

İki Boyutlu Dikdörtgen Örgünün Spin Şekillenimleri*

Gülistan MERT, Şevki MERT

Selçuk Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Konya

Özet: İki boyutlu dikdörtgen örgünün spin şekillenimleri mikroskopik metot kullanılarak incelendi. Dört tane direkt değişim (*exchange*) etkileşimi, üç tane süper değişim etkileşimi olmak üzere yedi tane değişim etkileşimi kullanıldı. Mümkün olan k-vektörleri ve bunlara karşılık gelen spin şekillenimleri elde edildi.

Anahtar kelimeler: Değişim Etkileşimi, k-Vektörü, Manyetik Kip, Manyetik Yapı, Mikroskopik Yöntem, Spin Şekillenimi.

Spin Configurations of Two-Dimensional Rectangular Lattice

Abstract: The spin configurations of two-dimensional rectangular lattice with seven-exchange interaction parameters (Four of these are taken as direct-exchange interactions, the other three as super-exchange interactions) have been investigated using microscopic method. Possible k-vectors and spin configurations have been obtained.

Keywords: Exchange Interaction, k-Vector, Magnetic Mode, Magnetic Structure, Microscopic Method, Spin Configuration.

Giriş

Néel [1] tarafından geliştirilen ferrimanyetizma ve antiferromanyetizmanın teorisi, manyetik iyon konumlarının alt örgülere bölünebileceği varsayımı üzerinedir. Alt örgülere ayrılmanın Heisenberg enerjisini [2] minimize ettiği gayet açık bir şekilde anlaşılmasına rağmen, spin şekillenimlerinin doğrudan Heisenberg enerjisinden elde edilmesi fikri, çok sonraları Kaplan'ın [3] krom üzerindeki helisel şekillenimler ve Yoshimori'nin [4] MnO_2 üzerindeki çalışmalarında önerildi. Bravais örgülerindeki manyetik iyonlar için ilk teori Villain [5] tarafından verildi.

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

1961'lerin başlarına gelindiğinde, en genel metot, anizotropik çiftlenimlerde dâhil olmak üzere Bertaut [8-13] tarafından bir dizi çalışmalarla ortaya kondu. Bunu takip eden yıllarda bir çok araştırmacı bu konuyla ilgilendi [15-17]. Bu metot da, kimyasal hücre ile manyetik hücrenin aynı olma zorunluluğu yoktur. Aynı zamanda kristalin simetri özellikleri oldukça önem kazanmaktadır.

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

* Bu çalışma Gülistan Mert'in Yüksek Lisans tezinden derlenmiştir.
E-mail: gmert@selcuk.edu.tr

Metot

Spinler arasında Heisenberg tipi klasik etkileşim olduğunu varsayacağız. Bu durumda Hamiltoniyen aşağıdaki gibi verilir:

$$H = -2 \sum_{RR'} J_{RR'} \mathbf{S}_R \cdot \mathbf{S}'_{R'}, \quad (1)$$

burada toplam \mathbf{R}, \mathbf{R}' üzerindedir. $J_{RR'}$, \mathbf{R} ve \mathbf{R}' konumlarındaki \mathbf{S}_R ve $\mathbf{S}'_{R'}$ spinleri arasındaki değişim etkileşimidir. Denklem (1), birim vektörler cinsinden aşağıdaki gibi ifade edilebilir:

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

Statik dengede, \mathbf{S}_R spin vektörleri $\sum_{R'} J_{RR'} \mathbf{S}'_{R'}$ 'e paralel olmalıdır. Bu nedenle \mathbf{S}_R spin vektörleri ve $\sum_{R'} J_{RR'} \mathbf{S}'_{R'}$, birbirlerine bir λ_R orantı (enerji boyutunda) katsayısı ile bağlı olmalıdır. Bu sonuç birim spin vektörler cinsinden ifade edilirse

$$\lambda_R \boldsymbol{\sigma}_R = \sum_{R'} \hat{J}_{RR'} \boldsymbol{\sigma}'_{R'}, \quad (3)$$

elde edilir.

$$J_{ij}(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \sum_{R_i, R_j} \hat{J}_{R_i R_j} \exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)] \quad (4)$$

ve

$$\mathbf{S}_i(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \sum_{R_i} \boldsymbol{\sigma}_i(\mathbf{R}_i) \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i), \quad (5)$$

dönüşümleri kullanılarak

$$\lambda_i \mathbf{S}_i(\mathbf{k}) = \sum_j J_{ij}(\mathbf{k}) \mathbf{S}_j(\mathbf{k}). \quad (6)$$

elde ederiz. Görüldüğü gibi $\mathbf{S}_i(\mathbf{k})$, \mathbf{R}_i 'deki $\boldsymbol{\sigma}_i(\mathbf{R}_i)$ birim spinin Fourier dönüşümüdür ve aynı zamanda \mathbf{R}_i ve \mathbf{R}_j 'deki spinler arasındaki değişim etkileşimi olan $J_{ij}(\mathbf{k})$, $\hat{J}_{R_i R_j}$ 'nin Fourier dönüşümüdür. N, kristaldeki birim hücrelerin toplam sayısıdır.

Denklem (6) matris formunda ifade edilebilir:

$$(J(\mathbf{k}) - \lambda) \mathbf{S}(\mathbf{k}) = 0, \quad (7)$$

burada $J(\mathbf{k})$, matris elemanları Denklem (4) ile tanımlanan n mertebeli hermityen bir matristir. λ , elemanları $\lambda_i \delta_{ij}$ olan köşegen bir matristir. $\mathbf{S}(\mathbf{k})$, bileşenleri $S_i(\mathbf{k})$ ($i = 1, 2, \dots, n$) olan n bileşenli bir sütun vektörüdür. $\mathbf{S}_i(\mathbf{k})$ 'nin ters Fourier dönüşümü aşağıdaki gibidir:

$$\sigma_i(\mathbf{R}_i) = \frac{1}{N} \sum_k \mathbf{S}_i(\mathbf{k}) \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i). \quad (8)$$

Eğer $S(\mathbf{k})$ bir çözümdür, $J(\mathbf{k})$ matrisinin hermityen doğasından dolayı $S(-\mathbf{k})$ da bir çözümdür. Sadece bir tane yayılma vektörü ($\pm \mathbf{k}_o$) olduğunu varsayacağız. Bu varsayımdan ve her \mathbf{R}_i için

$$[\sigma_i(\mathbf{R}_i)]^2 = 1, \quad (9)$$

şartından

$$S_i^2(\mathbf{k}_o) = 0 \quad \mathbf{k}_o \neq 0 \quad (10)$$

elde ederiz. $S_i(\mathbf{k}_o)$ kompleksdir. Denklem (10) 'in basit bir çözümü aşağıdaki gibi verilir:

$$S_i(\mathbf{k}_o) = \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{x}} + i\hat{\mathbf{y}}) \exp(-i\varphi_i), \quad (11)$$

burada $\hat{\mathbf{x}}$ ve $\hat{\mathbf{y}}$, dik birim vektörlerdir, φ_i faz açısıdır. Sırayla \mathbf{R}_1 ve \mathbf{R}_2 konumlarındaki ve i ve j alt örgülerine ait iki $\sigma_i(\mathbf{R}_1)$ ve $\sigma_j(\mathbf{R}_2)$ spin vektörlerin skaler çarpımı aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$\sigma_i(\mathbf{R}_1) \cdot \sigma_j(\mathbf{R}_2) = \cos \Theta_{ij}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2), \quad (12)$$

burada $\Theta_{ij}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$, $\sigma_i(\mathbf{R}_1)$ ve $\sigma_j(\mathbf{R}_2)$ spinleri arasındaki açıdır. (8) ve (11) Denklemleri kullanılarak,

$$\Theta_{ij}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = 2\pi \mathbf{k}_o \cdot (\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2) + \varphi_{ij}, \quad (13)$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada

$$\varphi_{ij} = \varphi_i - \varphi_j \quad (14)$$

sadece i ve j alt örgüsüne bağlı olan faz farkıdır.

Denklem (13) 'deki faz açısı, Denklem (14) deki faz farkı ve \mathbf{k}_o ve \mathbf{R}_2 vektörleri sabit olsun. Bu durumda, Denklem (13), \mathbf{k}_o ve \mathbf{R}_1 'in hareket ettiği düzleme dik olan bir Π düzlemi tanımlar. İlginç özelliklerden biri, nötron kırınımı ile çözülen manyetik yapıların büyük çoğunluğun da bir alt örgünün spinlerinin hepsinin verilen bir spinle aynı fazda olduğu Π düzlemlerinin mevcut olmasıdır.

Teorik incelemeler için, birinci Brillouin bölgesine indirgenen \mathbf{k} vektörlerini kullanmak yararlı olur. Kimyasal ve manyetik hücreler özdeş olduğu zaman $\mathbf{k} = 0$ vektörü göz önüne alınabilir. Bundan sonra farklı Bravais örgülerinin sayısı n olmak üzere, problem $n-1$ tane φ_i fazını bulmaya indirgenir. Ancak bu durumda birinci Brillouin bölgesine indirgenmemiş bir \mathbf{k} vektörünü göz önüne almak kolaylık sağlayabilir. Örneğin; ferritlerin klasik Néel şekillenimi $\mathbf{k} = 0$ kipi olarak altı-bileşenli bir $S(0) = (1, 1, -1, -1, -1, -1)$ vektörü ile veya bir $S(\mathbf{k}) = (1, 1, 1, 1, 1, 1)$ kipi olarak bir $\mathbf{k} = [444]$ (veya $[400]$ olarak) yayılma vektörü ile tanımlanabilir. Her iki yaklaşımda faydalıdır. Birincisinde ($\mathbf{k} = 0$), $J(\mathbf{k})$ matrisi gerçeldir; $J_{ij}(0)$ matris elemanlarını, koordinat sayısı ile değişim integralinin çarpımı oluşturur. $\sigma(\mathbf{R}_i)$ spinleri ve $S_i(0)$ Fourier bileşenleri de özdeş alınabilir. İkincisinde, $\mathbf{k} = [hkl] \neq 0$ yayılma vektörü, spinlerin paralel veya aynı fazda olduğunu (h, k, l) kristal düzlemleri gösterir.

Denklem (5), düzenli örgüde, eğer $T(0) \neq 0$ olursa, ferromanyetizmanın mümkün olduğunu gösterir. Eğer $\mathbf{k} \neq 0$ olursa ve orijine indirgenemezse, ferromanyetizma yoktur [9].

n eşdeğer atom durumunda, $\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_n = \lambda$ olur. $n = 1$ yani tek Bravais örgüsünün olduğu özel durum Villain tarafından daha önce çalışılmıştır. Bu durumda, Denklem (7) 'deki matris sistemi, tek bir denkleme indirgenir. $n \geq 0$ durumunda, Denklem (7), basit bir özdeğer denklemine indirgenir. n tane spin kipi, yani n tane λ^p özdeğeri ve n tane $S^p(\mathbf{k})$ ($p = 1, \dots, n$; p bir üst indistir.) özvektörü vardır. \mathbf{k} 'nin bir fonksiyonu olarak tek bir λ kökü bulmak ve λ 'yı maksimum yapılarak tüm mümkün spin şekillenimlerini üretmek yeterli olacaktır.

\mathbf{R}_{j0} ($i = 1, \dots, n$), n tane farklı manyetik atomların referans konumları yani kimyasal birim hücrede n tane Bravais örgülerinin orijinleri olsun. Matris elemanlarını koordinatlardan bağımsız yapmak için aşağıdaki dönüşüm yapalım:

$$\mathbf{Q}_j(\mathbf{k}) = \mathbf{S}_j(\mathbf{k}) \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{j0}). \quad (15)$$

Böylece (7) matris denklemi aşağıdaki gibi dönüşmüş olur:

$$(\eta(\mathbf{k}) - \lambda) \mathbf{Q}(\mathbf{k}) = 0, \quad (16)$$

burada $\eta(\mathbf{k})$ matris elemanları aşağıdaki gibi verilen hermitiyen bir matristir.

$$\eta_{ij} = \sum_{R_j} \hat{J}_{R_i R_j} \exp[2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{j0} - \mathbf{R}_j)]. \quad (17)$$

Her iki \mathbf{R}_{j0} ve \mathbf{R}_j vektörü aynı j Bravais örgüsüne ait olduğundan, yukarıdaki ifade de $\mathbf{R}_{j0} - \mathbf{R}_j$ faz farkının öteleme grubunun τ vektörü olduğu görülebilir. Bu gerçek, $\mathbf{Q}(\mathbf{k})$ özvektörlerinin ve λ özdeğerlerinin açık olarak atomik koordinatlara neden bağlı olmadığını açıklar.

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

$$\sigma_j(\mathbf{R}_{j0}) = \mathbf{Q}_j(\mathbf{k}) + \mathbf{Q}_j^*(\mathbf{k}) \quad (18)$$

Eğer $\mathbf{Q}_j(\mathbf{k})$, gerçelse, $\sigma_j(\mathbf{R}_{j0})$ ile özdeş alınabilir. Denklem (15) 'yı Denklem (18) 'da yerine yazarak

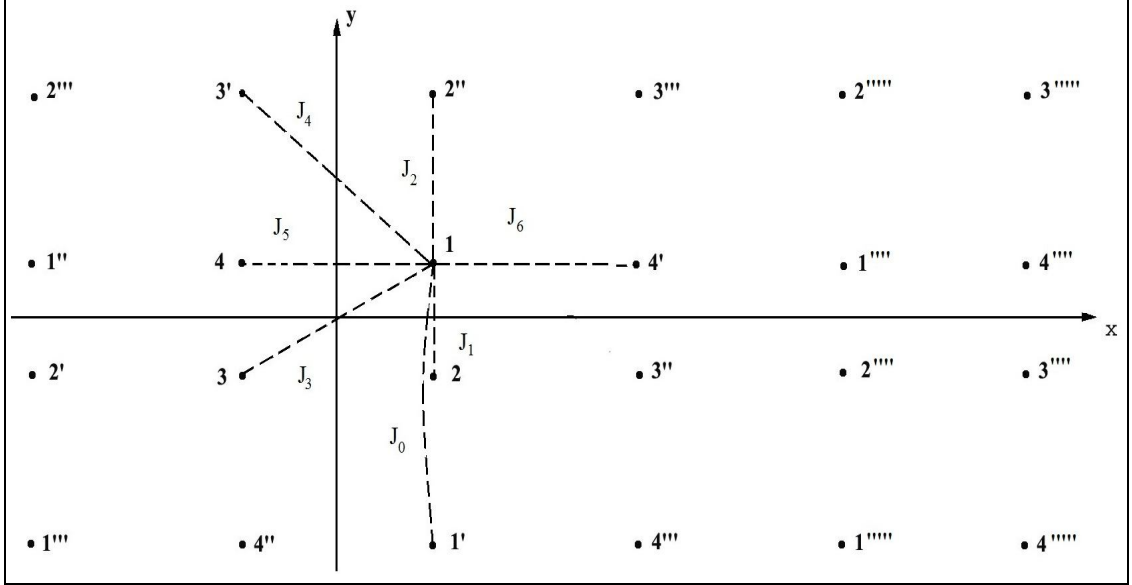
$$\sigma_j(\mathbf{R}_{j0}) = \mathbf{S}_j(\mathbf{k}) \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{j0}) + \mathbf{S}_j^*(\mathbf{k}) \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{j0}) \quad (19)$$

elde ederiz. Son olarak Denklem (11) 'yi Denklem (19) de yerine yazarak

$$\sigma_j(\mathbf{R}_{j0}) = \hat{\mathbf{x}} \cos(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{j0} + \varphi_j) + \hat{\mathbf{y}} \sin(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{j0} + \varphi_j) \quad (20)$$

elde ederiz. Bu spin doğrultularını bulmak için teorinin temel denklemdir.

Gözönüne aldığımız örgü, Şekil 1 'de gösterildiği gibi dört tane alt örgüden oluşmaktadır. Alt örgüler 1, 2, 3, 4 olarak etiketlenmiştir. 1 atomunun konumu (x, y) dir.



Şekil 1. Dört alt örgülü ve değişim parametrelili iki boyutlu dikdörtgen örgü.

Örgüdeki atomların her biri diğeriyle yedi tane farklı değişim etkileşimi ile etkileştiği varsayılır. Örneğin eğer 1 ve 4 yerlerinde Mn^{++} katyonu ve orijinde oksijen anyonu varsa 1 ve 3 iyonları veya 2 ve 4 iyonları arasındaki J_3 integrali 180 derecelik süper değişim integrali olduğu için büyük ve negatif olacaktır. Bu durumda $|J_3| > |J_1|$ ve $|J_3| > |J_2|$ olacaktır. Burada J_0 ; 1 ve 1' atomları arasındaki, J_1 ; 1 ve 2 atomları arasındaki, J_3 ; 1 ve 3 atomları arasındaki, J_5 ; 1 ve 4 atomları arasındaki direkt değişim etkileşim sabitidir. J_2 ; 1 ve 2'' atomları arasındaki, J_4 ; 1 ve 3' atomları arasındaki, J_6 = 1 ve 4' atomları arasındaki süper-değişim etkileşim sabitidir.

Denklem (17) ile tanımlanan dönüşüm kullanılarak, matris elemanları aşağıdaki gibi elde edilir:

$$\begin{aligned}
 \eta_{11} &= 2J_0 \cos(2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}) \\
 \eta_{12} &= J_1 + J_2 \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}) \\
 \eta_{13} &= J_3 + J_4 \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}) \\
 \eta_{14} &= J_5 + J_6 \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{a})
 \end{aligned} \tag{21}$$

η matrisi

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

olur. Burada * kompleks eşlenik operatörünü gösterir. Denklem (22) deki matrisin özvektör ve özdeğerlerini bulmalıyız. Bu homojen denklem sisteminin çözümü aşağıdaki şartların sağlanmasına bağlıdır:

$$\det |\eta - \lambda I| = \begin{vmatrix} A-\lambda & B & C & D \\ B^* & A-\lambda & D & C^* \\ C^* & D^* & A-\lambda & B^* \\ D^* & C & B & A-\lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (23)$$

Nümerik olarak λ_i ($i = 1, 2, 3, 4$) değerlerini, direkt ve süper-değişim parametrelerinin bir fonksiyonu olarak belirledik. Aynı zamanda aşağıdaki denklemden, iki tane k -vektörü belirledik: $k_1 = [0, 0]$, $k_2 = [0.5, 0.5]$.

$$\frac{\partial \lambda_1}{\partial h} = 0, \quad \frac{\partial \lambda_1}{\partial k} = 0. \quad (24)$$

Her bir $k = [h, k]$ vektörü için, Denklem (16) yeniden çözülür. Böylece elde edilen özvektörler Tablo 1`de verilmiştir. Taban ve uyarılmış durum için, Denklem (11) ile elde edilen Bravais örgüsünün fazları Tablo 2`de verilmiştir.

Tablo 1. k_1 ve k_2 için elde edilen özdeğerler ve özvektörler.

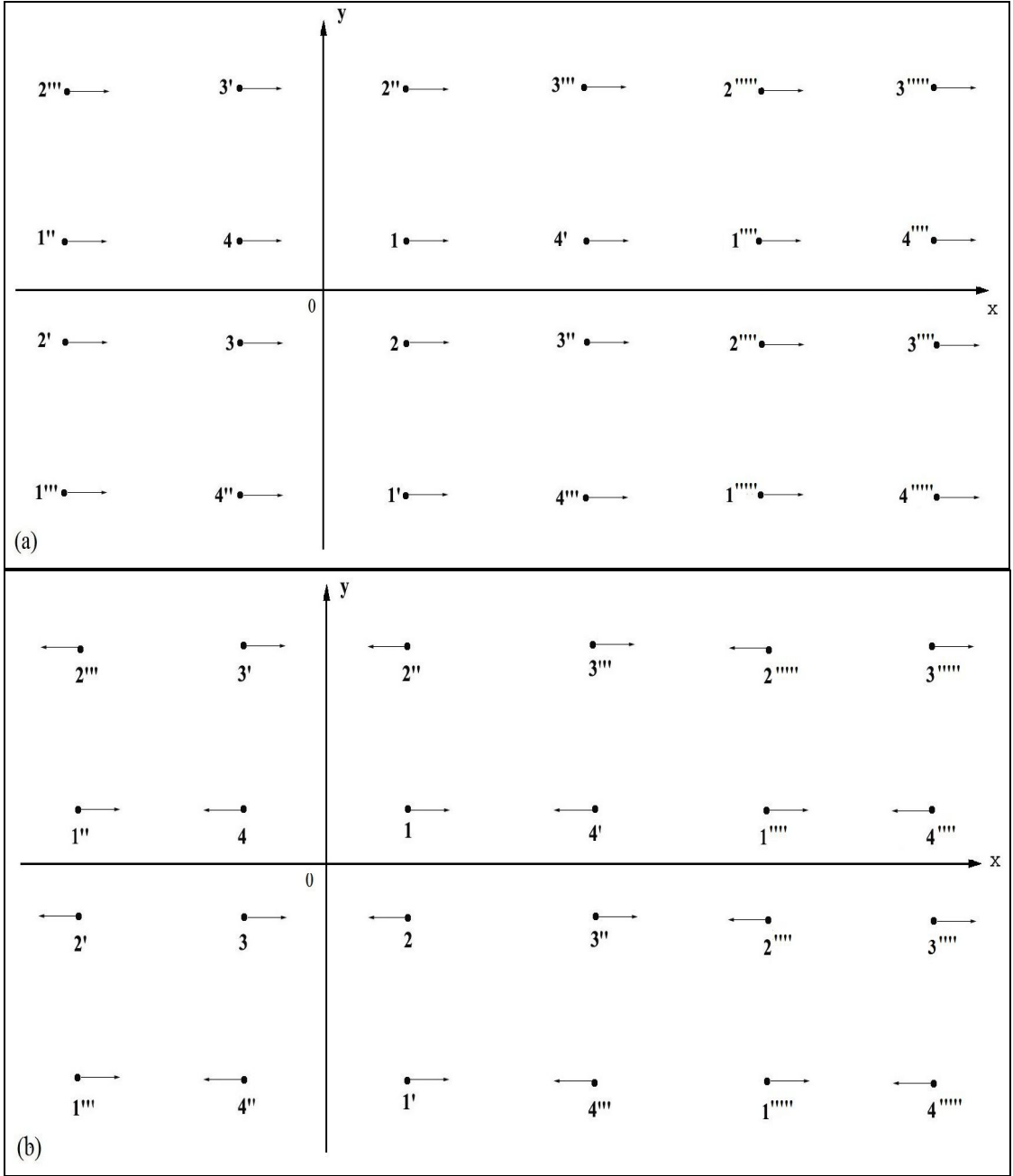
$k_1 = [0, 0]$	$\lambda_1(k_1) = 0.026$	$Q_1(k_1) = [\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ -\frac{1}{2} \ -\frac{1}{2}]$
	$\lambda_2(k_1) = -0.004$	$Q_2(k_1) = [\frac{1}{2} \ -\frac{1}{2} \ -\frac{1}{2} \ \frac{1}{2}]$
	$\lambda_3(k_1) = -0.010$	$Q_3(k_1) = [\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2}]$
	$\lambda_4(k_1) = -0.012$	$Q_4(k_1) = [\frac{1}{2} \ -\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ -\frac{1}{2}]$
$k_2 = [0.5, 0.5]$	$\lambda_1(k_2) = 0.08$	$Q_1(k_2) = [\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2}]$
	$\lambda_2(k_2) = -0.038$	$Q_2(k_2) = [\frac{1}{2} \ -\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ -\frac{1}{2}]$
	$\lambda_3(k_2) = -0.018$	$Q_3(k_2) = [\frac{1}{2} \ -\frac{1}{2} \ -\frac{1}{2} \ \frac{1}{2}]$
	$\lambda_4(k_2) = -0.024$	$Q_4(k_2) = [\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ -\frac{1}{2} \ -\frac{1}{2}]$

Tablo 2. k_1 ve k_2 vektörlerine karşılık gelen faz açıları.

$k_1 = [0, 0]$	$\lambda_4(k_1) = -0.012$	$\varphi_1 = 0$	$\varphi_2 = \pi$	$\varphi_3 = 0$	$\varphi_4 = \pi$
	$\lambda_3(k_1) = -0.010$	$\varphi_1 = 0$	$\varphi_2 = 0$	$\varphi_3 = 0$	$\varphi_4 = 0$
$k_2 = [0.5, 0.5]$	$\lambda_2(k_2) = -0.038$	$\varphi_1 = 0$	$\varphi_2 = \pi$	$\varphi_3 = 0$	$\varphi_4 = \pi$
	$\lambda_4(k_2) = -0.024$	$\varphi_1 = 0$	$\varphi_2 = 0$	$\varphi_3 = \pi$	$\varphi_4 = \pi$

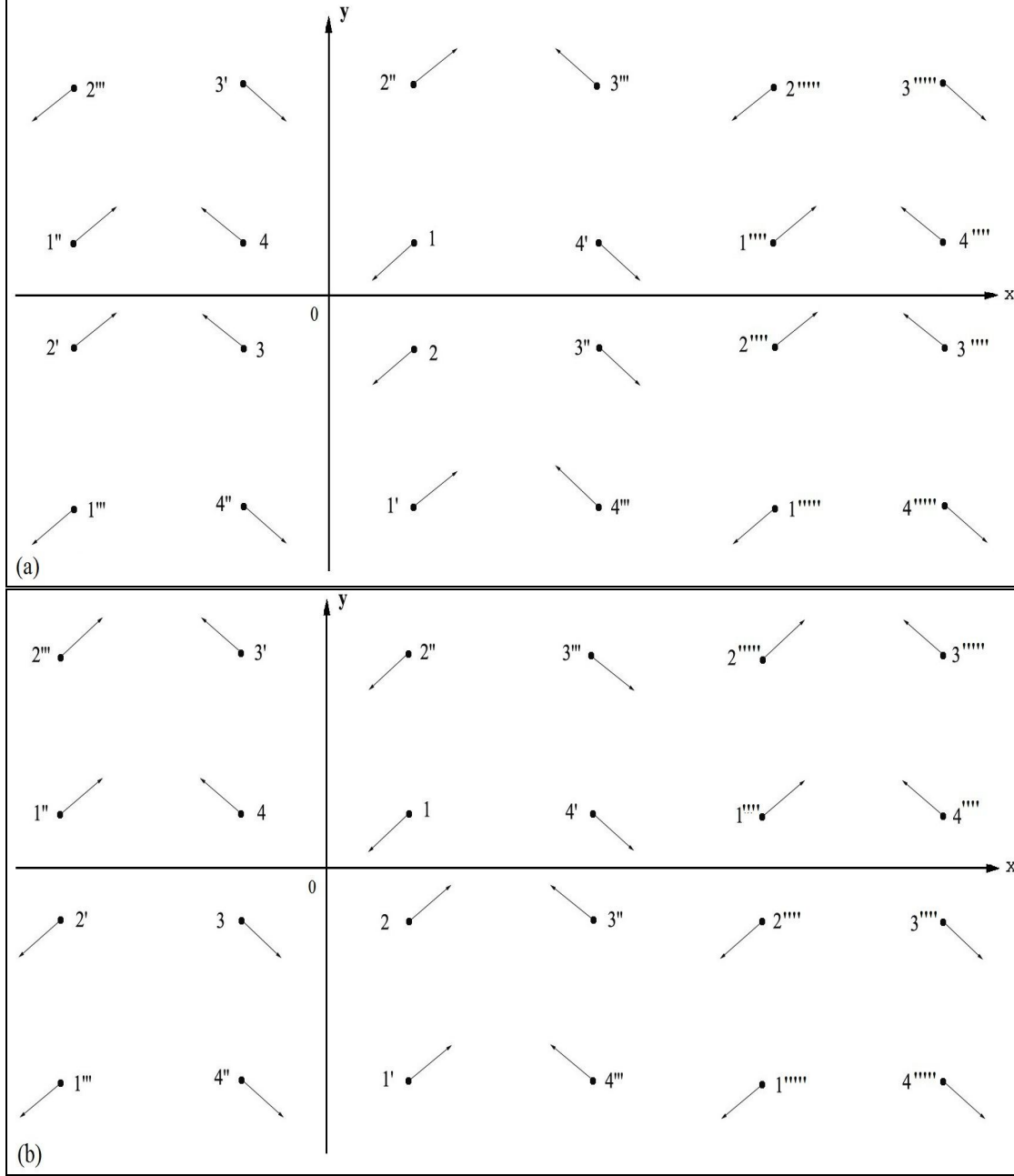
Tablo 2`de verilen k -vektörleri ve faz açıları kullanılarak, her bir spinin yönelimi ve alt örgülerin taban ve uyarılmış durumlarının spin şekillenimleri elde edilir. Elde edilen sonuçlar Şekil 2 ve Şekil 3`de gösterilmiştir.

Şekil 2, $k_1 = [0, 0]$ dalga vektörü için taban ve birinci uyarılmış durum için spin şekillenimlerini göstermektedir. Şekilden görüldüğü gibi, spin şekillenimleri kolineer yapıdadır ve spin şekillenimlerinin periyodu kristal örgünün periyodu ile aynıdır. Şekil 2(a)`da spin şekillenimi Koehler sınıflandırma şemasına [14] göre F-tipi ferromanyetizmadır. k -dalga vektörleri sıfırdır. Bu, manyetik ve kimyasal hücrenin özdeş olduğu anlamına gelir. Şekil 2(b)`de, G-tipi spin şekillenimi elde ederiz.



Şekil 2. $k_1 = [0, 0]$ dalga vektörü için (a) taban (b) birinci uyarılmış durum spin şekillenimi.

Şekil 3, $k_2 = [0.5, 0.5]$ dalga vektörünün taban ve birinci uyarılmış durum için spin şekillenimlerini göstermektedir. Lineer olmayan yani bükümlü (*canted*) spin şekillenimi elde edilir. Hem x- hem de y- doğrultusunda spin şekillenimin periyodu kimyasal hücrenin iki katıdır, manyetik hücrenin kimyasal hücrenin iki katı olduğu anlamına gelir.



Şekil 3. $k_1 = [0.5, 0.5]$ dalga vektörü için (a) taban (b) birinci uyarılmış durum spin şekillenimi.

Sonuçlar ve Tartışma

Bu çalışmada, ana hatları açıklanan mikroskopik yöntem, dört alt örgüye bölünen iki boyutlu dikdörtgen örgüye uygulandı. Bu özel durum için, değişim parametrelerini aşağıdaki gibi alırsınız: $J_0 = 0$, $J_1 = 0.018$, $J_2 = -0.01$, $J_3 = 0.005$, $J_4 = -0.016$, $J_5 = 0.012$ ve $J_6 = -0.019$. Örgüdeki atomların yedi farklı değişim etkileşimi ile etkileştikleri varsayıldı. Bunların dört tanesi direkt değişim, diğer üç tanesi süper değişim olarak alınmıştır. (örneğin, 1 ve 4' atomların süper değişim olarak etkileştiği varsayılır.) Literatürde bu değişim etkileşimlerinin hesabı oldukça zor

olduğundan gerçeğe yakın sayısal değerler kullanılmıştır. Değişim etkileşimlerinin bu seçilen değerleri altında, özdeğerler, h ve k 'nin fonksiyonu olarak elde edildi. Özdeğer fonksiyonlarının h ve k 'ya göre türevlerinin sıfır olması koşulundan hareketle örgüde mümkün olabilen iki tane k dalga vektörü sayısal olarak elde edildi. Bulunan her bir k dalga vektörü için özvektörler elde edildi. Bulunan bu özvektörler yardımıyla taban durumu ve birinci uyarılmış durum için Bravais örgülerinin faz açıları bulundu. Bu fazlar kullanılarak her bir kip için örgüdeki bütün spinlerin yönleri ve şekillenimleri belirlendi. Uyarılmış durumda bazı Bravais alt örgülerinin spinlerinin yön değiştirdiği tespit edildi.

Bu çalışmada kolineer kipler ve kolineer kiplerden biraz sapma gösteren ve bükümlü spin kipleri adı verilen kipler bulunmuştur. Kolineer olmayan yani helisel kipler bulunamamıştır. Ancak bu kiplerin de mevcut olabileceğini düşünmekteyiz. Bu durum gayet anlaşılabilir bir durumdur çünkü şimdiye kadar nötron kırınımı ile deneysel olarak çözülen yapıların yüzde doksandan fazlası kolineer ve bükümlü bir yapı arz etmektedir.

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

Mikroskopik metodun verdiği sonuçlar grup teorisinin sonuçlarıyla uyum içerisindedir. Grup teorisinden hangi kiplerin çiftlenim yaptığı tespit edilebilmekte ve bu yolla spin şekillenimleri bulunabilmektedir. Bu şekilde grup teorisinden de yararlanılarak spin şekillenimleri bulunabilmektedir. Grup teorisinden yararlanılarak bulunan spin şekillenimleri, mikroskopik metod ile bulunan spin şekillenimleri ile uyum içinde olduğu gözlenmektedir.

Kaynaklar

1. Néel L., **Magnetic properties of ferrites: ferrimagnetism and antiferromagnetism**, Ann. Phys. Paris 3 137 (1948).
2. Heisenberg W., **Zur Theorie des Ferromagnetismus**, Z. Physik, 49 619 (1928).
3. Kaplan T. A., **Classical spin configuration stability in the presence of competing exchange forces**, Phys. Rev., 116 888 (1959).
4. Yoshimori A., **A new type of antiferromagnetic structure in the rutile type crystal**, J. Phys. Soc. Japan, 14 (1959) 807.
5. Villain J., **La structure des substances magnetiques**, J. Phys. Chem. Solids, 11 (1959) 103.
6. Dzialoshinski I. E., **A thermodynamic theory of weak ferromagnetism of antiferromagnetism**, J. Phys. Chem. Solids, 4 (1958) 241.
7. Turov E. A. and Nays V. E., J. Met. USSR., 9 10 (1960).
8. Bertaut E. F., **Magnétisme - Configurations magnetiques**, Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, 252 76 (1961).
9. Bertaut E. F., **Magnétisme**, Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, 252 2032 (1961).
10. Bertaut E. F., **Magnétisme - Configurations de spins dans le cas général**, Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, 252 2078 (1961).
11. Bertaut E. F., **Magnétisme - Configurations de spins**, Comptes Rendus de l'Académie des Sciences., 252 85 (1961).
12. Bertaut E. F., **Magnétisme - Configurations colinéaires de spins dans les structures du type corindon**, Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, 252 252 (1961).
13. Bertaut E. F., J. Phys. Radium, **Spin configurations and group theory. Configurations de spin et théorie des groupes**, 22 321 (1961).

14. Koehler W. C., Wollan E. O. and Wilkinson M. K., **Neutron diffraction study of the magnetic properties of rare-earth-iron perovskites**, Phys. Rev., 118 (1960) 58.
15. Wintenberger M., **Structure magnetique de Fe₂Te₃O₉ a 4.2 K**, Phys. Stat. Sol. (a), 68 11 (1981).
16. Darendeliođlu H. Ő. and Yüksel H., **Spin configuration of 2-dimensional orthorhombic lattice**, J. Phys. Chem Solids 54 1599 (1993).
17. Darendeliođlu H. Ő., **Magnetization process in honeycomb lattice**, Scrip. Met. et Mater., 33 1825 (1995).