



T.C.

SELÇUK ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

İKİ BOYUTLU ÖRGÜDE FERRİMANYETİZMANIN İNCELENMESİ

Gülistan MERT

DOKTORA TEZİ

Fizik Anabilim Dalı

0cak-2013
KONYA
Her Hakkı Saklıdır

ÖZET

DOKTORA TEZİ

İKİ BOYUTLU ÖRGÜDE FERRİMANYETİZMANIN İNCELENMESİ

Gülistan MERT

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof.Dr. Haluk ŞAFAK

2013, 100 Sayfa

Jüri
Danışman Prof.Dr. Haluk ŞAFAK
Prof.Dr. Cesur EKİZ
Prof.Dr. Rıza ERDEM
Yrd.Doç.Dr. Atilla GÜLEÇ
Yrd.Doç.Dr. M. Özgür SEZER

Kare örgüde karma spin- 1 ve spin- 2 Heisenberg ferrimanyetik sistemin manyetik davranışları, çift-zaman sıcaklık-bağımlı Green fonksiyon teorisi kullanılarak incelendi. Sistem dış manyetik alanda tanımlanmaktadır. En yakın ve ikinci en yakın komşu etkileşimlerin, kristal alanların ve dış manyetik alanın, kompansasyon ve kritik sıcaklık üzerine etkileri gözlenmiştir. Ayrıca değişen bir manyetik alan için histerisiz eğrileri çizilmiştir. Dış manyetik alan sıfırken, sadece en yakın komşu etkileşimi ve kristal alan dâhil edildiğinde, kompansasyon noktası gözlenmez. İkinci en yakın komşu etkileşimleri de dahil edildiğinde ve belirli minimum bir değeri aştığı zaman kompansasyon noktası gözlenmeye başlar. Ayrıca sistem dış manyetik alana maruz kaldığı zaman birinci mertebe faz geçişleri gözlenmiştir.

Anahtar Kelimeler: Ferrimanyetik sistem, Green fonksiyonu, Histerisiz eğrisi, Karma-spin Heisenberg model, Kritik sıcaklık, Kompansasyon sıcaklık, Manyetik alınganlık.

ABSTRACT

Ph. D THESIS

STUDY OF FERRIMAGNETISM IN TWO DIMENSIONAL LATTICE

Gülistan MERT

THE GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCE OF SELÇUK UNIVERSITY
THE DEGREE OF DOCTOR OF PHILOSOPHY
IN PHYSICS

Advisor: Prof.Dr. Haluk ŞAFAK

2013, 100 Pages

Jury
Advisor Prof.Dr. Haluk ŞAFAK
Prof.Dr. Cesur EKİZ
Prof.Dr. Rıza ERDEM
Asst.Prof.Dr. Atilla GÜLEÇ
Asst.Prof.Dr. M. Özgür SEZER

Magnetic properties of mixed spin-1 and spin-2 Heisenberg ferrimagnetic system on square lattice have been studied by using the double-time temperature-dependent Green `s function theory. The system is defined in external magnetic field. The effects of the nearest and next nearest neighbor interactions, crystal fields and external magnetic field on the compensation and critical temperatures have been observed. Moreover, for a varying magnetic field, the hysteresis curves have been drawn. In the case of there is no external magnetic field, when only the nearest neighbor interaction and crystal field are included, one does not observe compensation point. When the next nearest neighbor interactions exceed a certain minimum value, compensation temperature begins to appear. The system has phase transition properties when it is under the influence of an external magnetic field.

Keywords: Critical temperature, Compensation temperature, Ferrimagnetic system, Green`s function, Hystresis curve, Mixed-spin Heisenberg model, Magnetic susceptibility.

ÖNSÖZ

Bu çalışma Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsüne doktora tezi olarak sunulmuştur.

Öncelikle eşim Prof.Dr. H. Şevki Mert, bana böyle önemli ve güzel bir konu önerdiği için kendisine teşekkür ederim. Sayın Hocam Prof.Dr. Haluk Şafak `a tez çalışmam sırasında çeşitli konularda yardımları için teşekkür ederim. Yine tez izleme komitesi üyesi Hocam Prof.Dr. Cesur Ekiz `e değerli katkılarından dolayı teşekkür ederim.

Bu tez jürisinde görev alan Hocalarım Prof. Dr. Rıza Erdem `e, Yrd.Doç.Dr. Atilla Güleç `e ve Yrd.Doç.Dr. M. Özgür Sezer `e değerli katkı ve önerileri için teşekkür ediyorum.

Gülistan MERT
KONYA-2013

İÇİNDEKİLER

ÖZET ..... **iv**

ABSTRACT ..... **v**

ÖNSÖZ ..... **vi**

İÇİNDEKİLER ..... **vii**

SİMGELER DİZİNİ ..... **viii**

ŞEKİLLER DİZİNİ ..... **xi**

1. GİRİŞ **1**

2. KENDİLİĞİNDEN MANYETİZASYON **4**

3. GREEN FONKSİYONLARININ GENEL ÖZELLİKLERİ **7**

4. MODEL **16**

5. NÜMERİK SONUÇLAR **27**

5.1 Dış manyetik alanın yokluğunda manyetizasyon 27
5.2 Dış manyetik alanda manyetizasyon 67
5.3 Manyetik alınganlık 77
5.4 Manyetik histerisiz 80

6. SONUÇLAR **92**

KAYNAKLAR **94**

ÖZGEÇMİŞ **98**

SİMGELER DİZİNİ

$A(t)$: t zamanındaki Heisenberg operatörü

C : Curie sabiti

D_A : A alt örgüsünün tek-iyon anizotropisi

D_B : B alt örgüsünün tek-iyon anizotropisi

G_r : Gecikmiş Green fonksiyonu

G_a : İlerlemiş Green fonksiyonu

G : Green fonksiyonu

$\mathcal{H}$: Hamiltoniyen

h : Dış manyetik alan

h_c : Zorlayıcı alan

$J_{ij} = J$: A ve B alt örgülerindeki en yakın komşu iyonlar arasındaki antiferromanyetik değiş-tokuş etkileşim parametresi

$J_{ii'} = J_1$: A alt örgüsündeki ikinci en yakın komşu iyonlar arasındaki ferromanyetik değiş-tokuş etkileşim parametresi

$J_{jj'} = J_2$: B alt örgüsündeki ikinci en yakın komşu iyonlar arasındaki ferromanyetik değiş-tokuş etkileşimi parametresi

k_B : Boltzmann sabiti

M : Toplam manyetizasyon

m_A : A alt örgüsünün manyetizasyonu

m_B : B alt örgüsünün manyetizasyonu

Q_A : A alt örgüsünün kuadrupol momenti

Q_B : B alt örgüsünün kuadrupol momenti

$\mathbf{S}_i$: i konumundaki spin

$\mathbf{S}_j$: j konumundaki spin

T : Mutlak sıcaklık

T_c : Kritik sıcaklık

T_{komp} : Kompansasyon sıcaklığı

T_D : Manyetizasyonun süreksiz olduğu sıcaklık

χ : Alınganlık

δ : Dirac delta fonksiyonu

θ : Adım fonksiyonu

1. GİRİŞ

Ferrimanyetler, farklı alt örgüdeki iyonların özdeş olmayan, zıt manyetik momente sahip olduğu maddelerdir. Her bir alt örgüdeki iyonlar, komşuları ile ferromanyetik olarak etkileşir, ama örgüler arası çiftlenim antiferromanyetiktir. İki alt örgünün manyetizasyonunun sıcaklığa bağımlılığı farklıdır ama her ikisi de aynı T_c kritik sıcaklığına sahiptir, yani her iki alt örgü manyetizasyonu sıcaklıkla farklı davranış göstermelerine rağmen aynı sıcaklıkta sıfır değerini alırlar. Kritik sıcaklıkta ısısal çalkantılar değiş-tokuş (*exchange*) kuvvetlerinin manyetik dipolleri tutmasını bozar. Kritik sıcaklıktan daha büyük sıcaklıklar da madde paramanyetik durumda olur. Manyetizasyon eğrisinin davranışı maddeyi oluşturan elementlere, kristal yapılarına ve değiş-tokuş parametrelerine bağlıdır.

Ferrimanyetler karmaşık manyetik yapıya sahiptir, bu nedenle bu maddelerin teorik çalışmasında ilginç ve bilinen davranışlarını incelemek büyük çaba gerektirmektedir. Ferrimanyetlerin en önemli özelliklerinden biri kompansasyon sıcaklığı sergilemeleridir. Alt örgü manyetizasyonlarının farklı sıcaklık bağımlılığı kompansasyon sıcaklığının meydana gelmesine imkan sağlar. Eğer T_c kritik sıcaklığının aşağısında iki alt örgünün manyetizasyonları eşit ve birbirine zıt olursa ve dolayısıyla toplam manyetizasyon sıfıra eşit olursa bu sıcaklığa kompansasyon sıcaklığı (T_{komp}) denir (Néel, 1948). Bu tür kompansasyon noktaları birçok ferrimanyetik maddelerde gözlenmektedir. Ferrimanyetlerde kompansasyon sıcaklığının varlığı manyeto-optik kayıt gibi ilginç teknolojik uygulamalara sahiptir (Mansuripur, 1995). Manyetizasyon kompansasyon sıcaklığında belli bir dış alan değerinde sıfırdır; dış alanın çok küçük artışında ve azalışında manyetizasyon işaret değiştirir. Bu olay manyetik kayıt yapma prensibinin temelini oluşturur. Uygulamada bu işlemin bir anlam kazanabilmesi için kompansasyon sıcaklığı ne çok küçük ne de çok büyük olmalıdır, yani oda sıcaklığı civarında olmalıdır. Deneysel olarak, moleküler-tabanlı manyetler alanında Mathoniére ve ark. (1996), $AM^{II}\,Fe^{III}\,(C_2O_4)_3$ (A = N(n-C_nH_{2n+1}), n = 3-5; M = Mn, Fe) bileşikleri için ve Svitlyk ve ark. (2012), $Fe_{1.14}Cr_{1.86}Se_4$ ferrimanyeti için negatif manyetizasyon gözlediklerini rapor ettiler. Bu bileşikler karma-spin sistemlerin örneği olarak gösterilebilir. Ayrıca Chern ve ark. (2001), kompansasyon noktasının ölçümlerini ve Fe_3O_4/Mn_3O_4 süperörgünün faz diyagramlarını rapor ettiler. Ziese ve ark. (2010), $La_{0.7}Sr_{0.3}MnO_3/SrR_4O_3$ süperörgüsünde manyetizasyonun ters çevrilme mekanizmasını

incelediler. Burada kompansasyon sıcaklığında zorlayıcı alan sıfır olarak bulunmuştur. Fishman ve Reboredo (2008), tek eksen anizotropili bir polikristal ferrimanyetin kompansasyon noktasında minimum bir zorlayıcı alana sahip olduğunu buldular.

Karma-spin Ising veya Heisenberg sistemler, ferrimanyetik düzen sergileyen modeller olarak göz önüne alınabilir. Bu sistemlerin manyetik özelliklerini incelemek için bir çok farklı teorik metot vardır: Korelasyonlu etkin alan teorisi (Wei ve ark., 2004; Deviren ve ark., 2010 ve 2011), ortalama alan teorisi (Godoy, 2004; Mohamad, 2011), Oguchi yaklaşımı (Bobák ve ark., 2009 ve 2011), Monte-Carlo simülasyonu (Buendìa ve Cardona, 1999; Buendìa ve Machado, 2000; Buendìa ve Hurtado, 2000; Godoy, 2004), Bethe örgüsünde tam tekrarlama bağıntıları (Ekiz, 2006; Ekiz ve Erdem, 2006), spin dalga teorisi (Li ve ark., 2003), Green fonksiyon teorisi (Kohno ve ark., 2005; Yao ve ark., 2007; Li ve ark., 2004; 2005 ve 2007) vd. gibi.

Bu tezde dış manyetik alanda, her iki alt örgüde tek-iyon anizotropisi tanımlanan Heisenberg ferrimanyetik sistemin manyetik özelliklerini incelemek için çift-zaman sıcaklık-bağımlı Green fonksiyon metodunu (Zubarev, 1960) kullanacağız. Bu metotta, daha yüksek mertebeden Green fonksiyonlarının daha düşük mertebeden Green fonksiyonlara ayrıştığı lineer olmayan bir diferansiyel denklem elde edilir. Daha yüksek mertebeli Green fonksiyonlarının her biri lineer olmayan bir denklem biçiminde yeniden yazılabilir. Böylece elde edilen her denklem daha alt mertebeden terimler cinsinden tekrar edip gider ve böyle devam eder. Hareket denklemleri ile türetilen Green fonksiyonlarının hiyerarşisini sona erdirmek için ayrıştırma prosedürleri kullanılır. Ayrıştırma, düzenli bir metot değildir ama sıcaklığın ve manyetik alanın geniş bir aralığında önceki çalışmalarla ve deneylerle iyi bir uyum elde etmek için basit ve yeterli bir yol sağlar. Bu metodun üstünlüğü, manyetizasyonun manyetik alan ve sıcaklık bağımlılığını tüm sıcaklık bölgesi üzerinden uygun hassasiyette vermesidir.

Spin-1/2 durumunda Heisenberg ferromanyeti için tüm sıcaklık aralığında geçerli olan bir yaklaşım veren Bogolyubov ve Tyablikov (1959), çift-zaman sıcaklık-bağımlı Green fonksiyon metodunu ilk olarak ferromanyetizmaya uyguladılar ve Green fonksiyonunu en düşük mertebeye indirgemek için rastgele faz ayrıştırmasını kullandılar. Tahir-Kheli ve ter Haar (1962), spin-1/2 için Tyablikov tarafından verilen ferromanyetizma teorisini daha yüksek değerlikli spinler için genişlettiler ve Green fonksiyon hareket denklemler zincirini rasgele faz ayrıştırma metodu kullanılarak sonlandırdılar. Düşük sıcaklık sonuçlarını iyileştirmek için Callen (1963),

ferromanyetizma probleminde genel spin-S için yaklaşık olarak tüm sıcaklık aralığında geçerli olan, simetrik tip olarak bilinen bir ayrıştırma önerdi. Simetrik ayrıştırma metodu en iyi spin-1/2 durumu için iyi sonuçlar verir. Ayrıca Callen, herhangi bir spin kuantum sayısı için $<S^z>$ `yi hesapladı. Ferromanyetizma probleminde Green fonksiyonu metodu literatürde çok olmasına rağmen (Kondo and Yamaji, 1972; Junger ve ark., 2004; Chen ve ark.,2005) antiferromanyetizmada ve ferrimanyetizmada daha azdır. İlk olarak Pu (1960) antiferromanyetizma problemini ele aldı ama sadece spin-1/2 durumunu inceledi. Lines (1964), bir dış manyetik alanda Green fonksiyon tekniğini kullanarak genel S-spinli ve Heisenberg değiş-tokuş etkileşmeli antiferromanyetik problemi inceledi. Lines `in teorisi iki ferromanyetik alt örgünün her birinin ötelemesel olarak değişmez olacağı ve spin yöneliminin tek bir doğrultuda olacağı varsayımı üzerine geliştirildi. Yablonskiy (1991), genel spinli bir ve iki boyutlu izotropik kuantum ferromanyet ve antiferromanyet teorisinin denge özelliklerini incelemek için Green fonksiyon metodunu kullandı. Mills ve ark. (1966), n-alt örgülü ferrimanyetin manyetik özelliklerini incelemek için rasgele faz ayrıştırmasını kullandılar. Fu ve ark. (2008), organik moleküler tabanlı ferrimanyetler olan, elmas benzeri spin zincirinin manyetik özelliklerini incelemek için Heisenberg modelini, Green fonksiyon metodunu kullanarak incelediler.

Çift-zaman sıcaklık bağımlı Green fonksiyon metodu ile inceleyeceğimiz karma spin-1 ve spin-2 Heisenberg ferrimanyetik model için takip ettiğimiz yol Li ve ark. (2004; 2005 ve 2007) `nın çalışmalarında izlediği prosedüre çok yakın olmasına rağmen, bizim dış manyetik alanda elde ettiğimiz sonuçlar onların bulduğu sonuçlardan farklıdır. Buendìa and Hurtado (2000) Ising sistemde manyetizasyonun süreksiz olduğunu yani birinci mertebe faz geçişleri elde ettiler, biz de bu tezde Heisenberg sistem için aynı sonuçların geçerli olduğunu gösterdik.

2. KENDİLİĞİNDEN MANYETİZASYON

Bazı maddeler dış manyetik alan olmadığında bile manyetizasyona sahip olmaları ile karakterize edilirler. Bu özellik *kendiliğinden manyetizasyon* olarak adlandırılır. Bu maddeler manyetik atomlar arasındaki değiş-tokuş etkileşimlerinden dolayı kendiliğinden mıknatıslanırlar. Değiş-tokuş etkileşmesi dış manyetik alan uygulamadan atomik dipollerin dizilmelerini sağlar ve böylece madde dış manyetik alan uygulanmamasına rağmen çok büyük manyetizasyona sahip olur. Kendiliğinden manyetizasyon sıcaklıkla değişir; mutlak sıfırda doyum değerindedir ve sıcaklığın artmasıyla azalarak kritik sıcaklıkta kaybolur. Bu özelliğe sahip maddeler dört sınıfa ayrılır: *ferromanyetik, antiferromanyetik, ferrimanyetik* ve *helimanyetik.* Ferromanyetik malzemeler eskiden beri bilinmektedir, diğer taraftan diğer üç sınıfın varlığı sadece son yıllarda tanınmaktadır. Néel, antiferromanyetizma kavramını 1930 `larda önerdi ve daha sonra bu fikrin genelleştirilmesi ferrimanyetizma ve helimanyetizmanın keşfine neden oldu.

Curie (1895), ilk defa manyetik maddelerin termal özelliklerini inceledi. M manyetizasyonun h dış manyetik alan ile orantılı olduğunu buldu ve manyetik alınganlık olarak bilinen orantı katsayısını inceledi. Paramanyetik maddeler için alınganlık

$$\chi = \lim_{h\to 0} \frac{M}{h} = \frac{C}{T} \tag{2.1}$$

olarak tanımlanır. Burada C, Curie sabitidir ve T, mutlak sıfır cinsinden ölçülen sıcaklıktır. Ayrıca ferrromanyetik maddelerde sıcaklık, Curie sıcaklığı olarak adlandırılan kritik bir değere doğru artarken manyetizasyonun hızla azaldığını buldu. Diamanyetik maddelerde χ negatiftir ve T ile çok az değişir. Langevin, 1905 `de diamanyetizmayı açıkladı. Ayrıca sadece kalıcı bir manyetik momente sahip olan atomlarda paramanyetizmanın var olduğunu açıkladı.

Manyetizmanın ilk ve modern teorisi Weiss tarafından 1907 `de verildi. Weiss, manyetik atomun kristal ile etkileşmesini etkin bir alan ya da moleküler alan yardımı ile tanımladı. Bu alan ortalama alan olarak da tanımlanabilir ve bu yaklaşımda her bir

manyetik atom manyetizasyon ile orantılı olacak şekilde bir alan içinde olduğu düşünülür:

$$h_E = \lambda M \tag{2.2}$$

Burada λ sabiti sıcaklıktan bağımsızdır. Böylece her spin diğer spinlerin ortalama alanını görür. Spinlerin ortalama değerleriyle yer değiştirilmesi, ortalama değer civarındaki düzensiz değişimlerin ihmal edildiği anlamına gelir. Bu yaklaşım ortalama alan teorisi olarak adlandırılır. Curie-Weiss yasasında manyetik alınganlık

$$\chi = \frac{C}{T - T_c} \tag{2.3}$$

şeklinde verilir. Burada T_c, Curie sıcaklığı olarak adlandırılır ve kendiliğinden manyetizasyonun kaybolduğu sıcaklıktır.

Ferromanyetik maddelerde manyetik atomlar arasındaki etkileşimler atomik manyetik momentlerin paralel yönelmesini sağlar. Mutlak sıfırda hepsi aynı doğrultuda yönelir ve kendiliğinden manyetizasyon maksimum doyum değerini alır. Sıcaklık artırıldığında manyetik momentlerin rastgele yönelmesini sağlayan termal uyarma etkileri hissedilmeye başlar. Sıcaklık artarken manyetizasyon, kritik sıcaklıkta sıfır oluncaya kadar azalır. Sıcaklık kritik bir sıcaklık değerine ulaştığı zaman kendiliğinden manyetizasyon kaybolur ve ferromanyetik fazdan paramanyetik faza değişim sürekli bir değişimdir, bu ikinci mertebe faz geçişi olarak adlandırılır. Eğer değişim süreksiz olursa birinci mertebe faz geçişi olarak adlandırılır. Kritik sıcaklığın çok altındaki sıcaklıklarda bir ferromanyetin manyetik momentleri tamamen paraleldir. Oysa maddeye bir bütün olarak bakıldığında manyetik moment doyum değerinin çok altında olur. Weiss ferromanyetlerin birçok *domene* ayrıldığını iddia etmiştir. Spinler kritik sıcaklığın altında kendiliğinden küçük domenler içinde dizilirler. Domenlerin her biri belirli bir manyetizasyona sahiptir ama her birindeki spin yönü farklı olduğundan toplam manyetizasyon sıfır olur. Domenler arasında Bloch duvarı denilen spinleri bir yönden diğer yöne dönen dar bir bölge vardır. Ferromanyete dış bir manyetik alan uygulandığında domen duvarları ortadan kalkar ve manyetik alan doğrultusunda bir manyetizasyon oluşur. Buradaki en ilginç özellik dış manyetik alan kaldırıldığında domen duvarları eski haline dönmeyebilir ve manyetizasyon kalıcı olabilir. Maddeyi

eski haline döndürmek için maddeye ters yönde bir manyetik alan uygulanması gerekir. Bu alan *zorlayıcı alan* olarak adlandırılır. Böylece malzemenin manyetizasyonu dış manyetik alanın değişimine göre çizilirse manyetizasyon ve demanyetizasyon eğrileri farklı olur. Bu olay *histerisiz* olarak adlandırılır.

Antiferromanyetizma fikri, 1932 `de Néel tarafından önerildi. Néel bir alt örgüdeki atomların diğer alt örgünün manyetizasyonuyla orantılı ve doğrultuca ona zıt moleküler bir alan ile karşılaştığını varsayarak Weiss moleküler alan yaklaşımını antiferromanyetizmaya genelleştirdi ve negatif değiş-tokuş etkileşimli iki tane alt örgü fikrini ortaya attı. Antiferromanyetik maddelerde manyetik atomlar örgüsü, iki tane eşdeğer iç içe geçen A ve B alt örgülerine bölünebilir. Öyle ki A atomları en yakın komşu olarak sadece B atomlarına sahiptir (veya B atomları en yakın komşu olarak sadece A atomlarına sahiptir). Manyetik etkileşimler antiparalel olan alt örgü manyetizasyonuna neden olur. Mutlak sıfırda her bir alt örgü maksimum doyum manyetizasyonuna sahiptir ve sıcaklık arttırıldıkça termal uyarma, alt örgü manyetizasyonunu ferromanyetizmaya benzer şekilde azaltır. Ancak bütün sıcaklıklarda iki eşdeğer alt örgünün manyetizasyonu birbirini yok ettiğinden dolayı toplam manyetizasyon sıfır olur.

Néel (1948), bazı maddelerde görünen anormal manyetik momentleri izah etmek için antiparalel sıralamayı -negatif değiş-tokuş etkileşimini- önerdi. Gerçekte ferrimanyetler manyetik oksitlerin önemli bir sınıfını oluşturan ferritlerin spin düzenini tanımlamak için ortaya atılmıştır. Néel maddelerin ferrimanyetizmasını izah edebilmek için örgüyü, antiferromanyetizmadaki gibi iki tane eşdeğer iç içe geçen A ve B alt örgülerine bölmüştür. Ama farklı alt örgüdeki iyonlar, özdeş olmayan, zıt manyetik momente sahiptir. Bundan dolayı, antiferromanyetlerden farklı olarak, toplam manyetizasyon sıfır değildir. Ferrimanyetik malzemeler magneto-optik kayıt gibi ilginç teknolojik uygulamalara sahiptirler. Kritik sıcaklığın altında kendiliğinden manyetizasyon ve histerisiz sergilerler. Ferromanyetler gibi içinde elektron spinlerinin kendiliğinden paralel olarak dizildiği küçük domenlere sahiptirler.

Son olarak, helimanyetizma da ise spin düzlemleri helisel bir diziliş sergiler. Bir helimanyette manyetik momentler sabit bir açıyla komşu dipole göre dönmektedir ve böylece bir helis üretirler. Örneğin, magnezyum dioksitte dipoller arasındaki açı yaklaşık 129^{o} derecedir.

3. GREEN FONKSİYONLARININ TANIMI VE GENEL ÖZELLİKLERİ

Kuantum alan teorisinde Green fonksiyonları, "*propagatörler*" olarak adlandırılır. Bu adlandırma, bir sistemin önemli fiziksel özelliklerini bulmak için her bir parçacığın detaylı davranışını bilmekten ziyade, sadece bir veya birkaç parçacığın ortalama davranışını bilmek üzerine dayandırılır.

Çok cisim probleminde, alan teorisi incelemesinde Green fonksiyonları en önemli rolü oynar. Green fonksiyonlarının farklı tipleri vardır: tek-parçacık, iki-parçacık, … , n-parçacık, ilerlemiş, gecikmiş, nedensel, sıfır sıcaklık, sonlu sıcaklık, reel zaman, sanal zaman vs. Etkileşen bir sistemde, bir noktadan diğerine hareket eden bir parçacığın hareketini detaylı olarak tanımlamak imkansızdır. Yine de hareket için bir olasılık genliği vererek, ortalama şeklinde hareketi tanımlayabiliriz.

$G_1(\mathbf{r}_2,t_2;\ \mathbf{r}_1,t_1)$ *tek-parçacık propagatörü*, bir sistemdeki tek bir parçacığın, eğer parçacık t_1 zamanında $\mathbf{r}_1$ noktasından harekete başlarsa, t_2 zamanında $\mathbf{r}_2$ noktasına hareket edeceği veya yayılacağı olasılık (genlik) olarak tanımlanır. Kuantum alan teorisi metodunda tek-parçacık Green fonksiyonu, bir sistemin makroskopik özelliklerini karakterize eden bir niceliktir ve direkt olarak enerjileri ve yarı-parçacıkların ömürlerini verir, ayrıca momentum dağılımını, spin ve parçacık yoğunluğunu verir. G_2 *iki-parçacık propagatörü*, eğer ilk parçacığı $(\mathbf{r}_1,t_1)$ `de sisteme dahil edersek ve ikinci parçacığı $(\mathbf{r}_2,t_2)$ `de sisteme dahil edersek, bir parçacığı $(\mathbf{r}_3,t_3)$ `de ve diğer parçacığı $(\mathbf{r}_4,t_4)$ `de gözlemek için gereken olasılık genliğini verir. G_2 propagatörü, enerjileri, kolektif uyarmaların ömürlerini ve ayrıca manyetik alınganlığı, elektriksel iletkenliği ve bütün sıcaklıklarda diğer dengede olmayan özellikleri verir.

Green fonksiyonları başlıca iki yoldan hesaplanır. Birinci yol, Green fonksiyonunu, sonsuz pertürbasyon serisine açarak seriyi yaklaşık olarak hesaplamaktır. Genellikle yapıldığı gibi bütün terimleri ikinci ve üçüncü mertebeye kadar toplamak Green fonksiyonu için yeterli olmaz. Çünkü seri çok yavaş yakınsar. Bazı durumlarda serideki bütün terimler ıraksayabilir. Bu durumda bazı terimler üzerinden toplam almak gerekir. Bu işleme seçici toplam adı verilir. Elbette sonsuz mertebede pertürbasyon teorisinde bu seçici toplamı yapmak için yeni bir yöntem gerekir. Bu yöntem Feynman diyagramları yöntemi olarak bilinir.

Diğer bir metot da -analitik metot-, Green fonksiyonlarını sağlayan çiftlenimli diferansiyel denklemler çözülür. Bunun anlamı tek-parçacık Green fonksiyonu G, bilinmeyen iki-parçacık Green fonksiyonu G_2 `yi içeren diferansiyel denklemi sağlar. Aynı şekilde iki-parçacık Green fonksiyonu $G_3$ `ü içeren diferansiyel denklemi de sağlar. Bu şekilde devam eder gider. Sonuç olarak sonsuz hiyerarşik çiftlenimli lineer olmayan diferansiyel denklemlerle ilgilenilmesi gerekir. Gerçekte çiftlenimli denklemler, uygun aşamalarda uygun bir ayrıştırma kullanılarak çiftlenimsiz hale getirilebilir ve sonra da elde edilen çiftlenimsiz denklemler çözülebilir.

İlerlemiş ve gecikmiş çift-zaman sıcaklık-bağımlı Green fonksiyonlarının matematiği Zubarev (1960) tarafından geliştirildi. Green fonksiyonları korelasyon fonksiyonlarının bir genelleştirmesidir ve denklemler oluşturulup çözülebildiği zaman çok kullanışlıdır. Burada bu tekniğin özelliklerini kısaca vereceğiz.

A ve B operatörlerinin $G_r(t-t')$ ve $G_a(t-t')$ *gecikmiş* ve *ilerlemiş* Green fonksiyonları aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$G_r(t-t') \equiv \left\langle\left\langle \mathbf{A}(t);\, \mathbf{B}(t')\right\rangle\right\rangle_r \tag{3.1}$$

$$G_a(t-t') \equiv \left\langle\left\langle \mathbf{A}(t);\, \mathbf{B}(t')\right\rangle\right\rangle_a \tag{3.2}$$

Burada *A(t), t* zamandaki Heisenberg operatörüdür, yani

$$\mathbf{A}(t) = e^{i\mathcal{H}t} A e^{-i\mathcal{H}t} \tag{3.3}$$

ve $\mathcal{H}$, sistemin Hamiltoniyenidir. $\left\langle\left\langle \ldots \right\rangle\right\rangle_{r,a}$, gecikmiş ve ilerlemiş Green fonksiyonları için kısaltılmış gösterimdir ve komütatörlerin kanonik bir küme üzerinden ortalaması alınarak tanımlanır.

$G_{r,a}(t,\, t')$ Green fonksiyonlarının önemli özelliklerinden biri, istatiksel denge durumunda $(t-t')$ farkına bağlı olmasıdır. Bu özellik Green fonksiyonunun spektral temsilini bulmada yararlıdır. $\left\langle \mathbf{A}(t)\mathbf{B}(t')\right\rangle$ ve $\left\langle \mathbf{B}(t')\mathbf{A}(t)\right\rangle$, zamanlar farklı olduğunda zaman-korelasyon fonksiyonlarını verir. Zaman-korelasyonları için gereken spektral temsiller aşağıdaki gibi verilebilir:

$$\langle \mathbf{A}(t)\mathbf{B}(t')\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{\omega/\theta} e^{-i\omega(t-t')} d\omega \tag{3.4}$$

$$\langle \mathbf{B}(t')\mathbf{A}(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{i\omega(t-t')} d\omega \tag{3.5}$$

$G_r(t-t')$ ve $G_a(t-t')$ Green fonksiyonlarının spektral temsilleri Denklem (3.4) ve (3.5) `den elde edilir. $G_r(E)$, $G_r(t-t')$ `nün Fourier dönüşümü olsun.

$$G_r(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} G_r(E) e^{-iE(t-t')} dE \tag{3.6}$$

veya

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_r(t-t') e^{iE(t-t')} dt \tag{3.7}$$

şeklinde verilir. Green fonksiyonların tanımı kullanılarak

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dt \left[e^{iE(t-t')} \theta(t-t') \cdot \left\{ \langle \mathbf{A}(t)\mathbf{B}(t')\rangle - \eta \langle \mathbf{B}(t')\mathbf{A}(t)\rangle \right\} \right] \tag{3.8}$$

elde ederiz. Burada θ(t), adım fonksiyonu aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$\theta(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ 1 & t > 0 \end{cases} \tag{3.9}$$

Aynı zamanda [A, B] = AB - ηBA komütatör veya anti-komütatördür. (A ve B, Bose operatörleri ise η eksi, fermi operatörleri ise artı olur). Denklem (3.8) `de Denklem (3.4) ve (3.5) `de tanımlanan zaman-korelasyon fonksiyonlarını yerine yazarsak

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} dt\left[e^{iE(t-t')}\theta(t-t')\cdot\left\{ \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)e^{\omega/\theta}e^{-iE(t-t')}d\omega - \eta\int_{-\infty}^{\infty} J(\omega)e^{-iE(t-t')}d\omega \right\}\right]$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, J(\omega)(e^{\omega/\theta}-\eta)\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{iE(t-t')}e^{-i\omega(t-t')}\theta(t-t') \tag{3.10}$$

veya

$$G_r(E) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, J(\omega)(e^{\omega/\theta}-\eta)\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i(E-\omega)}\theta(t) \tag{3.11}$$

elde ederiz. Yukarıdaki işlemlerde

$$\theta(t) = \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon t}\delta(t)\,dt, \qquad \varepsilon \to 0\ (\varepsilon > 0) \tag{3.12}$$

temsili kullanıldı.

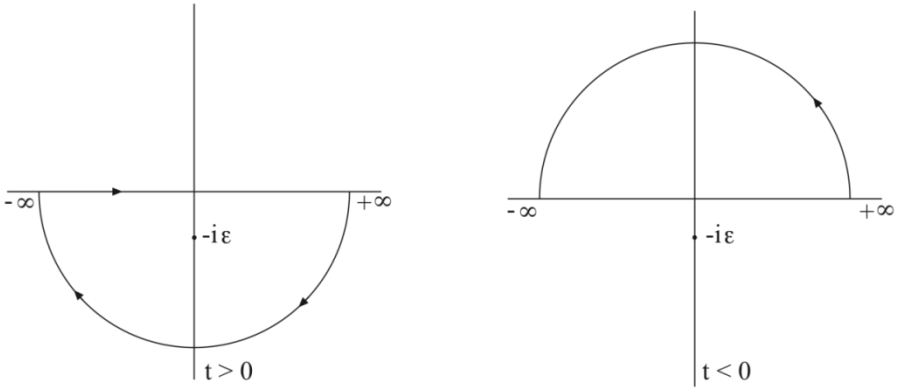
$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixt}dx \tag{3.13}$$

bağıntısını göz önüne alarak

$$\begin{aligned}\theta(t) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon t}dt\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixt}dx \\ &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{t} e^{(\varepsilon-ix)t}dt\,dx \\ &= \frac{1}{2\pi}\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\varepsilon - ix}e^{(\varepsilon-ix)t}\,dx \\ &= \frac{i}{2\pi}\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{-ixt}}{x+i\varepsilon}dx\end{aligned} \tag{3.14}$$

elde ederiz. Bu denklem süreksiz bir fonksiyondur. x `i kompleks değişken olarak alırsak Denklem (3.14) `de verilen integral Şekil 3.1 `de gösterilen kontur üzerinden

alınır. İntegrali alınacak kısım alttaki yarım düzlemde $x = -i\varepsilon$ `da bir kutupa sahiptir. $x = x_1 + ix_2$ yazarsak $e^{-ixt} = e^{-i(x_1+ix_2)t} = e^{-ix_1t}e^{x_2t}$ elde ederiz. Eğer $t > 0$ ise x_2 sıfır olmayan integral için negatif olmak zorundadır. Aynı zamanda kutup alttaki yarım düzlemde olduğundan, integralin değeri 1 olur. $t < 0$ olduğu zaman x_2 pozitif olmalıdır ve böylece kontur üst yarım kürede olmalıdır; ama kutup üstteki yarım kürede olmadığından integrali alınacak kısmın değeri sıfır olur.



Şekil 3. 1. Kompleks düzlemde integral konturu

Denklem (3.14) kullanılarak

$$\begin{aligned}\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i(E-\omega)t}\theta(t) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i(E-\omega)t}\,\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{-ixt}}{x+i\varepsilon}dx \\ &= \frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{-ixt}}{x+i\varepsilon}dx\,\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i(x-E+\omega t)}dt \\ &= \frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{x+i\varepsilon}\delta(x-E+\omega) \\ &= \frac{i}{2\pi}\frac{1}{E-\omega+i\varepsilon}\end{aligned} \tag{3.15}$$

elde edilir. O zaman Denklem (3.11) aşağıdaki gibi olur:

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}(e^{\omega/\theta}-\eta)J(\omega)\frac{d\omega}{E-\omega+i\varepsilon} \tag{3.16}$$

Benzer olarak

$$G_a(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\omega/\theta} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega - i\varepsilon} \tag{3.17}$$

yazılır. Denklem (3.16) ve (3.17) birleştirilirse aşağıdaki denklem elde edilir:

$$G_{r,a}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\omega/\theta} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega \pm i\varepsilon} \tag{3.18}$$

Buradaki + işareti *r* (gecikmiş Green fonksiyonu) indisine ve – işareti *a* (ilerlemiş Green fonksiyonu) indisine karşılık gelir. Eğer E `nin kompleks olduğu varsayılırsa Denklem (3.18), kompleks bir E düzleminde analitik olarak süreklidir, böylece

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\omega/\theta} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega} = \begin{cases} G_r(E) & \operatorname{Im} E > 0 \\ G_a(E) & \operatorname{Im} E < 0 \end{cases} \tag{3.19}$$

Olur. Bu integral, Cauchy-tipi bir integraldir. Aynı zamanda $G_r(E)$ ve $G_a(E)$ reel eksen üzerinde bir tekillik ile tüm kompleks düzlemde tanımlanan aynı analitik fonksiyonun, $G(E)$, iki dalı olarak düşünülebilir:

$$G(E) = \begin{cases} G_r(E), & \operatorname{Im} E > 0 \\ G_a(E), & \operatorname{Im} E < 0 \end{cases} \tag{3.20}$$

Denklem (3.18) `den

$$G(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\omega/\theta} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega} \tag{3.21}$$

elde ederiz. *E* ve ω `yı yer değiştirsek

$$G(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{E/\theta} - \eta) J(E) \frac{dE}{\omega - E} \tag{3.22}$$

olur. Böylece

$$G(\omega + i\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{E/\theta} - \eta) J(E) \frac{dE}{\omega + i\varepsilon - E} \tag{3.23}$$

$$G(\omega - i\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{E/\theta} - \eta) J(E) \frac{dE}{\omega - i\varepsilon - E} \tag{3.24}$$

denklemlerini elde ederiz. Denklem (3.23) ve (3.24) `ü birleştirirsek

$$G(\omega + i\varepsilon) - G(\omega - i\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{E/\theta} - \eta) J(E) \left(\frac{1}{\omega - E + i\varepsilon} - \frac{1}{\omega - E - i\varepsilon} \right) dE \tag{3.25}$$

elde ederiz. δ-fonksiyonunun aşağıdaki temsilini kullanarak

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi i} \left(\frac{1}{x - i\varepsilon} - \frac{1}{x + i\varepsilon} \right) \tag{3.26}$$

zaman-korelasyon fonksiyonu ve *G(E)* arasındaki ilişkiyi aşağıdaki gibi elde ederiz:

$$\begin{aligned} G(\omega + i\varepsilon) - G(\omega - i\varepsilon) &= \frac{-2\pi i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{E/\theta} - \eta) J(E) \delta(\omega - E) dE \\ &= -i(e^{\omega/\theta} - \eta) J(\omega) \end{aligned} \tag{3.27}$$

Böylece *J(ω)* ve Denklem (3.4) ve (3.5) `de verilen korelasyon fonksiyonları bulunabilir. Denklem (3.27) `den

$$J(\omega) = -\frac{1}{i} \frac{G(\omega + i\varepsilon) - G(\omega - i\varepsilon)}{e^{\omega/\theta} - \eta} \tag{3.28}$$

elde ederiz. Denklem (3.28) `i Denklem (3.5) `de yerine yazarsak

$$\langle \mathbf{B}(t')\mathbf{A}(t)\rangle = i \lim_{\varepsilon \to +0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G(\omega + i\varepsilon) - G(\omega - i\varepsilon)}{e^{\omega/\theta} - \eta} e^{-i\omega(t-t')} d\omega \tag{3.29}$$

eşitliğini elde ederiz.

Denklem (3.1) `deki Green fonksiyonlarının türevini alarak, aşağıdaki hareket denklemini elde ederiz:

$$\begin{aligned} i\frac{dG}{dt} &= i\frac{d}{dt}\langle\langle \mathbf{A}(t);\mathbf{B}(t')\rangle\rangle \\ &= \frac{d}{dt}\langle\{\theta(t-t')\mathbf{A}(t)\mathbf{B}(t') - \eta\theta(t'-t)\mathbf{B}(t')\mathbf{A}(t)\}\rangle \\ &= \frac{d}{dt}\theta(t-t')\langle[\mathbf{A}(t);\mathbf{B}(t')]\rangle + \left\langle\left\langle i\frac{d\mathbf{A}(t)}{dt};\mathbf{B}(t')\right\rangle\right\rangle \end{aligned} \tag{3.30}$$

Burada

$$\frac{d\theta(t)}{dt} = \delta(t) \tag{3.31}$$

şeklinde verilir. Denklem (3.30) `da

$$i\frac{d\mathbf{A}}{dt} = [\mathbf{A}, \mathscr{K}] \tag{3.32}$$

ifadesini kullanarak

$$i\frac{d}{dt}\langle\langle \mathbf{A}(t), \mathbf{B}(t')\rangle\rangle \;= \delta(t-t')\langle[\mathbf{A}(t), \mathbf{B}(t')]_-\rangle + \langle\langle[\mathbf{A}(t), \mathscr{K}]_-; \mathbf{B}(t')\rangle\rangle \tag{3.33}$$

elde ederiz. Burada δ, Dirac delta fonksiyonudur; gecikmiş ve ilerlemiş Green fonksiyonu için alt indisler düşülmüştür, çünkü her ikisi için de hareket denklemi aynıdır. Green fonksiyonunun Fourier dönüşümü, ω `nın fonksiyonudur ve

$\langle\langle \mathbf{A}(t);\mathbf{B}(t')\rangle\rangle_E$ ile gösterilir. Bu dönüşüm sonucunda hareket denklemi aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$E\langle\langle \mathbf{A}(t),\mathbf{B}(t')\rangle\rangle_E = \frac{1}{2\pi}\langle[\mathbf{A}(t),\mathbf{B}(t)]_-\rangle + \langle\langle[\mathbf{A}(t),\mathscr{H}]_-;\mathbf{B}(t')\rangle\rangle_E \tag{3.34}$$

elde edilir. Bu denklemin sağındaki ikinci terim genellikle daha yüksek mertebeden Green fonksiyonu içerir. Daha yüksek mertebeli Green fonksiyonları için Denklem (3.33) biçiminde denklemler oluşturulabilir ve bu hala daha yüksek mertebeli Green fonksiyonları gerektirir. Böylece çiftlenimli denklemlerin bir hiyerarşisi elde edilir. Böyle bir çiftlenimli denklemler kümesinin tam çözümünü bulmak için hala bir metot yoktur ve böyle denklemler zinciri uygun bir ayrıştırma kullanılarak ayrıştırılır. Bogolyubov ve Tyablikov (1959), Green fonksiyonlarını en düşük mertebeye indirgemek için aşağıdaki gibi tanımlanan rasgele faz ayrıştırmasını kullandılar:

$$\langle\langle n_i\mathbf{A}_j;\mathbf{B}_l\rangle\rangle \cong \langle n_i\rangle\langle\langle \mathbf{A}_j;\mathbf{B}_l\rangle\rangle \tag{3.35}$$

Bu şekilde bir ayrıştırma, n_i ve $\mathbf{A}_j$ arasında korelasyon olmadığı anlamına gelir ve bu nedenle r*asgele faz ayrıştırması* olarak bilinir.

Eğer Denklem (3.7), $\langle\langle \mathbf{A}(t);\mathbf{B}(t')\rangle\rangle_E$ için çözülürse, Denklem (3.29) `da verilen $\langle \mathbf{B}(t')\mathbf{A}(t)\rangle$ korelasyon fonksiyonu bulunabilir:

$$\langle \mathbf{B}(t')\mathbf{A}(t)\rangle = \lim_{\varepsilon\to 0} i\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\langle\langle \mathbf{A};\mathbf{B}\rangle\rangle_{E=\hbar\omega+i\varepsilon} - \langle\langle \mathbf{A};\mathbf{B}\rangle\rangle_{E=\hbar\omega-i\varepsilon}}{e^{\hbar\omega/kT}-1} e^{-i\omega(t-t')}d\omega \tag{3.36}$$

Denklem (3.34) ve (3.36), Green fonksiyon metodunun uygulanması için gereken temel denklemlerdir. Eğer $\langle \mathbf{B}(t')\mathbf{A}(t)\rangle$ korelasyon fonksiyonu bilinirse diğer termodinamik nicelikler hesaplanabilir.

4. MODEL

Amacımız ilk önce A ve B alt örgülerinin sırayla ortalama alt örgü manyetizasyonları m_A ve m_B `yi hesaplamaktır, bunlar aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$m_A = \left\langle S_A^z \right\rangle \quad \text{ve} \quad m_B = \left\langle S_B^z \right\rangle \tag{4.1}$$

Ayrıca kuadropol moment olarak adlandırılan manyetizasyonun karesinin ortalaması

$$Q_A = \left\langle (S_A^z)^2 \right\rangle \quad \text{ve} \quad Q_B = \left\langle (S_B^z)^2 \right\rangle \tag{4.2}$$

olarak tanımlanır.

Kare örgüde karma spin-1 ve spin-2 Heisenberg ferrimanyetik modeli inceleyeceğiz. Örgü, iki eşdeğer A ve B alt örgüsüne bölünür. Her iki alt örgü de yine bir kare örgüdür. A ve B atomları arasındaki mesafe a olarak alınmaktadır. Hamiltoniyenin aşağıdaki gibi olduğunu varsayacağız:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -\sum_{<nn>} J_{ij} \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j - \sum_{<nnn>} J_{ii'} \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_{i'} - \sum_{<nnn>} J_{jj'} \boldsymbol{S}_j \cdot \boldsymbol{S}_{j'} - D_A \sum_i (S_i^z)^2 \\ & - D_B \sum_j (S_j^z)^2 - h\left(\sum_i S_i^z + \sum_j S_j^z \right) \end{aligned} \tag{4.3}$$

Burada <*nn*> ve <*nnn*>, sırayla en yakın ve ikinci en yakın komşu etkileşimleri göstermektedir ve toplam, iki boyutlu örgü üzerinden bütün en yakın veya ikinci en yakın komşu çiftler üzerinden alınır. *i* indisi, A alt örgüsüne (spin-1) aittir ve *j* indisi, B alt örgüsüne (spin-2) aittir. $J_{ij} = J$ (< 0), $\boldsymbol{S}_i$ ve $\boldsymbol{S}_j$ en yakın komşu spinleri arasındaki antiferromanyetik değiş-tokuş etkileşimidir; $J_{ii'} = J_1$ (> 0), $\boldsymbol{S}_i$ ve $\boldsymbol{S}_{i'}$ ikinci en yakın komşu spinleri arasındaki ferromanyetik değiş-tokuş etkileşimidir ve $J_{jj'} = J_2$ (> 0), $\boldsymbol{S}_j$ ve $\boldsymbol{S}_{j'}$ ikinci en yakın komşu spinleri arasındaki ferromanyetik değiş-tokuş etkileşimidir. D_A, A alt örgüsünün tek-iyon anizotropi parametresidir ve D_B, B alt

örgüsünün tek-iyon anizotropi parametresidir. *h* dış manyetik alanı, *z*-ekseni boyunca uygulanmaktadır.

$S_i^{\pm} = S_i^x \pm iS_i^y$ spin yükseltme ve spin alçaltma operatörleri, $[S_i^+, S_j^-] = 2S_i^z\delta_{ij}$ ve $[S_i^{\pm}, S_j^z] = \mp S_i^{\pm}\delta_{ij}$ komütasyon bağıntıları yardımıyla yukarıdaki Hamiltoniyen aşağıdaki gibi yeniden yazılabilir:

$$\begin{aligned}\mathcal{H} = &-\sum_{<nn>} J_{ij}\left(\tfrac{1}{2}S_i^-S_j^+ + \tfrac{1}{2}S_i^+S_j^- + S_i^zS_j^z\right)\\ &-\sum_{<nnn>} J_{ii'}\left(\tfrac{1}{2}S_i^-S_{i'}^+ + \tfrac{1}{2}S_i^+S_{i'}^- + S_i^zS_{i'}^z\right)\\ &-\sum_{<nnn>} J_{jj'}\left(\tfrac{1}{2}S_i^-S_{i'}^+ + \tfrac{1}{2}S_i^+S_{i'}^- + S_i^zS_{i'}^z\right)\\ &-D_A\sum_i (S_i^z)^2 - D_B\sum_j (S_j^z)^2 - h\left(\sum_i S_i^z + \sum_j S_j^z\right)\end{aligned} \tag{4.4}$$

Bu modelin manyetik özelliklerini hesaplamak için Green fonksiyonları olarak Callen (1963) `e göre çift-zaman-sıcaklık bağımlı $\langle\langle S_i^+; B_l\rangle\rangle_\omega$ ve $\langle\langle S_j^+; B_l\rangle\rangle_\omega$ Green fonksiyonlarını alalım. Burada $B_l = e^{\xi S_i^z}S_i^-$ (ξ, bir parametredir; $S_i^+(t)$ ve $S_i^-(0)$, Heisenberg spin operatörleridir.) şeklinde tanımlanır.

Green fonksiyonunun zamana göre Fourier dönüşümünü alırız. Bu iki Green fonksiyonu için hareket denklemlerini aşağıdaki gibi elde ederiz:

$$\begin{aligned}\omega\langle\langle S_i^+; B_l\rangle\rangle = &\delta_{il}\langle[S_i^+, B_l]\rangle - J\sum_{<nn>}\langle\langle(S_i^zS_j^+ - S_i^+S_j^z); B_l\rangle\rangle\\ &-J_1\sum_{<nnn>}\langle\langle(S_i^zS_{i'}^+ - S_i^+S_{i'}^z); B_l\rangle\rangle\\ &+D_A\langle\langle(S_i^+S_i^z + S_i^zS_i^+); B_l\rangle\rangle + h\langle\langle S_i^+; B_l\rangle\rangle\end{aligned} \tag{4.5}$$

$$\begin{aligned}\omega\langle\langle S_j^+; B_l\rangle\rangle = &\delta_{jl}\langle[S_j^+, B_l]\rangle - J\sum_{<nn>}\langle\langle(S_j^zS_i^+ - S_j^+S_i^z); B_l\rangle\rangle\\ &-J_2\sum_{<nnn>}\langle\langle(S_j^zS_{j'}^+ - S_j^+S_{j'}^z); B_l\rangle\rangle\\ &+D_B\langle\langle(S_j^+S_j^z + S_j^zS_j^+); B_l\rangle\rangle + h\langle\langle S_j^+; B_l\rangle\rangle\end{aligned} \tag{4.6}$$

Burada δ, Dirac delta fonksiyonudur ; <…>, termal ortalamadır ve $\hbar = 1$ olarak alırız.

Yukarıdaki denklemin sağ tarafındaki daha yüksek mertebeli Green fonksiyonlarını aşağıdaki gibi ayrıştırırız. $\langle\langle(S_i^z S_j^+ - S_i^+ S_j^z); B_l\rangle\rangle$ gibi değiş-tokuş terimlerinden meydana gelen Green fonksiyonları rastgele faz ayrıştırması (Tahir-Kheli ve ter Haar, 1962) kullanılarak ayrıştırılabilir, yani

$$\langle\langle S_i^z S_j^+; B_l\rangle\rangle \cong \langle S_i^z\rangle\langle\langle S_j^+; B_l\rangle\rangle \tag{4.7}$$

$\langle\langle(S_i^z S_i^+ + S_i^+ S_i^z); B_l\rangle\rangle$ gibi tek-iyon anizotropi terimlerinden meydana gelen Green fonksiyonları Anderson ve Callen (1964) `in ayrıştırma şeması kullanılarak ayrıştırılabilir, yani

$$\langle\langle(S_i^+ S_i^z + S_i^z S_i^+); B_l\rangle\rangle \cong \tau_A\langle\langle S_i^+; B_l\rangle\rangle \tag{4.8}$$

ve

$$\langle\langle(S_j^+ S_j^z + S_j^z S_j^+); B_l\rangle\rangle \cong \tau_B\langle\langle S_j^+; B_l\rangle\rangle \tag{4.9}$$

şeklinde verilir. Burada

$$\tau_A = 2m_A\left\{1 - \frac{1}{2S_A^2}[S_A(S_A+1) - Q_A]\right\} \tag{4.10}$$

ve

$$\tau_B = 2m_B\left\{1 - \frac{1}{2S_B^2}[S_B(S_B+1) - Q_B]\right\} \tag{4.11}$$

şeklinde verilir. Bu ayrıştırma şeması çok daha iyi sonuçlar vermektedir (Devlin, 1971).

Uzay ve zaman değişkenlerine göre, bu denklemlerin Fourier dönüşümlerini aldıktan sonra, Green fonksiyonlarını aşağıdaki gibi buluruz:

$$G_A(\omega,\mathbf{k}) = \frac{\Theta_A(\eta)}{E^+ - E^-}\left[\frac{\omega - C - h}{\omega - E^+} - \frac{\omega - C - h}{\omega - E^-}\right] \tag{4.12}$$

$$G_B(\omega,\mathbf{k}) = \frac{\Theta_B(\eta)}{E^+ - E^-}\left[\frac{\omega - A - h}{\omega - E^+} - \frac{\omega - A - h}{\omega - E^-}\right] \tag{4.13}$$

Burada

$$\Theta_A(\eta) = \langle [S_i^+, e^{\eta S_i^z} S_i^-] \rangle, \;\; \Theta_B(\eta) = \langle [S_j^+, e^{\eta S_j^z} S_j^-] \rangle \tag{4.14}$$

$$E^+ = \frac{1}{2}\left\{(A + C + 2h) \pm [(A - C)^2 + 4BD]^{1/2}\right\} \tag{4.15}$$

$$A = D_A\tau_A + 4Jm_B - 4J_1 m_B(\gamma_2 - 1) \tag{4.16}$$

$$B = -4Jm_A\gamma_1 \tag{4.17}$$

$$C = D_B\tau_B + 4Jm_A - 4J_2 m_B(\gamma_2 - 1) \tag{4.18}$$

$$D = -4Jm_B\gamma_1 \tag{4.19}$$

$$\gamma_1 = \cos(\frac{\sqrt{2}}{2}k_x a)\cos(\frac{\sqrt{2}}{2}k_x a) \tag{4.20}$$

$$\gamma_2 = \frac{1}{2}[\cos(\sqrt{2}k_x a) + \cos(\sqrt{2}k_x a)] \tag{4.21}$$

şeklinde verilir.

Şimdi Callen (1963) `in metodunu göz önüne alalım. Callen

$$\Psi(\eta) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} \Psi(\mathbf{k},\eta) \tag{4.22}$$

ve

$$\Theta(\eta) = \langle [S^+, e^{\eta S^z} S^-] \rangle \tag{4.23}$$

bağıntılarının η `ya bağımlılığını kullanan bir diferansiyel denklem geliştirdi. Bu yöntem Tahir-Kheli ve ter Haar (1962) `ın metodundaki 2S tane diferansiyel denklemin yerini aldı.

$$[S^+, S^z]_- = -S^+ \tag{4.24}$$

bağıntısından

$$[S^+, (S^z)^n]_- = [(S^z - 1)^n - (S^z)^n]S^+ \tag{4.25}$$

özdeşliğini elde ederiz. Böylece

$$\begin{aligned}
\Theta(\eta) &= \langle [S^+, e^{\eta S^z} S^-] \rangle \\
&= \langle S^+ e^{\eta S^z} S^- - e^{\eta S^z} S^- S^+ \rangle \\
&= \langle S^+ e^{\eta S^z} S^- - e^{\eta S^z} S^- S^+ + e^{\eta S^z} S^+ S^- - e^{\eta S^z} S^+ S^- \rangle \\
&= \langle e^{\eta S^z} (S^+ S^- - S^- S^+) + (S^+ e^{\eta S^z} - e^{\eta S^z} S^+) S^- \rangle \\
&= \langle e^{\eta S^z} [S^+, S^-]_- + [S^+, e^{\eta S^z}]_- S^- \rangle \\
&= 2\langle e^{\eta S^z} S^z \rangle + (e^{-\eta} - 1)\langle e^{\eta S^z} S^+ S^- \rangle \\
&= 2\langle e^{\eta S^z} S^z \rangle + (e^{-\eta} - 1)\langle e^{\eta S^z} \{S(S+1) - (S^z)^n + S^z\} \rangle \\
&= S(S+1)(e^{-\eta} - 1)\langle e^{\eta S^z} \rangle + \langle e^{\eta S^z} S^z \rangle (1 + e^{-\eta}) \\
&\quad -(e^{-\eta} - 1)\langle e^{\eta S^z} (S^z)^2 \rangle
\end{aligned} \tag{4.26}$$

olur. $\Omega(\eta) = \langle e^{\eta S^z} \rangle$ ve $D = \dfrac{d}{d\eta}$ olarak tanımlanır. Bu durumda Denklem (4.26) aşağıdaki gibi olur:

$$\Theta(\eta) = S(S+1)(e^{-\eta} - 1)\Omega + (e^{-\eta} + 1)D\Omega - (e^{-\eta} - 1)D^2\Omega \tag{4.27}$$

ve ayrıca

$$\begin{aligned}\Psi(k) &= \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}\Psi(\mathbf{k},\eta) \\ &= \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}\sum_{\mathbf{g}-\mathbf{f}} e^{-i(\mathbf{g}-\mathbf{f}).\mathbf{k}}\langle e^{\eta S_f^z} S_f^- S_g^+\rangle \\ &= \langle e^{\eta S^z} S^- S^+\rangle \\ &= S(S+1)\Omega - D\Omega - D^2\Omega\end{aligned} \tag{4.28}$$

elde ederiz. Aynı zamanda Denklem (4.22) aşağıdaki gibi yeniden yazılabilir:

$$\Psi(\mathbf{k},\eta) = \Phi(\mathbf{k})\Theta(\eta) \tag{4.29}$$

$\Phi(\mathbf{k})$ `yı **k**-vektörü üzerinden toplarsak $\Psi(\eta) = \Phi\Theta(\eta)$ elde ederiz. Bu durumda Denklem (4.27) ve (4.28) kullanarak

$$D^2\Omega[1-(e^{-\eta}-1))\Phi] + D\Omega[1+(1+e^{-\eta})\Phi] - S(S+1)\Omega[1-(e^{-\eta}-1)\Phi] = 0 \tag{4.30}$$

diferansiyel denklemi elde edilir. Bu denklemin her iki tarafını e^{η} ile çarpıp düzenlersek

$$D^2\Omega + \frac{(1+\Phi)e^{\eta}+\Phi}{(1+\Phi)e^{\eta}-\Phi} D\Omega - S(S+1)\Omega = 0 \tag{4.31}$$

olur. $\Omega(0) = 1$ ve $\prod_{r=-S}^{+S}(S^z - r) = 0$ şartları altında yukarıdaki diferansiyel denklemin çözümü aşağıdaki gibi verilir:

$$\begin{aligned}\langle S^z\rangle &= D\Omega(\eta)_{\eta=0} \\ &= \frac{(S-\Phi)(1+\Phi)^{2S+1} + (S+1+\Phi)\Phi^{2S+1}}{(1+\Phi)^{2S+1} - \Phi^{2S+1}}\end{aligned} \tag{4.32}$$

Callen `in bu tekniğini kullanarak alt örgü manyetizasyonlarını aşağıdaki gibi elde edilir:

$$m_A = \frac{(S_A - \Phi_A)(1+\Phi_A)^{2S_A+1} + (S_A + 1 + \Phi_A)\Phi_A{}^{2S_A+1}}{(1+\Phi_A)^{2S_A+1} - \Phi_A{}^{2S_A+1}} \tag{4.33}$$

$$m_B = \frac{(S_B - \Phi_B)(1+\Phi_B)^{2S_B+1} + (S_B + 1 + \Phi_B)\Phi_B{}^{2S_B+1}}{(1+\Phi_B)^{2S_B+1} - \Phi_B{}^{2S_B+1}} \tag{4.34}$$

Ayrıca A ve B alt örgüsünün kuadropol momentlerini aşağıdaki gibi elde edilir:

$$Q_A = (2\Phi_A + 1)(1+\Phi_A) - \frac{S_A{}^2\Phi_A{}^{2S_A+1} - (1+S_A)^2(1+\Phi_A)^{2S_A+1} + 2[S_A\Phi_A{}^{2S_A+1} + (1+\Phi_A)^{2S_A+1}(1+S_A)](1+\Phi_A)}{(1+\Phi_A)^{2S_A+1} - \Phi_A{}^{2S_A+1}} \tag{4.35}$$

$$Q_B = (2\Phi_B + 1)(1+\Phi_B) - \frac{S_B{}^2\Phi_B{}^{2S_B+1} - (1+S_B)^2(1+\Phi_B)^{2S_B+1} + 2[S_B\Phi_B{}^{2S_B+1} + (1+\Phi_B)^{2S_B+1}(1+S_B)](1+\Phi_B)}{(1+\Phi_B)^{2S_B+1} - \Phi_B{}^{2S_B+1}} \tag{4.36}$$

Burada Φ_A ve Φ_B ifadelerini aşağıdaki gibi elde ettik:

$$\Phi_A = \frac{2}{N}\sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E^+ - E^-}\left[\frac{E^+ - C - h}{e^{\beta E^+} - 1} - \frac{E^- - C - h}{e^{\beta E^-} - 1}\right] \tag{4.37}$$

$$\Phi_B = \frac{2}{N}\sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E^+ - E^-}\left[\frac{E^+ - A - h}{e^{\beta E^+} - 1} - \frac{E^- - A - h}{e^{\beta E^-} - 1}\right] \tag{4.38}$$

Sistemin toplam manyetizasyonu aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$M = m_A + m_B \tag{4.39}$$

Alt örgü manyetizasyonlarının temel denklemleri (4.33) - (4.39) nümerik olarak çözülebilir. Kompansasyon sıcaklığı ve kritik sıcaklık temel denklemlerden belirlenebilir.

Dış manyetik alan sıfırken, T = 0 K `de $[\exp(\beta E)-1]^{-1}$ çarpanı E>0 için sıfırdır ve E<0 için -1 `dir. Bu durumda Denklem (4.37) ve (4.38) aşağıdaki gibi olur:

$$\Phi_{A0} = \frac{2}{N}\sum_{\mathbf{k}} \frac{E^{+} - C}{E^{+} - E^{-}} \tag{4.40}$$

$$\Phi_{B0} = \frac{2}{N}\sum_{\mathbf{k}} \frac{E^{+} - A}{E^{+} - E^{-}} \tag{4.41}$$

Sıfır sıcaklık manyetizasyonunu elde etmek için Denklem (4.40) ve (4.41) `i, Denklem (4.33) ve (4.34) `de yerine yazarız.

Sistemin başlangıç paralel alınganlık ifadeleri ise aşağıdaki gibi elde edilir. Sistemin dış manyetik alanda lineer değiştiğini göz önüne alalım (Li ve ark, 2007). Alt örgü manyetizasyonlarını

$$\langle S_A^z \rangle = \langle S_A^z \rangle_0 + \chi_A h \tag{4.42}$$

$$\langle S_B^z \rangle = \langle S_B^z \rangle_0 + \chi_B h \tag{4.43}$$

olarak yazabiliriz. Burada

$$\chi_A = \left. \frac{\partial \langle S_A^z \rangle}{\partial h} \right|_{h=0} \tag{4.44}$$

$$\chi_B = \left. \frac{\partial \langle S_B^z \rangle}{\partial h} \right|_{h=0} \tag{4.45}$$

şeklinde verilir. Böylece toplam başlangıç paralel alınganlık aşağıdaki gibi olur:

$$\chi_{\parallel} = \left. \frac{\partial \langle S_A^z \rangle}{\partial h} \right|_{h=0} + \left. \frac{\partial \langle S_B^z \rangle}{\partial h} \right|_{h=0} = \chi_A + \chi_B \tag{4.46}$$

Buradaki türevleri aşağıdaki gibi elde ederiz:

$$\chi_A = \frac{\langle S_A^z \rangle}{\partial h}\bigg|_{h=0} = \left[\frac{\partial \langle S_A^z \rangle}{\partial \Phi_A}\frac{\partial \Phi_A}{\partial h}\right]\bigg|_{h=0} \tag{4.47}$$

$$\chi_B = \frac{\langle S_B^z \rangle}{\partial h}\bigg|_{h=0} = \left[\frac{\partial \langle S_B^z \rangle}{\partial \Phi_B}\frac{\partial \Phi_B}{\partial h}\right]\bigg|_{h=0} \tag{4.48}$$

$$\frac{\partial \langle S_A^z \rangle}{\partial \Phi_A} = (2S_A+1)\frac{(S_A - \langle S_A^z \rangle - \Phi_A)(1+\Phi_A)^{2S_A} + (S_A + \langle S_A^z \rangle + 1 + \Phi_A){\Phi_A}^{2S_A}}{(1+\Phi_A)^{2S_A+1} - {\Phi_A}^{2S_A+1}} - 1 \tag{4.49}$$

$$\frac{\partial \langle S_B^z \rangle}{\partial \Phi_B} = (2S_B+1)\frac{(S_B - \langle S_B^z \rangle - \Phi_B)(1+\Phi_B)^{2S_B} + (S_B + \langle S_B^z \rangle + 1 + \Phi_B){\Phi_B}^{2S_B}}{(1+\Phi_B)^{2S_B+1} - {\Phi_B}^{2S_B+1}} - 1 \tag{4.50}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Phi_A}{\partial h}\bigg|_{h=0} &= \frac{2}{N}\sum_{\mathbf{k}}\frac{1}{(E^+ - E^-)^2}\left(\frac{\partial E^-}{\partial h} - \frac{\partial E^+}{\partial h}\right)\left(\frac{E^+ - C}{e^{\beta E^+} - 1} - \frac{\partial E^- - C}{e^{\beta E^-} - 1}\right)\bigg|_{h=0} \\ &+ \frac{2}{N}\sum_{\mathbf{k}}\frac{1}{E^+ - E^-}\left(\frac{\frac{\partial E^+}{\partial h} - \frac{\partial C}{\partial h} - 1}{e^{\beta E^+} - 1} - \frac{\frac{\partial E^-}{\partial h} - \frac{\partial C}{\partial h} - 1}{e^{\beta E^-} - 1}\right)\bigg|_{h=0} \\ &- \frac{2}{N}\sum_{\mathbf{k}}\frac{\beta}{E^+ - E^-}\left[\frac{e^{\beta E^+}}{(e^{\beta E^+} - 1)^2}\frac{\partial E^+}{\partial h}(E^+ - C) - \frac{e^{\beta E^-}}{(e^{\beta E^-} - 1)^2}\frac{\partial E^-}{\partial h}(E^- - C)\right]\bigg|_{h=0}\end{aligned} \tag{4.51}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Phi_B}{\partial h}\bigg|_{h=0} &= \frac{2}{N}\sum_{\mathbf{k}}\frac{1}{(E^+ - E^-)^2}\left(\frac{\partial E^-}{\partial h} - \frac{\partial E^+}{\partial h}\right)\left(\frac{E^+ - A}{e^{\beta E^+} - 1} - \frac{\partial E^- - A}{e^{\beta E^-} - 1}\right)\bigg|_{h=0} \\ &+ \frac{2}{N}\sum_{\mathbf{k}}\frac{1}{E^+ - E^-}\left(\frac{\frac{\partial E^+}{\partial h} - \frac{\partial A}{\partial h} - 1}{e^{\beta E^+} - 1} - \frac{\frac{\partial E^-}{\partial h} - \frac{\partial A}{\partial h} - 1}{e^{\beta E^-} - 1}\right)\bigg|_{h=0} \\ &- \frac{2}{N}\sum_{\mathbf{k}}\frac{\beta}{E^+ - E^-}\left[\frac{e^{\beta E^+}}{(e^{\beta E^+} - 1)^2}\frac{\partial E^+}{\partial h}(E^+ - A) - \frac{e^{\beta E^-}}{(e^{\beta E^-} - 1)^2}\frac{\partial E^-}{\partial h}(E^- - A)\right]\bigg|_{h=0}\end{aligned} \tag{4.52}$$

$$\left.\frac{\partial\langle (S_A^z)\rangle}{\partial h}\right|_{h=0} = (4\Phi_A+3)\left.\frac{\partial\Phi_A}{\partial h}\right|_{h=0}$$
$$-\frac{(2S_A+1)[S_A(S_A-2){\Phi_A}^{2S_A}-(1+S_A)^2(1+\Phi_A){\Phi_A}^{2S_A}}{(1+\Phi_A)^{2S_A+1}-{\Phi_A}^{2S_A+1}}\left.\frac{\partial\Phi_A}{\partial h}\right|_{h=0}$$
$$-\frac{4(S_A+1)[S_A{\Phi_A}^{2S_A+1}+(1+\Phi_A)^{2S_A+1}(1+S_A)]}{(1+\Phi_A)^{2S_A+1}-{\Phi_A}^{2S_A+1}}\left.\frac{\partial\Phi_A}{\partial h}\right|_{h=0}$$
$$+\frac{[S_A^2{\Phi_A}^{2S_A+1}-(1+\Phi_A)^{2S_A+1}(1+S_A)^2](2S_A+1)[(1+\Phi_A)^{2S_A}-{\Phi_A}^{2S_A}}{[(1+\Phi_A)^{2S_A+1}-{\Phi_A}^{2S_A+1}]^2}\left.\frac{\partial\Phi_A}{\partial h}\right|_{h=0}$$
$$+\frac{2[S_A{\Phi_A}^{2S_A+1}+(1+\Phi_A)^{2S_A+1}(1+S_A)^2](2S_A+1)[(1+\Phi_A)^{2S_A}-{\Phi_A}^{2S_A}}{[(1+\Phi_A)^{2S_A+1}-{\Phi_A}^{2S_A+1}]^2}\left.\frac{\partial\Phi_A}{\partial h}\right|_{h=0} \tag{4.53}$$

$$\left.\frac{\partial\langle (S_B^z)\rangle}{\partial h}\right|_{h=0} = (4\Phi_B+3)\left.\frac{\partial\Phi_B}{\partial h}\right|_{h=0}$$
$$-\frac{(2S_B+1)[S_B(S_B-2){\Phi_B}^{2S_B}-(1+S_B)^2(1+\Phi_B){\Phi_B}^{2S_B}}{(1+\Phi_B)^{2S_B+1}-{\Phi_B}^{2S_B+1}}\left.\frac{\partial\Phi_B}{\partial h}\right|_{h=0}$$
$$-\frac{4(S_B+1)[S_B{\Phi_B}^{2S_B+1}+(1+\Phi_B)^{2S_B+1}(1+S_B)]}{(1+\Phi_B)^{2S_B+1}-{\Phi_B}^{2S_B+1}}\left.\frac{\partial\Phi_B}{\partial h}\right|_{h=0}$$
$$+\frac{[S_B^2{\Phi_B}^{2S_B+1}-(1+\Phi_B)^{2S_B+1}(1+S_B)^2](2S_B+1)[(1+\Phi_B)^{2S_B}-{\Phi_B}^{2S_B}}{[(1+\Phi_B)^{2S_B+1}-{\Phi_B}^{2S_B+1}]^2}\left.\frac{\partial\Phi_B}{\partial h}\right|_{h=0}$$
$$+\frac{2[S_B{\Phi_B}^{2S_B+1}+(1+\Phi_B)^{2S_B+1}(1+S_B)^2](2S_B+1)[(1+\Phi_B)^{2S_B}-{\Phi_B}^{2S_B}}{[(1+\Phi_B)^{2S_B+1}-{\Phi_B}^{2S_B+1}]^2}\left.\frac{\partial\Phi_B}{\partial h}\right|_{h=0} \tag{4.54}$$

$$\left.\frac{\partial E^{\pm}}{\partial h}\right|_{h=0} = 1+\frac{1}{2}\left.\left(\frac{\partial A}{\partial h}+\frac{\partial C}{\partial h}\right)\right|_{h=0}$$
$$\pm\frac{1}{2\sqrt{(A-C)^2+4BD}}\left.\left[2(A-C)\left(\frac{\partial A}{\partial h}-\frac{\partial C}{\partial h}\right)+4\frac{\partial B}{\partial h}D+4B\frac{\partial D}{\partial h}\right]\right|_{h=0} \tag{4.55}$$

$$\frac{\partial\tau_A}{\partial h} = \frac{\langle S_A^z\rangle}{S_A^2}\left.\frac{\partial\langle (S_A^z)^2\rangle}{\partial h}\right|_{h=0} + \left\{2-\frac{1}{S_A^2}[S_A(S_A+1)-\langle (S_A^z)^2\rangle_0]\right\}\left.\frac{\partial\langle S_A^z\rangle}{\partial h}\right|_{h=0} \tag{4.56}$$

$$\frac{\partial\tau_B}{\partial h} = \frac{\langle S_B^z\rangle}{S_B^2}\left.\frac{\partial\langle (S_B^z)^2\rangle}{\partial h}\right|_{h=0} + \left\{2-\frac{1}{S_B^2}[S_B(S_B+1)-\langle (S_B^z)^2\rangle_0]\right\}\left.\frac{\partial\langle S_B^z\rangle}{\partial h}\right|_{h=0} \tag{4.57}$$

$$\left.\frac{\partial A}{\partial h}\right|_{h=0} = \left(D_A \frac{\partial \tau_A}{\partial h} + 4J \frac{\partial \langle S_B^z \rangle}{\partial h} - 4J_1 \frac{\partial \langle S_A^z \rangle}{\partial h} (\gamma_2 - 1) \right) \Bigg|_{h=0} \tag{4.58}$$

$$\left.\frac{\partial B}{\partial h}\right|_{h=0} = \left(-4J \frac{\partial \langle S_A^z \rangle}{\partial h} \gamma_1 \right) \Bigg|_{h=0} \tag{4.59}$$

$$\left.\frac{\partial C}{\partial h}\right|_{h=0} = \left(D_B \frac{\partial \tau_B}{\partial h} + 4J \frac{\partial \langle S_A^z \rangle}{\partial h} - 4J_2 \frac{\partial \langle S_B^z \rangle}{\partial h} (\gamma_2 - 1) \right) \Bigg|_{h=0} \tag{4.60}$$

$$\left.\frac{\partial D}{\partial h}\right|_{h=0} = \left(-4J \frac{\partial \langle S_B^z \rangle}{\partial h} \gamma_1 \right) \Bigg|_{h=0} \tag{4.61}$$

Burada verilen denklemler çok karmaşık olduğundan paralel başlangıç alınganlığı nümerik olarak bulunabilir.

Son olarak, sistemin histerisiz davranışını toplam manyetizasyonun uygulanan dış manyetik alanın fonksiyonu olarak incelenmesi ise Denklem (4.33) ve (4.34) ile verilen ifadelerden elde edilir. Zorlayıcı alan histerisiz verilerinden nümerik olarak incelenmektedir.

5. NÜMERİK SONUÇLAR

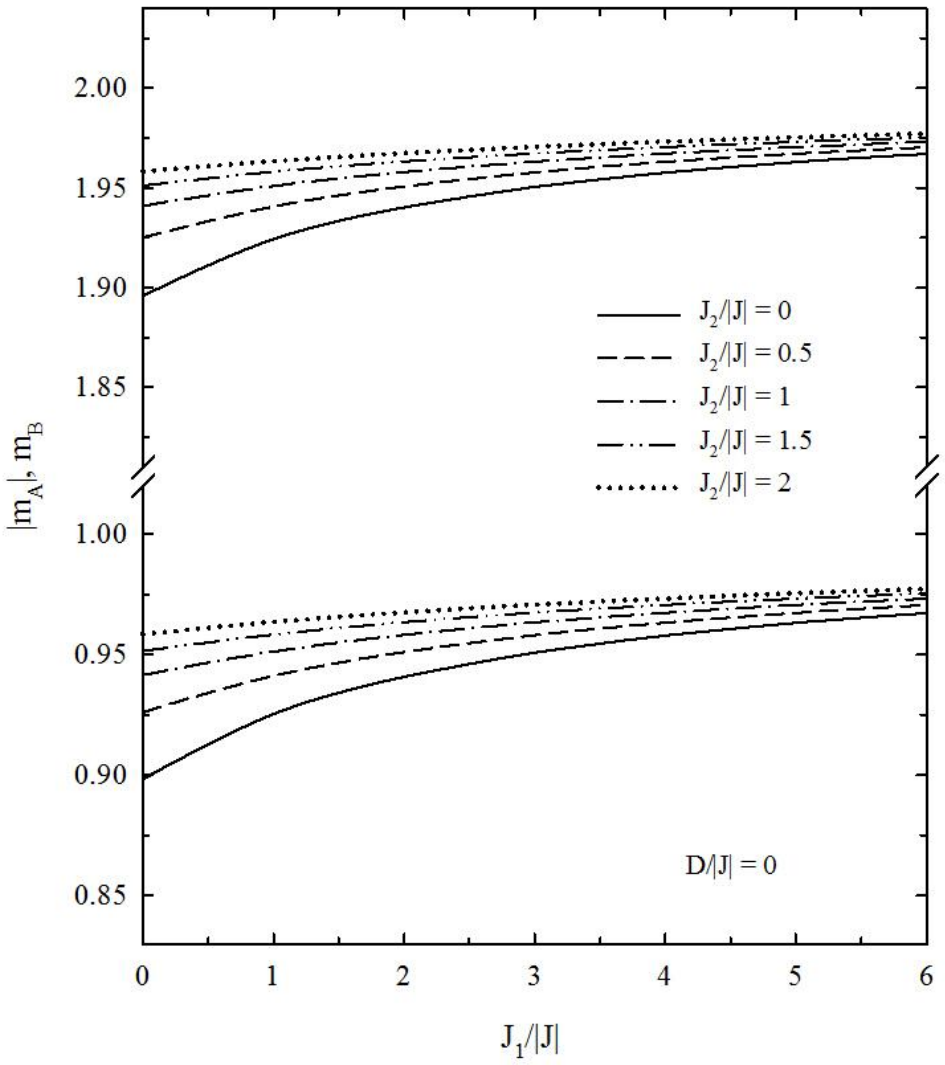
5. 1. Dış manyetik alan yokluğunda manyetizasyon

Dış manyetik alan yokluğunda, ilk olarak taban durumunda alt örgü manyetizasyonlarını inceleyeceğiz. Daha sonra sadece en yakın komşu etkileşiminin ve tek-iyon anizotropilerinin manyetizasyon eğrileri üzerine etkisini inceleyeceğiz. Ayrıca her bir anizotropiyi ayrı ayrı ele alarak her birinin etkisini de göreceğiz. Daha sonra en yakın komşu etkileşimi ve tek-iyon anizotropilerine A alt örgüsünün ikinci en yakın komşu etkileşimini dahil edip kritik sıcaklık ve kompansasyon sıcaklığı üzerine etkisini vereceğiz. Son olarak, B alt örgüsünün ikinci en yakın komşu etkileşimini de alarak, Hamiltoniyendeki diğer parametreleri değiştirerek manyetizasyon ve kuadropol moment eğrileri üzerine etkilerini, ayrıca kompansasyon ve kritik sıcaklık üzerine etkilerini inceleyeceğiz.

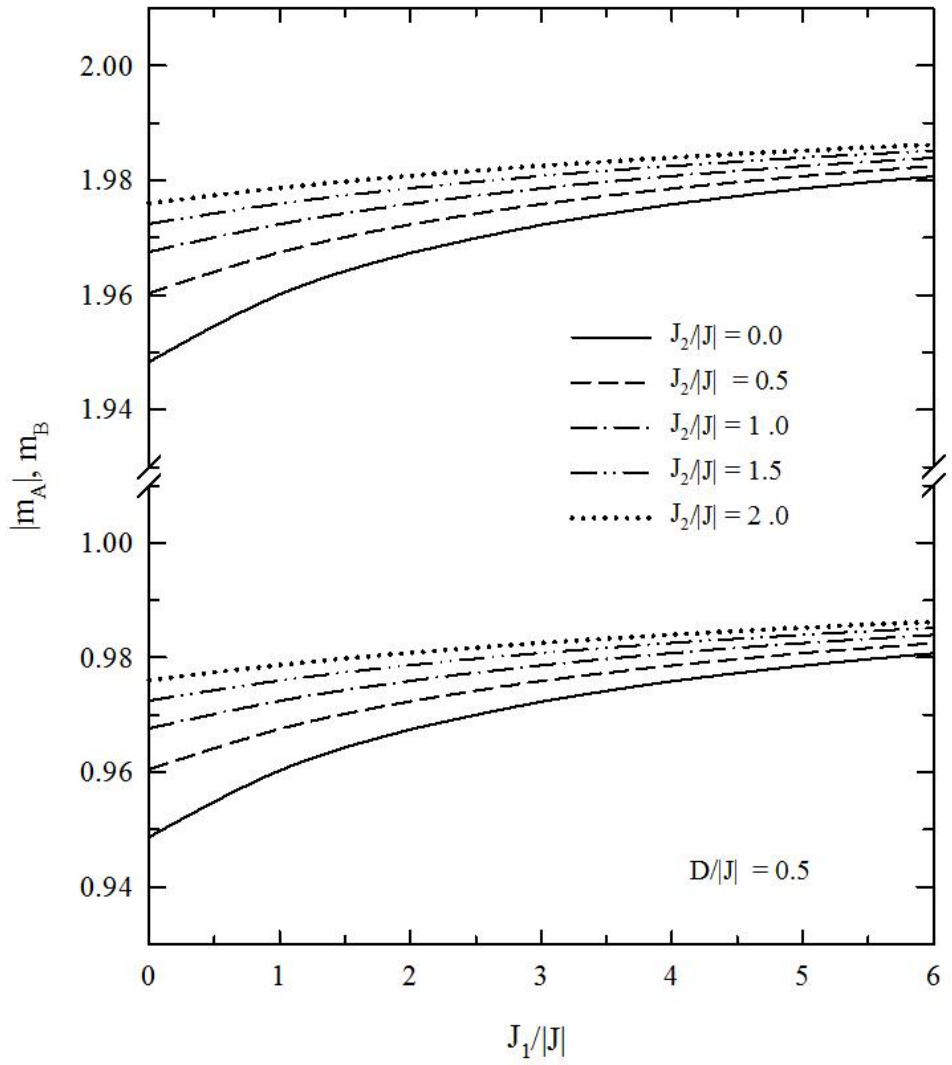
Taban durumunda (T = 0 K) alt örgü manyetizasyon eğrilerinin davranışı Şekil 5.1 ve 5.2 `de verilmiştir. Şekil 5.1, tek-iyon anizotropileri sıfıra eşit olduğunda, Şekil 5.2 ise $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 0.5$ olduğunda $J_2/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($J_2/|J| = 0$, 0.5, 1, 1.5 ve 2) $J_1/|J|$ `nin fonksiyonu olarak alt örgü manyetizasyonlarını göstermektedir. Bu şekillerden alt örgü manyetizasyonlarının mutlak sıfırda doyuma ulaşmadığını görebiliriz. Mutlak sıfırda spinler için sıfır nokta çalkantısı olduğu bilinmektedir. Ayrıca spinlerin sıfır nokta çalkantısının ikinci en yakın komşu etkileşimi ve tek-iyon anizotropileri arttıkça azaldığını görebiliriz. Çünkü tek-iyon anizotropisi ve ikinci en yakın komşu etkileşimi sistemin uzun menzil düzenini ayarladığından dolayı sıfır nokta çalkantısını azaltır.

Şekil 5.3, 5.4, 5.5, 5.6 ve 5.7 `de, ikinci en yakın komşu etkileşimleri olmadığı zaman (yani $J_1/|J| = J_2/|J| = 0$) toplam manyetizasyon eğrilerini çizdik. Bu şekillerden görüldüğü gibi, sadece en yakın komşu etkileşimler ve tek-iyon anizotropiler olduğunda kompansasyon sıcaklığı gözlenmez ve manyetizasyon basitçe kritik sıcaklıkta sıfıra gider. Bu sonuç, Buendiá ve Cardona (1999) `nın Monte Carlo simulasyonu ile kare örgüde karma spin Ising ferrimanyetik sistem için bulduğu sonuç ile aynıdır ( Şekil 5.8). Bu şekiller üç tip manyetizasyon davranışı sergiler. Şekil 5.3 `de sadece en yakın komşu etkileşimi ve B alt örgüsünün tek-iyon anizotropisini ($J_1/|J| = J_2/|J| = 0$ ve $D_A/|J| = 0$) dahil ettik. Burada $D_B/|J| = 1$ değerini aldığı zaman manyetizasyon eğrisi, Néel (1948) sınıflandırmasında Q tipi (Şekil 5.9) davranış gösterir ve $D_B/|J| = 2$, 4, 6 ve 8 değerlerini

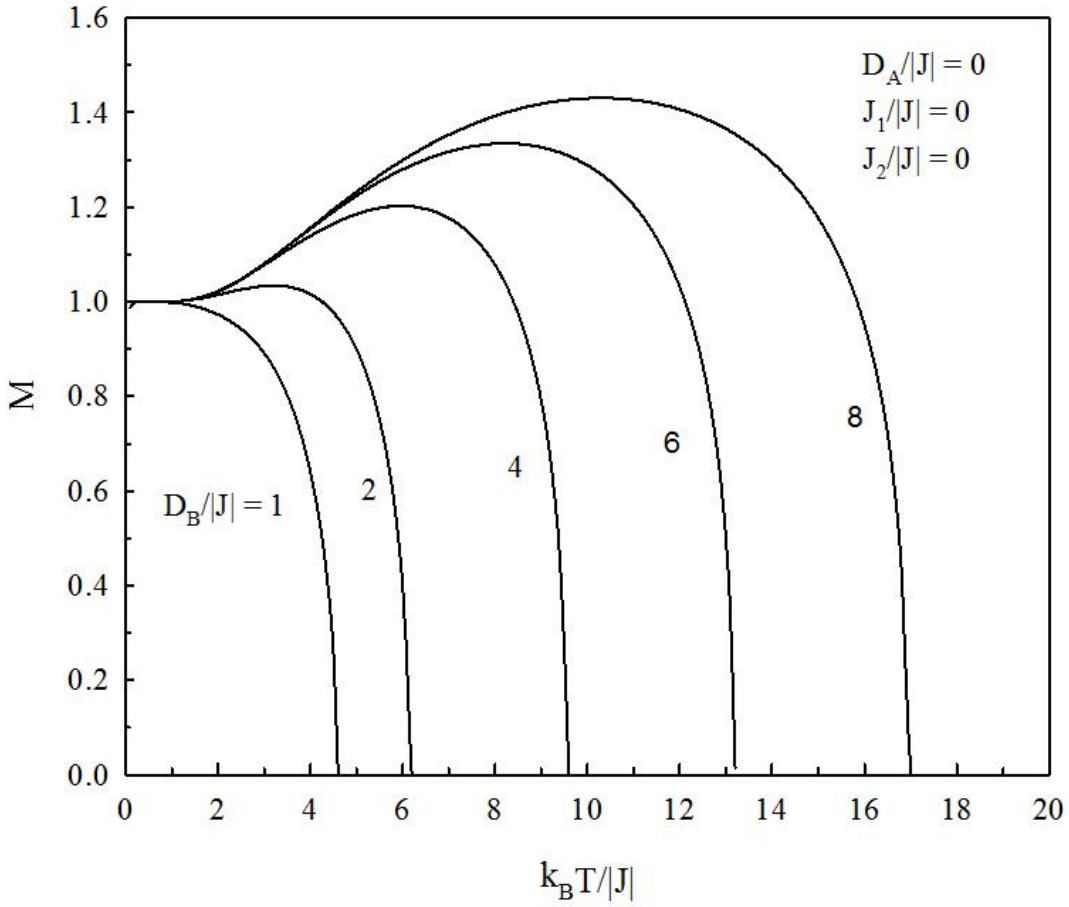
aldığı zaman manyetizasyon eğrileri Néel sınıflandırmasında P tipi (Şekil 5.9) davranış gösterir. Şekil 5.4 `de, sadece en yakın komşu etkileşimi ve $D_A/|J| = 1$ olduğunda $D_B/|J| = -0.2, 0.5, 1, 2, 3$ ve 4 değerleri için toplam manyetizasyon-sıcaklık grafiğini çizdik. Burada $D_B/|J| = -0.2, 0.5$ ve 1 değerlerini aldığı zaman manyetizasyon eğrileri Q tipi (Néel sınıflandırmasında) davranış gösterir ve $D_B/|J| = 2$, 3 ve 4 değerlerini aldığı zaman manyetizasyon eğrileri P tipi (Néel sınıflandırmasında) davranış gösterir. Şekil 5.5 `de, sadece en yakın komşu etkileşimi ve A alt örgüsünün tek-iyon anizotropisini ($J_1/|J| = J_2/|J| = 0$ ve $D_B/|J| = 0$) dahil ettik. Burada $D_A/|J| = 1$ ve 2 değerlerini aldığı zaman manyetizasyon eğrileri Q tipi (Néel sınıflandırmasında) davranış gösterir ve $D_A/|J| = 4$, 6 ve 8 olduğunda manyetizasyon eğrileri doyum değerinden çok hızlı düşer, bu tip davranış Néel sınıflandırmasında yer almamaktadır. Şekil 5.6 `da, sadece en yakın komşu etkileşimi ve $D_B/|J| = 1$ olduğunda $D_A/|J| = -4, -2, -0.5, 1, 3$ ve 4 değerleri için toplam manyetizasyon-sıcaklık grafiğini çizdik. Burada $D_A/|J|$ `nın negatif değerleri için manyetizasyon eğrileri P tipi (Néel sınıflandırmasında) davranış gösterir ve pozitif değerleri için manyetizasyon eğrileri Q tipi (Néel sınıflandırmasında) davranış gösterir. Şekil 5.7 `de ise sadece en yakın komşu etkileşimi ve birbirlerine eşit tek-iyon anizotropileri ($J_1/|J| = J_2/|J| = 0$ ve $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J|$) dahil ettik. Burada $D/|J| = 0{,}5$ ve 1 değerlerini aldığı zaman manyetizasyon eğrileri Q tipi (Néel sınıflandırmasında) davranış gösterir ve $D/|J| = 2$, 3 ve 4 değerlerini aldığı zaman manyetizasyon eğrileri P tipi (Néel sınıflandırmasında) davranış gösterir.



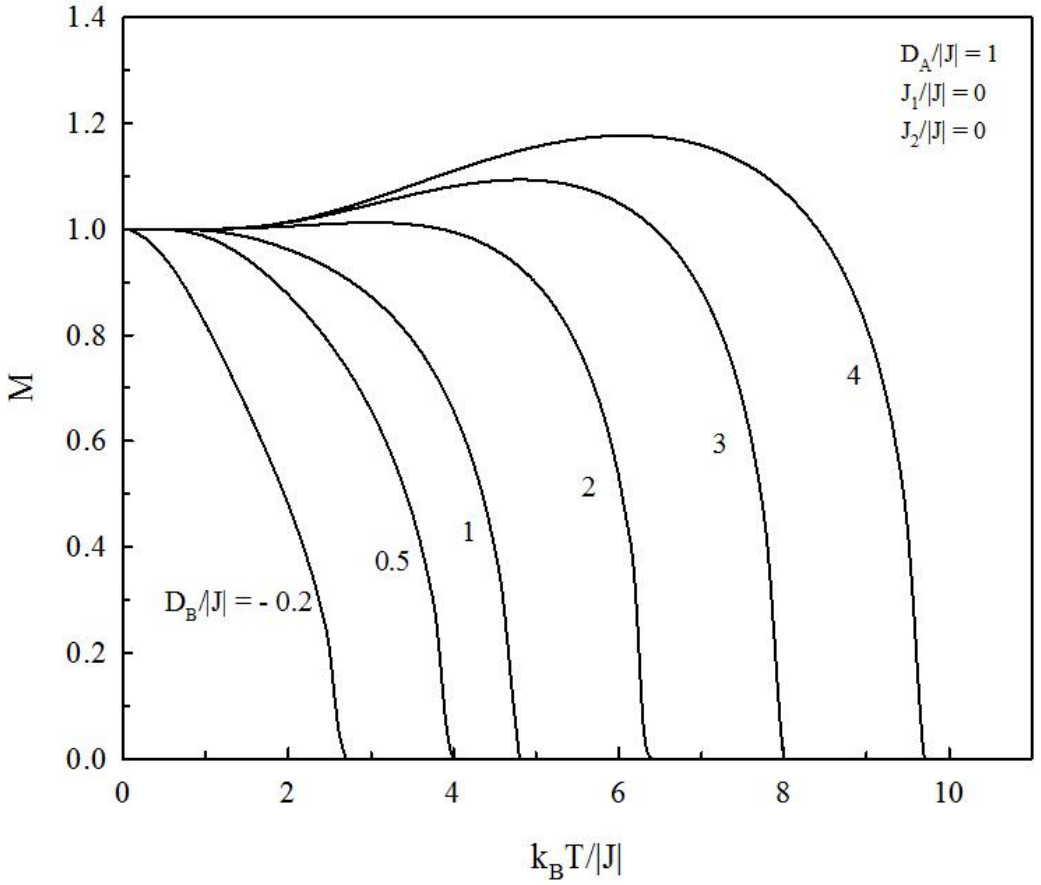
Şekil 5.1. $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 0$ değerinde $J_2/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($J_2/|J| = 0$, 0.5, 1, 1.5 ve 2) taban durumunda $J_1/|J|$ `nin fonksiyonu olarak alt örgü manyetizasyonlarının grafiği



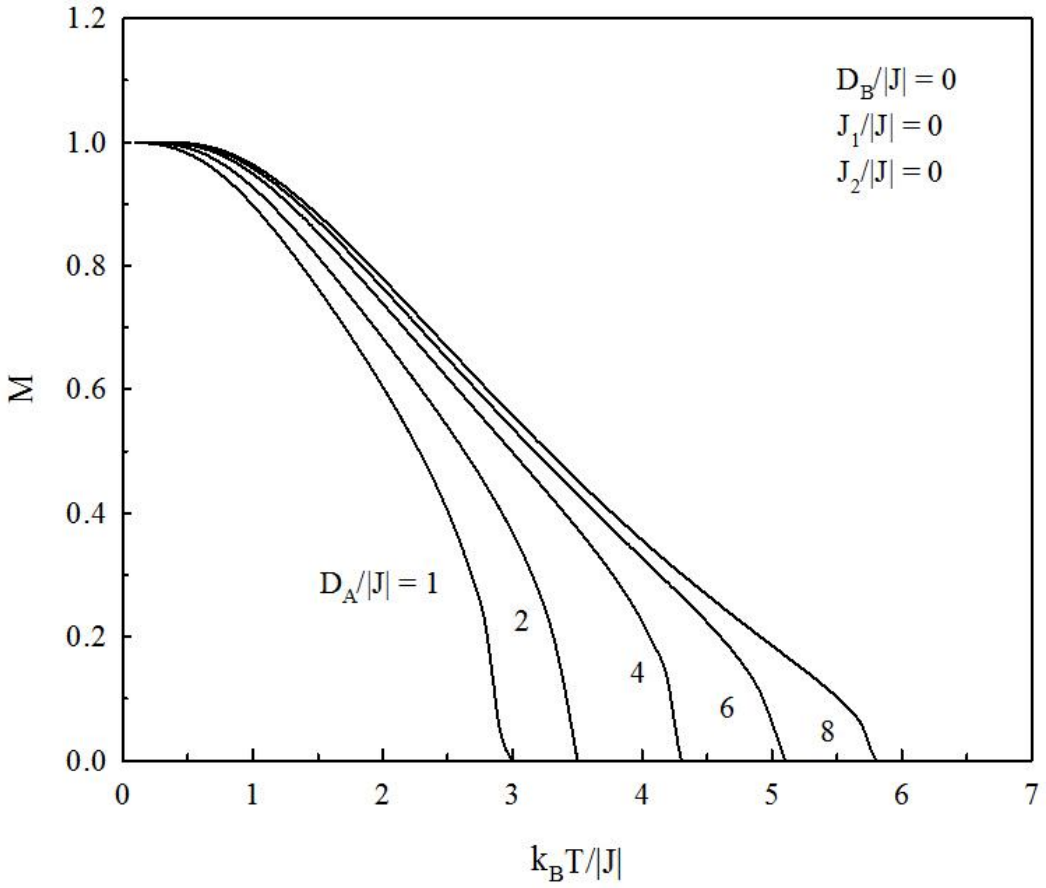
Şekil 5.2. $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 0.5$ değerinde $J_2/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($J_2/|J| = 0$, 0.5, 1, 1.5 ve 2) taban durumunda $J_1/|J|$ `nin fonksiyonu olarak alt örgü manyetizasyonlarının grafiği



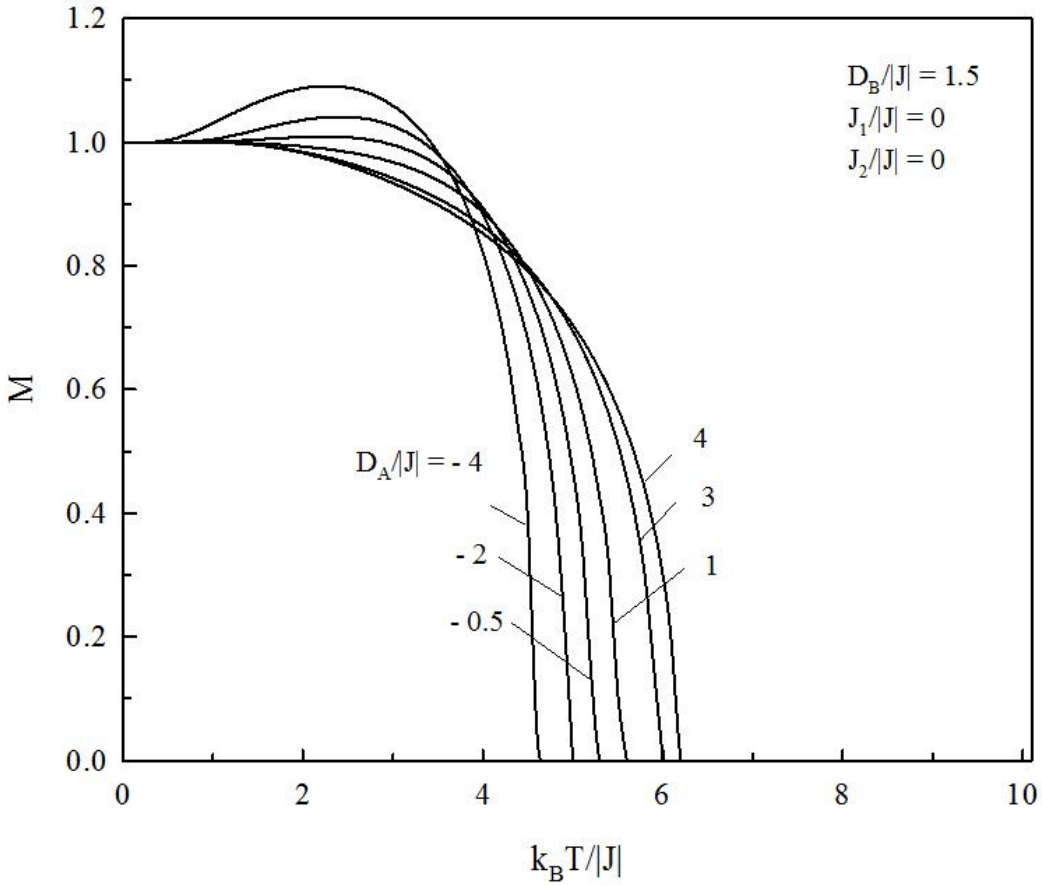
Şekil 5.3. $J_1/|J| = J_2/|J| = 0$ ve $D_A/|J| = 0$ değerlerinde $D_B/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($D_B/|J| = 1$, 2, 4, 6 ve 8) toplam manyetizasyon-sıcaklık grafiği



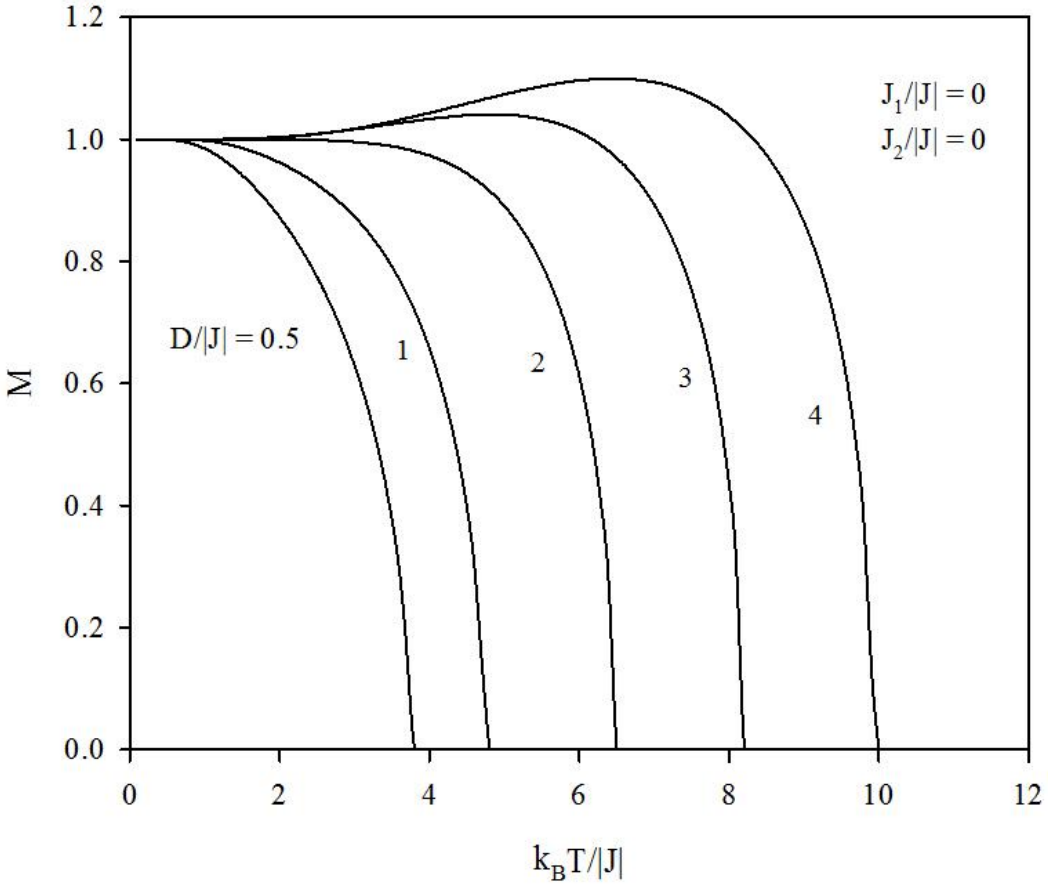
Şekil 5.4. $J_1/|J| = J_2/|J| = 0$ ve $D_A/|J| = 1$ değerlerinde $D_B/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($D_B/|J| = -0.2$, 0.5, 1, 2, 3 ve 4) toplam manyetizasyon-sıcaklık grafiği



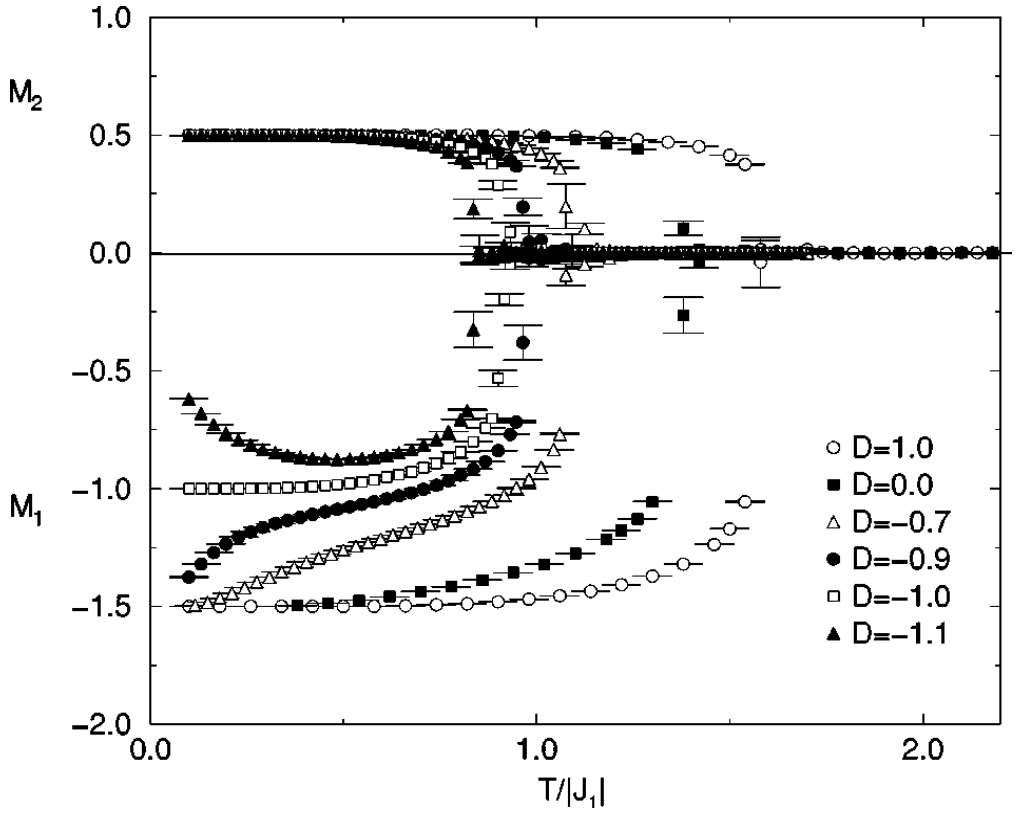
Şekil 5.5. $J_1/|J| = J_2/|J| = 0$ ve $D_B/|J| = 0$ değerlerinde $D_A/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($D_A/|J| = 1$, 2, 4, 6 ve 8) toplam manyetizasyon-sıcaklık grafiği



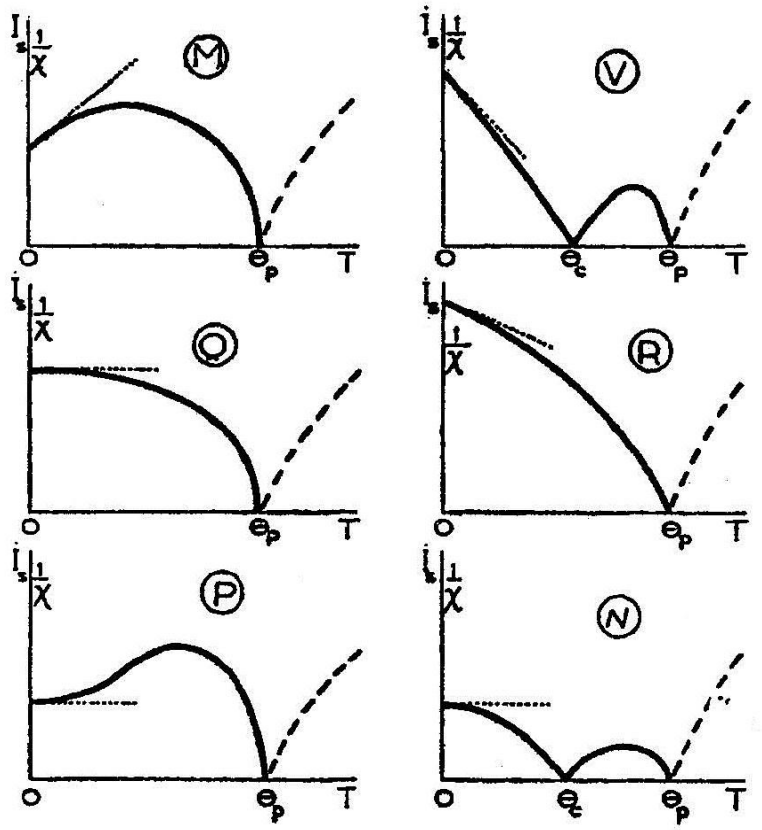
Şekil 5.6. $J_1/|J| = J_2/|J| = 0$ ve $D_B/|J| = 1.5$ değerlerinde $D_A/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($D_A/|J| = -4$, -2, -0.5, 1, 3 ve 4) toplam manyetizasyon-sıcaklık grafiği



Şekil 5.7. $J_1/|J| = J_2/|J| = 0$ değerlerinde $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($D/|J| = 0.5$, 1, 3 ve 4) toplam manyetizasyon-sıcaklık grafiği



Şekil 5.8. Buendìa ve Cardona (1999) `nın kare örgüde karma spin Ising ferrimanyetik sistem için farklı anizotropi değerlerinde Monte Carlo simülasyonu ile elde ettikleri alt örgü manyetizasyonları-sıcaklık grafiği



Şekil 5.9. Néel (1948) tarafından verilen manyetizasyon tiplerinin şematik gösterimi (manyetizasyonun ve alınganlığın tersinin sıcaklıkla değişim grafiği)

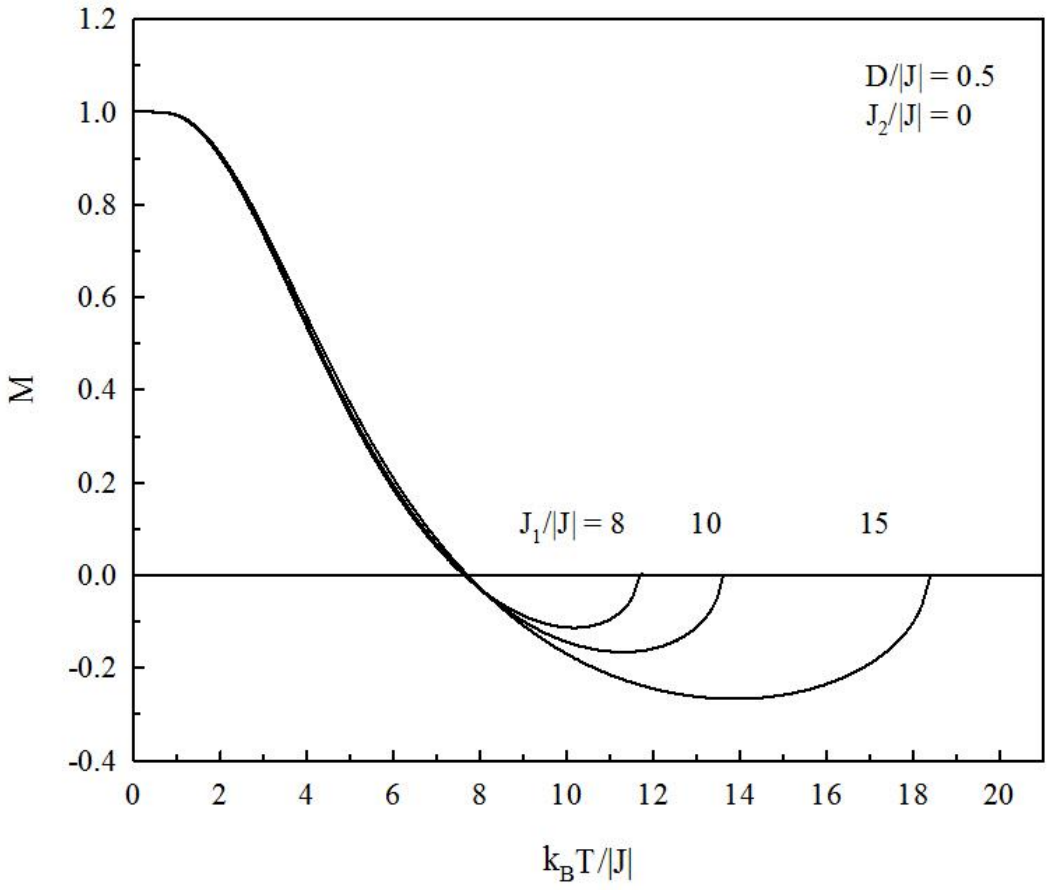
A alt örgüsünün ikinci en yakın komşu etkileşimini, $J_1/|J|$, dahil edelim. Şekil 5.10 ve 5.11, $J_2/|J| = 0$ olduğu zaman, $J_1/|J| = 8$, 10 ve 15 değerlerini aldığında $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($D/|J| = 0.5$ ve 1) toplam manyetizasyon eğrilerini göstermektedir. $J_1/|J| = 15$ ve $J_2/|J| = 0$ değerlerini aldığında alt örgü manyetizasyonları ve toplam manyetizasyon eğrileri $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 0.5$ değeri için Şekil 5.12 `de; $D_A/|J| = 1$ ve $D_B/|J| = 0.5$ değerleri için Şekil 5.13 `de; $D_A/|J| = 2$ ve $D_B/|J| = -0.2$ değerleri için Şekil 5.14 `de; $D_A/|J| = -0.1$ ve $D_B/|J| = -0.01$ değerleri için Şekil 5.15 `de gösterilmiştir. Şekil 5.16, 5.17, 5.18 ve 5.19, $J_1/|J| = 15$, $J_2/|J| = 0$ ve $D_B/|J| = 1.5$ olduğu zaman sırayla $D_A/|J| = -1.5$, -1.2, -1 ve -0.8 değerlerini aldığında alt örgü manyetizasyonları ve toplam manyetizasyon eğrilerini verir. Manyetizasyonun süreksiz olduğu sıcaklık (T_D) noktalı çizgi ile gösterilmiştir. Burada T_D, birinci mertebe faz geçiş sıcaklığını göstermektedir. Görüldüğü gibi $D_A/|J|$ `nin negatif değerleri için birinci mertebe faz geçişleri vardır. Oysa $D_B/|J|$ `nin negatif değerleri için faz geçişi görülmemektedir (Şekil 5.14). Anizotropilerin her ikisi de negatif değer aldığında birinci mertebe faz geçişi olduğunu Şekil 5.15 `den görebiliriz. Şekil 5.16 `de kompansasyon sıcaklığı görülmemektedir, oysa Şekil 5.17, 5.18 ve 5.19 `de kompansasyon sıcaklığı vardır. Ayrıca Şekil 5.17 `da $T_{komp} = T_D$ `dir. Buradaki şekillerden görüldüğü gibi $T = 0$ `da manyetizasyonların değerleri doyum değerine yaklaşmaktadır. Bobák ve ark. (2009), Oguchi metodu kullanarak elde ettikleri basit kübik örgüde karma spin isotropik Heisenberg sistem için tek-iyon anizotropisinin bazı negatif değerleri için birinci mertebe faz geçişi gözlemiştir ve bazı değerler için kompansasyon noktası yokken bazıları için bir veya daha çok kompansasyon noktası vardır (Şekil 5.20). Ayrıca Bobák ve ark. (2011), Oguchi metodu kullanarak elde ettikleri basit kübik örgüde karma spin Ising ferrimanyetinde negatif anizotropi değeri için yine birinci mertebe faz geçişi gözlemiştir ve şekilden görüldüğü gibi manyetizasyonun süreksiz olduğu sıcaklıktan daha düşük sıcaklıkta bir kompansasyon noktası vardır (Şekil 5.21). Burada verilen şekillerden, en yakın komşu etkileşimi, tek-iyon anizotropiler ve A alt örgüsünün ikinci en yakın komşu etkileşimi dahil edildiğinde kompansasyon sıcaklığının mevcut olduğunu görebiliriz. Burada $J_1/|J|$, minimum bir değeri aştığında kompansasyon noktası gözlenmektedir, bu sonuç Şekil 5.22 `de verilmiştir. Şekil 5.22 `de $J_2/|J| = 0$ değerinde $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($D/|J| = 0.5$, 1.0 ve 1.5), $J_1/|J|$ `nin bir fonksiyonu olarak kompansasyon ve kritik sıcaklık çizilmiştir ve burada düz çizgiler kritik sıcaklığı, kesikli çizgiler kompansasyon sıcaklığını göstermektedir. Her kritik sıcaklık eğrisi, karşılık gelen

kompansasyon sıcaklık eğrisi ile kesişir. $J_1/|J|$ `nin değeri, $D/|J| = 0.5$ için $J_{1min}/|J| = 4.05$, $D/|J| = 1.0$ için $J_{1min}/|J| = 4.15$ ve $D/|J| = 1.5$ için $J_{1min}/|J| = 4.41$ aştığında kompansasyon sıcaklığı görülmeye başlar. Ayrıca bu şekilden görüldüğü gibi, kritik sıcaklık $J_1/|J|$ `nin artması ile artar oysa kompansasyon sıcaklığı $J_1/|J|$ `nin artması ile azalır; hem kritik sıcaklık hem de kompansasyon sıcaklığı $D/|J|$ `nin artması ile artar. Şekil 5.23, Buendìa ve Cardona (2000) `nın kare örgüde karma spin Ising ferrimanyetik sistem için farklı anizotropi değerlerinde Monte Carlo simulayonu ile elde ettikleri $J_2/|J_1|$ - sıcaklık grafiğidir. Burada J_1 en yakın komşu etkileşimi ve J_2 ikinci en yakın komşu etkileşimini göstermektedir.

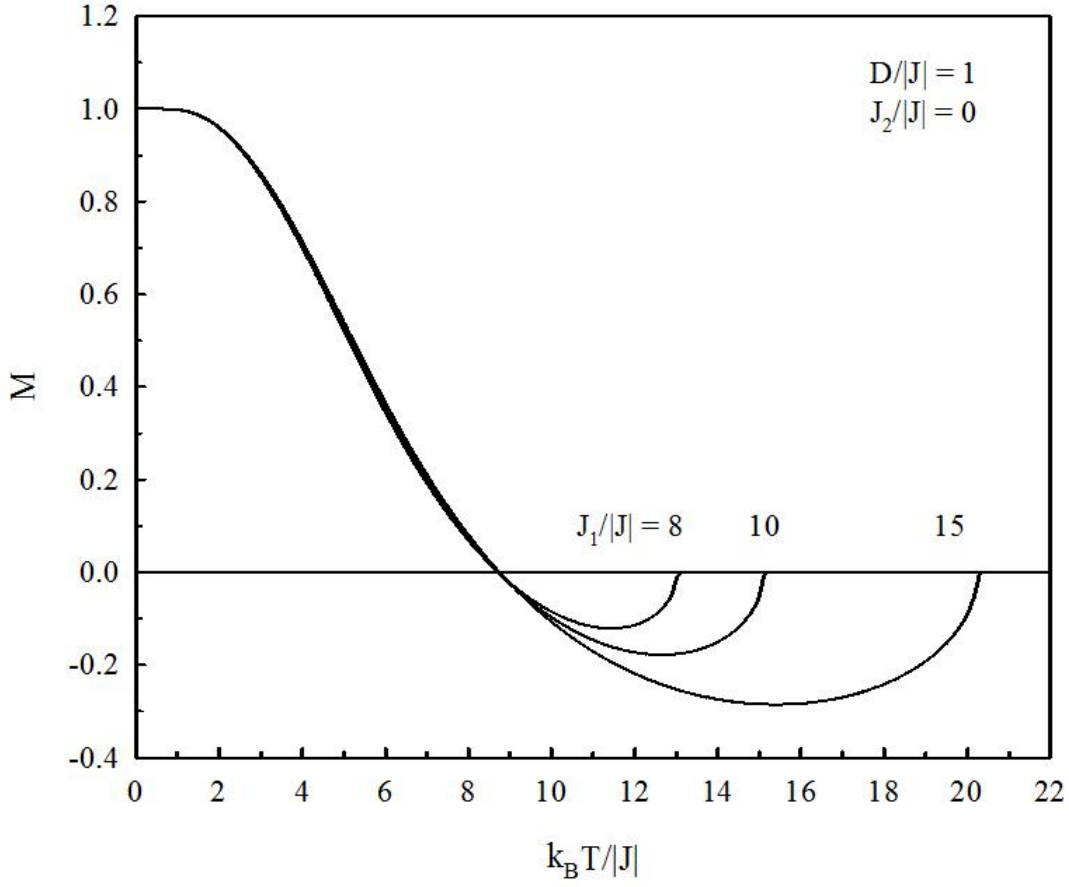
$D_B/|J| = 1.5$ ve $J_2/|J| = 0$ `da $D_A/|J|$ `nin muhtelif negatif ve pozitif değerleri için, kritik, kompansasyon ve birinci mertebe faz geçiş sıcaklıklarının $J_1/|J|$ `e bağımlılığı Şekil 5.24 çizilmiştir. Düz çizgiler kritik sıcaklığı, kesikli çizgiler kompansasyon sıcaklığını ve noktalı çizgiler birinci mertebe faz geçiş sıcaklığını göstermektedir. Her kritik sıcaklık eğrisi ve faz geçiş eğrisi, karşılık gelen kompansasyon sıcaklık eğrisi ile kesişir. Şekillerden görüldüğü gibi, $D_A/|J|$ `nin negatif değerleri için birinci mertebe faz geçişleri vardır, oysa pozitif değerleri için faz geçişleri gözlenmez. Birinci mertebe faz geçiş sıcaklığı $J_1/|J|$ arttıkça $J_1/|J|$ `nin belirli bir değerine kadar artar, ondan sonra $J_1/|J|$ `nin artması ile değişmez. Kompansasyon sıcaklığı $D_A/|J| = -0.5$, 1 ve 2 için aynı değere sahiptir, oysa $D_A/|J| = -2$ için kompansasyon sıcaklığı gözlenmez. Kritik sıcaklık $D_A/|J|$ `nin pozitif değerleri ve $J_1/|J|$ arttıkça artar.

Şekil 5.25, $J_1/|J| = 0.5$ ve $J_2/|J| = 0$ `da $D_A/|J|$ `nin muhtelif negatif ve pozitif değerleri için, $D_B/|J|$ `nin bir fonksiyonu olarak, kritik, kompansasyon ve birinci mertebe faz geçiş sıcaklığını göstermektedir. Düz çizgiler kritik sıcaklığı, kesikli çizgiler kompansasyon sıcaklığını ve noktalı çizgiler birinci mertebe faz geçiş sıcaklığını göstermektedir. Her kritik sıcaklık eğrisi, karşılık gelen kompansasyon sıcaklık eğrisi ile kesişir. $D_B/|J|$ arttıkça kompansasyon sıcaklığı kritik sıcaklığa doğru $D_B/|J|$ `nin maksimum bir değerine ($D_A/|J| = -1$ için $D_{Bmax}/|J| = 8.46$, $D_A/|J| = -0.5$ için $D_{Bmax}/|J| = 8.77$, $D_A/|J| = 1$ için $D_{Bmax}/|J| = 9.74$ ve $D_A/|J| = 2$ için $D_{Bmax}/|J| = 9.99$) kadar artar ve $D_{Bmax}/|J|$ `de kompansasyon ve kritik sıcaklık özdeş olur. $D_{Bmax}/|J|$ `den daha büyük $D_B/|J|$ değerleri için kompansasyon sıcaklığı kaybolur. Diğer taraftan $D_A/|J|$ `nin burada verilen değerleri için kompansasyon çizgileri üst üste biner. $D_A/|J|$ `nin negatif değerleri için, $D_B/|J|$ `nin belirli bir değerine kadar birinci mertebe faz geçişleri

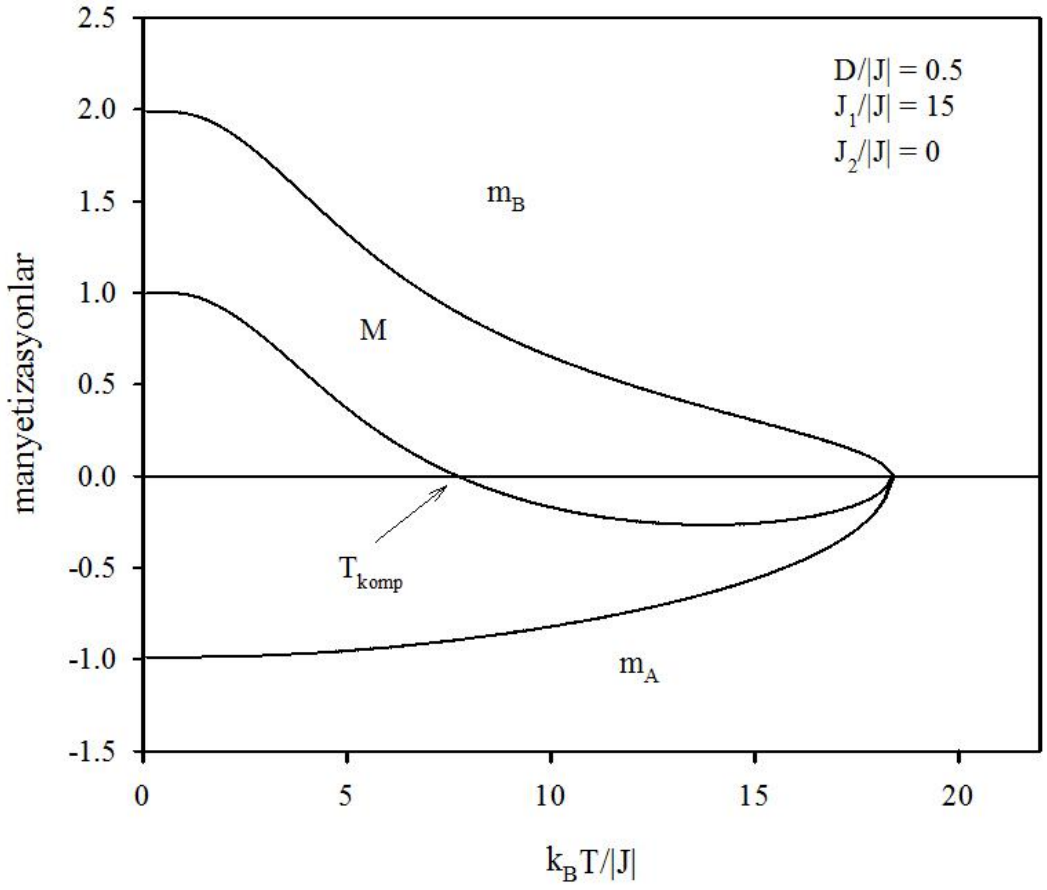
vardır. Bu değerden daha büyük değerler için faz geçişleri olmaz ve manyetizasyon kritik sıcaklıkta sıfıra gider. Ayrıca burada verilen negatif değerlerde kompansasyon sıcaklığı faz geçiş eğrisi ve kompansasyon eğrisinin kesiştiği noktadan itibaren görülmeye başlar. Oysa $D_A/|J|$ `nin pozitif değerleri için, $D_B/|J| = 0$ `da kompansasyon sıcaklığı görülmektedir.



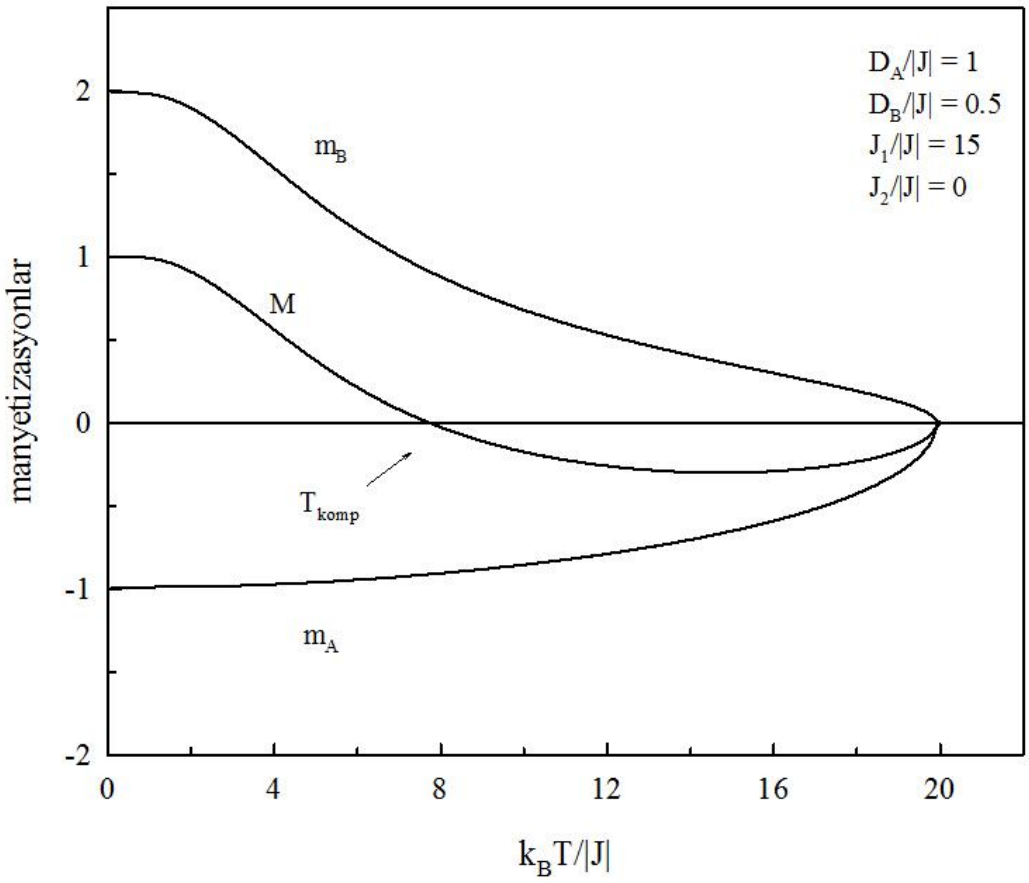
Şekil 5.10. $J_2/|J| = 0$ ve $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 0.5$ değerlerinde $J_1/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($J_1/|J| = 8$, 10 ve 15) toplam manyetizasyon-sıcaklık grafiği



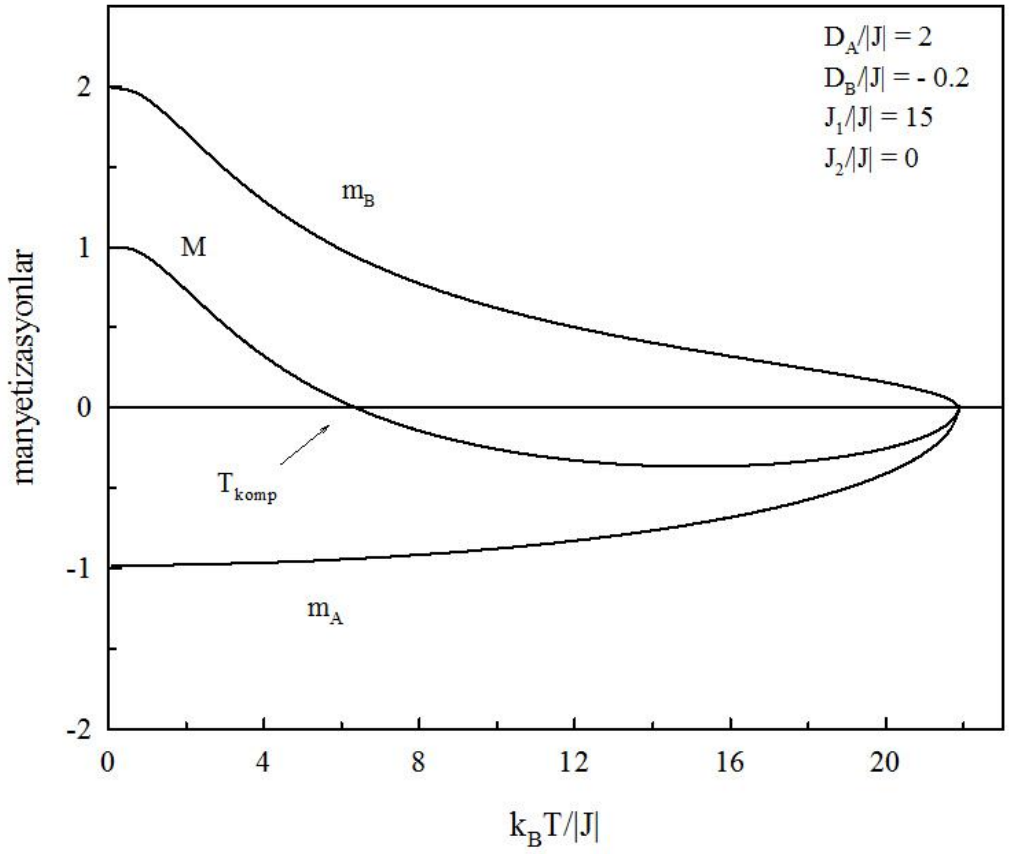
Şekil 5.11. $J_2/|J| = 0$ ve $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 1$ değerlerinde $J_1/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($J_1/|J| = 8$, 10 ve 15) toplam manyetizasyon-sıcaklık grafiği



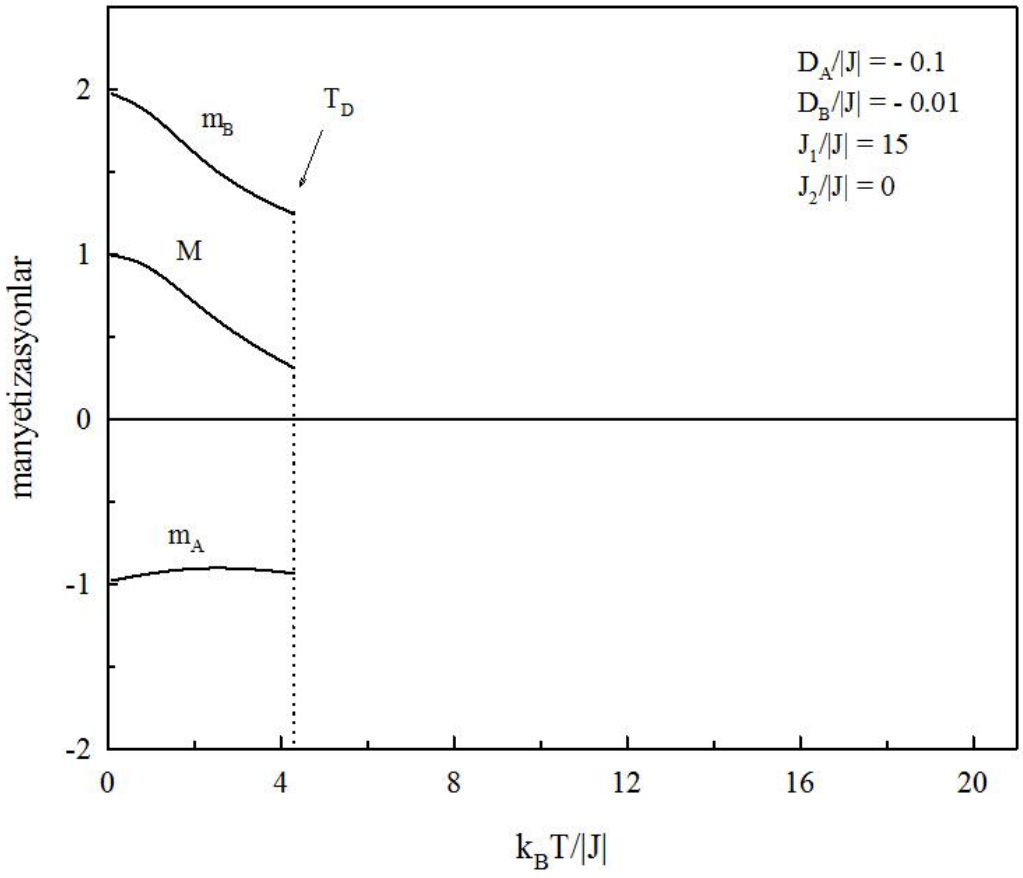
Şekil 5.12. $J_2/|J|$ = 0, $D_A/|J|$ = $D_B/|J|$ = $D/|J|$ = 0.5 ve $J_1/|J|$ = 15 değerleri için alt örgü manyetizasyonların ve toplam manyetizasyonun sıcaklığa bağımlılığı



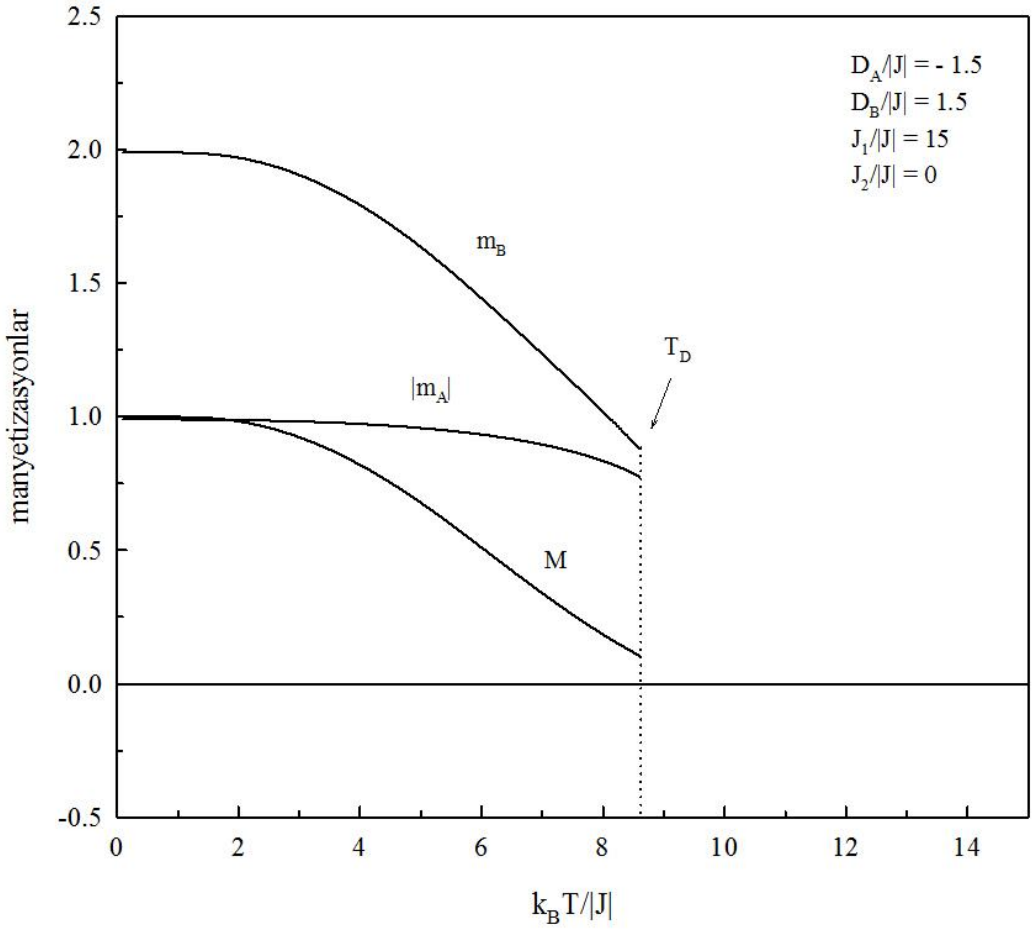
Şekil 5.13. $J_2/|J| = 0$, $D_A/|J| = 1$, $D_B/|J| = 0.5$ ve $J_1/|J| = 15$ değerleri için alt örgü manyetizasyonların ve toplam manyetizasyonun sıcaklığa bağımlılığı



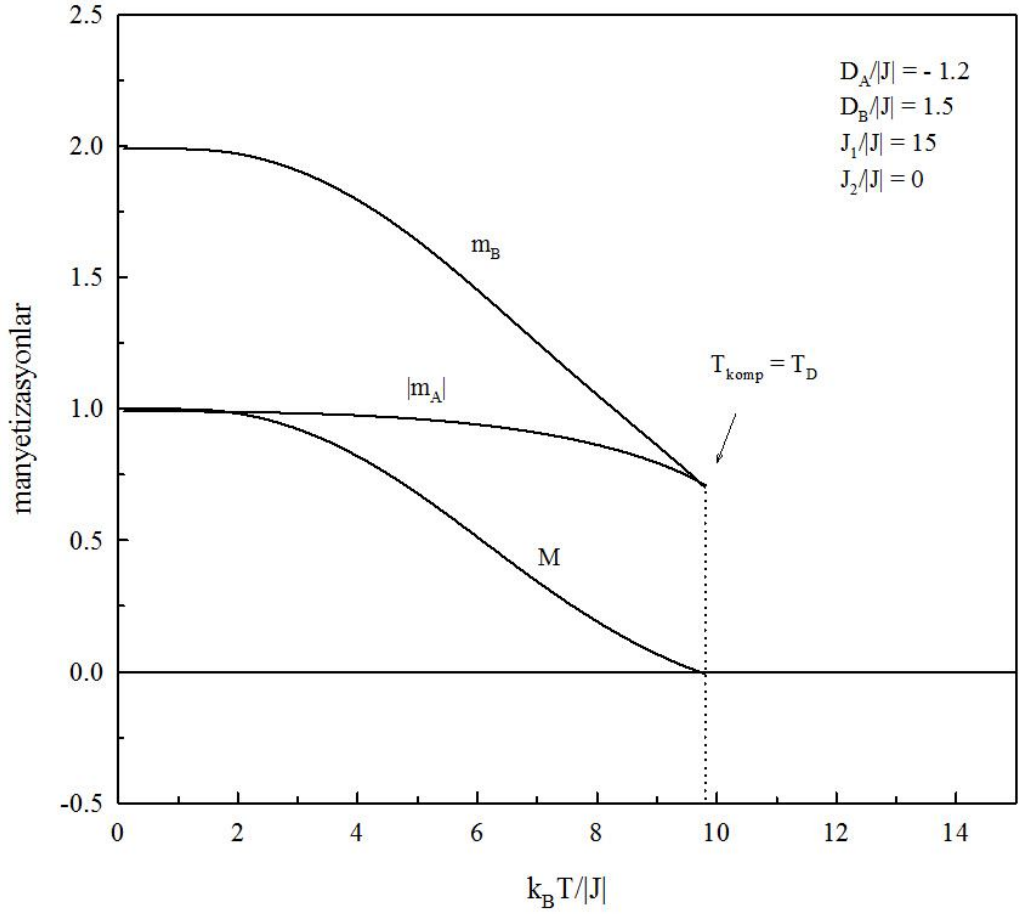
Şekil 5.14. $J_2/|J| = 0$, $D_A/|J| = 2$, $D_B/|J| = -0.2$ ve $J_1/|J| = 15$ değerleri için alt örgü manyetizasyonların ve toplam manyetizasyonun sıcaklığa bağımlılığı



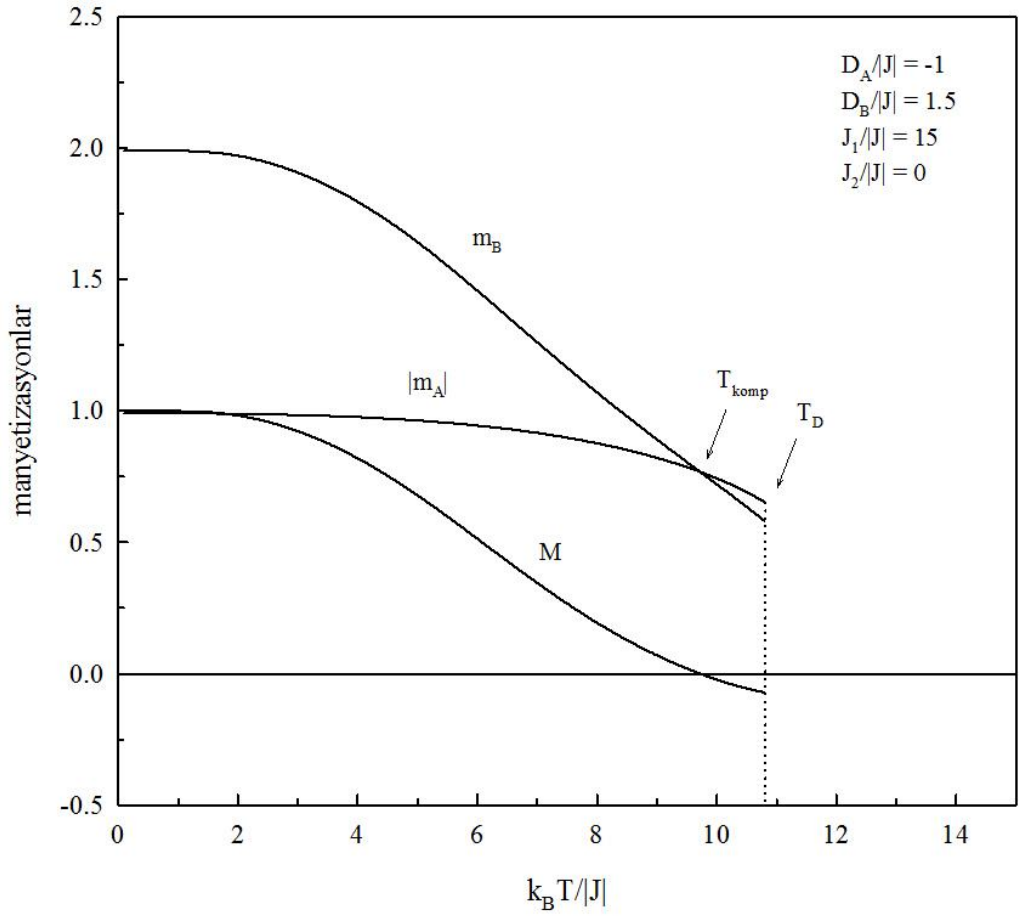
Şekil 5.15. $J_2/|J| = 0$, $D_A/|J| = -0.1$, $D_B/|J| = -0.01$ ve $J_1/|J| = 15$ değerleri için alt örgü manyetizasyonların ve toplam manyetizasyonun sıcaklığa bağımlılığı. Manyetizasyonun süreksiz olduğu sıcaklık (T_D) noktalı çizgi ile gösterilmiştir. Burada T_D, birinci mertebe faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.



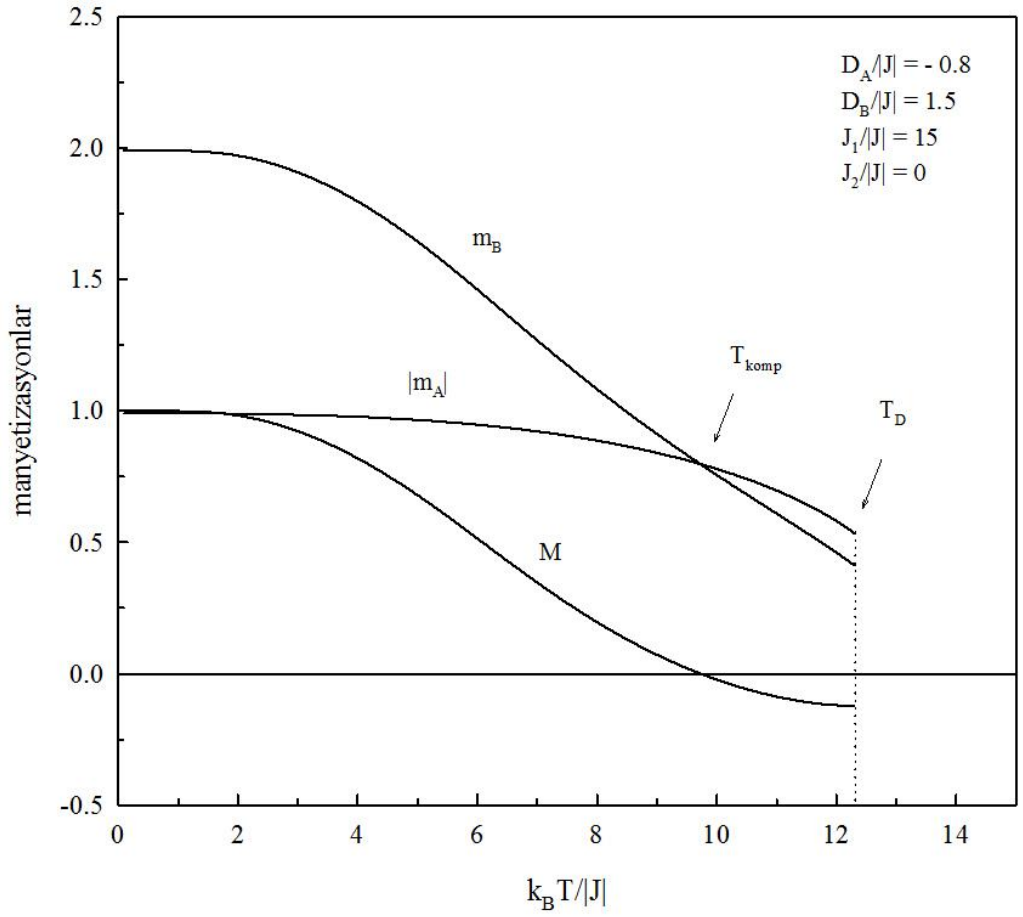
Şekil 5.16. $J_1/|J|$ = 15, $J_2/|J|$ = 0 ve $D_B/|J|$ = 1.5 değerlerinde $D_A/|J|$ = – 1.5 için alt örgü manyetizasyonlarının ve toplam manyetizasyonun sıcaklığa bağımlılığı. Manyetizasyonun süreksiz olduğu sıcaklık (T_D) noktalı çizgi ile gösterilmiştir. Burada T_D, birinci mertebe faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.



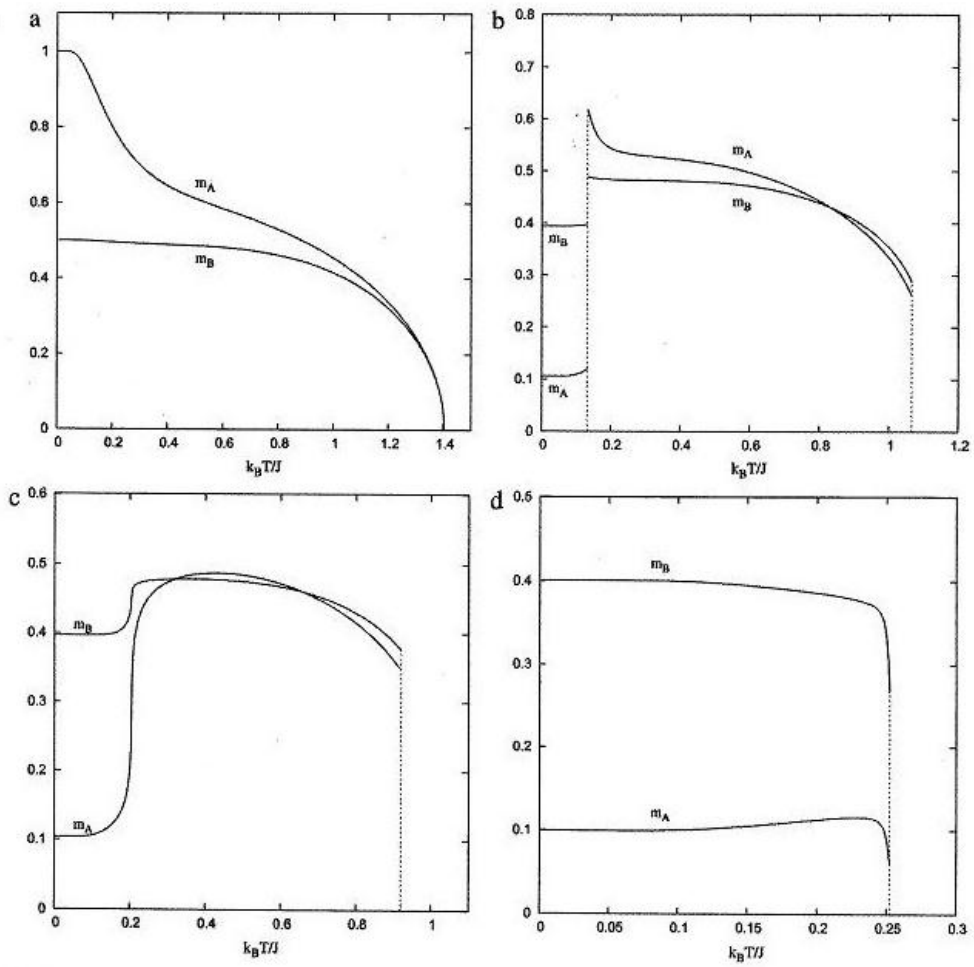
Şekil 5.17. $J_1/|J|$ = 15, $J_2/|J|$ = 0 ve $D_B/|J|$ = 1.5 değerlerinde $D_A/|J|$ = – 1.2 için alt örgü manyetizasyonlarının ve toplam manyetizasyonun sıcaklığa bağımlılığı. Manyetizasyonun süreksiz olduğu sıcaklık (T_D) noktalı çizgi ile gösterilmiştir. Burada T_D, birinci mertebe faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.



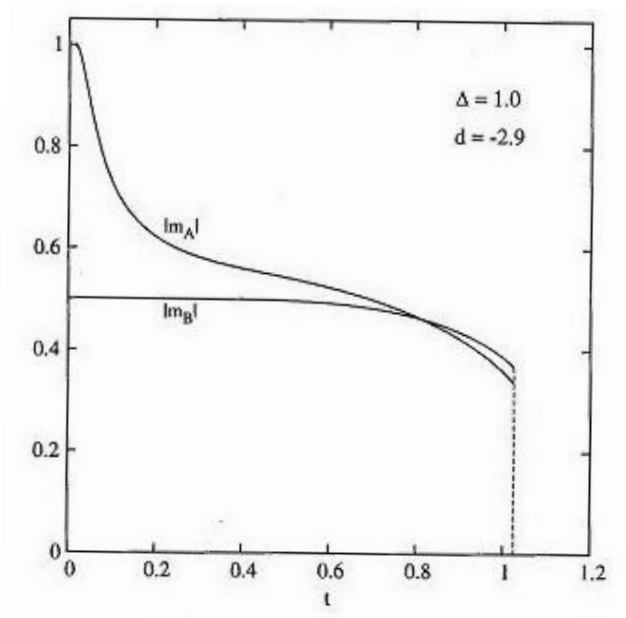
Şekil 5.18. $J_1/|J|$ = 15, $J_2/|J|$ = 0 ve $D_B/|J|$ = 1.5 değerlerinde $D_A/|J|$ = – 1 için alt örgü manyetizasyonlarının ve toplam manyetizasyonun sıcaklığa bağımlılığı. Manyetizasyonun süreksiz olduğu sıcaklık (T_D) noktalı çizgi ile gösterilmiştir. Burada T_D, birinci mertebe faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.



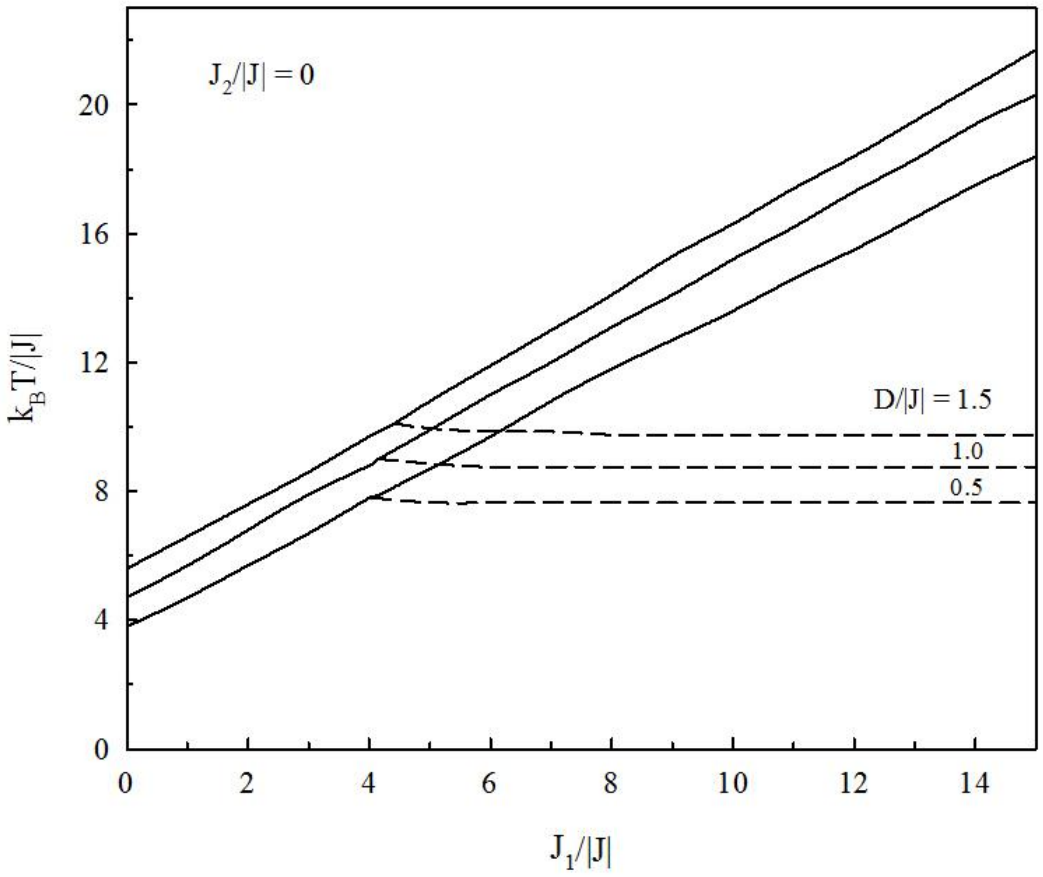
Şekil 5.19. $J_1/|J|$ = 15, $J_2/|J|$ = 0 ve $D_B/|J|$ = 1.5 değerlerinde $D_A/|J|$ = – 0.8 için alt örgü manyetizasyonlarının ve toplam manyetizasyonun sıcaklığa bağımlılığı. Manyetizasyonun süreksiz olduğu sıcaklık (T_D) noktalı çizgi ile gösterilmiştir. Burada T_D, birinci mertebe faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.



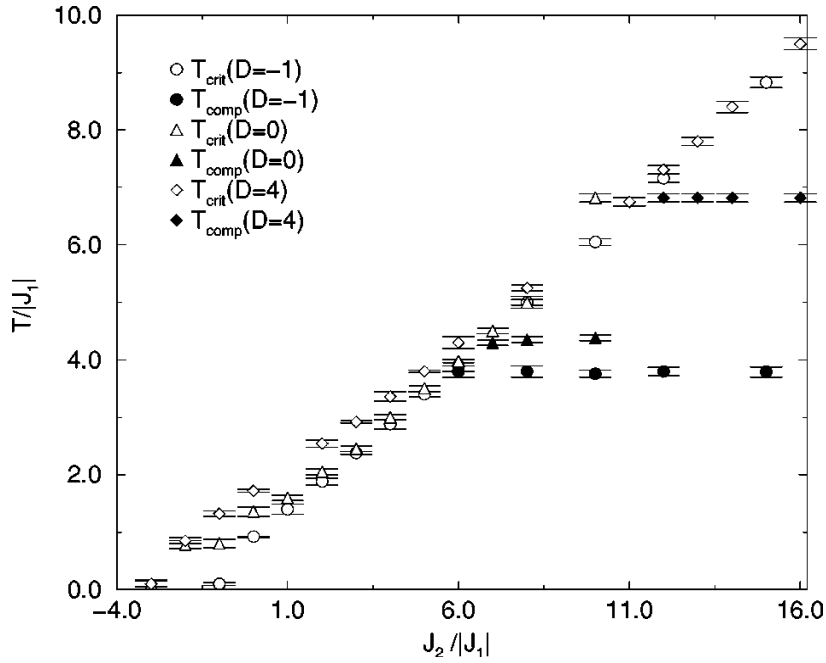
Şekil 5.20. Bobàk ve ark. (2009) `nın basit kübik örgüde karma spin-1 va spin-1/2 izotropik Heisenberg model için Oguchi metotu kullanarak elde ettikleri manyetizasyon-sıcaklık grafikleri



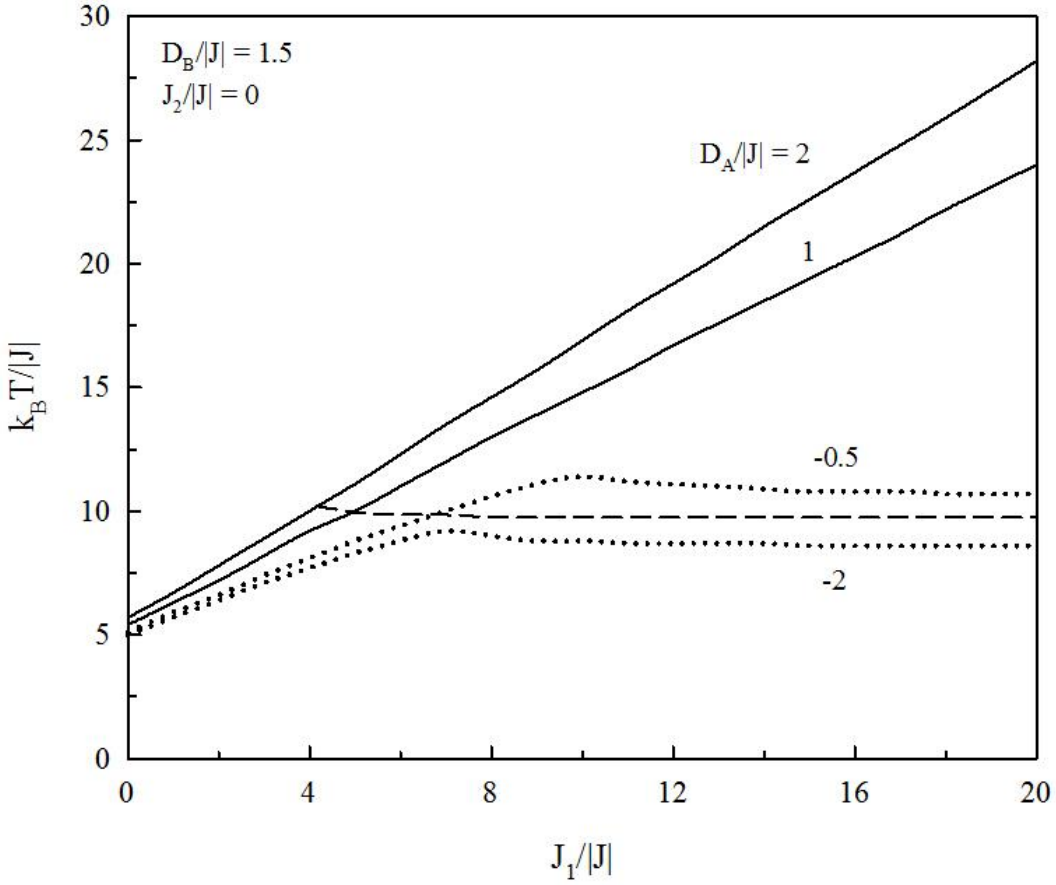
Şekil 5.21. Bobàk ve ark. (2011) `nın basit kübik örgüde karma spin-1 va spin-1/2 Ising ferrimagnet için Oguchi metotu kullanarak elde ettikleri manyetizasyon-sıcaklık grafiği



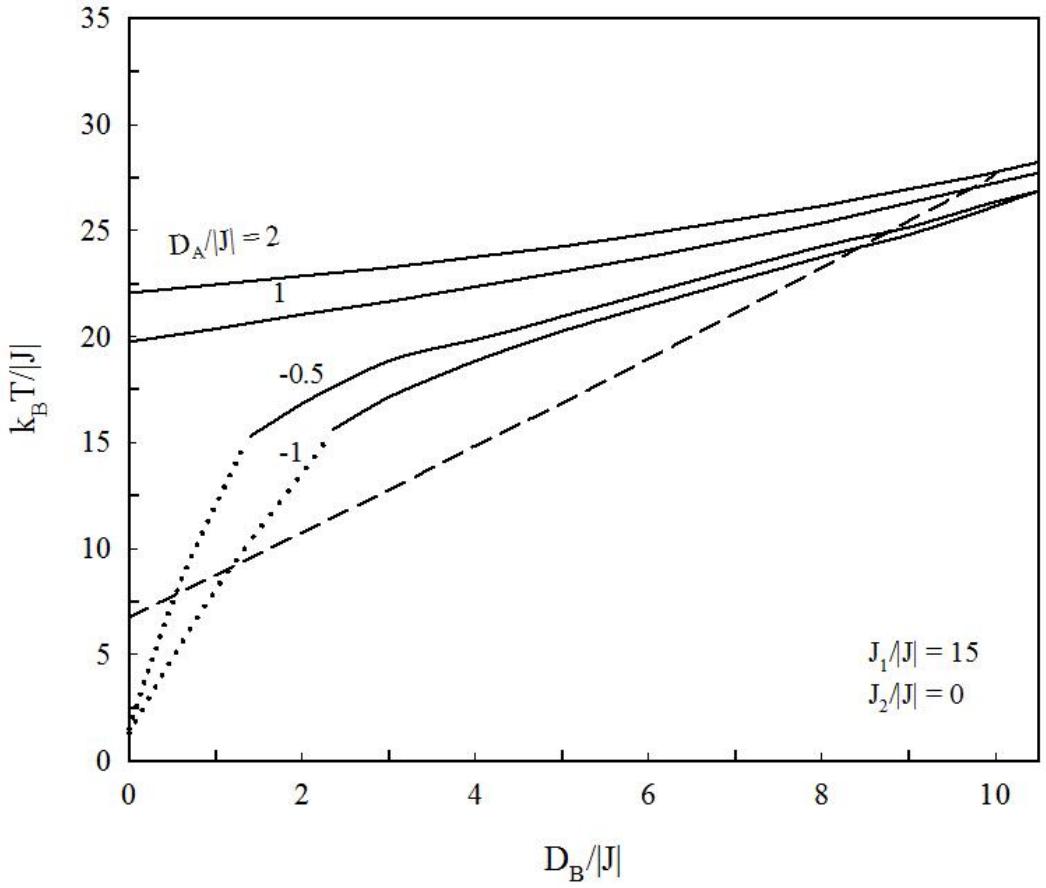
Şekil 5.22. $J_2/|J| = 0$ değerinde $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($D/|J| = 0.5$, 1.0 ve 1.5), $J_1/|J|$ `nin fonksiyonu olarak kompansasyon ve kritik sıcaklık. Düz çizgiler kritik sıcaklığı, kesikli çizgiler kompansasyon sıcaklığını göstermektedir.



Şekil 5.23. Buendìa ve Cardona (1999) `nın kare örgüde karma spin Ising ferrimanyetik sistem için farklı anizotropi değerlerinde Monte Carlo simulayonu ile elde ettikleri $J_2/|J_1|$- sıcaklık grafiği



Şekil 5.24. $J_2/|J| = 0$ ve $D_B/|J| = 1.5$ değerlerinde $D_A/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($D_A/|J| = -2, -0.5$, 1.0 ve 2), $J_1/|J|$ `nin fonksiyonu olarak kompansasyon, kritik ve birinci mertebe faz geçiş sıcaklıkları. Düz çizgiler kritik sıcaklığı, kesikli çizgiler kompansasyon sıcaklığını ve noktalı çizgiler faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.

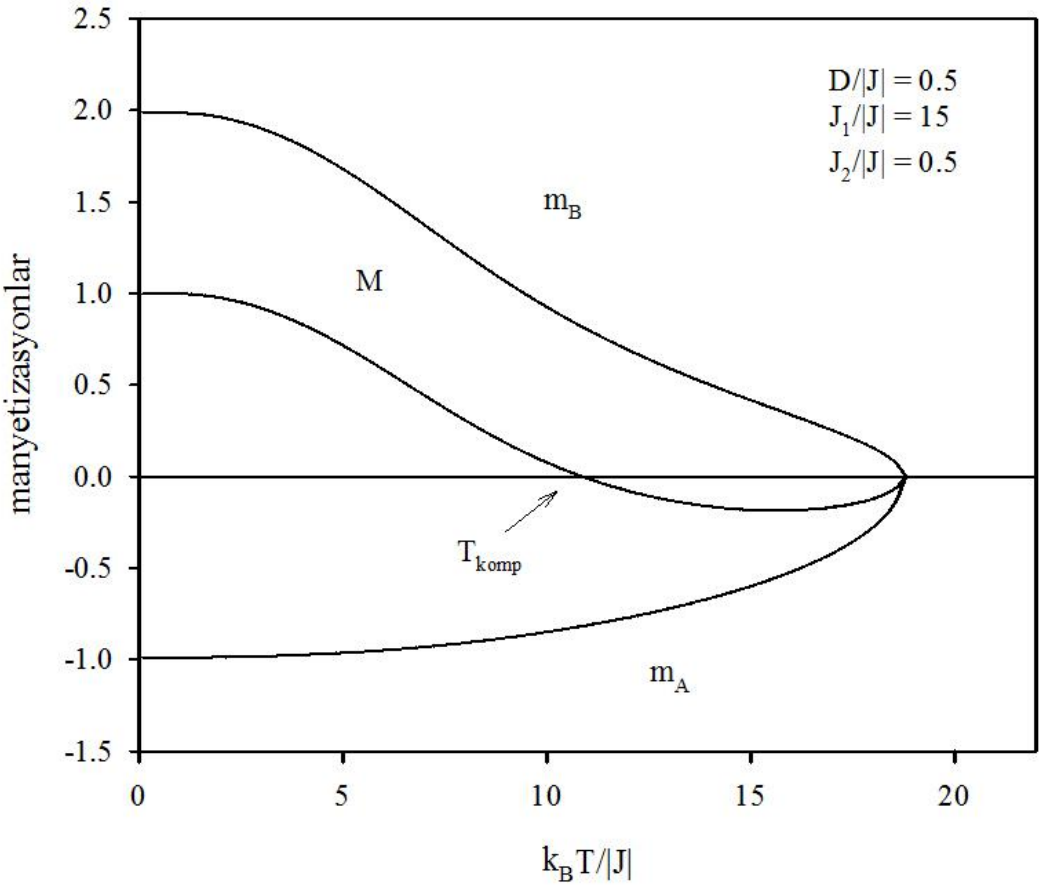


Şekil 5.25. $J_1/|J| = 15$ ve $J_2/|J| = 0$ değerlerinde $D_A/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($D_A/|J| = -1, -0.5, 1$ ve 2), $D_B/|J|$ `nin fonksiyonu olarak kompansasyon, kritik ve birinci mertebe faz geçiş sıcaklıkları. Düz çizgiler kritik sıcaklığı, kesikli çizgiler kompansasyon sıcaklığını ve noktalı çizgiler faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.

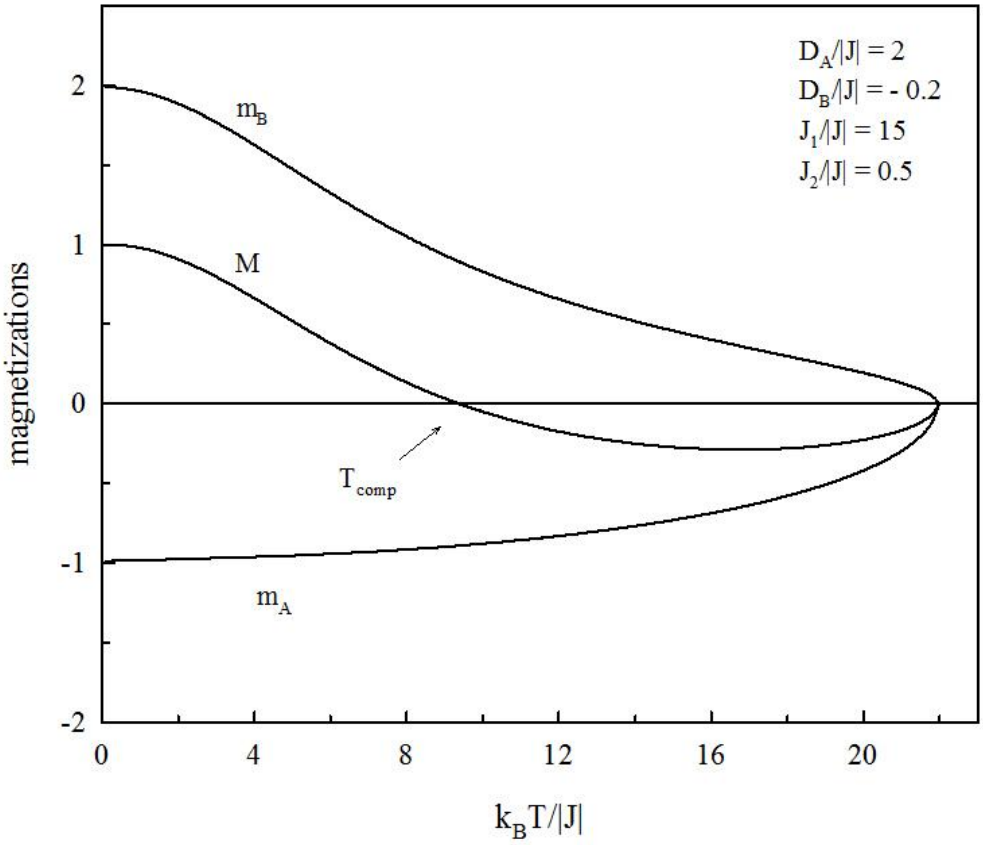
B alt örgüsünün ikinci en yakın komşu etkileşimini, $J_2/|J|$, de dahil edelim ve kompansasyon ve kritik sıcaklık üzerine etkisini inceleyelim. $J_1/|J| = 15$ ve $J_2/|J| = 0.5$ değerini aldığında alt örgü manyetizasyonları ve toplam manyetizasyon eğrileri $D_A/|J| = D_B/|J| = 0.5$ değerleri için Şekil 5.26 `de; $D_A/|J| = 2$ ve $D_B/|J| = -0.2$ değerleri için Şekil 5.27 `da; $D_A/|J| = -1$ ve $D_B/|J| = 1.5$ değerleri için Şekil 5.28 `de; $D_A/|J| = 1$ ve $D_B/|J| = 0.5$ değerleri için Şekil 5.29 `de; $D_A/|J| = -0.1$ ve $D_B/|J| = -0.01$ değerleri için Şekil 5.30 `da gösterilmiştir. Manyetizasyonun süreksiz olduğu sıcaklık ($T_D$) noktalı çizgi ile gösterilmiştir. Burada $T_D$, birinci mertebe faz geçiş sıcaklığını göstermektedir. Görüldüğü gibi $J_2/|J| = 0$ `da olduğu gibi, $D_A/|J|$ `nin negatif değerleri için birinci mertebe faz geçişleri vardır (Şekil 5.28). Oysa $D_B/|J|$ `nin negatif değerleri için faz geçişi görülmemektedir (Şekil 5.27). Anizotropilerin her ikisi de negatif değer aldığında birinci mertebe faz geçişi vardır (Şekil 5.30). Şekillerden görüldüğü gibi, B alt örgüsünün ikinci en yakın komşu etkileşimi dahil edildiğinde kompansasyon sıcaklığının varlığı aşikârdır. Şekil 5.31, $J_1/|J| = 10$ olduğu zaman $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 0.5$ için $J_2/|J| = 0$, 0.5, 1, 1.5 ve 2 değerlerinde toplam manyetizasyon eğrilerini vermektedir. Bu şekilden $J_2/|J| = 0$, 0.5 ve 1 değerlerini aldığında kompansasyon sıcaklığı varken, $J_2/|J| = 1.5$ ve 2 değerlerini aldığında kompansasyon sıcaklığı yok olduğu görülmektedir. Bu sonuç Şekil 5.32 `de verilmiştir. Şekil 5.32, $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 0.5$ için $J_1/|J| = 10$, 15 ve 20 değerlerini aldığında $J_2/|J|$ `nin bir fonksiyonu olarak kompansasyon ve kritik sıcaklığı göstermektedir. $J_2/|J|$ arttığı zaman kompansasyon sıcaklığı $J_2/|J|$ `nin maksimum bir değerine kadar kritik sıcaklığa doğru artar ($J_1/|J| = 10$ için $J_{2max}/|J| = 1.3$, $J_1/|J| = 15$ için $J_{2max}/|J| = 2.3$, $J_1/|J| = 20$ için $J_{2max}/|J| = 3.5$) ve $J_{2max}/|J|$ `de kompansasyon ve kritik sıcaklık özdeş olur ve bu değerden daha büyük $J_2/|J|$ değerleri için kompansasyon sıcaklığı kaybolur. Ayrıca $J_1/|J|$ `nin verilen değerleri için kompansasyon çizgisi $J_2/|J| = 0$ `da üst üste biner ve belirli bir değerden sonra ayrılır. Kritik sıcaklık $J_1/|J|$ ve $J_2/|J|$ `nin artması ile artar. Şekil 5.31 ve Şekil 5.32, B alt örgüsünün ikinci en yakın komşu etkileşiminin dar bir aralığında kompansasyon sıcaklığının var olduğunu göstermektedir.

Şekil 5.33 `de $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 0.5$, $J_1/|J| = 10$ ve $J_2/|J| = 1$ için kuadropol momentlerin sıcaklığa bağımlılığı gösterilmektedir. Şekil 5.34, $J_1/|J| = 10$ değerinde $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($D/|J| = 0.5$, 1 ve 1.5), $J_2/|J|$ `nin fonksiyonu olarak kompansasyon ve kritik sıcaklığı verir. Hem kritik sıcaklık hem de kompansasyon sıcaklığı $J_2/|J|$ ve $D/|J|$ `nin artması ile artar. Buradaki

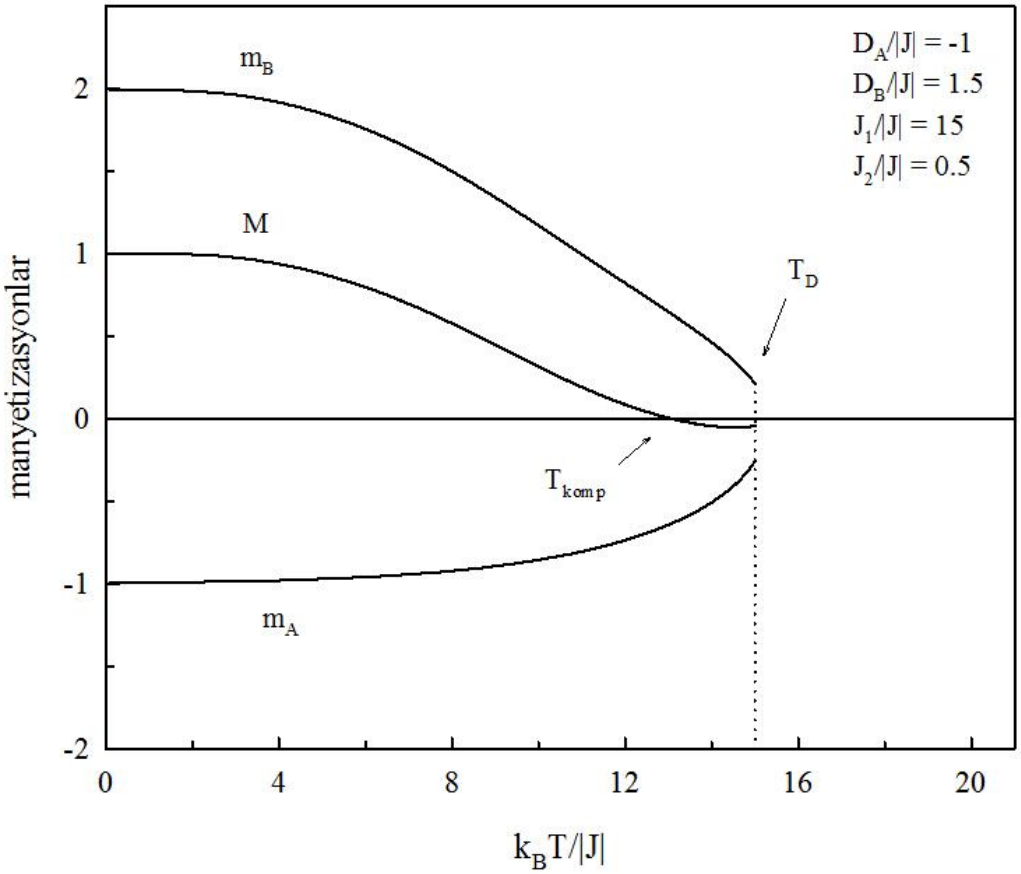
durum Şekil 5.32 `deki duruma benzerdir, yani $J_2/|J|$ `nin değeri $D/|J| = 0.5$ için $J_{2max}/|J| = 1.3$, $D/|J| = 1.0$ için $J_{2max}/|J| = 1.25$ ve $D/|J| = 1.5$ için $J_{2max}/|J| = 1.5$ değerinden daha büyük olduğunda kompansasyon sıcaklığı kaybolmaktadır. Şekil 5.34 `de elde ettiğimiz grafik, Şekil 5.35 de verilen Oitmaa (2005) `nın farklı anizotropi değerlerinde dikdörtgen veya kübik örgüde tabakalı karma spin Ising ferrimanyetik model için Monte Carlo simülasyonu ile elde ettiği grafik ile uyumludur. Şekil 5.36, $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 0.5$ değerini aldığında $J_2/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($J_2/|J| = 0$, 1 ve 2), $J_1/|J|$ `nin bir fonksiyonu olarak kompansasyon ve kritik sıcaklığı verir. Hem kritik sıcaklık hem de kompansasyon sıcaklığı $J_2/|J|$ ve $J_1/|J|$ `nin artması ile artar. Burada $J_1/|J|$ `nin değeri $J_2/|J| = 0$ için $J_{1min}/|J| = 4.05$, $J_2/|J| = 1.0$ için $J_{1min}/|J| = 8.95$ ve $J_2/|J| = 2.0$ için $J_{1min}/|J| = 13.55$ değerini aştığında kompansasyon noktası gözlenmektedir. Şekil 5.37, $J_1/|J| = 10$ ve $J_2/|J| = 0.5$ değerlerini aldığında, $D_A/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($D_A/|J| = 0.5$, 1 ve 1.5), $D_B/|J|$ `nin fonksiyonu olarak kompansasyon ve kritik sıcaklığı verir. Kritik sıcaklık $D_A/|J|$ `nin artması ile artar ama kompansasyon sıcaklığı $D_A/|J|$ `nin verilen değerleri için üst üste binmiştir. Ayrıca $D_B/|J|$ `nin değeri $D_A/|J| = 0.5$ için $D_{Bmax}/|J| = 3.46$, $D_A/|J| = 1.0$ için $D_{Bmax}/|J| = 3.76$ ve $D_A/|J| = 1.5$ için $D_{Bmax}/|J| = 4.2$ değerinden daha büyük olduğunda kompansasyon sıcaklığı kaybolmaktadır.



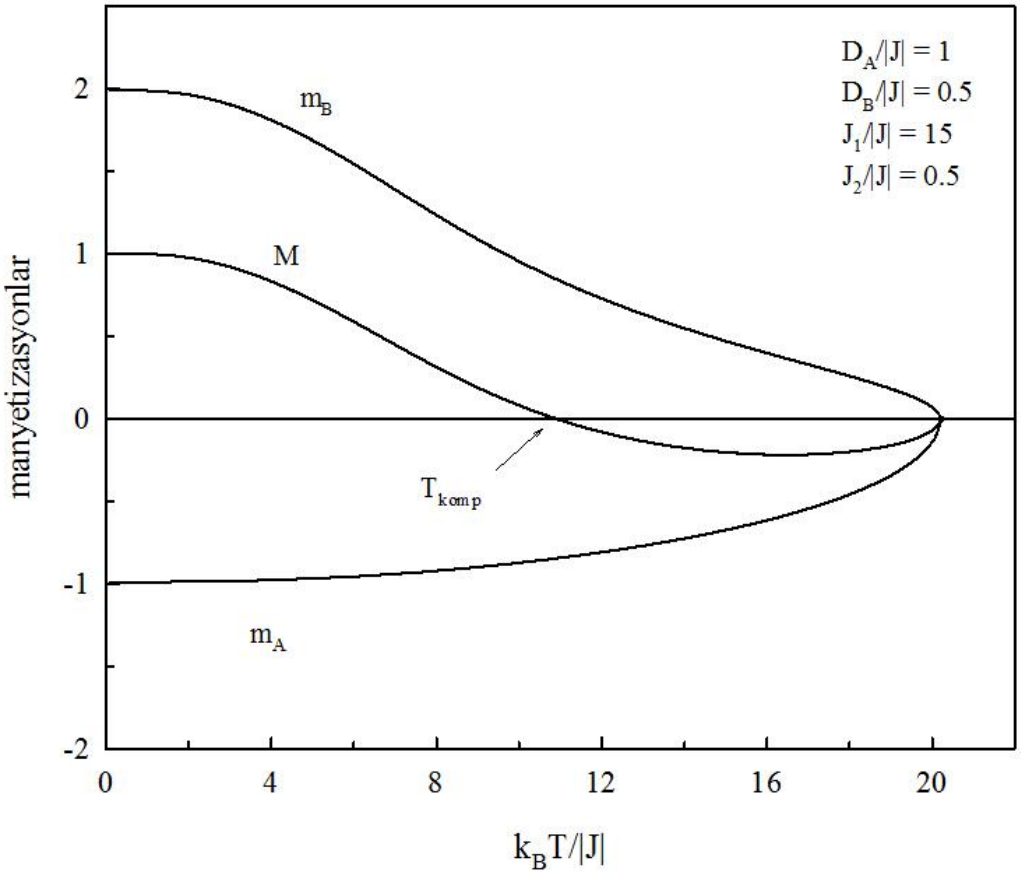
Şekil 5.26. $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 0.5$, $J_1/|J| = 15$ ve $J_2/|J| = 0.5$ değerlerini aldığında alt örgü manyetizasyonlarının ve toplam manyetizasyonun sıcaklığa bağımlılığı



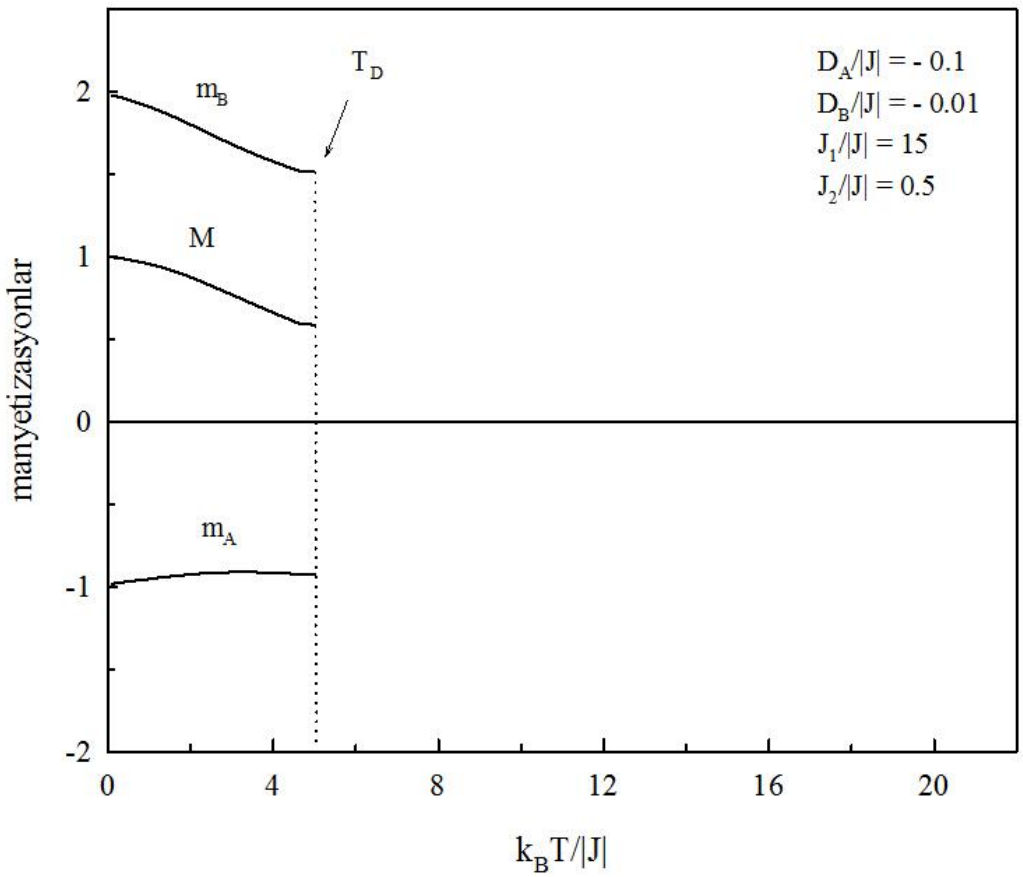
Şekil 5.27. $D_A/|J|$ = 2, $D_B/|J|$ = – 0.2, $J_1/|J|$ = 15 ve $J_2/|J|$ = 0.5 değerlerini aldığında alt örgü manyetizasyonlarının ve toplam manyetizasyonun sıcaklığa bağımlılığı



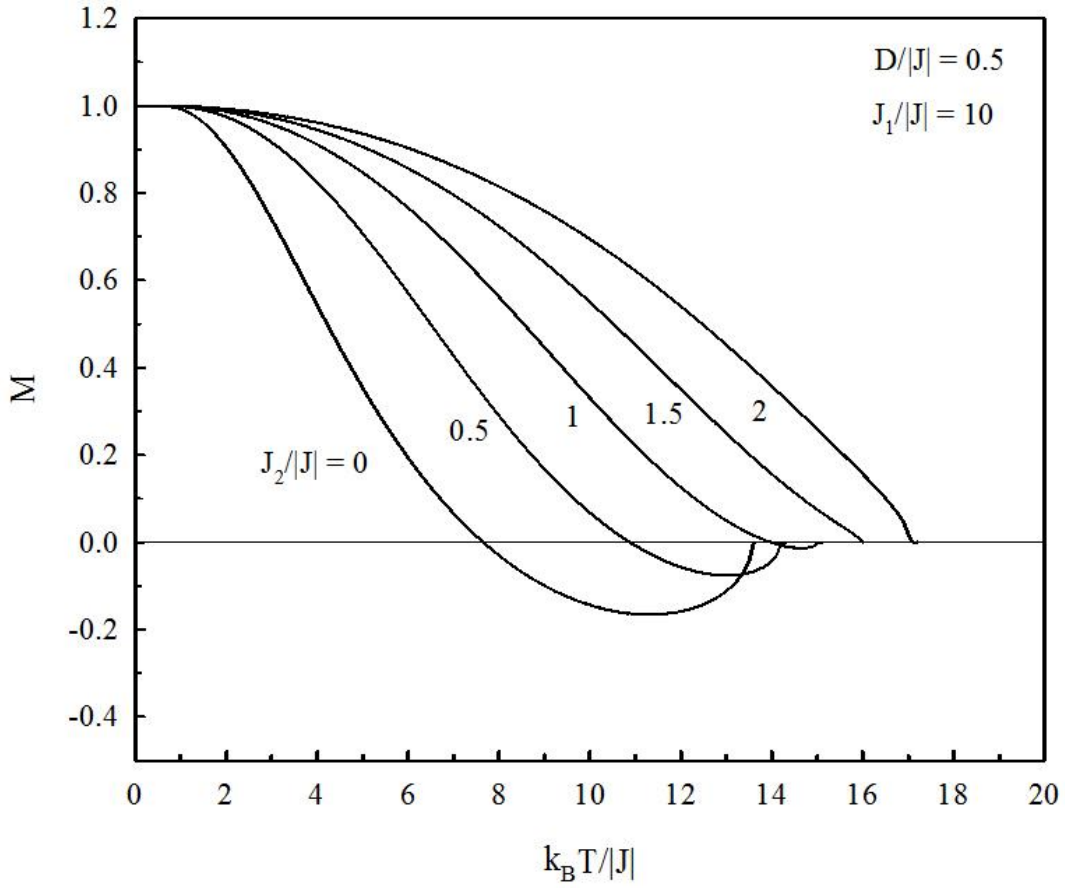
Şekil 5.28. $D_A/|J| = -1$, $D_B/|J| = 1.5$, $J_1/|J| = 15$ ve $J_2/|J| = 0.5$ değerlerini aldığında alt örgü manyetizasyonlarının ve toplam manyetizasyonun sıcaklığa bağımlılığı. Manyetizasyonun süreksiz olduğu sıcaklık (T_D) noktalı çizgi ile gösterilmiştir. Burada T_D, birinci mertebe faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.



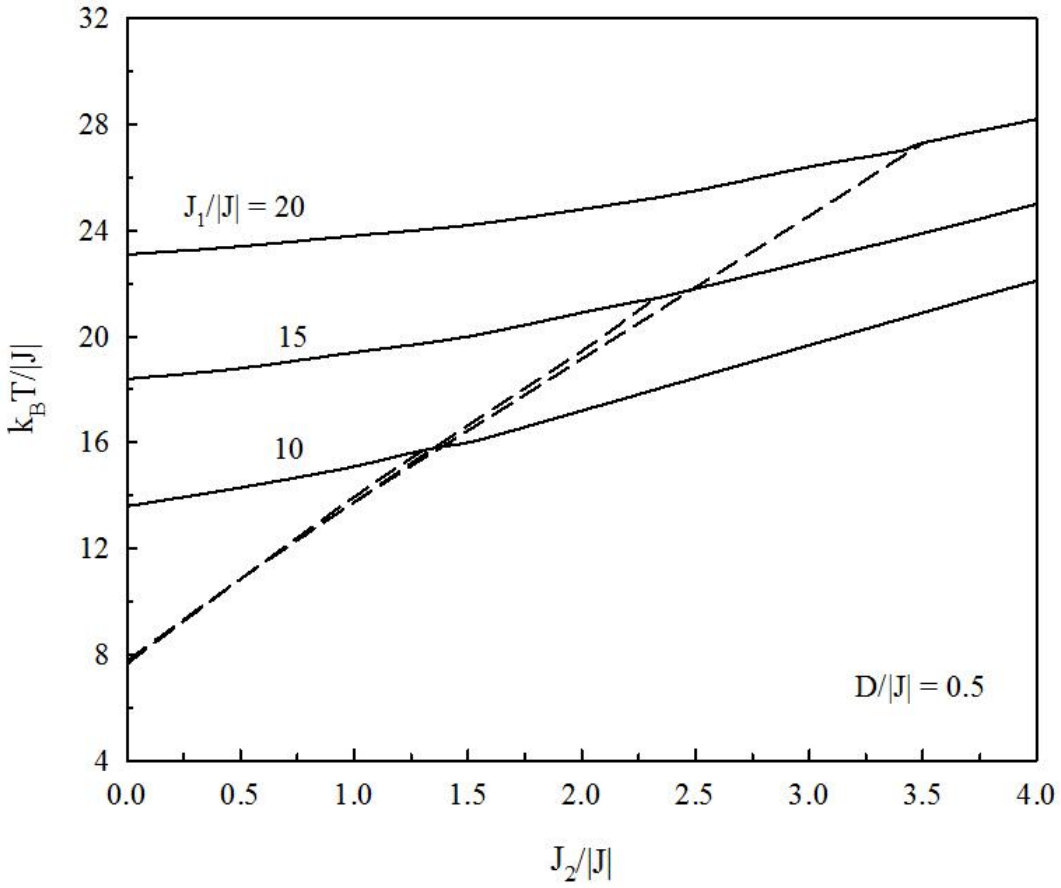
Şekil 5.29. $D_A/|J|$ = 1, $D_B/|J|$ = 0.5, $J_1/|J|$ = 15 ve $J_2/|J|$ = 0.5 değerlerini aldığında alt örgü manyetizasyonlarının ve toplam manyetizasyonun sıcaklığa bağımlılığı



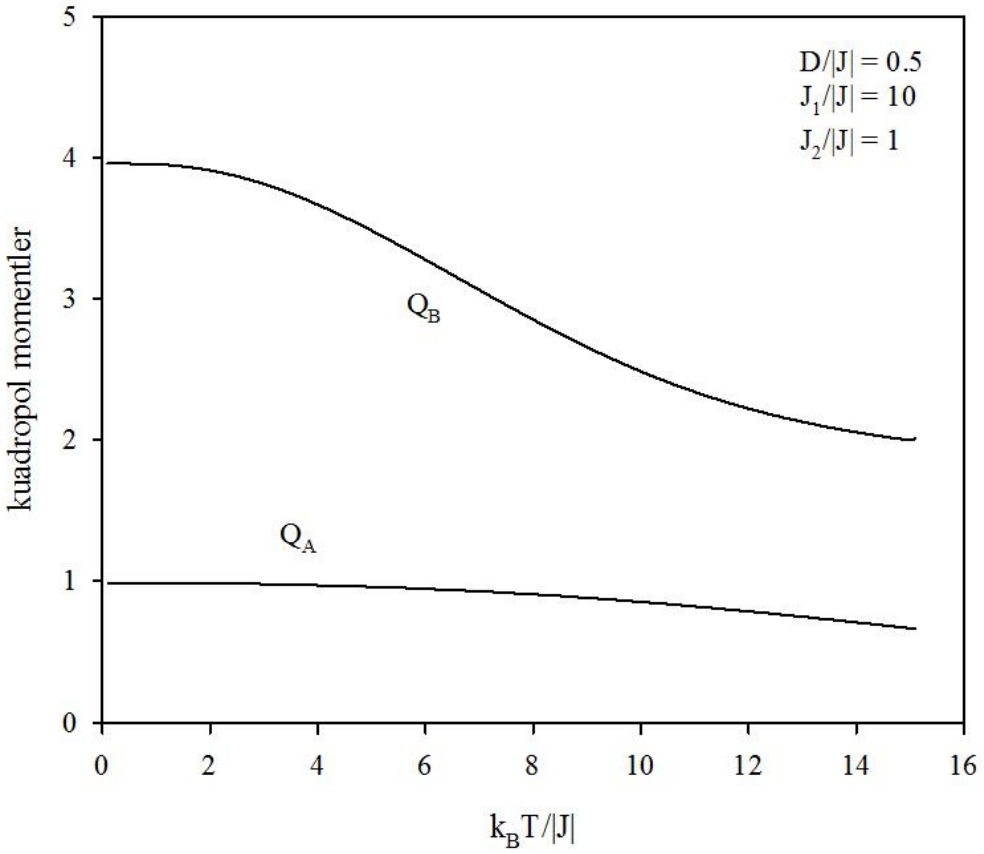
Şekil 5.30. $D_A/|J| = -0.1$, $D_B/|J| = -0.01$, $J_1/|J| = 15$ ve $J_2/|J| = 0.5$ değerlerini aldığında alt örgü manyetizasyonlarının ve toplam manyetizasyonun sıcaklığa bağımlılığı. Manyetizasyonun süreksiz olduğu sıcaklık (T_D) noktalı çizgi ile gösterilmiştir. Burada T_D, birinci mertebe faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.



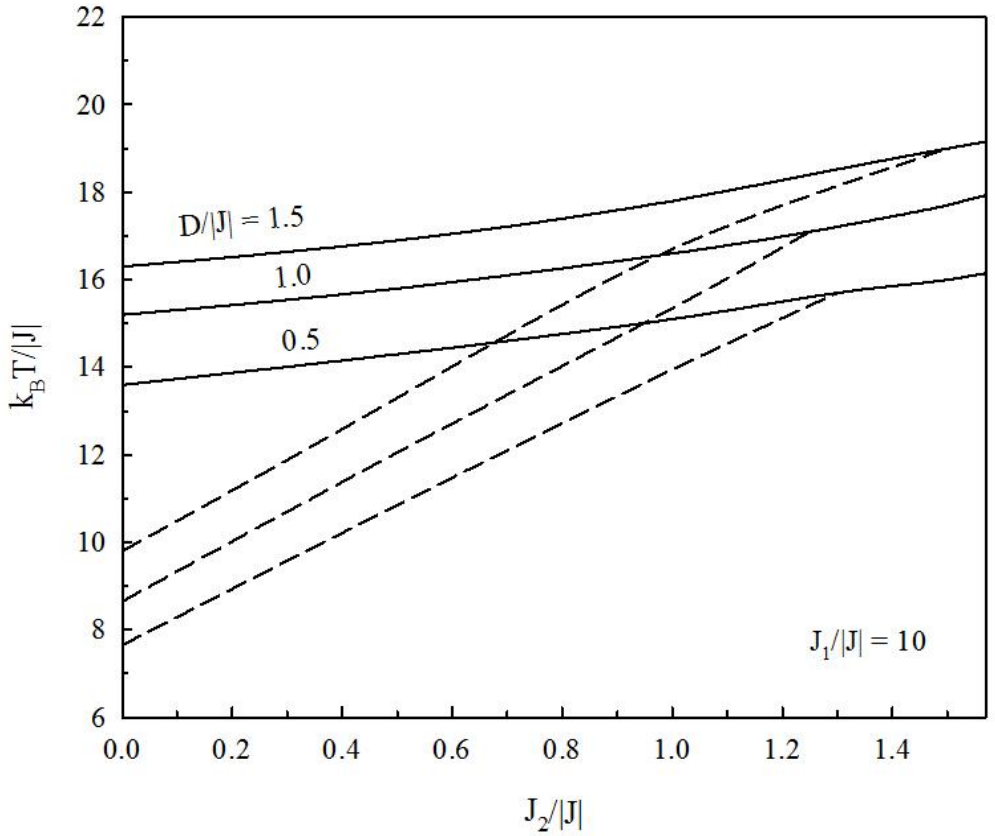
Şekil 5.31. $J_1/|J|$ = 10 değerini aldığında $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J|$ = 0.5 `de $J_1/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($J_1/|J|$ = 0, 0.5, 1.0, 1.5 ve 2), toplam manyetizasyon-sıcaklık grafiği



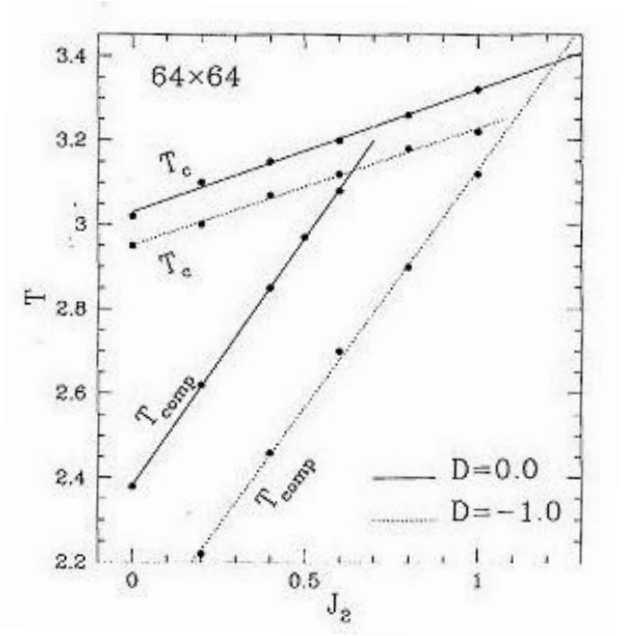
Şekil 5.32. $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 0.5$ değerini aldığında $J_1/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($J_1/|J| = 10$, 15 ve 20), $J_2/|J|$ `nin fonksiyonu olarak kompansasyon ve kritik sıcaklık. Düz çizgiler kritik sıcaklığı, kesikli çizgiler kompansasyon sıcaklığını göstermektedir.



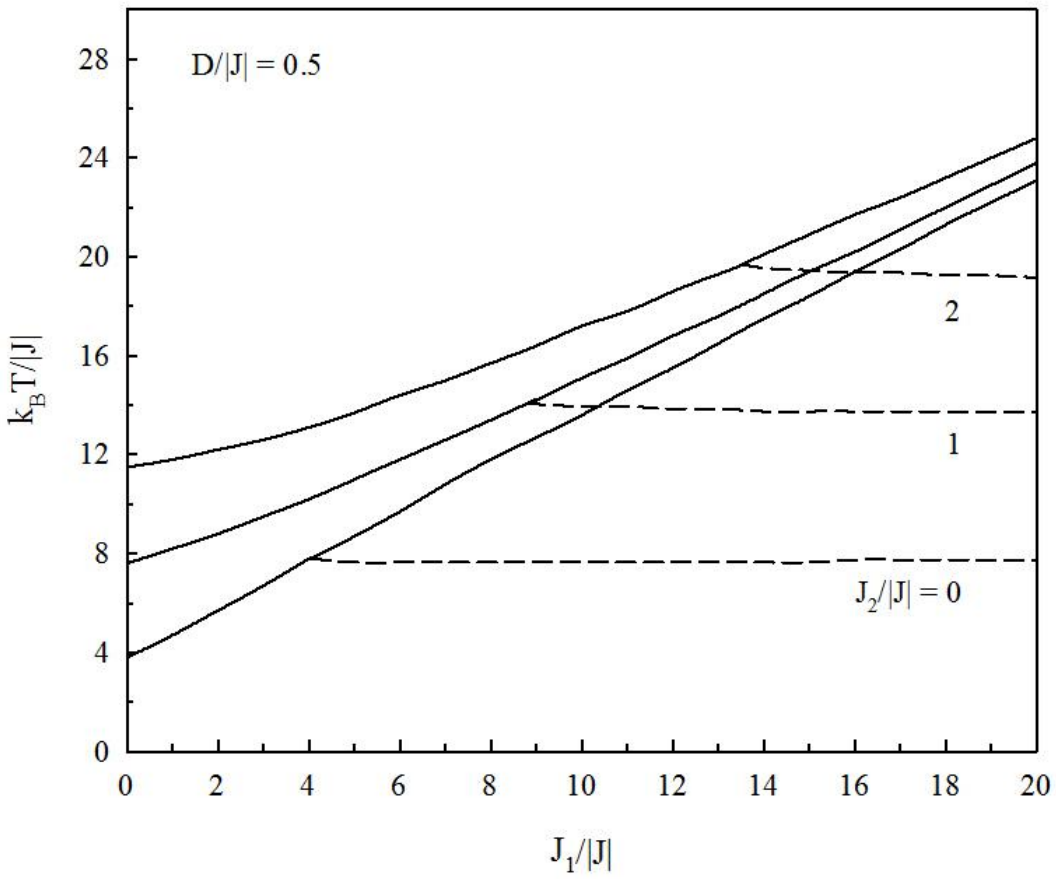
Şekil 5.33. $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 0.5$, $J_1/|J| = 10$ ve $J_2/|J| = 1$ değerlerini aldığında Q_A ve Q_B kuadropol momentlerinin sıcaklığa bağımlılığı



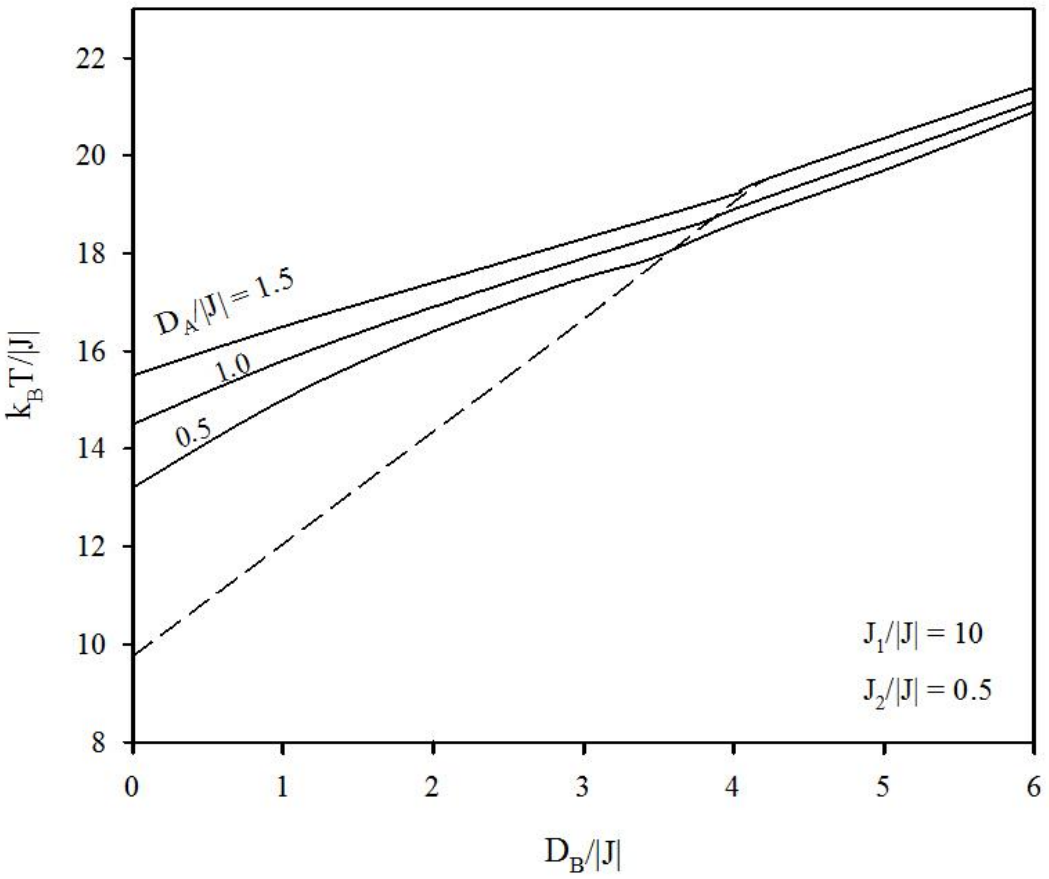
Şekil 5.34. $J_1/|J|$ = 10 değerini aldığında $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($D/|J|$ = 0.5, 1.0 ve 1.5), $J_2/|J|$ `nin fonksiyonu olarak kompansasyon ve kritik sıcaklık. Düz çizgiler kritik sıcaklığı, kesikli çizgiler kompansasyon sıcaklığını göstermektedir.



Şekil 5.35. Oitmaa (2005) `nın tabakalı karma spin Ising ferrimanyetik model için farklı anizotropi değerlerinde Monte Carlo simulayonu ile elde ettikleri J_2- T grafiği



Şekil 5.36. $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 0.5$ değerini aldığında $J_2/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($J_2/|J| = 0.5$, 1.0 ve 1.5), $J_1/|J|$ `nin fonksiyonu olarak kompansasyon ve kritik sıcaklık. Düz çizgiler kritik sıcaklığı, kesikli çizgiler kompansasyon sıcaklığını göstermektedir.



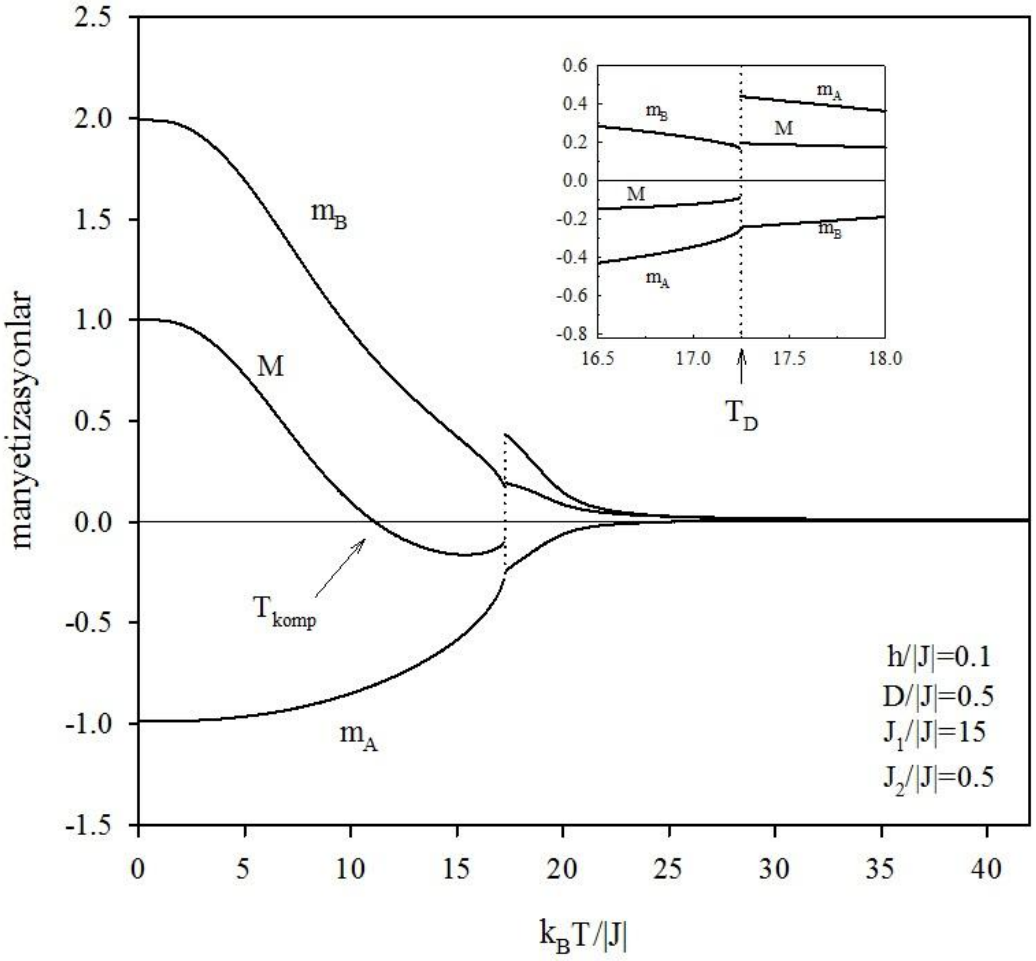
Şekil 5.37. $J_1/|J| = 10$ ve $J_2/|J| = 0.5$ değerlerini aldığında $D_A/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($D_A/|J| = 0.5$, 1.0 ve 1.5), $D_B/|J|$ `in fonksiyonu olarak kompansasyon ve kritik sıcaklık. Düz çizgiler kritik sıcaklığı, kesikli çizgiler kompansasyon sıcaklığını göstermektedir.

5.2. Dış manyetik alanda manyetizasyon

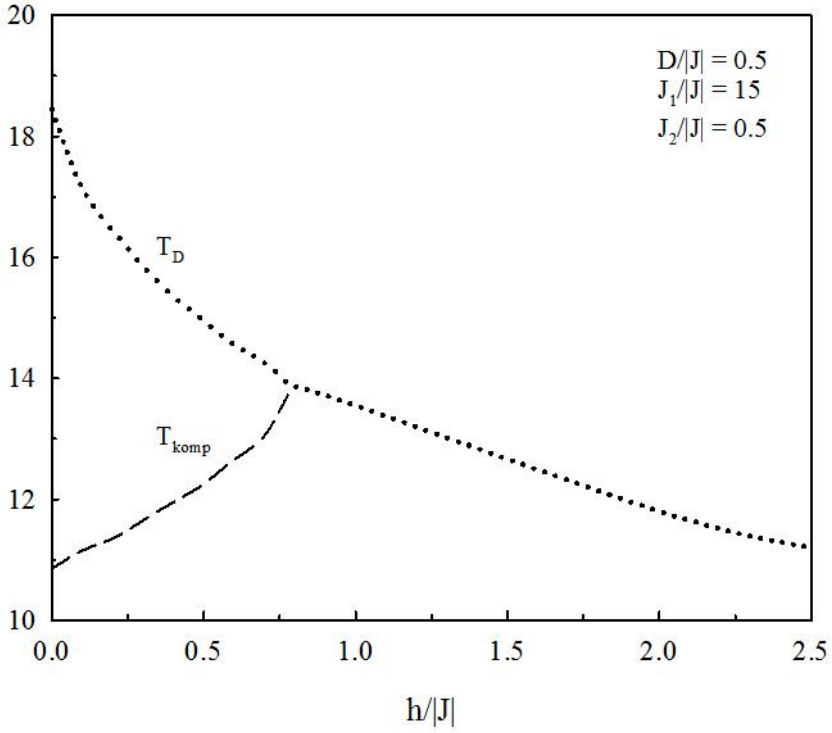
Şimdi h dış manyetik alanın etkisi altındaki sistemin manyetik özelliklerini inceleyelim. Şekil 5.38, $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 0.5$, $J_1/|J| = 15$ ve $J_2/|J| = 15$ için, $h/|J| = 0.1$ değerini aldığında alt örgü manyetizasyonları ve toplam manyetizasyonun sıcaklığa bağımlılığını göstermektedir. Belirli bir alanda manyetizasyon 180^o sıçrama yapar. Böylece manyetizasyon eğrisinde bir süreksizlik yani birinci mertebe faz geçişi meydana gelmektedir. Enerji ısı olarak harcanır, manyetizasyondaki atlama için kritik alan serbest enerjiyi bir maksimumdan minimuma (yani yarı kararlı durumdan kararlı duruma) değiştiği zaman meydana gelmektedir. Kesikli çizgi $k_BT/|J| = 17.25$ `de birinci mertebe faz geçişini göstermektedir. Şekil 5.39 `den görüldüğü gibi, $T_{komp} = T_D$ oluncaya kadar, kompansasyon sıcaklığı manyetik alanın artması ile artarken, manyetizasyonun süreksiz olduğu sıcaklık azalmaktadır ve sonra kompansasyon sıcaklığı kaybolur. Dış manyetik alanın küçük bir aralığında kompansasyon sıcaklığı vardır. Verilen parametreler için $h/|J| = 0.77$ `den daha büyük manyetik alan değerleri için kompansasyon noktası kaybolur. Bu, Şekil 5.40 `da gösterilmiştir. Bu davranışlar Buendìa ve Hurtado (2000) tarafından verilen Ising sisteminin sonuçları ile uyumludur. Onların çalışmasında manyetik alanın $0<H<0.50$ aralığı için kompansasyon noktası vardır (Şekil 5.41). Li ve ark. (2005), karma spin-2 ve spin-1/2 Heisenberg ferrimanyetik sistem için çift-zaman Green fonksiyon metodunu kullandılar ama Şekil 5.42 den görüldüğü gibi dış manyetik alanda faz geçişi gözleyememişlerdir. Ayrıca Şekil 5.40 `da manyetik alanın negatif değerleri için manyetizasyon eğrileri de çizilmiştir. Şekilden görüldüğü gibi dış manyetik alanın negatif değerleri içinde kompansasyon sıcaklığı vardır. Bu sonuç Mohamad (2011) tarafından verilen Ising sisteminin sonuçlarından farklıdır; burada verilen Ising sistemde manyetik alanın pozitif değerleri için kompansasyon sıcaklığı gözlenirken negatif değerleri için kompansasyon sıcaklığı gözlenmez (Şekil 5.43).

Şekil 5.44, 5.45 ve 5.46, dış manyetik alanın fonksiyonu olarak kompansasyon sıcaklıklarını göstermektedir. Şekil 5.44, $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 0.5$ ve $J_2/|J| = 0.5$ değerlerini aldığında $J_2/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($J_2/|J| = 0$, 0.1 ve 0.3) çizilmiştir. Burada dış manyetik alan ve $J_2/|J|$ arttıkça kompansasyon sıcaklığı artmaktadır. Dış manyetik alanın belirli bir değerinden sonra kompansasyon sıcaklığı kaybolur ($J_2/|J| = 0$ için $h/|J| = 1.302$, $J_2/|J| = 0.1$ için $h/|J| = 1.18$ ve $J_2/|J| = 0.3$ için

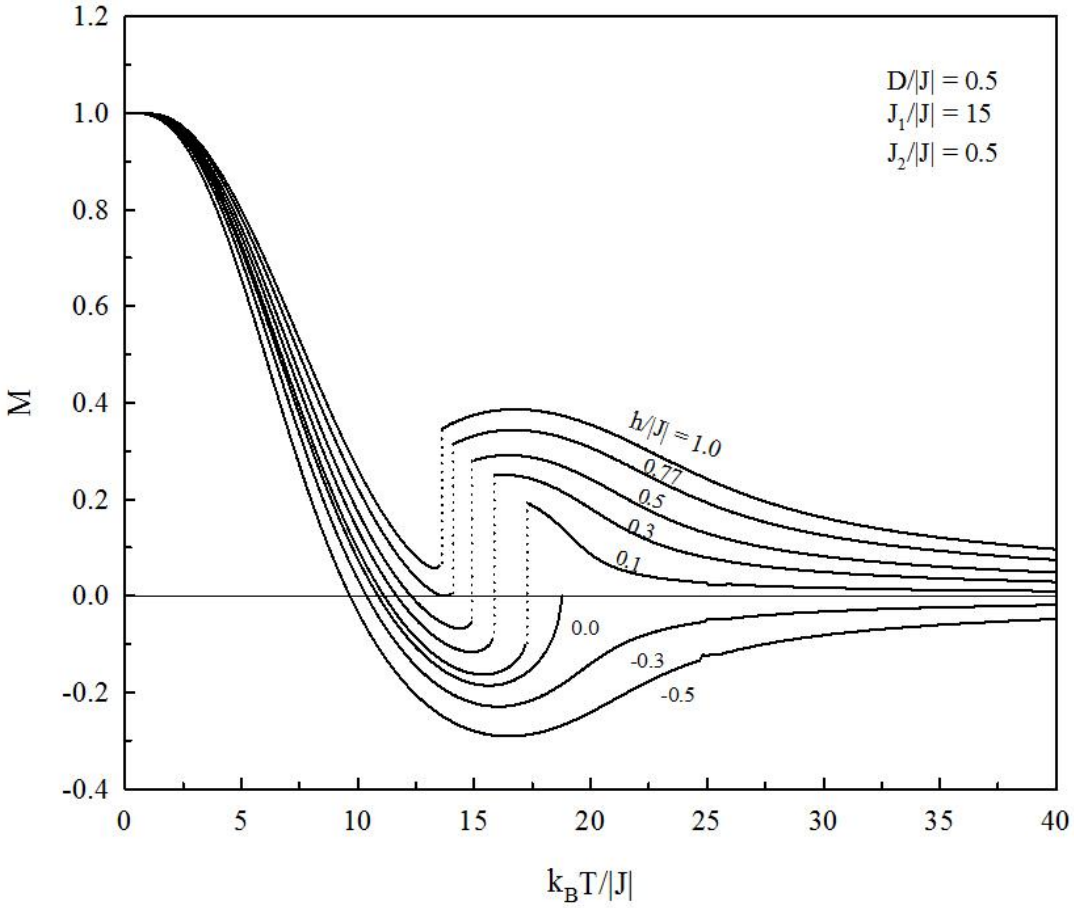
h/|J| = 1.062 değerlerinden sonra kompansasyon sıcaklığı yoktur). Şekil 5.45, $D_A/|J|$ = $D_B/|J|$ = $D/|J|$ = 1 ve $J_1/|J|$ = 5 değerlerini aldığında $J_1/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($J_1/|J|$ = 4, 5 ve 6) çizilmiştir. Burada manyetik alan arttıkça kompansasyon sıcaklığı artmaktadır. Dış manyetik alanın $J_1/|J|$ = 10 için $h/|J|$ = 0.7125, $J_1/|J|$ = 15 için $h/|J|$ = 1.089 ve $J_1/|J|$ = 20 için $h/|J|$ = 1.302 değerlerinden sonra kompansasyon sıcaklığı kaybolur. Şekil 5.46, $J_1/|J|$ = 1.5 ve $J_2/|J|$ = 0.5 değerlerini aldığında $D_A/|J|$ = $D_B/|J|$ = $D/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($D/|J|$ = 0.5, 1 ve 1.5) çizilmiştir. Şekil 5.46 `deki durum Şekil 5.44 `deki duruma benzerdir yani dış manyetik alan ve $D/|J|$ arttıkça kompansasyon sıcaklığı artmaktadır. Dış manyetik alanın $D/|J|$ = 0.5 için $h/|J|$ = 0.77, $D/|J|$ = 1 için h/|J| = 0.974 ve $D/|J|$ = 1.5 için h/|J| = 1.069 değerlerinden sonra kompansasyon sıcaklığı kaybolur.



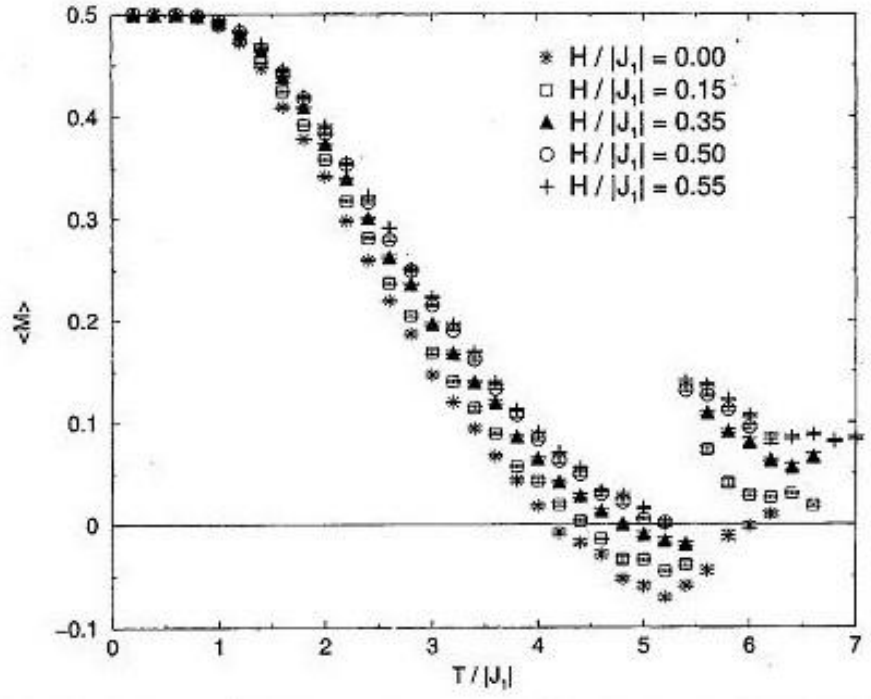
Şekil 5.38. $h/|J| = 0.1$ değerini aldığında, $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 0.5$, $J_1/|J| = 15$ ve $J_2/|J| = 0.5$ için alt örgü manyetizasyonları ve toplam manyetizasyon-sıcaklık grafiği. Manyetizasyonun süreksiz olduğu sıcaklık (T_D) değeri inset de görülmektedir: $k_BT/|J| = 17.25$. Burada T_D, birinci mertebe faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.



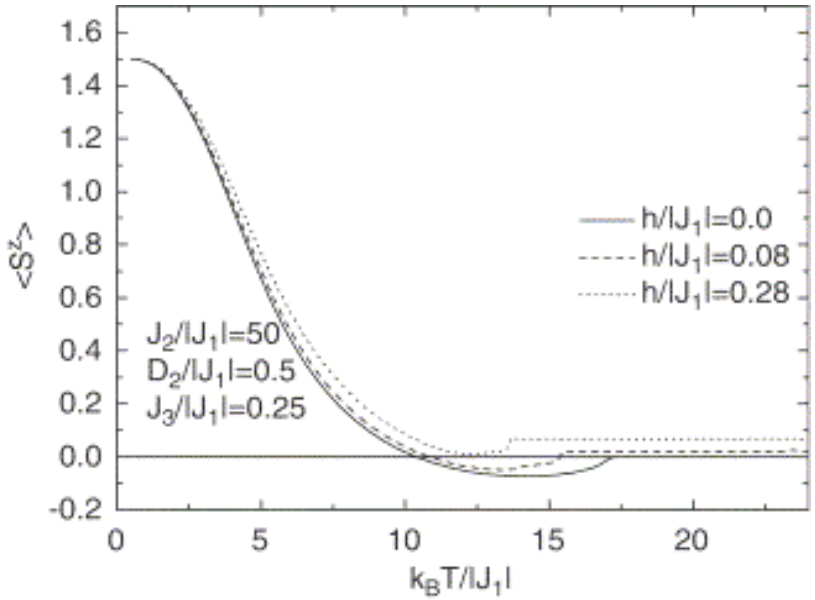
Şekil 5.39. $h/|J| = 0.1$ değerini aldığında, $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 0.5$, $J_1/|J| = 15$ ve $J_2/|J| = 0.5$ için dış manyetik alanın bir fonksiyonu olarak T_D veT_{komp} sıcaklıklarının değişimi



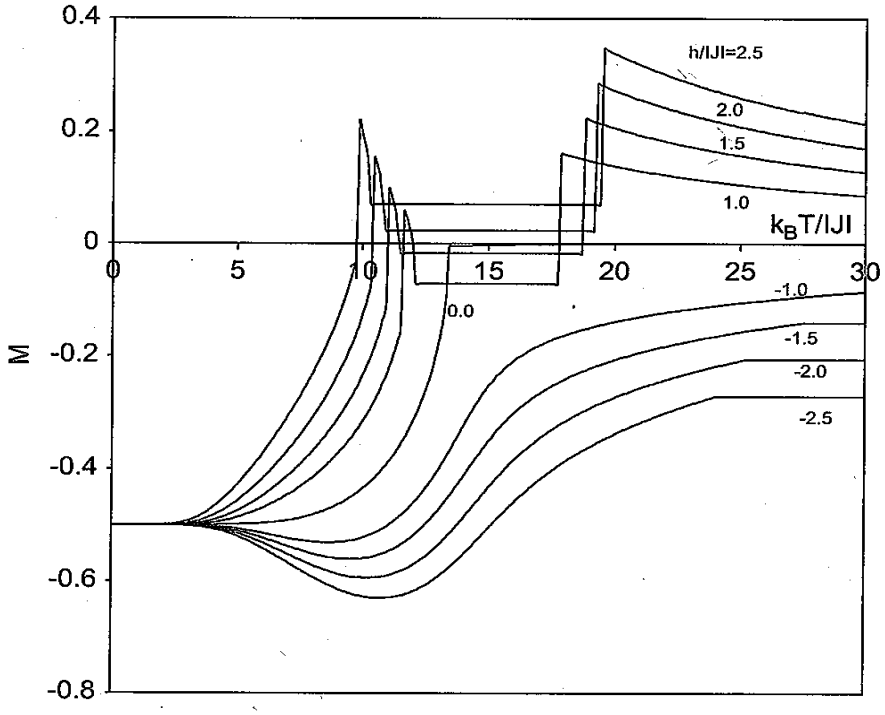
Şekil 5.40. $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 0.5$, $J_1/|J| = 15$ ve $J_2/|J| = 0.5$ için, dış manyetik alan muhtelif değerler aldığında ($h/|J|$ = -0.5, -0.2, -0.1, 0.0, 0.1, 0.3, 0.5, 0.77 ve 1.0) toplam manyetizasyon-sıcaklık grafiği. Manyetizasyonun süreksiz olduğu sıcaklıklar (T_D) kesikli çizgi ile gösterilmiştir. Burada T_D, birinci mertebe faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.



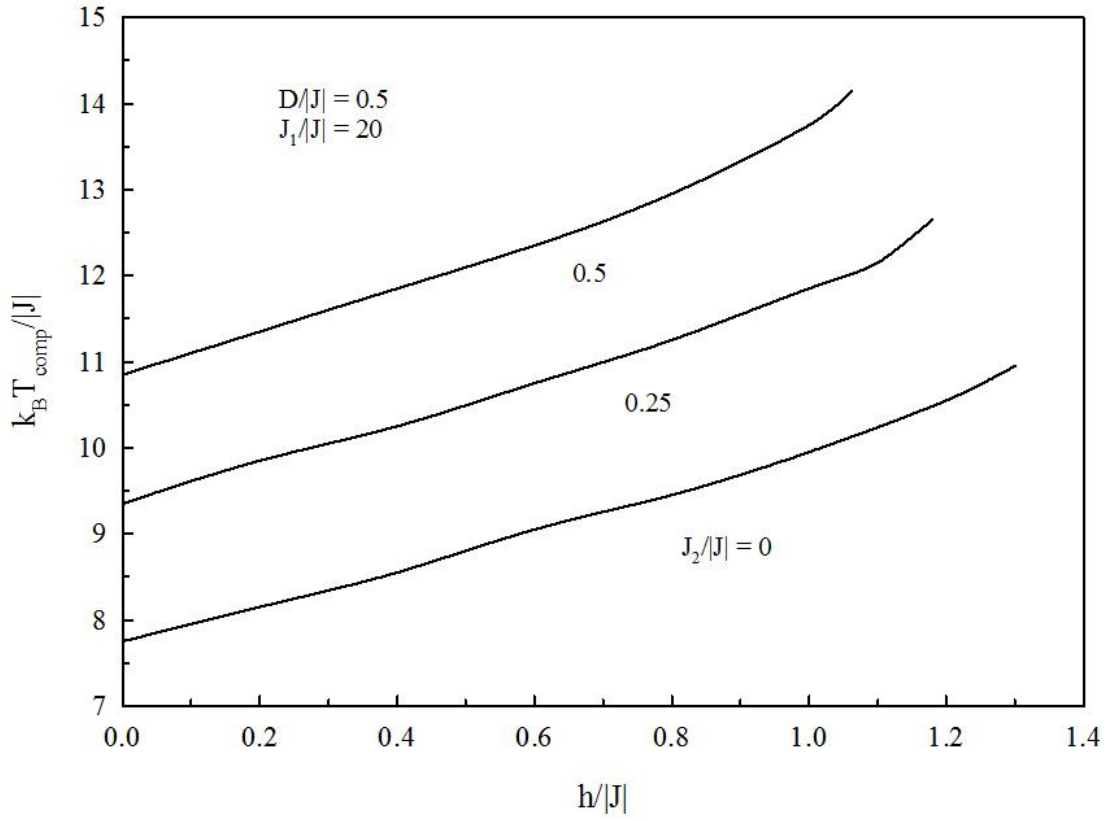
Şekil 5.41. Dış manyetik alanda Buendia ve Hurtado (2000) tarafından verilen manyetizasyon-sıcaklık grafiği



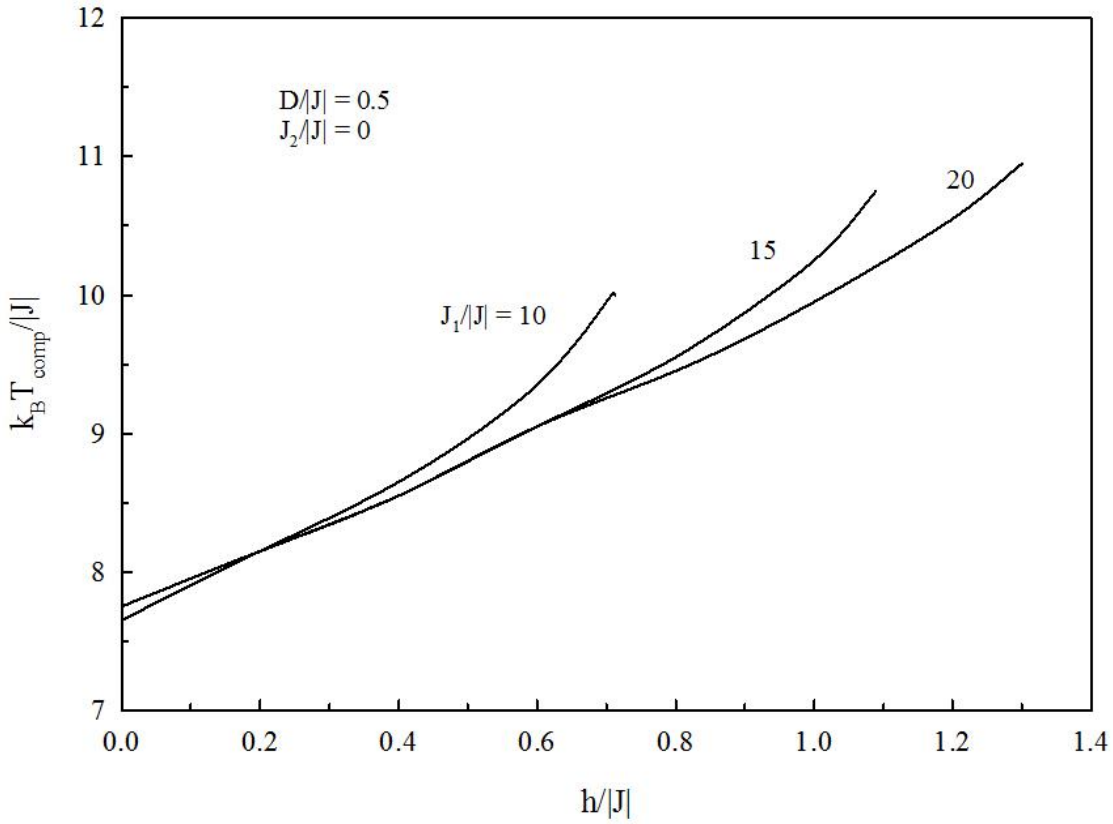
Şekil 5.42. Dış manyetik alanda Li ve ark. (2005) tarafından verilen manyetizasyon-sıcaklık grafiği.



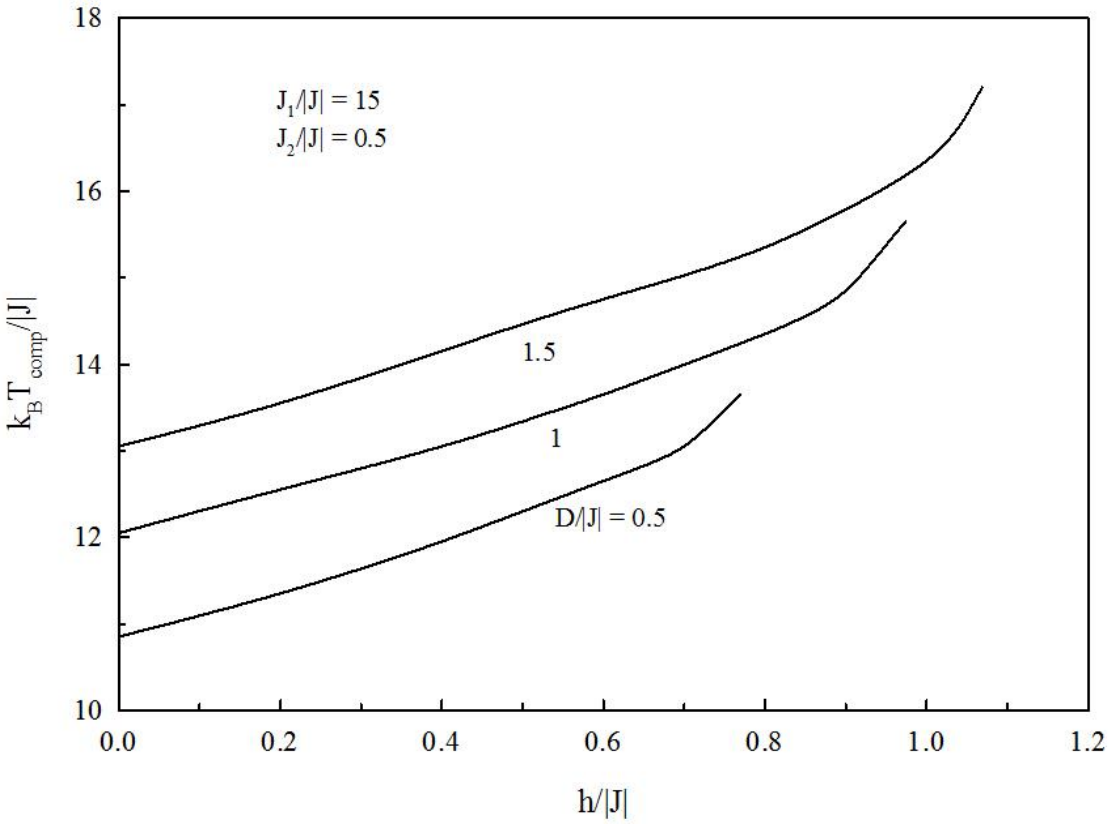
Şekil 5.43. Mohamad (2011) `ın ortalama alan teorisi kullanarak karma spin Ising ferrimagneti için dış manyetik alanın hem pozitif hem de negatif değerlerinde elde ettiği manyetizasyon-sıcaklık grafiği



Şekil 5.44. $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 0.5$ ve $J_1/|J| = 20$ değerlerini aldığında $J_2/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($J_2/|J| = 0$, 0.25 ve 0.5) dış manyetik alanın fonksiyonu olarak kompansasyon sıcaklığının değişimi



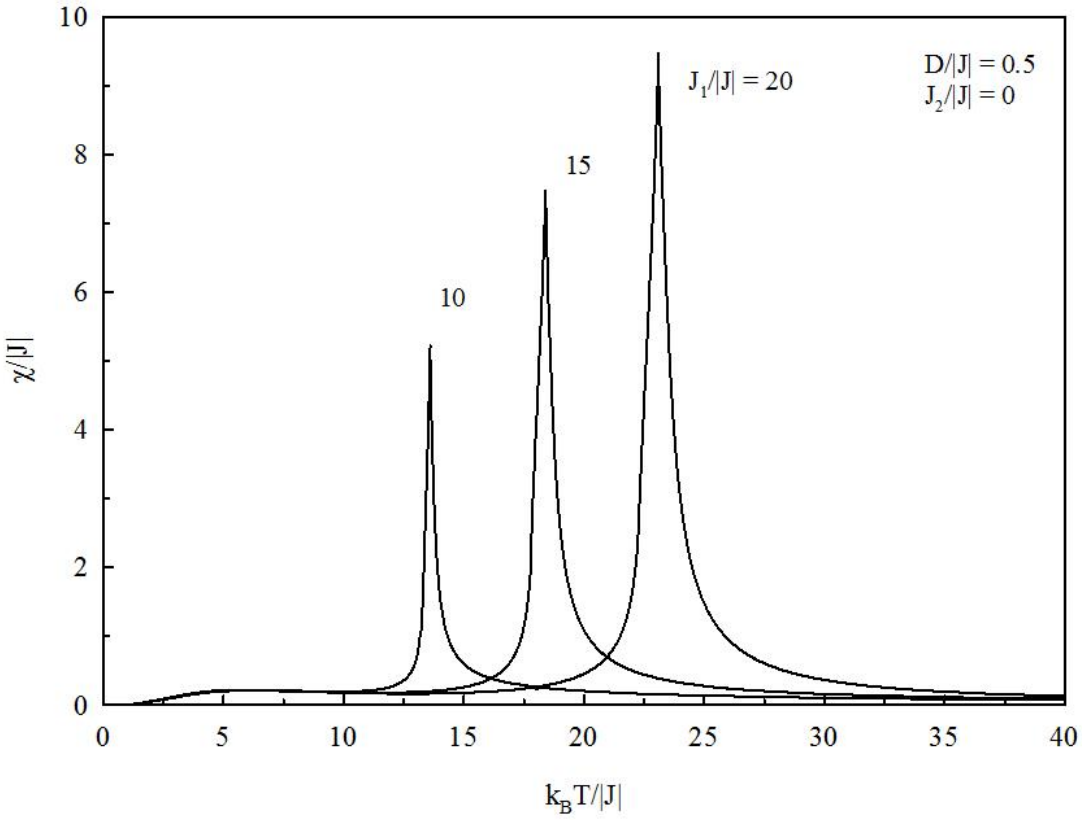
Şekil 5.45. $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 0.5$ ve $J_2/|J| = 0.5$ değerlerini aldığında $J_1/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($J_1/|J| = 10$, 15 ve 20) dış manyetik alanın fonksiyonu olarak kompansasyon sıcaklığının değişimi



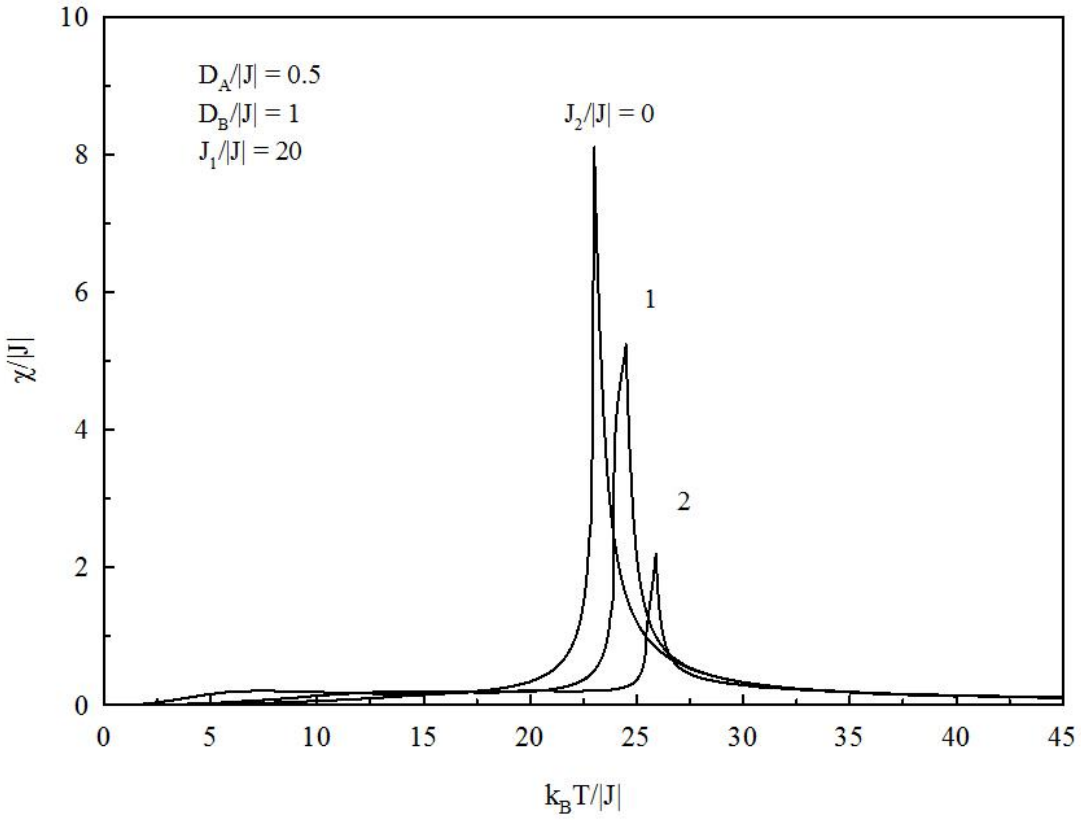
Şekil 5.46. $J_1/|J|$ = 1.5 ve $J_2/|J|$ = 0.5 değerlerini aldığında $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($D/|J|$ = 0.5, 1 ve 1.5) dış manyetik alanın fonksiyonu olarak kompansasyon sıcaklığının değişimi

5.3. Manyetik alınganlık

Şekil 5.47, $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 0.5$ ve $J_2/|J| = 0$ değerlerini aldığında $J_1/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($J_1/|J| = 10$, 15 ve 20) sıcaklığın fonksiyonu olarak paralel başlangıç alınganlığının davranışını göstermektedir. Şekilden görüldüğü gibi, alınganlık mutlak sıfırda sıfır değerini almaktadır ve kritik sıcaklıkta pik yapar (alınganlığın pik yaptığı değerler $J_1/|J| = 10$ için $k_BT/|J| = 13.6$, $J_1/|J| = 15$ için $k_BT/|J| = 18.4$ ve $J_1/|J| = 20$ için $k_BT/|J| = 23.1$ şeklinde verilir). Ayrıca $J_2/|J|$ arttıkça alınganlığın maksimum değeri artar. Şekil 5.48, $D_A/|J| = 0.5$, $D_B/|J| = 1$ ve $J_1/|J| = 20$ değerlerini aldığında $J_2/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($J_2/|J| = 0$, 1 ve 2) sıcaklığın fonksiyonu olarak paralel alınganlığın davranışını göstermektedir. Burada da alınganlık mutlak sıfırda sıfır değerini almaktadır ve kritik sıcaklıkta pik yapar (alınganlığın pik yaptığı değerler $J_2/|J| = 0$ için $k_BT/|J| = 22.9$, $J_2/|J| = 1$ için $k_BT/|J| = 24.5$ ve $J_2/|J| = 2$ için $k_BT/|J| = 25.8$ şeklinde verilir). Ama $D/|J|$ arttıkça alınganlığın maksimum değeri azalır. Bu şekillerden kompansasyon sıcaklığında alınganlığın düzenli bir davranış gösterdiği sadece kritik sıcaklıkta pik yaptığı aşikârdır. Çünkü kompansasyon sıcaklığı sadece alt örgü manyetizasyonlarının farklı sıcaklık bağımlılıklarından dolayı meydana gelir ve böylece özel bir davranış sergilemez.



Şekil 5.47. $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 0.5$ ve $J_2/|J| = 0$ değerlerini aldığında $J_1/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($J_1/|J|$ = 10, 15 ve 20) sıcaklığın bir fonksiyonu olarak paralel başlangıç alınganlığının davranışı

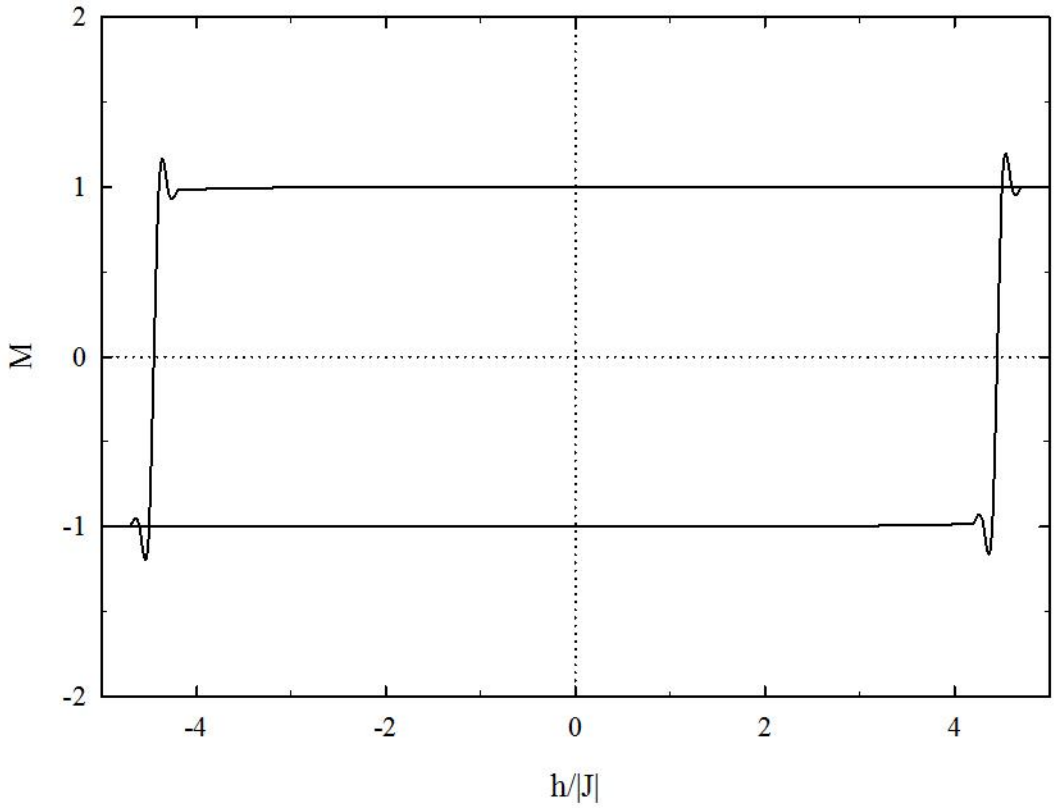


Şekil 5.48. $D_A/|J| = 0.5$, $D_B/|J| = 1$ ve $J_1/|J| = 20$ değerlerini aldığında $J_2/|J|$ `nin muhtelif değerleri için ($J_2/|J| = 0$, 1 ve 2) sıcaklığın bir fonksiyonu olarak paralel başlangıç alınganlığının davranışı

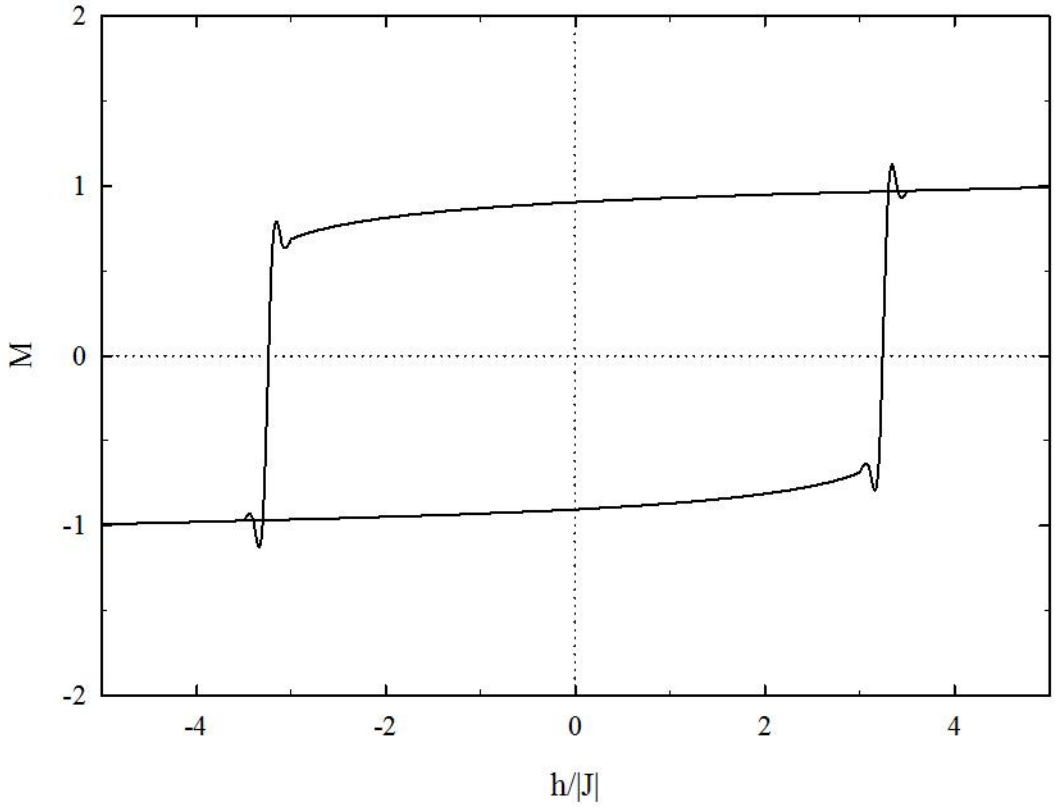
5.4. Manyetik histerisiz

Manyetizasyonun dış manyetik alana göre grafiğini çizerek histerisiz eğrisini elde ettik. Bunun için $h/|J|$ `yi sıfırdan belirli bir değere kadar her iki yönde değiştirerek manyetizasyon değerlerini bulduk. Elde ettiğimiz eğrilerin histerisiz eğrilerini verdiğini gözlemledik. h_c zorlayıcı alan, toplam manyetizasyonun sıfıra gitmesi için gereken minimum dış alan değeri olarak tanımlanmaktadır.

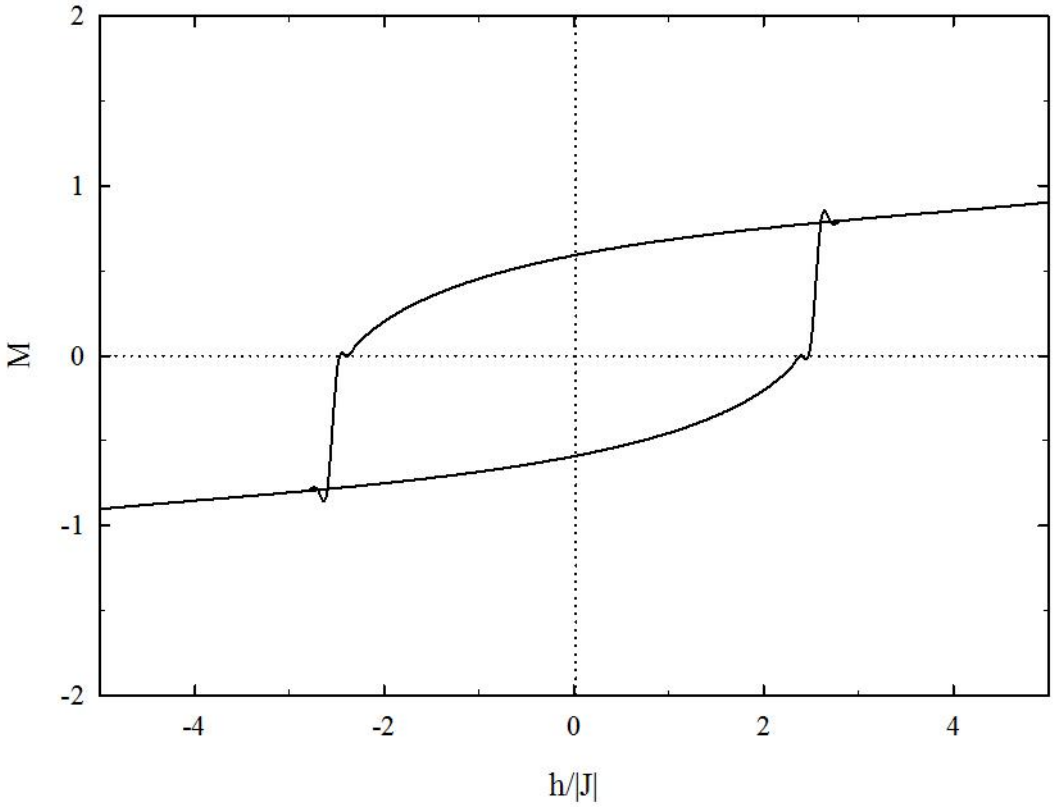
$D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 1$, $J_1/|J| = 20$ ve $J_2/|J| = 1$ için, Şekil 5.49, Şekil 5.50, Şekil 5.51, Şekil 5.52, Şekil 5.53, Şekil 5.54, Şekil 5.55 ve Şekil 5.56 sırayla $k_BT/|J| = 1$, 5, 9, 12, 15, 18, 23 ve 26 değerleri için histerisiz döngülerini göstermektedir. Burada verilen parametreler için, kompansasyon sıcaklığı $k_BT_{komp}/|J| = 14.95$ ve kritik sıcaklık $k_BT_c/|J| = 26.05$ değerine karşılık gelmektedir. Ayrıca kritik sıcaklığa kadar bütün sıcaklıklarda histerisiz eğrisi gözlemledik. Şekil 5.57, Chern ve ark. (2001) `nın Fe_3O_4/Mn_3O_4 süperörgüsü için verdikleri manyetik histerisiz eğrilerini göstermektedir. Şekil 5.58, $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 1$, $J_1/|J| = 20$ ve $J_2/|J| = 1$ için zorlayıcı alanın sıcaklıkla değişimini göstermektedir. Şekilden görüldüğü gibi düşük sıcaklıklarda zorlayıcı alan büyüktür. Zorlayıcı alan sıcaklık arttıkça azalarak kompansasyon sıcaklığında ($k_BT/|J| = 15$) sıfırı keser ve kritik sıcaklığa doğru artıp tekrar kritik sıcaklığa doğru azalarak T_c ($k_BT/|J| = 26$) `de sıfıra gider. Burada elde ettiğimiz sonuç -zorlayıcı alanın kompansasyon noktasında sıfır olduğu-, Chern ve ark. (2001) `nın (Şekil 5.57), Demirtas ve ark. (2004) `nın (Şekil 5.59), Ziese ve ark. (2010) `nın (Şekil 5.60) ve Fishman ve Reboredo (2008) `nın (Şekil 5.61) elde ettikleri sonuçlarla tutarlıdır. Şekil 5.62 `den görüldüğü gibi, kompansasyon noktası 33 K `dadır ve bu sıcaklıkta zorlayıcı alan sıfırdır. Demirtas ve ark. (2004), Fe/Gd çoklu tabakalarında kompansasyon sıcaklığı civarında zorlayıcı alan ve değiş-tokuş bayas etkilerini incelediler (Şekil 5.63). Burada kompansasyon sıcaklığında (90 K) zorlayıcı alan sıfır olarak bulunmuştur ve sonra zorlayıcı alan artarak tekrar azalır. Ziese ve ark. (2010), $La_{0.7}Sr_{0.3}MnO_3/SrR_4O_3$ süperörgüsünde manyetizasyonun ters çevrilme mekanizmasını incelediler. Şekil 5.60 `den görüldüğü gibi kompansasyon sıcaklığında (62 K) zorlayıcı alan sıfır olarak bulunmuştur. Ayrıca Fishman ve Reboredo (2008) `nın bir polikristal için verdigi zorlayıcı alanın sıcaklıkla değişimi Şekil 5.61 `da verilmiştir. Burada $T_{komp}/T_c = 0.67$ şeklinde verilmektedir ve bu sıcaklıkta zorlayıcı alan sıfırdır.



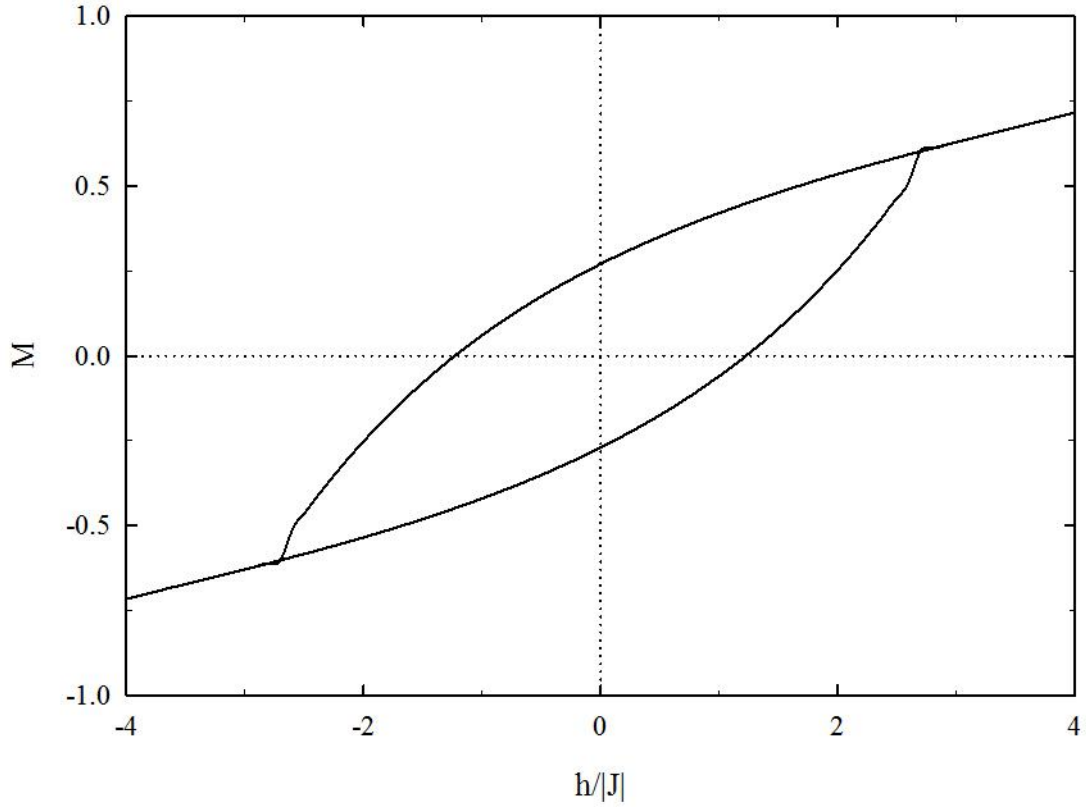
Şekil 5.49. $k_BT/|J|$ = 1 değerinde $D_A/|J|$ = $D_B/|J|$ = $D/|J|$ = 1, $J_1/|J|$ = 20 ve $J_2/|J|$ = 1 için histerisiz döngüsü



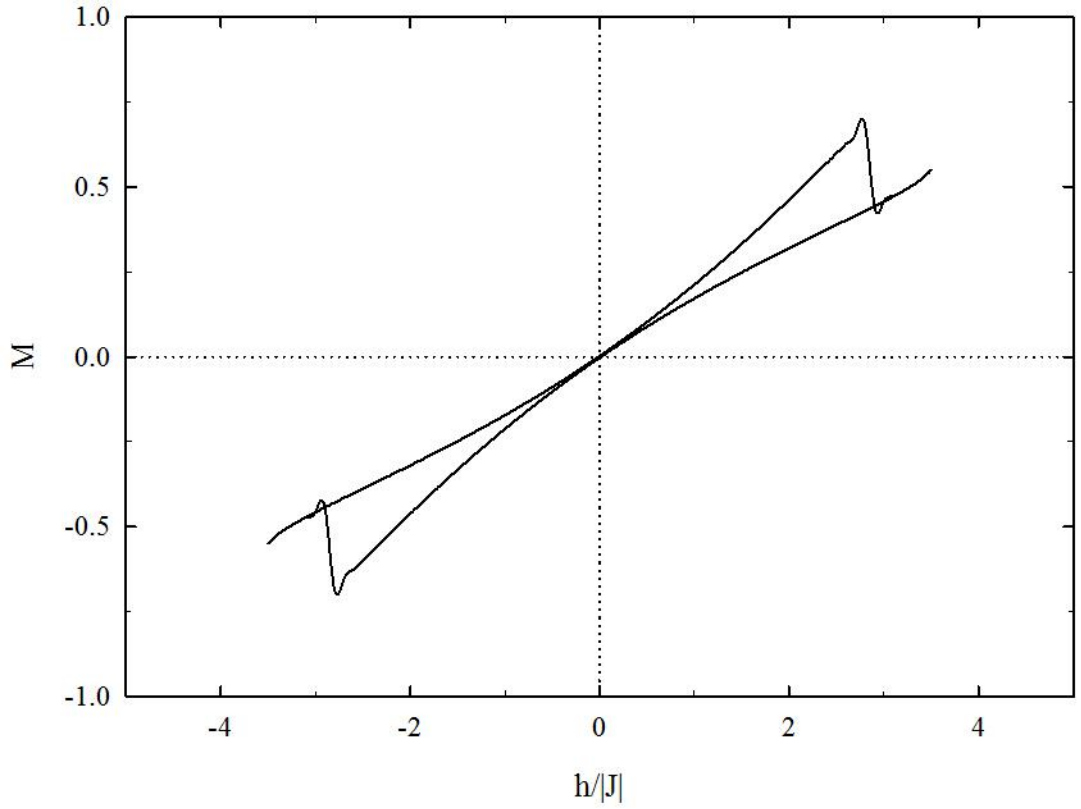
Şekil 5.50. $k_BT/|J|$ = 5 değerinde $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 1$, $J_1/|J| = 20$ ve $J_2/|J| = 1$ için histerisiz döngüsü



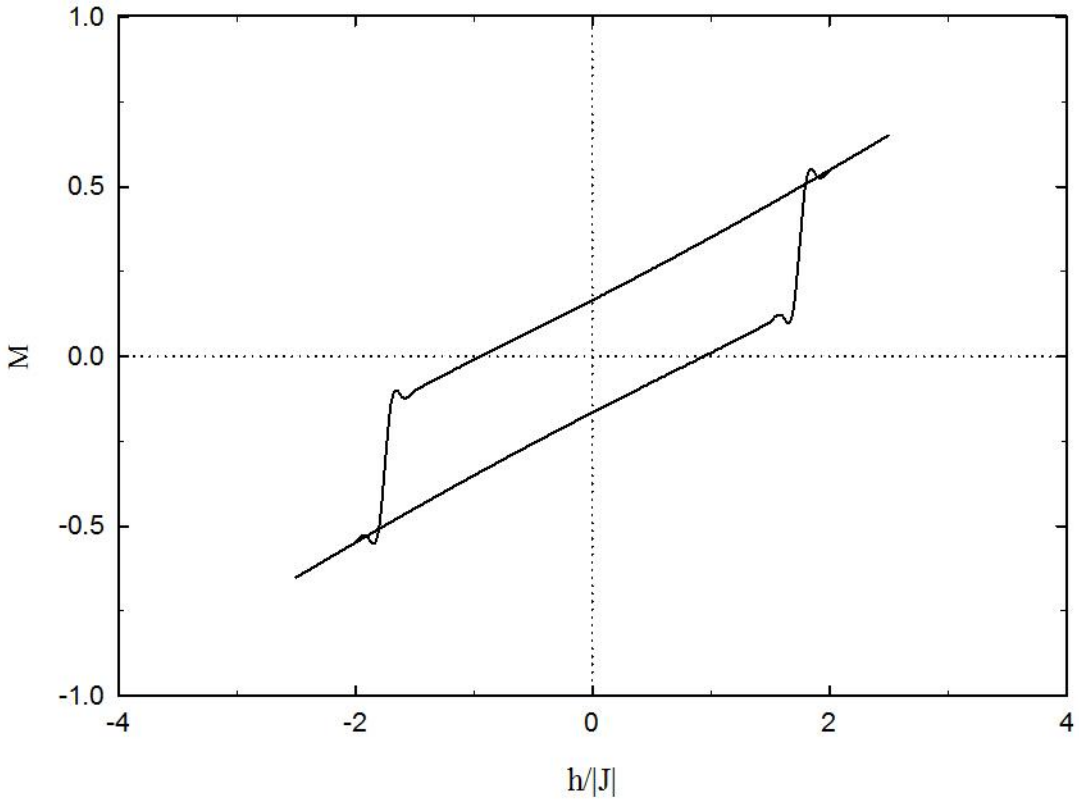
Şekil 5.51. $k_BT/|J|$ = 9 değerinde $D_A/|J|$ = $D_B/|J|$ = $D/|J|$ = 1, $J_1/|J|$ = 20 ve $J_2/|J|$ = 1 için histerisiz döngüsü



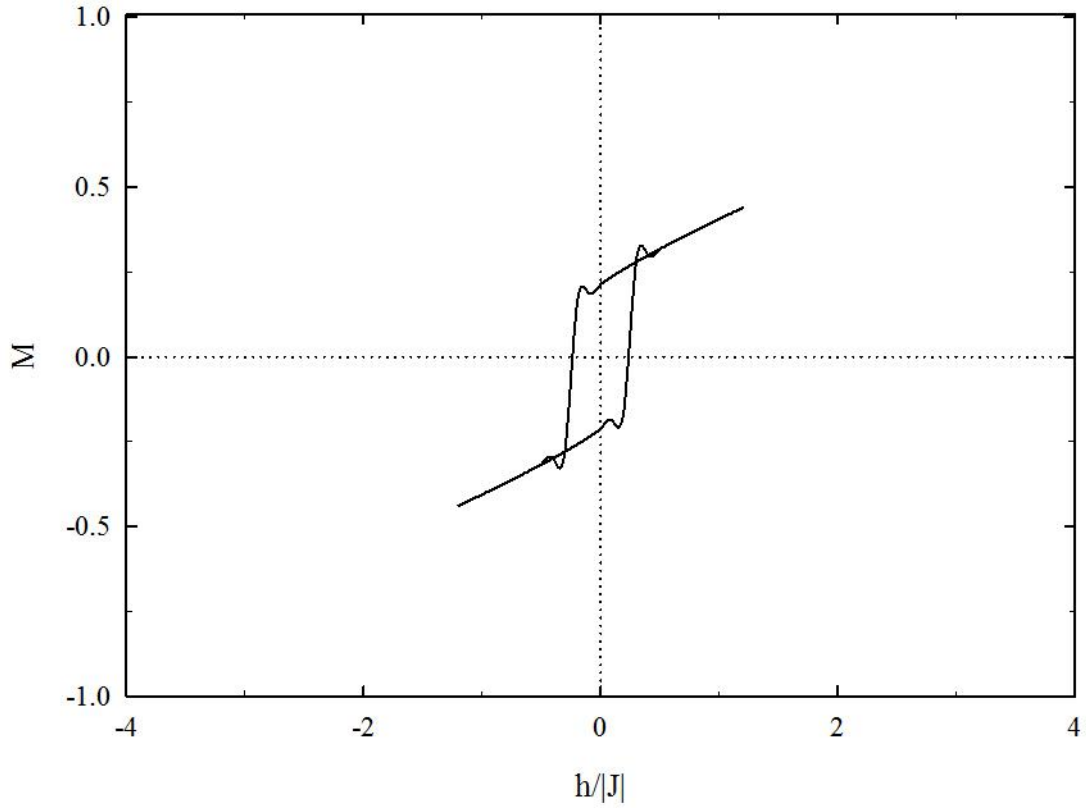
Şekil 5.52. $k_BT/|J| = 12$ değerinde $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 1$, $J_1/|J| = 20$ ve $J_2/|J| = 1$ için histerisiz döngüsü



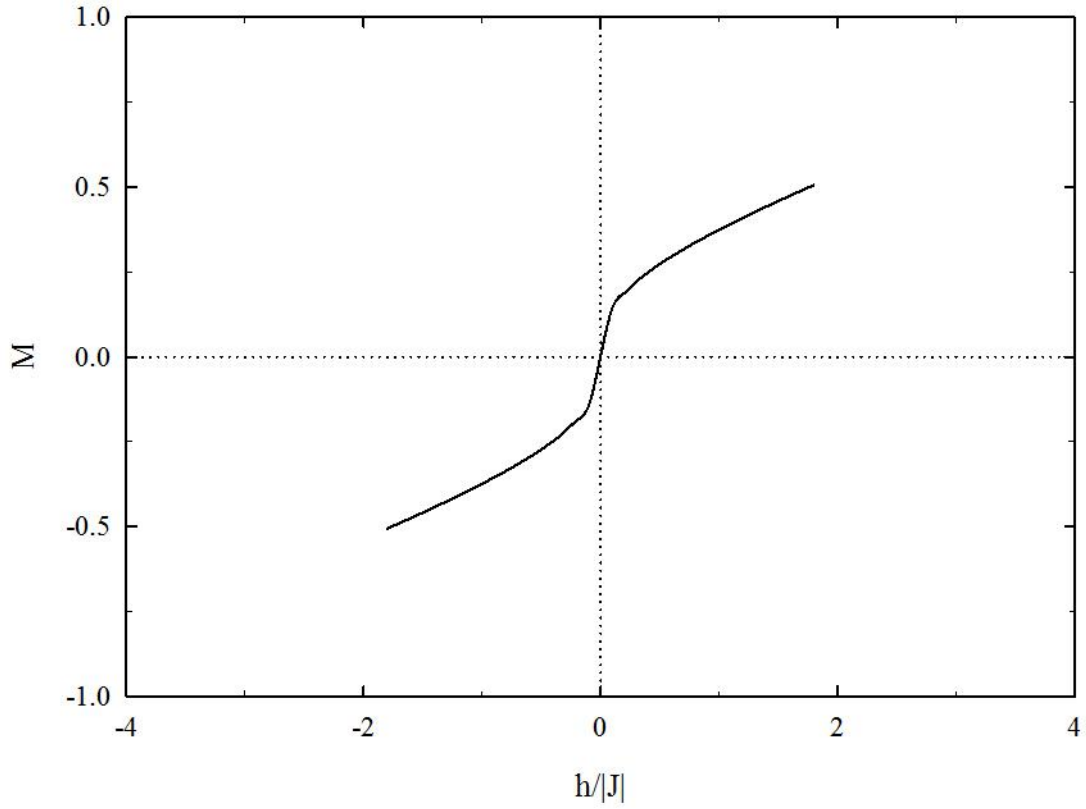
Şekil 5.53. $k_BT/|J| = 15$ değerinde $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 1$, $J_1/|J| = 20$ ve $J_2/|J| = 1$ için histerisiz döngüsü



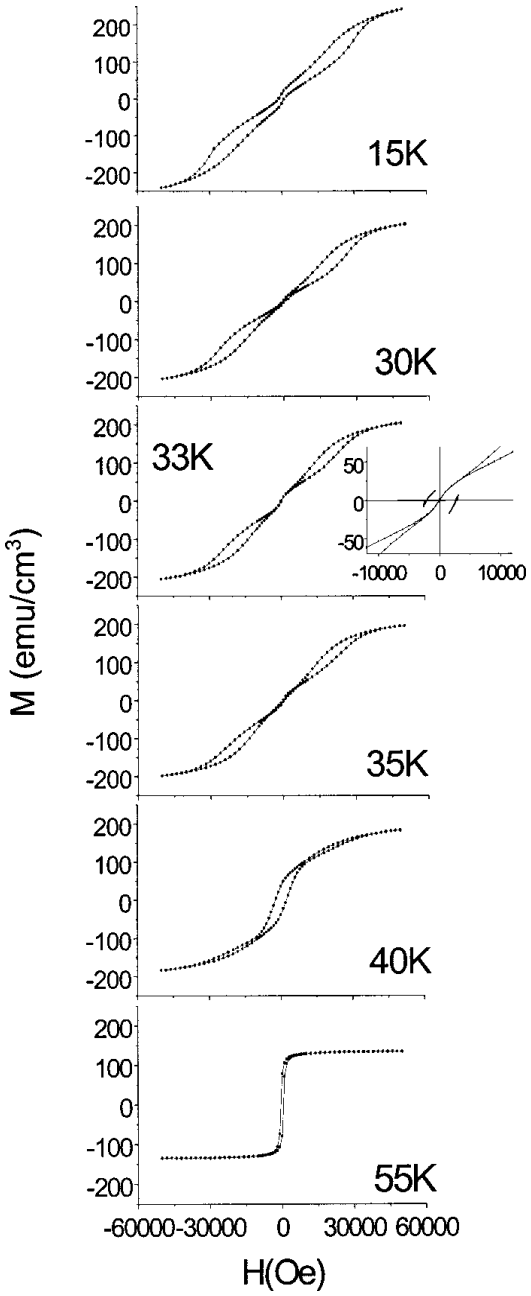
Şekil 5.54. $k_BT/|J|$ = 18 değerinde $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 1$, $J_1/|J| = 20$ ve $J_2/|J| = 1$ için histerisiz döngüsü



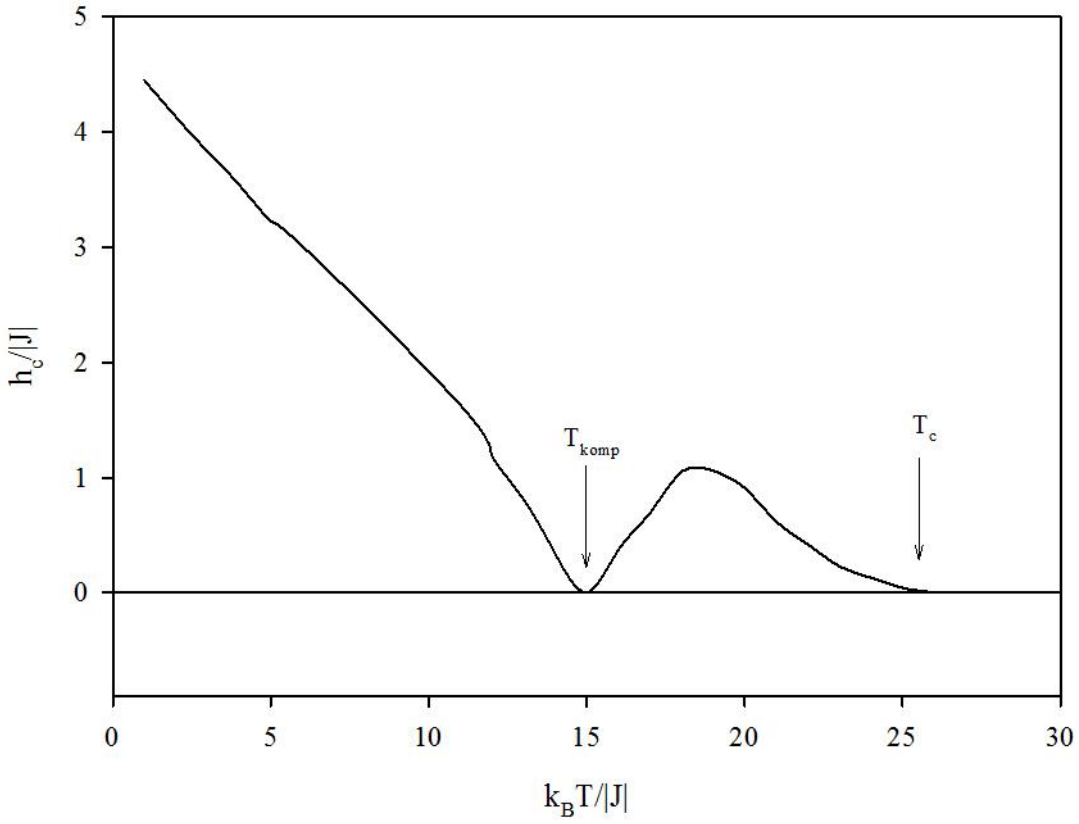
Şekil 5.55. $k_BT/|J| = 23$ değerinde $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 1$, $J_1/|J| = 20$ ve $J_2/|J| = 1$ için histerisiz döngüsü



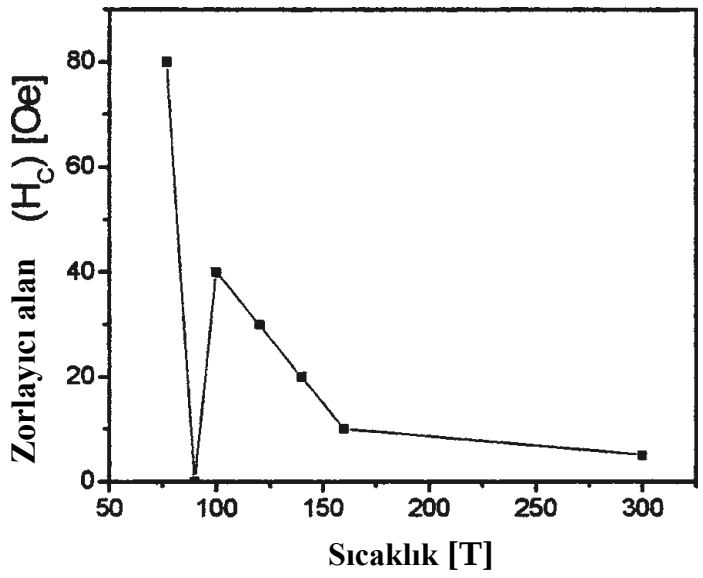
Şekil 5.56. $k_BT/|J| = 26$ değerinde $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 1$, $J_1/|J| = 20$ ve $J_2/|J| = 1$ için histerisiz döngüsü



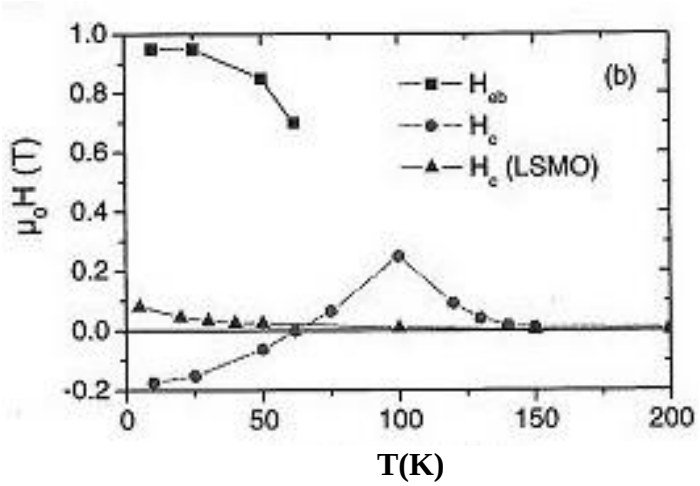
Şekil 5.57. Chern ve ark. (2001) `nın Fe_3O_4/Mn_3O_4 süperörgüsü için verdikleri manyetik histerisiz eğrileri. Kompansasyon noktası $T_{komp} = 33$ K değerindedir ve kompansasyon noktasında zorlayıcı alan sıfırdır.



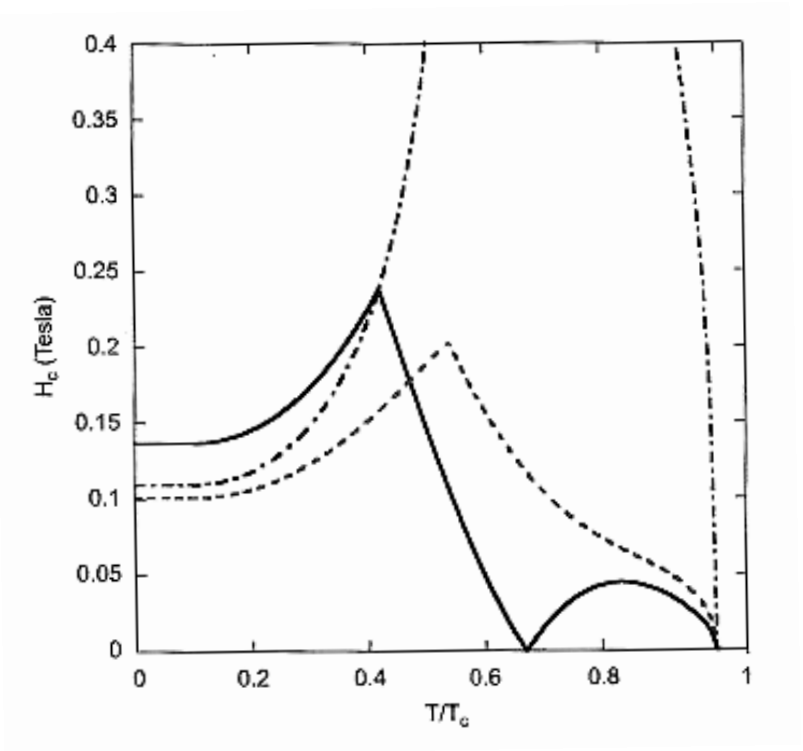
Şekil 5.58. $D_A/|J| = D_B/|J| = D/|J| = 1$, $J_1/|J| = 20$ ve $J_2/|J| = 1$ değerleri için $h_c/|J|$ zorlayıcı alanın sıcaklığın bir fonksiyonu olarak değişimi



Şekil 5.59. Demirtas ve ark. (2004), Fe/Gd çoklutabakalarında kompansasyon sıcaklığı civarında zorlayıcı alan ve değiş-tokuş bayas etkilerini incelediler. Burada kompansasyon sıcaklığında (90 K) zorlayıcı alan sıfır olarak bulunmuştur.



Şekil 5.60. Ziese ve ark. (2010), $La_{0.7}Sr_{0.3}MnO_3/SrR_4O_3$ süperörgüsünde manyetizasyonun ters çevrilme mekanizmasını incelediler. Burada kompansasyon sıcaklığında (62 K) zorlayıcı alan sıfır olarak bulunmuştur.



Şekil 5.61. Fishman ve Reboredo (2008) `nın verdigi zorlayıcı alanın sıcaklıkla değişimi. (T_{comp}/ T_c= 0.67)

6. SONUÇLAR

Bu tezde kare örgüde her iki altörgü içinde tek-iyon anizotropisi tanımlanan karma spin-1 ve spin-2 Heisenberg ferrimanyetik sistemin -dış manyetik alanın varlığında ve yokluğunda- manyetizasyon, kompansasyon sıcaklığı, kritik sıcaklık, alınganlık ve histerisiz gibi manyetik özelliklerini inceledik.

Dış manyetik alan yokken, sadece en yakın komşu etkileşimi ve tek-iyon anizotropiler mevcut olduğunda kompansasyon sıcaklığının olmadığını bulduk ve bu çalışmada Néel sınıflandırmasında tanımlanmayan bir manyetizasyon eğrisi gözlemledik. A alt örgüsünün ikinci en yakın komşu etkileşimi, $J_1/|J|$, dahil edildiğinde $J_1/|J|$ minimum bir değeri ($J_{1min}/|J|$) aştığı zaman kompansasyon sıcaklığı gözlenir. Ayrıca $J_1/|J|$ arttıkça kritik sıcaklık artar. B alt örgüsünün ikinci en yakın komşu etkileşimi, $J_2/|J|$, dahil edildiğinde kompansasyon sıcaklığı sıfırdan $J_2/|J|$ `nin maksimum belirli bir değerine ($J_{2max}/|J|$) kadar artar ve daha sonra kompansasyon sıcaklığı kaybolur. $J_2/|J|$ `nin sadece küçük bir aralığında kompansasyon sıcaklığı vardır.

Tek-iyon anizotropilerinin her ikisi de negatif değer aldığında birinci mertebe faz geçişleri gözlenmiştir. Ayrıca sadece A alt örgüsünün tek-iyon anizotropisinin negatif değerleri için birinci mertebe faz geçişleri gözlenmiştir ve aynı zamanda bazı değerler için kompansasyon sıcaklığı mevcuttur. Ama sadece B alt örgüsünün tek-iyon anizotropisinin negatif değerleri için birinci mertebe faz geçişleri gözlenmez.

Dış manyetik alanda, manyetizasyonun süreksiz olduğu sıcaklıkta (T_D) birinci mertebe faz geçişleri gözlenir. Dış manyetik alanın artan değerleri için $T_{komp} = T_D$ oluncaya kadar kompansasyon sıcaklığı artar, oysa T_D azalır; $T_{komp} = T_D$ olduğu $h/|J|$ değerinden daha büyük dış manyetik alan değerleri için kompansasyon sıcaklığı kaybolur, yani sadece dış manyetik alanın küçük bir aralığında kompansasyon sıcaklığı vardır.

Sistemin alınganlığı sıfır sıcaklıkta sıfırdır ve kritik sıcaklıkta bir pik yapar. Kompansasyon sıcaklığı sadece alt örgü manyetizasyonlarının farklı sıcaklık bağımlılıklarından dolayı meydana gelir ve böylece alınganlık bu sıcaklıkta özel bir davranış sergilemez.

Düşük sıcaklıklardan kritik sıcaklığa kadar bütün sıcaklık değerlerinde histerisiz eğrileri gözlenmiştir. Zorlayıcı alan düşük sıcaklıklarda maksimum değer alır ve kompansasyon sıcaklığında sıfır olur ve tekrar artıp kritik sıcaklığa doğru azalarak T_c `de sıfıra gider.

KAYNAKLAR

Anderson, F. B. and Callen, H. B., 1964, Statistical mechanics and field-induced phase transitions of the Heisenberg antiferromagnet, *Physical Review*, **136**, A1068.

Bogolyubov, N. N. and Tyablikov, S. V., 1959, ***Doklady*** *Akademii* ***Nauk*** *SSSR*, **126**, 53 [English taranslation: 1959, Retarded and advanced Green functions in statistical physics, *Soviet Physics-Doklady*, **4**, 589].

Buendìa, G. M. and Cardona, R., 1999, Monte Carlo study of a mixed spin-3/2 and spin-1/2 Ising ferrimagnetic model, *Physical Review B*, **59**, 6784.

Buendìa, G. M. and Machado, E., 2000, Magnetic behavior of a mixed Ising ferrimagnetic model in an oscillating magnetic field, *Physical Review B*, **61**, 14686.

Buendìa, G. M. and Hurtado, N., 2000, Numerical study of a three-dimensional mixed Ising ferrimagnet in the presence of an external field, *Physica Status Solidi (b)*, **220**, 959.

Bobák, A., Pokorný, V., Dely, J., 2009, Critical properties of the mixed spin-1 and spin-1/2 anisotropic Heisenberg model in the Oguchi approximation, *Physica A*, **388**, 2157.

Bobák, A., Dely, J., Žukovič, M., 2011, Phase transition and compensation temperature in the mixed spin-1 and spin-1/2 anisotopic Heisenberg ferrimagnet, *Physica A*, **390**, 1953.

Callen, H. B., 1963, Green function theory of ferromagnetism, *Physical Review*, **130**, 890.

Chen, Y., Wang, Z. M. and Hu, A. Y., 2005, Green `s functions method applied to the crossover of the one-dimensional quantum anisotropic Heisenberg ferromagnet, *Physical Review B*, **72**, 172406.

Chern, G., Horng, L., Shieh, W. K. and Wu T. C., 2001, Antiparallel state, compensation point, and magnetic phase diagram of Fe_3O_4/Mn_3O_4 superlattices, *Physical Review B*, **63**, 094421.

Curie, P., 1895, Propriétés magnétiques des corps à diverses températures, *Annales de Chimie et Physique*, **5**(7), 289.

Demirtas, S. and Koymen, A. R., 2004, Coercivity and exchange bias near the compensation temperature for inhomogeneous Fe/Gd ferrimagnets, *Journal of Applied Physics*, **95**, 4949.

Deviren, B., Ertaş, M., Keskin, M., 2010, The effective-field theory studies of critical phenomena in a mixed spin-1 and spin-2 Ising model on honeycomb and square lattices, *Physica A*, **389**, 2036.

Deviren, B., Akbudak, S., Keskin, M., 2011, Mixed spin-1 and spin-3/2 Ising system with two alternative layers of a honeycomb lattice within the effective-field theory, *Solid State Communations*, **151**, 193.

Devlin, J. F., 1971, Effect of crystal-field anisotropy on magnetically ordered systems, *Physical Review B*, **4**, 136.

Ekiz, C., 2006, The possibility of two compensation points in a ferrimagnetic mixed spin-1 and spin-3/2 Ising system using Bethe lattice approach, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **307**, 139.

Ekiz, C., Erdem, R., 2006, Effect of crystal-field potential on compensation temperature of a mixed spin-1/2 and spin-1 Ising ferrimagnetic system, *Physics Letters A*, **352**, 291.

Fishman, R. S., Reboredo, F. A., 2008, Coercive field of a polycrystalline ferrimagnet with uni-axial anisotropy, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **320**, 1700.

Fu, H., Yao, K. and Liu, Z., 2008, Magnetic properties and quantum phase transitions of purely organic molecule-based ferrimagnets based on Green `s function theory, *The Journal of Chemical Physics*, **128**, 114705.

Godoy, M. Leite, V. S. and Figueiredo, W., 2004, Mixed-spin Ising model and compensation temperature, *Physical Review B*, **69**, 054428.

Junger, I. J., Ihle, D., Richter J. and Klümber, A., 2004, Green-function theory of the Heisenberg ferromagnet in a magnetic field, *Physical Review B*, **70**, 104419.

Kohno, M., Wan, X. and Hu, X., 2005, Theoretical study on Ferrimagnetism of new material $Sr_8CaRe_3Cu_4O_{24}$, *Journal of the Physical Society Japan*., **74**, Supply 98

Kondo, J. and Yamaji, K., 1972, Green's-Function Formalism of the One-Dimensional Heisenberg Spin System, *Progress Theoretical Physics*, **47**(3), 807.

Langevin, P., 1905, Magnétisme et théeorie des électrons, *Annales de Chimie et Physique*, **5**(8), 70.

Li, J., Du, A. and Wei, G., 2003, Low - temperature properties of a mixed spin Heisenberg ferrimagnetic system on a honeycomb lattice, *Physica Status Solidi (b)*, **240**, 610.

Li, J., Wei, G. and Du, A., 2004, Compensation temperature of a mixed spin-1 and spin-1/2 Heisenberg ferrimagnetic model, *International Journal of Modern Physics B*, **18**, 1637.

Li, J., Wei, G. and Du, A., 2005, Compensation phenomena of a mixed spin-2 and spin-1/2 Heisenberg ferrimagnetic model: Green function study, *Physica B*, **368**, 121.

Li, J., Du, A. and Wei, G., 2007, The compensation behavior and initial susceptibilities of a mixed-spin Heisenberg ferrimagnetic system in an external magnetic field, *International Journal of Modern Physics B*, **21**, 1077.

Lines, M. E., 1964, Green functions in the theory of antiferromagnetism, *Physical Review*, **135**, 1336.

Mansuripur, M., 1995, The physical principles of magneto-optical recording, *Cambridge University Press*, New York.

Mathoniére, C., Nuttal, C. J., Carling, S. G. and Day, P., 1996, Ferrimagnetic mixed-valency and mixed-metal Tris(oxalato)iron(III) compouds: Synthesis, structure and magnetism, *Inorganic Chemistry*, **35**(5), 1201.

Mills, R. E., Kenan, R. P. and Milford, F. J., 1965, Renormalized spin waves in ferrimagnets, *Journal of Applied Physics*, **36**, 1131.

Mohamad, H. K., 2011, Spin compensation temperatures induced by longitudinal fields in a mixed spin-3/2 and spin-5/2 Ising ferrimagnet, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **323**, 61.

Néel, L., 1932, Influence des fluctuations du champ moléculaire sur les propriétés magnétiques des corps, *Ann. Phys. Paris*, **17**, 5.

Néel, L., 1932, Propriétés magnétiques du manganèse et du chrome en solution solide étendue, *Journal de Physique et Le Radium*, **3**, 160.

Néel, L., 1948, Magnetic properties of ferrites: ferrimagnetism and antiferromagnetism (Propriétés magnétiques des ferrites: ferrimagnétisme et antiferromagnétisme), *Ann. Phys. Paris*, **3**, 137.

Oitmaa, J., 2005, Ferrimagnetism and the existence of compensation points in layered mixed spin (½, 1) Ising models, *Physical Review B*, **72**, 224404.

Pu, F. C., 1960, ***Doklady*** *Akademii* ***Nauk*** *SSSR*, **131**(3), 546 [English transition: 1960, On approximate method for the calculation of the magnetization of an isotropic antiferromagnetic material, *Soviet Physics-Doklady*, **5**, 321]

Svitlyk, V., Russell T., Kolodiazhnyi T., Mozhariuskyj Y., 2012, Structure and magnetic properties of $Fe_{1.14}Cr_{1.86}Se_4$ ferrimagnet: Negative magnetization and its dependence on magnetic field, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **324**, 1419.

Tyablikov, S. V., 1959, Ferromanyetizma teorisinde gecikmiş ve ilerlemiş Green fonksiyonları (Запаздывающие и опережающие функции Грина в теории феромагнетизма), *Ukrain. Mat. Zh.*, **11**, 287.

Tahir-Kheli, R. A. and ter Haar, D., 1962, Use of Green functions in the theory of ferromagnetism I. General discussion of the spin-S case, *Physical Review*, **127**, 88.

Wei, G., Zhang, Q., Xin, Z., Liang, Y., 2004, Internal energy and initial susceptibility of mixed spin-2 and spin-5/2 ferrimagnetic Ising system with interlayer coupling, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **277**, 1.

Weiss, P., 1907, L'hypothèse du champ moléculaire et la propriété ferromagnétique, *Journal de Phys*ique, **6** (4), 661.

Yablonskiy, D. A., 1991, Tyablikov approximation in the theory of low-dimensional quantum Heisenberg ferromagnets and antiferromagnets, *Physical Review B*, **44**, 4467.

Yao, K. L., Li J. W., Liu Z. L., Fu H. H. and Zu L., 2007, Magnetic properties of a mixed spin-2 and spin-5/2 Heisenberg ferrimagnetic system on a two-dimensional honeycomb lattice: Green `s function approach, *Communications in Theoretical* ***Physics*** *(Beijing, China)*, **47**, 741.

Ziese, M., Vrejoiu, I. and Hesse, D., 2010, Inverted hysteresis and giant exchange bias in $La_{0.7}Sr_{0.3}MnO_3/SrR_4O_3$ superlattices, *Applied Physics Letters*, **97**, 052504.

Zubarev, D. N., 1960, *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*, **71**, 71 [English Translation: 1960, Double-time Green functions in statistical physics, *Soviet Physics-Uspekhi.*, **3**, 320]

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : Gülistan Mert
Uyruğu : TC
Doğum Yeri ve Tarihi : Konya / 13.09.1981
Telefon : 05556578777
Faks : 03322376591
e-mail : *gmert@selcuk.edu.tr*

EĞİTİM

Derece		Adı, İlçe, İl	Bitirme Yılı
Lise	:	İmam Hatip Lisesi, Karatay, Konya	1999
Üniversite	:	Selçuk Üniversitesi, Selçuklu, Konya	2004
Yüksek Lisans	:	Selçuk Üniversitesi, Selçuklu, Konya	2006
Doktora	:	Selçuk Üniversitesi, Selçuklu, Konya	2013

İŞ DENEYİMLERİ

Yıl	Kurum	Görevi
2008	Selçuk Üniversitesi	Arş. Görevlisi

UZMANLIK ALANI

YABANCI DİLLER: İngilizce

YAYINLAR

1. Gülistan Mert, 2012, **Green`s function study of a mixed spin-1 and spin-3/2 Heisenberg ferrimagnetic system**, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **324**(18), pp. 2706-2710
2. Gülistan Mert and H. Şevki Mert, 2012, "**Magnetic properties of a mixed spin-1 and spin-2 Heisenberg ferrimagnetic system: Green's function study**", Physica A: Statistical Mechanics and its Applications **391**(23), pp. 5926-5934 (2012). (Doktora Tezinden yapılmıştır.)
3. Gülistan Mert ve H. Şevki Mert, 2011, **İki boyutlu dikdörtgen örgünün spin şekillenimleri,** *Selçuk Üniversitesi Fen Fakültesi Fen Dergisi*, Sayı 37, 15-24 (Yüksek Lisans Tezinden yapılmıştır.)
4. Gülistan Mert, 2011, **Karma spin-1/2 ve spin-5/2 Heisenberg ferrimanyetik sistemin manyetik özellikleri**, *Selçuk Üniversitesi Fen Fakültesi Fen Dergisi*, Sayı 37, 25-32.
5. G. Mert**,** H. Ş. Mert, " **Magnetic properties of a mixed spin-3/2 and spin-5/2 Heisenberg ferrimagnetic system using Green's function method**", 4-th

Conference Statistical Physics: Modern Trends and Applications, 3-6 Haziran 2012, Lviv, Ukrayna (Book of abstracts, P70) (Poster).

6. G. Mert**,** H. Ş. Mert, "**Dipolar interaction in the Heisenberg chain**"**,** 4-th Conference Statistical Physics: Modern Trends and Applications, 3-6 Haziran 2012, Lviv, Ukrayna (Book of abstracts, P71) (Poster).

7. G. Mert and H. Ş. Mert, "**Study of mixed spin heisenberg ferrimagnetic model using Green's function technique**", Turkish Physical Society 29th International Physics Congress, 5-8 September 2012, Bodrum (Book of abstracts, P212) (Sözlü sunum).

8. Gülistan Mert, H. Şevki Mert, "**Kare örgüde karma spin-1 ve spin-2 Heisenberg ferrimanyetik sistemin manyetik özellikleri**", Yoğun Madde Fiziği-İzmir Toplantısı, 06 Nisan 2012, İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, İzmir (YMF– Bildiri Özetleri, P17) (Sözlü sunum).