



**KARIŐIK SPİN 3 – SPİN 5/2 ISING MODELİN KARE ÖRGÜDE
CELLULAR AUTOMATON İLE İNCELENMESİ**

Çağrı KANI

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANA BİLİM DALI**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

NİSAN 2025

ETİK BEYAN

Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Tez Yazım Kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmada;

- Tez içinde sunduğum verileri, bilgileri ve dokümanları akademik ve etik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
 - Tüm bilgi, belge, değerlendirme ve sonuçları bilimsel etik ve ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu,
 - Tez çalışmada yararlandığım eserlerin tümüne uygun atıfta bulunarak kaynak gösterdiğimi,
 - Kullanılan verilerde herhangi bir değişiklik yapmadığımı,
 - Bu tezde sunduğum çalışmanın özgün olduğunu,
- bildirir, aksi bir durumda aleyhime doğabilecek tüm hak kayıplarını kabullendiğimi beyan ederim.

Çağrı KANI

18/04/2025

KARIŞIK SPİN 3 – SPİN 5/2 ISING MODELİN KARE ÖRGÜDE CELLULAR
AUTOMATON İLE İNCELENMESİ

(Yüksek Lisans Tezi)

Çağrı KANİ

GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Nisan 2025

ÖZET

Bu çalışmada Spin 3 – Spin 5/2 karışımı iki boyutlu kare örgüde Ising model ile modellenerek Cellular Automaton soğutma algoritması ile taklit edilmiş ve manyetik özellikleri araştırılmıştır. Hesaplamalar örgü boyutu $L=32, 64, 96$ ve 126 olan kare örgülerde, periyodik sınır şartları altında yapılmıştır. İlk kez çalışılan Spin 3 – Spin 5/2 karışımının taban durum faz diyagramının bir kısmı elde edilmiş, farklı ferrimanyetik düzen bölgeleri olduğu görülmüştür. Yapılan hesaplamalarda düzen parametresi olan mıknatıslanmada ferrimanyetik – paramanyetik faz geçişi gözlenmiş, bazı parametreler için telafi noktası tespit edilmiştir. Telafi noktasında ve farklı sıcaklıklarda karışık spin sisteminin dış manyetik alan varlığında davranışını incelemek için histerezis eğrileri elde edildi. Karışık spin sisteminin farklı taban durum bölgelerine ait, seçilmiş parametre setleriyle sonlu örgü ölçekleme yöntemi kullanılarak termodinamik niceliklerin kritik davranışları statik kritik üsleri elde edilmiştir. Karışık Spin 3- Spin 5/2 Ising modelin seçilen parametre setleri için iki boyutlu Ising model evrensellik sınıfına dahil olduğu görülmüştür.

Bilim Kodu : 20208
Anahtar Kelimeler : Ising model, ferrimanyetizma, telafi noktası, Cellular Automaton, kare örgü, evrensellik, kritik üs, histerezis, soğutma algoritması
Sayfa Adedi : 53
Danışman : Doç. Dr. Aycan ÖZKAN

INVESTIGATION OF MIXED SPIN 3 - SPIN 5/2 ISING MODEL ON THE SQUARE
LATTICE VIA CELLULAR AUTOMATON

(M. Sc. Thesis)

Çağrı KANI

GAZİ UNIVERSITY

GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES

April 2025

ABSTRACT

In this study, Spin 3 - Spin 5/2 mixture was modeled with Ising model in two-dimensional square lattice and simulated with Cellular Automaton cooling algorithm and its magnetic properties were investigated. Calculations were made under periodic boundary conditions in square lattices with lattice size $L=32, 64, 96$ and 128 . A part of the ground state phase diagram of Spin 3 - Spin 5/2 mixture, which was studied for the first time, was obtained and it was seen that there were different ferrimagnetic order regions. In the calculations, ferrimagnetic - paramagnetic phase transition was observed in magnetization, which is the order parameter, and compensation point was determined for some parameters. Hysteresis loops are obtained to study the behavior of the mixed spin system in the presence of an external magnetic field at the compensation point and at different temperatures. The critical behaviors and static critical exponents of thermodynamic quantities are obtained using the finite mesh scaling method with selected parameter sets for different ground state regions of the mixed spin system. It is observed that the Mixed Spin 3-Spin 5/2 Ising model belongs to the universality class of the two-dimensional Ising model for the selected parameter sets.

Science Code : 20208

Key Words : Ising model, ferrimagnetism, compensation point, Cellular Automaton, square lattice, universality, critical exponent, hysteresis, cooling algorithm

Page Number : 53

Supervisor : Assoc. Prof. Dr. Aycañ ÖZKAN

TEŐEKKÖR

Tez alıŐmamın her anında bilgi ve tecrübesi ile bana büyük destek sađlayan, tezin tamamlanmasındaki her süreçte yardımlarını esirgemeyen saygıdeđer hocam Do. Dr. Aycan ÖZKAN'a içtenlikle teşekkür ederim.

Hayatım boyunca bana maddi ve manevi desteklerini esirgemeyen anneme ve babama, bunun yanında her zaman desteklerini yanımda hissettiđim sevgili eşime ve ođlum Uraz KANÍ'ye teşekkürü bir bor bilirim.



İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	iv
ABSTRACT.....	v
TEŞEKKÜR.....	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....	ix
ŞEKİLLERİN LİSTESİ.....	x
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	xii
1. GİRİŞ.....	1
2. TEORİ.....	3
2.1. Ising Model.....	3
2.1.1. Serbest enerji ve öz ısı.....	5
2.2. Mıknatıslanma	6
2.2.1. Paramanyetizma	7
2.2.2. Ferromanyetizma.....	8
2.2.3. Antiferromanyetizma	9
2.2.4. Ferrimanyetizma.....	10
2.3. En Yakın Komşu Etkileşimli Ising Model	11
2.4. Statik Kritik Olay ve Statik Kritik Üsler	14
2.4.1. Kendiliğinden mıknatıslanma M , manyetik alınganlık χ ve öz ısı c 'nin sıcaklık bağımlılıkları.....	14
2.4.2. Spin-spin korelasyon fonksiyonu $g(r)$	15
2.4.3. Binder kümülanları.....	16
2.5. Sonlu Örgü Ölçekleme Teorisi	16
2.5.1. Boyut analizi	16
2.5.2. Termodinamik nicelikler için sonlu örgü ölçekleme bağıntıları.....	17

	Sayfa
2.6. Ising Modelde Manyetik Alan Etkisi.....	19
2.6.1. Histerezis eğrisi.....	20
3. MODEL.....	23
3.1. Cellular Automaton (CA) Modeli.....	23
3.2. “Cellular Automation” Algoritmaları.....	24
3.2.1. Soğutma algoritması.....	24
3.2.2. Creutz Cellular Automaton algoritmasında termodinamik niceliklerin hesabı.....	27
4. ARAŞTIRMA BULGULARI.....	29
4.1. Karışık Spin 3- Spin 5/2 Ising Modelin Taban Durumu ve Faz Tanımları.....	29
4.2. Karışık Spin 3- Spin 5/2 Ising Modelde Dış Manyetik Alan Etkisi.....	34
4.3. Karışık Spin 3- Spin 5/2 Ising Modelde Sonlu Örgü Ölçekleme.....	37
5. SONUÇ VE ÖNERİLER.....	43
KAYNAKLAR.....	45
ÖZGEÇMİŞ.....	53

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 4.1. Statik kritik üsler.....	41



ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. Ferromanyetik malzemelerde sıcaklığa karşı mıknatıslanma grafiği	5
Şekil 2.2. Paramanyetik malzemelerde mıknatıslanma.....	7
Şekil 2.3. Ferromanyetik malzemelerde atomların manyetik momenti	8
Şekil 2.4. Antiferromanyetik malzemelerde spin yönelimleri	9
Şekil 2.5. Antiferromanyetik malzemelerde alınganlık değerinin sıcaklık ile değişimi.....	10
Şekil 2.6. Ferrimanyetik malzemelerin spin dizilimleri	10
Şekil 2.7. Üç değerlikli katyonların tetrahedral (d), oktahedral (a) veya dodekahedral (12 kenarlı çarpık çok yüzlü) (c) bölgeleri işgal ettiği, katyonları çevreleyen oksijen çok yüzlü ortorombik kristal yapı [61].....	11
Şekil 2.8. M – H grafiği (a) $T < T_C$, (b) $T = T_C$, (c) $T > T_C$	12
Şekil 2.9. Dış manyetik alana karşı maddenin gösterdiği histerezis eğrisi şeklindeki mıknatıslanma eğrisi	21
Şekil 3.1. Zaman adımları her hücreye uygulanan yerel kural.....	23
Şekil 3.2. Orijinal olarak von Neumann tarafından tanımlanan Cellular Automaton..	24
Şekil 3.3. Kare örgüde; $J = 10$, $D_A = 0$, $D_B = 0$ ve $h=0$ parametre seti için taban durum konfigürasyonunun tespiti ve iç enerjideki değişimi dHI 'nin (a) merkez spinin 2,5 olduğu durum için (b) merkez spinin 3 olduğu durum için.....	26
Şekil 4.1. Karışık Spin 3 – Spin 5/2 Ising modelin (D_B/J , D_A/J) taban durum faz diyagramı	29
Şekil 4.2. (a) Mıknatıslanma (M) ve (b) alınganlığın (\square) sıcaklıkla değişimi.....	30
Şekil 4.3. (a) İç enerji (H_I) ve (b) Öz ısının (C) sıcaklıkla değişimi	31
Şekil 4.4. Alt örgü düzen parametrelerinin (m_a , m_b) sıcaklıkla değişimi.....	31
Şekil 4.5. Alt örgü düzen parametrelerinin mutlak değerlerinin ($ m_a $, $ m_b $) sıcaklıkla değişimi.....	32
Şekil 4.6. Toplam düzen parametresinin (M_I) sıcaklıkla değişimi.....	33
Şekil 4.7. $KT/J - D_A/J$ faz uzayında, $D_B/J=-1.0$ değeri için, kritik sıcaklık (T_C) ve telafi noktaları (T_{comp})	34

Şekil	Sayfa
Şekil 4.8. Toplam mıknatıslanmanın dış manyetik alana göre değişimi (a) Başlangıç spin değerleri $S=3$, $\sigma=-5/2$ için, (b) Başlangıç spin değerleri $S=-3$, $\sigma=5/2$ için.....	35
Şekil 4.9. Toplam mıknatıslanmanın dış alana göre davranışını veren histerezis eğrileri (a) $kT/J < kT_{comp}/J$ ($kT/J=3.0$), (b) $kT/J = kT_{comp}/J$ ($kT/J=4.6$), (c) $kT_{comp}/J < kT/J < kT_C/J$ ($kT/J= 6.0$), (d) $kT/J=kT_C/J$ ($kT/J=7.3$), (e) $kT_C/J < kT/J$ ($kT/J=7.5$)	36
Şekil 4.10. $L=32, 48, 72, 96, 128$ örgülerinde M_t için hesaplanan; Binder kümülanının (U_L) sıcaklıkla değişimi ve sonsuz örgü kritik sıcaklık ($T_C(\infty)$) tespiti, (a) $D_A/J = 1.5$, $D_B/J = -1.0$ (b) $D_A/J = 2.5$, $D_B/J = -1.0$, (c) $D_A/J = 4.0$, $D_B/J = -1.0$...	37
Şekil 4.11. $L=32, 48, 72, 96, 128$ örgülerinde M_t için hesaplanan; Binder kümülanının (U_L) sonlu örgü ölçeklemesi, (a) $D_A/J = 1.5$, $D_B/J = -1.0$ (b) $D_A/J = 2.5$, $D_B/J = -1.0$, (c) $D_A/J = 4.0$, $D_B/J = -1.0$	38
Şekil 4.12. $L=32, 48, 72, 96, 128$ örgülerinde; öz ısının (C/k) sıcaklıkla değişimi, (a) $D_A/J = 1.5$, $D_B/J = -1.0$ (b) $D_A/J = 2.5$, $D_B/J = -1.0$, (c) $D_A/J = 4.0$, $D_B/J = -1.0$...	38
Şekil 4.13. $L=32, 48, 72, 96, 128$ örgülerinde; öz ısıdan (C/k) elde edilen örgü kritik sıcaklıklarının $\nu=1.0$ için sonsuza ekstrapolasyonu, (a) $D_A/J = 1.5$, $D_B/J = -1.0$ (b) $D_A/J = 2.5$, $D_B/J = -1.0$, (c) $D_A/J = 4.0$, $D_B/J = -1.0$	39
Şekil 4.14. $L=32, 48, 72, 96, 128$ örgülerinde; $\beta = \beta \nu = 0,125$ ve $\nu=1.0$ için mıknatıslanmanın (M) sonlu örgü ölçeklemesi, (a) $D_A/J = 1.5$, $D_B/J = -1.0$ (b) $D_A/J = 2.5$, $D_B/J = -1.0$, (c) $D_A/J = 4.0$, $D_B/J = -1.0$	39
Şekil 4.15. Şekil 4.13. $L=32, 48, 72, 96, 128$ örgülerinde; $\gamma = \gamma' = 1.75$ ve $\nu=1.0$ için alınganlığın (χ) sonlu örgü ölçeklemesi, (a) $D_A/J = 1.5$, $D_B/J = -1.0$ (b) $D_A/J = 2.5$, $D_B/J = -1.0$, (c) $D_A/J = 4.0$, $D_B/J = -1.0$	40
Şekil 4.16. $L=32, 48, 72, 96, 128$ örgülerinde; $\nu=1.0$ için öz ısının (C/k) kritiğinin altında ($T < T_C$) sonlu örgü ölçeklemesi, (a) $D_A/J = 1.5$, $D_B/J = -1.0$, (b) $D_A/J = 2.5$, $D_B/J = -1.0$, (c) $D_A/J = 4.0$, $D_B/J = -1.0$	40
Şekil 4.17. $L=32, 48, 72, 96, 128$ örgülerinde; $\nu=1.0$ için öz ısının (C/k) kritiğinin üstünde ($T_C < T$) sonlu örgü ölçeklemesi, (a) $D_A/J = 1.5$, $D_B/J = -1.0$, (b) $D_A/J = 2.5$, $D_B/J = -1.0$, (c) $D_A/J = 4.0$, $D_B/J = -1.0$	41

SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılmış simgeler ve kısaltmalar, açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmuştur.

Simgeler

Açıklamalar

∞	Sonsuz
ε	İndirgenmiş sıcaklık
ε	İndirgenmiş sıcaklık
χ	Manyetik alınganlık
σ_i	i. düğümdeki buçuklu spin
$\langle \rangle$	Beklenen değer ve ortalama
C	Öz ısı
d	Uzay boyutu
D_A	Kristal alan parametresi
D_B	Kristal alan parametresi
H	Hamiltonyen
J	Bilineer etkileşim parametresi
k_B	Boltzmann sabiti
M	Manyetizasyon
M_t	Toplam manyetizasyon
N	Düğüm sayısı
S_i	i. düğümdeki tam spin
T	Sıcaklık
T_C	Kritik sıcaklık
U	İki komşu spin arasındaki etkileşim enerjisi
U_L	Binder kümülantı
α, α'	Öz ısı kritik üssü
β, β'	Manyetizasyon kritik üssü
γ, γ'	Manyetik alınganlık kritik üssü
ν	Korelasyon uzunluğu kritik üssü

Kısaltmalar**CA****CCA CCA****h****Açıklamalar**

Cellular Automaton

Creutz Cellular Automaton

Dış manyetik alan



1. GİRİŞ

Günümüzde ferritler teknolojik açıdan önemli malzemeler olduğundan, ferrimanyetizma yoğun bir şekilde incelenen ve ilgi çeken bir alan olarak karşımıza çıkmaktadır. Kendiliğinden mıknatıslanmaya sahip kararlı; kristal oda sıcaklığı mıknatısları, termomanyetik kayıt ve cihazlar gibi alanlardaki potansiyel uygulamaları nedeniyle büyük ilgi görmektedir [1]. Yeni ferrimanyetik malzemelerin sentezi malzeme biliminde aktif bir alandır [2-6]. Ferrimanyetik malzemelerin senteziyle ilgili yoğun çalışmalar bu malzemelerin teorik olarak çalışılmasının da önünü açmıştır. Karışık spin sistemlerinin Ising model yardımıyla modellenmesi ferrimanyetizmanın teorik olarak incelenmesi için oldukça elverişlidir. Ferrimanyetikler, sonlu bir kalıcı mıknatıslanmaya sahip birkaç alt örgüden oluşur ve kritik sıcaklık (T_C) üzerinde paramagnetik davranış gösterirler. Bir ferromanyetikten farklı olarak, mıknatıslanmanın belirli koşullar altında ortadan kalktığı bir telafi sıcaklığının ($T_{comp} < T_C$) var olma olasılığı bu malzemeyi ilginç kılan bir özelliktir [7, 8]. Telafi noktasındaki davranış, termo-manyetik kayıt alanında temel öneme sahiptir. Telafi noktasında koersivite farklılaşmaktadır [9]. Bu noktada manyetizasyonun işaretini tersine çevirmek için yalnızca küçük bir sürücü alan gereklidir. Telafi sıcaklığının hemen altında koersivite, düşük sıcaklıkta tekrar yükselmeden önce minimuma düşer. Telafi noktasının yakınındaki koersivitenin bu sıcaklık bağımlılığı, yüksek yoğunluklu manyeto-optik kayıt ortamlarında yazma ve silme için geçerlidir. Termo-manyetik etkiler, odaklanmış bir lazer ışınıyla yerel ısıtma yapılarak elde edilir [10]. Ising spin modelin, istatistiksel mekanikte, parametrelerin varsayılan değerlerine göre, ortaya çıkan mıknatıslanmanın sıcaklığa bağlı olduğu çeşitli ferrimanyetik davranış tipleri için tamamen çözülebilir modeller olduğu gösterilmiştir [11]. Uzun yıllar boyunca Ising modeli ve varyantları, fiziksel sistemlerin temel yönlerini modellemek için tasarlanmış teorik basitleştirmeler olarak kabul edilmiştir. Fakat 1950' lerin başlarında saf nadir toprak elementleri daha kolay ulaşılabilir hale gelmiş ve bu da yeni manyetik malzemelerin incelenmesini teşvik etmiştir. Başlangıç deneyleri; ortalama alan [12-14], küme modelleri [15,16], tam doğrusal zincir sonuçlarının ortalama alanla kombinasyonları [17] ve hem düşük hem de yüksek sıcaklıklarda seri açılımları [18] dahil olmak üzere çeşitli yaklaşımlar kullanılarak Ising model teorisiyle karşılaştırıldı. Ising modelleri ile bir dizi gerçek manyetik malzeme arasındaki benzerlikleri ve farklılıkları incelendiğinde ideal Ising modeli ile gerçek malzemeler arasında önemli farklılıklar olmasına rağmen, uyumun genellikle çok iyi olduğu bulunmuş ve ortaya çıkan sonuçlar, Ising modelinin ve gerçek manyetik malzemelerin son 40 yılda teori ve deney arasındaki

etkileşim için alışılmadık derecede zengin ve üretken bir alan sağladığını göstermektedir [19]. Ising modelde hesaplama yapabilmek için birçok farklı model ve simülasyon yöntemi kullanılmıştır. Bogoliubov eşitsizliğine dayalı ortalama alan teorisi ($3/2-2$) ve ($3/2-1-5/2$) spin karışımlarında uygulanmıştır [20-22]. Aynı teori ($1, 7/2$) ve ($2, 7/2$) spin karışımlarına da uygulanmış ve telafi noktalarına rastlanmıştır [23-25]. Monte Carlo methodu ($1-3/2$), ($2 - 5/2$), ($3/2 - 5/2$), ($1/2 - 1$) spin karışımlarına uygulanarak telafi nokta elde edilmiştir [26-30]. Etkili alan teorisi ile karışık spin ($1/2-3/2$) incelenmiş ve yine bu spinlerde telafi noktasına rastlanmıştır [31]. Sekiz köşe modeli ile ($1/2 - 3/2$) ve ($1/2 - S$) karışık spinleri incelenmiştir ve bu çalışmalarda telafi sıcaklığı görülmemiştir [26,32]. Farklı bir hesaplama methodu olan ortalama alan teorisi ile incelenen ($1/2 - 1$) spin karışımında da telafi noktaları tespit edilmiştir [12-14]. Dinamik çift yaklaşımı modeli, transfer matrisi yöntemi, Bethe Peierls hesaplaması ve Single-site cluster teorisine dayalı sonlu küme yaklaşımı ile yine karışık spin ($1/2 - 1$) incelenmiştir ve bu çalışmalarda telafi noktası görülmemiştir [15,33,34]. İstatistiksel mekaniğin uygulama alanına giren simülasyon teknikleri; bilgisayar teknolojisindeki ilerlemeler, deneysel çalışmalar ile uyumları ve artan bir ivme ile sürdürülmekte olan malzeme araştırmaları nedeniyle yaygın hale gelmiştir. Bu simülasyon tekniklerinden biri de “Cellular Automaton (CA)”dır. 1952’ de John von Neumann tarafından keşfedilen Cellular Automaton’ in ilk teorileri Wolfram tarafından geliştirilmiştir [35,36], 1986’ da M. Creutz tarafından mikrokanonik Creutz Cellular Automaton (CCA) algoritması önerilmiştir [37]. Zamanın ve uzayın kesikli olduğu Cellular Automatonda kurallar uygulanarak bir örgü noktasının bir zaman adımı sonraki durumuna komşularının durumu dikkate alınarak karar verilir. Amaç, herhangi bir verilen kural için incelenen sistemin durumunun belirlemek, durumlar değiştikçe oluşan faz geçişlerinin evrensellik sınıflarını tanımlamaktır [38].

Bu tez çalışmasında karışık spin 3 – spin $5/2$ Ising modelin manyetik özellikleri araştırıldı. Termodinamik nicelikler, kare örgü üzerinde, periyodik sınır şartlarında CCA soğutma algoritması ile 1.000.000 zaman adımı ve örgü noktası başına ortalamalar alınarak hesaplandı [38-41]. Taban durum faz diyagramı elde edilerek faz uzayının çeşitli bölgelerinde termodinamik niceliklerin sıcaklığa bağlı davranışı incelendi. Ferrimanyetik sistemlerin bir özelliği olan telafi noktasının varlığı araştırıldı.

2. TEORİ

2.1. Ising Model

Fiziksel sistemler atom ve molekül gibi parçacıklardan oluşur ve bu sistemin sıcaklık, yoğunluk ve manyetizasyon gibi özellikleri ölçülerek bulunabilir. Bunun yanında parçacıklar arası etkileşimler kullanılarak ölçülebilir bu özellikler hakkında istatistiksel olarak yorum yapılabilir. Özellikle faz geçişlerinde malzemelerin atomları belli bir düzen içerisinde olurlar. Maddelerin katı, sıvı ve gaz hallerine dönüşümleri, Bose-Einstein yoğunlaşması birinci derece faz geçişi olarak tanımlanır. Ferromantizmadan paramanyetizmaya geçiş, ikili alaşımlarda düzenden düzensizliğe geçiş ve süper akışkandan akışkana geçişler ise ikinci derece faz geçişleri olarak tanımlanabilir [42].

Ising model 1900'de Kölnde doğan Ernst Ising tarafından 1925'te ferromanyetik malzemelerin özelliklerini açıklamak için tasarlanmıştır [43].

Ising model ilk olarak dış manyetik alan olmadığına da mıknatıslanmaya sahip olan ferromanyetik malzemelerin özelliklerini incelemek için kullanılmıştır. Ferromanyetik malzemelerin termodinamik davranışları, sıvı veya gazların faz dönüşümleri, faz geçişleri spin-1/2 ve spin-1 Ising modelleri kullanılarak hesaplanabilir. Farklı özellikleri hesaplamak için daha fazla durumlu Ising model kullanmak da mümkündür.

Genel olarak maddelerin termodinamik niceliklerini hesaplamak, sistem çok sayıda parçacık ve olası durum içereceğinden, istatistiksel yöntemlerle mümkündür. Ising model çok sayıda parçacık içeren karmaşık bir sistemin yapısını ve özelliklerini incelemek, bu karmaşık yapıdaki parçacıkların birbirleri ile etkileşimlerini belirlemek için matematiksel bir metot olarak kullanılır [44].

En temel spin-1/2 Ising model ile modellenen fiziksel sistemleri üç kategoride sınıflandırmak mümkündür. İlki uygulanan alana bağlı olarak spinleri yukarı veya aşağı olarak ayarlanabilen mıknatıslar, ikincisi farklı tür moleküllerin karışımı olan yapılar, üçüncüsü ise moleküller ve boşlukların karışımı olan yapılardır. Düzenli bir örgünün her bir noktasına iki değerli bir değişken atandığını söylersek, her üç tür de soyut olarak aynı modelle temsil edilebilir. Bahsedilen üç yapıya bağlı olarak +1 veya -1 değerli değişken değerleri

ile; ilk yapıda o noktadaki molekülün yukarı veya aşağı spine sahip olduğu, ikinci yapıda iki türden birine ait olduğu, üçüncü yapıda mevcut veya yok olduğu söylenebilir. Genellikle iki ya da daha fazla değerli değişken, örgünün i . noktasında spin S_i olarak adlandırılır. Örgülerin spin değerlerine bağlı olan tüm farklı durumları sonlu bir N düğüm için $2N$ farklı durum olacaktır. En yakın komşu etkileşimli Ising modelde moleküllerin birbirlerine uzun menzilde etki uygulamadığı kabul edilerek örgüdeki etkileşimin sadece komşu noktalar arasında olduğu kabul edilmektedir.

En yakın komşu etkileşimli spin-1/2 Ising modelin hamiltonyeni

$$H_I = J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + H \sum_i S_i \quad (2.1)$$

şeklindedir [35]. Burada; $J < 0$ ferromanyetik bilineer etkileşim terimi, H ise dış alandır. $\langle ij \rangle$ en yakın komşu etkileşimler üzerinden hesap yapıldığını belirtir. Bölüşüm fonksiyonundan sistemin tüm termodinamik fonksiyonları türetilbilir ve sistemin bir faz geçişine uğrayıp uğramadığı bulunabilir [45].

Örgü yapısı iki boyutta; kare, üçgen, üç boyutta; kübik veya hegzagonal olarak karşımıza çıkabilir. Daha genel olarak bir örgünün köşelerinde bulunmaya zorlanmış spinleri N sayısına kadar olmak üzere i indisi ile gösterdiğimizde aşağı ve yukarı spinler kümesi $S = \{S_i\}$ tüm sistemin olası durumlarını vermektedir. Buradan spinler arası etkileşimi ($E_0(s)$) ve spinlerle dış manyetik alanın etkileşimini ($E_1(s)$) içeren Hamiltonyen terimlerini kullanarak eşitlik 2.2 yazılabilir.

$$E(s) = E_0(s) + E_1(s) = E_I \quad (2.2)$$

k ; Boltzmann sabiti olmak üzere durumları s_i olan bir sistemin dağılım fonksiyonu,

$$Z_I(H, T) = \sum_{S_1} \sum_{S_2} \dots \sum_{S_N} e^{-\frac{E_I(S_i)}{kT}} \quad (2.3)$$

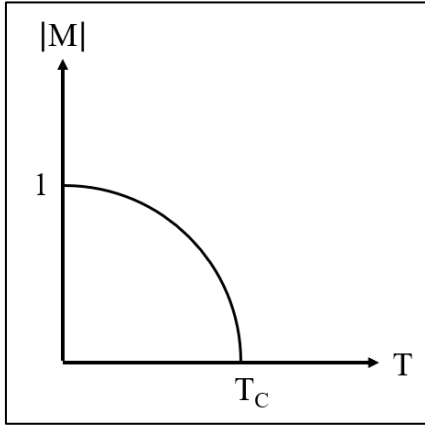
olarak verilir.

$X(s_i)$, bir sistemin s_i durumuna karşılık gelen ortalama termodinamik değeri,

$$\langle X \rangle = Z_1^{-1} \sum s_i X(s_i) e^{-\frac{E_1(s_i)}{kT}} \quad (2.4)$$

olarak ifade edilir [46].

Ferromanyetik maddeler kendiliğinden mıknatıslanmaya sahiptir. Ferromanyetik sistemde Curie sıcaklığında (T_C) gerçekleşen faz geçişi sonrası mıknatıslanma ortadan kalkar. Faz geçişi ile sıfıra giden nicelikler “düzen parametresi” olarak adlandırılır [47]. İki durumlu Spin-1/2 Ising modeli tek düzen parametrelidir olup, ferromanyetik ve antiferromanyetik malzemelerin kritik durumlarını incelemek için kullanılabilir.



Şekil 2.1. Ferromanyetik malzemelerde sıcaklığa karşı mıknatıslanma grafiği

Ferromanyetik malzemelerde mıknatıslanma Curie sıcaklığında (T_C) tamamen sıfır olmaktadır.

Üç durumlu spin-1 Ising modeli ise iki düzen parametresine sahiptir. Çok bileşenli akışkanlar ve sıvı kristal karışımlara [47-49] uygulanan model yarıiletken alaşımlar [50], mikroemülsiyonlar [51], absorbate sistemler [52] ve ferromanyetik ikili alaşımlar [53] gibi malzemeleri incelemek amacıyla kullanılır. Dört durumlu spin-3/2 Ising modeli üç düzen parametresi ile incelenmektedir. Bu yapıdaki maddeler çok zengin faz diyagramlarına sahiptir [54].

2.1.1. Serbest enerji ve öz ısı

Bir sistemin serbest enerjisi, sistemdeki örgü ne kadar büyükse o kadar fazla olması beklenir. Dış manyetik alan ve sıcaklığın fonksiyonu olarak spin başına düşen serbest enerji;

$$f(H,T) = -kT \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \ln Z_I(H, T) \quad (2.5)$$

limit ifadesiyle verilir.

Bir sistemin termodinamik özelliklerini hesaplamak için sistemin serbest enerjisine spin başına serbest enerjiden ulaşılır. Spin başına iç enerji ve öz ısı eşitlikleri denklem (2.6) ve (2.7) de verilmiştir [55].

$$U_I(H,T) = -kT^2 \frac{\partial(\frac{f}{kT})}{\partial T} \quad (2.6)$$

$$C(H,T) = \frac{\partial U_I}{\partial T} \quad (2.7)$$

2.2. Mıknatıslanma

Manyetize olmuş ferromanyetik malzemelerde manyetize olmadan önce gelişigüzel sıralanan moleküllerin dış manyetik alan uygulandığında alan yönünde sıralanmasıyla mıknatıslanma gerçekleşir. Maddelerin manyetik davranışları 1905 yılında Langevin'in paramanyetizma teorisi ile açıklanma sürecine girmiştir. Langevin güçlü bir mıknatıslanmanın atomik mıknatıslar arasındaki etkileşim ile mümkün olacağını söylemiştir [56]. Manyetik domainlerin toplam enerjisiyi azaltmak için ortaya çıktığını söyleyen Landau ve Lifshitz 1935 yılında bu yapıların modellenmesini de yapmışlardır [57].

Dış manyetik alan olmadan manyetize olabilen maddeler “kendiliğinden manyetizasyon” özelliğine sahiptirler. Bu özelliğin nedeni atomlar arasındaki değiş tokuş etkileşimleri ile atomic dipollerin düzgün bir şekilde sıralanması nedeniyle oluşur. Manyetizasyon mutlak sıfırda doyum noktasında iken sıcaklığın artması ile kritik sıcaklıkta kaybolur. Ferromanyetik, antiferromanyetik, ferrimanyetik ve helimanyetik malzemeler kendiliğinden manyetizasyon durumunu gösterebilirler [58]. Bir örgüdeki yüzey başına spinlerin ortalaması hesaplandığında mıknatıslanma bulunabilir.

$$M(H,T) = N^{-1} Z_I^{-1} \sum_s (s_1 + s_2 + \dots + s_N) e^{\{-[E_0(s) - H \sum_i s_i]/kT\}} \quad (2.8)$$

(2.8) eşitliğine göre mıknatıslanma değeri -1'den +1 değerine kadardır.

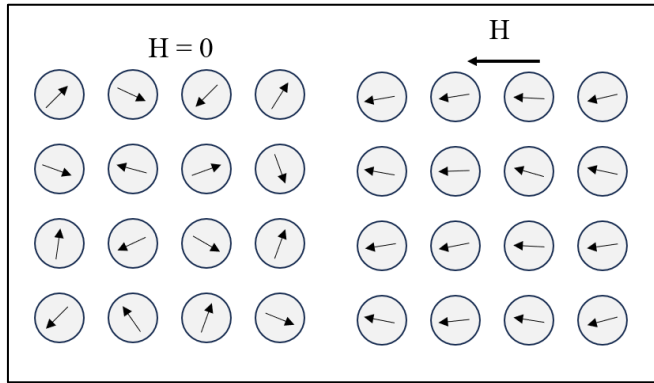
Mıknatıslanma değerinin bulunması ile bir sistemin manyetik alınganlık (χ) değeri şu şekilde yazılır.

$$\chi = \left(\frac{N}{kT}\right) \langle [M - \langle M \rangle]^2 \rangle \quad (2.9)$$

Eşitlik (2.9)'dan manyetik alınganlığın pozitif bir değer olduğu görülmektedir [59].

2.2.1. Paramanyetizma

Paramanyetik malzemelerde dış bir manyetik alan uygulandığında uygulanan manyetik alan yönünde ortaya çıkan bir mıknatıslanma görülür. Manyetik alınganlık pozitif olduğundan uygulanan dış manyetik alanın büyüklüğüyle doğru orantılı olarak malzeme atomlarında manyetik moment ortaya çıkar ve mıknatıslanma dış manyetik alan uygulandığı sürece oluşur. Paramanyetik malzemelere dış bir manyetik alan uygulandığında, Şekil 2.2.'te görüldüğü gibi rastgele yönlenmiş manyetik momentler belirli bir dereceye kadar hizalanacaktır. Böylece uygulanan manyetik alanla aynı yönde düşük bir mıknatıslanma olacaktır.



Şekil 2.2. Paramanyetik malzemelerde mıknatıslanma

Paramanyetik malzemelerde uygulanan manyetik alan yönünde mıknatıslanma olur.

Curie yasasına göre alınganlık;

$$\chi = \frac{C}{T} \quad (2.10)$$

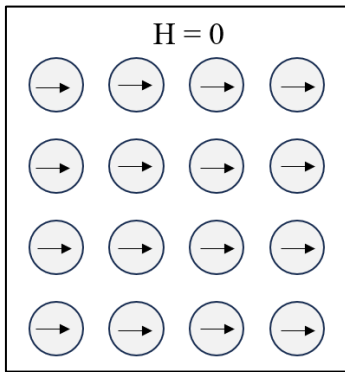
şeklinde verilmektedir. Burada C , Curie sabiti olarak adlandırılan bir sabittir. Curie yasası, Weiss teorisinden türetilen Curie Weiss yasasının, (2.11) eşitliğindeki gibi ifade edilen özel bir durumudur. θ , malzemeye bağlı olarak pozitif veya negatif olabilen sıcaklık boyutunda Curie sabitidir.

$$\chi = \frac{C}{T-\theta} \quad (2.11)$$

Komşu manyetik momentler arasında etkileşim yoksa $\theta = 0$ olur. Bunun yanında θ pozitif veya negatif değerler de alabilir

2.2.2. Ferromanyetizma

Kalıcı manyetizma ilk olarak Fe_3O_4 adlı doğal demir cevherinde tespit edilmiş olup, ferro demir anlamına gelmektedir. Şekil 2.3.'te görüldüğü gibi atomların manyetik momentleri birbirine paralel olarak hizalıdır. Ferromanyetik malzemeler için Weiss tarafından moleküler bir alanın varlığından söz edilmiştir. Ferromanyetik malzemeler, atomik manyetik momentlerin bir yönde hizalandığı bölgeler olan manyetik alanlar içerir. Her iki bitişik alan arasında, manyetik momentin yönü sürekli olarak bir alandan diğerine değişir. Demir, Nikel ve Kobalt elementleri oda sıcaklığında ferromanyetik özellik gösterirken bu malzemelerin sıcaklığı kritik sıcaklığa ulaşır bu sıcaklığı geçtiğinde manyetik özellikleri azalır.



Şekil 2.3. Ferromanyetik malzemelerde atomların manyetik momentleri

Ferromanyetik malzemelerde atomların manyetik momentleri birbirine paralel olarak hizalanmıştır.

Paramanyetik bir malzeme iç etkileşme ile manyetik momentleri paralel hale gelerek ferromanyetik bir malzeme haline gelir ve bu iç etkileşim B_E ile tanımlanmaktadır. Ferromanyetik malzemelerde mıknatıslanma (2.12) eşitliği ile verilmektedir.

$$\vec{B}_E = \lambda \vec{M} \quad (2.12)$$

λ bir sabit ve \vec{M} mıknatıslanmadır.

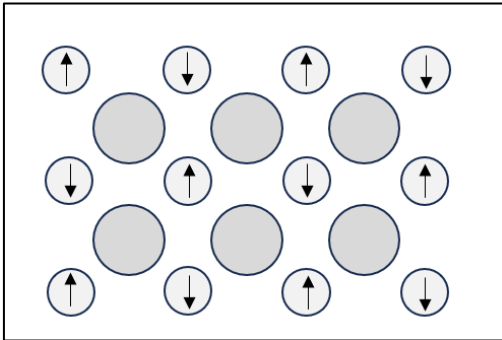
Sıcaklık; Curie sıcaklığının (T_C) altında ise sistem ferromanyetik, Curie sıcaklığının üstünde ise sistem paramanyetik özellik gösterir. Paramanyetik fazda olan bir malzemeye (B_A) dış manyetik alanı uygulandığında mıknatıslanma (2.13) eşitliği ile verilmektedir.

$$M = \chi (B_A + B_E) \quad (2.13)$$

Ferromanyetik maddeler için (2.11) eşitliğinde θ pozitif değerler almaktadır ve buradan χ hesaplanmaktadır [60].

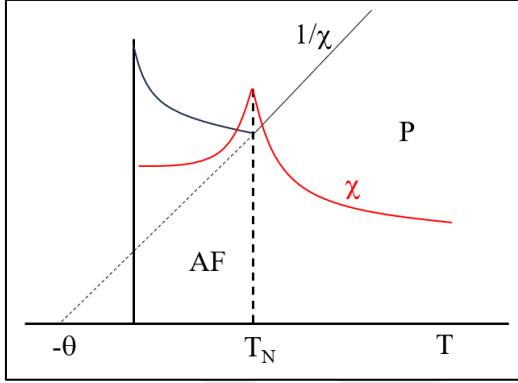
2.2.3. Antiferromanyetizma

Ferromanyetik malzemelerde atomların spinleri aynı yöne yönelirken antiferromanyetik malzemelerde spin yönelimleri birbirine zıttır. Antiferromanyetik malzemeler, komşu atomlar arasındaki değişim etkileşimi nedeniyle atomik manyetik momentlerin antiparalel bir şekilde hizalandığı ferromanyetik malzemelere çok benzer. Bu durum Şekil 2.4'te gösterilmiştir. Antiferromanyetik maddelerde χ değeri hesaplanırken (2.11) eşitliğinde θ negatif değerler almaktadır.



Şekil 2.4. Antiferromanyetik malzemelerde spin yönelimleri

Antiferromanyetik malzemelerde spin yönelimleri birbirine zıttır. Şekil 2.5’deki grafiğe göre χ değeri sıcaklık T_N ’ye (Néel Sıcaklığı antiferromanyetizmada kritik sıcaklıktır) kadar arttıktan sonra doyuma ulaşmış ve azalmaya başlamıştır. Antiferromanyetik maddelerde, T_N faz geçiş sıcaklığının altında spinlerin birbirine zıt yönelme eğilimleri, bu sıcaklık aralığındaki termal enerjiye oranla oldukça büyüktür.

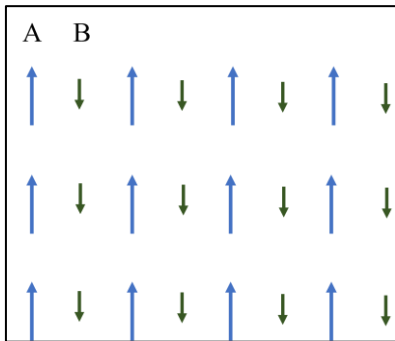


Şekil 2.5. Antiferromanyetik malzemelerde alınganlık değerinin sıcaklık ile değişimi

Antiferromanyetik (AF) malzemelerde alınganlık değerinin sıcaklık ile değişimi. Burada Paramanyetizma (P), Curie sıcaklık sabiti θ ile gösterilmiştir.

2.2.4. Ferrimanyetizma

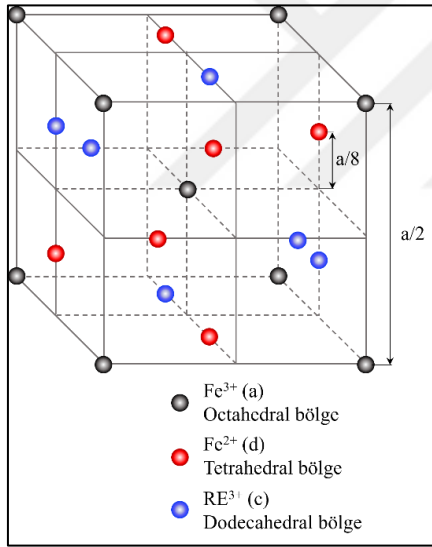
Ferrimanyetizma, karışık kristal yapıya sahip malzemelerde aynı büyüklükte olmayan spinler nedeniyle net mıknatıslanma meydana gelmesi halidir. Ferromanyetik malzemelere göre ferrimanyetik malzemelerin net mıknatıslanmaları daha düşük olacaktır. Ferrimanyetik malzemelerin atomları arasındaki spin dizilimleri antiferromanyetik etkileşim için Şekil 2.6’de gösterilmiştir.



Şekil 2.6. Ferrimanyetik malzemelerin spin dizilimleri

Daha önce çalışılmış ferrimanyetik sistemlere örnek vermek gerekirse, spinel yapılı AB_2O_4 genel formülüne sahip kübik yapılı kristallerden bahsedilebilir. Burada A iki değerlikli kanyonları ve B üç değerlikli kanyonları, oksijen iyonlarıyla bir örgü oluşturur [61,62]. A ve B bölgeleri arasındaki değişim etkileşimi negatif olduğundan ve kanyonlar arasında en güçlüsü olduğundan, spinelin net mıknatıslanması, iki bölge arasındaki manyetik moment farkıdır.

Bir diğer örnekte, spinel yapının dışında garnetler, nadir toprak iyonları ve Fe^{3+} iyonları da dahil olmak üzere üç değerlikli kanyonların tetrahedral (d), oktahedral (a) veya dodekahedral (12 kenarlı çarpık çok yüzlü) (c) bölgeleri işgal ettiği, kanyonları çevreleyen oksijen çok yüzlü ortorombik kristal yapılarıdır. Tetrahedral ve oktahedral bölgeler arasındaki etkileşim paralel değildir, net manyetik moment ise c bölgelerindeki nadir toprak iyonlarına paralel değildir. Şekil 2.7’de garnet yapısında temsili bir yapı gösterilmiştir [63].



Şekil 2.7. Üç değerlikli kanyonların tetrahedral (d), oktahedral (a) veya dodekahedral (12 kenarlı çarpık çok yüzlü) (c) bölgeleri işgal ettiği, kanyonları çevreleyen oksijen çok yüzlü ortorombik kristal yapı [61]

2.3. En Yakın Komşu Etkileşimli Ising Model

Ising spin etkileşim enerjisini tanımlayan $E(s)$ 'nin (Eşitlik 2.2) bağlı olduğu fonksiyonlarda $E_0(s)$ bileşeni için en yakın komşu etkileşimlerine bakıp 2.14 eşitliği çıkarılabilir.

$$E_0(s) = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j \quad (2.14)$$

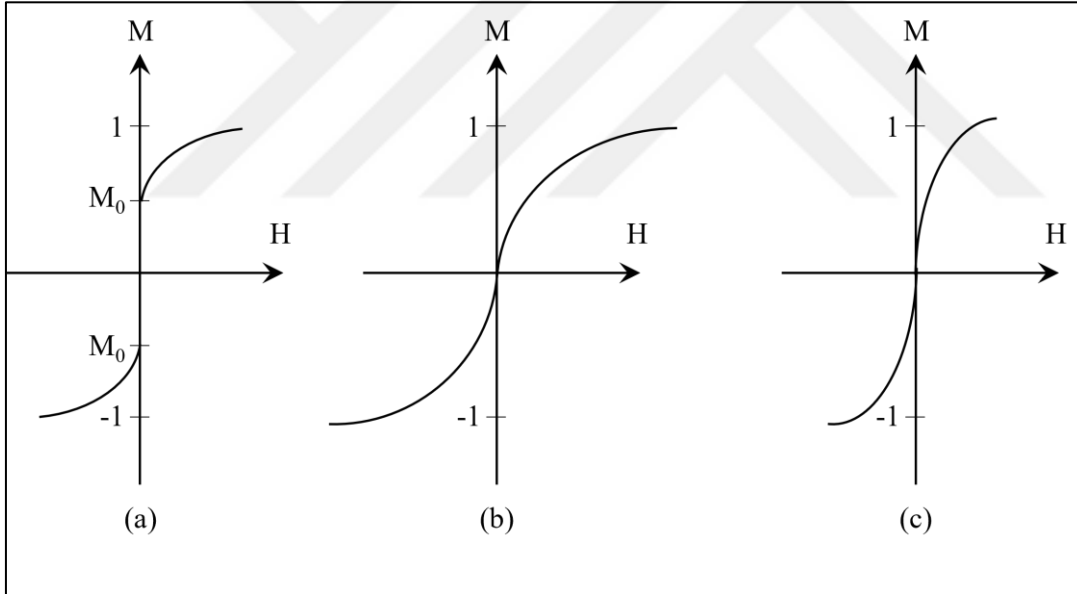
Ferromanyetik durumlar için $J > 0$ dir. i ve j en yakın komşuları göstermektedir. İki boyutta Ising modelin sıcaklığa bağlı dağılım fonksiyonu eşitlik 2.15'te verilmiştir.

$$Z_I = \sum_S e^{\left[\frac{J}{kT} \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j + \frac{H}{kt} \sum_i s_i \right]} \quad (2.15)$$

$\frac{J}{kT}$ değerine K ve $\frac{H}{kt}$ değerine h denilirse K ve h nin bir fonksiyonu olan Z_I 'ya bağlı olarak mıknatıslanma eşitlik 2.16'da verilmiştir.

$$M = \frac{\partial \left[\lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \ln Z_I(h, K) \right]}{\partial h} \quad (2.16)$$

Mıknatıslanmanın $T < T_C$, $T = T_C$ ve $T > T_C$ kritik sıcaklıklarına göre dış manyetik alana karşı grafikleri Şekil 2.8a, Şekil 2.8b ve Şekil 2.8c'de verilmiştir.



Şekil 2.8. $M - H$ grafiği (a) $T < T_C$, (b) $T = T_C$, (c) $T > T_C$

Grafiklerdeki sıcaklık değerleri dikkate alınarak kare bir örgü için Z_I değeri eşitlik 2.17 gibi bulunabilir.

$$Z_I = (2 \cosh h)^N \{ 1 - 2NKt^2 - NK^2 [(2N - 7)t^4 + 6t^2 + 1] + O(K^3) \} \quad (2.17)$$

$$t = \tanh h \quad (2.18)$$

olarak alındığında mıknatıslanma değeri M eşitlik 2.19 olarak elde edilir.

$$M = \tanh h\{1 + 4\operatorname{sech}^2 h[K + (3-7t^2)K^2 + O(K^3)]\} \quad (2.19)$$

Kritik sıcaklıktan yüksek sıcaklıklar için $M(0,T) = 0$ elde edilir ve bu durumda fonksiyonun Şekil 2.8c'deki gibi sürekli olduğu görülür. Fakat sıcaklık kritik sıcaklıktan düşükse K büyük bir değer alacaktır. Böylece Z_I , eşitlik 2.20'de görülen u 'nun kuvvetleri olarak açılıp eşitlik 2.21 elde edilir [55].

$$u = e^{-4K} \quad (2.20)$$

$$\begin{aligned} Z_I = & e^{2NK+Nh} \left\{ 1 + Nu^2 e^{-2h} + 2Nu^3 e^{-4h} + \frac{1}{2}N(N-5)u^4 e^{-4h} \right. \\ & \left. + 6Nu^4 e^{-6h} + Nu^4 e^{-8h} + O(u^5) \right\} \\ & + e^{2NK-Nh} \left\{ 1 + Nu^2 e^{2h} + 2Nu^3 e^{4h} + \frac{1}{2}N(N-5)u^4 e^{4h} \right. \\ & \left. + 6Nu^4 e^{6h} + Nu^4 e^{8h} + O(u^5) \right\} \end{aligned} \quad (2.21)$$

Eşitlik 2.21, ψ fonksiyonu ile eşitlik 2.22'deki gibi yazılabilir.

$$Z_I = e^{N\psi(h,K)} + e^{N\psi(-h,K)} \quad (2.22)$$

$\psi(h, K)$ fonksiyonu eşitlik 2.23 olarak verilir.

$$\begin{aligned} \psi(h, K) = & 2K + h + u^2 e^{-2h} + 2u^3 e^{-4h} + u^4 \left(-2\frac{1}{2}e^{-4h} + 6e^{-6h} + e^{-8h} \right) \\ & + O(u^5) \end{aligned} \quad (2.23)$$

Eğer h pozitif ise, eşitlik 2.22'de ilk terim ikincisinden daha büyük olacaktır. Buradan hareketle M , eşitlik 2.24 gibi bulunur.

$$M(0, T) = \lim_{h \rightarrow 0^+} M = 1 - 2u^2 - 8u^3 - 34u^4 - O(u^5) \quad (2.24)$$

Bu eşitliğe göre düşük sıcaklıklarda Şekil 2.8a’da olduğu gibi süreksiz bir fonksiyon grafiği elde edilir.

2.4. Statik Kritik Olay ve Statik Kritik Üsler

İkinci derece faz geçişi yapan bir sistemin kritik sıcaklık yakınlarındaki davranışları kritik olay olarak adlandırılır. Kritik sıcaklığa yaklaşan değerler olduğu için bu noktadaki süreksizlikler kritik üsler ile tanımlanmaktadır. Dış manyetik alan etkili olmadığında termodinamik nicelikler farklı türde kritik üslere sahiptir.

2.4.1. Kendiliğinden mıknatıslanma M , manyetik alınganlık χ ve öz ısı c ’nin sıcaklık bağımlılıkları

Dış manyetik alan etkili olmadığında kendiliğinden mıknatıslanma M , kritik sıcaklık civarında 2.25.a ve 2.25.b eşitliklerine uygun davranışlar gösterir.

$$M(H,T) \approx \varepsilon^{\beta'} \quad \varepsilon \rightarrow 0^+ \quad (2.25.a)$$

$$M(H,T) \approx \varepsilon^{\beta} \quad \varepsilon \rightarrow 0^- \quad (2.25.b)$$

Kritik noktadaki termodinamik niceliklerin süreksizlikleri için kritik üsler kullanılır. Mıknatıslanma eşitliklerinde kritik üsler β ve β' olarak verilir. İki boyutlu Ising modelde kritik üslerin değerleri $\beta = \frac{1}{8}$ ve $\beta' = \frac{7}{8}$ olarak verilir. Eşitliklerdeki ε değeri ise $\varepsilon = \frac{T-T_C}{T_C}$ indirgenmiş sıcaklıktır.

Kritik sıcaklık civarındaki manyetik alınganlık değerleri eşitlik 2.26.a ve 2.26.b’de gösterilmiştir.

$$kT\chi(0,T) \approx \varepsilon^{-\gamma} \quad \varepsilon \rightarrow 0^+ \quad (2.26.a)$$

$$kT\chi(0,T) \approx (-\varepsilon)^{-\gamma'} \quad \varepsilon \rightarrow 0^- \quad (2.26.b)$$

Eşitliklerde görüldüğü gibi alınganlığın kritik üsleri γ ve γ' olarak verilmiştir. Bu iki kritik üs değeri de birbirine eşit ve $\frac{7}{4}$ olarak verilir.

Öz ısı değerinin kritik üsleri α ve α' ile gösterilir. Kritik üs değerlerinin ikisi de $\alpha = \alpha' = 0$ olur. Bunun yanında kritik sıcaklık civarında verilen öz ısı değerlerinde b^+ ve b^- düzeltme terimleri kullanılmıştır [63,64].

$$C(0,T) \approx \varepsilon^{-\alpha} + b^+ \quad \varepsilon \rightarrow 0^+ \quad (2.27.a)$$

$$C(0,T) \approx (-\varepsilon)^{-\alpha'} + b^- \quad \varepsilon \rightarrow 0^- \quad (2.27.b)$$

2.4.2. Spin-spin korelasyon fonksiyonu $g(r)$

Bir sistemde i. ve j. spinler arasındaki korelasyon $g_{ij} = g_{ij}(r_{ij})$ ile verilmektedir.

$$g(r) \rightarrow r^{-p} e^{-r/\xi} \quad (2.28)$$

$t \rightarrow 0$

2.28 eşitliğinde ξ korelasyon uzunluğu olarak verilmiştir ve kritik sıcaklık civarında indirgenmiş sıcaklığa bağlı olarak aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\xi \approx \varepsilon^{-\nu} \quad \varepsilon \rightarrow 0^+ \quad (2.29a)$$

$$\xi \approx (-\varepsilon)^{-\nu'} \quad \varepsilon \rightarrow 0^- \quad (2.29b)$$

Korelasyon uzunluğu için kritik üsler ν ve ν' olarak tanımlanmıştır ve bu kritik üslerin değeri $\nu = \nu' = 1$ dir. 2.29.a ve 2.29.b eşitliklerinde korelasyon uzunluğunun ε civarındaki kritik davranışı verilmiştir. Bunun yanında kritik sıcaklıktan büyük bir sıcaklıkta fonksiyonun değeri eşitlik 2.30'da görülmektedir.

$$g(r) = e^{-r/\xi} \left(\frac{\pi r}{\xi}\right)^{-1/2} 2^{-3/8} \quad (2.30)$$

İki boyutlu örgülerde ise $g(r)$ fonksiyonun değeri kritik sıcaklıkta eşitlik 2.31'deki gibi verilir.

$$g(r) \approx r^{-\eta} \quad (2.31)$$

Buradaki kritik üs $\eta = 1/4$ 'tür. Ising modelde bir sistemi simüle ederken kritik üs değerleri önemlidir ve kritik üsler değişmez sabitlerdir [63-65].

2.4.3. Binder kümülanları

Mıknatıslanmadan yola çıkılarak elde edilen bir diğer nicelik de binder kümülanıdır. U_L Binder kümülanı Eşitlik 2.33'teki gibi hesaplanmıştır.

$$U_L = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle_L}{(3\langle M^2 \rangle_L^2)} \quad (2.33)$$

Eşitlikte görüldüğü gibi U_L dördüncü derecedendir. $U_L - T$ grafikleri çizildiğinde, farklı L örgü büyüklüklerine ait verilere karşılık gelen eğrilerin kesişim noktasından sonsuz örgü kritik sıcaklık değeri bulunabilmektedir [65-67].

2.5. Sonlu Örgü Ölçekleme Teorisi

Bir sistemin termodinamik özellikleri ile ilgili ölçekleme teorileri sisteme ait bütün uzunlukların korelasyon uzunluğu cinsinden yazılabilmesi ve sistemin kritik nokta yakınlığında olmasını gerektirmektedir [63].

2.5.1. Boyut analizi

Boyutsuz termodinamik niceliklere boyut kazandırabilmek için boyut kazandırılacak niceliğin ξ^{-d} ile ölçeklendirilmesi gerekmektedir. Mıknatıslanmanın boyut kazanabilmesi için öncelikle korelasyon fonksiyonunun eşitlik 2.34'deki gibi tanımlanmalıdır. Sonrasında korelasyon fonksiyonu ile boyutu aynı olan $\langle M(0) \rangle^2$ ifadesi birbirine eşitlenerek mıknatıslanma $[\frac{M}{V}]$ eşitlik 2.35 gibi boyutlandırılır.

$$[g(x)] = L^{2-d-\eta} \quad (2.34)$$

$$[\frac{M}{V}] = L^{(2-d-\eta)/2} \quad (2.35)$$

Josephson, Fisher, Rushbrooke ve Widom kanunları ile kritik üsler arasındaki ilişki aşağıda verilmiştir [5, 13].

$$\alpha = 2 - \nu d \quad (2.36)$$

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \quad (2.37)$$

$$\beta = -\nu(2 - d - \eta)/2 \quad (2.38)$$

$$\partial\beta = \nu(2 + d - \eta)/2 \quad (2.39)$$

2.5.2. Termodinamik nicelikler için sonlu örgü ölçekleme bağıntıları

Bir sistem kritik sıcaklıkta bir uzunluğa sahip olmaz. Bu durum korelasyon uzunluğunun $\varepsilon = 0$ için ıraksak davranması anlamına gelmektedir. Sistemi daha fazla büyütüp gerçek sistemin bir kısmının boyutuna getirildiğinde arada bir fark yoksa ölçek değişmez sistem olarak tanımlanabilir. Korelasyon fonksiyonu $\varepsilon = 0$ için eşitlik 2.40 olarak verilir.

$$g(r) \sim x^{-P} \quad (2.40)$$

Birim uzunluğu artırmak için bir b faktörü kullanılırsa x koordinatı yeniden ölçeklenerek $x' = x/b$ olarak yazılır. Bu dönüşüme göre korelasyon fonksiyonu ölçek değişmez bir fonksiyon olarak tekrar yazılırsa eşitlik 2.41 elde edilir.

$$g(x/b) = b^P g(x) \quad (2.41)$$

eşitlikte P , $g(x)$ fonksiyonunun boyutudur ve $P = d - 2 + \eta$ olarak verilir.

Bir başka termodinamik nicelik olan hacim başına serbest enerji (d -boyutunda) eşitlik 2.42'deki gibi ölçeklendirilebilir. L kare örgünün kenar uzunluğu olmak üzere sonsuz örgü kritik üsleri kullanılarak serbest enerji aşağıdaki gibidir.

$$f(h, \varepsilon) = L^{(\alpha-2)/\nu} \Xi \left(L^{\frac{\delta\beta}{\nu}} h, L^{\frac{1}{\nu}} \varepsilon \right) \quad (2.42)$$

$$\varepsilon = \frac{(T - T_C(\infty))}{T_C(\infty)} \quad (2.43)$$

Sonsuz örgü ve sonlu örgü kritik sıcaklıkları arasındaki fark eşitlik 2.44'te verilmiştir.

$$\Delta\varepsilon = \frac{(T_C(\infty) - T_C(L))}{T_C(\infty)} \propto aL^{-1} \quad L \rightarrow \infty \quad (2.44)$$

Kendiliğinden mıknatıslanma için $\Xi = X^\circ$ ve eşitlik 2.39'daki bağıntı kullanılarak sonlu bir örgüde ölçeklendirme yapılırsa aşağıdaki eşitlik elde edilmektedir.

$$M(h, \varepsilon) = L^{-\frac{\beta}{\nu}} X^\circ(L^{\frac{\delta\beta}{\nu}} h, L^{\frac{1}{\nu}} \varepsilon) \quad (2.45)$$

$h = 0$ alınarak dış manyetik alan olmadığı kabul edildiğinde mıknatıslanma eşitlik 2.46'daki gibi olur.

$$M = L^{-\frac{\beta}{\nu}} X^\circ(L^{\frac{1}{\nu}} \varepsilon) \quad (2.46)$$

Başka nicelik olan manyetik alınganlığın sonlu bir örgü sisteminde ölçeklendirme bağıntısı aşağıdaki gibi verilmiştir.

$$kT\chi = L^{\frac{\gamma}{\nu}} Y^\circ(L^{\frac{1}{\nu}} \varepsilon) \quad (2.47)$$

Eşitlik 2.47 olarak verilen bağıntıda manyetik alınganlık için kritik üsler kullanılmış ve Y° olarak verilen fonksiyonun yerine A kritik genlik, w fonksiyonun kritik üssü olmak üzere Ax^w kullanılacaktır. Aynı sistemde öz ısı bağıntısı yazılırsa

$$C = L^{\frac{\alpha}{\nu}} Z^\circ(L^{\frac{1}{\nu}} \varepsilon) \quad (2.48)$$

elde edilir ve Z° fonksiyonunda manyetik alınganlık için kullanılan değerler aynı şekilde bu fonksiyonda da kullanılacaktır. Bu fonksiyonlar şekil fonksiyonu olarak adlandırılır. Bu fonksiyon L 'ye bağlı olarak birim uzunluk arttığında iki spin arası mesafenin $r' = r/L$ şeklinde dönüşmesi ile ortaya çıkar.

U_L oranlarının sonlu örgü ölçeklemesi eşitlik 2.50'de gösterilmiştir.

$$U_L = g(\varepsilon L^{\frac{1}{\nu}}) \quad (2.49)$$

ν 'nin değeri U_L 'nin ölçeklemesi ile bulunabilir [65, 66].

Ölçekleme bağıntılarının önemi, sonlu örgü için ölçeklendirme yapıldığında sonsuz örgü davranışlarının elde edilebilmesidir. Ölçekleme bağıntıları ile ilgili verilen termodinamik nicelikler, olasılık dağılımı ve Binder kümülanının örgülerin ebatları değiştikçe bu örgülere ait verileri büyük x değerleri için bir doğru üzerinde toplar. Termodinamik nicelikler ve Binder kümülanı için x değeri eşitlik 2.50'de verilir.

$$x = \varepsilon L^{\frac{1}{\nu}} \quad (2.50)$$

Bulunan doğrunun eğimini hesaplayarak kritik üs değeri elde edilmektedir [59].

2.6. Ising Modelde Manyetik Alan Etkisi

Ferromanyetik malzemelere dışarıdan bir manyetik alan uygulandığında malzemedeki atomların dizilimleri aynı yöne bakma eğilimde olur. Bu durum, maddenin mıknatıs özelliği göstermesine neden olurken manyetik alan etkisi ortadan kalktığında dahi madde mıknatıslık özelliği göstermeye devam eder. Malzemenin gösterdiği mıknatıslık özelliği yapısına göre değişmektedir. Örneğin; bazı alaşımlarda geçici mıknatıslanma olurken bazılarında kalıcı olabilmektedir. Kalıcı mıknatıslanma özelliği gösteren malzemeleri ilk durumdaki haline dönüştürmek için bazı yöntemler uygulanabilir. Bunlardan birisi, malzemeyi Curie sıcaklığına ısıtmak diğeri ise mıknatıslanma yönüne ters yönde başka bir manyetik alan uygulamaktır. Örnek vermek gerekirse nadir toprak amorf alaşımları ve intermetalikler, bileşim, sıcaklık veya manyetik alan uygulamasındaki ince değişikliklerle manyetik özelliklerinin geniş bir aralıkta değiştirilmesine izin veren büyük bir manyetik malzeme sınıfıdır [71-75]. Malzemeler uygulamalarda sert mıknatıslar veya kayıt ortamı olarak yer bulmuştur ve hala spintronik [76], magnonik [77] ve ultra hızlı manyetizma alanlarında zengin bir uygulama alanı bulmaktadır [78]. Ferrimanyetik sistemler üzerine çalışmalar onlarca yıldır yapılmasına rağmen, bu sistemler büyük ilgi görmekte, teorik ve deneysel çalışmalara konu olmaktadır. Moleküler tabanlı manyetik malzemelerin başarılı deneysel senteziyle, manyetik özellikleri giderek daha fazla ilgi çekmiştir. Bu araştırma alanında, araştırmacılar pratik uygulama için yüksek Curie sıcaklığına sahip manyetik malzemeler bulmayı ummaktadır. Bu malzemelerde, oda sıcaklığında veya üzerinde elde edilebilen ferrimanyetler ideal malzemeler gibi görünmektedir. Teorik olarak, karışık spin Ising sistemleri genellikle ferrimanyetiklerin manyetik özelliklerini keşfetmek için basit modeller

olarak kullanılır. Bu sistemlerde, belirli koşullar altında telafi noktaları oluşabilir. Bir telafi noktasının görünümü, özellikle manyeto-optik kayıta geniş uygulamalara sahiptir [79].

Manyetik sistemlerin termodinamiğini tanımlamak için Weiss moleküler alan teorisi adı verilen bir ortalama alan modeli kullanılır. Sistemin Hamiltoniyen'i eşitlik 2.51'te verilmiştir [80,81].

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i|j \rangle} s_i \cdot s_j - \mathbf{H} \sum_i s_i \quad (2.51)$$

Burada \mathbf{H} uygulanan dış manyetik alandır ve J spinler veya manyetik momentler s_i arasındaki etkileşimin gücünü ölçen büyüklüktür. Ferromanyetik sistemler $J > 0$ 'a, anti-ferromanyetik sistemler ise $J < 0$ 'a karşılık gelir. Her spin bir kafes üzerinde sabit bir konuma sahiptir ve i indeksi ile etiketlenirken, $\langle ij \rangle$ indeksi yalnızca en yakın komşu etkileşimlerinin dikkate alındığını gösterir.

Sistemin net mıknatıslanması eşitlik 2.52 gibi verilir.

$$M = \sum_i s_i \quad (2.52)$$

İkinci mertebeden faz geçişleri, paramanyetik fazı ferromanyetik fazdan ayıran ferromanyetiklerdeki Curie noktası gibi manyetik sistemlerde de meydana gelir. Bu durum, Curie sıcaklığının altında sistemin harici bir manyetik alan yokluğunda kendiliğinden mıknatıslandığı, Curie sıcaklığının üstünde ise sistemin mıknatıslanmadığı ve yalnızca harici bir manyetik alan uygulandığında tepki verdiği anlamına gelir[82].

2.6.1. Histerezis eğrisi

Histerezis eğrileri, bir manyetik malzemenin mıknatıslanma davranışını gösteren grafiklerdir ve genellikle manyetik alan (H) ile manyetizasyon (B veya M) arasındaki ilişkiyi ifade eder. Bu eğriler, özellikle manyetik malzemelerin enerji kayıplarını, mıknatıslanmanın geri kazanılabilirliği ve tekrarlanan manyetik döngülerdeki davranışlarını anlamada kritik rol oynar [83]. Teknoloji açısından önemli bir analiz yöntemidir. Teknolojideki yerine bakmak gerekirse; transformatör ve motor tasarımında histerisiz kayıpları, enerji verimliliğini doğrudan etkilediği için, elektrik motorları ve transformatörlerin çekirdek

Eğrinin orta kısmının genişliği, malzemenin koersivite (h_c) değeri ile ilişkilidir. Yüksek koersivite elde etmek için, hem manyetik anizotropi, genellikle kristal veya şekil anizotropisi ile manyetizasyonun tersine dönmesini önlemek hem de ters alanların ortaya çıkmasını veya büyümesini önlemek gerekir. Mıknatıslanmanın $M, H > 0$ için manyetik alan H 'nin içbükey bir fonksiyonu (ve $H \leq 0$ için dışbükey bir fonksiyon olması gerektiği), ferromanyetiklerin kritik noktalarına yakın davranışlarını analiz etmede yararlı olmaktadır [88, 89].



3. MODEL

3.1. Cellular Automaton (CA) Modeli

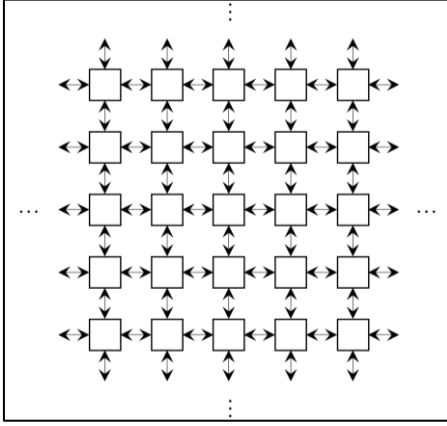
Cellular Automaton ilk olarak John von Neumann tarafından kendi kendine üreyen organizmaların modelleri olarak ortaya çıkarılmıştır. Üzerinde çalışılan yapı çoğunlukla bir ve iki boyutlu sonsuz örgülerdi. Daha sonra fizikçiler ve biyologlar kendi alanlarında modelleme amacıyla Cellular Automaton üzerinde çalışmaya başladılar. Günümüzde Cellular Automaton çok farklı açılardan incelenmekte ve bu yapıların mevcut problemlerle ilişkisi sürekli olarak araştırılmakta ve keşfedilmektedir. Bir CA'nın en basit tanımı tek boyutlu (muhtemelen iki yönlü sonsuz) bir hücre dizisidir. Zaman kesiklidir ve her zaman aralığında her hücre sonlu sayıda olası durumdan birinde bulunur. Hücreler zaman ilerledikçe durum değiştirir ve yeni durum hücrenin sol ve sağ komşuları tarafından belirlenir. Bu durum değişikliğini belirleyen fonksiyon tüm hücreler için aynıdır. CA herhangi bir girdiye sahip değildir ve dolayısıyla otonomdur. Herhangi bir zaman noktasındaki hücre durumlarının toplamına CA'nın konfigürasyonu denir ve CA'nın durum değişimini tanımlar. $t = 0$ zamanında, CA bir başlangıç konfigürasyonundadır ve bundan böyle her zaman adımında her hücreye uygulanan yerel kuralın etkisi altında Şekil 3.1'de görüldüğü gibi deterministik olarak ilerler.

Bir sistemdeki toplam enerji korunmasına rağmen iç enerji dalgalanmalarından öz ısı mikrokronik Creutz CA ile hesaplanabilir [37]. Creutz Cellular Automaton algoritmasından üretilen “soğutma algoritması” faz uzayındaki özel noktaları tespit etmekte başarılıdır [90,91].

Zaman adımı 0	...	0	1	1	0	1	0	1	1	0	...
Zaman adımı 1	...	0	1	0	1	0	1	1	1	0	...
Zaman adımı t	...	1	0	1	1	0	1	1	0	1	...

Şekil 3.1. Zaman adımları her hücreye uygulanan yerel kural

Zaman adımları her hücreye uygulanan yerel kuralın etkisi altında ilerler (Şekil 3.1).



Şekil 3.2. Orijinal olarak von Neumann tarafından tanımlanan Cellular Automaton

Orijinal olarak von Neumann tarafından tanımlanan Cellular Automaton her bir hücrenin dört ortogonal komşusuna bağlı olduğu iki boyutlu sonsuz bir tek tip hücre dizisidir [92].

3.2. “Cellular Automation” Algoritmaları

Cellular Automaton’da Ising spin sistemine ait termodinamik nicelikleri hesaplayabilmek için bazı algoritmalar kullanılır. Bu algoritmalarda, sistemin spin değişimleri ile girilebilir durumlar meydana gelir ve termodinamik nicelikler herbir zaman adımında hesaplanarak ortalama bir değer bulunur.

3.2.1. Soğutma algoritması

Soğutma algoritmasında örgüdeki her bir hücrede Ising spin değişkeni, spine eşlik eden momentum ve parite olmak üzere üç değişken vardır. Hücrelerdeki bu değişkenler, kendi değişkenleri ve en yakın komşularının değişkenlerinden bir CA kuralıyla belirlenir.

Bu çalışmada dikkate alınan Ising hamiltonyeni aşağıdaki gibidir.

$$H_I = J \sum_{\langle ij \rangle} S_i \sigma_j + D_A \sum_i S_i^2 + D_B \sum_i \sigma_j^2 + h \sum_i (S_i + \sigma_j) \quad (3.1)$$

Bu hamiltonyende; J bilineer en yakın komşu etkileşim terimi, D_A ve D_B tek iyon anizotropi terimidir. Her bir hücredeki ilk değişken Ising spinidir. B_i ile gösterilen bu değişken S_i için

$\pm 3, \pm 2, \pm 1$ ve 0 deęerlerini, σ için $\pm 5/2, \pm 3/2$ ve $\pm 1/2$ deęerlerini alır. Böylece Cellular Automaton uygulamasının tam sayılar ile hesaplama yapmasına imkân sağlar. S_i ve σ_j deęerleri $S_i = B_i - 3$ ve $\sigma_j = (2B_j - 5)/2$ olarak tanımlanır. İkinci deęişken ise spine eşlik eden momentum deęişkenidir. Momentumun karşılığı olan kinetik enerji H_K , $(0, m)$ aralığında tam sayı deęerleri almaktadır. Toplam enerji açısından mikrokantonik olan algoritmada toplam enerji her adımda korunmalıdır. Toplam enerji aşığıdaki şekilde yazılabilir.

$$H = H_I + H_K$$

Algoritma spin deęişimi yaparken belli bir t zaman adımındaki Ising enerjisi H_I^t ile gösterilir ve S için $1/6$, σ için $1/5$ olasılıkla verilen durumlardan birine dönüştürülür. Bu dönüşüm sonunda Ising enerjisi H_I^{t+1} olur. Sonrasında Ising enerji deęişimi dH_I bulunur. Algoritmada t zaman adımı boyunca deęişim uygulanarak termodinamik niceliklerin hesabı yapılmaktadır [42].

$$H_I^t = H_I^{t+1} \quad (3.2)$$

$$H_I^t + H_K^t = H_I^{t+1} + H_K^{t+1} \quad (3.3)$$

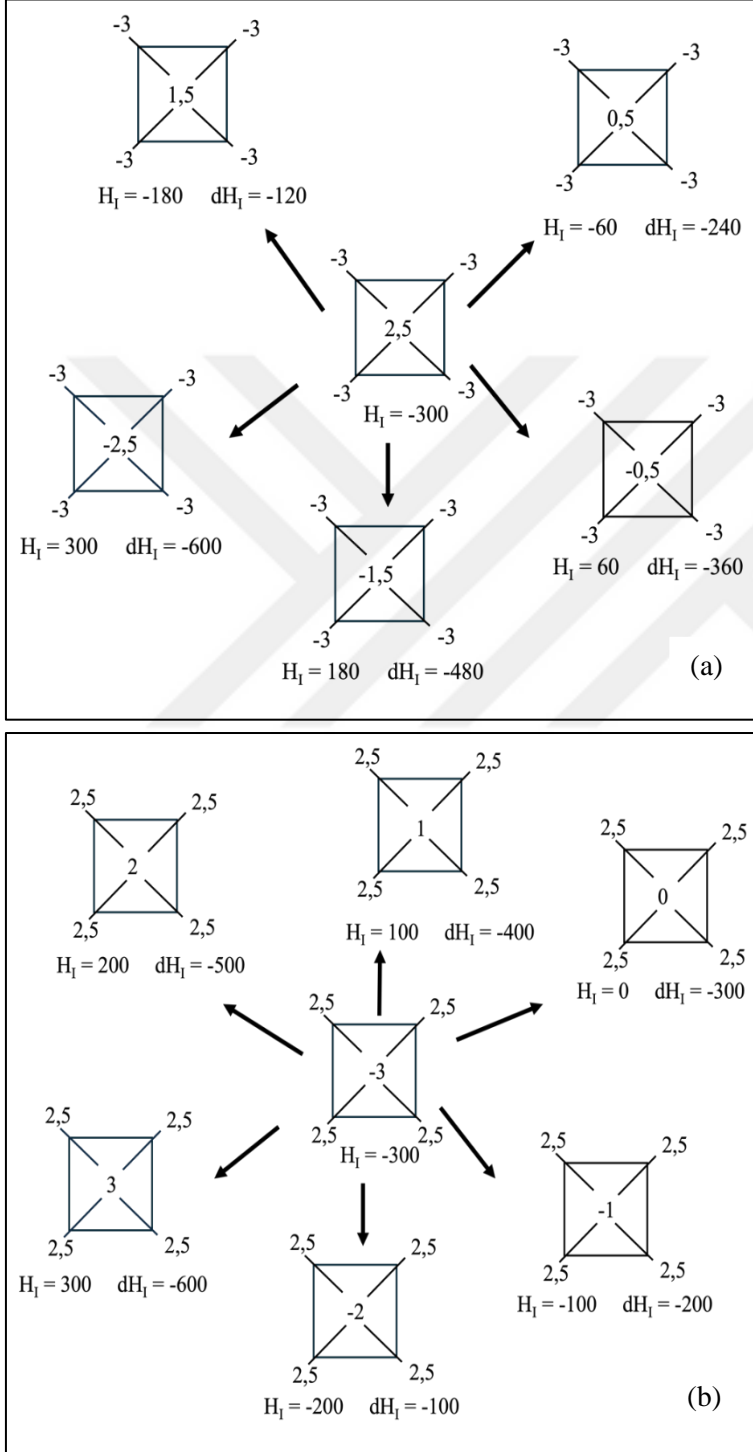
$$H_K^{t+1} = H_I^t - H_I^{t+1} + H_K^t \quad (3.4)$$

$$H_K^{t+1} = H_K^t + dH_I \quad (3.5)$$

Soęutma algoritmasının başlangıcında spinler taban durumda alınarak sonraki adımda yüksek sıcaklıkta düzensiz fazda başlangıç durumu oluşturulur. Sonrasında sistem belli bir hızda soęutulup, H_K kinetik enerjili bir hücreden enerji alınarak, daha düşük sıcaklıkta sistemin t zaman adımı boyunca termodinamik nicelikleri hesaplanır.

Soęutma algoritmasında öncelikle yine düzenli fazda başlangıç konfigürasyonu oluşturulur ve sisteme belli miktar enerji verilerek yüksek sıcaklıkta, düzensiz fazda bir konfigürasyon elde edilir. Sistem her bir zaman adımımda belli bir hızda soęutulularak tüm zaman adımlarında sistemin termodinamik nicelikleri hesaplanır [93].

Şekil 3.3'te antiferromanyetik düzendeki taban durumlarındaki olası spin değişimlerinde yeni konfigürasyonun sahip olduğu iç enerji ve iç enerjideki değişimler görülmektedir. Burada sunulan spin değişimleri dışarıdan bir enerji almaksızın gerçekleşemez ($dH_I < 0$).



Şekil 3.3. Kare örgüde; $J = 10$, $D_A = 0$, $D_B = 0$ ve $h=0$ parametre seti için taban durum konfigürasyonunun tespiti ve iç enerjideki değişimi dH_I 'nın (a) merkez spinin 2,5 olduğu durum için (b) merkez spinin 3 olduğu durum için

3.2.2. Creutz Cellular Automaton algoritmasında termodinamik niceliklerin hesabı

Creutz Cellular Automaton (CCA) algoritmasında sistem, dengeye gelene kadar değişen kinetik enerji ve iç enerji durumunda kanonik bir davranış gösterir. Böylece kinetik enerji, $T = \frac{1}{\beta}$ sıcaklığına karşılık gelen üstel dağılım gösterir.

$$P(E_i) \sim e^{(-4\beta E_i)} \quad (3.6)$$

Dağılım fonksiyonundaki değerler aşağıdaki gibi verilmiştir.

$$H_K = 4E_i \quad (3.7)$$

$$E_i = D_{1,i} + 2D_{2,i} \quad (3.8)$$

Buradan hareketle sistem sıcaklığının ortalama değerini bulmak için E_i ifadesinin beklenen değeri eşitlik 3.9'da verilmiştir.

$$\langle E_i \rangle = \frac{\sum_{n=0}^3 n e^{-4n\beta}}{\sum_{n=0}^3 e^{-4n\beta}} \quad (3.9)$$

Sistemin ortalama sıcaklık değerinin bulunması ile bu sıcaklığa karşılık gelen; mıknatıslanma, alınganlık, iç enerji ve öz ısı gibi termodinamik nicelikler hesap edilebilir. Alt örgü mıknatıslanmaları (m_a ve m_b), mıknatıslanma (M) ve toplam mıknatıslanma (M_t) aşağıdaki eşitliklerde verilmiştir [39].

$$m_a = \frac{2}{N} \sum_{i=1}^N S_i \quad (3.10)$$

$$m_b = \frac{2}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (3.11)$$

$$M = \frac{|m_a - m_b|}{2} \quad (3.12)$$

$$M_t = \frac{|m_a + m_b|}{2} \quad (3.13)$$

İç enerji ifadesi (H_I) eşitlik 3.14'deki gibidir.

$$H_I = -\frac{1}{2N} \sum_{\langle ij \rangle}^N S_i S_j \quad (3.14)$$

Yukarıdaki eşitliklerde N değeri $N = L \times L$ örgüdeki hücre sayısıdır. Alınganlık değeri (χ) ise,

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial h} = L^2 (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) / kT \quad (3.15)$$

şeklinde mıknatıslanmadaki dalgalanmalardan hesap edilir.

Son olarak iç enerjideki dalgalanmalardan hesaplanan öz ısı ifadesi (C/k) ise,

$$\frac{C}{k} = \frac{\partial H_I}{\partial T} = L^2 (\langle H_I^2 \rangle - \langle H_I \rangle^2) / kT \quad (3.16)$$

şeklindedir.

Binder kümülantı toplam mıknatıslanmadan

$$U_L = 1 - \frac{\langle M_t^4 \rangle_L}{(3 \langle M_t^2 \rangle_L^2)} \quad (3.17)$$

Eşitlik 3.10-14' te verilen ifadeler hücre başına ortalama değerdir [62].

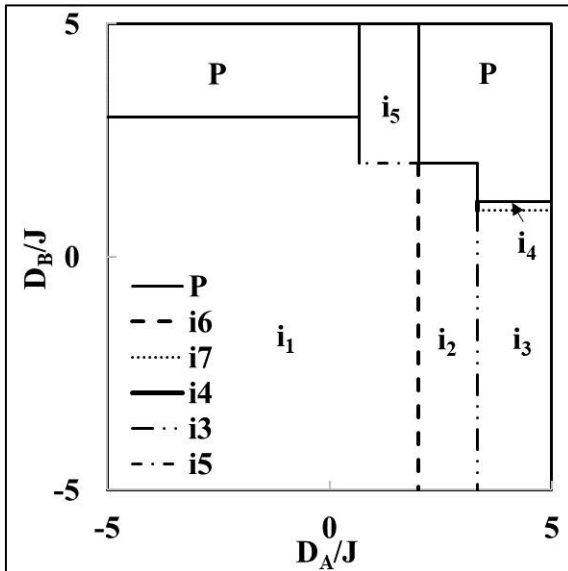
4. ARAŞTIRMA BULGULARI

Karışık Spin 3 – Spin 5/2 Ising modelin ilk kez incelendiği bu çalışmada spin karışımının manyetik özellikleri iki boyutlu kare örgüde, periyodik sınır şartlarında Cellular Automaton ile incelendi. Hesaplamalarda Creutz Cellular Automaton algoritmasından üretilen soğutma algoritması kullanıldı.

Öncelikle $-5 \leq D_A/J \leq 5$ ve $-5 \leq D_B/J \leq 5$ değer aralıkları için spin karışımının taban durum fazları ve taban durum faz diyagramı (D_B/J , D_A/J) araştırıldı. Hesaplamalar $L=128$ örgü boyuna sahip kare örgüde yapıldı. Faz uzayının farklı bölgelerinde bulunan parametre setleri için; mıknatıslanma (M), toplam mıknatıslanma (M_t), alt örgü mıknatıslanmaları (m_a , m_b), alınganlık (χ), iç enerji (H_t) ve özısı (C) zaman adımı ve örgü ortalamaları üzerinden hesaplandı.

4.1. Karışık Spin 3- Spin 5/2 Ising Modelin Taban Durumu ve Faz Tanımları

$-5 \leq D_A/J \leq 5$ ve $-5 \leq D_B/J \leq 5$ değer aralıkları içerisinde elde edilen (D_B/J , D_A/J) faz diyagramında farklı taban durumlara sahip ferrimanyetik bölgeler tespit edildi.



Şekil 4.1. Karışık Spin 3 – Spin 5/2 Ising modelin (D_B/J , D_A/J) taban durum faz diyagramı

S ile temsil edilen tam spinler m_a , σ ile temsil edilen spinler m_b alt örgüsünde bulunmak üzere bu bölgeler taban durum faz diyagramında;

i_1 : $m_a=3$ ($S=3$), $m_b=-5/2$ ($\sigma=-5/2$)

i_2 : $m_a=2$ ($S=2$), $m_b=-5/2$ ($\sigma=-5/2$)

i_3 : $m_a=1$ ($S=1$), $m_b=-5/2$ ($\sigma=-5/2$)

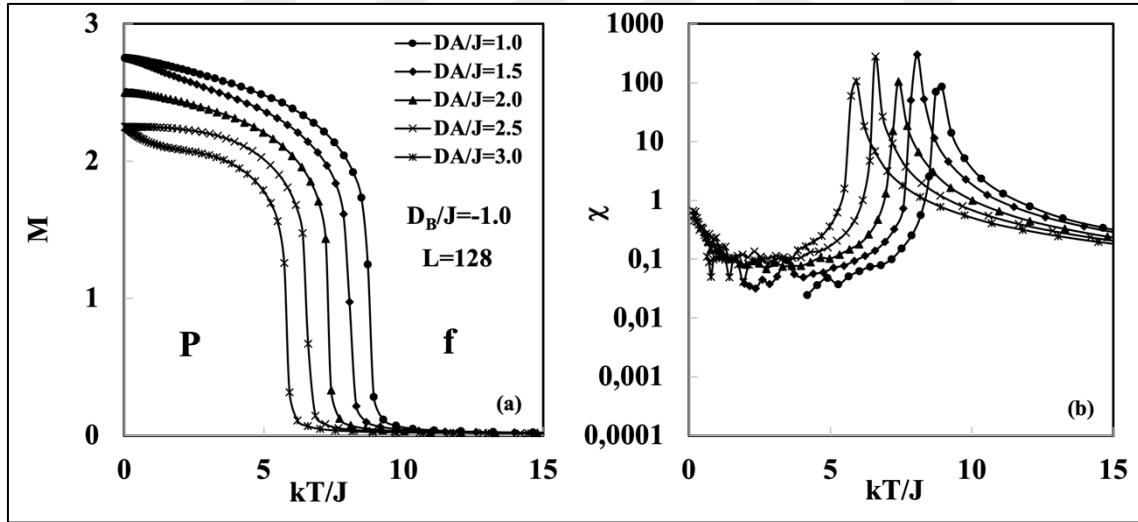
i_4 : $m_a=1$ ($S=1$), $m_b=-3/2$ ($\sigma=-3/2$)

i_5 : $m_a=1$ ($S=1$), $m_b=-1/2$ ($\sigma=-1/2$)

i_6 : $m_a=5/2$ ($S=2$ ve 3), $m_b=-5/2$ ($\sigma=-5/2$)

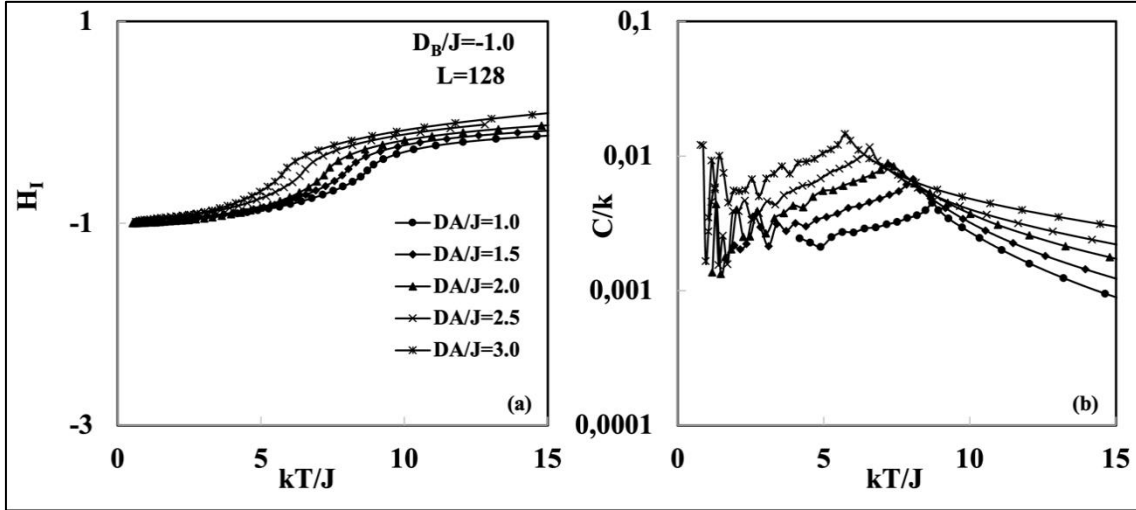
i_7 : $m_a=1$ ($S=1$), $m_b=-2$ ($\sigma=-1.5$ ve $-5/2$)

olarak adlandırıldı (Şekil 4.1). Hesaplamalar $L=128$ boyutlu örgü için yapıldı.



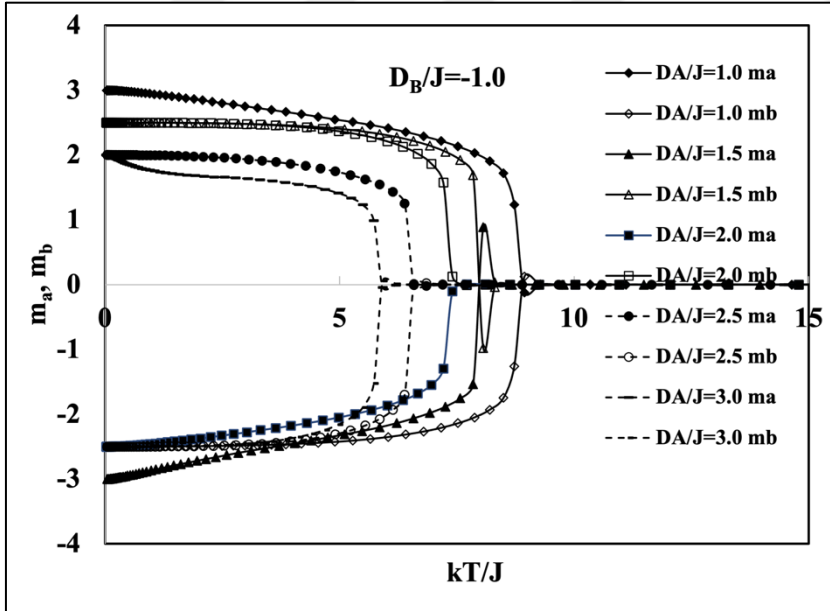
Şekil 4.2. (a) Mıknatıslanma (M) ve (b) alınganlığın (χ) sıcaklıkla deęiřimi

Mıknatıslanma (M) ve alınganlığın (χ) sıcaklıkla deęiřimine bakıldıęında, mıknatıslanma eęrilerinin D_A/J ' nin artan deęerleriyle daha dūřuk sıcaklık bōlgelerine kaymaktadır (Şekil 4.2.(a)). Kritik sıcaklıkta meydana gelen alınganlık pikleri takip edildięinde ise D_A/J ' nin artan deęerleriyle kritik sıcaklık deęerlerinin dūřtūęü gōrōlmektedir (Şekil 4.2.(b)).

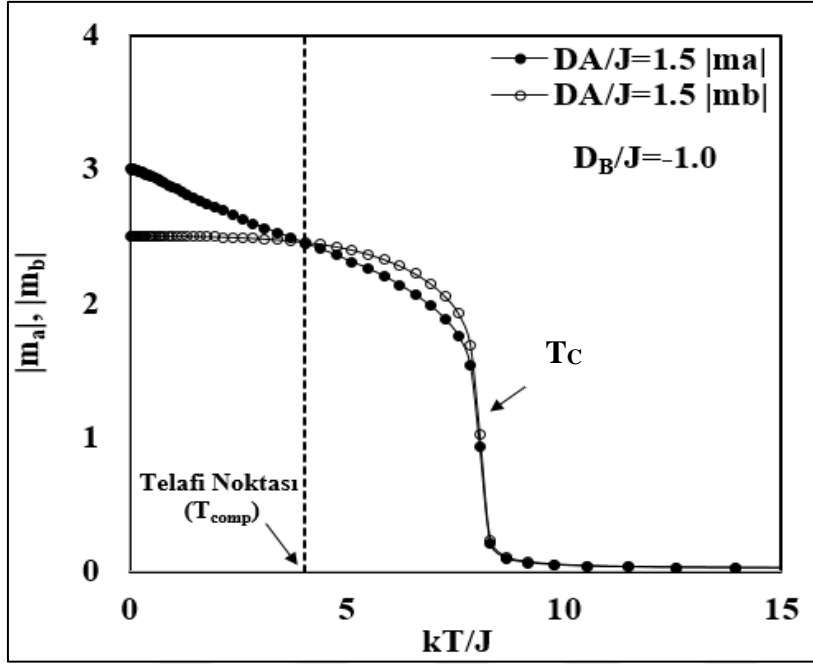


Şekil 4.3. (a) İç enerji (H_I) ve (b) Öz ısının (C) sıcaklıkla değişimi

Spin karışımının iç enerji eğrileri (H_I) kritik sıcaklık civarında süreklilik sergileyerek ikinci derece faz geçişini işaret etmektedir (Şekil 4.3.(a)). Öz ısı eğrileri (C) ise kritik sıcaklıkta birer pike sahiptir. Bu nedenle, alınganlıkta olduğu gibi, pikler D_A/J ' nin artan değerleriyle düşük sıcaklıklara doğru kaymaktadır (Şekil 4.3.(b)).



Şekil 4.4. Alt örgü düzen parametrelerinin (m_a , m_b) sıcaklıkla değişimi



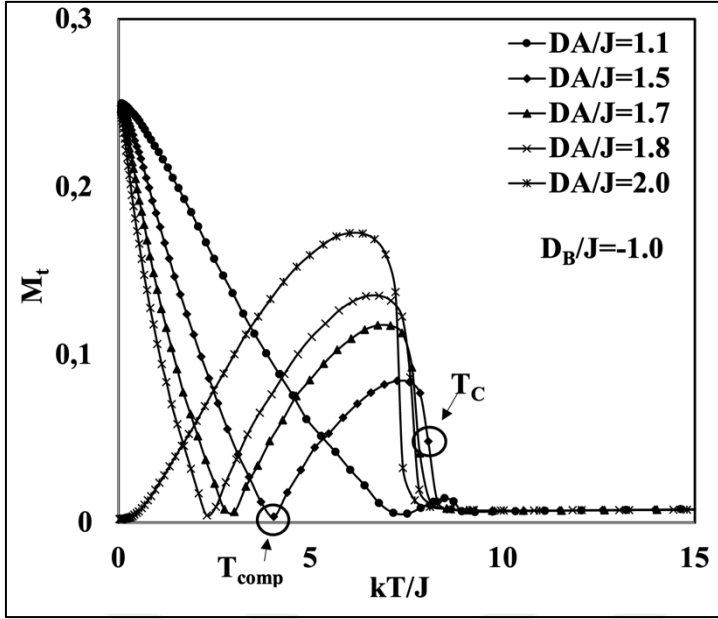
Şekil 4.5. Alt örgü düzen parametrelerinin mutlak değerlerinin ($|m_a|$, $|m_b|$) sıcaklıkla değişimi

“a” ile indislenen alt örgüde ± 3 , ± 2 , ± 1 , 0 değerlerine sahip olan S spinleri, “b” ile indislenen alt örgüde ise $\pm 5/2$, $\pm 3/2$, $\pm 1/2$ değerlerine sahip σ spinleri konumlanmıştır. $D_B/J=-1.0$ değeri için D_A/J ’nin; 0,6, 1.0 ve 1.5 değerleri i_1 , 2.0 değeri i_6 , 2.5 ve 3.0 değerleri ise i_2 bölgesine aittir. D_A/J ’nin belirtilen değerlerinde elde edilen alt örgü düzen parametreleri taban durum faz diyagramının ait oldukları bölgelerinin özelliklerini sergilemektedir ve ikinci derece faz geçişi yapmaktadırlar. Diğerlerinden farklı olarak D_A/J ’nin 2.0 değerine ait alt örgü düzen parametrelerinin tüm sıcaklık değerlerinde eşit büyüklükte olduğu görülmektedir (Şekil 4.4.).

Şekil 4.5.’te $D_A/J=1.5$ ve $D_B/J=-1.0$ için alt örgü düzen parametrelerinin mutlak değerlerine ($|m_a|$, $|m_b|$) ait eğrilerin kritik sıcaklık değerinden (T_C) önce bir sıcaklıkta eşitlendikleri görülmektedir. Bu sıcaklık değeri telafi sıcaklığı (T_{comp}) olarak adlandırılır ve $T_{comp} < T_C$ şartını sağlar. Aşağıdaki eşitlikler telafi noktasını tanımlamak için uygundur [39].

$$|m_a(T_{comp})| = |m_b(T_{comp})| \quad (4.1)$$

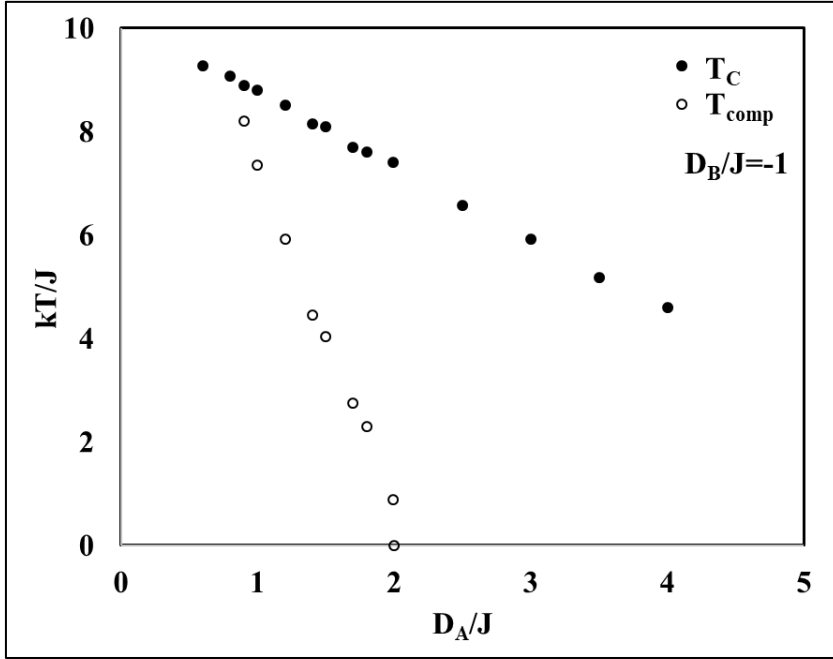
$$sign(m_a(T_{comp})) = -sign(m_b(T_{comp})) \quad (4.2)$$



Şekil 4.6. Toplam düzen parametresinin (M_t) sıcaklıkla değişimi

Telafi sıcaklığının ortaya çıkışını takip etmenin bir diğer yolu da toplam mıknatıslanmanın sıcaklık bağımlılığını incelemektir. Telafi noktasının varlığını görülür hale getirmenin bir yolu da toplam mıknatıslanmanın (M_t) sıcaklıkla değişimini elde etmektir (Şekil 4.6.). $D_B/J=-1.0$ için $D_A/J=0,6, 1.1, 1.5, 1.7, 1.8$ ve 2.0 değerlerinde yapılan hesaplamalarda eğrilerin kritik sıcaklıktan daha düşük bir sıcaklıkta sıfır değerine gittiği, alt örgü mıknatıslanmalarının birbirlerine büyüklükçe eşit olduğu görüldü. Diğer eğrilerden farklı olarak $D_A/J=2.0$ eğrisi $kT/J=0,0$ sıcaklığında telafi noktasına sahiptir. I_6 taban durumunda a alt örgüsünde spinin $S=3$ ve $S=2$ değerleri bir arada bulunduğundan b alt örgüsündeki $\sigma=-2/5$ spinlerini telafi etmektedir.

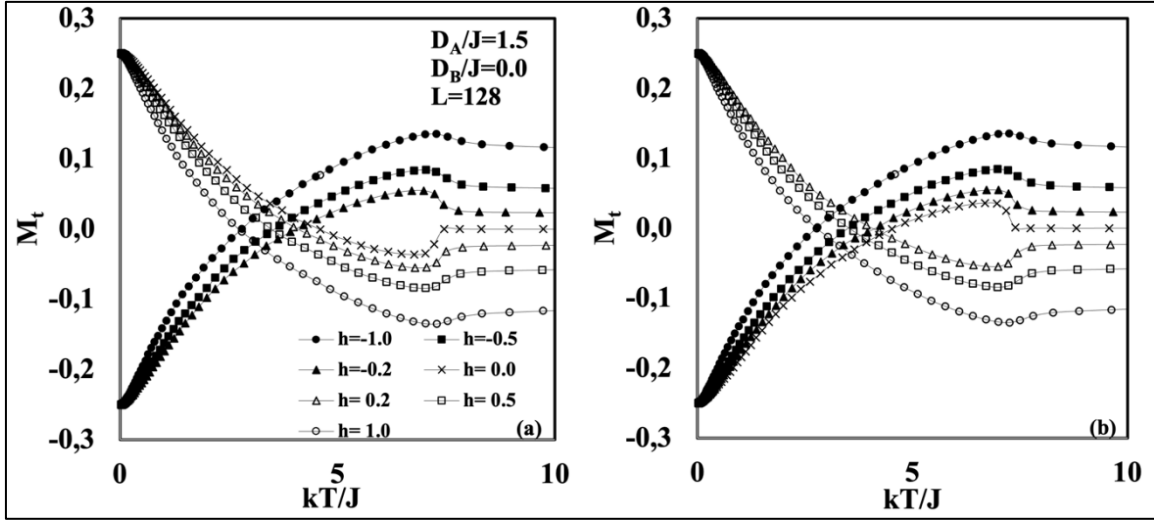
$kT/J - D_A/J$ grafiğinde D_A/J değerlerinde görülen telafi noktaları (T_{comp}) ve kritik sıcaklık (T_C) değerleri yer almaktadır. Telafi noktaları, kritik sıcaklıktan önce meydana geldikleri için, kritik sıcaklık değerlerinin altında bir hat boyunca yer almaktadır. Her iki sıcaklıkta diğer termodinamik niceliklerin davranışına uygun olarak D_A/J ' nin artan değeri ile azalmaktadır.



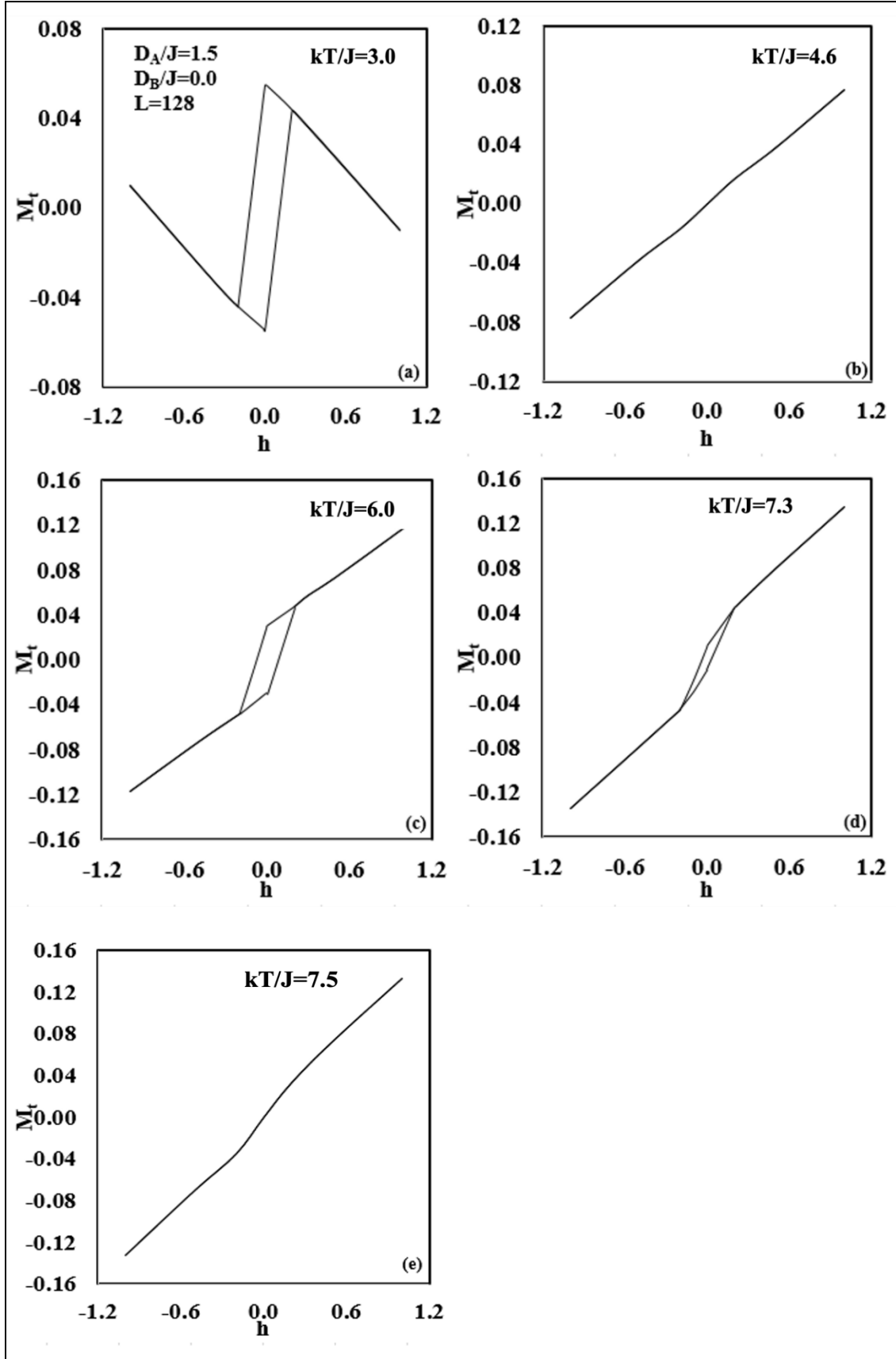
Şekil 4.7. KT/J - D_A/J faz uzayında, $D_B/J=-1.0$ değeri için, kritik sıcaklık (T_C) ve telafi noktaları (T_{comp})

4.2. Karışık Spin 3- Spin 5/2 Ising Modelde Dış Manyetik Alan Etkisi

$D_A/J=1.5$, $D_B/J=0$ parametre seti için karışık spin 3- spin 5/2 Ising modelde toplam mıknatıslanmanın dış manyetik alan varlığında davranışı incelenerek histerezis eğrileri elde edildi. Başlangıç prosedüründe taban durum; spin up eğrisini elde etmek için $S=3$, $\sigma=-5/2$, spin down eğrisini elde etmek için $S=-3$, $\sigma=5/2$ olarak alındı ve toplam mıknatıslanmanın bu iki taban durumu için sıcaklıkla değişimi elde edildi. Bu grafikteki toplam mıknatıslanma veirleri Eşitlik (3.13) te mutlak değer uygulanmadan elde edildi (Şekil 4.8.). Böylece çeşitli sıcaklık bölgelerinde histerezis eğrileri çizildi. $kT/J < kT_{comp}/J$ ($kT/J=3.0$) sıcaklık değeri için eğride geniş bir histerezis alanı olduğu görülürken $kT/J = kT_{comp}/J$ ($kT/J=4.6$) sıcaklığında bu histerezis alanı ortadan kalkmaktadır. Bu değişim toplam mıknatıslanmaların telafi noktasında sıfır olmasından kaynaklanmaktadır. Telafi sıcaklığı ile kritik sıcaklık arasındaki $kT/J=6$ sıcaklığında alt örgü mıknatıslanmalarının birbirinden farklı değer alması ile beraber yeniden histerezis alanı gözlemlendi. Kritik sıcaklıkta ($kT/J=7.3$) daralan histerezis alanının kritik sıcaklıktan sonra ($kT/J=7.5$) ortadan kaybolduğu görüldü. Bu davranış literatürde yer alan karışık spin sistemlerinin histerezis davranışı ile uyumludur (Şekil 4.9.).



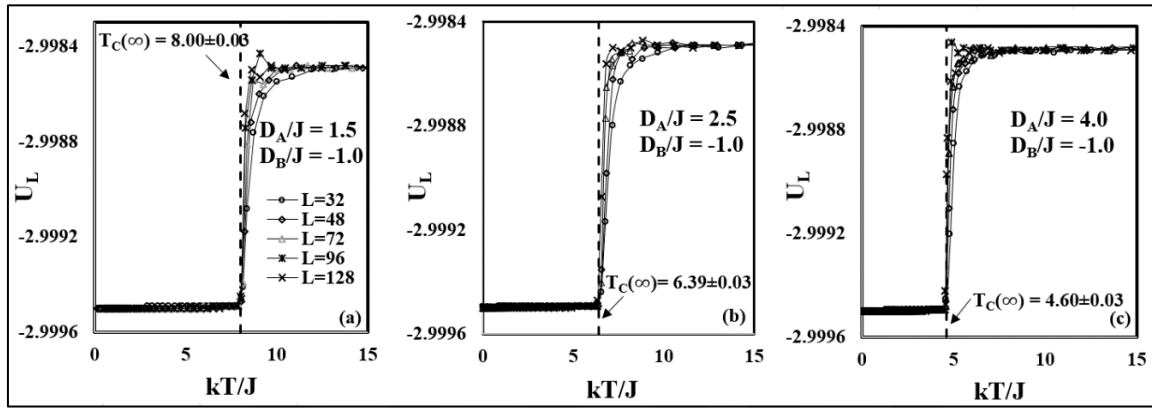
Şekil 4.8. Toplam mıknatıslanmanın dış manyetik alana göre değişimi (a) Başlangıç spin değerleri $S=3, \sigma=-5/2$ için, (b) Başlangıç spin değerleri $S=-3, \sigma=5/2$ için.



Şekil 4.9. Toplam mıknatıslanmanın dış alana göre davranışını veren histeresis eğrileri (a) $kT/J < kT_{comp}/J$ ($kT/J=3.0$), (b) $kT/J = kT_{comp}/J$ ($kT/J=4.6$), (c) $kT_{comp}/J < kT/J < kT_c/J$ ($kT/J=6.0$), (d) $kT/J = kT_c/J$ ($kT/J=7.3$), (e) $kT_c/J < kT/J$ ($kT/J=7.5$)

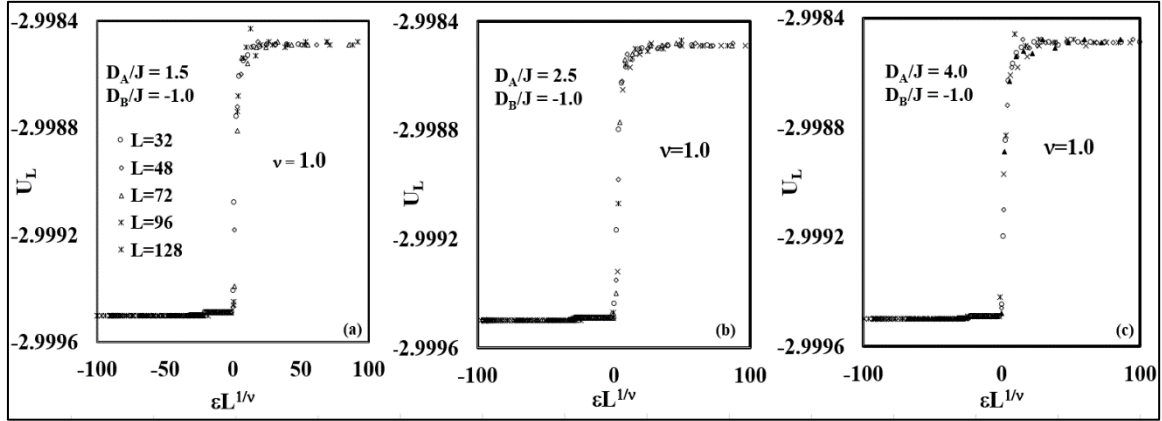
4.3. Karışık Spin 3- Spin 5/2 Ising Modelde Sonlu Örgü Ölçekleme

Karışık spin 3- spin 5/2 Ising modelin i_1 , i_2 ve i_3 taban durum bölgelerinde yer alan ($D_A/J=1.5$, $D_B/J=-1$); ($D_A/J=2.5$, $D_B/J=-1$) ve ($D_A/J=4.0$, $D_B/J=-1$) parametre setleri için; Binder kümülanı (U_L), Mıknatıslanma (M), alınganlık (χ) ve öz ısı (C) niceliklerinin sonlu örgü ölçekleme analizleri yapıldı. Farklı örgü boyları için elde edilen verilerin ölçeklendiği α , β , γ ve ν kritik üslerinin evrensel değerlere uygunluğu araştırıldı.



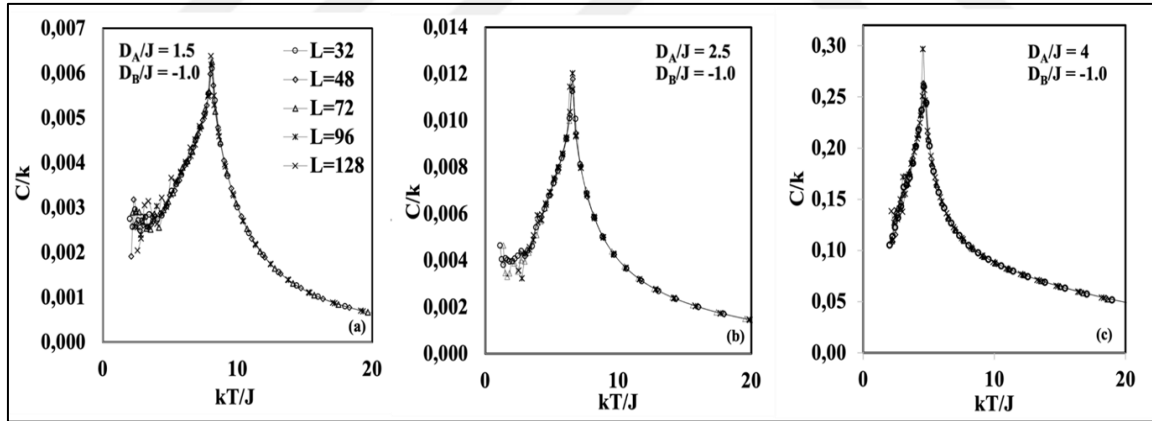
Şekil 4.10. $L=32, 48, 72, 96, 128$ örgülerinde M_t için hesaplanan; Binder kümülanının (U_L) sıcaklıkla değişimi ve sonsuz örgü kritik sıcaklık ($T_C(\infty)$) tespiti, (a) $D_A/J = 1.5$, $D_B/J = -1.0$ (b) $D_A/J = 2.5$, $D_B/J = -1.0$, (c) $D_A/J = 4.0$, $D_B/J = -1.0$

Faz uzayının i_1 , i_2 ve i_3 taban durum bölgelerinde yer alan $D_A/J = 1.5, 2.5, 4.0$ ve $D_B/J = -1.0$ parametre seti için, Şekil 4.10 da Binder kümülanının sıcaklıkla değişimi görülmektedir. İncelenen parametre setleri için farklı büyüklükte örgülere ait eğrilerin kesiştiği sonsuz örgü kritik sıcaklığı değerleri sırasıyla; $T_C(\infty) = 8.00 \pm 0.03$, 6.39 ± 0.03 ve 4.60 ± 0.03 olarak tespit edildi.



Şekil 4.11. $L=32, 48, 72, 96, 128$ örgülerinde M_t için hesaplanan; Binder kümülantının (U_L) sonlu örgü ölçeklemesi, (a) $D_A/J = 1.5, D_B/J = -1.0$ (b) $D_A/J = 2.5, D_B/J = -1.0$, (c) $D_A/J = 4.0, D_B/J = -1.0$

$D_A/J = 1.5, 2.5, 4.0$ ve $D_B/J = -1.0$ parametre seti için elde edilen sonsuz örgü kritik sıcaklık değeri kullanılarak Şekil 4.11 de Binder kümülantının (U_L) sonlu örgü ölçeklemesi yapıldı. Farklı örgülere ait verilerin üç parametre seti için $\nu=1.0$ değerinde üst üste gelerek ölçeklendiği görüldü.

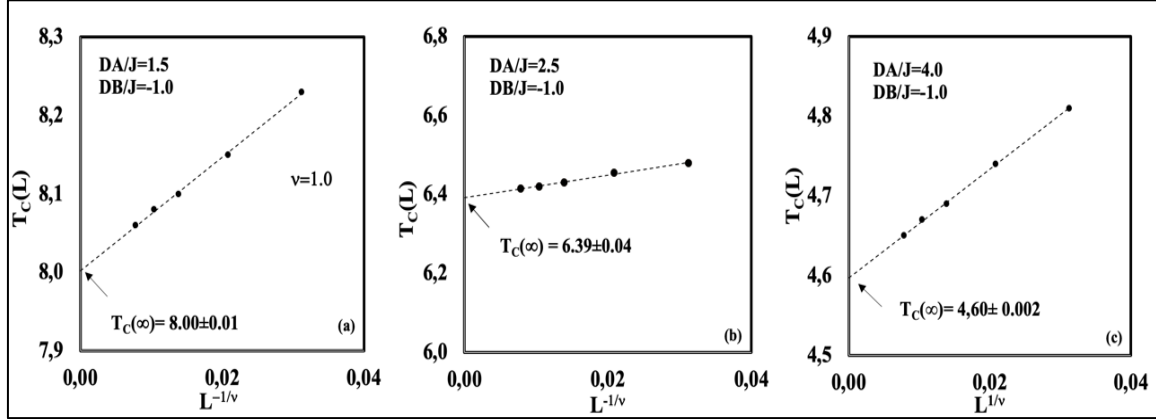


Şekil 4.12. $L=32, 48, 72, 96, 128$ örgülerinde; öz ısının (C/k) sıcaklıkla değişimi, (a) $D_A/J = 1.5, D_B/J = -1.0$ (b) $D_A/J = 2.5, D_B/J = -1.0$, (c) $D_A/J = 4.0, D_B/J = -1.0$

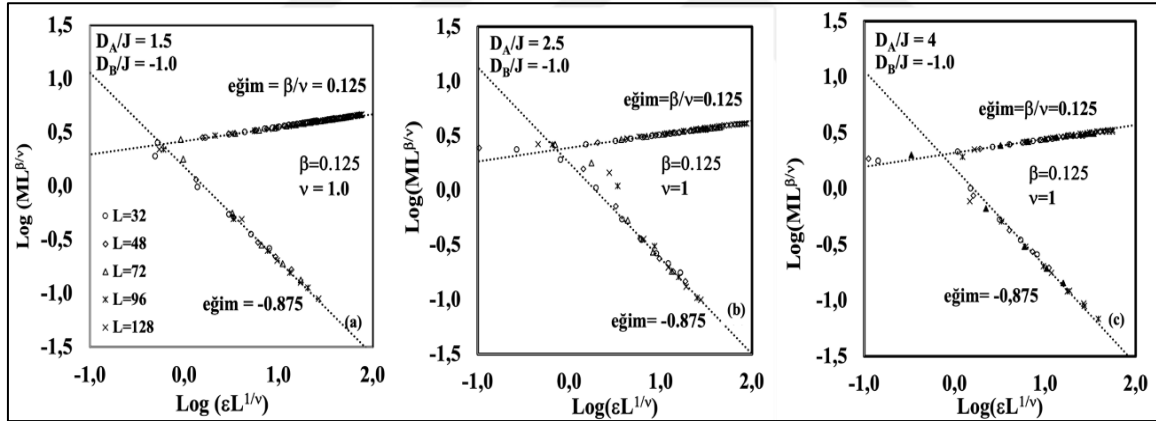
Şekil 4.12 de $D_A/J = 1.5, 2.5, 4.0$ ve $D_B/J = -1.0$ parametre seti için öz ısının (C/k) sıcaklıkla değişimi görülmektedir. Öz ısı niceliği örgü kritik sıcaklıklarında ikinci derece faz geçişine has piklere sahiptir.

Öz ısı pik sıcaklıklarının sonsuza ekstrapolasyonu sonucu sonsuz örgü kritik sıcaklıkları üç parametre seti için, sırasıyla, $T_C(\infty) = 8.00 \pm 0.01, 6.39 \pm 0.04$ ve 4.60 ± 0.02 olarak belirlendi.

Bu değerler Binder kümülantından tespit edilen sonsuz örgü sıcaklık değeri ile uyumludur (Şekil 4.13).

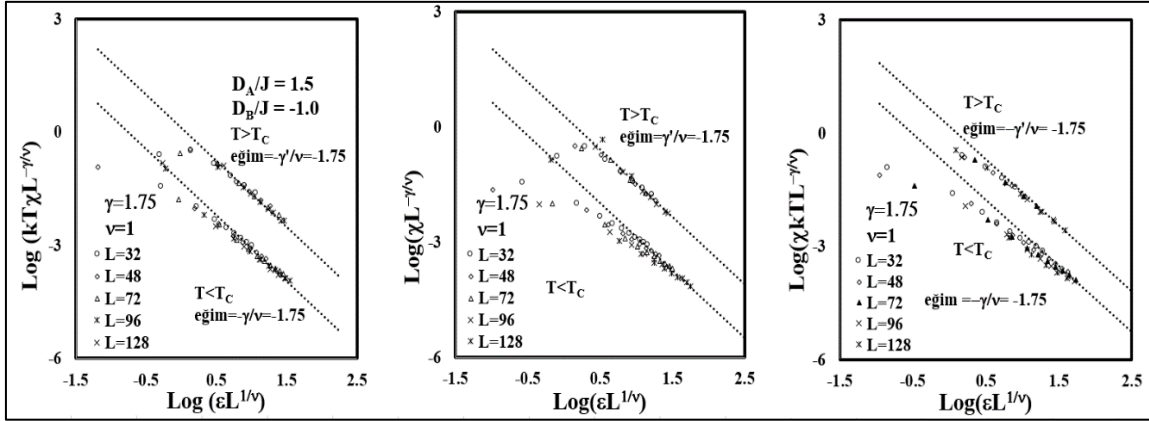


Şekil 4.13. $L=32, 48, 72, 96, 128$ örgülerinde; öz ısıdan (C/k) elde edilen örgü kritik sıcaklıklarının $\nu=1.0$ için sonsuza ekstrapolasyonu, (a) $D_A/J=1.5, D_B/J=-1.0$ (b) $D_A/J=2.5, D_B/J=-1.0$, (c) $D_A/J=4.0, D_B/J=-1.0$



Şekil 4.14. $L=32, 48, 72, 96, 128$ örgülerinde; $\beta=\beta'=0,125$ ve $\nu=1.0$ için miknatislanmanın (M) sonlu örgü ölçeklemesi, (a) $D_A/J=1.5, D_B/J=-1.0$ (b) $D_A/J=2.5, D_B/J=-1.0$, (c) $D_A/J=4.0, D_B/J=-1.0$

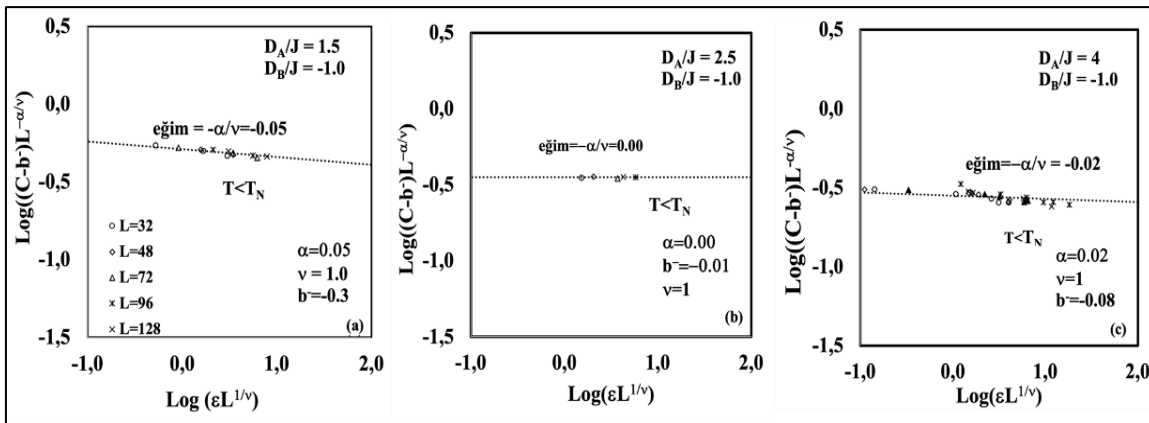
Miknatislanmanın (M) sonlu örgü ölçekleme grafiğine bakıldığında her üç parametre seti için verilerin $\beta=\beta'=0,125$ ve $\nu=1$ evrensel kritik üs değerleri ile birer doğrunun üzerinde toplanarak ölçeklendiği görüldü. (Şekil 4.14).



Şekil 4.15. $L=32, 48, 72, 96, 128$ örgülerinde; $\gamma=\gamma'=1.75$ ve $\nu=1.0$ için alınganlığın (χ) sonlu örgü ölçeklemesi, (a) $D_A/J=1.5, D_B/J=-1.0$ (b) $D_A/J=2.5, D_B/J=-1.0$, (c) $D_A/J=4.0, D_B/J=-1.0$

Alınganlık (χ) verileri ise $\gamma=\gamma'=1.25$ ve $\nu=1.0$ iki-boyutlu Ising evrensel kritik üs değerleri ile ölçeklenerek kritik sıcaklığın altında ve üstünde birer doğru üzerinde toplandı (Şekil 4.15).

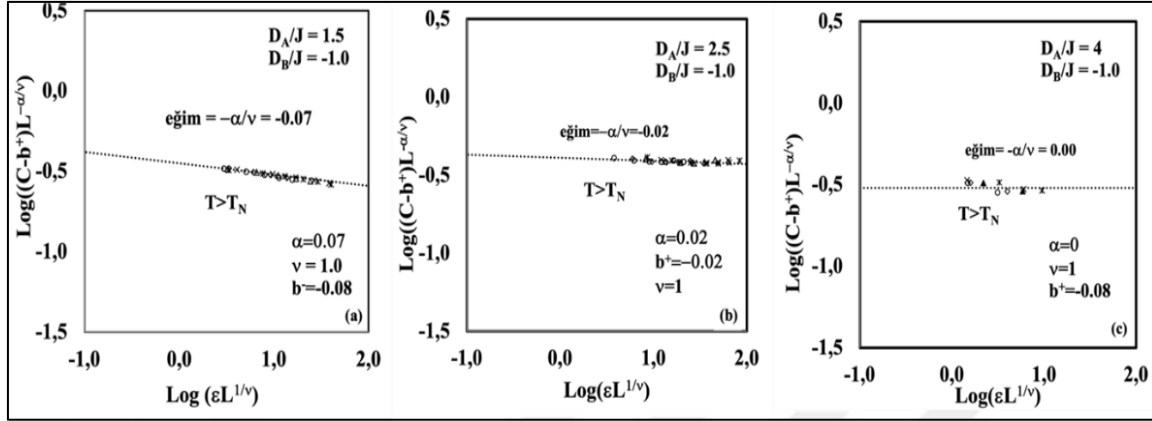
Şekil 4.16 da öz ısı (C/k) verileri; incelenen parametre setlerinde kritiğin altında ($T < T_C$), sırasıyla, $\alpha=0.05, 0.00, 0.02$ ve $b^-=-0.3, -0.01, -0.08$ kritik üs ve düzeltme terimi değerleri ile ölçeklendiğinde birer doğru üzerinde toplandıkları görüldü. Bu kritik üs değerleri iki-boyutlu Ising evrensel kritik üssü α ile uyumludur.



Şekil 4.16. $L=32, 48, 72, 96, 128$ örgülerinde; $\nu=1.0$ için öz ısının (C/k) kritiğin altında ($T < T_C$) sonlu örgü ölçeklemesi, (a) $D_A/J=1.5, D_B/J=-1.0$, (b) $D_A/J=2.5, D_B/J=-1.0$, (c) $D_A/J=4.0, D_B/J=-1.0$

Kritiğin üstünde ($T_C < T$) öz ısı (C/k) verileri; incelenen parametre setlerinde, sırasıyla, $\alpha=0.07, 0.02, 0.00$ ve $b^-=-0.08, -0.02, -0.08$ kritik üs ve düzeltme terimi değerleri ile

ölçeklendiğinde birer doğru üzerinde toplandıkları görüldü. Bu kritik üs değerleri iki-boyutlu Ising evrensel kritik üssü α ile uyumludur (Şekil 4.17)



Şekil 4.17. $L=32, 48, 72, 96, 128$ örgülerinde; $v=1.0$ için öz ısının (C/k) kritiğin üstünde ($T_C < T$) sonlu örgü ölçeklemesi, (a) $D_A/J = 1.5, D_B/J = -1.0$, (b) $D_A/J = 2.5, D_B/J = -1.0$, (c) $D_A/J = 4.0, D_B/J = -1.0$

Çizelge 4.1. Statik kritik üsler

	ν	α	$\alpha\epsilon$	β	$\beta\Box$	γ	$\gamma\Box$	b^-	b^+
2-d Ising model evrensel statik kritik üsler [95]	1.0	0,00	-	0,125	-	1.75	-	-	-
$D_A/J = 1.5, D_B/J = -1.0$	1.0	0,05	0,07	0,125	0,125	1.75	1.75	-0,30	-0,08
$D_A/J = 2.5, D_B/J = -1.0$	1.0	0,00	0,02	0,125	0,125	1.75	1.75	-0,01	-0,02
$D_A/J = 4.0, D_B/J = -1.0$	1.0	0,02	0,00	0,125	0,125	1.75	1.75	-0,08	-0,08

Çizelge 4.1.'de iki boyutlu Ising model evrensel statik kritik üs değerleri ve sonlu örgü ölçekleme analizi sonucu elde edilen statik kritik üs değerleri verildi. Farklı taban durum bölgelerine karşılık gelen parametre setleri için üretilen simülasyon verilerinin ölçeklenmesi ile elde edilen kritik üs değerlerinin ikinci derece faz geçişine has evrensel kritik üs değerleriyle uyumlu olduğu görüldü.



5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Spin 3 – Spin 5/2 karışımının Ising model ile modellendiği, hesaplamaların kare örgü üzerinde periyodik sınır şartlarında Cellular Automaton cooling algoritması ile yapıldığı çalışmamızda, hamiltonyende yer alan tek iyon anizotropi terimlerinin $-5 \leq D_A/J \leq 5$ ve $-5 \leq D_B/J \leq 5$ değer aralığında spin karışımının zengin bir taban durum faz diyagramına sahip olduğu görüldü. Çalıştığımız $D_A/J - D_B/J$ değer aralığında termodinamik nicelikler ferrimanyetizmadan paramanyetizmaya (f→P) ikinci derece faz geçişi sergiledi. $D_A/J - D_B/J$ faz uzayında telafi noktaları (T_{comp}) tespit edildi. Seçilen $D_B/J=-1$ değeri için, D_A/J' nin artan değerleri ile birlikte kritik sıcaklık ve telafi noktası değerlerinin azaldığı görüldü. Seçilen malzemenin dış manyetik alanın etkisinde nasıl davranış gösterdiği incelendi, toplam mıknatıslanma (M_t) için malzemenin histerezis eğrileri elde edildi. Telafi sıcaklığında (T_{comp}) ve kritik sıcaklık sonrasında ($T_C < T$) malzemede M_t sıfıra gittiğinden bu sıcaklıklarda histerezis alanı oluşmadı. $T < T_{comp}$, $T < T_C$ ve $T_C < T$ bölgelerinde ise sıcaklıkla değişen remnant mıknatıslanma değeri gözlemlendi. Bu da karışık spin sisteminin faz uzayında kayıt sistemlerindeki veri güvenliği açısından elverişli özelliklere sahip parametre setleri olduğunu gösterdi. Karışık spin 3- spin 3/2 Ising modelin evrensel davranışını araştırmak için bazı parametreler için yapılan sonlu örgü ölçeklemeleri sonucunda, faz uzayının incelenen noktalarında termodinamik niceliklerin ölçeklendiği statik kritik üslerin iki-boyutlu Ising model kritik üsleri ile uyumlu olduğu, faz uzayının incelenen noktalarının iki-boyutlu Ising model evrensellik sınıfına dahil olduğu görüldü.



KAYNAKLAR

1. Gatteschi, D., Kahn, O., Miller, J. S. ve Palacio, F. (Eds.). (1991). *Magnetic molecular materials (NATO ASI Series)*. Dordrecht: Kluwer Academic, 26-45.
2. Buendia, G. M. ve Novotny, M. A. (1997). Numerical study of a mixed Ising ferrimagnetic system. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 9, 5951–5964.
3. Kahn, O., Pei, Y., Verdaguer, M., Renard, J. P. ve Sletten, J. (1988). Magnetic ordering of manganese(II) copper(II) bimetallic chains: Design of a molecular-based ferromagnet. *Journal of the American Chemical Society*, 110(3), 782–789.
4. Willett, R. D., Wang, Z., Molnar, S., Brewer, K., Landee, C. P., Turnbull, M. M. ve Zhang, W. (1993). Synthesis and magnetic properties of cyano-bridged bimetallic complexes. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 233(1), 277–284.
5. Tamaki, H., Zhong, Z. J., Matsumoto, N., Kida, S., Koikawa, M., Achiwa, N., Hashimoto, Y. ve Okawa, H. (1992). Design of metal-complex magnets. Syntheses, structures, and magnetic properties of oxalato-bridged dinuclear and trinuclear iron(III) complexes. *Journal of the American Chemical Society*, 114(18), 6974–6979.
6. Turnbull, M. M., Landee, C. P., Soesbe, T. C. ve Willett, R. D. (1993). Synthetic design of ferrimagnetic materials: Two and three-dimensional networks. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 233(1), 269–276.
7. Néel, L. (1948). Propriétés magnétiques des ferrites: ferrimagnétisme et antiferromagnétisme. *Annales de Physique*, 12(3), 137–198.
8. Herpin, A. (1968). *Théorie du magnétisme*. Saclay: Presses Universitaires de France, 65-78.
9. Mansuripur, M. (1987). Magnetization reversal, coercivity, and the process of thermomagnetic recording in thin films of amorphous rare earth–transition metal alloys. *Journal of Applied Physics*, 61(4), 1580–1587.
10. Shieh, H.-P. D. ve Kryder, M. H. (1986). Magneto-optic recording materials with direct overwrite capability. *Applied Physics Letters*, 49(8), 473–474.
11. Kaneyoshi, T. (1996). Ferrimagnetism in a decorated Ising model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 229, 166–180.
12. Godoy, M., Leite, V. S. ve Figueiredo, W. (2004). Mixed-spin Ising model and compensation temperature. *Physical Review B*, 69, 054428.
13. Akimenko, S. S., Myshlyavtsev, A. V. ve Myshlyavtseva, M. D. (2021). Mixed spin-1/2 and spin-1 Ising model on a bilayer hierarchical lattice. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 530, 167929.
14. Keskin, M. ve Ertaş, M. (2010). Mixed-spin Ising model in an oscillating magnetic field and compensation temperature. *Journal of Statistical Physics*, 139, 333–344.

15. Ghliyem, M. ve Benayad, N. (2010). Mixed spin Ising model with four-spin interactions and crystal field. *Mediterranean Journal of Condensed Matter*, 12(3), 38-66.
16. De La Espriella, N., Buendía, G. M. ve Madera, J. C. (2018). Mixed spin-1 and spin-2 Ising model: Study of the ground states. *Journal of Physics Communications*, 2, 025006.
17. Daoulas, K. C. ve Müller, M. (2006). Single chain in mean field simulations: Quasi-instantaneous field approximation and quantitative comparison with Monte Carlo simulations. *The Journal of Chemical Physics*, 125, 184904.
18. Sandvik, A. W. (2003). Stochastic series expansion method for quantum Ising models with arbitrary interactions. *Physical Review E*, 68, 056701.
19. Wolf, W. P. (2000). The Ising model and real magnetic materials. *Brazilian Journal of Physics*, 30(4), 794–810.
20. Bobak, A. ve Dely, J. (2007). Phase transitions and multicritical points in the mixed spin-3/2 and spin-2 Ising system with a single-ion anisotropy. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 310, 1419–1421.
21. Bobak, A. ve Abubrig, F. O. (2003). Multicritical points in the mixed ferromagnetic-ferrimagnetic ternary alloy with a single-ion anisotropy. *Physical Review B*, 68, 224405.
22. Mohamad, H. K. (2014). Magnetic and thermodynamic properties of a mixed spin-1 and spin-7/2 Blume-Capel Ising ferrimagnetic system. *International Journal of Advanced Research*, 2(9), 442–445.
23. Abubrig, F. O. (2017). The possibility of four compensation points in a mixed spin-2 and spin-7/2 Ising ferrimagnetic system using mean-field theory. *Libya for Applied and Technical Science*, 4(1), 22-28.
24. Abubrig, F. (2013). Mean-field solution of the mixed spin-2 and spin-5/2 Ising ferrimagnetic system with different single-ion anisotropies. *Open Journal of Applied Sciences*, 3, 270–277.
25. Pereira, J. R. V., Tunes, T. M., de Arruda, A. S. ve Godoy, M. (2018). Thermal properties of the mixed spin-1 and spin-3/2 Ising ferrimagnetic system with two different random single-ion anisotropies. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 500(C), 265–272
26. Strecka, J. (2018). Strong- and weak-universal critical behaviour of a mixed-spin Ising model with triplet interactions on the Union Jack (centered square) lattice. *Entropy*, 20, 91.
27. Xiao, B.-W., Huang, S.-Y., An, Y. ve Wang, W. (2025). Dynamic magnetic properties of the mixed-spin (5/2, 2) Ising model with an MBene-like structure. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 663(C), 130447.

28. Alzate-Cardona, J. D., Sabogal-Suárez, D. ve Restrepo-Parra, E. (2017). Critical and compensation behavior of a mixed spin-3/2 and spin-5/2 Ising ferrimagnetic system in a graphene layer. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 429, 34–39.
29. De La Espriella Velez, N., Madera Yancez, J. ve Paez Mesa, M. S. (2014). Monte Carlo studies of critical phenomena in mixed spin-3/2 and spin-5/2 Ising model on square lattice. *Revista Mexicana de Física*, 60, 419–424.
30. Gharaibeh, M., Almahmoud, A. ve Obeidat, A. (2022). Compensation and transition order temperature behavior of mixed spin-1 and spin-1/2 Ising model on a centered honeycomb-hexagonal structure: Two points of compensation. *SN Applied Sciences*, 4, 211.
31. Yigit, A. ve Albayrak, E. (2013). Mixed spin-1/2 and spin-3/2 Ising model with random crystal field distribution. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 392, 4216–4221.
32. Strecka, J. ve Canova, L. (2006). Non-universal critical behaviour of a mixed-spin Ising model on the extended Kagome lattice. *Condensed Matter Physics*, 9(45), 179–186.
33. Godoy, M. ve Figueiredo, W. (2000). Mixed-spin Ising model with one- and two-spin competing dynamics. *Physical Review E*, 61(1), 78–85.
34. Lisnyi, B. ve Strečka, J. (2015). Exactly solved mixed spin-(1,1/2) Ising–Heisenberg diamond chain with a single-ion anisotropy. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 377, 502–510.
35. Wolfram, S. (1983). Statistical mechanics of cellular automata. *Reviews of Modern Physics*, 55, 601.
36. Wolfram, S. (1984). Universality and complexity in cellular automata. *Physica D*, 10, 1.
37. Creutz, M. (1986). Deterministic Ising dynamics. *Annals of Physics*, 167, 62.
38. Grinstein, G., Jayaprakash, C. ve He, Y. (1985). Statistical mechanics of probabilistic cellular automata. *Reviews of Modern Physics*, 55(23), 102–105.
39. Özkan, A. (2015). A simulation of the mixed spin 3–spin 3/2 ferrimagnetic Ising model. *Phase Transitions*, 89(1), 94–105.
40. Özkan, A. ve Kutlu, B. (2017). Critical behavior of low dimensional magnetic systems. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 425, 78–83.
41. Kutlu, B., Özkan, A., Seferoğlu, N., Solak, A. ve Binal, B. (2005). The tricritical behavior of the 3D Blume-Capel model on a cellular automaton. *International Journal of Modern Physics C*, 16, 933–950.
42. Özkan, A. (2007). *Karışık spin sistemlerinde kritik davranışlar*. Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 102–122.

43. Singh, S. P. (2020). The Ising model: Brief introduction and its application. In S. Sivasankaran, P. K. Nayak, and E. Günay (Eds.), *Solid State Physics—Metastable, Spintronics Materials and Mechanics of Deformable Bodies—Recent Progress*. New York: IntechOpen, 1-17.
44. Ising, E. (1925). Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, 31, 253–258.
45. Brush, S. G. (1967). History of the Lenz-Ising model. *Reviews of Modern Physics*, 39(4), 883–893.
46. Willet, R. D., Wang, Z., Molnar, S., Brewer, K., Landee, C. P., Turnbull, M. M. ve Zhang, W. (1993). *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 233, 277.
47. Sivardière, J. ve Lajzerowicz, J. (1975). Spin-1 lattice gas model. I. Condensation and solidification of a simple fluid. *Physical Review A*, 11, 2079–2089.
48. Sivardière, J. ve Lajzerowicz, J. (1975). Spin-1 lattice gas model. II. Condensation and phase separation in a binary fluid. *Physical Review A*, 11, 2090–2100.
49. Sivardière, J. ve Lajzerowicz, J. (1975). Spin-1 lattice gas model. III. Tricritical points in binary and ternary fluids. *Physical Review A*, 11, 2101–2110.
50. Newman, K. E. ve Dow, J. D. (1983). Zinc-blende-diamond order-disorder transition in metastable crystalline (GaAs)_{1-x}Ge_{2x} alloys. *Physical Review B*, 27, 7495–7508.
51. Shick, M. ve Shih, W. H. (1986). Spin-1 model of a microemulsion. *Physical Review B*, 34, 1797–1801.
52. Kundrotas, P. J., Lapinskas, S. ve Rosengren, A. (1997). Model of adsorbate-induced missing-row reconstructions of the (100) surface of fcc metals. *Physical Review B*, 56, 6486–6489.
53. Lapinskas, S. ve Rosengren, A. (1994). Blume-Emery-Griffiths model on three-dimensional lattices: Consequences for the antiferromagnetic Potts model. *Physical Review B*, 49, 15190–15196.
54. Cengiz, T. (2018). *Spin modelleri üzerine çalışmaları*. Doktora Tezi, Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kayseri, 108-126.
55. Baxter, R. J. (1995). *Exactly solved models in statistical mechanics*. London: Academic Press, 45-65.
56. Hubert, A. ve Schäfer, R. (2000). *Magnetic domains*. New York: Springer, 78-85.
57. Landau, L. ve Lifshitz, E. (1935). On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies. *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion*, 8, 153–169.
58. Mert, G. (2013). *Ferritlerin mikrodalga özellikleri üzerine çalışmalar*. Yüksek Lisans Tezi, Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Konya, 85-95.

59. Özkan, A. (2001). *İki boyutlu spin sistemleri üzerine çalışmalar*. Yüksek Lisans Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 102-122.
60. Kittel, C. (2005). *Introduction to solid state physics* (8th ed.). Hoboken: John Wiley & Sons Inc, 26-38.
61. Ozgur, U., Alivov, Y. ve Morkoc, H. (2009). Microwave ferrites, part 1: Fundamental properties. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 20(9), 789–834.
62. Sugimoto, M. (1999). The past, present, and future of ferrites. *Journal of the American Ceramic Society*, 82(2), 269–280.
63. Kutlu, B. (1995). *Spin modellerinde kritik davranışlar*. Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 145-152.
64. Kutlu, B. (1995). *Spin modellerinde kritik davranışlar*. Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 145-152.
65. Kadanoff, L. P. (1966). Spin-spin correlation in two-dimensional Ising model. *Il Nuovo Cimento B*, 44, 276.
66. Binder, K. ve Wang, J.-S. (1989). Finite-size effects at critical points with anisotropic correlations: Phenomenological scaling theory and Monte Carlo simulations. *Journal of Statistical Physics*, 55(1–2), 87–126.
67. Binder, K. (1981). Finite size scaling analysis of Ising model block distribution functions. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 43(2), 119–140.
68. Binder, K. (1985). Critical properties and finite-size effects of the five-dimensional Ising model. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 61(1), 13–23.
69. Binder, K., Landau, D. P. ve Challa, M. S. S. (1986). Finite-size effects at temperature-driven first-order transitions. *Physical Review B*, 34(3), 1841–1852.
70. Novotny, M. A. ve Evertz, H. G. (1991). Finite-size scaling for first-order phase transitions. In D. P. Landau, K. K. Mon, & H.-B. Schüttler (Eds.), *Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics III*. New York: Springer, 188–192
71. Binder, K. ve Landau, D. P. (1984). Finite-size scaling at first-order phase transitions. *Physical Review B*, 30(3), 1477–1485.
72. Buschow, K. H. J. (1977). Intermetallic compounds of rare-earth and 3d transition metals. *Reports on Progress in Physics*, 40(10), 1179–1256.
73. Franse, J. J. M. ve Radwański, R. J. (1993). Magnetic properties of binary rare-earth 3d-transition-metal intermetallic compounds. In K. H. J. Buschow (Ed.), *Handbook of Magnetic Materials* (Vol. 7). Holland: North-Holland, 307–501.
74. Belov, K. P., Zvezdin, A. K., Kadomtseva, A. M. ve Levitin, R. Z. (1976). Spin-reorientation transitions in rare-earth magnets. *Soviet Physics Uspekhi*, 19(7), 574–596.

75. Duc, N. H., Kim Anh, D. T. ve Brommer, P. E. (2002). Metamagnetism, giant magnetoresistance and magnetocaloric effects in RCo₂-based compounds in the vicinity of the Curie temperature. *Physica B: Condensed Matter*, 319(1–4), 1–9.
76. Sechovský, V., Havela, L., Prokeš, K., Nakotte, H., de Boer, F. R. ve Brück, E. (1994). Giant magnetoresistance effects in intermetallic compounds (invited). *Journal of Applied Physics*, 76(10), 6913–6918.
77. Žutić, I., Fabian, J. ve Das Sarma, S. (2004). Spintronics: Fundamentals and applications. *Reviews of Modern Physics*, 76(2), 323–410.
78. Kruglyak, V. V., Demokritov, S. O. ve Grundler, D. (2010). Magnonics. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 43(26), 264001.
79. Davydova, M. D., Zvezdin, K. A., Becker, J., Kimel, A. V. ve Zvezdin, A. K. (2019). H–T phase diagram of rare-earth–transition metal alloy in the vicinity of the compensation point. *Physical Review B*, 100, 064409.
80. Jiang, L., Shen, S., Feng, Q., Zhang, J.-M. ve Huang, Z. (2020). Monte Carlo study on the compensation behavior and hysteresis properties of a ferrimagnetic superlattice with alternate layers. *International Journal of Modern Physics B*, 34(21), 145-156.
81. Mattis, D. C. (1985). *The theory of magnetism II: Thermodynamics and statistical mechanics*. Berlin: Springer, 95-105.
82. Heisenberg, W. (1928). Zur Theorie des Ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, 49(9–10), 619–636.
83. Ibarra-García-Padilla, E., Malanche-Flores, C. G. ve Poveda-Cuevas, F. J. (2016). The hobbyhorse of magnetic systems: The Ising model. *European Journal of Physics*, 37, 065103.
84. Cullity, B. D. ve Graham, C. D. (2011). *Introduction to magnetic materials* (2nd ed.). New York: Wiley-IEEE Press, 18–21.
85. Wang, W., Fan, J., Li, C., Yu, Y., Wang, A., Li, S. ve Liu, J. (2025). Low-loss soft magnetic materials and their application in power conversion: Progress and perspective. *Energies*, 18, 482.
86. Tumanski, S. (2007). *Modern magnetic measurement*. New York: Springer, 145-166.
87. Kepaptsoglou, D. M., Ktena, A. ve Hristoforou, E. (2005). Magnetic sensor response dependence on hysteresis effects. *Sensors and Actuators A: Physical*, 119, 133–137.
88. Stirbu, R. S. ve Mitoseriu, L. (2024). Modeling of hysteretic response of porous piezo/ferroelectric ceramics. *Computational Materials Science*, 232, 112633.
89. Griffiths, R. B., Hurst, C. A. ve Sherman, S. (1970). Concavity of magnetization of an Ising ferromagnet in a positive external field. *Journal of Mathematical Physics*, 11(3), 753–756.

90. Livingston, J. D. (1981). A review of coercivity mechanisms. *Journal of Applied Physics*, 52(3), 85-96.
91. Özkan, A., Seferoğlu, N. ve Kutlu, B. (2006). Critical exponents of the three dimensional Blume-Capel model on a cellular automaton. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 362, 327–337.
92. Seferoğlu, N., Özkan, A. ve Kutlu, B. (2006). Finite size effect for the first-order phase transition of the three dimensional Blume-Capel model on a cellular automaton. *Chinese Physics Letters*, 23, 2526–2529.
93. Sarkar, P. (2000). A brief history of cellular automata. *ACM Computing Surveys*, 32(1), 80–107.
94. Kadanoff, L. P. (1966). Spin-spin correlation in two-dimensional Ising model. *Il Nuovo Cimento B*, 44, 276.
95. Huang, K. (1987). *Statistical mechanics*. New York: John Wiley & Sons, 156-165.





Gazili olmak ayrıcalıktır