

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

KARMA SPİN-1 VE SPİN-2 İSİNG NANOTÜP
SİSTEMİNİN DİNAMİK DAVRANIŞININ İNCELENMESİ

Tezi Hazırlayan
Fuat KÖSESOY

Tez Danışmanı
Prof. Dr. Şeyma AKKAYA DEVİREN

Fizik Anabilim Dalı
Yüksek Lisans Tezi

ARALIK 2023
NEVŞEHİR

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

KARMA SPİN-1 VE SPİN-2 İSİNG NANOTÜP
SİSTEMİNİN DİNAMİK DAVRANIŞININ İNCELENMESİ

Tezi Hazırlayan
Fuat KÖSESOY

Tez Danışmanı
Prof. Dr. Şeyma AKKAYA DEVİREN

Fizik Anabilim Dalı
Yüksek Lisans Tezi

ARALIK 2023

Prof. Dr. Şeyma AKKAYA DEVİREN danışmanlığında Fuat KÖSESOY tarafından hazırlanan "**Karma Spin-1 ve Spin-2 Ising Nanotüp Sisteminin Dinamik Davranışının İncelenmesi**" başlıklı bu çalışma, jürimiz tarafından Nevşehir Hacı Bektaş Veli Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında **Yüksek Lisans Tezi** olarak kabul edilmiştir.

.../.../2023

JÜRİ

Başkan : Prof. Dr. Bayram DEVİREN

Üye : Prof. Dr. Şeyma AKKAYA DEVİREN

Üye : Doç. Dr. Gökhan KOÇAK

ONAY:

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

... /... / 2023

Prof. 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.



Fuat KÖSESOY

TEŞEKKÜR

Tez çalışmamın tamamlanmasında bana şimdiye kadar hep destek olan ve yardımlarını hiçbir zaman esirgemeyen ve engin bilgi ve tecrübesinden yararlandığım değerli hocam ve tez danışmanım Prof. Dr. Şeyma AKKAYA DEVİREN'e en içten teşekkürlerimi ve saygılarımı sunarım.

Tez çalışmam sırasında değerli görüş ve yardımlarına ihtiyaç duyduğum Prof. Dr. Bayram DEVİREN hocama teşekkür ederim.

Ayrıca hayatımın en önemli süreçlerinden biri olan bu tez çalışmasında bana maddi ve manevi her türlü desteği veren eşim Cemile KÖSESOY ve oğlum Kerem KÖSESOY'a sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

KARMA SPİN-1 VE SPİN-2 ISING NANOTÜP SİSTEMİNİN DİNAMİK DAVRANIŞININ İNCELENMESİ

(Yüksek Lisans Tezi)

Fuat KÖSESOY

NEVŞEHİR HACI BEKTAŞ VELİ ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Aralık 2023

ÖZET

Zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında öz-kabuk yapısına sahip karma spin-1 ve spin-2 Ising nanotüp sisteminin dinamik manyetik özellikleri (faz geçiş sıcaklıkları, faz diyagramları, düzen parametreleri), ortalama alan yaklaşımı (OAY) ve Glauber-tipi stokastik dinamik kullanılarak incelendi. Bu nanotüp sisteminin kararlı fazlarını elde etmek için düzen parametrelerinin zamana bağlı davranışları çalışıldı. Dinamik faz geçişlerinin doğasını (birinci veya ikinci dereceden) karakterize etmek ve dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıklarını elde etmek için dinamik düzen parametreleri sıcaklığın bir fonksiyonu olarak incelendi. Sistemin dinamik faz diyagramları manyetik alan genliği ve sıcaklık düzlemlerinde sunuldu. Karma spin-1 ve spin-2 Ising nanotüp sisteminin dinamik manyetik özelliklerinin etkileşme parametrelerine kuvvetli bir şekilde bağlı olduğu gözlemlendi. Dinamik faz diyagramları, paramanyetik (p), ferrimanyetik (i) temel fazların yanısıra temel fazların birlikte olduğu $i+p$ karma faz bölgesi gözlemlendi. Dinamik faz diyagramlarında birinci- ve ikinci-derece faz geçiş sıcaklıklarının yanında, dinamik üçlü kritik nokta gibi özel dinamik kritik noktaların sergilendiği görüldü.

Anahtar Kelimeler: Nanotüp; Ising model; Karma spin sistemi; Ortalama alan yaklaşımı; Glauber-tipi stokastik dinamik.

Tez Danışman: Prof. Dr. Şeyma AKKAYA DEVİREN

Sayfa Adeti: 45

INVESTIGATION OF THE DYNAMIC BEHAVIORS OF MIXED SPIN-1 AND SPIN-2 ISING NANOTUBE SYSTEM

(M. Sc. Thesis)

Fuat KÖSESOY

NEVŞEHİR HACI BEKTAŞ VELİ UNIVERSITY

GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES

December 2023

ABSTRACT

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

Keywords: Nanotube; Ising model; Mixed spin system; Mean-field approach; Glauber-type stochastic dynamic.

Thesis Supervisor: Prof. Dr. Şeyma AKKAYA DEVİREN

Pages: 45

İÇİNDEKİLER

KABUL VE ONAY SAYFASI	i
TEZ BİLDİRİM SAYFASI	ii
TEŞEKKÜR.....	iii
ÖZET	iv
ABSTRACT.....	v
İÇİNDEKİLER	vi
BÖLÜM 1	1
GİRİŞ	1
BÖLÜM 2	7
METOT VE MODELİN TANITIMI.....	7
2.1. Model.....	7
2.2. Glauber Dinamiği ve Ortalama-Alan Dinamik Denklemlerinin Elde Edilmesi.....	9
BÖLÜM 3	18
KARMA SPİN-1 VE SPİN-2 İSİNG NANOTÜP SİSTEMİNİN NÜMERİK ÇÖZÜMÜ	18
3.1. Ortalama Alt Örgü Mıknatıslanmalarının Zamanla Değişimi.....	18
3.2. Dinamik Düzen Parametreleri ve Dinamik Faz Geçiş Noktaları	22
3.3. Dinamik mıknatıslanmaların termal davranışı	23
3.4. $(T/J_C, h/J_C)$ Düzleminde Dinamik Faz Diyagramları	26
BÖLÜM 4	35
SONUÇ VE TARTIŞMA	35
KAYNAKLAR	38
ÖZGEÇMİŞ	45

ŞEKİLLER LİSTESİ

- Şekil 2.1. (a) Karma spin (1, 2) Ising nanotüp sistemini tarif eden silindirik hegzagonal ara kesitinin şematik gösterimi, (b) Karma spin (1, 2) Ising nanotüp sistemini tarif eden silindirik hegzagonal yapının üç boyutlu şematik gösterimi. Hegzagonal örgünün örgü noktalarındaki sarı küreler özdeki spin-1 ve mavi küreler ise kabuktaki spin-2 manyetik atomları temsil etmektedir. 7
- Şekil 3.1. Karma spin-1 ve spin-2 Ising nanotüp sistemi için ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının $m_C(\zeta)$ ve $m_S\zeta$ zamanla değişimi. Sistemde paramanyetik (p) faz mevcuttur. ($d=-3.0$, $h=9.50$, $T=6.0$) 19
- Şekil 3.2. Karma spin-1 ve spin-2 Ising nanotüp sistemi için ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının $m_C(\zeta)$ ve $m_S\zeta$ zamanla değişimi. Sistemde paramanyetik (p) fazı mevcuttur. ($d=-4.6$, $h=8.0$, $T=2.8$) 20
- Şekil 3.3. Karma spin-1 ve spin-2 nanotüp sistemi için ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının $m_C(\zeta)$ ve $m_S\zeta$ zamanla değişimi. Sistemde ferrimanyetik (i) faz mevcuttur ($d=2.0$, $h=4.0$, $T= 8.0$) 20
- Şekil 3.4. Karma spin-1 ve spin-2 nanotüp sistemi için ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının $m_C(\xi)$ ve $m_S(\xi)$ zamanla değişimi. Sistemde ferrimanyetik (i) faz mevcuttur. ($d=-5.0$, $h=6.0$, $T= 1.5$) 21
- Şekil 3.5. Karma spin-1 ve spin-2 nanotüp sistemi için ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının $m_C(\xi)$ ve $m_S(\xi)$ zamanla değişimi. Sistemde ferrimanyetik (i) ve paramanyetik (p) fazlar başlangıç değerine bağlı olarak bir arada bulunmaktadır. ($d=1.0$, $h=7.0$, $T= 1.0$). 22
- Şekil 3.6. $\Delta_s = 1.0$, $r = 1.0$, $d = 1.0$ ve $h = 2.0$ değerleri için dinamik alt örgü mıknatıslanmanın yani (M_a) 'nın sıcaklığa bağlı davranışı $T_c/J_c = 10.810$ ferrimanyetik (i) fazından paramanyetik (p) faza ikinci-derece faz geçiş sıcaklığını göstermektedir. 24

Şekil 3.7. $\Delta s = 1.0$, $r = 1.0$, $d = 2.0$ ve $h = 8.0$ değerleri için dinamik alt örgü mknatıslanmanın yani (M_a)'nın sıcaklığa bağlı davranışı $T_c/J_c = 1.810$ ferrimanyetik (i) fazından paramanyetik (p) faza birinci-derece faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.	25
Şekil 3.8. $\Delta s = 1.0$, $r = 1.0$, $d = -4.0$ ve $h = 2.0$ değerleri için M_a 'nın sıcaklığa bağlı davranışı $T_c/J_c = 4.310$ ferrimanyetik (i) fazından paramanyetik (p) faza ikinci-derece faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.	26
Şekil 3.9. Karma spin-1 ve spin-2 Ising nanotüp sisteminde $d=1.0$ değeri için (T/J_c , h/J_c) düzleminde dinamik faz diyagramı.	28
Şekil 3.10. Karma spin-1 ve spin-2 Ising nanotüp sisteminde $d=-3.0$ değeri için (T/J_c , h/J_c) düzleminde dinamik faz diyagramı.	29
Şekil 3.11. Karma spin-1 ve spin-2 Ising nanotüp sisteminde $d=-4.6$ değeri için (T/J_c , h/J_c) düzleminde dinamik faz diyagramı	30
Şekil 3.12. Karma spin-1 ve spin-2 Ising nanotüp sisteminde $d=-5.0$ değeri için (T/J_c , h/J_c) düzleminde dinamik faz diyagramı.	31
Şekil 3.13. Karma spin-1 ve spin-2 Ising nanotüp sisteminde $d=-6.0$ değeri için (T/J_c , h/J_c) düzleminde dinamik faz diyagramı.	32
Şekil 3.14. Karma spin-1 ve spin-2 Ising nanotüp sisteminde $d=-8.0$ değeri için (T/J_c , h/J_c) düzleminde dinamik faz diyagramı	33
Şekil 3.15. Karma spin-1 ve spin-2 Ising nontüp sisteminde $d=-10.0$ değeri için (T/J_c , h/J_c) düzleminde dinamik faz diyagramı	34

BÖLÜM 1

GİRİŞ

Bilimin tarihsel gelişim sürecine baktığımızda farklı uzunluk ölçüleri karşımıza çıkmaktadır. Çünkü bu süreçte bilim sürekli gelişmiş ve yenilenmiştir. Klasik fizikte uzunluk ölçü birimi metre olarak ifade edilirken, atomik yapıdaki parçacıkların ve sistemlerin incelenmesi sürecinde bu parçacıkların ve bu sistemlerin boyutlarının belirtilmesinde yeni tanımlamalara ihtiyaç duyulmuştur. Bu durum parçacıkların tanımlanmasında metre milyarlarca defa küçültülmüş ve bu küçültülen her bir parçaya nano denilmiş ve atomik yapıdaki parçaların ve sistemlerin boyutlarının tarifinde kullanılmıştır.

Nanometre, metrenin milyarda biri olarak tanımlanmakta olup sembolü (nm) dir ve bilimsel olarak 1 nanometre 1×10^{-9} metre (m) şeklinde gösterilir. Nanometre gözle görülemeyecek kadar küçük parçacıkları ölçmek için kullanılmaktadır.[1]

Günümüzde farklı bilim alanlarında birçok bilim insanının nano ölçekteki malzemelerle ilgilenmesinin nedeni, malzemelerin nano ölçekteki özellikleri ile makro ölçekteki özelliklerinin tamamen birbirinden farklı özellikler sergilemesi ve bunların birçok farklı alanda gözlenmesidir. Makro boyuttan nano boyuta doğru gidildikçe maddelerin birçok farklı, ilginç ve yararlı özelliği ortaya çıkmaktadır [2]. Yapılan araştırmalar ve incelemeler sonucunda maddelerin makro ölçekteki özellikleri aynı kalırken, maddeler gittikçe küçültüldüğünde bir takım küçük değişiklikler gözlenmekte olup, madde nano boyutlara indirildiğinde daha büyük değişimler gözlemlenebilmektedir. Maddelerin boyutlarındaki değişebilen özelliklerinden bazıları manyetik, mekanik, elektronik, optik, termodinamik özellikler olarak gösterilebilir [3].

Maddelerin nano düzeye indirgenerek incelenmesi artık kuantum mekaniğinin kontrolüne girmekte ve kuantum mekaniği tarafından incelenmektedir [2]. 21. yüzyılda Atomik kuvvet mikroskobu (AFM), Taramalı elektron mikroskobu (SEM), Taramalı tünelleme mikroskobu (STM) ve Manyetik kuvvet mikroskobu (MFM) gibi çok fonksiyonlu

mikroskoplar sayesinde malzemelerin atomik boyutlar hakkında detaylı bilgiler elde edildi [5]. Atomik boyutlarda elde edilen bu bilgiler nano ölçeğe yaklaştıkça fiziksel (tutum, mukavemet, hava geçirgenliği) kimyasal (nano boyutlarda malzemeye bir başka atom bağlayarak yalıtkan malzemeyi iletken hale getirmek) ve biyolojik (kemoterapi uygulamaları) sistemlerde yeni özelliklerin ortaya çıktığını gösterdi [6,7]. Böylece bilim insanları nano-ölçekli sistemler üzerine çok sayıda deneysel ve teorik çalışmalara odaklanarak hızlı bir şekilde “Nanobilim” olarak adlandırılan bilimsel ve teknolojik devrim kapasitesi olan yeni bir araştırma alanının ortaya çıkması sağlandı [8].

Nanoteknolojinin gelişmesiyle popülerleşen ve nano-malzemeler adı verilen malzemeler; sensörler [9], mıknatıslar [10], manyetik kayıt [11], biyoteknoloji [12], tıbbi uygulamalar [13, 14], gibi birçok teknolojik alanlarda uygulama kapasitesi olup bu alanlarda popüler ve yenilikçi yaklaşımlar sunmaktadırlar. Birkaç nanometre civarında büyüklüğe sahip farklı uzunluklarda iletken ya da yarıiletken tellere nanotel denir. Kuantum telleri olarak da adlandırılan bu tellerin bilinen farklı çeşitleri mevcuttur: metalik (Ni, Pt, Au, Fe), yarı iletken (Si, Ge, InP, GaN), ve yalıtkan (SiO₂ TiO₂). Bu listeye yine tek boyutlu olan karbon nanotüpler de dahil edilebilir [15-18]. Akademik araştırmaların odağı haline gelen karbon nanotüplerin elektrik ve ısı iletkenliği, sağlamlık ve dayanıklılık gibi özellikleri sayesinde optoelektronikte, çok küçük boyutlarda nano ölçekli elektronik cihazların üretilmesinde, biyo-moleküler nano algılayıcılar için uç olarak kullanılmaktadır [19-21].

Nano sistemlerin manyetik özelliklerinin derinlemesine incelenirken, karma spin Ising sistemleri oldukça elverişli bir modeldir. Karma spin sistemlerinde manyetik faz geçişleri kritik üsteller, reentrant olaylar gibi nicelik kullanılan renormalizasyon grup (RG) tekniği [22], yüksek sıcaklık seri açılımı [23], serbest-yarım tamsayı yaklaşımı [24], Bethe-Peierls (BP) yöntemi [25,26], etkin alan teorisi (EAT) [27-30], ortalama alan yaklaşımı (OAY) [31, 32], Monte Carlo (MC) yöntemi [33,34], kümesel değişim yaklaşımı [35,36], transfer matris (TM) yöntemi [37] ile incelendiği görülmektedir.

Nano yapıli sistemlerin manyetik özellikleri incelenirken karma spin Ising modeli sıklıkla kullanılmıştır. Leite ve Figueiredo [38] MC yönteminden faydalanarak nano parçacıkları araştırmışlardır. Zaim ve arkadaşları [39,40] MC metodundan yararlanarak öz ve kabuktan oluşan nano parçacıklar için kritik, telafi sıcaklıklarını tespit etmişlerdir. Lui ve

ark. [41] silindirik amorf Co nanotelinin manyetik özelliklerini MC yönteminden yararlanarak araştırdılar. Konstantinova [42] MC yöntemini kullanarak farklı yarıçaplara sahip nanotüplerin alınganlık, manyetizasyon ve özısı grafiklerini oluşturdu. Iglesias ve Labarta [43] MC yönteminden yararlanarak nanoparçacıklarda sonlu boyut ve yüzey etkilerini araştırdı. Jiang ve ark. [44] Metalik nanotüplerin manyetik ve termodinamik özelliklerini araştırdılar. Kaneyoshi [45] nano ölçekli transverse Ising ince filmlerinin karakteristik özelliklerini seyreltilmiş yüzeyler varlığında araştırdı. Hanafin ve arkadaşları [46] MC metodunu kullanarak CoO nano yapısının manyetik ve termodinamik özelliklerini araştırdılar. Kaneyoshi Ising nanotüp ve nanotelin manyetik davranışlarını EAT metodundan faydalanarak öz-kabuk kavramlarını ele alarak incelemişlerdir. [47]. Jiang ve arkadaşları. [48] tek-iyon anizotropi ve transverse alan varlığında ferrimanyetik hegzagonal nanotelin manyetik özellikleri üzerinde yüzey etkilerini incelediler. Yüksel ve arkadaşları. [49] MCS yöntemini kullanarak spin-1 kabuk ve spin-3/2 çekirdek ferrimanyetik nano parçacık sistemini araştırmışlar ve faz diyagramlarını elde etmişlerdir. Zhang ve arkadaşları ise EAT ve MC metotlarından faydalanarak bal peteği örgüsü ile ilgili çalışmalarda bulunmuş ve bu örgü üzerinde karma spin (1, 2) yapısının manyetik durumlarını çok detaylı bir şekilde incelemişlerdir [50]. Wei ve arkadaşları MC ve OAY metotlarından yararlanarak farklı anizotropik karma spin (1,2) Isin sisteminde manyetik durumları inceleyerek rapor etmişlerdir [51]. Iwashita ve arkadaşları [52], dört-spin model yaklaşımını kullanarak karma spin-1 ve spin-2 Ising sisteminin mıknatıslanmasının sıcaklığa bağlılığını incelemişlerdir. Şarlı ve Keskin, karma spin-1/2 çekirdek ve spin-1 kabuk Ising nanotüp sisteminin manyetik özelliklerini kolerasyonlu EAT yönteminden yararlanarak detaylı incelemişlerdir [53]. Canko ve arkadaşları [54] EAT yönteminden faydalanarak karma spin-1/2 öz ve spin-1 kabuk Ising nanotüp için manyetik özelliklerin kristal alana bağımlılığını araştırmışlardır. Feraoun ve arkadaşları [55] Monte Carlo Simülasyonu metodundan yararlanarak kabuk/öz morfolojisine sahip karma spin (1, 3/2) ferrimanyetik nanotel sistemini ayrıntılı bir şekilde araştırmışlardır. Nanotel üzerine yapılan araştırmalar bununla sınırlı kalmamıştır. Kolerasyonlu EAT metodundan yararlanarak karma spin hegzagonal tip Ising nanotel sisteminde kabuğu spin-1 ve çekirdeği spin-1/2 olan sistemi araştırmışlar ve bu araştırmalar sonucunda bu sistemin manyetik davranışlarını Kocakaplan ve Kantar tespit etmişlerdir [56].

Ising modeli kullanılarak nano yapılı sistemlerin denge özelliklerinin anlaşılması için yeterli sayıda çalışma yapılmasına rağmen, dinamik özellikleri için yeterli sayıda çalışma yapılmamıştır ve özellikle son yıllarda nano yapılı sistemlerin dinamik özellikleri üzerinde çalışılmaya başlanmıştır. Deviren ve arkadaşları nanotel üzerine araştırmalar yapmış ve korelasyonlu etkin alan teorisinden faydalanarak spin-1/2 silindirik Ising nanotelin manyetiklik durumu hakkında önemli sonuçlara ulaşmışlardır. Bu sonuçlara göre spin-1/2 silindirik Ising nanotel sisteminde üçlü kritik nokta olduğu rapor edilmiştir. Deviren ve arkadaşları araştırmalarını yaptıkları bu sistemde dinamik faz geçişlerin özelliklerini de ortaya koymuş ve toplam, transverse (enine) manyetizmaların bağımlılık durumları hakkında detaylı bilgilere ulaşmışlardır [57]. Kantar ve Ertaş [58], salınımlı manyetik alan içinde OAY metodunu kullanarak spin-1/2 silindirik Ising nanotel sisteminin dinamik manyetik davranışlarını inceleyerek bu sistemde R-, N-, S-, P- ve Q- tipinde beş farklı telafi sıcaklığı olduğunu belirtmiş ve bunun yanında reentrant davranış olduğunu bulmuşlardır. Ayrıca yapılan bu çalışmada dinamik faz geçişlerinin (DFG) tabiatını araştırmışlar ve elde edilen faz diyagramlarını, manyetik alan genliğini ile sıcaklık ekseninde elde etmişlerdir. Yine Ertaş ve Kantar [59], ortalama alan yaklaşıklığı ile silindirik Ising nanotel yapıda, spin-1 Blume-Capel modelinin dinamik manyetik davranışları üzerine incelemeler yapmışlar ve bu incelemeler sonucunda kristal alan (D), sıcaklığın (T) bilineer etkileşim parametresi (J) etkilerini tespit etmişlerdir. Bu tespitler sonucunda sistemde üçlü kritik nokta bulunduğunu ve bu sistemin fiziksel niceliklerine bağlı olarak Q-, P-, S-, W- ve P-tipi beş farklı telafi sıcaklıklarını olduğunu görmüşlerdir. Vatansever ve Polat [60] yine Metropolis algoritması temelli Monte Carlo simülasyonu yönteminden yararlanarak, kübik öz-kabuk ferrimanyetik nanoparçacık sisteminin dinamik manyetik özelliklerinin değiştiğini bulmuşlar ve bu çalışmada kabuk kalınlığına, manyetik alanın periyoduna ve manyetik alanın genliği gibi parametreler araştırılmış, bu parametrelerde birtakım değişiklikler meydana geldiğini fark etmişlerdir. Yine Vatansever ve Polat [61], Kabuk spin-1 ve öz spin-3/2 katmanından meydana gelen bir küresel kabuk-öz nanoparçacığı sisteminde dinamik faz geçiş davranışı Metropolis algoritması temelli Monte Carlo simülasyonu yöntemini kullanarak araştırmışlar ve bu araştırmalar sonucunda, bu sistemde Q-, P- ve N- tipinde üç farklı mıknatıslanma diyagramlarını tespit etmişlerdir. Ertaş ve Kocakaplan [62] Glauber-tipi stokastik dinamik ve etkin alan teorisinden yararlanarak hegzagonal Ising nanotelde dinamik faz geçiş noktalarını, bunların faz diyagramlarını ve faz geçişlerin doğasını tespit etmişler ve

bu tespitler sonucunda temel ve karma faz bölgeleri, dinamik faz diyagramları, reentrant davranış gösterdiğini ve sistemde üçlü kritik noktanın varlığını rapor etmişlerdir. Bir başka çalışmada ise Yüksel ve arkadaşları [63] Monte Carlo Simülasyonu yönteminden yararlanarak kabuk-öz yapısını bulduran nanoparçacık sisteminin dinamik faz geçiş davranışlarını araştırmışlar ve bu araştırmalar sonucunda bu sistemde Q-, N-ve P- tipinde üç farklı mıknatıslanma diyagramları bulmuşlardır. Üçlü histeresis döngü davranışını anti ferromanyetik arayüz etkileşimi varlığında gözlemlemişlerdir.

Nano yapıli sistemlerin dinamik davranışları için yapılan çalışmaları özetlersek: Spin-1/2 silindirik Ising nanotel sisteminin dinamik manyetik özelliklerini EAT yöntemi kullanılarak incelenmiş ve üçlü kritik noktanın varlığı bulunarak, kinetik faz geçiş sıcaklıklarının karakterizasyonu dinamik geçişlerin doğasını anlamak için dinamik mıknatıslanmaların sıcaklıkla bağımlılıkları incelenmiştir [57]. Spin-1/2 silindirik Ising nanotel sisteminin dinamik manyetik özellikleri, ortalama alan yaklaşımı (OAY) ile çalışılmış telafi sıcaklıkları ve reentrant davranış sergilendiği rapor edilmiştir [58]. Spin-1 Ising nanotel sisteminin dinamik manyetik özellikleri ortalama alan yaklaşımı (OAY) ile çalışılmış ve sistem parametrelerine bağıli olarak üçlü kritik nokta ve telafi sıcaklıkları gösterilmiştir. MC yönteminden yararlanılarak kübik öz-kabuk ferrimanyetik nanoparçacık sisteminin dinamik manyetik özelliklerinin değıştiğini bulmuşlar [59]. Spin-1 ve spin-3/2 nanoparçacığı sisteminde dinamik faz geçiş davranışı Monte Carlo yönteminden yararlanılarak incelenmiş ve bu incelemeler sonucunda, sistemde mıknatıslanmalar olduğu bulunarak bu mıknatıslanmaların diyagramlarını oluşturmuşlardır [61]. Hegzagonal Ising nanotel sistemi üzerine Glauber-tipi stokhastik dinamik ve EAT kullanılarak, temel ve karma faz bölgeleri, üçlü kritik nokta ve reentrant davranışları ile dinamik faz diyagramları hesaplanmıştır [62]. MC metodundan faydalanarak kabuk-öz yapısını bulduran nanoparçacık sisteminin dinamik faz geçiş davranışlarını araştırmışlar, üçlü histeresis döngü davranışını anti ferromanyetik arayüz etkileşimi varlığında rapor etmişlerdir [63].

Dengesiz sistemlerdeki önemli olgulardan biri olan dinamik faz geçiş sıcaklıklarıdır. İlk defa Glauber-tipi stokhastik dinamiğinden faydalanılarak elde edilen dinamik faz geçişlerine sebep olan temel prensip henüz tam olarak anlaşılammıştır [64]. Bu yüzden

bu konu üzerine halen yoğun olarak çalışılmakta ve yapılan çalışmalar önemli bir değer arz etmektedir.

Bu tez çalışmasında ise karma spin-1 ve spin2 Ising nanotüp sisteminin dinamik manyetik özellikleri ortalama alan yaklaşıklığı ve Glauber-tipi stokastik dinamik kullanılarak çalışılacaktır. Sistemin ortalama düzen parametrelerinin zamana bağlı hareketleri araştırılarak dinamik faz geçiş noktaları hesaplanacak, dinamik faz diyagramları (T/J_C , h/J_C) düzlemlerinde resmedilecek. Aynı zamanda Böylece tezin amacı olan karma spin-1 ve spin-2 Ising nanotüp sisteminin dinamik manyetik özelliklerinin derinlemesine incelenmesi olacaktır.

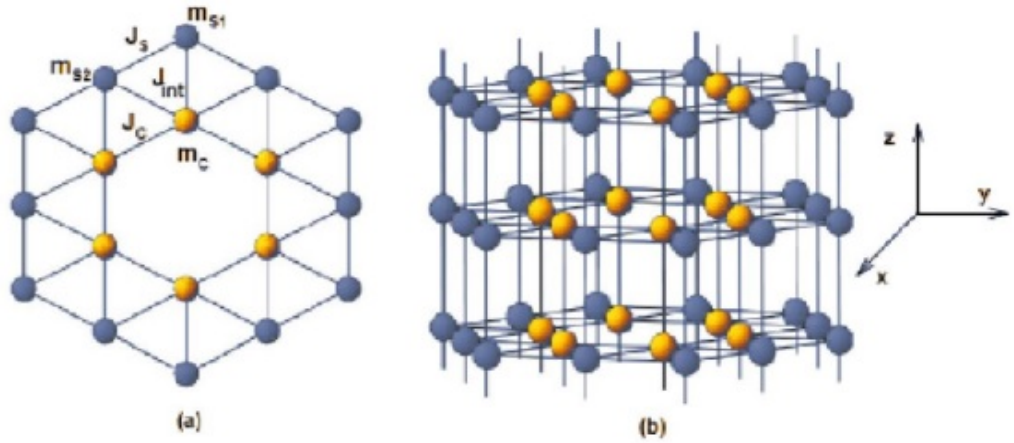


BÖLÜM 2

METOT VE MODELİN TANITIMI

2.1. Model

Ferrimanyetik karma spin (1, 2) Ising nanotüp sisteminin dinamik özelliklerini incelemek için tercih edilen en kullanışlı örgü modeli hegzagonal örgü modelidir. Bu model incelenirken Glauber-tipi stokastik temelli ortalama alan yaklaşımından (OAY) faydalanılmıştır. Aşağıda Şekil 2.1’de gösterilen hegzagonal şematik yapıda mavi ve sarı küreler hegzagonal örgünün örgü noktalarına yerleşmişlerdir. Burada sarı renkli olan küreler özdeki spin-1’i gösterirken mavi renkli olan küreler ise kabuktaki spin-2 manyetik atomlarını temsil etmektedir. Bu sebeple hazırlanan bu tez çalışmasında nanotüp sistemini tarif eden hegzagonal örgü yapısı karma spin (1, 2) Ising nanotüp sistemi olarak tanımlanmıştır. Bu Şekil 2.1 (a)’da karma spin (1, 2) Ising nanotüp sisteminin ara kesiti, (b)’de karma spin (1, 2) Ising nanotüp sistemi şematik üç boyutlu olarak gösterilmiştir



Şekil 2.1. (a) Karma spin (1, 2) Ising nanotüp sistemini tarif eden silindirik hegzagonal ara kesitin şematik gösterimi, (b) Karma spin (1, 2) Ising nanotüp sistemini tarif eden silindirik hegzagonal yapının üç boyutlu şematik gösterimi. Hegzagonal örgünün örgü noktalarındaki sarı küreler özdeki spin-1 ve mavi küreler ise kabuktaki spin-2 manyetik atomları temsil etmektedir.

Yukarıda şematik olarak gösterilen ve üzerinde çalışılan bu model A, B ve C gibi birbirini tekrarlayan üç alt tabakadan oluşmuştur. A alt tabakası spin-1 manyetik atomlarına

sahiptir ve bu tabaka $\pm 1, 0$ deęerini alır ve sarı renkli küreler ile gösterilir. Bu modelde A tabakasının dışında kalan B ve C alt tabakaları ise mavi renkli küreler ile gösterilmiş olup $\pm 2, \pm 1$ ve 0 deęerlerini alır. B ve C alt tabakalarındaki kabukta bulunan S spinleri spin-2 manyetik atomlarına sahiptir. Modelde kabuklar özü çevreleyen S spinleri tarafından doldurulurken, kristal örgünün özü σ spinleri tarafından doldurulmuştur. Zamana baęlı dıő manyetik alan, tek iyon anizotropisi veya kristal alan, en yakın komőu etkileşmeleri, ifadelerini barındıran silindirik karma spin (1, 2) Ising nanotüp sisteminin Hamiltonyen ifadesi denklem (2.1)' deki gibidi

$$H = -J_c \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - J_s \sum_{\langle mn \rangle} S_m S_n - J_{int} \sum_{\langle kl \rangle} \sigma_k S_l - D \sum_{\langle m \rangle} (\sigma_i^2 + S_m^2) + h(t) \left(\sum_i \sigma_i + \sum_m S_m \right) \quad (2.1)$$

Bu ifade de J_c , öz manyetik atomları arasındaki bilineer etkileşim parametresini belirtmektedir. Yine Hamiltonyen ifadesinde J_s kabuk manyetik atomları arasındaki bilineer etkileşim parametresini ve J_{int} kabuk öz arasındaki bilineer etkileşim parametresini belirtmektedir. Hamiltonyen ifadesinde D parametresi ise tek iyon anizotropisi veya kristal alan terimini ifade etmekte olup yine denklem 2.1 Hamiltonyen ifadesinde $h(t)$ ise zamana baęlı salınımlı dıő manyetik alanı ifade etmektedir. Burada $\langle ij \rangle$ toplamı öz, $\langle mn \rangle$ toplamı kabuk ve $\langle kl \rangle$ toplamı kabuk öz arasındaki komőu spinlerin çiftleri üzerinden olacaęını belirtmektedir. Zamana baęlı dıő manyetik alan ifadesi denklem (2.2) gösterilmiştir.

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

Denklem (2.2)'de h_0 salınımlı alanın genlięini ve $\omega = 2\pi\nu$ salınımlı alanının frekansını ifade etmektedir. Üzerinde çalışılan bu sistem T_A mutlak sıcaklığında izotermal ısı banyosu ile temas durumundadır. Nano boyutundaki sistemlerin fiziksel karakterleri üzerinde kabuk yüzeyinde bulunan atomlarının tesiri yüksek olduęu için genel olarak nano boyutundaki sistemlerde kabuk yüzeyinde bulunan manyetik özellik taşıyan atomlar arasındaki bilineer etkileşim ifadesi denklem (2.3)'de gösterilmiştir.

$$J_s = J_c(1 - \Delta_s) \quad (2.3)$$

Kabuk ile öz arasındaki bilineer etkileşim katsayısı ise,

$$r = \frac{J_{lt}}{J_c} \quad (2.4)$$

denklem (2.4) ile verilir. Bu tez çalışmasında da $r = 1.0$ değeri yine aynı şekilde $J_c = 1.0$ değerleri verilerek çalışılmıştır. Burada r değerinin pozitif olması kabuk ve öz arasındaki spinlerin yönelimlerinin birbirine paralel olduğunu ve ferrimanyetik spin konfigürasyonu sergilediklerini gösterir.

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

Glauber dinamiği ve Master denklemlerinden yararlanarak zamana bağlı salınımlı dış manyetik varlığında karma spin (1, 2) Ising nanotüp sistemi ve bu sistemin dinamik özelliklerini ifade eden ortalama alan dinamik denklemleri bu alt bölümde elde edilmektedir. Glauber-tipi stokastik dinamiğe göre karma spin (1, 2) Ising nanotüp sistemi birim zamanda farklılık göstermekte olup bu farklılık $1/\tau$ oranındadır. Ortalama alan dinamik denklemlerinin elde edilmesi, spin-1/2 sistemi [65] ve farklı spin sistemleri [66, 67] için detaylı bir çalışma yapılarak anlatılmıştır. Bu tez çalışmasında karma spin (1, 2) nanotüp sisteminin denklemlerinin genel denklemleri elde edilecektir.

Karma spin (1, 2) Ising nanotüp sisteminin herhangi bir t zamanında A, B ve C alt örgülerin bazı konfigürasyonlara sahiptir ve bu konfigürasyonlar için ifade edilmiş olup bu durumda ihtimaliyet fonksiyonları elde edilecektir. Fakat bu ihtimaliyet fonksiyonları oluşturulurken üç alt örgüden ikisinde spinlerin sabit kaldığı durumlarda diğer alt örgüdeki spinlerin konfigürasyonları için ihtimaliyet fonksiyonu elde edilecektir. İlk olarak C alt örgüsü için ihtimaliyet fonksiyonu oluşturulurken herhangi bir t zamanında A ve B alt örgülerindeki spinlerin sabit kaldığı durumda C alt örgülerindeki spinler S_1, S_2, \dots, S_N konfigürasyonuna sahiptirler ve ihtimaliyet fonksiyonu ise $P^C(S_1, S_2, \dots, S_N; t)$ ile tanımlanabilir. Bu durum diğer iki alt örgüler içinde geçerlidir. Yani B alt örgüleri için de herhangi bir t zamanında A ve C alt örgüleri üzerinde spinlerin sabit kaldığı durumda ise B alt örgüsündeki spinler S_1, S_2, \dots, S_N konfigürasyonuna sahiptirler ve ihtimaliyet fonksiyonu $P^B(S_1, S_2, \dots, S_N; t)$ ile ifade edilir. Son olarak A alt örgüsü için de geçerlidir. Herhangi bir t zamanında bu B ve C alt örgülerdeki spinlerin sabit kaldığı durumda ise buradaki konfigürasyon $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N$ şeklinde olur ve ihtimaliyet fonksiyonu $P^A(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N; t)$ olarak verilebilir. Burada ihtimaliyet

fonksiyonu oluşturulurken örgülerdeki spinlerin sabit kalma şartı aranırken bu şart sağlanıyorsa konfigürasyonla ifade edilip ihtimaliyet fonksiyonu buna bağlı olarak türetilmektedir.

Şimdi A, B, C alt örgülerdeki spinlerin birim zamanda geçiş olasılıklarından yararlanılarak master denklemleri elde edilecektir. A ve C alt örgülerindeki spinler sabit olduğu zaman $W_j^B(S_j \rightarrow S'_j)$ j. spinin S_j durumundan S'_j durumuna birim zamanda geçiş ihtimalini belirtmektedir. Bu ifadenin benzeri diğer alt örgüler içinde türetilbilir. Bu durumda A ve B alt örgülerde spinler sabit olduğu zaman $W_j^C(S_j \rightarrow S'_j)$ j. spinin S_j durumundan S'_j durumuna birim zamanda geçiş ihtimalini belirtmektedir. Son olarak B ve C alt örgülerindeki spinlerin sabit olduğu zaman $W_i^A(\sigma_i - \sigma'_i)$ i. spinin σ_i durumundan σ'_i durumuna birim zamanda geçiş ihtimalini ifade etmektedir. Böylelikle A alt örgüsü için master denklemi aşağıdaki gibi türetilbilir.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} = P^A(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N; t) = & - \left(\sum_i W_i^A(\sigma_i - \sigma'_i) \right) P^A(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N; t) \\ & + \sum_i W_i^A(\sigma_i - \sigma'_i) P^A(\sigma_1, \sigma_2, \dots, -\sigma_i, \dots, \sigma_N; t), \end{aligned} \quad (2.5)$$

biçiminde ifade edilir. Burada $W_i^A(\sigma_i - \sigma'_i)$ parametresi i'inci σ spinin σ_i durumundan σ'_i durumuna birim zamanda geçme ihtimali olarak belirlenir. Denge durumunda ise

$$\frac{d}{dt} P^A(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N; t) = 0 \quad (2.6)$$

biçiminde elde edilir ve burada olasılık yoğunluğunu türetmek için master denklemden yararlanılarak aşağıdaki verilen

$$\frac{W_i^A(-\sigma_i)}{W_i^A(\sigma_i)} = \frac{P^A(\sigma_1, \sigma_2, \dots, -\sigma_i, \dots, \sigma_N)}{P^A(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N)} \quad (2.7)$$

denklemini elde etmiş oluruz. Alt örgülerdeki spinlerin zamanla değişim ihtimaliyetleri denklem (2.1) deki Hamiltonyen ifadesindeki terimlerin olasılıkları üzerinden hesaplanması ile

$$P^A(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3 \dots, \sigma_N) \propto \exp(-\beta\mathcal{H}), \quad (2.8)$$

şeklinde yazılabilir. Denklem (2.8) ile verilen bu ifade genel kanonik dağılım ifadesinden faydalanılarak birim zamandaki geçiş ihtimaliyet yoğunluğu ise,

$$W_i^A(\sigma_i - \sigma'_i) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta\Delta E^A(\sigma_i - \sigma'_i))}{\sum_{\sigma_i} \exp(-\beta\Delta E^A(\sigma_i - \sigma'_i))} \quad (2.9)$$

biçiminde yazılır. Denklem (2.9) da $\beta = 1/k_B T$, k_B Boltzmann faktörüdür $\Delta E^A(\sigma_i - \sigma'_i)$ ise spinler arası geçişte sistemin enerjisindeki değişmeyi ifade etmektedir ve Hamiltonyen ifadesinden yararlanılarak türetilebilir. σ_i 'nin zaman içindeki beklenen değerindeki değişme ile daha önce belirlenen $W_i^A(\sigma_i - \sigma'_i)$ ve $\Delta E^A(\sigma_i - \sigma'_i)$ ifadelerinin kullanılmasıyla σ spinleri için ortalama alan dinamik denklemleri bulunur. Ayrıca denklem (2.9) da belirtilen \sum_{σ_i} ise toplamın $\sigma_i = \pm 1.0$ değeri üzerinden değerlendirilerek daha önce oluşturulan Hamiltonyen bağıntısından faydalanılarak aşağıdaki denklem (2.10) türetilebilir.

$$\Delta E^A(\sigma_i - \sigma'_i) = (\sigma'_i - \sigma_i) \left(J_C \sum_j \sigma_j + J_{int} \sum_l S_l + h(t) \right) - ((\sigma_i)^2 - (\sigma'_i)^2) D \quad (2.10)$$

Her mümkün $\sigma_i - \sigma'_i$ geçişi için bulunan bu enerji değişim ifadelerini tespit etmek için (2.9) denkleminde yerine yazılırsa olasılık yoğunlukları aşağıdaki gibi elde edilir. Bu

$$W_i^A(1 \rightarrow 0) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta D)}{2 \cos h(\beta u) + \exp(-\beta D)} \quad (2.11a)$$

$$W_i^A(-1 \rightarrow 0) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta D)}{2 \cos h(\beta u) + \exp(-\beta D)} \quad (2.11b)$$

$$W_i^A(-1 \rightarrow 1) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(\beta u)}{2 \cos h(\beta u) + \exp(-\beta D)} \quad (2.11c)$$

$$W_i^A(0 \rightarrow 1) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(\beta u)}{2 \cos h(\beta u) + \exp(-\beta D)} \quad (2.11d)$$

$$W_i^A(1 \rightarrow -1) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(\beta u)}{2 \cos h(\beta u) + \exp(-\beta D)} \quad (2.11e)$$

$$W_i^A(0 \rightarrow -1) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta u)}{2 \cos h(\beta u) + \exp(-\beta D)} \quad (2.11f)$$

$$W_i^A(0 \rightarrow 0) = W_i^A(1 \rightarrow 1) = W_i^A(-1 \rightarrow -1) = 0 \quad (2.11g)$$

elde edilir, ve yukarıdaki ifade de $u = J_C \sum_j S_l + J_{lnt} \sum_l S_l + J_S \sum_m S_m + h(t)$ ile tanımlanmıştır. Olasılık yoğunlukları bağıntısından faydalanarak $W_i^A(\sigma_i \rightarrow \sigma_i')$ 'nin σ_i' ye bağlı olmadığını, bu durumda $W_i^A(\sigma_i \rightarrow \sigma_i') = W_i^A(\sigma_i')$ yazılabilir. A alt örgüsünü için genel ortalama-alan dinamik denklemi master denklemlerinden yararlanarak aşağıdaki gibi elde edilmesi mümkündür.

$$\tau \frac{d}{dt} \langle \sigma_k \rangle = -\langle \sigma_k \rangle + \frac{2 \sin h[\beta u]}{2 \cosh[\beta u] + \exp[-\beta D]} \quad (2.12)$$

ortalama alan yaklaşımı ifadesini kullanarak

$$\tau \frac{d}{dt} \langle \sigma_k \rangle_A = -\langle \sigma_k \rangle_A + \frac{2 \sin h[\beta u_1]}{2 \cosh[\beta u_1] + \exp[-\beta D]} \quad (2.13)$$

biçiminde elde edilir. Bu ifadede $u_1 = 4J_C \langle \sigma_i \rangle_A + J_{lnt} \langle S_1 \rangle_B + J_{lnt} \langle S_m \rangle_C + h_0 \sin(\omega t)$ elde edilir ve ortalama alan denklemi,

$$\Omega_{d\zeta}^d m_c = -m_c + \frac{2 \sin h \left[\frac{1}{T} (4J_C m_c + J_{lnt} m_{s1} + 2J_{lnt} m_{s2} + h \sin(\zeta)) \right]}{2 \cosh \left[\frac{1}{T} (4J_C m_c + J_{lnt} m_{s1} + 2J_{lnt} m_{s2} + h \sin(\zeta)) \right] + \exp \left[-\frac{d}{T} \right]} \quad (2.14)$$

biçiminde oluşturulur (2.14) denkleminde $m_c \equiv \langle \sigma_i \rangle_A$, $m_{S_1} \equiv \langle S_1 \rangle_B$, $m_{S_2} \equiv \langle S_m \rangle_C$, $\zeta = wt$, $T = (\beta J z)^{-1}$ $h = h_0 \sin(wt)$, $h = h_0 / J_C$, $d = D / J_C$ ve $\Omega = \tau w$ olarak ifade edilir. Burada T, h ve Ω boyutsuz parametreler olarak kabul edilir. Bu sistemde $\Omega = 2\pi$ değerinde sabit olarak kabul edilecektir.

Sistemdeki B alt örgüsü için oluşturulacak ortalama alan dinamik ifadeleri için Karma spin (1,2) Ising nanotüp yapıda A ile C alt örgülerinde bulunan spinlerin bir an sabit kaldığı düşünülürse yukarıda türetilen denklemleri kullanarak bulunabilir. Böylelikle master denklemini B alt örgüsü için aşağıdaki gibi türetilebilir.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P^B(S_1, S_2, \dots, S_N; t) = & - \sum_j \left(\sum_{S_i \neq S'_i} W_j^B(S_j \rightarrow S'_j) \right) P^B(S_1, S_2, \dots, S_j, \dots, S_N; t) \\ & + \sum_j \left(\sum_{S_i \neq S'_i} W_j^B(S'_j \rightarrow S_j) P^B(S_1, S_2, \dots, S'_j, \dots, S_N; t) \right) \end{aligned} \quad (2.15)$$

Biçiminde yazılır. Denklem 2.15 de $W_j^B(S_j \rightarrow S'_j)$ ve $W_j^B(S'_j \rightarrow S_j)$ geçiş yoğunlukları veya olasılık yoğunlukları olarak belirtilir. Genel kanonik dağılım denkleminden yararlanarak

$$P^B(S_1, S_2, \dots, S'_j, \dots, S_N) \propto \exp(-\beta \mathcal{H}) \quad (2.16)$$

Şeklinde yazılır. Denklem 2.16'da $P^B(S_1, S_2, \dots, S'_j, \dots, S_N)$ sistem dengede olduğu anda $(S_1, S_2, \dots, S'_j, \dots, S_N)$ konfigürasyonunda spinlerin bulunma olasılığını göstermektedir. Sistem dengede olduğu anda kanonik dağılımın ve master denkleminin tanımından faydalanılarak her bir spinin S_j durumundan S'_j durumuna birim zamanda geçiş ihtimali $W_j^B(S_j \rightarrow S'_j)$;

$$W_j^B(S_j \rightarrow S'_j) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta \Delta E^B(S_j - S'_j))}{\sum_{S_j} \exp(-\beta \Delta E^B(S_j - S'_j))} \quad (2.17)$$

biçiminde verilir ve (2.17) ifadesinde $\beta = \frac{1}{k_B T}$ dir ve k_B Boltzmann faktörü olarak karşımıza çıkmaktadır. Yukarıda yapılan işlemlerin aynısını B alt örgüsü için uygulanırsa birinci yüzey ortalama alan dinamik denklemlerini aşağıdaki gibi elde edebiliriz.

$$\Delta E^B(S_j - S'_j) = (S'_j - S_j) \left(J_{Int} \sum_i \sigma_i + J_S \sum_k S_k + h(t) \right) - ((S'_j)^2 - (S_j)^2) D \quad (2.18)$$

yukarıdaki denklemde $z = \left(J_{Int} \sum_i \sigma_i + J_S \sum_k S_k + h(t) \right)$ ile tanımlanırsa spin-ler arası geçişte sistemin enerjisindeki değişim $\Delta E^B(S_j - S'_j)$ ile tanımlanır.

$$\Delta E^B(S_j - S'_j) = -(S'_j - S_j) y - ((S'_j)^2 - (S_j)^2) D \quad (2.19)$$

Denklemi elde edilmiş olur ve bu denklemde S_j ve S'_j parametrelerine bağlı olan enerji değişimleri hesaplanabilir. Tespit edilen bütün bu enerji değişim tanımları denklem (2.17) uygulanarak bütün geçişler için olasılık ihtimaliyet yoğunlukları aşağıdaki gibi hesaplanabilmektedir.

$$W_j^B(2 \rightarrow 1) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta(x + 3d))}{1 + \exp(-\beta(x + 3d)) + \exp(-2\beta(x + 2d)) + \exp(-3\beta(x + d)) + \exp(-4\beta x)} \quad (2.20a)$$

$$W_j^B(2 \rightarrow -2) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-4\beta x)}{1 + \exp(-\beta(x + 3d)) + \exp(-2\beta(x + 2d)) + \exp(-3\beta(x + d)) + \exp(-4\beta x)} \quad (2.20d)$$

$$W_j^B(1 \rightarrow 2) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(\beta(x + 3d))}{1 + \exp(\beta(x + 3d)) + \exp(-\beta(x + d)) + \exp(-\beta 2x) + \exp(-\beta(3x - 3d))} \quad (2.20e)$$

$$\begin{aligned} W_j^B(1 \rightarrow 0) &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta(x + d))}{1 + \exp(\beta(x + 3d)) + \exp(-\beta(x + d)) + \exp(-\beta 2x) + \exp(-\beta(3x - 3d))} \\ &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-2\beta(x + 2d))}{1 + \exp(-\beta(x + 3d)) + \exp(-2\beta(x + 2d)) + \exp(-3\beta(x + d)) + \exp(-4\beta x)} \end{aligned} \quad (2.20f)$$

$$W_j^B(1 \rightarrow -1) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-2\beta x)}{1 + \exp(\beta(x + 3d)) + \exp(-\beta(x + d)) + \exp(-\beta 2x) + \exp(-\beta(3x - 3d))} \quad (2.20g)$$

$$= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-3\beta(x+d))}{1 + \exp(-\beta(x+3d)) + \exp(-2\beta(x+2d)) + \exp(-3\beta(x+d)) + \exp(-4\beta x)}$$

$$\begin{aligned} W_j^B(1 \rightarrow -2) &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-3\beta(x-d))}{1 + \exp(\beta(x+3d)) + \exp(-\beta(x+d)) + \exp(-\beta 2x) + \exp(-\beta(3x-3d))} \\ &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-4\beta x)}{1 + \exp(-\beta(x+3d)) + \exp(-2\beta(x+2d)) + \exp(-3\beta(x+d)) + \exp(-4\beta x)} \end{aligned} \quad (2.20h)$$

$$\begin{aligned} W_j^B(0 \rightarrow 2) &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(2\beta(x+2d))}{1 + \exp(2\beta(x+2d)) + \exp(\beta(x+d)) + \exp(-\beta(x-d)) + \exp(-2\beta(x+d))} \\ &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(\beta(x+3d))}{1 + \exp(\beta(x+3d)) + \exp(-\beta(x+d)) + \exp(-2\beta x) + \exp(-3\beta(x+d))} \end{aligned} \quad (2.20i)$$

$$\begin{aligned} W_j^B(0 \rightarrow 1) &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(\beta(x+d))}{1 + \exp(2\beta(x+2d)) + \exp(\beta(x+d)) + \exp(-\beta(x-d)) + \exp(-2\beta(x+2d))} \\ &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta(x+3d))}{1 + \exp(\beta(x+3d)) + \exp(-2\beta(x+2d)) + \exp(-4\beta x) + \exp(-3\beta(x+d))} \end{aligned} \quad (2.20i)$$

$$\begin{aligned} W_j^B(0 \rightarrow -1) &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta(x-d))}{1 + \exp(2\beta(x+2d)) + \exp(\beta(x+d)) + \exp(-\beta(x-d)) + \exp(-2\beta(x+2d))} \\ &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-3\beta(x+d))}{1 + \exp(\beta(x+3d)) + \exp(-2\beta(x+2d)) + \exp(-4\beta x) + \exp(-3\beta(x+d))} \end{aligned} \quad (2.20j)$$

$$\begin{aligned} W_j^B(0 \rightarrow -2) &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-2\beta(x-2d))}{1 + \exp(2\beta(x+2d)) + \exp(\beta(x+d)) + \exp(-\beta(x-d)) + \exp(-2\beta(x+2d))} \\ &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-4a)}{1 + \exp(-\beta(x+3d)) + \exp(-2\beta(x+2d)) + \exp(-4\beta x) + \exp(-3\beta(x+d))} \end{aligned} \quad (2.20k)$$

$$\begin{aligned} W_j^B(-1 \rightarrow 2) &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(3\beta(x+d))}{1 + \exp(3\beta(x+d)) + \exp(2\beta x) + \exp(\beta(x-d)) + \exp(-\beta(x-3d))} \\ &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(\beta(x+3d))}{1 + \exp(\beta(x+3d)) + \exp(-\beta(x+d)) + \exp(-2\beta x) + \exp(-3\beta(x-d))} \end{aligned} \quad (2.20l)$$

$$\begin{aligned} W_j^B(-1 \rightarrow 1) &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(2\beta x)}{1 + \exp(3\beta(x+d)) + \exp(2\beta x) + \exp(\beta(x-d)) + \exp(-\beta(x-3d))} \\ &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(\beta(x+3d))}{1 + \exp(-\beta(x+3d)) + \exp(-2\beta(x+2d)) + \exp(-4\beta x) + \exp(-3\beta(x+d))} \end{aligned} \quad (2.20m)$$

$$\begin{aligned} W_j^B(-1 \rightarrow 0) &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(\beta(x-d))}{1 + \exp(3\beta(x+d)) + \exp(2\beta x) + \exp(\beta(x-d)) + \exp(-\beta(x-3d))} \\ &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-2\beta(x+2d))}{1 + \exp(-\beta(x+3d)) + \exp(-2\beta(x+2d)) + \exp(-4\beta x) + \exp(-3\beta(x+d))} \end{aligned} \quad (2.20n)$$

$$\begin{aligned}
W_j^B(-1 \rightarrow -2) &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta(x-3d))}{1 + \exp(3\beta(x+d)) + \exp(2\beta x) + \exp(\beta(x-d)) + \exp(-\beta(x-3d))} \\
&= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-4\beta x)}{1 + \exp(-\beta(x+3d)) + \exp(-2\beta(x+2d)) + \exp(-4\beta x) + \exp(-3\beta(x+d))}
\end{aligned} \tag{2.20o}$$

$$\begin{aligned}
W_j^B(-2 \rightarrow 2) &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(4\beta x)}{1 + \exp(4\beta x) + \exp(3\beta(x-d)) + \exp(2\beta(x-2d)) + \exp(\beta(x-3d))} \\
&= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(\beta(x+3d))}{1 + \exp(\beta(x+3d)) + \exp(\beta(x+d)) + \exp(-2\beta x) + \exp(-3\beta(x-d))}
\end{aligned} \tag{2.20ö}$$

$$\begin{aligned}
W_j^B(-2 \rightarrow 1) &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(3\beta(x-d))}{1 + \exp(4\beta x) + \exp(3\beta(x-d)) + \exp(2\beta(x-2d)) + \exp(\beta(x-3d))} \\
&= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta(x+3d))}{1 + \exp(-\beta(x+3d)) + \exp(-2\beta(x+2d)) + \exp(-4\beta x) + \exp(-3\beta(x+d))}
\end{aligned} \tag{2.20p}$$

$$\begin{aligned}
W_j^B(-2 \rightarrow 0) &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(2\beta(x-2d))}{1 + \exp(4\beta x) + \exp(3\beta(x-d)) + \exp(2\beta(x-2d)) + \exp(\beta(x-3d))} \\
&= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-2\beta(x+2d))}{1 + \exp(-\beta(x+3d)) + \exp(-2\beta(x+2d)) + \exp(-4\beta x) + \exp(-3\beta(x+d))}
\end{aligned} \tag{2.20r}$$

$$\begin{aligned}
W_j^B(-2 \rightarrow -1) &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(\beta(x-3d))}{1 + \exp(4\beta x) + \exp(3\beta(x-d)) + \exp(2\beta(x-2d)) + \exp(\beta(x-3d))} \\
&= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-2\beta(x+2d))}{1 + \exp(-\beta(x+3d)) + \exp(-2\beta(x+2d)) + \exp(-4\beta x) + \exp(-3\beta(x+d))}
\end{aligned} \tag{2.20s}$$

Bu arada $W_j^B(S_j - S'_j)$ ifadesini incelediğimizde ihtimaliyet yoğunlukları tespit edilirken S'_j 'den bağımsız olduğu anlaşılır. Bu durum bize denklemde $W_j^B(S_j) = W_j^B(S_j - S'_j)$ şeklinde yazmamıza olanak sağlar. Böylelikle ihtimaliyet yoğunlukları aşağıdaki gibi elde edilmiş olur.

$$\begin{aligned}
W_j^B(1 \rightarrow 2) &= W_j^B(0 \rightarrow 2) = W_j^B(-1 \rightarrow 2) = W_j^B(-2 \rightarrow 2) = W_j^B(2) \\
&= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(\beta(x+3d))}{1 + \exp(\beta(x+3d)) + \exp(-\beta(x+d)) + \exp(-2\beta x) + \exp(-3\beta(x-d))}
\end{aligned} \tag{2.21a}$$

$$\begin{aligned}
W_j^B(2 \rightarrow 1) &= W_j^B(0 \rightarrow 1) = W_j^B(-1 \rightarrow 1)W_j^B(-2 \rightarrow 1) = W_j^B(1) \\
&= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\beta(x+3d))}{1 + \exp(-\beta(x+3d)) + \exp(-2\beta(x+2d)) + \exp(-4\beta x) + \exp(-3\beta(x+d))}
\end{aligned} \tag{2.21b}$$

$$\begin{aligned}
W_j^B(-2 \rightarrow 0) &= W_j^B(-1 \rightarrow 0) = W_j^B(1 \rightarrow 0) = W_j^B(2 \rightarrow 0) = W_j^B(0) \\
&= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-2\beta(x + 2d))}{1 + \exp(-\beta(x + 3d)) + \exp(-2\beta(x + 2d)) + \exp(-4\beta x) + \exp(-3\beta(x + d))} \quad (2.21c)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_j^B(2 \rightarrow -1) &= W_j^B(0 \rightarrow -1) = W_j^B(1 \rightarrow -1) = W_j^B(-2 \rightarrow -1) = W_j^B(-1) \\
&= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-3\beta(x + d))}{1 + \exp(-\beta(x + 3d)) + \exp(-2\beta(x + 2d)) + \exp(-4\beta x) + \exp(-3\beta(x + d))} \quad (2.21d)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_j^B(2 \rightarrow -2) &= W_j^B(1 \rightarrow -2) = W_j^B(0 \rightarrow -2) = W_j^B(-1 \rightarrow -2) = W_j^B(-2) \\
&= \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-4\beta x)}{1 + \exp(-\beta(x + 3d)) + \exp(-2\beta(x + 2d)) + \exp(-4\beta x) + \exp(-3\beta(x + d))} \quad (2.21e)
\end{aligned}$$

Şeklinde yazılabilir. Denklem (2.15) eşitliğinden daha önce A alt örgüsü için bulmuş olduğumuz ortalama alan denklemlerini B alt örgüsü için de ortalama alt örgü denklemleri aşağıdaki gibi oluşturulur.

$$\begin{aligned}
\Omega \frac{dm_{s_1}}{d\zeta} &= -m_{s_1} \quad (2.22) \\
&+ \frac{2 \exp\left[\left(\frac{4}{\tau}\right) \sinh\left(\left(\frac{2}{\tau}\right) J_{int} m_c + 2J_s m_{s_2} + 2J_s m_{s_1} + h \cos(\zeta)\right)\right] + 2 \exp\left[\left(\frac{D}{\tau}\right) \sinh\left(\frac{1}{\tau}\right) (J_{int} m_c + 2J_s m_{s_2} + 2J_s m_{s_1} + h \cos(\zeta))\right]}{\exp\left[\left(\frac{4D}{\tau}\right) \cosh\left(\left(\frac{2}{\tau}\right) J_{int} m_c + 2J_s m_{s_2} + 2J_s m_{s_1} + h \cos(\zeta)\right)\right] + \exp\left[\left(\frac{D}{\tau}\right) \cosh\left(\frac{1}{\tau}\right) (J_{int} m_c + 2J_s m_{s_2} + 2J_s m_{s_1} + h \cos(\zeta) + 0.5)\right]}
\end{aligned}$$

Şeklinde yazılabilir. Yukarıda tespit edilen ve uygulanan bütün işlemleri C alt örgüsü içinde uygularsak C alt örgüsü için ortalama alan dinamik denklemini aşağıdaki gibi

$$\begin{aligned}
\Omega \frac{dm_{s_2}}{d\zeta} &= -m_{s_2} \quad (2.23) \\
&+ \frac{2 \exp\left[\left(\frac{4}{\tau}\right) \sinh\left(\left(\frac{2}{\tau}\right) (2J_{int} m_c + 2J_s m_{s_1} + 2J_s m_{s_2} + h \cos(\zeta))\right)\right] + 2 \exp\left[\left(\frac{D}{\tau}\right) \sinh\left(\frac{1}{\tau}\right) (2J_{int} m_c + 2J_s m_{s_1} + 2J_s m_{s_2} + h \cos(\zeta))\right]}{\exp\left[\left(\frac{4D}{\tau}\right) \cosh\left(\left(\frac{2}{\tau}\right) (2J_{int} m_c + 2J_s m_{s_1} + 2J_s m_{s_2} + h \cos(\zeta))\right)\right] + \exp\left[\left(\frac{D}{\tau}\right) \cosh\left(\frac{1}{\tau}\right) (2J_{int} m_c + 2J_s m_{s_1} + 2J_s m_{s_2} + h \cos(\zeta) + 0.5)\right]}
\end{aligned}$$

elde edilmiş oluruz. Yukarıda bulunan bu sonuçlar A, B, ve C alt örgülerindeki spinlerin sabit kaldığı düşünülerek elde edilmiş sonuçlardır. Kısaca özetlersek bu alt örgülerdeki ortalama alan denklemleri (2.22), (2.23), ve (2.14)'de verilmiştir.

BÖLÜM 3

KARMA SPİN-1 VE SPİN-2 İSİNG NANOTÜP SİSTEMİNİN NÜMERİK ÇÖZÜMÜ

3.1. Ortalama Alt Örgü Miknatislanmalarının Zamanla Değişimi

Bu bölümde sistemimizde bulunan mevcut fazları tespit edebilmek için ikinci bölümde türetilen ortalama alan dinamik denklemlerinden faydalanarak faz diyagramları oluşturulacaktır. Bu fazların tespiti indirgenmiş sıcaklığı (T), manyetik alanın genliğini (h) ve kristal alan (d) parametrelerin varlığında araştırılacaktır. Denklem (2.14), (2.24), ve (2.25)'un devinimsiz çözümleri, periyodik bir fonksiyonun 2π periyodu için ζ 'nin periyodik bir fonksiyonu olacaktır. Böylelikle

$$m_c(\zeta + 2\pi) = m_c(\zeta) \quad (2.26a)$$

$$m_{s1}(\zeta + 2\pi) = m_{s1}(\zeta) \quad (2.26b)$$

$$m_{s2}(\zeta + 2\pi) = m_{s2}(\zeta) \quad (2.26c)$$

Sistemde aşağıda verilen üç tip çözümden biri olması için verilen bu ifadelerin sağlanıp sağlanmama durumları incelenebilir.

$$m_c(\zeta + 2\pi) = -m_c(\zeta) \quad (2.27a)$$

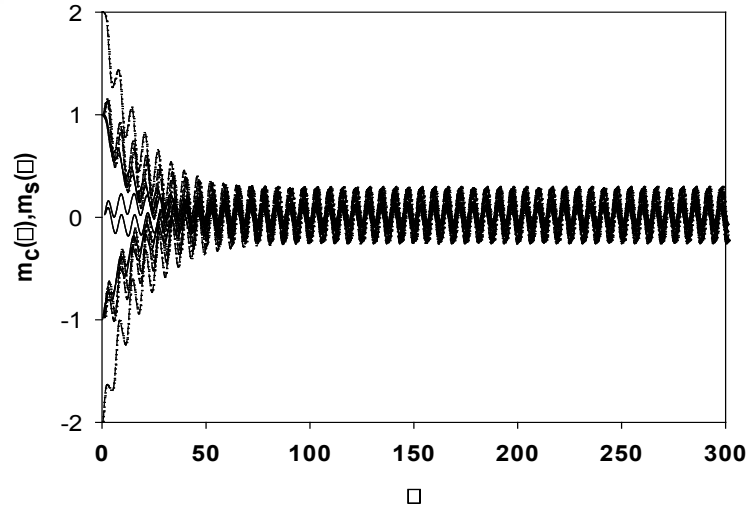
$$m_{s1}(\zeta + 2\pi) = -m_{s1}(\zeta) \quad (2.27b)$$

$$m_{s2}(\zeta + 2\pi) = -m_{s2}(\zeta) \quad (2.27c)$$

Yukarıda bahsedilen ifadelerde örgü için alt örgü miknatislanma $m_c(\zeta)$ yüzey için alt örgü miknatislanma parametresi $m_s(\zeta)$ (m_{s1} ve m_{s2}) alınarak analiz edilecektir. Yukarıdaki denklemlerden (2.26a) ifadesi paramanyetik veya düzensiz (p) fazına karşılık gelmekte olup simetrik çözüm birinci tip çözümü şeklinde ifade edilir. Bu çözümlerde, ortalama alt örgü miknatislanmaları olarak ifade edilen $m_c(\zeta)$ ve $m_s(\zeta)$ ifadeleri birbirine eşit olup ve sıfır değeri etrafında salınırken dış manyetik alan ile uyum içinde bulunduğu sonucuna varılmıştır. İkinci tip çözüm için yukarıda verilen denklemler analiz

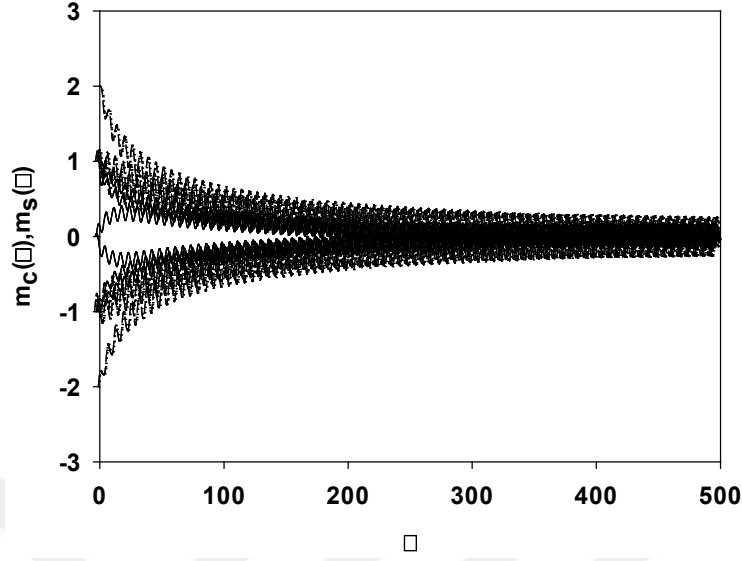
edildiğinde ikinci tip çözüm yukarıda belirtilen çözüm (2.21) denklemlerine uymamaktadır ve bu çözüm simetrik olmayan bir çözüme karşılık geldiği görülmüştür. Bu ikinci tip çözümde ferrimanyetik çözüme karşılık gelir ve bunlar ferrimanyetik (i) olarak belirtilir. Bu çözümlerde $m_c(\zeta)$ (yüzey için ortalama alt örgü mıknatıslanma parametresi) ile örgü için alt $m_s(\zeta)$ (örgü için ortalama alt örgü mıknatıslanma parametresi) birbirinden farklı olduğu görülmüş ve sıfır olmayan değerler etrafında salındığı sonucuna varılmıştır. Burada elde edilen sistemdeki i, p ve i+p fazlarını ikinci bölümde türetilen (2.14), (2.24) ve (2.25) ortalama alan dinamik denklemlerinin Adams Moulten düzeltme ve kestirme metodundan faydalanarak ve sistemde bulunan parametreler ve başlangıç değerleri bu denklemlerin analiz edilmesiyle bulunmuştur.

Şekil 3.1’de karma spin (1, 2) için sadece simetrik çözüm vardır. Bundan dolayı Şekil 3.1 grafiğinde sadece paramanyetik faz (p) olduğu tespit edilmiştir. Bu durumda $m_c(\zeta)$ ve $m_s(\zeta)$ birbirine eşittir ve sıfır değeri çevresinde salınım yaparlar yani ($m_c(\zeta)=$ ve $m_s(\zeta)=0$) olur. Böylelikle sistemin simetrik çözümü vardır denebilir.



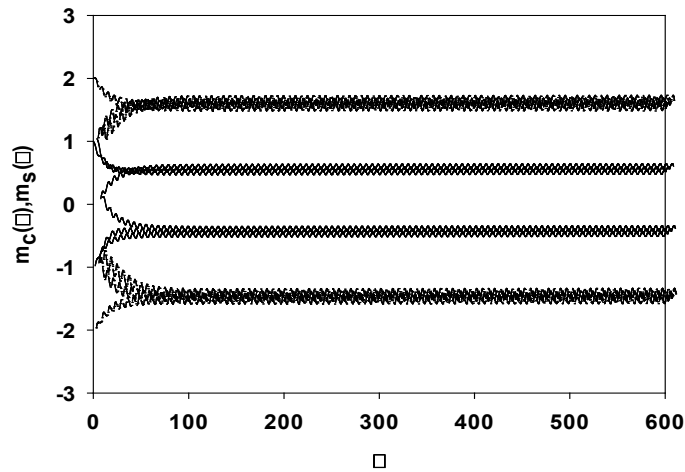
Şekil 3.1. Karma spin-1 ve spin-2 Ising nanotüp sistemi için ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının $m_c(\zeta)$ ve $m_s(\zeta)$ zamanla değişimi. Sistemde paramanyetik (p) faz mevcuttur. ($d=-3.0$, $h=9.50$, $T=6.0$)

Şekil 3.2’de yine d, h ve T’nin farklı değerleri için simetrik çözüm elde edilmiştir. Bu durumda $m_c(\zeta)$ ve $m_s(\zeta)$ birbirine eşittir ve sıfır değeri çevresinde salınım yaparlar yani ($m_c(\zeta)=$ ve $m_s(\zeta)=0$) olur ve p fazı sistemde mevcuttur.



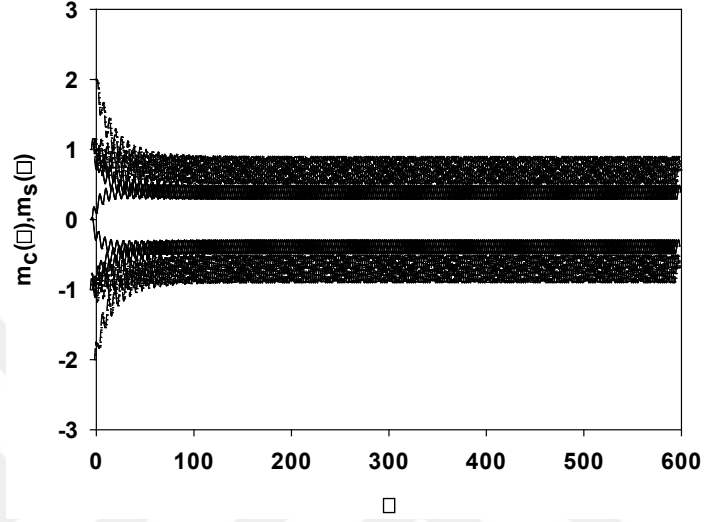
Şekil 3.2. Karma spin-1 ve spin-2 Ising nanotüp sistemi için ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının $m_c(\xi)$ ve $m_s(\xi)$ zamanla değişimi. Sistemde paramanyetik (p) fazı mevcuttur. ($d=-4.6$, $h=8.0$, $T=2.8$)

Şekil 3.3'de sistemde simetrik olmayan çözüm mevcuttur. $m_c(\xi) = \pm 1.0$ değeri etrafında salınım yaparken, $m_s(\xi) = \pm 2.0$ değeri etrafında salınım yaptığı tespit edilmiş ve sonuç olarak sistemde ferrimanyetik (i) fazı olduğu sonucuna varılmıştır.



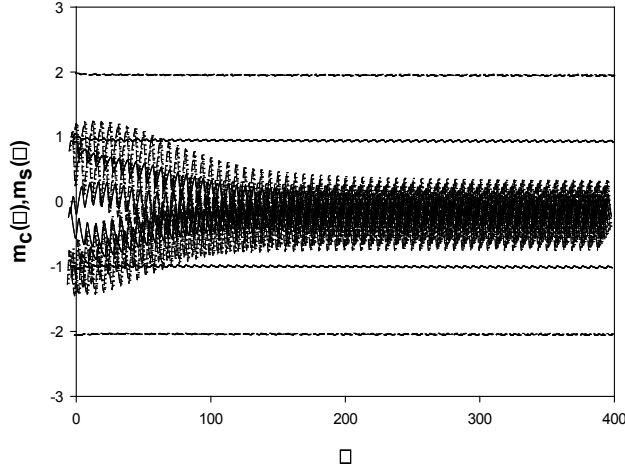
Şekil 3.3. Karma spin-1 ve spin-2 nanotüp sistemi için ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının $m_c(\xi)$ ve $m_s(\xi)$ zamanla değişimi. Sistemde ferrimanyetik (i) faz mevcuttur ($d=2.0$, $h=4.0$, $T=8.0$)

Şekil 3.4'te sistemde $m_c(\zeta)=\pm 1.0$ etrafında salınırken $m_s(\zeta)=\pm 2.0$ değerleri etrafında salınır bu durumda sistemde ferrimanyetik (i) faz mevcuttur. Bulunan bu değerler başlangıç değerlerinden bağımsızdır.



Şekil 3.4. Karma spin-1 ve spin-2 nanotüp sistemi için ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının $m_c(\xi)$ ve $m_s(\xi)$ zamanla değişimi. Sistemde ferrimanyetik (i) faz mevcuttur. ($d=-5.0$, $h=6.0$, $T= 1.5$)

Şekil 3.5'de sistemde iki farklı çözüm $d=1.0$, $h=7.0$, $T= 1.0$ değerleri için elde edilmiştir. Bu durumda sistemde p ve i fazları bir arada bulunmaktadır. Buradaki ilk çözümde, $m_c(\xi)$ ve $m_s(\xi)$ sıfır değeri civarında salınırlar ve bundan dolayı sistemde paramanyetik (p) faz elde edilmiştir. İkinci çözümde ise $m_c(\xi)=\pm 1.0$ değeri etrafında salınırken, $m_s(\xi)=\pm 2.0$ değeri etrafında salınır ve burada ferrimanyetik (i) faz elde edilmiştir. Her iki çözümden yararlanılarak sistemde i + p karma fazı elde edilmiştir.



Şekil 3.5. Karma spin-1 ve spin-2 nanotüp sistemi için ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının $m_c(\xi)$ ve $m_s(\xi)$ zamanla değişimi. Sistemde ferrimanyetik (i) ve paramanyetik (p) fazlar başlangıç değerine bağlı olarak bir arada bulunmaktadır. ($d=1.0$, $h=7.0$, $T= 1.0$).

3.2. Dinamik Düzen Parametreleri ve Dinamik Faz Geçiş Noktaları

Bu alt bölümde sistemde var olan karma fazlar arasındaki dinamik faz sınırları tespit edilecektir. Bu tespiti yapabilmemiz için dinamik faz geçiş sıcaklıklarını (DFG) hesaplamamız gerekir. Burada ikinci derece veya birinci derece yani süreksiz veya sürekli faz geçişlerini açıklayıcı bir şekilde ortaya koymalıyız. Hesaplamış olduğumuz dinamik faz geçiş sıcaklıklarından yararlanarak sistemin faz diyagramlarını belirleyebiliriz. DFG sıcaklıkları dinamik düzen parametrelerinin ya da bir periyot başına ortalama düzen parametrelerinin davranışının indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak araştırılmasıyla bulunacaktır. Zamana bağlı salınımlı manyetik alan varlığında bir periyot boyunca dinamik alt örgü veya dinamik düzen parametrelerini aşağıdaki şekilde gösterebiliriz.

$$M_\alpha = \frac{w}{2\pi} \oint m_\alpha(t) d(t) \quad (2.28)$$

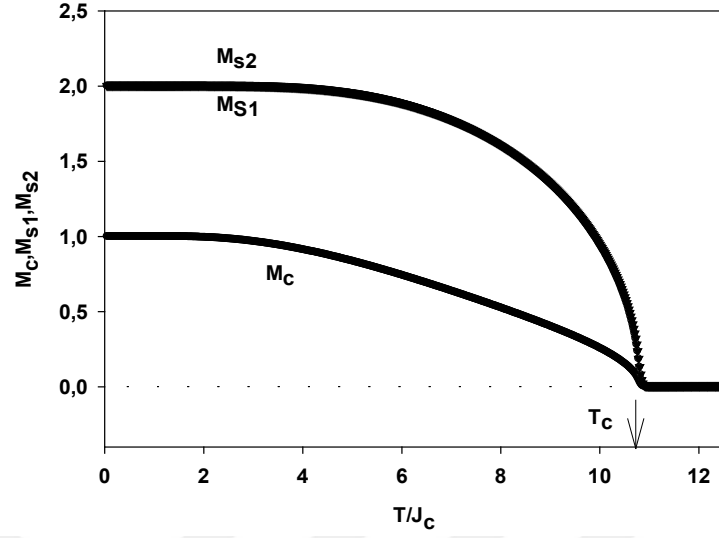
Denklem (2.28) ifadesinde yani incelenen bu sistemde dinamik öz mıknatıslanması ve yüzey mıknatıslanmasına karşılık gelen birtakım parametrelerin olduğu sonucuna varılmıştır. İncelenen bu sistemde $\alpha = C$, mıknatıslanması S_1 birinci yüzey mıknatıslanması olarak kabul edersek bu da sistemdeki dinamik öz mıknatıslanmaya karşılık gelirken, yüzey mıknatıslanması S_2 ise dinamik yüzey mıknatıslanmaya karşılık gelmekte olduğu görülür. Yapılan matematiksel analizlerde sistemdeki dinamik

mıknatıslanmalar yani $(M_a) J_c$ parametresine bağılı olarak da tespit edilebilir. Yukarıda verilen (2.22) denklemi, Adams-Moulton kestirme düzeltme yöntemi ve Romberg integrasyonu kullanılarak incelenecektir.

3.3. Dinamik mıknatıslanmaların termal davranışı

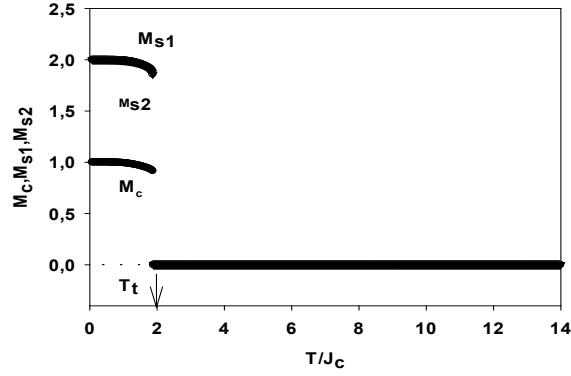
Bu kısımda karma spin (1, 2) Ising nanotüp sisteminin sıcaklık değerinin bir fonksiyonu olarak dinamik alt örgü mıknatıslanmaları (M_a) nın termal değişimleri farklı etkileşim parametrelerine göre araştırılacaktır. Burada bir önceki alt başlıkta vermiş olduğumuz (2.28) denklemden faydalanarak (M_a) nın termal davranışını ve temas parametrelerini verilen farklı değerler için indirgenmiş tek iyon anizotropisinin ve indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak Romberg integrali ve Adams-Moulton kestirme ve düzeltme yöntemini birleştirerek rapor edilecektir. Bulunan bu fazlar arasında dinamik ve bu DFG'lerin yapısı ve bu fazlar arasındaki DFG sıcaklıklarının nasıl tespit edildiği Şekil 3.5, Şekil 3.6, Şekil 3.7'de gösterilmiştir. Burada belirtilen grafiklerde birtakım parametreler verilmiştir. Bu grafiklerde birinci derece faz geçiş sıcaklığı ve ikinci derece faz geçiş sıcaklığını gösteren parametreler mevcuttur. T_c parametresi ferrimanyetik fazdan ve manyetik olmayan fazdan paramanyetik faza ikinci-derece faz geçiş sıcaklıklarını T_t birinci-derece faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.

Şekil 3.5, M_a 'nın yani dinamik alt örgü mıknatıslanmanın termal durumları $d = 1.0$, $h = 2.0$, $\Delta_s = 1.0$ ve $r = 1.0$ değerleri baz alınarak sonuç bulunmuştur. Oluşturulan bu grafikte mutlak sıfır sıcaklık noktasında M_{S1} ve $M_{S2} = 2.0$ ve $M_c = 1.0$ doygunluk değerlerinde iken, sıcaklık değeri yükseldikçe öz dinamik mıknatıslanması sıfıra düzenli bir şekilde sürekli olarak yaklaştığı ve bu durumun kabuk dinamik mıknatıslanmaları için de geçerli olduğu yani kabuk mıknatıslanmalarıda sıfıra sürekli yaklaştığı görülmektedir. Yani dinamik mıknatıslanmalar sıcaklık artarken sürekli olarak sıfıra yaklaşmakta ve $T_c/J_c = 10.810$ sıcaklık değerinde ferrimanyetik (i) fazından paramanyetik (p) fazına ikinci-derece faz geçişi olduğu tespit edilmiştir.



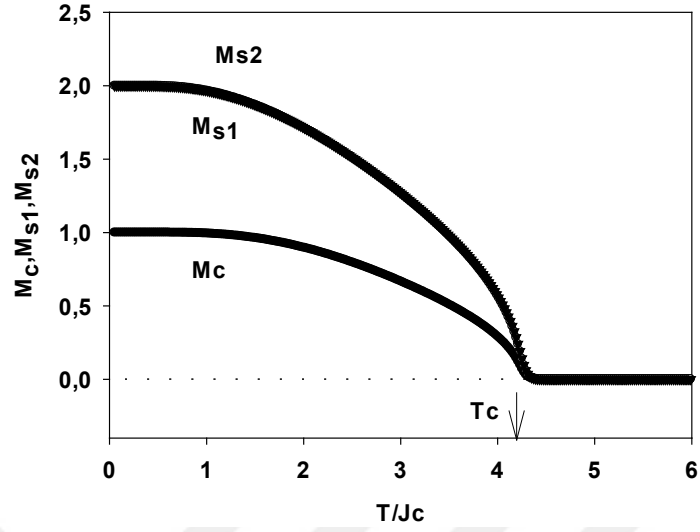
Şekil 3.6. $\Delta s = 1.0$, $r = 1.0$, $d = 1.0$ ve $h = 2.0$ değerleri için dinamik alt örgü mıknatıslanmanın yani (M_a) 'nın sıcaklığa bağlı davranışı $T_c/J_c = 10.810$ ferrimanyetik (i) fazından paramanyetik (p) faza ikinci-derece faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.

Şekil 3.6' de dinamik alt örgü mıknatıslanmanın yani (M_a) 'nın termal durumları sistemde bulunan $\Delta s = 1.0$, $r = 1.0$, $d = 2.0$ ve $h = 8.0$ parametrelerine verilen değerler için oluşturulmuştur. Aşağıda Şekil 3.6 grafiğinde sıfır sıcaklık değerinde $M_c=1.0$ ve $M_{s1}=M_{s2}=2.0$ başlangıç doygunluk değerlerine sahiptir. Bu grafikte sıcaklık arttıkça mıknatıslanmalarda sürekli azaldığı görülmektedir. $T_i/J_c = 1.810$ sıcaklık değerinde aniden sıfır değerine indiği gözlemlenmektedir. Yani $T_i/J_c = 1.810$ sıcaklık değerinde ferrimanyetik (i) fazından paramanyetik (p) faza birinci-derece faz geçişi olduğu tespit edilmiştir.



Şekil 3.7. $\Delta s = 1.0$, $r = 1.0$, $d = 2.0$ ve $h = 8.0$ değerleri için dinamik alt örgü mıknatıslanmanın yani (M_a)'nın sıcaklığa bağlı davranışı $T_c/J_c = 1.810$ ferrimanyetik (i) fazından paramanyetik (p) faza birinci-derece faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.

Şekil 3.7 grafiği (Δs , r , d , h) parametrelerine verilen değerler yani $\Delta s = 1.0$, $r = 1.0$, $d = 4.0$ ve $h = 2.0$ için sıfır sıcaklık değerinde $M_c = 1.0$ ve $M_{s1} = M_{s2} = 2.0$ başlangıç değerlerine sahip olduğu tespit edilmiştir. Oluşturulan bu grafikte sıfır sıcaklık değerinde $M_c = 1.0$ ve $M_{s1} = M_{s2} = 2.0$ iken sıcaklık arttıkça özdeki mıknatıslanma değerinin $T/J_c = 4.310$ değerine kadar sürekli bir şekilde azaldığı ve bu değerde ferrimanyetik fazdan paramanyetik faza ikinci derece faz geçişi meydana geldiği gözlemlenmiştir. Benzer davranışın kabukta oluşan mıknatıslanmalar içinde geçerli olduğu ve ferrimanyetik fazdan paramanyetik faza ikinci derece faz geçişi değerinin özdeki mıknatıslanma değeriyle aynı olduğu görülmektedir. Yani $T/J_c = 4.310$ sıcaklık değerinde yavaş yavaş sürekli bir şekilde dinamik mıknatıslanmaların sıfıra indiği görülmüştür. Böylece $T/J_c = 4.310$ sıcaklık değerinde ikinci derece bir faz geçişi olduğu anlaşılmaktadır. Bu faz geçişi ferrimanyetik (i) fazından paramanyetik (p) faza birinci-derece faz geçişi olduğunu söylemek mümkündür.



Şekil 3.8. $\Delta s = 1.0$, $r = 1.0$, $d = -4.0$ ve $h = 2.0$ değerleri için M_a 'nın sıcaklığa bağlı davranışı $T_c/J_c = 4.310$ ferrimanyetik (i) fazından paramanyetik (p) faza ikinci-derece faz geçiş sıcaklığını göstermektedir.

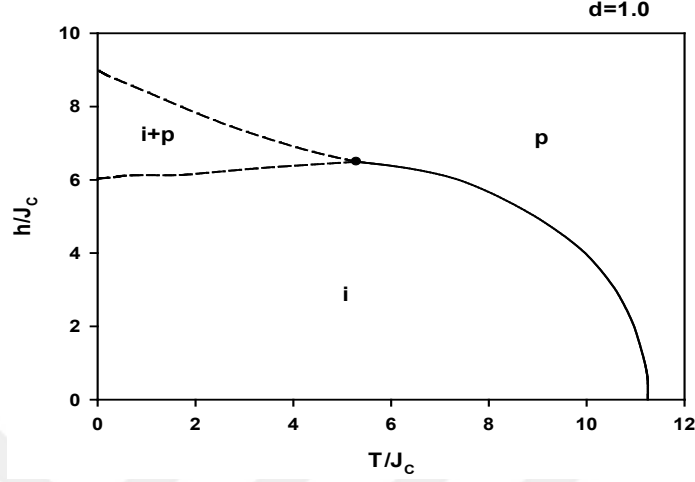
3.4. $(T/J_c, h/J_c)$ Düzleminde Dinamik Faz Diyagramları

Daha önceki bölümde elde edilen dinamik faz geçiş sıcaklıkları değerlerinden (DFG) sıcaklıklarından istifade ederek bu bölümde üzerinde çalıştığımız sistemin dinamik faz diyagramları $(T/J_c, h/J_c)$ ekseninde sunulacaktır. Bu bölümde Hamiltoniyen parametreleri ve bu parametrelere verilen başlangıç değerlerine karşılık oluşturulacak dinamik faz diyagramları üzerinde durulacaktır. Bahsedilen bu parametrelerden bazıları bu faz grafikleri oluşturulurken sabit tutulmuştur, örneğin yüzey etkileşim değişim parametresi ($\Delta s = 0.0$), bir diğer sabit tutulan parametre ise yüzeyler arası etkileşim parametresidir ($r = 1.0$). Ancak kristal alan veya tek-iyon anizotropisi (d)'nin farklı değerler için $(T/J_c, h/J_c)$ ekseninde dinamik faz diyagramları şekillerle tanımlanacaktır. Böylelikle $(T/J_c, h/J_c)$ düzlemindeki dinamik faz diyagramlarının özellikle kristal alana karşı nasıl bir değişim sergileyeceği analiz edilecektir. Bu dinamik faz diyagramlarında, birinci derece faz geçişlerini tanımlayan kesikli çizgiler bulunduğu görülmüş olup, bunun yanında ikinci faz geçiş çizgileri de mevcut olduğu ve bu ikinci faz geçiş çizgilerini ise sürekli çizgiler tarif etmektedir. Oluşturulan bu dinamik faz diyagramlarında, diyagramlardaki üzerinde içi dolu kürelerin varlığı gözlenmiştir. Gözlenen bu içi dolu küreler dinamik faz diyagramları üzerinde dinamik üçlü kritik noktayı ifade etmektedir. Bu dinamik faz diyagramlarında E ifadesi kritik son noktayı temsil ederken bu dinamik

faz diyagramları üzerinde oluşan QP ifadesi ise dinamik dörütlü noktayı temsil etmektedir. Oluşturulan bu dinamik faz diyagramlarının özellikleri ile etkileşim parametrelerinin dinamik dinamik faz diyagramları üzerindeki tesiri aşağıda maddeler halinde sunulmuştur.

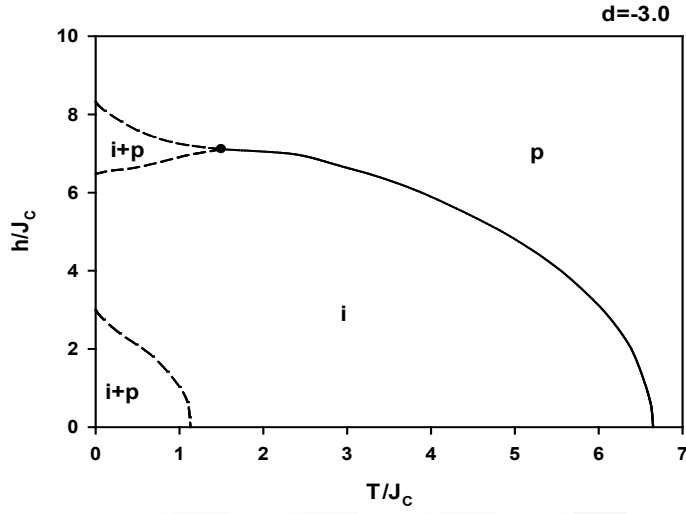
(i) Şekil 3.8 grafiğinde, $(T/J_C, h/J_C)$ eksenlerinde ($r=1.0, \Delta s = 0.0$) ve $d=1.0$ değerleri için oluşturulan dinamik faz diyagramıdır. Şekilde gösterilen ilk dinamik faz diyagramı, yüksek indirgenmiş sıcaklık parametresi (T) ile ve yüksek manyetik alan genliği (h) parametresi ile sistemde paramanyetik (p) faz bulunduğu görülmektedir. T ve h parametrelerinin düşük değerlerinde ise sistemde ferrimanyetik (i) faz bulunmakta olup dinamik faz diyagramı üzerinde bu iki bölgeyi birbirinden ayıran dinamik faz sınırı ise i fazından p fazına ikinci derece faz geçiş çizgisi olduğu görülmektedir. Ayrıca (h ve T) parametrelerinin aldığı bazı değerlerde belirli i fazı ile p fazının bir arada olduğu karma ($i+p$) fazı bulunduğu tespit edilmiştir. Şekil 3.8 grafiğinde iki adet temel yani (p ve i) fazı ve bir adet karma ($i+p$) faz olduğu görülmektedir. Temel fazları birbirinden ayıran sürekli çizgilerin ikinci derece faz geçiş çizgisi olduğu tespit edilip grafikte bulunan karma fazdan bu temel fazları ayıran kesikli çizgilerin olduğu bu ise birinci derece faz geçiş çizgileriyle temsil edildiği bilinmektedir. Şekil 3.8 dinamik faz diyagramında iki adet birinci derece faz geçiş çizgisi tespit edilmiştir. Oluşturulan bu dinamik faz diyagramında bulunan bu iki birinci derece faz geçiş çizgileri birbirine yaklaşıyorlar ve birleştiği bu noktadan sonra birinci derece faz geçiş çizgisi yerini ikinci derece faz geçiş çizgisine bıraktığı tespit edilmiştir. Yine bu dinamik faz diyagramı üzerinde tespit edilen bir başka durum ise birinci derece faz geçiş çizgisi ile ikinci derece faz geçiş çizgisinin birleştiği noktadır. Bu nokta daha önce içi dolu küre olarak ifade ettiğimiz dinamik üçlü kritik noktadır. Oluşturulan bu dinamik faz diyagramlarına uyan dinamik faz diyagramları daha önce kinetik spin-1/2 [65] (yapılan bu çalışmada sistemde i fazı yerine ferromanyetik (f) faz geldiği görülmüştür.), spin-1 [66,67,68] (bu çalışmada ise i fazı yerine f fazı gelmektedir). Spin-3/2 [69,70,71], (bu çalışmada i fazı yerine ferromanyetik-3/2 ($f_{3/2}$) fazı gelmektedir.) spin-2 [72,73], (bu çalışmalar da i fazı yerine ferromanyetik-2 (f_2) geldiği görülmekte olup Ising sistemlerinde oluşturulmuştur. Yine bu faz diyagramının benzeri faz diyagramı karma spin (1/2, 1) [74,75] karma spin (1,3/2) [76], karma spin (1/2, 2) [77], karma spin (1, 5/2) [78], karma spin (3/2,2) [79], karma spin (1,2) [80], karma spin

(1/2, 3/2) [81], spin (1/2, 5/2) [82], ve karma spin (3/2, 5/2) [83], Ising sisteminde elde edilmiştir.



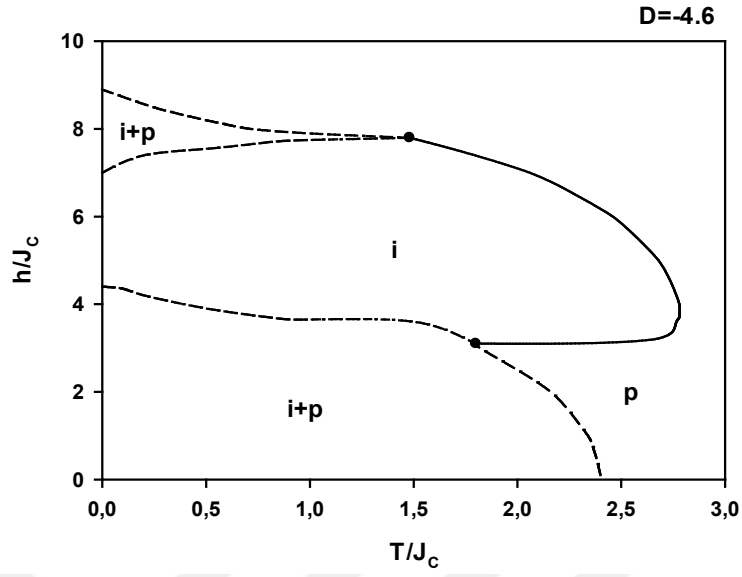
Şekil 3.9. Karma spin-1 ve spin-2 Ising nanotüp sisteminde $d=1.0$ değeri için $(T/J_c, h/J_c)$ düzleminde dinamik faz diyagramı.

(ii) Şekil 3.9 grafiğinde $r=1.0$, $\Delta s = 0.0$ ve $d=-3.0$ değerleri için, $(T/J_c, h/J_c)$ eksenlerinde oluşturulan dinamik faz diyagramları sunulmuştur. Manyetik alan genliği (h) indirgenmiş sıcaklıkta (T)'nin yüksek değerlerinde temel fazlardan paramanyetik (p) fazının olduğu tespit edilmiştir. Bu parametrelerin düşük olduğu değerlerde ise, ferrimanyetik (i) fazının olduğu gözlemlenmiştir. Ayrıca sistemde bulunan temel fazlardan (i) fazı ile (p) fazı birinci-derece faz geçiş çizgileriyle ayıran karma i+p fazı tespit edilmiştir. Belirli bir manyetik alan genliği değerleri ve indirgenmiş sıcaklığın belirli değerlerinde i ve p fazı birlikte bulunduğu durumu açıklamaktadır. Sistemde tespit edilen temel fazlardan yani ferrimanyetik (i) fazı ile paramanyetik (p) fazını birbirinden ayıran ikinci derece faz geçiş çizgileriyle ayrıldığı görülerek rapor edilmiştir. Tespit edilen bu temel fazları sistemde bulunan karma fazlardan ayıran birinci derece faz geçiş çizgileri olduğu görülmüştür. Ayrıca bu dinamik faz diyagramında indirgenmiş sıcaklık ve manyetik alan genliğinin ve kristal alanının (d) düşük değerleri için ikinci bir (i+p) karma fazı gözlemlenmiştir. Oluşan bu dinamik faz diyagramı yapısal olarak Şekil 3.8'deki dinamik faz diyagramına benzemektedir. Son olarak bu dinamik faz diyagramında birinci-derece faz geçiş çizgileriyle ikinci-derece faz geçiş çizgilerinin birleştiği noktada üçlü kritik noktanın varlığı söz konusudur.



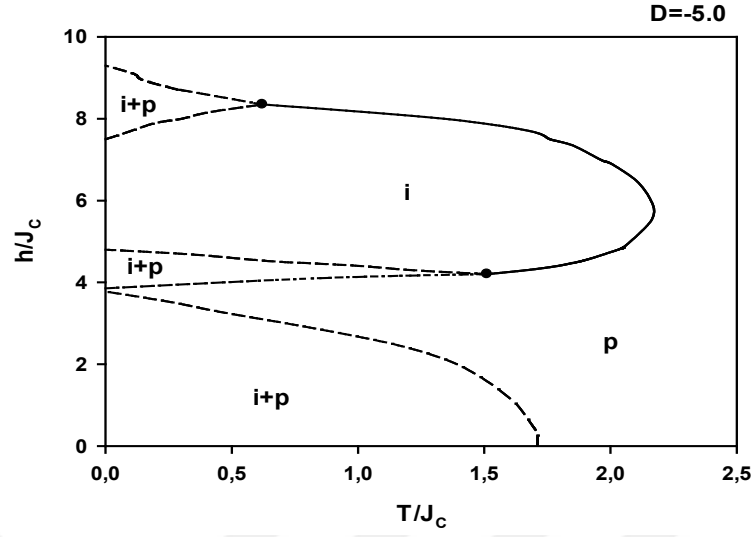
Şekil 3.10. Karma spin-1 ve spin-2 Ising nanotüp sisteminde $d=-3.0$ değeri için $(T/J_c, h/J_c)$ düzleminde dinamik faz diyagramı.

(iii) Şekil 3.10'da $r=1.0$, $\Delta s=0.0$ ve $d=-4.6$ değerleri için $(T/J_c, h/J_c)$ düzleminde elde edilen faz diyagramı gösterilmektedir. Bu faz diyagramında, indirgenmiş sıcaklıkta (T) ve manyetik alan genliğinde (h) sistem ferrimanyetik (i) ve paramanyetik (p) iki temel fazdan ve ayrıca ferrimanyetik ve paramanyetik fazın bir arada bulunduğu iki adet karma ($i+p$) fazından oluştuğu görülmektedir. Bu sistemde yine temel fazların bir arada olduğu karma fazlardan ($i+p$) fazı temel fazlardan birinci-derece faz geçiş çizgileriyle ayrılırken temel fazlar yani ferrimanyetik ve paramanyetik fazları birbirinden ikinci derece faz geçiş çizgileriyle ayrıldığı görülmüştür. Sistemde iki adet üçlü kritik noktanın varlığı bulunmuş ayrıca tek-iyon anizotropisinin negatif değerlerine gidildikçe düşük manyetik alan değerlerindeki karma ($i+p$) fazının büyüdüğü ve paramanyetik faz ile arasında birinci derece faz geçişi olduğu tespit edilmiştir.



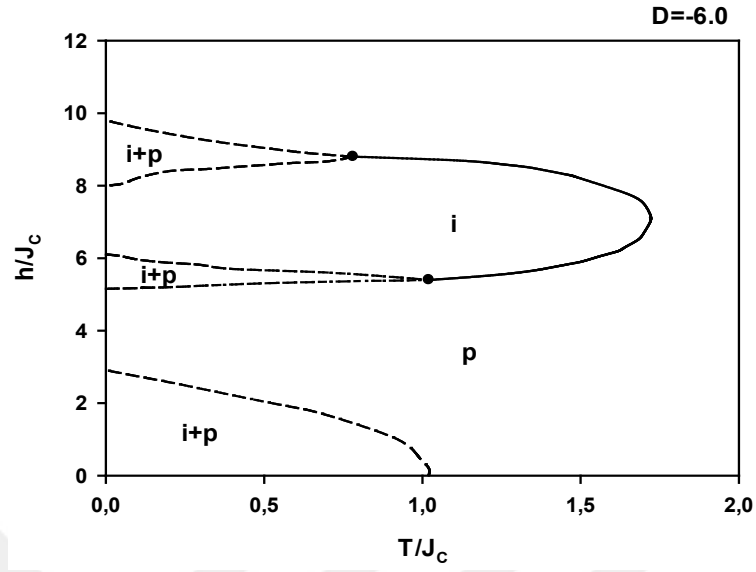
Şekil 3.11. Karma spin-1 ve spin-2 Ising nanotüp sisteminde $d=-4.6$ değeri için $(T/J_c, h/J_c)$ düzleminde dinamik faz diyagramı

(iv) Şekil 3.11’de $r=1.0$, $\Delta s = 0.0$ ve $d=-5.0$ değerleri için $(T/J_c, h/J_c)$ eksenlerinde dinamik faz diyagramları oluşturulmuştur. Sistemde, indirgenmiş sıcaklıkta (T) ve manyetik alan genliğinde (h), bazı değerlerinde temel fazlardan ferrimanyetik (i), paramanyetik (p) ve üç adet karma (i+p) fazının olduğu gözlemlenmiştir. Burada temel (i) ve (p) fazları arasındaki dinamik faz sınırları ikinci-derece faz geçiş çizgileri ile belirlendiği görülmekte iken sistemde indirgenmiş sıcaklık ve manyetik alan genliğinin belirli değerlerinde i ve p fazının birlikte bulunduğu üç adet karma i+p fazı bulunduğu tespit edilmiştir. Bu dinamik faz diyagramında tek-iyon anizotropisinin negatif etkisinden dolayı üçüncü bir karma faz yani (i+p) fazının olduğu sonucuna varılmıştır. Tespit edilen bu karma fazlardan (i+p) karma fazlarından ikisi için birinci derece faz geçiş çizgileri birbirine yaklaştığı görülmüş ve iki adet dinamik üçlü kritik noktanın varlığı bulunmuştur. Bu dinamik faz diyagramında karma fazlar ile temel fazları birbirinden ayıran birinci derece faz geçiş çizgilerinin olduğu bulunmuştur.



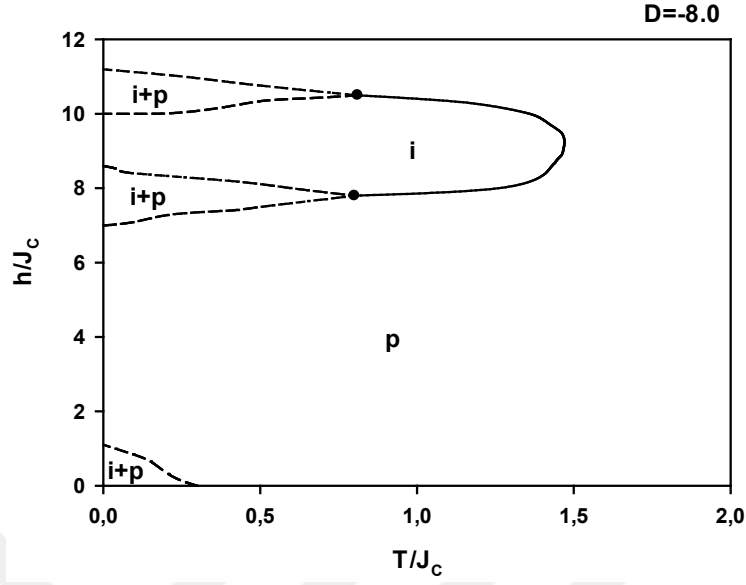
Şekil 3.12. Karma spin-1 ve spin-2 Ising nanotüp sisteminde $d=-5.0$ değeri için $(T/J_c, h/J_c)$ düzleminde dinamik faz diyagramı.

(iv) Şekil 3.12 grafiğinde $r=1.0$, $\Delta s=0.0$ ve $d=-6.0$ değerleri için $(T/J_c, h/J_c)$ ekseninde elde edilen dinamik faz diyagramı sunulmuştur. Oluşturulan bu dinamik faz diyagramında, şekil 3.11 ile yapısal olarak benzerdir ve indirgenmiş sıcaklıkta (T) ve manyetik alan genli (h) belirli değerlerinde bu dinamik faz diyagramında ferrimanyetik (i) ve paramanyetik (p) temel fazın yanında bir de üç tane karma i+p karma fazı görülmektedir. Sistemde bulunan temel fazlar (i ve p) arasındaki dinamik faz sınırları ikinci-derece faz geçiş çizgileri ile ayrıldığı görülmekte iken ayrıca sistemde bulunan karma fazlardan iki tanesi (i+p) i ve p fazından birinci-derece faz geçiş çizgileri ile ayrıldığı tespit edilmiştir. Ayrıca bu sistemde de iki adet dinamik üçlü noktanın varlığı tespit edilmiştir. Kristal alanın (d) negatif değerlerine aldıkça faz diyagramlarındaki karma fazlardan (i+p) fazın küçüldüğü tespit edilmiştir.



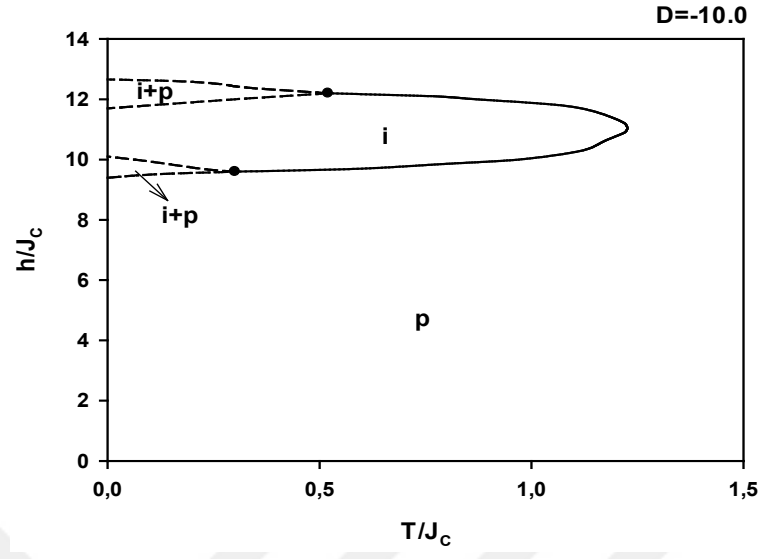
Şekil 3.13. Karma spin-1 ve spin-2 Ising nanotüp sisteminde $d=-6.0$ değeri için $(T/J_c, h/J_c)$ düzleminde dinamik faz diyagramı.

(v) Şekil 3.13’de $r=1.0$, $\Delta s=0.0$ ve $d=-8.0$ değerleri için $(T/J_c, h/J_c)$ ekseninde oluşturulan faz diyagramı gösterilmektedir. Bu faz diyagramında, indirgenmiş sıcaklıkta (T) ve manyetik alan genliğinde (h) bazı değerlerinde bu faz diyagramında da ferrimanyetik (i) ve paramanyetik (p) gibi temel fazlar tespit edilmiştir. Bunun yanında sistemde indirgenmiş sıcaklık ve manyetik alan genliğinin belirli değerlerinde bir de üç adet karma $i+p$ karma fazı görülmektedir Şekil 3.13’deki dinamik faz diyagramı yapısal olarak Şekil 3.12’deki dinamik faz diyagramına benzemektedir. Sistemde bulunan temel fazlar ikinci faz geçiş çizgileriyle birbirinden ayrılırken yine sistemde bulunan i ve p fazının birlikte bulunduğu karga fazlardan ($i+p$) fazı temel fazlardan birinci-derece faz geçiş çizgileriyle ayrılmaktadır. Yine Şekil 3.13’deki gibi sistemde kristal alanın negatif değerlerine gidildikçe faz diyagramlarındaki karga fazlardan ($i+p$) fazının küçüldüğü tespit edilmiştir.



Şekil 3.14. Karma spin-1 ve spin-2 Ising nanotüp sisteminde $d=-8.0$ değeri için $(T/J_c, h/J_c)$ düzleminde dinamik faz diyagramı

(vi) Şekil 3.14’de $r=1.0$, $\Delta s=0.0$ ve $d=-10.0$ değerleri için $(T/J_c, h/J_c)$ düzleminde elde edilen faz diyagramı gösterilmektedir. Bu faz diyagramında, indirgenmiş sıcaklıkta (T) ve manyetik alan genliğinde (h) sistemde iki adet temel faz bulunmakta ve bu temel fazlar ferrimanyetik (i) ve paramanyetik (p) fazlardır. Ayrıca sistemde indirgenmiş sıcaklık ve manyetik alan genliğinin belirli değerlerinde bir de iki adet karma $i+p$ fazı görülmektedir. Sistemde bulunan bu iki birinci-derece faz geçiş çizgileri birbirine yaklaşarak birleşmekte ve birinci- derece faz geçiş çizgisi artık sonlanarak, ikinci-derece faz geçiş çizgisi oluştuğu görülmekte ve burada dinamik üçlü kritik noktanın varlığı tespit edilmektedir. Grafikte Tek-iyon anizotropisinin negatif değerlerine gidildikçe faz diyagramlarındaki karma fazlardan ($i+p$) fazının küçüldüğü ve düşük manyetik alan değerindeki karma faz ($i+p$)’nin kristal alanın etkisiyle kaybolduğu gözlemlenmiştir.



Şekil 3.15. Karma spin-1 ve spin-2 Ising nontip sisteminde $d=-10.0$ değeri için $(T/J_c, h/J_c)$ düzleminde dinamik faz diyagramı

BÖLÜM 4

SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu akademik tez çalışmasında karma spin (1, 2) Ising nanotüp sistemi ortalama-alan yaklaşığı ve Glauber tipi stokastik dinamik yöntemlerinden yararlanılarak Ising nanotüp yapısının dinamik özellikleri analiz edilmiş ve ayrıntılı olarak incelenmiştir. Bu incelemede kullanılan teorik yöntemler ve bilgisayar programı vasıtasıyla teorik olarak karma spin (1, 2) Ising nanotüp sisteminin dinamik davranışları, Ising modelinden yararlanılarak sistemi tanımlayan Hamiltoniyen parametrelerinden en yakın komşu etkileşmelerinin ve kristal alan (tek-iyon anizotropisi)'nin etkileri araştırılmıştır. Karma spin (1, 2) Ising nanotüp sistemi için zamana bağlı dış manyetik alan varlığında ortalama alan dinamik denklemlerini oluşturabilmek için Master denklemlerinden ve Glauber dinamiğinden istifade edilmiştir.

Karma spin (1, 2) Ising nanotüp sistemi Glauber dinamiğine göre zamanla bazı değişimler gösterdiği ve bu değişimlerin $1/\tau$ zamanında olduğu sonucuna varılarak ortalama alan dinamik denklemleri elde edilmiştir. İlk olarak sistemde bulunan fazları tespit etmek için sistemi tanımlayan dinamik denklemleri (2.14), (2,22) ve (2,23) ifadeleri olarak elde edilmiştir. Sistemdeki mevcut fazların tespitinde sistemde bulunan manyetik alan genliğinden (h), kristal alan (d) ve sıcaklık (T) gibi parametrelerin farklı değerleri araştırılmıştır. (2.14), (2,22) ve (2,23) ile elde edilen denklemlerin analizi yapılırken Adams-Moulton kestirme ve düzeltme yöntemi kullanılarak ve sistemde bulunan parametreler kullanılmıştır. Başlangıç değerlerinin farklı durumları incelenerek sistemde ferrimanyetik (i), paramanyetik (p) ve karma ($i+p$) fazı gibi fazlarının olduğu tespit edildi. Bu fazlara karşılık gelen çözümler Şekil (3.1), Şekil (3.2), Şekil (3.3), Şekil (3.4) ve Şekil (3.5) ile verilmiştir. Şekil 3.1 ve Şekil 3.2'de sadece simetrik çözüm bulunduğu sonucuna varılarak sistemde temel fazlardan sadece paramanyetik faz bu şekillerde gösterilmiştir. Bu durumda sistemde $m_c(\zeta)$ ve $m_s(\zeta)$ parametrelerinin eşit olduğu ve sıfır değeri etrafında salınım yaptığı ve dış manyetik alan ile uyumlu olduğu gözlenerek rapor edilmiştir. Şekil 3.3 ve Şekil 3.4'de sunulan alt örgü mıknaatıslanmalarının zamanla değişimlerinde $m_c(\zeta) = \pm 1.0$ değeri etrafında salınım yaptığı ve $m_s(\zeta) = \pm 2.0$ değeri

etrafında salınım yaptığı gözlemlenmiş olurken bu grafiklerde ferrimanyetik (i) fazına rastlanarak bu grafikte dış manyetik alanla uyumlu olmadığı sonucuna varıldı. Şekil 3.5’de sunulan alt örgü miknatıslanmalarının zamanla değişimlerinde başlangıç değerlerine bağlı olarak sistemde hem ferrimanyetik (i) hemde paramanyetik (p) fazların bir arada buldukları tespit edildi. Yani şekil 3.5’de sistemde karma (i+p) fazı elde edilmiştir. Özetle Şekil 3.1, Şekil 3.2, Şekil 3.3, ve Şekil 3.4 incelendiğinde sistemde sadece temel i ve p fazlarının olduğu, Şekil 3.4’de ise karma (i+p) fazının olduğu tespit edilmiştir.

Sistemdeki mevcut fazlar arasındaki dinamik faz geçiş sınırlarının tespiti ve bu faz geçiş sınırlarının birinci- yada ikinci-derece faz geçiş çizgilerinde hangi ile ayrıldığı ise Adams Moulton kestirme ve düzeltme yöntemi ile Romberg integrasyonu metodu beraber kullanılarak dinamik düzen parametrelerinin yani (M_α) sıcaklığa bağlı değişimleri ile hesaplanmıştır. Bunun için farklı etkileşme parametrelerine verilen farklı değerler için analiz edilerek Şekil 3.6, Şekil 3.7, Şekil 3.8’de dinamik faz geçiş sıcaklıklarının nasıl oluşturulduğu ve fazlar arasındaki dinamik faz sınırlarının nasıl türetildiği gösterildi. Bu grafiklerde bazı parametreler belirlenerek tanımlandı. Bunlardan birinci derece faz geçiş sıcaklığını belirten parametre T_i ile ifade edilirken, manyetik olmayan fazlardan ve ferrimanyetik fazdan paramanyetik faza ikinci derece faz geçiş sıcaklığını belirten parametre ise T_c ile ifade edildi. Dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıklarından faydalanılarak farklı etkileşim parametreleri, yüzeyler arası etkileşim parametresi (r), yüzey değişim etkileşim parametresi (Δs) ve kristal alan (d)’nin farklı değerleri için (T/J_c ve h/J_c) eksenindeki dinamik faz diyagramları Şekil 3.8 - Şekil 3.14 arasında sunuldu. Belirtilen bu düzlemlerde yedi adet farklı topolojik yapıda dinamik faz diyagramları oluşturuldu. Bu dinamik faz diyagramlarında kesikli çizgiler ve sürekli çizgiler olduğu gözlemlenerek bu çizgilerin tanımları yapıldı. (T/J_c ve h/J_c) eksenlerinde oluşturulan dinamik faz diyagramlarında görülen kesikli çizgiler birinci derece faz geçiş çizgilerini gösterirken sürekli çizgiler ise ikinci derece faz geçiş çizgilerini belirtilmektedir. Ayrıca bu faz diyagramlarında içi dolu kürelerin varlığı tespit edildi ve bu kürelerin dinamik üçlü kritik noktayı belirtmektedir.

Karma spin (1, 2) Ising nanotüp sistemi dinamik faz diyagramları incelendiğinde, bu sistemin dinamik özelliklerinin çok güçlü bir şekilde etkileşim parametrelerine bağlı

oldukları sonucuna varılmıştır. Özellikle bu durum kristal alanın negatif yüksek değerleri incelendiğinde dinamik faz diyagramları incelenerek tespit edilmiştir.

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



KAYNAKLAR

- 1- Uldrich, J. & Newberry, D. (2005). Sıradaki büyük şey aslında çok küçük. (T. Alıcı, ed.) Ledo Yyayınları.
- 2- Ramsden, J., “Nanotechnology: an introduction” Elsevier, (ISBN: 978-0-08-096447- 8), 2011.
- 3- Shong C. W., Haur S. C., Wee A. T. S., “ Science at the Nanoscale: An Introductory Textbook”, Singapore: Pan Stanford Pub., s.214, 2010.
- 4- Wegrowe J. E., Kelly D., Jaccard Y., et. al, “Current-induced magnetization reversal in magnetic nanowires”, Europhysics Letters, 45, s. 626-632, 1999.
- 5- G. Ali Mansoori and T. A. Fauzi Soelaiman, "Nanotechnology – An Introduction for the Standards", Journal of ASTM International, 2 (2005) 1-21.
- 6- Lindsay S., “Introduction to Nanoscience” , Oxford University Press, 472,2010
- 7- Göçek İ., Kurşun S., “Küçük G.Tekstil endüstrisinde nanoteknoloji uygulamaları”, s.164 ,3/2006.
- 8- Mansuripur, M., “Magnetization reversal, coercivity, and the process of thermomagnetic recording in thin films of amorphous rare earth–transition metal alloys”, Journal of Applied Physics, 61, 1580-1587, 1987.
- 9- 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
- 10- 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.
- 11- Fert A., Piraux L., “Magnetic nanowire”, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 200, s.338-358, 1999.
- 12- Son, S.J.,Reichet, J., He, B., Schuchman, M., Lee, S.B., “Magnetic nanotubes for magnetic-field-assisted bioseparation, biointeraction, and drug delivery”, J. Am. Chem. Soc., 127, 7316, 2005
- 13- Wong, A.P.Y., Chan, M.H.W., “Liquid-vapor critical point of ^4He in aerogel”, Physical Review Letters, 65, s. 2567-2570, 1990.
- 14- Alexiou C., Schmidt A., Klein R., Hullin P., Bergemann C., Arnold W., “Magnetic drug targeting: biodistribution and dependency on magnetic field strength”, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 252, s. 363-366, 2002.

- 15- Ateş, H., "Nano parçacıklar ve nano teller", Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi Part:3(1), 437-442, 2015
- 16- Bushan, B., "Handbook of nanotechnology" Third edition., ISBN: 978-3-642-02524-2, (2010).
- 17- Dresselhaus, M.S., Lin, Y.M., Rabin, O., Jorio, A., SouzaFilho, A.G., Pimenta, M.A., Saito, R., Samsonidze, G.G., Dresselhaus, G., "Nanowires and nanotubes", Mater. Sci. Eng. C., 23, 129–140 2003.
- 18- Huber, C.A., Huber, T.E., Sadoqi, M., Lubin, J.A., Manalis, S., Prater, C.B., "Nanowire array composites", Science., 263, 800–802, 1994.
- 19- Vizcaino, J.L., P., Nunez, C.G.A., "Fast, effective manipulation of nanowires for electronic devices". SPIE newsroom., doi:10.1117/2.1201312.005260. edit 2013.
- 20- Engel, Y., Elnathan, R., Pevzner, A., Davidi, G., Flaxer, E., Patolsky, F., "Supersensitive detection of explosives by silicon Nanowire arrays", Angewandte Chemie international edition., 49 (38): 6830– 6835. doi:10.1002/anie.201000847, 2010
- 21- Elnathan, R., Kwiat, M., Pevzner, A., Engel, Y., Burstein, L., Khatchourints, A., Lichtenstein, A., Kantaev, R., Patolsky, F., "Biorecognition layer engineering: overcoming screening limitations of
- 22- Schofield, S.L., Bowers, R.G., Renormalization Group Calculations on a Mixed-Spin System in 2 Dimensions, J. Phys. A: Math. Gen, 13, 3697-3706, 1980
- 23- Schofield, S.L., Bowers, R.G., High-Temperature Series Expansion Analyses of Mixed-Spin Ising-Models, J. Phys. A: Math. Gen, 14, 2163-2169, 1981.
- 24- Tang, F.K., Critical Couplings of Mixed Spin-1/2 and Spin-S Ising Model: A Free-Fermion Approximation, J. Phys. A: Math. Gen. 21, L1097, 1988.
- 25- Iwashita, T., Uryu, N., The Effect of the Biquadratic Exchange Interaction on the Curie-Temperature of the Mixed Ising Ferromagnet, Phys. Lett. A, 96, 311-313, 1983.
- 26- Kaneyoshi, T., Curie Temperatures and Tricritical Points in Mixed Ising Ferromagnetic Systems. J. Phys. Soc. Jpn., 56, 2675-2680, 1987.
- 27- Kaneyoshi, T., Curie Temperatures and Tricritical Points in Mixed Ising Ferromagnetic Systems. J. Phys. Soc. Jpn., 56, 2675-2680, 1987.

- 28- Kaneyoshi, T., Magnetic Properties of a Mixed Spin Ising-Model with Random Nearest-Neighbor Interactions, *J. Magn. Magn. Mater.*, 92, 59-67, 1990.
- 29- Siqueira, A.F., Fittipaldi, I.P., Thermodynamical Properties of a Mixed Ising Ferromagnetic System, *J. Magn. Magn. Mater.*, 54-57, 678-680, 1986.
- 30- Kaneyoshi, T., Theory of Surface Phase-Diagrams in Semi-Infinite Mixed Ising Alloys *J. Phys. Soc. Jpn.*, 56, 2886-2895, 1987.
- 31- Plascak, J.A., Multicritical Points in the Ferromagnetic Binary Ising Model, *Physica A*, 198, 655-665, 1993
- 32- Vieira, A.P., de Carvalho, J.X., Salinas, S.R., Phase Diagram of a Random-Anisotropy Mixed-Spin Ising Model, *Phys. Rev. B*, 63, 184415, 2001.
- 33- Zhang, G.M., Yang, C.Z., Monte-Carlo Study of the 2-Dimensional Quadratic Ising Ferromagnet with Spins $s = 1/2$ and $s = 1$ and with Crystal-Field Interactions, *Phys. Rev. B*, 48, 9452-9455, 1993
- 34- Buendia, G.M., Novotny, M.A., Numerical Study of a Mixed Ising Ferrimagnetic System, *J. Phys.: Condens. Matter*, 9, 5951-5964, 1997.
- 35- Tucker, J.W., The Ferrimagnetic Mixed Spin-1/2 and Spin-1 Ising System, *J. Magn. Magn. Mater.*, 195, 733-740, 1999
- 36- Ekiz, C., Keskin M., Magnetic Properties of the Mixed Spin-1/2 and Spin-1 Ising Ferromagnetic System, *Physica A*, 317, 517-534, 2003.
- 37- Fu, H.H., Yao, K.L., Liu, Z.L., Thermodynamic Properties of Mixed-Spin Chains in Magnetic Field by the Transfer Matrix Method, *J. Magn. Magn. Mater.*, 305, 253-258, 2006
- 38- Leite, V.S., Figueiredo, W., Spin-glass surface disorder on the magnetic behaviour of antiferromagnetic small particles, *Physica A*, 350: 379–392 2005.
- 39- Zaim, A., Kerouad, M., Amraoui, Y.E., Magnetic properties of a ferrimagnetic core/shell nanocube Ising model: A Monte Carlo simulation study, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 321: 1077–1083 2009
- 40- Zaim, A., Kerouad, M., Monte Carlo simulation of the compensation and critical behaviors of a ferrimagnetic core/shell nanoparticle Ising model, *Physica A*, 389: 3435-3442 2010.
- 41- Liu, S.Y., Soh, A.K., Hong, L., Lateral surface induced effects on ultra-thin amorphous Co nanowire, *Journal of Physics D: Applied Physics*, 42: 215002-215008 2009.

- 42- Konstantinova, E., Theoretical simulations of magnetic nanotubes using Monte Carlo method, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 320: 2721– 2729 2008
- 43- Iglesias, O., Labarta, A., Finite-size and surface effects in maghemite nanoparticles: Monte Carlo simulations, *Physical Review B*, 63: 184416- 184427 2001
- 44- Jiang, W., Li, XX., Guo, AB., Guan, HY., Wang, Z. and Wang, K, Magnetic properties and thermodynamics in a metallic nanotube, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 355: 309-318 2014.
- 45- Kaneyoshi, T., Characteristic phenomena in nanoscaled transverse Ising thin films with diluted surfaces, *Physica B-Condensed Matter*, 407: 4358-4364 2012.
- 46- Hanafin, R., Archer, T., Sanvito, S., Magnetism of wurtzite CoO nanoclusters, *Physical Review B*, 81: 054441-054448 2010.
- 47- Kaneyoshi, T., “Magnetic properties of a cylindrical Ising nanowire or nanotube”, *Phys. Status Solidi.*, B 248, 250-258, 2011.
- 48- Jiang, W., Zhang, F., Li, XX., Guan, HY., Guo, AB. And Wang, Z, Surface effects on a ferrimagnetic hexagonal nanowire with single-ion anisotropis and transverse field, *Physica E-Low-Dimensional Systems & Nanostructures*, 47: 95-102 2013
- 49- Yüksel, Y. Aydın, E., and Polat, H., Thermal and magnetic properties of a ferrimagnetic nanoparticle with spin-3/2 core and spin-1 shell structure, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 323: 3168-3175 2011.
- 50- Zhang, Q., Wei, G., Xin, Z., Liang, Y., Effective-Field Theory and Monte Carlo Study of a Layered Mixed Spin-1 and Spin-2 Ising System on Honeycomb Lattice, *J. Magn. Magn. Mater.*, 280, 14, 2004
- 51- Wie, G.-Z., Gu, Y.-W., Liu, J., Mean-Field and Monte Carlo Studies of a Mixed Spin-1 and Spin-2 Ising System with Different Anisotropies *Phys. Rev. B*, 74,024422, 2006.
- 52- Iwashita, T., et al., Mixed Ising Spin System with Higher-Order Spin Interaction, *J. Magn. Magn. Mater.* 226, 577, 2001
- 53- Şarlı, N., “Band structure of the susceptibility, internal energy and specific heat in a mixed core/shell Ising nanotube”, *Physica B*, 411: 12-25 2013.
- 54- Canko, O., Erdinç, A., Taşkın, F., and Atiş, M., Some characteristic behavior of spin-1 Ising nanotube, *Physics Letter A*, 375: 3547-3551 2011.

- 55- Feraoun, A., Zaim, A., Kerouad, M., “Monte Carlo study of a mixed spin (1,3/2) ferrimagnetic nanowire with core/Shell morphology”, *Physica B Condensed Matter.*, 445, 74-80, 2014
- 56- Kocakaplan, Y. and Kantar, E., “Thermodynamic and magnetic properties of the hexagonal type Ising nanowire”, *European Physical Journal B*, 87: 135-142 2014.
- 57- Deviren, B., Ertaş, M., Keskin, M., “Dynamic magnetizations and dynamic phase transitions in a transverse cylindrical Ising nanowire”, *Physica Scripta*, 85,5,1025-1030, 2012
- 58- Kantar, E., Ertaş, M., “Cylindrical Ising nanowire in an oscillating magnetic field and dynamic compensation temperature”, *Superlattices Microstruct.*, 75, 831-842, 2014.
- 59- Ertaş, M., Kantar, E., “Cylindrical Ising Nanowire With Crystal Field: Existence Of A Dynamic Compensation Temperatures”, *Phase Transitions.*, 88, 567-581, 2015.
- 60- Vatansever, E., Polat, H., “Non-equilibrium dynamics of a ferrimagnetic core-shell nanocubic particle”, *Physica A.*, 394, 82-89, 2014.
- 61- 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
- 62- Ertaş, M., Kocakaplan, Y., “Dynamic behaviors of the hexagonal Ising nanowire”, *Phys. Lett. A.*, 378, 845-850, 2014
- 63- Yüksel, Y., Vatansever, E., Polat, H., “Dynamic phase transition properties and hysteretic behavior of a ferrimagnetic core-shell nanoparticle in the presence of a time dependent magnetic field”, *Journal of Physics: Condensed Matter.*, 24, 436004-436017, 2012.
- 64- Glauber, R.J., Time-dependent statistics of the Ising model. *Journal of Mathematical Physics*, 4, 294-307, 1963.
- 65- 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.
- 66- Keskin, M., Canko, O., Temizer, Ü., “Dynamic Phase Transition in the Kinetic Spin-1 Blume-Capel model Under a Time-Dependent Oscillating External Field”, *Phys. Rev., E*, 72, 036125-1-036125-10, 2005.

- 67- Keskin, M., Canko, O., Kantar, E., “Dynamic Dipole and Quadrupole Phase Transitions in the Kinetic Spin-1 Model”, *Int. J. Mod. Phys., C*, 17, 1239-1255, 2006.
- 68- Keskin, M., Canko, O., Temizer, Ü., “Dynamic Phase Transition in the Kinetic Blume-Emery-Griffiths Model in an Oscillating External Field”, *Int. J. Mod. Phys., C*, 17, 1717-1737, 2006.
- 69- Keskin, M., Canko, O., Deviren, B., “Dynamic Phase Transition in the Kinetic Spin-3/2 Blume-Capel Model Under a Time-Dependent Oscillating External Field”, *Phys. Rev., E*, 74, 011110-1-011110-10, 2006
- 70- Keskin, M., Canko, O., Kirak, M., “Dynamic Dipole and Quadruple Phase Transition in the Kinetic Spin-3/2 Model”, *J. Stat. Phys.*, 127, 359-380, 2007.
- 71- Canko, O., Deviren, B., Keskin M., “Dynamic Phase Transition in the Spin-3/2 Blume-Emery-Griffiths Model in an Oscillating Field”, *J. Phys.: Condens. Matter.*, 18, 6635-6653, 2006
- 72- Keskin, M., Canko, O., Ertas, M., “Kinetics of the Spin-2 Blume-Capel Model Under a Time-Dependent Oscillating External Field”, *J. Exp. Theor. Phys.*, 105, 1190-1197, 2007.
- 73- Ertas, M., Canko, O., Keskin, M., “Dynamic Phase Transition in the Kinetic Spin-2 Blume-Emery-Griffiths Model in an Oscillating Field”, *J. Magn. Magn.Mater.*, 320, 1765-1774, 2008.
- 74- Buendia, G.-M., Machado, E., “Kinetics of a Mixed Ising Ferrimagnetic System”, *Phys. Rev., E*, 58, 1260, 1998.
- 75- Keskin, M., Canko, O., Polat, Y., “Dynamic Phase Transitions in the Kinetic Mixed Spin-1/2 and Spin-1 Ising Ferrimagnetic System Under Time- Dependent Magnetic Field”, *J. Korean Phys.Soc.*, 53, 497, 2008
- 76- Keskin, M., Kantar, E., Canko, O., “Kinetics of a Mixed Spin-1 and Spin-3/2 Ising System Under a Time-Dependent Oscillating Magnetic Field”, *Phys. Rev. E.*, 77, 051130, 2008.
- 77- Keskin, M., Canko, O., Güldal, S., “Kinetics of a Mixed Spin-1/2 and Spin-2 Ising Ferrimagnetic System”, *Phys. Lett., A*, 374, 1-7, 2009.
- 78- Keskin, M., Canko O., Bati, M., “Dynamic Phase Diagrams of a Mixed Spin-1 and Spin-5/2 Ising System in an Oscillating Magnetic Field”, *J. Korean Phys. Soc.*, 55, 1344-1356, 2009

- 79- Keskin, M., Polat Y., “Phase Diagrams of a Nonequilibrium Mixed Spin-3/2 and Spin-2 Ising System in an Oscillating Magnetic Field”, *J. Magn. Magn. Mater.*, 321, 3905, 2009.
- 80- Keskin, M., Ertas, M., Canko, O., “Dynamic Phase Transitions and Dynamic Phase Diagrams in the Kinetic Mixed Spin-1 and Spin-2 Ising System in an Oscillating Magnetic Field”, *Phys. Scr.*, 79, 025501, 2009
- 81- Deviren, B., Keskin, M., Canko, O., “Kinetics of a Mixed Spin-1/2 and Spin-3/2 Ising Ferrimagnetic Model”, *J. Magn. Magn. Mater.*, 321, 458-466, 2009.
- 82- Deviren, B., Keskin, M., Canko, O., “Dynamic Phase Transitions in the Kinetic Mixed Spin-1/2 and Spin-5/2 Ising Model Under a Time-Dependent Oscillating Magnetic Field”, *Phase Trans.*, 83, 526-542, 2010.
- 83- Deviren, B., Keskin, M., “Dynamic Phase Transitions and Compensation Temperatures in a Mixed Spin-3/2 and Spin-5/2 Ising System”, *J. Stat. Phys.*, 140, 934-947, 2010.