

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

**SİLİNDİRİK İSİNG NANOTÜP SİSTEMİNİN DİNAMİK
MANYETİK HİSTERESİS DAVRANIŞLARI VE DİNAMİK
FAZ DİYAGRAMLARI**

**Tezi Hazırlayan
Yunus ŞENER**

**Tez Danışmanı
Prof. Dr. Bayram DEVİREN**

**Fizik Anabilim Dalı
Yüksek Lisans Tezi**

**ŞUBAT 2023
NEVŞEHİR**

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

**SİLİNDİRİK İSİNG NANOTÜP SİSTEMİNİN DİNAMİK
MANYETİK HİSTERESİS DAVRANIŞLARI VE DİNAMİK
FAZ DİYAGRAMLARI**

**Tezi Hazırlayan
Yunus ŞENER**

**Tez Danışmanı
Prof. Dr. Bayram DEVİREN**

**Fizik Anabilim Dalı
Yüksek Lisans Tezi**

**Bu çalışma Nevşehir Hacı Bektaş Veli Üniversitesi Araştırma Fonu, Proje
No:2012/12 tarafından desteklenmiştir.**

**ŞUBAT 2023
NEVŞEHİR**

ONAY SAYFASI

Prof. Dr. Bayram DEVİREN danışmanlığında Yunus ŞENER tarafından hazırlanan "**Silindirik Ising Nanotüp Sisteminin Dinamik Manyetik Histeresis Davranışları ve Dinamik Faz Diyagramları**" başlıklı bu çalışma, jürimiz tarafından Nevşehir Hacı Bektaş Veli Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında **Yüksek Lisans Tezi** olarak kabul edilmiştir.

.../.../....

JÜRİ

Başkan : Prof. Dr. Bayram DEVİREN

Üye : Doç. Dr. Gökhan KOÇAK

Üye : Doç. Dr. Şeyma AKKAYA DEVİREN

ONAY:

Bu tezin kabulü Enstitü Yönetim Kurulunun.....tarih ve..... sayılı kararı ile onaylanmıştır.

.../.../....

Doç. Dr. Cemal ÇARBOĞA
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 atıf yapıldığını bildiririm.

Yunus ŞENER



TEŐEKKÖR

“Silindirik Ising Nanotüp Sisteminin Dinamik Manyetik Histeresis DavranıŐları ve dinamik Faz Diyagramları” konulu tez alıŐmasının seiminde, yűrűtűlmesinde, sonulandırılmasında ve sonularının deęerlendirilmesinde maddi ve manevi destek ve yardımlarını esirgemeyen deęerli hocam Prof. Dr. Bayram DEVİREN’e sonsuz teŐekkűrlerimi sunarım.

Tez alıŐması boyunca bana verdięi manevi destekten dolayı deęerli arkadaŐım Ercan SAVAŐ’a ve bugűnlere gelmemde her tűrlű desteęini saęlayan aileme sonsuz teŐekkűrlerimi sunarım.

SİLİNDİRİK ISING NANOTÜP SİSTEMİNİN DİNAMİK MANYETİK HİSTERESİS DAVRANIŞLARI VE DİNAMİK FAZ DİYAGRAMLARI

(Yüksek Lisans Tezi)

Yunus ŞENER

NEVŞEHİR HACI BEKTAŞ VELİ ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Şubat 2023

ÖZET

Zamana bağlı periyodik olarak değişen dış manyetik alanın ($h(wt)$) etkisinde kinetik silindirik Ising nanotüp sisteminin mıknatıslanmasının ($m(wt)$) doğası (zamanla değişimi) korelasyonlu etkin alan teorisi ve Glauber-tipi stokastik dinamiği kullanılarak çalışıldı. Farklı sıcaklık değerlerinde $m(wt)$ ve $h(wt)$ nin zamanla değişimi incelendi ve dinamik manyetik histeresis davranışları araştırıldı. Dinamik mıknatıslanma, histeresis ilmek alanları ve korelasyonların sıcaklığa bağlılığı yani dinamik geçişlerin doğası (kesikli veya sürekli yani birinci- veya ikinci- derece faz geçişleri) karakterize etmek için ve de dinamik faz geçiş sıcaklıklarını elde etmek için araştırıldı. Üç farklı düzlemde dinamik faz diyagramları sunuldu ve denge ve denge dışı durumların sonuçları karşılaştırıldı. Faz diyagramları dinamik üçlü kritik, yalıtılmış kritik ve çoklu kritik ve üçlü kritik nokta sergiler. Sonuçların, deneysel ve teorik sonuçlar ile uyum içerisinde olduğu tespit edildi.

Anahtar Kelimeler: Nanotüp; Ising model; Spin sistemi; Etkin alan teorisi; Glauber-tipi stokastik dinamik.

Tez Danışman: Prof. Dr. Bayram DEVİREN
Sayfa Adeti: 65

**DYNAMIC MAGNETIC HYSTERESIS BEHAVIOR AND DYNAMIC PHASE
DIAGRAMS IN THE KINETIC CYLINDRICAL ISING NANOTUBE**

(M. Sc. Thesis)

Yunus ŞENER

NEVŞEHİR HACI BEKTAŞ VELİ UNIVERSITY

GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES

February 2023

ABSTRACT

The nature (time variation) of response magnetizations $m(wt)$ of the kinetic cylindrical Ising nanotube in the presence of a time varying periodically external magnetic field $h(wt)$ is studied by employing the effective-field theory (EFT) with correlations as well as the Glauber-type stochastic dynamics. We have determined the time variations of $m(wt)$ and $h(wt)$ for various temperatures, and investigated the dynamic magnetic hysteresis behavior. Temperature dependence of the dynamic magnetizations, hysteresis loop areas and correlations are investigated in order to characterize the nature (first- or second-order) of the dynamic transitions as well as to obtain the dynamic phase transition temperatures. We also present the dynamic phase diagrams in the three different planes and compare the results of the equilibrium and nonequilibrium states. The phase diagrams exhibit dynamic tricritical, isolated critical, multicritical and triple points. The results are in good agreement with some experimental and theoretical results.

Keywords: Nanotube; Ising model; Spin system; Effective-field theory; Glauber-type stochastic dynamic.

Thesis Supervisor: Prof. Dr. Bayram DEVİREN

Pages: 65

İÇİNDEKİLER

ONAY SAYFASI.....	i
TEZ BİLDİRİM SAYFASI.....	ii
TEŞEKKÜR	iii
ÖZET	iv
ABSTRACT	v
İÇİNDEKİLER.....	vi
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	viii
BÖLÜM 1.....	1
GİRİŞ.....	1
BÖLÜM 2.....	5
ISING MODELİ.....	5
2.1. Ising Modelinin Tarihçesi ve Önemi	5
2.2. Etkin Alan Teorisi.....	8
2.3. Glauber Dinamiği	12
2.3.1. Glauber Dinamiği ve Master Denklemi	12
2.3.2. Tek Spinden Oluşan Sistem	13
2.3.3. N Tane Spinden Oluşan Sistem.....	15
BÖLÜM 3.....	20
MODELİN TANITIMI VE ETKİN ALAN DİNAMİK DENKLEMLERİNİN ELDE EDİLMESİ	20
BÖLÜM 4.....	24
NÜMERİK SONUÇLAR.....	24
4.1.Ortalama Alt Örgü Mıknatıslanmalarının Zamanla Değişimi	24
4.2. Mıknatıslanmanın Zamanla Değişimi ve Dinamik Histeresis Davranışları	27
4.3. Dinamik Mıknatıslanmalar, Histeresis Alanlar ve Dinamik Korelasyonlar	29
4.4. Telafi Sıcaklığı.....	33

4.5. Dinamik Faz Diyagramları	34
4.5.1. (h-T) Düzleminde Faz Diyagramları	35
4.5.2. (r-T) Düzleminde Faz Diyagramları.....	37
4.5.3. (Δs -T) Düzleminde Faz Diyagramları	39
BÖLÜM 5.....	42
TARTIŞMA VE SONUÇ.....	42
KAYNAKLAR.....	44
ÖZGEÇMİŞ.....	52



ŞEKİLLERİN LİSTESİ

- Şekil 3.1.** Spin-1/2 Ising nanotüp sistemini tanımlayan silindirik hegzagonal yapının şematik temsili: (a) ara kesit ve (b) üç boyutlu. Sarı ve mavi kürelerde hem özde spin-1/2 hem de kabukta spin-1/2 manyetik atomları göstermektedir.....20
- Şekil 3.2.** Spin-1/2 Ising nanotüp sistemi için ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının $m_c(\xi)$ ve $m_s(\xi)$ zamanla değişimi. (a) Sistemde paramanyetik (P) faz mevcuttur. (b) Sistemde ferromanyetik (F) faz mevcuttur. (c) Sistemde ferrimanyetik (I) faz mevcuttur..... 25
- Şekil 3.3.** Spin-1/2 Ising nanotüp sistemi için ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının $m_c(\xi)$ ve $m_s(\xi)$ zamanla değişimi. (a) Sistemde hem ferromanyetik (F) ve hemde paramanyetik (P) fazları birarada mevcuttur (F+P). (b) Sistemde ferrimanyetik (I) ve paramanyetik (P) fazlar birarada mevcuttur (I+P).....26
- Şekil 3.3.** $\Delta_S = 1.0$, $r = 1.0$, $d = -2.0$ ve $h = 2.0$ değerleri için M_α 'nın sıcaklığa bağlı davranışı. $T_C/J_C = 4.405$, ferrimanyetik (i1) fazından paramanyetik (p) faza ikinci-derece faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.....20
- Şekil 3.4.** $\Delta_S = 0.0$, $r = 1.0$, $d = -3.4$ ve $h = 4.3$ değerleri için M_α 'nın sıcaklığa bağlı davranışı. $T_C/J_C = 1.645$ manyetik olmayan (nm) fazdan paramanyetik (p) faza ikinci-derece faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.....21
- Şekil 3.5.** $\Delta_S = 0.0$, $r = 1.0$, $d = 1.0$ ve $h = 6.5$ değerleri için modelin $m_c=1.0$ ve $m_{S1}=m_{S2}=1.5$ başlangıç değerlerinde M_α 'nın sıcaklığa bağlı davranışı. $T_i/J_C = 1.375$ sıcaklık değerinde ferrimanyetik-1 (i1) fazından paramanyetik (p) faza birinci-derece faz geçişi olmuştur..... 22

- Şekil 3.6.** $\Delta_S = 0.0$, $r = 1.0$, $d = -3.4$ ve $h = 5.3$ değerleri için M_a 'nın sıcaklığa bağlı davranışı. $T_V/J_C = 0.495$ ve $T_C/J_C = 1.225$ sıcaklık değerlerinde sistem sırasıyla p fazından nm fazına birinci derece ve nm fazından p fazına ikinci derece faz geçişleri sergilemektedir..... 23
- Şekil 3.7.** $\Delta_S = 0.0$, $r = 1.0$, $d = -3.5$ ve $h = 0.75$ değerleri için M_a 'nın termal davranışları. (a) $m_C=0.0$, $m_{S1}=m_{S2}=0.0$ başlangıç değerleri, (b) $m_C=1.0$, $m_{S1}=m_{S2}=1.5$ başlangıç değerleri için elde edilmiştir. $T_C/J_C = 1.045$ değerine kadar karma i_2+nm fazı mevcutken, $T_C/J_C = 1.045$ ile $T_V/J_C = 1.64$ arasında i_2+p fazı, $T_V/J_C = 1.64$ 'den büyük değerler için p fazı mevcuttur.....24
- Şekil 3.8.** Karma spin (1, 3/2) Ising nanotüp sisteminde $d= 1.0$ değeri için $(T/J_C, h/J_C)$ düzleminde dinamik faz diyagramı..... 26
- Şekil 3.9.** Karma spin (1, 3/2) Ising nanotüp sisteminde $d= -1.7$ değeri için $(T/J_C, h/J_C)$ düzleminde dinamik faz diyagramı..... 27
- Şekil 3.10.** Karma spin (1, 3/2) Ising nanotüp sisteminde $d= -2.0$ değeri için $(T/J_C, h/J_C)$ düzleminde dinamik faz diyagramı..... 28
- Şekil 3.11.** Karma spin (1, 3/2) Ising nanotüp sisteminde $d= -2.5$ değeri için $(T/J_C, h/J_C)$ düzleminde dinamik faz diyagramı..... 29
- Şekil 3.12.** Karma spin (1, 3/2) Ising nanotüp sisteminde $d= -3.0$ değeri için $(T/J_C, h/J_C)$ düzleminde dinamik faz diyagramı..... 30
- Şekil 3.13.** Karma spin (1, 3/2) Ising nanotüp sisteminde $d= -3.1$ değeri için $(T/J_C, h/J_C)$ düzleminde dinamik faz diyagramı.....31
- Şekil 3.14.** Karma spin (1, 3/2) Ising nanotüp sisteminde $d= -3.3$ değeri için $(T/J_C, h/J_C)$ düzleminde dinamik faz diyagramı.....32
- Şekil 3.15.** Karma spin (1, 3/2) Ising nanotüp sisteminde $d= -3.4$ değeri için $(T/J_C, h/J_C)$ düzleminde dinamik faz diyagramı.....33

Şekil 3.16. Karma spin (1, 3/2) Ising nanotüp sisteminde $d = -3.5$ değeri için $(T/J_C, h/J_C)$ düzleminde dinamik faz diyagramı.....	34
Şekil 3.17. Karma spin (1, 3/2) Ising nanotüp sisteminde $d = -3.7$ değeri için $(T/J_C, h/J_C)$ düzleminde dinamik faz diyagramı.....	35
Şekil 3.18. Karma spin (1, 3/2) Ising nanotüp sisteminde $d = -4.0$ değeri için $(T/J_C, h/J_C)$ düzleminde dinamik faz diyagramı.....	36
Şekil 3.19. Karma spin (1, 3/2) Ising nanotüp sisteminde $d = -6.0$ değeri için $(T/J_C, h/J_C)$ düzleminde dinamik faz diyagramı.....	37

BÖLÜM 1

GİRİŞ

21. yüzyılda nanobilimin ortaya çıkmasıyla beraber nano-ölçekli sistemlerin araştırılmasına yönelik teorik ve deneysel çalışmalar, teknolojik gelişmelere paralel olarak hızla artmaktadır. Son yıllarda nano-tüp, nano-tel, nano-çubuk, nano-parçacık, nano-ölçekli ince film gibi nano yapıları malzemelerin manyetik özellikleri yoğun bir şekilde araştırılmaktadır. Bunun nedeni nanotüp gibi manyetik nanoparçacık tabanlı sistemler birçok teknolojik uygulama, yüksek kapasiteli manyetik kayıt cihazları, manyetik soğutucular, spin elektronikler, optikler, sensörler, moleküler görüntüleme cihazları ve manyetik ilaç taşıyıcı sistemlerle belli kemoterapi tedavileri gibi farklı alanlarda uygulama potansiyellerine sahip olmalarına dayanmaktadır [1]. Bu sistemlerin manyetik özellikleri, büyüklükleri ve boyutlarıyla yakından ilişkilidir. Bir manyetik sistemin büyüklüğü nano-ölçeğe düşürüldüğünde, bulk sistemlerde olmayan ve yüzeyin fiziksel özelliklerine son derece bağlı olan yeni manyetik özellikler sergilemektedir [2].

Nanosistemler hem teorik hem de deneysel olarak üzerinde çok çalışılan bir konu olmuştur. Teorik olarak nano-ölçekli fonksiyonel sistemlerin manyetik özellikleri Ising modeli kullanılarak çok basit bir şekilde incelenebilmektedir. Ising modelinin çözümü için Etkin Alan Teorisi (EAT), Ortalama Alan Yaklaşıklığı (OAY), Monte Carlo (MC) Simülasyonu, Sonlu Boyut Ölçekleme (FSS), Değişimsel Kümülan Genişleme (VCE) Metodu, Sonlu Küme Teorisi (FC) ve Bethe Peierls (BPY) gibi yaklaşımlar kullanılarak bu sistemlerin denge davranışları yaygın bir şekilde incelenmektedir.

Son yıllarda Kaneyoshi [3-7] EAT ve OAY metodunu kullanarak nanotüp, nanotel, nanoparçacık ve nano-ölçekli ince filmlerin manyetik özelliklerini inceledi. Birçok çalışma manyetik nanoparçacıkların davranışının daha iyi anlaşılmasını sağlamak için bilgisayar simülasyonları [8,9] kullanılarak deneysel [10], teorik [11] olarak yapılmıştır. Wang ve arkadaşları [12,13] VCE metodunu kullanarak, kübik yapıları Ising nanoparçacıklarının; basit kübik(sc), cisim merkezli kübik(bcc) ve yüzey merkezli kübik(fcc) manyetik nanoyapılar için faz diyagramlarını ve kritik sıcaklıkları elde ettiler. Bakuzis ve Morais [14] Van der Waerder özdeşliğini kullanarak diferansiyel operatör tekniği ile manyetik nanoparçacıklardan oluşan sistemlerin süperparamanyetik özellikleri ile bu yapıların büyüklükleri arasındaki bağımlılığı incelediler. Zaim ve arkadaşları

[15,16] MC metodunu kullanarak öz ve yelekten oluşan nanoparçacıklar için kritik ve telafi sıcaklıklarını ve öz/yelek yapısına sahip nano yapılar için telafi sıcaklıklarını ve manyetizasyonlarını elde ettiler. Keskin ve arkadaşları EAT kullanarak silindirik spin-1/2 Ising nanotelin histeresis davranışlarını [17] elde ettiler. Rego ve Figueiredo [18] BPY metodunu kullanarak nanoparçacıkların manyetik özelliklerini hesaplamak için yeni bir model geliştirdiler ve öz ve yelekten oluşan hegzagonal bir nanosistem için manyetizasyon ve histeresis diyagramlarını elde ettiler. Michael ve Trimper [19] Green fonksiyonu metodunu kullanarak Ising modeli ile ferroelektrik nanoparçacıklar için polarizasyon, histeresis ve kritik sıcaklık diyagramlarını elde ettiler.

Nanosistemlerle ilgili yapılan bu teorik araştırmalara ek olarak bu konu üzerinde birçok deneysel araştırma da yapılmıştır. Masrouf ve arkadaşları [20] MC metodu ile CoO nanoparçacıkların antiferromanyetik özelliklerini incelediler. Yalçın ve arkadaşları [21] BPY kullanarak tek-bölgeli öz ve yelekten oluşan bir nanoyapı için manyetizasyon ve histeresis diyagramlarını elde ettiler. Scheinfein ve arkadaşları [22] CaF₂/Si (111) yüzeyine depolanan Fe parçacıklarından oluşan nano-ölçekli bir yapının manyetik özelliklerini yapıyı oluşturan parçacıkların yarıçap ve yoğunluklarına bağlı olarak MC ve OAY ile inceleyerek, elde edilen süperparamanyetiklik verileriyle, aynı yapının deneysel elde edilen süperparamanyetiklik sonuçları arasında nicel uyumluluklar olduğunu gözlemlediler.

Görüldüğü gibi nanosistemler, Ising modeli ile tanımlanabilmektedir. Ising modeli literatürden de anlaşılabilceği üzere nanosistemlerin manyetik özelliklerinin incelenmesinde en yaygın kullanılan modeldir. Ising modelinin basit olmasına rağmen üzerinde bu kadar fazla çalışılmasının sebepleri arasında, gerçekte de bu modelle örtüşen sistemler olmasının yanı sıra evrensellik kavramı ile çok daha farklı sistemlerin de böylesine basit bir modelle açıklanabilmesi gösterilmektedir.

Nanosistemlerin manyetik özelliklerinin Etkin Alan Teorisi (EAT) ile incelenmesine öncülüğü T. Kaneyoshi yapmıştır. Kaneyoshi geliştirdiği yaklaşımla nanosistemleri Ising spin sistemleriyle basit bir şekilde tanımlamış ve nanosistemlere ait manyetik özellikleri incelemiştir.

Denge davranışları manyetik malzemeleri incelemek için araştırılan nanosistemlerin dengesiz özellikleri hakkında yapılan çalışmalar oldukça sınırlıdır. Bu çalışmalar Wang

ve arkadaşları [23] silindirik ferroelektrik nanotüpün faz diyagramlarının dinamik özelliklerini incelerken, Deviren ve arkadaşları [24] silindirik Ising nanotüpün dinamik düzen parametrelerini elde etmişlerdir.

Dengesiz sistemlerdeki ilginç problemlerden biri de dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıklarının hesaplanması ve dinamik faz diyagramlarının elde edilmesidir. Dinamik faz geçişlerinin mekanizması kesin olarak keşfedilmediği gibi temel fenomenolojisi halen çok az geliştirilebilmiştir. Bundan dolayı üzerinde çok çalışılan konulardan biri olmuştur.

Dinamik faz geçişleri (DFG) ilk olarak Glauber tipi stokastik dinamiği [25] kullanılarak zamana bağlı salınımlı manyetik alan altında kinetik spin-1/2 Ising modelinin kararlı durumları ortalama alan yaklaşık metodu (OAY) ile incelenmesi sonucu bulundu [26,27]. Daha sonra kinetik spin-1/2 Ising modelindeki dinamik faz geçişleri, dinamik ortalama alan yaklaşık metoduyla [28] ve dinamik Monte-Carlo hesaplamaları ile incelenmiştir [29-33]. Tutu ve Fujiwara [34], Landau tipi potansiyelleri olan sistemlerde DFG sıcaklıklarını elde edebilecek sistematik metod geliştirmişler ve dinamik faz diyagramlarını sunmuşlardır. Tek boyutlu kinetik spin-1/2 Ising modelindeki DFG'ler Glauber metoduyla incelenmiştir [35]. Ayrıca DFG sıcaklıkları deneysel olarak ilk defa çok ince Co/Cu (001) ferromanyetik filmler [36], ferroik (ferromanyetler, ferroelektrikler ve ferroelastikler) sistemlerde ve çok ince manyetik filmlerde gözlenmiştir [37]. Bunlara ilaveten DFG'lerin evrenin ilk oluşumunun açıklanmasında rol oynayabileceği de düşünülmektedir [38].

Teorik olarak tanımlanan nanotüp sisteminin öz ve yüzeyinde bulunan her bir atomun mıknatıslanmasının nümerik olarak hesaplanması için gerekli olan mıknatıslanma denklemleri Etkin Alan Teorisi (EAT) kullanılarak elde edildi. Nanotüp sisteminin mıknatıslanma denklemleri kullanılarak sistemin düzen parametreleri, telafi davranışları ve faz diyagramları elde edildi.

Son yıllarda bir taraftan deneysel çalışmaların çok daha hassas yapılması ve diğer taraftan bilgisayarların yoğun bir şekilde, hassas ve hızlı hesaplamalarda kullanılmasından dolayı sistemlerde kararlı durumlar daha kapsamlı olarak incelenmeye başlanmıştır. Bu sebeple yoğun olarak çalışılan bir araştırma konusu olmuştur.

İstatistik mekanik sistemlerin dinamik davranışı, deneysel ve teorik fizik açısından oldukça önemlidir. Teknolojinin gelişmesine bağlı olarak sayısal hesaplama teknikleri

fiziksel problemlerin incelenmesinde yaygın olarak kullanılmaktadır. Bu durum sayısal hesaplamalarda dinamik davranışın yeni bir problem olarak ortaya çıkmasına neden olmuştur. Dengeli davranışı bu kadar detaylı çalışılan spin-1/2 Ising nanotüp dengesiz yani dinamik davranışı üzerinde yapılan çalışmalar sınırlıdır. Bu tez çalışmasında salınımlı dış manyetik alan altında spin-1/2 Ising nanotüpün dinamik davranışı, Glauber tipi stokastik dinamik temelli korelasyonlu etkin alan teorisi kullanarak çalışıldı.

Tez çalışmasının 2. bölümünde ise Ising modelinin ortaya çıkışı ve öneminden bahsedilecek. Aynı zamanda Ising modelinin açıklayabildiği durumlar ele alınacaktır. Yine modelin tanıtımı bu bölümde yer alacaktır. 3. bölümde ise nanotüpün şekli hakkında bilgi verilecek ve gerekli dinamik durum denklemleri elde edilecektir. 4. bölümde elde edilen dinamik durum denklemleri kullanılarak sistemde var olan fazlar için mıknatıslanmanın zamanla değişim grafikleri tanıtılacaktır. Sistemde mevcut fazlar için düzen parametreleri (Mıknatıslanmanın sıcaklığa bağlı grafiği) ve sistemin histeresis değişim grafikleri (mıknatıslanmanın manyetik alana bağlı grafiği) çizilecektir. DFG nin doğası (kesikli veya sürekli yani birinci- veya ikinci- derece faz geçişleri) karakterize edilecektir. Yine bu bölümde sistemin dinamik faz diyagramları üç farklı düzlemde elde edilecektir. (h, T) , (r, T) ve (Δ_S, T) düzleminde verilecektir. Son olarak 5. Bölümde ise, yapılan çalışmalar özetlenerek elde edilen sonuçların tartışılması yer almaktadır.

BÖLÜM 2

ISING MODELİ

2.1. Ising Modelinin Tarihçesi ve Önemi

20. yüzyılın başlarında geliştirilen yeni teorilerle birlikte manyetik faz geçişlerinin anlaşılması hız kazanmıştır. Bunlardan ilki Pierre Weiss'in 1907'de geliştirdiği ferromanyetizma teorisidir. Bu teori, sistemi oluşturan manyetik momentlerin birbirleriyle etkileşmesi ve bu etkileşmenin de ortalama manyetizasyonla (mıknatıslanma) orantılı olan yapay bir moleküler alan yoluyla olması ilkesine dayanmaktadır. Bu modellerin ortak özelliği manyetik momentlerin sabit örgü konumlarına yerleştirilmesi ve momentlerin paralel olması durumunda enerjisi maksimum olan çift etkileşmeleri şeklinde olmasıdır.

Günümüzde ferromanyetizmanın açıklanması ile ilgili olarak iki teori sıklıkla kullanılmaktadır. Bu teoriler Weiss'in ferromanyetizma teorisine üzerine inşa edilen Wilhelm Lenz'in kurduğu fakat öğrencisi Ernest Ising tarafından geliştirilen Ising Modeli ve bir diğeri ise Heisenberg Modeli'dir. Ising modelinde kristaldeki sabit örgü noktalarında, iki yönelime sahip "çubuklar" şeklinde manyetik momentlerin olduğu klasik olarak ele alınmıştır. Her bir örgü noktasını spin manyetik momenti (mıknatıs) diye adlandırıp ve her bir spin manyetik momentinin pozitif (yukarı) ve negatif (aşağı) şekilde iki yönelimi olduğunu varsaydı. Ising spin-1/2 modelinin tek boyuttaki çözümünü yaptı. Sonraları bu model Ising modeli olarak adlandırıldı. Bu model akışkanlar sistemindeki örgü-gaz modeline benzeyen manyetik bir modeldir. İkinci model olan Heisenberg Modeli 'nde ise manyetik momentleri kuantum mekaniksel üç boyutlu spin operatörleri şeklinde değerlendirip, enerjilerinin bu operatörlerin skaler çarpımıyla orantılı olduğunu kabul eder. Bu modeldeki x ve y bileşenleri ihmal edildiği zaman model Ising modeline dönüşür. z bileşeni ihmal edildiğinde de model XY modeli olarak adlandırılır. XY modeli tek boyutlu durumda tam olarak çözülebildiğinden dolayı teorik olarak çok ilginçtir fakat XY modeliyle tam olarak gösterilebilecek gerçek bir fiziksel sistem bulunamamıştır. Buna karşılık, Ising modeli bir yönde kuvvetli anizotropiye sahip gerçek fiziksel sistemlere karşılık gelmektedir.

Bir boyutlu örgü için Ising modeli Transfer Matris Metoduyla tam olarak çözüldüğünde modelin sıfırdan farklı sıcaklıklarda faz geçişi vermediği görülmüştür [39, 40, 41-46]. İki boyutlu örgü için Ising modelinin kritik sıcaklığı önce Kramer ve Wannier [47] tarafından hesaplanmış ve daha sonra da tam analitik çözüm Onsager [48] tarafından yapılmıştır. Üç boyutlu sistemler için ne Ising ne de Heisenberg modelinin henüz kesin çözümü elde edilememiştir.

Ising tarafından tanımlanan ve iki durumlu yapıya sahip olan model, spin-1/2 Ising modeli olarak adlandırılır. Birçok fiziksel olayların termodinamik davranışlarını mesela, akışkan konsantrasyonu, gazların soğurulması, ikili ve üçlü sıvı veya gazların faz dönüşümleri, ikili alaşımlardaki düzenli-düzensiz faz geçişleri, sıvıların donması, manyetik ve elektrik faz geçişleri spin-1/2 Ising modeli veya iki durumlu sistemler kullanılarak açıklanmaktadır. Ferromanyetik maddenin yapısı Ising model ile taklit edilmiş ve bu modelin basit örgü sistemleri için tam çözümü Onsager tarafından gerçekleştirilmiştir. Ising modelin çözümü, ikili alaşım ve örgü-gaz modelleri ona eşdeğer olarak incelenebildiğinden oldukça önemlidir.

Öte yandan fizikte ve istatistik mekanikteki ilginç durumlardan biri de faz geçişleridir. Faz geçişlerinin açıklanmasında da Ising modeli kullanılmaktadır. Doğada maddeler katı, sıvı ve gaz fazın birinde bulunmaktadır. Atom veya moleküller sıcaklık artışı ile düzenli yapılardan düzensiz yapıya geçmeye başlar. Bu geçiş sırasında da moleküller komşu moleküllerle etkileşim yaparak onları düzensiz konuma geçmeye zorlarlar. İşte bu düzenli yapısı bozulan katı çözülmeye başlayarak sıvı, yani düzensiz duruma geçer. Düzenli durumdan düzensiz duruma geçiş diğer termodinamik değişkenlerin sabit tutulduğu durumda keskin sıcaklıklarda gerçekleşir. Bu sıcaklığa **Curie Kritik Sıcaklığı** denir. Ising modeli faz geçişlerinin çalışılması için basit teorik sistemlerin en önemlilerinden biridir. Kritik sıcaklık ve civarında sistemin ve sistemi oluşturan parçacıkların davranışlarını incelemek, faz geçişini anlamak adına önemlidir.

Diğer taraftan fiziğin önemli konularından biri de manyetizmadır. Demir ve nikel gibi bazı metaller, manyetik alanın yokluğunda dahi kendiliğinden oluşmuş manyetik momente sahiptir. Kendiliğinden manyetik momentin meydana gelmesi, elektronların spinleriyle manyetik momentlerinin uyumlu bir şekilde olduğunu gösterir. Bir dış manyetik alan yok iken maddelerin mıknatıslanmaya sahip olma özelliğine **kendiliğinden mıknatıslanma** denir. Bu özellik sıcaklık ile değişir. Mutlak sıfır sıcaklığında en büyük

değerini alırken, sıcaklığın yükselmesiyle sürekli bir şekilde azalır ve kritik (T_c) sıcaklığında sıfır olur. Çünkü kritik sıcaklığın üstünde spinler gelişi güzel yönelmişlerdir ve dolayısı ile bu spinler net bir manyetik alan meydana getirmezler. İşte bu durumdaki madde düzensizdir denir. Kritik sıcaklığın altında ise spinler gelişi güzel değil, belirli bir yönelmeye sahiptirler. Bu durumdaki madde düzenli durumdadır. Dolayısıyla kritik sıcaklığın altında düzenli olan madde, bu sıcaklığın üstünde artık düzenli değildir. Ayrıca sistem A ve B gibi iki alt örgü şeklinde tanımlandığı takdirde her bir alt örgünün manyetizasyonları birbirine eşit ve antiparalel ise sistem antiferromanyetik düzene sahiptir ve antiferromanyetik düzenden paramanyetik yani düzensiz duruma geçiş belli bir sıcaklıkta olur. Bu sıcaklığa *Neel sıcaklığı* denir ve T_N ile gösterilir.

Sistemin kendi içerisinde dengede olup olmadığının anlaşılabilmesi düzen parametresi adı verilen bir değişken tarafından açıklanabilmektedir. Manyetik sistemler için düzen parametresi olarak sistemin manyetizasyonu (mıknatıslanması) böyle bir parametredir. Manyetizasyon sıfır ise sistem düzensiz fazda yani paramanyetik fazdadır. Ferromanyetik (ya da antiferromanyetik) fazdan paramanyetik faza geçiş sırasında sistemin düzenli halden düzensiz hale geçmesi ise kritik bir sıcaklık değerinde meydana gelir. 1/2 spinli parçacıklardan oluşmuş sisteme, kritik sıcaklığın altındaki bir sıcaklıkta, manyetik alan uygulanırsa sistemi oluşturan parçacıkların spinleri alan doğrultusunda yönelirler. Belli bir süre geçtikten sonra manyetik alan sıfırlanırsa, sistemin parçacıklarının spinleri aynı doğrultuda kalırlar. Sistemdeki net manyetizasyon ise sistemin kritik sıcaklığın üstünde bir sıcaklığa ısıtılması ile sıfıra gider.

Demir, nikel gibi katıların kalıcı mıknatıslanma özelliği ferromanyetizma olarak adlandırılır. Ferromanyetizma, elektronların spin manyetik momentlerinden kaynaklanır. Katı cisimdeki tüm atomların manyetik momentleri hep birlikte aynı yönde dizildiğinde makroskobik olarak gözlenen bir mıknatıslanma oluşur. Ancak ortamdaki ısısal çalkantı nedeniyle ferromanyetik düzen sıcaklık arttıkça bozulur ve kritik sıcaklıkta sıfır olur. Bu kritik değerde ikinci derece faz geçişi meydana gelir. Kritik sıcaklık değerinin üzerinde ise mıknatıslık kaybolur.

Ising modelinin bir diğer önemli noktası da düzensiz faz ile düzenli fazlar arasında gerçekleşen faz geçişlerinin doğasını karakterize etmektir. Doğada bu fazlar arasındaki geçiş iki türlü olur. Bunlardan biri ikinci derece faz geçişi, diğeri ise birinci derece faz geçişidir. İkinci derece faz geçişi sıcaklığın artmasına bağlı olarak mıknatıslanmanın

düzenli bir şekilde azalarak sıfır olması durumudur. Yani sistemin düzen parametresinin sürekli bir şekilde azalarak sıfır olması durumudur. Birinci derece faz geçişi ise sıcaklığın artmasına bağlı olarak mıknatıslanmanın bir noktadan sonra kesikli değer almasıdır. Yani sistemin düzen parametresinin bir noktadan sonra ani bir sıçrama ile sıfır civarında olması durumudur.

2.2. Etkin Alan Teorisi

Bu tez çalışmasında silindirik nanotüpün manyetik özellikleri spin-1/2 Ising sistemiyle etkin alan teorisi (EFT) kullanılarak incelenecektir. Silindirik yapılara en yakın örgü hekzagonal örgüdür. Bu yüzden silindirik nanotüpün enine kesiti alınarak spin-1/2 parçacığı hekzagonal örgünün her bir noktasına yerleştirilecektir. Spin-1/2 Ising sistemine EFT'ni uygulayalım. Spin-1/2 Ising modeli için en genel Hamiltonyen

$$H = -J \sum_{\langle i j \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i \quad (2.1)$$

Eşitlik (1.1) ile tanımlanır. Burada H dış manyetik alandır. Birinci toplam en yakın komşu çiftler üzerinden, ikinci toplam N özdeş spin üzerinden alınacaktır. $S_i = \pm 1$ değerini alır ve J, i ve j örgü noktaları arasındaki değiş-tokuş etkileşme parametresidir. Sistemin bölüşüm fonksiyonu ve i. örgü noktasındaki spin değişkeninin beklenen değeri;

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H}, \quad (2.2)$$

$$\langle S_i \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} [S_i e^{-\beta H}]. \quad (2.3)$$

Burada Tr sistemin girilebilir durumlar üzerinden toplamıdır ve $\beta = 1/k_B T$, k_B Boltzmann sabitidir. Spin değişkenlerinin ortalama değeri için kesin bağıntıları (1.2) ve (1.3) denklemlerinden elde edilebilir. Bunu elde etmek için Hamiltonyeni birbiriyle sıra değiştiren iki kısma ayırabiliriz. Biri i. örgü noktası ile ilişkili tüm katkıları içeren Π_i , diğeri i. örgü noktasına bağlı olmayan kısım Π' 'dir. Bu durumda Hamiltonyen

$$H = H_i + H', \quad (2.4)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $H_i = -S_i E_i$ iken $E_i = J \sum_{j-1}^z S_j + H$ 'dir ve E_i i. duruma ait yerel alanı açıklayan operatördür. Spin değişkenleri sıra değiştirebilir, yani $[S_i, S_j] = 0$, komutatiftir. Dolayısıyla $[H_i, H'] = [H_i, H'] = 0$ 'dır. Bu durumda denklem (1.3) aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\langle S_i \rangle = \frac{1}{\text{Tre}^{-\beta H}} \left\{ \text{Tre}^{-\beta H} \left[\frac{\sum_{i=-1}^{+1} S_i e^{-\beta H_i}}{\sum_{i=-1}^{+1} e^{-\beta H_i}} \right] \right\}, \quad (2.5)$$

S_i 'nin kısmi izi alınarak

$$\langle S_i \rangle = \frac{e^{\beta E_i} - e^{-\beta E_i}}{e^{\beta E_i} + e^{-\beta E_i}}, \quad (2.6)$$

elde edilir. Burada $\langle S_i \rangle$ ifadesi trigonometrik formda yazılırsa,

$$\langle S_i \rangle = \langle \tanh(\beta E_i) \rangle, \quad (2.7)$$

elde edilir. Bu eşitlik H.B. Callen tarafından 1963 'te elde edilen spin korelasyonunu ifade eden Callen eşitliğidir [49]. Bu eşitliğin genelleştirilmiş formu,

$$\langle \{f_i\} S_i \rangle = \langle \{f_i\} \tanh(\beta E_i) \rangle, \quad (2.8)$$

şeklinde tanımlanır. Burada $\{f_i\}$, S_i hariç spin değişkenlerinin herhangi bir keyfi fonksiyonunu, $\langle \dots \rangle$ ise kanonik küme ortalamasını göstermektedir.

Honmura ve Kaneyoshi 1979 'da diferansiyel operatör tekniğini kullanarak bu bağıntıları spin-1/2 ve yüksek dereceden spin sistemleri için kolayca elde etmişlerdir [50]. Bu tez çalışmasında, silindirik nanotüp sisteminin manyetik özellikleri Honmura ve Kaneyoshi yaklaşımları ile incelenecektir. Şimdi diferansiyel operatör tekniği kullanarak etkin alan teorisini tanıyalım.

$$\tanh(\beta E_i) = \exp(E_i \nabla) \tanh(x)|_{x=0}, \quad (2.9)$$

olmak üzere, burada $\nabla = \partial/\partial x$ diferansiyel operatörüdür. Burada aşağıdaki matematiksel ilişki ile verilen diferansiyel operatör tekniği kullanılacaktır. Diferansiyel operatör tekniğine göre üstel bir diferansiyel operatör herhangi bir $f(x)$ arasındaki ilişki aşağıdaki gibi verilebilir [50].

$$e^{a \nabla} f(x) = f(x + a), \quad (2.10)$$

Bu bağıntı Taylor serisinin üstel terime genişletilmesiyle kolaylıkla görülebilir.

$$e^{a \nabla} f(x) = \left[1 + a \nabla + \frac{a^2}{2!} \nabla^2 - \dots \right] f(x) = f(x) + a \nabla f(x) + \dots = f(x + a), \quad (2.11)$$

bu eşitlikler kullanılarak (1.7) ve (1.8) bağıntıları sırasıyla aşağıdaki formlarda yazılabilir.

$$\langle \{f_i\} S_i \rangle = \langle \{f_i\} e^{E_i V} \rangle \tanh(\beta E_i), \quad (2.12)$$

$$\tanh(\beta E_i) = f(x)|_{x=0}, \quad (2.13)$$

(1.13) eşitliği kullanılarak, (1.12) eşitliği genel formda

$$\langle \{f_i\} S_i \rangle = \langle \{f_i\} e^{E_i V} \rangle f(x)|_{x=0}, \quad (2.14)$$

yazılabilir. Bu denklem aynı zamanda diferansiyel operatör tekniğinin temel bağıntısıdır. $f(x)$ fonksiyonu aşağıdaki gibi yazılabilir [51].

$$f(x) = \frac{1}{\sum_{n=1}^m \exp(\beta \lambda_n)} \left\{ \sum_{n=1}^m \langle \varphi_n | S_i | \varphi_n \rangle \exp(\beta \lambda_n) \right\} \quad (2.15)$$

burada λ_n ve φ_n sırasıyla H_i 'nin öz değerleri ve öz fonksiyonlarıdır. Spin-1/2 Ising sistemi için $f(x)$ fonksiyonun bulunabilmesi için öncelikle matris temsili bulunmalıdır [52]. Bunlar ise,

$$S_z | s, m_s \rangle = m_s \hbar | s, m_s \rangle, \quad S^2 | s, m_s \rangle = s(s+1) \hbar^2 | s, m_s \rangle, \quad \text{ve } m_s = 1/2, -1/2$$

değerleri için S, matris temsili,

$$S_z = \begin{pmatrix} \langle 1/2, 1/2 | S_z | 1/2, 1/2 \rangle & \langle 1/2, 1/2 | S_z | 1/2, -1/2 \rangle \\ \langle 1/2, -1/2 | S_z | 1/2, 1/2 \rangle & \langle 1/2, -1/2 | S_z | 1/2, -1/2 \rangle \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

veya

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

elde edilir. Pauli spin matrisleri kullanılarak,

$$\hat{\sigma} = \frac{2}{\hbar} \hat{S} \quad \text{ve} \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.18)$$

olur. Burada σ_z Pauli spin matrislerinin z bileşenidir. Öz değerleri $\lambda_1 = 1$ ve $\lambda_2 = -1$ 'dir. Öz vektörleri ise

$$\varphi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{ve} \quad \varphi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

Biçiminde elde edilir. (1.15) denklemini kullanılarak,

$$f_{1/2}(x) = \frac{1}{\sum_{n=1}^2 \exp(\beta \lambda_n)} \left\{ \sum_{n=1}^2 \langle \varphi_n | S_{1/2} | \varphi_n \rangle e^{\beta \lambda_n} \right\}, \quad (2.20)$$

$$f(x) = \frac{1}{e^{\beta x/2} + e^{-\beta x/2}} \{ \langle \varphi_1 | S_{1/2} | \varphi_1 \rangle e^{\beta x/2} + \langle \varphi_2 | S_{1/2} | \varphi_2 \rangle e^{-\beta x/2} \}, \quad (2.21)$$

$$f_{1/2}(x) = \frac{1}{e^{\beta x/2} + e^{-\beta x/2}} \left\{ \begin{array}{l} (1 \quad 0) \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{\beta x/2} + \\ (0 \quad -1) \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} e^{-\beta x/2} \end{array} \right\}, \quad (2.22)$$

$$f_{1/2}(x) = \frac{e^{\beta x/2} - e^{-\beta x/2}}{2(e^{\beta x/2} + e^{-\beta x/2})} = \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{\beta}{2} x \right), \quad (2.23)$$

elde edilir. Ortalama mıknatıslanma, kritik sıcaklık, iç enerji, manyetik alınganlık ve öz ısı diferansiyel operatör tekniği kullanılarak hesaplanabilir. Farklı sistemlerin faz diyagramları elde edilir.

Eşitlik (2.23) Ising sistemi için tam bağıntıdır. Ancak bunu hesaplamak için bazı yaklaşımlar yapmaya ihtiyaç vardır. Bu eşitlik aynı zamanda ortalama alan ve Zernike yaklaşımlarını sonuçlarını vermektedir [53]. Eşitlik (2.23) 'de hiperbolik trigonometrik fonksiyonlar cinsinden üstel diferansiyel operatörlere genişletilerek hesaplanabilir. Herhangi bir spin sistemi için üstel diferansiyel operatör, spin değerleri için van der Waerden özdeşliğinin kullanılmasıyla elde edilebilir [54].

Şimdi de spin-1/2 için Ising sistemi için van der waerden özdeşliği kullanılarak, herhangi bir örgü için bu eşitlik,

$$\langle S_i \rangle = \left\langle \left[\cosh \left(\frac{JV}{2} \right) + 2S_i \sinh \left(\frac{JV}{2} \right) \right]^\delta \frac{1}{2} \tanh \left[\frac{\beta}{2} (x + h) \right] \right\rangle_{x=0}, \quad (2.24)$$

formuna dönüşür. Spin-1/2 Ising sistemleri için bilinen bu eşitlikleri silindirik Ising nanotüp için uygulayalım. Böylece spin-1/2 Ising nanotüp sistemi için mıknatıslanma ifadelerini elde edebiliriz.

2.3. Glauber Dinamiđi

Bu kesimde zamanla deđişen kooperatif olayların istatistiksel olarak incelenmesinde kullanılan en önemli metotlardan biri olan Glauber modeli [56] ve Glauber modelinin temelini oluşturan Master denklemi anlatılacaktır. İlk olarak tek spin sistemi, daha sonra ise N tane spinden oluşan bir sistem için detaylı bilgi verilecektir.

2.3.1. Glauber Dinamiđi ve Master Denklemi

Dengesiz istatistik mekaniđin incelenmesinde karşılaşılan en büyük zorluk sistemi incelemek için gerekli formülleri elde etmenin zor oluşudur. Bundan dolayı kooperatif sistemlerin zamana bađlı davranışları hakkında yapılacak çalışmalar çok önemlidir. Bu durumdan hareketle Glauber [56], spin-1/2 Ising modelini farklı bir şekilde tasarlamak için istatistik süreci zamanın bir fonksiyonu olarak ele almıştır ki bu durum modelin temelini oluşturmaktadır. Burada tartışılacak olan model N tane sabit parçacığın spinleri zamanın stokhastik bir fonksiyonu olarak $S_i(t)$, ($i = 1,2,3, \dots, N$) ile gösterilir. S_i spin sistemine göre farklı deđerler alır ve rastgele bu deđerler arasında geçiş yapabilir. Bu geçişler spinlerin ısı deposu ile etkileşmesi sonucu meydana gelir. Aynı zamanda bu geçişler komşu spinlerin anlık deđerlerine de bađlıdır.

Olasılık dađılımının zamanla deđişimini gösteren denkleme **master denklemi** denir. Ayrıca bu denklem Glauber modelinin de temelini oluşturur. Master denklemde, olasılık dađılımının zaman içerisindeki deđişimi stokhastik deđerkenlerin alabileceđi farklı deđerler arasındaki geçişlere bađlıdır. Böylece stokhastik deđerkenlerin farklı deđerleri arasındaki geçişler sebebiyle sistemin verilen bir durumda bulunma olasılıđı zamanla deđişecektir. Bu deđişme sistem zaman içerisinde son denge durumuna ulaşınca kadar devam edecektir.

Master denklemini elde etmek için, stokhastik deđerkenler arasında meydana gelen her bir geçiş olasılıđının sistemin geçmişteki herhangi bir durumuna bađlı olmadığı durum ele alınmaktadır. Stokhastik deđerkenlerin deđerleri arasında meydana gelen geçişler küçük adımlarla olursa, bu durumda master denklemi yaklaşık, kısmi diferansiyel bir denkleme indirgenebilir.

Master denklemi

$$\frac{\partial P_1(y_2, t)}{\partial t} = \int \{W(y_1, y_2)P_1(y_1, t) - W(y_2, y_1)P_1(y_2, t)dy_1\}, \quad (2.25)$$

şeklinde ifade edilir. Burada sağdaki ilk terim y_1 durumlarından y_2 durumlarına geçişler, ikinci terim ise y_2 durumundan y_1 durumuna geçişler sebebiyle $P_1(y_2, t)$ olasılık yoğunluğunun değişme oranını vermektedir. W ise olasılık yoğunluğunu göstermektedir. Denklem (2.25) ile verilen master denklemini veren ifadede değişkenler kesikli olduğunda integral yerine toplam alınır.

Basit sistemler dışında master denkleminin çözülmesi imkânsızdır. Bununla birlikte sistem toplam hacim ya da toplam parçacık gibi geniş parametrelere sahipse, yaklaşık çözümü bulmak için sistematik bir genişletme işlemi Van Kampen [57] tarafından geliştirilmiştir.

2.3.2. Tek Spinden Oluşan Sistem

Öncelikle manyetik alan yokluğunda tek bir spin-1/2 parçacıktan oluşan sistemi inceleyelim. Bir ısı banyosu ile etkileşen tek bir parçacık zamanla $s = 1$ ve $s = -1$ değerleri arasında rastgele geçiş yapar. Yani spin ya yukarı ya da aşağı yönde yönelmiştir. Manyetik alanın yokluğunda tek bir spin-1/2 parçacık $s = \pm 1$ durumlarının her birini istediği gibi seçebilir. Bu durumda, parçacığın bir durumdan diğer duruma geçiş olasılığı birim zamanda W olarak yazılır.

Sistemin t zamanında spinin s ($s = \pm 1$) durumunda bulunma ihtimaliyeti ise $P(s, t)$ ifadesi ile verilir ve $P(s, t)$ ifadesinin bilinmesi gerekir.

Normalizasyon şartından

$$P(1, t) + P(-1, t) = 1, \quad (2.26)$$

olduğu kolaylıkla yazılabilir.

$P(s, t)$ ifadesini hesaplayabilmek için bir diferansiyel denklem oluşturup çözmeliyiz.

Master denkleminde,

$$\left(\frac{d}{dt}\right)P(s, t) = -WP(s, t) + WP(-s, t), \quad (2.27)$$

şeklinde yazılır. Burada ilk ifadedeki - işareti spinlerin zaman içerisindeki geçişleri sırasında $P(-s, t)$ ihtimaliyeti artarken $P(s, t)$ ihtimaliyetinin azaldığını göstermektedir. Herhangi bir spinin zaman içindeki beklenen değeri

$$Q(t) \equiv \langle Q(t) \rangle = \sum_{j=1}^2 S_j P(S_j, t), \quad (2.28)$$

şeklindedir. Burada, toplam S_j 'nin olası durumları üzerinden alınır. $S_j = \pm 1$ değerlerini aldığına göre, bu durumda (2.4) ifadesi açıkça yazılırsa

$$Q(t) = P(1, t) - P(-1, t), \quad (2.29)$$

olarak elde edilir. (2.2) ve (2.5) denklemlerinin yardımıyla $S_j = \pm 1$ değerleri için olasılık yoğunlukları

$$P(+1, t) = \frac{1}{2}\{1 + Q(t)\}, \quad (2.30a)$$

$$P(-1, t) = \frac{1}{2}\{1 - Q(t)\}, \quad (2.30b)$$

olarak bulunur. (2.30a) ve (2.30b) denklemleri (2.27) denkleminde yerine yazılırsa

$$\frac{d}{dt}Q(t) = -2WQ(t), \quad (2.31)$$

elde edilir. Buradan her iki tarafın integrali alınır ve gerekli işlemler yapılırsa zaman içindeki genel beklenen değer ifadesi

$$Q(t) = Q(0)e^{-2Wt}, \quad (2.32)$$

olarak bulunur.

Böylece master denklemi çözülmüş oldu. (2.32) denklemi bize spinlerin ortalama olarak sistemin başlangıç durumundan ($t = 0$ zamanındaki durum) son durumuna ($t = \infty$ zamanındaki durum) $\frac{1}{2W}$ gevşeme zamanı ile üstel olarak azalacağını söylemektedir. Daha karmaşık Ising sistemleri için beklenen değer ifadeleri $Q(t)$ 'ye benzerdir fakat sistemler denge durumuna farklı gevşeme zamanları ile ulaşırlar.

2.3.3. N Tane Spinden Oluşan Sistem

Bu kesimde, N tane parçacıktan oluşan lineer olarak düzenli bir şekilde sıralanmış parçacık sistemini ele alalım. Bu sistemin dinamik incelemesi tek bir spinin dinamik incelemesinden tamamen farklıdır.

N tane spin-1/2 parçacıktan oluşan bir spin sistemi için Ising Hamiltonyeni

$$H = - \sum_{j,k=1}^N J_{jk} S_j S_k - \mu H \sum_{j=1}^N S_j, \quad (2.33)$$

şeklindedir. Burada $j=k$ dışında ilk toplam j ve k örgü noktalarının tüm çiftleri üzerinden alınmaktadır. S_j iki atomlu değişkendir ve $S_j = \pm 1$ değerini alır. J_{jk} , j ve k örgüleri arasındaki etkileşme parametresi, μ her spin için manyetik moment ve H ise dış manyetik alandır. H dış manyetik alanı sabit olabileceği gibi zaman içerisinde değişebilir. Denklem (2.33) Ising Hamiltonyen denklemi ile tanımlanan fiziksel sistem kendiliğinden herhangi başka bir duruma değişmez. Bu yüzden kendine özgü dinamik özelliklere sahip değildir. Çünkü tüm S_j operatörleri denklem (2.33) ile verilen Ising Hamiltonyeni ile komut ederler. Bundan dolayı zamanın bir fonksiyonu olarak sabittirler. Buna göre bir dinamik model sistem elde etmek için denklem (2.27) ile verilen Hamiltonyen ifadesine ek olarak bir dış pertürbasyon öne sürülmek zorundadır. Bu pertürbasyon ifadesi ilk kez ihtimaliyet fonksiyonlarının göz önüne alınması ile 1963 yılında Glauber [56] tarafından türetilmiştir.

Glauber [56], denklem (2.33) Hamiltonyen ifadesiyle tanımlanan Ising sistemlerinin bir ısı banyosu ile temas halinde olduğunu ve spinlerin bir durumdan diğer bir duruma zamana bağlı olarak değiştiğini öngörmüştür. Yani herhangi bir spinin S_j durumundan $-S_j$ durumuna geçişini bir ihtimaliyet fonksiyonu olarak ele almıştır.

Herhangi bir j 'nci spinin S_j durumundan $-S_j$ durumuna birim zamandaki geçiş ihtimaliyeti yani olasılık yoğunluğu $W_j(S_1, S_2, S_3, \dots, S_N)$ şeklinde tanımlanır. Bu olasılık yoğunluğu ifadesinin sistemin daha önceki durumundan bağımsız olduğu varsayılır. Bu durumda $W_j(S_1, S_2, S_3, \dots, S_N)$, spin sisteminin $(S_1, S_2, S_3, \dots, S_N)$ konfigürasyonuna bağlı olmasına rağmen birim zamandaki olasılık yoğunluğu $W_j(S_j)$ olarak basitçe yazılabilir. Bu şekildeki dinamik Ising modelinin tam bir istatistik tanımlamasının yapılabilmesi için

t zamanında spin sisteminin $(S_1, S_2, S_3, \dots, S_N)$ konfigürasyonunda bulunduğu zamandaki ihtimaliyet fonksiyonunun yani $P(S_1, S_2, S_3, \dots, S_N; t)$ ifadesinin bilinmesi gerekir. Bu ihtimaliyet fonksiyonunun zamana bağlı denklemleri master denklemleri ile verilir. Buna göre master denklemleri

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P(S_1, S_2, S_3, \dots, S_N; t) = & - \sum_{j=1}^N W_j(S_j) P(S_1, \dots, S_j, \dots, S_N; t) \\ & + \sum_{j=1}^N W_j(-S_j) P(S_1, \dots, -S_j, \dots, S_N; t), \end{aligned} \quad (2.34)$$

şeklinde yazılır. Burada ilk toplam sistemin $(S_1, \dots, S_j, \dots, S_N)$ konfigürasyonunda bulunduğu zamanki duruma, ikinci toplam ise sistemin $(S_1, \dots, -S_j, \dots, S_N)$ konfigürasyonunda bulunduğu zamanki duruma karşılık gelir. Denklem (2.34) ile verilen master denkleminin çözümü güçlü bir şekilde olasılık yoğunluğu ifadesi $W_j(S_j)$ 'ye bağlıdır. Master denklemleri mevcut sistemi tam olarak tanımlayan bir denklemdir. Burada şu noktayı da belirtmeliyiz ki olasılık yoğunluğu ele aldığımız stokastik modele uygundur.

Şimdi de denklem (2.34) ile verilen master denkleminin çözümünü bulalım. Sistemin denge durumu göz önüne alınırsa

$$\frac{d}{dt} P(S_1, S_2, S_3, \dots, S_N; t) = 0, \quad (2.35)$$

olacaktır. Bu durumda denklem (2.10) ile verilen eşitliğin sağ yanısı için

$$W_j(S_j) P_0(S_1, \dots, S_j, \dots, S_N) = W_j(-S_j) P_0(S_1, \dots, -S_j, \dots, S_N), \quad (2.36)$$

yazılır. Burada $P_0(S_1, \dots, S_j, \dots, S_N)$ ve $P_0(S_1, \dots, -S_j, \dots, S_N)$ ifadeleri sistem dengedeyken spinlerin sırasıyla, $(S_1, \dots, S_j, \dots, S_N)$ ve $(S_1, \dots, -S_j, \dots, S_N)$ konfigürasyonlarında bulunma ihtimaliyetini göstermektedir. Genel Kanonik Dağılım formülü

$$P_0(S_1, S_2, \dots, S_N) \propto \exp(-\beta H), \quad (2.37)$$

şeklinde olduğuna göre (2.36) denkleminde olasılık yoğunluklarının oranı

$$\frac{W_j(S_j)}{W_j(-S_j)} = \frac{\exp(-\beta E_j S_j)}{\exp(\beta E_j S_j)}, \quad (2.38)$$

olarak bulunur. Burada E_j genel Hamiltonyen ifadesinden

$$E_j = \mu H + \sum_{k=1}^N J_{jk} S_k, \quad (2.39)$$

şeklinde elde edilir. Eğer üstel açılımı ve \cos 'ün (kosinüsün) simetrik, \sin 'ün (sinüsün) simetrik olmadığı göz önüne alınır ve

$$\exp(\beta E_j S_j) = \cosh \beta E_j + S_j \sinh \beta E_j = \cosh \beta E_j (1 + S_j \tanh \beta E_j), \quad (2.40)$$

$$\exp(-\beta E_j S_j) = \cosh \beta E_j - S_j \sinh \beta E_j = \cosh \beta E_j (1 - S_j \tanh \beta E_j), \quad (2.41)$$

eşitliklerinden yararlanılırsa olasılık yoğunluklarının oranı

$$\frac{W_j(S_j)}{W_j(-S_j)} = \frac{1 - S_j \tanh \beta E_j}{1 + S_j \tanh \beta E_j}, \quad (2.42)$$

olarak bulunur. Buradan olasılık yoğunluğu

$$W_j(S_j) = \frac{1}{2^\tau} (1 - S_j \tanh \beta E_j), \quad (2.43)$$

şeklinde verilir. Burada τ zamanın tersi boyutunda bir sabittir ve dinamik sürecin zaman skalasını belirler. Eğer bu sistemi $H(t)$ gibi zamana bağlı dış manyetik alanın etkisinde bir sisteme genişletmek istersek (2.43) eşitliği değişmez fakat bu durumda (2.39) ile verilen enerji ifadesi farklı olacaktır. Genel beklenen değer ifadesi

$$\langle S_j \rangle = \sum_{\langle S \rangle} S_j P(S_1, S_2, \dots, S_N; t), \quad (2.44)$$

şeklinindedir. Burada toplam spin sisteminin tüm mümkün konfigürasyonları üzerinden alınacaktır. Buradan $\langle S_j \rangle$ 'nin zaman içerisindeki değişimi göz önüne alınacak olursa yani zamana göre türevi alınır

$$\frac{d}{dt} \langle S_j \rangle = \sum_{\{S\}} \frac{\partial S_j}{\partial t} P(S_1, S_2, \dots, S_N; t) + \sum_{\{S\}} S_j \frac{\partial P}{\partial t} (S_1, S_2, \dots, S_N; t), \quad (2.45)$$

olarak yazılabilir. S_j zamana bağlı olmadığından

$$\frac{\partial S_j}{\partial t} = 0, \quad (2.46)$$

olur ve bu durumda denklem (2.21) eşitliği

$$\frac{d}{dt} \langle S_j \rangle = \sum_{\{S\}} S_j \frac{\partial P}{\partial t} (S_1, S_2, \dots, S_N; t), \quad (2.47)$$

şekline dönüşür.

(2.34) ile verilen master eşitliği denklem (2.47) 'de yerine yazılırsa

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle S_j \rangle = \sum_{\{S\}} S_j & \left(- \sum_{j=1}^N W_j(S_j) P(S_1, S_2, \dots, S_j, \dots, S_N; t) \right) \\ & + \sum_{\{S\}} S_j \left(\sum_{j=1}^N W_j(-S_j) P(S_1, S_2, \dots, -S_j, \dots, S_N; t) \right), \end{aligned} \quad (2.48)$$

olarak bulunur. Burada $S_j = \pm 1$ değerleri için master eşitliğini simetrik olarak yazabilmek için sadece $+1$ 'i alıp 2 ile çarpalım ve τ sabit olmak üzere olasılık yoğunluğu için verilen (2.43) denklemini (2.48) denkleminde yerine yazalım.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle S_j \rangle = 2 & \left(- \sum_{j=1}^N \frac{1}{2\tau} (1 - \tanh \beta E_j) P(S_1, S_2, \dots, S_j, \dots, S_N; t) \right) \\ & + 2 \left(\sum_{j=1}^N \frac{1}{2\tau} (1 + \tanh \beta E_j) P(S_1, S_2, \dots, -S_j, \dots, S_N; t) \right), \end{aligned} \quad (2.49)$$

Gerekli düzenlemeler yapılırsa

$$\begin{aligned} \tau \frac{d}{dt} \langle S_j \rangle = \sum_{j=1}^N & \left[P(S_1, S_2, \dots, -S_j, \dots, S_N; t) - P(S_1, S_2, \dots, S_j, \dots, S_N; t) \right] \\ & + \sum_{j=1}^N \tanh \beta E_j \left[P(S_1, \dots, S_j, \dots, S_N; t) + P(S_1, \dots, -S_j, \dots, S_N; t) \right], \end{aligned} \quad (2.50)$$

elde edilir. (2.50) denkleminde köşeli parantez içindeki ilk terim yönelmeler farkını göstermektedir ve

$$\sum_{j=1}^N \left(P(S_1, S_2, \dots, -S_j, \dots, S_N; t) - P(S_1, S_2, \dots, S_j, \dots, S_N; t) \right) = -\langle S_j \rangle, \quad (2.51)$$

değerine eşittir.

$$\sum_{j=1}^N \tanh \beta E_j \left[P(S_1, \dots, S_j, \dots, S_N; t) + P(S_1, \dots, -S_j, \dots, S_N; t) \right] = \langle \tanh \beta E_j \rangle, \quad (2.52)$$

olduğu göz önüne alınırsa

$$\tau \frac{d}{dt} \langle S_j \rangle = -\langle S_j \rangle + \langle \tanh \beta E_j \rangle, \quad (2.53)$$

diferansiyel denklemi elde edilir [56]. Böylece sabit manyetik alan altında N tane spin-1/2 parçacıktan oluşan bir sistemin herhangi bir S_j 'inci spinin zaman içerisindeki

beklenen değerindeki değişmeyi veren diferansiyel denklem elde edilmiş oldu. Bu aşamadan sonra denklem (2.39) ile verilen enerji ifadesi denklem (2.53)'da yerine yazılır ve nümerik olarak diferansiyel denklem çözümlerse sistemin özellikleri incelenebilir.

Şimdi sabit bir manyetik alan yerine zamanla değişen bir manyetik alan kullanalım ve denklem (2.33) ile verilen Ising Hamiltonyeni yerine de

$$H = -\frac{J}{N} \sum_{j,k=1}^N S_j S_k - H \sum_{j=1}^N S_j, \quad (2.54)$$

Hamiltonyenini ele alalım. Burada $J > 0$, H ise zamanla değişen sinüzoidal manyetik alandır ve

$$H(t) = H_0 \cos (wt), \quad (2.55)$$

ile verilir. Hamiltonyen ifadesine göre sistemin enerjisi ise

$$E_i = \frac{1}{N} \sum_{j \neq i} S_j + H(t), \quad (2.56)$$

şeklinde elde edilir. Termodinamik limit gereği $N \rightarrow \infty$ alınırsa

$$E_i = J \langle S_j \rangle + H(t), \quad (2.57)$$

olur. Bulunan enerji ifadesi ve manyetik alan değeri (2.53) denkleminde yerine yazılırsa

$$\tau \frac{d}{dt} \langle S_i \rangle = -\langle S_i \rangle + \tanh\{\beta [J \langle S_i \rangle + H_0 \cos (wt)]\}, \quad (2.58)$$

elde edilir. Burada gerekli düzenlemeler yapılırsa, zamanla değişen manyetik alan altında N tane spin-1/2 'den oluşan bir sistem için diferansiyel denklem ifadesi

$$\Omega \frac{dm}{d\xi} = -m + \tanh \left[\frac{1}{T} (m + h \cos \xi) \right], \quad (2.59)$$

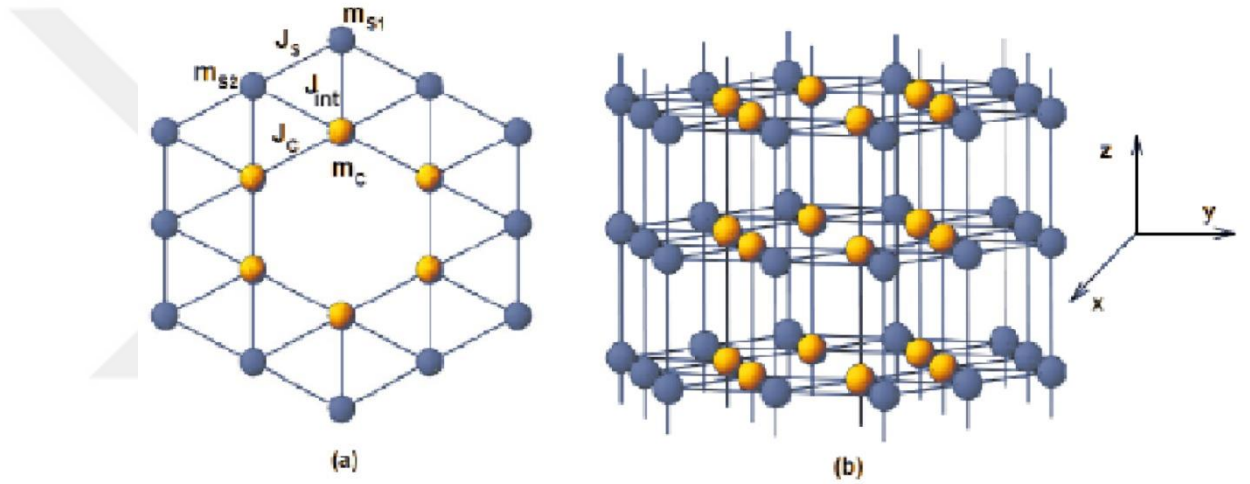
olarak bulunur [58]. Burada $m = \langle S_i \rangle$, $\xi = wt$, $T = (\beta J)^{-1}$, $h = \frac{H_0}{J}$, $\Omega = w\tau$ şeklindedir.

T , h ve Ω boyutsuz parametrelerdir.

BÖLÜM 3

MODELİN TANITIMI VE ETKİN ALAN DİNAMİK DENKLEMLERİNİN ELDE EDİLMESİ

Kinetik silindirik Ising nanotüpün şematik olarak gösterimi Şekil 3.1’de verilmiştir. Silindirik nanotüp; öz ve özü saran yüzey kabuğundan oluşmuştur. Şekildeki her bir örgü noktasına spin- 1/2 Ising parçacığı yerleştirilmiştir. Her bir spin silindir boyunca altında ve üstündeki komşu spinlerle etkileşim içerisinde.



Şekil 3.1. Spin-1/2 Ising nanotüp sistemini tanımlayan silindirik hegzagonal yapının şematik temsili: (a) ara kesit ve (b) üç boyutlu. Sarı ve mavi kürelerde hem özde spin-1/2 hem de kabukta spin-1/2 manyetik atomları göstermektedir.

Sistemin Hamiltonyen denklemi

$$H = -J_s \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - J_c \sum_{\langle mn \rangle} S_m S_n - J_{int} \sum_{\langle im \rangle} S_i S_m - h(t) \left(\sum_{\langle i \rangle} S_i + \sum_{\langle m \rangle} S_m \right) \quad (3.1)$$

ile verilir. Burada yüzey kabuğundaki en yakın komşu manyetik parçacıklar arasındaki bilineer etkileşim parametresi J_s , özdeki en yakın komşu manyetik parçacıklar arasındaki bilineer etkileşim parametresi J_c ve bir yüzey kabuğu ile bir özde bulunan en yakın komşu

manyetik parçacıklar arasındaki bilineer etkileşim parametresi J_{int} olarak tanımlanmıştır. Yine denklemden yer alan S terimleri Ising nanotüp sisteminin öz ve yüzeyine yerleştirilen manyetik parçacıkların spin değerlerini temsil eder. Spin-1/2 Ising parçacığı için S_i her yerinde ± 1 değerini alır. Burada $\langle ij \rangle$ yüzey kabuğundaki etkileşimleri, $\langle mn \rangle$ özdeki etkileşimleri ve $\langle im \rangle$ yüzeyle öz arasındaki etkileşimleri temsil etmektedir. Yüzey etkileşim parametresi J_S nano-sistemde fiziksel özelliklerde yüzey etkilerini açıklamak için $J_S = J_C(1 + \Delta_S)$ olarak tanımlanır [59-61]. J_S 'in işareti pozitif değerler seçildiğinde yüzey kabuğundaki spinler birbirine paralel, negatif değer seçildiğinde ise yüzey kabuğundaki spinler antiparaleldir. Hamiltonyen denklemindeki $h(t)$ zamana bağlı salınımlı dış manyetik alandır ve

$$h(t) = h_0 \sin(\omega t), \quad (3.2)$$

ile verilir. Burada h_0 manyetik alanın genliği ve $\omega = 2\pi\nu$ açısal frekanstır. Sistem T_A sıcaklığında izotermal ısı banyosu ile temas halindedir.

Şimdi korelasyonlu EAT kullanılarak model için EAT eşitliklerini elde edilecektir. Bu yöntem Honmura ve Kaneyoshi [62] ve Kaneyoshi arkadaşları [63] tarafından ilk kez ortaya konmuştur. Bu yöntem Ising sistemlerin ele alınıp incelenmesinde MFA'dan daha çok gelişmiştir. EAT kapsamında her öz mıknatıslanması m_C ve yüzey kabuğu mıknatıslanmaları m_{S1} ve m_{S2} ifadeleri nanotüp için eşitlik (1.36) ve eşitlik (1.37) deki van der Waerden özdeşlikleri kullanılarak şöyle yazılır,

$$m_{S1} = \frac{[\cosh(J_S \nabla) + m_{S1} \sinh(J_S \nabla)]^2 [\cosh(J_S \nabla) + m_{S2} \sinh(J_S \nabla)]^2}{[\cosh(J_{int} \nabla) + m_C \sinh(J_{int} \nabla)]} f(x+h) \Big|_{x=0}, \quad (3.3)$$

$$m_{S2} = \frac{[\cosh(J_S \nabla) + m_{S2} \sinh(J_S \nabla)]^2 [\cosh(J_S \nabla) + m_{S1} \sinh(J_S \nabla)]^2}{[\cosh(J_{int} \nabla) + m_C \sinh(J_{int} \nabla)]^2} f(x+h) \Big|_{x=0}, \quad (3.4)$$

$$m_C = \frac{[\cosh(J_C \nabla) + m_C \sinh(J_C \nabla)]^4 [\cosh(J_{int} \nabla) + m_{S1} \sinh(J_{int} \nabla)]}{[\cosh(J_{int} \nabla) + m_{S2} \sinh(J_{int} \nabla)]^2} f(x+h) \Big|_{x=0}, \quad (3.5)$$

Burada $\nabla = \partial/\partial x$ diferansiyel operatördür. m_C , m_{S1} ve m_{S2} mıknatıslanmaları şekil-1'de gösterilmiştir. $f(x+h)$ fonksiyonu şöyle tanımlanır.

$$f(x+h)=\tanh(\beta(x+h)), \quad (3.6)$$

burada $\beta = 1/k_B T_A$, T_A mutlak sıcaklık ve k_B Boltzman faktörüdür. Ayrıca yüzey kabuğunun boyuna mıknatıslanması (m_S) ve boyuna toplam mıknatıslanması (m_T) nı tanımlayalım.

$$m_S = \frac{1}{2}(m_{s1} + m_{s2}), \quad (3.7)$$

$$m_T = \frac{1}{3}(m_S \pm m_C). \quad (3.8)$$

Bu noktada bir r etkileşim parametresi tanımlayalım.

$$r = \frac{J_{Int.}}{J_C}. \quad (3.9)$$

Bu tez çalışmasında sistemin dinamik özellikleri hem $r > 0$ yani ferromanyetik, hem de $r < 0$ antiferromanyetik durumlar için incelendi. r (ya da J_{int}) pozitif bir değer seçilirse yüzey kabuğu ve özdeki spinler birbirlerine paraleldir ve bu yüzden sistem ferromanyetik faz sergiler. r (ya da J_{int}) negatif bir değer seçilirse yüzey kabuğunun spinleri özdeki spinlere zıt yönelir ve bu yüzden sistem ferrimanyetik davranış gösterir [59-61].

Şimdi de dinamik Etkin-Alan eşitliklerini elde etmek için Glauber Stokastik dinamiği [56] kullanılacaktır.

$$\begin{aligned} \frac{dm_{s1}}{dt} = & -m_{s1} + a_0 + a_1 m_C + a_2 m_{s1} + a_3 m_C m_{s1} + a_4 m_{s1}^2 + a_5 m_C m_{s1}^2 + a_6 m_{s2} + a_7 m_C m_{s2} \\ & + a_8 m_{s1} m_{s2} + a_9 m_C m_{s1} m_{s2} + a_{10} m_{s1}^2 m_{s2} + a_{11} m_C m_{s1}^2 m_{s2} + a_{12} m_{s1} m_{s2}^2 \\ & + a_{13} m_C m_{s1} m_{s2}^2 + a_{14} m_{s1}^2 m_{s2}^2 + a_{15} m_C m_{s1}^2 m_{s2}^2 + a_{16} m_{s1}^2 m_{s2}^2 + a_{16} m_C m_{s1}^2 m_{s2}^2, \end{aligned} \quad (3.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{dm_{s2}}{dt} = & -m_{s2} + b_0 + b_1 m_C + b_2 m_C^2 + b_3 m_{s1} + b_4 m_C m_{s1} + b_5 m_C^2 m_{s1} + b_6 m_{s1}^2 \\ & + b_7 m_C m_{s1}^2 + b_8 m_C^2 m_{s1}^2 + b_9 m_{s2} + b_{10} m_C m_{s2} + b_{11} m_C^2 m_{s2} + b_{12} m_{s1} m_{s2} \\ & + b_{13} m_C m_{s1} m_{s2} + b_{14} m_C^2 m_{s1} m_{s2} + b_{15} m_{s1}^2 m_{s2} + b_{16} m_C m_{s1}^2 m_{s2} + b_{17} m_C^2 m_{s1}^2 m_{s2} \\ & + b_{18} m_{s2}^2 + b_{19} m_C m_{s2}^2 + b_{20} m_C^2 m_{s2}^2 + b_{21} m_{s1} m_{s2}^2 + b_{22} m_C m_{s1} m_{s2}^2 + b_{23} m_C^2 m_{s1} m_{s2}^2 \\ & + b_{24} m_{s1}^2 m_{s2}^2 + b_{25} m_C m_{s1}^2 m_{s2}^2 + b_{26} m_C^2 m_{s1}^2 m_{s2}^2, \end{aligned} \quad (3.11)$$

$$\begin{aligned}
\frac{dm_c}{dt} = & -m_c + c_0 + c_1 m_c + c_2 m_c^2 + c_3 m_c^3 + c_4 m_c^4 + c_5 m_{s1} + c_6 m_c m_{s1} + c_7 m_c^2 m_{s1} \\
& + c_8 m_c^3 m_{s1} + c_9 m_c^4 m_{s1} + c_{10} m_{s2} + c_{11} m_c m_{s2} + c_{12} m_c^2 m_{s2} + c_{13} m_c^3 m_{s2} \\
& + c_{14} m_c^4 m_{s2} + c_{15} m_{s1} m_{s2} + c_{16} m_c m_{s1} m_{s2} + c_{17} m_c^2 m_{s1} m_{s2} + c_{18} m_c^3 m_{s1} m_{s2} \\
& + c_{19} m_c^4 m_{s1} m_{s2} + c_{20} m_{s2}^2 + c_{21} m_c m_{s2}^2 + c_{22} m_c^2 m_{s2}^2 + c_{23} m_c^3 m_{s2}^2 + c_{24} m_c^4 m_{s2}^2 \\
& + c_{25} m_{s1} m_{s2}^2 + c_{26} m_c m_{s1} m_{s2}^2 + c_{27} m_c^2 m_{s1} m_{s2}^2 + c_{28} m_c^3 m_{s1} m_{s2}^2 + c_{29} m_c^4 m_{s1} m_{s2}^2.
\end{aligned} \tag{3.12}$$

Buradaki a_i ($i = 0, 1, \dots, 16$), b_j ($j = 0, 1, \dots, 26$) ve c_k ($k = 0, 1, \dots, 29$) gibi katsayılar $\exp(a \nabla) f(x) = f(x+a)$ matematiksel ifadesi kullanılarak kolayca hesaplanabilir.

Dinamik düzen parametreleri veya dinamik mıknatıslanmalar salınımlı manyetik alanın bir periyodunda ortalama zamana bağlı olarak

$$M_\alpha = \frac{w}{2\pi} \oint \tilde{m}_\alpha(t) dt, \tag{3.13}$$

denklemlerle verilir. Burada $\alpha = S$ (*Shell*), C (*Core*), T (*Total*) sırasıyla kabuk, öz ve dinamik toplam mıknatıslanmaya karşılık gelir. Öte yandan histeresis ilmek alanları Acharyya tarafından tanımlanmıştır[64] ve

$$A_\alpha = - \oint \tilde{m}_\alpha(t) dh = -h_0 w \oint \tilde{m}_\alpha(t) \cos(wt) dt, \tag{3.14}$$

denklemlerle verilir. Histeresisten dolayı meydana gelen enerji kaybına karşılık gelir. Dinamik korelasyonlar ise

$$C_\alpha = \frac{w}{2\pi} \oint \tilde{m}_\alpha(t) h(t) dt = \frac{wh_0}{2\pi} \oint \tilde{m}_\alpha(t) \sin(wt) dt. \tag{3.15}$$

denklemlerle verilir. Ayrıca sayısal hesaplamalarda, histeresis ilmek alanlarını A_α ve dinamik korelasyonlar $C_\alpha J_C$ biriminde ölçülür. Aynı zamanda bu çalışmada $J_C = 1.0$, $w = 2\pi$ ve $k_\beta = 1.0$ sabit olarak alınmıştır. Bu eşitliklerin nümerik sonuçları Bölüm 4' de verilmiştir.

BÖLÜM 4

NÜMERİK SONUÇLAR

4.1. Ortalama Alt Örgü Miknatıslanmalarının Zamanla Değişimi

Bu bölümde, ilk olarak sistemdeki fazları ve ortalama yüzey ve öz miknatıslanmalarının zamanla değişimlerini çalışıldı. Yüzey ve öz miknatıslanmalarının zamana bağlı değişimlerini araştırmak için ilk olarak eşitlik (3.10)-(3.12)'de verilen r , Δ_S , T ve h parametrelerinin çeşitli değerleri için incelenecektir. Bu eşitliklerin kararlı çözümleri 2π ile ξ 'in periyodik fonksiyonu olacaktır, yani

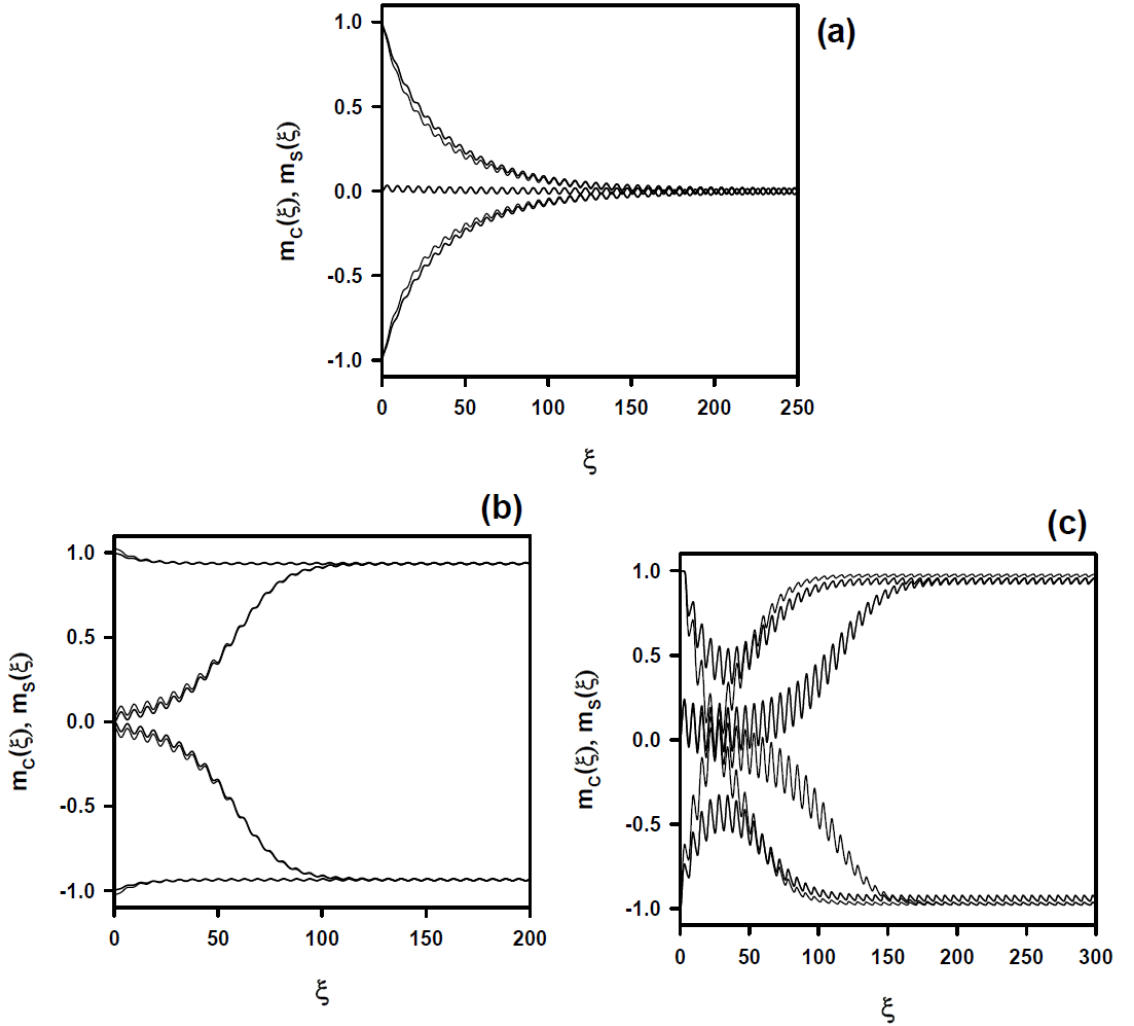
$$\begin{aligned} m_s(\xi + 2\pi) &= m_s(\xi) \\ m_c(\xi + 2\pi) &= m_c(\xi) \end{aligned} \quad (4.1)$$

şeklinde tanımlanmaktadır. Ayrıca aşağıdaki özelliklerin sağlanıp sağlanamamasına göre sistemde üç tip çözüm olduğu bulundu.

$$\begin{aligned} m_s(\xi + \pi) &= -m_s(\xi) \\ m_c(\xi + \pi) &= -m_c(\xi). \end{aligned} \quad (4.2)$$

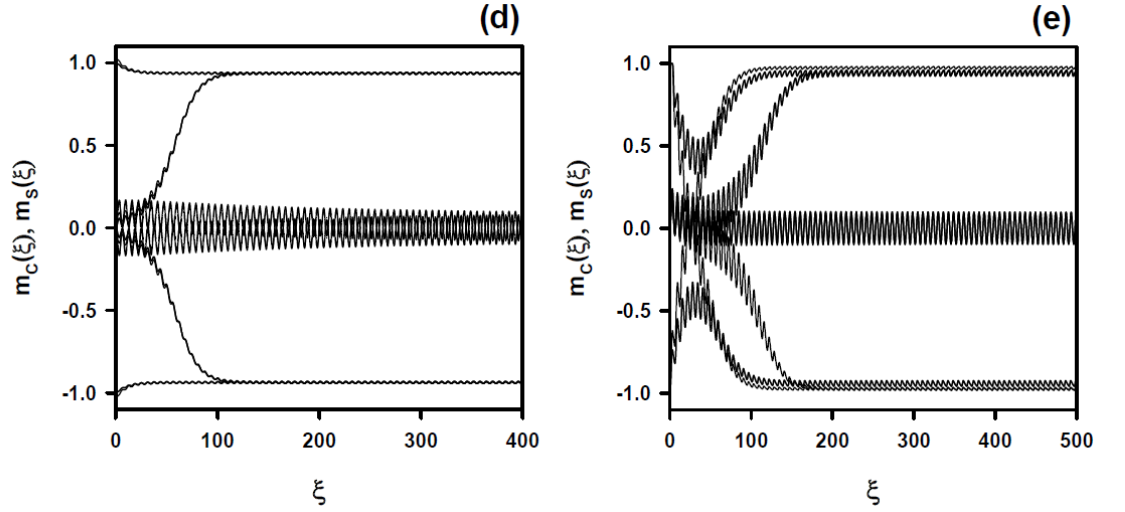
Çözümler eşitlik (4.2) denklemleriyle verilen özelliğe sahipse simetrik çözüm olarak adlandırılır ve bu paramanyetik (P) çözüme karşılık gelir. Bu çözümde ortalama düzen parametreleri, yani $m_s(\xi)$ ve $m_c(\xi)$ birbirine eşittir ve sıfır değeri civarında salınarak dış manyetik alana uyum gösterirler. İkinci tip çözüm ise eşitlik (4.2) ile verilen özelliğe sahip değildir ve bu simetrik olmayan çözüm olarak adlandırılır ki bu çözüm ferromanyetik çözümlerdir. Bu çözümde $m_s(\xi)$ ve $m_c(\xi)$ birbirine eşit fakat sıfırdan farklı değerlere yani ± 1 değeri etrafına salınırlar. ($m_s(\xi) = m_c(\xi) \neq 0$) Olduğundan sistem ferromanyetik (F) fazda bulunur ve artık dış manyetik alana uyum göstermezler. Üçüncü tip çözüm eşitlik (4.2) ye uymaz ve bu simetrik olmayan çözüm olarak adlandırılır. Fakat bu çözüm ferrimanyetik (I) çözüme karşılık gelir. Bu çözümde $m_s(\xi)$

ve $m_c(\xi)$ birbirine eşit değildir ve $m_s(\xi) \pm 1$ ve $m_c(\xi) \neq 1$ değerlerini alır ve $(m_s(\xi) \neq m_c(\xi) \neq 0)$ olduğundan ferrimanyetik fazdır ve artık dış manyetik alana uyum göstermezler. Bu çözümlerin gerçekliği açık bir şekilde eşitlik (3.10)-(3.12) ile verilen Etkin-Alan dinamik denklemlerinin nümerik olarak çözülmesiyle görülür. (3.10)-(3.12) numaralı denklemlerin verilen parametreler ve başlangıç değerleri için Adams-Moulton kestirme-düzeltilme yöntemi kullanılarak çözülmesiyle sistemde P, F ve I temel fazlarının yanı sıra F+P ve I+P karma fazları bulundu. Temel fazlara karşılık gelen çözümler Şekil 3.2'de ve karma fazlara karşılık gelen çözümler Şekil 3.3'de verilmiştir.



Şekil 3.2. Spin-1/2 Ising nanotüp sistemi için ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının $m_c(\xi)$ ve $m_s(\xi)$ zamanla değişimi. (a) Sistemde paramanyetik (P) faz mevcuttur. (b) Sistemde ferromanyetik (F) faz mevcuttur. (c) Sistemde ferrimanyetik (I) faz mevcuttur.

Şekil 3.2’de üç farklı çözüm görülmektedir. Bunlar temel fazlar P, F ve I fazlarıdır. Şekil 3.2(a)’da sadece simetrik çözümler görülmektedir. Bu durumda $m_s(\xi) = m_c(\xi)$ sıfır değeri etrafına salınır. $(m_s(\xi) = m_c(\xi) = 0)$ şartını sağladığından dolayı elde edilen faz paramanyetik (P) fazdır. Şekil 3.2(b) ve Şekil 3.2(c)’de sadece simetrik olmayan çözümler görülmektedir. Bu yüzden Şekil 3.2(b) ferromanyetik ve Şekil 3.2(c) ise ferrimanyetik faza karşılık gelmektedir. Şekil 3.2(b)’de $m_s(\xi)$ ve $m_c(\xi) \pm 1$ değeri etrafına salınır. $(m_s(\xi) = m_c(\xi) \neq 0)$ şartını sağladığından dolayı sistemde ferromanyetik (F) faz vardır. Şekil 3.2(c)’de ise $m_s(\xi) \pm 1$ değeri etrafına ve $m_c(\xi) \square 1$ değeri etrafına salınmaktadır. $(m_s(\xi) \neq m_c(\xi) \neq 0)$ şartını sağladığından bu da ferrimanyetik (I) faza karşılık gelir.



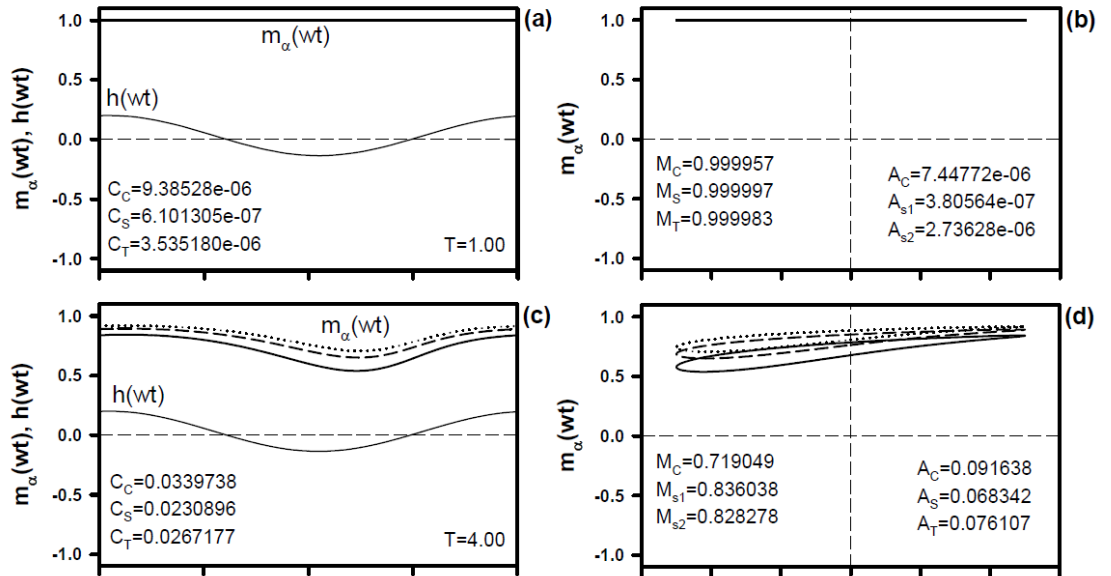
Şekil 3.3. Spin-1/2 Ising nanotüp sistemi için ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının $m_c(\xi)$ ve $m_s(\xi)$ zamanla değişimi. (d) Sistemde hem ferromanyetik (F) ve hemde paramanyetik (P) fazları birarada mevcuttur (F+P). (e) Sistemde ferrimanyetik (I) ve paramanyetik (P) fazlar birarada mevcuttur (I+P).

Şekil 3.3(d)’de $m_s(\xi)$ ve $m_c(\xi) \pm 1$ değeri etrafına salınır bu ferromanyetik faza karşılık gelir, aynı zamanda $m_s(\xi)$ ve $m_c(\xi)$ sıfır değeri etrafına salınır bu da paramanyetik faza karşılık gelir. Bu yüzden Şekil 3.3(d) karma faz (F+P) çözümlere karşılık gelir. Şekil

3.3(e)'de ise $m_s(\xi) \pm 1$ etrafına salınır ve $m_c(\xi) \square 1$ etrafına salınır, bu ferrimanyetik faza karşılık gelir hem de $m_s(\xi)$ ve $m_c(\xi)$ birbirine eşit ve sıfır değeri etrafına salınır, bu çözümler paramanyetik faza karşılık gelir. Bu yüzden Şekil 3.3(e) karma faz (I+P) çözümlere karşılık gelir. Simetrik çözümler başlangıç değerlerinden bağımsızdır ancak simetrik olmayan çözümler başlangıç değerlerine bağlıdır.

4.2. Mıknatıslanmanın Zamanla Değişimi ve Dinamik Histeresis Davranışları

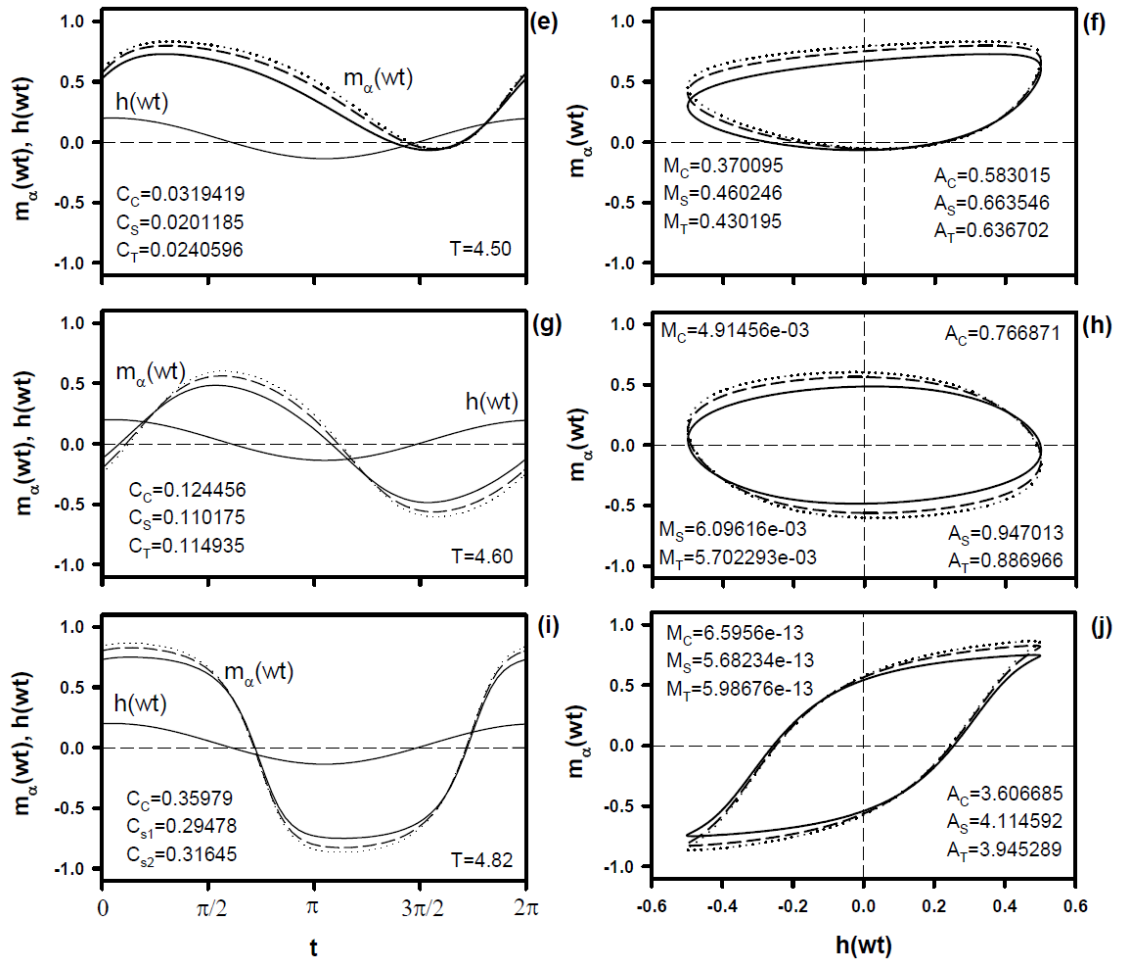
Mıknatıslanmanın zamanla değişimini $m_\alpha(wt)$, zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan $h(wt)$ ve dinamik manyetik histeresis davranışlarını incelemek için başlangıç değerleri ve parametreleri için Adams-Moulton kestirme-düzeltilme yöntemi kullanılarak Denklem (3.10)-(3.12) çözüldü ve Şekil 3.4'de bazı ilginç durumlar sunuldu. Dinamik mıknatıslanmanın değeri (M_α), dinamik korelasyonlar (C_α) ve de histeresis ilmek alanları (A_α) Şekil 4'de verilmiştir.



Şekil 4:

Şekil 4 (a); $r = 0.5$, $\Delta_S = 0.5$, $h = 0.5$ ve $T/J_C = 1.0$ sabit değerleri için mıknatıslanmanın zamanla değişimini göstermektedir. Eşitlik (3.10)-(3.12) 'den $wt \rightarrow wt + 2\pi$ den de anlaşıldığı üzere $M_\alpha(wt)$ başlangıç değerinde sabit kalmıştır. Yani zamanla herhangi bir

değişim gözlenmemiştir. Şekil 4 (b) 'de ise $r = 0.5$, $\Delta_s = 0.5$, ve $T/J_C = 1.0$ değerleri için mıknatıslanmanın manyetik alana göre değişimi (m - h) çizilmiştir. Burada da benzer olarak mıknatıslanma başlangıç değerinde sabit kalmıştır. Dinamik korelasyon ve dinamik histeresis alanı da sıfırdır. Şekil 4 (c) 'de ve şekil 4 (d) 'de $r = 0.5$, $\Delta_s = 0.5$ ve $T = 4.0$ değeri için mıknatıslanmalar ve mıknatıslanmanın dış manyetik alanla değişimi verildi. Şekil 4 (c) 'den de anlaşılacağı üzere belirli bir zaman için $m_\alpha(wt)$ doygunluk değeri azalır ve tekrar başlangıç değerine çıkar. Bu da bize bazı spinlerin zaman periyodunda yavaş yavaş dönmeye başladığını göstermektedir. Şekil 4 (d) 'de ise m - h döngüsü sonlu bir alanı kapsar ve sıcaklık arttığından m - h alanı oluşur. Sıcaklık arttığı için mıknatıslanmanın da azaldığı görülmektedir.



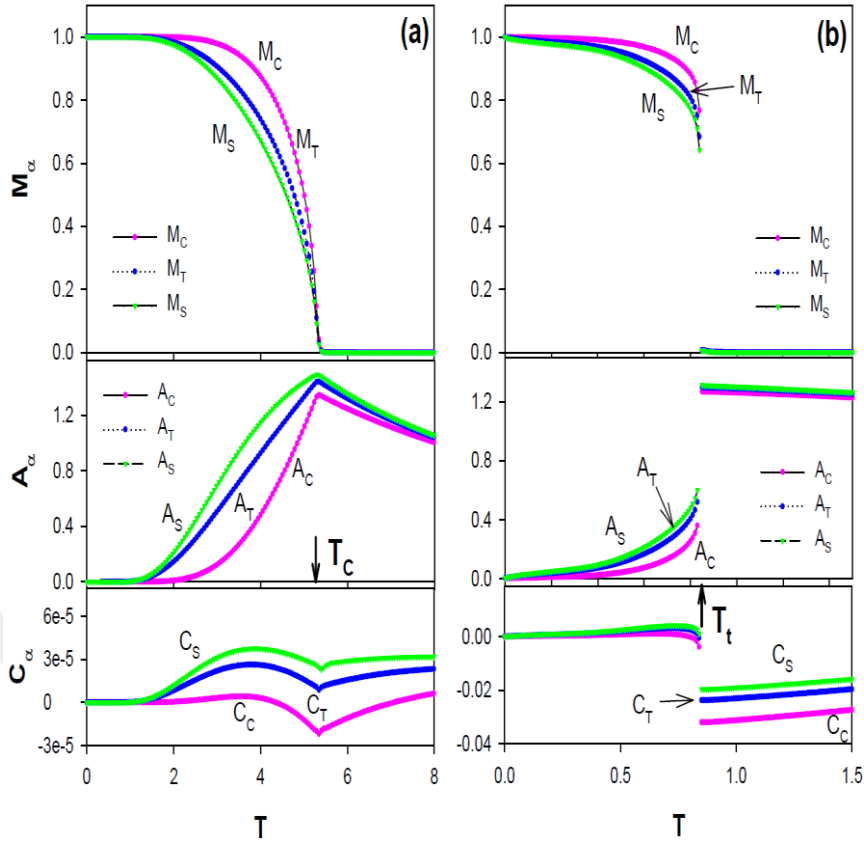
Şekil 5:

Şekil 5 (a); $r = 0.5$, $\Delta_s = 0.5$, $h = 0.5$ ve $T/J_c = 4.50$ sabit değerleri için mıknatıslanmanın zamanla değişimini göstermektedir. Sıcaklık, kritik sıcaklık değerine (T_c) yaklaştıkça mıknatıslanma değeri iyice azalmıştır. Şekil 5 (b) 'den de görüldüğü üzere histeresis alanı artmaya başlamıştır. Şekil 5 (c) 'de $T = 4.60$ değeri için çizilmiştir. Bu değer kritik sıcaklığa yaklaştığından mıknatıslanma sıfır değeri etrafında simetrik olarak değişmektedir. Dinamik korelasyonların değerleri artmıştır. Benzer olarak şekil 5 (d) 'de m-h alanı artmış ve sıfır civarında simetrik bir görünüm almıştır. Şekil 5 (e)-(f) $T = 4.82$ değeri için çizilmiştir ki bu da kritik sıcaklık (T_c) değeridir. Kritik sıcaklık değerinde mıknatıslanma gözlenmez yani sıfırdır. Dinamik korelasyonlar artmıştır. Yine benzer olarak histeresis alanı da tam olarak gözlenmiştir.

Şekil 4 ve 5 ile benzer davranışları teorik olarak dinamik OAT [64], dinamik EAT [65] ve hem de MC Simülasyonu kullanarak kinetik Ising modelinde gözlenmiştir. Ayrıca benzer histeresis davranışlarının kırılma noktaları deneysel olarak oda sıcaklığında yüzey magneto-optik Kerr etkin çalışması kullanılarak Co/Cu(001) [66] ve Fe/W(110) [67] gibi ultra ferromanyetik filmlerde gözlenmiştir. Ultra Fe/W(110) ile daha önce yapılan deneysel çalışmalarda [67] histeresis alanının kırılma noktaları açıkça gösterilmiştir.

4.3. Dinamik Mıknatıslanmalar, Histeresis Alanlar ve Dinamik Korelasyonlar

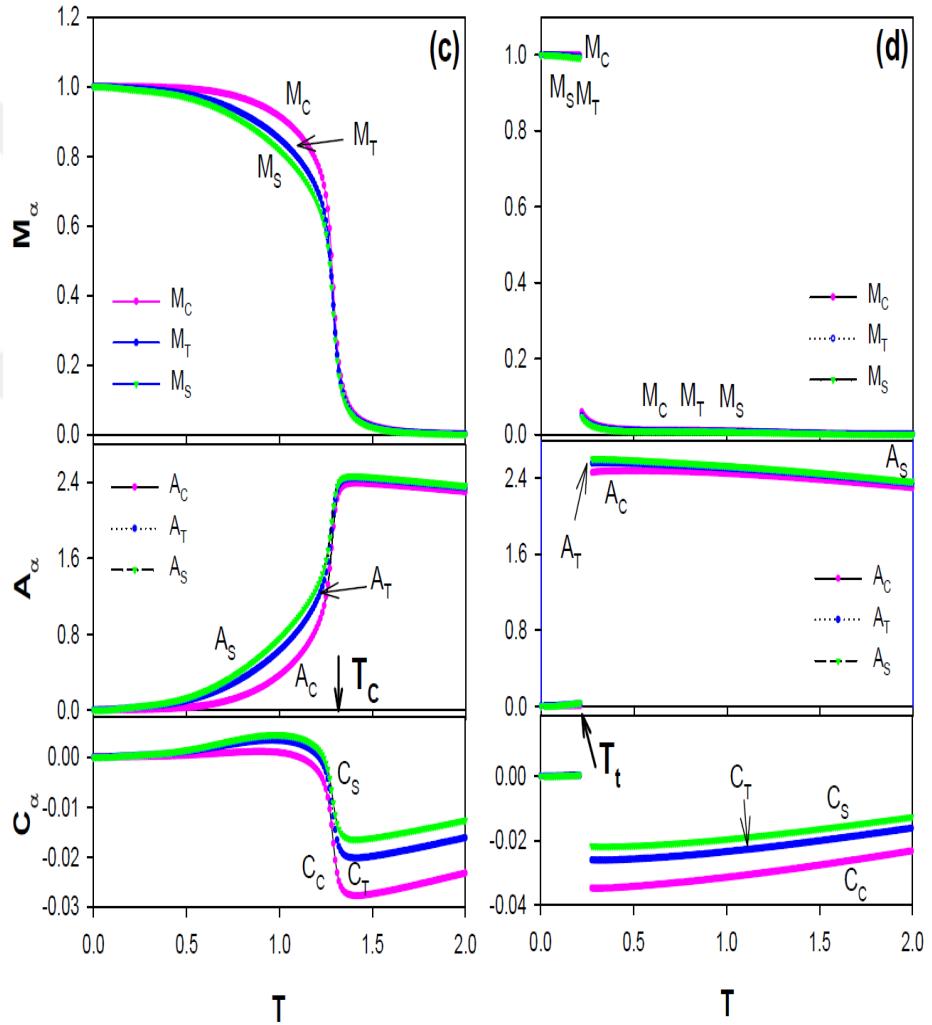
Bu bölümde, bir periyotta ortalama düzen parametrelerinin davranışları araştırıldı. Yani dış manyetik alan altında r ve Δ_s 'in bazı sabit değerleri için silindirik Ising nanotüpüne artan sıcaklık değerlerine bağlı olarak yüzey, öz ve toplam mıknatıslanmalar (dinamik mıknatıslanmalar(M_α)), histeresis alanlar(A_α) ve korelasyonlar(C_α) araştırıldı. M_α , A_α ve C_α 'nın termal davranışlarını araştırmak için Romberg İntegrasyonu ile Adams-Moulton kestirme-düzeltilme nümerik yöntemleri kullanılarak eşitlik (3.13)-(3.15) çözüldü. Bu tez çalışmasında gözlenecek olan fazların belirlenmesinde kullanılacak olmasından dolayı öncelikle dinamik faz geçişlerinin doğası (kesikli veya sürekli) analiz edildi. Bunun yanı sıra diğer fazlara geçişte dinamik faz geçiş noktaları (DFG) gösterildi. Bu ilginç sonuçlar DFG noktaları ve de geçişlerin doğası şekil 6 'da gösterildi.



Şekil 6:

Şekil 6 (a) 'da $r=1.0$, $\Delta_S=0.0$ ($J_S=1.0$) ve $h=2.0$ için M_α , A_α ve C_α nın termal değişimleri gösterilmiştir. Bu şekilde sıcaklığın sıfır değerinde dinamik mıknatıslanmalar $M_\alpha=1.0$ ve sıcaklık değerinin artmasına bağlı olarak sürekli bir şekilde azalmaktadır, bu yüzden sistem $T_C=5.402$ sıcaklık değerinde ikinci derece faz geçişi sergilemektedir. Bu dinamik faz geçişi ferromanyetik fazdan paramanyetik fazadır. Ayrıca M_T 'nin davranışı bir telafi sıcaklığı gösterdiğinden ya da başka bir ifadeyle Néel Teori [68] 'de belirtilen davranışları sergilediğinden Q-Tipi davranıştır [69]. Histeresis alanı A_α ve dinamik korelasyonlar C_α değerlerinin araştırılması ile sistemin fazları arasındaki dinamik faz geçişlerinin kararlılığı kontrol edildi. İkinci derece faz geçişinin olduğu T_C kritik sıcaklığında histeresis alanı A_α en yüksek (maximum) değerde ve dinamik korelasyonlar C_α ise en düşük (minimum) değerdedir. Şekil 6(b) 'de $h=5.0$ ve $r=1.0$, $\Delta_S=0.0$ ($J_S=1.0$) için sıfır sıcaklığında $M_S=M_C=M_T=1.0$ değerinden başlayarak sıcaklığın artmasına bağlı olarak mıknatıslanma değerleri kesikli (süreksiz) olarak sıfıra doğru azalmıştır. Bu yüzden sistem $T_t=0.825$ 'te birinci derece faz geçişi ile ferromanyetik (F) fazdan paramanyetik (P) faza geçmiştir. Bu yüzden T_t sıcaklığı bir atlama ya da kesikli olarak tanımlanan

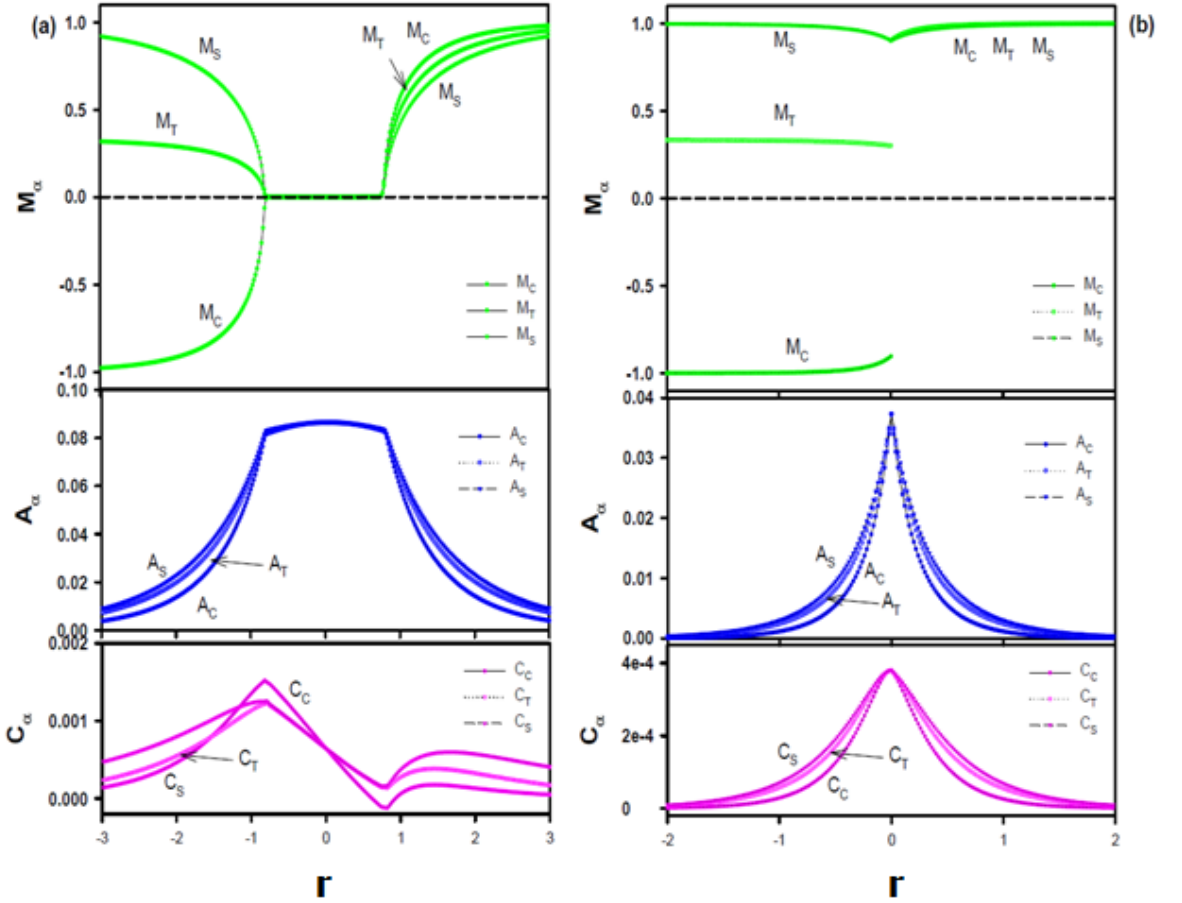
birinci derece faz geçiş sıcaklığıdır. Şekil 6(b) 'de görüldüğü gibi bu kesikli değerde histeresis alanı A_α ve dinamik korelasyonlar C_α değerlerinin termal davranışları gösterildi. Şekil 6(b) 'den görüldüğü üzere sıfırdan başlayan sıcaklık değeri arttıkça histeresis alanı A_α ve dinamik korelasyonlar C_α değerleri sıfırdan farklı değerler almakta ve pozitif değerler almakta, T_t sıcaklığında histeresis alanı A_α en yüksek pozitif değere, dinamik korelasyonlar C_α ise en düşük negatif değere sıçramaktadır. Böylece dinamik mıknatıslanmalar(M_α), histeresis alanlar(A_α) ve korelasyonlar(C_α) değerlerinin termal davranışlarının araştırılması ile bulunan birinci derece faz geçişi $T_t=0.825$ sıcaklığında meydana gelmiştir.



Şekil 7 :

Şekil 7(a) ve Şekil 7(b) 'de görüldüğü gibi $r=1.0$, $\Delta_s=0.0$ ($J_s=1.0$) ve $h=4.9$ değerleri için M_α , A_α ve C_α nın sıcaklığa bağlılığı incelenerek karma faz (F+P) bölgesi elde edilmiştir.

Şekil 7(a) 'nın davranışı şekil 6(a) 'ya benzerdir; bu yüzden sistem $T_C=1.455$ kritik sıcaklık değerinde ferromanyetik (F) fazdan paramanyetik (P) fazına ikinci derece faz geçişi ile geçmiştir. Şekil 7(b) 'de $T_i=0.225$ değerinde M_a , A_a ve C_a kesikli değerler aldığı için sistem birinci derece faz geçişi göstermiştir. Bu geçiş ferromanyetik (F) fazdan paramanyetik (P) fazadır. Şekil 7 (a) ve şekil 7 (b) ile şekil 10 karşılaştırılırsa, sistem $T_i=0.225$ in altındaki değerler için sadece ferromanyetik faz, $T_i=0.225$ ile $T_C=1.455$ aralığında ferromanyetik+paramanyetik faz (F+P) ve $T_C=1.455$ değerinin üstündeki değerler için paramanyetik faz sergilemiştir. $T_i=0.225$ ile $T_C=1.455$ aralığındaki bölge karma faz bölgesi olarak adlandırılır.



Şekil 8:

Şekil 8 'de görüldüğü gibi dinamik mıknatıslanmalar(M_a), histeresis alanlar(A_a) ve korelasyonlar(C_a) yüzey ve öz spinleri arasındaki ara yüzey etkileşim parametresi r 'nin bir fonksiyonu olarak iki grafikte gösterildi. Şekil 8(a) ve (b) sistemdeki çok ilginç davranışlardan biridir. Şekil 8(a) $\Delta_S=0.0$ ($J_S=1.0$), $h=1.0$ ve $T=5.0$ değerleri için

çizilmiştir. r 'nin negatif değerleri için $M_S = 1.0$, $M_C = -1.0$ ve $M_T = 0.33$ elde edilmiştir bu yüzden sistem ferrimanyetik faz (I) sergilemiştir. r değerinin artmasına bağlı olarak M_S ve M_T değerleri azalmakta ve M_C değeri sürekli olarak artmaktadır ve $r = -0.785$ değerinde sıfır olmaktadır. Bu yüzden sistem ferrimanyetik (I) fazdan paramanyetik (P) faza ikinci derece faz geçişi ile geçmiştir. Ayrıca paramanyetik faz $r = -0.785$ ile 0.785 değerleri aralığında gözlenmiştir, r değeri daha da arttırıldığında dinamik mıknatıslanmalar M_α , $r = 0.785$ değerinden itibaren artmaya başlamış ve 1.0 değerine ulaşmıştır bu bölgede ferromanyetik (F) faz gözlenmiştir. Histeresis alanı A_α ve dinamik korelasyonlar C_α ikinci derece faz geçiş noktalarında pik yapmıştır. Şekil 8(b) 'de ise $\Delta_S=0.0$ ($J_S=1.0$), $h=1.0$ ve $T=2.0$ değerleri için çizilmiş ve sistemde birinci derece faz geçişi gözlenmiştir. Şekil 8 (b) 'de dinamik mıknatıslanmaların M_α davranışları şekil 8 (a) 'dakine benzerdir ancak burda $r = 0.0$ değerinde bir sıçrama yapmıştır. r değeri arttıkça dinamik mıknatıslanmalar M_α artmış ve $r \geq 2.0$ için 1.0 değerini almıştır. Histeresis alanlar A_α ve korelasyonlar C_α değerleri birinci derece faz geçiş noktalarında keskin bir pik yapmışlardır.

4.4. Telafi Sıcaklığı

Kritik sıcaklık değerinden önce toplam mıknatıslanmanın ($M_T=0$) sıfır olduğu sıcaklığa **telafi sıcaklığı** denir ve T_{Comp} şeklinde gösterilir. Telafi sıcaklığı (noktası) alt örgü mıknatıslanmalarının mutlak değerleri arasındaki geçiş noktalarına bakılarak belirlenebilir. Bu sıcaklık değerinde alt örgü mıknatıslanmaların büyüklükleri eşit olmalıdır. Bu yüzden telafi noktalarında aşağıdaki eşitlikler sağlanmalıdır.

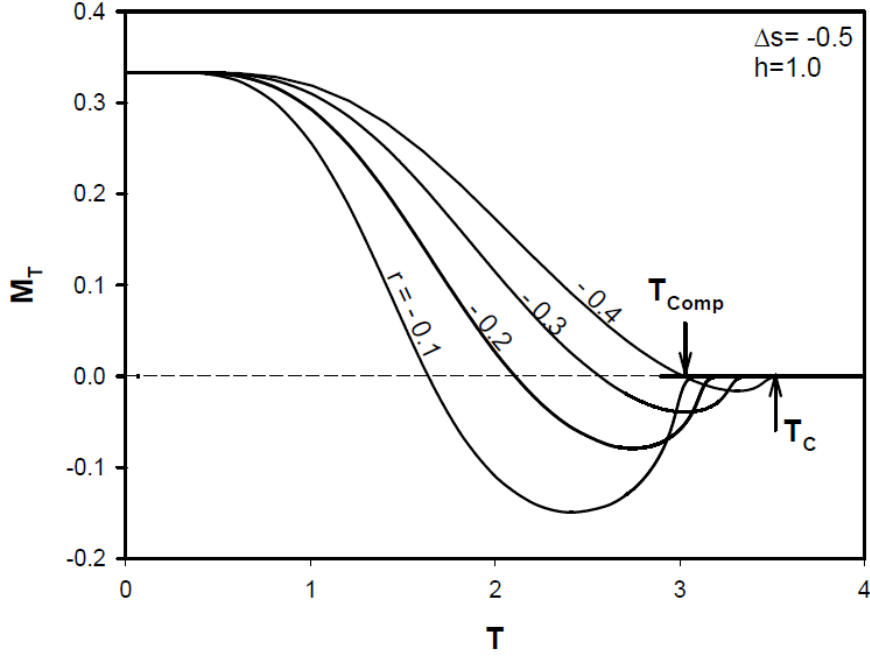
$$|M_S(T_{Comp})| = |M_C(T_{Comp})|$$

ve

$$\text{sgn}[M_S(T_{Comp})] = -\text{sgn}[M_C(T_{Comp})]$$

Ayrıca $T_{Comp} < T_C$ olması gerekmektedir. Bu koşullar, M_S ve M_C değerlerinin telafi sıcaklığında birbirini yok ettiğinden meydana gelmektedir. Bu durumda toplam mıknatıslanma sıfır olduğundan malzeme dış alanla etkileşmez. Oda sıcaklığı civarında telafi sıcaklığının varlığı bazı ferromanyetik malzemelerde termomanyetik kayıt sistemleri açısından kritik öneme sahiptir. Telafi sıcaklığı; alt örgülerden birinin

mıknatıslanmasındaki artışı diğer alt örgünün mıknatıslanmasının azalmasından daha hızlı gerçekleşiyorsa telafi sıcaklığı gözlenir.



Şekil 9: Telafi sıcaklığı

Nümerik olarak hesaplanan eşitlikler ve elde edilen sonuçlar $\Delta_S = -0.5$ ($J_S = 0.5$), $h = 1.0$ için silindirik Ising nanotüpün dinamik telafi sıcaklığında arayüzey etkileşim parametresi (r) nin etkisi incelendi ve şekil 9 da gösterildi. Şekil 9 'da görüldüğü üzere dinamik toplam mıknatıslanma $r = -0.1$ den -0.4 aralığındaki değerler için sıcaklık artışına bağlı olarak çizilmiştir. Görüldüğü gibi toplam mıknatıslanma iki noktada sıfır değerini almıştır. Mıknatıslanmanın sıfır olduğu (birinci sıfır noktasındaki) sıcaklık değeri telafi sıcaklığını ve ikinci sıfır noktasındaki sıcaklık değeri de sistemin kritik sıcaklık değerini göstermektedir. Dinamik mıknatıslanmanın bir telafi sıcaklığı sergilediği gözlenmektedir yani sistemde Néel Teori [68] 'sine göre N-Tipi [69] davranış olarak adlandırılan davranış gözlenmektedir.

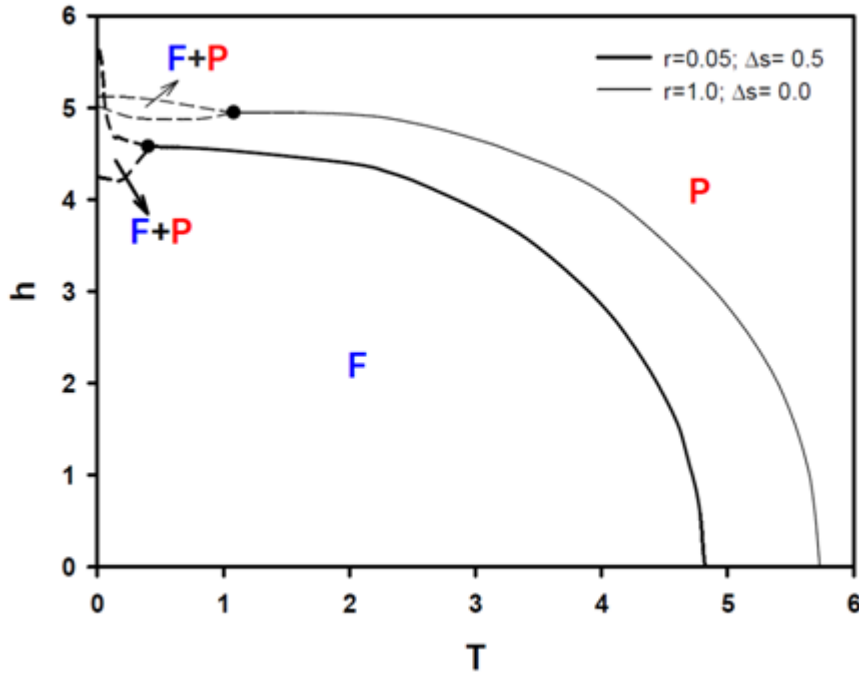
4.5. Dinamik Faz Diyagramları

Bölüm 4.3 'de dinamik geçişlerin doğası karakterize edildi ve DFG noktaları gösterildi, bu bölümde ise sistemin sergilediği dinamik faz diyagramları incelenecektir. Sistem

parametrelerinin indirgenmiş sıcaklığa bağlı olarak değişimini gösteren grafiğe faz diyagramı denir. Faz diyagramları h - T , r - T ve Δ_S - T düzlemlerinde çizilmiştir.

4.5.1. (h - T) Düzleminde Faz Diyagramları

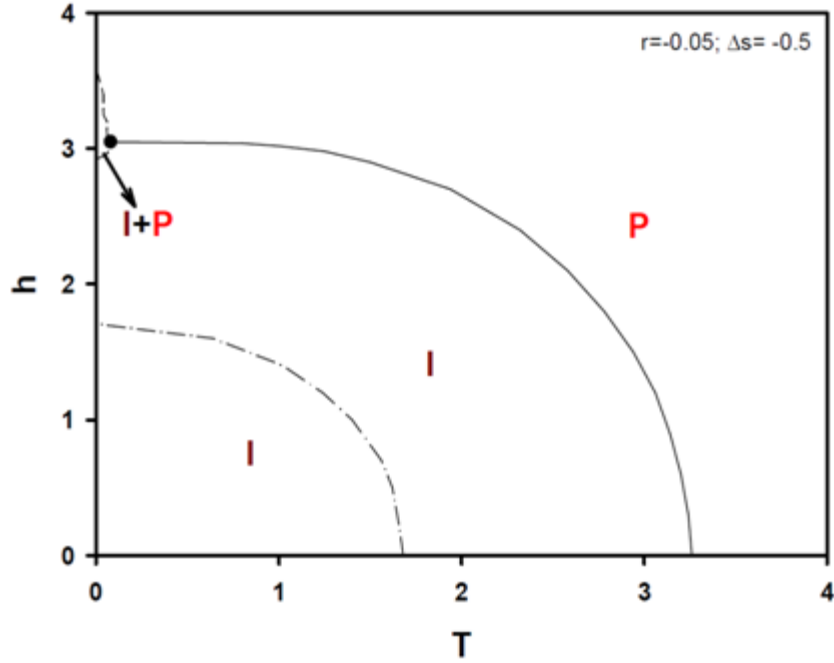
Burada r ve Δ_S 'in bazı sabit değerleri için h - T grafiği incelenecektir. Dolayısıyla dış manyetik alan (h) değerinin sistem üzerine etkisi gözlenecektir.



Şekil 10(a): h - T düzleminde faz diyagramı

Şekil 10(a); $r = 0.05$ ve $\Delta_S = 0.5$ ($J_S=1.5$) değerleri için h - T düzleminde faz diyagramı gösterilmiştir. Yine aynı grafikte $r = 1.0$ ve $\Delta_S = 0.0$ ($J_S=1.0$) değerleri için h - T düzleminde faz diyagramı gösterilmiştir. Şekilden de görüldüğü üzere dış manyetik alanın ve indirgenmiş sıcaklığın düşük değerlerinde sistemde düzenli faz, yüksek değerlerinde ise sistemde düzensiz faz mevcuttur. Dinamik faz geçişi sıcaklık artışına bağlı olarak bölgeler arasında ferromanyetik (F) fazdan paramanyetik (P) faza ikinci derece faz geçişi ile olmuştur. Sistemdeki bu geçişler düz çizgi ile gösterilmiştir. Düşük sıcaklıkta ve çeşitli h (zamana bağlı dış manyetik alan) değerlerinde ferromanyetik ve paramanyetik fazın bir arada bulunduğu karma faz bölgeleri gözlenmiştir ve (F+P) ile gösterilmiştir. F+P bölgesi ile ferromanyetik ve paramanyetik faz bölgelerine geçişler birinci derece faz geçişidir ve kesikli çizgi ile gösterilmiştir. Şekilden de görüldüğü üzere

r değerinin artışına bağlı olarak kritik sıcaklığın da arttığı gözlenmiştir. Sistemde birinci derece faz geçişleriyle ikinci derece faz geçişinin birleştiği noktalar üçlü kritik nokta olarak adlandırılır ve (●) şeklinde gösterilmiştir. Sistemde her bir grafik için bir tane üçlü kritik nokta gözlenmiştir. Bu noktalarda sistemin faz geçişinin türü ayırt edilemez ve sistem her iki fazı bir arada bulundurur. Çizilen faz diyagramları kinetik spin-1/2 [70], spin-1 [71], spin-3/2 [72] ve de karma Ising sistemlerin spin (1/2, 1) [73], spin (1/2, 3/2) [74], spin (1, 3/2) [75], spin (1, 2) [76] ve spin (2, 5/2) [77] çalışmalarında elde edilen sonuçlarla benzerdir.

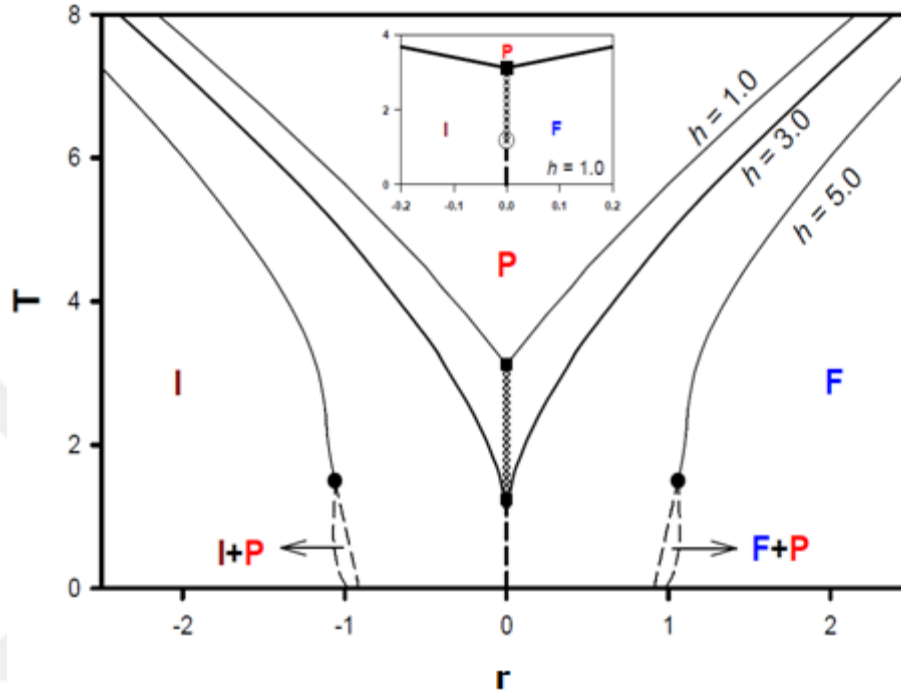


Şekil 10(b): h-T düzleminde faz diyagramı

Şekil 10(b); $r = -0.05$ ve $\Delta_s = -0.5$ ($J_s = 0.5$) değerleri için h-T düzleminde faz diyagramı gösterilmiştir. Şekil 10(b) 'deki faz diyagramı şekil 10(a) ile benzerdir ancak iki farklı durum gözlenmiştir. h ve T nin düşük değerleri için sistemde telafi noktaları gözlenmiştir ve çizgi- nokta-çizgi ile gösterilmiştir. Dış manyetik alanın ve indirgenmiş sıcaklığın düşük değerlerinde sistem düzenli fazda bulunur. Bu düzenli faz arayüzey etkileşim parametresi (r) ve yüzey etkileşim parametresi Δ_s değerlerinin negatif olmasından ötürü sistemde düzenli faz ferrimanyetik (I) fazdır. Şekil 10(b) 'deki karma faz bölgesi şekil 10(a) 'daki karma faz bölgesiyle karşılaştırıldığında daha küçüktür. Bu da r değerinin küçük seçilmiş olmasından kaynaklanmaktadır.

4.5.2. (r-T) Düzleminde Faz Diyagramları

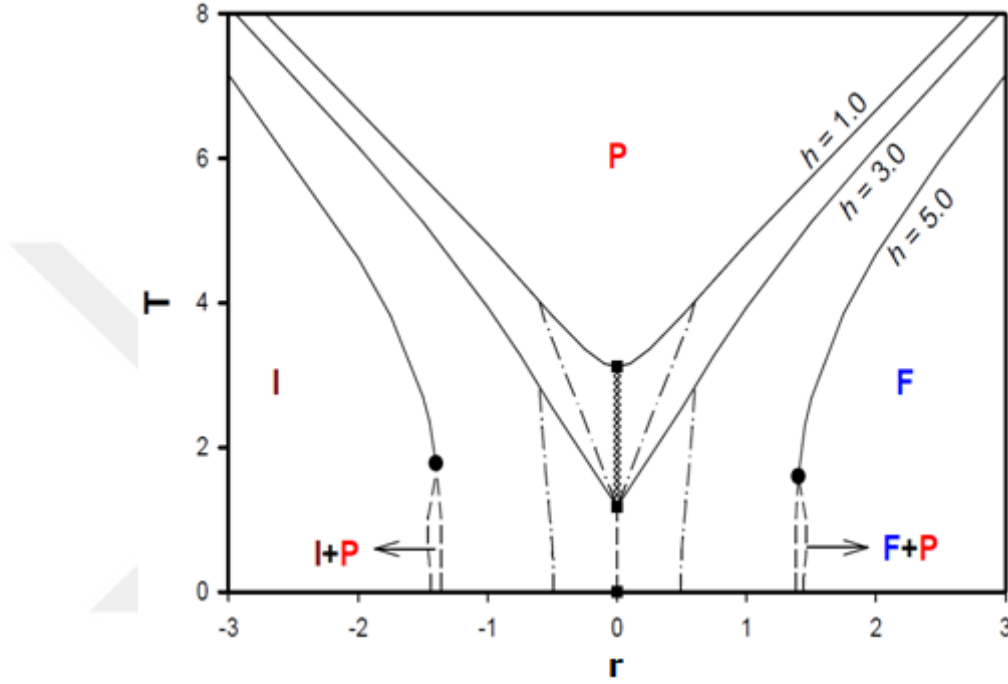
Burada h ve Δ_S in bazı sabit değerleri için r-T grafiği incelenecektir. Dolayısıyla ara yüzey etkileşim parametresi (r) 'nin sistem üzerine etkisi gözlenecektir.



Şekil 11(a): r - T düzleminde faz diyagramı

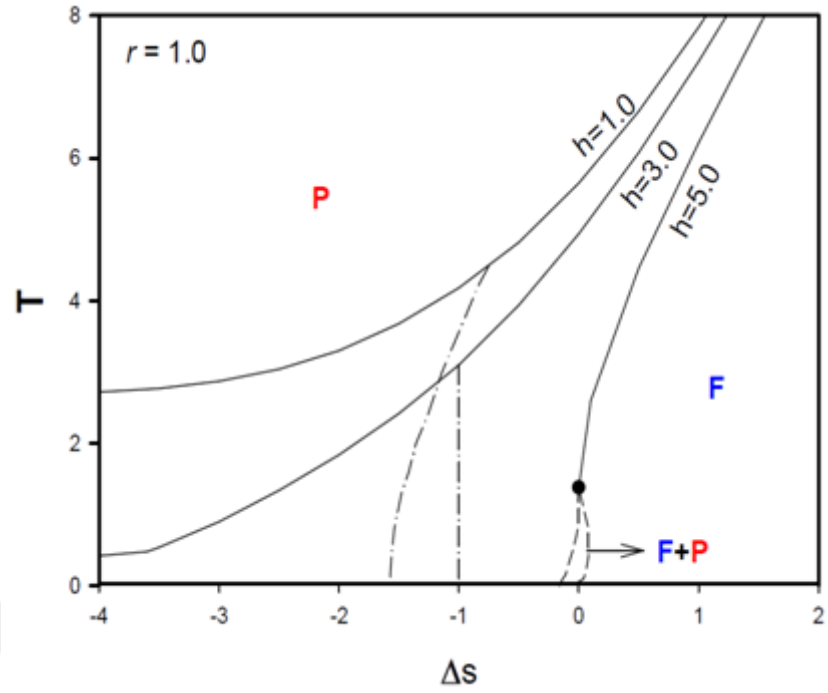
Şekil 11(a); $h = 1.0, 3.0$ ve 5.0 ile $\Delta_S = 0.0$ ($J_S = 1.0$) değerleri için r - T düzleminde çizilen faz diyagramı gösterilmiştir. Şekilde ikinci derece faz geçişi düz çizgi ile, birinci derece faz geçişi ise kesikli çizgilerle ve telafi sıcaklığı ise çizgi-nokta-çizgi ile gösterilmiştir. Bunun yanı sıra sistemde üçlü kritik nokta (●) ve çoklu kritik nokta (■) gözlenmiştir. $h = 1.0$ için faz diyagramı $r = 0.0$ boyunca var olan birinci derece faz geçiş noktalarında izole edilmiş kritik nokta gözlenmiştir. İzole edilmiş kritik noktalar şekilde ayrıntılı gösterilmiştir. Faz diyagramında $h = 1.0$ ile $r = 0.0$ için çizilen kritik nokta ferromanyetik (F) ile ferrimanyetik (I) fazlar arasındaki birinci derece faz geçiş noktalarının üzerindedir. Sistem $M_C \neq 0$ ve $M_S = 0$ olan çoklu kritik nokta ve izole edilmiş kritik noktalar arasında faz geçişi göstermez. Çoklu kritik nokta üzerinde sistem ikinci derece faz geçişi sergiler, bu yüzden F, I ve P fazları arasındaki geçişler ikinci derece faz geçişidir. Şekil 11 'de görüldüğü gibi ikinci derece faz geçişleri simetriktir ($r=0$ 'a göre). Örneğin $h = 3.0$ için faz diyagramından görüldüğü gibi aynı sıcaklıklarda $4.55 \geq h \geq 2.25$ değerleri için izole edilmiş ve çoklu kritik noktalar sergilemiştir. $h > 4.55$ değerleri için sistemde üçlü kritik

noktalar ve karma faz (F+P) ve (I+P) gözlenmektedir. Buna ilaveten sistemde r değerinin artmasına bağlı olarak faz geçiş sıcaklıklarının da arttığı görülmektedir. r değerinin negatif olduğu bölgede düzenli faz ferrimanyetik (I), pozitif olduğu bölgede ise düzenli fazın ferromanyetik (F) olduğu görülmektedir.



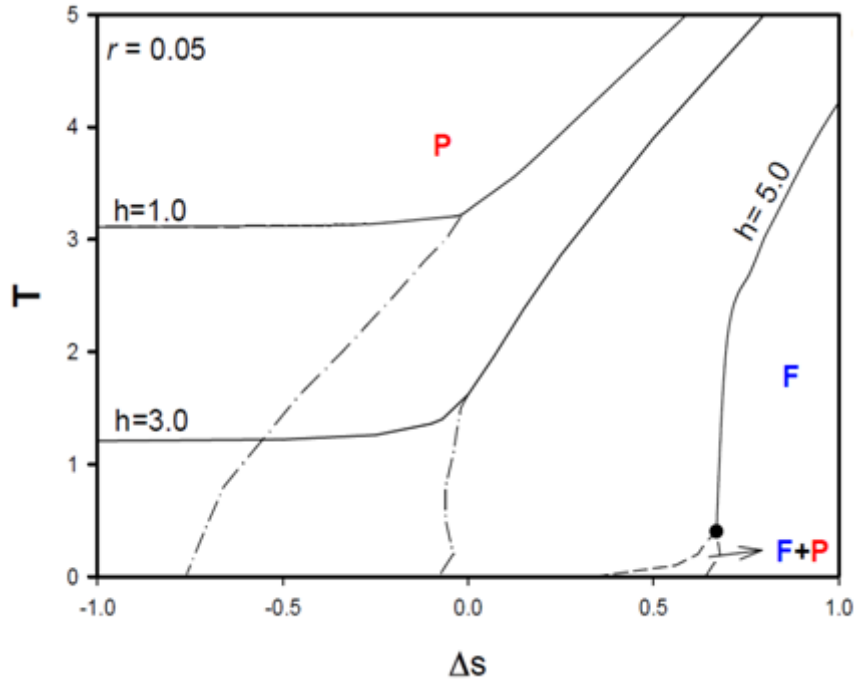
Şekil 11(b): $r - T$ düzleminde faz diyagramı

Şekil 11(b) de ise $h = 1.0, 3.0$ ve 5.0 ile $\Delta_S = -0.5$ ($J_S = 0.5$) seçilen değerleri için araştırılmıştır. Bu faz diyagramı Şekil 11 (a) ile benzerdir ancak farklı olarak bu faz diyagramında r ve T nin bazı değerlerinde telafi sıcaklığı gözlenmiştir. Telafi etkisi arayüzey etkileşim parametresi (r) ile yüzey etkileşim parametresi (Δ_S) arasındaki etkiden kaynaklanır. Burada da $\Delta_S = -0.5$ negatif olduğundan telafi sıcaklığı gözlenmiştir. Yine burada da r değerinin artışına bağlı olarak sistemdeki faz geçiş sıcaklıklarının arttığı gözlenmiştir. Dış manyetik alanın $h > 4.55$ değerleri için sistemde üçlü kritik noktalar ve karma faz (F+P) ve (I+P) gözlenmektedir.



Şekil 12(a): Δ_s - T düzleminde faz diyagramı

Şekil 12(a) 'da üç h değeri $h = 1.0, 3.0$ ve 5.0 ile $r = 1.0$ değeri için $\Delta_s - T$ düzleminde sistemin faz diyagramları çizilmiştir. Şekilde ikinci derece faz geçişi düz çizgi ile, birinci derece faz geçişi ise kesikli çizgilerle ve telafi sıcaklığı ise çizgi-nokta-çizgi ile gösterilmiştir. Bunun yanı sıra sistemde üçlü kritik nokta (●) gözlenmiştir. T 'nin yüksek ve Δ_s 'in düşük değerlerinde sistemde paramanyetik faz (P), Δ_s 'in büyük değerlerinde ise sistemde ferromanyetik (F) fazda bulunur. Benzer olarak manyetik alan $h > 4.55$ değerleri için sistemde üçlü kritik noktalar ve karma faz (F+P) bölgesi gözlenmektedir. $h = 1.0$ ve $h = 3.0$ için Δ_s 'in negatif değerlerinde yine sistemde telafi noktaları gözlenmiştir. Sistemde Δ_s değerinin artmasına bağlı olarak faz geçiş sıcaklıklarının da arttığı görülmektedir.



Şekil 12(b): Δ_s - T düzleminde faz diyagramı

Şekil 12 (b) 'de seçilen üç h değeri $h = 1.0, 3.0$ ve 5.0 ile $r = 0.05$ değeri için Δ_s - T düzleminde sistemin faz diyagramları gösterilmiştir. Şekilde sistem ferromanyetik (F) fazdan paramanyetik (P) faza ikinci derece faz geçişi ile geçmiştir. Karma faz bölgesi (F+P) den oluşmuş ve bu faz bölgesi ile ana faz bölgeleri arasındaki geçiş birinci derece faz geçişidir. Sistem $h = 5.0$ değeri için yine birinci derece faz geçiş noktası ile ikinci derece faz geçiş noktasının birleştiği yerde bir tane üçlü kritik nokta sergilemiştir. Ayrıca faz diyagramında $h=1.0$ ve 3.0 değerleri için Δ_s in bazı değerlerinde sistemde telafi davranışları gözlenmiştir. Şekilde $h = 1.0$ için Δ_s in azalmasına bağlı olarak telafi sıcaklığının da azaldığı görülmektedir. Burada ara yüzey parametresi $r = 0.05$ gibi çok küçük değerde seçilmiştir. Dolayısıyla yüzeydeki spinler özdeki spinlere yaklaşacaktır ve böylelikle sadece özde spin varmış gibi davranacaktır. Bunun sonucunda özden gelen katkı daha fazla olacağından grafik hemen hemen doğrusal olarak artış göstermektedir. Bu faz diyagramlarının kinetik karma spin $(1/2, 1)$ [81], spin $(1, 3/2)$ [82] ve spin $(3/2, 5/2)$ [83] Ising sistemleriyle benzer faz diyagramları gözlenmiştir. Şekil 9 (b) de; $r = 0.05$ ve düşük h değerlerinde öz-yüzey arası parametre J_{int} çok zayıf olmaya başlar. Dolayısıyla öz katkısı daha büyük olur ve böylece düşük h değerlerinde grafik hemen hemen doğrusal olarak elde edilmiştir. Dış manyetik alan altında incelenen Ising nanotel [84] sistemlerin faz diyagramlarında da benzer olay gözlenmiştir.

BÖLÜM 5

TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu çalışmada, biz ferromanyetik ve antiferromanyetik için yüzey ve öz spinleri arasındaki etkileşimleri dikkate alan Etkin Alan Teorisi (EAT) ve Glauber Stokastik Dinamiği ile zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında silindirik Ising nanotüpün dinamik özelliklerini araştırdık. İlk olarak sistemdeki fazları belirleyebilmek için ortalama mıknatıslanmaların zamana bağlı olarak salınımlarını çalıştık. Sonra zamana bağlı salınımlı ortalama manyetik alan $h(wt)$ ve ortalama mıknatıslanma $m(wt)$ nin zamana bağlılığı ve dinamik manyetik histeresis davranışları araştırıldı. Değişen sıcaklık değerleri için histeresis alanları çizildi ve sıcaklığın artmasına bağlı olarak histeresis alanların değiştiği gözlemlendi. Şekil 3 te elde edilen sonuçlar deneysel ve teorik sonuçlarla uyum içerisindedir. İkinci olarak ise, dinamik mıknatıslanmalar, dinamik histeresis alanlar ve dinamik korelasyonlar yüzey ve öz spinleri arasındaki arayüzey etkileşim parametresi (r) nin etkisi incelendi. Telafi sıcaklığı ve dinamik kritik sıcaklıklarda r nin etkisi gösterildi. Bu çalışmada dinamik faz geçişlerinin doğası (birinci derece ve ikinci derece) karakterize edildi ve de dinamik faz diyagramları (DFG noktaları) gösterildi. Dinamik faz diyagramları $h-T$, $r-T$ ve Δ_s-T olmak üzere üç düzlemde çizildi. Biz etkileşim parametrelerinin değerlerine bağlı olarak sistemin davranışlarını inceledik. Faz diyagramları dinamik kritik noktalar, örneğin üçlü kritik, izole edilmiş kritik, üçlü ve çoklu kritik noktalar sergiledi. Hamiltonyen parametrelerine bağlı olarak paramanyetik (P), ferromanyetik (F) ve ferrimanyetik (I) üç temel fazın yanısıra paramanyetik+ferromanyetik (F+P) ve paramanyetik+ferrimanyetik (I+P) iki karma faz bölgesi sistemde meydana geldi. Sistemde elde edilen bu sonuçlar yine önceki çalışmalarda elde edilen sonuçlarla benzerdir.

İstatistik Fizikte nanosistemlerin denge faz geçişleri kapsamlıca incelenmiştir fakat nanosistemlerin denge dışı yani dinamik özellikleri kapsamlıca incelenememiştir. Ancak biz bu çalışmada bir silindirik Ising nanotüp modelinin dinamik özelliklerine odaklandık. Etkin Alan Teorisi (EAT) ve Glauber Stokastik dinamiği kullanılarak incelenen nanosistemlerde dinamik faz geçişleri teorik olarak detaylı bir şekilde araştırdık

ve elde ettiğimiz bu sonuçların deneysel olarak elde edilen gerçek materyal sistemlerin dinamik özellikleriyle uyum sağladığını gözledik.



KAYNAKLAR

1. Vakhrushev A. V., Kodolov V. I., Hagi A. K., Ameta S. C., "Carbon Nanotubes and Nanoparticles, Current and Potential Applications", Apple Academic Press, s. 316, 2019.
2. Shong C. W., Haur S. C., Wee A. T. S., "Science at the Nanoscale: An Introductory Textbook", Singapore: Pan Stanford Pub., s.214, 2010.
3. Kaneyoshi, T., "Phase diagrams of a nanoparticle described by the transverse Ising model", *Phys. Status Solidi.*, B242, 2938-2948, 2005.
4. Kaneyoshi T., "Magnetizations of a nanoparticle described by the transverse Ising model", *J. Magn. Magn. Mater.*, 321, 3430-3435, 2009.
5. Kaneyoshi, T., "Compensation temperature in a cylindrical Ising nanowire (or nanotube)", *Physica.*, A390, 3697, 2011.
6. Kaneyoshi, T., "Magnetic properties of a cylindrical Ising nanowire or nanotube", *Phys. Stat. Solidi B* 248, 250-258, 2011.
7. Kaneyoshi, T., "Phase diagrams of a cylindrical transverse Ising ferromagnetic nanotube; Effects of surface dilution", *Solid State Commun.*, 151, 1528-1532, 2011.
8. Kovylyna M., Garcia del Muro M., Konstantinovic Z., Varela M., Iglesias O., Labarta A., Batlle X., "Controlling exchange bias in Co-CoOx nanoparticles by oxygen content", *Nanotechnology.*, 20, 175702, 2009.
9. Vasilakaki M., Trohidou K.N., "Numerical study of the exchange-bias effect in nanoparticles with ferromagnetic core/ferrimagnetic disordered shell morphology", *Phys. Rev.*, B79, 144402, 2009.
10. Momose S., Kodama H., Uzumaki T., Tanaka A., "Magnetic properties of magnetically isolated L10-FePt nanoparticles", *Appl. Phys. Lett.*, 85(10), 1748-1750, 2004

11. Coffy W.T., Crothers D.S.F., Dormann J.L., Kalmykov Yu.P., Kennedey E.C., Wernsdorfer .W., "Effect of an oblique magnetic field on the superparamagnetic relaxation time. II. Influence of the gyromagnetic term", *Phys.Rev.Lett.* 80, 5655, 1998
12. Wang, C.D., Lu, Z.Z., Yuan, W.X., Kwok, S.Y., Teng, B. H., "Dynamic properties of phase diagram in cylindrical ferroelectric nanotubes", *Phys. Lett. A*, 375, s. 3405-3409, 2011.
13. Zeng H., Li J., Liu J.P., Wang Z.L., Sun S., "Exchange-coupled nanocomposite magnets by nanoparticle self-assembly", *Nature*, 420, s. 395-398, 2002.
14. Bakuzis, A. F., Morais, P. C., "Magnetic nanoparticle systems: an Ising model approximation", *J. Magn. Magn. Mater.*, 272, s. E1161-E1163, 2004.
15. Zaim N., Zaim A., Kerouad M., "Monte Carlo simulation of the magnetic properties of a spin-1 Blume–Capel nanowire", *J. Alloys and Comp.*, 663, 516-523, 2016.
16. Zaim N., Zaim A., Kerouad M., "Compensation behavior of a ferrimagnetic nanoparticle system with binary alloy shell", *Solid State Commun.* 246, 23-28, 2016.
17. Keskin, M., Şarlı, N., Deviren, B., "Hysteresis behaviors in a cylindrical Ising nanowire", *Solid State Commun.*, 151 (14-15), 1025-1030, 2011.
18. Rego, L.G.C., Figueiredo, W., "Magnetic properties of nanoparticles in the Bethe-Peierls approximation", *Pyhs. Rev. E.*, 64, 144424, 2001.
19. Michael, Th., Trimper, S., Wesselinowa, J. M., "Size and doping effects on the coercive field of ferroelectric nanoparticles: A microscopic mode", *Phys. Rev. B*, 74, 214113, 2006.
20. Masrour, R., Bahmad, L., Hlil, E. K., Hamedoun, M., Benyoussef, A., "Antiferromagnetic properties of CoO nanoparticle: a Monte Carlo simulation", *Ind. J. Phys.*, 90, 539-542, 2016.
21. Yalcin, O., Erdem, R., Ovunc, S., "Spin-1 model of noninteracting nanoparticles", *Acta Physica Polonica*, 114, 835-844, 2008.

22. Scheinfein, M.R., Schmidt, K.E., Heim, K.R., Hembree, G.G., "Magnetic order in two-dimensional arrays of nanometer-sized superparamagnets", *Phys. Rev. Lett.*, 76, 1541-1544, 1996.
23. Wang, C.D., Lu, Z.Z., Yuan, W.X., Kwok, S.Y., Teng, B. H., "Dynamic properties of phase diagram in cylindrical ferroelectric nanotubes", *Phys. Lett. A*, 375, s. 3405-3409, 2011.
24. Deviren, B., Şener, Y., Keskin, M., "Dynamic magnetic properties of the kinetic cylindrical Ising nanotube", *Physica.*, A, 392, 3969-3983, 2013.
25. Glauber, R.J., "Time-dependent statistics of the Ising model", *J. Math. Phys.*, 4, 294-307, 1963.
26. 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.
27. Mendes, J.F.F., Lage, E.J.S., "Dynamics of the infinite ranged Potts model, *J. Stat. Phys.*, 64, 653-672, 1991
28. Acharyya, M., Nonequilibrium Phase Transition in the Kinetic Ising Model: Critical Slowing Down and the Specific-Heat Singularity, *Phys. Rev. E*, 56, 2407-2411, 1997.
29. Chatterjee, A., Chakrabarti, B.K., Fluctuation Cumulant Behavior for the Field-Pulse-Induced Magnetization-Reversal Transition in Ising Models, *Phys. Rev. E*, 67,046113-1-046113-5, 2003.
30. Sides, S.W., Rikvold, P.A., Novotny, M.A., Kinetic Ising Model in an Oscillating Field: Finite-Size Scaling at the Dynamic Phase Transition, *Phys. Rev. Lett.*, 81, 834-837, 1998.
31. Korniss, G., White, C.J., Rikvold, P.A., Novotny, M.A., Dynamic Phase Transition, Universality, and Finite-Size Scaling in the Two-Dimensional Kinetic Ising Model in an Oscillating Field, *Phys. Rev. E*, 63, 016120-1-016120-15, 2001.
32. Korniss, G., Rikvold, P.A., Novotny, M.A., Absence of First-Order Transition and Tricritical Point in the Dynamic Phase Diagram of a Spatially Extended

- Bistable System in an Oscillating Field, *Phys. Rev. E*, 66, 056127-1-056127-12, 2002.
33. Chakrabarti, B.K., Acharyya, M., Dynamic Transitions and Hysteresis, *Rev. Mod. Phys.*, 71, 847-859, 1999.
34. Tutu, H., Fujiwara, N., Landau Theory of Dynamic Phase Transitions and Systematic Perturbation Expansion Method for Getting Phase Diagrams, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 73, 2680-2696, 2004.
35. Acharyya, M., Chakrabarti, B.K., Response of Ising Systems to Oscillating and Pulsed Fields: Hysteresis, ac, and Pulse Susceptibility, *Phys. Rev. B*, 52, 6550-6568, 1995
36. Jiang, Q., Yang, H.N., Wang, G.C., Scaling and Dynamics of Low-Frequency Hysteresis Loops in Ultrathin Co Films on a Cu (001) Surface, *Phys. Rev. B*, 52, 14911-14916, 1995.
37. Kleemann, W., et al., Dynamic Phase Transitions in Ferroic Systems with Pinned Domain Walls, *Phase Trans.*, 78, 811-816, 2005
38. Gedik, N., Yang, D.S., Logvenov, G., Bozovic, I., Zewail, A.H., "Nonequilibrium phase transitions in cuprates observed by ultrafast electron crystallography", *Science* 20, 425, 2007.
39. Kurlyandskaya G. V., Sanchez M. L., Hernando B., Prida V. M., Gorria P., Tejedor M., "Giant-magnetoimpedance-based sensitive element as a model for Biosensors", *Applied Physics Letters*, 82, s. 3053-3055, 2003.
40. Zeng H., Li J., Liu J.P., Wang Z.L., Sun S., "Exchange-coupled nanocomposite magnets by nanoparticle self-assembly", *Nature*, 420, s. 395-398, 2002.
41. Nie S., Emory S.R., "Probing single molecules and single nanoparticles by surface-enhanced Raman scattering", *Science*, 275, s.1102-1106, 1997.
42. Elliott D.W., Zhang W.X., "Field Assessment of Nanoscale Bimetallic Particles for Groundwater Treatment", *Environmental Science and Technology*, 35, s. 4922-4926, 2001.

43. Wong A.P.Y., Chan M.H.W.,” Liquid-Vapor Critical Point of 4He in Aerogel”, *Physical Review Letters*, 65, s.2567-2570, 1990.
44. Alexiou C., Schmidt A., Klein R., Hullin P., Bergemann C., Arnold W.,” Magneticdrug targeting: biodistribution and dependency on magnetic field strength”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 252, s. 363-366, 2002.
45. Bourlinos A.B., Simopoulos A., Boukos N., et al.,” Magnetic modification of the external surfaces in the MCM-41 porous Silica: Synthesis, characterization, and functionalization”, *The Journal of Physical Chemistry B.*, 105, s. 7432-7437, 2001.
46. Gross A.F., Diehl M.R., Beverly K.C., et al, “Controlling magnetic couplingbetween Cobalt nanoparticles through nanoscale confinement in hexagonal mesoporous Silica”, *The Journal of Physical Chemistry B*, 107, 5475-5482, 2003.
47. Lindsay S., “Introduction to Nanoscience” , *Oxford University Press*, 472,2010.
48. Göçek İ., Kurşun S., “Küçük G.Tekstil endüstrisinde nanoteknoloji uygulamaları”, s.164 ,3/2006.
49. Corti CW., Holiday RJ., Thompson DT., “Developing New Industrial Applications for Gold” , *Gold Nanotechnology ,Gold Bulletin* , 35(4), 111-117, 2002.
50. Özdoğan E., Demir A., Seventekin N., “Lotus Etkili Yüzeyler, Tekstil ve Konfeksiyon", s.287-290,1/2006.
51. MomoseS., Kodama H., Uzunaki T., Tanaka A., “Magnetic properties of magnetically isolated L10-FePt nanoparticles”, *Appl.Phys.Lett.*, 85(10), 1748-1750, 2004
52. Coffy W.T., Crothers D.S.F., Dormann J.L., Kalmykov Yu.P., Kennedy E.C., Wernsdorfer .W.,“Effect of an oblique magnetic field on the superparamagnetic relaxation time. II. Influence of the gyromagnetic term”., *Phys.Rev.Lett.* 80, 5655, 1998

53. Kovylyina M., Garcia del Muro M., Konstantinovic Z., Varela M., Iglesias O., Labarta A., Batlle X., “Controlling exchange bias in Co-CoOx nanoparticles by oxygen content”, *Nanotechnology.*, 20, 175702, 2009.
54. Vasilakaki M., Trohidou K.N., “ Numerical study of the exchange-bias effect in nanoparticles with ferromagnetic core/ferrimagnetic disordered shell morphology”, *Phys.Rev.*, B79, 144402, 2009.
55. Maller, J., Zhang, K.Y., Chien, C.L., Eagleton T.S., Searson, P.C., “Fabrication and magnetic properties of fcc CoXPt1–XCoXPt1–X nanowires”, *Appl.Phys.Lett.*, 84, 39002004
56. Konstantinova, E., “Theoretical simulations of magnetic nanotubes using Monte Carlo method”, *J. Magn. Magn. Mater.* 320, 2721, 2008.
57. Kaneyoshi, T., “Phase diagrams of a nanoparticle described by the transverse Ising model”, *Phys.StatusSolidi.*, B242, 2938-2948, 2005;
- Kaneyoshi, T., “Compensation temperature in a cylindrical Ising nanowire (or nanotube)”, *Physica.*, A390, 3697, 2011;
- Kaneyoshi, T., “Phase diagrams of a cylindrical transverse Ising ferromagnetic nanotube; Effects of surface dilution”, *Solid State Commun.*, 151, 1528-1532, 2011.
58. Wang, C.D., Lu, Z.Z., Yuan, W.X., Kwok, S.Y., Teng, B. H., “Dynamic properties of phase diagram in cylindrical ferroelectric nanotubes”, *Phys.LetA.*, 375, 3405-3409, 2011.
59. Mi, B.Z., Wang, H.Y., Zhou, Y.S., “Theoretical investigations of magnetic properties of ferromagnetic single-walled nanotubes”, *J. Magn. Magn. Mater.*, 322, 952-958, 2010;
60. Kaneyoshi, T., “Magnetic properties of a cylindrical Ising nanowire or nanotube”, *Phys.Status Solidi.*, B 248, 250-258, 2011.
61. Jiang, W., Li, X.X., Guo, A.B., Guan, H.Y., Wang, Z., Wang K., “Magnetic properties and thermodynamics in a metallic nanotube”, *J. Magn. Magn. Mater* 355, 309-318, 2014.

62. Kaneyoshi T., “Cylindrical Ising nanowire and nanotube with a negative exchange interaction at the surface”, *Physica E.*, 71, 84-90, 2015.
63. Magoussi, H., Zaim, A., Kerouad, M., “Monte Carlo simulation of the magnetic properties of a spin-1 Blume–Capel nanowire”, *Solid State Commun.*, 200, 32-41, 2014
64. Boughrara, M., Kerouad, M., Zaim, A., “Phase diagrams and magnetic properties of a cylindrical Ising nanowire: Monte Carlo and effective field treatments”, *J. Magn. Mater.* 368, 169-179, 2014.
65. Kaneyoshi T., “Characteristic phenomena in nanoscaled transverse Ising thin films with diluted surfaces”, *Physica.*, B 407, 4358-4364, 2012.
66. Kaneyoshi T., “Transverse Ising nano-systems, Unconventional surface effects”, *Phys J., Chem Solid.*, 81, 66-73, 2015.
67. Kaneyoshi T., “Introduction to Amorphous Magnets”, *World Scientific, Singapore.*, 1992.
68. Li, X., Jia, Q., Lv, F., Pan, D., Li, Z., “Vector analysis of the magnetic polarity from individual magnetic nanoparticles”, *Mater Lett.*, 170, 205-209, 2016.
69. Rosensweig R.E., “Ferrohydrodynamics”. *Dover, New York.*, 1997.
70. Gupta, A.K., Gupta, M., “Synthesis and surface engineering of iron oxide nanoparticles for biomedical applications”, *Biomaterials.*, 26, 3995-4021, 2005.
71. Dlamini, W.B., Msomi, J.Z., Moyo, T., “XRD, Mössbauer and magnetic properties of $Mg_xCo_{1-x}Fe_2O_4$ nanoferrites”, *J. Magn. Mater.*, 373, 78-82, 2005.
72. Srivastava M., Layek S., Singh J., Das A.K., Verma H.C., Ojha A.K., Kim N.H., Lee J.H., “Synthesis, magnetic and Mössbauer spectroscopic studies of Cr doped lithium ferrite nanoparticles”, *Alloys J. Compd.*, 591, 174-180, 2014.
73. Kaneyoshi T., “Magnetizations of a nanoparticle described by the transverse Ising model”, *J. Magn. Mater.*, 321, 3430-3435, 2009.
74. Magoussi, H., Zaim, A., Kerouad, M., “Monte Carlo simulation of the magnetic properties of a spin-1 Blume–Capel nanowire”, *Solid State Commun J.*, 200, 32-41, 2014.

75. Zaim N., Zaim A., “Kerouad M., Monte Carlo simulation of the magnetic properties of a spin-1 Blume–Capel nanowire”, *Alloys Compd J.*, 663, 516-523, 2016.
76. Jiang, W., Huang, J.Q., “Magnetic properties of a hexagonal prismatic nanoparticle
77. Ertaş, M., Kantar, E., “Cylindrical Ising Nanowire With Crystal Field: Existence Of A Dynamic Compensation Temperatures”, *Phase Transitions.*, 88, 567-581, 2015.
78. Deviren, B., Kantar, E., Keskin, M., “Dynamic phase transitions in a cylindrical Ising nanowire under a time-dependent oscillating magnetic field”, *J. Magn. Magn. Mater.*, 324, 2163-2170, 2012;
79. Ertaş, M., Kocakaplan, Y., “Dynamic behaviors of the hexagonal Ising nanowire”, *Phys. Lett., A* 378, 845-850, 2014.
80. Deviren, B., Ertaş, M., Keskin, M., “Dynamic magnetizations and dynamic phase transitions in a transverse cylindrical Ising nanowire”, *Phys. Scr.*, 85, 055001, 2012.
81. Kantar, E., Ertaş, M., Keskin, M., “Dynamic phase diagrams of a cylindrical Ising nanowire in the presence of a time dependent magnetic field”, *J. Magn. Magn. Mater.*, 361, 61-67, 2014.
82. Deviren, B., Keskin, M., “Thermal behavior of dynamic magnetizations, hysteresis loop areas and correlations of a cylindrical Ising nanotube in an oscillating magnetic field within the effective-field theory and the Glauber type stochastic dynamics approach”, *Physics Letters A.*, 376, 1011-1019 2012.
83. Deviren, B., Şener, Y., “Magnetic properties of mixed spin (1,3/2) Ising nanoparticles with core-shell structure”, *J. Magn. Magn. Mater.*, 386, 11-19, 2015.
84. Vatansever, E., Polat, H., “Monte Carlo investigation of a spherical ferrimagnetic core–shell nanoparticle under a time dependent magnetic field”, *J. Magn. Magn. Mater.*, 343, 221-227, 2013.