - K \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 \quad (2.5)$$

bulunur. Burada J, komşu moleküller arasındaki itme enerjisini gösteren keyfi bilineer değişim etkileşme sabitidir. K ise bikuadratik değişim etkileşme sabitidir.  $\langle ij \rangle$  sembolü en yakın komşu spin çifti anlamına gelir.

Bu Hamiltoniyende;

$J > 0$  için, en düşük enerji seviyesine sahip bütün spinler aynı yönde ve yukarı doğru olup en düşük enerji seviyesine sahiptir, yani sistem ferromagnetik bir karakter gösterir. Sistem, magnetik alan "sıfır" olduğu zaman  $J < 0$  için düşük sıcaklıkta antiferromagnetik bir karaktere sahiptir.

## 2.2. Genel Olarak Hamiltoniyenin Yazılışı

Faz geçişine uğrayan sistemlerin çoğu örgü düzenlenimleri bakımından komşu noktaların durumlarının şekline bağlı olan en yakın komşu etkileşmesiyle ifade edilirler. Bu tür bir model, verilen problemlerin istatistik niteliklerini bozmadan temsil ettiği fiziksel sistemi önemli ölçüde basitleştirir.

İnceleyeceğimiz sistemde örgü noktalarındaki her atomun spinlerini  $s = \pm \frac{1}{2}$  alalım.

Bu model önce magnetizmaya uygulansın. Bunun için N tane örgü noktasının her birinin, uzayda  $(2J+1)$  kesikli yönelebilen, büyüklüğü de  $(g\mu_B J)$  olan bir magnetik momentine sahip bir atom tarafından doldurulduğunu düşünelim. Böylece tüm örgü için  $(2J+1)^N$  konfigürasyonu vardır.  $J = \frac{1}{2}$  ile uyumlu olması elektronların yörünge hareketi ile değil sadece spinleri ile ilgili olduğunu göstermektedir. Bundan dolayıdır ki tüm örgü için  $2^N$  tane konfigürasyon mevcuttur. Basitlik için  $\frac{1}{2}$  spinli atomlar ele alınacaktır. Dolayısıyla örgü noktalarındaki her atom "yukarı" ve "aşağı" olmak üzere iki yönde yönelebilir.

$N=1$  için  $2^N=2^1=2$  (iki farklı konfigürasyon vardır)

↑ ↓  
I. II.

$N=2$  için  $2^N=2^2=4$  (Dört farklı konfigürasyon vardır)

↑↓ ↓↑ ↑↑ ↓↓  
I. II. III. IV.

Şimdi  $S_i$  ve  $S_j$  komşu spin çifti arasındaki etkileşme enerjisini düşünelim. Kuantum mekaniğine göre bu enerji  $K_{ij} \pm J_{ij}$  şeklindedir. Eğer komşu spinler "Paralel" ise yani  $S=1$  iken etkileşme enerjisi;

$$E_{\uparrow\uparrow} = K_{ij} - J_{ij} \quad (2.6)$$

olur. "Antiparalel" durumda ise yani  $S=0$  iken etkileşme enerjisi;

$$E_{\uparrow\downarrow} = K_{ij} + J_{ij} \quad (2.7)$$

olacaktır. Burada  $K_{ij}$ ; iki spin arasındaki "COULOMB" enerjisi,  $J_{ij}$ ; spinler arasındaki "DEĞİŞ-TOKUŞ" enerjisidir.

Etkileşme enerjileri farkları ise;

$$E_{\uparrow\uparrow} - E_{\uparrow\downarrow} = K_{ij} - J_{ij} - K_{ij} - J_{ij}$$

$$E_{\uparrow\uparrow} - E_{\uparrow\downarrow} = -2J_{ij} \quad (2.8)$$

bulunur. Bu durumda komşu spinlerin etkileşme enerjisi için;

$$E_{\uparrow\uparrow} - E_{\uparrow\downarrow} = -2J_{ij}$$

denklemindeki enerji farkı ile uyumlu olan şu denklem yazılır;

$$E_{ij} = -2J_{ij} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) \quad (2.9)$$

İki spinin uzaklaşmasında  $J_{ij}$  hızla küçüleceğinden, ilk yaklaşımda sadece en yakın komşu çiftleri göz önüne alınır. Diğerleri için  $J_{ij}$  ihmal edilebilir. Böylece örgünün etkileşme enerjisi;

$$E = -2J \sum_{\langle ij \rangle} (S_i \cdot S_j) \quad (2.10)$$

elde edilir.

Hesaplamalarda kolaylık için, örgünün etkileşmesi başka bir ifadeyle "yukarı" bir spin için +1, "aşağı" bir spin için -1 değerini alan  $S_i$ ,  $S_j$  spin değişkenleri kullanılarak şöyle yazılır;

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (2.11)$$

Bu ifade enerji farkı denklemini ile uyumludur. Bu son yazdığımız enerji ifadesini esas alan model ferromagnetizmanın “ISING MODELİ” olarak bilinir.

$E_{\uparrow\uparrow} - E_{\uparrow\downarrow} = -2J_{ij}$  bağıntısına göre  $J > 0$  ise, eşitliğin sağ tarafı negatif olur. Sağ tarafın negatif olabilmesi için  $E_{\uparrow\uparrow}$  enerjisinin  $E_{\uparrow\downarrow}$  enerjisinden küçük olması gerekir. Buna göre bir sistemin her zaman düşük enerjili durumu tercih edeceğinden spinler “Paralel” ( $\uparrow\uparrow$ ) veya ( $\downarrow\downarrow$ ) halinde bulunurlar. Böylece “FERROMAGNETİZMA” ortaya çıkar.

$E_{\uparrow\uparrow} - E_{\uparrow\downarrow} = -2J_{ij}$  bağıntısına göre  $J < 0$  ise, eşitliğin sağ tarafı pozitif olur. Sağ tarafın pozitif olabilmesi için  $E_{\uparrow\uparrow}$  enerjisinin  $E_{\uparrow\downarrow}$  enerjisinden büyük olması gerekir. Buna göre, bir sistem daima düşük enerjili durumu tercih edeceğinden spinler “Antiparalel” ( $\uparrow\downarrow$ ) halinde bulunurlar. Böylece “ANTİFERROMAGNETİZMA” ortaya çıkar.

Paralel ve Antiparalel hallerin etkileşme enerjisini tek bir ifade ile belirtelim.  $S_i$  ve  $S_j$  spinlerinin skaler çarpımından;

$$S_i \cdot S_j = \left(\frac{1}{2}\right) [(S_i + S_j)^2 - S_i^2 - S_j^2] \quad (2.12)$$

$$S_i \cdot S_j = \left(\frac{1}{2}\right) S(S+1) - S(S+1) \quad (2.13)$$

olarak elde edilir. Bu ifadenin, sonuçları nitel olarak etkilemeyeceği düşünülerek; Ising modelinde şu kabul ve yaklaşımlar yapılmıştır;

1) Faz geçişi olaylarının temelde atomlar arasındaki etkileşme enerjilerinin bir sonucu olduğu düşünülerek örgü noktaları ile ilgili olan atomların kinetik enerjileri ihmal edilmiştir.

2) Etkileşme enerjisi en yakın komşuların etkileşmeleri göz önüne alınmış, diğer etkileşmelerden gelecek katkılar ihmal edilmiştir.

### 3.METODUN TANIMI

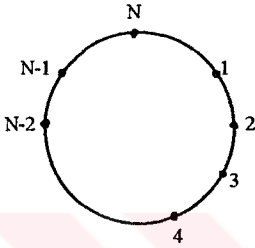
#### 3.1.Transfer Matris Metodunun Spin-1/2 Ising Modeline Uygulanması

Tek boyutta Ising modeli, her bir spinin iki en yakın komşusu ile ve bir dış. magnetik alan ile etkileştiği N spinli bir zincirdir.

$\{S_1, S_2, S_3, \dots, S_N\}$  ile belirtilen konfigürasyon enerjisi;

$$E_I = - \epsilon \sum S_k S_{k+1} - H \sum S_k \quad (3.1)$$

dir. (Burada I indisi Ising' i ifade etmektedir).



Şekil-3.1. Tek boyutta Ising örgüsünün topolojisi

Şekil-3.1' de görüldüğü gibi, zincirin topolojisini bir daire olarak düşünersek;  $S_{N+1} = S_1$  şeklinde sınır şartımız olur.

Hamiltoniyen ifadesine göre sistemin bölüşüm fonksiyonu;

$$Z_I = \sum_{S_1} \sum_{S_2} \dots \sum_{S_N} \exp \left[ \beta \sum_{k=1}^N (\epsilon S_k S_{k+1} + H S_k) \right] \quad (3.2)$$

şeklinde ifade edilir.

Periyodik sınır şartının kullanılması ile (3.2) ifadesine eşdeğer olarak bölüşüm fonksiyonu;

$$Z_I(H, T) = \sum_{S_1} \sum_{S_2} \dots \sum_{S_N} \exp \left[ \beta \sum_{k=1}^N (\epsilon S_k S_{k+1} + \frac{1}{2} H (S_k + S_{k+1})) \right] \quad (3.3)$$

olarak elde edilir. Şimdi öyle bir  $(2 \times 2)$  tipinde bir T matrisi tanımlayalım ki bu matrisin elemanları;

$$\langle S|T|S' \rangle = \exp \left[ \beta (\epsilon S S' + \frac{1}{2} H (S + S')) \right] \quad (3.4)$$

ile verilsin. Burada S ve S' bağımsız olarak  $\pm 1$  değerlerini alabilir. Biz elemanları (3.4) ile verilen T matrisini tanımlıyoruz. Zira (3.2) ifadesinde bölüşüm fonksiyonundaki üstel terim en yakın komşu spinleri içeren terimler cinsinden açılırsa;



$$Z_I(H, T) = \sum \dots \sum \langle S_1 | T | S_2 \rangle \langle S_2 | T | S_3 \rangle \dots \langle S_N | T | S_1 \rangle \quad (3.5)$$

formunda bir açılım elde edilir ki, bu ise  $(2 \times 2)$  tipinde bir matris elemanlarının çarpımı olarak gözükmemektedir.

Şimdi;

$$\langle S | T | S' \rangle = \exp \left[ \beta (\epsilon S S' + \frac{1}{2} H (S + S')) \right] \quad (3.6)$$

matris elemanlarını açık olarak yazalım.

$$T_{11} = \langle +1 | T | +1 \rangle = \exp \left[ \beta (\epsilon \cdot 1 \cdot 1 + \frac{1}{2} H (1 + 1)) \right] = \exp [\beta (\epsilon + H)] \quad (3.7)$$

$$T_{12} = \langle +1 | T | -1 \rangle = \exp \left[ \beta (\epsilon \cdot 1 \cdot (-1) + \frac{1}{2} H (1 - 1)) \right] = \exp [-\beta \epsilon] \quad (3.8)$$

$$T_{21} = \langle -1 | T | +1 \rangle = \exp \left[ \beta (\epsilon (-1) \cdot 1 + \frac{1}{2} H (-1 + 1)) \right] = \exp [-\beta \epsilon] \quad (3.9)$$

$$T_{22} = \langle -1 | T | -1 \rangle = \exp \left[ \beta (\epsilon (-1) \cdot (-1) + \frac{1}{2} H (-1 - 1)) \right] = \exp [\beta (\epsilon - H)] \quad (3.10)$$

Buna göre matrisimiz,

$$T = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix}$$

olur. 1 indisi  $+1$ ' i, 2 indisi  $-1$ ' i göstermek üzere,

$$T = \begin{bmatrix} \langle +1 | T | +1 \rangle & \langle +1 | T | -1 \rangle \\ \langle -1 | T | +1 \rangle & \langle -1 | T | -1 \rangle \end{bmatrix}$$

olarak yazılabilir.  $T_{ij}$ ' lerin (3.7)-(3.10) tanımları göz önüne alınarak,

$$T = \begin{bmatrix} \exp \beta (\epsilon + H) & \exp -(\beta \epsilon) \\ \exp -(\beta \epsilon) & \exp \beta (\epsilon - H) \end{bmatrix} \quad (3.11)$$

şeklinde elde edilir. Bu T matrisine *transfer matrisi* denir.

(3.5) ifadesine göre  $S'$  ler üzerinden toplam alırsak matris cebiri kurallarına göre ve periyodik sınır şartından dolayı ( $S_{N+1} = S_1$ ),

$$Z_I = \sum_{S_1} \langle S_1 | T^N | S_1 \rangle = \text{Tr } T^N \quad (3.12)$$

olur. Şimdi  $X_1$  ve  $X_2$ , T'nin özvektörleri,  $\lambda_1$  ve  $\lambda_2$  de sırasıyla bunların özdeğerleri olsun.

Buradan,

$$TX_j = \lambda_j X_j, \quad j=1,2,3,\dots \quad (3.13)$$

yazılır. Sütun vektörleri  $X_1$  ve  $X_2$  olan bir  $V$  matrisi tanımlayalım. Yani,  $V=(X_1, X_2)$  olsun.

Şimdi de  $TX_j = \lambda_j X_j$  ifadesinden  $TV'$  yi yazalım.

$$TV = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} V \quad (3.14)$$

olur.

$T$ , simetrik bir matris olduğundan  $X_1$  ve  $X_2$  ortogonal ve lineer bağımsız seçilebilmelidir.  $V$ ,  $V^{-1}$  inversine sahip bir matristir. (3.14) denklemini  $V^{-1}$  ile çarpılırsa,

$$T = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \quad (3.15)$$

elde edilir.  $Z = \int Z T^N$  olduğu göz önüne alındığında

$$Z_1(H, T) = \int Z \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix}^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N \quad (3.16)$$

olarak elde edilir. O halde şimdi  $Z_1'$  'yı yazmak için  $\lambda_1 = \lambda_+$  ve  $\lambda_2 = \lambda_-$  nin ne olduğuna bakalım. Bunun için  $TX_j = \lambda_j X_j$  denklem takımının çözümü olabilmesi için katsayılar determinantı sifira eşitlenmelidir.

$$\det|T - \lambda I| = 0 \quad (3.17)$$

$$\begin{vmatrix} e^{\beta(\epsilon+H)} - \lambda & e^{-\beta\epsilon} \\ e^{-\beta\epsilon} & e^{\beta(\epsilon-H)} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (3.18)$$

$$(e^{\beta(\epsilon+H)} - \lambda)(e^{\beta(\epsilon-H)} - \lambda) - e^{-2\beta\epsilon} = 0 \quad (3.19)$$

$$e^{2\beta\epsilon} - \lambda e^{\beta(\epsilon+H)} - \lambda e^{\beta(\epsilon-H)} \lambda^2 - e^{-2\beta\epsilon} = 0 \quad (3.20)$$

$$e^{2\beta\epsilon} - e^{-2\beta\epsilon} - \lambda e^{\beta\epsilon} [e^{\beta H} + e^{-\beta H}] + \lambda^2 = 0 \quad (3.21)$$

$\sinh x$  ve  $\cosh x$  açılımları yapılırsa;

$$2\sinh(2\beta\epsilon) - 2\lambda e^{\beta\epsilon} \cosh(\beta H) + \lambda^2 = 0 \quad (3.22)$$

$$\lambda^2 - 2\lambda e^{\beta\epsilon} \cosh(\beta H) + 2\sinh(2\beta\epsilon) = 0 \quad (3.23)$$

$ax^2+bx+c=0$  tipinde bir denklem olduğundan,

$$\lambda_{1,2} = \frac{-b \pm [b^2 - 4ac]^{1/2}}{2a} \quad (3.24)$$

den,

$$\lambda_{1,2} = \frac{2e^{\beta\epsilon} \cosh(\beta H) \pm \left[ 4e^{2\beta\epsilon} \cosh^2(\beta H) - 8\sinh(2\beta\epsilon) \right]^{1/2}}{2}$$

$$\lambda_{1,2} = e^{\beta\epsilon} \cosh(\beta H) \pm \left[ e^{2\beta\epsilon} \cosh^2(\beta H) - 2\sinh(2\beta\epsilon) \right]^{1/2}$$

$$\lambda_{1,2} = e^{\beta\epsilon} \left[ \cosh(\beta H) \pm (\cosh^2(\beta H) - 2e^{-2\beta\epsilon} \sinh(2\beta\epsilon)) \right]^{1/2} \quad (3.25)$$

olur ki;

$$\lambda_+ = e^{\beta\epsilon} \left[ \cosh(\beta H) + (\cosh^2(\beta H) - 2e^{-2\beta\epsilon} \sinh(2\beta\epsilon))^{1/2} \right] \quad (3.26)$$

$$\lambda_- = e^{\beta\epsilon} \left[ \cosh(\beta H) - (\cosh^2(\beta H) - 2e^{-2\beta\epsilon} \sinh(2\beta\epsilon))^{1/2} \right] \quad (3.27)$$

elde edilir.  $\lambda$  köklerinin bu değerleri Denklem (3.16)' da yerine yazıldığında,

$$Z_1(H, T) = \lambda_+^N \left[ 1 + (\lambda_- / \lambda_+)^N \right] \quad (3.28)$$

elde edilir. Her iki tarafın logaritması alınacak olursa,

$$\ln Z_1(H, T) = N \left[ \ln \lambda_+ + \ln \left( 1 + (\lambda_- / \lambda_+)^N \right) \right] \quad (3.29)$$

$$\frac{1}{N} \ln Z_1(H, T) = \ln \lambda_+ + \ln \left[ 1 + (\lambda_- / \lambda_+)^N \right] \quad (3.30)$$

olur.  $\lambda_+ > \lambda_-$  olduğu göz önüne alındığında,  $N \rightarrow \infty$  için  $[\lambda_- / \lambda_+]^N$ ' in sifira gittiği görülecektir. Bu durumda,

$$\frac{1}{N} \ln Z_1(H, T) = \ln \lambda_+ + \ln 1$$

olur ve  $\ln 1 = 0$  olduğundan denklemimizi şu şekilde yazabiliriz;

$$\frac{1}{N} \ln Z_1(H, T) = \ln \lambda_+ \quad (3.31)$$

Böylece spin başına Helmholtz serbest enerjisi;

$$\frac{1}{N} F_1(H, T) = -kT \ln Z_1(H, T) \quad (3.32)$$

ifadesinde  $\lambda_+$  nın değerinin yerine konmasıyla,

$$\frac{1}{N} F_1(H, T) = -kT \ln \left[ e^{\beta\epsilon} (\cosh(\beta H) + \cosh^2(\beta H) - 2e^{-2\beta\epsilon} \sinh(2\beta\epsilon))^{1/2} \right] \quad (3.33)$$

elde edilir.

#### IV. TRANSFER MATRİS METODUNUN MAGNETİK ALAN YOKLUĞUNDA SPİN-1 ISING MODELİNE UYGULANMASI.

Tek Boyutta Ising Modeli, her bir spinin iki en yakın komşusu ile ve bir dış magnetik alan ile etkileştiği N spinli bir zincirdir. En yakın komşu çifti için etkileşme Hamiltoniyeni,

$$H = -\sum_{n=1}^N [JS_n S_{n+1} + KS_n^2 S_{n+1}^2 - \Delta S_n^2 + HS_n^2] \quad (4.1)$$

ile verilirse; Burada N; spin sayısını,  $S_n; +1, 0, -1$  spin ortalama değerlerini, H; S' den dolayı gelen magnetik alanı,  $\Delta$ ; Anizotropiyi J; Bilineer değişim etkileşme sabitini ve K' da bikuadratik değişim etkileşim sabitini göstermektedir.

Magnetik alan yokluğunda (H=0) Hamiltoniyen,

$$H = -\sum_{n=1}^N [JS_n S_{n+1} + KS_n^2 S_{n+1}^2 - \Delta S_n^2] \quad (4.2)$$

olarak yazılır. Hamiltoniyen için sistemin bölüşüm fonksiyonu yazılacak olursa;

$$Z_1(0, T) = \sum \sum \dots e^{\beta [\sum JS_n S_{n+1} + KS_n^2 S_{n+1}^2 - \Delta S_n^2]} \quad (4.3)$$

şeklinde ifade edilebilir.

Şekil-1 de görüldüğü gibi zincirin topolojisini bir daire olarak göz önüne alırsak;  $S_{N+1} = S_N$  şeklinde bir periyodik sınır şartımız olur. Buna göre (4.3) ifadesindeki üstel terimler en yakın komşu spinleri içeren terimler cinsinden açılabilir. Bu durumda bölüşüm fonksiyonu için,

$$Z_1(0, T) = \sum_S \langle S_1 | T | S_2 \rangle \langle S_2 | T | S_3 \rangle \dots \langle S_N | T | S_1 \rangle \quad (4.4)$$

ifadesi elde edilir. Bu ifadedeki matris elemanlarının genel formunu,

$$\langle S_n | T | S_{n+1} \rangle = e^{-\beta \left[ -JS_n S_{n+1} - KS_n^2 S_{n+1}^2 + \frac{\Delta}{2} (S_n^2 + S_{n+1}^2) \right]} \quad (4.5)$$

olarak yazabiliriz. Burada  $S_n$  ve  $S_{n+1}$  birbirinden bağımsız olarak +1, 0, -1 değerleri alabilirler. T, (3 × 3) tipinde bir matris olur. Spinler +1, 0, -1 değerleri alacağından, böylece T matrisinin elemanları;

$$T = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{bmatrix} \quad (4.6)$$

olarak yazılır.

Böylece, Denklem (4.6)'yı Denklem (4.5)'de kullanarak T matrisinin elemanları;

$$T_{11} = \langle +1|T|+1 \rangle = e^{(J+K-\Delta)}$$

$$T_{12} = \langle +1|T|0 \rangle = e^{-\beta\Delta/2}$$

$$T_{13} = \langle +1|T|-1 \rangle = e^{\beta(-J+K-\Delta)}$$

$$T_{21} = \langle 0|T|+1 \rangle = e^{-\beta\Delta/2}$$

$$T_{22} = \langle 0|T|0 \rangle = 1$$

$$T_{23} = \langle 0|T|-1 \rangle = e^{-\beta\Delta/2}$$

$$T_{31} = \langle -1|T|+1 \rangle = e^{\beta(-J+K-\Delta)}$$

$$T_{32} = \langle -1|T|0 \rangle = e^{-\beta\Delta/2}$$

$$T_{33} = \langle -1|T|-1 \rangle = e^{\beta(J+K-\Delta)}$$

şeklinde elde edilir. Böylece T transfer matrisi,

$$T = \begin{bmatrix} e^{\beta(J+K-\Delta)} & e^{-\beta\Delta/2} & e^{\beta(-J+K-\Delta)} \\ e^{-\beta\Delta/2} & 1 & e^{-\beta\Delta/2} \\ e^{\beta(-J+K-\Delta)} & e^{-\beta\Delta/2} & e^{\beta(J+K-\Delta)} \end{bmatrix} \quad (4.7)$$

olarak elde edilir. (4.4) denklemine göre S' ler üzerinden toplam alınır ve  $(S_{n+1}=S_1)$  periyodik sınır şartı uygulanırsa,

$$Z_1 = \sum \langle S_1 | T^N | S_1 \rangle = \hat{L} Z T^N \quad (4.8)$$

ifadesi bulunur.  $X_1, X_2, X_3$  T' nin özvektörleri;  $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$  de sırasıyla bunların özdeğerleri olsun. Buradan;

$$TX_j = \lambda_j X_j, \quad J=1, 2, 3, \dots$$

yazılır. T matrisi simetrik bir matris olduğundan Denklem (3.14)' e benzer formda diyagonal olarak yazılabilir.

$$T = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{bmatrix} \quad (4.9)$$

Bu sonuç Denklem (4.8)' de yerine yazılırsa;

$$Z = \text{Tr} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{bmatrix}^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N + \lambda_3^N \quad (4.10)$$

elde edilir. O halde şimdi T matrisinin özdeğerleri olan  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$  ve  $\lambda_3$  değerlerini bulmak için;

$TX_j = \lambda_j X_j$  denklem takımını sağlayan  $\lambda$  çözümlerini elde etmek için katsayılar determinantı sifira eşitlenir:

$$\det T = |T - \lambda I| = 0 \quad (4.11)$$

$$\begin{vmatrix} e^{\beta(J+K-\Delta)} - \lambda & e^{-\beta\Delta/2} & e^{\beta(-J+K-\Delta)} \\ e^{-\beta\Delta/2} & 1 - \lambda & e^{-\beta\Delta/2} \\ e^{\beta(-J+K-\Delta)} & e^{-\beta\Delta/2} & e^{\beta(J+K-\Delta)} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (4.12)$$

Buradan matrisin özdeğerleri,

$$\lambda_1 = \delta^{-1} \left\{ 1 + \frac{1}{2}(y+z) + \frac{1}{2}[(y-z)^2 + 8x^2]^{1/2} \right\} \quad (4.13)$$

$$\lambda_2 = \delta^{-1}(1-y) \quad (4.14)$$

$$\lambda_3 = \delta^{-1} \left\{ 1 + \frac{1}{2}(y+z) - \frac{1}{2}[(y-z)^2 + 8x^2]^{1/2} \right\} \quad (4.15)$$

olarak bulunur[11].

Burada;

$$\delta = 1+z = e^{-\beta(J+K-\Delta)}, \quad x = e^{-\beta(J+K-\Delta/2)}, \quad y = e^{-2\beta}$$

olarak kısaltılabilir. Sistemin bölüşüm fonksiyonu,

$$Z_1 = \lambda_1^N + \lambda_2^N + \lambda_3^N = \lambda_1 \left[ 1 + \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right)^N + \left(\frac{\lambda_3}{\lambda_1}\right)^N \right] \quad (4.16)$$

ifadesinin logaritmasının  $N \rightarrow \infty$  için limiti,

$$\ln Z_1 = \ln \lambda_1 \quad (4.17)$$

değerini verir. Denklem (3.31) kullanılarak spin başına serbest enerji;

$$-\beta f = \ln \lambda_1 \quad (4.18)$$

olarak yazılır.  $J=0$  için, sistemin kuadrupol momenti,

$$Q = -\frac{\bar{\alpha}}{\partial \Delta} \quad (4.19)$$

dan,

$$Q = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{1 - (e^{-\beta(K-\Delta)} - 1)}{[(1 - e^{-\beta(K-\Delta)} + 1)^2 + 8e^{-2\beta(K-\Delta/2)}]^{1/2}} \right\} \quad (4.20)$$

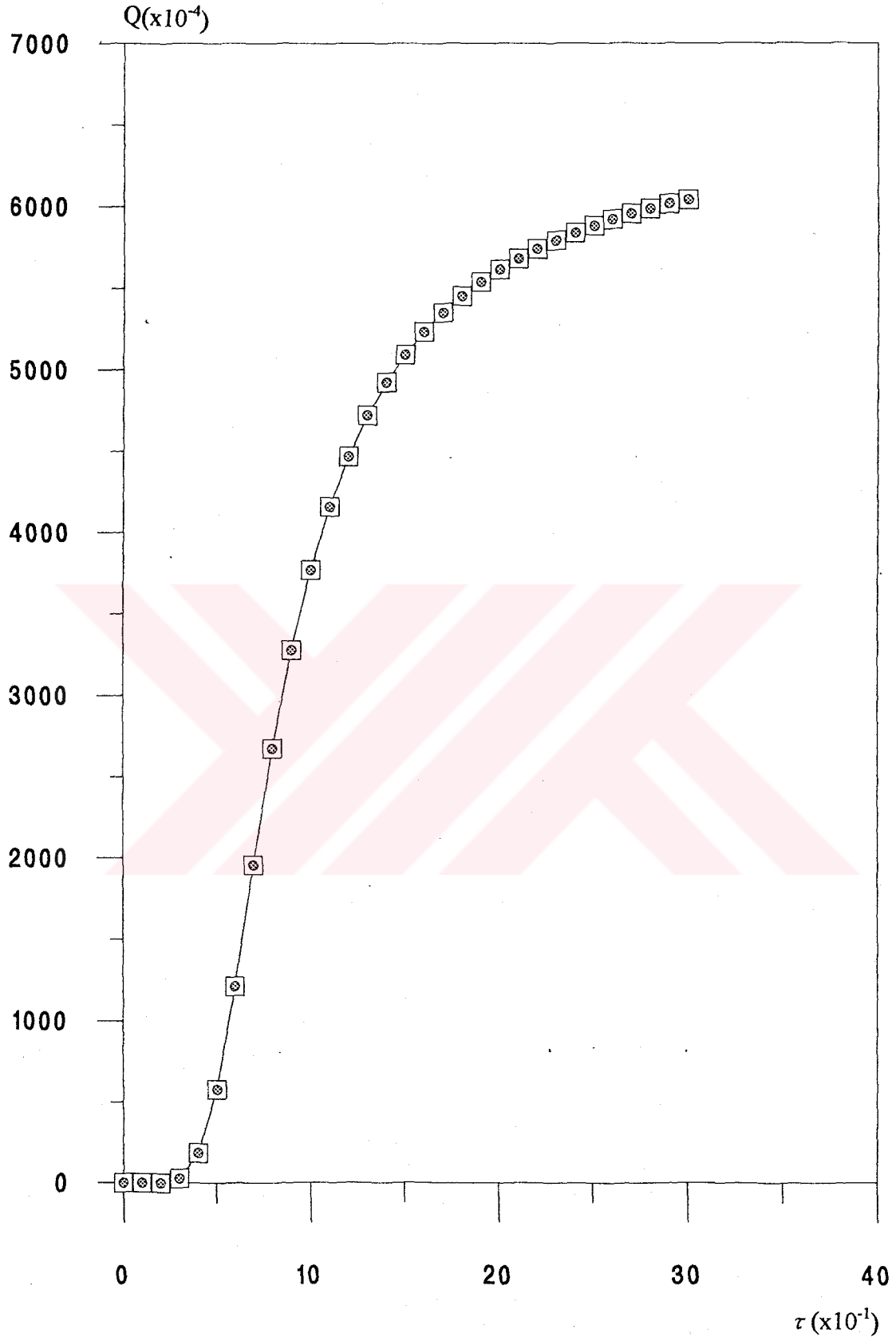
olarak hesaplanır. Bu ifade düzenlendiğinde,

$$Q = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{2 - e^{-\beta K(1-\frac{\Delta}{K})}}{[4 - 4e^{-\beta K(1-\frac{\Delta}{K})} + e^{-2\beta K(1-\frac{\Delta}{K})} + 8e^{-2\beta K(1-\frac{\Delta}{2K})}]^{1/2}} \right\} \quad (4.21)$$

elde edilir.  $\beta = \frac{1}{kT}$ ,  $\tau = \frac{kT}{K}$  kısaltmaları yapılarak Denklem (4.21) yeniden yazılırsa,

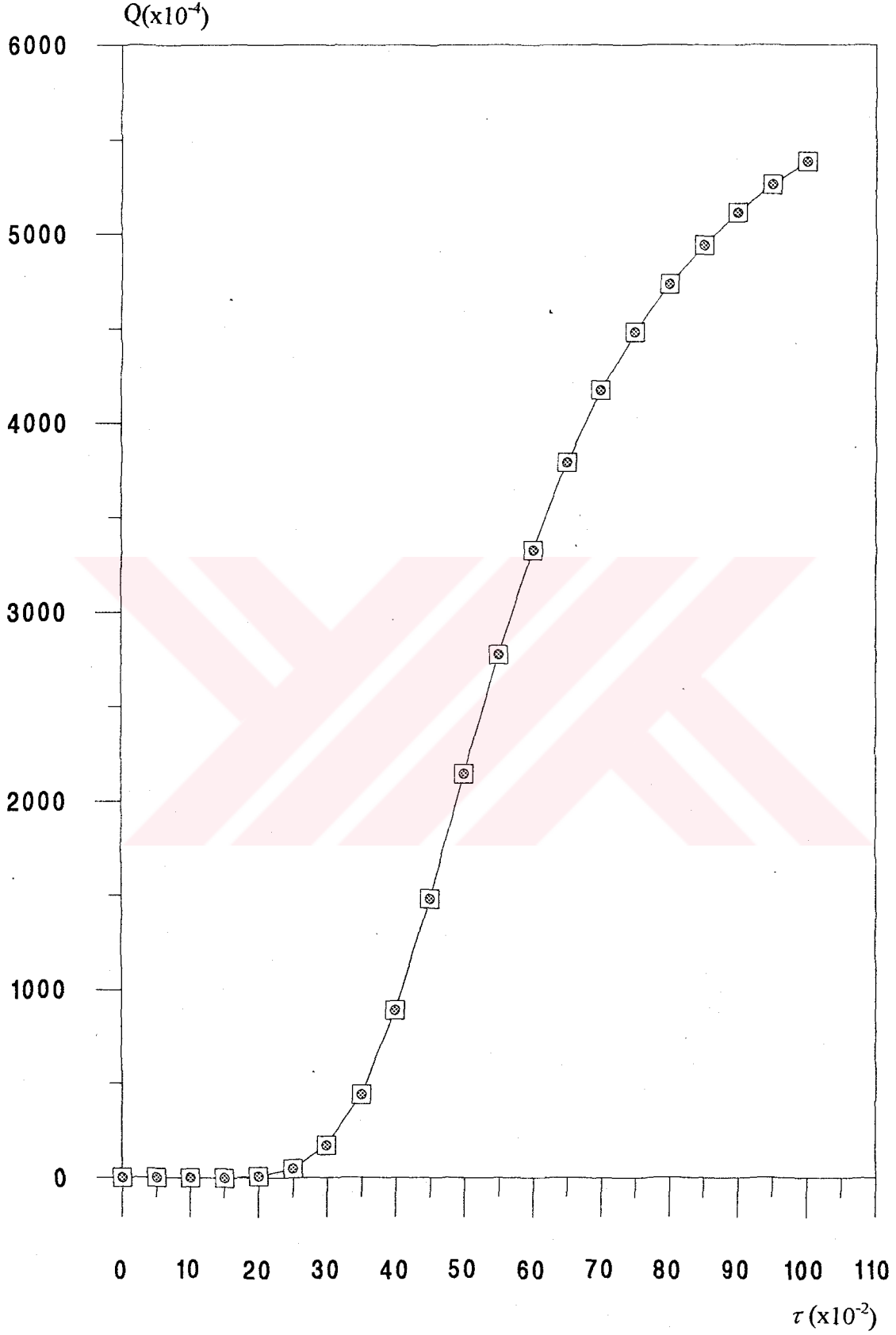
$$Q = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{2 - e^{-\frac{1}{\tau}(1-\frac{\Delta}{K})}}{[4 - 4e^{-\frac{1}{\tau}(1-\frac{\Delta}{K})} + e^{-\frac{2}{\tau}(1-\frac{\Delta}{K})} + 8e^{-\frac{2}{\tau}(1-\frac{\Delta}{2K})}]^{1/2}} \right\} \quad (4.22)$$

sonucu bulunur. Denklem (4.22)'yi  $\frac{\Delta}{K}$  nin çeşitli değerlerine karşı sayısal olarak elde edip, kuadrupol düzen parametresi  $Q$ 'nun sıcaklığa ( $\tau$ ) bağlı grafikleri çizilerek kararlı çözümleri elde edilmiştir.

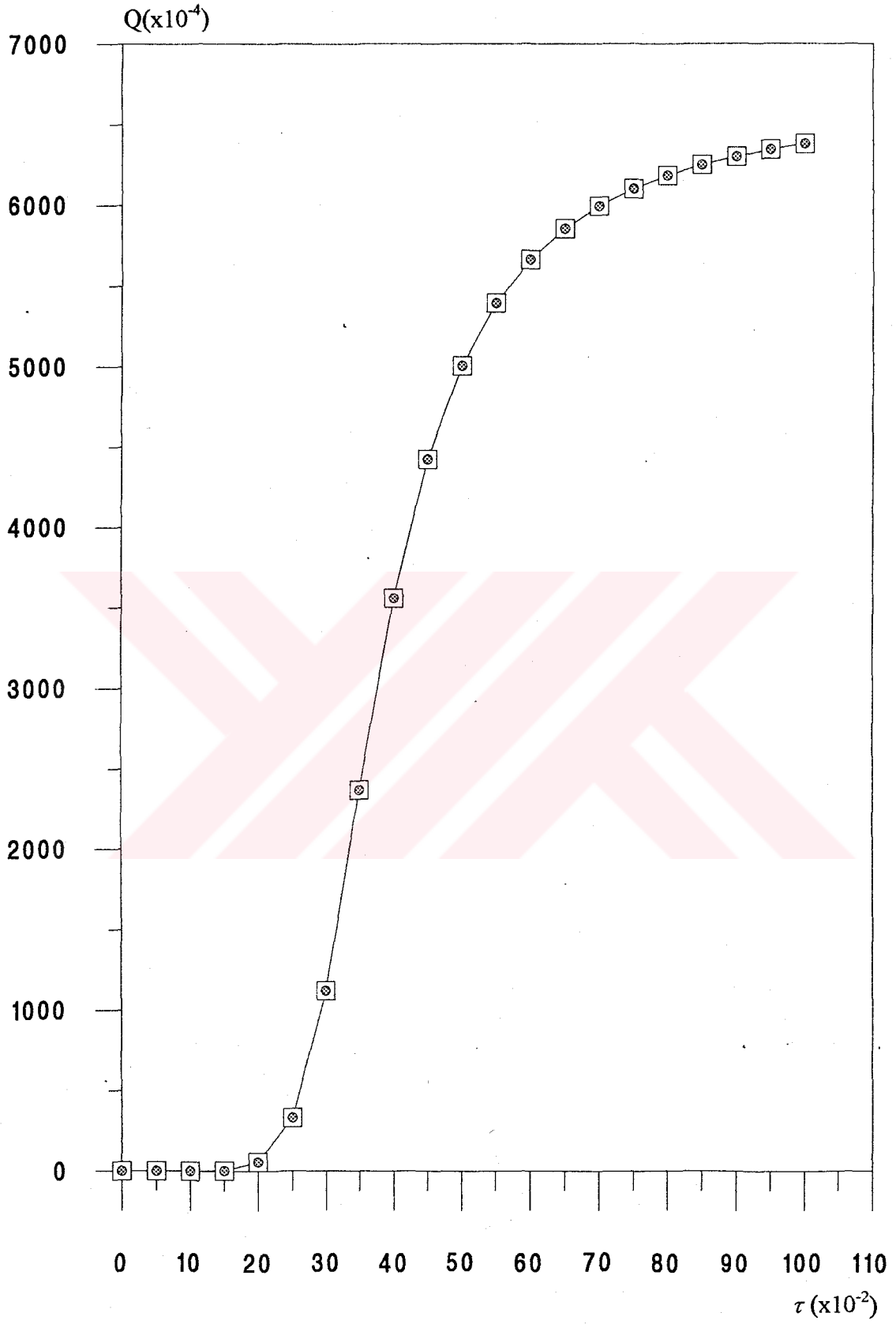


Şekil 4.1.  $\frac{\Delta}{K} = 2$  için  $Q$ ' nun sıcaklığa göre değişimi.

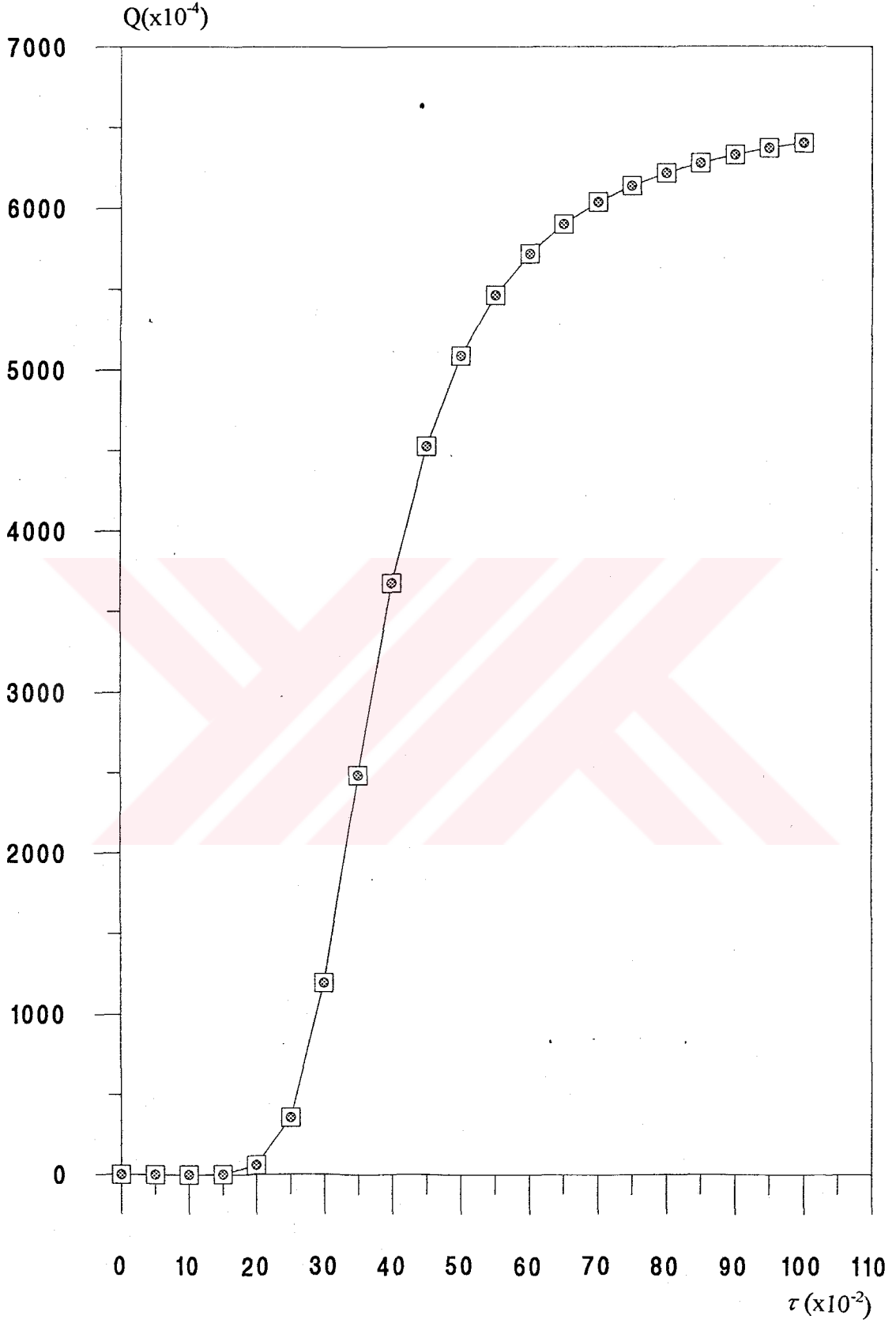




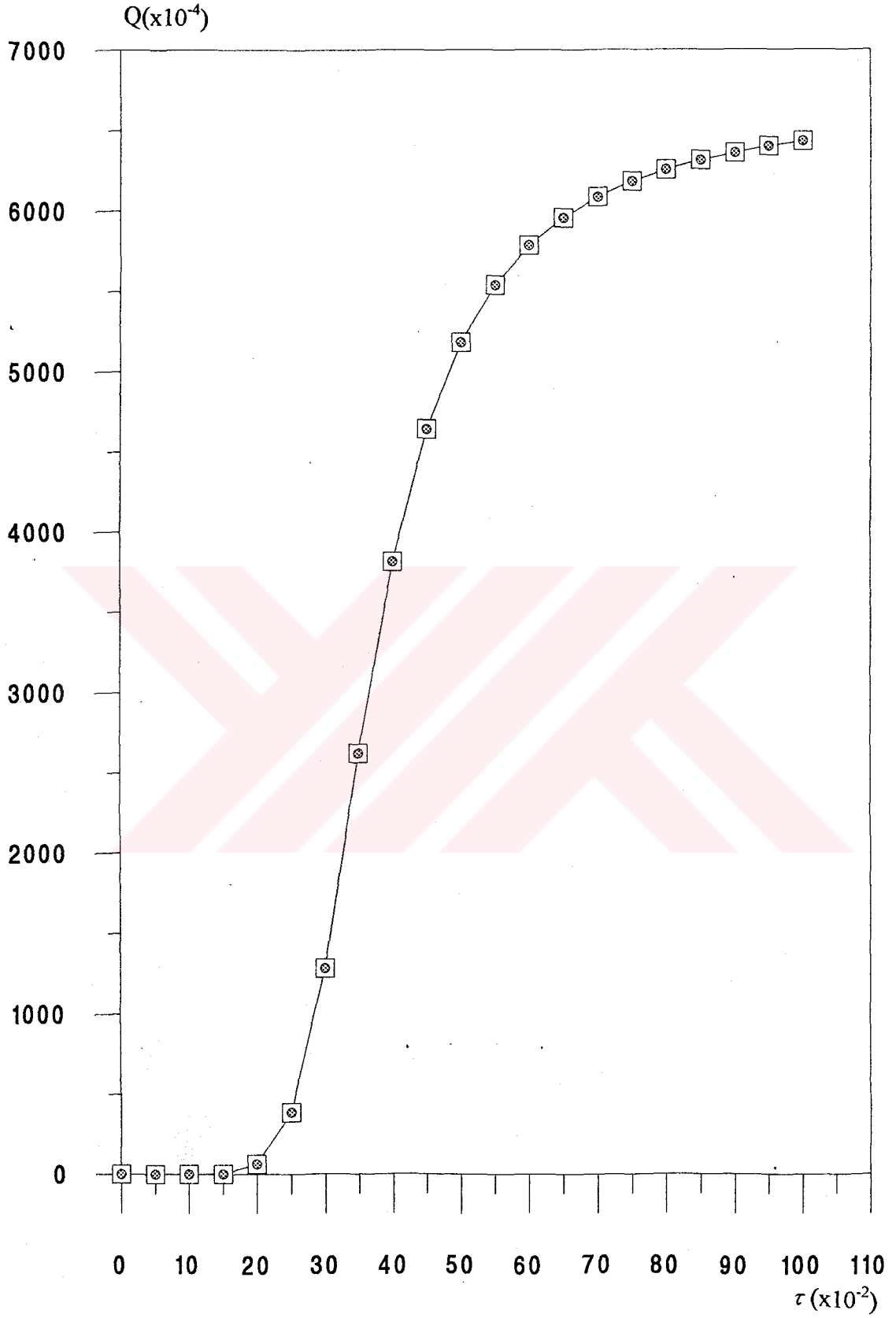
Şekil 4.2.  $\frac{\Delta}{K} = 1.6$  için  $Q$ ' nun sıcaklığa göre değişimi.



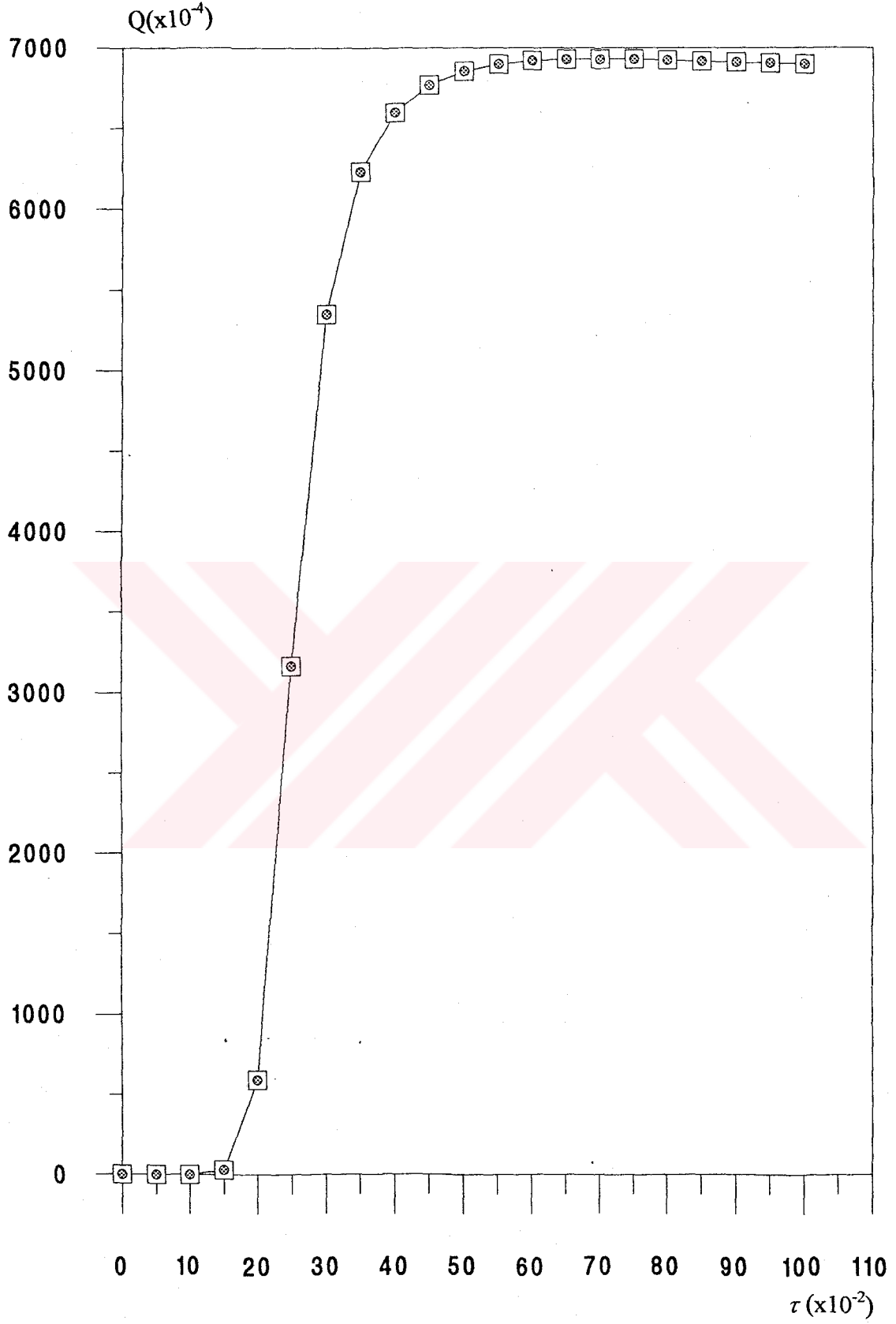
Şekil 4.3.  $\frac{\Delta}{K} = 1.346$  için  $Q$ ' nun sıcaklığa göre değişimi.



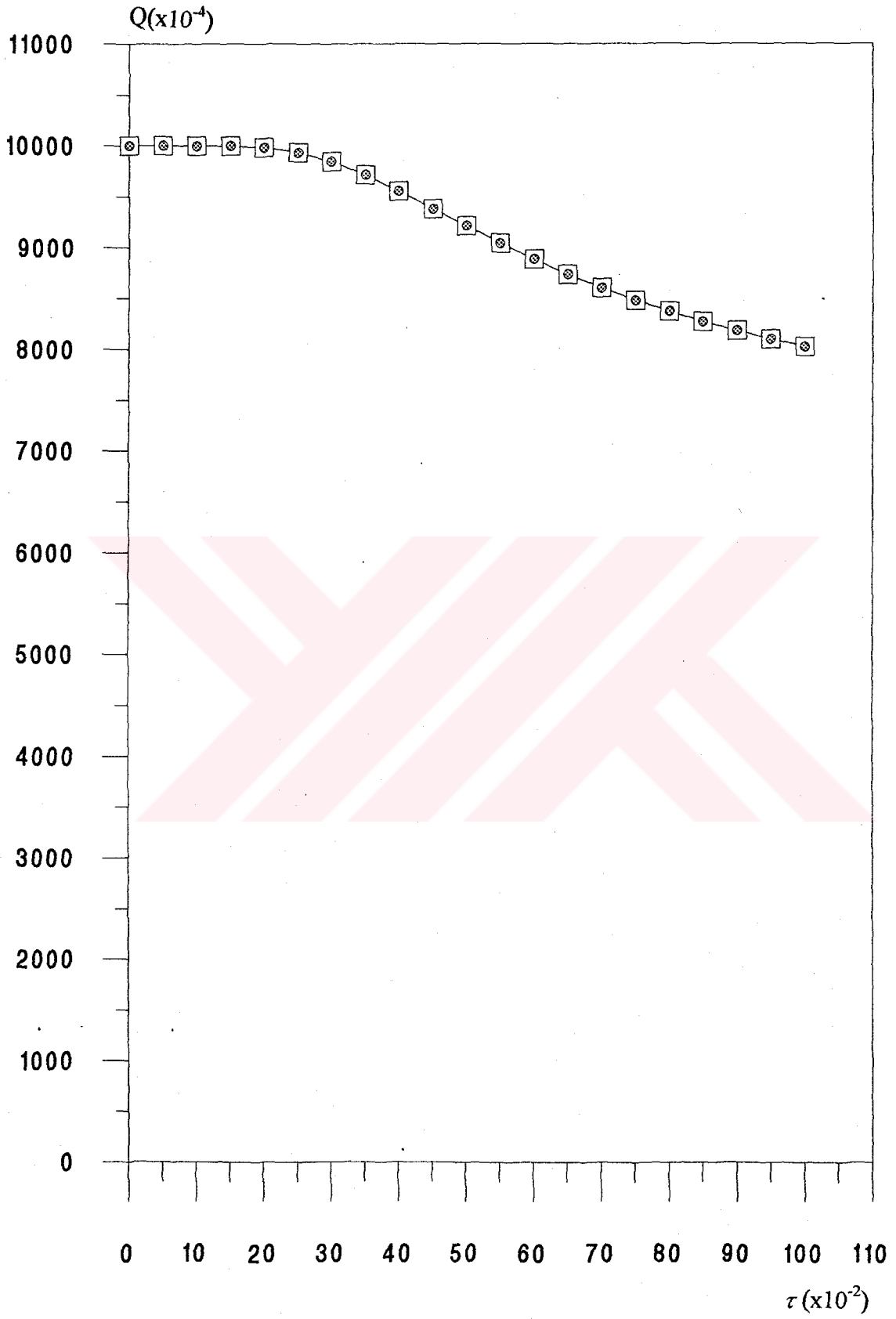
Şekil 4.4.  $\frac{\Delta}{K} = 1.34$  için  $Q'$  nun sıcaklığa göre değişimi.



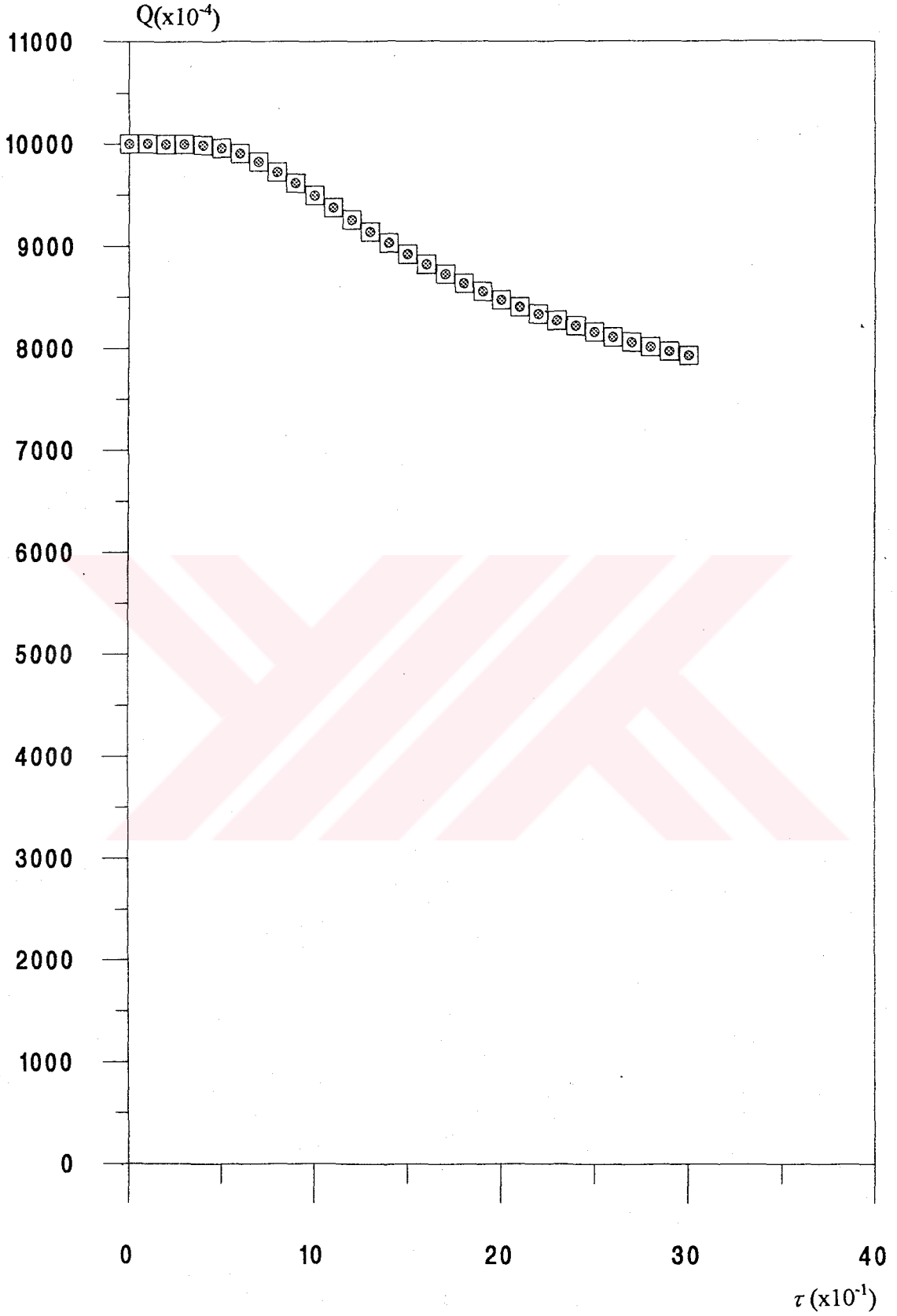
Şekil 4.5.  $\frac{\Delta}{K} = \frac{4}{3}$  için  $Q'$  nun sıcaklığa göre değişimi.



Şekil 4.6.  $\frac{\Delta}{K} = 1.2$  için  $Q$ ' nun sıcaklığa göre değişimi.



Şekil 4.7.  $\frac{\Delta}{K} = 0.8$  için  $Q'$  nun sıcaklığa göre değişimi.



Şekil 4.8.  $\frac{\Delta}{K} = -0.4$  için Q' nun sıcaklığa göre değişimi.

## 5. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Transfer matris metodu, bilineer (J) ve bikuadratik (K) değişim etkileşme Hamiltoniyenine sahip spin-1 Ising modeline magnetik alan yokluğunda uygulanarak incelendi.

Bu çalışmada, spin-1 Ising modelinin moleküler alan yaklaşımı ile incelenmesine alternatif olarak transfer matris metoduyla incelenmesi ele alındı. Moleküler alan yaklaşımının kullanıldığı önceki çalışmalarda, düzen parametresi olarak kullanılan dipol ve kuadrupol momentleri sadece sıcaklığın fonksiyonu olan yalın ifadelerle elde edilememiş olup, kublajlı denklemler halinde bulunmuştur. Ele aldığımız transfer matris metodunda düzen parametresi olan kuadrupol moment (Q), sıcaklığın fonksiyonu olarak elde edilmiştir. Bunun sonucu olarak Q' nun kararlı çözümleri bulunmuştur. Faz geçişleri doğrudan düzen parametresinin sıcaklığa bağlı değişiminden belirlenmiştir.

Anizotropi ( $\frac{\Delta}{K}$ ) değerleri değiştirilerek kuadrupol moment Q' nun sıcaklığa bağlı grafikleri Şekil 4.1-4.8 de verilmiştir. Şekil 4.1' den görüleceği üzere;  $\frac{\Delta}{K}=2$  iken Q' nun sıcaklığa ( $\tau$ ) karşı grafiğinde, Q' nun  $\tau=3$ ' e kadar exponansiyel olarak arttığını ancak,  $\tau$ ' nun bu değerinden sonra sabit bir şekilde devam ettiği görüldü. Şekil 4.2' de;  $\frac{\Delta}{K}=1.6$  iken Q' nun  $\tau=1$ ' e kadar arttığı ve sonrasında sabit olarak devam ettiği gözlemlendi. Yine Şekil 4.3-4.5 de ise  $\frac{\Delta}{K}$ ' nin sırasıyla 1.346, 1.34 ve  $\frac{4}{3}$  değerlerine karşı Q' nun  $\tau=1$ ' e kadar artıp daha sonra da sabit kaldığı belirlendi. Ancak, Şekil 4.6' da da  $\frac{\Delta}{K}=1.2$  iken Q' nun  $\tau=0.7$ ' e kadar yükselip, daha sonra küçük bir şekilde azalarak sabit kaldığı izlendi. Şekil 4.7 ve 4.8 de ise; bütün bunlara karşın  $\frac{\Delta}{K}=0.8$  ve  $\frac{\Delta}{K}=-0.4$  alınarak, Q' nun sıcaklığın artması ile birlikte az bir şekilde azalarak daha sonra sabit olarak devam ettiği görüldü. Bunun sonucu olarak;  $\frac{\Delta}{K}$ ' nin 2' den 1.2' ye kadar azalmasıyla birlikte Q' nun sıcaklığa bağlı olarak önce artıp sonra sabit kaldığı,  $\frac{\Delta}{K}$ ' nin 1.2' den düşük değerlerinde de azaldığı ve sonra sabit kaldığı görüldü.



Anizotropi parametresi küçüldükçe sistem düşük sıcaklıklarda düzenli bir yapı sergilemektedir. Anizotropi parametresinin büyük değerleri düşük sıcaklıklarda düzenliliği bastırmakta ve sistemin düzen parametresi sıfır olmaktadır. Bu durumda sıcaklığın artışı anizotropi etkisini yok ettiğinden sistem düzenli duruma geçmektedir.

Sonuç olarak; buradaki tüm faz geçişleri birinci derece faz geçişleri olup, bu kararlı çözümlerin moleküler alan yaklaşımıyla elde edilen kuadrupol düzen parametresinin sıcaklığa bağlı kararlı çözümleriyle [16] uygunluğu görülmüştür.



**KAYNAKLAR**

- [1] Patheria, P.K., "Statistical Mechanics" P.Pergamon Press, Oxford, 1984.
- [2] Blume, M., Emery, V.J. and Griffiths, R.B., "Ising Model for the Transition and Phase Separation in He<sup>3</sup>-He<sup>4</sup> Mixtures" Phys.Rev., A 4, 1071, 1971.
- [3] Keskin, M., Ari, M. and Meijer, P.H.E., "Stable, Metastable and Unstable solutions of a Spin-1 Ising System Obtained by the Molecular Field Approximation and the Path Probability Method" Physica A, 157, 1000, 1989.
- [4] Chen, H.H. and Levy, P.H., "Dipole and Quadrupole Phase Transitions in Spin-1 Models" Phys. Rev., B 7, 4267, 1973.
- [5] Keskin, M., Ari, M. and Meijer, P.H.E., "A Model for Quenching via Hidden Variables; Non-Equilibrium Behavior of a System with Two Long Range Order Parameters" Physica, 122 A, 1, 1983.
- [6] Keskin, M., "A Model for Quenching via Hidden Variables; Non-Equilibrium Behavior of a System with Two Long Range Order Parameters II. Influence of a Magnetic Field" Physica A, 135, 226, 1986.
- [7] Burley, D. M., "Phase Transition and Critical Phenomena" Ed. by C. Domb and M.S. Green, Vol. 2, Academic, London, 1972.
- [8] Kikuchi, R., "A Theory of Cooperative Phenomena" Phys.Rev., 81, 988, 1951.
- [9] Kikuchi, R., "The Path Probability Method" Prog. Theor., Phys. Suppl., 35,1, 1966.
- [10] Harris, R., "A Study of First and Second Order Phase Transition Using Monte Carlo Simulations in the Micro Canonical Ensemble" Phys. Lett. A, 111, 299, 1985.
- [11] Krinsky, S. and Furman, D., "Exact Renormalization Group Exhibiting Tricritical Fixed Point for a Spin-One Ising Model in One Dimension" Phys. Rev. B, 11, 2602, 1975.
- [12] Berker, A. N. and Wortis, M., "Blume-Emery-Griffiths Model in Two Dimension: Phase Diagram and Critical Properties from a Position-Space Renormalization Group" Phys. Rev. B, 14, 6945, 1976.
- [13] Chen, H. H. and Joseph, R. J., "Exchange Interaction Model of Ferromagnetism" J. Math. Phys. 13, 725, 1972.
- [14] Oitmaa, J., "High Temperature Series Expansions for a Griffiths Model of He<sup>3</sup>-He<sup>4</sup> Mixture" Phys. Lett. A 33, 230, 1970.

- [15] Oitmaa, J., "High Temperature Series Expansions for a Lattice Model Critical Behavior in Multicomponent Systems" *J. Phys. C* 4, 2466, 1971; 5, 435, 1973.
- [16] Lajzerowicz, J. and Sivardiere, J., "Spin-1 Lattice-gas Model I Condensation and Phase Separation of a Simple Fluid" *Phys. Rev. A* 11, 2079, 1975.
- [17] Sivardiere, J. and Lajzerowicz, J., "Spin-1 Lattice-gas Model II Condensation and Phase Separation in a Binary Fluid" *Phys. Rev. A* 11, 2090, 1975.
- [18] Sivardiere, J. and Lajzerowicz, J., "Spin-1 Lattice-gas Model III Tricritical Points in a Binary and Ternary Fluids" *Phys. Rev. A* 11, 2101, 1975.
- [19] Furman, D., Dattagupta, S. and Griffiths, R. B., "Global Phase Diagram for Three-Component Model" *Phys. Rev.* 15, 441, 1971.
- [20] Lawrie, I. D. and Sarbash, S., "Phase Transition and Critical Phenomena" Ed. by Comb, C. and Lebowitz, J.L., Vol. 9, Academic, London, 1984.
- [21] Keskin, M. and Meijer, P.H.E., "Dynamics of a Spin-1 Model with the Pair Correlation" *J. Chem. Phys.* 85(12), 7324, 1986.
- [22] Chacabarty, K.G. and Morita, T., "A Spin-One Ising Model on the Bethe Lattice" *Physica A*, 129, 415, 1985.
- [23] Keskin, M. and Özgan, Ş., "Stable, Metastable and Unstable Solutions of a Spin-1 Ising System Based on the Free Energy Surfaces" *Phys. Lett.* 145 A, 340, 1990.
- [24] Huan, K., "Statistical Mechanics" Wiley J. and Sons., Inc. New York, 1963.

### **ÖZGEÇMİŞ**

Abdullah Kaplan, 1965 yılında Isparta' nın Yenişarbademli ilçesinde doğdu. İlk ve ortaokulu Yenişarbademli' de tamamladı. 1982 yılında Ankara Elektronik Astsubay Hazırlama Okulu'ndan derece ile mezun oldu. Aynı yıl Kara Harp Okulu adına O.D.T.Ü' ne girdi. Eğitim Fakültesi Fizik Öğretmenliği Bölümünden mezun olduktan sonra 1991-1993 yılları arasında Ankara Özel Ayşeabla Lisesi' nde fizik öğretmenliği görevinde bulundu. Eylül 1993 yılından itibaren de Süleyman Demirel Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünde Araştırma Görevlisi olarak görevini sürdürmektedir. İngilizce biliyor. Evli ve bir çocuk babasıdır.

