



T.C.  
NİĞDE ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ  
FİZİK ANABİLİM DALI

AKILLI KÜBİK NANOPARÇACIKLARDA MARTENSİTİK VE ÖSTENİTİK FAZ  
GEÇİŞLERİNİN ARAŞTIRILMASI

HALİL NURİ EKER

Temmuz 2015



T.C.  
NİĞDE ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ  
FİZİK ANABİLİM DALI

AKILLI KÜBİK NANOPARÇACIKLARDA MARTENSİTİK VE ÖSTENİTİK FAZ  
GEÇİŞLERİNİN ARAŞTIRILMASI

HALİL NURİ EKER

Yüksek Lisans Tezi

Danışman

Prof. Dr. Orhan YALÇIN

Temmuz 2015

**Halil Nuri EKER** tarafından **Prof. Dr. Orhan YALÇIN** danışmanlığında hazırlanan “Akıllı Kübik Nanoparçacıklarda Martensitik ve Östenitik Faz Geçişlerinin Araştırılması” adlı bu çalışma jürimiz tarafından Niğde Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü **Fizik** Ana Bilim Dalı’nda Yüksek Lisans Tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan : Prof. Dr. Rıza ERDEM Akdeniz Üniversitesi

Üye : Prof. Dr. Emin ÇADIRLI Niğde Üniversitesi

Üye : Prof. Dr. Orhan YALÇIN Niğde Üniversitesi

**ONAY:**

Bu tez, Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulunca belirlenmiş olan yukarıdaki jüri üyeleri tarafından ....../....../20.... tarihinde uygun görülmüş ve Enstitü Yönetim Kurulu’nun ....../....../20.... tarih ve ..... sayılı kararıyla kabul edilmiştir.

...../...../20...

**Doç. Dr. Murat BARUT**  
**MÜDÜR**

## **TEZ BİLDİRİMİ**

Tez içindeki bütün bilgilerin bilimsel 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 bildiririm.

Halil Nuri EKER

## ÖZET

### AKILLI KÜBİK NANOPARÇACIKLARDA MARTENSİTİK VE ÖSTENİTİK FAZ GEÇİŞLERİNİN ARAŞTIRILMASI

EKER, Halil Nuri  
Niğde Üniversitesi  
Fen Bilimleri Enstitüsü  
Fizik Anabilim Dalı

Danışman : Prof. Dr. Orhan YALÇIN

Temmuz 2015, 44 sayfa

Bu tezde, kare örgü üzerinde tanımlanan bilineer ( $J$ ), biquadratik ( $K$ ) ve kristal alan ( $D$ ) etkileşmeli Spin-1 Ising modeli (veya Blume-Emery-Griffiths (BEG) modeli), çekirdek-yüzey tipi kübik nanoparçacıkların manyetik, martensitik ve östenitik faz geçişi özelliklerini incelemek amacıyla kullanıldı. Nanoparçacığın çekirdek ( $C$ ), arayüzey ( $CS$ ) ve yüzey ( $S$ ) kesimlerindeki Ising spinleri çift yaklaşım yöntemiyle elde edildi. Model Hamiltoniyen ifadesi kullanılarak  $C$ ,  $CS$  ve  $S$  kesimleri için bağ enerji parametreleri ( $\varepsilon_{ij}$ ) tespit edildi ve bağ değişkenleri ( $P_{ij}$ ) için özuyumlu denklemler türetildi. Kare örgülü homojen ve kompozit kübik nanoparçacıklar için martensit ve östenit faz geçişlerinin kaynağı farklı sıcaklık ve manyetik alanda gözlemlendi.

*Anahtar Sözcükler:* Kübik nanoparçacıklar, martensit ve östenit faz geçişleri, çift yaklaşım yöntemi, biquadratik ve kristal alan etkileşmesi

## SUMMARY

### INVESTIGATION OF MARTENSITIC AND AUSTENITIC PHASE TRANSITIONS IN SMART CUBIC NANOPARTICLES

EKER, Halil Nuri

Niğde University

Graduate School of Natural and Applied Sciences  
Department of Physics

Supervisor : Prof. Dr. Orhan YALÇIN

July 2015, 44 pages

In this thesis, Spin-1 Ising model (or Blume-Emery-Griffiths (BEG) model) with bilinear ( $J$ ), biquadratic ( $K$ ) and crystal field ( $D$ ) interactions on square lattices is used to investigate the magnetic, martensitic and austenitic properties of core-surface type cubic nanoparticles. The Ising spins of the nanoparticles in core ( $C$ ), core-surface ( $CS$ ), and surface ( $S$ ) parts were incorporated with the pair approximation method. Using the model Hamiltonian expression, the bond energy parameters ( $\varepsilon_{ij}$ ) for  $C$ ,  $CS$  and  $S$  parts were determined and a set of self-consistent equations for the bond variables ( $P_{ij}$ ) were derived. The origin of the martensitic and austenitic phase transition for homogeneous and composite cubic nanoparticles with square lattice has been observed at various temperatures and magnetic fields.

*Keywords:* Cubic nanoparticles, martensitic and austenitic phase transition, pair approximation methods, biquadratic and crystal field effects

## ÖN SÖZ

Tez çalışmam boyunca yardım ve desteğini esirgemeyen tez danışmanım Sayın Prof. Dr. Orhan YALÇIN'a teşekkür ederim.

Akdeniz Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü öğretim üyesi Sayın Prof. Dr. Rıza ERDEM'e tez çalışmalarına verdiği destek için teşekkür ederim.

Tez çalışmamla ilgili olarak vaktini ayırıp ilgi ve desteğini esirgemeyen Songül ÖZÜM'e teşekkür ederim.

Yaşamım boyunca maddi ve manevi desteğini esirgemeyen ve tez boyunca anlayışı için değerli eşim Derya EKER'e sonsuz şükranlarımı sunarım.

## İÇİNDEKİLER

ÖZET .....	iv
SUMMARY .....	v
ÖNSÖZ.....	vi
İÇİNDEKİLER DİZİNİ.....	vii
ÇİZELGELER DİZİNİ .....	ix
ŞEKİLLER DİZİNİ .....	x
SİMGE VE KISALTMALAR .....	xii
BÖLÜM I GİRİŞ .....	1
BÖLÜM II KURUMSAL BİLGİ .....	4
2.1 Mıknatıslanma .....	4
2.1.1 Ferromanyetik malzemeler .....	5
2.1.2 Antiferromanyetik malzemeler .....	7
2.1.3 Ferrimanyetik malzemeler .....	8
2.1.4 Paramanyetik malzemeler .....	9
2.1.5 Diyamanyetik malzemeler .....	11
2.2 Nanoparçacıklar .....	12
2.3 Tek Dömen Nanoparçacıklar ve Nano Sistemlerdeki Yeri .....	12
BÖLÜM III TEORİK MODEL .....	14
3.1 Ising Modeli .....	14
3.2 Çift Yaklaşım Yöntemi .....	15
3.3 S=1 Ising Nanoparçacıkların Manyetik Özellikleri .....	17
BÖLÜM IV BULGULAR VE TARTIŞMA .....	21
4.1 Homojen Sistem için Mıknatıslanma Eğrileri, Faz Diyagramları ve Histerezis Eğrileri .....	21

## 4.2 Kompozit Sistem için Mıknatıslanma Eğrileri, Faz Diyagramları ve Histerezis

Eğrileri.....	27
BÖLÜM V SONUÇ.....	33
KAYNAKLAR .....	36
ÖZ GEÇMİŞ .....	43
TEZ ÇALIŞMASINDAN ÜRETİLEN ESERLER (MAKALE) .....	44

## ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 3.1. Çekirdek-yüzey tipi kübik nanoparçacıkların $S = 1$ Ising modeli için parçacık ve parçacık çifti sayıları ile bağ enerjileri.....	20
--	----

## ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1. Ferromanyetik bir malzemede manyetik momentlerin (a) dış manyetik alan yokken (b) dış manyetik alan varken temsili dizilimi.....	5
Şekil 2.2. Ferromanyetik bir malzemenin temsili $m - h$ grafiği .....	6
Şekil 2.3. Ferromanyetik bir numunenin manyetik histerezis( $m - h$ ) eğrisi.....	6
Şekil 2.4. Antiferromanyetik bir malzemede manyetik dipol momentlerin (a) dış manyetik alan yokken (b) dış manyetik alan varken temsili dizilimi .....	7
Şekil 2.5. Antiferromanyetik bir malzemenin temsili $m - h$ grafiği .....	8
Şekil 2.6. Ferrimanyetik bir malzemede manyetik momentlerin (a) dış manyetik alan yokken (b) dış manyetik alan varken temsili dizilimi.....	8
Şekil 2.7. Ferrimanyetik bir malzemenin temsili $m - h$ grafiği .....	9
Şekil 2.8. Paramanyetik bir malzemede manyetik momentlerin (a) dış manyetik alan yokken (b) dış manyetik alan varken temsili dizilimi.....	9
Şekil 2.9. Paramanyetik bir malzemenin temsili $m - h$ grafiği .....	10
Şekil 2.10. (a) İkinci derece faz dönüşümü (b) birinci derece faz dönüşümü $m - T$ grafiği .....	10
Şekil 2.11. Diyamanyetik bir malzemede manyetik momentlerin temsili dizilimleri ...	11
Şekil 2.12. Diyamanyetik bir malzemenin $m - h$ grafiği .....	12
Şekil 2.13. Nanoyapılı malzemelerin manyetik özelliklerinin parçacık büyüklüğüne bağlı değişimi ve bu değişime karşılık gelen histerezis eğrisi.....	13
Şekil 3.1. İki boyutta iki kabuktan oluşan kare örgünün şematik gösterimi. ....	17

- Şekil 4.1. Farklı  $D$  değerleri için homojen sistemin indirgenmiş sıcaklığa ( $k_B T/J_0$ ) bağlı mıknatıslanma ( $m$ ) eğrileri.  $J_C = J_{CS} = J_S = J_0 = 1$  ..... 21
- Şekil 4.2. Homojen sistem için termal histerezis eğrileri.  $J_C = J_{CS} = J_S = J_0 = 1$  ..... 22
- Şekil 4.3. Homojen sistem için  $k_B T/J_0$ 'nin  $D/J_0$ 'a göre gelişimi.(a)  $R=3$ , (b)  $R=10$  .. 23
- Şekil 4.4. Homojen sistem için (a)  $D$  değerlerinin ve (b) kritik sıcaklığın ( $T_C$ )  $R$ 'ye göre farklı manyetik alan durumları altındaki ( $h=0.0, h=0.9$ ) gelişimi.  $K = -0.4$  ..... 24
- Şekil 4.5. Homojen sistem için mıknatıslanma değerlerinin ( $m$ ) dış manyetik alana ( $h$ ) göre değişimi..... 25
- Şekil 4.6. Farklı  $D$  değerleri için kompozit sistemin indirgenmiş sıcaklığa ( $k_B T/J_0$ ) bağlı mıknatıslanma ( $m$ ) eğrileri.  $J_C = J_S = J_0 = 1, J_{CS} = -1$  .....27
- Şekil 4.7. Kompozit sistem için termal histerezis eğrileri.  $J_C = J_S = J_0 = 1, J_{CS} = -1$  .28
- Şekil 4.8. Kompozit sistem için  $k_B T/J_0$ 'nin  $D/J_0$ 'a göre gelişimi. (a)  $R=8$ , (b)  $R=10$  .....29
- Şekil 4.9. Kompozit sistem için (a)  $D$  değerlerinin ve (b) kritik sıcaklığın ( $T_C$ )  $R$ 'ye göre farklı manyetik alan durumları altındaki ( $h=0.0, h=0.9$ ) gelişimi.  $K = -0.4$  .....30
- Şekil 4.10. Kompozit sistem için kübik örgüde mıknatıslanma değerlerinin ( $m$ ) dış manyetik alana ( $h$ ) göre değişimi.....31

## SİMGE VE KISALTMALAR

<b>Simgeler</b>	<b>Açıklama</b>
$D$	Tek İyon Anizotropisi
$E$	Etkileşme Enerjisi
$\varepsilon_{ij}$	Bağ Enerjisi
$\Phi$	Serbest Enerji
$\gamma$	Koordinasyon Sayısı
$h$	Dış Manyetik Alan
$h_C$	Koersif Alan
$H$	Hamiltoniyen
$H_C$	Çekirdek Hamiltoniyeni
$H_{CS}$	Ara Yüzey Hamiltoniyeni
$H_S$	Yüzey Hamiltoniyeni
$J$	Değiş Tokuş Etkileşme Sabiti
$K$	Biquadratik Etkileşme Sabiti
$k_B$	Boltzman Sabiti
$m_s$	Doyum Mıknatıslanması
$m_r$	Kalıcı Mıknatıslanma
$m$	Mıknatıslanma Değeri
$p_i$	Spin Durum Değişkeni
$P_{ij}$	Bağ Değişkeni
$R$	Yarıçap
$Q$	Kuadrupol Moment
$S$	Spin
$S_E$	Entropi
$S_i$	Çekirdek Spin Değeri
$\sigma_i$	Yüzey Spin Değeri
$T_C$	Kritik Sıcaklık

Z Bölüşüm Fonksiyonu

**Kısaltmalar**

**Açıklama**

AFM	Antiferromanyetik
AT	Östenitik Faz Geçişı
BEG	Blume-Emery-Griffiths
C	Çekirdek
CS	Ara yüzey
C/S	Çekirdek/Yüzey
FM	Ferromanyetik
MT	Martensitik Faz Geçişı
NP	Nanoparçacık
PM	Paramanyetik
S	Yüzey
SP	Süperparamanyetik

# BÖLÜM I

## GİRİŞ

### 1.1 Giriş

Aktif olarak 1–100 nm arasındaki büyüklük nano rejim (veya nano ölçek) olarak adlandırılır. Nanoparçacıklar, nano ölçekteki manyetizasyonun anlaşılmasında çok önemli bir rol üstlenen nano yapılardır. Bu yapılar fizik, biyoloji, sağlık, askeri ve biyomolekül sistemler başta olmak üzere birçok farklı alanda büyük ilgi uyandırmıştır. Özellikle tıbbi müdahalelerde kullanılan tek domenli nanoparçacıkların manyetik, süperparamanyetik, martensitik ve östenitik faz durumları ciddi bir ilgi odağıdır. Çünkü nano ölçekte parçacıkların boyutu küçüldükçe yeni ve ilginç özellikler ortaya çıkmaya başlar. Kuantum etkilerin görüldüğü bu küçük ölçek davranışlarından özellikle çekirdek-kabuk (C/S) tipi nanoparçacıkların yüksek yoğunluklu verinin optik bilgisayarlar nakli, nano robot montajı ve yüzey etkileri içeren teknolojilerdeki kullanımı son derece önem arz etmektedir. Bu tür C/S tipi nanoparçacıklar yeni nesil spin bağımlı tünelleme cihazları, spin-transistörü, manyeto-elektronikteki ince film cihazları, spin vanaları ile yakından ilgilidir (Babin vd., 2003).

Diğer taraftan, kübik nanoparçacıklarda yüzey atomları arası etkileşimler ihmal edilebilir olduğundan çekirdek (C), ara yüzey (CS) ve yüzey (S) gibi bölgelerden oluşan altıgen yapıdaki (veya küresel) diğer nanoparçacık türlerine göre farklılıklar sergilerler. Özellikle çalışılması ve elde edilmesi güç olan bu nanoparçacıklar manyetik nano yapıların anlaşılmasında çok kullanışlı araçlardır (El-Sayed vd., 2010; Campbell vd., 2011). Bir kübik nanoparçacık (NP), çevresindeki diğer parçacıklarla yüzey-yüzeye tam temas yaparak iki-boyutta altıgen örgü yerine kare örgü yapısında sıkı paketlenmiş bir dizilim gerçekleştirebilirler. Bu nedenle, kare örgü yüzey teması açısından diğer örgülere göre daha avantajlı durumdadır (Yamamuro vd., 2006). Bu açıdan her bir kübik NP, katalizlerde tekrar aktive edilebilme ve seçicilik özellikleri yönüyle önemli bir konumda bulunur (Ahmadi vd., 1996; Bratlie vd., 2007; Loghmani vd., 2013 ). Yüzey etkilerinin araştırılması amacıyla farklı deneysel teknikler kullanılarak nanoparçacıklar sentezlenebilmektedir (Favero vd., 2006; Wörle vd., 2006; Kaur vd., 2011; Salavatti-Niasari vd., 2012; Kao vd., 2013; Wang vd., 2013; Dian vd., 2013;

Yung vd., 2013; Lee vd., 2013). Bir kübik NP, yüzey etkilerinden dolayı hacimsel (bulk) malzemelerden daha farklı elektronik özellikler de gösterebilir (Bader, 2006) ve dolayısıyla yarıiletken cihazları, sensör teknolojisi ve malzeme biliminde de kullanılabilir (Nakagawa vd., 2007; Zhao vd., 2013; Qaeed vd., 2013). Diğer taraftan, kübik nanoparçacıkların manyetik özellikleri mıknatıslanmadaki baskın yüzey anizotropi rolü nedeniyle parçacık şekline daha duyarlıdır (Song vd., 2004; Skomski vd., 2007; Shukla vd., 2007; Boubeta vd., 2013). Çok sayıda fiziksel ve kimyasal yöntem kübik örgü yapısında tasarlanan nanoparçacıkların sentezlenmesi amacıyla uygulanmaktadır (Freire vd., 2013; Şimşek vd., 2014; Rashin vd., 2014; Zhou vd., 2014; Disch vd., 2014; Nikam vd., 2014). Ayrıca, tek domenli ve yüzey anizotropili kübik nanoparçacıklar, Monte-Carlo (MC) tekniği ile de teorik olarak incelenebilir (Diaz-Ortiz vd., 1997; Woińska vd., 2013; Parra vd., 2013; Oubouchou vd., 2013).

Ising ve Heisenberg modellerine dayalı C/S tipi kübik nanoparçacıklar üzerine literatürde birçok araştırma yapılmıştır. Bunların sabit veya salınımlı manyetik alan altındaki değişik termodinamik ve manyetik özellikleri Monte-Carlo (MC) simülasyon tekniği ile yaygın olarak çalışılmıştır (Russ vd., 2007; Zaim vd., 2009; Zaim vd., 2010; Weizenmann vd., 2010; Jiang vd., 2010; Yüksel vd., 2011; Vatansever vd., 2014). Çalışmalarda varılan sonuçlara göre, kabuk ve ara yüzey etkileşmelerinin kritik manyetik özelliklere olan etkileri tartışılmıştır. Bununla birlikte, deneysel ve simülasyon tekniklerindeki gelişmelere rağmen ferromanyetik (FM) ve antiferromanyetik (AFM) karakterli C/S kübik nanoparçacıkların fiziksel özellikleri hakkında yeterli bir bilgi mevcut değildir. Bu tez çalışmasında, yakın zamanda, altıgen örgü yapısına sahip nanoparçacıklar için kullanılan teorik formülasyon çerçevesinde C/S kübik nanoparçacıkların manyetik özellikleri incelenecektir. Özellikle, histerezis döngülerindeki yarılmalarla ilintili olan martensitik-östenitik faz geçişleri araştırılacaktır.

Yalçın ve çalışma arkadaşları tarafından altıgen örgü için kullanılan teorik formülasyon (Yalçın vd., 2014; Yalçın vd., 2015),  $S = 1$  Ising sistemi (ya da  $S = 1$  Blume-Emery-Griffiths (BEG) modeli) (Blume vd., 1971) ve onun Kikuchi versiyonundaki çift (bağ) yaklaşım yöntemi (Kikuchi, 1974) ile çözümüne dayanmaktadır. BEG modeli istatistik mekanikte bilinen önemli bir spin-örgü modeli olup tek iyon anizotropinin ( $D$ ) dâhil edildiği bilinear ( $J$ ) ve bikuadratik ( $K$ ) etkileşmeli bir sistemdir. Çoklu kritik olaylara ve

farklı makro sistemlere başarılı bir şekilde uygulanmıştır (Berker vd., 1976; Hoston vd., 1991; Keskin vd., 2004). Ayrıca, aynı model bazı hacimsel malzemelerdeki martensitik faz dönüşümlerinin incelenmesi amacıyla da kullanılmıştır (Vives vd., 1996; Branco vd., 1999; Castán vd., 1999; Burkhardt vd., 1999; Buchelnikov vd., 2010). Ancak, modelin çift yaklaşım yöntemine dayalı çözümleri, bazı Ising spin kümelerinin manyetik özellikleri üzerindeki sonlu ölçek etkilerini yansıtmamaktadır. Bu etkiler ise nano ölçekte sonlu örgü olarak düşünülen spin sistemleri ile yakından ilgilidir (Rego vd., 2001). Önceki çalışmada (Yalçın vd., 2014), nano yapılarda çekirdek ve yüzeyden gelen mıknatıslanma katkısını tam olarak hesaplayabilmek için, çift yaklaşım yöntemindeki bağ değişkenleri ile spin sayısı arasında bir ilişki önerilmiştir. Bu tezde, söz konusu ilişkiye dayalı bağ değişkenlerinin nümerik çözümü ile kübik nanoparçacığın mıknatıslanma ve histerezis eğrileri elde edilerek analiz edildi. Çalışmamızda varılan sonuçlara göre, martensitik-östenitik faz geçişleri bikuadratik etkileşme değeri ayarlanmak suretiyle gözlenmiş ve altıgen örgü yapısındaki nanoparçacık için bulunan sonuçlarla karşılaştırmalı olarak analiz edilmiştir.

Bu giriş bilgilerinden sonra, ikinci bölümde manyetizma, manyetik malzemelerin sınıflandırılması ve manyetik nanoparçıklar hakkında kuramsal bilgi verildi. Üçüncü bölümde, çalışmamızda kullandığımız Ising modelleri ile çift yaklaşım yöntemi hakkında kısaca bilgi verildikten sonra  $J$ ,  $K$  ve  $D$  Hamiltonyenli BEG modeli homojen ve kompozit kübik nanoparçacığa uygulanarak bağ değişkenleri ve mıknatıslanma denklemi tanımlandı. Yapılan hesaplamalar sonucu elde edilen mıknatıslanma ve histerezis eğrilerine dair grafiksel bulgular ve fiziksel yorumlar dördüncü bölümde tartışıldı.

## BÖLÜM II

### KURAMSAL BİLGİ

#### 2.1 Mıknatıslanma

Elektron'un spin ve yörünge hareketlerinden kaynaklanan manyetik dipol momentlerin vektörel toplamına o malzemenin mıknatıslanması denir. Bu nedenle manyetik açıdan bir malzemenin mıknatıslanmaya sahip olması, o malzemenin atomik açıdan manyetik özellik gösterip göstermemesine bağlıdır. Bir atomun sadece elektrondan kaynaklanan mıknatıslanma özelliği göz önüne alındığında, bu atoma bağlı o elektronun enerji düzeyleri söz konusudur. Bu durumda elektronlar Pauli dışarlama ilkesine uyacak şekilde yerleşirler. Böylece elektron için iki durum ortaya çıkar. Birincisi elektronun uygulanan dış manyetik alana ( $h$ ) paralel, ikincisi ise anti paralel olmasıdır. Diğer bir ifadeyle bunun anlamı bir elektron dış manyetik alan altında iki türlü yönelim gösterir. Matematiksel olarak enerji düzeyleri elektronun manyetik momenti ile dış manyetik alanın skaler çarpımı şeklindedir. Skaler çarpımda her iki vektörün büyüklüğü ve bu iki vektör arasındaki açının değeri söz konusudur. Manyetik moment ile dış manyetik alan arasındaki açı  $0^\circ$  (sıfır) ile  $180^\circ$  (yüz seksen) arasında değer alabilir. Bu iki açı dışındaki diğer açılar matematiksel olarak bir değere karşılık gelse de manyetik momentin kuantumlu olmasından dolayı fiziksel bir karşılığı yoktur. Bir elektronun manyetik alana göre paralel ya da antiparalel olmasının nedeni budur. Benzer şekilde yüklü bütün parçacıkların elektronda olduğu gibi manyetik dipol momentleri (mıknatıslanma) vardır.

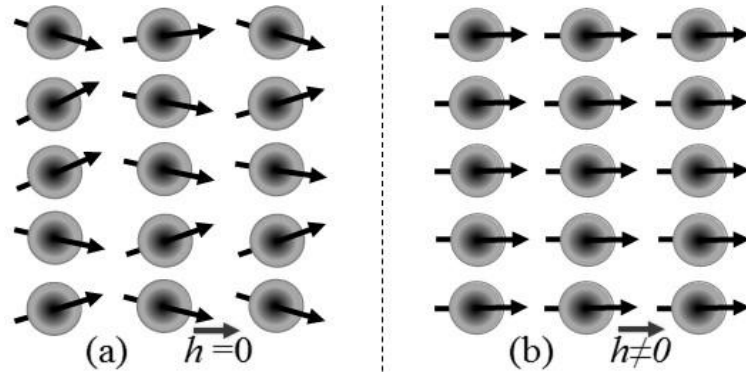
Atomun çekirdeğinden kaynaklanan manyetik dipol moment, elektronun dipol momentine göre çok küçük olduğu için maddenin mıknatıslanmasıyla ilgili çalışmalarda genelde ihmal edilir. Bu tez çalışmasında da kübik nanoparçacık olduğu için çekirdeğin mıknatıslanması dikkate alınmadı. Bunlara ek olarak bir malzemenin etkin mıknatıslanma değeri manyetik alanın yanında sıcaklık ve etkileşmelere de bağlıdır. Bu etkileşmeler manyetik kaynaklı olup, malzemenin/sistemin mıknatıslanmasının anlaşılmasında yardımcı olur.

Bir malzemenin mıknatıslanma özelliğinin ölçüsü manyetik alınganlık/duygunluk olarak adlandırılır ve  $\chi$  ile gösterilir. Bu şartlar altında bir malzemenin

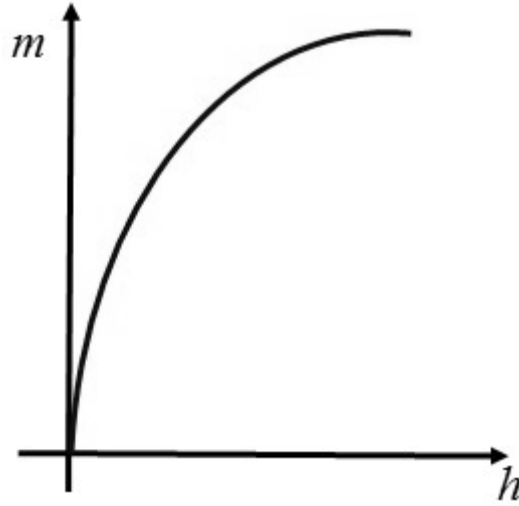
mıknatıslanması manyetik alınganlık ve dış manyetik alana bağılı olarak  $m = \chi h$  şeklinde yazılır. Buradaki manyetik alınganlığın sıfır olması manyetik malzeme olmamasına, sıfırdan küçük olması ise diyamanyetik olmasına karşılık gelir. Üçüncü olarak manyetik alınganlığın sıfırdan büyük olması ise ferromanyetik, antiferromanyetik, ferrimanyetik veya paramanyetik (PM) sistemleri gösterir. Bunlar da kendi aralarında mıknatıslanmanın etkin değerlerine göre ayırt edilirler. Bunun anlamı ise maddelerin mıknatıslık açısından ferromanyetik, antiferromanyetik, ferrimanyetik ve paramanyetik şeklinde sınıflandırılmasını gösterir (Coey, 2010). Bu sistemler aşağıda detaylıca verildi.

### 2.1.1 Ferromanyetik malzemeler

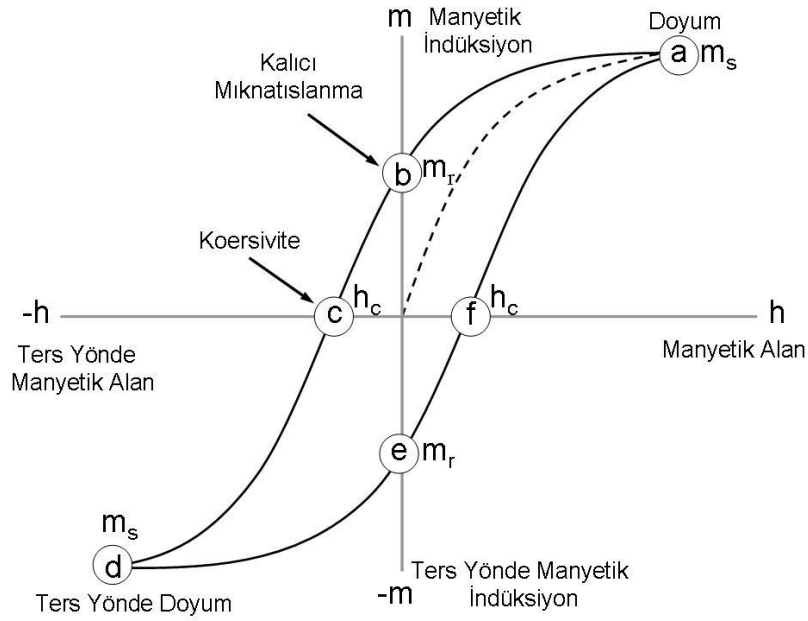
Bazı maddeler dış manyetik alan olmadan da mıknatıslanmaya sahip olup bunlar ferromanyetik madde olarak adlandırılırlar. Ferromanyetik maddelerdeki kendiliğinden mıknatıslanma; iç manyetik alanlardan kaynaklanır. Heisenberg, böyle bir iç alanın komşu atomların çiftlenmemiş elektronlarının spinleri arasındaki kuantum mekaniksel kökenli değış-tokuş etkileşmelerinden kaynaklandığını göstermiştir. Değış-tokuş etkileşimleri atomlar arası mesafeye bağılıdır. Ferromanyetik maddeler çok küçük dış manyetik alan altında bile alan doğrultusunda yönelir ve dış manyetik alan kaldırıldığında kalıcı bir mıknatıslanma oluşur. Ferromanyetik bir maddenin temsili spin yönelimi ve temsili  $m-h$  grafikleri sırasıyla Şekil 2.1 ve Şekil 2.2 'de gösterilmiştir.



**Şekil 2.1.** Ferromanyetik bir malzemede manyetik momentlerin (a) dış manyetik alan yokken, (b) dış manyetik alan varken temsili dizilimi



Şekil 2.2. Ferromanyetik bir malzemenin temsili  $m-h$  grafiği



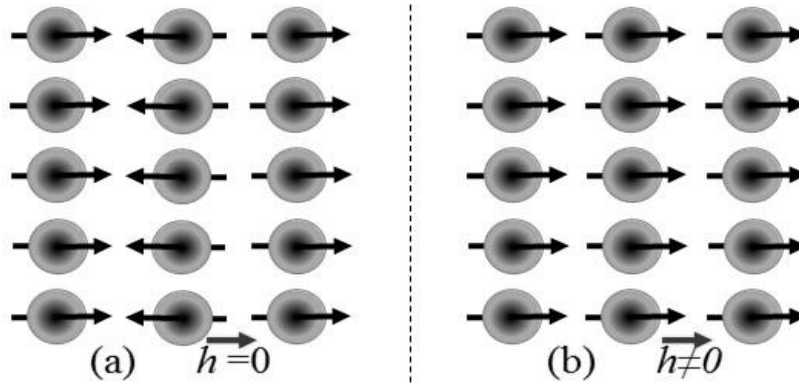
Şekil 2.3. Ferromanyetik bir numunenin manyetik histerezis ( $m-h$ ) eğrisi

Histerezis eğrisi manyetik özellik gösteren bir malzemenin ferromanyetik veya paramanyetik davranış sergilediğini anlamaya yarar. Eğride başlangıçta mıknatıslanması olmayan bir malzemeye bir dış manyetik alan uygulandığında malzeme bir noktada ( $m_s$ ) doyum mıknatıslanmasına ulaşır. Bu noktadan sonra malzemeye uygulanan dış manyetik alanı azaltılırsa eğri iki yol izleyebilir; malzeme paramanyetik ise eğri başlangıç eğrisi üzerinden geçer, ferromanyetik ise şekilde görüldüğü gibi kalıcı bir mıknatıslanma ( $m_r$ ) oluşur. Bu kalıcı mıknatıslanma remanans olarak adlandırılır ve doyum mıknatıslanmayla ilişkilidir. Daha sonra oluşan mıknatıslanmayı yok edebilmek

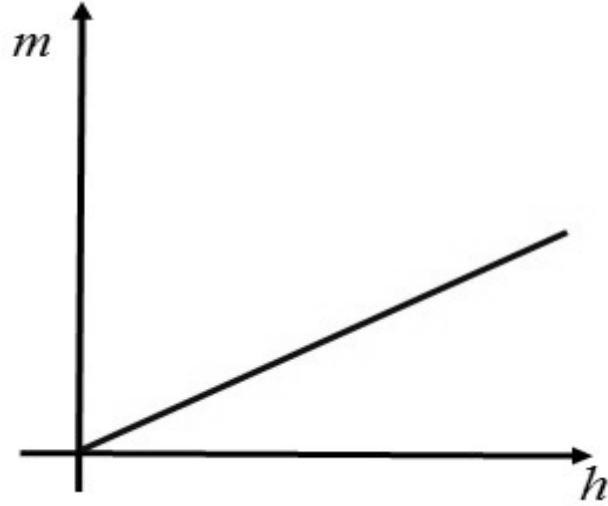
için ters yönde dış manyetik alan uygulanır ve mıknatıslanmayı sıfırlayan bu alana koersif alan ( $h_c$ ) denir. Bu işlem ters yönde doyuma ulaşınca kadar devam ettirilir. Aynı şekilde artan ve azalan dış manyetik alan uygulanarak Şekil 2.3 'deki eğri oluşur. Bu eğriye histerezis eğrisi denir.

### 2.1.2 Antiferromanyetik malzemeler

Bazı durumlarda atomlar arası değiş-tokuş etkileşimi komşu atomların manyetik momentlerinin zıt yönlü yönelmesine neden olur. Bu davranış “antiferromanyetizma” olarak adlandırılır. Bu zıt yönelmiş momentler birbirlerinin etkisini neredeyse sıfırladığından malzemenin mıknatıslanması ferromanyetik malzemenin mıknatıslanmasından çok daha küçük olur. Böyle bir maddenin temsili spin dizilimleri ve  $m-h$  grafiği ise sırasıyla Şekil 2.4 ve Şekil 2.5 'de verilmiştir.



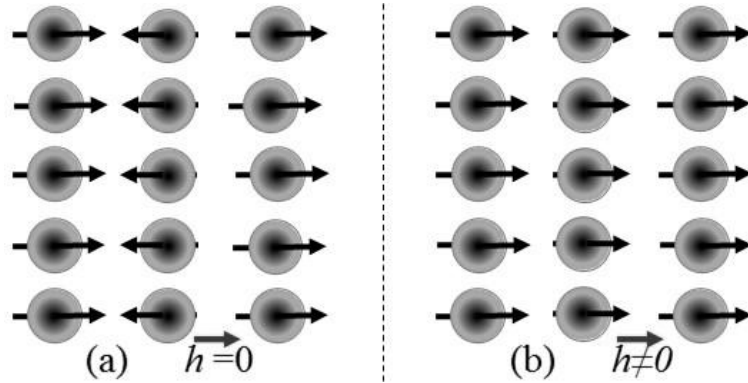
**Şekil 2.4.** Antiferromanyetik bir malzemedeki manyetik dipol momentlerinin (a) dış manyetik alan yokken, (b) dış manyetik alan varken temsili dizilimi



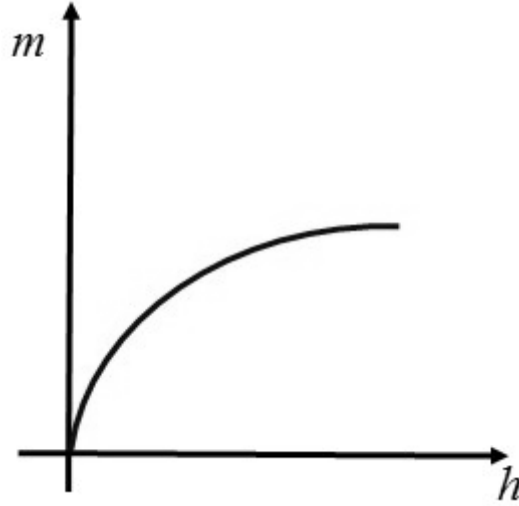
Şekil 2.5. Antiferromanyetik bir malzemenin temsili  $m - h$  grafiği

### 2.1.3 Ferrimanyetik malzemeler

Bir ferrimanyetik madde, iki veya daha fazla türden manyetik dipol momentlerin zıt yönde oluşması sonucu meydana gelir. Bu manyetik momentlerin zıt yönlü olması sebebiyle toplam mıknatıslanmayı azaltıcı bir etkiye sahiptir. Ferrimanyetik malzemede ferromanyetik malzeme gibi kalıcı mıknatıslanma vardır. Fakat ferromanyetik maddeye kıyaslandığında mıknatıslanma daha küçüktür. Ferrimanyetik bir maddenin temsili spin yönelimi ve  $m - h$  grafiği sırasıyla Şekil 2.6 ve Şekil 2.7 'de görülmektedir.



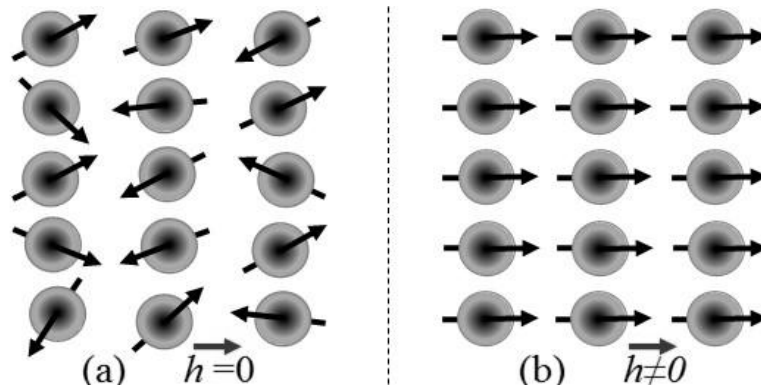
Şekil 2.6. Ferrimanyetik bir malzemede manyetik momentlerin (a) dış manyetik alan yokken (b) dış manyetik alan varken temsili dizilimi



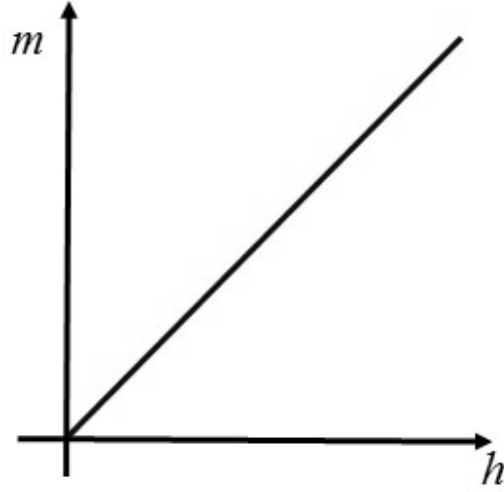
Şekil 2.7. Ferrimanyetik bir malzemenin temsili  $m-h$  grafiği

#### 2.1.4 Paramanyetik malzemeler

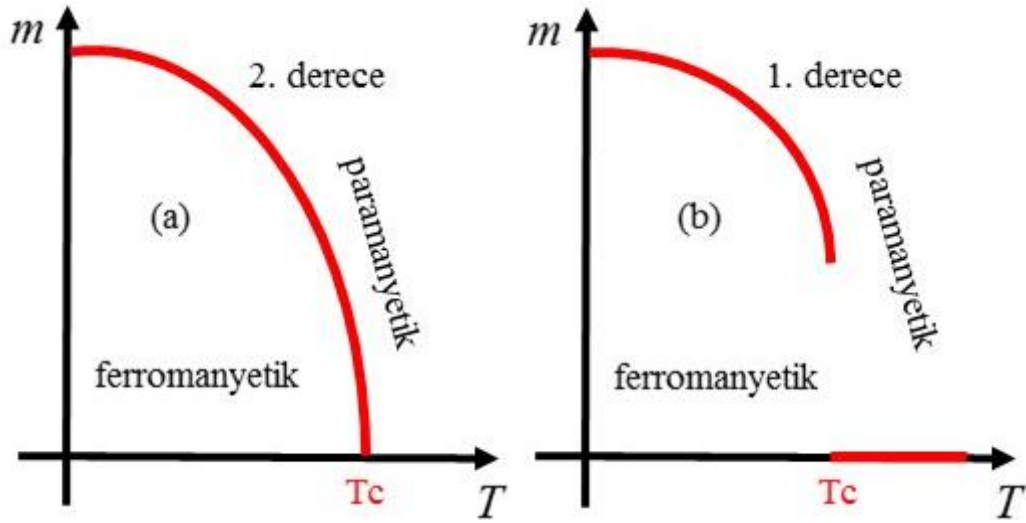
Bazı atomlarda eşlenmemiş elektronlar bulunur ve bu tür atomlar sıfırdan farklı net bir manyetik dipol momente sahip olurlar. Bu atomları bir dış manyetik alan içine koyduğumuzda atomun sahip olduğu manyetik dipol momenti kısmen dış manyetik alan doğrultusuna yönelir. Bu tür maddelere paramanyetik maddeler denir. Paramanyetik maddeler dış manyetik alan kaldırıldığında kalıcı mıknatıslanma göstermezler. Böyle bir malzemenin temsili spin yönelimi Şekil 2.8 'de çizilmiştir. Paramanyetik malzemeler pozitif duygunluğa ( $\chi > 0$ ) sahiptir ve temsili  $m-h$  grafiği Şekil 2.9 'da gösterilmiştir.



Şekil 2.8. Paramanyetik bir malzemede manyetik momentlerin (a) dış manyetik alan yokken, (b) dış manyetik alan varken temsili dizilimi



Şekil 2.9. Paramanyetik bir malzemenin temsili  $m-h$  grafiği



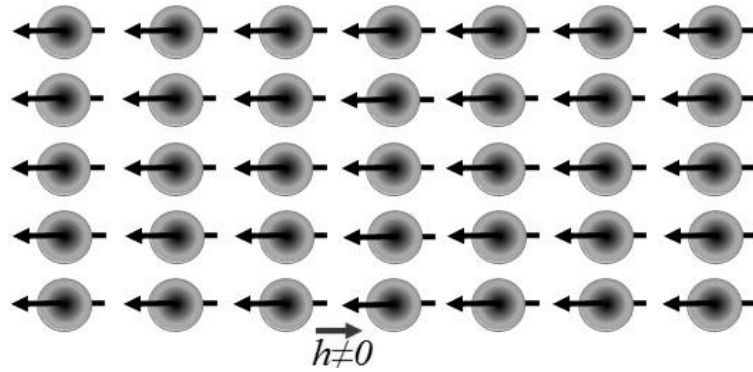
Şekil 2.10. (a) İkinci-derece faz dönüşümü ve (b) birinci-derece faz dönüşümü sergileyen manyetik malzeme için  $m-T$  grafiği

Pierre Curie; paramanyetik malzemelerin mıknatıslanmasının uygulanan dış manyetik alanla doğru, sıcaklıkla ters orantılı olduğunu  $m = Ch/T$  ( $C$  Curie sabiti) bağıntısıyla göstermiştir. Dış manyetik alan kaldırıldığında mıknatıslanma sıfır olur. Mıknatıslanmanın sıfır olması ise manyetik dipol momentlerin rastgele yönelmelerinden kaynaklanmaktadır. Şekil 2.10 'da görüldüğü gibi bir malzeme Curie sıcaklığı altında ferromanyetik fazda üstünde ise paramanyetik fazda bulunur. Sistemde her sıcaklık değerine karşılık bir mıknatıslanma oluyorsa yani sıcaklık artışı ile mıknatıslanma sürekli olarak azalarak sıfıra gidiyorsa (Şekil 2.10 (a)) sistem ikinci-derece faz

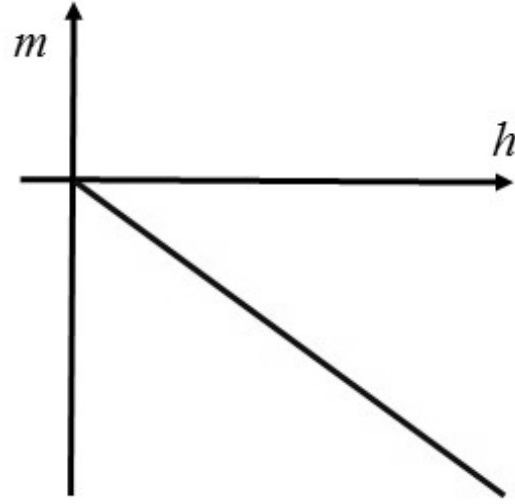
dönüşümü, sıcaklıkla azalmasının yanında tam Curie sıcaklığında süreksizlik (yani atlama) gösteriyorsa (Şekil 2.10 (b)) sistem birinci-derece faz dönüşümü gerçekleştirir.

### 2.1.5 Diyamanyetik malzemeler

Kalıcı ve net bir manyetik dipol momente sahip olmayan bazı maddelere bir dış manyetik alan uygulandığında atomun yörüngesindeki elektronlar daha hızlı hareket etmeye başlarlar ve dolayısıyla elektronun manyetik dipol momenti artar. Bu değişim ise uygulanan dış manyetik alana zıt yönde manyetik alan oluşturur. Uygulanan dış manyetik alan maddeyi biraz iter. Böyle manyetik malzemeye diyamanyetik malzeme adı verilir. Diyamanyetik malzemeler negatif alınganlığa sahiptirler ( $\chi < 0$ ). Bu malzemelere örnek olarak; bizmut, bakır, kurşun, civa ve gümüş gibi maddeler verilebilir. Diyamanyetik bir malzemenin dış manyetik alan varlığında ters yöneliminin olduğu Şekil 2.11 'de ve temsili  $m-h$  grafiği de Şekil 2.11 'de gösterilmiştir.



Şekil 2.11. Diyamanyetik bir malzemede manyetik momentlerin temsili dizilimleri



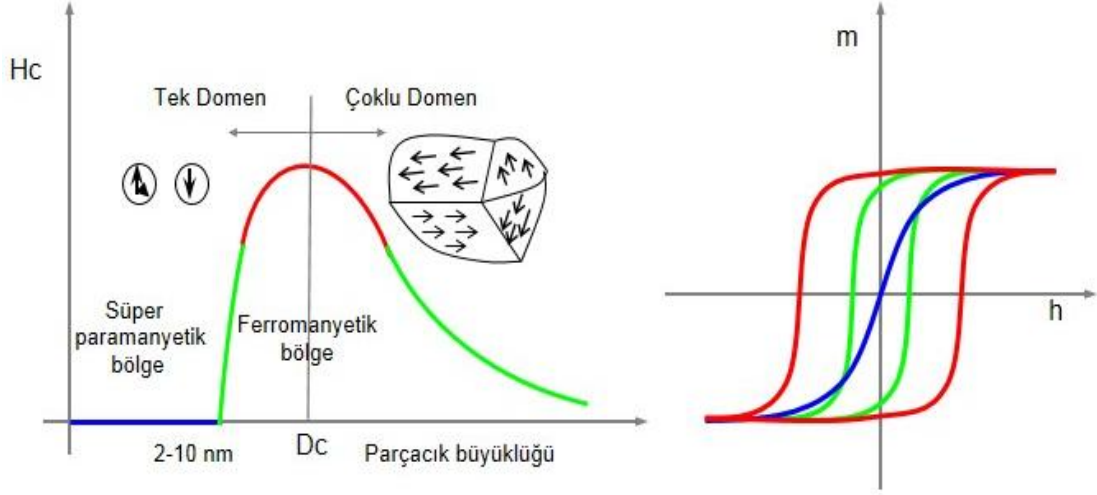
Şekil 2.12. Diyamanyetik bir malzemenin  $m-h$  grafiği

## 2.2 Nanoparçacıklar

Nano Yunanca'da son derece küçük, ufak, küçücük anlamına gelir. Fiziksel büyüklük olarak metrenin bir milyarda biridir. Yani  $1m = 10^9 nm$  büyüklüğündedir. Nanoparçacıklar makro yapıda bulunan malzemelere göre çok büyük yüzey/hacim oranına sahiptirler. Bu da parçacığın etkileşme yüzeyi ve yüzey gerilimini artırmaktadır. Dolayısıyla parçacıklar nano boyutlara yaklaştıkça farklı davranışlar sergiler. Nano boyutlarda parçacık daha sert, daha hafif ve ısıya daha dayanıklı bir yapıya sahip olabilir. Bu özelliklerinden dolayı nanoparçacıkların geniş bir kullanım alanı vardır (Gubin, 2009).

## 2.3 Tek Domen Nanoparçacıklar ve Nano Sistemlerdeki Yeri

100 nm 'den daha küçük boyuta sahip parçacıklar yüksek yüzey/hacim oranına sahip olmalarından dolayı hacimsel parçacıklara göre farklı fiziksel ve kimyasal özellikler sergilemektedir. Bu parçacıklar kritik boyut altında tek domen halinde bulunurlar ve kritik boyutun üstünde çoklu domen oluştururlar.



**Şekil 2.13.** Nanoyapılı malzemelerin manyetik özelliklerinin parçacık büyüklüğüne bağlı değişimi ve bu değişime karşılık gelen histerezis eğrisi

Şekil 2.13 'te mavi çizgiler süperparamanyetik, yeşil ve kırmızı çizgiler ferromanyetik durumu göstermektedir. Tek domen (manyetik bölge) parçacığın koersif alanı artan parçacık büyüklüğü ile artış sergilemekte ve parçacık süperparamanyetik bölgeden ferromanyetik bölgeye geçmektedir. Dolayısıyla parçacığın doyum mıknatıslanma değeri, parçacık boyutuna kuvvetli bir bağımlılık sergiler.

Manyetik nanoparçacıkların teknolojik uygulamaları ve çalışma alanları sürekli artmaktadır. Manyetik nanoparçacıklar günümüzde küçük bir alana daha fazla bilgi depolamak için kayıt etme tabakalarında kullanılmaktadır. Ayrıca savunma sanayisinde, biyomedikal ürünlerde, tüketici eşyaları ve kişisel bakım ürünlerinde, mühendislik materyalleri, elektronik ve bilgisayar teknolojilerinde etkin olarak kullanılır.

## BÖLÜM III

### TEORİK MODEL

#### 3.1 Ising Modeli

Ising modeli, modern istatistik fiziğin manyetizmaya uygulanan çok sayıdaki teorilerinden biri olup, manyetik (FM/PM) faz geçişlerinin incelenmesinde kullanılmaktadır. Modele göre, bir manyetik kristalin her bir örgü noktasına bir manyetik atom (ya da spin) yerleştirilir ve en yakın komşularıyla etkileştiği düşünülür. Atomun spin durumu  $S_i$  değişkeni ile etiketlenir. Bu değişken spin yönelimine bağlı olarak iki değer alır. Şayet spinler yukarı doğru yönelmiş bir dış manyetik alana ( $h$ ) paralel ise  $S_i = +1$ , anti paralel ise  $S_i = -1$  seçilir. Ortaya çıkan fiziksel sisteme  $S = 1/2$  Ising modeli denir (Ising, 1925). Spin konfigürasyonu  $\{S_i\}$  olan Ising sisteminin Hamiltoniyeni en basit şekliyle aşağıdaki gibidir:

$$H\{S_i\} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - h \sum_{\langle ij \rangle} (S_i + S_j) \quad (3.1)$$

Burada  $\langle ij \rangle$  en yakın komşu spin çifti üzerinden alınan toplamı ifade etmektedir. (3.1)'deki  $J$  sabiti komşu örgü noktaları arasındaki bilineer (ya da dipol-dipol) etkileşme enerjisini gösterir. Sistem,  $J < 0$  olduğunda ferromanyetik özellik,  $J > 0$  olma durumunda ise antiferromanyetik özellik taşır. Modeldeki uzun menzil düzen parametresi mıknatıslanma (ya da dipol moment) ( $m$ ) olarak adlandırılır ve bir tarafa yönelmenin diğer taraf yönelmeden fazla oluşunun bir ölçüsüdür.

Diğer taraftan üç durumlu spin sistemleri için spin değişkeni  $S_i = +1, 0, -1$  şeklinde seçilir ve (3.1) Hamiltoniyenine yüksek mertebeli bir etkileşme terimi ( $K$ ) ile bir dış alan terimi ( $D$ ) daha ilave edilir:

$$H\{S_i\} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - K \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 - D \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^2 + S_j^2) - h \sum_{\langle ij \rangle} (S_i + S_j) \quad (3.2)$$

Burada  $K$  bikuadratik (ya da kuadrupol-kuadrupol) etkileşme enerjisi ve  $D$  tek iyon anizotropi sabitidir. Bu parametrelerin birimleri  $k_B T$  ( $k_B$  Boltzmann sabiti ve  $T$  sıcaklıktır) enerji birimidir. (3.2) denklemi  $S = 1$  Ising modeli veya Blume-Emery Griffiths (BEG) modeli olarak isimlendirilir (Blume vd., 1971). BEG modelinde mıknatıslanmaya ilave olarak kuadrupol düzeni ( $q$ ) olarak bilinen ikinci bir uzun menzil düzen parametresi söz konusudur.

Her iki model Hamiltoniyeninde, bir  $i$ 'nci ( $S = 1/2$  olursa  $i = +, -$  veya  $S = 1$  olduğunda  $i = +, 0, -$ ) spin durumunun olasılığı için  $p_i$  gösterimi kullanılır. Bu değişken takımı durum (ya da nokta) değişkenleri olarak ta adlandırılır.  $p_i$ 'ler  $\sum_i p_i = 1$  normalizasyon şartına uyarlar. Ayrıca, durum değişkenleri cinsinden mıknatıslanma  $m = p_+ - p_-$  şeklinde kuadrupol düzeni  $q = p_+ + p_-$  ile ifade edilir. Bu tezde sadece mıknatıslanma bağıntısı kullanılacaktır.

### 3.2 Çift Yaklaşım Yöntemi

Kikuchi (1974) tarafından geliştirilen çift yaklaşım yönteminde, nokta değişkenlerine ( $p_i$ ) ilave olarak herhangi iki örgü noktasının biri birlerine göre farklı spin durumlarının olasılığını ifade eden yeni bir değişken takımı daha tanımlanır. Bunlara bağ değişkenleri de denir ve  $P_{ij}$  ile temsil edilirler. Aralarında  $P_{ij} = P_{ji}$  şeklinde bir simetri ilişkisi söz konusudur (Burada  $i, j = +, -$  veya  $i, j = +, 0, -$  alınır). Bağ değişkenleri  $\sum_{i,j} P_{ij} = 1$  normalizasyon şartını sağlarlar ve durum değişkenlerine  $p_i = \sum_j P_{ij}$  ile bağlanmışlardır. Bu nedenle,  $m = p_+ - p_-$  ifadesi yardımıyla yapılan bir mıknatıslama hesabı  $P_{ij}$  parametreleri için bulunan bir öz-uyumlu denklem sisteminin çözümü ile ilintilidir. Kısaca bağ değişkenlerini biri birine bağlayan lineer olmayan denklem sistemi kısaca aşağıdaki gibi türetilir:

Önce sistemin iç enerjisi ( $E$ ) ve entropisi ( $S_E$ )  $P_{ij}$  cinsinden aşağıdaki gibi yazılır:

$$\beta E = N \frac{\gamma}{2} \sum_{i,j} \varepsilon_{ij} P_{ij} \quad (3.3)$$

$$S_E = Nk_B \left( (\gamma-1) \sum_{i,j} P_i \ln(P_i) - \frac{\gamma}{2} \sum_{i,j} P_{ij} \ln(P_{ij}) \right) \quad (3.4)$$

Burada  $\beta = 1/k_B T$ ,  $N$  toplam spin sayısı ve  $\gamma$  seçilen kristaldeki bir örgü noktasının en yakın komşularının sayısı ya da örgü koordinasyon sayısıdır. (3.3) numaralı denklemdeki  $\varepsilon_{ij}$  parametresi en yakın komşu spin çiftleri  $(i, j)$  için bağ enerjileri olarak adlandırılır ve (3.1) veya (3.2) denklemindeki tanımlardan tespit edilirler. Daha sonra, sisteminin denge özellikleri için spin başına serbest enerji ifadesi

$$\Phi = \frac{\beta F}{N} = \frac{\beta}{N} (E - TS_E) \quad (3.5)$$

şeklinde yazılır ve minimize edilir.  $\partial\Phi/\partial P_{ij} = 0$  sonucu denge durumundaki sistem için lineer olmayan denklem sistemi şu şekilde elde edilir:

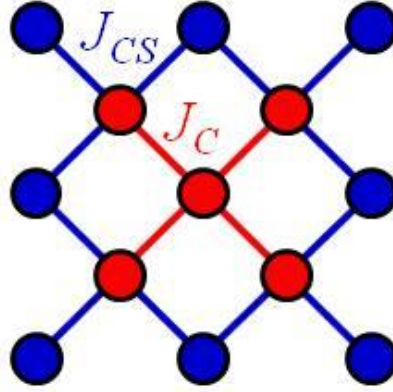
$$P_{ij} = \frac{1}{Z} (P_i P_j)^{(\gamma-1)/\gamma} e^{-\beta \varepsilon_{ij}} \equiv \frac{e_{ij}}{Z} \quad (3.6)$$

Burada  $Z$  bölüşüm fonksiyonu olup aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$Z = \exp(2\beta\lambda/\gamma) = \sum_{i,j} e_{ij} \quad (3.7)$$

(3.7) numaralı denklemde  $\lambda$ , normalizasyon şartında kullanılan ek bir terimdir. (3.6) denklem sistemi, literatürde değişik Hamiltoniyenli spin modellerine kolayca uygulanarak bulk malzemelerin manyetik özellikleri ve denge faz geçişleri incelenmiştir (Keskin vd., 1986; Erdinç vd., 2002; Keskin vd., 2004).

### 3.3 S=1 Ising Nanoparçacıkların Manyetik Özellikleri



**Şekil 3.1.** İki boyutta iki kabuktan oluşan kare örgünün şematik gösterimi (Kırmızı ve mavi renkteki içi dolu daireler sırasıyla çekirdek ve yüzey atomlarını gösterir. Kırmızı ve mavi çizgiler ise çekirdek ve çekirdek-yüzey spin çiftlerini temsil eder)

Bu tezde tek domen olan bir kübik nanoparçacığın manyetik özellikleri ve bunların büyüklüğe bağlılığı incelendi. Nanoparçacık için çalışma iki boyutta kare örgü üzerinde yapılarak sonuçlar üç boyutta yorumlandı. Böyle bir sistem Şekil 3.1 'de detaylıca gösterildi. Şekle göre, iki boyutta kabukların sayısı dolayısıyla nanoparçacığın büyüklüğü atom sayısı ile orantılıdır. Burada kabuk sayısı nanoparçacığın yarıçapını ( $R$ ) göstermektedir. Kübik nanoparçacık çekirdek ( $C$ ), ara yüzey ( $CS$ ) ve yüzey ( $S$ ) olmak üzere üç bölgeden oluşur. Her bir bölgenin spin sayısı çekirdek için  $N_C$ , ara yüzey için  $N_{CS}$  ve yüzey için  $N_S$  ise nanoparçacığın spin sayısı  $N = N_C + N_S$  olacaktır.

Çekirdek/yüzey tipi bir kübik nanoparçacık için (3.2) Hamiltoniyen ifadesi yukarıda tanımlanan  $C$ ,  $CS$  ve  $S$  bölgeleri dikkate alınarak

$$H = H_C + H_{CS} + H_S \quad (3.8)$$

şeklinde yazılır. (3.8) 'deki terimler sırasıyla

$$H_C = -J_C \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - K_C \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 - D_C \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^2 + S_j^2) - h \sum_{\langle ij \rangle} (S_i + S_j)$$

$$H_{CS} = -J_{CS} \sum_{\langle ij \rangle} S_i \sigma_j - K_{CS} \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 \sigma_j^2$$

$$H_S = -J_S \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - K_S \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i^2 \sigma_j^2 - D_S \sum_{\langle ij \rangle} (\sigma_i^2 + \sigma_j^2) - h \sum_{\langle ij \rangle} (\sigma_i + \sigma_j) \quad (3.9)$$

şeklinde dir. (3.9) 'daki  $S_i$  ve  $\sigma_i$  de ğiřkenleri sırasıyla çekirdek ve yüzey spinlerin spin durumunu temsil eden de ğiřkenlerdir. Bölgelerin bilineer etkileřme, bikuadratik etkileřme ve kristal alan sabitleri sırasıyla  $J_C, J_{CS}, J_S; K_C, K_{CS}, K_S; D_C, D_S$  ile gösterilmiřtir. řayet  $J_C = J_{CS} = J_S$  ve  $K_C = K_{CS} = K_S$  ise parçacık homojen nanoparçacık olarak bilinir.  $J_C \neq J_{CS} \neq J_S, J_C = J_{CS} \neq J_S, J_C \neq J_{CS} = J_S, J_{CS} \neq J_C = J_S$  ve  $K_C \neq K_{CS} \neq K_S, K_C = K_{CS} \neq K_S, K_C \neq K_{CS} = K_S, K_{CS} \neq K_C = K_S$  şartlardan en az bir tanesi geçerli olması durumunda ise parçacık kompozit nanoparçacık olarak adlandırılır: Bu çalışmada, basitlik olması bakımından homojen kübik nanoparçacıklar için  $J_C = J_{CS} = J_S = J_0 = 1$ , kompozit kübik nanoparçacıklar için  $J_C = J_S = J_0 = 1, J_{CS} = -J_0 = -1$  seçilmiřtir. Her iki durumda da  $K_C = K_{CS} = K_S = K$  ve  $D_C = D_S = D$  olarak alındı.

Yukarıda tanımlanan nanoyapıların (3.6) denklem sistemi yardımıyla manyetik özelliklerinin veya yapısal faz geçiřlerinin incelenebilmesi için (bulk sistemlerden farklı olarak)  $\epsilon_{ij}$  ba ğ enerjileri için ařa ğıdaki tanım kullanılır:

$$\epsilon_{ij} = N_P^C \epsilon_{ij}^C + N_P^{CS} \epsilon_{ij}^{CS} + N_P^S \epsilon_{ij}^S \quad (3.10)$$

Burada  $N_P^C, N_P^{CS}, N_P^S$  sırasıyla çekirdek, ara yüzey ve yüzeyde bulunan spin çiftlerinin sayısını gösterir. Bunları spin sayıları ve örgü koordinasyon sayıları cinsinden řöyle yazabiliriz:  $N_P^C = (N_C \gamma_C / 2) - N_{CS}, N_P^S = N_S \gamma_S / 2$  ve  $N_P^{CS} = 2N_{CS} \gamma_{CS} / 2$ . řekil 3.1 'e göre iki boyutta kare örgü için örgü koordinasyon sayıları  $\gamma_C = 4, \gamma_{CS} = 2, \gamma_S = 0$  şeklindedir. Her bölgenin spin sayıları ( $N_C, N_{CS}, N_S$ ), spin çifti sayıları ( $N_P^C, N_P^{CS}, N_P^S$ ) ve ba ğ enerjileri ( $\epsilon_{ij}^C, \epsilon_{ij}^S, \epsilon_{ij}^{CS}$ ) Çizelge 3.1 'de detaylı olarak verilmiřtir. Böylece, üç durum de ğiřkeni ( $p_+, p_0, p_-$ ) ba ğ de ğiřkenleri cinsinden  $p_+ = P_{++} + P_{+0} + P_{+-}, p_0 = P_{0+} + P_{00} + P_{0-}, p_- = P_{-+} + P_{-0} + P_{--}$  şeklinde ifade edildi ğinden parçacık mıknatıslanması  $m = p_+ - p_-$  kullanılarak kolayca hesaplanır.

Bunun için Çizelge 3.1 'deki rakamlar eşitlik (3.10) de dikkate alınarak denklem (3.6) iterasyon tekniği ile nümerik olarak çözülür. Çözümler mıknatıslanma eğrileri ( $m-T$ ) ve histerezis döngüleri ( $m-h$ ) şeklinde elde edilir. Tez çalışmamızda varılan tüm sonuçlar Şekil 4.1, Şekil 4.10 'da grafiksel olarak verilmiş olup gelecek kesimde ayrıntılı olarak tartışılacaktır.

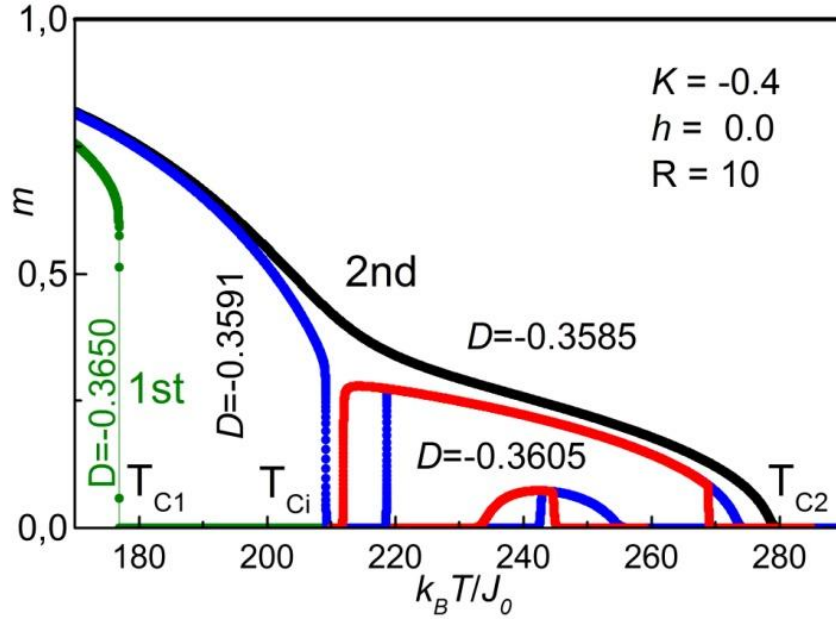
**Çizelge 3.1** Çekirdek-yüzey tipi kübik nanoparçacıkların  $S = 1$  Ising modeli için parçacık ve parçacık çifti sayıları ile bağ enerjileri

<b>Parçacık Yarıçapı</b>	<b>R</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>4</b>	<b>5</b>	<b>6</b>	<b>7</b>	<b>8</b>	<b>9</b>	<b>10</b>
Parçacık ve Parçacık Çifti Sayıları (Yalçın vd., 2012)	$N_C$	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
Bağ Enerjileri (Yalçın vd., 2014)	$\mathcal{E}_{++}$	$-J_C - K_C - 2D_C - 2h$			$-J_{CS} - K_{CS}$			$-J_S - K_S - 2D_S - 2h$		
	$\mathcal{E}_{+0}$	$-D_C - h$			$0$			$-D_S - h$		
	$\mathcal{E}_{+-}$	$+J_C - K_C - 2D_C$			$+J_{CS} - K_{CS}$			$+J_S - K_S - 2D_S$		
	$\mathcal{E}_{0+}$	$-D_C - h$			$0$			$-D_S - h$		
	$\mathcal{E}_{00}$	$0$			$0$			$0$		
	$\mathcal{E}_{0-}$	$-D_C + h$			$0$			$-D_S + h$		
	$\mathcal{E}_{-+}$	$+J_C - K_C - 2D_C$			$+J_{CS} - K_{CS}$			$+J_S - K_S - 2D_S$		
	$\mathcal{E}_{-0}$	$-D_C + h$			$0$			$-D_S + h$		
$\mathcal{E}_{--}$	$-J_C - K_C - 2D_C + 2h$			$-J_{CS} - K_{CS}$			$-J_S - K_S - 2D_S + 2h$			

## BÖLÜM IV

### BULGULAR ve TARTIŞMA

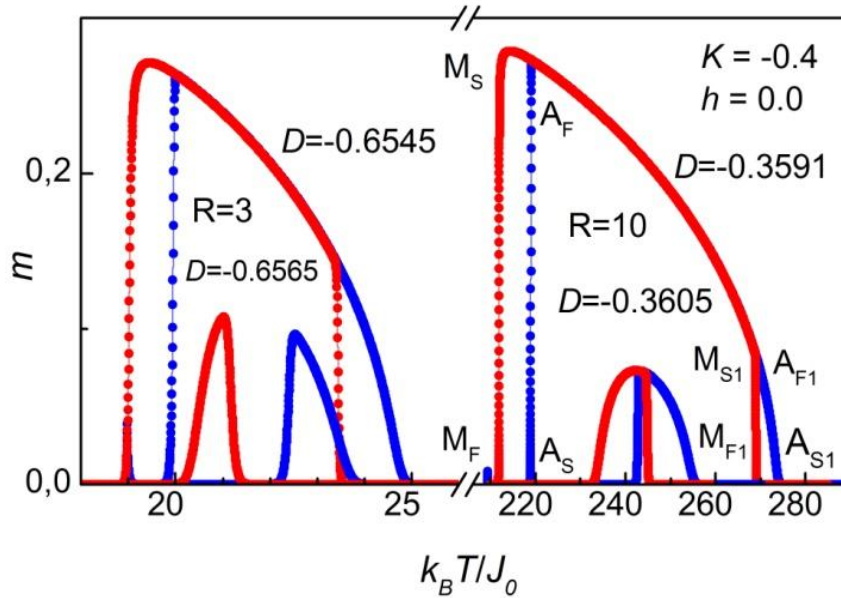
#### 4.1 Homojen Sistem İçin Mıknatıslanma Eğrileri, Faz Diyagramları ve Histerezis Eğrileri



**Şekil 4.1.** Farklı  $D$  değerleri için homojen sistemin indirgenmiş sıcaklığa ( $k_B T / J_0$ ) bağlı mıknatıslanma ( $m$ ) eğrileri ( $J_C = J_{CS} = J_S = J_0 = 1$ )

Kare örgü üzerinde tanımlanan farklı kristal alan değerlerine sahip yarıçapı  $R=10$  olan tek domenli bir homojen sistemin (NP) manyetik alan yokluğunda ( $h=0.0$ )  $K=-0.4$  seçilerek elde edilen mıknatıslanma eğrilerinin sıcaklığa bağlı gelişimi Şekil 4.1 'deki gibi elde edildi. Homojenlik çekirdek, yüzey ve ara yüzey bilineer etkileşme değerleri  $J_C = J_{CS} = J_S = J_0 = 1$  şeklinde seçilerek sağlandı.  $D=-0.3585$  için artan sıcaklıkla birlikte manyetizasyonun ( $m$ ) 1 'den 0 'a kadar sürekli bir azalma gösterdiği gözlemlendi (siyah eğri). Bu sürekli azalmanın sifıra ulaştığı nokta Curie sıcaklığı ( $T_{C2}$ ) olarak tespit edildi. Bu tarz mıknatıslanmanın sürekli olarak azalıp herhangi bir sıcaklık değerinde sifıra ulaşmasıyla sistemin ikinci-derece faz dönüşümü geçirdiği sonucuna ulaşıldı. Ayrıca,  $D=-0.3650$  seçildiğinde sistem manyetizasyonu artan sıcaklıkla birlikte yine azalırken bu kez bir başka sıcaklık değerinde ( $T_{C1}$ ) sifıra atlayarak kesikli değişim göstermiştir (yeşil eğri). Bu durumda parçacık birinci-derece faz dönüşümüne uğramaktadır.  $T_{C2}$  ve  $T_{C1}$  kritik sıcaklık değerlerinden sonra artan sıcaklıkla birlikte

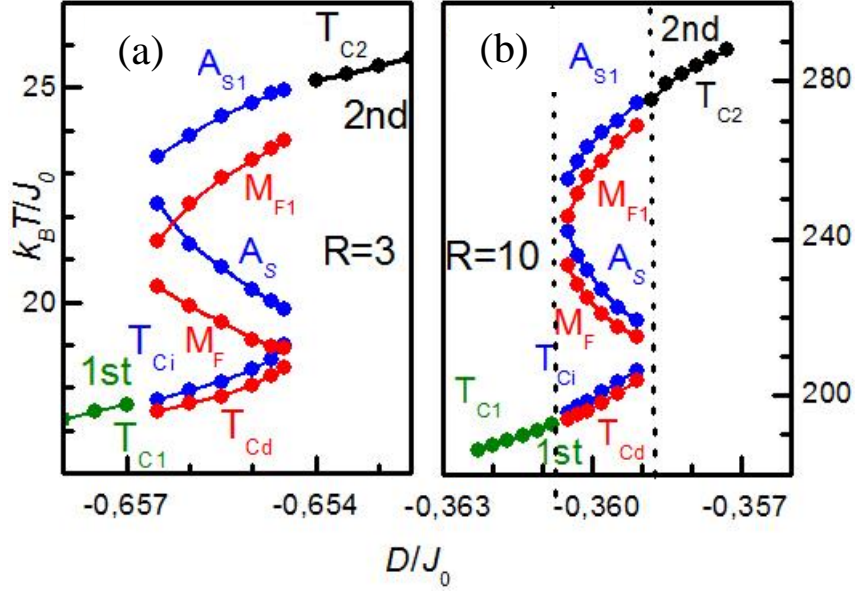
mıknatıslanmada bir başka deęişim gözlenmemiř dolayısıyla NP paramanyetik faz durumunda dengededir. Dięer taraftan  $D=-0.3605$  ve  $D=-0.3591$  deęerleri için (sırasıyla mavi ve kırmızı eęriler) mıknatıslanma artan ve azalan sıcaklıkla birlikte ikinci- ve birinci-derece faz geçiřleri arasında farklı davranıřlar sergilemektedir. Sistem artan sıcaklıkla birlikte bir kritik sıcaklıktan ( $T_{Ci}$ ) geçtikten sonra artan ve azalan yeni sıcaklık deęerlerinde gösterdięi bu davranıřlar östenitik ve martensitik faz geçiřleri olup termal histerezisleri oluřturmaktadır. Özellikle martensitik ve östenitik faz geçiřleri birinci-derece faz geçiřinin üzerindeki sıcaklık deęerlerinde tespit edilmiřtir. Kare örgüden oluřan homojen bir nanoparçacık için östenitik ve martensitik faz geçiřleri termal histerezis döngüleri ile birlikte ařaęıda detaylıca açıklanmıřtır.



**řekil 4.2.** Homojen sistem için termal histerezis eęrileri ( $J_c = J_{cs} = J_s = J_0 = 1$ )

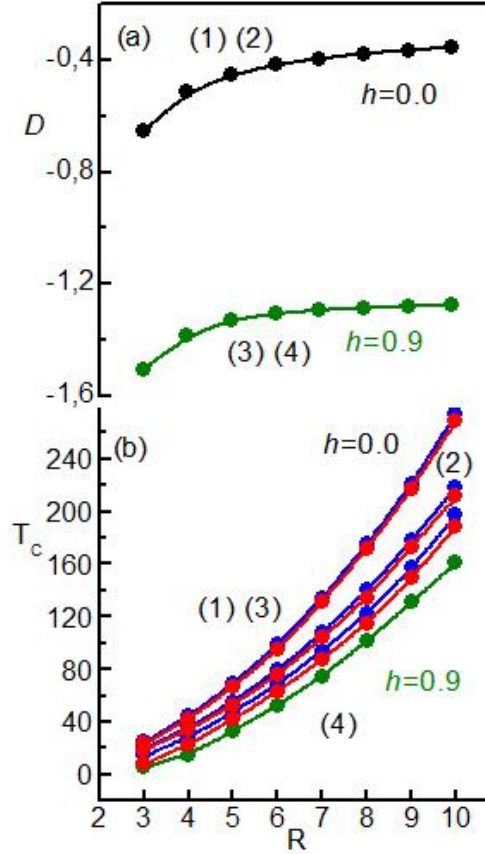
řekil 4.2 'de homojen sistemin bikuadratik etkileřme deęeri  $K=-0.4$  için iki farklı parçacık yarıçapı ( $R=3$ ,  $R=10$ ) dikkate alınarak ve bazı tek iyon anizotropi ( $D$ ) deęerleri kullanılarak  $h=0.0$  durumunda elde edilen termal histerezis eęrileri görölmektedir. řekle göre, sıcaklık arttıkça martensitten (kırmızı eęri) östenite (mavi eęri) geçiřte endotermik pik oluřurken, sıcaklık azaldıkça östenitten martensite geçiřte ekzotermik pik oluřmaktadır. Bu pikler  $R=3$  için  $D=-0.6565$  (küçük pik),  $-0.6545$  (büyük pik) ve  $R=10$  için  $D=-0.3605$  (küçük pik),  $-0.3591$  (büyük pik) deęerlerinde gözlemlendi. Ayrıca bu piklerin oluřtuęu sıcaklık deęerleri  $R=3$  için 18–24

$k_B T/J_0$  ve  $R=10$  için  $211-273 k_B T/J_0$  sıcaklık aralığındadır. Karakteristik sıcaklıklar,  $M_S$  ve  $M_F$  martensitik başlama ve bitiş sıcaklığı,  $A_S$  ve  $A_F$  östenitik başlama ve bitiş sıcaklıklarıdır. Artan sıcaklıkla birlikte  $A_S$  'den  $A_F$  'ye doğru mıknatıslanmada keskin bir artış güçlü östenitik faz,  $A_{F1}$ 'den  $A_{S1}$ 'e doğru mıknatıslanmadaki azalma ise zayıf östenitik faz olarak belirlendi.  $M_F$ ,  $M_S$ ,  $A_S$  ve  $A_F$  'lerin oluşturduğu kapalı eğrilere termal histerezis,  $M_{F1}$ ,  $M_{S1}$ ,  $A_{S1}$  ve  $A_{F1}$  'lerin oluşturduğu kapalı eğrilere ise zayıf termal histerezis eğrileri denir.  $R=10$  için zayıf termal histerezis eğrisi  $R=3$  'den küçük, sıcaklık ( $k_B T/J_0$ ) aralığı ise  $R=10$  'da  $R=3$  'den büyük olduğu bulundu. Bunlara ek olarak  $R=3$  'de pikler birbirlerinden ayrılmıştır.



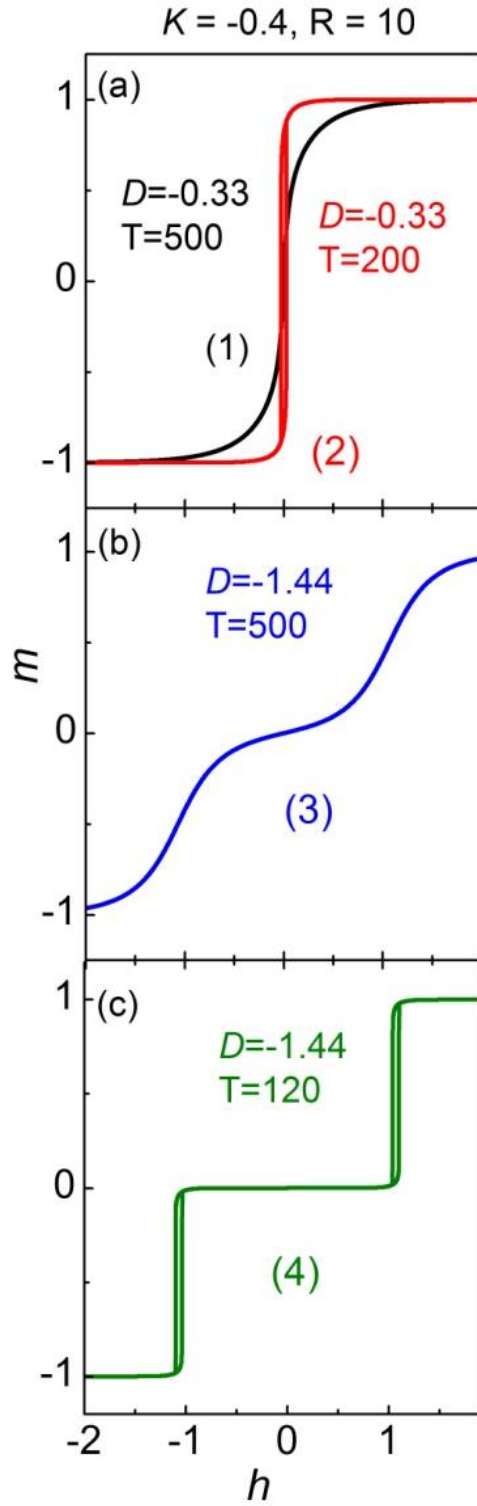
**Şekil 4.3.** Homojen sistem için  $k_B T/J_0$  'nin  $D/J_0$  'a göre gelişimi (a)  $R=3$ , (b)  $R=10$

Homojen sistem için  $R=3$  ve  $R=10$  'da birinci-derece, martensitik, östenitik ve ikinci-derece faz geçişleri Şekil 4.3 'te gösterildi. Şekle göre, sistem artan  $D/J_0$  değerleri ile, sırasıyla birinci-derece, martensitik, östenitik, ve ikinci-derece faz geçişleri sergiler. Birinci-derece faz geçiş eğrileri (yeşil eğriler)  $D/J_0$  değerleri ile üstel olarak değişirken, ikinci-derece faz geçiş eğrileri (siyah eğriler) artan  $D/J_0$  değerlerine logaritmik olarak bağlıdır. Termal histerezislerini oluşturan martensitik ve östenitik fazlar ise tek iyon anizotropi sabiti ( $D$ ) ve bikuadratik etkileşme ( $K$ ) parametresinden kaynaklanmaktadır. Martensitik ( $M_{F1}$ ) ve östenitik ( $A_S$ ) faz geçiş eğrileri sadece  $R \leq 3$  değerlerinde kesişmektedir (Şekil 4.3a).



**Şekil 4.4.** Homojen sistem için (a)  $D$  değerlerinin ve (b) kritik sıcaklığın ( $T_c$ )  $R$  'ye göre farklı manyetik alan durumları altındaki ( $h=0.0, h=0.9$ ) gelişimi ( $K=-0.4$ )

Şekil 4.4 'de kare örgüye sahip homojen sistem için  $D$  ve  $T_c$  değerlerinin  $R$  'ye göre gelişimi  $h=0.0$  ve  $h=0.9$  seçilerek incelendi. Bu durumda,  $D$  sabiti  $R$  'ye göre logaritmik değişim gösterirken (Şekil 4.4a)  $T_c$ , martensitik ve östenitik sıcaklıkları üstel olarak artmaktadır (Şekil 4.4b). Homojen NP için  $D-R$  ve  $T_c-R$  düzlemlerinde dört ana bölge oluşturuldu. Bu bölgeler, sıcaklık artarken ve azalırken birinci- ve ikinci-derece faz geçişleri arasında gerçekleşen ilk-son martensitik ve östenitik değerleri alınarak elde edildi. Birinci bölge (1),  $h=0.0$  değerine göre büyük  $D$  ve  $T_c$  değerlerine sahiptir. İkinci bölge  $h=0.0$  değerine göre büyük  $D$  değerine sahip iken  $T_c$  değeri  $h=0.0$  ve  $h=0.9$  arasındadır.  $h=0.9$  'a göre küçük  $D$  değeri ve  $h=0.0$  'a göre büyük  $T_c$  değeri üçüncü bölge olarak tanımlanmaktadır. Son olarak dördüncü bölge  $h=0.9$  'a göre küçük  $D$  ve  $T_c$  değerine sahiptir.

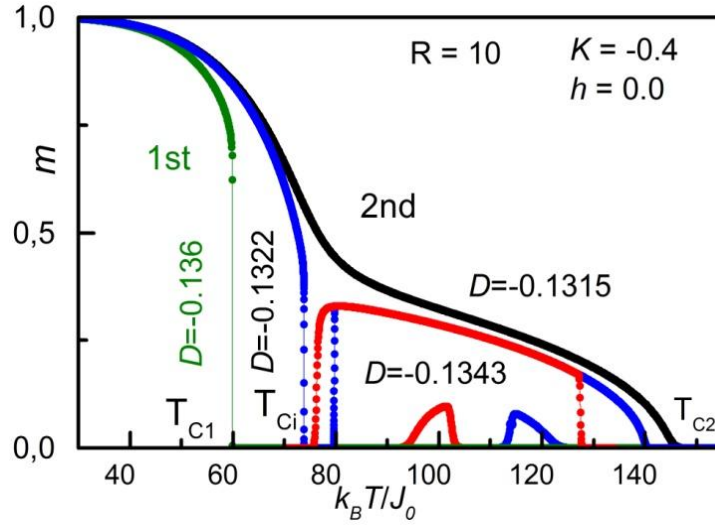


**Şekil 4.5.** Homojen sistem için mıknatıslanma değerlerinin ( $m$ ) dış manyetik alana ( $h$ ) göre değişimi

Şekil 4.4 'te oluşturulan dört bölgeden okunan değerler yardımıyla elde edilen histerezis eğrileri Şekil 4.5 'te açıklanmıştır. Şekil 4.5 (a) 'ya göre, yüksek tek iyon anizotropi ( $D=-0.33$ ) ve yüksek sıcaklık ( $T=500$ ) değerlerinde paramanyetik davranış (siyah eğri), sıcaklık değeri azaltıldığında ( $T=200$ ) ferromanyetik davranış (kırmızı eğri) sergiler. Bu

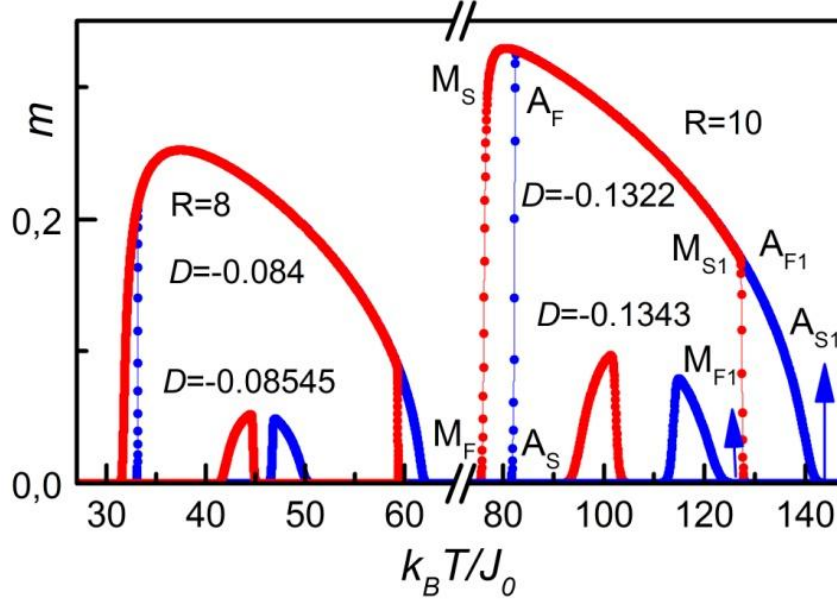
davranışlar, sırasıyla Şekil 4.4 'deki birinci ve ikinci bölgelere karşılık gelir. Şekil 4.5 b'deki mavi eğri ile temsil edilen ve iki farklı domende meydana gelen paramanyetik davranış  $T=500$  için kristal alan değeri azaltılarak ( $D=-1.44$ ) elde edilir ve Şekil 4.4'deki üçüncü bölgeye karşılık gelir. Dördüncü bölgede ( $D=-1.44, T=120$ ) ise yine iki farklı domen oluşmakta fakat sıcaklık değeri azaltıldığı için ferromanyetik bir davranış tespit edildi. Benzer özellikler farklı  $R$  değerlerinde de gözlenmektedir. Burada sunumu kolaylaştıracak  $R=10$  değerindeki histerezis eğrileri verildi. Dolayısıyla bu tez çalışmasında farklı  $R$  değerlerinden ziyade Şekil 4.4 'te oluşturulan dört bölgenin yansımaları olan eğriler üzerinde duruldu. Sistem homojen olduğu için genelde bağımsız değişkenlere göre (bu tez çalışmasında genelde yatay eksen) manyetik davranışlar simetrik özellikler sergilemektedir. Şekil 4.5 'te elde edilen histerezis eğrilerinin manyetik alana göre simetrik olduğu görülmektedir. Bu durum; tez çalışmasında kullanılan Hamiltoniyen parametrelerinin homojen sistem için aynı formda yansımalarından kaynaklanmaktadır. Diğer bir ifadeyle, manyetik histerezis eğrilerinde farklı özelliklerin bulunması farklı fiziksel parametrelere bağlı olacağına işaret etmektedir.

## 4.2 Kompozit Sistem İçin Mıknatıslanma Eğrileri, Faz Diyagramları ve Histerezis Eğrileri



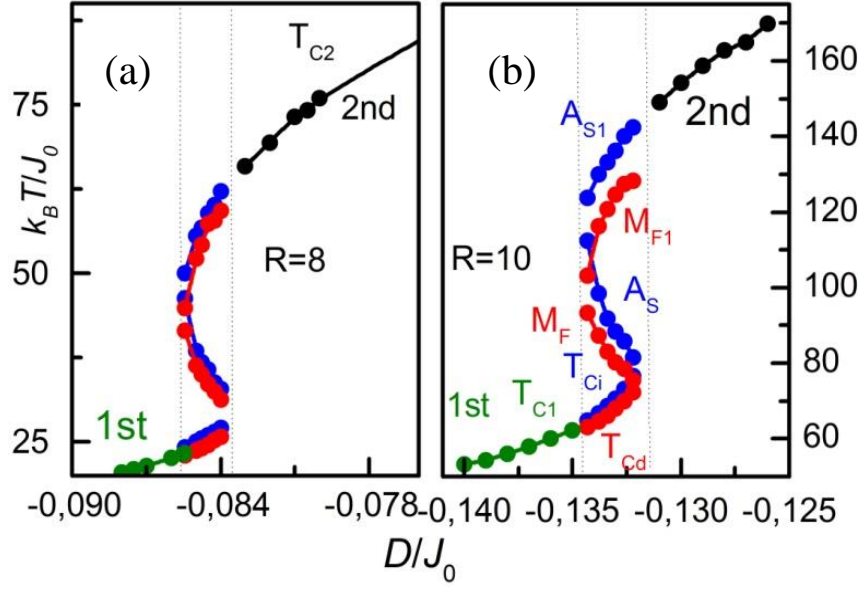
**Şekil 4.6.** Farklı  $D$  değerleri için kompozit sistemin indirgenmiş sıcaklığa ( $k_B T/J_0$ ) bağlı mıknatıslanma ( $m$ ) eğrileri ( $J_C = J_S = J_0 = 1$ ,  $J_{CS} = -1$ )

Kompozit sistemin ( $J_C = J_S = J_0 = 1, J_{CS} = -1$ ) manyetik alanın sıfır olduğu duruma ait mıknatıslanma eğrileri sıcaklığa göre değişim şeklinde farklı  $D$  değerleri ve  $K = -0.4$ ,  $R = 10$  kullanılarak hesaplandı ve sonuçlar Şekil 4.6 'da gösterildi. Bu şekil genel görünüm itibariyle Şekil 4.1 'e benzemektedir. Ancak olayın gerçekleştiği sıcaklık ve  $D$  değerleri birbirinden farklıdır. Bunun nedeni de sistemin kompozit olmasından kaynaklanmaktadır. Diğer bir ifadeyle homojen sistemde mıknatıslanma tek yönelime sahipken kompozitte bu durum farklılık gösterebilmektedir. Burada dikkat edilecek en önemli durum kritik sıcaklık ve faz geçişlerinin homojen sisteme göre daha büyük  $D$  değerlerinde gerçekleşiyor olmasıdır. Çünkü yukarıda da ifade edildiği gibi homojen sistemde toplam parçacık sayısı net mıknatıslanmayı oluştururken kompozitte net mıknatıslanma sistemin mıknatıslanmasına karşılık gelmektedir. Bu durum homojen sistemdeki faz geçişlerinin kompozitteki karşılığının büyük  $D$  değerlerinde olmasını zorunlu kılmaktadır. Siyah renkte gösterilen ve artan sıcaklıkla birlikte 1'den itibaren azalıp  $T_{C2}$  Curie değerinde sıfıra inen eğri mıknatıslanma için ikinci dereceden faz geçişine karşılık gelmektedir. Şekil 4.6 'da termal histerezis eğrisi büyük martensitik ve östenitiklerde gözlenirken, ufak martensitik ve östenitik piklerin birbirinden ayrıldığı görüldü. Bu durumlarında detaylı bir incelemesi aşağıda yapıldı.



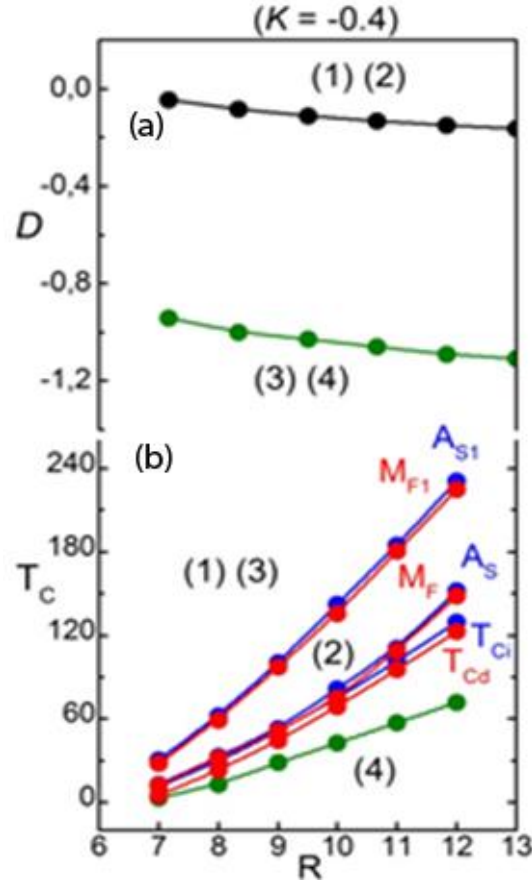
**Şekil4.7.** Kompozit sistem için termal histerezis eğrileri ( $J_C = J_S = J_0 = 1$ ,  $J_{CS} = -1$ )

Yarıçap değerleri  $R=8$  ve  $R=10$  olan kompozit sistemin manyetik alan yokluğunda martensitik ve östenitik fazlar ile bunların oluşturduğu termal histerezis eğrileri Şekil 4.7 'de gösterilmiştir. Buradaki genel görünüm de Şekil 4.2 'ye benzemektedir. Kompozit sistem için  $R=8$  ve  $R=10$  değerlerindeki küçük piklerin her ikisinde birbirinden ayrıldığı görülmektedir. Bu ayrılmanın en önemli nedenleri arasında büyük  $D$  değerleri bulunmaktadır. Başka bir ifade ile  $R=8$  için  $D = -0.08545$  'de ve  $R=10$  alınınca  $D = -0.1343$  değerlerinde endotermik ve ekzotermik pikler görüldü. Oysa, homojen sistem için her iki durumda da büyük martensitik ve östenitik geçişler termal histerezisleri oluşturmuştur. Ayrıca, kompozit sistem için  $M_{F1}$ ,  $M_{S1}$ ,  $A_{S1}$  ve  $A_{F1}$  'lerin oluşturduğu zayıf termal histerezis eğrileri hemen hemen  $M_F$ ,  $M_S$ ,  $A_S$  ve  $A_F$  'lerin oluşturduğu termal histerezis eğrilerini zorlamaktadır.



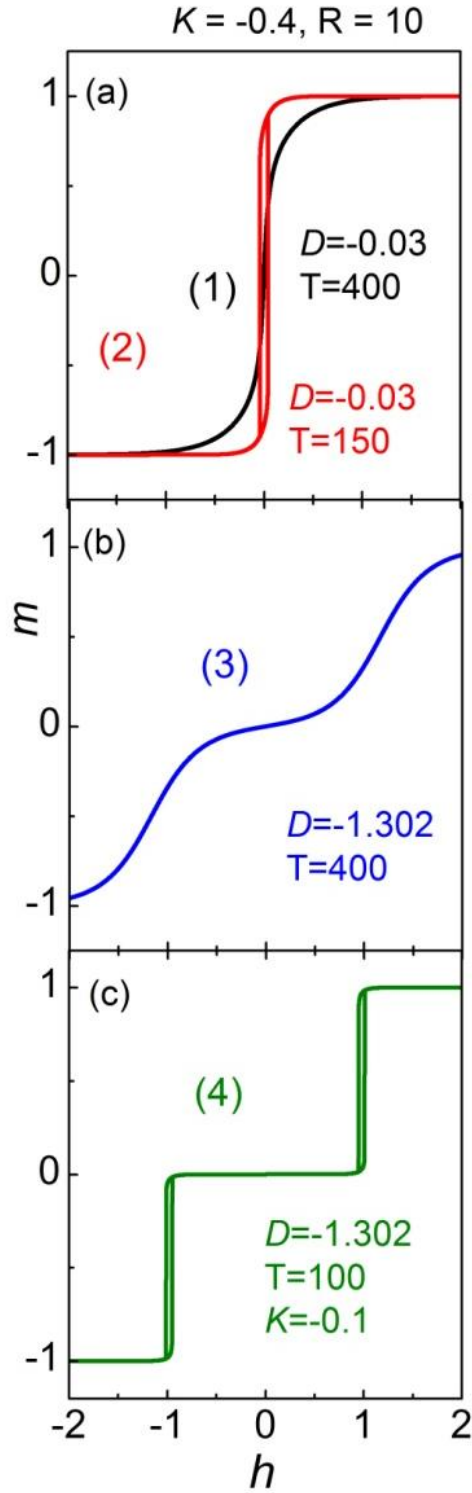
**Şekil 4.8.** Kompozit sistem için  $k_B T / J_0$  'nin  $D / J_0$  'a göre gelişimi ((a)  $R=8$ , (b)  $R=10$ )

Kare örgüdeki kompozit sistemin 8 ve 10 değerlerindeki  $R$  değerleri için  $k_B T / J_0$  'ın  $D / J_0$  'ye göre artan gelişimi sırasıyla birinci-derece, martensitik, östenitik, ve ikinci derece faz geçişleri Şekil 4.8 'de verilmiştir. Bu faz diyagramı gösterimi, şekil itibariyle Şekil 4.3 'deki ile uyum halindedir. Homojen sistem için martensitik ve östenitik faz geçiş eğrileri sadece  $R \leq 3$  değerlerinde kesişirken kompozit için kesişim olayı her durumda gerçekleşmektedir ve bu faz diyagramları  $k_B T / J_0$  ve  $D / J_0$  değerlerine göre daha dar bölgeye sıkışmaktadır (Şekil 4.8a ve b).



**Şekil 4.9.** Kompozit sistem için (a)  $D$  değerlerinin ve (b) kritik sıcaklığın ( $T_C$ )  $R$  'ye göre farklı manyetik alan durumları altındaki ( $h=0.0, h=0.9$ ) gelişimi ( $K=-0.4$ )

Kare örgü üzerinde tasarlanan nano yapı için gerçekleştirilen bu tez çalışmasında elde edilen ve Şekil 4.9 'da sunulan diyagram farklı çalışmaların da önünü açması bakımından önem arz etmektedir. Bu şekilde, dış manyetik alan varlığında ( $h=0.9$ ) ve yokluğunda ( $h=0.0$ ) kompozit sisteme ait  $D$  ve  $T_C$  değerlerinin  $R$  'ye göre değişimi detaylıca verilmiştir. Homojen sistem için elde edilen Şekil 4.4 ile kompozit sistem için elde edilen Şekil 4.9 'da  $D$  'nin  $R$  'ye göre değişimleri farklılık gösterir. Homojen sistem için bu durum logaritmik olarak artarken, kompozit için azalmaktadır.  $T_C$  'nin  $R$  'ye göre değişiminde ise bir farklılaşma gözlenmemiştir. Kompozit sistem için de  $D$ - $R$  ve  $T_C$ - $R$  düzlemlerinde dört ana bölge oluşmuştur. Her bir bölgenin manyetik özellikleri homojen sistem ile benzer özellikler göstermektedir. Bu şekil kullanılarak oluşabilecek bütün manyetik histeresis eğrileri ( $m$ - $h$ ) önceden belirlenebilir. Diğer bir ifadeyle buradaki dört bölgeye bakılarak sistem için histeresis eğrilerinin nasıl bir davranış sergileyeceği gruplandırılmış olduğu için buradan çıkan sonuç şudur: hem homojen hem de kompozit sistem dört farklı histeresis eğrileri elde edilir, diğer eğriler bu dört eğriden mutlaka birine benzer ve sadece sayısal değerleri değişir.



**Şekil 4.10.** Kompozit sistem için kübik örgüde mıknatıslanma değerlerinin ( $m$ ) dış manyetik alana ( $h$ ) göre değişimi

Şekil 4.9 'daki dört farklı bölge kullanılarak kompozit sisteme ait manyetik histerezis eğrileri ( $m-h$ ) Şekil 4.10 'daki gibi çizildi. Kompozit sistemin eğrileri sırasıyla tek bölge PM ve FM fazlar için sırasıyla siyah ve kırmızı eğriler, çift bölge PM ve FM fazlar için mavi ve yeşil eğriler ile gösterilmiştir. Burada da genel görünüm homojen sistemin

sonuçlarıyla uyum içindedir. Ancak bazı sayısal farklılıklar ortaya çıkmaktadır. Örneğin, yeşil renkli döngülerle temsil edilen ayrılmış eğrilerin ( $m-h$ ) ayrılma özelliği  $K = -0.1$  değerinde gerçekleşmiştir. Oysa bu değer homojen sistem için  $K = -0.4$  şeklindedir. Ayrıca, kompozit sisteme ait eğriler homojene göre daha dar bölgelere yerleşmiştir. Gözlenen bu sayısal farklılıklar toplam net mıknatıslanma ile ilintilidir.

## BÖLÜM V

### SONUÇ

Bu tez çalışmasında homojen ve kompozit kübik nanoparçacıkların büyüklük, sıcaklık, martensitik, östenitik, termal histerezis ve diğer manyetik özellikleri Ising modelleri kullanılarak incelenmiştir. Öncelikli olarak üç boyutta kübik örgü zorluğundan kurtulmak için sistem iki boyutta kare örgüye indirgenmiş ve modelleme bu boyutta yapılmıştır. Ising sistemlerine ait Hamiltoniyen iki boyutta kare örgüye ait çekirdek, ara-yüzey ve yüzey gibi üç bölge için parçacık (atom) sayılarını da içerecek şekilde yeniden modifiye edilerek yazılmıştır. Bu düzenlemeler sonucunda hem homojen hem de kompozit nanoparçacıkların manyetik özelliklerinin incelenmesine fırsat sağlayan iki boyuttaki çözümler üç boyutta yorumlanacak şekilde mıknatıslanma, martensitik, östenitik ve histerezis eğrileri elde edilmiştir.

Ising modelinin homojen ve kompozit sisteme ait modifikasyonu ile mıknatıslanmanın sıcaklıkla değişimi detaylıca elde edilmiştir. Artan sıcaklıkla birlikte mıknatıslanma eğrisinin 1 den itibaren azalıp sıfır olduğu değer ikinci-derece faz geçiş sıcaklığı olan Curie sıcaklıkları tespit edildi. Homojen durum için bu Curie sıcaklığının kompozit durumunkine göre daha yüksek değerlerde olduğu bulundu. Benzer şekilde homojen ve kompozit sistemler için uygun tek iyon anizotropi ( $D$ ) ve bikuadratik etkileşme sabitleri ( $K$ ) çekirdek, yüzey ve ara yüzeyler için kullanılarak birinci-derece faz geçişleri, martensitik, östenitik ve zayıf martensitik-östenitik sıcaklıkları tespit edildi. Bu değerler azalan sıcaklığa göre ikinci-derece geçiş sıcaklığı olan  $T_{C2}$ , zayıf östenitik-martensitik, östenitik-martensitik, sıcaklık artarken elde edilen birinci dereceden faz geçiş sıcaklığı, sıcaklık artarken elde edilen  $T_{Ci}$  ve sadece birinci-derece faz geçişlerinin gözlemlendiği  $T_{C1}$  sıcaklık değerleridir. Martensitik ve östenitik fazlar en küçük ikinci derece ile en büyük birinci derece faz geçiş bölgesinde gözlenmiştir. Yani martensitik ve östenitik fazlar ve bunların çakışmasında oluşan termal histerezis eğrileri birinci derece geçişlerin gerçekleştiği sıcaklıklardan daha yüksek değerlerde oluşmaktadır. Bu sıcaklık değerleri homojen sistem için daha büyük kompozit için ise daha küçüktür. Ayrıca kompozit sistem için elde edilen değerler daha hassas çalışmalar sonucunda elde edilmiştir.

Yukarıda ifade edilen mıknatıslanmanın sıcaklıkla gelişimlerinde martensitik ve östenitik pikler de ayrıca farklı  $R$  değerleri kullanılarak ta elde edilmiş ve

karşılaştırmaları yapılmıştır. Büyük  $R$  değerlerinde geçiş sıcaklıkları da artmıştır. Genel olarak aynı büyüklükteki ( $R$ ) homojen ve kompozit nanoparçacıkların kritik sıcaklık değerleri karşılaştırıldığında homojen olanın kompozit olana göre daha büyük olduğu tespit edildi. Kompozit sistem için elde edilen martensitik ve östenitik fazlara karşılık gelen  $D$  değerlerinde ise kompozit sistemin  $D$ 'lerinin daha büyük olduğu görüldü. Bunun nedeni net mıknatıslanmayla ilgili olduğu sonucuna ulaşıldı. Çünkü homojen bir sistemde net mıknatıslanma değerini kompozit sistem ile elde etmek için daha büyük  $D$  değerlerine gereksinim vardır.

Mıknatıslanmanın sıcaklığa göre değişimlerinden faz diyagramları elde edildi. Diğer bir ifadeyle hem homojen hem de kompozit sistem için  $k_B T/J_0$ 'lerin  $D/J_0$  'ye göre değişimleri çizildi. Bu değişimde artan  $D/J_0$  'ye göre önce birinci-derece faz geçişi, sonra martensitik ve östenitik fazlar en sonunda da ikinci derece faz geçişi tesbit edildi. Bu faz diyagramlarından martensitik ve östenitik fazların oluşması birinci derece faz geçişlerinin bittiği yerden itibaren başladığı sonucu açıkça gösterildi. Sonuçtan kesin olarak emin olunması için de farklı  $R$  değerlerinde işlem tekrarlandı.

Ayrıca  $D$  ve  $T_C$ 'nin  $R$  'ye göre değişimleri de detaylıca incelendi. Homojen sistem için  $T_C$  'nin  $R$  'ye göre değişimi ile kompozit sistem sonuçlarının uyumlu olduğu gözlemlendi. Ancak  $T_C$  'nin  $R$  'ye göre değişimlerinde farklılık görüldü.  $T_C$  'nin  $R$  'ye göre değişimleri homojen için logaritmik olarak artma ve kompozit için logaritmik bir azalma gösterdi. Burada önemli sonuç şudur;  $D$  ve  $T_C$  'nin  $R$  'ye göre değişimlerinden dört bölge elde edildi. Bu bölgeler aynı zamanda bu tür çekirdek-kabuk şeklindeki nanoparçacık ve nano sistemler içinde elde edilebilecek manyetik histerezis ( $m-h$ ) eğrilerinin gruplanmasını göstermiştir. Kısaca bu tür sistemlerde hangi manyetik parametreler olursa olsun sisteme ait dört ana bölgeye karşılık gelen birer manyetik histerezis eğrileri bulunmaktadır.

Son olarak bir üst paragrafta ifade edilen bölgeler yardımıyla homojen ve kompozit sistemler için  $m-h$  histerezis eğrileri elde edildi. Bunların tek domenli paramanyetik, tek domenli ferromanyetik, iki domenli paramanyetik ve son olarak iki domenli ferromanyetik histerezis eğrileri olduğu bulundu. Kompozit sistemin histerezis eğrileri homojen sisteme göre daha dar bölgede çıktığı tespit edildi.

Sonuç olarak; iki boyuta indirgenerek incelenen homojen ve kompozit kübik nanoparçacıklara ait manyetik özelliklerin araştırılmasında martensitik ve östenitik faz geçişleri ve manyetik histerezis eğrilerinin yarılması için bikuadratik alan değeri ( $K$ ) ile tek iyon anizotropi ( $D$ ) değerlerinin ilişkili olduğu bulunmuştur. Gerek şart  $D$  iken yeter şart  $K$  olarak tespit edilmiştir. Yüksek sıcaklıklarda parçacıklar süperparamanyetik davranış sergilerken, düşük sıcaklıklarda ferromanyetik davranış sergiledikleri gösterilmiştir.

## KAYNAKLAR

Ahmadi, T. S., Wang, Z. L., Henglein, A., and El-Sayed, M. A., “Cubic colloidal platinum nanoparticles”, *Chem. Mater.* 8, 1161–1163, 1996.

Babin, V., Garstecki, P. and Holyst, R., “Multiple Photonic Band Gaps in the Structures Composed of Core-Shell Particles”, *J. Appl. Phys.* 94, 4244, 2003.

Bader, S. D., “Colloquium: Opportunities in nanomagnetism”, *Rev. Mod. Phys.* 78, 1–15, 2006.

Berker, A. N. and Wortis, M., “Blume-Emery-Griffiths-Potts model in two dimensions: Phase diagram and critical properties from a position-space renormalization group”, *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 14, 4946–4963, 1976.

Blume, M., Emery, V. J. and Griffiths, R. B., “Ising Model for the  $\bar{\nu}$  Transition and Phase Separation in  $\text{He}^3$ - $\text{He}^4$  Mixtures”, *Phys. Rev. A* 4, 1071–1077, 1971.

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. and Baldomir, D., “Learning from Nature to Improve the Heat Generation of Iron-Oxide Nanoparticles for Magnetic Hyperthermia Applications”, *Sci. Rep.* 3, 1–8, 2013.

Branco, N. S., “Blume-Emery-Griffiths model in a random crystal field” *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 60, 1033–1037, 1999.

Bratlie, K. M., Lee, H., Komvopoulos, K., Yang, P. and Somorjai, G. A., “Platinum nanoparticle shape effects on benzene hydrogenation selectivity”, *Nano Lett.* 7, 3097–3101, 2007.

- Buchelnikov, V., Sokolovskiy, V., Taskaev, S., Taranenko, I. and Entel, P., “The modeling of phase diagrams and premartensitic effects in Heusler Ni-Mn-Ga alloy by Monte Carlo method”, *Phys. Proc.* 10, 132–137, 2010.
- Burkhardt, T. W., “Equivalence of the p-degenerate and ordinary Blume-Emery-Griffiths models”, *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 60, 12502–12503, 1999.
- Castán, T., Vives, E. and Anker Lindgård, P., “Modeling premartensitic effects in Ni<sub>2</sub>MnGa: A mean-field and Monte Carlo simulation study”, *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 60, 7071–7084, 1999.
- Campbell, J. L., Arora, J., Cowell, S. F., Garg, A. Eu, P., Bhargava, S. K. and Bansal, V., “Quasi-Cubic Magnetite/Silica Core-Shell Nanoparticles as Enhanced MRI Contrast Agents for Cancer Imaging”, *PLoS ONE* 6, e21857 (1) - e21857 (8), 2011.
- Coey, J. M. D., *Magnetism and Magnetic Materials*, Cambridge CB2 8RU, UK, ISBN-13978-0-521-81614-4, 2010.
- 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., “Cubic phase nanoparticles for sustained release of ibuprofen formulation characterization and enhanced bioavailability study”, *Int. J. Nanomed.* 8, 845–854, 2013.
- Diaz-Ortiz, A., Sanchez, J. M. and Morán-López, J. L., “Thermodynamics of binary alloy thin films”, *Comp. Mater. Sci.* 8, 79–86, 1997.
- Disch, S., Hermann, R. P., Wetterskog, E., Podlesnyak, A. A., An, K., Hyeon, T., Salazar-Alvarez, G., Bergström, L. and Brückel Th., “Spin excitations in cubic maghemite nanoparticles studied by time-of-flight neutron spectroscopy”, *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 89, 064402 (1)–064402 (7), 2014.

El-Sayed, M. A. and Yoo, J. W., “Preparation of Cubic Pt Nanoparticles deposited on Alumina and their Application to Propene Hydrogenation”, *Chem Cat Chem.* 2, 268–271, 2010.

Erdinç, A. and Keskin, M., “Quadrupolar ordering and metastable phase diagram in a ferroquadrupolar phase”, *Phys. Lett. A* 320, 28–34, 2003.

Favero, P. P., de Souza-Parise, M., Fernandez, J. L. R., Miotto, R. and Ferraz, A. C., “Surface Properties of CdS Nanoparticles”, *Braz. J. Phys.* 36, 1032–1034, 2006.

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., “M<sub>2</sub>ZnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (M = Ni, Mn) cubic superparamagnetic nanoparticles obtained by hydro thermal synthesis”, *J. Nanopart. Res.* 15, 1–12, 2013.

Gubin S. G. (EditedBy), *Magnetic Nanoparticles*, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Moscow, 2009

Hoston, W. and Berker, A. N., “Multicritical phase diagrams of the Blume-Emery-Griffiths model with repulsive biquadratic coupling”, *Phys. Rev. Lett.* 67, 1027–1030, 1991.

Ising, E., “Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus”, *Zeitschrift für Physik* 31, 253–258, 1925.

Jiang, L., Zhang, J., Chen, Z., Feng, Q. and Huang, Z., “Monte Carlo study of magnetic properties for the mixed spin-3/2 and spin-1 ferrimagnetic nanoparticles”, *Physica B* 405, 420–424, 2010.

Kao, M. J., Hsu, F. C. and Guo, J. B., “The thermal behavior of the synthesis of Cu–BTA composite nanoparticles by thermal decomposition”, *Curr. Appl. Phys.* 13, S79–S83, 2013.

Kaur, J., Kotnala, R. K. and Verma, K. C., “Multiferroic properties of Ba (Fe<sub>x</sub>Ti<sub>1-x</sub>) O<sub>3</sub> nanorods”, *Mater. Lett.* 65, 3160–3163, 2011.

Keskin, M. and Meijer, P. H. E., “Dynamics Of A Spin-1 Model With The Pair Correlation”, *J. Chem. Phys.* 85, 7324–7333, 1986.

Keskin, M. and Erdinç, A., “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”, *J. Magn. Mater.* 283, 392–408, 2004.

Kikuchi, R., “Superposition approximation and natural iteration calculation in cluster-variation method”, *J. Chem. Phys.* 60, 1071–1080, 1974.

Lee, Y. J., Kim, D. Y., Lee, K. H., Han, M. H., Kang, K. S., Bae, K. K. and Lee, J. H., “Ammonium fluoride-activated synthesis of cubic  $\delta$ -TaN nanoparticles at low temperatures”, *Nanoscale Res. Lett.* 8, 126 (1–9), 2013.

Loghmani, M.H. and Shojaei, A.F., “Hydrogen generation from hydrolysis of sodium borohydride by cubic Co-La-Zr-B nano particles as novelcatalyst”, *Int. J. Hydrogen Energy* 38, 10470–10478, 2013.

Nakagawa, K., Murata, Y., Kishida, M., Adachi, M., Hiro, M. and Susa, K., “Formation and reactionactivity of CeO<sub>2</sub> nanoparticles of cubic structure and various shaped CeO<sub>2</sub>-TiO<sub>2</sub> composite nanostructures”, *Mater. Chem. Phys.* 104, 30–39, 2007.

Nikam, D. S., Jadhav, S. V., Khot, V. M., Phadatare, M. R. and Pawar, S. H., “Study of AC Magnetic Heating Characteristics of Co<sub>0.5</sub>Zn<sub>0.5</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> nanoparticles for magnetic Hyperthermia therapy”, *J. Magn. Mater.* 349, 208–213, 2014.

- Oubouchou, H., Slimani, A. and Boukhedden, K., “Inter play between elastic interactions in a core-shell model for spin-crossover nanoparticles”, *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 87, 104104 (1)–104104 (12), 2013.
- Parra, E. R., Hernández, G. O. and Rojas, J. C. R., “Monte Carlo simulation of surface anisotropy in  $\text{La}_{2/3}\text{Ca}_{1/3}\text{MnO}_3$  nanoparticles”, *J. Magn. Magn. Mater.* 344, 44–48, 2013.
- Qaeed, M. A., Ibrahim, K., Saron, K. M. A. and Salhin, A., “Cubic and Hexagonal GaN Nanoparticles Synthesized at Low Temperature”, *Superlattice. Microstruct.* 64, 70–77, 2013.
- Rego, L. G. C. and Figueiredo, W., “Magnetic properties of nanoparticles in the Bethe-Peierls approximation”, *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 64,144424 (1)–144424(7), 2001.
- Rashin, M. N. and Hemalatha, J., “Magnetic and ultrasonic studies on stable cobalt ferrite magnetic nanofluid”, *Ultrasonics* 54, 834–840, 2014.
- Russ, S. and Bunde, A., “Ising-like dynamics and frozen states in systems of ultrafine magnetic particles”, *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 75, 174445 (1)–174445 (5), 2007.
- Salavatti-Niasari, M., Esmaeili-Zare, M. and Sobhani, A., “Cubic Hg Senano particles: sonochemical synthesis and characterization”, *Micro Nano Lett.* 7, 1300–1304, 2012.
- Shukla, N. and Nigra, M. M., “Synthesis and self-assembly of magnetic nanoparticles”, *Surf. Sci.* 601, 2615–2617, 2007.
- Skomski, R., Wei, X. H. and Sellmyer, D. J., “Magnetization Reversal in Cubic Nanoparticles with Uniaxial Surface Anisotropy”, *IEEE T. Magn.* 43, 2890–2892, 2007.

Song, Q. and Zhang, Z. J., “Shapecontrol and associated magnetic properties of spinel cobalt ferrite nanocrystals”, *J. Am. Chem. Soc.* 126, 6164–6168, 2004.

Şimşek, T. and Özcan, Ş., “Effective magnetic anisotropy enhancement of Fe Pt nanocrystals through shape control”, *J. Magn. Magn. Mater.* 351, 47–51, 2014.

Vatansever, E. and Polat, H., “Magnetic response of a disordered binary ferromagnetic alloy to an oscillating magnetic field”, *Physica A* 394, 82–89, 2014.

Vives, E., Castán, T. and Anker Lingård, P., “Degenerate Blume-Emery-Griffiths model for the martensitic transformation”, *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 53, 8915–8921, 1996.

Wang, H., Qian, C., Yi, Z., L. Rao, L., Liu, H. and Zeng, S., “Hydro thermal Synthesis and Tunable Multicolor Upconversion Emission of Cubic Phase  $Y_2O_3$  Nanoparticles”, *Adv. Condens. Matter. Phys.* 2013, 1–6, 2013.

Weizenmann, A. and Figueiredo, W., “Two-dimensional small particles coupled by dipolar interactions”, *Physica A* 389, 5416–5424, 2010.

Woińska, M., Szczytko, J., Majhofer, A., Gosk, J., Działkowski, K. and Twardowski, A., “Magnetic interactions in an ensemble of cubic nanoparticles: A Monte Carlo study”, *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 88, 144421 (1)–144421 (12), 2013.

Wörle, G., Siekmann, B., Koch, M. H. J. and Bunjes, H., “Transformation of vesicular into cubic nanoparticles by autoclaving of aqueous monoolein/poloxamer dispersions”, *Eur. J. Pharm. Sci.* 27, 44–53, 2006.

Yalçın, O., Erdem, R. and Demir, Z., “Magnetic Properties and Size Effects of Spin-1/2 and Spin-1 Models of Core-Surface Nanoparticles in Different Type Lattices”, *Smart Nanoparticles Technology* 541-560, 2012.

Yalçın, O., Erdem, R. and Özüm, S., “Origin of the martensitic and austenitic phase transition in core-surface smart nanoparticles with size effects and hysteretic splitting”, *J. Appl. Phys.* 115, 054316 (1)-054316 (7), 2014.

Yalçın, O., Erdem, R. Özüm, S., and Demir, Z., “The phase diagrams with influence of biquadratic exchange coupling on martensitic–austenitic transformations for core–surface nanoparticles”, *J. Magn. Magn. Mater.* 389, 120–123, 2015.

Yamamuro, S. and Sumiyama, K., “Why do cubic nanoparticles favor a square array? Mechanism of shape-dependent arrangement in nanocube self-assemblies”, *Chem. Phys. Lett.* 418, 166–169, 2006.

Yung, T. Y., Lee, J. Y. and Liu, L. K., “Nanocomposite for methanol oxidation: synthesis and characterization of cubic Pt nanoparticles on graphene sheets”, *Sci. Technol. Adv. Mat.* 14, 035001 (1)– 035001 (8), 2013.

Yüksel, Y., Aydın, E., Polat, H., “Thermal and magnetic properties of a ferrimagnetic nanoparticle with spin-3/2 core and spin-1 shell structure”, *J. Magn. Magn. Mater.* 323, 3168–3175, 2011.

Zaim, A., Kerouad, M., and EL Amraoui, Y., “Magnetic properties of a ferrimagnetic core/shell nanocube Ising model: A Monte Carlo simulation study”, *J. Magn. Magn. Mater.* 321, 1077–1083, 2009.

Zaim, A. and Kerouad, M., “Monte Carlo simulation of the compensation and critical behaviors of a ferrimagnetic core/shell nanoparticle Ising model”, *Physica A* 389, 3435–3442, 2010.

Zhao, J., Wei, L., Peng, C., Su, Y., Yang, Z., Zhang, L., Wei, H. and Zhang, Y., “A non-enzymatic glucose sensor based on the composite of cubic Cu nanoparticles and arc-synthesized multi-walled carbon nanotubes”, *Biosens. Bioelectron.* 47, 86–91, 2013.

## ÖZ GEÇMİŞ

Halil Nuri EKER 11.07.1973 tarihinde Niğde’de doğdu. İlk, orta ve lise öğretimini Niğde’de tamamladı. 1990 yılında girdiği Atatürk Üniversitesi Kazım Karabekir Eğitim Fakültesi Fizik Öğretmenliği bölümünden 1994 yılında mezun oldu. 26.12.1994 tarihinde Şanlıurfa Birecik ilçesinde öğretmenlik görevine başladı. 1998 yılında Niğde iline atandı. Niğde’nin çeşitli okullarında çalıştı, halen Cumhuriyet Anadolu lisesinde Fizik öğretmeni olarak görev yapmaktadır. Evli ve iki çocuk babasıdır.

2012 yılında Niğde Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı’nda yüksek lisans öğrenimine başladı. Temmuz 2015’de yüksek lisans öğrenimini tamamlamıştır.

## **Tez Çalışmasından Üretilen Eserler**

Bu tez çalışmasından, 1 (bir) adet uluslararası makale üretilmiştir. Bu üretilen çalışma aşağıda sunulmuştur.

Özüm, S., Yalçın, O., Erdem, R., Bayrakdar, H. and Eker, H.N., “Martensitic and austenitic transformations in core-surface cubic nanoparticles”, *J. Magn. Magn. Mater.* 373, 217–221, 2014.