

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

Sr₂FeMoO₆ TİPİ İKİLİ PEROVSKİT YAPININ DİNAMİK
ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

Tezi Hazırlayan
RuziyeURGENÇ

Tez Danışmanı
Doç. Dr. Şeyma AKKAYA DEVİREN

Fizik Anabilim Dalı
Yüksek Lisans Tezi

KASIM 2019
NEVŞEHİR

Doç. Dr. Şeyma AKKAYA DEVİREN danışmanlığında Ruziye URGENÇ tarafından hazırlanan "**Sr₂FeMoO₆ Tipi İkili Perovskit Yapının Dinamik Özelliklerinin İncelenmesi**" başlıklı bu çalışma, jürimiz tarafından Nevşehir Hacı Bektaş Veli Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında **Yüksek Lisans Tezi** olarak kabul edilmiştir.

26/11/2019

JÜRİ

Başkan : Prof. Dr. Ali YİĞİT

Üye : Prof. Dr. Bayram DEVİREN

Üye : Doç. Dr. Şeyma AKKAYA DEVİREN

ONAY:

Bu tezin kabulü Enstitü Yönetim Kurulunun 25.12.2019 tarih ve 78-731 sayılı kararı ile onaylanmıştır.

25/12/2019
Prof. Dr. Sahlan ÖZTÜRK
Enstitü Müdürü

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 olarak atıf yapıldığını bildiririm.


Ruziye URGENÇ

TEŐEKKÜR

Tez alıŐmalarım boyunca ilgisini ve emeđini benden esirgemedi, bütün alıŐmalarım süresince deđerli tecrübeleri ve fikirleriyle bana destek olan kıymetli hocam Do.Dr.Őeyma AKKAYA DEVİREN'e sonsuz teŐekkürlerimi sunarım.

Tez alıŐmalarımın en baŐından tamamlandıđı güne kadar bana gösterdiđi anlayıŐ ve sabırdan dolayı ayrıca bütün alıŐmalarım deđerli fikirleriyle sunduđu muazzam katkıdan dolayı saygı deđer hocam Prof. Dr. Bayram DEVİREN'e teŐekkürü bir bor bilirim.

Bugüne ulaŐmamda ve bu alıŐmayı tamamlamamda üzerimdeki hakkımı hiçbir zaman ödeyemeyeceđim, varlıđıyla beni her zaman destekleyen ve yüreklendiren canım anneme bütün kalbimle teŐekkürlerimi sunarım.

Son olarak benimle geçireceđi güzel zamanları bu alıŐma için seveseve feda eden canımın ii kızım Bilge Elmira'ya ve ođlum Metehan'a teŐekkür ederim.

Sr₂FeMoO₆ TİPİ İKİLİ PEROVSKİT YAPININ DİNAMİK ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

(Yüksek Lisans Tezi)

Ruziye URGENÇ

NEVŞEHİR HACI BEKTAŞ VELİ ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

KASIM 2019

ÖZET

Zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında Sr₂FeMoO₆ tipi ikili perovskit yapının dinamik manyetik özellikleri (faz geçiş sıcaklıkları, faz diyagramları, ortalama alan yaklaşımı (OAY) ve Glauber-tipi stokastik dinamik kullanılarak incelendi. İkili perovskit sisteminin kararlı fazlarını elde etmek için düzen parametrelerinin zamana bağlı davranışları çalışıldı. Dinamik faz geçişlerinin doğasını (birinci veya ikinci mertebeden) karakterize etmek ve dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıklarını elde etmek için dinamik düzen parametrelerinin davranışı sıcaklığın bir fonksiyonu olarak incelendi. Sistemin manyetik faz diyagramları (h,T) düzleminde kristal alanın farklı değerleri için ve (J₁-T) ve (J₂-T) düzlemlerinde dış manyetik alanın farklı değerleri için sunuldu. Sr₂FeMoO₆ tipi ikili perovskit yapının dinamik manyetik özelliklerinin etkileşme parametrelerine kuvvetli bir şekilde bağlı olduğu gözlemlendi. Dinamik faz diyagramlarında, paramanyetik (p), ferromanyetik (f), ferrimanyetik-1 (i₁), ferrimanyetik-2 (i₂) temel fazlar yanı sıra temel fazların birlikte olduğu f+p, f+i₂, i₁+f, i₁+p, i₁+i₂ ve i₂+p karma faz bölgeleri gözlemlendi. Dinamik faz diyagramlarının birinci- ve ikinci-derece faz geçiş sıcaklıklarının yanında, dinamik üçlü kritik nokta gibi özel dinamik kritik noktaları sergilediği görüldü.

Anahtar Kelimeler: *İkili Perovskit; Sr₂FeMoO₆; Ising model; Karma spin sistemi; Glauber-tipi stokastik dinamik.*

**INVESTIGATION OF THE DYNAMIC PROPERTIES OF DYNAMIC OF
Sr₂FeMoO₆ TYPE DOUBLE PEROVSKITE STRUCTURE**

(Yüksek Lisans Tezi)

Ruziye URGENÇ

NEVŞEHİR HACI BEKTAŞ VELİ ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

KASIM 2019

ABSTRACT

The nonequilibrium magnetic properties (phase transition temperatures, phase diagrams) are studied, within a mean-field approach, in the Sr₂FeMoO₆ type double perovskite 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, is 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 (h,T) and (J,T) planes. The phase diagrams also contain paramagnetic (p), ferromagnetic (f), ferrimagnetic (i₁), ferrimagnetic (i₂) phases, six coexistence or mixed regions, f+p, f+i₂, i₁+f, i₁+p, i₁+i₂ ve i₂+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.

Keywords: *Double perovskite; Sr₂FeMoO₆; Ising model; Mixed spin system; Glauber-type stochastic d*

İÇİNDEKİLER

<i>ONAY SAYFASI</i>	<i>ii</i>
<i>TEZ BİLDİRİM SAYFASI</i>	<i>iii</i>
<i>TEŞEKKÜR</i>	<i>iv</i>
<i>ÖZET</i>	<i>iii</i>
<i>ABSTRACT</i>	<i>iv</i>
<i>İÇİNDEKİLER</i>	<i>v</i>
<i>ŞEKİLLER LİSTESİ</i>	<i>vi</i>
<i>BÖLÜM 1</i>	<i>1</i>
<i>GİRİŞ</i>	<i>1</i>
<i>BÖLÜM 2</i>	<i>6</i>
<i>METOT VE MODELİN TANITIMI</i>	<i>6</i>
<i>2.1. Model</i>	<i>6</i>
<i>2.2. Glauber Dinamiği ve Ortalama-Alan Dinamik Denklemlerinin Elde Edilmesi</i> 9	
<i>BÖLÜM 3</i>	<i>22</i>
<i>DİNAMİK FAZ GEÇİŞ NOKTALARI VE DİNAMİK FAZ DİYAGRAMLARI</i>	<i>22</i>
<i>3.1. Ortalama Alt Örgü Mıknatıslanmalarının Zamanla Değişimi</i>	<i>22</i>
<i>3.3. Dinamik mıknatıslanmalar</i>	<i>26</i>
<i>3.4. T/h ve T/J Düzleminde Dinamik Faz Diyagramları</i>	<i>36</i>
<i>3.4.1. T/h düzleminde dinamik faz diyagramları</i>	<i>36</i>
<i>3.4.2. T/J düzleminde dinamik faz diyagramları</i>	<i>46</i>
<i>BÖLÜM 4</i>	<i>55</i>
<i>Sonuç ve Tartışma</i>	<i>55</i>
<i>KAYNAKÇA</i>	<i>57</i>
<i>ÖZGEÇMİŞ</i>	<i>64</i>

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 2. 1 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ tipi ikili perovskit yapıyı tanımlayan iç içe geçmiş ikili yüzey merkezli kübik (fcc) yapısının şematik gösterimi.....	6
Şekil 2. 2 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ tipi ikili perovskit yapısındaki etkileşim parametrenin daha net anlaşılması için yüzey merkezli kübik örgünün üç boyutlu gösterimi.....	8
Şekil 3. 1 Fe ve Mo atomları için ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının ($m_A(\xi)$ ve $m_B(\xi)$) zamanla değişimi grafikleri	25
Şekil 3. 2 $J_1=J_2=J_3=1.0$, $D= 1.0$ ve $h = 5.0$ için dinamik mıknatıslanmaların (M_{Fe} ve M_{Mo}) sıcaklığa bağlı olarak davranış diyagramı.....	27
Şekil 3. 3 $J_1=J_2=J_3=1.0$, $D= 1.0$ ve $h = 28.0$ için dinamik mıknatıslanmaların (M_{Fe} ve M_{Mo}) sıcaklığa bağlı olarak davranış diyagramı.....	28
Şekil 3. 4 $J_1=J_2=J_3=1.0$, $D= -6.0$ ve $h = 1.0$ için dinamik mıknatıslanmaların (M_{Fe} ve M_{Mo}) sıcaklığa bağlı olarak davranış diyagramı.....	29
Şekil 3. 5 (a) $J_1=J_2=J_3=1.0$, $D= -6.5$ ve $h = 1.0$ için dinamik mıknatıslanmaların (M_{Fe} ve M_{Mo}) sıcaklığa bağlı olarak davranış diyagramı.....	30
Şekil 3. 5 (b) $J_1=J_2=J_3=1.0$, $D= -6.5$ ve $h = 1.0$ için dinamik mıknatıslanmaların (M_{Fe} ve M_{Mo}) sıcaklığa bağlı olarak davranış diyagramı.....	31
Şekil 3. 6 (a). $J_1=J_2=J_3=1.0$, $D= -7.5$ ve $h = 1.0$ için dinamik mıknatıslanmaların (M_{Fe} ve M_{Mo}) sıcaklığa bağlı olarak davranış diyagramı.....	32
Şekil 3. 6 (b).de $J_1=J_2=J_3=1.0$, $D= -7.5$ ve $h = 1.0$ için dinamik mıknatıslanmaların (M_{Fe} ve M_{Mo}) sıcaklığa bağlı olarak davranış diyagramı.....	33
Şekil 3. 7 $J_1=J_2=J_3=1.0$, $D= -8.0$ ve $h = 5.0$ için dinamik mıknatıslanmaların (M_{Fe} ve M_{Mo}) sıcaklığa bağlı olarak davranış diyagramı.....	34
Şekil 3. 8 $J_1=J_2=J_3=1.0$, $D= -8.5$ ve $h = 7.0$ için dinamik mıknatıslanmaların (M_{Fe} ve M_{Mo}) sıcaklığa bağlı olarak davranış diyagramı.....	35
Şekil 3. 9 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $D=1.0$ için (h, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.....	37
Şekil 3. 10 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $D= -2.0$ değeri için (h, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.....	38
Şekil 3. 11 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $D= -4.0$ için değeri için (h, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.....	39
Şekil 3. 12 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $D= -5.0$ için (h, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.....	40
Şekil 3. 13 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $D= -6.0$ için (h, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.....	41

Şekil 3. 14 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $D=-6.5$ için (h, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.....	42
Şekil 3. 15 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $D=-7.5$ için (h, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.....	43
Şekil 3. 16 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $D=-8.0$ için (h, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.....	44
Şekil 3. 17 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $D=-8.5$ için (h, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.....	45
Şekil 3. 18 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $D=-10.0$ için (h, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.....	46
Şekil 3. 19 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $J_2=J_3=1.0$, $D=1.0$ ve $h=1.0$ için (J_1 , T) düzleminde dinamik faz diyagramı.....	47
Şekil 3. 20 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $J_2=J_3=1.0$, $D=1.0$ ve $h=10.0$ için (J_1 , T) düzleminde dinamik faz diyagramı.....	48
Şekil 3. 21 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $J_2=J_3=1.0$, $D=1.0$ ve $h=20.0$ için (J_1 , T) düzleminde dinamik faz diyagramı.....	49
Şekil 3. 22 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $J_2=J_3=1.0$, $D=1.0$ ve $h=30.0$ için (J_1 , T) düzleminde dinamik faz diyagramı.....	50
Şekil 3. 23 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $J_1=J_3=1.0$, $D=1.0$ ve $h=10.0$ için (J_2 , T) düzleminde dinamik faz diyagramı.....	51
Şekil 3. 24 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $J_1=J_3=1.0$, $D=1.0$ ve $h=20.0$ için (J_2 , T) düzleminde dinamik faz diyagramı.....	52
Şekil 3. 25 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $J_1=J_3=1.0$, $D=1.0$ ve $h=25.0$ için (J_2 , T) düzleminde dinamik faz diyagramı.....	53
Şekil 3. 26 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $J_1=J_3=1.0$, $D=1.0$ ve $h=30.0$ için (J_2 , T) düzleminde dinamik faz diyagramı.....	54



BÖLÜM 1

GİRİŞ

Günümüzde malzemeler, tarihte hiç olmadığı kadar hızla evrim geçirmektedir. Bu da var olan ürünlerin performanslarının artırılmasına ve hayatımızın her alanını kolaylaştıran yenilikçi teknolojiler geliştirilmesine olanak vermektedir. Malzeme alanındaki gelişmeler yeni tasarım ölçütlerini de beraberinde getirmekte ve yeni ürünlerin ortaya çıkmasına olanak sağlamaktadır. Rekabetçi küresel ekonomide öne çıkmanın anahtarlarından biri malzeme bilimindeki gelişmelerdir. Malzeme biliminin gelişimi mikro-elektronik, biyoteknoloji ve nanoteknoloji gibi ülkemize ekonomik katma değer sağlayacak alanları önemli ölçüde etkilemektedir. Teknolojik gelişmeleri ortaya çıkaran bilimsel araştırmaların ticari sektörlere girmesi durumunda üretim maliyetlerinin azaltılması ve küçük hacimli üretilmesi önem arz etmektedir. Ancak teknolojik gelişmeler ve sürekli artan dünya nüfusu enerji ihtiyacının artmasına neden olmaktadır. Artan enerji talebinin karşılanması ve insanların günlük hayatının lüksüne ayak uydurulması maksadıyla özellikle enerji sektöründeki materyallere birçok yeni yatırım yapılmaktadır. İşte çevreye duyarlı temiz ve yenilenebilir enerjinin artırılması için özellikle güneş enerjisi alanında yapılan çalışmalar son yıllarda perovskitler üzerine yoğunlaşmıştır.

1839 yılında keşfedilen ABO_3 yapısında olan dünyadaki en yaygın mineral olan perovskitler önemli ferroelektrik malzemeler arasındadır. Yer küremizden de ziyade perovskitler Mars'tan daha büyük gezegenlerin neredeyse tamamının yüzeyinde kararlı durumda kristal yapıda bulunmaktadır. Perovskitlerin kayda değer kristal yapısı ilk kez 1926 yılında Victor Goldschmidt tarafından yapılan çalışmalarla incelenmiştir [1]. Kristal yapı daha sonra 1945 yılında Helen DickMegaw tarafından baryum titanat üzerinde yaptığı X-ışını kırınım çalışmalarına dayanan verilerden yayınlanmıştır [2]. ABO_3 yapısındaki perovskitlerde, alkali metal ya da nadir toprak elementlerinden oluşan A katyonları kristal örgünün köşelerinde yer alırken, 3d, 4d veya 5d durumunda olan geçiş elementlerinden oluşan B katyonları yüzey merkezli kübik (fcc) yapının merkezinde yer alır [3]. Perovskit yapıdaki malzemelere gösterilen yoğun ilgi bu

malzemelerin, manyeto-elektrik [4,5], manyeto-direnç [6], manyeto-kapasite [7], manyeto-ısı [8] gibi teknolojik öneme sahip özelliklerinden ileri gelmektedir. Bu özellikler arasında yarımetallik [9], manyeto dielektriklik [10], yüksek Curie sıcaklığı göstermeleri de yer almaktadır. Bilhassa 360 K i aşamayan Curie sıcaklıklarında manyeto direnç sıfır olmaktadır. Bu ve yukarıda bahsi geçen özellikler bilgi teknolojisindeki potansiyel uygulamaların yanı sıra spintronik bilimi (elektronun spinine daha doğrusu yüküne odaklanan spin elektronik bilim) altındaki birçok gelişmeye katkı sunmuştur. Biyomedikal uygulamalar [11], hassas manyetik alan sensörler, tünel kavşakları, manyetik hafıza uygulamaları [12], spin tabanlı sensörler [13], relaksör ferroelektrik davranışlı ince filmler [14], manyeto dielektrik kapasitörler [15], konum sensörleri ve bağlantısız potansiyometreler [16] örnek olarak verilebilir.

İkili perovskitler ise $A_2BB'O_6$ genel formülüne sahiptir. A toprak alkali metali ya da nadir toprak elementinden, B ise manyetik geçiş metali ve B' manyetik olmayan geçiş metalinden oluşur. Oksijen (O) atomu B ve B' metallerinin etrafında BO_6 ve $B'O_6$ oktahedral düzende iki iç içe geçmiş yüzey merkezli kübik (fcc) yapıya dönüşür. Daha geniş olan A katyonları oktahedral yapının arasındaki küp-oktahedral boşluğu doldurmaktadır. A atomunun bu noktaya konumlanması ile sekiz bitişik oksijen tarafından oktahedral yapı oluşturulur [17-22]. A ve B/B' katyon türleri arasındaki bu göreceli büyüklüğe bağlı olarak kristal yapı farklı simetrilere uyum sağlayabilir [23], kafes yapısında bozulmalar ve kafesin dönmesi söz konusu olabilir [24]. B/B' katyonlarının hem büyüklükleri hem de yükleri arasındaki fark, farklı düzen dereceleri oluşturabilir [23]. Bu dönmeler optik, elektriksel ve elastik özellikleri değiştirir [24]. Yapısal özelliklerde meydana gelen bu çeşitlilik klinik teknolojiler için sensörler ve cihazlarda [25], bellek cihazlarında, spintronik uygulamalarda ciddi faydalar sağlamıştır [26]. Bu tip uygulamalarda ikili perovskit malzemeyi benzersiz kılan, süper iletken sıcaklıktan daha yüksek olan Curie sıcaklıklarıdır [26]. $A_2BB'O_6$ ikili perovskit yapıları basit malzemelerde fark edilemeyen geniş yelpazedeki fiziksel özelliklere sahip olduklarından dolayı teorik ve deneysel olarak son zamanlarda yoğun çalışılan konulardan biridir.

Deneysel bakış açısından, çeşitli yöntemlerle değişik ikili perovskit yapıları çalışılmıştır. Sr_2FeMoO_6 [27], La_2FeRhO_6 , La_2CrRhO_6 [28], Ba_2CrMoO_6 , Ba_2FeMoO_6

[29], $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ [30], $\text{Ca}_2\text{TiMnO}_6$ [3] ikili perovskitlerin elektrik manyetik ve yapısal özellikleri XRD ve nötron toz kırınım metodu (NPD) ile detaylıca çalışılmıştır. Bu bileşiklerin sahip olduğu yapısal farklılıktan dolayı, malzemelerin elektrik ve manyetik özellikleri, klasik perovskitlerden oldukça farklıdır. Ca_2NiWO_6 [31], Ba_2NiMoO [31], $\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{Ge}_4\text{O}_6$ [32], $\text{Sr}_2\text{NiMoO}_6$ [31], ikili perovskit yapıların faz geçişleri ve kritik olaylar XRD ve NPD yöntemleri ile incelenmiş, $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ikinci derece ferromanyetik faz geçişi görülmüş [33] ve Curie sıcaklığına yakın değerlerde paramanyetik fazdan ferromanyetik faza geçtiğini göstermiştir [34]. Ayrıca manyeto direnç ve manyeto kalorik etki bu yapılarda XRD yöntemiyle incelenmiştir [35, 33].

Literatürde bulunan deneysel çalışmalara ilaveten teorik çalışmalara da örnek verebiliriz. Teorik fizikte sıklıkla kullanılan metodlardan MC simülasyon metodu kullanılarak termal mıknatıslanma, manyetik duyarlılık, iç enerji ve spesifik ısı, alan başına düşen iç enerji ve alan başına düşen mıknatıslanma ve manyetoklorik etki gibi fiziksel nicelikler $\text{Sr}_2\text{CrIrO}_6$ [36], Sr_2CrWO_6 [37], $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ [38], $\text{Sr}_2\text{CrMoO}_6$ [39, 40], $\text{Ca}_2\text{CrMoO}_6$ ve $\text{Ca}_2\text{CrReO}_6$ [41], $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ [42], $\text{La}_{2/3}\text{Ca}_{1/3}\text{MnO}_6$ [43] ikili perovskitleri için incelenerek kritik sıcaklık tespit edilip Curie sıcaklığının değişimi ve faz geçişleri incelenmiştir. Yoğunluk fonksiyon teorisi (DFT) ile; $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ [44, 45], Sr_2CrWO_6 [46], $\text{Sr}_2\text{MnTaO}_6$ [47] ikili perovskitlerinin yapısal, elastik, mekanik, elektronik, manyetik, termoelektrik ve termodinamik özellikleri çalışılmıştır. Etkin alan teorisi (EFT) yaklaşımı ile; $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ ikili perovskitinin faz diyagramları [48] ortalama alan yaklaşımı (MFT) ile; $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitinde manyeto kalorik etki çalışılmıştır [49].

İkili perovskit yapının statik faz geçişleri çeşitli yöntemlerle çalışılmasına rağmen dinamik faz geçişleri ile ilgili literatürde rastladığımız tek çalışma J.D. Alzate-Cardona ve arkadaşları tarafından MCS yönteminin kullanarak $\text{La}_{2/3}\text{Ca}_{1/3}\text{MnO}_6$ ikili perovskitinin dinamik faz geçişleri üzerinedir [43]. Dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıklarının hesaplanması ve dinamik faz diyagramlarının elde edilmesi dengesiz sistemlerdeki ilginç problemlerden birisidir. Dinamik faz geçişlerine sebep olan mekanizma kesin olarak keşfedilmediği gibi temel fenomenolojisi de halen çok az geliştirilebilmiştir ve bundan dolayı da üzerinde çok çalışılan ve çalışılması gerekli konulardan birisi olmuştur. Dinamik faz geçiş sıcaklıkları ilk olarak, Glauber-tipi

stokastik dinamik [50] kullanılarak, zamana bağılı salınımlı dış manyetik alan altında kinetik spin-1/2 Ising modelinin kararlı durumlarının OAY metodu ile incelenmesi sonucu bulunmuştur [51,52]. Daha sonra, kinetik spin-1/2 Ising modeli için dinamik faz geçişleri, dinamik OAY metodu [53,54] ve dinamik MC hesaplamaları ile incelenmiştir [55,56].

Bu tez çalışmasında ise Sr_2FeMoO_6 tipi ikili perovskit yapının dinamik manyetik özellikleri (faz geçiş sıcaklıkları, faz diyagramları, ortalama alan yaklaşımı (OAY) ve Glauber-tipi stokastik dinamik kullanılarak incelenecektir. Sistemde mevcut olan fazları bulmak için ortalama düzen parametrelerinin zamana bağılı 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-derece veya ikinci-derece faz geçişleri) karakterize edilerek sistemin dinamik faz diyagramları (h,T) ve (J,T) düzlemlerinde sunulacaktır. Burada T indirgenmiş sıcaklığı ifade ederken, h ise indirgenmiş dış manyetik alandır. Böylece, bu tezin temel amaçlarından birisi olan Sr_2FeMoO_6 tipi ikili perovskit yapının dinamik faz geçişleri ve dinamik faz diyagramlarını yorumlamak mümkün olacaktır.

Bölüm 2’de ilk olarak Sr_2FeMoO_6 tipi ikili perovskit yapıları sistem tanıtılacak, bu sistemin 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 Sr_2FeMoO_6 tipi ikili perovskit yapıları sistemin dinamik davranışları ve sistemde mevcut olan fazları elde etmek için, ortalama mıknatıslanmanın zamana bağılı davranışları incelenecektir. Elde edilecek olan bu diferansiyel denklemler Adams Moulton kestirme ve düzeltme, Runge-Kutta, vb. gibi nümerik yöntemlerle çözülecek ve 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 deęişimleri kapsamlıca incelenerek, sistemlerde meydana gelen dinamik faz geişlerinin tabiatı (birinci-derece ve ikinci-derece) karakterize edilecek ve aynı zamanda DFG sıcaklıkları bulunacaktır. Daha sonrada hesaplanan DFG sıcaklıkları kullanılarak sistemlerin dinamik faz diyagramları (h,T) ve (J,T) düzleminde sunulacaktır.

Son bölümde ise, yapılan alıřmalar özetlenerek elde edilen sonuçların tartışması yapılmıřtır.

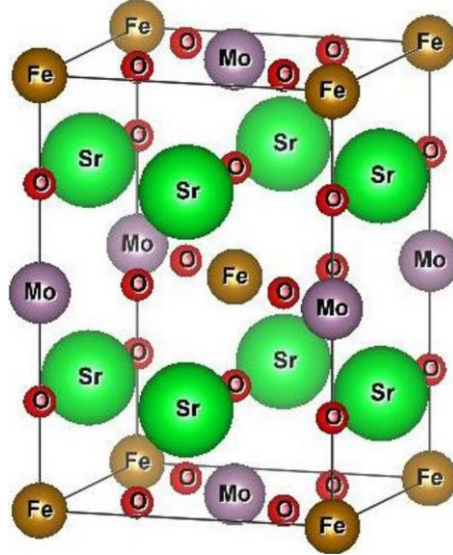


BÖLÜM 2

METOT VE MODELİN TANITIMI

2.1. Model

İkili perovskitler, genel kimyasal formülü $A_2BB'O_6$ olan geçiş metali oksit sınıfındandır ve basitçe iki farklı ABO_3 ve $AB'O_3$ perovskit malzemelerin sırasıyla düzenli bir şekilde örgü üzerine iç içe yerleştirilmesiyle katmanlı bir yapıda elde edilebilir. Burada A alkali toprak veya nadir toprak elementlerinden birini, B ve B' ise geçiş metallerini temsil etmektedir. Bu yapısal farklılıktan dolayı, malzemelerin elektrik ve manyetik özellikleri, klasik perovskitlerden oldukça farklıdır. $A_2BB'O_6$ yapısındaki ikili perovskitler basit malzemelerde fark edilemeyen ve merak uyandıran özelliklerine rağmen, yüksek kaliteli malzemelerin sentezinden karakterizasyonuna ve teorik olarak bu ilginç özelliklerin anlaşılmasındaki zorluklardan dolayı bu özelliklerin arkasındaki mekanizma tam anlamıyla keşfedilmemiştir. İkili perovskit sistemini Ising modeli ile tanımlamak için kullanılan en yakın örgü iç içe geçmiş ikili yüzey merkezli kübik (fcc) yapısıdır. Bu tez çalışmasında kullanılacak ve ikili perovskit yapısını tanımlayan ikili yüzey merkezli kübik örgünün şematik gösterim Şekil 2.1 deki gibi verilmektedir.



Şekil 2. 1 Sr_2FeMoO_6 tipi ikili perovskit yapısını tanımlayan iç içe geçmiş ikili yüzey merkezli kübik (fcc) yapısının şematik gösterimi. Yeşil, kahverengi, Gri ve kırmızı küreler sırasıyla Sr, dinamik manyetik özelliklerini araştırmak için kullanılmaktadır.

İkili perovskit sistemini Ising modeli ile tanımlamak için kullanılan en yakın örgü iç içe geçmiş ikili yüzey merkezli kübik (fcc) yapısıdır.[48]

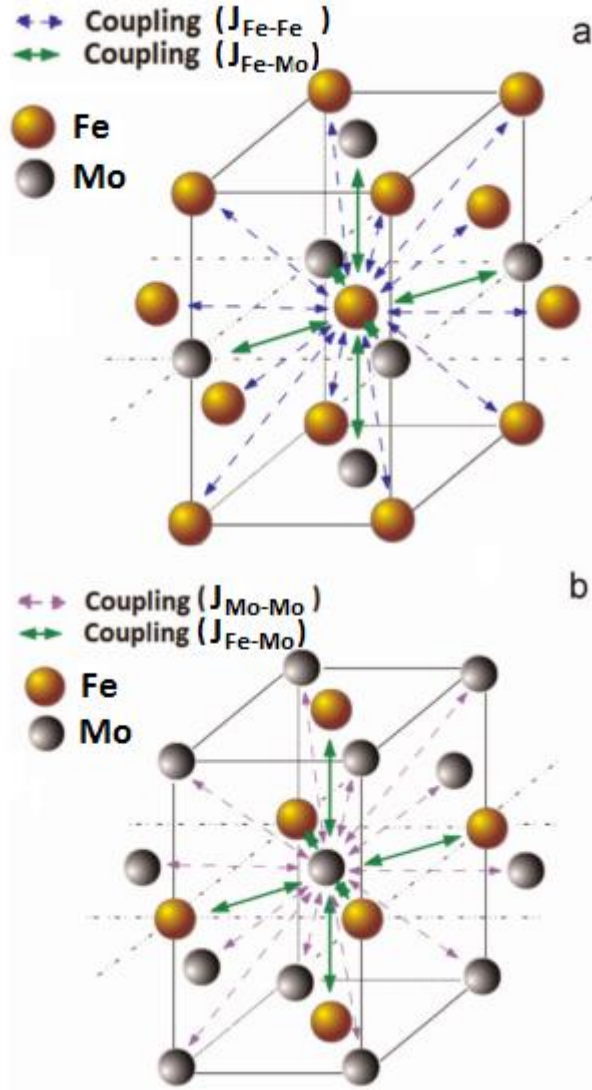
En yakın komşu etkileşmelerini, kristal alan veya tek-iyon anizotropi terimini ve zamana bağlı dış manyetik alan terimini içeren $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ tipi ikili perovskit yapılı Ising sisteminin Hamiltonyen ifadesi,

$$H = -J_{\text{Fe-Fe}} \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - J_{\text{Mo-Mo}} \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - J_{\text{Fe-Mo}} \sum_{\langle ij \rangle} S_i \sigma_j - \Delta_{\text{Fe}} \sum_i (S_i)^2 - h(t) \left[\sum_i (S_i + \sigma_i) \right] \quad (2.1)$$

biçiminde tanımlanmaktadır. Burada, $\langle ij \rangle$ toplamlarım en yakın komşu spinlerin çiftleri üzerinden olacağını ifade etmektedir. $J_{\text{Fe-Fe}}$, $J_{\text{Mo-Mo}}$ ve $J_{\text{Fe-Mo}}$ sırasıyla demir (Fe) manyetik atomları arasındaki bilineer etkileşim parametresini, molibden (Mo) manyetik atomları arasındaki bilineer etkileşim parametresini ve demir (Fe) ile molibden (Mo) manyetik atomları arasındaki bilineer etkileşim parametresini göstermektedir. Δ_{Fe} kristal-alan veya tek iyon anizotropi etkileşme terimini ve $h(t)$ ise zamana bağlı salınımlı dış manyetik alanı ifade etmektedir. Zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan ifadesi,

$$h(t) = h_0 \sin(\omega t), \quad (2.2)$$

şeklindedir. Burada h_0 ve $\omega = 2\pi\nu$ sırasıyla salınımlı alanının genliği ve açısal frekansıdır. Sistem T_A mutlak sıcaklığında izotermal ısı banyosu ile etkileşim halindedir. Burada demir (Fe) atomlarını ifade eden $S_i = \pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$ ve molibden (Mo) atomlarını ifade eden $\sigma_i = \pm 1/2$ değerlerini almaktadır. Hamiltonyen ifadesindeki terimlerin daha iyi anlaşılması için etkileşim parametrelerin üç boyutlu gösterimi Şekil 2.2. de gösterilmektedir.



Şekil 2. 2 Sr_2FeMoO_6 tipi ikili perovskit yapısındaki etkileşim parametrelerinin daha net anlaşılması için yüzey merkezli kübik örgünün üç boyutlu gösterimi [48]. (a) Merkezde Fe atomları mevcuttur. (b) Merkezde Mo atomları mevcuttur.

İlgilenilen model, alternatif olarak birbirini tekrarlayan iki alt tabaka A ve B'den oluşmaktadır. Sarı renklerle gösterilen spin-5/2 manyetik atomlarına ait olan ilk alt örgü (A), $\pm 5/2$, $\pm 3/2$ ve $\pm 1/2$ değerlerini almaktadır. Gri renkli küreler spin-1/2 manyetik atomlarına aittir ve bu alt örgü B ise $\pm 1/2$ değerlerini almaktadır. Burada J_{Fe-Fe} ve J_{Mo-Mo} 'nun pozitif olması (ferromanyetik etkileşim) aynı atom grupları arasındaki spinlerin yönelimlerinin birbirine paralel olduklarını; J_{Fe-Mo} 'nun negatif olması (anti-ferromanyetik) farklı atom grupları arasındaki spinlerin yönelimlerinin birbirine paralel ancak zıt yönde olduklarını ifade etmektedir. Bu tez çalışmasında, Glauber-tipi

stokastik dinamik temelli ortalama alan yaklaşımı (OAY) yöntemi, $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ tipi ikili perovskit yapının dinamik manyetik özelliklerini araştırmak için kullanılacaktır.

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

Zamana bağlı salınımlı dış manyetik varlığında $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ tipi ikili perovskit yapılı Ising sisteminin dinamik davranışını açıklayan ortalama-alan dinamik denklemlerini elde edebilmek için Glauber dinamiğini kullanacağız ve Master denklemden yararlanacağız. $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ tipi ikili perovskit yapılı Ising sistemi, Glauber-tipi stokastik dinamiğe göre birim zamanda $1/\tau$ oranında değişim gösterir. Ortalama alan dinamik denklemlerinin türetilmesi, spin-1/2 sistemi [51] ve farklı spin sistemleri [57, 58] için ayrıntılı olarak açıklandığından, burada $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ tipi ikili perovskit yapılı Ising sisteminin denklemleri elde edilecektir. B alt örgüsündeki spinler sabit kaldığı zaman, sistemin t zamanında, $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N$, spin konfigürasyonuna sahip olduğu andaki olasılık fonksiyonu $P^A(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N; t)$ ile tanımlanır. A alt örgüsü üzerindeki spinler sabit kaldığı zaman, sistemin t zamanında, S_1, S_2, \dots, S_N spin konfigürasyonuna sahip olduğu andaki ihtimaliyet fonksiyonu ise $P^B(S_1, S_2, \dots, S_N; t)$ ile tanımlanır. $W_i^A(\sigma_i)$ i. spinin σ_i durumundan $-\sigma_i$ durumuna (B alt örgüsündeki spinler sabit kaldığı durumda) ve $W_j^B(S_j \rightarrow S'_j)$ j. Spinin S_j durumundan S'_j durumuna (A alt örgüsündeki spinler sabit kaldığı durumda) birim zamandaki geçiş olasılığıdır. B alt örgüsündeki spinlerin bir an için sabit olduğu düşünülürse, A alt örgüsü için master denklemi,

$$\frac{d}{dt} P^A(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N; t) = - \left(\sum_i W_i^A(\sigma_i) \right) P^A(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N; t) + \sum_i W_i^A(-\sigma_i) P^A(\sigma_1, \sigma_2, \dots, -\sigma_i, \dots, \sigma_N; t), \quad (2,3)$$

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

$$\frac{d}{dt} P^A(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N; t) = 0, \quad (2,4)$$

ve master denklemden olasılık yoğunlukları oranı,

$$\frac{W_i^A(-\sigma_i)}{W_i^A(\sigma_i)} = \frac{P^A(\sigma_1, \sigma_2, \dots, -\sigma_i, \dots, \sigma_N)}{P^A(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N)}, \quad (2,5)$$

olduğu kolayca görülebilir. Buradan

$$P^A(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots, \sigma_N) \propto \exp(-\beta \mathcal{H}), \quad (2,6)$$

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

$$W_i^A(\sigma_i) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta \Delta E^A(\sigma_i))}{\sum_{\sigma_i} \exp(-\beta \Delta E^A(\sigma_i))} \quad (2,7)$$

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

$$\Delta E^A(\sigma_i) = 2\sigma_i (J_{Mo-Mo} \sum_j \sigma_j + J_{Fe-Mo} \sum_i S_i + h(t)) \quad (2,8)$$

şeklinde bulunur. Bulunan bu enerji değişimi ifadeleri (2,7) denkleminde yerine yazılırsa $W_i^A(\sigma_i)$ olasılık yoğunlukları;

$$W_i^A\left(-\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(-\beta x/2)}{\cosh(\beta x/2)}, \quad (2,9a)$$

$$W_i^A\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(\beta x/2)}{\cosh(\beta x/2)}, \quad (2,9b)$$

şeklinde elde edilir. Burada $x = J_{Mo-Mo} \sum_j \sigma_j + J_{Fe-Mo} \sum_i S_i + h(t)$ ile tanımlanır. Master denkleminde yararlanılarak, A alt örgüsü için genel ortalama-alan dinamik denklemini şu şekilde elde edilir:

$$\tau \frac{d}{dt} \langle \sigma_k \rangle = -\langle \sigma_k \rangle + \frac{1}{2} \tanh \left[\frac{\beta}{2} (x) \right]. \quad (2,10)$$

Ortalama-alan yaklaşımı kullanılarak (2,10) denklemini,

$$\tau \frac{d}{dt} \langle \sigma_i \rangle_A = -\langle \sigma_i \rangle_A + \frac{1}{2} \tanh \left[\frac{\beta}{2} (x_1) \right] \quad (2,11)$$

olarak yazılabilir. Burada $x_1 = 12 J_{Mo-Mo} \langle \sigma_j \rangle_A + 6 J_{Fe-Mo} \langle S_i \rangle_B + h_0 \sin(\omega t)$. Elde edilen bu ortalama-alan dinamik denklemini,

$$\Omega \frac{d}{d\xi} m_{Mo} = -m_{Mo} + \frac{1}{2} \tanh \left[\frac{1}{2T} (12 J_{Mo-Mo} m_{Mo} + 6 J_{Fe-Mo} m_{Fe} + h_0 \sin(\xi)) \right] \quad (2,12)$$

şeklinde de yazılabilir. Burada $m_{Mo} = \langle \sigma_j \rangle_A$, $m_{Fe} = \langle S_i \rangle_B$, $\xi = \omega t$, $T = (\beta J_Z)^{-1}$, $h = h_0 \sin(\omega t)$, $h = h_0 / J_C$ ve $\Omega = \tau \omega$ olarak tanımlanmıştır. T, h ve Ω boyutsuz parametrelerdir. Sistemimizde $\Omega = 2\pi$ değerinde sabit olarak ele alınacaktır.

Diğer taraftan Sr_2FeMoO_6 tipi ikili perovskit yapılı Ising sisteminde A alt örgüsündeki spinlerin bir an için sabit kaldığı düşünülerek, B alt örgüsü için ortalama alan dinamik denklemlerini yukarıdaki gibi benzer hesaplamaları kullanarak da elde edebiliriz. Bu durumda B alt örgüsü için master denklemini;

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P^B(S_1, S_2, \dots, S_N; t) = & - \sum_j \left(\sum_{S_j \neq S'_j} W_j^B(S_j \rightarrow S'_j) \right) P^B(S_1, S_2, \dots, S_j, \dots, S_N; t) \\ & + \sum_j \left(\sum_{S_j \neq S'_j} W_j^B(S'_j \rightarrow S_j) P^B(S_1, S_2, \dots, S'_j, \dots, S_N; t) \right), \end{aligned} \quad (2,13)$$

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;

$$P^B(S_1, S_2, \dots, S'_j, \dots, S_N) \propto \exp(-\beta \mathcal{H}), \quad (2,14)$$

yazılır. Burada $P^B(S_1, S_2, \dots, S'_j, \dots, S_N)$ sistem dengede iken $(S_1, S_2, \dots, S'_j, \dots, S_N)$ 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 $W_j^B(S_j \rightarrow S'_j)$;

$$W_j^B(S_j \rightarrow S'_j) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta \Delta E^B(S_j \rightarrow S'_j))}{\sum_{S_j} \exp(-\beta \Delta E^B(S_j \rightarrow S'_j))}, \quad (2,15)$$

ile verilir. Burada $\beta = 1/k_B T$ 'dır ve k_B Boltzmann faktörüdür. Daha sonra Hamiltonyen ifadesinin kullanılması ile $\Delta E^B(S_i \rightarrow S'_i)$ değeri bulunur.

$$\Delta E^B(S_j \rightarrow S'_j) = -(S'_j - S_j)(J_{Fe-Fe} \sum_i S_i + J_{Fe-Mo} \sum_i \sigma_i + h(t)) - \left[(S'_j)^2 - (S_j)^2 \right] \Delta_{Fe} \quad (2,16)$$

$\Delta E^B(S_j \rightarrow S'_j)$ spinler arası geçişte sistemin enerjisindeki değişimdir. Burada

$y = J_{Fe-Fe} \sum_i S_i + J_{Fe-Mo} \sum_i \sigma_i + h(t)$ ile tanımlanırsa,

$$\Delta E^B(S_j \rightarrow S_j') = -(S_j' - S_j)y - [(S_j')^2 - (S_j)^2] \Delta_{Fe} \quad (2,17)$$

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,

$$W_j^B\left(\frac{5}{2} \rightarrow \frac{5}{2}\right) = 0$$

$$W_j^B\left(\frac{5}{2} \rightarrow \frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(3\beta y/2) \exp(-2\beta \Delta_{Fe})}{\exp(2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta \Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(\frac{5}{2} \rightarrow \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(\beta y/2) \exp(-4\beta \Delta_{Fe})}{\exp(2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta \Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(\frac{5}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(-\beta y/2) \exp(-4\beta \Delta_{Fe})}{\exp(2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta \Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(\frac{5}{2} \rightarrow -\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(-3\beta y/2) \exp(-2\beta \Delta_{Fe})}{\exp(2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta \Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(\frac{5}{2} \rightarrow -\frac{5}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(-5\beta y/2) \exp(2\beta\Delta_{Fe})}{\exp(2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta\Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(\frac{3}{2} \rightarrow \frac{5}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(5\beta y/2) \exp(2\beta\Delta_{Fe})}{\exp(2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta\Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(\frac{3}{2} \rightarrow \frac{3}{2}\right) = 0,$$

$$W_j^B\left(\frac{3}{2} \rightarrow \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(\beta y/2) \exp(-4\beta\Delta_{Fe})}{\exp(2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta\Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(\frac{3}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(-\beta y/2) \exp(-4\beta\Delta_{Fe})}{\exp(2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta\Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(\frac{3}{2} \rightarrow -\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(-3\beta y/2) \exp(-2\beta\Delta_{Fe})}{\exp(2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta\Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(\frac{3}{2} \rightarrow -\frac{5}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(-5\beta y/2) \exp(2\beta\Delta_{Fe})}{\exp(2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta\Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(\frac{1}{2} \rightarrow \frac{5}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(5\beta y/2) \exp(2\beta \Delta_{Fe})}{\exp(2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta \Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(\frac{1}{2} \rightarrow \frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(3\beta y/2) \exp(-2\beta \Delta_{Fe})}{\exp(2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta \Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(\frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2}\right) = 0,$$

$$W_j^B\left(\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(-\beta y/2) \exp(-4\beta \Delta_{Fe})}{\exp(2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta \Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(-3\beta y/2) \exp(-2\beta \Delta_{Fe})}{\exp(2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta \Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{5}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(-5\beta y/2) \exp(2\beta \Delta_{Fe})}{\exp(2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta \Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(-\frac{1}{2} \rightarrow \frac{5}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(5\beta y/2) \exp(2\beta \Delta_{Fe})}{\exp(2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta \Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(-\frac{1}{2} \rightarrow \frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(3\beta y/2) \exp(-2\beta\Delta_{Fe})}{\exp(2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta\Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(-\frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(\beta y/2) \exp(-4\beta\Delta_{Fe})}{\exp(2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta\Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(-\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}\right) = 0,$$

$$W_j^B\left(-\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(-3\beta y/2) \exp(-2\beta\Delta_{Fe})}{\exp(2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta\Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(-\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{5}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(-5\beta y/2) \exp(2\beta\Delta_{Fe})}{\exp(2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta\Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(-\frac{3}{2} \rightarrow \frac{5}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(5\beta y/2) \exp(2\beta\Delta_{Fe})}{\exp(2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta\Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(-\frac{3}{2} \rightarrow \frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(3\beta y/2) \exp(-2\beta\Delta_{Fe})}{\exp(2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta\Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(-\frac{3}{2} \rightarrow \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(\beta y/2) \exp(-4\beta\Delta_{Fe})}{\exp(2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta\Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(-\frac{3}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(-\beta y/2) \exp(-4\beta\Delta_{Fe})}{\exp(2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta\Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(-\frac{3}{2} \rightarrow -\frac{3}{2}\right) = 0,$$

$$W_j^B\left(-\frac{3}{2} \rightarrow -\frac{5}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(-5\beta y/2) \exp(2\beta\Delta_{Fe})}{\exp(2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta\Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(-\frac{5}{2} \rightarrow \frac{5}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(5\beta y/2) \exp(2\beta\Delta_{Fe})}{\exp(2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta\Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(-\frac{5}{2} \rightarrow \frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(3\beta y/2) \exp(-2\beta\Delta_{Fe})}{\exp(2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta\Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(-\frac{5}{2} \rightarrow \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(\beta y/2) \exp(-4\beta\Delta_{Fe})}{\exp(2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta\Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta\Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(-\frac{5}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(-\beta y/2) \exp(-4\beta \Delta_{Fe})}{\exp(2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta \Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(-\frac{5}{2} \rightarrow -\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(-3\beta y/2) \exp(-2\beta \Delta_{Fe})}{\exp(2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta \Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}$$

$$W_j^B\left(-\frac{5}{2} \rightarrow -\frac{5}{2}\right) = 0,$$

$W_j^B(S_j \rightarrow S'_j)$ 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,

$$\begin{aligned} W_j^B\left(\frac{3}{2} \rightarrow \frac{5}{2}\right) &= W_j^B\left(\frac{1}{2} \rightarrow \frac{5}{2}\right) = W_j^B\left(-\frac{1}{2} \rightarrow \frac{5}{2}\right) = W_j^B\left(-\frac{3}{2} \rightarrow \frac{5}{2}\right) = W_j^B\left(-\frac{5}{2} \rightarrow \frac{5}{2}\right) \\ &= W_j^B\left(S_j \rightarrow \frac{5}{2}\right) \\ &= \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(5\beta y/2) \exp(2\beta \Delta_{Fe})}{\exp(2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta \Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} W_j^B\left(\frac{5}{2} \rightarrow \frac{3}{2}\right) &= W_j^B\left(\frac{1}{2} \rightarrow \frac{3}{2}\right) = W_j^B\left(-\frac{1}{2} \rightarrow \frac{3}{2}\right) = W_j^B\left(-\frac{3}{2} \rightarrow \frac{3}{2}\right) = W_j^B\left(-\frac{5}{2} \rightarrow \frac{3}{2}\right) \\ &= W_j^B\left(S_j \rightarrow \frac{3}{2}\right) \\ &= \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(3\beta y/2) \exp(-2\beta \Delta_{Fe})}{\exp(2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta \Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_j^B \left(\frac{5}{2} \rightarrow \frac{1}{2} \right) &= W_j^B \left(\frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2} \right) = W_j^B \left(-\frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2} \right) = W_j^B \left(-\frac{3}{2} \rightarrow \frac{1}{2} \right) = W_j^B \left(-\frac{5}{2} \rightarrow \frac{1}{2} \right) \\
&= W_j^B \left(S_j \rightarrow \frac{1}{2} \right) \\
&= \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(\beta y/2) \exp(-4\beta \Delta_{Fe})}{\exp(2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta \Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_j^B \left(\frac{5}{2} \rightarrow -\frac{1}{2} \right) &= W_j^B \left(\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{1}{2} \right) = W_j^B \left(-\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{1}{2} \right) = W_j^B \left(-\frac{3}{2} \rightarrow -\frac{1}{2} \right) \\
&= W_j^B \left(-\frac{5}{2} \rightarrow -\frac{1}{2} \right) = W_j^B \left(S_j \rightarrow -\frac{1}{2} \right) \\
&= \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(-\beta y/2) \exp(-4\beta \Delta_{Fe})}{\exp(2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta \Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_j^B \left(\frac{5}{2} \rightarrow -\frac{3}{2} \right) &= W_j^B \left(\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{3}{2} \right) = W_j^B \left(-\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{3}{2} \right) = W_j^B \left(-\frac{3}{2} \rightarrow -\frac{3}{2} \right) \\
&= W_j^B \left(-\frac{5}{2} \rightarrow -\frac{3}{2} \right) = W_j^B \left(S_j \rightarrow -\frac{3}{2} \right) \\
&= \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(-3\beta y/2) \exp(-2\beta \Delta_{Fe})}{\exp(2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta \Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_j^B \left(\frac{5}{2} \rightarrow -\frac{5}{2} \right) &= W_j^B \left(\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{5}{2} \right) = W_j^B \left(-\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{5}{2} \right) = W_j^B \left(-\frac{3}{2} \rightarrow -\frac{5}{2} \right) \\
&= W_j^B \left(-\frac{5}{2} \rightarrow -\frac{5}{2} \right) = W_j^B \left(S_j \rightarrow -\frac{5}{2} \right) \\
&= \frac{1}{2\tau} \frac{\exp(-5\beta y/2) \exp(2\beta \Delta_{Fe})}{\exp(2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(5\beta y/2) + \exp(-2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y/2) + \exp(-4\beta \Delta_{Fe}) \cosh(\beta y/2)}
\end{aligned}$$

şeklinde yazılabilir.

$W_j^B(S_j \rightarrow S'_j) = W_j^B(S'_j)$ olduğundan denklem 2,15 ile verilen master eşitliği,

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} P^B(S_1, S_2, \dots, S_N; t) &= - \sum_j \left(\sum_{S_j \neq S'_j} W_j^B(S'_j) \right) P^B(S_1, S_2, \dots, S_j, \dots, S_N; t) \\
&+ \sum_j W_j^B(S_j) \left(\sum_{S_j \neq S'_j} P^B(S_1, S_2, \dots, S'_j, \dots, S_N; t) \right),
\end{aligned} \tag{2,18}$$

şekline dönüşür. Master denkleminde yararlanılarak, B alt örgüsü için genel ortalama-alan dinamik denklemi şu şekilde elde edilir:

$$\begin{aligned}
\tau \frac{d}{dt} \langle S_j \rangle_B &= - \langle S_j \rangle_B + \\
&\frac{5 \exp(2\beta \Delta_{Fe}) \sin(5\beta y_1/2) + 3 \exp(-2\beta \Delta_{Fe}) \sin(3\beta y_1/2) + \exp(-4\beta \Delta_{Fe}) \sin(\beta y_1/2)}{2 \exp(2\beta \Delta_{Fe}) \cos(5\beta y_1/2) + 2 \exp(-2\beta \Delta_{Fe}) \cosh(3\beta y_1/2) + 2 \exp(-4\beta \Delta_{Fe}) \cosh(\beta y_1/2)}
\end{aligned} \tag{2,19}$$

olarak yazılabilir. Burada $y_1 = 12 J_{Fe-Fe} \langle S_j \rangle_B + 6 J_{Fe-Mo} \langle \sigma_j \rangle_B + h_0 \sin(\omega t)$. Elde edilen bu ortalama-alan dinamik denklemi,

$$\Omega \frac{d}{d\xi} m_{Fe} = -m_{Fe} + \frac{5 \exp(2d/T) \sin(5y_2/2T) + 3 \exp(-2d/T) \sin(3y_2/2T) + \exp(-4d/T) \sin(y_2/2T)}{2 \exp(2d/T) \cos(5y_2/2T) + 2 \exp(-2d/T) \cos(3y_2/2T) + 2 \exp(-4d/T) \cos(y_2/2T)} \quad (2,20)$$

şeklinde de yazılabilir. Burada $m_{Mo} = \langle \sigma_j \rangle_B$, $m_{Fe} = \langle S_j \rangle_B$, $\xi = wt$, $T = (\beta Jz)^{-1}$, $y_2 = 12 J_{Fe-Fe} m_{Fe} + 6 J_{Fe-Mo} m_{Mo} + h \sin(\xi)$ ve $\Omega = \tau w$ olarak tanımlanmıştır. T, h ve Ω boyutsuz parametrelerdir. Sistemimizde $\Omega = 2\pi$ değerinde sabit olarak ele alınacaktır. Böylece, sistemin dinamik davranışını tanımlayan iki ortalama alan dinamik denklem elde edilir.



BÖLÜM 3

DİNAMİK FAZ GEÇİŞ NOKTALARI VE DİNAMİK FAZ DİYAGRAMLARI

Bu kesimde öncelikle

$$\Omega \frac{d}{d\xi} m_{Mo} = -m_{Mo} + \frac{1}{2} \tanh \left[\frac{1}{2T} (12 J_{Mo-Mo} m_{Mo} + 6 J_{Fe-Mo} m_{Fe} + h_0 \sin(\xi)) \right] \quad (2.12)$$

ve

$$\Omega \frac{d}{d\xi} m_{Fe} = -m_{Fe} + \frac{5 \exp(2d/T) \sin(5y_2/2T) + 3 \exp(-2d/T) \sin(3y_2/2T) + \exp(-4d/T) \sin(y_2/2T)}{2 \exp(2d/T) \cos(5y_2/2T) + 2 \exp(-2d/T) \cos(3y_2/2T) + 2 \exp(-4d/T) \cos(y_2/2T)} \quad (2.20)$$

ortalama alan dinamik denklemleri Adams Moulten kestirme ve düzeltme yöntemi kullanılarak nümerik olarak çözümlenecektir. Böylelikle A ve B alt örgüleri için ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının ($m_A(\xi)$ ve $m_B(\xi)$) zamana bağlı davranışları mercek altına alınacaktır.

Bir sonraki aşamada 2.12 ve 2.20 denklemleri Adams-Moulten kestirme ve düzeltme yöntemi ile Roubert integrasyon yöntemleri kullanılarak sayısal olarak çözülecek ve bir periyot içinde ortalama düzen parametrelerinin diğer bir deyişle dinamik alt örgü mıknatıslanmalarının davranışları indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak incelenecektir. Buna bağlı olarak da dinamik faz geçiş sıcaklıkları (DFG) tespit edilecek ve dinamik faz geçişlerinin yapısı (birinci- ya da ikinci derece faz geçişi) belirlenecektir. Bütün bu analizler sonucunda sistemin dinamik faz diyagramları h-T ve J-T düzlemlerinde gösterilecektir.

3.1. Ortalama Alt Örgü Mıknatıslanmalarının Zamanla Değişimi

Sistemdeki mevcut fazları bulmak için denklem (2.12) ve (2.20) ile verilen ortalama alan dinamik denklemlerin kararlı çözümleri farklı kristal alan (D), salınımlı dış manyetik alan (h) ve sıcaklık (T) değerleri için kritik edilecektir. Denklem (2.12) ve (2.20)'nin kararlı çözümleri 2π periyodu için ξ 'nin periyodik bir fonksiyonu olacaktır, yani...

$$m_A (\xi + 2\pi) = m_A(\xi), \quad (3.1)$$

$$m_B (\xi + 2\pi) = m_B (\xi). \quad (3.2).$$

Ayrıca, aşağıdaki özelliklerin sağlanıp veya sağlanmamasına göre sistemde üç tip çözüm mevcuttur.

$$m_A (\xi + 2) = -m_A(\xi), \quad (3.3)$$

$$m_B (\xi + 2) = -m_B (\xi). \quad (3.4).$$

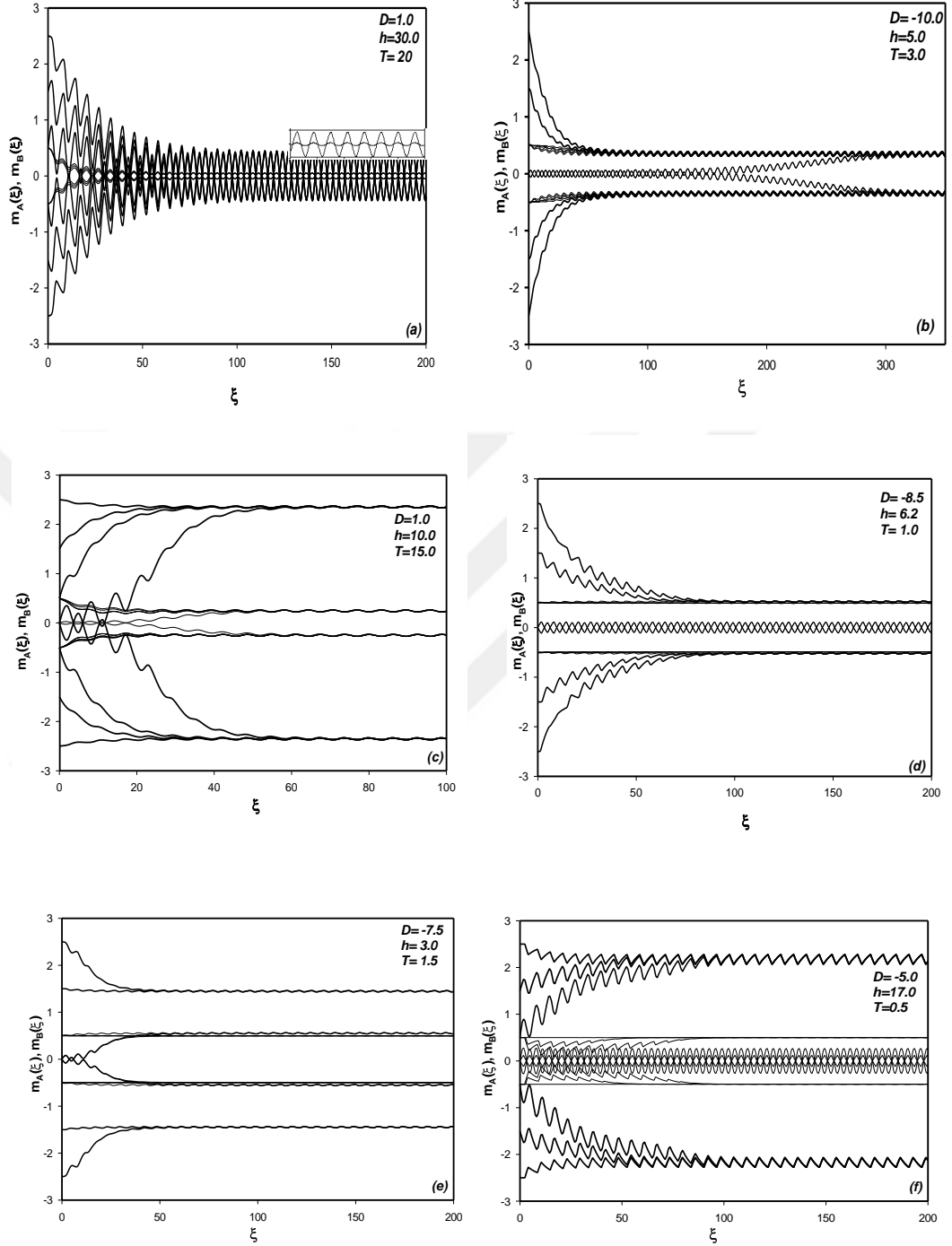
(3.3) ve (3.4) denklemleriyle verilen özelliğe sahip olan çözümler simetrik çözüm olarak adlandırılır ve bu paramanyetik (p) çözüme denk gelir. Elde edilen bu çözümde, ortalama düzen parametreleri, diğer bir deyişle ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının ($m_A(\xi)$ ve $m_B(\xi)$) birbirine eşit olduğu görülür ve sıfır değeri etrafında salınarak dış manyetik alana uyum sağladığı anlaşılır. Elde edilen ikinci çözüm ise, (3.3) ve (3.4) denklemleriyle verilen özelliği taşımazlar. Bu nedenle simetrik olmayan çözüm olarak isimlendirilir ki bu çözüm ferromanyetik (1/2,1/2) çözüme denk gelir. Yapılan bu çözümde $m_A(\xi)$ ve $m_B(\xi)$ birbirine eşittir ($m_A(\xi)=m_B(\xi)$) fakat bu sefer sıfır etrafında değil $m_A(\xi)=m_B(\xi)=\pm 1/2$ etrafında salınırlar ve artık dış manyetik alana uyum göstermeyi bırakırlar. Üçüncü tip çözüm, (3.3) ve (3.4) denklemleriyle uyum göstermez ve bu nedenle simetrik olmayan çözüm olarak adlandırılır. Bu çözüm simetrik değildir ancak ferrimanyetik (i) çözüme denk gelmektedir. Bu çözümde $m_A(\xi)$ ve $m_B(\xi)$ 'nin birbirine eşit olmadığı görülür ($m_A(\xi) \neq m_B(\xi)$) ve sıfır olmayan değerler civarında salınım gösterirler. Eğer $m_A(\xi)=\pm 1/2$ ve $m_B(\xi)=\pm 3/2$ etrafında salınım gösteriyorsa ferrimanyetik (i_2) faz, $m_A(\xi)=\pm 1/2$ ve $m_B(\xi)=\pm 5/2$ etrafında salınım gösteriyorsa ferrimanyetik (i_1) faz olarak isimlendirilir. Bu durumlarda ortalama mıknatıslanmalar dış manyetik alana uyum sağlamazlar. Bu çözümlerin doğruluğu net bir biçimde (2.12) ve (2.20) ile verilen ortalama-alan dinamik denklemlerin sayısal çözümleriyle görülür. (2.12) ve (2.20) denklemlerinin verilen değişkenler ve başlangıç değerleri için Adams-Moulton kestirme ve düzeltme yöntemi ile çözülmesiyle sistemde paramanyetik (p), ferromanyetik (f), ferrimanyetik (i_2) ve (i_1) temel fazlarının yanında altı adet f+p, i_2+f , i_1+f , i_1+i_2 , i_2+p ve i_1+p karma fazları bulundu. Bu fazlara karşılık gelen çözümler Şekil 3.1'de gösterilmiştir.

Şekil 3.1.(a)'da sadece simetrik çözüm bulunmuştur ve bu sebeple sistemde sadece paramanyetik (p) faz bulunmaktadır. Bu durumda $m_A(\xi)$ ve $m_B(\xi)$ birbirine eşittir ve sıfır değeri etrafında salınırlar. Şekil 3.1 (b) - (c)'de sadece simetrik olmayan çözüm bulunmuştur. Şekil 3.1(b)'de $m_A(\xi)$ ve $m_B(\xi)$ birbirine eşittir ve $m_A(\xi)=m_B(\xi)=\pm 1/2$ değerleri civarında salınırlar. $m_A(\xi) = m_B(\xi) = \pm 1/2$, olması sebebiyle sistemde ferromanyetik (f) faz bulunmaktadır. Şekil 3.1(c)'de $m_A(\xi)$ ve $m_B(\xi)$ sırayla $\pm 1/2$ ve $\pm 5/2$ değerleri civarında salınım yaparlar ve bu sebeple sistemde ferrimanyetik (i_1) faz bulunmaktadır. Bu çözümler başlangıç değerlerinden bağımsızdır.

Şekil 3.1(d)'de iki farklı çözüm bulunmuştur ve sistemde paramanyetik (p) ve (f) fazları bir arada bulunmaktadır. Birinci çözümde, $m_A(\xi)$ ve $m_B(\xi)$ sıfır değeri etrafında salınım yaparlar. Bu sebeple sistemde paramanyetik (p) faz elde edilmistir. Elde edilen ikinci çözümde ise $m_A(\xi)=m_B(\xi)=\pm 1/2$ değeri etrafında salınım yaptıkları ve burada ferromanyetik (f) faz tespit edilmiştir. Bu yüzden sistemde f + p karma fazı mevcuttur.

Şekil 3.1(e)'de de iki farklı çözüm elde edilmiştir fakat bu sefer sistemde (f) ve (i_2) fazları bir arada bulunmaktadır. Buradaki ilk çözümde, $m_A(\xi)$ ve $m_B(\xi)= 1/2$ değeri etrafında salınım yaparken, ikinci çözümde ise $m_A(\xi)=\pm 1/2$ değeri civarında salınırken, $m_B(\xi) = \pm 3/2$ değeri etrafında salınır ve burada ferrimanyetik (i_2) faz elde edilmiştir. Bundan dolayı sistemde $i_2 + f$ karma fazı mevcuttur.

Şekil 3.1(f)'de de iki farklı çözüm bulunmuştur fakat bu sefer sistemde paramanyetik (p) ve (i_1) fazları bir arada bulunmaktadır. Burada yapılan birinci çözümde, $m_A(\xi)$ ve $m_B(\xi)$ yine sıfır değeri etrafında salınırlarken, ikinci çözümde ise $m_A(\xi)=\pm 1/2$ değeri etrafında salınırken, $m_B(\xi) = \pm 5/2$ değeri etrafında salınır ve burada ferrimanyetik (i_1) faz elde edilmiştir. Bundan dolayı sistemde $i_1 + p$ karma fazları bir arada bulunur.



Şekil 3. 1 Fe ve Mo atomları için ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının ($m_A(\xi)$ ve $m_B(\xi)$) zamanla değişimi. (a) Sistemde sadece paramanyetik (p) faz mevcuttur. ($d = 1.0$, $h = 30.0$ ve $T = 20.0$), (b) Sistemde sadece ferromanyetik (f) faz mevcuttur. ($d = -10.0$, $h = 5.0$ ve $T = 3.0$), (c) Sistemde sadece ferrimanyetik (i_1) faz mevcuttur. ($d = 1.0$, $h = 10.0$ ve $T = 15.0$), (d) Sistemde (f+p) karma fazı mevcuttur. ($d = -8.5$, $h = 6.2$ ve $T = 1.0$), (e) Sistemde (i_2+f) karma fazı mevcuttur. ($d = -7.5$, $h = 3.0$ ve $T = 1.5$), (f) Sistemde (i_1+p) karma fazı mevcuttur. ($d = -5.0$, $h = 17.0$ ve $T = 0.5$).

3.2 Dinamik Düzen Parametreleri ve Dinamik Faz Geçiş Noktaları

$\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ tipi ikili peroksit yapılı karma spin (1/2, 5/2) Ising sistemindeki mevcut olan sekiz farklı faz arasındaki dinamik faz sınırları bu bölümde elde edilecektir. Bunun için dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıklarını hesaplamalıyız ve dinamik faz geçişlerinin doğasını (sürekli 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 periyot 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:

$$M_{Fe} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} m_{Fe}(\xi) d\xi, \quad (3.5)$$

$$M_{Mo} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} m_{Mo}(\xi) d\xi. \quad (3.6)$$

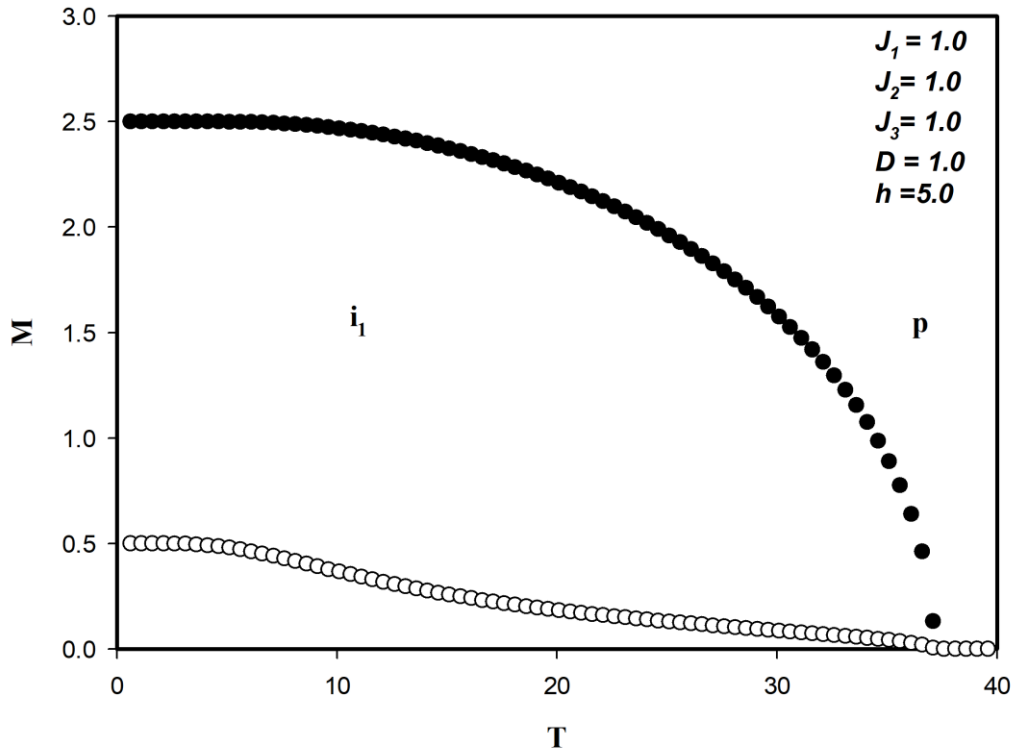
Burada M_{Fe} ve M_{Mo} sırasıyla sistemdeki dinamik demir ve molibyum mıknatıslanmalarına karşılık gelir. (3.5) ve (3.6) deki bu denklemler, Simpson integrasyonu ile Adams-Moulton prediktör düzeltme metodu kullanılarak sayısal olarak demir ve molibyum mıknatıslanmalarının başlangıç koşullarına bağlı olarak çözülecektir. Bir sonraki alt bölümde bu denklemlerin sayısal sonuçları incelenecektir.

3.3. Dinamik mıknatıslanmalar

Bu alt bölümde, $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ tipi ikili perovskit yapılı karma spin (1/2, 5/2) Ising sisteminin sıcaklık değerinin bir fonksiyonu olarak, dinamik mıknatıslanmaların termal değişimini farklı etkileşim parametresi değerleri için incelenecektir. M_{Fe} ve M_{Mo} 'nin termal davranışlarını denklem (3.5) ve (3.6) kullanarak dinamik düzen parametrelerinin davranışını etkileşim parametrelerinin farklı değerleri için indirgenmiş sıcaklığın ve indirgenmiş tek-iyon anizotropisinin bir fonksiyonu olarak Adams-Moulton kestirme ve düzeltme metodu ile Romberg integrasyon metodu birleştirilerek incelenecektir. Mevcut olan fazlar arasındaki dinamik faz sınırlarını belirleyebilmemiz için, dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıklarını hesaplamalı ve DFG'lerinin doğasını sürekli ya da sürekli

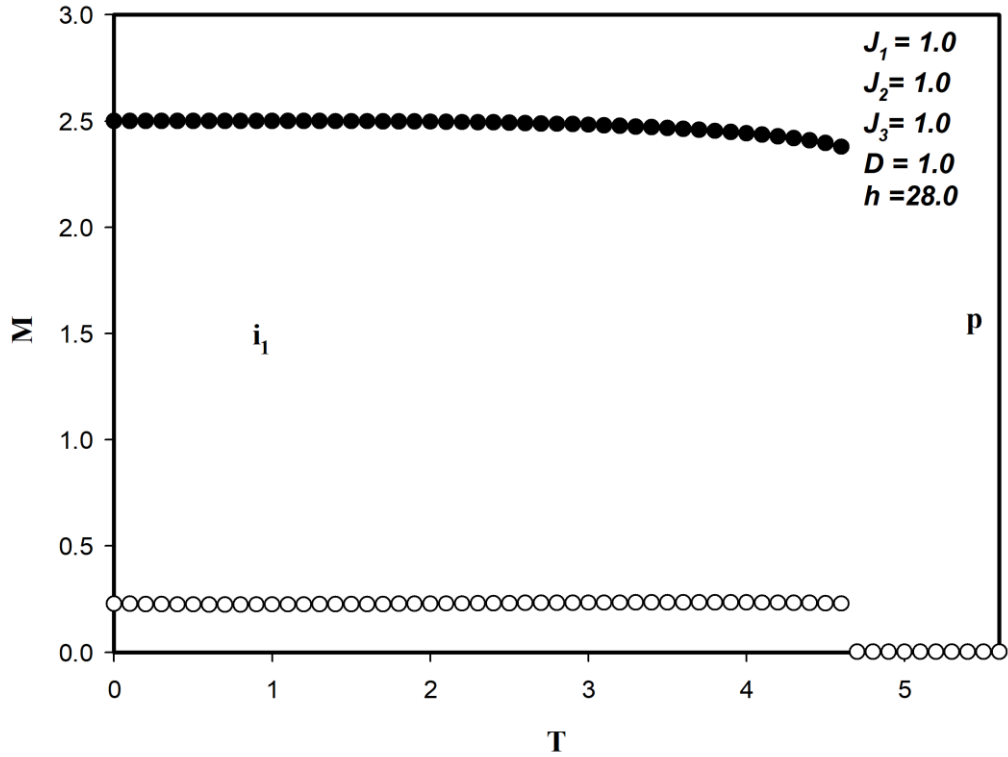
(kesikli) yani birinci- veya ikinci-derece faz geçişleri karakterize etmeliyiz. Dinamik mıknatıslanmaların (M_{Fe} ve M_{Mo}) davranışı etkileşme parametrelerinin farklı değerleri için indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak Adams-Moulton kestirme ve düzeltme metodu ile Romberg integrasyon metodu gibi nümerik metotların birleştirilmesiyle incelendi. Fazlar arasındaki dinamik faz sınırlarının ve DFG sıcaklıklarının nasıl elde edildiği Şekil 3.2, Şekil 3.3, Şekil 3.4, Şekil 3.5 (a) ve Şekil 3.5 (b), Şekil 3.6 (a) ve (b) ile Şekil 3.7, Şekil 3.8’de gösterilmektedir. Bu şekillerde, T_i birinci-derece faz geçiş sıcaklığını gösterirken, T_c ise ferrimanyetik ve ferromanyetik fazlardan paramanyetik faza ikinci-derece faz geçiş sıcaklıklarını göstermektedir.

- i) Şekil3.2. M_{Fe} ve M_{Mo} ’nin termal davranışları $J_1=J_2=J_3=1.0$, $D= 1.0$ ve $h = 5.0$ değerleri için elde edilmiştir. Bu şekilde mutlak sıfır sıcaklık değerinde $M_{Fe}= 5/2$ ve $M_{Mo}= 1/2$ iken sıcaklık arttıkça hem demir hemde molibyum mıknatıslanmaları sürekli olarak sıfıra yaklaştığını ve $T_C=37.07$ sıcaklığında ferrimanyetik-1 (i_1) fazından paramanyetik (p) fazına ikinci-derece faz geçişi meydana gelmektedir.



Şekil 3. 2 $J_1=J_2=J_3=1.0$, $D= 1.0$ ve $h = 5.0$ için dinamik mıknatıslanmaların (M_{Fe} ve M_{Mo}) sıcaklığa bağlı olarak davranışını göstermektedir. Şekilde i_1 fazından p fazına ikinci derece faz geçiş sıcaklığı ($T_C= 37.07$) meydana gelmiştir.

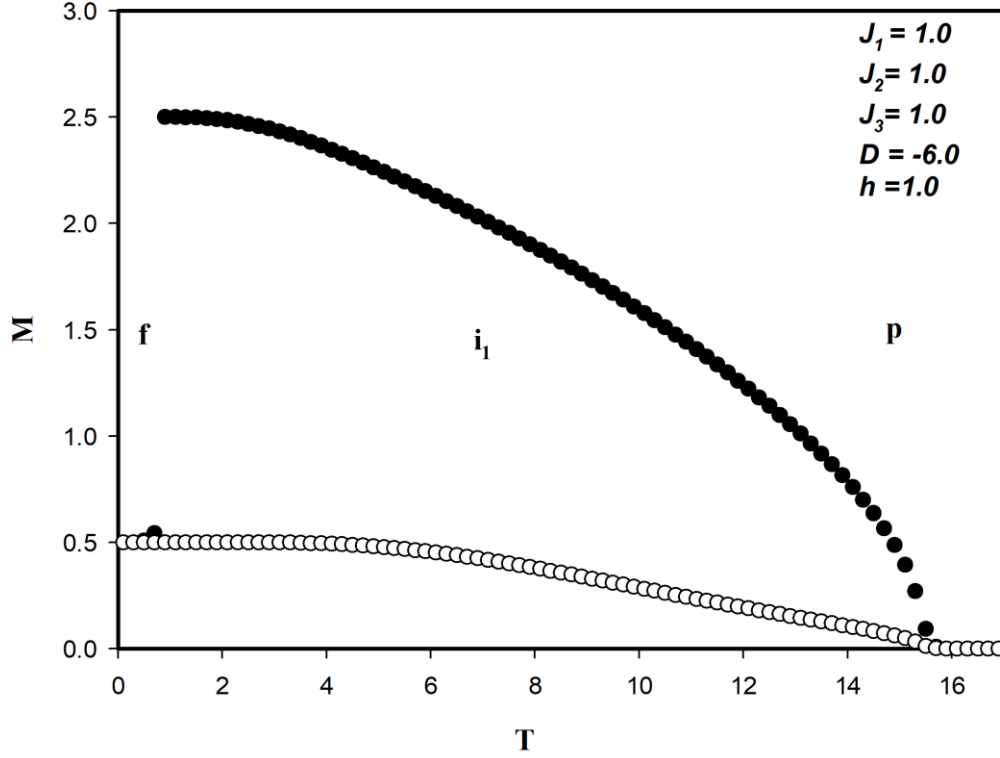
- ii) Şekil 3.3. M_{Fe} ve M_{Mo} 'nin termal davranışları $J_1=J_2=J_3=1.0$, $D= 1.0$ ve $h = 28.0$ değerleri için elde edilmiştir. Bu şekilde mutlak sıfır sıcaklık değerinde $M_{Fe} = 5/2$ ve $M_{Mo} = 1/2$ iken sıcaklık artarken, sıcaklığın $T_t = 4.70$ değerinde dinamik mıknatıslanmalar aniden (süreksiz bir biçimde) sıfır değerine gitmiştir. Bu durumda sistemde i_1 fazından p fazına birinci derece faz geçişi olmuştur.



Şekil 3. 3 $J_1=J_2=J_3=1.0$, $D= 1.0$ ve $h = 28.0$ için dinamik mıknatıslanmaların (M_{Fe} ve M_{Mo}) sıcaklığa bağlı olarak davranışını göstermektedir. Şekilde i_1 fazından p fazına birinci derece faz geçiş sıcaklığı ($T_t= 4.70$) meydana gelmiştir.

- iii) Şekil 3.4.' te M_{Fe} ve M_{Mo} 'nin termal davranışları $J_1=J_2=J_3=1.0$, $D= -6.0$ ve $h=1.0$ değerleri için elde edilmiştir. Bu şekilde mutlak sıfır sıcaklık değerinde $M_{Fe} = 1/2$ ve $M_{Mo} = 1/2$ iken sıcaklığın artmasıyla $T_t = 0.9$ değerinde dinamik mıknatıslanmalar aniden (süreksiz bir biçimde) $M_{Fe} = 5/2$ ve $M_{Mo} = 1/2$ değerine gitmiştir. Bu durumda sistemde f fazından i_1 fazına birinci derece faz geçişi olmuştur. Artan sıcaklık değeriyle birlikte demir ve molibyum mıknatıslanmaları sürekli olarak azalarak sıfıra yaklaşmış ve $T_c= 15.70$

sıcaklığında ferrimanyetik-1 (i_1) fazından paramanyetik (p) fazına ikinci-derece faz geçişi meydana gelmektedir.

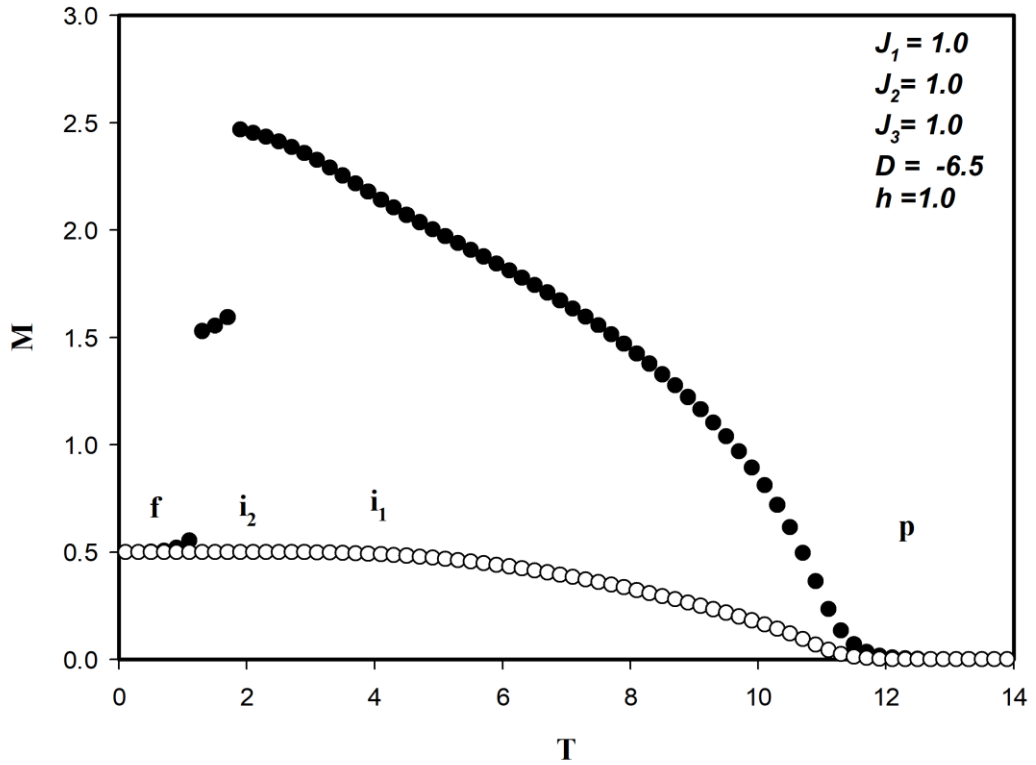


Şekil 3. 4 $J_1=J_2=J_3=1.0$, $D= -6.0$ ve $h = 1.0$ için dinamik mıknatıslanmaların (M_{Fe} ve M_{Mo}) sıcaklığa bağlı olarak davranışını göstermektedir. Şekilde f fazından i_1 fazına birinci derece faz geçiş sıcaklığı ($T_t=0.9$) ve ferrimanyetik-1 (i_1) fazından paramanyetik (p) fazına ikinci-derece faz geçişi $T_c= 15.70$ sıcaklığında meydana gelmiştir.

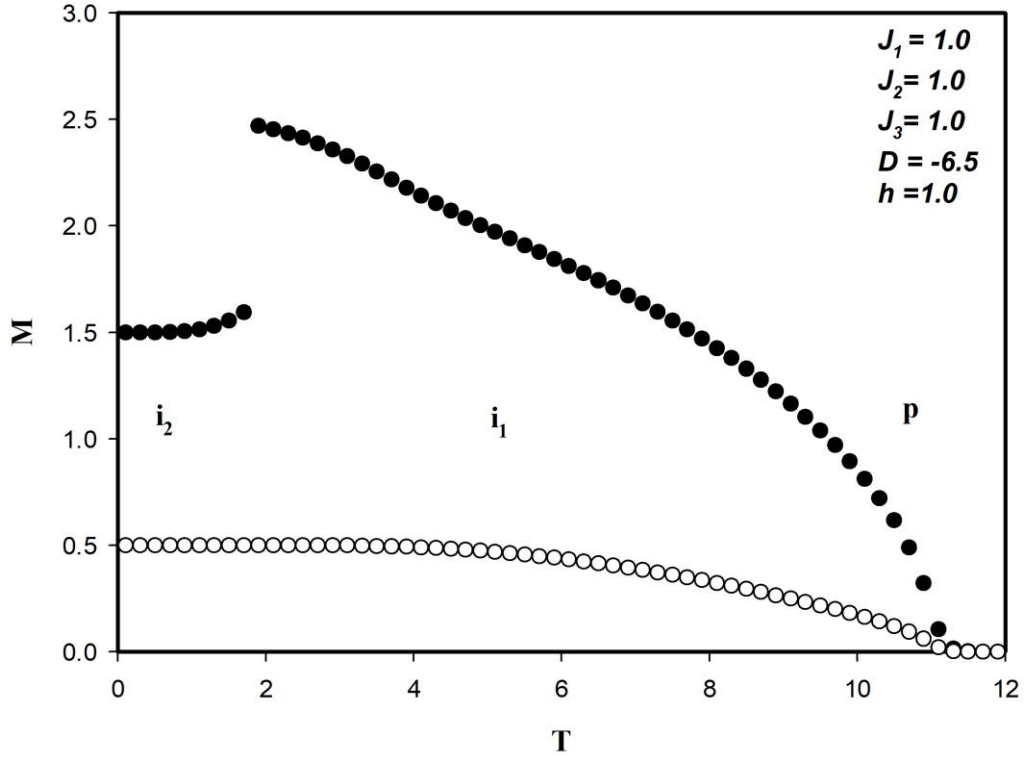
- iv) Şekil 3.5.(a) ve Şekil 3.5.(b) de M_{Fe} ve M_{Mo} 'nin termal davranışları $J_1=J_2=J_3=1.0$, $D= -6.5$ ve $h=1.0$ değerleri için iki farklı başlangıç değeri için elde edilmiştir. Şekil 3.5.(a) 'da mutlak sıfır sıcaklık değerinde $M_{Fe} = 1/2$ ve $M_{Mo} = 1/2$ iken sıcaklığın artmasıyla $T_t = 1.22$ değerinde dinamik mıknatıslanmalar aniden (sürekli bir biçimde) $M_{Fe} = 3/2$ ve $M_{Mo} = 1/2$ değerine gitmiştir. Bu durumda sistemde ferromanyetik (f) fazından ferrimanyetik-2 (i_2) fazına birinci derece faz geçişi olmuştur. Sıcaklığın artan değerinde $T_t = 1.86$ değerinde dinamik mıknatıslanmalar bu kez aniden (sürekli bir biçimde) $M_{Fe} = 5/2$ ve $M_{Mo} = 1/2$ değerine gitmiştir. Bu durumda sistemde ferimanyetik-2 (i_2) fazından ferrimanyetik-1 (i_1) fazına birinci derece faz geçişi olmuştur. Sıcaklık artmaya devam ettikçe demir ve

molibyum mıknatıslanmaları sürekli olarak azalarak sifira yaklařmıř ve $T_c=11.70$ sıcaklıęında ferrimanyetik-1 (i_1) fazından paramanyetik (p) fazına ikinci-derece faz geęiři meydana gelmektedir.

řekil 3.5.(b)'de mutlak sıfır sıcaklık deęerinde $M_{Fe} = 3/2$ ve $M_{Mo} = 1/2$ iken sıcaklıęın artmasıyla $T_t = 1.86$ deęerinde dinamik mıknatıslanmalar aniden (sürekli bir biçimde) $M_{Fe} = 5/2$ ve $M_{Mo} = 1/2$ deęerine gitmiřtir. Bu durumda sistemde ferrimanyetik-2 (i_2) fazından ferrimanyetik-1 (i_1) fazına birinci derece faz geęiři olmuřtur. Sıcaklıęın artan deęeriyle birlikte demir ve molibyum mıknatıslanmaları sürekli olarak azalarak sifira yaklařmıř ve $T_c=11.70$ sıcaklıęında ferrimanyetik-1 (i_1) fazından paramanyetik (p) fazına ikinci-derece faz geęiři meydana gelmektedir.



řekil 3. 5 (a) $J_1=J_2=J_3=1.0$, $D= -6.5$ ve $h = 1.0$ için dinamik mıknatıslanmaların (M_{Fe} ve M_{Mo}) sıcaklıęa baęlı olarak davranıřını göstermektedir. řekilde f fazından i_2 fazına birinci derece faz geęiř sıcaklıęı ($T_t= 1.22$) ve ferrimanyetik-2 (i_2) fazından ferrimanyetik-1 (i_1) fazına ikinci-derece faz geęiř sıcaklıęı $T_t= 1.86$ ve ferrimanyetik-1 (i_1) fazından paramanyetik (p) fazına ikinci derece faz geęiř sıcaklıęı $T_c= 11.70$ görölmektedir.

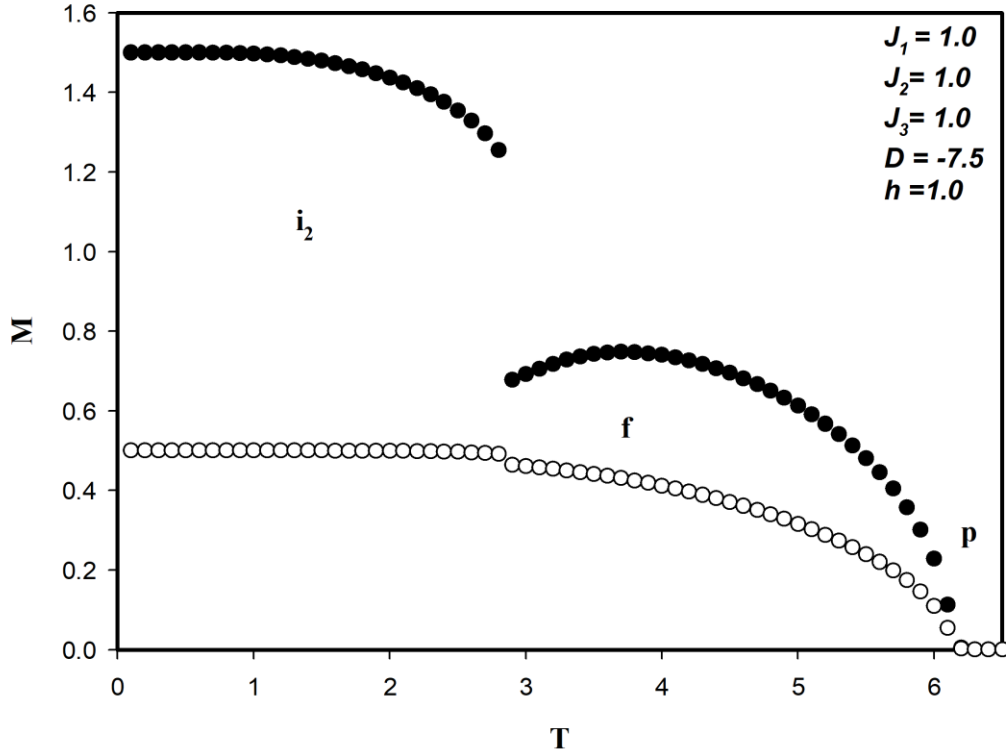


Şekil 3. 5 (b) $J_1=J_2=J_3=1.0$, $D= -6.5$ ve $h = 1.0$ için dinamik mıknatıslanmaların (M_{Fe} ve M_{Mo}) sıcaklığa bağlı olarak davranışını göstermektedir. Şekilde ferrimanyetik-2 (i_2) fazından ferrimanyetik-1 (i_1) fazına birinci derece faz geçiş sıcaklığı ($T_1= 1.86$) ve ferrimanyetik-1 (i_1) fazından paramanyetik (p) fazına ikinci derece faz geçiş sıcaklığı $T_c= 11.70$ görülmektedir.

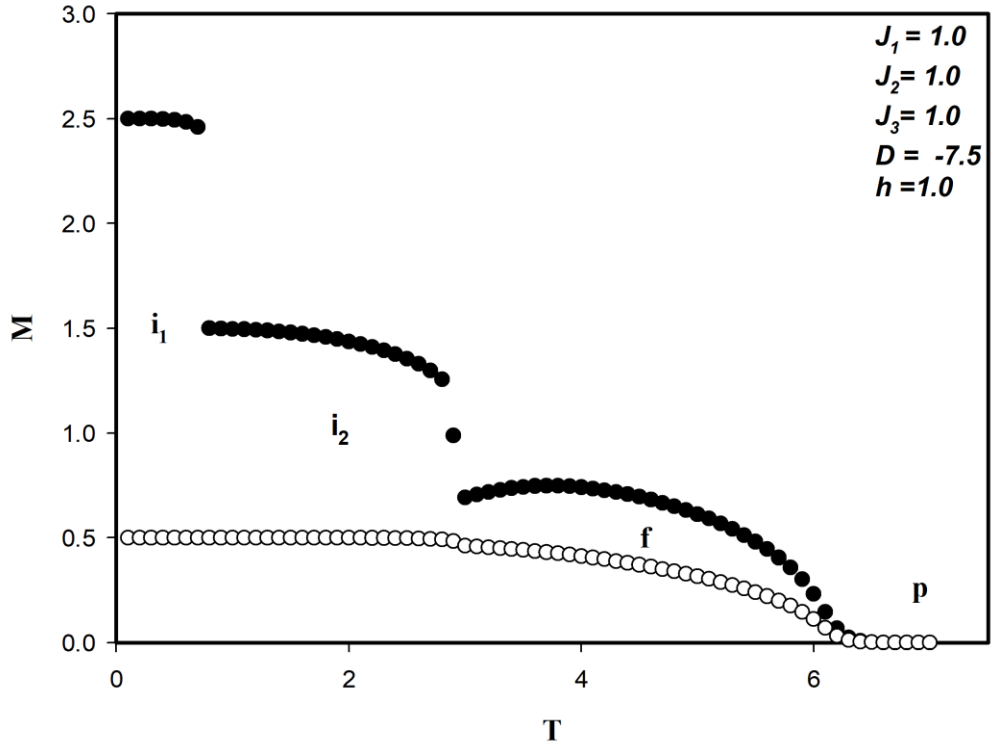
- v) Şekil 3.6.(a) ve Şekil 3.6.(b) de M_{Fe} ve M_{Mo} 'nin termal davranışları $J_1=J_2=J_3=1.0$, $D= -7.5$ ve $h=1.0$ değerleri için iki farklı başlangıç değeri için elde edilmiştir. Şekil 3.6.(a) 'da mutlak sıfır sıcaklık değerinde $M_{Fe} = 3/2$ ve $M_{Mo} = 1/2$ iken sıcaklığın artmasıyla $T_1 = 2.90$ değerinde dinamik mıknatıslanmalar aniden (süresiz bir biçimde) $M_{Fe} = 1/2$ ve $M_{Mo} = 1/2$ değerine gitmiştir. Bu durumda sistemde ferrimanyetik-2 (i_2) fazından ferromanyetik (f) fazına birinci derece faz geçişi olmuştur. Sıcaklık artarken demir ve molibyum mıknatıslanmaları sürekli olarak azalarak sıfıra yaklaşmış ve $T_c= 6.20$ sıcaklığında ferromanyetik (f) fazından paramanyetik (p) fazına ikinci-derece faz geçişi meydana gelmektedir.

Şekil 3.6.(b)'de mutlak sıfır sıcaklık değerinde $M_{Fe} = 5/2$ ve $M_{Mo} = 1/2$ iken sıcaklığın artmasıyla $T_1 = 0.74$ değerinde dinamik mıknatıslanmalar aniden

(sürekli bir biçimde) $M_{Fe} = 3/2$ ve $M_{Mo} = 1/2$ değerine gitmiştir. Bu durumda sistemde ferrimanyetik-1 (i_1) fazından ferrimanyetik-2 (i_2) fazına birinci derece faz geçişi olmuştur. Sıcaklık artarken $T_t = 2.92$ değerinde ferrimanyetik-2 (i_2) fazından ferromanyetik (f) faza birinci derece faz geçişi olmuştur. Sıcaklığın artan değeriyle birlikte demir ve molibyum mıknatıslanmalarının her ikisi birden sürekli olarak azalarak sıfıra yaklaşmış ve $T_c = 6.20$ sıcaklığında ferrimanyetik-1 (i_1) fazından paramanyetik (p) fazına ikinci-derece faz geçişi meydana gelmektedir.

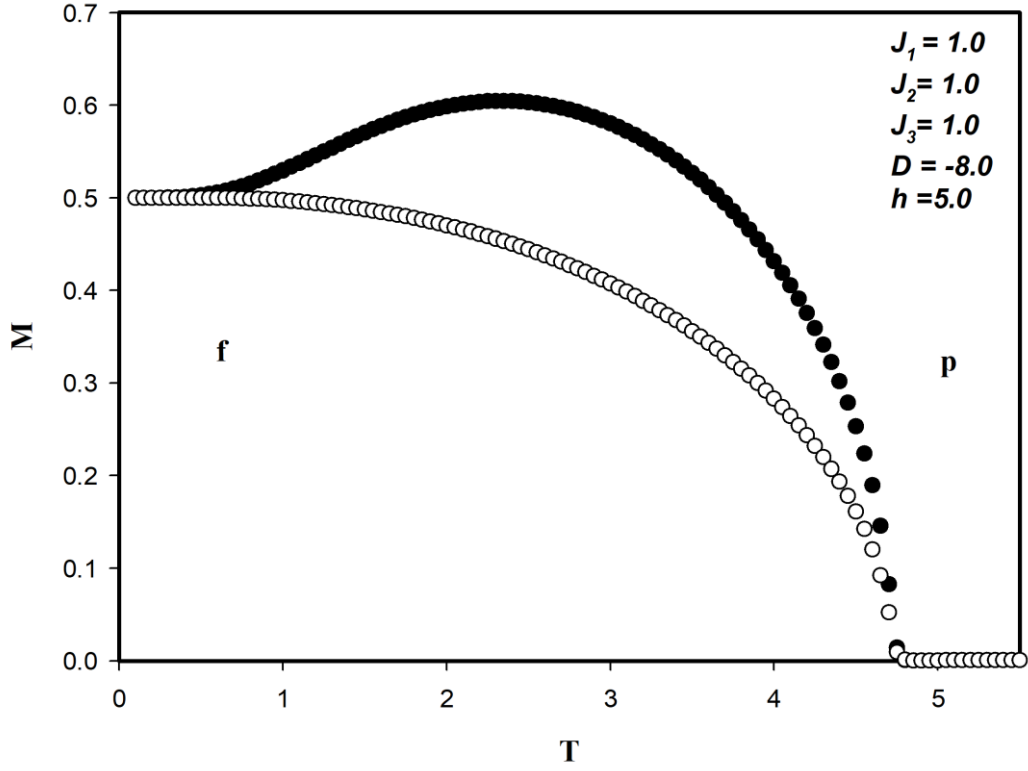


Şekil 3. 6 (a). $J_1=J_2=J_3=1.0$, $D= -7.5$ ve $h = 1.0$ için dinamik mıknatıslanmaların (M_{Fe} ve M_{Mo}) sıcaklığa bağlı olarak davranışını göstermektedir. Şekilde ferrimanyetik-2 (i_2) fazından ferromanyetik (f) fazına birinci derece faz geçiş sıcaklığı ($T_t= 2.90$) ve ferromanyetik (f) fazından paramanyetik (p) fazına ikinci derece faz geçiş sıcaklığı $T_c= 6.20$ görülmektedir.



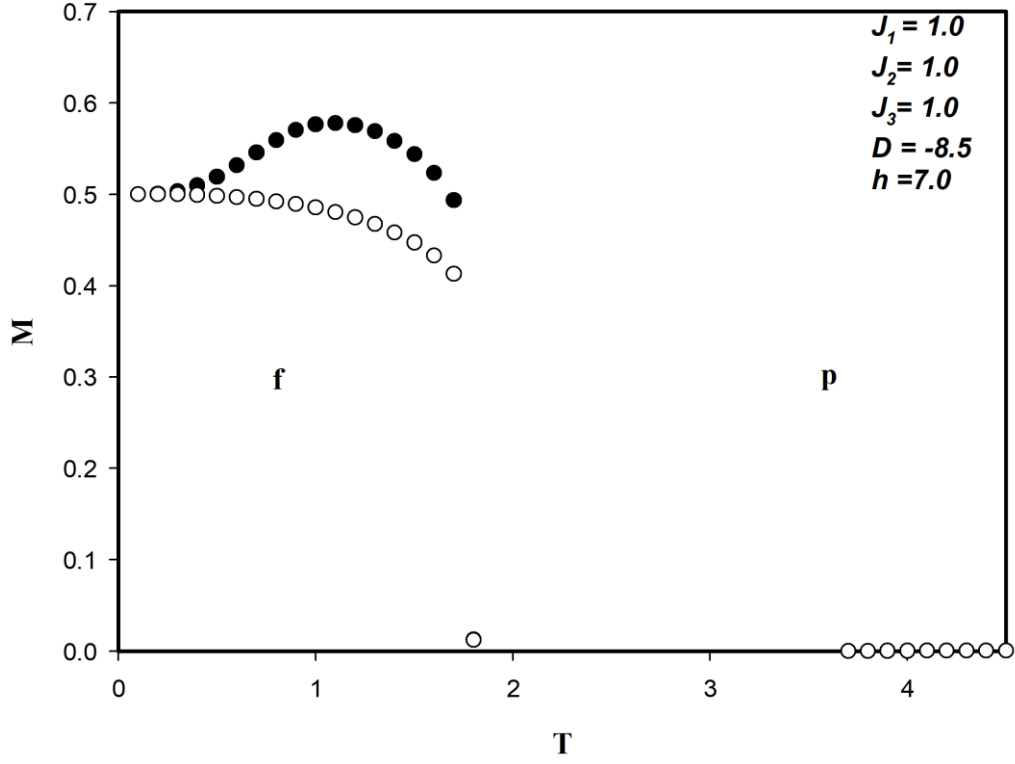
Şekil 3. 6 (b).de $J_1=J_2=J_3=1.0$, $D= -7.5$ ve $h = 1.0$ için dinamik mıknatıslanmaların (M_{Fe} ve M_{Mo}) sıcaklığa bağlı olarak davranışını göstermektedir. Şekilde ferrimanyetik-1 (i_1) fazından ferrimanyetik-2 (i_2) fazına birinci derece faz geçiş sıcaklığı ($T_c= 0.74$) ve ferrimanyetik-2 (i_2) fazından ferromanyetik (f) fazına birinci derece faz geçiş sıcaklığı ($T_c= 2.92$) ve ferromanyetik (f) fazından paramanyetik (p) fazına ikinci derece faz geçiş sıcaklığı $T_c= 6.20$ görülmektedir.

- vi) Şekil 3.7. M_{Fe} ve M_{Mo} 'nin termal davranışları $J_1=J_2=J_3=1.0$, $D= -8.0$ ve $h = 5.0$ değerleri için elde edilmiştir. Bu şekilde mutlak sıfır sıcaklık değerinde $M_{Fe}= 1/2$ ve $M_{Mo}= 1/2$ iken sıcaklık arttıkça hem demir hemde molibyum mıknatıslanmaları sürekli olarak sıfıra yaklaştığını ve $T_c=4.80$ sıcaklığında ferromanyetik (f) fazından paramanyetik (p) fazına ikinci-derece faz geçişi meydana gelmektedir.



Şekil 3. 7 $J_1=J_2=J_3=1.0$, $D= -8.0$ ve $h = 5.0$ için dinamik mıknatıslanmaların (M_{Fe} ve M_{Mo}) sıcaklığa bağlı olarak davranışını göstermektedir. Şekilde f fazından p fazına ikinci derece faz geçiş sıcaklığı ($T_C= 4.80$) meydana gelmiştir.

- vii)** Şekil 3.8. M_{Fe} ve M_{Mo} 'nin termal davranışları $J_1=J_2=J_3=1.0$, $D= -8.5$ ve $h = 7.0$ değerleri için elde edilmiştir. Bu şekilde mutlak sıfır sıcaklık değerinde $M_{Fe} = 1/2$ ve $M_{Mo} = 1/2$ iken sıcaklık artarken, sıcaklığın $T_t = 1.90$ değerinde dinamik mıknatıslanmalar aniden (süresiz bir biçimde) sıfır değerine gitmiştir. Bu durumda sistemde ferromanyetik (f) fazından paramanyetik (p) fazına birinci derece faz geçişi olmuştur.



Şekil 3. 8 $J_1=J_2=J_3=1.0$, $D= -8.5$ ve $h = 7.0$ için dinamik mıknatıslanmaların (M_{Fe} ve M_{Mo}) sıcaklığa bağlı olarak davranışını göstermektedir. Şekilde f fazından p fazına birinci derece faz geçiş sıcaklığı ($T_t= 1.90$) meydana gelmiştir.

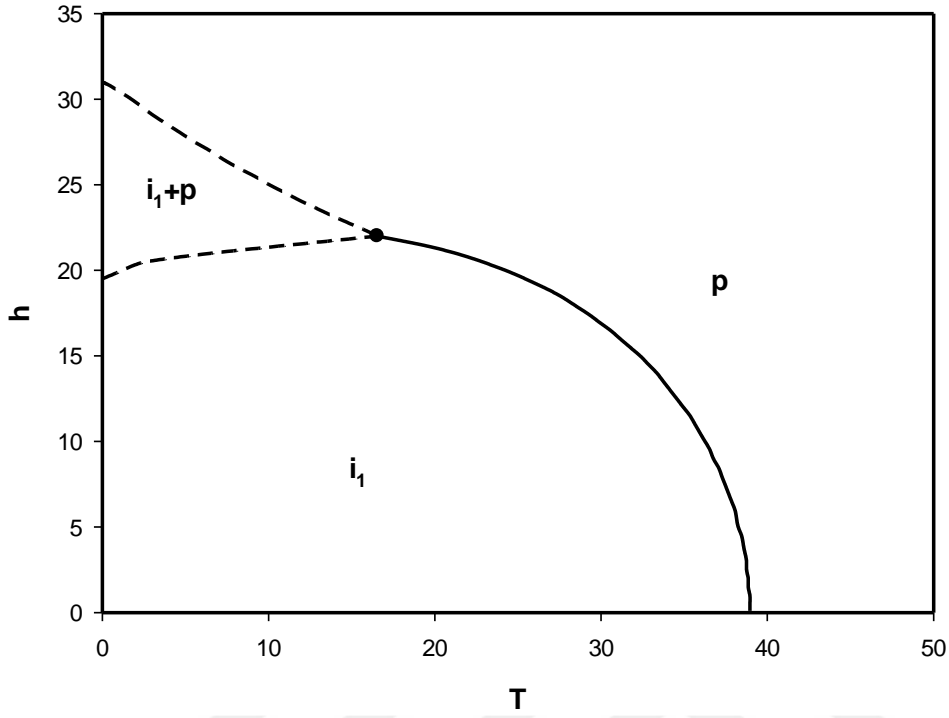
3.4. h/T ve J/T Düzleminde Dinamik Faz Diyagramları

3.4.1. h/T düzleminde dinamik faz diyagramları

i) Şekil 3.9 da $D=1.0$, değeri için (h, T) düzleminde elde edilen dinamik faz diyagramı bulunmaktadır. Bu faz diyagramında, indirgenmiş yüksek sıcaklıkta (T) ve indirgenmiş yüksek manyetik alan genliğinde (h), paramanyetik (p) faz görülmektedir. h ve T'nin düşük değerlerinde ise ferrimanyetik-1 (i_1) fazı vardır. i_1 fazı ile paramanyetik faz bölgesi ikinci-derece faz geçiş çizgisi ile ayrılmıştır. İndirgenmiş sıcaklığın ve indirgenmiş manyetik alan genliğinin belirli değerlerinde i_1 ve p fazının birlikte görüldüğü i_1+p karma fazı bulunmaktadır. i_1 ve p temel faz bölgeleri, i_1+p karma faz bölgesinden birinci-derece faz geçiş çizgisiyle ayrılmıştır. i_1+p karma faz bölgesini i_1 ve p fazından ayıran birinci-derece faz geçiş çizgileri kritik sıcaklık değerinde birleşerek ikinci-derece faz geçiş çizgisi halinde devam etmektedir. Kritik sıcaklığın görüldüğü bu birleşim noktası şekil 3.9 daki diyagramda içi dolu yuvarlak ile gösterilmiştir ve dinamik üçlü kritik noktayı ifade etmektedir.

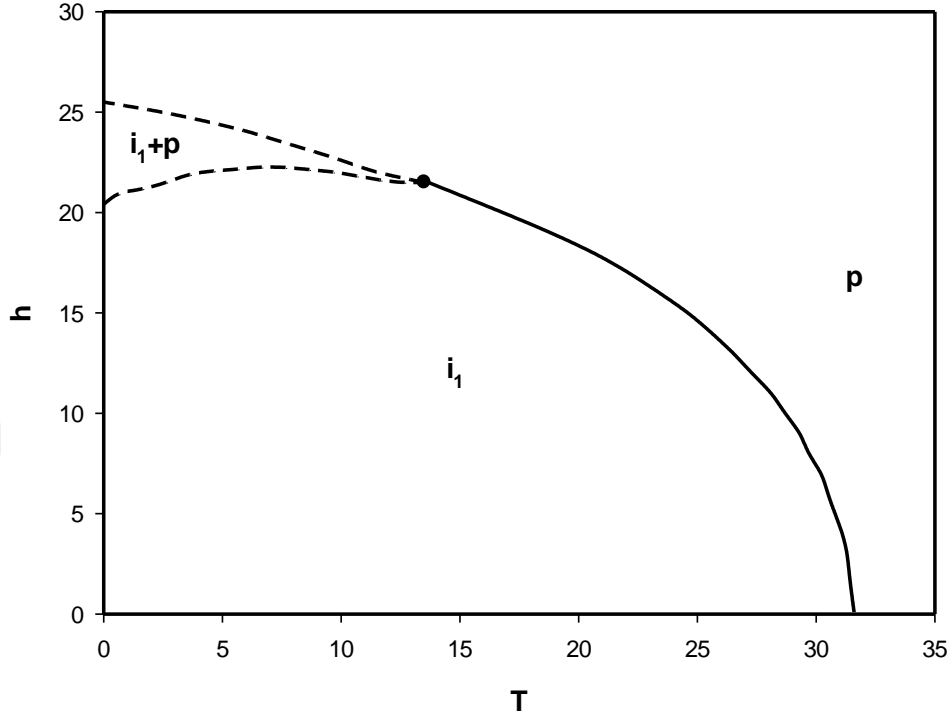
Bu faz diyagramına benzer faz diyagramları daha önce kinetik spin-1/2 [47] (bu sistemde i_1 fazı yerine ferromanyetik (f) faz gelmektedir), spin-1 [55,56,57] (bu çalışmalarda i_1 fazının yerine f fazı gelmektedir), spin-3/2 [58,59,60] (bu çalışmada i_1 fazının yerine ferromanyetik-3/2 ($f_{3/2}$) fazı gelmektedir), spin-2 [61,62] (bu çalışmalarda i_1 fazı yerine ferromanyetik-2 (f_2) fazı gelmektedir) Ising sistemlerinde elde edilmiştir.

Yine bu faz diyagramının benzeri faz diyagramı karma spin (1/2, 1) [63,64], spin(1, 3/2) [65], spin (1/2, 2) [66], spin (1, 5/2) [67], spin (3/2, 2) [68], spin (2, 5/2) [69] Ising sistemlerinde de elde edilmiştir. Bunlara ilaveten benzer bir faz diyagramı, [70] kapsamında üzerinde çalışılmış karma spin (1/2, 3/2) [71,72], spin (1/2, 5/2) [73] ve spin (3/2, 5/2) [74] (bu çalışmalarda i_1 fazı yerine i fazı gelmektedir) Ising modellerinde de elde edilmiştir.



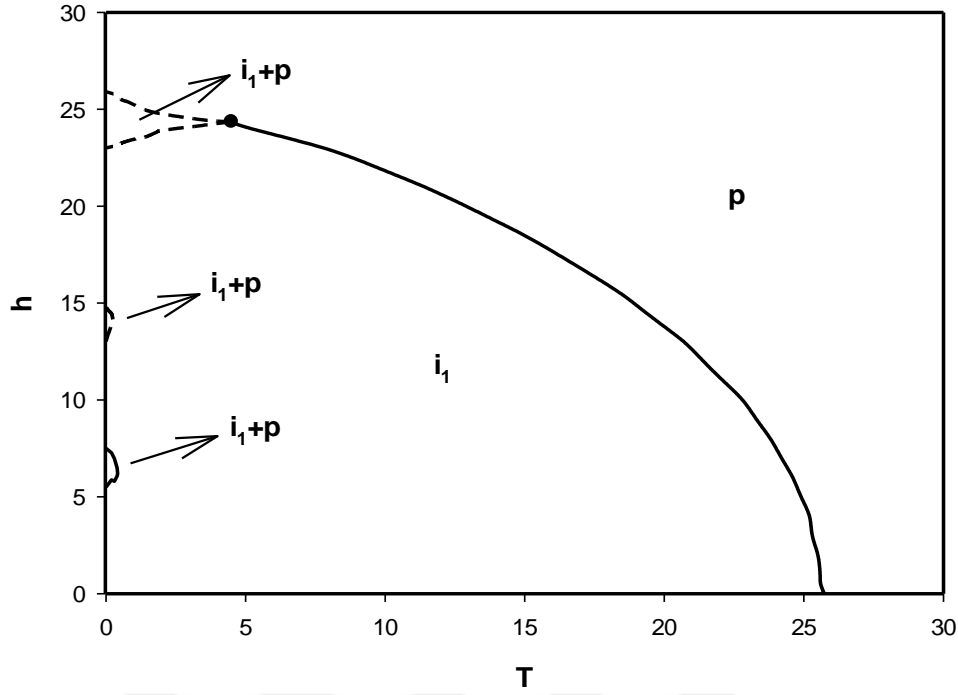
Şekil 3. 9 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $D=1.0$ için (h, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.

ii) Şekil 3.10 $D= - 2.0$ değeri için (h, T) düzleminde elde edilen dinamik faz diyagramını göstermektedir. Bu faz diyagramı Şekil 3.9'a benzemektedir. Sıcaklığın ve manyetik alan genliğinin yüksek olduğu bölgelerde p temel fazı mevcutken, sıcaklık ve manyetik alan genliğinin düşük olduğu bölgelerde de i_1 temel fazı mevcuttur. Yine Şekil 3.9'a benzer olarak bir adet dinamik üçlü kritik noktaya sahiptir. Üçlü kritik noktanın altındaki sıcaklık değerlerinde $i_1 + p$ karma fazı, i_1 ve p faz bölgelerinden birinci-derece faz geçişi çizgisiyle ayrılırken, üstündeki sıcaklık değerlerinde ise i_1 ve p fazlarının ikincisi-derece faz geçişi çizgisiyle ayrıldığı görülmektedir.



Şekil 3. 10 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $D= -2.0$ değeri için (h, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.

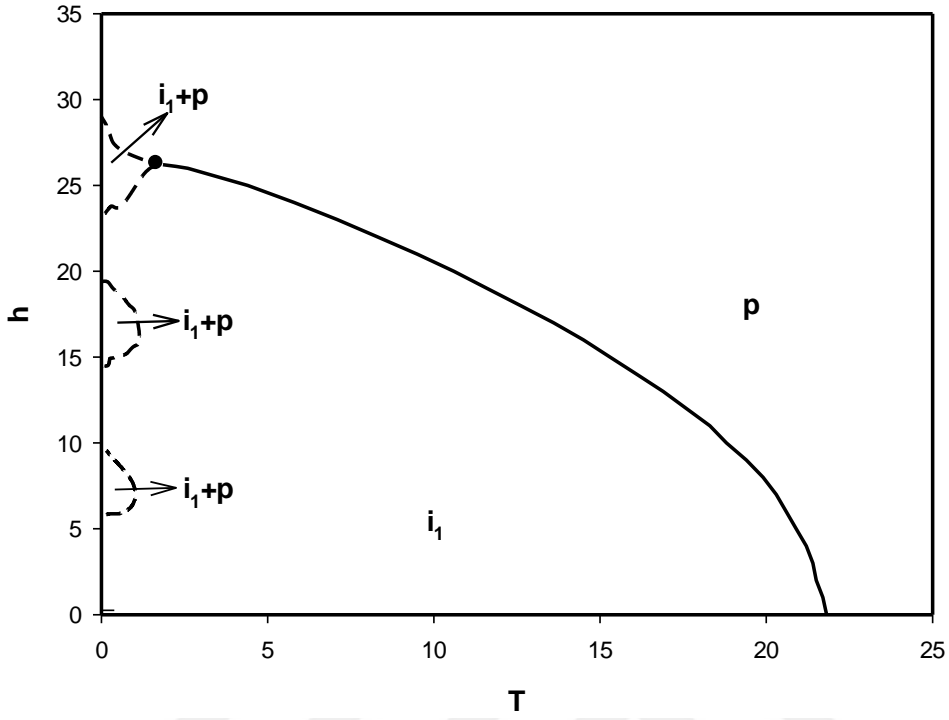
iii) Şekil 3.11 $D= -4.0$ değeri için elde edilmiştir. Bu faz diyagramı Şekil 3.10'a benzemektedir. Şekil 3.10' da olduğu gibi sadece bir tane dinamik üçlü kritik nokta mevcuttur. Fakat Şekil 3.10'dan farklı olarak indirgenmiş sıcaklığın düşük olduğu ve indirgenmiş manyetik alan genliğinin belirli değerlerinde üçüncü ve dördüncü $i_1 + p$ karma fazları meydana gelmektedir. Bu $i_1 + p$ karma fazları ilk olarak indirgenmiş manyetik alan genliğinin düşük değerlerinde ortaya çıkmaktadır. Karma $i_1 + p$ fazı ile i_1 temel fazı arasındaki dinamik faz geçiş çizgisi, birinci-derece faz geçiş çizgisidir. Bu faz diyagramına benzer faz diyagramları daha önce kinetik spin-3/2 [58,59,60] (bu çalışmalarda i_1 fazının yerine ferromanyetik-3/2 ($f_{3/2}$) fazı gelmektedir), ve birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerinde karma spin-1/2 ve spin-3/2 [72] (bu çalışmada i_1 fazı yerine i fazı gelmektedir) Ising modelinde elde edilmiştir.



Şekil 3. 11 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $D = -4.0$ için değeri için (h, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.

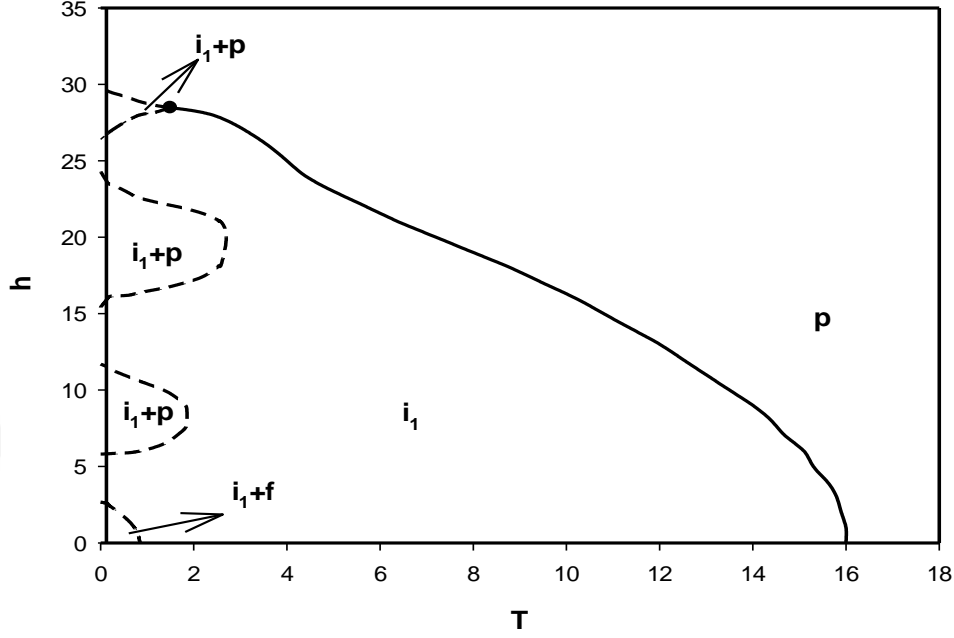
iv) Şekil 3.12 $D = -5.0$ değeri için elde edilmiştir. Bu faz diyagramı Şekil 3.11'e benzemektedir, fakat Şekil 3.11'den farklı olarak indirgenmiş sıcaklığın düşük ve indirgenmiş manyetik alan genliğinin belirli değerlerinde ortaya çıkan 3. ve 4. karma $i_1 + p$ fazı belirgin hale gelmektedir. i_1 temel fazının küçülüp ,karma $i_1 + p$ fazının büyümeye başlamasında tek-iyon anizotropisinin (kristal alanın) azalan negatif değerlerinin etkisi açıkça görülmektedir. Karma $i_1 + p$ fazı ile i_1 temel fazı arasındaki dinamik faz geçiş çizgisi, birinci-derece faz geçiş çizgisidir.

Bu faz diyagramına benzer faz diyagramı daha önce yalnızca birbirini takip eden tabakalı altıgen örgüler üzerinde karma spin-1/2 ve spin-3/2 [72] (bu çalışmada i_1 fazı yerine i fazı, $i_1 + p$ fazı yerine $i+p$ fazı gelmektedir.) Ising modelinde elde edilmiştir. Yine benzer bir çalışma bal peteği ve kare örgüleri için spin-1/2 ve spin-5/2 [70] (bu çalışmada i_1 fazı yerine $f_{5/2}$ fazı, $i_1 + p$ fazı yerine $f_{5/2} + p$ fazı gelmektedir.) Ising modelinde elde edilmiştir.



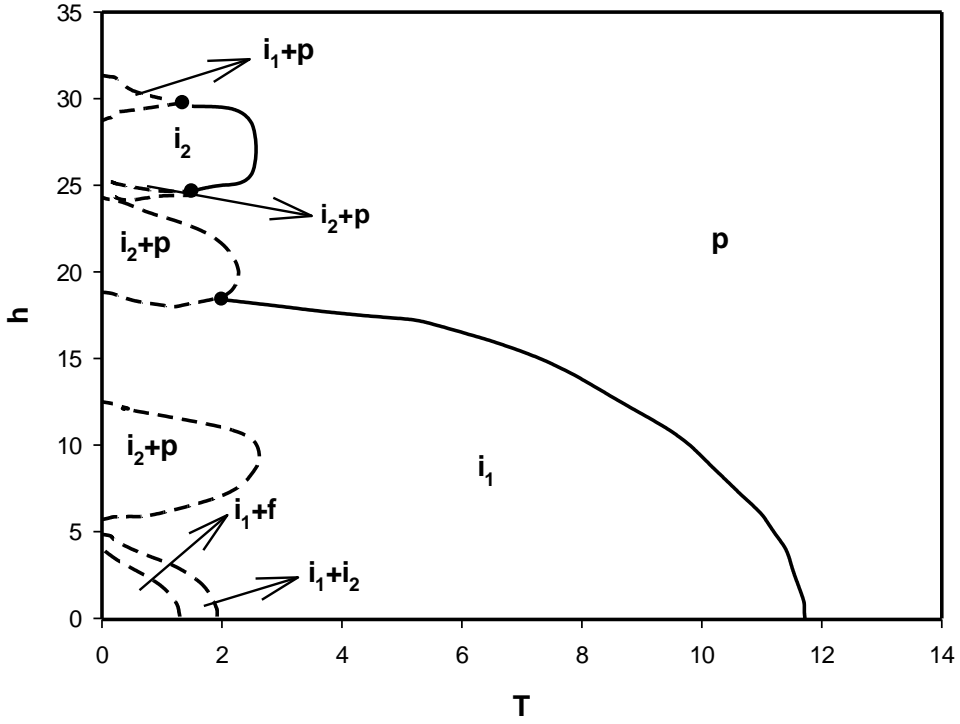
Şekil 3. 12 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $D= -5.0$ için (h, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.

v) Şekil 3.13, $D=-6.0$ değeri için (h, T) düzleminde elde edilen dinamik faz diyagramını göstermektedir. Bu faz diyagramı Şekil 3.12'ye benzemektedir, fakat Şekil 3.12'den farklı olarak indirgenmiş sıcaklığın düşük ve indirgenmiş manyetik alan genliğinin belirli değerlerinde yeni bir karma i_1+f fazı meydana gelmektedir. Yeni oluşan bu karma i_1+f fazı, i_1 fazından birinci-derece faz geçiş çizgisiyle ayrılmıştır. Şekil 3.11 'de oluşan $i_1 + p$ fazları burada daha da belirgin şekilde büyümüştür. Kristal alanın negatif değerlerinin bu büyümede etkin faktör olduğu açıkça görülmektedir.



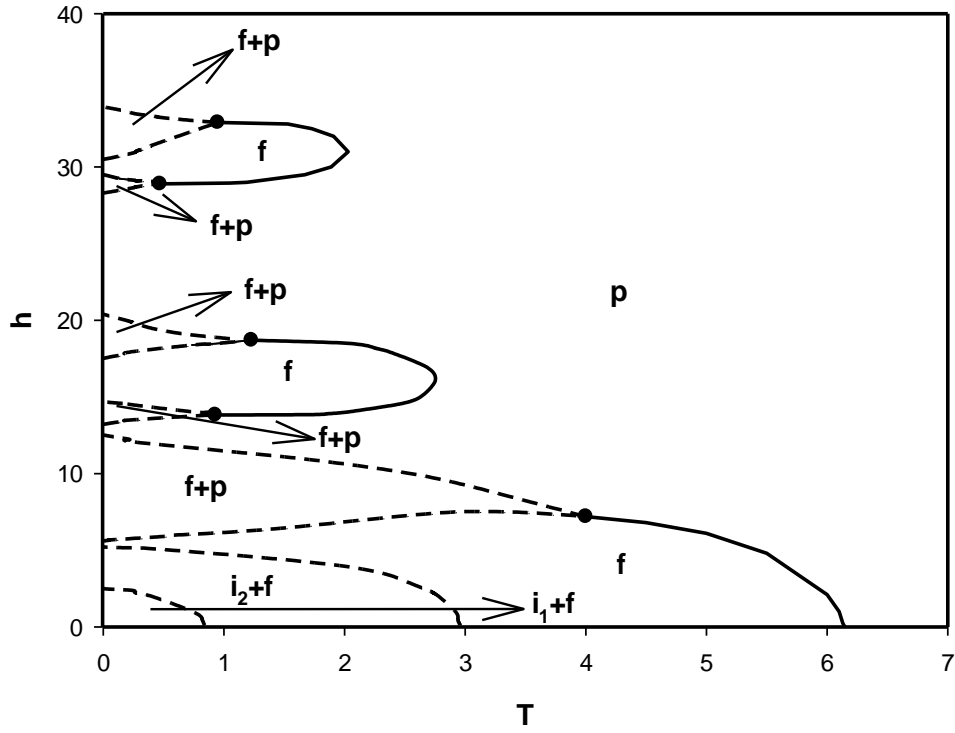
Şekil 3. 13 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $D = -6.0$ için (h, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.

vi) Şekil 3.14, $D = -6.5$ değeri için (h, T) düzleminde elde edilen dinamik faz diyagramıdır. Bu faz diyagramı Şekil 3.13'e benzemektedir, fakat Şekil 3.13'den farklı olarak indirgenmiş sıcaklığın düşük değerlerinde ve indirgenmiş manyetik alan genliğinin yüksek değerlerinde i_2+p , düşük değerlerinde ise i_1+i_2 karma fazları oluşmaya başlamıştır. Kristal alan negatif değerlere kaydıkça i_1 fazının küçülmeğe olduğu, buna karşılık i_2 ve f fazlarının ise sistemde daha baskın hale geldiği görülmektedir. Bu durumda sistemde i_1+i_2 , i_1+f , i_1+p , i_2+p karma fazlarının yanında üç adet dinamik üçlü nokta da mevcuttur. Bu karma fazlar arasındaki dinamik faz sınırı birinci-derece faz geçiş çizgileridir. i_1 temel fazı ile p faz arasında ise sıcaklığın ve manyetik alan genliğinin belirli değerine kadar ikinci-derece faz geçişi görülmeye devam etmektedir.



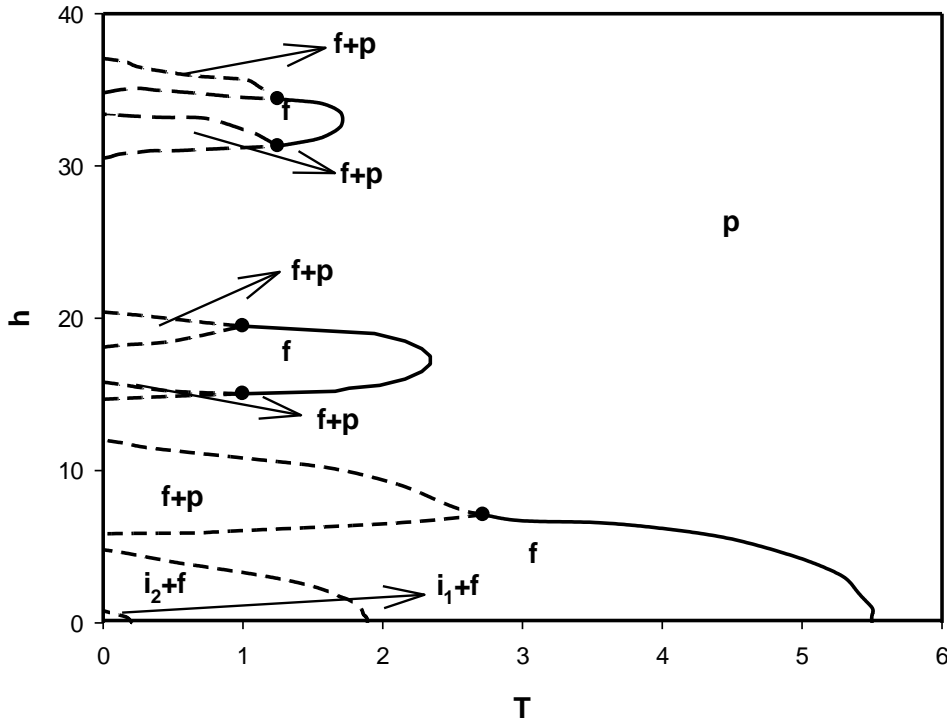
Şekil 3. 14 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $D= -6.5$ için (h, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.

vii) Şekil 3.15 $D= -7.5$ değeri için elde edilmiş dinamik faz diyagramını göstermektedir. Bu faz diyagramında temel faz olarak f ve p fazları görülürken, bunların yanında f+p, i_1+f , i_2+f karma fazları olmak üzere toplam üç adet karma faz bulunmaktadır. Şekil 3.14' de de bahsettiğimiz gibi kristal alanın negatif değerlere kayışı faz diyagramında i_1 ve i_2 fazlarının etkisinin azalmasına neden olurken, ferromanyetik (f) fazın daha etkin hale gelmesine sebep olmaktadır. Karma faz bölgeleri f ve p temel fazlarından birinci-derece faz geçiş çizgileriyle ayrılırken, f ve p temel fazları arasındaki geçiş ise ikinci-derece faz geçiş çizgisiyle ayrılmaktadır. Bu sistemde ayrıca birinci- ve ikinci derece faz geçiş çizgilerini birleştiren beş adet dinamik üçlü nokta mevcuttur.



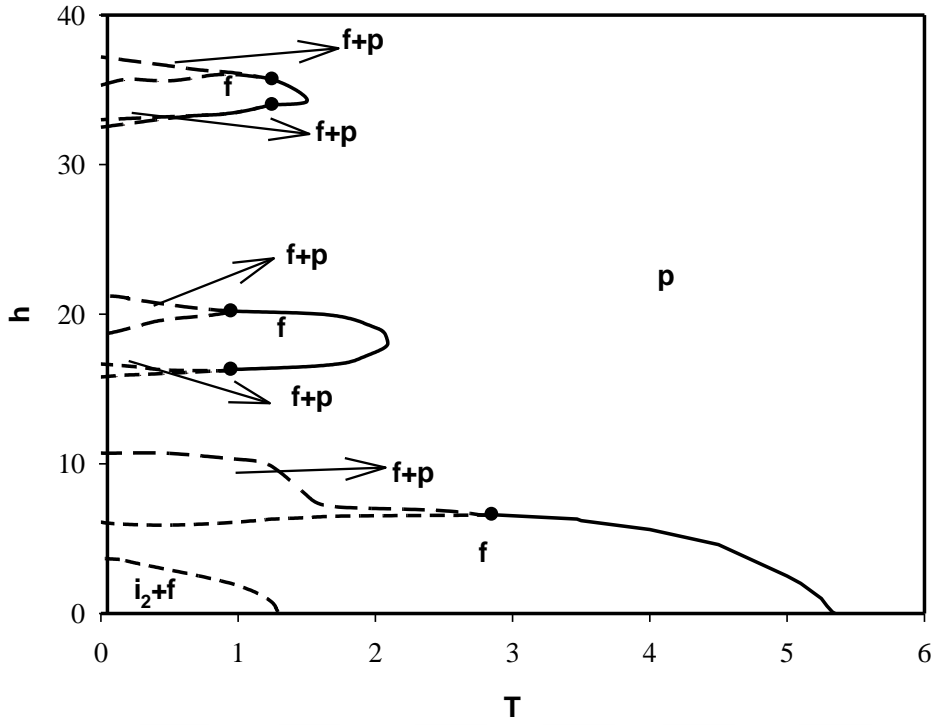
Şekil 3. 15 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $D= -7.5$ için (h, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.

viii) Şekil 3.16 $D= -8.0$ değeri için elde edilmiş dinamik faz diyagramına aittir. Elde ettiğimiz bu faz diyagramı şekil 3.15'e benzemektedir. Fakat şekil 3.15'den farklı olarak indirgenmiş sıcaklığın ve indirgenmiş manyetik alan genliğinin düşük değerlerinde görülen i_1+f ve i_2+f fazının etkisi kristal alanın azalan negatif değerleri nedeniyle oldukça azalmıştır. Sistemde f fazı etkinliğini artırmıştır. Birinci- ve ikinci- faz geçiş çizgilerinin birleştiği beş adet dinamik üçlü kritik nokta bulunmaktadır.



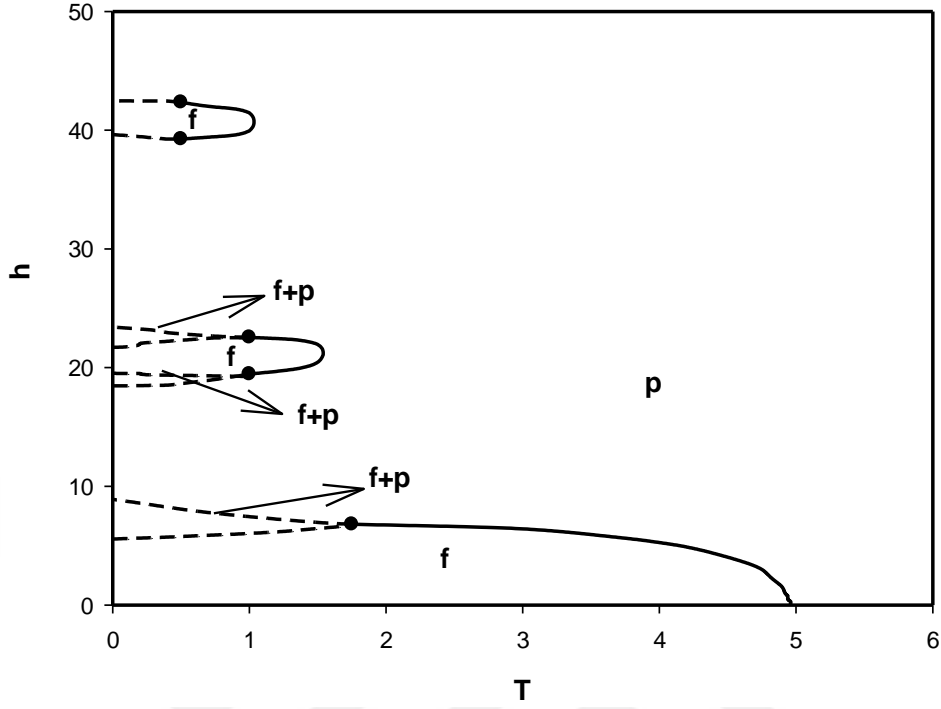
Şekil 3. 16 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $D= -8.0$ için (h, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.

ix) Şekil 3.17'de $D=-8.5$ değeri için (h, T) düzleminde elde edilen dinamik faz diyagramı gösterilmektedir. Bu faz diyagramı şekil 3.16 'ya benzemektedir fakat şekil 3.16'dan farkı ise indirgenmiş sıcaklığın ve manyetik alan genliğinin düşük değerlerindeki karma i_2+f fazları kristal alanın negatif değerlerinin etkisinden dolayı ortadan kaybolmuştur. Sistemde sadece f ve p temel fazlarının yanı sıra karma i_2+f ve $f+p$ fazları yer almaktadır. Faz diyagramındaki f ve p temel fazları arasındaki dinamik faz geçiş sınırları ikinci-derece faz geçiş çizgileri iken karma fazlar birinci-derece faz geçiş çizgileri ile ayrılmaktadır. Sistemde hala beş adet dinamik üçlü kritik nokta bulunmaktadır.



Şekil 3. 17 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $D= -8.5$ için (h, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.

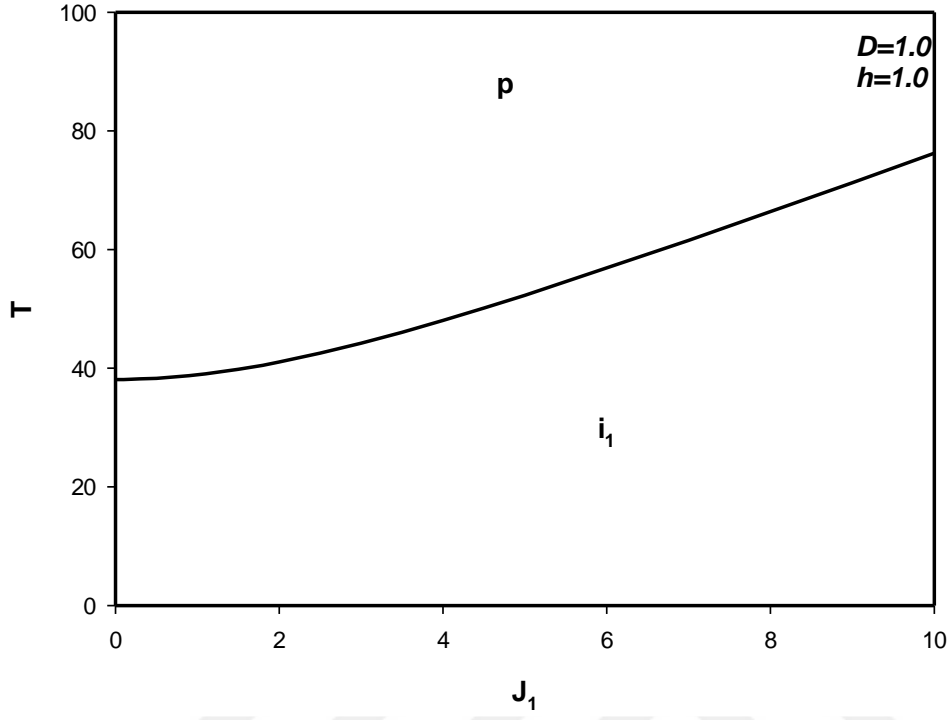
x) Şekil 3.18' de $D= -10.0$ değeri için (h, T) düzleminde elde edilen dinamik faz diyagramı görülmektedir. Bu faz diyagramı şekil 3.17'ye benzemektedir ancak şekil 3.17'den farkı indirgenmiş sıcaklığın ve indirgenmiş manyetik alan genliğinin düşük değerlerinde karma i_2+f fazının da ortadan kaybolmasıdır. Faz diyagramındaki f ve p temel fazları arasında ikinci-derece faz geçiş çizgileri bulunmakta iken diğer bütün fazlar arasındaki sınırlar birinci-derece faz geçiş çizgileri ile ayrılmaktadır. Daha önce de bahsettiğimiz gibi kristal alanın negatif değerlerine doğru gidildikçe faz diyagramlarındaki f fazının etkisinin sistemde baskın olduğu fark edilmektedir. Bu faz diyagramlarına bakarak şunu açıkça söyleyebiliriz ki, sistemin davranışında kristal alan oldukça etkin rol oynamaktadır.



Şekil 3. 18 Sr₂FeMoO₆ ikili perovsktine ait D=-10.0 için (h, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.

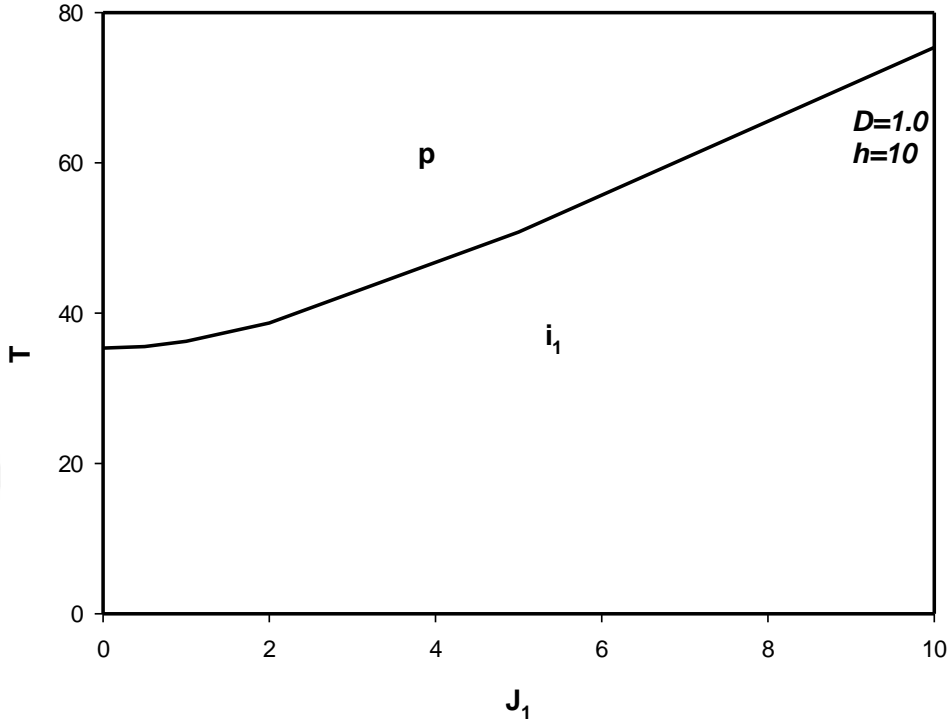
3.4.2. J/T düzleminde dinamik faz diyagramları

- i) Şekil 3.19'da $J_2=J_3=1.0$, $D=1.0$ ve $h=1.0$ değerleri için (J_1 , T) düzlemindeki dinamik faz geçiş diyagramı görülmektedir. Bu diyagramda i_1 ve p temel fazları yer almaktadır ve bu temel fazlar arasındaki geçiş ikinci-derece faz geçiş çizgisiyle gösterilmiştir. Fe-Mo atomları arasındaki etkileşim (J_1) arttıkça dinamik faz geçiş sıcaklıklarının da artış göstermekte olduğu görülmüştür.



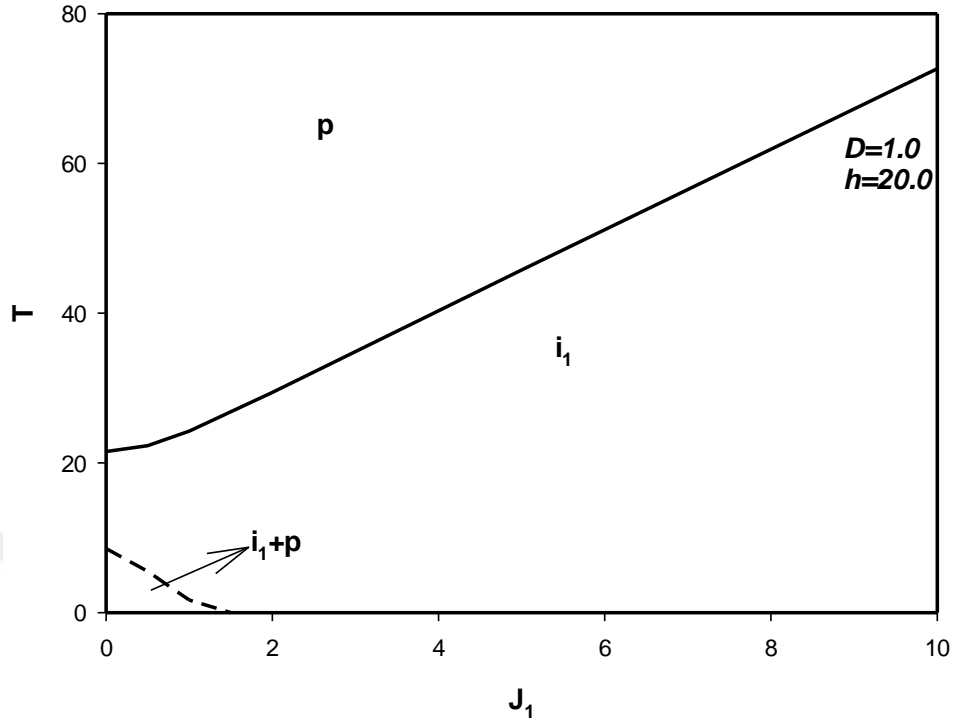
Şekil 3. 19 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $J_2=J_3=1.0$, $D=1.0$ ve $h=1.0$ için (J_1, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.

- ii) Şekil 3.20 $J_2=J_3=1.0$, $D=1.0$ ve $h=10$ için (J_1, T) düzlemindeki dinamik faz geçiş diyagramını göstermektedir. Bu diyagramda da yalnızca i_1 ve p temel fazları bulunmaktadır. Yine bu fazlar arasında ikincisi-derece dinamik faz geçişi mevcuttur. Bu diyagramın şekil 3.19'dan farkı ise i_1 temel fazının yüksek sıcaklık değerlerinde de etkin hale gelmiş olmasıdır.



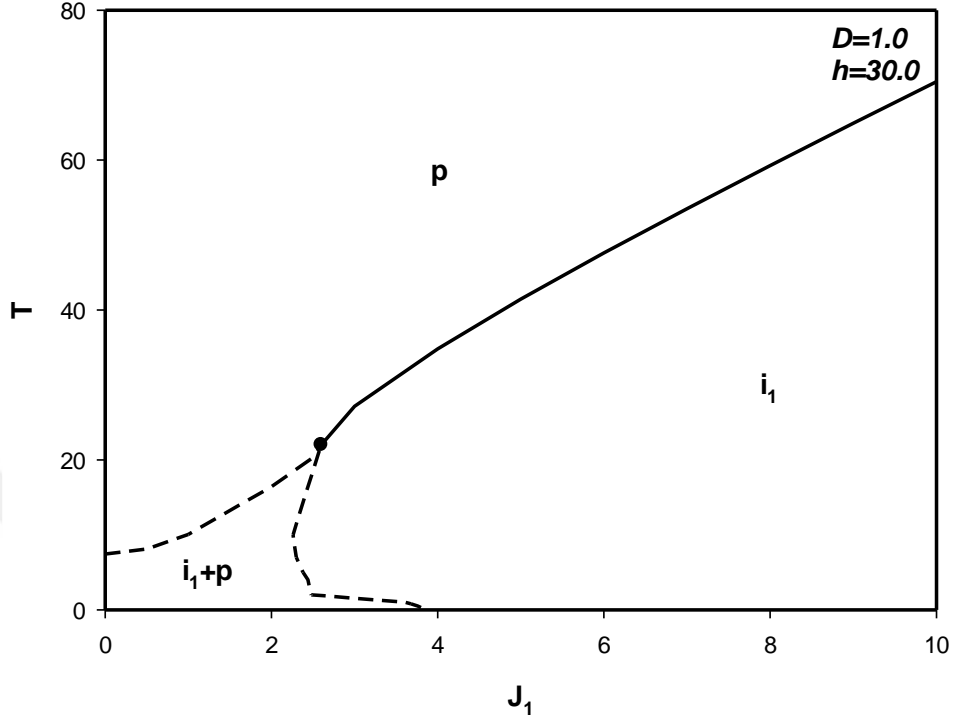
Şekil 3. 20 Sr₂FeMoO₆ ikili perovskitine ait J₂=J₃=1.0, D=1.0 ve h=10.0 için (J₁, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.

- iii)** Şekil 3.21'de J₂=J₃=1.0, D=1.0 ve h=20.0 için (J₁, T) düzleminde elde edilen dinamik faz geçiş diyagramı görülmektedir. Bu diyagram şekil 3.19 ve şekil 3.20'ye benzemektedir. Fakat şekil 3.19 ve şekil 3.20'den farklı olarak Fe-Mo etkileşiminin ve indirgenmiş sıcaklığın düşük değerlerinde i₁+p karma fazı oluşmaktadır. Bu karma faz bölgesi i₁ temel fazından birinci-derece faz geçiş çizgisiyle ayrılmaktadır.



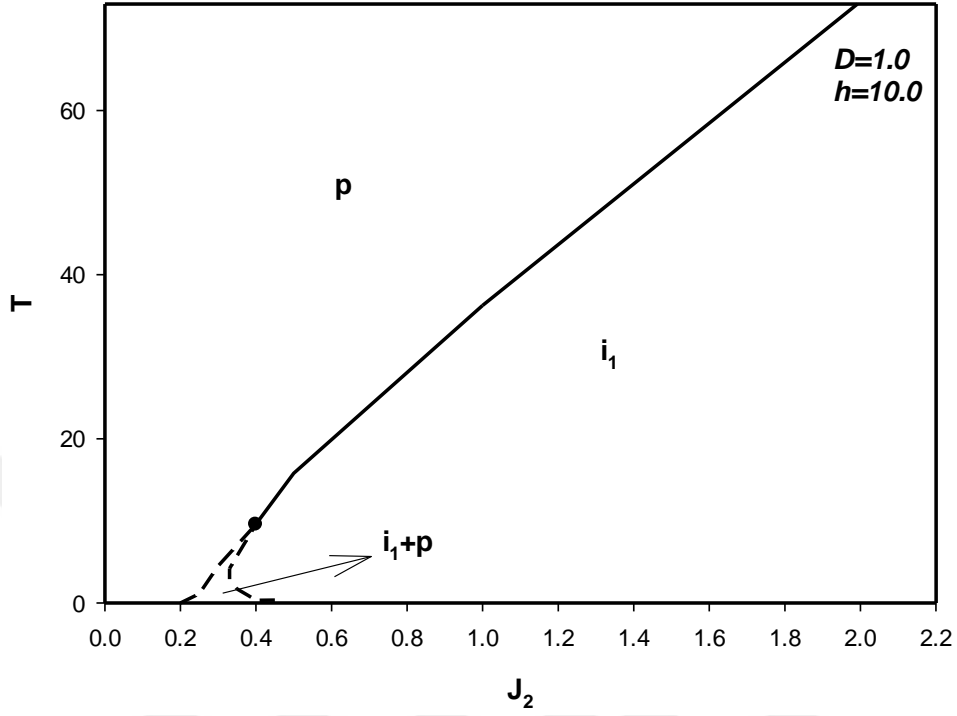
Şekil 3. 21 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $J_2=J_3=1.0$, $D=1.0$ ve $h=20.0$ için (J_1, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.

- iv) Şekil 3.22'de $J_2=J_3=1.0$, $D=1.0$ ve $h=30.0$ değerleri için (J_1, T) düzleminde elde edilen dinamik faz geçiş diyagramını göstermektedir. Bu faz diyagramında i_1 ve p temel fazlarının yanı sıra indirgenmiş sıcaklığın ve J_1 'in düşük değerlerinde i_1+p karma fazı bulunmaktadır. i_1+p karma faz bölgesi i_1 ve p temel fazlarından birinci-derece faz geçiş çizgisiyle ayrılmıştır. Bu birinci-derece faz geçiş çizgileri dinamik üçlü kritik noktada birleşerek ikinci-derece faz geçiş çizgisi olarak devam etmektedir.



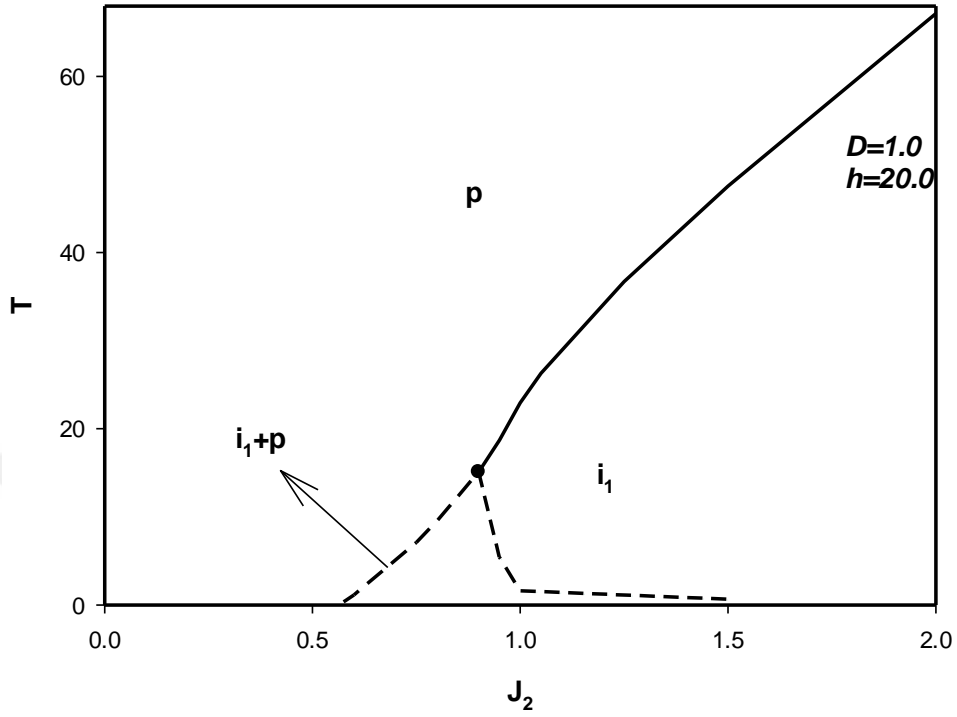
Şekil 3. 22 Sr₂FeMoO₆ ikili perovskitine ait J₂=J₃=1.0, D=1.0 ve h=30.0 için (J₁, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.

- v) Şekil 3.23 J₁=J₃=1.0, D=1.0 ve h=10.0 değerleri için (J₂, T) düzleminde elde edilen dinamik faz geçiş diyagramını göstermektedir. Bu diyagramda i₁ ve p temel fazlarıyla birlikte i₁+p karma fazı ve bir adet dinamik üçlü kritik nokta bulunmaktadır. İndirgenmiş sıcaklığın ve Fe-Fe etkileşiminin düşük olduğu bölgelerde i₁+p karma fazı oluşmaktadır. i₁ ve p temel fazları ikinci-derece dinamik faz geçiş çizgisiyle ayrılırken i₁+p karma fazı birinci-derece dinamik faz geçişi ile ayrılmıştır.



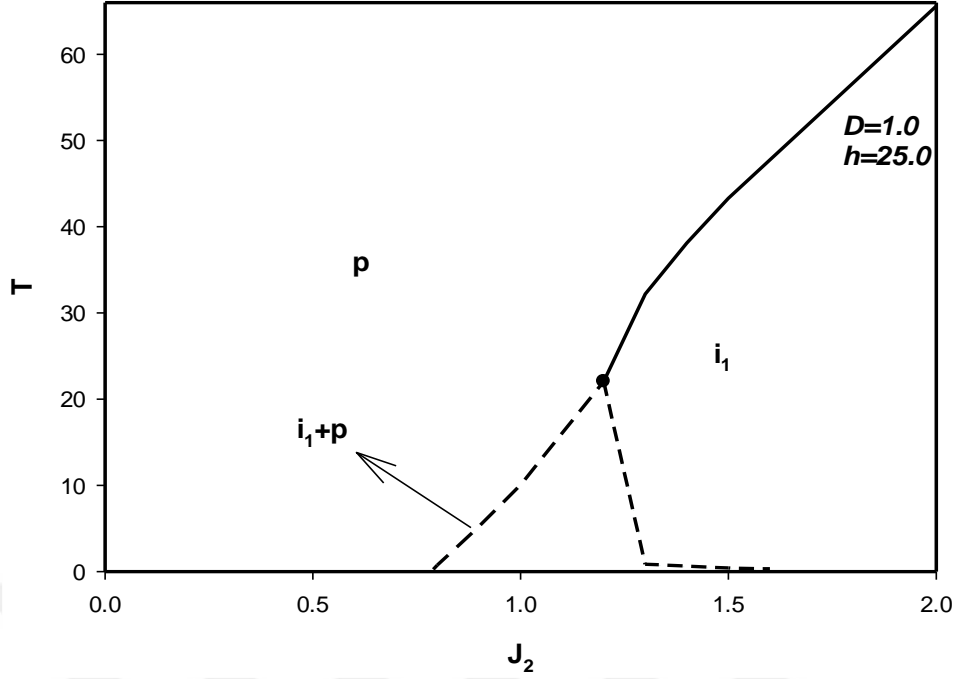
Şekil 3. 23 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $J_1=J_3=1.0$, $D=1.0$ ve $h=10.0$ için (J_2, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.

- vi) Şekil 3.24'de $J_1=J_3=1.0$, $D=1.0$ ve $h=20.0$ değerleri için (J_2, T) düzleminde elde edilen dinamik faz geçiş diyagramı görülmektedir. Bu diyagram şekil 3.23'e benzemektedir fakat indirgenmiş sıcaklığın düşük değerlerinde i_1+p karma fazının daha etkin olduğu görülmektedir.



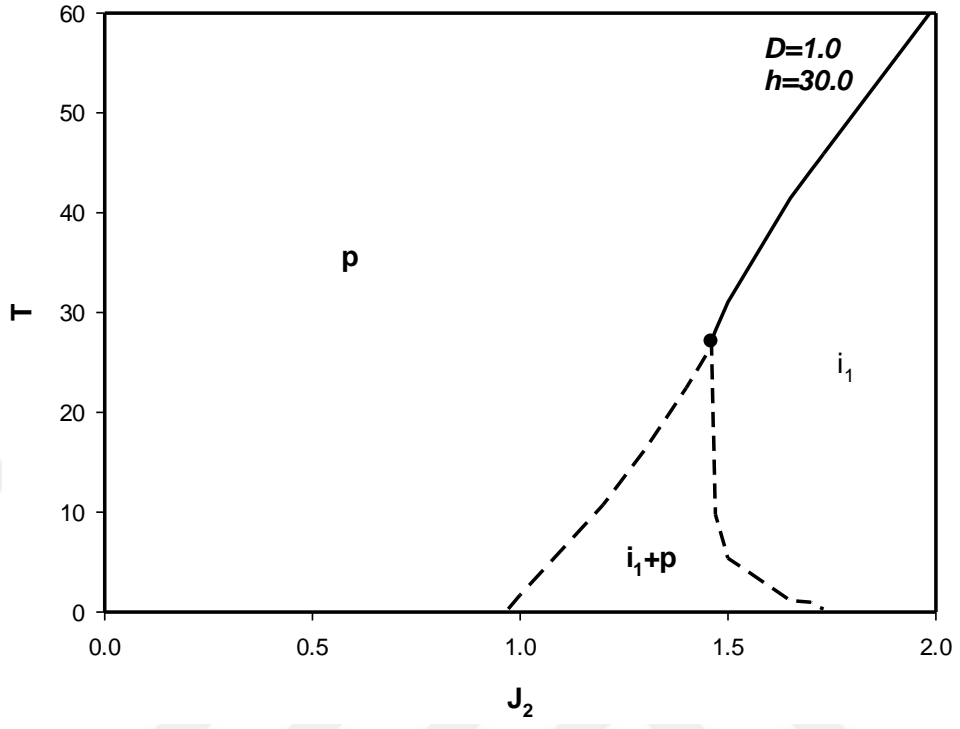
Şekil 3. 24 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $J_1=J_3=1.0$, $D=1.0$ ve $h=20.0$ için (J_2, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.

vii) Şekil 3.25’de $J_1=J_3=1.0$, $D=1.0$ ve $h=25.0$ değerleri için (J_2, T) düzleminde elde edilen dinamik faz geçiş diyagramı görülmektedir. Bu diyagram şekil 3.23 ve şekil 3.24’e benzemektedir. Fakat şekil 3.23 ve şekil 3.24’den farklı olarak i_1+p karma faz bölgesi sıcaklığın yüksek değerlerine doğru genişlemiştir. İndirgenmiş dış manyetik alan genliğinin artan değerleriyle birlikte dinamik üçlü kritik noktanın da daha yüksek sıcaklık değerlerine doğru kaymakta olduğu görülmüştür.



Şekil 3. 25 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ikili perovskitine ait $J_1=J_3=1.0$, $D=1.0$ ve $h=25.0$ için (J_2, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.

- viii) Şekil 3.26 $J_1=J_3=1.0$, $D=1.0$ ve $h=30.0$ değerleri için (J_2, T) düzleminde elde edilen dinamik faz geçiş diyagramını göstermektedir. Bu diyagram şekil 3.23, şekil 3.24 ve şekil 3.25'e benzemekle birlikte i_1+p karma fazının gösterdiği davranışla onlardan ayrılmaktadır. i_1+p karma fazı, Fe-Fe etkileşiminin ve indirgenmiş sıcaklığın düşük değerlerinden artan değerlerine doğru kaymaktadır. Bu diyagramdan da açıkça görüldüğü gibi indirgenmiş manyetik alanın genliğindeki artış dinamik üçlü kritik noktanın daha da yüksek sıcaklık değerlerine kaymasına neden olmaktadır.



Şekil 3. 26 Sr_2FeMoO_6 ikili perovskitine ait $J_1=J_3=1.0$, $D=1.0$ ve $h=30.0$ için (J_2, T) düzleminde dinamik faz diyagramı.

BÖLÜM 4

Sonuç ve Tartışma

Bu tez çalışmasında elektrik ve manyetik özellikleriyle birlikte bir çok yönden incelenen fakat dinamik faz geçişleri bakımından üzerinde hiçbir çalışma yapılmamış olan $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ tipi ikili perovskit yapının zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında gösterdiği dinamik manyetik özellikleri (faz geçiş sıcaklıkları, faz diyagramları), ortalama alan yaklaşımı (OAY) ve Glauber-tipi stokastik dinamik kullanılarak incelendi.

Sistemin dinamik davranışını açıklayan ortalama-alan dinamik denklemleri elde edilerek, sistemde var olan fazları tespit etmek için, sistemin dinamik faz diyagramları elde edildi. Sistemin dinamik faz diyagramları, etkileşme parametrelerinin farklı değerlerine göre, (h, T) ve (J, T) düzlemlerinde sunuldu. (h, T) düzleminde on ve (J, T) düzlemlerinde sekiz farklı dinamik faz diyagramları elde edildi. Dinamik faz geçişleri (kesikli veya sürekli yani birinci- veya ikinci-derece faz geçişleri) karakterize edildi.

(h, T) düzleminde elde edilen faz diyagramlarında i_1 , i_2 , f ve p temel fazlarının yanı sıra $f+p$, $f+i_2$, i_1+f , i_1+p , i_1+i_2 ve i_2+p karma fazları görülmektedir. Bu fazları birbirinden ayıran dinamik faz sınırları, birinci- veya ikinci-derece faz geçiş çizgileridir. Ayrıca elde edilen bu faz diyagramlarının hepsinde en az bir tane olmak üzere dinamik üçlü kritik nokta tespit edilmiştir. Bu çalışmada sonuç olarak faz diyagramlarının kristal alan değerine (D) ve indirgenmiş manyetik alan genliğine (h) kuvvetli bir şekilde bağlı olduğu gözlenmiştir. Kristal alanın negatif değerlere doğru ilerlemesi sisteme genel olarak hakim olan i_1 fazının etkisini azaltmasına ve yerini sırasıyla i_2 ve f fazına bırakmasına neden olmaktadır. Kristal alanın negatif değerlerindeki ilerlemesi Curie sıcaklığında düşmeye neden olmuştur. Benzer bir davranış El-Rhozani ve Slassi tarafından yapılan çalışmada [40] $\text{Sr}_2\text{CrMoO}_6$ için gözlemlenmiş ve $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ için kaydedilen sonuçlara benzer olduğu vurgulanmıştır. Yine çift perovskitlerin yapısı üzerinde yapılmış çalışmada [75] Curie sıcaklığının kristal alan artışıyla arttığı belirtilmiştir.

(J, T) düzleminde elde edilen faz diyagramlarının dört tanesi Fe-Mo atomları arasındaki etkileşim ile indirgenmiş sıcaklık arasındaki ilişkiyi gösteren (J_1 , T), dört tanesi de Fe-

Fe atomları arasındaki etkileşim ile indirgenmiş sıcaklık arasındaki ilişkiyi gösteren (J_2 , T) diyagramlarıdır. Bu dinamik faz diyagramları kristal alanın $D=1.0$ olduğu durumlar için indirgenmiş manyetik alan genliğinin farklı değerleri için elde edilmiştir.

(J_1, T) diyagramlarında indirgenmiş manyetik alan genliğinin düşük olduğu durumlarda sistemde i_1 ve p temel fazları hakim iken manyetik alan genliğinin artan değerlerinde ortaya i_1+p karma fazının ve dinamik üçlü kritik noktanın çıktığı görülmektedir. Ayrıca indirgenmiş manyetik alan genliğinin artışıyla birlikte karma faz bölgesi büyümekte ve dinamik üçlü kritik nokta da daha yüksek sıcaklık değerlerinde ortaya çıkmaktadır.

(J_2, T) diyagramlarında indirgenmiş manyetik alan genliğinin bütün değerlerinde i_1 ve p temel fazları ile i_1+p karma fazı dinamik üçlü kritik noktayla birlikte görülmektedir. Elde edilen bu diyagramlarda indirgenmiş manyetik alan genliğinin artan değerleriyle birlikte i_1+p karma faz bölgesi genişlemekte ve dinamik üçlü kritik nokta da daha yüksek sıcaklık değerlerinde ortaya çıkmaktadır.

KAYNAKÇA

1. Goldschmidt, V.M., "Die Gesetze der Krystallochemie", *Die Naturwissenschaften*, 21(21), 477-485, 1926.
2. Megaw, H., "Crystal Structure of Barium Titanate", *Nature*, 155(3938), 484-485, 1945.
3. Tse, G., Yu, D., "The Electronic and Structural Properties in $\text{Ca}_2\text{TiMnO}_6$ Double Perovskite: The First Principle Study", *Comp. Cond. Mat.* 9, 35-39, 2016.
4. Scott, J.F., "Multiferroic Memories", *Nat. Mater.* 6, 256, 2007.
5. Bibes, M., Barthelmy, A., "Towards a Magnetocaloric Memory", *Nat. Mater.* 7, 425, 2008.
6. Hundley, M. F., Nickel, J. H., Ramesh, R., Tokura, Y., "Science And Tecnology Of Magnetic Oxides", *Mater. Res.Soc.Proc.* 494, 1998.
7. Wu, S.M., Cybart, S.A., Yu, P., Rossell, M. D., Zhang, J.X., Ramesh R., R.C. Dynes, "Reversible Electric Control Of Exchange Bias In A Mulltiferroic Field-Effect Device", *Nat. Mater.* 9, 756, 2010.
8. Phan, M.-H., Yu, S.-C., "Rewiev of the Magnetocaloric Effect in Manganite Materials" *J. Magn. Magn. Mater.* 308, 25, 2007.
9. Bonilla, C.M., Landinez, D.A., Rodriguez, A.J, Lopez, E.V., Roa-Rojas, J., "Half-Metallic Behavior And Electronic Structure Of $\text{Sr}_2\text{CrMoO}_6$ Magnetic System", *Physica B*, 398, 208-211, 2007.
10. Zhong, C., Fang, J., Jiang, Q., "Magneto Dielectirc Effects in The Ferroelectric Ferromagnet BiMnO_3 ", *J. Phys: Condens. Matter.*, 16, 9059, 2005.
11. Wu, Z.-Y., Ma, C.-B., Tang, X.-G., Li, R., Liu, Q.-X., Chen, B.-T., "Double-Perovskite Magnetic $\text{La}_2\text{NiMnO}_6$ Nanoparticles For Adsorption Of Bovine Serum Albumin Application", *Nanoscale Res Lett.*, 8, 207, 2013.
12. Patterson, F. K., Moeller, C. W., Ward, R., "Magnetic Oxides Of Molybdenum (V) And Tungsten (V) With The Ordered Perovskite Structure", *Inorg. Chem.* 2, 196, 1963.
13. Singh, M., Yadav, B.C., Ranjan, A., Kaur, M., Gupta, S.K., "Synthesis And Characterization Of Perovskite Barium Titanate Thin Film And Its Applications As LPG Sensor", *Sens. Act. Chem.*, 241, 1170-1178, 2017.

14. Dang,H.T., Trinh, T.T., Nguyen, C.T.Q., Do, T.V., Nguyen, M.D., Vu, H.N.,"Enhancement Of Relaxor Behavior By La Doping And Its Influence On The Energy Storage Performance And Electric Breakdown Strength Of Ferroelectric $\text{Pb}(\text{Zr}_{0.52}\text{Ti}_{0.48})\text{O}_3$ Thin Films",*Mat. Chem. Phys.*, 234,210-216,2019.
15. Rogado,N.S., Li, J., Sleight, A.W., Subramanian,M.A.,"Magnetocapacitance and magnetoresistance near room temperature in a ferromagnetic semiconductor: $\text{La}_2\text{NiMnO}_6$ ", *Adv. Mat.* 17 ,2225,2005.
16. Fontcuberta, J., Balcells, L., Bibes, M., Navarro, J., Frontera,C., Santiso J., Fraxedas J., Martinez, B., Nadolski, S., Wojcik, M., Jedryka ,E., Casanove, M. "Magnetoresistive Oxides: New Development And Applications ", *J. Magn. Magn. Mater.*, 245 ,98,2002.
17. Longo, J.M., Ward, R., " Magnetic Compounds of Hexavalent Rhenium with the Perovskite-type Structure", *J. Am. Chem. Soc.*, 83,1088,1961.
18. Serrate,D., De Teresa, J.M., Ibarra,M.R.,"Double Perovskites with ferromagnetism above room temperature", *J. Phys: Condens. Matter* 19, 023201,2007.
19. Jung,A., Ksenofontov, V., Reiman, S., Felser, C., Tremel,W., "Magnetic Transitions in Double Perovskites $\text{Sr}_2\text{FeRe}_{1-x}\text{Sb}_x\text{O}_6$ ($0 \leq x \leq 0.9$)", *Phys. Rev. B*, 73,144414,2006.
20. Galasso, F.S., "Structure, Properties and Preparation of Perovskite-type Compounds", *Pergamon Press*, Oxford, New York, 1969.
21. Nakayama, S., Nakagawa, T., Nomura, S.,"Neutron Diffraction Study of $\text{Sr}_2(\text{FeMo})\text{O}_6$ ", *J. Phys. Soc. Jpn.* 24, 219, 1996.
22. Li, Q.F., Zhu,X.F., Chen, L.F.," First-principles Investigations of Disorder Effects on Electronic Structure and Magnetic Properties in $\text{Sr}_2\text{CrMoO}_6$ ", *J. Phys: Condens. Matter* 20,255230,2008.
23. Anderson, M.T., Greenwood, K.B., Taylor, G.A., Poeppelmeier, K.R.,"B-Cations Arrangments in Double Perovskite", *Prog. Solid State Chem.* 22,197,1993.
24. Cox,P.A.," Transitions Metal Oxides : an Introduction to Their Electronic Structure and Properties", 27, OUP Oxford , 2010.

25. Shi, C.Y., Hao, Y.M., Hu, Z.B., "Microstructure and colossal dielectric behavior of $\text{Ca}_2\text{TiMnO}_6$ ceramics", *Scr. Mater.* 64 (3), 272-275, 2011.
26. Kim, J., Paul, A., Crowell, P., Koester, S.J., Sapatnekar, S.S., Wang, J.P., Kim, C.H., "Spin Based Computing :Device concepts, current status, and a case study on high-performance microprocessor", *Proc. IEEE* 103 (1), 106-130, 2005.
27. Park, B.G., Park, J.H., Jeong, Y.H., "Double-Perovskite $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ Thin Films Prepared By Using Pulsed Laser Deposition: Growth And Crystal, Electronic And Magnetic Structures", *J. of the Korean Phys. Soc.* 53 (2), 1084-1088, 2008.
28. Smith, A.E., Sleight, A.W., Subramanian, M.A., "Electrical And Magnetic Properties Of New Rhodium Perovskites: La_2MRhO_6 , M= Cr, Fe, Cu.", *Mat. Res. Bul.* 45, 460-463, 2010.
29. Saad H.-E., M.M., El-Hagary, M., "Structural, Electronic And Magnetic Properties Of Mo(4d)-Based Complex Perovskites Ba_2MMoO_6 (M= Cr And Fe)", *J. Magn. Magn. Mater.*, 360, 229-233, 2014.
30. Feng, X.-M., Huang, Q.-Z., RAO, G.-H., "Influence Of Annealing Treatment On Structural And Magnetic Properties Of Double Perovskite $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ", *Trans. of Nonf. Met. Soc. of Chi.* 16 (1), 122-126, 2006.
31. Eriksson, A. K., Eriksson, S. -G., Ivanov, S. A., "Phase Transition Of The Magnetoelectric A_2NiMoO_6 (A= Ba, Sr) and Ca_2NiWO_6 By Neutron Diffraction.", *C. S. Knee & H. Rundlöf* 339 (1), 235-243, 2006.
32. Zheng, J.-G., Zhou, J.-S., Goodenough, J.B., Su, Y.T., Sui, Y., "Evidence Of Three-Dimensional Ising Ferromagnetism In The A-Site-Ordered Perovskite $\text{CaCu}_3\text{Ge}_4\text{O}_{12}$ ", *Phys. Rev. B*, 83, 212403, 2011.
33. Hussain, I., Anwar, M.S., Khan, S.N., Kim, J.W., Chung, K.C., Koo, B.H., "Effects Of Electron Injection On The Magnetic And Magnetocaloric Behavior Of $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ Double Perovskite", *J. of All. and Comp.*, 694, 815-822, 2017.
34. Yanchun, H., Yuting, W., Xianwei, W., , Weixia, L., Yawen, C., Liuju Z., "Structural And Magnetic Evolution Of Sr Site Electron Doping In $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ", *Chn. J. of Phys.*, 55 (6), 2441-2447, 2017.

35. Sher,F., Venimadhav,A., Blamire,M.G., Kamenev,K., Attfield, J.P.,"Cation Size Variance Effects In Magneto-resistive $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ Double Perovskite", *Chem. Mater.*,17 (1) ,176-180,2005.
36. El Rhazouani, O., El Khatabi, M., Zarhri,Z., Slassi,A., Benyoussef, A., El Kenz A.,"Magnetism, Histeresis Cycle And Ir-Substitution Doping Of $\text{Sr}_2\text{CrIrO}_6$ Double Perovskite: A Monte Carlo Simulation", *Phys. Let. A*, 380,4075-4082,2016.
37. El Rhazouani,O., Slassi,A., Ziat, Y., Benyoussef, A.,"Exchange Coupling Calculation In The Double Perovskite Sr_2CrWO_6 ", *Phys. A*, 476,38-42,2017.
38. El Rhazouani,O., Slassi,A., Ziat,Y., Benyoussef, A.,"Competing Exchange Couplings in $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ Double Perovskite",*Phys. A*, 381,1177-1180,2017.
39. Ngantso, G.D., Boujnah,M., Benyoussef,A., El Kenz, A.,"The Itinerant Magnetism in a 3d-4d Double Perovskite $\text{Sr}_2\text{CrMoO}_6$ ", *J. Magn. Magn. Mater.*,444,243-248,2017.
40. El Rhazouani,O., Slassi,A.,"Low Field Magnetocaloric Effect In The Double Perovskite $\text{Sr}_2\text{CrMoO}_6$: Monte Carlo Simulation", *Comp. Cond. Matter*, 11,55-59,2017.
41. El Rhazouani, O., Ziat, Y., Benyoussef, A.,"Monte Carlo Simulation For Calculating The Exchange Couplings In Ca_2CrNO_6 (N=Mo,Re) Double Perovskites", *Mod. Elec. Mat.*, 3,99-103,2017.
42. Elyacoubi, A.S. E., Masrour, R., Jabar, A., Ellouze,M., Hlil, E.K.,"Magnetic Properties And Magnetocalroiceffect In Double $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ Perovskites", *Matter. Res. Bull.*, 99,132-135,2018.
43. Alzate-Cardona, J.D., Barco-Rios, H., Restrepo-Parra, E.,"Dynamic Phase Transition in $\text{La}_{2/3}\text{Ca}_{1/3}\text{MnO}_3$ Manganites:a Monte Carlo Simulation Study", *Phys. Let. A*, 382,792-797,2018.
44. Pillo ,J., Rosas, J.L., Carvajal, E., Cruz-Irisson ,M., Navarro,O.," Electronic Properites And Magnetic Moment Distribution On Perovskite Type Slabs: $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$, Sr_2FeO_3 , Sr_2MoO_3 ", *Phys. Pro.*, 75,1035-1040,2015.
45. Wu,H., Ma,Y., Qian,Y., Kan, E., Deng K.,"The Effect Of Oxygen Vacancy On The Half-Metalic Nature Of Double Perovskite $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$: A Therotical Study", *Solid State Com.*, 177,57-60,2014.

46. Amraoui,S., Feraoun, A., Kerouad,M.,"Electronic And The Magnetic Properties Of The Double Perovskite Sr_2CrWO_6 :Ab Initio and Monte Carlo Studies", *J. of Phys. and Chem. of Solids*, 131,189-195,2019.
47. Dar,S.A., Srivastava, V., Sakalle, U.K.,"Structural,Elastic, Mechanical, Electronic, Magnetic, Thermoelectric And Thermodynamic Investigation Of Half Metallic Double Perovskite Oxide $\text{Sr}_2\text{MnTaO}_6$ ", *J. Magn. Magn. Mater.*, 484,298-306,2019.
48. El Rhazouani,O., Benyoussef, A., El Kenz,A.,"Phase Diagram Of The Double Perovskite $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$: Effective Field Theory", *J. Magn. Magn. Mater.*, 377 ,319-324,2015.
49. Anwar, M.S., Hussain,I., Koo, B.H.,"Reversible Magnetocaloric Response in $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ Double Perovskite", *Mat. Let.*, 181,56-58,2016.
50. Glauber, R.J.,"Time-Dependent Statistics Of The Ising Model", *J. Math. Phys.*, 4, 294-307, 1963.
51. Tome, T.,Oliveira, M.J.,"Dynamic Phase Transition In The Kinetic Ising Model Under A Time-Dependent Oscillating Field", *Phys. Rev. A*, 41, 4251-4254,1990.
52. Mendes, J.F.F.,Lage, E.J.S.,Dynamics Of The Infinite Ranged Potts Model", *J. Stat. Phys.*,64,653-672,1991.
53. Acharyya, M.," Nonequilibrium Phase Transition In The Kinetic Ising Model: Critical Slowing Down And The Specific-Heat Singularity", *Phys. Rev. A*, 56, 2407-2411,1997.
54. Chatterjee, A.,Chakrabarti, B.K.,"Fluctuation Cumulant Behavior For The Field-Pulsed-Induced Magnetization-Reversal Transition In Ising Models", *Phys. Rev. A*, 67, 046113-5,2003.
55. Sides, S.W., Rikvold, P.A., Novotny, M.A.,"Kinetic Ising Model In A Oscillating Field:Finite-Size Scaling At The Dynamic Phase Transition", *Phys. Rev. Lett.*, 81, 834-837,1998.
56. Fujisaka, H., Tutu, H., Rikvold, P.A.,"Dynamic Phase Transition In The Time-Dependent Ginzburg-Landau Model In A Oscillating Field", *Phys. Rev. E.*, 63, 036109-1-036109-11,2001.

57. 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.
58. Keskin,M.,Canko,O.,Kantar,E.,"DynamicDipoleandQuadrupolePhaseTransitions in theKinetic Spin-1 Model", *Int. J. Mod. Phys.*, C, 17, 1239-1255, 2006.
59. 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.
60. 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.
61. 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.
62. 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.
63. 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.
64. Canko, O., Deviren, B., Keskin M., "Dynamic Phase Transition in the Spin-3/2 Blume-Emery-Griffiths Model in an Oscillating Field", *J. Phys.: Condens. Matter*, 18, 6635-6653, 2006.
65. Keskin, M., Canko, O., Ertas, M., "Kinetics of the Spin-2 Blume-Capel Model Under a Time-Dependent Oscillating External Field", *J. Exp. Theor.Phys.*,105, 1190-1197, 2007.
66. 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.
67. Buendia, G.-M., Machado, E., "Kinetics of a Mixed Ising Ferrimagnetic System", *Phys. Rev. E*, 58, 1260, 1998.
68. 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.
69. Keskin, M., Kantar, E., Canko, O., "Kinetics of a Mixed Spin-1 and Spin-3/2 Ising System Under a Time-Dependent Oscillating Magnetic Field", *Phys. Rev. E*, 77, 051130, 2008.
70. 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.

71. 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.
72. Keskin, M., Polat Y., " Phase Diagrams of a Nonequilibrium Mixed Spin-3/2 and Spin-2 Ising System in an Oscillating Magnetic Field", *J. Magn. Magn. Mater.*, 321, 3905, 2009.
73. 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.
74. Li, J., Du, A., Wei, G., " Green Function Study of a Mixed Spin-2 and Spin-5/2 Heisenberg Ferrimagnetic System on a Honeycomb Lattice", *Phys. Stat. Sol b*, 238, 191, 2003.
75. Ngantso,G.D., El Amroui,Y., Benyoussef,A.,El Kenz,A., "Effective Field Study of Ising Model on a Double Perovskit Structure", *J. Mag.Mag.Mat.*,423,337-342,2017.

ÖZGEÇMİŞ

Adı ve Soyadı: Ruziye URGENÇ

Baba Adı :Osman

Anne Adı :Hatice

DoğumYeri :Kayseri

DoğumTarihi :22.05.1984

İlk ve orta öğrenimini Kayseri’de tamamladı. 2003 yılında Hacettepe Üniversitesi Eğitim Fakültesi Fizik Öğretmenliği Bölümüne yerleşti. Hacettepe Üniversitesi Yabancı Diller Yüksek Okulunda 1 yıllık Almanca hazırlık programını tamamlayıp 2009 yılında tezsiz yüksek lisansını tamamladı. 2011 yılında Gülşehir Çok Programlı Lisesi’nde fizik öğretmeni olarak göreve başladı. 2015 yılında Nevşehir Hacı Bektaş Veli Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümünde Yüksek Lisans eğitimine başladı. Şu anda Nevşehir H. Avni İncekara Fen Lisesi’nde fizik öğretmenliği görevini sürdürmektedir. Evli ve iki çocuk annesidir.

Adres :Çalışanlar Mah. M. Galip Özdiler Cad. No:4/5

GÜLŞEHİR/NEVSEHIR

Telefon : 0 5055115741

E-posta :ruzgenc@gmail.com

