

1. GİRİŞ

Néel [1] tarafından geliştirilen ferromanyetizma ve antiferromanyetizmanın teorisi, manyetik iyon konumlarının alt örgülere bölünebileceği varsayımı üzerinedir.

Alt örgülere ayrılmanın Heisenberg enerjisini [2] minimize ettiği gayet açık bir şekilde anlaşılmasına rağmen, spin şekillenimlerinin doğrudan Heisenberg enerjisinden elde edilmesi fikri, çok sonraları Kaplan'ın [3] krom üzerindeki helisel şekillenimler ve Yoshimori'nin [4] MnO_2 üzerindeki çalışmalarında önerildi. Bravais örgülerindeki manyetik iyonlar için ilk teori Villain [5] tarafından verildi.

Dzialoshinski [6] ve Turov ve Nays [7], kristal uzay grubu simetri işlemleri ve spin terslenimi altında değişmez kalan makroskobik Hamiltoniyenden spin şekillenimlerini elde etmeyi başardılar. Bu oldukça güçlü metod, sadece manyetik ve kimyasal hücrenin aynı olması koşulu altında geçerli olması nedeniyle oldukça sınırlı bir kullanım alanına sahiptir.

1961'lerin başlarına gelindiğinde, en genel metod, anizotropik çiftlenimlerde dahil olmak üzere Bertaut tarafından bir dizi çalışmalarla ortaya kondu [8-13]. Bu metod da, kimyasal hücre ile manyetik hücrenin aynı olma zorunluluğu yoktur. Aynı zamanda kristalin simetri özellikleri oldukça önem kazanmaktadır.

Manyetik hücrenin kimyasal hücre ile aynı olması halinde elde edilen sonuçlar Villain metodu [5] ile uyum içerisindedir. Mikroskobik metodun verdiği sonuçlar grup teorisinin sonuçlarıyla da uyum içerisindedir. Bu metodun en temel avantajı temel etkileşimleri göz önüne alması ve manyetik hücrenin kimyasal hücre ile aynı olması zorunluluğunu ortadan kaldırmasıdır. Ayrıca izotropik etkileşimler kadar anizotropik etkileşimler de ikinci mertebeden bir Hamiltoniyen yardımıyla ifade edilebilmektedir.

Bu tezde Bertaut'un geliştirdiği metod iki boyutlu ortorombik örgüye uygulanarak sonuçlar irdelenmiştir.

2. MİKROSKOBİK METOT

$\mathbf{R}$ konumundaki $\mathbf{S}$ spini ve $\mathbf{R}'$ konumundaki $\mathbf{S}'$ spini arasındaki ikinci mertebeden etkileşim enerjisinin en genel ifadesi aşağıdaki gibi verilir:

$$W_{RR'} = -2 \sum_{\alpha, \beta} A_{\alpha\beta}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') S_{\alpha}(\mathbf{R}) S'_{\beta}(\mathbf{R}') \quad (\alpha, \beta = x, y, z) \quad (2.1)$$

Dokuz bileşenli $A_{\alpha\beta}$ tansörü aşağıdaki gibi, bir simetrik ve bir antisimetrik kısma ayrılabilir:

$$\begin{aligned} A_{sym} &= \frac{1}{2} (A_{\alpha\beta} + A_{\beta\alpha}) \\ A_{anti} &= \frac{1}{2} (A_{\alpha\beta} - A_{\beta\alpha}) \end{aligned} \quad (2.2)$$

Antisimetrik kısım, antisimetrik çiftlenimin Dzialoshinsk–Moriya vektörüne özdeş bir $\mathbf{D}_{RR'}$ vektörü tanımlar. Simetrik kısım ise, $J_{RR'}$ izotropik Takas etkileşimini temsil eden bir matrisin izi izole edilirse, geriye ikinci mertebeden küresel bir $\mathbf{\Phi}_{RR'}$ tansörü kalır. Bu, izi sıfır olan diyadik vektördür ve bilinen anizotropi tansörünü temsil eder.

Özetle, $\mathbf{W}_{RR'}$ diyadik notasyonda aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$W_{RR'} = -2 \left(J_{RR'} \mathbf{S}_{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{S}'_{\mathbf{R}'} + \mathbf{D}_{RR'} \cdot (\mathbf{S}_{\mathbf{R}} \times \mathbf{S}'_{\mathbf{R}'}) + \mathbf{S}_{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{\Phi}_{RR'} \cdot \mathbf{S}'_{\mathbf{R}'} \right) \quad (2.3)$$

$\mathbf{R} = \mathbf{R}'$ olduğu zaman, sabit terimleri ihmal ederek

$$W_{RR} = -2 \mathbf{S}_{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{\Phi}_{RR} \cdot \mathbf{S}'_{\mathbf{R}} \quad (2.4)$$

elde ederiz. $W_{\mathbf{R}}$, $\mathbf{R}'$ noktasındaki kristal alandan dolayı oluşan spin enerjisidir. $\mathbf{\Phi}_{\mathbf{R}}$, kristal alan tansörü ile orantılıdır ve $\mathbf{R}$ noktasının simetri elemanlarına sahiptir.

Dolayısıyla sistemin Hamiltoniyeni için aşağıdaki toplam elde edilir:

$$H = -2 \sum_{\alpha, \beta, R, R'} A_{\alpha\beta}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') S_{\alpha}(\mathbf{R}) S_{\beta}(\mathbf{R}') \quad \text{ise}$$

$$H = \sum_{R, R'} W_{R, R'} \quad (2.5)$$

Burada $\mathbf{R} = \mathbf{R}'$ de toplama dahil edilmiştir.

Heisenberg-Néel enerjisi olarak tanımlanan H_N izotropik takas etkileşim kısmını inceleyeceğiz:

2.1. İzotropik Takas Etkileşimi

$$H_N = -2 \sum_{RR'} J_{RR'} \mathbf{S}_R \cdot \mathbf{S}_{R'} \quad (2.6)$$

Denklem (2.6) 'da

$$\boldsymbol{\sigma}_R = \frac{\mathbf{S}_R}{S_R} \quad \text{ve} \quad \hat{J}_{RR'} = S_R J_{RR'} S_{R'} \quad (2.7)$$

kullanılarak, birim vektörler cinsinden ifade edilirse Denklem (2.8) elde edilir.

$$H_N = -2 \sum_{RR'} J_{RR'} \frac{\mathbf{S}_R}{S_R} \cdot \frac{\mathbf{S}_{R'}}{S_{R'}} S_{R'} S_R$$

$$H_N = -2 \sum_{RR'} \hat{J}_{RR'} \boldsymbol{\sigma}_R \cdot \boldsymbol{\sigma}_{R'} \quad (2.8)$$

Statik dengede $\mathbf{S}_R$ spin vektörü, $\sum_{R'} J_{RR'} \mathbf{S}'_{R'}$ 'ye paralel olmalıdır. Bu sonuç H_N Néel enerjisi, $S_R^2 = \text{sabit}$ şartı altında minimize edilmesiyle elde edilir.

$$\hbar \frac{\partial \mathbf{S}_R}{\partial t} = 2 \sum_{R'} J_{RR'} \mathbf{S}'_{R'} \times \mathbf{S}_R \quad (2.9)$$

Statik dengede $\mathbf{S}_R$ spin vektörünün zamana göre değişimi sıfırdır:

$$0 = 2 \sum_{R'} J_{RR'} \mathbf{S}'_{R'} \times \mathbf{S}_R$$

Burada vektörel çarpımın sıfır olması için $\mathbf{S}_R$ spin vektörünün $\sum_{R'} J_{RR'} \mathbf{S}'_{R'}$ 'ye paralel olması gerekir. Böylece $\mathbf{S}_R$ spin vektörü ve $\sum_{R'} J_{RR'} \mathbf{S}'_{R'}$, birbirlerine bir λ_R orantı sabiti ile bağlı olmalıdır.

$$\lambda_R \mathbf{S}_R = \sum_{R'} \hat{J}_{RR'} \mathbf{S}'_{R'} \quad (2.10.1)$$

λ_R , enerji boyutuna sahip bir orantı katsayısıdır. Denklem (2.10.1), birim spinler ile ifade edilirse:

$$\lambda_R \boldsymbol{\sigma}_R = \sum_{R'} \hat{J}_{RR'} \boldsymbol{\sigma}'_{R'} \quad (2.10.2)$$

yazılabilir. Denklem (2.10.2) 'nin her iki tarafı $\boldsymbol{\sigma}_R$ ile çarpılırsa

$$\lambda_R \boldsymbol{\sigma}_R \cdot \boldsymbol{\sigma}_R = \sum_{R'} \hat{J}_{RR'} \boldsymbol{\sigma}_R \cdot \boldsymbol{\sigma}'_{R'} \quad (2.10.3)$$

ve Denklem (2.10.3) 'ün her iki tarafının $\mathbf{R}$ üzerinden toplamı alınırsa

$$-2 \sum_R \lambda_R \sigma_R^2 = -2 \sum_{RR'} \hat{J}_{RR'} \sigma_R \cdot \sigma_{R'}$$

elde edilir. Böylelikle

$$H = -2 \sum_{RR'} \hat{J}_{RR'} \sigma_R \cdot \sigma_{R'} = -2 \sum_R \lambda_R \quad (2.11)$$

yazılabilir. λ_R , $\mathbf{S}_R$ spininin bütün yakın komşu spinler ile etkileşiminden dolayı takas enerjisine katkı olarak düşünülebilir. λ_R bir skaler olduğundan her kristalografik simetri işlemi altında invaryanttır. Bu, λ_R 'nin kristalografik olarak eşdeğer atomlar için aynı olduğu anlamına gelir.

Kristalografik birim hücreye ait manyetik atomların farklı Bravais örgülerini i (veya j) = 1, 2, 3, ..., n şeklinde numaralandıralım. Burada n , toplam alt örgü sayısını göstermektedir. Bu indisler, $\mathbf{R}$ ve $\mathbf{R}'$ 'nin yerini alacaktır. Öteleme simetrisi aşağıdaki şekilde göz önüne alınacaktır. Manyetik atomların Bravais örgüleri kadar denklem (n tane) yazarız. $\exp (2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i) / N$ terimini $\lambda_i \sigma_i$ terimi ile çarpalım ve i Bravais örgüsüne ait tüm $\mathbf{R}_i$ üzerinden toplam alalım:

$$\frac{1}{N} \sum_{R_i} \lambda_i \sigma_i(\mathbf{R}_i) \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i) = \frac{1}{N} \sum_{R_i} \sum_{R_j} \hat{J}_{R_i R_j} \sigma_j(\mathbf{R}_j) \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i)$$

son eşitliğin sağ tarafına $\exp (2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j) \exp (-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j)$ ilave edilirse ve $\mathbf{T}_i(\mathbf{k})$ 'nin ifadesi yerine yazılırsa, Denklem (2.12) elde edilir:

$$\frac{1}{N} \sum_{R_i} \lambda_i \sigma_i(\mathbf{R}_i) \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i) = \frac{1}{N} \sum_{R_i} \sum_{R_j} \hat{J}_{R_i R_j} \sigma_j(\mathbf{R}_j) \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i) \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j) \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j)$$

$$\lambda_i \frac{1}{N} \sum_{R_i} \sigma_i(\mathbf{R}_i) \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i) = \sum_{R_i} \hat{J}_{R_i R_j} \exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)] \frac{1}{N} \sum_{R_j} \sigma_j(\mathbf{R}_j) \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j)$$

$$\lambda_i \mathbf{T}_i(\mathbf{k}) = \sum_j \xi_{ij}(\mathbf{k}) \mathbf{T}_j(\mathbf{k}) \quad (2.12)$$

Burada

$$\mathbf{T}_i(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}_i} \boldsymbol{\sigma}_i(\mathbf{R}_i) \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i) \quad (2.13)$$

şeklinde tanımlanmaktadır. Görülüyor ki $\mathbf{T}_i(\mathbf{k})$, $\boldsymbol{\sigma}_i(\mathbf{R}_i)$ birim spininin Fourier dönüşümüdür ve $\hat{J}_{R_i R_j}$, sadece $|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|$ mesafesine bağlıdır. N ise kristaldeki toplam birim hücre sayısıdır.

Denklem (2.12) 'de

$$\xi_{ij}(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}_i} \hat{J}_{R_i R_j} \exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)] \quad (2.14)$$

tanımı kullanılmıştır. Bu toplam $\mathbf{R}_i$ konumundaki atomu sabit tutarak ve j örgüsünün tüm $\mathbf{R}_j$ atomları üzerinden toplam alınarak hesaplanabilir.

Denklem (2.12) sistemi aşağıdaki gibi tek bir matris denklemi şeklinde yazılabilir:

$$\lambda_1 \mathbf{T}_1(\mathbf{k}) = \xi_{11}(\mathbf{k}) \mathbf{T}_1(\mathbf{k}) + \xi_{12}(\mathbf{k}) \mathbf{T}_2(\mathbf{k}) + \dots + \xi_{1n}(\mathbf{k}) \mathbf{T}_n(\mathbf{k})$$

$$\lambda_2 \mathbf{T}_2(\mathbf{k}) = \xi_{21}(\mathbf{k}) \mathbf{T}_1(\mathbf{k}) + \xi_{22}(\mathbf{k}) \mathbf{T}_2(\mathbf{k}) + \dots + \xi_{2n}(\mathbf{k}) \mathbf{T}_n(\mathbf{k})$$

$$\vdots$$

$$\lambda_n \mathbf{T}_n(\mathbf{k}) = \xi_{n1}(\mathbf{k}) \mathbf{T}_1(\mathbf{k}) + \xi_{n2}(\mathbf{k}) \mathbf{T}_2(\mathbf{k}) + \dots + \xi_{nn}(\mathbf{k}) \mathbf{T}_n(\mathbf{k})$$

$$\begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{T}_1(\mathbf{k}) \\ \mathbf{T}_2(\mathbf{k}) \\ \vdots \\ \mathbf{T}_n(\mathbf{k}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \xi_{11}(\mathbf{k}) & \xi_{12}(\mathbf{k}) & \dots & \xi_{1n}(\mathbf{k}) \\ \xi_{21}(\mathbf{k}) & \xi_{22}(\mathbf{k}) & \dots & \xi_{2n}(\mathbf{k}) \\ \vdots & \dots & \ddots & \vdots \\ \xi_{n1}(\mathbf{k}) & \xi_{n2}(\mathbf{k}) & \dots & \xi_{nn}(\mathbf{k}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{T}_1(\mathbf{k}) \\ \mathbf{T}_2(\mathbf{k}) \\ \vdots \\ \mathbf{T}_n(\mathbf{k}) \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \xi_{11}(\mathbf{k}) & \xi_{12}(\mathbf{k}) & \cdots & \xi_{1n}(\mathbf{k}) \\ \xi_{21}(\mathbf{k}) & \xi_{22}(\mathbf{k}) & \cdots & \xi_{2n}(\mathbf{k}) \\ \vdots & \cdots & \ddots & \vdots \\ \xi_{n1}(\mathbf{k}) & \xi_{n2}(\mathbf{k}) & \cdots & \xi_{nn}(\mathbf{k}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{T}_1(\mathbf{k}) \\ \mathbf{T}_2(\mathbf{k}) \\ \vdots \\ \mathbf{T}_n(\mathbf{k}) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{T}_1(\mathbf{k}) \\ \mathbf{T}_2(\mathbf{k}) \\ \vdots \\ \mathbf{T}_n(\mathbf{k}) \end{bmatrix} = 0$$

$$(\xi(\mathbf{k}) - \lambda) \mathbf{T}(\mathbf{k}) = 0 \quad (2.15)$$

Burada $\xi(\mathbf{k})$, Denklem (2.14) ile tanımlanan n mertebeli hermitik bir matristir. (λ) , elemanları $\lambda_i \delta_{ij}$ olan köşegen bir matristir. $\mathbf{T}(\mathbf{k})$ ise, n bileşenli $\mathbf{T}_i(\mathbf{k})$ ($i = 1, 2, \dots, n$) bir sütun vektörüdür. $\sigma_i(\mathbf{R}_i)$, $\mathbf{T}_i(\mathbf{k})$ 'nın Fourier dönüşümü ile verilir.

$$\sigma_i(\mathbf{R}_i) = \frac{1}{N} \sum_k \mathbf{T}_i(\mathbf{k}) \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i) \quad (2.16)$$

$\mathbf{T}(\mathbf{k})$ bir çözüm ise, $\mathbf{T}(-\mathbf{k})$ da $\xi(\mathbf{k})$ 'nın hermityen yapısının bir sonucu olarak çözüm olur. Sadece tek bir yayılma vektörü ($\pm \mathbf{k}_0$) olduğunu varsayacağız. Bu varsayım ve her $\mathbf{R}_i$ için

$$\sigma^2 = 1 \quad (2.17)$$

şartı yardımıyla

$$\mathbf{T}_i^2(\mathbf{k}_0) = 0 \quad \mathbf{k}_0 \neq 0 \text{ için} \quad (2.18)$$

elde edilir. $\mathbf{T}_i(\mathbf{k}_0)$ mutlaka kompleksdir. Denklem (2.18) 'in basit bir çözümü aşağıdaki gibi verilir:

$$\mathbf{T}_i(\mathbf{k}_0) = \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{x}} + i \hat{\mathbf{y}}) \exp(-i \varphi_i) \quad (2.19)$$

$\mathbf{R}_1$ ve $\mathbf{R}_2$ noktalarında, i ve j örgülerine ait olan $\sigma_i(\mathbf{R})$ ve $\sigma_j(\mathbf{R})$ spinlerinin çarpımı

$$\boldsymbol{\sigma}_i(\mathbf{R}_1) \cdot \boldsymbol{\sigma}_j(\mathbf{R}_2) = \cos \Theta_{ij}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) \quad (2.20)$$

şeklinde. Burada spinler arasındaki açı $\Theta_{ij}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$, (2.16) ve (2.19) Denklemleri kullanılarak aşağıdaki gibi yazılır:

$$\Theta_{ij}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = 2\pi \mathbf{k}_o \cdot (\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2) + \varphi_{ij} \quad (2.21)$$

Burada

$$\varphi_{ij} = \varphi_i - \varphi_j \quad (2.22)$$

sadece i ve j örgülerine bağlı olan bir faz farkıdır.

Denklem (2.21)'deki Θ_{ij} açısını, φ_{ij} fazını, $\mathbf{k}_o$ ve $\mathbf{R}_2$ vektörlerini sabitleyelim. Bu durumda Denklem (2.21), içerisinde $\mathbf{R}_1$ 'in hareket ettiği $\mathbf{k}_o$ 'a dik bir Π düzlemi tanımlar.

İlginç özelliklerden biri, nötron kırınımı ile çözülen manyetik yapıların büyük çoğunluğun da bir alt örgünün spinlerinin hepsinin aynı fazda olduğu (yani aynı Θ açısı yaptığı) Π düzlemlerinin mevcut olduğudur [8].

Teorik incelemeler için, birinci Brillouin bölgesine indirgenen $\mathbf{k}$ vektörlerini kullanmak yararlı olur. Kimyasal ve manyetik hücreler özdeş olduğu zaman $\mathbf{k} = 0$ alınabilir. Bundan sonra problem n-1 tane φ_i fazını bulmaya indirgenir. Ancak bu durumda indirgenmemiş bir $\mathbf{k}$ vektörünü göz önüne almak kolaylık sağlayabilir. Örneğin; ferritlerin klasik Néel konfigürasyonu altı-bileşenli bir $\mathbf{T}(0) = (1, 1, -1, -1, -1, -1)$ vektörü ile $\mathbf{k} = 0$ modu olarak, ama aynı zamanda bir $\mathbf{k} = [444]$ (veya $[400]$ olarak) yayılma vektörü ile bir $\mathbf{T}(\mathbf{k}) = (1, 1, 1, 1, 1, 1)$ modu olarak seçilebilir. Her iki görüşte faydalıdır. Birincisinde ($\mathbf{k} = 0$), $\xi(\mathbf{k})$ matrisi gerçeldir; $\xi_{ij}(0)$ elemanlarında, eşdeğer komşu sayısıyla çarpılan takas integrali vardır. $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{R}_i)$ spinleri ve Fourier bileşenleri de özdeşleştirilebilir. İkincisinde, $\mathbf{k} = [\text{hkl}] \neq 0$ yayılma vektörü, hangi (hkl) kristal düzlemlerinde, spinlerin paralel veya aynı fazda olduğunu gösterir.

Denklem (2.13), düzenli örgüde, eğer $\mathbf{T}(0) \neq 0$ olursa, ferromanyetizmanın mümkün olduğunu gösterir. Eğer $\mathbf{k} \neq 0$ olursa ve orijine indirgenemezse, ferromanyetizma yoktur [9].

n eşdeğer atom durumunda, $\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_n = \lambda$ olur. $n = 1$ yani tek Bravais örgüsünün olduğu özel durum Villain tarafından daha önce çalışılmıştır. Bu durumda, Denklem (2.15) 'deki matris sistemi, takas integralinin Fourier dönüşümünün maksimum olduğu sonuç ile tek bir denkleme indirgenir.

$n \geq 0$ olduğu zaman, Denklem (2.15), basit bir özdeğer denklemine indirgenir. N tane spin modu, yani n tane λ^p özdeğeri ve n tane $\mathbf{T}^p(\mathbf{k})$ ($p = 1, \dots, n$; p bir üst indistir.) özvektörü vardır. $\mathbf{k}$ 'nın bir fonksiyonu olarak tek bir λ kökü bulmanın ve λ 'yı maksimize ederek tüm mümkün spin şekillenimlerini türetmek yeterli olacaktır.

Kimyasal ve manyetik hücreler özdeş olduğu zaman aşağıdaki iki yol takip edilir:

- i. $\xi(0)$ 'ın özdeğerlerinin ve özvektörlerinin bulunması
- ii. Herhangi bir λ kökünün maksimumlarının bulunması

$\mathbf{R}_{i0}$ ($i = 1, \dots, n$), n tane farklı manyetik atomların referans konumları yani kimyasal birim hücrede n tane Bravais örgülerinin orijinleri olsun. Aşağıdaki dönüşüm yapalım:

$$\mathbf{Q}_i(\mathbf{k}) = \mathbf{T}_j(\mathbf{k}) \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{jo}) \quad (2.23)$$

Denklem (2.12) 'nin her iki tarafını $\exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{i0})$ ile çarpalım:

$$\lambda_i \mathbf{T}_i(\mathbf{k}) \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{i0}) = \sum_j \xi_{ij}(\mathbf{k}) \mathbf{T}_j(\mathbf{k}) \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{i0})$$

ve yukarıdaki denklemin sağ tarafına $\exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{j0}) \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{j0})$ ilave edelim:

$$\lambda_i \mathbf{T}_i(\mathbf{k}) \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{i0}) = \sum_j \xi_{ij}(\mathbf{k}) \mathbf{T}_j(\mathbf{k}) \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{i0}) \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{j0}) \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{j0})$$

Burada Denklem (2.23) `deki dönüşüm kullanılırsa, Denklem (2.24) elde edilir:

$$\lambda_i \mathbf{Q}_i(\mathbf{k}) = \sum_j \sum_{R_j} \hat{J}_{R_i R_j} \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{i0} - \mathbf{R}_j)) \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{i0}) \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{j0}) \mathbf{Q}_j(\mathbf{k})$$

$$\lambda_i \mathbf{Q}_i(\mathbf{k}) = \sum_j \eta_{ij} \mathbf{Q}_j(\mathbf{k}) \quad (2.24)$$

Denklem (2.24) sistemi aşağıdaki gibi tek bir matris denklemini şeklinde yazılabilir:

$$\lambda_1 \mathbf{Q}_1(\mathbf{k}) = \eta_{11}(\mathbf{k}) \mathbf{Q}_1(\mathbf{k}) + \eta_{12}(\mathbf{k}) \mathbf{Q}_2(\mathbf{k}) + \dots + \eta_{1n}(\mathbf{k}) \mathbf{Q}_n(\mathbf{k})$$

$$\lambda_2 \mathbf{Q}_2(\mathbf{k}) = \eta_{21}(\mathbf{k}) \mathbf{Q}_1(\mathbf{k}) + \eta_{22}(\mathbf{k}) \mathbf{Q}_2(\mathbf{k}) + \dots + \eta_{2n}(\mathbf{k}) \mathbf{Q}_n(\mathbf{k})$$

$$\vdots$$

$$\lambda_n \mathbf{Q}_n(\mathbf{k}) = \eta_{n1}(\mathbf{k}) \mathbf{Q}_1(\mathbf{k}) + \eta_{n2}(\mathbf{k}) \mathbf{Q}_2(\mathbf{k}) + \dots + \eta_{nn}(\mathbf{k}) \mathbf{Q}_n(\mathbf{k})$$

$$\begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1(\mathbf{k}) \\ \mathbf{Q}_2(\mathbf{k}) \\ \vdots \\ \mathbf{Q}_n(\mathbf{k}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \eta_{11}(\mathbf{k}) & \eta_{12}(\mathbf{k}) & \dots & \eta_{1n}(\mathbf{k}) \\ \eta_{21}(\mathbf{k}) & \eta_{22}(\mathbf{k}) & \dots & \eta_{2n}(\mathbf{k}) \\ \vdots & \dots & \ddots & \vdots \\ \eta_{n1}(\mathbf{k}) & \eta_{n2}(\mathbf{k}) & \dots & \eta_{nn}(\mathbf{k}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1(\mathbf{k}) \\ \mathbf{Q}_2(\mathbf{k}) \\ \vdots \\ \mathbf{Q}_n(\mathbf{k}) \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \eta_{11}(\mathbf{k}) & \eta_{12}(\mathbf{k}) & \dots & \eta_{1n}(\mathbf{k}) \\ \eta_{21}(\mathbf{k}) & \eta_{22}(\mathbf{k}) & \dots & \eta_{2n}(\mathbf{k}) \\ \vdots & \dots & \ddots & \vdots \\ \eta_{n1}(\mathbf{k}) & \eta_{n2}(\mathbf{k}) & \dots & \eta_{nn}(\mathbf{k}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1(\mathbf{k}) \\ \mathbf{Q}_2(\mathbf{k}) \\ \vdots \\ \mathbf{Q}_n(\mathbf{k}) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1(\mathbf{k}) \\ \mathbf{Q}_2(\mathbf{k}) \\ \vdots \\ \mathbf{Q}_n(\mathbf{k}) \end{bmatrix} = 0$$

Böylece (2.15) matris denklemini aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$(\eta(\mathbf{k}) - \lambda) \mathbf{Q}(\mathbf{k}) = 0 \quad (2.25)$$

Burada $\eta(\mathbf{k})$, elemanları Denklem (2.26) `daki gibi verilen bir hermitik matristir.

$$\eta_{ij} = \sum_{\mathbf{R}_j} \hat{J}_{\mathbf{R}_i \mathbf{R}_j} \exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{j0} - \mathbf{R}_j)] \quad (2.26)$$

Aynı j Bravais örgüsüne ait iki vektörün τ farkı olan yani öteleme grubunun bir τ vektörü olan, exponansiyel ifadedeki $\mathbf{R}_{j0} - \mathbf{R}_j$ `ın bulunduğu dikkat edin. Bu nedenle $\mathbf{Q}(\mathbf{k})$ özvektörleri ve λ özdeğerleri açık olarak atomik koordinatlara bağlı değildir.

Sadece bir $\pm \mathbf{k}$ yayılma vektörü olduğu zaman, referans atomlarının spinleri aşağıdaki gibi verilmektedir:

$$\boldsymbol{\sigma}_j(\mathbf{R}_{j0}) = \mathbf{Q}_j(\mathbf{k}) + \mathbf{Q}_j^*(\mathbf{k}) \quad (2.27)$$

Eğer $\mathbf{Q}_j(\mathbf{k})$ gerçelse, $\boldsymbol{\sigma}_j(\mathbf{R}_{j0})$, $\mathbf{Q}_j(\mathbf{k})$ ile özdeşleştirilebilir.

Denklem (2.19), Denklem (2.27) `da yerine koyulursa, Denklem (2.28) elde edilir:

$$\boldsymbol{\sigma}_i(\mathbf{R}_{j0}) = \mathbf{T}_j(\mathbf{k}) \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{j0}) + \mathbf{T}_j^*(\mathbf{k}) \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{j0})$$

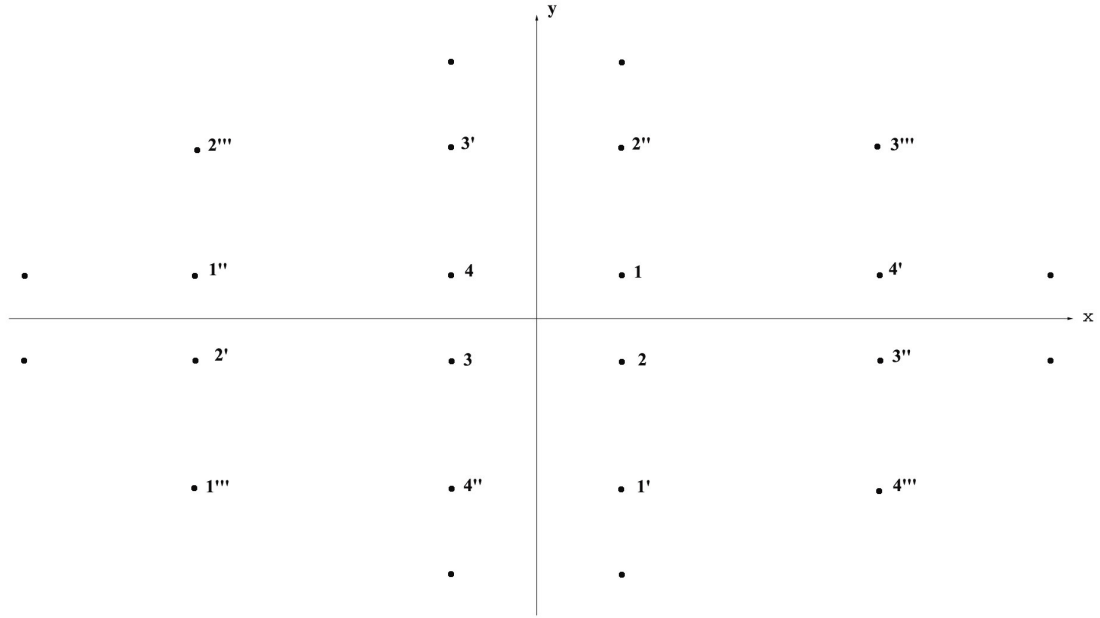
$$\boldsymbol{\sigma}_i(\mathbf{R}_{j0}) = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{x}} + i\hat{\mathbf{y}}) \exp(-i\varphi_j) \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{j0}) + \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{x}} - i\hat{\mathbf{y}}) \exp(i\varphi_j) \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{j0})$$

$$\boldsymbol{\sigma}_i(\mathbf{R}_{j0}) = \frac{1}{2} \hat{\mathbf{x}} 2 \cos(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{j0} + \varphi_j) + \frac{1}{2} i \hat{\mathbf{y}} [-i 2 \sin(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{j0} + \varphi_j)]$$

$$\boldsymbol{\sigma}_i(\mathbf{R}_{j0}) = \hat{\mathbf{x}} \cos(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{j0} + \varphi_j) + \hat{\mathbf{y}} \sin(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{j0} + \varphi_j) \quad (2.28)$$

3. İKİ BOYUTLU ORTOROMBİK ÖRGÜNÜN İNCELENMESİ

Örgü, Şekil 1`de gösterildiği gibi dört-alt Bravais örgüsünden meydana gelmiştir.



Koordinatlar:

1	2	3	4
x,y	x, -y	-x, -y	-x, y
1'	2'	3'	4'
x, y-1	x-1, -y	-x, 1-y	1-x, y
1''	2''	3''	4''
x-1, y	x, 1-y	1-x, -y	-x, y-1
1'''	2'''	3'''	4'''
x-1, y-1	x-1, 1-y	1-x, 1-y	1-x, y-1

Şekil 1. İki boyutlu ortorombik örgüde atom koordinatları.

Bu problemde, Denklem (2.14) ile verilen matris elemanları aşağıdaki gibi yazılır:

$$\begin{aligned}
\xi_{11} &= 2 J_0 \cos(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}) \\
\xi_{12} &= [J_1 + J_2 \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{b})] \exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)] \\
\xi_{13} &= [J_3 + J_4 \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{b})] \exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_3)] \\
\xi_{14} &= [J_5 + J_6 \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{a})] \exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_4)] \\
\xi_{21} &= [J_1 + J_2 \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{b})] \exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1)] \\
\xi_{22} &= 2 J_0 \cos(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}) \\
\xi_{23} &= [J_5 + J_6 \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{a})] \exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_3)] \\
\xi_{24} &= [J_3 + J_4 \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{b})] \exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_4)] \\
\xi_{31} &= [J_3 + J_4 \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{b})] \exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_3 - \mathbf{R}_1)] \\
\xi_{32} &= [J_5 + J_6 \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{a})] \exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_3 - \mathbf{R}_2)] \\
\xi_{33} &= 2 J_0 \cos(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}) \\
\xi_{34} &= [J_1 + J_2 \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{b})] \exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_3 - \mathbf{R}_4)] \\
\xi_{41} &= [J_5 + J_6 \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{a})] \exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_4 - \mathbf{R}_1)] \\
\xi_{42} &= [J_3 + J_4 \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{b})] \exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_4 - \mathbf{R}_2)] \\
\xi_{43} &= [J_1 + J_2 \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{b})] \exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_4 - \mathbf{R}_3)] \\
\xi_{44} &= 2 J_0 \cos(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{b})
\end{aligned} \tag{3.1}$$

Burada;

$J_0 = 1$ ve $1'$ atomları arasındaki direkt takas etkileşim sabitidir.

$J_1 = 1$ ve 2 atomları arasındaki direkt takas etkileşim sabitidir.

$J_2 = 1$ ve $2''$ atomları arasındaki süper-takas etkileşim sabitidir.

$J_3 = 1$ ve 3 atomları arasındaki direkt takas etkileşim sabitidir.

$J_4 = 1$ ve $3'$ atomları arasındaki süper-takas etkileşim sabitidir.

$J_5 = 1$ ve 4 atomları arasındaki direkt takas etkileşim sabitidir.

$J_6 = 1$ ve $4'$ atomları arasındaki süper-takas etkileşim sabitidir.

Denklem (2.23) 'de tanımlanan dönüşüm yardımıyla, (3.1) 'deki matris elemanları, Denklem (2.26) 'da verilen η_{ij} matris elemanları kullanılarak aşağıdaki matris elemanlarına dönüştürülür:

$$\begin{aligned}
\eta_{11} &= 2 J_0 \cos(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}) \\
\eta_{12} &= J_1 + J_2 \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}) \\
\eta_{13} &= J_3 + J_4 \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}) \\
\eta_{14} &= J_5 + J_6 \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}) \\
\eta_{21} &= J_1 + J_2 \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}) \\
\eta_{22} &= 2 J_0 \cos(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}) \\
\eta_{23} &= J_5 + J_6 \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}) \\
\eta_{24} &= J_3 + J_4 \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}) \\
\eta_{31} &= J_3 + J_4 \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}) \\
\eta_{32} &= J_5 + J_6 \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}) \\
\eta_{33} &= 2 J_0 \cos(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}) \\
\eta_{34} &= J_1 + J_2 \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}) \\
\eta_{41} &= J_5 + J_6 \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}) \\
\eta_{42} &= J_3 + J_4 \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}) \\
\eta_{43} &= J_1 + J_2 \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}) \\
\eta_{44} &= 2 J_0 \cos(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{b})
\end{aligned} \tag{3.2}$$

$$\eta = \begin{bmatrix} \eta_{11} & \eta_{12} & \eta_{13} & \eta_{14} \\ \eta_{21} & \eta_{22} & \eta_{23} & \eta_{24} \\ \eta_{31} & \eta_{32} & \eta_{33} & \eta_{34} \\ \eta_{41} & \eta_{42} & \eta_{43} & \eta_{44} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B & C & D \\ B^* & A & D & C^* \\ C^* & D^* & A & B^* \\ D^* & C & B & A \end{bmatrix} \tag{3.3}$$

Burada * işareti kompleks eşlenik işlemini göstermektedir.

Yukarıdaki matrisin özdeğerlerini ve özvektörlerini bulmak için (2.25) özdeğer denklemini çözmemiz gerekmektedir. Bu homojen denklem sisteminin çözümü

$$\det |\eta - \lambda I| = \begin{vmatrix} A - \lambda & B & C & D \\ B^* & A - \lambda & D & C^* \\ C^* & D^* & A - \lambda & B^* \\ D^* & C & B & A - \lambda \end{vmatrix} = 0 \tag{3.4}$$

koşulunun sağlanmasını gerektirir. Bu determinantın açılmasıyla elde edilen ve λ 'ya göre 4. mertebeden bir polinom olan cebirsel denklemin çözümüyle, λ_i ($i = 1,2,3,4$) özdeğerleri, $\mathbf{k} = [h, k]$ dalga vektörü ve takas parametrelerine bağlı olarak sayısal olarak hesaplandı.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \lambda_1}{\partial h} &= 0 \\ \frac{\partial \lambda_1}{\partial k} &= 0 \end{aligned} \quad (3.5)$$

denklemlerini çözerek $\mathbf{k} = [h, k]$ dalga vektöründeki h ve k değerleri elde edildi. Bulunan bu değerler Tablo 1 'de gösterilmiştir. Yukarıdaki hesaplarda, A terimi, bütün enerji seviyelerine aynı katkıyı sağladığı için göz önüne alınmamıştır.

Tablo 1. Sayısal olarak hesaplanan $\mathbf{k} = [h, k]$ dalga vektörü.

$\mathbf{k} = [h, k]$
$\mathbf{k}_1 = [0, 0]$
$\mathbf{k}_2 = [0.5, 0.5]$
$\mathbf{k}_3 = [-0.5, -0.5]$
$\mathbf{k}_4 = [-0.5, 0.5]$
$\mathbf{k}_5 = [0.5, -0.5]$
$\mathbf{k}_6 = [1.5, 1.5]$
$\mathbf{k}_7 = [-1.5, -1.5]$
$\mathbf{k}_8 = [-1.5, 1.5]$
$\mathbf{k}_9 = [1.5, -1.5]$

Bulunan her bir $\mathbf{k} = [h, k]$ değeri için (2.25) özdeğer denklemi yeniden çözülerek bulunarak özvektörler Tablo 2 'de gösterilmiştir.

Tablo 2. Hesaplanan $\mathbf{k} = [h, k]$ dalga vektörüne göre elde edilen özdeğer ve özvektörlerin sayısal olarak hesaplanması.

$\mathbf{k}_1 = [0, 0]$	$\lambda_1(\mathbf{k}_1) = 0.026$	$\mathbf{Q}_1(\mathbf{k}_1) = [\frac{1}{2} \frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2}]$
	$\lambda_2(\mathbf{k}_1) = -0.004$	$\mathbf{Q}_2(\mathbf{k}_1) = [\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{1}{2}]$
	$\lambda_3(\mathbf{k}_1) = -0.01$	$\mathbf{Q}_3(\mathbf{k}_1) = [\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}]$
	$\lambda_4(\mathbf{k}_1) = -0.012$	$\mathbf{Q}_4(\mathbf{k}_1) = [\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{1}{2} - \frac{1}{2}]$
$\mathbf{k}_2 = [0.5, 0.5]$	$\lambda_1(\mathbf{k}_2) = 0.08$	$\mathbf{Q}_1(\mathbf{k}_2) = [\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}]$
	$\lambda_2(\mathbf{k}_2) = -0.038$	$\mathbf{Q}_2(\mathbf{k}_2) = [\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{1}{2} - \frac{1}{2}]$
	$\lambda_3(\mathbf{k}_2) = -0.018$	$\mathbf{Q}_3(\mathbf{k}_2) = [\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{1}{2}]$
	$\lambda_4(\mathbf{k}_2) = -0.024$	$\mathbf{Q}_4(\mathbf{k}_2) = [\frac{1}{2} \frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2}]$
$\mathbf{k}_3 = [-0.5, -0.5]$	$\lambda_1(\mathbf{k}_3) = 0.08$	$\mathbf{Q}_1(\mathbf{k}_3) = [\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}]$
	$\lambda_2(\mathbf{k}_3) = -0.038$	$\mathbf{Q}_2(\mathbf{k}_3) = [\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{1}{2} - \frac{1}{2}]$
	$\lambda_3(\mathbf{k}_3) = -0.018$	$\mathbf{Q}_3(\mathbf{k}_3) = [\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{1}{2}]$
	$\lambda_4(\mathbf{k}_3) = -0.024$	$\mathbf{Q}_4(\mathbf{k}_3) = [\frac{1}{2} \frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2}]$
$\mathbf{k}_4 = [-0.5, 0.5]$	$\lambda_1(\mathbf{k}_4) = 0.08$	$\mathbf{Q}_1(\mathbf{k}_4) = [\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}]$
	$\lambda_2(\mathbf{k}_4) = -0.038$	$\mathbf{Q}_2(\mathbf{k}_4) = [\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{1}{2} - \frac{1}{2}]$
	$\lambda_3(\mathbf{k}_4) = -0.018$	$\mathbf{Q}_3(\mathbf{k}_4) = [\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{1}{2}]$
	$\lambda_4(\mathbf{k}_4) = -0.024$	$\mathbf{Q}_4(\mathbf{k}_4) = [\frac{1}{2} \frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2}]$
$\mathbf{k}_5 = [0.5, -0.5]$	$\lambda_1(\mathbf{k}_5) = 0.08$	$\mathbf{Q}_1(\mathbf{k}_5) = [\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}]$
	$\lambda_2(\mathbf{k}_5) = -0.038$	$\mathbf{Q}_2(\mathbf{k}_5) = [\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{1}{2} - \frac{1}{2}]$
	$\lambda_3(\mathbf{k}_5) = -0.018$	$\mathbf{Q}_3(\mathbf{k}_5) = [\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{1}{2}]$
	$\lambda_4(\mathbf{k}_5) = -0.024$	$\mathbf{Q}_4(\mathbf{k}_5) = [\frac{1}{2} \frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2}]$

$\mathbf{k}_6 = [1.5, 1.5]$	$\lambda_1(\mathbf{k}_6) = 0.08$	$\mathbf{Q}_1(\mathbf{k}_6) = [\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}]$
	$\lambda_2(\mathbf{k}_6) = -0.038$	$\mathbf{Q}_2(\mathbf{k}_6) = [\frac{1}{2} -\frac{1}{2} \frac{1}{2} -\frac{1}{2}]$
	$\lambda_3(\mathbf{k}_6) = -0.018$	$\mathbf{Q}_3(\mathbf{k}_6) = [\frac{1}{2} -\frac{1}{2} -\frac{1}{2} \frac{1}{2}]$
	$\lambda_4(\mathbf{k}_6) = -0.024$	$\mathbf{Q}_4(\mathbf{k}_6) = [\frac{1}{2} \frac{1}{2} -\frac{1}{2} -\frac{1}{2}]$
$\mathbf{k}_7 = [-1.5, -1.5]$	$\lambda_1(\mathbf{k}_7) = 0.08$	$\mathbf{Q}_1(\mathbf{k}_7) = [\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}]$
	$\lambda_2(\mathbf{k}_7) = -0.038$	$\mathbf{Q}_2(\mathbf{k}_7) = [\frac{1}{2} -\frac{1}{2} \frac{1}{2} -\frac{1}{2}]$
	$\lambda_3(\mathbf{k}_7) = -0.018$	$\mathbf{Q}_3(\mathbf{k}_7) = [\frac{1}{2} -\frac{1}{2} -\frac{1}{2} \frac{1}{2}]$
	$\lambda_4(\mathbf{k}_7) = -0.024$	$\mathbf{Q}_4(\mathbf{k}_7) = [\frac{1}{2} \frac{1}{2} -\frac{1}{2} -\frac{1}{2}]$
$\mathbf{k}_8 = [-1.5, 1.5]$	$\lambda_1(\mathbf{k}_8) = 0.08$	$\mathbf{Q}_1(\mathbf{k}_8) = [\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}]$
	$\lambda_2(\mathbf{k}_8) = -0.038$	$\mathbf{Q}_2(\mathbf{k}_8) = [\frac{1}{2} -\frac{1}{2} \frac{1}{2} -\frac{1}{2}]$
	$\lambda_3(\mathbf{k}_8) = -0.018$	$\mathbf{Q}_3(\mathbf{k}_8) = [\frac{1}{2} -\frac{1}{2} -\frac{1}{2} \frac{1}{2}]$
	$\lambda_4(\mathbf{k}_8) = -0.024$	$\mathbf{Q}_4(\mathbf{k}_8) = [\frac{1}{2} \frac{1}{2} -\frac{1}{2} -\frac{1}{2}]$
$\mathbf{k}_9 = [1.5, -1.5]$	$\lambda_1(\mathbf{k}_9) = 0.08$	$\mathbf{Q}_1(\mathbf{k}_9) = [\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}]$
	$\lambda_2(\mathbf{k}_9) = -0.038$	$\mathbf{Q}_2(\mathbf{k}_9) = [\frac{1}{2} -\frac{1}{2} \frac{1}{2} -\frac{1}{2}]$
	$\lambda_3(\mathbf{k}_9) = -0.018$	$\mathbf{Q}_3(\mathbf{k}_9) = [\frac{1}{2} -\frac{1}{2} -\frac{1}{2} \frac{1}{2}]$
	$\lambda_4(\mathbf{k}_9) = -0.024$	$\mathbf{Q}_4(\mathbf{k}_9) = [\frac{1}{2} \frac{1}{2} -\frac{1}{2} -\frac{1}{2}]$

Taban durumu ve birinci uyarılmış durum için, Tablo 2`de gösterilen özvektörler ve Denklem (2.19) kullanılarak elde edilen Bravais örgülerinin fazları Tablo 3`de gösterilmiştir.

Tablo 3. Her bir $\mathbf{k} = [h, k]$ dalga vektörüne karşılık gelen faz açıları.

$\mathbf{k}_1 = [0, 0]$	$\lambda_3(\mathbf{k}_1) = -0.01$	$\varphi_1 = 0 \quad \varphi_2 = 0 \quad \varphi_3 = 0 \quad \varphi_4 = 0$
	$\lambda_4(\mathbf{k}_1) = -0.012$	$\varphi_1 = 0 \quad \varphi_2 = \pi \quad \varphi_3 = 0 \quad \varphi_4 = \pi$
$\mathbf{k}_2 = [0.5, 0.5]$	$\lambda_2(\mathbf{k}_2) = -0.038$	$\varphi_1 = 0 \quad \varphi_2 = \pi \quad \varphi_3 = 0 \quad \varphi_4 = \pi$
	$\lambda_4(\mathbf{k}_2) = -0.024$	$\varphi_1 = 0 \quad \varphi_2 = 0 \quad \varphi_3 = \pi \quad \varphi_4 = \pi$
$\mathbf{k}_3 = [-0.5, -0.5]$	$\lambda_2(\mathbf{k}_2) = -0.038$	$\varphi_1 = 0 \quad \varphi_2 = \pi \quad \varphi_3 = 0 \quad \varphi_4 = \pi$
	$\lambda_4(\mathbf{k}_2) = -0.024$	$\varphi_1 = 0 \quad \varphi_2 = 0 \quad \varphi_3 = \pi \quad \varphi_4 = \pi$
$\mathbf{k}_4 = [-0.5, 0.5]$	$\lambda_2(\mathbf{k}_2) = -0.038$	$\varphi_1 = 0 \quad \varphi_2 = \pi \quad \varphi_3 = 0 \quad \varphi_4 = \pi$
	$\lambda_4(\mathbf{k}_2) = -0.024$	$\varphi_1 = 0 \quad \varphi_2 = 0 \quad \varphi_3 = \pi \quad \varphi_4 = \pi$
$\mathbf{k}_5 = [0.5, -0.5]$	$\lambda_2(\mathbf{k}_2) = -0.038$	$\varphi_1 = 0 \quad \varphi_2 = \pi \quad \varphi_3 = 0 \quad \varphi_4 = \pi$
	$\lambda_4(\mathbf{k}_2) = -0.024$	$\varphi_1 = 0 \quad \varphi_2 = 0 \quad \varphi_3 = \pi \quad \varphi_4 = \pi$
$\mathbf{k}_6 = [1.5, 1.5]$	$\lambda_2(\mathbf{k}_2) = -0.038$	$\varphi_1 = 0 \quad \varphi_2 = \pi \quad \varphi_3 = 0 \quad \varphi_4 = \pi$
	$\lambda_4(\mathbf{k}_2) = -0.024$	$\varphi_1 = 0 \quad \varphi_2 = 0 \quad \varphi_3 = \pi \quad \varphi_4 = \pi$
$\mathbf{k}_7 = [-1.5, -1.5]$	$\lambda_2(\mathbf{k}_2) = -0.038$	$\varphi_1 = 0 \quad \varphi_2 = \pi \quad \varphi_3 = 0 \quad \varphi_4 = \pi$
	$\lambda_4(\mathbf{k}_2) = -0.024$	$\varphi_1 = 0 \quad \varphi_2 = 0 \quad \varphi_3 = \pi \quad \varphi_4 = \pi$
$\mathbf{k}_8 = [-1.5, 1.5]$	$\lambda_2(\mathbf{k}_2) = -0.038$	$\varphi_1 = 0 \quad \varphi_2 = \pi \quad \varphi_3 = 0 \quad \varphi_4 = \pi$
	$\lambda_4(\mathbf{k}_2) = -0.024$	$\varphi_1 = 0 \quad \varphi_2 = 0 \quad \varphi_3 = \pi \quad \varphi_4 = \pi$
$\mathbf{k}_9 = [1.5, -1.5]$	$\lambda_2(\mathbf{k}_2) = -0.038$	$\varphi_1 = 0 \quad \varphi_2 = \pi \quad \varphi_3 = 0 \quad \varphi_4 = \pi$
	$\lambda_4(\mathbf{k}_2) = -0.024$	$\varphi_1 = 0 \quad \varphi_2 = 0 \quad \varphi_3 = \pi \quad \varphi_4 = \pi$

Denklem (2.28) kullanılarak Şekil 1`deki her bir atom koordinatı için spin vektörlerinin yönlerini bulmak için aşağıdaki ifadeleri elde ettik:

$\mathbf{R}_{10}$ için;

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{10} = hx + ky$$

$$\sigma_1(\mathbf{R}_{10}) = \hat{x} \cos(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{10} + \varphi_1) + \hat{y} \sin(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{10} + \varphi_1)$$

$\mathbf{R}_{20}$ için;

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{20} = hx - ky$$

$$\sigma_2(\mathbf{R}_{20}) = \hat{x} \cos(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{20} + \varphi_2) + \hat{y} \sin(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{20} + \varphi_2)$$

$\mathbf{R}_{30}$ için;

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{30} = -hx - ky$$

$$\sigma_3(\mathbf{R}_{30}) = \hat{x} \cos(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{30} + \varphi_3) + \hat{y} \sin(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{30} + \varphi_3)$$

$\mathbf{R}_{40}$ için;

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{40} = -hx + ky$$

$$\sigma_4(\mathbf{R}_{40}) = \hat{x} \cos(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{40} + \varphi_4) + \hat{y} \sin(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{40} + \varphi_4)$$

$\mathbf{R}_{50} = \mathbf{R}_{1',0}$ için;

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{50} = hx + k(y-1)$$

$$\sigma_5(\mathbf{R}_{50}) = \hat{x} \cos(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{50} + \varphi_1) + \hat{y} \sin(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{50} + \varphi_1)$$

$\mathbf{R}_{60} = \mathbf{R}_{2',0}$ için;

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{60} = h(x-1) - ky$$

$$\sigma_6(\mathbf{R}_{60}) = \hat{x} \cos(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{60} + \varphi_2) + \hat{y} \sin(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{60} + \varphi_2)$$

$\mathbf{R}_{70} = \mathbf{R}_{3',0}$ için;

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{70} = -hx + k(1-y)$$

$$\sigma_7(\mathbf{R}_{70}) = \hat{x} \cos(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{70} + \varphi_3) + \hat{y} \sin(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{70} + \varphi_3)$$

$$\mathbf{R}_{80} = \mathbf{R}_{4,0} \quad \text{için};$$

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{80} = h(1-x) + ky$$

$$\sigma_8(\mathbf{R}_{80}) = \hat{x} \cos(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{80} + \varphi_4) + \hat{y} \sin(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{80} + \varphi_4)$$

$$\mathbf{R}_{90} = \mathbf{R}_{1'',0} \quad \text{için};$$

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{90} = h(x-1) + ky$$

$$\sigma_9(\mathbf{R}_{90}) = \hat{x} \cos(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{90} + \varphi_1) + \hat{y} \sin(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{90} + \varphi_1)$$

$$\mathbf{R}_{10,0} = \mathbf{R}_{2'',0} \quad \text{için};$$

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{10,0} = hx + k(1-y)$$

$$\sigma_{10}(\mathbf{R}_{10,0}) = \hat{x} \cos(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{10,0} + \varphi_2) + \hat{y} \sin(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{10,0} + \varphi_2)$$

$$\mathbf{R}_{11,0} = \mathbf{R}_{3'',0} \quad \text{için};$$

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{11,0} = h(1-x) - ky$$

$$\sigma_{11}(\mathbf{R}_{11,0}) = \hat{x} \cos(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{11,0} + \varphi_3) + \hat{y} \sin(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{11,0} + \varphi_3)$$

$$\mathbf{R}_{12,0} = \mathbf{R}_{4'',0} \quad \text{için};$$

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{12,0} = -hx + k(y-1)$$

$$\sigma_{12}(\mathbf{R}_{12,0}) = \hat{x} \cos(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{12,0} + \varphi_4) + \hat{y} \sin(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{12,0} + \varphi_4)$$

$$\mathbf{R}_{13,0} = \mathbf{R}_{1''',0} \quad \text{için};$$

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{13,0} = h(x-1) + k(y-1)$$

$$\sigma_{13}(\mathbf{R}_{13,0}) = \hat{x} \cos(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{13,0} + \varphi_1) + \hat{y} \sin(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{13,0} + \varphi_1)$$

$$\mathbf{R}_{14,0} = \mathbf{R}_{2''',0} \quad \text{için};$$

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{14,0} = h(x-1) + k(1-y)$$

$$\sigma_{14}(\mathbf{R}_{14,0}) = \hat{x} \cos(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{14,0} + \varphi_2) + \hat{y} \sin(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{14,0} + \varphi_2)$$

$$\mathbf{R}_{15,0} = \mathbf{R}_{3''',0} \quad \text{için};$$

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{15,0} = h (1-x) + k (1-y)$$

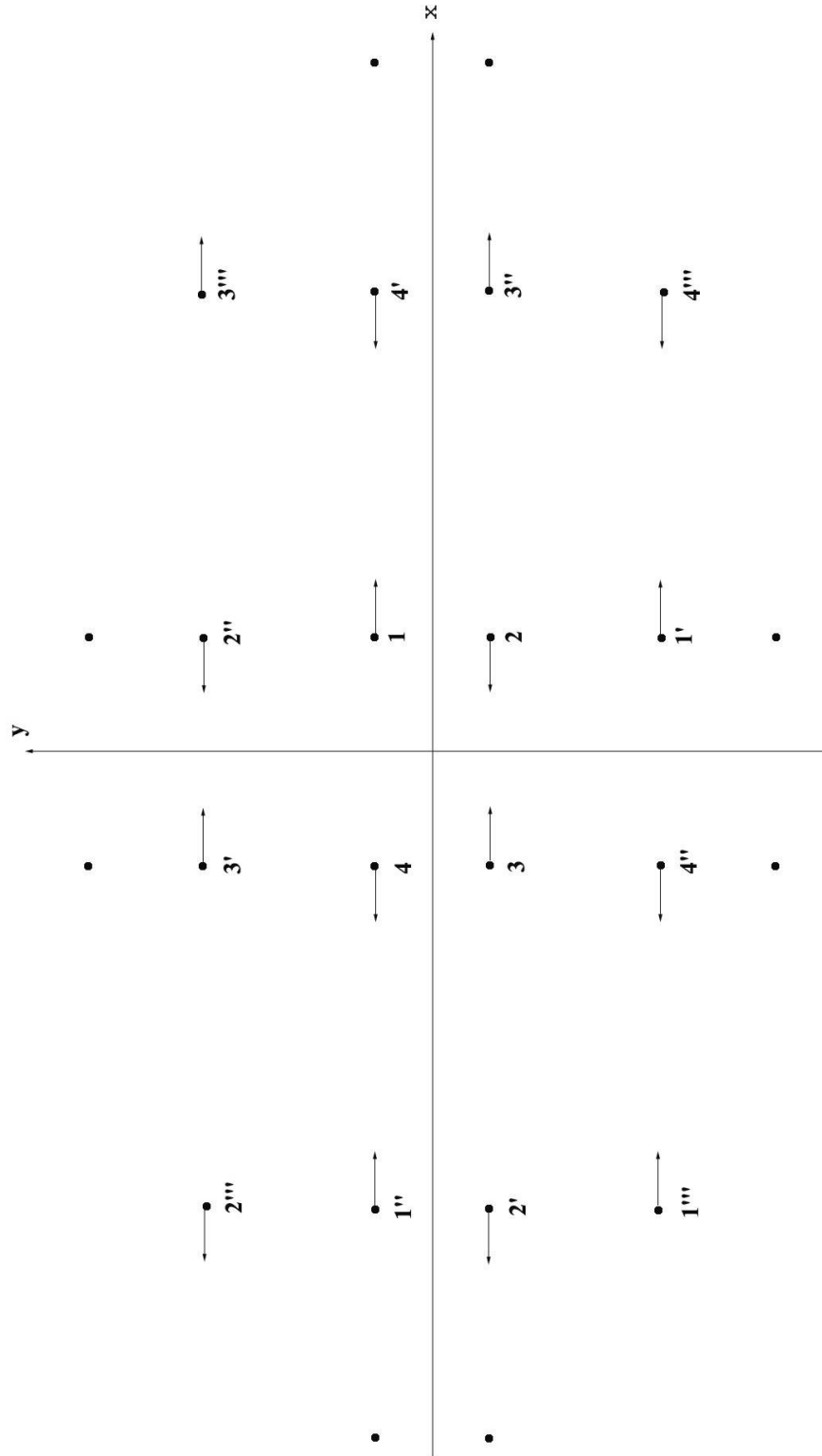
$$\sigma_{15}(\mathbf{R}_{15,0}) = \hat{x} \cos (2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{15,0} + \varphi_3) + \hat{y} \sin (2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{15,0} + \varphi_3)$$

$$\mathbf{R}_{16,0} = \mathbf{R}_{4''',0} \quad \text{için};$$

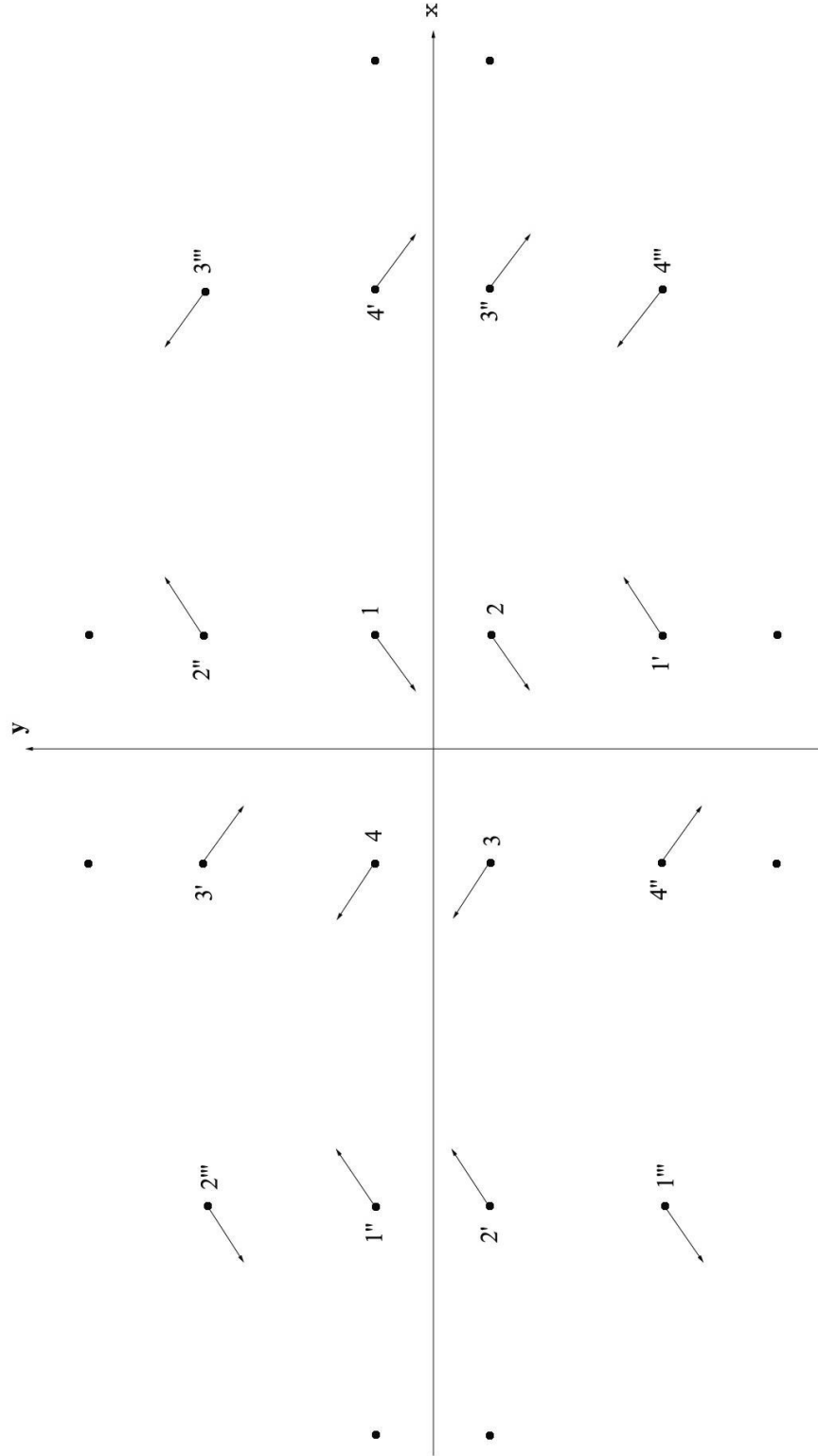
$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{16,0} = h (1-x) + k (y-1)$$

$$\sigma_{16}(\mathbf{R}_{16,0}) = \hat{x} \cos (2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{16,0} + \varphi_4) + \hat{y} \sin (2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{16,0} + \varphi_4)$$

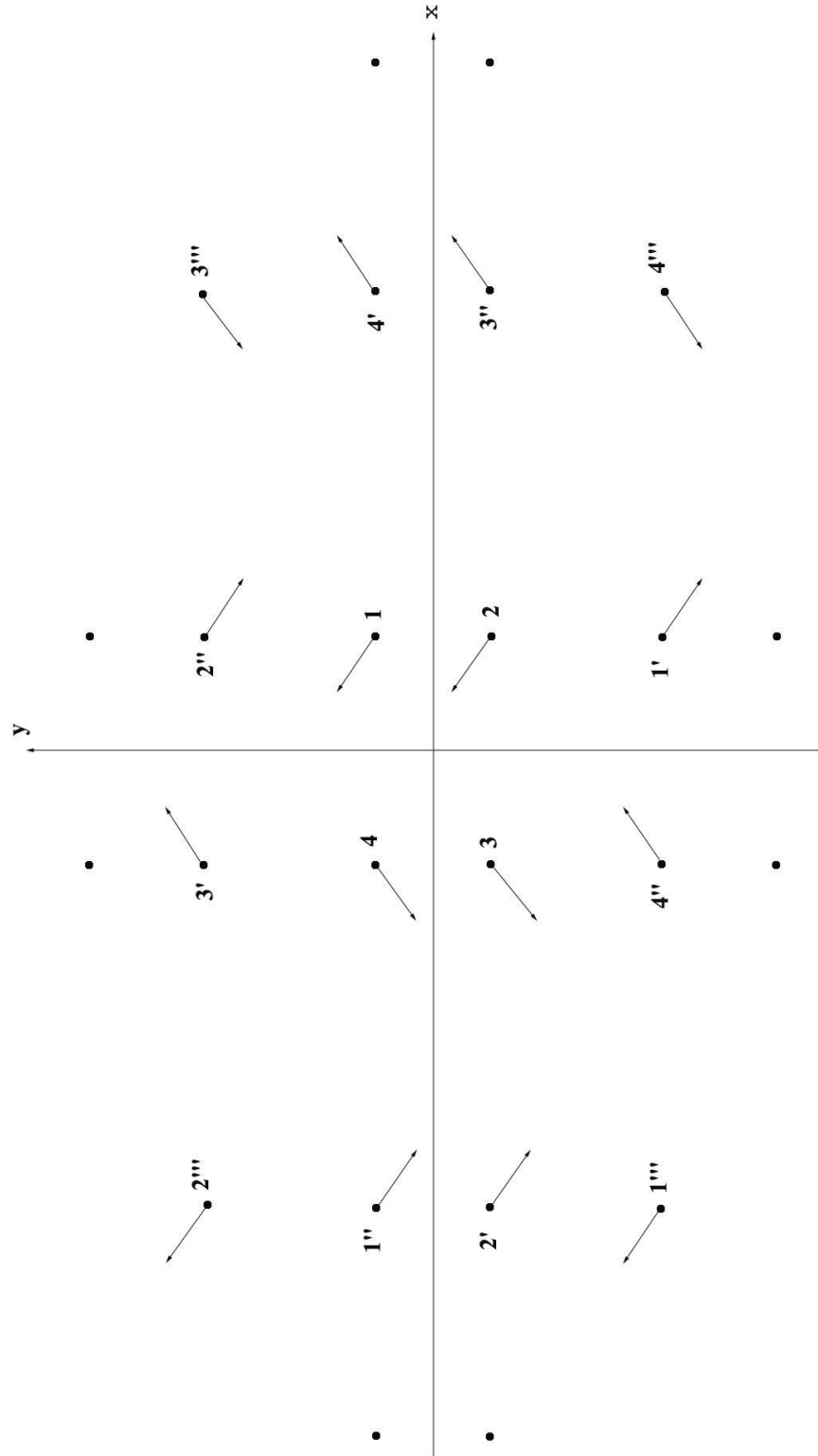
Yukarıdaki $\sigma_i(\mathbf{R}_{i,0})$ ($i = 1,2,\dots,16$) spin ifadelerinde her bir $\mathbf{k} = [h, k]$ dalga vektörü için, taban durumu ve birinci uyarılmış durum için, alt Bravais örgülerinin, Tablo 3`de gösterilen fazları kullanılarak spin vektörlerinin yönleri ve şekillenimleri Şekil 2`den Şekil 19`a kadar aşağıda gösterildiği gibi elde edilmiştir.



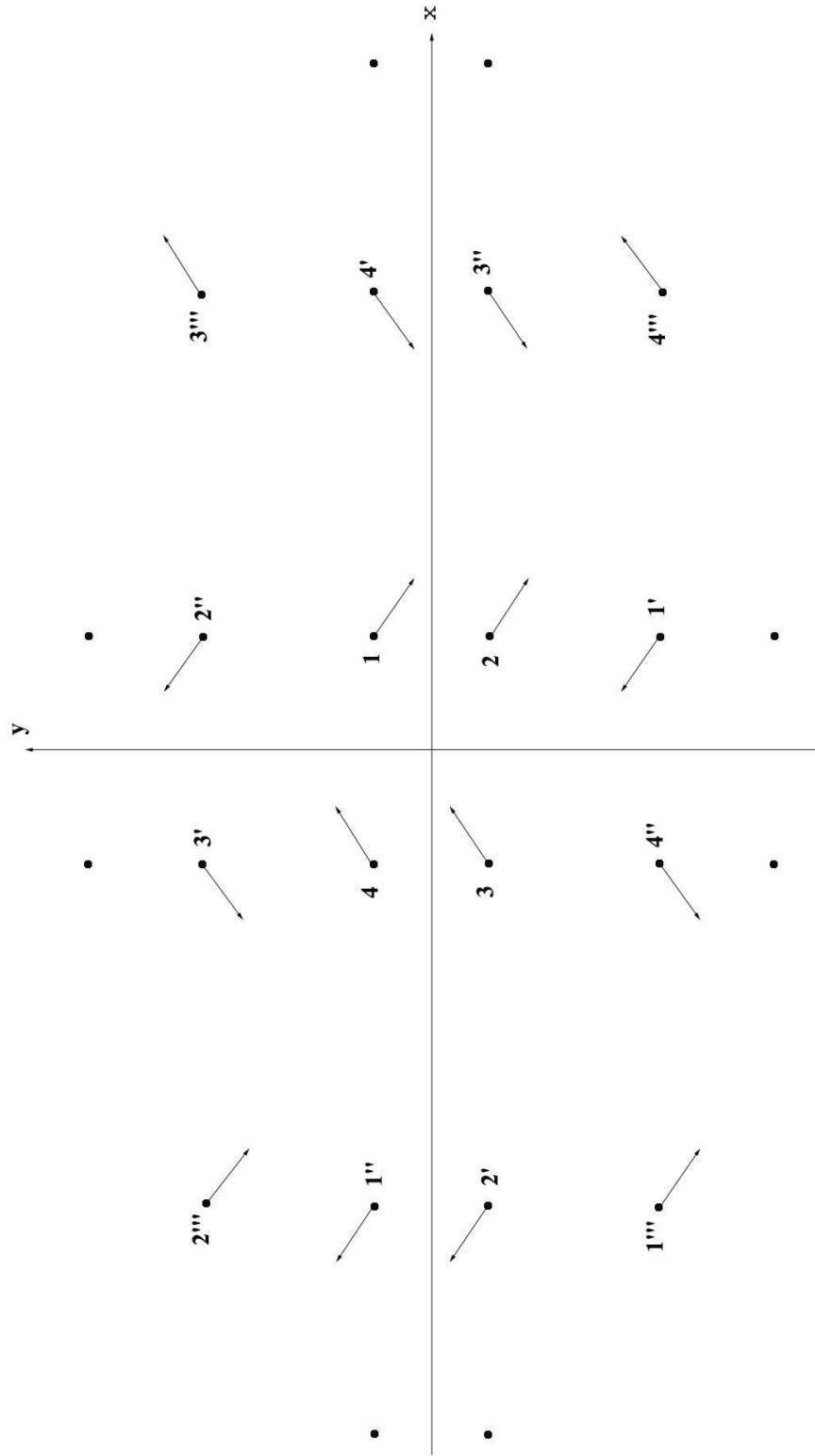
Şekil 2. $\mathbf{k}_1 = [0, 0]$ dalga vektörü için taban durum spin şekillenimi.



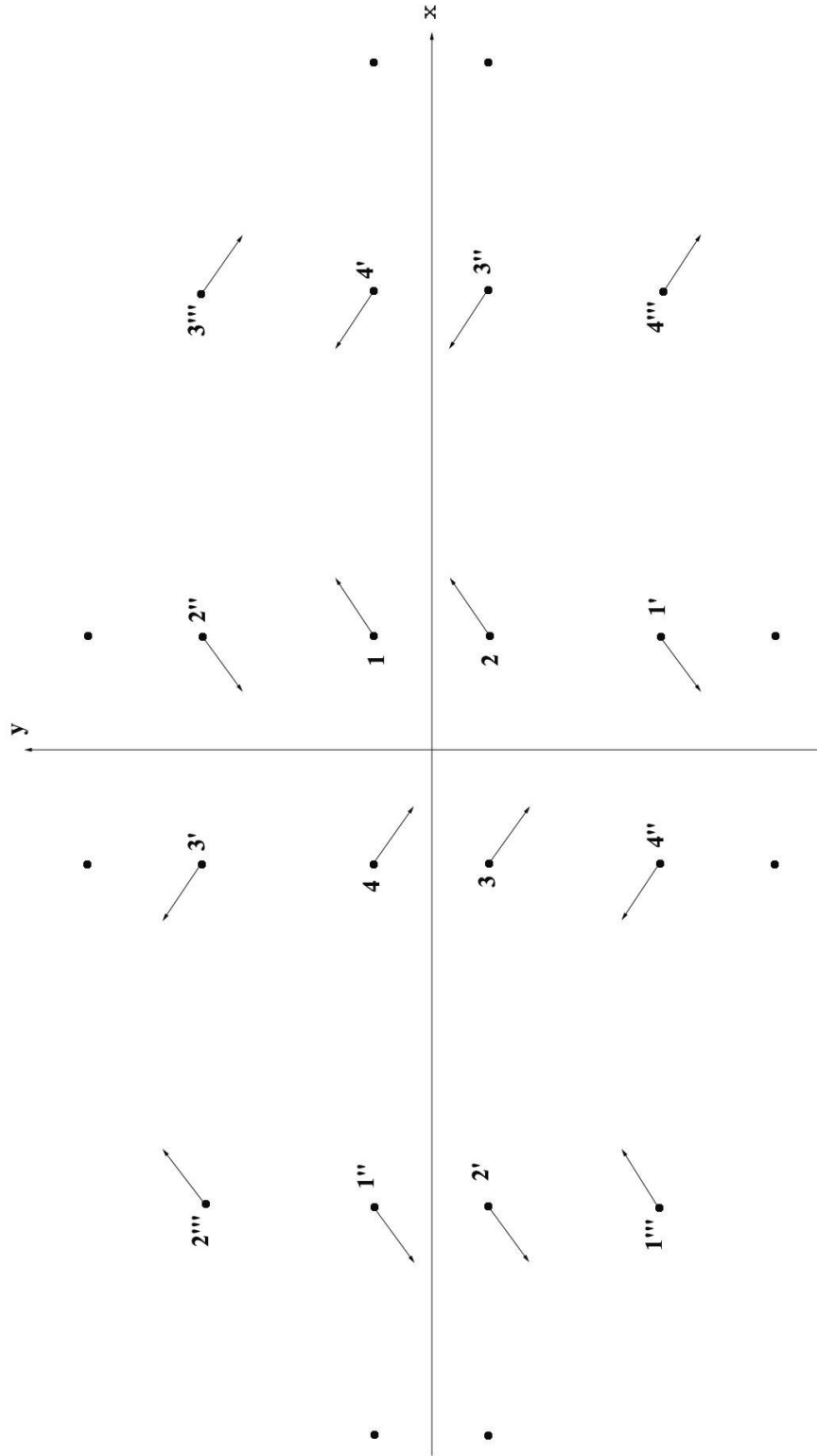
Şekil 3. $k_2 = [0.5, 0.5]$ dalga vektörü için taban durum spin şekillenimi.



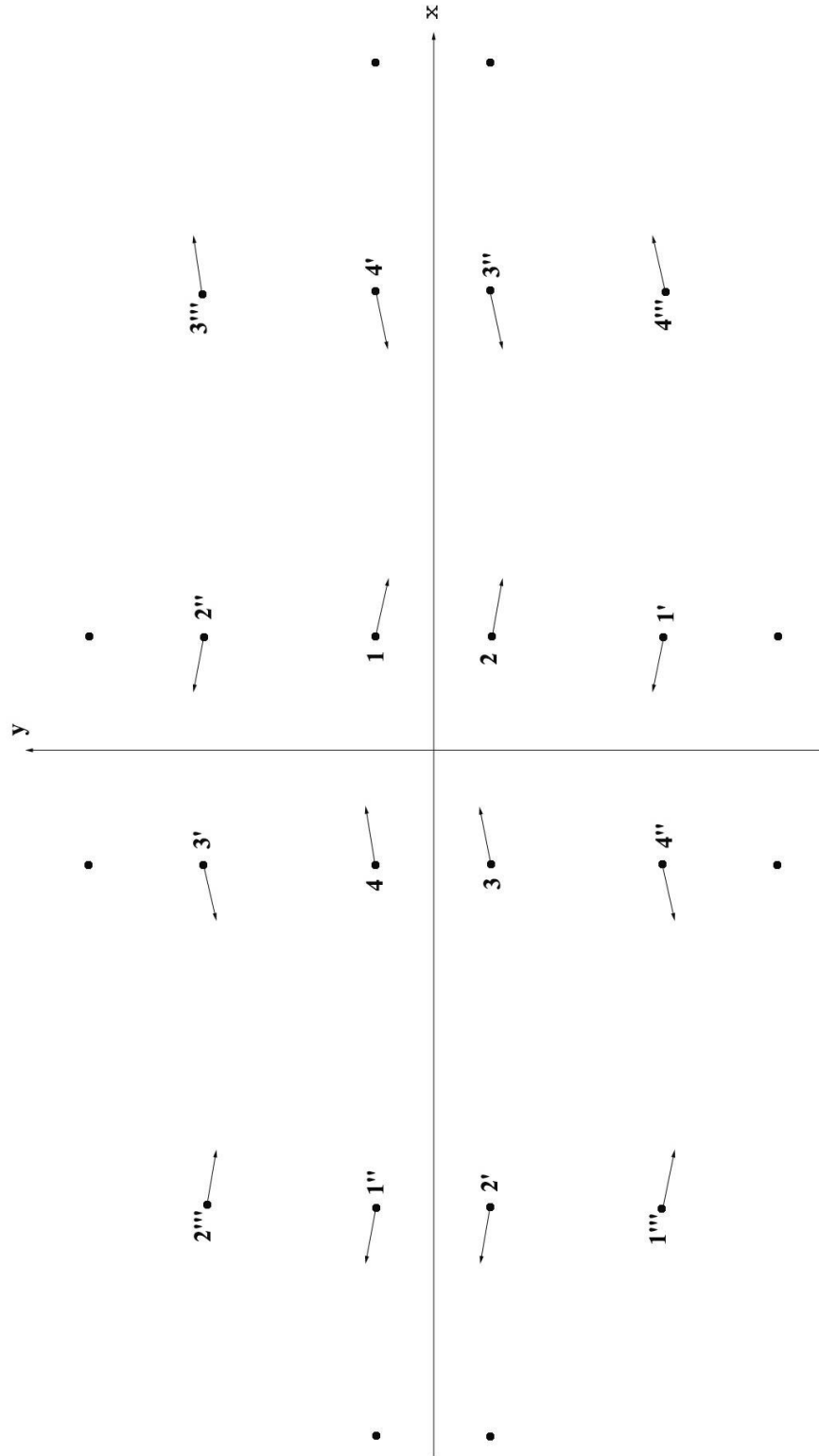
Şekil 4. $\mathbf{k}_3 = [-0.5, -0.5]$ dalga vektörü için taban durum spin şekillenimi.



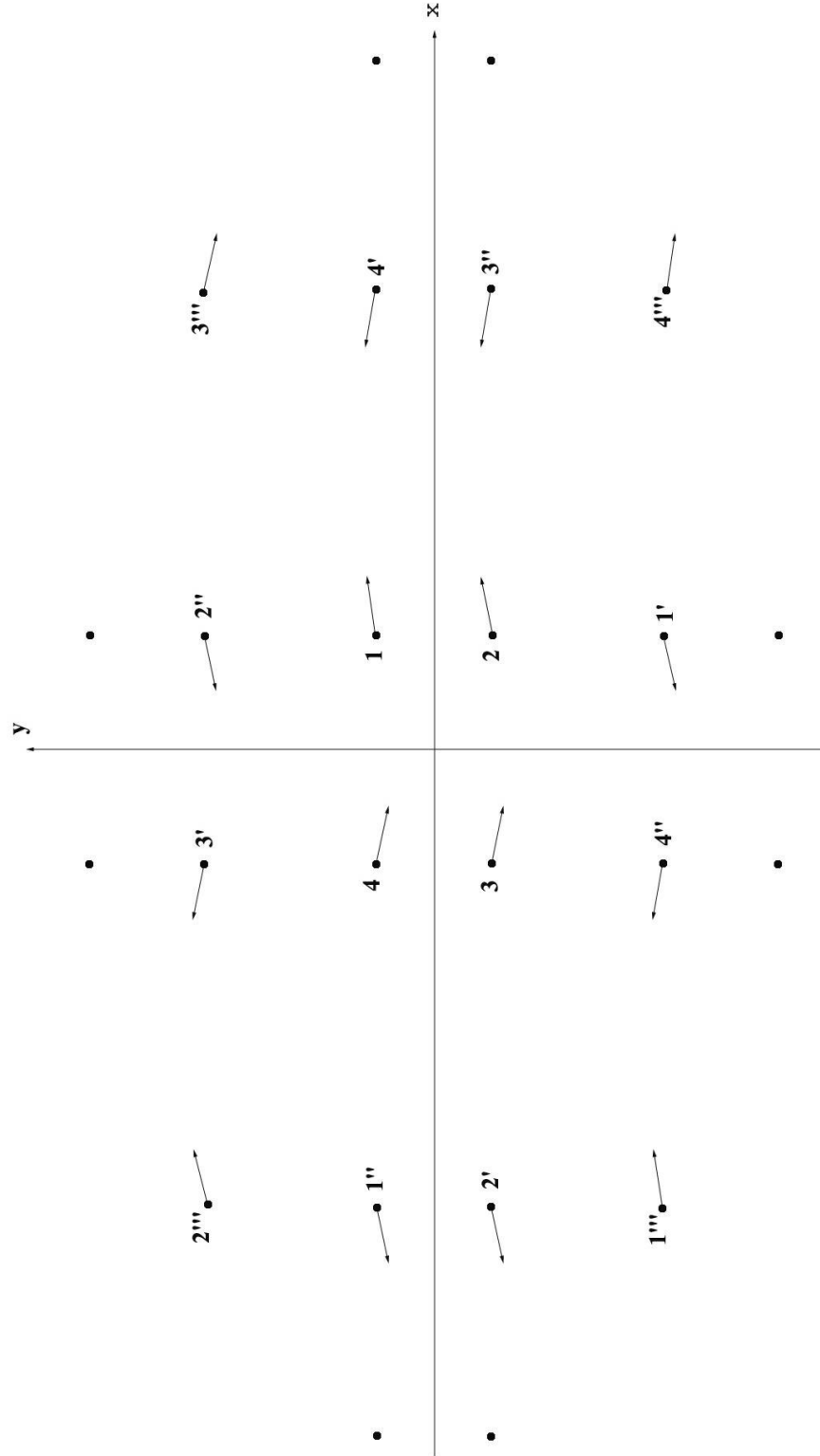
Şekil 5. $\mathbf{k}_4 = [-0.5, 0.5]$ dalga vektörü için taban durum spin şekillenimi.



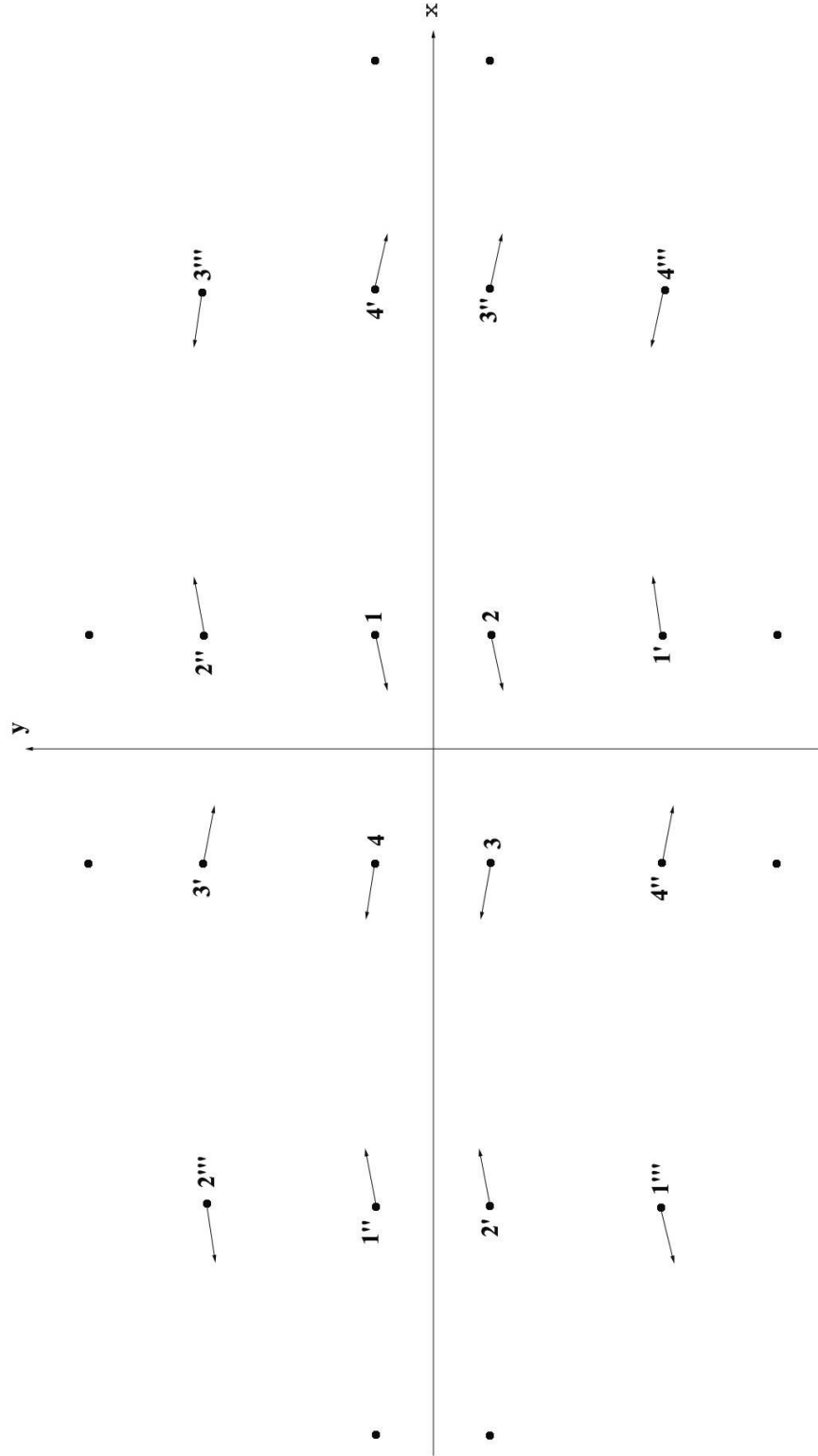
Şekil 6. $\mathbf{k}_5 = [0.5, -0.5]$ dalga vektörü için taban durum spin şekillenimi.



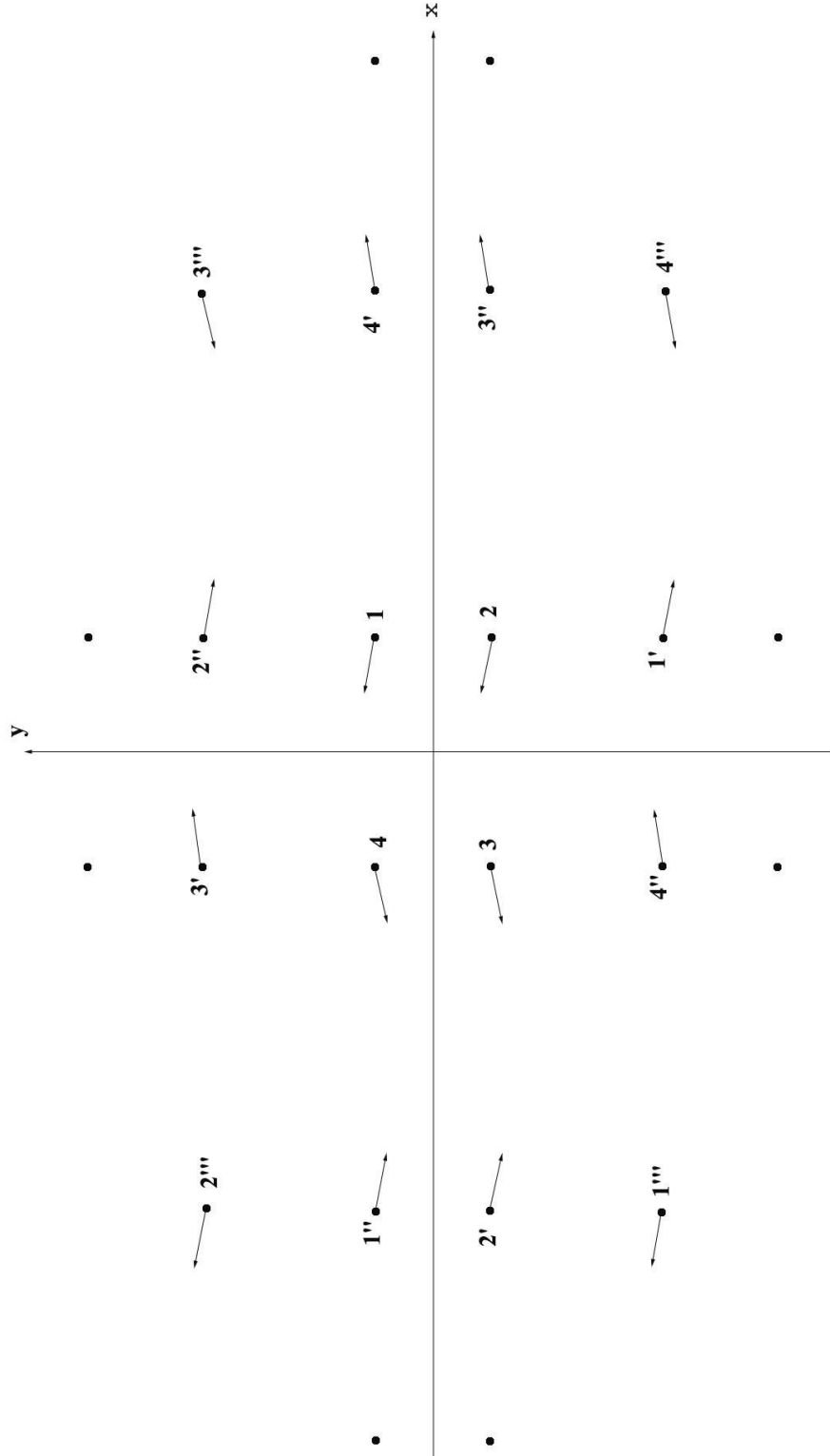
Şekil 7. $\mathbf{k}_6 = [1.5, 1.5]$ dalga vektörü için taban durum spin şekillenimi.



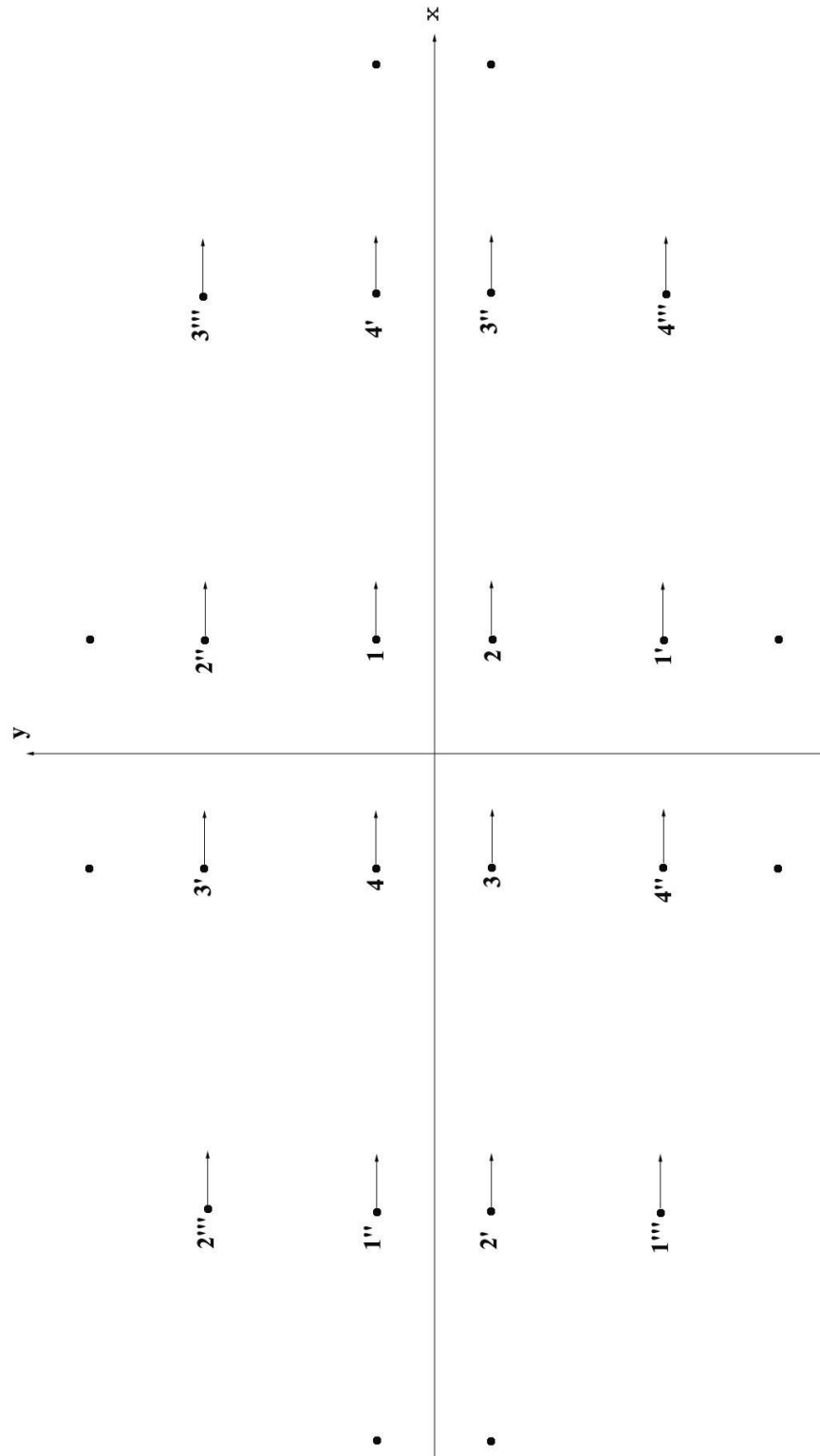
Şekil 8. $\mathbf{k}_7 = [-1.5, -1.5]$ dalga vektörü için taban durum spin şekillenimi.



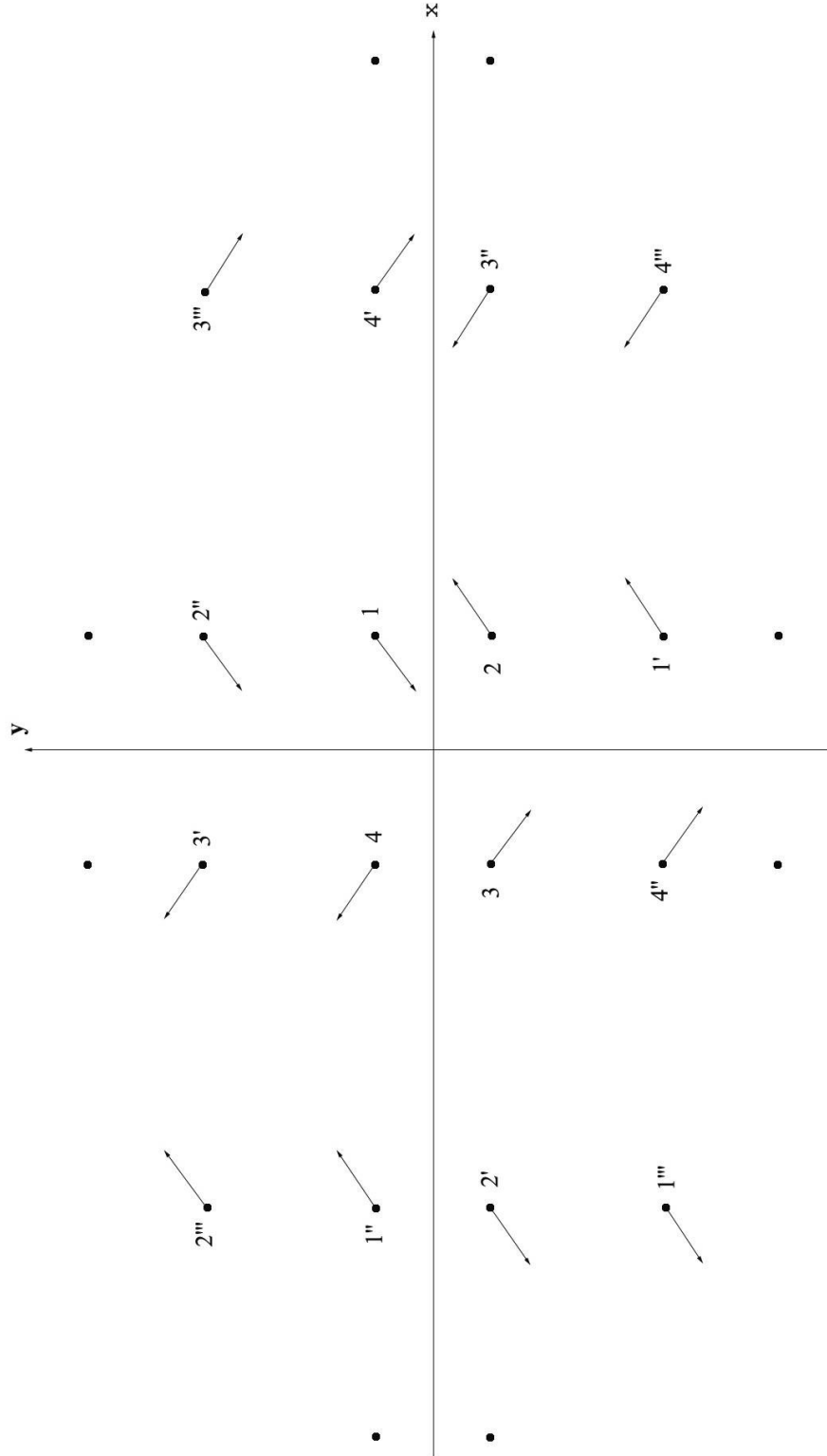
Şekil 9. $k_8 = [-1.5, 1.5]$ dalga vektörü için taban durum spin şekillenimi.



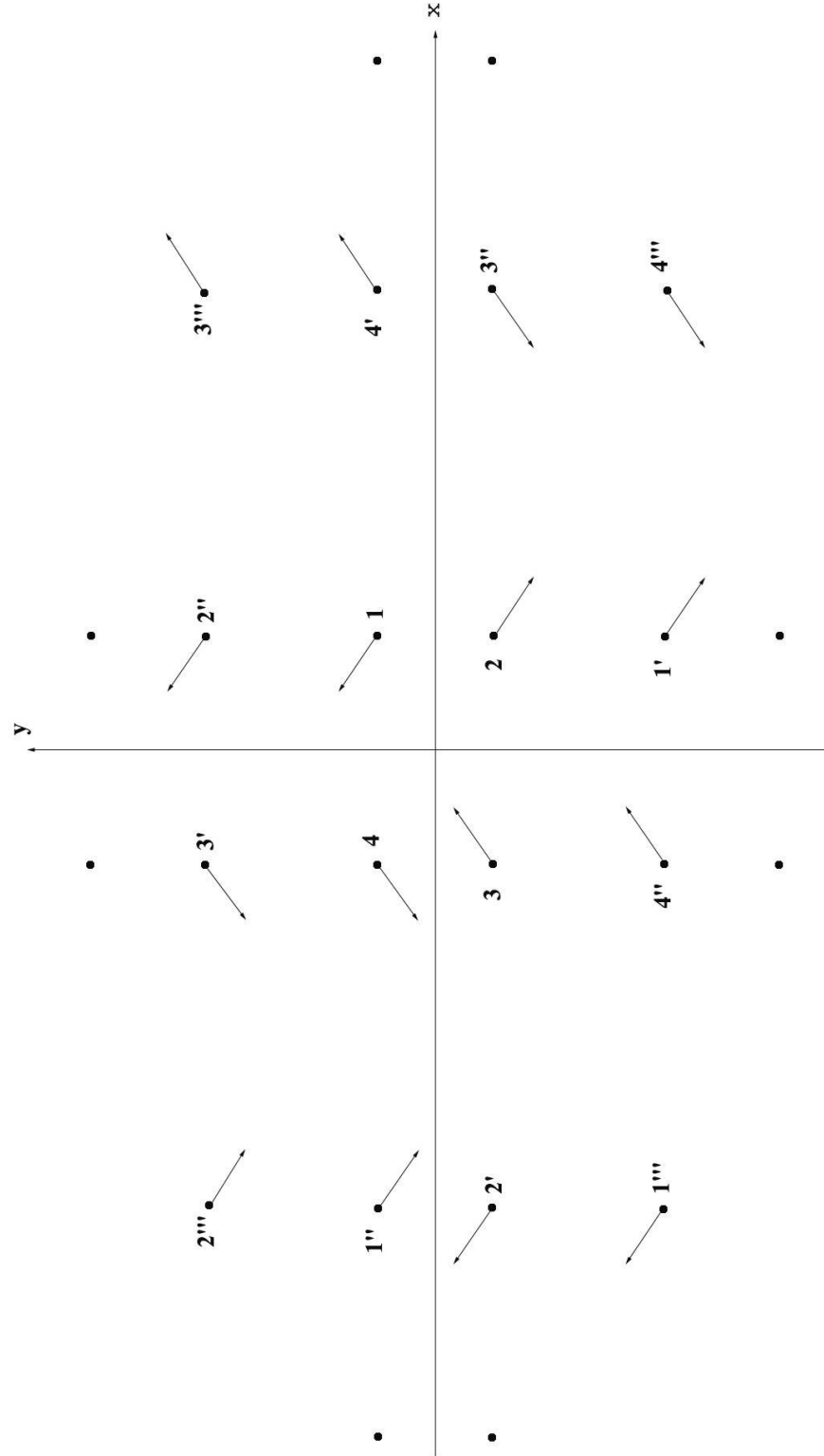
Şekil 10. $\mathbf{k}_9 = [1.5, -1.5]$ dalga vektörü için taban durum spin şekillenimi.



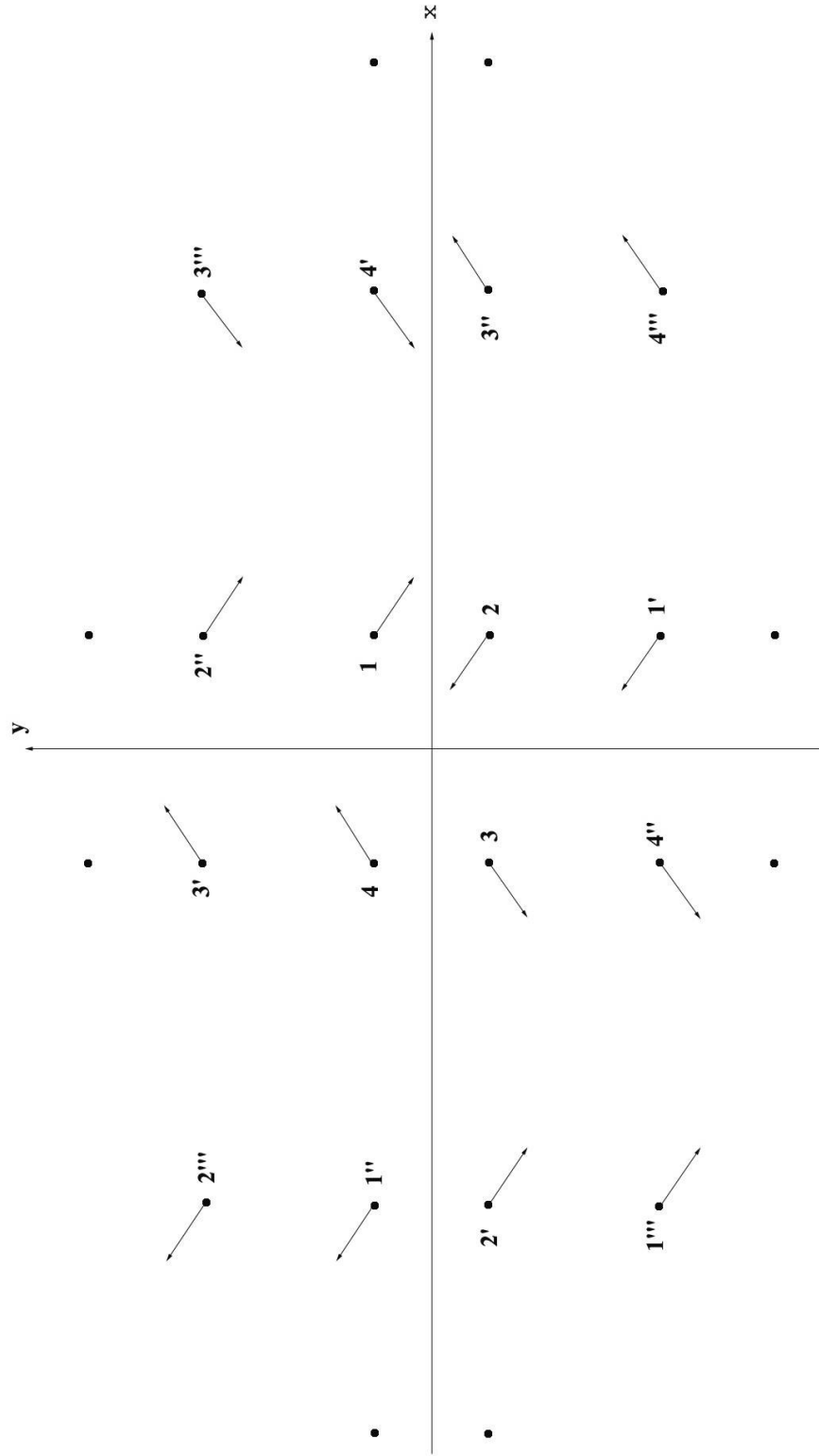
Şekil 11. $\mathbf{k}_1 = [0, 0]$ dalga vektörü için uyarılmış durum spin şekillenimi.



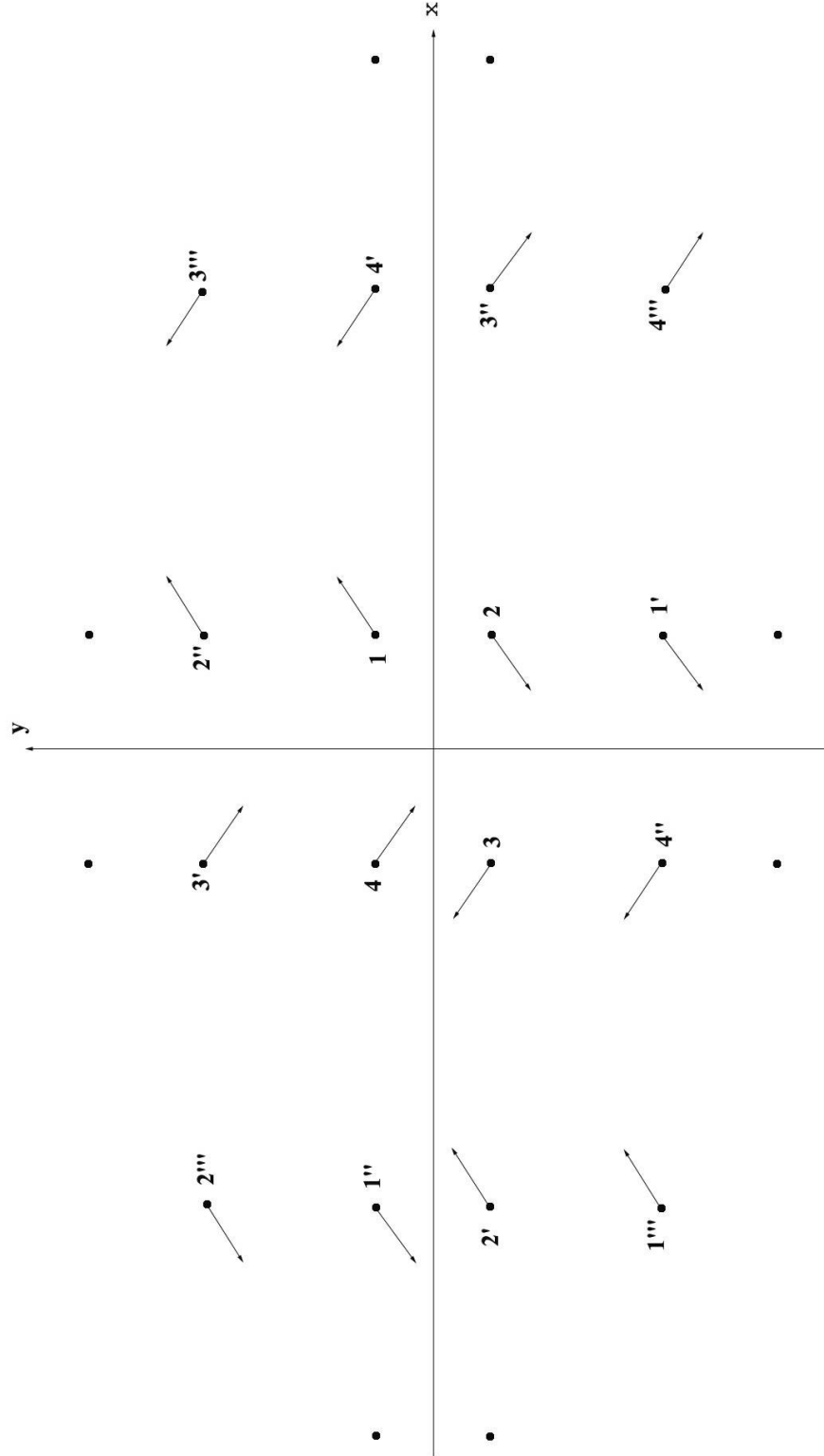
Şekil 12. $\mathbf{k}_2 = [0.5, 0.5]$ dalga vektörü için uyarılmış durum spin şekillenimi.



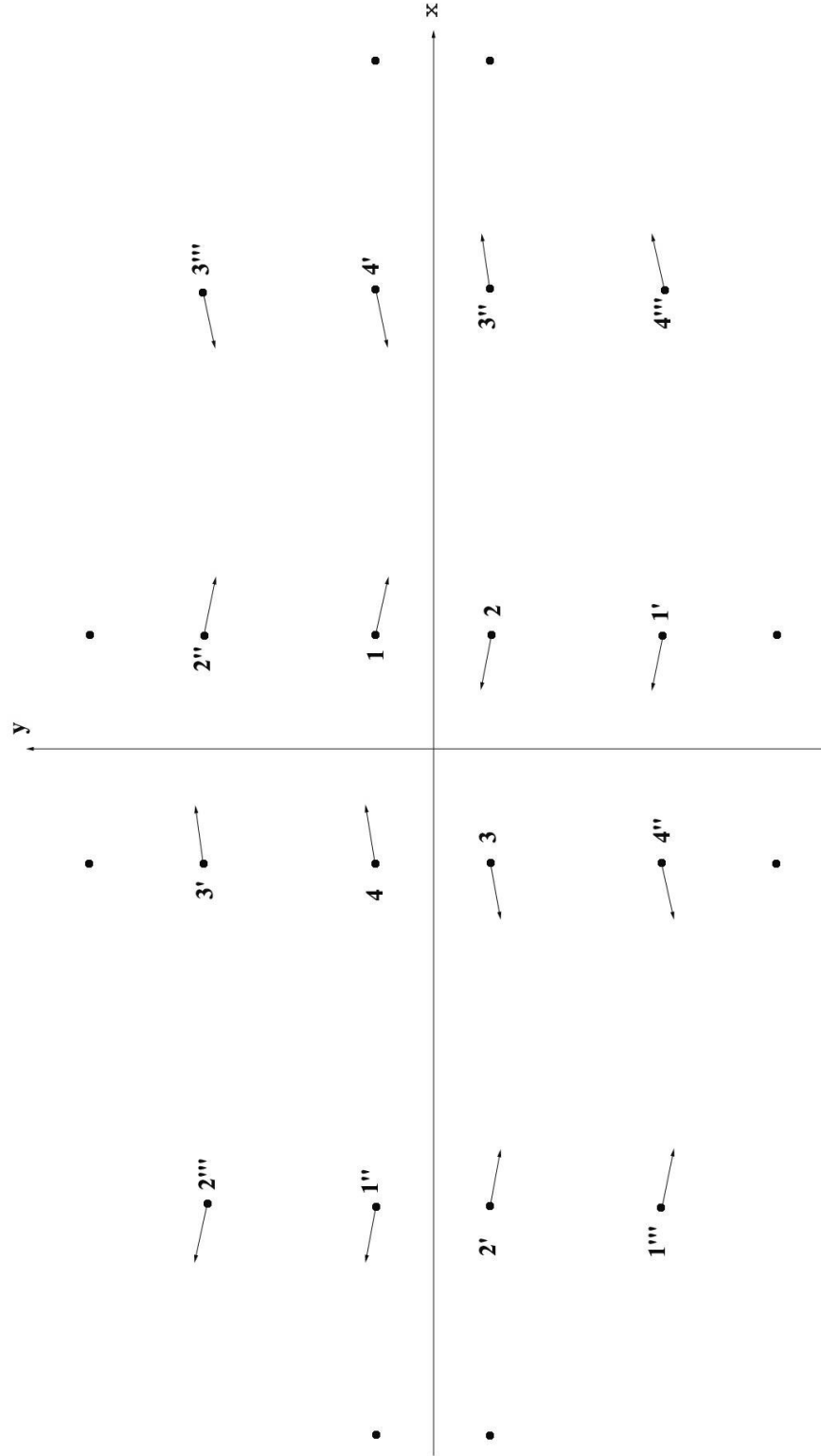
Şekil 13. $k_3 = [-0.5, -0.5]$ dalga vektörü için uyarılmış durum spin şekillenimi.



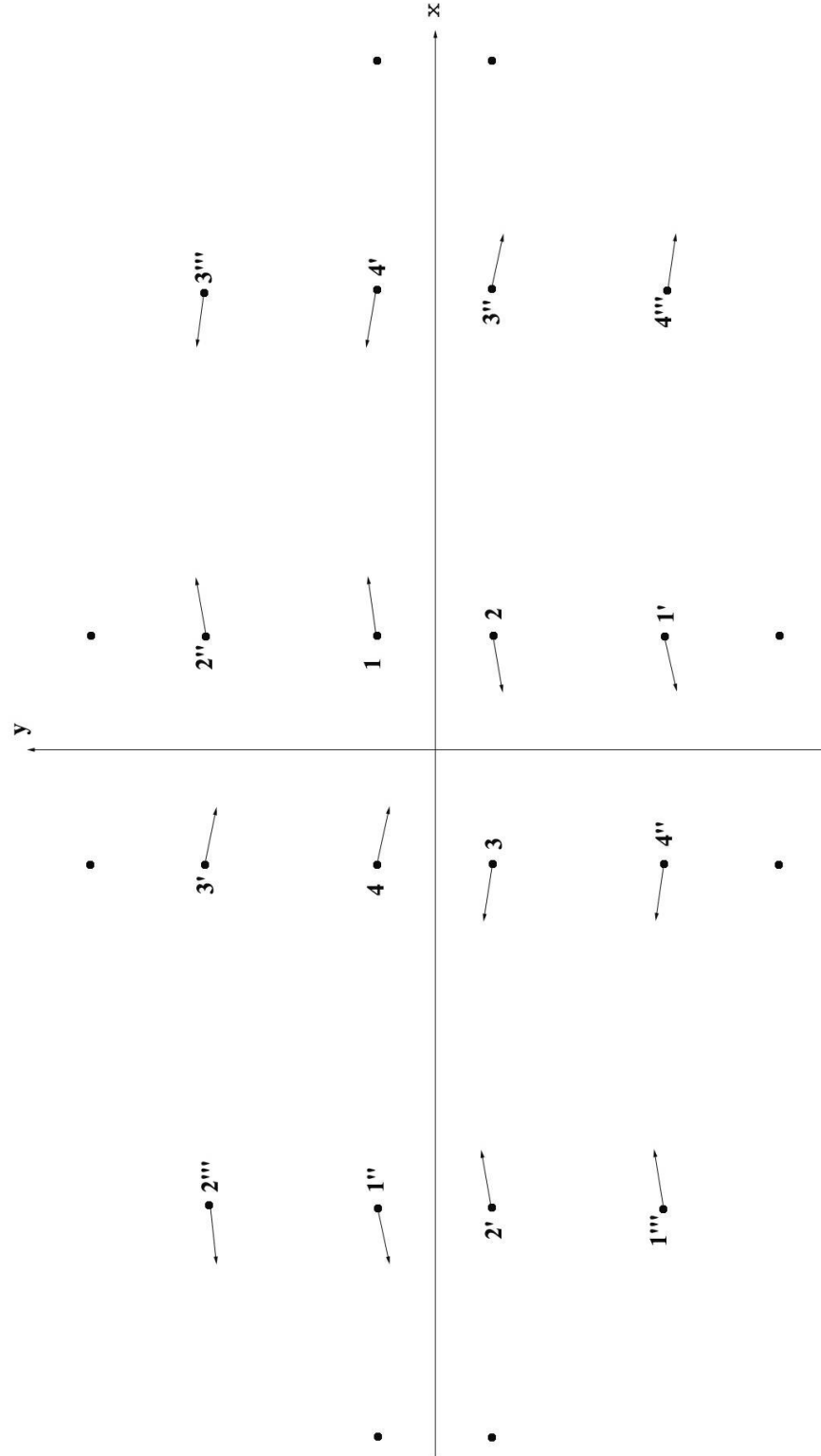
Şekil 14. $\mathbf{k}_4 = [-0.5, 0.5]$ dalga vektörü için uyarılmış durum spin şekillenimi.



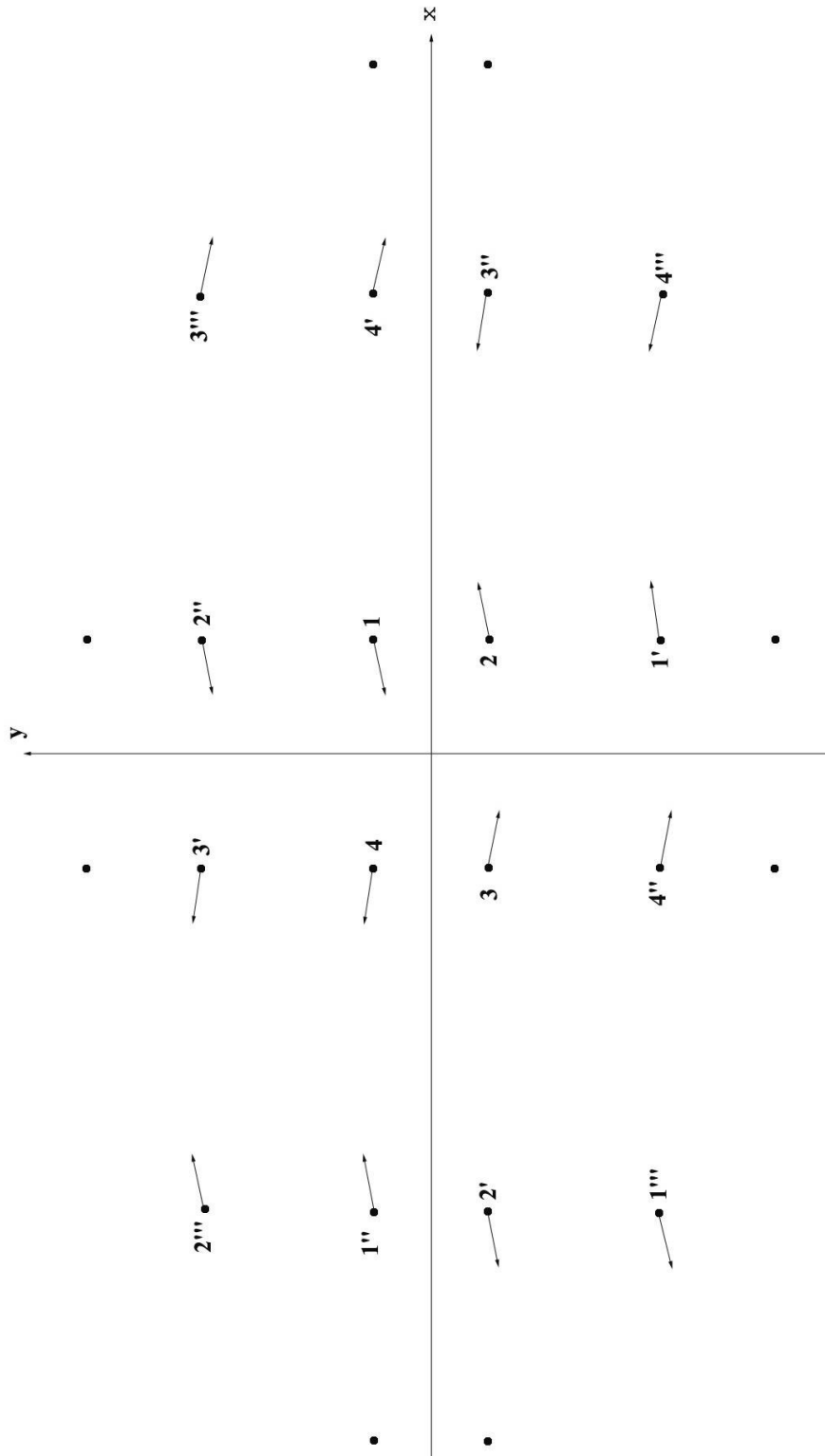
Şekil 15. $\mathbf{k}_5 = [0.5, -0.5]$ dalga vektörü için uyarılmış durum spin şekillenimi.



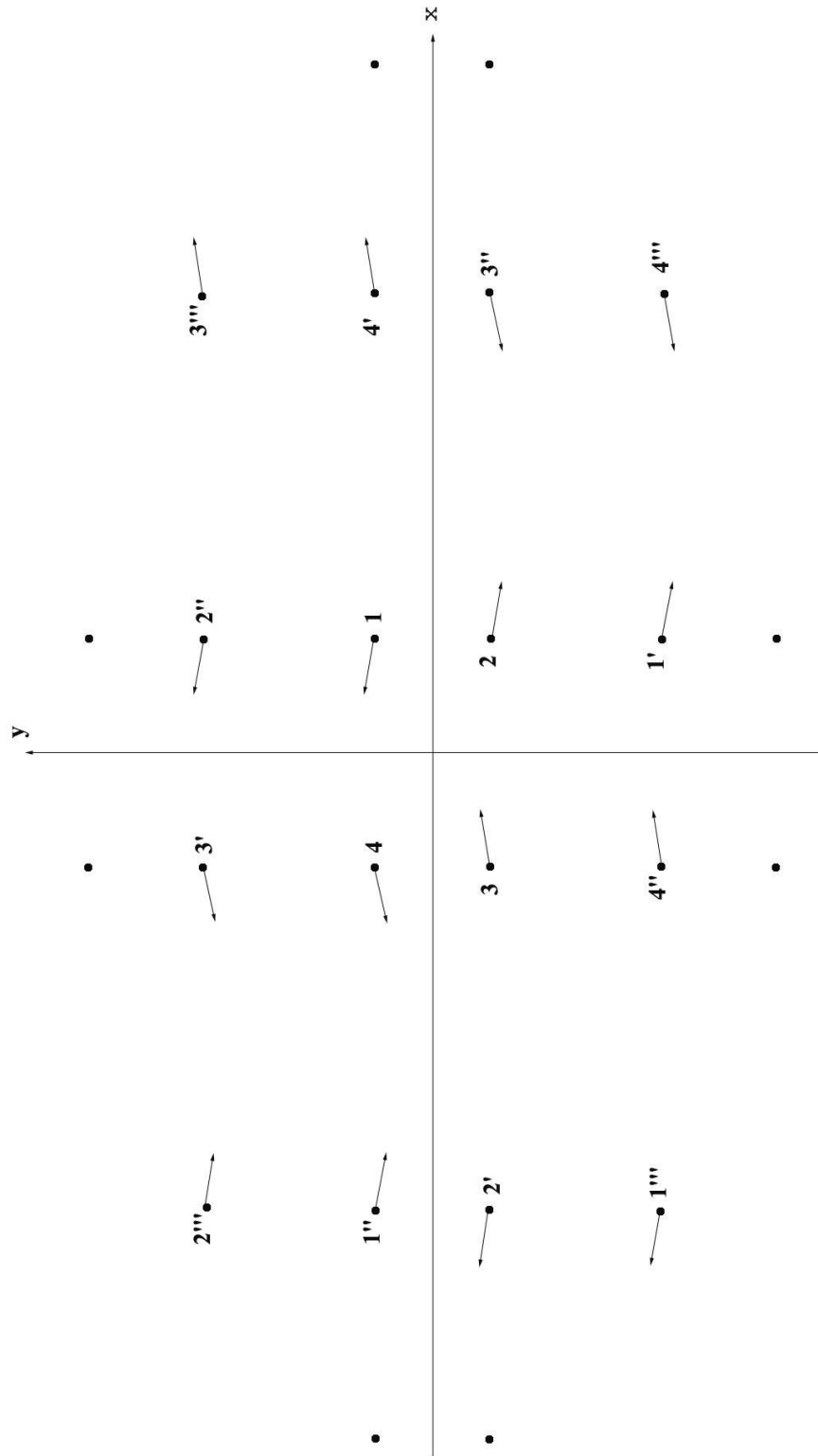
Şekil 16. $k_6 = [1.5, 1.5]$ dalga vektörü için uyarılmış durum spin şekillenimi.



Şekil 17. $\mathbf{k}_7 = [-1.5, -1.5]$ dalga vektörü için uyarılmış durum spin şekillenimi.



Şekil 18. $\mathbf{k}_8 = [-1.5, 1.5]$ dalga vektörü için uyarılmış durum spin şekillenimi.



Şekil 19. $\mathbf{k}_9 = [1.5, -1.5]$ dalga vektörü için uyarılmış durum spin şekillenimi.

4. SONUÇ VE TARTIŞMALAR

Bu çalışmada, ana hatları açıklanan mikroskobik yöntem, iki boyutlu ortorombik örgüye uygulandı. Örgüdeki atomların yedi farklı takas etkileşimi ile etkileştikleri varsayıldı. Bunların dört tanesi direkt takas, diğer üç tanesi süper-takas olarak alınmıştır. Literatürde bu takas etkileşimlerinin hesabı oldukça zor olduğundan tezde gerçeğe yakın sayısal değerler kullanılmıştır. Takas etkileşimlerinin bu seçilen değerleri altında, özdeğerler, h ve k 'nın fonksiyonu olarak elde edildi. Özdeğer fonksiyonlarının h ve k 'ya göre türevlerinin sıfır olması koşulundan hareketle örgüde mümkün olabilen dokuz tane k dalga vektörü sayısal olarak hesaplandı. Bulunan her bir k dalga vektörü için özvektörler elde edildi. Bulunan bu özvektörler yardımıyla taban durumu ve birinci uyarılmış durum için Bravais örgülerinin faz açıları bulundu. Bu fazlar kullanılarak her bir mod için örgüdeki bütün spinlerin yönleri ve şekillenimleri belirlendi. Uyarılmış durumda bazı Bravais alt örgülerinin spinlerinin yön değiştirdiği tespit edildi. Tek hassasiyet hesaplama yetersiz kaldığından, hesaplamalarda çift hassasiyet kompleks sayı kullanıldı.

Bu tezde kolineer modlar ve kolineer modlardan biraz sapma gösteren ve bükümlü spin modları adı verilen modlar bulunmuştur. Kolineer olmayan yani helisel modlar bulunamamıştır. Ancak bu modların da mevcut olabileceğini düşünmekteyiz. Kolineer ve bükümlü modlar için dokuz tane k dalga vektörü bulunmasına rağmen, helisel modlar için k dalga vektörü bulunamamıştır. Bu durum gayet anlaşılabilir bir durumdur çünkü şimdiye kadar nötron kırınımı ile deneysel olarak çözülen yapıların yüzde doksanından fazlası kolineer ve bükümlü bir yapı arz etmektedir.

Genellikle anizotropik etkileşim gösteren kristallerde gözlenen bükümlü spin modlarının sadece izotropik etkileşimleri içeren bu tezde incelediğimiz örgüde de bulunmuş olması oldukça ilginçtir.

5. KAYNAKLAR

1. L. Néel, Ann. Physik, **3**, 137 (1948)
2. W. Heisenberg, Z. Physik, **49**, 619 (1928)
3. T. A. Kaplan, Phys. Rev., **116**, 888 (1959)
4. A. Yoshimori, J. Phys. Soc. Japan, **14**, 807 (1959)
5. J. Villain, J. Phys. Chem. Solids, **11**, 103 (1959)
6. I. E. Dzialoshinski, J. Phys. Chem. Solids, **4**, 241 (1958)
7. E. A. Turov and V. E. Nays, J. Met. U. S. S. R., **9**, 10 (1960)
8. E. F. Bertaut, Compt. Rend., **252**, 76 (1961)
9. E. F. Bertaut, Compt. Rend., **252**, 2032 (1961)
10. E. F. Bertaut, Compt. Rend., **252**, 2078 (1961)
11. E. F. Bertaut, Compt. Rend., **252**, 3895 (1961)
12. E. F. Bertaut, Compt. Rend., **252**, 252 (1961)
13. E. F. Bertaut, J. Phys. Radium, **22**, 231 (1961)