

## 1. GİRİŞ

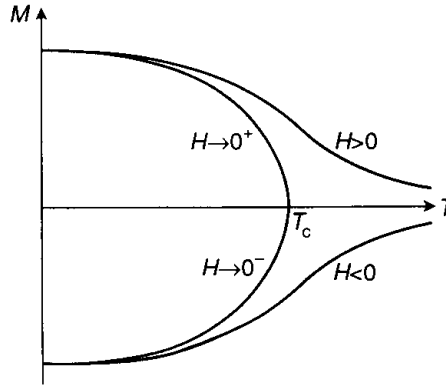
Fiziksel olayların meydana geliş şekillerini incelemek için bazı özelliklerinden faydalanılmaktadır. Bu olayların fiziksel, kimyasal, magnetik, termodinamik v.b. gibi özellikleri o yapı hakkında bize bazı bilgiler vermektedir. Fiziksel kooperatif olayların termodinamik davranışları, örneğin akışkan konsantrasyonu, gazların soğurulması, ikili veya üçlü sıvı ve gaz karışımlarının faz dönüşümleri, ikili alaşımlardaki düzenli-düzensiz faz geçişleri, sıvıların donması, magnetik faz geçişleri, spin-1/2 Ising veya iki durumlu sistemler kullanılarak açıklanabilmektedir. Yukarıda belirtilen faz dönüşümleri iki durum ve tek bir düzen parametresiyle karakterize edilirler. İstatistik mekaniğin en yoğun çalışılan konularından biri olan Ising modeli ilk olarak Lenz tarafından 1920 yılında ferromagnetik maddelerin (demir, nikel v.b.) faz dönüşümlerinin açıklanabilmesi amacıyla doktora öğrencisi Ising'e tez konusu olarak verilmiş ve Ising (1925) tarafından bir boyutta çözümü yapılmıştır. Ising, tezinde magnetik momentlerin bir zincir üzerindeki özel dizilimini inceledi. Bu dizilimde momentlerin özel olarak sadece aşağı ve yukarı yönelimlere sahip olduğu ve sadece en yakın komşuları ile çiftler halinde etkileştiği varsayıldı. Ising, modelin tek boyuttaki çözümünü yaparak tek boyutta sıfırdan farklı sıcaklıklarda faz dönüşümünün olmadığını göstermiştir. Ortaya çıkan bu sonuç neticesinde ilk önceleri modele olan ilgi azalmıştır. Ancak daha sonraki yıllarda Heisenberg modelinin geliştirilmesi ve Onsager tarafından modelin iki boyuttaki Ising modelinin sıfır magnetik alanda tam çözümünün yapılması, modele olan ilgiyi arttırmıştır. İlk önceleri Lenz-Ising modeli olarak anılan model daha sonraları Ising modeli olarak adlandırılmıştır.

1941 yılında Kramers ve Wannier dış magnetik alan olmaması durumunda kare örgü için kritik sıcaklık değerini veren bir ifade buldu (Kramers ve Wannier, 1941). 1944 yılında Onsager, Helmholtz serbest enerjisini kullanarak Kramers ve Wannier tarafından bulunan kritik sıcaklık değerinin doğruluğunu açık bir şekilde gösterdi (Onsager, 1944). 1960 yılında Domb, iki boyutta bal peteği ve üçgen örgü için tam çözümü buldu (Domb, 1960).

Modelin basit olmasına rağmen üzerinde yoğun şekilde çalışılır olmasının sebepleri arasında, gerçekte de bu modelle örtüşen sistemler olmasının yanı sıra evrensellik kavramı ile çok daha farklı sistemlerin de böylesine basit bir modelle açıklanabilmesi gösterilmektedir.

Ising modeli kullanılarak açıklanan olaylardan birisi faz geçişidir. Faz geçişi, sistemin bir fazdan diğer bir faza geçmesi olayıdır ve bu olay sırasında sistemde ilginç davranışlar gözlenir. Sistemi oluşturan parçacıklar arasında sonsuz erimli bir korelasyon oluşur ve sistemin bir ucundaki parçacığının diğer bir ucundaki parçacığını "görmesi" olayı gerçekleşmektedir. Bunun yanında sistemin termodinamik fonksiyonlarından bazıları ıraksar. Faz geçişi, diğer termodinamiksel değişkenler sabit tutulduğunda, belli bir sıcaklıkta oluşur ve bu sıcaklığa kritik sıcaklık denir. Kritik sıcaklık ve civarında sistemin ve sistemi oluşturan parçacıkların davranışlarının incelenmesi sırasında, kritik üsler kavramı ortaya çıkar ve bu kritik üs kavramı, sıcaklığın kritik sıcaklığa gittiğinde gösterdiği davranışı anlatır. Aynı evrensellik sınıfına ait sistemlerin termodinamik fonksiyonlarının, faz geçişi yakınında ya da sırasında aynı davranışı gösterdikleri kritik üsleri de aynıdır. Bu duruma örnek olarak süperakışkan fazdan normal faza geçiş olayı, sistemle aynı evrensellik sınıfında bulunan daha basit bir sistemin açıklanmasıyla mümkün olabilmektedir. Sistemin kendi içerisinde dengede olup olmadığının anlaşılabilmesi düzen parametresi adı verilen bir değişken tarafından açıklanabilmektedir. Magnetik sistemler için düzen parametresi olarak sistemin magnetizasyonu böyle bir parametredir. Magnetizasyon sıfır ise sistem paramagnetik fazda yani düzensizdir. Ferromagnetik (ya da antiferromagnetik) fazdan paramagnetik faza geçiş sırasında sistemin düzenli halden düzensiz hale geçmesi ise kritik bir sıcaklık değerinde meydana gelir. Konuya ilişkin bir örnek vermek gerekirse,  $1/2$  spinli parçacıklardan oluşmuş sisteme, kritik sıcaklığın altındaki bir sıcaklıkta, magnetik alan uygulanırsa sistemi oluşturan parçacıkların spinleri alan doğrultusunda yönelirler. Belli bir süre geçtikten sonra magnetik alan sıfırlanırsa, sistemin parçacıklarının spinleri aynı doğrultuda kalırlar. Sistemdeki net magnetizasyon ise sistemin kritik sıcaklığın üstünde bir sıcaklığa ısıtılması ile sıfıra gider.

Demir, Nikel gibi bazı katıların kalıcı mıknatıslanma özelliği ferromagnetizma olarak adlandırılır. Ferromagnetizma, elektronların spin magnetik momentlerinden kaynaklanır. Katı cisimdeki tüm atomların magnetik momentleri hep birlikte aynı yönde dizildiğinde makroskopik olarak gözlenen bir mıknatıslanma oluşur. Ancak, ortamdaki ısısal çalkantı nedeniyle ferromagnetik düzen, sıcaklık arttıkça bozulur ve Curie sıcaklığı denilen kritik bir  $T_C$  değerinde sıfır olur (Şekil 1.1). Bu kritik değerde ikinci dereceden bir faz geçişi meydana gelir. Kritik  $T_C$  sıcaklığı üstünde ise mıknatıslık kaybolur.



Şekil 1.1:  $H$  dış magnetik alanının sağdan veya soldan sıfıra yaklaşması halinde ( $H \rightarrow 0^+$  veya  $H \rightarrow 0^-$ ) magnetizasyonun sıcaklığa göre değişimi.

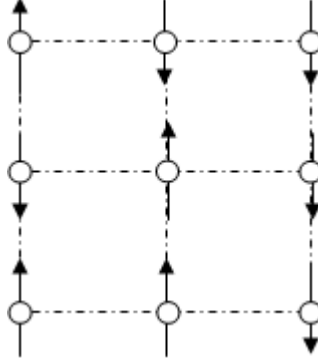
$T_C$  kritik sıcaklığından daha düşük sıcaklıklarda ( $T < T_C$ ) düzenli faza (ferromagnetik faza),  $T_C$ 'den yüksek sıcaklıklarda ise düzensiz faza (paramagnetik) geçtiği görülür ( $T > T_C$ ).

İstatistik fizikte en fazla çalışılan problemlerden Ising sistemlerinin en basiti, spin-1/2 Ising modelidir. Spinler bir dış magnetik alanda ( $h$ ) aşağıda verilen Hamiltonyene göre etkileşirler:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i . \quad (1.1)$$

Burada  $J$ , bilinear etkileşme parametresidir, pozitif olması durumu (ferromagnetik durum) spinlerin aynı yönde olmasını sağlarken, negatif olması, antiparalel yönelmeye yani antiferromagnetik duruma karşılık gelmektedir. Diğer taraftan  $J = 0$  durumu bir paramagnete karşılık gelmektedir. Bu durumda spinlerin yönelimine sadece magnetik alan etkide bulunur, spinler arası etkileşme yoktur ve böylece faz dönüşümü meydana gelmez. Model, iki durumlu ve tek düzen parametrelili (yoğunluk, konsantrasyon, kristalografik düzen parametresi, magnetizasyon, elektriksel polarizasyon v.b) bir sistem olup yukarıda bahsettiğimiz bir çok fiziksel kooperatif olayın termodinamik davranışlarını açıklamaktadır. Yukarıda da ifade edildiği gibi Ising, problemi çözerken basit bir model geliştirmiştir: Her bir örgü noktası spin, magnetik moment (mıknatıs) diye adlandırılır ve her bir spin magnetik momentinin pozitif (yukarı) veya negatif

(aşağı) şekilde iki yönelmesi vardır. Diğer bir ifadeyle, her bir örgü noktasındaki spinlerden bazıları yukarı yönelir, bunlar spin yukarı diye ve bazıları ise aşağıya yönelir, bunlar da spin aşağı diye adlandırılır.



Şekil 1.2 : İki boyutlu Ising modeli. Örgü noktaları üzerindeki oklar, yukarı ve aşağı spin durumlarını gösterir.

Yukarıdaki çalışmalarda anlatılanlara ek olarak çoğu fiziksel sistemler iki durum ve tek bir düzen parametresiyle incelenmezler. Bu tür fiziksel sistemlerin incelenmesi için en az üç durum ve iki düzen parametrelili modeller gereklidir. Böyle modellerden en iyi bilinen ve yaygın olarak kullanılanlardan birisi de spin-1 Ising modelidir. Spin-1 Ising modeli, sistemi tanımlayan Hamiltonyendeki etkileşme parametrelerine göre farklı olarak adlandırılmaktadır. Blume-Emery-Griffiths (BEG) modelinin en yakın komşu çifti etkileşmeli genel Hamiltonyeni;

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - K \sum_{\langle ij \rangle} s_i^2 s_j^2 + D \sum_i s_i^2 - L \sum_{\langle ij \rangle} (s_i^2 s_j + s_i s_j^2) - h \sum_i s_i \quad (1.2)$$

ifadesi ile verilmektedir. Burada  $J$ , bilineer etkileşme parametresini,  $K$ , bikuadratik değişme etkileşme parametresini,  $D$  kristal alan etkileşme sabitini veya anizotropiyi,  $L$  üçüncü dereceden magnetik pertürbasyonu,  $h$  ise dış magnetik alanı göstermektedir. Spin-1 Ising modelinin BEG modeli olarak adlandırılarak kullanılması ilk olarak Blume, Emery ve Griffiths (1971) tarafından  $^3\text{He} - ^4\text{He}$  karışımlarının termodinamik davranışlarını incelemek için yapmış oldukları öncü çalışma sonrasında başlamıştır. Böylece model ile, pek çok fiziksel kooperatif olaydaki termodinamik davranışlar farklı metodlar kullanılarak incelenmiştir. Örneğin basit ve ikili sıvıların yoğunlaşması ve katılaşması, ikili ve üçlü

akışkanlarda kritik noktaların incelenmesi, mikroemülsiyonlar, re-entrant olaylar, donma, magnetik düzenlilik, düzenli ve düzensiz geçişler, ikili ve üçlü akışkanların incelenmesi, yarı kararlı ve kararsız durumlar gibi birçok fiziksel kooperatif olayın termodinamik özelliklerinin açıklanması bu model kullanılarak yapılmaktadır. BEG modeli, Lajzerowicz and Sivardiere (1975a) tarafından moleküler alan yaklaşımı ile çözülerek, basit akışkanlardaki katılaşma, yoğunlaşma vb. olaylar incelenmiştir. Daha sonra (1975b), ikili sıvıların faz ayrışması ve yoğunlaşmasını incelemişlerdir. Sivardiere ve Lajzerowicz (1975c) bu seri çalışmalarının sonucunda, ikili bir sıvının davranışını sergilemek için kullandıkları spin-1 örgü-gaz modelini, sabit bir basınçta tutulan üçlü bir sıvının davranışını göstermek içinde kullanmışlardır. Ayrıca sistemde meydana gelen birinci ve ikinci derece faz dönüşümlerini de kapsamlıca göstermişlerdir. Tanaka ve Takahashi (1978) Bethe yaklaşımını kullanarak modelin çözümünü yapmışlardır. Arora ve Landau (1973) ile Tanaka ve Kawabe tarafından modelin Monte-Carlo çalışmaları yapılmıştır. Wang ve Wentworth (1987) Monte-Carlo metodunu kullanarak modelin faz diyagramlarını elde etmişlerdir. Yine Kaneyoshi ve Wang (1987), Lee ve Kimel (1987) Monte-Carlo metodunu kullanarak modeli incelemişlerdir. İlk araştırmacılar modeldeki faz dönüşümlerini incelemişler ve Kaneyoshi ise, düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimlerini incelemiştir. Horuguchi (1986) tarafından, modelin bal peteği örgüsü üzerindeki tam çözümleri yapılmış ve bu çalışmalar daha sonra Wu (1986), Shankar (1986), Urumov (1987) tarafından magnetik alan etkisinde incelenmiştir. Chen ve Joseph (1972) ile Oitma (1970, 1973) Spin-1 Ising modelinin yüksek sıcaklıkta seriye açma çalışmalarını yapmışlardır. Chen ve Levy (1973), spin-1 Ising modelinin,  $J$  ve  $K$  etkileşme sabitli Hamiltonyenini kullanarak moleküler alan yaklaşımı ile çözümü üzerinde ilk defa çalışanlar arasında bulunmaktadır. Chen ve Levy, bu çalışmalarında değişik simetrikli Hamiltonyenler kullanarak farklı düzen çeşitlerini ve faz dönüşümlerini incelemişlerdir.

Son zamanlarda ise model, en düşük dereceli kümesel değişim metodu ile incelenerek kararlı, yarı kararlı ve özellikle kararsız durumlarının elde edilerek faz diyagramları bu durumların varlığında elde edilmiştir. (Keskin, Ekiz ve Yalçın, 1999; Keskin ve Ekiz, 2000; Ekiz ve Keskin, 2002). Diğer taraftan, Denklem (1.2) ile verilen Hamiltonyende  $K=0$  olarak alınırsa, o zaman model, Blume-Capel modeli olarak adlandırılır ki bu model de ilk olarak Blume (1966) ve Capel (1966a, 1966b, 1967a, 1967b) tarafından, birbirinden bağımsız olarak

geliştirilmiştir. Son zamanlarda bir taraftan deneysel çalışmaların çok daha hassas yapılması ve diğer taraftan bilgisayarların yoğun bir şekilde, hassas ve hızlı hesaplamalarda kullanılması sonucu sistemlerde kararlı durumlar daha kapsamlı olarak incelenmeye başlanmıştır. Ising model uzun yıllardır çalışılmasına rağmen tam çözüm üç boyutlu örgülerde henüz yapılamamıştır. Bu sebeple üzerinde yoğun olarak çalışılan bir araştırma konusudur. Üç boyutta tam sonuçlar olmamasına rağmen bir ve iki boyutta tam çözümler ve değişik yaklaşım metodları mevcuttur. Ising modelinin dengeli durum davranışının incelenmesinde kapalı form yaklaşım metodları olarak adlandırılan (Bragg-Williams yaklaşımı, ortalama (moleküler) alan teorisi, Bethe-Peierls yaklaşımı, sabit-çiftlenim yaklaşımı, kümesel değişim metodu v.b.), Monte-Carlo metodu, transfer matris metodu, renormalizasyon grup metodu, etkin alan teorisi, seriye açma metodu, lineer zincir yaklaşımı sayılabilir. Diğer taraftan yoğun madde fiziğinin en önemli aynı zamanda en zor problemlerinden birisi de fiziksel kooperatif olayların dengesiz, yani dinamik davranışlarının incelenmesidir. Modelin dengeli davranışı üzerine değişik metotlarla çok fazla çalışma yapılmasına rağmen, dengesiz yani dinamik davranışı üzerine az çalışma yapılmış ve bu çalışmalarda da dengesiz istatistik mekanikteki bazı metotlar kullanılmış olup dengeli davranışa göre daha az sayıdadır. Bu metodlardan en önemlileri arasında zamana bağlı Ginzburg-Landau metodu, gerçek uzay renormalizasyon grup metodu, Gluber metodu, yol ihtimaliyet metodu ve tersinmez termodinamiğin Onsager teorisi gösterilebilir. Literatürdeki çalışmaların büyük çoğunluğu tek katmanlı Ising modelinin denge durumlarının incelenmesiyle ilgilidir. Bunun yanı sıra modelin iki katmanlı olduğu durumda bazı yöntemlerle incelenmesi mevcuttur.

Bu tez çalışmasındaki amacımız, fiziksel kooperatif olayların davranışının incelenmesinde çok fazla kullanılan Ising modelini iki katmanlı olarak ele alıp modelin denge özelliklerini daha önce kullanılmamış olan en düşük dereceli kümesel değişim metoduyla incelemektir. Denk. 1.2'de yazılan ifade de  $K=L=0$  alınarak spin  $1/2 - 1/2$  ve spin  $1/2 - 1$  durumları için Ising modeli üzerinde çalışacağız. Bu durumda modelin Hamiltonyeni aşağıdaki gibi verilebilir:

$$\begin{aligned}
 H = & -J_A \sum_{i \in A, j \in A} \sigma_i^A \sigma_j^A - J_B \sum_{i \in B, j \in B} S_i^B S_j^B - J_{AB} \sum_{i, i'} S_i^B \sigma_i^A - D \sum_{i'} (S_{i'}^B)^2 \\
 & - h \left\{ \sum_i \sigma_i + \sum_{i'} S_{i'} \right\}
 \end{aligned} \tag{1.3}$$

Basit olarak bir spin ya yukarı yönlü yani (+z) yönünde ya da aşağı yönlü yani (-z) yönünde yönelecektir. Her bir örgü noktasındaki bir spin öncelikli olarak hem kendisine en yakın örgü noktasındaki bir spinle hem de bir “ $h$ ” dış magnetik alanıyla etkileşirler. Pozitif  $J$  katsayısı spin-spin etkileşmesinin şiddetini belirleyen sabittir. Dış magnetik alanda iki spin paralel ise enerjisi daha düşük olur. Ancak, ortamdaki ısısal çalkantı enerjisi nedeniyle, spinlerin paralelliği tam oluşmaz.

İlk önce model tabaka magnetizasyonlarının her ikisinin de aynı spin değerli olması durumunda incelenecektir. Daha sonra ise tabakalardaki farklı spin durumları ele alınacaktır. Bu incelemenin yapılabilmesi için en düşük dereceli kümesel değişim metodu modele uygulanarak sistemin denge durumunu veren denklem sistemleri elde edilecektir. Öz-bağıllık denklem sistemi olarak adlandırılan bu denklem sistemini ise uygun bir nümerik analiz yöntemiyle çözüp, modelin faz dönüşümleri, doyum sıcaklığı, mıknatıslanma eğrileri ve üçlü kritik nokta gibi magnetik özellikleri incelenecektir.

## 2. KURAMSAL TEMELLER

Son zamanlarda ince film magnetlerinde karşılaşılan teknik problemler, faz geçişlerinin temel araştırmalarından alınan deneysel ve teorik sonuçlar için çeşitli magnetik tabakalı yapıların magnetik özelliklerine karşı özel bir ilgi oluşturmuştur. Teorik olarak, bu sistemin bağlanma şekillerinin yanı sıra spin düzeninin incelenmesi de dikkat çekici olmuştur. Bu tip materyallerde ortaya çıkan çeşitli fiziksel olayları teorik olarak açıklamak için magnetik tabaka yapısına sahip model, oldukça önemlidir. Örneğin, yan yana dizilmiş iki kare örgülü Ising modeli magnetik özellikleri teorik olarak hesaplamamızda bize yardımcı olmaktadır.

İki katmanlı Ising modelinde, kritik noktaların, kritik üstellerin, düzen parametrelerinin ve alınganlığın hesaplanmasında transfer matris, renormalizasyon grup teorisi, ortalama alan yaklaşımı, yüksek sıcaklık serileri için ölçekleme yaklaşımı, etkin alan teorisi ve genişletilmiş Bethe-Peierls yaklaşımı gibi metodlar kullanılmaktadır.

Magnetik çok katmanlı sistemlere aktarılan teorik çalışmaların çoğu Ising veya Heisenberg sistemleriyle sınırlanmıştır. Burada her bir tabaka farklı büyüklükte bağlanma sabitlerine sahiptir. Farklı spinler için magnetik çok katmanlı yapılardan söz etmek gerekir. Bunun için de genellikle korelasyonlu etkin alan teorisi, ortalama alan yaklaşımı ve Bethe-Peierls yaklaşımı kullanılmaktadır.

Farklı magnetik maddelerin çok katmanlı yapıları ile elde edilen sistemler bilgi depolama ve geri almadaki teknolojiler ve çeşitli uygulamalar için yeni materyallerin oluşturulmasında önemli uygulama alanlarına sahiptir. Ferromagnetik materyallerden başka antiferromagnetik materyaller de bu olgularda önemli rol oynamaktadır. Antiferromagnetik substratlar magnetik sensörlerde önemli bir konuma sahiptir. Yüksek magnetorezistansın keşfi, ince filmlerin magnetizması alanındaki araştırmanın önemli bir kısmını oluşturur. Böylece bu teknoloji, hard disk uygulamalarının olduğu bilgisayarlarda geniş ölçüde kullanılmıştır.

Bu yüzden çift katmanlı magnetik yapılar ve örgü içindeki kritik olaylara ek olarak spin hareketlerinin incelenmesi de söz konusudur. Deneysel olarak magnetik çok katmanlı sistemler üzerine yapılan daha önceki çalışmalarda örneğin; Co-Cr veya Mn-Fe den oluşan çok katmanlı sistemler ve daha birçok nitelikli örnekler geliştirilmektedir. Birkaç deneysel ve teorik çalışmalar uzun menzilli magnetik



düzenin amorf sistemlerde var olabildiği sonucuna götürmüştür. Aynı zamanda düzensiz yapıdan dolayı magnetik malzemelerde gözlenmeyen birçok ilginç fiziksel özellik anlaşılır hale gelmiştir. Amorf arayüzlerin varlığı, çok katmanlı ince filmlerin magnetik özelliklerinde önemli bir rol oynamıştır. Bu gibi sistemlerde teorik çalışmalar yapmak için genellikle kare örgü modeli kullanılmıştır. Son zamanlarda, yüksek kaliteli Y-Gd örgüleri ortaya çıkmıştır. Diğer taraftan, iki bileşenli tabaka sistemleri arasındaki arayüz bölgesi kompleks yapıdadır. Fe-Dy den oluşan çok katmanlı sistemlerdeki Fe katmanının amorf yapıda geliştirildiği gösterilmiştir. Bir benzer davranış da Gd-Fe çift katmanlı ve Gd-Fe-Gd üç katmanlı yapıların detaylı olarak incelenmesinde bulunmuştur.

Nadir toprak/geçiş metalleri, çok katmanlı ince film yapısına sahip olup, bu metallere teorik fiziksel bir model tanımlayabilmek için ferromagnetik tekli tabakaların, komşu tabakalar arasındaki bir etkileşme parametresi ile çiftlenimli olması gerekmektedir.

Bu tabakalardan meydana gelen çift katmanlı sistemlerin magnetik özellikleri,  $A$  katmanı için spin değeri  $\sigma = 1/2$  ve  $B$  katmanı için de spin değeri  $S \geq 1/2$  olan durumlar için incelenir. Tek tabakalar üzerindeki etkileşme parametreleri  $J_A$  ve  $J_B$  ile komşu tabakalar arasındaki  $J_{AB}$  etkileşme parametreleri, spinlerin yukarı ve aşağı yöneliminde simetrik fazları oluşturmaktadır. Diğer taraftan ferromagnetik  $A$  katmanı ve antiferromagnetik  $B$  katmanı arasındaki ferromagnetik etkileşme ile sistemde frustrasyon ortaya çıkarmaktadır. Ferromagnetik/Antiferromagnetik sistemin taban durumu ferromagnetik/ferromagnetik sistemin taban durumundan farklıdır. Ferromagnetik/ferromagnetik bir örgüde ferromagnetik katmanlara doğru her bir spin zincirinin yapısı  $\dots++++\dots$  şeklindedir. Buna rağmen ferromagnetik/antiferromagnetik bir örgüde ferromagnetik ve antiferromagnetik katmanlara doğru bir dikey spin zincirinin yapısında  $\dots++++\dots$  şeklindedir. Ancak en yakın komşu zincirler arasındaki spin yapısı da  $\dots+-+-+-\dots$  şeklindedir. Bunun anlamı da katmanlar bir spinin beklenen değeri en yakın komşu zincirlerdeki spin değeri ile aynı değildir. Kolaylık olması açısından örgüler  $A$  ve  $B$  katmanları olarak iki alt örgüye ayrılmış olarak düşünülür ve sistem her bir alt katmanın birbirine geçmesiyle yeni bit katman, tabaka oluşturulur. Ferromagnetik katmanlara yönelen en yakın komşu dikey spinlerinin dördü sınırsız bir grup gibi davranır ve sınır spin zincirlerindeki spin grubunun dışındaki diğer spinler tarafından üretilen etkin bir alandır. Etkin alan, merkezi zincirde spin yapısının

beklenen değeri ile orantılıdır. Merkezi zincirdeki farklı spin yapılarından dolayı ortalama alan yaklaşımı kullanılmıştır.

İnce film yapısındaki tabaka sistemlerine teorik olarak model oluşturulup incelenmesinde, literatürde birçok çalışma mevcuttur. Ancak burada tez çalışması ile ilgili olan en önemli olanlar kısaca şöyle özetlenebilir: Bengrine ve ark. (1998) tarafından yapılan bir çalışmada, çift katmanlı ferromagnetik amorf sistemler için faz diyagramlarını ve net mıknatıslanmanın sıcaklığa göre değişimini etkin alan teorisi ile kuramsal olarak incelemiştir. Bu çalışmada tek tabakalar ve tabakalar arasındaki etkileşme parametrelerinin farklı değerleri için kapsamlı faz diyagramları elde edilmiştir. Jascur ve Kaneyoshi (1996), amorf sistemler için çok katmanlı Ising modelinin faz diyagramlarını ve mıknatıslanmaların sıcaklığa göre değişimlerinin yine etkin alan teorisini kullanmak suretiyle elde etmişlerdir. Htoutou ve arkadaşları (2004), spin korelasyon fonksiyonu için bir olasılık dağılım tekniğini kullanarak çift katmanlı Ising sistemine kristal alan etkisini incelemiştir. Ayrıca korelasyonlu etkin alan teorisini  $B$  tek katman yapısı içinde magnetik özelliklerinin enine kristal alan etkisiyle kare örgü için detaylı olarak incelemiştir. Wiatrowski (2000), farklı değişim etkileşimleri ile ince ferromagnetik çift katmanlı yapılar için karışık spin değerleri ile çalışmalar yapmıştır. Kritik sıcaklıkların faz diyagramları, arayüz parametreleri ve katman magnetizasyonlarının sıcaklığa bağlılığını ortaya koymuştur. Kaneyoshi (2001), etkin alan teorisini diferansiyel operatör tekniği çerçevesinde aynı  $L$  kalınlıklı iki farklı ferroelektrik plakanın ( $S_i-1/2$ ,  $\sigma_i-1/2$  çift katmanlı Ising sisteminin) kritik özelliklerini incelemiştir. Jiang (2002), farklı etkileşme parametreleri ve farklı spin değerleri ile  $A$  ve  $B$  gibi iki magnetik tabakadan oluşan ferromagnetik ve ferrimagnetik çift katmanlı sistemin faz diyagramlarını enine kristal alan varlığında incelemiştir. Diğer taraftan tabaka yapısındaki Ising modeli, Bethe örgüsü üzerinde tam tekrarlamalı tekniği kullanılarak incelenmiştir. (Ekiz, 2006). Bu çalışmada çift tabakalı Bethe örgüsü yapısındaki Ising modeli için tam formülasyon yapılmış ve sistemin faz dönüşümleri, termal değişimler ve faz diyagramları tam olarak incelenmiştir. Ayrıca modelin taban durum özellikleri de analitik olarak incelenmiştir. Essaoudi (2007), tabakalardaki  $1/2$  ve  $3/2$  spin değerleri için Ising modelinin magnetik özelliklerini incelemiş, mıknatıslanmanın termal davranışlarını ve magnetik alınganlığın etkileşim parametreleriyle olan davranışını göstermiştir. Du (2006), bir doğrusal grup ortalama alan yaklaşımını ferromagnetik/antiferromagnetik Ising örgüsünün magnetik özelliklerinin

incelenmesi çalışmasında kullanmış, tek iyon anizotropisi ile spin-1/2 ferromagnetik tek katman ve spin-1 antiferromagnetik tek katmanın birleşmesiyle oluşan bir çift katman sistemini ele almıştır. Farklı tek iyon anizotropisi için çok katmanlı değişim çiftinin bir fonksiyonu olarak geçiş sıcaklığını vermiş ve magnetik alınganlığın ve mıknatıslanmanın belli başlı özelliklerinin analizini yapmıştır. Literatürdeki bu çalışmalara rağmen, iki tabakadan oluşan çift katmanlı Ising sisteminin magnetik özellikleri, en düşük dereceli kümesel değişim metodu kullanılarak kapsamlıca incelenmemiştir. Özellikle düzen parametrelerinin (tabaka mıknatıslanmaları) ve toplam mıknatıslanmanın sıcaklıkla değişimleri ve meydana gelen faz geçişleri, taban durumu faz diyagramları incelenmemiştir. Biz bu çalışmamızda en düşük dereceli kümesel değişim metodunu çift katmanlı Ising sistemine uygulayacağız. Önce küme diye adlandırılan zayıf etkileşen sistemler topluluğu belirlenecek ve iç değişkenler tanımlanarak, kümenin konfigürasyonu, iç değişkenler cinsinden ifade edilecektir. Yani her iki alt katman için ağırlık faktörü olarak adlandırılan  $W$  bulunacaktır. Son olarak da serbest enerji ifadesi bulunup, iç değişkenlere göre minimize edilerek, öz-bağıllık denklem sistemi elde edilecektir.  $m_A$  ve  $m_B$  ortalama magnetizasyondur ki (mıknatıslanma), bir tarafa yönelmenin diğer tarafa yönelmeden fazlalığını gösterir ve dipol momenti diye de adlandırılır. Tabaka yapısındaki Ising modelinin ayrıntılı gösterimi ve kümesel değişim metodunun modele uygulanması bir sonraki bölümde yapılacaktır.

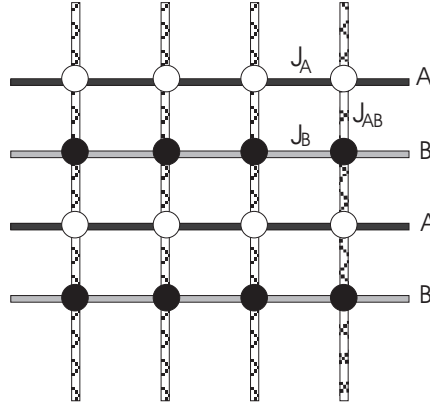
### 3. MATERYAL VE YÖNTEM

#### 3.1 Materyal

Bu çalışmada göz önüne alınacak olan sistem,  $A$  ve  $B$  olarak çift tabakalı bir örgü üzerindeki aşağıdaki Hamiltonyenle tanımlanan spin- $\sigma$  ( $\sigma = 1/2$ ) ve spin- $S$  ( $S = 1/2$  ve  $1$ ) Ising modelidir:

$$H = -J_A \sum_{i \in A, j \in A} \sigma_i^A \sigma_j^A - J_B \sum_{i \in B, j' \in B} S_i^B S_{j'}^B - J_{AB} \sum_{i, i'} S_i^B \sigma_i^A - D \sum_{i'} (S_{i'}^B)^2 - h \left( \sum_i \sigma_i^A + \sum_{i'} S_{i'}^B \right). \quad (3.1)$$

Burada  $A$  tabakasındaki spini  $1/2$  ( $\pm 1/2$ ) olan parçacıklar ve  $B$  tabakasında da spini  $1$  ( $\pm 1, 0$ ) olan parçacıklar bulunmaktadır.  $J_A$  ve  $J_B$ , birinci ve ikinci tabakalardaki en yakın komşu spin çiftleri arasındaki etkileşme parametresi,  $J_{AB}$  ise ilk tabaka ve onun en yakınındaki komşu ikinci tabakanın spinleri arasındaki etkileşme parametresi ve  $D$  ise,  $B$  tabakasındaki parçacıkların spin-1 durumu olması durumunda tabakanın sahip olduğu anizotropi parametresidir. Bununla birlikte tekli tabakalardaki parçacıkların yarım spinli parçacıklardan oluşması durumunda bu terim ortadan kalkmaktadır. Son olarak sistemin Hamiltonyenindeki  $h$  terimi, dış magnetik alanı göstermektedir. Modelin tasviri bir gösterimi aşağıdaki Şekil 3.1 de  $A$  ve  $B$  tabakaları üzerine yerleştirilen atomların aynı spin değerli ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1/2$ ) ve farklı spin değerli ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1$ ) durumlarına karşılık gelmektedir. Ayrıca şekilde içi boş daireler spin-1/2 durumlu parçacıkları ve içi dolu daireler ise yarım ve bir spinli parçacıkları göstermektedir.



Şekil 3.1. İki ferromagnetik A ve B tabakalarından oluşan iki katmanlı sistemin tasviri gösterimi. Sırasıyla  $J_A$  ve  $J_B$  katmanlardaki ferromagnetik spin etkileşme parametrelerini ve  $J_{AB}$  ise komşu A ve B katmanları arasındaki etkileşme parametresini gösterir.

### 3. 2 Yöntem

Çalışmada yöntem olarak en düşük dereceli kümesel değişim metodu kullanılacaktır. Kümesel değişim metodu, ilk defa Kikuchi (1951) tarafından tanımlanmış ve daha sonra Kikuchi ve çalışma arkadaşları tarafından (1967, 1977) geliştirilmiştir. Metod, kapalı form yaklaşımlarının en önemlisi ve kullanılanlarından bir tanesidir. Ayrıca kümesel değişim metodunun zamana bağlı durumlara genelleştirilebilmesi ve birçok fiziksel problemin çözümünde iyi sonuçlar vermesi metodu önemli kılmaktadır. Örneğin, donma, magnetik düzenlilik, faz dönüşümleri, düzenli-düzensiz geçişler v.s. gibi birçok fiziksel kooperatif olayın incelenmesinde iyi sonuç verir. Kümesel değişim metodu, uzun mesafe düzen parametresi üzerine bina edilen Bragg-Williams metodu (1934, 1935) ile, uzun menzil düzen parametresiyle birlikte kısa menzil düzen parametresi üzerine kurulan Bethe metodunun (1935) geliştirilmiş şeklidir.

Genel olarak kümesel değişim metodunun fiziksel modellere uygulanmasında aşağıdaki sıra takip edilir:

1. İlk önce, küme olarak adlandırılan ve zayıf etkileşen sistemler topluluğu tanımlanır.
2. Alınan kümenin şekillenimi (konfigürasyonu), iç değişkenler cinsinden ifade edilir.

3. Şekillenim ve iç enerji yardımıyla, entropi ve serbest enerji ifadeleri elde edilir. Sonra da serbest enerji ifadesi minimize edilerek incelenen sistemin denge durumu özellikleri incelenir.

Kümesel değişim metodu, fiziksel modellerin incelenmesinde tercih edilmesinin nedenleri ise şunlardır:

1. Verilen bir kristal örgüde temel kümesel büyüklük olarak nokta seçildiğinde, metod en düşük dereceli kümesel değişim metodu olarak adlandırılır ki ortalama alan veya Bragg-Williams yaklaşımıyla, temel kümesel büyüklük en yakın komşu çiftler seçildiğinde, Bethe yaklaşımıyla aynı sonucu verdiğinden, her iki yaklaşımı da içine almasıdır.

2. Temel kümesel büyüklük üçgen veya kare ağ seçilirse, metod yüksek dereceli kümesel değişim metodu olarak adlandırılır ki ağırlık faktörünü bulmak çok zor, fakat hesaplamalar daha hassastır.

3. İç değişkenler uygun bir şekilde tanımlandıktan sonra, termodinamik değişkenlerin bu iç değişkenlere bağlı olarak elde edilmesi kümesel değişim metoduyla daha kolay olmaktadır.

4. Kümesel değişim metodunun zamana bağlı durumlara genelleştirilebilmesi ve donma, magnetik düzenlilik, faz geçişleri, düzenli-düzensiz geçişler gibi birçok fiziksel kooperatif olayın incelenmesinde iyi sonuçlar vermesinden dolayı, kapalı form yaklaşımlarının en önemlilerinden birisidir.

Ayrıca Kümesel değişim metodunun daha iyi anlaşılabilmesi için spin-1/2 Ising modeline uygulanması aşağıda verilecektir.

### 3. 2. 1 Kümesel Değişim Metodunun Spin-1/2 Ising Modeline Uygulanması

Basit bir örnek olarak kümesel değişim metodunu tek boyutta Ising modeline uygulayarak inceleyelim. Bu model basit bir kabule dayanır. Bu kabulde, örgü diye adlandırılan  $N$  tane sabit noktanın dizilmesiyle meydana gelen tek boyutlu bir örgü sistemi düşünülür. Her bir örgü noktasındaki spin magnetik momenti diye adlandırılan küçük bir mıknatıs ya + veya - doğrultuda olduğu kabul edilir. Başka bir deyişle yukarı yönelen spinler  $\uparrow$  veya + ile gösterilir ve spin yukarı, aşağı yönelen spinler  $\downarrow$  veya - ile gösterilir ve spin aşağı diye adlandırılır.

Şimdi örnek olarak, kümesel değişim metodunu, spin-1/2 Ising modeline uygulayarak kritik sıcaklığı ( $T_C$ ) bulalım. Bunun için önce serbest enerji ifadesi elde edilecektir. Serbest enerjiyi elde etmek için de iç değişkenler tanımlanacak,

sonra serbest enerji bu iç değişkenlere göre minimize edilecektir. Söz konusu iç değişkenler yaklaşım yapmaksızın sistemin entropisi ve iç enerji ifadelerini veren değişkenlerdir. Bunun için önce küme diye adlandırılan topluluk tanımlanır. Sonra kümenin şekillenimi, iç değişkenler cinsinden elde edilir ve daha sonrada serbest enerji bulunur.

Yukarıdaki işlemleri yapmak için, temel kümesel büyüklük nokta seçilir.  $X_1$  ve  $X_2$  olarak iç değişkenler cinsinden  $X_i$ 'lerin tanımlanmasında (+)'ları  $X_1$  ve (-)'leri  $X_2$  şeklinde yazılır. Bu iç değişkenler normalizasyon şartına uyacaklarından;

$$\sum_{i=1}^2 X_i \quad (3.2)$$

Bir noktayı gösteren  $X_i$ lerin tanımlanmasında (+)'ları  $X_1$  ve (-)'leri  $X_2$  şeklinde yazılır. (+) spinlerin sayısı  $X_1N$  ve (-) spinlerin sayısı  $X_2N$  olur. Böylece bu sistemdeki  $N$  tane örgü noktasına dağıtılmış spinlerin  $W$  ağırlık faktörü,

$$W = \frac{N!}{(X_1N)!(X_2N)!} \quad (3.3)$$

olur. Ayrıca entropi  $S$  ve serbest enerji  $F$ ; sırasıyla  $S = k \ln W$  ve  $F = E - TS$  şeklinde tanımlanır. Burada  $k$  Boltzman sabiti ve  $T$ 'de mutlak sıcaklıktır. Buna göre entropiyi (3.3) denkleminde yararlanarak,

$$S = kN \sum_1^2 X_i \ln X_i \quad (3.4)$$

şeklinde yazılır.  $E$ , iç değişkenler cinsinden

$$E = -\varepsilon \sum_{\langle ij \rangle} X_i X_j \quad (3.5)$$

bağıntısı ile verilir. Burada  $\langle ij \rangle$ ,  $2\omega N$  terimi içine alır.  $2\omega$ , koordinasyon sayısı olarak adlandırılır ve verilen herhangi bir konuma en yakın komşu örgü noktalarının sayısı olarak tanımlanır (lineer zincirde  $\omega = 1$ ).  $\varepsilon$ , etkileşme enerjisidir ve izotropik etkileşme alındığında  $\varepsilon_{ij}$  verilen herhangi bir  $\varepsilon$  değerine eşit olur. (3.5) eşitliği açık olarak;

$$E = -\omega N \mathcal{E}(X_1 X_1 - X_1 X_2 - X_2 X_1 + X_2 X_2) \quad (3.6)$$

şeklinde yazılır. Bu bağıntı daha kısa formda aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$E = -\omega N \mathcal{E}(X_1 - X_2)^2 \text{ dir.} \quad (3.7)$$

Bu (3.4), (3.7) ve  $F = E - TS$  denkleminde spin başına serbest enerji ifadesi,

$$\frac{F}{N} = -\omega \mathcal{E}(X_1 - X_2)^2 + \frac{1}{\beta} \sum_{i=1}^2 X_i \ln X_i - \lambda \left(1 - \sum_{i=1}^2 X_i\right) \quad (3.8)$$

şeklinde yazılır.  $\lambda$ , normalizasyon sabiti olup, Lagrange çarpanı diye adlandırılır.  $(X_1 - X_2)$  ifadesi ise  $L$  uzun menzil düzen parametresi olup,

$$L = X_1 - X_2 \quad (3.9)$$

olarak yazılır. Aynı zamanda  $X_i$  ' ler için normalizasyon şartı (3.2) denklemi ile verildiğinden (3.2) ve (3.9) denklemleri kullanılarak  $X_1$  ve  $X_2$ ,  $L$  uzun menzil parametresi cinsinden;

$$X_1 = \frac{1}{2}(1+L) \quad \text{ve} \quad X_2 = \frac{1}{2}(1-L) \quad (3.10)$$

şeklinde bulunur. (3.10) denklemi (3.8) denkleminde yerine konur ve gerekli işlemler yapılırsa,

$$\frac{F}{N} = -\omega \mathcal{E} L^2 + \frac{1}{2}(1+L) \ln \frac{1}{2}(1+L) + \frac{1}{2}(1-L) \ln \frac{1}{2}(1-L) \quad (3.11)$$

denklemi elde edilir. Bu son denklemin,  $L$  ye göre türevi alınıp minimize edilirse,

$$\frac{\partial}{\partial L} \left( \frac{F}{N} \right) = -2\omega \mathcal{E} L + \frac{1}{2} \ln \frac{X_1}{X_2} = 0 \quad (3.12)$$



$$\ln\left(\frac{X_1}{X_2}\right)^{1/2} = 2\omega\varepsilon L \quad \text{ve} \quad \left(\frac{X_1}{X_2}\right)^{1/2} = e^{2\omega\varepsilon L} \quad \text{ara işlemleri}$$

yapılarak

$$\left(\frac{X_1}{X_2}\right) = e^{4\omega\varepsilon L} \text{ elde edilir. Bu ifade, yeni bir } \theta \text{ değişkeni ile } \beta\theta = 2\varepsilon L$$

tanımlanarak,

$$\frac{X_1}{X_2} = e^{\beta(2\omega\theta)} \quad (3.13)$$

şeklinde yazılır. (3.10) denklemlerini (3.13) denkleminde yerine yazarak,

$$L = \tanh(\beta\omega\theta) \quad (3.14)$$

elde edilir. Bu (3.12) ve (3.14) denklemlerini kullanılarak,

$$2\varepsilon\beta \tanh(\omega\theta) = 0 \quad (3.15)$$

ifadesi bulunur. Burada  $\beta = \frac{1}{kT}$  ifadesi yerine yazarak,

$$\frac{kT}{\varepsilon} = \frac{2 \tanh(\omega\theta)}{\theta} \quad (3.16)$$

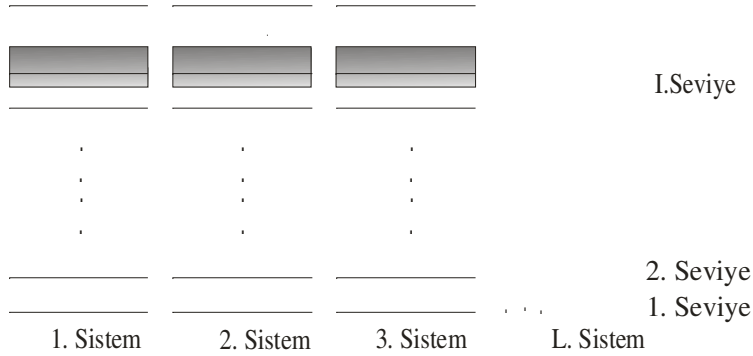
bulunur. Bu ifade (3.14) denkleminde kritik sıcaklık  $T_C$ , ( $\theta \rightarrow 0$ ) sifıra giderken,

$$kT_C = 2\omega\varepsilon \quad (3.17)$$

olarak elde edilir.  $T_C$ , kritik sıcaklıktır. Çünkü  $\theta$ ' nın sifıra gitmesi demek uzun menzil düzen parametresinin sifıra gitmesi demektir ki bu sıcaklık kritik sıcaklık olarak adlandırılır. Bu sonuç moleküler alan yaklaşımıyla bulunan sonuçla aynıdır (Huang, 1963; Kubo, 1981).

### 3.2.2 Kümesel Değişim Metodunun Fermi Parçacık Sistemine Uygulanması

Bu kesimde kümesel değişim metodunu Fermi parçacık sistemine uygulayarak, herhangi bir  $r$  kuantum durumunda bulunan parçacık sayısı (bazen işgal sayısı olarak da adlandırılır) bulunacaktır. Kümesel değişim metodunun ilk adımı, zayıf olarak etkileşen sistemler topluluğu tanımlamak olduğundan ilk olarak bağımsız Fermi parçacıkları için sistem topluluğunun tanımlayalım. Bir sistemin içinde  $N$  parçacık olduğunu ve bir parçacığın  $i = 1, 2, 3, \dots$  parametreleriyle belirtilen durumlarda olabileceğini varsayalım.  $i$  durumundaki bir parçacığın enerjisi  $\mathcal{E}_i$  olsun. Fermi istatistiğine göre bir durumda birden fazla parçacık bulunamaz ve basitlik için durumlarında katlılık (dejenere) olmadığını kabul ediyoruz. Sistemin durumunu özelleştiren iç değişkenler  $i = 1, 2, 3, \dots$  gibi  $i$  seviyelerini işgal eden  $X_i$ 'nin olasılık takımlarıdır.



Şekil-3.2 Fermi Parçacık Sistemi

Fermi parçacıklarından meydana gelen  $L$  sistemli topluluk (assembly) her bir sistemin  $i$  seviyeleri kalın çizgilerle çizilmiştir. Kümesel değişim metodunun ikinci adımı; alınan sistemin şekillenimi iç değişkenler cinsinden ifade edilir. Sistemin girilebilir durumlarının sayısı  $X_i$ 'ler cinsinden ifade edilecektir. Bütün topluluk için enerji,

$$\bar{E} = L \sum_{i=1}^{\infty} \mathcal{E}_i X_i \quad (3.18)$$

ile verilir. Sistemin  $X_i L$  tanesinin  $i$  seviyesinde geri kalan  $(1 - X_i)L$  tanesinin diğer seviyelerde olduğu değişik şekillenimlerin sayısı;

$$\frac{L!}{(X_i L)! [(1 - X_i) L]!} \quad (3.19)$$

dır. Sistemi oluşturan toplam sayı  $X_i$  ( $i=1, 2, \dots$ ) değerini aldığında,

$$\Omega = \prod_{i=1}^{\infty} \frac{L!}{(X_i L)! [(1 - X_i) L]!} \quad (3.20)$$

bulunur.

Kümesel değişim metodunun son basamağı ise; şekillenim ve iç enerji ifadeleri yardımı ile entropi ve serbest enerji ifadelerinin elde edilmesi ve serbest enerjinin minimize edilmesi ile sistemin denge durumunun incelenmesidir. Entropi ifadesinde denklem (3) yerine yazılırsa;

$$S = k \ln \frac{L!}{(X_i L)! [(1 - X_i) L]!} \quad (3.21)$$

$$S = -kL \sum_i X_i \ln X_i + L(1 - X_i) \ln(1 + X_i) \quad (3.22)$$

ve denklem (3.22)' de serbest enerji ifadesinde yazılırsa,

$$F = L \sum_i \varepsilon_i X_i - T \left[ -kL \sum_i X_i \ln X_i + L(1 - X_i) \ln(1 + X_i) \right] - \mu L \left[ \sum_i X_i - N \right] \quad (3.23)$$

elde edilir. Sistemlerin parçacıklarının toplam sayısı  $N$  iken;

$$\sum_i X_i - N = 0 \quad (3.24)$$

$\mu$  Lagrange çarpanıdır. Sistem denge durumunda iken serbest enerji minimumdur.

$$\frac{dF}{dX_i} = -L[\varepsilon_i + kT[\ln X_i - \ln(1 - X_i)]] - \mu = 0 \quad (3.25)$$

$$-kT[\ln X_i - \ln(1 - X_i)] = \varepsilon_i - \mu \quad (3.26)$$

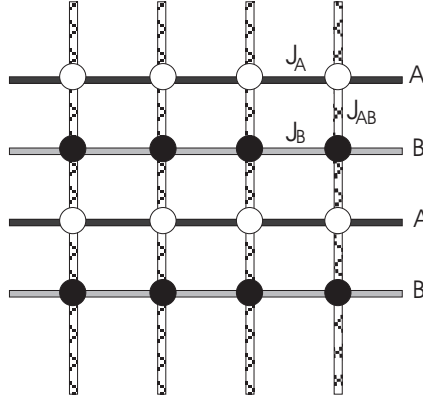
$$X_i = \frac{1}{\exp[(\varepsilon_i - \mu)/kT] + 1} \quad (3.27)$$

bulunur. Bu parçacığın  $i$  düzeyinde bulunma ihtimaliyetidir ve Fermi dağılımı olarak bilinir ve diğer yöntemlerle bulunan sonuçla aynıdır.

## 4. BULGULAR VE TARTIŞMA

### 4. 1. Kümesel Değişim Metodunun $\sigma = 1/2$ ve $S = 1/2$ Katmanlı Ising Modeline Uygulanması

Bu kesimde kümesel değişim metodu ile iki durumlu Ising modeli, yani her iki tabakadaki spin değerleri  $1/2$  olması durumu ele alınacaktır. Tabaka sistemi aşağıdaki şekilde içi boş ve dolu dairelerle görülen, sırasıyla  $A$  ve  $B$  tabakalarındaki örgü noktalarına yerleşmiş  $\sigma_i = \pm 1/2$  ve  $S_{i'} = \pm 1/2$  spin değişkenlerine sahip iki katmanlı bir sistem olarak tanımlanır.



Şekil 4.1: İki ferromagnetik  $A$  ve  $B$  tabakalarından oluşan iki katmanlı sistemin gösterimi. Sırasıyla  $J_A$  ve  $J_B$  katmanlardaki ferromagnetik spin etkileşme parametrelerini ve  $J_{AB}$  ise katmanlar arasındaki etkileşme parametresini gösterir.

$A$  tabakasındaki her bir spin durumunun ortalama değeri  $X_1^A$  ve  $X_2^A$  ile,  $B$  tabakasındaki her bir spin durumunun ortalama değeri  $X_1^B$  ve  $X_2^B$  ile gösterilecek, ayrıca durum veya nokta değişkenleri olarak adlandırılacaktır. Burada  $X_i$ , herhangi bir spinin  $i$ 'nci ( $i=1, 2$ ) durumda olma olasılığıdır. İç değişkenler  $A$  ve  $B$  tabakaları için normalizasyon şartına uyacaklarından

$$\sum_{i=1}^2 X_i^A = 1 \quad \text{ve} \quad \sum_{i'=1}^2 X_{i'}^B = 1, \quad (4.1)$$

olarak yazılır. Diğer taraftan model, aşağıdaki gibi uzun mesafe düzen parametresi olan  $A$  ve  $B$  tabakaları için ortalama mıknatıslanmalar (magnetizasyonlar),  $\langle \sigma_i \rangle$  ve  $\langle S_{i'} \rangle$  olarak tanımlanır ki, bir tarafa yönelmenin diğer tarafa yönelmeden fazlalığını gösterir ve dipol momentleri olarak da adlandırılır. Düzen parametrelerinin iç değişkenler cinsinden değerleri

$$m_A = \langle \mu_i^A \rangle = X_1^A - X_2^A$$

ve

$$m_B = \langle S_{i'}^B \rangle = X_1^B - X_2^B \quad (4.2)$$

olarak hesaplanır. (4.1) ve (4.2) denklemlerinin kullanılmasıyla  $A$  ve  $B$  tabakaları için iç değişkenler, düzen parametreleri cinsinden

$$X_1^A = \frac{1}{2}(1 + m_A), \quad X_2^A = \frac{1}{2}(1 - m_A),$$

ve

$$X_1^B = \frac{1}{2}(1 + m_B), \quad X_2^B = \frac{1}{2}(1 - m_B), \quad (4.3)$$

olarak bulunur. Böylece bu dönüşümlerle elde edilen spin ortalama kesirsel değerleri, uzun mesafe düzen parametreleri cinsinden ifade edilmiş olur.

Tek tabakalardaki bilineer etkileşme parametreleri ( $J_A$  ve  $J_B$ ) ve komşu tabakalar arasındaki spin etkileşme terimini ( $J_{AB}$ ) içeren tabaka sisteminin bir dış magnetik alan varlığındaki Hamiltonyeni

$$H = -J_A \sum_{i \in A, j \in A} \sigma_i^A \sigma_j^A - J_B \sum_{i' \in B, j' \in B} S_{i'}^B S_{j'}^B - J_{AB} \sum_{i, i'} S_{i'}^B \sigma_i^A - h \left\{ \sum_i \sigma_i^A + \sum_{i'} S_{i'}^B \right\} \quad (4.4)$$

formunda verilir. Burada,  $A$  tabakası üzerinde  $\sigma_i^A$ ,  $\pm 1/2$  ve  $B$  tabakası üzerinde  $S_{i'}^B$ ,  $\pm 1/2$  değerlerini alabilir ve Hamiltonyendeki ilk iki toplam aynı tabakalar üzerindeki en yakın etkileşmeli komşu spin çiftleri üzerinden alınır. Aynı tabakalar üzerindeki ferromagnetik spin etkileşmelerinin  $J_A > 0$ ,  $J_B > 0$  ve komşu tabakalar arasındaki spin etkileşmelerinin antiferromagnetik olması durumunda,

nümerik hesaplamalarda  $J_{AB} < 0$  olarak alınır. Modelin magnetik özelliklerinin incelenmesi için, her bir  $A$  ve  $B$  tabaka yapıları mıknatıslanmaların elde edilmesi gereklidir. Bunun için ortalama-alan yaklaşımına eşdeğer olan en düşük dereceli kümesel değişim metodu modele uygulanacaktır.  $A$  ve  $B$  tabakaları için ağırlık faktörleri  $W^A$  ve  $W^B$  iç değişkenler cinsinden

$$W^A = \frac{N^A!}{\prod_{i=1}^2 (X_i^A N^A)!} \quad \text{ve} \quad W^B = \frac{N^B!}{\prod_{i=1}^2 (X_i^B N^B)!}, \quad (4.5)$$

olarak ifade edilir ki burada  $N^A$  ve  $N^B$ ,  $A$  ve  $B$  tabakalarındaki örgü nokta sayısıdır. Diğer taraftan sistemin iç enerjisi kümesel değişim metodunda

$$\frac{E}{N} = -J_A m_A^2 - J_B m_B^2 - J_{AB} m_A m_B - h(m_A + m_B), \quad (4.6)$$

şeklinde yazılır. Denklem (4.6) ve denklem (4.3)'den, iç enerji, iç değişkenler cinsinden

$$\begin{aligned} \frac{E}{N} = & -J_A (X_1^A - X_2^A)^2 - J_B (X_1^B - X_2^B)^2 - J_{AB} (X_1^A - X_2^A)(X_1^B - X_2^B) \\ & - h(X_1^A - X_2^A)(X_1^B - X_2^B), \end{aligned} \quad (4.7)$$

olarak ifade edilir. Burada  $N = N_A + N_B$  toplam örgü nokta sayısıdır. Entropinin tanımından ( $S = k_B \ln W$ ) yazılabilir. Sistemin entropisi, parçacık sayısının çok büyük olduğunu dikkate alarak, Stirling yaklaşımını ( $\ln N! \cong N \ln N - N$ ) kullanarak her bir tabaka için ayrı ayrı hesaplanabilir. Toplam entropi ise tabaka entropilerinin toplamına eşittir. Sistemin serbest enerjisi,  $F = E - TS$  bağıntısıyla verilir. (4.7) denklemini entropi ifadesiyle birlikte serbest enerji ifadesinde kullanarak, sistemin serbest enerjisi için,

$$\begin{aligned} F = & N(-J_A m_A^2 - J_B m_B^2 - J_{AB} m_A m_B - h(m_A + m_B)) + \frac{N}{\beta} \left[ \sum_{i=1}^2 X_i^A \ln X_i^A \right. \\ & \left. + \sum_{i=1}^2 X_i^A \ln X_i^A + \lambda^A (1 - \sum_{i=1}^2 X_i^A) + \lambda^B (1 - \sum_{i=1}^2 X_i^B) \right], \end{aligned} \quad (4.8)$$

bağıntısı bulunur. Burada  $\lambda^A$  ve  $\lambda^B$  normalizasyon şartını sağlamak için kullanılır.  $\beta = 1/k_B T$ ,  $T$  mutlak sıcaklık ve  $k_B$  Boltzman sabitidir. Molekül başına serbest enerji ise,  $\phi = F/N$  bağıntısından bulunur. Böylece tabakalar için uzun mesafe düzen parametreleri, yana tabaka mıknatıslanmaları  $m_A$  ve  $m_B$ , sistem dengede iken serbest enerji minimum olacağından parçacık başına serbest enerjinin iç değişkenlere göre minimize edilmesiyle bulunur:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial X_i^A} = 0 \quad (i=1, 2) \quad \text{ve} \quad \frac{\partial \Phi}{\partial X_i^B} = 0 \quad (i'=1, 2) \quad (4.9)$$

(4.2), (4.8) ve (4.9) denklemlerini birlikte kullanarak, öz-bağıllık denklem sistemi,

$$m_A = \frac{1}{2} \tanh \left[ \beta (J_A m_A + \frac{1}{2} J_{AB} m_B + \frac{1}{2} h) \right]$$

ve

$$m_B = \frac{1}{2} \tanh \left[ \beta (J_B m_B + \frac{1}{2} J_{AB} m_A + \frac{1}{2} h) \right], \quad (4.10)$$

olarak elde edilir. Şimdi tabaka yapısına sahip Ising modelinin magnetik özelliklerini öz-bağıllık denklem sistemi olan denklem (4.10)'u iterasyon veya Newton-Raphson yöntemini kullanarak inceleyebiliriz. Özellikle tek tabakaların mıknatıslanmalarının sıcaklığa göre değişimleri ile net mıknatıslanmanın sıcaklıkla değişimleri ve faz dönüşümleri kapsamlı olarak incelenecektir. Ayrıca sistemin faz diyagramları da elde edilecektir.

#### 4. 1. 1 Tabaka Magnetizasyonu ve Toplam Magnetizasyonların Sıcaklığa Göre Değişimleri

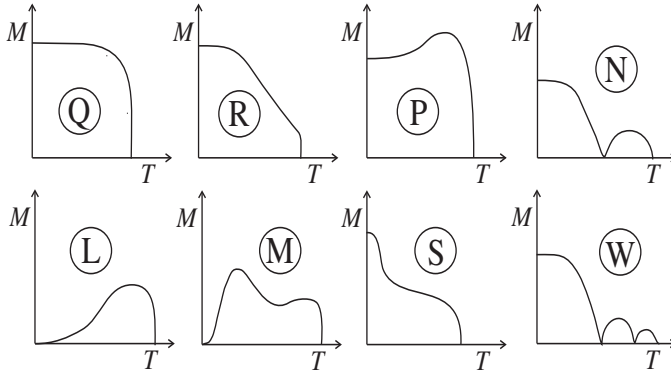
Bu kesimde sistemin tabaka magnetizasyonlarının ve toplam magnetizasyonun sıcaklığa göre değişimi incelenecektir. Bu amaçla faz dönüşümlerinin sınıflandırılmasında kullanılan ve Şekil 4.2. de verilen Neel sınıflandırmasından yararlanılacaktır.

Tabaka ve net mıknatıslanmaların sıcaklığa göre değişimleri Şekil 4.3-4.8'de görülmektedir. Sıcaklığa göre elde edilen magnetizasyonların ( $m_A$  ve  $m_B$ ) grafikleri, bütünüyle modeli tanımlayan Hamiltonyendeki etkileşme

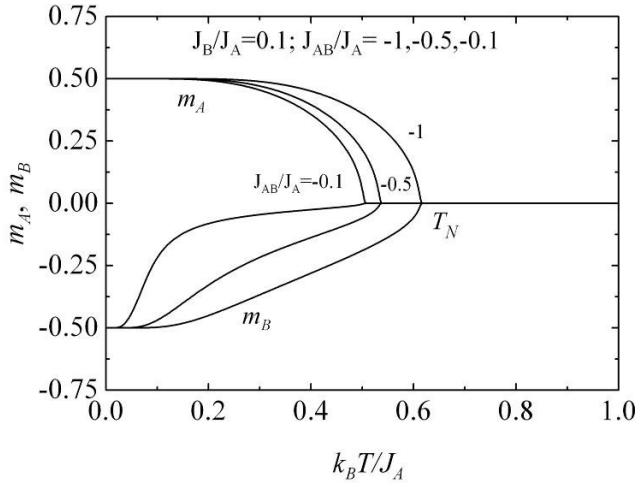


parametrelerine ve spin değerlerine göre değişiklik göstermektedir. Şekillerde görülen tüm çözümler, en düşük enerjiye sahip kararlı durum çözümlerini göstermektedir. Şekil 4.3, komşu tabakalar arasındaki etkileşme parametresi  $J_{AB}$  nin -1, -0.5 ve -0.1 değerleri için  $J_B = 0.1$  sabit değerinde, tabaka magnetizasyonlarının termal değişimlerini göstermektedir. Burada görüldüğü gibi sıcaklık arttıkça magnetizasyonlar azalmakta ve belli bir sıcaklık değerinde yok olmakta, Neel sıcaklığı olarak adlandırılan bu sıcaklıkta ikinci dereceden faz dönüşümü meydana gelmektedir.  $J_{AB}$  nin -1 den -0.1 e değiştirilmesi yani daha zayıf antiferromagnetik komşu tabakalar arasındaki etkileşme durumunda magnetizasyonlar daha düşük sıcaklıklarda faz dönüşümü geçirmektedirler ve bu durum Şekil 4.3 de açıkça görülmektedir. Ayrıca yine burada görüldüğü gibi tabaka magnetizasyonları arasında simetri bozulması vardır ve bu bozulma  $J_{AB}$  küçüldükçe artmaktadır. B tabakasındaki etkileşme parametresi  $J_B$  nin 0.1 de  $J_B = 0.5$  çıkarılması esnasında magnetizasyonların termal değişimleri üç farklı  $J_{AB}$  parametresi için Şekil 4.4 de verilmektedir. Bir önceki duruma göre burada görüldüğü gibi  $J_B$  nin artışıyla ikinci dereceden faz dönüşüm sıcaklığı artmaktadır. Diğer taraftan, Şekil 4.5 de görüldüğü gibi tabakalardaki spin etkileşme parametrelerinin aynı değerli olması durumunda ( $J_A = J_B = 1$ ) magnetizasyonlar için tam bir simetrik durum elde edilmektedir. Tabaka magnetizasyonları burada da görüldüğü gibi sadece ikinci dereceden antiferromagnetik faz dönüşümü geçirmekte ve tabaka mıknatıslanmaları faz dönüşüm sıcaklığına simetrik olarak yaklaşmaktadır. Tabakalar arasındaki  $J_{AB}$  etkileşme parametresinin artması ise ikinci derece faz dönüşüm sıcaklığını azaltmaktadır. Diğer taraftan tek tabakalar üzerindeki farklı ferromagnetik etkileşmeleri incelemek üzere Şekil 4.6 da B tabakasındaki daha kuvvetli etkileşmeler ( $J_B / J_A = 2$ ) ele alındı. Bu defa A tabakasındaki mıknatıslanmanın simetrisi bozulmakta fakat diğer mıknatıslanma ile aynı faz dönüşüm sıcaklığına sahip olmaktadır. Şekil 4.3 ve 4.6 daki etkileşme parametrelerine karşılık gelen sistemin net magnetizasyonun sıcaklığa göre değişimini görebilmek için Şekil 4.7 ve 4.8 deki net magnetizasyonun sıcaklığa göre değişim grafikleri elde edilmiştir. Her iki şekilde de görülen net magnetizasyonların ancak tabakalardaki farklı ferromagnetik etkileşmeler durumunda ortaya çıktığı, diğer taraftan tabakalardaki eşit ferromagnetik etkileşmeler durumunda tabaka mıknatıslanmalarının tam bir simetrik durum sergilemesinden dolayı net magnetizasyonun oluşmaması yani sıfır olmasıdır. Ayrıca tabakalar arası etkileşmenin ( $J_{AB} / J_A = -1, -0.5, -0.1$ ) artması net mıknatıslanmayı artırmakta fakat Neel sıcaklığını azaltmaktadır. Yine Şekil

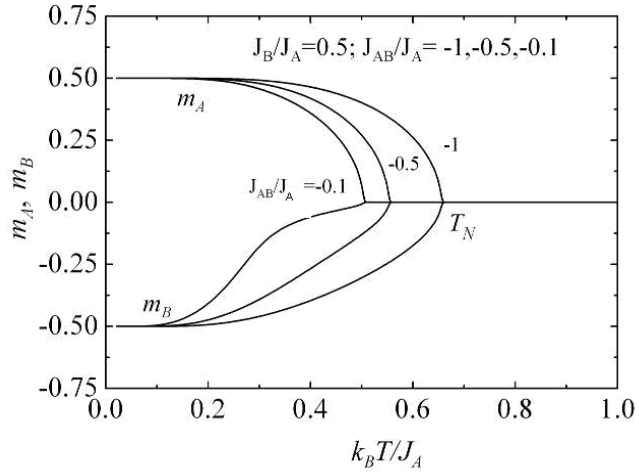
4.2’de verilen toplam magnetizasyonun farklı sıcaklık deęişimlerine göre verilen Neel sınıflandırmasına göre, Şekil 4.7 ve 4.8’deki toplam magnetizasyonun sıcaklığa göre deęişiminin L tipi bir faz dönüşümü olduęu görülmektedir. Bu kesimde son olarak Şekil 4.9’da magnetik alanın sistem üzerindeki etkisini görebilmek için net mıknatıslanmanın magnetik alana göre deęişimi elde edilmiştir. Burada göze çarpan en önemli özellik, alçak sıcaklıklarda net mıknatıslanmanın düzlük yapısı sergilemesi ve belli bir magnetik alan deęerinde keskin atlama yapmasıdır.



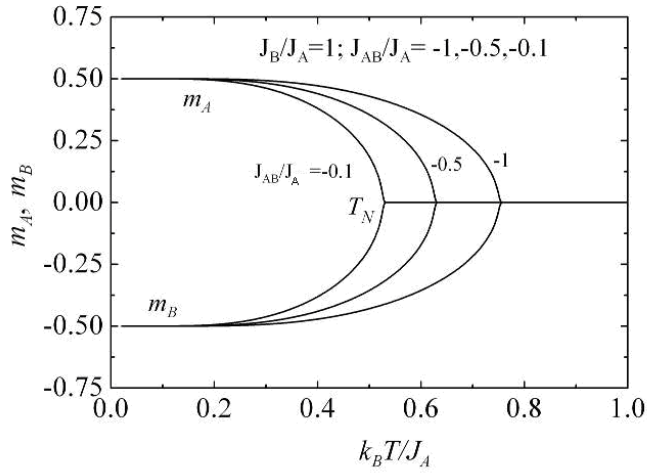
Şekil 4.2: Toplam magnetizasyonun ( $M$ ) farklı sıcaklık deęişimleri için kapsamlı Neel sınıflandırması



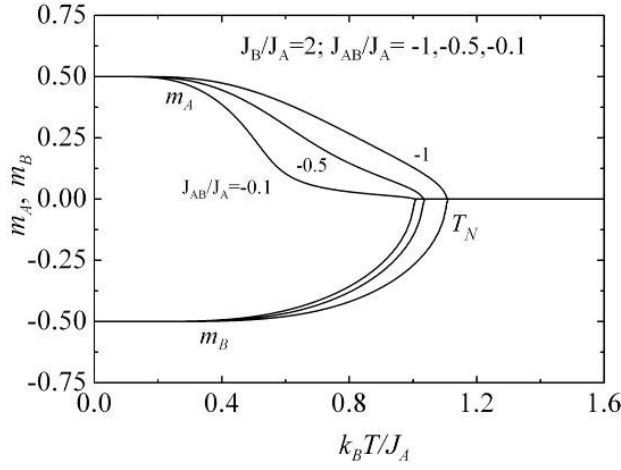
Şekil 4.3 İki katmanlı Ising modelinde ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1/2$ ),  $J_B / J_A = 0.1$  için tabaka magnetizasyonlarının sıcaklıkla olan deęişimi.  $T_N$ , Neel sıcaklığında mıknatıslanmalar ikinci dereceden sürekli faz dönüşümü geçirmektedir.



Şekil 4.4 : İki katmanlı Ising modelinde ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1/2$ ),  $J_B / J_A = 0.5$  için tabaka magnetizasyonlarının sıcaklıkla olan değişimi.  $T_N$ , Neel sıcaklığında mıknatıslanmalar ikinci dereceden sürekli faz dönüşümü geçirmektedir.

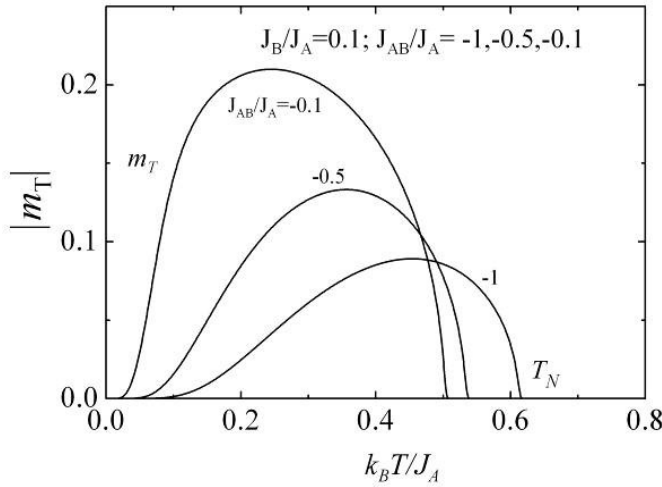


Şekil 4.5: İki katmanlı Ising modelinde ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1/2$ ), tekli tabakalardaki eşit ferromagnetik etkileşimler durumunda ( $J_B / J_A = 1$ ) tabaka magnetizasyonlarının sıcaklıkla olan değişimi. Bu durumda sistemde tam bir simetri elde edilmekte ve mıknatıslanmal Neel sıcaklığına simetrik olarak yaklaşmakta ve faz dönüşümü geçirmektedir.

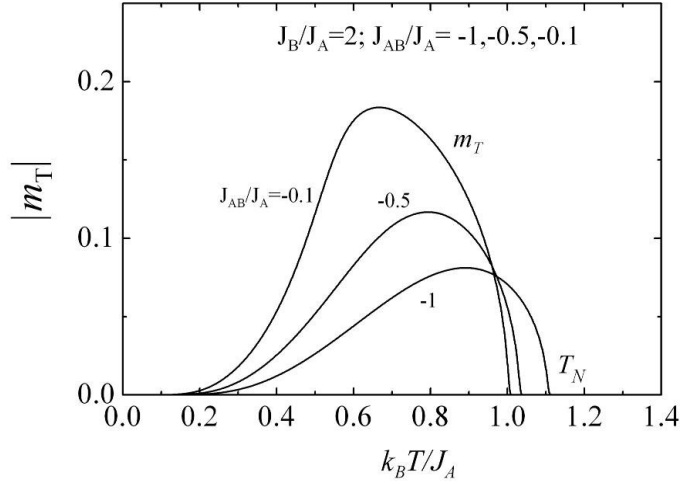


Şekil 4.6. İki katmanlı Ising modelinde ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1/2$ ), tekli tabakalardaki farklı ferromagnetik etkileşmeler durumunda ( $J_B / J_A = 2$ ) tabaka magnetizasyonlarının sıcaklıkla olan değişimi.

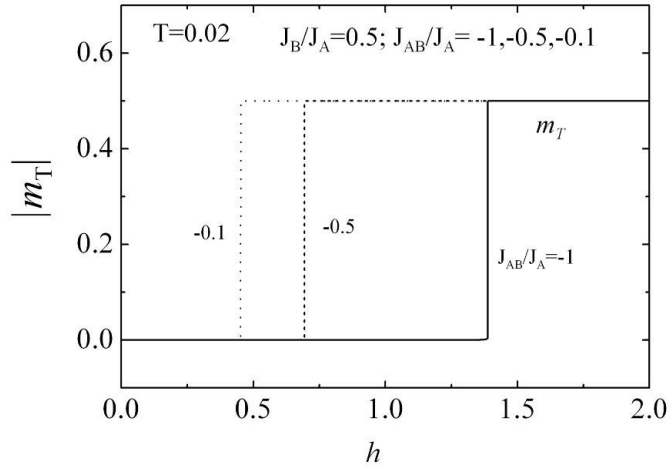
Bu durumda sistemde var olan simetri bozulmakta ve faz dönüşümü oluşmaktadır.



Şekil 4.7: İki katmanlı Ising modelinde ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1/2$ ),  $J_B / J_A = 0.1$  için net mıknatıslanmanın sıcaklıkla olan değişimi.  $T_N$ , Neel sıcaklığında mıknatıslanmalar ikinci dereceden sürekli faz dönüşümü geçirmektedir.



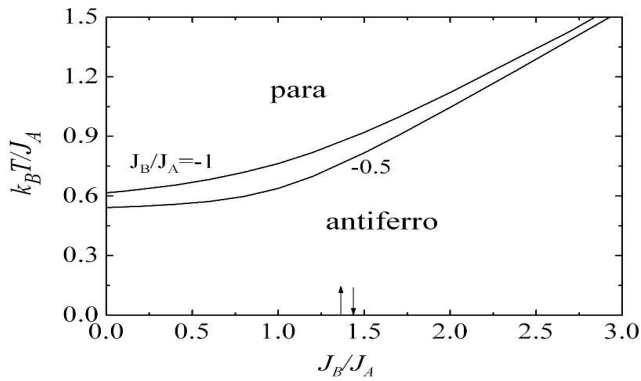
Şekil 4.8: İki katmanlı Ising modelinde ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1/2$ ),  $J_B / J_A = 2$  için net mıknatıslanmanın sıcaklıkla olan değişimi.  $T_N$ , Neel sıcaklığında mıknatıslanmalar ikinci dereceden sürekli faz dönüşümü geçirmektedir.



Şekil 4.9: İki katmanlı Ising modelinde ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1/2$ ),  $J_B / J_A = 0.5$  için net mıknatıslanmanın magnetik alanla olan değişimi.

#### 4. 1. 2 Faz Diyagramı

Bu kesimde tek tabakalar üzerindeki aynı spin değerli Ising modeli için faz diyagramı verilmiştir. Tabaka ve net mıknatıslanmalarının sıcaklığa göre olan değişiminden sistemin sadece sürekli faz dönüşümü geçirdiği ve bu faz dönüşüm sıcaklıklarının kapsamlı olarak hesaplanması ile Şekil 4.10'da görülen sıcaklık faz diyagramı elde edilmiştir. Taban durumunda aynı spin değerleri antiferromagnetik bir yönelim sergilemekte fakat sıcaklığın artışıyla birlikte sistem Neel sıcaklığında düzensiz paramagnetik faza geçmektedir.



Şekil 4.10: İki katmanlı Ising modelinde ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1/2$ ),  $J_{AB} / J_A = -1$  için faz diyagramı. Sürekli çizgiler ilinci derece faz dönüşüm çizgilerini gösterir.

#### 4. 2. Kümesel Değişim Metodunun $\sigma = 1/2$ ve $S = 1$ Katmanlı Ising Modeline Uygulanması

Bu kesimde kümesel değişim metodu ile model, tabakalardaki farklı spin değerleri için ele alınacaktır. Tabaka sistemi, sırasıyla  $A$  ve  $B$  tabakalarındaki  $\sigma_i = \pm 1/2$  ve  $S_i = \pm 1, 0$  spin değişkenlerine sahip iki katmanlı bir sistem olarak tanımlanır.  $A$  tabakasındaki her bir spin durumunun ortalama değeri  $X_1^A$  ve  $X_2^A$  ile,  $B$  tabakasındaki her bir spin durumunun ortalama değeri  $X_1^B$ ,  $X_2^B$  ve  $X_3^B$  ile gösterilecektir. Burada  $X_i$ , herhangi bir spinin  $i$ 'nci ( $i=1,2$ ) durumda olma olasılığıdır ve  $B$  tabakası için  $A$  tabakasından farklı olarak üç kesirsel değer ( $i=1, 2, 3$ ) almaktadır. İç değişkenler  $A$  ve  $B$  tabakaları için normalizasyon şartına uyacaklarından

$$\sum_{i=1}^2 X_i^A = 1 \quad \text{ve} \quad \sum_{i'=1}^3 X_{i'}^B = 1, \quad (4.11)$$

formunda yazılır. Diğer taraftan model,  $A$  ve  $B$  tabakaları için uzun mesafe düzen parametresi olan ortalama mıknatıslanmalar  $\langle \sigma_i \rangle$  ve  $\langle S_i \rangle$  olarak tanımlanır ki, bir tarafa yönelmenin diğer tarafa yönelmeden fazlalığını gösterir ve dipol momentleri olarak da adlandırılır. Düzen parametrelerinin iç değişkenler cinsinden değerleri

$$m_A = \langle \mu_i^A \rangle = X_1^A - X_2^A,$$

$$m_B = \langle S_i^B \rangle = X_1^B - X_3^B,$$

ve

$$q_B = \langle (S_i^B)^2 \rangle = X_1^B + X_3^B \quad (4.12)$$

şeklinde hesaplanır. Burada  $B$  tabakasındaki spin-1 durumu için,  $A$  tabakasından farklı olarak magnetizasyona ek olarak kuadrupolar moment ( $q_B$ ) ortaya çıkmaktadır. (4.11) ve (4.12) denklemlerinin kullanılmasıyla sırasıyla  $A$  ve  $B$  tabakaları için iç değişkenler düzen parametreleri cinsinden

$$\begin{aligned} X_1^A &= \frac{1}{2}(1 + m_A), & X_2^A &= \frac{1}{2}(1 - m_A), \\ X_1^B &= \frac{1}{2}(m_B + q_B), & X_2^B &= \frac{1}{2}(1 - q_B) \quad \text{ve} \quad X_3^B = \frac{1}{2}(q_B - m_B) \end{aligned} \quad (4.13)$$

olarak bulunur. Böylece bu dönüşümlerle elde edilen spin ortalama kesirsel değerleri, uzun mesafe düzen parametreleri cinsinden ifade edilmiş olur. Tabakalardaki spin etkileşmelerini ( $J_A$  ve  $J_B$ ) ve komşu tabakalar arasındaki spin etkileşme terimini ( $J_{AB}$ ) ve  $B$  tabakasındaki anizotropi parametresini ( $D$ ) içeren sistemin Hamiltoniyeni

$$\begin{aligned} H &= -J_A \sum_{i \in A, j \in A} \sigma_i^A \sigma_j^A - J_B \sum_{i \in B, j \in B} S_i^B S_j^B - J_{AB} \sum_{i, i'} S_i^B \sigma_i^A - D \sum_{i'} (S_i^B)^2 \\ &\quad - h \left( \sum_i \sigma_i^A + \sum_{i'} S_{i'}^B \right), \end{aligned} \quad (4.14)$$

şeklinde tasvir edilir. Burada,  $A$  tabakası üzerinde  $\sigma_i^A$ ,  $\pm 1/2$  ve  $B$  tabakası üzerinde  $S_i^B$ ,  $\pm 1, 0$  değerlerini alabilir ve Hamiltonyendeki ilk iki toplam, aynı tabaka üzerindeki en yakın etkileşmeli komşu spin çiftleri üzerinden alınır. Aynı tabakalar üzerindeki ferromagnetik etkileşmeler için bilineer etkileşme parametreleri  $J_A > 0$ ,  $J_B > 0$  ve komşu tabakalar arasındaki spin etkileşmelerinin antiferromagnetik olması durumunda  $J_{AB} < 0$  olarak alınır. Hamiltonyendeki  $D$  anizotropi parametresini ve  $h$  ise dış magnetik alanı gösterir. Modelin magnetik özelliklerinin incelenmesi için, her bir  $A$  ve  $B$  tabaka yapıları miknatislanmaların elde edilmesi gereklidir. Bunun için ortalama-alan yaklaşımına eşdeğer olan en düşük dereceli kümesel değişim metodunu kullanacağız.  $A$  ve  $B$  tabakaları için ağırlık faktörleri,  $W^A$  ve  $W^B$ , iç değişkenler cinsinden

$$W^A = \frac{N^A!}{\prod_{i=1}^2 (X_i^A N^A)!} \quad \text{ve} \quad W^B = \frac{N^B!}{\prod_{i=1}^3 (X_i^B N^B)!}, \quad (4.15)$$

olarak ifade edilir ki burada  $N^A$  ve  $N^B$ ,  $A$  ve  $B$  tabakalarındaki örgü nokta sayısıdır. Diğer taraftan sistemin iç enerjisi kümesel değişim metodunda

$$\frac{E}{N} = -J_A m_A^2 - J_B m_B^2 - J_{AB} m_A m_B - D q_B - h(m_A + m_B), \quad (4.16)$$

şeklinde yazılır. Denklem (4.12) ve (4.13)'den, iç enerjinin iç değişkenler cinsinden

$$\begin{aligned} \frac{E}{N} = & -J_A (X_1^A - X_2^A)^2 - J_B (X_1^B - X_3^B)^2 - J_{AB} (X_1^A - X_2^A)(X_1^B - X_3^B) \\ & - D(X_1^B + X_3^B) - h(X_1^A - X_2^A) - h(X_1^B - X_3^B), \end{aligned} \quad (4.17)$$

olarak ifade edilir. Burada  $N = N_A + N_B$  toplam örgü nokta sayısıdır. Entropinin tanımından,  $S = k_B \ln W$  yazılabilir. Sistemin entropisi, parçacık sayısının çok büyük olduğunu dikkate alarak, Stirling yaklaşımını ( $\ln N! \cong N \ln N - N$ ) kullanarak her bir tabaka için ayrı hesaplanabilir. Toplam entropi ise tabaka entropilerinin toplamına eşittir. Sistemin serbest enerjisi,  $F = E - TS$  bağıntısıyla verilir. (4.17) denklemini entropi ifadesiyle birlikte serbest enerji ifadesinde kullanarak, sistemin serbest enerjisi için



$$\begin{aligned}
F = N(-J_A m_A^2 - J_B m_B^2 - J_{AB} m_A m_B - Dq_B - h\{m_A + m_B\}) \\
+ \frac{N}{\beta} \left( \sum_{i=1}^2 X_i^A \ln X_i^A + \sum_{i'=1}^3 X_{i'}^B \ln X_{i'}^B + \lambda^A \left(1 - \sum_{i=1}^2 X_i^A\right) \right. \\
\left. \lambda^B \left(1 - \sum_{i'=1}^3 X_{i'}^B\right) \right), \quad (4.18)
\end{aligned}$$

bağıntısı bulunur. Burada  $\lambda^A$  ve  $\lambda^B$  normalizasyon şartını sağlamak için kullanılır.  $\beta=1/kT$ ,  $T$  mutlak sıcaklıktır ve  $k_B$  Boltzman sabitidir. Molekül başına serbest enerji ise,  $\phi = F/N$  bağıntısından bulunur. Böylece tabakalar için uzun mesafe düzen parametreleri  $m_A$  ve  $m_B$ , sistem dengede iken serbest enerji minimum olacağından parçacık başına serbest enerjinin iç değişkenlere göre minimize edilmesiyle bulunur:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial X_i^A} = 0 \quad (i=1, 2) \quad \text{ve} \quad \frac{\partial \Phi}{\partial X_{i'}^B} = 0 \quad (i'=1, 2, 3) \quad (4.19)$$

Denklem 4.19'u kullanarak, öz-bağıllık denklem sistemi,

$$\begin{aligned}
m_A &= \frac{1}{2} \tanh \left[ \beta(J_A m_A + \frac{1}{2} J_{AB} m_B) + \frac{1}{2} h \right], \\
m_B &= \frac{2 \exp(\beta D) \sinh[\beta(2J_B m_B + J_{AB} m_A + h)]}{1 + 2 \exp(\beta D) \cosh[\beta(2J_B m_B + J_{AB} m_A + h)]}, \\
q_B &= \frac{2 \exp(\beta D) \cosh[\beta(2J_B m_B + J_{AB} m_A + h)]}{1 + 2 \exp(\beta D) \cosh[\beta(2J_B m_B + J_{AB} m_A + h)]} \quad (4.20)
\end{aligned}$$

şeklinde elde edilir. Şimdi tabaka yapısına sahip Ising modelinin magnetik özelliklerini, öz-bağıllık denklem sistemi olan denklem (4.20)'i iterasyon veya Newton-Raphson yöntemini kullanarak çözerek inceleyebiliriz. Fakat öncelikle sistemin taban durumda yani sıfır sıcaklıktaki özelliklerin bilinmesi bize yüksek sıcaklıklardaki davranışını incelemek için bir yok gösterici olacaktır.

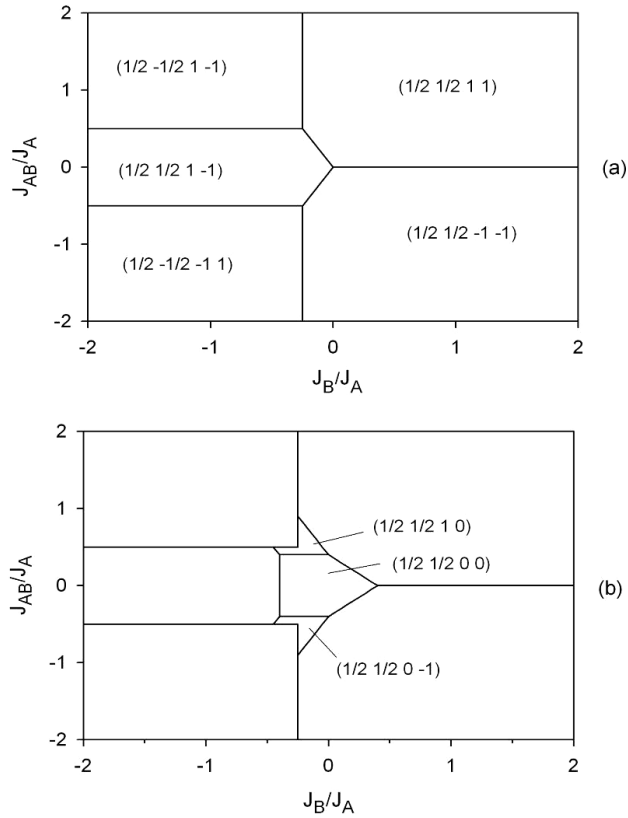
Daha sonra tabaka magnetizasyonlarının sıcaklıkla olan deęişimlerini ve faz dönüşümlerini elde edeceğiz. Ayrıca sistemin faz diyagramları da elde edilecektir.

#### 4.2.1 Taban Durum Faz Diyagramları

Bu kesimde tabaka magnetizasyonların sıcaklıkla deęişimini kapsamlı olarak incelemeden önce modelin taban durum faz diyagramları iki farklı düzlemde elde edilecektir. Sistemin taban durum enerjisi

$$E = \left[ \sigma_i \sigma_j + \frac{J_B}{J_A} S_i S_j + \frac{J_{AB}}{J_A} (S_i \sigma_i + S_j \sigma_j) + \frac{D}{J_A} (S_i^2 + S_j^2) \right] \quad (4.21)$$

bağıntısıyla verilmektedir. Taban durum faz diyagramları elde edilirken, sıfır sıcaklıkta farklı fazların Denklem 4. 22 ile verilen iç enerji deęerleri birbirine eşitlenerek bölgeler arasındaki faz sınır çizgileri elde edildi. Şekil 4.11(a)'da  $J_B / J_A - J_{AB} / J_A$  düzleminde modelin anizotropi yokluęunda ( $D / J_A = 0$ ) taban durum faz diyagramı verilmektedir. Bu durumda faz diyagramında  $(1/2, -1/2, 1, -1)$ ,  $(1/2, 1/2, 1, -1)$ ,  $(1/2, -1/2, -1, 1)$ ,  $(1/2, 1/2, 1, 1)$  ve  $(1/2, 1/2, -1, -1)$  ile gösterilen birbirinden farklı beş faz bölgesi elde edilmektedir. Elde edilen bu sonuç Hu (1999) tarafından elde edilen sonuç ile aynıdır. Ayrıca faz diyagramından görüldüğü gibi  $J_{AB}$  parametresinin düşey eksen boyunca olan deęerlerine göre simetrik fazlar elde edilmektedir. Elde edilen faz diyagramı spin-1/2 durumunda Hu ve ark. (1999) yapılan taban durum faz diyagramı ile aynıdır. Dięer taraftan sisteme anizotropi parametresinin ( $D$ ) dahil edilmesiyle taban durum faz diyagramları daha karmaşık bir yapı sergilemektedir.  $D / J_A = -0.2$  için modelin taban durum faz diyagramı Şekil 4.11(b) de verilmektedir. Burada görüldüğü gibi sistemde yeni olarak şekilde  $(1/2, -1/2, 1, 0)$ ,  $(1/2, -1/2, 0, 0)$  ve  $(1/2, -1/2, 0, -1)$  ile gösterilen yeni faz bölgeleri ortaya çıkmaktadır. Buradan anizotropi parametresinin modele dahil edilmesiyle çok daha zengin faz diyagramların ortaya çıktığı ve bu parametrenin sistemin taban durum özellikleri üzerinde önemli bir etkiye sahip olduęu anlaşılmaktadır.



Şekil 4.11: Karma spin çift tabakalı Ising modeli için  $J_{AB}/J_A - J_B/J_A$  düzleminde taban durumu faz diyagramları (a)  $D/J_A = 0$  (b)  $D/J_A = -0.2$

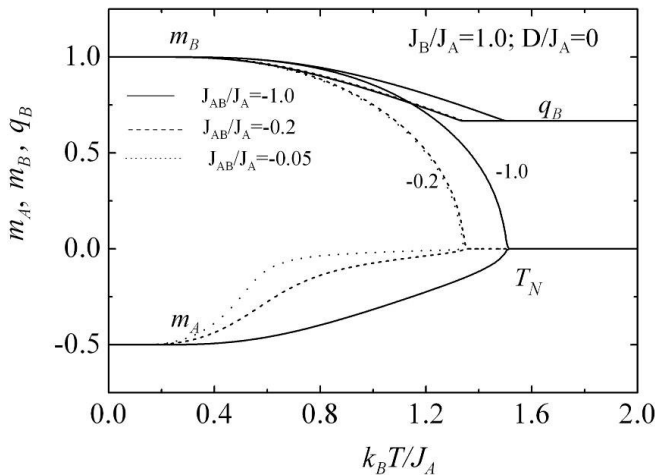
#### 4. 2. 2 Tabaka Magnetizasyonlarının Sıcaklığa Göre Değişimleri

Bu kesimde tabaka magnetizasyonların sıcaklıkla değişimleri kapsamlı olarak incelenecektir.  $A$  ve  $B$  tabakaları arasındaki bilineer etkileşme parametresi antiferromagnetik alınacak ve böylece tüm sistem bir ferrimagnet olacaktır.

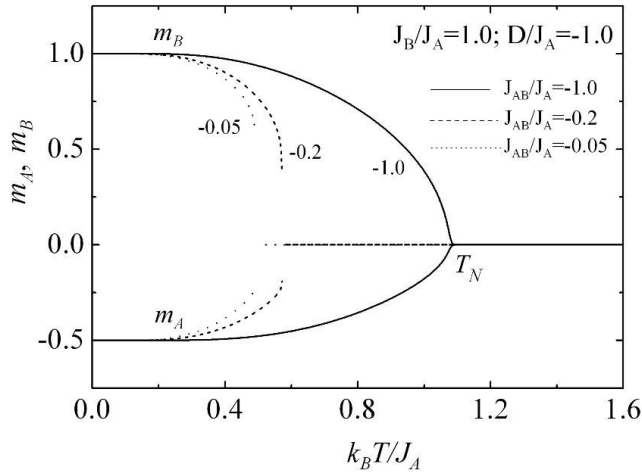
*i) Tabakaların etkileşme parametrelerinin eşit olduğu durum ( $J_B/J_A = 1$ ):*

Şekil 4.12’de tabaka sistemi için anizotropinin olmayışında aynı tabaka etkileşme parametreleri için ( $J_A = J_B = 1, D/J_A = 0$ ) magnetizasyon ve kuadrupolar moment düzen parametrelerinin sıcaklığa göre değişimleri görülmektedir. Burada görüldüğü gibi komşu tabakalar arasındaki antiferromagnetik etkileşme parametreleri ( $J_{AB}/J_A = -1, -0.2, -0.05$ ) için ferrimagnetik yönelim meydana

gelmektedir. Şekilde de açıkça görüldüğü gibi sıcaklık arttıkça magnetizasyonlar sürekli olarak azalmakta ve Neel sıcaklığında ( $T_N$ ) ikinci dereceden faz dönüşümü meydana gelmektedir. Şekildeki sürekli, kesikli ve noktalı çizgiler sırasıyla tabakalar arası etkileşme parametrelerinin ( $J_{AB}/J_A = -1, -0.2, -0.05$ ) değerlerine karşılık gelmektedir. Yine buradan görüldüğü gibi bu parametrenin büyümesi ikinci dereceden faz dönüşüm sıcaklığını düşürmektedir. Yani komşu tabaka spinlerinin kuvvetli etkileşmesi durumunda faz dönüşüm sıcaklığı azalmaktadır. Diğer taraftan  $B$  tabakası için elde edilen kuadropolar moment ( $q_B$ ) herhangi bir faz dönüşümü geçirmemekte ve etkileşme parametrelerinin değişmesi herhangi bir faz dönüşümüne yol açmamaktadır. Bu sebeple ( $q_B$ ) nin bundan sonraki diğer şekillerdeki parametreler için termal değişimleri grafiklere konulmayacaktır. Tek tabakaların ( $A$  ve  $B$ ) eşit etkileşme parametresine sahip olması durumunda ( $J_B/J_A = 1$ ), negatif anizotropi parametresinin ( $D/J_A = -1$ ) sistem üzerindeki etkisini görebilmek için Şekil 4.13'de verilen tabaka mıknatıslanmalarının sıcaklığa göre değişimleri elde edilmiştir. Burada görüldüğü gibi sistem her iki faz dönüşümüne de sahiptir. Ancak birinci derece faz dönüşümleri  $J_{AB}/J_A = -1$  ve  $-0.2$  için meydana gelmektedir. Birinci derecen faz dönüşümü, sıcaklık arttıkça magnetizasyonların sıfıra atlama yaptığı, yani süreksiz olarak değiştiği sıcaklık değerlerinde meydana gelmektedir.



Şekil 4.12: İki katmanlı Ising modeli için ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1$ ) magnetizasyon ve kuadropol moment düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi.  $T_N$ , Neel sıcaklığında ikinci dereceden sürekli faz dönüşümü elde edilmektedir.



Şekil 4.13: İki katmanlı Ising modeli için ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1$ ) tabaka magnetizasyonlarının sıcaklıkla olan değişimi.  $T_N$ , Neel sıcaklığında ikinci dereceden sürekli faz dönüşümü, kesikli ve noktali çizgilerle gösterilen eğrilerin süreksizlik gösterdiği sıcaklıklarda ise birinci dereceden faz dönüşümü meydana gelmektedir.

Modelin toplam (net) magnetizasyonunun sıcaklıkla olan değişimini inceleyebilmek yukarıdaki iki duruma karşılı gelen toplam magnetizasyonların sıcaklıkla olan değişimleri sırasıyla Şekil 4.14 ve 4.15’de elde edildi. Bu şekillerden komşu tabakalar arasındaki büyük antiferromagnetik etkileşmeler için ikinci derece faz dönüşüm sıcaklığının azalmakta olduğu görülmektedir. Ayrıca artan  $J_{AB}$  değerleri Neel sıcaklığının altında daha güçlü mıknatıslanmalar yol açmaktadır. Neel sınıflandırmasına göre buradaki faz dönüşümü  $P$  tipi sürekli faz dönüşümüdür. Fakat modelde birinci dereceden faz dönüşümünün meydana geldiği Şekil 4.15’de bunun tersi durum gözlenmektedir.

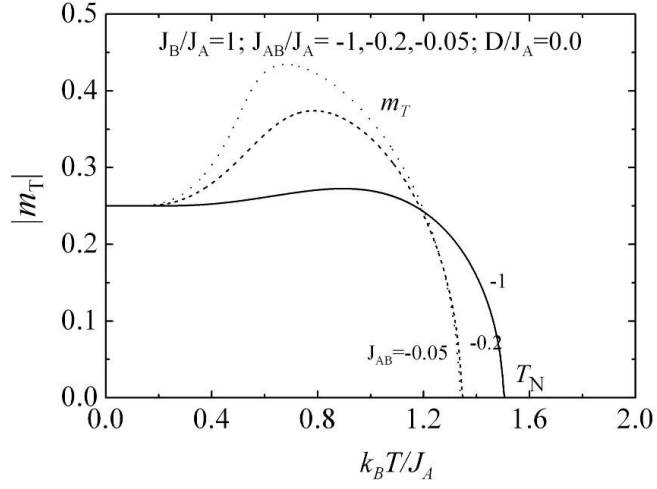
**ii) Tabakaların etkileşme parametrelerinin farklı olduğu durum ( $J_B < J_A$ ):**

Şekil 4.16 ve 4.17’de sırasıyla anizotropinin yokluğunda ve negatif anizotropi değerinde ( $D / J_A = 0, -0.8$ ),  $J_B / J_A = 0.2$  için mıknatıslanmaların sıcaklığa göre değişimleri verilmektedir. Buradan anlaşıldığı gibi sistemde yine sadece ikinci derece faz dönüşümü meydana gelmekte ve B tabakasındaki A tabakasına göre zayıf etkileşmeler yüzünden ( $J_B < J_A$ ) tabaka magnetizasyonu daha küçük değerler olarak yok olmaktadır. Diğer taraftan B tabakasındaki A tabakasına göre zayıf olan etkileşmeler modelde önemli magnetik davranışlara yol açmaktadır. Bu

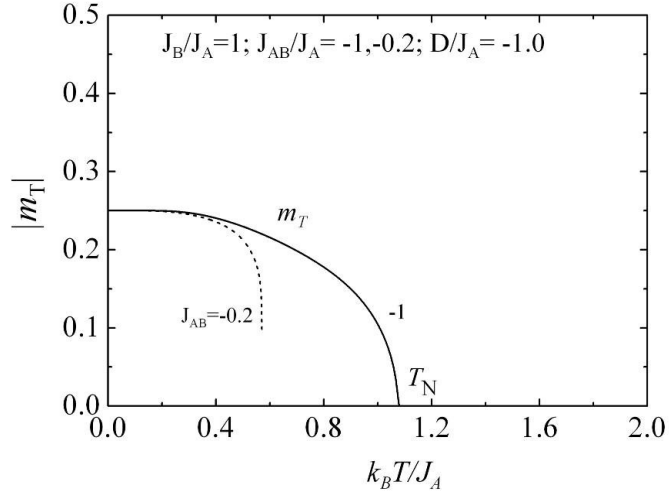
ise, Şekil 4.18’de görülen toplam magnetizasyonun sıcaklığa göre olan değişiminde görülmektedir. Grafikten görüldüğü gibi toplam magnetizasyon  $J_B / J_A = 0.2$  değerinde,  $J_{AB} / J_A = -0.2$  ve  $-0.05$  için ikinci dereceden faz dönüşüm sıcaklığı olan Neel sıcaklığının altında ilk defa yok olmakta, yani kompensasyon sıcaklığı meydana gelmekte ve bu sıcaklıkta net mıknatıslanma sıfır olmakta, sonra ise ikinci derece faz dönüşüm sıcaklığında ikinci defa sıfır olmaktadır. Dolayısıyla Neel sınıflandırmasına göre, burada  $R$  ve  $N$  tipi sürekli faz dönüşümleri meydana gelmektedir. Bununla birlikte Şekil 4.19’da sisteme negatif anizotropinin dahil edilmesiyle ( $D / J_A = -0.8$ ), kompensasyon sıcaklığı ortadan kalkmakta ve sadece Neel sıcaklığı oluşmakta, faz dönüşümü tipleri ise  $Q$  ve  $S$  tipi olmaktadır. Sistemde ortaya çıkan kompensasyon sıcaklığı, etkin-alan teorisi (Jaščur, 1993; Kaneyoshi, 1993 (a) and 1993 (b); Jiang, 2002 ve 2005) ve genişletilmiş Bethe-Peierls yaklaşımından (Du, 2004 ve 2006) elde edilen sonuçlarla uyumludur.

***iii) Tabakaların etkileşme parametrelerinin farklı olduğu durum ( $J_B > J_A$ ):***

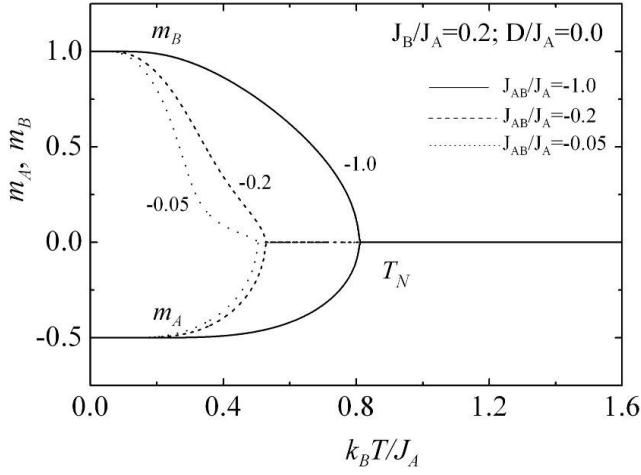
Bu durumda ( $J_B / J_A > 1$ ) olarak alınmıştır ve Şekil 4.20 ve 4.21’de görüldüğü gibi iki farklı davranış sergilemiştir. Şekil 4.20’de görülen anizotropinin olmayışında ( $D / J_A = 0$ ) sistem sadece Neel sıcaklığında ikinci dereceden faz dönüşümü geçirmekte, bununla birlikte sisteme anizotropinin dahil edilmesiyle birlikte ( $D / J_A = -6$ ) magnetizasyonların ilk defa süreksizlik gösterdiği sıcaklık değerlerinde birinci derece faz dönüşümü geçirmektedirler. Şekil 4.20 ve 4.21’deki verilen parametrelere karşılık gelen toplam magnetizasyonun sıcaklıkla olan değişimi Şekil 4.22 ve 4.23’de verilmektedir. Anizotropinin yokluğunda tabakalar arasındaki etkileşmenin artırılması ( $J_{AB} / J_A = -1, -0.2, -0.05$ ) faz dönüşüm sıcaklığını hemen hemen değiştirmemesine rağmen bu sıcaklığın altındaki mıknatıslanmayı artan yönde etkilemektedir. Burada elde edilen faz dönüşümü Neel sınıflamasına göre  $P$  tipi bir faz dönüşümüdür. Diğer taraftan  $D / J_A = -6$  için Şekil 4.23’de birinci derece faz dönüşümü elde edilmektedir.



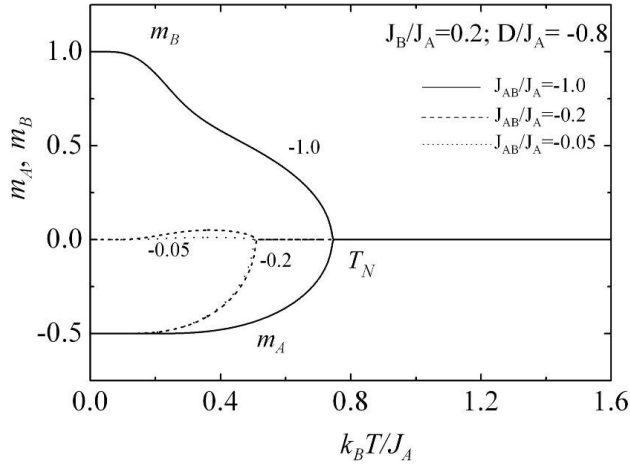
Şekil 4.14. İki katmanlı Ising modeli için ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1$ ) toplam (net) magnetizasyonun sıcaklıkla değişimi.  $T_N$ , Neel sıcaklığında ikinci dereceden sürekli faz dönüşümü meydana gelmektedir.



Şekil 4.15: İki katmanlı Ising modeli için ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1$ ) tabaka magnetizasyonlarının sıcaklıkla olan değişimi.  $T_N$ , Neel sıcaklığında ikinci dereceden sürekli faz dönüşümü, kesikli ve noktali çizgilerle gösterilen eğrilerin süreksizlik

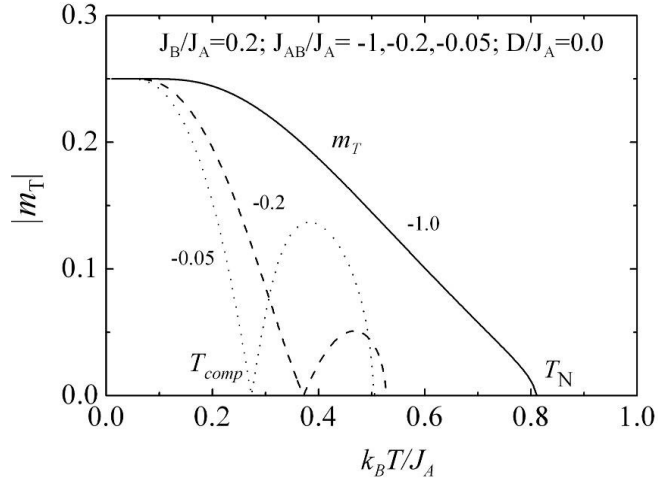


Şekil 4.16: İki katmanlı Ising modeli için ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1$ ) tabaka magnetizasyonlarının sıcaklıkla olan değişimi.  $T_N$ , Neel sıcaklığında ikinci dereceden sürekli faz dönüşümü meydana gelmektedir.

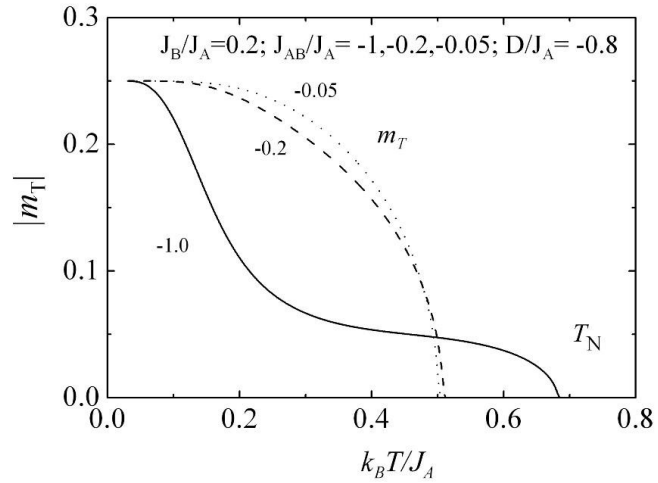


Şekil 4.17: İki katmanlı Ising modeli için ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1$ ) tabaka magnetizasyonlarının sıcaklıkla olan değişimi.  $T_N$ , Neel sıcaklığında ikinci dereceden sürekli faz dönüşümü meydana gelmektedir.

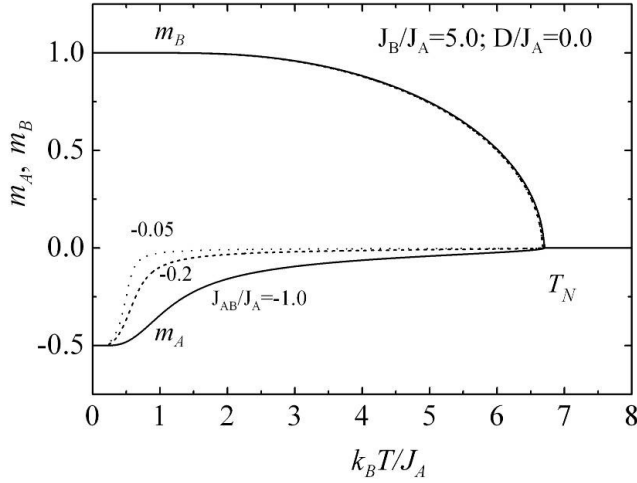




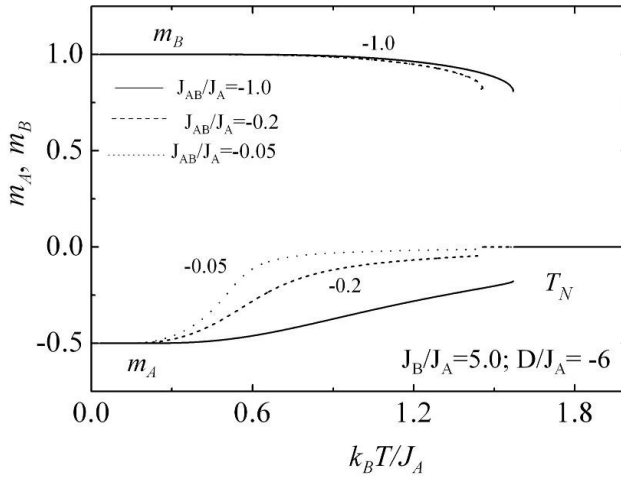
Şekil 4.18: İki katmanlı Ising modeli için ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1$ ), B tabakasındaki zayıf etkileşmeler için ( $J_B / J_A = 0.2$ ) toplam (net) magnetizasyonun sıcaklıkla değişimi.  $T_N$ , Neel sıcaklığında ikinci dereceden sürekli faz dönüşümü meydana gelmekte ve  $T_{comp}$  ile gösterilen kompensasyon sıcaklığında toplam mıknatıslanma ilk defa, ayrıca Neel sıcaklığında ikinci defa sıfır olmaktadır.



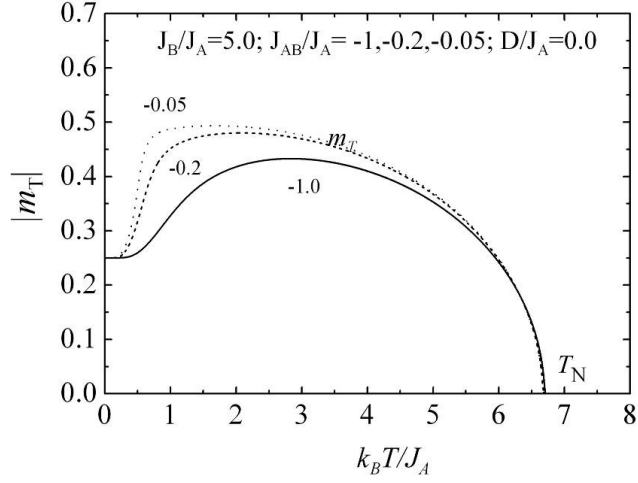
Şekil 4.19: İki katmanlı Ising modeli için ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1$ ), B tabakasındaki zayıf etkileşmeler için ( $J_B / J_A = 0.2$ ) toplam (net) magnetizasyonun sıcaklıkla değişimi.  $T_N$ , Neel sıcaklığında ikinci dereceden sürekli faz dönüşümü meydana gelmektedir.



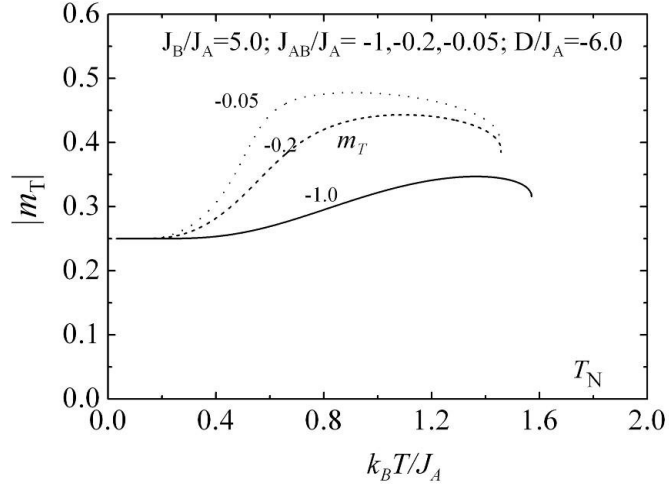
Şekil 4.20. İki katmanlı Ising modelinde ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1$ ),  $J_B / J_A > 1$  ve  $D = 0$  olması durumunda tabaka magnetizasyonlarının sıcaklıkla olan değişimi.  $T_N$ , Neel sıcaklığında ikinci dereceden sürekli faz dönüşümü meydana gelmektedir.



Şekil 4.21. İki katmanlı Ising modelinde ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1$ ),  $J_B / J_A > 1$  ve  $D \neq 0$  olması durumunda tabaka magnetizasyonlarının sıcaklıkla olan değişimi. Mıknatıslanmaların süreksizlik gösterdiği sıcaklıklarda birinci dereceden faz dönüşümü meydana gelmektedir.



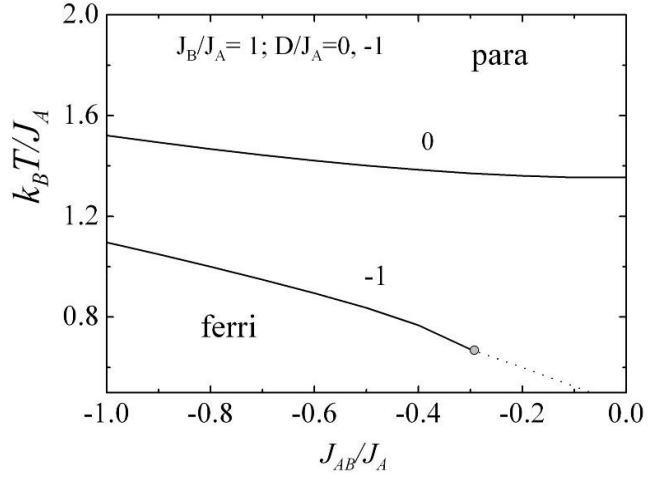
Şekil 4.22: İki katmanlı Ising modeli için ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1$ ), B tabakasındaki kuvvetli etkileşimler ( $J_B / J_A = 5$ ) ve  $D = 0$  için toplam (net) magnetizasyonun sıcaklıkla değişimi.  $T_N$ , Neel sıcaklığında ikinci dereceden sürekli faz dönüşümü meydana gelmektedir.



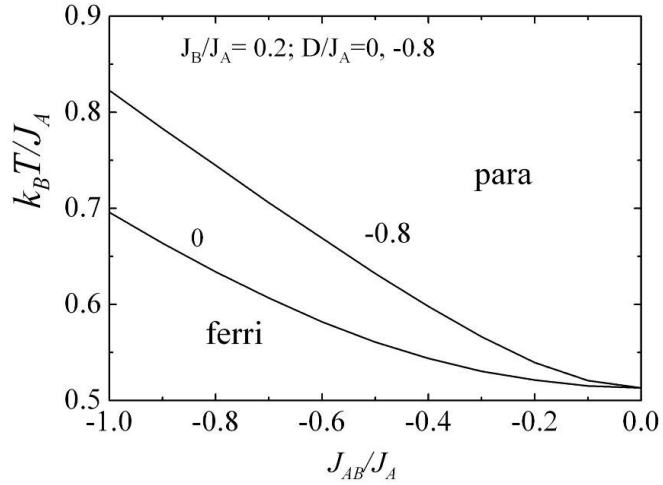
Şekil 4.23. İki katmanlı Ising modeli için ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1$ ), B tabakasındaki kuvvetli etkileşimler ( $J_B / J_A = 5$ ) ve  $D = -6$  için toplam (net) magnetizasyonun sıcaklıkla değişimi. Toplam magnetizasyonun süreksizlik gösterdiği sıcaklıklarda birinci dereceden kesikli faz dönüşümü meydana gelmektedir.

### 4. 2. 3 Faz Diyagramları

Bu kesimde bir önceki kesimde tabaka magnetizasyonlarının sıcaklığa göre değişiminin kapsamlı olarak incelenmesi neticesinde  $J_B / J_A = 1$ ,  $J_B < J_A$  ve  $J_B > J_A$  durumları için faz diyagramları incelenecektir. Faz diyagramlarının elde edilmesinde birinci derece ve ikinci derece faz dönüşüm sıcaklıkları kullanıldı. Bu amaçla faz diyagramının hassas elde edilebilmesi için modelin Hamiltonyenindeki parametreleri çok küçük adımlarla değiştirerek faz dönüşüm sıcaklıkları hesaplanmıştır. Şekil 4.24 (a)'da tek tabakalardaki ferromagnetik etkileşme parametrelerinin eşit ( $J_B / J_A = 1$ ) ve  $D / J_A = 0$  ve  $-1$  olması durumunda sistemin faz diyagramını göstermektedir. Faz diyagramındaki sürekli çizgiler ikinci derece faz dönüşüm sıcaklığını ve kesikli çizgiler ise birinci dereceden faz dönüşüm sıcaklığıdır. Ayrıca birinci ve ikinci derece faz dönüşüm çizgilerinin tam birleştiği nokta ise üçlü kritik nokta olarak adlandırılmaktadır. Üçlü kritik noktada sistem keskin magnetik ve termal özellikler sergilemektedir. Sistemde ortaya çıkan kompensasyon sıcaklığı, etkin-alan teorisi (Jaščur, 1993; Kaneyoshi, 1993 (a) and 1993 (b); Jiang, 2005 ve 2002) ve genişletilmiş Bethe-Peierls yaklaşımından (Du, 2004 ve 2006) elde edile sonuçlarla uyumlu olmasına rağmen üçlü kritik nokta, Htoutou ve ark. (2004) tarafından olasılık dağılım tekniğine dayalı etkin alan teorisi ile elde edilen ve üçlü kritik nokta davranışı görülmeyen çalışma ile uyumlu değildir. Faz diyagramında belirgin olarak iki faz bölgesi, yani düzenli ferrimagnetik faz ile, düzensiz paramagnetik faz meydana gelmektedir. Faz dönüşüm çizgileri ise bu bölgeleri birbirinden ayırmaktadır. Yine şekilden  $D / J_A = 0$  için sadece sürekli faz dönüşümü meydana gelmekte, fakat  $D / J_A = -1$  için birinci derece faz dönüşü dolayısıyla üçlü kritik nokta meydana gelmekte olduğu görülmekte ve böylece anizotropinin sistemin magnetik davranışı üzerinde önemli bir etkiye sahip olduğu anlaşılmaktadır. Şekil 4.24 (b) de, tek tabakalardaki ferromagnetik etkileşme parametrelerinin eşit olmadığı ( $J_B / J_A < 1$ ) ve  $D / J_A = 0$  ve  $-0.8$  olması durumunda sistemin faz diyagramı elde edilmiştir. Faz diyagramındaki sürekli çizgiler ikinci derece faz dönüşüm sıcaklığıdır. Faz diyagramında yine belirgin olarak iki faz bölgesi, yani düzenli ferrimagnetik faz ile düzensiz paramagnetik faz meydana gelmektedir. İkinci derece faz dönüşüm çizgileri ise bu bölgeleri birbirinden ayırmaktadır. Yine şekilden gerek  $D / J_A = 0$  için gerekse  $D / J_A = -0.8$  için sadece sürekli faz dönüşümü meydana gelmekte, böylece sistem önceki faz diyagramındaki durum gibi herhangi bir kritik noktaya sahip değildir.

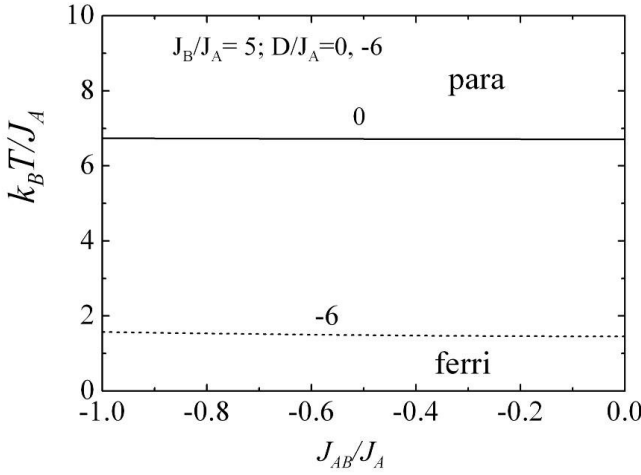


Şekil 4.24: (a) İki katmanlı Ising modelinin ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1$ ) tek tabakalardaki eşit etkileşmeler durumunda  $D/J_A = 0$  ve  $-1$  için faz diyagramı. Sürekli çizgiler ikinci derece faz dönüşümünü kesikli çizgiler ise birinci derece faz dönüşümünü gösterirler. İçi boş daire üçlü kritik noktayı temsil etmektedir.



Şekil 4.24: (b) İki katmanlı Ising modelinin ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1$ ) tek tabakalardaki farklı etkileşmeler durumunda ( $J_B < J_A$ ),  $D/J_A = 0$  ve  $-0.8$  için faz diyagramı. Sürekli çizgiler ikinci derece faz dönüşümünü gösterirler.

Şekil 4.24(c)'de ise, tek tabakalardaki ferromagnetik etkileşme parametrelerinin eşit olmadığı fakat  $J_B/J_A > 1$  olduğu durumda,  $D/J_A = 0$  ve  $-6$  için sistemin faz diyagramı elde edilmiştir. Faz diyagramında görüldüğü gibi anizotropi yokluğunda  $J_B/J_A = 5$  için model ikinci derece faz dönüşümü sergilemektedir. Yani B tabakasındaki kuvvetli ferromagnetik etkileşmeler sistemde sürekli faz dönüşümüne yol açmaktadır. Diğer taraftan sisteme anizotropinin dahil edilmesiyle birlikte sürekli faz dönüşümü kesikli faz dönüşümüne dönüşmektedir. Böylece anizotropinin sistemin magnetik faz geçişleri üzerinde önemli bir etkisi olduğu açıkça görülmektedir. Yine sistemde ferrimagnetik ve paramagnetik olmak üzere iki faz bölgesi elde dilmektedir.

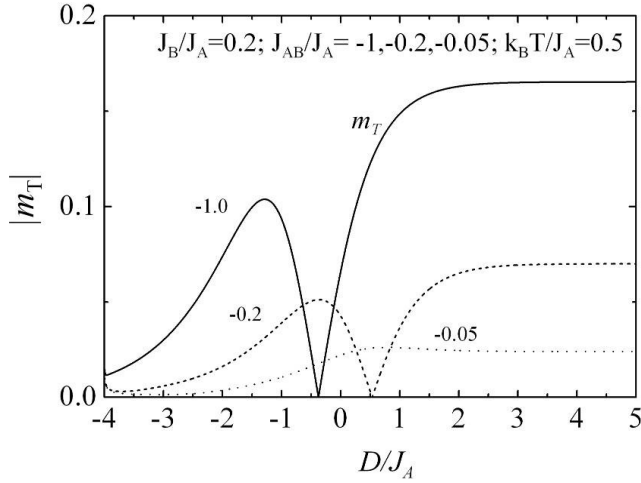


Şekil 4.24 (c) İki katmanlı Ising modelinin ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1$ ) tek tabakalardaki farklı etkileşmeler durumunda ( $J_B/J_A > 1$ ),  $D/J_A = 0$  ve  $-6$  için faz diyagramı. Sürekli çizgiler ikinci derece faz dönüşümünü kesikli çizgiler ise birinci derece faz dönüşümünü gösterirler.

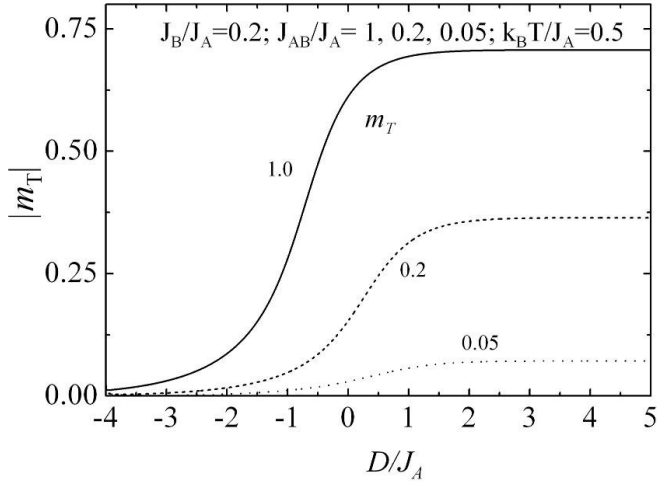
Şimdi ise sabit bir sıcaklıkta ( $k_B T/J_A = 0.5$ ) anizotropi parametresinin sistem üzerindeki etkisini görebilmek için Şekil 4.25(a)'da toplam magnetizasyonun anizotropiye göre değişimi elde edilmiştir. Tabakalar arasındaki  $J_{AB}$  etkileşmeleri yine antiferromagnetik yani negatif olarak alınmıştır. Grafikten görüldüğü gibi  $J_{AB}/J_A = -1$  için  $D/J_A$  arttıkça toplam magnetizasyon artmakta, fakat sonra hızlı bir düşüşe geçmekte ve belli bir anizotropi değerinde toplam magnetizasyon yok olmaktadır. Ancak anizotropinin artışıyla birlikte yine net magnetizasyon hızlı

şekilde artmakla birlikte yüksek anizotropilerde sabit kalmaktadır. Yani buradan anizotropi parametresinin sistem üzerinde ancak belli değerlerinde etkili olduğu anlaşılmaktadır. Diğer taraftan verilen aynı sıcaklık değerinde  $J_{AB} / J_A = -0.2$  ve  $-0.05$  parametreleri için yukarıdaki benzer davranış görülmekle birlikte şekilden kesikli ve noktalarla çizgilerle gösterilen eğrilerden daha küçük mıknatıslanma elde edildiği görülmektedir. Şekil 4.25(b), tabakalar arasındaki etkileşmelerin ferromagnetik olduğu ( $J_{AB} > 0$ ) durumda toplam mıknatıslanmanın anizotropiye göre değişimini göstermektedir. Buradan da çok açık şekilde görüldüğü gibi tabakaların ferromagnetik olarak etkileştikleri durumdaki sistemin magnetik davranışı oldukça farklıdır. Grafikten de açıkça görüldüğü gibi ferromagnetik  $J_{AB}$  parametresinin azalması daha zayıf mıknatıslanmaların elde edilmesine neden olmaktadır. Yine faz diyagramından görülen dikkat çekici bir özellik anizotropinin artışıyla birlikte toplam mıknatıslanmanın hızlı şekilde artması ve daha sonra da mıknatıslanmanın plato özelliği sergilemesidir ve bu durum pek çok magnetik sistemde gözlenmektedir.

Bu kesimde son olarak dış magnetik alanın tabaka yapısına sahip Ising modeli üzerindeki etkisini görebilmek için toplam magnetizasyonun magnetik alana göre değişimi Şekil 4.26(a)'da verilmiştir. Şekilde görüldüğü gibi anizotropinin varlığında  $D / J_A = -0.8$  için düzgün bir dış magnetik alanın artması sonucu taban duruma yakın alçak sıcaklıklarda ( $T = 0.02$ ) modelin net magnetizasyonu plato özelliği sergilemektedir. Magnetik alanın artması neticesinde kritik bir alan değerinde mıknatıslanma doyum magnetizasyonu olarak adlandırılan yeni bir değere atlamakta ve bu değerinde sabit kalmaktadır. Ayrıca sabit bir magnetik alan değerinde ( $h = 3$ ) net mıknatıslanmanın sıcaklığa göre değişimi Şekil 4.26(b)'de verilmektedir. Burada göze çarpan en dikkat çekici özellik sabit bir magnetik alanda modelde kritik bir sıcaklığın görülmemesi yani faz dönüşümü elde edilememesidir.

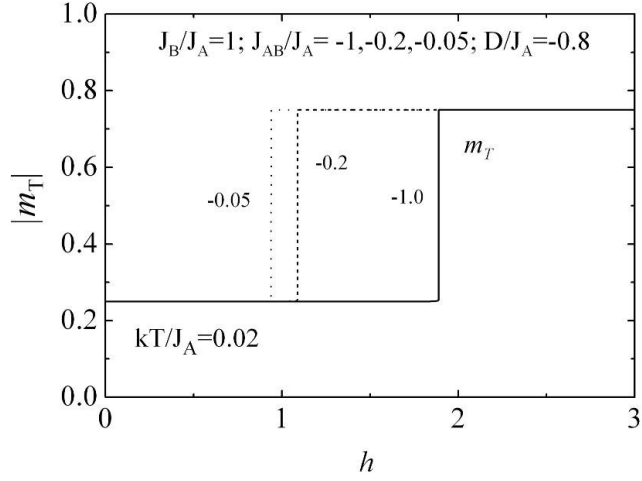


Şekil 4.25 (a) İki katmanlı Ising modelinde ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1$ ), tabakaların antiferromagnetik çiftlenimli olduğu ( $J_{AB} < 0$ ), B tabakasındaki zayıf etkileşmeler ( $J_B / J_A = 0.2$ ) ve  $k_B T / J_A = 0.5$  sıcaklığı için toplam (net) magnetizasyonun ( $m_T$ ) anizotropiye ( $D$ ) göre değişimi.

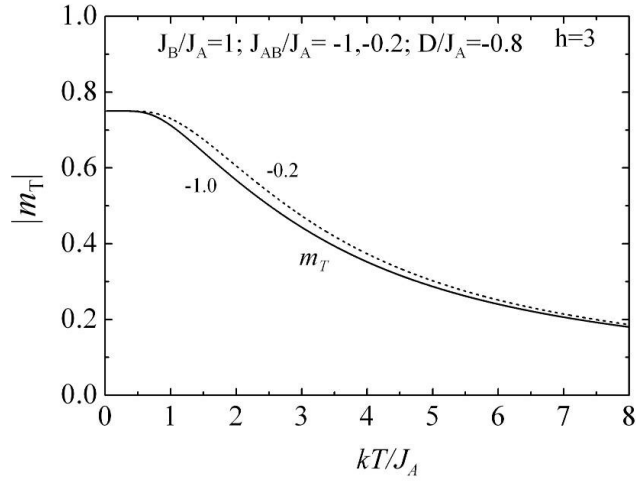


Şekil 4. 25(b) İki katmanlı Ising modelinde ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1$ ), tabakaların ferromagnetik çiftlenimli olduğu ( $J_{AB} > 0$ ), B tabakasındaki zayıf etkileşmeler ( $J_B / J_A = 0.2$ ), ve  $k_B T / J_A = 0.5$  sıcaklığı için toplam (net) magnetizasyonun ( $m_T$ ) anizotropiye ( $D$ ) göre değişimi.





Şekil 4.26(a): İki katmanlı Ising modelinde ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1$ ), tabakaların antiferromagnetik çiftlenimli olduğu ( $J_{AB} < 0$ ), A ve B tabakasındaki eşit etkileşimler ( $J_B / J_A = 1.0$ ), ve  $k_B T / J_A = 0.02$  sıcaklığı için toplam (net) magnetizasyonun ( $m_T$ ) dış magnetik alana ( $h$ ) göre değişimi.



Şekil 4.26(b) İki katmanlı Ising modelinde ( $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1$ ), tabakaların antiferromagnetik çiftlenimli olduğu ( $J_{AB} < 0$ ), A ve B tabakasındaki eşit etkileşimler ( $J_B / J_A = 1.0$ ) için toplam (net) magnetizasyonun ( $m_T$ ) sıcaklığa ( $k_B T / J_A$ ) göre değişimi.

## 5. SONUÇ

Bu çalışmada ince film yapısına sahip iki katmanlı Ising modeli en düşük dereceli kümesel değişim metodunun kullanılmasıyla incelendi. İlk olarak ferromagnetik spin etkileşmeli tekli tabakalardaki spin değerleri  $\sigma_A = S_B = 1/2$  olarak gözönüne alındı. Kümesel değişim metodunun modeli uygulanmasıyla tabaka magnetizasyonları olarak adlandırılan  $m_A$  ve  $m_B$  elde edildi. Daha sonra tabaka magnetizasyonlarının nümerik çözümleri yapılarak tabakalar arasındaki antiferromagnetik etkileşme parametresi ( $J_{AB} < 0$ ) için sıcaklığa göre değişimleri incelendi. Magnetizasyonların sıcaklığa göre elde edilen değişimlerinden tüm etkileşme parametreleri için sistemde sadece ikinci derece faz dönüşümü meydana geldiği görülmekte ve ikinci derece faz dönüşüm sıcaklığının da etkileşme parametrelerine göre değişiklik gösterdiği görülmektedir. Tabakalar için sıcaklığa göre elde edilen magnetizasyon değişimleri kararlı durumlara yani serbest enerji olarak en küçük değerlere karşılık gelmektedir. Bununla birlikte modelde mevcut olabilecek yarıkararlı ve kararsız durumlar, ancak Newton-Raphson metodu gibi nümerik çözüm yöntemleri aracılığıyla incelenebilecektir. Tekli tabakalardaki bileşer etkileşme parametrelerinin ( $J_A$  ve  $J_B$ ) birbirlerine eşit veya farklı olmalarına göre de tabaka magnetizasyonları önemli ölçüde değişiklik göstermektedir. Tabakalar arasındaki etkileşme parametresi antiferromagnetik olduğunda ve tabakalardaki ferromagnetik etkileşme parametreleri ise birbirine eşit olduğunda tabaka magnetizasyonları için tam bir simetri elde edilmektedir. Diğer taraftan tabakalardaki ( $J_A$  ve  $J_B$ ) parametreleri farklı olduğunda, tabaka magnetizasyonlarının faz dönüşüm sıcaklıkları aynı olmakla birlikte simetri bozulmaktadır. Yani ( $J_A > J_B$ ) olması durumunda  $A$  tabakasının mıknatıslığı daha güçlü olmakta, bununla birlikte ( $J_A < J_B$ ) için  $B$  tabakasının mıknatıslığı daha güçlü olmaktadır. Buradan tabakalardaki magnetizasyon değerleri üzerinde tabakalardaki etkileşme parametrelerinin önemli rol oynadığı anlaşılmaktadır.

Tabaka sisteminin net magnetizasyonun sıcaklığa göre değişimlerini tasvir edebilmek için tabaka magnetizasyonlarının ortalaması alınarak termal değişimler elde edilmiştir. Buradan tabakalar arasındaki  $J_{AB}$  parametresinin artan değerleri için daha büyük yani güçlü mıknatıslanmalar elde edilmektedir. Tüm etkileşme

parametreleri için sistemin tam olarak anlatabilmek için faz diagramı elde edilmiştir. Sistemin faz diyagramının elde edilebilmesinde ilk önce magnetizasyonların faz dönüşüm sıcaklıkları ayrıntılı olarak hesaplandı. Faz diagramında antiferromagnetik ve paramagnetik olarak adlandırılan düzenli ve düzensiz iki bölge elde edilmektedir. Yine faz diagramından tabaka sisteminde sadece sürekli faz dönüşümü yani ikinci derece faz dönüşümü meydana geldiği anlaşılmaktadır. Ayrıca modelin faz diagramından sıfır sıcaklıkta yani taban durumda spinlerin antiferromagnetik yönelime sahip olduğu görülmektedir.

Daha sonra en düşük dereceli kümesel değişim metodu  $\sigma = 1/2$  ve  $S = 1$  spin değerlerini içeren iki tabakalı Ising modeline uygulanarak modelin denge durumunda magnetik özellikleri hakkında bilgi sahibi olabileceğimiz tabaka magnetizasyonları ve kuadrupol momenti elde edildi. Burada, aynı spin değerlerini içeren önceki sistemden farklı olarak tabakalardan birindeki spin değeri bir olarak alınmış ve bu tabakanın bir anizotropi parametresine sahip olduğu gözönüne alınmıştır. Böylece model sistem A tabakası için sadece magnetizasyona sahip olmakla birlikte, B tabakası için üç durumlu bir sistem olduğu için magnetizasyon ve kuadrupolar momente sahip olmaktadır. Ancak kuadrupol momentin sistemin magnetik davranışı üzerine bir etkisi olmaması dolayısıyla sadece tabaka magnetizasyonları gözönüne alınmıştır. Magnetizasyonların sıcaklıkla değişiminden önce modelin taban durum faz diagramları iki farklı düzlemde incelenmiştir. Taban durum faz diagramları elde edilirken, sıfır sıcaklıkta farklı fazların iç enerji değerleri birbirine eşitlenerek faz sınır çizgileri elde edilmiştir. Daha sonra sistemin magnetizasyon bağıntıları iteratif olarak çözümlenerek tabakaya ve toplam magnetizasyonun sıcaklığa göre davranışları incelenmiştir. Elde edilen termal değişimlerden etkileşme parametrelerinin değerlerine göre sistemde hem birinci derece hem de ikinci derece faz dönüşümü meydana geldiği görülmektedir. Toplam (Net) magnetizasyonda yine aynı şekilde faz dönüşümlerine uğramaktadır. Aynı spin değerli tabaka yapısında olduğu gibi burada da her bir tabakadaki ferromagnetik etkileşme parametrelerinin birbirine eşit ve farklı olmasına göre magnetizasyonların faz dönüşüm sıcaklıkları aynı olmakla birlikte sıcaklıkla olan büyüklükleri önemli ölçüde değişmektedir. Ayrıca tabakalar arasındaki antiferromagnetik  $J_{AB}$  etkileşme parametresinin negatif olarak büyümesi ikinci dereceden faz dönüşüm sıcaklığı olan Neel sıcaklığını azaltmaktadır. Modelde, sistemin magnetik davranışını önemli ölçüde etkileyen bir diğer parametrede  $B$

tabakasındaki spin-1 durumlarına etkiyen anizotropi parametresi  $D$  dir. Anizotropi parametresi özellikle sistemde faz dönüşümü üzerinde, yani birinci derece faz dönüşümünün ortaya çıkmasında ve kompensasyon sıcaklığının görülmesinde etkilidir. Kompensasyon sıcaklığında toplam magnetizasyonun sıcaklığa göre değişiminde ikinci dereceden faz dönüşüm sıcaklığının altında net magnetizasyon ilk olarak yok olmaktadır ve bu sıcaklık deneysel sistemlerde özellikle magnetik kayıt sistemlerinde büyük öneme sahiptir. Böylece tabakalardaki spin değerlerinin farklı olması ve anizotropi parametresinin sisteme dahil edilmesi daha zengin faz dönüşümlerine ve kompensasyon sıcaklığı gibi magnetik davranışlara yol açmaktadır.

## KAYNAKLAR

- Albuquerque, E. I., Sarmiento, E. F., Tilley, D. F. 1986. Spin waves in a magnetic superlattice **Solid State Commun.**, 58: 41-44
- Arora, B. L., Landau, D. P. 1973. **AIP Conf. Proc.**, 10: 870.
- Bragg, W.L. and Williams, E.J. 1934. The Effect of Thermal Agitation on Atomic Arrangement in Alloys. **Proc. Roy. Soc. A**, 145: 699.
- Bragg, W.L. and Williams, E.J. 1935. The Effect of Thermal Agitation on Atomic Arrangement in Alloys II. **Proc. Roy. Soc., A**: 540.
- Bethe, H.A. 1935. Statistical theory of super lattices. **Proc. Roy. Soc. London A**, 150: 552-561.
- Bengrine, M., Benyoussef, A., El Kenz A., Loulidi M., Mhirech F. 1998. Phase diagrams of a ferromagnetic amorphous bilayer system. **J. Magn. Magn. Mater.** 183: 334-344.
- Blume, M., Emery, V. J., Griffiths, R. B. 1971. Ising Model for the  $\lambda$  Transition and Phase Separation in  $He^3 - He^4$  Mixtures. **Phys. Rev. A**, 4: 1071-1077.
- Blume, M. 1966. Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in  $UO_2$ , **Phys. Rev.**, 141: 517-524.
- Capel, H. W. 1966a. On the Possibility of First-Order Phase Transitions in Ising Systems of Triplet Ions with Zero-Field Splitting. **Physica**, 32: 966-988.
- Capel, H. W. 1966b. Phase transition in spin-one system. **Phys. Lett.**, 23: 327-328.
- Capel, H. W. 1967a. On the possibility of first-order phase transitions in Ising system of triplet ions with zero-field splitting. **Physica**, 33: 295-331.
- Capel, H. W. 1967b. On the Possibility of First-Order Phase Transitions in Ising Systems of Triplet Ions with Zero-Field Splitting. **Physica**, 37: 423-441.
- Chen, H. H. Levy, P. M. 1973. Dipole and Quadrupole Phase Transitions in Spin-1 Models, **Phys. Rev. B**, 7: 4267-4284.
- Chen, H. H. Joseph, R. J. 1972. Exchange Interaction Model of Ferromagnetism, **J. Math. Phys.** 13: 725-739.

- Du, A. Liu, H.J. Wang, B. 2004. Magnetic properties in the Ising-mixed spin-1/2 and spin-1 superlattice. **Physica A**, 342: 583-596.
- Du, A., Ma, Y., Wu, Z. H., 2006. Magnetization and magnetic susceptibility of the Ising ferromagnetic/antiferromagnetic superlattice. **J. Magn. Magn. Mater.**, 305: 233-239.
- Domb C. 1960. On the Theory of Cooperatif Phenomena, **Adv. Phys.**, 9:149-361
- Ekiz, C. 2008. Influence of anisotropic crystal field on a ferrimagnetic mixed-spin bilayer system, **Physica A**, 387: 1185-1199.
- Ekiz, C., Keskin, M. 2002. Multicritical phase diagrams of the Blume-Emery-Griffiths model with repulsive biquadratic coupling including metastable phases. **Phys. Rev. B**, 66: 54105-54115.
- Elmers, H. J. 1995. Ferromagnetic Monolayers. **J. Mod. Phys. B**, 9: 3115-3180
- Elmers, H. J., Hauschild, J., Gradmann, U. 1996. Critical behavior of the uniaxial ferromagnetic monolayer Fe(110) on W(110) **Phys. Rev. B**, 54: 15224-15233.
- Endl, G., Bielmeier, B., Hoffmann, H. 1991. Coll. Digest 13th International Coll. On Magnetic Films and Surfaces, Glasgow, p. 155.
- Ferrenberg, A. M., Landau, D. P. 1991. Monte-Carlo Study Of Phase-Transitions In Ferromagnetic Bilayers **J. Appl. Phys.** (70: 6215-6217).
- Grigelionis, G., Rosengren, A. 1994. Study of the Blume-Emery-Griffiths Model on the Triangular Lattice by the Cluster Variation Method, **Physica A**, 208:287-299.
- Heisenberg, W. 1928. Zur Theorie des Ferromagnetismus. **Z. Physik**, 49: 619-636.
- Hinchey, L. L., Mills, D. L. 1986. Magnetic-properties of superlattice of formed from ferromagnetic and antiferromagnetic materials **Phys. Rev. B**, 33: 3329-3343
- Horuguchi, T. 1986. A Spin-One Ising Model on a Honeycomb Lattice. **Phys. Lett.** 113: 425-428.
- Horiguchi, T., Tsushima, N. 1997. Shift exponent and breakdown of universality fort he two-layer Ising model on a square lattice. **Physica A**, 238: 295-306.
- Huang, K. Statistical Mechanics, 1963. J. Wiley Sons. Inc., New York. Chapter 16.

- Hu, C. K., Izmailian, N. Sh., Oganessian, K. B. 1999. Exact phase diagrams for an Ising model on a two-layer Bethe lattice. **Phys. Rev. E** **59**: 6489-6496.
- Htoutou, K., Ainane, A., Saber, M. 2004. The transverse crystal-field effects of the mixed spin Ising bilayer system. **J. Magn. Magn. Mater.** **269**: 245-258.
- Ising, E. 1925. **Z. Physik**, **31**: 253-8.
- Jaščur, M., Kaneyoshi, T. 1993. A Ferrimagnetic bilayer system in an applied transverse field **J. Phys.: Condens. Matter** **5**: 6313-6322.
- Jaščur, M., Kaneyoshi, T. 1995. Specific-heat of a ferromagnetic or ferrimagnetic bilayer system **J. Magn. Magn. Mater.** **140**: 488-490.
- Jiang, W., Wei, G. Z. 2005. Effects of biaxial crystal-field on a ferrimagnetic bilayer system. **Physica B**, **362**: 236-242.
- Jiang, W., Wei, G. Z., Du, A. 2002. A ferromagnetic or ferrimagnetic bilayer system with a transverse crystal field. **J. Magn. Magn. Mater.** **250**: 49-56.
- Kaneyoshi, T., Jaščur, M. 1993a. Magnetic properties of a ferromagnetic or ferrimagnetic bilayer system. **Physica A** **195**: 474-496.
- Kaneyoshi, T. 1995. The relation between compensation temperature and anisotropy in a ferrimagnetic bilayer system with disordered interface **Sol. Stat. Commun.** **93**: 691-695
- Kaneyoshi, T., Jaščur, M., 1993b. Compensation temperatures of ferrimagnetic bilayer systems. **J. Magn. Magn. Mater.** **118**: 17-27.
- Kaneyoshi, T., Wang, Y. L. 1987. A New Disordered Phase and its Physical Contents of the Blume-Emery-Griffiths Model, **Phys. Lett. A**, **56**: 4199-4202.
- Kaneyoshi, T. 2001. Phase Diagrams for a Transverse Ising Bilayer System, **J. Magn. Magn. Mater.** **226**: 1746-1748
- Keskin, M., Ekiz, C., Yalçın, O. 1999. Stable, metastable and unstable solutions of the Blume-Emery-Griffiths model. **Physica A**, **267**: 392-405.
- Keskin, M., Ekiz, C. 2000. The metastable phase diagram of the Blume-Emery-Griffiths model in addition to the equilibrium phase diagram. **J. Chem. Phys.** **113**: 5407-5412.
- Kikuchi, R. 1951. A theory of cooperative phenomena. **Phys. Rev. B**, **81**:988-1002.

- Kikuchi, R. 1967. The Cluster-variation method. **J. De Physique**, **7**: 307-313.
- Kikuchi, R., Brush, S. G. 1967. Improvement of the Cluster Variation Method, **J. Chem. Phys.** **47**: 195-203.
- Kikuchi R, Brush S G, 1977. Improvement of the Cluster-variation method. **J. Chem. Phys.**, **47**: 195-203.
- Kikuchi, R. Irreversible Cooperative Phenomena, **Annals of Physics** **10**:127-141, 1960.
- Kramers H. A., Wannier G. H. 1941 Statistics of the Two-Dimensional Ferromagnet. **Phys. Rev.** **60**: 252-262.
- Labrune, M., Niedoba, H. 2002. Dipolar coupling effect in magnetic bilayer system **Eur. Phys. J. B** **27**: 103-109.
- Lapinskas, S., Rosengren, A. 1994. Blume-Emery-Griffiths Model on the Three-Dimensional Lattices: Consequences for the Antiferromagnetic Potts Model, **Phys. Rev. B**, **49**:15190-15196.
- Netz, R. R. 1992. New Phases and Multiple Re-entrance of Blume-Emery-Griffiths Model with Repulsive Biquadratic Coupling: Monte-Carlo Renormalization-Group Theory, **Europhys. Lett.** **17**:373-377
- Wang, Y. L., Lee, F., Kimel, J. D., 1987. Phase Diagrams of the Spin-1 Ising Blume-Emery Griffiths Model: Monte-Carlo Simulations. **Phys. Rev. B** **36**: 8945-8947.
- Oitma, J. 1970. High Temperature Series Expansions for Griffiths Model of  $^3\text{He}$ - $^4\text{He}$  Mixture, **Phys. Lett. A** **33**: 230-235.
- Oitma, J. 1973. High Temperature Series Expansions for a Lattice Model of Critical Behavior in Multicomponent Systems, **J. Phys. C** **4**: 2466-2470.
- Onsager, L., 1944. Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition. **Phys. Rev.**, **65**: 117-149.
- Lajzerowicz, J., Sivardière, J. 1975. Spin-1 Lattice-Gas Model. I. Condensation and Solidification of a Simple Fluid, **Phys. Rev. A** **11**: 2079-2089.
- Sivardière, J., Lajzerowicz, J. 1975. Spin-1 Lattice-Gas Model. II. Condensation and Phase Separation in a Binary Fluid. **Phys. Rev. A** **11**: 2090-2100.



- Sivardière, J., Lajzerowicz, J. 1975. Spin-1 Lattice-Gas Model. III. Tricritical Points in a Binary and Ternary Fluids, **Phys. Rev. A** **11**: 2101-2110.
- Shankar, R. 1986. Solvable case of a spin-1 model in a magnetic field. **Phys. Lett. A** **117**: 365-366.
- Tanaka, M., Takahashi, K. 1978. On the Phase Transition of the Spin-1 Ising System with the Biquadratic Interaction, **Prog. Theor. Phys.**, **60**: 633-635.
- Tanaka, M., Kawabe, T. 1985. Spin-1 Ising Model Including Biquadratic Interaction with Positive Coupling Constant, **J. Phys. Soc. Jpn.** **54**: 2194-2203.
- Tucker, J. W., et al. 1998. Phase Diagram of a spin-1 Magnetic Bilayer by Cluster Variational Theory: Exact Results for BEG Model on a Bethe Lattice with Five-fold Coordination, **J. Magn. Magn. Mat.** **187**:381-392
- Urumov, V. 1987. The Magnetisation of the spin-1 Ising model on a honeycomb lattice. **J. Phys. C: Solid Stat. Phys.** **20**: 875-879.
- Wang, Y. L., Wentworth, C. 1987. Phase Diagrams of Three-Dimensional Blume-Emery-Griffiths Model, **J. Appl. Phys.** **61**: 4411-4412.
- Wiatrowski, G. 2000. Compensation effect and interface delocalization of tricritical phenomenon in antiferromagnetically coupled bilayer system  $A(n_A)/B(n_B)(S_A=1/2$  and  $S_B=1)$ , **J. Magn. Magn. Mater.** **212**: 29-39.
- Wu, F. Y. 1986. On Horuguchi's solution on the Blume-Emery-Griffiths model. **Phys. Lett. A**, **116**: 245-246.