

Karma Spin-1/2 ve Spin- 5/2 Heisenberg Ferrimanyetik Sistemin Manyetik Özellikleri

Gülistan MERT*

Selçuk Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü, 42075 Konya, Türkiye

Özet: Kare örgüde karma spin- $\frac{1}{2}$ ve spin- $\frac{5}{2}$ Heisenberg ferrimanyetik sistemin manyetik davranışları, çift-zaman sıcaklık-bağımlı Green fonksiyon teorisi kullanılarak incelendi. En yakın ve ikinci en yakın komşu etkileşimlerinin ve tek-iyon anizotropisinin kompensasyon ve kritik sıcaklık üzerine etkisi incelendi. Sistem sadece en yakın komşu etkileşimi ve kristal alan içerdiğinde kompensasyon noktası gözlenmez. İkinci en yakın komşu etkileşimler dâhil edildiğinde ve belirli minimum bir değeri aştığı zaman kompensasyon noktası gözlenmektedir.

Anahtar kelimeler: Karma spin Heisenberg model, ferrimanyetik sistem, Green fonksiyonu, kritik sıcaklık, kompensasyon sıcaklık.

Magnetic Properties of a Mixed Spin-1/2 and Spin-5/2 Heisenberg Ferrimagnetic System

Abstract: The magnetic behaviors of a mixed spin- $\frac{1}{2}$ and spin- $\frac{5}{2}$ Heisenberg ferrimagnetic system on a square lattice are studied by using the double-time temperature-dependent Green's function technique. The influences of the nearest- and next-nearest-neighbor interaction and the single-ion anisotropy on compensation and critical temperature are studied. When the system includes only a nearest-neighbor interaction and the single-ion anisotropies, one does not observe a compensation point. When the next nearest-neighbor interactions are included and exceed a certain minimum value, a compensation point appears.

Keywords: Mixed-spin Heisenberg model, ferrimagnetic system, Green's function, Critical temperature, Compensation temperature.

Giriş

Ferrimagnetler, farklı altörgüdeki iyonların özdeş olmayan, zıt manyetik momente sahip olduğu maddelerdir. Her bir alt örgüdeki iyonlar kendi alt örgüsündeki komşuları ile ferromanyetik olarak etkileşir, ama örgüler arası çiftlenim antiferromanyetikdir. İki alt örgünün manyetizasyonun sıcaklığa bağlılığı farklıdır ama her ikisi de aynı T_c kritik sıcaklığına sahiptir. Manyetizasyon eğrisinin davranışı maddeyi oluşturan elementlere, kristal yapılarına ve değişim parametrelerine bağlıdır. Kritik sıcaklıktan daha büyük sıcaklıklar için madde paramanyetik olur.

Ferrimagnetlerin en önemli özelliklerinden biri kompensasyon noktası sergilemesidir. Alt örgü manyetizasyonlarının farklı sıcaklık bağılılığı kompensasyon sıcaklığının görünmesine imkân sağlar. Eğer T_c 'den daha düşük sıcaklıklarda iki alt örgünün manyetizasyonları eşit ve birbirine zıt olursa ve böylece toplam manyetizasyon sıfıra eşit olursa bu sıcaklığın kompensasyon sıcaklığı olduğu söylenir [1]. Bu kompensasyon noktaları birçok maddede gözlenmektedir. Ferrimagnetlerde kompensasyon sıcaklığının varlığı magneto-optik kayıt gibi ilginç teknolojik uygulamalara sahiptir [2].

Karma-spin Ising veya Heisenberg sistemler, ferrimanyetik düzen sergileyen modeller olarak göz önüne alınabilir. Bu sistemlerin manyetik özelliklerini incelemek için birçok farklı teorik

* gmert@selcuk.edu.tr

metot vardır: Ortalama alan teorisi [3], etkin alan teorisi [4], Oguchi yaklaşımı [5], Monte- Carlo simülasyonu [6], Bethe örgüsü [7], Green fonksiyon teorisi [8, 14-16] vs. Bu çalışmada çift-zaman sıcaklık-bağımlı Green fonksiyon teorisi kullanılarak, kare örgüde karma spin- $\frac{1}{2}$ ve spin- $\frac{5}{2}$ Heisenberg ferrimanyetik sistemin manyetik davranışlarını inceleyeceğiz. Benzer bir çalışma J. Li [9] tarafından verilmiştir.

Model

Kare örgüde karma spin- $\frac{1}{2}$ ve spin- $\frac{5}{2}$ Heisenberg ferrimanyetik modeli inceleyeceğiz. Örgü, iki eşdeğer A ve B alt örgüsüne bölünür. Her iki alt örgüde bir kare örgüdür. A ve B atomları arasındaki mesafe a olarak alınmaktadır.

Amacımız A ve B alt örgülerinin sırayla ortalama alt örgü manyetizasyonları m_A ve m_B 'yi hesaplamaktır, bunlar aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$m_A = \langle S_A^z \rangle, \quad m_B = \langle S_B^z \rangle. \quad (1)$$

Ayrıca kuadropol moment olarak adlandırılan manyetizasyonun karesinin ortalaması

$$Q_A = \langle (S_A^z)^2 \rangle, \quad Q_B = \langle (S_B^z)^2 \rangle. \quad (2)$$

olarak tanımlanır.

Hamiltoniye'nin aşağıdaki gibi olduğunu varsayacağız:

$$H = - \sum_{\langle nn \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \sum_{\langle nnn \rangle} J_{i'i'} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i'} - \sum_{\langle nnn \rangle} J_{j'j''} \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j''} - D_B \sum_j (S_j^z)^2 \quad (3)$$

Burada $\langle nn \rangle$ ve $\langle nnn \rangle$, sırayla en yakın ve ikinci en yakın komşu etkileşimleri göstermektedir ve toplam, iki boyutlu örgü üzerinden bütün en yakın ve ikinci en yakın komşu çiftler üzerinden alınır. i, A alt örgüsüne (spin- $\frac{1}{2}$) aittir ve j, B alt örgüsüne (spin- $\frac{5}{2}$) aittir. $J_{ij} = J (< 0)$, \mathbf{S}_i ve \mathbf{S}_j en yakın komşu spinleri arasındaki antiferromanyetik değişim etkileşimidir; $J_{i'i'} = J_1 (> 0)$, \mathbf{S}_i ve $\mathbf{S}_{i'}$ en yakın komşu spinleri arasındaki ferromanyetik değişim etkileşimidir ve $J_{j'j''} = J_2 (> 0)$, \mathbf{S}_j ve $\mathbf{S}_{j''}$ en yakın-komşu spinleri arasındaki ferromanyetik değişim etkileşimidir. D_B , B alt örgüsünün tek-iyon anizotropi parametresidir.

Bu modelin manyetik özelliklerini hesaplamak için, Callen [10] 'e göre çift-zaman-sıcaklık bağımlı Green fonksiyonları $\langle\langle S_i^+; B_l \rangle\rangle_\omega$ and $\langle\langle S_j^+; B_l \rangle\rangle_\omega$ dâhil edelim, burada $B_l = e^{i\eta S_l^z} S_l^-$ (η , bir parametredir; $S_i^+(t)$ ve $S_i^-(0)$, Heisenberg spin operatörleridir) şeklinde verilir. Bu iki Green fonksiyonu için hareket denklemlerini aşağıdaki gibi elde ederiz:

$$\begin{aligned} \omega \langle\langle S_i^+; B_l \rangle\rangle &= \delta_{il} \langle [S_i^+, B_l] \rangle - J \sum_{\langle nn \rangle} \langle\langle (S_i^z S_j^+ - S_i^+ S_j^z); B_l \rangle\rangle \\ &\quad - J_1 \sum_{\langle nnn \rangle} \langle\langle (S_i^z S_{i'}^+ - S_i^+ S_{i'}^z); B_l \rangle\rangle \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \omega \langle\langle S_j^+; B_l \rangle\rangle &= \delta_{jl} \langle [S_j^+, B_l] \rangle - J \sum_{\langle nn \rangle} \langle\langle (S_j^z S_i^+ - S_j^+ S_i^z); B_l \rangle\rangle \\ &\quad - J_2 \sum_{\langle nnn \rangle} \langle\langle (S_j^z S_{j'}^+ - S_j^+ S_{j'}^z); B_l \rangle\rangle + D_B \langle\langle (S_j^+ S_j^z + S_j^z S_j^+); B_l \rangle\rangle, \end{aligned} \quad (5)$$

Burada δ , Dirac fonksiyonudur ; $\langle \dots \rangle$, termal ortalamadır ve $\hbar = 1$ olarak alırız.

Yukarıdaki denklemin sağ tarafındaki daha yüksek mertebeli Green fonksiyonlarını aşağıdaki gibi ayrıştırırız. $\langle\langle(S_i^z S_j^+ - S_i^+ S_j^z); B_l\rangle\rangle$ gibi değişim terimlerinden meydana gelen Green fonksiyonları Rastgele Faz Ayrıştırması (RPA) [11] kullanılarak ayrıştırılabilir, yani;

$$\langle\langle S_i^z S_j^+; B_l\rangle\rangle \cong \langle S_i^z \rangle \langle\langle S_j^+; B_l\rangle\rangle. \quad (6)$$

$\langle\langle(S_j^z S_j^+ + S_j^+ S_j^z); B_l\rangle\rangle$ gibi tek-iyon anizotropi terimlerinden meydana gelen Green fonksiyonları Anderson ve Callen`nin ayrıştırma şeması [12] kullanılarak ayrıştırılabilir, yani

$$\langle\langle(S_j^+ S_j^z + S_j^z S_j^+); B_l\rangle\rangle \cong \tau_B \langle\langle S_j^+; B_l\rangle\rangle \quad (7)$$

şeklinde verilir. Burada

$$\tau_B = \left\{ 2 - \frac{1}{S_B^2} [S_B(S_B + 1) - Q_B] \right\} m_B \quad (8)$$

şeklinde verilir. Bu ayrıştırma şeması çok daha iyi sonuçlar vermektedir [13]. Green fonksiyonlarını aşağıdaki gibi buluruz:

$$G_A(\omega, K) = \frac{\Theta_A(\eta)}{E^+ - E^-} \left[\frac{\omega - C}{\omega - E^+} - \frac{\omega - C}{\omega - E^-} \right] \quad (9)$$

$$G_B(\omega, K) = \frac{\Theta_B(\eta)}{E^+ - E^-} \left[\frac{\omega - A}{\omega - E^+} - \frac{\omega - A}{\omega - E^-} \right] \quad (10)$$

Burada

$$\Theta_A(\eta) = \langle [S_i^+, e^{nS_i^z} S_i^-] \rangle, \quad \Theta_B(\eta) = \langle [S_j^+, e^{nS_j^z} S_j^-] \rangle, \quad (11)$$

$$E^+ = \frac{1}{2} \left\{ (A + C) \pm [(A - C)^2 + 4BD]^{1/2} \right\} \quad (12)$$

$$A = 4Jm_B - 4J_1 m_B (\gamma_2 - 1), \quad (13)$$

$$B = -4Jm_A \gamma_1, \quad (14)$$

$$C = D_B \tau_B + 4Jm_A - 4J_2 m_B (\gamma_2 - 1), \quad (15)$$

$$D = -4Jm_B \gamma_1, \quad (16)$$

$$\gamma_1 = \cos\left(\frac{\sqrt{2}}{2} k_x a\right) \cos\left(\frac{\sqrt{2}}{2} k_x a\right), \quad (17)$$

$$\gamma_2 = \frac{1}{2} [\cos(\sqrt{2} k_x a) + \cos(\sqrt{2} k_x a)], \quad (18)$$

şeklinde verilir.

Spektral teorem ve Callen [10] `nin tekniğini kullanarak alt örgü manyetizasyonlarını aşağıdaki gibi elde ederiz:

$$m_A = \frac{(S_A - \Phi_A)(1 + \Phi_A)^{2S_A+1} + (S_A + 1 + \Phi_A)\Phi_A^{2S_A+1}}{(1 + \Phi_A)^{2S_A+1} - \Phi_A^{2S_A+1}}, \quad (19)$$

$$m_B = \frac{(S_B - \Phi_B)(1 + \Phi_B)^{2S_B+1} + (S_B + 1 + \Phi_B)\Phi_B^{2S_B+1}}{(1 + \Phi_B)^{2S_B+1} - \Phi_B^{2S_B+1}}, \quad (20)$$

Ayrıca A ve B alt örgüsünün kuadropol momentlerini aşağıdaki gibi elde ederiz:

$$Q_A = (2\Phi_A + 1)(1 + \Phi_A) - \frac{S_A^2 \Phi_A^{2S_A+1} - (1 + S_A)^2 (1 + \Phi_A)^{2S_A+1} + 2[S_A \Phi_A^{2S_A+1} + (1 + \Phi_A)^{2S_A+1} (1 + S_A)](1 + \Phi_A)}{(1 + \Phi_A)^{2S_A+1} - \Phi_A^{2S_A+1}}, \quad (21)$$

$$Q_B = (2\Phi_B + 1)(1 + \Phi_B) - \frac{S_B^2 \Phi_B^{2S_B+1} - (1 + S_B)^2 (1 + \Phi_B)^{2S_B+1} + 2[S_B \Phi_B^{2S_B+1} + (1 + \Phi_B)^{2S_B+1} (1 + S_B)](1 + \Phi_B)}{(1 + \Phi_B)^{2S_B+1} - \Phi_B^{2S_B+1}}, \quad (22)$$

Burada

$$\Phi_A = \frac{2}{N} \sum_K \frac{1}{E^+ - E^-} \left[\frac{E^+ - C}{e^{\beta E^+} - 1} - \frac{E^- - C}{e^{\beta E^-} - 1} \right] \quad (23)$$

$$\Phi_B = \frac{2}{N} \sum_K \frac{1}{E^+ - E^-} \left[\frac{E^+ - A}{e^{\beta E^+} - 1} - \frac{E^- - A}{e^{\beta E^-} - 1} \right] \quad (24)$$

şeklinde verilir.

Sistemin toplam manyetizasyonu aşağıdaki gibi tanımlanır:

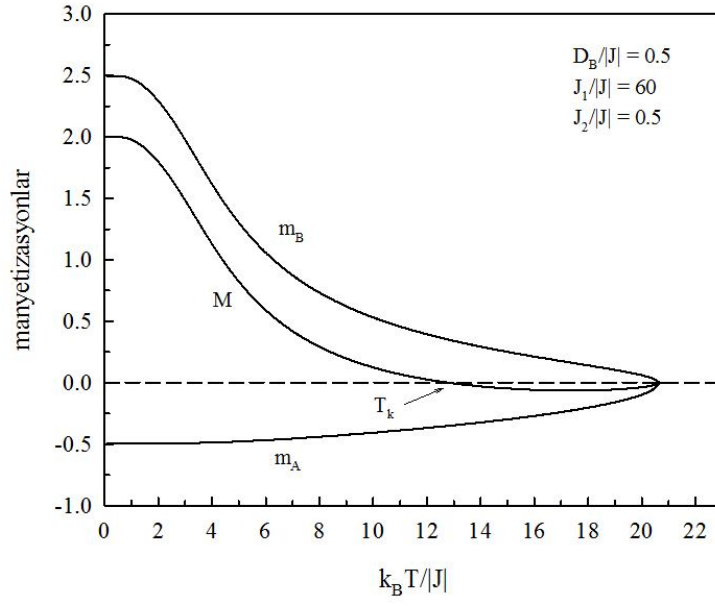
$$M = m_A + m_B \quad (25)$$

Alt örgü manyetizasyonlarının temel denklemleri (19) - (24) nümerik olarak çözülebilir.

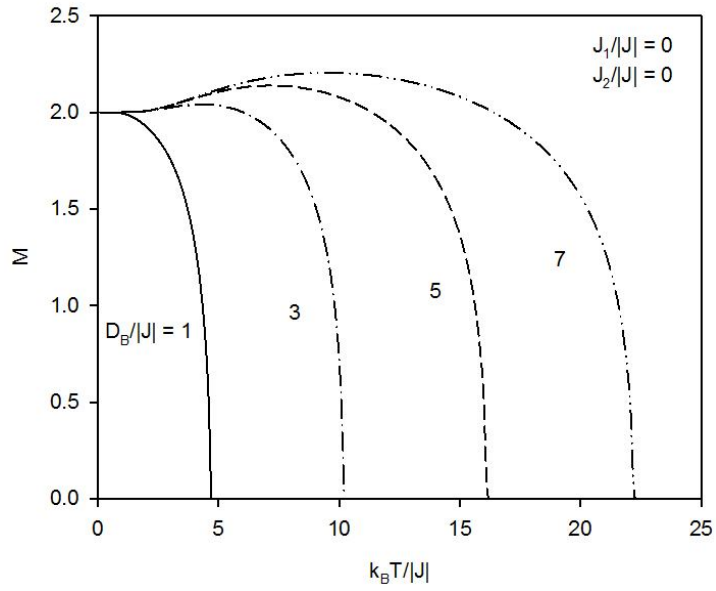
Nümerik sonuçlar

Şekil 1 `de, ikinci en yakın komşu etkileşimleri olmadığı zaman (yani $J_1/|J| = J_2/|J| = 0$) toplam manyetizasyon eğrilerini çizdik. Bu şekilden görüldüğü gibi, sadece en yakın komşu etkileşimler ve kristal alan olduğunda kompensasyon sıcaklığı gözlenmez ve manyetizasyon basitçe kritik sıcaklıkta sıfıra gider. Bu şekil iki tip manyetizasyon davranışı sergiler. Burada $D_B/|J| = 1$ değerini aldığı zaman manyetizasyon eğrisi, Neél sınıflandırmasında [1] Q tipi davranış gösterir ve $D_B/|J| = 3, 5$ ve 7 değerlerini aldığı zaman manyetizasyon eğrileri P tipi (Neél sınıflandırmasında) davranış gösterir.

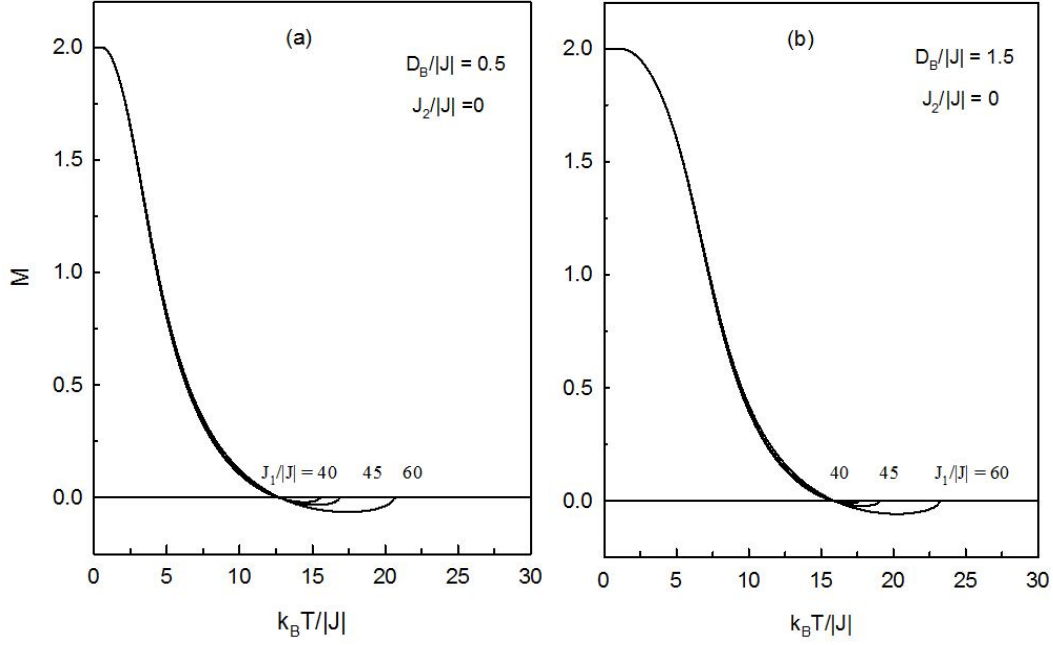
$D_B/|J| = 0.5, J_1/|J| = 60$ ve $J_2/|J| = 0.5$ değerleri için alt örgü manyetizasyonları ve toplam manyetizasyon Şekil 2 `de gösterilmiştir. T_k kompensasyon noktası şekilden görülmektedir. Şekil 3, $J_2/|J| = 0$ olduğu zaman, $J_1/|J| = 40, 45$ ve 60 değerlerini aldığı zaman $D_B/|J|$ `nin farklı değerleri için toplam manyetizasyon eğrilerini göstermektedir. Bu şekillerden, en yakın komşu etkileşimi, kristal alan ve ikinci en yakın komşu etkileşimi dâhil edildiğinde kompensasyon sıcaklığının mevcut olduğunu görebiliriz. Ayrıca tek iyon anizotropisi arttıkça kompensasyon sıcaklığı ve kritik sıcaklık artmaktadır. Burada $J_1/|J|$, minimum bir değeri, $J_{1min}/|J|$, aştığında kompensasyon noktası gözlenmektedir, bu sonuç Şekil 4 `de görülmektedir. Burada düz çizgiler kritik sıcaklığı, kesikli çizgiler kompensasyon sıcaklığını göstermektedir. Her kritik sıcaklık eğrisi, karşılık gelen kompensasyon eğrisi ile kesişir. Ayrıca bu şekilden görüldüğü gibi, kompensasyon sıcaklığı ve kritik sıcaklık, $J_1/|J|$ `nin artması ile artar.



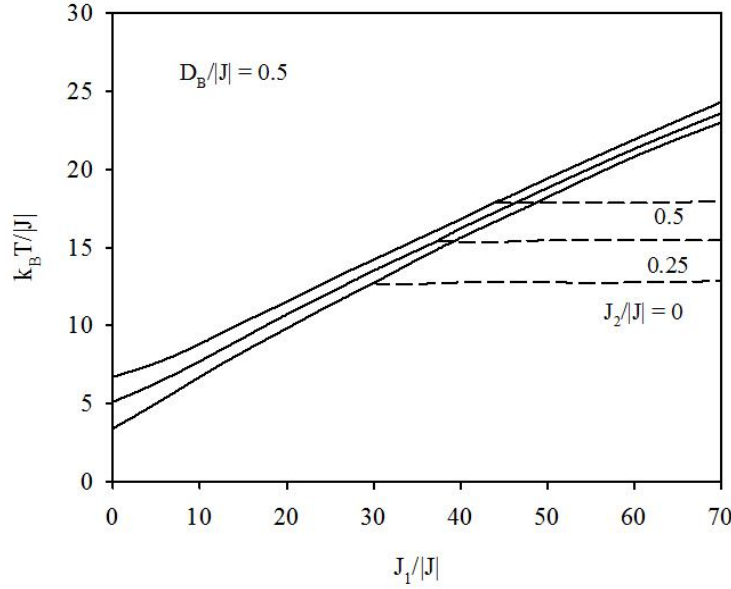
Şekil 1. $J_1 / J = J_2 / J = 0$ olduğunda, D_B / J 'nin farklı değerleri için ($D_B / J = 1, 3, 5$ ve 7) toplam manyetizasyon- sıcaklık grafiği.



Şekil 2. $D_B / J = 0.5$, $J_1 / J = 60$ ve $J_2 / J = 0.5$ değerleri için alt örgü manyetizasyonları ve toplam manyetizasyonunun sıcaklık bağılılığı.



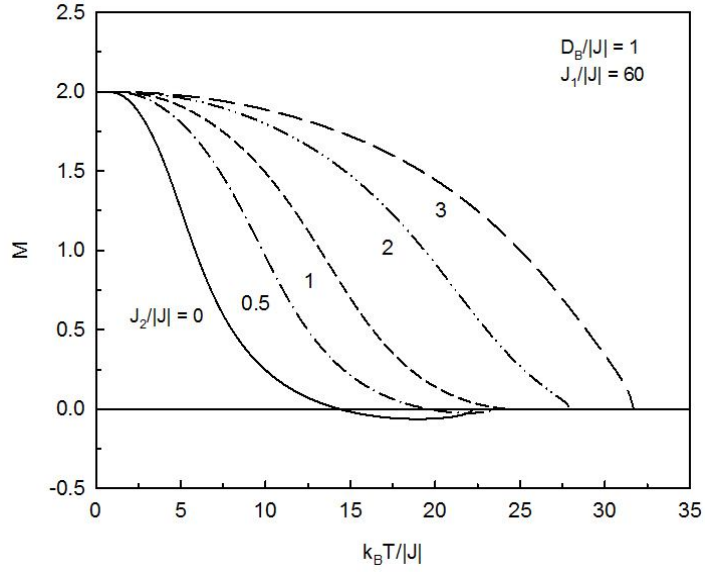
Şekil 3. $J_2/|J| = 0$ olduğunda, $J_1/|J|$ 'nin farklı değerleri için ($J_1/|J| = 40, 45, 60$) (a) $D_B/|J| = 0.5$ 'de (b) $D_B/|J| = 1.5$ 'de toplam manyetizasyon- sıcaklık grafiği.



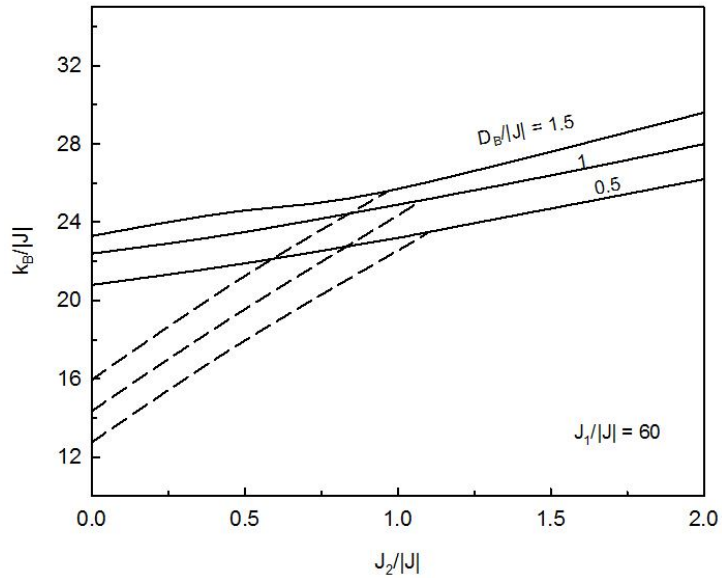
Şekil 4. $D_B/|J| = 0.5$ 'de $J_2/|J| = 0, 0.25$ ve 0.5 değerlerini aldığıında $J_1/|J|$ 'nin sıcaklığa bağılılığı. Düz çizgiler kritik sıcaklıkları, kesikli çizgiler kompensasyon sıcaklıkları göstermektedir.

B alt örgüsünün ikinci en yakın komşu etkileşimini, yani $J_2/|J|$, de dâhil edelim ve kritik sıcaklık ve kompensasyon sıcaklığı üzerine etkisini inceleyelim. Şekil 5, $J_1/|J| = 60$ olduğu zaman $D_B/|J| = 1$ için $J_2/|J| = 0, 0.5, 1, 2$ ve 3 değerlerini aldığıında toplam manyetizasyon eğrisini göstermektedir. Şekilden görüldüğü gibi, $J_2/|J|$ arttıkça kompensasyon sıcaklığı artar ve $J_2/|J| = 0$

ve 0,5 değerlerini aldığıında kompensasyon sıcaklığı varken, $J_2/|J| = 1, 2$ ve 3 değerlerini aldığıında kompensasyon sıcaklığı yoktur. Bu sonuç Şekil 6`de gösterilmektedir. Şekil 6, $J_1/|J| = 60$ için $D_B/|J| = 0.5, 1$ ve 1.5 değerlerini aldığıında $J_2/|J|$ `nin bir fonksiyonu olarak kritik sıcaklığı ve kompensasyon sıcaklığını göstermektedir. $J_2/|J|$ arttığı zaman kompensasyon sıcaklığı $J_2/|J|$ `nin maksimum bir değerine kadar kritik sıcaklığa doğru artar ve $J_{2max}/|J|$ `da kritik sıcaklık ve kompensasyon sıcaklığı özdeş olur ve bu değerden büyük $J_2/|J|$ değerleri için kompensasyon noktası kaybolur. Kompensasyon sıcaklığı ve kritik sıcaklık $J_1/|J|$ ve $J_2/|J|$ `nin artması ile artar.



Şekil 5. $J_1/|J| = 60$ olduğunda $D_B/|J| = 1$ `de $J_2/|J|$ `nin farklı değerleri için ($J_2/|J| = 0, 0.5, 1, 2$ ve 3) toplam manyetizasyon- sıcaklık grafiği.



Şekil 6. $J_1/|J| = 60$ olduğunda $D_B/|J|$ `nin farklı değerleri için ($D_B/|J| = 0.5, 1.0, 1.5$), $J_2/|J|$ `in fonksiyonu olarak kompensasyon ve kritik sıcaklık. Düz çizgiler kritik sıcaklıkları, kesikli çizgiler kompensasyon sıcaklıkları göstermektedir.

Sonuçlar ve Tartışma

Çift-zaman sıcaklık-bağımlı Green fonksiyon teorisini kullanarak, kare örgüde karma spin- $\frac{1}{2}$ ve spin- $\frac{5}{2}$ Heisenberg ferrimanyetik sistemin manyetik davranışlarını inceledik. Sadece en yakın komşu etkileşimi ve kristal alan varlığında kompensasyon sıcaklığı gözlenmez. İkinci en yakın komşu etkileşimleri dâhil ettiğimizde ise kompensasyon sıcaklığı gözlenmektedir. kompensasyon noktası, $J_2/|J| = 0$ olduğu zaman, $J_1/|J|$ 'in değişen değerleri için, $J_1/|J|$ belirli minimum bir değeri, $J_{1min}/|J|$, aştığı zaman meydana gelmektedir. $J_2/|J|$ 'de belirli değerler aldığıında, $J_2/|J|$ arttıkça kompensasyon sıcaklığı maksimum bir değerine, $J_{2max}/|J|$, kadar kritik sıcaklığa doğru artar ve ondan sonra kaybolur.

Kaynaklar

1. Néel L., **Magnetic properties of ferrites : ferrimagnetism and antiferromagnetism**, Ann. Phys. Paris 3 137 (1948).
2. Mansuripur M., **The physical principles of magneto - optical recording**, Cambridge, New York, Cambridge university press (1995)
3. Godoy M., Leite V. S., Figueiredo W., **Mixed spin Ising model and compensation temperature**, Phys, Rev. B, 69 054428 (2004).
4. Deviren B., Akbudak S., Keskin M., **Mixed spin-1 and spin-3/2 Ising system two alternative layers of a honeycomb lattice within the effective-field theory**, Solid Stat. Com., 151 193 (2011).
5. Bobak A., Pokorny V., Dely J., **Critical properties of the mixed spin-1 and spin-1/2 anisotropic Heisenberg model in the Oguchi approximation**, Physica A, 388 2157 (2009).
6. Buendia G. M., Cardona R., **Monte Carlo study of a mixed spin-3/2 and spin-1/2 Ising ferrimanyetik model**, Phys, Rev. B, 59 6784 (1999).
7. Ekiz C., **The possibility of two compensation points in a ferrimanyetik mixed spin-1 and spin-3/2 Ising system Bethe lattice approach**, J. Magn. Magn. Mater., 307 139 (2006).
8. Mills R. E., Kenan R. P., Milford F. J., **Green's function theory of ferrimagnetism with an application to magnetite**, Phys, Rev. B, 145 704 (1966).
9. J. Li, A. Du and G. Wei, **Green function study of a mixed spin-3/2 and spin-1/2 Heisenberg ferrimagnetic model**, J. Magn. Magn. Mater., 269 (2004) 410.
10. Callen H. B., **Green function theory of ferromagnetism**, Phys. Rev. 130 890 (1963).
11. Tahir-Kheli and D. ter Haar R. A., **Use of Green functions in the theory of ferromagnetism I. General discussion of the spin case**, Phys. Rev. 127 88 (1962).
12. Anderson F. B. and Callen H. B., **Statistical mechanics and field induced phase transitions of the Heisenberg antiferromagnet**, Phys. Rev. 136 A1068 (1964).
13. Devlin J. F., **Effect of crystal-field anisotropy on magnetically ordered systems**, Phys. Rev. B 4 136 (1971).
14. Li J., Du A., Wei G. Z., **Green function study of a mixed spin-2 and spin-5/2 Heisenberg ferrimagnetic system on a honeycomb lattice**, Physica Status Solidi 238 191 (2003).
15. Li J., Wei G. Z., Du A., **Compensation phenomena of a mixed spin-2 and spin-1/2 Heisenberg ferrimagnetic model: Green function study**, Physica B, 368 121 (2005).
16. Kai-Lun Y., Jian-Wen L., Zu-Li L. *et al.*, **Magnetic properties of a mixed spin-2 and spin-5/2 Heisenberg ferrimagnetic system on a two-dimensional honeycomb lattice: Green's function approach**, Communications in Theoretical Physics, 47 741 (2007).