# T.C. NEVŞEHİR HACI BEKTAŞ VELİ ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

# KARMA SPİN-1/2 VE SPİN-1 ISING NANOTÜP SİSTEMİNİN DİNAMİĞİ

Tezi Hazırlayan Barış REÇBER

Tez Danışmanı Doç. Dr. Bayram DEVİREN

> Fizik Anabilim Dalı Yüksek Lisans Tezi

> > KASIM 2017 NEVŞEHİR

# T.C. NEVŞEHİR HACI BEKTAŞ VELİ ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

# KARMA SPİN-1/2 VE SPİN-1 ISING NANOTÜP SİSTEMİNİNDİNAMİĞİ

Tezi Hazırlayan Barış REÇBER

Tez Danışmanı Doç. Dr. Bayram DEVİREN

> Fizik Anabilim Dalı Yüksek Lisans Tezi

> > KASIM 2017 NEVŞEHİR

Doç. Dr. Bayram DEVİREN danışmanlığında Barış REÇBER tarafından hazırlanan **''Karma Spin-1/2 ve Spin-1 Ising Nanotüp Sisteminin Dinamiği''** başlıklı bu çalışma, jürimiz tarafından Nevşehir Hacı Bektaş Veli Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında **Yüksek Lisans Tezi** olarak kabul edilmiştir.

06/11/2017

JÜRİ

Başkan

:

:

:

Doç. Dr. Ali YİĞİT

Üye

Doç. Dr. Bayram DEVİREN

Üye

Yrd. Doç. Dr. Şeyma AKKAYA DEVİREN

#### ONAY:

Bu tezin kabulü Enstitü Yönetim Kurulunun. **2/11.1.2.0.1**. tarih ve. **5.0.-440**.. sayılı kararı ile onaylanmıştır.



# TEZ BİLDİRİM SAYFASI

Tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada yer alan bütün bilgilerin bilimsel ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu ve bana ait olmayan her türlü ifade ve bilginin kaynağına eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

Barış REÇBER

Bu çalışma Nevşehir Hacı Bektaş Veli Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Koordinasyon Birimi tarafından NEÜLÜP16/F3 numaralı yüksek lisans projesiyle desteklenmiştir.

# TEŞEKKÜR

Tez çalışmamın tamamlanmasında emek ve yardımını esirgemeyen ve çalışmalarım süresince değerli fikir ve tecrübeleri ile şahsıma büyük destek sağlayan saygıdeğer hocam Doç. Dr. Bayram DEVİREN' e sonsuz teşekkür ederim.

Ayrıca tez çalışmam sırasında değerli görüş ve yardımlarını gördüğüm Doç. Dr. Ali YİĞİT, Yrd. Doç. Dr. Şeyma AKKAYA DEVİREN hocalarıma ve Dr. Filiz KUZU ARICAK ve Sami EYİCİ arkadaşlarıma teşekkür aderim.

Çalışmalarım süresince, bana maddi ve manevi yönden desteklerini hiç eksik etmeyen anneme, babama ve kardeşime en içten dileklerimle teşekkürlerimi sunarım.

Teknik ve idari yardımlarından dolayı Nevşehir Hacı Bektaş Veli Üniversitesi Rektörlüğü'ne Fen- Edebiyat Fakültesi Dekanlığıa Fizik Bölüm Başkanlığı'na veNevşehir Hacı Bektaş Veli Üniversitesi BAP Birimi'ne teşekkür ederim.

## KARMA SPİN-1/2 VE SPİN-1 ISING NANOTÜP SİSTEMİNİN DİNAMİĞİ

#### (Yüksek Lisans Tezi)

#### **Barış REÇBER**

# NEVŞEHİR HACI BEKTAŞ VELİ ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

#### Kasım 2017

## ÖZET

Zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında öz-kabuk yapısına sahip karma spin (1/2, 1) Ising nanotüp sisteminindinamik manyetik özellikleri (faz geçiş sıcaklıkları, faz diyagramları, histeresisdöngü alanları, dinamik korelasyondavranışları), ortalama alan yaklaşımı (OAY) veGlauber-tipi stokhastik dinamik kullanılarak incelendi. Ising nanotüp sisteminin kararlı fazlarını elde etmek için düzen parametrelerinin zamana bağlı davranışları çalışıldı. Dinamik faz geçişlerinin doğasını (birinci veya ikinci dereceden) karakterize etmek vedinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıklarını elde etmek için dinamik düzen parametrelerinin, histeresis döngü alanlarının ve korelasyonların davranışı sıcaklığın bir fonksiyonu olarak incelendi. Sistemin manyetik alan genliği ve sıcaklık düzleminde dinamik faz diyagramları sunuldu. Karma spin (1/2, 1) Ising nanotüp sisteminin dinamik manyetik özelliklerinin etkileşme parametrelerine kuvvetli bir şekilde bağlı olduğu gözlendi. Dinamik faz diyagramlarının, paramanyetik (p), ferrimanyetik (i), manyetik olmayan (nm) temel fazlar yanısıra temel fazların birlikte olduğu i+p, i+nm, nm+p ve i+nm+ p dört karma faz bölgeleri gözlemlendi. Dinamik faz diyagramlarının birinci- ve ikinci-derece faz geçiş sıcaklıklarının yanında, dinamik üçlü kritik nokta ve dörtlü kritik nokta gibi özel dinamik kritik noktaları sergilediği görüldü.

Anahtar Kelimeler: Nanotüp; Ising model; Karma spin sistemi; Ortalama alan yaklaşımı; Glauber-tipi stokhastik dinamik. Tez Danışman: Doç. Dr. Bayram DEVİREN Sayfa Adeti: 67

#### **DYNAMICS OF SPIN-1/2 AND SPIN-1 ISING NANOTUBE SYSTEM**

#### (Yüksek Lisans Tezi)

#### **Barış REÇBER**

## NEVŞEHİR HACI BEKTAŞ VELİ ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

#### Kasım 2017

#### ABSTRACT

The nonequilibrium magnetic properties (phase transition temperatures, phase diagrams, hysteresis loop areas and dynamic correlations) are studied, within a mean-field approach, (MFA) in the kinetic mixed spin (1/2, 1) Ising nanotube system with coreshell structure under the presence of a time varying (sinusoidal) magnetic field by using the Glauber-type stochastic dynamics. The time-dependence behavior of order parameters and the behavior of average order parameters in a period, which is also called the dynamic order parameters, as a function of temperature, are investigated. Temperature dependence of the dynamic magnetizations, hysteresis loop areas and correlations are investigated in order to characterize the nature (first- or second-order) of the dynamic phase transitions as well as to obtain the dynamic phase transition temperatures. We present the dynamic phase diagrams in the magnetic field amplitude and temperature plane. The phase diagrams also contain paramagnetic (p), ferrimagnetic (i), nonmagnetic (nm) phases, four coexistence or mixed regions, i+p, i+nm, nm+p andi+nm+ p, which strongly depend on interaction parameters. The phase diagrams also exhibit first- and second-order phase transitions as well as a dynamic tricritical point and quadruple point.

Keywords: Nanotube; Ising model; Mixed spin system; Mean-field approach; Glauber-type stochasticdynamic. Tez Danışman: Doç. Dr. Bayram DEVİREN Sayfa Adeti: 67

• •	•
ICINID	ELUI ED
IVIII	
3 .	

ONAY SAYFASIi
TEZ BİLDİRİM SAYFASIii
TEŞEKKÜRiii
ÖZET
ABSTRACTv
İÇİNDEKİLERvi
BÖLÜM 1
GİRİŞ1
BÖLÜM 2
METOT VE MODELİN TANITIMI
2.1. Model
2.2. Glauber Dinamiği ve Ortalama-Alan Dinamik Denklemlerinin Elde Edilmesi12
BÖLÜM 3
KARMA SPİN (1/2, 1) ISING NANOTÜP SİSTEMİNİN NÜMERİK ÇÖZÜMÜ
3.1. Ortalama Alt Örgü Mıknatıslanmalarının Zamanla Değişimi
3.2 Dinamik Düzen Parametreleri ve Dinamik Faz Geçiş Noktaları
3.3. Dinamik mıknatıslanmalar, histeresis döngüsü alanları ve korelasyonlarıntermal
davranışı
3.4.(T/J <sub>C</sub> , h/J <sub>C</sub> )Düzleminde Dinamik Faz Diyagramları
BÖLÜM 4
SONUÇ VE TARTIŞMA44
KAYNAKLAR
ÖZGEÇMİŞ

#### ŞEKİLLER LİSTESİ

- - Şekil 3.3 Δ<sub>S</sub> = 0.0, r = 1.0, d = -4.0 ve h =0.75 değerleri için M<sub>α</sub>, A<sub>α</sub>, C<sub>α</sub>'nın sıcaklığa bağlı davranışı. T<sub>C</sub>/J<sub>C</sub>= 0.95 manyetik olmayan (nm) fazdan paramanyetik
    (p) faza ikinci-derece faz geçiş sıcaklığını göstermektedir......27

  - Şekil 3.6  $\Delta_S = 0.0$ , r = 1.0, d = -3.3 ve h = 0.5 değerleri için M<sub>a</sub>, A<sub>a</sub> ve C<sub>a</sub>'nin sıcaklığa bağlı davranışları. (a) m<sub>C</sub>=0.5, m<sub>S1</sub>=m<sub>S2</sub>=1.0 başlangıç değerleri, (b) m<sub>C</sub>=0.5, m<sub>S1</sub>=m<sub>S2</sub>=0.0 başlangıç değerleri için elde edilmiştir. T<sub>t</sub>/J<sub>C</sub> = 0.300

- Şekil 3.14 Karma spin(1/2, 1) Ising nanotüp sisteminde d= -3.4 değeri için (T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>) düzlemindedinamik faz diyagramı......40
- Şekil 3.16 Karma spin(1/2, 1) Ising nanotüp sisteminde d= -5.0 değeri için (T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>) düzleminde dinamik faz diyagramı......42

## BÖLÜM 1

#### GİRİŞ

Bir malzemenin sahip olduğu manyetik, optik, mekanik, kimyasal, elektrik ve termal özellikleri, ilgili malzemenin çeşitli doğrultularda nanometre düzeyinde küçültüldüğünde çarpıcı şekilde değişmektedir[1]. Boyutlar nanometre ölçeğine indirgendiğinde malzemenin fiziksel özellikleri kuantum mekaniğinin kontrolüne girmekte, elektron durumlarının fazı ve enerji spektrumunun kesikli ve süreksiz yapısı daha belirgin hal almaktadır. Teknolojinin gelişmesiyle birlikte nano ölçülerin incelenmesine imkan sağlayan Atomik kuvvet mikroskobu (AFM), Taramalı elektron mikroskobu(SEM), Taramalı tünelleme mikroskobu(STM) ve Manyetik kuvvet mikroskobu(MFM) gibi gelişmiş mikroskopların ve Mössbauer Spekrometresi gibi gelişmiş spektrometrelerin üretilmesiyle beraber nano ölçülerdeki malzemeler hakkında detaylı bilgiler elde etmeye olanak sağlanmış, nano bilimin temeli atılmıştır.Nanobilimin ortaya çıkmasıyla beraber nanotüp, nanotel, nanoparçacık, nanoelektrik, nanoölçekli film gibi fiziksel sistemlerin deneysel ve teorik çalışmaları hızla artmıştır. Bu çalışmalar nano yapılı yüksek kapasiteli magnetik kayıt cihazları[2,3], sensör ve görüntüleme cihazları[4,5], kalıcı mıknatıslar [6], lineer olmayan optik [7], çevre ıslahı [8], medikal uygulama [9,10] ve kemeoterapi [11,12] vb. çeşitli teknolojik alanlarında geniş bir uygulamaya sahiptir. Nanobilimin günümüz teknolojisi yardımıyla her gelişmesiyle birlikte nanoteknoloji geçen gün doğmuştur.Nanoteknoloji ise nano yapılar tasarlayıp sentezlemeyi, bu yapılara olağanüstü özellikler kazandırmayı, ortaya çıkan yeni özellikli ürünler farklı alanlarda kullanmayı sağlayan bilimdir. Nanoteknolojinin amacı nano ölçekte malzemeler tasarlamak, bu malzemelerden yeni yöntemlerle hayatımızı kolaylaştıracak, yaşam kalitemizi ürünler üretmektir. Nanoteknoloji artıracak yeni yardımıyla nanoparçacıkların kullanım alanları ile ilgili araştırmalar her geçen gün artmaktadır.Nano boyutlarda malzemenin bilinen özelliklerindeki değişim sonucu malzeme, fiziksel ve kimyasal yapısına, büyüklüğüne, atomik yapısına, cinsine vb. özelliklerine göre çok farklı olağanüstü davranışlar göstermektedir. Örneğin nano boyutlarda, malzemeye yabancı bir atomun bağlanması, aslında iletken olmayan bir maddeyi iletken hale getirebilir. Eğer bu bağlanan atom geçiş elementiyse nano yapıya manyetik özellik de kazandırır [13]. Tekstilde nanoteknoloji uygulamaları, nanotekstiller olarak adlandırılabilir. Tutum, mukavemet, hava geçirgenliği, ıslanma gibi fiziksel ve mekanik özellik kaybının az olması, düşük kimyasal kullanımı ve düşük enerji maliyetleri, nanoteknolojinin tekstil ve giysi uygulamalarında kullanılmasının sebepleridir[14]. Altın normal şartlar da hiçbir madde ile etkileşime girmez, zaten bu özelliğinden dolayı mücevher olarak kullanılır. Ancak altın nanoparçacıkları hemen hemen her madde ile etkileşime girebilir, örneğin Romalı sanatçılar, altın tuzlarını (AuCl ve AuCl<sub>3</sub>) eritilmiş cama katarak nano ve mikro boyutta altın taneciklerinin oluşmasını sağladılar. Böylece beyaz ışığı soğuran altın taneciklerinin tane iriliğine bağlı olarak, yakut kırmızısı ile mor ışık aralığında ışık yaydığı Lycurgus Kasesi gibi kıymetli sanat eserleri üretilmiştir [15].

Yiyecekürünlerinin saklanmasında, plastik ambalajın nanokil taneciklerinin kullanılarak geliştirilmesi, plastik filmlerde plastik içine yayılmış nanokil tanecikleri oksijen, karbondioksit ve nemin geçişini engelleyerek saklanan besin maddelerini taze kalmasını sağlamaktadır.Nanokil aynı zamanda plastiği daha hafif, güçlü ve ısıya dayanıklı yapmıştır.Benzer bir uygulama, gıda ambalajında kullanılan gaz geçirmez kaplama ile hemen hemen aynı yararlı etkileri olan oksit kaplı ince polimer filmlerdir[16].Elektronik araçların nanometre ölçeklerinde elde edilmesi ile halen kullanılan sistemlerin işlem gücleri ve kapasiteleri bir kaç kat artmıştır. Nano teknolojilerin kullanım alanlarından biri olarak önerilen kuantum bilgisayarların geliştirilmesi ile günümüzün en modern bilgisayarları ile kıyaslanamayacak seviyelerde yüksek işlem gücü elde etmek mümkün olacaktır. Bunlara ek olarak elektronik araçlar için geliştirilen sensör, gösterge sistemleri ve sinyal iletimi alanlarında ciddi ilerlemeler kaydedilmiştir[16].Nano malzemelerin ve nano kompozitlerin fosil yakıt endüstrilerinin verimliliğini geliştirme potansiyeli de bulunmaktadır. Nano kompozitlerin yaygın olarak kullanılması ile daha yüksek verimliliğe sahip motorların ve dolayısı ile daha temiz, çevre dostu ulaşım sistemlerinin kurulması mümkün olacaktır[16]. Askeri uygulamalarda geliştirilmiş elektronik sistemlerle, daha iyi silah sistemleri, geliştirilmiş kamufulaj ve akıllı sistemler birçok Ar-Ge çalışmasının gerçekleşmektedir[16].Havacılık ve uzay araçlarında ise nano teknoloji malzemelerin ağırlığını önemli ölçüde azaltırken, maliyetlerin düşürülmesini de sağlayabilmektedir. Ayrıca çekme direnci çelikten kat kat yüksek nano tüpler sayesinde dünya yüzeyinden atmosfere kadar yükselebilecek yapılar inşa edilmesi potansiyel uygulama alanları içinde yer alabilmektedir. Böylece uzay ve havacılık araştırma maliyetlerinin büyük kısmını oluşturan fırlatma maliyetleri düşürülebilecektir[16].Nanoteknoloji yaşayan sistemlere de moleküler seviyelerde müdahale etme olanağı yaratabilecektir. Yaşayan organizmalar ile etkileşime geçebilecek boyutlarda araçlar üretilmesi ile birçok yeni teşhis ve tedavi yöntemlerinin gelişmesi olanaklı hale gelecektir.Sadece hastalığın bulunduğu ve/veya yayıldığı bölgelere saldırarak ilaç veren makineler, insan vücudu içinde hareket edilmesine olanak sağlayan teşhis araçları, nanoteknolojinin tıp ve sağlık sektörü üzerindeki potansiyel uygulamaları örneklerinden bazılarıdır. Örneğin nano parçacıklara tutturulmuş ilaç, dokuya enjekte edilerek bu parçacıkların rehberliğinde istenilen bölgeye dışarıdan manyetik alan uygulanarak taşınır. Terapi tamamlanana kadar parçacıklar burada tutulur ve terapi tamamlanınca uzaklaştırılır böylece sağlıklı dokuların zarar görmesi engellenmiş olur[11,12].

Diğer taraftan nanotüpler, pek çok farklı malzemenin gösterdikleri özellikleri tek başına bünyesinde toplamaktadır. Nanoteknolojinin gelişmesiyle; kalıcı bilgisayar bellekleri, karbon nanotüpler, düz ekran televizyonlar, kurşun geçirmeyen kumaşlar, "nanotext" denilen leke ve bakteri tutmayan kumaşlar, ortamda bulunan zehirli gazları algılayabilen gaz dedektörleri, hidrojen depolama ve yakıt hücreleri, nano mıknatıslar, yüksek yoğunluklu bilgi depolayan küçük ölçekli sabit diskler ve deformasyon ölçmeye yönelik ölçü aletler vb. seri üretime geçebilecektir.Manyetik nano parçacıkların manyetik özelliklerinin daha iyi anlaşılması için deneysel[17], analitik [18] ve bilgisayar simülasyonu [19,20] çalışmalar yapılmış ve yapılmaya devam etmektedir. Teknolojik olarak yukarıda bahsettiğimiz nano parçacıklar; manyetik kayıt sistemleri, manyetik soğutmalar, manyetik sıvılar, optik, sensör, termo elektrik aletler, kanser tedavisi vb. gibi birçok uygulama alanına sahiptir [21]. Bunun yanında, deneysel yöntemlerleson zamanlarda FePt ve Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> nanotüplerin fabrikasyona geçmesi için birçok farklı metotla manyetik özellikleri araştırılmıştır. Potansiyel uygulamalarda, nanoteknolojik ve biyoteknolojik nanotüplerde, teorik olarak, denge istatistik fiziğinde manyetik özellikle simülasyonlar [22], ferromanyetizmanın süreklilik teorisi [23], Monte Carlo Simülasyonu (MCS) [24], Etkin alan teorisi (EAT) [25,26], Green fonksiyonu metoduda [27] kullanılan metotlardır.Nanotüp sistemleri hem deneysel hem de teorik olarak en fazla çalışılan nanoyapılardır, ayrıca bu sistemlerin fiziksel özellikleri dengeli istatistik fizik yöntemleriyle Ising modeli kullanılarak çok kolay ve tam olarak

tanımlanabilmektedir.Son yıllarda T. Kaneyoshi tarafından incelenen silindirik Ising nanotüp ve nanotelin manyetik özellikleri öz-kabuk kavramları kullanılarak EAT ile incelenmeye başlanmıştır[28]. Bu çalışmalar öz ve kabukdaki spin yapılandırmaları normal, ferromanyetik veya ferrimanyetikdir. Bu sistemlerin içindeki atomların büyük çoğunluğu geniş bir şekilde yüzeylerinde bulunmasından dolayı özellikle yüzey etkileri manyetik özelliklere farklı katkılar verir. Materyallerin ebatları küçüldüğü zaman bu özellikler daha önemli bir hal değişimi geçirirler. Özellikle ebatlar kritik seviyenin (atomlar arası en küçük mesafe) altına indiği zaman manyetik nanosistemlerin materyallerin manyetik kütlenin coklu alan yapılarının aksine deneysel olarak tek alanda olduklarını fark edebilir. Bu sistemlerin manyetik özellikleri farklı teorik yöntemler kullanılarak çalışılmıştır [29,30]. Bu tekniklerin en önemlileri OAY, EAT ve MCS olarak verilebilir. Nanoyapılı sistemler ile ilgili çalışmalar EAT'den edilen sonuçlar MCS'dan edilenler gibi aynı topolojiye sahiptir. MCS'dan elde edilen sonuçlar EAT'den edilinenlerden daha küçüktür [31,32]. Özellikle reentrant davranışın farklı türlerinin olasılıkları teorik olarak nanoskala manyetik materyallerin çeşitliliği için araştırılmıştır. Bunalımlı düzen için yeni tip reentrant davranış, bozukluktan bağımsız EAT kullanılarak tartışılmıştır [33,34]. Geleneksel olarak reentrant davranış deneysel ve teorik olarak manyetik sistemin düzensizliği özellikle etkileşim içindeki değişikliğin işaretinden dolayı bunalımın etkisindeki spin cam sistemleri önemli rol oynadığı bulunmuştur [35,36]. Son yıllarda, nanopartiküller, nanoteller, nanofilmler, nanotüpler gibi nano malzeme sistemlerinin manyetik özelliklerinin incelenmesine gözle görülür bir ilgi olmuştur [37,38]. Bu sistemler dökme (bulk) malzemelerin birbirinden farklı yeni fiziksel ve manyetik özelliklerini ortaya çıkarabilir ve birçok önemli teknolojik uygulamalar olabilir. Günümüzde nanopartikül sistemleri manyetik rezonans görüntüleme [39], kataliz [40], ultra yüksek yoğunluklu kayıt cihazları [41], ferroakışkan [42] ve biyomedikal [43] gibi çeşitli alanlardaki potansiyel kullanımında umut verici olarak kabul edilmektedir. Deneysel olarak, nanopartikül sistemleri manyetik davranışları, Mössbauer spektroskopisi, X- ışını kırınımı, elektron mikroskopu ve manyetooptik gibi çeşitli teknikler kullanılarak karakterize edilmektedir [44,45].

Teorik olarak ise nano yapılı bu sistemlerin manyetik özellikleri çeşitli teknikler ile incelenmektedir [46,47]. Son yıllarda, Zaim ve arkadaşları, MC simülasyonu kullanarak silindirik nanotellerin faz diyagramları üzerindeki rastgele manyetik alanın etkilerini

incelemistir [48]. Üçlü kritik nokta, izole kritik nokta ve üçlü nokta gibi çoklu kritik noktalar elde etmişlerdir. Bethe kafesi üzerinde, öz-kabuk yapılı kare örgü üzerinde Ising nanotellerinin faz diyagramları Albayrak tarafından araştırılmıştır [49,50]. Sonuçlar sistem parametrelerine bağlı olarak, sistemde sadece ikinci-dereceden faz geçiş çizgileri [49] veya hem ikinci hemde birinci dereceden faz geçişlerinin [50] mevcut olabildiğini göstermiştir. Akıncı [51] spin-1/2 Ising nanotellerin faz diyagramlarına rastgele dağılımlı manyetik alanın etkilerini incelemek için, korelasyonlu EAT kullanmış ve reentrant davranışları ve birinci-dereceden faz geçişleri gibi bazı ilginç sonuçlar elde etmiştir. Blume-Capel tellerin histeresisis davranışı ısı banyosu algoritmasına dayalı MCS ile incelenmiştir [52]. Karakteristik davranışların sistem parametrelerinin uygun değerleri için ikili ve üçlü histeresisis döngülerin varlığı elde edilmiştir. Spin-1 Ising nanotüp sisteminin manyetik özellikleri olasılık dağılımı yöntemine dayalı EAT kullanarak ve bir faz diyagramları üzerinde trimodal rastgele boyuna alanın etkisi incelenmiş, sonuçlar sistemin birinci derece faz geçişleri, üçlükritik nokta, reentrant davranış ve hatta çift reentrant davranış sergileyebileceğini göstermişlerdir [53]. Teorik olasılık dağılımı yöntemine dayalı etkin alan teorisi ve Metropolis algoritmasına dayalı MCS kullanılarak sonuçların bir nano skalasındaki ferrimanyetik ince filmin manyetik özellikleri araştırılmış ve elde edilen EAT sonuçları ile MCS sonuçlarının kalitatif uyum içinde olduğu tespit edilmiştir [54]. Parçalı lsing nano tellerin histeresisis döngüsü, zorlayıcı alan ve kalıcı mıknatıslanmaları elde etmişlerdir [55]. Ferrimanyetik öz-kabuk yapısına sahip bir altıgen prizmatik nanoparçacığın manyetik özellikleri MCS kullanılarak incelenmiştir. Uygun parametreler ile nanoparçacık, telafi sıcaklığı sergilemektedir. Bu sistemde iki telafi sıcaklığının varlığı tesbit edilmiştir.

Son yıllarda karma spin sistemleri istatistik fizikte ve yoğun madde fiziğinde aktif olarak en çok çalışılan konuların başında gelmektedir. Nedeni ise: (i) Bu çalışmaların, termomanyetik kayıt sistemleri gibi önemli teknolojik uygulama alanları ile ilgili olması [56], (ii) bu sistemlerin, tek spinli sistemlere göre daha az yerdeğiştirme simetrisine sahip olmaları, (iii) Bu sistemlerin, moleküler tabanlı manyetik malzemelerin anlaşılabilmesine model oluşturmalarıdır [57]. Karma spin sistemlerinin denge özellikleri, dengeli istatistik fizikte geliştirilen ve iyi bilinen kapalı form yaklaşıkları OAY, Bragg-Williams (BW), Bethe-Peierls (BP), kümesel değişim yaklaşıklıkları, serive acılım, transfer matris (TM), EAT, MCS, renormalizasyon grup (RG) teknikleri vb. yöntemlerle kapsamlıca incelenmiştir. Ayrıca, farklı morfolojideki öz-kabuk nanoyapılar çeşitli istatistik fizik yöntemleri kullanılarak kapsamlıca araştırılmıştır [58]. Bu nanoyapılarla ilgili teorik olarak yapılan çalışmalar aşağıdaki gibi çoğaltılabilir. MCS bağlı Metropolis algoritmasına kullanılarak altıgen örgü yapısı üzerinde karma spin (1, 3/2) manyetik tellerin kritik davranışı incelenmiş ve sistemin birinci-derece faz geçişleri, üçlükritik nokta, kritik son nokta ve telafi sıcaklıkları sergileyebileceğini göstermişlerdir [58]. Öz-kabuk yapılı karma spin (1/2, 3/2) nanoparçacıkların manyetik özellikleri MCS kullanılarak incelenmiştir [59]. Kritik telafi sıcaklıkları cekirdek arayüzü etkileşim parametreleri ile araştırılmıştır. Başka bir çalışmada, İsing tipi karma nano yapısını histeresisis davranışları korelasyonluEAT kullanılarak incelenmiştir [60]. Nanotellerin sıcaklık, kristal alan geometrik parametrelerinin, sistemin histeresisis davranışlarına etkileri incelenmiştir.Şarlı ve Keskin, karma spin-1/2 çekirdek ve spin-1 kabuk Ising nanatüp sisteminin manyetik özelliklerini(manyetik alınganlık,iç enerji ve ısı sığasının bant yapısı) kolerasyonlu EAT kullanılarak detaylıca incelenmişlerdir[61]. Aynı karma spin Ising nanotüp sisteminin manyetik özelliklerinin kristal alana bağımlılığı ise yine kolerasyonlu EAT kullanılarak incelenmiştir[62].Yüksel ve arkadaşları ise karma spin-3/2 çekirdek ve spin-1 kabuk ferrimanyetik nanoparcacık sistemini MCS kullanarak incelemişler ve faz diyagramını elde etmişlerdir[63].Liu ve arkadaşları kristal alan ve transverse alan varlığında spin-1 çekirdek ve spin-3/2 kabuk Ising kübik nanotel sistemini incelemişler, mıknatıslanma ve faz diyagramını elde etmişlerdir[64].Karma spin-1/2 çekirdek ve spin-1 kabuk ferrimanyetik nanotel sisteminin manyetik özellikleri ve faz diyagramını Boughrara ve arkadaşları incelemişlerdir[65].Kocakaplan ve Kantar karma spin hegzagonal tip Ising nanotel sisteminde çekirdeği spin-1/2 ve kabuğu spin-1 olan sistemi kolerasyonlu EAT incelemişler ve sistemin manyetik özelliklerini elde etmişlerdir[66].Karma spin-1/2 çekirdek ve spin-3/2 kabuk Ising nanotüp sisteminin termal ve manyetik özellikleri ise Taşkın ve arkadaşları tarafından kolerasyonlu EAT ile incelenmiştir [83]. Bu nano yapılı sistemlerin denge özellikleri, mıknatıslanmaları, histeriseğrileri, rentrant davranışları, birinci ve ikinci derece faz geçişleri ve faz diyagramlarıyla ilgilidir.

Ising modeli kullanılarak nanoyapılı sistemlerin denge özelliklerinin anlaşılması için yeterli sayıda çalışma yapılmasına rağmen, dinamik özellikleri için yeterli sayıda

calışma yapılmamıştır ve özellikle son yıllarda bu nano yapılı sistemlerin dinamik özellikleri üzerinde çalışılmaya başlanmıştır. Ferromanyetik ve antiferromanyetik etkileşim parametreleri için zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında silindirik Ising nanotellerin dinamik faz geçişleri Glauber-tipi stokhastik dinamik temelli OAY [68, 69] ve EAT [70-75] kullanılarak incelenmiştir. Kantar ve Ertaş [68],öz kabuk spin-1/2 silindirik Ising nanotel sisteminin dinamik manyetik özelliklerini, salınımlı manyetik alan içerisinde, Glauber-tipi stokhastik dinamik ve OAY kullanılarak incelenmişlerdir. Dinamik faz geçişlerinin doğasını incelemişler, faz diyagramlarını indirgenmis manyetik alan genliği ve sıcaklık düzleminde elde edilerek sistemde meydana gelen fazları sunmuşlardır. Sistemde N-, Q-, P-, R-, S-tipi telafi sıcaklıkları yanısıra reentrant davranış gözlemlemişlerdir. Ertaş ve Kantar [69], OAY ile silindirik Ising nanotel sisteminde, spin-1 BC modelinin dinamik manyetik özellikleri üzerine, bilineer etkileşim parametresi (J), kristal alanın (D), sıcaklığın (T) etkileri araştırmışlardır. İnceleme sonucunda üçlü kritik nokta ve sistemin fiziksel parametrelerine bağlı olarak N-, P-, Q-, S- ve W tipi telafi sıcaklıklarını bulmuşlardır. Deviren ve arkadaşları [70], öz ve kabuktan oluşan silindirik Ising nanotel sisteminde, hem ferromanyetik hem de antiferromanyetik etkilesimler için zamana bağlı salınımlı bir dış manyetik alan altında dinamik nyetik özellikleri, korelasyonlu EAT ve Glaubertipi stokhastik dinamik kullanarak araştırmışlardır. Dinamik öz, kabuk ve toplam mıkntıslanmalar için dinamik faz geçişlerinin doğasını (birinci veya ikinci dereceden), histeresis döngü alanları ve dinamik korelasyonları incelemişler. Hamiltonyen parametrelerinin değerlerine göre, sistemde Q-, R-, S-, P- ve L- olmak üzere beş farklı telafi davranışı tipi bulmuşlardır. Ertaş ve Kocakaplan [71], hegzagonal Ising nanotelde faz geçişlerin doğasını, dinamik faz geçiş noktalarını ve dinamik faz diyagramlarınıelde etmek için, Glauber-tipi stokhastik dinamik ve EAT kullanmışlardır. Dinamik faz diyagramları temel ve karma faz bölgeri, üçlü kritik nokta ve rentrant davranış sergilediğini bulmuşlardır. Deviren ve arkadaşları [72],korelasyonlu EAT ve Glaubertipi stokhastik dinamik kullanarak transfer alan varlığında silindirik Ising nanotel sisteminin dinamik özeliklerini incelemişlerdir. Sistemin fiziksel parametrelere bağlı olarak, Q-, R-, S- ve P- olmak üzere dört farklı telafi sıcaklık tipi gösterdiğini elde etmişlerdir. Kantar ve arkadaşları [73], zamana bağlı bir manyetik alan varlığında silindirik Ising nanotelin dinamik faz geçiş noktalarını ve dinamik faz diyagramları elde etmek için Glauber-tipi stokhastik dinamik ve EAT kullanmışlardır. Etkileşim

parametrelerinin değerlerine göre, dinamik faz diyagramlarında birçok dinamik kritik nokta (üçlü kritik nokta, çift kritik son nokta, kritik son nokta, vb.) elde etmişlerdir.Deviren ve Keskin [74],korelasyonlu EAT ve Glauber-tipi stokhastik dinamik kullanarak zamanla değişen bir manyetik alan varlığında silindirik Ising nanotüpünün dinamik özelliklerini, dinamik mıknatıslanmaların sıcaklığa bağımlılığını inceleyerek dinamik geçişlerin doğasını, dinamik faz geçiş sıcaklıklarını ve telafi davranışlarını elde etmişlerdir. Ayrıca, histeresis döngü alanlarını sunmuşlardır. Sistemin fiziksel parametrelere bağlı olarak, Q-, R-, S-, P- ve N- olmak üzere beş farklı telafi sıcaklığı tipi gösterdiğini elde etmislerdir. Deviren ve arkadasları [75], silindirik Ising nanotüpünün, dinamik manyetik özellikleri korelasyonlu EAT ve Glauber-tipi stokhastik dinamikler kullanarak incelemişlerdir. Dinamik mıknatıslanmaların ve histeresis döngü alanının sıcaklığa bağımlılığı, yanı sıra dinamik faz diyagramları elde edilmiştir. Sistemde üçlü kritik nokta ile birlikte izole kritik, çoklu kritik noktalar sergilediğini gözlemlemişlerdir.Diğer taraftan, öz-kabuk yapılı nanoparçacıkların dinamik manyetik özellikleri MCS kullanılarak da incelenmiştir [76-78]. Vatansever ve Polat [76], metropolis algoritması temelli MCS kullanarak, spin-3/2 öz ve spin-1 kabuk tabakasından oluşan bir küreşel öz- kabuk nanopartikül sisteminin dinamik faz geçiş özelliklerini analiz etmişlerdir. Sistemde, P-, N- ve Q-tipi mıknatıslanma eğrilerini görmüşlerdir. Yine Vatansever ve Polat [77]; kübik öz- kabuk ferrimanyetik nanopartikül sisteminin dinamik manyetik özellliklerini metropolis algoritması temelli MCS kullanarak araştırmışlardır. Kabuk kalınlığına, manyetik alanın genliğine, manyetik alanın periyoduna ve Hamilton parametrelerine parçacığın termal ve manyetik özelliklerinin önemli ölçüde değiştiğini gözlemlemişlerdir. Yüksel ve arkadaşları [78]; öz-kabuk yapısına sahip nanopartikül sisteminin dinamik faz geçiş özelliklerini MCS ile incelemişlerdir. Sistemde, P-, N- ve Q-tipi mıknatıslanma eğrilerini görmüşlerdir. Güçlü bir antiferromanyetik arayüz etkileşimi varlığında üçlü histeresisis döngü davranışını gözlemişlerdir. Ancak en temel karma spin sistemi olan karma spin (1/2, 1) Ising nanotüp üzerine dinamik çalışma mevcut değildir.

Bu tez çalışmasında ise karma spin (1/2, 1) Ising nanotüp sisteminin dinamik davranışları ortalama-alan dinamik ve Glauber-tipi stohastik dinamik kullanılarak incelenecektir. Sistemde mevcut olan fazları bulmak için ortalama düzen parametrelerinin zamana bağlı davranışları incelenecektir. Daha sonra ortalama düzen

parametrelerinin veya dinamik düzen parametrelerinin, indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak davranışları incelenerek DFG sıcaklıkları tespit edilecek ve dinamik faz geçişlerinin doğası (kesikli veya sürekli yani birinci- veya ikinci-derece faz geçişleri) karakterize edilerek sistemin dinamik faz diyagramları (T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>) düzlemlerde sunulacaktır. Burada T indirgenmiş sıcaklığı ifade ederken, h ise indirgenmiş dış manyetik alandır. Böylece, bu tezin temel amaçlarından birisi olan karma spin (1/2, 1) Ising nanotüp sisteminin dinamik faz geçişleri ve dinamik faz diyagramlarını yorumlamak mümkün olacaktır. Ayrıca bu sistemin dinamik histeresis döngü alanları ve dinamik korelasyon gibi iki dinamik manyetik özellikleri indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak incelenecektir.Böylece hem faz geçiş sıcaklıklarının doğruluğu cevap fonksiyonları cinsinden kontrol edimiş olacak hemde sistemle ilgili manyetik özellikler detaylıca incelenmiş olacaktır.

Bölüm 2'de ilk olarak sistemin model ve formülasyonu tanımlanacak ve bundan yararlanarak sistemin düzen parametreleri için ortalama alan denklemleri elde edilecektir. Elde edilecek olan bu diferansiyel denklemler Adams-Moulton kestirme ve düzeltme, Runge-Kutta, vb gibi nümerik yöntemlerle çözülecektir.

Bölüm 3'de karma spin (1/2, 1) Ising nanotüp sisteminin dinamik davranışları ve sistemlerdeki mevcut olan fazları elde etmek için, ortalama mıknatıslanmanın zamana bağlı davranışları incelenecektir. Elde edilecek olan bu diferansiyel denklemler Adams-Moulton kestirme ve düzeltme, Runge-Kutta, vb gibi nümerik yöntemlerle çözülecekve ortalama düzen parametrelerinin zamana göre değişimi kapsamlıca incelenerek sistemlerde oluşan fazlar tespit edilecektir. Dinamik düzen parametrelerini veren denklemler Adams-Moulton kestirme ve düzeltme ve Romberg integrasyon yöntemiyle beraber kullanılarak çözülecek ve dinamik düzen parametrelerinin indirgenmiş sıcaklığa göre değişimleri kapsamlıca incelenerek, sistemlerde meydana gelen dinamik faz geçişlerinin tabiatı (birinci- ve ikinci-derece) karakterize edilecek ve aynı zamanda DFG sıcaklıkları bulununacaktır. Ayrıca bu sistemin dinamik histeresis döngü alanları ve dinamik korelasyon gibi iki dinamik manyetik özellikleri indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak bu bölümde incelenecektir. Daha sonrada hesaplanan DFG sıcaklıkları kullanılarak sistemlerin dinamik faz diyagramları (T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>) düzleminde sunulacaktır. Son bölümde ise, yapılan çalışmalar özetlenerek elde edilen sonuçların tartışması yapılmıştır.

# **BÖLÜM 2**

#### METOT VE MODELİN TANITIMI

#### 2.1. Model

Glauber-tipi stokhastik dinamik temelliortalama alan yaklaşımı (OAY) yöntemi, ferrimanyetik karma spin (1/2, 1) Ising nanotüp gibi karmaşık spin sistemlerinin dinamik manyetik davranışlarını araştırmak için kullanılmaktadır. Silindirik nanotüp sistemini Ising modeli ile tanımlamak için kullanılan en yakın örgü hegzagonal örgü yapısıdır. Bu nedenle bu tez çalışmasında kullanılacak ve nanotüp sistemini tanımlayanhegzagonal örgü yapılı şematik gösterim Şekil 2.1 deki gibi verilmektedir.



Şekil 2.1.Karma spin (1/2, 1) Ising nanotüp sistemini tanımlayan silindirik hegzagonal yapının şematik temsili: (a) ara kesit ve (b) üç boyutlu. Sarı ve mavi küreler sırasıyla özdeki spin-1/2 ve kabuktaki spin-1 manyetik atomları göstermektedir.

İlgilenilen model, alternatif olarak birbirini tekrarlayan üç alt tabaka A, B ve C'den oluşmaktadır. Sarı renklerle gösterilen özdeki spin-1/2 manyetik atomlarına ait olan ilk alt tabaka (A),  $\pm$  1/2 değerlerini almaktadır. Mavi renkli küreler ile gösterilen diğer iki alt tabaka B ve C,  $\pm$  1, 0 değerlerini almaktadır vekabuktaki S spinleri spin-1 değerlerini almaktadır. Çekirdeğin etrafi  $\sigma$  spinleri tarafından işgal edilirken, kabukların etrafi S spinleri tarafından işgal edilir. En yakın komşu etkileşmelerini, kristal alan veya tek-

iyon anizotropi terimini ve zamana bağlı dış manyetik alan terimini içeren silindirik karma spin (1/2, 1) Ising nanotüp sisteminin Hamiltonyen ifadesi,

$$\mathbf{H} = -\mathbf{J}_{C}\sum_{\langle ij \rangle} \boldsymbol{\sigma}_{i} \boldsymbol{\sigma}_{j} - \mathbf{J}_{S}\sum_{\langle mn \rangle} \mathbf{S}_{m} \mathbf{S}_{n} - \mathbf{J}_{Int}\sum_{\langle kl \rangle} \boldsymbol{\sigma}_{k} \mathbf{S}_{l} - \mathbf{D}\sum_{\langle m \rangle} \mathbf{S}_{m}^{2} + h\left(t\right) \left(\sum_{i} \boldsymbol{\sigma}_{i} + \sum_{m} \mathbf{S}_{m}\right), (2.1)$$

biçiminde tanımlanmaktadır. Burada,  $\langle ij \rangle$ ,  $\langle mn \rangle$  ve  $\langle kl \rangle$ toplamlarım sırasıyla öz, kabuk ve öz ile kabuk arasındaki komşu spinlerin çiftleri üzerinden olacağını ifade etmektedir. J<sub>C</sub>, J<sub>S</sub> ve J<sub>Int</sub> sırasıyla öz manyetik atomları arasındaki bilineer etkileşim parametresini, kabuk manyetik atomları arasındaki bilineer etkileşim parametresini ve öz ile kabuk manyetik atomları arasındaki bilineer etkileşim parametresini göstermektedir. D kristal-alan veya tekiyon anizotropi etkileşme terimini ve h(t) ise zamana bağlı salınımlı dış manyetik alanı ifade etmektedir. Zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan ifadesi,

$$h(t) = h_0 \sin(wt), \qquad (2.2)$$

şeklindedir. Burada  $h_0ve w = 2\pi v$  sırasıyla salınımlı alanının genliği ve açısal frekansıdır. Sistem T<sub>A</sub> mutlak sıcaklığında izotermal ısı banyosu ile etkileşim/temas halindedir. Nano yapılı malzemelerinfiziksel özellikleri üzerinde kabuk yüzeyindeki atomlarının etkisi çok fazla olduğundangenellikle nano yapılı malzemelerde kabuk yüzeyinde manyetik atomlar arasındakibilineer etkileşme terimi aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$J_{s} = J_{c} \left( 1 - \Delta_{s} \right), \tag{2.3}$$

Öz ile kabuk arasındaki bilineer etkileşim parametresi ise,

$$r = \frac{J_{Int}}{J_c}, \qquad (2.4)$$

şeklinde tanınlanır. Bu çalışma süresince  $J_C = 1.0$  ve r = 1.0 alınarak çalışılmıştır. Burada r'nin pozitif olması öz ve kabuk arasındaki spinlerin yönelimlerinin birbirine paralel olduklarını ve ferrimanyetik spin konfigürasyonu sergilediklerini belirtmektedir.

#### 2.2. Glauber Dinamiği ve Ortalama-Alan Dinamik Denklemlerinin Elde Edilmesi

Zamana bağlı salınımlı dış manyetik varlığında karma spin (1/2, 1) Ising nanotüp sistemi için sistemin dinamik davranışını açıklayan ortalama-alan dinamik denklemlerini elde edebilmek için Glauber dinamiğni kullanacağız ve Master denkleminden yararlanacağız. Karma spin (1/2, 1) Ising nanotüp sistemi, Glauber-tipi stokhastik dinamiğe göre birim zamanda  $1/\tau$  oranında değişim gösterir. Ortalama alan dinamik denklemlerinin türetilmesi, spin-1/2 sistemi [79] ve farklı spin sistemleri [80, 81] için ayrıntılı olarak açıklandığından, burada karma spin (1/2, 1) nanotüp sistemin denklemleri elde edilecektir. B ve C alt örgülerindeki spinler sabit kaldığı zaman, sistemin t zamanında,  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$ , ..., $\sigma_N$ , spin konfigürasyonuna sahip olduğu andaki olasılık fonksiyonu  $P^{A}(\sigma_{1}, \sigma_{2},...,\sigma_{N}; t)$  ile tanımlanır. A ve C alt örgülerindeki üzerindeki spinler sabit kaldığı zaman, sistemin tzamanında,  $S_1, S_2, \ldots, S_N$  spin konfigürasyonuna sahip olduğu andaki ihtimaliyetfonksiyonu ise  $P^{B}(S_{1}, S_{2},...,S_{N}; t)$  ile tanımlanır. Son olarak A ve B alt örgülerindeki üzerindeki spinler sabit kaldığı zaman, sistemin tzamanında,  $S_1$ ,  $S_2$ , ...,  $S_N$  spin konfigürasyonuna sahip olduğu andaki ihtimaliyetfonksiyonu ise  $P^{C}(S_{1}, S_{2},...,S_{N}; t)$  ile tanımlanır.  $W_{i}^{A}(\sigma_{i})$  i. spinin  $\sigma_{i}$ durumundan -oi durumuna (B ve C alt örgülerindeki spinler sabit kaldığı durumda),  $W_{j}^{B}(S_{j} \rightarrow S_{j}')$  j. spinin  $S_{j}$  durumundan  $S_{j}'$  durumuna (Ave C alt örgülerindeki spinler sabit kaldığı durumda) ve  $W_j^c(S_j \to S'_j)$  j. spinin  $S_j$  durumundan  $S'_j$  durumuna (Ave B alt örgülerindeki spinler sabit kaldığı durumda) birim zamandaki geçiş olasılığıdır. B ve C alt örgülerindekispinlerin bir an için sabit olduğu düşünülürse, A alt örgüsü için master denklemi,

$$\frac{d}{dt}P^{A}(\sigma_{1},\sigma_{2},...,\sigma_{N};t) = -\left(\sum_{i}W_{i}^{A}(\sigma_{i})\right)P^{A}(\sigma_{1},\sigma_{2},...,\sigma_{i},...\sigma_{N};t) + \sum_{i}W_{i}^{A}(-\sigma_{i})P^{A}(\sigma_{1},\sigma_{2},...,-\sigma_{i},...\sigma_{N};t),$$
(2.5)

şeklinde yazılır. Burada  $W_i^A(\sigma_i)$ , i'inci  $\sigma$  spinin  $\sigma_i$  durumundan  $-\sigma_i$  durumuna birim zamanda geçme olasılığıdır. Denge durumunda,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \mathbf{P}^{\mathrm{A}} \left( \boldsymbol{\sigma}_{1}, \boldsymbol{\sigma}_{2}, \dots, \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{N}}; t \right) = 0, \qquad (2.6)$$

ve master denkleminden olasılık yoğunlukları oranı,

$$\frac{W_{i}^{A}(-\sigma_{i})}{W_{i}^{A}(\sigma_{i})} = \frac{P^{A}(\sigma_{1},\sigma_{2},...,-\sigma_{i},...\sigma_{N})}{P^{A}(\sigma_{1},\sigma_{2},...,\sigma_{i},...\sigma_{N})},$$
(2.7)

olduğu kolayca görülebilir. Buradan

$$P^{A}(\sigma_{1},\sigma_{2},\sigma_{3},...\sigma_{N}) \alpha \exp(-\beta \mathcal{H}), \qquad (2.8)$$

ile tanımlanan genel kanonik dağılım ifadesinden, birim zamandaki geçiş olasılığı,

$$W_{i}^{A}(\sigma_{i}) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta \Delta E^{A}(\sigma_{i}))}{\sum_{\sigma_{i}} \exp(-\beta \Delta E^{A}(\sigma_{i}))}$$
(2.9)

şeklinde verilir. Burada  $\beta = 1/k_{B}T$ ,  $k_{B}$  Boltzmann faktörü,  $\sum_{\sigma_{i}}$  ise toplamın  $\sigma_{i} = \pm 1/2$ , üzerinden alınacağını göstermektedir. Eşitlik (2.1) ile verilen Hamiltonyen ifadesinden yararlanılarak,

$$\Delta \mathbf{E}^{\mathbf{A}}(\boldsymbol{\sigma}_{i}) = 2\boldsymbol{\sigma}_{i} \left( \mathbf{J}_{\mathbf{C}} \sum_{j} \boldsymbol{\sigma}_{j} + \mathbf{J}_{\text{Int}} \sum_{l} \mathbf{S}_{l} + \mathbf{h}(t) \right)$$
(2.10)

şeklinde bulunur. Bulunan bu enerji değişimi ifadeleri (2.9) denkleminde yerine yazılırsa  $W_i^A(\sigma_i)$  olasılık yoğunlukları;

$$W_{i}^{A}(-\frac{1}{2}) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(-\beta x/2)}{\cosh(\beta x/2)},$$
(2.11a)

$$W_{i}^{A}(\frac{1}{2}) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(\beta x/2)}{\cosh(\beta x/2)},$$
(2.11b)

şeklinde elde edilir. Burada  $x = J_C \sum_j \sigma_j + J_{Int} \sum_l S_l + h(t)$  ile tanımlanır.Master denkleminden yararlanılarak, A altörgüsü için genel ortalama-alan dinamik denklemi şu şekilde elde edilir:

$$\tau \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} \langle \sigma_{\mathrm{k}} \rangle = - \langle \sigma_{\mathrm{k}} \rangle + \frac{1}{2} \tanh\left[\frac{\beta}{2}(\mathrm{x})\right].$$
(2.12)

Ortalama-alan yaklaşımı kullanılarak (2.12) denklemi,

$$\tau \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} \langle \sigma_{\mathrm{i}} \rangle_{\mathrm{A}} = -\langle \sigma_{\mathrm{i}} \rangle_{\mathrm{A}} + \frac{1}{2} \tanh\left[\frac{\beta}{2}(\mathbf{x}_{1})\right]$$
(2.13)

olarak yazılabilir. Burada  $x_1 = 4 J_C \langle \sigma_j \rangle_A + J_{Int} \langle S_j \rangle_B + 2 J_{Int} \langle S_j \rangle_C + h_0 sin(wt)$ . Elde edilen bu ortalama-alan dinamik denklemi,

$$\Omega \frac{d}{d\xi} m_{\rm C} = -m_{\rm C} + \frac{1}{2} \tanh \left[ \frac{1}{2T} \left( 4 J_{\rm C} m_{\rm C} + J_{\rm Int} m_{\rm S1} + 2 J_{\rm Int} m_{\rm S2} + h \sin(\xi) \right) \right]$$
(2.14)

şeklinde de yazılabilir. Burada  $m_C \equiv \langle \sigma_j \rangle_A$ ,  $m_{S1} \equiv \langle S_j \rangle_B$ ,  $m_{S2} \equiv \langle S_j \rangle_C$ ,  $\xi = wt$ ,  $T = (\beta Jz)^{-1}$ ,  $h = h_0 \sin(wt)$ ,  $h = h_0 / J_C$  ve  $\Omega = \tau w$  olarak tanımlanmıştır. T, h ve  $\Omega$ boyutsuz parametrelerdir. Sistemimizde  $\Omega = 2\pi$  değerinde sabit olarak ele alınacaktır. Karma spin (1/2, 1) Ising nanotüp sisteminde A ve C alt örgülerindeki spinlerin biran için sabit kaldığı düşünülerek, B alt örgüsü için ilk yüzeydeki ortalama alan dinamik denklemlerini aşağıdaki gibi benzer hesaplamaları kullanarak da elde edebiliriz. Bu durumda B alt örgüsü için master denklemi;

$$\frac{d}{dt} P^{B}(S_{1}, S_{2}, ..., S_{N}; t) = -\sum_{j} \left( \sum_{S_{j} \neq S_{j}'} W_{j}^{B}(S_{j} \rightarrow S_{j}') \right) P^{B}(S_{1}, S_{2}, ..., S_{j}, ..., S_{N}; t) 
+ \sum_{j} \left( \sum_{S_{j} \neq S_{j}'} W_{j}^{B}(S_{j}' \rightarrow S_{j}) P^{B}(S_{1}, S_{2}, ..., S_{j}', ..., S_{N}; t) \right),$$
(2.15)

şeklinde yazılır. Burada  $W_j^B(S_j \rightarrow S'_j)$  ve  $W_j^B(S'_j \rightarrow S_j)$  olasılık yoğunlukları veya geçiş yoğunlukları olarak tanımlanır. Genel kanonik dağılım ifadesinden;

$$\mathbf{P}^{\mathrm{B}}(\mathbf{S}_{1},\mathbf{S}_{2},\ldots,\mathbf{S}_{j}',\ldots,\mathbf{S}_{\mathrm{N}}) \ \alpha \ \exp(-\beta\mathcal{H}), \tag{2.16}$$

yazılır. Burada  $P^{B}(S_{1}, S_{2}, ..., S'_{j}, ..., S_{N})$  sistem dengede iken  $(S_{1}, S_{2}, ..., S'_{j}, ..., S_{N})$ konfigürasyonunda spinlerin bulunma ihtimaliyetini gösterir. Sistem dengede iken, master denklemi ve kanonik dağılımın genel tanımı yardımıyla her bir spinin  $S_{j}$ durumundan  $S'_{j}$  durumuna birim zamanda geçiş olasılığı  $W_{j}^{B}(S_{j} \rightarrow S'_{j})$ ;

$$W_{j}^{B}(S_{j} \rightarrow S_{j}') = \frac{1}{\tau} \frac{\exp\left(-\beta \Delta E^{B}(S_{j} \rightarrow S_{j}')\right)}{\sum_{S_{j}} \exp\left(-\beta \Delta E^{B}(S_{j} \rightarrow S_{j}')\right)},$$
(2.17)

ile verilir. Burada  $\beta = 1/k_{B}T$ 'dır ve  $k_{B}$  Boltzmann faktörüdür. Daha sonra Hamiltonyen ifadesinin kullanılması ile  $\Delta E^{B}(S_{j} \rightarrow S'_{j})$  değeri bulunur.

$$\Delta E^{B}(S_{j} \rightarrow S_{j}') = -\left(S_{j}' - S_{j}\right) \left(J_{Int}\sum_{i}\sigma_{i} + J_{S}\sum_{k}S_{k} + h(t)\right) - \left[\left(S_{j}'\right)^{2} - \left(S_{j}\right)^{2}\right] D$$
(2.18)

 $\Delta E^{B}(S_{j} \rightarrow S'_{j})$  spinler arası geçişte sistemin enerjisindeki değişmedir. Burada  $y = J_{Int} \sum_{i} \sigma_{i} + J_{S} \sum_{k} S_{k} + h(t)$  ile tanımlanırsa,

$$\Delta E^{B} \left( S_{j} \rightarrow S_{j}^{'} \right) = -(S_{j}^{'} - S_{j}^{'})y - ((S_{j}^{'})^{2} - (S_{j}^{'})^{2})D$$
(2.19)

olur. Şimdi  $S_j$  durumundan  $S'_j$  durumuna mümkün olan tüm enerji değişimlerini hesaplayabiliriz. Bulunan bu enerji değişimi ifadeleri (2.17) denkleminde yerine yazılarak tüm geçişler için olasılık yoğunluklarını şu şekilde hesaplayabiliriz,

$$W_{j}^{B}(1 \to 0) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta(y+D))}{1 + \exp(-\beta(y+D)) + \exp(-2\beta y)},$$
(2.20a)

$$W_{j}^{B}(1 \to -1) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-2\beta y)}{1 + \exp(-\beta(y + D)) + \exp(-2\beta y)},$$
(2.20b)

$$W_{j}^{B}(0 \to 1) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(\beta(y+D))}{1 + \exp(\beta(y+D)) + \exp(\beta(-y+D))},$$
(2.20c)

$$W_{j}^{B}(0 \to -1) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(\beta(-y+D))}{1 + \exp(\beta(y+D)) + \exp(\beta(-y+D))}$$

$$= \frac{\exp(-2\beta y)}{1 + \exp(-\beta(y+D)) + \exp(-2\beta y)},$$
(2.20d)

$$W_{j}^{B}(-1 \to 0) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(\beta(y - D))}{1 + \exp(\beta(y - D)) + \exp(2\beta y)}$$
  
=  $\frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta(y + D))}{1 + \exp(-\beta(y + D)) + \exp(-2\beta y)},$  (2.20e)

$$W_{j}^{B}(-1 \to 1) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(2\beta y)}{1 + \exp(\beta(y - D)) + \exp(2\beta y)}$$
  
=  $\frac{1}{\tau} \frac{\exp(\beta(y + D))}{1 + \exp(\beta(y + D)) + \exp(\beta(-y + D))},$  (2.20f)

 $W_j^B(S_j \rightarrow S'_j)$  ifadesine baktığımızda olasılık yoğunluklarının  $S_j$ 'ye bağlı olmadığını görürüz. Bu bize  $W_j^B(S_j \rightarrow S'_j) = W_j^B(S'_j)$  şeklinde yazabilmemizi sağlar. Böylece olasılık yoğunlukları,

$$W_{j}^{B}(0 \to 1) = W_{j}^{B}(-1 \to 1) = W_{j}^{B}(1) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(\beta y)}{2\cosh(\beta y) + \exp(-\beta D)},$$
(2.21a)

$$W_{j}^{B}(1 \to 0) = W_{j}^{B}(-1 \to 0) = W_{j}^{B}(0) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta D)}{2\cosh(\beta y) + \exp(-\beta D)},$$
(2.21b)

$$W_{j}^{B}(1 \to -1) = W_{j}^{B}(0 \to -1) = W_{j}^{B}(-1) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta y)}{2\cosh(\beta y) + \exp(-\beta D)}, \quad (2.21c)$$

şeklinde yazılabilir.

 $W_j^{B}(S_j \rightarrow S'_j) = W_j^{B}(S'_j)$  olduğundan denklem 2.15 ile verilen master eşitliği,

$$\frac{d}{dt} P^{B}(S_{1}, S_{2}, ..., S_{N}; t) = -\sum_{j} \left( \sum_{S_{j} \neq S_{j}} W^{B}_{j}(S_{j}') \right) P^{B}(S_{1}, S_{2}, ..., S_{j}, ..., S_{N}; t))$$

$$+ \sum_{j} W^{B}_{j}(S_{j}) \left( \sum_{S_{j} \neq S_{j}} P^{B}(S_{1}, S_{2}, ..., S_{j}', ..., S_{N}; t) \right),$$
(2.22)

şekline dönüşür. Master denkleminden yararlanılarak, B altörgüsü için genel ortalamaalan dinamik denklemi şu şekilde elde edilir,

$$\tau \frac{d}{dt} \langle \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \rangle = - \langle \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \rangle + \frac{2 \sinh(\beta \mathbf{y})}{\exp(-\beta \mathbf{D}) + 2 \cosh(\beta \mathbf{y})}.$$
(2.23)

Burada,  $y = J_{Int} \sum_{i} \sigma_{i} + J_{S} \sum_{k} S_{k} + h(t)$  olduğu dikkate alınırsa,ortalama-alan yaklaşımı kullanılarak (2.23) denklemi,

$$\tau \frac{d}{dt} \left\langle S_{j} \right\rangle_{B} = -\left\langle S_{j} \right\rangle_{B} + \frac{2\sinh(\beta y_{1})}{\exp(-\beta D) + 2\cosh(\beta y_{1})}, \qquad (2.24)$$

olarak bulunur. Burada  $y_1 = J_{Int} \langle \sigma_i \rangle_A + 2J_S \langle S_k \rangle_B + 2J_S \langle S_l \rangle_C + h(t) sin(wt)$ . Elde edilen bu ortalama-alan dinamik denklemi,

$$\Omega \frac{dm_{S1}}{d\xi} = -m_{S1} + \frac{2\sinh\left[\left(J_{Int}m_{C} + 2J_{S}m_{S1} + 2J_{Int}m_{S2} + h\sin\xi\right)/T\right]}{2\cosh\left[\left(J_{Int}m_{C} + 2J_{S}m_{S1} + 2J_{Int}m_{S2} + h\sin\xi\right)/T\right] + \exp(-\beta d)},$$
(2.25)

şeklindede yazılabilir. Burada  $d = D/J_c$ , olarak tanımlanmıştır ve boyutsuz parametredir. ( $\xi = wt, \Omega = \tau w$ )

Son olarak A ve B alt örgülerindeki spinlerin bir an için sabit kaldıkları düşünülüse C alt örgüsündeki ikinci yüzey ortalama alan dinamik denklemi yukarıdaki benzer işlemler yapılarak

$$\Omega \frac{dm_{s_2}}{d\xi} = -m_{s_2} + \frac{2\sinh\left[\left(2J_{Int}m_C + 2J_Sm_{S1} + 2J_{Int}m_{S2} + h\sin\xi\right)/T\right]}{2\cosh\left[\left(2J_{Int}m_C + 2J_Sm_{S1} + 2J_{Int}m_{S2} + h\sin\xi\right)/T\right] + \exp(-\beta d)},$$
(2.26)

Böylece, sistemin dinamik davranışını tanımlayan üç adetortalama alan dinamik denklemleri (2.14), (2.25) ve (2.26) elde edilir.

## **BÖLÜM 3**

# KARMA SPİN (1/2, 1) ISING NANOTÜP SİSTEMİNİN NÜMERİK ÇÖZÜMÜ

#### 3.1. Ortalama Alt Örgü Mıknatıslanmalarının Zamanla Değişimi

Sistemde var olan fazları bulmak için denklem (2.14), (2.25) ve (2.26) ile verilen ortalama-alan (OAY) dinamik denklemlerinkararlı çözümleri farklı kristal alan (d), indirgenmiş yüksek manyetik alan genliğinde (h) ve indirgenmiş yüksek sıcaklıktaki (T) değerleri için incelenecektir. Denklem (2.14), (2.25) ve (2.26)'nın devinimsiz çözümleri, periyodik bir fonksiyonun  $2\pi$  periyodu için  $\xi$  'nin periyodik bir fonksiyonu olacaktır, yani

$$m_{c}(\xi + 2\pi) = m_{c}(\xi),$$
 (2.27a)

$$m_{s_1}(\xi + 2\pi) = m_{s_1}(\xi),$$
 (2.27b)

ve

$$m_{s2}(\xi + 2\pi) = m_{s2}(\xi)$$
 (2.27c)

Ayrıca, aşağıdaki özelliklerin sağlanıp veya sağlanmama özelliklerine göre sistemde üç tipçözümden biri olabilir.

$$m_{c}(\xi + \pi) = -m_{c}(\xi),$$
 (2.28a)

$$m_{s_1}(\xi + \pi) = -m_{s_1}(\xi),$$
 (2.28b)

ve

$$m_{s_2}(\xi + \pi) = -m_{s_2}(\xi)$$
 (2.28c)

Bu çözümlerde örgü ve yüzey için ortalama alt örgü mıknatıslanmaları sırasıyla  $m_{c}(\xi)$  ve  $m_{s}(\xi)(m_{s1}$  ve  $m_{s2})$  olarak çözülecektir. Buradaki denklem (2.28a) birinci tip çözümü, simetrik çözüm olarak adlandırılır ve bu çözüm düzensiz veya paramanyetik

(p) çözüme karşılık gelir. Bu çözümde, ortalama düzen parametreleri, yani ortalama alt örgü mıknatıslanmaları  $m_{c}(\xi)$  ve  $m_{s}(\xi)$  birbirine eşittir ve sıfır değeri civarında salınarak dış manyetik alana uyum gösterirler. İkinci tip çözüm, (2.28a) ile verilen denkleme uymazken, (2.28b) ve (2.28c) ile verilen denklemlere uyar. Bu çözüm manyetik olmayan(nm) çözüme karşılık gelir ve bu çözümde  $m_{c}(\xi) = \pm 1/2$  değerleri etrafında salınırken  $m_s(\xi) = 0$  sıfır etrafında salınır. Üçüncü tip çözümde, elde ettiğimiz çözüm (2.28) denklemlerine uymaz ve bu simetrik olmayan çözümdür, bu çözüm ferrimanyetik (i) çözüme karşılık gelir. Bu çözümde  $m_c(\xi)$  ve  $m_s(\xi)$  birbirine eşit değildir  $(m_c(\xi) \neq m_s(\xi))$  ve sıfır olmayan değerler etrafında salınırlar, yani  $m_{c}(\xi) = \pm 1/2$ ,  $m_{s}(\xi) = \pm 1.0$  etrafinda salınırlar ve dış manyetik alana uymazlar. Bu çözümler, açık bir şekilde (2.14), (2.25) ve (2.26) ile verilen ortalama-alan dinamik denklemlerin nümerik olarak çözülmesiyle görülür. (2.14), (2.25) ve (2.26) numaralı denklemler, verilen parametreler ve başlangıç değerleri için Adams-Moulton kestirme ve düzeltme yöntemi kullanılarak çözülmesiyle sistemde paramanyetik (p), manyetik olmayan (nm) ve ferrimanyetik (i) temel fazlarının yanında i + nm, nm + p, i + nm + p ve i + p karma fazları bulundu. Bu fazlara karşılık gelen bazı çözümler Şekil 3.1'de gösterilmiştir.Şekil 3.1.(a)'da yalnızca simetrik çözüm elde edildi ve bundan dolayı sistemde sadece paramanyetik (p) faz mevcuttur. Bu durumda  $m_c(\xi)$  ve  $m_s(\xi)$ birbirine eşittir ve sıfır değeri civarında salınırlar  $(m_{c}(\xi) = m_{s}(\xi) = 0)$ .Şekil 3.1.(b) ve Şekil 3.1.(c)'de simetrik olmayan çözümler elde edilmiştir. Şekil 3.1.(b)'de  $m_{c}(\xi) = \pm 1/2$  civarında salınırken ve  $m_{s}(\xi) = \pm 1.0$  değeri etrafında salınırlar, bu durumda sistemde ferrimanyetik (i) faz mevcuttur. Şekil 3.1.(c)'de  $m_c(\xi) = \pm 1/2$ değerleri etrafında salınırken  $m_s(\xi) = 0$  sıfır etrafında salınır. Bundan dolayı sistemde manyetik olmayan(nm) faz elde edilmiştir. Bu çözümler başlangıç değerlerine bağlı değildir. Şekil 3.1.(d)'de iki farklı çözüm elde edilmiştir ve sistemde p ve i fazları bir arada bulunmaktadır. İlk çözüm de  $m_c(\xi)$  ve  $m_s(\xi)'$  ler sıfır değeri civarında salınırken sistemde paramanyetik (p) faz gözlenmiştir. İkinci çözümde ise  $m_{c}(\xi) = \pm 1/2$  civarında salınırken ve  $m_{s}(\xi) = \pm 1.0$  değeri etrafında salınırlar, bu durumda sistemde ferrimanyetik (i) fazgözlenmiştir.

Bundan dolayı sistemde i + p karma fazı bulunduğu gözlenmiştir. Şekil 3.1.(e)'de yineiki farklı çözüm elde edilmiştir ama bu sefer sistemde p ve nm fazları bir arada bulunmaktadır. Buradaki ilk çözüm de  $m_c(\xi)$  ve  $m_s(\xi)$  yine sıfır değeri civarında salınırlar ve bundan dolayı sistemde paramanyetik (p) faz elde edilmiştir.İkinci çözümde ise  $m_c(\xi) = \pm 1/2$  değerleri etrafında salınırken  $m_s(\xi) = 0$  sıfır etrafında salınır. Bundan dolayı sistemde manyetik olmayan (nm) faz elde edilmiştir. Bundan dolayı sistemde manyetik olmayan (nm) faz elde edilmiştir. Bundan dolayı sistemde manyetik olmayan (nm) faz elde edilmiştir. Bundan dolayı sistemde manyetik olmayan (nm) faz elde edilmiştir. Bundan dolayı sistemde nm +p karma fazıda elde edilmiştir.Böylece, Şekil 3.1'de görüldüğü gibi sistemde karma fazlar mevcuttur. Bir sonraki bölümde bu faz bölgeleri arasındaki dinamik faz sınırları belirlenecektir.



Şekil 3.1.Karma spin (1/2,1)nanotüp sistemi için ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının  $m_{c}(\xi)$  ve  $m_{s}(\xi)$  zamanla değişimi.(a)Sistemde sadece paramanyetik (p) faz mevcuttur, (d=-0.50, h=0.20, T=0.37).(b) Sistemde sadece ferrimanyetik (i) faz mevcuttur, (d=0.125, h=0.25, T=0.50).(c) Sistemde sadece maynetik olmayan (nm) faz mevcuttur, (d=-0.50, h=0.15, T=0.10). (d) Sistemde hem ferrimagnetik (i) ve hemde paramagnetik (p) fazlar mevcuttur, (d=0.125, h=0.50, T=0.025).(e) Sistemde hem manyetik olmayan(nm) ve hemde paramagnetik (p) fazlar mevcuttur. (d=-0.50, h=0.30, T=0.05)

3.2 Dinamik Düzen Parametreleri ve Dinamik Faz Geçiş Noktaları

Bu kesimde, sistemde mevcut olan karma fazlar arasındaki dinamik faz sınırları belirlenecektir. Bunun için dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıklarını hesaplamalıyız ve dinamik faz geçişlerinin doğasını (süreksiz veya sürekli yani birinci- veya ikinci-derece faz geçişleri) karakterize etmeliyiz. Daha sonra bu DFG sıcaklıkları kullanılarak sistemin dinamik faz diyagramlarını sunabiliriz. DFG sıcaklıkları, bir peryot başına ortalama düzen parametrelerinin ya da dinamik düzen parametrelerinin davranışının indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak incelenmesiyle elde edilecektir.Zamana bağlı salınımlı manyetik alan varlığında bir periyot boyunca dinamik düzen parametreleri veya dinamik alt örgü mıknatıslanmaları şu şekilde verilir:

$$M_{\alpha} = \frac{w}{2\pi} \iint m_{\alpha}(t) dt, \qquad (2.29)$$

Burada  $\alpha$  = C öz mıknatıslanması,  $\alpha$ =S<sub>1</sub>; 1. yüzey mıknatıslanması,  $\alpha$ = S<sub>2</sub>; 2. yüzey mıknatıslanması; sistemdeki dinamik öz ve yüzey mıknatıslanmalarınakarşılık gelir. Öte yandan, dinamik histeresis döngü alanları Acharyya [82] tarafından şeklinde ifade edilir:

$$A_{\alpha} = -\iint m_{\alpha}(t) dh = -h_0 w \iint m_{\alpha}(t) \cos(wt) dt, \qquad (2.30)$$

Bu denklemhisterezise bağlı enerji kaybına karşılık gelir. Dinamik korelasyonların termal değişimi de aşağıdaki gibi hesaplanır:

$$C_{\alpha} = \frac{w}{2\pi} \iint m_{\alpha}(t) h(t) dt = \frac{w h_0}{2\pi} \iint m_{\alpha}(t) \sin(wt) dt.$$
(2.31)

Sayısal hesaplamalarda, dinamik histeresis döngü alanları  $A_{\alpha}$ 'nın ve dinamik korelasyonların termal değişimi olan  $C_{\alpha}$  parametresinin, J<sub>C</sub> parametresine bağlı olarak da ölçülebilir. (2.29)-(2.31) dekibu denklemler, Simpson integrasyonu ile Adams-Moulten prediktör düzeltme metodu kullanılarak sayısal olarak öz ve kabuk mıknatıslanmalarının başlangıç koşullarına bağlı olarak çözülecektir. Bir sonraki bölümde bu denklemlerin sayısal sonuçları incelenecektir.

# 3.3. Dinamik mıknatıslanmalar, histeresis döngüsü alanları ve korelasyonlarıntermal davranışı

Bu alt bölümde, karma spin (1/2,1) Ising nanotüp sisteminin sıcaklık değerinin bir fonksiyonu olarak, dinamik alt örgü mıknatıslanmaları (M<sub>α</sub>), histeresiz döngü alanlarının (A<sub> $\alpha$ </sub>) ve dinamik koralasyonların (C<sub> $\alpha$ </sub>) termal değişimini farklı etkileşim parametresi değerleri için incelenecektir.  $M_{\alpha}$ ,  $A_{\alpha}$  ve $C_{\alpha}$ 'nin termal davranışlarını denklem (2.29)-(2.31) kullanarak dinamik düzen parametrelerinin davranışınıetkileşme parametrelerinin farklı değerleri için indirgenmiş sıcaklığın ve indirgenmiş tek-iyon anizotropisinin bir fonksiyonu olarak Adams-Moulton kestirme ve düzeltme metodu ile Romberg integrasyon metodu birleştirerek incelenecektir.Mevcut olan fazlar arasındaki dinamik faz sınırlarını belirleyebilmemiz içinkarakterize etmeliyiz. Dinamik düzen parametrelerinin  $M_{\alpha}$ ,  $A_{\alpha}$  ve  $C_{\alpha}$ 'nın davranışları etkileşme parametrelerininfarklı değerleri için indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak, Adams-Moultonkestirme ve düzeltme metodu ile Romberg integrasyon metodu gibi nümerik metotların birleştirilmesiyle incelenecektir. Fazlar arasındaki dinamik faz sınırlarının ve DFG sıcaklıklarının nasıl elde edildiği Şekil 3.2, Şekil 3.3, Şekil 3.4, Şekil 3.5, Şekil 3.6 (a) ve (b) ile Şekil 3.7 (a) ve (b)'de gösterilmektedir. Bu şekillerde, T<sub>t</sub>birinci-derece faz geçiş sıcaklığını gösterirken, Tc ise ferrimanyetik ve manyetik olmayan fazlardan paramanyetik faza ikinci-derece faz geçiş sıcaklıklarını göstermektedir.

Şekil 3.2,  $M_{\alpha}$ ,  $A_{\alpha}$  ve  $C_{\alpha}$ 'nin termal davranışları  $\Delta_{S}$ = 1.0, r = 1.0, d = 1.0 ve h = 1.50 değerleri için elde edilmiştir. Bu şekilde, mutlak sıfır sıcaklık değerinde  $M_{C}$ = 0.5 ve $M_{S1}$ =  $M_{S2}$ = 1.0 iken sıcaklık arttıkça hem öz hemde kabuk mıknatıslanmaları sürekli olarak sıfıra yaklaştığını ve  $T_{C}/J_{C}$ =3.00 sıcaklığında ferrimanyetik (i) fazdan paramanyetik (p) faza ikinci-derece faz geçişi meydana geldiğigösterilmektedir. Ayrıca faz geçişsıcaklığında( $T_{C}/J_{C}$ =3.00) histerezis döngüalanları (A<sub>a</sub>) maksimumbir değere sahip olurken dinamik korelasyonlar( $C_{\alpha}$ ) ise minimum bir değere sahip olmaktadır.



Şekil 3.2.  $\Delta_S$ = 1.0, r = 1.0, d = 1.0 ve h = 1.50 değerleri için M<sub>a</sub>, A<sub>a</sub>,C<sub>a</sub>'nınsıcaklığa bağlı davranışı.T<sub>C</sub>/J<sub>C</sub> = 3.00,ferrimanyetik (i) fazdan paramanyetik (p) faza ikinci-derece faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.

Şekil 3.3, $M_{\alpha}$ ,  $A_{\alpha}$  ve  $C_{\alpha}$ 'nin termal davranışları  $\Delta_{S} = 0.0$ , r = 1.0, d = -4.0 ve h = 0.75 değerleri için elde edilmiştir. Bu şekilde mutlak sıfır sıcaklık değerinde  $M_{C} = 0.5$  ve $M_{S1} = M_{S2} = 0.0$  iken sıcaklık arttıkça öz mıknatıslanması ( $M_{C}$ ) sürekli olarak azalarak sıfıra  $T_{C}/J_{C} = 0.95$  değerinde gitmektedir. Burada kabuk mıknatıslanmaları ise herhangi faz geçişi sergilemeyip sürekli sıfır değerindedir. Öz ve kabuk mıknatıslanmalarından anlaşılacağı üzere  $T_{C}/J_{C} = 0.95$  değerinde sistem manyetik olmayan (nm) fazdan paramanyetik (p) faza ikinci-derece faz geçişi göstermektedir. Ayrıca faz geçişsıcaklığında( $T_{C}/J_{C} = 0.95$ ) öz için histerezis döngüalanı (A $\alpha$ ) maksimumbir değere sahip olurken dinamik korelasyon( $C\alpha$ ) ise minimum bir değere sahip olmaktadır. Kabuk için histerezis döngüalanlarıve dinamik korelasyonlar ise sıfırdan itibaren düzenli bir şekilde artmaktadır, herhangi bir pik veya faz geçiş özelliği sergilememektedir.



Şekil 3.3.  $\Delta_S = 0.0$ , r = 1.0, d = -4.0 ve h = 0.75 değerleri için $M_{\alpha}$ ,  $A_{\alpha}$ ,  $C_{\alpha}$ 'nın sıcaklığa bağlı davranışı.  $T_C/J_C = 0.95$  manyetik olmayan (nm) fazdan paramanyetik (p) faza ikinci-derece faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.

Şekil 3.4'de $M_{\alpha}$ ,  $A_{\alpha}$  ve  $C_{\alpha}$ 'nin termal davranışları  $\Delta_S = 0.0$ , r = 1.0, d = 1.0 ve h = 3.5 değerleri için modelin  $m_C=0.5$  ve  $m_{S1}=m_{S2}=1.0$  başlangıç değerlerinde elde edilmiştir. Bu şekilde mutlak sıfır sıcaklık değerinde $M_C=0.5$  ve  $M_{S1}=M_{S2}=1.0$ iken sıcaklık artıkça öz ve kabuk mıknatıslanmaları  $T_t/J_C=1.10$  sıcaklık değerinde aniden (süreksiz) sıfıra inmektedir. Yani  $T_t/J_C=1.10$  sıcaklık değerinde ferrimanyetik (i) fazdanparamanyetik (p) faza birinci-derece faz geçişi olmuştur. Benzer bir süreksiz atlama durumu ( $T_t/J_C=1.10$  sıcaklık değerinde) histerezis döngüalanlarında ( $A_{\alpha}$ ) maksimum bir değere, dinamik korelasyonlarda( $C_{\alpha}$ ) ise minimum bir değere meydana gelmiştir.



Şekil 3.4,  $\Delta_{\rm S} = 0.0$ , r = 1.0, d = 1.0 ve h =3.5 değerleri için M<sub>a</sub>, A<sub>a</sub>,C<sub>a</sub>'nın sıcaklığa bağlı davranışı. T<sub>t</sub>/J<sub>C</sub>= 1.10 sıcaklık değerinde ferrimanyetik (i) fazdanparamanyetik (p) faza birinci-derece faz geçişi olmuştur.

Şekil 3.5' deM<sub>a</sub>, A<sub>a</sub> ve C<sub>a</sub>'nin termal davranışları,  $\Delta_S = 0.0$ , r = 1.0, d = -3.0 ve h =1.6 değerleri için modelin m<sub>C</sub>=0.5 ve m<sub>S1</sub>=m<sub>S2</sub>=0.0 başlangıç değerlerinde elde edilmiştir.Bu şekilde mutlak sıfır sıcaklık değerindeM<sub>C</sub> = 0.5 veM<sub>S1</sub>= M<sub>S2</sub>= 0.0 iken sıcaklık arttıkça öz mıknatıslanması (M<sub>C</sub>) T<sub>t</sub>/J<sub>C</sub>= 0.268 değerinde aniden sıfıra gitmektedir. Burada kabuk mıknatıslanmaları ise herhangi faz geçişi sergilemeyip sürekli sıfır değerindedir. Öz ve kabuk mıknatıslanmalarından anlaşılacağı üzere T<sub>t</sub>/J<sub>C</sub>= 0.268 değerinde sistem manyetik olmayan (nm) fazdan paramanyetik (p) faza birinciderece faz geçişi göstermektedir. Ayrıca faz geçişsıcaklığında(T<sub>t</sub>/J<sub>C</sub>= 0.268) öz için Aα maksimumbir değere sahip olurken Cαise minimum bir değere sahip olmaktadır. Kabuk için histerezis döngüalanlarıve dinamik korelasyonlar ise sıfırdan itibarendüzenli bir şekilde artmaktadır, herhangi bir pik veya faz geçiş özelliği sergilememektedir.



Şekil 3.5,  $\Delta_S = 0.0$ , r = 1.0, d = -3.0 ve h = 1.60 değerleri için  $M_{\alpha}$ ,  $A_{\alpha}$ ,  $C_{\alpha}$ 'nın sıcaklığa bağlı davranışı.  $T_t/J_C = 0.268$  sıcaklık değerinde manyetik olmayan (nm) fazdanparamanyetik (p) faza birinci-derece faz geçişi olmuştur.

Şekil 3.6 (a) ve Şekil 3.6 (b), $M_{\alpha}$ ,  $A_{\alpha}$  ve  $C_{\alpha}$ 'nin termal davranışları $\Delta_{S}$ = 0.0, r = 1.0, d = -3.3 ve h =0.50 değerleri ve sistemin farklı başlangıç değerleri için elde edilmiştir. Şekil 3.6 (a)'da arka arkaya iki faz geçişi meydana gelmiştir. İlk durumda mutlak sıfır sıcaklık değerinde  $M_{C}$ = 0.5 ve $M_{S1}$ =  $M_{S2}$ = 1.0 iken sıcaklık arttıkça kabuk mıknatıslanması sürekli olarak sıfıra yaklaşırken ve  $T_{C}/J_{C}$  = 1.075 değerinde ikinci derece faz geçişi vermiştir. Ancak sıcaklık artarken öz mıknatıslanmaları önce düzenli bir şekilde azalırken  $T_t/J_C$  = 0.300 değerinde aniden sıfır değerine düşmektedir, yani  $T_t/J_C$  = 0.300 değerinde ferrimanyetik (i) fazdan manyetik olmayan (nm) fazına faz geçişi meydana gelmiştir. Bu şekil dikkatlice incelendiğinde sistemde  $T_t/J_C$  = 0.300 değerine kadar i fazı mevcutken,  $T_t/J_C$  = 0.300 ile  $T_C/J_C$  = 1.075 arasında nm fazı,  $T_C/J_C$ = 1.075'den büyük değerler için p fazı mevcuttur. Birinci ve ikinci derece faz geçiş sıcaklıklarında ilgili histerezis döngüalanlarında (A<sub>a</sub>) maksimum değerlere, dinamik korelasyonlarda(C<sub>a</sub>) ise minimum değerlerde sürekli ve süreksiz atlamalar mevcuttur. Diğer taraftan Şekil 3.6 (b) yapı itibariyle Şekil 3.3'e benzer manyetik davranış sergilemektedir. Şekil 3.3 ile arasındaki tek fark nm fazından p fazına dinamik faz geçişinin  $T_C/J_C = 1.075$  olmasıdır. Şekil 3.6 (a) ve Şekil 3.6 (b) aynı sistem parametreleri için elde edildiğinden (sadece başlangıç değerleri farklı) beraber dikkatlice incelendiğinde sistemde  $T_t/J_C = 0.300$  değerine kadar karma i+nm fazı mevcutken,  $T_t/J_C = 0.300$  ile  $T_C/J_C = 1.075$  arasında nm fazı,  $T_C/J_C = 1.075$ 'den büyük değerler için p fazı mevcuttur.



d=-3.30 ve h=0.50 T<sub>t</sub> /J<sub>c</sub>=0.30 ve T<sub>c</sub>/J<sub>c</sub>=1.075



Şekil 3.6. $\Delta_S = 0.0$ , r = 1.0, d = -3.3 ve h = 0.50değerleri için M<sub>a</sub>, A<sub>a</sub> ve C<sub>a</sub>'nin termal davranışları. (a)m<sub>C</sub>=0.5, m<sub>S1</sub>=m<sub>S2</sub>=1.0 başlangıç değerleri, (b)m<sub>C</sub>=0.5, m<sub>S1</sub>=m<sub>S2</sub>=0.0 başlangıç değerleri için elde edilmiştir. T<sub>t</sub>/J<sub>C</sub> = 0.300 değerine kadar karma i+nm fazı mevcutken, T<sub>t</sub>/J<sub>C</sub> = 0.300 ile T<sub>C</sub>/J<sub>C</sub> = 1.075 arasında nm fazı, T<sub>C</sub>/J<sub>C</sub> = 1.075'den büyük değerler için p fazı mevcuttur.

Şekil 3.7 (a) ve Şekil 3.7 (b), $M_{\alpha}$ ,  $A_{\alpha}$  ve  $C_{\alpha}$ 'nin termal davranışları  $\Delta_{S} = 0.0$ , r = 1.0, d = 1.0 ve h = 3.1değerleri ve sistemin farklı başlangıç değerleri için elde edilmiştir. Şekil 3.7 (a) yapı itibariyle Şekil 3.2'ye benzer manyetik davranış sergilemektedir. Şekil 3.2 ile arasındaki tek fark i fazından p fazına dinamik faz geçişinin  $T_C/J_C = 1.96$  olmasıdır. Şekil 3.7 (b)'de mutlak sıfır sıcaklık değerinde  $M_C = 0.0$  ve $M_{S1} = M_{S2} = 0.0$  (yani paramanyetik faz sistemde mevcut) iken sıcaklık arttıkça öz ve kabuk mıknatıslanmaları  $T_t/J_C = 0.815$  değerinde aniden $M_C = 0.5$  ve $M_{S1} = M_{S2} = 1.0$  (yani ferrimanyetik faz

sistemde mevcut) durumuna birinci derece faz geçişi meydana gelmiştir. Sıcaklık artmaya devam ettikçe öz ve kabuk mıknatıslanmaları sürekli bir şekilde azalarak  $T_C/J_C$ = 1.96 değerinde sıfıra inmiştir. Şekil 3.7 dikkatlice incelendiğinde sistemde  $T_t/J_C$  = 0.815'ye kadar karma i+p fazı,  $T_t/J_C$  = 0.815 ile  $T_C/J_C$  = 1.96 arasında i fazı ve  $T_C/J_C$  = 1.96'den yüksek sıcaklıklarda p fazı mevcuttur. Birinci ve ikinci derece faz geçiş sıcaklıklarında ilgili histerezis döngüalanlarında (A<sub>a</sub>) maksimum değerlere, dinamik korelasyonlarda(C<sub>a</sub>) ise minimum değerlerde sürekli ve süreksiz atlamalar mevcuttur





Şekil 3.7.  $\Delta_S = 0.0$ , r = 1.0, d = 1.0 ve h = 3.10değerleri için  $M_{\alpha}$ ,  $A_{\alpha}$  ve  $C_{\alpha}$ 'nin termal davranışları. (a)m<sub>C</sub>=0.5, m<sub>S1</sub>=m<sub>S2</sub>=1.0 başlangıç değerleri, (b)m<sub>C</sub>=0.0, m<sub>S1</sub>=m<sub>S2</sub>=0.0 başlangıç değerleri için elde edilmiştir.  $T_t/J_C = 0.815$ 'ye kadar karma i+p fazı,  $T_t/J_C = 0.815$  ile  $T_C/J_C = 1.96$  arasında i fazı ve  $T_C/J_C = 1.96$ 'den yüksek sıcaklıklarda p fazı mevcuttur.

#### **3.4.**(T/Jc, h/Jc)Düzleminde Dinamik Faz Diyagramları

Önceki bölümde elde edilen dinamik faz geçiş (DFG)sıcaklıklarından yararlanılarak artık sistemin dinamik faz diyagramlarını(T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>) düzleminde sunabiliriz. Bu bölümde etkileşim parametreleri, yüzeyler arası etkileşim parametresi (r), yüzey değişim etkileşim parametresi ( $\Delta_s$ ) ve kristal alan (d)'nin farklı değerleri için (T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>)düzlemindeki dinamik faz diyagramları şekillerle ifade edilecektir. Böylece (T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>) düzlemindeki faz diyagramlarına etkileşim parametrelerinin etkisi incelenecektir. Bu dinamik faz diyagramlarında, kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci ve ikinciderece faz geçiş çizgilerini göstermektedir. Faz diyagramlarında, içi dolu küreler dinamik üçlükritik noktayı temsil ederken, QP dinamik dörtlü noktayı temsil etmektedir. Elde edilen faz diyagramlarının özellikleri ile etkileşim parametrelerinin dinamik faz diyagramları üzerindeki etkisi aşağıdaki gibi sunulmuştur. Bu faz diyagramları:

i) r=1.0,  $\Delta_s=0.0$  ve d=1.0 değerleri için (T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>) düzleminde elde edilen faz diyagramı Şekil 3.8'de gösterilmektedir. Bu faz diyagramında, indirgenmiş sıcaklıkta (T) ve manyetik alan genliğinde (h) sistemdeparamanyetik (p) faz mevcuttur. T ve h'nin düşük değerlerinde ise sistemde ferrimanyetik (i) faz mevcuttur. Bu iki bölge arasındaki dinamik faz sınırı,  $i \rightarrow p'$  ye ikinci-derece faz geçiş çizgisidir. Ayrıcaindirgenmiş sıcaklıkve manyetik alan genliğinin belirli değerlerinde i ve p fazının birlikte bulunduğu karma i+p fazı bulunmaktadır. Karma i+p fazı, i fazı ve p fazından birinci-derece faz geçiş çizgileriyle ayrılmıştır. Bu iki birinci-derece faz geçiş çizgileri birbirine yaklasarak birlesmekte ve birinci-derece faz geçiş çizgisi son bularak, ikinci-derece faz geçiş çizgisi meydana gelmektedir.Birinci ve ikinci faz geçiş çizgilerinin birleştiği noktada sistemdedinamik üçlükritik nokta görülmektedir.Dinamik üçlükritik nokta içi dolu küre ile ifade edilmektedir. Bu faz diyagramlarına benzer faz diyagramları daha önce kinetik spin-1/2 [79] (bu sistemde i fazı yerine ferromanyetik (f) faz gelmektedir), spin-1 [80,81,82] (bu çalışmalar da i fazının yerine f fazı gelmektedir), spin-3/2 [83,84,85] (bu çalışmada i fazının yerine ferromanyetik-3/2 (f<sub>3/2</sub>) fazı gelmektedir), spin-2 [86, 87] (bu çalışmalar da i fazı yerine ferromanyetik-2 (f<sub>2</sub>) fazı gelmektedir) Ising sistemlerinde elde edilmiştir. Yine bu faz diyagramının benzeri faz diyagramı karma spin (1/2, 1) [88,89], karma spin (1, 3/2) [90], karma spin (1/2, 2) [91], karma spin (1, 5/2) [92], karma spin (3/2,2) [93],karma spin (1, 2) [94], karma spin (1/2,3/2)

[95], spin(1/2, 5/2) [96] ve karma spin (3/2, 5/2) [97] Ising modellerinde de elde edilmiştir.



Şekil 3.8. Karma spin(1/2, 1) Ising nanotüp sisteminde d= 1.0 değeri için (T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>) düzleminde dinamik faz diyagramı.

ii) r=1.0,  $\Delta_s$ =0.0 ve d=-1.0 değerleri için (T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>) düzleminde elde edilen faz diyagramıŞekil 3.9'da gösterilmektedir.Bu faz diyagramında, indirgenmiş sıcaklıkta (T) ve manyetik alan genliğinde (h)sistemdekarma i+p ve karma i+nm fazı meydana gelmektedir. Karma i+nm fazı ile i fazı arasındaki dinamik faz sınırı, birinci derece faz geçişidir. Bu faz diyagramına benzer faz diyagramları daha önce kinetik spin-3/2 [83, 84, 85] bu çalışmalarda i fazının yerine ferromanyetik-3/2 (f<sub>3/2</sub>) fazı gelmektedir ve spin-5/2 [98] (bu çalışada i fazı yerine ferromanyetik-5/2 (f<sub>5/2</sub>) fazı gelmektedir) Ising sistemlerinde elde edilmiştir.



Şekil 3.9, Karma spin(1/2, 1) Ising nanotüp sisteminde d= -1.0 değeri için (T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>) düzleminde dinamik faz diyagramı.

iii)r=1.0,  $\Delta_s$ =0.0 ve d=-2.0 değerleri için (T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>) düzleminde elde edilen faz diyagramıŞekil 3.10'da gösterilmektedir.Bu faz diyagramında, indirgenmiş sıcaklıkta (T) ve manyetik alan genliğinde (h) sistemde bulunan i+p, i+nmkarmafazlarınyanı sıra ayrıca bu faz diyagramında düşük sıcaklık ve belirli manyetik alan değerlerinde yeni bir i+p karma faz bölgesi gözlenmeye başlanıyor. Karma i+nm, i+p fazları ile i fazı arasındaki dinamik faz sınırı, birinci-derece faz geçişidir.Şunuda belirtmek gerekir ki tek-iyon anizotropisinin negatif değerlerinde ferrimanyetik fazın küçülüp, karma i+p fazının büyümeye başladığı gözlemlenmiştir. Bu faz diyagramına benzer faz diyagramı daha önce yalnızca kinetik spin-5/2Ising sisteminde elde edilmiştir [98]. (Bu çalısmada i fazı yerine ferromanyetik-5/2 (f<sub>5/2</sub>) fazı, i+p fazı yerine f<sub>5/2</sub>+p fazı ve i+nm fazı yerine f<sub>5/2</sub>+f<sub>1/2</sub> fazı gelmektedir. Ancak spin-5/2 BC modeli için herhangi bir telafi etkisi gözlenmemiştir)



Şekil 3.10, Karma spin(1/2, 1) Ising nanotüp sisteminde d= -2.0 değeri için (T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>) düzleminde dinamik faz diyagramı.

iv) r=1.0,  $\Delta_s=0.0$  ve d=-2.5 değerleri için (T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>) düzleminde elde edilen faz diyagramıŞekil 3.11'de gösterilmektedir.Bu faz diyagramında, indirgenmiş sıcaklıkta (T) ve manyetik alan genliğinde (h) sistemde bulunan düşük değerlerinde ikinci bir karma i+nm+p fazı meydana gelmektedir. Bu faz diyagramındaki karma fazlararasındaki ve bu karma fazların i fazı arasındaki dinamik faz geçiş sınırı, birinciderece faz geçişidir. Üçlü karma fazın meydan gelme nedeni kristal alanın negatif yüksek değerlerine çıkıldıkça karma i+nm ve i+p faz bölgelerinin büyüyerek birbiri içine yerleşmesidir veayrıca sistem de bir adet dörtlükritik nokta(QP) meydana gelmektedir.Tek-iyonanizotropisinin negatif değerlerine gidildikce faz diyagramlarındaki ferrimanyetik fazın daha da küçüldüğü ve karma fazların büyümeye devam ettiği gözlemlenmiştir.Bu faz diyagramına benzer faz diyagramı daha önce yalnızca kinetik spin-5/2 [98](bu çalışmada yeni gözlemlenen i+nm fazı yerine f<sub>5/2</sub>+p fazı gelmektedir) Ising sistemin de elde edilmiştir.



Şekil 3.11.Karma spin(1/2, 1) Ising nanotüp sisteminde d= -2.5 değeri için (T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>) düzleminde dinamik faz diyagramı.

**v**) r=1.0,  $\Delta_S$ =0.0 ve d=-3.0 değerleri için (T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>) düzleminde elde edilen faz diyagramıŞekil 3.12'de gösterilmektedir.Bu faz diyagramında, indirgenmiş sıcaklıkta (T) ve manyetik alan genliğinde (h) bu faz diyagramı p, i, nm, i+p, nm+p ve i+nm fazlarının tümüne sahiptir. Temel fazlar (p, i ve nm) arasındaki dinamik faz sınırları ikinci-derece faz geçiş çizgileri ile belirlenirken,diğer fazlar arasındaki dinamik faz sınırları birinci-derece faz geçiş çizgileri ile ayrılmaktadır. Sistemde indirgenmiş manyetik alan genliğin yüksek değerlerinde ve düşük sıcaklıkta iki yeni dinamik üçlükritik nokta meydana gelmektedir. Sistemde toplam üç adet dinamik üçlü kritik noktave dörtlükritik nokta(QP) mevcuttur.



Şekil 3.12, Karma spin(1/2, 1) Ising nanotüp sisteminde d= -3.0 değeri için (T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>) düzleminde dinamik faz diyagramı.

vi)r=1.0,  $\Delta_s$ =0.0 ve d=-3.2 değerleri için (T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>)düzleminde elde edilen faz diyagramıŞekil 3.13'de gösterilmektedir.Bu faz diyagramında, indirgenmiş sıcaklıkta (T) ve manyetik alan genliğinde (h) belirli değerlerinde karma i+p, nm+p, i+nm fazlarıgözlenirken, dörtlükritik nokta (QP) tek-iyon anizotropisinin negatif etkisinden dolayı ortadan kaybolmuştur ve i+nm fazı bölgesi küçülmeye başlamıştır.



Şekil 3.13.Karma spin(1/2, 1) Ising nanotüp sisteminde d= -3.2 değeri için (T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>) düzleminde dinamik faz diyagramı.

vii) Tek-iyon anizotropisinin negatif etkisi daha da arttığında, r=1.0,  $\Delta_s$ =0.0 ve d=-3.4 değerleri için (T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>) düzleminde elde edilen faz diyagramıŞekil 3.14'de gösterilmektedir.Bu faz diyagramında, indirgenmiş sıcaklıkta (T) ve manyetik alan genliğinde (h) belirli değerlerinde Şekil 3.14'deki faz diyagramı elde edilmiştir ve karma i+nm fazı daha da küçülmüştür. Bu faz diyagramında nm ve i faz bölgeleri ile p fazı arasında dinamik faz sınırı ikinci-derece faz geçiş çizgisiyle birbirinde ayrılırken diğer fazlar arasındaki dinamik faz sınırları, birinci-derece faz geçiş çizgileridir. Şekil 3.13 ve Şekil 3.14' de elde edilen faz diyagramlarına benzer faz diyagramı daha önce sadece kinetik spin-3/2 Blume-Emery-Griffithsmodelinde elde edilmiştir [85]. (Bu çalışma da nm fazınınyerine ferromanyetik-1/2 (f<sub>1/2</sub>) fazı, i+nm fazının yerine f<sub>3/2</sub>+f<sub>1/2</sub> fazı, nm+p ve i+p fazlarının yerine f<sub>1/2</sub>+f<sub>q</sub> fazı gelmektedir.)



Şekil 3.14.Karma spin(1/2, 1) Ising nanotüp sisteminde d= -3.4değeri için (T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>) düzleminde dinamik faz diyagramı.

**viii**)r = 1.0,  $\Delta_s$  = 0.0 ve d = -4.0 değerleri için (T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>) düzleminde elde edilen faz diyagramıŞekil 3.15'de gösterilmektedir.Bu faz diyagramı Şekil 3.14'e benzemektedir, ancak farkı düşük sıcaklıktaki karma i+p faz bölgesinin krsital alanın etkisiyle kaybolmasıdır. Bu faz diyagramında nm fazı ile p fazı arasında dinamik faz sınırı ikinciderece faz geçiş çizgisiyle birbirinden ayrılırken, diğer fazlar arasındaki dinamik faz sınırları, birinci-derece faz geçiş çizgileridir. Ayrıca bu faz diyagramında, indirgenmiş sıcaklıkta (T) ve indirgenmiş manyetik alan genliğinde (h) belirli değerlerinde tek-iyon anizotropisinin negatif etkisinden dolayı i+nm karma faz bölgesi küçülmeye başlamıştır.



Şekil 3.15. Karma spin(1/2, 1) Ising nanotüp sisteminde d= -4.0 değeri için (T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>) düzleminde dinamik faz diyagramı.

**ix**) r = 1.0,  $\Delta_S = 0.0$  ve d = -5.0 değerleri için (T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>) düzleminde elde edilen faz diyagramıŞekil 3.16'da gösterilmektedir.Bu faz diyagramında, indirgenmiş sıcaklıkta (T) ve manyetik alan genliğinde (h) belirli değerlerinde karma i+nm fazı, tek-iyon anizotropisinin negatif etkisinden dolayı ortadan kaybolmuştur. Şunuda belirtmek gerekirki, tek-iyon anizotropisinin negatif daha yüksek değerlerinde elde edilen tüm faz diyagramları bu faz diyagramına yapısal olarak benzemektedir.



Şekil 3.16, Karma spin(1/2, 1) Ising nanotüp sisteminde d= -5.0 değeri için (T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>) düzleminde dinamik faz diyagramı.

#### **BÖLÜM 4**

#### SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu tez çalışmasında karma spin (1/2,1) Ising nanotüp sisteminin dinamik davranışları ortalama-alan yaklaşıklığı ve Glauber-tipi stokhastik dinamik kullanılarak incelendi. Silindirik nanotüp sistemiIsing modeli ile tanımlanaraken yakın komşu etkileşmelerini, kristal alan (tek-iyon anizotropi)etkileşimi ve zamana bağlı dış manyetik alan terimini içeren silindirik karma spin (1/2, 1)Ising nanotüp sisteminin Hamiltonyen ifadesi ile sistem detaylıca incelendi.

Zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan varlığında karma spin (1/2, 1) Ising nanotüp sistemi için sistemin dinamik davranışlarını açıklayan OA dinamik denklemlerini elde etmek için Glauber dinamiği ve master denklemlerinden yararlanıldı. Karma spin (1/2, tipi stokhastik dinamiğe 1) Ising nanotüp sistemi Glaubergöre birim zamanda1/toranında değişim gösterdiği ortalama-alan dinamik denklemlerin denklemleri elde edildi.Önceliklesistemde var olan fazları bulmak için sistemin dinamik denklemlerinden (denklem (2.14),(2.25)ve (2.26))yararlanılarak, bu denklemlerinkararlı çözümleri, farklı kristal alan (d), manyetik alan genliği (h) ve sıcaklık (T) değerleri için incelendi. Bu denklemlerin cözümleri, verilen sistem parametreleri ve başlangıç değerleri için Adams-Moulton kestirme ve düzeltme yöntemi kullanılarak detaylıca incelendi ve sistemde paramanyetik (p), manyetik olmayan (nm) ve ferrimanyetik (i) temel fazlarının yanında,i+ nm, nm + p, i+nm+p ve i + p karma fazları bulundu. Bu fazlara karşılık gelen bazı çözümlerŞekil 3.1'de gösterildi. Şekil 3.1.(a)'da yalnızca simetrik çözüm elde edildi ve bundan dolayı sistemde sadece paramanyetik (p) faz mevcut olduğu görüldü. Bu durumda  $m_c(\xi)$  ve  $m_s(\xi)$  birbirine eşittir ve sıfır değeri civarında salınırlar ve dış manyetik alanla uyum içinde olduğu görüldü.  $(m_c(\xi) = m_s(\xi) = 0)$ . Şekil 3.1.(b) ve Şekil 3.1.(c)'de simetrik olmayan çözümler elde edildi. Şekil 3.1.(b)'de  $m_c(\xi) = \pm 1/2$  civarında salınırken ve  $m_s(\xi) = \pm 1.0$  değeri etrafında salınırlar, bu durumda sistemde ferrimanyetik (i) faz mevcut olduğuve dış manyetik alana uyum göstermediği görüldü. Şekil 3.1.(c)'de  $m_{\rm C}(\xi) = \pm 1/2$ değerleri etrafında salınırken  $m_s(\xi) = 0$ sıfır etrafında salınırkensistemin manyetik olmayan (nm) faza sahip olduğu görüldü. Elde edilen bu

cözümlerin başlangıç değerlerine bağlı olmadığı görüldü. Sekil 3.1.(d)'de iki farklı çözüm elde edilmiştir ve sistemde p ve i fazları bir arada bulunmaktadır. İlk çözüm de  $m_c(\xi)$  ve  $m_s(\xi)$ 'ler sıfır değeri civarında salınırken sistemde paramanyetik (p) faz gözlenmiştir. İkinci çözümde ise  $m_{c}(\xi) = \pm 1/2$  civarında salınırken ve  $m_{s}(\xi) = \pm 1.0$ değeri etrafında salınırlar, bu durumda sistemde ferrimanyetik (i) faz gözlenmiştir.Bundan dolayı sistemde i + p karma fazı bulunduğu gözlenmiştir. Şekil 3.1.(e)'de yine iki farklı çözüm elde edilmiştir ama bu sefer sistemde p ve nm fazları bir arada bulunmaktadır. Buradaki ilk çözüm de  $m_c(\xi)$  ve  $m_s(\xi)$  yine sıfır değeri civarında salınırlar ve bundan dolayı sistemde paramanyetik (p) faz elde edilmiştir. İkinci çözümde ise  $m_{c}(\xi) = \pm 1/2$  değerleri etrafında salınırken  $m_{s}(\xi) = 0$  sıfır etrafında salınır. Bundan dolayı sistemde manyetik olmayan (nm) faz elde edilmiştir. Bundan dolayı sistemde nm + p karma fazı da elde edilmiştir. Özetle, Şekil 3.1'de görüldüğü gibi sistemde karma fazlar mevcuttur. Bu fazlar, sırasıyla p, i, nm temel fazları vei + p, nm + p, i+nm+p ve i+ nm karma fazlarıdır.

Dinamik düzen parametrelerinin  $M_{\alpha}$ ,  $A_{\alpha}$  ve  $C_{\alpha}$ 'nın sıcaklığa bağlı davranışı etkileşme parametrelerinin farklı değerleri için Adams-Moulton kestirme ve düzeltme metodu ile Romberg integrasyon metodu ile nümerik metotların birleştirilmesiyle incelendi. Fazlar arasındaki dinamik faz sınırlarının ve dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıklarının nasıl elde edildiği Şekil 3.2, Şekil 3.3, Şekil 3.4, Şekil 3.5, Şekil 3.6 (a) ve (b) ile Şekil 3.7 (a) ve (b)'de gösterildi. Bu şekillerde, T<sub>t</sub> birinci-derece faz geçiş sıcaklığını gösterirken, Tc ise ferrimanyetik ve manyetik olmayan fazlardan paramanyetik faza ikinci-derece faz geçiş sıcaklıklarını göstermektedir. Birinci ve ikinci derece faz geçiş sıcaklıklarında ilgili olarak histerezis döngü alanlarında ( $A_{\alpha}$ ) maksimum değerlere, dinamik korelasyonlarda  $(C_{\alpha})$  ise minimum değerlerde sürekli ve süreksiz atlamaların mevcut olduğu görüldü.Daha sonra dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıklarından yararlanılarak,farklı etkileşim parametreleri, yüzeyler arası etkileşim parametresi (r), yüzey değişim etkileşim parametresi ( $\Delta_s$ ) ve kristal alan (d)'nin farklı değerleri için (T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>) düzlemindeki dinamik faz diyagramları Şekil 3.8 ve Şekil 3.16 arasında sunuldu. (T/J<sub>C</sub>, h/J<sub>C</sub>) düzlemindedokuz tane farklı yapıda dinamik faz diyagramı elde edildi. Bu dinamik faz diyagramlarında, kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci ve ikinci-derece faz geçiş çizgilerini göstermektedir. Faz diyagramlarında, içi dolu küreler dinamik üçlükritik noktayı temsil ederken, QP dinamik dörtlü noktayı temsil etmektedir. Karma spin(1/2, 1) Ising nanotüp sisteminin dinamik faz diyagramları incelendiğinde sistemin davranışının kuvvetli bir şekilde etkileşim parametreleri olan, yüzeyler arası etkileşim parametresi (r), yüzey değişim etkileşim parametresi ( $\Delta_s$ ) ve kristal alan (d)'ye bağlı olduğu açık olarak görülmektedir.

Son olarak belirtmek gerekir ki dinamik yöntemden kaynaklanan eksikliklerden dolayı dinamik ortalama-alan yaklaşımında bazı birinci-dereceden faz geçiş sıcaklıkları ve yapay özel noktalar olabilir. Bu yüzden bu tez çalışmamasının daha hassas ölçüm olanağı sağlayandinamik etkin-alan teorisi, dinamik Monte Carlo (DMC) simülasyonu gibi daha iyi sonuç veren yöntemlerleincelenmesine ışık tutacağını ümit etmekteyiz.

#### KAYNAKLAR

- 1. Shong C. W., Haur S. C., Wee A. T. S., "Science at the Nanoscale: An Introductory Textbook", Singapore: Pan Stanford Pub., s.214, 2010.
- 2. Wegrowe J. E., Kelly D., Jaccard Y., et. al, "Current-induced magnetization reversal in magnetic nanowires", Europhysics Letters, 45, s. 626-632, 1999.
- Fert A., Piraux L., "Magnetic nanowire", Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 200, s.338-358, 1999.
- O'Connor C.J., Tang J., Zhang J. H., "Nanostructured magnetic materials" in Magnetism: Molecules to materials III: Nanosized magnetic materials, Miller J.S., Drillon M (Eds.), Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim, s.1-36, 2002.
- Kurlyandskaya G. V., Sanchez M. L., Hernando B., Prida V. M., Gorria P., Tejedor M.," Giant-magnetoimpedance-based sensitive element as a model for Biosensors", Applied Physics Letters, 82, s. 3053-3055, 2003.
- 6. Zeng H., Li J., Liu J.P., Wang Z.L., Sun S., "Exchange-coupled nanocomposite magnets by nanoparticle self-assembly", Nature, 420, s. 395-398, 2002.
- 7. Nie S., Emory S.R.,"Probing single molecules and single nanoparticles by surfaceenhanced Raman scattering", Science, 275, s.1102-1106, 1997.
- Elliott D.W., Zhang W.X.," Field Assessment of Nanoscale Bimetallic Particles for Groundwater Treatment", Environmental Science and Technology, 35, s. 4922-4926, 2001.
- Wong A.P.Y., Chan M.H.W," Liquid-Vapor Critical Point of 4He in Aerogel", Physical Review Letters, 65, s.2567-2570, 1990.
- Alexiou C., Schmidt A., Klein R., Hullin P., Bergemann C., Arnold W.," Magneticdrug targeting: biodistribution and dependency on magnetic field strength", Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 252, s. 363-366, 2002.
- Bourlinos A.B., Simopoulos A., Boukos N., et al.," Magnetic modification of the external surfaces in the MCM-41 porous Silica: Synthesis, characterization, and functionalization", The Journal of Physical Chemistry B., 105, s. 7432-7437, 2001.
- Gross A.F., Diehl M.R., Beverly K.C., et al, "Controlling magnetic couplingbetween Cobalt nanoparticles through nanoscale confinement in hexagonal mesoporous Silica", The Journal of Physical Chemistry B, 107, 5475-5482, 2003.
- 13. Lindsay S., "Introduction to Nanoscience", Oxford University Press, 472,2010.
- Göçek İ., Kurşun S., "Küçük G.Tekstil endüstirisinde nanoteknoloji uygulamaları", s.164,3/2006.

- Corti CW., Holiday RJ., Thompson DT., "Developing New Industrial Applications for Gold", Gold Nanotechnology ,Gold Bulletin, 35(4), 111-117, 2002.
- Özdoğan E., Demir A., Seventekin N., "Lotus Etkili Yüzeyler, Tektil ve Konfeksiyon", s.287-290,1/2006.
- MomoseS., Kodama H., Uzumaki T., Tanaka A., "Magnetic properties of magnetically isolated L10-FePt nanoparticles", Appl. Phys. Lett., 85(10), 1748-1750, 2004
- Coffy W.T., Crothers D.S.F., Dormann J.L., Kalmykov Yu.P., Kennedey E.C., Wernsdorfer .W., "Effect of an oblique magnetic field on the superparamagnetic relaxation time. II. Influence of the gyromagnetic term"., Phys.Rev.Lett. 80, 5655, 1998
- Kovylina M., Garcia del Muro M., Konstantinovic Z., Varela M., Iglesias O.,Labarta A., Batlle X., "Controlling exchange bias in Co-CoOx nanoparticles by oxygen content", Nanotechnology., 20, 175702, 2009.
- Vasilakaki M., Trohidou K.N., "Numerical study of the exchange-bias effect in nanoparticles with ferromagnetic core/ferrimagnetic disordered shell morphology", Phys. Rev., B79, 144402, 2009.
- 21. Maller, J., Zhang, K.Y., Chien, C.L., EagletonT.S., Searson, P.C., "Fabrication and of fcc CoXPt1-XCoXPt1-X nanowires", magnetic properties Appl.Phys.Lett.,84,39002004 Lieber C.M., Wang Z.L., "Functional Nanowires", MRS Bull. 32, 99-108, 2007; Parkin, S.S.P., Hayashi, М., Thomas, L., "Magnetic domain-wall racetrack memory", Science., 320, 190-4, 2008; Zhang, H., Hoffmann, A., Divan, R., Wang, P., "Direct-current effects on magnetization reversal properties of submicron-size Permalloy patterns for radiofrequency devices", Appl Phys. Lett., 95, 232503, 2009.
- 22. Lee, J., Suess, D., Schrefl ,T., Oha, K.H., Fidler, J., "Magnetic characteristics of ferromagnetic nanotube", J.Magn Magn Mater., 310, 2445-2447, 2007.
- Landeros, P., Allende, S., Escrig, J., Salcedo, E., Altbir, D., "Role of grain boundary and grain defects on ferromagnetism in Co:ZnO films", Appl.Phys.Lett.,90,102506,2007;

Landeros P., Suarez O.J., Cuchillo A., Vargas P., "Equilibrium states and vortex domain wall nucleation in ferromagnetic nanotubes", Phys. Rev. B79, 024404, 2009.

- 24. Konstantinova, E., "Theoretical simulations of magnetic nanotubes using Monte Carlo method", J. Magn. Magn. Mater. 320, 2721, 2008.
- 25. Kaneyoshi, T., "Phase diagrams of a nanoparticle described by the transverse Ising model", Phys.StatusSolidi., B242, 2938-2948, 2005;
  Kaneyoshi, T., "Compensation temperature in a cylindrical Ising nanowire (or nanotube)", Physica., A390,3697, 2011;
  Kaneyoshi, T., "Phase diagrams of a cylindrical transverse Ising ferromagnetic nanotube; Effects of surface dilution", Solid Stade Commun., 151, 1528-1532, 2011.
- Wang, C.D., Lu, Z.Z., Yuan, W.X., Kwok, S.Y., Teng, B. H., "Dynamic properties of phase diagram in cylindrical ferroelectric nanotubes", Phys.LetA., 375,3405-3409,2011.
- 27. Mi, B.Z., Wang, H.Y., Zhou, Y.S., "Theoretical investigations of magnetic properties of ferromagnetic single-walled nanotubes", J. Magn. Magn. Mater., 322, 952-958, 2010;
  Mi B.Z., Wang H.Y., Zhou Y.S., "Theoretical investigations of magnetic properties of ferromagnetic single-layered nanobelts", Phys.Status Solidi., B 248,1280-1286,
  - 2011.
- Kaneyoshi, T., "Magnetic properties of a cylindrical Ising nanowire or nanotube", Phys.Status Solidi., B 248, 250-258, 2011.
- Jiang, W., Li, X.X., Guo, A.B., Guan, H.Y., Wang, Z., Wang K., "Magnetic properties and thermodynamics in a metallic nanotube", J. Magn. Magn. Mater 355, 309-318,2014.
- 30. Kaneyoshi T., "Cylindrical ising nanowire and nanotube with a negative exchange interaction at the surface", Phsyica E., 71, 84-90, 2015.
- Magoussi, H., Zaim, A., Keroud, M., "Monte Carlo simulation of the magnetic properties of a spin-1 Blume–Capel nanowire", Solid Stade Commun., 200, 32-41, 2014
- Boughrara, M., Kerouad, M., Zaim, A., "Phase diagrams and magnetic properties of a cylindrical Ising nanowire: Monte Carlo and effective field treatments", J. Magn. Magn. Mater. 368, 169-179, 2014.

- Kaneyoshi T., "Characteristic phenomena in nanoscaled transverse Ising thin films with diluted surfaces", Phsyica., B 407, 4358-4364, 2012.
- 34. Kaneyoshi T., "Transverse Ising nano-systems, Unconventinal surface effects", Phys J., Chem Solid., 81, 66-73, 2015.
- 35. See, E.G., Moorjani K., Coey J.M.D., "Magnetic Glasses", Elsevier, Amsterdam, 1984.
- Kaneyoshi T., "Introduction to Amorphous Magnets", World Scientific, Singapore., 1992.
- Li, X., Jia, Q., Lv, F., Pan, D., Li, Z., "Vector analysis of the magnetic polarity from individual magnetic nanoparticles", Mater Lett., 170, 205-209, 2016.
- Şarlı N., "Paramagnetic atom number and paramagnetic critical pressure of the sc, bcc and fcc Ising nanolattices", J. Magn. Magn. Mater., 374, 238-244, 2015.
- 39. Kim J., Park S., Lee J.E., Jin S.M., Lee J.H., Lee I.S., Yang I., Kim J.S., Kim S.K., Cho M.H., Hyeon T., "Designed fabrication of multifunctional magnetic gold nanoshells and their application to magnetic resonance imaging and photothermal therapy", Angew, Chem.Int.Ed., 45, 7754-8, 2006.
- A, H., Schmidt, W., Matoussevitch, N., Bconnemann, H., Spliethoff, B., Tesche, B., Bill, E., Kiefer, W., Schuth, F., "Nanoengineering of a magnetically separable hydrogenation catalyst", Angew, Chem.Int.Ed., 43(33), 4303-6, 2004.
- 41. Govind, Raj K., Joy, P.A., "Magnetism in disordered carbon as a function of the extent of graphitization", Solid State Commun J., 177, 89-94, 2014.
- 42. Rosensweig R.E., "Ferrohydrodynamics". Dover, New Yorg., 1997.
- 43. Gupta, A.K., Gupta, M., "Synthesis and surface engineering of iron oxide nanoparticles for biomedical applications", Biomaterials., 26, 3995-4021, 2005.
- Dlamini, W.B., Msomi, J.Z., Moyo, T., "XRD, Mössbauer and magnetic properties of Mg<sub>x</sub>Co<sub>1-x</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>nanoferrites", J. Magn. Magn. Mater., 373, 78-82, 2005.
- 45. Srivastava M., Layek S., Singh J., Das A.K., Verma H.C., Ojha A.K., Kim N.H., Lee J.H., "Synthesis, magnetic and Mössbauer spectroscopic studies of Cr doped lithium ferrite nanoparticles", Alloys J. Compd., 591, 174-180, 2014.
- Kaneyoshi T., "Magnetizations of a nanoparticle described by the transverse Ising model", J. Magn. Magn. Mater., 321, 3430-3435, 2009.

- Magoussi, H., Zaim, A., Kerouad, M., "Monte Carlo simulation of the magnetic properties of a spin-1 Blume–Capel nanowire", Solid State Commun J., 200, 32-41, 2014.
- Zaim N., Zaim A., "Kerouad M., Monte Carlo simulation of the magnetic properties of a spin-1 Blume–Capel nanowire", Alloys Compd J.,663, 516-523, 2016.
- 49. Albayrak E., "Core-shell structured triangular Ising nanowire on the Bethe lattice", Phys J. Lett., A 380, 458-464, 2016.
- 50. Albayrak, E., "Core–shell structured square mixed-spin 1 and 1/2 Ising nanowire on the Bethe lattice", J. Magn. Magn. Mater., 401, 532-538, 2016.
- 51. a)Akıncı, Ü., "Effects of the randomly distributed magnetic field on the phase diagrams of Ising nanowire I: Discrete distributions", J. Magn. Magn. Mater., 324, 3951-3960, 2012;
  b) Akıncı, Ü., "Effects of the randomly distributed magnetic field on the phase

diagrams of the Ising Nanowire II: Continuous distributions", J. Magn. Magn. Mater., 324, 4237-4244, 2012.

- Magaussi, H., Zaim, A., Kerouad, M., "Monte Carlo simulation of the magnetic properties of a spin-1 Blume–Capel nanowire", Solid State Commun., 200, 32-41, 2014.
- 53. Magoussi, H., Zaim, A., Kerouad, M., "Theoretical investigations of the phase diagrams and the magnetic properties of a random field spin-1 Ising nanotube with core/shell morphology", J. Magn. Magn. Mater., 344, 109-115, 2013.
- Magoussi, H., Zaim, A., Kerouad, M., "Magnetic properties of a nanoscaled ferrimagnetic thin film: Monte Carlo and effective field treatments", Superlattices Microstruct., 89, 188-203, 2016.
- 55. Jiang, W., Huang, J.Q., "Magnetic properties of a hexagonal prismatic nanoparticle with ferrimagnetic core–shell structure", Phys J., 78, 115-122, 2016.
- 56. Mansuripur, M., "Magnetization reversal, coercivity, and the process ofthermomagnetic recording in thin films of amorphous rare earth–transition metal alloys", Journal of Applied Physics., 61, 1580-1587, 1987.
- 57. Coronado, E., Dekhais, P., Gatteschi, D., Miller, J. S., "Molecular Magnetism: From Molecular Assemblies to the Devices (NATO ASI Series E, Vol. 321)," Kluwer Academic Publishers, Dordrecht., 1996.

- 58. Feraoun, A., Zaim, A., Kerouad, M., "Monte Carlo study of a mixed spin (1, 3/2) ferrimagnetic nanowire with core/shell morphology", Phys., B 445, 74-80, 2014.
- 59. Dakir, O., El kenz, A., Benyoussef A., "Magnetic properties of core-shell (1/2-3/2) nanoparticle: Monte Carlo simulation", Phys J., A 426,45-55, 2015.
- 60. Kantar, E., "Hysteretic features of Ising-type segmented nanostructure with alternating magnetic wires", Alloys J. Compd., 676, 337-346, 2016.
- 61. Şarlı, N., "Band structure of the susceptibility, internal energy and specific heat in a mixed core/shell Ising nanotube", Physica B, 411: 12-25 2013.
- 62. Canko, O., Erdinç, A., Taşkın, F., and Atiş, M., "Some characteristic behavior of spin-1 Ising nanotube", Physics Letter A, 375: 3547-3551 2011.
- 63. Yüksel, Y. Aydıner, E., and Polat, H., "Thermal and magnetic properties of a ferrimagnetic nanoparticle with spin-3/2 core and spin-1 shell structure", Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 323: 3168-3175 2011.
- 64. Liu, LM., Jiang, W., Wang, Z., Guan, HY. and Guo, AB., "Magnetization and phase diagram of a cubic nanowire in the presence of the crystal field and the transverse field", Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 324: 4034-4042 2012.
- 65. Boughrara, M., Kerouad, M. and Zaim, A., "The phase diagrams and the magnetic properties of a ferrimagnetic mixed spin 1/2 and spin 1 Ising nanowire", Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 360: 222-228 2014.
- 66. Kocakaplan, Y. and Kantar, E., "Thermodynamic and magnetic properties of the hexagonal type Ising nanowire", European Physical Journal B, 87: 135-142 2014.
- 67. Taşkın, F., Canko, O., Erdinç, A. and Yıldırım, A. F., "Thermal and magnetic properties of a nanotube with spin-1/2 core and spin-3/2 shell structure", Physica A-Statistical Mechanics and Its Applications, 407: 287-294 2014.
- Kantar, E., Ertaş, M., "Cylindrical Ising nanowire in an oscillating magnetic field and dynamic compensation temperature", Superlattices Microstruct., 75, 831-842, 2014.
- Ertaş, M., Kantar, E., "Cylindrical Ising Nanowire With Crystal Field:Existence Of A Dynamic Compensation Temperatures", Phase Transitions., 88, 567-581, 2015.
- Deviren, B., Kantar, E., Keskin, M., "Dynamic phase transitions in a cylindrical Ising nanowire under a time-dependent oscillating magnetic field", J. Magn. Magn. Mater., 324, 2163-2170, 2012;

- 71. Ertaş, M., Kocakaplan, Y., "Dynamic behaviors of the hexagonal Ising nanowire", Phys.Lett., A 378, 845-850, 2014.
- 72. Deviren, B., Ertaş, M., Keskin, M., "Dynamic magnetizations and dynamic phase transitions in a transverse cylindrical Ising nanowire", Phys. Scr., 85, 055001, 2012.
- 73. Kantar, E., Ertaş, M., Keskin, M., "Dynamic phase diagrams of a cylindrical Ising nanowire in the presence of a time dependent magnetic field", J. Magn. Magn. Mater., 361, 61-67, 2014.
- 74. Deviren, B., Keskin, M., "Thermal behavior of dynamic magnetizations, hysteresis loop areas and correlations of a cylindrical Ising nanotube in anoscillating magnetic field within the effective-field theory and the Glauber type stochastic dynamics approach", Physics Letters A., 376, 1011-1019 2012.
- 75. Deviren, B., Şener, Y., Keskin, M., "Dynamic magnetic properties of the kinetic cylindrical Ising nanotube", Physica., A, 392, 3969-3983, 2013.
- Vatansever, E., Polat, H., "Monte Carlo investigation of a spherical ferrimagnetic core-shell nanoparticle under a time dependent magnetic field", J. Magn. Magn. Mater., 343, 221-227, 2013.
- 77. Vatansever, E., Polat, H., "Non-equilibrium dynamics of a ferrimagnetic coreshell nanocubic particle", Physica A., 394, 82-89, 2014.
- 78. Yüksel, Y., Vatansever, E., Polat, H., "Dynamic phase transition properties and hysteretic behavior of a ferrimagnetic core–shell nanoparticle in the presence of a time dependent magnetic field", Journal of Physics: Condensed Matter., 24, 436004-436017, 2012.
- 79. Tome,T.,Oliveira,M.J., "DynamicPhaseTransitionintheKineticIsingModel UnderaTime-DependentOscillatingField",Phys.Rev.,A,41,4251-4254,1990.
- Keskin, M., Canko, O., Temizer, Ü., "Dynamic Phase Transition in the Kinetic Spin-1 Blume-Capel model Under a Time- Dependent Oscillating External Field", Phys. Rev., E, 72, 036125-1-036125-10,2005.
- Keskin, M., Canko, O., Kantar, E., "Dynamic Dipole and Quadrupole Phase Transitions in the Kinetic Spin-1 Model", Int. J. Mod. Phys., C, 17, 1239-1255, 2006.
- Keskin, M., Canko, O., Temizer, Ü., "Dynamic Phase Transition in the Kinetic Blume-Emery-Griffiths Model in an Oscillating External Field", Int. J. Mod. Phys., C, 17, 1717-1737,2006.

- Keskin, M., Canko, O., Deviren, B., "Dynamic Phase Transition in the Kinetic Spin-3/2 Blume-Capel Model Under a Time-Dependent Oscillating External Field", Phys. Rev., E, 74, 011110-1-011110-10,2006.
- Keskin, M., Canko, O., Kirak, M., "Dynamic Dipole and Quadruple Phase Transition in the Kinetic Spin-3/2 Model", J. Stat. Phys., 127, 359-380,2007.
- Canko, O., Deviren, B., Keskin M., "Dynamic Phase Transition in theSpin-3/2 Blume-Emery-Griffiths Model in an Oscillating Field", J. Phys.: Condens. Matter., 18, 6635-6653,2006.
- Keskin, M., Canko, O., Ertas, M., "Kinetics of the Spin-2 Blume-Capel Model UnderaTime-DependentOscillatingExternalField", J.Exp. Theor. Phys., 105, 1190-1197, 2007.
- 87. Ertas, M., Canko, O., Keskin, M., "Dynamic Phase Transition in the Kinetic Spin-2 Blume-Emery-Griffiths Model in an Oscillating Field", J. Magn. Magn.Mater., 320, 1765-1774,2008.
- Buendia,G.-M.,Machado,E., "KineticsofaMixedIsingFerrimagneticSystem", Phys. Rev., E, 58, 1260, 1998.
- Keskin, M., Canko, O., Polat, Y., "Dynamic Phase Transitions in the Kinetic Mixed Spin-1/2 and Spin-1 Ising Ferrimagnetic System Under Time- Dependent Magnetic Field", J. Korean Phys.Soc., 53, 497, 2008.
- 90. Keskin, M., Kantar, E., Canko, O., "Kinetics of a Mixed Spin-1 and Spin-3/2 IsingSystemUnderaTime-DependentOscillatingMagneticField", Phys.Rev. E., 77, 051130,2008.
- Keskin, M., Canko, O., Güldal, S., "Kinetics of a Mixed Spin-1/2 and Spin-2 Ising Ferrimagnetic System", Phys. Lett., A, 374, 1-7,2009.
- 92. Keskin, M., Canko O., Bati, M., "Dynamic Phase Diagrams of a Mixed Spin-1 and Spin-5/2 Ising System in an Oscillating Magnetic Field", J. Korean Phys. Soc., 55, 1344-1356,2009.
- 93. Keskin, M., PolatY., 'PhaseDiagramsofaNonequilibriumMixedSpin-3/2and Spin-2 Ising System in an Oscillating Magnetic Field", J. Magn. Magn. Mater., 321, 3905,2009.
- 94. Keskin, M., Ertas, M., Canko, O., "Dynamic Phase Transitions and Dynamic Phase Diagrams in the Kinetic Mixed Spin-1 and Spin-2 Ising System in an Oscillating Magnetic Field", Phys. Scr., 79, 025501,2009.

- 95. Deviren, B., Keskin, M., Canko, O., Kinetics of a Mixed Spin-1/2 and Spin-3/2 Ising Ferrimagnetic Model", J. Magn. Magn. Mater., 321, 458-466, 2009.
- 96. Deviren, B., Keskin, M., Canko, O., "Dynamic Phase Transitions in theKinetic Mixed Spin-1/2 and Spin-5/2 Ising Model UnderaTime-Dependent OscillatingMagnetic Field", Phase Trans., 83, 526-542,2010.
- 97. Deviren, B., Keskin, M., "Dynamic Phase Transitions and Compensation Temperatures in a Mixed Spin-3/2 and Spin-5/2 Ising System", J. Stat. Phys.,140, 934-947, 2010.
- 98. Deviren, B., Keskin, M., Canko, O., "Dynamic Phase Transition and Dynamic PhaseDiagramsinthespin-5/2Blume-CapelModelUnderaTime-Dependent Oscillating External Field", Phase Trans., 82, 683-698,2009.

# ÖZGEÇMİŞ

Adı ve Soyadı: Barış REÇBER

Baba Adı : Halit

Anne Adı : Behiye

Doğum Yeri : Ankara

Doğum Tarihi : 28.06.1980

İlk, orta, lise öğrenimini Nevşehir'in Gülşehir ilçesinde tamamladı.1997 yılında Trakya Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünü kazandı. 2001 yılıda lisans eğitimini tamamladı.2001-2004 yıllayı arasında vekil öğretmenlik yaptı. 2004-2008 yılları arasında dershanelerde fen bilgisi ve fizik öğretmeni olarak çalıştı. 2008-2014 yılları arsında Aktif Formül Etüt Eğitim Dershanesinde kurucu müdür olarak çalıştı. 2011 yılında Nevşehir üniversitesi fizik bölümünde yüksek lisansa başladı. Ayrıca 2.International Conference on Material Science and Technology in Cappadocia (IMSTEC 2017) "Dynamıcs Of The Mıxed Spın (1/2, 1) Isıng Nanotube System" adlıbir adet bildiri sundu.

Adres : Fatih Mah. No:13 Gülşehir/ NEVŞEHİR

Tel : 0 506 994 76 66

E- posta : mevrek\_50@hotmail.com