



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

**ALTİGEN ÖRGÜ ÜZERİNDE KARMA-SPİN (1/2, 1) ISING
SİSTEMİNİ KULLANARAK MOLEKÜLER-TEMELLİ
MANYETİK MALZEMELERİN DİNAMİK MANYETİK
DAVRANIŞLARININ İNCELENMESİ**

**Hazırlayan
Oktay İNCE**

**Danışman
Prof. Dr. Mustafa GENÇASLAN**

Yüksek Lisans Tezi

TEMMUZ 2022, KAYSERİ

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

**ALTİGEN ÖRGÜ ÜZERİNDE KARMA-SPİN (1/2, 1) ISING
SİSTEMİNİ KULLANARAK MOLEKÜLER-TEMELLİ
MANYETİK MALZEMELERİN DİNAMİK MANYETİK
DAVRANIŞLARININ İNCELENMESİ**

**Hazırlayan
Oktay İNCE**

**Danışman
Prof. Dr. Mustafa GENÇASLAN**

Bu çalışma TUBİTAK tarafından 119F129 kodlu proje ile desteklenmiştir.

Temmuz 2022, KAYSERİ

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

**ALTİGEN ÖRGÜ ÜZERİNDE KARMA-SPİN (1/2, 1) ISING
SİSTEMİNİ KULLANARAK MOLEKÜLER-TEMELLİ
MANYETİK MALZEMELERİN DİNAMİK MANYETİK
DAVRANIŞLARININ İNCELENMESİ
(Yüksek Lisans Tezi)**

**Hazırlayan
Oktay İNCE**

**Danışman
Prof. Dr. Mustafa GENÇASLAN**

Bu çalışma TUBİTAK tarafından 119F129 kodlu proje ile desteklenmiştir.

Temmuz 2022, KAYSERİ

BİLİMSEL ETİĞE UYGUNLUK

Bu çalışmadaki tüm bilgilerin, akademik ve etik kurallara uygun bir şekilde elde edildiğini beyan ederim. Aynı zamanda bu kural ve davranışların gerektirdiği gibi, bu çalışmanın özünde olmayan tüm materyal ve sonuçları tam olarak aktardığımı ve referans gösterdiğimi belirtirim.

Oktay İNCE

İmza

“Altıgen Örgü Üzerinde Karma-Spin (1/2, 1) Ising Sistemini Kullanarak Moleküller–Temelli Manyetik Malzemelerin Dinamik Manyetik Davranışlarının İncelenmesi” başlıklı Yüksek Lisans Tezi, Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Lisansüstü Tez Yazım Kılavuzuna uygun olarak hazırlanmıştır.

Hazırlayan

Oktay İNCE

İmza

Danışman

Prof. Dr. Mustafa Gençaslan

İmza

FİZİK ABD Başkanı

Prof. Dr. Mustafa GENÇASLAN

İmza



TEŞEKKÜR

Tez çalışmalarım süresince bana hep destek olan beni yetiştiren, maddi, manevi her türlü desteği sunan, okumamda emeği çok büyük olan babam Servet İNCE, annem Zikrinaz İNCE ve her zaman yanımda olup bana destek olan eşim Beyza İNCE ye teşekkürlerimi sunarım. Hayatım boyunca bana destek olan babam Servet İnce'yi rahmetle anar ve ona verdiğim sözü tutup araştırmacı olmanın huzurunu yaşadığımı belirtmek isterim. Bana tez çalışma konusunu veren ve çalışmalarımda en büyük desteği kendisinden gördüğüm, çalışmalarım süresince geniş bilgi birikimi, yol göstericiliği, tecrübesi ile destek ve yardımlarını esirgemeyen ve hayatımda önder ve örnek aldığım saygı değer hocam tez danışmanım Sayın Prof. Dr. Mustafa Gençaslan'a ve TÜBİTAK Projesinde bana bursiyer olarak çalışma imkânı sağlayan Sayın Prof. Dr. Mustafa Keskin'e teşekkürlerimi ve minnettarlığımı sunarım.

Tez çalışması süresince 119F129 kodlu proje kapsamında sağladıkları destekten dolayı Türkiye Bilimsel ve Teknoloji Araştırma Kurumuna (TÜBİTAK) teşekkür ederim.

Oktay İNCE

TEMMUZ 2022, KAYSERİ

ALTIGEN ÖRGÜ ÜZERİNDE KARMA-SPİN (1/2, 1) ISING SİSTEMİNİ KULLANARAK MOLEKÜLER-TEMELLİ MANYETİK MALZEMELERİN DİNAMİK MANYETİK DAVRANIŞLARININ İNCELENMESİ

Oktay İNCE

Erciyes Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü
Yüksek Lisans Tezi, Temmuz 2022
Danışman: Prof. Dr. Mustafa GENÇASLAN

ÖZET

Molekül-temelli manyetik malzemelerin dinamik manyetik davranışlarını, birden fazla oran sabiti ihtiva eden ve ortalama dinamik düzen parametrelerinin çiftlenimli hale geldiği Yol İhtimaliyet Yöntemi (YİY), altıgen örgü üzerinde karma-spin (1/2, 1) Ising sistemine uygulayarak inceledik. Ortalama dinamik mıknatıslanmaları hesaplayarak sistemdeki mümkün fazları tespit ettik. Dinamik faz geçişlerinin tabiatını karakterize eden dinamik mıknatıslanmaların termal özelliklerini inceledik ve dinamik faz geçiş sıcaklıkları elde ettik. Paramanyetik (P), manyetik olmayan (NM), ferrimanyetik (I) temel fazları ve sistem parametrelerine bağlı olarak $P+I$, $NM+I$ karma veya hibrit fazların yanı sıra, dinamik üçlükritik nokta, kritik son nokta, çift kritik son nokta, sıfır-sıcaklık kritik nokta ve çoklu kritik nokta gibi özel noktaları içeren dinamik faz diyagramları değişik düzlemlerde sunuldu. Ayrıca, dinamik telafi davranışlarını incelenmiş ve N, P, Q, R ve S- tipi telafi davranışları sergilediği tespit edilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Karma-spin (1/2, 1) Ising sistemi; Dinamik faz geçişi; Dinamik faz diyagramları; Dinamik telafi sıcaklık tipleri; Yol ihtimaliyet yöntemi.

INVESTIGATION OF THE DYNAMIC MAGNETIC BEHAVIOR OF MOLECULAR-BASED MAGNETIC MATERIALS USING THE MIXED-SPIN (1/2, 1) ISING SYSTEM ON A HEXAGONAL LATTICE

Oktay İNCE

Erciyes University, Graduate School of Institute of Science

Master Thesis, July 2022

Supervisor: Prof. Dr. Mustafa GENÇASLAN

ABSTRACT

We investigated the dynamic magnetic behaviors of molecular-based magnetic materials using the mixed spin (1/2, 1) Ising system on a hexagonal lattice within the path probability method (PPM) that contains more than one rate constants and the average dynamic order parameters were coupled. We obtained the phases in the system by solving the average dynamic magnetizations. We examined the thermal features of dynamic magnetizations to characterize the nature of the dynamic phase transitions (DPTs) and obtained the DPT temperatures. We introduced the dynamics phase diagrams in various planes, which contain the dynamic tricritical, critical end, double critical end, zero-temperature critical and multicritical special points as well as the paramagnetic (P), non-magnetic (NM), ferromagnetic (I) fundamental phases and $P+I$, $NM + I$ mixed or hybrid phases depending on system parameters. We also investigated the dynamic compensation behaviors, and the N-, P-, Q-, R- and the S-types compensation behaviors were found.

Keywords: Mixed spin (1/2, 1) Ising system; Dynamic phase transition; Dynamic phase diagrams; Dynamic compensation types; Path probability method.

İÇİNDEKİLER

ALTİGEN ÖRGÜ ÜZERİNDE KARMA-SPİN (1/2, 1) ISING SİSTEMİNİ KULLANARAK MOLEKÜLER-TEMELLİ MANYETİK MALZEMELERİN DİNAMİK MANYETİK DAVRANIŞLARININ İNCELENMESİ

BİLİMSEL ETİĞE UYGUNLUK	ii
KILAVUZA UYGUNLUK.....	iii
KABUL VE ONAY TUTANAĞI.....	iv
TEŞEKKÜR	v
ÖZET	vi
ABSTRACT	vii
İÇİNDEKİLER.....	viii
KISALTMALARIN LİSTESİ.....	x
TABLolar LİSTESİ	xi
ŞEKİLLER LİSTESİ.....	xii
GİRİŞ	1

BİRİNCİ BÖLÜM

GENEL BİLGİLER ve LİTERATÜR ÇALIŞMASI

1.1. Ising Sistemi	4
1.2. Literatür Çalışması ve Motivasyon	5

İKİNCİ BÖLÜM

ALTİGEN ÖRGÜ ÜZERİNDE KARMA-SPİN (1/2, 1) ISING SİSTEMİ VE DİNAMİK FAZ GEÇİŞLERİ İÇİN DÜZEN PARAMETRELERİ

2.1. Ardışık Altıgen Örgü Üzerinde Karma-Spin (1/2, 1) Ising Modeli	8
2.2. YİY kullanarak Dinamik Manyetik Faz Geçişleri için Düzen Parametreleri	13

3. BÖLÜM

MOLEKÜLLER-TEMELLİ MANYETİK MALZEMELERİN DİNAMİK MANYETİK ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

3.1. Ortalama Alt Örgü Mıknatıslanmalarının Zamanla Değişimi	20
3.2. Dinamik Faz Diyagramları	21
3.2.1 Muhtelif Düzlemlerde Dinamik Faz Diyagramları	25
3.3. Telafi Davranışlar	27

4. BÖLÜM

SONUÇ ve TARTIŞMA

4.1. Sonuç ve Tartışma	30
KAYNAKÇA	32
ÖZGEÇMİŞ	36

KISALTMALAR

af	: Antiferromanyetik faz.
CMK	: Cisim Merkezli Kübik.
D	: Kristal alan etkileşim sabiti.
DTD	: Dinamik Telafi Davranışları.
DEAT	: Dinamik Etkin Alan Teorisi.
DFG	: Dinamik Faz Geçişlerini.
DOYM	: Dinamik Ortalama Yaklaşım Metodu.
DOAT	: Dinamik Ortalama Alan Teori.
ODAT	: Ortalama Dinamik Alan teorisi.
H	: Zamanla değişen salınımlı dış manyetik alan.
H_0	: Zamanla değişen salınımlı dış manyetik alanın genliği.
I	: Ferrimanyetik Faz.
J_1 ,	: Bilineer etkileşim sabiti.
J_2 ,	: Bilineer etkileşim sabiti.
J_3	: Bilineer etkileşim sabiti.
$M^{A,B}$	: A ve B alt örgüleri için dinamik mıknatıslanma.
KDY	: Kümesel Değişim Yöntemi.
MC	: Monte Carlo.
MCS	: Monte Carlo Simülasyonu.
NM	: Manyetik olmayan Faz.
OAT	: Ortalama Alan Teorisi.
MST	: Melt- spinning Tekniği (Soğutucu Diskli Erimiş Metal Spinleme).
OAT	: Ortalama Alan Teorisi.
P	: Paramanyetik faz.
T	: Sıcaklık.
T_c	: İkinci dereceden faz geçişi.
T_t	: Birinci dereceden faz geçişi.
YİY	: Yol İhtimaliyet Yöntemi.
T_{TSN}	: Telafi sıcaklık noktası.

TABLÖLAR LİSTESİ

Tablo -1.1: *A* alt örgüsü için etkileşimler..... 15

Tablo-1.2: *B* alt örgüsü için etkileşimler..... 16



ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 1-1 Ising sisteminde komşu spin sistemleri örgü sayısı.....4

Şekil 2-1 Müteakip tabakalı altıgen örgüler üzerinde spinlerin yerleşiminin taslağı. Örgü, σ (beyaz daireler) ve S (kırmızı daireler) spinlerinin birbirini takip eden tabakalara yerleşmesiyle oluşmuştur. Böylece model A ve B gibi birbiri içine geçmiş iki alt örgülü Ising sistemi olarak ele alınabilir.....9

Şekil 3-1 Ortalama mıknatıslanmaların (m^A ve m^B) zamana göre değişimleri: (a) $T=7.5$, $J_2 = 2.0$, $J_3 = 0.1$, $H_0 = 2.80$ ve $D = 3.0$ için P faz; (b) $T = 0.75$, $J_2 = 5.0$, $J_3 = 0.90$ ve $D = -9.0$ için NM faz; (c) $T = 1.0$, $J_2 = 5.0$, $J_3 = 0.9$; $H_0 = 0.10$ ve $D = 1.0$ için I faz; (d) $T = 0.50$, $J_2 = 0.01$, $J_3 = 0.6$; $H_0 = 0.90$ ve $D = -2.0$ için $P + I$ karma faz sergilediği görülür.....22

Şekil 3-2 $|M^A|$ ve $|M^B|$ dinamik manyetizasyonların sıcaklığa bağımlılıkları. T_c ikinci ve T_t birinci dereceden faz geçiş sıcaklıklarıdır. (a) $J_2 = 1.5$, $J_3 = 2.0$, $H_0 = 2.0$, $D = -3.0$ için I 'dan P 'ye ikinci dereceden bir faz geçişi ki $T_c = 4.59$ 'dır. (b) $J_2 = 1.5$, $J_3 = 2.0$, $H_0 = 2.0$, $D = -6.5$ için NM fazdan P fazına birinci dereceden bir faz geçişi $T_t = 0.63$ iken meydana gelir. (c) ve (d) şekillerinde aynı $J_2 = 1.0$, $J_3 = 3.0$, $H_0 = 2.0$, $D = -5.5$ parametreleri kullanılmışken ilkinde manyetizasyon başlangıç değerleri $|M^A| = 0.0$, $|M^B| = 0.0$, ikincisinde $|M^A| = 0.5$, $|M^B| = 1.0$ alınmıştır ki sonuçlar sistemin art arda iki faz geçişi sergilediğini gösterir. Yani (c) $T_t = 1.23$ 'te P 'den I 'ya birinci; (d) $T_c = 5.782$ 'de I 'dan P 'ye ikinci dereceden bir faz geçişi gerçekleşmektedir. (e) ve (f) aynı $J_2 = 1.0$, $J_3 = 3.0$, $H_0 = 0.50$, $D = -5.5$ parametreleri için fakat (e)'de manyetizasyon başlangıç değerleri $|M^A| = 0.0$, $|M^B| = 0.0$ alınmıştır ki sistemin art arda üç fazdan geçtiği görülür. Yani önce $T_{c1} = 0.975$ 'de NM 'den P 'ye ikinci; sonra $T_t = 1.96$ 'da P 'den I 'ya birinci; ve son olarak $T_{c2} = 5.40$ ' da I 'dan P 'ye ikinci dereceden geçiş sergilerken (f)'de manyetizasyon başlangıç değerleri $|M^A| = 0.5$, $|M^B| = 1.0$ alındığında $T_{c2} = 5.40$ 'da doğrudan I 'dan P 'ye ikinci dereceden bir faz geçişi gerçekleşir.24

Şekil 3-3 Sistemin dinamik faz diyagramlarının (D, T) düzleminde görünümü. Düz (kırmızı) ve kesikli çizgiler (mavi) sırasıyla ikinci ve birinci dereceden faz geçiş sıcaklıklarını gösterir. Yine sırayla $T_{ÜKN}$, A , B , E ve Z dinamik üçlü kritik, çoklu kritik, çift kritik son nokta ve kritik son nokta ve sıfır sıcaklık kritik nokta gibi özel kritik noktaları temsil eder. (a) $J_2 = 5.0$, $J_3 = 1.1$, $H_0 = 0.10$; (b) $J_2 = 1.0$, $J_3 = 3.0$, $H_0 = 0.50$; (c) $J_2 = 1.0$, $J_3 = 3.0$, $H_0 = 2.0$**26**

Şekil 3-4 Şekil 3-3 ile aynıdır. Ancak; (a) (J_2, T) düzleminde $J_3 = 0.5$, $H_0 = 0.50$ ve $D=1.0$ için; (b) (J_3, T) düzleminde $J_2 = 1.0$, $H_0 = 0.10$ ve $D = -0.50$ için; (c) (D, J_2) düzleminde $J_3 = 0.5$, $H_0 = 0.50$ ve $T = 0.30$ için; (d) $(D, -J_3)$ düzleminde $J_2 = 0.9$, $H_0 = 0.10$ ve $T = 1.0$ için; (e) (H_0, T) düzleminde $J_2 = 1.0$ için, $J_3 = 3.0$ ve $D = -5.0$ dır.....**28**

Şekil 3-5 Sistemin N-, P-, Q-, R- ve S- tipi dinamik telafi davranışları. (a) $J_2 = 5.0$, $J_3 = 0.9$, $H_0 = 2.0$ ve $D = -2.0$; (b) $J_2 = 2.0$, $H_0 = 2.0$ ve $D = -3.0$; (d) $J_2 = 2.0$, $J_3 = 1.5$, $H_0 = 2.0$ ve $D = -3.5$; (e) $J_2 = 5.0$, $J_3 = 0.9$, $H_0 = 2.0$ ve $D = -5.0$ dır.....**29**

GİRİŞ

Araştırmacılar manyetik malzemelerin özelliklerini uzun zamandan beri (mıknatısın keşfi) incelemektedirler. Moleküller-temelli manyetik malzemeler, süper iletkenler, nanoteknoloji gibi ileri teknolojik uygulama potansiyellerine sahip malzemeler olduğundan hem deneysel ve hem de teorik araştırmacıların en yoğun olarak çalıştıkları konulardan birisidir. Teorik olarak bu malzemeler Karma-spin sistemleri ile incelenmektedir. Karma-spin sistemlerinin özelliği, saf spin sistemlerine göre daha az öteleme simetrisine sahip olmalarından dolayı çok daha zengin kritik davranışlar sergilerler. Moleküller-temelli manyetik malzemeler için en uygun ve en fazla kullanılan prototip karma-spin sistemleri ise karma spin $(1/2, 1)$, $(1/2, 3/2)$ ve $(2, 5/2)$ Ising sistemleridir. Karma-spin $(1/2, 1)$, $(1/2, 3/2)$ ve $(2, 5/2)$ Ising sistemleri kullanılarak moleküller-temelli manyetik malzemelerin denge manyetik özellikleri çok ayrıntılı olarak incelenmiş ve halen de incelemeler devam etmektedir. Diğer taraftan, belirtilen karma-spinler kullanılarak moleküller-temelli manyetik malzemelerin dinamik manyetik özellikleri ve denge-dışı özellikleri üzerine çok az sayıda çalışma yapılmıştır. Yapılan çalışmalar da tek oran sabiti içeren Dinamik Ortalama Alan Teorisi (DOAT), Dinamik Etkin Alan Teorisi (DEAT) ve Monte Carlo (MC) gibi yöntemlerle gerçekleştirilmiştir.

Karma-spin sistemleri gibi karmaşık fiziksel sistemleri, tek oran sabiti içeren yöntemlerle incelemek önemli bir noksanlık olduğu gibi, sonuçların deneysel çalışmalarla, özellikle de soğumanın önemli olduğu deneylerle karşılaştırılmasında ve deneysel çalışmacılara yol göstermesinde de eksiklikler olmaktadır. Melt-spinning tekniğindeki (MST) teker hızı, YİY'deki oran sabitlerinin birisine karşılık gelmektedir. YİY ile elde edilen histerisiz ve mıknatıslanma davranışlarının MST tekniğiyle elde edilenlerle karşılaştırılması, hem teorik ve hem de deneysel çalışmalara ışık tutma potansiyelindedir. Bu nedenlerden dolayı, bu tez çalışmasının temel amacı, karma-spin

(1/2, 1) Ising sistemini kullanarak, moleküler-temelli manyetik malzemelerin, dinamik manyetik özelliklerini, iki ve daha fazla oran sabiti içeren yol ihtimaliyet yöntemiyle (YİY) ile incelemektir. Özellikle, dinamik mıknatıslanma davranışları ve DFG'ni incelemek ve dinamik faz diyagramları sunmak ve sonuçları uygun teorik ve deneysel sonuçlarla karşılaştırmak gereklidir.

Karma-spin (1/2, 1) Ising sistemini YİY ile inceleyip sonuçları DOAT, DEAT ve Monte Carlo (MC) gibi tek oran sabiti içeren yöntemlerle karşılaştırıp, böylece oran sabitlerinin sistemin davranışlarına etkisinin olup olmadığını tespit edeceğiz.

Tezimizde DFG sıcaklıkları inceleneceğinden, kesin olarak keşfedilmemiş olan bunların arkasındaki mekanizmanın anlaşılması, yani ikinci veya birinci dereceden oluşları, konusuna da az da olsa katkıda bulunmuş olacağız.

BİRİNCİ BÖLÜM

GENEL BİLGİLER ve LİTERATÜR ÇALIŞMASI

1.1. Ising Sistemi

Karma-spin (1/2, 1) Ising sistemlerini kullanarak, dinamik histerisiz, telafi davranışları veya dinamik faz geçişleri ve faz diyagramları gibi sistemin dinamik manyetik özellikleri yol ihtimaliyet yöntemiyle incelenebilir. Bu yöntem, kümesel değişim yönteminin (KDY) (cluster variation method) zamana bağlı durumlara doğal bir genelleştirmesidir ve Kikuchi tarafından ilk defa tanımlanmış daha sonra çalışma arkadaşlarıyla beraber daha da geliştirmişlerdir Wada[27] vs. Bu yöntemle çok farklı fiziksel kooperatif sistemlerin dengesiz davranışları incelenmiş ve kullanılmaktadır ve birçok önemli fiziksel sistemlerin açıklanmasında kullanılmıştır. Örneğin, düzenli sistemlerin örgü konumlarındaki yer değiştirme difüzyonu, katı elektrolitlerdeki difüzyon ve iyonik iletkenlik, cisim merkezli kübik (bcc) alaşımlarda düzenli– düzensiz geçişlerin kinetikleri, ikili alaşımlar, spin-1/2, spin-1 ve spin-3/2 Ising modelleri, fonon ve atomik difüzyon sistemleri, üçlü sistemler, Si (001) bölgesel yüzeyi üzerindeki indüklenmiş bölge dönüşüm olayının mikroskobik mekanizması ve voltaj-kapılı iyon kanallarının basit dinamiğinin incelenmesi ve benzeri homojen ve homojen olmayan sistemlerin dengesiz sistemlerin düzensiz davranışlarını tanımlamak için başarıyla uygulanmıştır.

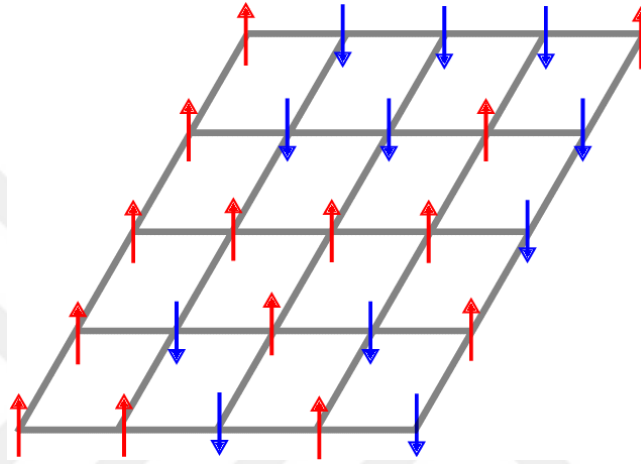
Ising sistemi, Şekil 1.1’de olduğu gibi kristal örgü noktalarının μ_0 manyetik momentli birer atom tarafından işgal edildiğini kabul eder. Bu manyetik momentler Ising spini olarak adlandırılır. Her bir Ising spinin durumu 1 veya -1 değerini alan σ_s değişkeni ($j = 1, 2, \dots, N$; N toplam atom sayısıdır) ile temsil edilir. Kristaldeki komşu spinler arasında, paralel veya anti-paralel olmalarına bağlı olarak

$$J_{++} = J_{--} = -J, \quad J_{+-} = J \quad (1.1)$$

şeklinde bir J etkileşimi (bilineer etkileşim parametresi) vardır. Böylece sistemin etkileşme enerjisi

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \mu_0 \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (1.2)$$

şeklinde ifade edilir ki burada toplam, etkileşen komşu çiftler üzerinden alınır. Şekil 1.1 de görüldüğü gibi en yakın komşu spin sayısı ile kare örgü sayısı simgeleştirilmiştir.



Şekil 1.1 Ising sisteminde komşu spin sistemleri örgü sayısı.

Ising sistemi, manyetik sistemlerini açıklamak için ortaya atılmış fakat basit dönüşümlerle çok farklı sistemlere kolayca uygulanabilen ve günümüzde çok aktif olarak kullanılmakta olan bir modeldir.

Ising sistemi içinde en basit ve en yaygın olarak kullanılan model, spin-1/2 Ising sistemidir. Ancak, ferrimanyetik yapıya sahip karmaşık bileşikler, seyreltik ferrimanyetik sistemler, yarı-iletken alaşımlar, amorf yapıya sahip alaşımlar, termomanyetik ve moleküler tabanlı kayıt sistemleri, moleküler tabanlı mıknatıslar, telafi sıcaklıklarının varlığı, ferrimanyetik düzenlilik ve düzenli-düzensiz faz geçişleri gibi daha karmaşık fiziksel sistemlerin termodinamik açıklamaya çalışmak için daha yüksek spinli veya karma-spinli Ising sistemleri gibi daha fazla durumlu ve birden fazla düzen parametrelili bir model gerekmektedir. Dolayısıyla 1980'li yıllarda, karma-spin Ising sistemleri ile ilgili çalışmalara başlanmış ve bu spin sistemleri günümüzde de kullanılan ve kullanılmaya da devam edecek olan en önemli sistemleri olmuşlardır.

Ising modelinin bu kısaca genel tanımından sonra, gelecek kısımda, yani literatür çalışması kısmında karma-spin sistemleri hakkında yapılmış olan çalışmalar ile ilgili kısaca bilgi verilecektir.

1.2. Literatür Çalışması ve Motivasyon

Karma-spin ($1/2, 1$) sistemi, daha önce de belirtildiği gibi üzerinde en fazla çalışma yapılan bir sistemdir. Nedeni ise, basit olmakla beraber bir çok manyetik moleküler bileşikler için prototip model olarak kullanılmasıdır. Bu sistemlere örnek olarak; $\text{CuNi(EDTA).6H}_2\text{O}$ [1], $\text{CuNi(pbaOH)(H}_2\text{O)}_3.n\text{H}_2\text{O}$ [2], $\text{CuNi(pba)(D}_2\text{O)}_3.2\text{D}_2\text{O}$ [3], $\text{PPh}_4[\text{Ni(pn)}_2][\text{Fe(CN)}_6]. \text{H}_2\text{O}$ [4], $\{\text{Pr(bet)}_2\} (\text{H}_2\text{O)}_3\text{Fe(CN)}_6\}$ [5] ve $\{\text{Ru(acac)}_2(\text{CN)}_2\} \{\text{ni(dmphen)(NO}_3)\}$ [6] sistemlerini örnek olarak alabiliriz.

Karma-spin ($1/2, 1$) sisteminin dinamiği üzerine ilk teorik çalışma, en iyi bilgilerimiz dâhilinde, Buendia ve Machado [7] tarafından, basit bir Hamiltonyen alınarak ve DOAT kullanılarak yapılmıştır. Sonuçta üç farklı dinamik faz diyagramı bulunmuş ve DFD'ler paramanyetik (P), ferrimanyetik (F) ve $P+F$ karma faz içerdiği tespit edilmiştir. Aynı zamanda, sistemin birinci ve ikinci dereceden faz geçişleri geçirdiği ve dinamik üçlü kritik nokta davranışı sergilediği bulunmuştur. Spin-1 BC modelinin dinamiği üzerine Keskin vd. [8] çalışmalar yapmış ve bu sistemin daha zengin DFD vereceği düşüncesiyle; Keskin vd. [9], karma-spin ($1/2, 1$) sistemini DOAT ile tekrar incelemişler ve sonuçta altı farklı topolojik tipli DFD elde etmişlerdir. Aynı zamanda, sistemin dinamik kritik son nokta gibi özel kritik nokta da sergilediği bulunmuştur. Godoy ve Figueiredo [10], manyetik alan yokluğunda ve en basit Hamiltonyenli sistem, Glauber tipi dinamiği ve dinamik çift yaklaşık yöntemlerini kullanarak incelemişler sonuçta P , F ve antiferrimanyetik (AF) fazları içeren, fakat herhangi özel dinamik kritik nokta içermeyen basit bir faz diyagramı elde etmişlerdir. Godoy ve Figueiredo [11], MC simülasyonu kullanarak karma-spin ($1/2, 1$) sisteminin dinamiğini incelemişler ve sonuçta, bir önceki çalışmalarına [10] çok benzer dinamik faz diyagramı elde etmişlerdir. Ekiz ve Keskin [12], YİY'i kullanarak karma-spin ($1/2, 1$) sisteminde meydana gelen, kararlı durumların yanı sıra yarı kararlı (metastable) ve kararsız

durumları da elde etmişler ve bu durumların geçirdiği faz geçişlerinin doğasını (birinci-veya ikinci-derece) tespit etmişlerdir. Bunlara ilaveten, denge faz diyagramı ile beraber yarı kararlı faz diyagramları da verilmiştir. Bu noktayı vurgulayalım ki yarı kararlı ve kararsız durumların eksiksiz ve doğru olarak elde edildiğinden emin olmak için sistemin dinamiği, Kikuchi [13] tarafından geliştirilen YİY ile incelenmiştir. Keskin ve Ertaş [14], zamana bağlı manyetik alan varlığında sistemin içerdiği dinamik telafi davranışlarını altıgen örgü için DOAT ile incelemişler ve N-tipi davranış sergilediğini bulmuşlardır. Aynı zamanda, farklı düzlemlerde dinamik faz diyagramlarını sunmuşlar ve sistemin dinamik üçlü kritik nokta, çoklu kritik nokta ve kritik son nokta gibi özel kritik noktalar sergilediğini belirlemişlerdir. Vatansever ve Polat [15] karma-spin ($1/2$, 1) sistemini kullanarak nanokübik parçacıkların dengesiz davranışlarının salınımlı manyetik alan varlığında klasik MC hesaplama tekniğiyle incelemişler ve farklı düzlemlerde DFD sunmuşlar ve aynı zamanda ısı kapasitesinin indirgenmiş sıcaklığa göre değişimini araştırmışlardır. Vatansever vd. [16], düzensiz ikili ferromanyetik alaışımının manyetik özelliklerini incelemek için bu sistemi kullanmışlar ve yöntem olarak da DEAT uygulanmıştır. Ertaş ve Keskin [17], zamana bağlı manyetik alan varlığında sistemin dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıklarını DEAT ile incelemişler ve DFD'lerini sunmuşlar ve salınım frekansının DFD'larına etkisini araştırmışlardır. DEAT nin DOAT a göre en önemli avantajı spin korelasyon etkisinin de hesaplamalara katılmasıdır. Sonuçlar, DOAT ile yapılan çalışma [18] ile karşılaştırılmış ve bazı birinci derece faz geçiş çizgilerinin kaybolduğu bulunmuştur. Ertaş ve Keskin [19], bu karma-spin sistemini, basit Hamiltonyen kullanarak YİY ile de araştırmış, DFG sıcaklıklarını incelemiş ve DFD'lerini yalnız sıcaklık-manyetik alan genliği düzleminde sunmuşlardır. Sonuçta, çok daha fazla sayıda farklı topolojik tipte faz diyagramları elde edilmiş ve daha zengin faz diyagramları bulunmuştur. Nedenleri: (i) Yöntemin iki farklı oran sabiti içermesinden, (ii) m ile q düzen parametrelerinin çiftlenmiş olarak dinamik denklem sisteminde yer almasından, kaynaklanmaktadır. Batı ve Ertaş [20], karma-spin ($1/2$, 1) Ising ferrimanyetik sisteminin altıgen örgü üzerindeki dinamik manyetik histerisiz (DMH) davranışlarını ayrıntılı olarak DOAT ile incelemişler ve özellikle etkileşme parametrelerinin histerisiz davranışlara etkisini araştırmışlardır. Yakın zamanda Vatansever [21], bu karma-spin Ising sistemini kullanarak kübik ve küresel öz/yelek nanoparçacıklardaki dinamik faz geçişlerini incelemiştir. Ayrıca, dinamik miknatislanma ve histerisiz davranışları ayrıntılı olarak sunulmuştur.

Çalışmamızda, zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında bir altıgen kristal örgüde karma-spin ($1/2, 1$) Ising ferrimanyetik sisteminin dinamik faz geçişlerinin yol ihtimaliyet metodu ile incelenecektir. Böylece, ileri teknolojik uygulamalarda önemli manyetik malzeme sınıfına giren moleküler-temelli manyetik malzemelerin dinamik davranışları birden fazla oran sabiti içeren bir yöntemle incelenerek uygun teorik ve deneysel sonuçlarla karşılaştırılacaktır. Diğer taraftan, soğutmanın önemli olduğu deneysel çalışmalarda ve özellikle hızlı katılaştırma yöntemlerinden en önemli ve en fazla kullanılan yöntem olan melt-spinning tekniğiyle (MST) yeni manyetik alaşımlar üretme üzerine çok daha fazla yol gösterici olacaktır. Çünkü MST'deki teker hızı, YİY'deki oran sabitlerinin birisine karşılık gelmektedir. Deneysel olarak, MST'deki teker hızının çok çok yükseğe çıkarılması mümkün değildir (Genellikle 10 m/s-60 m/s hızlar arasında çalışmalar yapılmaktadır. Az sayıda da olsa 80 m/s'de çalışmalar mevcuttur, örneğin Karaköse vb. [22]). Teorik/nümerik olarak bu oran sabiti için yüksek değerler kullanarak manyetik özellikleri, ve mıknatıslanma davranışlarını incelemek mümkün olacaktır. Böylece, elde edilen sonuçların, MST ile rapor edilen çalışmalarla nitel olarak karşılaştırılması mümkün olacağı gibi bu konuda çalışan deneyci bilim insanlarına da yol gösterme potansiyeline sahip olacaktır.

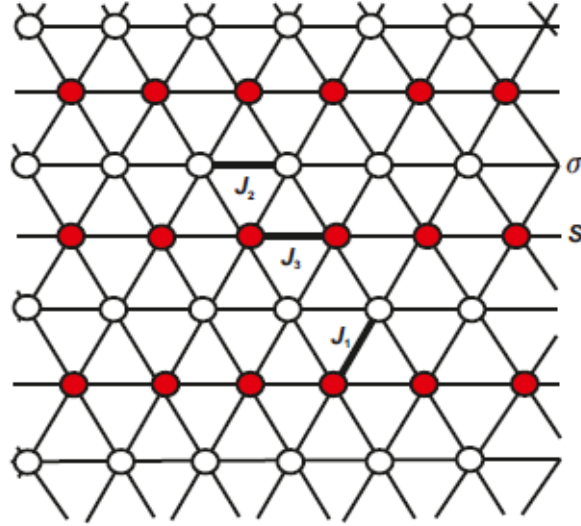
2. BÖLÜM

ALTİGEN ÖRGÜ ÜZERİNDE KARMA-SPİN (1/2, 1) ISING SİSTEMİ VE DİNAMİK FAZ GEÇİŞLERİ İÇİN DÜZEN PARAMETRELERİ

2.1. Ardışık Altıgen Örgü Üzerinde Karma-Spin (1/2, 1) Ising Sistemi

Önceki bölümlerde belirtildiği gibi bu tezde altıgen örgü üzerinde karma-spin (1/2, 1) Ising sistemini kullanarak, dinamik histerisiz, telafi sıcaklık davranışları ve dinamik faz geçişleri ve faz diyagramları gibi, dinamik manyetik özellikleri YİY ile incelemektir. Bu yöntemle çok farklı fiziksel kooperatif sistemlerin denge dışı davranışları incelenmiş ve incelenmektedir. YİY yukarıda belirttiğimiz gibi birçok önemli fiziksel sistemlerin açıklanmasında kullanılmıştır

Altıgen örgü üzerinde karma spin (1/2, 1) Ising sistemi, A ve B gibi birbiri içine geçmiş iki alt örgülü Ising modeli şeklinde ele alınabilir. Örgünün birbirini takip eden her tabakasında, yani A alt örgüde $\sigma_i^A = \pm 1/2$ ve B alt örgüde $S_j^B = \pm 1,0$ spinli parçacıklar yer alırlar. Bu spinli parçacıklar, örgü noktalarına öyle dağılmışlardır ki Şekil 2.1’de görüldüğü gibi müteakip tabakalı altıgen örgüleri oluştururlar. Bazı örgüler beyaz ile simgelenirken bazıları kırmızı ile simgelenmiştir ve kırmızı ve beyaz örgü ile simgelenen spinlerin birbirleri arasındaki bağlantılar J_1 , J_2 , J_3 ile gösterilmiştir. J_1 ; kırmızı ve beyaz ile tarif ettiğimiz örgü sisteminin arasındaki geçişi gösterirken, J_2 , iki beyaz örgü arasındaki geçişi ve J_3 ’de iki kırmızı arasındaki geçişleri göstermektedir.



Şekil-2.1: Müteakip tabakalı altıgen örgüler üzerinde spinlerin yerleşiminin taslağı. Örgü, σ (beyaz daireler) ve S (kırmızı daireler) spinlerinin birbirini takip eden tabakalara yerleşmesiyle oluşmuştur. Böylece model, A ve B gibi birbiri içine geçmiş iki alt örgülü Ising sistemi olarak ele alınabilir.

Müteakip tabakalı altıgen örgüler üzerinde karma-spin $(1/2, 1)$ Ising sistemi için düzen parametreleri aşağıdaki gibidir.

a) A alt örgüsü için, yani σ_i^A spinleri için ortalama (dipol moment) mıknatıslanma,

$$m^A = \langle \sigma_i^A \rangle$$

b) B alt örgüsü için, yani S_j^B spinleri için ortalama (dipol moment) mıknatıslanma,

$$m^B = \langle S_j^B \rangle$$

c) B alt örgüsü için, yani S_j^B spinleri için ortalama kuadrupol moment,

$$q^B = \langle (S_j^B)^2 \rangle$$

şeklindedir. Öte yandan A ve B alt örgüleri için, her bir spin durumunun ortalaması ki bunlar iç değişkenler veya durum ya da nokta değişkenler olarak da adlandırılır, X_1^A , X_2^A iç değişkenleri sırayla $+1/2$, $-1/2$ değerlerini alırken X_1^B , X_2^B ve X_3^B iç değişkenleri sırayla $+1$, 0 , -1 değerlerini alırlar. Bu iç değişkenler normalizasyon şartına uyarlar, yani $\sum_{i=1}^2 X_i^A = 1$ ve $\sum_{j=1}^3 X_j^B = 1$ 'dir. Düzen parametreleri, normalizasyon şartlarının da kullanılmasıyla,

$$m^A \equiv \langle \sigma_i^A \rangle = \frac{\sum_{i=1}^2 \sigma_i^A X_i^A}{\sum_{i=1}^2 X_i^A} = \frac{1}{2}(X_1^A - X_2^A), \quad (2.1)$$

$$m^B \equiv \langle S_j^B \rangle = \frac{\sum_{j=1}^3 S_j^B X_j^B}{\sum_{j=1}^3 X_j^B} = \frac{1}{2}(X_1^B - X_3^B), \quad (2.2)$$

$$q^B \equiv \langle (S_j^B)^2 \rangle = \frac{\sum_{j=1}^3 (S_j^B)^2 X_j^B}{\sum_{j=1}^3 X_j^B} = X_1^B + X_3^B. \quad (2.3)$$

şeklinde iç değişkenler cinsinden yazılabilirler. Ayrıca iç değişkenleri, düzen parametrelerinin lineer kombinasyonu olarak da yani,

$$X_1^A = \frac{1}{2} + m^A \text{ ve } X_2^A = \frac{1}{2} - m^A, \quad (2.4)$$

$$X_1^B = \frac{1}{2}(m^B + q^B), \quad X_2^B = 1 - q^B \text{ ve } X_3^B = \frac{1}{2}(q^B - m^B). \quad (2.5)$$

olarak ifade edebiliriz.

Düzen parametreleri, müteakip tabakalı altıgen örgüler üzerinde karma-spin (1/2, 1) Ising sistemi için iki farklı temel fazı tanımlamaktadırlar. Bu temel fazlar:

- 1) Paramanyetik faz (P): $m^A = m^B = 0$,
- 2) Ferrimanyetik faz (I): $m^A \neq m^B \neq 0$, ($m^A = \pm 1/2$ ve $m^B = \mp 1, 0$)
- 3) Nanmanyetik faz (NM): $m^B = 0$, $m^A \neq 0$

şeklindedir.

Müteakip tabakalı altıgen örgüler üzerinde karma-spin (1/2, 1) Ising sistemi için Hamiltonyen ifademiz,

$$\mathcal{H} = -J_1 \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i^A \sigma_j^B - J_2 \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i^A \sigma_j^A - J_3 \sum_{\langle ij \rangle} S_i^B S_j^B - D \sum_j (S_j^B)^2 - H \left(\sum_i \sigma_i^A + \sum_j S_j^B \right) \quad (2.6)$$

olacaktır ki burada J_1 , J_2 ve J_3 sırayla $\sigma_i^A - S_j^B$, $\sigma_i^A - \sigma_i^A$ ve $S_j^B - S_j^B$ arasındaki bilineer etkileşme sabitleridir. Bu aşamada en yakın komşu çift sayılarının (z) da belirtilmesi gerekir ki bu tezde altıgen örgü kullanılacağından J_1 için $z_1 = 4$, J_2 ve J_3 için ise $z_2 = z_3 = 2$ 'dir. Hamiltonyenimizde D , kristal alan etkileşmesi veya tek-iyon anizotropi sabiti, H ise zamanla değişen salınımlı dış manyetik alan olup

$$H = H_0 \cos(\omega t) \quad (2.7)$$

formundadır ki H_0 salınımın genliği ve $\omega = 2\pi\nu$ ise açısal frekansıdır.

İlk etapta, uzunluğuna manyetik alan altında altıgen örgü üzerinde karma-spin (1/2, 1) Ising sistemini kümesel değişim metodu uygulayarak sistemin manyetik özelliklerini, düzen parametrelerinin yarı-kararlı, kararsız ve kararlı davranışlarını tespit edebilmek için denge faz diyagramları için düzen parametreleri elde edilebilir. Bunun için ise

$$F = E - TS \quad (2.8)$$

formunda serbest enerjini hesap edilmesi gerekir ki burada E , iç enerji; T , k_B Boltzman sabiti cinsinden sıcaklık ve S , $1/k_B$ cinsinden entropidir. Toplam örgü noktası başına iç enerji,

$$\frac{E}{N} = -J_1 m^A m^B - J_2 m^A m^A - J_3 m^B m^B - Dq^B - Hm^A - Hm^B \quad (2.9)$$

olup iç değişkenler cinsinden ifade edilmelidir. Entropi için ağırlık faktörlerinin, yani

$$W^A = \frac{N!}{\prod_{i=1}^2 (X_i^A N)!} \quad \text{ve} \quad W^B = \frac{N!}{\prod_{j=1}^4 (X_j^B N)!} \quad (2.10)$$

ifadelerinin yazılıp $S = k \ln W$ entropi tanımı $\ln N \cong N \ln N - N$ Stirling yaklaşımının kullanılmasıyla her bir alt örgü için entropiler

$$S^A = N \sum_{i=1}^2 X_i^A \ln X_i^A \quad \text{ve} \quad S^B = N \sum_{j=1}^4 X_j^B \ln X_j^B \quad (2.11)$$

şeklinde bulunur. Böylece toplam örgü noktası başına serbest enerji,

$$f = \frac{F}{N} = (-J_1 m^A m^B - J_2 m^A m^A - J_3 m^B m^B - Dq^B - Hm^A - Hm^B) + \frac{1}{\beta} (X_1^A \ln X_1^A + X_2^A \ln X_2^A) + \frac{1}{\beta} (X_1^B \ln X_1^B + X_2^B \ln X_2^B + X_3^B \ln X_3^B) \quad (2.12)$$

olarak hesaplanır. Şimdi öz bağıllık denklemleri,

$$\frac{\partial f}{\partial X_i^A} = 0 \quad (i=1,2) \quad \text{ve} \quad \frac{\partial f}{\partial X_j^B} = 0 \quad (j=1,2,3) \quad (2.13)$$

kullanılmasıyla bulunur. Böylece, denge faz diyagramlarında kullanılacak denklemler,

$$\left. \begin{aligned} X_i^A &= \frac{1}{Z^A} e_i^A \\ e_i^A &= e^{-\frac{\beta}{N} \left(\frac{\partial E}{\partial X_i^A} \right)} \end{aligned} \right\} \quad Z^A = \sum_{i=1}^2 e_i^A = e_1^A + e_2^A$$

$$\left. \begin{aligned} X_j^B &= \frac{1}{Z^B} e_j^B \\ e_j^B &= e^{-\frac{\beta}{N} \left(\frac{\partial E}{\partial X_j^B} \right)} \end{aligned} \right\} \quad Z^B = \sum_{j=1}^4 e_j^B = e_1^B + e_2^B + e_3^B \quad (2.14)$$

olmak üzere (ki burada, $\beta = 1/T$ dir. Yani (28) denkleminin tamamında yapıldığı gibi sıcaklık enerji birimindedir),

$$m^A = \frac{1}{2} (X_1^A - X_2^A) = \frac{1}{2Z^A} (e_1^A - e_2^A) \quad (2.15)$$

$$m^B = (X_1^B - X_3^B) = \frac{1}{Z^B} (e_1^B - e_3^B) \quad (2.16)$$

$$q^B = (X_1^B + X_3^B) = \frac{1}{Z^B} (e_1^B + e_3^B) \quad (2.17)$$

elde edilirler ki bu denklemler de Z^A ve Z^B bölüşüm fonksiyonlarıdır. Bu denklemlerin sayısal çözümleri ise uygun bir FORTRAN programı ile yapılarak sonuçların bir grafik çizim programına aktarılmasıyla denge faz diyagramları elde edilebilir ki bu tezde sistemin sadece dinamik davranışları incelenecektir.

2.2. YİY kullanarak Dinamik Manyetik Faz Geçişleri için Düzen Parametreleri

Şimdi ise bu tezin özgünlüğünü teşkil eden zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında bir altıgen kristal örgüde karma-spin (1/2, 1) Ising ferrimanyetik sisteminin

dinamik faz geçişleri yol ihtimaliyet metodu ile incelemek için gerekli dinamik denklemleri elde edelim. Dinamik denklemleri elde etmek için YİY kullanılacaktır. YİY’de iç değişkenlerin değişim oranı,

$$\frac{dX_i}{dt} = \sum_{i \neq j} (\chi_{ji} - \chi_{ij}) \quad (2.18)$$

dır ki burada χ_{ij} , i durumundan j durumuna geçen sistem için yol ihtimaliyet oranı (yol ihtimaliyet fonksiyonu) olarak adlandırılır ve $\chi_{ij} = \chi_{ji}$ denge durumunu verir. Kikuchi [13], χ_{ij} için iki adet tanımı yapmıştır ki biz bu tezde

$$\chi_{ij} = k_{ij} Z^{-1} X_i e^{-\frac{\beta}{N}(\frac{\partial E}{\partial X_j})}, \quad e_i = e^{-\frac{\beta}{N}(\frac{\partial E}{\partial X_i})}, \quad e_j = e^{-\frac{\beta}{N}(\frac{\partial E}{\partial X_j})} \quad (2.19)$$

ile verdiği tarife II’yi kullanacağız. Şimdi bu tarifeyi kullanarak düzen parametrelerinin zamanla değişimlerini bulalım.

$$m^A = \frac{1}{2}(X_1^A - X_2^A) \quad (2.20)$$

olduğundan

$$\frac{dm^A}{dt} = \frac{1}{2} \left(\frac{dX_1^A}{dt} - \frac{dX_2^A}{dt} \right) \quad (2.21)$$

hesaplanacaktır. Bunun için yol ihtimaliyet fonksiyonu ve etkileşimler yazılmalıdır. A alt örgüsü için Denklem (2.18)’yi kullanarak,

Tablo-1.1: A alt örgüsü için etkileşimler.

	$X_1 (1/2)$	$X_2 (-1/2)$
$X_1 (1/2)$		$k_2 (k_{12})$
$X_2 (-1/2)$	$k_2 (k_{21})$	

$$\begin{aligned} \frac{dX_1^A}{dt} &= (\chi_{21} - \chi_{12}) \rightarrow Z^A \frac{dX_1^A}{dt} = k_{21} X_2^A e_1^A - k_{12} X_1^A e_2^A \\ \frac{dX_2^A}{dt} &= (\chi_{12} - \chi_{21}) \rightarrow Z^A \frac{dX_2^A}{dt} = k_{12} X_1^A e_2^A - k_{21} X_2^A e_1^A \end{aligned} \quad (2.22)$$

olup $k_{ij} = k_{ji}$ oran sabitleridir ve Tablo-1.1’de görüldüğü gibi $k_{12} = k_{21} = k_2$ ‘dir. Burada belirtelim ki oran sabitleri,

$k_1 \equiv$ Parçacıkların örgü boyunca ötelenmesi (translation),

$k_2 \equiv$ Parçacıkların örgü konumundaki dönmesini (rotation),

temsil eder ve genellikle $k_2 > k_1$ alınır. Böylece,

$$Z^A \frac{dm^A}{dt} = k_2 (X_2^A e_1^A - X_1^A e_2^A) \quad (2.23)$$

bulunur ve iç değişkenlerin de yerine yazılarak düzenlenmesiyle

$$\frac{dm^A}{dt} = -k_2 m^A + k_2 \frac{1}{2} \tanh\left[\frac{1}{2T} (J_1 z_1 m^B + 2J_2 z_2 m^A + H)\right] \quad (2.24)$$

halini alır. Salınımlı manyetik alanı $H = H_0 \cos(\omega t)$ alıp eşitliğin sol tarafını ω ve k ile çarpıp bölerek düzenleme yaparsak,

$$\Omega \frac{dm^A}{d\xi} = -\frac{k_2}{k} m^A + \frac{k_2}{k} \frac{1}{2} \tanh\left[\frac{1}{2T} (J_1 z_1 m^B + 2J_2 z_2 m^A + H_0 \cos(\xi))\right] \quad (2.25)$$

elde edilir ki burada $\Omega = \omega/k$, $\xi = \omega t$ ve $k = k_1/k_2$ 'dir. Benzer şekilde B alt örgüsü için de dinamik manyetizasyon, quadrupolar denklemleri elde edilir. Ancak bu kez etkileşme oran sabitleri Tablo-1,2'deki gibi olacaktır. Böylece,

$$m^B = (X_1^B - X_3^B) \quad (2.26)$$

$$q^B = (X_1^B + X_3^B) \quad (2.27)$$

olduğu için değişimleri,

$$\frac{dm^B}{dt} = \left(\frac{dX_1^B}{dt} - \frac{dX_3^B}{dt} \right) \quad (2.28)$$

$$\frac{dq^B}{dt} = \left(\frac{dX_1^B}{dt} + \frac{dX_3^B}{dt} \right) \quad (2.29)$$

olacaktır ve

Tablo-1.2: B alt örgüsü için etkileşimler.

	$X_1 (1)$	$X_2 (0)$	$X_3 (-1)$
$X_1 (1)$		$k_1 (k_{12})$	$k_2 (k_{13})$
$X_2 (0)$	$k_1 (k_{21})$		$k_1 (k_{23})$
$X_3 (-1)$	$k_2 (k_{31})$	$k_1 (k_{32})$	

böylece Kikuchi [13]'nin tarife II'sini veren Denklem (2.22)'yi kullanarak, yani

$$\begin{aligned}\frac{dX_1^B}{dt} &= (\chi_{21} - \chi_{12}) + (\chi_{31} - \chi_{13}) \\ \frac{dX_2^B}{dt} &= (\chi_{12} - \chi_{21}) + (\chi_{32} - \chi_{23}) \\ \frac{dX_3^B}{dt} &= (\chi_{13} - \chi_{31}) + (\chi_{23} - \chi_{32})\end{aligned}\quad (2.30)$$

olup

$$\begin{aligned}Z^B \frac{dX_1^B}{dt} &= k_{21}(X_2 e_1 - X_1 e_2) + k_{31}(X_3 e_1 - X_1 e_3) \\ &= k_1(X_2 e_1 - X_1 e_2) + k_2(X_3 e_1 - X_1 e_3) \\ Z^B \frac{dX_2^B}{dt} &= k_{12}(X_1 e_2 - X_2 e_1) + k_{32}(X_3 e_2 - X_2 e_3) \\ &= k_1(X_1 e_2 - X_2 e_1) + k_1(X_3 e_2 - X_2 e_3) \\ Z^B \frac{dX_3^B}{dt} &= k_{13}(X_1 e_3 - X_3 e_1) + k_{23}(X_2 e_3 - X_3 e_2) \\ &= k_2(X_1 e_3 - X_3 e_1) + k_1(X_2 e_3 - X_3 e_2)\end{aligned}\quad (2.31)$$

bulunur.

(2.14) denkleminin kullanılıp iç değişkenlerin ve e' lerin yerlerine yazılıp düzenlenmesiyle, daha önce elde ettiğimiz A alt örgüsü için dinamik mıknatıslanma denklemini de yazarsak topluca dinamik denklemlerimiz,

$$\Omega \frac{dm^A}{d\xi} = -\frac{k_2}{k} m^A + \frac{k_2}{k} \frac{1}{2} \tanh[a] \quad (2.32)$$

$$\Omega \frac{dm^B}{d\xi} = -\frac{k_2[2\cos(b)e^{\frac{D}{T}} + k]m^B - 2\sinh(b)e^{\frac{D}{T}}[q^B(k_2 - k_1) + k_1]}{k[2\cos(b)e^{\frac{D}{T}} + 1]} \quad (2.33)$$

$$\Omega \frac{dq^B}{d\xi} = -\frac{k_1}{k} \frac{[(2\cosh(b)e^{\frac{D}{T}} + 1)q^B - 2\cosh(b)e^{\frac{D}{T}}]}{[2\cosh(b)e^{\frac{D}{T}} + 1]} \quad (2.34)$$

olur ki burada, $a = \frac{(J_1 z_1 m^B + 2 J_2 z_2 m^A + H_0 \cos(\xi))}{T}$, $b = \frac{(J_1 z_1 m^A + 2 J_3 z_3 m^B + H_0 \cos(\xi))}{T}$

$\Omega = \omega / k$, $\xi = \omega t$ ve daha önce bahsettiğimiz üzere $z_1 = 4$; $z_2 = z_3 = 2$ 'dir.

Elde ettiğimiz dinamik sistemin nümerik çözümünü, Adams-Moulton kestirme düzeltme yöntemi ile yapılabilir.

İkinci önemli basamak olarak, M^A ve M^B dinamik mıknatıslanma düzen parametrelerinin, yani sırasıyla A ve B alt örgünün dinamik mıknatıslanmalarının elde edilmesi ve sıcaklığa göre davranışlarının incelenmesidir. Dinamik düzen parametreleri,

$$M^A = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} m^A(\xi) d\xi, \quad (2.35 a)$$

$$M^B = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} m^B(\xi) d\xi, \quad (2.35 b)$$

şeklinde tanımlanır ki burada $\xi = \omega t$ 'dir. Bu tip integraller, Adams-Moulton kestirme düzeltme yöntemi ve Romberg integrasyon yönteminin kullanılmasıyla çözülerek, dinamik düzen parametrelerinin sıcaklıkla olan değişimleri incelenir. Bu incelemeler sonucunda DFG sıcaklıkları tespit edilir. DFG sıcaklıkları kullanılarak her bir sistem için, farklı düzlemlerde dinamik faz diyagramları elde edilecektir.

Son olarak, diğer bir önemli manyetik özellik olan dinamik telafi sıcaklığı davranışları ise

$$M^T = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left(\frac{m^A(\xi) + m^B(\xi)}{2} \right) d\xi \quad (2.36)$$

integrali nümerik olarak çözülerek elde edilir. Burada M^T , toplam mıknatıslanmadır. Sistemin dinamik telafi davranışları, farklı sistem parametreleri için detaylıca hesaplanacaktır.



3. BÖLÜM

MOLEKÜLER-TEMELLİ MANYETİK MALZEMELERİN DİNAMİK MANYETİK ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

3.1. Ortalama Alt Örgü Mıknatıslanmalarının Zamanla Değişimi

Moleküler temelli manyetik malzemelerin dinamik manyetik özelliklerini açıklamak için zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında bir altıgen kristal örgüde karma-spin (1/2, 1) Ising ferrimanyetik sistemini YİY kullanarak gerekli dinamik denklemler (2.27), (2.31) ve (2.32) olarak elde edilmişti. Bu bölümde ise bu denklemlerin, Adams-Moulton kestirme ve düzeltme yöntemi ve Romberg integrasyon yöntemleri kullanılarak nümerik olarak çözülmesiyle ortalama düzen parametrelerinin, yani A ve B alt örgüleri için ortalama alt örgü mıknatıslanmalarının ($m^A(\xi)$ ve $m^B(\xi)$) zamana bağlı davranışları incelenmiştir.

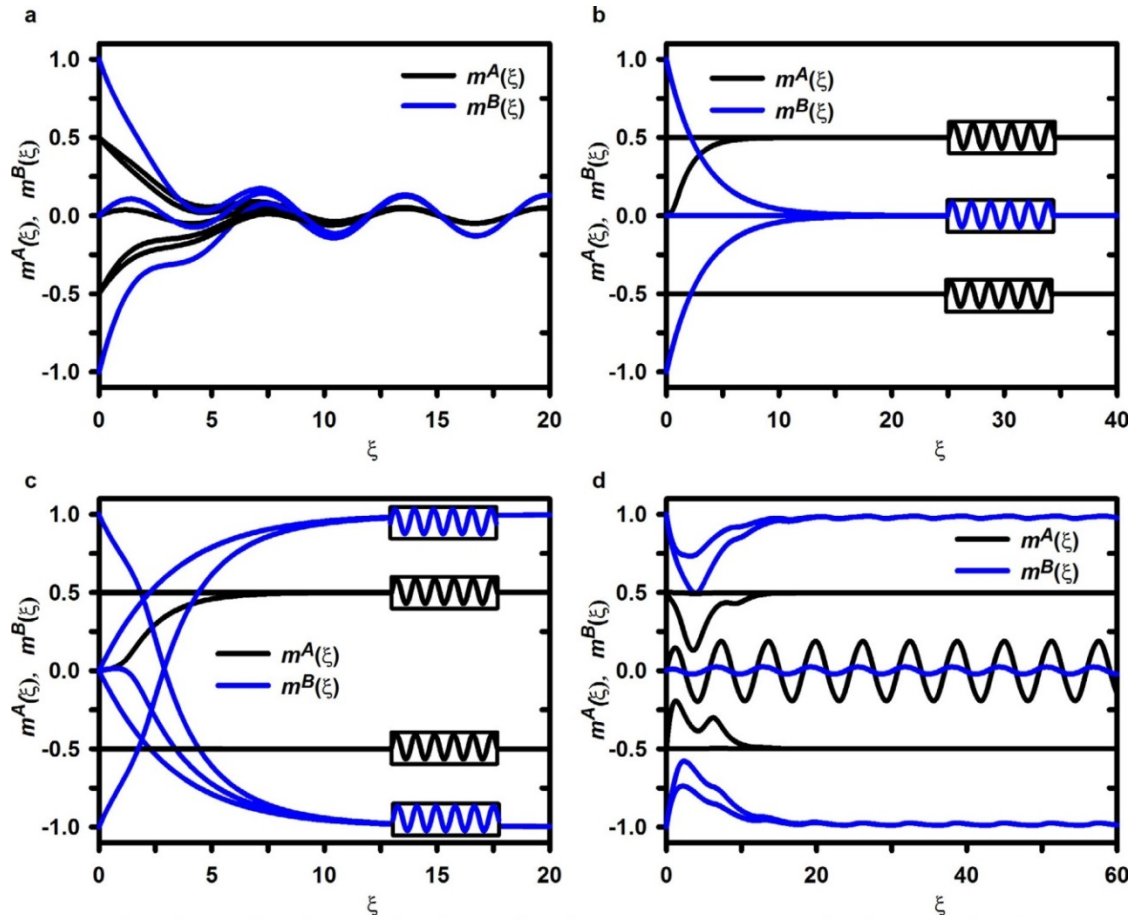
Farklı sistem parametrelerine göre, A ve B alt örgüleri için elde edilen ortalama alt örgü dinamik mıknatıslanma davranışları, Şekil 3.1 (a)-(d)'de görülmektedir. Bu şekli ve diğer kesimlerdeki şekilleri elde ederken $J_1 = -1.0$, $z_1 = 4.0$, $z_2 = z_3 = 2.0$ değerleri sabit tutulmuştur. $H_0 = 2.80$, $D = 3.0$, $T = 7.5$, $J_2 = 2.0$ ve $J_3 = 0.1$ kullanılarak elde edilen Şekil 3.1 (a)'ya dikkat edilirse, $m^A(\xi)$ ve $m^B(\xi)$ 'nin tüm başlangıç değerlerinde başlayan salınımlar zamanla $m^A(\xi) = m^B(\xi) = 0.0$ etrafında salınmaya başlıyor ki bu paramanyetik (P) faza tekabül eder. Şekil 1 (b)'de ise $H_0 = 0.10$, $D = -9.0$, $T = 0.75$, $J_2 = 5.0$ ve $J_3 = 0.9$ parametreleri kullanılmıştır ki yine $m^A(\xi)$ ve $m^B(\xi)$ 'nin tüm

başlangıç değerlerinde başlayan salınımlar zamanla $m^A(\xi) = \pm 1/2$ etrafında salınırken $m^B(\xi) = 0.0$ etrafında salınmaktadır ki bu durum manyetik olamayan fazı (NM) temsil eder. $H_0 = 0.10$, $D = 1.0$, $T = 1.0$, $J_2 = 5.0$ ve $J_3 = 0.9$, parametreleri kullanıldığında bulunan Şekil 3.1 (c)'de $m^A(\xi)$ ve $m^B(\xi)$ 'nin zamanla $m^A(\xi) = \pm 1/2$, $m^B(\xi) = \pm 1.0$ etrafında salındığı bulunmuştur ki bu ise ferrimanyetik faza (I) tekabül eder. Son olarak, $H_0 = 0.90$, $D = -2.0$, $T = 0.5$, $J_2 = 0.01$ ve $J_3 = 0.6$ alındığında elde edilen Şekil 3.1 (d)'ye dikkat edilirse bunun hem paramanyetik faz hem de ferrimanyetik faz, yani $P+I$ karma veya hibrit fazı sergilediği görülür. Çünkü $m^A(\xi)$ ve $m^B(\xi)$ 'nin zamanla hem $m^A(\xi) = \pm 1/2$, $m^B(\xi) = \pm 1.0$ hem de $m^A(\xi) = m^B(\xi) = 0.0$ etrafında salınmaktadırlar.

Böylece, A ve B alt örgüleri için muhtemel tüm ortalama alt örgü dinamik mıknatıslanma davranışları elde edilmiş olduğu gibi karma veya hibrit faz da edilmiş olundu.

3.2. Dinamik Faz Diyagramları

Kullanmış olduğumuz altıgen kristal örgüde karma-spin (1/2, 1) Ising ferrimanyetik sisteminde mevcut olan fazlar arasındaki dinamik faz sınırlarını belirleyebilmemiz için, (2.27), (2.31) ve (2.32) olarak elde edilen dinamik denklemler ve (2.35)'in Adams-Moulton kestirme ve düzeltme yöntemi ve Romberg integrasyon yöntemleri kullanılarak nümerik olarak çözümlenerek dinamik faz geçiş sıcaklıkları (DFT) elde edilmeli ve dinamik faz geçişlerinin (DFG) tabiatı karakterize edilmelidir. DFG sıcaklıkları bir periyot başına ortalama düzen parametrelerinin yani dinamik alt örgü mıknatıslanmalarının davranışının sıcaklığın bir fonksiyonu olarak incelenmesiyle elde edilmiştir. Bu sıcaklık değerlerinin tespit edilmesiyle muhtelif düzlemlerde dinamik faz diyagramlarını ve bu diyagramlarda ortaya çıkan özel kritik noktaları göz önüne serilmiştir..



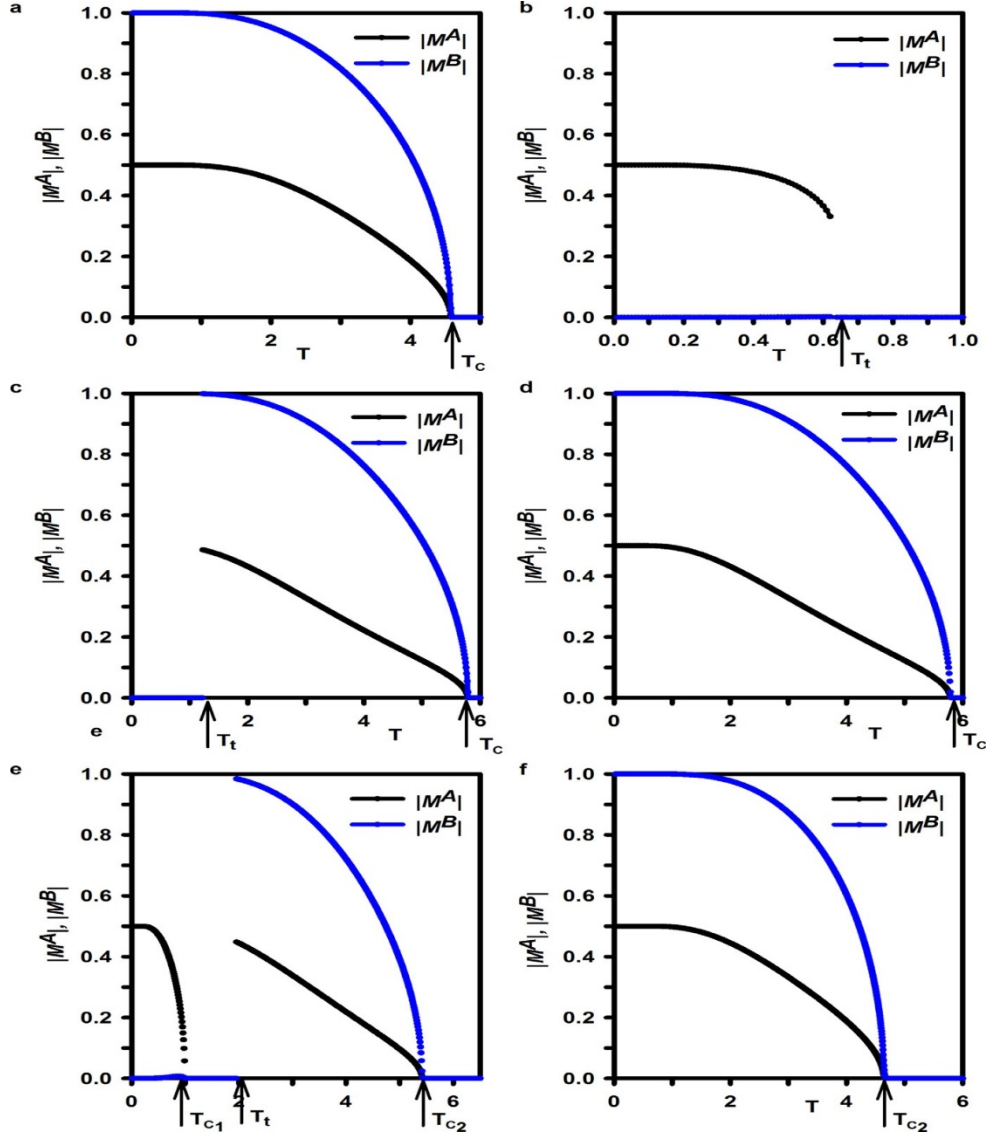
Şekil 3-1 Ortalama mıknatıslanmaların (m^A ve m^B) zamana göre değişimleri: (a) $T = 7.5$, $J_2 = 2.0$, $J_3 = 0.1$; $H_0 = 2.80$ ve $D = 3.0$ için P faz; (b) $T = 0.75$, $J_2 = 5.0$, $J_3 = 0.90$ ve $D = -9.0$ için NM faz; (c) $T = 1.0$, $J_2 = 5.0$, $J_3 = 0.9$; $H_0 = 0.10$ ve $D = 1.0$ için I faz; (d) $T = 0.50$, $J_2 = 0.01$, $J_3 = 0.6$ $H_0 = 0.90$ ve $D = -2.0$ için $P + I$ karma faz sergilediği görülür.

Dinamik faz davranışlarını ve buradan tespit edilecek dinamik faz geçiş sıcaklıkları için Şekil 3.2 (a)-(f) oluşturulmuştur. $H_0 = 2.0$, $D = -3.0$, $J_2 = 1.5$ ve $J_3 = 2.0$ için elde edilen Şekil 3.2 (a), artan sıcaklıkla birlikte $|M^A|$ ve $|M^B|$ 'nin sıfıra gidişini göstermektedir ki bu değer $T_C = 4.59$ olduğu görülür ki bu noktada ferrimanyetik (I) fazdan paramanyetik (P) faza bir dinamik faz geçişi cereyan etmiştir. Şekil 3.2 (b), $H_0 = 2.0$, $D = -6.5$, $J_2 = 1.5$ ve $J_3 = 2.0$ için elde edilmiştir ve dikkat edilirse $|M^A| = 0.0$ iken $|M^B| = 0.5$ manyetik olmayan (NM) fazda iken artan sıcaklıkla $T_t = 0.63$ sıcaklığında birinci dereceden faz geçişi ile paramanyetik (P) faza geçmektedir. Şekil 3 (c)-(d) aynı $H_0 = 2.0$, $D = -5.5$, $J_2 = 1.0$ ve $J_3 = 3.0$ parametreleri için elde edilmiş olmasına rağmen düzen parametrelerinin başlangıç değerleri farklıdır;

(c) şeklinde $|M^A|=0.0$, $|M^B|=0.0$ 'den bir $T_t=1.23$, olarak ferrimanyetik fazdan $T_C=5.782$ değerinde paramanyetik faza geçerken (d) şeklinde $|M^A|=0.5$ iken $|M^B|=1.0$ 'den $T_C=5.782$ paramanyetik faza geçtiği görülmektedir. Yani, birbirini takip eden faz geçişleri gözlenmektedir.

Özetle, Şekil 3.2 (c) ve (d) birlikte ele alındığında $P+I$ karma faz veya hibrit fazın meydana geldiği görülür. Şekil 3.2 (e)-(f) ise $H_0=0.5$, $D=-5.5$, $J_2=1.0$ ve $J_3=3.0$ parametreleri için elde edilmiştir. Ancak, düzen parametrelerinin başlangıç değerleri (e) şekli için $|M^A|=0.0$, $|M^B|=0.0$ ve (f) şekli için ise $|M^A|=0.5$, $|M^B|=1.0$ seçilmiştir. Şimdi (e) şekline dikkat edilirse üç adet ardışık faz geçişi gözlenmektedir; $T_{C_1}=0.975$ ikinci dereceden faz geçiş sıcaklığı, sonra $T_{C_1}=3.03$ ve sonrasında tekrar ikinci dereceden faz geçişle $T_{C_2}=5.40$ değerinde paramanyetik faza geçtiği görülür. (f) şeklinde ise $T_{C_2}=4.60$ sıcaklığında ikinci dereceden gaz geçişi olduğu görülmektedir.

Şekil 3.2(a)-(f) ile sistem parametrelerinin bazı değerleri için dinamik faz diyagramlarından tipik olarak bazılarını verdik. Elbette, bu sistem parametrelerinden bazılarını sabit tutup diğerlerini değişken alarak elde edilen birinci dereceden ve ikinci dereceden faz geçiş sıcaklıklarını her bir durum için hesaplayıp özel sıcaklıkları not ederek grafik oluşturmak mümkün ve buna sabit tutulan değişkenlere göre filanca düzlemde faz diyagramı adını veriyoruz. Bundan sonraki kesimde bu düzlemlerde faz diyagramlarını ele alıp özel kritik noktaları tespit edeceğiz.



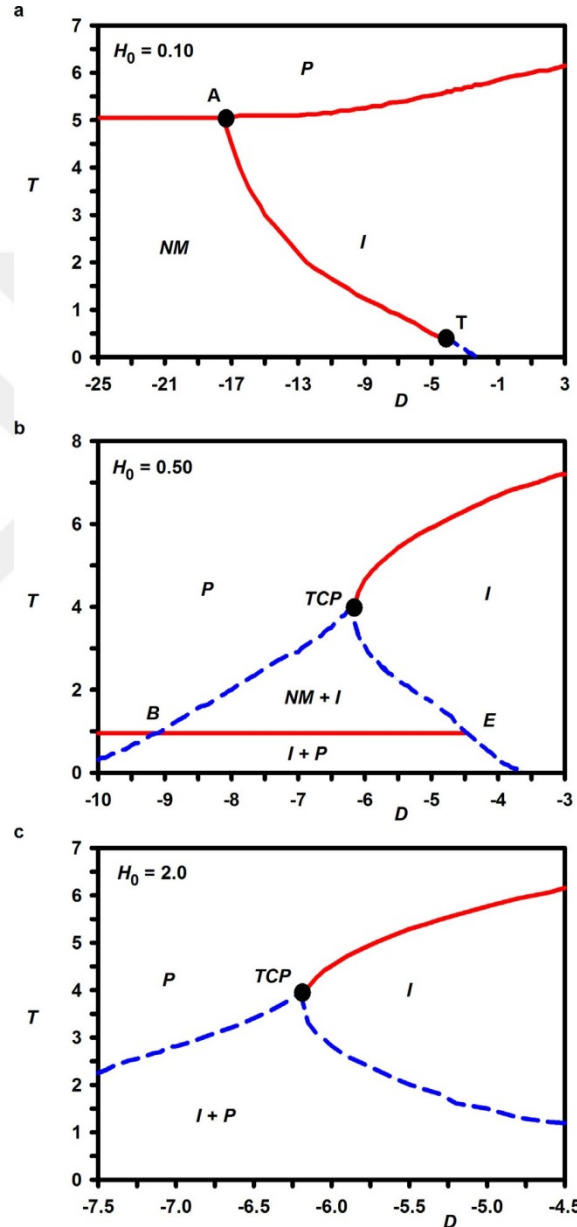
Şekil 3-2 $|M^A|$ ve $|M^B|$ dinamik mıknatıslanmalarının sıcaklığa bağımlılıkları. T_c ikinci ve T_t birinci dereceden faz geçiş sıcaklıklarıdır. (a) $J_2 = 1.5$, $J_3 = 2.0$, $H_0 = 2.0$, $D = -3.0$ için I' 'den P 'ye ikinci dereceden bir faz geçişi ki $T_c = 4.59$ 'dır. (b) $J_2 = 1.5$, $J_3 = 2.0$, $H_0 = 2.0$, $D = -6.5$ için NM fazdan P fazına birinci dereceden bir faz geçişi $T_t = 0.63$ iken meydana gelir. (c) ve (d) şekilleri aynı $J_2 = 1.0$, $J_3 = 3.0$, $H_0 = 2.0$, $D = -5.5$ parametreleri kullanılmışken ilkinde manyetizasyon başlangıç değerleri $|M^A| = 0.0$, $|M^B| = 0.0$, ikincisinde $|M^A| = 0.5$, $|M^B| = 1.0$ alınmıştır ki sonuçlar sistemin art arda iki faz geçişi sergilediğini gösterir. Yani (c) $T_t = 1.23$ 'te P 'den I' ya birinci; (d) $T_c = 5.782$ 'de I' 'den P 'ye ikinci dereceden bir faz geçişi gerçekleşmektedir. (e) ve (f) aynı $J_2 = 1.0$, $J_3 = 3.0$, $H_0 = 0.50$, $D = -5.5$ parametreleri için fakat (e)'de manyetizasyon başlangıç değerleri $|M^A| = 0.0$, $|M^B| = 0.0$ alınmıştır ki sistemin art arda üç fazdan geçtiği görülür. Yani önce $T_{c1} = 0.975$ 'de NM 'den P 'ye ikinci; sonra $T_t = 1.96$ 'da P 'den I' ya birinci; ve son olarak $T_{c2} = 5.40$ 'da I' 'den P 'ye ikinci dereceden geçiş sergilerken (f)'de manyetizasyon başlangıç değerleri $|M^A| = 0.5$, $|M^B| = 1.0$ alındığında $T_{c2} = 5.40$ 'da doğrudan I' 'den P 'ye ikinci dereceden bir faz geçişi gerçekleşir.

3.2.1. Muhtelif Düzlemlerde Dinamik Faz Diyagramları

Önceki kesimde sistemdeki fazları, dinamik faz geçiş sıcaklıklarını ve bunların karakterini (birinci veya ikinci dereceden) tespit etmiştik. Şimdi, bu değerleri kullanarak farklı sistem parametreleri için hesaplanan dinamik faz diyagramlarının muhtelif düzlemlerde görünümü Şekil 3.3 ve 3.4’de olduğu gibidir. Tüm şekillerde içi dolu çember dinamik üçlü kritik noktayı temsil eder. Ayrıca *TCP*, *A*, *B*, *E* ve *Z* sembolleri sırayla şu özel kritik noktaları gösterir: Dinamik üçlü kritik; çoklu kritik; çift kritik son nokta; kritik son nokta ve sıfır-sıcaklık kritik nokta. Yine tüm şekillerde kırmızı sürekli çizgi ikinci derece faz geçiş çizgisini, mavi kesikli çizgi ise birinci derece faz geçiş çizgisini temsil eder. Burada çok sayıda parametre kullanmak yerine hangi parametre veya parametrelerin sabit tutulduğu ve bunların değerleri her bir şekil üzerinde yazılmıştır.

Şekil 3.3, (*D*, *T*) düzleminde oluşturulmuş dinamik faz diyagramlarının göstermektedir. (*D*, *T*) düzleminde üç temel topolojik davranış tespit edildi ki bunlar Şekil 3.3(a)-(c)’de olduğu gibidir. Bu ilginç ve önemli kritik dinamik özellikler şöyledir: (i) H_0 ’ın küçük değerleri için ($H_0 = 0.10$) oluşturulan Şekil 3.3(a)’ya bakılırsa dinamik faz diyagramı *P* (paramanyetik), *NM* (manyetik olmayan) ve *I* (ferrimanyetik) fazlarının yanı sıra *TCP* ve *A* özel kritik noktalarını içerdiği görülür. *P*, *I* ve *NM* fazlar arasındaki sınır çizgileri *T*’nin yüksek değerlerinde ikinci derece faz geçiş çizgileri iken *T*’nin küçük değerlerinde *NM* faz ile *I* faz arasındaki birinci derece faz geçiş çizgisidir. Benzer dinamik faz diyagramlarına karma spin (1/2, 3/2), karma spin (1, 3/2) Ising sistemlerinde de rastlanır [27]. (ii) H_0 ’ın büyük değerleri için ($H_0 = 0.50$) çizdirilen Şekil 3.3(b)’ye dikkat edilirse bu kez faz diyagramı *P*, *NM*, *I*, *P+I* ve *NM+I* fazlarının yanı sıra *TCP*, *B* ve *E* özel kritik noktalarını ihtiva ettiği görülür. *P*, *I* fazları arasındaki; *NM*, *P* arasındaki ve *NM+I*, *P+I* hibrit fazları arasındaki sınır çizgisi ikinci dereceden faz geçiş çizgisi iken *NM+I*, *I* fazları; *NM*, *NM+I* fazları ve *P*, *NM+I* fazları arasındaki sınır çizgisi birinci dereceden faz geçiş çizgisidir. Yine benzer davranışlara karma spin (1, 3/2) Ising sistemlerinde rastlanırken bu tezde yani YİY metodu ile hesaplamalarda daha zengin dinamik faz davranışları elde edilmiştir. (iii) H_0 ’ın çok daha büyük

değerleri için ($H_0 = 2.00$) elde edilen Şekil 3.3(c)'ye dikkat edilirse bu kez faz diyagramında P , I , $P+I$ fazları ve dinamik TCP özel noktası yer alır. P fazı ve I fazı arasındaki sınır çizgisi ikinci dereceden faz geçiş çizgisi iken $I+P$ ve I arasındaki sınır çizgisi, birinci dereceden faz geçiş çizgisidir. Yine benzer dinamik davranışlara başka karma-spin Ising sistemlerinde de rastlanır.



Şekil 3-3 Sistemin dinamik faz diyagramlarının (D , T) düzleminde görünümü. Düz (kırmızı) ve kesikli çizgiler (mavi) sırasıyla ikinci ve birinci dereceden faz geçiş sıcaklıklarını gösterir. Yine sırayla $T_{ÜKN}$, A , B , E ve Z dinamik üçlü kritik, çoklu kritik, çift kritik son nokta ve kritik son nokta ve sıfır sıcaklık kritik nokta gibi özel kritik noktaları temsil eder. (a) $J_2 = 5.0$, $J_3 = 1.1$, $H_0 = 0.10$; (b) $J_2 = 1.0$, $J_3 = 3.0$, $H_0 = 0.50$; (c) $J_2 = 1.0$, $J_3 = 3.0$, $H_0 = 2.0$.

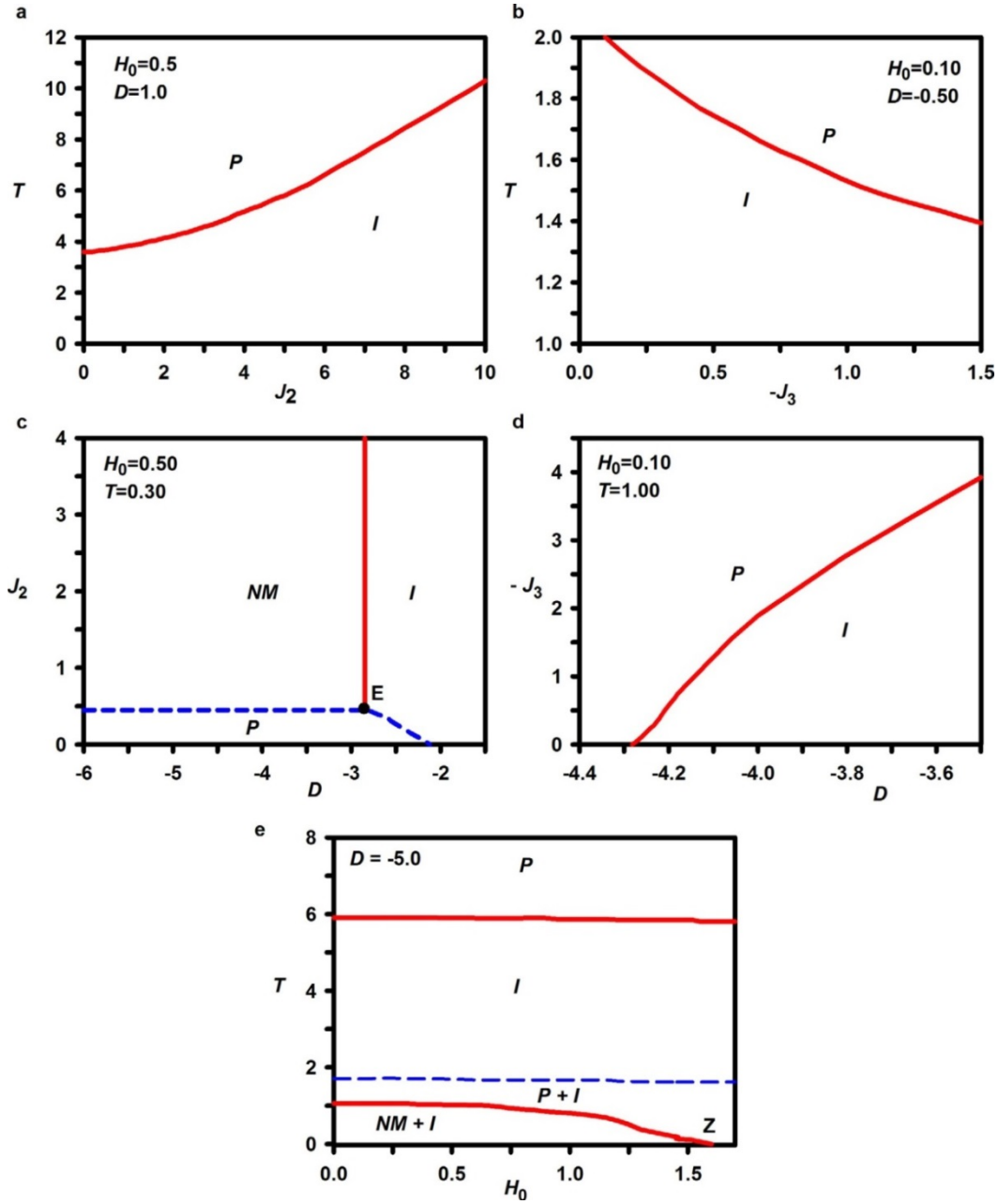
Şekil 3.4 (a)-(e), bazı ilginç dinamik faz diyagramlarını sırayla (J_2, T) , $(-J_3, T)$, (D, J_2) , (D, J_3) ve (H_0, T) düzlemlerinde göstermektedir. Şekil 3.4 (a)'da sadece P ve I fazları yer almakta ve bunları ayıran dinamik faz geçiş çizgisinin ikinci dereceden faz geçiş çizgisi oluşu görülmektedir. Şekil 3.4 (b) ise Şekil 3.4 (a)'ya şeklen benzer ancak artan T 'ye karşılık J_3 'ün azaldığı görülmektedir.

Şekil 3.4 (c) diyagramı P , NM , I temel fazları ve E özel kritik noktasını içerir. NM ve I arasındaki dinamik çizgi, ikinci dereceden faz geçiş çizgisi iken NM , I ve P , I fazları arasındaki ise birinci dereceden faz geçiş çizgisidir. Şekil 3.4 (d), (a) ve (b)'deki gibi sadece P ve I fazlarını ve bunları ayıran ikinci dereceden faz geçiş çizgisi ihtiva eder. Son olarak Şekil 3.4 (e), (H_0, T) düzleminde verilen dinamik faz diyagramı P , I , $P+I$ ve $NM+I$ fazlarının mevcudiyetini gösterir ki P , I ve $NM+I$, $P+I$ fazları arasındaki dinamik çizgi ikinci dereceden; $P+I$, I fazları arasındaki ise birinci dereceden faz geçiş çizgisidir. Ayrıca, z sıfır-sıcaklık kritik noktası içerir.

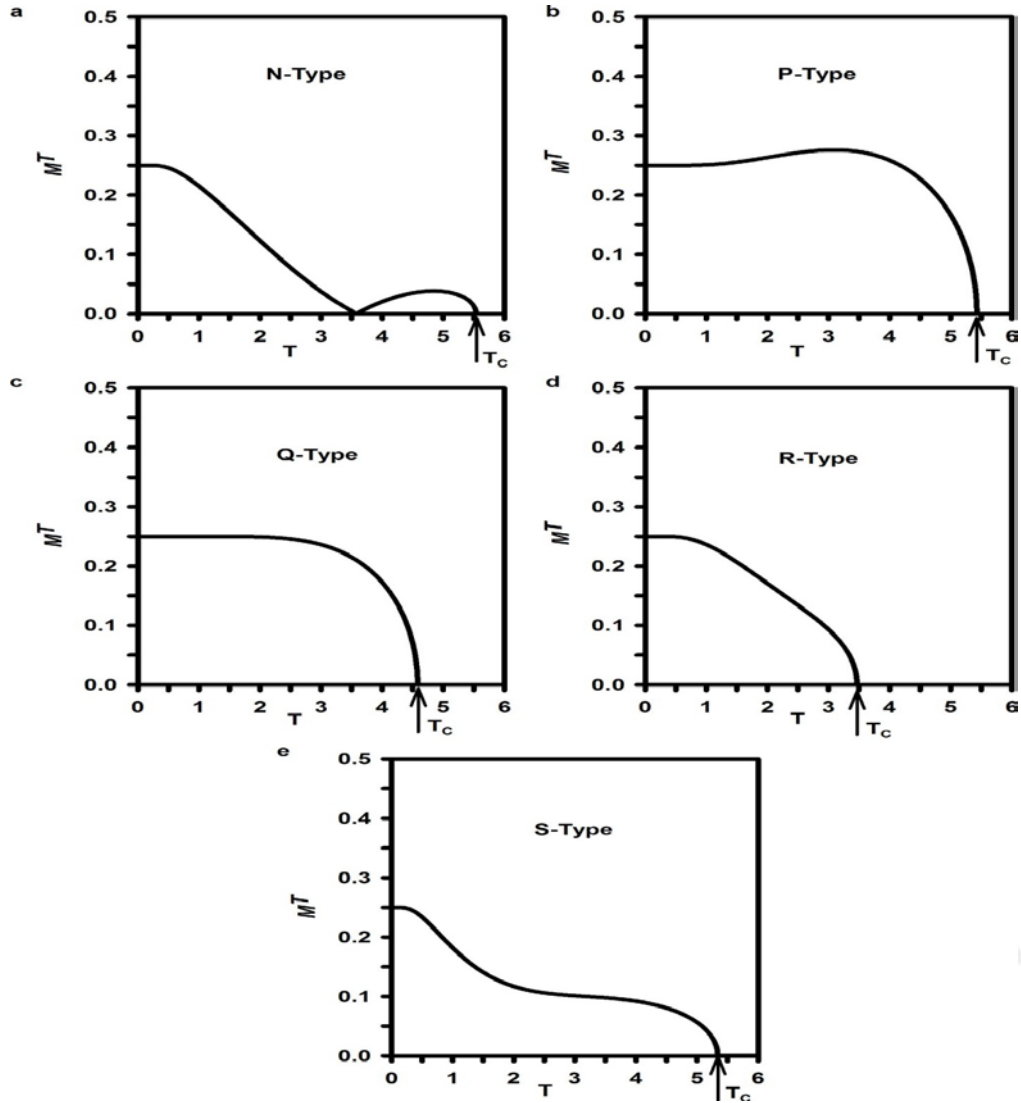
3.3. Telafi Sıcaklık Davranışlar

Bu kesimde, dinamik telafi davranışları ve T_{TSN} dinamik telafi sıcaklıkları incelenmiştir. T_{TSN} sıcaklığında, M^A ve M^B mıknatıslanmaları birbirini telafi eder ve kritik sıcaklığın altında $M^T = (M^A + M^B)/2$ toplam mıknatıslanma sonlanır. T_{TSN} 'nin mevcudiyetinin önemi büyüktür zira bu sıcaklıkta, toplam mıknatıslanmanın işaretini değiştirmek için sadece küçük bir sürücü kuvvet gereklidir.

Şekil 3.5 (a)-(e), bazı sistem parametreleri için sistemin dinamik telafi sıcaklık davranışlarını, yani M^T toplam mıknatıslanmanın sıcaklığa göre davranışını gösterir. Dikkat edilirse sistemin sırayla, N-, P- Q-, R- ve S-tipi zengin telafi davranışı sergilediği görülürken yaygın rastlanılan L-, M- ve W-tipi telafi davranışına görülmemiştir.



Şekil 3-4 Şekil 3 – 3 ile aynıdır. Ancak (a) (J_2, T) düzleminde $J_3 = 0.5$, $H_0 = 0.50$ ve $D = 1.0$ için; (b) (J_3, T) düzleminde $J_2 = 1.0$, $H_0 = 0.10$ ve $D = -0.50$ için; (c) (D, J_2) düzleminde $J_3 = 0.5$, $H_0 = 0.50$ ve $T = 0.30$ için; (d) $(D, -J_3)$ düzleminde $J_2 = 0.9$, $H_0 = 0.10$ ve $T = 1.0$ için; (e) (H_0, T) düzleminde $J_2 = 1.0$ için, $J_3 = 3.0$ ve $D = -5.0$ dır.



Şekil 3-5 Sistemin N-, P-, Q-, R- ve S- tipi dinamik telafı davranışları. (a) $J_2 = 5.0$, $J_3 = 0.9$, $H_0 = 2.0$ ve $D = -2.0$; (b) $J_2 = 2.0$, $H_0 = 2.0$ ve $D = -3.0$; (d) $J_2 = 2.0$, $J_3 = 1.5$, $H_0 = 2.0$ ve $D = -3.5$; (e) $J_2 = 5.0$, $J_3 = 0.9$, $H_0 = 2.0$ ve $D = -5.0$ dir.

4. BÖLÜM

SONUÇ ve TARTIŞMA

4.1. Sonuç ve Tartışma

Moleküller-temelli manyetik malzemeler, ileri teknolojik uygulama potansiyellerine sahip malzemeler olduğundan, hem deneysel hem de teorik çalışmaların ve aynı zamanda akademik araştırmaların yapıldığı en yoğun çalışma konularından birisidir. Teorik olarak bu malzemeler, genel olarak, karma-spin sistemleri ile incelenmektedir. Çünkü karma-spin sistemleri, karma olmayan spinlere göre daha az öteleme simetrisine sahip olmalarından dolayı, saf spin sistemlerine göre çok daha zengin kritik olayların gözlenmesine imkân vermektedir. Bu çalışmada, Moleküller-temelli manyetik malzemeler için en uygun ve en fazla kullanılan prototip karma-spin sistemleri ise karma-spin $(1/2, 1)$, $(1/2, 3/2)$ ve $(2, 5/2)$ Ising sistemleridir. Bir yüksek lisans tezi olarak bu çalışmada, karma-spin $(1/2, 1)$ Ising sistemi kullanılmıştır. Bu sistemle, moleküler-temelli manyetik malzemelerin dinamik manyetik özellikleri dinamik manyetik özellikleri YİY ile incelenmiştir. Zira, YİY'in, Glauber-tipi stokastik dinamik temelli ortalama-alan teorisi (dinamik ortalama alan teorisi (DOAT) diye de adlandırılır) Glauber-tipi stokastik dinamik temelli etkin-alan teorisi (dinamik etkin-alan teorisi (DEAT) diye de adlandırılır) ve dinamik Monte Carlo (DMC) yöntemlerine göre şu şekilde avantajları vardır: (i) YİY, iki veya daha fazla oran sabiti içerir ki bu deneysel çalışmalarda soğutma hızlarına karşılık gelir. Öte yandan DOAT, DEAT ve DMC ise tek oran sabiti içerirler. (ii) Basit Hamiltoniyenli sistemler için bile düzen parametreleri çiftlenimli (coupling) hale gelmektedir. (iii) Dinamik denklemlerin elde edilmesi, DOAT ve DEAT yöntemlerine göre daha kolaydır. Diğer taraftan, YİY'in

DEAT ve DMC yöntemlerine göre bir dezavantajı, spin dalgalanmalarının hesaplamalara katılmamasıdır.

Moleküler temelli manyetik malzemelerin dinamik manyetik özellikleri, zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında bir altıgen kristal örgüde karma-spin (1/2, 1) Ising ferrimanyetik sistemine YİY'i uygulayarak inceledik. Önce, YİY kullanarak sistemin düzen parametreleri için dinamik denklemleri elde edildi ve bunlar Adams-Moulton kestirme ve düzeltme yöntemi ve Romberg integrasyon yöntemleri kullanılarak nümerik olarak çözüldü. İlk etapta, A ve B alt örgüleri için ortalama alt örgü dinamik mıknatıslanmalarının ($m^A(\xi)$ ve $m^B(\xi)$) zamana bağlı davranışları incelenmiştir. Daha sonra M^A ve M^B dinamik manyetizasyonlarının sıcaklığa göre davranışlarını muhtelif sistem parametreleri için elde ettik ki buradan dinamik faz geçiş sıcaklıklarını ve bunların karakterini (birinci dereceden veya ikinci dereceden) tespit ettik. Bu sıcaklık değerleri kullanılarak sistemin dinamik faz diyagramlarını farklı düzlemlerde elde ettik. Son olarak, sistemin telafi sıcaklık davranışları hesaplandı ve hangi tip davranışlar sergiledikleri tespit edildi.

Moleküler temelli manyetik malzemeler için elde etmiş olduğumuz dinamik faz diyagramlarına bakıldığında, yukarıda bahsettiğimiz diğer metodlarla elde edilenlere göre daha zengin dinamik faz davranışı sergiledikleri görülür. Ayrıca, yine zengin dinamik telafi davranış tipleri tespit edilmiştir. Bunların sebebi, bu kısmın giriş kısmında bahsettiğimiz YİY metodunu kullanmanın avantajlarıdır.

Bu tezde edilen sonuçlardan üretilen bir makale, Physica A 583 (2021) 126270 dergisinde yayınlanmıştır.

KAYNAKLAR

- [1] Coronado, E., Sapina, F., Drillon, M., de Jongh, L.J. 1990. 1D antiferromagnetism in spin-alternating bimetallic chains, **J. Appl. Phys.** **67**, 6001-6002.
- [2] van Koningsbruggen, P.J., Kahn, O., Keitaro, K., Pei, Y., Renard, J.P., Drillon, M., Legoll, P. 1990. Magnetism of A-copper(II) bimetallic chain compounds (A = iron, cobalt, nickel): one- and three-dimensional behaviors, **Inorg. Chem.**, **29**, 3321-3325.
- [3] Hagiwara, M., Minami, K., Narumi, Y., Tatani, K., Kindo, K. 1998. Magnetic Properties of a Quantum Ferrimagnet: $\text{NiCu(pba)}(\text{D}_2\text{O})_3 \cdot 2\text{D}_2\text{O}$, **J. Phys. Soc. Jpn.** **67**, 209.
- [4] Ohba, M., Usuki, N., Fukita, N., Okawa, H. 1998. Structure and Magnetic Properties of One dimensional $\text{PPh}_4[\text{Ni}(\text{pn})_2][\text{M}(\text{CN})_6] \cdot \text{H}_2\text{O}$ (M = Fe, Cr, Co) Bimetallic Assemblies, **Inorg. Chem.** **37**, 3349-3354.
- [5] Yan, B., Wang, H.D., Chen, Z.D. 2001. Novel one-dimensional cyano-bridged chain complexes $[\text{Ln}(\text{bet})_2(\text{H}_2\text{O})_3\text{Fe}(\text{CN})_6]_n$ (Ln = Nd, Pr, Sm, Gd; bet = betaine): synthesis, crystal structure and magnetochemistry, **Polyhedron**, **20**, 591-597.
- [6] Toma, L. M., Toma, M., Toma, L.D., Delgado, F.S, Ruiz-Perez C., Sletten J., Cano, J., Clemente-Juan M., Lloret, F., Julve, M., 2006. Trans-dicyanobis(acetylacetonato) ruthenate(III) as a precursor to build novel cyanide-bridged RuIII-MII bimetallic compounds [M = Co and Ni], **Coord. Chem. Rev.** **250**, 2176-2193.
- [7] Buendia, G. M., Machado, E. 1998. Kinetics of a mixed ferrimagnetic system, **Phys. Rev. E** **58**, 1260-1265
- [8] Keskin, M., Canko, O., Temizer, Ü. 2005. Dynamic phase transition in the kinetic spin-1 Blume-Capel model under a time-dependent oscillating external field, **Phys. Rev. E** **72**, 036125.

- [9] Keskin, M. Deviren, B., Canko, O. 2009. Dynamic compensation temperature in the mixed spin-1/2 and spin-3/2 Ising model in an oscillating field on alternate layers of hexagonal lattice. **IEEE TRANSACTIONS ON MAGNETICS** **45**, 2640-2643.
- [10] Godoy, M., Figueiredo, W. 2000. Mixed-spin Ising model with one- and two-spin competing dynamics, **Phys. Rev. E** **61**, 218-222.
- [11] Godoy, M., Figueiredo, W. 2002. Critical behavior of the mixed-spin Ising model with two-spin competing dynamics, **Phys. Rev. E** **65**, 026111.
- [12] Ekiz, C., Keskin, M. 2003. Magnetic properties of the mixed spin-1/2 and spin-1 Ising ferromagnetic system, **Physica A** **317**, 517-534.
- [13] Kikuchi, R. 1966. The path probability method, **Suppl. Prog. Theor. Phys.** **35**, 1-64.
- [14] Keskin, M., Ertaş, M. 2010. Mixed spin Ising model in an oscillating magnetic field and compensation temperature, **J. Stat. Phys.** **139**, 333-344.
- [15] Vatansever, E., Polat, H. 2014. Non-equilibrium Dynamics of a ferrimagnetic core-shell nanocubic particle, **Physica A** **394**, 82-89.
- [16] Vatansever, E., Akinci, U., Polat, H. 2015. Non-equilibrium phase transition properties of disordered binary ferromagnetic alloy, **J. Magn. Magn. Mater.** **389**, 40-47.
- [17] Ertaş, M., Keskin, M. 2015. Dynamic phase diagrams of a ferrimagnetic mixed spin-(1/2,1) Ising system within the path probability method, **Physica A** **437**, 430-436.
- [18] Keskin M., Canko, O., Polat, Y. 2008. Dynamic phase transitions in the kinetic mixed spin-1/2 and spin-1 Ising ferrimagnetic system under a time-dependent magnetic field, **J. Korean Phys. Soc.** **53**, 497-504.
- [19] Ertaş, M., Keskin, M. 2015. Dynamic phase transition properties for the mixed spin- (1/2,1) Ising model in an oscillating magnetic field, **Physica B** **470-471**, 76-81.
- [20] Batı, M. Ertaş, M. 2017. Effect of the Hamiltonian parameters on the hysteresis properties of the kinetic mixed spin (1/2, 1) Ising ferrimagnetic model on a hexagonal lattice, **Physica B** **513**, 40-47.

- [21] Vatansever, E., 2018. Monte Carlo simulation of dynamic phase transition properties of core-shell magnetic nanoparticles with similar volumes, **Turk J. Phys.** **42**, 210-222.
- [22] Karaköse, E. İbrahim, A .M. Keskin, M. 2018. The Morphological Properties and Microhardness of As-Cast and Melt-Spun Al–5Zn–2.5Mg Alloy, **Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials** **28**, 2645–2652.
- [23] Wada, K, Kaburagi, M. Uchida, T. C. and Kikuchi, R., 1988. Reformulation of the Path Probability Method and Its Application to Crystal Growth Models, **J. Stat. Phys.** **53**, 1081-1101.
- [24] Moran-Lopez, J.L. and J.M. Sanchez, J. M.,1995. Proceedings of the international Workshop on Theory and Applications of The Cluster Variation and Path Probability Methods, **held June 19-23, in San Juan Teotihacan, Mexico.**
- [25] Wang, C. C. and Akbar, S. A., J., 1994. Determination of atomistic parameters and transport properties combining theory and experiments of demixing in (Co,Mg)O, **J. Phys. D Appl. Phys.** **28**, 120-128.
- [26] Ince O., Gençaslan M. and Keskin M., 2021. Magnetic features and compensation behaviors of a mixed spin (1/2, 1) Ising ferrimagnetic system on a hexagonal lattice, **Physica A** **583**, 126270.
- [27] X. Shi, Y. Qi, 2015. Existence of a dynamic compensation temperature of the mixed spin-1 and spin-3/2 Ising model within the effective-field theory, **Physica A** **430**, 93.
- [28] Keskin M., Ertaş M., Canko O., 2009. Dynamic phase transitions and dynamic phase diagrams in the kinetic mixed spin-1 and spin-2 Ising system in an oscillating magnetic field, **J.Magn. Magn. Mater.** **321**, 458.
- [29] Ertaş M., Keskin M., 2012. Dynamic magnetic behavior of the mixed-spin bilayer system in an oscillating field within the mean-field theory, **Physica A** **391**, 1038.
- [30] Deviren B., Keskin M., 2010. Dynamic Phase Transitions and Compensation Temperatures in a Mixed Spin-3/2 and Spin-5/2 Ising System, **J. Stat. Phys.** **140**, 934.

[31] X. Shi, Y. Qi. 2016. Ferrimagnetic ordering behaviors and compensation temperatures in the FeIIFeIII bimetallic oxalates: Effective-field theory, **Physica B** 495, 117.



ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı: OKTAY İNCE

EĞİTİM

Derece	Kurum	Mezuniyet Tarihi
Lisans	Erciyes Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik	2019

İŞ DENEYİMİ

Yıl	Kurum	Görev
2014-2017	Uluslar Arası Ulusoy Yazılım Şirketi	Senyör Yazılımcı
2017-2022	Turkuaz İsem Akademi	Fizik Öğretmeni
2019-2021	Erciyes Üniversitesi TÜBİTAK 1001 Projesi Araştırmacısı	Araştırmacı Öğrenci