

99

T.C.
İNÖNÜ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI

GREEN FONKSİYONU YÖNTEMİ İLE KRİTİK
SICAKLIK TAYİNİ

(YÜKSEK LİSANS TEZİ)
YAKUP BALCI

MALATYA-1987

ÖNSÖZ

Bu çalışmayı bana vererek çalışmalarım süresince yakın ilgi ve yardımlarını esirgemeyen Sayın Hocam Doç.Dr. Servet Ekmekçi'ye teşekkür ve şükranlarımı sunmayı bir borç bilirim.

Yakup Balcı

1987

ÖZET

Ferromanyetik bir cismin paramanyetik bir faza geiş noktası "Curie sıcaklığı" olarak bilinir. Bu kritik sıcaklık ikinci mertebeden bir geiş noktası olup çeşitli yaklaşık yöntemler ile bulunmuştur.

Bu çalışmada Curie sıcaklığı T_c Green fonksiyonu yöntemi ile iki boyutta kare için hesaplanmıştır.

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
1. GİRİŞ.....	1
1.1. Maddelerin Manyetik Özellikleri.....	1
1.2. Diamanyetizma ve Paramanyetizma.....	1
1.3. Ferromanyetizma.....	2
2. İSTATİSTİK MEKANİKDE GREEN FONKSİYONU YÖNTEMİ..	5
2.1. Çift Zamanlı Sıcaklığa Bağlı Green Fonksiyonları.....	5
2.2. Green Fonksiyonları İçin Hareket Denklemleri.....	8
2.3. İlerlemiş ve Gecikmiş Green Fonksiyonları İçin Spektral İfadeler.....	9
2.4. İlerlemiş ve Gecikmiş Green Fonksiyonları İçin Spektral İfadeler.....	10
3. GREEN FONKSİYONUNUN FERROMANYETİZMADA UYGULANMASI VE KRİTİK SICAKLIK TAYİNİ.....	13
4. SONUÇ VE TARTIŞMA.....	21
5. KAYNAKLAR.....	22

1. GİRİŞ

1.1. Maddelerin Manyetik Özellikleri

Manyetizma, elektronların spin ve yörüngesel momentlerinin düzgün bir şekilde dizilmelerinden doğmaktadır. Bu dizilişin bir dış manyetik alan içerisindeki farklılığından dolayı maddeler manyetik özelliklerine göre sınıflandırılabilirler.

Bir madde \vec{H} dış manyetik alanına konulduğunda madde içinde doğacak olan indüksiyon alanı \vec{B} ,

$$\vec{B} = \vec{H} + 4\pi\vec{M} = \vec{H}(1 + 4\pi X) \quad (1.1)$$

ile verilir. Burada \vec{M} maddenin manyetizasyonu ve X geçirgenlik katsayısı olup, maddenin karakteristik parametresidir. Onun işareti ve büyüklüğüne göre maddeler üç grupta sınıflandırılabilirler.

$X < 0$ diamanyetik, $X > 0$ paramanyetik ve $X = \infty$ ferromanyetik durumlara karşılık gelir [1].

1.2. Diamanyetizma ve Paramanyetizma

Diamanyetizma ve paramanyetizma birer atom özelliği olup, orbital elektronlarının indüklenmiş manyetik alanlarından oluşur, bu nedenle hemen hemen tüm maddeler diamanyetik özellik gösterirler. Öyleki, paramanyetik maddelerde bile diamanyetizma vardır. Bir yörüngede hareket etmekte olan elektron uygulanan alanla doğru orantılı bir manyetik moment gösterir. Manyetik moment yörünge

yarıçapının karesi ile orantılıdır ($\mu = \frac{e}{2} w_0^2 r^2$). Bu nedenle diamanyetik geçirgenlik de yörünge yarıçapı ile büyür. O halde yarıçapı büyük olan orbitallerdeki elektronların diamanyetizması küçük yarıçaplı orbitallerde bulunanlarınkine göre daha büyük olur.

Ferromanyetizmanın en önemli kaynağı elektron spinlerinden doğan manyetik momentlerdir. Orbital manyetik momenti ise, ancak yan rol oynar. n çiftleşmemiş elektronu bulunan bir taneciğin $\mu_m = \sqrt{n(n+2)} \mu_B$ bağıntısı ile verilen bir devamlı momenti vardır. Bu bağıntıda μ_B "Bohr Magnetonu"nu göstermektedir. ($\mu_B = \frac{eh}{2mc}$). Buna göre yalnız dolu tabakaları bulunan atom ve iyonların devamlı manyetik momentleri yoktur ve bunlar paramanyetik olamazlar. Bu nedenle asal gazlar veya bunlara benzeyen N_a^+ ve Cl^- gibi iyonlar diamanyetikdirler. Paramanyetik tanecikler topluluğunda bir alan bulunmadığında bu manyetik momentler termik hareketler nedeniyle gelişigüzel yönelmişlerdir. Bu nedenle net bir manyetik moment oluşturmazlar. Manyetik alan uygulandığında bir yönelme olur, fakat yönelme termik hareketler nedeniyle tam olmaz.

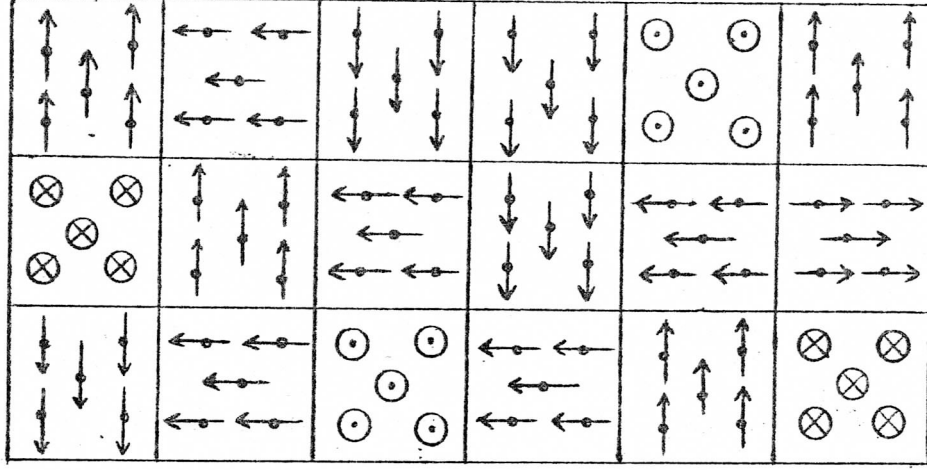
1.3. Ferromanyetizma

Paramanyetizma bir kristalde atom manyetik momentleri bir alan olmadığı zaman gelişigüzel yönelmişlerdir. Ferromıknatısal bir kristalde ise, atomlar manyetik momentleri dış alan bulunmadan da paralel bir şekilde dizilmişlerdir dolayısı ile geçirgenlik çok büyüktür. Bu paralel yönelme tüm kristalde aynı olmayıp, atom moment-

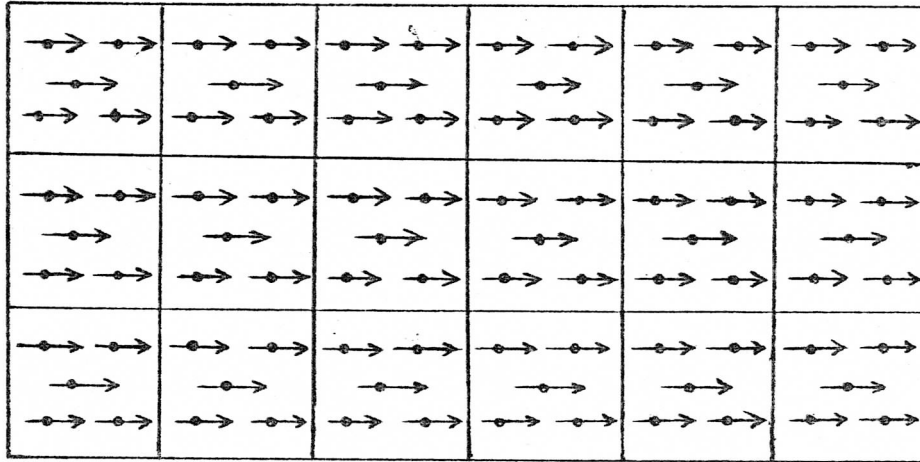
lerinin paralel yönelmiş olduğu bölgeler vardır. Bu bölgeler "Domen" olarak bilinir [2] ve küçük bir mıknatıs gibi davranıp yönelmeleri gelişigüze'dir. Bir mıknatısta belli yönde yönelmiş olan domenlerin sayısı diğer yönde yönelmiş olan domenlerin sayısından fazla olup, bir numunenin net manyetik momenti atom momentlerinin vektörel toplamıdır. Domen yönelmeleri uygulanan alanın bir fonksiyonu olup, bir numunede sıcaklığın artması ile termik hareket artar ve domenler içinde manyetik momentlerin paralelliği gittikçe azalır bunun sonucunda ferromanyetizma zayıflar ve "Curie Sıcaklığı" [2] denilen belli bir sıcaklıkta tamamen kaybolur. Bu sıcaklıkta manyetizasyon sıfırdır. Bu sıcaklığın üzerinde paramanyetik olur. Alanın artırılması ile belli bir yöne yönelmiş domenlerin sayısında arttığından geçirgenlik alanla değişir. Ferromanyetler, dış manyetik alanın mevcut olmadığı durumda bile kendiliğinden manyetik momente sahip olduğunu söylemiştik. İşte sıfır manyetik alanda manyetizasyona sahip olma özelliğine "Kendiliğinden Manyetizasyon" denir.

Ferromanyetik bir cismin paramanyetik bir faza geçiş noktası "Curie Sıcaklığı" olarak bilinen kritik değerde meydana geldiğini ifade etmiştik. Bu kritik sıcaklık ikinci mertebeden bir geçiş noktası olup, bu sıcaklığın üstünde sistem paramanyetik ve altında ferromanyetiktir. İkinci mertebeden geçiş noktası Curie sıcaklığı T_c çeşitli yaklaşık yöntemler ile bulunmuştur [3]. Bu çalışmada aynı nokta Green fonksiyonu yöntemi ile bulunacaktır.

Şekil-1 Ferromanyetik maddelerde domen yönelmelerini manyetik alanın varlığında ve yokluğunda göstermektedir [4].



(a)



(b)

Şekil-1 : (a) Manyetik alanın bulunmadığı durum
(b) Manyetik alanın bulunduğu durum

2. İSTATİSTİK MEKANİKTE GREEN FONKSİYONU YÖNTEMİ

Son zamanlarda istatistik mekanik modern kuantum alan teorisi yöntemlerinden çok etkilenmiştir. İstatistik mekanikteki sınırlı bir alan ile bir parçacığın etkileşmesi veya bir sistemdeki etkileşen alanlar gibi problemler örnek olarak gösterilebilir.

Ayrıca istatistik mekanikteki termodinamik niceliklerin termodinamik ortalamalarını bilmek istediğimiz birçok durumlar vardır. Bu ortalamaları kullanışlı bir şekilde veya tam olarak hesaplamak için çeşitli yöntemler geliştirilmiştir. Bu yöntemlerden biri özellikle manyetik teoride çok kullanışlı olan Green fonksiyonu yöntemidir. Bu yöntem ilk defa Bogolyubov ve Tyablikov[5] tarafından geliştirilmiştir. Doğrudan bu yöntemin uygulanmasına geçmeden önce Green fonksiyonunun bazı özelliklerini tanımlayalım.

Green fonksiyonu yöntemi değişken katsayıların hesaplanması, geçirgenlik, yarıiletkenler ve normal metallerdeki etkileşen elektronlar sistemi onun basit uygulamalarıdır.

2.1. Çift Zamanlı Sıcaklığa Bağlı Green Fonksiyonları

İstatistik mekanikteki Green fonksiyonları korelasyon fonksiyonları kavramlarının uygun genelleştirilmiş halidir[6]. Denklemler formüllendirilip çözüldüğü zaman çok büyük avantajlar sağlar ve sadece gözlenen nicelik-

lerin deęerleri ile iliřkilidirler.

İstatistik mekanikte, kuantum alan teorisindeki gibi farklı Green fonksiyonlarını gözönüne alabiliriz. Örneęin, operatörlerin T ile çarpımının ortalama deęeri cinsinden tanımlanan $G_c(t,t')$ Causal, $G_a(t,t')$ ilerlemiş ve $G_r(t,t')$ gecikmiş Green fonksiyonlarını řu şekilde tanımlayabiliriz.

$$G_c(t,t') = \langle\langle A(t);B(t') \rangle\rangle_c = -i \langle T A(t)B(t') \rangle \quad (2.1)$$

$$G_r(t,t') = \langle\langle A(t);B(t') \rangle\rangle_r = -i \theta(t-t') \langle [A(t), B(t')] \rangle \quad (2.2)$$

$$G_a(t,t') = \langle\langle A(t)B(t') \rangle\rangle_a = i \theta(t'-t) \langle [A(t), B(t')] \rangle \quad (2.3)$$

Burada $\langle \rangle$ gösterimi ortalamayı ve $\langle\langle \rangle\rangle$ gösterimi ise Causal, ilerlemiş ve gecikmiş Green fonksiyonlarına karşılık gelir[6].

$A(t)$ ve $B(t)$ Kuantize alan fonksiyonlarının çarpımı cinsinden ifade edilen A ve B operatörlerinin Heisenberg ifadeleridir. A ve B operatörleri farklı şekilde seçilebilir. Örneęin, Fermi veya Bose operatörleri ve onların çarpımı, Pauli operatörleri ve onların çarpımı, yoğunluk operatörleri gibi.

A ve B operatörlerinin seçimi problemin koşullarına göre belirlenir. T sembolü sıralı çarpımı veya operatörlü çarpımı gösterir.

$$TA(t)B(t') = \theta(t-t')A(t)B(t') + \Gamma\theta(t'-t)B(t')A(t) \quad (2.4)$$

Burada basamak fonksiyonu $\theta(t)$,

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

olarak tanımlanır. Denklem (2.4) de verilen A ve B operatörleri Γ 'yı içererek komütatif gösterimde,

$$\{A,B\} = AB - \Gamma BA \quad (2.5)$$

şeklinde verilir. Burada Γ 'nın işaretini, gözönüne alınan problem için + veya - alabiliriz. Eğer A ve B Bose operatörleri ise + Fermi operatörleri ise - alınmalıdır. Denklem (2.4) ve (2.5) kullanılarak $G_c(t,t')$, $G_a(t,t')$ ve $G_r(t,t')$,

$$G_c(t-t') = -i\theta(t-t')\langle A(t)B(t') \rangle - i\Gamma\theta(t'-t)\langle B(t')A(t) \rangle \quad (2.6)$$

$$G_r(t-t') = -i\theta(t-t')\{\langle A(t)B(t') \rangle - \Gamma\langle B(t')A(t) \rangle\} \quad (2.7)$$

$$G_a(t-t') = i\theta(t'-t)\{\langle A(t)B(t') \rangle - \Gamma\langle B(t')A(t) \rangle\} \quad (2.8)$$

formunda yazılabilir. $t = t'$ de denklem (2.6), (2.7) ve (2.8) deki Green fonksiyonları $\theta(t-t')$ tanımından dolayı tanımlı değildirler. Bu fonksiyonlar çift zamanlı Green

fonksiyonları olup, bunlar yardımı ile çok parçacıklı sistemlerin özellikleri hakkında bilgi edilebilir.

2.2. Green Fonksiyonları İçin Hareket Denklemleri

Denklem (2.1), (2.2) ve (2.3) de verilen Green fonksiyonları için en genel hareket denklemi,

$$i \frac{dG}{dt} = i \frac{d}{dt} \langle\langle A; B \rangle\rangle = \frac{d\theta(t-t')}{dt} \langle [A(t), B(t')] \rangle + \langle\langle i \frac{dA(t)}{dt} ; B(t') \rangle\rangle \quad (2.9)$$

eşitliği ile verilir. $\theta(t)$ adım fonksiyonu ile δ dirac fonksiyonu arasındaki bağıntı,

$$\dot{\theta}(t-t') = -\dot{\theta}(t'-t) = \delta(t-t')$$

denklem (2.9)da kullanılarak hareket denklemi,

$$i \frac{dG}{dt} = \delta(t-t') \langle A(t), B(t') \rangle + \langle\langle \{ A(t)H(t) - H(t)A(t) \} ; B(t') \rangle\rangle \quad (2.10)$$

şeklinde yazılır. Burada $\dot{\theta}$ türevi gösterir.

Green fonksiyonunun Foureir dönüşümünün hareket denklemi ise,

$$E \langle\langle A; B \rangle\rangle = \frac{1}{2\pi} \langle A(t), B(t') \rangle + \langle\langle A(t), H(t) ; B(t') \rangle\rangle \quad (2.11)$$

ile verilir[7].

2.3. Zamana Bağlı Korelasyon Fonksiyonları

Heisenberg ifadesindeki [8] operatörlerin çarpımının istatistiksel ortalamaları,

$$F_{BA}(t, t') = \langle B(t')A(t) \rangle \quad (2.12)$$

$$F_{AB}(t, t') = \langle A(t)B(t') \rangle$$

şeklinde tanımlanır ve bunlar Korelasyon fonksiyonları olarak bilinir [6]. Bu fonksiyonlar istatistik denge durumunda,

$$F_{BA}(t, t') = F_{BA}(t-t'); \quad F_{AB}(t, t') = F_{AB}(t-t') \quad (2.13)$$

koşullarını sağlarlar ve denklem (2.6), (2.7) ve (2.8)'de verilen Green fonksiyonlarının aksine Korelasyon fonksiyonları adım fonksiyonu $\theta(t-t')$ 'yi içermezler, öyleki $t = t'$ durumunda bile tanımlıdırlar.

$$F_{BA}(0) = \langle B(t)A(t) \rangle = \langle B(0)A(0) \rangle \quad (2.14)$$

$$F_{AB}(0) = \langle A(t)B(t) \rangle = \langle A(0)B(0) \rangle$$

Tanımlanan Korelasyon fonksiyonları için hareket denklemleri,

$$i \frac{dF_{BA}}{dt} = \langle B(t') \{A(t)H(t) - H(t)A(t)\} \rangle \quad (2.15)$$

$$i \frac{dF_{AB}}{dt} = \langle \{A(t)H(t) - H(t)A(t)\} B(t') \rangle$$

olarak yazılır.

Korelasyon fonksiyonları $F_{AB}(t, t')$ ve $F_{BA}(t, t')$ 'nin Fourier dönüşümleri,

$$F_{BA}(t-t') = \langle B(t')A(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iw(t-t')} J(w) dw \quad (2.16)$$

$t-t' \rightarrow t-t' + \frac{i}{\theta}$ dönüşümü yapılırsa,

$$F_{AB}(t-t') = \langle A(t)B(t') \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iw(t-t')} e^{\frac{w}{\theta}} J(w) dw \quad (2.17)$$

olarak bulunur. Burada $J(w)$ spektral yoğunluğu olup,

$$J(w) = Q^{-1} \sum_{\gamma\mu} (C_{\gamma}^* A(0) C_{\mu}) (C_{\mu}^* B(0) C_{\gamma}) e^{-\frac{E_{\mu}}{\theta}} \delta(E_{\mu} - E_{\gamma} - w)$$

eşitliği ile verilir. Burada $\theta = kT$ dir.

2.4. İlerlemiş ve Gecikmiş Green Fonksiyonları İçin Spektral İfadeler

$G_a(E)$ ilerlemiş ve $G_r(E)$ gecikmiş Green fonksiyonları için spektral ifadeler denklem (2.16) ve (2.17)'de tanımlanan eşitlikler yardımı ile elde edilebilirler.

$G_r(E); G_r(t-t')$ Green fonksiyonunun Fourier bileşeni

$$G_r(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} G_r(E) e^{-iE(t-t')} dE \quad (2.18)$$

ise, buradan

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_r(t) e^{iE(t-t')} dt \quad (2.19)$$

bulunur. Denklem (2.7), (2.19) da yerine yazılırsa,

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iE(t-t')} \theta(t-t') \{ \langle A(t)B(t') \rangle - \Gamma \langle B(t')A(t) \rangle \} \quad (2.20)$$

ve denklem (2.16), (2.17) kullanılarak,

$$G_r(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dw J(w) (e^{\frac{w}{\theta}} - \Gamma) \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{i}{\theta} (E-w)t \theta(t) \quad (2.21)$$

olarak elde edilir. Burada $\theta(t)$ adım fonksiyonu,

$$\theta(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-iEt} dE}{E+i\epsilon} \quad (2.22)$$

olarak yazılabilir. Denklem (2.22), bir'e eşit olacağından denklem (2.21),

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\frac{w}{\theta}} - \Gamma) J(w) \frac{dw}{E-w+i\epsilon} \quad (2.23)$$

şekline indirgenebilir.

$G_a(t)$ Green fonksiyonunun $G_a(E)$ Foureir bileşeni için aynı yol tekrarlanırsa,

$$G_a(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\frac{w}{\theta}} - \Gamma) J(w) \frac{dw}{E-w-i\epsilon} \quad (2.24)$$

olarak bulunur. $G_r(E)$ ve $G_a(E)$ için türetilen bu denklemler birleştirilerek,

$$G_{r,a}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\frac{w}{\theta}} - \Gamma) J(w) \frac{dw}{E-w \pm i\epsilon} \quad (2.25)$$

şeklinde yazılır.

Türetilen $G_{r,a}(E)$ fonksiyonlarının farkı alındığında,

$$G(w+i\epsilon) - G(w-i\epsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\frac{E}{\theta}} - \Gamma) J(E) \left\{ \frac{1}{w-E+i\epsilon} - \frac{1}{w-E-i\epsilon} \right\} \quad (2.26)$$

ve Dirac fonksiyonunun

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi i} \left\{ \frac{1}{x-i\epsilon} - \frac{1}{x+i\epsilon} \right\} \quad (2.27)$$

özelliği kullanılarak,

$$G(w+i\epsilon) - G(w-i\epsilon) = -i (e^{\frac{w}{\theta}} - \Gamma) J(w) \quad (2.28)$$

eşitliği bulunur.

Bu eşitlikten spektral yoğunluk $J(w)$,

$$J(w) = i \frac{G(w+i\epsilon) - G(w-i\epsilon)}{(e^{\frac{w}{\theta}} - \Gamma)} \quad (2.29)$$

olarak elde edilir.

3. GREEN FONKSİYONUNUN FERROMANYETİZMADA UYGULAMASI VE KRİTİK SICAKLIK TAYİNİ

Green fonksiyonu yöntemi ferromanyetizmaya ilk defa N.N.Bogolyubov ve Tyablikov tarafından uygulanmıştır[6].

Heisenberg modeline göre bir ferromanyetik kristal spin operatörleri cinsinden Hamiltoniyen ifadesi \mathcal{H} ,

$$\mathcal{H} = -\mu_B H \lambda \sum_f \hat{S}_f^z - 2 \sum_{f,g} I(f-g) (\hat{S}_f \cdot \hat{S}_g) \quad (3.1)$$

ile tanımlanır[9]. Burada μ_B Bohr magnetonu, λ Lande faktörü, H , z-ekseni boyunca uygulanan dış alan ve $I(f-g)$, f ve g konumunda bulunan spinler arasındaki etkileşme sabiti olup,

$$I(f-f) = 0, I(f-g) = I(g-f) \quad (3.2)$$

özelliklerine sahiptir. \hat{S}_f , f konumundaki spin işlemcisi olup bileşenleri Pauli spin matrisleridir.

$$\hat{S}^x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \hat{S}^y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \hat{S}^z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

Pauli spin matrislerinin lineer birleşimi olarak yeni \hat{b}_f ve \hat{b}_f^+ işlemcilerini

$$\hat{b}_f = \hat{S}_f^+ = \hat{S}_f^x + i\hat{S}_f^y, \hat{b}_f^+ = \hat{S}_f^- = \hat{S}_f^x - i\hat{S}_f^y \quad (3.4)$$

veya

$$\hat{b}_f = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{b}_f^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

olarak tanımlayalım. Denklem (3.4) ve (3.5) yardımıyla \hat{S}_f^x , \hat{S}_f^y ve \hat{S}_f^z

$$\hat{S}_f^x = \frac{1}{2} (\hat{b}_f + \hat{b}_f^+) \quad (3.6.a)$$

$$\hat{S}_f^y = \frac{i}{2} (\hat{b}_f^+ - \hat{b}_f) \quad (3.6.b)$$

$$\hat{S}_f^z = \frac{1}{2} (1 - 2\hat{n}_f) \quad (3.6.c)$$

şeklinde yazılır. Burada $\hat{n}_f = \hat{b}_f^+ \hat{b}_f$ dir. Benzer işlem ile \hat{S}_g^x , \hat{S}_g^y ve \hat{S}_g^z operatörlerinin denklem (3.6) ile aynı olduğu bulunur. Bulunan bu değerler denklem (3.1) de yerine yazılırsa \mathcal{H} ,

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -\mu_B N H + 2\mu_B H \sum_f \hat{n}_f - 2 \sum_{f,g} I(f-g) \hat{b}_f^+ \hat{b}_g - \frac{1}{2} N \sum_f I(f) \\ & + 2 \sum_f I(f) \sum_g \hat{n}_g - 2 \sum_{f,g} I(f-g) \hat{n}_f \hat{n}_g \end{aligned} \quad (3.7)$$

olarak elde edilir.

$\langle \hat{b}_g; \hat{b}_f^+ \rangle$ Green fonksiyonu için \hat{b}_f ve \hat{b}_f^+ işlemcilerinin komütasyon bağıntıları,

$$[\hat{b}_f, \hat{b}_g] = [\hat{b}_f^+, \hat{b}_g^+] = \hat{b}_f^2 = \hat{b}_f^+{}^2 = 0 \quad (3.8)$$

$$[\hat{b}_f, \hat{b}_g^+] = [1 - 2\hat{n}_f] \delta_{fg}$$

ile verilir. Burada δ_{fg} Kroneker delta fonksiyonudur.

Şimdi denklem (2.11) kullanılarak

$$E \langle \hat{b}_g; \hat{b}_f^+ \rangle = \frac{1}{2\pi} \delta_{fg} (1-2\bar{n}_f) + 2 \{ \mu_B^{H+\Sigma I(f)} \} \langle \hat{b}_g; \hat{b}_f^+ \rangle$$

$$-2 \Sigma_I(p-g) \langle \hat{b}_p; \hat{b}_f^+ \rangle + 4 \Sigma_I(p-g) \{ \langle \hat{n}_g \hat{b}_p; \hat{b}_f^+ \rangle - \langle \hat{n}_p \hat{b}_g; \hat{b}_f^+ \rangle \} \quad (3.9)$$

eşitliği elde edilir. Denklem (3.9)'un son terimi için

$$\langle \hat{n}_g \hat{b}_p; \hat{b}_f^+ \rangle = \langle \hat{n}_g \rangle \langle \hat{b}_p; \hat{b}_f^+ \rangle$$

yaklaşımı [9] kullanılarak,

$$E \langle \hat{b}_g; \hat{b}_f^+ \rangle = \frac{1-2\bar{n}}{2\pi} \delta_{fg} + \{ 2\mu_B^{H+2(1-2\bar{n})} \Sigma_I(f) \}$$

$$\langle \hat{b}_g; \hat{b}_f^+ \rangle - 2(1-2\bar{n}) \Sigma_I(p-g) \langle \hat{b}_p; \hat{b}_f^+ \rangle \quad (3.10)$$

eşitliği elde edilir. Burada $\langle \hat{n}_f \rangle = \bar{n}$ eşitliği kullanılmıştır. Bu denklem (3.10) örgünün temel simetri dönüşümü ve ferromanyetizma teorisinde uygulanan yöntemler ile çözülebilir. $G_{g,f}$ 'nin yalnız g-f örgü vektörlerinin farkına bağlı olduğunu ve periyodik bir fonksiyon olduğunu gözönünde tuttuğumuzda örgü yapısına göre Fourier dönüşümü,

$$\langle \hat{b}_g; \hat{b}_f^+ \rangle = G_{g,f}(E) = \frac{1}{N} \Sigma_q e^{iq(g-f)} G_q(E) \quad (3.11)$$

ile verilir. Burada q dalga vektörüdür. Kroneker delta fonksiyonu $\delta_{f,g'}$

$$\delta_{g,f} = \frac{1}{N} \sum_q e^{iq(g-f)} \quad (3.12)$$

olarak tanımlandığından bu iki eşitlik denklem(3.10)'da yerine konursa,

$$G_q(E) \{E - 2\mu_B H - 2(1 - 2\bar{n}) [K(0) - K(q)]\} = \frac{1 - 2\bar{n}}{2\hbar} \quad (3.13)$$

veya

$$G_q(E) = \frac{1}{2\hbar} \frac{1 - 2\bar{n}}{(E - E_q)} \quad (3.14)$$

olarak bulunur. Burada,

$$K(q) = \sum_f I(f) e^{i(f \cdot q)}$$

ve

$$E_q = 2\mu_B H + 2(1 - 2\bar{n}) [K(0) - K(q)]$$

dir.

Denklem (3.14), (2.26) da yerine yazılarak ve denklem (2.27) kullanılarak spektral yoğunluk,

$$I_q(\omega) = \frac{1 - 2\bar{n}}{E_q / \theta} \delta(\omega - E_q) \quad (3.15)$$

e⁻¹

olarak bulunur ve bulunan bu değer $\langle\langle \hat{b}_g(t); \hat{b}_f^+(t') \rangle\rangle$ fonksiyonu için spektral yoğunluğunda yerine konulursa,

$$I_{g,f}(w) = \frac{1}{N} (1-2\bar{n}) \sum_q \frac{e^{iq(g-f)}}{e^{E_q/\theta} - 1} \delta(w-E_q) \quad (3.16)$$

elde edilir. Bulunan bu deęer denklem (2.16)'da yerine yazılırsa,

$$\langle \hat{b}_f^+(t') \hat{b}_g(t) \rangle = \frac{1-2\bar{n}}{N} \sum_q \frac{e^{iq(g-f)}}{e^{E_q/\theta} - 1} e^{-iE_q(t-t')} \quad (3.17)$$

eşitlięi bulunur. Burada $t = t'$ ve $f = g$ alınır ve $\bar{n} = \hat{b}_f^+ \hat{b}_f$ eşitlięi kullanılırsa,

$$\frac{\bar{n}}{1-2\bar{n}} = \frac{v}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3q}{e^{E_q/\theta} - 1} \quad (3.18)$$

manyetizasyon için bir eşitlik elde edilir. \bar{n} deęeri bu eşitlikte yerine yazılırsa,

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{v}{(2\pi)^3} \int \text{Coth}\left(\frac{1}{2} \beta E_q\right) d^3q \quad (3.19)$$

bulunur. Burada $\sigma = 1-2\bar{n}$ dır.

Elde edilen bu denklemin ferromanyetik sistemlerde kritik deęer bulunmasında nasıl iyi bir yaklaşım olduęunu görmek ilginçtir. İlk olarak Curie noktasının T_c nerede ortaya çıktığını görelim.

Manyetizasyon, T_c yakınında ve altında E_q küçük olacaktır. $H = 0$ manyetik alanda, $\text{Coth}\left(\frac{1}{2} \beta E_q\right)$ 'nun seriye açılımı,

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{v}{(2\pi)^3} \int \left\{ \frac{2}{\sigma\beta K(0)U(q)} + \frac{\sigma\beta K(0)U(q)}{6} - \frac{\sigma^3\beta^3 K^3(0)U^3(q)}{180} + \dots \right\} d^3q \quad (3.20)$$

ile verilir. burada,

$$U(q) = 1 - \frac{\eta K(q)}{K(0)}$$

ve η (anizotropi), 0 ile 1 arasında deęer alır. İki yakın komşu atom arasındaki etkileşme sabiti I ve en yakın komşu sayısı z alınırsa,

$$K(0) = zI \text{ ve } K(q) = \sum_f I(f) e^{i(q \cdot f)}$$

dir. Burada toplam en yakın komşu atomlar üzerindedir.

Ayrıca kristal yapıya baęlı bir parametre $F(n)$,

$$F(n) = \frac{v}{(2\pi)^3} \int U^n(q) d^3q \quad (3.21)$$

ile tanımlansın.

Seriye açılan manyetizasyon $F(n)$ cinsinden,

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{2F(-1)}{\sigma\beta K(0)} + \frac{1}{6} \sigma\beta K(0) - \dots$$

şeklinde yazılır. Bu eşitlikte $\sigma \rightarrow 0$ ve $\beta = \beta_c$ alınırsa,

$$\beta_c = \frac{2F(-1)}{K(0)} = \beta_{c_0} F(-1) \quad (3.22)$$

sonucu bulunur. Burada β_{c_0} Moleküler Alan yaklaşımı sonucudur[9].

Şimdi $F(-1)$ 'i η 'ya bağılı olarak hesaplayalım. İki boyutta kare bir yapı için denklem (3.21) kullanılarak $F(-1)$ aşağıdaki şekilde yazılır[10].

$$F(-1) = \frac{1}{\Pi^2} \int_0^{\Pi} \int_0^{\Pi} \frac{dx dy}{1-\eta \cos x \cos y}$$

Bu integralin çözümü için $\tan \frac{x}{2} = t$ ve $a = \eta \cos y$ dönüşümü yapılırsa,

$$\begin{aligned} F(-1) &= \frac{\Pi}{\Pi^2} \int_0^{\Pi} \frac{dy}{\sqrt{(\eta \cos y + 1)(1 - \eta \cos y)}} \\ &= \frac{1}{\Pi} \int_0^{\Pi} \frac{dy}{\sqrt{1 - \eta \cos^2 y}} \end{aligned} \quad (3.23)$$

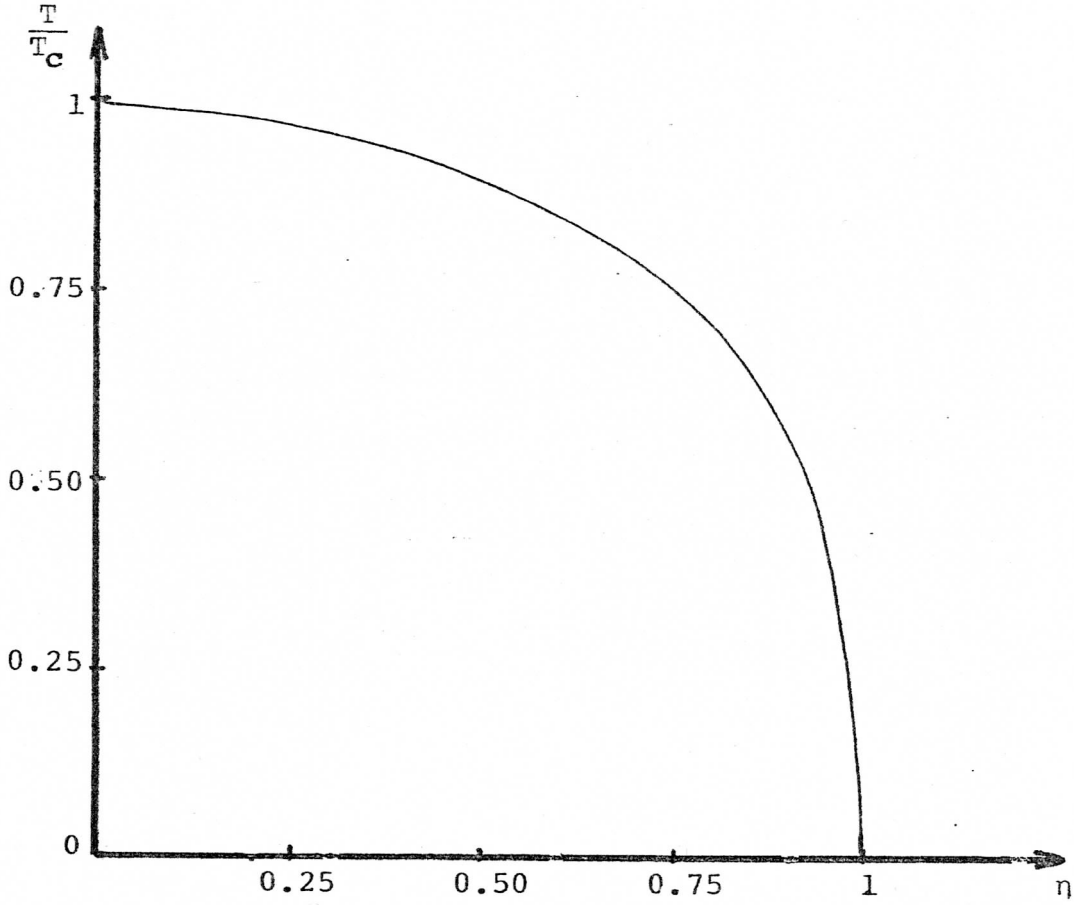
elde edilir. Denklem (3.23) için $y = \frac{\Pi}{2} - x$ dönüşümü yapılırsa $F(-1)$,

$$F(-1) = \frac{2}{\Pi} \int_0^{\Pi/2} \frac{dx}{\sqrt{1 - \eta^2 \sin^2 x}} = \frac{2}{\Pi} E(\eta) \quad (3.24)$$

olarak bulunur. Burada $E(\eta)$ 1. çeşit tam eliptik integraldir. η 'nın 0,1'den 1'e kadar değerleri için hesaplanan $F(-1)$ ve denklem (3.22) kullanılarak hesaplanan T_c değerleri aşağıdaki Tablo-3.1'de verilmiştir.

η	$F(-1)$	T_c
0	1	4
0,1	1,0264	3,8971
0,2	1,0565	3,7860
0,3	1,0910	3,6663
0,4	1,1315	3,5351
0,5	1,1547	3,4641
0,6	1,2410	3,2232
0,7	1,3200	3,0303
0,8	1,4369	2,7837
0,9	1,6412	2,4372

Tablo-3.1



Şekil-3.1 : Kritik Sıcaklığın η ile Değişimi

4. SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu çalışmada iki boyutta kare için kritik sıcaklıklar atomlar arasında en yakın etkileşme dikkate alınarak, Green fonksiyonu yöntemi ile anizotropiye bağlı olarak hesaplandı. Tablo-3.1'de η 'nin çeşitli değerleri için bulunan T_c değerleri η 'nin küçülen değerleri için sırası ile Bethe ve Ortalama Alan değerlerine yaklaşmaktadır. $\eta = 0,9$ değerinde Green fonksiyonu yöntemi ile bulunan T_c değeri, Tablo-4.1'de çeşitli yöntemler ile bulunmuş T_c değerleri ile karşılaştırıldığında Green fonksiyonu yönteminin Kikuchi'nin değerine çok yakın olduğu ve Osa-gar'ın kesin değerinden % 6 lık bir sapma gösterdiği görülmür.

Yaklaşım	Ortalama Alan	Bethe	Bu çalışma	Kikuchi	Kesin
T_c	4	2,88	2,43	2,42	2,26

Tablo-4.1

5. KAYNAKLAR

1. Wagner, D., 1972. Introduction to The Theory of Magnetizm. Pergamen Prees. Oxford.
2. Morrish, A.H., 1965. The Physical Princirles of Magnetism. Universty of Minnesta. Minnesta.
3. Domb, C., Green, M.S., 1972. Phase Transitions and Critical Phenomena. Academic Prees Inc. London.
4. Abbott, A.F., 1970. Ordinary Level Physics. Heineman Educational Books. London.
5. Tahir-Kheli, R.A., 1963. Interpolation Approach to The Green Function Theory of Ferromagnetism. Phys. Rev.132:689-701.
6. Zubarev, D.N., 1960. Double-Time Green Functions In Statistical Physics. Soviet Phys-Uspekhi. 3:320-338.
7. Callen, H.B., 1962. Green Function of Ferromagnetism Phys.Rev.130:890-898.
8. Tjablikov, S.W., 1965. uantentheoretisch Methoden Des Magnetismus. B.G. Teubner Stuttgart.
9. ter Haar, D., 1971. Lectures on Selected Topics In Statistical Mechanics. Pergamen Prees. Oxford.
10. Dalton, N.W. and Wood, D.W., 1972. Critical Behaviour of The Simple Anisotropic Heisengebr Model.Proc. Phys.Soc.90:459-473.