



**T.C.  
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**İKİ BOYUTLU ÖRGÜDE  
FERROMANYETİZMANIN İNCELENMESİ**

**Elmas AKSOY**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**Fizik Anabilim Dalı**

**Haziran-2011  
KONYA  
Her Hakkı Saklıdır**

## **TEZ BİLDİRİMİ**

Bu tezdeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edildiğini ve tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada bana ait olmayan her türlü ifade ve bilginin kaynağına eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

## **DECLARATION PAGE**

I hereby declare that all information in this document has been obtained and presented in accordance with academic rules and ethical conduct. I also declare that, as required by these rules and conduct, I have fully cited and referenced all materials and results that are not original to this work.

İmza  
Elmas AKSOY  
Tarih: 29.06.2011

## ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

### İKİ BOYUTLU ÖRGÜDE FERROMANYETİZMANIN İNCELENMESİ

Elmas Aksoy

Selçuk Üniversitesi  
Fen Bilimleri Enstitüsü  
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. H.Şevki MERT  
2011,42.sayfa

Jüri: Prof.Dr. H. Şevki MERT  
Prof. Dr. Haluk ŞAFAK  
Yrd. Doç. Dr. İmran ORAL

Bir kristalde manyetik iyonlar, birbirlerini birkaç atomik mesafeye kadar yaklaştıkları zaman basit dipolar etkileşimlere nazaran çok kuvvetli olarak etkileşmeye başlarlar. Bu etkileşmeler, Weiss modelinin temelini oluşturur ve aynı zamanda Pauli prensibine uygunluk sağlar. Katıhal fiziğinde hala zor problemlerden bir tanesi değişim alanlarının nicel hesaplanmasıdır. Bu zorluğu yenmek için bu çalışmada kullanacağımız Heisenberg modeli yaklaşımı getirilmiştir. Bu model ile bir çok başarı sağlanmıştır.

İki boyutlu manyetik sistemler, manyetik özellikleri nedeniyle oldukça ilgi çekmektedirler. Bir çok teoride çalışmalar bunların kritik sıcaklarının bulunması üzerinde yoğunlaşmıştır. İzotropik sistemler için taban durum gayet kolaylıkla bulunmaktadır. Bu çalışmamızda iki boyutlu bir sistemin manyetizasyonu düşük sıcaklık bölgesinde indirgenmiş sıcaklığa bağlı olarak incelenmiştir.

**Anahtar kelimeler:** Ferromanyetizma, Green fonksiyonu, İki boyutlu örgü,

**ABSTRACT**

**M. Sc.Thesis**

**STUDY OF FERROMANYETIZM IN TWO  
DIMENSIONAL LATTICE**

**Elmas Aksoy  
Selcuk University  
Graduate School of Natural and Applied Sciences  
Department of Physics**

**Supervisor: Prof. Dr. H.Şevki MERT  
2011,.....pages**

**Jury: : Prof.Dr. H. Şevki MERT  
Prof. Dr. Haluk ŞAFAK  
Yrd. Doç. Dr. İmran ORAL**

In a crystal, when magnetic ions approach to each other till few atomic distances they begin to interact very strongly with respect to simple dipolar interactions. These interactions make the ground of Weiss model and at the same time this is conformation of Pauli's principle. In solid state physics, one of the most difficult problem is quantitative calculation of exchange fields. In order to overcome this difficulty one uses Heisenberg model as we do in this thesis. This model explained very successful many phenomena.

Because of their magnetic properties two dimensional magnetic systems are very attractive. Studies are on the calculations of critical temperature of these. For the isotropic systems ground state can be calculated very easily. In these thesis magnetizations of the two dimensional system will be studied at low temperature region as a function of reduced temperature.

**Key words:** Ferromagnetism, Green Function, Two Dimensional System

## ÖNSÖZ

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsüne Yüksek Lisans tezi olarak sunulan bu çalışmada, iki boyutlu örgüde Ferromanyetizma incelenmiştir.

Çalışma süresince bilgi ve tecrübeleri, bilimsel rehberliği ile manevi olarak desteğini esirgemedi her zaman yanımda olan saygıdeğer hocam **Prof. Dr.H Şevki MERT**'e en içten teşekkürlerimi sunarım.

Tüm çalışmam boyunca beni her zaman maddi ve manevi olarak destekleyen annem, babam ve eşime çok teşekkür ederim.

Elmas Aksoy

## KISALTMALAR

$H$	: Hamiltonien operatörü.
$H$	: Manyetik alan.
$g$	: Landé faktörü.
$N$	: Parçacık sayısı.
$V$	: Potansiyel.
$E$	: Enerji.
$F(r)$	: Kuvvet.
$G_a$	: İlerlemiş Green fonksiyonu.
$G_r$	: Gerilemiş Green fonksiyonu.
$Z$	: Bölüşüm fonksiyonu.
$\langle \dots \rangle$	: Ortalama.
$k$	: Boltzmann sabiti.
$T$	: Mutlak sıcaklık.
$\Omega$	: Termodinamik potansiyel.
$\theta(t)$	: Basamak fonksiyonu.
$J(\omega)$	: Spektral temsil.
$K$	: Dalga vektörü.
$J(0)$	: Değişim etkileşim sabitlerinin toplamı.
$\bar{n}$	: Birim hacimdeki elektron sayısı.
$\langle S^z \rangle$	: Manyetizasyon.
$\nu$	: Parçacık başına düşen alan.
$\phi(S)$	: Ara fonksiyon.
$F$	: Ara fonksiyon.
$\tau$	: İndirgenmiş sıcaklık.
$\mu_B$	: Bohr manyetonu.
$T_C$	: Curie sıcaklığı.

## İÇİNDEKİLER

TEZ BİLDİRİMİ .....	iii
ÖZET.....	iv
ABSTRACT.....	v
ÖNSÖZ.....	vi
KISALTMALAR.....	vii
İÇİNDEKİLER.....	viii
1. GİRİŞ.....	1
2. GREEN FONKSİYON FORMALİZMİ.....	2
3. KARE ÖRGÜDE MANYETİZASYONUN İNCELENMESİ.....	20
3.1 Dış Manyetik Alan Yokluğunda Manyetik Alanın İncelenmesi.....	21
3.2 Dış Manyetik Alan Varlığında Manyetik Alanın İncelenmesi.....	30
4. SONUÇLAR ve ÖNERİLER.....	40
5. KAYNAKLAR.....	41
ÖZGEÇMİŞ.....	42

## 1. GİRİŞ

Kuantum alan teorisi metodunda tek parçacık Green fonksiyonu bir sistemin mikroskobik özelliklerini karakterize eden en önemli niceliklerden biridir. Katıların manyetik özellikleri için kullanılan çift zamanlı, sıcaklığa bağlı Green fonksiyonunu göz önünde bulundurmadan önce Green fonksiyonlarını genel özellikleriyle belirtmek gerekir.

İki boyutlu sonsuz yapıların manyetik özelliklerinin incelenmesi son zamanlarda oldukça önem kazanmıştır. Bu sistemleri anlamak için muhtelif teorik çalışmalar yapılmıştır. Yüksek Sıcaklık Açılımı (Binder ve ark., 1974), Monte Carlo Simülasyon Yöntemleri (Binder ve ark., 1984), Renormalizasyon Grup Çalışmaları (Mariz, 1987), Green Fonksiyonu Çalışmaları (Zubarev, 1960), deneysel olarak da iki boyutlu yapıları ve yüzeylerin manyetik özelliklerini anlamak için çalışmalar yapılmıştır. (Rau ve ark., 1980) (Weller., 1985) (Dürr., 1989) (Cellotta., 1986) (Rau and Robert., 1987)

Bu çalışmada model olarak Ising modelinden daha gerçekçi olan Heisenberg modeli kullanılmıştır. Anizotropik terimler göz önüne alınmamıştır. Spinler arasındaki etkileşim ferromanyetik değişim etkileşimi olarak alınmış ve sadece en yakın komşu atomlar arası etkileşimin varolduğu kabul edilmiştir. Bu sebepten dolayı ikinci, üçüncü, komşuluktaki atomlar arasındaki etkileşimler ihmal edilmiştir. Bu varsayım atomlar arasındaki değişim etkileşiminin aradaki uzaklık fonksiyonu ile hızla azalan bir fonksiyonu olduğu düşünülürse gayet yerindedir. Dış manyetik alan z yönünde doğrultusunda kabul edilmiştir.

Tez dört bölümden oluşmuştur: İkinci bölümde Green fonksiyonu hakkında bilgi verilmiştir. Üçüncü bölümde manyetizasyon dış manyetik alan varken ve dış manyetik alan yok iken incelenmiş ve manyetizasyon ifadeleri indirgenmiş sıcaklığın fonksiyonu olarak bulunmuştur. Dördüncü bölümde sonuçlar tartışılmıştır.



## 2. GREEN FONKSİYONU FORMALİZMİ

Kuantum alan teorisiyle istatistiksel mekaniğe dayalı teoriler arasında benzerlik olduğunu savunan görüşler mevcuttur. Buradaki problem bir sistemin parçacıkları birbiriyle etkileştiği zaman başlar. Parçacıkların tek başına serbest hareket etmedikleri artık biliniyor. Bu durumda her parçacığın diğer parçacıklar üzerinde oldukça karmaşık bir etkisi olduğu söylenebilir. Gazlar hariç bütün fizik sistemleri için bu durum geçerlidir. Örneğin sıvı molekülleri, katı maddelerin elektronları, çekirdekdeki proton ve nötronlar vs... için bu durumu gözlemleyebiliriz.

Çok cisim probleminde ana kavram parçacıklar arasındaki etkileşimlerin parçacıklar üzerindeki etkisidir. Örneğin etkileşimlerin taban durum ve uyarılmış durum enerjileri üzerine, termodinamik özellikler üzerine elektriksel ve manyetik özellikler üzerine etkileriyle ilgilenilir.

Çok cisim probleminin çözümüne oldukça yaklaşan, günümüzde de kullanılan başarılı metotlardan biri kanonik dönüşüm tekniğidir. Bu tekniği kısaca anlatalım.

Bu teknik etkileşimin çok küçük olduğu yeni koordinat sistemlerine Shrödinger denklemini dönüştürmeyi içerir. Bu yaklaşımdaki ana zorluk tekniğin sistematik olmadığı için uygulamasının zor oluşudur. 1950'lere kadar bir sistematik metodun eksikliği yüzünden çok cisim teorisi çok az ilerledi. Daha sonraları çok iyi ilerlemeler kaydedildi. Kuantum alan teorisini geliştiren önemli makaleler yayımlandı. Bu makaleler hazırlandıktan sonra temel parçacık fiziğine uygulandı.

Hem kuantum alan teorisinde hem de istatistiksel mekanikte kuantum mekaniksel operatörlerin ortalamaları ile ilgilenilir fakat kuantum alan teorisi sistemin taban durumu üzerindeki ortalamalarla ilgilenirken ( $T = 0$ ), istatistiksel mekanik küme ortalamaları ile ilgilenir. ( $T \neq 0$ )

İstatistiksel mekanik, enerji seviyeleri çok yoğun olan sistemler ile ilgilenir. Öyle ki bu enerji seviyeleri arasındaki uzaklık hacim sonsuza giderken sifıra gider. Bu durumdan dolayı spektrum süreklidir ve pertürbasyon enerjisi her zaman enerji aralıklarından büyük olur. Bu yüzden pertürbasyon teorisi sürekli spektrumlarda kullanılmalıdır. Bağlı diyagramların, diyagram tekniğine dahil edilmesi sonucunda pertürbasyon teorisinde büyük ilerlemeler kaydedildi.

Son yıllarda Green fonksiyonlarda bir düzenleme yapılarak kuantum alan teorisinde istatistiksel problemlere uygulandı. Pertürbasyon teori diyagramlarında sınırlandırılmış sınıflar üzerinden toplama yaparken Green fonksiyonlarını kullanmak

çok kullanışlı bir hale geldi ve spektral terimlerle kombine edildiği zaman çok güçlü bir hal aldı.

Öncelikle bir parçacık Green fonksiyonlarını düşünelim. Etkileşen bir sistemde bir parçacık bir yerden başka bir yere devamlı hareket halindedir. Bu parçacığın davranışlarını detaylı olarak incelemek tabiki çok zor olacaktır. Yine de harekete olasılık kazandırarak hareketi ortalama bir şekilde tanımlayabiliriz. Böylece tek parçacık Green fonksiyonu  $G(r_2, t_2; r_1, t_1)$ , bir parçacığın  $t_1$  anında  $r_1$  noktasından başlayarak  $t_2$  anında  $r_2$  noktasına varma olasılığı olarak tanımlanır.

İki parçacık Green fonksiyonu da benzer şekilde tanımlanır. Bu Green fonksiyonları, önemli sistemlerin fiziksel özelliklerinin elde edilmesini sağlar.

Kütleleri  $m_1, m_2 \dots m_N$  olan  $N$  tane parçacık,  $V(r)$  potansiyeli ile ilişkilendirilerek harici bir  $F(r)$  kuvvet alanında, dönüşüm formülleri kullanılarak zamandan bağımsız bir şekilde problemin çözümünde kullanılırsa bu parçacıkların hareketlerini belirleyebiliriz.  $N$  parçacık sistemi için Shrödinger denklemi tek parçacık Shrödinger denklemine şu şekilde ayrışır;

$$H_i \phi_{K_i}(r_i) = E_{K_i} \phi_{K_i}(r_i) \quad i = 1, \dots, N \quad (2.1)$$

$$H_i = \frac{P_i^2}{2m} + V(r_i) \quad (2.2)$$

Toplam enerji tek parçacık için verilen enerjilerin toplamları ile bulunabilir  $\left( E = \sum_i E_{K_i} \right)$ . Parçacıklar birbirleriyle etkileşmeye başladıkları zaman  $N$  tane çiftlenimli denklemi çözmek zorunda kalırız.

$$F(r_i) + \sum_{j=1}^N F(r_i, r_j) = m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} \quad i = 1, \dots, N \quad (2.3)$$

denklem sistemini çözmek zorundayız. Burada  $F(r_i, r_j)$  konumları  $r_i$  ve  $r_j$  olan iki parçacık arasındaki etkileşimi gösterir. Ayrılamayan Shrödinger denklemi ise;

$$\left[ \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{P_i^2}{2m} + V(r_i) \right\} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N V(r_i, r_j) \right] \Psi(r_1, \dots, r_N) = E \Psi(r_1, \dots, r_N) \quad (2.4)$$

Burada  $V(r_i, r_j)$ ,  $r_i$  ve  $r_j$  konumlarında bulunan iki parçacık arasındaki etkileşim potansiyelidir. Şimdi de güçlü ve zayıf etkileşimleri ayıralım. Eğer etkileşimlerimiz zayıf ise etkileşmeyen durum çözümlerine çok küçük bir pertürbasyon katkısı olacaktır. Çözümü etkileşmeyen parçacıkların çözümünde olduğu gibi yapabiliriz. Bu durum bizim sıradan sonlu pertürbasyon teorisiyle çözümü elde edebileceğimizi gösterir. Çözümü sıradan sonlu pertürbasyon teorisiyle elde edemezsek güçlü etkileşim formüllerine başvurmalıyız. Bir çok katıda olduğu gibi etkileşimler genellikle güçlüdür. Örneğin metaller içindeki iki elektron arasındaki Coulomb etkileşmesi şu formdadır :

$$V(r_i, r_j) = \frac{e^2}{(r_i - r_j)} \quad (2.5)$$

Taban durum enerjisi bu formül kullanılarak hesaplanırsa;

$$E_0 = E_0^{(0)} + E_0^{(1)} + \text{sonsuz} \quad (2.6)$$

elde edilir.

Birinci terimden sonraki pertürbasyon teorisinin bütün terimleri sonsuzdur. Buradaki çıkmazdan, koordinat dönüşümü yaparak kurtulabiliriz. Öyle ki yeni koordinatları kullanırsak (2.3) denklemi yaklaşık olarak çiftlenimsiz olur. Bu dönüşümün detaylarına girmeyeceğiz. Bu dönüşümler bir sistem için kullanılırsa etkileşen parçacıklar yaklaşık olarak etkileşmeyen parçacıklar gibi düşünülebilir.

Şimdi çoğunlukla incelenen, katılardaki temel uyarılmayı gözönünde bulunduralım. Temel uyarılmanın ne olduğunu ve hayali parçacıklar ile nasıl bağlı olduğunu anlamaya çalışalım. Katılardaki titreşim kuantumlarına yani fononlara bakalım. Harmonik osilatörün kuantumlaştırılmasıyla kuantumlu enerji aşağıdaki denklemdeki gibi olur.

$$E'_q = \hbar\omega_q \left( n_q + \frac{1}{2} \right) \quad (2.7)$$

Harmonik osilatör, taban durum enerjisi  $\frac{1}{2}\hbar\omega$  olan ve her biri  $\hbar\omega$  enerjisine sahip olan  $n_q$  tane kuantumlardan meydana gelen bir küme olarak düşünülebilir. Ses dalgalarının bu kuantumları fononlar olarak adlandırılır. Fononlar parçacıklar gibi hareket ederler. Gerçek birer parçacık olmayan bu fononlar kuantum mekaniksel alanda birer parçacıktır.

Verilen bir  $n_q$  için dalga sayısı  $q$  olan kuantumlanmış tek ses dalgası vardır fakat dalga sayısı  $q$  olan çok sayıda fonon vardır ( $n_q$  kadar). Bu yüzden fononu bir kuantum olarak ya da bir ses parçacığı olarak isimlendirmek daha uygundur.

$\hbar\omega$  enerjisi, sıfır nokta enerjisi  $\left(\frac{1}{2}\hbar\omega\right)$  üzerindeki uyarılma enerjisinin minimum birimidir. Fonon bu minimum birimi taşıdığından dolayı temel uyarılma olarak kabul edilir.

Birleşik uyarılmalar iki katagoriye ayrılır: “toplu uyarılmalar” ve “sanki parçacıklar.” Toplu uyarılmalar sistemdeki parçacıkların makroskobik gruplarının toplu hareketleriyle ilişkilendirilmiş kuantumlardır. Toplu uyarılmalar gerçek parçacıklarla benzerlik göstermezler oysaki sanki parçacıklar gerçek parçacıklarla oldukça benzerdir.

Bir parçacık bir sistem içerisinde hareket ettiği müddetçe yakın parçacıkları iter ya da çeker. Böylece uyarılmış parçacıklarla çevrilmiş bir bulut oluşturur. Gerçek parçacık ve bulutu sanki parçacık oluşturur. Parçacık bulutu gerçek parçacığı ekranladığından, büyük ölçekte kuvvet alanını azalttığından, sanki parçacık diğer parçacıklarla sadece zayıf bir şekilde etkileşir ve böylece onlardan bağımsız gibi kabul görür.

Taban durum enerjisi, temel uyarılma enerjileri ve temel uyarılmaların yaşam süreleri için bir sistematik metod elde etmek gerekir. Parçacık fiziğiyle sınırlandırılmış kuantum alan teorisi tam aradığımız metodu verir. Kuantum alan teorisi bu konuda bize bütünleştirilmiş bir yol sunar.

Çok cisim problemimizde, alan teorisi incelemesinde Green fonksiyonları en önemli rolü oynar. Green fonksiyonlarının farklı çeşitleri vardır. Tek parçacık, iki parçacık, ...,n parçacık, ilerlemiş, gerilemiş, nedensel, sıfır sıcaklık, sonlu sıcaklık, gerçek zaman, sonlu zaman, kompleks zaman Green fonksiyonları v.b...

Örneğin tek parçacık Green fonksiyonu  $G(r_2, t_2; r_1, t_1)$ 'i ele alalım. Green fonksiyonu olasılık genliğini verir. Yani biz bir parçacığı etkileşen bir sistem içerisine,  $r_1$  konumuna,  $t_1$  zamanında koyarsak ve diğer parçacıklarla çarpışmasına izin verirsek  $t_2$  zamanında  $r_2$  konumunda bulunma olasılığını bulabiliriz.

Green fonksiyonu  $G$ , sanki parçacıkların direkt enerjilerini ve yaşam sürelerini verir. Ayrıca momentum dağılımları spin ve parçacık yoğunlukları taban durum enerjileri gibi bilgilere de Green fonksiyonu kullanılarak ulaşılabilir.  $G$  fonksiyonunun sonlu sıcaklık versiyonunu kullanılırsak bu özelliklerin tamamı sonlu sıcaklıkta elde edilebiliriz.

İki parçacık Green fonksiyonu  $G_2$ , bir parçacık  $r_1$  konumunda  $t_1$  zamanında başka bir parçacık  $r_2$  konumunda  $t_2$  zamanında sistem içerisine konulursa; birinci parçacığın  $r_3$  konumunda  $t_3$  zamanında, ikinci parçacığın  $r_4$  konumunda  $t_4$  zamanında bulunma olasılık genliğini verir. Ayrıca  $G_2$  fonksiyonu, toplu uyarılmaların enerjilerini, yaşam sürelerini, magnetik duyarlılıklarını, elektiriksel iletkenliklerini ve diğer dengede olmayan özelliklerin hepsini de bütün sıcaklıklar için doğrudan verir.

Çok cisim problemimizde daha az rol oynamasına rağmen bir hayli önemli olan boşluk genliği ismindeki fiziksel büyüklük üzerinde duralım. Sıfır sıcaklık boşluk genliği taban durum enerjisinin hesaplanmasında kullanılabilir. Bu genliğin sonlu sıcaklık versiyonu ise büyük bölüşüm fonksiyonunu verir. Buradan da sistemin dengedeki bütün özellikleri belirlenebilir.

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

Diğer bir metotta yani analitik metotta Green fonksiyonlarını sağlayan çiftlenimli diferansiyel denklemler çözülür. Bunun anlamı tek parçacık Green fonksiyonu  $G$ , bilinmeyen iki parçacık Green fonksiyonu  $G_2$ 'yi dahil eden diferansiyel denklemi sağlar. Aynı şekilde tek parçacık Green fonksiyonu  $G_3$ 'ü dahil eden diferansiyel denklemi de sağlar. Bu şekilde devam eder gider. Sonuç olarak sonsuz

hiyerarşik çiftlenimli nonlinear diferansiyel denklemlerle ilgilenilmesi gerekir. Gerçekte çiftlenimli denklemler, uygun aşamalarda uygun bir kesme kullanılarak çiftlenimsiz hale getirilebilir ve sonra da elde edilen çiftlenimsiz denklemler çözülebilir.

Çift zamanlı sıcaklığa bağlı gecikmiş ve ilerlemiş Green fonksiyonu aşağıdaki şekilde tanımlanır.

$$\begin{aligned} G_r(t, t') &\equiv \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle_r \\ &= -i\theta(t - t') \langle [A(t), B(t')] \rangle \end{aligned} \quad (2.8)$$

ve,

$$\begin{aligned} G_a(t, t') &\equiv \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle_a \\ &= i\theta(t' - t) \langle [A(t), B(t')] \rangle \end{aligned} \quad (2.9)$$

şeklindedir. Burada  $\langle\langle \dots \rangle\rangle_{r,a}$  her bir Green fonksiyonuna karşılık gelen kısaltılmış gösterimlerdir.  $\langle \dots \rangle$  Büyük kanonik küme üzerine ortalamayı gösterir. Parçacık sayısı sabit olmadığından bu istatistik uygundur.  $\langle \dots \rangle$  aşağıdaki şekilde tanımlanmıştır.

$$\langle \dots \rangle = Z^{-1} \text{Tr} \left( e^{-H/\theta} \dots \right) \quad (2.10)$$

burada

$$Z = \text{Tr} \left( e^{-H/\theta} \right) = e^{-\Omega/\theta} \quad (2.11)$$

$\theta = \frac{1}{kT}$  dir.  $k$  Boltzmann sabitidir.  $T$  mutlak sıcaklığı gösterir.  $Z$  bölüşüm fonksiyonudur.  $\Omega$  termodinamik potansiyeldir.  $H$  operatörü genelleştirilmiş Hamiltoniyendir. Aşağıdaki şekilde verilir.

$$H = H - \mu N \quad (2.12)$$

Burada  $H$  zamandan bağımsız Hamiltoniyendir.  $N$  toplam parçacık sayısı operatörüdür.  $\mu$  kimyasal potansiyeldir.  $A(t), B(t')$  Heisenberg gösterimindeki operatörlerdir; ki bunlar kuantumlanmış operatörlerin çarpımları olarak ifade edilebilir.

$$A(t) = e^{iHt} A(0) e^{-iHt}; \quad \hbar = 1 \quad (2.13)$$

Denk. (2.8) ve denk. (2.9)'daki  $\theta(t)$ , basamak fonksiyonu olarak adlandırılır. Aşağıdaki gibi tanımlanmıştır.

$$\theta(t) = \begin{cases} 0, & t < 0 \\ 1, & t > 0 \end{cases} \quad (2.14)$$

$[A, B]$  komütatör veya anti komütatördür. Yani,

$$[A, B] = AB - \eta BA \quad \eta = \pm 1 \quad (2.15)$$

$\eta$ ,  $A$  ve  $B$  Bose operatörü ise pozitif ve her ikisi de Fermi operatörü ise negatiftir.  $\eta$  değeri için problem durumuna göre  $(-1)$  ya da  $(+1)$  seçilir. Denklem (2.15)'i kullanarak, (2.8) ve (2.9)'u aşağıdaki gibi yazarız.

$$G_r(t, t') = -i\theta(t - t') [\langle A(t)B(t') \rangle - \eta \langle B(t')A(t) \rangle] \quad (2.16)$$

$$G_a(t, t') = i\theta(t - t') [\langle A(t)B(t') \rangle - \eta \langle B(t')A(t) \rangle] \quad (2.17)$$

(2.14) ve (2.16) dan görürüz ki;  $G_r(t, t')$ ,  $t' < t$  olduğu zaman  $G_r(t, t') = 0$  olur.  $t' > t$  olduğu zaman ve  $t' = t$  olduğu zaman  $G_r(t, t')$ , tanımlı değildir.  $\theta(t)$  nin  $t = 0$  da süreksizliğinden dolayı  $G_r(t, t')$ ,  $t' = t$  de tanımlı değildir. Benzer düşünceler  $G_a(t, t')$  ye de uygulanabilir. (2.16), (2.10), (2.13) ve (2.8) kullanılarak aşağıdaki denklemleri elde edebiliriz.

$$G_a(t, t') = -i\theta(t - t') \langle A(t)B(t') \rangle - i\eta\theta(t - t') \langle B(t')A(t) \rangle \quad (2.18)$$

$$A(t)B(t') = e^{iHt} A(0) e^{-iHt} e^{iHt'} B(0) e^{-iHt'} \quad (2.19)$$

denklemimizi  $e^{iHt'}$  ve  $e^{-iHt'}$  ile çarpalım

$$\begin{aligned} A(t)B(t') &= e^{iHt} e^{-iHt'} A(0) e^{-iHt} e^{iHt'} B(0) e^{-iHt'} e^{iHt'} \\ &= e^{iH(t-t')} A(0) e^{-iH(t-t')} B(0) \end{aligned} \quad (2.20)$$

bulunur. Benzer olarak,

$$B(t')A(t) = e^{iH(t'-t)} B(0) e^{-iH(t'-t)} A(0) \quad (2.21)$$

olur. Böylece (2.20) ve (2.21)'ü (2.18) içerisine yazarsak (2.22) elde edilir.

$$\begin{aligned} G_a(t, t') &= -i\theta(t-t') Z^{-1} \text{Tr} \left[ e^{H[i(t-t')-\beta]} A(0) e^{-iH(t-t')} B(0) \right] \\ &\quad -i\theta(t-t') Z^{-1} \text{Tr} \left[ e^{H[i(t'-t)-\beta]} B(0) e^{-iH(t-t')} A(0) \right] \end{aligned} \quad (2.22)$$

burada

$$\beta = \frac{1}{kT} = \frac{1}{\theta} \quad (2.23)$$

şeklindedir. Denklem (2.22) aşağıdaki denklemi gösterir.

$$G_a(t, t') = G_a(t-t') \quad (2.24)$$

benzer olarak,

$$G_r(t, t') = G_r(t-t') \quad (2.25)$$

şeklinde gösterilir.



$$\begin{aligned}
F_{BA}(t, t') &= \langle B(t')A(t) \rangle \\
F_{AB}(t, t') &= \langle A(t)B(t') \rangle
\end{aligned}
\tag{2.26}$$

Yukarıdaki gibi Heisenberg temsilindeki operatörlerin çarpımının, istatistik küme üzerine ortalamaları, istatistik fizikte önemlidir. Bunlar zaman korelasyon fonksiyonu olarak adlandırılır. Zamanlar farklı olduğunda  $(t \neq t')$  bu ortalamalar korelasyon fonksiyonunu verir; ki bunlar iletim olayı için vazgeçilmezdir. İstatistiksel dengedeki Green fonksiyonları gibi bu zaman korelasyon fonksiyonları da  $(t - t')$ 'ne bağlıdır.

$$\begin{aligned}
F_{BA}(t, t') &= F_{BA}(t - t') \\
F_{AB}(t, t') &= F_{AB}(t - t')
\end{aligned}
\tag{2.27}$$

Bu gerçek yukarıdaki denklemlerin spektral temsillerini bulmamıza yardım eder. Aynı zamanda onları Green fonksiyonuna bağlar.

Şimdi spektral temsilleri türetelim. Belirtildiği gibi Green fonksiyonları ve zaman korelasyon fonksiyonları sadece  $(t - t')$ 'ye bağlıdır. Bu her bir fonksiyon için Fourier integralini bulmada kullanılır. Bu integraller spektral temsil olarak adlandırılır.

Öncelikle zaman korelasyon fonksiyonu için bir temsil elde edelim. Daha sonra da Green fonksiyonları için bir temsil elde edelim. Böylece ikisi arasında bir bağıntı bulabiliriz.

Matris elemanları için  $H$  nin köşegen olduğu bir temsil kullanırsak, o zaman;

$$\langle \phi_\mu | H | \phi_\nu \rangle = \delta_{\mu\nu} E_\nu
\tag{2.28}$$

Bu denklem aşağıdaki ifadeyi gerektirir.

$$H | \phi_\nu \rangle = E_\nu | \phi_\nu \rangle
\tag{2.29}$$

Denklem (2.27) ile verilen zaman korelasyon fonksiyonlarının tanımında istatistiksel ortalama işlemini açıkça kullanırsak, aşağıdaki ifadeyi buluruz.

$$\begin{aligned}
F_{BA}(t, t') &= \langle B(t')A(t) \rangle \\
&= Z^{-1} \sum_{\nu} \langle \phi_{\nu} | B(t')A(t) | \phi_{\nu} \rangle e^{-E_{\nu}/\theta} \\
&= Z^{-1} \sum_{\mu} \sum_{\nu} \langle \phi_{\nu} | B(t') | \phi_{\mu} \rangle \langle \phi_{\mu} | A(t) | \phi_{\nu} \rangle e^{-E_{\nu}/\theta}
\end{aligned} \tag{2.30}$$

Burada  $|\phi_{\nu}\rangle$ 'nin komple baz özelliği kullanıldı. (17.48) ve (17.60) kullanılarak aşağıdaki bağıntıyı elde ederiz.

$$\begin{aligned}
\langle B(t')A(t) \rangle &= Z^{-1} \sum_{\mu, \nu} \langle \phi_{\nu} | e^{iHt'} B(0) e^{-iHt'} | \phi_{\mu} \rangle \langle \phi_{\mu} | e^{iHt} A(0) e^{-iHt} | \phi_{\nu} \rangle e^{-E_{\nu}/\theta} \\
&= Z^{-1} \sum_{\mu, \nu} \langle \phi_{\nu} | e^{iE_{\nu}t'} B(0) e^{-iE_{\mu}t'} | \phi_{\mu} \rangle \langle \phi_{\mu} | e^{iE_{\mu}t} A(0) e^{-iE_{\nu}t} | \phi_{\nu} \rangle e^{-E_{\nu}/\theta} \\
&= Z^{-1} \sum_{\mu, \nu} \langle \phi_{\nu} | B(0) | \phi_{\mu} \rangle \langle \phi_{\mu} | A(0) | \phi_{\nu} \rangle e^{-i(E_{\nu}-E_{\mu})(t-t')} e^{-E_{\nu}/\theta}
\end{aligned} \tag{2.31}$$

benzer olarak,

$$\langle A(t)B(t') \rangle = Z^{-1} \sum_{\mu, \nu} \langle \phi_{\nu} | A(0) | \phi_{\mu} \rangle \langle \phi_{\mu} | B(0) | \phi_{\nu} \rangle e^{-E_{\nu}/\theta} e^{-i(E_{\nu}-E_{\mu})(t-t')} \tag{2.32}$$

olur. (2.32)'deki toplama indisleri  $\mu$  ve  $\nu$  yer değiştirerek (2.33) denklemini elde edebiliriz.

$$\begin{aligned}
\langle A(t)B(t') \rangle &= Z^{-1} \sum_{\mu, \nu} \langle \phi_{\mu} | A(0) | \phi_{\nu} \rangle \langle \phi_{\nu} | B(0) | \phi_{\mu} \rangle e^{-E_{\mu}/\theta} e^{-i(E_{\mu}-E_{\nu})(t-t')} \\
&= Z^{-1} \sum_{\mu, \nu} \langle \phi_{\nu} | A(0) | \phi_{\mu} \rangle \langle \phi_{\mu} | B(0) | \phi_{\nu} \rangle e^{-E_{\mu}/\theta} e^{-i(E_{\nu}-E_{\mu})(t-t')}
\end{aligned} \tag{2.33}$$

Denklemi  $e^{-E_{\nu}/\theta}$  ile ve  $e^{E_{\nu}/\theta}$  ile çarpalım.

$$\begin{aligned}
\langle A(t)B(t') \rangle &= Z^{-1} \sum_{\mu, \nu} \langle \phi_{\nu} | A(0) | \phi_{\mu} \rangle \langle \phi_{\mu} | B(0) | \phi_{\nu} \rangle e^{-E_{\nu}/\theta} e^{\omega/\theta} e^{-i(E_{\nu}-E_{\mu})(t-t')} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{\omega/\theta} e^{-i\omega(t-t')} d\omega
\end{aligned} \tag{2.34}$$

elde edilir. Burada

$$\omega - E_\nu + E_\mu = 0 \quad (2.35)$$

olduğu için  $E_\nu - E_\mu$  yerine  $\omega$  yazılmıştır.

$$J(\omega) = Z^{-1} \sum_{\mu, \nu} \langle \phi_\nu | B(0) | \phi_\mu \rangle \langle \phi_\mu | A(0) | \phi_\nu \rangle e^{-E_\nu/\theta} \delta(\omega - E_\nu + E_\mu) \quad (2.36)$$

olarak kullanılmıştır. Benzer olarak,

$$\begin{aligned} F_{BA}(t-t') &= \langle B(t')A(t) \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega \end{aligned} \quad (2.37)$$

olur. Burada  $J(\omega)$ , (2.36)'daki ile aynıdır. (2.34) ve (2.37) zaman korelasyonu fonksiyonları için aranan spektral fonksiyonların (2.34) ve (2.37)'deki gibi olduğuna dikkat ediniz. Burada  $J(\omega)$ ,  $F_{BA}(t)$  fonksiyonunun spektral temsilleridir.

Şimdi  $G_r(t-t')$  ve  $G_a(t-t')$ 'nin spektral temsillerini göz önünde bulunduralım. Bunlar (2.34) ve (2.37) sayesinde elde edilir.

$G_r(E)$ ,  $G_r(t-t')$ 'nin Fourier dönüşümü olsun.

$$G_r(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} dE G_r(E) e^{-iE(t-t')} \quad (2.38)$$

veya

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_r(t-t') e^{-iE(t-t')} dt \quad (2.39)$$

dir. (2.39) içine (2.16)'yı yerleştirirsek aşağıdaki denklemi elde ederiz.

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dt \left[ e^{iE(t-t')} \theta(t-t') \cdot \left\{ \langle A(t)B(t') \rangle - \eta \langle B(t')A(t) \rangle \right\} \right] \quad (2.40)$$

(2.34) ve (2.37) denklemlerini (2.39) içerisine yazarsak;

$$\begin{aligned} G_r(E) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dt \left[ e^{iE(t-t')} \theta(t-t') \right. \\ &\quad \left. \cdot \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{\omega/\theta} e^{-i\omega(t-t')} d\omega - \eta \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega \right\} \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega) (e^{\omega/\theta} - \eta) \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iE(t-t')} e^{-i\omega(t-t')} \theta(t-t') \end{aligned} \quad (2.41)$$

olur.

Şimdi  $(t-t')=t$  (zaman farkı) kullanarak, (2.42) denklemini elde edebiliriz.

$$G_r(E) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega) (e^{\omega/\theta} - \eta) \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(E-\omega)t} \theta(t) \quad (2.42)$$

Sürekli fonksiyon  $\theta(t)$  aşağıdaki biçimde yazılabilir.

$$\theta(t) = \int_{-\infty}^t e^{\varepsilon t} \delta(t) dt, \quad \varepsilon \rightarrow 0 (\varepsilon > 0)$$

Burada

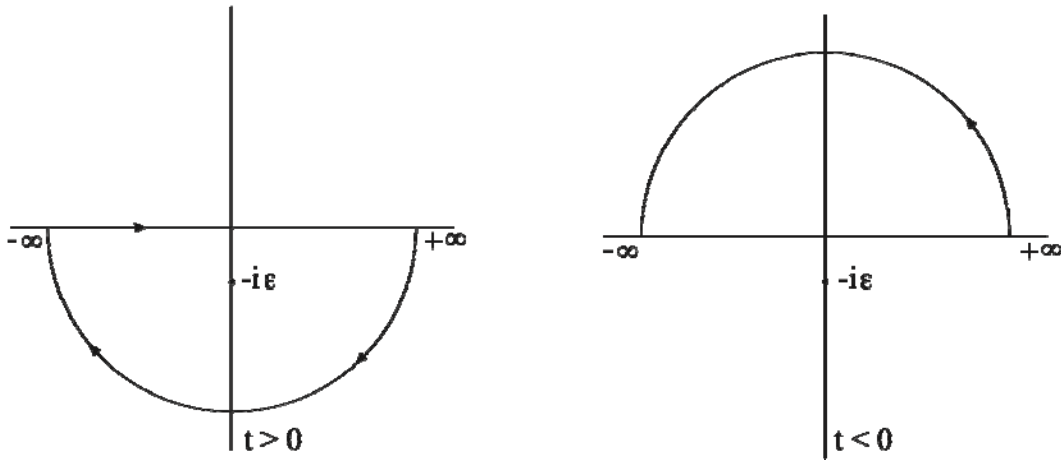
$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixt} dx$$

Bu yüzden

$$\theta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^t e^{\varepsilon t} dt \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixt} dx$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{(\varepsilon-ix)t} dt dx \\
&= \frac{1}{2\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\varepsilon - ix} e^{(\varepsilon-ix)t} dx \\
&= \frac{i}{2\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ixt}}{x + i\varepsilon} dx \tag{2.43}
\end{aligned}$$

(2.43)'te tanımlanan fonksiyonun süreksiz  $\theta$  fonksiyonunun özelliklerine sahip olduğu kolaylıkla görülebilir. Şimdi  $x$ 'i kompleks değişken olarak ele alacağız ve (2.43) integrali şekil 2.1'de gösterilen kontur üzerinden alacağız.



2.1 Kompleks düzlemde integralin izlediği yol

İntegrale alınacak fonksiyon aşağı yarı düzlemde  $x = -i\varepsilon$  kutbuna sahiptir.  $x = x_1 + ix_2$  yazılarak aşağıdaki denklem yazılır.

$$e^{-ixt} = e^{-i(x_1+ix_2)t} = e^{-ix_1t} e^{x_2t}$$

Şimdi  $t > 0$  ise integralin sıfır olması için,  $x_2$  negatif olmalıdır. Kutup aşağı yarı düzlemde olduğundan integralin değeri 1'dir.  $t < 0$  olduğu zaman  $x_2$  pozitif olmalıdır. Bundan dolayı kontur yukarıdaki yarı düzlemde olmalıdır; fakat kutup yukarı yarı düzlemde olmadığından integral sıfır olur. (2.43)'ü kullanarak (2.42) denklemini hesaplamaya çalışalım.

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i(E-\omega)t} \theta(t) \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(E-\omega)t} \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ixt}}{x+i\varepsilon} dx \\
&= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x+i\varepsilon} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(x-E+\omega)t} dt \\
&= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x+i\varepsilon} \delta(x-E+\omega) \quad \left[ \because \delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixt} dt \right] \\
&= \frac{i}{2\pi} \frac{1}{E-\omega+i\varepsilon}
\end{aligned}$$

(2.42) denklemini şu hale getir.

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\omega/\theta} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega + i\varepsilon} \quad (2.44)$$

Benzer olarak;

$$G_a(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\omega/\theta} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega - i\varepsilon} \quad (2.45)$$

olur. (2.44) ve (2.45)'i birleştirerek aşağıdaki denklemini elde edebiliriz.

$$G_{r,a}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\omega/\theta} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega \pm i\varepsilon} \quad (2.46)$$

Burada “+” işareti “r” indisine, “-” işareti “a” indisine karşılık gelir. Eğer “E” kompleks kabul edilirse, (2.46) kompleks “E” düzleminde analitiksel olarak devam edebilir. Böylece;

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\omega/\theta} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega} = \begin{cases} G_r(E), & \text{Im } E > 0 \\ G_a(E), & \text{Im } E < 0 \end{cases} \quad (2.47)$$

olur. (2.47)'nin sol tarafı Cauchy integralidir.  $G_r(E)$  ve  $G_a(E)$ ,  $G(E)$ 'nin iki kolu olarak düşünülebilir.  $G(E)$ , bütün düzlemlerde süreklidir. Reel  $x$  eksenini hariç.

$$G(E) = \begin{cases} G_r(E), & \text{Im } E > 0 \\ G_a(E), & \text{Im } E < 0 \end{cases} \quad (2.48)$$

Şimdi (2.48)'in ispatını verelim.  $G(E)$ , Bogolyubov ve Parasyuk dispersiyon bağıntıları teorisinde ispatladıkları bir teoremin sonucudur.

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_r(t) e^{iEt} dt \quad (2.49)$$

Daha önceden gördüğümüz gibi burada  $G_r(t) = 0$  dır. ( $t < 0$  olduğu zaman)

Şimdi de  $G_r(E)$  nin kompleks  $E$  bölgesinde sürekli, analitiksel olabileceğini gösterelim. Kabul edelim ki  $E$ , sıfır olmayan kompleks kısma sahip olsun.

$$E = \text{Re } E + i \text{Im } E = \alpha + i\gamma \quad \gamma > 0 \quad (2.50)$$

O zaman aşağıdaki bağıntıyı elde ederiz.

$$G_r(\alpha + i\gamma) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} G_r(t) e^{i\alpha t} e^{-\gamma t} dt, \quad \gamma > 0 \quad (2.51)$$

Bu denklemde  $e^{-\gamma t}$ ,  $G_r(E)$  nin integralinin ve  $E$ 'ye göre türevlerinin yakınsak olmasını sağlayan bir kesme faktörü rolünü oynar. Böylece  $G_r(E)$  fonksiyonu yukarı yarı düzlemde analitik olabilir.  $G_a(E)$ 'nin de aşağı yarı düzlemde analitik olduğu gösterilebilir. Şayet reel ekseninde bir kesme yapılırsa  $G(E)$ 'nin iki branşı olduğu düşünülebilir.

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

(2.36)'daki  $J(\omega)$  ve (2.48)'deki  $G(E)$  arasında bir bağıntı bulalım. (2.46)'dan

$$G(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\omega/\theta} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega} \quad (2.52)$$

dir. “ $E$ ” ve “ $\omega$ ” yı yer değiştirelim.

$$G(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{E/\theta} - \eta) J(E) \frac{dE}{\omega - E} \quad (2.53)$$

Buradan (2.54) elde edilir.

$$G(\omega + i\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{E/\theta} - \eta) J(E) \frac{dE}{\omega + i\varepsilon - E} \quad (2.54)$$

Benzer olarak;

$$G(\omega - i\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{E/\theta} - \eta) J(E) \frac{dE}{\omega - i\varepsilon - E} \quad (2.55)$$

Her ikisini birleştirerek aşağıdaki bağıntıyı bulabiliriz.

$$\begin{aligned} G(\omega + i\varepsilon) + G(\omega - i\varepsilon) \\ = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{E/\theta} - \eta) J(E) \left( \frac{1}{\omega - E + i\varepsilon} - \frac{1}{\omega - E - i\varepsilon} \right) dE \end{aligned} \quad (2.56)$$

Aşağıdaki  $\delta$  fonksiyonunu kullanarak (2.58)'i elde ederiz.

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi i} \left( \frac{1}{x - i\varepsilon} - \frac{1}{x + i\varepsilon} \right) \quad (2.57)$$

$$G(\omega + i\varepsilon) + G(\omega - i\varepsilon)$$



$$\begin{aligned}
&= -\frac{2\pi i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{E/\theta} - \eta) J(E) \delta(\omega - E) dE \\
&= -i (e^{\omega/\theta} - \eta) J(\omega)
\end{aligned} \tag{2.58}$$

Böylece  $G(E)$ 'nin bilinmesi halinde  $J(\omega)$ 'yı bilebiliriz. (2.37)'den (2.59) elde edilebilir.

$$\langle B(t')A(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega \tag{2.59}$$

(2.58)'den de  $J(\omega)$  aşağıdaki gibi elde edilebilir.

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

Bunu (2.59)'da yerine yazarsak sonuçta (2.60) bulunur.

$$\langle B(t')A(t) \rangle = i \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{G(\omega + i\varepsilon) - G(\omega - i\varepsilon)}{e^{\omega/\theta} - \eta} e^{-i\omega(t-t')} d\omega \tag{2.60}$$

$$\frac{1}{E - \omega \pm i\varepsilon} = P \frac{1}{E - \omega} \mp i\pi \delta(E - \omega) \tag{2.61}$$

Yukarıdaki bağıntıyı (2.44) ve (2.45)'te kullanalım. Burada  $\varepsilon \rightarrow 0$ ,  $\varepsilon > 0$  ve  $P$ , integralin temel değerini göstermek üzere aşağıdaki sonuç elde edilir.

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\omega/\theta} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega} - \frac{i}{2} (e^{E/\theta} - \eta) J(E) \tag{2.62}$$

$$G_a(E) = \frac{1}{2\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\omega/\theta} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega} + \frac{i}{2} (e^{E/\theta} - \eta) J(E) \tag{2.63}$$

Burada  $(E - \omega)$  bir reel büyüklük olarak göz önüne alınır. (2.62) ve (2.63)'ten Green fonksiyonlarının reel ve sanal kısımları arasında (2.64) ve (2.65) bağıntıları bulunur.

$$\operatorname{Re} G_r(E) = \frac{P}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im} G_r(\omega)}{\omega - E} d\omega \quad (2.64)$$

$$\operatorname{Re} G_a(E) = -\frac{P}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im} G_a(\omega)}{\omega - E} d\omega \quad (2.65)$$

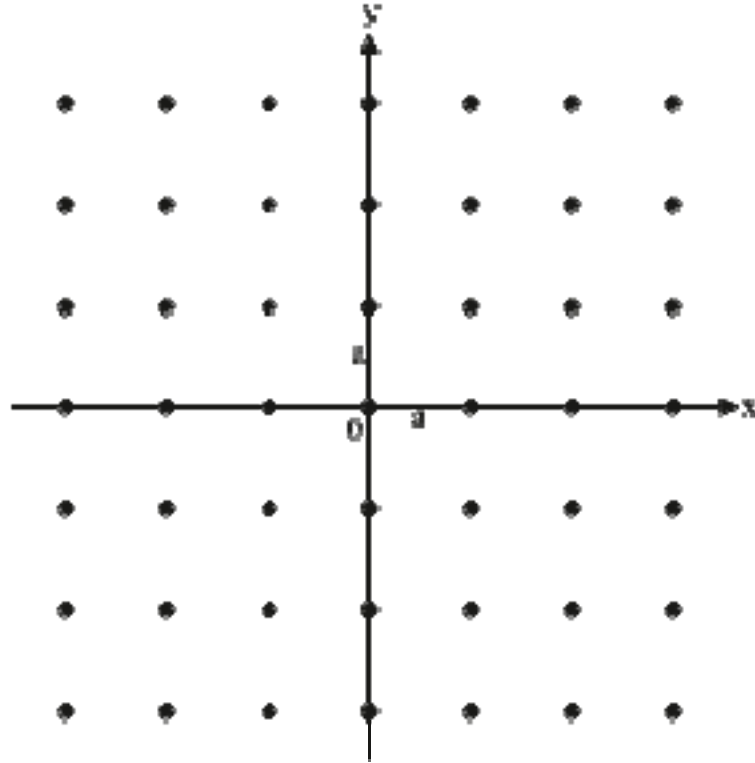
(2.64) ve (2.65) denklemleri dispersiyon bağıntılarını içerir. (2.62) ve (2.63)'teki  $J(E)$ 'nin göze çarpan özelliklerine bakalım. İlk olarak  $J(E)$  gerçek eksen üzerinde kutuplara sahip olabilir. Şayet böyle kutuplar  $E_i$  noktalarında mevcut iseler  $F_{BA}$ ,  $E_i$  frekansıyla salınım yapar.  $T = 0$ ' da  $E_i$  frekansları sistemin tam enerji özdeğerleridir ve sistemin kararlı durumlarını verir.  $T \neq 0$  için şayet bütün  $E_i$ 'ler mevcut ise bunlar sıcaklığa ve kimyasal potansiyele bağlıdır ve yorumları tam değildir. Bununla beraber sönümsüz hareketi karakterize ederler. Sıcaklığa bağımlı enerji düzeylerini verirler. En genel halde  $J(E)$  karışık cinsten tekillere sahip olabilir. Bu yüzden kutuplara indirgenemezler. Bunun sonucunda  $F_{BA}$ , zamanın bir sönümlü fonksiyonu olur. Sonuçta  $T = 0$  için, kararlı durumları olmaz ve  $T \neq 0$  için, taban durum ortalaması oluşmaz.

### 3. KARE ÖRGÜDE MANYETİZASYONUN İNCELENMESİ

Tezde şekil 3.1 de görülen iki boyutlu kare örgüde manyetizasyonu inceleyeceğiz. Kare örgüdeki spinlerin aşağıdaki şekilde etkileştiklerini varsayacağız.

$$H = -g\mu_B H \sum_g S_g^z - \frac{1}{2} \sum_{g,f} J(g-f) S_g S_f \quad (3.1)$$

Burada  $J(g-f)$ ,  $g$  ve  $f$  örgü noktalarındaki iki spin arasındaki değişim etkileşimini göstermektedir. Toplam, örgüdeki toplam örgü noktaları üzerinedir. Ancak hemen belirtelim ki; bazı yazarlar  $\frac{1}{2}$  katsayısı yerine 2 katsayısını almaktadırlar.  $J(g-f)$  Ferromanyetik maddeler için pozitif, antiferromanyetik maddeler için negatiftir.



Şekil-3.1 İki boyutlu kare örgü

### 3.1 Dış Manyetik Alan Yokluğunda Manyetizasyonun İncelenmesi

İki boyutlu örgüde  $H=0$  durumunda  $\phi(S)$  fonksiyonu denklem (3.2)'deki gibi verilir. Bir kristaldeki herhangi bir atomun kristaldeki diğer bütün atomlarla olan değişim etkileşim sabitlerinin toplamı  $J(0)$  ile gösterilir.  $K$  dalga vektörüdür. Birim hücrenin alanı  $\nu$ , ise parçacık başına düşen alandır. ( $\nu = A/N$ ). Bu tezde elde edeceğimiz manyetizasyon ifadesi  $\langle S^z \rangle$ 'dir.

$$\phi(S) = \frac{\nu}{(2\pi)^2} \int d^2K \sum_{r=1}^{\infty} \exp \left[ -\frac{2r\eta(K)\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} \right] \quad (3.2)$$

$$\eta(K) = 1 - \frac{J(K)}{J(0)} \quad (3.3)$$

olarak verilmiştir. İki boyutlu kare örgü için en yakın komşuluk düşünülerek aşağıdaki yaklaşım kullanılabilir.

$$J(K) = \frac{1}{2} J(0) [\cos(K_x a) + \cos(K_y a)] \quad (3.4)$$

$$\frac{J(K)}{J(0)} = \frac{1}{2} [\cos(K_x a) + \cos(K_y a)] \quad (3.5)$$

Bu ifadeyi (3.3) denkleminde yerine yazalım.

$$\eta(K) = 1 - \frac{\left(\frac{1}{2}\right) J(0) [\cos(K_x a) + \cos(K_y a)]}{J(0)} \quad (3.6)$$

bulunur.  $\cos(K_x a)$  ve  $\cos(K_y a)$  ifadelerini seri açtıktan sonra taraf tarafa toplayalım.

$$\cos(x) = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \dots \quad (3.7)$$

yaklaşımını kullanarak;

$$\begin{aligned}
\cos(K_x a) &= 1 - \frac{(K_x a)^2}{2!} + \frac{(K_x a)^4}{4!} - \frac{(K_x a)^6}{6!} + \frac{(K_x a)^8}{8!} - \frac{(K_x a)^{10}}{10!} + \dots \\
\cos(K_y a) &= 1 - \frac{(K_y a)^2}{2!} + \frac{(K_y a)^4}{4!} - \frac{(K_y a)^6}{6!} + \frac{(K_y a)^8}{8!} - \frac{(K_y a)^{10}}{10!} + \dots \\
\cos(K_x a) + \cos(K_y a) &= 2 - a^2 \frac{(K_x^2 + K_y^2)}{2!} + a^4 \frac{(K_x^4 + K_y^4)}{4!} - a^6 \frac{(K_x^6 + K_y^6)}{6!} \\
&\quad + a^8 \frac{(K_x^8 + K_y^8)}{8!} - a^{10} \frac{(K_x^{10} + K_y^{10})}{10!}
\end{aligned} \tag{3.8}$$

ifadesini bulabiliriz.  $\eta(K)$  denkleminde bulunan sonucu yerine yazalım.

$$\begin{aligned}
\eta(K) &= 1 - \frac{1}{2} \left[ 2 - (K_x^2 + K_y^2) \frac{a^2}{2!} + (K_x^4 + K_y^4) \frac{a^4}{4!} - (K_x^6 + K_y^6) \frac{a^6}{6!} \right. \\
&\quad \left. + (K_x^8 + K_y^8) \frac{a^8}{8!} - (K_x^{10} + K_y^{10}) \frac{a^{10}}{10!} \right]
\end{aligned} \tag{3.9}$$

Elde edilir.  $\phi(S)$  dekleminin üstel kısmını yukarıda bulunan ifadeler yardımıyla hesaplırsak;

$$\begin{aligned}
\exp \left[ \frac{-2r \langle S^z \rangle}{\hbar \tau} \eta(K) \right] &= \exp \left( -\frac{r \langle S^z \rangle}{\hbar \tau} \right) \left[ (K_x^2 + K_y^2) \frac{a^2}{2!} - (K_x^4 + K_y^4) \frac{a^4}{4!} + (K_x^6 + K_y^6) \frac{a^6}{6!} \right. \\
&\quad \left. + (K_x^8 + K_y^8) \frac{a^8}{8!} - (K_x^{10} + K_y^{10}) \frac{a^{10}}{10!} \right] \\
&= \exp \left[ -\frac{r \langle S^z \rangle}{\hbar \tau} \right] \left( (K_x^2 + K_y^2) \frac{a^2}{2!} \right) \exp \left\{ \left[ -\frac{r \langle S^z \rangle}{\hbar \tau} \right] \left( (K_x^4 + K_y^4) \frac{a^4}{4!} \right) \right. \\
&\quad \left. - \left[ -\frac{r \langle S^z \rangle}{\hbar \tau} \right] \left( (K_x^6 + K_y^6) \frac{a^6}{6!} \right) + \left[ -\frac{r \langle S^z \rangle}{\hbar \tau} \right] \left( (K_x^8 + K_y^8) \frac{a^8}{8!} \right) \right. \\
&\quad \left. - \left[ -\frac{r \langle S^z \rangle}{\hbar \tau} \right] \left( (K_x^{10} + K_y^{10}) \frac{a^{10}}{10!} \right) \right\}
\end{aligned} \tag{3.10}$$

Oluşturduğumuz ikinci üstel fonksiyonu seri açarsak,

$$e^{-x} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots \quad (3.11)$$

$$e^{\left[ \frac{-2r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} \eta(K) \right]} = \exp \left[ -\frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} (K_x^2 + K_y^2) \frac{a^2}{2!} \right] \left[ 1 + \frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} (K_x^4 + K_y^4) \frac{a^2}{4!} \right. \\ \left. - \frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} (K_x^6 + K_y^6) \frac{a^2}{6!} + \frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} (K_x^8 + K_y^8) \frac{a^8}{8!} - \frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} (K_x^{10} + K_y^{10}) \frac{a^{10}}{10!} \right. \\ \left. + \frac{r^2 \langle S^z \rangle^2}{\hbar^2 \tau^2} \frac{a^8}{4!4!2} (K_x^8 + K_y^8 + 2K_x^4 K_y^4) \right] \quad (3.12)$$

elde ederiz.  $\phi(S)$  denkleminde yerine yazalım.

$$\phi(S) = \frac{\nu}{(2\pi)^2} \left[ \int d^2 K \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} (K_x^2 + K_y^2) \frac{a^2}{2!}} \right. \\ \left. + \int d^2 K \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} (K_x^2 + K_y^2) \frac{a^2}{2!}} \left( \frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} (K_x^4 + K_y^4) \frac{a^4}{4!} \right) \right. \\ \left. - \int d^2 K \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} (K_x^2 + K_y^2) \frac{a^2}{2!}} \left( \frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} (K_x^6 + K_y^6) \frac{a^6}{6!} \right) \right. \\ \left. + \int d^2 K \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} (K_x^2 + K_y^2) \frac{a^2}{2!}} \left( \frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} (K_x^8 + K_y^8) \frac{a^8}{8!} \right) \right. \\ \left. - \int d^2 K \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} (K_x^2 + K_y^2) \frac{a^2}{2!}} \left( \frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} (K_x^{10} + K_y^{10}) \frac{a^{10}}{10!} \right) \right. \\ \left. + \int d^2 K \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} (K_x^2 + K_y^2) \frac{a^2}{2!}} \left( \frac{r^2 \langle S^z \rangle^2}{\hbar^2 \tau^2} \frac{a^8}{4!4!2} (K_x^8 + K_y^8 + 2K_x^4 K_y^4) \right) \right] \quad (3.13)$$

Bulunuz. Bu integralleri çözebilmek için aşağıdaki formülleri ve çıkarımları kullanacağız.

$$I_n = \int_0^{\infty} e^{-\alpha x^p} x^n dx = \frac{\Gamma(k)}{p\alpha^k}, \quad k = \frac{n+1}{p}, \quad p > 0, \quad n > -1 \quad (3.14)$$

$$I_0 = \int_0^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \alpha^{-1/2} \quad (3.15)$$

denkleminiz simetrik olduğundan;

$$I_0 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = 2 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \alpha^{-1/2} = \sqrt{\pi} \alpha^{-1/2} \quad (3.16)$$

olarak kullanılır. Tezdeki integrallerin hesabında aşağıdaki Gama değerleri kullanılmıştır.

$$\Gamma(2) = 1! = 1 \quad (3.17)$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi} \quad (3.18)$$

$$\Gamma(n+1) = n\Gamma(n) \quad (3.19)$$

$$\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \quad (3.20)$$

$$\Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{3}{4} \sqrt{\pi} \quad (3.21)$$

$$\Gamma\left(\frac{7}{2}\right) = \frac{15}{8} \sqrt{\pi} \quad (3.22)$$

$$\Gamma\left(\frac{9}{2}\right) = \frac{105}{16} \sqrt{\pi} \quad (3.23)$$

$$\Gamma\left(\frac{11}{2}\right) = \frac{9}{2} \cdot \frac{105}{16} \sqrt{\pi} \quad (3.24)$$

böylece  $I_n$  değerleri hesaplanabilir.

$$I_0 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle}{2\hbar\tau} a^2 K_x^2} dK_x = \frac{\sqrt{\pi}}{\left(\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{2\hbar\tau}\right)^{1/2}} = \sqrt{\pi} \left(\frac{2\hbar\tau}{r\langle S^z \rangle a^2}\right)^{1/2} \quad (3.25)$$

$$I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle}{2\hbar\tau} a^2 K_x^2} K_x^2 dK_x = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{\left(\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{2\hbar\tau}\right)^{3/2}} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(\frac{2\hbar\tau}{r\langle S^z \rangle a^2}\right)^{3/2} \quad (3.26)$$

$$I_4 = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle}{2\hbar\tau} a^2 K_x^2} K_x^4 dK_x = \frac{3}{4} \frac{\sqrt{\pi}}{\left(\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{2\hbar\tau}\right)^{5/2}} = \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \left(\frac{2\hbar\tau}{r\langle S^z \rangle a^2}\right)^{5/2} \quad (3.27)$$

$$I_6 = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle}{2\hbar\tau} a^2 K_x^2} K_x^6 dK_x = \frac{15}{8} \frac{\sqrt{\pi}}{\left(\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{2\hbar\tau}\right)^{7/2}} = \frac{15\sqrt{\pi}}{8} \left(\frac{2\hbar\tau}{r\langle S^z \rangle a^2}\right)^{7/2} \quad (3.28)$$

$$I_8 = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle}{2\hbar\tau} a^2 K_x^2} K_x^8 dK_x = \frac{105}{16} \frac{\sqrt{\pi}}{\left(\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{2\hbar\tau}\right)^{9/2}} = \frac{105\sqrt{\pi}}{16} \left(\frac{2\hbar\tau}{r\langle S^z \rangle a^2}\right)^{9/2} \quad (3.29)$$

$$I_{10} = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle}{2\hbar\tau} a^2 K_x^2} K_x^{10} dK_x = \frac{9.105}{32} \frac{\sqrt{\pi}}{\left(\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{2\hbar\tau}\right)^{11/2}} = \frac{9.105\sqrt{\pi}}{32} \left(\frac{2\hbar\tau}{r\langle S^z \rangle a^2}\right)^{11/2} \quad (3.30)$$

Bulduğumuz  $I_n$  değerlerini yukardaki (3.13) nolu denklemde yerine yazarsak;

$$\begin{aligned} \phi(S) &= \frac{\nu}{(2\pi)^2} \left[ \int \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle^2}{\hbar\tau} \frac{a^2}{2!} K_x^2} dK_x \int \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} \frac{a^2}{2!} K_y^2} dK_y \right. \\ &\quad + \frac{r\langle S^z \rangle a^4}{\hbar\tau 4!} \int \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle^2}{\hbar\tau} \frac{a^2}{2!} K_x^2} K_x^4 dK_x \int \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} \frac{a^2}{2!} K_y^2} dK_y \\ &\quad \left. + \frac{r\langle S^z \rangle a^4}{\hbar\tau 4!} \int \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} \frac{a^2}{2!} K_x^2} dK_x \int \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle^2}{\hbar\tau} \frac{a^2}{2!} K_y^2} K_y^4 dK_y \right] \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
& -\frac{r\langle S^z \rangle a^6}{h\tau 6!} \int \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle^2 a^2}{h\tau} K_x^2} K_x^6 dK_x \int \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{h\tau} K_y^2} dK_y \\
& -\frac{r\langle S^z \rangle a^6}{h\tau 6!} \int \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle^2 a^2}{h\tau} K_x^2} dK_x \int \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{h\tau} K_y^2} K_y^6 dK_y \\
& +\frac{r\langle S^z \rangle a^8}{h\tau 8!} \int \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle^2 a^2}{h\tau} K_x^2} K_x^8 dK_x \int \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{h\tau} K_y^2} dK_y \\
& +\frac{r\langle S^z \rangle a^8}{h\tau 8!} \int \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle^2 a^2}{h\tau} K_x^2} dK_x \int \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{h\tau} K_y^2} K_y^8 dK_y \\
& -\frac{r\langle S^z \rangle a^{10}}{h\tau 10!} \int \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle^2 a^2}{h\tau} K_x^2} K_x^{10} dK_x \int \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{h\tau} K_y^2} dK_y \\
& -\frac{r\langle S^z \rangle a^{10}}{h\tau 10!} \int \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle^2 a^2}{h\tau} K_x^2} dK_x \int \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{h\tau} K_y^2} K_y^{10} dK_y \\
& +\frac{r^2 \langle S^z \rangle^2 a^8}{h^2 \tau^2 4! 4! 2!} \int \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle^2 a^2}{h\tau} K_x^2} K_x^8 dK_x \int \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{h\tau} K_y^2} dK_y \\
& +\frac{r^2 \langle S^z \rangle^2 a^8}{h^2 \tau^2 4! 4! 2!} \int \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle^2 a^2}{h\tau} K_x^2} dK_x \int \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{h\tau} K_y^2} K_y^8 dK_y \\
& +\left. \frac{2r^2 \langle S^z \rangle^2 a^8}{h^2 \tau^2 4! 4! 2!} \int \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle^2 a^2}{h\tau} K_x^2} K_x^2 dK_x \int \sum_{r=1}^{\infty} e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{h\tau} K_y^2} K_y^2 dK_y \right] \tag{3.31}
\end{aligned}$$

elde ederiz. Gerekli hesaplamalar yapıldığında (3.31) denklemimiz aşağıdaki gibi olur.

$$\begin{aligned}
\phi(S) &= \frac{\nu}{(2\pi)^2} \left[ \pi \frac{2h\tau}{r\langle S^z \rangle a^2} + \frac{r\langle S^z \rangle a^4}{h\tau 4!} \frac{3\sqrt{\pi}}{2} \left( \frac{2h\tau}{r\langle S^z \rangle a^2} \right)^{5/2} \sqrt{\pi} \left( \frac{2h\tau}{r\langle S^z \rangle a^2} \right)^{1/2} \right. \\
& - \frac{r\langle S^z \rangle a^6}{h\tau 6!} \frac{15\sqrt{\pi}}{4} \left( \frac{2h\tau}{r\langle S^z \rangle a^2} \right)^{7/2} \sqrt{\pi} \left( \frac{2h\tau}{r\langle S^z \rangle a^2} \right)^{1/2} \\
& \left. + \frac{r\langle S^z \rangle a^8}{h\tau 8!} \frac{105\sqrt{\pi}}{8} \left( \frac{2h\tau}{r\langle S^z \rangle a^2} \right)^{9/2} \sqrt{\pi} \left( \frac{2h\tau}{r\langle S^z \rangle a^2} \right)^{1/2} \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{r \langle S^z \rangle a^{10}}{h\tau 10!} \frac{9.105}{16} \left( \frac{2h\tau}{r \langle S^z \rangle a^2} \right)^{11/2} \sqrt{\pi} \left( \frac{2h\tau}{r \langle S^z \rangle a^2} \right)^{1/2} \\
& + \frac{r^2 \langle S^z \rangle^2 a^8}{h^2 \tau^2 4! 4! 2!} \frac{105 \sqrt{\pi}}{8} \left( \frac{2h\tau}{r \langle S^z \rangle a^2} \right)^{9/2} \sqrt{\pi} \left( \frac{2h\tau}{r \langle S^z \rangle a^2} \right)^{1/2} \\
& + \frac{r^2 \langle S^z \rangle^2 a^8}{h^2 \tau^2 4! 4!} \frac{\pi}{4} \left( \frac{2h\tau}{r \langle S^z \rangle a^2} \right)^3 \Big] \tag{3.32}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\phi(S) &= \frac{\nu}{(2\pi)^2} \left[ \pi \frac{2h\tau}{\langle S^z \rangle a^2} \frac{1}{a^2} \frac{1}{r} + \frac{3\pi}{4!} \left( \frac{2h\tau}{\langle S^z \rangle} \right)^2 \frac{1}{a^2} \frac{1}{r^2} - \frac{15\pi}{2.6!} \left( \frac{2h\tau}{\langle S^z \rangle} \right)^3 \frac{1}{a^2} \frac{1}{r^3} \right. \\
& + \frac{105\pi}{4.8!} \left( \frac{2h\tau}{\langle S^z \rangle} \right)^4 \frac{1}{a^2} \frac{1}{r^4} - \frac{9.105\pi}{8.10!} \left( \frac{2h\tau}{\langle S^z \rangle} \right)^5 \frac{1}{a^2} \frac{1}{r^5} + \dots \\
& \left. + \frac{105\pi}{2.4! 4! 2!} \left( \frac{2h\tau}{\langle S^z \rangle} \right)^3 \frac{1}{a^2} \frac{1}{r^3} + \frac{\pi}{4! 4!} \left( \frac{2h\tau}{\langle S^z \rangle} \right) \frac{1}{a^2} \frac{1}{r} \right] \tag{3.33}
\end{aligned}$$

İki boyutlu örgü için  $\nu = a^2$  alınırsa;

$$\begin{aligned}
\phi(S) &= \frac{a^2}{(2\pi)^2} \left[ \pi \frac{2h\tau}{\langle S^z \rangle a^2} \frac{1}{a^2} \frac{1}{r} \frac{577}{576} + \frac{\pi}{8} \left( \frac{2h\tau}{\langle S^z \rangle} \right)^2 \frac{1}{a^2} \frac{1}{r^2} + \frac{9\pi}{256} \left( \frac{2h\tau}{\langle S^z \rangle} \right)^3 \frac{1}{a^2} \frac{1}{r^3} \right. \\
& \left. + \frac{\pi}{1536} \left( \frac{2h\tau}{\langle S^z \rangle} \right)^4 \frac{1}{a^2} \frac{1}{r^4} - \frac{\pi}{30720} \left( \frac{2h\tau}{\langle S^z \rangle} \right)^5 \frac{1}{a^2} \frac{1}{r^5} + \dots \right] \tag{3.34}
\end{aligned}$$

olur.

$$\sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r^p} = \zeta(p) \tag{3.35}$$

şeklindeki bağıntıyı (3.34) denkleminde yerine yazalım.

$$\begin{aligned} \phi(S) = & \zeta(1) \left( \frac{2h\tau}{4\pi \langle S^z \rangle} \right) \frac{577}{576} + \zeta(2) \frac{\pi}{8} \left( \frac{2h\tau}{4\pi \langle S^z \rangle} \right)^2 - \zeta(3) \frac{9\pi^2}{16} \left( \frac{2h\tau}{4\pi \langle S^z \rangle} \right)^3 \\ & + \zeta(4) \frac{\pi^3}{6} \left( \frac{2h\tau}{4\pi \langle S^z \rangle} \right)^4 - \zeta(5) \frac{\pi^4}{30} \left( \frac{2h\tau}{4\pi \langle S^z \rangle} \right)^5 + \dots \end{aligned} \quad (3.36)$$

$\zeta(i)$  ve katsayıları çarpımının  $a_i$  terimleri şeklinde kısaltılması denk. (3.37)'de görörlmektedir.

$$\begin{aligned} \phi(S) = & a_1 \cdot \left( \frac{2h\tau}{4\pi \langle S^z \rangle} \right) + a_2 \cdot \left( \frac{2h\tau}{4\pi \langle S^z \rangle} \right)^2 - a_3 \cdot \left( \frac{2h\tau}{4\pi \langle S^z \rangle} \right)^3 \\ & + a_4 \cdot \left( \frac{2h\tau}{4\pi \langle S^z \rangle} \right)^4 - a_5 \cdot \left( \frac{2h\tau}{4\pi \langle S^z \rangle} \right)^5 + \dots \end{aligned} \quad (3.37)$$

(3.36) denklemini (3.38) denklemi içerisine yazalım.

$$\frac{1}{\langle S^z \rangle} = 1 + \phi(S) \quad (3.38)$$

Yukardaki denklemin çıkarımı denklem (3.55)'de ifade edilmiştir. Denk. (3.55)'te  $\phi(S)$  yerine  $F$  kullanılmıştır.

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{1 + \phi(S)} \quad (3.39)$$

olur.

$$\frac{1}{1 + \phi(S)} = 1 - \phi(S) + [\phi(S)]^2 - [\phi(S)]^3 + \dots \quad (3.40)$$

Şeklinde seri açılım yapılırsa ve  $\phi(S)$ 'lerin denk. (3.37)'deki değerleri kullanılırsa , manyetizasyon ifadesi aşağıdaki şekli alır.

$$\langle S^z \rangle = 1 - \sum_{j \geq 1} A_j \tau^j \quad (3.41)$$

$$A_1 = \left( \frac{1}{2\pi} \right) \frac{577}{576} \zeta(1), \quad (3.42)$$

$$A_2 = \frac{\pi}{8} \left( \frac{1}{2\pi} \right)^2 \zeta(2), \quad (3.43)$$

$$A_3 = \frac{9\pi^2}{16} \left( \frac{1}{2\pi} \right)^3 \zeta(3), \quad (3.44)$$

$$A_4 = \frac{\pi^3}{6} \left( \frac{1}{2\pi} \right)^4 \zeta(4), \quad (3.45)$$

$$A_5 = \frac{\pi^4}{30} \left( \frac{1}{2\pi} \right)^5 \zeta(5), \quad (3.46)$$

Sonuç olarak, düşük sıcaklık bölgelerinde manyetik alansız bir ortamda aşağıdaki manyetizasyon ifadesi türetilmiştir.

$$\langle S^z \rangle_{s=\frac{1}{2}} = \left[ \frac{1}{2} - \phi\left(\frac{1}{2}\right) + 2 \left[ \phi\left(\frac{1}{2}\right) \right]^2 + 0 \left[ \phi\left(\frac{1}{2}\right) \right]^3 \right] \quad (3.47)$$

$$\begin{aligned} \langle S^z \rangle_{s=\frac{1}{2}} = & \left[ \frac{1}{2} - \zeta(1) \frac{\hbar\tau}{\pi} \frac{577}{576} - \zeta(2) \frac{\pi}{8} \left( \frac{\hbar\tau}{\pi} \right)^2 + \zeta(3) \frac{9\pi^2}{16} \left( \frac{\hbar\tau}{\pi} \right)^3 \right. \\ & - \zeta(4) \frac{\pi^3}{6} \left( \frac{\hbar\tau}{\pi} \right)^4 + \zeta(5) \frac{\pi^4}{30} \left( \frac{\hbar\tau}{\pi} \right)^5 + \dots \\ & + \left[ \zeta(1) \right]^2 \left( \frac{\hbar\tau}{\pi} \right)^2 \frac{332929}{165858} + \left[ \zeta(2) \right]^2 \frac{\pi^2}{64} \left( \frac{\hbar\tau}{\pi} \right)^4 + \zeta(1)\zeta(2) \frac{577\pi}{1152} \left( \frac{\hbar\tau}{\pi} \right)^3 \\ & \left. - \zeta(1)\zeta(3) \frac{577\pi^2}{256} \left( \frac{\hbar\tau}{\pi} \right)^4 + \zeta(1)\zeta(4) \frac{577\pi^3}{864} \left( \frac{\hbar\tau}{\pi} \right)^5 - \dots \right] \quad (3.48) \end{aligned}$$

### 3.2 Dış Manyetik Alan Varlığında Manyetizasyonun İncelenmesi

$H \neq 0$  durumundaki enerji ifadesi aşağıdaki gibi verilir.

$$E_K = 2g\mu_B H + 2[J(0) - J(K)] \quad (3.49)$$

Burada  $\beta = \frac{1}{kT}$  dir.  $H$  dış manyetik alandır.  $g$ , elektron için Landé faktörüdür.  $\mu_B$ , Bohr manyetonudur.  $\bar{n}$ , birim hacimdeki elektron sayısıdır.  $\langle S^z \rangle$  ise birim hacimdeki manyetizasyondur.

Yukardaki  $E_K$  ifadesinin her iki tarafını  $\frac{1}{2}\beta$  ile çarpalım ve yeni ifadeyi aşağıdaki büyüklükler cinsinden elde edelim.

$$\tau = \frac{1}{\beta J(0)}, \quad \eta(K) = 1 - \frac{J(K)}{J(0)}, \quad L = \frac{g\mu_B H}{J(0)}$$

$$\frac{1}{2}\beta E_K = g\mu_B H + (1 - 2\bar{n})\beta J(0) \left[ 1 - \frac{J(K)}{J(0)} \right] \quad (3.50)$$

$$\frac{1}{2}\beta E_K = \frac{L}{\tau} + \frac{\langle S^z \rangle}{\tau} [\eta(K)] \quad (3.51)$$

$$\frac{1}{\langle S^z \rangle} = \frac{\nu}{(2\pi)^2} \int \coth \left( \frac{1}{2}\beta E_K \right) d^2 K \quad (3.52)$$

Şeklinde verilen manyetizasyon ifadesinde yukardaki  $\frac{1}{2}\beta E_K$  değerini yerine yazarsak,

$$\frac{1}{\langle S^z \rangle} = \frac{\nu}{(2\pi)^2} \int \coth \frac{L + \langle S^z \rangle \eta(K)}{h\tau} d^2 K \quad (3.53)$$

ifadesini elde ederiz.

$T \ll T_C$ ,  $\tau \rightarrow 0$ ,  $L + \langle S^z \rangle \eta(K) \gg \tau$  durumu için, aşağıdaki açılımı kullanırız. Burada  $T_C$ , Curie sıcaklığıdır, yani manyetizasyonun sıfır değerini aldığı sıcaklıktır. Yukardaki integralde,  $\coth x$ 'in yerine aşağıdaki açılımını alalım.

$$\begin{aligned} \coth x &= (1 + e^{-2x})(1 - e^{-2x})^{-1} \\ &= 1 + 2 \sum_{r=1}^{\infty} e^{-2rx} \end{aligned} \quad (3.54)$$

$$\frac{1}{\langle S^z \rangle} = 1 + F \left( \frac{\tau}{\langle S^z \rangle}, \frac{L}{\tau} \right) \quad (3.55)$$

Burada F aşağıdaki şekilde tanımlanmıştır.

$$F = \sum_{r=1}^{\infty} \frac{2\nu}{(2\pi)^2} \int d^2K \exp \left[ -2r \left( \frac{L + \langle S^z \rangle \eta(K)}{h\tau} \right) \right] \quad (3.56)$$

$$\frac{1}{\langle S^z \rangle} = \frac{\nu}{(2\pi)^2} \int 1 + 2 \sum_{r=1}^{\infty} \exp \left[ -2r \left( \frac{L + \langle S^z \rangle \eta(K)}{h\tau} \right) \right] d^2K \quad (3.57)$$

$$\frac{1}{\langle S^z \rangle} = \frac{\nu}{(2\pi)^2} \int d^2K + \frac{\nu}{(2\pi)^2} 2 \sum_{r=1}^{\infty} \exp \left[ -2r \left( \frac{L + \langle S^z \rangle \eta(K)}{h\tau} \right) \right] d^2K \quad (3.58)$$

Ters örgü üzerinden;

$$\int d^2K = \frac{(2\pi)^2}{\nu} \quad \text{dir.} \quad (3.59)$$

$$\frac{1}{\langle S^z \rangle} = 1 + F \left( \frac{\tau}{\langle S^z \rangle}, \frac{L}{\tau} \right)$$

$$F = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{2\nu}{(2\pi)^2} \int d^2 K \exp \left[ -2r \frac{L + \langle S^z \rangle \eta(K)}{\hbar \tau} \right]$$

idi.

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

Olarak tanımlanmıştı.  $H \neq 0$  durumu için aşağıdaki denklemleri yeniden hesaplayalım.

$$\frac{J(K)}{J(0)} = \frac{1}{2} [\cos(K_x a) + \cos(K_y a)] \quad (3.60)$$

$$\eta(K) = 1 - \frac{\left(\frac{1}{2}\right) J(0) [\cos(K_x a) + \cos(K_y a)]}{J(0)} \quad (3.61)$$

$\cos(K_x a)$  ve  $\cos(K_y a)$  ifadelerini seri açtıktan sonra taraf tarafa toplayalım.

$$\cos(x) = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \dots \quad (3.62)$$

$$\cos(K_x a) = 1 - \frac{(K_x a)^2}{2!} + \frac{(K_x a)^4}{4!} - \frac{(K_x a)^6}{6!} + \frac{(K_x a)^8}{8!} - \frac{(K_x a)^{10}}{10!} + \dots$$

$$\cos(K_y a) = 1 - \frac{(K_y a)^2}{2!} + \frac{(K_y a)^4}{4!} - \frac{(K_y a)^6}{6!} + \frac{(K_y a)^8}{8!} - \frac{(K_y a)^{10}}{10!} + \dots$$

$$\begin{aligned} \cos(K_x a) + \cos(K_y a) &= 2 - a^2 \frac{(K_x^2 + K_y^2)}{2!} + a^4 \frac{(K_x^4 + K_y^4)}{4!} - a^6 \frac{(K_x^6 + K_y^6)}{6!} \\ &\quad + a^8 \frac{(K_x^8 + K_y^8)}{8!} - a^{10} \frac{(K_x^{10} + K_y^{10})}{10!} \end{aligned} \quad (3.63)$$

$$\eta(K) = 1 - \frac{1}{2} \left[ 2 - (K_x^2 + K_y^2) \frac{a^2}{2!} + (K_x^4 + K_y^4) \frac{a^4}{4!} - (K_x^6 + K_y^6) \frac{a^6}{6!} \right. \\ \left. + (K_x^8 + K_y^8) \frac{a^8}{8!} - (K_x^{10} + K_y^{10}) \frac{a^{10}}{10!} \right] \quad (3.64)$$

Olur. Üstel ifadeye, bulunan değerleri yerine koyarsak;

$$\exp \left[ -2r \left( \frac{L + \langle S^z \rangle \eta(K)}{\hbar \tau} \right) \right] \\ = \exp \left( \frac{-2rL}{\hbar \tau} \right) \exp \left( -\frac{r \langle S^z \rangle}{\hbar \tau} \right) \cdot \left[ (K_x^2 + K_y^2) \frac{a^2}{2!} - (K_x^4 + K_y^4) \frac{a^4}{4!} \right. \\ \left. + (K_x^6 + K_y^6) \frac{a^6}{6!} - (K_x^8 + K_y^8) \frac{a^8}{8!} + (K_x^{10} + K_y^{10}) \frac{a^{10}}{10!} \right] \quad (3.65)$$

$$= \exp \left[ \frac{-2rL}{\hbar \tau} \right] \exp \left[ -\frac{r \langle S^z \rangle}{\hbar \tau} \right] \left( (K_x^2 + K_y^2) \frac{a^2}{2!} \right) \cdot \\ \exp \left\{ \left[ -\frac{r \langle S^z \rangle}{\hbar \tau} \right] \left( (K_x^4 + K_y^4) \frac{a^4}{4!} \right) - \left[ -\frac{r \langle S^z \rangle}{\hbar \tau} \right] \left( (K_x^6 + K_y^6) \frac{a^6}{6!} \right) \right. \\ \left. + \left[ -\frac{r \langle S^z \rangle}{\hbar \tau} \right] \left( (K_x^8 + K_y^8) \frac{a^8}{8!} \right) - \left[ -\frac{r \langle S^z \rangle}{\hbar \tau} \right] \left( (K_x^{10} + K_y^{10}) \frac{a^{10}}{10!} \right) \right\} \quad (3.66)$$

elde edilir. Üçüncü üstel fonksiyonu seri açalım.

$$e^{-x} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots \quad (3.67)$$

$$e^{\left[ -2r \frac{L + \langle S^z \rangle \eta(K)}{\hbar \tau} \right]} = \exp \left[ \frac{-2rL}{\hbar \tau} \right] \exp \left[ -\frac{r \langle S^z \rangle}{\hbar \tau} \left( (K_x^2 + K_y^2) \frac{a^2}{2!} \right) \right] \left[ 1 + \frac{r \langle S^z \rangle}{\hbar \tau} (K_x^4 + K_y^4) \frac{a^2}{4!} \right. \\ \left. - \frac{r \langle S^z \rangle}{\hbar \tau} (K_x^6 + K_y^6) \frac{a^2}{6!} + \frac{r \langle S^z \rangle}{\hbar \tau} (K_x^8 + K_y^8) \frac{a^8}{8!} - \frac{r \langle S^z \rangle}{\hbar \tau} (K_x^{10} + K_y^{10}) \frac{a^{10}}{10!} \right]$$



$$\left. + \frac{r^2 \langle S^z \rangle^2}{\hbar^2 \tau^2} \frac{a^8}{4!4!2!} (K_x^8 + K_y^8 + 2K_x^4 K_y^4) \right] \quad (3.68)$$

elde ederiz. F denkleminde yerine yazalım.

$$\begin{aligned} F &= \frac{2\nu}{(2\pi)^2} \int d^2 K \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right) - \frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} (K_x^2 + K_y^2)} \frac{a^2}{2!} \\ &+ \int d^2 K \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right) - \frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} (K_x^2 + K_y^2)} \frac{a^2}{2!} \left( \frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} (K_x^4 + K_y^4) \frac{a^4}{4!} \right) \\ &- \int d^2 K \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right) - \frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} (K_x^2 + K_y^2)} \frac{a^2}{2!} \left( \frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} (K_x^6 + K_y^6) \frac{a^6}{6!} \right) \\ &+ \int d^2 K \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right) - \frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} (K_x^2 + K_y^2)} \frac{a^2}{2!} \left( \frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} (K_x^8 + K_y^8) \frac{a^8}{8!} \right) \\ &- \int d^2 K \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right) - \frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} (K_x^2 + K_y^2)} \frac{a^2}{2!} \left( \frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} (K_x^{10} + K_y^{10}) \frac{a^{10}}{10!} \right) \\ &+ \int d^2 K \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right) - \frac{r\langle S^z \rangle}{\hbar\tau} (K_x^2 + K_y^2)} \frac{a^2}{2!} \left( \frac{r^2 \langle S^z \rangle^2}{\hbar^2 \tau^2} \frac{a^8}{4!4!2!} (K_x^8 + K_y^8 + 2K_x^4 K_y^4) \right) \end{aligned} \quad (3.69)$$

F denklemini daha açık bir şekilde yazalım;

$$\begin{aligned} F &= \frac{2\nu}{(2\pi)^2} \left[ \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right)} \int e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{\hbar\tau} \frac{K_x^2}{2!}} dK_x \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right)} \int e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{\hbar\tau} \frac{K_y^2}{2!}} dK_y \right. \\ &+ \frac{r\langle S^z \rangle a^4}{\hbar\tau 4!} \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right)} \int e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{\hbar\tau} \frac{K_x^2}{2!}} K_x^4 dK_x \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right)} \int e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{\hbar\tau} \frac{K_y^2}{2!}} dK_y \\ &+ \frac{r\langle S^z \rangle a^4}{\hbar\tau 4!} \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right)} \int e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{\hbar\tau} \frac{K_x^2}{2!}} dK_x \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right)} \int e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{\hbar\tau} \frac{K_y^2}{2!}} K_y^4 dK_y \\ &\left. - \frac{r\langle S^z \rangle a^6}{\hbar\tau 6!} \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right)} \int e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{\hbar\tau} \frac{K_x^2}{2!}} K_x^6 dK_x \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right)} \int e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{\hbar\tau} \frac{K_y^2}{2!}} dK_y \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{r\langle S^z \rangle a^6}{h\tau 6!} \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{h\tau}\right)} \int e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{h\tau} K_x^2} dK_x \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{h\tau}\right)} \int e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{h\tau} K_y^2} K_y^6 dK_y \\
& +\frac{r\langle S^z \rangle a^8}{h\tau 8!} \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{h\tau}\right)} \int e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{h\tau} K_x^2} K_x^8 dK_x \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{h\tau}\right)} \int e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{h\tau} K_y^2} dK_y \\
& +\frac{r\langle S^z \rangle a^8}{h\tau 8!} \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{h\tau}\right)} \int e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{h\tau} K_x^2} dK_x \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{h\tau}\right)} \int e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{h\tau} K_y^2} K_y^8 dK_y \\
& -\frac{r\langle S^z \rangle a^{10}}{h\tau 10!} \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{h\tau}\right)} \int e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{h\tau} K_x^2} K_x^{10} dK_x \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{h\tau}\right)} \int e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{h\tau} K_y^2} dK_y \\
& -\frac{r\langle S^z \rangle a^{10}}{h\tau 10!} \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{h\tau}\right)} \int e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{h\tau} K_x^2} dK_x \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{h\tau}\right)} \int e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{h\tau} K_y^2} K_y^{10} dK_y \\
& +\frac{r^2 \langle S^z \rangle^2 a^8}{h^2 \tau^2 4! 4! 2!} \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{h\tau}\right)} \int e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{h\tau} K_x^2} K_x^8 dK_x \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{h\tau}\right)} \int e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{h\tau} K_y^2} dK_y \\
& +\frac{r^2 \langle S^z \rangle^2 a^8}{h^2 \tau^2 4! 4! 2!} \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{h\tau}\right)} \int e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{h\tau} K_x^2} dK_x \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{h\tau}\right)} \int e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{h\tau} K_y^2} K_y^8 dK_y \\
& +\frac{2r^2 \langle S^z \rangle^2 a^8}{h^2 \tau^2 4! 4! 2!} \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{h\tau}\right)} \int e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{h\tau} K_x^2} K_x^2 dK_x \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{h\tau}\right)} \int e^{-\frac{r\langle S^z \rangle a^2}{h\tau} K_y^2} K_y^2 dK_y \Big] \quad (3.70)
\end{aligned}$$

$\phi(S)$  denklemi için hesapladığımız  $I_n$  değerlerini burada da kullanırsak,

$$\begin{aligned}
F &= \frac{2\nu}{(2\pi)^2} \left[ \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{h\tau}\right)} \pi \frac{2h\tau}{r\langle S^z \rangle a^2} \right. \\
& + \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{h\tau}\right)} \frac{r\langle S^z \rangle a^4}{h\tau 4!} \frac{3\sqrt{\pi}}{2} \left( \frac{2h\tau}{r\langle S^z \rangle a^2} \right)^{5/2} \sqrt{\pi} \left( \frac{2h\tau}{r\langle S^z \rangle a^2} \right)^{1/2} \\
& - \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{h\tau}\right)} \frac{r\langle S^z \rangle a^6}{h\tau 6!} \frac{15\sqrt{\pi}}{4} \left( \frac{2h\tau}{r\langle S^z \rangle a^2} \right)^{7/2} \sqrt{\pi} \left( \frac{2h\tau}{r\langle S^z \rangle a^2} \right)^{1/2} \\
& \left. + \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{h\tau}\right)} \frac{r\langle S^z \rangle a^8}{h\tau 8!} \frac{105\sqrt{\pi}}{8} \left( \frac{2h\tau}{r\langle S^z \rangle a^2} \right)^{9/2} \sqrt{\pi} \left( \frac{2h\tau}{r\langle S^z \rangle a^2} \right)^{1/2} \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right)} \frac{r \langle S^z \rangle a^{10}}{\hbar\tau 10!} \frac{9 \cdot 105}{16} \left( \frac{2\hbar\tau}{r \langle S^z \rangle a^2} \right)^{11/2} \sqrt{\pi} \left( \frac{2\hbar\tau}{r \langle S^z \rangle a^2} \right)^{1/2} \\
& + \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right)} \frac{r^2 \langle S^z \rangle^2 a^8}{\hbar^2 \tau^2 4!4!2!} \frac{105\sqrt{\pi}}{8} \left( \frac{2\hbar\tau}{r \langle S^z \rangle a^2} \right)^{9/2} \sqrt{\pi} \left( \frac{2\hbar\tau}{r \langle S^z \rangle a^2} \right)^{1/2} \\
& + \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right)} \frac{r^2 \langle S^z \rangle^2 a^8}{\hbar^2 \tau^2 4!4!} \frac{\pi}{4} \left( \frac{2\hbar\tau}{r \langle S^z \rangle a^2} \right)^3 \left. \right] \quad (3.71)
\end{aligned}$$

elde ederiz. Gerekli hesaplamaları yaparsak;

$$\begin{aligned}
F &= \frac{2\nu}{(2\pi)^2} \left[ \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right)} \frac{2\pi\hbar\tau}{\langle S^z \rangle} \frac{1}{a^2} \frac{1}{r} + \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right)} \frac{3\pi}{4!} \left( \frac{2\hbar\tau}{\langle S^z \rangle} \right)^2 \frac{1}{a^2} \frac{1}{r^2} \right. \\
& - \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right)} \frac{15\pi}{2 \cdot 6!} \left( \frac{2\hbar\tau}{\langle S^z \rangle} \right)^3 \frac{1}{a^2} \frac{1}{r^3} \\
& + \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right)} \frac{105\pi}{4 \cdot 8!} \left( \frac{2\hbar\tau}{\langle S^z \rangle} \right)^4 \frac{1}{a^2} \frac{1}{r^4} - \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right)} \frac{9 \cdot 105\pi}{8 \cdot 10!} \left( \frac{2\hbar\tau}{\langle S^z \rangle} \right)^5 \frac{1}{a^2} \frac{1}{r^5} + \dots \\
& \left. + \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right)} \frac{105\pi}{2 \cdot 4!4!2!} \left( \frac{2\hbar\tau}{\langle S^z \rangle} \right)^3 \frac{1}{a^2} \frac{1}{r^3} + \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right)} \frac{\pi}{4!4!} \left( \frac{2\hbar\tau}{\langle S^z \rangle} \right) \frac{1}{a^2} \frac{1}{r} \right] \quad (3.72)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F &= \frac{2a^2}{(2\pi)^2} \left[ \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right)} \frac{2\pi\hbar\tau}{\langle S^z \rangle} \frac{1}{a^2} \frac{1}{r} \frac{577}{576} + \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right)} \frac{\pi}{8} \left( \frac{2\hbar\tau}{\langle S^z \rangle} \right)^2 \frac{1}{a^2} \frac{1}{r^2} \right. \\
& + \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right)} \frac{9\pi}{256} \left( \frac{2\hbar\tau}{\langle S^z \rangle} \right)^3 \frac{1}{a^2} \frac{1}{r^3} \\
& \left. + \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right)} \frac{\pi}{1536} \left( \frac{2\hbar\tau}{\langle S^z \rangle} \right)^4 \frac{1}{a^2} \frac{1}{r^4} - \sum_{r=1}^{\infty} e^{\left(\frac{-2rL}{\hbar\tau}\right)} \frac{\pi}{30720} \left( \frac{2\hbar\tau}{\langle S^z \rangle} \right)^5 \frac{1}{a^2} \frac{1}{r^5} + \dots \right] \quad (3.73)
\end{aligned}$$

olarak buluruz. Yukardaki denklemde

$$\left(\frac{2L}{h\tau}\right) = x \quad (3.74)$$

kısaltması yapılarak;

$$Z_p(x) = \sum_{l=1}^{\infty} r^{-p} e^{-rx} \quad (3.75)$$

fonksiyonu kullanılarak; (3.73) ifadesi,

$$\begin{aligned} F = & Z_1(x) \left(\frac{h\tau}{2\pi\langle S^z \rangle}\right) \frac{577}{288} + Z_2(x) \frac{\pi}{4} \left(\frac{h\tau}{2\pi\langle S^z \rangle}\right)^2 - Z_3(x) \frac{9\pi^2}{8} \left(\frac{h\tau}{2\pi\langle S^z \rangle}\right)^3 \\ & + Z_4(x) \frac{\pi^3}{3} \left(\frac{h\tau}{2\pi\langle S^z \rangle}\right)^4 - Z_5(x) \frac{\pi^4}{15} \left(\frac{h\tau}{2\pi\langle S^z \rangle}\right)^5 + \dots \end{aligned} \quad (3.76)$$

olarak bulunur.  $Z_i(x)$ 'ler ve katsayıları  $a_i\left(\frac{L}{\tau}\right)$  fonksiyonları olarak kabul edilirse

denk. (3.76) aşağıdaki gibi yazılır.

$$\begin{aligned} F\left(\frac{\langle S^z \rangle}{\tau}, \frac{L}{\tau}\right) = & a_1\left(\frac{L}{\tau}\right) \left(\frac{\tau}{\langle S^z \rangle}\right) + a_2\left(\frac{L}{\tau}\right) \left(\frac{\tau}{\langle S^z \rangle}\right)^2 - a_3\left(\frac{L}{\tau}\right) \left(\frac{\tau}{\langle S^z \rangle}\right)^3 \\ & + a_4\left(\frac{L}{\tau}\right) \left(\frac{\tau}{\langle S^z \rangle}\right)^4 - a_5\left(\frac{L}{\tau}\right) \left(\frac{\tau}{\langle S^z \rangle}\right)^5 \dots \end{aligned} \quad (3.77)$$

$$\frac{1}{\langle S^z \rangle} = 1 + F$$

idi. Buradan

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{1+F} \quad (3.78)$$

olur.

$$\frac{1}{1+F} = 1 - F + F^2 - F^3 + \dots \quad (3.79)$$

Şeklinde seri açılım yapılırsa,  $F$  nin denk. (3.76)'daki değerleri (3.79)'da yerine yazılırsa, manyetizasyon ifadesi aşağıdaki şekli alır.

$$\langle S^z \rangle = 1 - \sum_{j \geq 1} A_j \tau^j \quad (3.80)$$

$$A_1 = \left( \frac{1}{2\pi} \right) \frac{577}{288} Z_1 \quad (3.81)$$

$$A_2 = \frac{\pi}{4} \left( \frac{1}{2\pi} \right)^2 Z_2, \quad (3.82)$$

$$A_3 = \frac{9\pi^2}{8} \left( \frac{1}{2\pi} \right)^3 Z_3, \quad (3.83)$$

$$A_4 = \frac{\pi^3}{3} \left( \frac{1}{2\pi} \right)^4 Z_4, \quad (3.84)$$

$$A_5 = \frac{\pi^4}{15} \left( \frac{1}{2\pi} \right)^5 Z_5, \quad (3.85)$$

Şeklinde katsayılar elde edilir.

Sonuç olarak düşük sıcaklık bölgelerinde manyetik alanlı bir ortamda aşağıdaki manyetizasyon ifadesi türetilmiştir.

$$\langle S^z \rangle_{s=\frac{1}{2}} = \left[ \frac{1}{2} - \phi\left(\frac{1}{2}\right) + 2 \left[ \phi\left(\frac{1}{2}\right) \right]^2 + 0 \left[ \phi\left(\frac{1}{2}\right) \right]^3 \right]$$

$$\begin{aligned}
\langle S^z \rangle_{s=\frac{1}{2}} = & \left[ \frac{1}{2} - Z_1(x) \frac{\hbar\tau}{\pi} \frac{577}{288} - Z_2(x) \frac{\pi}{4} \left( \frac{\hbar\tau}{\pi} \right)^2 + Z_3(x) \frac{9\pi^2}{8} \left( \frac{\hbar\tau}{\pi} \right)^3 \right. \\
& - Z_4(x) \frac{\pi^3}{3} \left( \frac{\hbar\tau}{\pi} \right)^4 + Z_5(x) \frac{\pi^4}{15} \left( \frac{\hbar\tau}{\pi} \right)^5 + \dots \\
& + \left( \frac{\hbar\tau}{\pi} \right)^2 \frac{332929}{41472} [Z_1(x)]^2 + \frac{\pi^2}{8} \left( \frac{\hbar\tau}{\pi} \right)^4 [Z_2(x)]^2 \\
& + \frac{577\pi}{576} \left( \frac{\hbar\tau}{\pi} \right)^3 Z_1(x)Z_2(x) - \frac{577\pi^2}{128} \left( \frac{\hbar\tau}{\pi} \right)^4 Z_1(x)Z_3(x) \\
& \left. + \frac{577\pi^3}{432} \left( \frac{\hbar\tau}{\pi} \right)^5 Z_1(x)Z_4(x) - \dots \right] \tag{3.86}
\end{aligned}$$

#### 4. SONUÇLAR ve ÖNERİLER

Bu tezde iki boyutlu bir kare örgüde Heisenberg etkileşimi yapan spin sisteminde Green fonksiyonları kullanılarak manyetizasyon ifadesi indirgenmiş sıcaklığın kuvvet serisi fonksiyonları olarak düşük sıcaklık bölgesinde türetildi.

Bu türetme önce dış manyetik alansız bir ortamda sonra da dış manyetik alanlı ortamda incelenmiştir. Her iki durumda da manyetizasyon ifadesi sıcaklığın serisi olarak elde edilmiştir.

Mutlak sıfır sıcaklığında manyetizasyon ifadesinden doyum değeri olan  $1/2$  değerinin elde edildiği görülmüştür.

Bu çalışmada iki boyutlu kare örgüde manyetizasyonun bir kritik sıcaklığa sahip olduğunu ve manyetizasyonun artan sıcaklıkla düzgün bir şekilde azaldığını gördük.

## 5. KAYNAKLAR

Binder, K. ve ark., 1974 P.C. Hohenberg, Phys. Rev. B, 9- 2194

Binder, K. ve D.P., 1984 Landau Physy. Rev. Lett. 52 -318

Cellotta, R.J.,1986 Science 234-249

Dürr, W., 1989, Phys. Rev. Lett 62-206

Mariz, A. ve ark., 1987, Europhysy. Lett, 3-27

Rau, C. ve ark., 1980, in Nuclear Methods in Materials Research, edited by Bethe, K. (Vieweg, Braunschweig), 354

Rau, C. and Robert, M., 1987 Phys.Rev.Lett.58,2714

Weller, D., 1985 Phys. Rev. Lett. 14-1555

Zubarev, D., 1960 Sov. Physy. Doklady, 3-320



## ÖZGEÇMİŞ

### KİŞİSEL BİLGİLER

**Adı Soyadı** : Elmas Aksoy  
**Uyruđu** : T.C  
**Dođum Yeri ve Tarihi** : 26.06.1984  
**Telefon** : 0(332) 3515755

### EĐİTİM

<b>Derece</b>	<b>Adı, İlçe, İl</b>	<b>Bitirme Yılı</b>
Lise	: Açık Öğretim Lisesi, Karatay, Konya	<b>2002</b>
Üniversite	: Selçuk Üniversitesi, Selçuklu, Konya	<b>2007</b>
Yüksek Lisans	: Selçuk Üniversitesi, Selçuklu, Konya	<b>2011</b>