

**T.C.
BOZOK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI**

Yüksek Lisans Tezi

**KRİSTAL ALAN VE KUADRATİK ETKİLEŞMELİ
NANOPARÇACIĞIN SPİN-1 MODELİNİN ÇİFT
YAKLAŞIM YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ**

Songül ÖZÜM

**Tez Danışmanı
Doç. Dr. Orhan YALÇIN**

Yozgat 2010

**T.C.
BOZOK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI**

Yüksek Lisans Tezi

**KRİSTAL ALAN VE KUADRATİK ETKİLEŞMELİ
NANOPARÇACIĞIN SPİN-1 MODELİNİN ÇİFT
YAKLAŞIM YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ**

Songül ÖZÜM

**Tez Danışmanı
Doç. Dr. Orhan YALÇIN**

Yozgat 2010

T.C.
BOZOK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

TEZ ONAYI

Enstitümüzün Fizik Anabilim Dalı 7011050005 numaralı öğrencisi Songül Özüm'ün hazırladığı “**Kristal alan ve Kuadratik Etkileşmeli Nanoparçacığın Spin-1 Modelinin Çift Yaklaşım Yöntemi İle incelenmesi**” başlıklı ~~DOKTORA~~/YÜKSEK LİSANS tezi ile ilgili TEZ SAVUNMA SINAVI, Lisansüstü Eğitim-Öğretim ve Sınav Yönetmeliği uyarınca 09/07/2010 Cuma günü saat 10'da yapılmış, tezin onayına OY ÇOKLUĞU / OY BİRLİĞİYLE karar verilmiştir.

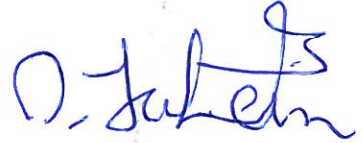
Başkan : Doç. Dr. Recep ŞAHİNGÖZ



Üye : Doç. Dr. Hidayet ÇETİN



Üye : Doç. Dr. Orhan YALÇIN (Danışman)



ONAY:

Bu tezin kabulü, Enstitü Yönetim Kurulu'nun 12/7/10 tarih ve 09 sayılı kararı ile onaylanmıştır.



Enstitü Müdürü
Prof. Dr. Ergül HAMZAÖĞÜ
Bozok Üniversitesi
Fen Bil. Enst. Müdürü

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET.....	iii
ABSTRACT.....	v
TEŞEKKÜR.....	vii
TABLolar LİSTESİ.....	viii
ŞEKİLLER LİSTESİ.....	ix
KISALTMALAR LİSTESİ.....	xi
1. GİRİŞ.....	1
1.1. Konuyla İlgili Yayınlar ve Çalışmalar.....	1
1.2. Stoner-Wohlfarth Modeli.....	5
1.3. Manyetizma Teorisi.....	8
1.3.1. Manyetizmanın Kısa Tarihçesi.....	9
1.3.2. Manyetizmanın Temelleri.....	9
1.3.3. Manyetik Malzemelerin Sınıflandırılması.....	12
1.3.4. Histerezis Eğrisi ve Manyetik Özellikler.....	19
1.4. Nanoteknoloji: Boyutlar.....	21
1.4.1. Nanoteknolojinin Önemi.....	22
1.4.2. Nanoparçacıkların Önemi.....	22
1.4.3. Nanoparçacığın Manyetik Nano Sistemlerdeki Yeri.....	23
2. TEORİK YÖNTEM.....	25
2.1. Ising Modeli.....	25
2.2. Spin-1 Ising Modeli.....	27
2.3. Çift (Pair) Yaklaşımı.....	28
2.4. Kristal Alan ve Kuadratik Etkileşmeli Nanoparçacığın Spin-1 Modeli İle İncelenmesi.....	29
3. TEORİK BULGULAR VE TARTIŞMALAR.....	35
3.1. Heterojen Nanoparçacık İçin Manyetizasyonun (Mıknatıslanmanın) Sıcaklığa Bağlılığı.....	35
3.2. Homojen Nanoparçacığın Boyuta Bağlılığı.....	37
3.3. Kompozit (Core-Shell) Nanoparçacığın Boyuta Karşı Gelişimi.....	39

3.4. Kompozit (Core-Shell) Nanoparçacığın Uygulanan Farklı Sıcaklık Değerlerinde Mıknatıslanmanın Dış manyetik Alana Karşı Gelişimi.....	41
3.5. Farklı Tür Kompozit (Core-Shell) Nanoparçacığın Boyuta Karşı Gelişimi.....	43
4. SONUÇ VE TARTIŞMA.....	45
KAYNAKLAR.....	47
EKLER.....	52
ÖZGEÇMİŞ.....	53

KRİSTAL ALAN VE KUADRATİK ETKİLEŞMELİ NANOPARÇACIĞIN SPİN-1 MODELİNİN ÇİFT YAKLAŞIM YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ

Songül ÖZÜM

**Bozok Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı
Yüksek Lisans Tezi**

2010; Sayfa: 53

Tez Danışmanı: Doç. Dr. Orhan YALÇIN

ÖZET

Bu tez çalışmasında; bilineer, kuadratik ve kristal alan etkileşmeli spin-1 Ising modelleri ile incelenen nanoparçacığın manyetik özellikleri incelendi. Nanoparçacık içindeki spinler sırasıyla; çekirdek, ara yüzey ve yüzey olmak üzere üç bölgeye ayrıldı. Ising modeli için kullanılan Hamiltoniyen; bilineer, kuadratik ve kristal alan etkileşmeli tek nanoparçacık için genel anlamda yazıldıktan sonra her üç bölgeyi de kapsayacak şekilde genişletildi. Çift yaklaşım; bilineer, kuadratik ve kristal alan Hamiltoniyenli spin-1 Ising modeline uygulanarak denklemler türetildi. Serbest enerji ifadesi kabuk ve öz (core-shell nanoparçacık) için detaylıca elde edildi. Farklı çap ve sıcaklık değerleri için bilineer, kuadratik ve kristal alan etkileşmeli homojen ve heterojen nanoparçacığın manyetik özellikleri incelendi. Uygulanan dış manyetik alanın, kuadratik ve kristal alanın farklı değerleri için mıknatıslanmanın sıcaklığa göre gelişimi ve heterojen nanoparçacık için histerezis eğrileri elde edildi. Bilineer, kristal alan ve kuadratik etkileşmeli homojen ve heterojen tek nanoparçacık için kalıcı mıknatıslanmanın nanoparçacığın yarıçapına göre değişimi detaylıca araştırıldı.

Ising modelleri, ilk olarak ferromanyetizma için kurulmuş ve daha sonra da değişik manyetik sistemler için geliştirilmiş modellerden birisidir. Bu modelleri ve kullanım alanlarını

geniřletmeye ynelik her teorik alıřma ncelikle manyetik nanoparacık sistemleri, nanomıknatıslar, manyetik ince filmler, manyetik akıřkanlar v.b. gibi birok teknolojik neme sahip arařtırma alanlarında yapılan deneysel alıřmalara ve bu alıřmalarda elde edilen nemli bulgulara ıřık tutmaktadır. Yapılan bu tez; tezde kullanılan ift yaklařım ynteminin nanoparacıklara uygulanması yapılabilcek farklı teorik alıřmalara taban oluřturmuřtur. Deneysel olarak elde edilmesi ok kolay olmayan kabuk-ekirdek nanoparacıkların manyetik zelliklerinin teorik olarak nceden incelenmesine fırsat saęlamaktadır. Manyetik nanoparacık sistemlerin DNA'lara tutturulması, zararlı molekllerin tespit ve teřhisinde, biyo-medikal alanda son derece kullanım fırsatı sunduęu iin bunların modellenmelerinde kolaylık saęlamaktadır.

Anahtar Kelimeler: Nanoparacık, Ising Modeli, ift Yaklařım Yntemi, Nano Manyetizma

**A STUDY WITH PAIR APPROXIMATION OF SPIN-1 ISING MODEL OF
NONINTERACTING NANOPARTICLES WITH QUADRATIC AND
CRYSTAL FIELD INTERACTIONS**

Songül ÖZÜM

**Bozok University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Physics
Master of Science Thesis**

2010; Page: 53

Thesis Supervisor: Assoc. Prof. Orhan YALÇIN

ABSTRACT

In this thesis; bilinear, quadratic and crystal field interactions of spin-1 Ising model was studied to investigate the magnetic properties of noninteracting monodomain nanoparticles. The Ising spins in three parts that are core, core-surface, and surface within the nanoparticle were incorporated. After the Hamiltonian which is used for Ising model was written generally, it was written for three parts. Equations were solved for core-shell nanoparticle by using the pair approximation for bilinear, quadratic and crystal field interactions Hamiltonian of spin-1 Ising model. The free energy was calculated for core-shell nanoparticle. Magnetic properties were studied for bilinear, quadratic and crystal field interactions of homogeneous and composite nanoparticles for different values of temperature and diameter. Hysteresis loops of the homogeneous and composite system were plotted for different values of magnetic field and quadratic and crystal field values. The coercive field and its linear fit to the data were plotted as a function of radius of ferromagnetic nanoparticles.

The Ising model is firstly used for ferromagnetism and then is advanced for different magnetic systems. The theoretical studies are show the way for these models before all else magnetic nanoparticle systems, nanomagnet, magnetic thin film, magnetic fluid etc. a lot of

important technological experimental studies. This thesis is important because of the method which we used sets good example for other theoretical studies. It provides opportunity to examine prior to magnetic properties of core-shell nanoparticles which are difficult to get by experimental studies. It offers the opportunity for magnetic nanoparticle systems to keep the DNA, detection and identification of harmful molecules, in the bio-medical fields, so it gets an extremely convenient of their modellings.

Keywords: Nanoparticle, Ising Models, Pair Approximation Methods, Nanomagnetism.

TEŞEKKÜR

Yüksek lisans çalışmalarım süresi içinde, gerek ders dönemi gerekse tez dönemi boyunca, yardım ve desteğini esirgemeyen, akademik çalışmalarında yardımcı olan tez danışmanım Sayın Doç. Dr. Orhan YALÇIN'na teşekkür ederim.

Çalışmalarımın her aşamasında benden yardımlarını esirgemeyen Akdeniz Üniversitesi Fizik Bölümü Öğretim Üyesi Sayın Doç. Dr. Rıza ERDEM'e ve adını burada sayamadığım Bozok Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı Öğretim Elemanlarına, çalışmalarım süresince vaktini ayırıp ilgi ve desteğini üzerimden eksik etmeyen arkadaşım Nur ELMAS'a teşekkürü bir borç bilirim.

Hayatım boyunca koruyan, kollayan ve maddi-manevi desteğini esirgemeyen annem Firuze ÖZÜM'e ve babam Tahir ÖZÜM'e, çalışmalarımın her aşamasında desteğini esirgemeyen Çankırı Karatekin Üniversitesi Öğretim Görevlisi Sayın Murat AYDEMİR'e ve burada ismini sayamadığım diğer tüm arkadaşlarıma içtenliğimle teşekkür ederim.

TABLÖLAR LİSTESİ

Sayfa

Tablo 1.1.	Manyetik Malzemeler ve Alınganlık Değerlerinin Gösterimi.....	19
Tablo 2.1.	Nanoparçacığın yarıçapına göre çekirdek, yüzey ve ara yüzeydeki atom sayılarının iki boyuttaki değerleri.....	34

ŞEKİLLER LİSTESİ

Sayfa

Şekil 1.1:	Stoner-Wholfarth parçacık için temsili gösterimi ve sisteme ait koordinat sistemi.....	7
Şekil 1.2:	Manyetik alan içerisindeki mıknatıslanmış cisimler.....	10
Şekil 1.3:	Diyamanyetik bir malzemede atom dizilişlerinin temsili resmi....	12
Şekil 1.4:	Diyamanyetik bir malzemenin M-H grafiği.....	13
Şekil 1.5:	Paramanyetik bir malzemede manyetik momentlerin temsili dizilimi.....	14
Şekil 1.6:	Paramanyetik bir malzemenin temsili M-H grafiği.....	14
Şekil 1.7:	Paramanyetik bir malzemenin temsili M-T grafiği.....	15
Şekil 1.8:	Ferromanyetik bir malzemede manyetik momentlerin temsili dizilimi.....	16
Şekil 1.9:	Ferromanyetik bir malzemenin temsili M-H grafiği.....	16
Şekil 1.10:	Antiferromanyetik bir malzemede manyetik momentlerin temsili dizilimi.....	17
Şekil 1.11:	Antiferromanyetik bir malzemenin temsili M-H grafiği.....	17
Şekil 1.12:	Ferrimanyetik bir malzemede manyetik momentlerin temsili dizilimi.....	18
Şekil 1.13:	Ferrimanyetik bir malzemenin temsili M-H grafiği.....	18
Şekil 1.14:	Bir ferromanyet için örnek histerezis eğrisi.....	20
Şekil 1.15:	Nano yapıli malzemelerin manyetik özelliklerinin temsili gösterimi ve sınırları.....	24
Şekil 2.1:	İki boyutta Ising modelinin temsili gösterimi.....	25
Şekil 2.2:	Heterojen Nanoparçacık içi mıknatıslanma değeriinin indirgenmiş sıcaklığa göre değışimi.....	26
Şekil 2.3:	Heterojen nanoparçacık için histerezis eğrisi.....	26
Şekil 2.4:	Üç boyutlu olarak tek bir nanoparçacığın kesit görünümü.....	30
Şekil 3.1:	Farklı kuadratik (K) ve kristal alan (D) değeriileri için mıknatıslanma (manyetizasyon) değeriinin sıcaklığa karşı eğrisi....	35

Şekil 3.2:	Farklı kuadratik ve sabit kristal alan için mıknatıslanma değerinin sıcaklığa karşı eğrisi.....	36
Şekil 3.3:	Tek domen nanoparçacık için mıknatıslanma değerinin indirgenmiş sıcaklığa göre değişimi.....	37
Şekil 3.4:	Homojen nanoparçacık için histerezis eğrisi (solda) ve kalıcı alanın yarıçapa göre değişim (sağda) eğrisi.....	38
Şekil 3.5:	Homojen nanoparçacık için farklı etkileşmelerde kalıcı alanın yarıçapa göre değişimi.	39
Şekil 3.6:	Kompozit nanoparçacık için farklı büyüklükteki histerezis eğrisi..	40
Şekil 3.7:	Kompozit nanoparçacık için farklı K değerlerindeki M-H eğrisi...	40
Şekil 3.8:	Kompozit nanoparçacık için farklı K değerlerinde (a) $D = 0.0$ ve (b) $D = 0.5$ için farklı indirgenmiş sıcaklık değerlerindeki M-H değişimi.....	41
Şekil 3.9:	Kompozit nanoparçacık için (c) $K = 2J_0$ ve (d) $K = J_0/2$ değerlerindeki M-H eğrisi.....	42
Şekil 3.10:	Kalıcı alanın farklı K değerleri için (H_c) sıcaklığa göre değişimi...	42
Şekil 3.11:	Sabit kristal alan değerinde kompozit nanoparçacık için farklı K değerlerindeki görünümü.....	43

KISALTMALAR LİSTESİ

AFM	:	Antiferromanyetik
FM	:	Ferromanyetik
H_C	:	Zorlayıcı Alan
T_N	:	Neel sıcaklığı
M	:	Mıknatıslanma
K	:	Kuadratik
J	:	Bilineer
D	:	Kristal Alan Değeri
DFG	:	Dinamik Faz Geçiş
BEG	:	Blume-Emery-Griffiths
SW	:	Stoner-Wohlfarth
H	:	Dış Manyetik Alan
H_0	:	Dış Manyetik Alanın Başlangıç Değeri
B	:	Manyetik İndüksiyon
C	:	Çekirdek
CS	:	Çekirdek-Yüzey (ara bölge)
S	:	Yüzey
N_C	:	Çekirdekteki Spin Sayısı
N_{CS}	:	Çekirdek-Yüzey (ara bölge) Spin Sayısı
N_S	:	Yüzey Spin Sayısı

1. GİRİŞ

1.1. Konuyla İlgili Yayınlar ve Çalışmalar

Tek domen nanoparçacığın manyetik özellikleri son yıllarda tıp, biyoloji, askeri, biyo-molekül sistemleri ve fizik gibi geniş alanda büyük ilgi uyandırmaktadır. Düşük boyutlu sistemleri tanımlamak için ilk olarak Stoner-Wohlfarth modeli kullanılmıştır. Manyetik sistemlerdeki ferromanyetik nanoparçacık, birbirleri ile etkileşen ferromanyetik (FM) yüzey ve antiferromanyetik (AFM) çekirdekten oluşan tek domenli nanoparçacıktan oluşur. Bu ve benzeri çalışmalarda kullanılan modellerden biriside Ising modelidir. Bu modellerde parçacıkları oluşturan atomların spin değerleri kullanılır. Ising spin sistemlerinin nanoparçacıklara ilk uygulananı spin-1/2 modelidir [1].

Nano-boyuttaki malzemeler, hacimli (bulk) malzemelerden daha farklı yapısal, elektriksel ve manyetik özellikler gösterirler [2–3]. Örnek verilecek olunursa; nano boyuta getirilen malzemelerin kalıcı mıknatıslanmalarının artması, zorlayıcı alan değerlerinin artması ve dayanıklılığın (mukavemetin) artması gibi birçok örnek verilebilir. Yapılan deneysel çalışmalarda çeşitli yöntemlerle nano boyuta indirgenen malzemelerin manyetik özelliklerinin farklı sonuçlar gösterdiği bulunmuştur.

Antiferromanyetik nanoparçacıkların manyetizmasında demir (*Fe*) katkı (aşı) miktarının etkileri çalışılmıştır. Tek demir anizotropi içeren Heisenberg modeli ve Green fonksiyonu kullanılarak antiferromanyetik nanoparçacıkların kalıcı alan (koersivite) (H_C), Néel sıcaklığı T_N ve mıknatıslanma M , üzerindeki katkı (aşı) etkileri çalışılmıştır. Katkı (aşı) etkisinden kaynaklanan oda sıcaklığındaki mıknatıslanma deneysel olarak elde edilmiştir [4]. Nikel-ferrit (24 ± 4 nm) nanoparçacıklar, ferrit ve nikel tuzları kullanılarak kimyasal çökme metodu ile incelenmiştir. Azalan sıcaklık değerlerinde nanoparçacığın artan zorlayıcı alan değeri bulunmuştur [5].

Chern ve arkadaşları Fe_3O_4 ve Mn_3O_4 süper örgülerinin faz diyagramlarını ve telafi sıcaklıklarını (T_C : Curie sıcaklığı) bileşiklerin sıcaklığa bağlı karakteristiklerini

inceleyerek elde etmişlerdir [6]. Kageyama ve ark., nikel II format dehidratın $Ni(HCOO_2)2H_2O$ manyetik özelliklerini inceleyerek bu bileşiğin düşük sıcaklıklarda zayıf bir ferrimanyet olduğunu bulmuşlardır [7]. Manyetik kayıt yüzeyleri, kalıcı manyetler ve yüksek frekansa uygun elektronik devre elemanları gibi uygulama alanları olan metal-ferrit nanoparçacıklar jel şekillendirme (styling gel) [8–9], ısı ayrışma (thermal decomposition) [10], sıcak su sentezi (synthesis of hot water) [11–12–13], kuru öğütme (dry grinding) [14] gibi yöntemlerle hazırlanmaktadır. Ancak bu yöntemlerin çoğu yüksek maliyetli ya da uzun ve zordur.

Seramik, normalde kırılgan bir malzemedir. Ancak tanecik büyüklüğü nano boyuta indirildiğinde kolaylıkla deforme olup şekillendirilebilmektedir. Nano büyüklükteki tozlarla takviye edilen bileşik (kompozit) (kompozit: makroskobik olarak birbirinden ayrı iki ya da daha fazla malzemenin bir araya getirilmesi ile imal edilen malzeme türüdür) malzemeler daha yüksek performans değerine ulaşmaktadırlar [15]. Yapılan deneysel bir çalışmada süspansiyon içerisindeki nano kristallerin tanecik büyüklüğü ve şekilleri renk farklılığına sebep olduğu gözlenmiştir [16]. Örnek vermek gerekirse; 1 nm büyüklüğündeki altın parçacıkları kırmızı renk görünmektedirler.

Spin–1 Ising modeli üç durumlu ve iki düzen parametrelili sistemlerdir [1]. Bilineer (J), bikuadratik (K) ve kristal alan (D) etkileşme Hamiltoniyenli spin–1 Ising modeli Bulume-Emery-Griffiths (BEG) veya spin–1 BEG modeli olarak adlandırılır. BEG modeli ilk defa, Bulume, Emery ve Griffiths tarafından 3He , 4He karışımlarının termodinamik davranışlarını incelemek için geliştirilmiştir [17].

Erdoğan ve Keskin çalışmalarında Bethe yaklaşımı olarak isimlendirilen kümesel değişim metodunun çift (pair) yaklaşımını kullanarak bilineer (J) ve bikuadratik (K) çift etkileşmeli spin–1 Ising modelinin denge özelliklerini hacim merkezli kübik kafeste incelemişlerdir. Bu çalışmada ilk olarak sabit ve sabit olmayan dipol ve kuadrapolar moment düzen parametrelerinin termal değişimleri gözlenmiştir. $\alpha = J/K$ değeri azaldığında geçiş sıcaklığının da azaldığı, sabit ve sabit olmayan düzen parametrelerinin bir kısmının da kaybolduğu gözlenmiştir. Kuadrapolar fazda modelin dengede olmayan davranışları incelenmiştir [18]. Erdem, istatistiğin denge

teorisini ve termodinamiğin tersinmez sürecini kullanarak bilinear ve bikuadratik etkileşmeli spin-1 Ising modelinin manyetik durulma teorisini incelemiştir. Manyetik Gibbs enerjisi için moleküler alan ifadesini kullanarak, tersinmez süreçte bulunan manyetik Gibbs enerjisini hesaplamıştır. Dinamik ve karmaşık manyetik alınganlık için ifade türetmiştir [19]. Erdem tersinmez termodinamiğin Onsager teorisini kullanarak, bilinear ve bikuadratik etkileşmeli spin-1 Ising modeli için karmaşık alınganlık veya dinamik alınganlığı hesaplamıştır [20]. Spin-1 ve spin-2 Blume-Capel Ising ferromanyetik sistemin Bethe örgüsü üzerindeki kesin çözümü Albayrak ve Yiğit tarafından yapılmıştır. Karma spin (1/2, 2) sistemi için telafi sıcaklıkları elde edilmiştir [21]. Ekiz ve Keskin modelin dinamiğini manyetik alan varlığında ve manyetik alan yokluğunda küme varyasyon yöntemi kullanarak incelemişlerdir [22].

Ortalama alan yaklaşımı ile karma spin (1/2, 3/2) Ising sistemlerinde dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıkları elde edilmiş ve dinamik faz diyagramları sunulmuştur [23]. Bahmand ve arkadaşları ortalama alan yaklaşımını kullanarak, olası kristal alan varlığında spin-1 ve spin-1/2 Ising ferrimanyetik sistemlerin manyetik özelliklerini çalışmışlardır. Uygun aralıklardaki kristal alan için, sistemin telafi sıcaklık davranışlarını ve yeniden oluşma (re-entrant) davranışı sergilediğini gözlemlemişlerdir [24]. Temizer ve arkadaşları zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında ortalama alan yaklaşımını kullanarak itici bikuadratik etkileşmeli ($K < 0$) kinetik Blume-Emery-Griffith (BEG) modelini incelemişlerdir. Glauber metodu kullanarak dinamik faz diyagramlarını sundular [25]. Keskin ve arkadaşları Glauber modelini kullanarak bilinear ve bikuadratik çift etkileşimli kinetik spin-3/2 Ising modelinin dinamik faz geçişlerini incelemişlerdir. Dokuz temel faz diyagramı elde edilmiştir [26]. Keskin ve arkadaşları ise BEG modelini en düşük kümesel değişim metodu ile incelemişlerdir. Sabit ve sabit olmayan düzen parametrelerinin faz geçişlerini elde etmişlerdir [27]. Albayrak BEG modelini karma spin (2, 5/2) Ising ferromanyetik sistemler için incelemiştir. Çalışmasında kristal alan ve kuadratik etkileşmeli alt kafes için faz diyagramlarını elde etmiştir [28]. Albayrak ve arkadaşları kristal alan etkileşimli spin-3/2 Ising modeli için Bethe örgüsü üzerinde faz diyagramlarını analiz etmişlerdir [29]. Ekiz Bethe örgüsü üzerinde karma Ising ferro ve ferrimanyetik sistemlerin manyetik özelliklerini incelemiştir [30]. Karma

spin $(3/2, 2)$ [31], $(3/2, 5/2)$ [32], sistemleri incelenmiş ve faz diyagramları elde edilmiştir.

Monte-Carlo metodu kullanılarak kübik kafes yapısında manyetik Ising spin-1 filmin kritik davranışlarında kristal alanın etkisi çalışılmıştır. Kristal alan etkileşiminin farklı değerleri için düzlemde faz diyagramları elde edilmiştir [33]. Monte-Carlo metodu kullanılarak iki boyutlu kare kafeste, dört spin etkileşimli spin-1/2 ve spin-1 Blume-Capel Ising ferrimanyetik modelin kritik davranışları ve manyetik özellikleri çalışılmıştır. Faz diyagramlarında dört spin etkileşimi ve kristal alan etkileşimi elde edilmiştir [34]. Boughrara ve Kerouad, Monte-Carlo metodunu kullanarak kübik kafes yapısında Ising sistemlerin manyetik özelliklerini ve kritik davranışlarını incelemiştir. Çalışmada sistem A ve B, spin-1/2 ve spin-1 gibi iki manyetik atom içermektedir. Faz diyagramlarına bağlı olarak değiş tokuş etkileşmesi üzerinde çalışılmıştır [35]. Kristal alan varlığında karma $(1/2, 3/2)$ ferromanyetik ve ferrimanyetik iki alt örgülü sistemin manyetik özellikleri çalışılmıştır [36]. Spin-fonon modeli esas alınarak ferromanyetik nanoparçacıkların boyut ve yüzey etkisi çalışılmıştır. Farklı yüzey spin-fonon etkileşim sabitleri için parçacık boyutunun azaltılmasıyla fononun enerjisinin azaldığı veya arttığı gözlenmiştir [37].

Etkileşmeyen nanoparçacıkların klasik manyetik özelliklerini tanımlamak için bazı metotlar önerilmiştir. Çift yaklaşım kullanılarak, nanoparçacık içindeki herhangi bir yöndeki spinlerin klasik manyetizasyonu için bir eşitlik geliştirilmiştir. Metot da, standart ortalama alan yaklaşımı ve spinler arasındaki en yakın komşu etkileşmeler ele alınmıştır [38]. Çift yaklaşım kullanılarak boyuna manyetik alan altında kristal alan etkileşimli Ising modelde histerezis eğrilerinin düşük sıcaklıklarda davranışları incelenmiştir. Farklı sıcaklık değerleri için histerezis eğrileri elde edilmiştir ve bazı sıcaklık değerlerinde histerezis eğrilerinin kaybolduğu gözlenmiştir [39]. Deviren ve arkadaşları etkin alan teorisini kullanarak, bal peteği örgüsünde anti-ferromanyetik ve ferrimanyetik karma spin $(1/2, 5/2)$ Ising sistemlerin manyetik özelliklerini incelemiştir ve faz diyagramlarını elde etmişlerdir [40]. Etkin alan teorisi kullanılarak, basit kübikte hem enine hem de boyuna kristal alan etkileşimli çift eksenli Ising modelinin kritik davranışları çalışılmıştır [41]. Ortalama alan ve etkin

alan teorisi kullanılarak, boylamsal kristal alan etkileşmeli spin-2 Ising modelin temel durum manyetik özellikleri çalışılmıştır. Temel durum faz diyagramlarında, sistem üç kritik davranış göstermiştir. Sistemin manyetik özelliklerinde spin bağıntısı önemli bir etkiye sahiptir. Spin-2 enine Ising modelinin temel durum faz diyagramları için, spin-3/2 enine Ising modelinkinden farklı sonuçlar elde edilmiştir [42]. Chen ve Levy, J ve K etkileşmeli Hamiltoniyen kullanarak spin-1 Ising modelinin moleküler alan yaklaşımı ile çözümünde ilk defa çalışanlar arasındadırlar.[43]. Aşırı soğutma olayını açıklayabilmek için, Keskin ve Meijer, J ve K etkileşme sabitli spin-1 Ising modelini kullanmışlardır [44]. Daha sonra ise; Keskin, dış manyetik alanın etkisini de göz önüne alarak aşırı soğutma olayını açıklayabilmek için spin-1 Ising modelini kullanmıştır. [45]. Ayrıca Keskin ve Arslan, en düşük kümesel değişim metodunu kullanarak spin-1 Ising modelinin J ve K etkileşmeli Hamiltoniyen için dipol ve kuadrupol momentlerinde meydana gelen manyetik alan varlığında incelemişlerdir [46].

Bu tez çalışmasında, bilineer, kuadratik ve kristal alan etkileşmeli tek nanoparçacığın spin-1 modeli çift yaklaşım metodu kullanılarak incelenmiştir. İlk olarak, etkileşmeyen çekirdek ve kabuktan oluşan nanoparçacık için Hamiltoniyen denklemleri çift yaklaşım kullanılarak elde edildi ve serbest enerji ifadesi en genel anlamda bulundu. İkinci aşamada ise; kristal alan ve kuadratik etkileşmeli sistem için manyetizasyon eğrilerinin sıcaklığa karşı davranışını verecek ve histerezis eğrilerinin elde edilmesini sağlayacak lineer olmayan denklem sistemi elde edildi.

Elde edilen doğrusal olmayan (non-linear) denklem sistemi iterasyon yöntemlerinden uygun olan kullanılarak nümerik hesaplar gerçekleştirildi.

1.2. Stoner-Wohlfarth Modeli

Sonlu büyüklükteki parçacıklar için ilk mıknatıslanma ile ilgili çalışma 1948 yılında Stoner ve Wohlfarth tarafından gerçekleştirilmiştir. Tek bir parçacık için sert malzemelerde bir eksen boyunca yüksek bir zorlama olduğu gözlenmiştir. Bu sistemdeki yönelime bağlılığın varlığını gösteren ilk model Stoner-Wohlfarth modeli olmuştur. Stoner-Wohlfarth (SW) Modeli, tek eksenli anizotropik tek domen

ferromanyetik parçacığın toplam manyetik momentini incelemektedir. Model, parçacık içindeki bütün manyetik momentlerin paralel olduğunu varsaymaktadır. Stoner-Wohlfarth parçacığın manyetizasyon süreci, bütün bu momentlerin düzgün yönelimleri boyunca gerçekleşmektedir. Herhangi bir anda parçacık içindeki manyetik momentlerin yönleri paralel olmaktadır. Bu modelin temelinde ilk olarak tek bir nanoparçacığın mıknatıslanmasındaki kalıcılığın, ikinci olarak ta parçacıklar arasında ki etkileşmenin ihmal edilebilir olması vardır. Bu durumda nano parçacığın mıknatıslanma vektörlerinin denge yönleri, kolay-yön eksenleri ve uygulanan manyetik alanın yönleri ile tanımlanmaktadır.

İlk olarak, düşük boyutları tanımlamak için Stoner-Wohlfarth modeli kullanılmıştır. Model temelde, uygun tek bir domen parçacık durumunda Brown denklemlerinden elde edilebilir. Aşağıda bu modelin temel varsayımları özet halinde verilmiştir [47]:

1. tek domen parçacık
2. küresel geometri
3. dönme-simetri ekseninde tek eksenli anizotropisi

Öncelikle cisim içinde düzgün manyetizasyon varsayarsak, enerji değişimi serbest enerjiye sıfır katkı sağlamaktadır. Daha sonra, elips geometri manyetostatik alanın hesaplanmasında önemli bir basitleştirme sağlamaktadır. Çünkü bu, mıknatıslanma ile basit tensorial arasındaki bağlantı tarafından ifade edilebileceğini göstermektedir [48].

$$\vec{H}_m = -N \cdot \vec{M} \quad (1.1)$$

Burada N , her zaman pozitif olan ve mıknatıs hassasını gideren tensördür. Burada x, y, z eksenleri olan N , elipsoid eksenleri ile çakışmaktadır ve aşağıdaki gibi yazılır;

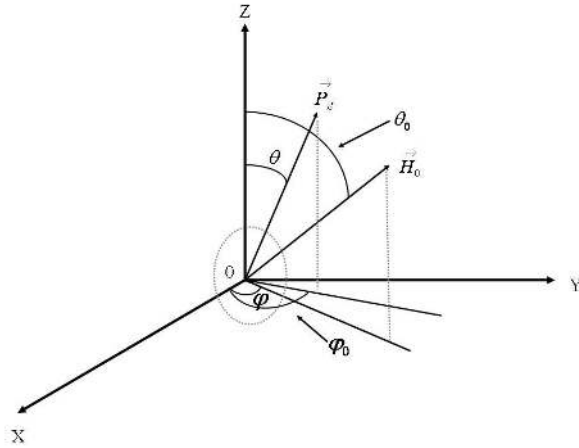
$$\begin{pmatrix} H_x \\ H_y \\ H_z \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} N_x & 0 & 0 \\ 0 & N_y & 0 \\ 0 & 0 & N_z \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} M_x \\ M_y \\ M_z \end{pmatrix}$$

Burada N_x , N_y , N_z mıknatıs hassasını giden faktörlerdir. $N_x + N_y + N_z = 1$ dir.

Tek eksenli tek domen kristal için manyeto kristal serbest enerji yoğunluğu aşağıdaki gibidir;

$$W_k = -K \cos^2 \theta \quad (1.2)$$

Burada θ parçacığın doyum polarizasyon momenti ile parçacığın kolay eksen (OZ eksen) arasındaki açıdır [49].



Şekil 1.1. Stoner-Wholfarth parçacık için temsili gösterimi ve sisteme ait koordinat sistemi.

Manyetostatik serbest enerji yoğunluğu, denklem (1.3)'de verilmiştir.

$$\begin{aligned} W_m &= -\vec{P}_s \cdot \vec{H}_0 \\ &= -P_s H_0 (\sin \theta_0 \sin \theta \cos \varphi_0 \cos \varphi + \sin \theta_0 \sin \theta \sin \varphi_0 \sin \varphi + \cos \theta_0 \cos \theta) \end{aligned} \quad (1.3)$$

Burada $\vec{P}_s$ parçacığın doyum polarizasyonudur, $\vec{H}_0$ ise uygulanan alan vektörüdür.

Küresel koordinatlar; (P_s, θ, φ) , $(H_0, \theta_0, \varphi_0)$ dır.

Anizotropik alan ise;

$$H_k = \frac{2K}{P_s} \text{ dir.} \quad (1.4)$$

Tek bir domen parçacık için serbest enerji yoğunluğu aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$W = \frac{P_s}{2} \left[-H_k \cos^2 \theta - 2H_0 \left(\frac{\sin \theta_0 \sin \theta \cos \varphi_0 \cos \varphi + \sin \theta_0 \sin \theta \sin \varphi_0 \sin \varphi + \cos \theta_0 \cos \theta}{\sin \theta_0 \sin \theta \cos \varphi_0 \cos \varphi + \sin \theta_0 \sin \theta \sin \varphi_0 \sin \varphi + \cos \theta_0 \cos \theta} \right) \right] \quad (1.5)$$

1.3 Manyetizma Teorisi

Manyetizma, bir dış manyetik alanda malzemenin vermiş olduğu tepkiye denir. Bütün malzemeler manyetik özelliğe sahiptirler. Manyetik alan içinde madde manyetizasyon yani mıknatıslık (yönelme yani kutuplanma) kazanır. Mıknatıslanma, birim hacimdeki net manyetik moment yoğunluğudur. Malzemelerin manyetik yapısı hakkında genel bilgi elde edebilmek için bu malzemelerin mıknatıslanmasını ve manyetik duygunluğunu ölçmek gerekir. Manyetizma maddenin atom ve kristal yapısına bağlıdır. Manyetik özelliklerin büyüklükleri ve sıcaklığa bağlılıkları farklıdır. Bu durum yalnızca maddenin mıknatıslanmasıyla sınırlı olmamakla birlikte ısı iletimi, ses iletimi, rezonans gibi özellikler açısından da farklılıklar taşır. Mıknatıslanma kristal yapısında uygulanan dış alana göre farklı fiziksel özellik gösteriyorsa anizotropik, aynı özelliği gösteriyorsa izotropiktir denir.

1.3.1. Manyetizmanın Kısa Tarihçesi

Manyetizma kelimesi eski topraklarda Yunanistan'ın şuan da ise Türkiye topraklarında buluna Manisa (Magnesia) bölgesinden gelmektedir. Bunun sebebi ise; ilk kalıcı manyet olarak bilinen manyetit (Fe_2O_4) bu bölgede yoğun olarak bulunmasıdır. Yunanlılar manyetit mineralinin demiri çektiğini ve demirin bu malzemeye sürtüldüğünde mıknatıslandığını bulmuşlardır.

Manyetizma hakkında yapılan ilk gerçek bilimsel çalışma 1500'lü yıllarda İngiliz William Gilbert tarafından yapılmıştır. 18. yüzyılda çelik bileşimli manyetler yapılmıştır.

Hans Christian Oersted tarafından elektrik akımının manyetik alan ürettiğini bulması ile 1825 yılında ilk elektromanyet yapılmıştır [50].

1.3.2 Manyetizmanın Temelleri

Manyetizmanın temel kaynağı yüklü parçacıkların hareketidir. Dolayısıyla bütün malzemeler küçük de olsa manyetik özellik gösterirler. Malzemenin manyetik özelliğinin sebebi elektronların spinleri ve yörüngesel hareketleridir. Elektronlar Pauli dışarlama ilkesine uygun olarak enerji düzeylerine yerleşmişlerdir. Bu ilkeye göre; aynı enerji düzeyinde yalnızca iki elektron bulunabilir ve bu elektronların spinleri zıt yönlü olmalıdır [50].

Manyetik dipol momenti malzemelerin manyetik davranışlarını anlayabilmek için önemlidir.

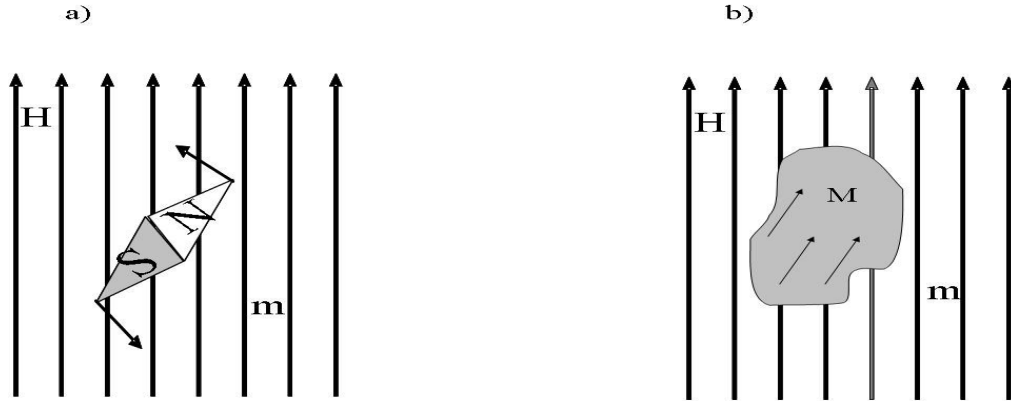
$$m = MV \quad (1.6)$$

burada M mıknatıslanma, V ise mıknatısın hacmidir. Dış manyetik alan ile moment etkileşimi için enerji aşağıdaki gibi tanımlanır;

$$E = -\mu_0 m \cdot H \quad (1.7)$$

Burada μ_0 manyetik alan sabitidir. SI birim sisteminde $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ J / A}^2 \text{ m}$ dir. Yukarıdaki tanımlanan enerji denklemi Zeeman enerjisi olarak bilinmektedir.

Şekil 1.2’de, homojen manyetik alan içinde küçük bir parçacık ve pusula iğnesi gösterilmiştir. Manyetik enerji $E = -\mu_0 m H \cos \theta$ dır. Burada θ manyetik alan ile pusula iğnesi arasındaki açıdır. Tork; $\Gamma = -dE/d\theta$ dır. Burada E yi yerine koyduğumuz zaman $\Gamma = -\mu_0 m H \sin \theta$ olur. $\theta = 0$ ya da $m \parallel H$ olduğu zaman en düşük enerji elde edilir.



Şekil 1.2. Manyetik alan içerisindeki mıknatıslanmış cisimler. a) Pusula iğnesi. b) Homojen mıknatıslanmış parçacık.

Verilen (1.7) denklemi iki önemli durum göstermektedir. i) Homojen veya homojen olmayan küçük mıknatısları ve ii) homojen manyetik alandaki keyfi boyuttaki

mıknatıslar. Homojen olmayan alandaki büyük mıknatıslar aşağıdaki gibi ifade edilir;

$$E = -\mu_0 \int M(r) \cdot H(r) dV \quad (1.8)$$

Atomik moment $m_i = m(r_i)$ ise;

$$E = -\mu_0 \sum_i m_i \cdot H(r_i) \quad (1.9)$$

olur [51]. Malzemedeki elektron spinleri uygulanan alan yönünde yönlendiklerinde net mıknatıslanma oluşmaktadır ve aşağıdaki gibi yazılır.

$$B = H + 4\pi M \quad (1.10)$$

Burada; H uygulanan dış manyetik alan ve B ise manyetik akı yoğunluğudur. Mıknatıslanma (M) birim hacimdeki manyetik momenttir. M ile H arasındaki ilişki aşağıdaki gibi verilebilir.

$$M = \chi \cdot H \quad (1.11)$$

Burada χ manyetik duyunluktur. Malzemenin uygulanan manyetik alana nasıl tepki verdiğini gösterir.

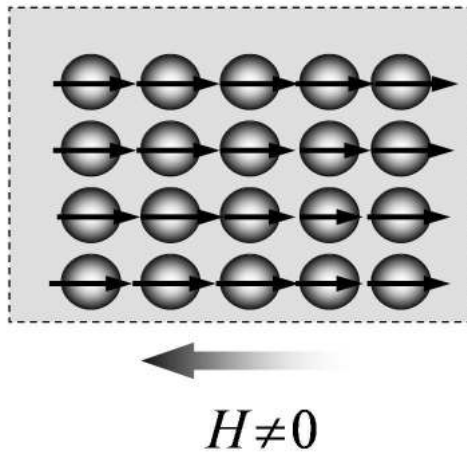
Mıknatıslanmış bir malzemedeki manyetik momentler iç atomik akımlardan kaynaklanmaktadır. Bu akımlar elektronların çekirdek ve ya kendi eksenini etrafında ve çekirdek protonlarının kendi eksenini etrafında dönmesinden dolayı oluşmaktadır.

Atomik teoriye göre atomik manyetik moment aşağıdaki nedenlerden oluşmaktadır;

- 1) Elektronların kendi eksenini etrafında dönmesinden kaynaklanan spin açısal momentumu yani “ S ”
- 2) Atomun en dıştaki yörüngede bulunan elektronların çekirdek etrafında dönmesinden kaynaklanan yörünge açısal momentumu yani “ L ”
- 3) Uygulanan manyetik alandan kaynaklanan yörünge açısal momentumdaki değişimlerdir [52].

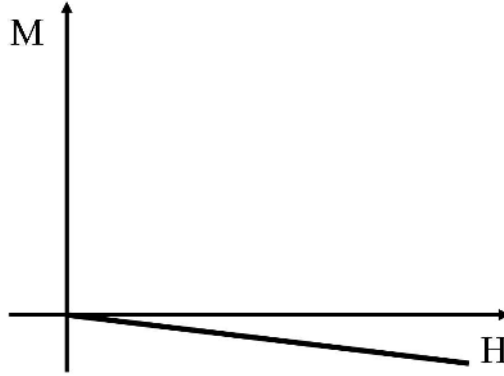
1.3.3 Manyetik Malzemelerin Sınıflandırılması

Malzemeler, dış manyetik alana karşı verdikleri tepkiye göre sınıflandırılırlar. Bir malzemedeki manyetik momentlerin yönelimlerinin tarifi, doğada gözlenmiş manyetizmanın farklı şekillerini kimliklendirmede yardımcı olurlar. Manyetizmanın 5 temel türü şöyledir; diyamanyetizma, paramanyetizma, ferromanyetizma, antiferromanyetizma ve ferrimanyetizmadır. Atomik mevcut eğrileri, uygulanan dış manyetik alanın varlığında uygulanan manyetik alana karşı elektronların orbital hareketleriyle oluşturulur. **Diyamanyetizma** olarak bilinen bir manyetik alan için bütün malzemeler zayıf geri tepme tipini gösterirler. Diyamanyetizma, manyetik momentlerin eşleştirildiği ve hepsinin birbiriyle etkisiz hale getirildiği dolu alt kabuklu malzemelerde gözlenir. Diyamanyetik malzemeler negatif alınganlığa sahiptirler. ($\chi < 0$)



Şekil 1.3. Diyamanyetik bir malzemedeki atom dizilişlerinin temsili resmi.

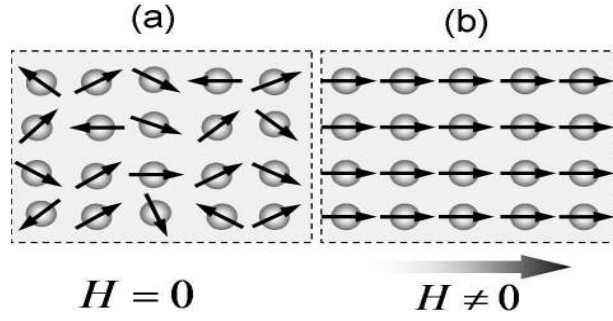
Yukarıdaki şekilde diyamanyetik bir malzemenin, dış manyetik alan varlığında manyetik momentlerinin ters yönlendiği görülmektedir. Aşağıdaki şekilde ise; diyamanyetik bir malzemenin dış manyetik alana karşı nasıl tepki verdiği eğri üzerinde gösterilmiştir.



Şekil 1.4. Diyamanyetik bir malzemenin M-H grafiği.

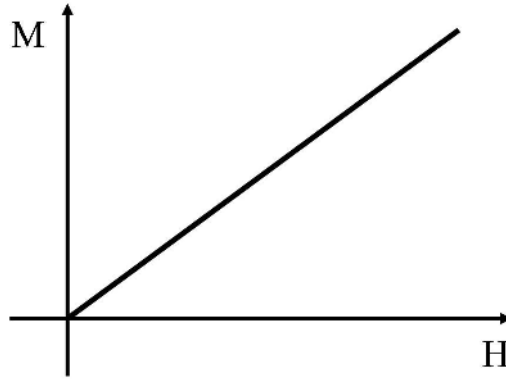
Grafikte malzeme dış manyetik alana karşı ters taraftan bir manyetik alan meydana getirmiştir. Ayrıca, dış manyetik alan arttıkça malzemenin oluşturduğu alanında büyüdüğü gözlenmektedir.

Atomik manyetik momentleri çözülmemiş malzemeler **paramanyetik** özellik gösterirler. Bu yüzden tamamen dizilemezler. Ancak dış manyetik alan uygulandığında bu dış alan doğrultusunda yönelme eğilimi gösterirler. Pozitif küçük manyetik alınganlık üretirler ($\chi > 0$). Uygulanan alan kaldırıldığında indüklenmiş alan yok olur. Aşağıdaki şekillerde dış manyetik alan varken ve yokken paramanyetik bir malzemede atomların nasıl dizildikleri gösterilmiştir.



Şekil 1.5. Paramanyetik bir malzemede manyetik momentlerin temsili dizilimi.
a) Dış manyetik alan yokken. **b)** Dış manyetik alan varken.

Şekil 1.5'te görüldüğü gibi paramanyetik bir malzemeye dış manyetik alan uygulandığında malzeme içerisindeki düzensiz olan manyetik momentler dış manyetik alan yönünde düzenlenmeye başlamıştır. Aşağıdaki şekilde ise; mıknatıslanmanın dış manyetik alana karşı grafiği verilmiştir. Dış manyetik alan arttıkça malzemenin toplam mıknatıslanması da artmaktadır.

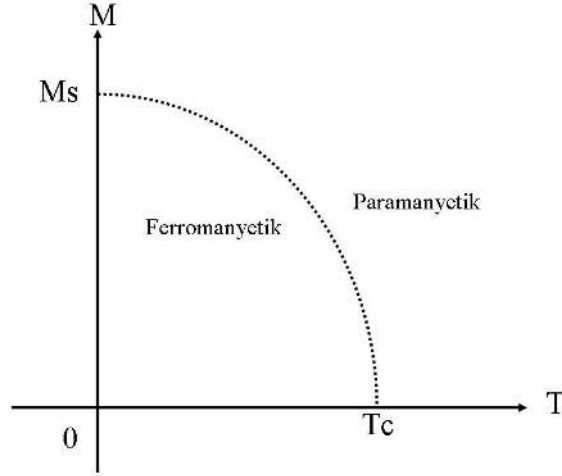


Şekil 1.6. Paramanyetik bir malzemenin temsili M-H grafiği.

Bazı koşullar altında paramanyetik malzemelerin mıknatıslanmasının alanla doğru, mutlak sıcaklıkla ters orantılı olduğu Pierre Curie tarafından bulunmuştur ve bağıntı aşağıdaki gibidir;

$$M = C \frac{H}{T}$$

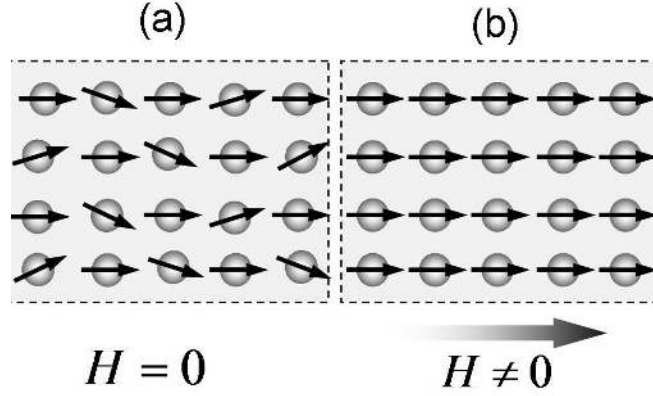
Mıknatıslanmanın artan alanla ve azalan sıcaklıkla arttığını göstermektedir. $H=0$ da mıknatıslanma sıfırdır ve manyetik momentler rasgele yönelmişlerdir. Paramanyetik bir malzemenin mıknatıslanmasının sıcaklıkla değişimi şekil 1.7’ de gösterilmiştir.



Şekil 1.7. Paramanyetik bir malzemenin temsili M-T grafiği.

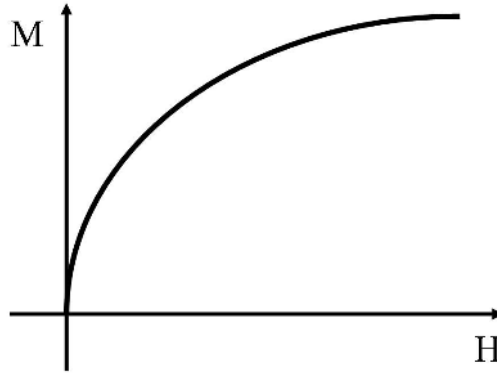
Şekilden görüldüğü gibi, Curie sıcaklığının altında manyetik momentler paralel dizildiklerinde ferromanyetik olur. T_c 'nin üstünde ise malzeme paramanyetik olur.

Ferromanyetik malzemeler zayıf bir manyetik alan altında bile birbirlerine paralel yönelmeye çalışan manyetik momentlere sahiptirler. Bu paralel yönelme komşu atomik manyetik momentler arasındaki değiş-tokuş etkileşiminden kaynaklanmaktadır. Ferromanyetik malzemeler, uygulanan alan kaldırıldıktan sonra kendiliğinden mıknatıslık kazanırlar.



Şekil 1.8. Ferromanyetik bir malzemede manyetik momentlerin temsili dizilimi.
a) Dış manyetik alan yokken. **b)** Dış manyetik alan varken.

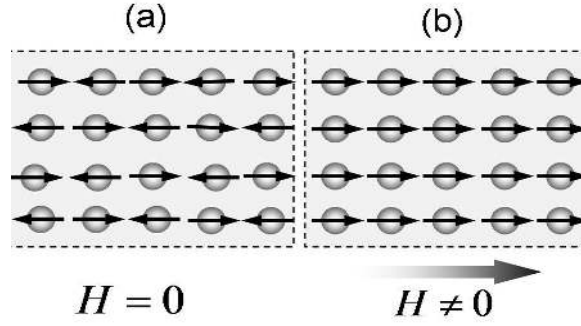
Şekilde dışardan bir manyetik alan uygulandığında ferromanyetik bir malzemenin düzenlenimi verilmiştir.



Şekil 1.9. Ferromanyetik bir malzemenin temsili M-H grafiği.

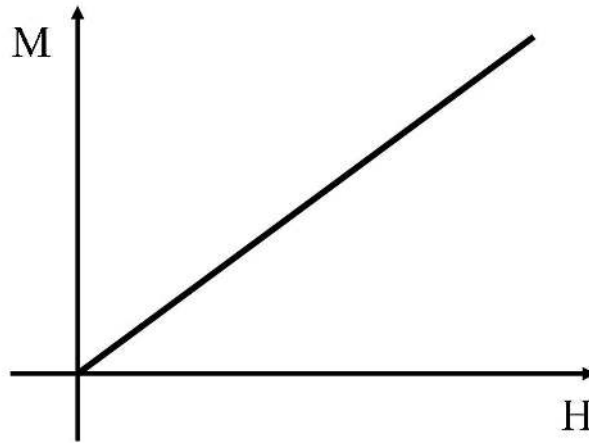
Şekilde dış manyetik alan uygulandığında malzemenin davranışı verilmiştir. Dış manyetik alan arttıkça malzemenin toplam mıknatıslanması da artmakta ve doyuma ulaşmaktadır.

Manyetik alanın yokluğunda kalıcı mıknatıslanmayı koruyan malzemeler sert manyetler olarak bilinirler. Atomik manyetik momentleri eşit, anti paralel düzenlenmiş malzemeler **antiferromanyetik** olarak bilinirler. Zıt yönlü yönelmiş manyetik momentler eşit büyüklükte olduğundan dolayı net manyetizasyon sıfırdır.



Şekil 1.10. Antiferromanyetik bir malzemedeki manyetik momentlerin temsili dizilimi. a) Dış manyetik alan yokken. b) Dış manyetik alan varken.

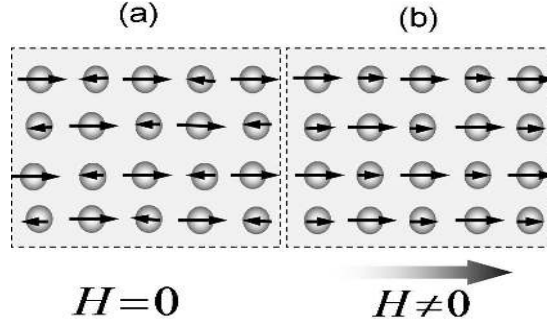
Şekil 1.10’da antiferromanyetik bir malzeme üzerine dışardan bir manyetik alan uygulandığında nasıl dizildiği gösterilmiştir. Dış manyetik alana ters yönlü atomik manyetik momentler manyetik alan yönünde dizilmiştir.



Şekil 1.11. Antiferromanyetik bir malzemenin temsili M-H grafiği.

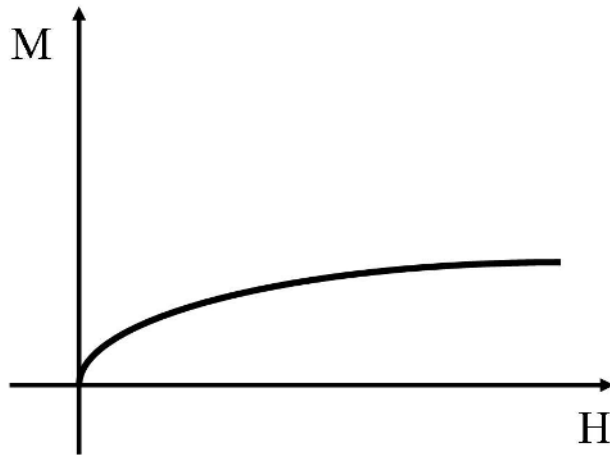
Grafikte dış manyetik alan arttıkça malzemenin toplam mıknatıslanmasının da arttığı gözlenmektedir.

Ferrimanyetizma; iki farklı alt kafes olmasından ve antiferromanyetik değişim etkileşmesi olmasından dolayı anti ferromanyetizmaya benzemektedir. Ancak, anti paralel dizilmiş farklı tipteki bu iki momentler büyüklük açısından eşit değildir ve bu yüzden net mıknatıslanma üretilmektedir.



Şekil 1.12. Ferrimanyetik bir malzemede manyetik momentlerin temsili dizilimi.
a) dış manyetik alan yokken. **b)** dış manyetik alan varken.

Şekilde ferrimanyetik bir malzemeye dışardan bir manyetik alan uygulandığında nasıl dizildikleri verilmiştir. Bu diziliş ferromanyetik bir malzemenin verdiği tepkiye benzemektedir. Fakat bu malzemenin doyma mıknatıslanma değeri ferromanyetik malzemelere göre daha düşüktür. Doyma mıknatıslanması bir malzemedan elde edilebilecek en büyük mıknatıslanma değeridir. En büyük mıknatıslanma değeri ise; malzeme içerisindeki manyetik bölgelerin hepsinin paralel ve aynı yönlü olmasıyla elde edilir. Ferrimanyetik malzemede ise bazı bölgelerin manyetik yönelimi kristalin genel yönelimine ters olur bu da toplam mıknatıslanmanın azalmasına sebep olmaktadır.



Şekil 1.13. Ferrimanyetik bir malzemenin temsili M-H grafiği.

Grafikten görüldüğü gibi dışardan manyetik alan (H) uygulandığında atomlar aynı yöne yönelmişlerdir. Toplam mıknatıslanma artmaktadır ve sonuçta düzenlenecek atom kalmadığından toplam mıknatıslanma doyum değerine ulaşmıştır.

Manyetik malzemelerin özellikleri verildikten sonra bu malzemelerin manyetik alınganlık değerleri Tablo 1.1’de özetlenmiştir.

Tablo 1.1. Manyetik Malzemeler ve Alınganlık Değerlerinin Gösterimi.

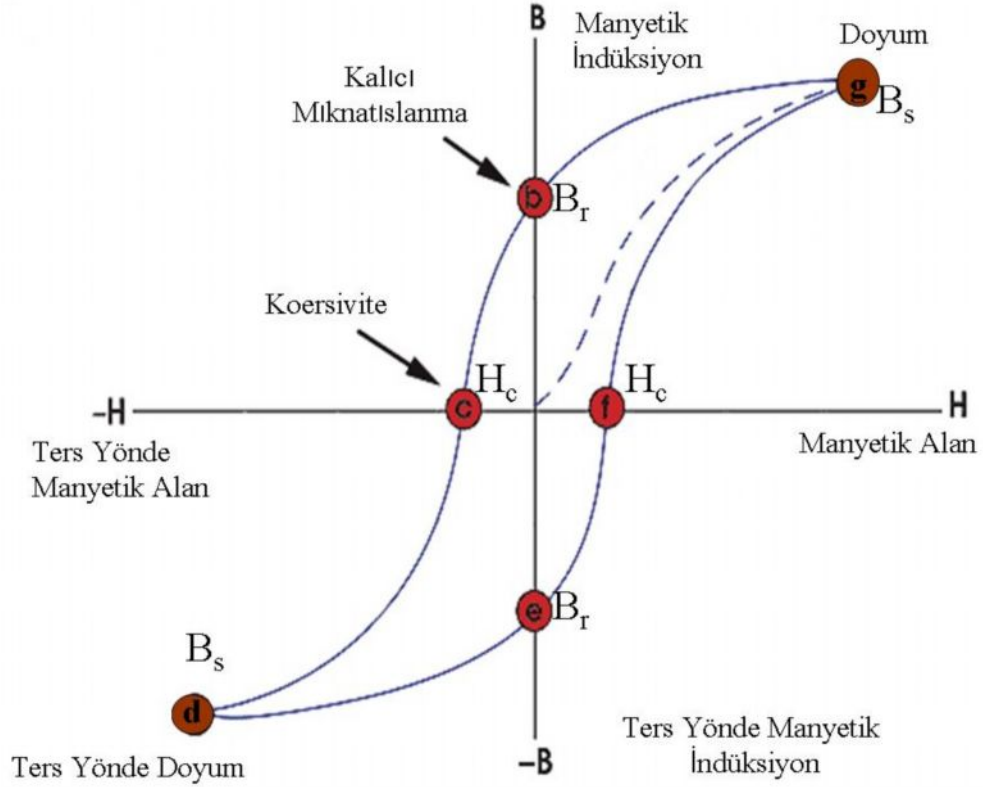
Malzeme Türü	Alınganlık
Diyamanyetizma	Küçük ve negatif Au..... -2.74×10^{-6} Cu..... -0.77×10^{-6}
Paramanyetizma	Küçük ve pozitif $\beta - Sn$ 0.19×10^{-6} Pt..... 21.04×10^{-6} Mn..... 66.10×10^{-6}
Ferromanyetizma	Büyük ve pozitif Fe..... ≈ 100.000
Antiferromanyetizma	Küçük ve pozitif Cr..... 3.6×10^{-6}
Ferrimanyetizma	Büyük ve pozitif Ba..... ≈ 3

Kaynak: Jakubovics, J.P., Magnetism and Magnetic Materials, The University of Oxford, London, 1994.

1.3.4. Histerezis Eğrisi ve Manyetik Özellikler

Histerezis eğrisi üzerinde çalışılarak bir malzemenin manyetik özellikleri hakkında pek çok bilgi edinilebilir. Bir histerezis eğrisi, manyetik indüksiyon B ile manyetik

alan H arasındaki ilişkiyi gösterir. Örnek bir histerezis eğrisi aşağıda gösterilmektedir. Şekilde daha önce hiç mıknatıslanmamış veya mıknatıslık özelliği giderilmiş bir ferromanyetik malzeme kesikli çizgilerle gösterilmiştir.



Şekil 1.14. Bir ferromanyet için örnek histerezis eğrisi.

Şekilde, B yi sıfıra götüren ters manyetik alana, kalıcı alan (H_c) denir (c noktası). $H = 0$ daki B değeri olan b noktasına remanans adı verilir. g noktası B - H nin yüksek H daki limitine doyum indüksiyonu (B_s) adı verilir. Doyum manyetizasyonu $M_s = B_s/4\pi$ ile gösterilmektedir. Doyum manyetizasyonu; manyetik bir malzemenin manyetizasyonunun artık değişmediği bölgedir. Mıknatıslanma kuvveti negatif yönde artarken, malzeme d noktasının tersinde g noktasında doyum noktasına ulaşacaktır. H dış manyetik alanın azalması e noktasıyla gösterilmiştir.

Bu histerezis eğrisinden bir malzemenin manyetik özellikleri belirlenebilir.

1- Kalıcı manyetik indüksiyonun (Remanans) bir ölçümü manyetik bir malzemenin doyum indüksiyonu ile ilişkilidir. Doyum noktasına ulaştıktan sonra manyetik alan kaldırıldığında, malzemenin kalıcı manyetik alanın bir kısmını koruyabilme kabiliyetidir. Histerezis eğrisinde b noktasıyla gösterilmiştir.

2- Kalıcı Manyetizma veya Kalıcı İndüksiyon (B_r) : Manyetik alan sıfır olduğunda bir malzemedeki manyetik indüksiyonun kalmasıdır. Doyum noktasına getirmek için bir malzeme mıknatıslandığında kalıcı manyetizma ile remanans aynıdır. Ancak, mıknatıslanmış kuvvet doyum noktasına ulaştığında kalıcı manyetizmanın değeri remanansından daha düşük olabilir.

3- Kalıcı Alan (Koersivite) H_c = Manyetik indüksiyonu sıfıra getirmek için manyetik bir malzemeye uygulanan ters manyetik alandır. Eğride c noktasıyla gösterilmiştir [53].

1.4 Nanoteknoloji: Boyutlar

“Nano” sözcük olarak, bir metrenin milyarda birine karşılık gelir. İnsan saç telinin çapının yaklaşık 100.000 nanometre olduğu düşünülürse ne kadar küçük bir ölçekten bahsedildiği daha kolay anlaşılabilir. Ayrıca, bir atom çapının yaklaşık 10 katına eşit olmaktadır. Nanoteknoloji ise; nano boyutlardaki cisimlerle çok çeşitli yapılan çalışmalara verilen isimdir. Nanoteknoloji sayesinde bilinmeyen özelliklere sahip malzemeler, sistemler 1–100 nm arasında oluşturulmaktadır. Bu malzemelere örnek verilecek olunursa; nano katmanlarda ayrılabilen optik bariyerler ve sert kaplamalar, nano kristal malzemelerde yüksek manyetik direnç, kimyasal ve bio detektörler, nanoparçacıklarla güçlendirilmiş malzemeler vs. dir [54].

1.4.1 Nanoteknolojinin Önemi

Nano boyut 1960'larda Richard Feynman tarafından öngörülmesine karşın 1990'lı yıllara kadar bu konuda fazla bir gelişme olmamıştır. Nanoteknoloji ancak 1990'lı yıllardan sonra büyüyen endüstri haline gelmiştir. Günümüzde ise nanoteknolojinin girmediği hiçbir sanayi dalı kalmamıştır. Nano yapı ve nanoteknolojinin uygulama alanları, malzeme üretim, elektronik, ilaç, sağlık, çevre, enerji, kimya, tarım, bilgisayar, biyoteknoloji ve bilişim teknolojisi.

Nanoteknolojinin önemi, atomlar ve moleküller seviyesinde (1–100 nanometre (nm) arasında) çalışarak, gelişmiş ve/veya tamamen yeni fiziksel, kimyasal, biyolojik özelliklere sahip yapılar elde edilmesine imkân sağlamasından kaynaklanmaktadır. Teknik olarak açıklamak gerekirse malzeme özellikleri ve cihazların çalışma prensipleri, genel olarak 100 nm'den büyük boyutları temel alarak yapılan varsayımların sonucunda ortaya çıkarılmış geleneksel modelleme ve teorilere dayanmaktadır. Boyut 100 nm'nin altına indiğinde ise geleneksel teori ve modeller ortaya çıkan özellikleri açıklamakta çoğu zaman yetersiz kalmaktadır. Nanoteknoloji ise burada devreye girmektedir. Sağladığı avantajlar ise; daha sağlam, daha kaliteli, daha uzun ömürlü ve daha ucuz, daha hafif, daha küçük cihazlar geliştirmektir [55].

1.4.2 Nanoparçacıkların Önemi

Malzemeler nanoboyutta makro dünyadan farklı davranmaktadırlar. Örneğin; külçe şeklindeki altın başka maddelerle reaksiyona girmezken nano boyuttaki altında bu durumun tam tersi gözlenmiştir. Kuantum etkileri nedeniyle maddeler nanoboyutta farklı özellikler göstermektedirler. Malzemeler nanoboyutta yapılar haline geldiklerinde meydana gelen değişimleri şöyle sıralayabiliriz;

1. Büyüklük değişiminden dolayı malzemelerde yeni fiziksel, kimyasal ve biyolojik özellikler meydana gelmektedir. Malzemeler küçüldükçe etkileşim yüzeyleri

artmaktadır ve parçacık yüzeyleri arasındaki molekül sayısı, kuantum elektromanyetik etkileşim, yüzey gerilimi artmaktadır. Yapı içerisinde dalga özelliği gösteren elektronlar meydana gelen şekil ve hacim değişiminden etkilenmektedirler. Bu özellikten dolayı, 50 nm altına inildikçe yapı içerisinde kuantumlanmış özellikler etkin hale gelmektedir ve eğer yapı 10 nm altında olursa oda sıcaklığında bile bu özellikler fark edilebilmektedir.

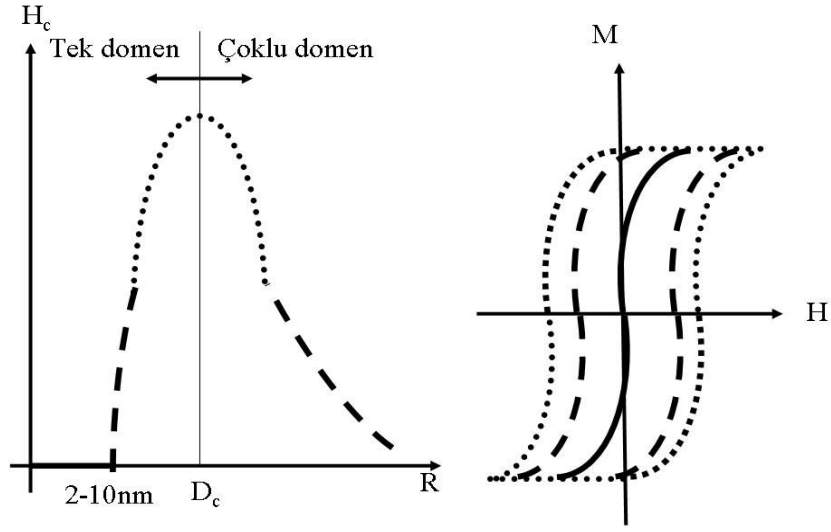
2. Yapı belirli bir büyüklüğe ulaştığında, alışıldan farklı optoelektronik, manyetik özellikleri, parçacık büyüklüğüne bağlı renk, hücre içerisine yapay bileşen koyulabilmesi gibi özellikler gerçekleştirebilmektedir.

3. Yapı küçüldükçe, mesafeler azalacağı için yapılan işlemin gerçekleşmesindeki zaman değişir ve kısa zaman aralıkları nedeniyle etkilerin spektrumunda bir artış meydana gelir (elektrostatik, manyetik, basınç vs.). Bu nedenle özel sistemlerde meydana getirilen işlemlerin hızında gözle görülebilir bir artış olmaktadır [55].

Nano yapılar bilimde ve teknolojiye bugüne kadar mümkün olmayacağı düşünülen pek çok şeyi yapılabilir kılmıştır. Bugün sanayide ihtiyaç duyulan pek çok şey yığın malzemeler ile sağlanamamaktadır. Oysa nano boyuta indikçe malzemelerin özellikleri değişmekte ve ihtiyaç duyulan pek çok özelliği sunmaktadır. Bu yüzden nanoparçacıklar boya sanayinden tıbbi uygulamalara, uzay sanayinden arıtma sistemlerine kadar pek çok alanda kullanılmaktadırlar.

1.4.3 Nanoparçacığın Manyetik Nano Sistemlerdeki Yeri

100 nm'den daha küçük boyuta sahip parçacıklar, yığın ya da moleküler sistemlerde görülmeyen farklı fiziksel ve kimyasal özelliklere sahiptirler. Bunun sebebi ise; kuantum boyut sınırlaması ve yüksek yüzey hacim oranına sahip olmalarından dolayıdır [56–57–58]. Bu alandaki en belirgin değişiklik ise parçacık büyüklüğüne bağlı koersivite (zorlayıcı alan) değişiminde olur. Şekil (1.15)



Şekil 1.15. Nano yapılı malzemelerin manyetik özelliklerinin temsili gösterimi ve sınırları.

- Ferromanyetizma
- - Paramanyetizma
- Süper paramanyetizma

Şekilde görüldüğü gibi belli bir kritik boyut altında nanoparçacıklar tek domen malzemelerdir. Malzemenin tanecik büyüklüğü tek domen büyüklüğüne eşitken maksimum koersivite gözlenmektedir. Belli bir boyutun altında ise koersivite gözlenmemekte yani malzeme süper paramanyetik özellik göstermektedir [59].

Manyetik nanoparçacıklar konusunda yapılan çalışma ve teknolojik uygulamaların sayısı gün geçtikçe hızla artmaktadır. Manyetik nanoparçacıklar günümüzde özellikle ferro akışkanların aktif bir elemanı, kayıt etme tabakalarında, biyomedikal malzemelerde ve katalizlerde oldukça önemli yer edinmiştir. Bununla birlikte, manyetik nanoparçacıklar; malzeme üretimi, elektronik aygıtlar, ilaç sektörü, sağlık alanı, çevre, enerji, biyoloji, kimya, biyoteknoloji, tarım, bilgisayar ve bilişim teknolojilerinde kullanılması amaçlanmaktadır [60].

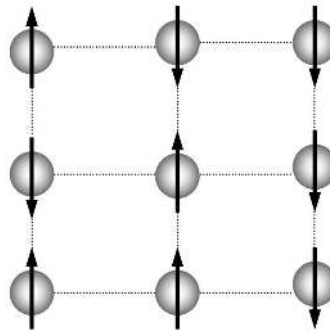
2. TEORİK YÖNTEM

2.1. Ising Modeli

Termodinamik sistemlerin fiziksel özelliklerini incelemeye en yaygın olarak kullanılan modellerden birisi Ising Modelidir. En basit şekliyle Ising modeli (1925) için Hamiltoniyen ifadesi denklem (2.1) ile tanımlanır;

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

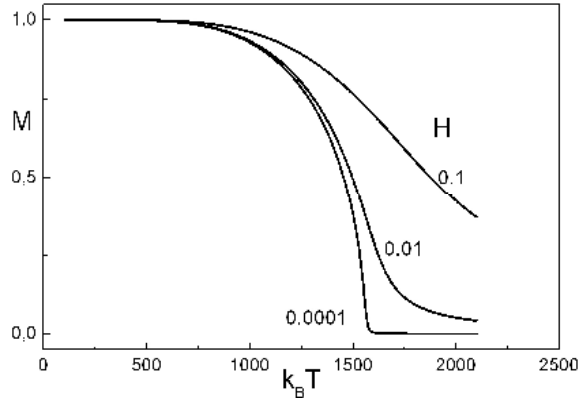
Bu Hamiltoniyen ifadesinde ilk terim i ve j örgü noktalarındaki atomların etkileşimini, ikinci terim ise dış manyetik alan etkisini göstermektedir. $J_{ij} > 0$ olduğunda spinler paralel olup ve düşük sıcaklıklarda tüm spinler ferromanyetik düzende olurlar. $J_{ij} < 0$ olduğunda ise düşük sıcaklıkta spinler antiparalel dizilip antiferromanyetik bir yapıda şekillenirler. Yukarıdaki (2.1) ifadesinde $J_{ij} = 0$ olduğunda tüm sıcaklıklarda para manyetik karakter tanımlamaktadır [1].



Şekil 2.1. İki boyutta Ising modelinin temsili gösterimi.

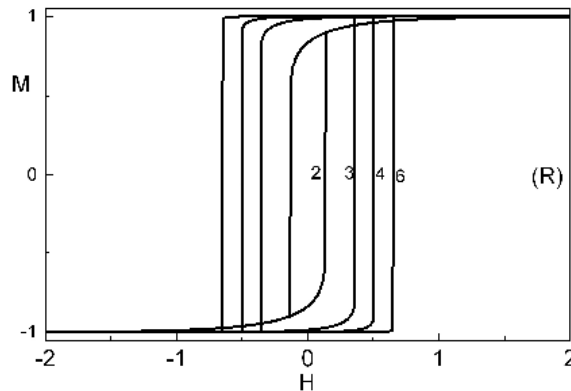
Verilen (2.1) ifadesindeki (i,j) toplamında her spinin en yakın komşu etkileşmesi alınmaktadır. Şekil 2.1'deki kare örgü için en yakın komşu sayısı 4 olur.

Spin-1/2 Ising sistemi kullanılarak heterojen nanoparçacık için manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklığa göre değişim eğrisi Şekil 2.2'de verilmiştir [61].



Şekil 2.2. Heterojen Nanoparçacık için mıknatıslanma değerinin indirgenmiş sıcaklığa göre değişimi.

Mıknatıslanma (manyetizasyon) değerinin sıcaklığa göre değişim eğrisinde uygulanan manyetik alanın farklı değerleri kullanıldı. Grafikten de görüldüğü gibi artan manyetik alanla birlikte Curie sıcaklığının arttığı gözlemlendi. Aynı sistemin manyetik histerezis eğrisi aşağıdaki şekilde gösterildi.



Şekil 2.3. Heterojen nanoparçacık için histerezis eğrisi.

Eğride artan farklı yarıçap değerlerinde histerezis eğrileri gösterildi. Nanoparçacığın yarıçap değeri arttıkça histerezis eğrisinin genişlediği gözlemlendi. Küçük çaplı

nanoparçacıkların histerezis eğrilerinin de kalıcı mıknatıslanma (koersivite) değerinin en düşük değerde olduğu gözlemlendi. Bu davranış süper paramanyetik sistemlerin gösterdiği davranışa çok yakın olduğu görüldü.

2.2. Spin-1 Ising Modeli

Spin-1 Ising modeli de istatistik fizik ve yoğun madde fiziğinde en fazla incelenen, üzerinde çalışılan modellerdendir. Spin-1 Ising sistemleri üç durumlu ve iki düzen parametrelili sistemlerdir. Burada bahsedilen düzen parametresinin ikisi de uzun mesafe düzen parametresidir. Üç durum ise, sistemdeki her bir spin durumlarının ortalama kesirsel değerleridir. Bunlar X_1, X_2, X_3 ile gösterilir. Sistemdeki spin ortalama değerleri $+1, 0$ ve -1 dir. Yani X_1, X_2, X_3 sırasıyla $+1, 0, -1$ olma ihtimalini göstermektedir. X_i , herhangi spinin i 'yinci durumunda ($i=1,2,3$) olma olasılığıdır.

Modelde iki düzen parametresi aşağıdaki gibi tanımlanır;

1) $\langle S \rangle$ ortalama mıknatıslanmadır ve bir tarafa yönelmenin diğer tarafa yönelmeden fazla olmasını gösterir. Çift kutup momenti olarak ta isimlendirilir.

2) Q kuadrupol momenttir ve mıknatıslanmanın karesinin ortalamasının $\langle S^2 \rangle$ çizgisel bir fonksiyonu olup aşağıdaki gibi yazılır;

$$Q = 3\langle S^2 \rangle - 2 \quad (2.2)$$

Düzen parametreleri iç değişkenler cinsinden aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$S = \langle S \rangle = x_1 - x_3, \quad Q = \langle Q \rangle = x_1 - 2x_2 + x_3 \quad (2.3)$$

2.3. Çift (Pair) Yaklaşımı

Ele aldığımız bilineer (J), kuadratik (K) ve kristal alan (D) etkileşimli sistemde çift yaklaşım metodu kullanılmaktadır. Bu metotta, en yakın komşu çiftlerin etkileşmesi dikkate alınmaktadır. Çift yaklaşımdan yukarıda verilen X_i ' ler denklem (2.4)'deki gibi yazılır.

$$\sum_{i=1}^3 X_i = 1 \text{ normalizasyon şartı } X_i = \sum_{j=1}^3 Y_{ij} \quad \sum_{i,j=1}^3 Y_{ij} = 1 \quad (2.4)$$

Denklem (2.3) ve (2.4) kullanılarak durum değişkenleri düzen parametreleri cinsinden aşağıdaki şekilde olduğu gibi türetildi.

$$x_1 = \frac{1}{3} + \frac{1}{2}S + \frac{1}{6}Q, \quad x_2 = \frac{1}{3}(1-Q), \quad x_3 = \frac{1}{3} - \frac{1}{2}S + \frac{1}{6}Q \quad (2.5)$$

Çift yaklaşım metoduna göre; i durumdaki en yakın komşu çiftinin ortalama sayısı ve j durumundaki ikinci en yakın komşu çiftinin ortalama durum sayını gösteren Y_{ij} durum değişkenleri tanımlanır. Çift yaklaşımına göre denklem (2.6) yazıldı.

$$X_i = \sum_{j=1}^3 Y_{ij} \quad \sum_{i,j=1}^3 Y_{ij} = 1 \quad (i=1,2,3) \quad (2.6)$$

Y_{ij} değişkenleri çift değişken olarak adlandırılır. Spin-1 için dokuz tane çift değişken vardır ve X_i arasındaki ilişki,

$$\begin{aligned} X_1 &= Y_{11} + Y_{12} + Y_{13} \\ X_2 &= Y_{21} + Y_{22} + Y_{23} \\ X_3 &= Y_{31} + Y_{32} + Y_{33} \end{aligned} \quad (2.7)$$

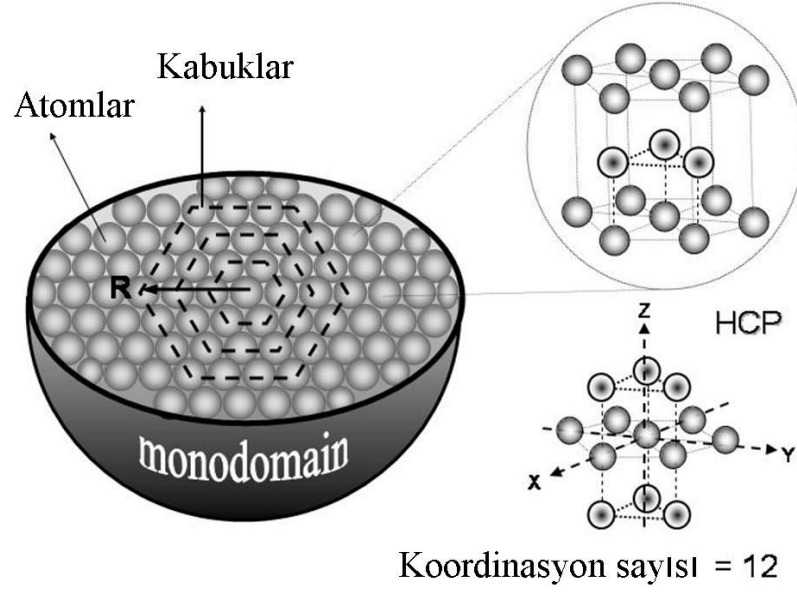
şeklinde elde edilir.

Eğer sistemde çiftlenim sayısı N_p ise sistemdeki $(+,+)$ bağ sayısı $Y_{11}N_p$ olur. Benzer şekilde $(0,0)$; $Y_{22}N_p$, $(-,-)$; $Y_{33}N_p$, $(+,0)$; $Y_{12}N_p$, $(0,+)$; $Y_{21}N_p$, $(+,-)$; $Y_{13}N_p$, $(-,+)$; $Y_{31}N_p$, $(0,-)$; $Y_{23}N_p$ ve $(-,0)$; $Y_{32}N_p$ olur [1,62].

2.4. Kristal Alan ve Kuadratik Etkileşmeli Nanoparçacığın Spin–1 Modeli İle İncelenmesi

Tezde incelenen nanoparçacığın kesiti ve parçacığı oluşturan atomların altıgen (hexagonal) yapıda dizilişleri Şekil 2.4’de temsili olarak gösterildi. Sistemi incelemek için düşünülen farklı büyüklükteki nanoparçacığın kabukları ve kabuk sayıları altıgen yapıda en yakın komşu etkileşmelerden ortaya çıkar. Bu nanoparçacık sisteminde kabuk sayıları nanoparçacığın yarıçapıyla orantılıdır. Yarıçap (R) kabuk sayılarını içerir ve nanoparçacığın boyutu kabuk sayıları ile artmaktadır. Bu yüzden, nanoparçacık; çekirdek (core: C), çekirdek yüzeyi (core-surface: CS), ve yüzey (surface: S) olmak üzere üç kısımda ele alındı. Bu kısımların her biri çekirdek spin sayısı (N_C), çekirdek-yüzey-spin sayısı (N_{CS}), ve yüzey spin sayısı (N_S)’nı içerdiği düşünüldü.

Toplam spin sayısı çekirdekteki ve yüzeydeki spin sayılarının toplamından oluşur. Yüzeydeki ve çekirdekteki spinler ferromanyetik ve antiferromanyetik olarak etkileşmektedirler.



Şekil 2.4. Üç boyutlu olarak tek bir nanoparçacığın kesit görünümü.

Kristal alan (D) ve kuadratik etkileşmeli (K) nanoparçacığın spin-1 modeli için Hamiltoniyen ifadesi;

$$H = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j - \sum_{\langle i,j \rangle} K_{ij} S_i^2 S_j^2 - \sum_i D S_i^2 - H \sum_i S_i \quad (2.8)$$

şeklinde yazılır. Burada $S_i = \pm 1, 0$ değerlerini alır. $\langle ij \rangle$ toplamın en yakın komşu çiftler üzerinden alınacağını gösterir. J , K ve D sırasıyla bilineer, kuadratik ve kristal alan etkileşme sabitleridir. H ise dış manyetik alandır.

En yakın komşu etkileşmeler kristal alan ve kuadratik etkileşmeli nanoparçacık içindeki spinler sırasıyla; çekirdek, ara yüzey ve yüzey olmak üzere üç ayrı bölgeye ayrıldı. Sistem için kullanılan Hamiltoniyen, kristal alan ve kuadratik etkileşmeli nanoparçacık için genel olarak (2.8) ifadesinde olduğu gibi yazıldıktan sonra her üç bölgeyi de kapsayacak şekilde en genel olarak aşağıdaki gibi yazıldı.

$$H = \left\{ \begin{aligned} & - \sum_{\langle i,j \rangle} J_c S_i S_j - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{cs} S_i S_j - \sum_{\langle i,j \rangle} J_s S_i S_j \\ & - \sum_{\langle i,j \rangle} K_c S_i^2 S_j^2 - \sum_{\langle i,j \rangle} K_{cs} S_i^2 S_j^2 - \sum_{\langle i,j \rangle} K_s S_i^2 S_j^2 \\ & - \sum_i^{N_c} D_c S_i^2 - \sum_i^{N_s} D_s S_i^2 - H \sum_i^N S_i \end{aligned} \right\} \quad (2.9)$$

Bu ifade de ilk terim, dördüncü terim i ve j örgü noktasındaki atomların çekirdekteki sırasıyla bilineer, kuadratik etkileşmelerini, yedinci terim her bir atomun kristal alan değerini göstermektedir. İkinci terim ve beşinci terim i ve j örgü noktasındaki atomların ara yüzeydeki etkileşmelerine karşılık gelmektedir. Son olarak üçüncü ve altıncı terimler i ve j örgü noktalarındaki atomların yüzeydeki etkileşmelerini ve sekizinci terim ise; her bir atomun yüzeydeki kristal alan değerlerini göstermektedir. H ise dış manyetik alandır. Kristal alan ve kuadratik etkileşmeli tek nanoparçacığın spin-1 modeli için mıknatıslanma değeri denklem (2.10)'da olduğu gibi yazılır.

$$M = \langle M \rangle = X_1 - X_3 = Y_{11} + Y_{12} + Y_{13} - (Y_{31} + Y_{32} + Y_{33}) \quad (2.10)$$

Etkileşme enerjisi;

$$\beta E = N_c \frac{\gamma}{2} \sum_{i,j}^3 \eta_{ij} Y_{ij} + N_{cs} \frac{\gamma}{2} \sum_{i,j}^3 \eta_{ij} Y_{ij} + N_s \frac{\gamma}{2} \sum_{i,j}^3 \eta_{ij} Y_{ij} \quad (2.11)$$

şeklinde yazıldı. Burada $\beta = 1/k_B T$ dir. N_c , N_{cs} , N_s çekirdekteki, ara yüzeydeki ve yüzeydeki spin sayılarını ve γ ise koordinasyon sayısını göstermektedir. Spin-1 modeli kullanılarak incelenen nanoparçacık için dokuz farklı etkileşme değeri aşağıda görüldüğü gibi türetildi.

$$\eta_{11} = -J_c - J_{cs} - J_s - K_c - K_{cs} - K_s - D_c - D_s - H$$

$$\eta_{22} = 0$$

$$\eta_{33} = -J_c - J_{cs} - J_s - K_c - K_{cs} - K_s - D_c - D_s + H$$

$$\begin{aligned}
\eta_{12} &= -D_C - D_S - H \\
\eta_{21} &= 0 \\
\eta_{13} &= J_c + J_{cs} + J_s - K_C - K_{CS} - K_S - D_C - D_S - H \\
\eta_{31} &= J_c + J_{cs} + J_s - K_C - K_{CS} - K_S - D_C - D_S + H \\
\eta_{23} &= 0 \\
\eta_{32} &= -D_C - D_S + H
\end{aligned} \tag{2.12}$$

İncelenen çekirdek-kabuk (core-shell) nanoparçacık için çekirdek, çekirdek-kabuk ve kabuk olmak üzere üç bölgeyi kapsayacak şekilde, bağımsız çiftlenim sayısı aşağıdaki gibi yazıldı.

$$W_p = \frac{(\gamma N_C / 2)!}{\prod_{i,j=1}^3 (\gamma N_C Y_{ij} / 2)!} \cdot \frac{(\gamma N_{CS} / 2)!}{\prod_{i,j=1}^3 (\gamma N_{CS} Y_{ij} / 2)!} \cdot \frac{(\gamma N_S / 2)!}{\prod_{i,j=1}^3 (\gamma N_S Y_{ij} / 2)!} \tag{2.13}$$

Burada $N_{p,C} = \gamma N_C / 2$, $N_{p,CS} = \gamma N_{CS} / 2$, $N_{p,S} = \gamma N_S / 2$ dir. Bu değerler ve denklem (2.6) kullanılarak denklem (2.13) aşağıdaki gibi yazıldı.

$$W_x = \frac{N_C!}{\prod_{i=1}^3 (X_i N_C)!} \cdot \frac{N_{CS}!}{\prod_{i=1}^3 (X_i N_{CS})!} \cdot \frac{N_S!}{\prod_{i=1}^3 (X_i N_S)!} \tag{2.14}$$

Sistem için entropi ve serbest enerji ifadeleri sırasıyla;

$$S = k_B \ln W \quad , \quad F = E - TS \tag{2.15}$$

şeklinde yazılır. Burada $S = S_C + S_{CS} + S_S$ dir.

(2.13) ve (2.15) denklemlerine Stirling yaklaşımı uygulanıp, serbest enerji yani ϕ aşağıdaki gibi bulundu.

$$\phi = \beta F = \left\{ \begin{aligned} & N_C \frac{\gamma}{2} \sum_{i,j}^3 \eta_{ij} Y_{ij} + N_C \frac{\gamma}{2} \sum_{i,j}^3 Y_{ij} \ln(Y_{ij}) + N_{CS} \frac{\gamma}{2} \sum_{i,j}^3 \eta_{ij} Y_{ij} \\ & + N_{CS} \frac{\gamma}{2} \sum_{i,j}^3 Y_{ij} \ln(Y_{ij}) + N_S \frac{\gamma}{2} \sum_{i,j}^3 \eta_{ij} Y_{ij} + \\ & N_S \frac{\gamma}{2} \sum_{i,j}^3 Y_{ij} \ln(Y_{ij}) - (\gamma - 1) \sum_{i=1}^3 X_i \ln(X_i) + \beta \lambda \left(1 - \sum_{i,j=1}^3 Y_{ij} \right) \end{aligned} \right\} \quad (2.16)$$

Çift yaklaşımı kullanılarak denklemler aşağıdaki gibi yazıldı.

$$Y_{ij} = \frac{1}{Z} (X_i X_j)^{\bar{\gamma}} e^{-\eta_{ij}} \equiv \frac{e_{ij}}{Z} \quad (2.17)$$

$$\bar{\gamma} = \frac{\gamma - 1}{\gamma}, \quad Z = \exp\left(\frac{2\beta\lambda}{\gamma}\right) = \sum_{i,j=1}^3 e_{ij} \quad (2.18)$$

Buradan Spin=1 için dokuz farklı Y değerleri elde edildi. Bunlar aşağıda sırasıyla verildi.

$$Y_{11} = \frac{1}{Z} (X_1 X_1)^{\bar{\gamma}} \exp \frac{\gamma}{2} \begin{pmatrix} -N_C J_C - N_{CS} J_{CS} - N_S J_S - N_C K_C \\ -N_{CS} K_{CS} - N_S K_S - N_C D_C - N_S D_S \\ -NH \end{pmatrix} \equiv \frac{e_{11}}{Z}$$

$$Y_{22} = (X_2 X_2)^{\bar{\gamma}} \equiv \frac{e_{22}}{Z}$$

$$Y_{33} = \frac{1}{Z} (X_3 X_3)^{\bar{\gamma}} \exp \frac{\gamma}{2} \begin{pmatrix} -N_C J_C - N_{CS} J_{CS} - N_S J_S - N_C K_C \\ -N_{CS} K_{CS} - N_S K_S - N_C D_C - N_S D_S \\ +NH \end{pmatrix} \equiv \frac{e_{33}}{Z}$$

$$Y_{12} = \frac{1}{Z} (X_1 X_2)^{\bar{\gamma}} \exp \frac{\gamma}{2} (-N_C D_C - N_S D_S - NH) \equiv \frac{e_{12}}{Z}$$

$$Y_{21} = \frac{1}{Z} (X_2 X_1)^{\bar{\gamma}} \equiv \frac{e_{21}}{Z}$$

$$\begin{aligned}
Y_{13} &= \frac{1}{Z} (X_1 X_3)^{\bar{y}} \exp \frac{\gamma}{2} \begin{pmatrix} N_C J_C + N_{CS} J_{CS} + N_S J_S - N_C K_C \\ - N_{CS} K_{CS} - N_S K_S - N_C D_C - N_S D_S \\ - NH \end{pmatrix} \equiv \frac{e_{13}}{Z} \\
Y_{31} &= \frac{1}{Z} (X_3 X_1)^{\bar{y}} \exp \frac{\gamma}{2} \begin{pmatrix} N_C J_C + N_{CS} J_{CS} + N_S J_S - N_C K_C \\ - N_{CS} K_{CS} - N_S K_S - N_C D_C - N_S D_S \\ + NH \end{pmatrix} \equiv \frac{e_{31}}{Z} \\
Y_{23} &= \frac{1}{Z} (X_2 X_3)^{\bar{y}} \equiv \frac{e_{23}}{Z} \\
Y_{32} &= \frac{1}{Z} (X_3 X_2)^{\bar{y}} \exp \frac{\gamma}{2} (-N_C D_C - N_S D_S + NH) \equiv \frac{e_{32}}{Z}
\end{aligned} \tag{2.19}$$

Burada $N = N_C + N_{CS}$ dir. Nanoparçacığın yarıçapına göre çekirdekteki, ara yüzeydeki ve yüzeydeki atom sayıları iki boyutlu olarak sayılıp üç boyutta yorumlanmıştır. Değerler Tablo 2.1’de gösterilmiştir.

Tablo 2.1. Nanoparçacığın yarıçapına göre çekirdek, yüzey ve ara yüzeydeki toplam atom sayılarının iki boyuttaki değerleri.

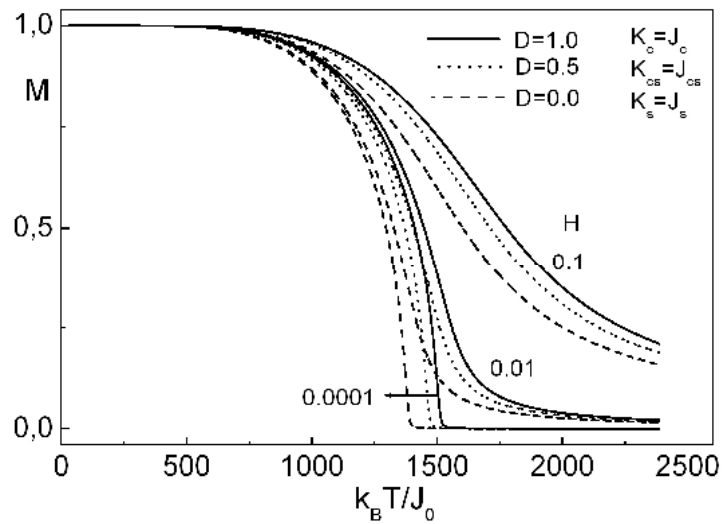
R	N_C	N_S	N_{CS}
2	7	12	9
3	19	18	15
4	37	24	21
5	61	30	27
6	91	36	33
7	127	42	39
8	169	48	45
9	217	54	51
10	271	60	57

Kaynak: Orhan Yalçın, Rıza Erdem, Sinan Övünç (2008); “Spin-1 Model of Noninteracting Nanoparticles”, Acta Physica Polonica A, 114, 835-844.

3. TEORİK BULGULAR VE TARTIŞMALAR

3.1. Heterojen nanoparçacık için Manyetizasyonun (Mıknatıslanmanın) Sıcaklığa Bağlılığı

Şekil 3.1’de altı kabuktan ($R=6$) oluşan tek domen bir nano-parçacığın bilineer ve kuadratik etkileşmelerinin eşit olduğu, artan kristal alan varlığında mıknatıslanmanın (manyetizasyon) indirgenmiş sıcaklığa göre gelişimi görülmektedir. Eğri için, $J_0 = 1$, $J_C = -J_0/2$, $J_S = 2J_0$, $J_{CS} = J_0$ alınmıştır ve 6 kabuklu tek bir nanoparçacık için N_C , N_S , N_{CS} değerleri Tablo 2.1’de verilmiştir.

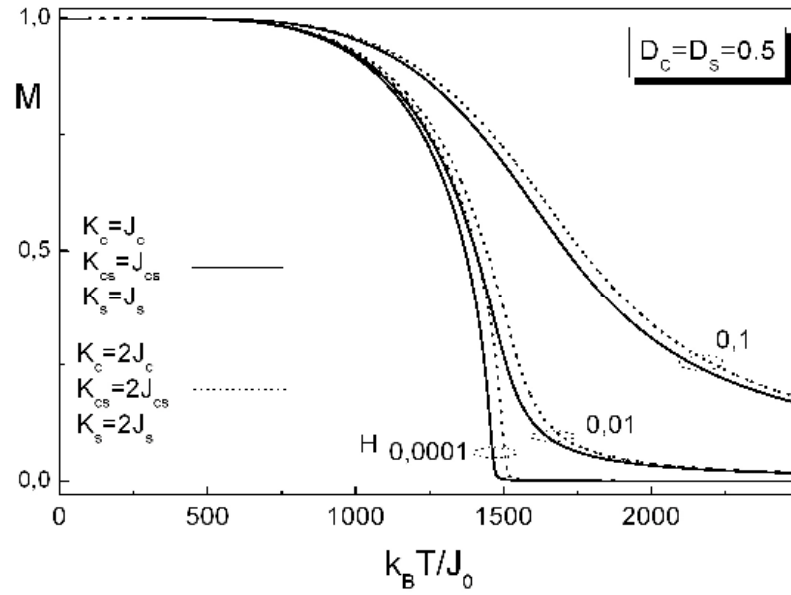


Şekil 3.1. Farklı kuadratik (K) ve kristal alan (D) değerleri için mıknatıslanma (manyetizasyon) değerinin sıcaklığa karşı eğrisi.

Mıknatıslanmanın indirgenmiş sıcaklığa göre gelişiminde artan sıcaklıkla birlikte manyetizasyon değeri azalmaktadır. Bu azalış geçiş sıcaklığına kadar devam etmektedir. Manyetizasyonun sıcaklığa göre değişiminden Curie sıcaklığı, artan dış manyetik alanla birlikte artmaktadır. Aynı dış alan ortamında ($H=0,0001$) kristal alan değerlerine göre hem mıknatıslanma değeri hem de geçiş sıcaklıkları artmaktadır. Düşük alanlarda geçiş sıcaklık civarında mıknatıslanma değerlerinin değişimi keskin bir davranış sergilediği, artan dış alanla birlikte geçiş yumuşak bir şekilde olduğu

gözlendi. Mıknatıslanma değerleri artan sıcaklık, dış manyetik alan ve kristal alanla sürekli bir değişim gösterdiğinden geçiş ikinci dereceden bir faz geçişi olarak adlandırılır. (Manyetizasyonun sıcaklığa karşı değişiminde, eğer artan sıcaklıkla birlikte manyetizasyon bütün sıcaklık değerlerinde sürekli olarak değişim gösteriyorsa buna ikinci dereceden faz geçişi denir. Şayet mıknatıslanmanın sıcaklığa karşı değişiminde Curie sıcaklık bölgesinde sürekli değilde bir bölgede kesikli şekilde değişim varsa buna da birinci dereceden faz geçişi denir.)

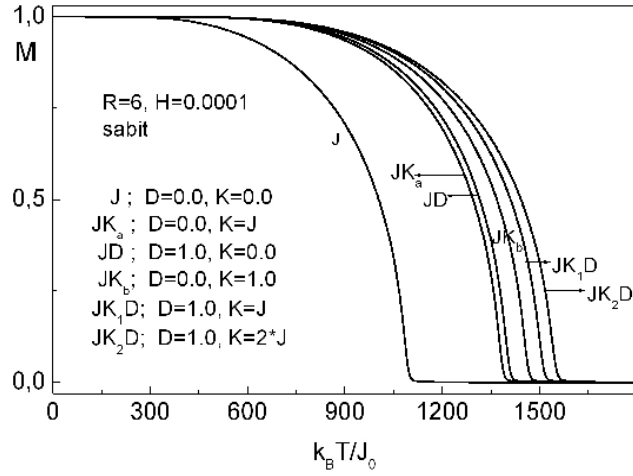
Şekil 3.2’de kristal alan sabit tutularak ($D=0,5$) kuadratik alanın, bilineer etkileşmeye eşit ve iki katı olduğu durumlar için manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklığa göre gelişimi görülmektedir.



Şekil 3.2. Farklı kuadratik ve sabit kristal alan için mıknatıslanma (manyetizasyon) değerinin sıcaklığa karşı eğrisi.

Uygulanan dış manyetik alanın etkisiyle ve kuadratik alan değeri arttıkça Curie geçiş sıcaklık değerinin arttığı gözlemlendi. Yine burada düşük alan değerlerinde geçiş sıcaklık civarında mıknatıslanma değerlerinin değişimi keskin bir davranış sergilerken, artan dış alanla birlikte geçişin yumuşak bir şekle büründüğü gözlemlendi.

Şekil 3.3’de, nanoparçacığın yarıçapı altı ve dış manyetik alan $H=0,0001$ sabit alınarak, bilineer (J), bilineer-kuadratik (JK), bilineer-kristal alan (JD), ve bilineer-kuadratik-kristal alan (JKD) etkileşimleri için $M-T$ eğrisi gösterilmiştir.



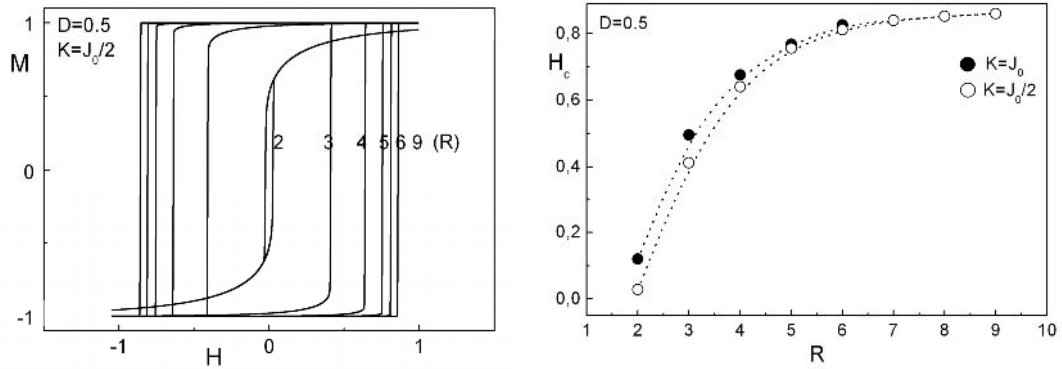
Şekil 3.3. Tek domen nanoparçacık için mıknatıslanma değerinin indirgenmiş sıcaklığa göre değişimi.

Bilineer etkileşmesi D ve K sıfır alınarak, bilineer-kuadratik etkileşmesi D sıfır ve $K=J_0$ alınarak, bilineer-kristal alan etkileşmesi $D=1$ alınarak ve bilineer-kuadratik-kristal alan etkileşimleri ise $D=1$ ve sırasıyla $K=J_0$ ve $K=2J_0$ alınarak gözlemlendi. Kristal alan ve kuadratik alan etkileşme değerleri arttıkça Curie sıcaklığının arttığı gözlemlendi. Ayrıca şekilde şu ilginç sonuçta açığa çıkmaktadır; mıknatıslanmanın sıcaklığa karşı gelişiminde kuadratik etkileşmenin kristal alandan daha etkili olduğu gözlemlenmiştir.

3.2. Homojen Nanoparçacığın Boyuta Bağlılığı

Homojen nanoparçacık için aynı kristal alan değerinde artan yarıçap değerleri için histerezis eğrileri (solda) ve kalıcı mıknatıslanma değerlerinin (sağda) nanoparçacık çapına göre değişimi Şekil 3.4'te verildi. Histerezis eğrileri için, farklı yarıçap değerlerine karşılık gelen N_C , N_S , N_{CS} değerleri Tablo 2.1'de verilmiştir.

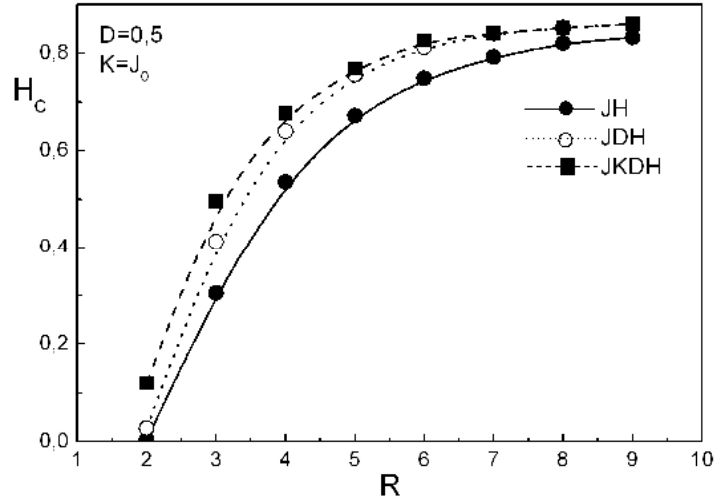
$J_0 = 1$, $J_C = J_S = J_{CS} = J_0$, $T = 300J_0/k_B$ değerleri kullanıldı.



Şekil:3.4. Homojen nanoparçacık için histerezis eğrisi (solda) ve kalıcı alanın yarıçapa göre değişim (sağda) eğrisi.

Soldaki şekilde, kristal alan değerinin ($D=0,5$) de sabit tutularak, kuadratik etkileşmesinin, bilineer etkileşmesinin yarısı olması durumunda artan büyüklüklerde nanoparçacığın histerezi görülmektedir. Buna göre nanoparçacığın büyüklüğü arttıkça kalıcı alanın da (coercive field) arttığı görülmektedir. Kalıcı alanların (coercive field) yarıçapla ve kuadratik etkileşmelerinin ($K_i=J_i$ ve $K_i=J_i/2$) farklı değerleri ile değişiminin tam olarak nasıl olduğu sağdaki şekilde görüldü. Buradan artan büyüklükle birlikte kalıcı alanların üstel olarak arttığı net olarak görülmektedir. $K_i=J_i$ için elde edilen kalıcı alanların yarıçapla değişimi $K_i=J_i/2$ için elde edilen kalıcı alanların aynı büyüklükteki değerlerinden az da olsa her zaman daha büyük olduğu görüldü. Bu davranış bize K_i lerin de bu homojen nanoparçacık için etkin olduğunu gösterdi. Büyük çaplı nanoparçacıklar için kalıcı alan değerlerinin (H_c) birbirlerine yaklaştığı gözlenmektedir. Bu durum büyük malzemelerde (bulk) kalıcı alan değerlerinin (H_c) nanoparçacığın büyüklüğüne bağlı olup, K_i lerin büyük nanoparçacıklar için etkinliğini yitirdiği anlamına gelir. Daha açık bir ifadeyle; bu durum nano sistemlerden daha büyük sistemlere geçildiğinin bir göstergesidir. Artan yarıçapla birlikte nanoparçacık özelliğini kaybedip hacimsel (bulk) sistemler gibi davranmaya başlamaktadır. Böylelikle farklı şiddette kuadratik etkileşmeler kendini göstermemektedir. Buradan küçük boyutlardaki nanoparçacıklar için kuadratik etkileşmenin etkin olduğu tespit edilmiştir.

Şekil 3.5’de kristal alan $D=0,5$ ve kuadratik etkileşme $K=J_0$ sabit alınarak; bilineer, kuadratik ve kristal alan etkileşimlerinin kalıcı alana göre gelişimi görülmektedir.



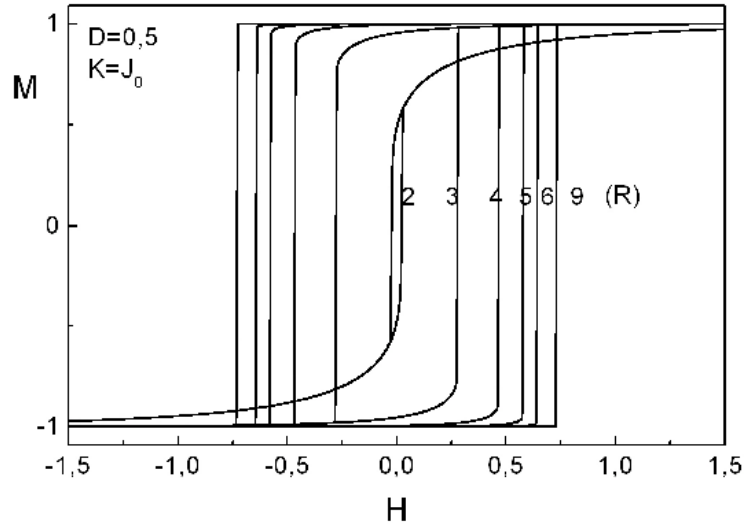
Şekil:3.5. Homojen nanoparçacık için farklı etkileşmelerde kalıcı alanın yarıçapa göre değişimi.

Kalıcı alanın yarıçapla değişiminde kuadratik etkileşmenin, bilineer ve kristal alan etkileri yanında belirgin bir katkısının olduğu görülmektedir. Büyük yarıçap değerlerinde bilineer ve kristal alan etkisinin aynı davranışlar gösterdiği, kuadratik etkileşiminin ise yakın davranışlar gösterdiği görülmektedir. Artan yarıçapla birlikte koersivite değerleri birbirine yaklaşmaktadır. Bu durum büyük sistemlerde etkileşme değerlerinin ayırt edilemeyeceği anlamına gelir. Nanoparçacığın yarıçapı büyüdükçe hacimsel malzemeye geçiş olup, nanoparçacık özelliği kaybolmaktadır. Böylelikle farklı tür etkileşmelerin olduğu nanoparçacıklarda çalışmak için belli değerdeki nanoparçacıklarda çalışmak gerekmektedir.

3.3. Kompozit (Core-Shell) Nanoparçacığın Boyuta Karşı Gelişimi

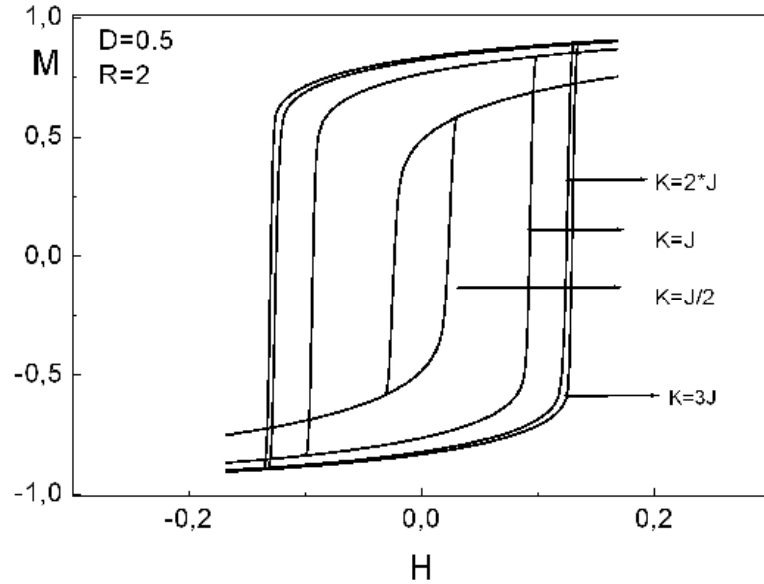
Heterojen nanoparçacık için verilen farklı yarıçap değerlerinde mıknatıslanma değerinin dış manyetik alana karşı gelişimi Şekil 3.6’da gösterildi. Aşağıdaki eğriler için alınan yarıçap değerlerine göre N_c , N_s , N_{cs} değerleri Tablo 2.1’de verilmiştir.

$J_0 = 1$, $J_c = J_0$, $J_s = 5J_0$, $J_{cs} = -4J_0$, $T = 350J_0/k_B$ olarak alınmıştır.



Şekil 3.6. Kompozit nanoparçacık için farklı büyüklükteki histerezis eğrisi.

Kristal alan değeri $D = 0.5$ ve kuadratik etkileşme $K=J_0$ sabit alınmıştır. Histerezis eğrilerinin nanoparçacığın yarıçapı arttıkça arttığı gözlenmektedir. Eğri düşük boyutlarda yumuşak bir geçiş sergilerken yüksek boyutlarda daha keskin değişim sergilediği gözlemlendi.



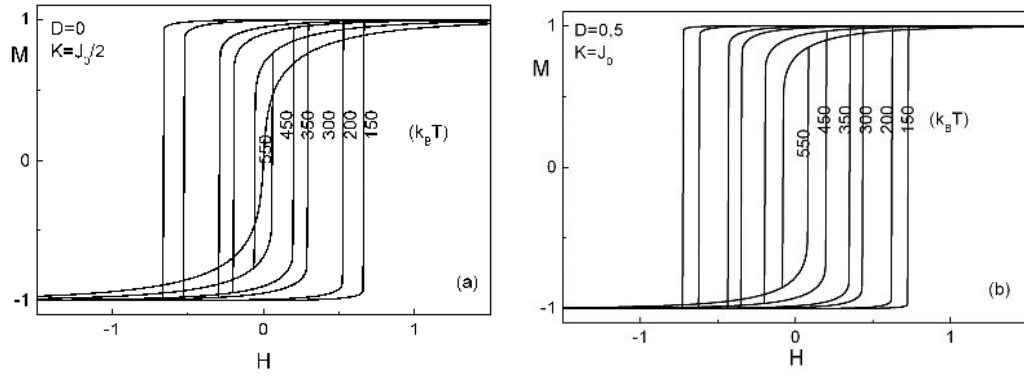
Şekil 3.7. Kompozit nanoparçacık için farklı K değerlerindeki M-H eğrisi

Şekil 3.7’de, kristal alan $D = 0.5$ ve yarıçap $R=2$ de sabit tutularak kuadratik alanın farklı değerlerinde mıknatıslanmanın H dış manyetik alana göre etkileri incelendi.

Kuadratik alan, bilineer etkileşmeye eşit ($K=J_0$), yarısı ($K=J_0/2$), iki katı ($K=2J_0$) ve üç katı ($K=3J_0$) olduğu durumlarda davranışlar tespit edildi. Uygulanan dış manyetik alanın etkisi ve kuadratik alan değerinin artmasıyla mıknatıslanma değerinin azaldığı gözlemlendi.

3.4. Kompozit (Core-Shell) Nanoparçacığın Uygulanan Farklı Sıcaklık Değerlerinde Mıknatıslanmanın Dış manyetik Alana Karşı Gelişimi

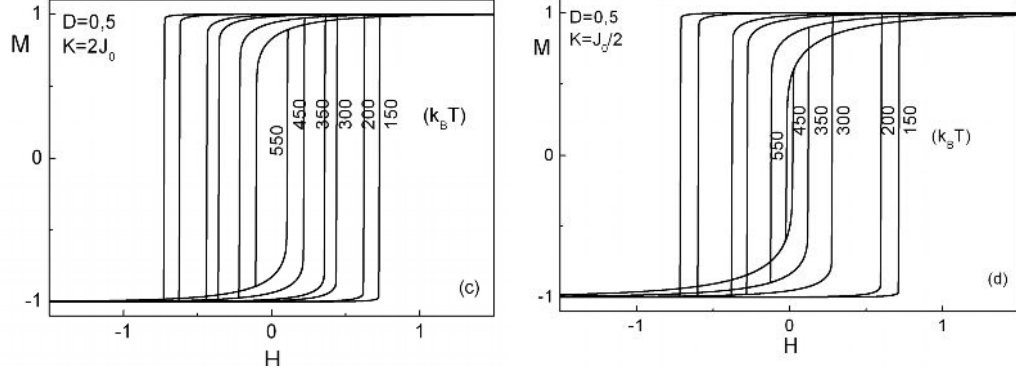
Kompozit nanoparçacık için kristal alan ve kuadratik alan değerleri farklı alınarak farklı indirgenmiş sıcaklık değerlerinde histerezis eğrileri Şekil 3.8’de verildi.



Şekil 3.8. Kompozit nanoparçacık için farklı K değerlerinde (a) $D = 0.0$ ve (b) $D = 0.5$ için farklı indirgenmiş sıcaklık değerlerindeki M-H değişimi.

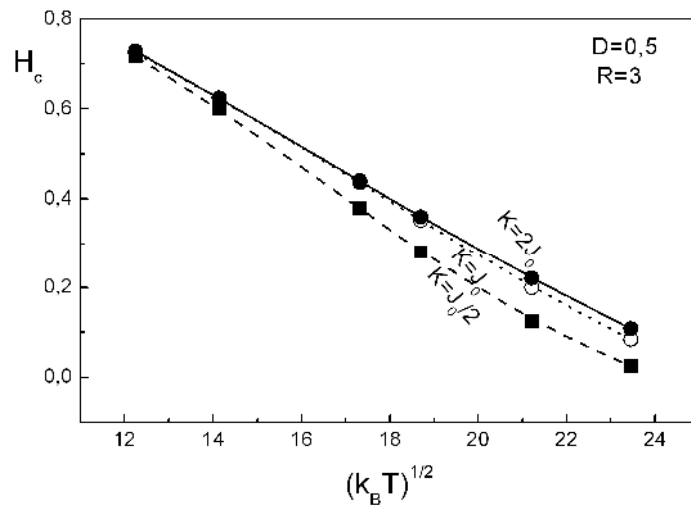
Şekil (a) da, heterojen nanoparçacık için kristal alan değeri sıfır ve kuadratik alan değeri bilineer etkileşmenin yarısı alınarak farklı indirgenmiş sıcaklık değerlerinde histerezis eğrileri incelendi. Artan sıcaklıkla birlikte histerezis eğrilerinin keskin halden daha yumuşak hale geçtiği gözlemlendi. Ayrıca artan sıcaklıkla birlikte kalıcı mıknatıslanma değerinin de azaldığı gözlemlendi. Bu beklenen bir davranıştır. Şekilde en yüksek sıcaklık değerinde histerezis eğrisinin artan ve azalan manyetik alanla birlikte aynı bölgeden geçtikleri tespit edildi. Bu davranış nanoparçacıklar için süperparamanyetik davranış olarak isimlendirilir. Şekil (b) de, kristal alan değeri $D = 0.5$ ve kuadratik alan değeri bilineer etkileşmeye eşit alınarak farklı sıcaklık değerlerinde histerezis değişimi incelendi. Şekil (b) deki histerezis eğrisinin şekil (a) daki aynı indirgenmiş sıcaklık değerlerindeki histerezis eğrisine göre daha geniş

olduğu tespit edildi. Bu sıcaklık değerlerinde kalıcı alanlar ölçülerek kalıcı alanın (H_c) sıcaklığa göre davranışı Şekil 3.10'da verilerek diğer K değerleri için elde edilen sonuçlarla karşılaştırması yapıldı.



Şekil 3.9. Kompozit nanoparçacık için (c) $K = 2J_0$ ve (d) $K = J_0/2$ değerlerindeki M-H eğrisi.

Şekil (c) ve (d) de, kristal alan değeri 0,5 ve sırasıyla kuadratik alan değeri bilineer etkileşmenin iki katı ve yarısı alınarak farklı sıcaklık değerlerinde histerezis eğrileri elde edildi. Aynı indirgenmiş sıcaklık değerlerinde kalıcı alanlar ölçülerek kalıcı alanın (H_c) sıcaklığa göre eğrisi elde edilerek detaylı karşılaştırması Şekil 3.10'da yapıldı.

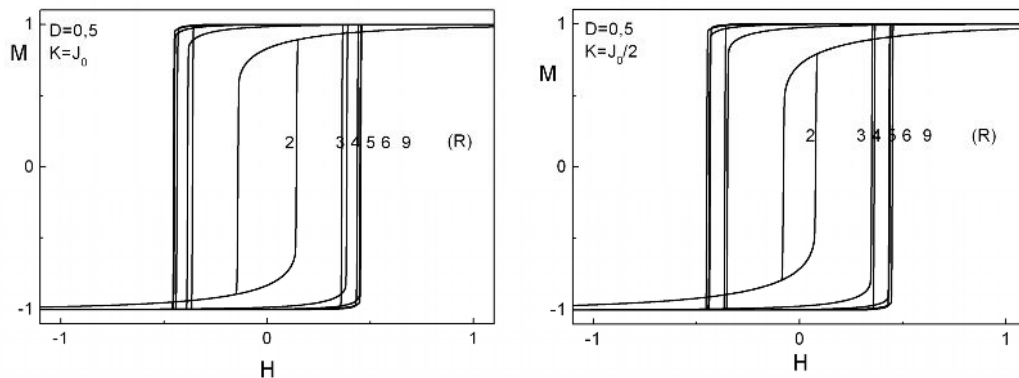


Şekil 3.10. Kalıcı alanın farklı K değerleri için (H_c) sıcaklığa göre değişimi.

Yukarıdaki (b), (c), (d) şekilleri için farklı sıcaklık değerlerinde kalıcı alanlar ölçülerek kalıcı alanın sıcaklığa göre gelişimi gözlenmektedir. Kristal alan $D=0,5$ ve yarıçap $R=3$ de sabit alındı. Şekilde kuadratik alan değeri arttıkça kalıcı alan değerinin artma eğiliminde olduğu sıcaklığa bağlı olarak gözlemlendi. Sıcaklık arttıkça farklı tür kuadrupol etkileşmelerinde koersivitenin birbirinden ayrıştığı gözlemlendi. Sabit büyüklükte bir nanoparçacık için sıcaklığın artması nanoparçacığı paramanyetik davranışa zorlar. Eğer nanoparçacık tek bir domen gibi davranırsa süperparamanyetik olarak adlandırılır. Yarıçap sabit olduğundan artan sıcaklık değerlerinde kuadrupol etkileşme etkinliğini daha açık bir şekilde ortaya çıkarmaktadır. Kuvvetli kuadrupol etkileşmelerde koersivite daha yüksek olmaktadır.

3.5. Farklı Tür Kompozit (Core-Shell) Nanoparçacığın Boyuta Karşı Gelişimi

Şekil 3.11’de kompozit nanoparçacık için kristal alan değeri sabit alınarak mıknatıslanma değerinin dış manyetik alana karşı değişim eğrisi görünmektedir. Farklı yarıçap değerleri için histerezis eğrileri elde edildi. Eğriler için, alınan yarıçap değerlerine karşılık gelen N_C , N_S , N_{CS} ifadeleri sırasıyla Tablo 2.1’de verilmiştir. $J_0 = 1$, $J_C = -J_0/2$, $J_S = 2J_0$, $J_{CS} = J_0$, $T = 350J_0/k_B$ olarak alınmıştır.



Şekil 3.11. Sabit kristal alan değerinde kompozit nanoparçacık için farklı K değerlerindeki (solda $K = J_0$, sağda $K = J_0/2$) M-H eğrisi.

Şekilde heterojen nanoparçacık için, kristal alan değeri $D = 0.5$ ve sırasıyla kuadratik alan değeri bilineer etkileşmeye eşit ve yarısı alınarak artan yarıçap değerlerinde mıknatıslanma değerinin dış manyetik alana göre gelişimi verildi. Şekiller karşılaştırıldığında, kuadratik alan değerinin (K) bilineer etkileşmenin yarısı olduğu durumda histerezis eğrilerinin daha dar olduğu gözlemlendi.

4. SONUÇ ve TARTIŞMA

Homojen, heterojen ve kompozit çekirdek-kabuk (core-shell) nanoparçacıkların sıcaklığa, nanoparçacığın büyüklüğüne ve etkileşme türlerine göre detaylı incelenmesi yapıldı. Bu sistemlerin sonuçları aşağıdadır.

Heterojen bir nanoparçacık için yarıçap değeri $R=6$ da sabit olacak şekilde ($J_0 = 1, J_C = -J_0/2, J_S = 2J_0, J_{CS} = J_0$) olan sabit bir büyüklükte artan kristal alan değerleriyle geçiş sıcaklık değerlerinin arttığı gözlemlendi. Mıknatıslanma değerleri artan sıcaklık, dış manyetik alan ve kristal alanla sürekli bir değişim gösterdiğinden geçiş ikinci dereceden bir faz geçişi olarak adlandırılır. Kristal alan değerleri sabit tutulup kuadratik etkileşme değerleri artırıldığında yine geçiş sıcaklık değerlerinin arttığı gözlemlendi. $R=6$ kabuklu nanoparçacık için, dış manyetik alan sabit tutulup, sırasıyla bilineer (J), bilineer-kuadratik (JK), bilineer-kristal alan (JD), ve bilineer-kuadratik-kristal alan (JKD) etkileşimleri için karşılaştırma yapıldı. Buna göre; etkileşme türleri arttıkça geçiş sıcaklık değerlerinin arttığı gözlemlendi. Sabit büyüklükteki bir nanoparçacık için kuadratik etkileşme değerinin kristal alandan daha etkin olduğu tespit edildi.

$J_0 = 1, J_C = J_S = J_{CS} = J_0, T = 300J_0/k_B$ türü etkileşen homojen nanoparçacığın kalıcı mıknatıslanma değerinin (coercive field) artan nanoparçacık büyüklüğü ile üstel olarak arttığı tespit edildi. Nanoparçacık büyüklüğü arttıkça belli değerden sonra sabit bir değerde kaldığı gözlemlendi. Bu davranış beklenen bir durumdur. Çünkü artan büyüklük nano boyutlardan hacimsel (bulk) büyüklüğe erişmiş olup, nano boyuttaki özellikler aktif olmamaktadır. Aynı tür etkileşen nanoparçacık sisteminde; kalıcı mıknatıslanmanın sabit kristal alan (D_i) ve kuadratik etkileşme altında, etkileşme tür çeşitleri arttıkça (sırasıyla bilineer (J), bilineer-kuadratik (JK), bilineer-kristal alan (JD), ve bilineer-kuadratik-kristal alan (JKD) etkileşimleri için) artan parçacık büyüklüğüne göre kalıcı alanın daha kavisli hale geldiği gözlemlendi.

Heterojen nanoparçacığın ($J_0 = 1$, $J_C = J_0$, $J_S = 5J_0$, $J_{CS} = -4J_0$, $T = 350J_0/k_B$) farklı yarıçap değerlerinde mıknatıslanma değerinin sıcaklığa göre gelişiminde $D = 0.5$ ve $K = J_0$ sabit alınarak kalıcı alanın artan nanoparçacık büyüklüğü ile arttığı gözlemlendi. Histerezis eğrisi düşük boyutlarda yumuşak bir geçiş sergilerken yüksek boyutlarda daha keskin değişim sergilediği gözlemlendi. Aynı tür etkileşen nanoparçacık için $D = 0.5$ ve yarıçap $R=2$ de sabit tutularak kuadratik alanın farklı değerlerinde mıknatıslanmanın H dış manyetik alana göre etkileri incelendi. Kuadratik alan, bilineer etkileşmeye eşit ($K=J_0$), yarısı ($K=J_0/2$), iki katı ($K=2J_0$) ve üç katı ($K=3J_0$) olduğu durumlarda davranışlar tespit edildi. Uygulanan dış manyetik alanın etkisi ve kuadratik alan değerinin artmasıyla mıknatıslanma değerinin azaldığı gözlemlendi.

Kompozit nanoparçacık için; aynı indirgenmiş sıcaklık değerlerinde kalıcı alanlar ölçülerek kalıcı alanın (H_c) sıcaklığa göre eğrisi elde edilerek detaylı karşılaştırması yapıldı. $D = 0.5$ ve $R = 3$ için kalıcı alanın sıcaklığın karekökü ile lineer olarak azaldığı gözlemlendi. Kuadratik etkileşme, bilineer etkileşme türüne göre daha fazla olması durumunda değişimin lineerliği, doğrusala kayma eğilimi gösterdi.

KAYNAKLAR

1. Yalçın, O., Erdem, R., Övünç, S., Spin-1 Model of Noninteracting Nanoparticles, *Acta Physica Polonica A*, 114, 835-844, 2008.
2. Hadjipanayis, G.C., Nanophase Hard Magnets, *J. Magn. Magn. Mater*, 200, 373–391, 1999.
3. Cantor, B., “et al”., Applications of Nanocomposites, *Scripta Materialia*, 44, 2055 – 2059, 2001.
4. Wesselinowa, J.M., Effects of İon Doping on Magnetism of Antiferromagnetic Nanoparticles, *J. Magn. Magn. Mater*, 322, L34-L36, 2010.
5. Maaz, K., “et al”., Temperature Dependent Coercivity and Magnetization of Nickel Ferrite Nanoparticles, *J. Magn. Magn. Mater*, 322, 2199–2202, 2010.
6. Chern, G., “et al”., Antiparallel State, Compensation Point and Magnetic Phase Diagram of $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{Mn}_3\text{O}_4$ Superlattices, *Phys. Rev. B*, 63, 094421–094426, 2001.
7. Kageyama, H., “et al”., Weak Ferrimagnetism, Compensation Point and Magnetization Reversal in $\text{Ni}(\text{HCOO})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, *Phys. Rev. B*, 67, 224422–224429, 2003.
8. Plocek, J., “et al”., Preparation of $\text{ZnFe}_2\text{O}_4/\text{SiO}_2$ and $\text{CdFe}_2\text{O}_4/\text{SiO}_2$ Nanocomposites by sol–gel Method, *J. Non-Cryst. Solids*, 315, 70 -76, 2003.
9. Seyyed Ebrahimi, S.A., Azadmanjiri, J., Evaluation of NiFe_2O_4 Ferrite Nanocrystalline Powder Synthesized by a sol–gel Auto-Combustion Method, *J. Non-Cryst. Solids*, 3153, 802–804, 2007.
10. Gajbhiye, N.S., Bhattacharya, U., Darshane, V.S., Thermal Decomposition of zinc-iron Citrate Precursor, *Thermochimica Acta*, 264, 219-230, 1995.
11. Yu, S.H., Fujino, T., Yoshimura, M., Hydrothermal synthesis of ZnFe_2O_4 ultrafine particles with high magnetization, *J. Magn. Magn. Mater*, 256, 420–424, 2003.
12. Toledo, J.A., “et al”., Effect of Al^{3+} Introduction into Hydrothermally Prepared ZnFe_2O_4 , *Applied Catalysis A: General*, 198, 235-245, 2000.

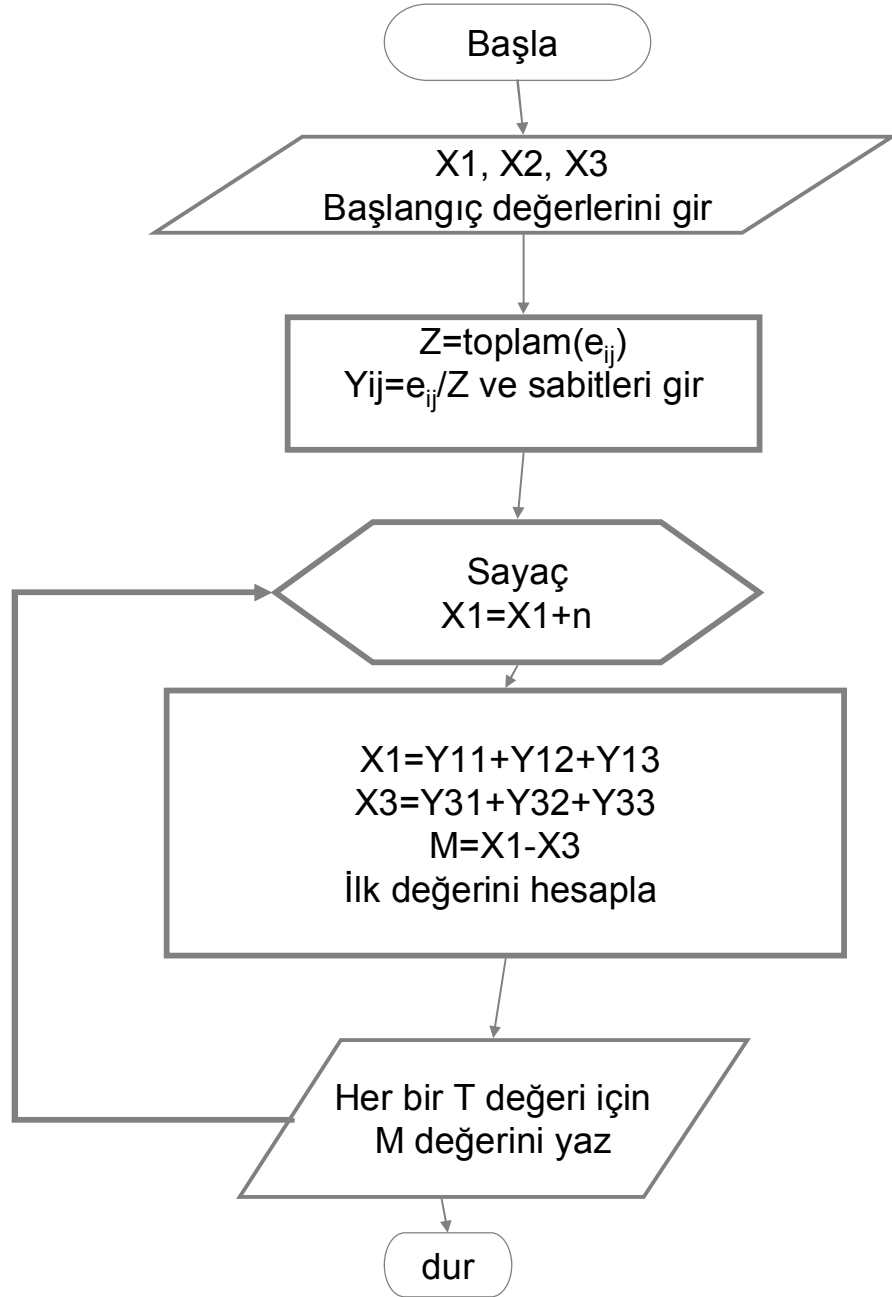
13. Zhao, D., “et al”., Study on Supercritical Hydrothermal Synthesis of CoFe_2O_4 Nanoparticles, *The Journal of Supercritical Fluids*, 42, 226-233, 2007.
14. Parvatheeswara Rao, B., “et al”., Synthesis and Characterization of Mixed Ferrite Nanoparticles, *J. Magn. Magn. Mater*, 310, e812-e814, 2007.
15. Kut, D., Güneşoğlu, C., Nanoteknoloji ve Tekstil Sektöründeki Uygulamaları *Tekstil&Teknik*, Şubat, 224–230, 2005.
16. Xin, J.H., *Nanotechnology for Textiles and Apparel*. The Hong Kong Polytechnic University, Institute of Textiles&Clothing, 2006.
17. Blume, M., Emery, V.J., Griffiths, R.B., Ising Model for the λ Transition and Phase Separation in $\text{He}_3\text{-He}_4$ Mixtures, *Phys. Rev. A*, 4, 1071–1077, 1971.
18. Erdiñç, A., Keskin, M., Equilibrium and Nonequilibrium Behavior of the Spin-1 Ising Model in the Quadrupolar Phase, *Physica A*, 307, 453-468, 2002.
19. Erdem, R., Magnetic Relaxation in a Spin-1 Ising Model near the second-order Phase Transition Point, *J. Magn. Magn. Mater*, 320, 2273– 2278, 2008.
20. Erdem, R., Frequency Dependence of the Complex Susceptibility for a Spin-1 Ising Model, *J. Magn. Magn. Mater*, 321, 2592–2595, 2009.
21. Albayrak, E., Yigit, A., The Critical Behavior of the Mixed Spin-1 and Spin-2 Ising Ferromagnetic System on the Bethe lattice, *Physica A*, 349, 471-486, 2005.
22. Ekiz, C., Keskin, M., Magnetic Properties of the Mixed Spin-1/2 and Spin-1 Ising Ferromagnetic System, *Physica A*, 317, 517-534, 2003.
23. 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.
24. Bahmad, L., Benyoussef, A., El Kenz, A., Mean Field Study of the Mixed Ising Model in a Random Crystal Field, *Physica A*, 387, 825-833, 2008.
25. Temizer, U., “et al”., Multicritical Dynamical Phase Diagrams of the Kinetic Blume–Emery–Griffiths Model with Repulsive Biquadratic Coupling in an Oscillating Field, *J. Magn. Magn. Mater*, 320, 1787–1801, 2008.
26. Keskin, M., Canko, O., Kirak, M., Dynamic Dipole and Quadrupole Phase Transitions in the Kinetic Spin-3/2 Model, *J. Stat. Phys.*, 127, 359-380, 2007.

27. Keskin, M., Ekiz, C., Yalçın, O., Stable, Metastable and Unstable Solutions of the Blume-Emery-Griffiths Model, *Physica A*, 267, 392-405, 1999.
28. Albayrak, E., Mixed Spin-2 and Spin-5/2 Blume–Emery–Griffiths Model, *Physica A*, 375, 174-184, 2007.
29. Albayrak, E., Yilmaz, S., Akaya, S., The spin-3/2 bilayer Bethe Lattice with Crystal Field, *Physica A*, 381, 189-201, 2007.
30. Ekiz, C., Mixed Spin-1/2 and Spin-3/2 Ising System in a Longitudinal Magnetic Field, *J. Magn. Magn. Mater*, 293, 913–923, 2005.
31. Albayrak, E., The Critical and Compensation Temperatures for the Mixed Spin-3/2 and Spin-2 Ising Model, *Physica B*, 391, 47-53, 2007.
32. Albayrak, E., Yigit, A., Mixed Spin-3/2 and Spin-5/2 Ising System on the Bethe Lattice, *Phys. Lett. A*, 353, 121–129, 2006.
33. Zaim, A., “et al”., Monte Carlo Study of the Spin-1 Blume–Capel Ising Film, *J. Magn. Magn. Mater*, 320, 1030–1034, 2008.
34. Zaim, A., Kerouad, M., Belmamoun, Y., Monte Carlo Study of a Mixed Spin-1/2 and Spin-1 Blume-Capel Ferrimagnetic Model with four-spin interaction, *Physica B*, 404, 2280-2284, 2009.
35. Boughrara, M., Kerouad, M., Phase Transition and Magnetic Properties of a Decorated Ising Film: Monte Carlo and Effective Field Treatments, *Physica A*, 387, 6105-6114, 2008.
36. Essaoudi, I., “et al”., Magnetic Properties and Hysteresis Loops of the $S=1/2$ and $S=3/2$ Bilayer Ising Model, *Physica A*, 385, 208-220, 2007.
37. Wesselinowa, J.M., Apostolova, I., Theoretical Study of Phonon Spectra in Ferromagnetic Nanoparticles, *Physics Letters A*, 372, 305-311, 2008.
38. Rego, L.G.C., Figueiredo, W., Magnetic Properties of Nanoparticles in the Bethe-Peierls Approximation, *Phys. Rev. B*, 64, 144424–1, 144424–7, 2001.
39. Ekiz, C., Hysteretic Behavior in an Ising Model with Crystal-Field Potential: A Bethe Lattice Approach, *Phys. Lett. A*, 349, 21–26, 2006.
40. Deviren, B., Keskin, M., Canko, O., Magnetic Properties of an Anti-ferromagnetic and ferrimagnetic Mixed Spin-1/2 and Spin-5/2 Ising Model in the Longitudinal Magnetic Field within the Effective-Field Approximation, *Physica A*, 388, 1835_1848, 2009.

41. Xu, L., Yan, S.L., Critical Properties of the Biaxial Ising Model with both the Longitudinal Crystal Field and the Transverse Dilution Crystal Field, *Solid State Communications*, 142, 159-164, 2007.
42. Wei, G., “et al”., Ground-State Magnetic Properties of the Spin-2 Transverse Ising Model, *J. Magn. Magn. Mater*, 320, 1151–1156, 2008.
43. Chen, H.H., Levy, P.H., Dipole and Quadropole Phase Transitions Spin-1 Models, *Phys.Rev.B*, 7, 4267-4284; High Temperature Series Expansions for a Spin-1 Model of Ferromagnetism, *Phys.Rev. B*, 7, 4284–4289, 1973.
44. Keskin, M., Meijer, P.H., A Model for Quenching Via Hidden Variables; Non-Equilibrium Behaviour of a System with Two Long Range Order Parameters. *Physica* 122A, 1–12, 1983.
45. Keskin, M., A Model for Quenching Via Hidden Variables Non-Equilibrium Behaviour of a system with Two Range Order Parameters II. Influence of a Magnetic Field, *Physica A*, 135, 226-236, 1986.
46. Keskin, M., Arslan, H., A Spin-1 Ising Model in the Presence of the Magnetic Fields due to the Dipol and Quadropole Moments, *Tr. J. of Physic*, 19, 408–415, 1995.
47. Stoner, E.C., Wohlfarth, E.P., A Mechanism of Magnetic Hysteresis in Heterogeneous Alloys, *Philos. Trans. R. Soc. London Ser., A*, 240, 599-642, 1949.
48. Brown, W.F., Jr, *Magnetostatic Principles in Ferromagnetism*, North-Holland Publishing Company (1962).
49. Stancu, A., Al. I. Cuza University, Iasi, Romania,
http://www.magmanet-eu.net/index.php?/topic_1_0.html.
50. Cullity, B.D., Graham, C.D., *Introduction to Magnetic Materials*, 1–2, 85–87, 1972.
51. Skomski, R., *Simple Models of Magnetism*, Department of Physics and Astronomy and Nebraska Center for Materials and Nanoscience University of Nebraska, Oxford University Press, 2008.
52. Mattis, D.C., *The Theory of Magnetism*, Vol. I: Statics and Dynamics, Springer-Verlag Series in Solid State Sciences, Berlin-New York, 1981.

53. Kavas, H., Superparamagnetic Resonance Studies on Magnetic Nanoparticles, Fatih Üniversitesi, İstanbul, 2006.
54. <http://www.nanoturk.com/yaklasan.htm>
55. Tjong, S.C., Chen, H., Nanocrystalline Materials and Coatings, Materials Science and Engineering R, 45, 1-88, 2004.
56. Leonardi, K., “et al”., CdSe/ZnSe Quantum Structures grown by migration enhanced Epitaxy: Structural and Optical Investigations, Appl. Phys. Lett, 71, 1510–1512, 1997.
57. Murray, C.B., “et al”., Colloidal Synthesis of Nanocrystals and Nanocrystal Superlattices, IBM Journal of Research and Development, 45, 47-56, 2001.
58. Zeng, H., “et al”., Exchange-Coupled Nanocomposite Magnets via Nanoparticle self-assembly, Nature, 420, 395-398, 2002.
59. Mathew, D.S., Juang, R.S., An overview of the Structure and Magnetism of Spin el Ferrite Nanoparticles and their Synthesis in Microemulsions, Chemical Engineering Journal, 129, 51-65, 2007.
60. Kodama, R.H., Magnetic Nanoparticles, J. Magn. Magn. Mater, 200, 359–372, 1999.
61. Özüm, S., Spin-1 ve Spin-1/2 Modelleri İle İncelenen Tek Nanoparçacığın Manyetik Özelliklerinin Karşılaştırılması, Yüksek Lisans Semineri, Bozok Üniversitesi, Yozgat, 2009.
62. Erdem, R., Bilineer ve Bikuadratik Etkileşmeli Spin-1 Ising Modelinin Dinamiği, Yüksek Lisans Tezi, Gaziosmanpaşa Üniversitesi, Tokat, 1995.

Ek: Programın Algoritması



ÖZGEÇMİŞ

1984 yılında Çorumun Alaca ilçesinde doğan Songül ÖZÜM, orta ve lise öğrenimini doğum yerinde sırasıyla Sakarya İlköğretim Okulu, Mehmet Çelik Anadolu Lisesinde tamamlamıştır. 2003 yılında kazandığı Gaziosmanpaşa Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünü 2008 yılında tam zamanlı olarak başarıyla bitirmiştir.

2008 yılında yüksek lisans eğitimine Bozok Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında başlamıştır. Halen adı geçen enstitüde Yüksek Lisans öğrencisidir.

İletişim Bilgileri

Adres: Yıldızhan Mah. Cengiz Topel Cad. No:90

19600 Alaca/ÇORUM

E-posta: songulozum@gmail.com