

34183

ÇİFT YAKLAŞIM METODUYLA BİLİNEER VE BİQUADRATİK ETKİLEŞMELİ

SPİN-1 ISING MODELİNİN İNCELENMESİ

AHMET ERDİNÇ

ERCIYES ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ'NE

FİZİK ANABİLİM DALI'NDA YÜKSEK LİSANS TEZİ OLARAK SUNULMUŞTUR

EYLÜL-1994

Erciyes Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürlüğü'ne

Bu çalışma, jürimiz tarafından Fizik anabilim dalında yüksek lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

30 / 9 / 1994

Başkan : Yrd. Doç. Dr. Mehmet ARİ  
Üye : Prof. Dr. Mustafa Kashi  
Üye : Y. Doç. Dr. İbrahim Küçük

ONAY

Yukarıdaki imzaların, adı geçen öğretim üyelerine ait olduğunu onaylarım.

10 / 11 / 1994

Enstitü Müdürü  
Prof. Dr. Mehmet GONDOZ

## ÖZGEÇMİŞ

Adı ve Soyadı : Ahmet Erdinç  
Baba adı : Veli  
Anne Adı : Hatice  
Doğum Yeri : Tomarza / Kayseri  
Doğum Yılı : 1967

İlk, orta ve lise öğrenimini Kayseri'de tamamladı. Yüksek öğrenimini Ankara Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Mühendisliği Bölümünde 1991 yılında tamamladı. 1993 yılında Erciyes Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümüne araştırma görevlisi olarak girdi, halen bu göreve devam etmektedir.

## TEŐEKKUR

Bana bu tez konusunu veren ve alıŐmalarım boyunca yardımlarını esirgemeyen hocam Prof.Dr. Mustafa Keskin'e teŐekkürlerimi arz ederim. Amerika Ulusal Standartlar ve Teknolojisi Enstitüsünün (NST) SNSQE alt programını, Erciyes Üniversitesi bilgi işlemler merkezine kurmak için yardım eden Dr. R. Boisvert'e ve Amerikan Katolik Üniversitesinden Prof.Dr. P.H.E. Meijer'a teŐekkürlerimi sunarım. Ayrıca, bilgisayar alıŐmalarımda yardımını gördüğüm, Erciyes Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü AraŐtırma Görevlisi Mustafa Gençaslan'a teŐekkür ederim. Bu alıŐma TÜBİTAK tarafından desteklenmiştir.

## ÖZET

Bilineer (J) ve biquadratik (K) etkileşmeli spin-1 Ising modeli, kümesel değişim metodunun çift yaklaşımı ile çiftlenim oran sabiti  $\alpha$ 'nın ( $\alpha = J/K$ ) küçük değerleri için ( $0 < \alpha < 3$ ) incelendi. b.c.c. yapı Kümesel Değişim Metodu (KDM)'nin çift yaklaşımı ile incelendi. Dipol ve quadrupol momentlerinin sıcaklığa göre değişimleri,  $0 < \alpha < 3$  değerleri için incelendi ve faz geçişinin olmadığı görüldü. Birçok deneysel ve teorik çalışmalarda çok önemli rol oynayan, yarıkararlı ve kararsız çözümlerin belli sıcaklık değerlerinin altında elde edilebildiği tespit edildi ki bu sıcaklığa yarıkritik (quasi-critical) sıcaklık ( $T_{qc}$ ) adı verilir. Sonuçta  $\alpha$  değerini küçülttüğümüz zaman yarıkritik sıcaklık değerinin de küçüldüğü ve bazı yarıkararlı ve kararsız çözümlerin mevcut olmadığı ortaya çıktı. Şayet  $\alpha$  değerleri 0.1 civarında olduğunda yarıkararlı ve kararsız çözümlerin bir çoğunun meydana gelmediği bulundu.

## ABSTRACT

The spin-1 Ising model with arbitrary bilinear ( $J$ ) and biquadratic ( $K$ ) pair interactions is studied on a body-centered cubic lattice for small ratio of the coupling parameters  $\alpha = J/K$  ( $0 < \alpha < 3$ ) by using the pair approximation of the cluster variation method. The thermal variation of the dipole and the quadrupole moments is investigated and it is found that there is no phase transition in this range of  $\alpha$ . However below certain temperatures, called quasicritical temperatures, metastable and unstable solutions occur which are important for many experimental and theoretical works. It is found that if values of  $\alpha$  are decreasing, quasicritical temperatures are also decreasing and some of metastable or unstable solutions disappear. If  $\alpha$  values are around 0.1 most of the metastable and unstable solutions disappear.

## İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖNAY.....	II
ÖZGEÇMİŞ.....	III
TEŞEKKÜR.....	IV
ÖZET.....	V
ABSTRACT.....	VI
İÇİNDEKİLER.....	VII
BÖLÜM I. GİRİŞ.....	1
BÖLÜM II. ÇİFT YAKLAŞIM METODU.....	6
II.1. Metod Hakkında Genel Bilgiler.....	6
II.2. Entropi ve Serbest Enerjinin Elde Edilişi..	7
BÖLÜM III. MODELİN TANIMI.....	18
BÖLÜM IV. DENGİ DURUMUNUN İNCELENMESİ.....	23
IV.1. Ağırlık Faktörünün Elde Edilişi.....	23
BÖLÜM V. SONUÇ VE TARTIŞMA.....	32
BÖLÜM VI. KAYNAKLAR.....	35
EK-1 Öz-bağıllık Denklem Sisteminin SNSQE Alt Proğramı ile Çözümünün Proğramı.....	41

## BÖLÜM I

### I. GİRİŞ

Birçok fiziksel kooperatif olayların termodinamik davranışları, örneğin donma, manyetik düzenlilik, faz dönüşümleri, düzenli ve düzensiz geçişler, faz ayrışması ve  $\text{He}^3\text{-He}^4$  karışımında süper akışkanlık düzeni [1], faz ayrışması ve ikili alaşımlarda ferromanyetizma [2-3], sıvı karışımlar, sıvı-kristal karışımlar, katı-sıvı-gaz karışımlar [4-6], mikro-emülsiyonlar [7], re-entrant v.b. gibi olaylar spin-1 Ising modeli ve üç durumlu sistemler kullanılarak açıklanabilmektedir. En genel Hamiltoniyenli spin-1 Ising modeli Blume-Emery-Griffiths [1] modeli olarak adlandırılır. En yakın komşu çift etkileşmeli Hamiltoniyen,

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & H_S \sum_{i=1}^N S_i - H_Q \sum_{j=1}^N Q_j + \Delta \sum_{j=1}^N S_j^2 - J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \\ & - H_3 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j (S_i + S_j) - K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2 \\ & + L \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i S_j^2 + S_i^2 S_j) \end{aligned} \quad (\text{I.1})$$

formülü ile verilmektedir. Burada  $H_S$ , dipol momentinden dolayı meydana gelen manyetik alan;  $H_Q$ , quadrupol momentinden

dolayı meydana gelen manyetik alan;  $N$ , örgü nokta sayısı;  $\Delta$ , kristal alan etkileşme sabiti;  $J$ , bilineer değişme etkileşme sabiti;  $K$ , biquadratik değişme etkileşme sabiti;  $H_3$ , üçüncü dereceden manyetik pertürbasyon parametresi,  $L$  ise tek (odd) etkileşme parametresi veya dipol-quadrupol etkileşme parametresi diye adlandırılır. Eğer  $H_3 = K = 0$  olarak alınır ise model, Blume-Capel modeli olarak adlandırılır. Bu model ilk defa Blume [9] ve Capel [10-13] taraflarından birbirlerinden bağımsız olarak geliştirilmiştir. Chen ve Levy [14] de  $J$  ve  $K$  etkileşme sabitli Hamiltoniyeni kullanarak spin-1 Ising modelinin moleküler alan yaklaşımı ile çözümü üzerinde ilk defa çalışanlar arasında bulunmaktadır. Bu çalışmalarında, değişik simetrik Hamiltoniyenler kullanmışlar ve bu Hamiltoniyenler ile de değişik düzen tiplerini ve faz dönüşümlerini incelemişlerdir. Keskin ve Meijer [15] ise aşırı soğutma olayını açıklayabilmek için,  $J$  ve  $K$  etkileşme sabitli spin-1 Ising modelini kullanmışlardır. Daha sonra Keskin [16], dış manyetik alanın etkisini de gözönüne alarak aşırı soğutma olayını açıklayabilmek için spin-1 Ising modelini kullanmıştır. Her iki çalışmada da spin-1 Ising modelinin bazı özel durumlar için dengeli ve dengesiz davranışları incelenmiştir. Bu incelemeler yapılırken, dengeli durum davranışı kapalı form yaklaşımlarından [17] olan en düşük dereceli kümesel değişim metodu [18-20] ve dengesiz davranış için de yol ihtimaliyet metodu (path probability) [21] kullanılmıştır.

Spin-1 Ising modelinin Monte Carlo simülasyonu Arora ve Landau [22] ile Jain ve Landau [23] taraflarından yapılmıştır. Harris [24] ise yarıkararlı durumlar hakkında bilgi edinmek için yine modelin Monte Carlo simülasyon hesaplarını yapmıştır. Bu çalışmalara ek olarak Tanaka ve Nagahashi, Ono [25]  $K$  ve  $H$  Hamiltoniyenli spin-1 Ising modelinin Monte Carlo çalışmasını yapmışlar ve Bethe sabit çiftlenim yaklaşımlarıyla yapılan çalışmalarla karşılaştırmışlardır. Tanaka ve Fujiwara [26] ise  $J$ ,  $K$  ve  $H$  Hamiltoniyenli modelin Monte Carlo çalış-

malarını yaparak sistemde meydana gelen faz dönüşümlerini incelemişlerdir. Lee ve Landau [27], aynı Hamiltoniyeni kullanarak atomların tek tabakadaki absorbe olmalarının faz dönüşümlerini incelemişlerdir. Arora, J, K ve H hamiltoniyenli modelin öz ısısının sıcaklığa göre değişimlerini Monte Carlo metoduyla incelemiştir [28]. Spin-1 Ising modelinin renormalizasyon grup [29] çalışmaları Krinsky ve Furman [30] tarafından ve daha sonra iki boyutta incelemesini Berker ve Wortis, Adler ve çalışma arkadaşları [31] taraflarından yapılmıştır. J ve K hamiltoniyenli modelin renormalizasyon grup çalışmasını Bonfim ve Sa' barreto [32], Carneiro ve çalışma arkadaşları [33] taraflarından yapılmıştır. Basit Hamiltoniyenli spin-1 Ising modelini Migdal-Kadanoff, renormalizasyon grup çalışmasını Droz ve Malaspinas, Bose ve Chatterjee [34] yapmışlardır. Spin-1 Ising modelinin yüksek sıcaklıkta seriye açma çalışmaları ise Allan ve Betts, Chen ve Joseph, Oitmaa ve Taggart [35] taraflarından yapılmıştır. Modelin örgü-gaz tipi çözümleri ise Lajzerowicz ve Sivardiére [4] ile Sivardiére Lajzerowicz [5,6] tarafından yapılmıştır. Kapsamlı faz diyagramları ise Furman ve arkadaşları [36] tarafından verilmiştir. Lawrie ve Sarbach [37] üçlü kritik noktaların incelenmesinde spin-1 Ising modelini kullanmıştır. İkili etkileşmeyi gözönüne alarak J ve K Hamiltoniyenli spin-1 Ising modelinin dengeli ve dengesiz durum davranışları Keskin ve Meijer [38] tarafından incelenmiştir. Kaneyoshi, spin-1 Ising modelindeki faz dönüşümleri [39] ve re-entrant davranışları [8] incelemişlerdir. Modelin bal peteği örgüsü üzerindeki çalışmaları Horiguchi ve Shankar [40], mikro-emülsiyon çalışmasını ise Schick ve Shih [7] yapmışlardır. Özellikle son yıllarda Keskin ve çalışma arkadaşları [41,42] J ve K Hamiltoniyenli modelinde meydana gelen kararlı, yarıkararlı ve kararsız durum çözümlerini serbest enerji yüzeylerine bağlı olarak ve kümesel değişim metoduyla incelemişlerdir. Keskin [43], aynı modeli dış manyetik alanı gözönüne alarak kararlı, yarıkararlı ve kararsız durum çözümlerini incelemek için kullandı.

Daha sonra Keskin ve çalışma arkadaşları [44] J ve K hamiltoniyenli spin-1 Ising modelinin denge durumunu dipol ve quadrupol momentlerinden dolayı meydana gelen  $H_S$  ve  $H_Q$  iç manyetik alanları hesaba katarak, en düşük dereceli kümesel değişim metodunu kullanarak, inceledi.

Yukarıda bahsedildiği gibi, model oldukça kapsamlı bir biçimde incelenmiştir. Fakat J ve K hamiltoniyenli modelin çiftlenim oran sabiti  $\alpha$ 'nın ( $\alpha = J / K$ ) küçük değerleri için spin-1 Ising modelinin denge durumu KDM'nun çift yaklaşımı ile incelenmemiştir.

Bizim bu tezdeki amacımız ise, şu ana kadar yapılmamış olan J ve K Hamiltoniyenli spin-1 Ising modelinin denge durumunu küçük  $\alpha$  değerleri için ( $0 < \alpha < 3$ ) KDM'nun çift yaklaşımı ile incelemek ve  $\alpha$  çiftlenim oran sabitinin kararlı, yarıkararlı ve kararsız çözümlere özellikle yarıkararlı ve kararsız çözümlere etkisi araştırılacaktır. Çünkü yarıkararlı ve kararsız çözümler bir çok deneysel ve teorik çalışmalarda çok önemli rol oynar. Örneğin camı (amorflar) metallerde, basit akışkanlarda (gaz-sıvı dönüşümlerinde), ikili akışkanlarda, ikili alaşımlarda, süper akışkanlarda, süper iletkenlerde, yarıiletkenlerde, jellerde, lazerlerde, manyetik sistemlerde, düzenli-düzensiz sistemlerde, astrofizikte, cam ve kristal seramiklerde, minerallerde v.b. [45] önemli rol oynar.

Girişteki bu açıklamalardan sonra, Bölüm-II'de modeli çözmede kullanılan çift yaklaşım metodu, iki boyutlu spin-1/2 Ising modeli örnek alınarak kısaca açıklandı ve daha sonra diğer örgü sistemleri için genelleştirilmesi yapıldı.

Bölüm-III'te model tanımlandı. Dipol ve quadrupol momentleri iç değişkenler cinsinden ifade edildi ve tezde kullanılacak Hamiltoniyen verildi.

Bölüm-IV'de sistemin ağırlık faktörü verildi. Yine bu bölümde

en düşük dereceli kümesel deęişim metodunun çift yaklaşımı modele uygulanarak, sistemin entropi ve serbest enerji ifadeleri ile öz-baęlılık denklemleri elde edilip sistemin denge durumu incelendi.

Öz-baęlılık denklemlerinin nümerik çözümleri yapıldı. Düzen parametrelerinin sıcaklığa göre deęişimi ve çiftlenim oran parametresi  $\alpha$ 'nın çözümleri nasıl etkiledięi incelendi. Quasi kritik sıcaklığın ( $T_{qi}$ ), çiftlenim oran sabiti  $\alpha$  ile deęişimi gözlemlendi.

Son bölümde ise sonuçlar tartışıldı.



## BÖLÜM II

### II. ÇİFT YAKLAŞIM METODU

#### II.1. Metod Hakkında Genel Bilgiler

Kümesel değişim metodunun (KDM) çift yaklaşımı ile her hangi bir sistemin denge davranışını inceleyebiliriz [18-20,47-48]. Genel olarak KDM'nun diğer metodlarla ilgisi şu şekildedir: Verilen bir kristal örgüde temel kümesel büyüklük nokta seçildiğinde, KDM ortalama alan veya Bragg-Williams yaklaşımını da içine alır ve metod en düşük dereceli kümesel değişim metodu olarak adlandırılır. Eğer temel kümesel büyüklük, en yakın komşu çiftler seçilirse Bethe veya yarı-kimyasal yaklaşımı da içine alır ve metod kümesel değişim metodunun çift yaklaşımı olarak adlandırılır. Eğer temel kümesel büyüklük üçgen veya kare ağ seçilirse, metod yüksek dereceli kümesel değişim metodu olarak adlandırılır. Kümesel değişim metodunun kullanımı aşağıdaki gibidir [47]:

1. Temel kümenin şekli tanımlanır.

2. Temel kümenin ve kümelerin örgü noktalarındaki atomik görünüş dağılımları ile oluşan alt kümenin tüm mümkün şekilleri oluşturulur.

3. Bir kümenin her bir konfigürasyonuna bir dağılım değişkeni tayin edilir.

4. Tüm sistemin yaklaşık serbest enerjisi bu dağılım değişkenleri cinsinden yazılır. Bu serbest enerji ifadesi, yaklaşımın doğruluk derecesini belirler.

5. Serbest enerji ifadesi dağılım değişkenlerine göre minimize edilir ki bu dağılım değişkenleri bizi genellikle lineer olmayan cebirsel denklem sistemine götürür.

6. Elde edilen bu denklem sisteminin çözümü yapılarak sistemin denge durumu hakkında bilgi edinilir.

## II.2. Entropi ve Serbest Enerjinin Elde Edilişi

Sistemin denge durumunu belirleyen öz-bağıllık denklemlerinin elde edilmesi için önce, entropinin ve daha sonra da serbest enerjinin elde edilmesi gerekmektedir. Bu kesimde çift yaklaşım metodu kullanılarak, spin-1/2 Ising modelinin iki boyuttaki entropi ve serbest enerji ifadelerinin nasıl elde edilebileceği örnek olarak verilecektir. Bunun için, önce spin sisteminin gözönüne alınması ve sonrada genel örgü için aynı ifadelerin türetilmesinin yapılması daha uygundur. Bilindiği gibi serbest enerji, sistemin iç enerjisine ve entropisine bağlıdır. Bu sebepten dolayı iç enerji ve entropinin iç değişkenler cinsinden elde edilmesi gereklidir. Burada bir nokta belirtilmelidir ki bu da entropiyi elde edebilmek için  $W$  ağırlık faktörünün iç değişkenler cinsinden elde edilmesi gereklidir.

Temel kümesel büyüklük nokta alındığında,  $N$  spin sayısı olmak üzere iki durumlu bir sistem için  $x_1$ , spinin + (yukarı) oluşunu  $x_2$ , spinin - (aşağı) oluşunu göstermektedir. Bu iç değişkenler normalizasyon şartına uyacaklarından,

$$\sum_{i=1}^2 x_i = 1 \quad (II.1)$$

şeklinde yazılırlar. Bu durumda  $y_i$  kesirsel değişkenlerini hesaba katmamız gerekir.

Modelde spinlerin en yakın komşu çiftleri gözönüne aldığımızda yani (++) veya (--) paralel spinlerin arasındaki etkileşim enerjisi  $-\varepsilon$  kadar sistemin enerjisine katkıda bulunurken diğer yandan (+-) veya (-+) antiparalel spinlerin en yakın komşu çiftlerde sistemin enerjisine  $+\varepsilon$  kadar katkıda bulunur.  $-\varepsilon$  pozitif paralel spinli hal en düşük enerjiye sahip olduğundan daha karardır.

Örnek, enerjinin en yakın komşu çifte bağlı olması sebebiyle Tablo-II.1'de tanımlanan çiftler iç değişkenler olarak seçilir ki bunlar kesirsel değişkenler olarak da adlandırılır. Burada kesirsel değişkenler şekillenim ihtimaliyeti veya ihtimaliyet anlamında gelmektedirler. Tablo-II.1'deki  $y_i$  kesirsel değişkenlerin anlamı ise: örgü noktalarının sayısı ve dolayısıyla sistemdeki bağların sayısı  $N$  ise sistemdeki (++) bağların sayısı  $y_1 N$ , (+-) bağların sayısının  $y_2 N$ , (-+) bağların sayısı  $y_3 N$  ve (--) bağların sayısı  $y_4 N$  olacaktır. ihtimaliyetin anlamından dolayı  $y_i$  kesirsel değişkenleri

$$\sum_{i=1}^4 y_i = 1 \quad (II.2)$$

şeklinde normalizasyon şartına uyarlar.

Bağın Gösterilişi	Kesirsel değişkenler	Enerji
++	$y_1$	$-\varepsilon$
+-	$y_2$	$+\varepsilon$
-+	$y_3$	$+\varepsilon$
--	$y_4$	$-\varepsilon$

Tablo-II.1 Bir bağ için  $y_i$  kesirsel değişkenlerinin tanımlanması.

Sistemin iç enerjisi  $y_i$ 'ler cinsinden,

$$E = N\varepsilon(-y_1+y_2+y_3-y_4) \quad (II.3)$$

şeklinde yazılır.  $x_i$  iç değişkenleri ile  $y_i$  kesirsel değişkenleri arasındaki ilişki Tablo-II.2' de verilmiştir.

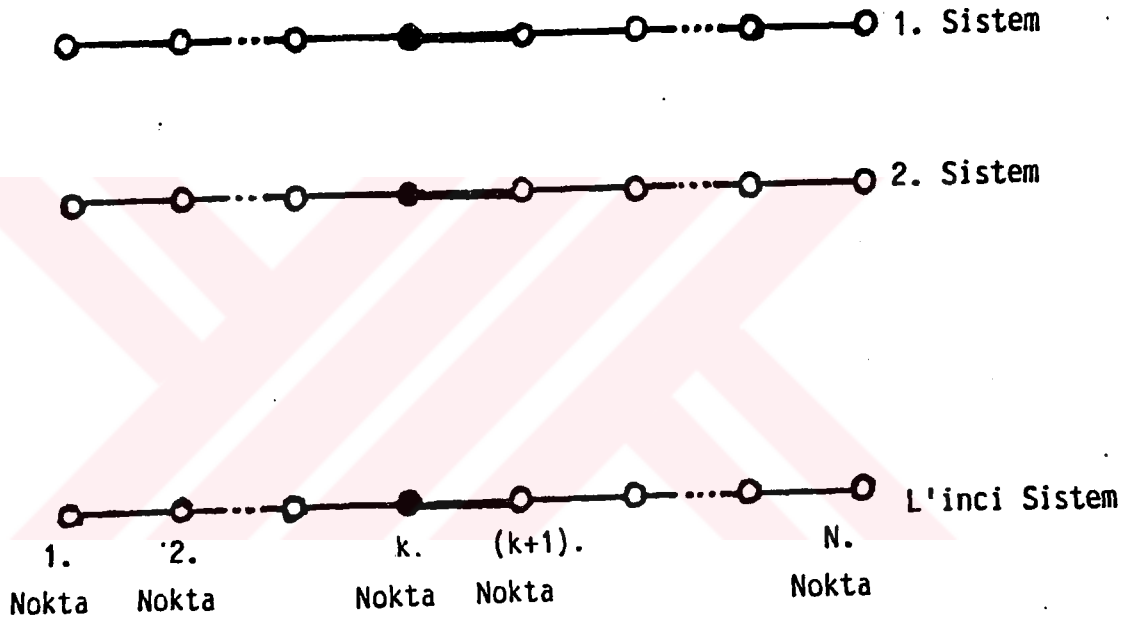
Bir Noktanın Gösterilişi	Kesirsel Değişkenler
+	$x_1 = y_1 + y_2$
-	$x_2 = y_3 + y_4$

Tablo-II.2 Bir noktayı gösteren  $x_i$ 'lerin tanımlanması.

Bir sistemin S entropisi ve F serbest enerjisi,

$$S = k \ln W \quad ; \quad F = E - TS \quad (II.4)$$

şeklinde tanımlanır. Burada k, Boltzmann faktörü, W sistemin ağırlık faktörü, yani mevcut problem için W faktörü, verilen  $y_i$  kesirsel değişkenleri ile belirlenen bir sistemin farklı konfigürasyonlarının sayısıdır ve T ise mutlak sıcaklığı göstermektedir. Burada entropi ve serbest enerji ifadelerini daha anlaşılır bir şekilde ifade edebilmek için bazı kavramları tanımlamamız gerekmektedir. Bunlar topluluk ve grup kavramlarıdır. Şekil-II.1'de görülen sistemlerin hepsine birden topluluk denir. Yani bir topluluk, L tane sistemden meydana gelmektedir. Böyle bir toplulukdaki her bir sisteme ait tek k'inci örgü noktasını düşünmek mümkün olabilir. Bu noktalara k'inci nokta grubu da denir. Şekil-II.1'de kalın çizgilerle gösterilen k-(k+1) bağın hepsinden meydana getirilen gruplardan da bahsedilebilir ki buna k-(k+1) bağın grubu da denir. Bütün bağ gruplarının denk olması yüzünden k-(k+1) bağ grubu dikkate alınır. Tablo-II.1 bize bir bağda (++) bağların sayı-



Şekil-II.1. L sistemden oluşan bir topluluk. Her bir daire + veya - spinlerin yerleştirildiği bir örgü noktasıdır.

dikkate alınır. Tablo-II.1 bize bir bağda (++) bağların sayısının  $y_1L$ , (+-) bağların sayısını da  $y_2L$  olduğunu söyler. k'inci nokta grubu için + noktalarının sayısı Tablo-II.2'de görüldüğü gibi  $x_1L$ 'dir. Böylece k'inci nokta ve k-(k+1) bağı ve daha sonra (k+1)'inci nokta ve k-(k+1) bağı dikkate alarak aşağıdaki bağıntılar

$$\begin{aligned}x_1 &= y_1 + y_2 \\x_2 &= y_3 + y_4 \\x_1 &= y_1 + y_3 \\x_2 &= y_2 + y_4\end{aligned}\tag{II.5}$$

yazılır ve (II.5) bağıntısından

$$y_2 = y_3\tag{II.6}$$

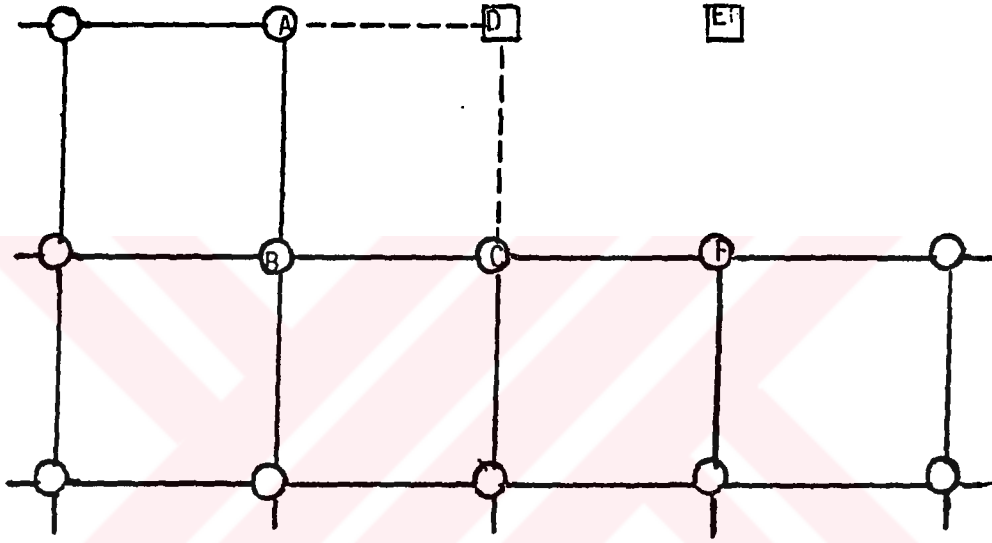
bağıntısı yazılır.

Şimdi sistemin W faktörünü  $y_i$  ve  $x_i$ 'ler cinsinden bulalım. Bunun için önce topluluğun ağırlık faktörünü yani  $w^{(t)}$  hesap edilir. Daha sonra L'ye bölünür, çünkü topluluk L tane sistemden meydana gelmiştir. Topluluğun ağırlık faktörü,

$$w^{(t)}(y) = \frac{\prod_{i=1}^2 (x_i L)!}{\prod_{j=1}^4 (y_j L)!}\tag{II.7}$$

şeklinde tanımlanır. Buradaki (t) ise topluluğu temsil eder.

Sistemi biraz daha genelleştirmek için bir kare örgünün W faktörünü bulalım. Bunun için Şekil-II.2 bir sistemin teşkil edilmesindeki ara durumu göstermektedir. Şekil-II.2'deki örgü noktalarının kümeleri + veya - spinlerle doldurulduğu düşünülmektedir. Böylece teşkil edilen her bir bağ kümesi için,



Şekil-II.2. Bir kare örgünün bir topluluğun ara durumu.

dağılımına sahip ise A noktasının da  $x_i$  dağılımına sahip olduğu görülür. Benzer şekilde C noktası da  $x_i$  dağılımına sahiptir. Şekil-II.2'de görülen kare ağdaki D noktasına A-D ve C-D bağlarının her birisi  $y_i$  dağılımına sahip olacağı şekilde spin yerleştirme yollarının sayısı bulunmalıdır. Bunun için de önce A-D bağı  $y_i$  dağılımına sahip olacak şekilde spin yerleştirme yollarının sayısı bulunmalıdır. Yani,

$$g = \frac{\prod_{i=1}^2 (x_i L)!}{\prod_{j=1}^4 (y_j L)!} \quad (II.8)$$

olur ki bu da denklem (II.7) bağıntısına eşittir. Fakat denklem (II.8) bağıntısı C-D bağına baktığımızda bazılarının  $y_i$  dağılımına sahip olabileceğini, bir çoğunun da  $y_i$  dağılımına sahip olmayabileceğini gösterir. Buna rağmen yaklaşık olarak C-D bağı için gerekli  $y_i$  dağılımına sahip bir konfigürasyon kesri tahmin edilebilir. Bu durumda D örgü noktasına yerleştirilen spinler gerçekten C'deki spinlerden bağımsızdır. Çünkü D ve C deki spinler C-B-A-D gibi bir bağlantı şekliyle birbirleriyle bağlantılıdır. Bu şekildeki bir kesrin kabaca aşağıdaki orana eşit olduğu belirlenir. Bu oran,

$$\Gamma = \frac{g}{g'} \quad (II.9)$$

dir burada,

$$g' = \frac{L!}{(x_1 L)! (x_2 L)!} \quad (II.10)$$

olur. Bu  $g'$  de C noktasındaki spinden bağımsız D noktası grubuna spinler yerleştirme yollarının sayısıdır.  $g$  de (II.8) bağıntısında olduğu gibi D noktası grubuna spinleri yerleş-

tirme yollarının sayısını temsil eder. Sonuçta C-D bağı, gerekli  $y_i$  dağılımına sahip olur. Dolayısıyla  $\Gamma$  düzeltme faktörü,

$$\Gamma = \frac{\prod_{i=1}^z (x_i L)^z!}{L! \prod_{j=1}^d (y_j L)^z!} \quad (II.11)$$

olarak yazılabilir. Böylece  $g\Gamma$  çarpımı, gerekli dağılım  $y_i$  olmak üzere D noktasına spin yerleştirme yollarının sayısıdır. Bu spinleri yerleştirme yollarının sayısı hem A-D hem de C-D bağları içindir ve  $g\Gamma$  çarpımı (II.8) ve (II.11) çarpımını kullanarak,

$$g\Gamma = \frac{\prod_{i=1}^z (x_i L)^z!}{L! \prod_{j=1}^d (y_j L)^z!} \quad (II.12)$$

şeklinde elde edilir. Böylece spinlerin D noktasına yerleştirilmesinden sonra şekil-II.2'deki son nokta olan E noktasının durumu incelenebilir. Burada D noktasına bir spin yerleştirmede yaptığımız işlemler tam olarak aynısı olmakla birlikte aradaki fark sadece örgü sabitinin kaymasıdır. Böylece örgünün her nokta kümesine aynı şekilde spin yerleştirme işlemleri tekrarlanır. Sonuçta N sayıdaki bütün topluluğu teşkil etmenin  $w(t)$  yollarının toplam sayısı denlem (II.12) deki  $g\Gamma$  çarpımının N'inci kuvveti ile verilir. Bu ifadedeki her bir topluluk N tane noktadan oluşan L sistemden meydana gelmiştir. Dolayısıyla,

$$w(t) = (g\Gamma)^N = \left[ \frac{\prod_{i=1}^z (x_i L)^z!}{L! \prod_{j=1}^d (y_j L)^z!} \right]^N \quad (II.13)$$

şeklinde ifade edilir.

Bu aşamadan sonra  $W$  ağırlık faktörünü genel örgü için ifade edebiliriz. Burada  $W$ 'yi bulmak için takip edeceğimiz yol iki boyutlu kare ağda  $W$ 'yi bulmak için takip edilen yolun benzeri olacaktır.  $W$ 'yi elde ederken Şekil-II.3'deki üçgen ağ örnek olarak seçilecektir.

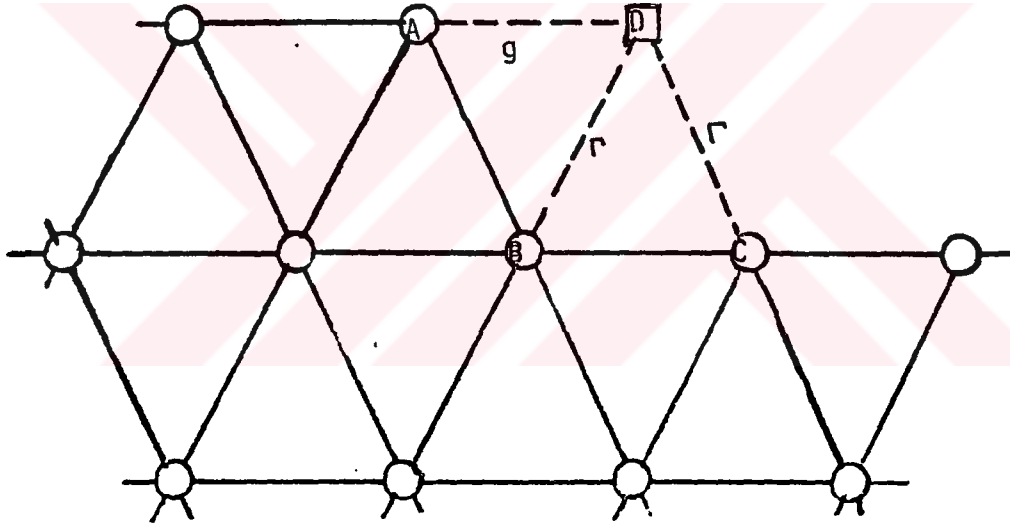
Şekil-II.3 Üçgen örgüyü teşkil etmenin ara durumunu göstermektedir. Bu şekildeki sürekli bağların hepsinin  $y_i$  dağılımıyla yerleştirilmesinden sonra,  $D$  noktasına spin yerleştirme yollarının sayısı hesaplanır. Yukarıdaki iki boyutlu kare ağda uyguladığımız aynı metodla ilerleyerek önce  $A-D$  çiftine bakıp çift için gerekli  $y_i$  dağılımına sahip olacak şekilde  $D$  noktasının grubuna spinler yerleştirilir. Bunu yapmanın yollarının sayısı denklem (II.8)'de  $g$  olarak verilmişti. Bu yapıldıktan sonra  $C-D$  bağına bakılacaktır. Bu da Şekil-II.2'deki  $C-D$  bağına aynıdır. Fakat buradaki  $\Gamma$  düzeltme faktörü Şekil-II.3 için yeterli değildir. Bu yüzden  $D-B$  çiftinin  $y_i$  dağılımına sahip olmasına ihtiyaç duyulur.  $D-B$  bağı için başka bir düzeltme yapılmalıdır. İhtiyaç duyulan düzeltme faktörü yine denklem (II.9)'daki  $\Gamma'$ 'dir. Böylece herbiri  $N$  örgü noktasından meydana gelmiş  $L$  sistemden oluşan topluluğu teşkil etmenin  $W^{(t)}$  yollarının sayısı,

$$[W^{(t)}]^{1/N} = g\Gamma'^2 = \frac{\prod_{i=1}^z (x_i L)!}{\prod_{j=1}^a (y_j L)!} \left[ \frac{\prod_{i=1}^z (x_i L)^2!}{\prod_{j=1}^a (y_j L)!} \right]^2 \quad (II.14)$$

şeklinde olur.

Denklem (II.14) her hangi iki durumlu bir örgü sistemi için genelleştirilebilir. Böylece  $\nu$  koordinasyon sayılı örgü için  $W^{(t)}$  faktörünün genel hali,

$$[W^{(t)}]^{1/N} = \frac{\prod_{i=1}^z (x_i L)^{\nu-1}!}{L!^{\nu-1} \prod_{j=1}^a (y_j L)^\nu!} \quad (II.15)$$



Şekil-II.3. Üçgen bir ağ topluluğu teşkil etmenin ara durumu.

olarak bulunur. Herhangi iki durumlu bir örgü sistemi için  $W$  ağırlık faktörü genel olarak elde edildikten sonra, iki durumlu bir örgü için entropi ifadesini bulmak çok daha kolaydır. Böylece (II.6) ve (II.15) denklemleri kullanılıp Stirling yaklaşımı ( $\ln N! \sim N \ln N - N$ ) yapıldığında iki durumlu bir sistemin entropi ifadesi

$$S_e = kN \left[ (\bar{v}-1) \sum_{i=1}^A x_i \ln(x_i) - \bar{v}/2 \sum_{j=1}^A y_j \ln(y_j) \right] \quad (\text{II.16})$$

şeklinde elde edilir. Denklem (II.6) ve (II.16) kullanılarak iki durumlu bir örgü için serbest enerji ifadesi ise

$$F = N\bar{v}\epsilon (-y_1 + y_2 + y_3 - y_3) - NkT \left[ (\bar{v}-1) \sum_{i=1}^A x_i \ln(x_i) - \bar{v}/2 \sum_{j=1}^A y_j \ln(y_j) \right] \quad (\text{II.17})$$

şeklinde yazılabilir.

## BÖLÜM III

### III. MODELİN TANIMI

Spin-1 Ising modeli üç durumlu ve iki düzen parametrelili bir sistemdir. Burada söz konusu edilen düzen parametrelerinin ikisi de uzun menzilli düzen parametresidir. Bahsedilen üç durum ise, sistemdeki her bir spin durumlarının ortalama kesirsel değerlerini gösterir. Her bir spin durumlarının ortalama kesirsel değerleri  $X_1$ ,  $X_2$  ve  $X_3$  ile gösterilir. Bu  $X_i$ 'ler iç veya nokta ya da durum değişkenleri diye adlandırılır. Sistemdeki spin ortalama değerleri +1, 0 ve -1 dir. Burada  $X_1$ ,  $X_2$  ve  $X_3$ , spin ortalama kesirsel değerinin sırasıyla +1, 0 ve -1 olma ihtimalini gösterirler.  $X_i$ 'ler ihtimalin tanımından dolayı normalizasyon şartına uyarlar ve dolayısıyla,

$$\sum_{i=1}^3 X_i = 1 \quad (\text{III.1})$$

ifadesini yazabiliriz. Spin-1 Ising modeli spin açıklamasının yanı sıra örgü gaz modeli için de kullanılır [52].

Çift yaklaşımını göz önüne aldığımız takdirde,  $i$  durumundaki en yakın komşu çiftinin ortalama sayısı ve  $j$  durumundaki

ikinci en yakın komşu çiftinin ortalama durum sayısını gösteren  $Y_{ij}$  iç değişkenlerini tanımlamamız gerekir [38].  $Y_{ij}$  değişkenleri çift ya da örgü değişkenleri olarak adlandırılacaktır.  $X_i$  ve  $Y_{ij}$  terimleri arasındaki ilişki

$$X_i = \sum_{j=1}^3 Y_{ij} \quad (i=1,2,3) \quad (\text{III.2a})$$

şeklindedir. Yukarıdaki ifadede 9 tane örgü değişkeni olup bu örgü değişkenleri ile  $X_i$ 'ler arasındaki ilişki açık olarak,

$$\begin{aligned} X_1 &= Y_{11} + Y_{12} + Y_{13} \\ X_2 &= Y_{21} + Y_{22} + Y_{23} \\ X_3 &= Y_{31} + Y_{32} + Y_{33} \end{aligned} \quad (\text{III.2b})$$

şeklinde olacaktır. Fakat örgü noktalarının simetrik olduğunu kabul edersek,

$$Y_{ij} = Y_{ji} \quad (\text{III.3})$$

olur ve böylece örgü değişkenlerinin sayısı 6'ya indirgenir. Eğer bir sistemde çiftlenim sayısını  $N_p$  olarak alırsak, sistemde (+,+) örgülerin sayısı  $Y_{11}N_p$ , (0,0) örgülerin sayısı  $Y_{22}N_p$ , (-,-) örgülerin sayısı  $Y_{33}N_p$ , (+,0) veya (0,+) örgülerin sayısı  $Y_{12}N_p (=Y_{21}N_p)$ , (+,-) veya (-,+) örgülerin sayısı  $Y_{13}N_p (=Y_{31}N_p)$ , (0,-) veya (-,0) örgülerin sayısı  $Y_{23}N_p (=Y_{32}N_p)$  olacaktır. Yukarıda görüldüğü gibi son üç durum dejeneredir, yani  $g=2$  dir Benzer şekilde  $Y_{ij}$ 'ler de

$$\sum_{i,j=1}^3 Y_{ij} = 1 \quad (\text{III.4})$$

şeklinde normalizasyon şartına uyarlar.

Modeldeki iki düzen parametrelerini şöyle tanımlayabiliriz: (1)  $\langle S \rangle$ , ortalama mıknatıslanmadır ki bir tarafa yönelmenin diğer tarafa yönelmeden daha fazla olmasını gösterir ve çift kutup momenti diye adlandırılır. (2)  $Q$ , quadrupol momenti ise mıknatıslanmanın karesinin ortalamasınının, yani  $\langle S^2 \rangle$ 'nin çizgisel bir fonksiyonudur ve

$$Q = 3 \langle S^2 \rangle - 2 \quad (\text{III.5})$$

şeklinde tanımlanır. Düzen parametreleri iç değişkenler cinsinden kolayca

$$S \equiv \langle S \rangle = X_1 - X_3 \quad ; \quad Q \equiv \langle Q \rangle = X_1 - 2X_2 + X_3 \quad (\text{III.6})$$

olarak elde edilir. Denklem (III.1) ve (III.6) kullanılarak nokta (iç) değişkenleri, düzen parametreleri cinsinden

$$\begin{aligned} X_1 &= 1/3 + 1/2 S + 1/6 Q \\ X_2 &= 1/3(1-Q) \\ X_3 &= 1/3 - 1/2 S + 1/6 Q \end{aligned} \quad (\text{III.7})$$

şeklinde ifade edilir.

Düzen parametrelerini denklem (III.2), (III.3) ve (III.6) kullanılarak band değişkenleri cinsinden

$$\langle S \rangle = Y_{11} + Y_{12} - (Y_{32} + Y_{33}) \quad (\text{III.8a})$$

$$\langle Q \rangle = Y_{11} + Y_{33} + 2Y_{13} - (Y_{21} + 2Y_{22} + Y_{23})$$

olarak tanımlayabiliriz. Bütün band değişkenlerinin spin ortalamalarına ve korelasyonlarına dönüşümleri, band değişken-

leri cinsinden,

$$\langle SS \rangle = Y_{11} - 2Y_{13} + Y_{33}$$

$$\langle SQ \rangle = Y_{11} - Y_{33} - 2Y_{12} + 2Y_{23} \quad (\text{III.8b})$$

$$\langle QQ \rangle = Y_{11} + 2Y_{13} + 4Y_{22} + Y_{33} - 4(Y_{12} + Y_{23})$$

olduđu gibidir. Benzer şekilde nokta deđişkenlerini denklem (III.4), (III.8a) ve (III.8b) denklemleri kullanılarak düzen parametreleri cinsinden,

$$\begin{aligned} \langle Y_{11} \rangle &= 1/9 + 1/3 \langle S \rangle + 1/9 \langle Q \rangle \\ &\quad + 1/4 \langle SS \rangle + 1/6 \langle SQ \rangle + 1/36 \langle QQ \rangle \\ \langle Y_{22} \rangle &= 1/9 - 2/9 \langle Q \rangle + 1/9 \langle QQ \rangle \\ \langle Y_{33} \rangle &= 1/9 - 1/3 \langle S \rangle + 1/9 \langle Q \rangle + 1/4 \langle SS \rangle \\ &\quad - 1/6 \langle SQ \rangle + 1/36 \langle QQ \rangle \\ \langle Y_{12} \rangle &= 1/9 + 1/6 \langle S \rangle - 1/18 \langle Q \rangle - 1/6 \langle SQ \rangle - 1/18 \langle QQ \rangle \\ \langle Y_{13} \rangle &= 1/9 + 1/9 \langle Q \rangle - 1/4 \langle SS \rangle + 1/36 \langle QQ \rangle \\ \langle Y_{23} \rangle &= 1/9 - 1/6 \langle S \rangle - 1/18 \langle Q \rangle + 1/6 \langle SQ \rangle - 1/18 \langle QQ \rangle \end{aligned} \quad (\text{III.9})$$

şeklinde elde edilir, buradaki son üç denklemin iki kez de-  
jenere olduđu görölmektedir.

Sistemin  $\mathcal{H}$  Hamiltoniyeni,

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle kl \rangle} ( JS_k S_l + KQ_k Q_l ) \quad (\text{III.10})$$

halindedir, burada J, bilineer deđişme etkileşme sabiti, K  
biquadratik deđişme etkileşme sabitidir. J ve K parametre-  
lerinin sıcaklığa bağımlılığı ise  $J \rightarrow J / kT$ ,  $K \rightarrow K / kT$  dir  
ve burada T mutlak sıcaklık, k Boltzmann faktörüdür.

E iç enerjisi çift değişkenler cinsinden,

$$\frac{\beta E}{1/2 \forall N} = \sum_{i,j} \epsilon_{ij} Y_{ij} ; \quad E = \langle \mathcal{H} \rangle \quad (\text{III.11})$$

olarak ifade edebiliriz, burada N, örgü nokta sayısı,  $\forall$  koordinasyon sabitidir ve  $\epsilon_{ij}$ 'ler ise

$$\begin{aligned} \epsilon_{11} &= - ( J + K ) \\ \epsilon_{22} &= - 4K \\ \epsilon_{33} &= - ( J + K ) \\ \epsilon_{12} &= \epsilon_{21} = 2K \\ \epsilon_{13} &= \epsilon_{31} = ( J - K ) \\ \epsilon_{23} &= \epsilon_{32} = 2K \end{aligned} \quad (\text{III.12})$$

olarak verilir.

Modelin örgü-gaz modelindeki uygulanması ise şu şekildedir: Örgü-gaz modelindeki dolu konumu işgal eden parçacıkların iki duruma sahip olduğu kabul edilir. Bu kabule göre iki yönelme hareketi ortalama spin değerlerinin +1 ve -1 olma ihtimaline karşılık gelir. Spin ortalama değerinin 0 olma ihtimalini ise örgü-gaz modelindeki boş konuma karşılık gelir ve örgü-gaz modelindeki K, parçacıklar arasındaki yönelmeden bağımsız etkileşme enerji sabiti ve J ise çiftlenimin yönelmeye bağlı enerji sabitidir.

## BÖLÜM IV

### IV. DENGİ DURUMUNUN İNCELENMESİ

Bu bölümde kümesel deęişim metodunun çift yaklaşımı ile bilineer ve biquadratik etkileşmeli spin-1 Ising modeline uygulanarak sistemin denge davranışını belirleyen lineer olmayan cebirsel denklem sistemi elde edilecektir. Bu denklem sistemi öz-baęlılık denklemleri diye adlandırılır. Bunun için Bölüm II-1 de verilen sıra takip edilecektir ki önce temel kümenin şekli belirlenecek ve daha sonra kümenin her bir konfigürasyonu bir dağılım deęişkeni ile ifade edilecektir. Bundan sonra aęırlık faktörü olan  $W$ , Denklem-II.15'den faydalanılarak tespit edilip entropi ve serbest enerji ifadeleri elde edilecek ve iç deęişkenlere göre minimize edilip öz-baęlılık denklemleri çıkarılacaktır.

#### 4.1 Aęırlık Faktörü $W$ 'nin Elde Edilmesi

Entropi ve serbest enerji ifadelerini elde edebilmek için önce  $W$  aęırlık faktörünün hesaplanması gerekmektedir. Bölüm-II.2'de iki durumlu sistemler için genelleştirerek hesaplanan aęırlık faktörü, kolayca üç durumlu sistemler içinde genelleştirilip yazılabilir. Bunun için Bölüm III'de de tanımlanan  $X_i$  nokta deęişkenleri ve  $Y_{ij}$  band deęişkenleri kullanılırsa,

Üç durumlu sistem için, özellikle spin-1 Ising sistemi için  $W$  ağırlık faktörü

$$[W]^{1/N} = \frac{[\prod_{i=1}^3 (X_i L)!]^{\mathcal{V}-1}}{L!^{\mathcal{V}-1} [\prod_{i,j=1}^3 (Y_{ij} L)!]^{\mathcal{V}}} \quad (IV.1)$$

şeklinde hesaplanır. Burada  $N$ , sistemdeki örgü noktaları sayısı,  $L$  toplulukdaki sistem sayısı,  $\mathcal{V}$  koordinasyon sayısıdır ki bu da örgüdeki en yakın komşu örgü noktalarının sayısıdır.

Bu çalışmada bilineer ve biquadratik etkileşmeli spin-1 Ising modeli b.c.c. yapı için, yani  $\mathcal{V}=8$  alınarak,  $\alpha$  çiftlenim oran sabitinin küçük değerlerinde sistemin davranışı incelenecektir. Kümesel değişim metodunun b.c.c. yapı için daha hassas sonuç verdiği bilinmektedir [48]. Burada bu noktayı da belirtelim ki KDM'nun çift yaklaşım metodu f.c.c. örgü için bulunan sonuçlar çok iyi değildir.

Sistemin entropisini, (II.4), (III.11 ve (IV.1) denklemleri Stirling yaklaşımıyla beraber kullanılırsa sistemin  $S_e$  entropisini

$$S_e = kN [ \frac{\mathcal{V}}{2} \sum_{i,j=1}^3 Y_{ij} \ln Y_{ij} - (\mathcal{V}-1) \sum_{i=1}^3 X_i \ln X_i ] \quad (IV.2)$$

şeklinde elde edilir. Böylece serbest enerji ifadesi, (II.4), (III.11) ve (IV.2) denklemleri kullanılarak iç değişkenler cinsinden,

$$\begin{aligned} \mathbb{F} = \frac{\beta F}{N} = & \frac{\mathcal{V}}{2} \sum_{i,j=1}^3 \epsilon_{ij} Y_{ij} + \frac{\mathcal{V}}{2} \sum_{i,j=1}^3 Y_{ij} \ln Y_{ij} \\ & - (\mathcal{V}-1) \sum_{i=1}^3 X_i \ln X_i + \lambda (1 - \sum_{i,j=1}^3 Y_{ij}) \end{aligned} \quad (IV.3)$$

ifade edilir, burada  $\lambda$  normalizasyon sabiti olup Lagrange çarpanı diye de adlandırılır ve Lagrange çarpanından önceki

terim çift terimler üzerinden alınan hesabı düzeltmek için için gelir.

Sistemin denge durumunu inceleyebilmek için denklem (IV.3) ile verilen serbest enerji ifadesini band değişkenlerine göre minimize ederek öz-bağıllık denklemlerini bulmamız gerekir. Denklem (IV.3)'ün  $Y_{ij}$ 'lere göre minimize edilişi

$$\frac{\partial \Xi}{\partial Y_{ij}} = 0 \quad (i,j=1,2,3) \quad (IV.4)$$

şeklindedir. Yukarıdaki eşitlikten 9 tane öz-bağıllık denklem elde edilir, bu denklemlerin genel hali ise,

$$Y_{ij} = (X_i X_j)^{\frac{1}{V}} \exp(-\varepsilon_{ij}) / Z \equiv \frac{e_{ij}}{Z} \quad (IV.5)$$

olup burada

$$\frac{1}{V} = \frac{V-1}{V} \quad \text{ve} \quad Z = \sum_{i,j=1}^3 e_{ij}$$

ile verilir. Bu 9 tane öz-bağıllık denklem sayısı  $Y_{ij} = Y_{ji}$  simetrisini göz önüne aldığımızda denklem sayısı,

$$\begin{aligned} Y_{11} &= (X_1 X_1)^{\frac{1}{V}} \exp(-\varepsilon_{11}) / Z \equiv \frac{e_{11}}{Z} \\ Y_{22} &= (X_2 X_2)^{\frac{1}{V}} \exp(-\varepsilon_{22}) / Z \equiv \frac{e_{22}}{Z} \\ Y_{33} &= (X_3 X_3)^{\frac{1}{V}} \exp(-\varepsilon_{33}) / Z \equiv \frac{e_{33}}{Z} \\ Y_{12} &= (X_1 X_2)^{\frac{1}{V}} \exp(-\varepsilon_{12}) / Z \equiv \frac{e_{12}}{Z} \equiv \frac{e_{21}}{Z} \\ Y_{13} &= (X_1 X_3)^{\frac{1}{V}} \exp(-\varepsilon_{13}) / Z \equiv \frac{e_{13}}{Z} \equiv \frac{e_{31}}{Z} \\ Y_{23} &= (X_2 X_3)^{\frac{1}{V}} \exp(-\varepsilon_{23}) / Z \equiv \frac{e_{23}}{Z} \equiv \frac{e_{32}}{Z} \end{aligned} \quad (IV.6)$$

şeklinde 6'ya indirgenir.

Buradaki 6 adet lineer olmayan cebirsel denklemler  $\alpha = J/K$ ,

$\gamma=8$  ve  $kT$ 'ye bağılı olarak Amerikan Ulusal Standartlar ve Teknoloji Enstitüsü (NIST)'nin SNSQE alt proğramı kullanılarak çözüldü. Elde edilen  $Y_{ij}$  değerleri denklem (III.8a)'da yerlerine konularak  $S$  ve  $Q$  düzen parametrelerinin sıcaklığa göre değişimi küçük  $\alpha$  değerleri için ( $0 < \alpha < 3$ ) elde edildi. Çözümler Şekil-IV.1, 2 ve 3'te verildi. Çözümlere ve şekillere geçmeden önce, burada şu noktayı açıklayalım ki bu denklemlerin  $\alpha \geq 3$  için çözümlerin kapsamlı tartışması M. Keskin ve P.H.E.Meijer [38] tarafından yapılmıştır bu çalışmalarında özetle şunlar çıkarılabilir:

1)  $\alpha > 4$  için  $S$  ve  $Q$ 'nun kararlı durum çözümleri sıfırdan büyüktür ve bu çözümlerin sıcaklık yükseldikçe sürekli bir şekilde sıfıra yaklaştığı görülmektedir ki bu bize ikinci dereceden faz geçişi olduğunu gösterir. Kararlı çözümlere ilaveten  $S=0$  ve  $Q>0$  olduğu yarıkararlı çözümler elde edilmektedir.

2)  $3 < \alpha \leq 4$  aralığındaki çözümler için  $S$  ve  $Q$ 'nun kararlı durum çözümleri yine sıfırdan büyüktür. Fakat  $S$  ve  $Q$  sıcaklık yükseldikçe belli bir sıcaklıkta aniden sıfıra atlamaktadır.  $S$  ve  $Q$ 'nun sürekli durumdan aniden sıfıra atlaması birinci dereceden faz geçişi olduğunu göstermektedir.  $\alpha$ 'nın bu oranı için  $S = 0$  ve  $Q > 0$  olduğu yarıkararlı durum çözümleri de bulunur.

3)  $\alpha = 3$  için özel bir durum olduğunu söyleyebiliriz ki bu durum toplam simetriye uyar [36].  $S$  ve  $Q$ 'nun kararlı durum çözümleri  $S=Q>0$  olduğu görülmektedir. Yine  $S$  ve  $Q$ 'nun kararlı değerleri aralıklı olarak sıfıra iner, yine bu durumda  $S$  ve  $Q$  nun kararlı durumlarının sıfır olduğu görülmektedir.

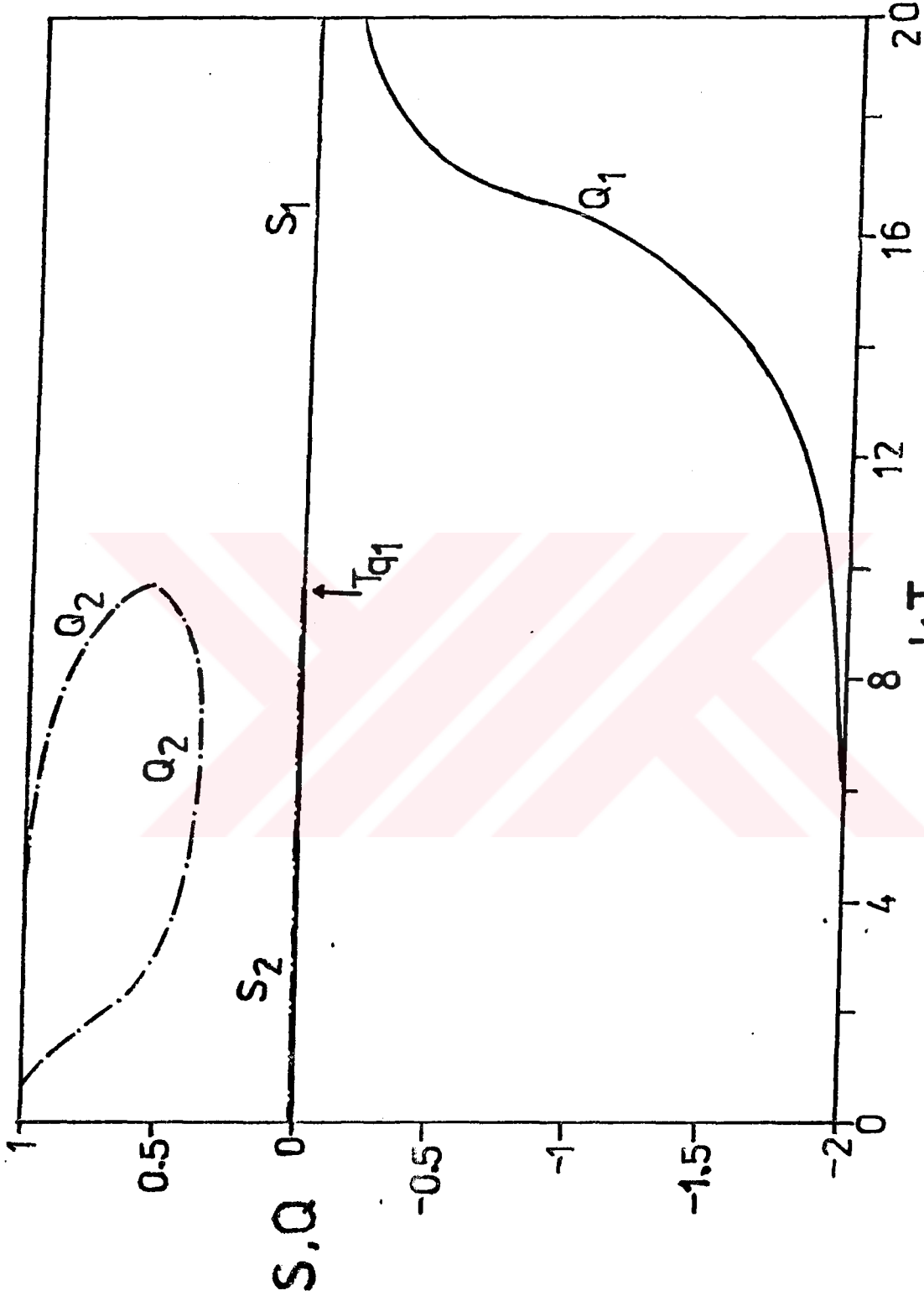
Bu çalışmanın amacı ise bilinear ve biquadratik etkileşmeli spin-1 Ising modelinin b.c.c. yapı için kümesel değişim metodunun çift yaklaşımı ile  $0 < \alpha < 3$  aralığında sistemin davran-

nışını incelemektir.  $\alpha = 0.1$ ,  $\alpha = 1$  ve  $\alpha = 2$  değerleri için (IV.6) lineer olmayan cebirsel denklem sistemi çözüldü ve  $Y_{ij}$  değerleri denklem (III-8a)'da yerlerine yazılarak S ve Q düzen parametrelerinin sıcaklığa göre değişimleri elde edildi ve bunlar Şekil-IV.1, 2 ve 3'te gösterildi. Bu şekillerde kullanılan 1 alt indisi kararlı durum çözümlerini, 2 alt indisi yarıkararlı veya kararsız durum çözümlerini göstermektedir.

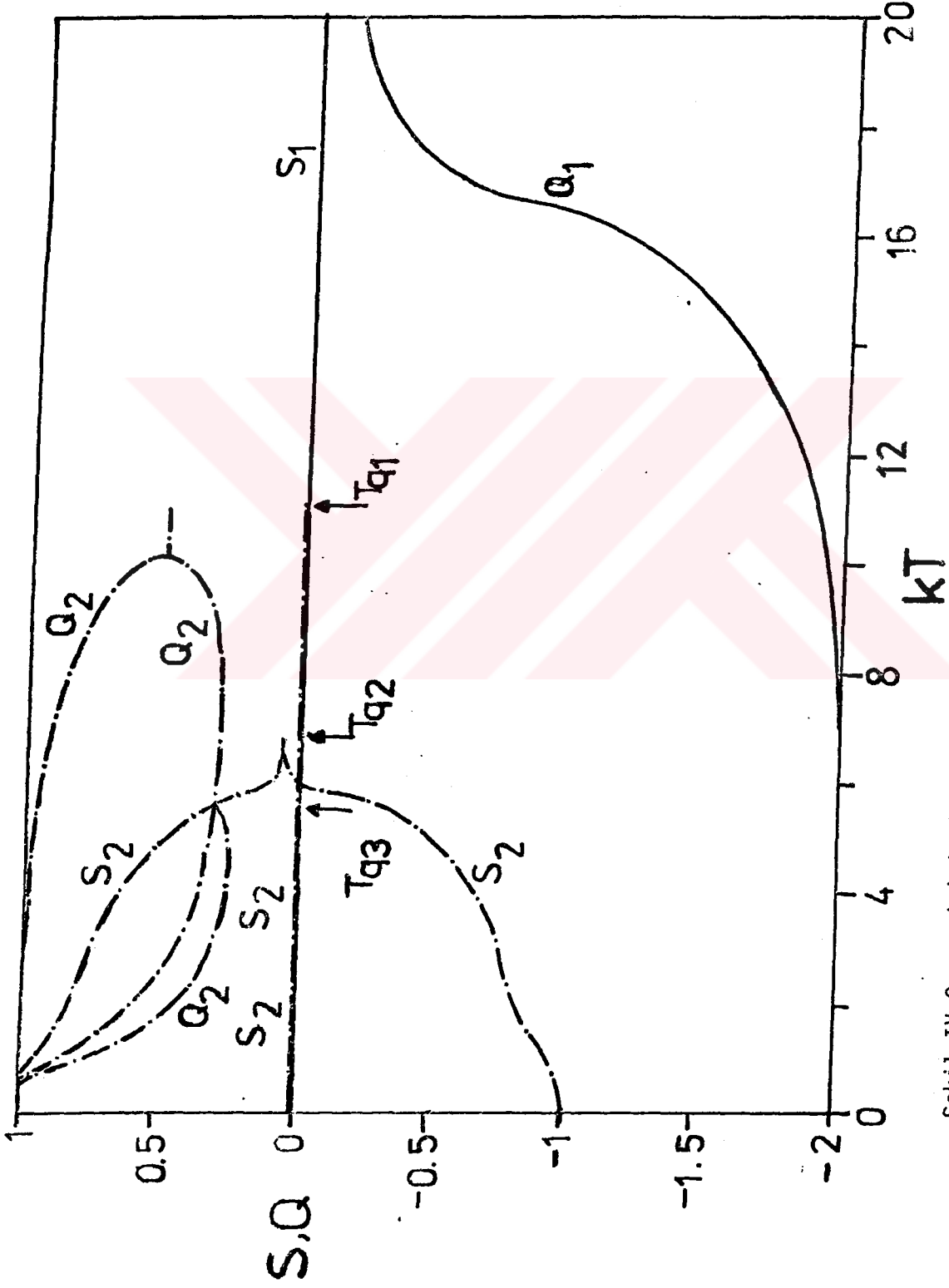
Şekil-IV.1'de  $\alpha = 0.1$  değeri için S'nin kararlı durum çözümü daima sıfır olduğu ve Q'nun kararlı durum çözümü negatif olduğu ve sıcaklık yükseldikçe sürekli bir şekilde sıfıra yaklaştığı görülmektedir. Ayrıca bu durumda serbest enerji en düşük değerdedir. S'nin yarıkararlı veya kararsız durum çözümlerinin de sıfır olduğu ve Q'nun yarıkararlı veya kararsız durum çözümlerinin pozitif olduğu görülmektedir. Quasikritik sıcaklık ise düşük sıcaklıklarda meydana gelmektedir.

Şekil-IV.2'de  $\alpha = 1$  değeri için Şekil-IV.1'e benzer şekilde S'nin kararlı durum çözümü daima sıfır ve Q'nun kararlı durum çözümü daima negatif ve sıcaklık yükseldikçe sürekli bir şekilde sıfıra yaklaştığı görülmektedir. Ayrıca bu durumda serbest enerji en düşük değerdedir. S'nin yarıkararlı veya kararsız durum çözümlerinin bir kısmı sıfır olmakla birlikte bir kısmı ise sıcaklık eksenine göre simetrik olmaktadır. Q'nun yarıkararlı veya kararsız durum çözümleri ise daima pozitif değerde olduğu görülmektedir. Bu durumda birden fazla  $T_{qi}$  meydana gelmektedir ve bunlardan birisi  $\alpha=0.1$  durumuna göre daha yüksek sıcaklıkta meydana gelmektedir.

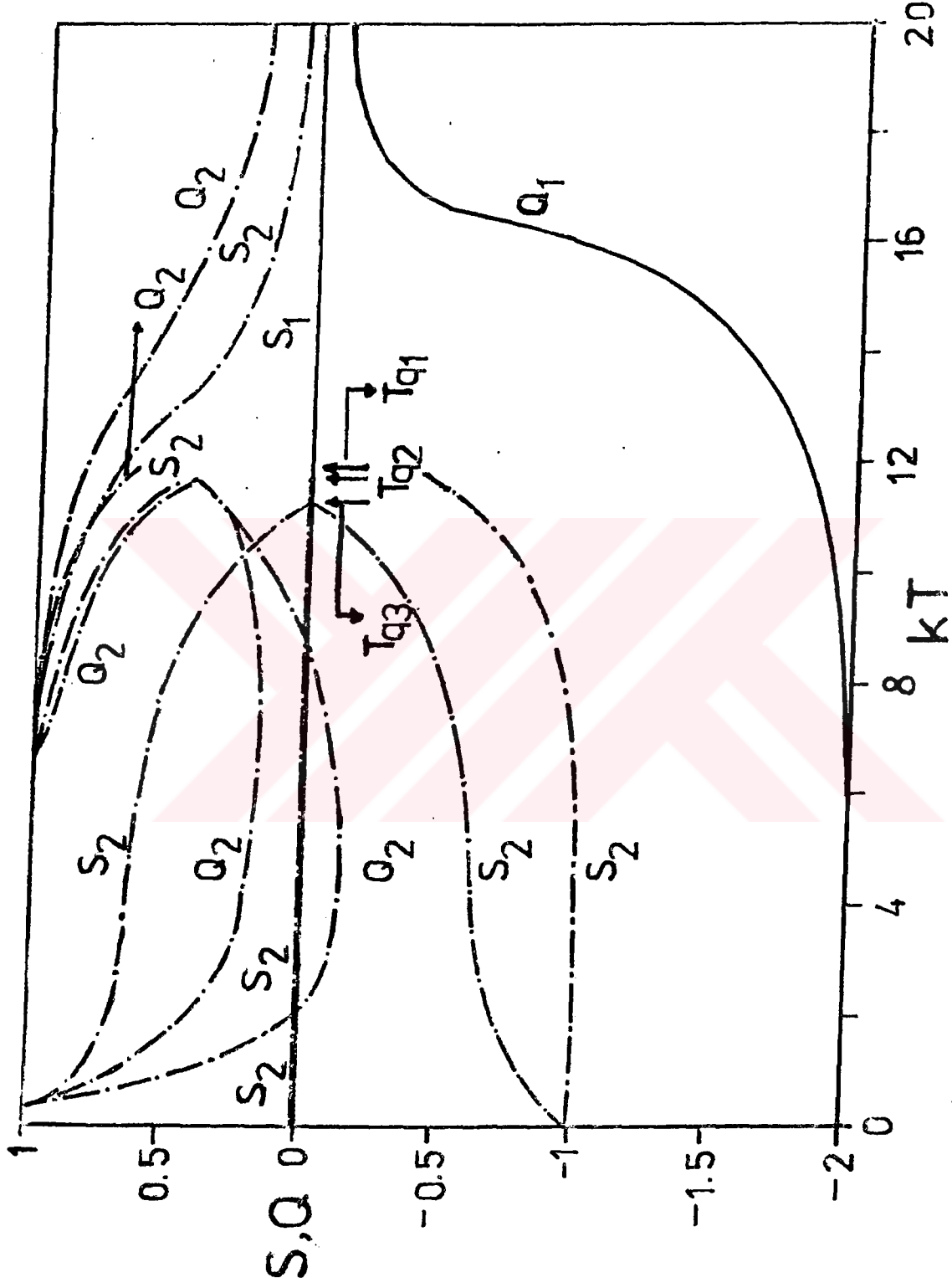
Şekil-IV.3'te  $\alpha = 2$  değeri için yine aynı şekilde S'nin kararlı durum çözümünün daima sıfır olduğu ve Q'nun kararlı durum çözümünün negatif olduğu ve sıcaklık yükseldikçe Q'nun kararlı durum çözümünün sıfıra yaklaştığı görülmektedir. Yine bu durumda serbest enerji en düşük değerdedir. S ve Q'nun yarıkararlı ve kararsız durum çözümlerinin hem negatif hem de



Şekil-IV.1.  $\alpha=0.1$  için S ve Q'nun sıcaklığa göre değişimi. 1 alt indisi kararlı çözümlü, 2 indisi ise yarıkararlı veya kararsız çözümü göstermektedir.



Şekil-IV.2.  $\alpha=1$  için S ve Q'nun sıcaklığa göre değişimi. 1 alt indisi kararlı çözümleri, 2 indisi ise yarıkararlı veya kararlı çözümleri göstermektedir.



Şekil-IV.3.  $\alpha=2$  için S ve Q'nun sıcaklığa göre değişimi. 1 alt indisi kararlı çözümlü, 2 indisi ise yarıkararlı veya kararlı çözümlü göstermektedir.

pozitif olduđu gör÷lmektedir. Ayrıca  $\alpha = 2$  durumunda birden fazla yarıkararlı ve kararsız durum çözümlerinin var olduđu gör÷lmektedir. Özel bir durum arzeden birden fazla yarıkararlı ve kararsız durumların meydana gelmesi olayı deneysel olarak hızlı soğutma teknikleriyle elde edilen amorf metallerde gözlenmektedir [53].

Son olarak  $\alpha$  değeri azalırken aynı zamanda yarıkararlı ve kararsız çözümlerin ortaya çıktığı en yüksek sıcaklık değeri olan yarıkritik ( $T_{qi}$ ) sıcaklığının da azaldığı açıkça gör÷lmektedir.  $\alpha$ 'nın düşük değerlerine karşılık  $T_{qi}$ , küçük sıcaklıklarda meydana gelir ve bazı yarıkararlı ve kararsız durum çözümleri meydana gelmez.

## BÖLÜM V

### V. SONUÇ VE TARTIŞMA

Bilineer ve biquadratik etkileşmeli spin-1 Ising modelinin dengeli davranışı en düşük dereceli kümesel değişim metodunun çift yaklaşımı ile incelendi. Çiftlenme oran sabiti  $\alpha$ 'nın küçük değerleri için ( $0 < \alpha < 3$ ) S ve Q düzen parametrelerinin sıcaklığa bağıllığı Şekil-IV.1, 2 ve 3'te verildi. Bu şekillerden faydalanılarak aşağıdaki sonuçlar çıkarılabilir:

1)  $\alpha = 0.1$  değeri için S'nin kararlı durum çözümü daima sıfırdır, Q'nun kararlı durum çözümü negatiftir ve sıcaklık yükseldikçe Q'nun kararlı durum çözümü sürekli bir şekilde sıfıra yaklaşmaktadır. Ayrıca bu durumda serbest enerji değeri en düşük değerde olduğu görülmektedir. Q'nun yarıkararlı veya kararsız durum çözümleri daima pozitif değerdedir. S'nin yarıkararlı veya kararsız durum çözümlerinin ise daima sıfır olduğu görülmektedir (Bkz. Şekil-IV.1). Yarıkararlı veya kararsız durum çözümlerinin başladığı en yüksek sıcaklık değeri  $\alpha = 0.1$  için  $T_q = 9.7$  dir.

2)  $\alpha = 1$  değeri için de benzer şekilde S'nin kararlı durum çözümü daima sıfırdır, Q'nun kararlı durum çözümü ise daima negatif ve sıcaklık yükseldikçe Q'nun kararlı durum çözümü

sürekli bir şekilde sifira yaklaşmaktadır. Ayrıca bu durumda serbest enerji değeri en düşük degerdedir. S'nin yarıkararlı veya kararsız durum çözümlerinin bir kısmı sifirdır ve bir kısmı ise sıcaklık eksenine göre simetrik bir hal arz etmektedir. Q'nun yarıkararlı veya kararsız durum çözümleri ise daima pozitif degerde olduđu görülmektedir ( Bkz. Şekil-IV.2). Q'nun yarıkararlı veya kararsız durum çözümlerinin başladığı en yüksek sıcaklık değeri  $T_{q1} = 11.1$  dir ve S'nin sifirdan farklı yarıkararlı veya kararsız durum çözümlerinin başladığı en yüksek sıcaklık değeri  $T_{q2} = 6.1$  dir.

3)  $\alpha = 2$  değeri için yine benzer şekilde S'nin kararlı durum çözümleri daima sifir, Q'nun kararlı durum çözümleri ise daima pozitif ve sıcaklığın yükselmesiyle Q'nun kararlı durum çözümleri sifira yaklaşmaktadır ve ayrıca bu durum da serbest enerji en düşük değerine sahiptir. S ve Q'nun yarıkararlı veya kararsız durum çözümlerinin hem pozitif hem de negatif olduđu görülmektedir. Ayrıca  $\alpha = 2$  durumunda birden fazla yarıkararlı ve kararsız durum çözümlerinin olduđu görülmektedir. Bu olay hızlı katılaştırma teknolojisinin deneysel çalışmalarında önemli rol oynar [53]. S'nin yarıkararlı veya kararsız durum çözümlerinin bir kısmı da sıcaklık eksenine göre simetrik bir durum sergilemektedir. S ve Q'nun yarıkararlı veya kararsız durum çözümlerinin bir kısmı  $T_{q1} = 11.8$ , bir kısmı  $T_{q2} = 11.6$  ve bir kısımda  $T_{q3} = 11.2$  sıcaklıklarının altında elde edilmektedir. Ayrıca S ve Q'nun yarıkararlı veya kararsız durum çözümleri yüksek sıcaklıkta elde edilmektedir. Bu durumda 3 tane  $T_{qi}$  meydana gelmektedir.

Şekil-IV.1, 2 ve 3'te görülen bütün 2 alt indislerinin yarıkararlı ya da kararsız çözümler olup olmadığını sınıflandırmadık. Bu çözümlerin sınıflandırması aşağıdaki yollardan birisi ile yapılabilir:

1) Serbest enerjinin  $Y_{ij}$  değişkenlerine göre ikinci türevi-

nin determinantı olan Hessian determinantı hesaplanmalıdır ve tüm alt determinantların işaretleri incelenmelidir. Hessian determinantının değeri negatif ise çözüm bir eyer noktasına sahiptir ve kararsız çözümdür. Eğer Hessian determinantının değeri pozitif ise maksimum yada minimum olup olmadığına bakılır veya alt determinantların işaretlerine bağlı olarak eyer noktasına bakılır. Eğer alt determinantlarının tamamının işareti pozitif ise yarıkararlı duruma karşılık gelen bir minimuma sahip oluruz zira, serbest enerjinin en düşük değerine karşılık gelen bir çözüm değildir. Çünkü serbest enerjinin en küçük değeri kararlı çözümdür. Alt determinantların tüm değerleri negatif ise çözümler maksimum olur ki bu kararsız çözüme karşılık gelir. Eğer işaretler karışık ise eyer noktaları ile ilgileniriz ki bu aynı zamanda bir kararsız çözümdür.

2) Oran denklemi elde edilmeli ve S ve Q'nun iki boyutlu faz uzayındaki grafiksel gösteriminden oluşan akış (flow) diyagramları şeklinde çözümler ifade verilmelidir. Akış diyagramındaki eyer veya pik noktalarına karşı gelen çözümler kararsız çözümler, aksi takdirde yarıkararlı çözümlerdir. Bu oran denklemi Kikuchi'nin yol ihtimaliyet metodu ile elde edilebilir [21].

#### KAYNAKLAR

- [1] M. Blume, V. J. Emery and R. B. Griffiths, "Ising Model for the Transition and Phase Separation in He<sup>3</sup>-He<sup>4</sup> Mixtures", Phys. Rev. A4, 1071-1077 (1971).
- [2] A. Hintermann and F. Rys, "Gittermodell eines ungeordneten Ferromagneten II. Exakte Lösung des eindimensionalen Modells", Helv. Phys. Acta, 42, 608 (1969).
- [3] J. Bernasconi and F. Rys, "Critical Behaviour of a Magnetic Alloy", Phys. Rev. B4, 3045 (1971).
- [4] J. Lajzerowicz and J. Sivardière, "Spin-1 Lattice-Gas Model I. Condensation and Solidification of a Simple Fluid", Phys. Rev. A11, 2079-2089 (1975).
- [5] J. Sivardière and J. Lajzerowicz, "Spin-1 Lattice-Gas Model II. Condensation and Phase Separation in a Binary Fluid", Phys. Rev. A11, 2090-2100 (1975).
- [6] J. Sivardière and J. Lajzerowicz, "Spin-1 Lattice-Gas Model III. Tricritical Points in Binary and Ternary Fluids", Phys. Rev. A11, 2101-2110 (1975).
- [7] M. Schick and W. H. Shih, "Spin-1 Model of a Microemulsion", Phys. Rev. B34, 1796 (1986); Phys. Rev. Lett. 59, 1205 (1987); G. Gompper and M. Schick, Phys. Rev. B41, 9148 (1990).

- [8] K. G. Chakraborty, "The Re-entrant Behaviour of the Spin-1 Ising Model in the Effective-field Approximation", *J. Phys. C*21, 2991 (1986); R. R. Netz, *Europhys. Lett.* 17, 373 (1992).
- [9] M. Blume, "Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in  $UO_2$ ", *Phys. Rev.* 141, 517-524 (1966).
- [10] H. W. Capel, "On the Possibility of First-Order Phase Transition in Ising System of Triplet Ions with Zero Field Splitting", *Physica*, 32, 966-988 (1966).
- [11] H. W. Capel, "On the Possibility of First-Order Phase Transition in Ising System of Triplet Ions with Zero Field Splitting II.", *Physica*, 33, 295-331 (1967)
- [12] H. W. Capel, "On the Possibility of First-Order Phase Transition in Ising System of Triplet Ions with Zero Field Splitting I.", *Physica*, 37, 423-441 (1967)
- [13] H. W. Capel, "Phase Transition in Spin-One System", *Phys. Lett.* 23, 327-328 (1966).
- [14] H.H. Chen and P. H. Levy, "Dipole and Quadrupole Phase Transition in Spin-1 Models", *Phys. Rev. B*7, 4267-4284, (1973); "High Temperature Series Expansions for a Spin-1 Model of Ferromagnetism", *Phys. Rev. B*7, 4284-4289 (1973).
- [15] M. Keskin and P. H. E. Meijer, "A Model for Quenching Via Hidden Variables; Non-Equilibrium Behaviour of a System with Two Long Range Order Parameters", *Physica*, 122A, 1-12 (1983).
- [16] M. Keskin, "A Model for Quenching Via Hidden Variables; Non-Equilibrium Behaviour of a System with Two Long Range Order Parameters II. Influence of a Magnetic Field", *Phys.* 135A, 226-236 (1986).
- [17] D. M. Burley, "Phase Transition and Critical Phenomena" ed. by C. Domb and M. D. Green (Academic, London, 1972) Vol. 2.

- [18] R. Kikuchi, "A Theory of Cooperative Phenomena", Phys. Rev. 81, 988-1002 (1951).
- [19] R. Kikuchi, "Crystal Statistic", (Hughes Research Labs. Malibu, California, 1979 Basılmamış Çalışma).
- [20] H. Şişman ve M. Keskin, "Kooperatif Olayların Kümesel Değişim Metodu ile Çözümü", Doga-Tr.J. of Phys. 14, 88-112 (1990).
- [21] R. Kikuchi, "The Path Probability Method", Prog. Theor. Phys. Supply, 35, 1-64 (1966).
- [22] B. L. Arora and D. P. Landau, AIP Conf. Proc. 10, 870 (1973).
- [23] A. K. Jain and D. P. Landau, Phys. Rev. B4, 694 (1976).
- [24] R. Harris, "A Study of First and Second Order Phase Transition Using Monte Carlo Simulations in the Micro-Canonical Ensemble", Phys. Lett. A111,299-303 (1985).
- [25] M. Tanaka and N. Nagahashi, " Monte Carlo Study of the Ising System with Biquadratic Interaction", phys. stat. sol. (b) 98, K17 (1980); I. Ono, J. de Physique, C8, 1541 (1988).
- [26] M. Tanaka, Y. Fujiwara, "Kinetic Spin-One Ising Model Including Biquadric Interactions", phys. stat. sol. (b) 143, K107 (1987).
- [27] H. H. Lee, D. P. Landau, "Phase Transitions in an Ising Model for Monolayers of Coadsorbed Atoms", Phys. Rev. B20, 2873 (1979).
- [28] B. L. Arora, " Specific Heat of Spin-1 Ising Chain in the Presence of Impurities and Magnetic Field", J. Phys. C17, 2511 (1980).
- [29] K. G. Wilson, "The Renormalization Group and Block Spins", Phys. Rev. B9, 3174-3184 (1971).
- [30] S. Krinsky and D. Furman, "Exact Renormalization Group Exhibiting Tricritical Fixed Point for a Spin-1 Ising Model in One Dimension", Phys. Rev. B11, 2602-2611 (1975).

- [31] A. N. Berker and M. Wortis, "Blume-Emery-Griffiths Model in Two Dimensions; Phase Diagram and Critical Properties from a Position-Space Renormalization Group", *Phys. Rev. B*14, 6945-6967 (1976); J. Adler, A. Aharoni, J. Oitmaa, *J. Phys. A*11, 963 (1978).
- [32] D. F. A. Bonfim, F. C. Sa Barreto, "Renormalization Group Treatment of a Spin-One Ising Model with Biquadratic Exchange Interaction", *Phys. Lett.* 107A, 341 (1985).
- [33] C.E.I. Carneiro, V. B. Henriques, S. R. Salinas, "Renormalization Group Calculations for a Spin-1 Ising Model with Bilinear and Biquadratic Exchange Interactions", *J. Phys. A*20, 189 (1987).
- [34] M. Droz, A. Malaspinas, "Migdal Renormalization-Group Transformation for the Kinetic Ising Model in Arbitrary Dimension", *J. Phys. C*13, 4365 (1980); I. Bose, S. Chatterjee, *Phys. Stat. Sol. (b)* 111, K137 (1982).
- [35] G. A. T. Allan, D. D. Betts, "Stability Conditions for the Generalized Ising Model", *Proc. Phys. Soc. London*, 91, 341 (1972); H. H. Chen, R. J. Joseph, *J. Math. Phys.* 13, 725 (1972); J. Oitmaa, *J. Phys. C*4, 2465 (1971); 5, 435 (1973); G. B. Taggart, *Phys. Rev. B*20, 3886 (1979).
- [36] D. Furman, S. Dattagupta and R. B. Griffiths, "Global Phase Diagram for Three Component Model", *Phys. Rev.* 15, 441-464 (1971).
- [37] I. D. Lawrie, S. Sarbach, "Phase Transitions and Critical Phenomena", ed. by C. Comb, J. L. Lebowitz (Academic, London, 1984) Vol. 9.
- [38] M. Keskin and P. H. E. Meijer, "Dynamics of a Spin-1 Ising Model with the Pair Correlation", *J. Chem. Phys.* 85, 7324-7333 (1986).

- [39] T. Kaneyoshi, "A New Disordered Phase and Its Physical Contents of the Blume-Energy-Griffiths Model", J. de Physique, C8, 1539 (1988); 21 L1679 (1988).
- [40] T. Horiguchi, 'A Spin-One Ising Model on a Honeycomb Lattice', Phys. Lett. 113A, 425 (1986).
- [41] M. Keskin, M. Arı, Ş. Özgan, 'Spin-1 Ising Modelinin Serbest Enerji Yüzeylerine Bağlı Olarak Çözümleri ve Sonuçların Yol İhtimaliyet Metoduyla Elde Edilenlerle Karşılaştırılması', Doğa-Tr. J. of Phys. 15, 575 (1991).
- [42] M. Arı, "Kümesel Değişim Metodu ile Spin-1 Ising Sisteminin Kararlı, Yarıkararlı ve Kararsız Çözümleri", Erciyes Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü Yüksek Lisans Tezi (1988).
- [43] M. Keskin, "Stable, Metastable and Unstable Solutions of a Spin-1 Ising System in the Presence of an External Magnetic Field", Physica Scripta, 47, 328-332 (1993).
- [44] H. Arslan, 'Dipol ve Quadrupol Momentlerinden Dolayı Meydana Gelen Manyetik Alanlar Varlığında Spin-1 Ising Sisteminin İncelenmesi', Erciyes Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü Yüksek Lisans Tezi (1994)
- [45] J. D. Gunton and M. Droz, "Introduction to the Theory of Metastable and Unstable States", (Springer Berlin, 1983); M. Keskin and Ş. Özgan, "A Model for Studying How to Obtain the Metastable States", Physica Scripta, 42, 349 (1990).
- [46] R. Kikuchi, "The Cluster Variation Method ", J. de Physique, 7, 307-313 (1977).
- [47] M. Kurata, R. Kikuchi, T. Wateria, "A Theory Cooperative Phenomena III. Detailed Discussion of the Cluster Variation Method", J. Chem. Phys. 213, 434-448 (1953).

- [48] R. Kikuchi, S. G. Brush, "Improvement of the Cluster Variation Method", J. Chem. Phys. 47, 195-203 (1967).
- [49] K. Huang, "Statistical Mechanics", First Edition, John Wiley and Sons. Inc. New York, 1963, Chapter 16.
- [50] H. A. Bethe, "Statistical Theory of Super Lattices" Proc. Roy. Soc. London, A150, 552 (1935).
- [51] R. Kubo, "Statistical Mechanics", North-Holland Pub. Comb. Amsterdam (1981).
- [52] P. H. E. Meijer, M. Keskin, J. L. Pegg, "Critical Lines for Generalized Three States Binary Gas-Liquid Lattice Model", J. Chem. Phys. 88, 1976-1982 (1988).
- [53] D. Turnbull, Rapid Solidification Technology, R. L. Ashbrook, ed. (American Society for Metals, Metals Park. OH, 1983).

## EK-1

```

*****ERDINC.FOR*****
***** BU PROGRAM LINEER OLMAYAN 6 ADET DENKLEMİ *****
*****SNSQE ALT PROGRAMI YARDIMIYLA ÇÖZER VE *****
*****SERBEST ENERJİYİ HESAP EDER*****
REAL J1,K,W(6),Y(6)
INTEGER J,N,IOPT,NPRINT,INFO,LWA,NWRITE
REAL TOL,FNORM
REAL X(6),FVEC(6),WA(180)
REAL ENORM, R1MACH
EXTERNAL FCN
COMMON E1,E2,E3,E4,E5,E6,G2,C1,C2,C3,Z
OPEN(21,FILE='BB')
DATA NWRITE/6/
IOPT=2
N=6
LWA=180
NPRINT=0
TOL=SQRT(R1MACH(4))
G1=8.0
G2=(G1-1.0)/G1
K=1.0

PRINT*, 'ENTER: X(1),X(2),X(3),X(4),X(5),X(6),STEP,MM,T,H1,H,J1'
READ(5,*) X(1),X(2),X(3),X(4),X(5),X(6),STEP,MM,T,H1,H,J1
WRITE(21,55) STEP,MM,H1,H,J1,T,X(1),X(2),X(3),X(4),X(5),X(6)
FORMAT(1X,'STEP=',F3.2,1X,'MM=',I3,1X,'H1=',F4.3,1X,'H=',F4.3,
* 1X,'J1=',F4.2,1X,'T=',F6.3// 'X(1)=' ,F7.5,1X,'X(2)=' ,F7.5,1X,
* 'X(3)=' ,F7.5,1X,'X(4)=' ,F7.5,1X,'X(5)=' ,F7.5,1X,'X(6)=' ,F7.5,//
* ,3X,'X(1)',3X,'X(2)',3X,'X(3)',3X,'X(4)',3X,'X(5)',3X,'X(6)',
* 4X,'S',8X,'Q',7X,'T',7X,'FREE'//)
FORMAT(1X,F6.3,2X,I3,2X,F6.3,2X,F6.3,2X,F6.3,2X,F8.3/6F7.5//)

DO 22 M=1,MM

B1=J1+K+2.*H+2.*H1
B2=4.*(K-H1)
B3=K+J1-2.*H+2.*H1
B4=-2.*K+H-H1
B5=K-J1+2.*H1
B6=-2.*K-H-H1

E1=EXP(B1/T)
E2=EXP(B2/T)
E3=EXP(B3/T)
E4=EXP(B4/T)
E5=EXP(B5/T)
E6=EXP(B6/T)

CALL SNSQE(FCN,JAC,IOPT,N,X,FVEC,TOL,NPRINT,INFO,WA,LWA)

S=X(1)+X(4)-X(6)-X(3)
Q=X(1)-2.*X(2)+X(3)-X(4)+2.*X(5)-X(6)

W(1)=E1*(C1*C1)**G2
W(2)=E2*(C2*C2)**G2
W(3)=E3*(C3*C3)**G2
W(4)=E4*(C1*C2)**G2
W(5)=E5*(C1*C3)**G2
W(6)=E6*(C2*C3)**G2
Z=W(1)+W(2)+W(3)+2.*(W(4)+W(5)+W(6))

```

```
DO 15 I=1,6  
Y(I)=W(I)/Z  
CONTINUE
```

```
A1=4.*({B1*Y(1)+B2*Y(2)+B3*Y(3)}+2.*{B4*Y(4)+B5*Y(5)+B6*Y(6)})  
A2=4.*T*{(Y(1)*ALOG(Y(1))+Y(2)*ALOG(Y(2))+Y(3)*ALOG(Y(3)))+2.*  
* (Y(4)*ALOG(Y(4))+Y(5)*ALOG(Y(5))+Y(6)*ALOG(Y(6)))}  
A3=7.*T*(C1*ALOG(C1)+C2*ALOG(C2)+C3*ALOG(C3))  
FREE=-A1+A2-A3  
FREE=-T*ALOG(Z)
```

```
PRINT*, X(1),X(2),S,Q,T,FREE  
WRITE(21,120) X(1),X(2),X(3),X(4),X(5),X(6),S,Q,T,FREE  
FORMAT(6F7.5,1X,F7.5,1X,F8.6,1X,F6.3,1X,F10.5)
```

```
T=T-STEP  
CONTINUE  
STOP  
END
```

