



T.C.

HİTİT ÜNİVERSİTESİ

LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ

İLERİ MALZEMELER VE NANOTEKNOLOJİ ANABİLİM DALI

**İKİ-BOYUTLU VE KARE ÖRGÜLÜ SPİN-1 İSİNG
NANOPARÇACIĞININ DİPOL-KUADRUPOL ETKİLEŞMESİ
ALTINDA MANYETİK VE KUADRUPOL ÖZELLİKLERİNİN
İNCELENMESİ**

Yüksek Lisans Tezi

Ramazan KAVLAK

Çorum - 2021

**İKİ-BOYUTLU VE KARE ÖRGÜLÜ SPİN-1 İSİNG NANOPARÇACIĞININ
DİPOL-KUADRUPOL ETKİLEŞMESİ ALTINDA MANYETİK VE
KUADRUPOL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ**

Ramazan KAVLAK

Lisansüstü Eğitim Enstitüsü

İleri Malzemeler ve Nanoteknoloji Anabilim Dalı

Yüksek Lisans Tezi

TEZ DANIŞMANI

Dr. Öğr. Üyesi Songül ÖZÜM

Çorum 2021

Ramazan KAVLAK tarafından hazırlanan “İki-Boyutlu ve Kare Örgülü Spin-1 Ising Nanoparçacığının Dipol-Kuadrupol Etkileşmesi Altında Manyetik ve Kuadrupol Özelliklerinin İncelenmesi” adlı tez çalışması .../.../..... tarihinde aşağıdaki jüri üyeleri tarafından oy birliği/oy çokluğu ile Hitit Üniversitesi Lisansüstü Eğitim Enstitüsü İleri Malzemeler ve Nanoteknoloji Anabilim Dalında Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

(Unvanı, Adı SOYADI)*

.....

(Unvanı, Adı SOYADI)**

.....

(Unvanı, Adı SOYADI)

.....

(Unvanı, Adı SOYADI)

.....

(Unvanı, Adı SOYADI)

.....

Hitit Üniversitesi Lisansüstü Eğitim Enstitüsü Yönetim Kurulunun .../.../..... tarih ve sayılı kararı ile’ın Anabilim Dalında Yüksek Lisans/Doktora derecesi alması onanmıştır.

(İmza)

Prof. Dr. Muhammed Asif Yoldaş

Lisansüstü Eğitim Enstitüsü Müdürü

* Jüri Başkanının adı yazılmalıdır.

** Tez danışmanının adı yazılmalıdır.

TEZ BİLDİRİMİ

Tez içindeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu, ayrıca tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada bana ait olmayan her türlü ifade ve bilginin kaynağına eksiksiz atıf yapıldığını beyan ederim.

Ramazan KAVLAK



İKİ-BOYUTLU VE KARE ÖRGÜLÜ SPİN-1 İSİNG NANOPARÇACIĞININ DİPOL-KUADRUPOL ETKİLEŞMESİ ALTINDA MANYETİK VE KUADRUPOL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

Ramazan KAVLAK

ORCID: 0000-0003-3946-3208

HİTİT ÜNİVERSİTESİ

LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ

Yüksek Lisans Tezi

Eylül 2021

ÖZET

Bu tez çalışmasında, bilineer (dipol-dipol/ J), bikuadratik (kuadrupol-kuadrupol / K), dipol-kuadrupol (ya da tek / L) ve kristal alan (tek-iyon anizotropisi / D) etkileşmeli iki-boyutlu ve kare örgülü spin-1 Ising homojen ve kompozit nanoparçacığının (NP) mıknatıslanma (M) ve kuadrupol (Q) özellikleri çift (bağ) yaklaşım yöntemi kullanılarak incelendi. Spin-1 Ising modeli yardımı ile kare örgü üzerindeki çekirdek (C), çekirdek-yüzey (CS) ve yüzey (S) bölgeleri için bağ enerji parametreleri (ε_{ij}) elde edildi. Bağ enerjileri kullanılarak öz uyumlu bağ değişken (P_{ij}) denklem sistemi çözülerek mıknatıslanma (M) ve kuadrupol (Q) düzen parametreleri hesaplandı. Bu çalışmada ilk olarak iki-boyutlu ve kare örgülü spin-1 Ising homojen ve kompozit nanoparçacık için mıknatıslanmanın ve kuadrupol düzen parametresinin sıcaklığa bağlılığı sonuçları verildi. Farklı, dipol-kuadrupol etkileşme, yarıçap ve manyetik alan değerleri için mıknatıslanma ve kuadrupol düzen eğrileri detaylıca incelendi. Daha sonra, homojen ve kompozit nanoparçacık için manyetik ve kuadrupol histerezis eğrileri farklı dipol-kuadrupol etkileşme, sıcaklık ve yarıçap değerleri için elde edildi. Özellikle histerezis eğrileri üzerinde L parametresinin etkisi ayrıca incelendi. Bu sonuçlara ilave olarak, farklı manyetik alan ve sıcaklık değerleri kullanılarak homojen ve kompozit nanoparçacık için mıknatıslanmanın kristal alana göre değişimi bulundu. Farklı sıcaklık, dipol-kuadrupol etkileşme ve kristal alan parametreleri kullanılarak homojen ve kompozit nanoparçacık için kuadrupol değerinin manyetik alana göre değişimi hesaplandı. Tez çalışmasından elde edilen sonuçları özetleyecek olursak; iki-boyutlu ve kare örgülü homojen ve kompozit nanoparçacıkların manyetik ve kuadrupol özelliklerin araştırılmasında elde edilen yeni özelliklerin bilineer, bikuadratik, kristal alan etkileşmelerine ilave olarak dipol-kuadrupol

etkileşme değerin de etkili olduđu bulunmuştur. Sonuçlar, yapılan diğr teorik çalışmalar ile karşılaştırıldı ve literatür ile uyumlu olduđu gözlemlendi.

Anahtar Kavramlar: İki-boyutlu kare örgülü nanoparçacık, spin-1 Ising modeli, dipol-kuadrupol etkileşmesi, çift yaklaşım, kuadrupol özellik

Bilim Kodu: 20208, 20215, 20227



INVESTIGATIONS OF MAGNETIC AND QUADRUPOLE PROPERTIES OF TWO-DIMENSIONAL AND SQUARE LATTICE SPIN-1 ISING NANOPARTICLE WITH DIPOLE-QUADRUPOLE INTERACTIONS

Ramazan KAVLAK

ORCID: 0000-0003-3946-3208

HITIT UNIVERSITY

GRADUATE SCHOOL

Master of Science Thesis

September 2021

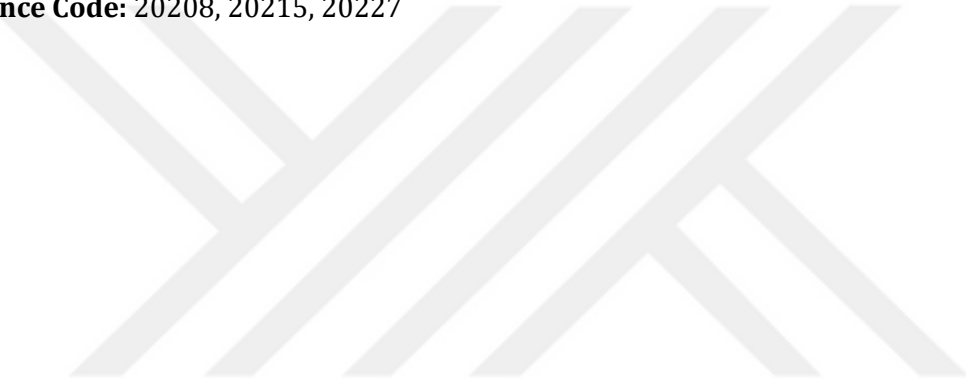
ABSTRACT

In this thesis, the magnetic (M) and quadrupole (Q) properties of two-dimensional and square lattice spin-1 Ising homogeneous and composite nanoparticle (NP) with bilinear (dipole-dipole / J), biquadratic (quadrupole-quadrupole / K), dipole-quadrupole (or odd / L) and crystal field (single-ion anisotropy / D) interactions have been investigated using the pair (bond) approximation. The bond energy parameters (ε_{ij}) for core (C), core-surface (CS) and surface (S) parts on square lattices were defined with the spin-1 Ising model. Using the bond energy, the self-consistent equations (P_{ij}) were solved to calculate the magnetization (M) and quadrupole (Q) order parameters. In this study, firstly, the results of the temperature dependence of magnetization and quadrupole order parameter for two-dimensional and square lattice spin-1 Ising homogeneous and composite nanoparticle are given. Magnetization and quadrupole order curves were examined in detail for different dipole-quadrupole interactions, radius and magnetic field values. Then, magnetic and quadrupole hysteresis curves for homogeneous and composite nanoparticles were obtained for different dipole-quadrupole interaction, temperature, and radius values. In particular, the effect of the L parameter on the hysteresis curves was also examined. In addition to these results, the variation of magnetization according to the crystal field was found for homogeneous and composite nanoparticles using different magnetic field and temperature values. By using different temperature, dipole-quadrupole interaction and crystal field parameters, the variation of the quadrupole value according to the magnetic field was calculated for

homogeneous and composite nanoparticles. If we summarize the results obtained from the thesis study; It has been found that the dipole-quadrupole interaction value is also effective in addition to the bilinear, biquadratic, crystal field interactions of the new properties obtained in the investigation of the magnetic and quadrupole properties of two-dimensional and square lattice homogeneous and composite nanoparticles. The results were compared with other theoretical studies, and it was observed that they were compatible with the literature.

Key Terms: two-dimensional and square lattice nanoparticle, spin-1 Ising model, dipole-quadrupole interaction, pair approximation, quadrupole properties

Science Code: 20208, 20215, 20227



TEŞEKKÜR

Tez çalışmam boyunca bilgi ve yardımlarını esirgemeyen, bana her türlü desteği sağlayan tez danışmanım Sayın Dr. Öğr. Üyesi Songül ÖZÜM'e en içten teşekkürlerimi sunarım.

Akdeniz Üniversitesi, Fen Fakültesi Fizik Bölümü Öğretim Üyesi Sayın Prof. Dr. Rıza ERDEM ve Niğde Ömer Halisdemir Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü Öğretim Üyesi Sayın Prof. Dr. Orhan YALÇIN hocalarıma tez çalışmama verdikleri destek için teşekkür ederim.

Manevi ve maddi destekleriyle beni yalnız bırakmayan aileme, eşime, çalışmalarımda yardımlarını esirgemeyen arkadaşlarım Doğan KAFKAS, Halit MÜFTÜOĞLU ve Kaan ÖZSOY'a teşekkürü bir borç bilirim.

Ramazan KAVLAK



İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	iv
ABSTRACT	vi
TEŞEKKÜR.....	viii
İÇİNDEKİLER	ix
TABLolar DİZİNİ.....	xi
ŞEKİLLER DİZİNİ	xii
SİMGELER VE KISALTMALAR	xv
GİRİŞ.....	1

1. BÖLÜM TEORİK BİLGİ

1.1. Manyetizma	4
1.2. Manyetik Malzemelerin Sınıflandırılması	4
1.2.1. Diyamanyetik malzemeler	4
1.2.2. Paramanyetik malzemeler	6
1.2.3. Ferromanyetik malzemeler	7
1.2.4. Antiferromanyetik malzemeler	8
1.2.5. Ferrimanyetik malzemeler	9
1.3. Manyetik Histerezis.....	12
1.4. Nanoteknoloji ve Kullanım Alanları	14
1.5. Nanoparçacıklar.....	15
1.5.1. Manyetik nanoparçacıklar	15
1.6. Manyetik Nanoparçacığın Mıknatıslanması	16

2. BÖLÜM**MATERYAL VE YÖNTEM**

2.1. Ising Modeli	17
2.2. Çift Yaklaşım Yöntemi	17
2.3. Dipol Dipol Etkileşmeli İki-Boyutlu Kare Örgülü Nanoparçacığın Spin-1 Modelinin İncelenmesi	18

3. BÖLÜM**ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA**

3.1. Homojen ve Kompozit Nanoparçacığın Manyetik Özellikleri	23
3.1.1. Homojen ve kompozit nanoparçacığın mıknatıslanma eğrileri	23
3.1.2. Homojen ve kompozit nanoparçacığın kuadrupol düzen eğrileri	28
3.1.3. Homojen ve kompozit nanoparçacığın manyetik histerezis eğrileri	33
3.1.4. Homojen ve kompozit nanoparçacığın kuadrupol histerezis eğrileri	40
SONUÇ	49
KAYNAKÇA	52
ÖZGEÇMİŞ	59

TABLolar DİZİNİ

Tablo	Sayfa
Tablo 2.1. İki-boyutlu ve kare örgü spin-1 Ising nanoparçacığının yarıçapına göre çekirdek, çekirdek-yüzey ve yüzeydeki toplam spin sayıları ve spin çifti sayıları (Yalçın ve ark., 2012).....	21
Tablo 2.2. Çekirdek-yüzey tipi kare örgülü nanoparçacığın spin-1 Ising modeli için bağ enerjileri	22



ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil	Sayfa
Şekil 1.1. Diyamanyetik bir malzemede manyetik momentlerin temsili dizilimleri	5
Şekil 1.2. Diyamanyetik bir malzemenin $M-H$ grafiği	5
Şekil 1.3. Paramanyetik bir malzemede manyetik momentlerin temsili dizilimleri	6
Şekil 1.4. Paramanyetik bir malzemenin $M-H$ grafiği	6
Şekil 1.5. Ferromanyetik bir malzemede manyetik momentlerin temsili dizilimleri	7
Şekil 1.6. Ferromanyetik bir malzemenin $M-H$ grafiği	7
Şekil 1.7. Antiferromanyetik bir malzemede manyetik momentlerin temsili dizilimleri	8
Şekil 1.8. Antiferromanyetik bir malzemenin $M-H$ grafiği	9
Şekil 1.9. Ferrimanyetik bir malzemede manyetik momentlerin temsili dizilimleri	9
Şekil 1.10. Ferrimanyetik bir malzemenin $M-H$ grafiği	10
Şekil 1.11. (a) Birinci derece faz grafiği, (b) İkinci derece faz grafiği	11
Şekil 1.12. Manyetik duygunluk-Sıcaklık grafiği	11
Şekil 1.13. Manyetizasyon (M) – Sıcaklık (T) grafiği	12
Şekil 1.14. Ferromanyetik bir malzemenin histerezis eğrisinin gösterimi	13
Şekil 1.15. Nanoyapılı malzemeler için H_c 'nin parçacık büyüklüğüne bağlı değişimi ve manyetik histerezis eğrisi	16
Şekil 2.1. İki boyutlu kare örgünün şematik gösterimi (Kırmızı içi dolu daireler çekirdek, mavi içi dolu daireler ise yüzey atomlarını gösterir. Kırmızı ve mavi çizgiler çekirdek-yüzey spin çiftleridir)	19
Şekil 3.1. (a) Homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için mıknatıslanmanın indirgenmiş sıcaklığa ($k_B T/J_0$) bağlı değişimi. $J_C = J_{CS} = J = 1, R = 4$ ve $H = 0.0$	24
Şekil 3.2. Farklı H değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için mıknatıslanmanın indirgenmiş sıcaklığa ($k_B T/J_0$) bağlı değişimi. $R = 4, J = 1.0, K = J = L, D = -1.0$	25

Şekil 3.3. Farklı R değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için mıknatıslanmanın indirgenmiş sıcaklığı ($k_B T/J_0$) bağlı değişimi. $J = 1.0, K = J = L, D = -1.0$	26
Şekil 3.4. Farklı L değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için mıknatıslanmanın indirgenmiş sıcaklığı ($k_B T/J_0$) bağlı değişimi. $J = 1.0, D = 1.0, H = 0.0$	27
Şekil 3.5. (a) Homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için kuadrupol düzen parametresinin indirgenmiş sıcaklığı ($k_B T/J_0$) bağlı değişimi. $R = 4, H = 0.0$	28
Şekil 3.6. Farklı H değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için kuadrupol düzen parametresinin indirgenmiş sıcaklığı ($k_B T/J_0$) bağlı değişimi. $R = 4, J = 1.0, K = J = L, D = -1.0$	29
Şekil 3.7. Farklı R değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için kuadrupol düzen parametresinin indirgenmiş sıcaklığı ($k_B T/J_0$) bağlı değişimi $J = 1.0, K = J = L, D = -1.0, H = 0.1$	31
Şekil 3.8. Farklı L değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için kuadrupol düzen parametresinin indirgenmiş sıcaklığı ($k_B T/J_0$) bağlı değişimi. $J = 1.0, D = 1.0, H = 0.0$	32
Şekil 3.9 Farklı L değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için mıknatıslanmanın manyetik alana göre (H) değişimi. $R = 6, T = 100 J_0/k_B, J = 1.0, D = -1.0$	33
Şekil 3.10. Şekil 3.9 ile aynı fakat $D = 1.0$ için elde edilmiştir	34
Şekil 3.11. Farklı T değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için mıknatıslanmanın manyetik alana göre (H) değişimi. $R = 8, J = 1.0, L = 0.353, D = -1.0$	35
Şekil 3.12. Şekil 3.11 ile aynı fakat $D = 1.0$ için elde edilmiştir	36
Şekil 3.13. Farklı R değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için mıknatıslanmanın manyetik alana göre (H) değişimi. $T = 100 J_0/k_B, J = 1.0, L = 0.353, D = -1.0$	37
Şekil 3.14. Şekil 3.13 ile aynı fakat $D = 1.0$ için elde edilmiştir	38

- Şekil 3.15.** (a) Homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için L etkileşmesinin $M - H$ eğrisi üzerindeki etkisi39
- Şekil 3.16.** Farklı L değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için kuadrupol değerinin (Q) kristal alana (D) göre değişimi. $R = 6, T = 100 J_0/k_B, J = 1.0$ 40
- Şekil 3.17.** Farklı T değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için kuadrupol değerinin (Q) kristal alana (D) göre değişimi. $R = 8, J = 1.0, L = 0.353$ 41
- Şekil 3.18.** Farklı R değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için kuadrupol değerinin (Q) kristal alana (D) göre değişimi. $T = 100 J_0/k_B, J = 1.0, L = 0.353$ 42
- Şekil 3.19.** Farklı H değerlerinde homojen nanoparçacık için mıknatıslanmanın kristal alana (D) göre değişimi. $R = 6, T = 100 J_0/k_B, J = 1.0, L = 0.1$ 43
- Şekil 3.20.** Farklı H değerlerinde kompozit nanoparçacık için mıknatıslanmanın kristal alana (D) göre değişimi. $R = 6, T = 100 J_0/k_B, J = 1.0, L = 0.1$ 44
- Şekil 3.21.** Farklı T değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için mıknatıslanmanın kristal alana (D) göre değişimi. $R = 6, H = 0.1, J = 1.0, L = 0.1$ 45
- Şekil 3.22.** Farklı T değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için kuadrupol değerinin manyetik alana (H) göre değişimi. $R = 6, J = 1.0, L = 0.1, D = -1.0$ 46
- Şekil 3.23.** Farklı L değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için kuadrupol değerinin manyetik alana (H) göre değişimi. $R = 6, T = 100 J_0/k_B, J = 1.0, D = -1.0$ 47
- Şekil 3.24.** Farklı D değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için kuadrupol değerinin manyetik alana (H) göre değişimi. $R = 6, T = 100 J_0/k_B, J = 1.0, L = 0.1$ 48

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

D	Tek iyon anizotropisi
E	Etkileşme enerjisi
H	Dış manyetik alan
H_C	Koersif alan
$\hat{H}$	Hamiltoniyen
$\hat{H}_C$	Çekirdek hamiltoniyeni
$\hat{H}_{CS}$	Ara yüzey hamiltoniyeni
$\hat{H}_S$	Yüzey hamiltoniyeni
J	Değiş tokuş etkileşme sabiti
K	Biküadratik etkileşme sabiti
k_B	Boltzmann sabiti
M	Mıknatıslanma değeri
M_S	Doyum mıknatıslanması
M_R	Kalıcı mıknatıslanma
P_i	Spin durumu değişkeni
P_{ij}	Bağ değişkeni
R	Yarıçap
Q	Kuadrupol Moment
S	Spin
S_E	Entropi
S_i	Çekirdek spin değeri
T_C	Kritik sıcaklık
Z	Bölüşüm fonksiyonu
ε_{ij}	Bağ enerjisi

Φ	Serbest enerji
γ	Koordinasyon sayısı
σ_i	Yüzey spin değeri

Kısaltmalar

AFM	Antiferromanyetik
BEG	Blume-Emery-Griffiths
C	Çekirdek
CS	Ara yüzey
C/S	Çekirdek/Yüzey
CM	Kompozit
FM	Ferromanyetik
HM	Homojen
MC	Monte Carlo
NP	Nanoparçacık
PM	Paramanyetik
S	Yüzey
SP	Süperparamanyetik

GİRİŞ

Nano kelimesi, Yunanca “cüce” anlamına gelmektedir. Türkçede ise çok küçük anlamına karşılık gelir ve bir ölçek anlamını teşkil eder. Nanometre ise metrenin milyarda birine denir. Bu ölçekte, fiziksel ve kimyasal özellikleri inceleyen bilim dalı ise nanoteknolojidir. Nano ölçek 1 ile 100 nm aralığını kapsamaktadır (Hayashi ve ark., 1996). Nano malzemeler ise, bu teknolojiye kullanılan malzemelere verilen isimlendirmedir (Guo ve ark., 2014). Bunlar nano parçacıklar, nano kristaller, nano teller, nano tüpler, nano çubuklar ve ince filmlerdir (Lopez ve ark., 2015). Nanoteknolojinin günümüzde birçok kullanım alanları vardır. Bunlardan bazıları; moleküler görüntüleme cihazları (Mirshojaei ve ark., 2016), biyomedikal uygulamalar (Pankhurst ve ark., 2003, Ivanov ve ark., 2016, McNamara, 2017), termomanyetik kayıt cihazları (Ma ve ark., 2018), sensörler (Manikandan ve ark., 2019), kalıcı mıknatıslar (Shen ve ark., 2020), biyoteknoloji (Tartaj ve ark., 2005, Mehta ve ark., 2017), tıbbi uygulamalar (Kita ve ark., 2010, Carrrey ve ark., 2011, Obaidat ve ark., 2015, Faaliyan ve ark., 2019) örnek olarak yazılabilir. Malzemeler nano boyutta incelendiğinde kendine özgü yapısının makro dünyaya göre farklı özelliklere sahip olduğu görülmüştür. Bu nedenle ince film cihazları, spin transistörleri, spin bağımlı tünelleme cihazları ile nanoparçacıklar yakından ilgilidir (Babin ve ark., 2003).

Günümüze kadar nanoparçacıklar ile ilgili çok sayıda teorik çalışmalar yapılmıştır. Bunlardan bazıları; kare örgü üzerinde Monte Carlo (MC) Simülasyonu (Jabar ve ark., 2018), karışık spinli 2D nanoparçacıkların MC araştırması (Mouhib ve ark., 2018), MC simülasyonu ile nanoparçacıkların manyetik özelliklerinin incelenmesi (Zaim ve ark., 2009, Feraoun ve ark., 2019), Ising modelin katmanlı kare kafes üzerindeki etkileri (Godoy ve ark., 2020). Nano sistemlerin faz diyagramları üzerine (Boughazi ve ark., 2014), ara yüzey etkileri üzerine (Laguno ve ark., 2016) de çalışmalar yapılmıştır. Tıbbi cihazlarda kullanılan tek domenli manyetik, süperparamanyetik faz durumları ile ilgili çalışmalar yapılmıştır (Özüm ve ark., 2015). Manyetik nanoparçacıkların çeşitli spin modelleri teorik olarak incelenmiştir. Bu modeller arasında en yaygın ve bilinen model Ising modelidir (Rego ve ark., 2001, Yalçın ve ark., 2008, Kaneyoshi ve ark., 2009, Khater ve ark., 2011). Özellikle manyetik nanoparçacıklar için spin-1 Ising modeli statik ve dinamik yönlerden dolayı histerezis araştırmalarda yeni bir alan açmıştır.

İlk olarak 1920 yılında Ising tarafından ferromanyetizma problemi için $S=1/2$ kendi adını aldığı Ising modeli önerildi. Bu model spin durumlarına ve düzen parametresine göre isim alır (Ising, 1925). 1948 yılında ise Stoner – Wohlfarth tarafından tek domenli nanoparçacıklar için ilk çalışma yapıldı. Günümüze kadar çekirdek-yüzey (C/S) kübik nanoparçacıklar için Ising ve Heisenberg modellerine göre birçok çalışmalar yapılmıştır (Russ ve ark., 2007, Zaim ve ark., 2009, Zaim ve ark., 2010, Weizenmann ve ark., 2010, Jiang ve ark., 2010, Yüksel ve ark., 2011, Vatansever ve ark., 2014). Yapılan araştırmalar sonucu kabuk ve ara yüzey etkileşimlerinin,

manyetik özelliklere karşı etkileri ele alınmıştır. Diğer taraftan, $S = 1$ Ising modeli ($S = 1$ Blume-Emery-Griffiths modeli) ve Kikuchi versiyonundaki çift (bağ) yaklaşım yöntemi kullanılarak, Yalçın ve arkadaşları tarafından altıgen örgü için teorik formülasyon elde edilmiştir (Yalçın ve ark., 2014, Yalçın ve ark., 2015). BEG modeli istatistik mekanikte bilinen önemli bir spin-örgü modeli olup tek iyon anizotropinin dâhil edildiği bilineer (J) ve bikuadratik (K) etkileşmeli bir sistemdir (Berker ve ark., 1976, Hoston ve ark., 1991, Keskin ve ark., 2004, Yalçın ve ark., 2008, Özüm 2010, Demirer 2015). Nanoparçacıklarda çekirdek ve yüzeyden gelen mıknatıslanma katsayısını tam olarak hesaplayabilmek için, çift yaklaşım yöntemindeki bağ değişkeleri ile spin sayısı arasında bir ilişki verilmiştir (Yalçın ve ark., 2014). Altıgen ve kare örgülü nanoparçacıklar için karakteristik özellikleri manyetizasyon döngüsü (histerzis eğrileri), kristal alanın farklı değerleri için elde edilmiştir. Kuadrupol moment için, özellikle bikuadratik etkileşimi ve kristal alan anizotropi farktörlerinin dikkate alındığı bazı yeni ve önemli histerzis davranışları çalışılmıştır (Erdem ve ark., 2021).

Nanoparçacıklar; çekirdek (C), ara yüzey (CS) ve yüzey (S) şeklinde üç bölgeden oluşur. Ferromanyetik ve antiferromanyetik etkileşme ara yüzeyde görülür. Ferromanyetik ve antiferromanyetik etkileşme ise yüzey ve çekirdekte meydana gelir. Kübik yapıdaki yüzey atomları arası etkileşimler ihmal edilebilir. Bu tip nanoparçacıkların elde edilmesi zor olduğundan dolayı manyetik nanoparçacıkların araştırılmasında önemli bir yere sahiptir (Özüm ve ark., 2015, Eker, H. N. 2015, Özüm ve ark., 2021). Yüzey yüzeye tam temas yapan bir kübik nanoparçacık altıgen örgü yerine kare örgü yapısında sıkı bir dizilim gerçekleştirebilir. Kare örgünün yüzeye olan tam teması sayesinde diğer örgülere göre daha avantajlı olmasını sağlar (Yamamuro ve ark., 2006). Bu nedenle katalizlerde seçicilik yönüyle ve tekrardan aktive olabilmesi sayesinde çok büyük bir önem teşkil eder (Ahmadi ve ark., 1996, Bratlie ve ark., 2007, Loghmani ve ark., 2013). Bu özelliklerinden dolayı farklı teknikler kullanılarak nanoparçacıklar sentezlenebilmektedir (Favero ve ark., 2006, Kaur ve ark., 2011, Lee ve ark., 2013, Yung ve ark., 2013, Dian ve ark., 2013, Wang ve ark., 2013, Kao ve ark., 2013, Yalçın ve ark., 2013, Bayrakdar ve ark., 2014, Bayrakdar ve ark., 2021, Yalçın ve ark., 2021). Kübik nanoparçacıklar, malzeme biliminde, sensör teknolojisi gibi alanlarda kullanılabilirler. Kullanılma nedeni ise yüzey etkilerinin hacimsel malzemelerden daha farklı elektronik özellik göstermesidir (Bader, 2006, Nakagawa ve ark., 2007, Zhao ve ark., 2013, Qaeed ve ark., 2013). Kübik nanoparçacıklar manyetik özellikleri sayesinde parçacık oluşturma şekline daha elverişlidirler (Song ve ark., 2004, Skomski ve ark., 2007, Shukla ve ark., 2007, Boubeta ve ark., 2013). Kübik nanoparçacıkların farklı yollarla sentezlenmesi için araştırmalar yapılmıştır (Freire ve ark., 2013, Şimsek ve ark., 2014, Rashin ve ark., 2014, Disch ve ark., 2014, Nikam ve ark., 2014). Ayrıca, teorik olarak Monte-Carlo (MC) tekniği ile tek domenli kübik nanoparçacıklar incelenmiştir (Diaz-Ortiz ve ark., 1997, Woinska ve ark., 2013, Parra ve ark., 2013, Oubouchou ve ark., 2013).

Tek tabakalı nanosistemler (NML) teknolojide yüksek uygulama potansiyeline sahiptirler (Liu ve Xu 1995, Friedrich ve ark., 2000, Zhao ve ark., 2000, Bhure ve ark., 2010, Mukherjee ve ark.,

2015, Ankamwar ve ark., 2016, Lv ve ark., 2019, Rajashekara ve ark., 2020). Ayrıca, altıgen örgü, kare örgü, nano-grafen yapısı gibi farklı tipte örgü yapılarının inşa edildiği birçok teorik çalışmada dikkate alınmıştır. Söz konusu kafesler üzerindeki NML sistemlerinin manyetik ve termal özellikleri, özellikle manyetik histerezis fenomenolojisi, çift yaklaşım (PA) (Rego ve ark., 2001, Yalçın ve ark., 2008, Yalçın ve ark., 2014, Yalçın ve ark., 2015, Özüm ve ark., 2015, Erdem ve ark., 2016, Erdem ve ark., 2021), etkin alan teorisi (EFT) (Kantar ve ark., 2014, Bouhou ve ark., 2017), Monte Carlo simülasyonu (MC) (Albano ve ark., 1989, Ramirez-Pastor ve ark., 1998, Aouini ve ark., 2017, Jabar ve ark., 2019, Fadil ve ark., 2019), yoğunluk foksiyoneli teorisi (DFT) (Wang ve ark., 2016), sonlu küme yaklaşımı (Mouhib ve ark., 2016), anahtarlama işlemlerinin mikromanyetik simülasyonları (Torres ve ark., 2001, Maicas ve ark., 2002) ve Lennard-Jones potansiyeli (Biham ve ark., 1993) gibi çeşitli teknikler kullanılarak çalışılmıştır. Bu çalışmaların çoğunda, Ising model çerçevesi, farklı şekillerle manyetik/histeretik özelliklerin araştırılmasında yeni bir yol açmıştır. Özellikle, spin-1 Ising modeli ve altıgen/kare örgülü NML üzerindeki çalışmalar büyük ilgi gördü (Yalçın ve ark., 2008, Yalçın ve ark., 2014, Kantar ve ark., 2014, Yalçın ve ark., 2015, Özüm ve ark., 2015, Erdem ve ark., 2016, Wang ve ark., 2016, Mouhib ve ark., 2016, Bouhou ve ark., 2017, Aouini ve ark., 2017, Jabar ve ark., 2019, Fadil ve ark., 2019, Erdem ve ark., 2021). Bir nanoparçacığın manyetik özellikleri spin-1 modeli için kuadrupol-kuadrupol (K) ve dipol-kuadrupol (L) üzerine çalışmalar yapıldı (Çiftçi, 2011). L parametresinin Hamiltoniyen ifadesine dahil edilmesiyle, çift yaklaşım (PA) (Kikuchi, 1974) formalizmi, bir kare kafes NML üzerinde yapılan deneylerde gözlemlenen histerezis döngüleri için teorik bir çerçeve sağlayabilir. Çift yaklaşım yöntemi kullanılarak spin-1 Ising altıgen nanoparçacık için histeretik özellikler incelenmiştir (Erdem ve ark., 2016). Bu çalışmadaki manyetik histerezis eğrilerindeki kayma özelliğinin (Exchange-bias) Hamiltoniyen ifadesine dahil edilen L parametresine bağlı olduğu gözlemlendi. Ayrıca, bu çalışmada L parametresinin manyetik histeretik özellik üzerindeki etkisi araştırılırken kuadrupol özellik araştırılmamıştır. Bu tez çalışmanın amacı, kare kafes üzerine dekore edilmiş bir spin-1 Ising NML'nin histeretik ve kuadrupol özellikleri üzerinde L 'nin etkisini araştırmaktır.

Yukarıda vermiş olduğumuz giriş bilgilerinden sonra, ikinci bölümde manyetizma, manyetik malzemelerin sınıflandırılması, manyetik histerezis, nanoteknoloji ve kullanım alanları, nanoparçacıklar ve manyetik nanoparçacığın miknatislanması hakkında kuramsal bilgiler verildi. Üçüncü bölümde, çalışmamızda kullandığımız Ising modeli ile çift yaklaşım yöntemi ile ilgili bilgiler verildi ve bilineer (J), bikuadratik (K), dipol-kuadrupol ve kristal alan (D) etkileşmeli iki boyutlu ve kare örgülü spin-1 Ising homojen ve kompozit nanoparçacığın (NP) miknatislanma (M) ve kuadrupol (Q) özellikleri çift yaklaşım yöntemi kullanılarak incelendi. Dördüncü bölümde ise yapılan araştırmalar sonucunda homojen ve kompozit nanoparçacık için $M - k_B T/J_0$, $Q - k_B T/J_0$, $M - H$, $Q - D$, $M - D$ $Q - H$ elde edilen grafikler sunulmuştur.

1. BÖLÜM

TEORİK BİLGİ

1.1. Manyetizma

Manyetik etkiler hem kütlesi hem de elektrik yükü olan parçacıkların hareketlerinden kaynaklanır. Dönen elektrik yüklü bir parçacık, spin adı verilen manyetik bir dipol oluşturur. Bir enerji seviyesinde bulunan elektronlar yukarı ve aşağı yönlü iki farklı yönelime sahip olabilirler. Mıknatıslanmada, çekirdekten kaynaklanan dipol momenti küçük olacağından dolayı göz ardı edilir. Ortamdaki sıcaklık, atomlar arası etkileşim ve dış manyetik alan atomdaki manyetik dipol momentlerin yönünü etkiler. Manyetik geçirgenlik; manyetik kuvvet çizgisinin içinden geçmesine izin veren malzemenin özelliği olarak isimlendirilir ve χ ile gösterilir. Bir numunenin manyetizasyonu, manyetik geçirgenlik ve dış manyetik alana bağlı olarak $M = \chi H$ ile gösterilir. Manyetik kuvvet çizgisi, malzemenin iletkenliği ile doğru orantılıdır. Bağlı manyetik geçirgenlikler için; ferromanyetik (FM) maddeler 1'den çok büyük olan, paramanyetik (PM), 1'den biraz daha büyük olan, diyamanyetik ise 1'den küçük olan maddelerdir.

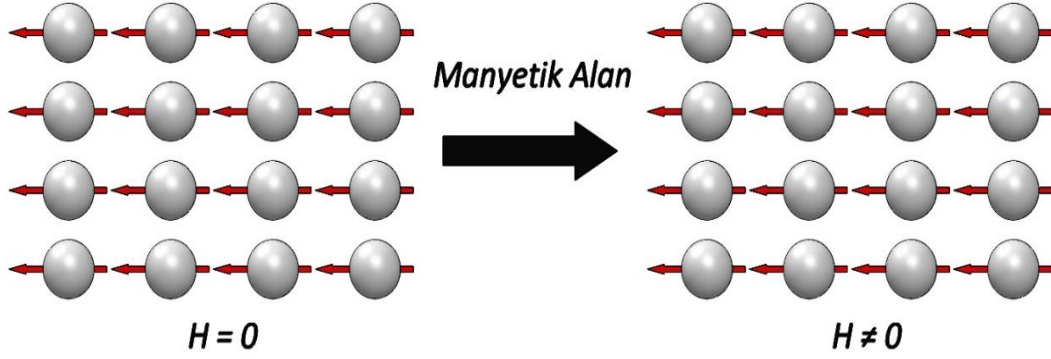
1.2. Manyetik Malzemelerin Sınıflandırılması

Tüm maddeler, harici bir manyetik alana yerleştirildiğinde manyetik özellik sergiler. 1845'te Michael Faraday, maddeleri Paramanyetik, Diyamanyetik ve Ferromanyetik olarak sınıflandıran ilk kişidir. Bunlara Ferrimanyetik ve Antiferromanyetik sınıflandırmalarda daha sonradan ilave edilmiştir.

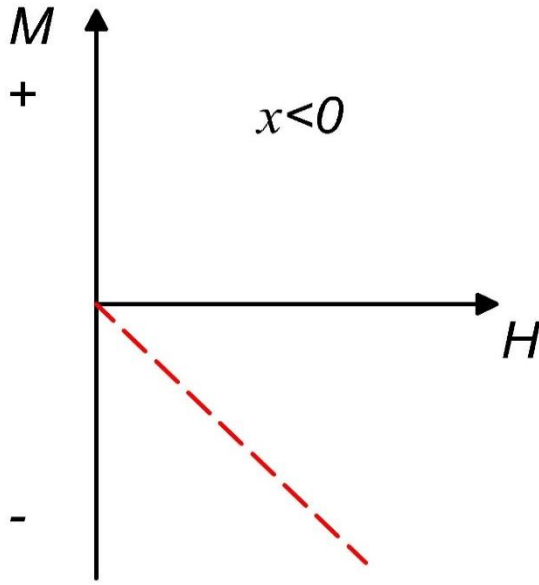
1.2.1. Diyamanyetik malzemeler

En zayıf manyetizma biçimidir. Diyamanyetik maddeler, net manyetik momentleri olmayan atomlardan oluşur. Yani tüm yörünge kabukları doludur ve eşleşmemiş elektronlar yoktur. Güçlü bir elektromıknatısın içine yerleştirildiğinde, diyamanyetik malzemeler manyetik alanın

zayıf olduğu yöne doğru çekilir. Diyamanyetik bir malzemenin dış manyetik alan varlığında temsili gösterimi Şekil 1.1'de ve $M - H$ grafiği'de Şekil 1.2'de gösterilmiştir.



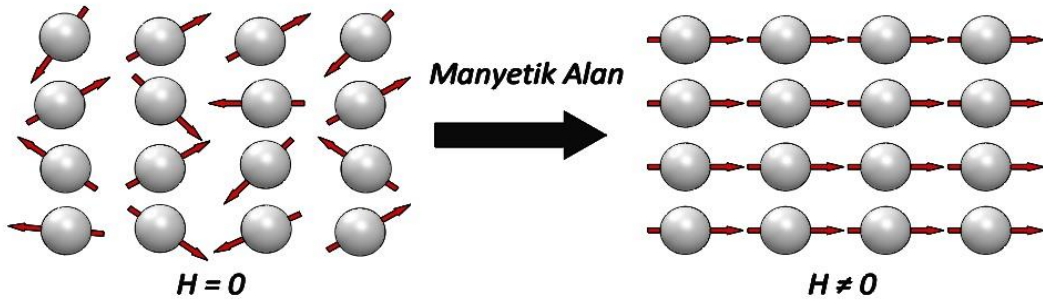
Şekil 1.1. Diyamanyetik bir malzemede manyetik momentlerin temsili dizilimleri



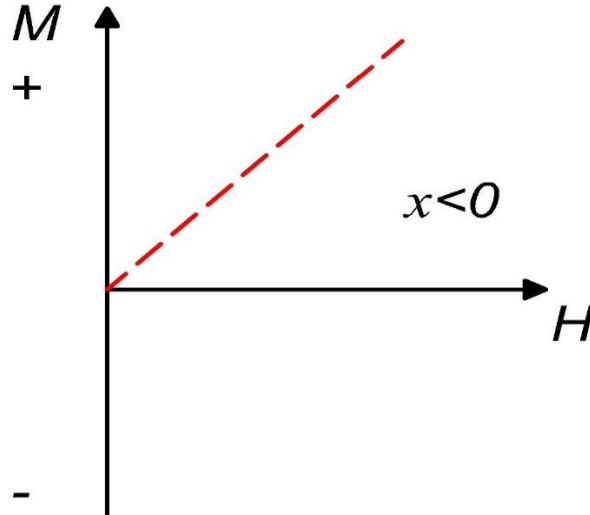
Şekil 1.2. Diyamanyetik bir malzemenin $M - H$ grafiği

1.2.2. Paramanyetik malzemeler

Paramanyetizma, yalnızca harici olarak uygulanan bir manyetik alanın etkisi altında ortaya çıkan bir manyetizma biçimidir. Bir yada daha fazla eşleşmemiş elektrona sahip bir atomun manyetik durumunu ifade eder. Eşleşmemiş elektronlar, elektronların manyetik dipol momentleri nedeni ile bir manyetik alan tarafından çekilir. Bu nedenle göreceli manyetik geçirgenliği 1'den biraz büyüktür. Bir atom en az bir paramanyetik elektron içerdiğinde paramanyetik olarak kabul edilir. Harici olarak uygulanan bir manyetik alanın herhangi bir manyetizasyon etkisi olmaz iken ve dış manyetik alan etkisinde iken temsili olarak Şekil 1.3'de gösterimi yapılmıştır. $M - H$ grafiğinde Şekil 1.4'de gösterilmiştir.



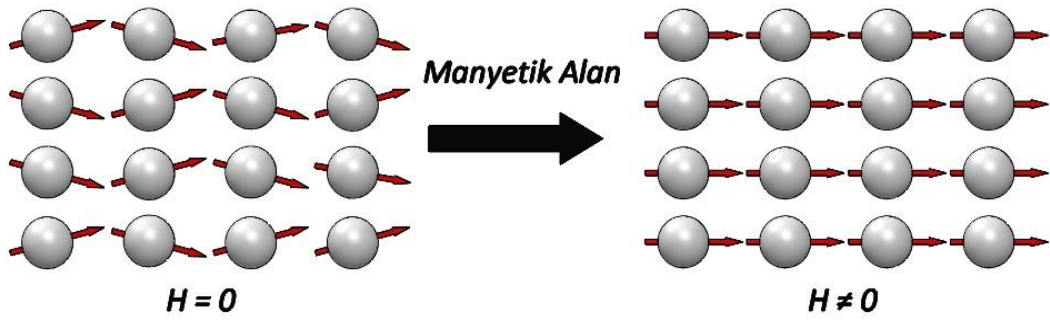
Şekil 1.3. Paramanyetik bir malzemede manyetik momentlerin temsili dizilimleri



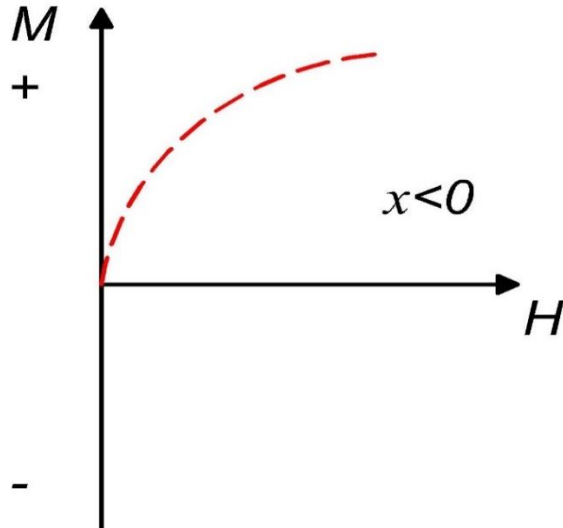
Şekil 1.4. Paramanyetik bir malzemenin $M - H$ grafiği

1.2.3. Ferromanyetik malzemeler

Elektriksel olarak yüklenmemiş bazı malzemelerin güçlü bir şekilde diğerlerini çektiği fiziksel malzemelerdir. Ferrromanyetizma, demir, kobalt, nikel ve bu elementlerden bir veya daha fazlasını içeren bazı alaşımlar veya bileşiklerle ilişkili bir tür manyetizmadır. Ferromanyetik (FM) malzemeler kolaylıkla manyetize edilebilir. Küçük bir dış manyetik alandan bile çok çabuk etkilenirler. Ferromanyetik sistemlerde bulunan manyetik dipollerin dış manyetik alan etkisinde iken ve etkisi bulunmadığı durumdaki temsili görünümü Şekil 1.5'te gösterilmiştir. FM bir malzemenin temsili olarak M - H grafiği Şekil 1.6'da gösterilmiştir.



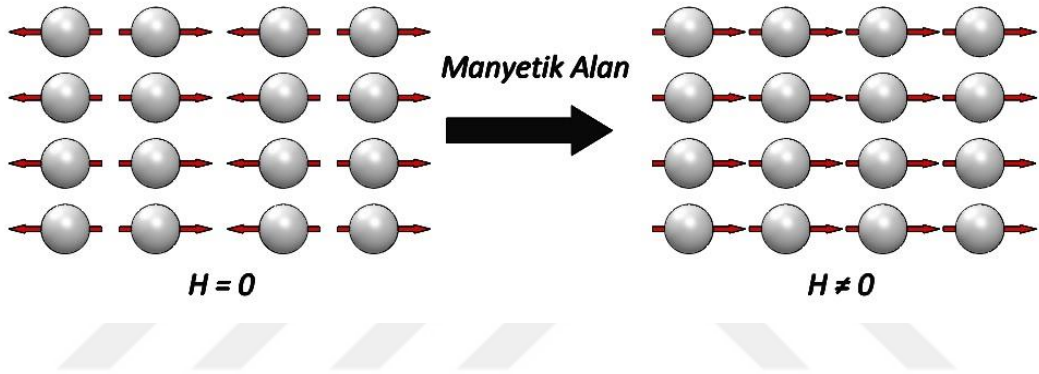
Şekil 1.5. Ferromanyetik bir malzemede manyetik momentlerin temsili dizilimleri



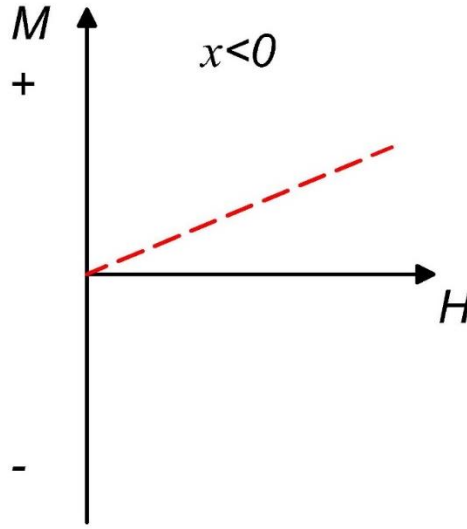
Şekil 1.6. Ferromanyetik bir malzemenin $M - H$ grafiği

1.2.4. Antiferromanyetik malzemeler

Bir manyetik alan uygulandığında ve kritik sıcaklığın altındaki sıcaklıklarda manyetik momentler antiparalel olarak kendiliğinden hizalanırlar. Antiferromanyetik malzemelere uygulanan manyetik alan ortamdaki kaldırıldığında antiparalel olarak hizalamalarını korumazlar. Ortamda herhangi bir manyetik alan yoksa yörüngedeki her elektronun manyetik momentlerinin tümü rasgele olarak konumlanmıştır. Manyetik bir alan uygulandığında ise Şekil 1.7’de temsili olarak gösterildiği gibi konumlanırlar. Ters yönelmiş momentler bir birlerine olan etkisini sıfırladığında malzeme diyamanyetik malzemeye benzer ve manyetizasyon azalır. Antiferromanyetik bir malzemenin $M - H$ grafiği Şekil 1.8’de gösterilmiştir.



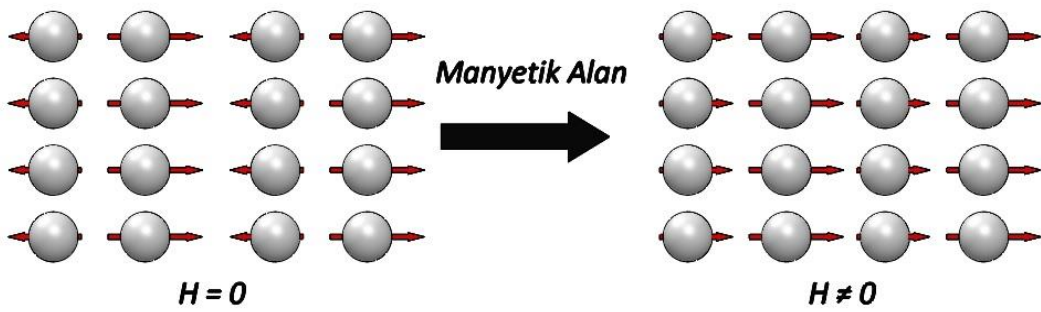
Şekil 1.7. Antiferromanyetik bir malzemedeki manyetik momentlerin temsili dizilimi



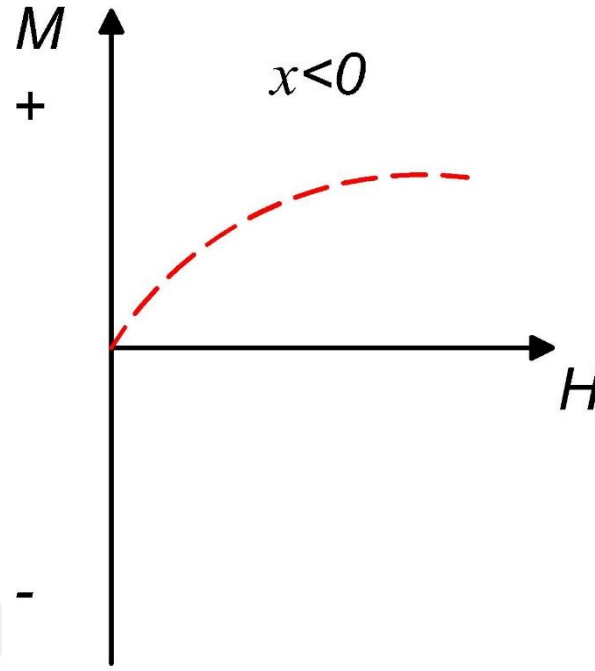
Şekil 1.8. Antiiferromanyetik bir malzemenin $M - H$ grafiği

1.2.5. Ferrimanyetik malzemeler

Ferrimanyetik malzemelerin momentleri birbirine paralel olarak hizalanır. Karşıt manyetik momentlere sahip malzemelerdir. Ferrimanyetik malzemelerde karşıt momentler birbirine eşit değildir. Manyetik alan olmadan bile kalıcı manyetizasyona sahiptirler. Ferrimanyetik malzemenin sıcaklığa bağımlılığı, ferromanyetik malzemelerinkine benzer. Ferrimanyetik malzemenin manyetik moment etkisi altındaki temsili olarak gösterimi Şekil 1.9'da, bu malzemenin $M - H$ grafiği ise Şekil 1.10'da gösterilmiştir.

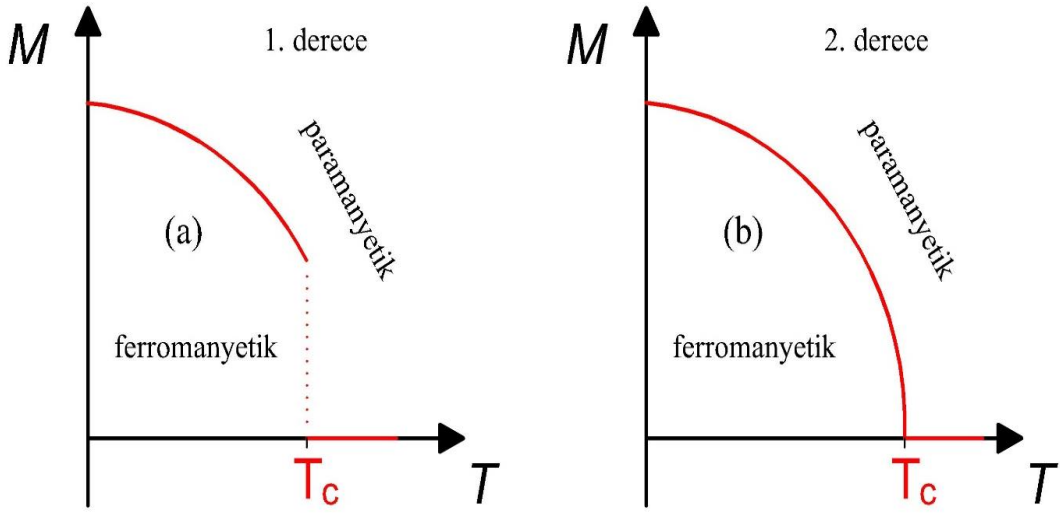


Şekil 1.9. Ferrimanyetik bir malzemedde manyetik momentlerin temsili dizilimleri



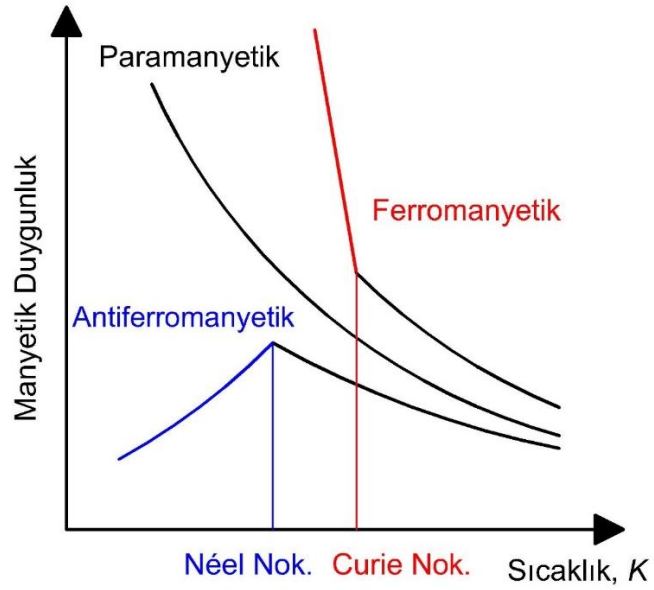
Şekil 1. 10. Ferrimanyetik bir malzemenin $M - H$ grafiği

Bir malzemeye dış manyetik alan uygulanır ve daha sonra bu manyetik alan kaldırıldığında mıknatıslanma sıfır olur. Mıknatıslanmanın sıfır olmasının nederni manyetik dipol momentlerinin rastgele hareketlerinden kaynaklanır. Bu malzemenin manyetizasyon değeri Şekil 1.11’de gösterildiği gibi artan sıcaklıkla bir değerden sıfır sıcaklığına direk inerse birinci derece faz geçişi gösterir. Eğer bu malzemenin manyetizasyonu sıcaklığın artması ile sürekli bir azalma gösteriyor ise ikinci derece faz geçişi gösterir. Buradaki sıfır olduğu değer Curie sıcaklığı değeridir. Bu sıcaklığın altındaki bütün manyetik sistemler ferromanyetik fazda bulunurlar. Bu sıcaklığın üzerindeki kiler ise paramanyetik fazda bulunurlar.



Şekil 1. 11. (a) Birinci derece faz grafiği, (b) İkinci derece faz grafiği

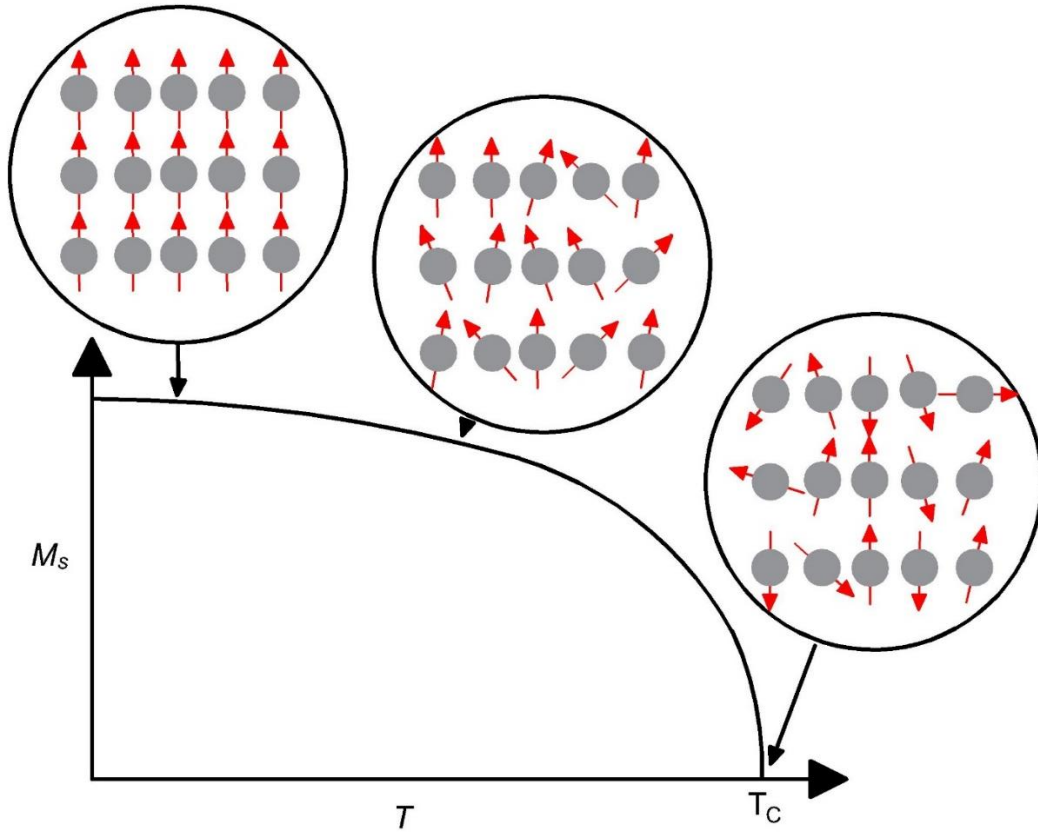
Manyetik duygunluğun sıcaklığa bağlı olarak değişimini ve Néel noktası ile Curie noktaları Şekil 1.12’de gösterilmiştir.



Şekil 1. 12. Manyetik duygunluk-Sıcaklık grafiği

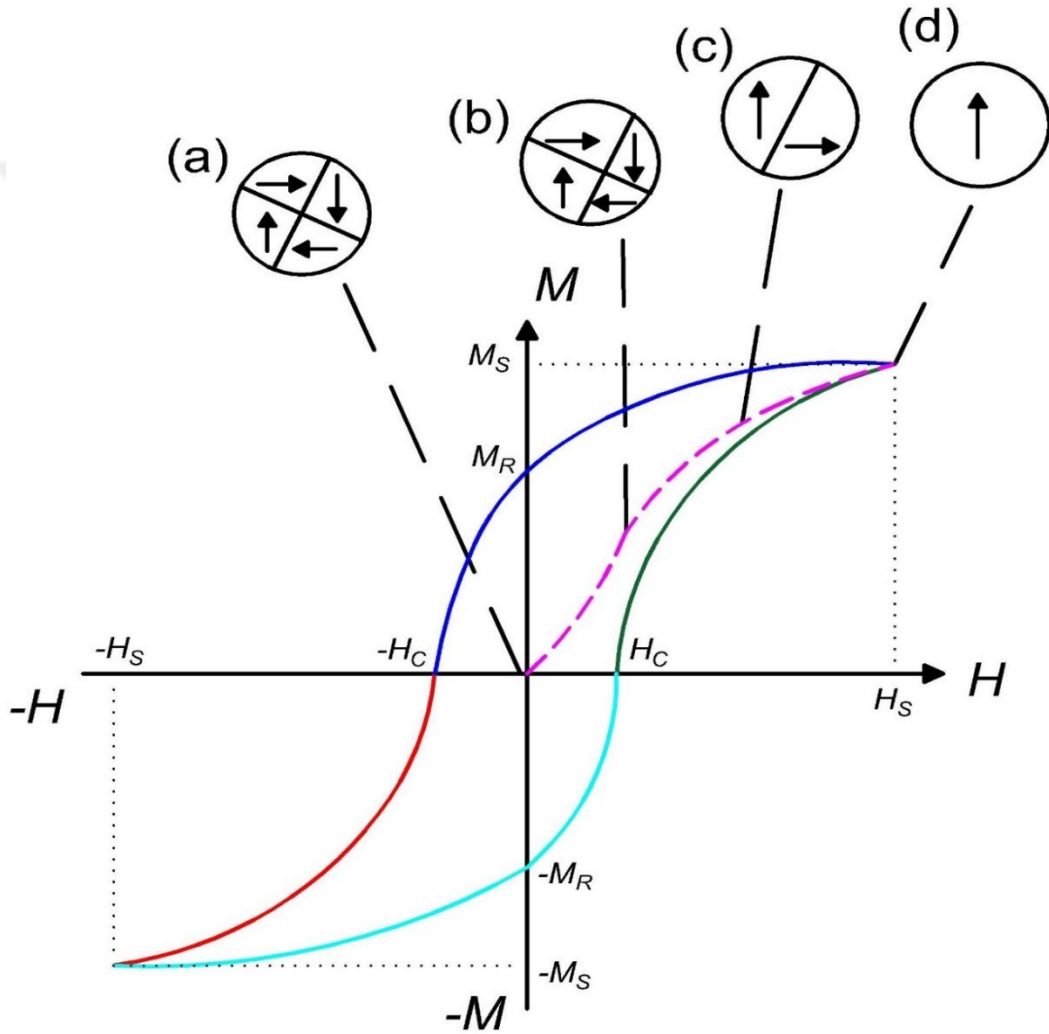
1.3. Manyetik Histerezis

Manyetik etkisi kaybolmuş bir malzemeye dışarıdan uygulanan manyetik alan (H) ile manyetizasyon (M) ile ilişkilerinin gösterildiği eğrilere Histerezis eğrileri denir. Sıfır noktası mıknatıslanmanın olmadığını ve herhangi bir kuvvetin uygulanmadığını gösterir. Şekil 1.13’de manyetizasyon (M) sıcaklık (T) ile ilişkili grafik gösterilmiştir. Grafikteki T_c Curie sıcaklığı olarak adlandırılır. Curie sıcaklığı, ferromanyetik bir malzemenin belirli bir sıcaklıkta kalıcı mıknatıslanmasını kaybedip paramanyetik hale geçtiği kritik sıcaklık noktasıdır. Bu sıcaklığın altında ferromanyetik maddeler düzenlidir.



Şekil 1. 13. Manyetizasyon (M) – Sıcaklık (T) grafiği

Bir malzemeye dış manyetik alan uygulandığında (d) noktasında doyum mıknatıslanmasına ulaşır. Bu noktaya ulaştıktan sonra malzemeye uygulanan manyetik alan azaltılır ise eğri iki yol izleyebilir. Başlangıç eğrisi üzerinden geçen eğri malzemenin paramanyetik olduğunu gösterir. Malzeme ferromanyetik ise şekildeki gibi mavi çizgi üzerindeki M_R oluşur. Burada M_R kalıcı mıknatıslanmayı göstermektedir. Ters yönde bir dış mıknatıslanma uygulanır. Bu ters mıknatıslanma oluşan mıknatıslanmayı yok edebilmek içindir. Sıfırlanan bu bölgeye koersif alan (H_C) denir. Bu işlem doyuma ulaşana kadar devam ettirilir. Bu işlem esnasında Şekil 1.14'deki eğri oluşur ve bu eğriye histerezis eğrisi denilir.



Şekil 1. 14. Ferromanyetik bir malzemenin histerezis eğrisinin gösterimi

1.4. Nanoteknoloji ve Kullanım Alanları

Günümüzde nanoteknoloji büyük bir bilim dalı haline gelmiştir. Nanoteknoloji ile yapılan araştırmalar günümüz hayatını kolaylaştırmada önemli rol oynamaktadır. Bu kelimeyi tarihte ilk kullanan Norio Taniguchi (1974). Nanoteknolojinin dönüm noktası 1959 yılında Richard Feynman'ın atomların ve moleküllerin , nano boyutlarda yeni malzemelerin üretilmesi ile kontrol edilebileceği söylemesidir. K.Eric Drexler'in 1980 yılında yaptığı araştırmalarda moleküler üretime yönelik temel düşüncelerin alt yapısını oluşturmuştur. Taramalı mikroskobun icadı ile nanoteknoloji biliminde büyük bir ilerleme kaydetmiştir (Gerd Binnig ve Heinrich Rohrer, 1981). İlerleyen yıllarda "Fullerenlerin (Buckyballs)" keşfi (1985), Atomik kuvvet mikroskobunun (1986) icadı ile bu bilim dalına ışık tutmuştur.

Nanoteknoloji, makro dünya ile nano boyut arasındaki geçişi incelemek için araştırmalar yapan bir bilim dalıdır. Bu araştırmalarda nano boyutaki maddeler için ihtiyaç duyulan ölçüm araçlarının, fiziksel-kimyasal yapılarının incelenmesi için gerekli cihazların gelişmesi konularını kapsar. Nanoteknoloji günümüzde tıp ve sağlık, havacılık, uzay ve savunma sanayi, otomobil sanayi, bilgi depolama, tekstil, elektronik gibi bir çok önemli alanlarda kullanılmaktadır.

Tıp ve Sağlık: Tanı ve tedavi, ilaç geliştirme, hastalık ve travmatik yaraların önlenmesinde geliştirilen nanotüpler, nanosensörler yardımı ile insanlığın daha sağlıklı olarak yaşamasında önemli rol oynamaktadır.

Havacılık ve Uzay: Yapılacak veya yapılan malzemelerin çok hafif, dayanıklı ve ısıya karşı daha dirençli olması ile bu sektördeki ulaşım araçlarının enerji tüketimini düşürmesi, daha konforlu ve güvenli bir yolculuk yapılmasını sağlar.

Savunma Sanayi: Bu alanda da yapılan araştırmalar ile maliyetleri düşürerek daha kullanışlı ve daha güvenli askeri araçlar ve donanmalar yapılmaktadır. Örneğin gemilerde en önemli sorun deniz suyunun ve atmosferin etkisi ile gövdenin aşınmasıdır. Nanokompozit malzemeler yardımı ile geminin dış yüzeyi kaplanarak su ile teması kesilir. Bu sayede gemi gövdesi daha dayanıklı olur ve gövdedeki aşınma azalarak geminin uzun süre denizde kalması sağlanır.

Otomobil Sanayi: Bu sektörde araçların ağır olması yakıt tüketimini artırmaktadır. Yapılan araştırmalar sayesinde araç gövdelerinin hafifletilerek daha dayanıklı arabalar üretilerek yakıt tüketiminde tasarruf edilmektedir. Aynı zamanda daha çevreci araçlar yapılarak doğa korunmakta, elektronik sistemler sayesinde ise daha güvenli ve konforlu yolculuklar olmaktadır.

Bilgi Depolama: Geçmiş yıllarda veri depolamak için büyük hardisklere ihtiyaç duyulurdu ve bu hardisklere Megabayt veya Gigabayt büyüklüğündeki veriler depolanabilirdi. Günümüzde ise nanoteknoloji sayesinde küçük çiplere terabaytlar kadar çok büyük bilgileri depolamak mümkündür.

1.5. Nanoparçacıklar

Nanoparçacıkların diğer malzemelerden farkları; elektronik yapısı, hacim oranı, fiziksel ve kimyasal yapılarıdır. Atomik boyutlara inildikçe malzeme özellikleri değişkenlik gösterir. Bunun nedeni yüzey alanın, hacim oranının değişmesidir. Çok küçük boyutlarda olması ile nanoparçacıklar, plaka ve sac gibi dökme malzemeler ile karşılaştırıldığında çok geniş bir yüzey alanına ve hacim oranına sahiptirler. Bu özellik nanoparçacıkların elektronlarını hapsedecek ve kuantum etkileri üretecek kadar küçük oldukları için optik, fiziksel ve kimyasal özelliklere sahip olmasını sağlar.

1.5.1. Manyetik nanoparçacıklar

Bazı nanoparçacık çeşitleri şunlardır; manyetik nanoparçacıklar, karbon nanotüpler, oksit nanoparçacıklar, metalik nanoparçacıklar, Grafen nanoparçacıklardır. Manyetik nanoparçacıklar biyoloji, fizik, kimya, tıp gibi bir çok bilim dalında kullanılmaktadır. En yaygın kullanım alanı tıp ve sağlıktır. Demir, kobalt, nikel gibi manyetik elementlerden meydana gelirler. Manyetik nanoparçacıklar nano boyuttan mikro boyuta kadar sentezlenebilmektedir. Uygulandığı manyetik alana karşılık verdiğinden dolayı istenilen hareketleri kolaylıkla yaptırabilmektedir. Bu nedenle manyetik nanoparçacıklar bir çok alanda avantaj sağlamaktadır.

Bu nanoparçacıklar;

Demir oksitler: Fe_3O_4 ve Fe_2O_3

Toz metaller: Fe ve Co

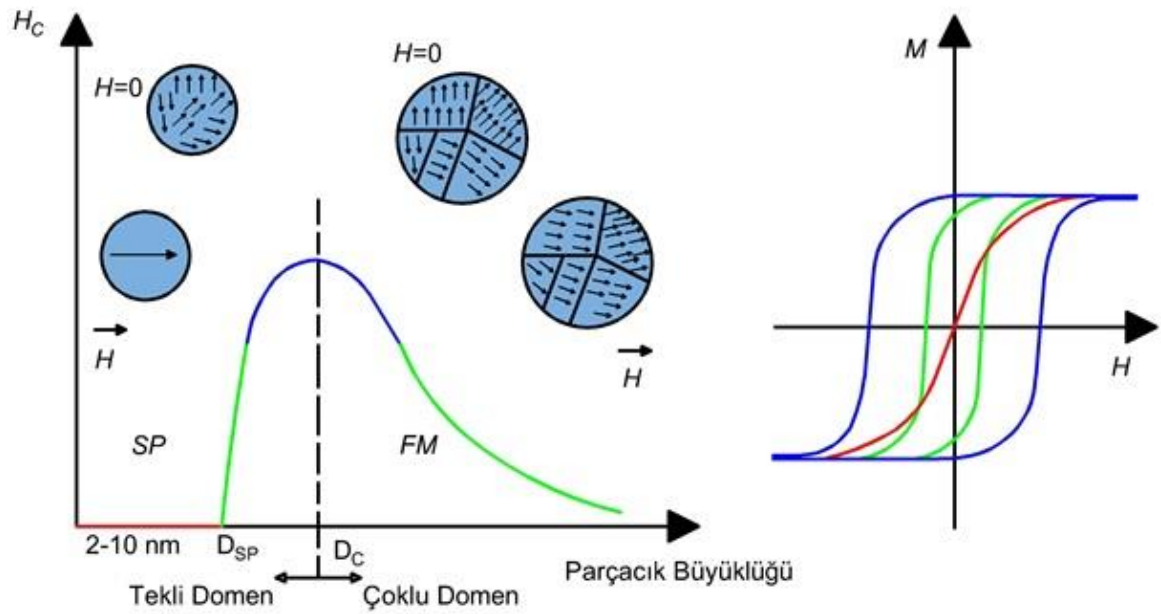
Alaşımalar: $CoPt_3$ ve $FePt$

Spinel yapıda ferrimagnetler: $MgFe_2O_4$, $MnFe_2O_4$ ve $CoFe_2O_4$ şeklinde uygulamalardan oluşturulabilirler.

En çok tercih edilen uygulama *demiroksit* nanoparçacıklardır. Tercih edilme nedeni ise nano boyutlarda büyük yüzey alanının olması ve nano boyutlarda bu maddeler süperparamanyetik (SP) özellik göstermesidir (Goya, 1999).

1.6. Manyetik Nanoparçacığın Mıknatıslanması

100 nm'den küçük boyuta sahip nanoparçacıklar kuantum boyut sınırlaması ve malzemenin yüksek yüzey-hacim oranı ve buna bağlı olarak yüzey atomlarının yığın durumuna göre daha fazla olması nedeniyle fiziksel özelliklerde farklılık gösterebilir. Nano boyutlara inidikçe malzemenin diğer özelliklerinde olduğu gibi manyetik özelliklerde de farklılık gösterir. Bu alanda en belirgin değişiklikler ferromanyetik malzemelerin gösterdiği zorlayıcı alan (koersitive) değerinde olur. Parçacık boyutu azaldıkça malzeme içerisindeki yapı, iç enerjisini minimum yapabilmek için domen büyümekte ve birim hacmindeki domen sayısı azalmakta ve buna bağlı olarak malzemenin sergilediği koersitive kalıcı mıknatıslanma değişmektedir. Koersitive değeri malzeme içerisindeki domain sayısına ve büyüklüğüne bağlıdır.



Şekil 1. 15. Nanoyapılı malzemeler için H_c 'nin parçacık büyüklüğüne bağlı değişimi ve manyetik histerezis eğrisi

Tek domen parçacığının koersif alanı artan parçacık büyüklüğü ile artış sergilemekte ve parçacık SP bölgeden FM bölgeye geçmektedir. Doyum mıknatıslanma değeri, parçacık boyutuna bağlıdır.

2. BÖLÜM

MATERYAL VE YÖNTEM

2.1. Ising Modeli

Ising modeli, faz geçişlerini anlamak için manyetizmaya uygulanan bir model sistemidir. Bu çalışmada Ising modeli ve çift yaklaşım yöntemi kullanıldı. Herhangi bir örgü noktası üzerine yerleşen örgü noktalarına en yakın komşu sayısına koordinasyon sayısı denir ve γ ile gösterilir. Ising modelinde, bir nanoparçacıkta N kadar atom olduğu düşünülür ise en yakın komşu etkileşim sayısı $N\gamma/2$ ile gösterilir.

Ising Hamiltoniyeni en basti şekli ile aşağıdaki Formül 3.1’de yazılmıştır;

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

Yukarıdaki formülde komşu örgü noktaları arasındaki bilineer etkileşme enerjisi J sabiti ile gösterilir. Eğer $J < 0$ ise ferromanyetik özellik, eğer $J > 0$ ise aniferromanyetik özellik gösterir. H dış manyetik alanı göstermektedir. Sistemde iki spin mevcuttur. Bu yüzden normalizasyon koşulu sağlanmalıdır. Bu koşul; $\sum_{i=1}^2 X_i = 1$ formülü ile belirtilir. Burada $X_1 = \frac{1}{2}(1 + M)$, $X_2 = \frac{1}{2}(1 - M)$ ’dir. Sistemdeki mıknatıslanma $M = X_1 - X_2$ ve kuadrupol $Q = X_1 + X_2$ ile gösterilir.

2.2. Çift Yaklaşım Yöntemi

Spinler arası çiftlerin etkileşimi, çift yaklaşım (Kikuchi, 1974) yöntemi olarak tanımlanır. Nokta değişkenler (p_i) ve bağ değişkenleri (P_{ij}) ile adlandırılır. Bağ değişkenleri normalizasyon şartını $\sum_{i,j=+,0,-} P_{ij} = 1$ denklemi sağlar. Durum değişkenlerine ise $p_i = \sum_{j=+,0,-} P_{ij}$ denklemi ile bağlantılıdır. P_{ij} değişkenleri kullanılarak, etkileşme enerjisi (E) ve entropi (S_E);

$$\beta E = N \frac{\gamma}{2} \sum_{i,j=+,0,-} \varepsilon_{ij} P_{ij} \quad (2.2)$$

$$S_E = N k_B [(\gamma - 1) \sum_{i,j=+,0,-} p_i \ln p_i - \frac{\gamma}{2} \sum_{i,j=+,0,-} P_{ij} \ln P_{ij}] \quad (2.3)$$

denklemleri yazılır. Yukarıdaki formülde γ örgü koordinasyon sayısı, N toplam spin sayısı, ε_{ij} en yakın komşu spin çiftleri (i, j) için bağ enerjilerini göstermektedir. Spin başına serbest enerji formülü (2.4) aşağıdaki gibi yazılır.

$$\Phi = \frac{\beta F}{N} = \frac{\beta}{N} (E - TS_E), \quad \beta = \frac{1}{kT} \quad (2.4)$$

Denge durumundaki sistem için lineer olmayan denklem formülü $\frac{\partial \Phi}{\partial p_{ij}} = 0$ eşitliği kullanılarak aşağıdaki denklem (bağ değişkenleri) (2.5) elde edilir.

$$P_{ij} = \frac{1}{Z} (p_i p_j)^\gamma e^{-\beta \varepsilon_{ij}} \equiv \frac{e_{ij}}{Z} \quad (2.5)$$

Yukarıdaki formülde Z bölüşüm fonksiyonunu olarak adlandırılır ve $\bar{\gamma} = (\gamma - 1)/\gamma$ olarak gösterilir. Bölüşüm fonksiyonu (Z) formülü;

$$Z = \exp\left(\frac{2\beta\lambda}{\gamma}\right) = \sum_{i,j=+,0,-} e_{ij} \quad (2.6)$$

ile gösterilir. Yukarıdaki denklemde (2.6) λ simgesi, normalizasyon şartında kullanılıp, işlem sonucunu etkilememektedir.

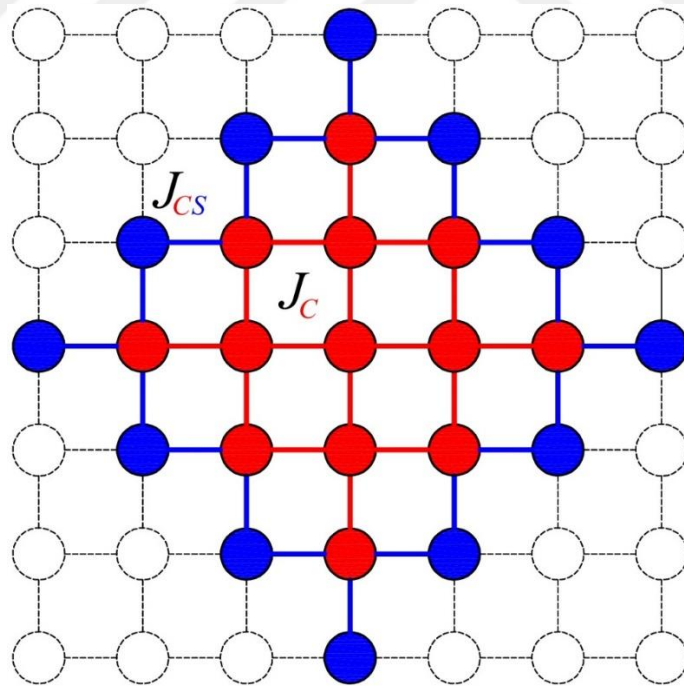
2.3. Dipol Dipol Etkileşmeli İki-Boyutlu Kare Örgülü Nanoparçacığın Spin-1 Modelinin İncelenmesi

Ising modelinde S_i spin durumlarını göstermektedir. Spinler üç farklı değer alırlar. Bunlar $+1$, 0 ve -1 dir. -1 değeri spin yöneliminin aşağı yönde ve dış manyetik alana zıt olduğunu gösterir. 0 değeri örgü noktasının boş olduğunu belirtir. $+1$ ise yukarı spin yöneliminin olduğunu ve dış manyetik alana paralelliğini gösterir. Bu şekilde gösterilen sistemlere spin-1 Ising modeli denir. bu şartlar altında, dipol, kuadrupol, dipol-kuadrupol, kristal alan (tek iyon anizotropi) etkileşmeli ve dış manyetik alan altında Hamiltoniyen şu şeklide yazılır;

$$\hat{H}\{S_i\} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - K \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 - L \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^2 S_j + S_i S_j^2) - D \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^2 + S_j^2) - H \sum_{\langle ij \rangle} (S_i + S_j) \quad (2.7)$$

$\langle i, j \rangle$ en yakın komşu etkileşmeli spinlerin toplamını gösterir. Hamiltoniye ifadesinde J komşu spinler arası dipol-dipol (bilineer), K kuadropol - kuadropol (bikuadratik), L dipol-kuadropol, D kristal alan (tek iyon anizotropi) etkileşme sabitlerini ve H dış manyetik alanı göstermektedir. Sistem $J > 0$ ise antiferromanyetik, $J < 0$ ise ferromanyetik özellik gösterir. Bu etkileşimlerin enerji birimleri $k_B T$ (k_B Boltzman sabiti ve T sıcaklık). $M \equiv \langle S_i \rangle$ denklemi, uzun düzen parametresi ortalama mıknatıslanma olarak isimlendirilir. $Q \equiv \langle S_i^2 \rangle$ denklemi ise kuadropol düzen olarak isimlendirilir. Mıknatıslanma $M = p_+ - p_-$, kuadropol ise $Q = p_+ + p_-$ denklemi ile gösterilir.

Bu tezde iki boyutlu ve kare örgülü spin-1 Ising nanoparçacığının dipol-kuadropol etkileşmesi altında manyetik ve kuadropol özellikleri incelendi. Böyle bir sistem için Şekil 2.1'de temsili görünüm verilmiştir. Şekil 2.1'de atom sayısı ile nanoparçacığın büyüklüğü doğru orantılıdır. Şekilde kabuk sayısı nanoparçacığın yarıçapını (R) göstermektedir. İki boyutlu nanoparçacık çekirdek (C), ara yüzey (CS) ve yüzey (S) şeklinde üç bölgeden oluşur. Bölgelerin spin sayıları çekirdek için N_C , ara yüzey için N_{CS} ve yüzey için N_S ile gösterilir. Nanoparçacığın toplam spin sayısı ise $N = N_C + N_S$ ile hesaplanır.



Şekil 2. 1. İki boyutlu kare örgünün şematik gösterimi (Kırmızı içi dolu daireler çekirdek, mavi içi dolu daireler ise yüzey atomlarını gösterir. Kırmızı ve mavi çizgiler çekirdek-yüzey spin çiftleridir).

Kare örgülü C/S tipi nanoparçacık için (2.7) formülü ele alınarak C , CS ve S ifadeleri kullanılarak aşağıdaki (2.8) numaralı denklem

$$\widehat{H} = \widehat{H}_C + \widehat{H}_{CS} + \widehat{H}_S \quad (2.8)$$

şeklinde yazılır.

C , CS ve S bölgeleri için Hamiltoniyenler sırasıyla;

$$\widehat{H}_C = -J_C \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - K_C \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 - L_C \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^2 S_j + S_i S_j^2) - D_C \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^2 + S_j^2) - H \sum_{\langle ij \rangle} (S_i + S_j) \quad (2.9)$$

$$\widehat{H}_{CS} = -J_{CS} \sum_{\langle ij \rangle} S_i \sigma_j - K_{CS} \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 \sigma_j^2 - L_{CS} \sum_{\langle ij \rangle} (S_i \sigma_j^2 + S_i^2 \sigma_j) \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned} \widehat{H}_S = & -J_S \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - K_S \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i^2 \sigma_j^2 - L_S \sum_{\langle ij \rangle} (\sigma_i \sigma_j^2 + \sigma_i^2 \sigma_j) - D_S \sum_{\langle ij \rangle} (\sigma_i^2 + \sigma_j^2) \\ & - H \sum_{\langle ij \rangle} (\sigma_i + \sigma_j) \end{aligned} \quad (2.11)$$

şeklinde elde edilir. S_i çekirdek spinlerinin spin durumunu ve σ_i ise yüzey spinlerinin spin durumunu göstermektedir. Her üç bölge için bileer, bikuadratik ve kristal alan etkileşimleri sırasıyla J_C, J_{CS}, J_S ; K_C, K_{CS}, K_S ; D_C, D_S ile gösterilir. Homojen nanoparçacık için $J_C = J_{CS} = J_S$ ve $K_C = K_{CS} = K_S$ olarak yazılır. Kompozit NP için ise $J_C \neq J_{CS} \neq J_S, J_C = J_{CS} \neq J_S, J_C \neq J_{CS} = J_S, J_{CS} \neq J_C = J_S$ ve $K_C \neq K_{CS} \neq K_S, K_C = K_{CS} \neq K_S, K_C \neq K_{CS} = K_S, K_{CS} \neq K_C = K_S$ koşullarından en az bir tanesi geçerlidir. Bu tez çalışmasında kolaylık olması açısından homojen nanoparçacıklar için $J_C = J_{CS} = J = 1$, $K_C = K_{CS} = K$, kompozit parçacıklar için $J_C = J = 1$, $J_{CS} = -J$, $K_C = K$, $K_{CS} = -K$ seçilmiştir. Her iki durumda da $L_C = L_{CS} = L$ ve $D_C = D$ olarak alındı. Çekirdek yüzey tipi nanoparçacıklarda dış manyetik alan spinler ile etkileştiği için ara bölgeden toplam mıknatıslanma ve kuadrupol momente bir katkı sağlamaz. Bu bölgede etkileşme çekirdek atomları ile yüzey atomları arasında gerçekleşir.

Yukarıda verilen (2.5) denklemi yardımı ile ε_{ij} bağ enerjileri (2.12) gösterildiği gibi yazılır.

$$\varepsilon_{ij} = N_P^C \varepsilon_{ij}^C + N_P^{CS} \varepsilon_{ij}^{CS} + N_P^S \varepsilon_{ij}^S \quad (2.12)$$

Burada N_P^C çekirdek, N_P^{CS} ara yüzey, N_P^S yüzeyde bulunan spin çiftlerinin sayısını ifade eder ve $N_P^C = (N_C \gamma_C / 2) - N_{CS}$, $N_P^S = (N_S \gamma_S / 2)$ ve $N_P^{CS} = 2N_{CS} \gamma_{CS} / 2$ şeklinde yazılır. Kare örgü için koordinasyon sayıları $\gamma_C = 4$, $\gamma_{CS} = 2$, $\gamma_S = 0$ şeklindedir. Her bölgenin spin sayıları (N_C, N_{CS}, N_S) , spin çift sayıları (N_P^C, N_P^{CS}, N_P^S) Çizelge 2.1 'de ve bağ enerjileri $(\varepsilon_{ij}^C, \varepsilon_{ij}^S, \varepsilon_{ij}^{CS})$ Çizelge 2.2 'de detaylı olarak gösterilmiştir. Böylece, üç durum değişkeni (p_+, p_0, p_-) bağ değişkenleri cinsinden $p_+ = P_{++} + P_{+0} + P_{+-}$, $p_0 = P_{0+} + P_{00} + P_{0-}$, $p_- = P_{-+} + P_{-0} + P_{--}$ ifade edilir. Parçacığın mıknatıslanma ve kuadrupol momentleri $M = p_+ - p_-$ ve $Q = p_+ + p_-$ formülleri kullanılarak hesaplanır. Öncelikle Çizelge 3.1 'de verilen spin sayıları ve spin çift sayıları eşitlik (2.12)'de dikkate alınarak eşitlik (2.5) iterasyon tekniği ile nümerik olarak çözüldü. Daha sonra, çözümler mıknatıslanma/kuadrupol eğrileri ve histerezis döngüleri şeklinde elde edildi. Tez çalışmasında elde edilen tüm sonuçlar Şekil 3.1 - Şekil 3.24 'de grafiksel olarak verilmiş olup bir sonraki bölümde ayrıntılı olarak tartışılacaktır.

Tablo 2.1. İki-boyutlu ve kare örgülü spin-1 Ising nanoparçacığının yarı çapına göre çekirdek, çekirdek-yüzey ve yüzeydeki toplam spin sayıları ve spin çifti sayıları (Yalçın ve ark., 2012)

R	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N_C	5	13	25	41	61	85	113	145	181
N_S	8	12	16	20	24	28	32	36	40
N_{CS}	6	10	14	18	22	26	30	34	38
N_P^C	4	16	36	64	100	144	196	256	324
N_P^{CS}	12	20	28	36	44	52	60	68	76

Tablo 2.2. Çekirdek-yüzey tipi kare örgülü nanoparçacığın spin-1 Ising modeli için bağ enerjileri

Bağ Enerjileri	ε_{++}	$-J_C - K_C - 2L_C - 2D_C - 2H$	$-J_{CS} - K_{CS} - 2L_{CS}$	$-J_S - K_S - 2L_S - 2D_S - 2H$
	ε_{+0}	$-D_C - H$	0	$-D_S - H$
	ε_{+-}	$J_C - K_C - 2D_C$	$J_{CS} - K_{CS}$	$J_S - K_S - 2D_S$
	ε_{0+}	$-D_C - H$	0	$-D_S - H$
	ε_{00}	0	0	0
	ε_{0-}	$-D_C + H$	0	$-D_S + H$
	ε_{-+}	$J_C - K_C - 2D_C$	$J_{CS} - K_{CS}$	$J_S - K_S - 2D_S$
	ε_{-0}	$-D_C + H$	0	$-D_S + H$
	ε_{--}	$-J_C - K_C + 2L_C - 2D_C + 2H$	$-J_{CS} - K_{CS} + 2L_{CS}$	$-J_S - K_S + 2L_S - 2D_S + 2H$

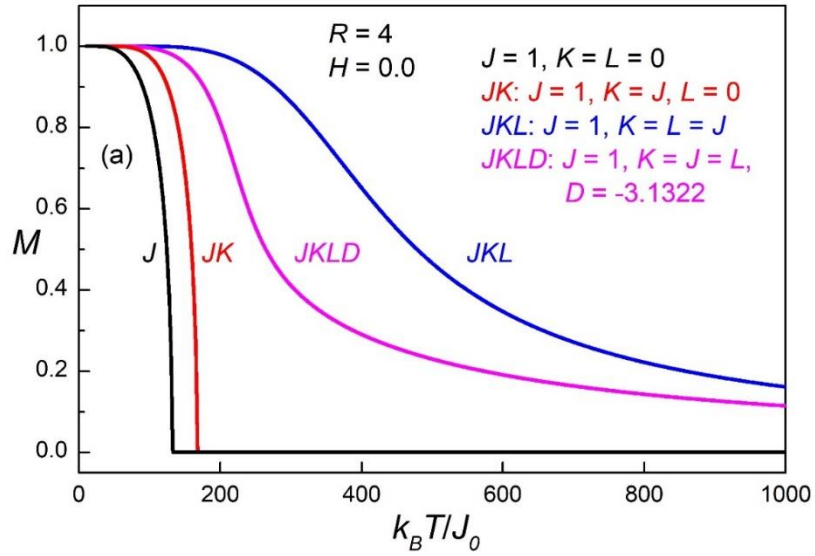
3. BÖLÜM

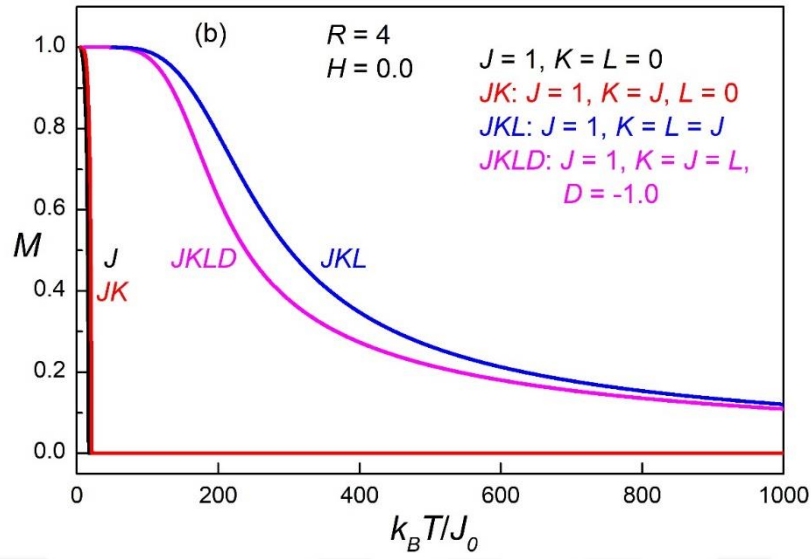
ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA

3.1. Homojen ve Kompozit Nanoparçacığın Manyetik Özellikleri

3.1.1. Homojen ve kompozit nanoparçacığın mıknatıslanma eğrileri

Şekil 3.1’de kare örgülü homojen ve kompozit nanoparçacığın $R = 4$ ve sıfır dış manyetik alanda bilinear, bikuadratik, dipol-kuadrupol ve kristal alan etkileşme değerleri için mıknatıslanmanın indirgenmiş sıcaklığa göre değişimi görülmektedir. Homojen nanoparçacık (HM-NP) için çekirdek, ara yüzey ve yüzey için dipol-dipol/kuadrupol-kuadrupol etkileşme değerleri $J_C = J_{CS} = J = 1$, $K_C = K_{CS} = K$, kompozit nanoparçacık (CM-NP) için $J_C = J = 1$, $J_{CS} = -J$, $K_C = K$, $K_{CS} = -K$ seçilmiştir. Her iki durumda da $L_C = L_{CS} = L$ ve $D_C = D$ olarak alındı.

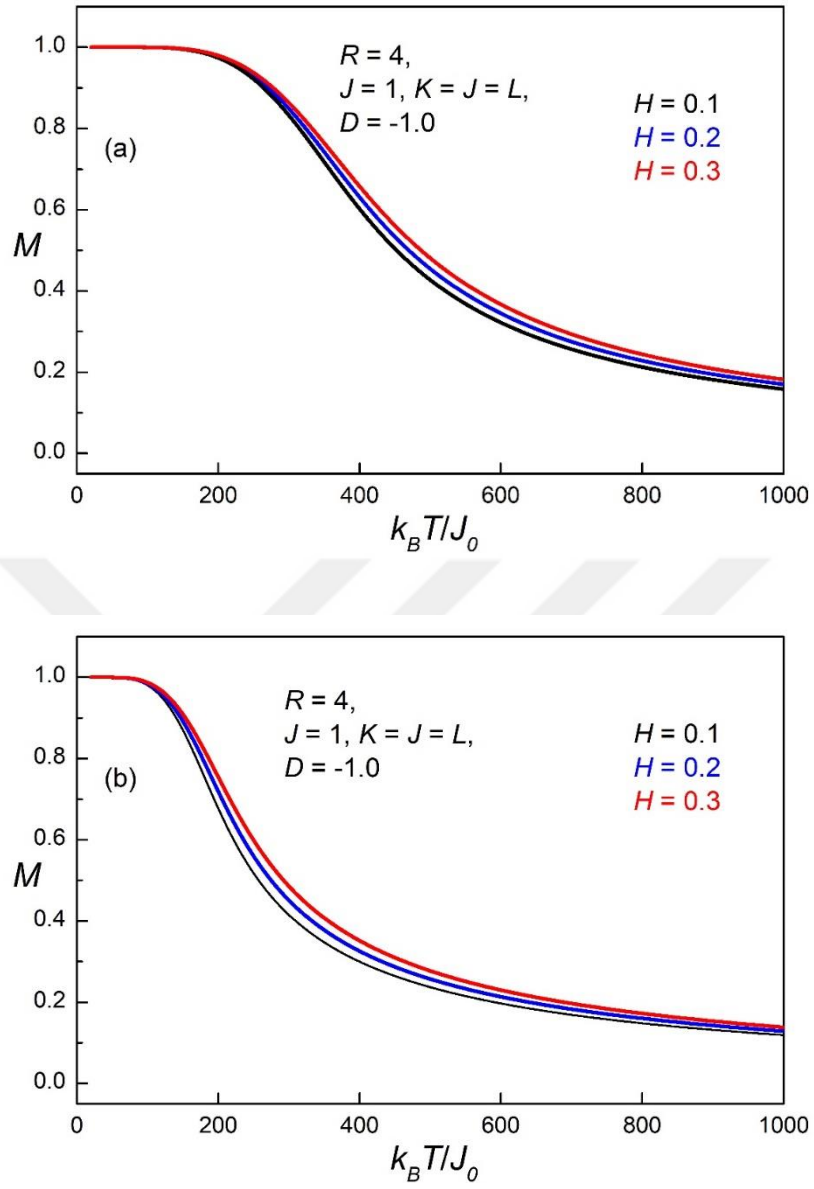




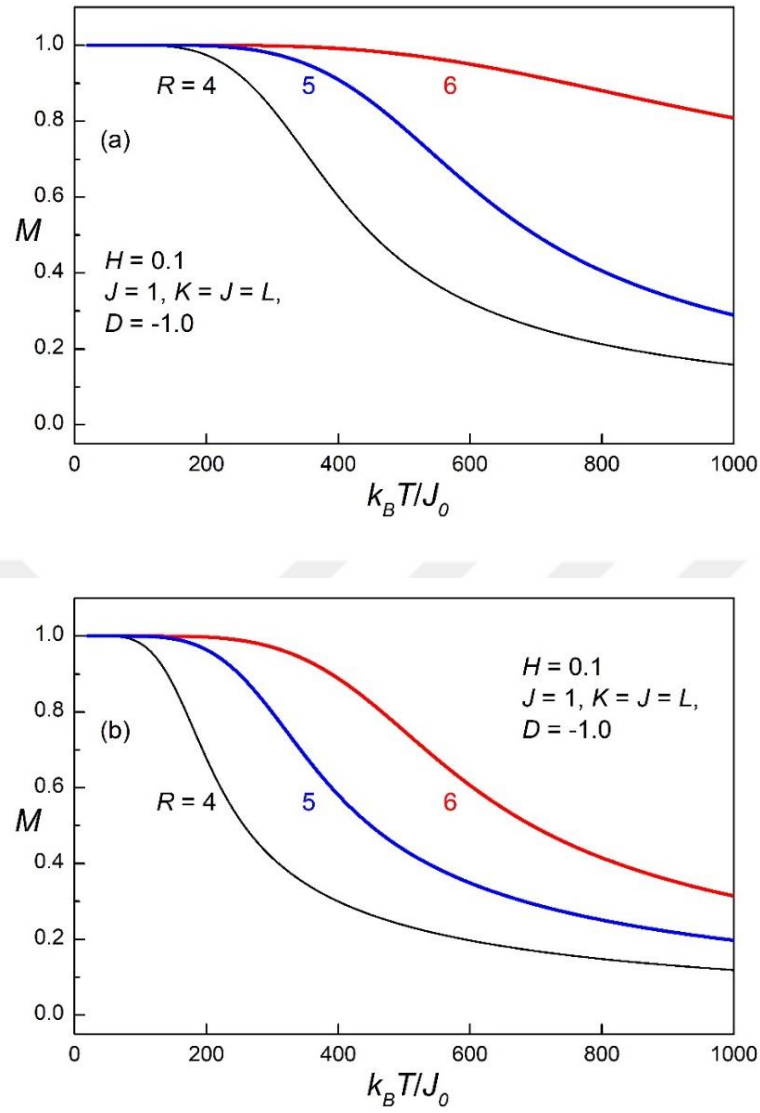
Şekil 3. 1. (a) Homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için mıknatıslanmanın indirgenmiş sıcaklığa ($k_B T / J_0$) bağlı değişimi. $J_C = J_{CS} = J = 1$, $R = 4$ ve $H = 0.0$.

Homojen kare örgülü nanoparçacığın artan sıcaklıkla birlikte manyetizasyon değeri (M) 1 'den 0 'a kadar sürekli bir azalma göstermektedir. Bu azalış dipol-dipol etkileşmesi (J / siyah eğri) ve dipol-dipol ve kuadrupol-kuadrupol (JK / kırmızı eğri) etkileşmelerinde görülmektedir. Bu sürekli azalmanın sıfıra ulaştığı nokta Curie sıcaklığı (T_C) olarak ifade edilir. Bikuadratik etkileşmenin (K) dahil edilmesiyle T_C değerinin arttığı görülmüştür. Bu etkileşmelere dipol-kuadrupol (L) ve kristal alan (D) etkileşmeleri de dahil edildiğinde mıknatıslanma değeri yumuşak bir eğilim sergiler. Benzer durum Şekil 3.1 (b)'de kompozit nanoparçacık için gözlenmiştir. Kompozit nanoparçacık (CM-NP) için çekirdek, ara yüzey ve yüzey bileer ve bikuadratik etkileşme değerleri $J_C = J = 1$, $J_{CS} = -J$, $K_C = K$, $K_{CS} = -K$ olarak seçilmiştir. CM-NP Curie sıcaklığı değerinden önce FM, üzerinde ise PM fazda bulunur. Homojen ve kompozit (Şekil 3.1) nanoparçacıklar için elde edilen mıknatıslanma eğrilerindeki en belirgin özellik, kompozit nanoparçacıklarda faz geçişinin daha düşük sıcaklık değerlerinde gerçekleşmesidir.

Homojen ve kompozit nanoparçacığın $R = 4$ ve manyetik alan farklı değerleri alınarak mıknatıslanmanın indirgenmiş sıcaklığa bağlı grafiği Şekil 3.2'de verilmiştir. Burada kristal alan etkileşmesi ($D = -1.0$) negatif değer alınmıştır. Bilineer, bikuadratik ve dipol-kuadrupol etkileşme değerleri ise pozitif olup 1 alınmıştır. İndirgenmiş sıcaklığın artması ile grafikte de görüldüğü gibi artan dış manyetik alan değeri ile birlikte mıknatıslanma değerinin de arttığı gözlenmiştir.



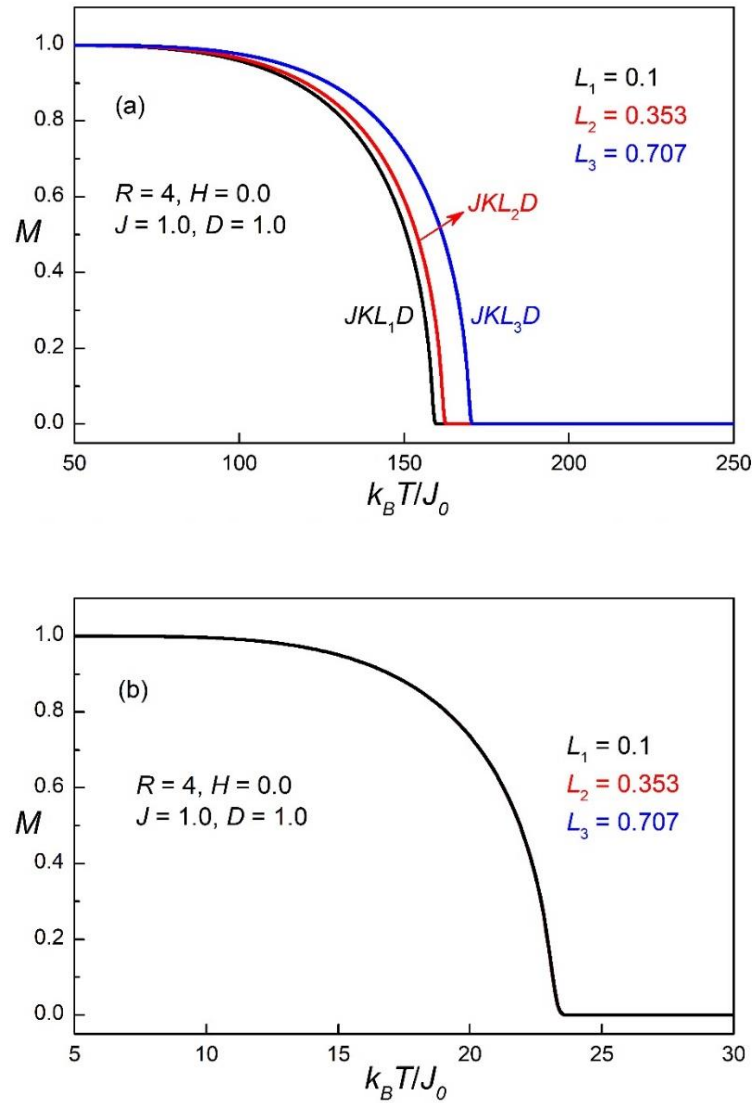
Şekil 3.2. Farklı H değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için mıknatıslanmanın indirgenmiş sıcaklığa ($k_B T / J_0$) bağlı değişimi. $R = 4$, $J = 1.0$, $K = J = L$, $D = -1.0$.



Şekil 3.3. Farklı R değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için mıknatıslanmanın indirgenmiş sıcaklığa ($k_B T / J_0$) bağlı değişimi. $J = 1.0, K = J = L, D = -1.0$.

Şekil 3.3'te HM/CM-NP için farklı yarıçap ($R = 4, 5, 6$) ve sabit dış manyetik alan ($H = 0.1$) değerlerinde mıknatıslanmanın indirgenmiş sıcaklığa göre değişimi gösterilmiştir. Bilineer, bikuadartik, dipol-kuadrupol etkileşme değerleri $J = 1.0$, $K = J = L$ ve kristal alan değeri ise $D = -1.0$ olarak alınmıştır. M düzen parametresi artan sıcaklıkla birlikte yumuşak bir artış eğilimi sergiler. HM/CM-NP için M 'nin kritik değerleri Curie sıcaklık değerindeki davranışlarına göre şekillenir ve böylece sistem CM-NP için daha düşük sıcaklık değerlerinde FM fazdan PM faza geçiş gerçekleşir.

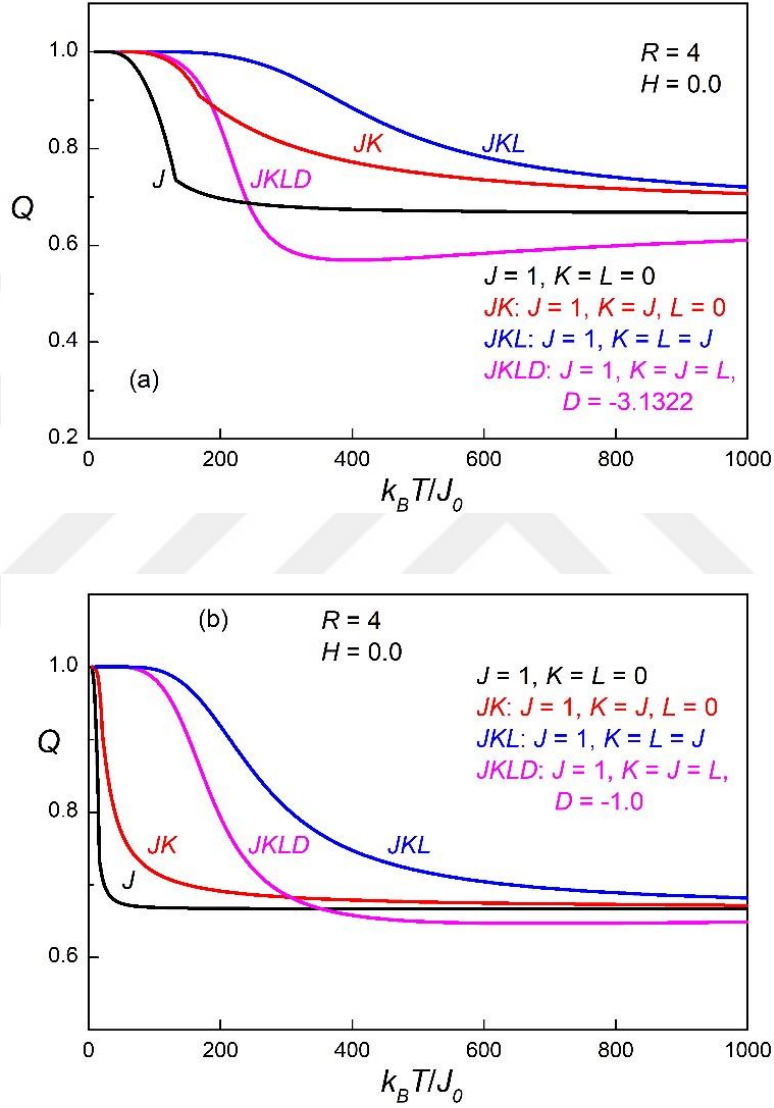
Farklı L değerleri için HM/CM-NP için $M - k_B T/J_0$ değişim grafiği Şekil 3.4'de gösterilmiştir. Elde edilen eğrilerde bilineer ve kristal alan etkileşim değerleri $J = 1.0, D = 1.0$, dış manyetik alan değeri $H = 0.0$ ve yarıçap $R = 4$ olarak alınmıştır. HM/CM-NP için mıknatıslanma değeri artan sıcaklıkla birlikte 1'den 0'a doğru bir azalış görüldü. HM-NP için artan dipol-kuadrupol değeri ile birlikte faz geçiş sıcaklığı artarken CM-NP için dipol-kuadrupol değerinin faz geçiş sıcaklığında bir etkisi görülmemiştir.



Şekil 3.4. Farklı L değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için mıknatıslanmanın indirgenmiş sıcaklığa ($k_B T/J_0$) bağlı değişimi. $J = 1.0, D = 1.0, H = 0.0$.

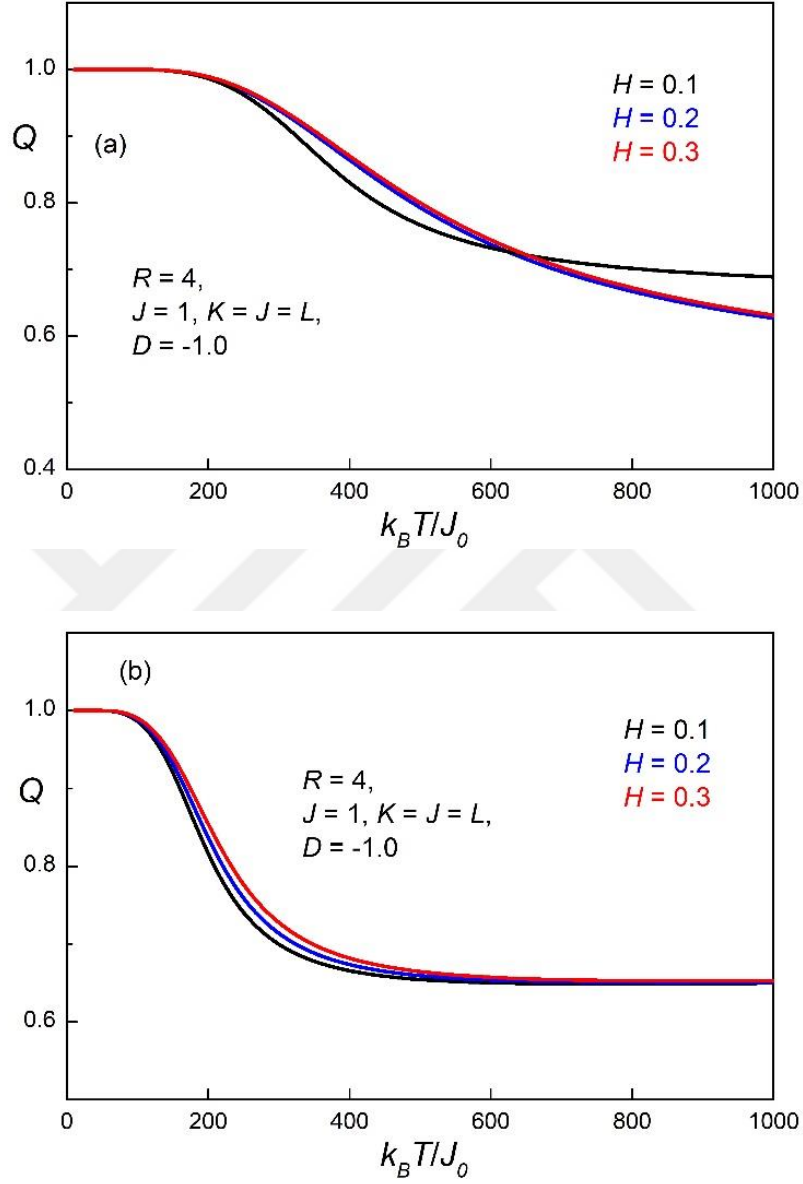
3.1.2. Homojen ve kompozit nanoparçacığın kuadrupol düzen eğrileri

Şekil 3.5’de kare örgü üzerinde tanımlanan ve parçacık yarıçapı $R = 4$ olan tek domenli homojen/kompozit nanoparçacığın manyetik alan yokluğunda ($H = 0.0$) kuadrupol düzen (Q) eğrilerinin indirgenmiş sıcaklığa ($k_B T/J_0$) göre değişimi görülmektedir.



Şekil 3.5. (a) Homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için kuadrupol düzen parametresinin indirgenmiş sıcaklığa ($k_B T/J_0$) bağlı değişimi. $R = 4, H = 0.0$.

HM-NP için çekirdek, ara yüzey ve yüzey için dipol-dipol/kuadrupol-kuadrupol etkileşme değerleri $J_C = J_{CS} = J = 1$, $K_C = K_{CS} = K$, CM-NP için $J_C = J = 1$, $J_{CS} = -J$, $K_C = K$, $K_{CS} = -K$ seçilmiştir. Her iki durumda da $L_C = L_{CS} = L$ ve $D_C = D$ olarak alındı.

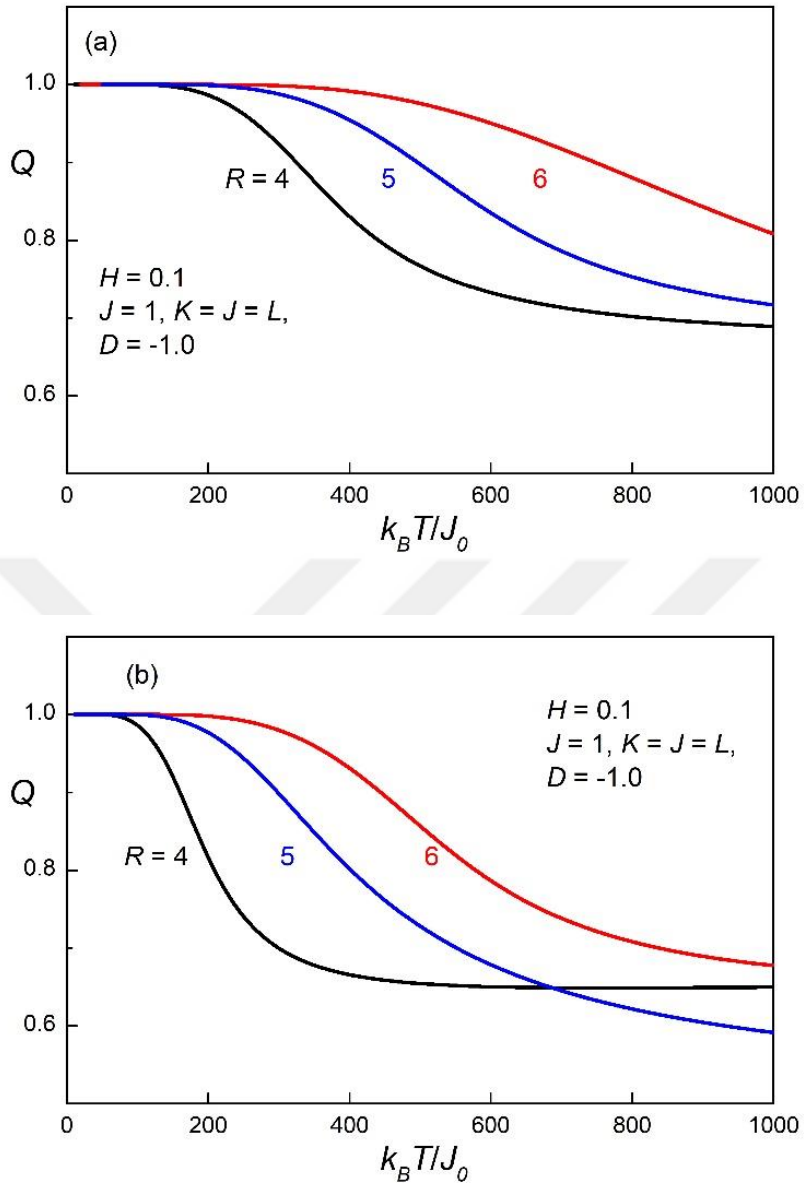


Şekil 3.6. Farklı H değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için kuadrupol düzen parametresinin indirgenmiş sıcaklığa ($k_B T / J_0$) bağlı değişimi. $R = 4$, $J = 1.0$, $K = J = L$, $D = -1.0$.

Q düzen parametresinin artan sıcaklıkla birlikte azaldığı ancak sıfıra düşmeyerek yumuşak bir azalış eğilimi sergilediği görüldü. Bu durum kuadrupol düzen parametresinin tanımından kaynaklanmaktadır. HM-NP için sadece bilineer etkileşme (J / siyah eğri) varlığında $Q = 0.7$ değerinde, bilineer ve bikuadartik etkileşme varlığında (JK / kırmızı eğri) kırılma olduğu sonucuna varıldı. Hem HM-NP hem de CM-NP için dipol-kuadrupol etkileşme (JKL / mavi eğri) dahil edildiğinde faz geçiş sıcaklığının arttığı bulundu.

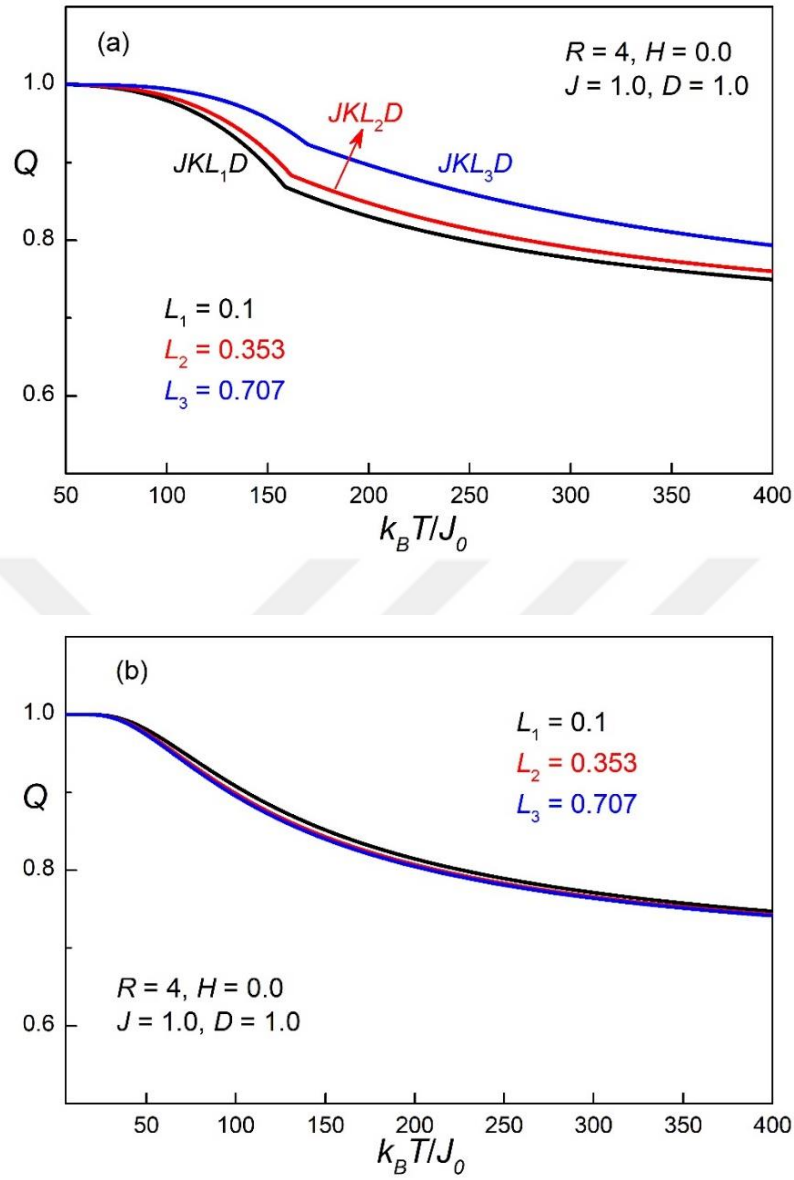
Farklı H değerleri için HM/CM-NP için $Q - k_B T / J_0$ bağlı değişimi Şekil 3.6'da verilmiştir. Artan sıcaklıkla birlikte kuadrupol düzen parametre değeri $Q \sim 0.7$ değerinde yumuşak bir eğilim ile azalma göstermektedir. Kuadrupol düzeni yine artan sıcaklıkla birlikte 1.0 'den başlayarak sürekli olarak azalır ve Şekil 3.1'deki gibi ikinci-derece faz geçişi sergiler.

Şekil 3.7'de farklı R değerleri için HM/CM-NP için kuadrupol düzen parametresinin indirgenmiş sıcaklığa göre değişimi gösterildi. $Q - k_B T / J_0$ eğrilerinde manyetik alan değeri bilineer, bikuadartik, dipol-kuadrupol etkileşme değerleri $J = 1.0$, $K = J = L$, kristal alan değeri, $D = -1.0$ ve manyetik alan değeri $H = 0.1$ olarak alınmıştır. HM-NP için artan sıcaklıkla ve yarıçap değeri ile birlikte Q değeri yaklaşık 0.8 civarında CM-NP için ise yaklaşık olarak 0.7 civarında bir düşüş oluşmuştur.



Şekil 3.7. Farklı R değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için kuadrupol düzen parametresinin indirgenmiş sıcaklığa ($k_B T / J_0$) bağlı değişimi. $J = 1.0$, $K = J = L$, $D = -1.0$, $H = 0.1$.

Kare örgülü homojen ve kompozit nanoparçacığın kuadrupol düzen parametresinin indirgenmiş sıcaklığa göre değişimi $R = 4, J = 1.0, D = 1.0, H = 0.0$ ve farklı L değerleri için Şekil 3.8’de elde edildi. HM-NP için Q değeri artan sıcaklıkla birlikte $Q \sim 0.9$ değerinde bir kırılma davranışı sergileyerek azalma eğilimi göstermiştir. Yine HM-NP için artan dipol-kuadrupol değeri ile birlikte faz geçiş sıcaklığının düştüğü görüldü.

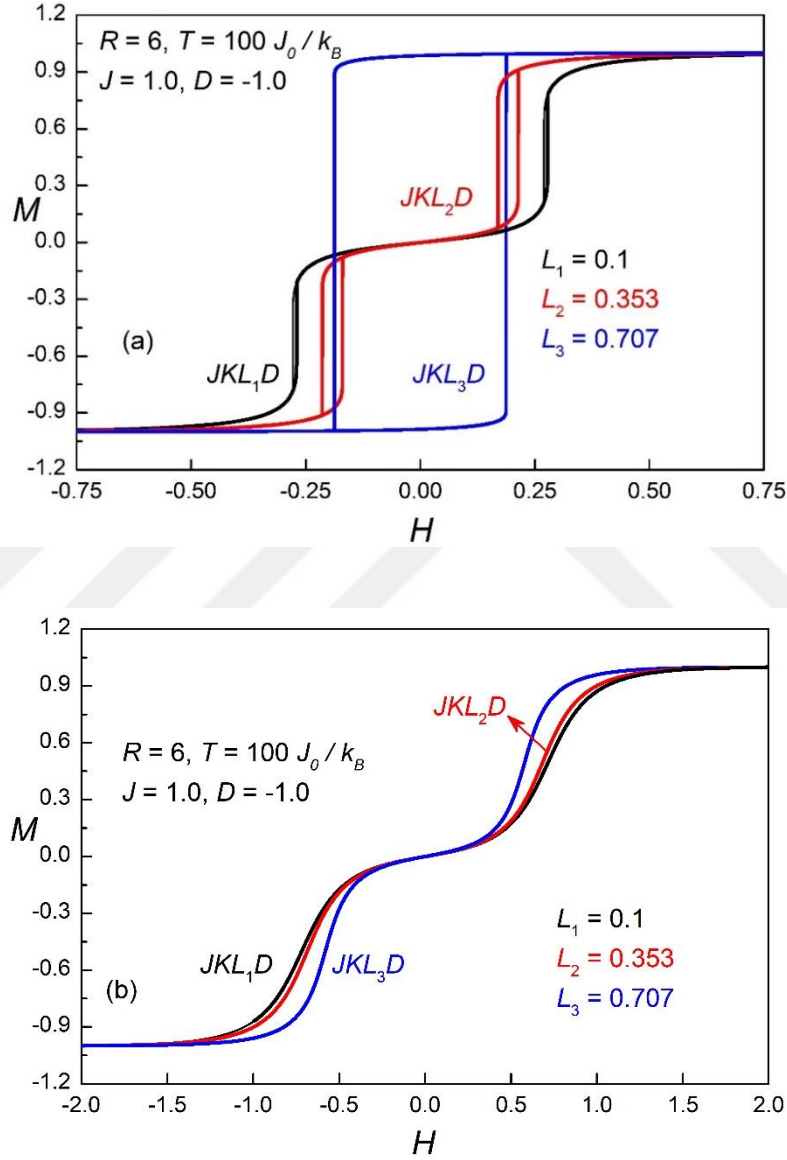


Şekil 3.8. Farklı L değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için kuadrupol düzen parametresinin indirgenmiş sıcaklığa ($k_B T / J_0$) bağlı değişimi. $J = 1.0$, $D = 1.0$, $H = 0.0$.

CM-NP için ise kuadrupol düzen parametresinin sıcaklığa göre değişiminde dipol-kuadrupol etkileşme etkisi fazla görülmedi. Artan L değeri ile $Q - k_B T / J_0$ eğrilerinde yaklaşık aynı davranış görüldü.

3.1.3. Homojen ve kompozit nanoparçacığın manyetik histerezis eğrileri

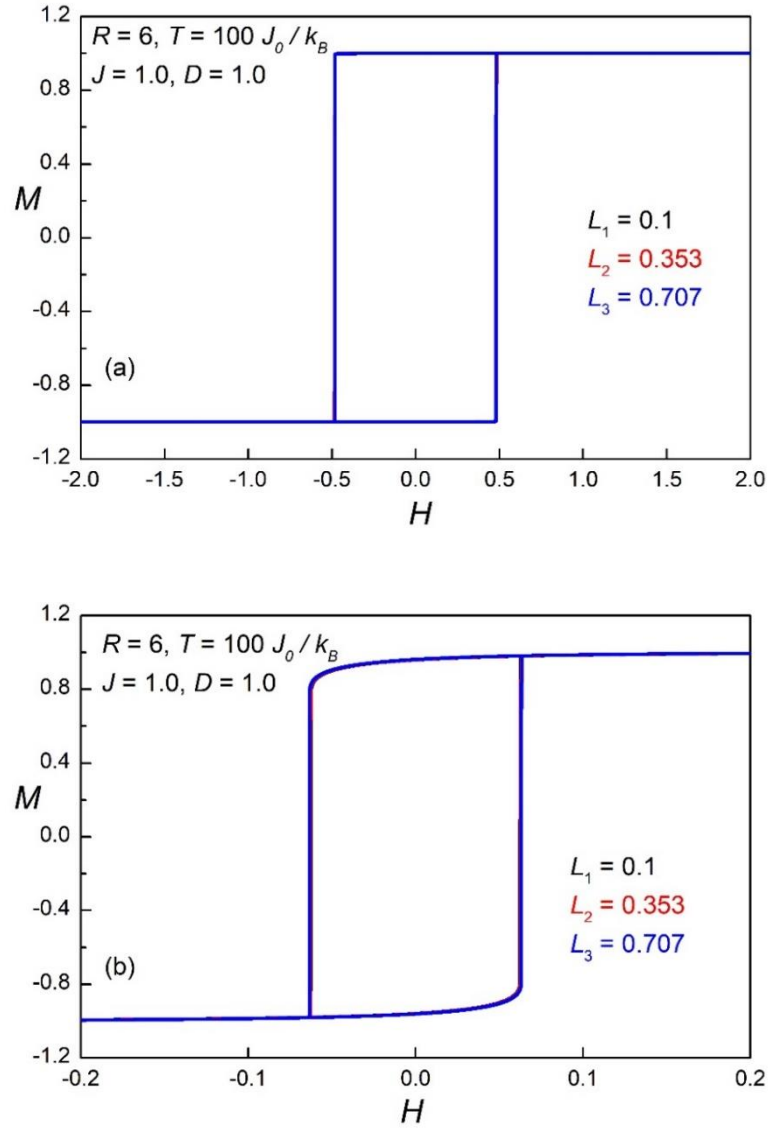
Şekil 3.9-3.15’ de HM/CM-NP için manyetik histerezis eğrileri verilmiştir. HM-NP için çekirdek, ara yüzey ve yüzey için dipol-dipol/kuadrupol-kuadrupol etkileşme değerleri $J_C = J_{CS} = J = 1$, $K_C = K_{CS} = K$, CM-NP için $J_C = J = 1$, $J_{CS} = -J$, $K_C = K$, $K_{CS} = -K$ seçilmiştir. Her iki durumda da $L_C = L_{CS} = L$ ve $D_C = D$ olarak alındı.



Şekil 3.9. Farklı L değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için mıknatıslanmanın manyetik alana (H) göre değişimi. $R = 6$, $T = 100 J_0 / k_B$, $J = 1.0$, $D = -1.0$.

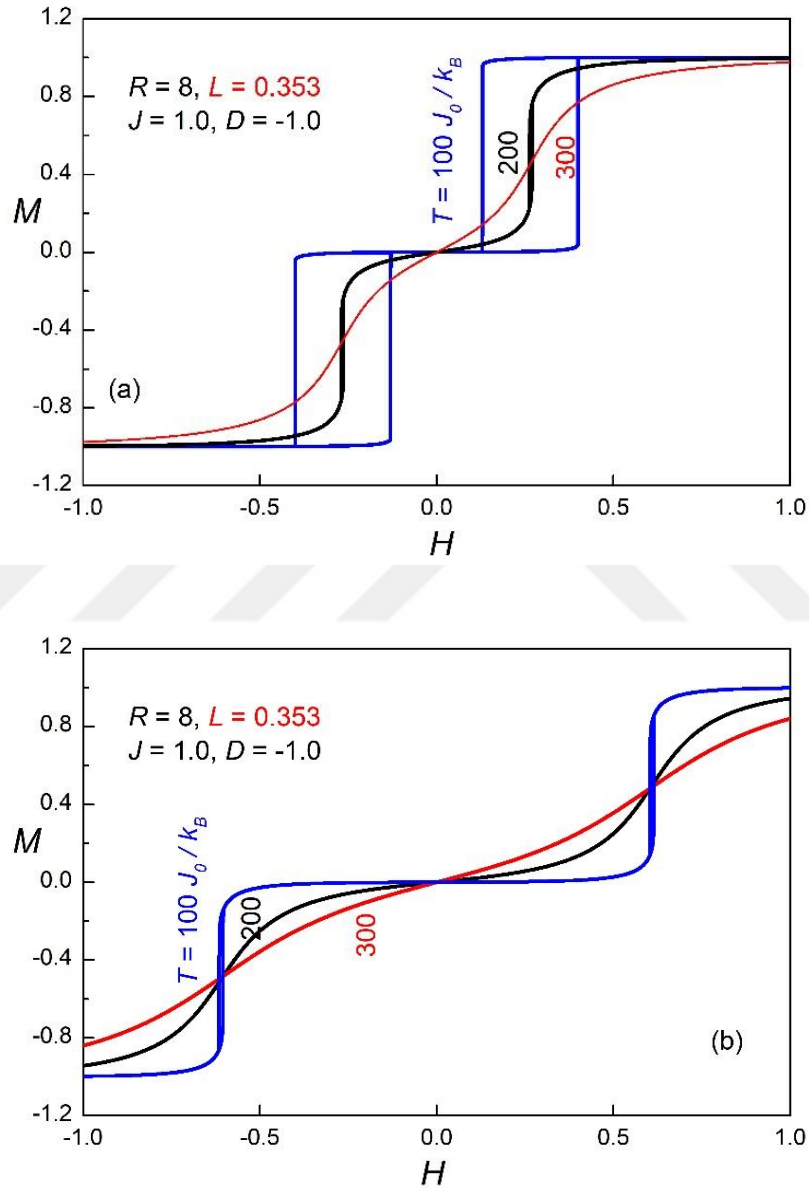
Şekil 3.9'da homojen nanoparçacık için $T = 100 J_0/k_B$, $D = -1.0$ ve yarıçap $R = 6$ alınarak dipol-kuadrupol (L) etkileşmesinin farklı değerlerinde H dış manyetik alana göre histerezis eğrileri gösterilmiştir. Homojen NP için $L = 0.707$ değerinde simetrik tek lop oluşurken, $L = \sqrt{JK}$ değerinin azalması ile çift lop oluşmaktadır (kırmızı ve siyah eğriler). Ayrıca, azalan L değeri ile birlikte kayma olduğu gözlemlendi (siyah eğri). Kompozit NP için ise farklı L değerlerinde çift süperparamanyetik (double SP) histerezis eğrileri elde edildi.

Şekil 3.10'da kare örgülü tek domenli homojen nanoparçacığın pozitif kristal alan değeri ve farklı L değerleri kullanılarak histerezis eğrileri görülmektedir. $D = 1.0$ değeri için HM/CM-NP için pozitif ve simetrik histerezis eğrileri oluşmuş ve dipol-kuadrupol etkileşmesinin etkisi görülmemiştir.



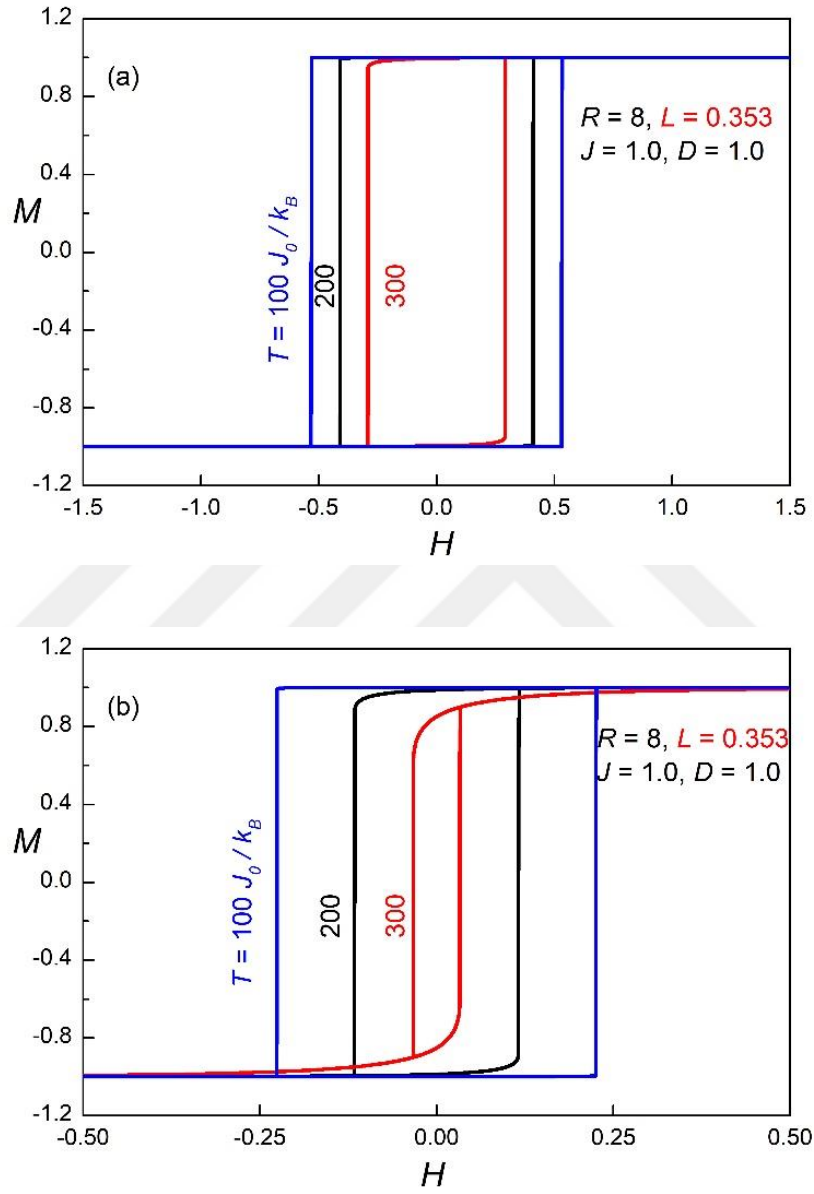
Şekil 3.10. Şekil 3.9 ile aynı fakat $D = 1.0$ için elde edilmiştir.

Kare örgü üzerinde tanımlanan tek domenli HM/CM nanoparçacığın $R = 8$, $J = 1.0$, $L = 0.353$, $D = -1.0$ değerleri kullanılarak değişik sıcaklık değerlerindeki histerezis eğrileri Şekil 3.11’de verildi. HM-NP için düşük sıcaklık değerlerinde çift FM lop (double FM loop) oluşurken artan sıcaklık ile birlikte lop kaybolmuş ve çift SP lop oluştuğu gözlemlendi (Şekil 3.11 (a)’da). CM-NP için ise Şekil 3.11 (b)’de $T = 100 J_0/k_B$ değerinde çift FM lop oluşurken yüksek sıcaklık değerlerinde lop kaybolmuştur.



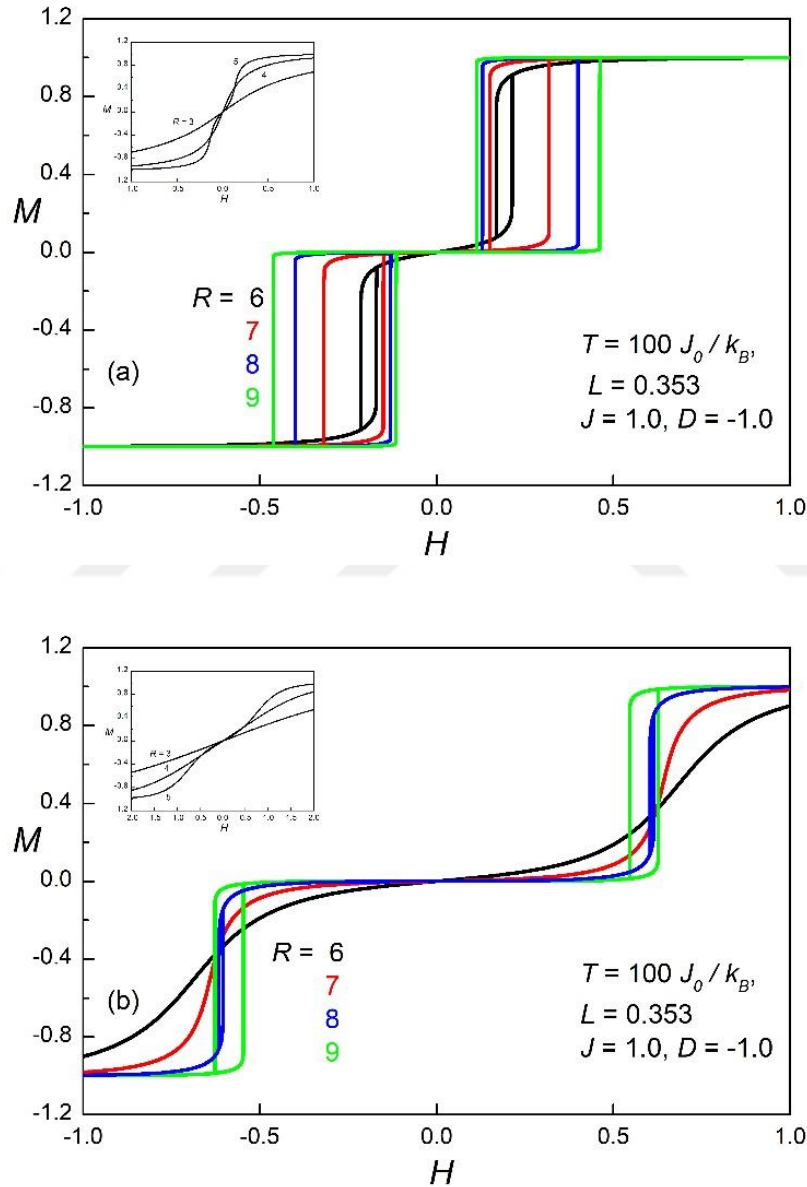
Şekil 3.11. Farklı T değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için mıknatıslanmanın manyetik alana (H) göre değişimi. $R = 8$, $J = 1.0$, $L = 0.353$, $D = -1.0$.

HM/CM-NP için pozitif kristal alan değeri için farklı sıcaklık alan değerleri için simetrik tek FM lop Şekil 3.12’de verildi. Artan sıcaklık ile birlikte histerezis eğrilerinin daraldığı gözlemlendi.



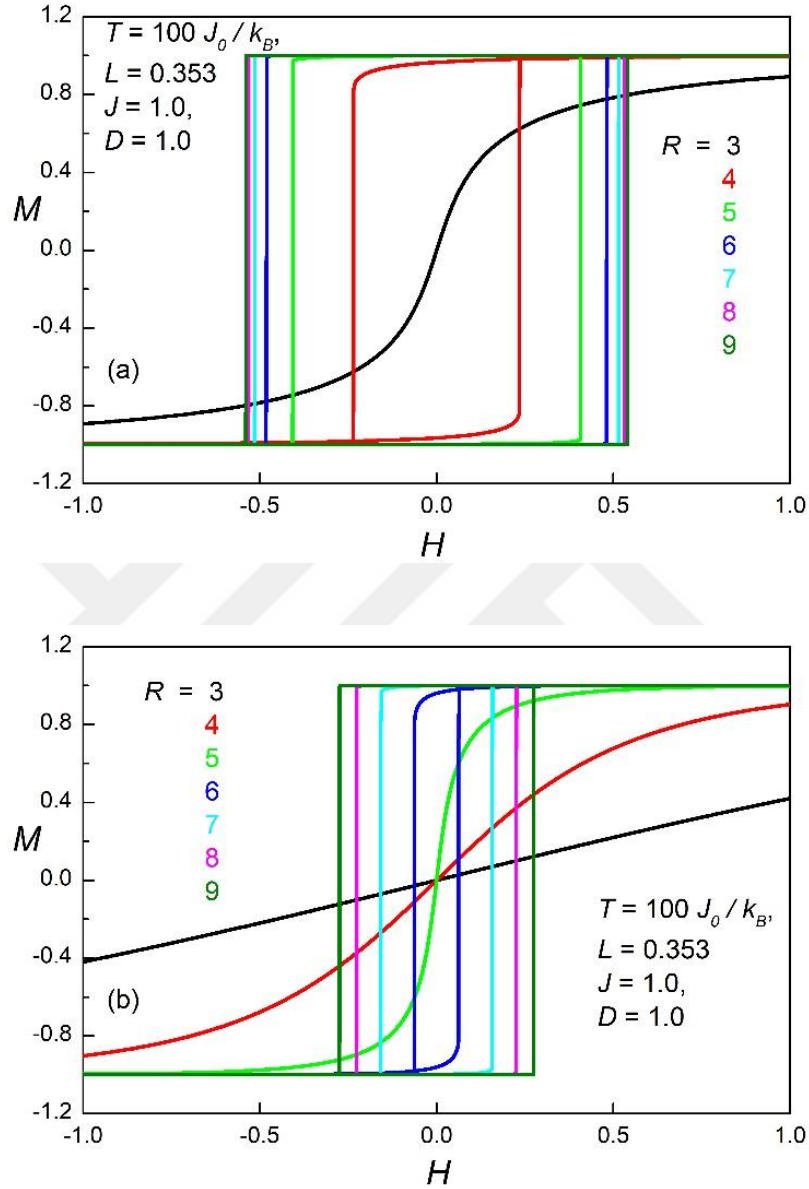
Şekil 3.12. Şekil 3.11 ile aynı fakat $D = 1.0$ için elde edilmiştir.

Farklı R değerleri için HM/CM-NP için $T = 100 J_0/k_B$, $J = 1.0$, $L = 0.353$, $D = -1.0$ değerleri kullanılarak elde edilen histerezis eğrileri Şekil 3.13'de verildi. HM-NP için Şekil 3.13 (a)'da çift FM lop oluşmakta ve artan R değeri ile birlikte lopların genişlediği sonucu gözlemlendi. Daha küçük R değerleri için ($R = 3, 4, 5$) manyetik histerezis eğrileri Şekil 3.13 (a)'da inset içinde gösterilmiş olup SP lop gözlenmiştir. CM-NP için ise Şekil 3.13 (b)'de sadece $R = 8$ ve 9 değerlerinde çift FM lop gözlenirken daha küçük yarıçap değerlerinde çift SP lop gözlenmiştir. Çift FM lop gözlenmesinin nedeni düşük kristal anizotropi parametresidir.



Şekil 3.13. Farklı R değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için mıknatıslanmanın manyetik alana (H) göre değişimi. $T = 100 J_0/k_B$, $J = 1.0$, $L = 0.353$, $D = -1.0$.

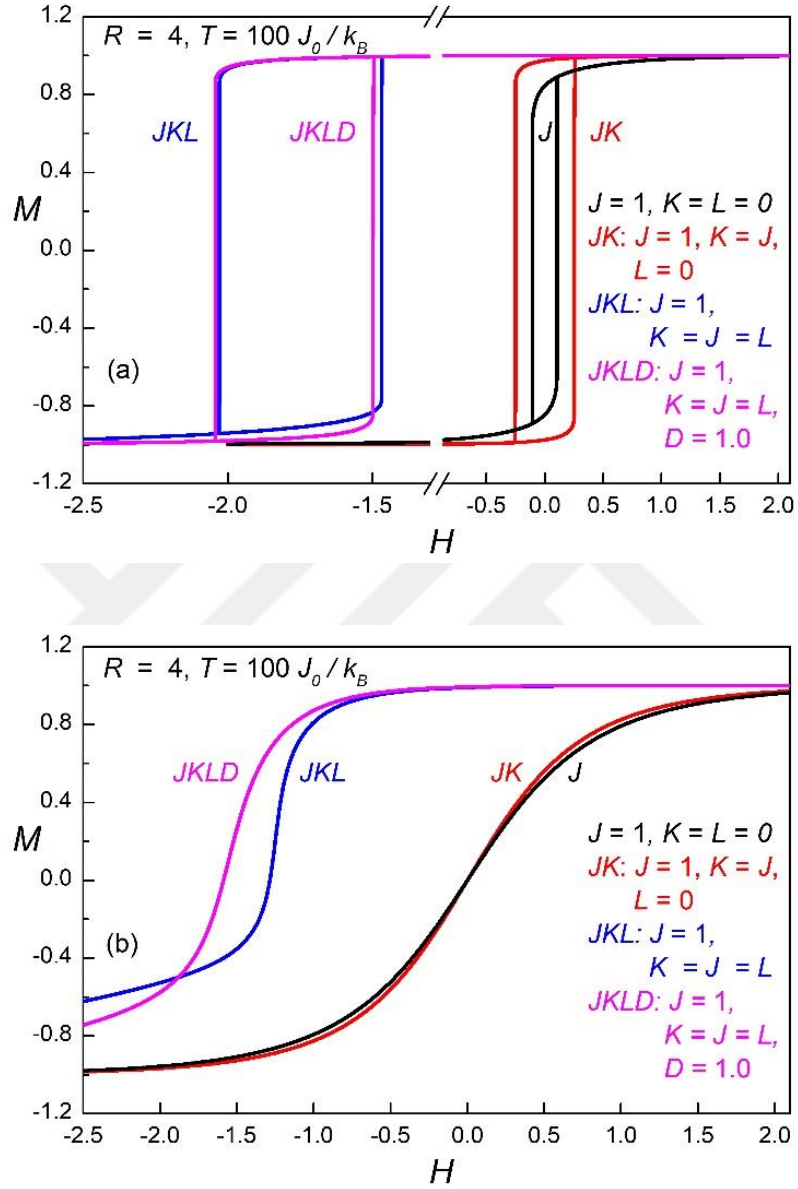
Şekil 3.14'de $T = 100 J_0 / k_B$, $J = 1.0$, $L = 0.353$ ve pozitif kristal alan değeri kullanılarak farklı R değerleri için HM/CM-NP için histeresis eğrileri verildi. Küçük yarıçap değerlerinde paramanyetik lop oluşurken yüksek R değerlerinde simetrik FM lop oluştuğu gözlemlendi.



Şekil 3.14. Şekil 3.13 ile aynı fakat $D = 1.0$ için elde edilmiştir.

Şekil 3.15'te $R = 4$ ve $T = 100 J_0 / k_B$ için tek domenli homojen ve kompozit nanoparçacığın dipol-kuadrupol etkileşmesinin (L) farklı değerlerinde H dış manyetik alana göre değişimi görülmektedir. HM-NP için FM lop oluşurken, CM-NP için ise paramanyetik lop oluştuğu

gözlenmektedir. Şekil 3.15 (a)'da dipol-dipol etkileşmesi (J / siyah eğri) ve dipol-dipol/kuadrupol-kuadrupol etkileşmesi (JK / kırmızı eğri) için simetrik histeresis eğrisi gözlenirken L parametresi dahil edildiğinde histeresis eğrisinin sola doğru kaydığı görüldü.

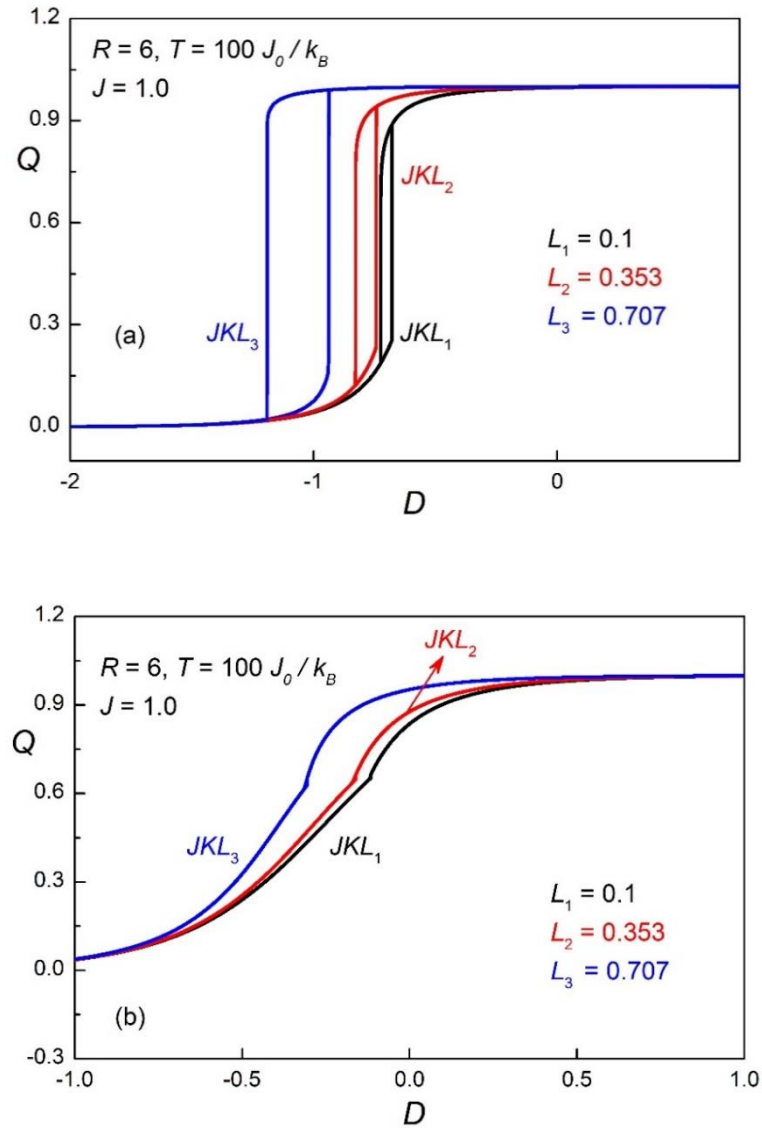


Şekil 3.15. (a) Homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için L etkileşmesinin $M - H$ eğrisi üzerindeki etkisi.

3.1.4. Homojen ve kompozit nanoparçacığın kuadrupol histerezis eğrileri

Şekil 3.16-3.18' de homojen ve kompozit nanoparçacığın kuadrupol histerezis eğrilerini elde etmek için etkileşme değerleri $J_C = J_{CS} = J = 1$, $K_C = K_{CS} = K$, CM-NP için $J_C = J = 1$, $J_{CS} = -J$, $K_C = K$, $K_{CS} = -K$ seçilmiştir. Her iki durumda da $L_C = L_{CS} = L$ ve $D_C = D$ olarak alındı.

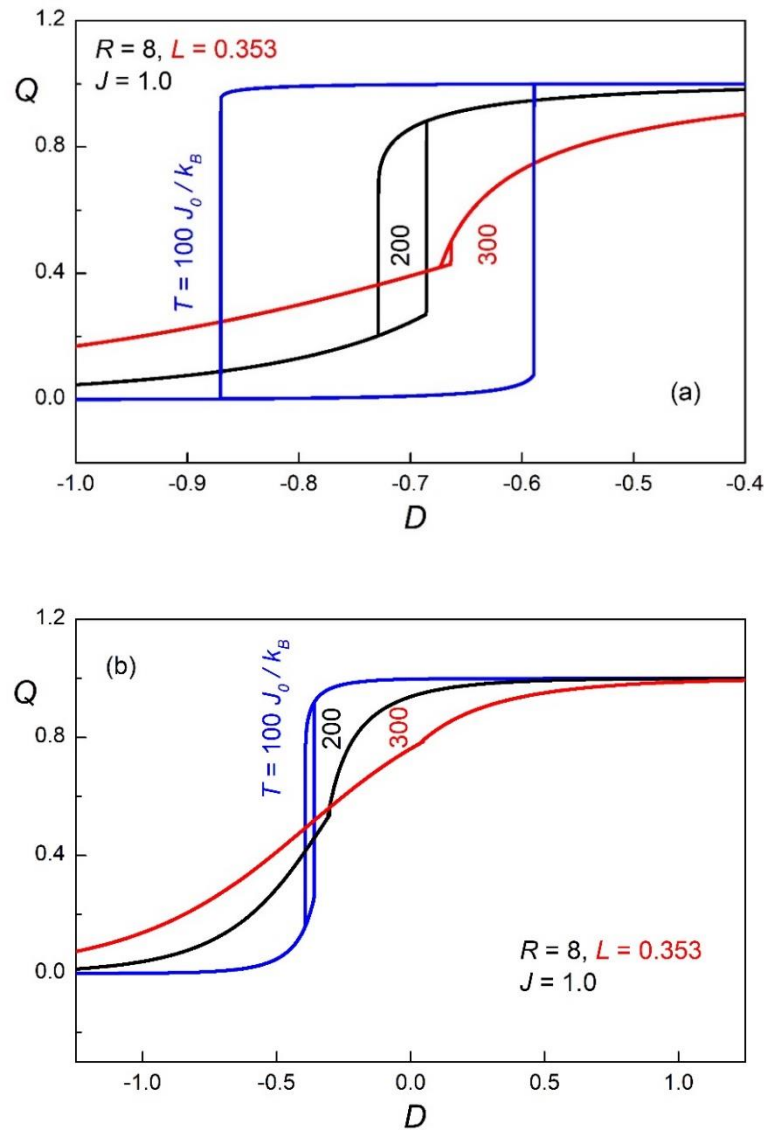
Şekil 3.16'da HM/CM-NP için farklı L değerleri kullanılarak, $R = 6$, $T = 100 J_0/k_B$, $J = 1.0$ için kuadrupol histerezis eğrileri ($Q - D$) verilmiştir. HM-NP için dipol-kuadrupol (L) değeri arttıkça FM histerezis eğrisinin (mavi eğri) genişleyerek sola doğru kaydığı gözlemlendi (Şekil 3.16a). CM-NP için kuadrupol histerezis eğrisinde çok küçük bir lop gözlenmiştir (Şekil 3.16b).



Şekil 3.16. Farklı L değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için kuadrupol değerinin (Q) kristal alana (D) göre değişimi. $R = 6$, $T = 100 J_0/k_B$, $J = 1.0$.

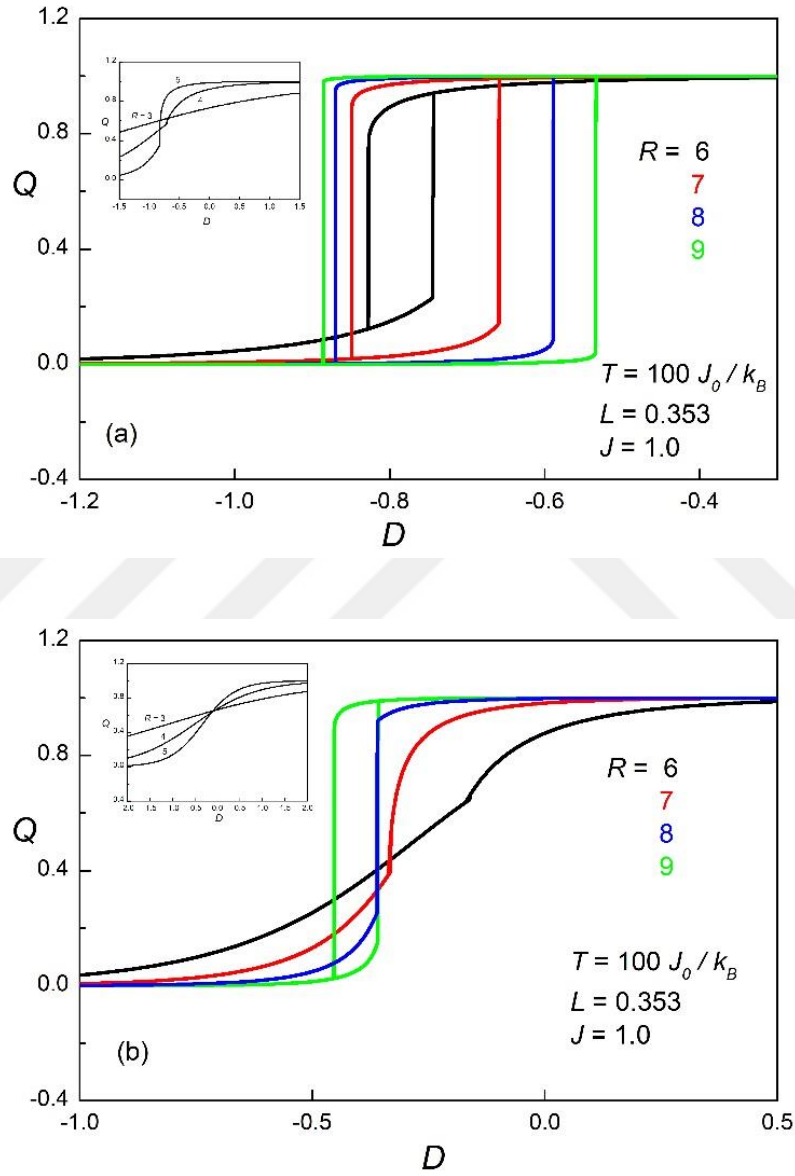
Ayrıca Şekil 3.16’da artan L değeri ile birlikte histerezis eğrisinin sola doğru kaydığı görüldü. $Q - D$ eğrilerinde $M - H$ eğrilerinden farklı olarak histerezis eğrisi sola doğru kaymaktadır. Diğer bir deyişle, negatif D bölgesine olan kayma değiş-tokuş etkileşmesinin etkisi olarak bilinir.

Farklı sıcaklık değerleri için HM/CM-NP için kuadrupol histerezis eğrileri $R = 8, J = 1.0, L = 0.353$ değerleri kullanılarak Şekil 3.17’de elde edildi. Şekil 3.17 (a)’da düşük sıcaklık değerlerinde geniş FM lop oluşurken sıcaklık arttıkça kuadrupol histerezis eğrisinin küçüldüğü görüldü. Şekil 3.17 (b)’de ise CM-NP için yüksek sıcaklık değerlerinde kuadrupol histerezis eğrilerinde yarıлма gözlenmedi.



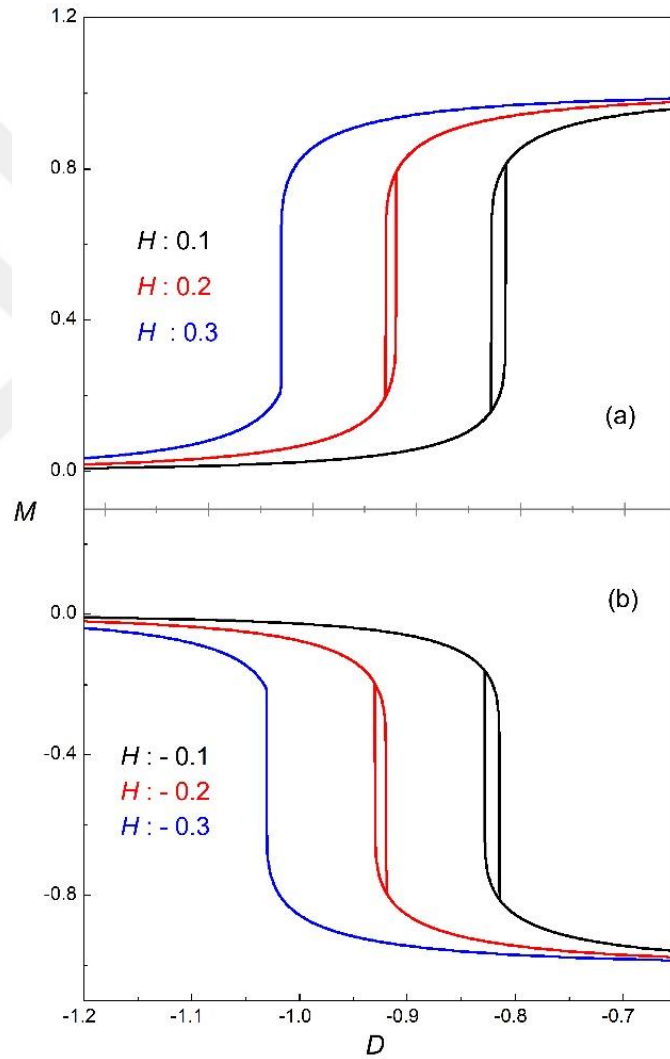
Şekil 3.17. Farklı T değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için kuadrupol değerinin (Q) kristal alana (D) göre değişimi. $R = 8, J = 1.0, L = 0.353$.

Şekil 3.18’de farklı R değerleri için $T = 100 J_0/k_B$, $J = 1.0$, $L = 0.353$ değerleri kullanılarak kuadrupol histerezis eğrileri gösterilmiştir. HM-NP için Şekil 3.18 (a)’da FM lop oluşmakta ve artan R değeri ile birlikte lopların genişlediği sonucu görüldü. Daha küçük R değerleri için ($R = 3, 4, 5$) kuadrupol histerezis eğrileri Şekil 3.18 (a)’de inset içinde verilmiş olup paramanyetik lop elde edilmiştir. CM-NP için ise Şekil 3.18 (b)’de azalan R değeri ile birlikte histerezis yarılmaları küçülüp kaybolmaktadır.



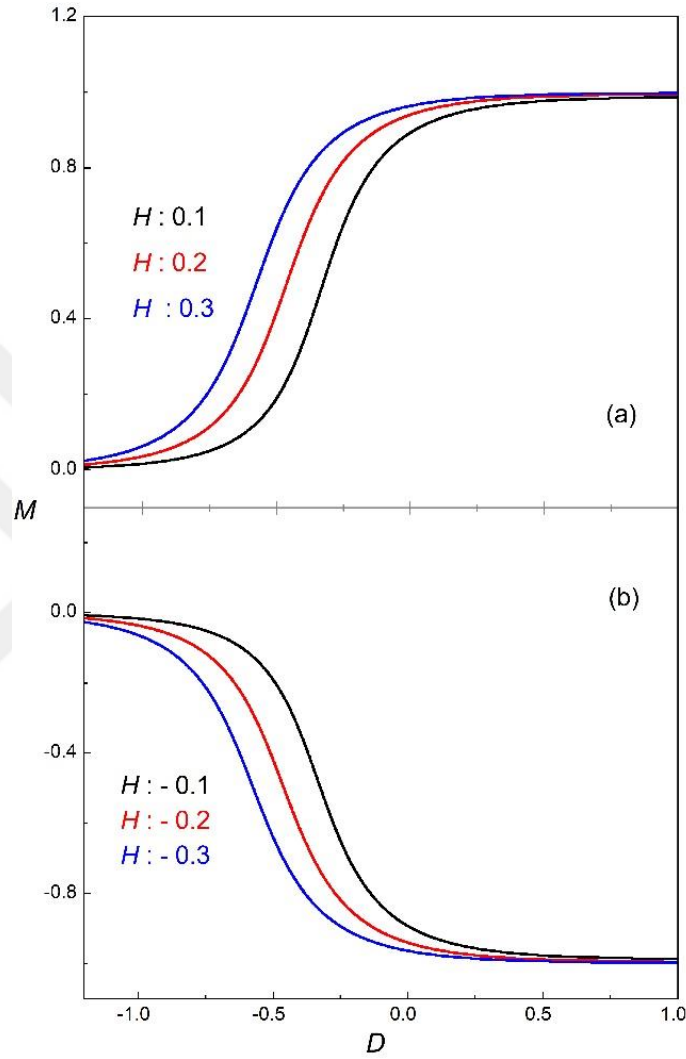
Şekil 3.18. Farklı R değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için kuadrupol değerinin (Q) kristal alana (D) göre değişimi. $T = 100 J_0/k_B$, $J = 1.0$, $L = 0.353$.

Şekil 3.19’da farklı H değerleri için homojen nanoparçacığın mıknatıslanmanın kristal alana (D) göre değişimi $R = 6, T = 100 J_0/k_B, L = 0.1$ değerleri kullanılarak elde edildi. $H = \pm 0.1, \pm 0.2, \pm 0.3$ değerleri için mıknatıslanmanın doyum değerleri $D \sim -0.65$ değerinde $M \sim \pm 1.0$ olarak bulunmuştur. Ayrıca dış manyetik alanın işareti değiştiğinde zıt yönlü iki spinden kaynaklanan eğiminde zıt olduğu sonucuna varıldı. Pozitif dış manyetik alan değerlerinde, azalan H değeri ile birlikte lop oluştuğu görülürken negatif H değerleri için azalan H değerinde lop küçülüp kaybolmaktadır. Şekil 3.19’da elde edilen eğrilerin daha önce yapılan teorik çalışmalarla uyumlu olduğu gözlemlendi (Masrour ve ark., 2017, Bouda ve ark., 2019).



Şekil 3.19. Farklı H değerlerinde homojen nanoparçacık için mıknatıslanmanın kristal alana (D) göre değişimi. $R = 6, T = 100 J_0/k_B, J = 1.0, L = 0.1$.

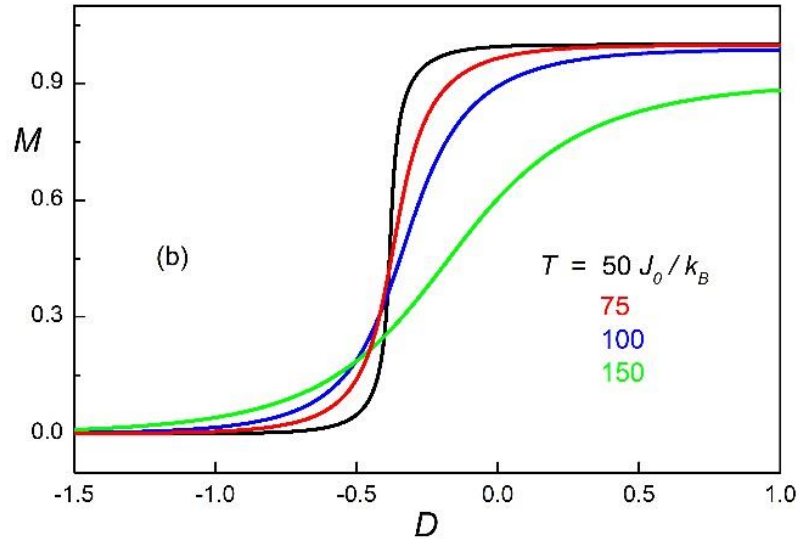
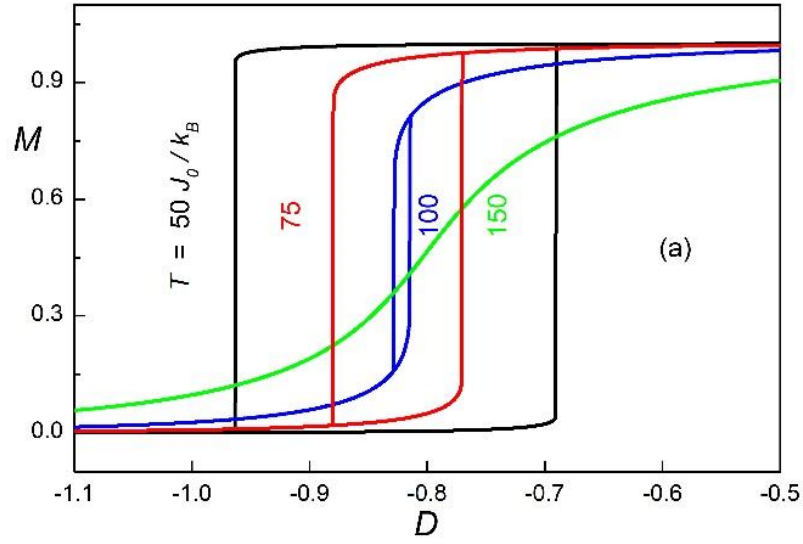
Şekil 3.20’de şekil 3.19 ile aynı ancak kompozit nanoparçacık için $M - D$ eğrisi elde edilmiştir. Homojen nanoparçacığın aksine kompozit nanoparçacık için $M - D$ eğrilerinde pozitif ve negatif H değerleri için yarıлма gözlenmemiştir. Pozitif H değerleri için artan H değeri ile birlikte eğrilerin negatif D değerine doğru kaydığı sonucuna varıldı.



Şekil 3.20. Farklı H değerlerinde kompozit nanoparçacık için mıknatıslanmanın kristal alana (D) göre değişimi. $R = 6, T = 100 J_0/k_B, J = 1.0, L = 0.1$.

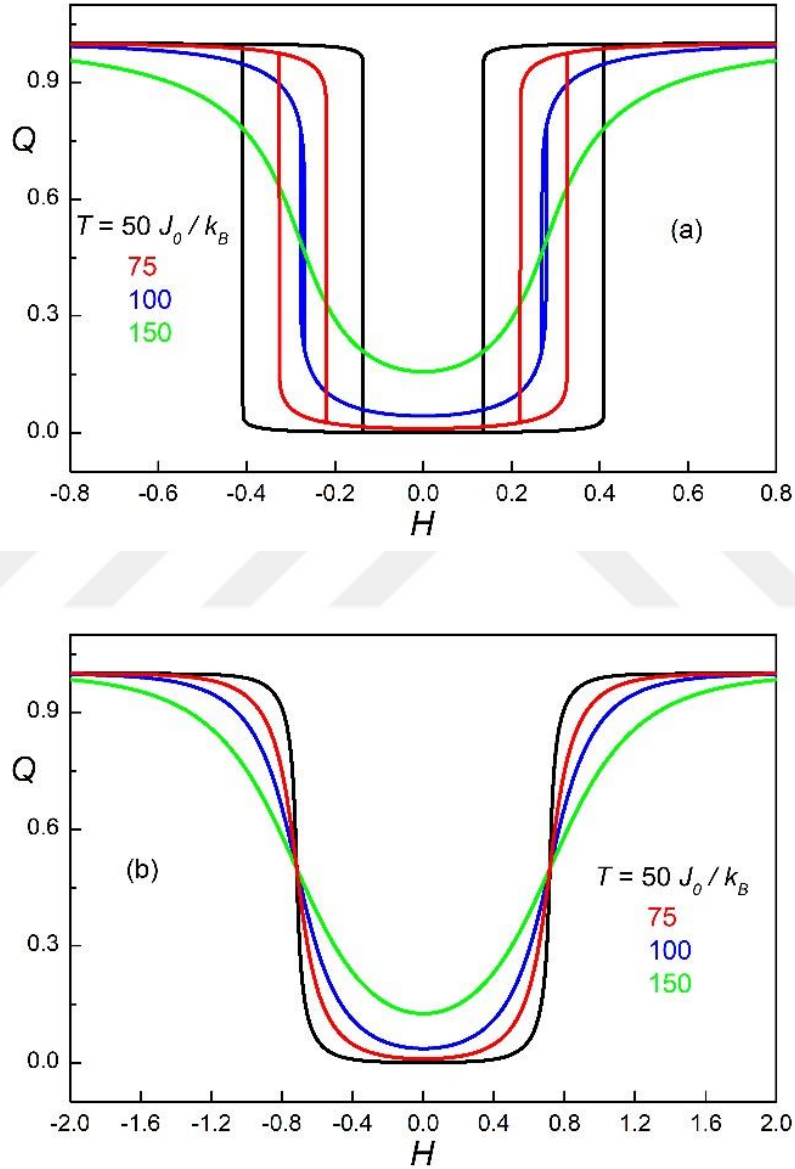
Şekil 3.21’de farklı T değerleri ve $R = 6, H = 0.1, J = 1.0, L = 0.1$ kullanılarak HM/CM-NP için $M - D$ değişimi verildi. HM-NP için düşük sıcaklık değerlerinde FM lop oluşurken sıcaklık arttıkça yarıлmanın kaybolduđu görüldü. CM-NP için ise tüm sıcaklık değerlerinde paramanyetik eğri elde edildi. Ayrıca, sıcaklığın tüm değerleri için tüm manyetizasyon

eğrilerinin $D \sim -0.5$ kristal alanında kesiştiğine dikkat etmek gerekir. Bu nedenle, küçük sıcaklıklar için $H = 0.1$ değerinde, D değerinin artmasıyla mıknatıslanmanın hızlı bir şekilde doyma değerine $M \sim 1$ vardıği görölmektedir. Mıknatıslanmanın kristal alana göre değışimi literatürde daha önce yapılan çalışmalar ile uyumlu olduđu sonucuna varıldı (Masrour ve ark., 2017).



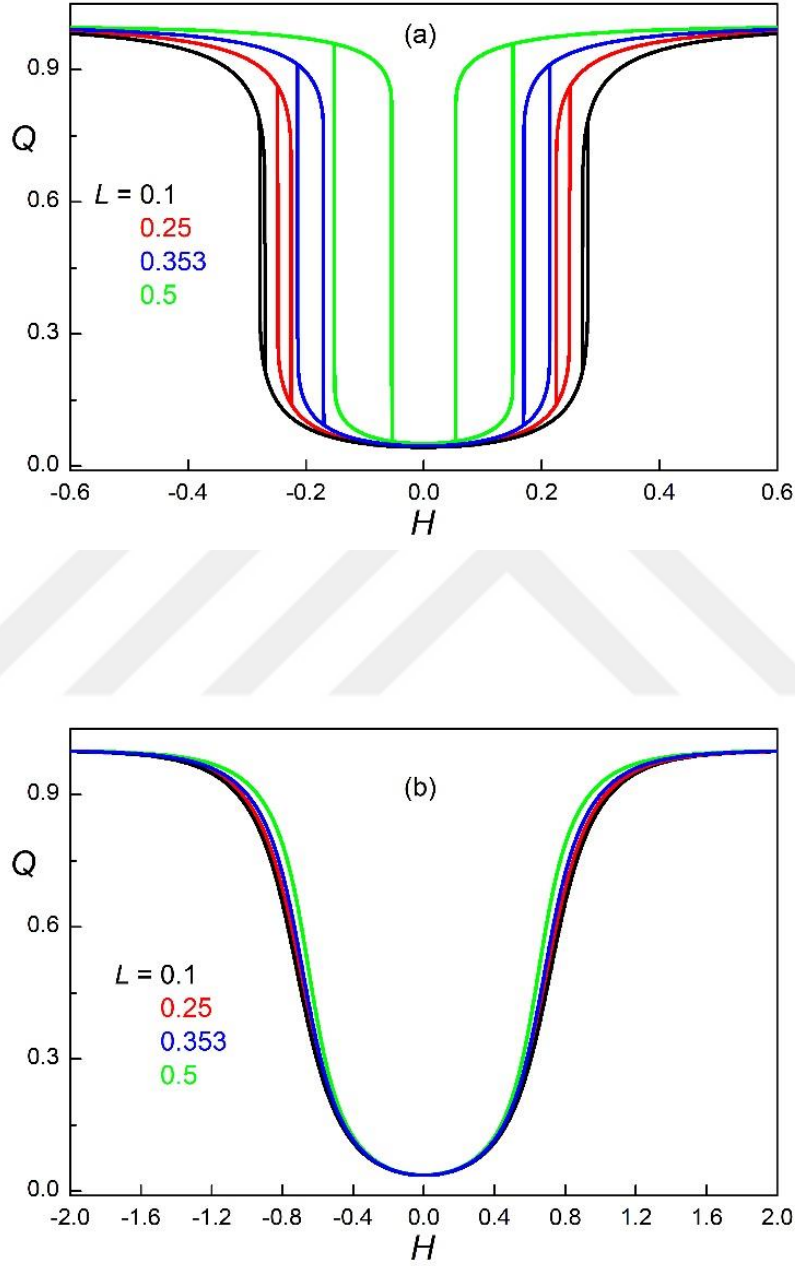
Şekil 3.21. Farklı T değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için mıknatıslanmanın kristal alana (D) göre değışimi. $R = 6, H = 0.1, J = 1.0, L = 0.1$.

Farklı T değerleri için HM/CM nanoparçacığın kuadrupol moment (Q) değerinin kristal alana (D) göre değişimi $R = 6$, $J = 1.0$, $L = 0.1$, $D = -1.0$ kullanılarak Şekil 3.22’de gösterildi. Şekil 3.22 (a)’da HM-NP için dış manyetik alanın negatif ve pozitif bölgesinde olmak üzere iki FM lop oluşmuştur. Düşük sıcaklıklarda yarılma oluşurken artan sıcaklıkla birlikte yarılmanın kaybolduğu görülmektedir. Şekil 3.22 (b)’de ise CM-NP için tüm sıcaklık değerlerinde yarılma gözlenmemiştir.



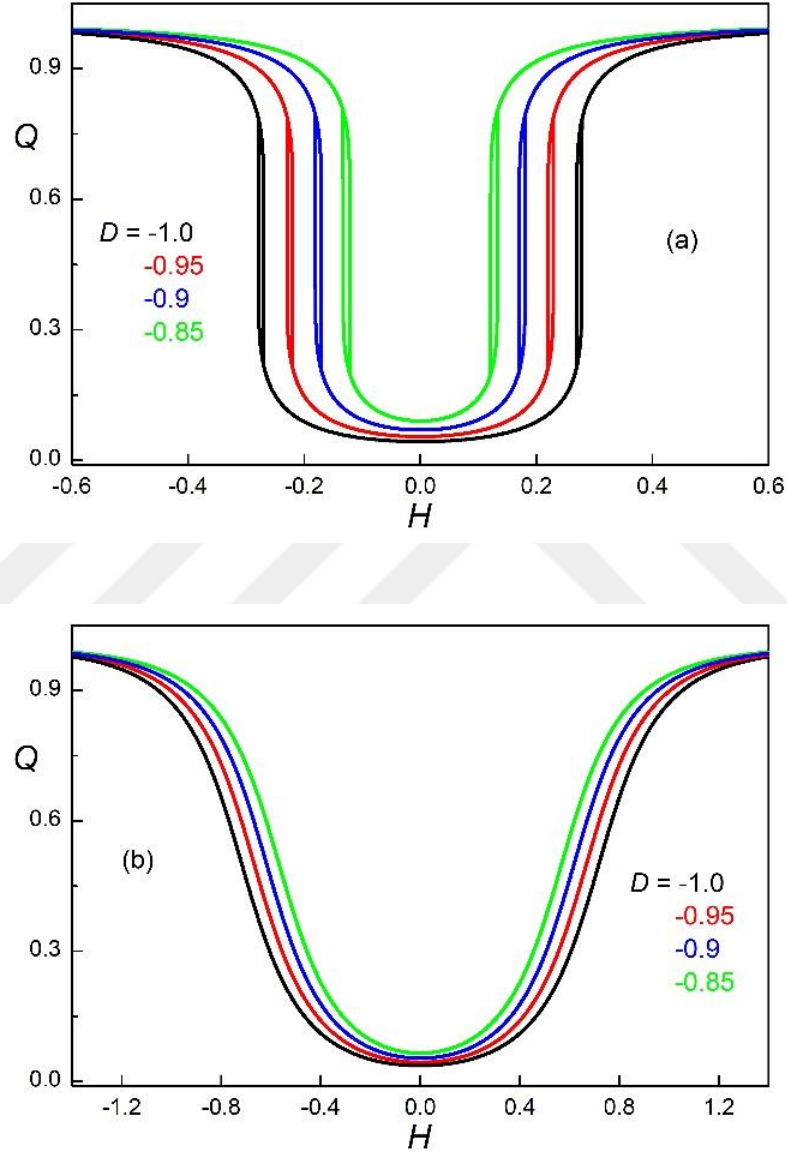
Şekil 3.22. Farklı T değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için kuadrupol değerinin manyetik alana (H) göre değişimi. $R = 6$, $J = 1.0$, $L = 0.1$, $D = -1.0$.

Şekil 3.23’de farklı L değerleri için HM/CM-NP için $R = 6, T = 100 J_0/k_B, J = 1.0, D = -1.0$ değerleri kullanılarak $Q - H$ grafiği verilmiştir. HM-NP için H ’nin hem pozitif hem negatif bölgelerinde loplar oluşmaktadır. Artan L değeri ile birlikte lopların genişlediği görülmektedir. CM-NP için ise farklı L değerlerinde lop oluşmadığı sonucu elde edildi.



Şekil 3.23. Farklı L değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için kuadrupol değerinin manyetik alana (H) göre değişimi. $R = 6, T = 100 J_0/k_B, J = 1.0, D = -1.0$.

Şekil 3.24’de farklı D değerleri için HM/CM-NP için $R = 6, T = 100 J_0/k_B, J = 1.0, L = 0.1$ değerleri kullanılarak $Q - H$ eğrisi verilmiştir. HM-NP için D ’nin farklı değerlerinde dış manyetik alanın hem pozitif hem de negatif bölgelerinde lop oluşurken CM-NP için farklı D değerlerinde lop gözlenmemiştir. Şekil 3.24 (a)’da artan D değeri ile birlikte lopların büyüdüğü görüldü. Tez çalışmasında elde edilen $Q - H$ eğrilerinin literatürde daha önce elde edilen $Q - H$ eğrileri ile uyumlu olduğu sonucuna ulaşıldı (Mancini ve ark., 2008, Mancini, 2010).



Şekil 3.24. Farklı D değerlerinde (a) homojen ve (b) kompozit nanoparçacık için kuadrupol değerinin manyetik alana (H) göre değişimi. $R = 6, T = 100 J_0/k_B, J = 1.0, L = 0.1$.

SONUÇ

Bu tez çalışmasında, dipol-kuadrupol etkileşmeli iki-boyutlu ve kare örgülü homojen ve kompozit nanoparçacıkların manyetik ve kuadrupol özellikleri etkileşme türlerine, parçacık yarıçapına ve sıcaklığa göre detaylıca incelendi. Model olarak, bilineer, bikuadratik, tek etkileşmeli ve kristal alan etkileşmeli spin-1 Ising modeli ve metot olarak da çift yaklaşım yöntemi kullanıldı. Tez çalışmasından elde edilen sonuçlar aşağıdaki şekilde sıralanabilir.

1) Dipol-kuadrupol etkileşmesinin (L), dipol-dipol (J), kuadrupol-kuadrupol (K) ve kristal alan (D) etkileşme türlerine göre parçacığın mıknatıslanma eğrileri üzerinde yaptığı değişiklikler incelendi. Yarıçap $R = 4$ ve manyetik alan $H = 0.0$ alınarak homojen ve kompozit nanoparçacık için bilineer (J), bilineer-bikuadratik (JK), bilineer-bikuadratik-tek etkileşim (JKL) ve bilineer-bikuadratik-tek-kristal alan ($JKLD$) etkileşmeleri için elde edilen sonuçlar karşılaştırıldı. $L = 0$ olduğu durumda sistem birinci derece faz dönüşümü gerçekleştirirken, $L \neq 0$ olduğu durumda ikinci derece faz dönüşümü gerçekleştiği sonucuna ulaşıldı.

2) $JKLD$ etkileşmeli homojen ve kompozit nanoparçacık için farklı dış manyetik alan ve yarıçap değerlerinin mıknatıslanma eğrisi üzerindeki etkisi araştırıldı. Dış manyetik alan ve yarıçap değerleri arttıkça faz dönüşüm sıcaklığının arttığı görüldü. Ayrıca farklı L değerleri için mıknatıslanmanın sıcaklığa bağlı değişimi incelenmiş olup, homojen nanoparçacık için tek etkileşim değerinin artmasıyla faz geçiş sıcaklığının arttığı, kompozit nanoparçacık için ise farklı L değerinin mıknatıslanma üzerinde herhangi bir etkisi olmadığı görüldü.

3) L etkileşmesinin J , K ve D etkileşme türlerine göre parçacığın kuadrupol eğrileri üzerinde yaptığı değişiklikler incelendi. $R = 4$ ve $H = 0.0$ alınarak homojen ve kompozit nanoparçacık için bilineer (J), bilineer-bikuadratik (JK), bilineer-bikuadratik-tek etkileşim (JKL) ve bilineer-bikuadratik-tek-kristal alan ($JKLD$) etkileşmeleri için elde edilen sonuçlar incelendi.

4) Kuadrupol düzen eğrileri, farklı dış manyetik alan ve yarıçap değerleri için detaylıca incelendi. Dış manyetik alan ve yarıçap değerleri arttıkça faz dönüşüm sıcaklığının arttığı görüldü. Bunun yanı sıra, farklı tek etkileşim değerleri için kuadrupol düzenin sıcaklığa bağlı değişimi incelenmiş olup, tek etkileşim değerinin artmasıyla faz geçiş sıcaklığının arttığı görüldü.

5) L etkileşmesinin manyetik histerezis eğrileri üzerindeki etkisi $R = 6$, $T = 100 J_0/k_B$, $J = 1.0$, $D = -1.0$ için elde edildi. Homojen nanoparçacık için L 'nin küçük değerlerinde manyetik alanın negatif ve pozitif değerlerinde çift histerezis eğrisi oluşurken L değeri arttıkça simetrik tek histerezis eğrisi oluştuğu görüldü. Ayrıca L değeri azaldıkça eğrinin daraldığı ve negatif manyetik alan değerine doğru değiş-tokuş kayma etkisi gösterdiği görüldü. Kompozit nanoparçacık için ise histerezis eğrilerinde yarıлма gözlenmeyip süperparamanyetik özellik gözlemlendi. Aynı etkileşim değerleri ancak pozitif kristal alan değeri için ($D = 1.0$) homojen ve

kompozit nanoparçacığın manyetik histerezis eğrileri üzerinde L 'nin etkisi açıkça görülmemiştir.

6) $R = 8, J = 1.0, L = 0.353, D = -1.0$ değerleri ve farklı sıcaklık değerleri için homojen ve kompozit nanoparçacığın manyetik histerezis eğrileri üzerindeki etkisi araştırıldı. Homojen nanoparçacık için düşük sıcaklık değerlerinde ($T = 100J_0/k_B, 200J_0/k_B$) nanoparçacığın iki farklı domende ferromanyetik davranışı görülürken $T = 300J_0/k_B$ değerinde iki farklı domende paramanyetik davranışı gözlemlendi. Kompozit nanoparçacık için ise sadece $T = 100J_0/k_B$ sıcaklık değerinde nanoparçacığın iki farklı domende ferromanyetik davranışı görüldü. Yüksek sıcaklığa doğru gidildikçe paramanyetik davranış sergilediği gözlemlendi. Pozitif kristal alan değeri için ise homojen ve kompozit nanoparçacığın manyetik histerezis eğrilerinin ferromanyetik davranış sergilediği ve artan sıcaklık ile histerezis eğrilerinin daraldığı görüldü.

7) Farklı R değerleri için homojen ve kompozit nanoparçacığın histerezis eğrileri $T = 100 J_0/k_B, J = 1.0, L = 0.353, D = -1.0$ değerleri kullanılarak incelendi. Yarıçap değeri arttıkça nanoparçacığın iki farklı domende ferromanyetik davranış sergilediği görüldü. Aynı etkileşim değerleri ve pozitif kristal alan değeri için histerezis eğrilerinin artan yarıçap değerleri ile genişleyen ferromanyetik davranış sergilediği sonucuna ulaşıldı.

8) L etkileşmesinin manyetik histerezis eğrisi üzerindeki etkisi $R = 4, T = 100 J_0/k_B$ için detaylıca incelendi. $J, JK, JKL, JKLD$ durumları arasındaki farklar gözlemlendi. Bilineer etkileşmesine bikuadratik etkileşmesinde dahil edilmesiyle histerezis eğrisinin genişlediği görüldü. JK etkileşmelerine L ve D etkileşmelerinin de dahil edilmesiyle histerezis eğrilerinin genişleyip negatif manyetik alan değerlerine doğru kaydığı görüldü.

9) L etkileşme parametresinin kuadrupol histerezis eğrileri üzerindeki etkisi homojen ve kompozit nanoparçacık için $R = 6, T = 100 J_0/k_B, J = 1.0$ değerleri kullanılarak incelendi. Homojen nanoparçacık için artan L değeri ile birlikte ferromanyetik histerezis eğrilerinin negatif kristal alan değerine doğru kaydığı görüldü. Kompozit nanoparçacık için ise farklı L değerleri için histerezis eğrilerinde çok küçük yarılma gözlemlendi. Farklı sıcaklık ve yarıçap değerleri için homojen ve kompozit nanoparçacığın kuadrupol histerezis eğrileri detaylıca incelendi. Artan sıcaklık değeri ile histerezis eğrilerinin daraldığı görüldü. Artan nanoparçacık değerinde ise histerezis eğrilerinin genişlediği sonucuna ulaşıldı.

10) Pozitif ve negatif H değerleri için homojen ve kompozit nanoparçacığın mıknatıslanmanın kristal alana (D) göre değişimi $R = 6, T = 100 J_0/k_B, J = 1.0, L = 0.1$ değerleri kullanılarak elde edildi. Homojen nanoparçacık için pozitif dış manyetik alan değerlerinde, azalan H değeri ile birlikte lop oluştuğu görülürken negatif H değerleri için azalan H değerinde lop küçülüp kaybolmaktadır. Kompozit nanoparçacık için ise histerezis eğrilerinde yarılma görülmemiştir. Mıknatıslanmanın kristal alana göre değişimi farklı sıcaklık değerleri için elde edildi. Homojen nanoparçacık için düşük sıcaklık değerlerinde ferromanyetik lop görülürken yüksek sıcaklık

değerlerinde paramanyetik lop gözlemlendi. Kompozit nanoparçacık için ise $M - D$ eğrilerinde yarılma gözlenmemiştir.

11) Farklı T, L ve D değerleri için homojen ve kompozit nanoparçacığın kuadrupol değerinin manyetik alana (H) göre değişimi detaylıca incelendi. Homojen nanoparçacık için farklı T değerlerindeki $Q - H$ eğrisinde dış manyetik alanın negatif ve pozitif bölgesinde olmak üzere iki FM lop oluşmuştur. Düşük sıcaklıklarda yarılma oluşurken artan sıcaklıkla birlikte yarılma kaybolmuştur. Kompozit nanoparçacık için ise tüm sıcaklık değerlerinde yarılma görülmedi. Farklı L değerleri için homojen $Q - H$ eğrisinde H 'nin hem pozitif hem negatif bölgelerinde loplar oluşmakta ve artan L değeri ile lopların genişlediği gözlemlendi. Kompozit nanoparçacık için ise farklı L değerlerinde yarılma gözlenmemiştir. Farklı D değerleri için kuadrupol değerinin manyetik alana göre değişim eğrisinde ise homojen nanoparçacık için dış manyetik alanın hem pozitif hem de negatif bölgelerinde lop oluşurken kompozit nanoparçacık için lop gözlenmemiştir.

Sonuç olarak; iki-boyutlu ve kare örgülü homojen ve kompozit nanoparçacıklara ait manyetik ve kuadrupol özelliklerinin araştırılmasında elde edilen yeni özellikler için bilineer, bikuadratik, kristal alan etkileşmelerine ilave olarak tek etkileşme değerinin de ilişkili olduğu bulunmuştur. Yüksek sıcaklıklarda nanoparçacığın süperparamanyetik davranış sergilerken, düşük sıcaklıklarda ferromanyetik davranış sergilediği görüldü.

KAYNAKÇA

- Ahmadi, T. S., Wang, Z. L., Henglein, A., and El-Sayed, M. A. (1996). Cubic Colloidal Platinum Nanoparticles. *Chemistry of Materials*, 8, 1161-1163.
- Albano, E.V., Binder, K., Heermann, D.W., Paul, W. (1989). The Ising Square Lattice in a L x M Geometry: A Model for The Effect of Surface Steps on Phase Transitions in Adsorbed Monolayers. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 77, 445-460.
- Ankamwar, P., Das, P., Sur, U.K. (2016). Graphene-Gold Nanoparticle-Based Nanocomposites as an Electrode Material in Supercapacitors. *Indian Journal of Physics*, 90(4), 391-397.
- Aouini, S., Ziti, S., Labrim, H., Bahmad, L., Supercond, J. (2017). Monte Carlo Study of a Nano-Hexagonal Structure: Wetting and Layering Transitions. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 30, 455-462.
- Aslibeiki, B., Varvaro, G., Peddis, D., Kameli, P. (2017). Particle Size, Spin Wave and Surface Effects on Magnetic Properties of MgFe_2O_4 Nanoparticles. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 422, 7-12.
- Babin, V., Garstecki, P. and Holyst, R. (2003). Multiple Photonic Band Gaps in the Structures Composed of Core-Shell Particles. *Journal of Applied Physics*, 94, 4244-4247.
- Bader, S. D. (2006). Colloquium: Opportunities in Nanomagnetism. *Reviews of Modern Physics*, 78, 1-15.
- Beker, A.N, Wortis, M. (1976). Blume-Emery-Griffiths-Potts Model in Two Dimensions: Phase Diagram and Critical Properties from a Position-Space Renormalization Group. *Physical Review B* 14, 4946-4963.
- Bhowmik, R.N., Ranganathan, R., Nagarajan, R. (2006). Lattice Expansion and Noncollinear to Collinear Ferrimagnetic Order in a MnCr_2O_4 Nanoparticle. *Physical Review B* 73, 144413(1)-14413(9).
- Bhure, R., Abdel-Fattah, T.M., Bonner, C., Hall, J.C., Mahapatro, A. (2010). Formation of Nanosized Phosphonic Acid Self Assembled Monolayers on Cobalt-Chromium Alloy for Potential Biomedical Applications. *Journal of Biomedical Nanotechnology*, 6, 117-128.
- Biham, O., Chen, L.W., Vidali, G. (1993). Models for Monolayers Adsorbed on a Square Substrate. *Surface Science*, 287-288, 815-819.
- Boubeta, C. M., Simeonidis, K., Makridis, A., Angelakeris, M., Iglesias, O., Guardia, P., Cabot, A., Yedra, L., Estradé, S., Peiró, F., Saghi, Z., Midgley, P. A., Leborán, I. C., Serantes, D., Baldomir, D. (2013). Learning from Nature to Improve the Heat Generation of Iron-Oxide Nanoparticles for Magnetic Hyperthermia Applications. *Scientific Reports*, 3, 1-8.
- Bouda, H., Bahlagui, T., Bahmad, L., Masrour, R., El Kenz, A., Benyousef, A. (2019). Hysteresis Cycle and Magnetization Behaviors of a Mixed-Spin (7/2,3/2) Ferrimagnetic Ising Model: Monte Carlo Investigation. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 32(8), 2539(1)-2539(16).
- Boughazi, B. (2014). Phase Diagrams and Magnetic Properties of a Ferrimagnetic Cylindrical Core/Shell Spin-1 Ising Nanowire. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 354, 173-177.
- Bouhou, S., Essaoudi, I., Ainane, A., Saber, M., Dujardin, F., Migue, J.J. (2012). Hysteresis Loops and Susceptibility of a Transverse Ising Nanowire. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 324(16), 2434-2441.
- Bouhou, M., El-Hamri, I., Essaoudi, I., Ainane, A., Ahuja, R., Dujardin, F. (2017). Some Hysteresis Loop Features of 2D Magnetic Spin-1 Ising Nanoparticle: Shape Lattice and Single-Ion Anisotropy Effects. *Chinese Journal of Physics*, 55(6), 2224-2235.
- Bratlie, K. M., Lee, H., Komvopoulos, K., Yang, P. and Somorjai, G. A. (2007). Platinum Nanoparticle Shape Effects on Benzene Hydrogenation Selectivity. *Nano Letters*, 7, 3097-3101.

- Cabot, P., Yedra, A., Estrade, L., Peiro, S., Saghi, Z., Midgley, P.A., Leboran, I.C., Serantes, D., Baldomir, D. (2013). Learning from Nature to Improve the Heat Generation of Iron-Oxide Nanoparticles for Magnetic Hyperthermia Applications. *Scientific Reports*, 3, 1–8.
- Carrey, J., Mehdaoui, B., Respaud, M. (2011). Simple Models for Dynamic Hysteresis Loop Calculations of Magnetic Single-Domain Nanoparticles: Application to Magnetic Hyperthermia Optimization. *Journal of Applied Physics*, 109, 083921(1)-083921(18).
- Ceylan, A., Baker, C.C., Hasanain, S.K., Shah, S.I. (2006). Effect of Particle Size on The Magnetic Properties of Core-Shell Structured Nanoparticles. *Journal of Applied Physics*, 100(8), 034301(1)-034301(6).
- Çiftçi, N. (2011). *Tek Domenli Bir Nanoparçacığın Dipol-Kuadrupol Etkileşmesi Altında Manyetik Özelliklerin İncelenmesi* (Yüksek Lisans Tezi), Tokat: Gaziosmanpaşa Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü.
- Das, K., Banu, N., Das, I., Dev, B.N. (2019). Investigation of Size-Dependent Magnetic Ordering in Charge Ordered Antiferromagnetic Nanoparticles Via Magnetocaloric Effect. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 487, 165309(1)-165309(5).
- Dian, L., Yang, Z., Li, F., Wang, Z., Pan, X., Peng, X., Huang, X., Guo, Z., Quan, G., Shi, X., Chen, B., Li, G. and Wu, C. (2013). Cubic Phase Nanoparticles for Sustained Release of Ibuprofen for Mulation Characterization and Enhanced Bioavailability Study. *International Journal of Nanomedicine*, 8, 845–854.
- Diaz-Ortiz, A., Sanchez, J. M., Morán-López, J. L. (1997). Thermodynamics of Binary Alloy Thin Films. *Computational Material Science*, 8, 79–86.
- Disch, S., Hermann, R. P., Wetterskog, E., Podlesnyak, A. A., An, K., Hyeon, T., Salazar-Alvarez, G., Bergström, L. and Brückel Th. (2014). Spin Excitations in Cubic Maghemite Nanoparticles Studied by Time-of-Flight Neutron Spectroscopy. *Physical Review B: Condens Matter* 89, 064402(1)-064402(7).
- Erdem, R., Yalçın, O., Özüm, S., Çiftçi, N. (2016). Origins of The Exchange-Bias Phenomenology, Coercivity Enhancement, and Asymmetric Hysteretic Shearing in Core-Surface Smart Nanoparticles. *Advances in Condensed Matter Pyhsics*, 6563274(1)-6563274(9).
- Erdem, R., Yalçın, O., Özüm, S., Şahin, A., Demirer, N. (2020). Hysteretic Behavior of Quadrupol Ordering in a 2D Magnetic Spin-1 Ising Nanoparticle. *Chinese Journal of Physics*, 69, 38-49.
- Faaliyan, K., Abdoos, H., Borhani E., Afghahi, S.S.S. (2019). Core-Shell Nanoparticles for Medical Applications: Effects of Surfactant Concentration on The Characteristics and Magnetic Properties of Magnetite-Silica Nanoparticles. *Nanomed Journal*, 6, 269–275.
- Fadil, Z., Mhirech, A., Kabouchi, B., Bahmad, L., Benomar, W.O. (2019). Dielectric Properties of a Monolayer Nano-Graphyne Structure: Monte Carlo Simulations. *Superlattices and Microstructures*, 135, 106285(1)-106285(5).
- Favero, P. P., de Souza-Parise, M., Fernandez, J. L. R., Miotto, R. and Ferraz, A. C. (2006). Surface Properties of CdS Nanoparticles. *Brazilian Journal of Physics*, 36, 1032–1034.
- Feraoun, A., Amraoui, S., Kerouad, M. (2019). Magnetic Properties of a Mixed Spin-(5/2, 2) Ising Core/Shell Nanoparticle: Monte Carlo Study. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 526, 120924(1)-120924(9).
- Freire, R. M., Ribeiro, T. S., Vasconcelos, I. F., Denardin, J. C., Barros, E. B., Mele, G., Carbone, L., Mazzetto, S. E. and Fechine, P. B. A. (2013). MZnFe₂O₄ Cubic Superparamagnetic Nanoparticles Obtained by Hydrothermal Synthesis. *Journal of Nanoparticle Research*, 15, 1–12.
- Friedrich, K.A., Henglein, F., Stimming, U., Unkauf, W. (2000). Size Dependence of The CO Monolayer Oxidation on Nanosized Pt Particles Supported on Gold. *Electrochimica Acta*, 45(20), 3283-3293.
- Godoy, P.F., Schmidt, M., Zimmer, F.M. (2020). The Ising Model on The Layered J₁-J₂ Square Lattice. *Physics Letters A*, 384(27), 126687(1)-126687(6).

- Guo, D., Xie, G., Luo, J. (2014). Mechanical Properties of Nanoparticles: Basics and Applications. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 47, 013001(1)-013001(26).
- Hayashi, T., Hirono, S., Tomita, M., Umemura, S. (1996). Magnetic Thin Films of Cobalt Nanocrystals Encapsulated in Graphite-Like Carbon. *Nature*, 381, 772-774.
- Hoston, W., Berker, A.N. (1991). Multicritical Phase Diagrams of The Blume-Emery-Griffiths Model with Repulsive Biquadratic Coupling. *Physical Review Letters*, 67, 1027(1)-1027(4).
- Ishizaki, T., Yatsugi, K., Akedo, K. (2016). Effect of Particle Size on The Magnetic Properties of Ni Nanoparticles Synthesized with Trioctylphosphine as The Capping Agent. *Nanomaterials*, 6(9), 172(1)-172(13).
- Ising, E. (1925). Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, 31, 253-258.
- Ivanov, Y.P., Alfadhel, A., Alnassar, M., Perez, J.E., Vazquez, M., Chuvilin, A., Kosel, J. (2016). Tunable Magnetic Nanowires for Biomedical and Harsh Environment Applications. *Journal of Scientific Reports*, 6, 24189.
- Jabar, A., Masrour, R. (2019)., Magnetic Properties of Mixed Spin-5/2 and Spin-2 Ising Model on a Decorated Square Lattice: A Monte Carlo Simulation. *Physica A* 515, 270(1)-270(22).
- Jiang, L., Zhang, J., Chen, Z., Feng, Q. and Huang, Z. (2010). Monte Carlo Study of Magnetic Properties for The Mixed Spin-3/2 and Spin-1 Ferrimagnetic Nanoparticles. *Physica B* 405, 420-424.
- Kaneyoshi, T. (2009). Magnetizations of a Nanoparticle Described by The Transverse Ising Model. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 321(20), 3430-3435.
- Kanta, E., Keskin, M. (2014). Thermal and Magnetic Properties of Ternary Mixed Ising Nanoparticles with Core-Shell Structure: Effective-Field Theory Approach. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 349, 165-172.
- Kao, M. J., Hsu, F. C. and Guo, J. B. (2013). The Thermal Behavior of The Synthesis of Cu-BTA Composite Nanoparticles by Thermal Decomposition. *Current Applied Physics*, 13, 79-83.
- Kaur, J., Kotnala, R. K. and Verma, K. C. (2011). Multiferroic Properties of Ba (Fe_xTi_{1-x}) O₃ Nanorods. *Materials Letters*, 65, 3160-3163.
- Keskin, M., Erdinç, A. (2004). Multicritical Phase Diagrams of The Blume-Emery-Griffiths Model With Repulsive Biquadratic Coupling Including Metastable Phases: The Pair Approximation and The Path Probability Method With Pair Distribution. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 283, 392-408.
- Khater, A. and Abou Ghantous, M. (2011). Magnetic Properties of 2D Nano-Islands I: Ising Spin Model. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 323(22), 2717-2726.
- Kikuchi, R., Chem, J. (1974). Superposition Approximation and Natural Iteration Calculation in Cluster-variation Method. *Journal of Chemical Physics*, 60, 1071(1)-1071(11).
- Kita, E., Oda, T., Kayano, T., Sato, S., Minagawa, M., Yanagihara, H., Kishimoto, M., Mitsumata, C., Hashimoto, S., Yamada, K., Ohkohchi, N. (2010). Ohkohchi, Ferromagnetic Nanoparticles for Magnetic Hyperthermia and Thermoablation Therapy. *Journal Physics D: Applied Physics* 43, 474011(1)-474011 (10).
- Kocakaplan, Y., Kantar, E., Keskin, M. (2013). Hysteresis Loops and Compensation Behavior of Cylindrical Transverse Spin-1 Ising Nanowire with The Crystal Field within Effective-Field Theory based on a Probability Distribution Technique. *European Physical Journal B*, 86(10), 420(1) -420(9).
- Laguna-Marco, M.A., Sanchez-Marcos, J., Menendez, N., Chaboy, J., Salas-Colera, E., Prieto, C. (2016). Microstructural, Electronic and Magnetic Characterization of Fe-Based Nanoparticles Embedded in Al Matrix. *Materials and Design*, 93, 388-396.

- Lee, Y. J., Kim, D. Y., Lee, K. H., Han, M. H., Kang, K. S., Bae, K. K. and Lee, J. H. (2013). Ammonium Fluoride-Activated Synthesis of Cubic δ -TaN Nanoparticles at Low Temperatures. *Nanoscale Research Letters* 8, 126(1)-126(9).
- Liu, Q., Xu, Z. (1995). Self-Assembled Monolayer Coating on Nanosized Magnetic Particles Using 16-Mercaptohexadecanoic Acid. *Langmuir*, 11, 4617-4622.
- Loghmani, M.H. and Shojaei, A.F. (2013). Hydrogen Generation from Hydrolysis of Sodium Borohydride by Cubic Co-La-Zr-B Nano Particles as Novelcatalyst. *International Journal of Hydrogen Energy*, 38, 10470–10478.
- Lopez-Ortega A., Estrader M., Salazar-Alvarez G., Roca A. and Nagues J. (2015). Applications of Exchange Coupled Bi-Magnetic Hard/Soft and Soft/Hard Magnetic Core/Shell Nanoparticles. *Physics Reports* 553, 1-32.
- Lv, Y., Lei, W., Liu, S., Zhang, W-H. (2019). Nanosized ReS₂ Monolayers Embedded in Nitrogen-Doped Carbon Nanotubes for High-Rate Capacitive Lithium Storage. *Advanced Electronic Materials*, 5, 1800830 (1)-1800830(9).
- Ma, J., Chen, K. (2018). Origin of Unusual Thermomagnetic Behaviors in Maghemite. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 112, 88-93.
- Maaz, K., Mumtaz, A., Hasanain, S.K., Bertino, M.F. (2010). Temperature Dependent Coercivity and Magnetization of Nickel Ferrite Nanoparticles. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 322, 2199–2202.
- Maicas, M., Rodriguez, M., Lopez, E., Sanchez, M.C., Aroca, C., Sanchez, P. (2002). Magnetic Switching Fields in Square Monolayer and Bilayer Nanodots. *Computational Materials Science*, 25(4), 525-530.
- Makhlouf, S.A., Parker, F.T., Spada, F.E., Berkowitz, A.E. (1997). Magnetic Anomalies in NiO Nanoparticles. *Journal of Applied Physics*, 81, 5561–5563.
- Mancini, F., Mancini, F.P. (2008). Magnetic and Thermal Properties of a One-Dimensional Spin-1 Model. *Condensed Matter Physics*, 11, 543-553.
- Mancini, F.P. (2010). Magnetic Behavior of a Spin-1 Blume-Emery-Griffiths Model. *Journal of Physics Conference Series* 200, 022030(1), 022030(5).
- Manikandan, V., Mirzaei, A., Vigneselman, S., Kativa, S., Mane, R.S., Kim, S.S., Chandrasekaran, J. (2019). Role of Ruthenium in The Dielectric, Magnetic Properties of Nickel Ferrite (Ru–NiFe₂O₄) Nanoparticles and Their Application in Hydrogen Sensors. *ACS Omega*, 4, 12919-12926.
- Masrour, R., Jabar, A., Bahmad, L., Hamedoun, M., Benyousse, A. (2017). Magnetic Properties of Mixed Integer and Half-Integer Spins in A Blume-Capel Model: A Monte Carlo Study. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 421, 76-81.
- McNamara, K., Tofail, S.A.M. (2017). Nanoparticles in biomedical applications. *Advances in Physics: X*, 2:1, 54-88.
- Mehta, R.V. (2017). Synthesis of Magnetic Nanoparticles and Their Dispersions with Special Reference to Applications in Biomedicine and Biotechnology. *Materials Science and Engineer, C* 79, 901-916.
- Mirshojaei, S.F., Ahmadi, A., Morales-Avila, E., Ortiz-Reynoso, M., Reyes-Perez, H. (2016). Radiolabelled Nanoparticles: Novel Classification of Radiopharmaceuticals for Molecular Imaging of Cancer. *Journal Drug Target*, 24, 91–101.
- Mouhib, M., Benayad, N., Azhari, M. (2016). Mixed Spin (1/2,1) Transverse Ising Nanoparticles. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 419, 325-337.
- Mouhib, M., Benayad, N., Azhari, M. (2018). Monte Carlo Investigation of Mixed Spin Ising 2D-Nanoparticles. *Journal of Physics Communications*, 2, 045006(1).-045006(20).

- Mukherjee, A., Mitra, P. (2015). Characterization of Tin (II) Sulphide Thin Film Synthesized by Successive Chemical Solution Deposition. *Indian Journal of Physics*, 89 (10), 1007-1012.
- Nakagawa, K., Murata, Y., Kishida, M., Adachi, M., Hiro, M. and Susa, K. (2007). Formation and Reaction Activity of CeO₂ Nanoparticles of Cubic Structure and Various Shaped CeO₂-TiO₂ Composite Nanostructures. *Materials Chemistry Physics*, 104, 30-39.
- Nikam, D. S., Jadhav, S. V., Khot, V. M., Phadatare, M. R. and Pawar, S. H. (2014). Study of AC Magnetic Heating Characteristics of Co_{0.5}Zn_{0.5}Fe₂O₄ Nanoparticles for Magnetic Hyperthermia Therapy. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 349, 208-213.
- Obaidat, I.M., Issa, B., Haik, Y. (2015). Magnetic Properties of Magnetic Nanoparticles for Efficient Hyperthermia. *Nanomaterials*, 5, 63-89.
- Oubouchou, H., Slimani, A. and Boukheddaden, K. (2013). Inter Play between Elastic Interactions in A Core-Shell Model for Spin-Crossover Nanoparticles. *Physics Review B: Condens Matter*, 87, 104104(1)-104104(12).
- Pankhurst, Q.A., Connolly, J., Jones, S.K., Dobson, J. (2003). Applications of Magnetic Nanoparticles in Biomedicine. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 36, R167(1)-R167(16).
- Parra, E. R., Hernández, G. O. and Rojas, J. C. R. (2013). Monte Carlo Simulation of Surface Anisotropy in La_{2/3}Ca_{1/3}MnO₃ Nanoparticles. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 344, 44-48.
- Qaeed, M. A., Ibrahim, K., Saron, K. M. A. and Salhin, A. (2013). Cubic and Hexagonal GaN Nanoparticles Synthesized at Low Temperature. *Superlattice and Microstructures*, 64, 70-77.
- Rajashekara, S., Shrivastava, A., Sumhitha, S., Kumari, S. (2020). Biomedical Applications of Biogenic Zinc Oxide Nanoparticles Manufactured from Leaf Extracts of Calotropis Gigantea (L.). *BioNanoScience*, 10 (3), 654-671.
- Ramirez-Pastor, A.J., Riccardo, J.L., Pereyra V.D. (1998). Monte Carlo Study of Dimer Adsorption at Monolayer on Square Lattices. *Surface Science*, 411 (3), 294-302.
- Rashin, M. N. and Hemalatha, J. (2014). Magnetic and Ultrasonic Studies on Stable Cobalt Ferrite Magnetic Nanofluid. *Ultrasonics*, 54, 834-840.
- Rego, L.G.C., Fiquieredo, W. (2001). Magnetic Properties of Nanoparticles in The Bethe-Peierls Approximation. *Physics Review B*, 64, 144424(1)-144424(7).
- Russ, S. and Bunde, A. (2007). Ising-Like Dynamics and Frozen States in Systems of Ultrafine Magnetic Particles. *Physics Review B: Condens Matter*, 75, 174445(1)-174445(5).
- Shen, B., Sun, S. (2020). Chemical Synthesis of Magnetic Nanoparticles for Permanent Magnet Applications. *Chemical European Journal*, 26, 6757-6766.
- Shukla, N. and Nigra, M. M. (2007). Synthesis and Self-Assembly of Magnetic Nanoparticles. *Surface Science*, 601, 2615-2617.
- Skomski, R., Wei, X. H. and Sellmyer, D. J. (2007). Magnetization Reversal in Cubic Nanoparticles with Uniaxial Surface Anisotropy. *IEEE Transactions on Magnetics*, 43 (6), 2890-2892.
- Song, Q. and Zhang, Z. J. (2004). Shape Control and Associated Magnetic Properties of Spinel Cobalt Ferrite Nanocrystals. *Journal of the American Chemical Society*, 126, 6164-6168.
- Şimşek, T. and Özcan, Ş. (2014). Effective Magnetic Anisotropy Enhancement of Fe Pt Nanocrystals Through Shape Control. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 351, 47-51.
- Özüm, S. (2010). *Kristal Alan ve Kuadratik Etkileşmeli Nanoparçacığın Spin-1 Modelinin Çift Yaklaşım Yöntemi ile İncelenmesi* (Yüksek Lisans Tezi), Yozgat: Bozok Üniversitesi Fizik ABD.

- Özüm, S., Yalçın, O., Erdem, R., Bayrakdar, H. and Eker, H.N.(2015). Martensitic and Austenitic Transformations in Core-Surface Cubic Nanoparticles. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 373, 217-221.
- Tartaj, P., Morales, M.P., Gonzalez-Carreno, T., Veintemillas-Verdaguer, S., Serna, C.J. (2005). Advances in Magnetic Nanoparticles for Biotechnology Applications. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 290-291, 28-34.
- Teng, X., Yang, H. (2005). Synthesis of Magnetic Nanocomposites and Alloys from Platinum–Iron Oxide Core–Shell Nanoparticles. *Nanotechnology*, 16, 554–561.
- Torres, L., Martinez E., Lopez-Diaz, L., Iñiguez, J. (2001). Micromagnetic Switching of Patterned Square Magnetic Nanostructures. *Journal of Applied Physics*, 89, 7585(1)-7585(4).
- Vatansever, E. and Polat, H. (2014). Magnetic Response of a Disordered Binary Ferromagnetic Alloy to An Oscillating Magnetic Field. *Physica A*, 394, 82–89.
- Wang, H., Qian, C., Yi, Z., L. Rao, L., Liu, H. and Zeng, S. (2013). Hydro thermal Synthesis and Tunable Multicolor Upconversion Emission of Cubic Phase Y_2O_3 Nanoparticles. *Advances Condensed Matter Physics*, 2013, 347406(1)-347406(6).
- Wang, N., Tian, Y., Zhao, J., Jin, P. (2016). CO Oxidation Catalyzed by Silicon Carbide (SiC) Monolayer: A Theoretical Study. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 66, 196-200.
- Weizenmann, A. and Figueiredo, W. (2010). Two-Dimensional Small Particles Coupled by Dipolar Interactions. *Physica A*, 389, 5416–5424.
- Wońska, M., Szczytko, J., Majhofer, A., Gosk, J., Dziatkowski, K. and Twardowski, A. (2013). Magnetic Interactions in An Ensemble of Cubic Nanoparticles: A Monte Carlo Study. *Physical Review B: Condens Matter*, 88, 144421(1)–144421(12).
- Yalçın, O., Erdem, R., Özüm, S. (2008). Spin-1 Model of Noninteracting Nanoparticles. *Acta Physics Polonica A*, 114, 835-844.
- Yalçın, O., Bayrakdar, H., Özüm, S. (2013). Spin-Flop Transition, Spin-Flop Transition, Magnetic and Microwave Absorption Properties of α - Fe_2O_4 Spinel Type Ferrite Nanoparticles. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 343, 157–162.
- Yalçın, O., Erdem, R., Özüm, S. (2014). Origin of The Martensitic and Austenitic Phase Transition in Core-Surface Smart Nanoparticles with Size Effects and Hysteretic Splitting. *Journal Applied Physics*, 115, 054316(1)-054316(7).
- Yalçın, O., Erdem, R., Özüm, S., Demir, Z. (2015). The Phase Diagrams with Influence of Biquadratic Exchange Coupling on Martensitic-Austenitic Transformations for Core-Surface Nanoparticles. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 389, 120–123.
- Yamamuro, S. and Sumiyama, K. (2006). Why do Cubic Nanoparticles Favor A Squarearray? Mechanism of Shape-Dependent Arrangement in Nanocube Self-Assemblies. *Chemical Physics Letters*, 418, 166–169.
- Yung, T. Y., Lee, J. Y. and Liu, L. K. (2013). Nanocomposite for Methanol Oxidation: Synthesis and Characterization of Cubic Pt Nanoparticles on Graphene Sheets. *Science and Technology of Advanced Materials*, 14(3), 035001(1)– 035001(8).
- Yüksel, Y., Aydin, E., Polat, H. (2011). Thermal and Magnetic Properties of a Ferrimagnetic Nanoparticle with Spin-3/2 Core and Spin-1 Shell Structure. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 323, 3168–3175
- Zaim, A., Kerouad, M. (2010). Monte Carlo Simulation of The Compensation and Critical Behaviors of a Ferrimagnetic Core/Shell Nanoparticle Ising Model. *Physica A*, 389(17), 3435-3442.
- Zhao, S., Chen, S., Wang, S., Lei, S., Quan, Z. (2000). Preparation of Rare-Earth Carbonate Nanosized Particles Monolayer by Using Potentiostatic Technique. *Thin Solid Films*, 360(1-2), 56-59.

Zhao, J., Wei, L., Peng, C., Su, Y., Yang, Z., Zhang, L., Wei, H. and Zhang, Y. (2013). A Non-Enzymatic Glucose Sensor Based on the Composite of Cubic Cu Nanoparticles and Arc-Synthesized Multi-Walled Carbon Nanotubes. *Biosensors and Bioelectronics*, 47, 86–91.

Zysler, R.D., Fiorani, D., Testa, A.M. (2001). Investigation of Magnetic Properties of Interacting Fe_2O_3 Nanoparticles. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 224, 5–11.



ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, Adı KAVLAK, Ramazan
Uyruğu T.C

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Lisans	Doğu Akdeniz Üniversitesi	2014
Lise	Safranbolu Lisesi	2003

İş Deneyimi

Yıl	Yer	Görev
2018	Çorum	Proje Müdürü
2017	Çorum	İmalat Mühendisi
2015	Burdur	Proje Mühendisi
2014	Karabük	Şantiye Şefi

Yabancı Dil

Almanca
İngilizce

Yayınlar

Tez çalışmasından üretilen eserler

Bu tez çalışmasından, 1 (bir) adet uluslararası (SCI) makale, 2 (iki) adet uluslararası sözlü bildiri üretilmiştir. Bu üretilen çalışmalar aşağıda sunulmuştur.

Özüm, S., **Kavlak, R.**, Erdem, R., Yalçın, O., 2021. Nanosized Monolayer on Square Lattice within Spin-1 Ising Model: Hysteretic Properties with Odd Interactions. Acta Physica Polonica A, 140, 84-90.

Kavlak, R., Özüm, S., Erdem, R., Yalçın, O. Nanosized Monolayer on the Square Lattice within Spin-1 Ising Model: Magnetic Properties with odd Interactions, Turkish Physical Society 36th International Physics Congress, 1-5 September 2020, s. 91.

Kavlak, R., Özüm, S., Erdem, R., Yalçın, O. Nanosized Monolayer on the Square Lattice within Spin-1 Ising Model: Hysteretic Properties with odd Interactions, TURK-COSE 2020: 2. International Turkic World Congress on Science and Engineering 14-15 November 2020, Nur-Sultan (Astana) – Kazakhstan, s. 70.

