

150

İNÖNÜ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

MAGNETİK ALANDA BASİT ANTİFERROMAGNETİK
ISING SPİN SİSTEMLERİNİN KRİTİK
SICAKLIK İLE DEĞİŞİMİ

Hamza Polat

DOKTORA TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

1987

MALATYA

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürlüğüne,

İşbu çalışma, Jürimiz tarafından, Fizik Anabilim Dalında DOKTORA TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Prof.Dr. Zekeriya AYDIN

Başkan

Zeki Aydın

Doç.Dr. Namık Kemal PAK

Üye

Namık K. Pak

Doç.Dr. Servet EKMEKÇİ

Üye

Servet Ekmeççi

ONAY

Yukarıda imzaların, adigeçen öğretim üyelerine ait olduğunu onaylarım. .3./7./1987

Orhan Özer
Prof.Dr. Orhan Özer

Enstitü Müdürü

Ö Z E T

Bu çalışmada, Geliştirilmiş Sabit Çiftlenim ve Kümesel Değişim Yaklaşımları kullanılarak, A ve B gibi iki farklı atomdan oluşmuş basit antiferromagnetik iki boyutlu kare (SQ), üç boyutlu basit küp (S.C) ve içiçe girmiş iki tane basit küpten oluşmuş hacim merkezli küp (B.C.C) örgü sistemlerinde en yakın komşu etkileşmesi dikkate alınarak $H = 0$ ve $H \neq 0$ değerlerinde $H^* - T^*$ faz diyagramları hesaplanmıştır. $H = 0$ durumunda elde edilen kritik Neel değerleri sırası ile, karede $kT_N/J = 2.269185$, basit küpte $kT_N/J = 4.538373$ ve hacim merkezli küpte $kT_N/J = 6.051160$ olarak bulunmuştur. $H \neq 0$ durumunda, kritik dış alan H_k değerleri ise, sırası ile, karede $H_k = 1.6$, basit küpte $H_k = 0.8$ ve hacim merkezli küpte $H_k = 0.5$ olarak elde edilmiştir.

ABSTRACT

In this study, the phase diagrams of $H^* - T^*$ space have been calculated by using Constant Coupling and Cluster Variation Approximations in the cases of $H = 0$ and $H \neq 0$ by considering the nearest neighbour interaction 2d - square, 3d - simple cubic and body centered cubic which is formed from two penetrating simple cubic. Each lattice is formed from two different A and B atoms. In the case of $H = 0$ the critical Neel points have been found for 2d - square $kT_N/J = 2.269185$, 3d - simple cubic $kT_N/J = 4.538373$ and body centered cubic $kT_N/J = 6.051160$, respectively. In the case of $H \neq 0$ the critical external magnetic field values have been found for 2d - square $H_k = 1.6$, 3d - simple cubic $H_k = 0.8$ and body centered cubic $H_k = 0.5$, respectively.

TEŞEKKÜR

Bu çalışmanın gerçekleşmesinde her türlü yardım ve ilgisini esirgemeyen tez yöneticisi hocam Sayın Doç.Dr. Servet EKMEKÇİ'ye teşekkürü bir borç bilirim.

Denklemlerin bilgisayar ile çözümünde büyük emeği geçen ve her zaman samimi desteğini gördüğüm Kimya Bölümü Araştırma Görevlilerinden Sayın Arş.Grv. Mustafa KARAKAPLAN'a ve ayrıca bu tezi özenle daktilo eden Sayın Emine TURGUT'a teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa No</u>
1.1 Giriş	1
2.1 Sabit Çiftlenim Yaklaşımı	7
3.1 Tek Boyutlu Kümesel Değişim Yöntemi	13
3.1.1 Kendi İçinde Uyumlu (Self Consistency) Denklemlerin Türetilmesi	14
4.1 İki Boyutlu Antiferromagnetik Kare Örgü	17
5.1 Üç Boyutlu Basit Antiferromagnetik (BAF) Modeller	35
5.1.1 Antiferromagnetik Basit Küp	35
5.2.1 İki Basit Küpten Oluşmuş Antiferromagnetik Hacim Merkezli Örgü	43
6.1 Sonuç ve Tartışma	54
KAYNAKLAR	57
EK-A Bilgisayar Programı	60

ŞEKİLLER ve ÇİZELGELER LİSTESİ

	<u>Sayfa No</u>	
Şekil 1.1	Entalpi (H) ve serbest enerjinin (G) birinci mertebeden faz geçişinde (a) sıcaklık ve (b) basınç ile değişimi	3
Şekil 1.2	(a) ısı kapasitesi ve (b) düzen parametresinin ikinci mertebeden faz geçişindeki değişimi	3
Şekil 1.3	Basit antiferromagnetik Ising spin sistemlerinin H - T faz diyagramı	5
Şekil 3.1	L tane sistemden oluşan lineer örgü noktaları topluluğu	13
Çizelge 3.1	Spin ve bağlarının şekillenim olasılıkları	14
Şekil 3.1.1	Lineer Ising örgü sistemini oluşturmak için alınan ara sistem	14
Şekil 4.1	İki boyutlu kare örgü	17
Çizelge 4.1	İki boyutlu antiferromagnetik karenin şekillenim olasılıkları	18
Çizelge 4.2	Çiftlerin ve spinlerin şekillenim olasılıkları ve aralarındaki bağıntılar	19
Çizelge 4.3	İki boyutlu antiferromagnetik kare için H_f , H_{et} , f 'nin özdeğerleri ve M magnetik kuantum sayısı	23
Çizelge 4.4	NA_+ , NA_- , NB_+ ve NB_- iki boyutlu kare örgünün f_i şekillenimlerindeki + ve - spinlerde bulunma sayıları	24

Çizelge 4.5	İki boyutlu antiferromagnetik kare örgü sistemi için değişik yaklaşımlar ile $H = 0$ da bulunan kritik sıcaklık değerleri	29
Çizelge 4.6	İki boyutlu antiferromagnetik kare örgü sisteminde bilgisayar programı ile elde edilen H_k ve T_N kritik parametreleri	31
Şekil 4.2	Basit antiferromagnetik sistemlerin $H^* - T^*$ faz diyagramları	32
Şekil 4.3	Pâde yaklaşımı kullanılarak elde edilen basit antiferromagnetik sistemlerinin $H^* - T^*$ faz diyagramları	34
Şekil 5.1.1	A ve B gibi iki farklı atomdan oluşmuş basit küp	35
Çizelge 5.1.1	Üç boyutlu antiferromagnetik küp için H_f , H_{et} , f 'nin özdeğerleri ve M magnetik kuantum sayısı	38
Çizelge 5.1.2	Üç boyutlu antiferromagnetik basit küp örgü sistemi için değişik yaklaşımlar ile $H = 0$ da bulunan kritik sıcaklık değerleri	40
Çizelge 5.1.3	Üç boyutlu antiferromagnetik basit küp örgü sisteminde bilgisayar programı ile elde edilen H_k ve T_N kritik parametreleri	42
Şekil 5.2.1	Farklı A ve B altörgülerinden oluşmuş BAF hacim merkezli küp örgü	44
Çizelge 5.2.1	Üç boyutlu antiferromagnetik hacim merkezli küpün şekillenim olasılıkları	45

- Çizelge 5.2.2 Üç boyutlu antiferromagnetik hacim merkezli küp için H_f , H_{et} , f 'nin özdeğerleri ve M kuantum sayısı 48
- Çizelge 5.2.3 NA_+ , NA_- , NB_+ ve NB_- üç boyutlu hacim merkezli küp örgünün f_i şekillenimlerindeki + ve - spinlerde bulunma sayıları 49
- Çizelge 5.2.4 Üç boyutlu antiferromagnetik hacim merkezli küp örgü sistemi için değişik yaklaşımlar ile $H=:$ da bulunan kritik sıcaklık değerleri 50
- Çizelge 5.2.5 Üç boyutlu antiferromagnetik hacim merkezli küp örgü sisteminde bilgisayar programı ile elde edilen H_k ve T_N kritik parametreleri 52

1.1 GİRİŞ

Kristaller düzenli yapılardır. Her bir düzen durumu (Basit küp, hacim merkezli küp, yüz merkezli küp v.b) için "düzen derecesi" η 'yı nicel bir karakteristik olarak tanımlayabiliriz (1). η sıfır ise, kristal düzensiz fazdadır. Yani sistem dengededir. Kristalde η 'nın sıfırdan farklı pozitif ve negatif değerler alması sistemin sıcaklığına bağlıdır. Kristalin sıcaklığı artırıldığında η sıfır; yani kristal düzenli halden düzensiz hale geçtiği (Örneğin, basit küpten hacim merkezli küpe) durumda, bazı termodinamik nicelikler süreksizlik gösteriyor ise, bu bir faz geçiştir.

Faz değişimleri genelde Gibbs'in serbest enerjisi G 'nin türevlerinin mertebesi ile sınıflandırılırlar (2). Bu türevlerde bazı termodinamik nicelikler süreksizlik gösterirler. Gibbs'in serbest enerjisi G ,

$$G = E + PV - TS \quad (1.1)$$

Burada E iç enerjiyi, P basıncı, V hacmi, T sıcaklığı ve S ise sistemin entropisini gösterir. Bu fonksiyonun diferansiyeli,

$$dG = V dP - S dT \quad (1.2)$$

olup, birinci ve ikinci mertebeden türevleri:

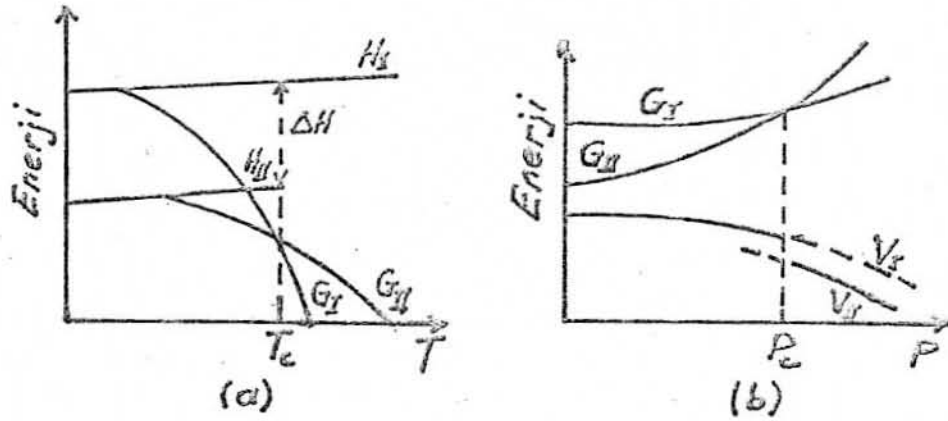
$$\left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_T = V \quad , \quad \left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_P = -S \quad (1.3)$$

$$\left(\frac{\partial^2 G}{\partial P^2}\right)_T = -\beta V \quad , \quad \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_P = -\frac{C_p}{T} \quad (1.4)$$

Burada β , sıkışabilirlik katsayısını ve C_p de ısı kapasitesini göstermektedir.

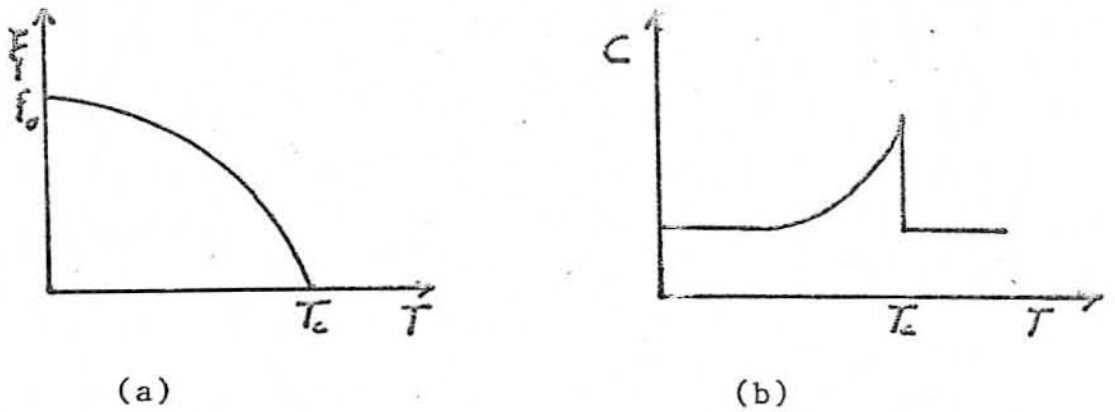
Denklem (1.3)'deki nicelikler birinci mertebeden ve denklem (1.4)'deki nicelikler ise, ikinci mertebeden faz geçiş noktalarında süreksizlik gösterirler. Üçüncü ve daha yüksek mertebeden dönüşümler daha büyük diferansiyel eşitlikleri içerirler. Bunlar konumuz dışında kalmaktadır.

Entropi (S) ve hacimdeki (V) değişim süreksizliğini içeren birinci mertebeden faz geçişleri sırası ile Şekil 1.1 a ve 1.1 b'de grafiksel olarak verilmiştir.



Şekil 1.1: Entalpi (H) ve serbest enerjinin (G) birinci mertebeden faz geçişinde (a) sıcaklık ve (b) basınç ile değişimi.

İkinci mertebeden faz geçişini gösteren grafik ise, Şekil 1.2'de verilmiştir.



Şekil 1.2: (b) ısı kapasitesi ve (a) düzen parametresinin ikinci mertebeden faz geçişindeki değişimi.

İkinci mertebeden faz geçişini en iyi temsil eden grafik "düzen parametresi"nin sıcaklık ile değişimi olanıdır.

Bu çalışmada, farklı A ve B atomlarından oluşan ve Hamiltonyeni H,

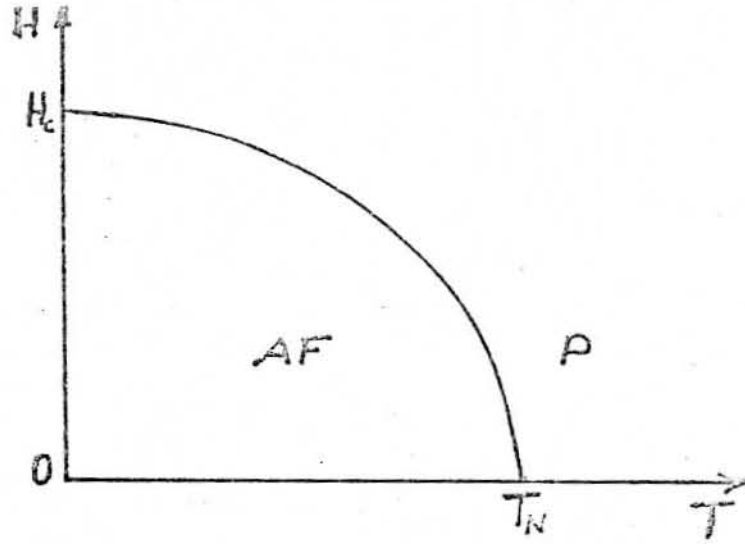
$$H = - J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - \mu H \sum_i S_i - \mu H_{st} \sum_i \eta_i S_i \quad (1.5)$$

verilen ve $J < 0$ koşulu ile iki ve üç boyutlu basit antiferromagnetik sistemler incelendi. Denklem (1.5)'de J, etkileşme parametresi; $\sum_{\langle i,j \rangle}$, en yakın komşu çiftleri üzerinden toplamı; S, spin vektör operatörü; μ , spin başına magnetik moment; H, uygulanan dış alanı; H_{st} , Stagered alanı ve η ise, sistemi oluşturan A atomu için $\eta = + 1$ iken, B atomu için $\eta = - 1$ değerlerini alan bir parametredir. H_{st} stagered alanı antiferromagnetik sistemleri incelemekte önemli bir parametredir. Bu alan hayali bir alan olup, laboratuvarında elde edilemez (3).

Basit antiferromagnetik sistemlerde, antiferromagnetik fazdan paramagnetik faza geçiş, ikinci mertebeden bir faz geçişidir. Bu geçiş belli bir sıcaklık değerinde olmaktadır. Bu geçiş sıcaklığına Neel Kritik Sıcaklığı (T_N) denir.

Şekil 1.3'de, "düzen parametresi"nin yerine geçen ve basit antiferromagnetik spin sistemine dışarıdan uygulanan magnetik alan (H)'nin sıcaklık ile değişimini veren faz diyagramı görülmektedir. Bu faz diyagramındaki Neel Kritik Sıcaklığı (T_N)'nin değeri, ferromagnetlerdeki dış alanın

(H) sıfır olduğu andaki geçiş sıcaklığı olan Curie noktasına benzerdir. Dış alanın sıfırdan farklı olduğu



Şekil 1.3: Basit antiferromagnetik Ising spin sistemlerinin H-T faz diyagramı.

basit antiferromagnetlerde ise, bu geçiş sıcaklığı giderek azalır, belli bir kritik H_k de durur ve sistem birinci mertebeden faza geçer.

İki ve üç boyutlu basit antiferromagnetik spin sistemlerinin H-T faz diyagramlarında gerek T_N noktasının, gerekse H-T eğrisinin çizimi, hem deneysel hem de kuramsal olarak çeşitli yaklaşım yöntemleri ile hesaplanmıştır (4,5). İki boyutlu ferromagnetik spin sisteminin kritik

sıcaklık değeri, kuramsal olarak kesin hesaplanırken (6) üç boyutlu ferromagnetik ve antiferromagnetik sistemlerde henüz kesin değer hesaplanamamıştır (7,8).

Bu çalışmada, sadece iki ve üç boyutlu basit antiferromagnetik Ising spin sistemleri incelendi. Yöntem olarak Geliştirilmiş Sabit Çiftlenim ve Kümesel Değişim Yaklaşımları kullanıldı. Örgü boyutu olarak, iki boyutta kare, üç boyutta ise basit küp (S.C) ve hacim merkezli küp (B.C.C) incelendi.

Seçilen modellerde en yakın komşu (AB) etkileşmeleri dikkate alındı. Çünkü yaklaşım problemlerinin iki önemli özelliği vardır. Bunlar; etkileşme türü ve örgü boyutudur. Bu çalışmada Çizelge 4.3, 5.1.1 ve 5.2.2'de U Boltzmann faktörlerinin kuvvet katsayıları ve M magnetik kuantum sayıları Kümesel Değişim yöntemi ile bulunmuştur.

Bu yaklaşımda, hesaplanan kritik sıcaklık değerleri ile $H^* - T^*$ faz diyagramları sırası ile, Çizelge 4.5, 5.1.2 ve 5.2.4 de ve Şekil 4.2 de verilmiştir. Gerek kritik sıcaklık değerleri gerekse, $H^* - T^*$ faz diyagramları literatürdeki diğer araştırmacıların (4,9,10) sonuçları ile uyum içindedir.

Bölüm 2'de Sabit Çiftlenim Yaklaşımının temel denklemini türetilmiş, Bölüm 3'de Tek Boyutlu Kümesel Değişim Yöntemi tanımlanmış. Bölüm 4'de Sabit Çiftlenim ve Kümesel Değişim Yaklaşımları farklı A ve B atomlarından oluşan iki boyutlu kareye, Bölüm 5'de ise, aynı yöntemler üç boyutlu basit küp ve içiçe girmiş iki basit küpten oluşmuş hacim merkezli basit antiferromagnetik Ising örgü sistemlerine uygulanmıştır.

2.1 Sabit Çiftlenim Yaklaşımı

Bu yaklaşım yüksek sıcaklıklarda ferromagnetizmayı ve antiferromagnetizmayı en basit şekilde anlatan bir yöntemdir (11). İlk defa Kasteleijn ve van Kranendonk (12) tarafından geliştirilmiştir. Daha sonraları Strieb (13), Fujishiro (14) ve Danielian (15) tarafından daha da geliştirilerek bugünkü kullanılır halini almıştır.

Yaklaşımın üstünlüğü, N tane spin problemini iki spin problemine indirgemesidir. Başka bir deyişle, bütün sistemin termodinamik özelliklerini iki parçacıklı (iki spinli) yoğunluk matrisi \mathcal{Y}_f ile tam olarak anlatmasıdır. Aslında \mathcal{Y}_f , iki parçacıklı altuzaylardan oluşmuş bütün sistemin yoğunluk matrisi \mathcal{Y} 'nin bir temsilidir.

Bu yöntemin temel kabülü, yüksek sıcaklık yaklaşımıdır. Bu kabüle göre denklem (2.13)'de $A_1=J$ ve $A_2=0$ 'dır. $A_1=J$ kabüllemesine rağmen, $T \rightarrow 0$ giderken A_1 sifıra gitmektedir. Bu da yöntemin termodinamiğin üçüncü yasası ile uyum içinde olduğunu göstermektedir. Halbuki kümesel yaklaşım yöntemleri (Kümesel Değişim Yöntemi, Bethe-Peierls Yaklaşımı) $T \rightarrow 0$ giderken termodinamiğin üçüncü yasasını yıkmaktadırlar (13). Söz konusu üstünlüklerinden dolayı bu çalışmada, Geliştirilmiş Sabit Çiftlenim Yaklaşımı kullanılmıştır.

Bu yaklaşımda, en yakın komşu etkileşmesini dikkate alarak basit antiferromagnetik spin sisteminin Hamiltonyeni iki parçacık operatörünün toplamı gibi yazılmaktadır (15).

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} S_{iz} S_{jz} - \mu H \sum_i S_{iz} \quad (2.1)$$

Burada J , çiftlenim sabitini; S_{iz} i . spininin spin vektör operatörünün z - bileşenini; $\sum_{\langle i, j \rangle}$, en yakın komşu çiftleri üzerinden toplamı; μ , spin başına magnetik momenti ve H ise, z - yönündeki dış magnetik alanı göstermektedir.

Sistemin termodinamik özellikleri Z bölüşüm fonksiyonu ile verileceğinden, N tane spin sistemi için bölüşüm fonksiyonu, denklem (2.1) yardımı ile,

$$Z = \text{Tr} \left[\exp(-\beta \mathcal{H}) \right] = \sum_n \exp(-\beta E_n) \quad (2.2)$$

olarak yazılır. Burada $\beta = 1/kT$ ve E_n , \mathcal{H} 'nin enerji düzeyleridir. Bu enerji düzeyleri S "long-range" parametresine bağlı olarak,

$$S = \frac{2m}{N} \quad (2.3)$$

yazılır. Burada m , $\sum_i S_{iz}$ 'nin özdeğerlerini; yani sistemdeki net magnetizasyonu gösterir. S , tam kuantum sayısı olduğundan, bölüşüm fonksiyonu Z ,

$$Z = \sum_s Z_s = \sum_{n'} \exp(-\beta E_{n'}) \quad (2.4)$$

ile verilir. Burada n' , S 'nin verilen değerlerine ait

düzeyleri göstermektedir. Her bir şekillenim için bölüşüm fonksiyonu Z_s bilindiğinden ortalama enerji $\bar{E}(\beta, S)$,

$$\bar{E}(\beta, S) = - \frac{\partial \ln Z_s}{\partial \beta} \quad (2.5)$$

dir. Burada $\bar{E}(\beta, S)$, β ile tanımlanan sıcaklıktaki bütün n' düzeyleri üzerinden denklem (2.1)'in ortalama enerjisidir. Denklem (2.5), sabit S için β üzerinden integre edilirse,

$$\ln Z_s(\beta) = - \int_0^\beta \bar{E}(\beta', S) d\beta' + \ln g(S) \quad (2.6)$$

olur. Burada $g(S)$ verilen S değerlerine ait düzeylerin sayısıdır. Aynı zamanda $\bar{E}(\beta, S)$, aynı n' düzeyleri üzerinden Hamiltonyen operatörü \mathcal{H} 'nin ortalama değeri $\overline{\mathcal{H}}$ 'ya da eşittir. Yani,

$$\bar{E}(\beta, S) = \overline{\mathcal{H}} = \frac{\text{Tr}'(\rho \mathcal{H})}{\text{Tr}'\rho} \quad (2.7)$$

Burada Tr' bütün n' düzeyleri üzerinden izi (Trace) ve ρ da topluluğun yoğunluk matris operatörünü gösterir. Daha açık olarak ρ ,

$$\rho = \frac{\exp(-\beta \mathcal{H})}{Z} \quad (2.8)$$

ile verilir. Bu yaklaşımda her bir şekillenimin

Hamiltonyeni H_f ile tanımlanmakta ve toplam Hamiltonyen

$$\mathcal{H} = \sum_f H_f \quad (2.9)$$

ile verilmektedir. Burada H_f ise,

$$H_f = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_{iz} S_{jz} - \frac{\mu H}{q} \sum_i S_{iz} \quad (2.10)$$

yazılmaktadır. Burada \sum' , verilen kümenin spinleri üzerinden toplamı ve q ise temel kümedeki atom sayısıdır.

$\overline{\mathcal{H}}$ veya $\overline{E}(\beta, S)$, H_f 'nin terimleri cinsinden,

$$\overline{\mathcal{H}} = N \text{Tr} (\rho_f H_f) \quad (2.11)$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada ρ_f , bir kümenin düzeylerinin olasılık dağılımını anlatan yoğunluk matrisidir ve söz konusu kümenin dışındaki bütün topluluğun spinleri üzerinden toplama ile elde edilir. Bu yaklaşımda ρ_f ,

$$\rho_f = \frac{\exp(-\beta \cdot \mathcal{H}_{et})}{\text{Tr} [\exp(-\beta \mathcal{H}_{et})]} = \frac{\exp(-\beta \cdot \mathcal{H}_{et})}{Z_f} \quad (2.12)$$

dir. Burada \mathcal{H}_{et} , belirli örgü boyutundaki seçilen

kümenin etkin Hamiltonyenidir. Denklem (2.12)'den; spin sisteminin z-bileşeninin toplam enerjisi hareketin bir sabiti olacağından, \mathcal{H}_{et} ile $S_{iz} + S_{jz}$ toplamı birbirleri ile komüt etmektedirler (11). Bundan dolayı denklem (2.12) magnetik alana bağlı değildir. Aynı neden ile, \mathcal{H}_{et} de magnetik alandan bağımsız olacaktır. Böylece \mathcal{H}_{et} ,

$$\mathcal{H}_{et} = - A_1 (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) - A_2 S_{iz} S_{jz} - \beta \mu A_3 (S_{iz} + S_{jz}) \quad (2.13)$$

yazılmaktadır. Burada A_ν ($\nu = 1, 2, 3$) katsayıları β ve S ' nin fonksiyonlarıdır. A_3 ise, bir moleküler olan karakterine sahiptir.

Geliştirilmiş Sabit Çiftlenim Yaklaşımında (15), $A_1 = J$ ve $A_2 = 0$ (Yüksek sıcaklık yaklaşımı) alınarak \mathcal{H}_{et} ,

$$\mathcal{H}_{et} = - J \sum_{\langle i, j \rangle} S_{iz} S_{jz} - A \sum_i S_{iz} \quad (2.14)$$

ile verilmektedir. Burada J , etkin çiftlenim sabiti yerine geçmektedir. A ise, β ve S 'lerin fonksiyonudur ve sistemin iç alanını gösterir.

Denklem (2.6) değişik bir şekilde

$$\ln Z_s = -\beta \bar{E}(\beta, S) - N \sum f_n \ln f_n + N \left[\sum f_n \ln f_n \right]_{\beta=0} + \ln g(S) \quad (2.15)$$

yazılabilir. Denklem (2.15), sabit β değerinde S' e göre türevi alınır, denge durumunda,

$$\beta \cdot \left[\frac{M \cdot H}{q} - A \right] \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial S} + \frac{\partial X}{\partial S} + \frac{1}{N} \frac{\partial \ln g(S)}{\partial S} = 0 \quad (2.16)$$

denklemini elde edilir. Burada X ,

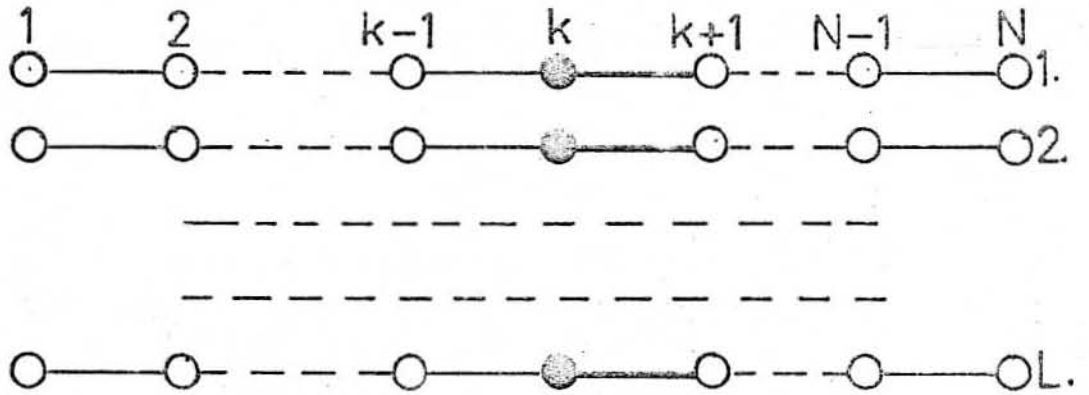
$$X = \left[\sum f_n \ln f_n \right]_{\beta=0} \quad \text{ve} \quad \mathcal{C}, \quad \mathcal{C} = \overline{\sum S_{iz}} \quad \text{dir.}$$

Eşitlik (2.16), Sabit Çiftlenim Yaklaşımının en temel denklemidir. Bu denklemde geçen son iki parametre, çalışmaya konu olan iki ve üç boyutlu basit antiferromagnetik Ising spin sistemleri için hesaplanmış ve yöntem gereği iç alan değişken olduğundan, bu değişkene göre temel denklemin türevi alınarak, denge koşulunu sağlayan kritik değerler hesaplanmıştır.

3.1 Tek Boyutlu Kümesel Değişim Yöntemi

Genel olarak Kümesel Değişim Yöntemini açıklamak için, tek boyutlu ferromagnetik Ising modelini örnek olarak vermek yeterli olacaktır (8). Ferromagnetik Ising modeli, sistemin spinlerinin aynı yönde olması ve spinler arası etkileşme enerjisinin pozitif olmasıdır.

Her biri N sayıda örgü noktasından meydana gelmiş sistem, bir topluluk oluşturur. L tane sistemden oluşmuş lineer örgü noktaları topluluğu, Şekil 3.1'de gösterilmiştir.



Şekil 3.1. L tane sistemden oluşan lineer örgü noktaları topluluğu.

Her sistemdeki k örgü noktaları siyah daireler ile ve $k - k + 1$ bağları ise koyu çizgilerle gösterilmiştir. $(+, +)$, $(+, -)$, $(-, +)$ ve $(-, -)$ spin bağlarının olma olasılığı sırası ile, y_1 , y_2 , y_3 ve y_4 gösterimleri ile Çizelge 3.1'de verilmiştir. Çizelge 3.1'deki $(+)$ ve $(-)$ spinler, x_1 ve x_2 olasılıklarına karşılık gelmektedir. $(+, +)$ ve $(-, -)$ bağlarında etkileşme enerjileri $-J$, $(+, -)$ veya $(-, +)$ bağlarının spinler arasındaki etkileşme enerjileri ise $+J$ olarak alınmıştır.

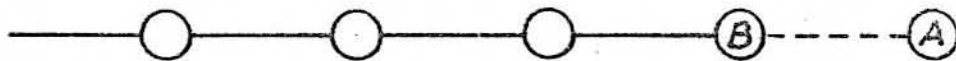
Çizelge 3.1 Spin ve bağlarının şekillenim olasılıkları.

Bağ	Olasılık	J	χ_i	Spin	Olasılık
$\oplus \text{---} \oplus$	y_1	-J	1	\oplus	$x_1 = y_1 + y_2$
$\oplus \text{---} \ominus$	y_2	+J	1	\ominus	$x_2 = y_3 + y_4$
$\ominus \text{---} \oplus$	y_3	+J	1		
$\ominus \text{---} \ominus$	y_4	-J	1		

3.1.1 Kendi İçinde Uyumlu (Self Consistency)

Denkleminin Türetilmesi

Şekil 3.1'de verilen lineer örgü noktaları topluluğunu elde etmek için, bu topluluğun Şekil 3.1.1'de verilen bir ara sistemi gözönüne alalım. Bu ara sistemde B-örgü noktasının sol tarafındaki bütün bağların oluştuğunu varsayıp, sisteme A-örgü noktasını ekleyelim. Problem, A-örgü noktasına yerleştirilecek spinin y_1 , y_2 , y_3 ve y_4 olasılıkları, verilen değerleri sağlamak üzere kaç şekilde konulabileceğidir.



Şekil 3.1.1 Lineer Ising örgü sistemini oluşturmak için alınan ara sistem.

B-örgü noktaları topluluğunda (+) spinlerin sayısı x_1L ve (-) spinlerin sayısı x_2L 'dir. x_1L örgü noktalarından rastgele y_1L 'yi seçelim, öyleki A-örgü noktasındaki spinler (+) olsun. Geriye kalan y_2L için A-örgü noktası üzerinde (-) spinler bulunsun. Bu seçim sonucunda y_1L bağları (+, +) şekillenimine ve y_2L bağları (+, -) şekillenimine sahiptir. Bu işlemi yapma olasılığını g_1 ile gösterirsek,

$$g_1 = \frac{(x_1L)!}{(y_1L)!(y_2L)!} \quad (3.1.1)$$

dir. B-örgü noktasında geriye kalan x_2L örgü noktalarından rastgele y_3L 'yi seçelim; öyle ki B-örgü noktasındaki spin (-) olsun. Bu rastgele seçim sonucunda y_3L bağı (-,+) şekillenimine ve y_4L bağı (-,-) şekillenimine sahip olur. Bu işlemi yapma olasılığını g_2 ile gösterirsek,

$$g_2 = \frac{(x_2L)!}{(y_3L)!(y_4L)!} \quad (3.1.2)$$

olur. A-örgü noktası üzerine bir spini yerleştirmek için toplam olasılık w_L , g_1 ve g_2 'nin çarpımıdır. Yani w_L ,

$$w_L = \frac{(x_1L)!(x_2L)!}{(y_1L)!(y_2L)!(y_3L)!(y_4L)!} \quad (3.1.3)$$

olur. Bütün L-sistem topluluğu için aynı işlem N kere tetrarlandığında $(w_L)^N$ bulunur. Burada w_L 'ye girilebilir durum sayısı denir ve onun e - tabanına göre logaritmasının k - Boltzmann faktörü ile çarpımı entropiyi verir:

$$S = k \ln (w_L)^N \quad (3.1.4)$$

Stirling yaklaşımı kullanılarak S,

$$S = kN \left[\sum_{i=1}^2 (x_i \ln x_i - x_i) - \sum_{i=1}^2 y_i (y_i \ln y_i - y_i) \right] \quad (3.1.5)$$

yazılır. Sistemin toplam enerjisi E,

$$E = w_c N \sum_{i=1}^4 J(-y_1 + y_2 + y_3 - y_4) \quad (3.1.6)$$

dir. Burada w_c sistemde en yakın komşu sayısıdır. Entropi ve enerji denklemlerinden sistemin serbest enerjisi

$F = E - TS$ 'dir. Birim örgü başına serbest enerji Φ :

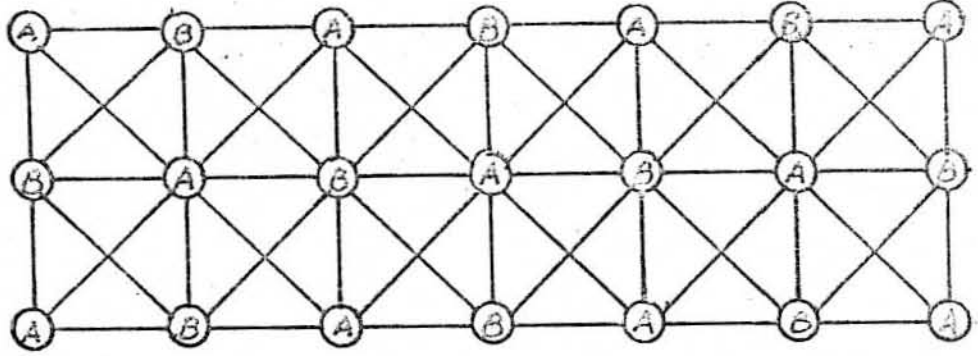
$$\begin{aligned} \Phi = \sum_{i=1}^4 \gamma_i J_i y_i - kT \left[\sum_{i=1}^2 (x_i \ln x_i - x_i) - \sum_{i=1}^2 \gamma_i (y_i \ln y_i - y_i) \right] \\ + \lambda (1 - \sum_{i=1}^4 \gamma_i y_i) \end{aligned} \quad (3.1.7)$$

bulunur. Burada γ_i aynı olasılığa sahip farklı şekilleri göstermektedir. λ Lagrange çarpanıdır ve $\beta = 1/kT$ 'dir. Φ 'nin y_i değişkenlerine göre türevi alınıp sıfıra eşitlenirse, Kendi İçinde Uyumlu 4 denklem elde edilir.

$$\begin{aligned} y_1 &= \exp(\beta J) \exp(\beta \lambda) x_1 \\ y_2 &= \exp(\beta J) \exp(\beta \lambda) x_1^{1/2} x_2^{1/2} \\ y_3 &= \exp(\beta J) \exp(\beta \lambda) x_1^{1/2} x_2^{1/2} \\ y_4 &= \exp(\beta J) \exp(\beta \lambda) x_2 \end{aligned} \quad (3.1.8)$$

4.1 İki Boyutlu Antiferromagnetik Kare Örgü

Sabit Çiftlenim Yaklaşımı Şekil 3.1'de verilen farklı A ve B atomlarından oluşan iki boyutlu antiferromagnetik Ising kare örgü sistemine uygulandı. Bu modelde kare, temel küme olup, altkümeleri A, B spinleri, (AB), (AA), (BB) çiftleri, (ABB) ve (BAA) üçgenleridir.



Şekil 4.1 İki boyutlu kare örgü

Bu örgü sisteminde etkileşme yalnız (AB) en yakın komşuları arasında dikkate alınıp, diğer etkileşmeler sıfır kabul edildi.

Antiferromagnetik karenin şekillenim olasılıkları Çizelge 4.1 de verilmiştir. Karenin dört köşesi bulunduğu ve her köşe iki olasılığa sahip olduğundan, mümkün olan şekillenim sayısı 2^4 olup, simetriden dolayı çizelgede yalnız 9 tane şekillenim f_i ($i= 1,2,3,\dots,9$) değişkenleri görülmektedir.

Çizelge 4.1 İki boyutlu antiferromagnetik karenin şekillenim olasılıkları.

KARE	OLASILIK	γ^*
	f_1	1
	f_2	2
	f_3	2
	f_4	4
	f_5	1
	f_6	1
	f_7	2
	f_8	2
	f_9	1

γ^* Aynı olasılığa sahip farklı şekillenim sayısı

Sabit Çiftlenim Yaklaşımının temel denklemindeki Boltzmann faktörleri ve magnetizasyon bu model için Kümesel Değişim Yöntemi yardımı ile hesaplanmıştır. Kümesel Değişim Yönteminde iki boyutlu antiferromagnetik Ising karenin A ve B spinlerinin (+) ve (-) olmak üzere iki, (AB) çiftinin de (+ +), (+ -), (- +) ve (- -) olmak üzere dört şekillenimi vardır (Çizelge 4.2).

Çizelge 4.2 Çiftlenim ve spinlerin şekillenim olasılıkları ve aralarındaki bağıntılar.

Çift	Olasılık y_i	J	Spin	Olasılık
$A \oplus \text{---} \oplus B$	y_1	1 -J	A(+)	$x_{1A} = y_1 + y_2$
$A \oplus \text{---} \ominus B$	y_2	1 +J	A(-)	$x_{2A} = y_3 + y_4$
$A \ominus \text{---} \oplus B$	y_3	1 +J	B(+)	$x_{1B} = y_1 + y_3$
$A \ominus \text{---} \ominus B$	y_4	1 -J	B(-)	$x_{2B} = y_2 + y_4$

Çizelge 4.2'deki J değerleri aynı yönlü spin çiftleri için negatif, zıt yönlüler için pozitif seçilmiştir. Çizelge 4.1 ve 4.2'den iki boyutlu antiferromagnetik Ising kare örgünün altkümeleri, temel kümelerinin çizgisel birleşimi olarak yazılabilir (16).

$$y_1 = f_1 + f_2 + f_3 + f_4$$

$$y_2 = f_3 + f_4 + f_6 + f_8 \quad (4.1 a)$$

$$y_3 = f_2 + f_4 + f_5 + f_7$$

$$y_4 = f_4 + f_8 + f_7 + f_9$$

$$\begin{aligned}
X_{1A} &= y_1 + y_2 = f_1 + f_2 + 2f_3 + 2f_4 + f_6 + f_8 \\
X_{2A} &= y_3 + y_4 = f_2 + 2f_4 + f_5 + 2f_7 + f_8 + f_9 \\
X_{1B} &= y_1 + y_3 = f_1 + 2f_2 + f_3 + 2f_4 + f_5 + f_7 \\
X_{2B} &= y_2 + y_4 = f_3 + 2f_4 + f_6 + f_7 + 2f_8 + f_9
\end{aligned} \tag{4.1 b}$$

Alt ve temel kümelerin

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^9 \delta^* f_i &= 1, & \sum_{i=1}^4 y_i &= 1 \\
\sum_{i=1}^2 x_{iA} &= 1, & \sum_{i=1}^2 x_{iB} &= 1
\end{aligned} \tag{4.2}$$

normalizasyon koşulunu sağlaması gerekir.

Antiferromagnetik sistemlerde, antiferromagnetik fazdan paramagnetik faza geçiş, ferromagnetik sistemlerde olduğu gibi ikinci mertebeden bir geçiş olup, "Neel" sıcaklığı olarak bilinir. Bu noktada antiferromagnetik magnetizasyon m^- sıfır olur ve bu parametre "long-range" parametresi ile eşdeğerdir. Antiferromagnetik magnetizasyon m^- Kümesel Değişim Yönteminde temel kümenin altkümeleri olarak tanımlanan x_i ve f_i değişkenleri cinsinden,

$$m^- = (x_{1A} - X_{2A}) - (x_{1B} - X_{2B})$$

veya denklem (4.1)'den

$$m^- = (f_6 - f_5) + (f_3 - f_7) + (f_8 - f_2) \quad (4.3)$$

şeklinde yazılabilir (17).

İki boyutlu basit antiferromagnetik Ising karenin alt ve temel kümeleri cinsinden girilebilir durum sayısı w ,

$$w = \frac{(y_i)^4!}{(f_i)^2! (x_{iA})! (x_{iB})!} \quad (4.4)$$

şeklinde yazılabilir. Sistemin entropisi S , Stirling yaklaşımı kullanılarak,

$$S = kN \left[4 \sum_{i=1}^4 Lf(y_i) - \sum_{i=1}^2 Lf(x_{iA}) - \sum_{i=1}^2 Lf(x_{iB}) - 2 \sum_{i=1}^9 \gamma^* Lf(f_i) \right] \quad (4.5)$$

olur. Burada Lf sembolleri Stirling açılımlarına karşı gelmektedir. Sistemin toplam enerjisi E ,

$$E = 4N \sum_i^4 J_i y_i,$$

birim başına serbest enerjisi Φ ,

$$\Phi = F/N = E - TS \quad \text{olmak üzere}$$

$$\begin{aligned} &= 4 \sum_{i=1}^4 y_i J_i + kT \left[2 \sum_{i=1}^9 \gamma^* Lf(f_i) \right. \\ &\quad \left. - 4 \sum_{i=1}^4 Lf(y_i) + \sum_{i=1}^2 Lf(x_{iA}) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{i=1}^2 Lf(x_{iB}) \right] + \lambda \left(1 - \sum_{i=1}^9 \gamma^* f_i \right) \quad (4.6) \end{aligned}$$

bulunur.

Serbest enerjinin denge durumunda minimum olma koşulu ile, iki boyutlu basit antiferromagnetik Ising kare için Kendi İçinde Uyumlu 9 tane denklem elde edilir. Örneğin f_1 bağımsız değişkeni için f_1 ,

$$\frac{\delta \Phi}{\delta f_1} = 0$$

$$f_1 = \exp(-2\beta J) y_1^2 (x_{1A} x_{1B})^{-1/2} q \quad (4.7)$$

olur. Burada $\beta = 1/kT$ ve $q = \exp(-1/2 \beta J)$ 'dir.

Seçilen modelde, denklem (2.10)'da tanımlanan f_i bağımsız değişkeni için Hamiltonyen H_f 'nin özdeğerleri E_n , denklem (2.14)'de verilen her f_i bağımsız değişkeni için etkin Hamiltonyen H_{et} 'nin özdeğerleri e_n , denklem (2.12)'de her f_i bağımsız değişkeni için tanımlanan \mathcal{S}_f 'nin özdeğerleri f_n 'ler Çizelge 4.3'de ve magnetik kuantum sayısı M ise, Çizelge 4.4'de verilmiştir. Çizelge 4,3'deki Boltzmann faktörlerinin (U 'ların) kuvvetleri Kümesel Değişim Yönteminin Kendi İçinde Uyumlu denklemlerinden elde edilmiştir. Örneğin, denklem (4.7)'deki eksponansiyelli terimin kuvveti, Çizelge 4.3'ün birinci satırındaki Boltzmann faktörünün kuvvetidir.

Çizelge 4.3: İki boyutlu antiferromagnetik kare için H_f , H_{et} : ρ_f 'nin özdeğerleri ve M magnetik kuantum sayısı.

n	M	E_n	e_n	$Z_{\rho_f} f_n$	γ_i
1	0	$2J$	$2J$	U^2	1
2	1	$-C$	$-A$	V^{-1}	2
3	-1	C	A	V	2
4	0	0	0	0	4
5	2	$-2J-2C$	$-2J-2A$	UV^{-2}	1
6	-2	$-2J+2C$	$-2J+2A$	UV^{+2}	1
7	1	$-C$	$-A$	V^{-1}	2
8	-1	C	A	V	2
9	0	$2J$	$2J$	U^2	1

$$C = \frac{\mu H}{4}, \quad U = \bar{e}^{-\beta J}, \quad V = \bar{e}^{\beta A}$$

Çizelge 4:4 NA_+ , NA_- , NB_+ ve NB_- iki boyutlu
kare örgünün f_i şekillenimlerindeki
+ ve - spinlerde bulunma sayıları.

	f_1	f_2	f_3	f_4	f_5	f_6	f_7	f_8	f_9
NA_+	2	2	1	1	2	0	1	0	0
NA_-	0	0	1	1	0	2	1	2	2
$NA_+ - NA_-$	2	2	0	0	2	-2	0	-2	-2
NB_+	2	1	2	1	0	2	0	1	0
NB_-	0	1	0	1	2	0	2	1	2
$NB_+ - NB_-$	2	0	2	0	-2	2	-2	0	-2
$(NA_+ - NA_-) - (NB_+ - NB_-)$	0	2	-2	0	4	-4	2	-2	0
M	0	1	-1	0	2	-2	1	-1	0

İki boyutlu antiferromagnetik örgü sistemini oluşturan A atomlarından yönü yukarı olan spinlerin olma olasılığı P_1 , yönü aşağı olanların olma olasılığı P_2 ; B atomlarından yönü yukarı olan spinlerin olma olasılığı P_3 ve yönü aşağı olan spinlerin olma olasılığı P_4 değerleri denklem (2.3) de tanımlanan "long-range" parametresi S 'nin fonksiyonu olarak,

$$P_1 = \frac{1}{2} (1 + S_1)$$

$$P_2 = \frac{1}{2} (1 - S_1)$$

(4.8)

$$P_3 = \frac{1}{2} (1 + S_2)$$

$$P_4 = \frac{1}{2} (1 - S_2)$$

eşitlikleri ile verilir. Denklem (4.8) den görüldüğü gibi $P_1 + P_2 = 1$ ve $P_3 + P_4 = 1$ normalizasyon koşullarını sağlamaktadır. A ve B atomları için NP_1 , NP_2 , NP_3 ve NP_4 sayılarının verilen toplam N spine dağılımını veren girilebilir durum sayısı $g(S)$,

$$g(S) = \frac{N!}{(NP_1)! (NP_2)! (NP_3)! (NP_4)!} \quad (4.9)$$

şeklinde tanımlanır. Denklem (4.9) dan $\ln g(S)$ Stirling Yaklaşımı kullanılarak,

$$\ln(S) = -N \ln N + N - 2N (P_1 \ln P_1 + P_2 \ln P_2) \quad (4.10)$$

bulunur. Burada spin yönlerinin yukarı ve aşağı olma olasılıkları birbirine eşit olduğundan $P_1=P_3$ ve $P_2=P_4$ eşitlikleri kullanılmıştır.

"Neel" noktasında sıfır olan "long-range" parametresine eşdeğer olan σ (Bölüm 2 de tanımlanmıştır) f_i bağımsız değişkenleri cinsinden,

$$\sigma = \overline{\sum S_{iz}} = 2S = 2 \left[(f_6 - f_5) + (f_3 - f_4) + (f_8 - f_2) \right] \quad (4.11)$$

eşitliği ile verilir. Her bir şekillenim olasılığı f_i 'ler için Bölüm 2 de tanımlanan bölüşüm fonksiyonu Z_f , Çizelge 4.3' den,

$$Z_f = 2u^2 + u^{-2} (v^2 + v^{-2}) + 4(v + v^{-1}) \quad (4.12)$$

yazılıp, magnetizasyon $Z_f S$,

$$Z_f S = u^{-2} (v^2 - v^{-2}) + 2(v - v^{-1}) \quad (4.13)$$

şeklinde elde edilir. A ve B atomlarının spinlerinin yönünün yukarı ve aşağı olma olasılıkları $Z_f P_1$ ve $Z_f P_2$ değerleri,

$$Z_{fP_1} = U^2 + U^{-2}V^2 + 3V + V^{-1} \quad (4.14)$$

$$Z_{fP_2} = U^2 + U^{-2}V^{-2} + 3V^{-1} + V$$

şeklinde bulunur.

Çizelge 4.1 den f_i ($i = 1, 2, 3, \dots, 9$) bağımsız değişkenleri, P_i ($i = 1, 2$) ler cinsinden,

$$\begin{aligned} f_1 &= P_1^4 & f_4 &= P_1^2 P_2^2 & f_7 &= P_1 P_2^3 \\ f_2 &= P_1^3 P_2 & f_5 &= P_1^2 P_2^2 & f_8 &= P_1 P_2^3 \\ f_3 &= P_1^3 P_2 & f_6 &= P_1^2 P_2^2 & f_9 &= P_2^4 \end{aligned} \quad (4.15)$$

şeklinde yazılır. Bölüm 2 de

$$X = \left[\sum_{i=1}^{16} f_n \ln f_n \right]_{\beta} = 0 \quad (4.16)$$

eşitliği ile tanımlanan X değerleri denklem (4.15) kullanılarak,

$$X = 4 \left[P_1 \ln P_1 + P_2 \ln P_2 \right] \quad (4.17)$$

eşitliği bulunur. Verilen model için denklem (4.10) de bulunan $\ln g(S)$ ve denklem (4.17) de bulunan X değerlerinden temel denklem (2.16) nın son iki terimi,

$$\frac{\partial X}{\partial S} + \frac{1}{N} \frac{\partial \ln g(S)}{\partial S} = \ln \frac{P_1}{P_2} \quad (4.18)$$

olarak elde edilir. Çizelge 4.3, denklem (4.11) ve denklem (4.18) yardımı ile Sabit Çiftlenim Yaklaşımının temel denklemi, seçilen model için,

$$\frac{U^4 V^2 + 3U^2 V^3 + U^2 V + V^4}{U^4 V^2 + 3U^2 V + U^2 V^3 + 1} = Z^2 V^2 \quad (4.19)$$

olarak bulunur. Burada $Z = \exp(-\mu \beta H/4)$ olup, U ve V değerleri Çizelge 4.3 de tanımlanmıştır.

Bu yaklaşımda iç alan değişken kabul edildiğinden, denge durumunda denklem (4.19)'ün V 'ye göre türevi alınıp, sıfıra eşitlenirse,

$$2U^4 V + 9U^2 V^2 + U^2 + 4V^3 - 4U^4 V^3 Z^2 - 9U^2 V^2 Z^2 - 5U^2 V^4 Z^2 - 2VZ^2 = 0 \quad (4.20)$$

eşitliği bulunur. Denklem (4.20) uygulanan dış alan ile sıcaklık değişimini veren analitik bir denklemdir.

Yapılan literatür taramasında alan ile sıcaklık değişimi yapılan bilgisayar programları ile bulunmaktadır.

Denklem (4.20) üç limit durumu için incelendiğinde;

Durum 1: $H=0$ ve $A=0$ alındığında denklem (4.20),

$$U^4 + 2U^2 - 1 = 0 \quad (4.21)$$

şeklini alır. Bu denklemin kökleri sırası ile

$U^2 = -1 + \sqrt{2}$ ve $U^2 = -1 - \sqrt{2}$ olup, en büyük kök istenen kök olduğundan ve $U^2 = \exp(-2\beta J)$ olarak tanımlandığından, iki boyutlu antiferromagnetik Ising kare için Neel Kritik değeri T_N ,

$$\frac{k T_N}{J} = 2.269185 \quad (4.28)$$

olarak bulunur. Bu değer, Orsager (6)'ın iki boyutlu ferromagnetik Ising spin sistemi için bulduğu kesin değer ile aynıdır. İki boyutlu Ising sistemlerde Curie ve Neel kritik değerleri aynıdır (16). Çizelge 4,5 de ise, çeşitli yaklaşım yöntemleri ile $H = 0$ durumunda elde edilen T_N değerleri görülmektedir.

Çizelge 4.5 İki boyutlu antiferromagnetik kare örgü sistemi için değişik yaklaşımlar ile $H = 0$ da bulunan kritik sıcaklık değerleri.

YAKLAŞIM	Ortalama Alan	Bethe	Kikuchi	Pâde	Kesin Değer	Bu Çalışma
kT_N/J	4	2.88	2.43	2.27	2.27	2.27

Durum 2: $H = 0$ ve $A \neq 0$ limitinde durum 1 de bulunan β 'nın sayısal değeri kullanılarak denklem (4.20)

$$5V^4 - 8V^3 + 4V - 1 = 0 \quad (4.29)$$

şekline indirgenir. Bu denklemin kökleri sırası ile,

$$V_1 = V_2 = 1$$

$$V_3 = 0,289897$$

$$V_4 = -0,689897$$

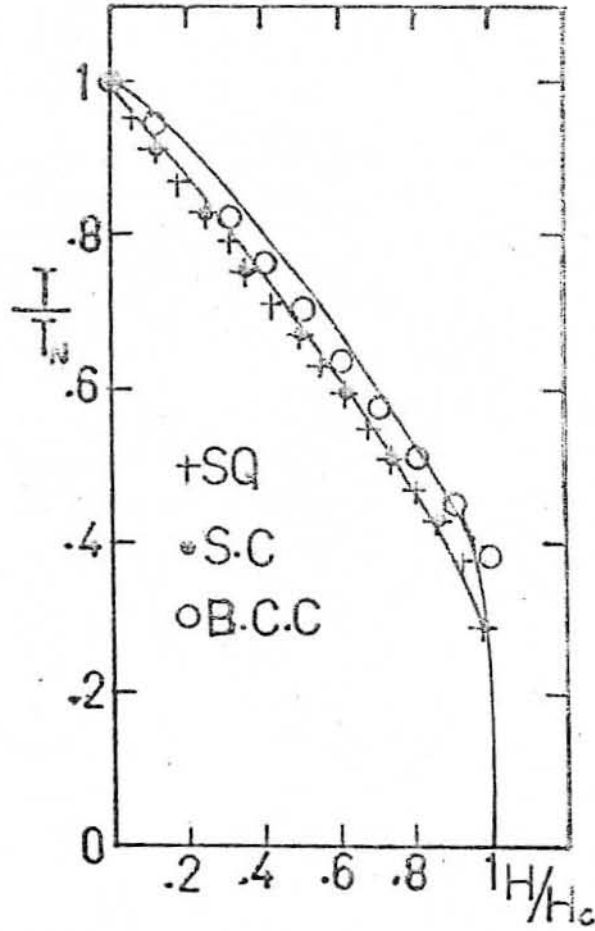
olup fiziksel kök V_3 değeridir. $V = \exp(-\beta A)$ olarak tanımlandığından, birim spin başına iç alan A değeri $A = 0.702443$ olarak bulunur. Bu değer temel küme olan kare için $A = 2.809773$ olup, 3. limit durumunda, bu çalışmada bilgisayar programı ile bulunan H değeri ve literatürde bulunan H değerleri uyum içerisindedir (17). Böylece iç alan A , analitik olarak bulunmuştur.

Durum 3: $H \neq 0$ ve $A \neq 0$ durumlarında denklem (4.20) de V yerine durum 2 de bulunan $V = 0.289897$ değeri alınarak, sisteme paralel olarak uygulanan çeşitli dış alan H değerleri için EK-A da verilen bilgisayar programı ile çözüldü. Denklem (4.20) 4. mertebeden bir denklem olduğundan, bilgisayar programı denklemini sıfır yapan 4 kök bulmaktadır. Aranılan kök en büyük olacağından eğrinin β eksenini kestiği ilk β değeri en büyük kök olmaktadır. Çünkü β sıcaklık ile ters orantılıdır.

Elde edilen sonuçlar Çizelge 4.6 de verilmiştir. Bu çizelgeden basit antiferromagnetik (BAF) sistemlerin özelliği olan $H = 0$ durumda T_N değerinin giderek azalması ve belli bir H_k değerinde kritik T_N nin var olmadığı gözlenmiştir. Bu ise ikinci mertebeden kritik değerlerden oluşan eğrinin birinci mertebeden faz eğrisine geçmiş olmasıdır (Bak. Şekil 4.2). Bu model için $H_k = 1.6$ değeri

Çizelge 4.6 İki boyutlu antiferromagnetik kare örgü sisteminde bilgisayar programı ile elde edilen H_k ve T_N kiritik parametreleri.

H	kT_N/J	$T^* = \frac{T}{T_N}$	$H^* = \frac{H}{H_c}$
0	2.269185	1	0
0.1	2.176548	0.95	0.06
0.2	2.084262	0.91	0.12
0.3	1.992337	0.87	0.18
0.4	1.900764	0.83	0.25
0.5	1.809545	0.79	0.31
0.6	1.718653	0.75	0.37
0.7	1.628038	0.71	0.43
0.8	1.537617	0.67	0.50
0.9	1.447238	0.63	0.56
1	1.356662	0.59	0.62
1.1	1.265475	0.55	0.68
1.2	1.172971	0.51	0.75
1.3	1.077832	0.47	0.81
1.4	0.977311	0.43	0.87
1.5	0.863955	0.38	0.93
1.6	0.678161	0.29	1



Şekil 4.2 Basit antiferromagnetik sistemlerin $H^* - T^*$ faz diyagramları.

Harbus (20) tarafından kuramsal olarak verilen

$\mu_{H_k} = q_z |J_z|$ eşitliğini sağlamaktadır. Burada $q_z = 2$ dir.

Alınan temel kümede iki çeşit atom bulunduğundan

$\mu_{H_k} = 4$ olup, bu çalışmada bulunan değer ise $\mu_{H_k} = 3.2$

dir. Literatürde yapılan taramada μ_{H_k} 'nin hiçbir zaman

4 olamayacağı ve 4'den daima küçük olacağı görülmek-

tedir (18). Böylece bulunan μ_{H_k} değeri beklenen bir

sonuç olup, durum 2 de spin başına bulunan $A = 0,702443$

bu model için $A = 2,809773$ olduğundan, bilgisayar yardımı

ile bulunan H_k değeri ile uyum içerisindedir. Ayrıca bu çalışmada elde edilen $T^* = \frac{T(H)}{T_N(0)}$ değerleri

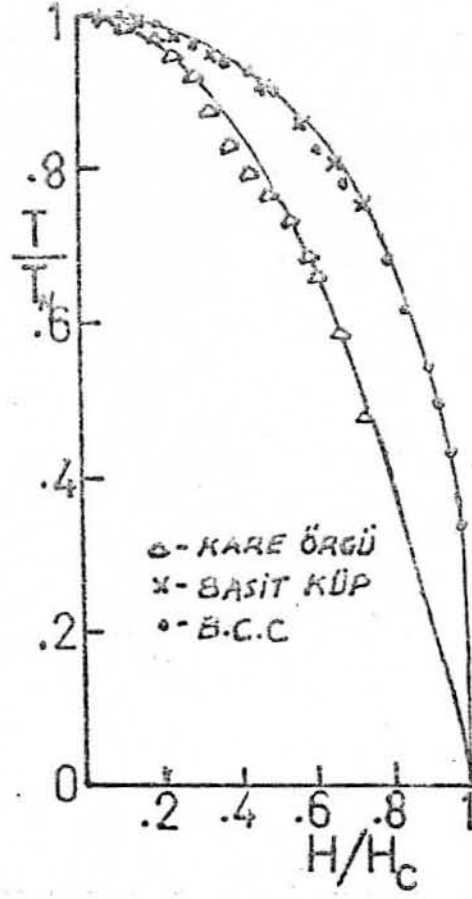
Bienenstock (4) tarafından kuramsal olarak ifade edilen

$$\frac{T(H)}{T_N(0)} = \left[1 - \left(\frac{H}{H_c} \right)^2 \right]^\xi \quad (\text{Burada } \xi \text{ sırası ile, iki boyutlu}$$

kare için $\xi = 0,87$; basit küp için $\xi = 0,35$ ve hacim küp için $\xi = 0,36$ dır) eşitliği ile de uyum içindedir. Bu çalışmada, en küçük T^* değeri $T^* = 0,29$ iken, Bienenstock'ta aynı değer $T^* = 0,48$ gibi daha büyüktür.

Şekil 4.2 de verilen $H^* - T^*$ (BAF) faz diyagramı birçok araştırmacının (3,4,9) çeşitli yaklaşım yöntemleri kullanarak bulduğu $H^* - T^*$ BAF faz diyagramları ile tamamen uyum içindedir. Bu çalışmanın diğer çalışmalardan farkı, BAF faz eğrisinin elde edilmesinde, $H=0$ durumunda $T_N = 2,269185$ kesin değer ile başlamasıdır. Diğer araştırmalarda ise, $H=0$ durumunda T_N yaklaşık değerdir.

Böylece $H=0$ durumunda, T_N kesin değer olduğundan, $H \neq 0$ durumlarında elde edilen kritik değerler literatürdeki değerlerden daha sağlıklıdır. Şekil 4.2 de bu çalışma için ve Şekil 4.3 de ise Bienenstock (4) tarafından aynı model için Pâde Yaklaşımı kullanılarak elde edilen BAF sistemlerinin $H^* - T^*$ faz diyagramları verilmiştir.



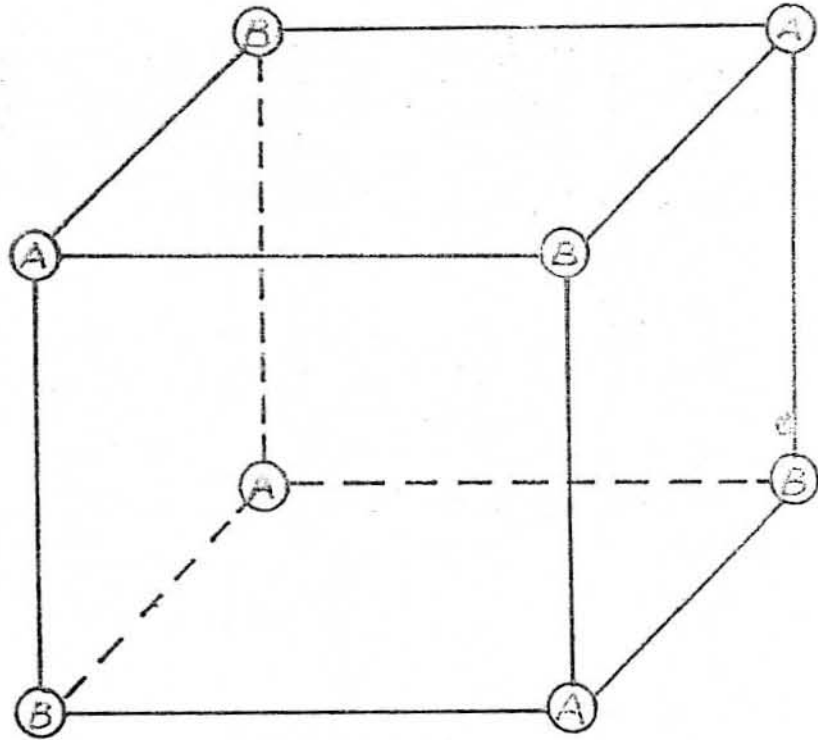
Şekil 4.3 Pâde yaklaşımı kullanılarak elde edilen basit antiferromagnetik sistemlerinin $H^* - T^*$ faz diyagramları.

5.1 Üç Boyutlu Basit Antiferromagnetik Modeller

Bu bölümde, üç boyutlu basit antiferromagnetik Ising spin sistemleri incelendi. Bunlar; basit küp (S.C) ve içiçe girmiş iki basit küpten oluşan hacim merkezli küp (B.C.C) örgü sistemleridir. Bu sistemlerdeki kritik değerlerin hesaplanmasında da Bölüm 3'deki yöntemler kullanıldı.

5.1.1 Antiferromagnetik Basit Küp

Basit küp örgüyü (Şekil 5.1.1) incelemek için temel küme olarak, Bölüm 3'de anlatılan iki boyutlu kare seçildi. Bölüm 3'deki bilgilerden yararlanılarak ve Çizelge 4.1 ve 4.4 kullanılarak, Çizelge 5.1.1 oluşturuldu.



Şekil 5.1.1 A ve B gibi iki farklı atomdan oluşmuş basit küp.

Çizelge 5.1.1'deki Boltzmann faktörlerinin kuvveti de yine Kümesel Değişim Yönteminin Kendi İçinde Uyumlu denklemlerinden elde edildi. Basit antiferromagnetik Ising küp örgü sisteminin ağırlık faktörü W ,

$$W = \frac{N^2 (y_i^{18})!}{(f_i)^6! (x_{iA})^7! (x_{iB})^7!} \quad (5.1.1)$$

dir. Sistemin toplam enerji ve entropisi

$$E = 6N \sum_{i=1}^4 y_i J_i \quad (5.1.2)$$

$$S = kN \left[18 \sum_{i=1}^4 Lf(y_i) - 6 \sum_{i=1}^9 \gamma^* Lf(f_i) - \left(7 \sum_{i=1}^2 Lf(x_{iA}) + \sum_{i=1}^2 Lf(x_{iB}) \right) \right] \quad (5.1.3)$$

olup, spin başına serbest enerjisi Φ :

$$\Phi = 6 \sum_{i=1}^4 y_i J_i + kT \left[6 \sum_{i=1}^9 \gamma^* Lf(f_i) - 18 \sum_{i=1}^4 Lf(y_i) + 7 \left(\sum_{i=1}^2 Lf(x_{iA}) + \sum_{i=1}^2 Lf(x_{iB}) \right) \right] + \lambda \left(1 - \sum_{i=1}^9 \gamma^* f_i \right) \quad (5.1.4)$$

bulunur.

Üç boyutlu basit antiferromagnetik Ising basit küp örgü sisteminin f_7 bağımsız değişkeni için Kendi İçinde Uyumlu denklemi,

$$\frac{\delta \Phi}{\delta f_7} = 0$$

$$f_7 = (y_3 y_4)^{3/2} (x_{1B} x_{2B})^{-7/12} x_{2A}^{-14/12} q \quad (5.1.5)$$

olur. Burada $q = \exp(-1/6 \beta \lambda)$ 'dir. Denklem (5.1.5)'de eksponansiyelli terimin kuvveti sıfırdır. Çizelge 5.1.1'deki yedinci satırın Boltzmann faktörünün kuvveti de Denklem (5.1.5) gereğince sıfır olarak bulunmuştur. Çünkü Boltzmann faktörlerinin kuvvetleri, sistemin denge durumunda elde edilen Kendi İçinde Uyumlu denklemlerinin eksponansiyelli terimin kuvvetlerine eşittir.

Çizelge 51.1 Üç boyutlu antiferromagnetik küp için H_f , H_{et} ve J_f 'nin özdeğerleri ve M magnetik kuantum sayısı.

n	M	E_n	e_n	$Z_f f_n$	χ_i
1	0	J	J	U	1
2	1	-C	-A	V^{-1}	2
3	-1	C	A	V	2
4	0	0	0	0	4
5	2	$-J - 2C$	$-J - 2A$	UV^{-2}	1
6	-2	$-J + 2C$	$-J + 2A$	UV^{+2}	1
7	1	-C	-A	V^{-1}	2
8	-1	C	A	V	2
9	0	J	J	U	1

$$C = \frac{4H}{4}, \quad U = e^{-\beta J}, \quad V = e^{-\beta A}$$

Çizelge 4.1 ve 5.1.1 kullanılarak basit küp için Sabit Çiftlenim Yaklaşımının temel denklemi,

$$\frac{U^2 V^2 + 3UV^3 + UV + V^4}{U^2 V^2 + 3UV + UV^3 + 1} = Z^2 V^2 \quad (5.1.6)$$

olarak bulundu. Sistemin denge durumunda, denklem (5.1.6) in V ye göre türevi

$$2U^2V + 9UV^2 + U + 4V^3 - 4U^2V^3Z^2 - 9UV^2Z^2 - 5UV^4Z^2 - 2VZ^2 = 0 \quad (5.1.7)$$

olur. Bu eşitlik de denklem (4.20) gibi analitik bir denklemdir. Denklem (5.1.7) üç limit durumu için incelendiğinde;

Durum 1: $H = 0$ ve $A = 0$ alındığında denklem (5.1.7),

$$U^2 + 2U - 1 = 0 \quad (5.1.8)$$

şeklini alır. Bu denklemin kökleri sırası ile,

$$U = -1 + \sqrt{2} \quad \text{ve} \quad U = -1 - \sqrt{2} \quad \text{olup, en büyük kök}$$

$$U = -1 + \sqrt{2} \quad \text{'dir. Bu kök Bölüm 3'de iki boyutlu basit}$$

antiferromagnetik kare için bulunan en büyük kök ile

aynıdır.. Faz geçişinde Boltzmann faktörü rol oynadığından,

seçilen modellerin boyutuna göre U'nun kuvvetleri

değişeceğinden, bu çalışmada, iki ve üç boyutlu modeller

için U'nun değeri aynı bulunmuştur. U'nun iki ve üç

boyutlu modeller için aynı olması, bu çalışmada bulunan

ilginç bir sonuçtur. Basit küp için U 'nun kuvveti 4 olacağından,

$$U^4 = -1 + \sqrt{2} \quad (5.1.9)$$

olur. $U = \exp(-\beta J)$ olduğundan basit küp için Neel kritik değeri T_N ,

$$\frac{kT_N}{J} = 4.538373 \quad (5.1.10)$$

olarak bulunur. Bu değer Çizelge 5.1.2'de verilen diğer yaklaşım yöntemlerinin sonuçları ile uyum içindedir.

Çizelge 5.1.2 Üç boyutlu antiferromagnetik basit küp örgü sistemi için değişik yaklaşımlar ile $H=0$ 'da bulunan kritik sıcaklık değerleri.

YAKLAŞIM	Ortalama Alan	Bethe	Kikuchi	Pâde	Bu Çalışma
kT_N/J	6	4.93	4.58	4.51	4.53

Üç boyutlu BAF Ising örgü sistemlerinde T_N kritik değeri kesin olarak bilinmediğinden, literatürde en iyi yaklaşım Pâde Yaklaşımı olduğundan, bu yöntem ile bulunan sonuç çizelgeden de görüldüğü gibi birbirine çok yakındır.

Durum 2: $H = 0$ ve $A \neq 0$ limitinde durum 1'de bulunan β 'nin sayısal değeri kullanılarak denklem (5.1.7),

$$5V^4 - 8V^3 + 4V - 1 = 0 \quad (5.1.11)$$

şekline indirgenir. Bu eşitlik denklem (4.29) ile aynıdır. Çünkü iki örgü sisteminde de temel küme olarak kare alınmıştır. Denklem (5.1.11)'in fiziksel kökü $V = 0,289897$ kullanılarak BAF Ising basit küp örgü için spin başına iç alan A değeri $A = 0,936592$ olarak bulunmuştur.

Durum 3: $H \neq 0$ ve $A \neq 0$ durumlarında denklem (5.1.7)'de V yerine durum 2'de bulunan $V=0,289897$ değeri alınarak, EK-A'da verilen bilgisayar programı yeniden düzenlenerek, iki boyutlu kare örgüde olduğu gibi, çeşitli dış alan H değerleri için denklem (5.1.7) çözüldü. Elde edilen sonuçlar Çizelge 5.1.3'de verilmiştir. Bu model için H_k kritik değeri spin başına $H_k = 0,8$ olarak bulunmuştur.

Çizelge 5.1.3 Üç boyutlu antiferromagnetik basit küp örgü sisteminde bilgisayar programı ile elde edilen H_k ve T_N kritik parametreleri.

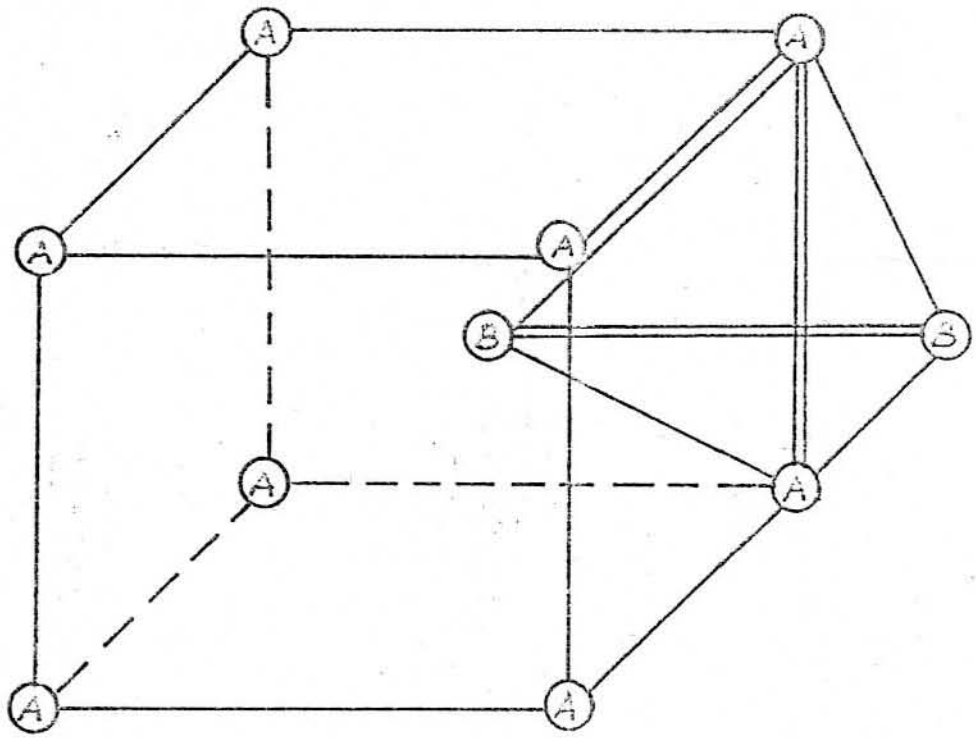
H	kT_N/J	T^*/T_N	H^*/H_c
0	4.538372	1	0
0.1	4.168524	0.91	0.12
0.2	3.801528	0.83	0.25
0.3	3.437304	0.75	0.37
0.4	3.075232	0.67	0.50
0.5	2.713320	0.59	0.62
0.6	2.345940	0.51	0.75
0.7	1.954620	0.43	0.87
0.8	1.356320	0.29	1

BAF Ising basit küp örgü için $H^* - T^*$ faz eğrisi de Şekil 3.2'de verilmiştir. Bu eğri Şekil 4.3'de verilen eğri ile tamamen uyum içindedir. Ancak bu çalışmada elde edilen $H^* - T^*$ diyagramı Şekil 4.3'e göre daha az doygundur.

Üç boyutlu BAF Ising örgü sistemlerinde $H = 0$ durumunda, T_N değeri kesin olarak bilinmediğinden, $H \neq 0$ durumlarında elde edilen kritik değerler hakkında bir yorum yapılamamaktadır. Ancak bu çalışmadaki en küçük T^* değeri, literatürdeki (3,4) en küçük T^* değerinden daha da küçüktür.

5.2.1 İki Basit Küpten Oluşmuş Antiferromagnetik Hacim Merkezli Örgü:

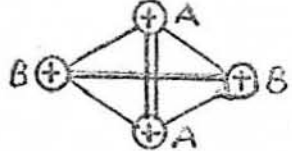
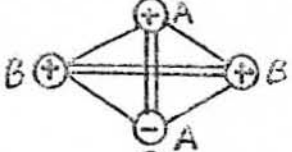
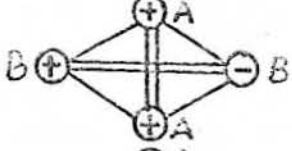
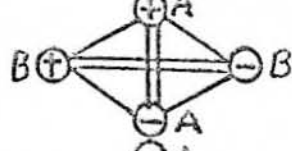
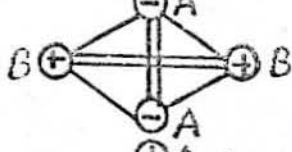
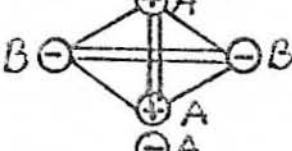
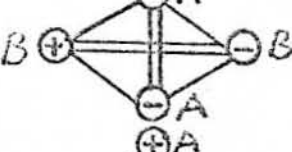
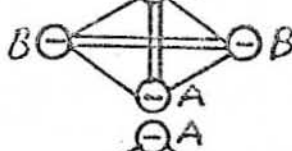
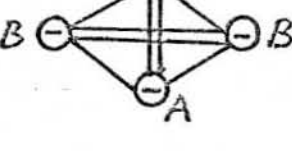
Şekil 5.2.1'de görüldüğü gibi iki basit küpün içiççe girmesinden oluşmuş Ising hacim merkezli antiferromagnetik küp (B.C.C) örgüyü incelemek için, temel küme olarak tetrahedron seçildi.



Şekil 5.2.1 Farklı A ve B altörgülerinden oluşmuş
BAF hacim merkezli küp (B.C.C) örgü.

Temel küme olarak seçilen tetrahedronun şekillenim
olasılıkları Çizelge 5.2.1'de görülmektedir.

Çizelge 5.2.1 Üç boyutlu antiferromagnetik hacim merkezli küpün şekillenim olasılıkları.

TETRAHEDRON	OLASILIK	γ^*
	f_1	1
	f_2	2
	f_3	1
	f_4	2
	f_5	4
	f_6	2
	f_7	1
	f_8	2
	f_9	1

γ^* Aynı olasılığa sahip farklı şekillenim sayısı

Çizelge 5.2.1'deki temel küme tetrahedronlarında tek çizgi ile bağlanmış (A B) çiftleri birinci en yakın ve iki çizgi ile bağlanmış (AA) ve (BB) çiftleri ise ikinci en yakın komşu etkileşmelerini göstermektedir. Bu çalışmada, birinci en yakın komşu etkileşmeleri dikkate alınmıştır.

Temel küme tetrahedronun mümkün şekillenim sayısı 2^4 olup, simetriden dolayı dokuz tane şekillenim f_i ($i = 1, 2, 3 \dots \dots \dots 9$) kalmaktadır.

Seçilen model için Bölüm 2'de tanımlanan her f_i bağımsız değişkeni için Hamiltonyen H_f 'nin özdeğerleri E_n , Hamiltonyen H_{et} 'nin özdeğerleri e_n , S_f 'nin özdeğerleri f_n 'ler Çizelge 5.2.2'de ve magnetik kuantum sayısı M değerleri ise, Çizelge 5.2.3'de verilmiştir. Çizelge 5.2.2'deki Boltzmann faktörlerinin kuvveti; ağırlık faktörü W,

$$W = \frac{N^{18} (x_{iA})! (x_{iB})!}{(f_i)^{12}! (y_i)^8!} \quad (5.2.1)$$

ve spin başına serbest enerjisi Φ ,

$$\begin{aligned} &= 8 \sum_{i=1}^4 y_i J_i - kT \left[\sum_{i=1}^2 Lf(x_{iA}) + \sum_{i=1}^2 Lf(x_{iB}) \right. \\ &\quad \left. - 8 \sum_{i=1}^4 Lf(y_i) - 12 \sum_{i=1}^9 \gamma Lf(f_i) \right] + \lambda \left(1 - \sum_{i=1}^9 \gamma f_i \right) \end{aligned} \quad (5.2.2)$$

ile verilen içiçe girmiş iki basit küpten oluşmuş hacim

merkezli küp örgü sisteminin denge durumundaki Kendi İçinde Uyumlu denklemlerinden elde edildi. Örneğin, f_3 bağımsız değişkeni için sistemin Kendi İçinde Uyumlu denklemi,

$$\frac{\delta \Phi}{\delta f_3} = 0$$

$$f_3 = \exp(-2/3 \beta J) y_2^{-2/3} (x_{1A} x_{2B})^{1/12} q \quad (5.2.3)$$

bulunur. Burada $q = \exp(-1/12 \beta \lambda)$ 'dır. Bu denklemin eksponansiyeli terimin kuvveti, Çizelge 5.2.2'deki üçüncü satırın Boltzmann faktörünün kuvvetine eşittir.

Çizelge 5.2.2 Üç boyutlu antiferromagnetik hacim merkezli küp için H_f , H_{et} ve \mathcal{J}_f 'nin özdeğerleri ve M magnetik kuantum sayısı.

n	M	E_n	e_n	$Z_f f_n$	γ_i
1	0	$2/3J$	$2/3J$	$U^{2/3}$	1
2	1	$-C$	$-A$	V^{-1}	2
3	2	$-2/3J-2C$	$-2/3J-2A$	$U^{-2/3}V^{-2}$	1
4	-1	C	A	V	2
5	0	0	0	0	4
6	1	$-C$	$-A$	V^{-1}	2
7	-2	$-2/3J+2C$	$-2/3J+2A$	$U^{-2/3}V^{+2}$	1
8	-1	C	A	V	2
9	0	$2/3J$	$2/3J$	$U^{2/3}$	1

$$C = \frac{\mu H}{4}, \quad U = e^{-\beta J}, \quad V = e^{-\beta A}$$

Çizelge 5.2.3 NA_+ , NA_- , NB_+ ve NB_- üç boyutlu hacim merkezli küp örgünün f_i şekillenimle-
rindeki + ve - spinlerde bulunma
sayıları.

	f_1	f_2	f_3	f_4	f_5	f_6	f_7	f_8	f_9
NA_+	2	2	2	1	1	1	0	0	0
NA_-	0	0	0	1	1	1	2	2	2
$NA_+ - NA_-$	2	2	2	0	0	0	-2	-2	-2
NB_+	2	1	0	2	1	0	2	1	0
NB_-	0	1	2	0	1	2	0	1	2
$NB_+ - NB_-$	2	0	-2	2	0	-2	2	0	-2
$(NA_+ - NA_-) - (NB_+ - NB_-)$	0	2	4	-2	0	2	-4	-2	0
M	0	1	2	-1	0	1	-2	-1	0

Çizelge 5.2.1 ve 5.2.2 kullanılarak hacim merkezli küp örgü için,

$$\frac{U^{4/3}V^2 + 3U^{2/3}V^3 + U^{2/3}V + V^4}{U^{4/3}V^2 + 3U^{2/3}V + U^{2/3}V^3 + 1} = Z^2V^2 \quad (5.2.4)$$

temel denklemi elde edildi. Denge durumunda eşitlik (5.2.4)'ün (V'ye göre türevi;

$$2U^{4/3}V + 9U^{2/3}V^2 + U^{2/3} + 4V^3 - 4U^{4/3}V^3Z^2 - 9U^{2/3}V^2Z^2 - 5U^{2/3}V^4Z^2 - 2VZ^2 = 0 \quad (5.2.5)$$

olur. Denklem (5.2.5) üç limit durumu için incelen-
diğinde;

Durum 1: $H = 0$ ve $A = 0$ alındığında
denklem (4.2.2),

$$U^{4/3} + 2U^{2/3} - 1 = 0 \quad (5.2.6)$$

olarak elde edilir.

Bu denklemin kökleri:

$$\begin{aligned} U^{2/3} &= -1 + \sqrt{2} \\ U^{2/3} &= -1 - \sqrt{2} \end{aligned} \quad (5.2.7)$$

olduğundan, en büyük kök $U^{2/3} = -1 + \sqrt{2}$ 'dir. $U = \exp(-\beta J)$
ile tanımlandığından, Neel kritik değeri T_N ,

$$\frac{k T_N}{J} = 6,051160 \quad (5.2.8)$$

bulunur. Bu kiritik deęer izelge 5.2.4'de verilen dięer yaklařım yntemlerinin sonularından Pde Yaklařımı sonucunun literatrde en iyi sonu olduęunu varsayarsak, bulunan sonu Pde'den de ok iyidir. nk u boyutta kesin deęer bilinmemektedir.

izelge 5.2.4 U boyutlu antiferromagnetik hacim merkezli kp (b.c.c) rg sistemi iin deęiřik yaklařımlar ile $H=0$ 'da bulunan kiritik sıcaklık deęerleri.

YAKLAřIM	Ortalama Alan	Bethe	Sabit iftlenim	Pde	Bu alıřma
kT_N/J	8	6.95	6.72	6.35	6.05

Durum 2: $H = 0$ ve $A \neq 0$ alındıęında durum 1 de bulunan β 'nin sayısal deęeri kullanılarak denklem (5.2.5),

$$5V^4 - 8V^3 + 4V - 1 = 0 \quad (5.2.9)$$

řekline indirgenir. Bu rg sisteminde spin bařına i alan A deęeri $A = 0,936592$ olarak bulunmuřtur. Bu deęer u boyutlu antiferromagnetik basit kpte bulunan deęer ile aynıdır. Bu da beklenen bir sonutur.

Durum 3: $H \neq 0$ ve $A \neq 0$ durumlarında denklem (5.2.5)'de V yerine denklem (5.2.9)'nın fiziksel çözümü alınarak (Bu değer tüm sistemlerde aynı ve $V = 0,289897$ 'dir), EK-A'da verilen bilgisayar programı yeniden düzenlenerek, üç boyutlu hacim merkezli küp (b.c.c) örgüde çeşitli dış alan H değerleri için denklem (5.2.5) çözüldü. Elde edilen sonuçlar Çizelge 5.2.5'de verilmiştir. Bu model için H_k kritik değeri $H_k = 0.5$ olarak bulunmuştur.

Çizelge 5.2.5 Üç boyutlu antiferromagnetik hacim merkezli küp örgü sisteminde bilgisayar programı ile elde edilen H_k ve T_N kritik parametreleri.

H	kT_N/J	T^*/T_N	H^*/H_c
0	6.051160	1	0
0.05	5.68096	0.93	0.1
0.15	4.94696	0.81	0.3
0.2	4.583072	0.75	0.4
0.25	4.220824	0.69	0.5
0.3	3.859296	0.63	0.6
0.35	3.496472	0.57	0.7
0.4	3.127920	0.51	0.8
0.45	2.742728	0.45	0.9
0.5	2.303880	0.38	1

Basit antiferromagnetik b.c.c örgü için $H^* - T^*$ faz diyagramı da Şekil 4.2'de verilmiştir. Bu diyagramla, aynı örgü için Bienenstock (4) tarafından elde edilen diyagram, tamamen uyum içindedir (Bak. Şekil 4.3).

6.1 Sonuç ve Tartışma

Bu çalışmada, Geliştirilmiş Sabit Çiftlenim ve Kümesel Değişim Yaklaşımları kullanılarak, basit anti-ferromagnetik iki boyutlu kare (S Q), üç boyutlu basit küp (S.C) ve içiçe girmiş iki basit küpten oluşmuş hacim merkezli küp (B.C.C) örgü sistemlerinin $H=0$ ve $H \neq 0$ değerlerinde $H^* - T^*$ faz diyagramları hesaplanmıştır.

İki boyutlu kare örgü sistemi için, temel küme olarak kare seçildi. Bu örgü sistemi için $H=0$ 'da elde edilen kritik Neel değeri T_N , Onsager (6)'ın $H=0$ 'da iki boyutlu ferromagnetik Ising spin sistemi için bulduğu kesin değer ile aynıdır.

$H \neq 0$ durumunda, iki boyutlu basit antiferromagnetik Ising karenin $H^* - T^*$ faz diyagramı elde edilmiştir. Faz diyagramını oluşturan kritik değerler Çizelge 4.6'da verilmiştir. $H = 0$ durumunda, diğer yaklaşım yöntemleri sonuçları ile uyum içindedir. Literatürde, kesin Neel kritik değerinden başlayarak, $H \neq 0$ durumunda, her kritik H_k değerlerine karşılık gelen T_N kritik değerleri bulunmadığından, bu çalışmada elde edilen ve Çizelge 4.6'da verilen değerleri karşılaştırma olanağımız olmamıştır.

Üç boyutlu antiferromagnetik Ising basit küp için temel küme olarak yine kare seçildi. Bu Ising sistemi için $H = 0$ 'da elde edilen kritik Neel değeri, literatürde en iyi bilinen Pâde Yaklaşımı sonucuna çok yakın bulundu. İki boyutlu Ising karede olduğu gibi, $H \neq 0$ durumunda

basit küp içinde $H^* - T^*$ faz diyagramı hesaplandı. Üç boyutlu BAF Ising örgü sistemlerinde, $H = 0$ durumunda T_N değeri kesin olarak bilinmediğinden, $H \neq 0$ durumlarında elde edilen kritik değerler hakkında bir yorum yapılamamaktadır.

Hacim merkezli küp (B.C.C) örgüde temel küme olarak, basit küpten farklı olarak tetrahedron seçildi. Basit antiferromagnetik Ising b.c.c örgü sisteminin $H = 0$ durumunda bulunan kritik Neel değeri ile, araştırmacıların aynı durumda elde ettikleri kritik Neel değerleri Çizelge 5.2.4'de verilmiştir. Üç boyutlu sistemlerde kesin kritik Neel değeri bilinmemekle birlikte, bu çalışmada hacim merkezli küp örgü sistemi için elde edilen kritik Neel değeri, literatürdeki değerlerden daha sağlıklıdır. $H \neq 0$ durumlarında elde edilen kritik değerler için, $H = 0$ durumunda kesin kritik Neel değeri bilinmediği için, literatürdeki aynı durumlar için karşılaştırma olanağımız yoktur.

Bu kuramsal çalışmanın pratikteki benzeri, akışkan sistemlerdir. Akışkanlarda, akışkanın hacmi (V) ve basıncı (P)'nin magnetik sistemlerdeki karşılığı sırası ile $V \longrightarrow -M$ (Magnetizasyon) ve $P \longrightarrow H$ (Dış magnetik alan) dır (18). Başka bir deyişle, akışkanın $P - T$ faz diyagramına, basit antiferromagnetik Ising sistemin $H - T$ faz diyagramı karşılık gelmektedir. $P - T$ faz diyagramında, akışkanın sıvı durumdan gaz durumuna geçişi, $H = 0$ durumundaki ferromagnetik sistemin, ferromagnetik durumdan

paramagnetik duruma geçmesine karşılık gelir. Aynı şekilde, P - T faz diyagramında sistemin katı fazdan sıvı faza geçmesi ise, H = 0 durumundaki basit antiferromagnetik Ising sistemin, antiferromagnetik fazdan paramagnetik faza geçmesine benzer (19).

Bu problemin uygulamadaki diğer önemli bir yeri alaşım problemleridir (6). Örneğin β -brasslı bakır (Cu) ve çinko (Zn) atomlarından oluşmuş bir hacim merkezli küp (b.c.c) örgüde, bakır atomunun söz konusu örgü sisteminin tam hacim merkezine yerleşerek düzenli bir yapı oluşturması, belli bir kritik sıcaklık değerinde olmaktadır. Alaşım probleminde bu kritik sıcaklık değerini hesaplamak önemli olduğundan, böyle kuramsal çalışmalar endüstride önem kazanmaktadır.

KAYNAKLAR :

- 1- Landau, L.D., and Lifshitz, E.M., 1969. Statistical Physics. Pergamon Press, Oxford.
- 2- Rao, C.N.R., and Rao, K.J., 1978. Phase Transitions in Solids McGraw-Hill, Inc., New York.
- 3- Harbus, F., and Stanley, H.E., 1973. High-Temperature-Series Study of Models Displaying Tricritical Behavior. I. Ferromagnetic Planes Coupled Antiferromagnetically. Phys. Rev. B, 8, 1141-1156
- 4- Bienenstock, A., 1966. Variation of the Critical Temperatures of Ising Antiferromagnets with Applied Magnetic Field. J. App. Phys., 37, 1459-1461
- 5- de Jongh, L. J., and Miedema, A.R., 1974. Experiments on Simple Magnetic Model Systems. Adv. in Phys., 23, 1-261
- 6- Huang, K., 1963. Statistical Mechanics. John Wiley and Sons, Inc., New York.
- 7- Kasteleijn, P.W., and van Kranendonk, J., 1956. Constant Coupling Approximation for Heisenberg Ferromagnetism. Physica, 22, 317-337
- 8- Kikuchi, R., 1950. A Theory of Cooperative Phenomena. Phys. Rev., 81, 988-1003

- 9- Burley, D.M., 1961. Critical Curves of An Antiferromagnetic on The Ising Model for Loose Packed Lattices. *Physica*, 27, 768-776
- 10- Kasteleyn, P.W., 1956. Constant Coupling Approximation for Ising Spin Systems. *Physica*, 22, 387-396
- 11- Wagner, D., 1972. Introduction to The Theory of Magnetism. Pergamon Press, New York.
- 12- Kasteleijn, P.W., and van Kranendonk, J., 1956. Constant Coupling Approximation for Antiferromagnetism. *Physica*, 22, 367-385
- 13- Strieb, B., and Callen, H., 1963. Cluster Expansion for the Heisenberg Ferromagnet. *Phys. Rev.*, 130, 1798-1808
- 14- Fujishiro, T., and Takano, F., 1964, Statistical Theory of Ferro-and Antiferromagnetism. *J. Phys. Soc. Japan*, 19, 1666-1677
- 15- Danielian, A., 1963. The Ordering of a Face-Centred Cubic Lattice. *Physica*, 29, 67-77
- 16- Ekmekçi, S., 1983. Kümesel Değişim Yöntemi ile İki Boyutlu Kare İçin Curie ve Neel Sıcaklıklarının Bulunması. *Doğa Bilim Dergisi*, A, 7, 3, 398-402
- 17- Meijer, P.H.E., and Ekmekçi, S., 1982. Phase Diagram of Simple Metamagnets. *Physica*, 113A, 351-366

- 18- Stanley, H.E., 1971. Phase Transitions and Critical Phenomena. Clarendon Press, Oxford.
- 19- Domb, C., and Green, M.S., 1972. Phase Transitions and Critical Phenomena. Academic Press, Inc., Vol. 2, London.

```

1 PRINT"□"
2 REM İKİ BOYUTLU ANTI FERROMAGNETİK İSİNG KARE İCİN HESAPLAMA PR.
3 REM"
4 REM" [ İNÖNÜ UNIVERSİTESİ
5 REM" [ FEN-EDEBİYAT FAKULTESİ
6 REM" [ FİZİK BÖLÜMÜ
7 REM" [
8 REM" [ MALATYA 1987
9 REM" [ HAMZA POLAT
10 REM" ]
11 REM"
12 REM "
13 REM" [ COMPUTER:COMMODORE 64
14 REM" [ PRINTER:MPS-802
15 REM" ]
19 CLR
20 TIME$="000000"
25 OPEN1,4:CMD1
30 H=0.0:Y=1:S=1:G=0.0:GOSUB500
40 PRINT"Y=1","H=";H,"B=";INT(P*1E8)/1E8
45 PRINT:PRINT
50 Y=0.289897
55 PRINT"Y=";Y:PRINT
57 PRINT" H B"
59 PRINT" _____"
60 FORH=.1TO5STEP.1
80 GOSUB500
85 PRINTH,INT(P*1E8)/1E8
90 NEXTH:END
500 FORB=6TO5STEPS
510 X=2*Y*(EXP(-4*B))+9*(Y↑2)*(EXP(-2*B))+EXP(-2*B)
520 W=4*(Y↑3)-4*(Y↑3)*(EXP(-4*B-.5*B*H))-2*Y*(EXP(-.5*B*H))
530 Q=-9*(Y↑2)*(EXP(-2*B-.5*B*H))-5*(Y↑4)*(EXP(-2*B-.5*B*H))
540 A=X+W+Q
542 IFH>0THEN550
544 IFA>0THEN590
546 GOT0560
550 IFA<0THEN590
560 P=B
570 NEXTB
580 PRINTH," COZUM YOK"
585 PRINT:PRINT:PRINT" PROGRAM ÇALIŞMA ZAMANI:";
586 PRINTLEFT$(TIME$,2);": ";MID$(TIME$,3,2);": ";RIGHT$(TIME$,2)
587 END: PROGRAM SONU
590 S=S/10:G=P
600 IFS<1E-3THEN700
610 GOT0500
700 S=1:RETURN
READY.

```

0	-4
1	1.42202759
0	-4
.1	-2.61556311
.2	-1.57593611
.3	-.797634967
.4	-.201108893
.5	.257811669
.4	-.201108893
.41	-.149686703
.42	-.0995900463
.43	-.0507806242
.44	-3.22137214E-03
.45	.0431235842
.44	-3.22137214E-03
.441	1.46718323E-03
.44	-3.22137214E-03
.4401	-2.75197253E-03
.4402	-2.26269398E-03
.4403	-1.81353465E-03
.4404	-1.34449638E-03
.4405	-8.75581056E-04
.4406	-4.06786799E-04
.4407	6.18882477E-05
.4408	-4.06786799E-04
.44061	-3.59915197E-04
.44062	-3.13043594E-04
.44063	-2.66171992E-04
.44064	-2.19302252E-04
.44065	-1.72436237E-04
.440659999	-1.25570223E-04
.440669999	-7.87042031E-05
.440679999	-3.18381935E-05
.440689999	1.50222331E-05
.440679999	-3.18381935E-05
.440680999	-2.71517784E-05
.440681999	-2.24653631E-05
.440682999	-1.77808106E-05
.440683999	-1.30943954E-05
.440684999	-8.40611756E-06
.440685999	-3.71970236E-06
.440686999	9.66712333E-07
.440688999	-3.71970236E-06
.440686039	-3.25217843E-06
.440686199	-2.78279185E-06
.440686299	-2.31340526E-06
.440686399	-1.84774339E-06
.440686499	-1.37849477E-06
.440686599	-9.10833478E-07
.440686699	-4.39584255E-07
.440686799	2.79396772E-08
.440686699	-4.39584255E-07
.440686709	-3.94880772E-07
.440686719	-3.46451998E-07
.44068673	-2.99885865E-07
.44068674	-2.5331874E-07

.44068675
.44068676
.44068677
.44068678
.44068679
.4406868

-2.04890966E-07
-1.60187483E-07
-1.09896064E-07
-6.51925802E-08
-1.86264515E-08
2.79396772E-08

62

H= 0

B= .44068679

READY.

CA

0	.964686165
1	-.247018145
0	.964686165
.1	.650054318
.2	.415150249
.3	.238289896
.4	.104128747
.5	1.71512843E-03
.6	-.0768409001
.5	1.71512843E-03
.51	-7.10493967E-03
.5	1.71512843E-03
.500999	8.22573668E-04
.501999	-6.76198397E-05
.500999	8.22573668E-04
.501099	7.33448076E-04
.5012	6.44345884E-04
.5013	5.55267674E-04
.5014	4.6621298E-04
.5015	3.77181568E-04
.5016	2.88174139E-04
.5017	1.99190108E-04
.5018	1.10229594E-04
.5019	2.1292828E-05
.502	-6.76206548E-05
.5019	2.1292828E-05
.50181	1.24003273E-05
.50182	3.50817572E-06
.50183	-5.38385936E-06
.50182	3.50817572E-06
.501821	2.61887908E-06
.501822	1.72969885E-06
.501823	8.40518624E-07
.501824	-4.86816045E-08

H= .3

B= .501923001

READY.